

Società Italiana della Scienza del Suolo SISS Newsletter

Nuclear Magnetic Resonance with Fast Field-Cycling Setup: A Valid Tool for Soil Quality Investigation

a cura di Pellegrino Conte, Paolo Lo Meo

p. 1

Pellegrino Conte, Paolo Lo Meo, 2020. *Nuclear Magnetic Resonance with Fast Field-Cycling Setup: A Valid Tool for Soil Quality Investigation*, Agronomy, 10(7), 1040

(<https://www.mdpi.com/2073-4395/10/7/1040/htm>)

Quando si parla di risonanza magnetica nucleare nella scienza del suolo la mente va, quasi esclusivamente, alla spettroscopia NMR “ad alto campo magnetico”, ovvero a quella tecnica che consente di ricostruire la struttura di una molecola o, nel caso del suolo, di investigare la composizione chimica della sostanza organica naturale. Certo è possibile trovare in letteratura studi sulla parte inorganica dei suoli, ma sempre di tipo analogo a quello summenzionato. Meno nota al grande pubblico della scienza del suolo è l’esistenza di tipologie differenti di tecniche NMR. In particolare, la *time-domain* (TD) NMR si basa sull’acquisizione di un *free induction decay* (il famoso FID di cui si legge sempre nei materiali e metodi di lavori basati sulla NMR) e sulla sua conversione (mediante uno strumento matematico che si chiama trasformata inversa di Laplace) in una distribuzione di tempi di rilassamento (sia T_1 che T_2 , a seconda del tipo di sequenza di impulsi utilizzata) in grado di fornire informazioni dettagliate sulla dinamica molecolare di sistemi complessi senza necessità di processi di estrazione e purificazione (Figura 1).

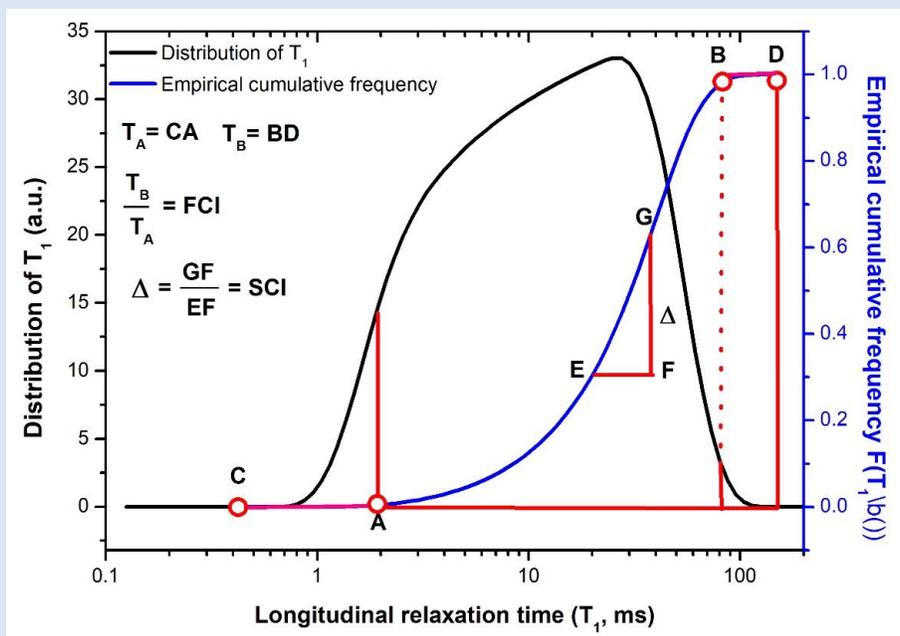


Figura 1. La curva in nero è la distribuzione dei tempi di rilassamento longitudinale (T_1) di molecole di acqua che si muovono sulla superficie porosa di un suolo. La dimensione dei pori sulla predetta superficie aumenta da sinistra a destra. La curva blu è la empirical cumulative frequency dalla cui interpretazione vengono ricavati l’indice di connettività funzionale (FCI) e l’indice di connettività strutturale (SCI).

Nel caso di sistemi solido-liquido, lo studio mediante TD-NMR consente di ottenere informazioni sulla distribuzione di pori sulla superficie della fase solida. Un nuovo strumento matematico, basato sulla *empirical cumulative frequency distribution* (Figura 1), permette, inoltre, di manipolare le distribuzioni di T_1 e T_2 in modo da individuare un indice di connettività funzionale, un indice di connettività strutturale ed un indice di porosità correlabili al grado di erosione di un suolo. Il grado di risoluzione della TD-NMR può essere incrementato nello sviluppo bidimensionale in cui i tempi T_1 sono riportati in funzione dei tempi T_2 . Informazioni aggiuntive relative ai tempi di correlazione – ovvero al tempo necessario perché una molecola ruoti di 1 rad o percorra una distanza pari al suo raggio di girazione – possono essere ottenute mediante lo studio dei profili di diffusione NMR (NMRD). Si tratta di profili in cui le velocità di rilassamento longitudinale ($R_1=1/T_1$) sono riportate in grafico contro le intensità dei campi magnetici applicati. Questi diagrammi hanno una forma di tipo lorentziano (Figura 2A) per sistemi semplici e tendono ad allontanarsi dalla predetta forma all'aumentare della complessità dei sistemi (Figura 2B).

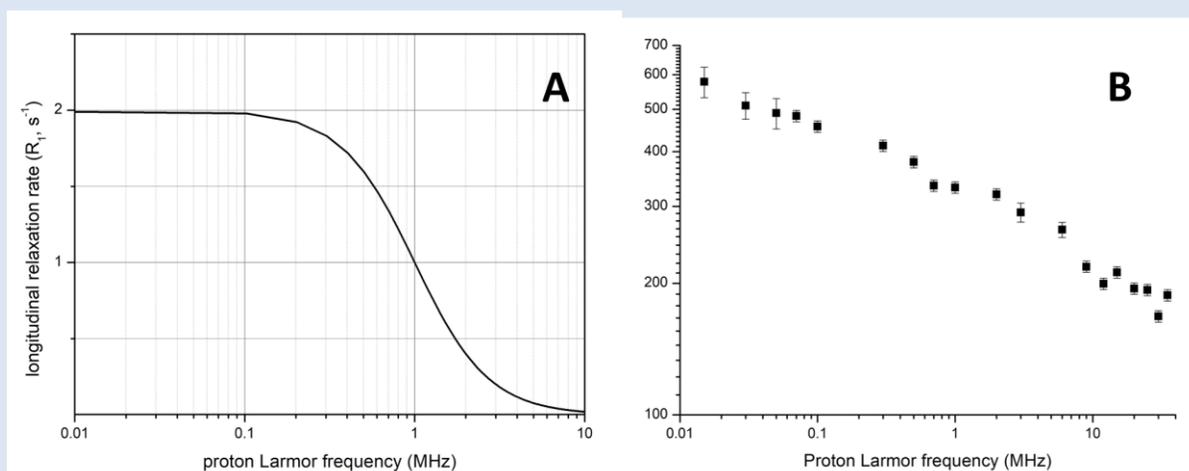


Figura 2. A. Tipica forma Lorentziana di un profilo NMRD. B. Forma stretched di un profilo NMRD ottenuto per un suolo saturo di acqua.

L'uso di modelli matematici opportuni consente di ricavare informazioni sulle dinamiche molecolari in un intervallo di tempi di correlazione molto più ampio rispetto a quello che si può studiare mediante l'uso di tecniche di risonanza magnetica a campo fisso.

Gli autori del lavoro oggetto della presente recensione sono esperti pluridecennali sia di spettroscopia NMR ad alta risoluzione che di tecniche NMR a bassa risoluzione oltre che a ciclo di campo su materiali di natura differente. Qui fanno un *excursus* sulle varie tipologie di analisi che la rilassometria NMR a ciclo di campo, ovvero a campo magnetico variabile, permette di fare nell'ambito della scienza del suolo. Vengono approfonditi limiti e vantaggi dei diversi modelli matematici necessari per l'elaborazione dati e tratte conclusioni in merito ad innovativi meccanismi di dinamica molecolare che coinvolgono i nutrienti nel suolo.