

# CARACTERIZAÇÃO DE AMOSTRAS POR RMN NO ESTADO SÓLIDO

Caroline Raquel Bender<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universidade Federal do Pampa, UNIPAMPA, CEP: 97650-000, Itaqui, RS, Brasil.

Embora a maioria dos experimentos realizados em Ressonância Magnética Nuclear (RMN) sejam no estado líquido, a técnica de RMN no estado sólido apresenta-se como um método robusto para o estudo de materiais distintos. Diferente de amostras dissolvidas, substâncias sólidas mantêm suas características anisotrópicas. Isso significa que suas propriedades – que variam de acordo com a direção – são preservadas em RMN no estado sólido [1]. Essas propriedades irão influenciar diretamente nos sinais (forma, largura, acoplamento, deslocamentos químicos) observado no espectro dos núcleos avaliados. Em vista disso, torna-se possível obter informações sobre a estrutura tridimensional (3D) do material analisado. Atualmente, três interações são as principais responsáveis pelos picos largos em RMN no estado sólido (acoplamento dipolar heteronuclear, acoplamento dipolar homonuclear e anisotropia do deslocamento químico). Essas interações podem ser facilmente manipuladas para que o espectro produzido tenha uma resolução muito próxima a um espectro no estado líquido [1]. Essa informação evidencia que existem mecanismos para eliminar o principal problema frequentemente associado a realização desta técnica no estado sólido, que limita sua ampla utilização [2,3]. Para qualquer aplicação envolvendo a química de novos materiais, é necessário ter conhecimento das características da amostra no estado sólido. Muitas vezes, algumas técnicas podem ser inconclusivas para caracterizar um material ou, então, restritas para uma pequena porção da amostra. Portanto, o objetivo desta palestra é (i) fornecer informações sobre a técnica de RMN no estado sólido – em comparação com RMN de líquidos – para a obtenção de espectros em boa resolução; e (ii) demonstrar como experimentos de RMN de sólidos, envolvendo núcleo distintos (*e.g.* <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C, <sup>15</sup>N), podem ser utilizados para responder perguntas relacionadas a estrutura da forma cristalina, presença de polimorfos, conformeros e/ou mais de uma molécula na unidade assimétrica (Z') da estrutura do material.

## REFERÊNCIAS

- [1] D.D. Laws, H.-M.L. Bitter, A. Jerschow. *Angew. Chemie Int. Ed.* 41 (2002) 3096.
- [2] G.C. Zimmer, A.B. Pagliari, C.R. Bender, *et al.* *CrystEngComm.* 20 (2018) 5154.
- [3] T. Orlando, P.R.S. Salbego, G.C. Zimmer, A.B. Pagliari, C.R. Bender *et al.* *European J. Org. Chem.* 2018 (2018) 4978.