



Rio de Janeiro, 16 de novembro de 2009.

Prezado(a) Senhor(a):

A AUREMN, com o apoio da Universidade de Brasília (UnB), estará realizando os Cursos de **RESSONÂNCIA MAGNÉTICA NUCLEAR (1ª. Versão do Curso de RMN no Centro-Oeste)**, no período de 22 de fevereiro a 03 de março de 2010, na Universidade de Brasília (UnB), prédio novo do Instituto de Química, Brasília, DF.

Analogamente aos outros anos, a AUREMN estará promovendo o curso em três módulos. No entanto, diferentemente dos anos anteriores, os módulos I e II serão ministrados simultaneamente.

Modulo I: Será um módulo básico para aprendizado apenas da metodologia básica da RMN necessária à compreensão e interpretação de espectros. Este módulo é direcionado para aqueles que nunca tiveram contato com a técnica e necessitam aprender o básico. Em Brasília também será direcionado aos alunos dos cursos de Farmácia e Biologia para complementar a grade curricular que não contempla um curso dessa natureza.

Modulo II: Direcionado para aqueles que já possuem algum conhecimento de RMN e até mesmo já trabalham com a técnica, mas querem aprofundar os seus conhecimentos teóricos. A carga horária desse módulo foi aumentada em relação à de 2009, para que possam ser fornecidas as bases matemáticas e físicas necessárias à compreensão da teoria de RMN.

Modulo III: É um módulo independente, dedicado à identificação de conformação de pequenas moléculas no estado líquido.

As inscrições poderão ser feitas para um ou mais módulos, desde que o candidato satisfaça os requisitos de cada um (ver o item "Requisitos para os Candidatos", descritos no programa de cada módulo). As vagas são limitadas, e a prioridade é em função da ordem cronológica de chegada das inscrições. A inscrição no curso deverá ser feita através do envio da ficha de inscrição, devidamente preenchida, acompanhada do comprovante do pagamento correspondente (depósito bancário), **até o dia 12/02/2010**. Somente após o envio da inscrição e do comprovante do pagamento, conforme descrito no site da AUREMN, www.auremn.org.br, sua vaga no curso, para qualquer módulo, estará garantida. Existe a possibilidade de **bolsa** para um número reduzido de alunos sócios da AUREMN.

Bolsas: Estão limitadas a um aluno por Instituição para cada módulo. Os interessados em candidatar-se poderão solicitar a bolsa preenchendo a ficha de inscrição no curso e enviando-a, juntamente com uma carta do(a) candidato(a) e uma carta do orientador explicando a necessidade da bolsa, os méritos e qualificações do(a) candidato(a) e as perspectivas de aproveitamento dos ensinamentos adquiridos, até o dia **02 de fevereiro de 2010**. O resultado da concessão das bolsas será divulgado até o dia **08 de fevereiro de 2010**, para permitir o pagamento do curso das pessoas não contempladas com a bolsa.

Atenciosamente.

José Daniel Figueroa Villar
Presidente da AUREMN

INSCRIÇÃO E FORMA DE PAGAMENTO

PRAZO FINAL PARA INSCRICOES (TODOS OS MÓDULOS): 12 DE FEVEREIRO DE /2010

FORMA DE PAGAMENTO: SOMENTE EM PARCELA ÚNICA ATRAVÉS DE DEPÓSITO BANCÁRIO

– O pagamento deverá ser efetuado **até o dia 12/02/2010**, no valor integral, através de depósito bancário, para: **AUREMN - Banco do Brasil, Agência 3652-8/UFRJ, Conta: 404.054-6**

INSCRICAO PASSO A PASSO:

1. Efetuar primeiramente o depósito bancário referente ao pagamento de sua inscrição, conforme tabela de pagamentos abaixo;
2. Digitalizar/escanear todos os comprovantes necessários a serem anexados à sua inscrição (de pagamento e/ou estudante);
3. Efetuar a sua inscrição preenchendo o formulário disponível no site da AUREMN, www.auremn.org.br, e anexar os respectivos comprovantes;
4. Enviar a ficha de inscrição preenchida e documentação necessária para o e-mail: auremn@uremn.org.br e aguardar a confirmação da inscrição. Caso não receba a confirmação de sua inscrição em 02 dias, favor contactar **Sandra Mello** no e-mail sandramello@globo.com

Atenção: A vaga só estará garantida após o recebimento da confirmação do pagamento e da documentação necessária (quando for o caso).

Informações Importantes:

- As vagas são limitadas, e serão reservadas na ordem cronológica de chegada das inscrições.
- Estudantes deverão enviar também o comprovante de matrícula.
- Informações sobre filiação à AUREMN e sobre os cursos estão no site www.auremn.org.br
- Cada módulo será realizado somente com um mínimo de 15 alunos inscritos.
- Outras informações: claudian@unb.br ou auremn@uremn.org.br (Claudia Nascimento ou Sandra Mello)

TABELA DE PREÇOS (R\$)

CATEGORIAS	MÓDULO I (40 HORAS) 22 a 26/02/10	MÓDULO II (49 HORAS) 22 a 28/02/10	MÓDULO III (24 HORAS) 01 a 03/03/10
PROFISSIONAIS SÓCIOS DA AUREMN	500,00	612,00	300,00
PROFISSIONAIS NÃO SÓCIOS DA AUREMN	1.000,00	1.225,00	600,00
ESTUDANTES DE PÓS-GRADUAÇÃO SÓCIOS DA AUREMN	250,00	306,00	150,00
ESTUDANTES DE PÓS-GRADUAÇÃO NÃO SÓCIOS DA AUREMN	500,00	612,00	300,00
ESTUDANTES DE GRADUAÇÃO SÓCIOS DA AUREMN	125,00	153,00	75,00
ESTUDANTES DE GRADUAÇÃO NÃO SÓCIOS DA AUREMN	250,00	306,00	150,00

CURSO “RESSONÂNCIA MAGNÉTICA NUCLEAR”

1ª. VERSÃO DO CURSO DE RMN DA AUREMN NO CENTRO-OESTE

MÓDULO I	PRINCÍPIOS BÁSICOS DA RMN: INTRODUÇÃO À DETERMINAÇÃO ESTRUTURAL POR RMN
DATA	22 a 26 de fevereiro de 2010
PROFESSORA	Inês Sabioni Resck (IQ/UnB)
CARGA HORÁRIA	20 horas de aulas teóricas e 20 horas divididas entre exercícios, estudo dirigido, avaliação
LOCAL	Universidade de Brasília - Campus Universitário Darcy Ribeiro – Prédio novo do Instituto de Química, Auditório 1 do IQ
HORARIO	08:30 às 12:30 horas e 13:30 às 17:30 horas

OBJETIVO: Fornecer ao aluno os elementos básicos para a determinação estrutural a partir de experimentos de RMN.

PROGRAMA

1. Ressonância Magnética Nuclear de hidrogênio (RMN-¹H): Noções básicas sobre a técnica de RMN ¹H. Conceitos de spin nuclear, número de spin. Energia e frequência em RMN. Blindagem, deslocamento químico, anisotropia magnética, integração, acoplamento spin-spin. Fatores que afetam o deslocamento químico do hidrogênio (blindagem e desblindagem). Noções de estereotopismo, desacoplamento, equivalência química, troca química (uso de D₂O), equação de Karplus e forma do sinal (dinâmica molecular).
2. Introdução ao estudo de RMN ¹³C. Espectros acoplados e desacoplados de carbono-13. Aplicação e comparação dos conceitos de blindagem, deslocamento químico, integração e acoplamento para 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. Espectros correlacionados: diferença entre detecção direta e indireta, COSY, DQF-COSY, HETCOR, COLOC, HMQC, HSQC, HMBC. Definição de experimentos com uso de gradientes de campo magnético: *g*-COSY, *g*-HMQC, *g*-HSQC e *g*-HMBC. Exemplos de determinação estrutural de diversas moléculas orgânicas simples usando RMN 1D e 2D de ¹H e ¹³C.
4. Aula experimental demonstrativa no equipamento de RMN

REQUISITO PARA O CANDIDATO: Não há.

AValiação e Aproveitamento: O aproveitamento no módulo requer aprovação nos trabalhos realizados em aula e numa prova final. Os candidatos que frequentarem pelo menos 90% do curso receberão certificado de participação.

BIBLIOGRAFIA

1. Silverstein, R. M., Bassler, C.G., Morrill, T. C. "Spectroscopic Identification of Organic Compounds", 6th Ed., Nova York, John Wiley & Sons, Inc., 1998. (Obra traduzida para a língua portuguesa – "Identificação Espectroscópica de Compostos Orgânicos" Livros Técnicos e Científicos. Editora S.A. Rio de Janeiro, 2000).
2. Pavia, D. L., Lampman, G. M., Kriz, G. S. "Introduction to Spectroscopy - A Guide for Students of Organic Chemistry", 2nd Ed., S. College (1996).
3. Crews, P., Rodríguez, J., Jaspars, M. "Organic Structure Analysis", Oxford, Nova York (1998).
4. Derome, A. E.; Modern NMR Techniques for Chemistry Research; Pergamon Press, Oxford, 1988.
5. Martin, Gary E. e Zektzer, Andrew S. Two-Dimensional NMR Methods for Establishing Molecular Connectivity: A Chemist's Guide to Experiment Selection, Performance, and Interpretation; VCH Publishers, Inc;1988.
6. Friebolin, H., Basic one-and two-Dimensional NMR Spectroscopy; VCH Publishers, Inc.: Weinheim; 4nd completely revised and updated edition, 2005.
7. Field, L.D.; Sternhell, S.; Kalman, J.R.; Organic Structures from Spectra; John Wiley & Sons: New York; 4nd edition, 2008.

CURSO “RESSONÂNCIA MAGNÉTICA NUCLEAR”

1ª. VERSÃO DO CURSO DE RMN DA AUREMN NO CENTRO-OESTE

MÓDULO II	TEORIA BÁSICA DE RMN
DATA	22 a 28 de fevereiro de 2010
PROFESSORES	José Daniel Figueroa Villar (IME/RJ); Heibbe Cristhian B. de Oliveira (UnB) e Claudia Jorge do Nascimento (UnB)
CARGA HORÁRIA	28 horas de aula teórica e 21 horas de exercícios/estudo dirigido/aula prática/avaliação
LOCAL	Universidade de Brasília - Campus Universitário Darcy Ribeiro – Prédio novo do Instituto de Química, Auditório 2 do IQ
HORARIO	08:30 às 12:30 horas e 13:30 às 16:30 horas

PROGRAMA

I. Bases Matemáticas

1. Números
2. Funções, Cálculo Diferencial e Integral
3. Álgebra Linear

II. Bases Físicas

1. Carga e matéria
2. Campo Elétrico
3. Lei de Gauss
4. Potencial Elétrico
5. Corrente e Resistência Elétrica
6. Campo Magnético e lei de Ampère
7. Lei de Faraday
8. Indutância

III. Bases da Mecânica Quântica

1. Introdução
 - Origem da Mecânica Quântica
 - Comportamento corpuscular e ondulatório da radiação eletromagnética
2. Princípios da Mecânica Quântica
 - Postulados da mecânica quântica

- Função de onda
 - Equação de Schrödinger
 - Normalização
 - Operadores, autovalores e autofunções
3. Momentos angulares
- Momento angular
 - Spin
 - Momento angular total

IV. Bases Quânticas da RMN

- Uso dos princípios da mecânica quântica na dedução das funções de onda e operadores de spin nuclear
- Equação fundamental e os Hamiltonianos da RMN
- Teoria do deslocamento químico
- Teoria do acoplamento spin-spin e acoplamento de segunda ordem
- Relaxação nuclear
- Equações de Bloch
- Breve descrição dos instrumentos modernos de RMN, com ênfase no processo de excitação e detecção

V. Formalismo Vetorial Semi-Clássico em RMN

- Descrição dos processos de excitação e detecção de sistemas de spins usando o formalismo vetorial semiclássico
- Detecção em quadratura
- Descrição de sequências de pulsos simples usando formalismo vetorial semiclássico (Spin echo, INEPT, DEPT, espectros de correlação heteronuclear)
- Excitação seletiva
- Processos dinâmicos em RMN
- Relaxação dipolar e o efeito de Overhauser nuclear

VI. Formalismo para descrição da RMN

- Matrizes de densidade na descrição dos fenômenos da RMN
- Origem do formalismo de produtos de operadores de spin
- Aplicação do formalismo de produtos de operadores de spin na descrição de sequências de pulsos em uma e duas dimensões: INEPT, BIRD, COSY, HSQC, HMQC, HMBC
- Ciclagem de fases

- Gradientes de campo magnético
- Ordem de coerência e seleção de rotas de coerência

REQUISITOS PARA O CANDIDATO: Ter sido aprovado no Módulo I do Curso de RMN da Auremn em anos anteriores ou ter comprovado curricularmente possuir conhecimentos básicos de RMN.

OBSERVAÇÃO: Nos dois primeiros dias do curso será feita uma revisão dos conceitos de matemática e de física (itens I e II do programa) necessários à compreensão das bases físicas da RMN. Os itens III e IV do programa serão dados simultaneamente.

AValiação e Aproveitamento: Os candidatos que frequentarem pelo menos 90% do curso receberão certificado de participação. Os alunos que desejarem contabilizar os créditos do curso nos seus respectivos programas, ou que desejarem obter certificado de aproveitamento do curso com conceito deverão obter a qualificação mínima 7,0 (sete) na prova final escrita sobre a matéria do módulo.

BIBLIOGRAFIA:

- 1) Harris, Robin K. Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy. A Physicochemical View, Longman, London, 1986
- 2) Gil, Victor M.S.; Geraldes, Carlos F.G.C. Ressonância Magnética Nuclear. Métodos e Aplicações. Fundação Calouste Gulbenkian, Lisboa, 1987.
- 3) Croasmun, W. R.; Carlson, R. M., Editores, "Two Dimensional NMR Spectroscopy, Applications for Chemists and Biochemists" 2nd. Ed., VCH Publishers, Inc, NY, 1994. Capítulos 2 e 3.
- 4) Derome, A. E. "Modern NMR Techniques for Chemistry Research" Pergamon Press, NY, 1987.
- 5) Bonagamba, T. J. "Os Núcleos Atômicos, o Spin Nuclear e a RMN" em "Princípios e Aplicações da RMN, Vol. 1", Figueroa-Villar, J. D. Editor, AUREMN, Rio de Janeiro, 1999.
- 6) Figueroa-Villar, J. D. "Aspectos Quânticos da RMN" em "Princípios e Aplicações da RMN, Vol. 2", Figueroa-Villar, J. D. Editor, AUREMN, Rio de Janeiro, 2001.
- 7) Gheorghe D. and A Valeriu "2D NMR, Density Matrix and Product Operator Treatment", Prentice Hall, 1993.

CURSO “RESSONÂNCIA MAGNÉTICA NUCLEAR”
1ª. VERSÃO DO CURSO DE RMN DA AUREMN NO CENTRO-OESTE

MÓDULO III	RMN PARA A DETERMINAÇÃO DA CONFORMAÇÃO DE PEQUENAS MOLÉCULAS
DATA	01 a 03 de março de 2010
PROFESSOR	Jochen Junker (CDTS & INCT/DN – FIOCRUZ, RJ)
CARGA HORÁRIA	24 horas de aula teórica/exercícios
LOCAL	Universidade de Brasília - Campus Universitário Darcy Ribeiro – Prédio novo do Instituto de Química, Auditório 1 do IQ
HORARIO	8:30 às 12:30 horas e 13:30 às 17:30 horas

PROGRAMA

1. O que é uma estrutura: Diferenciação de constituição, configuração e conformação; dados experimentais disponíveis para os três;
2. Experiências de RMN de 1D: Introdução simples (“*hand-waving*”) à origem do sinal de RMN e do deslocamento químico; Interpretação dos espectros de RMN de Hidrogênio e diferentes espectros de Carbono;
3. Acoplamento escalar e uso em experiências de RMN 2D: o que é o acoplamento escalar; informação estrutural contida; diferentes tipos de espectros e sua interpretação; observação de sinal versus acoplamento e conformação da molécula;
4. Determinação de constituição de uma molécula: métodos manuais e computacionais para a determinação da constituição; limitações na interpretação dos dados de RMN; discussão de uma constituição baseado em dados de RMN experimentais e teóricos;
5. Acoplamentos dipolares e uso em experiências de RMN 2D: NOE (efeito *Overhauser* nuclear) como fonte de informação conformacional; uso de acoplamentos escalares como complemento para a determinação da conformação;
6. Determinação da conformação de uma molécula: métodos computacionais para o cálculo da conformação; possíveis problemas na determinação da configuração;

7. Acoplamentos dipolares residuais e uso em experiências de RMN 2D: o que é o acoplamento dipolar; acesso experimental ao acoplamento dipolar; interpretação das informações obtidas;
8. Determinação da configuração e conformação de uma molécula: uso do acoplamento dipolar na modelagem de proteínas e pequenas moléculas;
9. Futuro da RMN: futuras aplicações de experiências existentes; “*quo vadis*” RMN;

REQUISITOS PARA O CANDIDATO: Ter sido aprovado no Módulo I do Curso de RMN ou ter comprovado curricularmente possuir conhecimentos básicos de RMN.

AValiação E Aproveitamento: Os candidatos que frequentarem pelo menos 90% do curso receberão certificado de participação.

REFERÊNCIAS

Geral:

Understanding NMR Spectroscopy

James Keeler

<http://www-keeler.ch.cam.ac.uk/>

2D NMR-Spectroscopy - Background and Overview of the Experiments

H Kessler, M Gehrke, C Griesinger.

Angew Chem Int Edit (1988) vol. 27 (4) pp. 490-536.

Automatização na determinação de estruturas:

Computer-assisted structure verification and elucidation tools in NMR-based structure elucidation.

ME Elyashberg, A Williams, GE Martin.

Prog Nucl Mag Res Sp (2008) vol. 53 (1-2) pp. 1-104.

<http://dx.doi.org/10.1016/j.pnmrs.2007.04.003>

Automatic Analysis of NMR Spectra

L Griffiths

ANNUAL REPORTS ON NMR SPECTROSCOPY Vol 50.

[http://dx.doi.org/10.1016/S0066-4103\(03\)50006-0](http://dx.doi.org/10.1016/S0066-4103(03)50006-0)

Validation of structural proposals by substructure analysis and C-13 NMR chemical shift prediction.

J Meiler, E Sanli, J Junker, R Meusinger, T Lindel, M Will, W Maier, M Kock.

J Chem Inf Comp Sci (2002) vol. 42 pp. 241-248.

COCON: From NMR correlation data to molecular constitutions.

T Lindel, J Junker, M Kock.

J Mol Model (1997) vol. 3 pp. 364-368

RDCs:

Use of RDCs in rigid organic compounds and some practical considerations concerning alignment media.

C Thiele.

Concept Magn Reson A (2007) vol. 30A (2) pp. 65-80.

<http://dx.doi.org/10.1002/cmr.a.20075>

RDC-enhanced NMR spectroscopy in structure elucidation of sucro-neolambertellin.

A Schuetz, T Murakami, N Takada, J Junker, M Hashimoto, C Griesinger.

Angew Chem Int Ed Engl (2008) vol. 47 (11) pp. 2032-4.

<http://dx.doi.org/10.1002/anie.200705037>

Stereochemistry of sagittamide a from residual dipolar coupling enhanced NMR.

A Schuetz, J Junker, A Leonov, OF Lange, TF Molinski, C Griesinger..

J Am Chem Soc (2007) vol. 129 pp. 15114-

<http://dx.doi.org/10.1021/ja0758761>