



E0455

**ATRIBUIÇÕES DOS DADOS DE RMN DE  $^1\text{H}$  E  $^{13}\text{C}$  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  $^1\text{H}$ ; 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  $^1\text{H}$  e de  $^{13}\text{C}$  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  $^{13}\text{C}$  puderam ser determinadas através de gHSQC. Para carbonos quaternários, análise de dados de gHMBC foram suficientes para completar a determinação.

Benzoilecgonina -  $^1\text{H}$  RMN -  $^{13}\text{C}$  RMN