



DADOS DE IDENTIFICAÇÃO E ATRIBUTOS¹

CÓDIGO							NOME							DEPARTAMENTO OU EQUIVALENTE						
PPGQ0023							Ressonância Magnética Nuclear de ¹ H e ¹³ C							Departamento de Química Orgânica						
CARGA HORÁRIA (estudante)							MODALIDADE/ SUBMODALIDADE							PRÉ-REQUISITO (POR CURSO)						
T	T/P	P	PP	Ext	E	TOTAL	Disciplina optativa													
60						60														
CARGA HORÁRIA (docente/turma)							MÓDULO							SEMESTRE DE INÍCIO DA VIGÊNCIA						
T	T/P	P	PP	Ext	E	TOTAL	T	T/P	P	PP	Ext	E	2023.1							
60						60	20													

EMENTA

Apresentar as diferentes técnicas e métodos de interpretação de espectros de RMN de ¹H e de ¹³C, mono e bidimensionais com fins a elucidação estrutural de moléculas orgânicas; elaboração de textos de caráter científicos relacionados aos trabalhos de elucidação estrutural empregando atribuição inequívoca de dados de RMN para as estruturas analisadas durante o curso.

OBJETIVOS

OBJETIVO GERAL

Preparar o aluno para realizar a identificação estrutural de compostos orgânicos, utilizando as técnicas de Ressonância Magnética Nuclear de ¹H e ¹³C.

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

Familiarizar o aluno com o espectrômetro de RMN e as operações básicas;

Usar as técnicas básicas de RMN para identificar compostos orgânicos;

Discutir técnicas específicas a determinados problemas estruturais.

CONTEÚDO PROGRAMÁTICO

1. Preparo de amostras para análise por RMN em solução.
2. Cuidados básicos com espectrômetros de RMN.
3. Operação básica de um espectrômetro de RMN para aquisição de experimentos em 1D e 2D.
4. Ajustes básicos (Temperatura, Lock, Shimming, Tuning, Matching).
5. Ajuste dos parâmetros básicos de aquisição e processamento (largura espectral, transmissor, fase, linha base, etc.).
6. Processamento de espectros uni e bidimensionais.
7. Revisão sobre o fenômeno da Ressonância Magnética Nuclear (RMN). Revisão sobre técnicas usuais (1D) de análise de núcleos de ¹H e ¹³C. RMN pulsada em uma dimensão.
8. Interpretação das sequências de pulsos - conceitos básicos.
9. Análise de espectros de RMN de ¹H e ¹³C de compostos orgânicos.
10. Deslocamentos químicos de ¹H e ¹³C de substâncias orgânicas. Constantes de acoplamentos entre ¹H-¹H e ¹H-¹³C. Relação entre espectros e estruturas moleculares. Análise de diferentes sistemas de spin. Relaxação spin-spin. Relaxação spin-rede.
11. Determinação da estereoquímica relativa de substâncias orgânicas empregando RMN. Emprego das técnicas de NOE na determinação estrutural e estereoquímica.
12. Teoria e aplicações das técnicas DEPT e INEPT na identificação das multiplicidades de carbonos de substâncias orgânicas.
13. Ressonância Magnética Nuclear bidimensional. J-resolvido, COSY, HSQC, HMBC, NOESY e TOCSY. Acoplamentos a longa distância.

METODOLOGIA DE ENSINO-APRENDIZAGEM

¹ Os "dados de identificação e atributos" devem estar registrados conforme especificado no Programa do Componente Curricular e disponível no site da Superintendência Acadêmica (SUPAC)SIAC. O único campo a ser preenchido nesse tópico do formulário é o que diz respeito ao módulo de vagas ofertadas.

Descrição da(s) atividade(s) didática(s): aulas expositivas e vídeos.

Serão utilizadas abordagens metodológicas ativas, participativas, colaborativas e criativas que privilegiem o protagonismo dos estudantes como construtores de saberes, de conhecimentos e de produções autorais.

AVALIAÇÃO DA APRENDIZAGEM

Serão utilizados instrumentos diversificados de avaliação da aprendizagem que reflitam o acompanhamento do processo de construção de conhecimentos nas suas dimensões conceituais, procedimentais e atitudinais pelo estudante, com estreita relação de coerência com os objetivos de aprendizagem e com a/s metodologia/s de ensino-aprendizagem adotadas.

A avaliação da aprendizagem será realizada por meio das seguintes ferramentas avaliativas: a) avaliação escrita, b) apresentação de seminários.

A nota final será constituída a partir da média ponderada das avaliações, a critério do professor.

REFERÊNCIAS

REFERÊNCIAS BÁSICAS

1. Claridge, T.D.W. High-Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry. 2. ed., Elsevier, 2009.
2. Jacobsen, N. E. NMR spectroscopy explained: simplified theory, applications and examples for organic chemistry and structural biology. John Wiley & Sons, 2007.
3. Pavia, D. L., Lampman, G. M., Kriz, G. S., Vyvyan, J.R. Introdução à Espectroscopia. Tradução da 5. Ed. norte-americana, Cengage Learning, 2016.
4. Silverstein, R.M.; Webster, F., Kiemle, D.J., Identificação Espectrométrica de Compostos Orgânicos, LTC, 2006

REFERÊNCIAS COMPLEMENTARES

5. Friebolin, H. Basic One- and Two-dimensional NMR Spectroscopy. John Wiley & Sons, 2005.
 6. Gil, V.M.S; Geraldes, C.F.G.C.; Ressonância Magnética Nuclear: Fundamentos, Métodos e Aplicações; Portugal, Fundação Calouste Gulbenkian, 1987.
 7. Jacobsen, N.E.; NMR data interpretation explained: Understanding 1D and 2D NMR spectra if organic compounds and natural products, New jersey: WILEY, Canada, 2016.
 8. Simpson, J. H. Organic Structure Determination Using 2-D NMR Spectroscopy: A Problem-Based Approach. Elsevier, Canada, 2008.
 9. Literatura científica de revistas especializadas, como Magnetic Resonance in Chemistry, Journal of Magnetic Resonance, Annals of Magnetic Resonance, Progress in Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy.
-
-

Aprovado na reunião do Departamento de Química Orgânica em, 29/09/2023

Assinatura do Chefe
