Resonancia Magnética Nuclear

Jose Antonio Reyes Vega* and Karen Alejandra Vergara Vega**

Universidad De Los Andes, Departamento de Física, Bogotá, Colombia

(Dated: 20 de enero de 2022)

El presente documento implementa la resonancia magnética nuclear, RMN por sus siglas en ingles, como una técnica para caracterizar sustancias con alto contenido de Hidrógeno $^1{\rm H}$ y Flúor $^{19}{\rm F}$ a partir del factor giromagnético g. Para este fin, se hace uso del montaje experimental Atomic and Nuclear Physics disponible en la Universidad de los Andes, los datos adquiridos se ajustan a funciones lineales mediante el software OriginPro 8,5 con parámetros de tolerancia de 1×10^{-9} y un número máximo de pasos de 400. Finalmente, se corrobora la dependencia lineal entre ν y B_o que surge como consecuencia de la interacción entre el momento dipolar magnético intrínseco con un campo magnético externo, se encuentra que las sustancias tratadas se pueden caracterizar por g en dos grupos: $g_1 = 5,589 \pm 0,002$ el cual corresponde al $^1{\rm H}$ y $g_2 = 5,258 \pm 0,003$ que corresponde al $^{19}{\rm F}$.

I. INTRODUCCIÓN

La resonancia magnética nuclear, RMN por sus siglas en ingles, es un fenómeno físico de naturaleza cuántica asociado a las oscilaciones del momento dipolar magnético intrínseco $\vec{\mu}$ de un átomo [2]. Inicialmente, $\vec{\mu}$ describe un movimiento de preseción, por ejemplo alrededor del eje z, debido a la interacción con un campo magnético externo constante \vec{B}_o ; si además se aplica un campo magnético alterno $\vec{H}(t)$ perpendicular a \vec{B}_o que permite invertir el cono de preseción de $\vec{\mu}$, va que S=1/2 y como consecuencia solo hay dos posibles orientaciones a lo largo del eje z, sólo si la frecuencia $\omega = \omega_o$, siendo ω_o la frecuencia asociada a la separación de los dos niveles de energía posibles, dicha frecuencia se conoce como frecuencia de resonancia [1][6][7]. La RMN se presenta en átomos cuyo número de protones más el número de neutrones es un número impar, lo cual conlleva a un espín neto S=1/2 , entre este tipo de átomos se destacan el Hidrógeno ¹H y el Flúor ¹⁹F [1][6].

De la teoría electromagnética clásica [3] se interpreta un dipolo magnético $\vec{\mu}$ como una corriente que circula en un loop cerrado; ahora bien, se puede extender la noción de $\vec{\mu}$ a situaciones para la cual no se tiene explícitamente corrientes circulando, para este tipo de situaciones $\vec{\mu}$ se identificará como un momento dipolar magnético intrínseco dado por:

$$\vec{\mu} = \frac{\mu_N}{\hbar} \vec{L} \tag{1}$$

El primer término se suele llamar magnetón nuclear $\mu_N = (5,05078352 \pm 0,00000024) \times 10^{-27} J/T$,

para el caso que q=e es el magnetón de Bohr; \vec{L} corresponde al momento angular y $\hbar=(6,626070040\pm0,000000081)\times10^{-34}Js$ es la constante de Planck reducida [5].

Ahora bien, en mecánica cuántica se suele distinguir entre diferentes tipos de momento angular, principalmente entre el espín y el momento angular orbital por ello se realiza el cambio $\vec{L} \to \hat{J}$ en la ecuación (1). Por ello se agrega el factor giromagnético o factor de Landé g, el cual da cuenta de como los efectos cuánticos modifican la ecuación de (1) [8]. De lo anterior se obtiene:

$$\vec{\mu} = \frac{g\mu_N}{\hbar}\hat{J} = \gamma\hat{J} \tag{2}$$

Para el $^{1}{\rm H}$ y $^{19}{\rm F}$ $g=g_{H}=5,58857$ y $g=g_{F}=5,2567$ respectivamente [1].

En presencia de un campo magnético externo $\vec{B} = B_o \hat{\mathbf{z}}$, considerando la interacción de dicho campo con el momento magnético intrínseco dado por (2) con $\hat{J} = \hat{S}$ y S = 1/2, el sistema experimentará una energía E dada por:

$$E = -\frac{\gamma m_s \hbar B_o}{2}. (3)$$

Con $m_s=\{1/2,-1/2\}$. Por otra parte, considerando la diferencia energética entre el estado base $(m_s=1/2)$ y el estado excitado $(m_s=-1/2)$ junto a la condición de cuantización de la energía $E=h\nu$, con ν siendo la frecuencia de resonancia. Se tiene:

$$\hbar\omega_o = \gamma\hbar B_o = g\mu_N B_o$$

$$h\nu = q\mu_N B_o \tag{4}$$

^{*} j.reyesv@uniandes.edu.co

^{**} k.vergara@uniandes.edu.co

Partiendo de lo anterior, el presente trabajo tiene como objetivo entender he implementar el fenómeno RMN para caracterizar sustancias con alto grado de ¹⁹F en su composición, como lo son la crema dental y el teflón; además de sustancias con alto grado de ¹H, como lo son el agua, la glicerina, la crema de manos, la fruta y el poliestireno. Dicha caracterización se realizará mediante g, para este fin, se implementa el montaje experimental Atomic and Nuclear Physics [1][4] disponible en la Universidad de los Andes, con el cual se identifica y corrobora la dependencia lineal entre la frecuencia de resonancia ω_o y el campo magnético B_o dada por la ecuación (4), relación que permite la obtención de g a partir de la pendiente de la gráfica.

II. MONTAJE EXPERIMENTAL

Para el desarrollo de la practica RMN se implementa el montaje presentado en la figura 1, donde se ilustra los dispositivos necesarios para el desarrollo del experimento: Unidad RMN, figura 1 recuadro verde; la muestra, figura 1, (a); bobinas de modulación, figura 1 (b); núcleo en forma U, figura 1, (c); fuente de corriente DC, figura 1, (d); sonda de radio frecuencias (RF), figura 1, (e); osciloscopio, figura 1, (f).

En la practica se utilizo siete muestras distintas para caracterizar: agua, crema de manos, crema dental, fruta, glicerina, poliestireno y teflón. Cada muestra se ubica en (a) y para obtener la RMN se implementa una fuente de corriente, la cual esta en conexión con (c) para generar el campo magnético necesario \vec{B}_o con una orientación horizontal, se establece una modulación periódica de \vec{B}_0 mediante las bobinas de modulación (b), dicho comportamiento permite que el sistema entre y salga de resonancia, un efecto óptimo para su detección por medio del osciloscopio. Adicionalmente, se tiene la sonda de radio frecuencias (RF) (e) que genera la señal de alta frecuencia (MHz) perpendicular al campo $\vec{B_0}$, señal necesaria para presentar el fenómeno RMN, cabe aclarar que la sonda también permite permite medir el efecto de los campos en la muestra.

Una vez se genera el fenómeno de interés en la muestra, la señal de salida RMN obtenida a partir de la unidad RMN entra al canal Y del osciloscopio. Ahora bien, cabe mencionar que la unidad RMN en su extremo derecho permite modificar la fase y la amplitud del campo de modulación, además de contar con un barrido de frecuencia rápida y lenta para facilitar la detección de las resonancias, la señal obtenida de dicho campo se conecta al canal X del osciloscopio. Finalmente, las señales en (f) permiten identificar mediante su observación el valor de B_0 necesario pa-

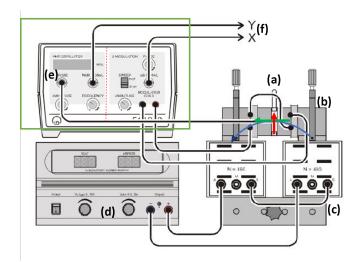


Figura 1. Montaje RMN. El montaje consiste de una unidad RMN la cual es indicada por el recuadro verde, la muestra en estudio se ubica en la sección (a), dos bobinas ubicadas en (b) que generan el campo magnético modulación (flecha verde), un núcleo en forma de U en (c) que junto a sus bobinas establecen el campo \vec{B}_0 (flecha azul), una fuente DC en (d) para aplicar la corriente necesaria en las bobinas en (c) v en (e) la sonda de radio frecuencias (RF) que genera una señal de alta frecuencia (MHz) perpendicular al campo $\vec{B_0}$ (flecha roja) para que se presente resonancia y en simultaneo permite medir dicha resonancia. Por ultimo en (f) se ubica el osciloscopio en el cual se visualiza la señal RMN en Y y en X la señal del campo de modulación. Cabe aclarar que la ubicación de la muestra en (a) garantiza que las señales asociadas al campo magnético modulado y el RF estén bien comportadas y que los campos tengan las direcciones que se muestran en la figura. Imagen obtenida de [1].

ra tener una resonancia a una frecuencia RF propuesta.

Para cada muestra se obtiene en el osciloscopio el comportamiento observado en la figura 2, donde la señal amarilla indica una señal de voltaje relacionada con el campo de modulación y la azul es la señal RMN la cual presenta un cambio abrupto debido a la transición energética en la muestra. Cuando ambas señales se interceptan como se muestra en dicha figura, se tiene la excitación asociada a la resonancia $\vec{\mu}$ del núcleo.

III. RESULTADOS Y ANÁLISIS

Una vez identificada una valor de frecuencia RF tal que la señal RMN presente picos de resonancia, se procede a modificar la corriente I con el fin de lograr la intersección de las dos señales como se muestra en la figura 2. Posteriormente, se procede a realizar la gráfica de B_o en función de $h\nu(\mu_N)^{-1}$, para corroborar la

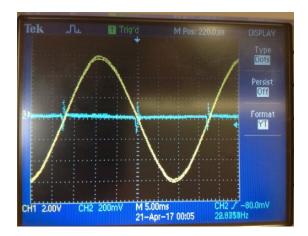


Figura 2. Señal esperada en el osciloscopio cuando se entra en resonancia. La curva amarilla indica la señal de voltaje relacionada con el campo magnético de modulación y la señal azul es la señal asociada a la señal RMN. Cuando ambas señales se interceptan como se muestra en la figura se tiene RMN para la corriente establecida en la unidad. Imagen obtenida de [1].

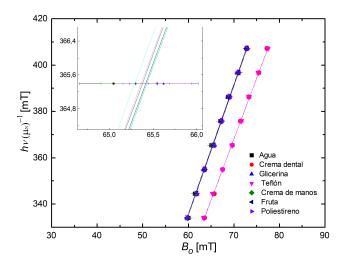


Figura 3. Curvas de ajuste para los datos experimentales de las siete muestras. En la parte superior izquierda se presenta un Zoom de la figura con el fin de resaltar la presencia de 5 rectas de ajuste correspondientes a las muestras con $^1{\rm H},$ dado que no son perceptibles en la gráfica completa. Para la recta con menor grado de inclinación se encuentran las 2 rectas de las muestras con alto contenido de $^{19}{\rm F}.$ Los resultados del proceso de ajuste se presentan en el cuadro I.

relación lineal entre dichas variables y a partir de ello obtener g. Estos resultados se presentan en la figura 3 y en el cuadro I.

Muestra	g	σ_g
Agua	5,597	0,007
Crema dental	5,258	0,004
Glicerina	5,590	0,006
Teflón	5,258	0,003
Crema de manos	5,589	0,002
Fruta	5,586	0,003
Poliestireno	5, 584	0,003

Cuadro I. Parámetros de ajuste de los datos obtenidos en la figura 3, la pendiente de cada recta corresponde al valor de a.

De los resultados presentados en la figura 3 y el cuadro I se encuentra que las muestras se pueden dividir en dos grupos, uno asociado al Flúor y el otro al Hidrógeno. Se procede a calcular el valor medio de g en los dos grupos con el fin de identificar a cual elemento corresponde cada uno.

■ Grupo 1: Se toman los valores de g reportados en el cuadro I para el agua, glicerina, crema de manos, fruta y poliestireno.

$$g_1 = 5,589 \pm 0,002 \tag{5}$$

■ *Grupo 2:* Se toman los valores de *g* reportados en el cuadro I para el crema dental y teflón.

$$g_2 = 5,258 \pm 0,003 \tag{6}$$

Comparando con los valores de [1], se encuentra que g_1 corresponde a $^1{\rm H}$ y g_2 a $^{19}{\rm F}.$

IV. CONCLUSIONES

Por medio de los datos experimentales y el proceso de análisis se puede concluir lo siguiente:

- Se evidencia RMN para las diferentes muestras al corroborar la validez de la ecuación (4) por medio de la figura 3.
- A partir de la figura 3 se puede identificar que las muestras se dividen en dos grupos. El primero agrupa el agua, la glicerina, crema de manos, fruta y poliestireno. El segundo el teflón y la crema dental.
- Los resultados presentados en la ecuación (5) y (6) permiten identificar que el primer grupo corresponde a muestras con alto contenido de ¹H y el segundo a muestras con alto contenido de ¹⁹F [1].

- Como $g_1 \neq 1$ y $g_2 \neq 1$ ello implica que el fenómeno de RMN es de naturaleza netamente cuántica [8].
- El término σ_{g_1} en la ecuación (5) representa el 0,04% del valor del factor giromagnético para el 1 H, esto indica un grado de precisión aceptable para el contexto académico implícito en el trabajo. Por otra parte, su magnitud es exacta en sus primeras cuatro cifras significativas en contraste con [1], debido a que se encuentra en el intervalo
- delimitado por las barras de error reportadas.
- El término σ_{g_2} en la ecuación (6) representa el 0,06 % del valor del factor giromagnético para el 19 F, esto indica un grado de precisión aceptable para el contexto académico implícito en el trabajo. Por otra parte, su magnitud es exacta en sus primeras cuatro cifras significativas en contraste con [1], debido a que se encuentra en el intervalo delimitado por las barras de error reportadas.
- [1] U. de los Andes. Resonancia magnéticanuclear(rmn). Online: https://sicuaplus.uniandes.edu.co/, Oct. 2020.
- [2] R. Feynman. Fisica. Addison Wesley Longman, Mexico, 2000.
- [3] D. Griffiths. *Introduction to electrodynamics*. Prentice Hall, Upper Saddle River, N.J, 1999.
- [4] L. P. Leaflet. Nuclear magnetic resonance polystyrene, glycerine and teflon. P6.5.3.1.
- [5] P. D. G. (PDG). Particle listing -leptons muon. https://pdg.lbl.gov/2020/listings/rpp2020-listmuon.pdf, 2020.
- [6] C. P. Slichter. Principles of Magnetic Resonance. Springer Berlin Heidelberg, 2010.
- [7] K. Vergara and J. Reyes. Bitacora resonancia magnética nuclear. Online, Oct. 2020. Entrega de la Bitacora para el experimento de Resonancia Magnética Nuclear (RMN)preparación para el trabajo de resonancia magnética nuclear (RMN).
- [8] N. Zettili. Quantum mechanics: concepts and applications. Wiley, Chichester, U.K, 2009.

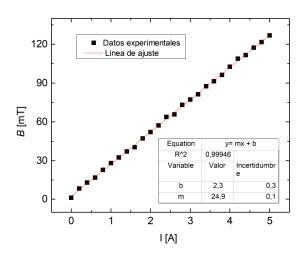


Figura 4. Calibración B_o . La gráfica presenta la relación lineal entre I y B_o junto a sus respectivos parámetros de ajuste.

B. Propagación de error - Campo magnético B_o

Dado que $B_o = mI + b$; entonces, B = B(m, I, b) y por lo tanto:

$$\sigma_B = \sqrt{\left(\frac{\partial B}{\partial m}\right)^2 \sigma_m^2 + \left(\frac{\partial B}{\partial I}\right)^2 \sigma_I^2 + \left(\frac{\partial B}{\partial b}\right)^2 \sigma_b^2}$$

$$\sigma_B = \sqrt{(I\sigma_m)^2 + (m\sigma_I)^2 + (\sigma_b)^2}$$

Donde m, σ_m y b, σ_b corresponden a los parámetros de ajuste obtenidos en la figura 4.

V. ANEXOS

A. Proceso de calibración del campo magnético

A continuación se presenta la gráfica entre B_o y la corriente I con el fin de determinar la relación funcional entre dichas variables.

C. Propagación de error - $y = \frac{\nu h}{\mu_N}$

Sea $y = y(\mu_N, h, \nu)$, entonces:

$$\sigma_y = \sqrt{\left(\frac{\partial B}{\partial \mu_N}\right)^2 \sigma_{\mu_N}^2 + \left(\frac{\partial B}{\partial h}\right)^2 \sigma_h^2 + \left(\frac{\partial B}{\partial \nu}\right)^2 \sigma_\nu^2}$$

$$\sigma_y = y \sqrt{\left(\frac{\sigma_{\mu_N}}{\mu_N}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_h}{h}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_\nu}{\nu}\right)^2}$$

$$\sigma_{\frac{\nu h}{\mu_N}} = \left(\frac{\nu h}{\mu_N}\right) \sqrt{\left(\frac{\sigma_{\mu_N}}{\mu_N}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_h}{h}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_\nu}{\nu}\right)^2}$$

Dado que no se contaba con algún criterio para identificar la mínima resolución de la frecuencia, se tomo $\sigma_{\nu}=0.$

D. Propagación de error - g_1 y g_2

Dado que el valor medio aritmético o valor promedio viene dado por:

$$\langle x \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} x_i$$

Su correspondiente propagación de error será:

$$\sigma_{\langle x \rangle} = \sqrt{\sum_{i}^{N} \left(\frac{\partial \langle x \rangle}{\partial x_{i}} \sigma_{x_{i}}\right)^{2}}$$

$$\sigma_{\langle x \rangle} = \frac{1}{N} \sqrt{\sum_{i}^{N} (\sigma_{x_i})^2}$$

Siendo σ_{x_i} la incertidumbre asociada a cada elemento x_i que se uso para determinar el promedio y N es el número de x_i usadas.