

ESTUDO DA RELAXAÇÃO DE UM SISTEMA HETERONUCLEAR COM INTERAÇÃO DIPOLAR VIA EQUAÇÃO DE REDFIELD

Adriane Consuelo Leal Aucasse ¹ Hugo Danilo Fernández Sare ² Ruben Aucasse Estrada ³
Vol 3, 2022 - 154490
Pôster

Download

Resumo

A interação dipolo-dipolo é uma importante interação entre dois ou mais núcleos que possuem distâncias internucleares ou intramoleculares. O estudo da interação dipolo-dipolo permite estabelecer a dinâmica de relaxação das partículas. Dentro deste contexto, há trabalhos pioneiros de relaxação introduzidos por Bloembergen, Purcell e Pound e Solomon. Dois anos depois, a abordagem foi estendida via equação mestra por Redfield através de conceitos da Mecânica Quântica. Dessa forma, neste trabalho, aplicou-se a Teoria de Redfield, para um sistema heteronuclear, onde consideramos uma espécie nuclear S de spin 1/2 interagindo dipolarmente com uma espécie nuclear I de spin 1/2. Como resultado, encontramos soluções analíticas para todos os elementos da matriz densidade determinando a dinâmica do sistema estudado.

Além disso, consideramos três situações onde obtemos expressões para as magnetizações das espécies S e I. A primeira situação é dada pelo condição de saturação, onde as populações da espécie nuclear S (a mais abundante) são iguais. Na segunda situação, é realizada a inversão das populações da espécie nuclear S. No terceiro caso, as populações das espécies nucleares S e I são invertidas. Para a primeira e segunda situação determinamos o tempo de enhancement.

No caso da saturação, encontramos um termo adicional no cálculo teórico da magnetização da espécie S, quando comparado com o método de resolução de Solomon. Isso acontece porque resolvemos o sistema de equações diferenciais obtendo as soluções analíticas, podendo assim extrair a informação completa do problema estudado. Ademais, simulamos as curvas das magnetizações usando os parâmetros de Bloembergen, Purcell, Pound e Solomon considerando uma molécula de ácido hidrófluorídrico (HF), onde a interação dipolar se dá entre o núcleo de hidrogênio e flúor. Nessa configuração, determinamos o tempo de correlação que é da ordem de picosegundos.

Desse trabalho, através da dinâmica das magnetizações e o tempo de correlação, as densidades espectrais, que são características de cada sistema ou molécula podem ser conhecidas.

Compartilhe suas ideias ou dúvidas com os autores!



Sabia que o maior estímulo no desenvolvimento científico e cultural é a curiosidade? Deixe seus questionamentos ou sugestões para o autor!

Criar tópico

Instituições

- ¹ USP - São Carlos
- ² Universidade Federal de Juiz de Fora
- ³ Universidade Estadual de Ponta Grossa

Eixo Temático

- 2. Geral (Profissionais e Estudantes de Graduação e Pós não concorrentes ao prêmio)

Palavras-chave

Relaxação Magnética Nuclear

Sistema dipolar

Teoria de Redfield

ESTUDO DA RELAXAÇÃO DE UM SISTEMA HETERONUCLEAR COM INTERAÇÃO DIPOLAR VIA EQUAÇÃO DE REDFIELD

*A. Consuelo-Leal¹, H. D. F. Sare¹, R. Auccaise²

¹Universidade Federal de Juiz de Fora, Minas Gerais, Brasil;

¹Universidade Federal de Juiz de Fora, Minas Gerais, Brasil;

²Universidade Estadual de Ponta Grossa, Brasil

*adrianeleal25@gmail.com

Palavras-chave: Relaxação Magnética Nuclear, Sistema dipolar, Teoria de Redfield.

A interação dipolo-dipolo é uma importante interação entre dois ou mais núcleos que possuem distâncias internucleares ou intramoleculares. O estudo da interação dipolo-dipolo permite estabelecer a dinâmica de relaxação das partículas. Dentro deste contexto, há trabalhos pioneiros de relaxação introduzidos por Bloembergen, Purcell e Pound [1] e Solomon [2]. Dois anos depois, a abordagem foi estendida via equação mestra por Redfield através de conceitos da Mecânica Quântica [3].

Dessa forma, neste trabalho, aplicou-se a Teoria de Redfield, para um sistema heteronuclear, onde consideramos uma espécie nuclear S de spin 1/2 interagindo dipolarmente com uma espécie nuclear I de spin 1/2. Como resultado, encontramos soluções analíticas para todos os elementos da matriz densidade determinando a dinâmica do sistema estudado.

Além disso, consideramos três situações onde obtemos expressões para as magnetizações das espécies S e I. A primeira situação é dada pela condição de saturação, onde as populações da espécie nuclear S (a mais abundante) são iguais. Na segunda situação, é realizada a inversão das populações da espécie nuclear S. No terceiro caso, as populações das espécies nucleares S e I são invertidas. Para a primeira e segunda situação determinamos o tempo de *enhancement*.

No caso da saturação, encontramos um termo adicional no cálculo teórico da magnetização da espécie S, quando comparado com o método de resolução de Solomon [2]. Isso acontece porque resolvemos o sistema de equações diferenciais obtendo as soluções analíticas, podendo assim extrair a informação completa do problema estudado. Ademais, simulamos as curvas das magnetizações usando os parâmetros de Bloembergen, Purcell, Pound [1] e Solomon [2] considerando uma molécula de ácido hidrófluorídrico (HF), onde a interação dipolar se dá entre o núcleo de hidrogênio e flúor. Nessa configuração, determinamos o tempo de correlação que é da ordem de picosegundos.

Desse trabalho, através da dinâmica das magnetizações e o tempo de correlação, as densidades espectrais, que são características de cada sistema ou molécula podem ser conhecidas.

Referências

[1] N. Bloembergen, E. M. Purcell, R. V. Pound, Physical Review, 1948, 73, 679-712.

[2] I. Solomon, Physical Review, 1955, 99, 559-566.

[3] A. G. Redfield, IBM Journal of Research and Development, 1957, 1, 19-31.

Agradecimentos

CNPq.