



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
PRÓ-REITORIA DE PÓS-GRADUAÇÃO

Via Washington Luís, Km 235 - Caixa Postal 676

Fones: (16) 3351-8109 / 3351-8110

Fax: (16) 3361-3176

CEP 13.565-905 - São Carlos - SP - Brasil

End. Eletrônico: progg@ufscar.br

FICHA DE CARACTERIZAÇÃO DE DISCIPLINAS

1. Programa de Pós-Graduação em:

Programa de Pós-Graduação em Química

2. Objetivo da Ficha: Alteração de disciplina.

Código da Disciplina	QUI.118	Total de Créditos	13	Início de Validade	1o. período de 2025
----------------------	---------	-------------------	----	--------------------	---------------------

Nome da Disciplina	Rmn Uma Abordagem Teórico/Prática Moderna
--------------------	---

Campos a serem Alterados

☒ Código da Disciplina	☐ Nome da Disciplina	☐ Carga Horária	☒ Ementa
Código Anterior: QUI.521	☐ Créditos	☐ Pré-Requisitos	

Justificativa:

Nova grade curricular a partir de 2025

3. Carga Horária da Disciplina:

Aulas Teóricas	72	Aulas Práticas	0	Exercícios e Seminários	123
----------------	----	----------------	---	-------------------------	-----

4. Ementa da Disciplina:

Obtenção de medidas espectroscópicas UNI- (1H, 1H c/ pré saturação - diversas sequências de pulsos, 13C{1H}, INEPT, DEPT e gNOESY-1d e BIDIMENSIONAL (gCOSY, TOCSY, J-Resolved, NOESY, HSQC, HMQC e HMBC) envolvendo os seguintes tópicos:

1. Escolha da técnica mais adequada: técnicas uni/bi-dimensionais, quantitativas/qualitativas e sequências de pulsos mais adequadas.

2. Preparo da amostra: cuidados na escolha do solvente, dos tubos e dos seus diâmetros; diferentes tipos de preparo de amostra tanto em solução como no estado semi-sólido (heterogêneo).

3. Ajuste (setup) do equipamento: conhecimento das várias partes do equipamento (amplificador, pré-amplificado, unidade de temperatura variável, sistemas de automação-autosample e diversos tipos de sondas); ajustes de tuning/matching e shimming; calibração de pulsos.

4. Ajuste (setup) dos parâmetros envolvidos nos experimentos: entendimento das sequências de pulsos (diagramas de pulsos e linguagem computacional), principais parâmetros de aquisição e de processamento.

5. Análise dos dados: principais etapas envolvidas no processamento dos espectros (digitalização, deconvolução e funções de apodização).

6. Medidas quantitativas em RMN (qNMR): five batch analysis.

7. RMN como ferramenta analítica: validação de método.

8. Análise quimiometria aplicada à RMN: PCA/HCA e SIMCA/PLS.

9. Seminários temas atuais envolvendo novas sequências de pulsos e/ou técnicas modernas (DNP, ultrafast NMR, Hyphenation-NMR, etc.)

5. Caráter da Disciplina:

Criada para o curso de:

☐

Mestrado

☐

Doutorado

☐

Mestrado Profissional

☒

Todos

Caráter para mestrado:

☐

Obrigatória para:

☒

Optativa para:

Química.

☐

Alternativa para:

☐

Área de Concentração para:

☐

Específica de Linha para:

Caráter para doutorado:

☐

Obrigatória para:

☒

Optativa para:

Química.

☐

Alternativa para:

☐

Área de Concentração para:

☐

Específica de Linha para:

Caráter para mestrado profissional:

☐

Obrigatória para:

☐

Optativa para:

☒

Alternativa para:

Ensino em Química, Química Tecnológica.

☐

Área de Concentração para:

☐

Específica de Linha para:

6. Disciplinas que São Pré-Requisitos:

7. Bibliografia Principal:

1- CLARIDGE, T. D.W. High Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry. 3a Ed. Elsevier Science. Amsterdam. 2016. 552 pp.

2- LEVITT, M.H. Spin dynamics Basics of Nuclear Magnetic Resonance. 2a Ed. Wiltshire. John Wiley & Sons Ltd. 2008. 752 pp.

3- KEELER, J. Understanding NMR Spectroscopy. 2a. Ed. Oxford. John Wiley & Sons. 2010. 528 pp.

4- BRAUN, S.; BERGER, S. 200 and more NMR Experiments: A Practical Course. 3a. Ed. Wiley. 2004. 854 pp.

5- HARWOOD, J.S.; MO, H. Practical NMR Spectroscopy Laboratory Guide. 1a. Ed. Elsevier. 2016. 127 pp.

8. Principais Docentes Responsáveis:

Antonio Gilberto Ferreira

Tiago Venâncio

9. Aprovação da Coordenação do Programa de Pós-Graduação:

Aprovada na 571a. reunião da coordenação deste programa de pós-graduação, realizada em 05/02/2025.

__/__/__

Assinatura do Coordenador do Programa

10. Aprovação do Centro:

Aprovada na 720a. reunião do Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia, realizada em 29/05/2025.

__/__/__

Assinatura do Diretor do Centro