

Simulação de Experimentos de Ressonância Magnética Nuclear

Bárbara Darós de Lelis Ferreira^{1,*} (PG), Rita de Cássia Oliveira Sebastião¹ (PQ), João Pedro Braga¹ (PQ).

¹ Departamento de Química, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, MG - CEP 31270-90

* barbaralelis@hotmail.com

Palavras Chave: RMN, Equações de Bloch

Introdução

A Ressonância Magnética Nuclear (RMN) consiste na aplicação de uma onda eletromagnética na faixa de radiofrequência (RF) que provoca a excitação de núcleos com spin não nulos imersos em um campo magnético. O campo primário, \vec{B}_0 interage com o momento magnético dos núcleos acarretando o desdobramento dos níveis de energia nuclear e um segundo campo, \vec{B}_1 induz as possíveis transições entre esses níveis^[1,2,3]. Neste trabalho procurou-se simular experimentos com o auxílio das equações diferenciais de Bloch que fornecem um meio de calcular as trocas de estados de energia dos spins^[2] e assim estudar a espectroscopia de pulsos, a precessão livre e as excitações fora de ressonância das oscilações de Torrey.

Resultados e Discussão

A magnetização macroscópica da amostra pode ser representada por um vetor de comportamento clássico considerando o processo de relaxação deste vetor para uma posição de equilíbrio através das interações entre os spins e entre os spins e o meio^[1,2,3,4] quando calculada diretamente pelas equações diferenciais de Bloch:

$$\frac{d\vec{M}}{dx} = \gamma\vec{M}' \left[\vec{B}_0 - \frac{w}{\gamma} \right] \vec{k} + \gamma\vec{M}' \times \vec{B}_1 \vec{i} - \frac{(u\vec{i} - v\vec{j})}{T_2} - \frac{\vec{k}(M_z - M_0)}{T_1} \quad \text{Equação 1}$$

As simulações foram realizadas considerando os parâmetros descritos na tabela 1.

Tabela 1. Parâmetros utilizados nas simulações de experimentos de RMN.

Parâmetros	Espectroscopia de Pulsos	Precessão Livre	Oscilações de Torrey.
θ	90°	90°	-
T_1	10s	1s	1s
T_2	10s	0.3s	0.3s
$\gamma B_1 / 2\pi$	10Hz	10Hz	10Hz
$\Delta / 2\pi$	0.5Hz	3.0Hz	8.0Hz
Tempo do Campo de rf	0.025s	0.025s	0.025s

As simulações da espectroscopia de pulso são mostradas nas figuras 1 (a) e (d), onde na primeira o vetor de magnetização decai no plano (u,v) e após o pulso a defasagem dos spins acontece, já em 1(d) as projeções u, v não mais alinhadas relaxam

vagarosamente até atingir a posição de equilíbrio, e o componente z atinge rapidamente o equilíbrio, após o pulso. Na Precessão livre as simulações utilizaram as condições inicial (0,1,0) e final (0,0,1) e assim obtiveram o comportamento do vetor magnetização no plano (u,v) tendendo para o valor zero no estado final como mostrado em 1(b), e em 1(e) os mesmos componentes no processo oscilatório. Já nas simulações das oscilações de Torrey com excitações fora da ressonância o estado estacionário final com valor de u diferente de zero é mostrado em 1 (c) e o comportamento dos três componentes do vetor magnetização é semelhante, porém com uma diferença de fase devido à saturação ao longo da aplicação dos pulsos que impede que o estado final das componentes não retorne a posição de equilíbrio inicial como mostrado em 1(f).

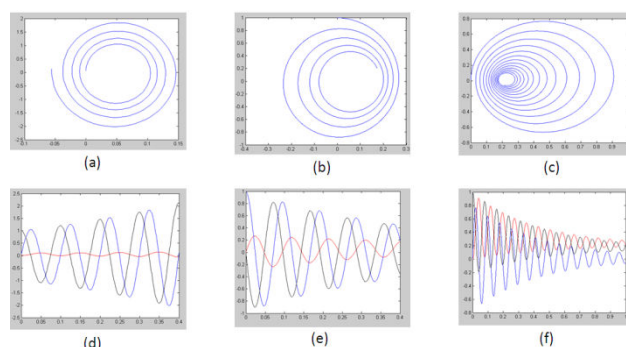


Figura 1. Projeção sobre o plano (u,v) do vetor de magnetização: (a) Espectroscopia de Pulso; (b) Precessão Livre; (c) Oscilações de Torrey. Comportamento dos vetores de magnetização: (d) Espectroscopia de Pulso; (e) Precessão Livre; (f) Oscilações de Torrey.

Conclusões

A através das simulações experimentais realizadas foi possível notar defasagem dos componentes do vetor magnetização ao atingirem a posição de equilíbrio após pulso aplicado devido à relaxação dos spins.

Agradecimentos

DQ/UFMG, CNPQ.

¹Sebastião, R.C.O, Braga, J.P., *Quím. Nova*, 31, 1058-1061, 2008.

²Sebastião, R.C.O., Braga J. P., *J. Mag. Reson.*, 177, 146-151, 2005.

³Sebastião, R.C.O.; Pacheco, C.N.; Braga, J.P.; Piló-Veloso, D. *J. Mag. Reson.*, 182, 22-28, 2006.

⁴Grivet, J.P.; *Am. J. Phys.*, 61, 1993.