

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA E INFORMÁTICA

**DESCRIÇÃO ANALÍTICA DA MAGNETIZAÇÃO
INDUZIDA PELA METODOLOGIA GMAX**

João Teles de Carvalho Neto

Dissertação apresentada ao Instituto de Física de São Carlos, da Universidade de São Paulo, para a obtenção do título de Mestre em Ciências “Física Aplicada”.

Orientador: Prof. Dr. Alberto Tannús

São Carlos
2003

Dedico este trabalho aos meus pais, João e Sandra, pelo seu
imenso amor e por estarem sempre presentes.

AGRADECIMENTOS

Gostaria de agradecer inicialmente ao Prof. Dr. Alberto Tannús por ter possibilitado a realização desse trabalho. Através dos seus conselhos e de nossas discussões obtive o estímulo e a base necessária para chegar aos resultados dessa dissertação. Agradeço também à sua amizade e à paciência com que me ensinou importantes conceitos de ressonância magnética, bem como de física geral nos seus aspectos práticos e teóricos.

Ao Prof. Dr. Horácio Carlos Panepucci pela amizade, conselhos e orientações, ajudando a esclarecer o foco deste trabalho.

Ao Dr. Edson L. G. Vidoto pela ajuda principalmente na explicação dos aspectos instrumentais da ressonância magnética. Ao Dr. Mateus J. Martins e aos técnicos João G. da Silva, José Carlos Gazziro e Odir A. Canevarollo. À secretária Isabel A. P. de Oliveira. A todos agradeço pela amizade e pela maneira competente com que trabalham.

Ao Dr. Eduardo A. Ribeiro pelos conselhos sobre o trabalho. Aos professores Dr. Tito J. Bonagamba, Dr. José Fabian Schneider e Dr. José Pedro Donoso pelos ensinamentos passados através de aulas e seminários. Ao Prof. Dr. Rene Ayres Carvalho pela atenção em alguns momentos do trabalho. Aos demais professores, funcionários e alunos. A todos, os meus sinceros agradecimentos.

Ao Prof. Dr. Reginaldo de Jesus Napolitano pela qualidade de suas aulas e por sua amizade que me incentivaram no início do meu mestrado.

Ao amigo Carlos E. Garrido Salmon pela grande amizade, ajuda e conselhos. Agradeço também à sua esposa e minha amiga Fani Tabak pela amizade e companheirismo.

Aos amigos que estiveram mais diretamente ligados às minhas atividades no laboratório: Rogério F. Xavier, Dr. Bernd Foerster, Fernando F. Paiva, Alessandro A. de Castro Sá, Daniel Papoti e Ariane Fecteau-Lefebvre. Aos amigos do grupo: José Fernando de Lima, Rômulo F. Abreu, Fábio A. Bonk, Dr. Roberto Franco, Rodrigo V. Portugal, Lucian S. Bueno, Elka F. B. Ozelo, Jason A. Ismail, André L. B. Bathista,

Tadeu Lourenço e Leandro V. da Silva Lopes. A todos agradeço pela ajuda, amizade e companheirismo.

Ao amigo Valdinei Sczibor pelo companheirismo e pela força dada ao longo dos dois anos que transcorreram à realização do mestrado.

Ao amigo Norberto H. Pasqua pela amizade e pelas estimulantes conversas que iam desde matemática até psicologia.

Aos meus amigos de graduação Haroldo Brasil Fraga e Ismael Victor de L. Costa por serem praticamente meus irmãos.

A todos os amigos, começando com aqueles de minha cidade natal, passando pelos quatro cantos do Brasil, correndo as Américas e indo até o Velho Mundo. Obrigado por dividirem as alegrias e dificuldades, ajudando a aprimorar o meu modo de ser.

À minha querida avó Terezinha por ter me ajudado sempre e por ter estado sempre presente. Aos meus queridos avós Aniss e Theodolinda também pela sua ajuda, presença e orientação constantes. Aos meus estimados padrinhos Edson e Jane pela atenção, pela ajuda e pelos conselhos. A todos os meus tios e tias, primos e primas por serem tão amigos e tão especiais. Em especial agradeço à minha prima Carol pelo seu carinho, pelo seu companheirismo e por ter me ajudado com tanta paciência. A todos agradeço pelo amor e carinho.

Agradeço ao meu irmão Luis por ser o meu melhor amigo, a quem amo e admiro muito.

Por fim, àqueles que me tornaram a pessoa que sou. Toda a minha ciência e a minha moral são devidas aos meus pais João e Sandra, aos quais agradeço e amo com todo o coração.

Não poderia esquecer de agradecer à população brasileira que através de agências como CAPES, CNPq, FAPESP e todas as instituições de ensino público, investe arduamente no desenvolvimento de nosso país.

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	7
LISTA DE TABELAS	8
LISTA DE ABREVIATURAS	9
RESUMO	10
ABSTRACT	11
INTRODUÇÃO.	12
1 – PRINCÍPIOS BÁSICOS DE NMR.	16
1.1 – Teoria clássica da NMR.	16
1.1.a – O fenômeno de ressonância.	19
1.2 – Teoria quântica da NMR.	20
1.2.a – Equivalência entre as duas descrições.	23
1.3 – Equação de Bloch.	25
2 – PRINCÍPIOS BÁSICOS DE MRI.	30
2.1 – Componentes físicos.	30
2.1.a – Campo magnético principal.	30
2.1.b – Bobinas de RF de excitação e de recepção.	31
2.1.c – Bobinas de gradiente de campo.	34
2.1.d – Amostra de estudo.	36

2.1.e – Componentes adicionais.	36
2.2 – Formação de imagens.	39
2.3 – Seqüências de pulsos.	43
2.3.a – Pulsos de RF seletivos.	43
2.3.b – Metodologia SE-2DDFT.	44
3 – A METODOLOGIA GMAX.	48
3.1 – Pulsos adiabáticos.	48
3.1.a – Coeficiente de adiabaticidade.	49
3.1.b – Pulsos adiabáticos OIA e GOIA.	52
3.2 – Descrição de GMAX através do critério de adiabaticidade.	55
3.3 – Descrição analítica de GMAX.	58
4 – RESULTADOS DA DESCRIÇÃO ANALÍTICA DE GMAX.	63
4.1 – Solução geral.	63
4.1.a – Solução em $t = 0$.	67
4.2 – Soluções discretas.	72
4.2.a – Modulação espacial da amplitude do campo de RF.	77
4.3 – Tentativas de obter soluções em formas fechadas.	79
CONCLUSÕES.	83
REFERÊNCIAS.	85
APÊNDICE.	89

Lista de figuras

Figura 1	14
Figura 2	35
Figura 3	46
Figura 4	50
Figura 5	51
Figura 6	55
Figura 7	57
Figura 8	58
Figura 9	71
Figura 10	74
Figura 11	76
Figura 12	78
Figura 13	79
Figura 14	92
Figura 15	93
Figura 16	94
Figura 17	96
Figura 18	99
Figura 19	100
Figura 20	101
Figura 21	102

Lista de tabelas

Tabela 1	91
Tabela 2	94
Tabela 3	95
Tabela 4	96

Lista de abreviaturas

AFP – “Adiabatic Full Passage”

AHP – “Adiabatic Half Passage”

EDM – Equação diferencial do momento dipolar magnético

EPI – “Echo Planar Imaging”

FF – Forma fechada

FOCI – “Frequency Offset Corrected Inversion”

GMAX – “Gradient-Modulated Adiabatic Excitation”

GOIA – “Gradient-modulated Offset-Independent Adiabaticity”

GRE – “Gradient Recalled Echo”

HS – “Hyperbolic Secant”

MRI – “Magnetic Resonance Imaging”

NMR – “Nuclear Magnetic Resonance”

OIA – “Offset-Independent Adiabaticity”

PSF – “Point Spread Function”

RF – Radiofrequência

RG – Referencial girante

RL – Referencial do laboratório

SE-2DDFT – “Spin Echo Two Dimensional Direct Fourier Transform”

TE – Tempo ao eco

TF – Transformada de Fourier

TR – Tempo de repetição

Resumo

A metodologia GMAX, “Gradient-Modulated Adiabatic Excitation”, caracteriza-se pelo uso de pulsos adiabáticos para localização de volumes em espectroscopia e seleção de fatias em MRI. A sua utilidade surge do interessante perfil de inversão da magnetização transversal induzido ao longo da amostra. Entretanto, a interpretação desse comportamento tem sido dada apenas de forma qualitativa, através da utilização da condição de adiabaticidade como ponto de partida. Neste trabalho é apresentada uma descrição analítica partindo da solução em termos da função hipergeométrica para os pulsos sech e tanh . A partir desse procedimento encontramos um conjunto de resultados com os quais é possível inferir analiticamente o comportamento característico da magnetização, tendo como objetivo obter um maior controle da magnetização a partir dos parâmetros da metodologia que proporcionam interpretação física.

Abstract

The Gradient-Modulated Adiabatic Excitation (GMAX) methodology is characterized by the use of adiabatic pulses for volume localization in spectroscopy and slice selection in MRI. Its use derives from the interesting nodal point transverse magnetization profile induced throughout the sample. Nevertheless, the interpretation of such behavior for the magnetization has been of qualitative purpose only, using the adiabatic condition as a starting point. Here, we present an analytical description, starting from the solution in terms of the hypergeometric functions for sech and tanh pulses. From this procedure we found a set of results with which is possible to infer analytically the characteristic behavior of the magnetization. This is on the purpose of obtaining greater control of the magnetization from parameters of the methodology that carry physical interpretation.

Introdução.

Este trabalho surgiu de uma proposta do Prof. Dr. Alberto Tannús¹ de encontrar soluções analíticas para a magnetização induzida pela metodologia GMAX. O interesse nessa descrição surgiu do interessante perfil da magnetização transversal induzida por essa metodologia. A magnetização apresenta um ponto de inversão abrupto ao longo da posição, que por muitas vezes assemelha-se a uma descontinuidade. Com o objetivo de não só descrever a causa desse efeito, mas também quantificar a intensidade dessa inversão é que esse trabalho foi realizado. Ou seja, fomos motivados por interesses acadêmicos e práticos.

Na verdade, o problema se caracterizava em encontrar soluções que além de serem analíticas pudessem ser escritas em forma fechada, ou seja, em termos de uma combinação finita de funções elementares. Essa exigência deve-se ao fato de que em geral podemos ter soluções analíticas que, devido a sua complexidade matemática, não possuem uma forma previsível em função das suas variáveis. Assim, era importante que soluções matemáticas que possuíssem uma forma previsível fossem encontradas, de tal forma que fatores como qualidade da borda, “sharpness”, e homogeneidade da fatia ou do volume, “flatness”, pudessem ser definidos e quantificados. Como pode ser visto ao longo desse trabalho, acreditamos que esses objetivos foram alcançados.

Este trabalho é estruturado em capítulos, seções e subseções. Embora convenções matemáticas de uso comum tenham sido adotadas, é interessante salientar alguns pontos que podem gerar ambigüidades. As grandezas vetoriais são escritas em negrito sem itálico e as grandezas escalares são escritas em itálico e sem negrito. As derivadas temporais em alguns casos são representadas como pontos sobre as variáveis. Variáveis seguidas com aspa podem representar ou uma mudança de referencial de coordenadas ou uma derivada que não seja temporal, sendo que a distinção é feita ao longo do texto.

No capítulo 1 são expostos os princípios básicos do fenômeno de ressonância magnética nuclear. Os tópicos tratados nesse capítulo têm como objetivo principal expor

os conceitos necessários para o entendimento dos procedimentos usados nos capítulos 3 e 4. Sendo assim, objetivando uma maior concisão do texto, assuntos importantes que não estão ligados diretamente ao assunto desta dissertação são ignorados, referenciados, ou tratados com superficialidade. Esse procedimento também é adotado nos demais capítulos.

O capítulo 2, assim como o 1, é um capítulo introdutório. Nesse caso, os princípios básicos da aplicação da ressonância magnética para a construção de imagens são expostos brevemente. Vários elementos discutidos nesse capítulo são básicos para o entendimento da metodologia GMAX.

O capítulo 3 entra mais especificamente no tema central do trabalho, iniciando com uma breve discussão sobre pulsos adiabáticos e terminando com a formulação da equação diferencial que descreve a dinâmica da magnetização induzida por GMAX.

Finalmente, o quarto e último capítulo apresenta todos os resultados que puderam ser obtidos até o momento através da solução da equação diferencial estabelecida na última seção do capítulo 3.

Foi anexado ao final deste trabalho um apêndice contendo as medidas experimentais de campo realizadas no magneto de 2 Tesla do laboratório de imagens do grupo de ressonância magnética do IFSC-USP e no magneto de 0.5 Tesla situado na Santa Casa de Misericórdia de São Carlos. Essas medidas, juntamente com o procedimento de *shimming* ativo, descrito na subseção 2.1.e, embora não façam parte do tema central desta dissertação, constituíram atividades paralelas realizadas ao longo do mestrado.

Antes de começarmos com os princípios expostos no capítulo 1, façamos uma breve contextualização da metodologia GMAX, mostrando a sua utilidade e o seu funcionamento básico.

Uma metodologia em ressonância magnética nuclear é caracterizada, de um modo geral, por uma seqüência específica de campos eletromagnéticos e campos magnéticos estáticos que interagem com uma amostra de estudo. Dessa interação, são produzidos campos eletromagnéticos resultantes, dos quais é possível obter informações físicas sobre a amostra. A metodologia GMAX, em especial, é uma metodologia de localização espacial, ou seja, ela faz com que somente uma região pré-determinada da

amostra produza sinal. Esse efeito tem uma série de interesses práticos. Em espectroscopia “in vivo”, por exemplo, a seleção de volumes é interessante pois evita que sinais oriundos de substâncias fora da região de interesse sobreponham-se sobre o sinal que se quer analisar. Em imagens por ressonância magnética, o interesse por seleção de fatias é devido ao fato de que a construção de imagens bidimensionais é a forma mais prática de se obter uma avaliação espacial do objeto de estudo. Além disso, poupa-se tempo ao adquirir o sinal bidimensional de uma fatia ao invés de todo um volume. Esse é um fator importante, principalmente nas aplicações clínicas do método de imagens por ressonância magnética nuclear.

A seleção de fatias realizada pela metodologia GMAX é constituída de duas etapas. Esse processo está representado esquematicamente na Figura 1. Primeiramente é gerada uma magnetização na amostra que possui sinais opostos em torno de um plano de inversão. O sinal gerado por essa magnetização é armazenado. Em seguida, uma segunda magnetização é gerada sobre a mesma amostra, com sinal invertido em relação a magnetização anterior. Além disso, o plano de inversão é deslocado de uma certa quantidade. Somando-se os sinais armazenados da magnetização da primeira e da segunda etapa, vemos que somente a região da amostra contida entre os planos de inversão contribuirá com sinal, enquanto os sinais da região externa se anularão. Resultando, portanto, na seleção da fatia.

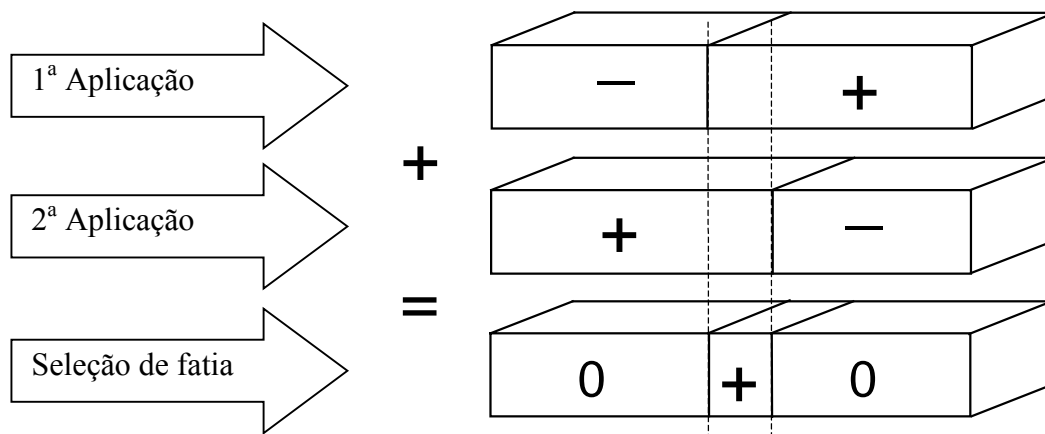


Figura 1. Representação esquemática do funcionamento da metodologia GMAX.

Outro aspecto importante da metodologia GMAX é que ela realiza localização espacial utilizando pulsos de radiofrequência chamados de pulsos adiabáticos. Esses pulsos, além de possuírem modulação de amplitude, também possuem uma modulação específica em frequência. O interesse mais prático dos pulsos adiabáticos está na sua insensibilidade à não-homogeneidade espacial da amplitude do pulso, para gerar excitações ou inversões da magnetização. Pulsos de radiofrequência espacialmente não-homogêneos são normalmente gerados por bobinas de superfície. Portanto, os pulsos adiabáticos são uma boa opção em situações onde se utilize esses tipos de bobinas.

1 – Princípios básicos de NMR.

Neste capítulo será exposta a teoria básica de Ressonância Magnética Nuclear, “Nuclear Magnetic Resonance (NMR)”, necessária para a compreensão do trabalho desenvolvido nessa dissertação. Portanto, muitos aspectos importantes dessa extensa área de pesquisa poderão ser omitidos ou discutidos com superficialidade.

Inicialmente será apresentada uma descrição clássica do fenômeno de NMR com o intuito principal de expor as propriedades básicas da dinâmica do momento dipolar magnético. Além disso será mostrado como se modifica a equação de evolução do momento magnético devido à rotação do sistema de coordenadas. Em seguida, uma descrição similar será dada utilizando o formalismo quântico, nesse caso tendo como objetivo estudar a evolução do momento magnético de spin nuclear de um núcleo com spin $\frac{1}{2}$. Em ambos os casos será descrita a evolução de um momento magnético livre, ou seja, sem as interações com outros possíveis momentos magnéticos. Essas interações, bem como os efeitos de agitação térmica que dão origem aos tempos de relaxação T_1 e T_2 , serão brevemente discutidos na última seção desse capítulo.

1.1 – Teoria clássica da NMR.

O fenômeno físico que pretendemos tratar é a evolução do momento dipolar magnético de uma partícula (dipolo magnético) sob a ação de um campo magnético externo. Em especial, iremos considerar que o momento dipolar magnético é proporcional ao momento angular da partícula. De fato é possível mostrar que esse sempre será o caso para um sistema de partículas carregadas eletricamente². Portanto:

$$[1.1] \quad \boldsymbol{\mu} = \gamma \mathbf{L}$$

Em que $\boldsymbol{\mu}$, \mathbf{L} e γ são o momento dipolar magnético, quantidade de movimento angular ou momento angular e constante giromagnética, respectivamente.

Também é possível mostrar³ que a ação de um campo magnético \mathbf{B} sobre uma partícula com momento magnético $\boldsymbol{\mu}$ produz um torque \mathbf{N} :

$$[1.2] \quad \mathbf{N} = \boldsymbol{\mu} \times \mathbf{B}$$

Portanto, do teorema do momento angular, $d\mathbf{L}/dt = \mathbf{N}$, temos:

$$[1.3] \quad \frac{d\boldsymbol{\mu}}{dt} = \boldsymbol{\mu} \times \gamma \mathbf{B}$$

A equação [1.3], que batizaremos de equação diferencial do momento (EDM), descreve portanto a dinâmica do momento dipolar magnético de uma partícula livre exposta a um campo magnético \mathbf{B} , sendo que \mathbf{B} pode variar no tempo.

O primeiro resultado interessante que podemos extrair de [1.3] é a conservação do módulo de $\boldsymbol{\mu}$, pois:

$$[1.4] \quad \frac{d}{dt} |\boldsymbol{\mu}|^2 = 2\boldsymbol{\mu} \cdot \frac{d\boldsymbol{\mu}}{dt} = 2\boldsymbol{\mu} \cdot (\boldsymbol{\mu} \times \gamma \mathbf{B}) = 0$$

Para o caso de um campo magnético variável no tempo mas com direção constante, o ângulo entre $\boldsymbol{\mu}$ e \mathbf{B} também conserva, pois:

$$[1.5] \quad \mathbf{B}(t) = B(t) \hat{\mathbf{k}}$$

$$[1.6] \quad \frac{d}{dt} (\hat{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\mu}) = \hat{\mathbf{k}} \cdot \frac{d\boldsymbol{\mu}}{dt} = \hat{\mathbf{k}} \cdot [\boldsymbol{\mu} \times \gamma B(t) \hat{\mathbf{k}}] = 0$$

Em que $\hat{\mathbf{k}}$ é um versor cuja direção é constante no tempo.

A taxa de variação temporal de um vetor genérico \mathbf{V} pode ser escrita como:

$$[1.7] \quad \frac{d\mathbf{V}}{dt} = \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{V}$$

Em que $\boldsymbol{\Omega}$ é a velocidade angular ou frequência instantânea de \mathbf{V} . Assim, comparando [1.3] com [1.7] vemos que a frequência instantânea de $\boldsymbol{\mu}$ é:

$$[1.8] \quad \boldsymbol{\Omega} = -\gamma \mathbf{B}$$

Conseqüentemente, para o caso em que \mathbf{B} é totalmente estático, $\mathbf{B} = B_0 \hat{\mathbf{k}}$, a componente de $\boldsymbol{\mu}$ perpendicular a $\hat{\mathbf{k}}$ possui módulo constante e roda com velocidade angular constante $\omega_0 = -\gamma B_0$ em torno de \mathbf{B} . Essa frequência de precessão ω_0 é conhecida como *freqüência de Larmor*.

Agora vejamos como a equação [1.3] se transforma sob a mudança para um referencial de coordenadas girantes cuja origem coincide com o referencial estacionário. Sejam $\hat{\mathbf{i}}, \hat{\mathbf{j}}$ e $\hat{\mathbf{k}}$ os versores cartesianos do referencial inercial do laboratório (RL), e sejam $\hat{\mathbf{i}}', \hat{\mathbf{j}}'$ e $\hat{\mathbf{k}}'$ os versores cartesianos do referencial girante (RG) *. Além disso, designemos por $\boldsymbol{\Omega}$ a frequência de rotação do RG em relação ao RL.

Representemos o vetor $\boldsymbol{\mu}$ nas coordenadas do RG:

$$[1.9] \quad \boldsymbol{\mu} = \mu_x \hat{\mathbf{i}}' + \mu_y \hat{\mathbf{j}}' + \mu_z \hat{\mathbf{k}}'$$

Derivando [1.9] temos:

* Neste capítulo será adotada a convenção de que todas as variáveis seguidas por linha se referem ao referencial girante. Além disso, todo RG possuirá o versor \mathbf{k}' coincidente ao versor \mathbf{k} do RL.

$$\begin{aligned}
\frac{d\boldsymbol{\mu}}{dt} &= \frac{d\mu_x'}{dt} \hat{\mathbf{i}}' + \frac{d\mu_y'}{dt} \hat{\mathbf{j}}' + \frac{d\mu_z'}{dt} \hat{\mathbf{k}}' + \mu_x' \frac{d\hat{\mathbf{i}}'}{dt} + \mu_y' \frac{d\hat{\mathbf{j}}'}{dt} + \mu_z' \frac{d\hat{\mathbf{k}}'}{dt} \\
[1.10] \quad \frac{d\boldsymbol{\mu}}{dt} &= \frac{d\mu_x'}{dt} \hat{\mathbf{i}}' + \frac{d\mu_y'}{dt} \hat{\mathbf{j}}' + \frac{d\mu_z'}{dt} \hat{\mathbf{k}}' + \boldsymbol{\Omega} \times (\mu_x' \hat{\mathbf{i}}' + \mu_y' \hat{\mathbf{j}}' + \mu_z' \hat{\mathbf{k}}') \\
\left(\frac{d\boldsymbol{\mu}}{dt} \right)_{RL} &= \left(\frac{d\boldsymbol{\mu}}{dt} \right)_{RG} + \boldsymbol{\Omega} \times \boldsymbol{\mu}
\end{aligned}$$

Em que utilizou-se a equação [1.7] para expressar as derivadas dos versores.

Aplicando [1.10] em [1.3] temos a EDM que descreve a dinâmica do dipolo no RG:

$$[1.11] \quad \left(\frac{d\boldsymbol{\mu}}{dt} \right)_{RG} = \boldsymbol{\mu} \times (\gamma \mathbf{B} + \boldsymbol{\Omega})$$

A equação [1.11] nos diz que a dinâmica no RG é a mesma que do RL a menos da adição de um campo magnético $\boldsymbol{\Omega}/\gamma$. Veremos que essa mudança de referencial facilitará a descrição e a solução da equação diferencial do dipolo.

1.1.a – O fenômeno de ressonância.

Consideremos o seguinte campo magnético no RL:

$$[1.12] \quad \mathbf{B}(\mathbf{t}) = B_1 \hat{\mathbf{u}} + B_0 \hat{\mathbf{k}}$$

Em que $\hat{\mathbf{u}} = \cos(\omega t) \hat{\mathbf{i}} + \sin(\omega t) \hat{\mathbf{j}}$. B_1 , B_0 e ω são constantes no tempo. A EDM em um RG com frequência $\boldsymbol{\Omega} = \omega \hat{\mathbf{k}}$ e com $\hat{\mathbf{i}}'$ coincidente com $\hat{\mathbf{u}}$, será:

$$[1.13] \quad \left(\frac{d\boldsymbol{\mu}}{dt} \right)_{RG} = \boldsymbol{\mu} \times [\gamma B_1 \hat{\mathbf{i}}' + (\gamma B_0 + \omega) \hat{\mathbf{k}}']$$

Note que o campo magnético na equação [1.13] agora é estático, o que nos permite descrever a evolução de μ de maneira idêntica à que foi feita anteriormente. Em especial, se $\omega = -\gamma B_0$ a equação [1.13] descreverá a rotação do dipolo em torno somente da direção transversal $\hat{\mathbf{i}}'$. Assim, a situação em que a frequência do campo transversal, $B_1 \hat{\mathbf{u}}$, é igual à frequência de Larmor caracteriza a condição de ressonância. Nessa condição, se considerarmos o vetor μ inicialmente na direção $\hat{\mathbf{k}}$ positivo, o mesmo girará de um ângulo $\theta = \gamma B_1 T$ em relação a $\hat{\mathbf{k}}$, sendo que T é o tempo de aplicação do pulso $B_1 \hat{\mathbf{u}}$. Para T tal que $\theta = \pi/2$ o pulso é chamado de *pulso de excitação* ou *pulso $\pi/2$* e para T tal que $\theta = \pi$ o pulso é chamado de *pulso de inversão* ou *pulso π* . Será mostrado mais adiante, na subseção 2.3.b, que um pulso que promova a rotação $\theta = \pi$ em torno de uma direção transversal poderá ser chamado de *pulso de refocalização*.

1.2 – Teoria quântica da NMR.

Nesta seção trataremos da dinâmica do momento magnético de um núcleo atômico com spin $1/2$. A importância desse estudo reside no fato de que os momentos magnéticos de spin nucleares são a base do fenômeno de NMR. Além disso, veremos na seção 3.3 que a EDM que surge devido à metodologia GMAX pode ser resolvida em termos de variáveis que correspondem às amplitudes dos auto-estados dos spins nucleares.

Os núcleos de determinados átomos, tais como ^1H , ^{13}C , ^{31}P entre outros apresentam a propriedade de possuírem um momento angular intrínseco, conhecido como momento angular de spin nuclear. Ao momento angular de spin está associado um momento magnético proporcional ao mesmo. A relação entre os dois momentos é a mesma da equação [1.1], sendo que cada núcleo possui um valor específico para a constante giromagnética γ . É interessante salientar que o valor de γ não é o mesmo que

esperaríamos através da teoria clássica do eletromagnetismo², sendo que o valor correto surge de um tratamento quântico relativístico.

A componente do vetor momento angular, \mathbf{L} , de um núcleo de spin $\frac{1}{2}$ ao longo de uma direção arbitrária, \mathbf{L}_z , pode fornecer em uma medida somente os valores $+\frac{1}{2}\hbar$ e $-\frac{1}{2}\hbar$. Conseqüentemente, esses são os autovalores associados aos dois auto-vetores, que chamaremos $|+\rangle$ e $|-\rangle$, respectivamente, do operador S_z associado a \mathbf{L}_z , os quais formam uma base no espaço do momento angular. Portanto, podemos representar o estado genérico $|\psi\rangle$ do núcleo nessa base, de modo que:

$$[1.14] \quad |\psi(t)\rangle = u(t)|+\rangle + v(t)|-\rangle$$

Para determinar $|\psi\rangle$, e conseqüentemente as grandezas que nos interessam como a energia e o momento magnético, é necessário determinar as amplitudes $u(t)$ e $v(t)$. Os desenvolvimentos que seguem dentro dessa seção terão esse objetivo.

A dinâmica de $|\psi\rangle$ é descrita pela equação de Schrödinger:

$$[1.15] \quad i\hbar \frac{d}{dt}|\psi\rangle = H(t)|\psi\rangle$$

Sendo que $H(t)$ é o operador hamiltoniano. Consideraremos que a energia do sistema é dada somente pela energia potencial da interação com o campo, e que é igual a³:

$$[1.16] \quad U(t) = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}(t)$$

Assim, o operador H é dado por:

$$[1.17] \quad H(t) = -\gamma \mathbf{S} \cdot \mathbf{B}(t) = -\gamma \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}(t)$$

\mathbf{S} é o operador momento angular e $\boldsymbol{\sigma}$ é o operador adimensional definido por $\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}$. Representando $\boldsymbol{\sigma}$ na base dos auto-vetores de S_z , as suas componentes são as matrizes de Pauli:

$$[1.18] \quad \boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \hat{\mathbf{i}} + \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \hat{\mathbf{j}} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \hat{\mathbf{k}}$$

Para o caso em que \mathbf{B} possui direção z , o operador H comuta com o operador S_z e conseqüentemente $|+\rangle$ e $|-\rangle$ também são auto-vetores de H , os quais para o caso de um campo estático B_0 resultam nos respectivos autovalores $+\hbar\omega_0/2$ e $-\hbar\omega_0/2$.

Agora, como estamos interessados em descrever o fenômeno de ressonância, vamos aplicar o mesmo campo da equação [1.12] na equação [1.17]. Logo:

$$[1.19] \quad H(t) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 & \omega_1 e^{-i\omega t} \\ \omega_1 e^{i\omega t} & -\omega_0 \end{pmatrix}$$

Sendo que $\omega_1 = -\gamma B_1$. Fazemos uma mudança de referencial para o mesmo RG da seção 1.1.a. Pode-se mostrar⁴ que $|\psi\rangle$ representado em um referencial rotado de um ângulo θ em torno do eixo z positivo corresponde a:

$$[1.20] \quad |\psi'\rangle = R(t)|\psi\rangle$$

$$[1.21] \quad R(t) = e^{i\theta(t)S_z/\hbar}$$

No caso do RG escolhido, $\theta = \omega t$. Assim, as componentes de $|\psi\rangle$ expressas em função de $|\psi'\rangle$ são:

$$[1.22] \quad \begin{aligned} u &= u' e^{-i\omega t/2} \\ v &= v' e^{i\omega t/2} \end{aligned}$$

Substituindo [1.22] em [1.15] e isolando $|\psi'\rangle$ temos a nova equação de Schrödinger no RG:

$$[1.23] \quad i\hbar \frac{d}{dt} |\psi'\rangle = H' |\psi'\rangle$$

$$[1.24] \quad H' = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 - \omega & \omega_1 \\ \omega_1 & \omega - \omega_0 \end{pmatrix}$$

Dessa forma, no RG, H' é independente do tempo. Escrevendo [1.23] em termos das componentes u' e v' :

$$[1.25] \quad \begin{aligned} i \frac{du'}{dt} &= \frac{(\omega_0 - \omega)}{2} u' + \frac{\omega_1}{2} v' \\ i \frac{dv'}{dt} &= \frac{\omega_1}{2} u' + \frac{(\omega - \omega_0)}{2} v' \end{aligned}$$

A solução do sistema [1.25] na ressonância, $\omega = \omega_0$, em termos dos valores iniciais em $t = 0$, u_0' e v_0' , é:

$$[1.26] \quad \begin{aligned} u'(t) &= u_0' \cos\left(\frac{\omega_1 t}{2}\right) - i v_0' \operatorname{sen}\left(\frac{\omega_1 t}{2}\right) \\ v'(t) &= v_0' \cos\left(\frac{\omega_1 t}{2}\right) - i u_0' \operatorname{sen}\left(\frac{\omega_1 t}{2}\right) \end{aligned}$$

1.2.a – Equivalência entre as duas descrições.

O vetor de estado dado por [1.26] descreve o estado de um único núcleo, o qual nos possibilita calcular apenas a probabilidade de encontrar a componente de μ em uma direção arbitrária em um dos dois autovalores: $+\frac{1}{2} \gamma \hbar$ ou $-\frac{1}{2} \gamma \hbar$. No entanto, nos

experimentos realizados em NMR, as medidas são feitas normalmente sobre quantidades de matéria que contêm uma quantidade de núcleos da ordem do número de Avogadro. Portanto, o valor médio de $\boldsymbol{\mu}$ sobre um elemento de matéria é efetivamente o valor medido no laboratório. A esse valor médio damos o nome de *magnetização*, a qual representaremos pelo vetor \mathbf{M} . Calculemos então o valor de \mathbf{M}^* :

$$[1.27] \quad \mathbf{M} = \langle \boldsymbol{\mu} \rangle = \langle \psi | \boldsymbol{\mu} | \psi \rangle$$

Calculando para cada componente:

$$[1.28] \quad \begin{aligned} M_x &= \frac{\gamma \hbar}{2} (uv^* + u^*v) \\ M_y &= i \frac{\gamma \hbar}{2} (uv^* - u^*v) \\ M_z &= \frac{\gamma \hbar}{2} (uu^* - vv^*) \end{aligned}$$

O símbolo $\langle \rangle$ significa o valor médio. A dedução da expressão [1.27] é simples e pode ser encontrada por exemplo em Cohen-Tannoudji⁵.

Substituindo [1.26] em [1.28] encontramos:

$$[1.29] \quad \begin{aligned} M_x'(t) &= M_{x0}' \\ M_y'(t) &= M_{y0}' \cos(\omega_1 t) - M_{z0}' \sin(\omega_1 t) \\ M_z'(t) &= M_{z0}' \cos(\omega_1 t) + M_{y0}' \sin(\omega_1 t) \end{aligned}$$

Vemos que o vetor \mathbf{M} dado por [1.29] também é solução da equação [1.13], que descreve a evolução do vetor momento magnético clássico $\boldsymbol{\mu}$.

* Na verdade a magnetização será igual ao valor médio de $\boldsymbol{\mu}$ multiplicado pelo número N de núcleos sobre os quais está se tirando a média. No entanto, omitiremos N , pois consideraremos a densidade de núcleos constante, e um fator de proporcionalidade não altera as discussões que seguem.

De fato, utilizando-se a equação que descreve a evolução do valor médio de um operador genérico A ⁶:

$$[1.30] \quad \frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H] \rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle$$

Pode-se mostrar que \mathbf{M} definido por [1.27] e inserido em [1.30] resulta em:

$$[1.31] \quad \frac{d\mathbf{M}}{dt} = \mathbf{M} \times \gamma \mathbf{B}$$

Que é exatamente a equação diferencial do momento [1.3].

1.3 – Equação de Bloch.

Nas seções 1.1 e 1.2 tratamos da evolução do dipolo magnético livre. No entanto, os momentos magnéticos nucleares contidos em um agregado de matéria estão sujeitos à agitação térmica e à flutuação do campo magnético local devido aos momentos vizinhos, fazendo com que a magnetização total de um agregado de matéria sofra alterações em sua dinâmica, além daquela determinada pelo campo externo B_0 . Assim, é necessário fazer uma correção à equação [1.3] de forma a dar conta desses efeitos.

Em 1946 F. Bloch⁷ propôs o seguinte modelo fenomenológico para a dinâmica da magnetização:

$$[1.32] \quad \frac{d\mathbf{M}(t)}{dt} = \mathbf{M}(t) \times \gamma \mathbf{B}(t) - \frac{M_x(t)\hat{\mathbf{i}} + M_y(t)\hat{\mathbf{j}}}{T_2} + \frac{M_0 - M_z(t)}{T_1} \hat{\mathbf{k}}$$

M_0 é o módulo da magnetização de equilíbrio e T_1 e T_2 são chamados de *tempo de relaxação longitudinal* e *transversal*, respectivamente.

Vamos resolver a equação [1.32] para o caso de um campo estático, $\mathbf{B} = B_0 \hat{\mathbf{k}}$, com a condição inicial $\mathbf{M}(t=0) = M_0 \hat{\mathbf{i}}$ no referencial girante com a frequência de Larmor. Essa condição inicial pode ser obtida aplicando-se um pulso de excitação sobre uma magnetização de equilíbrio $\mathbf{M} = M_0 \hat{\mathbf{k}}$. Podemos considerar o período T desse pulso como sendo bem menor que T_1 e T_2 de tal forma que a equação [1.32] se reduza à equação [1.31] e a evolução se dê da maneira descrita na seção 1.1.a. A solução é então:

$$\begin{aligned}
 M_x'(t) &= M_0 e^{-\frac{t}{T_2}} \\
 M_y'(t) &= M_0 e^{-\frac{t}{T_2}} \\
 M_z'(t) &= M_0 \left(1 - e^{-\frac{t}{T_1}} \right)
 \end{aligned}
 \tag{1.33}$$

Vemos que a magnetização transversal decresce exponencialmente com um tempo característico T_2 e a magnetização longitudinal retorna ao valor de equilíbrio também exponencialmente, mas com um tempo característico T_1 .

Assim, se esperarmos um tempo t longo o suficiente, $t \gg T_1$ e T_2 , na ausência de campo externo variável, a magnetização retornará ao valor de equilíbrio, $\mathbf{M} = M_0 \hat{\mathbf{k}}$. Esse é um efeito que pode ser compreendido através dos processos estatísticos associados aos muitos graus de liberdade contidos em um agregado de matéria. No que segue vamos descrever esse efeito.

Da mecânica estatística sabemos que um sistema em equilíbrio termodinâmico possui a probabilidade $P(E) = Z^{-1} e^{-\frac{E}{kT}}$ de ter a sua energia, por grau de liberdade, compreendida entre E e $E + dE$. Z é a função partição dada por $Z = \int e^{-\frac{E}{kT}} dE$, T é a temperatura do sistema e k é a constante de Boltzmann. Para o caso do spin $\frac{1}{2}$ submetido ao campo estático $B_0 \hat{\mathbf{k}}$, temos apenas dois níveis de energia discretos. Portanto, haverão

as probabilidades $Z^{-1}e^{-\hbar\omega_0/2kT}$ e $Z^{-1}e^{+\hbar\omega_0/2kT}$ do núcleo estar nos estados $|+\rangle$ e $|-\rangle$ respectivamente. $Z = e^{-\hbar\omega_0/2kT} + e^{+\hbar\omega_0/2kT}$.

Para descrever um sistema quântico que possui probabilidades clássicas de estar em um determinado estado, ao qual chamamos *mistura estatística*, utilizamos o operador densidade ρ , cuja descrição pormenorizada pode ser encontrada em Cohen-Tannoudji⁸ e Slichter⁹. Os elementos de matriz do operador ρ são dados por:

$$[1.34] \quad \rho_{np} = \sum_k P_k (c_n^k)(c_p^k)^*$$

Sendo que:

$$[1.35] \quad c_n^k = \langle u_n | \psi_k \rangle$$

P_k é a probabilidade clássica de ter o estado ψ_k , e u_n são os auto-vetores da base escolhida para expandir os estados ψ_k . No caso em que estamos estudando, encontramos o seguinte ρ na base de S_z :

$$[1.36] \quad \rho = Z^{-1} \begin{pmatrix} e^{-\hbar\omega_0/2kT} & 0 \\ 0 & e^{+\hbar\omega_0/2kT} \end{pmatrix}$$

O valor médio de um operador genérico A pode ser obtido de ρ a partir do traço da matriz ρA . Portanto, a magnetização será dada por:

$$[1.37] \quad \begin{aligned} M_x &= \gamma \overline{S_x} = \gamma \text{Tr}(\rho S_x) = 0 \\ M_y &= \gamma \overline{S_y} = \gamma \text{Tr}(\rho S_y) = 0 \\ M_z &= \gamma \overline{S_z} = \gamma \text{Tr}(\rho S_z) = -\frac{\gamma \hbar}{2} \tanh\left(\frac{\hbar\omega_0}{2kT}\right) \end{aligned}$$

Para os casos em que $T/|B_0| \gg \gamma \hbar / k$ o módulo do argumento da tanh é bem menor que 1 e encontramos a magnetização de equilíbrio igual a:

$$[1.38] \quad \mathbf{M}_0 = \frac{1}{kT} \left(\frac{\gamma \hbar}{2} \right)^2 B_0 \hat{\mathbf{k}}$$

Vimos então como se obtém a magnetização de equilíbrio. Para descrever a dinâmica do processo de relaxação, e assim explicar as relações embutidas na equação de Bloch, é necessário um desenvolvimento mais elaborado que não iremos tratar aqui, mas que pode ser encontrado em Slichter⁹ e Abragam¹⁰.

O que pode ser explicado de maneira qualitativa e não rigorosa é que em geral T_1 é maior que T_2 . Para facilitar essa análise vamos considerar separadamente a evolução, sob [1.3], das componentes longitudinal e transversal da magnetização em relação à direção do campo estático.

De [1.16] vemos que a alteração da componente longitudinal M_z implica na alteração da energia dos núcleos. Essa energia é trocada, na forma de agitação térmica, com o reservatório formado pela rede dos núcleos vizinhos, de tal forma que o valor de equilíbrio é alcançado de acordo com o resultado [1.38]. Ou seja, a relaxação de M_z depende da capacidade da rede em absorver energia.

A componente transversal M_T além de sofrer alteração devido à relaxação da componente longitudinal, pois o módulo de \mathbf{M} local é constante, sofre também uma diminuição extra do seu valor devido ao efeito de defasagem provocada pelas flutuações do campo magnético dos núcleos vizinhos. Portanto, a grosso modo, essa é a causa do tempo T_2 ser menor que T_1 .

Devido aos processos explicados acima, as relaxações longitudinal e transversal são também chamadas de relaxação spin-rede e relaxação spin-spin, respectivamente.

Outra maneira de explicar a diferença entre os tempos T_1 e T_2 é também dividir as flutuações do campo nas componentes transversal e longitudinal, $\Delta \mathbf{B}_T$ e $\Delta \mathbf{B}_z$. As variações dessas duas componentes influenciam na relaxação T_2 enquanto apenas $\Delta \mathbf{B}_T$ influencia na relaxação T_1 . Isso porque uma variação de $\Delta \mathbf{B}_z$ não causa variação da magnetização longitudinal, conforme é mostrado em [1.6]. Entretanto, a componente transversal da magnetização local irá se defasar em relação aos vizinhos justamente por estarem “sentindo” componentes longitudinais diferentes. Já $\Delta \mathbf{B}_T$ irá propiciar alterações

em ambas as componentes da magnetização, isso quando possuir frequências próximas à de Larmor.

2 – Princípios básicos de MRI.

Como a metodologia GMAX foi desenvolvida inicialmente como sendo uma técnica de seleção de fatias para MRI, iremos neste capítulo expor os princípios que compõe esse importante ramo da NMR.

A técnica de Imagens por Ressonância Magnética Nuclear, “Magnetic Resonance Imaging (MRI)”, propõe-se a fazer imagens de grandezas físicas tais como densidade de núcleos e tempos de relaxação de objetos extensos. Uma exposição geral do assunto pode ser encontrada em ¹¹⁻¹³. Livros dedicados exclusivamente à técnica de MRI também podem ser consultados¹⁴⁻¹⁶.

Inicialmente, na seção 2.1, são apresentados os componentes físicos utilizados pela técnica de MRI. Na seção seguinte é mostrado como o formalismo da transformada de Fourier nos permite fazer imagens da amostra a ser estudada. E na última seção são apresentadas algumas das inúmeras seqüências de pulsos utilizadas em MRI.

2.1 – Componentes físicos.

Nesta seção o sistema físico que compõe um sistema de MRI será dividido em quatro constituintes principais. Essa escolha é um tanto arbitrária, sendo feita apenas para facilitar a descrição.

2.1.a – Campo magnético principal.

O campo manético principal é o principal elemento, tanto em MRI como em espectroscopia por NMR. Ele é responsável por gerar uma magnetização não nula na

amostra. Procura-se fazer com que esse campo possua direção e módulo constantes no espaço e no tempo, por isso sendo chamado também de *campo estático*. Convenciona-se tomar a direção positiva desse campo como sendo a direção \mathbf{z} , e a representar o seu módulo por B_0 .

Conforme podemos ver pela equação [1.38], a magnetização resultante é proporcional ao valor do campo e inversamente proporcional à temperatura. Como em geral a técnica de MRI é aplicada em organismos vivos, a temperatura não pode ser reduzida muito abaixo da temperatura ambiente, ou seja, da ordem de dezenas de Kelvin. Portanto, o que se faz para obter a maior magnetização possível é aplicar um alto campo magnético. Atualmente em MRI são utilizados campos estáticos a partir de 0.01 T até 8 T, aproximadamente. Os valores mais baixos normalmente podem ser produzidos por magnetos resistivos, ou seja, magnetos que utilizam fios de materiais condutores operando em temperatura ambiente. Para os campos mais altos é necessária a utilização de magnetos supercondutores.

2.1.b – Bobinas de RF de excitação e de recepção.

A *bobina de excitação* é responsável por produzir rotações da magnetização de equilíbrio, ou seja, ela fornece energia para o sistema. Essa é uma bobina que em geral produz um campo magnético oscilante ao longo de uma direção fixa. Essa direção é perpendicular à direção do campo principal. Na seção 2.3 serão discutidos os tipos de pulsos que podem ser produzidos pelas bobinas de excitação. Em geral essa bobina é construída de forma a gerar um campo homogêneo ao longo do volume de interesse. Normalmente convenciona-se chamar de B_1 os campos produzidos por essas bobinas, que é o mesmo B_1 utilizado no capítulo 1.

A *bobina de recepção*, também chamada de bobina de *detecção*, é utilizada para captar o sinal produzido pela magnetização da amostra. O sinal medido é a força eletromotriz induzida na bobina através da variação do fluxo do campo magnético gerado pela precessão da magnetização da amostra.

Tanto o sinal enviado à bobina de excitação quanto o sinal medido pela bobina de recepção são sinais elétricos. Vejamos como um sinal elétrico pode ser induzido pela magnetização em uma bobina de recepção. Da equação de Maxwell que relaciona o rotacional do campo elétrico \mathbf{E} com a derivada temporal do campo magnético \mathbf{B} temos:

$$[2.1] \quad \begin{aligned} \varepsilon &= \oint_C \mathbf{E} \cdot d\mathbf{l} = -\frac{\partial \Phi}{\partial t} \\ \Phi &= \iint_S \mathbf{B} \cdot d\mathbf{s} \end{aligned}$$

Em que ε é a força eletromotriz induzida sobre um circuito fechado C . S é uma superfície aberta qualquer cuja fronteira é C . O vetor $d\mathbf{s}$ possui módulo igual ao elemento de área de S e direção normal a S e Φ é chamado de fluxo de \mathbf{B} por S .

O campo distante produzido por um dipolo magnético $\boldsymbol{\mu}$, em unidades gaussianas, é dado por¹⁷:

$$[2.2] \quad \mathbf{B}(r, \theta) = 2\mu \frac{\cos \theta}{r^3} \hat{\mathbf{n}} + \mu \frac{\sin \theta}{r^3} \hat{\boldsymbol{\theta}}$$

Em que $\mathbf{r} = r\hat{\mathbf{n}}$ é o vetor que liga a origem de $\boldsymbol{\mu}$ ao ponto de observação e θ é o ângulo que \mathbf{r} faz com $\boldsymbol{\mu}$. Vamos escolher $\boldsymbol{\mu}$ como sendo a componente x da magnetização transversal \mathbf{M}_T , ou seja $\mu = M_x = M_T \cos \varphi$.

Substituindo [2.2] em [2.1] e escolhendo S como sendo a superfície de uma semi-esfera centrada no dipolo e com a sua fronteira C coincidente ao circuito da bobina de raio a , temos:

$$[2.3] \quad \varepsilon = -\frac{2\pi}{a} \frac{\partial \mu}{\partial t}$$

Sendo que escolhemos o plano da bobina como sendo perpendicular a $\boldsymbol{\mu}$. Desenvolvendo [2.3]:

$$[2.4] \quad \varepsilon = -\frac{2\pi}{a} \left(\cos \varphi \frac{dM_T}{dt} - M_T \sin \varphi \frac{d\varphi}{dt} \right)$$

Em geral $\omega(t) \gg dM_T/dt$, pois $\omega(t)$ é da ordem da frequência de Larmor e dM/dt é da ordem de $1/T_2^*$, sendo que $\omega(t) = d\varphi/dt$. Além disso, as possíveis variações de $\omega(t)$, que ocorrem com campos de RF de frequência modulada (ver seção 3.1), são bem menores que o valor médio de $\omega(t)$, portanto:

$$[2.5] \quad \varepsilon \propto M_T \sin \varphi$$

É fácil mostrar que as componentes de \mathbf{M} paralelas ao plano da bobina não contribuem com sinal. Analogamente, para uma bobina perpendicular à componente M_y , a força eletromotriz induzida será $\varepsilon \propto M_T \cos \varphi$. Vemos então que a força eletromotriz induzida em uma bobina de seção circular com uma amostra colocada em seu centro será proporcional à componente da magnetização da amostra perpendicular ao plano da bobina.

É possível utilizar apenas uma bobina ao invés de duas perpendiculares entre si para se fazer a detecção da magnetização transversal \mathbf{M}_T . Utilizando-se duas bobinas temos uma determinação completa de \mathbf{M}_T através das medidas de M_x e M_y . Com apenas uma bobina, em princípio para um vetor genérico de \mathbf{M}_T , não podemos tirar nenhuma informação além do valor da componente sendo detectada. No entanto, para os campos utilizados em NMR e MRI o vetor \mathbf{M} possui um período T de rotação no plano xy tal que o módulo de \mathbf{M} varia desprezivelmente nesse período. Dessa forma, podemos extrair $|\mathbf{M}_T|$ e $|\varphi|$ com apenas uma bobina, ou seja, só ficamos com a indeterminação do sinal de φ . O desenvolvimento a seguir ilustra essa argumentação:

* Para o próton em um campo de 1T, $\omega_0 \cong 2.675 \times 10^8$ Hz. Para o próton do hidrogênio no tecido muscular, $1/T_2 \cong 20$ Hz.

$$\begin{aligned}
|\mathbf{M}_T(t)| &\approx |\mathbf{M}_T(t - T/4)| \\
M_x(t) &= |\mathbf{M}_T(t)| \cos(\omega t) \\
[2.6] \quad M_x(t - T/4) &= |\mathbf{M}_T(t - T/4)| \cos(\omega t - \omega T/4) = |\mathbf{M}_T(t)| \sin(\omega t) \\
\therefore |\mathbf{M}_T(t)| &= \sqrt{M_x(t)^2 + M_x(t - T/4)^2} \\
\varphi(t) &= \pm \arccos\left(\frac{M_x(t)}{|\mathbf{M}_T(t)|}\right)
\end{aligned}$$

À configuração de duas bobinas dispostas perpendicularmente entre si dá-se o nome de *bobinas em quadratura*, e a principal vantagem dessa configuração em relação à de uma única bobina é o maior ganho de sinal.

2.1.c – Bobinas de gradiente de campo.

Veremos na seção 2.2 que é interessante termos uma variação linear do módulo do campo magnético principal ao longo das três direções espaciais. Isso porque, conforme a relação [1.8], a frequência de Larmor da magnetização ao longo da amostra será uma função linear da posição, produzindo com isso uma discriminação espacial do sinal gerado. É essa discriminação espacial que permite em essência construir uma imagem da amostra. Para gerar uma variação linear somente do módulo do campo principal, o que se faz é sobrepor a ele um campo adicional produzido por um conjunto de três bobinas. As seguintes condições são impostas ao campo \mathbf{B}_G produzido pelas bobinas:

$$\begin{aligned}
[2.7] \quad \mathbf{B}_G &= B_z \hat{\mathbf{k}} \\
\mathbf{B}_G(\mathbf{r} = 0) &= 0 \\
\nabla B_z &= \frac{\partial B_z}{\partial x} \hat{\mathbf{i}} + \frac{\partial B_z}{\partial y} \hat{\mathbf{j}} + \frac{\partial B_z}{\partial z} \hat{\mathbf{k}} \equiv \mathbf{G} = cte
\end{aligned}$$

Assim, chamamos essas bobinas de *bobinas de gradiente*. Na prática, cada uma das três componentes de \mathbf{G} é produzida por uma bobina distinta. Inversamente, o campo \mathbf{B}_G em \mathbf{r} pode ser obtido através de \mathbf{G} :

$$[2.8] \quad \mathbf{B}_G = (\mathbf{G} \cdot \mathbf{r})\hat{\mathbf{k}}$$

É importante salientar que embora os gradientes de campo sejam constantes no espaço, os seus valores podem variar no tempo. Nesse caso dizemos que estamos usando *gradientes modulados*, sendo que muitas seqüências e metodologias fazem uso deles, inclusive a GMAX. Na Figura 2 estão representados os componentes expostos até agora.

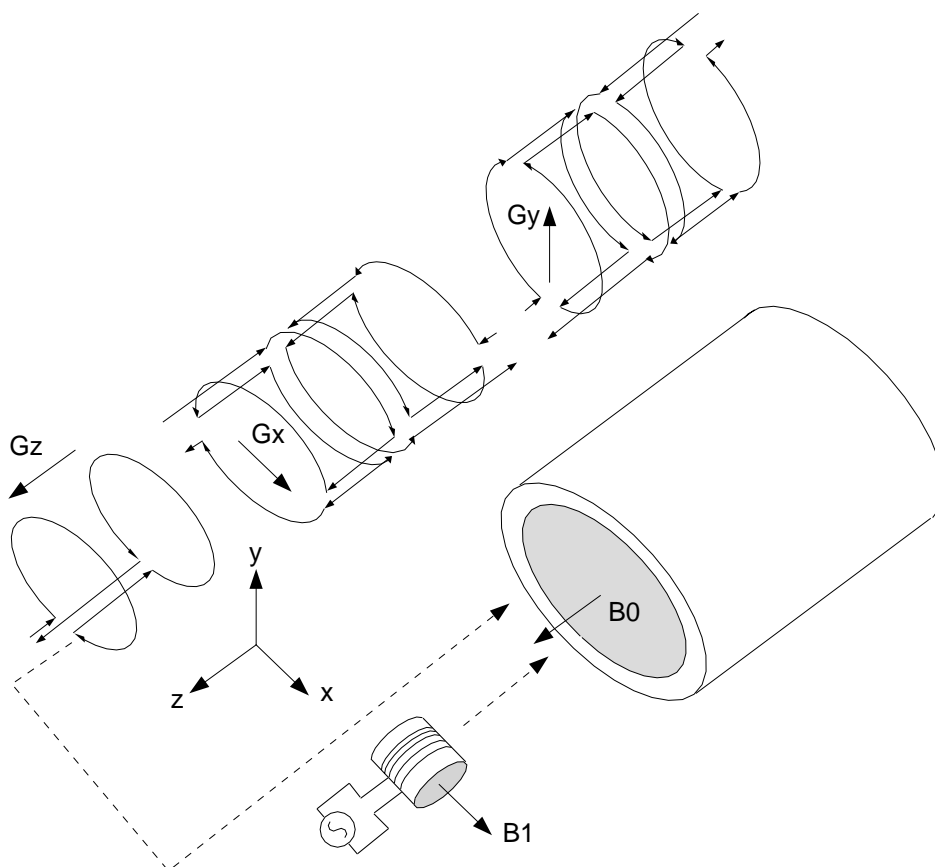


Figura 2. Configuração esquemática dos componentes físicos principais que constituem um sistema de MRI.

2.1.d – Amostra de estudo.

A principal aplicação da técnica de MRI está em fazer imagens de organismos biológicos. Tais organismos são constituídos, em sua maioria, por núcleos de hidrogênio presentes principalmente nas moléculas de água. Assim, as amostras das quais são feitas imagens por MRI apresentam uma magnetização total devida principalmente aos núcleos de ^1H , que por sua vez possuem spin $\frac{1}{2}$. Aí está, portanto, o motivo de nos atermos unicamente à descrição da NMR à esse número quântico de spin.

Mas, não só as moléculas de água contêm ^1H . Gordura, fluido cérebro espinal, entre outras substâncias, também contêm uma grande quantidade desse elemento. No entanto, devido ao diferente ambiente químico dos hidrogênios nessas substâncias, os tempos de relaxação também são distintos. Veremos na seção 2.3 que devido a esse efeito é possível construir seqüências de pulsos que gerem imagens com forte contraste entre as diferentes substâncias. Outro efeito experimentado pelos núcleos de ^1H , em diferentes moléculas ou compostos, é o efeito de deslocamento químico, que não iremos tratar aqui e pode ser encontrado em Slichter⁹.

2.1.e – Componentes adicionais.

Além dos componentes citados nas subseções anteriores, são utilizados outros componentes responsáveis pelo controle, qualidade e manutenção dos sinais e campos gerados e recebidos. Uma descrição pormenorizada de toda a parte instrumental utilizada em MRI pode ser encontrada em alguns dos trabalhos¹⁸⁻²¹ realizados pelo grupo de ressonância magnética da USP de São Carlos.

Nesta subseção nos atermos a descrever o processo de *shimming ativo*. Como foi exposto na subseção 2.1.a, o campo magnético principal deve ser o mais homogêneo possível. Na verdade o motivo dessa exigência será visto na seção seguinte. Assim, é importante que exista uma maneira de se calibrar o campo principal, uma vez que este pode ter a sua homogeneidade comprometida ao longo do uso do equipamento. Para se

fazer essa correção o que é feito é adicionar-se contribuições de campo magnético que anulem a não-homogeneidade. Essas contribuições podem ser geradas tanto por distribuições de correntes como por distribuições de materiais ferromagnéticos. No primeiro caso chamamos o processo de *shimming ativo*, pois podemos controlar a intensidade das contribuições através das intensidades de correntes, que por sua vez são geradas pelas *bobinas de shimming*. No segundo caso temos o processo de *shimming passivo*.

Para entendermos o processo de correção do campo magnético principal iremos inicialmente descrever o comportamento de um campo magnético estático genérico.

Das equações de Maxwell, na ausência de correntes e campos elétricos variáveis, o campo magnético deve satisfazer as seguintes condições locais:

$$[2.9] \quad \begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0 \\ \nabla \times \mathbf{B} &= 0 \end{aligned}$$

Utilizando a identidade $\nabla \times (\nabla \times \mathbf{F}) = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{F}) - \nabla^2 \mathbf{F}$, satisfeita por um campo vetorial genérico \mathbf{F} , resulta que \mathbf{B} satisfaz a equação de Laplace:

$$[2.10] \quad \nabla^2 \mathbf{B} = 0$$

Por mais que tenhamos a equação de Laplace limitando as possíveis formas de \mathbf{B} , ainda existem infinitas soluções que a satisfazem. No entanto, é possível mostrar através da *primeira identidade de Green*²² que a especificação de \mathbf{B} ao longo de uma superfície fechada S é suficiente para determinar univocamente \mathbf{B} no volume V englobado por S . Essa especificação é conhecida como *condição de contorno de Dirichlet*.

É conveniente resolver [2.10] no sistema de coordenadas esféricas. Embora outros sistemas de coordenadas possam ser utilizados, as coordenadas esféricas apresentam a vantagem de possuir a mais alta simetria espacial. Além disso é possível construir uma superfície fechada suave através de uma função suave das coordenadas.

Uma aproximação que podemos fazer para o campo \mathbf{B} é que somente a componente z possui uma magnitude apreciável. Portanto, a solução da equação de Laplace em coordenadas esféricas, com as fontes de campo fora da origem, é:

$$[2.11] \quad B_z(r, \theta, \phi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l A_{lm} r^l Y_{lm}(\theta, \phi)$$

Em que A_{lm} são constantes e $Y_{lm}(\theta, \phi)$ são o conjunto de funções conhecidas por harmônicos esféricos^{*}. Essas funções constituem uma base ortonormal no espaço vetorial abstrato associado ao espaço de funções com módulo ao quadrado integrável no intervalo $0 \leq \theta \leq \pi$ e $0 \leq \phi \leq 2\pi$. Assim, se soubermos os valores do campo em uma superfície esférica S de raio a , podemos determinar a amplitude de cada componente A_{lm} através do produto escalar de B_z em S com o correspondente Y_{lm} :

$$[2.12] \quad A_{lm} = \int Y_{lm}^*(\theta, \phi) B_z(r = a, \theta, \phi) d\Omega$$

Em que $d\Omega$ é o elemento de ângulo sólido. Assim, se resolvermos expandir o campo até a componente $l = n$, teremos:

$$[2.13] \quad B_z(r, \theta, \phi) = \sum_{l=0}^n \sum_{m=-l}^l A_{lm} \left(\frac{r}{a}\right)^l Y_{lm}(\theta, \phi)$$

Portanto, uma possível maneira de homogeneizar o campo principal é através do levantamento das amplitudes dos harmônicos esféricos em uma superfície esférica. Dessa forma, gera-se essas amplitudes com sinal invertido, a menos da componente A_{00} , através das bobinas de *shimming*, de tal maneira que o campo será homogêneo até a ordem n .

* No final do apêndice que consta no final desse trabalho são listadas as funções Y_{lm} em coordenadas retangulares até a quarta ordem.

Na prática existem outros métodos, provavelmente mais eficientes, de homogeneizar o campo. Uma boa descrição desse processo pode ser encontrada no artigo de Roméo e Hoult²³. O objetivo da descrição acima foi apenas de dar uma argumentação teórica para o procedimento de homogeneização. No apêndice contido no final deste trabalho é mostrado como utilizamos essa descrição para, a partir de medidas locais do campo, calcular as contribuições de cada harmônico esférico.

2.2 – Formação de imagens.

O processo de formação de imagens utilizando o sinal de NMR está relacionado com a transformada de Fourier do sinal gerado pela amostra. Nesta seção investigaremos os conceitos envolvidos nesse formalismo.

Talvez a definição mais geral do que seja uma imagem seja a definição de um campo escalar. Ou seja, dada uma coordenada \mathbf{r} , $\mathbf{r} \in \mathfrak{R}^n$, associamos uma grandeza escalar $f(\mathbf{r})$. Em MRI \mathbf{r} é justamente a coordenada espacial e $f(\mathbf{r})$ são as grandezas físicas que podemos medir através do fenômeno de NMR. A principal grandeza da qual podemos fazer imagens é a densidade de núcleos de hidrogênio presentes na amostra, que por sua vez é proporcional à magnetização de equilíbrio M_0 . Veremos ainda na seção seguinte que das grandezas T_1 e T_2 também se pode fazer imagens.

Como foi exposto na subseção 2.1.b, o sinal que é medido pela bobina de detecção corresponde à componente transversal da magnetização. Vamos utilizar a representação fasorial para expressar esse vetor no plano transversal definido pelas dimensões x real e y imaginário. Portanto, um pequeno volume Δv da amostra, centrado na posição \mathbf{r}_i , deverá contribuir com o seguinte sinal:

$$[2.14] \quad \Delta S(\mathbf{r}_i, t) = M_T(\mathbf{r}_i, t) e^{i\theta(\mathbf{r}_i, t)} \Delta v$$

O sinal total da amostra será a soma de todos os volumes:

$$[2.15] \quad S(t) = \sum_i M_T(\mathbf{r}_i, t) e^{i\theta(\mathbf{r}_i, t)} \Delta v$$

Podemos fazer Δv muito pequeno se comparado com as dimensões da amostra, pois ainda assim teremos uma magnetização macroscópica, de tal forma que Δv equivale a um elemento diferencial dv e a somatória torna-se uma integral:

$$[2.16] \quad S(t) = \iiint_V M_T(\mathbf{r}, t) e^{i\theta(\mathbf{r}, t)} dv$$

Dizemos que cada elemento dv é composto por uma *isocromata*. De uma maneira geral, dá-se o nome de isocromata ao conjunto de momentos magnéticos que giram com a mesma frequência de Larmor.

O sinal [2.16] é bastante geral. Por isso vamos considerar o caso em que um pulso de excitação de período T é aplicado sobre uma magnetização de equilíbrio $M_0(\mathbf{r})\hat{\mathbf{k}}$. Da equação de Bloch, para $T \ll T_2$ e atribuindo $t = 0$ ao instante seguinte à excitação:

$$[2.17] \quad S(t) = \iiint_V M_0(\mathbf{r}) e^{\frac{-t}{T_2}} e^{i\theta(\mathbf{r}, t)} dv$$

Fazendo-se uso da relação [1.8] e explicitando o campo magnético em função do campo principal e dos gradientes de campo temos:

$$[2.18] \quad \theta(\mathbf{r}, t) = \int \omega(\mathbf{r}, t) dt = \int \gamma(B_0 + \mathbf{G}(t) \cdot \mathbf{r}) dt$$

Sendo que convencionamos a fase inicial como sendo zero. Fazendo a seguinte mudança de variável:

$$[2.19] \quad \mathbf{k}(t) = \gamma \int \mathbf{G}(t) dt$$

O sinal [2.17] torna-se:

$$[2.20] \quad S(\mathbf{k}) = e^{\frac{-t(\mathbf{k})}{T_2} + i\omega_0 t(\mathbf{k})} \iiint_V M_0(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} dV$$

Conhecendo a frequência de Larmor é possível extrair a portadora $e^{i\omega_0 t}$ do sinal. A Transformada de Fourier (TF) tridimensional de [2.20], sem a portadora, é:

$$[2.21] \quad \mathfrak{F}\{S(\mathbf{k})\} = P(\mathbf{r}) \otimes M_0(\mathbf{r})$$

O produto de convolução é definido por $A(\mathbf{r}) \otimes B(\mathbf{r}) = \iiint A(\mathbf{r}') B(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d^3 r'$ e a equação [2.21] é obtida da identidade $\mathfrak{F}\{a(\mathbf{k})b(\mathbf{k})\} = \mathfrak{F}\{a(\mathbf{k})\} \otimes \mathfrak{F}\{b(\mathbf{k})\}$, cuja demonstração pode ser encontrada em Bracewell²⁴.

$P(\mathbf{r})$ é chamado de “Point Spread Function” (PSF), e para os casos em que \mathbf{G} é constante no tempo $P(\mathbf{r})$ é a função Lorentziana tridimensional:

$$[2.22] \quad P(\mathbf{r}) = \mathfrak{F} \left\{ e^{\frac{-\mathbf{k} \cdot \mathbf{G}}{\gamma |\mathbf{G}|^2 T_2}} \right\} \propto \prod_{i=1}^3 \frac{1}{1 + (\gamma T_2 |\mathbf{G}|^2 / G_{x_i})^2 x_i^2}$$

Os x_i 's são as componentes cartesianas x , y e z . Assim, a TF do sinal medido é a própria magnetização $M_0(\mathbf{r})$ convoluída com a PSF. Vemos da definição do produto de convolução que o mesmo é equivalente a extrair-se uma média, ponderada pela forma da PSF, de $M_0(\mathbf{r})$ no intervalo $\Delta \mathbf{r}$ em torno de \mathbf{r} em que $P(\mathbf{r})$ é apreciável. Dessa forma o que se obtêm é $\langle M_0(\mathbf{r}) \rangle$ na região $\mathbf{r} + \Delta \mathbf{r}$. Para o caso da Lorentziana [2.22], podemos definir $\Delta \mathbf{r}$ como sendo a largura à meia-altura de cada componente:

$$[2.23] \quad \Delta x_i = \frac{G_{x_i}}{\gamma T_2 |\mathbf{G}|^2} ; \quad i = 1, 2, 3.$$

$\Delta \mathbf{r} = \Delta x_1 \hat{\mathbf{i}} + \Delta x_2 \hat{\mathbf{j}} + \Delta x_3 \hat{\mathbf{k}}$. Essa é, portanto, a resolução espacial da medida de $M_0(\mathbf{r})$.

Na prática, a medida do sinal $S(\mathbf{k})$ não é realizada em todo o domínio de \mathbf{k} , pois isso tomaria muito tempo. Mede-se portanto o sinal até um dado $\mathbf{k}_{\text{máx}}$. Além disso, as medidas não são feitas de maneira contínua, mas sim discretizadas em intervalos $\delta \mathbf{k}$. A transformada de Fourier discretizada em intervalos $\delta \mathbf{r}$, obtida de um sinal discretizado de largura $\mathbf{k}_{\text{máx}}$, satisfaz a seguinte relação:

$$[2.24] \quad \delta x_i = \frac{1}{k_{\text{máx}_i}} = \frac{1}{\gamma G_{x_i} t_{\text{máx}}}$$

A primeira igualdade é geral para qualquer sinal e a segunda igualdade é específica para \mathbf{G} temporalmente constante. Novamente os índices i 's correspondem às componentes cartesianas.

O critério de Rayleigh para a distinção entre dois pontos nos diz que $\Delta x_i < \delta x_i$, resultando em:

$$[2.25] \quad \frac{G_i}{\gamma |\mathbf{G}| T_2^*} < \frac{1}{\gamma G_i t_{\text{máx}}}$$

A relação [2.25] é portanto uma condição necessária para se obter nitidez da imagem. Foi utilizado T_2^* para diferenciar do T_2 intrínseco da amostra. T_2^* é o tempo de relaxação efetivamente medido que surge devido à não-homogeneidade do campo principal em todo o volume da amostra que está gerando sinal. À essa não-homogeneidade correspondem frequências de precessão diferentes no plano transversal, implicando em perda de coerência entre as isocromatas que resulta em uma diminuição

no tempo de relaxação T_2 . Portanto, sempre $T_2^* < T_2$. Assim, vemos a importância da homogeneidade do campo principal, de tal forma que quanto mais homogêneo ele for mais T_2^* crescerá e tenderá a T_2 e maior será a resolução da imagem, de acordo com [2.25].

2.3 – Seqüências de pulsos.

Na seção anterior foi mostrado como a imagem ou o mapeamento da densidade de núcleos da amostra está relacionado com a TF do sinal emitido pela mesma. Existem diversas maneiras pelas quais podemos percorrer o espaço definido por \mathbf{k} , o qual chamaremos de espaço k . Essas diferentes maneiras caracterizam, em essência, as diferentes metodologias que por sua vez são compostas por pulsos de RF e pulsos de gradientes. De início vamos expor o conceito de pulsos de RF seletivos.

2.3.a – Pulsos de RF seletivos.

Ao se fazer imagens por NMR, na maioria das vezes é necessário construir a imagem de apenas uma parcela da amostra, não havendo, portanto, a necessidade de excitar a magnetização da amostra inteira. Assim, utilizando-se pulsos de RF seletivos, poupa-se tempo e potência ao construir-se imagens somente da região de interesse.

Em tomografia por MRI são feitas imagens de fatias planas da amostra com uma espessura mínima o suficiente para que se tenha a relação sinal-ruído desejada. Dessa forma, a imagem é construída utilizando-se a versão bidimensional da descrição geral dada na seção 2.2. Os motivos principais de se escolher a aquisição bidimensional ao invés da tridimensional, são que esta última apresenta dificuldades na visualização da imagem além de, novamente, tornar o tempo de aquisição demasiado longo.

Podemos construir pulsos de RF seletivos devidos novamente à criação de isocromatas proporcionadas pelos gradientes. De uma maneira geral, a distribuição dos

ângulos de rotação da magnetização induzidos em torno do campo de RF, $\varphi(\omega(\mathbf{r}), t)$, é proporcional à distribuição em frequência do campo de RF: $\varphi(\omega(\mathbf{r}), t) \propto \overline{B_1}(\omega)$.

Na verdade essa afirmação é uma aproximação válida somente para pequenos ângulos de rotação. Podemos vislumbrar a validade dessa afirmação ao analisarmos a evolução de cada isocromata no RG com frequência igual à respectiva isocromata. Nesse referencial, somente a componente espectral do campo de RF com frequência igual a da respectiva isocromata estará estacionária. Portanto, essa componente, por estar em ressonância com a magnetização, será a mais eficiente em promover rotações.

Assim, se quisermos promover um determinado ângulo de rotação uniformemente ao longo de uma largura espectral (espacial) 2Ω ($2\Omega/\gamma G$) da amostra devemos aplicar o seguinte pulso:

$$[2.26] \quad \overline{B_1}'(\omega) = \begin{cases} B_1 & , \quad -\Omega \leq \omega \leq \Omega \\ 0 & , \quad \text{no resto} \end{cases}$$

$$\therefore B_1'(t)\hat{\mathbf{i}}' = \mathfrak{F}\{\overline{B_1}'(\omega)\}\hat{\mathbf{i}}' \propto B_1 \frac{\text{sen}(\Omega t)}{t} \hat{\mathbf{i}}'$$

A aspa corresponde ao valor do campo no RG com frequência de Larmor γB_0 . Como já foi dito, o pulso [2.26] é tão eficiente quanto menor for o ângulo de rotação. Quando se necessita de rotações eficientes para ângulos maiores que aproximadamente 30° outros tipos de pulsos são utilizados. Uma otimização para pulsos de excitação, que foi recentemente desenvolvida no grupo de ressonância magnética do IFSC – USP, pode ser encontrada em ²⁵.

2.3.b – Metodologia SE-2DDFT.

Apresentaremos agora uma das metodologias mais básicas em MRI. O “Spin Echo Two Dimensional Direct Fourier Transform” (SE-2DDFT) é um método que utiliza o fenômeno de *eco de spins* juntamente com um mapeamento cartesiano do

espaço k bidimensional para a aquisição de imagens. Vejamos como ocorre o eco de spins.

O sinal emitido pela amostra, logo após a aplicação de um pulso $\pi/2$, para intervalos de tempo $t \ll T_2$ e sem a portadora $e^{i\omega_0 t}$ é:

$$[2.27] \quad \begin{aligned} S(t) &= \iiint_V M_0(\mathbf{r}) e^{i\theta(\mathbf{k}(t), \mathbf{r})} dV \\ \theta(\mathbf{k}(t), \mathbf{r}) &= \mathbf{k}(t) \cdot \mathbf{r} + \gamma \Delta B_0(\mathbf{r}) t \end{aligned}$$

Nesse caso representamos a não-homogeneidade do campo principal, ΔB_0 , explicitamente dentro da integral ao invés de representá-la como um tempo de relaxação efetivo T_2^* . Apliquemos agora um pulso π sobre \mathbf{M}_T na direção $\hat{\mathbf{i}}'$ no instante $t = \tau$. De acordo com a discussão da subseção 1.1.a esse pulso inverterá o sinal do ângulo [2.27] de $\theta \rightarrow -\theta$. Portanto, o ângulo $\theta(t, \mathbf{r})$ para $t > \tau$ será:

$$[2.28] \quad \theta(\mathbf{k}(t), \mathbf{r}) = (\mathbf{k}(t) - \mathbf{k}(\tau)) \cdot \mathbf{r} + \gamma \Delta B_0(\mathbf{r})(t - 2\tau)$$

Vemos de [2.28] que existem duas contribuições para a fase de cada isocromata: uma dispersão angular devido aos gradientes implícitos em \mathbf{k} e uma dispersão devido a não-homogeneidade do campo. O instante t' em que a dispersão de $\theta(t, \mathbf{r})$ ao longo da amostra for um mínimo local, implicará em um máximo local no módulo do sinal [2.27]. Nesse instante dizemos que ocorre um *eco de spins*. Vemos que em $t = 2\tau$ o anulamento do termo de não-homogeneidade em [2.28] contribui para diminuir a dispersão de $\theta(t, \mathbf{r})$ caracterizando um eco de spins nesse instante de tempo. Esse efeito é devido a aplicação inicial do pulso π , que por esse motivo é também chamado de *pulso de refocalização*.

É importante notar que podemos ter mínimos locais em θ devido a $\mathbf{k}(t)$, caracterizando ecos de spin, independentemente do pulso de refocalização, embora não tão intensos quanto poderiam ser se coincidisse com o anulamento da não-homogeneidade.

Temos agora todos os elementos fundamentais necessários para escrever a seqüência de pulsos que caracterizam a metodologia SE-2DDFT. A Figura 3.A) contém a seqüência de pulsos desenhada esquematicamente. A Figura 3.B) mostra o correspondente mapeamento do espaço k .

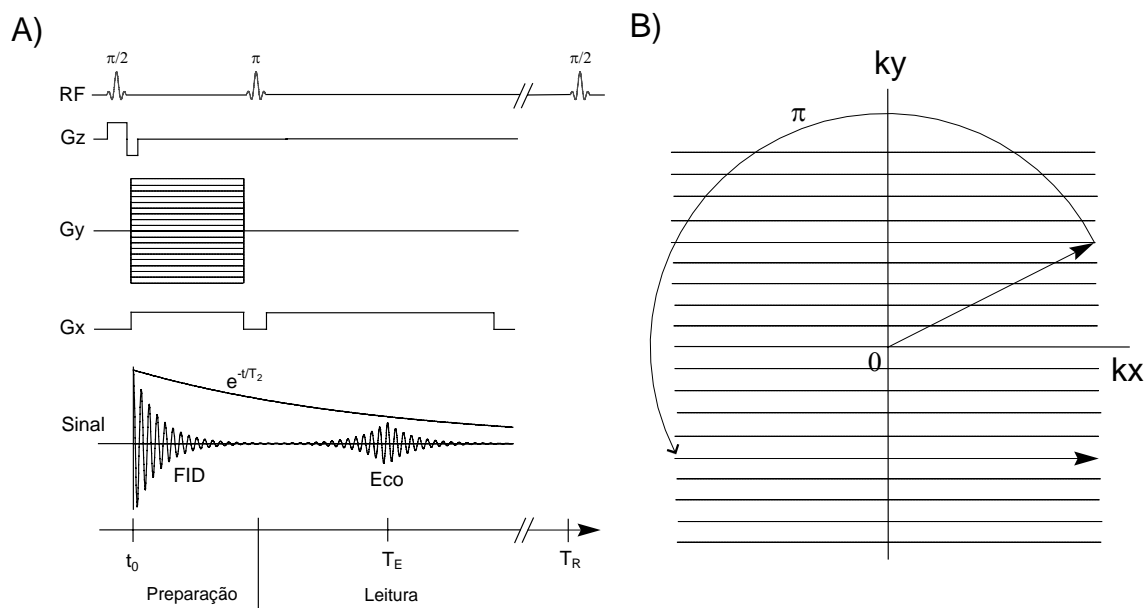


Figura 3. A) seqüência de pulsos utilizada na metodologia SE-2DDFT. B) mapeamento do espaço k .

A aquisição do sinal é feita durante o percurso horizontal do vetor \mathbf{k} pelo espaço k . Assim, o gradiente responsável por essa varredura é chamado de *gradiente de leitura*. O gradiente perpendicular a esse, que desloca o vetor \mathbf{k} verticalmente e assim adiciona uma fase inicial ao sinal em cada aquisição é chamado de *gradiente de fase*.

Alterando os tempos T_R e T_E podemos construir imagens com forte contraste entre substâncias com diferentes tempos de relaxação T_1 e T_2 . Utilizando um valor de T_R próximo de T_1 resulta em um retorno incompleto da magnetização ao valor de equilíbrio. Assim, partes da amostra que possuírem um maior T_1 apresentarão um menor sinal de NMR na próxima excitação em comparação com partes da amostra que possuírem um menor T_1 . Por outro lado, a utilização de um valor de T_E próximo de T_2 faz com que partes da amostra que possuam um maior valor de T_2 apresentem um maior sinal de NMR no eco em comparação com partes da amostra que possuam um menor valor de T_2 .

É possível utilizar a metodologia SE-2DDFT sem a aplicação do pulso de refocalização. Nesse caso temos a metodologia “Gradient Recalled Echo (GRE)²⁶”, em que os ecos que surgem são unicamente devidos à recuperação da coerência transversal ao longo do percurso no espaço k .

Existe uma outra metodologia que pertence ao conjunto de metodologias rápidas, chamada de “Echo Planar Imaging (EPI)²⁷”. Ela apresenta o mesmo mapeamento cartesiano da SE-2DDFT, com a diferença de que ao invés de se esperar o retorno da magnetização ao equilíbrio para se fazer a varredura de cada linha do espaço k , aplica-se um gradiente de fase ao término de cada linha de forma a levar o vetor \mathbf{k} para a linha seguinte, e assim fazer toda a varredura de k com um único pulso de excitação. A principal vantagem dessa técnica é o tempo de aquisição da imagem que é drasticamente reduzido. No entanto, ela apresenta uma anisotropia na resolução espacial devido à diferença no tempo de aquisição entre a linha de k correspondente ao gradiente de leitura e ao gradiente de fase.

Aproveitando o fato de que neste trabalho lidamos com uma metodologia de gradientes modulados, citarei aqui a metodologia de aquisição em espiral do espaço k , “spiral scanning”. Para tanto temos:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{k}(t) &= at \cos(bt) \hat{\mathbf{i}} + at \sin(bt) \hat{\mathbf{j}} \\
 [2.29] \quad \therefore \mathbf{G}(t) &= \frac{a}{\gamma} [\cos(bt) - bt \sin(bt)] \hat{\mathbf{i}} + \frac{a}{\gamma} [\sin(bt) + bt \cos(bt)] \hat{\mathbf{j}}
 \end{aligned}$$

A passagem da primeira para a segunda equação foi feita utilizando-se a equação [2.19]. Devido à variação suave dos gradientes, essa metodologia é mais fácil de implementar que a EPI. No entanto, embora a resolução espacial seja isotrópica, ou seja, mesma resolução nas direções x e y , a resolução em ambas as direções é inferior à resolução na direção do gradiente de fase na EPI.

3 – A metodologia GMAX.

Nos capítulos anteriores foi dada uma introdução sobre os princípios básicos e tópicos paralelos ao assunto principal desta dissertação. Iremos agora entrar mais especificamente na metodologia GMAX. A seção 3.1 tratará de expor o conceito de pulsos adiabáticos que, junto com os gradientes modulados, são uma característica fundamental da metodologia. Na seção 3.2, uma descrição qualitativa sobre GMAX é dada em função dos conceitos apresentados em 3.1. Por fim, a seção 3.3 apresenta uma solução analítica da EDM para a seqüência de pulsos usada em GMAX.

3.1 – Pulsos adiabáticos.

Pulsos adiabáticos é o nome dado aos pulsos de RF que promovem rotações na magnetização de uma maneira essencialmente diferente que os pulsos de RF convencionais apresentados no capítulo anterior. Eles se diferenciam quanto à forma espaço-temporal e quanto à maneira em que as rotações da magnetização são realizadas. A primeira característica que se pode observar nos pulsos adiabáticos é que, ao contrário dos pulsos comuns, eles possuem frequência variável:

$$\begin{aligned}
 [3.1] \quad \text{pulso comum :} \quad & \mathbf{B}_1(t) = B_1(t) \left[\cos(\omega t + \phi) \hat{\mathbf{i}} + \text{sen}(\omega t + \phi) \hat{\mathbf{j}} \right] \\
 \text{pulso adiabático :} \quad & \mathbf{B}_1(t) = B_1(t) \left[\cos\left(\int \omega(t) dt + \phi\right) \hat{\mathbf{i}} + \text{sen}\left(\int \omega(t) dt + \phi\right) \hat{\mathbf{j}} \right]
 \end{aligned}$$

Assim, o pulso comum é determinado unicamente pela função $B_1(t)$, enquanto o pulso adiabático é determinado por duas funções: $B_1(t)$ e $\omega(t)$.

A condição de frequência variável expressa em [3.1] é uma condição necessária mas não suficiente para que um pulso de RF seja chamado de adiabático. Talvez a definição mais simples e geral seja a seguinte:

“Um pulso $\mathbf{B}_1(t)$ opera em condição de adiabaticidade no intervalo de tempo Δt quando: no RG com frequência igual à frequência do pulso, o vetor magnetização $\mathbf{M}(t)$ mantém um ângulo constante com o vetor $\mathbf{B}_{ef}(t)$ ao longo de Δt .”

$\mathbf{B}_{ef}(t)$ é o campo total, também chamado campo efetivo, no RG. Veremos que para satisfazer essa definição o pulso precisa possuir frequência variável. É importante notar que essa definição de adiabaticidade não corresponde necessariamente à definição termodinâmica de um processo adiabático. Tal definição diz que, em uma transformação adiabática, o sistema em consideração evolui sem trocar calor com o meio. Portanto, para aplicar o conceito termodinâmico de processo adiabático à um sistema de spins, é necessário trabalhar com o conceito de temperatura de spin. Tal tratamento pode ser encontrado, por exemplo, no capítulo 6 do livro de Slichter⁹.

3.1.a – Coeficiente de adiabaticidade.

Para satisfazer a condição de adiabaticidade vamos considerar o pulso $\mathbf{B}_1(t)$ como sendo o segundo pulso de [3.1] e vamos começar a análise pelo RG com frequência $\omega(t)$. A Figura 4.A) mostra as componentes do pulso nesse RG. Nessa mesma figura está representado um segundo referencial girante, RG2, referido por aspa dupla. A Figura 4.B) mostra as componentes do campo no RG2. Todas essas componentes se originam do resultado [1.11] e a partir daqui será usada a convenção de que a frequência do RG e a respectiva componente de campo que surge estão relacionadas positivamente, ou seja, $B_{RG} = +\omega_{RG} / \gamma$.

Na Figura 4.A) $\Delta\omega(t) / \gamma = B_z + \omega(t) / \gamma$, sendo B_z o campo longitudinal no RL. \mathbf{B}_{ef} é o campo total representado no RG. Vemos que no RG2 aparece uma componente proporcional a $(d\alpha/dt) / \gamma$ ao longo de $\hat{\mathbf{j}}''$. Quanto menor o valor dessa componente em relação à componente B_{ef} mais o campo resultante \mathbf{B}'' será próximo ao campo \mathbf{B}_{ef} , e

como resultado teremos que a magnetização \mathbf{M} manterá um ângulo constante com \mathbf{B}_{ef} , conforme [1.6]. Portanto, a condição de adiabaticidade é dada por:

$$[3.2] \quad \left| \frac{d\alpha}{dt} \right| \ll \gamma |\mathbf{B}_{\text{ef}}|$$

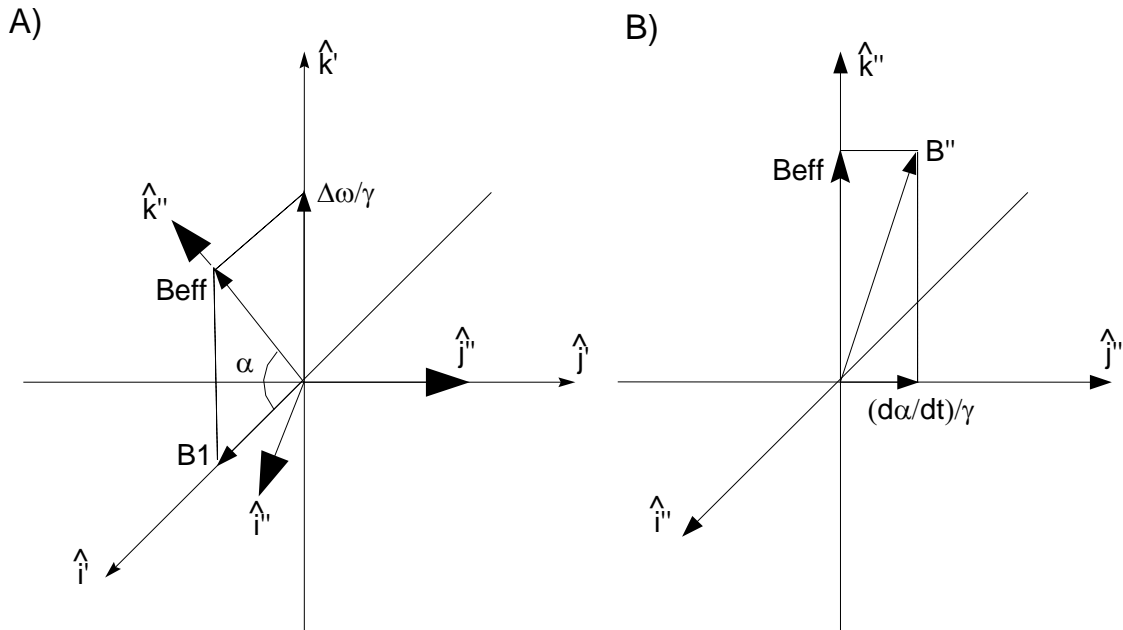


Figura 4. A) Componentes de campo expressas no RG com frequência $\omega(t)$. B) As mesmas componentes expressas em um segundo referencial girante com frequência $d\alpha/dt$ em torno de \hat{j}' .

Define-se o coeficiente de adiabaticidade:

$$[3.3] \quad K = \frac{\gamma |\mathbf{B}_{\text{ef}}|}{|d\alpha / dt|}$$

Assim, de [3.2] vemos que quanto maior o valor de K mais bem satisfeita é a condição de adiabaticidade. É importante notar que em geral K pode variar no tempo. Uma característica importante dos pulsos adiabáticos é a insensibilidade a possíveis variações espaciais da amplitude de \mathbf{B}_1 . Pois, desde que seja garantido um valor mínimo

de K ao longo da evolução de \mathbf{B}_1 , a magnetização evoluirá conjuntamente. Por esse mesmo motivo vemos que um único pulso adiabático, com variação espacial, é eficiente somente para promover rotações com ângulos múltiplos de 90° , pois esses são os únicos ângulos que se pode garantir independentemente * das variações espaciais de \mathbf{B}_1 . A Figura 5 mostra a forma do pulso adiabático Secante Hiperbólica, “Hyperbolic Secant (HS)”, que é talvez o pulso adiabático mais utilizado. Chamamos de “Adiabatic Half Passage (AHP)” quando a magnetização de equilíbrio é levada até o plano transversal. Se o pulso é aplicado até o fim, de forma a inverter a magnetização, temos a “Adiabatic Full Passage (AFP)”.

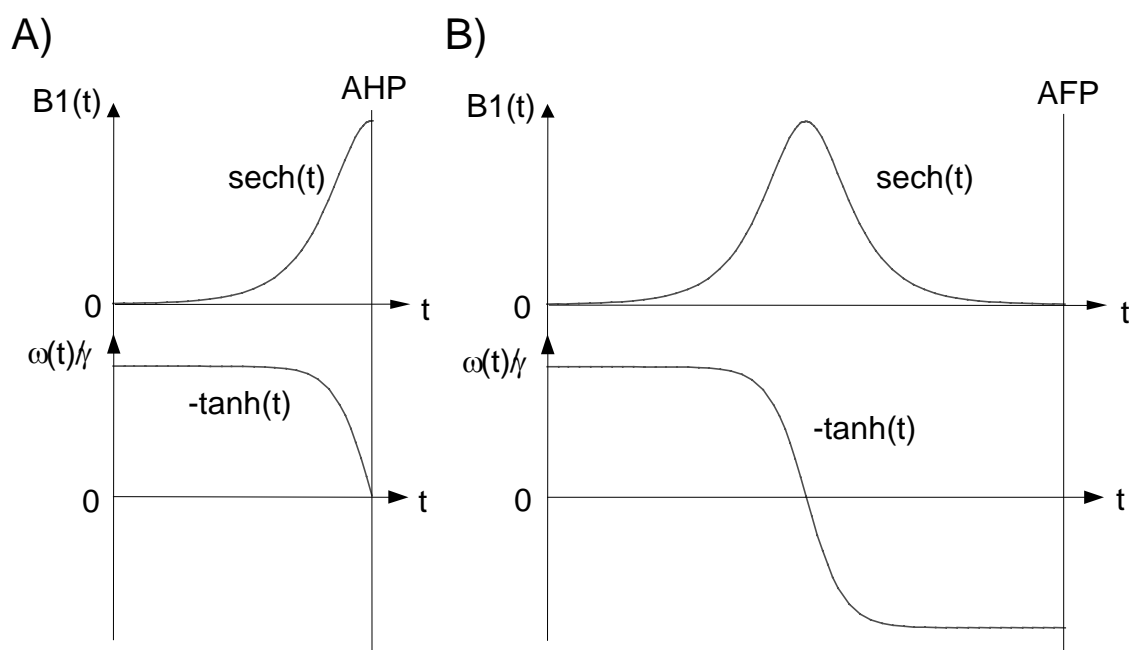


Figura 5. A) Pulso adiabático HS em AHP, onde a função $B_1(t)$ é uma sech e $\omega(t)$ é uma tanh. B) O mesmo pulso HS agora em AFP.

Outra característica dos pulsos adiabáticos é a incapacidade de prover rotações que mantenham a coerência transversal entre diferentes isocromatas. Esse efeito pode

* Não estamos considerando variações espaciais esdrúxulas de B_1 , mas sim variações suaves que normalmente são produzidas na prática por bobinas de RF.

ser visto da própria definição de adiabaticidade, que só garante que o ângulo entre \mathbf{M} e \mathbf{B} seja constante, enquanto o ângulo de rotação ϕ de \mathbf{M} em torno de \mathbf{B} dependerá da possível variação espacial de \mathbf{B}_1 :

$$[3.4] \quad \phi(x, t) = -\int \sqrt{[\gamma B_1(x, t)]^2 + \Delta\omega^2} dt$$

Assim, variações espaciais de \mathbf{B}_1 irão gerar diferentes ângulos entre os \mathbf{M} 's dessas diferentes posições. Vemos também da equação [3.4] que a variação espacial linear do campo produzido pelas bobinas de gradiente, implícita em $\Delta\omega$, não implica em uma variação linear de ϕ com a posição. Essa característica dificulta e até mesmo impossibilita a realização de ecos de spins produzidos pelos gradientes.

Para corrigir essas deficiências dos pulsos adiabáticos, que entre outras coisas dificultam a geração de ecos de spins, foram propostas combinações de pulsos, “composite pulses”, que não serão tratadas neste trabalho e podem ser encontradas em 28, 29.

3.1.b – Pulsos adiabáticos OIA e GOIA.

Vamos agora analisar como os pulsos adiabáticos se comportam quando há uma dispersão espectral na frequência da magnetização transversal proporcionada pelos gradientes, $\Omega(x)$. Para o caso do pulso com frequência * $\omega(t) - \gamma B_0$, o valor de K será obtido, conforme a Figura 4, de:

$$[3.5] \quad \gamma |\mathbf{B}_{\text{ef}}| = \sqrt{(\gamma B_1)^2 + \Delta\omega^2}$$

$$\tan(\alpha) = \frac{\Delta\omega}{\gamma B_1} \Rightarrow \sec^2(\alpha) \frac{d\alpha}{dt} = -\frac{1}{\gamma B_1} \frac{d\omega}{dt} - \frac{\Delta\omega}{\gamma B_1^2} \frac{dB_1}{dt}$$

* Todos os pulsos que possuírem frequência variável serão considerados com esse “offset” de $-\gamma B_0$.

$\Delta\omega = \Omega + \omega(t)$ e $\Omega = \gamma B_G$, sendo B_G o campo das bobinas de gradiente. Agora vamos impor a seguinte condição: que K , além de $\gg 1$, seja constante para todas as isocromatas na ressonância ($\Delta\omega = 0$). Assim, de [3.3] e [3.5] temos:

$$[3.6] \quad K_0 = \frac{[\gamma B_1(t)]^2}{\frac{d}{dt}\omega(t)}$$

Uma maneira mais algébrica de se obter a relação [3.6] pode ser encontrada em Abragam³⁰. Talvez a característica mais interessante da relação [3.6] é que ela nos diz que a energia do pulso é proporcional à taxa de varredura de frequência do pulso. Vemos então uma importante distinção entre os pulsos de RF seletivos do capítulo anterior e os pulsos adiabáticos do tipo [3.6]: no primeiro caso a densidade espectral de energia do pulso é constante, enquanto no segundo caso a energia do pulso é proporcional à frequência do mesmo. Esses pulsos foram denominados de “Offset-Independent Adiabaticity pulses, (OIA)” por Tannús e Garwood³¹. Podemos ver que o pulso HS satisfaz a equação [3.6].

Em um pulso de inversão adiabático do tipo OIA, as isocromatas com frequência Ω contida no domínio de frequências de $\omega(t)$ sofrerão inversão após a passagem por $\Delta\omega = 0$. Já as isocromatas fora desse domínio nunca alcançarão $\Delta\omega = 0$, permanecendo a componente transversal de $\Delta\omega(t)$ sempre com o mesmo sinal, conseqüentemente fazendo com que a magnetização volte ao valor original sem sofrer inversão. Assim, a largura espectral de $\omega(t)$ corresponde à largura espectral da amostra que é invertida.

Uma extensão dos pulsos OIA para o caso de gradientes modulados também foi proposta por Tannús e Garwood²⁸. Os pulsos com “Gradient-modulated Offset Independent Adiabaticity, (GOIA)” são obtidos de maneira análoga aos pulsos OIA, com a diferença que agora consideramos os gradientes dependentes do tempo:

$$\begin{aligned}
 \gamma B_{eff} &= \sqrt{(\gamma B_1)^2 + \Delta\omega^2} \\
 [3.7] \quad \sec^2(\alpha) \frac{d\alpha}{dt} &= -\frac{1}{\gamma B_1} \frac{d(\omega + \Omega)}{dt} - \frac{\Delta\omega}{\gamma B_1^2} \frac{dB_1}{dt}
 \end{aligned}$$

Novamente, impondo K constante em $\Delta\omega = 0$:

$$[3.8] \quad K_0 = \frac{[\gamma B_1(t)]^2}{\frac{d}{dt}(\omega(t) + \Omega(t, x_0))} = \frac{[\gamma B_1(t)]^2}{\frac{d}{dt}\omega(t) + x_0\gamma \frac{d}{dt}G(t)}$$

$$[3.9] \quad \Delta\omega = \Omega(t, x_0) + \omega(t) = \gamma G(t)x_0 + \omega(t) = 0$$

Substituindo [3.9] em [3.8]:

$$[3.10] \quad K_0 \left[\dot{\omega}(t) - \frac{\omega(t)\dot{G}(t)}{G(t)} \right] = [\gamma B_1(t)]^2$$

A equação [3.10] é uma equação diferencial para as três funções de modulação. Especificando-se duas delas determina-se a terceira. Existe o caso degenerado em que para $\omega(t) \propto G(t)$ [3.10] iguala-se a zero. Essa é o tipo de situação imposta pela metodologia GMAX que trataremos na seção seguinte.

A Figura 6 mostra a forma da modulação $\omega(t)$ obtida numericamente através da substituição em [3.10] das seguintes funções: $\gamma B_1(t) = 0.7 \operatorname{sech}(\beta\tau^4)$ e $\gamma G(t) = 10 - 9 \operatorname{sech}(\beta\tau^4)$. Em que $\tau = 2t/T_p - 1$, $T_p = 6ms$ e $\operatorname{sech}(\beta) = 0.01$. Estes pulsos foram utilizados²⁸ para otimizar a energia dos pulsos FOIC, “Frequency Offset Corrected Inversion”³², que têm como finalidade corrigir o desvio espacial causado por deslocamento químico na seleção de volumes e fatias.

Da mesma forma que em OIA, os pulsos GOIA promovem a inversão de uma largura espectral da amostra igual à largura espectral de $\omega(t)$, sendo que a largura espacial é determinada pelos valores inicial e final de $G(t)$.

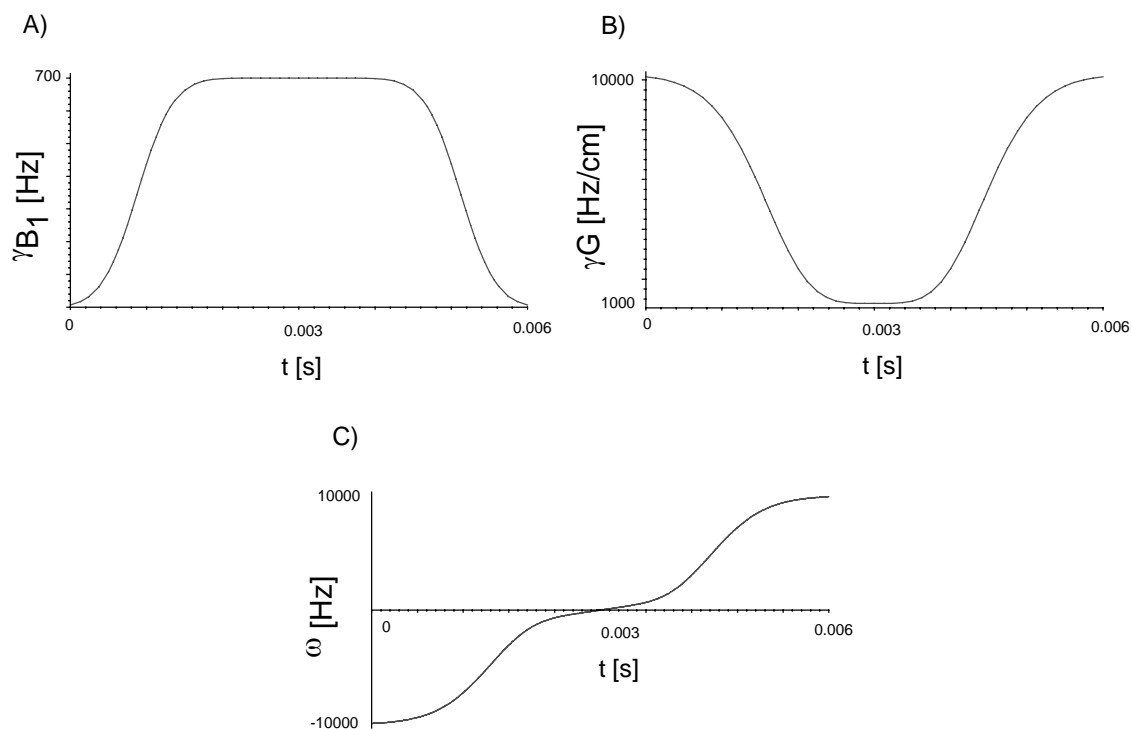


Figura 6. A) Exemplo de modulação da amplitude de RF, $\gamma B_1(t)$. B) Exemplo de modulação do gradiente, $\gamma G(t)$. C) Modulação da frequência de RF, $\omega(t)$, obtida da aplicação de $\gamma B_1(t)$ e $\gamma G(t)$ em [3.10].

3.2 – Descrição de GMAX através do critério de adiabaticidade.

Descreveremos agora o funcionamento da metodologia GMAX, “Gradient-Modulated Adiabatic eXcitation”³³. Esta é uma técnica de localização espacial, podendo servir tanto para seleção de fatias em MRI como para seleção de volumes em NMR. A descrição dada nesta seção é apenas qualitativa e segue de perto a dada pelos autores da metodologia.

As vantagens da utilização de GMAX começa pelo fato de que ela utiliza pulsos adiabáticos, possuindo dessa forma grande tolerância a variações da amplitude B_1 do campo de RF.

A metodologia consiste basicamente no uso da mesma função de modulação $f(t)$ para a frequência do pulso de RF, $\omega(t)$, e para a frequência associada ao gradiente de seleção, $\omega_G(x, t) = \gamma x G(t)$:

$$[3.11] \quad \begin{aligned} \omega(t) &= -pf(t) \\ \omega_G(x, t) &= qxf(t) \end{aligned}$$

p e q são as respectivas amplitudes. Portanto, no RG com frequência $\omega(t)$ teremos a seguinte componente de campo na direção $\hat{\mathbf{k}}'$:

$$[3.12] \quad \Delta\omega(x, t) / \gamma = [\omega_G(x, t) + \omega(t)] / \gamma = f(t)(qx - p) / \gamma$$

Vemos que a equação [3.12] é um produto de uma função temporal com uma função espacial. Supondo que usemos parâmetros p e q junto com funções $f(t)$ e $\gamma B_1(t)$ que satisfaçam o critério de adiabaticidade e sejam AHP de forma similar ao pulso da Figura 5.A), teremos um perfil de magnetização resultante ao longo da direção $\hat{\mathbf{i}}'$ conforme a Figura 7.B). A Figura 7.A) mostra a orientação dos vetores \mathbf{M} e \mathbf{B}_{ef} no começo do pulso para posições a esquerda e a direita do ponto de inversão $x_i = p/q$. A Figura 7.B) mostra a orientação dos mesmos vetores no final do pulso. A magnetização resultante na Figura 7.B) pode apresentar uma inversão bastante abrupta em x_i .

Com base nesse comportamento, se deslocarmos o ponto x_i de uma certa quantidade Δx e trocarmos o sinal entre p e q , teremos um perfil conforme a Figura 8.B), que somado com o perfil da Figura 8.A) resulta na seleção de uma fatia com largura Δx de acordo com a Figura 8.C). Assim, a cada vez que uma determinada metodologia necessitar utilizar um pulso de excitação para gerar o sinal, a seqüência que sucede a excitação deverá ser realizada uma vez após a excitação mostrada na Figura 8.A) e outra após a mostrada na Figura 8.B). Desde que a metodologia sendo empregada evolua a

fase de \mathbf{M} linearmente, a soma dos sinais será semelhante àquela mostrada na Figura 8.C).

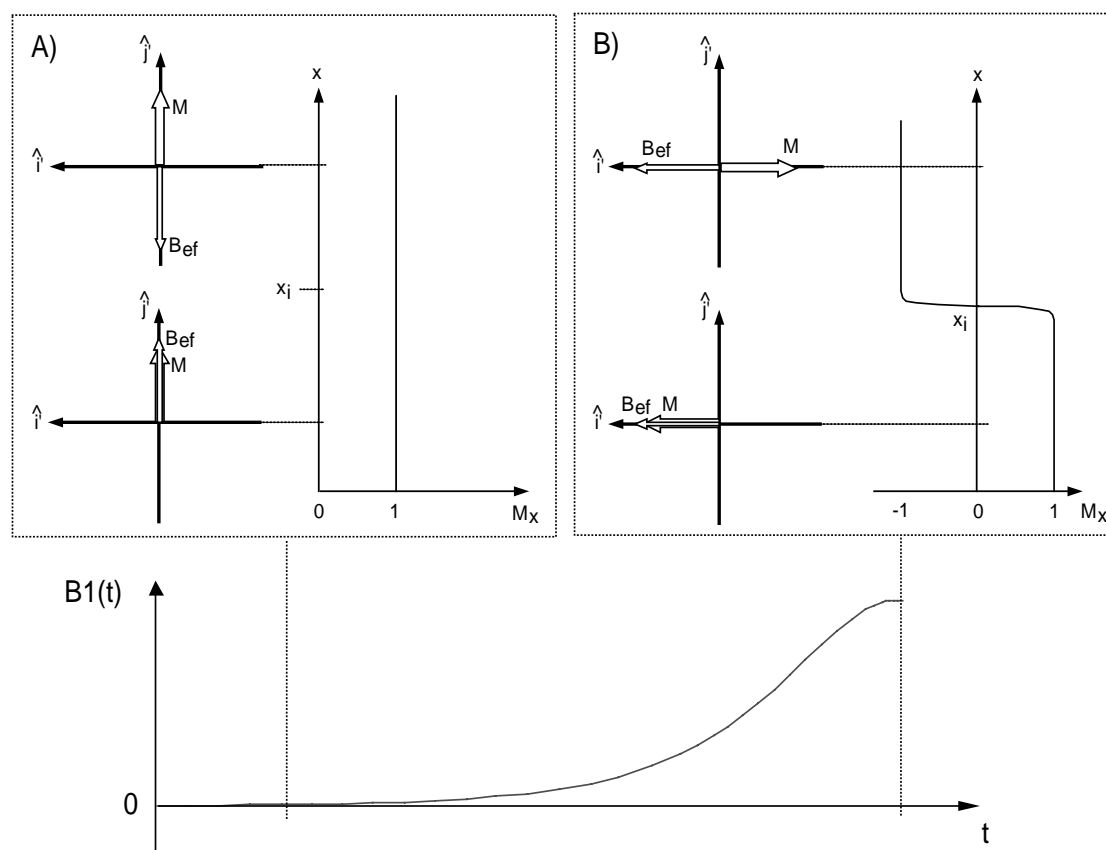


Figura 7. A) Orientação dos vetores \mathbf{M} e \mathbf{B}_{ef} no começo da aplicação de um pulso AHP. B) Os mesmos vetores no final da aplicação do pulso. Nota-se a inversão abrupta da componente M_x em x_i .

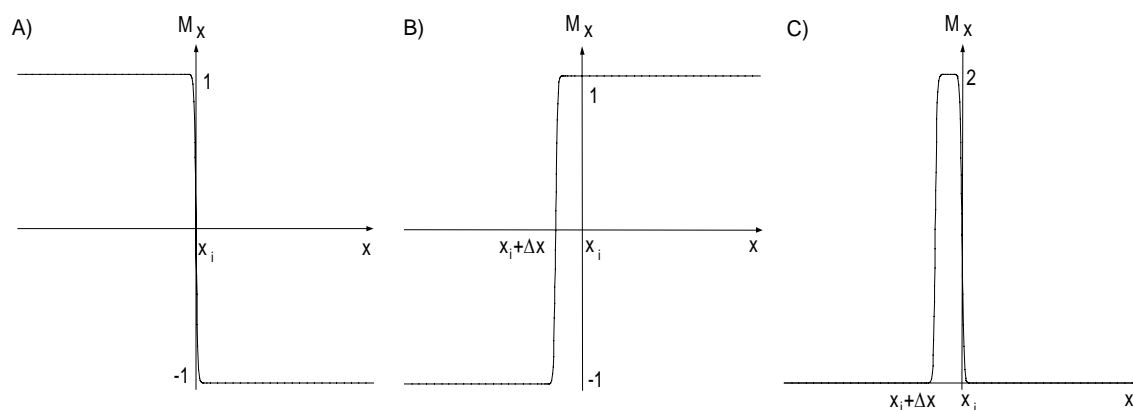


Figura 8. Magnetização transversal em C) corresponde à soma das magnetizações A) e B), resultando em seleção espacial.

Pode-se verificar que o número de aquisições necessárias para se selecionar um dado elemento espacial da amostra é 2^n , em que n é o número de coordenadas que caracterizam o elemento. Assim, para uma fatia, uma tira e um volume são necessárias duas, quatro e oito aquisições respectivamente. A localização de volume para NMR usando GMAX, chamada de 3D-GMAX, pode ser apreciada no experimento realizado em ³⁴.

3.3 – Descrição analítica de GMAX.

Iremos agora resolver analiticamente a equação diferencial obedecida pela magnetização exposta aos campos produzidos pela metodologia GMAX. Como foi dito anteriormente, iremos considerar os tempos de relaxação como sendo infinitos em comparação com o tempo de aplicação da metodologia. Sabemos portanto que sob essas circunstâncias a equação diferencial [1.3] governará o comportamento da magnetização. O desenvolvimento feito nesta seção é similar ao realizado por Hioe³⁵, com a diferença principal de que nesta dissertação trazemos a inovação de considerar campos magnéticos espacialmente variáveis devido à inclusão dos gradientes exigidos por GMAX. Essa proposta foi sugerida em ¹ e agora acreditamos que foi plenamente desenvolvida neste trabalho.

O desenvolvimento de soluções analíticas para a magnetização induzida por GMAX traz dois interesses mais amplos. Primeiramente o aspecto prático, pois uma vez que encontremos soluções analíticas, e a partir delas consigamos representações particulares em formas fechadas, teremos em mãos o controle e previsibilidade exatos do perfil da magnetização induzida em função dos parâmetros da metodologia. E em segundo lugar (não de importância), existe o interesse acadêmico no desenvolvimento dessas soluções, pois os pulsos HS empregados em GMAX pertencem à rara condição em que a EDM [1.3] possui solução analítica. Veremos também, no capítulo 4, o interessante resultado em que a dependência espacial das soluções, causada pelos gradientes, nos dão em um único pulso as soluções particulares encontradas por Hioe³⁵. Por fim, todos os procedimentos algébricos realizados até agora, e os posteriores que culminarão na solução do problema, foram abordados de forma a expor os conceitos e grandezas físicas subjacentes, como por exemplo, rotações e funções de onda, ao invés de apenas desenvolver os procedimentos matemáticos.

Iremos descrever a magnetização induzida por GMAX, no caso do pulso HS, começando pela descrição quântica da dinâmica do spin nuclear, utilizando os conceitos introduzidos na seção 1.2. Outras maneiras de descrever a magnetização foram apresentadas em trabalhos anteriores. Hioe³⁵ partiu da descrição clássica, resolvendo diretamente a EDM e Silver et al^{36, 37} partiram da equação de Bloch-Riccati, que é a forma que a EDM assume ao se utilizar a representação fasorial para as componentes transversais dos vetores campo magnético e magnetização. No entanto, ambas as descrições culminam na equação diferencial hipergeométrica governando a dinâmica de variáveis que correspondem exatamente às amplitudes dos autovetores de um spin nuclear $\frac{1}{2}$. Portanto, achamos mais instrutivo partir da descrição quântica. O problema de resolver um sistema quântico de dois níveis submetido a diversos tipos de modulações do campo interagente já foi estudado por vários autores³⁸⁻⁴¹.

Começemos descrevendo o vetor de estado no RG em que a componente B_z do campo magnético total desaparece. Para tanto devemos utilizar o seguinte ângulo de rotação na transformação [1.20]:

$$[3.13] \quad \theta(t) = -\int \gamma B_z(t) dt$$

Assim, as componentes de $|\psi\rangle$ no RL expressas em função de $|\psi'\rangle$ no RG são:

$$[3.14] \quad \begin{aligned} u(t) &= u'(t) e^{i\frac{\gamma}{2} \int B_z dt} \\ v(t) &= v'(t) e^{-i\frac{\gamma}{2} \int B_z dt} \end{aligned}$$

A equação de Schrödinger que descreve o sistema no RL é dada por:

$$[3.15] \quad i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = -\gamma \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \begin{bmatrix} B_1(t) \cos \int \omega dt \\ B_1(t) \sin \int \omega dt \\ B_z(t) \end{bmatrix} |\psi\rangle$$

Em que foi utilizada a representação [1.17] para o hamiltoniano. Substituindo [3.14] em [3.15] temos as duas equações diferenciais ordinárias de primeira ordem acopladas para as amplitudes do vetor de estado no RG:

$$[3.16] \quad \begin{aligned} \frac{dU}{dt} &= i \frac{\gamma B_1}{2} e^{-i \int \Delta \omega dt} V \\ \frac{dV}{dt} &= i \frac{\gamma B_1}{2} e^{i \int \Delta \omega dt} U \end{aligned}$$

Sendo que $\Delta\omega = \gamma B_z + \omega$ e a seguinte mudança de símbolos foi feita: $U \equiv u'$ e $V \equiv v'$. Vemos de [3.16] o motivo de termos escolhido o RG com a rotação [3.13]. Pois podemos transformar esse sistema em uma única equação diferencial de segunda ordem para uma das variáveis dependentes:

$$[3.17] \quad \ddot{U} + \left(i\Delta\omega(x,t) - \frac{\dot{B}_1(t)}{B_1(t)} \right) \dot{U} + \left(\frac{\gamma B_1(t)}{2} \right)^2 U = 0$$

Os pontos sobre as funções indicam derivada temporal. A equação [3.17], embora aparentemente simples, é ainda bastante geral. No entanto, se utilizarmos os pulsos HS no intervalo de tempo $-\infty < t \leq 0$:

$$[3.18] \quad \gamma B_1(t) = \frac{\alpha}{\pi\tau} \operatorname{sech}\left(\frac{t}{\tau}\right)$$

$$[3.19] \quad \Delta\omega(x, t) = \frac{\beta(x)}{\pi\tau} \tanh\left(\frac{t}{\tau}\right)$$

Juntamente com a seguinte transformação da variável t :

$$[3.20] \quad z = \frac{1}{2} \left[1 + \tanh\left(\frac{t}{\tau}\right) \right]$$

A equação [3.17] transforma-se na equação diferencial hipergeométrica:

$$[3.21] \quad z(1-z)U'' + [c - (a+b+1)z]U' - abU = 0$$

Em que:

$$[3.22] \quad \begin{aligned} a &= \frac{1}{2\pi}(\phi + i\beta) \\ b &= \frac{1}{2\pi}(-\phi + i\beta) \quad \text{e} \quad \phi(x) = \sqrt{\alpha^2 - \beta(x)^2} \\ c &= \frac{1}{2} \left(1 + i \frac{\beta}{\pi} \right) \end{aligned}$$

As aspas em [3.21] indicam derivada com respeito ao z de [3.20] (não confundir com a coordenada espacial z). A escolha dos pulsos [3.18] e [3.19], no intervalo temporal mencionado, correspondem a AHP da Figura 5.A). Foi utilizada a mesma

representação de H_{10e}^{35} para as constantes nas funções [3.18] e [3.19]. Essa escolha normaliza a área da função [3.18] quando $\alpha = 1$.

4 – Resultados da descrição analítica de GMAX.

Neste capítulo são encontradas as soluções da equação diferencial hipergeométrica [3.21], bem como são discutidas as implicações dessas soluções. Na seção 4.1 é encontrada a solução geral sendo expressa como a própria função hipergeométrica. Dessa solução geral obtemos uma solução particular através da restrição da variável tempo para o instante particular $t = 0$. Como resultado encontramos uma solução simples para a componente M_z , a qual permite estimar a forma da componente M_x . Uma outra forma de restrição é apresentada na seção 4.2, que resulta em soluções espacialmente discretas para M_x , no entanto, mais simples que a solução geral. Por fim, discutimos na seção 4.3 a possibilidade de se obter uma solução analítica em formas fechadas para a componente M_x no final da aplicação do pulso, ou seja, em $t = 0$. Neste trabalho chamamos de formas fechadas (FF's) aquelas funções que possam ser escritas como uma combinação finita de funções elementares. Sendo que funções elementares são aquelas definidas por operações simples de soma, multiplicação e potenciação efetuadas sobre variáveis contidas no conjunto dos números complexos.

4.1 – Solução geral.

A solução geral da equação [3.21] no intervalo $0 < z < 1$, que corresponde a $-\infty < t < \infty$ é dada por⁴²:

$$[4.1] \quad U = a_1 F(a, b, c; z) + a_2 z^{1-c} F(a - c + 1, b - c + 1, 2 - c; z)$$

F é chamada de função hipergeométrica e as suas várias representações integrais e em série de potências podem ser encontradas em Abramowitz⁴². As constantes a_1 e a_2 devem ser determinadas através das condições de contorno. Vamos impor, portanto, a seguinte condição inicial que condiz com a situação real:

$$[4.2] \quad \lim_{z \rightarrow 0^+} M_z = 1$$

Sendo que o valor da magnetização de equilíbrio foi normalizado a 1. Da terceira equação de [1.28], a condição [4.2] implica nos seguintes valores para U e V :

$$[4.3] \quad \lim_{z \rightarrow 0^+} |U|^2 = 1$$

$$[4.4] \quad \lim_{z \rightarrow 0^+} V = 0$$

Portanto vamos calcular o módulo ao quadrado de [4.1]:

$$[4.5] \quad |U|^2 = |a_1|^2 |F_1|^2 + a_1 a_2^* F_1 z^{1-c^*} F_2^* + a_1^* a_2 F_1^* z^{1-c} F_2 + |a_2|^2 z^{2-(c+c^*)} |F_2|^2$$

F_1 e F_2 são as funções F que multiplicam respectivamente a_1 e a_2 em [4.1]. Vamos usar a seguinte representação em série de F para calcular o limite em $z \rightarrow 0^+$:

$$[4.6] \quad F(a, b, c; z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n (b)_n}{(c)_n} \frac{z^n}{n!}$$

$(a)_n = \Gamma(a+n)/\Gamma(a)$ é chamado de símbolo de Pochhammer e Γ é a função gama. Vemos de [3.22] que $(c)_n$ e $(2-c)_n$ nunca se anulam. Portanto, utilizando [4.6] temos os seguintes limites:

$$[4.7] \quad \lim_{z \rightarrow 0^+} F_1 = \lim_{z \rightarrow 0^+} F_2 = 1$$

Também é fácil verificar que:

$$[4.8] \quad \lim_{z \rightarrow 0^+} z^{1-c^*} = \lim_{z \rightarrow 0^+} z^{1-c} = \lim_{z \rightarrow 0^+} z^{2-(c+c^*)} = 0$$

Utilizando os resultados [4.7] e [4.8] em [4.5]:

$$[4.9] \quad a_1 = e^{i\chi}$$

Sendo χ uma fase arbitrária. Tendo determinado a constante a_1 a partir de [4.3], vamos agora determinar a_2 a partir de [4.4]. O desenvolvimento a seguir é utilizado para se obter V em função de z partindo-se da primeira equação de [3.16]:

$$[4.10] \quad \frac{dU}{dz} \frac{dz}{dt} = i \frac{\gamma B_1}{2} e^{-i \int \Delta \omega dt} V$$

$$[4.11] \quad \therefore V = \frac{e^{i \int \Delta \omega dt}}{i \gamma B_1} \frac{1 - (2z - 1)^2}{\tau} \frac{dU}{dz}$$

Utilizando a seguinte relação satisfeita pela derivada de F^{42} :

$$[4.12] \quad \frac{d}{dz} F(a, b, c; z) = \frac{ab}{c} F(a + 1, b + 1, c + 1; z)$$

Temos:

$$[4.13] \quad \frac{dU}{dz} = a_1 \frac{ab}{c} F(a + 1, b + 1, c + 1; z) + a_2 (1 - c) z^{-c} F_2 + \frac{a_2 (a - c + 1)(b - c + 1)}{2 - c} z^{1-c} F(a - c + 2, b - c + 2, 3 - c)$$

A mesma argumentação utilizada em [4.7] aplica-se para as funções hipergeométricas em [4.13] de tal forma que todas se reduzem a 1 no limite $z \rightarrow 0^+$.

Prosseguindo com os outros termos de [4.11]:

$$[4.14] \quad \int \Delta \omega dt = \frac{\beta}{\pi} \ln[\cosh(t/\tau)] = \ln\left[1 - (2z-1)^2\right]^{-\beta/2\pi}$$

$$[4.15] \quad \therefore e^{i \int \Delta \omega dt} = \left[1 - (2z-1)^2\right]^{-i\beta/2\pi}$$

$$[4.16] \quad \gamma B_1 = \frac{\alpha}{\pi\tau} \left[1 - (2z-1)^2\right]^{1/2}$$

$$[4.17] \quad \therefore V = \frac{\pi}{i\alpha} [4z(1-z)]^{c^*} \frac{dU}{dz}$$

Ao inserir a equação [4.13] em [4.17] encontramos os seguintes limites:

$$[4.18] \quad \begin{aligned} \lim_{z \rightarrow 0^+} [4z(1-z)]^{c^*} &= 0 \\ \lim_{z \rightarrow 0^+} [4z(1-z)]^{c^*} z^{-c} &= [4(1-z)]^{c^*} z^{-i\beta/\pi} = 4^{c^*} z^{-i\beta/\pi} = \text{indeterminado} \\ \lim_{z \rightarrow 0^+} [4z(1-z)]^{c^*} z^{1-c} &= [4z^2(1-z)]^{c^*} = [4z^2(1-z)]^{1/2-i\beta/2\pi} = 0 \end{aligned}$$

Assim, devido ao segundo limite de [4.18], a única forma de satisfazer a condição [4.4] é através da imposição:

$$[4.19] \quad a_2 = 0$$

Como resultado, a solução geral para a componente U do vetor de estado, dada a condição inicial [4.2], é:

$$[4.20] \quad U = F(a, b, c; z)$$

Como veremos adiante, uma fase arbitrária em U não altera o valor da magnetização. Por isso escolhemos $\chi = 0$ em [4.20].

4.1.a – Solução em $t = 0$.

Vamos agora obter o valor da componente z da magnetização no instante $t = 0$ ($z = 1/2$). Na verdade esse é o instante que nos interessa, pois ele corresponde ao término da aplicação do pulso. Aplicando a relação de normalização $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ na terceira equação normalizada de [1.28], temos:

$$[4.21] \quad M_z = 2|U|^2 - 1$$

Aplicando-se as seguintes identidades em [4.21]⁴²:

$$[4.22] \quad \begin{aligned} F(a, b, c, z) &= F\left(a, b, \frac{a+b+1}{2}, z\right) \\ F\left(a, b, \frac{a+b+1}{2}, \frac{1}{2}\right) &= \sqrt{\pi} \frac{\Gamma\left(\frac{a+b+1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{a+1}{2}\right)\Gamma\left(\frac{b+1}{2}\right)} \\ \Gamma\left(\frac{1}{2} + ix\right)\Gamma\left(\frac{1}{2} - ix\right) &= \frac{\pi}{\cosh(\pi x)} \\ [\Gamma(x)]^* &= \Gamma(x^*) \end{aligned}$$

Encontramos:

$$[4.23] \quad M_z = 2\pi \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} + i\frac{\beta}{2\pi}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2} + \frac{a}{2}\right)\Gamma\left(\frac{1}{2} + \frac{b}{2}\right)} \cdot \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} - i\frac{\beta}{2\pi}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2} + \frac{a^*}{2}\right)\Gamma\left(\frac{1}{2} + \frac{b^*}{2}\right)} - 1$$

$$[4.24] \quad M_z = 2\pi \frac{\cosh\left(\frac{\pi a}{2i}\right) \cosh\left(\frac{\pi b}{2i}\right)}{\cosh\left(\frac{\beta}{2}\right)} - 1 = \frac{\cos\left(\frac{\phi}{2}\right) + \cosh\left(\frac{\beta}{2}\right)}{\cosh\left(\frac{\beta}{2}\right)} - 1$$

$$[4.25] \quad \therefore M_z(z = 1/2) = \cos(\phi/2) \operatorname{sech}(\beta/2)$$

A primeira igualdade de [4.22] aplica-se particularmente para os nossos parâmetros expressos em [3.22], enquanto as três outras igualdades aplicam-se para quaisquer valores de x pertencentes ao conjunto dos complexos.

O próximo passo seria continuar o desenvolvimento das equações acima e obter sucessivamente as componentes M_y e M_x através das outras duas relações de [1.28]. No entanto, é mostrado na seção 4.3 que, diferentemente da componente M_z , não foi possível encontrar uma expressão em termos de FF's para as outras duas componentes da magnetização, mesmo restringindo a solução para o instante $t = 0$.

Embora não seja possível encontrar uma expressão simples para a componente M_x , é possível obter informações de interesse prático sobre essa componente observando somente M_z expresso em [4.25].

É possível estabelecer a máxima qualidade permitida para a borda da fatia. Definimos essa qualidade como sendo tão alta quanto mais abrupta for a inversão da componente M_x . Assim, queremos que as outras duas componentes, M_y e M_z , não sejam nulas somente em uma região tão pequena quanto possível em torno de x_i da Figura 8, de tal forma que M_x alcance os valores extremos (± 1) fora dessa região. Como possuímos uma forma fechada somente para a componente M_z , podemos estimar a qualidade da fatia através da largura dessa componente. A largura de M_z corresponderá portanto ao intervalo mais curto de inversão de M_x possível. A questão de essa ser a máxima qualidade da borda decorre do fato de não sabermos qual é o comportamento de M_y , fazendo com que só possamos afirmar que a qualidade não ultrapassará o valor determinado pela largura de M_z . Essa argumentação decorre do fato de que, como não estamos considerando a relaxação, o módulo de \mathbf{M} se conserva, $M_x^2 + M_y^2 + M_z^2 = 1$.

Vamos analisar portanto a equação [4.25]. Primeiramente é importante observar que a coordenada espacial x está embutida nessa expressão de M_z através de $\beta(x)$. Mas a exata dependência de β dependerá da associação arbitrária que fizermos entre os parâmetros físicos do pulso expressos em [3.12] com as grandezas expressas em [3.19]. Assim, a partir daqui adotaremos as seguintes associações entre as grandezas dessas duas equações:

$$[4.26] \quad qx - p = \frac{\beta(x)}{\pi\tau}$$

$$[4.27] \quad f(t) = \tanh(t/\tau)$$

Continuando com [4.25], podemos identificar duas regiões distintas varridas por β . Para $|\beta| \leq |\alpha|$ o parâmetro ϕ é real. Conseqüentemente, nesse intervalo a largura de M_z será determinada pela envoltória $\text{sech}(\beta/2)$. Para $|\beta| > |\alpha|$ ϕ torna-se imaginário puro, e no limite em que $|\beta| \rightarrow \infty$ encontra-se $|M_z| = 1$. Assim, a região $|\beta| \leq |\alpha|$ é a que nos interessa. Portanto, primeiramente defini-se uma largura $\Delta\beta$ para a curva $\text{sech}(\beta/2)$, que pode ser a largura a meia altura. Em seguida relaciona-se esse $\Delta\beta$ com a largura espacial Δx através da expressão [4.26], resultando em:

$$[4.28] \quad \Delta x = \frac{\Delta\beta}{\pi\tau|q|}$$

A expressão [4.28] representa o fator de “sharpness”, que fornece quantitativamente a máxima qualidade da borda de inversão da componente M_x produzida pela metodologia GMAX. Vemos dessa expressão que a inversão será tão abrupta quanto maior for a amplitude q do gradiente expresso em [3.11] e quanto maior for a largura τ do pulso. Conseqüentemente, caso deseje-se a mesma qualidade para todas as bordas de uma fatia ou de um volume selecionado, deve-se utilizar o mesmo valor τq para os respectivos pulsos, sendo que a largura da fatia pode ser determinada

pela alteração do parâmetro p . Esses resultados são coerentes com o que esperaríamos de uma análise qualitativa da metodologia.

A Figura 9 ilustra bem a discussão feita nesta subseção. Nota-se que o valor de M_z retorna a 1 nas regiões em que $|\beta| > |\alpha|$. Assim, o parâmetro α , que é a própria amplitude do pulso de RF, determina a largura da região onde M_x é homogêneo, ou seja, a região onde o valor ± 1 é mantido razoavelmente constante. Temos então como definir um fator de “flatness” δx como sendo a metade da largura de x que satisfaz a desigualdade $|\beta| \leq |\alpha|$. De [4.26]:

$$[4.29] \quad \delta x = \left| \frac{\alpha \pi \tau + p}{q} - \frac{p}{q} \right| = \pi \tau \left| \frac{\alpha}{q} \right|$$

Vemos de [4.29] e [4.28] que quanto maior o produto $\alpha \tau$ menor será o fator Δx para um mesmo δx .

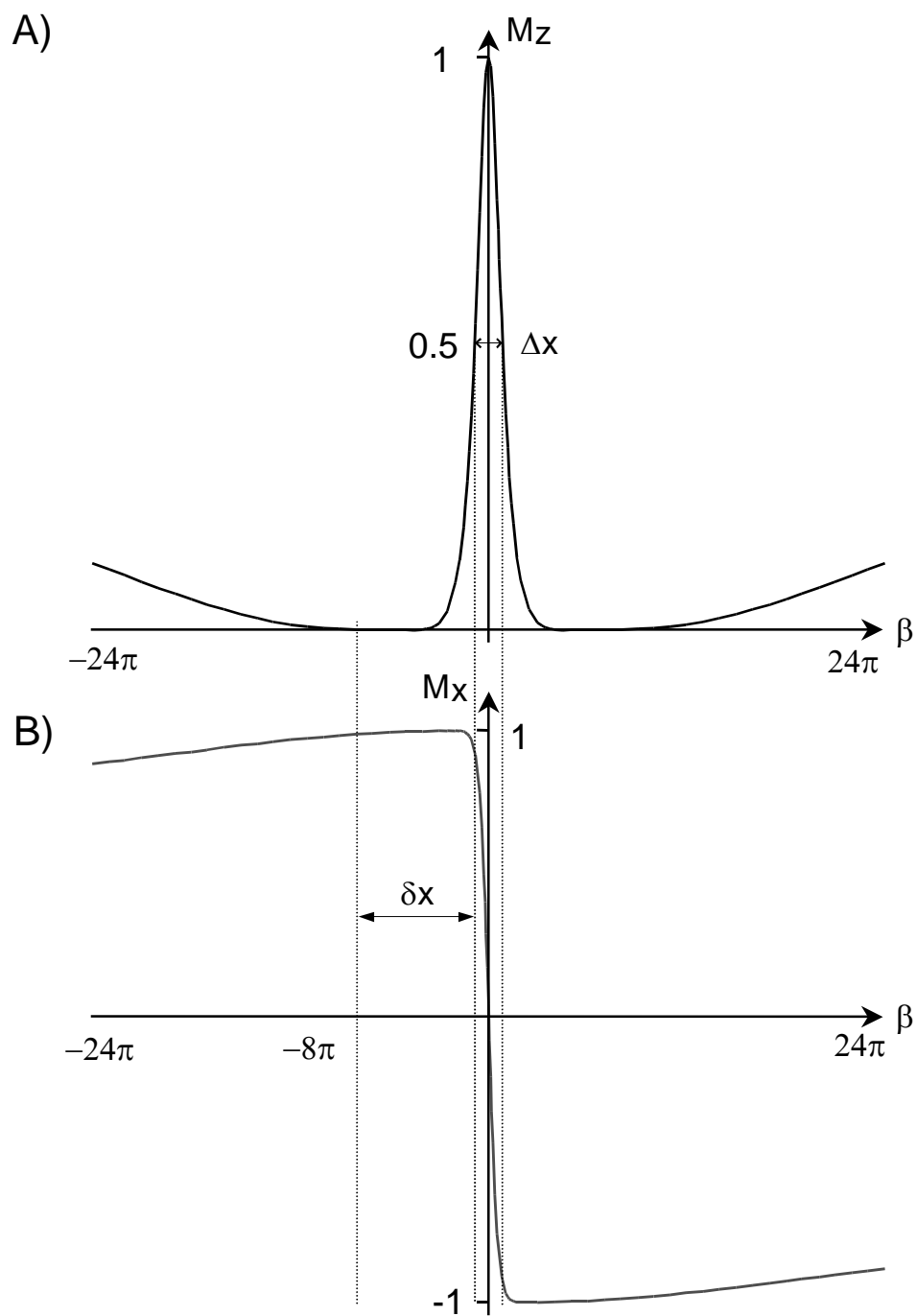


Figura 9. A) Curva $M_z(t=0)$. Pode-se notar que na região próxima à origem a curva é determinada pela sech e para regiões afastadas o valor de M_z tende a 1. B) Curva $M_x(t=0)$. A largura da inversão está associada com a largura da curva de M_z . Foi utilizado o valor $\alpha=8\pi$.

4.2 – Soluções discretas.

Nesta seção iremos obter uma simplificação para a solução geral [4.20]. O objetivo dessa simplificação é expressar a magnetização em termos de funções que admitam uma forma fechada. Para conseguir esse objetivo iremos observar em quais condições a representação em série [4.6] da função hipergeométrica se reduz a polinômios.

Começemos utilizando mais uma igualdade satisfeita por F ⁴²:

$$[4.30] \quad F(a, b, c; z) = (1-z)^{c-a-b} F(c-a, c-b, c; z)$$

De [3.22]:

$$[4.31] \quad \begin{aligned} c-a &= 1/2 - \phi/2\pi \equiv a' \\ c-b &= 1/2 + \phi/2\pi \equiv b' \\ c-a-b &= c^* \\ a' &= 1-b' \end{aligned}$$

$$[4.32] \quad \therefore U = F(a, b, c; z) = (1-z)^{c^*} F(a', b', c; z)$$

Calculando $(a')_n$:

$$[4.33] \quad (a')_n = \frac{\Gamma(a'+n)}{\Gamma(a')} = a'(a'+1)\dots(a'+n-1) = (1-b')(2-b')\dots(n-b')$$

Vemos de [4.33] que a maneira de transformar $F(a', b', c; z)$ em um polinômio em z é utilizar valores para b' tais que $b' \in \mathbb{N}$. De [4.31], definindo $m \equiv b'$, isso implica na seguinte restrição para ϕ :

$$[4.34] \quad \phi = (2m-1)\pi, \quad m = 1, 2, 3, \dots$$

Considerando que a amplitude α do pulso de RF é espacialmente constante, conclui-se da expressão de ϕ em [3.22] que somente determinados valores discretos de β satisfazem [4.34]. Os valores de β , as respectivas posições x e os respectivos valores de U , que restringem a representação em série de F, seguem abaixo:

$$[4.35] \quad \beta_m = \pm \sqrt{\alpha^2 - (2m-1)^2 \pi^2}$$

$$[4.36] \quad x_m = \frac{1}{q} \left(p \pm \frac{\sqrt{\alpha^2 - (2m-1)^2 \pi^2}}{\pi \tau} \right)$$

$$[4.37] \quad U(x_m) = (1-z)^c \sum_{n=0}^{m-1} \frac{(1-m)_n (m)_n}{(c)_n n!} z^n$$

Com [4.37] em mãos, podemos calcular $M_z(x_m)$ a partir de [4.21]. Para calcular as componentes M_x e M_y é mais conveniente utilizar o referencial girante com frequência igual à frequência do pulso $\omega(t)$. Essa escolha se deve ao fato que nesse referencial temos duas componentes de campo com as respectivas direções constantes: a componente $\Delta\omega/\gamma$ ao longo de $\hat{\mathbf{k}}'$, expressa em [3.12], e a componente B_1 ao longo de $\hat{\mathbf{i}}'$. Separando a EDM nesse RG nas três componentes temos:

$$[4.38] \quad \begin{aligned} \dot{M}_x &= \Delta\omega M_y \\ \dot{M}_y &= -\Delta\omega M_x + \gamma B_1 M_z \\ \dot{M}_z &= -\gamma B_1 M_y \end{aligned}$$

Assim, basta substituir $M_z(x_m)$ na terceira equação de [4.38] e obter $M_y(x_m)$. Em seguida substitui-se $M_z(x_m)$ e $M_y(x_m)$ na segunda equação de [4.38] e obtém-se $M_x(x_m)$. Talvez seja importante salientar que a utilização do mesmo M_z na passagem de um referencial para o outro nas equações acima é totalmente legítima, pois os dois RG's possuem os seus versores $\hat{\mathbf{k}}$ colineares.

Seguindo o procedimento descrito acima, apresentamos abaixo os valores de M_x para os dois primeiros m 's, $m = 1$ e $m = 2$:

$$\begin{aligned}
 [4.39] \quad M_x \left(x = \frac{p \pm \sqrt{\alpha^2 - \pi^2}}{q}, t \right) &= \mp \sqrt{1 - \left(\frac{\pi}{\alpha} \right)^2} \operatorname{sech} \left(\frac{t}{\tau} \right) \\
 M_x \left(x = \frac{p \pm \sqrt{\alpha^2 - (3\pi)^2}}{q}, t \right) &= \mp \frac{\sqrt{\alpha^2 - (3\pi)^2}}{\alpha^2 - 8\pi^2} \left\{ \alpha \operatorname{sech} \left(\frac{t}{\tau} \right) - \frac{4\pi^2}{\alpha} \operatorname{sech}^3 \left(\frac{t}{\tau} \right) \right\}
 \end{aligned}$$

Podemos encontrar os demais valores de $M_x(x_m)$ para todos os m 's tais que $(2m-1)\pi \leq |\alpha|$. O resultado sempre será uma série de potências ímpares de $\operatorname{sech}(t/\tau)$, com grau máximo $2m-1$. Na Figura 10 estão plotadas as parcelas positivas das equações [4.39]. Os valores $\alpha = 4\pi$ e $\tau = 1$ foram escolhidos arbitrariamente.

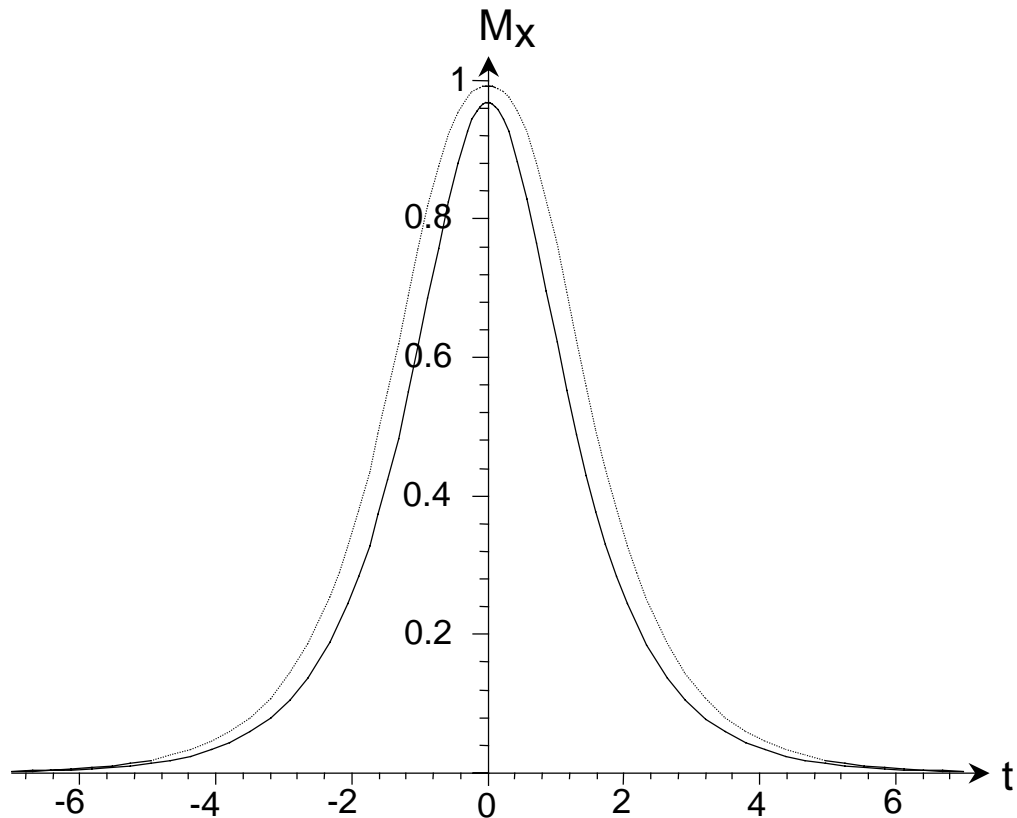
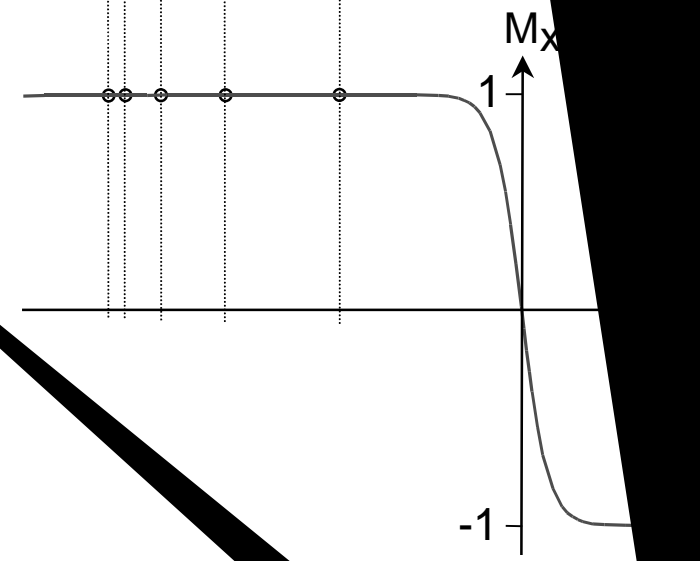
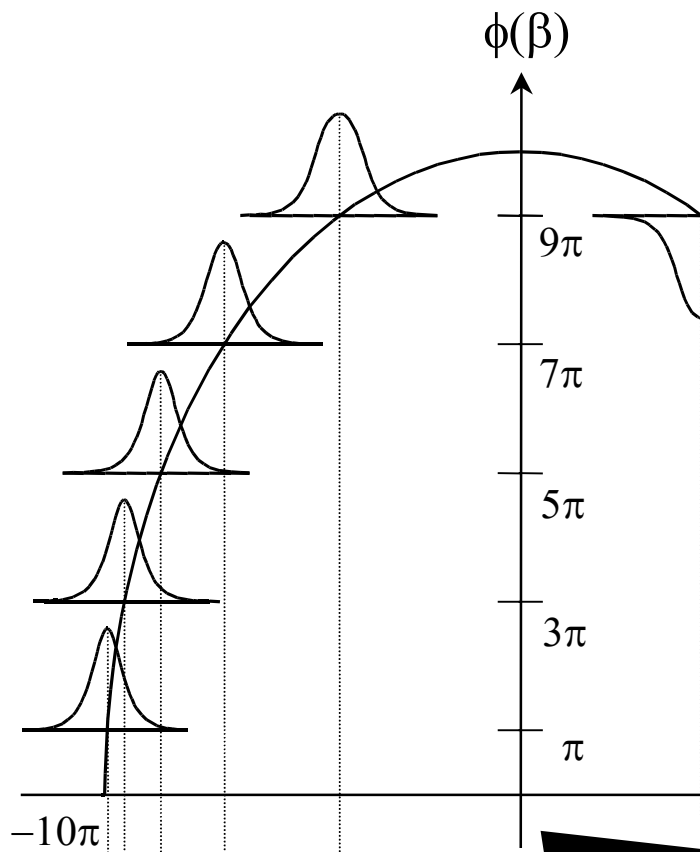


Figura 10. Curvas correspondentes às duas primeiras soluções discretas de M_x . A curva tracejada corresponde à $m=1$ e a sólida à $m=2$. Foram utilizados os valores $\alpha=4\pi$ e $\tau=1$.

A Figura 11 apresenta um bom resumo do que foi obtido nesta seção até este ponto. No gráfico da Figura 11.A) temos as curvas dos M_x 's em função do tempo plotadas nas posições $\beta(x)$ onde a função F se reduz a polinômios. Na Figura 11.B) temos a curva $M_x(\beta)$ em $t = 0$, obtida a partir da expressão geral [4.20]. Os pequenos círculos sobre a curva $M_x(\beta, t=0)$ indicam os valores que também são determinados pelas soluções discretas.

Observando a Figura 11.B) somos tentados a pensar se não é possível ajustar a curva exata de M_x em $t = 0$ com as soluções discretas, e assim fazer estimativas mais precisas a respeito do perfil de inversão. No entanto, é possível verificar que as soluções discretas sempre mantêm uma distância considerável do ponto de inversão, impossibilitando o ajuste de uma curva nessa região.

É interessante notar a característica singular do pulso proporcionado por gradientes modulados de apresentar uma função de modulação de frequência de RF cuja amplitude varia ao longo da posição através de $\beta(x)$. Como consequência, em um único pulso gerado por GMAX é possível encontrar em diferentes posições, utilizando a restrição [4.34], as várias soluções obtidas por Hioe³⁵. Este considerou um novo pulso para cada solução distinta.



4.2.a – Modulação espacial da amplitude do campo de RF.

A outra possibilidade de manter ϕ constante, com os valores de [4.34], é impor uma dependência espacial no parâmetro α :

$$[4.40] \quad \alpha(x) = \sqrt{\phi^2 + \beta(x)^2}$$

Como consequência, nos casos em que ϕ satisfaz [4.34], continuamos tendo as soluções simplificadas do tipo expresso em [4.39], só que agora $\beta(x)$ pode variar continuamente assim como a variável tempo. No entanto, o parâmetro α determina a amplitude do pulso de RF, fazendo com que a dependência [4.40] implique em um pulso de RF com amplitude não só temporalmente mas também espacialmente modulada.

Vamos analisar portanto quais são as formas das curvas da magnetização M_x e da amplitude α de RF para o caso mais simples em que $\phi = \pi$. Assim, inserindo [4.40] em [4.39] com $\phi = \pi$, temos as seguintes expressões:

$$[4.41] \quad M_x(\beta, t = 0) = \frac{-\beta}{\sqrt{\pi^2 + \beta^2}}$$

$$[4.42] \quad \alpha(\beta) = \sqrt{\pi^2 + \beta^2}$$

A Figura 12 expõe as curvas das equações [4.41] e [4.42]. A curva da Figura 12.A) mostra um perfil de M_x bastante satisfatório para a metodologia GMAX, pois além de possuir uma expressão extremamente simples ele apresenta a característica de tender a ± 1 nos valores extremos de β , algo que não acontece para o pulso GMAX com amplitude de RF espacialmente constante, conforme pode-se ver na Figura 9.B). No entanto, esse comportamento de M_x tem um alto preço na forma e na energia despendida pelo pulso de RF. É praticamente inviável produzir um campo que possua uma mudança de inclinação tão aguda quanto a que aparece na origem do gráfico da Figura 12.B).

Além disso, o valor de α nos extremos de β é cerca de três vezes maior que o valor de α utilizado na Figura 11.B), a qual possui um perfil de inversão praticamente igual ao da Figura 12.A).

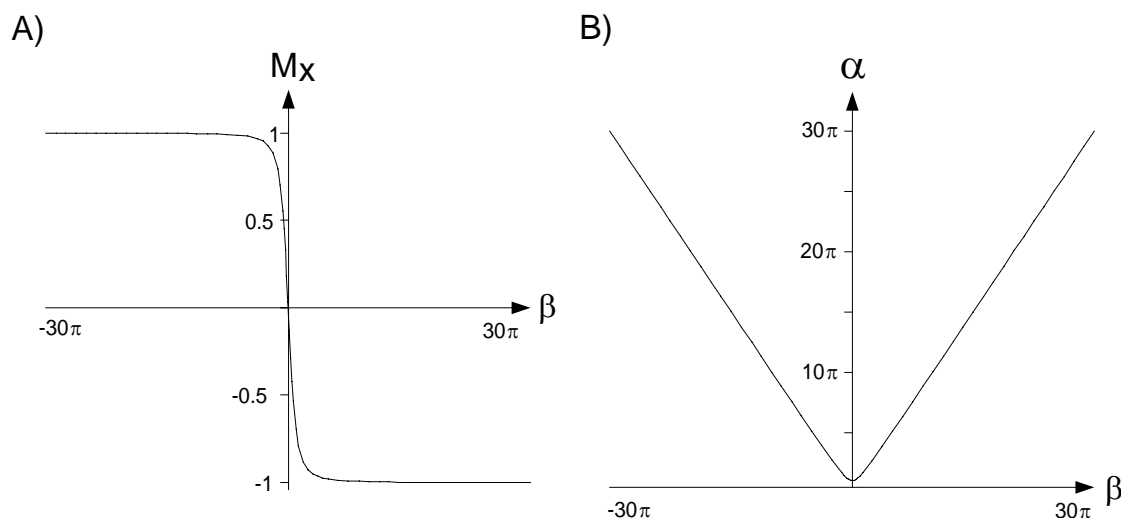


Figura 12. A) Magnetização M_x em $t=0$, obtida da solução mais simples que utiliza pulso de RF com amplitude espacialmente variável. B) Dependência espacial da amplitude de RF que produz a curva de M_x . Foi utilizado o parâmetro $\phi=\pi$.

Vejamos agora o que acontece se aumentarmos o valor do parâmetro ϕ . A Figura 13 apresenta os gráficos das mesmas variáveis da Figura 12 só que agora utilizando $\phi = 5\pi$. Com esse valor de ϕ já não temos uma expressão tão simples quanto a [4.41], embora ainda seja uma FF. No entanto, podemos ver da Figura 13.B) que a variação na inclinação de α é mais suave que a da Figura 12.B). Além disso, o perfil de inversão da Figura 13.A) é mais abrupto que da Figura 12.A). Utilizando-se um ϕ ainda maior é possível melhorar ainda mais essas características.

Os pulsos com amplitude espacialmente variável expostos nesta subseção necessitariam ser estudados mais detalhadamente para ver se existe viabilidade e vantagem prática em construí-los. Porém, eles foram abordados nesta dissertação, pois, independentemente do aspecto prático, são uma das possibilidades de interpretação do modelo proposto.

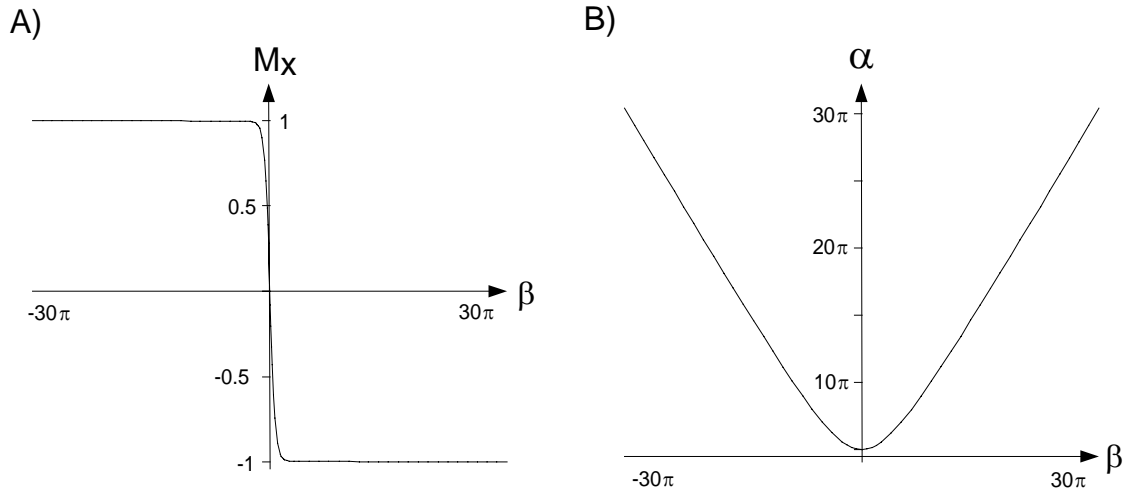


Figura 13. A mesma situação da Figura 12, utilizando-se agora $\phi=5\pi$.

4.3 – Tentativas de obter soluções em formas fechadas.

Fecharemos o trabalho discutindo sobre a dificuldade em encontrar soluções analíticas em termos de FF's, em $t = 0$, para as componentes transversais M_x e M_y .

No desenvolvimento a seguir iremos utilizar novamente as relações [4.12] e [4.22]. Com o intuito de obter M_x , comecemos da equação [4.21]:

$$[4.43] \quad M_z(t) = 2FF^* - 1$$

De [4.38]:

$$[4.44] \quad M_y(t) = -\frac{2}{\gamma B_1} (F'F^* + F'^*F) \dot{z}$$

$$[4.45] \quad \therefore M_y(t) = -\frac{\pi}{\alpha} (F'F^* + F'^*F) \operatorname{sech}\left(\frac{t}{\tau}\right)$$

Novamente a linha corresponde à derivada em z e o ponto à derivada em t . Podemos obter M_x através de:

$$[4.46] \quad M_x = \pm \sqrt{1 - M_z^2 - M_y^2}$$

Como já temos M_z em [4.25] expresso em FF's, só falta resolver o termo entre parênteses que contém as funções F na equação [4.45]. Logo:

$$[4.47] \quad F'(z=1/2)F^*(z=1/2) = \pi ab \frac{\Gamma(c)}{\Gamma\left(1+\frac{a}{2}\right)\Gamma\left(1+\frac{b}{2}\right)} \cdot \frac{\Gamma(c^*)}{\Gamma\left(\frac{1}{2}+\frac{a^*}{2}\right)\Gamma\left(\frac{1}{2}+\frac{b^*}{2}\right)}$$

$$[4.48] \quad \Gamma(c)\Gamma(c^*) = \Gamma\left(\frac{1}{2}+i\frac{\beta}{2\pi}\right)\Gamma\left(\frac{1}{2}-i\frac{\beta}{2\pi}\right) = \pi \operatorname{sech}\left(\frac{\beta}{2}\right)$$

As seguintes igualdades satisfeitas por [3.22]:

$$[4.49] \quad \begin{aligned} a^* &= -b \\ b^* &= -a \end{aligned}$$

Ao serem inseridas em [4.47] juntamente com [4.48] dão:

$$[4.50] \quad F'F^* + F'^*F = \pi^2 ab \operatorname{sech}\left(\frac{\beta}{2}\right) \left(\frac{1}{\Gamma\left(1+\frac{a}{2}\right)\Gamma\left(1+\frac{b}{2}\right)\Gamma\left(\frac{1}{2}-\frac{b}{2}\right)\Gamma\left(\frac{1}{2}-\frac{a}{2}\right)} + \frac{1}{\Gamma\left(1-\frac{b}{2}\right)\Gamma\left(1-\frac{a}{2}\right)\Gamma\left(\frac{1}{2}+\frac{a}{2}\right)\Gamma\left(\frac{1}{2}+\frac{b}{2}\right)} \right)$$

$$\begin{aligned}
& F'F^* + F'^*F = \frac{8\pi^2}{ab} \operatorname{sech}\left(\frac{\beta}{2}\right) \\
[4.51] \quad & \times \frac{\Gamma\left(\frac{a}{2}\right)\Gamma\left(\frac{b}{2}\right)\Gamma\left(\frac{1}{2}-\frac{b}{2}\right)\Gamma\left(\frac{1}{2}-\frac{a}{2}\right) + \Gamma\left(-\frac{b}{2}\right)\Gamma\left(-\frac{a}{2}\right)\Gamma\left(\frac{1}{2}+\frac{a}{2}\right)\Gamma\left(\frac{1}{2}+\frac{b}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{a}{2}\right)\Gamma\left(-\frac{a}{2}\right)\Gamma\left(\frac{b}{2}\right)\Gamma\left(-\frac{b}{2}\right)\Gamma\left(\frac{1}{2}-\frac{b}{2}\right)\Gamma\left(\frac{1}{2}+\frac{b}{2}\right)\Gamma\left(\frac{1}{2}-\frac{a}{2}\right)\Gamma\left(\frac{1}{2}+\frac{a}{2}\right)}
\end{aligned}$$

De [4.50] para [4.51] foi utilizada a propriedade $\Gamma(1+x) = x\Gamma(x)$. O denominador de [4.51] pode ser escrito em formas fechadas expressas por funções trigonométricas e hiperbólicas através do emprego da terceira equação de [4.22] e da seguinte identidade⁴².

$$[4.52] \quad \Gamma(x)\Gamma(-x) = \frac{\pi \csc(\pi x)}{x}$$

Resta, portanto, resolver o numerador, N , de [4.51]. Para isso, vamos utilizar a seguinte igualdade⁴³ satisfeita por Γ :

$$\begin{aligned}
[4.53] \quad & \Gamma\left(\frac{1}{2} + x\right) = \frac{\Gamma(x)}{f(x)} \\
& f(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\pi/2} \cos^{2x-1} \theta \, d\theta = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\pi/2} \operatorname{sen}^{2x-1} \theta \, d\theta
\end{aligned}$$

Com a restrição de que $\operatorname{Re}(x) > 0$. Inserindo [4.53] em N :

$$[4.54] \quad N = \Gamma\left(\frac{a}{2}\right)\Gamma\left(-\frac{a}{2}\right)\Gamma\left(\frac{b}{2}\right)\Gamma\left(-\frac{b}{2}\right) \left[f^{-1}\left(-\frac{b}{2}\right)f^{-1}\left(-\frac{a}{2}\right) + f^{-1}\left(\frac{b}{2}\right)f^{-1}\left(\frac{a}{2}\right) \right]$$

O termo fora dos colchetes em [4.54] pode ser resolvido com [4.52], enquanto o termo dentro dos colchetes permanece sem representação em termos de formas fechadas.

De uma maneira geral é possível mostrar que para os parâmetros [3.22], temos soluções com FF's para os seguintes produtos P :

$$[4.55] \quad P = \left(F^{(n)}\right)^* F^{(p)} \quad , \quad n - p = 2m \quad , \quad m \in Z$$

O índice $^{(n)}$ indica o grau da derivada com respeito a z ou t .

Infelizmente, como no caso da equação [4.45] a diferença da ordem das derivadas é um número ímpar, não podemos aplicar esse resultado. Assim, a representação em termos de $f(x)$ ou de Γ é a melhor simplificação que pudemos encontrar.

Conclusões.

A descrição analítica da magnetização induzida pela metodologia GMAX nos levou a uma série de resultados interessantes. Primeiramente, na seção 3.3, foi possível chegar à equação diferencial hipergeométrica que descreve a evolução dos auto-estados do operador momento angular de spin $\frac{1}{2}$. O procedimento utilizado foi similar ao desenvolvido por outros autores, em especial Hioe³⁵. Algumas diferenças na abordagem do problema foram devidas às questões específicas da metodologia, tais como alterações nas condições iniciais e o aparecimento da dependência espacial na frequência do campo de RF devido à modulação do gradiente.

Foi possível então restringir a solução geral obtida da equação hipergeométrica, para uma solução simplificada da componente M_z no instante $t = 0$. Tendo obtido M_z em termos de formas fechadas, foi possível estabelecer parâmetros que medem a qualidade das fatias e volumes selecionados pela metodologia. Assim, encontramos o fator de “sharpness” ou qualidade da borda Δx como sendo $\Delta x \propto 1/\tau|q|$, em que τ é a largura temporal do pulso de RF e q é a amplitude do gradiente. Também encontramos o fator de “flatness” ou homogeneidade da fatia δx como sendo $\delta x \propto \tau|\alpha/q|$, sendo α a amplitude do pulso de RF. É importante salientar que esses fatores de qualidade são os fatores ótimos, pois não levam em conta o comportamento da componente M_y .

Embora a componente M_z tenha possibilitado estimar a qualidade das fatias e dos volumes, ela não permite descrever a forma exata da magnetização transversal M_x . Com esse objetivo em mente, procuramos restringir a solução geral não no tempo mas no espaço, de forma a obter soluções simplificadas. Como resultado, encontramos posições discretas ao longo de x onde a solução geral se reduz a polinômios de secantes hiperbólicas. Essas soluções reduzem-se a pontos no instante $t = 0$ que delineiam a curva contínua de M_x . No entanto, esses pontos são muito escassos na região da inversão, fazendo com que a definição dos fatores de qualidade do parágrafo anterior

sejam mais satisfatórios na caracterização da qualidade das fatias e volumes selecionados.

As mesmas soluções espacialmente discretas de M_x implicam em outro resultado academicamente bastante interessante. Elas podem ser obtidas sem a discretização espacial, desde que seja imposta uma modulação espacial específica para a amplitude do campo de RF. Sob essa modulação específica, temos uma descrição contínua no tempo e no espaço para todas as componentes da magnetização. No entanto, verificamos que para as soluções mais simples, essa modulação apresenta variações muito intensas na inclinação da curva da amplitude de RF em função da posição. Esse comportamento pode inviabilizar a implementação dessa idéia na prática. Ainda assim, foi possível verificar que para as soluções mais complexas, no entanto ainda soluções em formas fechadas, a variação da inclinação da amplitude de RF é mais suave e a magnetização apresenta um perfil de inversão mais abrupto para a componente M_x .

Por fim, foi avaliada a questão de não se conseguir representar a solução da magnetização transversal induzida por GMAX em $t = 0$ em termos de formas fechadas. Chegamos à conclusão de que é pouco provável que uma tal solução exista em virtude da combinação de funções gama envolvidas.

Como proposta para futuros trabalhos, pretendemos desenvolver e implementar metodologias de imagens e espectroscopia “in vivo” por Ressonância Magnética Nuclear, que utilizem pulsos de RF caracterizados como pulsos adiabáticos, explorando as propriedades desses pulsos de radiofrequência com modulação em amplitude e em frequência. As metas compreendem o aprimoramento e a implementação de funções de modulação, das técnicas de localização e de supressão de volume, de desacoplamento hetero e homonuclear para espectroscopia “in vivo” e das técnicas de supressão de solvente.

Referências.

1. Tannús, A.; Garwood, M. Analytical solutions of the Bloch equations for RF pulses which include time-dependent magnetic field gradients. In: *International Society of Magnetic Resonance 5th Meeting*, Vancouver, BC - Canada, 1997. v.1, p.1543.
2. Jackson, J.D. *Classical Electrodynamics*. New York, John Wiley & Sons, 1962, Cap.5.6.
3. Jackson, J.D. *Classical Electrodynamics*. New York, John Wiley & Sons, 1962, Cap.5.7.
4. Cohen-Tannoudji, C.; Diu, B.; Laloë, F. *Quantum Mechanics*. New York, John Wiley & Sons, 1977. v.1, Cap.BIV.
5. Cohen-Tannoudji, C.; Diu, B.; Laloë, F. *Quantum Mechanics*. New York, John Wiley & Sons, 1977. v.1, Cap.IIIC4.
6. Cohen-Tannoudji, C.; Diu, B.; Laloë, F. *Quantum Mechanics*. New York, John Wiley & Sons, 1977. v.1, Cap.IIID1.
7. Bloch, F. Nuclear Induction. *Phys. Rev.*, v.70, n.7-8, p.460-474, 1946.
8. Cohen-Tannoudji, C.; Diu, B.; Laloë, F. *Quantum Mechanics*. New York, John Wiley & Sons, 1977. v.1.
9. Slichter, C.P. *Principles of magnetic resonance*. 3rd.ed. Springer Series in Solid-State Sciences. New York, Springer-Verlag, 1990.
10. Abragam, A. *Principles of nuclear magnetism*. New York, Oxford University Press, 1989.
11. Pykett, I.L. NMR Imaging in Medicine. *Sci. Am.*, v.246, n.5, p.54-65, 1982.
12. Panepucci, H.; Donoso, J.P.; Tannús, A.; Beckmann, N.; Bonagamba, T.J. Tomografia por ressonância magnética nuclear: novas imagens do corpo. *Ciência Hoje*, v.4, n.20, p.46-56, 1985.
13. Hobbie, R.K. *Intermediate physics for medicine and biology*. New York, Springer, 1997.

14. Mansfield, P.; Morris, P.G. *NMR Imaging in Biomedicine*. New York, Academic Press, 1982.
15. Haacke, E.M. *Magnetic resonance imaging: physical principles and sequence design*. New York, Wiley-Liss, 1999.
16. Callaghan, P.T. *Principles of Nuclear Magnetic Resonance Microscopy*. Oxford, Clarendon Press, 1995.
17. Jackson, J.D. *Classical Electrodynamics*. New York, John Wiley & Sons, 1962, Cap.5.5.
18. Tannús, A. *Desenvolvimento da tecnologia de tomografia por Ressonância Magnética Nuclear*. São Carlos, SP, 1987. 230p. PhD Thesis - DFCM-IFQSC, Universidade de São Paulo.
19. Martins, M.J. *Desenvolvimento de um Tomógrafo de Ressonância Magnética: Integração e Otimização*. São Carlos, 1995. 78p. Tese (Doutorado) - Departamento de Física e Ciência dos Materiais, USP.
20. Vidoto, E.L.G. *Projeto e construção de um equipamento de imagens por Ressonância Magnética para uso clínico e em pesquisa*. São Carlos, 2001. 109p. Tese (Doutorado) - FFI-IFSC, USP.
21. Xavier, R.F. *Desenvolvimento e construção de bobinas de gradiente com Blindagem Ativa (Active Shielding) com aplicação em Imagens por RMN*. São Carlos, 2000. 109p. Dissertação (Mestrado) - Departamento de Física e Informática - IFSC - USP, Universidade de São Paulo.
22. Jackson, J.D. *Classical Electrodynamics*. New York, John Wiley & Sons, 1962, Cap.1.9.
23. Roméo, F.; Hoult, D.I. Magnetic field profiling: Analysis and correcting coil design. *Magn. Reson. Med.*, v.1, n.1, p.44-65, 1984.
24. Bracewell, R.N. *Fourier transform and its applications*. New York, McGraw-Hill, 1965.
25. Foerster, B.U.; Vidoto, E.L.G.; Tannús, A.; Panepucci, H. Optimization of Selective Inversion Pulses by Temporal Preenphasys. In: *International Society of Magnetic Resonance in Medicine, Tenth Scientific Meeting and Exhibition*, Honolulu, Hawaii - USA, 2002. v.3, p.2496.

26. Johnson, G.; Hutchison, J.M.S. The limitations of NMR recalled-echo imaging techniques. *J. Magn. Reson.*, v.63, n.1, p.14-30, 1985.
27. Mansfield, P. Multi-planar image formation using NMR spin echoes. *J. Phys. C: Solid State Phys.*, v.10, n.3, p.L55-L58, 1977.
28. Tannús, A.; Garwood, M. Adiabatic Pulses. *NMR in Biomedicine*, v.10, p.423-434, 1997.
29. de Graaf, R.A.; Nicolay, K.; Garwood, M. Single-shot, B_1 -insensitive slice selection with a gradient-modulated adiabatic pulse, BISS-8. *Magn Reson Med*, v.35, p.652-657, 1996.
30. Abragam, A. *Principles of Nuclear Magnetism*. Oxford, Clarendon Press, 1961, Cap.IIE(c).
31. Tannús, A.; Garwood, M. Improved performance of frequency-swept pulses using offset-independent adiabaticity. *J. Magn. Reson. A*, v.120, p.133-137, 1996.
32. Ordidge, R.J.; Wylezinska, M.; Hugg, J.W.; Butterworth, E.; Franconi, F. Frequency Offset Corrected Inversion (FOCI) Pulses for Use in Localized Spectroscopy. *Magn. Reson. Med.*, v.36, p.562-566, 1996.
33. Johnson, A.J.; Garwood, M.; Ugurbil, K. Slice selection with gradient-modulated adiabatic excitation despite the presence of large B_1 inhomogeneities. *J. Magn. Reson.*, v.81, p.653-660, 1989.
34. Tannús, A.; Garwood, M.; Panepucci, H.; Bonagamba, T.J. Localized proton Spectroscopy with 3D-GMAX. In: *9th Society of Magnetic Resonance in Medicine*, New York, NY, 1990.
35. Hioe, F.T. Solution of Bloch equations involving amplitude and frequency modulations. *Phys. Rev. A*, v.30, p.2100-2103, 1984.
36. Silver, M.S.; Joseph, R.I.; Hoult, D.I. Highly selective $\pi/2$ and π pulse generation. *J Magn Reson*, v. 59, p.347-351, 1984.
37. Silver, M.S.; Joseph, R.I.; Hoult, D.I. Seletive Spin Inversion in Nuclear Magnetic Resonance and Coherent Optics Through an Exact Solution of the Bloch-Riccati Equation. *Phys. Rev. A*, v.31, n.4, p.2753-2755, 1985.

38. Rosen, N.; Zener, C. Double Stern-Gerlach Experiment and Related Collision Phenomena. *Phys. Rev.*, v.40, p.502-507, 1932.
39. Rabi, I.I. Space Quantization in a Gyration Magnetic Field. *Phys. Rev.*, v.51, p.652-654, 1937.
40. McCall, S.L.; Hahn, E.L. Self-Induced Transparency. *Phys. Rev.*, v.183, n.2, p.457, 1969.
41. Bambini, A.; Berman, P.R. Analytic solutions to the two-state problem for a class of coupling potentials. *Phys. Rev. A.*, v.23, n.5, p.2496-2501, 1981.
42. Abramowitz, M.; Stegun, I.A. *Handbook of mathematical functions*. New York, Dover, 1965.
43. Zhang, S.; Jin, J. *Computation of special functions*. New York, John Wiley, 1996.

Apêndice.

São expostos neste apêndice os resultados das medidas do campo magnético principal realizadas no magneto de 2 Tesla do laboratório de imagens do grupo de ressonância magnética do IFSC-USP e no magneto de 0.5 Tesla da Santa Casa de Misericórdia de São Carlos.

O objetivo das medidas dos campos gerados pelos magnetos citados acima foi a determinação das amplitudes dos harmônicos esféricos tendo em vista a homogeneização do campo principal.

A medida do campo local $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ na posição \mathbf{r} foi feita através da medida da frequência central * do sinal de ressonância magnética nuclear produzido pela excitação da magnetização de uma pequena amostra de água. Foi utilizada uma amostra com dimensões bem menores que o volume de interesse do magneto, de tal forma que pudemos associar o campo produzido pela amostra com a posição \mathbf{r} do centro da mesma, obtendo assim o mapeamento $\mathbf{B}(\mathbf{r})$. No caso do magneto de 2 Tesla foi utilizada uma amostra com volume de aproximadamente 0.5 cm^3 em um volume de interesse de aproximadamente 400 cm^3 .

Caso pudéssemos medir o campo \mathbf{B} continuamente ao longo de uma superfície S , bastaria utilizar uma superfície S esférica e aplicar as relações [2.12] e [2.13] para obter $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ ao longo de todo o volume em função da expansão em harmônicos esféricos. No entanto, experimentalmente esse não é o caso, sendo possível somente a realização de medidas em posições discretas \mathbf{r}_i . Dessa forma, achamos mais conveniente fazer medidas de campo distribuídas uniformemente ao longo de todo o volume de interesse. Assim, ajustamos os coeficientes da expansão [2.11] aos dados experimentais $\mathbf{B}(\mathbf{r}_i)$ através do método dos mínimos quadrados, resultando em uma expressão analítica para $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ experimental.

* Essa medida de frequência permite calcular o valor do campo através da relação de Larmor [1.8].

Optamos por fazer as medidas em simetria cilíndrica, pois essa escolha privilegia a simetria do magneto. Portanto, representaremos os dados experimentais nas coordenadas cilíndricas (ρ, ϕ, z) , em que z é a direção do campo principal B_0 .

A representação analítica do campo foi feita utilizando-se a solução real da equação [2.10]:

$$[A. 1] \quad B_z(r, \theta, \phi) = \sum_{l=0}^4 \sum_{m=0}^l r^l [A_{lm} Y_{lm}^C(\theta, \phi) + B_{lm} Y_{lm}^S(\theta, \phi)]$$

Sendo que, $Y_{lm}^C = \text{Re}\{Y_{lm}\}$ e $Y_{lm}^S = \text{Im}\{Y_{lm}\}$. As funções Y_{lm} até a quarta ordem em coordenadas retangulares estão listadas no final deste apêndice. Em [A. 1] foi utilizada a expansão somente até a quarta ordem, pois todas as componentes produzidas pelas bobinas de *shimming*, utilizadas tanto no magneto de 2 T quanto no magneto de 0.5 T, estão contidas * nessa expansão.

É possível avaliar a contribuição de cada componente A_{lm} e B_{lm} através do cálculo do desvio padrão do campo originado por essas componentes:

$$[A. 2] \quad \begin{aligned} \sigma_{A_{lm}}^2 &= \frac{1}{V} \iiint_V |A_{lm} r^l Y_{lm}^C|^2 dv \\ &= \alpha_m \frac{3R^{2l}}{4\pi(2l+3)} |A_{lm}|^2, \quad \begin{cases} \alpha_m = 1, & m = 0 \\ \alpha_m = 1/2, & m \neq 0 \end{cases} \end{aligned}$$

Sendo que V é o volume esférico de raio R no qual se deseja avaliar a homogeneidade. A componente $\sigma_{B_{lm}}$ é calculada da mesma forma, bastando substituir A_{lm} por B_{lm} . O desvio padrão de todo o campo será então:

$$[A. 3] \quad \sigma = \sqrt{\frac{1}{V} \iiint_V (B_z(r) - \langle B_z(r) \rangle)^2 dv} = \sqrt{\sum_{l=1}^4 \sum_{m=0}^l (\sigma_{A_{lm}}^2 + \sigma_{B_{lm}}^2)}$$

* Isso não significa que o equipamento produza todas as componentes expressas em [A. 1].

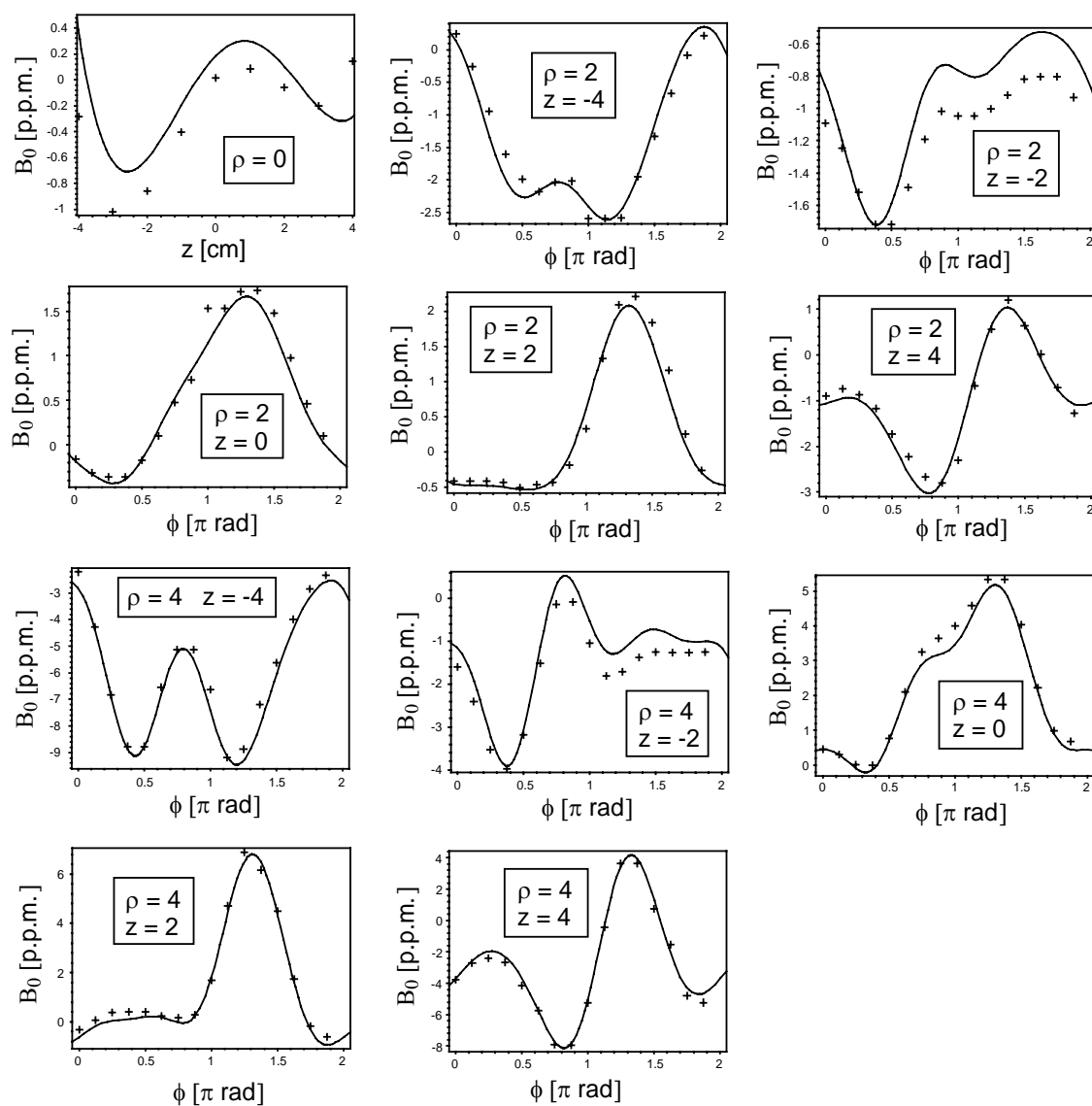


Figura 14. Pontos experimentais do campo do magneto de 2 T, sem otimização da homogeneidade, ajustados pela curva [A. 1].

A Figura 15 e a Tabela 2 descrevem as mesmas informações da Figura 14 e da Tabela 1, com a diferença de que nesse caso as medidas foram feitas com o campo sendo submetido a uma otimização da sua homogeneidade através das bobinas de *shimming*. O processo de otimização foi realizado utilizando-se o recurso de homogeneização do próprio espectrômetro de NMR do laboratório de imagens. Ele consiste em um método

iterativo que procura minimizar a largura da linha espectral do sinal de NMR produzido por uma amostra cujo volume corresponde ao volume que se quer homogeneizar.

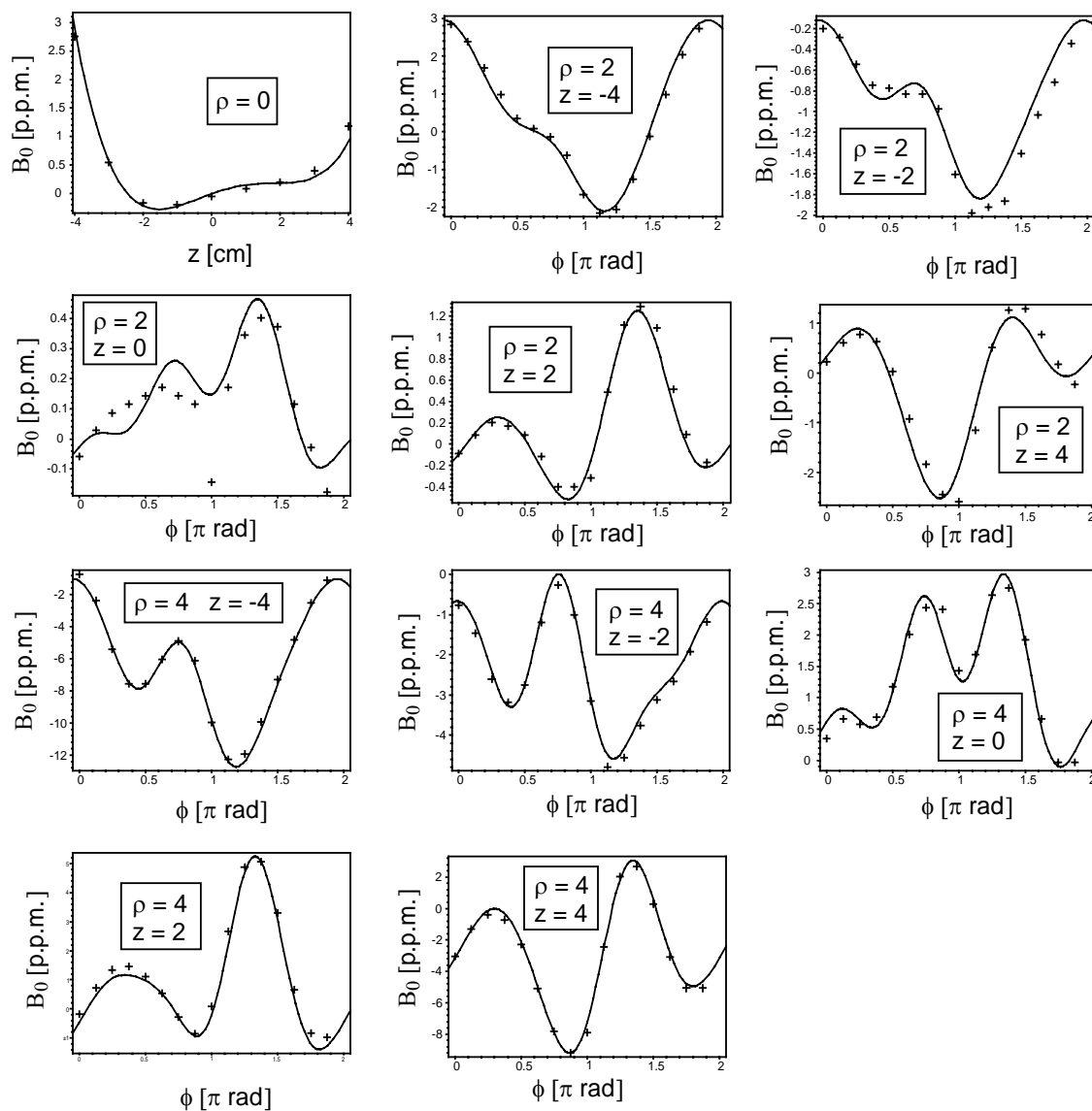


Figura 15. Pontos experimentais do campo do magneto de 2 T, com otimização da homogeneidade, ajustados pela curva [A. 1].

O desvio padrão obtido dos coeficientes ajustados aos dados experimentais da Figura 15 e aplicados na equação [A. 3] foi:

[A. 5] 2 T com otimização: $\sigma = 1.001$ p.p.m.

$l \setminus m$	$\sigma_{A_{lm}} / \sigma_T$ [%]					$\sigma_{B_{lm}} / \sigma_T$ [%]			
	0	1	2	3	4	1	2	3	4
1	10.82	1.50	0	0	0	1.74	0	0	0
2	5.86	6.48	3.05	0	0	6.56	2.40	0	0
3	11.46	8.82	5.21	5.15	0	0.71	9.64	2.46	0
4	12.90	0.40	0.44	0.36	0.74	1.04	0.54	1.33	0.39

Tabela 2. Desvios do campo causados pelas componentes dos harmônicos esféricos que se ajustam às medidas experimentais correspondentes à Figura 15.

A Figura 16 e a Tabela 3 correspondem aos dados experimentais obtidos do magneto de 0.5 T sem otimização da homogeneidade do campo.

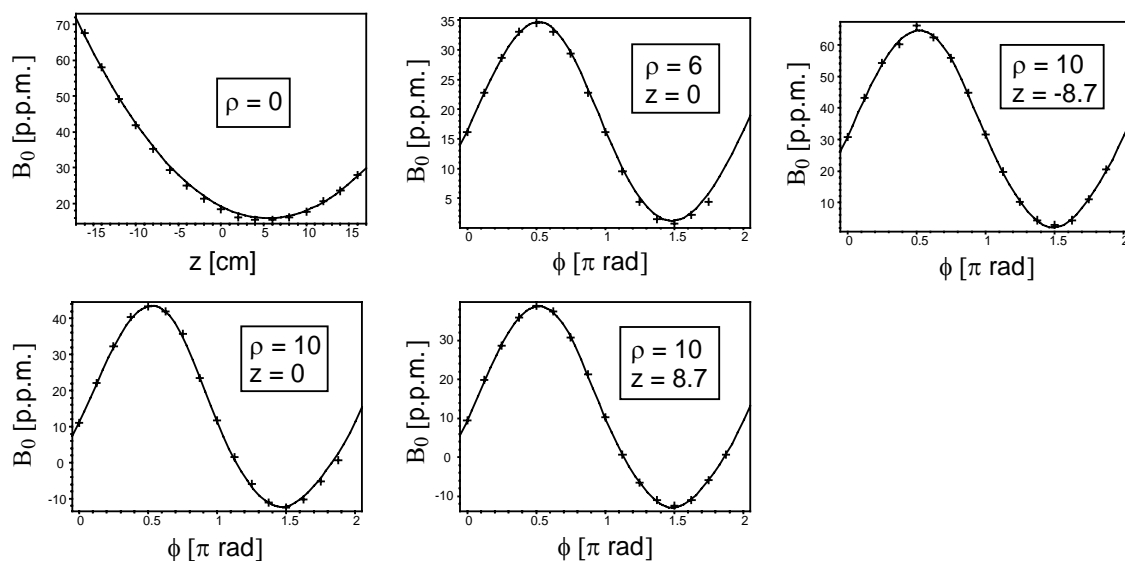


Figura 16. Pontos experimentais do campo do magneto de 0.5 T, sem otimização da homogeneidade, ajustados pela curva [A. 1].

$l \setminus m$	$\sigma_{A_{lm}} / \sigma_T$ [%]					$\sigma_{B_{lm}} / \sigma_T$ [%]			
	0	1	2	3	4	1	2	3	4
1	4.25	0.05	0	0	0	9.81	0	0	0
2	1.01	9.82	0.21	0	0	0.12	0.12	0	0
3	0	0	0	0	0	0.01	0	0	0
4	0	74.23	0	0	0	0.33	0	0	0

Tabela 3. Desvios do campo causados pelas componentes dos harmônicos esféricos que se ajustam às medidas experimentais correspondentes à Figura 16.

O desvio padrão obtido dos coeficientes ajustados aos dados experimentais da Figura 16 aplicados na equação [A. 3] foi:

[A. 6] 0.5 T sem otimização: $\sigma = 38.486$ p.p.m.

A Figura 17 e a Tabela 4 correspondem aos dados experimentais obtidos do magneto de 0.5 T com uma otimização da homogeneidade do campo produzida pelas bobinas de *shimming*. Diferentemente do caso do magneto de 2 T, o espectrômetro do magneto de 0.5 T não possui um recurso de otimização da homogeneidade do campo. Assim, o processo de otimização utilizado nesse magneto, que resultou nas medidas da Figura 17, foi realizado pelo aluno de doutorado Carlos E. Garrido Salmon, baseado no método proposto por Roméo e Hoult²³.

O desvio padrão obtido dos coeficientes ajustados aos dados experimentais da Figura 17 e aplicados na equação [A. 3] foi:

[A. 7] 0.5 T com otimização: $\sigma = 1.781$ p.p.m.

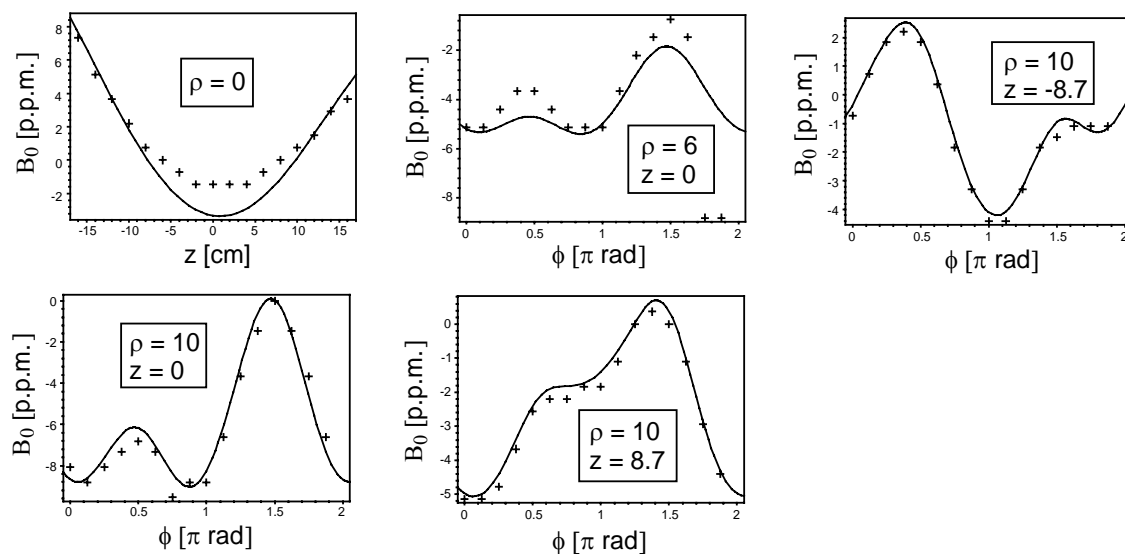


Figura 17. Pontos experimentais do campo do magneto de 0.5 T, com otimização da homogeneidade, ajustados pela curva [A. 1].

$l \setminus m$	$\sigma_{A_{lm}} / \sigma_T$ [%]					$\sigma_{B_{lm}} / \sigma_T$ [%]			
	0	1	2	3	4	1	2	3	4
1	4.46	0.88	0	0	0	11.16	0	0	0
2	7.06	8.94	4.09	0	0	0.46	0.85	0	0
3	0.03	0.06	0.04	0.02	0	0.76	0.04	0.06	0
4	0.06	53.49	0.08	0	0.02	7.43	0.02	0	0

Tabela 4. Desvios do campo causados pelas componentes dos harmônicos esféricos que se ajustam às medidas experimentais correspondentes à Figura 17.

Outro procedimento que usamos para avaliar a homogeneidade do campo foi utilizar os dados experimentais para simular a densidade espectral do sinal gerado por uma amostra de volume V .

A densidade espectral $S(\omega)$ do sinal gerado pela amostra é proporcional * ao volume V' da mesma que possui frequência entre ω e $\omega+d\omega$, ou seja:

$$[A. 8] \quad S(\omega) = \iiint_V \delta(\omega - f(\mathbf{r})) dv$$

Em que $f(\mathbf{r}) = -\gamma B_z(\mathbf{r})$ e o campo $B_z(\mathbf{r})$ é obtido pelo ajuste por mínimos quadrados dos dados experimentais usando a expressão [A. 1], de maneira idêntica ao que foi descrito anteriormente. Para obter a solução da equação [A. 8] é necessário obter as raízes do argumento do δ , o que não é uma tarefa simples tendo em vista a expressão do campo dada por [A. 1]. Portanto, decidimos resolver a equação [A. 8] utilizando a seguinte aproximação para a δ :

$$[A. 9] \quad \delta(x) = \begin{cases} \frac{1}{\Delta x}, & -\frac{\Delta x}{2} \leq x \leq \frac{\Delta x}{2} \\ 0, & \text{em outro caso} \end{cases}$$

Além disso, discretizamos as variáveis ω e \mathbf{r} em intervalos $\Delta\omega$ e Δr respectivamente, obtendo:

$$[A. 10] \quad S(n\Delta\omega) = \sum_{i,j,k} \delta(n\Delta\omega - f(i\Delta r, j\Delta r, k\Delta r)) \Delta r^3$$

i, j, k e n são números inteiros. Utilizando $\Delta x = \Delta\omega$ em [A. 9] e substituindo em [A. 10] temos:

$$[A. 11] \quad S(n\Delta\omega) = p_n \frac{\Delta r^3}{\Delta\omega}$$

* Essa afirmação é verdadeira somente quando a perda de coerência transversal por não-homogeneidade do campo é bem mais rápida que a relaxação transversal intrínseca da amostra, ou seja, $T_2^* \ll T_2$.

Sendo que p_n é o número de trios (i, j, k) que satisfazem a seguinte condição para $f(\mathbf{r})$: $\Delta\omega(n-1/2) \leq f(\mathbf{r}) \leq \Delta\omega(n+1/2)$.

Assim, o procedimento numérico e computacional utilizado para obter a simulação da densidade espectral foi discretizar o volume de interesse em pequenos cubos de largura Δr e fazer o histograma do número de cubos em que a frequência, no centro de cada cubo, apresenta valor entre $\omega - \Delta\omega/2$ e $\omega + \Delta\omega/2$.

O valor médio $\langle B \rangle$ e o desvio padrão σ do campo são dados por:

$$[A. 12] \quad \langle B \rangle = (\gamma\Delta\omega) \frac{\sum_n p_n n}{\sum_n p_n}$$

$$[A. 13] \quad \sigma^2 = (\gamma\Delta\omega)^2 \frac{\sum_n p_n n^2}{\sum_n p_n} - \langle B \rangle^2$$

A Figura 18, Figura 19, Figura 20 e Figura 21 apresentam os espectros simulados, para um volume esférico de 4 cm de raio, obtidos a partir dos dados experimentais correspondentes às situações da Figura 14, Figura 15, Figura 16 e Figura 17 respectivamente. É interessante notar que os valores dos desvios obtidos pelos dois métodos são bastante próximos, mostrando assim coerência entre os métodos.

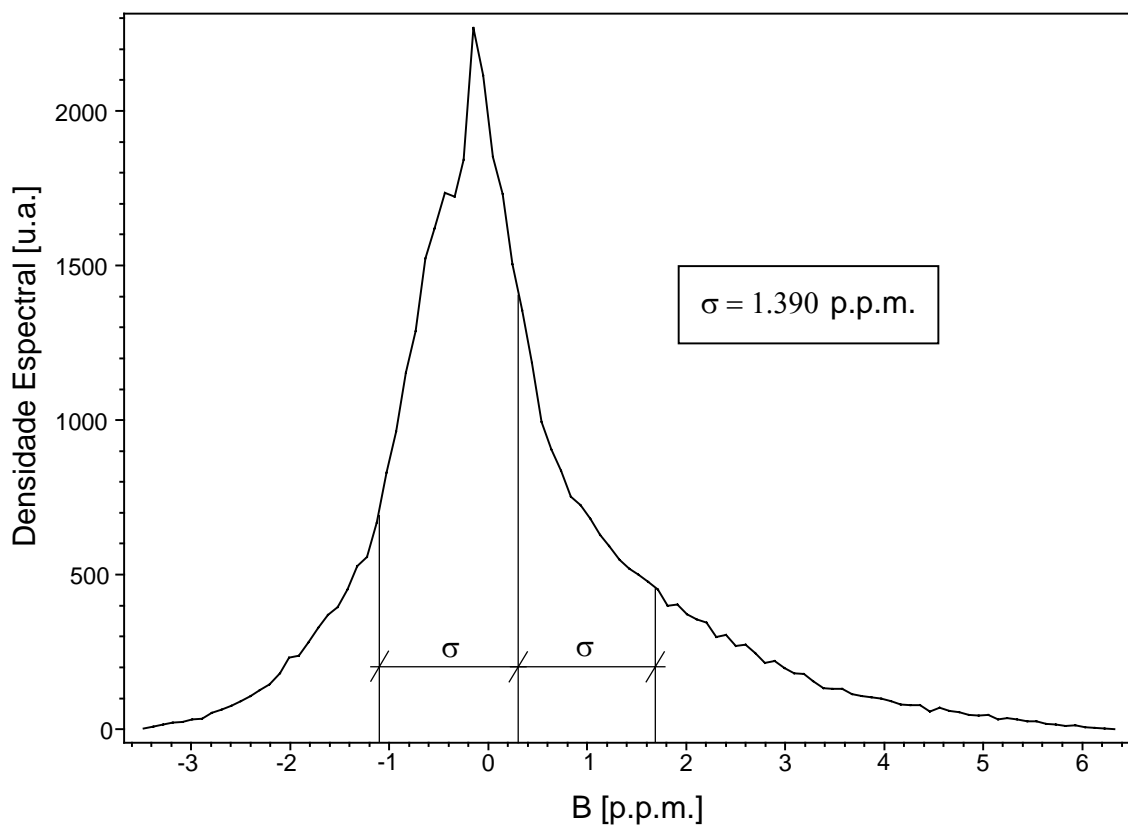


Figura 18. Simulação da densidade espectral do sinal de RMN, em um volume esférico de 4 cm de raio, obtida dos dados experimentais expostos na Figura 14.

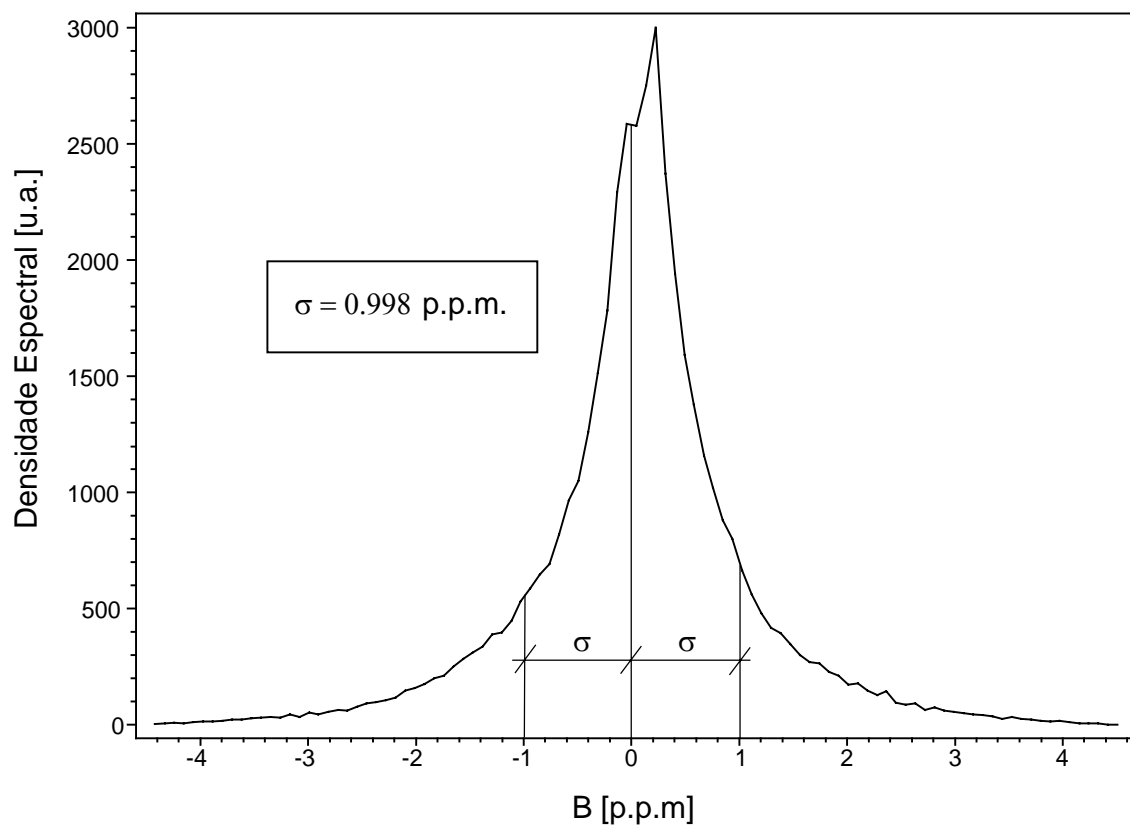


Figura 19. Simulação da densidade espectral do sinal de RMN, em um volume esférico de 4 cm de raio, obtida dos dados experimentais expostos na Figura 15.

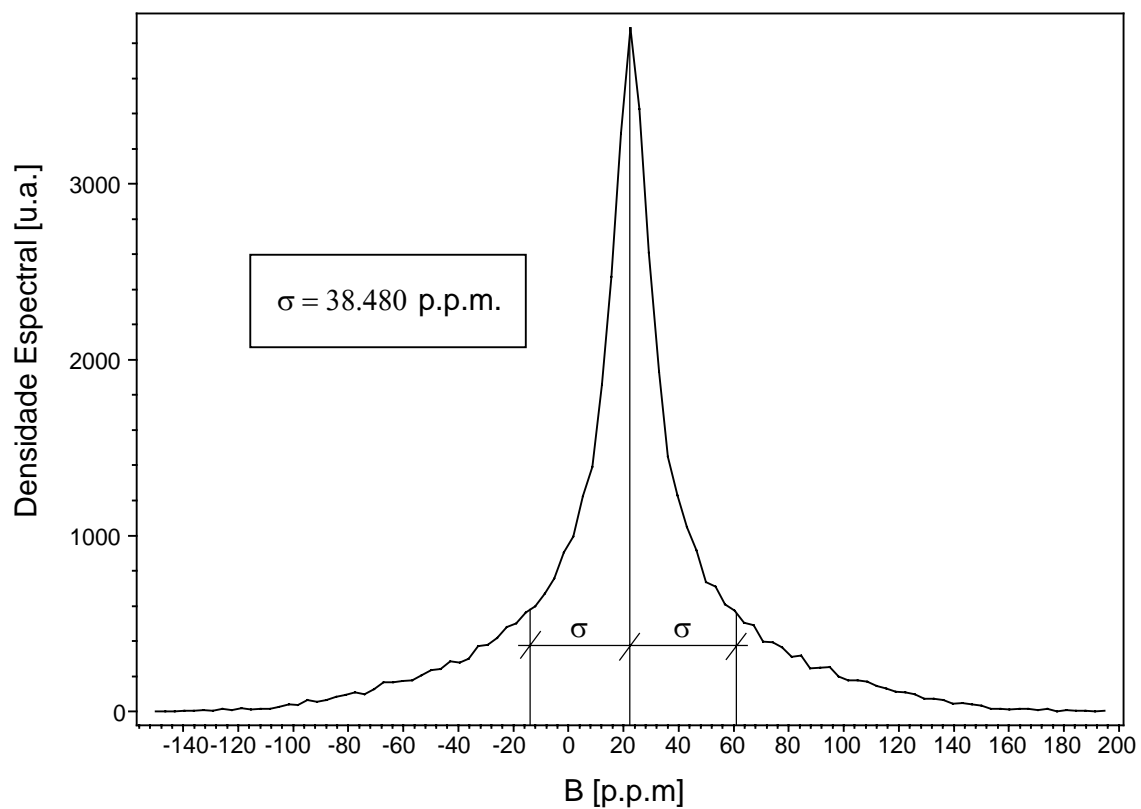


Figura 20. Simulação da densidade espectral do sinal de RMN, em um volume esférico de 4 cm de raio, obtida dos dados experimentais expostos na Figura 16.

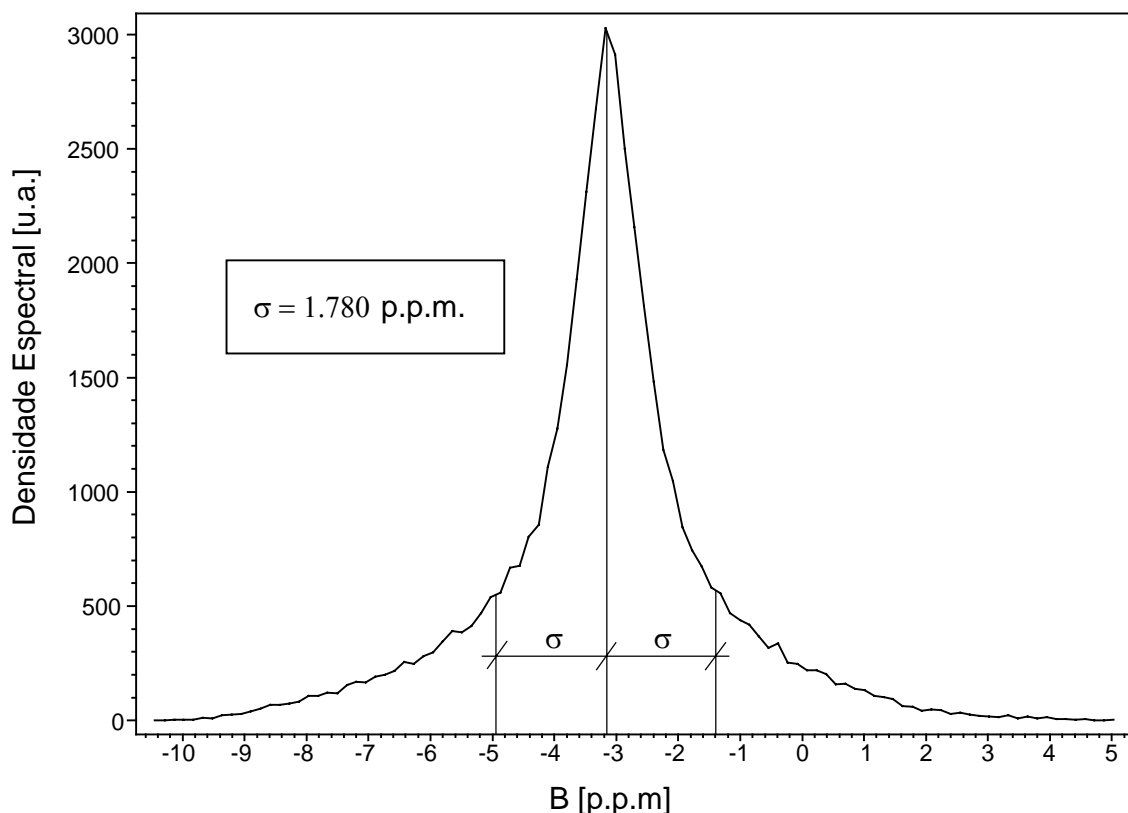


Figura 21. Simulação da densidade espectral do sinal de RMN, em um volume esférico de 4 cm de raio, obtida dos dados experimentais expostos na Figura 17.

Como finalização deste apêndice concluímos que os dois métodos desenvolvidos para avaliar a homogeneidade do campo se mostraram eficientes. Ambos utilizam o procedimento de ajuste por mínimos quadrados das medidas locais do campo magnético para a obtenção de uma expressão analítica do campo experimental. A expressão analítica fica totalmente determinada através do levantamento dos coeficientes da expansão do campo em harmônicos esféricos.

No primeiro método, para ambos os magnetos, calculamos os desvios causados por cada componente de forma a verificar qual delas mais contribui para a não-homogeneidade. Subseqüentemente, utilizando métodos de otimização da homogeneidade, verificamos uma diminuição no desvio do campo total.

No segundo método, também para ambos os magnetos, simulamos a densidade espectral a partir das medidas de campo locais. Essas simulações também permitiram

obter os desvios do campo total, que se mostraram em total acordo com os resultados do primeiro método. É importante notar que a utilização de três casas após a vírgula na representação dos valores dos desvios do campo estão além da precisão experimental. Tal precisão foi utilizada com o objetivo de verificar a coerência entre os métodos.

Harmônicos esféricos $Y_{lm}(x, y, z)$:

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

$$l = 0 \quad \left\{ \begin{array}{l} Y_{00} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \end{array} \right.$$

$$l = 1 \quad \left\{ \begin{array}{l} Y_{10} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \frac{z}{r} \\ Y_{11} = -\frac{1}{4} \sqrt{\frac{6}{\pi}} \frac{x + iy}{r} \end{array} \right.$$

$$l = 2 \quad \left\{ \begin{array}{l} Y_{20} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{5}{\pi}} \frac{2z^2 - x^2 - y^2}{r^2} \\ Y_{21} = -\frac{1}{4} \sqrt{\frac{30}{\pi}} \frac{xz + iyz}{r^2} \\ Y_{22} = \frac{1}{8} \sqrt{\frac{30}{\pi}} \frac{x^2 - y^2 + i2xy}{r^2} \end{array} \right.$$

$$l = 3 \left\{ \begin{array}{l} Y_{30} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{7}{\pi}} \frac{z(2z^2 - 3x^2 - 3y^2)}{r^3} \\ Y_{31} = -\frac{1}{8} \sqrt{\frac{21}{\pi}} \frac{(4z^2 - x^2 - y^2)(x + iy)}{r^3} \\ Y_{32} = \frac{1}{8} \sqrt{\frac{210}{\pi}} \frac{z(x^2 - y^2) + i2xyz}{r^3} \\ Y_{33} = -\frac{1}{8} \sqrt{\frac{35}{\pi}} \frac{x(x^2 - 3y^2) + iy(3x^2 - y^2)}{r^3} \end{array} \right.$$

$$l = 4 \left\{ \begin{array}{l} Y_{40} = \frac{3}{16} \sqrt{\frac{1}{\pi}} \frac{8z^4 - 24z^2(x^2 + y^2) + 3(x^4 + y^4) + 6x^2y}{r^4} \\ Y_{41} = -\frac{3}{8} \sqrt{\frac{5}{\pi}} \frac{(4z^2 - 3x^2 - 3y^2)(xz + iyz)}{r^4} \\ Y_{42} = \frac{3}{16} \sqrt{\frac{10}{\pi}} \frac{(6z^2 - x^2 - y^2)(x^2 - y^2 + i2xy)}{r^4} \\ Y_{43} = -\frac{3}{8} \sqrt{\frac{35}{\pi}} \frac{xz(x^2 - 3y^2) + iyz(3x^2 - y^2)}{r^4} \\ Y_{44} = \frac{3}{32} \sqrt{\frac{70}{\pi}} \frac{x^4 - 6x^2y^2 + y^4 + i4xy(x^2 - y^2)}{r^4} \end{array} \right.$$