



**PLANO DE DESENVOLVIMENTO DE DISCIPLINA**

**2º Semestre 2022**

<b>Disciplina</b>	
<b>Código</b>	<b>Nome</b>
QO424	Fundamentos em Espectroscopia de RMN

<b>Turmas</b>	<b>Horário</b>	<b>Local</b>
A	Qui - 19/21	CB04

**Docentes**

Cláudio F. Tormena, [tormena@unicamp.br](mailto:tormena@unicamp.br) (sala I-201 ou diretoria do IQ)

**Forma de Condução/Organização da Disciplina e das Avaliações**

Descrição: As aulas serão presenciais sendo que todo material será disponibilizado via classroom. Duas avaliações (A1 e A2) durante o semestre serão realizadas no formato remoto, e uma prova (P1) presencial ao final do semestre.

**Prazos de Entrega das Atividades e dos Resultados das Avaliações**

Descrição: As atividades A1 e A2 terão o prazo de 7 dias para serem entregues, enquanto a prova (P1) terá a duração de 100 min. Os resultados das atividades e da prova serão divulgados em no máximo uma semana.

**Critérios de Avaliação e Aprovação**

Uma Prova (P1) mais duas atividades A1 e A2. A média final será  $MF = 0,7 \times P1 + 0,3 \times (\text{média aritmética das atividades})$ . Nota < 5 exame. Para quem for para exame:  $(MF + \text{Nota Exame})/2$ , se  $\geq 5$  aprovado; se < 5 reprovado.

**Forma de Atendimento Extra-Classe**

Descrição: Os alunos serão atendidos na minha sala I-201 as quintas-feiras das 17:30 as 18:30.

**Calendário**

<b>Data</b>	<b>Atividade</b>
<b>18/08</b>	
<b>01, 08, 15, 22, 29/09</b>	
<b>06, 13, 20, 27/10</b>	<b>Atividade 1 dia 06/10</b>
<b>03, 10, 17, 24*/11</b>	<b>03/11 Atividade 2, 24/11 não haverá aula</b>
<b>01, 15/12</b>	<b>01/12 P1 e 15/12 exame</b>

**Outras informações relevantes**



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 (<math>\delta</math>)</i> 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 (<math>J</math>)</i> Origem da constante de acoplamento escalar (<math>J</math>) spin-spin; regra <math>2nI + 1</math>, intensidade das componentes dos multipletos; triângulo de Pascal; acoplamentos homonucleares e heteronucleares.</p> <p>4- <i>Constante de acoplamento homonuclear (<math>^1J_{HH}</math>)</i> Acoplamentos geminais (<math>^2J_{HH}</math>) positivo e negativo; acoplamento vicinal (<math>^3J_{HH}</math>) 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 <math>^{13}C</math></i> Núcleo de <math>^{13}C</math>; espectro acoplado; espectro desacoplado; deslocamento químico de <math>^{13}C</math>.</p> <p>6- <i>Resolução de espectros</i> Atribuição de sinais de espectros de RMN de <math>^1H</math> e de <math>^{13}C</math> 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 <math>^1H</math> e <math>^{13}C</math> para compostos contendo <math>^{19}F</math> e/ou <math>^{31}P</math>; efeito de núcleos quadrupolares (<math>^{14}N</math>) nos espectros de RMN de <math>^1H</math>; comparação com moléculas enriquecidas em <math>^{15}N</math>.</p> <p>8- <i>Outras técnicas de RMN</i> Espectros de RMN de <math>^{13}C</math> 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.

**Crerios de Avaliao**

Crerios de avaliao definidos pelo Professor, com base no disposto na Seao I – Normas Gerais, Capitulo V – Da Avaliao do Aluno na Disciplina, do Regimento Geral de Graduao. Frequencia: 75 % (\* O abono de faltas ser considerado dentro do previsto no capitulo VI, seao X, artigo 72 do Regimento Geral de Graduao)