



SERVIÇO PÚBLICO FEDERAL  
MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO  
UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA  
INSTITUTO DE QUÍMICA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA



Elucidação Estrutural de Compostos Orgânicos		
Código: PQU207		Área de Concentração: Química
Carga Horária: 75	Créditos: 5	
<b>Responsáveis:</b> Prof. Sérgio Antônio Lemos de Moraes		
<b>Objetivo:</b> 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		
<b>APRESENTAÇÃO DO CURSO, CONTEXTO E EXPECTATIVAS</b> <b>ESPECTROMETRIA DE MASSAS</b> 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. <b>ESPECTROSCOPIA NO INFRAVERMELHO</b> 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. <b>ESPECTROSCOPIA NO ULTRAVIOLETA/VISÍVEL</b> 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 determinação de estrutura de compostos orgânicos. <b>RESSONÂNCIA MAG. NUCLEAR DE HIDROGÊNIO (RMN de <sup>1</sup>H)</b> Aspectos gerais, deslocamentos químicos, integração dos sinais, acoplamento spin-spin, constante de acoplamento, utilização do espectro de RMN de <sup>1</sup> H na determinação de estrutura de compostos orgânicos. <b>RESSONÂNCIA MAG. NUCLEAR DE CARBONO 13 (RMN de <sup>13</sup>C)</b> Aspectos gerais; deslocamentos químicos; espectros de RMN de <sup>13</sup> C totalmente acoplado e desacoplado; DEPT; utilização do espectro de RMN de <sup>13</sup> C na determinação de estrutura de compostos orgânicos. Introdução á RMN de sólido <b>RMN BIDIMENSIONAL (CORRELAÇÕES).</b> Introdução; COSY; DQF-COSY; NOESY; HETCOR; HMQC; HSQC; HMBC; INADEQUATE; TOCSY; RMN 3D. <b>RMN NO ESTADO SÓLIDO</b> Introdução; ângulo mágico; exemplos. <b>IMAGEM POR RESSONÂNCIA MAGNÉTICA</b> 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. <b>AULAS DE EXERCÍCIOS ENVOLVENDO TODAS AS TÉCNICAS</b> Aulas de exercícios envolvendo toas as técnicas juntas.		
<b>Bibliografia:</b>  1. SILVERSTEIN, R. M.; WEBSTER, F. X.; KIEMLE, D. J. <i>Identificação espectrométrica de compostos orgânicos</i> . Rio de Janeiro, LTC, 7 ed., 2007.		



SERVIÇO PÚBLICO FEDERAL  
MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO  
UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA  
INSTITUTO DE QUÍMICA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA



2. SILVERSTEIN, R. M.; WEBSTER, F. X.; KIEMLE, D. J. *Identificação espectrométrica de compostos orgânicos*. Rio de Janeiro, LTC, 6 ed., 2000.
3. PAVIA, D.L.; LAMPMAN, G.M.; KRIZ, G.S. *Introduction to spectroscopy* 3. Ed Philadelphia. Harcourt Brace College Publishers, 2001.
4. 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.