ESPECTROMETRO DE RESSONANCIA MAGNETICA



ESPECTROMETRO DE RESSONANCIA MAGNETICA NUCLEAR DE BANCADA

1. Descricao do equipamento

Espectrometro de ressonancia magnetica nuclear de bancada com frequencia de operacao de 80 MHz para hidrogenio 1, equipado com ima permanente de 1,88 Tesla livre de liquidos criogenicos. De construcao compacta, pode ser instalado diretamente em bancada de laboratorio ou em capela de exaustao, sem necessidade de nitrogenio liquido, helio liquido, refrigeracao a agua ou exaustao adicional.

O sistema inclui gradiente de campo pulsado e trava de campo externa, que dispensa o uso de solventes deuterados, e utiliza tubos padrao de 5 mm. A operacao e realizada por software intuitivo, que adquire espectros com um unico comando, e tambem pelo mesmo software especialista utilizado em espectrometros de ressonancia magnetica nuclear de alto campo, permitindo a criacao e modificacao de fluxos de trabalho, sequencias de pulso, conjuntos de parametros e programas de automacao.

2. Aplicacao

- Pesquisa academica e basica: confirmacao de etapas de sintese, caracterizacao de estruturas e da dinamica molecular e obtencao de dados para publicacao.
- Ensino: treinamento pratico de estudantes de quimica, engenharia quimica, ciencias ambientais e biologia, com analise de acidos graxos saturados e insaturados em oleos, verificacao de produtos sintetizados, observacao de reacoes enzimaticas, determinacao de pH, estudo de enantiomeros e analise de bebidas.
- Controle de sintese quimica: verificacao estrutural de compostos intermediarios, reagentes, produtos e subprodutos, com interpretacao automatizada de dados.
- Monitoramento de reacoes e controle de processos, inclusive em linha com reatores e biorreatores.
- Analise forense: identificacao e quantificacao de substancias suspeitas, como novas substancias psicoativas, com analise de pequenas moleculas organicas, metabolitos, peptideos de medio porte e produtos naturais, analise de misturas em solucoes ou compositos, quantificacao por integracao de sinais sem necessidade de substancia padrao de referencia e organizacao dos espectros em banco de dados pesquisavel.

3. Principais caracteristicas tecnicas

- Ima permanente livre de liquidos criogenicos, com baixo custo de operacao e manutencao, sem preparacao especial para periodos de desligamento.
- Gradiente de campo pulsado para obtencao de espectros praticamente livres de artefatos, supressao de sinal de solvente ou de agua, experimentos de espectroscopia de difusao ordenada e espectros bidimensionais em tempo reduzido.
- Integridade de dados com software dedicado em conformidade com os principios da norma 21 CFR parte 11, aplicavel a laboratorios de desenvolvimento e de producao.
- Amostrador automatico opcional para ate 132 amostras, incluindo 12 de referencia, com operacao continua noturna ou em fins de semana.
- Controle ajustavel da temperatura da amostra de 25 a 60 graus Celsius, compativel com o amostrador automatico.
- Modulo opcional de monitoramento de reacoes com linhas de transferencia com temperatura controlada ao longo de todo o percurso da mistura reacional, operando com pressao de ate 10 bar.

4. Especificacoes tecnicas

Item	Especificacao
Frequencia de operacao	80 MHz para hidrogenio 1, correspondente a campo magnetico de 1,88 Tesla
Nucleos	Configuracoes disponiveis: hidrogenio 1; hidrogenio 1 e carbono 13, hidrogenio 1 e fosforo 31 ou hidrogenio 1 e xenonio 129; hidrogenio 1, carbono 13 e fluor 19; hidrogenio 1 e litio 7
Sensibilidade para hidrogenio 1 com etilbenzeno a 1 por cento	Sistemas somente hidrogenio 1: maior ou igual a 240 para 1, ou 220 para 1 com gradiente de campo pulsado. Sistemas hidrogenio 1 e segundo nucleo: maior ou igual a 180 para 1, ou 160 para 1 com gradiente. Sistemas hidrogenio 1, carbono 13 e fluor 19: maior ou igual a 110 para 1, com carbono 13 maior ou igual a 20 para 1 em etilbenzeno a 100 por cento e fluor 19 maior ou igual a 110 para 1 em trifluorotolueno a 0,5 por cento em cloroformio deuterado. Sistemas hidrogenio 1 e litio 7: maior ou igual a 90 para 1, com litio 7 maior ou igual a 2000 para 1 em brometo de litio 1 molar em agua deuterada
Intensidade do gradiente	Maior ou igual a 0,25 T por metro, equivalente a 25 G por cm
Temperatura ajustavel da amostra	25 a 60 graus Celsius, com gas de alimentacao no minimo 5 graus Celsius abaixo da temperatura alvo
Automacao	Amostrador automatico com capacidade para ate 120 amostras e mais 12 amostras de referencia
Resolucao para hidrogenio 1 a 50, 0,55 e 0,11 por cento da altura do sinal	Padrao: menor ou igual a 0,4 Hz, 15 Hz e 30 Hz. Opcao de alta definicao: menor ou igual a 0,3 Hz, 10 Hz e 15 Hz
Trava de campo	Externa digital, sem necessidade de solventes deuterados
Tubos de amostra	Tubos padrao de ressonancia magnetica nuclear com diametro de 5 mm e comprimento de 177,8 mm (7 polegadas), compativel com tubos com valvula de vedacao
Dimensoes	Aproximadamente 50 cm de altura x 70 cm de largura x 60 cm de profundidade
Peso	Aproximadamente 94 kg
Temperatura do laboratorio	18 a 28 graus Celsius. Para medicoes com temperatura da amostra acima de 40 graus Celsius, 18 a 25 graus Celsius
Alimentacao eletrica	100 a 240 V, 50 a 60 Hz, consumo tipico inferior a 300 W

Infraestrutura	Nao requer nitrogenio liquido, helio liquido, refrigeracao a agua nem exaustao adicional. O controle de temperatura ajustavel requer ar comprimido ou nitrogenio com pressao maxima de 5 bar

5. Itens opcionais

- Amostrador automatico.
- Controle ajustavel de temperatura da amostra.
- Opcao de alta definicao de resolucao.
- Modulo de monitoramento de reacoes em linha.
- Pacote de software para integridade de dados em ambientes regulados.

6. Imagens do equipamento



Figura 1. Espectrometro de ressonancia magnetica nuclear de bancada



Figura 2. Insercao do tubo de amostra no equipamento



Figura 3. Equipamento com amostrador automatico opcional