**CURSO:** PRODUTOS DE OPERADORES E MATRIZES DE DENSIDADE EM RMN – APLICAÇÕES EM SEQUÊNCIAS DE PULSOS

**PROFESSOR:** Luiz Henrique Keng Queiroz Júnior (DQ-UFG)

**LIMITE DE VAGAS:** não há

**PRÉ-REQUISITOS RECOMENDADOS:** curso BASES MATEMÁTICAS E FÍSICAS PARA A RMN e curso BASES QUÂNTICAS DA RMN E O FORMALISMO VETORIAL PARA SUA DESCRIÇÃO.

**OBJETIVOS:** apresentar a teoria de produtos de operadores e matrizes de densidade aplicados à RMN para a compreensão dos experimentos mais utilizados em RMN por sequências de pulsos

**PROGRAMA**

**1. Sequências de pulsos**

* Conceitos gerais de programação de sequências de pulsos.
* Correlação entre a linguagem gráfica e de texto.
* Desenvolvimento de sequências de pulsos auxiliado por simulações computacionais.

**2. Introdução ao formalismo do produto de operadores**

* Definições gerais e operadores de spin para um sistema desacoplado.
* Aplicação prática: efeito do bloco *spin echo* num sistema desacoplado e a relação entre o *composite pulse* e o desacoplamento de spins.
* Operadores de spin para um sistema acoplado.
* Aplicação prática: efeito do bloco *spin echo* num sistema acoplado e a calibração de um pulso de 90º de desacoplamento de ¹³C através da detecção do sinal de ¹H.
* O conceito de transferência de magnetização e a sequência INEPT.

**3. Introdução à abordagem de matrizes de densidade**

**4. Formalismo do produto de operadores na descrição de experimentos de RMN 2D**

* Descrição do experimento COSY: a importância da transferência de coerência.
* Ciclagem de fase ou gradientes de campo magnético? Entendendo a seleção dos caminhos de coerência.
* Coerências do tipo *multiple-quantum*: não-observáveis, mas de fundamental importância para a realização de diversos experimentos.
* Aplicação prática: os experimentos DQF-COSY e INADEQUATE.
* Diferenciação entre experimentos heteronucleares rotineiros: HMQC, HMBC, HSQC e SE-HSQC

**Bibliografia**

1. Jacobsen, N. E.; *NMR Spectroscopy Explained*, Wiley, New York, 2007.
2. Keeler, J.; *Understanding NMR Spectroscopy*, Wiley, New York, 2010.
3. Levitt, M. H.; *Spin Dynamics: Basis of Nuclear Magnetic Resonance*, Springer-Verlag, New York, 2008.
4. Cavanagh, J.; Fairbrother, W. J.; Palmer III, A. G.; Rance, M.; Skelton, N. J.; *Protein NMR Spectroscopy*, Academic Press Inc., San Diego, 2006.
5. Günther, H.; *NMR Spectroscopy: Basic Principles, Concepts, and Applications in Chemistry*, Wiley-VCH, Weinheim, 2013.
6. Gil, V. M. S.; Geraldes, C. F. G. C.; *Ressonância Magnética Nuclear: Fundamentos, Métodos e Aplicações*; Portugal, Fundação Calouste Gulbenkian, 1987.