

Métodos de RMN no estado sólido

PFIS 2020 / PQUI-227

Semestre 2017/01

Professor [Jair C. C. Freitas](#)

Lista 02: Interações de spin nuclear

1) Mostre que o termo angular $3\cos^2\theta - 1$, que é comum para a parte secular das interações de spin nuclear, possui média espacial nula, quando todas as orientações moleculares (ou de cristalitos) são consideradas. Faça esse cálculo a partir da integral de superfície do termo citado na superfície de uma esfera de raio arbitrário. (Veja a seção 7.9.2 de Levitt, por exemplo.)

2) (Baseado em Levitt, 14.1) No trabalho original de Pake (J. Chem. Phys. 1948;16:327-336), a distância entre os prótons nas moléculas de água de hidratação na substância investigada ($\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) foi estimada a partir do espectro de pó obtido por RMN de ^1H em uma amostra policristalina. O desdobramento entre os máximos do dubleto encontrado (conhecido como “dubleto de Pake”) foi de 10,8 G (1,08 mT), em um experimento registrado com variação do campo magnético aplicado.

a) Calcule o valor desse alargamento em unidades de frequência (como seria obtido em experimentos realizados com campo magnético fixo, da forma utilizada em geral na atualidade).

b) Use esses valores para estimar a distância entre os dois prótons em cada molécula de água.

Obs.: Consulte as expressões e figuras relacionadas a essa questão na [apresentação utilizada em sala de aula sobre acoplamento dipolar direto em sólidos](#).

3) Faça um esboço dos níveis de energia e das frequências de transição esperadas em um espectro de RMN para um núcleo com spin $I = 1$ na presença de um gradiente de campo elétrico (EFG) com simetria axial em um monocristal com orientação fixa em relação ao campo magnético externo, considerando apenas os efeitos da interação quadrupolar elétrica em primeira ordem. (Veja as expressões para os níveis de energia e frequência, além da ilustração correspondente ao caso $I = 3/2$, na [apresentação utilizada em sala de aula sobre efeitos quadrupolares em sólidos](#).)

4) Apresente um exemplo retirado de um texto científico (artigos, livros, etc.) contendo um espectro de pó registrado em um experimento de RMN de sólidos, associado a uma (ou mais) das interações discutidas nas aulas (anisotropia de deslocamento químico, interação dipolar, acoplamento J , interação quadrupolar). Discuta o resultado encontrado, identificando o núcleo e o tipo de material analisado, descrevendo a interpretação fornecida para esse resultado em termos dos parâmetros que descrevem a interação (ou interações) em questão e fornecendo outras informações que julgar relevantes.