



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA

INSTITUTO DE QUÍMICA

EMENTA

DISCIPLINA: PQU207 - ELUCIDAÇÃO ESTRUTURAL DE COMPOSTOS ORGÂNICOS

PROFESSOR:

Sérgio Antônio Lemos de Moraes

OBJETIVOS:

A disciplina ELUCIDAÇÃO ESTRUTURAL DE COMPOSTOS ORGÂNICOS tem como objetivo capacitar os alunos na utilização das técnicas espectrométricas e espectroscópicas para a identificação e caracterização estrutural de compostos orgânicos.

EMENTA

O curso conta com aulas expositivas e aulas de exercícios.

PLANO DO CURSO:

ETAPAS	DETALHAMENTO	Nº de AULAS	DATA
1	APRESENTAÇÃO DO CURSO, CONTEXTO E EXPECTATIVAS, REVISÃO.	5	
	ESPECTROMETRIA DE MASSAS		
	✓ Aspectos gerais, espectro de massas, determinação da massa molar, regras de fragmentação, alguns padrões de fragmentação, utilização do espectro de massas na determinação de estrutura de compostos orgânicos.	10	
	ESPECTROSCOPIA NO INFRAVERMELHO		
2	✓ Aspectos gerais, modos de vibrações moleculares, frequências de absorções características de grupamentos em moléculas orgânicas, utilização do espectro no IV na determinação de estrutura de compostos orgânicos.	10	
3	ESPECTROSCOPIA NO ULTRAVIOLETA/VISÍVEL	5	
	✓ Aspectos gerais, tipos de transições eletrônicas, sistemas conjugados, cromóforos, aplicação de regras empíricas na determinação do comprimento de onda de absorções em sistemas conjugados, utilização do espectro de IV na deter-		

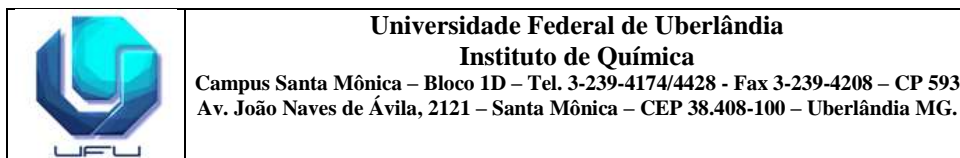


minação de estrutura de compostos orgânicos.

4	RESSONÂNCIA MAG. NUCLEAR DE HIDROGÊNIO (RMN de ^1H) ✓ Aspectos gerais, deslocamentos químicos, integração dos sinais, acoplamento spin-spin, constante de acoplamento, utilização do espectro de RMN de ^1H na determinação de estrutura de compostos orgânicos.	10
5	RESSONÂNCIA MAG. NUCLEAR DE CARBONO 13 (RMN de ^{13}C) ✓ Aspectos gerais; deslocamentos químicos; espectros de RMN de ^{13}C totalmente acoplado e desacoplado; DEPT; utilização do espectro de RMN de ^{13}C na determinação de estrutura de compostos orgânicos. Introdução á RMN de sólido.	5
	AULAS DE EXERCÍCIOS ENVOLVENDO TODAS AS TÉCNICAS ATÉ AGORA	10
	PROVA	5
6	RMN BIDIMENSIONAL (CORRELAÇÕES) ✓ Introdução; COSY; DQF-COSY; NOESY; HETCOR; HMQC; HSQC; HMBC; INADEQUATE; TOCSY; RMN 3D.	10
	AULAS DE EXERCÍCIOS ENVOLVENDO TODAS AS TÉCNICAS	10
7	RMN NO ESTADO SÓLIDO ✓ Introdução; ângulo mágico; exemplos.	3
8	IMAGEM POR RESSONÂNCIA MAGNÉTICA ✓ Geração do espectro de RMN; fatores que influenciam o espectro; material contendo água; mapeando a região de frequência compilação de um objeto, a imagem 3D; Imagem por RMN do cérebro.	2
	PROVA	5

BIBLIOGRAFIA

- SILVERSTEIN, R. M.; WEBSTER, F. X.; KIEMLE, D. J. *Identificação espectrométrica de compostos orgânicos*. Rio de Janeiro, LTC, 7 ed., 2007.
- SILVERSTEIN, R. M.; WEBSTER, F. X.; KIEMLE, D. J. *Identificação espectrométrica de compostos orgânicos*. Rio de Janeiro, LTC, 6 ed., 2000.
- PAVIA, D.L.; LAMPMAN, G.M.; KRIZ, G.S. *Introduction to spectroscopy* 3. Ed Philadelphia. Harcourt Brace College Publishers, 2001.
- Barbosa, L. C. de A. *Espectroscopia no Infravermelho na Caracterização de Compostos Orgânicos*. Editora: UFV - 1ª Ed, 2007.



5. FRIEBOLIN, H. *Basic one-and two-dimensional NMR spectroscopy*, Horst Friebolin; translated by Jack K. Becconsall. - 2nd ed. aumentada. - VCH, 1993.
6. DEROME, A. E. *Modern NMR techniques for chemistry research*, Oxford: Pergamon Press, 1987.

Uberlândia 05 de dezembro de 2013.

Prof. Dr. Sérgio Antônio Lemos de Morais
Instituto de Química
Universidade federal de Uberlândia
Correio eletrônico: salemos@ufu.br