|  |  |
| --- | --- |
| color_1024x768 | **UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA MARIA**  **PROGRAMA DE DISCIPLINA** |

DEPARTAMENTO:

|  |
| --- |
| **QUÍMICA** |

IDENTIFICAÇÃO DA DISCIPLINA:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| CÓDIGO | NOME (CARGA HORÁRIA - CRÉDITOS) | CARÁTER |
| **QMC995** | **Métodos Espectroscópicos em Química Orgânica**  **(90-6)** | **Obrigatória** |

EMENTA:

|  |
| --- |
| Espectrometria de Massas. Espectrometria no Infravermelho. Espectrometria de Ressonância Magnética Nuclear de Hidrogênio e Carbon-13. Técnicas multipulso unidimensionais (APT, INEPT, DEPT). RMN Bidimensional. Teoria básica, instrumentação e procedimento experimental. Interpretação de espectros, exemplos e exercícios. |

PROGRAMA:

|  |
| --- |
| TÍTULO E DISCRIMINAÇÃO DAS UNIDADES |
| UNIDADE 1 – ESPECTROMETRIA DE MASSAS  1.1 - Teoria básica, instrumentação, procedimento experimental, interpretação de espectros, fragmentações típicas de classes representativas de moléculas da química orgânica e exercícios.  UNIDADE 2 – ESPECTROMETRIA NO INFRAVERMELHO  2.1 - Teoria básica, instrumentação, procedimento experimental, interpretação dos espectros, frequências características de grupamentos, exemplos e exercícios  UNIDADE 3 – ESPECTROSCOPIA DE RESSONÂNCIA MAGNÉTICA NUCLEAR PROTÔNICA  3.1 - Histórico, teoria básica, instrumentação, manuseio da amostra, o espectro de RMN, deslocamento químico, fatores que afetam o deslocamento químico, acoplamento spin-spin, dupla ressonância (desacoplamento), deslocamento químico de hidrogênios ligados a carbono, deslocamento químico de hidrogênios ligados a heteroátomos, reagentes de deslocamento lantanídico, sistemas de spins, equivalência química e magnética, exemplos, exercícios.  UNIDADE 4 – ESPECTROSCOPIA DE RESSONÂNCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE CARBONO-13  4.1 - Diferenças fundamentais entre RMN de prótons e carbono-13: Vantagens e desvantagens, técnicas de pulso e transformadas de Fourier, deslocamento químico, fatores que afetam o deslocamento químico, acoplamento spin-spin, técnicas de dupla ressonância (desacoplamento), efeito nuclear de Overhauser, cálculo empírico de deslocamento químico, aplicações de RMN de carbono-13, exemplos, exercícios.  UNIDADE 5 – NOÇÕES GERAIS DE TÉCNICAS DE PULSO E TRANSFORMADAS DE FOURIER EM RMN DE 2-D |

|  |
| --- |
| 5.1 - Spin echo, APT, INEPT, DEPT, Espectroscopia correlacionada (COSY, TOCSY, RELAY, HMQC/HSQC, HMBC, INADEQUATE) espectroscopia bidimensional das constantes de acoplament (J-Resolvido), Espectroscopia do efeito nuclear Overhauser (NOESY, ROESY, HOESY) |

B IBLIOGRAFIA:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| BIBLIOGRAFIA BÁSICA E COMPLEMENTAR | | |
| SILVERSTEIN, R. M.; WEBSTER, F. X.; KIEMBLE D. J.; **Spectrometric Identification of Organic Compounds**, 7th Ed., Wiley, New York, 2005.  PAVIA, D. L.; LAMPMAN, G. M.; KRIZ, G. S.; VYVYAN, J. R.; **Introdução a Espectroscopia**, Tradução da 4ª Edição Americana, Cenage Learning, São Paulo, 2010.  CREWS, P.; RODRIGUES, J.; JASPARS. M.; **Organic Structure Analysis**, Oxford University Press, New York, 1998.  BECKER , E. D.; **High Resolution NMR Theory and Chemical Aplications**, 2nd Ed., Academic Press, New York, 1980.  JACKMAN, L. M.; STERNHELL, S.; **Applications of Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy in Organic Chemistry**, 2nd Ed., Pergamon Press, New York, 1969.  BREITMAIER, E.; VOELTER, W.; **Carbon-13 NMR Spectroscopy**, 3rd Ed., Verlag, New York, 1987.  RHAMAN, A.; **Nuclear Magnetic Resonance**, Springer Verlag, New York, 1986.  NAKANISHI, K.; SOLOMON, P. H.; **Infrared Absorption Spectroscopy**, 2nd Ed., Holden Day, San Francisco, 1977.  MCLAFFERTY, F. W.; TURECEK, F.; **Interpretation of Mass Spectra**, 4th Ed., University Science Books, Sausalito, 1993.  SANDERS, J. K. M.; HUNTER, B. K.; **Modern NMR Spectroscopy: A Guide for Chemists**, 2nd Ed., Oxford University Press, Oxford, 1994.  FRIEBOLIN, H.; **Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy**, 4th Ed., John Wiley & Sons, Weinheim, 2005.  Artigos científicos recentes sobre o tema publicados em periódicos da área. | | |
| Data: \_\_\_\_/\_\_\_\_/\_\_\_\_    \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_  Coordenador do Curso | Data: \_\_\_\_/\_\_\_\_/\_\_\_\_  \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_  Chefe do Departamento | |