

CURSO: INTRODUÇÃO À DETERMINAÇÃO ESTRUTURAL POR RMN – UMA ABORDAGEM NÃO-MATEMÁTICA

NÚMERO DE CRÉDITOS: 02

PROFESSORES: Denise Cristian Ferreira Neto (IME/RJ) e Claudia Nascimento (IBio/UNIRIO)

LIMITE DE VAGAS: não há

PRÉ-REQUISITO RECOMENDADO: 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 o deslocamento químico. Integração – Acoplamento spin-spin – Noções de estereotopismo, desacoplamento, equivalência química, troca química (uso de D₂O) – 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 e acoplamento 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.