



PLANO DE DESENVOLVIMENTO DE DISCIPLINA

2º Semestre 2023

Disciplina	
Código	Nome
QO424	Fundamentos em Espectroscopia de RMN

Turmas	Horário	Local
A	5ª: 19/21	PB18

Docentes

Prof. Cláudio F. Tormena, 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. 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 ≥ 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

Calendário

Data	Atividade
03, 10, 17, 24*, 31/08	*não haverá aula SQ
14, 21, 28/09	28/09 Atividade 1
05, 19, 26/10	
09, 16, 23, 30/11	30/11 prova
14/12	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.

O docente poderá inserir quaisquer outras informações que julgar relevante. Por favor, apagar este texto na versão final

SEGUEM A EMENTA, PROGRAMA E BIBLIOGRAFIA

Código: QO424								
Nome: Fundamentos em Espectroscopia e Ressonância Magnética Nuclear								
Nome em Inglês: Fundamentals of Spectroscopy and Nuclear Magnetic Resonance								
Nome em Espanhol: Fundamentos de Espectroscopia y Resonancia Magnética Nuclear								
Tipo de Disciplina: Semanal								
Tipo de Aprovação: Nota e Frequência								
Característica: Regular								
Frequência: 75%								
Tipo de Período / Período de Oferecimento: Semestral / Todos os períodos								
Exige Exame: Sim								
Vetores								
T	L	P	O	PE	OE	SL	SEMANAS	CRÉDITO
2	-	-	-	-	-	2	15	2
Ocorrência nos Currículos: 05, 50, 63								
Pré-requisitos: QO321								
Ementa: Fundamentos experimentais, interpretação de dados e aplicações da Espectroscopia de Ressonância Magnética Nuclear.								
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 (δ)								
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 ^1H e de ^{13}C e determinação estrutural de compostos orgânicos alifáticos saturados e insaturados, sistemas aromáticos e heteroaromáticos.

7- RMN de outros núcleos

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 .

8- Outras técnicas de RMN

Espectros de RMN de ^{13}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**, 2nd edition, Alpha Science (2004)
- 3) KEELER, J. **Understanding NMR spectroscopy**, 2nd edition; Wiley, 2010.
- 4) LEVITT, M. H. **Spin Dynamics: Basic of NMR**, 2nd ed., Wiley (2008)
- 5) CARBAJO, R. J.; NEIRA, J. L. **NMR for chemists and biologists**, 1 ed. Springer nature ebook 2013.