



Governo do Estado do Rio de Janeiro  
Secretaria de Estado de Ciência e Tecnologia  
Universidade Estadual do Norte Fluminense Darcy Ribeiro  
SECRETARIA ACADÊMICA/REITORIA

## PROGRAMA ANALÍTICO DE DISCIPLINA

Disciplina: PCN1724 - Técnicas Modernas de Elucidação Estrutural - Bio-orgânicos

CCT/LCQUI - Laboratório de Ciências Químicas

Início: 2016/2

Pré-requisito(s): não tem

Co-requisito(s): não tem

Equivalência(s): não tem

Carga horária: 68 (68 teóricas, 0 práticas, 0 extraclasse)

Créditos: 4

Tipo de aprovação: Média/Frequência

### EMENTA

A disciplina de Técnicas Modernas de Elucidação Estrutural destina-se ao treinamento do aluno na interpretação e na manipulação de dados obtidos a partir de técnicas espectroscópicas (IV) e espectrométricas (RMN e EM) utilizadas na elucidação estrutural de substâncias de fontes naturais e sintéticas.

### CONTEÚDO PROGRAMÁTICO

- Utilização de dados obtidos a partir dos espectros na região do infravermelho para identificação de grupos funcionais.
- Utilização de dados obtidos a partir de espectros de ressonância magnética nuclear em 1D (RMN1H, RMN13C, DEPT e APT) e espectros de massas de baixa e alta resolução para propor a fórmula molecular de uma substância desconhecida.
- Uso de técnicas de RMN em 1D (DEPT, DEPTQ, APT) e 2D (HSQC, HMQC, etc.) para a verificação de multiplicidade e o assinalamento de hidrogênios e carbonos de uma determinada estrutura.
- Uso de técnicas de RMN de correlação heteronuclear a longa distância (INEPT seletivo, COLOC, HMBC, TOCSY- 1D e 2D, etc.) para elucidação e confirmação estrutural.
- Verificação de estereoquímica através do uso de constantes de acoplamento escalar homonuclear (1H, 1H) e heteronuclear (1H, 13C).
- Uso de técnicas de RMN para a determinação de estereoquímica: aplicação do Efeito Overhauser Nuclear (NOESY e NOE diferencial).
- Espectrometria de massas de substâncias de origem natural e sintética (mecanismos de fragmentação).
- Aplicação das técnicas através da utilização de diversos Exemplos (terpenóides e esteróides, flavonóides, alcalóides, etc.), produtos de modificações estruturais e síntese.

### BIBLIOGRAFIA

1. Duddeck, H., Dietrich, W, Tóth G. (1998). Structure elucidation by modern NMR. 3ª Rev. Springer.
2. Claridge, T. D. W (1999). Tetrahedron organic chemistry series vol 19: High-resolution NMR techniques in organic chemistry. Pergamon.
3. Lambert, J. B., Shurvell, H. F., Lightner, D. A., Cooks, G.R. (1988). Organic structural spectroscopy. Prentice Hall.
4. Crews, P., Rodríguez, J., Jaspard, M. (1998). Organic structure analysis. Oxford