



PLANO DE DESENVOLVIMENTO DE DISCIPLINA

2º Semestre 2024

Disciplina	
Código	Nome
QO424A	Fundamentos em Espectroscopia de RMN

Turmas	Horário	Local
A	Quintas-Feiras das 19h00 às 21h00	CB01

Docentes
Prof. Emilio Carlos de Lucca Júnior, sala D-318, e-mail: eluccajr@unicamp.br

Forma de Condução/Organização da Disciplina e das Avaliações
Descrição: As aulas serão presenciais sendo que todo material será disponibilizado via Google 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 até uma semana antes da próxima avaliação.

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: Será realizado um plantão de dúvidas de 1 hora por semana com horário a definir, dependendo da disponibilidade dos alunos.

Calendário	
Data	Atividade
10/10	Atividade 1
28/11	Prova
12/12	Exame

Art. 58 do Regimento Geral de Graduação: O Exame deverá ser realizado no período previsto pelo Calendário Escolar e deverá estar agendado para o mesmo dia da semana e horário em que são ministradas as aulas da disciplina, exceto na ocorrência de feriado ou ponto facultativo.

19 a 23/08 - Semana da Química - não haverá aula para as disciplinas dos cursos 05/50.
07/09 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades
12/10 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades
15/10 - Avaliação e discussão de cursos - Não haverá aula
28/10 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades

02/11 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades
15 e 16/11 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades
20/11 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades
02 a 07/12 - Semana de Estudos
09 a 14/12 - Semana de Exames

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, O PROGRAMA E A 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; triângulo 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.