



**PLANO DE DESENVOLVIMENTO DE DISCIPLINA**

1º Semestre 2023

Disciplina	
Código	Nome
QO424	Fundamentos em Espectroscopia de RMN

Turmas	Horário	Local
A	21/23	IQ-03

**Docentes**

Prof. Cláudio F. Tormena, [tormena@unicamp.br](mailto:tormena@unicamp.br) (sala I-201 ou diretoria do IQ)  
MSc Laiza B. Loureiro, [l193237@dac.unicamp.br](mailto:l193237@dac.unicamp.br) (laboratório I-200)

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

Descrição: As aulas serão presenciais sendo que todo material será disponibilizado via classroom. Uma atividade (A1) durante o semestre e uma prova (P1) ao final do semestre.

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

Descrição: A atividade A1 e a prova P1 serão presenciais e terá duração de 100 min. Os resultados da atividade e da prova serão divulgados em no máximo uma semana.

**Critérios de Avaliação e Aprovação**

Uma Prova (P1) mais uma atividade (A1). A média final será  $MF = 0,7 \times P1 + 0,3 \times A1$ . Nota < 5 exame. Para quem for para exame:  $(MF + \text{Nota Exame})/2$ , se  $\geq 5$  aprovado; se < 5 reprovado. O exame final substituirá a prova no caso de faltas abonadas pelo inciso V do artigo 72 do regimento geral de graduação.

**Forma de Atendimento Extra-Classe**

Descrição: Os alunos serão atendidos na minha sala I-201 as quintas-feiras das 17:30 às 18:30, bem como pelo PED alocado para essa disciplina.

**Calendário**

Data	Atividade
07, 14, 21 e 28/03	
04, 11, 18 e 25/04	
02, 09, 16, 23, 30*/05	02/05 Atividade 1; 30/05 não haverá aula (SBQ)
06, 13, 20/06	20/06 Prova
11/07	exame

**Outras informações relevantes**

(1) Art. 56 do Regimento Geral de Graduação: São condições para aprovação: II - nas disciplinas em que nota e frequência são adotadas como forma de avaliação – obter **nota final**

igual ou superior a 5,0 (cinco vírgula zero) e a frequência mínima estabelecida para a disciplina no Catálogo dos Cursos de Graduação; a frequência mínima de 75%.

(2) **Sobre o Abono de Faltas:** os critérios do Abono de Faltas são definidos pelo artigo 72, do Regimento Geral de Graduação.

(3) De acordo com a **Deliberação CG 2022/01** sobre **PROVA SUBSTITUTIVA EM CASO DE FALTA JUSTIFICADA POR COVID-19**, a CG estabelece que o exame final poderá substituir a avaliação no dia de faltas abonadas pelo inciso V do artigo 72, exceto se o(a) estudante comprovar que a ausência foi motivada por suspeita ou contágio por COVID-19. Nessas situações – suspeita ou contágio comprovado por COVID-19 – o(a) estudante terá direito a reposição da atividade avaliativa, desde que componha sua média final, em data a ser combinada com o docente responsável, não podendo a prova de exame final ser utilizada para fins de substituição.

(4) Quaisquer alterações no PDE, propostas pelo(a) Docente ou Discentes, no transcorrer do semestre, só poderão ser realizadas mediante a concordância do(a) Docente e Discentes, e autorização da Comissão de Graduação.

SEGUEM A EMENTA, PROGRAMA E BIBLIOGRAFIA

Código: <b>QO424</b>								
Nome: <b>Fundamentos em Espectroscopia e Ressonância Magnética Nuclear</b>								
Nome em Inglês: <b>Fundamentals of Spectroscopy and Nuclear Magnetic Resonance</b>								
Nome em Espanhol: <b>Fundamentos de Espectroscopia y Resonancia Magnética Nuclear</b>								
Tipo de Disciplina: <b>Semanal</b>								
Tipo de Aprovação: <b>Nota e Frequência</b>								
Característica: <b>Regular</b>								
Frequência: <b>75%</b>								
Tipo de Período / Período de Oferecimento: <b>Semestral / Todos os períodos</b>								
Exige Exame: <b>Sim</b>								
Vetores								
T	L	P	O	PE	OE	SL	SEMANAS	CRÉDITO
2	-	-	-	-	-	2	15	2
Ocorrência nos Currículos: <b>05, 50, 63</b>								
Pré-requisitos: <b>QO321</b>								
Ementa: <b>Fundamentos experimentais, interpretação de dados e aplicações da Espectroscopia de Ressonância Magnética Nuclear.</b>								
Programa:								
1 - Princípios fundamentais								
Núcleos spin-ativos; momentum angular; momento magnético; núcleo em campo magnético estático; população dos níveis; condição de ressonância.								
2- Espectrômetro de Ressonância Magnética Nuclear								
Componentes eletrônicos básicos do espectrômetro; sonda; detecção do sinal de RMN; transformada de Fourier; preparação de amostra; solventes deuterados.								
3- Parâmetros espectrais								
Deslocamento Químico ( $\delta$ )								
Proteção nuclear e deslocamento químico (ambiente químico); blindagem diamagnética; blindagem paramagnética; compostos de referência; escala de deslocamento químico; intensidade do sinal.								
Constante de Acoplamento Escalar ( $J$ )								
Origem da constante de acoplamento escalar ( $J$ ) spin-spin; regra $2nI + 1$ , intensidade das componentes dos multipletos; triangulo de Pascal; acoplamentos homonucleares e heteronucleares.								
4- Constante de acoplamento homonuclear ( $^nJ_{HH}$ )								
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.								
5- Espectro de RMN de $^{13}C$								
Núcleo de $^{13}C$ ; espectro acoplado; espectro desacoplado; deslocamento químico de $^{13}C$ .								

#### 6- Resolução de espectros

Atribuição de sinais de espectros de RMN de  $^1\text{H}$  e de  $^{13}\text{C}$  e determinação estrutural de compostos orgânicos alifáticos saturados e insaturados, sistemas aromáticos e heteroaromáticos.

#### 7- RMN de outros núcleos

Espectros de RMN de  $^1\text{H}$  e  $^{13}\text{C}$  para compostos contendo  $^{19}\text{F}$  e/ou  $^{31}\text{P}$ ; efeito de núcleos quadrupolares ( $^{14}\text{N}$ ) nos espectros de RMN de  $^1\text{H}$ ; comparação com moléculas enriquecidas em  $^{15}\text{N}$ .

#### 8- Outras técnicas de RMN

Espectros de RMN de  $^{13}\text{C}$  DEPT; mapas de contorno 2D homonuclear (COSY, TOCSY e NOESY) e heteronuclear (HSQC e HMBC).

#### **Bibliografia básica**

- 1) SILVERSTEIN, R. M. et al. **Identificação espectrométrica de compostos orgânicos**. 8. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2019.
- 2) FRIEBOLIN, H. **Basic one- and two-dimensional NMR spectroscopy**. 5. ed. Weinheim: Wiley-VCH, 2011.
- 3) PAVIA, D. L.; LAMPMAN, G. M.; KRIZ, G. S. **Introduction to spectroscopy: a guide for students of organic chemistry**. 3. ed. South Melbourne: Brooks/Cole, 2001.

#### **Bibliografia Complementar**

- 1) MITCHELL, T. N.; COSTISELLA, B. **NMR – From spectra to structures: An experimental approach**, 2. Ed, Springer Nature ebook 2007
- 2) MOHAN, J. **Organic Spectroscopy: Principles and applications**, 2<sup>nd</sup> edition, Alpha Science (2004)
- 3) KEELER, J. **Understanding NMR spectroscopy**, 2<sup>nd</sup> edition; Wiley, 2010.
- 4) LEVITT, M. H. **Spin Dynamics: Basic of NMR**, 2<sup>nd</sup> ed., Wiley (2008)
- 5) CARBAJO, R. J.; NEIRA, J. L. **NMR for chemists and biologists**, 1 ed. Springer nature ebook 2013.