

Caracterização da disciplina							
Código da disciplina:	NHT4025-15	Nome da disciplina:	Métodos de análise em química orgânica				
Créditos (T-P-I):	(4-0-4)	Carga horária:	48 horas	Aula prática:	0	Câmpus:	Santo André
Código da turma:	DANHT4025-15SA NANHT4025-15SA	Turma:	A	Turno:	Diurno/ Noturno	Quadrimestre:	S
Ano:		2020					
Docente(s) responsável(is):		Célio Fernando Figueiredo Angolini					

Em situação excepcional a disciplina será ministrada no modalidade a distância, seguindo os critérios listados a baixo. Todo aluno matriculado será inscrito na plataforma moodle da disciplina, onde todo o material estará disponível. Caso não receba a inscrição pelo e-mails institucional até o dia de início do QS entrar em contato no e-mail: celio.fernando@ufabc.edu.br.

Alocação das turmas ^(a)						
	Segunda	Terça	Quarta	Quinta	Sexta	Sábado
08:00 – 10:00	Plano de estudos semanal (assíncrono)				Aulas e Atendimento online (síncrona)	
10:00 – 12:00			Aulas e Atendimento online (síncrona)			
19:00 – 21:00					Aulas e Atendimento online (síncrona)	
21:00 – 23:00			Aulas e Atendimento online (síncrona)			

^(a) Devido a situação atual, em substituição às aulas definidas no plano original da disciplina de carácter presencial, teremos: (1) O conteúdo programático da disciplina será passado na forma de planos de estudo; constituído de material gravado, exercícios, roteiros de estudo e serão disponibilizado todas as semanas às segundas-feiras. (2) Eventuais aulas síncronas e horários de atendimento serão online (atividade síncrona) utilizando a plataforma de conferenciaweb (<https://conferenciaweb.rnp.br/webconf/celio-2>; senha: massas), nas semanas agendadas sempre no horário acima, caso não combinado em outro horário. Todo material ficará disponível no Moodle da disciplina, no qual ainda contará com fórum de discussão e outras atividades. Eventuais mudanças podem ocorrer ao longo do curso e serão combinadas/avisadas aos alunos com antecedência. Todo conteúdo programático será oferecido de maneira assíncrona conforme [Resolução Consepe Nº 240/2020](#).

Planejamento da disciplina
Objetivos gerais
Análise de dados experimentais e espectrais, com foco na elucidação estrutural de compostos orgânicos.
Objetivos específicos
Adquirir conhecimento e habilidade de interpretação de dados experimentais de técnicas como: <ol style="list-style-type: none"> 1- Análise elementar. 2- Espectroscopia no UV-Vis. 3- Espectroscopia vibracional no IV. 4- Espectrometria de massa. 5- RMN de ¹H e ¹³C

Ementa

Princípios e fundamentos de técnicas de análise moleculares. Análise de dados experimentais e espectrais, com foco na elucidação estrutural de compostos orgânicos: Análise elementar, Espectrometria de massa, Espectroscopia no UV-Vis, Espectroscopia vibracional no IV, RMN de ^1H , ^{13}C .

Conteúdo programático^(a)

Semana	Horas (T+I)	Unidade (tema) principal	Conteúdo e objetivos específicos	Estratégias didáticas ED - Estudo dirigido (leitura) (tempo estimado de dedicação)	Avaliações
					LE - Lista de exercícios EI - Exercício individual AV - Avaliação Virtual
1 (21/09)	4-5	Introdução do curso - Aula inaugural (síncrona - 23/09) Aula 1 - Introdução e Análise elementar	Apresentação da disciplina, ementa, métodos de avaliação e bibliografia. Introdução e análise elementar. O aluno deve ser capaz de: Compreender as necessidades de uma caracterização química; determinar a F.M. a partir da análise elementar e calcular Nins.	1h - Aula síncrona 1,5h - Aula 1 1h - ED01	1h - LE01 - exercícios 1 ao 4
2 (28/09)	6-7	Aula 2 - Espectroscopia no Ultravioleta e Visível Aula 3 - Espectroscopia no Infravermelho	Princípios, fundamentos e instrumentação das técnicas de espectroscopia no UV-VIS e IV. O aluno deve ser capaz de: Identificar e caracterizar grupos cromóforos por UV-VIS; compreender os fenômenos envolvidos nos modos vibracionais fundamentais do IV.	1,5h - Aula 2 1,5h - Aula 3 1h - ED02	1h - LE01 - exercícios 5 ao 9
3 (05/10)	7	Aula 4 - Espectroscopia no Infravermelho Aula Dúvidas - Síncrona (09/10)	Grupos funcionais e seus modos vibracionais no IV. O aluno deve ser capaz de: Interpretar espectros de IV, UV-VIS e dados de análise elementar, propondo possíveis estruturas para os compostos.	1,5h - Aula 4 2h - Aula D. 1h - ED03	1h - LE01 - exercícios 10 ao 13 Gabarito lista 1 (02/10)
4 (13/10)	8	Aula 5 - Espectrometria de massas (EM) Aula 6 - EM - Fragmentações fundamentais (EI)	Princípios; técnicas de ionização e analisadores da espectrometria de massas. Introdução aos mecanismos de fragmentação. O aluno deve ser capaz de: Entender o funcionamento de um espectrômetro de massas e o tipo de informação obtida.	1,5h - Aula 5 1,5h - Aula 6 1h - ED04	1h - LE02 - exercícios 1 ao 3 0,5h - EI 01 (14- 16/10)
5 (19/10)	8	Aula 7 e 8 - EM- Fragmentação de	Mecanismos de fragmentação e grupos funcionais. Resolução de exercícios.	1,5h - Aula 7 e 8 1h - ED05	2h - LE02 - exercício 4

		grupos funcionais	O aluno deve ser capaz de: Interpretar um espectro de massas (EI), determinar a fórmula molecular e propor estruturas.		
6 (26/10)	8	Aula 9 – EM-Fragmentação grupos funcionais (CID) Aula dúvidas - Síncrona (28/10)	Mecanismos de fragmentação e grupos funcionais em CID. O aluno deve ser capaz de: Reconhecer as diferenças entre os espectros gerados pelos dois métodos de ionização, conhecer os principais mecanismos de frag. em CID.	1h – Aula 9 2h – Aula D. 1h – ED06	Gabarito lista 2 2h – AV01 (28-30/10) EI 02
7 (03/11)	8	Aula 10 e 10.1 – RMN ¹ H - introdução Aula 11 e 11.1 - RMN ¹ H - efeitos de anisotropia	Espectroscopia de Ressonância Magnética nuclear de ¹ H: Princípios, fundamentos e instrumentação. Anisotropia magnética e desdobramento spin-spin O aluno deve ser capaz de: Entender o funcionamento de um RMN e o tipo de informação obtida.	1,6h – Aula 10 e 10.1 2h – Aula 11 e 11.1 1h – ED07	2h – LE03
8 (09/11)	6	Aula12 – RMN ¹ H	RMN ¹ H: desdobramento spin-spin (2ª ordem) O aluno deve ser capaz de: Interpretar um espectro de RMN de ¹ H e determinar a estrutura do composto analisado.	1h – Aula 12 1h – Aula res. 1h – ED08	2h – LE04 Gabarito lista 3
9 (16/11)	6	Aula dúvidas Síncrona (18/11) Aula 13 - RMN ¹³ C	Espectroscopia de Ressonância Magnética nuclear de ¹³ C: Princípios, fundamentos. O aluno deve ser capaz de: Interpretar um espectro de RMN de ¹³ C e determinar a estrutura do composto analisado	2h – Aula D. 1h – Aula 13 1h – ED09	Gabarito lista 4 EI3 (18-20/11) 2h – LE05
10 (23/11)	8	Aula14– RMN ¹³ C Exercícios combinados Res	RMN ¹³ C: DEPT e COSY e 2D O aluno deve ser capaz de: Determinar a estrutura de compostos mais complexos usando todas as técnicas de caracterização em conjunto.	1h – Aula 14 1h – Aula res. 1h – ED10	Gabarito lista 5 2h – LE06 EI4 (25-27/11)
11 (30/11)	8	Aula duvidas Síncrona (02/04)	Aula de dúvidas e preparação para avaliação final.	2h – Aula D. 4h – ED revisão	Gabarito lista 6 2h – AV02

					(02-04/12)
12 (07/12)	4	Aula 15 - Aplicações modernas	Métodos modernos de análise estrutural em "big data" O aluno deve ser capaz de: Entender as aplicações das técnicas de caracterização que vão além da identificação de compostos.	1h- Aula 115	2h – REC (09-11/12)

^(a) Alterações podem acontecer ao longo do QS, tais alterações serão avisadas com antecedência via moodle.

Descrição dos instrumentos e estratégias didáticas para as aulas

A matéria da disciplina será ministrada assincronamente sob o formato de vídeo-aula e indicação de outras mídias.

Estes vídeos serão disponibilizados no YouTube com links disponíveis na página do Moodle da disciplina

Os PDFs dos slides das aulas assim como o material dos estudos dirigido estarão na página da disciplina no Moodle.

Descrição dos instrumentos para os horários de atendimento aos alunos

O formato do atendimento ocorrerá pelo chat e o fórum da página Moodle da disciplina, assim como nas aulas síncronas já agendadas no cronograma das disciplinas. Ficar atento com o dia e horário da sua turma. (<https://conferenciaweb.rnp.br/webconf/celio-2>) senha: massas

Descrição dos instrumentos e critérios de avaliação

O conceito final (CF) será dado por

$$CF = 0.4 * M_{A1} + 0.6 * M_{A2}$$

Onde:

$$M_{A1} = ((EI01+EI02)/2) * 0.3 + AV01 * 0.7$$

$$M_{A1} = ((EI03+EI04)/2) * 0.3 + AV02 * 0.7$$

Aproveitamento	Conceito
86 – 100%	A
71 – 85%	B
60 – 70%	C
50 – 59%	D
< 49%	F
Reprovação por falta de entrega das atividades	O

Todos instrumentos avaliativos ficarão disponíveis por um período mínimo de 72h, mas com prazos diferentes de execução.

Exercício individual (EI):

- Questão individual dissertativa envolvendo o conteúdo da disciplina.
- Após a abertura do exercício no Moodle, o aluno terá até 1 hora para finalizar (se não dito diferente).
- A resolução deverá ser enviada em formato de imagem de sua resolução manuscrita.

Avaliação Virtual (AV):

- Avaliação baseada nas listas de exercícios, onde aluno terá sorteada questões dissertativas onde a resolução deverá ser enviada em formato de imagem de sua resolução manuscrita.
- Após a abertura da avaliação no Moodle, o aluno terá até 3 horas para finalizar.

A avaliação de recuperação (REC) ficará condicionalmente marcada para os dias 09-12/dezembro e destinada aos alunos que obtiveram conceitos D e F. A média final, neste caso, será: $MF = (CF1+REC)/2$

Referências bibliográficas básicas

1. Pavia, D.L.; Lampman, G.M.; Kriz, G.S.; Vyvyan, J.R. Introdução a espectroscopia. 5 ed. Cengage, 2018.
2. Silverstein, R.M.; Webster, F.X.; Kiemli, D;J. Spectrometric identification of organic 7^a ed. : Wiley,

2005.

3. FIELD, L. D. et. al. Organic Structures from Spectra. 4a ed. San Francisco: Wiley , 2008.

Referências bibliográficas complementares

1. BRUICE, P.Y. Organic chemistry. 5a ed. Upper Saddle River: Pearson Prentice Hall, 2006.
2. CLAYDEN, J.; et al. Organic chemistry. 2a ed. Oxford: Oxford University Press, 2012.
3. COSTA, P.R.R. et al. Ácidos e bases em química orgânica. Porto Alegre: Bookman, 2005.