

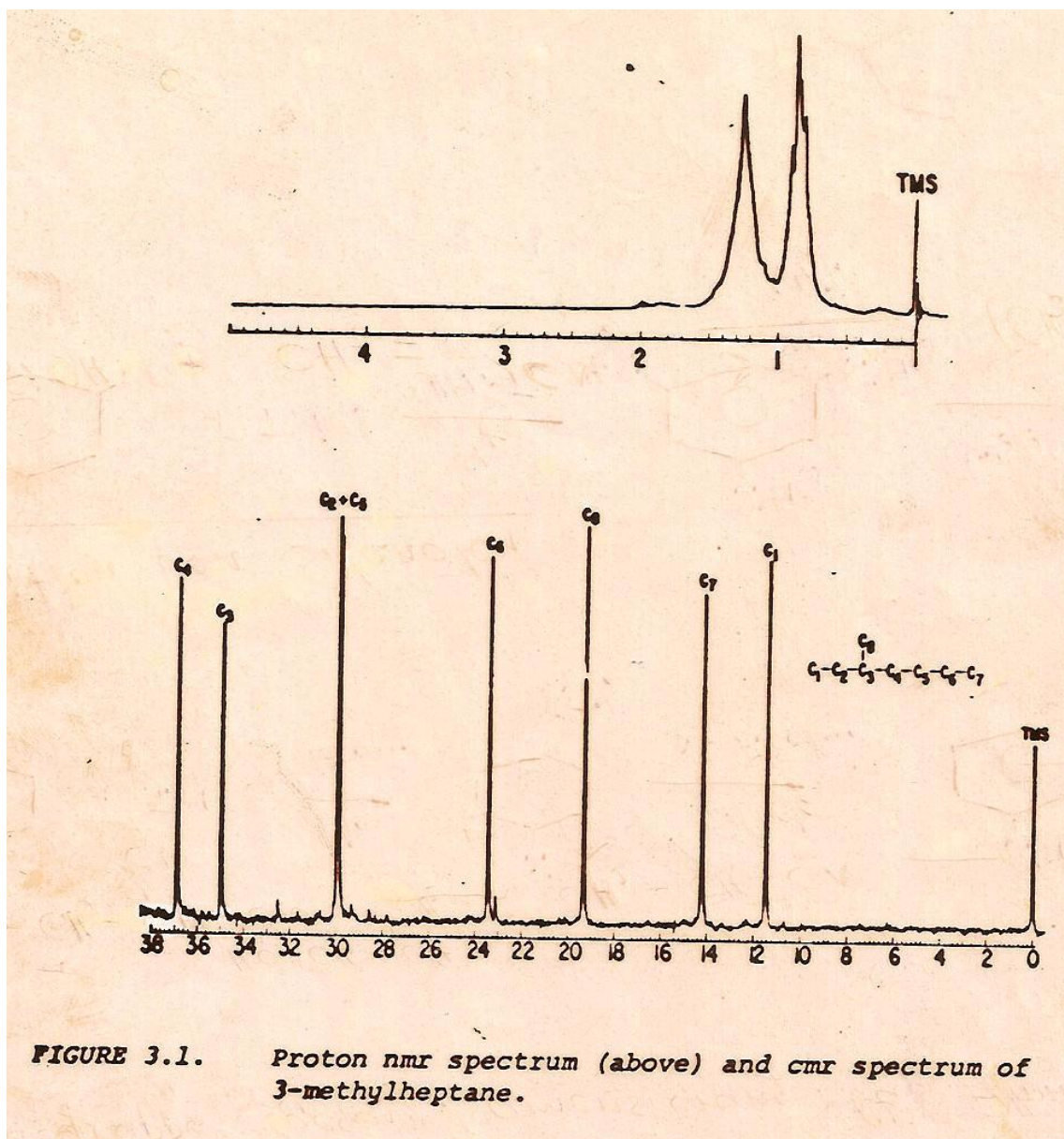
RNM DE CARBONO-13

INTRODUÇÃO

Paralelo entre RMN de ^1H RMN e ^{13}C RMN

CONSIDERAÇÕES SOBRE	^1H RMN	^{13}C RMN
1. Spin Nuclear	1/2	1/2
2. Razão Magnetogírica (γ)	26	6,5
3. Frequência de ressonância (100 MHz)	100 MHz	25 MHz
4. Abundância Natural	>99%	1,1%
5. Janela Espectral (largura do espectro)	10 ppm	220 ppm
6. Integração de sinais	Rotina	Difícil porém possível
7. Dupla ressonância (Desacoplamento)	Homonuclear	Heteronuclear
8. Informação sobre grupos funcionais	Indireta	Direta

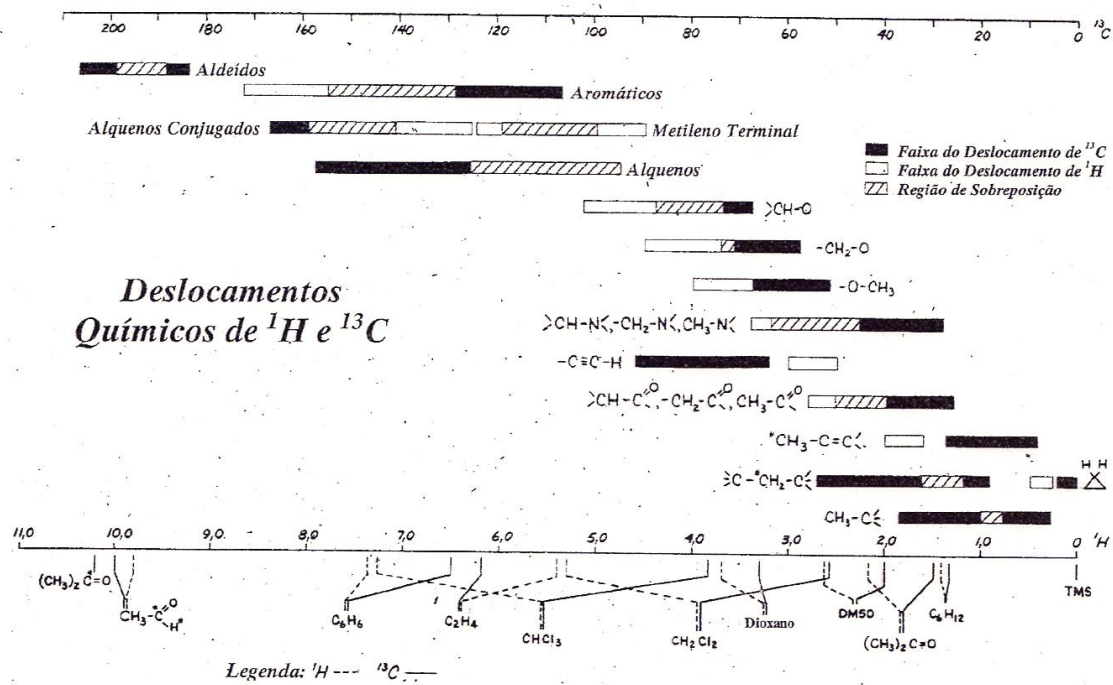
COMPARAÇÃO ENTRE ESPECTRO DE ^1H RMN e ^{13}C RMN



COMPARAÇÃO ENTRE ESPECTRO DE ^1H RMN e ^{13}C RMN

$$\delta_{13\text{C}} = \delta_{1\text{H}} (16 \text{ a } 10)$$

ESPECTROMETRIA DE RMN DE CARBONO-13



Comparação entre os Deslocamentos Químicos de ^1H e de ^{13}C .

TÉCNICAS DE PULSO E TRANSFORMADA DE FOURIER

O problema da sensibilidade

RMN → muito menos sensível do que UV e IV → diferentes magnitudes de energia envolvidos.

Solução: Aumentar o campo magnético

Acumulação de espectros

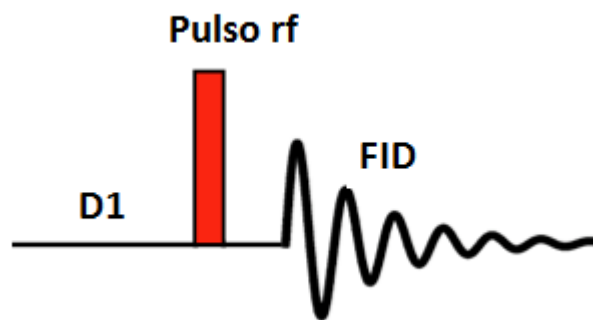
Onda contínua: registrar vários espectros e adicioná-los (a sensibilidade ou relação sinal/ruído (S/R) aumenta com a razão da raiz quadrada do número de espectros registrados).

Exemplo: acumulação de 100 espectros aumenta a (S/R) de 10:1.

Problema: tempo bastante longo para registrar um espectro de onda contínua

TÉCNICAS DE PULSO E TRANSFORMADA DE FOURIER

Técnica de pulso: Pulso de radiofrequência capaz de irradiar todos os núcleos da amostra ao mesmo tempo



D1 = Tempo de espera entre pulsos

FID = Free Induction Decay (Decaimento Induzido Livre)

Pulso de rf: Pulso de radiofrequência dado em μs .

TÉCNICAS DE PULSO E TRANSFORMADA DE FOURIER

Modelo de coordenadas giratórias

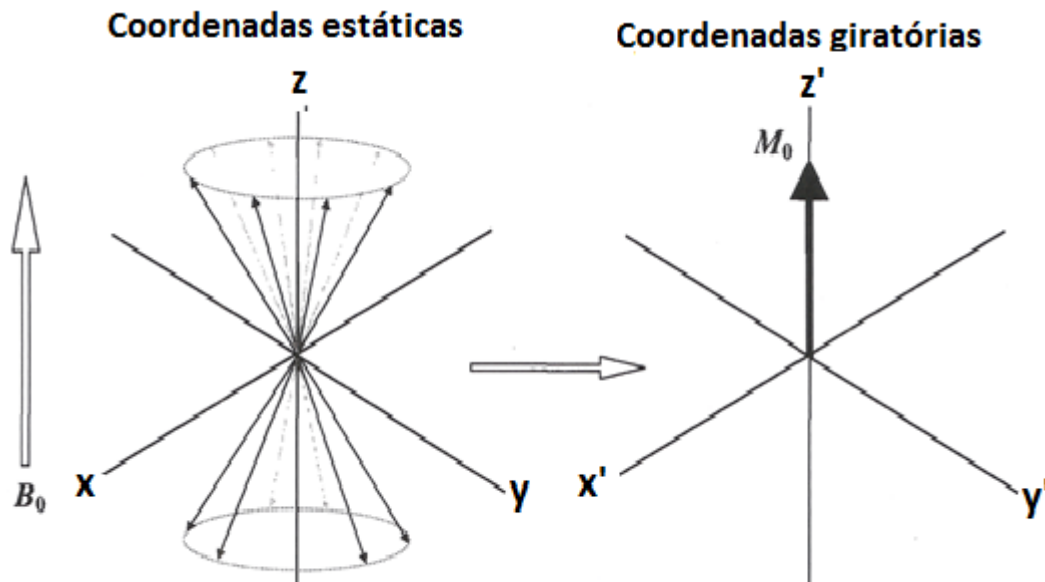
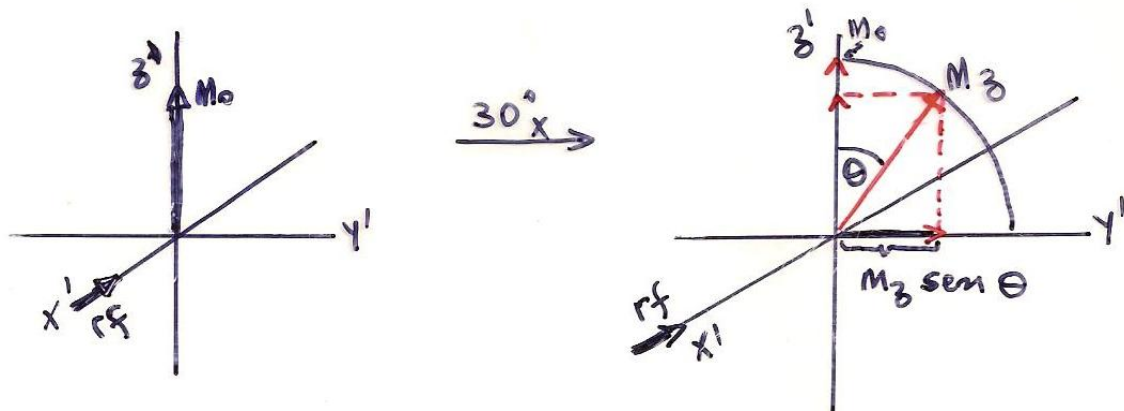


FIGURE 3.4 Assemblage of precessing nuclei with net macroscopic magnetization M_0 in the direction of the stationary magnetic field B_0 .

M_0 = Magnetização inicial

TÉCNICAS DE PULSO E TRANSFORMADA DE FOURIER

Efeito da aplicação de um pulso de radiofrequência

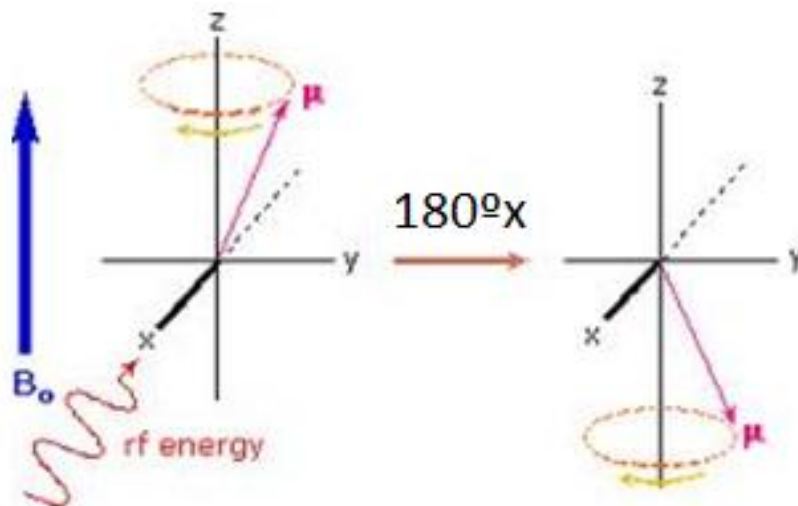


M_z = Magnetização final

Intensidade da linha espectral: $I = M_z \sin \theta$

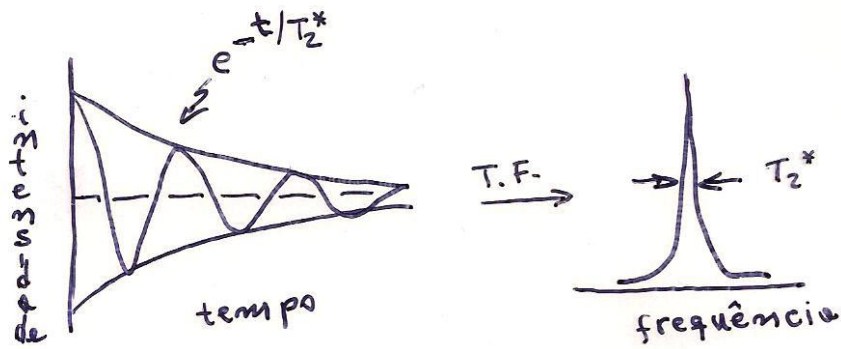
TÉCNICAS DE PULSO E TRANSFORMADA DE FOURIER

Representação de um pulso de 180°



TÉCNICAS DE PULSO E TRANSFORMADA DE FOURIER

Domínio do tempo e frequência



$$F(t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\omega) e^{i\omega t} d\omega$$

$$F(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{-i\omega t} dt$$

TÉCNICAS DE PULSO E TRANSFORMADA DE FOURIER

Domínio do tempo e frequência

