

Disciplina	Métodos de elucidação estrutural de compostos orgânicos/ C7	Carga horária	75
		Créditos	5
Docente responsável	Diogo de Oliveira Silva		
Sigla	MECO		
Grupo	C		
Ementa	<p>1) Ressonância Magnética Nuclear: Introdução à espectroscopia de RMN; RMN com transformada de Fourier; Blindagem; Número de sinais no espectro de RMN ¹H; Deslocamento químico; Posições relativas dos sinais de RMN; Valores característicos de deslocamento químico; Integração dos sinais de RMN; Anisotropia diamagnética; Desdobramento dos sinais; Exemplos de espectros de RMN ¹H; Constantes de acoplamento; Relação de Karplus; Diagramas de desdobramento; Hidrogênios diastereotópicos; Dependência do tempo da espectroscopia de RMN; Prótons ligados ao oxigênio e ao nitrogênio; Uso de deutério na espectroscopia de RMN ¹H; Resolução dos espectros de RMN ¹H; Espectroscopia de RMN ¹³C; Espectros de RMN ¹³C DEPT; Espectroscopia de RMN em duas dimensões. 2) Espectroscopia no Infravermelho: Espectroscopia e o espectro eletromagnético; Comprimento de onda, Frequência e número de onda; Vibrações moleculares; Espectrômetro de infravermelho por varredura de comprimento de onda; Espectrômetro de infravermelho por transformada de Fourier; Regiões de grupo funcional e de impressão digital; Bandas de absorção (deformações axiais) importantes no infravermelho; Intensidade das bandas de absorção; Vibrações inativas no infravermelho; Posição das bandas de absorção; Efeitos estruturais na posição das bandas de absorção; A importância do formato das bandas de absorção; A importância da ausência de bandas de absorção. 3) Espectrometria de Massas: Técnicas de ionização de amostras voláteis, em solução e sólidas; Analisadores de íons de baixa e alta resolução; Conceitos de resolução e exatidão de razão <i>m/z</i>; Analisadores híbridos (QqQ, Q-Tof, IT-Tof, etc); Sistemas hifenados (CG-MS e LC-MS); Espectrometria de Massas sequencial (Tandem MS); Mecanismos de fragmentação e elucidação estrutural.</p>		
Bibliografia	<p>1) Clayden, J.; Greeves, N.; Warren, S.; Wothers, P. Em Organic Chemistry; Oxford University Press: New York, 2001, 1a Edição. ISBN: 0198503466.</p> <p>2) Silverstein, R. M.; Webster, F. X.; Kiemle, D. Em Spectrometric Identification of Organic Compounds; John Willey & Sons: New York, 2005, 7a Edição. ISBN: 0471393622.</p> <p>3) Pavia, D. L.; Lampman, G. M.; Kriz, G. S. Em Introduction to Spectroscopy: A Guide for Students of Organic Chemistry; Brooks-Cole (Thomson Learning) Publishing: USA, 2001, 3a Edição. ISBN: 9780030319617.</p> <p>4) Crews, P.; Rodriguez, J.; Jaspars, M. Em Organic Structure Analysis - Topics in Organic Chemistry; Oxford University Press: New York; 1998, 1a Edição. ISBN: 0195101022.</p> <p>5) de Hoffmann, E.; Stroobant, V. Em Mass spectrometry: principles and applications; John Willey & Sons: New York, 2007, 3a Edição. ISBN: 9780470033104.</p> <p>6) Gross, J. H. Em Mass spectrometry A Textbook; Springer: Heidelberg, 2011, 2a Edição. ISBN: 9783642107092.</p> <p>7) Watson, J. T.; Sparkman, O. D. Em Introduction to mass spectrometry: instrumentation, applications, and strategies for data interpretation; John Willey & Sons: New York, 2007, 4a Edição. ISBN: 9780470516348.</p>		
Docentes envolvidos	<p>THIAGO ANDRÉ MOURA VEIGA ALESSANDRO RODRIGUES CRISTIANO RAMINELLI</p>		

