

termos e conseguiram obter resultados extremamente precisos para as correções da função de onda do He no estado fundamental, incluindo correções de sexta ordem e obtendo correções de décima terceira ordem para a energia, obtendo $E_0 = -2,90372438 e^2/a_0$. A correção de segunda ordem $E_0^{(2)}$ é de $-4,3eV$ e a de terceira ordem $E_0^{(3)}$, é de $+0,1eV$. Assim, com correções de terceira ordem a energia calculada para o He no estado fundamental passa a ser

$$E \cong E_0^{(0)} + E_0^{(1)} + E_0^{(2)} + E_0^{(3)}$$

$$\therefore E \cong -108,8eV + 34,0eV - 4,3eV + 0,1eV = -79,0eV$$

Este valor difere em menos que $0,1eV$ do valor experimental. Valor da energia eletrônica com correções de 21.^a ordem pode também ser encontrado na literatura⁵

¹ Eduardo M.A. Peixoto, Q. Nova, 1(2), 10 (1978).

² I.S. Gradshteyn, I.M. Ryzhik, "Table of Integrals, Series, and Products", Academic Press, New York, 1965.

³ K.F. Niessen, Phys. Rev. 34, 263 (1929).

⁴ C.W. Scherr, R.E. Knight, Rev. Mod. Phys., 35, 436 (1963).

⁵ J. Midtdal, Phys. Rev., 138A, 1010 (1965).

NOTAS TÉCNICAS

RMN ¹³C com Desacoplamento Coerente em Faixa Larga Um Oscilador de Baixo Custo

Paul M. Baker, Antônio Jorge Ribeiro da Silva e Eugênio Marins

Núcleo de Pesquisas de Produtos Naturais, Centro de Ciências
da Saúde, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Ilha da Cidade Universitária,
Rio de Janeiro, Brasil

(Recebido em 18/3/78)

A combinação de métodos de desacoplamento de prótons em faixa larga e de espectrometria de ressonância magnética nuclear com transformação de Fourier, tem possibilitado o uso de RMN¹³C como técnica rotineira na análise de estruturas químicas complexas. Normalmente, obtém-se desacoplamento de prótons em faixa larga, modulando-se a frequência de desacoplamento com ruídos ('noise decoupling'). Grutzner e Santini mostraram em artigo recente¹, vantagens da utilização de desacoplamento coerente em faixa larga, gerado pela técnica de modulação com onda quadrada.

Para os usuários do Varian XL-100 que não dispõem de um oscilador adicional para conectar ao modulador externo

do desacoplador do instrumento, o esquema anexo representa uma solução de baixo custo.

R_1 pode ser usado para sintonizar o circuito (entre 70 e 200 Hz) cuja tensão de saída é de 5 V. A frequência usada rotineiramente em nossos laboratórios é de 100 Hz, ajustada com o auxílio de um osciloscópio. O oscilador descrito tem permitido um incremento da relação sinal/ruído do nosso espectrômetro em um fator de dois ou mais.

Agradecimentos: - Este trabalho foi apoiado por verbas do CPEG-UFRJ, CNPq e FINEP (FNDCT).

¹ J. B. Grutzner e R. E. Santini, J. Magn. Resonance 19, 173 (1975).

