



Informações da disciplina

Disciplina: ORG3 - Química Orgânica III

Créditos: 72 horas (4 créditos)

Sala: PAV - Sala 2.08

Dia/hora: QUA e SEX, 15:15 – 17:05

Pré-requisitos: Química Orgânica II

Informações do professor

Nome: Lucas Raposo Carvalho

Sala: Sala 3.08, Departamento de Ciências Naturais (DCNAT), Bloco C

E-mail: lraposo@ufs.edu.br

Horário de atendimento: Mediante agendamento.

Conteúdo

1	Breve descrição da disciplina	2
2	Bibliografia	2
2.1	Bibliografia auxiliar	2
3	Objetivos da disciplina	2
4	Formas de avaliação	4
5	Calendário	4
6	Ementa	7
6.1	Módulo 1. Espectroscopia na região do UV-Visível	7
6.2	Módulo 2. Espectroscopia na região do Infravermelho	7
6.3	Módulo 3. Espectroscopia de Ressonância Magnética Nuclear	7
6.4	Módulo 4. Espectrometria de Massas	8

1 Breve descrição da disciplina

Pretende-se preparar os alunos do curso de Bacharelado em Química em tópicos centrais de elucidação estrutural utilizando técnicas espectroscópicas e espectrométricas – *viz.*, espectroscopia na região do UV-Vis e do infravermelho (IV), espectrometria de massas (EM) e espectroscopia de ressonância magnética nuclear (RMN) – que serão úteis em situações acadêmicas e profissionais futuras. Especificamente, serão abordados fundamentos teóricos sobre (i) a espectroscopia na região ultravioleta-visível, (ii) a espectroscopia na região do infravermelho, (iii) identificação de grupos funcionais e elementos estruturais pertinentes ao IV, (iv) análise de espectros de IV, (v) a espectrometria de massas, (vi) aspectos básicos de instrumentação de EM, (vii) o íon molecular e regras úteis para análise estrutural, (viii) fragmentações e rearranjos, (ix) a espectroscopia de ressonância magnética nuclear, (x) aspectos básicos de instrumentação de RMN, (xi) análise de espectros unidimensional, (xii) técnicas alternativas de elucidação, (xiii) RMN bidimensional.

2 Bibliografia

1. PAVIA, D. L.; LAMPMAN, G. M.; KRIZ, G. S.; VYVYAN, J. R. **Introdução à espectroscopia**, 2ª ed. Cengage Learning, São Paulo. 733 pp., **2016**;
2. SILVERSTEIN, R. M.; WEBSTER, F. X.; KIEMLE, D. J.; BRYCE, D. L. **Identificação espectrométrica de compostos orgânicos**, 8ª ed. LTC, Rio de Janeiro. 454 pp., **2019**.

2.1 Bibliografia auxiliar

1. KEMP, W. **Organic Spectroscopy**, 3ª ed. Palgrave. 410 pp., **1991**;
2. CLARIDGE, T. D. W. **High-Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry**, 3ª ed. Elsevier. 537 pp., **2016**;
3. FIELD, L. D.; STERNHELL, S.; KALMAN, J. R. **Organic Structures from Spectra**, 4ª ed. Wiley. 466 pp., **2008**;
4. BANWELL, C. N.; MCCASH, E. M. **Fundamentals of Molecular Spectroscopy**, 4ª ed. McGraw-Hill. 324 pp., **1994**.

3 Objetivos da disciplina

Ao final da disciplina, espera-se que o aluno possua as seguintes habilidades/competências:

- Saber alguns conceitos básicos do fenômeno da espectroscopia na região do UV-Vis;
- Saber identificar cromóforos, auxócromos e o efeito da conjugação em espectros de UV-Vis;
- Saber aplicar as regras de Woodward-Fieser para dienos e enonas;
- Ser capaz de analisar um espectro de UV-Vis;
- Saber alguns conceitos básicos do fenômeno da espectroscopia na região do infravermelho;
- Ter conhecimentos dos principais modos de vibração;
- Saber os principais números de onda de grupos funcionais relevantes e outros padrões estruturais em espectros;
- Ter domínio quanto à análise de um espectro de IV;
- Saber alguns conceitos básicos do fenômeno da espectrometria de massas;
- Saber os principais modos de ionização na EM;
- Ter domínio de reconhecimento padrões isotópicos, do pico do íon molecular e de regras úteis;
- Ter conhecimento dos principais padrões de fragmentação em EM;
- Saber alguns conceitos básicos do fenômeno e da instrumentação da espectroscopia de ressonância magnética nuclear;
- Ter domínio dos conceitos de deslocamento químico, anisotropia magnética, integração de sinais, acoplamento escalar e padrões de multiplicidade;
- Ter domínio na análise de espectros 1D de ^1H e ^{13}C ;
- Ter conhecimento de técnicas de desacoplamento;
- Ter conhecimento do efeito nuclear Overhauser (nOe) e suas implicações;
- Ter conhecimento da técnica do DEPT e ter domínio na análise de espectros;
- Ter conhecimento sobre relaxação nuclear e seus impactos em espectros;
- Ter conhecimento da técnica de RMN bidimensional;
- Ter domínio na análise de mapas de contorno COSY e HSQC.

4 Formas de avaliação

Os alunos serão avaliados por um total de três provas (P1, P2 e P3) e um trabalho em grupo (T1). Cada avaliação terá nota máxima de 10,0 pontos. A média final (MF) será a média aritmética das quatro avaliações.

Enquanto as provas terão conteúdo específico de acordo com as seções posteriores, o trabalho em grupo será estruturado da seguinte forma:

- Os alunos deverão formar três grupos de 4 pessoas e um grupo de 3 pessoas (totalizando 15 alunos matriculados). No máximo **quatro** grupos poderão ser formados;
- Cada grupo deverá preparar uma *apresentação* referente à elucidação estrutural *completa* de um composto específico utilizando as técnicas estudadas durante a disciplina;
- Cada grupo receberá um conjunto de espectros de uma molécula específica, cuja estrutura não é conhecida. Então, esse grupo terá o prazo de, aproximadamente, **três semanas** para realizar a elucidação estrutural e preparar uma apresentação que demonstre os passos dessa análise;
- As apresentações serão feitas em dois dias (dois grupos por dia) e terão duração entre **20 minutos e 30 minutos**. Cada grupo será avaliado quanto a (i) desenvoltura na fala, (ii) domínio do conteúdo da apresentação, (iii) adesão ao tempo, (iv) qualidade dos slides e (v) qualidade das respostas aos questionamentos.

O aluno terá direito a uma avaliação substitutiva, abrangendo toda a matéria lecionada, caso possua média inferior a 6,0 e presença igual ou superior ao mínimo exigido. A nota da avaliação substitutiva substituirá a menor nota de uma das provas, P1, P2 ou P3, caso seja maior que a de pelo menos uma delas. O aluno com média final igual ou superior a 6,0 após a última avaliação será considerado aprovado. O aluno com média final inferior a 6,0 após a última avaliação será considerado reprovado.

5 Calendário

QUARTA-FEIRA		SEXTA-FEIRA	
Data: 11/3	1	Data: 13/3	2
Apresentação da disciplina		1. Espectroscopia na região do UV-Vis	

QUARTA-FEIRA		SEXTA-FEIRA	
Data: 18/3 1. Espectroscopia na região do UV-Vis	3	Data: 20/3 1. Espectroscopia na região do UV-Vis	4
Data: 25/3 2. Espectroscopia na região do IV	5	Data: 27/3 2. Espectroscopia na região do IV	6
Data: 1/4 2. Espectroscopia na região do IV	7	Data: 3/4 Sexta-feira da Paixão	
Data: 8/4 2. Espectroscopia na região do IV	8	Data: 10/4 2. Espectroscopia na região do IV	9
Data: 15/4 2. Espectroscopia na região do IV	10	Data: 17/4 P1: Módulos 1 e 2	11
Data: 22/4 3. Espectroscopia de RMN	12	Data: 24/4 3. Espectroscopia de RMN	13
Data: 29/4 3. Espectroscopia de RMN	14	Data: 1/5 Dia do Trabalhador	
Data: 6/5 3. Espectroscopia de RMN	15	Data: 8/5 3. Espectroscopia de RMN	16
Data: 13/5 3. Espectroscopia de RMN	17	Data: 15/5 3. Espectroscopia de RMN	18
Data: 20/5 3. Espectroscopia de RMN	19	Data: 22/5 3. Espectroscopia de RMN	20

QUARTA-FEIRA		SEXTA-FEIRA	
Data: 27/5	21	Data: 29/5	22
3. Espectroscopia de RMN		3. Espectroscopia de RMN	
Data: 3/6	23	Data: 5/6	
3. Espectroscopia de RMN		Recesso	
Data: 10/6	24	Data: 12/6	25
3. Espectroscopia de RMN		P2: Módulos 1 a 3	
Data: 17/6		Data: 19/6	
49ª RASBQ		49ª RASBQ	
Data: 24/6	26	Data: 26/6	27
4. Espectrometria de Massas		4. Espectrometria de Massas	
Data: 1/7	28	Data: 3/7	29
4. Espectrometria de Massas		4. Espectrometria de Massas	
Data: 8/7	30	Data: 10/7	31
P3: Módulos 1 a 4		T1: Grupos 1 e 2	
Data: 15/7	32	Data: 17/7	33
T1: Grupos 3 e 4		Prova substitutiva: Módulos 1 a 4	

6 Ementa

6.1 Módulo 1. Espectroscopia na região do UV-Visível

Tópicos discutidos incluem (i) a natureza da excitação eletrônica, (ii) a estrutura de bandas e princípios de espectroscopia de absorção, (iii) conceitos básicos de instrumentação, (iv) impactos de solventes, (v) cromóforos, auxócromos, deslocamento e efeitos, (vi) o efeito da conjugação, (vii) as regras de Woodward-Fieser para dienos, (viii) as regras de Woodward-Fieser para enonas, (ix) espectros de compostos aromáticos.

Tópico principal	Duração pretendida	Bibliografia
Fenômeno da espectroscopia de absorção no UV-Vis, regras de Woodward-Fieser, e interpretação de espectros	Três aulas	Pavia: Cap. 7 Kemp: Cap. 4

6.2 Módulo 2. Espectroscopia na região do Infravermelho

Tópicos discutidos incluem (i) unidades utilizadas, (ii) o processo de absorção e usos da espectroscopia no IV, (iii) modos de vibração, (iv) propriedades de ligações químicas e seus impactos na espectroscopia no IV, (v) aspectos básicos de instrumentação, (vi) análise de espectros e tabelas de correlação, (vii) padrões espectrais de grupos funcionais específicos.

Tópico principal	Duração pretendida	Bibliografia
Fenômeno da espectroscopia de absorção no IV, modos de vibração e interpretação de espectros de IV	Seis aulas	Pavia: Cap. 2 Silverstein: Cap. 2 Kemp: Cap. 2

6.3 Módulo 3. Espectroscopia de Ressonância Magnética Nuclear

Tópicos discutidos incluem (i) descrição do fenômeno da RMN, (ii) deslocamento químico e blindagem, (iii) aspectos básicos de instrumentação, (iv) integração de sinais, (v) ambientes químicos, (vi) fenômenos de blindagem diamagnética, (vii) anisotropia magnética, (viii) o acoplamento escalar, triângulo de Pascal e padrões de multiplicidade, (ix) espectros de ^1H representativos, (x) deslocamentos químicos de ^{13}C , (xi) desacoplamentos, (xii) efeito nuclear Overhauser (nOe), (xiii) aspectos básicos de relaxação, (xiv) análises de DEPT, (xv) espectros de ^{13}C representativos, (xvi) RMN bidimensional, (xvii) mapas de contorno COSY e HSQC, (xviii) problemas combinados.

Tópico principal	Duração pretendida	Bibliografia
Aspectos básicos do fenômeno da RMN e de instrumentação, análise espectral de RMN 1D e 2D.	13 aulas	Pavia: Cap. 3, 4, 5, 6, 10 Silverstein: Cap. 3, 4 e 5 Kemp: Cap. 3

6.4 Módulo 4. Espectrometria de Massas

Tópicos discutidos incluem (*i*) aspectos básicos de instrumentação, (*ii*) métodos de ionização, (*iii*) analisadores de massas, (*iv*) espectros de massa, (*v*) determinação de massa e fórmula molecular, (*vi*) abundâncias isotópicas, (*vii*) IDH, regra dos 13 e regra do nitrogênio, (*viii*) análise estrutural e padrões de fragmentação.

Tópico principal	Duração pretendida	Bibliografia
Métodos de ionização, espectros de massas, abundâncias isotópicas e análise estrutural	Quatro aulas	Pavia: Cap. 8 Silverstein: Cap. 1 Kemp: Cap. 5