



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.521	Total de Créditos	13	Início de Validade	2o. período de 2011
----------------------	---------	-------------------	----	--------------------	---------------------

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

Campos a serem Alterados

<input type="checkbox"/> Código da Disciplina	<input type="checkbox"/> Nome da Disciplina	<input type="checkbox"/> Carga Horária	<input checked="" type="checkbox"/> Ementa
Código Anterior:	<input type="checkbox"/> Créditos	<input type="checkbox"/> Pré-Requisitos	

Justificativa:

Nova grade para o 2º/2011.

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 - diversos seqüências 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 seqüências 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 seqüências 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 seqüências 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: Físico-Química, Química, Química Analítica, Química Inorgânica, Química Orgânica.

Alternativa para:

Área de Concentração para:

Específica de Linha para:

Caráter para doutorado:

Obrigatória para:

Optativa para: Físico-Química, Química, Química Analítica, Química Inorgânica, Química Orgânica.

Alternativa para:

Área de Concentração para:

Específica de Linha para:

Caráter para mestrado profissional:

Obrigatória para:

Optativa para: Ensino em Química, Química Tecnológica.

Alternativa para:

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 Tetrahedron Organic Chemistry. Volume 27. 2a Ed. Elsevier Science. Amsterdam. 2009. 383 pp.
- 2) LEVITT, M.H. Spin dynamics Basics of Nuclear Magnetic Resonance. 2a Ed. Wiltshire. John Wiley & Sons Ltd. 2008. 714 pp.51.
- 3) KEELER, J. Understanding NMR Spectroscopy. Oxford. John Wiley & Sons. 2002.

8. Principais Docentes Responsáveis:

Tiago Venâncio

Antonio Gilberto Ferreira

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

Aprovada na 383a. reunião da coordenação deste programa de pós-graduação, realizada em 11/02/2011.

__/__/__

Assinatura do Coordenador do Programa

10. Aprovação do Centro:

Aprovada na 1a. reunião do Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia, realizada em 11/11/1111.

__/__/__

Assinatura do Diretor do Centro

11. Aprovação do Conselho de Pós-Graduação:

Aprovada na 28a. reunião da Câmara de Pós-Graduação, realizada em 06/07/2011.

__/__/__

Assinatura do Presidente do Conselho