

Fundamentos e aplicações de RMN no estado sólido

Jair C. C. Freitas

Programa de Pós-graduação em Física – UFES

Programa de Pós-graduação em Química - UFES

Sumário

- Fundamentos de RMN:
 - Relaxação longitudinal.
 - Medidas de T_1 .
 - Método de inversão-recuperação.

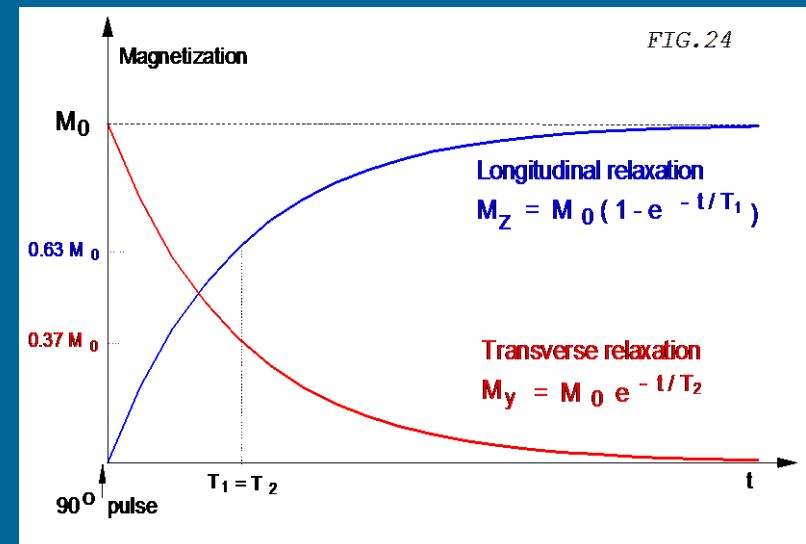
Relaxação do sistema de spins

- Relaxação longitudinal (T_1):
 - Trocas de energia entre spins e “rede”.
 - Existência de campos flutuantes com frequências $\sim \omega_L$.
 - Restauração do equilíbrio térmico.
- Relaxação transversal (T_2):
 - Perda de coerência entre os spins no plano transversal.
 - Distribuições de frequências de precessão.
 - Interações entre os spins.

Líquidos: $T_1 \approx T_2$

Sólidos: $T_1 \gg T_2$

} $T_1 \geq T_2$



Equações de Bloch

Efeito combinado de campos magnéticos e relaxação:

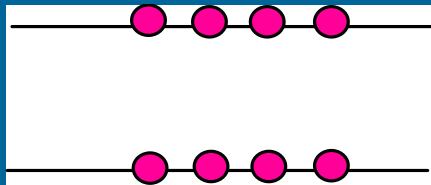
$$\frac{d M_x}{d t} = \gamma(\mathbf{M} \times \mathbf{B})_x - \frac{M_x}{T_2}$$

$$\frac{d M_y}{d t} = \gamma(\mathbf{M} \times \mathbf{B})_y - \frac{M_y}{T_2}$$

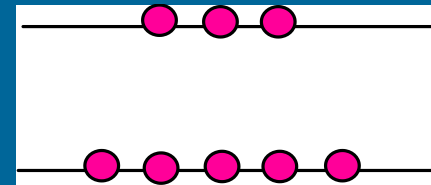
$$\frac{d M_z}{d t} = \gamma(\mathbf{M} \times \mathbf{B})_z - \frac{M_z - M_0}{T_1}$$

Relaxação longitudinal

Equilíbrio térmico: $B_0 = 0$



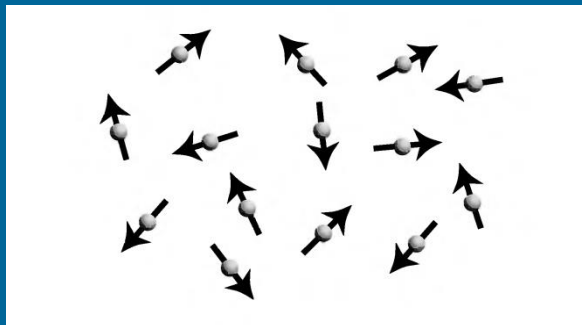
Equilíbrio térmico: $B_0 \neq 0$



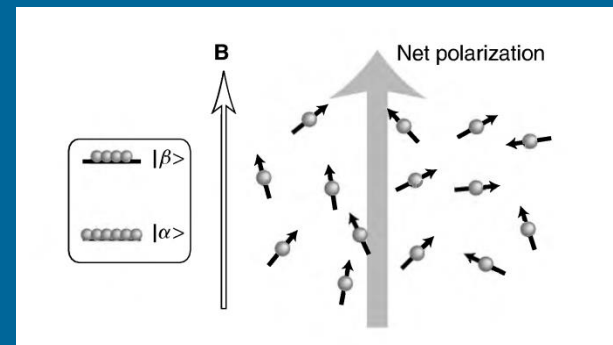
Relaxação

Processos
“spin-rede”

Transições
estimuladas



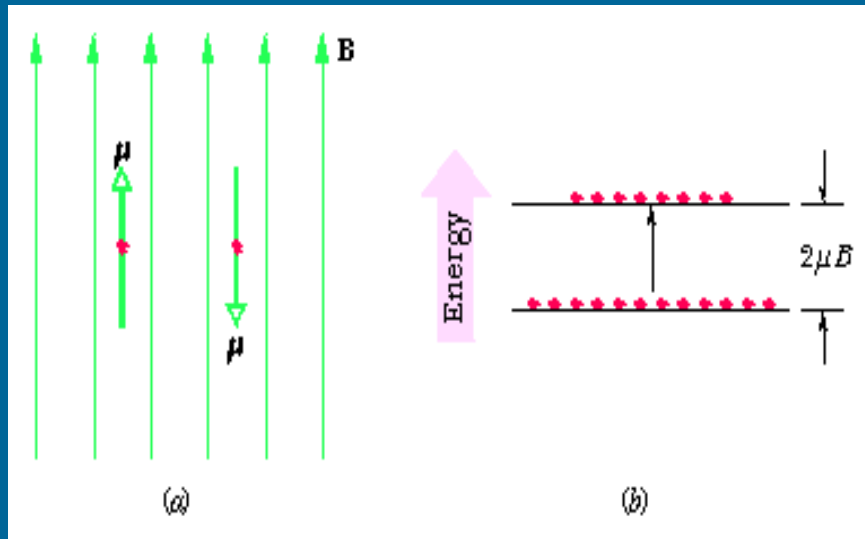
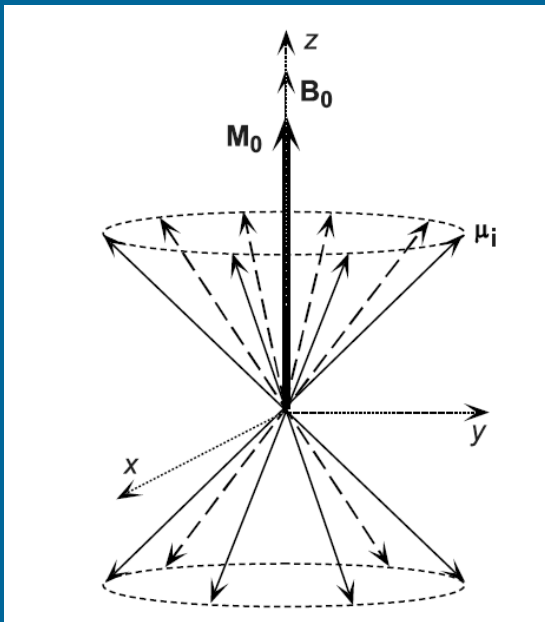
Relaxação



“Spin dynamics”, M. H. Levitt. John Wiley & Sons, 2002.

Paramagnetismo nuclear

Equilíbrio térmico na presença de B_0 :

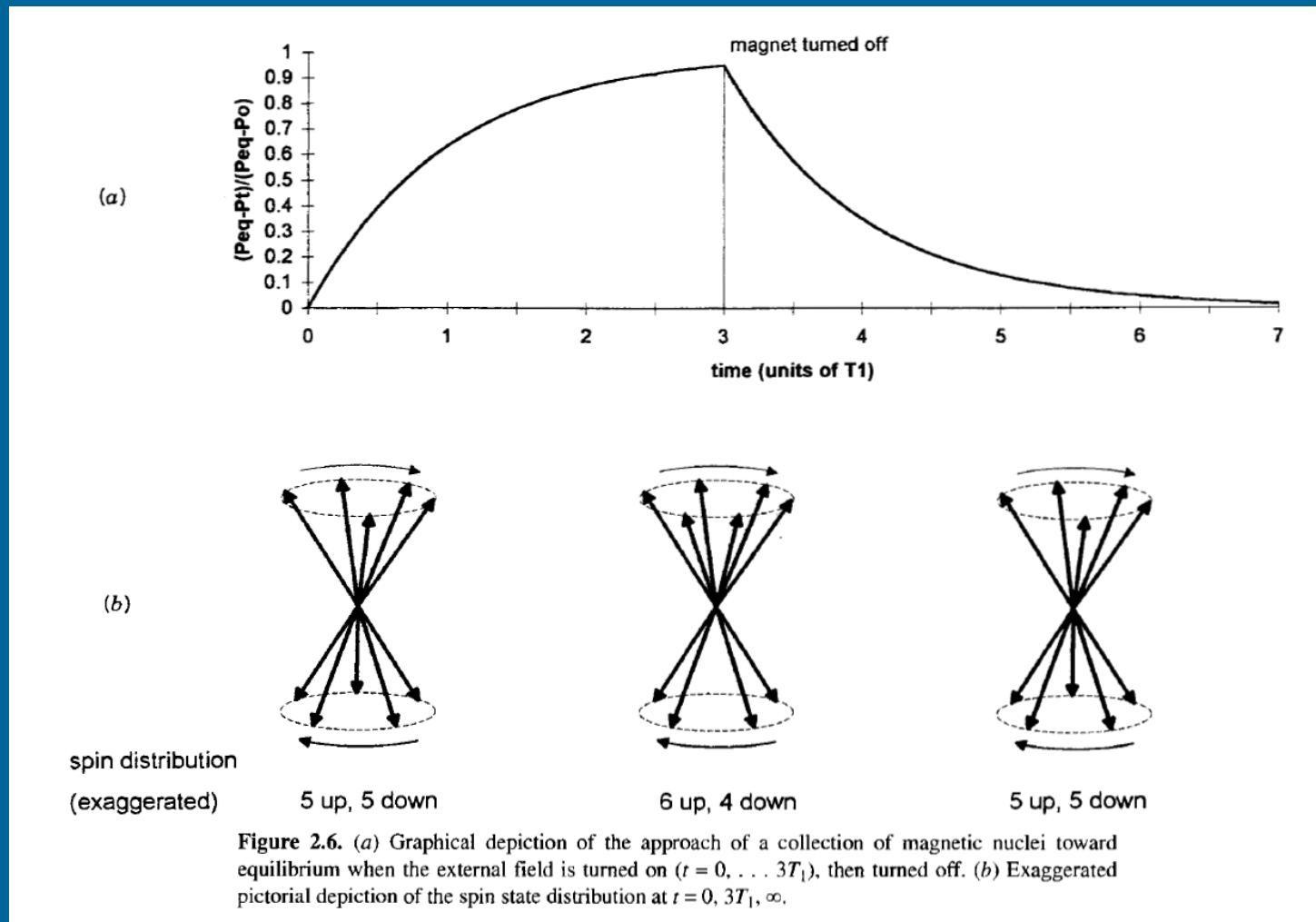


$$E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}_0 = -\gamma m \hbar B_0 = -m \hbar \omega_L$$

$$M_0 = \frac{N \mu^2 B_0}{3kT}$$

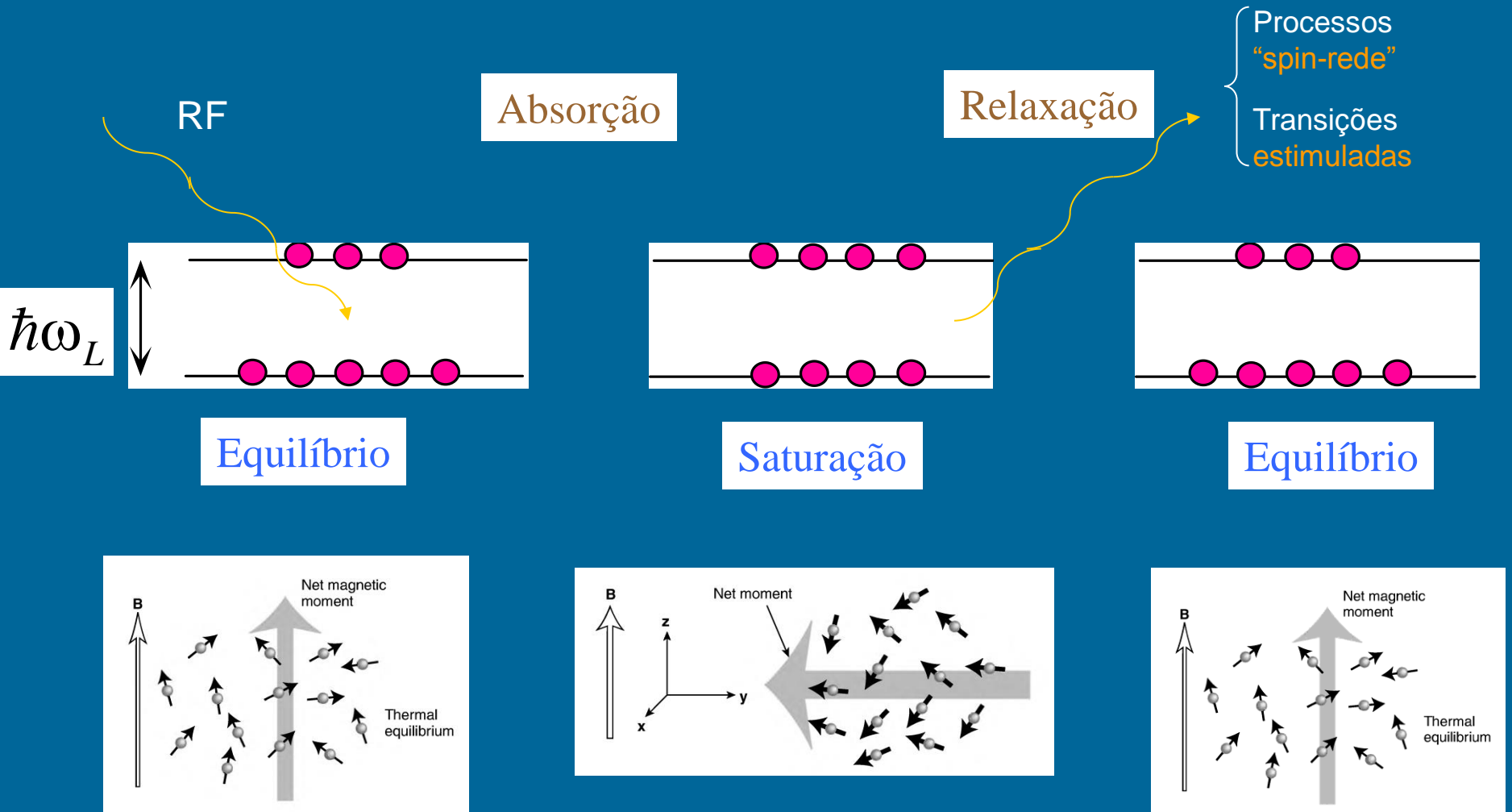
$$\frac{n_-}{n_+} = e^{(-\hbar \omega_L / kT)}$$

Relaxação longitudinal



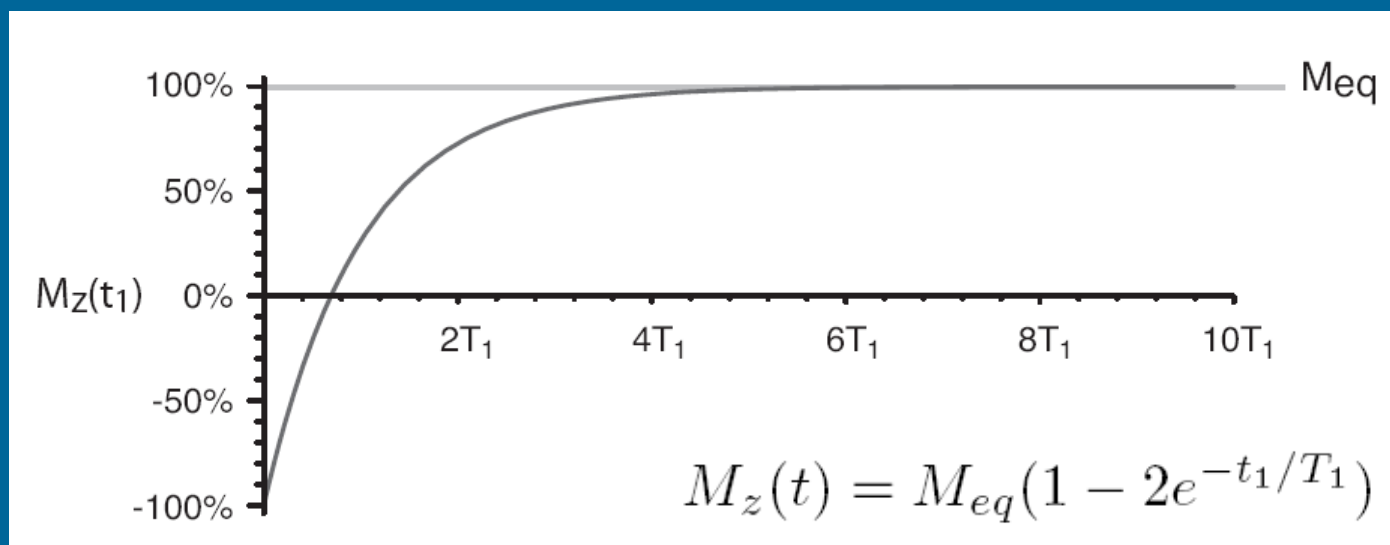
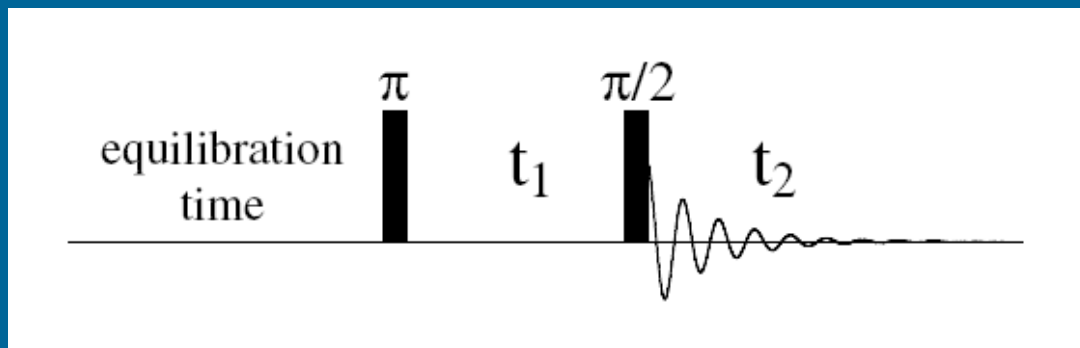
“A complete introduction to modern NMR spectroscopy”, R. S. Macomber. John Wiley & Sons, 1998.

Relaxação longitudinal



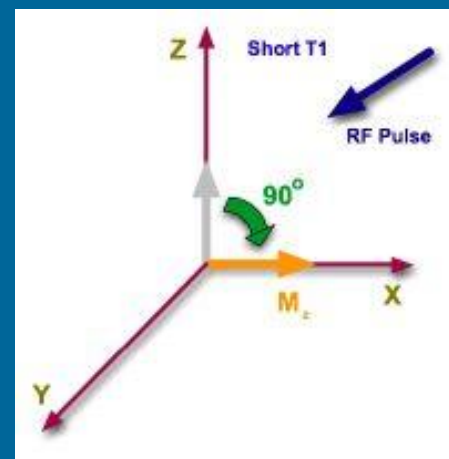
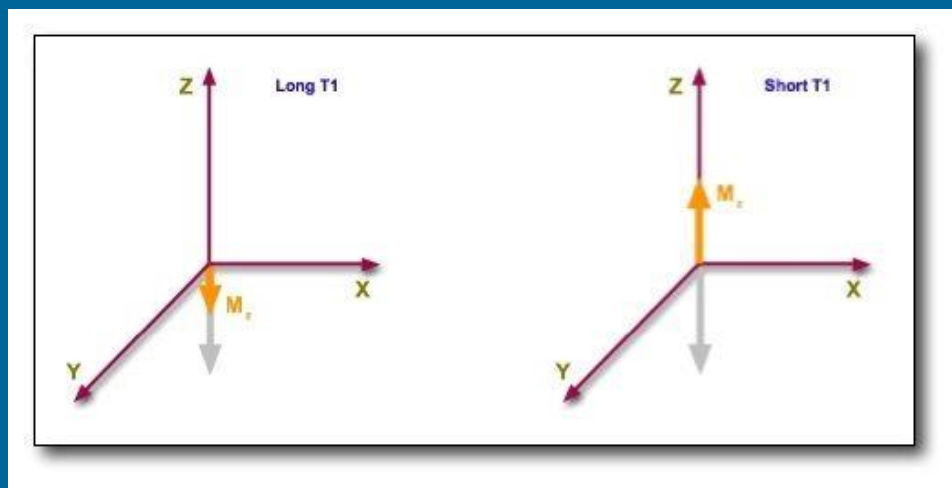
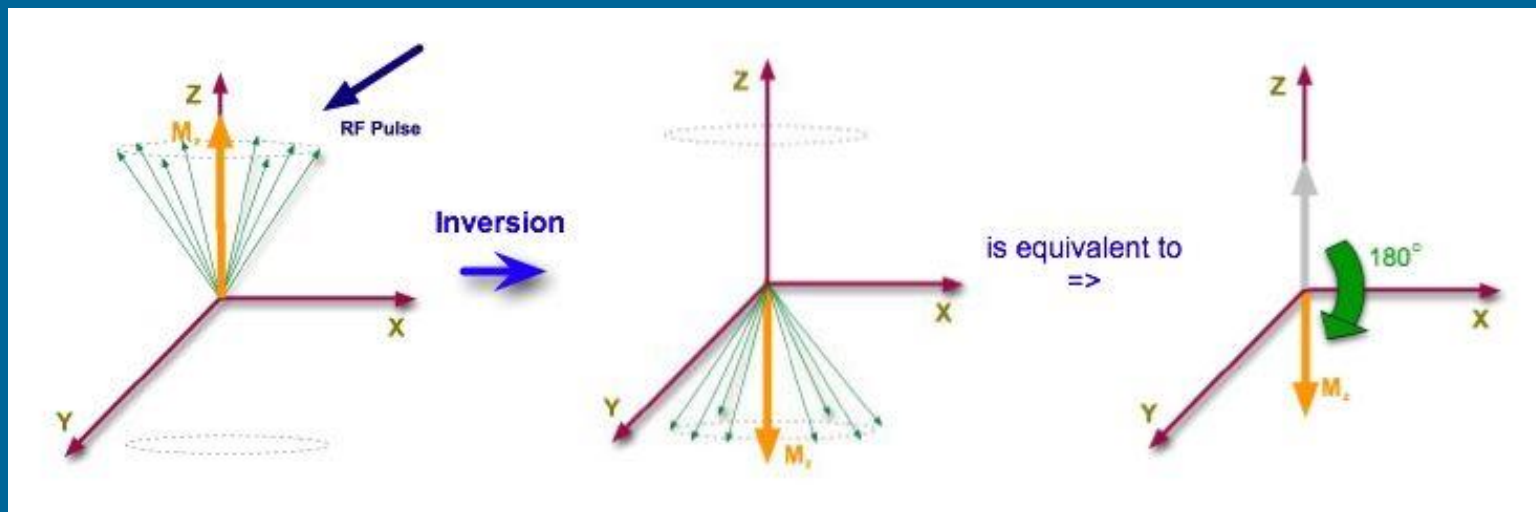
"Spin dynamics", M. H. Levitt. John Wiley & Sons, 2002.

Medida de T_1 : sequência inversão-recuperação



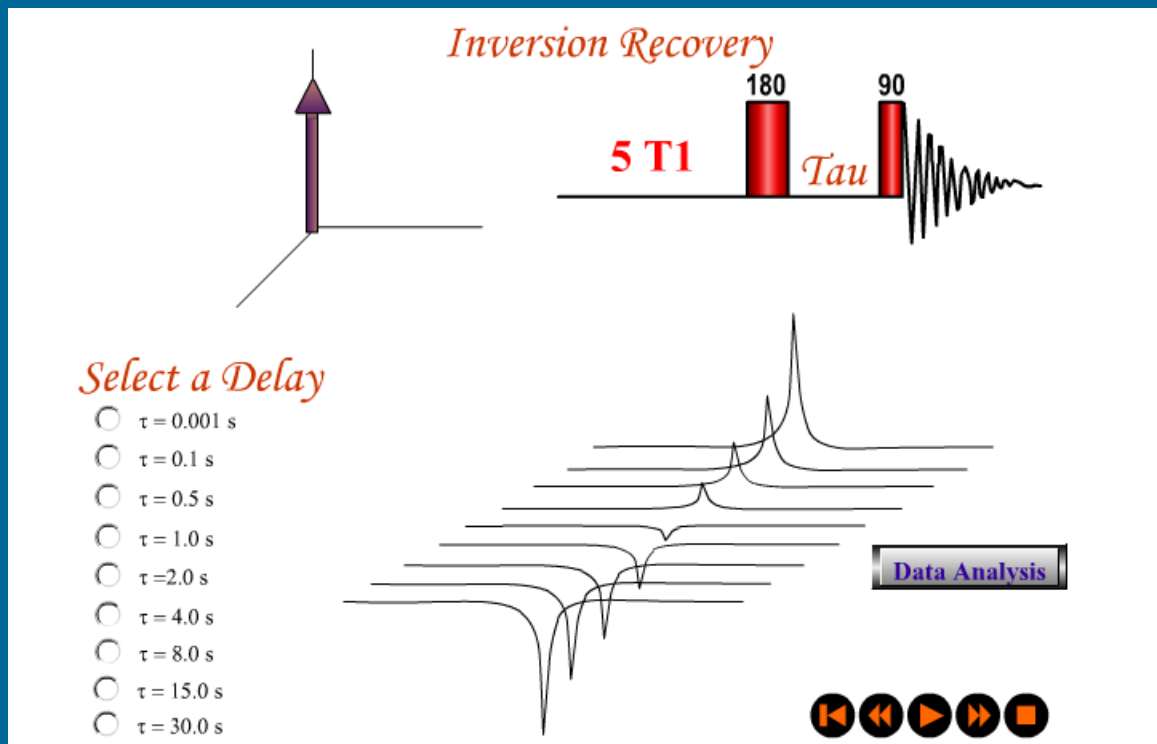
<http://grandinetti.org/Teaching/Chem824/Notes>

Medida de T_1 : sequência inversão-recuperação



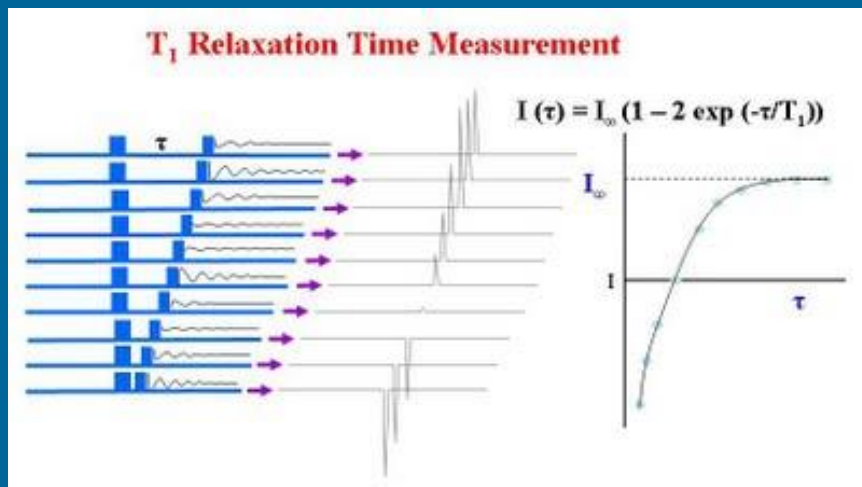
http://en.wikibooks.org/wiki/Basic_Physics_of_Nuclear_Medicine/MRI_&_Nuclear_Medicine

Medida de T_1 : sequência inversão-recuperação



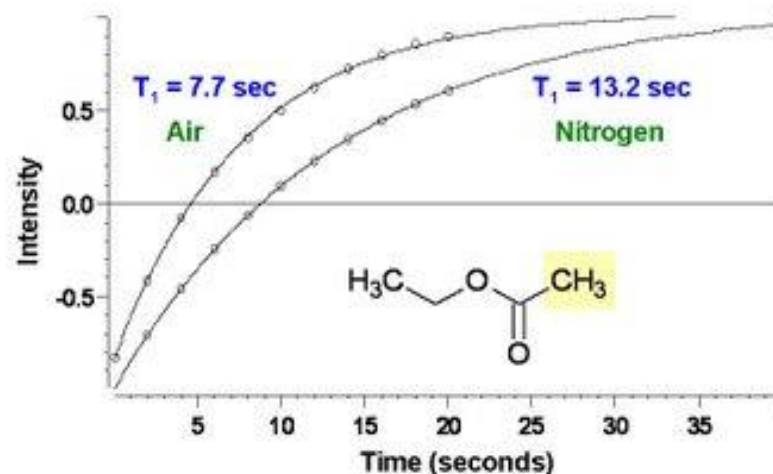
<https://qshare.queensu.ca/Users01/sauriolf/www/webcourse/list.htm>

Medida de T_1 : sequência inversão-recuperação



The Effect of Oxygen on T_1 Relaxation Times

^1H T_1 Measurement for the Acetate Methyl Protons of Ethyl Acetate in Acetone- d_6 - Samples in Air and Nitrogen



<http://u-of-o-nmr-facility.blogspot.com>

Bibliografia recomendada

➤ Fundamentos de RMN:

- “Spin dynamics”, M. H. Levitt. John Wiley & Sons, 2002.
- “Principles of magnetic resonance”, C. P. Slichter. Springer, 1996.
- “Nuclear magnetic resonance and relaxation”, B. Cowan. Cambridge University Press, 1997.
- “A complete introduction to modern NMR spectroscopy”, R. S. Macomber. John Wiley & Sons, 1998.
- “Ressonância magnética nuclear: fundamentos, métodos e aplicações”, V. M. S. Gil, C. F. G. C. Geraldes. Fundação Calouste Gulbekian, 1987.
- “Nuclear magnetic resonance for the people”, P. J. Grandinetti (notas de aula), disponível em <http://grandinetti.org/Teaching/Chem824/Notes>.
- “NMR Logging: Principles and Applications”, G. Coates, L. Xiao, M. G. Prammer, Halliburton Energy Services, 1999.