Nome	**Métodos de Elucidação Estrutural de Compostos Orgânicos**
Carga Horária	6 créditos - 90 h
Docente Responsável	Prof. Diogo de O. Silva
SIGLA	CTS27
Obrigatória	Não
Ementa	Ressonância Magnética Nuclear: • Introdução à espectroscopia de RMN; • RMN com transformada de Fourier; • Blindagem; • Número de sinais no espectro de RMN ^{1}H; • 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 ^{1}H; • 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 ^{1}H; • Resolução dos espectros de RMN ^{1}H; • Espectroscopia de RMN ^{13}C; • Espectros de RMN ^{13}C DEPT; • Espectroscopia de RMN em duas dimensões. Espectroscopia no Infravermelho: • Espectroscopia e o espectro eletromagnético; • Comprimento de onda, frequência e número de onda; • Espectroscopia no infravermelho; • 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 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 *m/z*; • 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.

Bibliografia	• Clayden, J.; Greeves, N.; Warren, S.; Wothers, P. Em *Organic Chemistry*; Oxford University Press: New York, **2001**, 1ª Edição. **ISBN:** 0198503466. • Silverstein, R. M.; Webster, F. X.; Kiemle, D. Em *Spectrometric Identification of Organic Compounds*; John Willey & Sons: New York, **2005**, 7ª Edição. **ISBN:** 0471393622. • 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. • Crews, P.; Rodriguez, J.; Jaspars, M. Em *Organic Structure Analysis - Topics in Organic Chemistry*; Oxford University Press: New York; **1998**, 1ª Edição. **ISBN:** 0195101022. • de Hoffmann, E.; Stroobant, V. Em *Mass spectrometry: principles and applications*; John Willey & Sons: New York, **2007**, 3ª Edição. **ISBN:** 9780470033104. • Gross, J. H. Em *Mass spectrometry A Textbook*; Springer: Heidelberg, **2011**, 2ª Edição. **ISBN:** 9783642107092. • 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.
Docentes envolvidos	Prof. Cristiano Raminelli