



PLANO DE DESENVOLVIMENTO DE DISCIPLINA

1º Semestre 2021

Disciplina	
Código	Nome
QO424	Fundamentos em Espectroscopia e RMN

Turmas	Horário	Local
A	Terças-feiras das 21:00 as 23:00	remota

Docentes
Cláudio Francisco Tormena

Disciplinas Teóricas – Plano de Ação IQ 1S/2021
As disciplinas teóricas do 1S/2021, em virtude da pandemia de COVID-19 e da necessidade de manutenção de distanciamento social, serão conduzidas integralmente de forma remota e mediada por tecnologia, incluindo os processos avaliativos . Qualquer alteração na forma de condução da disciplina será informada com a devida antecedência.

Forma de Condução das Aulas Remotas Mediadas por Tecnologia
<input type="checkbox"/> Aulas online síncronas (ao vivo) <input type="checkbox"/> Aulas Gravadas <input checked="" type="checkbox"/> Aulas online ao vivo + disponibilização da gravação da aula
Descrição:

Forma de Atendimento às Dúvidas das Aulas Remotas
Descrição: : Será agendando semanalmente com os alunos um horário para atendimento. O dia e horário será marcado a posteriori em comum acordo com os alunos

Plataforma Virtual que se pretende utilizar
<input checked="" type="checkbox"/> Google Classroom + Google Meet <input type="checkbox"/> Moodle
Outra (especificar):

Forma de Condução das Avaliações e Prazos de Entrega
Descrição: Será aplicada atividades ao longo do semestre via classroom e uma avaliação ao final também via classroom.

Critérios de Avaliação e Aprovação
Descrição: Uma Prova (P1) mais duas atividades A1 e A2. A média final será $MF = 0,7 \times P1 + 0,3 \times (\text{média aritmética das atividades})$. Nota < 5 exame. Para quem for para exame: $(MF + \text{Nota Exame})/2$, se ≥ 5 aprovado; se < 5 reprovado.

Calendário – Disciplinas Teóricas	
Data	Atividade
16, 23 e 30/03	
06, 13, 20, 27/04	Atividade* 1 dia 27/04
04, 11, 18, 25/05	Atividade* 2 dia 25/05
08, 15, 22, 29/06	Prova* 29/06
20/07	exame
*O prazo para realizar cada atividade e prova será de no mínimo 24 horas e no máximo 7 dias	
01 a 03/04 – Não haverá atividades 21/04 - Não haverá atividades 01/05 - Não haverá atividades 24/05 - Reunião de Avaliação de Curso – Não haverá atividades 03 a 05/06 - Não haverá atividades 09 e 10/07 - Não haverá atividades 17/07 - Término das Aulas 19 a 24/07 - Semana de Exames Finais	

Outras informações relevantes

SEGUEM A EMENTA, PROGRAMA E BIBLIOGRAFIA



Disciplina	
Código	Nome
QO424	Fundamentos em Espectroscopia e Ressonância Magnética Nuclear

Vetor
OF:S-5 T:002 P:000 L:000 O:000 D:000 HS:002 SL:002 C:002 AV:N EX:S FM:75%

Pré-Req
QO321

Ementa
Fundamentos experimentais, interpretação de dados e aplicações da Espectroscopia de Ressonância Magnética Nuclear.

Programa
<p>1 - <i>Princípios fundamentais</i> Núcleos spin-ativos; <i>momentum</i> angular; momento magnético; núcleo em campo magnético estático; população dos níveis; condição de ressonância.</p> <p>2- <i>Espectrômetro de Ressonância Magnética Nuclear</i> Componentes eletrônicos básicos do espectrômetro; sonda; detecção do sinal de RMN; transformada de Fourier; preparação de amostra; solventes deuterados.</p> <p>3- <i>Parâmetros espectrais</i> <i>Deslocamento Químico</i> (δ) Proteção nuclear e deslocamento químico (ambiente químico); blindagem diamagnética; blindagem paramagnética; compostos de referência; escala de deslocamento químico; intensidade do sinal. <i>Constante de Acoplamento Escalar</i> (J) Origem da constante de acoplamento escalar (J) spin-spin; regra $2nI + 1$, intensidade das componentes dos múltiplos; triângulo de Pascal; acoplamentos homonucleares e heteronucleares.</p> <p>4- <i>Constante de acoplamento homonuclear</i> ($^nJ_{HH}$) 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.</p> <p>5- <i>Espectro de RMN de ^{13}C</i> Núcleo de ^{13}C; espectro acoplado; espectro desacoplado; deslocamento químico de ^{13}C.</p> <p>6- <i>Resolução de espectros</i> 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.</p> <p>7- <i>RMN de outros núcleos</i> 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.</p> <p>8- <i>Outras técnicas de RMN</i> Espectros de RMN de ^{13}C DEPT; mapas de contorno 2D homonuclear (COSY, TOCSY e NOESY) e heteronuclear (HSQC e HMBC).</p>

Bibliografia

1. Silverstain, Bassler, Morril, Identificação Espectrométrica de Compostos Orgânicos.
2. Friebolin, basic One-and-Two-Dimensional NMR Spectroscopy, 2 ed, 1993.
3. Pavia, Lampman, Kriz, Introduction to Spectroscopy, 2 ed, 1996.

Critérios de Avaliação

Critérios de avaliação definidos pelo Professor, com base no disposto na Seção I – Normas Gerais, Capítulo V – Da Avaliação do Aluno na Disciplina, do Regimento Geral de Graduação. Frequência: 75 % (* O abono de faltas será considerado dentro do previsto no capítulo VI, seção X, artigo 72 do Regimento Geral de Graduação)