



**MEC-UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DO RIO DE JANEIRO
DECANATO DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO**

PROGRAMA ANALÍTICO

DISCIPLINA

CÓDIGO IC – IC/1332 CRÉDITOS – 4; 60T Cada crédito corresponde a 15h / aula	NOME: “Elucidação Estrutural de Substâncias Naturais” Pré-requisitos: Determinação Estrutural Orgânica (IC/1322) Química Biorgânica (IC-1304)
--	---

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS

OBJETIVO DA DISCIPLINA: Ensinar o aluno a elucidar estruturas de substâncias naturais através da análise de espectros e considerações biossintéticas e preparação de derivados.

EMENTA:

1. Uso das técnicas de análise orgânica para elucidar estruturas de produtos naturais aliados aos conceitos de biossíntese.
2. As técnicas são:
 - a) Ultra-violeta e visível,
 - b) Infra-vermelho,
 - c) Ressonância magnética nuclear uni-(1 D) e bidimensional (2 D),
 - d) Espectrometria de massas.
3. Considerações biogénicas das principais classes de substâncias naturais.
4. Preparação de derivados com acetilação, metilação, oxidação, redução, etc.

PROGRAMA ANALÍTICO

1. Uso dos métodos físicos de análise orgânica para identificar as diferentes classes dos produtos naturais e, inclusive, determinar estruturas de substâncias de representantes dessas classes como: ácidos e ésteres graxos saturados e insaturados, terpenos, derivados cinâmicos, mono- e bi-flavonóides, xantonas, cromonas, alcalóides, etc. .

As técnicas usadas são:

- a) Ultra-violeta e visível: Usar exemplos de aplicação de análise das bandas de transições eletrônicas com adição de reagentes como hidróxido de sódio, acetato de sódio, ácido bórico e cloreto de alumínio.
 - b) Infra-vermelho: usar exemplo de aplicação de IV para tirar conclusões relevantes para elucidar estrutura de produtos naturais.
 - c) Ressonância magnética nuclear uni-(1 D) e bidimensional (2 D). Usar exemplos de aplicação espectros de RMN ^1H e ^{13}C para definir estruturas naturais. As técnicas mais usadas são:
 - Correlação bidimensional homonuclear de hidrogênio e hidrogênio ($^1\text{H}\text{-}^1\text{H}$ -COSY) e carbono-13 e carbono-13 ($^{13}\text{C}\text{-}^{13}\text{C}$ -COSY- $^1\text{J}_{\text{CC}}$).
 - Correlação bidimensional heteronuclear de hidrogênio e carbono-13 via uma ligação HETERO-COSY e HMQC e a longa distância COLOC e HMBC.
 - Efeito nuclear Overhauser (NOE) por subtração de espectros ($^1\text{H}\{^1\text{H}\}$ NOE) e por experiência bidimensional ($^1\text{H}\text{-}^1\text{H}$ -NOESY).
 - d) Espectrometria de massas. Mostrar exemplos cujos dados de massas foram de extrema relevância na elucidação estrutural.
 - e) Rotação ótica ($[\alpha]_D$), dicroísmo circular (CD) e dispersão ótica rotatório (ORD). Como exemplo de definição estereoquímica da substância.
2. Mostrar preparação de derivados obtidos por acetilação, metilação, oxidação, redução. Etc. e usar técnicas especiais como NOEDIFF ou NOESY para definir estruturas naturais.
 3. Considerações biogenéticas das principais classes de substâncias naturais.

Referências

- a) Trabalhos que estão sendo desenvolvidos pelos grupos de pesquisa da UFRRJ.
- b) Trabalhos publicados em periódicos frequentemente utilizados para consultas tais como: *Phytochemistry*, *J. Nat. Prod.*, *Nat. Prod. Research*, *J. Org. Chem.*, *Tetrahedron Letter.*, *J. Braz. Chem. Soc.*, *Química Nova*, *J. Am. Chem. Soc.*, etc..
- c) Teses para serem analisados, inclusive, os espectros dos produtos naturais e derivados.
- d) Livros textos para consulta das técnicas:
 - E. Breitmaier and Voelter, Carbon-13 NMR Spectroscopy: High-Resolution Methods and Applications in Organic Chemistry and Biochemistry (3rd Edn), CH, Weinheim (1987).
 - A.E. Derome, Modern NMR Techniques for Organic Research, Oxford (1988)
 - J. B. Lambert, H.F. Shurvell, D. A. Lightner, R.G. Cooks, Introduction to organic spectroscopy, Macmillan Publ. Company, N. Y. (1987).
 - K.B.G. Torssell, Natural Product Chemistry: A Mechanistic and Biosynthetic Approach Secondary Metabolism, John Wiley, N.Y. (1983).