



## IQB-718 – FUNDAMENTOS DA RESSONÂNCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE BIOMOLÉCULAS

### Professor

Anderson de Sá Pinheiro (IQ-UFRJ) – pinheiro@iq.ufrj.br

**Carga horária:** 45 horas

Disciplina teórica

**Créditos:** 3

**Vagas:** 15

### Objetivo

A disciplina tem por objetivo principal transmitir aos alunos os principais conceitos físicos da teoria de Ressonância Magnética Nuclear (RMN), principalmente no que tange ao formalismo do produto de operadores de spin, a fim de compreender as sequências de pulsos dos principais experimentos utilizados na estratégia de determinação estrutural de proteínas por RMN.

### Ementa

Os principais tópicos do curso são: (i) Introdução à RMN; (ii) O espectrômetro de RMN; (iii) Frequências e oscilações; (iv) Introdução à mecânica quântica; (v) O modelo de vetores; (vi) O experimento básico da RMN; (vii) Produto de operadores de spin; (viii) Modulação J e INEPT; (ix) RMN 2D: COSY e HSQC; (x) Assinalamento sequencial das ressonâncias; (xi) Determinação estrutural de proteínas por RMN

### Programa Analítico

1. Introdução à RMN: frequência e deslocamento químico
2. O espectrômetro de RMN: o magneto, *lock*, *shimming*, a sonda, *tuning*, o amplificador de radiofrequências.
3. Frequências e deslocamento químico: escala de deslocamento químico, frequência do *receiver* e *offset*, largura e formato de linhas de RMN, acoplamento escalar, o experimento básico da RMN, frequências, oscilações e rotações, fótons
4. Introdução à mecânica quântica: níveis de energia e o espectro de RMN, funções de onda e o estado misto, operadores, autofunções e autovalores, Hamiltonianos e momento angular, autovalores e autofunções de  $\hat{I}_z$ , autovalores do Hamiltoniano de 1 spin, o espectro de 1 spin, a frequência de Larmor, os níveis de energia para 2 spins acoplados, o espectro para 2 spins acoplados, transições *single* e *multiple quanta*.
5. O modelo de vetores: a magnetização resultante, o sistema de eixos, a magnetização no equilíbrio, a precessão de Larmor, detecção, pulsos, coordenada giratória, a precessão de Larmor na coordenada giratória, o campo efetivo, pulsos *on resonance*, pulsos *hard*, pulsos *off resonance*, o experimento básico da RMN, o spin eco.

Av. Athos da Silveira Ramos, 149 – Prédio do Centro de Tecnologia, Bloco A, 7º Andar - Cidade Universitária

Rio de Janeiro – RJ – CEP 21941-909

Tel: (21) 3938-7260 e-mail spg@iq.ufrj.br

www.iq.ufrj.br/posgrad

Secretaria de Pós-graduação



6. Produto de operadores de spin: operadores de 1 spin, Hamiltoniano de precessão livre e pulsos, rotações, análise de sequências de pulso para 1 spin, operadores de 2 spins, o efeito do acoplamento escalar, termos *in-phase* e *anti-phase*, termos observáveis, Hamiltonianos para 2 spins.
7. Modulação J e INEPT: spin eco e modulação J, spin eco heteronuclear, INEPT.
8. RMN 2D: esquema geral do experimento 2D, coleção de espectros 2D, processamento de espectros 2D, *CORrelation Spectroscopy*, espectros de correlação heteronuclear, *Heteronuclear Single Quantum Coherence*
9. Assinalamento sequencial das ressonâncias: estratégia geral de determinação estrutural, preparação da amostra, purificação de proteínas, RMN 2D, HSQC, estratégias de assinalamento das ressonâncias, TOCSY, NOESY, padrão de NOEs em proteínas, RMN 3D, 3D <sup>15</sup>N/<sup>13</sup>C-*edited* TOCSY-HSQC, 3D <sup>15</sup>N/<sup>13</sup>C-*edited* NOESY-HSQC, acoplamento escalar em proteínas, experimentos de tripla ressonância, HNCO, HN(CA)CO, HNCA, HN(CO)CA, CBCA(CO)NH, HNCACB, deslocamentos químicos de <sup>13</sup>C, HCCH-TOCSY, pulsos seletivos, sensibilidade relativa, *chemical shift index* e *secondary structure propensity*.
10. Determinação estrutural de proteínas: restrições experimentais, restrições de distância, simulação de dinâmica molecular “contida”, cálculo estrutural iterativo, análise da qualidade estrutural.

#### Literatura recomendada

- James Keeler. *Understanding NMR Spectroscopy*, 2005. Wiley, John & Sons
- Wüthrich, K. "NMR of proteins and nucleic acids", 1986. Wiley, John & Sons.