

QMC 947 - Disciplina de Aplicação Experimental de Espectroscopia de RMN:
[45 horas/03 créditos]

Ementa da Disciplina:

Operações gerais de Espectrometro de RMN . Espectros de rotina. Atribuição de sinais através de experiências de dupla ressonância (desacoplamento). RMN de Carbon-13. Técnicas de pulso e Transformada de Fourier. Técnicas avançadas de RMN de 1D. RMN bidimensional. Exemplos. Exercícios.

Programa Detalhado:

I. Operação do Aparelho de RMN Perkin Elmer-Hitachi R24B:

Registro de espectro de rotina, integração, expansão de espectros, uso do Lock, dupla ressonância (desacoplamento),

II. Técnicas de Pulso Transformada de Fourier:

Coordenadas cartesianas, significados dos pulsos de radio frequência, precessão da magnetização transversal, relação entre a orientação do vetor, tempo de sinal e frequência do sinal.

III. RMN de Carbono-13:

Paralelo entre RMN de prótons e Carbono-13, o deslocamento químico, acoplamento spin-spin (C-H e C-C), técnicas de desacoplamento, integração de espectros de RMN de carbono-13, mecanismos de relaxar, do de spin, medidas do tempo de relação longitudinal, medidas do efeito nuclear de Overhauser.

IV. Técnicas Avançadas de RMN de 1D:

Spin echo, APT (Attached Proton Test), INEPT (Insensitive Nuclear Enhancement by Polarization Transfer), DEPT (Distortionless Enhancement by Polarization Transfer).

V. Ressonância Magnética Nuclear de 2D:

Mecânica do experimento de 2D, espectroscopia correlacionada homonuclear (COSY H-H), espectroscopia correlacionada heteronuclear (COSY C-H),

espectroscopia da constante de acoplamento homo-e heteronuclear, espectroscopia bidimensional do efeito nuclear de Overhauser (NOESY), INADEQUATE, aplicações de técnicas de 2D na atribuição de sinais de classe de moléculas representativas da química orgânica e biorgânica, exemplos, exercícios.

LITERATURA:

1. MARTIN, MARTIN & DELPUECH, Practical NMR Spectroscopy, Heyden, London, 1980.
2. BREITMAIER & VOELTER, Carbono-13 NMR Spectroscopy, 3rd ed., Verlag, NY, 1987,
3. ATTA-UR-RHAMAN, Nuclear Magnetic Resonance, Verlag, Ny, 1986.
4. Artigos Especializados da Literatura.