



E0455

ATRIBUIÇÕES DOS DADOS DE RMN DE ^1H E ^{13}C PARA BENZOILECGONINE, UM METABOLITE DA COCAÍNA

Lara Lombardi (Bolsista PIBIC/CNPq), Dra. Susimaire Pedersoli (Co-orientadora) e Prof. Dr. Roberto Rittner Neto (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

Benzoilecgonina (BEG) é o metabólito predominante da cocaína, e tem sido utilizado como um valioso marcador do uso de cocaína e crack. Em nosso laboratório foi iniciado um estudo que envolve a determinação de BEG em mecônio (primeira defecação) de recém-nascidos, cujas mães são suspeitas uso de drogas. O método de análise proposto envolve o uso de espectroscopia de RMN de ^1H ; entretanto os dados de RMN para BEG na literatura ainda não estão completos ou estão em discordância entre eles. Em vista disto, os dados de espectroscopia de RMN de ^1H e de ^{13}C foram determinados. A determinação de todos os sinais de hidrogênio e carbono foi obtida bem como as medidas de todas as constantes de acoplamento $^1\text{H}/^1\text{H}$. A maioria dos sinais de ^{13}C puderam ser determinadas através de gHSQC. Para carbonos quaternários, análise de dados de gHMBC foram suficientes para completar a determinação.

Benzoilecgonina - ^1H RMN - ^{13}C RMN