

Universidade de São Paulo
Instituto de Física de São Carlos

XII Semana Integrada do Instituto de
Física de São Carlos

Livro de Resumos

São Carlos
2022

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

SIFSC 12

Coordenadores

Prof. Dr. Osvaldo Novais de Oliveira Junior

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

Prof. Dr. Javier Alcides Ellena

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

Profa. Dra. Tereza Cristina da Rocha Mendes

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

Comissão Organizadora

Adonai Hilario

Arthur Deponte Zutião

Elisa Goettems

Gabriel dos Santos Araujo Pinto

Henrique Castro Rodrigues

Jeffer Santiago Mares

João Victor Pimenta

Julia Martins Simão

Letícia Martinelli

Lorany Vitoria dos Santos Barbosa

Lucas Rafael Oliveira Santos Eugênio

Natasha Mezzacappo

Paulina Ferreira

Vinícius Pereira Pinto

Willian dos Santos Ribela

Normalização e revisão – SBI/IFSC

Ana Mara Marques da Cunha Prado

Maria Cristina Cavarette Dziabas

Maria Neusa de Aguiar Azevedo

Sabrina di Salvo Mastrantonio

Ficha catalográfica elaborada pelo Serviço de Informação do IFSC

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos
(12: 10 out. - 14 out. : 2022: São Carlos, SP.)
Livro de resumos da XII Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos/ Organizado por Adonai Hilario [et al.]. São Carlos: IFSC, 2022.

446 p.

Texto em português.

1. Física. I. Hilario, Adonai, org. II. Título

ISBN: 978-65-993449-5-4

CDD: 530

IC16

Estudo de processos dinâmicos em meios porosos por RMN e técnicas físico-computacionais

CAMPOS, Nataly; BONAGAMBA, Tito; OLIVEIRA, Éverton Lucas

natalymelo@usp.br

Em um meio poroso, há constante interação de diferentes fluidos, por exemplo água e óleo, além da comunicação entre regiões de características variadas cujas moléculas encontram-se em movimento de translação devido à autodifusão. Dessa forma, há necessidade de caracterização da estrutura e dinâmica das moléculas de um fluido confinado, como também, obtenção de propriedades físico-químicas do meio petrofísico. Diante desta relevância, a Ressonância Magnética Nuclear (RMN) apresenta técnicas avançadas e constitui umas das mais importantes ferramentas na caracterização de meios porosos juntamente com a aplicação de técnicas físico-computacionais. Assim, foi utilizado o método computacional de *Random Walk* e, associadamente, foi introduzida a teoria de relaxometria da RMN, a partir da compreensão da dedução da equação de Bloch e processos de difusão descrito pelas Leis de Fick. Desse modo, foram implementados algoritmos análogos ao experimento de CPMG, que podem ser comparáveis a resultados teóricos propostos por Brownstein e Tarr.(1) Em seguida, a fim de analisar a conectividade entre sítios onde as moléculas confinadas encontram-se sob efeitos difusivos, foi realizado computacionalmente e experimentalmente o método de T_2 -Filtered- T_2 -Exchange.(2) Tal experimento é uma nova proposta do Laboratório de Espectroscopia de Alta Resolução por RMN (LEAR/USP), sendo uma implementação do experimento de T_2 - T_2 -Exchange proposto por Lee.(3) Assim, uma das análises consistiu em obter dados experimentais para uma amostra carbonática (*Indiana Limestone*), a fim de observar as curvas de troca entre os diferentes sítios da amostra. Outra análise, consistiu em implementar modelos numéricos das equações de troca, em que foi estudada a máxima intensidade de sinal a ser observado por RMN considerando um modelo de dois sítios, A e B. Estas análises trazem elementos importantes para entender o experimento de *Exchange* entre diferentes poros. O principal desafio do experimento T_2 -Filtered- T_2 -Exchange está em estimar os parâmetros relacionados às taxas de troca. Isso ocorre, pois, a quantidade de magnetização presente na microporosidade, muitas vezes é menor que 5% do sinal total, sendo fortemente influenciada pelo ruído presente no sinal, de modo que esta componente surge na distribuição de tempos de relaxação variando tanto em amplitude quanto em posição quando utilizado o método convencional da transformada de Laplace. Dessa forma, pretende-se aplicar métodos computacionais para Meios Porosos Digitais reconstruídos a partir de imagens de micro tomografia computadorizada de raio-X, a fim de caracterizar a estrutura e dinâmica das moléculas de um fluido, assim como obtenção de propriedades físico-química do meio poroso e consolidação do experimento de T_2 -Filtered- T_2 -Exchange.

Palavras-chave: Ressonância magnética nuclear. Difusão. Meios porosos.**Agência de fomento:** CNPq (143700/2021-9)**Referências:**

- 1 BROWNSTEIN, K. R.; TARR, C. E. Importance of classical diffusion in NMR studies of water in biological cells. **Physical Review**, v. 19, n. 6, p. 2446-2453, 1979.
- 2 D'EURYDICE, M. N.; MONTRAZI, E. T.; FORTULAN, C. A.; BONAGAMBA, T. J. T2-Filtered T2-T2-Exchange NMR. **Journal of Chemical Physics**, v. 144, n.20, p. 204201, 2016.
- 3 LEE, J. H. Two dimensional Laplace inverse transform NMR: altered relaxation times allow detection of exchange correlation. **Journal of the American Chemical Society** v. 115, n. 17, p.7761-7764, 1993.