

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 ou QO323 ou QO427								
Ementa: Fundamentos experimentais, interpretação de dados e aplicações da Espectroscopia de Ressonância Magnética Nuclear.								
<p>Programa:</p> <p>1 - Princípios fundamentais</p> <p>Núcleos spin-ativos; momentum angular; momento magnético; núcleo em campo magnético estático; população dos níveis; condição de ressonância.</p> <p>2- Espectrômetro de Ressonância Magnética Nuclear</p> <p>Componentes eletrônicos básicos do espectrômetro; sonda; detecção do sinal de RMN; transformada de Fourier; preparação de amostra; solventes deuterados.</p> <p>3- Parâmetros espectrais</p> <p>Deslocamento Químico (δ)</p> <p>Proteção nuclear e deslocamento químico (ambiente químico); blindagem diamagnética; blindagem paramagnética; compostos de referência; escala de deslocamento químico; intensidade do sinal.</p> <p>Constante de Acoplamento Escalar (J)</p> <p>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- Constante de acoplamento homonuclear ($^1J_{HH}$)</p> <p>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- Espectro de RMN de ^{13}C</p> <p>Núcleo de ^{13}C; espectro acoplado; espectro desacoplado; deslocamento químico de ^{13}C.</p>								

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.