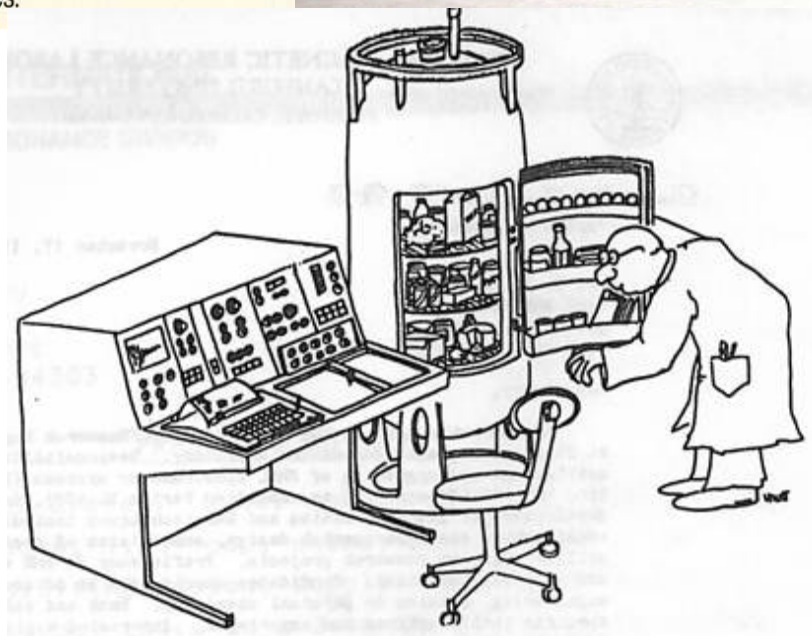


NMR practical jokes.

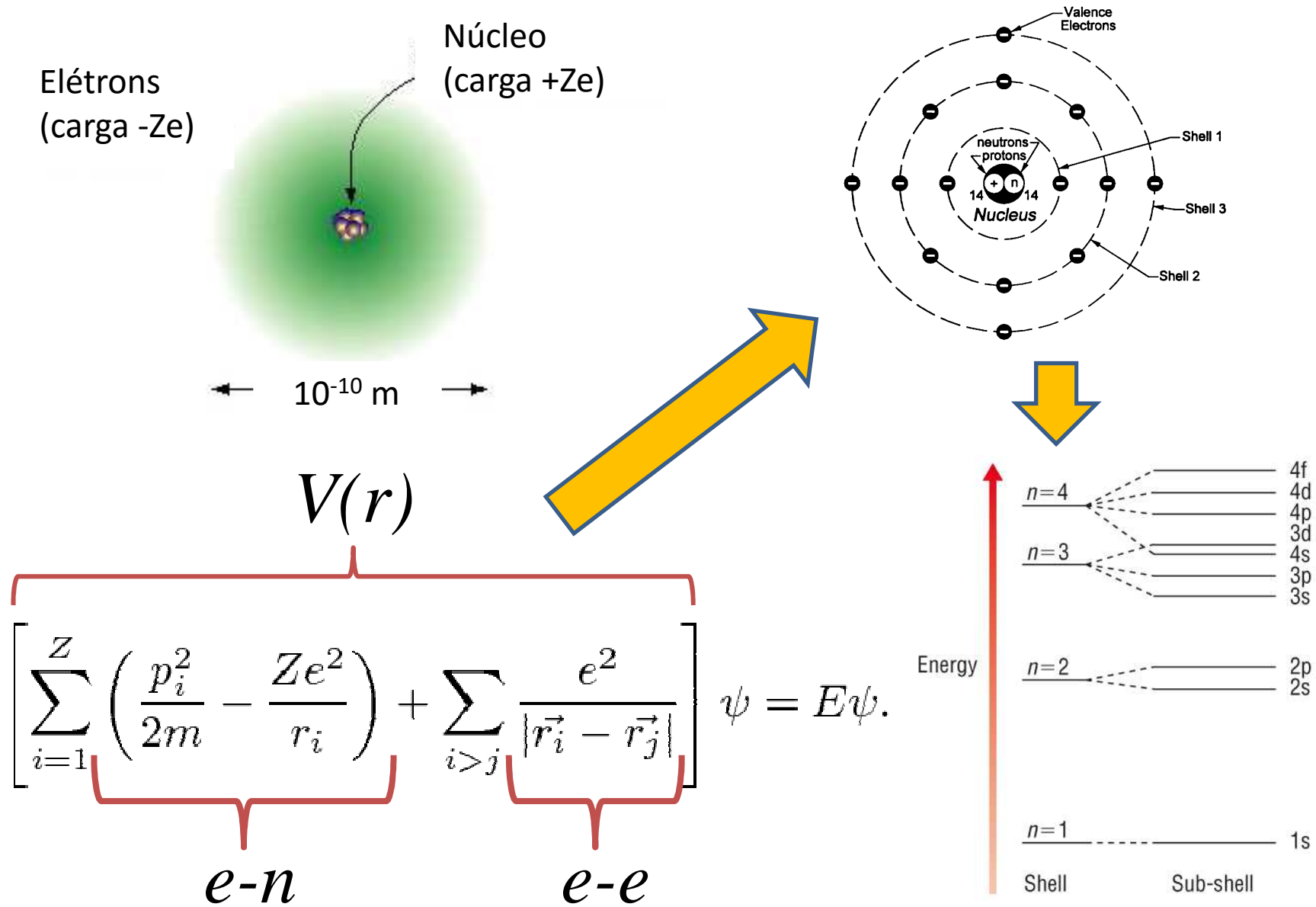


# **A origem do Spin Nuclear e a A RMN**

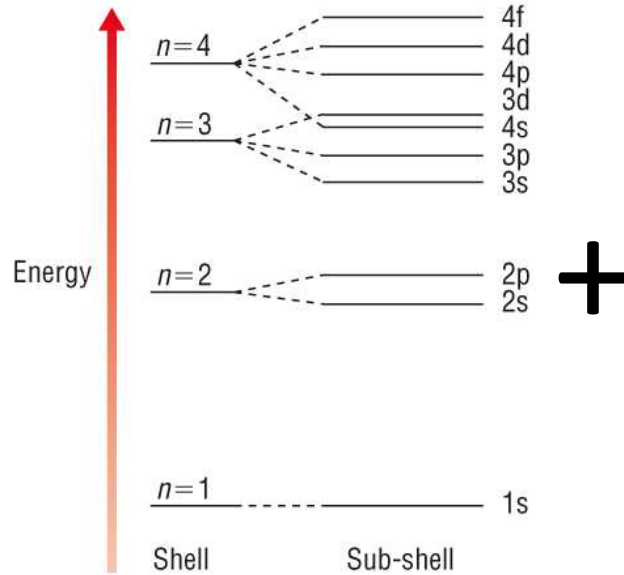
# Spin:

- O Spin é um momentum angular, propriedade fundamental de elétrons e núcleos como massa, carga.
- No caso de partículas como elétrons, prótons e neutrons, denominamos spin uma propriedade intrínseca, vale  $\frac{1}{2}$  e não tem análogo clássico.
- O que chamamos de spin nuclear é uma propriedades que está associada à combinação de todos os momentos angulares das partículas dentro do núcleo sejam eles de origem intrínseca ou orbital (movimento nuclear).
- O Spin está diretamente associado ao magnetismo da partícula através de uma relação de com o momento magnético. No caso de núcleos no seu estado fundamental, existe uma relação de proporcionalidade entre o spin nuclear e o momento magnético.
- O spin nuclear pode ser inteiro ou semi-inteiro e o seu valor depende se o número de massa do núcleo é par ou ímpar.
- Núcleos que possuem  $I > 1/2$  possuem uma propriedade denominada momento de quadrupolo elétrico, que afeta de forma importante suas características para RMN.

# O modelo de camadas atômico

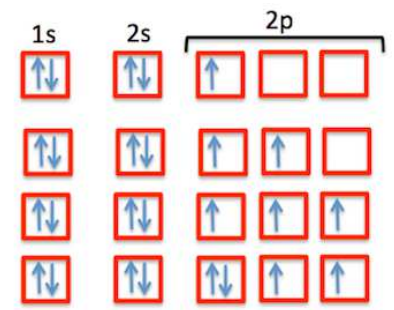


# Regras de Hund



**Forma fraca do princípio de exclusão de Pauli**

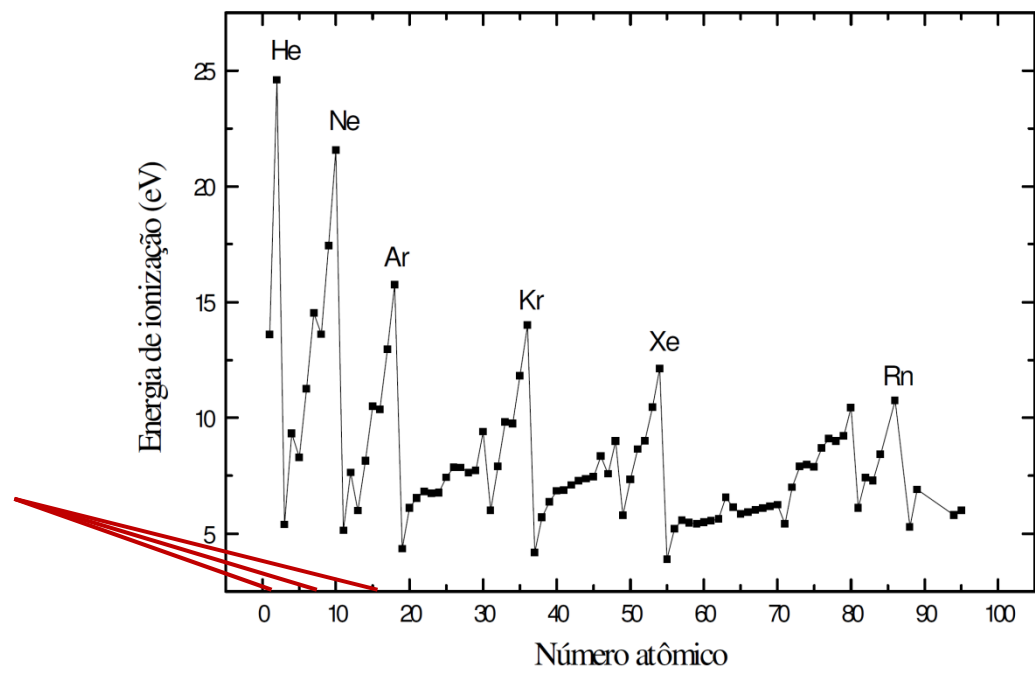
- Boron (5 electrons)  
 $1s^2 2s^2 2p^1$
- Carbon (6 electrons)  
 $1s^2 2s^2 2p^2$
- Nitrogen (7 electrons)  
 $1s^2 2s^2 2p^3$
- Oxygen (8 electrons)  
 $1s^2 2s^2 2p^4$



Hund's Rule

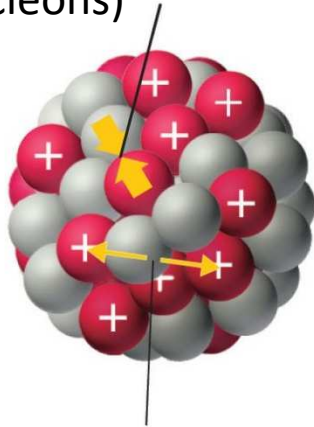


Números mágicos atômicos



# O núcleo atômico

Interação forte (força forte) e de curto alcance entre prótons e neutrons (nucleons)



$$V(r)$$



$$V(r)\psi = E\psi$$



Energias permitidas para os nucleons



$M$ = massa atômica $Z$ = número atômico $M \ X_Z$	<u>Núcleons:</u> $Z$ prótons $N (M-Z)$ nêutrons
--	---

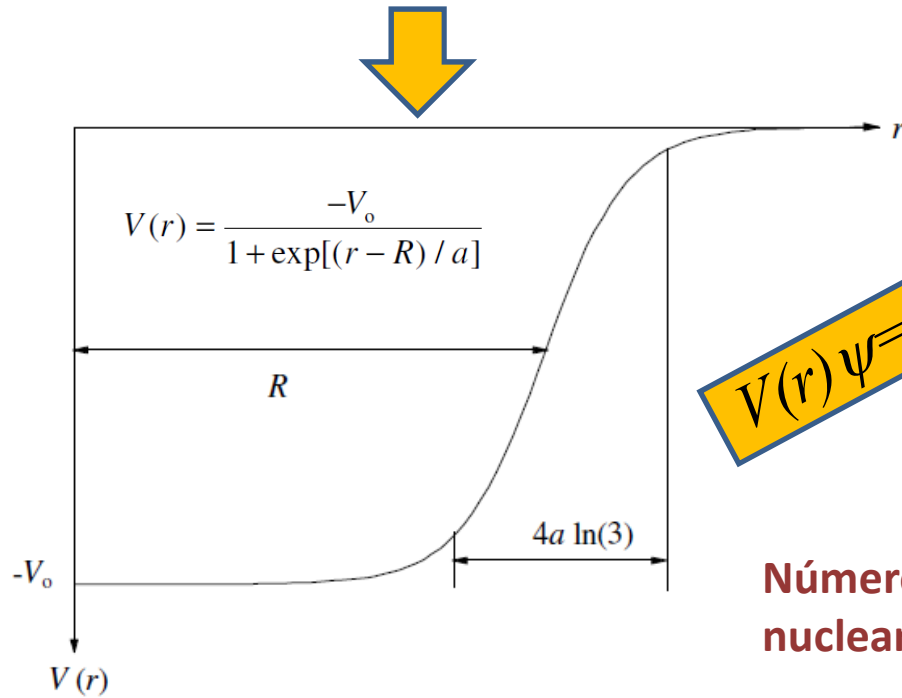
~~Interação eletrostática entre prótons (muito mais fraca que a interação forte a ponto de poder ser ignorada)~~

**Problema:** a forma de  $V(r)$  é desconhecida



# O modelo de camadas nuclear

Uma aproximação para o potencial de um nucleon (próton ou neutron) dentro do núcleo



$R = 1,25A^{1/3} F, \quad a = 0,525 F \text{ e } V_0 \sim 50 \text{ MeV}$

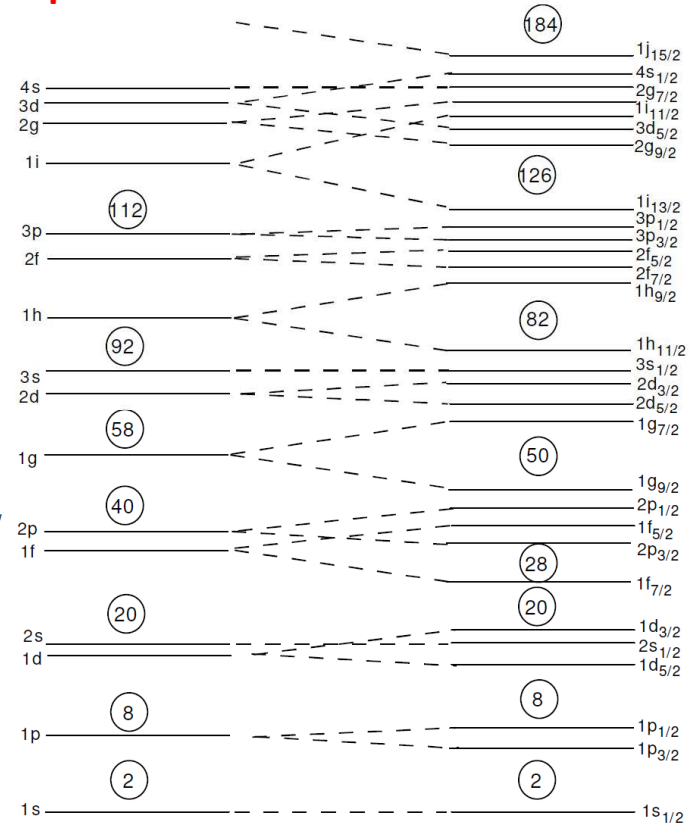
↑  
Raio do núcleo  
(1F = 10-15m)

↑  
Espessura da superfície nuclear

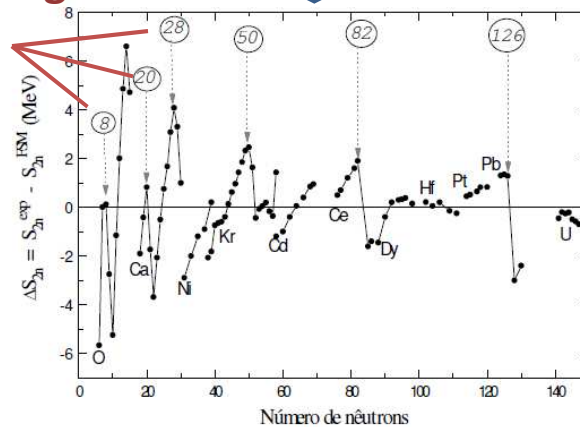
↑  
Energia de ligação dos nucleons

$V(r) \psi = E \psi$

Sem interação spin-órbita      Com interação spin-órbita

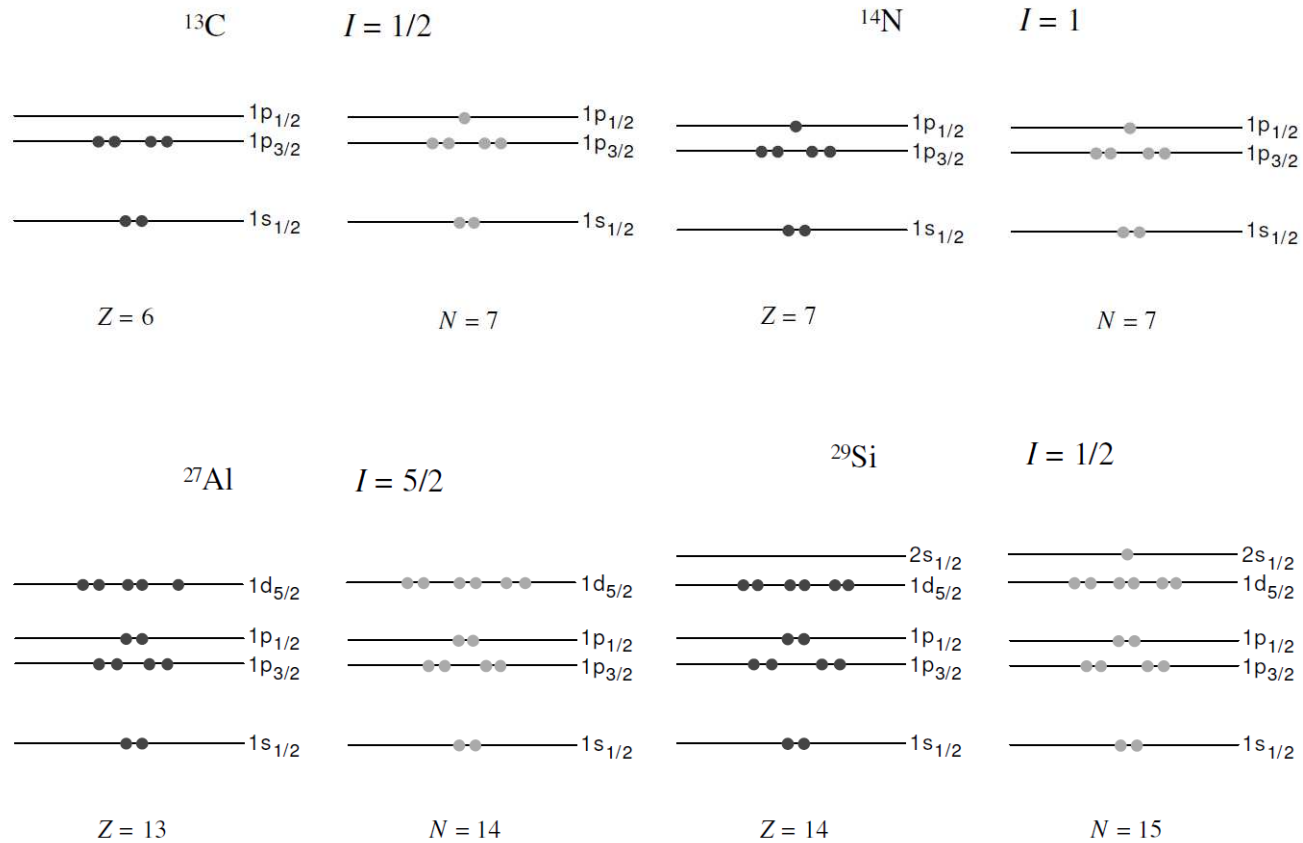


Números mágicos nucleares



↓  
Número quântico associado ao módulo do Momento angular total da camada

# O modelo de camadas e o spin nuclear



Z prótons	N nêutrons	M	Spin nuclear I	Exemplos
Par	Par	Par	Zero	$^{12}\text{C}_6$ e $^{16}\text{O}_8$
Par	Ímpar	Ímpar	Semi-inteiro	$^{13}\text{C}_6$ e $^{17}\text{O}_8$
Ímpar	Par	Ímpar	Semi-inteiro	$^{19}\text{F}_9$ e $^{31}\text{P}_{15}$
Ímpar	Ímpar	Par	Inteiro	$^2\text{H}_1$ e $^{14}\text{N}_7$



# A Tabela Periódica da RMN

IA												VIII A					
<b>H</b>	IIA	<div style="border: 1px solid black; padding: 2px; display: inline-block;">Spin = <math>\frac{1}{2}</math></div> <div style="border: 1px solid black; padding: 2px; display: inline-block;">Spin &gt; <math>\frac{1}{2}</math> <i>Quadrupolar</i> </div>										III A	IV A	VA	VIA	VII A	<b>He</b>
Li	Be											<b>B</b>	<b>C</b>	<b>N</b>	<b>O</b>	<b>F</b>	Ne
Na	Mg	IIIB	IVB	VB	VIB	VIIB	VIII B			IB	IIB	<b>Al</b>	<b>Si</b>	<b>P</b>	<b>S</b>	<b>Cl</b>	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	<b>Fe</b>	<b>Co</b>	<b>Ni</b>	<b>Cu</b>	<b>Zn</b>	Ga	Ge	As	<b>Se</b>	<b>Br</b>	Kr
Rb	Sr	<b>Y</b>	Zr	Nb	Mo	Tc	<b>Ru</b>	<b>Rh</b>	<b>Pd</b>	<b>Ag</b>	<b>Cd</b>	<b>In</b>	<b>Sn</b>	<b>Sb</b>	<b>Te</b>	<b>I</b>	Xe
Cs	Ba	La	Hf	Ta	<b>W</b>	Re	Os	Ir	<b>Pt</b>	<b>Au</b>	<b>Hg</b>	<b>Tl</b>	<b>Pb</b>	<b>Bi</b>	Po	At	Rn
Fr	Rd	Ac															
		Ce	<b>Pr</b>	<b>Nd</b>	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	<b>Tm</b>	<b>Yb</b>	Lu		
		Th	Pa	<b>U</b>	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr		

<http://grandinetti.org/Research/NMRMethods/index.html>

# Relação entre Momento Magnético e Momentum Angular

**Classicamente:**

**Dedução:**

$\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p} = rmV\hat{z} \rightarrow V = \frac{l}{mr}$

$I = \frac{e}{T} = e \frac{V}{2\pi r}$

$\vec{\mu} = I\pi r^2 \hat{z}$

$\vec{\mu} = e \frac{mr}{2\pi r} \pi r^2 \hat{z} = \frac{e}{2m} l\hat{z}$

$\vec{\mu} = \frac{e}{2m} \vec{l}$

Momento magnético      Momentum angular

**Quanticamente:**

$\mu_B = 9,2732 \times 10^{-24} \text{ J / T}$  (Magnéton de Bohr)

**Elétrons** {

- $\vec{\mu} = \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{l}$  (Orbital – elétron)
- $\vec{\mu} = g_{se} \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{s}$  (Spin intrínseco – elétron)

**Nucleons** {

- $\vec{\mu} = \frac{\mu_N}{\hbar} \vec{l}$  (Orbital – núcleo)
- $\vec{\mu} = g_{sp} \frac{\mu_N}{\hbar} \vec{s}$  (Spin intrínseco – próton)
- $\vec{\mu} = g_{sn} \frac{\mu_N}{\hbar} \vec{s}$  (Spin intrínseco – neutron)

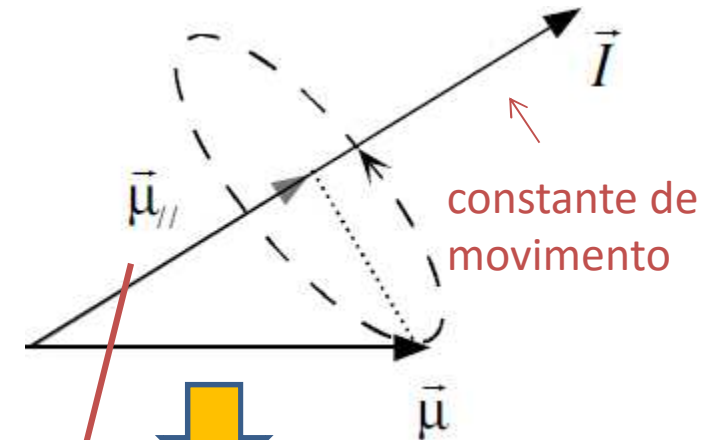
$\mu_N = 5,0505 \times 10^{-27} \text{ J / T}$  (Magnéton Nuclear)

# O Momento de Dipolo Magnético

$$\vec{\mu} = (\mu_N / \hbar) \left[ \sum_{k=1}^Z \vec{l}_k + \sum_{k=1}^Z g_{sp} \vec{s}_k + \sum_{k=Z+1}^A g_{sn} \vec{s}_k \right]$$

Protons e neutrons tem fatore g diferentes

Se o núcleo está no seu estado fundamental  $|\vec{I}|$  é Constante (em RMN sempre será)



Spin nuclear

$$\vec{L}_N = \hbar \vec{I} = \sum_{k=1}^A (\vec{l}_k + \vec{s}_k)$$

Soma sobre Todos nucleons

Contribuição orbital

Contribuição De spin intrínseco

$$\vec{\mu}_{eff} = \frac{\langle \vec{\mu} \cdot \vec{L}_N \rangle}{l(l+1)\hbar^2} \vec{L}_N$$

$$\vec{\mu}_{eff} = \gamma \vec{L}_N = \gamma \hbar \vec{I}$$

Constante magnetogírica (propriedade nuclear)

# Resumindo: O núcleo atômico e o spin nuclear

$M$ = massa atômica $Z$ = número atômico ${}^M X_Z$	<u>Núcleons:</u> $Z$ prótons $N (M-Z)$ nêutrons
---	---

<i>Exemplo:</i> ${}^{27}Al_{13}$	13 prótons 14 nêutrons
----------------------------------	---------------------------

**Momento angular total = soma das contribuições das partículas que o constituem**

$$\vec{L} = \hbar \vec{I} \Rightarrow \vec{\mu} = \gamma \hbar \vec{I}$$

$$I_z = -I, -(I+1), \dots, I$$

Z prótons	N nêutrons	M	Spin nuclear I	Exemplos
Par	Par	Par	Zero	${}^{12}C_6$ e ${}^{16}O_8$
Par	Ímpar	Ímpar	Semi-inteiro	${}^{13}C_6$ e ${}^{17}O_8$
Ímpar	Par	Ímpar	Semi-inteiro	${}^{19}F_9$ e ${}^{31}P_{15}$
Ímpar	Ímpar	Par	Inteiro	${}^2H_1$ e ${}^{14}N_7$

## Para saber mais:

**FREITAS, J. C. C. ; BONAGAMBA, Tito José .**  
*Os núcleos atômicos e a RMN* em Princípios e Aplicações da RMN, Vol.1, Figueroa Villar, J.D. Editor, Rio de Janeiro: Associação dos Usuários de Ressonância Magnética Nuclear, 1999.

# Descrição Clássica da RMN

## O Que é?

✓ A descrição clássica da Ressonância Magnética Nuclear é baseada na descrição clássica dos movimentos dos momentos magnéticos nucleares de modo a prover um modelo vetorial para a evolução da magnetização nuclear sob a ação de campos magnéticos externos

## Quando Vale?

✓ Só é estritamente válida quando não houver acoplamento entre os spins. Em alguns casos propriedades quânticas podem ser inseridas nos modelos de modo a adaptá-lo a casos onde haja acoplamento ou para inserir efeitos fenomenológicos, o que resulta nas chamadas descrições semi-clássicas ou fenomenológicas, respectivamente.

## Por que aprender?

✓ Pode ser bastante útil para entender efeitos de pulsos de RF, gradientes, relaxação, detecção de sinal ou mesmo experimentos mais simples como ecos de spin ou CPMG.

✓ Formalismos quânticos muito usados em RMN, por exemplo o formalismo de operadores produto, são de certa forma inspirados em modelos vetoriais.

# Movimento de um Momento Magnético em um campo magnético

*Campo magnético provoca um torque no imã, que produz uma variação temporal em seu momento angular até que esse se alinhe com o campo.*

$$\vec{\tau} = \frac{\Delta \vec{L}}{\Delta t} = \frac{d\vec{L}}{dt}$$

||

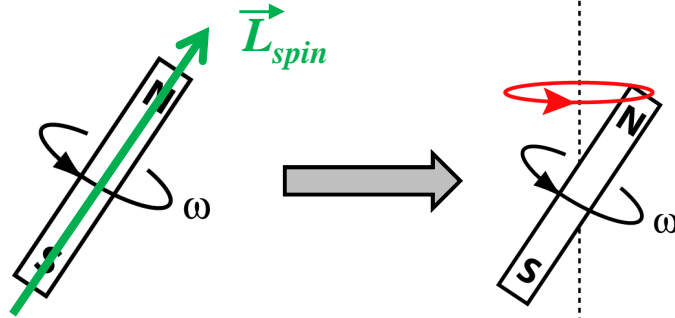
Torque também pode ser calculado em termos do momento magnético do imã e do campo magnético.

$$\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B}$$


$$\frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{\mu} \times \vec{B}$$



# Movimento de um Momento Magnético em um campo magnético



Se o imã girar em torno do próprio eixo com uma velocidade angular fixa  $\omega$ , haverá um momentum angular de spin (como é de fato chamado em física clássica) cujo módulo será dado por  $L_{spin} = I\omega$ , onde  $I$  é o momento de inércia do Imã.

**B** Aplicando-se um campo magnético aparece o torque, mas como  $\omega$  é fixo e  $I$  é uma propriedade mecânica do imã, o módulo de  $L_{spin}$  não tem variar e deste modo para satisfazer a equação de movimento a direção do momentum angular varia. Ocorre então o movimento de precessão em torno do campo magnético.



$$\frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{\mu} \times \vec{B}$$

Continua sendo satisfeito.

## Estendendo para o núcleo:

Núcleo atômico:

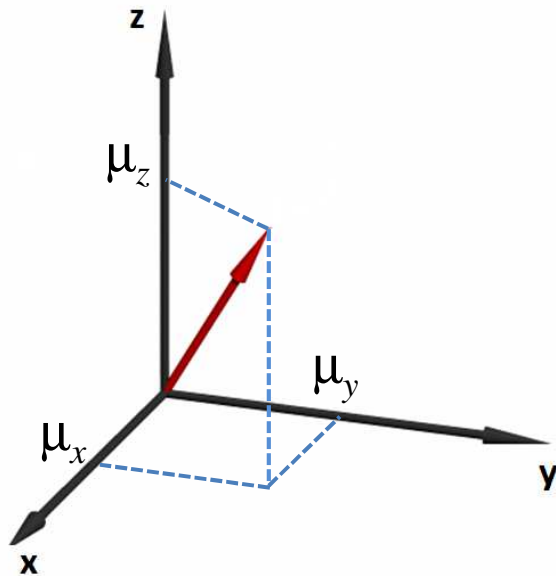
momento angular (spin):  $\hbar\vec{I}$

momento magnético:  $\vec{\mu} = \gamma\hbar\vec{I}$

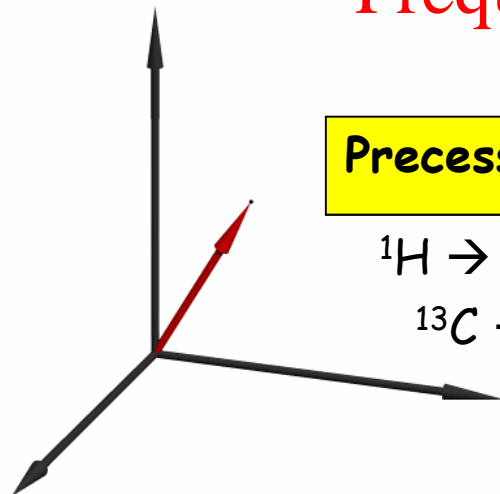
$$\left. \begin{array}{l} \frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{\mu} \times \vec{B}_0 \rightarrow \frac{d}{dt} \left( \frac{\vec{\mu}}{\gamma} \right) = \vec{\mu} \times \vec{B}_0 \\ \frac{d\vec{\mu}}{dt} = [\vec{\mu} \times \gamma\vec{B}_0] \end{array} \right\} \text{Equação de precessão}$$

### Dedução do Movimento de Precessão:

$$\vec{\mu} = \mu_x \hat{x} + \mu_y \hat{y} + \mu_z \hat{z} \quad \vec{B}_0 = B_0 \hat{z}$$



## Dedução do Movimento de Precessão:

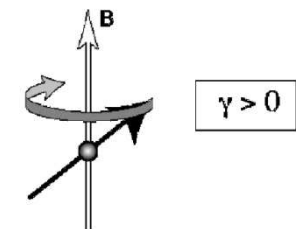
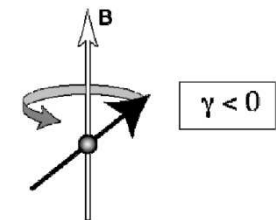


Frequência de Larmor

Precessão:  $\omega_0 = \gamma B_0$

$^1\text{H} \rightarrow \gamma = 42,58 \text{ MHz/Tesla}$

$^{13}\text{C} \rightarrow \gamma = 10,71 \text{ MHz/Tesla}$



## Magnetização macroscópica

$$\vec{M} = \sum_i \vec{\mu}_i \longrightarrow \frac{d\vec{M}}{dt} = \frac{d}{dt} \sum_i \vec{\mu}_i \longrightarrow \frac{d\vec{M}}{dt} = \gamma \sum_i \vec{\mu}_i \times \vec{B}$$

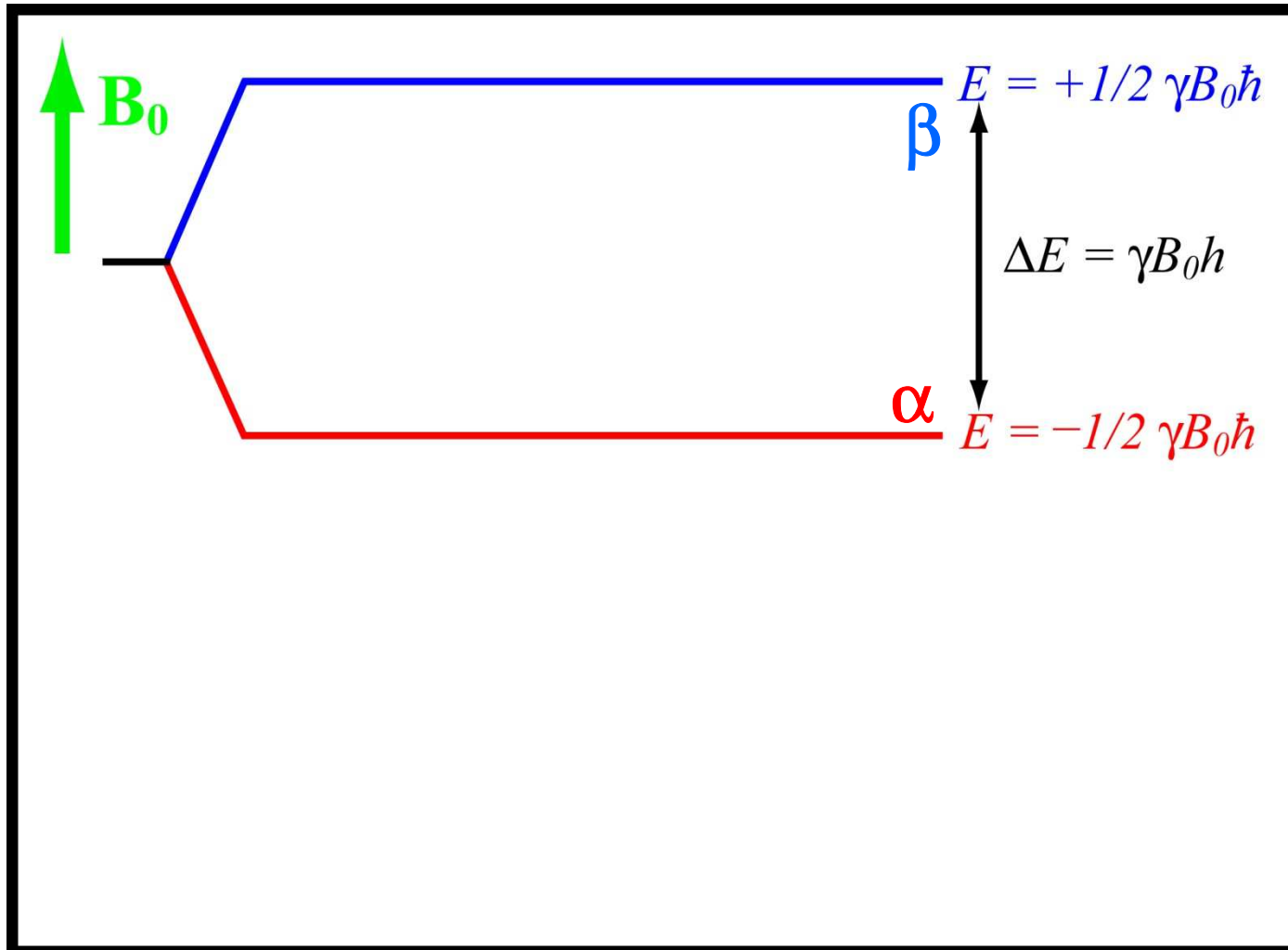
$$\frac{d\vec{M}}{dt} = \gamma \vec{M} \times \vec{B}$$

*Magnetização total segue a mesma lei de precessão que os momentos magnéticos individuais*

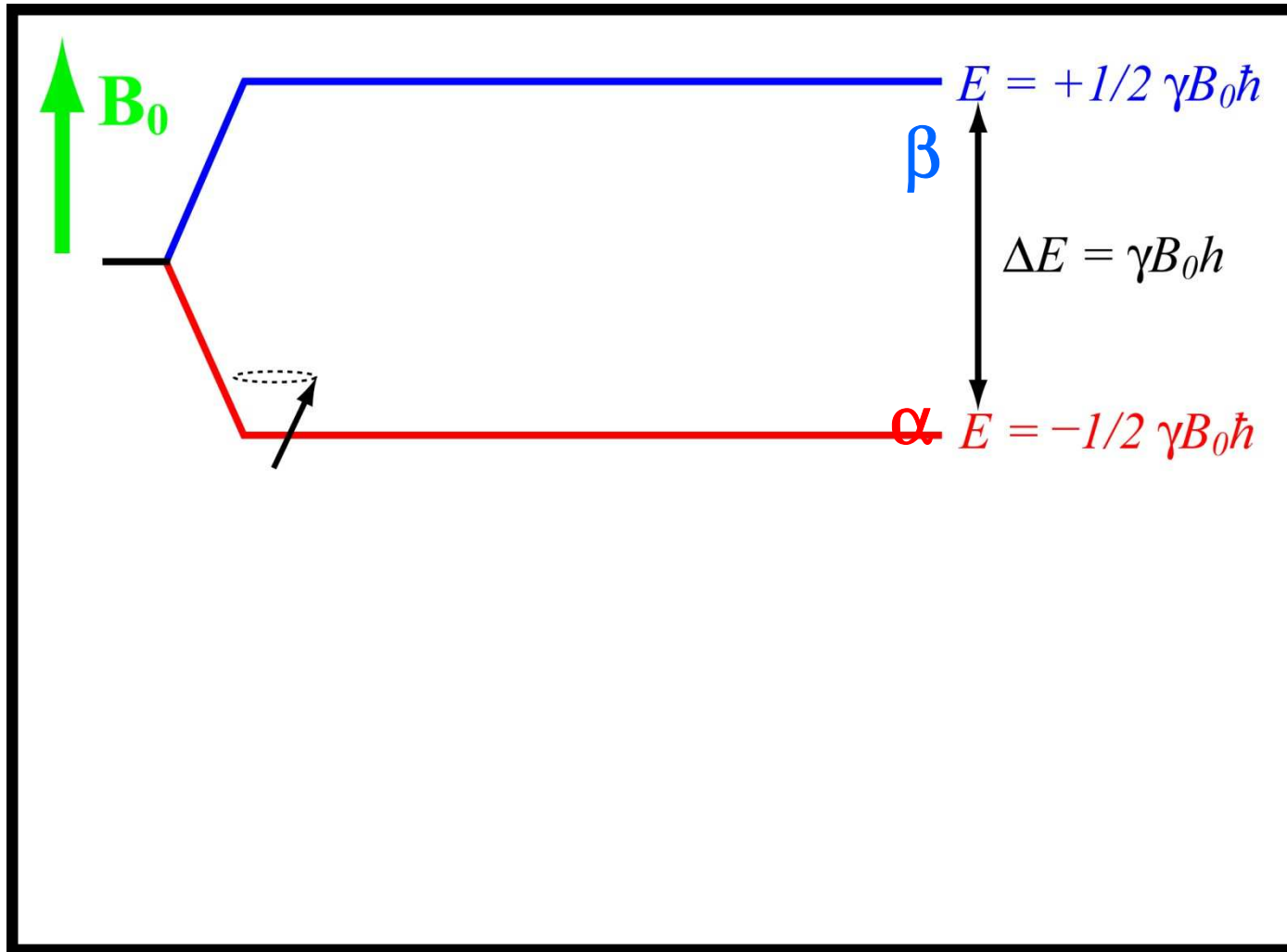
**Pergunta: O que define a magnetização macroscópica ?**

*Vamos ter que usar uma característica quântica do sistema.*

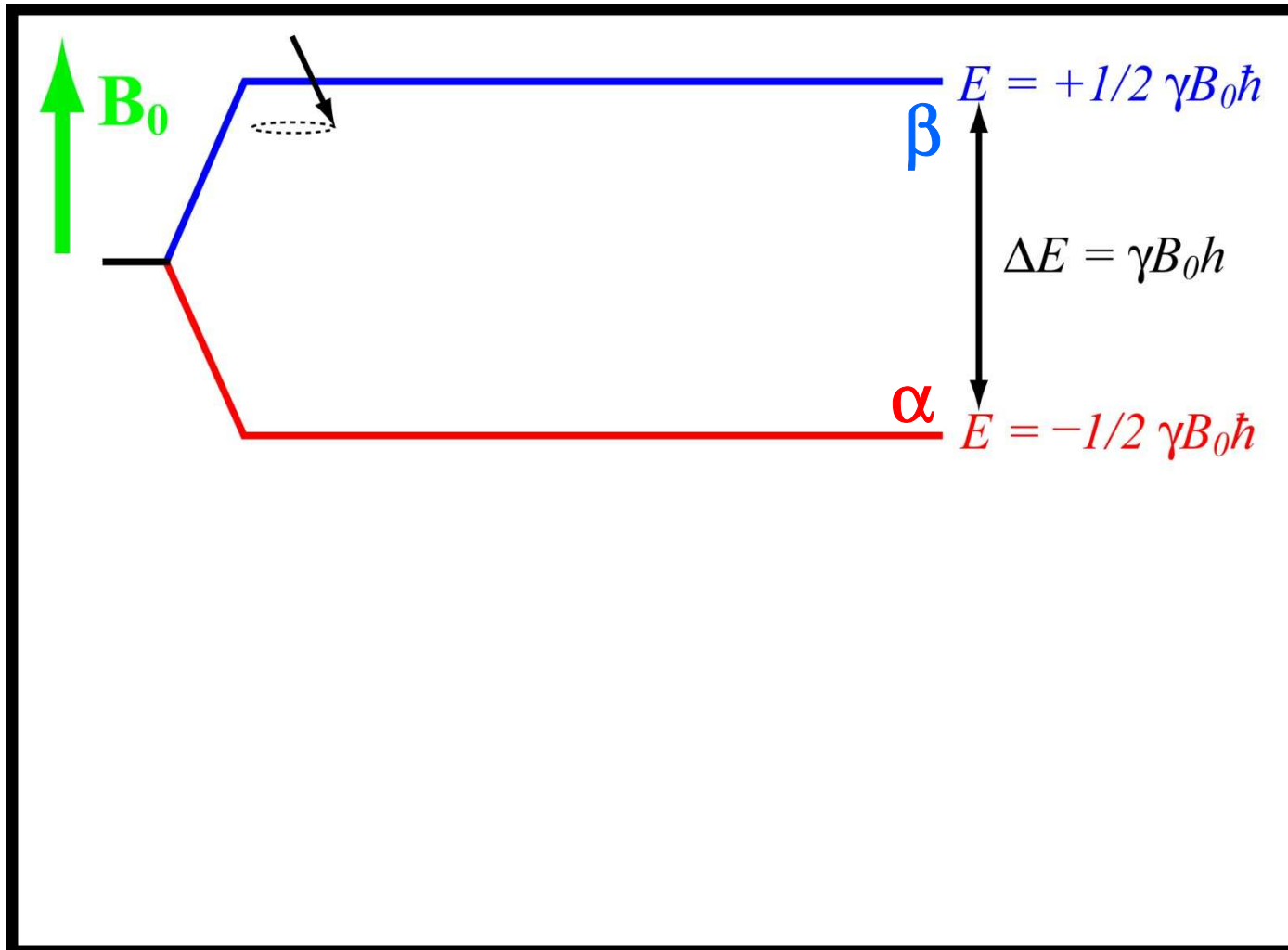
## Estados de Spin ( $I=1/2$ )



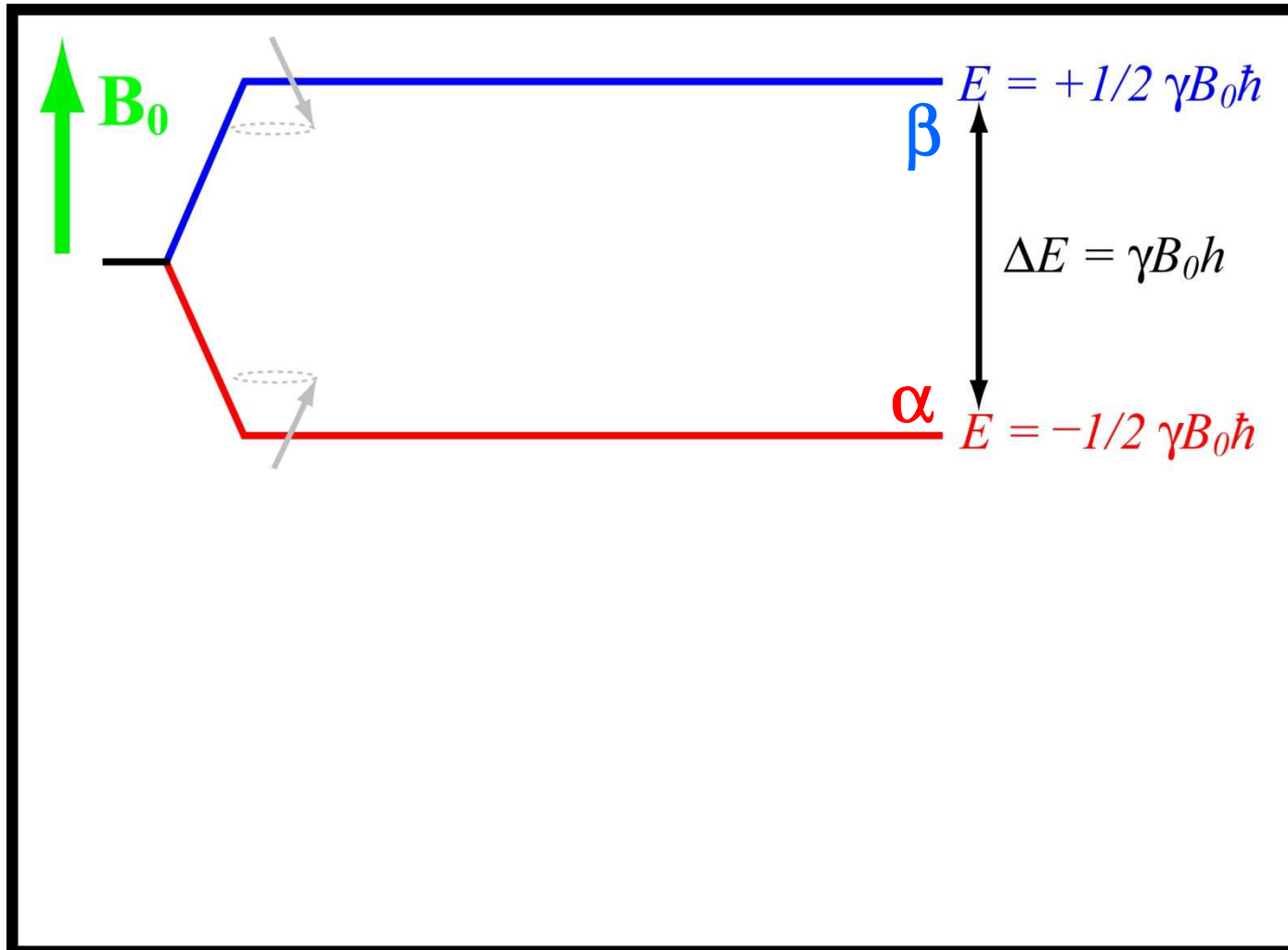
## Estados de Spin ( $I=1/2$ )



# Estados de Spin ( $I=1/2$ )

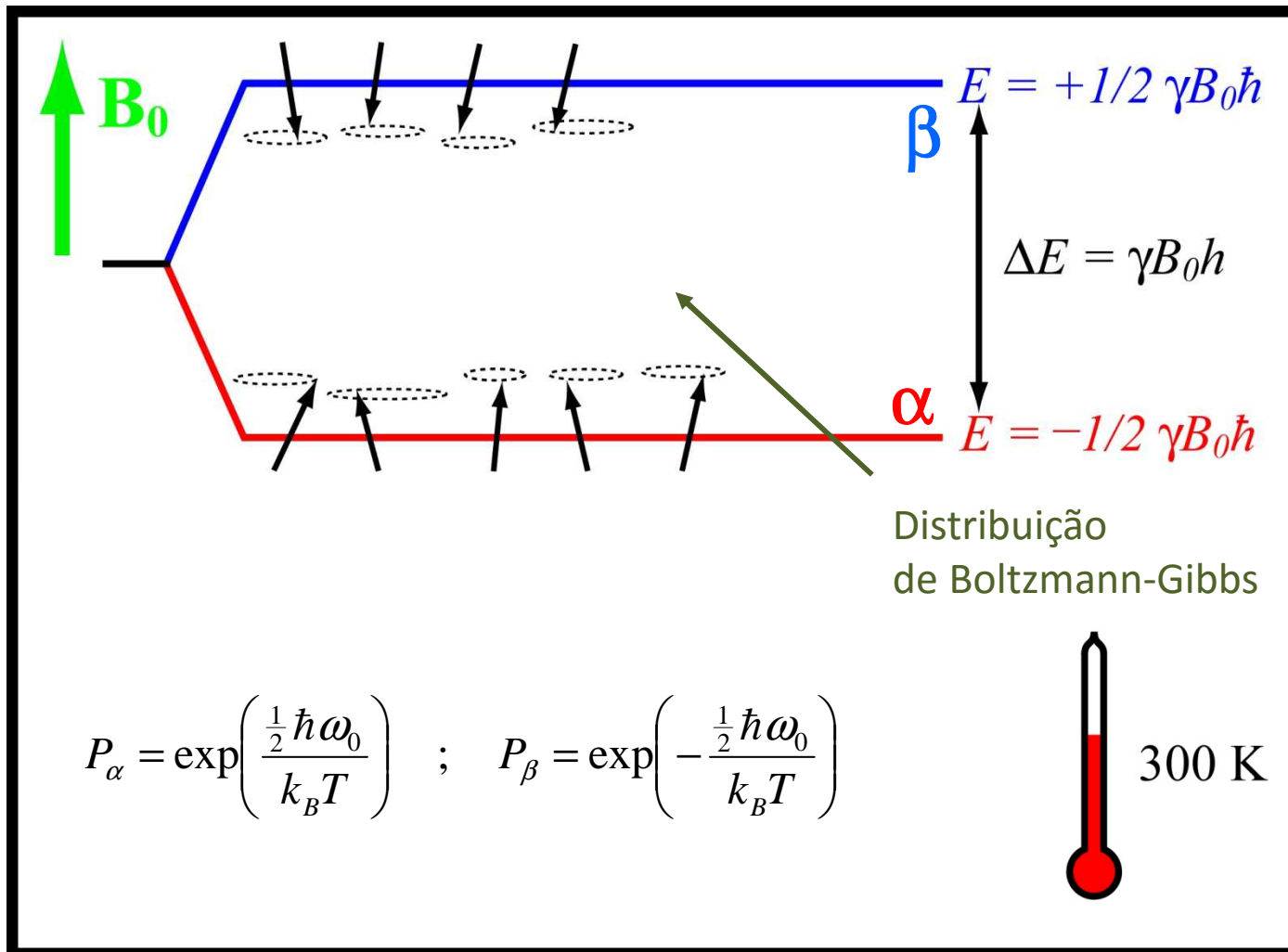


## Estados de Spin ( $I=1/2$ )

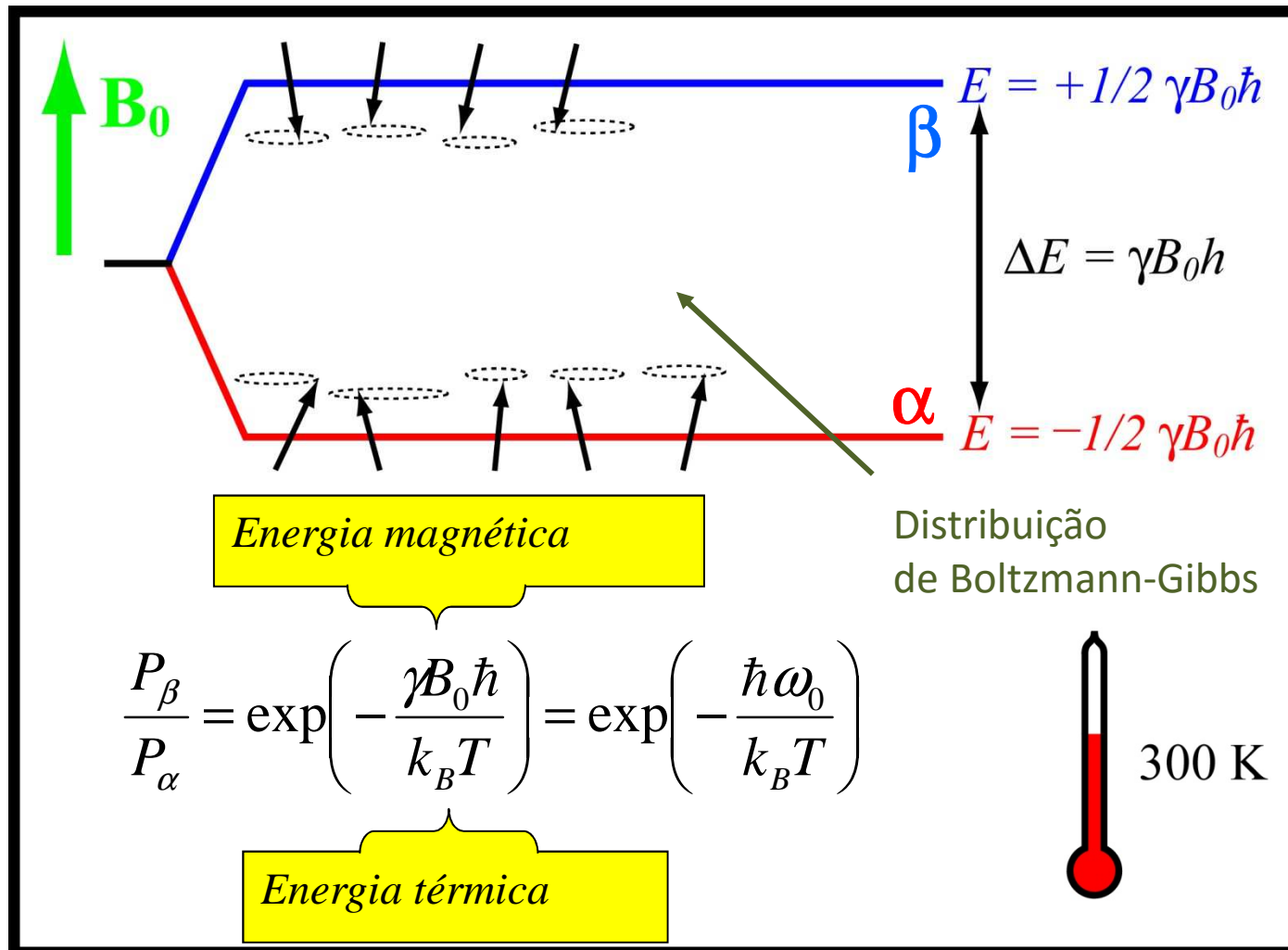




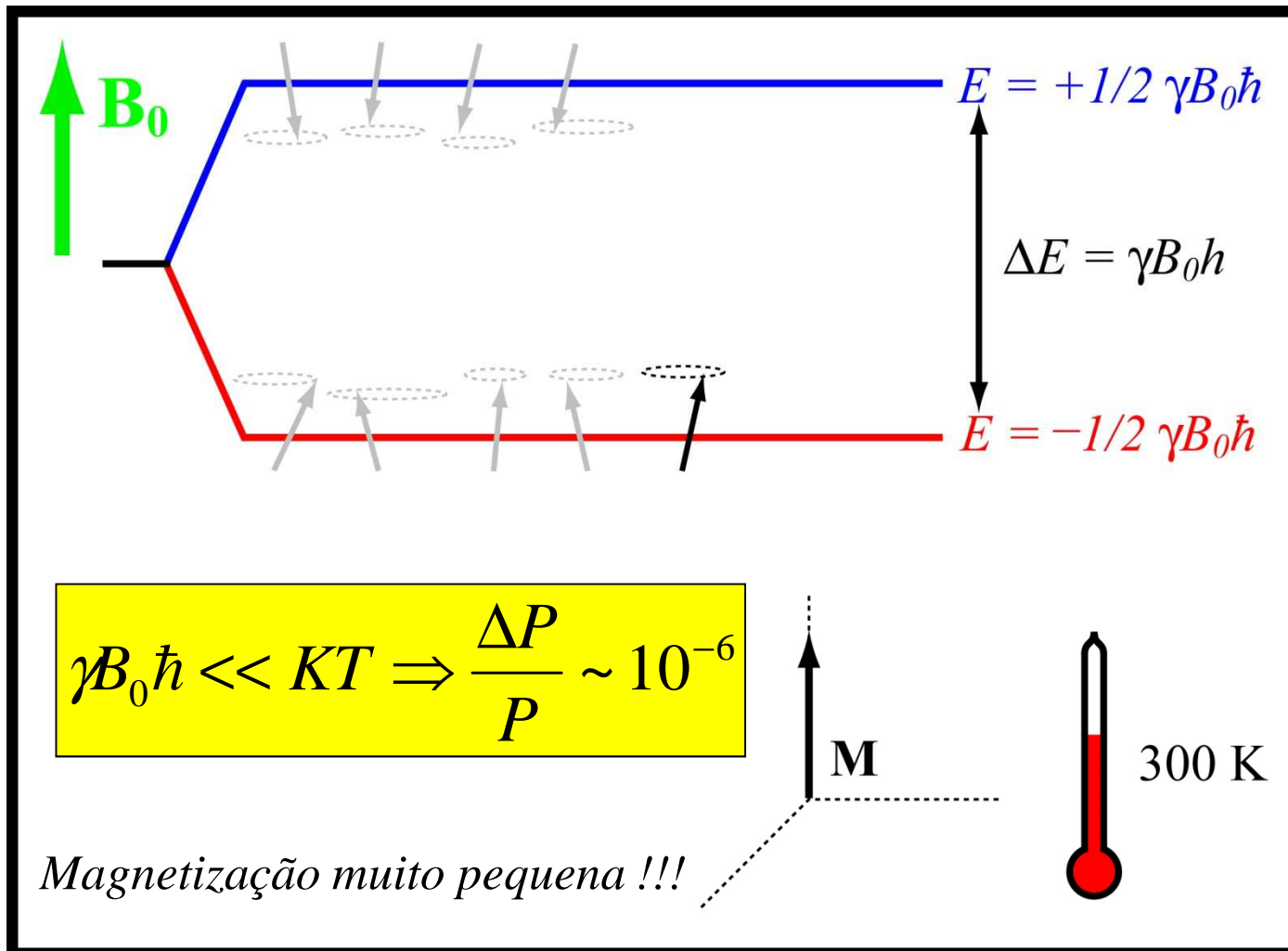
# Equilíbrio Térmico ( $I=1/2$ )



# Equilíbrio Térmico ( $I=1/2$ )



# Magnetização Macroscópica ( $I=1/2$ )



# Magnetização Macroscópica ( $I=1/2$ ) (Lei de Curie)

$$\left. \begin{aligned} \gamma B_0 \hbar \ll KT \Rightarrow P_\alpha \approx 1 + \frac{\hbar \omega_0}{k_B T} ; P_\beta \approx 1 - \frac{\hbar \omega_0}{k_B T} \\ M = N \langle \mu_z \rangle \left( \frac{\Delta P}{P} \right) = N \langle \mu_z \rangle \left( \frac{P_\alpha - P_\beta}{P_\beta + P_\alpha} \right) \end{aligned} \right\} M = \frac{N \hbar \gamma}{2} \frac{1 + \frac{\hbar \omega_0}{2k_B T} - 1 + \frac{\hbar \omega_0}{2k_B T}}{1 + \frac{\hbar \omega_0}{2k_B T} + 1 - \frac{\hbar \omega_0}{2k_B T}} = \frac{N \hbar^2 \gamma^2 B_0}{4k_B T}$$

*Número de spin  
por unidade de  
volume*

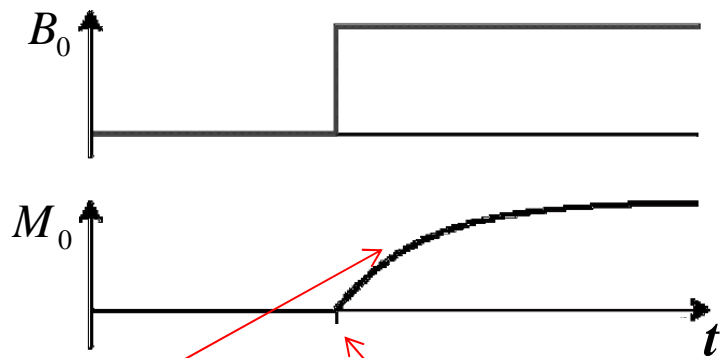
*Valor esperado  
de  $\mu_z$*

**Para o caso mais geral, incluindo  $I > 1/2$ :**

*Suceptibilidade  
magnética  
estática*

$$M = \frac{N \hbar^2 \gamma^2 I(I+1)}{3k_B T} B_0 = \chi_0 B_0$$

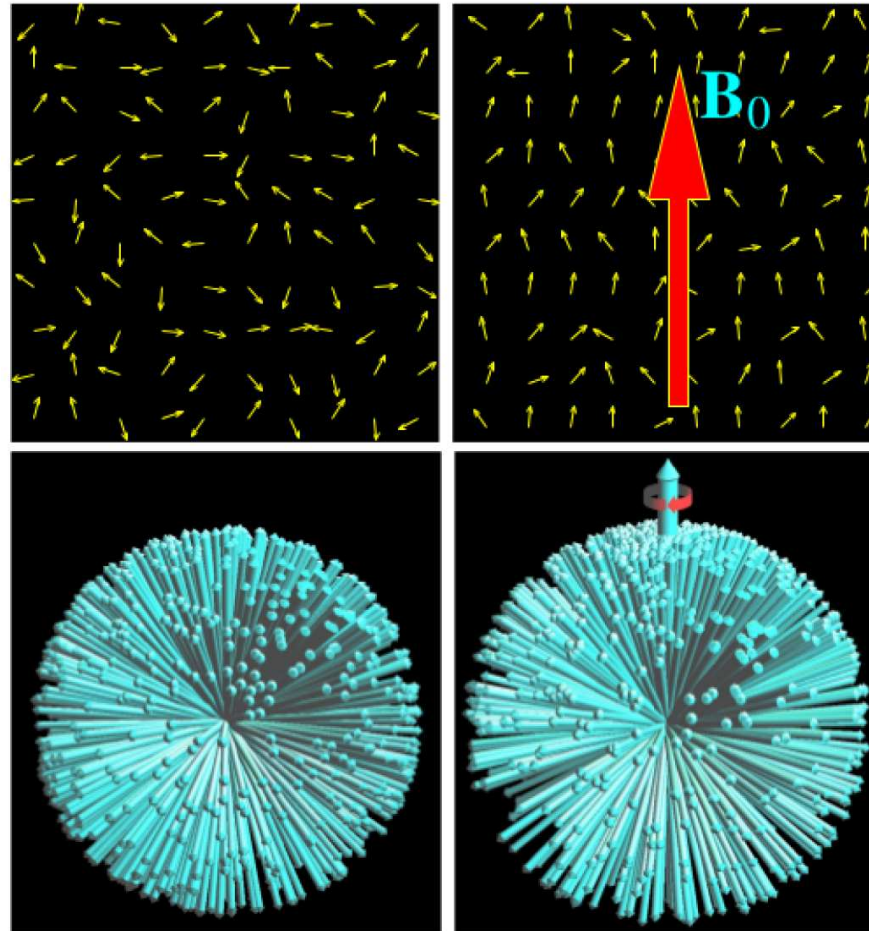
# Magnetização Macroscópica ( $I=1/2$ (Resumindo)



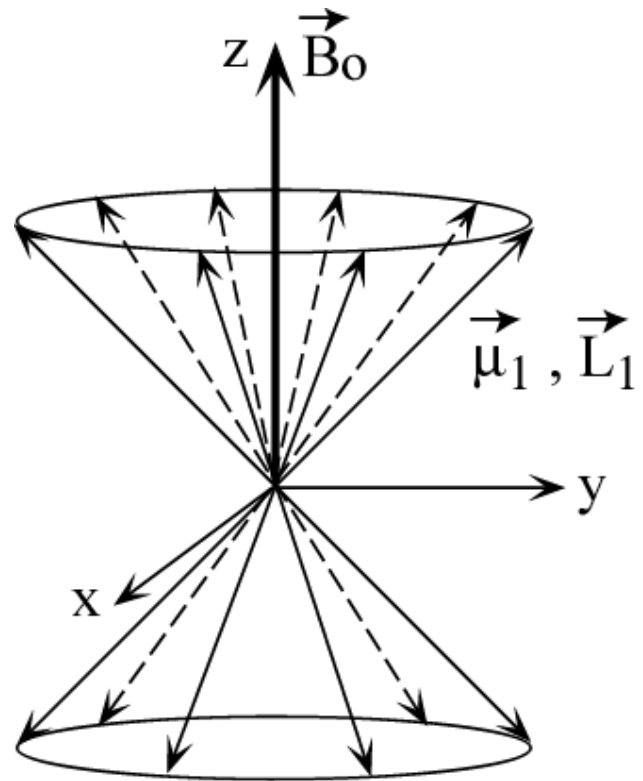
*Relaxação  $T_1$  –  
Estabelecimento  
do equilíbrio  
térmico*

$$M_0 = \frac{N\hbar^2 \gamma^2 I(I+1)}{3k_B T} B_0$$

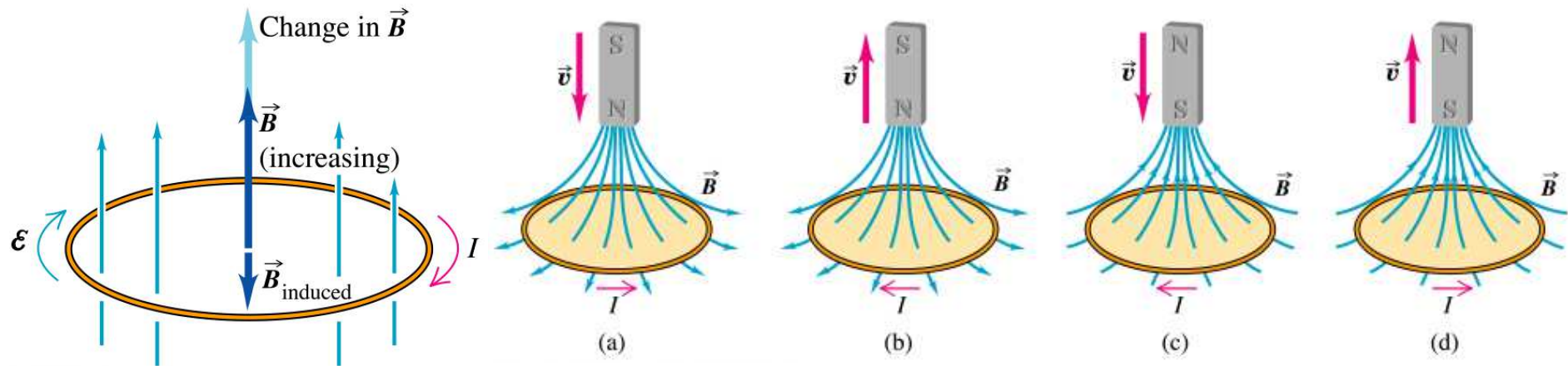
*Instante em  
que o campo é  
ligado*



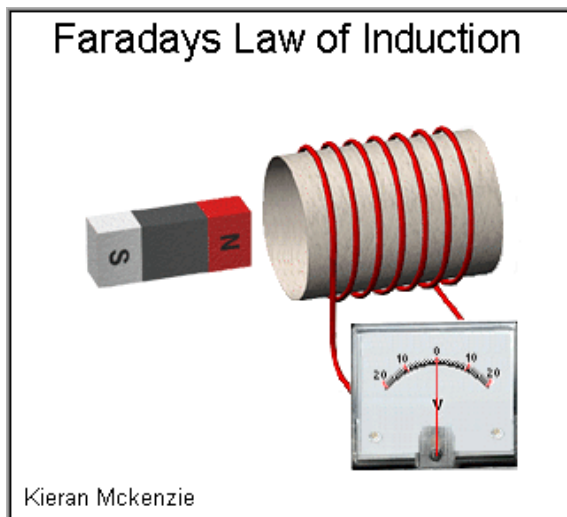
# Magnetização Macroscópica ( $I=1/2$ ) (Resumindo)



# Uma parêntese – LEI DE INDUÇÃO DE FARADAY-LENZ



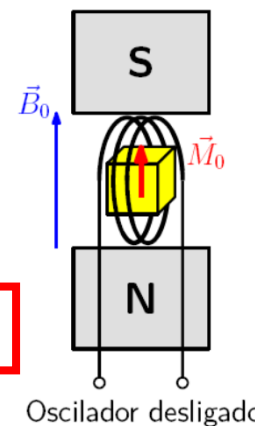
Quando o campo magnético ao longo do eixo de uma bobina varia no tempo, aparece uma corrente induzida na bobina que tem sentido tal que crie um campo induzido que tende a se contrapor à variação de B. Porém, somente a variação ao longo do eixo induz corrente na bobina.



$$V_{bobina} = - \frac{d\Phi_m}{dt}$$

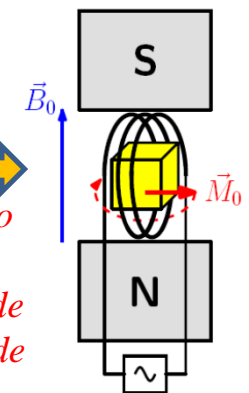
**(Lei de Faraday-Lenz)**

Equilíbrio térmico



Oscilador desligado

Força eletromotriz induzida



Osciloscópio ligado  
( $\omega_{rf} = \gamma B_0$ )

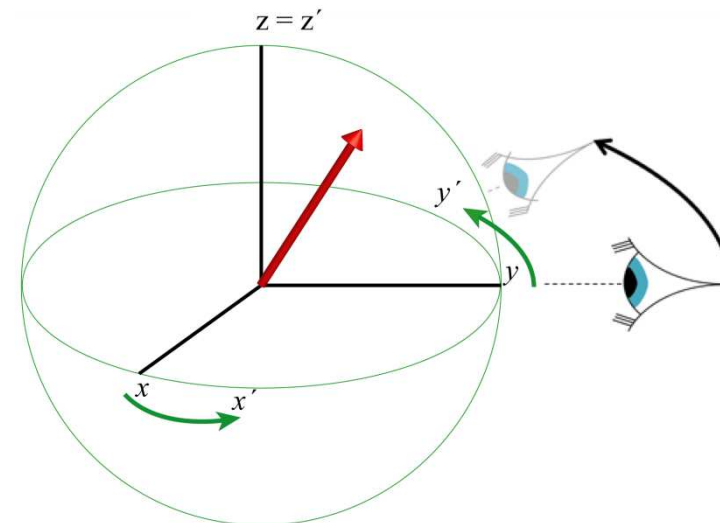
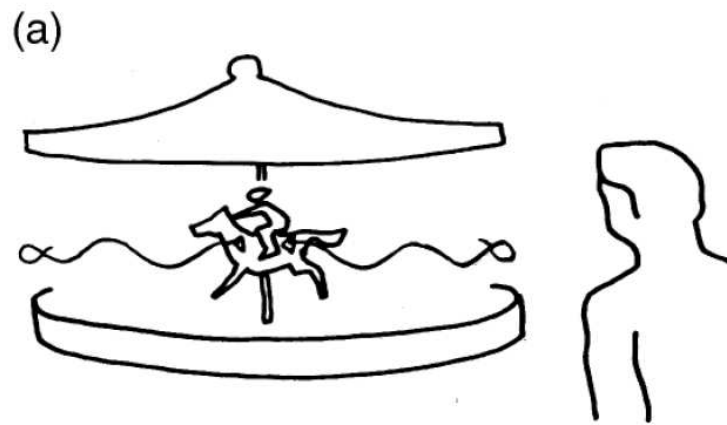
Necessário para detecção de  $M_0$  (sinal de RMN)

# Efeitos de Campos de Radiofrequência nos momentos magnéticos nucleares

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = \gamma \vec{M} \times \vec{B} = \gamma \vec{M} \times [B_0 \hat{z} + \vec{B}(t)]$$

• Os dois campos atuam simultaneamente, fazendo com que seja difícil descrever a trajetória da magnetização.

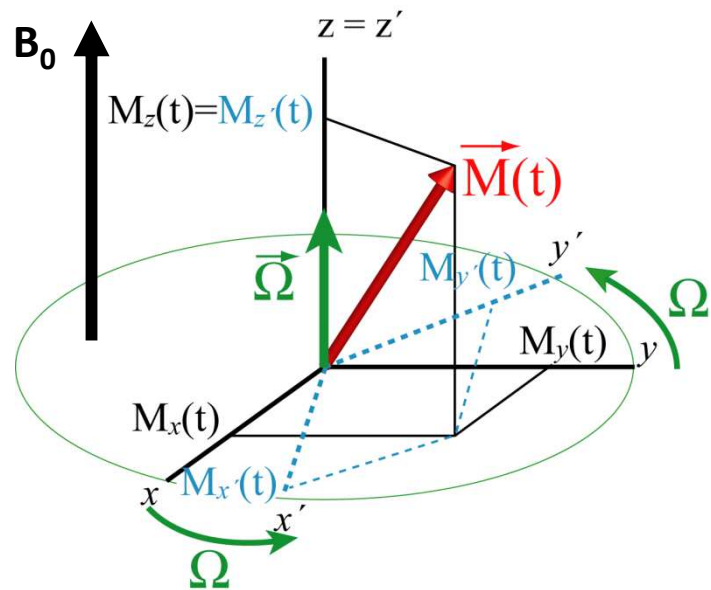
• Como a precessão de Larmor é muito bem definida, podemos “simplificar” a dependência com  $B_0$  olhando do ponto de vista de um sistema de referência que gira em torno de  $z$  com frequência próxima à frequência de Larmor.





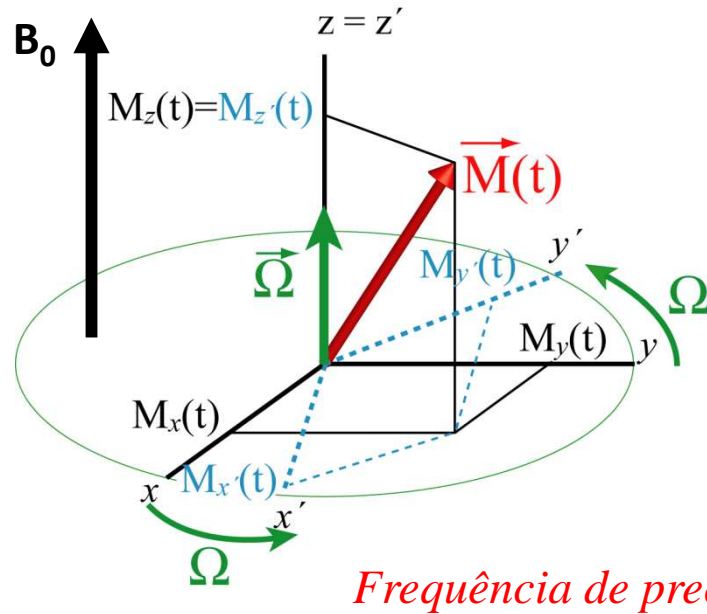
# Sistema de Coordenadas Girante

Dedução do Movimento de Precessão no sistema de coordenadas girante (SCG):



# Sistema de Coordenadas Girante

Demonstração: Equação de precessão da magnetização no SCG



$$\vec{M}(t) = M_x(t)\hat{x} + M_y(t)\hat{y} + M_z(t)\hat{z}$$

$$\vec{\Omega} = \Omega\hat{z}$$

*Campo fictício devido a mudança de coordenadas*

Partindo de:  $\frac{d\vec{M}}{dt} = \gamma\vec{M} \times \vec{B}_0$

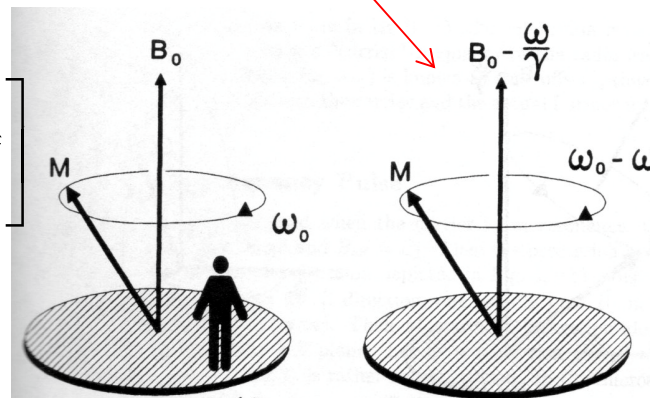
Chega-se a:  $\frac{d\vec{M}'}{dt} = \gamma\vec{M}' \times \underbrace{\left( \vec{B}_0 + \frac{\vec{\Omega}}{\gamma} \right)}_{\vec{B}_{eff}}$

Com  $\vec{\Omega} = -\omega\hat{z}$  :

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = \gamma\vec{M} \times \left[ \left( B_0 - \frac{\omega}{\gamma} \right) \hat{z} \right]$$

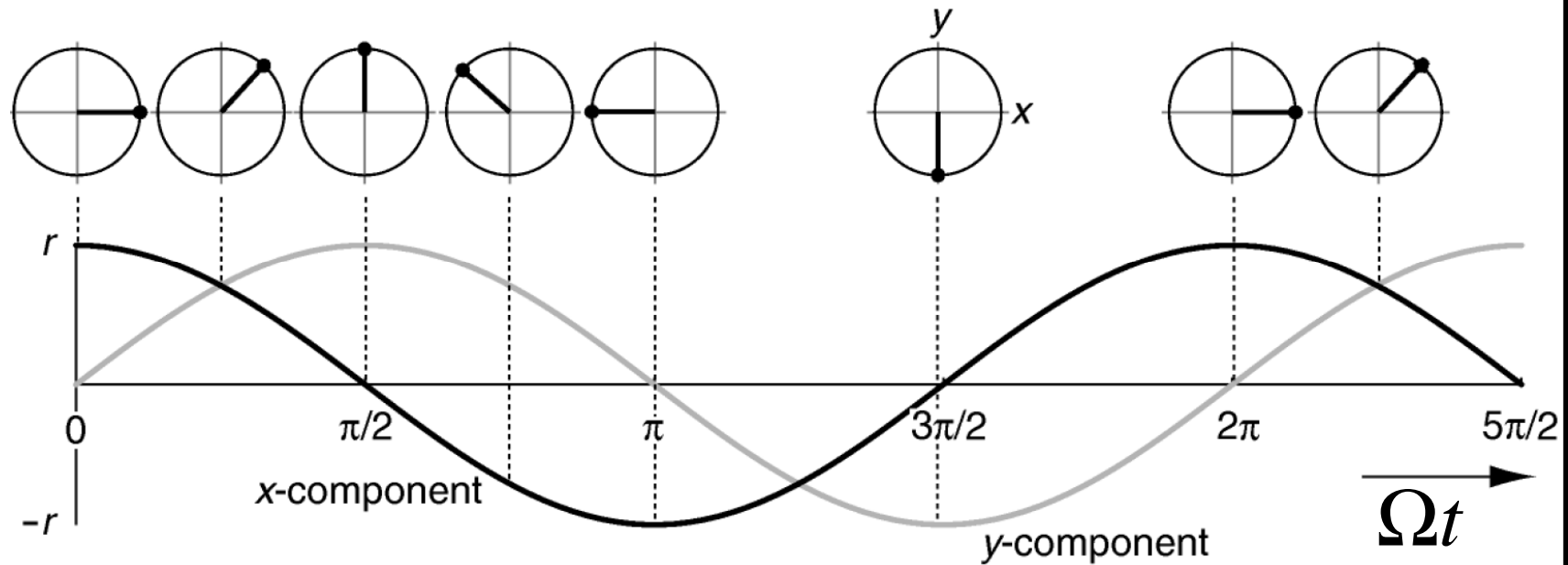
Com  $\vec{\Omega} = -\frac{B_0}{\gamma}\hat{z}$

$\frac{d\vec{M}}{dt} = 0 \Rightarrow$  *Magnetização não varia no tempo*



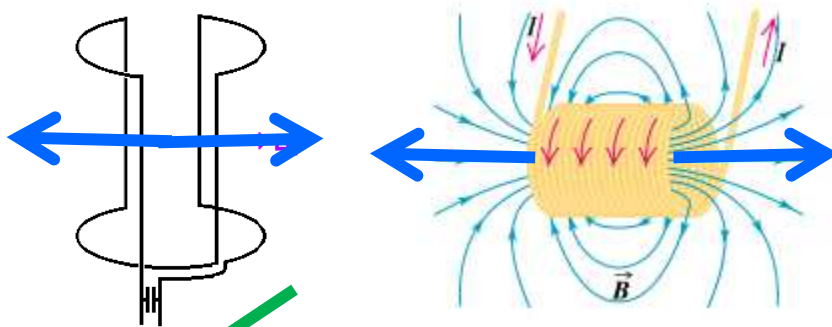
*Campo efetivo experimentado pela magnetização no SCG*

# Movimento Circular e Oscilação



$$\begin{array}{l}
 x(t) = x_0 \cos(\Omega t) \\
 y(t) = y_0 \sin(\Omega t)
 \end{array}
 \left. \begin{array}{l}
 \text{Oscilação em fase} \\
 \text{Oscilação em quadratura}
 \end{array} \right\} \text{ Movimento circular}$$

# Campo de radiofrequência (RF)



$$\vec{B}_1(t) = 2B_1 \cos(\omega_{RF}t) \hat{x}$$

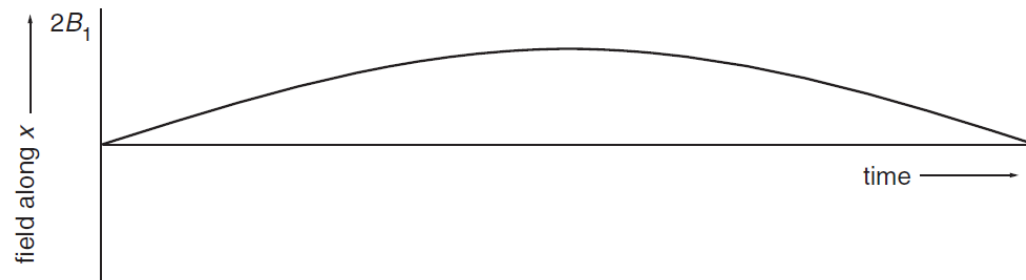
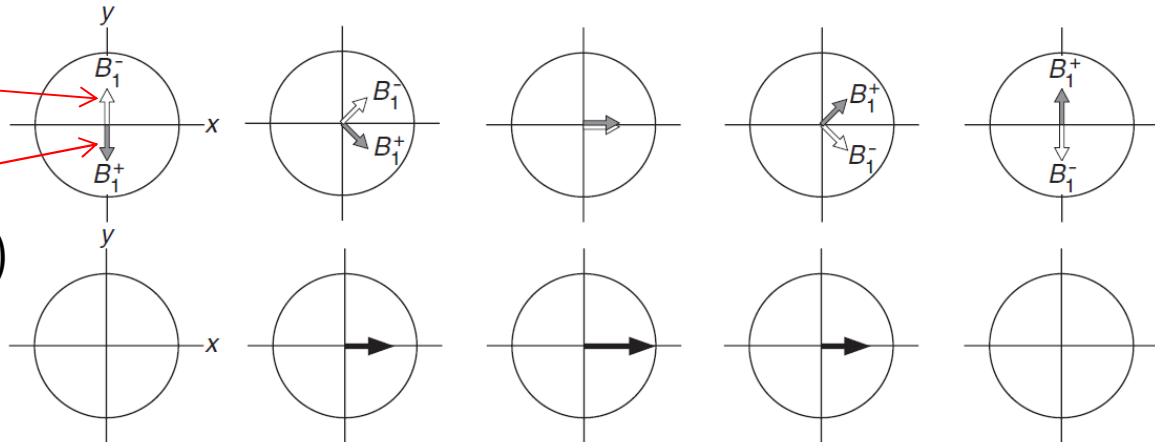
linearmente polarizado

~~Circularmente polarizado a esquerda~~

~~$$B_1^- = B_1 (\cos(\omega_{RF}t) \hat{x} + \cos(\omega_{RF}t) \hat{y})$$~~

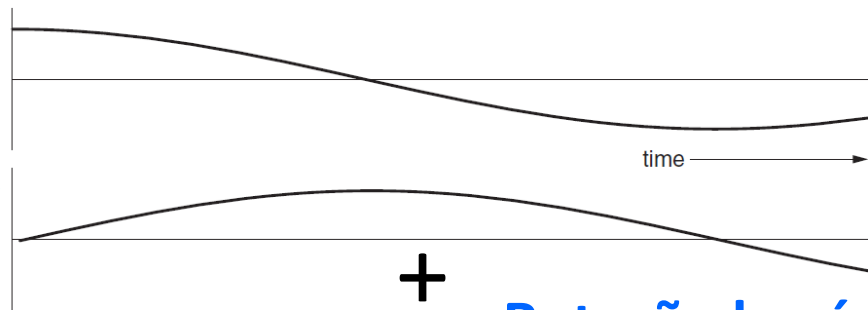
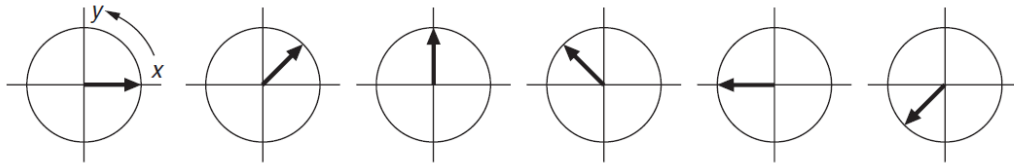
$$B_1^+ = B_1 (\cos(\omega_{RF}t) \hat{x} - \cos(\omega_{RF}t) \hat{y})$$

Circularmente polarizado a esquerda



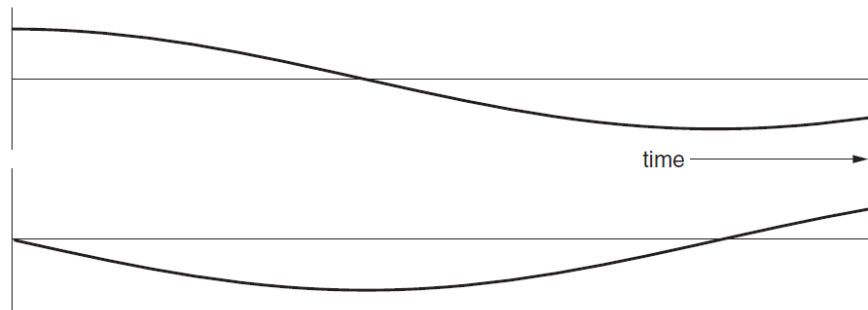
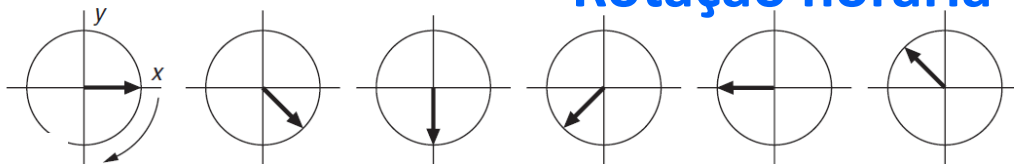
# Movimento Circular e Oscilação

## Rotação anti-horária



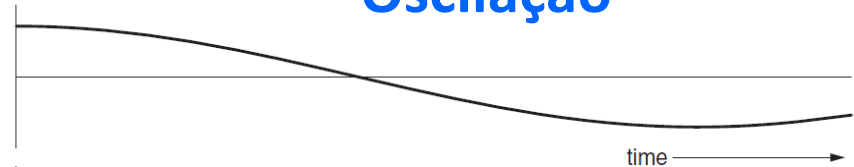
+

## Rotação horária



=

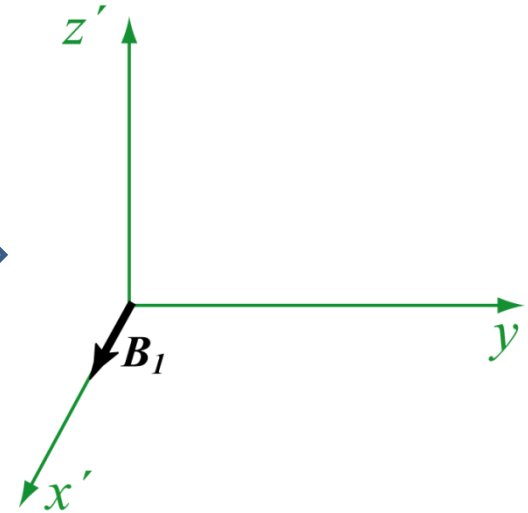
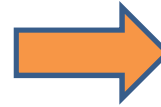
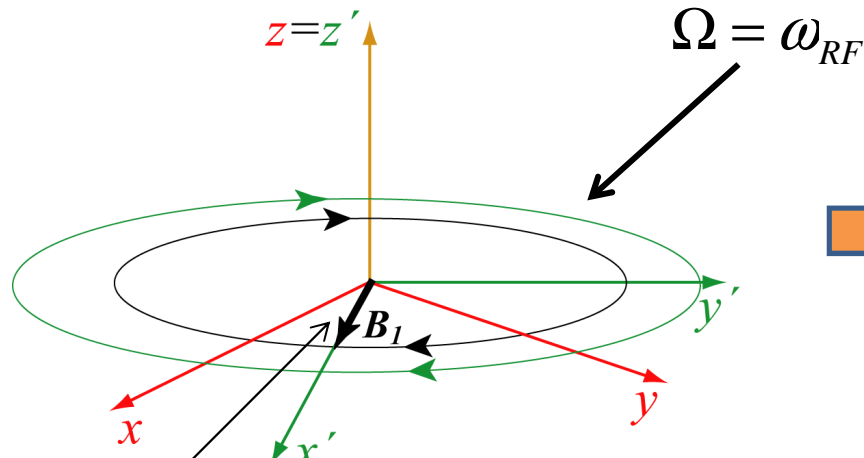
## Oscilação



# Campo de radiofrequência (RF)

Sistema de Laboratório

Sistema Girante



$$B_1^+(t) = B_1 [\cos(\omega_{RF}t)\hat{x} - \sin(\omega_{RF}t)\hat{y}]$$

$$\hat{x}' = [\cos(\Omega t)\hat{x} - \sin(\Omega t)\hat{y}]$$

$$B_1^+(t) = B_1 \hat{x}'$$

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = \gamma \vec{M} \times \left[ \left( B_0 - \frac{\Omega}{\gamma} \right) \hat{z}' + B_1 \hat{x}' \right]$$

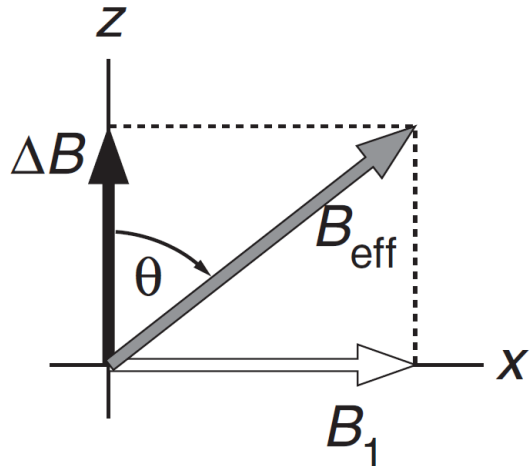
Offset de ressonância

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = \gamma \vec{M} \times \underbrace{\Delta\omega \hat{z}' + \omega_1 \hat{x}'}_{\vec{\omega}_{eff}}$$

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = \gamma \vec{M} \times \underbrace{[(\omega_0 - \Omega)\hat{z}' + \omega_1 \hat{x}']}_{\vec{\omega}_{eff}}$$

# Campo Efetivo

Em unidades de campo magnético:



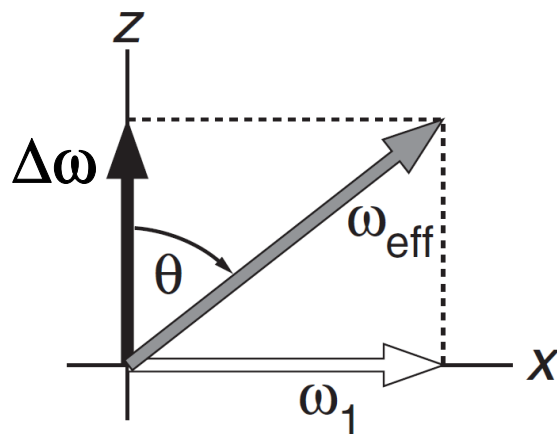
$$\Delta \vec{B} = \left( B_0 - \frac{\Omega}{\gamma} \right) \hat{z}$$

$$B_{\text{eff}} = \sqrt{B_1^2 + \Delta B^2}$$

$$\omega_1 = \gamma B_1$$

$$\omega_{\text{eff}} = \gamma B_{\text{eff}}$$

Em unidades de frequência:



$$\Delta \vec{\omega} = (\omega_0 - \Omega) \hat{z}'$$

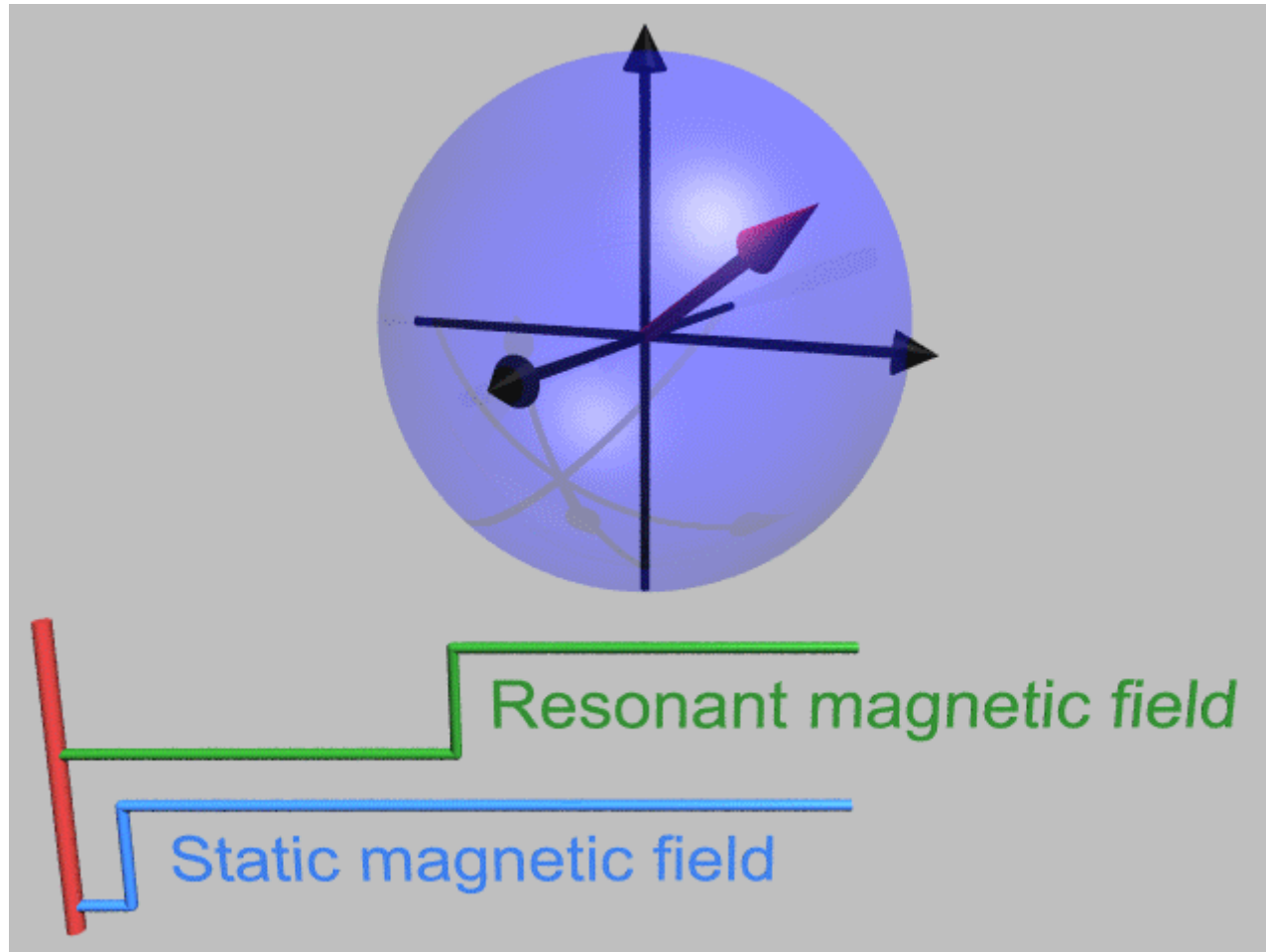
$$\omega_{\text{eff}} = \sqrt{\omega_0^2 + \Delta \omega^2}$$

$$\tan \theta = \frac{\Delta \omega}{\omega_1}$$

Amplitude do campo efetivo  
pode ser controlada pelo  
offset de ressonância

Direção do campo efetivo  
pode ser controlada pelo  
offset de ressonância e pela  
amplitude de  $B_1$ .

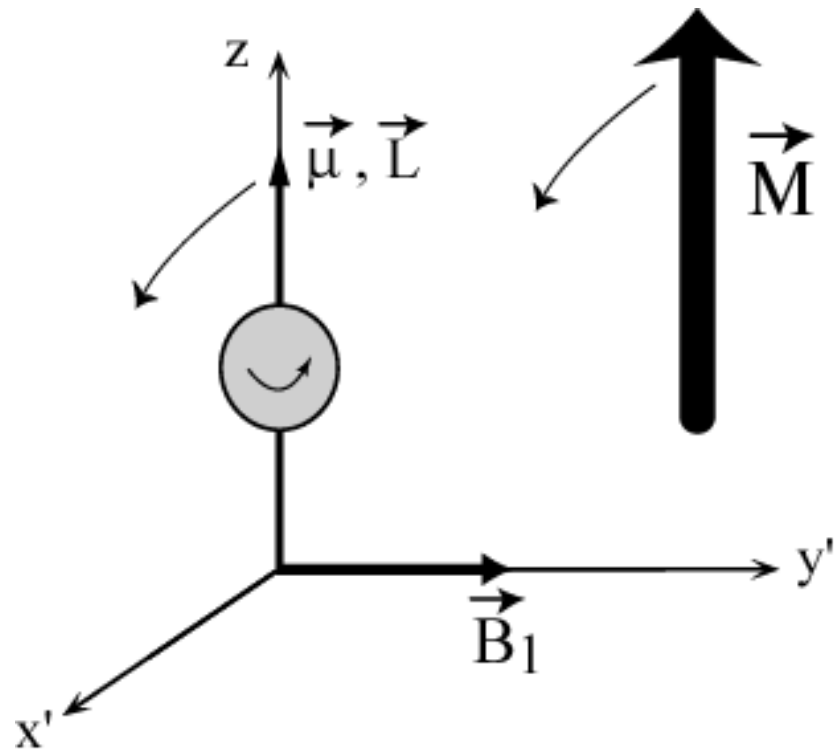
# Movimento da magnetização no campo efetivo





## Pulsos de RF em ressonância

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = \vec{M} \times \omega_1 \hat{x}$$



Ressonância  
Magnética  
Nuclear !

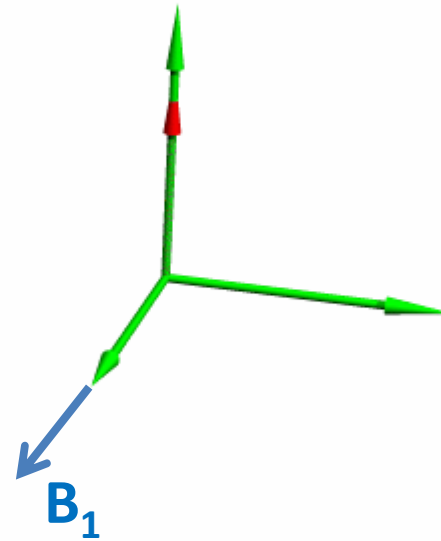
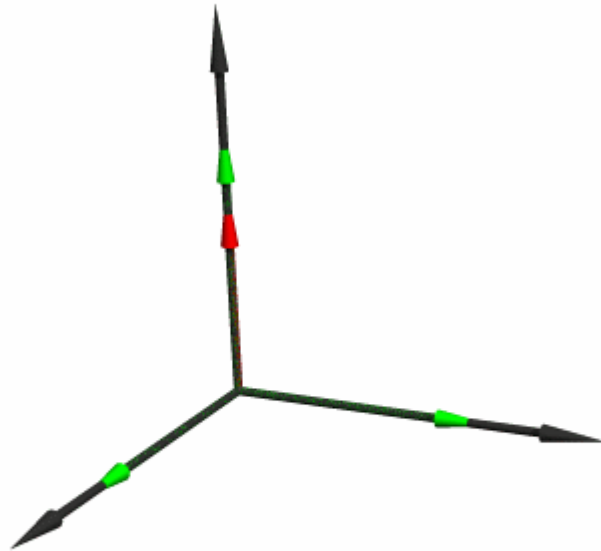
Movimento  
de Precessão  
do spin em torno de  $B_1$ :

$$v_{\text{Larmor}} = v_L = \gamma B_1$$

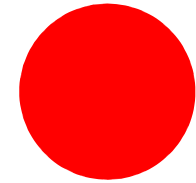
# Pulsos de RF em ressonância

Referencial de laboratório

Referencial Girante



# Pulsos de RF em ressonância

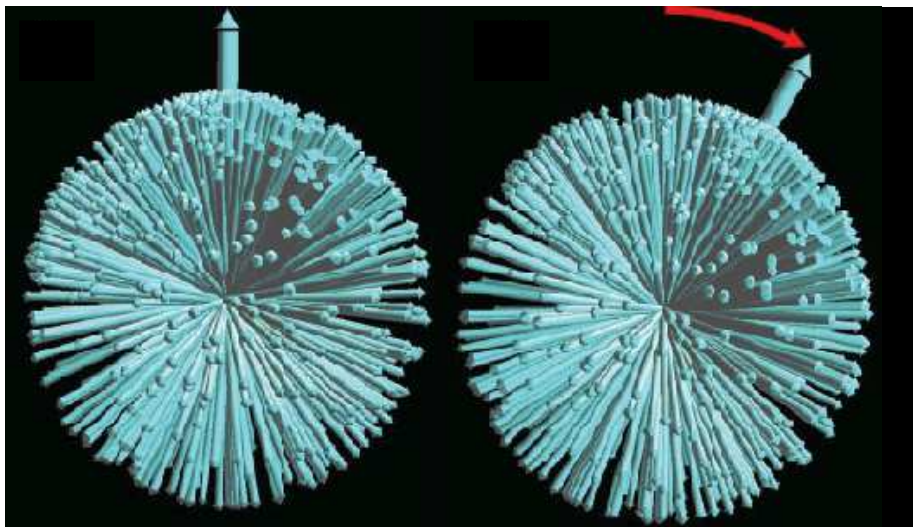


- Pulsos Radiofrequencia

$$\vec{B}_1(t) = B_1 \cos(\omega_{RF}t + \phi)\hat{x} - B_1 \sin(\omega_{RF}t + \phi)\hat{y}$$

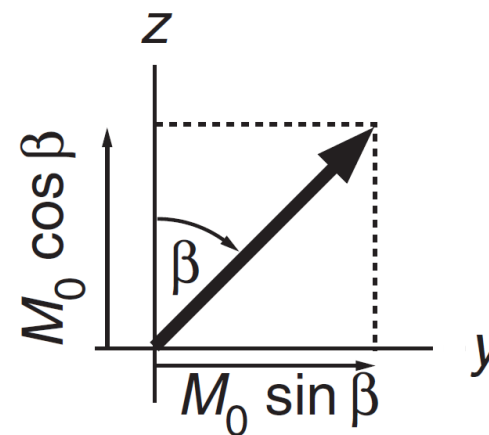
Fase do pulso de RF define a direção de  $B_1$

Ângulo de Flip (ou rotação)



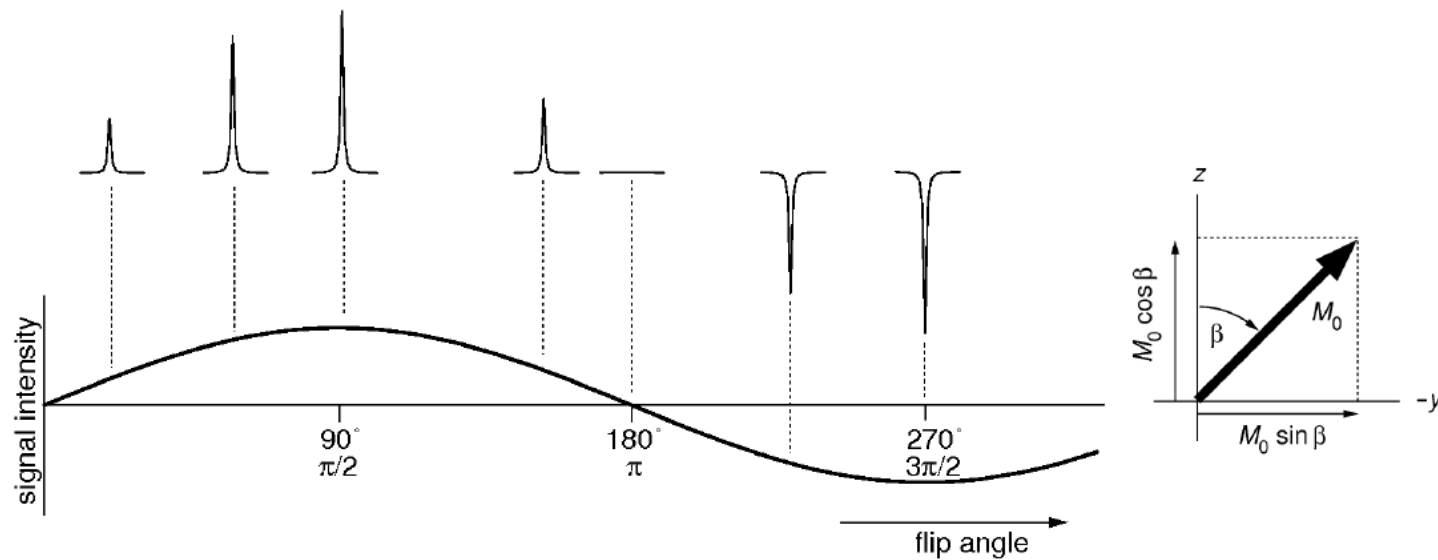
$$\beta = \omega_1 t_p = \gamma B_1 t_p$$

$$M_z = M_0 \cos \beta \quad M_y = -M_0 \sin \beta$$



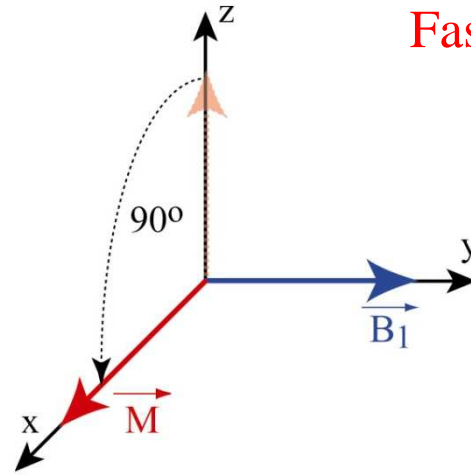
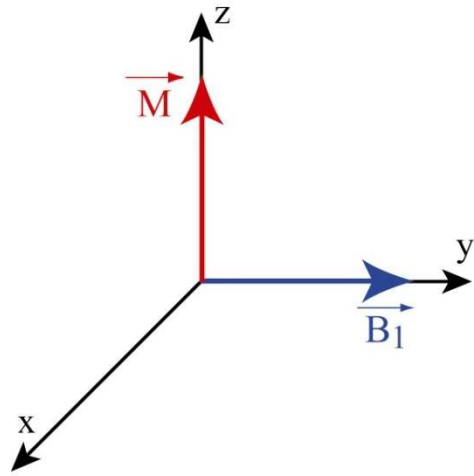
# Calibração de Pulsos

$$M_z = M_0 \cos \beta \quad M_y = -M_0 \sin \beta$$

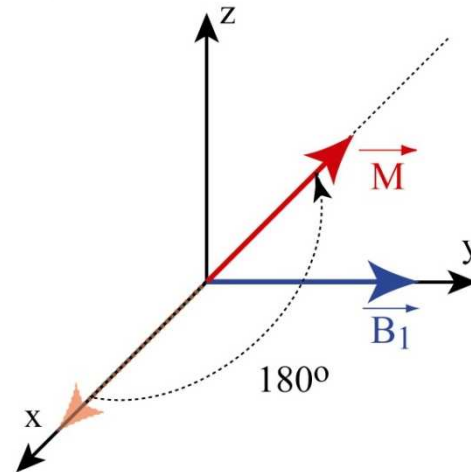
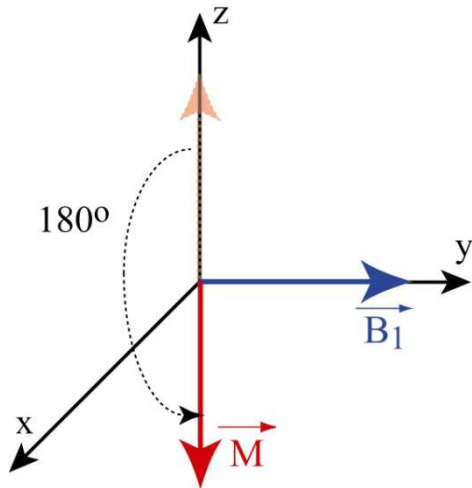


# Pulsos de RF em ressonância

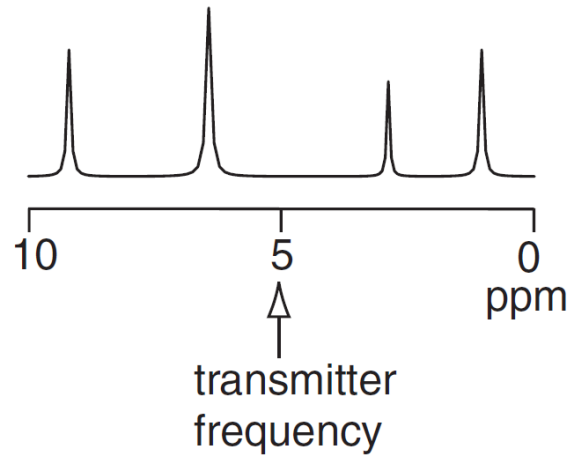
Coreografia de Spins com pulsos de RF:



Fases da RF: x, y, -x & -y



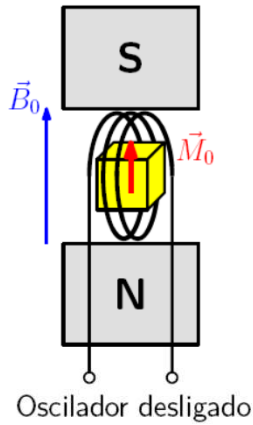
## Pulsos de RF em ressonância



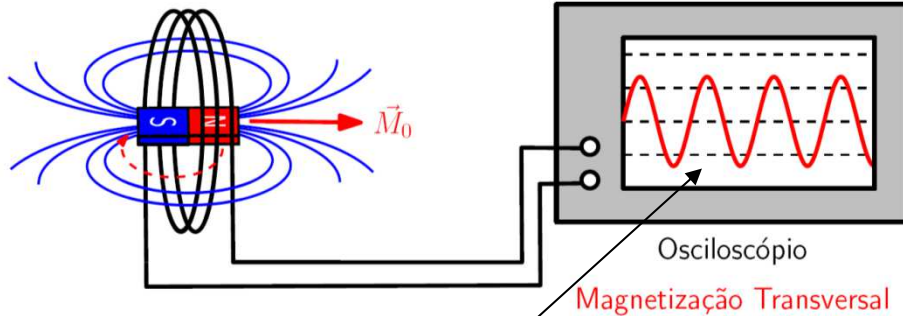
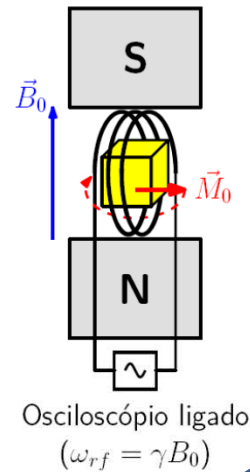
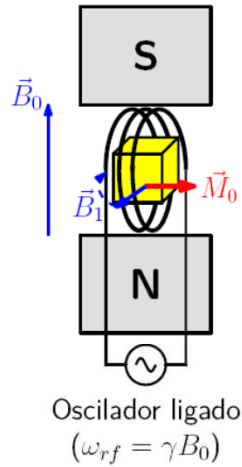
**Discussão:** como garantir que um sinal com múltiplas linha o pulso possa ser considerado em ressonância com todas elas: conceito de pulso hard

# Detecção do Sinal

Equilíbrio térmico



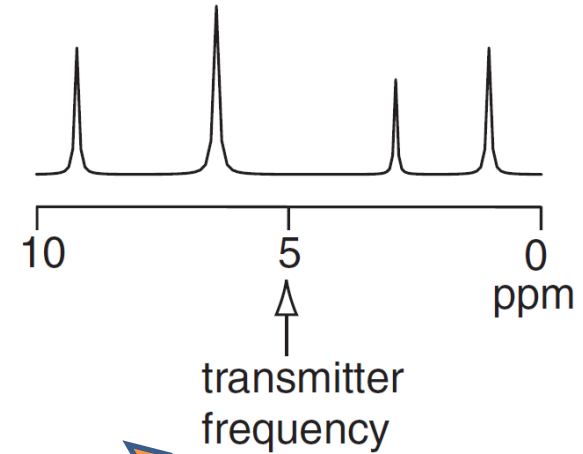
Pulso de  $\pi/2$  Força eletromotriz induzida



$$\varepsilon = - \frac{d\Phi_B}{dt}$$

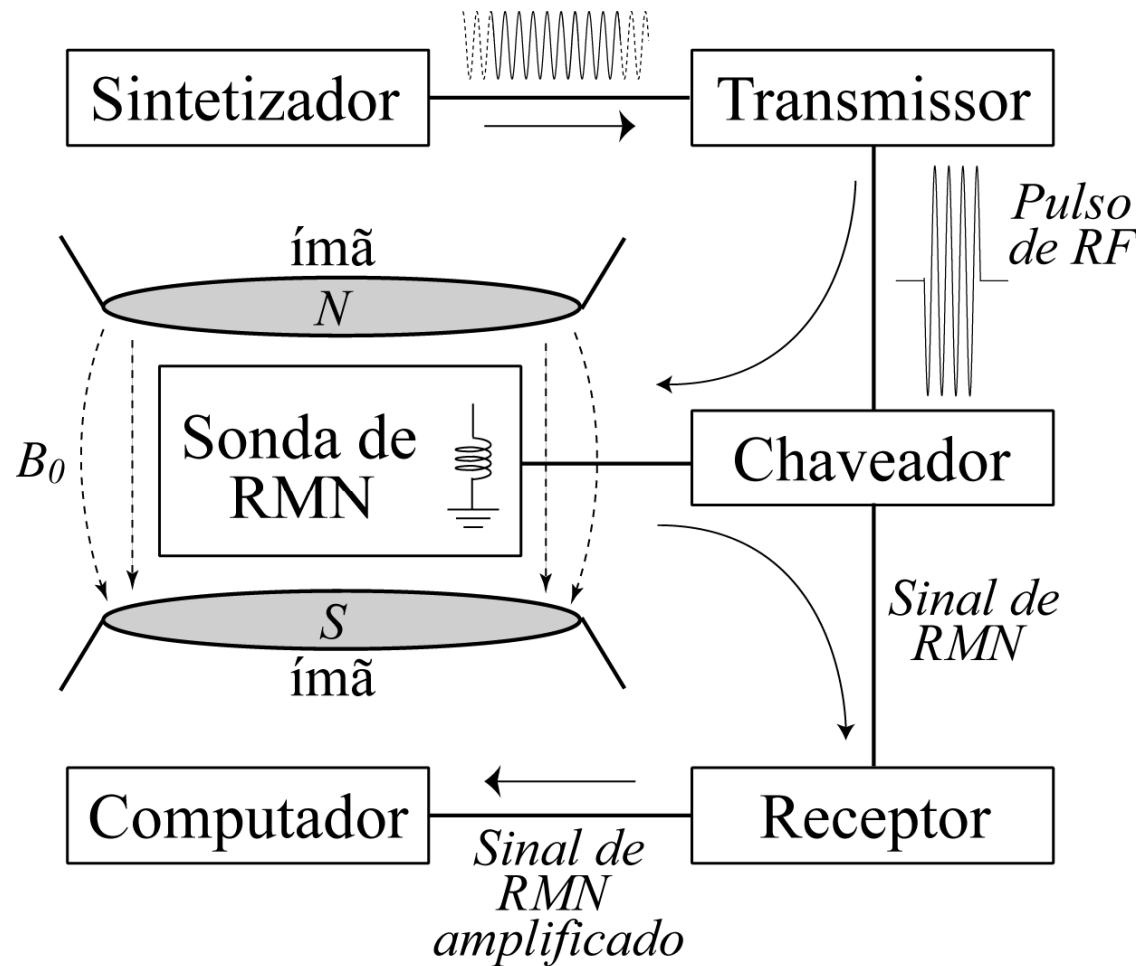
$$\omega_0 = \gamma B_0$$

$$S(t) = S_0 \cos[(\omega_0 - \omega_r)t] = S_0 \cos(\Delta\omega t)$$



*A frequência mostrada não é a frequência de precessão diretamente, mas a diferença entre a frequência de precessão e uma frequência de referência denominada frequência do transmissor*

# O Espectrômetro Básico



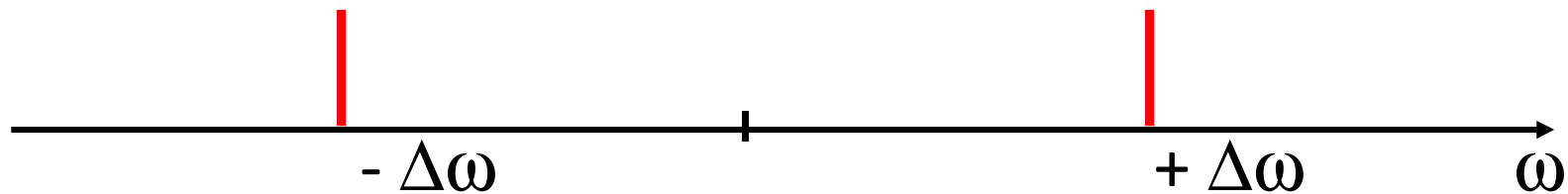


Como já discutido somente componente com um componente (cos) não é possível distinguir o sentido de rotação, ou seja, se a frequência é positiva ou negativa em relação a frequência de referência.



Com a aquisição somente da componente cosseno, todas as linhas apareceriam duplicadas (espelhadas em relação a frequência do transmissor)

Exemplo de Duplicação das linhas com a aquisição de uma componente do sinal

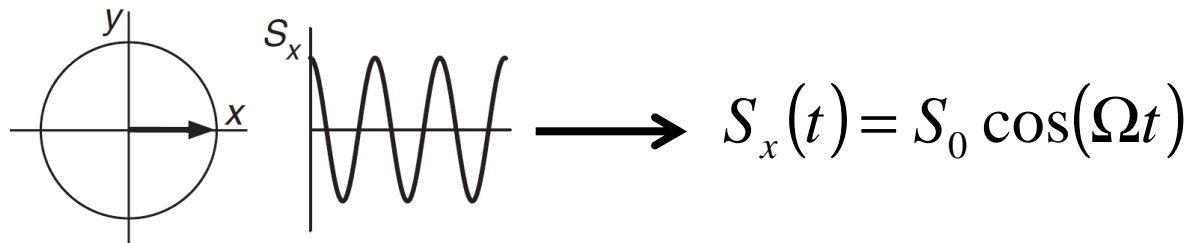


Mas como vimos o sinal adquirido é de fato:

$$S(t) = S_0 \cos[(\omega_0 - \omega_r)t] = S_0 \cos(\Delta\omega t)$$

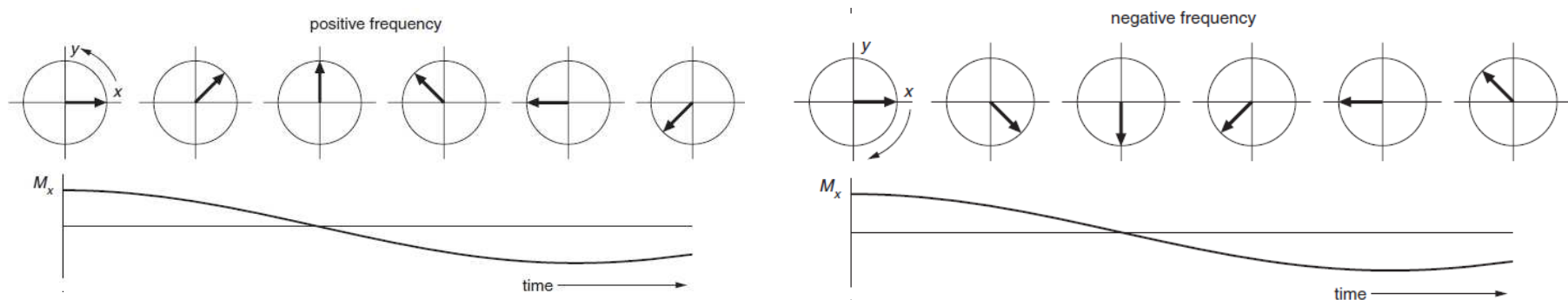
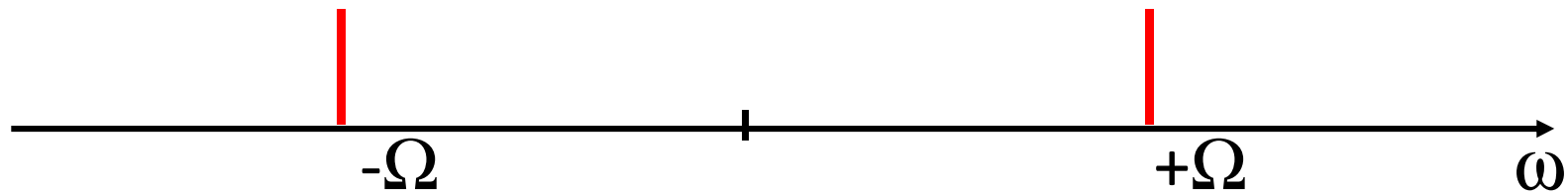
**Como resolver ???**

# Quadratura:

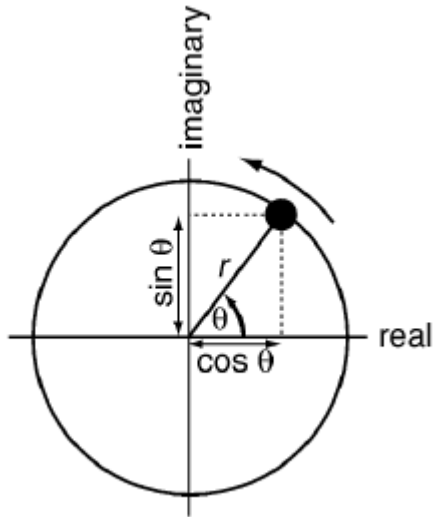


Dedução: transformada de Fourier do cosseno

$$\begin{aligned}
 S_x(\omega) &= \int_0^{\infty} S_x(t) e^{-i\omega t} dt = \int_0^{\infty} S_0 \cos(\Omega t) e^{-i\omega t} dt = S_0 \int_0^{\infty} \left[ \frac{e^{-i\Omega t} + e^{-i\Omega t}}{2} \right] e^{-i\omega t} dt = \\
 &= \frac{S_0}{2} \int_0^{\infty} e^{-i(\omega+\Omega)t} dt + \frac{S_0}{2} \int_0^{\infty} e^{-i(\omega-\Omega)t} dt = \frac{S_0}{2} \delta(\omega+\Omega) + \frac{S_0}{2} \delta(\omega-\Omega)
 \end{aligned}$$



## Um parêntese: Representação Complexa



A relação entre o movimento circular e oscilações lineares é útil para entender números complexos. Se considerarmos o eixo x é a parte real e eixo-y como o imaginário

**Movimento no sentido anti-horário:**

$$\exp(i\theta) = \cos \theta + i \sin \theta$$

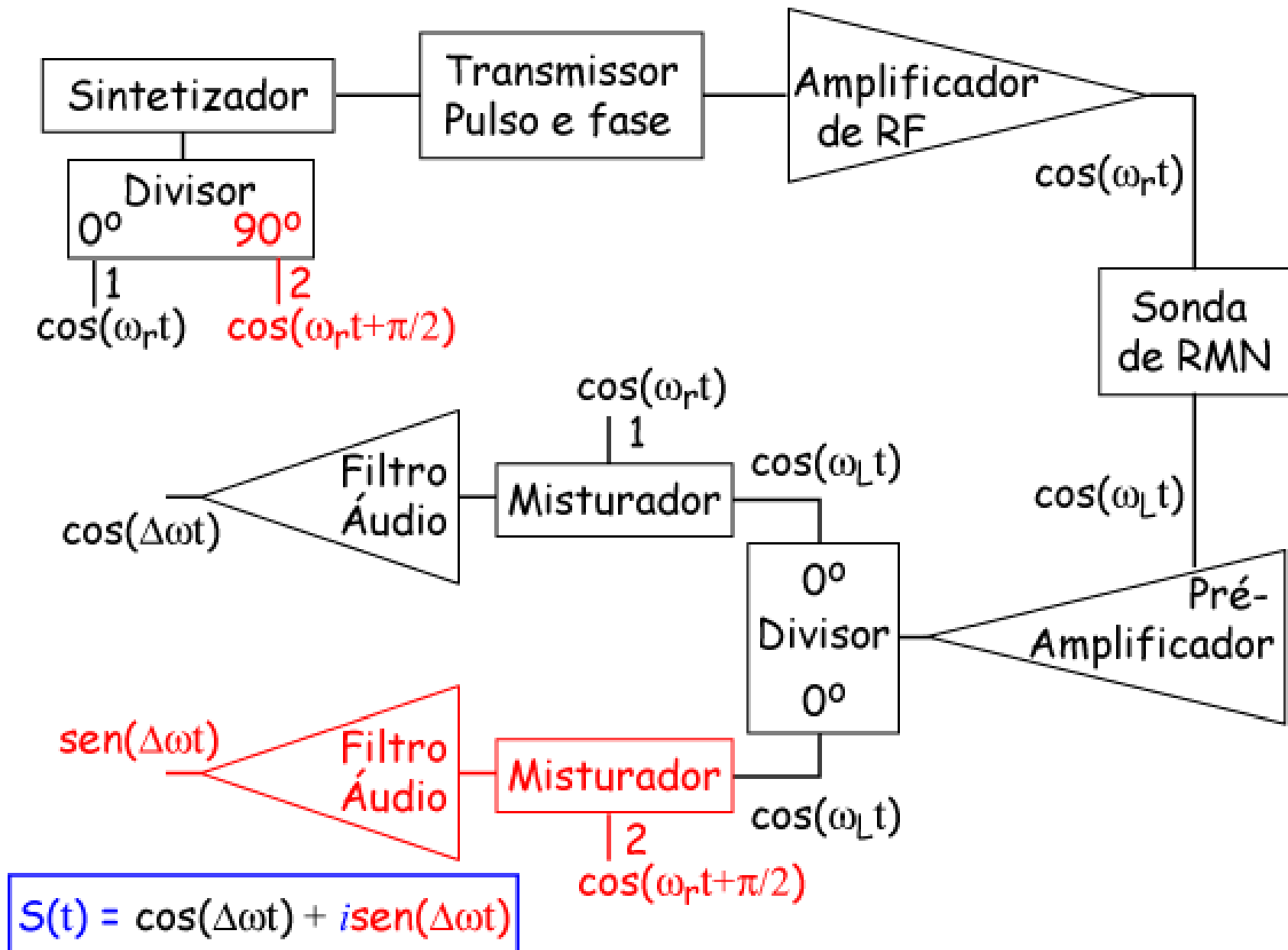
**Movimento no sentido horário:**

$$\exp(-i\theta) = \cos \theta - i \sin \theta$$



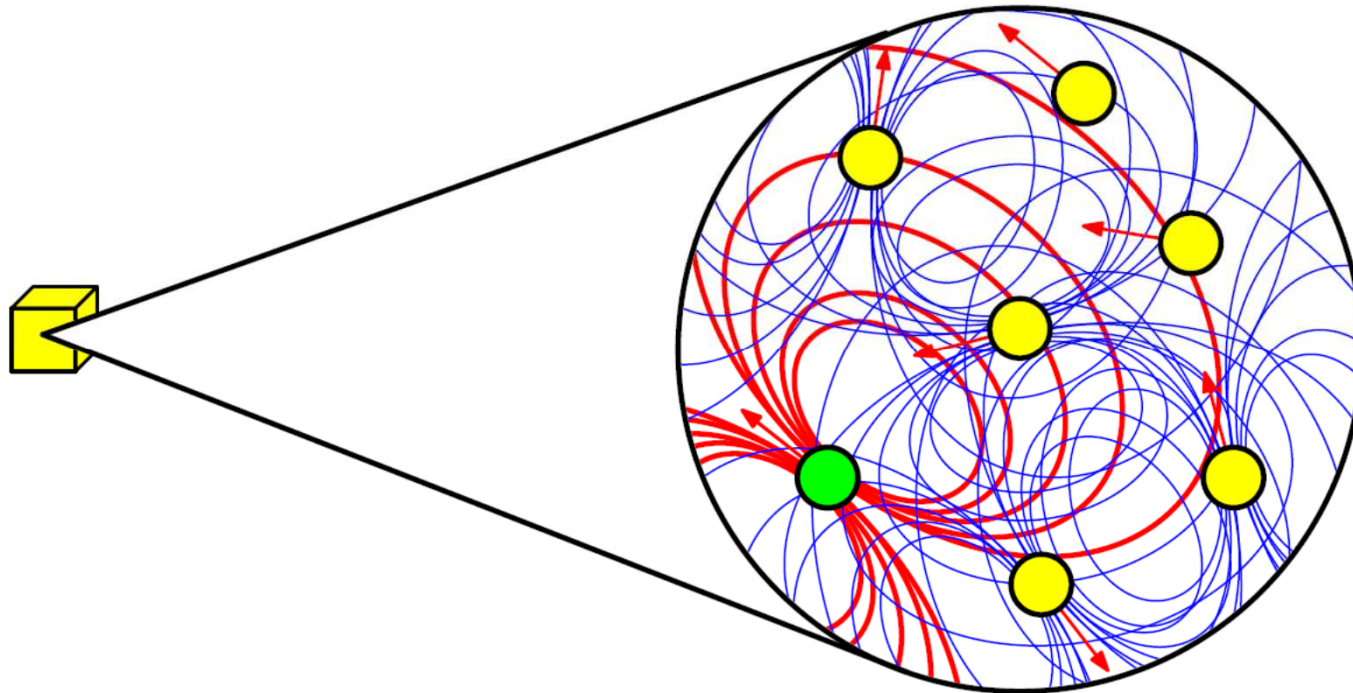
$$S(t) = S_0 [\cos(\Delta\omega t)\hat{x} + \sin(\Delta\omega t)\hat{y}] \equiv S(t) = S_0 [\cos(\Delta\omega t) + i \sin(\Delta\omega t)\hat{y}]$$

# Detecção em Fase e Quadratura



# Fenomenologia da Relaxação

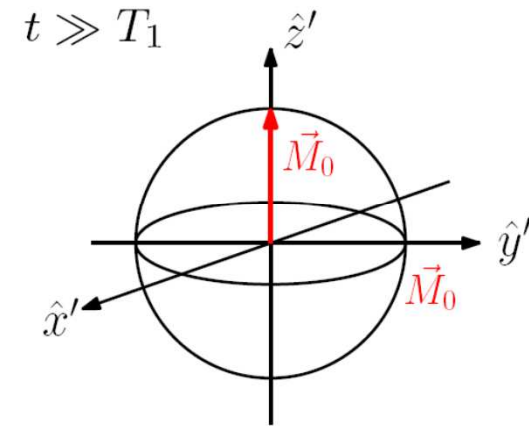
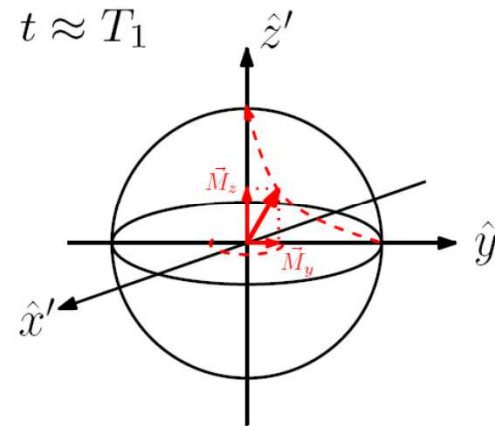
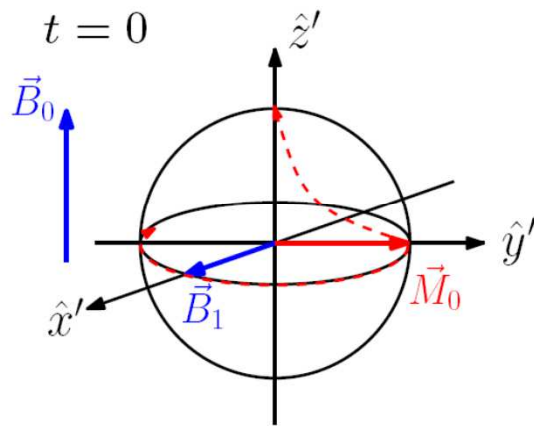
*Spins nucleares não estão isolados*



*Interagem magnética e eletricamente com outros núcleos e o ambiente.*

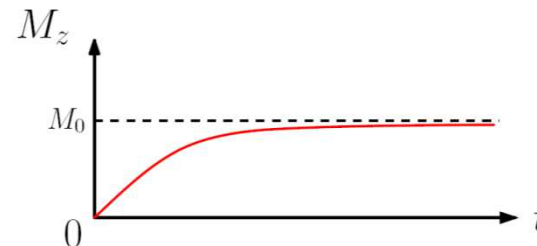
# Fenomenologia da Relaxação

Se fora do equilíbrio a magnetização tende a retornar ao seu estado de equilíbrio



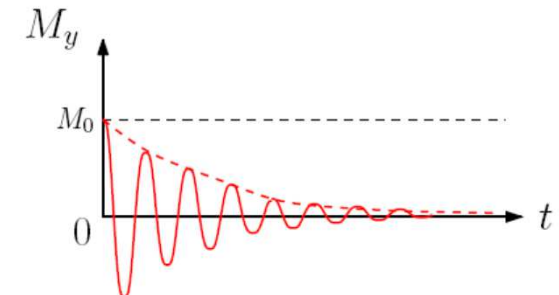
Relaxação Longitudinal

$$M_z(t) = M_0 \left( 1 - e^{-\frac{t}{T_1}} \right)$$



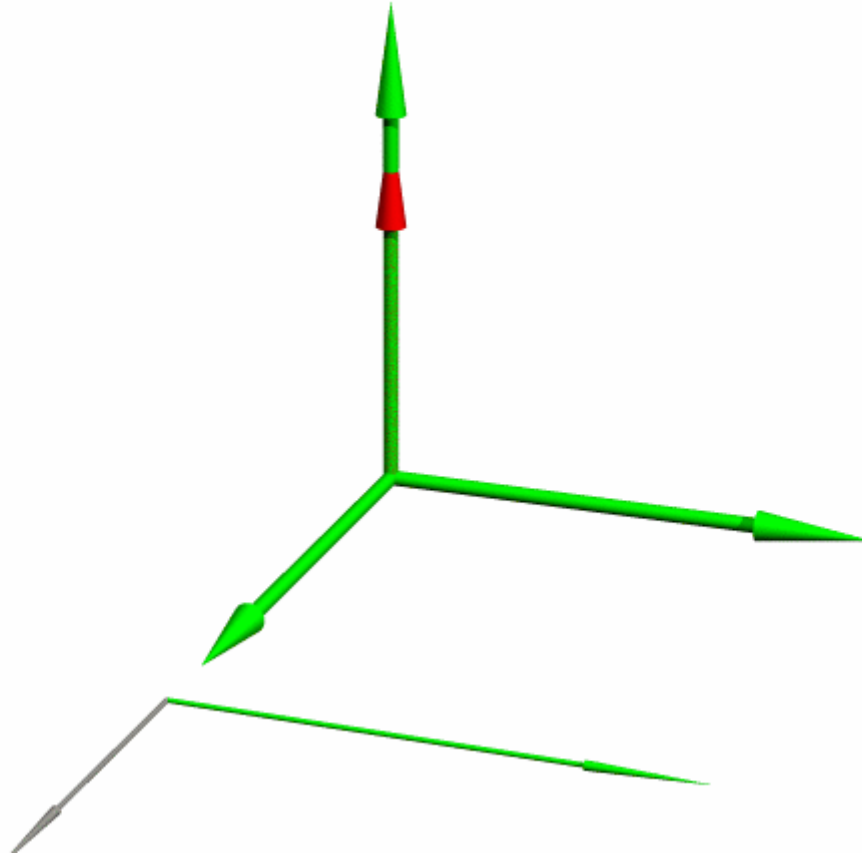
Relaxação Transversal

$$M_y(t) = M_0 e^{-\frac{t}{T_2}}$$



Tempos de relaxação dependem do ambiente magnético a que os spins nucleares estão submetidos. São particularmente sensíveis a flutuações dos campos magnéticos nos sítios nucleares.

# Fenomenologia da Relaxação



# Equações de Bloch

Matrix de relaxação

$$\frac{d\mathbf{M}(t)}{dt} = \mathbf{M}(t) \times \gamma \mathbf{B}(t) - \mathbf{R}(\mathbf{M}(t) - M_0)$$



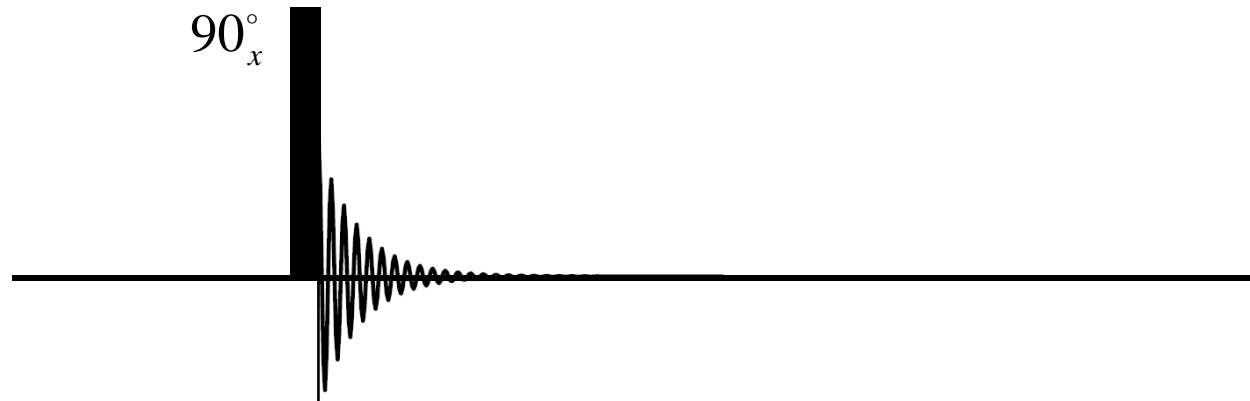
$$\frac{dM_z(t)}{dt} = \gamma [M_x(t)B_y(t) - M_y(t)B_x(t)] - \frac{M_z(t) - M_0}{T_1}$$

$$\frac{dM_x(t)}{dt} = \gamma [M_y(t)B_z(t) - M_z(t)B_y(t)] - \frac{M(t)_x}{T_2}$$

$$\frac{dM_y(t)}{dt} = \gamma [M_z(t)B_x(t) - M_x(t)B_z(t)] - \frac{M(t)_y}{T_2}$$



# Exemplo simples do uso das equações de Bloch



## Pulso:

$$\frac{dM_z(t)}{dt} = -M_y(t)\gamma B_x^r(t)$$

$$\frac{dM_x(t)}{dt} = 0$$

$$\frac{dM_y(t)}{dt} = M_z(t)\gamma B_x^r(t)$$



$$M_z(t) = M_0 \cos(\omega_x t)$$

$$M_x(t) = 0$$

$$M_y(t) = M_0 \sin(\omega_x t)$$

## Evolução Livre:

$$\frac{dM_z(t)}{dt} = -\frac{M_z(t) - M_0}{T_1}$$

$$\frac{dM_x(t)}{dt} = -\Omega M_y(t) - \frac{M_x(t)}{T_2}$$

$$\frac{dM_y(t)}{dt} = \Omega M_x(t) - \frac{M_y(t)}{T_2}$$

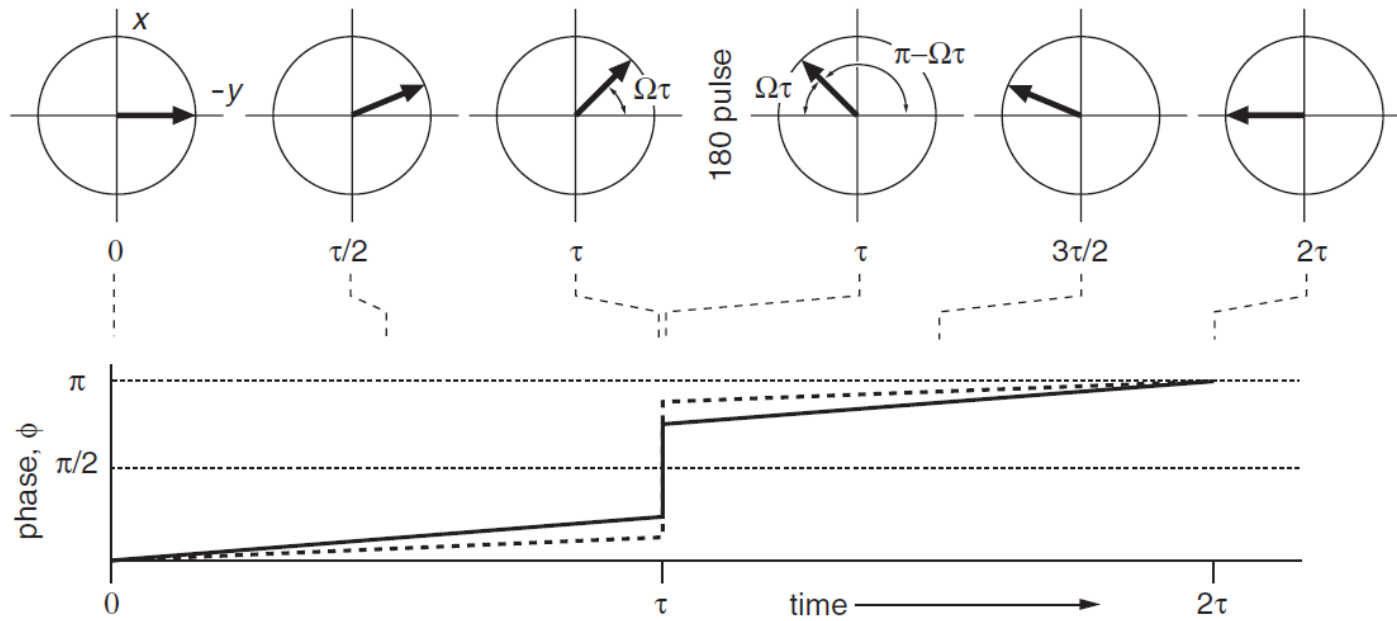
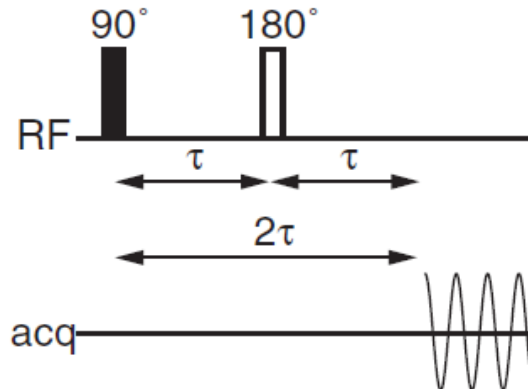


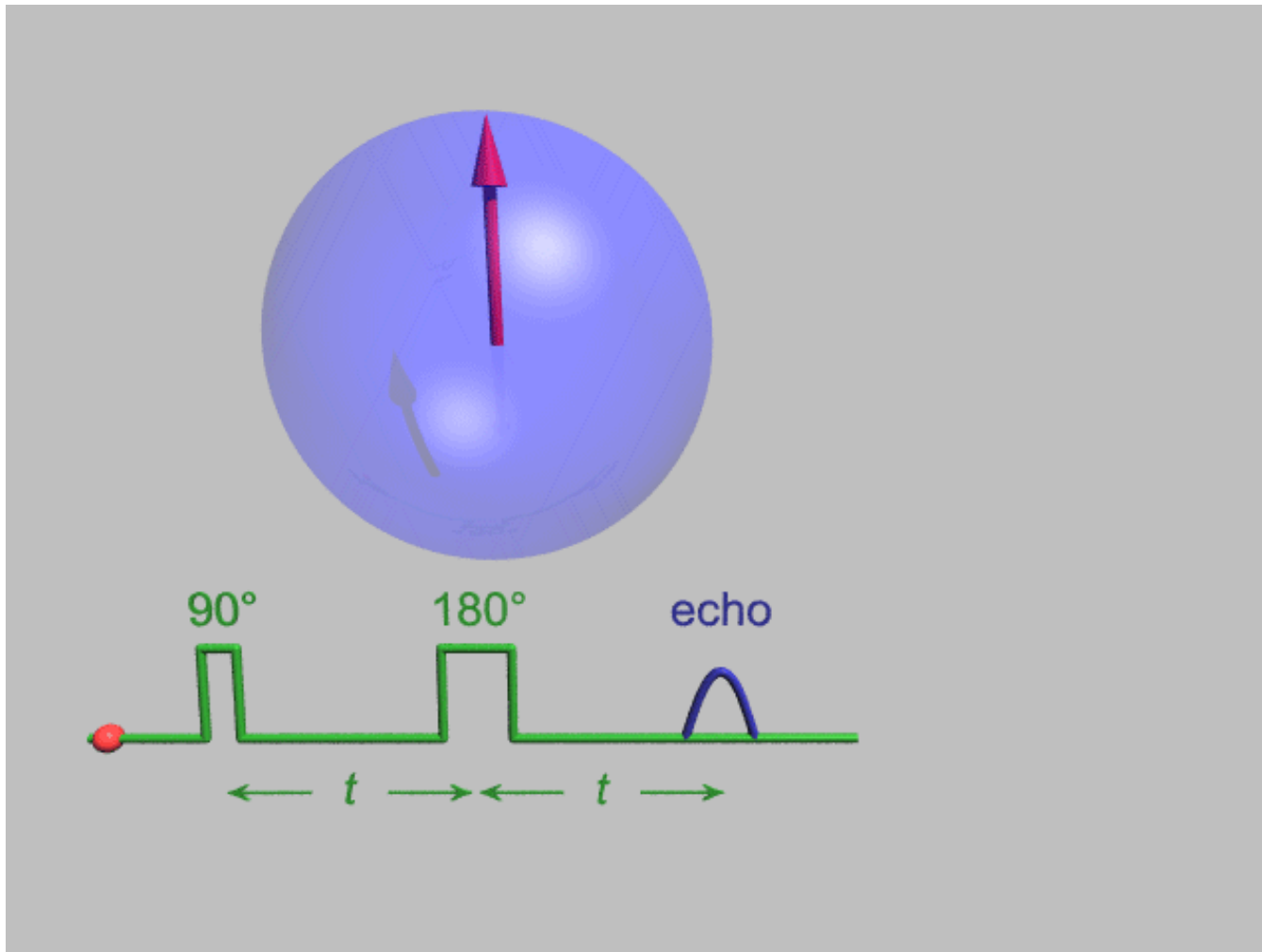
$$M_z(t) = M_0 (1 - e^{-\frac{t}{T_1}})$$

$$M_x(t) = M_0 \cos(\Omega t) e^{-\frac{t}{T_2}}$$

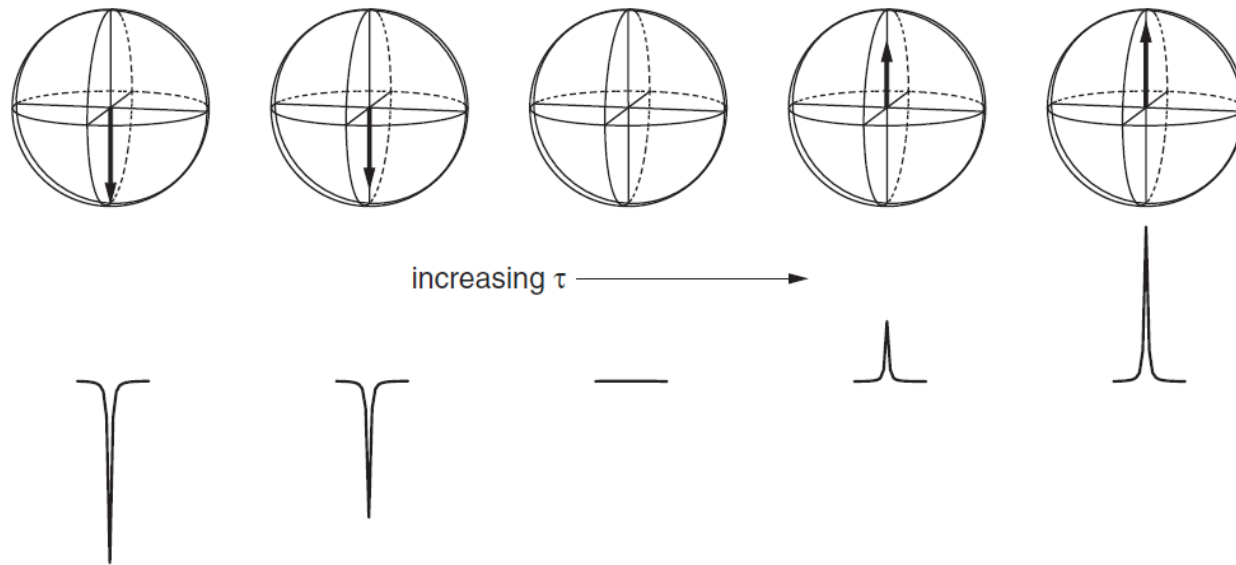
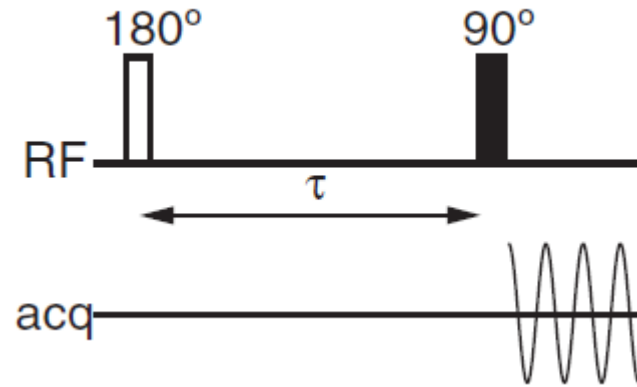
$$M_y(t) = M_0 \sin(\Omega t) e^{-\frac{t}{T_2}}$$

# Spin-Eco





# Inversão e Recuperação



Ver material Figueroa