

LIVRO DE RESUMOS



DÉCIMA PRIMEIRA SEMANA DA
GRADUAÇÃO E PÓS-GRADUAÇÃO DO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS – USP

2021



**Universidade de São Paulo
Instituto de Física de São Carlos**

**XI Semana Integrada do Instituto de
Física de São Carlos**

Livro de Resumos

**São Carlos
2021**

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

SIFSC 11

Coordenadores

Prof. Dr. Vanderlei Salvador Bagnato

Diretor do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Prof. Dr. Luiz Vitor de Souza Filho

Presidente da Comissão de Pós Graduação do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Prof. Dr. Luís Gustavo Marcassa

Presidente da Comissão de Graduação do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Comissão Organizadora

Arthur Deponte Zutião

Artur Barbedo

Beatriz Kimie de Souza Ito

Beatriz Souza Castro

Carolina Salgado do Nascimento

Edgard Macena Cabral

Fernando Camargo Soares

Gabriel dos Reis Trindade

Gabriel dos Santos Araujo Pinto

Gabriel Henrique Armando Jorge

Giovanna Costa Villefort

Inara Yasmin Donda Acosta

Humberto Ribeiro de Souza

João Hiroyuki de Melo Inagaki

Kelly Naomi Matsui

Leonardo da Cruz Rea

Letícia Cerqueira Vasconcelos

Natália Carvalho Santos

Nickolas Pietro Donato Cerioni

Vinícius Pereira Pinto

Normalização e revisão – SBI/IFSC

Ana Mara Marques da Cunha Prado

Maria Cristina Cavarette Dziabas

Maria Neusa de Aguiar Azevedo

Sabrina di Salvo Mastrandionio

Ficha catalográfica elaborada pelo Serviço de Informação do IFSC

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

(11: 06 set. - 10 set. : 2021: São Carlos, SP.)

Livro de resumos da XI Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos/ Organizado por João H. Melo Inagaki [et al.]. São Carlos: IFSC, 2021.

412 p.

Texto em português.

1. Física. I. Inagaki, João H. de Melo, org. II. Título

ISBN 978-65-993449-3-0

CDD 530

PG139

Estudo da relaxação de sistemas quadrupolares via Ressonância Magnética Nuclear

LEAL, A. C. S.¹; BONAGAMBA, T. J.¹

adrianeleal@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Um dos primeiros trabalhos reportados sobre relaxação em sistemas quadrupolares, utilizando a técnica de RMN, foi com núcleos de spin $I = 1$. O objetivo do trabalho foi entender como a interação quadrupolar influencia no alargamento dos multipletos do espectro dos núcleos de spin $I = 1/2$, também presentes no sistema. (1) O acoplamento quadrupolar foi considerado como a fonte do alargamento dos multipletos, e alguns testes experimentais foram realizados no sistema $^{14}\text{NH}_3$. Posteriormente, foram desenvolvidos outros trabalhos reportando resultados teóricos para amostras I quidas e gasosas, em moléculas não esféricas e sistemas onde flutuações magnéticas e quadrupolares II estão presentes. Outros estudos para spins $I > 1$ foram publicados, como por exemplo, em sistemas anisotrópicos utilizando espectroscopia quadrupolar bidimensional e o estudo de espectroscopia de múltiplo quantum. Um dos primeiros modelos teóricos da relaxação explorou a transição de probabilidade por unidade de tempo entre dois estados. (2) Nesta teoria estudou-se vários sistemas de spins nucleares, tais como sistemas de spins isolados, sistemas de spins acoplados, spins nucleares acoplados com elétrons. As interações mais importantes consideradas foram as interações escalares, dipolares e quadrupolares. Por outro lado, existe outra maneira de descrever o procedimento teórico da relaxação, o qual é por meio da Teoria de Redfield. (3) Esta teoria é considerada mais completa porque utiliza-se de conceitos da Mecânica Quântica através do formalismo da matriz densidade. Além disso, considera-se a taxa de troca dos elementos fora da diagonal da matriz densidade, pois esses elementos carregam as densidades espectrais, as quais dão as informações dos tempos de relaxação longitudinal e transversal. Nesse sentido, neste trabalho, estudou-se um sistema de spin nuclear $I = 7/2$, resolvendo as componentes da matriz densidade analiticamente. Como resultado discutiu-se uma metodologia para quantificar os tempos de relaxação transversal e longitudinal.

Palavras-chave: Ressonância magnética nuclear. Sistema quadrupolar. Teoria de relaxação de Redfield.

Referências:

- 1 POPLE. J. A. The effect of quadrupole relaxation on nuclear magnetic resonance multiplets. **Molecular Physics**, v.1, n.2,p,168–174, 1958.
- 2 ABRAGAM. A. **Principles of nuclear magnetism** Oxford: Oxford Science Publications,1994.
- 3 REDFIELD. A. G. On the theory of relaxation processes. **IBM Journal of Research and Development**,v.1,n.1, p.19–31, January 1957.