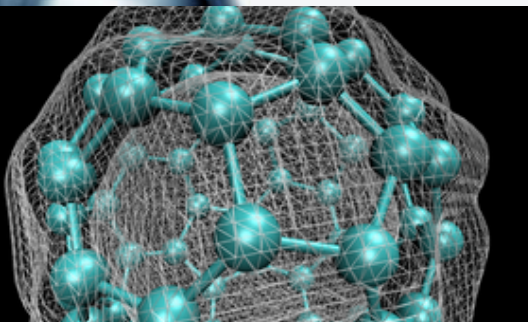
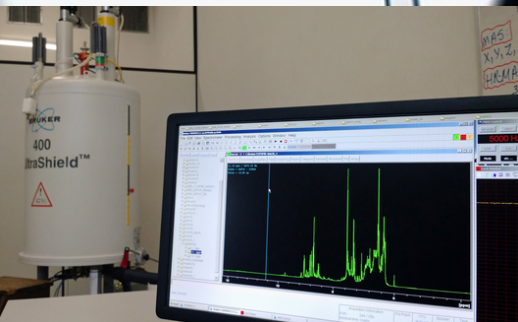


# RESSONÂNCIA MAGNÉTICA NUCLEAR E QUÍMICA: QUAL É A RELAÇÃO ENTRE AS DUAS?

Química e Tecnologia

Setembro de 2021



## A RESSONÂNCIA MAGNÉTICA NUCLEAR

A Ressonância Magnética Nuclear (RMN) é um método espectroscópico baseado no mapeamento do nosso corpo internamente. Sendo a espectroscopia um ramo da química que estuda a interação da radiação eletromagnética com a matéria. No caso da RMN, estuda-se a interação dessa radiação com o núcleo de um átomo<sup>1</sup>. Em entrevista, o pesquisador Dr. Lucas Ducati nos explica esse mecanismo: *"Pensem que este seja um pequeno ímã comum, com pólos norte e sul, sentindo atração ou repulsão de acordo com o campo magnético aplicado a ele. Assim, no momento que o núcleo sente o campo magnético aplicado, ele se alinha a este campo e manda um sinal para o chamado 'espectro de ressonância'. Com isso, consegue-se ter uma análise mais refinada de moléculas mais complexas."*

## UMA MOLÉCULA, DIFERENTES FORMAS

O espectro da ressonância é muito sensível à estrutura e arranjo dos átomos, e na química, sabe-se que uma mesma molécula pode assumir diferentes formas. Isso ocorre pela rotação do eixo das ligações entre os átomos, mas, para que isso ocorra, a molécula precisa superar uma barreira energética, o que chamamos de Barreiras Rotacionais Internas. E é nesse contexto que a RMN se insere, possibilitando o estudo sobre essas diferentes formas das moléculas, a interferência das barreiras rotacionais e como isso pode impactar nas propriedades de uma substância química.<sup>1</sup>

## QUÍMICA COMPUTACIONAL E SUA IMPORTÂNCIA

Para entender o que acontece com as moléculas em solução é comum utilizar a espectroscopia, mas esse método interfere na conformação mais estável da molécula. Estudos recentes visam compreender o comportamento de compostos em meio aquoso ou em outros solventes, visto que podem ocorrer mudanças das estruturas eletrônica e geométrica de uma molécula, o que geralmente resulta na alteração de propriedades químicas e físicas de uma determinada substância<sup>2,3</sup>. Por meio da RMN e outros métodos auxiliares, Dr. Lucas Ducati em sua pesquisa verificou que uma substância com Platina sofre alteração na estrutura de suas ligações sob efeito de um solvente. À vista disso, apesar da ressonância magnética nuclear ser largamente associada à medicina, ela é essencial para estudos no âmbito da química e, conseqüentemente, essas pesquisas podem ser fundamentais para outros ramos e atividades.

Universidade de São Paulo  
Instituto de Química

**"UTILIZAMOS A ESPECTROSCOPIA DE RMN PARA TENTAR 'ESPIAR' O COMPORTAMENTO DAS MOLÉCULAS EM SOLUÇÃO, POR EXEMPLO"**

*Dr. Lucas Ducati, pesquisador do Instituto de Química da Universidade de São Paulo (USP)*

<sup>1</sup> BROWN, H. et al. A Ciência Central. 13. ed. São Paulo: Pearson, 2016.

<sup>2</sup> BATISTA, P. R.; DUCATI, L. C.; AUTSCHBACH, J. Solvent effect on the 195Pt NMR properties in pyridonate-bridged Pt(II) dinuclear complex derivatives investigated by ab initio molecular dynamics and localized orbital analysis. Physical Chemistry Chemical Physics. 2021. Disponível em: <https://doi.org/10.1039/D0CP05849A>. Acesso em: 22 de agosto de 2021.

<sup>3</sup> DUCATI, L. C.; MARCHENKO, A.; AUTSCHBACH, J. NMR J-Coupling Constants of TI-Pt Bonded Metal Complexes in Aqueous Solution: Ab Initio Molecular Dynamics and Localized Orbital Analysis. Inorganic Chemistry. 2016. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1021/acs.inorgchem.6b02180>. Acesso em: 22 de agosto de 2021.