

SÚMULA DA DISCIPLINA ENSINO REMOTO EMERGENCIAL

1. Identificação

Código e nome da disciplina: QUP 177 – Ressonância Magnética Nuclear I

Professor responsável: Francisco Paulo dos Santos

Nível: Mestrado e Doutorado

Carga horária: 45 h

Créditos: 3 (três)

Revisado e atualizado em: Agosto_2019

2. Ementa

Fundamentos e elucidação de espectros de ^1H e ^{13}C - Ressonância Magnética Nuclear.

3. Objetivo

Resolução e atribuição dos sinais nos espectros de RMN de ^1H e de ^{13}C . Determinação estrutural de compostos orgânicos utilizando diferentes espectros de rotina ^1H , ^{13}C , DEPT. Espectros de correlação homonuclear COSY e TOCSY e de correlação heteronuclear HSQC e HMBC.

4. Conteúdo Programático

4.1 Princípios fundamentais Núcleos spin-ativos; momentum angular; momento magnético; núcleo em campo magnético condição de ressonância.

4.2 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.

4.3 Constante de acoplamento homonuclear (nJ_{HH}) Acoplamentos geminais ($2J_{\text{HH}}$); acoplamento vicinal ($3J_{\text{HH}}$) relação de Karplus; acoplamento a longa distância (alílicos); acoplamentos em moléculas rígidas; acoplamentos em moléculas flexíveis (mudança conformacional); tautomerismo cetoenólico; hidrogênios diastereotópicos; não equivalência química; não equivalência magnética.

4.4 Espectro de RMN de ^{13}C Núcleo de ^{13}C ; espectro acoplado; espectro desacoplado; deslocamento químico de ^{13}C .

4.5 Outras técnicas de RMN Espectros de RMN de ^{13}C DEPT; mapas de contorno 2D homonuclear (COSY, TOCSY) e heteronuclear (HSQC e HMBC).

5. Avaliação

Prova final. Será considerado aprovado o aluno que obtiver conceito final A, B ou C, atribuídos conforme relação abaixo:

A - Ótimo (90 a 100%)

B - Bom (75% a 89%)

C - Regular (60 a 74%)

D - Insuficiente (abaixo de 60%)

FF - Sem frequência

6. Método de Trabalho/Ensino

Serão utilizados recursos como MConf, ZOOM, Google Meeting e outros para atividades síncronas – videoconferência e chats ou assíncrona - exercícios, tarefas, vídeos, etc. As aulas serão dadas ao vivo e dependendo das necessidades disponibilizadas na forma de documentos virtuais.

7. Bibliografia

- T. D. W. Claridge, High-Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry, Tetrahedron Organic Chemistry, 27, Ed. Elsevier, 2009.
- M. Balci, Basic ^1H - ^{13}C -NMR Spectroscopy, Elsevier, Amsterdam, 2005.
- R. M. Silverstein, G. C. Bassler e T. C. Morrill, Identificação Espectrométrica de Compostos Orgânicos, 7ª Ed. LCT, 2010.
- D. Pavia, G. Lampman, G. Kriz e J. Vyvyan, Introduction to Spectroscopy. 2ª Ed. Cengage Learning, 2015.