

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE SANTA CRUZ PROREITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO DEPARTAMENTO DE CIÊNCIAS EXATAS PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA



CÓDIGO		DISCIPLINA
DEX101246		Elucidação Estrutural de Compostos Orgânicos
C/HORÁRIA	CRÉDITOS	
Teórica: 60	04	
Prática:		
Total: 60	04	

EMENTA

Métodos espectroscópicos de identificação de compostos: UV-Visível, Infravermelho, Ressonância Magnética de ¹H e de ¹³C unidimensional. Espectrometria de Massas. Elucidação estrutural de compostos orgânicos utilizando os métodos espectrométricos

OBJETIVOS

Formar conhecimentos básicos necessários à análise de compostos orgânicos. Familiarizar o aluno com as principais técnicas espectroscópicas e espectometricas para identificação e elucidação dos compostos orgânicos. Interpretar os dados espectroscópicos de compostos orgânicos no UV, IV, e RMN.

METODOLOGIA

Exposições dialogadas, estudos dirigidos, trabalhos de pesquisa. Interpretações de espectros no UV, IV, RMN. Interpretação de espectros de massas

AVALIAÇÃO

Através de verificações escritas, seminários, trabalhos de pesquisa e resolução de exercícios Frequência igual ou superior à 75%

CONTEÚDO PROGRAMÁTICO

- 1 Espectrometria de Massa
 - 1.1 Teoria e Instrumentação
 - 1.2. O Espectro de Massas características
 - 1.3 Determinação de fórmulas moleculares e de Massa Molecular
 - 1.4 Principais Fragmentações
 - 1.5 Aplicações na elucidação estrutural de compostos
- 2 Introdução aos métodos espectroscópicos
 - 2.1 O espectro eletromagnético
 - 2.2 Princípios da interação da energia com matéria
- 3 Ultravioleta:
 - 3.1 Teoria e instrumentação
 - 3.2 Absorção característica dos compostos orgânicos
 - 3.3 Lei de Lambert Beer
- 4 Espectroscopia no Infravermelho
 - 4.1. Teoria e instrumentação
 - 4.1 Frequência característica dos principais grupos funcionais dos compostos orgânicos:
 - 4.2 hidrocarbonetos e aromático, álcoois, e fenóis, éteres, aldeídos, cetonas, ácidos carboxílicos, esteres e lactonas, anidridos, ácidos carboxílicos, aminas e amidas
 - 4.3 Aplicações na elucidação estrutural de compostos
- 5 Espectroscopia de Ressonância Magnética Nuclear de Hidrogênio (RMN de ¹H)
 - 5.1 Propriedade magnética dos núcleos
 - 5.2 Teoria e instrumentação
 - 5.3 Deslocamento químico
 - 5.4 Interação simples spin-spin: mecanismo de proteção, correlação do Hidrogênio ligado ao carbono, correlação do hidrogênio ligado a outros núcleos
 - 5.5 Interações complexas spin-spin
 - 5.6 Noções de RMN de ¹³C



- -S. Bienz, L. Bigler, T. Fox, H. Meier, Spectroscopic Methods in Organic Chemistry, 3° ed, Thieme Chemistry, 2021
- -C. K. F. Hermann, T. C. Morrill, R. L. Shriner, R. C. Fuson, The Systematic Identification of Organic Compounds, 9° ed, Wiley, 2023
- -R. Silverstein, F. Webster, D. Kiemle, D. Bryce, Identificação Espectrométrica de Compostos Orgânicos, 8° ed, LTC, 2019
- -D. L. Pavia, G. M. Lampman, G. S. Kriz, J. R. Vyvyan, Introdução à Espectroscopia, 2° ed, editora Cengage; 2015