

## Programa



04 a 06 de agosto de 2010 Curitiba, PR, Brasil



## **TR56**

## AVALIAÇÃO DE DIFERENTES MODOS DE PROCESSAMENTO DE ESPECTROS DE RMN <sup>13</sup>C NO ESTADO ESTACIONÁRIO Poliana Macedo dos Santos(PG)<sup>1,2</sup>; André Alves de Souza(PG)<sup>3</sup>; Luiz Alberto

Colnago(PQ)2\*

<sup>1</sup>Instituto de Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos-SP; <sup>2</sup>Embrapa Instrumentação Agropecuária, São Carlos-SP; <sup>3</sup>Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos-SP. \*poliana@cnpdia.embrapa.br

Keywords: SSFP: 13C NMR; APODIZATION FUNCTION

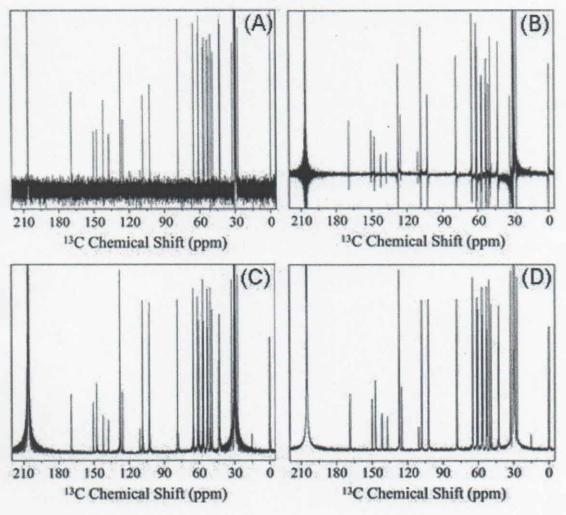
A sequência de Precessão Livre no Estado Estacionário (Steady-State Free Precession – SSFP)<sup>1</sup> tem sido muito empregada na ressonância magnética nuclear (RMN) de baixo campo e de imagem para análises rápidas com aumento na razão sinal-ruído (s/r). Esta sequência apresenta como principal vantagem a utilização de intervalos de tempo entre os pulsos (T<sub>p</sub>) menores que os tempos de relaxação longitudinal (T<sub>1</sub>) e transversal (T<sub>2</sub>). Este decréscimo de T<sub>p</sub> possibilita realizar a promediação de milhares de espectros por unidades de T<sub>1</sub>, proporcionando um ganho significativo na razão s/r, quando comparada com as demais sequências utilizadas na RMN. No entanto, os espectros obtidos neste regime são caracterizados por apresentarem anomalias de fase e amplitude do sinal, o que inviabiliza sua aplicação na RMN de alta resolução.

Para suprimir estas anomalias, Freeman e Hill<sup>2</sup> propuseram um método em que vários espectros de RMN no regime de SSFP eram adquiridos com diferentes valores de To. sendo estas variações realizadas aleatoriamente, após a aplicação de 64 pulsos. Esta sequência foi denominada de Scrambled Steady State. Recentemente demonstramos que o uso de valores de Tp com espaçamento fixo são mais eficientes do que o uso de valores aleatórios<sup>3</sup>. Schwenk<sup>4</sup> desenvolveu o método denominado de Quadriga Fourier Transform. no qual as anomalias de fase eram suprimidas ao promediar quatro espectros adquiridos com diferentes frequências de irradiação. No entanto, essas propostas não foram adotadas pelos usuários de RMN.

Neste contexto, o objetivo deste trabalho foi avaliar o potencial de diferentes funções de apodização aliado a visualização dos espectros no modo magnitude, para supressão destas anomalias nos espectros de RMN 13C adquiridos no regime SSFP.

Os espectros de RMN <sup>13</sup>C foram adquiridos em um espectrômetro Varian Inova de 9,4 T (400 MHz para o núcleo de <sup>1</sup>H e 100,5 MHz para o núcleo de <sup>13</sup>C). Para a técnica SSFP foram empregados pulsos (θ) de 60°, tempo de aquisição (at) igual a 99,7 ms e taxa de reciclo ( $T_R$ ) de 300  $\mu$ s, resultando em um  $T_p$  = 100 ms. Estes espectros foram comprados com os obtidos com a sequência padrão<sup>5</sup> ( $\theta$  = 30 $^{0}$ , at = 0,9 s e  $T_r$ , 0,480 s) As amostras analisadas foram: acetato de sódio (C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>O<sub>2</sub>Na) enriquecido com 99% de <sup>13</sup>C<sub>2</sub>, acetato de etila (C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>O<sub>2</sub>), octanol (C<sub>8</sub>H<sub>18</sub>O) e brucina (C<sub>23</sub>H<sub>26</sub>N<sub>2</sub>O<sub>4</sub>).

Na Figura 1 têm-se os espectros de RMN 13C de brucina, adquiridos com a sequência padrão (1A), com a sequência SSFP processado no modo convencional (1B), SSFP no modo magnitude (1C) e SSFP no modo magnitude aplicando a função de apodização Traff (1D).



**Figura 1**. Espectros de <sup>13</sup>C de brucina obtidos com a sequência (A) padrão, (B) com a sequência SSFP e processado no modo convencional, (C) SSFP processado no modo magnitude e (D) SSFP no modo magnitude e aplicando a função de apodização Traff.

Ao comparar estes espectros verifica-se um ganho significativo da do espectro no regime de SSFP (Figura 1B e 1C) em relação ao obtido com a sequência padrão (Figura 1A), sendo este ganho de aproximadamente 4 vezes. Por estes resultados, verifica-se também que ao aplicar o modo magnitude tem-se a eliminação das anomalias de fase (Figura 1C) e com aplicação da função Traff, a eliminação dos batimentos laterais (Figura 1D).

## Referências

- 1. Carr, H.Y. Phys. Rev. 1958, 112, 1693-1701.
- 2. Freeman, R.; Hill, H.D.W. J. Mag. Res. 1971, 4, 66-383.
- 3. Santos, P.M.; Sousa, A.A.; Colnago, L.A. Quim. Nova, 2010 (no prelo)
- 4. Schwenk, A. J. Mag. Res. 1971, 5, 376-389.
- 5. Braun, S.; Kalinowski, H.O.; Berger, S.; 150 and More Basic NMR Experiments; Wiley-VCH, Weinhein, 1998.

**FAPESP, CNPq e FINEP**