**CURSO:** INTRODUÇÃO À DETERMINAÇÃO ESTRUTURAL E ASSINALAMENTO DE PEQUENAS MOLÉCULAS POR RMN

**PROFESSOR:** Claudia Nascimento (IBio/UNIRIO)

**LOCAL**: Instituto de Física – USP/São Carlos

**CARGA HORÁRIA:** 24 horas (8h/dia, 3 dias) – 01 a 03/02/2017

**LIMITE DE VAGAS:** não há

**PRÉ-REQUISITO:** não há

**OBJETIVOS:** apresentar os conceitos fundamentais da RMN para que o participante seja capaz de utilizar a técnica para assinalamento e/ou determinação estrutural de pequenas moléculas.

**PROGRAMA**

1. Ressonância Magnética Nuclear de hidrogênio (RMN1H)

Noções básicas de RMN-1H necessárias à interpretação de espectros. Conceitos de spin nuclear, número de spin. Energia e frequência em RMN. Blindagem, deslocamento químico, anisotropia magnética, fatores que afetam odeslocamento químico. Integração – Acoplamento spin-spin – Noções de estereotopismo, desacoplamento, equivalência química, troca química (uso deD2O) – Equação de Karplus. Forma do sinal (dinâmica molecular). Noções de relaxação longitudinal e transversal.

2. Introdução ao estudo de RMN 13C

Aplicação e comparação dos conceitos de blindagem, deslocamento químico, integração eacoplamento para carbono-13. Espectros acoplados e desacoplados de carbono-13. Os experimentos APT e DEPT.

3. Introdução ao estudo da RMN bidimensional (RMN-2D)

O conceito e a geração de um espectro bidimensional. Diferença básica entre detecção direta e indireta. Espectros correlacionados: interpretação de espectros obtidos pelos experimentos COSY,HMQC, HSQC, HMBC, TOCSY. Experimentos com gradientes de campo magnético: comparação entre os espectros.

4. Acoplamento dipolar e uso em RMN

Definição de acoplamento dipolar e efeito de Overhauser nuclear (NOE). Aplicação para a determinação da estrutura tridimensional de uma molécula.Espectros ROESY e NOESY.