|  |  |
| --- | --- |
| color_1024x768 | **UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA MARIA**  **PROGRAMA DE DISCIPLINA** |

DEPARTAMENTO:

|  |
| --- |
| **QUÍMICA** |

IDENTIFICAÇÃO DA DISCIPLINA:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| CÓDIGO | NOME (CARGA HORÁRIA - CRÉDITOS) | CARÁTER |
| **QMC996** | **Aplicação Experimental de Espectroscopia de RMN (45-3)** | **Eletiva** |

EMENTA:

|  |
| --- |
| Bases Físicas da RMN. Operação básica de Espectrômetro de RMN. Técnicas de pulso e Transformada de Fourier. Experimentos de RMN 1D de núcleos mais comuns: 1H, 13C, 15N, 31P, 19F, 35Cl, 77Se. Experimentos de RMN 2D. Experimentos para determinação de mecanismos de relaxação. Experimentos para determinação de T1 e T2. Experimentos para determinação de coeficiente de difusão. RMN no estado sólido. Processos Dinâmicos na RMN. |

PROGRAMA:

|  |
| --- |
| TÍTULO E DISCRIMINAÇÃO DAS UNIDADES |
| UNIDADE 1 – OPERAÇÃO DO APARELHO DE RMN  1.1 - Registro de espectro 1D de 1H, 13C e heteronúcleos, integração, expansão de espectros, uso do Lock e desacoplamento  UNIDADE 2 – TÉCNICAS DE PULSO TRANSFORMADA DE FOURIER  2.1 - Coordenadas cartesianas, significados dos pulsos de radiofrequência, precessão da magnetização transversal, relação entre a orientação do vetor, tempo de sinal e frequência do sinal    UNIDADE 3 – EXPERIMENTOS RMN DE 1D  3.1 - Paralelo entre RMN de prótons e Carbono-13, o deslocamento químico, acoplamento spin-spin (C-H e N-H), técnicas de desacoplamento, integração de espectros de RMN, mecanismos de relaxação de spin,medidas do tempo de relação longitudinal, medidas do efeito nuclear de Overhauser  UNIDADE 4 – RESSONÂNCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE 2D  4.1 - Mecânica do esperimento de 2D, espectroscopia correlacionada homonuclear(COSY H-H), espectroscopia correlacionada heteronuclear (COSY C-H), espectroscopia da constante de acoplamento homo-e heteronuclear, espectroscopia bidimensional do efeito nuclear de Overhauser (NOESY), INADEQUATE, aplicações de técnicas de 2D na atribuição de sinais de classe de moléculas representativas da química orgânica e biorgânica  UNIDADE 5 - RMN NO ESTADO SÓLIDO  5.1 - Bases Físicas da RMN no estado sólido: comparação com RMN em solução  5.2 - Operação básica do equipamento de RMN no estado sólido  5.3 - Experimentos 1D de 13C, 15N, 77Se, 31P  Unidade 7 – Processos Dinâmicos na RMN  7.1 Experimentos com temperatura variável  7.2 Experimentos de titulação |

|  |
| --- |
| UNIDADE 6 – PROCESSOS DINÂMICOS NA RMN  6.1 - Experimentos com temperatura variável  6.2 - Experimentos de titulação |

BIBLIOGRAFIA:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| BIBLIOGRAFIA BÁSICA E COMPLEMENTAR | | |
| MARTIN, M. L.;DELPUECH, J. J.; MARTIN, G. J.; **Practical NMR Spectroscopy**, Heyden & Son Ltd., London, 1980.  RHAMAN, A.; **Nuclear Magnetic Resonance**, Springer Verlag, New York, 1986.  MCLAFFERTY, F. W.; TURECEK, F.; **Interpretation of Mass Spectra**, 4th Ed., University Science Books, Sausalito, 1993.  FRIEBOLIN, H.; **Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy**, 4th Completely Revised Edition, John Wiley & Sons, Weinheim, 2005.  Artigos científicos recentes sobre o tema publicados em periódicos da área. | | |
| Data: \_\_\_\_/\_\_\_\_/\_\_\_\_    \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_  Coordenador do Curso | Data: \_\_\_\_/\_\_\_\_/\_\_\_\_  \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_  Chefe do Departamento | |