

IQU-817 RMN de Sólidos I (30 horas)

Ementa:

Fundamentos da RMN de sólidos. Constantes de tempos de relaxação T_1 , T_2 e $T_{1\rho}$. Hamiltonianos que definem a forma do sinal em RMN de sólidos: Zeeman, Deslocamento Químico, Dipolar, Escalar e Quadrupolar. Formas dos sinais nos espectros estáticos de núcleos com spin igual a $\frac{1}{2}$. Formas dos sinais nos espectros estáticos de núcleos com spin $> \frac{1}{2}$. Definição dos parâmetros anisotropia e assimetria. Soluções para minimizar as interações que ocorrem no estado sólido e aumentar a relação sinal/ruído nos espectros de RMN de sólidos: Ângulo mágico de rotação (MAS), desacoplamento de alta potência, polarização cruzada (CP), técnicas de rotação em ângulos variáveis (DOR, DAS) e técnicas de excitação em MQMAS. Instrumentação. Obtenção de parâmetros espectrais com o emprego do programa DMFit. RMN de sólidos dos núcleos ^{13}C , ^1H , ^{29}Si , ^{31}P , ^{27}Al , ^{51}V , ^{93}Nb : propriedades e aplicações.

Bibliografia:

1. R. K. Harris. Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy, Longman Scientific & Technical, cap.6, 1986.
2. V. M. S. Gil e C. F. G. C. Geraldês. Ressonância Magnética Nuclear-Métodos e Aplicações, Fund. Calouste-Gulbenkian, Lisboa, 1012pp., 1987.
3. Colin A. Fyfe. Solid State NMR for Chemists, CFC Press, Canada, 593pp., 1983.
4. G. Engelhardt; D. Michel. High Resolution Solid-State NMR of Silicates and Zeolites, John Wiley & Sons, 484pp., 1987.
5. E. O. Stejskal; J. D. Memory. High Resolution NMR in the Solid State. Fundamentals of CP/MAS, Oxford University Press, 189pp., 1994.
6. M. J. Duer. Solid State NMR Spectroscopy. Principles and Applications. Blackwell Science, 567pp., 2002.
7. M. J. Duer. Introduction to Solid-State NMR Spectroscopy, Blackwell Publishing, 349pp., 2004.