

-- CONHECIMENTOS ESPECÍFICOS --

Considerando que a espectroscopia de ressonância magnética nuclear (RMN) tem se consolidado como uma ferramenta essencial na análise de produtos agroindustriais, julgue os itens que se seguem.

- 76** A combinação de espectroscopia de RMN com algoritmos de aprendizado de máquina, como máquinas de vetores de suporte com *kernels* não lineares e *random forest*, aprimora a discriminação de amostras com pequenas variações estruturais, devido à capacidade desses modelos de lidar com relações complexas entre os metabólitos diferenciais, extraindo informações sutis que não são facilmente captadas por técnicas lineares.
- 77** Considere que, para caracterizar diferentes métodos de extração utilizados na obtenção de amostras de óleos de camélia, tenha sido empregada a espectroscopia de RMN de ^1H , seguida de análise de componentes principais, e que os resultados tenham revelado agrupamentos distintos no espaço das componentes principais. Nesse caso, depreende-se que o método de extração influencia significativamente a composição química do óleo.
- 78** O uso de redes neurais artificiais na análise espectral de RMN elimina a necessidade de pré-processamento dos dados, pois esses algoritmos são capazes de identificar e remover ruídos automaticamente.

Julgue os itens subsequentes, tendo em vista que a espectroscopia, a relaxometria e as imagens de ressonância magnética nuclear (RMN) têm se mostrado eficientes ferramentas para monitorar características essenciais de produtos agropecuários, assim como sua qualidade.

- 79** Considere que pesquisadores tenham utilizado imagens por RMN baseadas em T_2 para monitorar a evolução de danos internos em frutos submetidos a compressão. Considere, ainda, que, no protocolo experimental, eles tenham adotado a sequência de pulso *spin-echo*, o que permite a reconstrução tridimensional detalhada das áreas lesionadas, e que, ao analisar as imagens ponderadas em T_2 , tenham observado ter havido acúmulo de líquido nas áreas danificadas dos frutos. Nessa situação, é correto concluir que o extravasamento de líquidos aumenta a mobilidade da água livre, prolongando o tempo de relaxação T_2 e resultando em regiões mais brilhantes, com menor intensidade de sinal.
- 80** A relaxometria de RMN de baixo campo pode ser usada para estimar o teor de umidade e a distribuição de gordura em carnes, o que permite controle de qualidade não destrutivo.
- 81** Em sistemas heterogêneos, como os alimentos, o tempo de relaxação *spin-rede* pode ser utilizado para monitorar a qualidade e a degradação de produtos agrícolas, ajudando a avaliar a integridade estrutural, por exemplo, ao detectar alterações nas interações moleculares ao longo do tempo.

Julgue os próximos itens, a respeito da instrumentação de ressonância magnética nuclear (RMN).

- 82** Na técnica de RMN, o transmissor emite o pulso de radiofrequência, que fornece energia suficiente para excitar os núcleos do material analisado e promove a transição dos *spins* nucleares de um estado de menor energia para um estado de maior energia: neste estado de maior energia, o sinal será captado pelo receptor, que gerará, por sua vez, um sinal de RMN.
- 83** Ímãs permanentes em espectrômetros de RMN de baixo campo possuem vantagens operacionais, mas necessitam de resfriamento criogênico para manter a estabilidade do campo magnético.
- 84** A escolha da sonda de RMN influencia diretamente a sensibilidade e a resolução espectral, sendo as sondas criogênicas especialmente úteis em RMN de alto campo para a detecção de metabólitos em baixas concentrações.

Em determinada fazenda produtora de amendoim, a equipe de controle de qualidade está buscando métodos eficientes para monitorar a qualidade dos grãos durante o armazenamento sob diferentes condições de temperatura e umidade. Para acompanhar essas condições, a equipe deseja utilizar espectroscopia de ressonância magnética nuclear de baixo campo (RMN-BC).

Considerando essa situação hipotética, julgue os itens seguintes.

- 85** A relaxometria T_2 pode ser utilizada para monitorar a oxidação dos lipídios presentes nos grãos, ao possibilitar a identificação de alterações estruturais que indicam a degradação dos lipídios ao longo do tempo, contribuindo para o controle de qualidade do amendoim.
- 86** Utilizando um ímã permanente de baixo campo, juntamente com sensores de radiofrequência e sequências de pulso otimizadas, a RMN-BC permite a análise direta dos alimentos de forma não destrutiva, processo facilitado pela mais alta resolução espacial pulsada que a técnica oferece em comparação, por exemplo, com a técnica de RMN de alto campo, permitindo a identificação de variações na composição interna dos alimentos, como distribuição de umidade, gordura e outros componentes.
- 87** A sequência de pulso CPMG (Carr-Purcell-Meiboom-Gill), se utilizada na técnica de RMN-BC, permitirá avaliar o impacto de diferentes condições de armazenamento do amendoim, como o efeito da umidade na estrutura interna dos grãos.

Uma empresa de café especializada em produção e exportação de grãos de *Coffea arabica* decidiu otimizar seus processos de controle de qualidade, focando na identificação precoce de sinais de envelhecimento químico nos grãos de café verde. Para isso, a empresa contratou uma equipe de pesquisa que aplicou a técnica de ressonância magnética nuclear (RMN) de alto campo para identificar marcadores de degradação de grãos, durante o armazenamento, em três diferentes tipos de embalagens: permeáveis, impermeáveis e a vácuo. O estudo utilizou diferentes métodos de RMN para analisar mudanças na composição química do café ao longo do tempo, com o objetivo de melhorar o processo de comercialização e garantir a qualidade do produto final.

Tendo como referência esse cenário hipotético, julgue os itens que se seguem.

- 88** Pela análise de espectros 2D de COSY (*Correlated Spectroscopy*), é possível identificar as interações entre os diferentes grupos funcionais no café verde, o que permite a distinção dos marcadores de envelhecimento, sem a necessidade de separação prévia dos compostos.
- 89** A equipe de pesquisa poderá utilizar o método DOSY (*Diffusion-Ordered Spectroscopy*) para obter informações sobre a mobilidade e a interação dos compostos presentes no sistema complexo dos grãos de café, o que permitirá identificar alterações nas propriedades físico-químicas dos grãos durante o armazenamento, como, por exemplo, alterações na distribuição de compostos voláteis e não voláteis.
- 90** Considerando que compostos com relaxamento rápido, como é o caso da água, podem distorcer os espectros de RMN, dificultando a análise precisa de outros compostos com relaxamento mais lento, como os polifenóis ou os carboidratos mais complexos, a equipe de pesquisa pode utilizar o método da espectroscopia de pulso de inversão, que melhora a qualidade dos espectros, minimizando esses efeitos de distorção.

Acerca da aplicação dos métodos tomográficos de ressonância magnética nuclear (RMN) na agropecuária, julgue os itens a seguir.

- 91** Uma desvantagem da tomografia por RMN é o fato de que essa tecnologia não pode ser aplicada em tempo real em campos agrícolas ou para a análise de grandes volumes de amostras, como em processos de colheita, devendo uma amostra ser retirada e levada ao laboratório.
- 92** O uso de RMN tomográfica em 3D é eficaz para monitorar a distribuição interna de água e nutrientes em culturas agrícolas, permitindo otimizar o manejo de irrigação e adubação, especialmente em regiões de clima semiárido.
- 93** A tomografia de RMN pode ser usada para inspecionar a qualidade interna de ovos, detectando defeitos estruturais nas cascas, sem a necessidade de abertura.

Acerca da ressonância magnética nuclear (RMN), das sequências de pulsos, dos processos de baixa e alta resolução, dos processos dinâmicos e de geração de imagens, julgue os itens a seguir.

- 94** O método mais aplicado na geração de imagens de RMN é aquele baseado na implementação de um campo magnético adicional com o objetivo de codificar informações de fase dos *spins*, e núcleo atômico mais utilizado para a formação de imagens é o núcleo de hidrogênio.
- 95** Na ressonância magnética nuclear (RMN) em altas resoluções, as técnicas utilizadas para amostras líquidas e sólidas são diferentes, pois os parâmetros espectrais são distintos.
- 96** Na RMN em alta resolução para amostras sólidas, no caso de elementos químicos com núcleos atômicos com *spin* $\frac{1}{2}$, é necessário que se faça a rotação das amostras em $54,73^\circ$ em relação ao campo magnético externo, a fim de que se eliminem as interações anisotrópicas.
- 97** No caso, de amostras líquidas ou em solução, as análises de ressonância magnética nuclear são obtidas com grande quantidade de pulsos de excitação.
- 98** Na agricultura, a ressonância magnética nuclear pode ser aplicada para a análise de solos quando a amostra a ser estudada tiver quantidade de carbono baixa e quantidade de íons ferromagnéticos alta.

A respeito de ressonância magnética nuclear (RMN), julgue os itens subsequentes.

- 99** Na espectroscopia de RMN, o deslocamento químico tem a capacidade de gerar informações sobre o ambiente químico de um núcleo, no entanto, não pode ser aplicado para distinguir entre diferentes isômeros de uma mesma molécula, uma vez que a posição do pico no espectro é influenciada apenas pelo tipo de núcleo, e não pela estrutura molecular específica.
- 100** Durante a análise por RMN, é fornecida energia aos núcleos dos átomos, os quais ficam excitados, e, para manter o sistema em equilíbrio, os núcleos que foram excitados liberam energia e retornam ao menor nível energia, em um processo chamado de relaxação, no qual o sinal de RMN é gerado.
- 101** As interações quadrupolares estão presentes somente quando núcleos com *spin* que possuem momento angular I maior que $\frac{1}{2}$ estão envolvidos.
- 102** A relaxação transversal corresponde a um processo entálpico em que há transferência de energia com o sistema, do sistema de *spins* que está no estado de maior energia (no estado excitado) para as moléculas do meio mais próximas que vibram nas frequências apropriadas, enquanto a relaxação longitudinal é um processo espontâneo, isto é, um processo entrópico que não envolve transferência de energia.
- 103** Nas aplicações espectroscópicas de RMN, são obtidas as informações da distribuição espacial (imagens) da água e da gordura em tecidos biológicos, desde alimentos a seres vivos.
- 104** O *spin* do próton, do nêutron e do elétron é igual a $\frac{1}{2}$, mas, como um núcleo pode ter mais de um próton ou nêutron, o *spin* total do núcleo pode ser igual a 0, $\frac{1}{2}$, 1, $3/2$, 2 e assim por diante, dependendo do número de elétrons.

Acerca do uso de inteligência artificial (IA) para desenvolver modelos utilizando dados espectrais de RMN para estudar a dinâmica molecular de proteínas e desenhar de forma mais racional novos fármacos para o tratamento de doenças de plantas e animais, julgue os próximos itens.

- 105** A aplicação de IA em dados de RMN permite superar limitações tradicionais associadas à baixa sensibilidade de RMN em quantidades muito pequenas de proteína.
 - 106** Mesmo com a AI aplicada à análise de RMN, não é possível diferenciar entre as estruturas proteicas nativas e as estruturas mal dobradas.
 - 107** Modelos de IA que utilizam apenas dados espectrais de RMN podem prever com precisão as interações fármaco-proteína.
 - 108** A modelagem preditiva com IA dispensa a exigência de experimentação em laboratório para analisar novos compostos fármacos.
 - 109** A IA possibilita diminuir o tempo de desenvolvimento de novos fármacos, em comparação com métodos tradicionais.
 - 110** A IA possibilita a identificação automática de alterações conformacionais de proteínas em tempo real a partir de dados espectrais de RMN.
-

Espaço livre
