



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.122	Total de Créditos	13	Início de Validade	1o. período de 2025
----------------------	---------	-------------------	----	--------------------	---------------------

Nome da Disciplina	Elucidação Estrutural de Pequenas Moléculas Por Rmn: Uma Abordagem Teórico/Prática Utilizando o Software Acd/Labs
--------------------	---

Campos a serem Alterados

☒ Código da Disciplina	☐ Nome da Disciplina	☐ Carga Horária	☒ Ementa
Código Anterior: QUI.500-1/24	☐ 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:

1. Introdução - público-alvo, objetivos e ementa do curso. Revisão de conceitos básicos: deslocamento químico, constante de acoplamento escalar e dipolar, equação de Karplus.
2. Sistemas de acoplamento de spins, equivalência química e magnética, efeito n.O.e.
3. Exercícios de determinação estrutural envolvendo espectros de ^1H , ^{13}C , COSY, HSQC e HMBC, usando o software TopSpin versão 4.0 da Bruker Biospin.
4. Apresentação do Software ACD/Labs: Conceitos básicos, importação de dados espectrais, database, misturas, elucidação e identificação estrutural.
5. Exercícios integrados de determinação estrutural envolvendo espectros de ^1H , ^{13}C , COSY, HSQC e HMBC, usando o software TopSpin versão 4.0 da Bruker Biospin e ACD da ACD/Labs. Na aula 08, lançamento da agenda para a resolução dos exercícios propostos.
6. Exercícios envolvendo determinação da confi/conformação estrutural (NOESY e ChemDraw).

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- Randazo, A. Guide to NMR Spectral Interpretation - A Problem Based Approach to Determining the Structures of Small Organic Molecules. Loghia Publishing. Itália, 2018. 344 pp.

2- ACD/ChemSketch, version 2021.1.1, Advanced Chemistry Development, Inc., Toronto, ON, Canada, www.acdlabs.com, 2021.

3- Silverstein, R. M., Webster, F. X., & Kiemle, D. J., Bryce, D.L. (2014). Spectrometric Identification of organic compounds. 8th Ed. Hoboken, NJ: John Wiley & Sons, 464 pp.

4- Elyashberg, M. Identification and structure elucidation by NMR spectroscopy (2015). Trends in Analytical Chemistry, v. 69, p. 88-97. <https://doi.org/10.1016/j.trac.2015.02.014>.

8. Principais Docentes Responsáveis:

Antonio Gilberto Ferreira

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

11. Aprovação do Conselho de Pós-Graduação:

Aprovada na 163a. reunião da Câmara de Pós-Graduação, realizada em 25/06/2025.