



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: propp@ufscar.br

FICHA DE CARACTERIZAÇÃO DE DISCIPLINAS

1. Programa de Pós-Graduação em:

Programa de Pós-Graduação em Química

2. Objetivo da Ficha: Criação de disciplina.

Código da Disciplina	QUI.126	Total de Créditos	4	Início de Validade	1o. período de 2025
----------------------	---------	-------------------	---	--------------------	---------------------

Nome da Disciplina	Processamento de Dados de Rmn e Preparação de Figuras Para Textos Científicos Um Curso Prático
--------------------	--

Campos a serem Alterados

☐ Código da Disciplina	☐ Nome da Disciplina	☐ Carga Horária	☐ Ementa
☐ Código Anterior:	☐ Créditos	☐ Pré-Requisitos	

Justificativa:

Nova grade curricular a partir de 2025

3. Carga Horária da Disciplina:

Aulas Teóricas	30	Aulas Práticas	0	Exercícios e Seminários	30
----------------	----	----------------	---	-------------------------	----

4. Ementa da Disciplina:

1. Processamento de dados de RMN de experimentos unidimensionais usando o software TopSpin

a) A transformada de Fourier; b) As funções de apodização; c) Ajuste de fase; d) Ajuste de deslocamento químico; e) Ajuste de linha de base; f) Integração de sinais; g) Determinação de multipletos e constantes de acoplamento; h) Deconvolução; i) Preparação de figuras no modo Plot;

2. Processamento de dados de RMN de experimentos bidimensionais usando o software TopSpin

a) A transformada de Fourier em duas dimensões; b) As funções de apodização; c) Ajuste de fase; d) Ajuste de deslocamento químico; e) Ajuste de linha de base; f) Redução de ruído em t1; g) Preparação de figuras no modo Plot;

3) Processamento de dados oriundos de experimentos especiais usando softwares TopSpin e Dynamics Center

a) Processamento de dados cinéticos; b) Determinação de T1; c) Determinação de T2; d) Difusão por RMN (DOSY);

4. Preparação de figuras usando o software InkScape

a) Discussões sobre: uso de cores, dimensões e espessuras de linha, quantidade de informações, combinação de múltiplas figuras, formatos de arquivo, ética na reprodução de figuras ou fragmentos de figuras.

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- MORRIS, G.A. NMR Data Processing. Encyclopedia of Spectroscopy and Spectrometry, 3rd Ed., 2017, p. 125-133. DOI: 10.1016/b978-0-12-409547-2.05103-9.
- 3- ROSS, D. G. (2017). The Role of Ethics, Culture, and Artistry in Scientific Illustration. Technical Communication Quarterly, 26(2), 145172, 2017. DOI: 10.1080/10572252.2017.1287376.
- 4- Bruker BioSpin, Processing Commands and Parameters User Manual, 13th Ed., 2023, 386 pp.
- 5- Bruker BioSpin, Dynamics Center User Manual, 6th Ed., 2024, 260 pp.
- 6- FERNANDES, A.; COELHO, A. Manual e Guia de exploração do InkScape para utilização em contexto de Educação Visual e Tecnológica. Disponível em https://evtdigital.wordpress.com/wp-content/uploads/2009/12/guia_e_manual_inkscape1.pdf (acesso em 31/01/2025).

8. Principais Docentes Responsáveis:

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.