



PROGRAMAS E BIBLIOGRAFIAS

Disciplina	
Código	Nome
QO424	Fundamentos em Espectroscopia e Ressonância Magnética Nuclear

Vetor
OF:S-5 T:002 P:000 L:000 O:000 D:000 HS:002 SL:002 C:002 AV:N EX:S FM:75%

Pré-Req
QO321

Ementa
Fundamentos experimentais, interpretação de dados e aplicações da Espectroscopia de Ressonância Magnética Nuclear.

Programa
<p>1 - <i>Princípios fundamentais</i> Núcleos spin-ativos; <i>momentum</i> angular; momento magnético; núcleo em campo magnético estático; população dos níveis; condição de ressonância.</p> <p>2- <i>Espectrômetro de Ressonância Magnética Nuclear</i> Componentes eletrônicos básicos do espectrômetro; sonda; detecção do sinal de RMN; transformada de Fourier; preparação de amostra; solventes deuterados.</p> <p>3- <i>Parâmetros espectrais</i> <i>Deslocamento Químico</i> (δ) Proteção nuclear e deslocamento químico (ambiente químico); blindagem diamagnética; blindagem paramagnética; compostos de referência; escala de deslocamento químico; intensidade do sinal.</p> <p><i>Constante de Acoplamento Escalar</i> (J) Origem da constante de acoplamento escalar (J) spin-spin; regra $2nI + 1$, intensidade das componentes dos multipletos; triangulo de Pascal; acoplamentos homonucleares e heteronucleares.</p> <p>4- <i>Constante de acoplamento homonuclear</i> (${}^nJ_{HH}$) Acoplamentos geminais (${}^2J_{HH}$) positivo e negativo; acoplamento vicinal (${}^3J_{HH}$) relação de Karplus; acoplamento a longa distância (alílicos); acoplamentos em moléculas rígidas; acoplamentos em moléculas flexíveis (mudança conformacional); tautomerismo ceto-enólico; hidrogênios diastereotópicos; não equivalência química; não equivalência magnética.</p> <p>5- <i>Espectro de RMN de ${}^{13}C$</i> Núcleo de ${}^{13}C$; espectro acoplado; espectro desacoplado; deslocamento químico de ${}^{13}C$.</p> <p>6- <i>Resolução de espectros</i> Atribuição de sinais de espectros de RMN de 1H e de ${}^{13}C$ e determinação estrutural de compostos orgânicos alifáticos saturados e insaturados, sistemas aromáticos e heteroaromáticos.</p> <p>7- <i>RMN de outros núcleos</i> Espectros de RMN de 1H e ${}^{13}C$ para compostos contendo ${}^{19}F$ e/ou ${}^{31}P$; efeito de núcleos quadrupolares (${}^{14}N$) nos espectros de RMN de 1H; comparação com moléculas enriquecidas em ${}^{15}N$.</p> <p>8- <i>Outras técnicas de RMN</i> Espectros de RMN de ${}^{13}C$ DEPT; mapas de contorno 2D homonuclear (COSY, TOCSY e NOESY) e heteronuclear (HSQC e HMBC).</p>

Bibliografia

1. Silverstein, Bassler, Morrill, Identificação Espectrométrica de Compostos Orgânicos.
2. Friebolin, basic One-and-Two-Dimensional NMR Spectroscopy, 2 ed, 1993.
3. Pavia, Lampman, Kriz, Introduction to Spectroscopy, 2 ed, 1996.

Critérios de Avaliação

Critérios de avaliação definidos pelo Professor, com base no disposto na Seção I – Normas Gerais, Capítulo V – Da Avaliação do Aluno na Disciplina, do Regimento Geral de Graduação. Frequência: 75 % (* O abono de faltas será considerado dentro do previsto no capítulo VI, seção X, artigo 72 do Regimento Geral de Graduação)