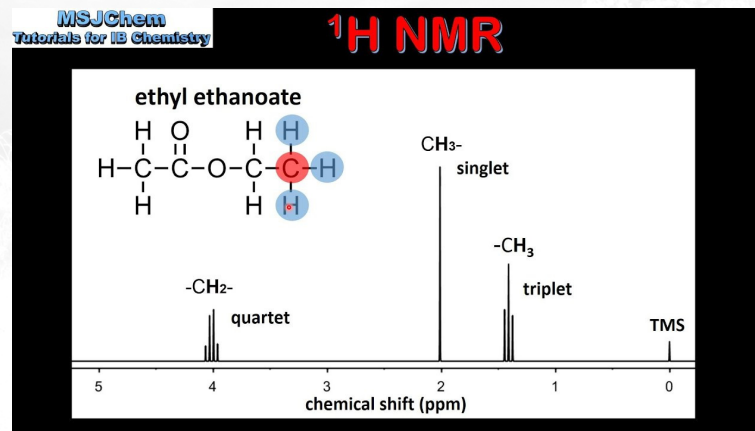
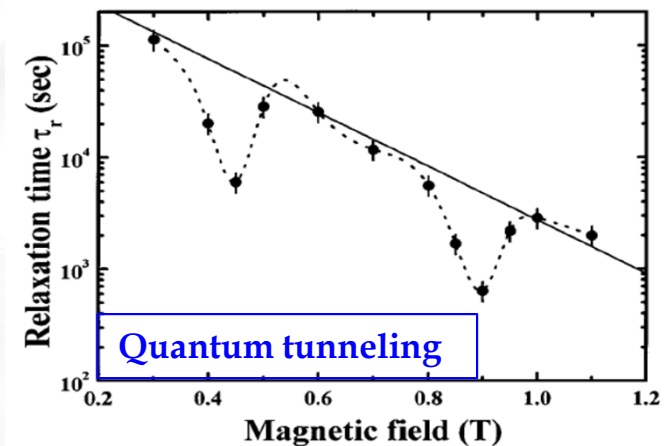
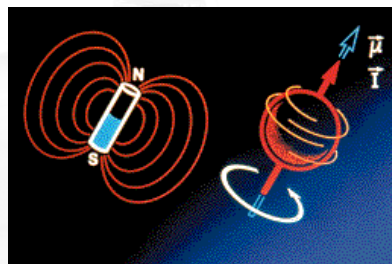


La Risonanza Magnetica Nucleare : aspetti classici e quantistici

Alessandro Lascialfari

Dipartimento di Fisica, Università degli studi di Pavia & INFN





Sommario

- Breve excursus storico
- Principi fisici della Risonanza Magnetica Nucleare (RMN o NMR):
«descrizione» classica e «descrizione» quantistica
- Cenni a fenomeni quantistici in NMR
- Alcune applicazioni

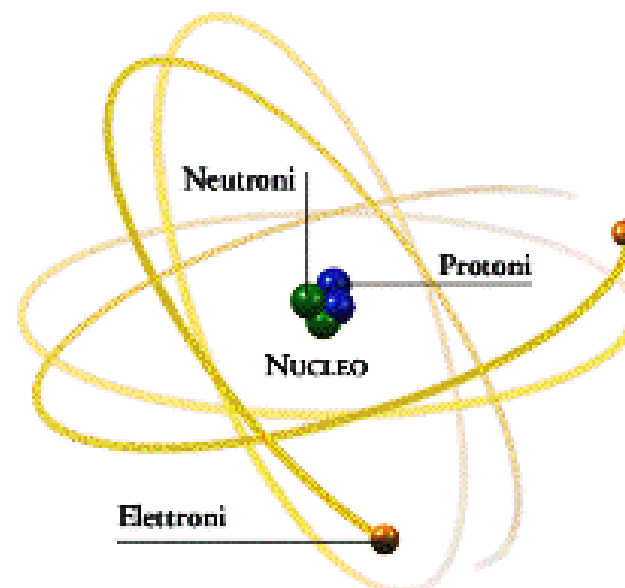
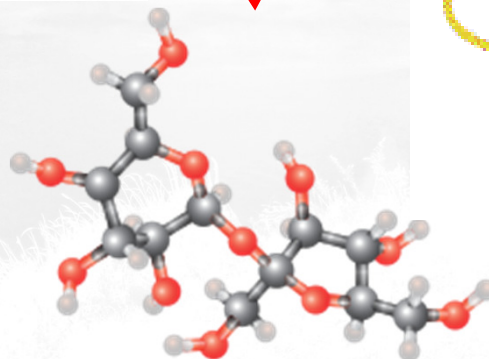
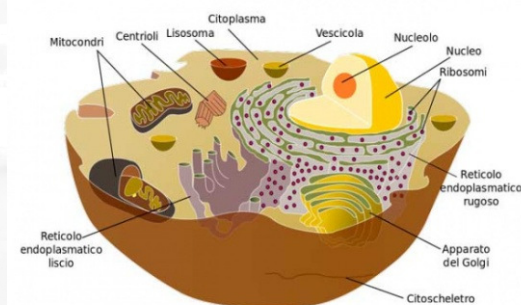
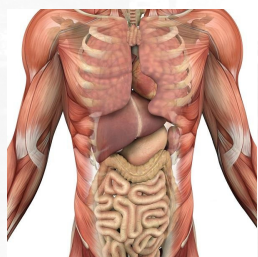


*Tipico Imager MRI per uso clinico,
campo magnetico $B = 1.5$ Tesla,
cioè frequenza f di risonanza
di circa 63 MHz .
Vale la relazione $2 \pi f = \gamma B$*



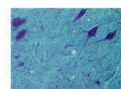
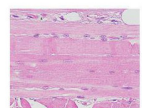
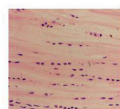
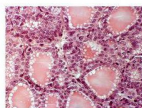
Caratteristica della Risonanza Magnetica Nucleare : **utilizzo** di particelle **sub-microscopiche (nuclei)** per avere **informazioni** su **"oggetti" macroscopici**

Organi ⇒ Tessuti ⇒ Cellule ⇒ Molecole ⇒ Atomi ⇒ **Nuclei**



I tessuti del corpo umano

- Epiteliale
- Connettivo
- Muscolare
- nervoso





Breve excursus storico



1937

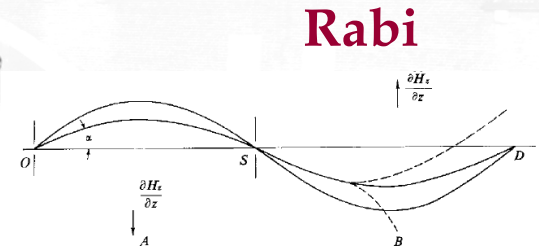
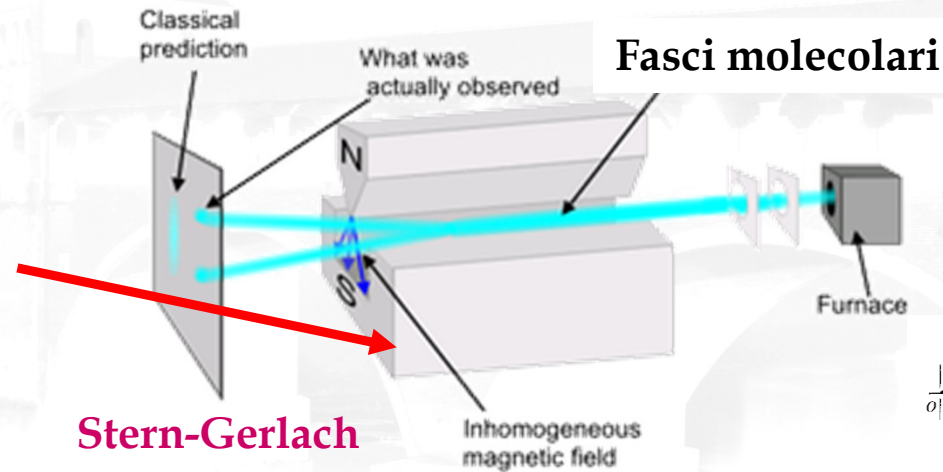
Esperimento di Rabi



INFN
Istituto Nazionale
di Fisica Nucleare

Generalizzazione dell'esperimento di Stern-Gerlach (dei fasci molecolari)
allo scopo di misurare il momento magnetico dei nuclei

All'interno di un tubo,
fasci molecolari
attraversano un
**campo magnetico
disomogeneo/omogeneo
generato da un
magnete, più
un campo oscillante**



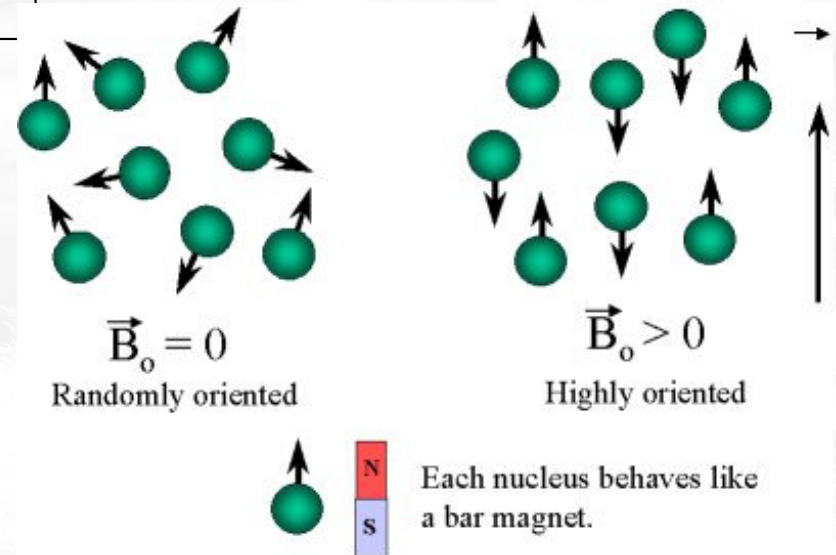
1944

Premio nobel a I. Rabi



Isidor Isaac Rabi

The Nobel Prize in Physics 1944 was awarded to Isidor Isaac Rabi "for his resonance method for recording the magnetic properties of atomic nuclei".



1945/46

Esperimento di Bloch-Purcell

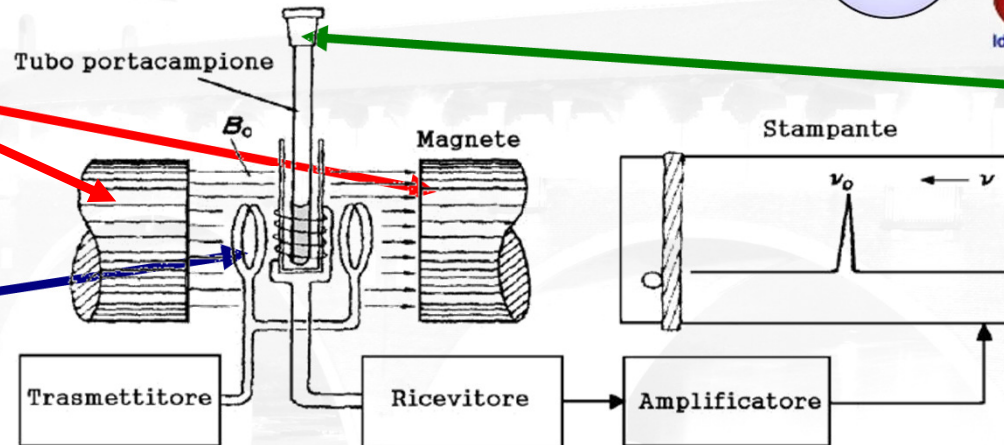
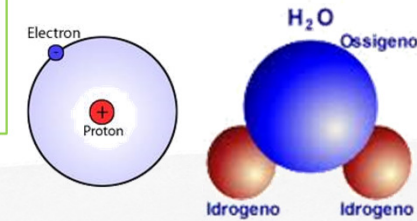


INFN
Istituto Nazionale
di Fisica Nucleare

Il **primo esperimento** di Risonanza Magnetica Nucleare nella materia condensata (nucleo dell'atomo di idrogeno)

Magnete che genera un **campo magnetico statico**

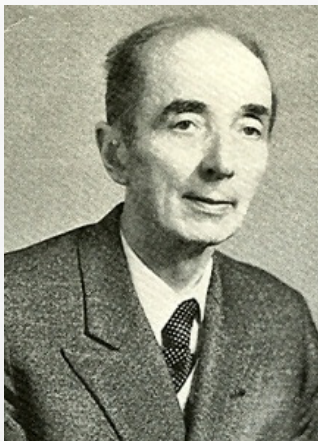
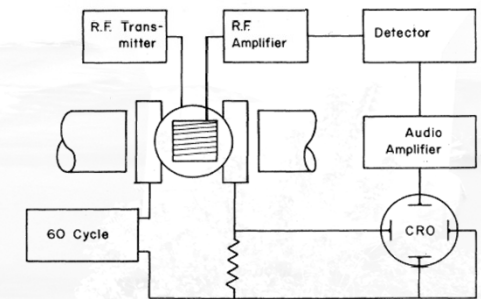
Bobine che generano un **campo magnetico a radiofrequenza**



Campione di H₂O

1948/50

Esperimenti RMN di Luigi Giulotto (Università di Pavia)



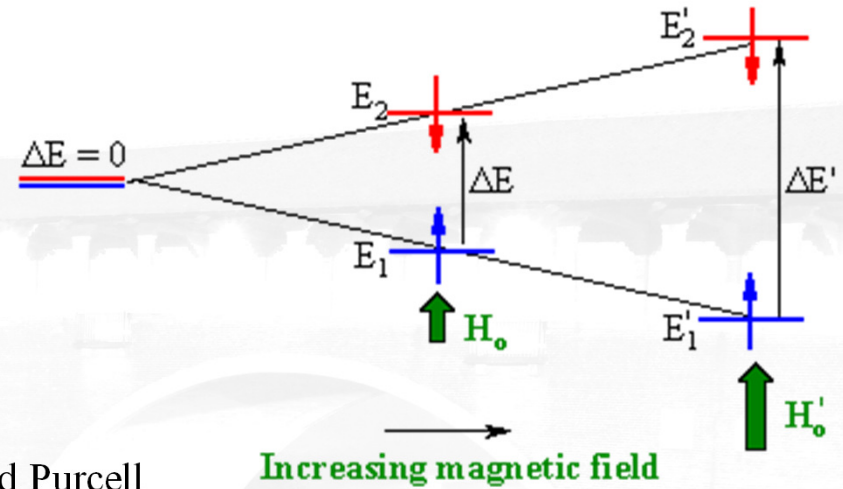
L.G. "sentiva" l'effetto di RMN in cuffia..... "bisogna avere fede..."
Risultati pubblicati sulla rivista italiana "Il Nuovo Cimento",
purtroppo a scarsa diffusione

1952

Premio nobel a F. Bloch e E. M. Purcell



INFN
Istituto Nazionale
di Fisica Nucleare



Felix Bloch **Edward Mills Purcell**

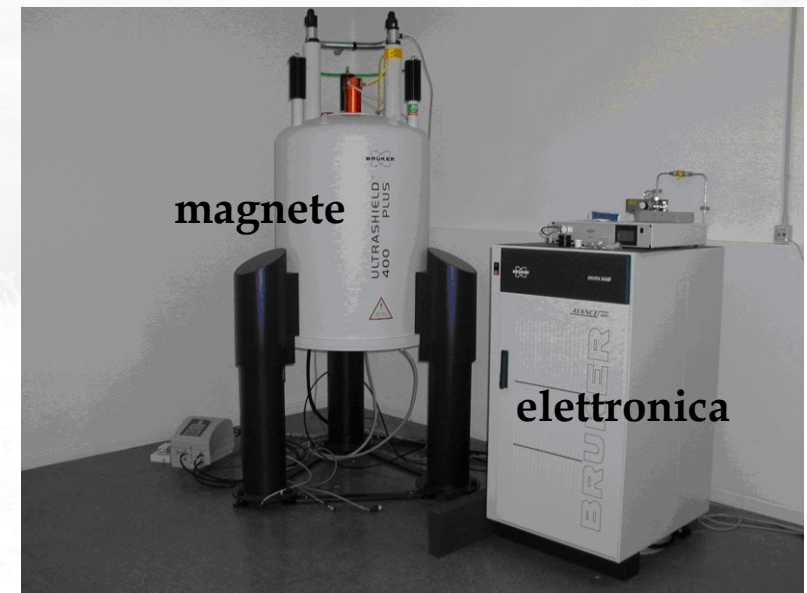
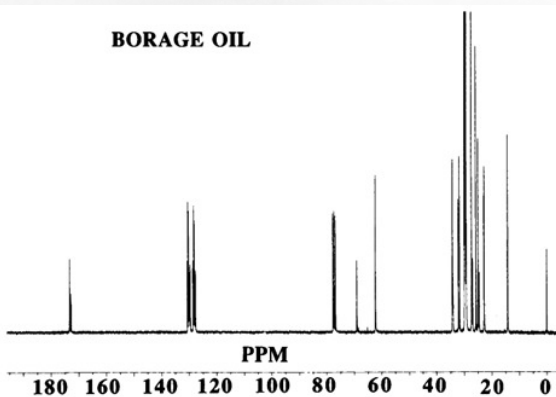
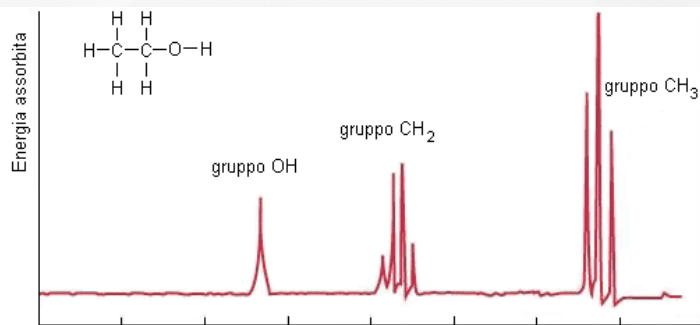
The Nobel Prize in Physics 1952 was awarded jointly to Bloch and Purcell
"for their development of new methods for nuclear magnetic precision measurements and discoveries in connection therewith"

1950-1970

RMN come tecnica analitica/chimica

Spettro ^1H NMR dell'alcool etilico
(etanolo, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$)

Spettro ^{13}C NMR dell'olio
di una pianta (borragine)



1970-oggi



INFN
Istituto Nazionale
di Fisica Nucleare

La RMI (MRI) si afferma grazie allo sviluppo degli elaboratori elettronici

- **1972 Tomografia computerizzata**
- 1973 MRI in retroproiezione - Lauterbur
- 1975 Immagini per Trasformata di Fourier Imaging - Ernst (phase and frequency encoding)
- **1977 MRI of the whole body - R. Damadian ;** EPI technique - P. Mansfield
- 1980 Spin-warp FT-MRI demonstrated - Edelstein
- 1986 Gradient Echo Imaging NMR Microscope
- 1988 Angiography - O'Donnell & Dumoulin
- 1989 Echo-Planar Imaging (images at video rates = 30 ms / image)
- **1991 Premio Nobel per la Chimica - Ernst**
- **1992 RMI funzionale (fMRI)**
- 1994 Hyperpolarized ^{129}Xe Imaging
- **2003 Premio Nobel per la Medicina - Lauterbur & Mansfield**



Principi/grandezze fisici/fisiche alla base della NMR

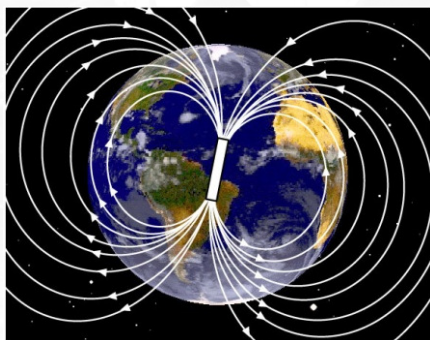
- Il campo magnetico (classico/quantistico)
- Magnetismo nei materiali : momento magnetico e magnetizzazione (classico/quantistico)
- Energia di atomi e nuclei : principio di Heisenberg, quanto di energia, struttura “discreta”, meccanica quantistica (quantistico)
- Il fenomeno della risonanza (classico/quantistico)



Il campo magnetico

Il campo magnetico

- **Grandezza fisica riconducibile ad osservazioni sperimentali** di fenomeni naturali : campo magnetico terrestre, forze attrattive e repulsive fra rocce, etc.
- Esiste sempre **una “sorgente” di campo magnetico**. Tipico esempio : la calamita
- **Sorgenti** di campo magnetico **di interesse** : elettromagneti , magneti superconduttori, magneti in genere
- Ad oggi esistono **multi esempi quotidiani** di utilizzo del campo magnetico



Levitazione diamagnetica della rana in alti campi magnetici (10 Tesla ; il campo terrestre è 0.00005 Tesla)



Il “più grande” magnete del mondo (CERN)

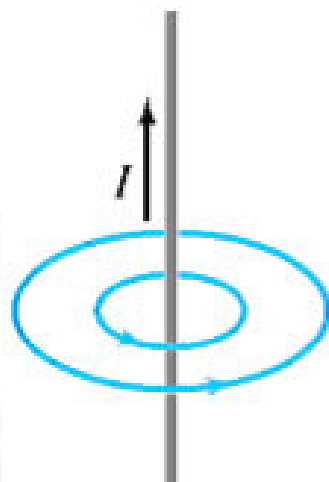


Levitazione dovuta a superconduttori ad alta temperatura critica



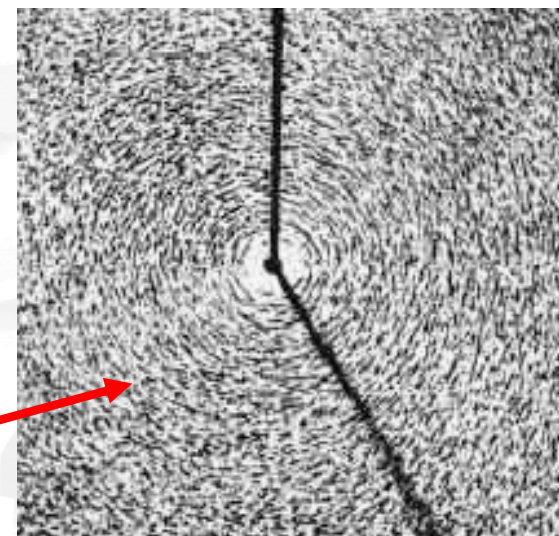
Treno a levitazione magnetica

Il campo magnetico è dovuto a cariche elettriche in moto



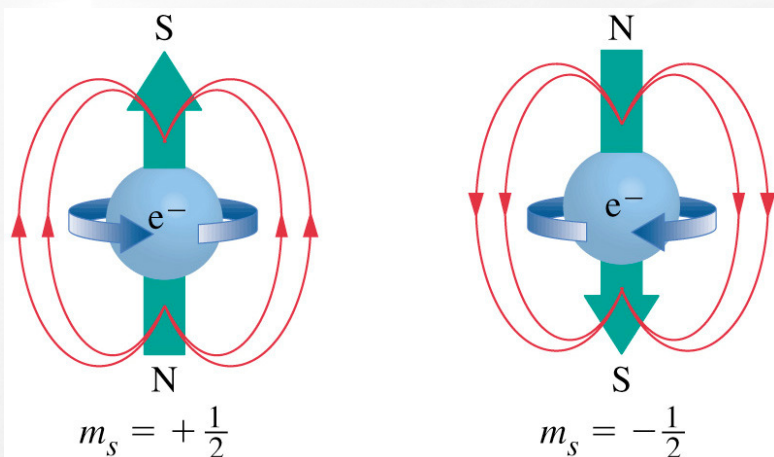
$$B = \frac{\mu_0 I}{2\pi r}$$

$$\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7}$$



Filo elettrico percorso da corrente : legge di Biot-Savart

La limatura di ferro fornisce la direzione del campo magnetico generato dalla corrente che percorre il filo (vista dall'alto)



Rotazione (spinning) dell'elettrone su se stesso : **piccola calamita !!**

Alcune evidenze



Levitazione dovuta a
superconduttori
ad alta temperatura critica

Levitazione diamagnetica
della rana in
alti campi magnetici (10
Tesla ; il campo
terrestre è 0.00005 Tesla)

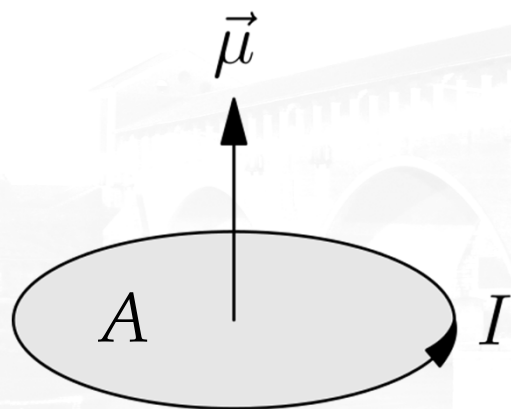




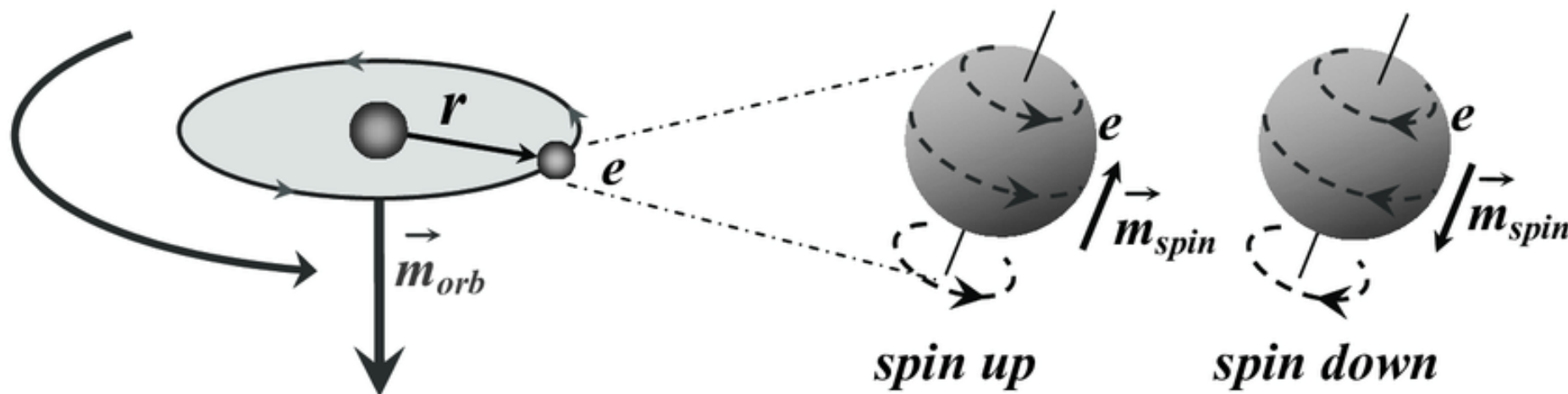
Magnetismo nei materiali : momento magnetico e magnetizzazione

Magnetismo nei materiali

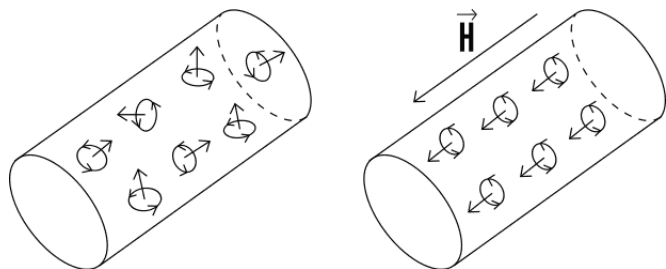
Il "magnetismo macroscopico" è di origine elettronica : corrente elettronica
 Il "magnetismo" di origine nucleare è molto più debole



$\vec{\mu} = \sum I \overline{\Delta \vec{A}}$ **momento magnetico (singolo)**
 Ciascun **nucleo "magnetico"** (momento magnetico, quindi momento angolare, diverso da zero) & ciascun **atomo con elettroni spaiati** ha un $\vec{\mu} \neq 0$



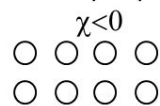
Magnetizzazione



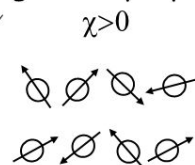
In un elemento di materiale **ferromagnetico**, i momenti magnetici degli atomi sono allineati parallelamente e si *sommano* in un momento magnetico effettivo.

MATERIALI

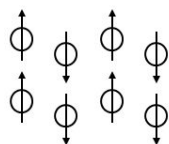
DIAMAGNETICI
non hanno un momento magnetico proprio



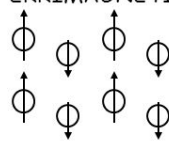
PARAMAGNETICI
hanno un momento magnetico proprio



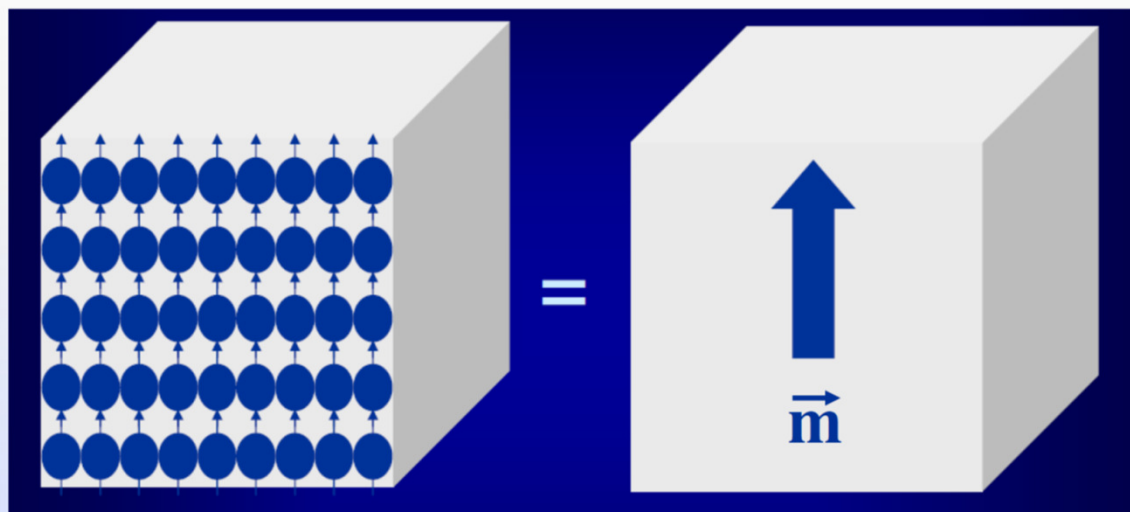
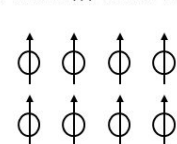
ANTIFERROMAGNETICI



FERRIMAGNETICI

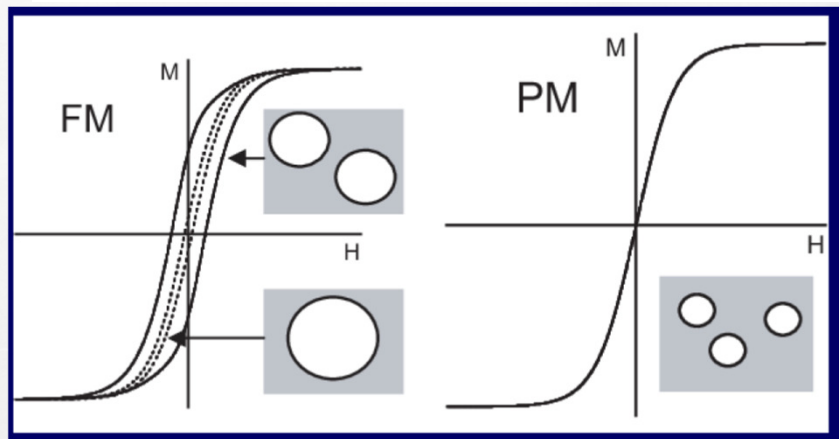


FERROMAGNETICI

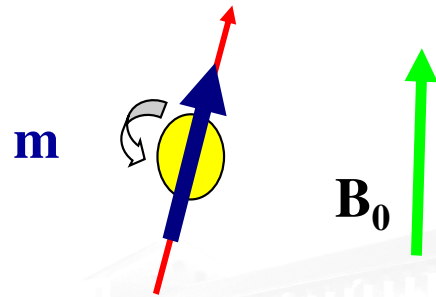


Magnetizzazione elettronica/nucleare :

$$M_{e,n} = \frac{1}{V} \sum_i m_i$$



... in presenza di un campo magnetico statico B_0



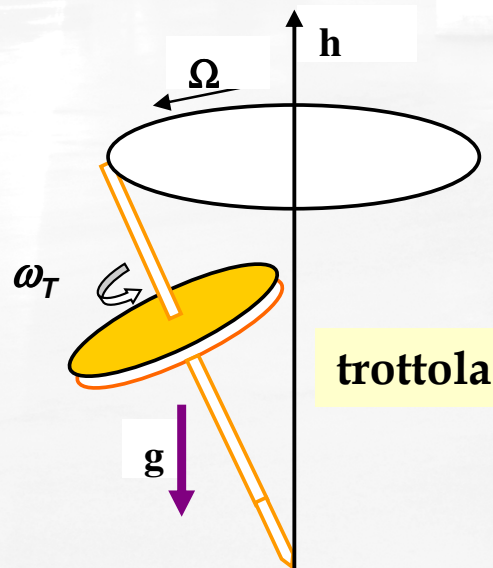
Momento magnetico \mathbf{m} o magnetizzazione \mathbf{M}

«immerso/a» in \mathbf{B}_0 :

1) Energia Zeeman $E_z = - \mathbf{m} \cdot \mathbf{B}_0$

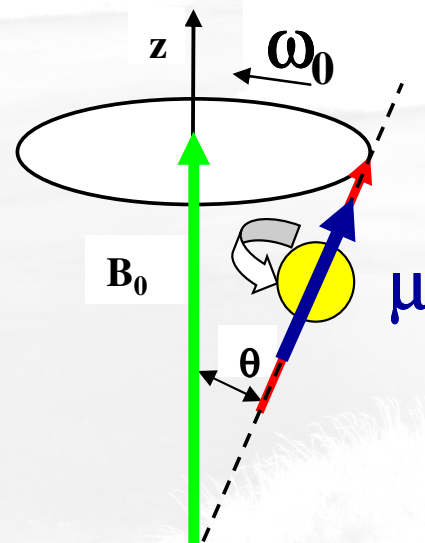
2) Momento torcente e precessione di Larmor

$\mathbf{m} = \gamma \mathbf{L}$; \mathbf{L} = momento angolare ; $\gamma = q/2m$, rapporto giromagnetico



trottola

$$\Omega = M g b / (I \omega_T)$$



spin o
magnetizzazione

Se il campione (il momento magnetico) è immerso in un campo magnetico statico \mathbf{B}_0 si genera una coppia

$$\mathbf{m} \times \mathbf{B}_0 = \gamma \mathbf{L} \times \mathbf{B}_0$$

che determina la precessione attorno a \mathbf{B}_0 con :

$$\omega_L = \omega_0 = \gamma B_0$$

Dalla soluzione dell'equazione di moto classica :

$$\partial \mathbf{L} / \partial t = \gamma \mathbf{L} \times \mathbf{B}_0$$

$$\partial \mathbf{m} / \partial t = \gamma \boldsymbol{\mu} \times \mathbf{B}_0$$



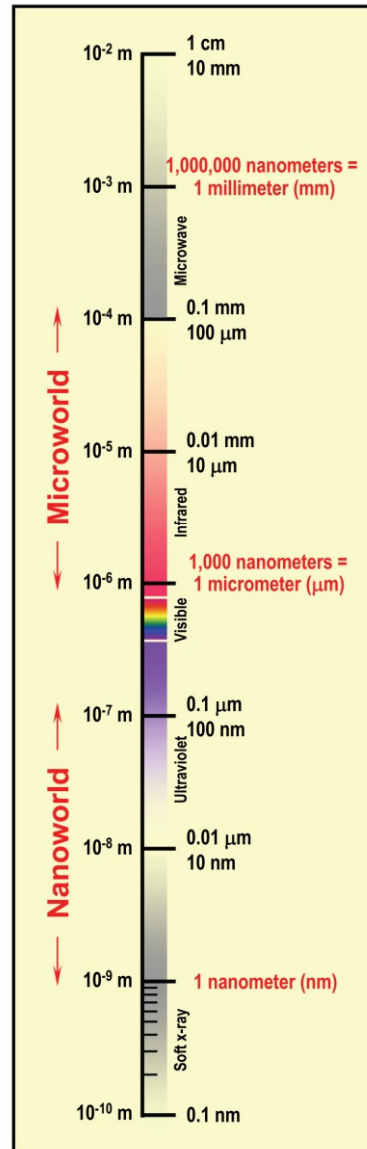
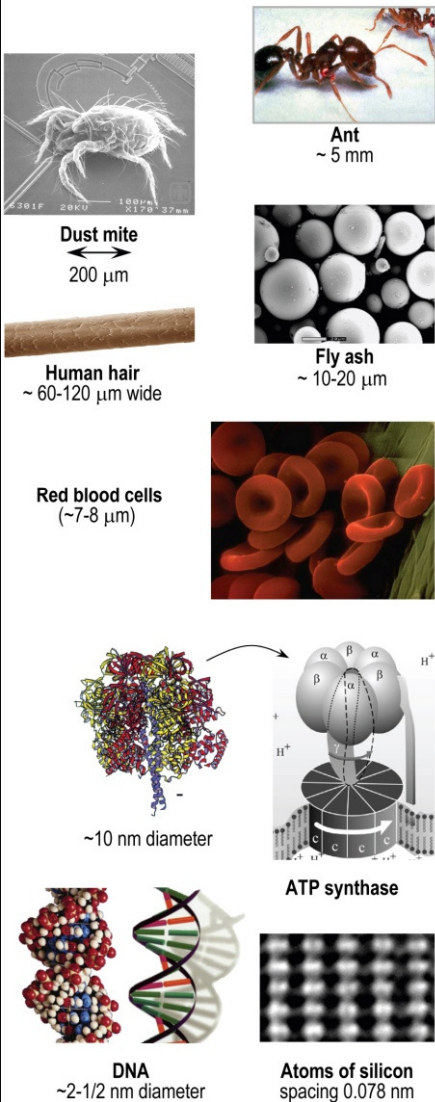
Struttura dei livelli di energia atomici e nucleari

Energia di atomi e nuclei



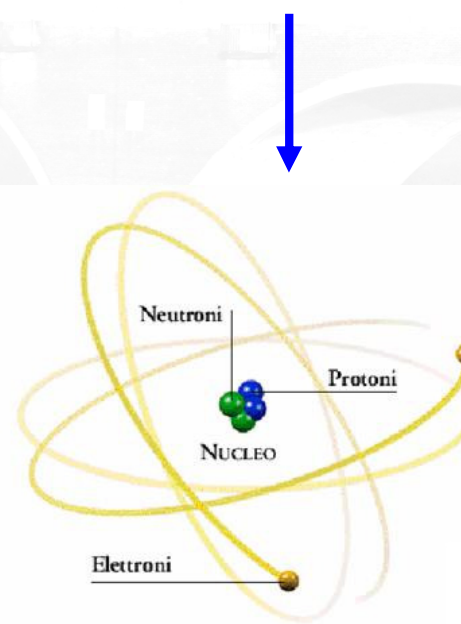
The Scale of Things – Na

Things Natural

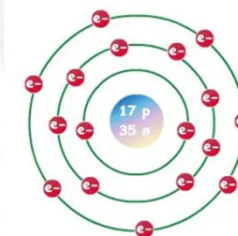


Organi → tessuti → molecole
→ Atomi → nuclei

Particelle atomiche e subatomiche

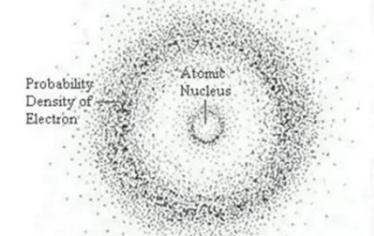


Bohr vs. Electron Cloud



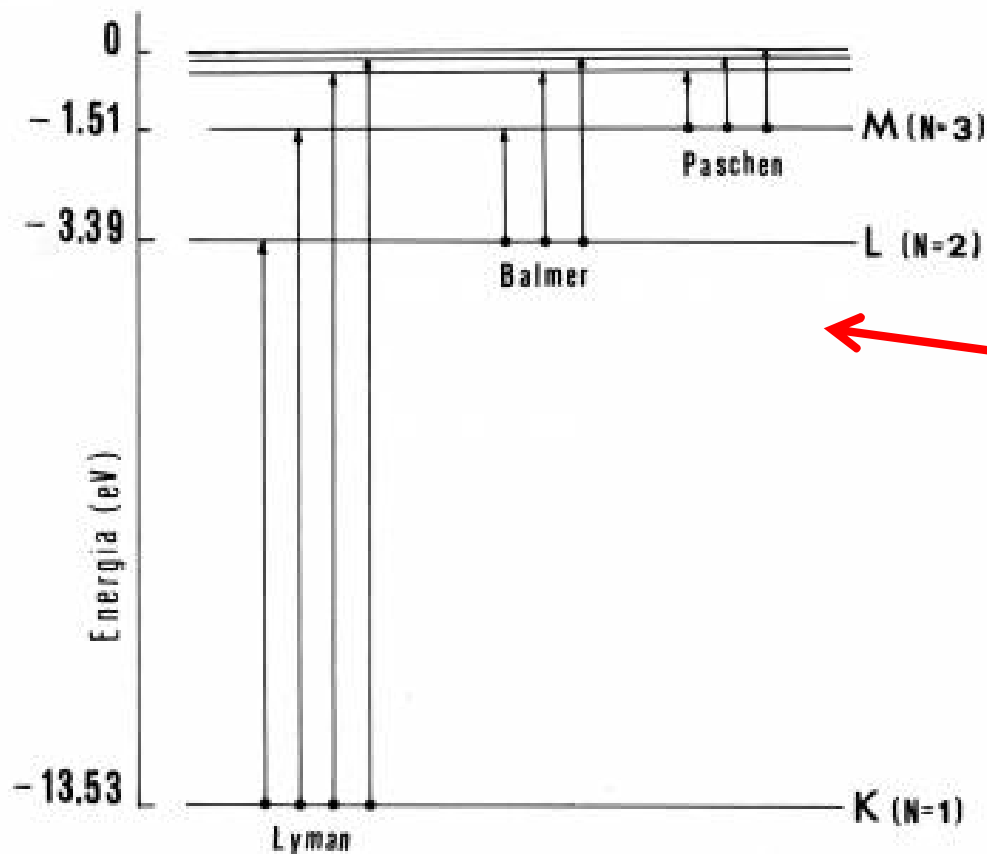
Probability
Density of
Electron

Atom
Nucleus





Struttura energetica atomica e nucleare



Quantizzazione
 Dei livelli energetici

Esempio : livelli
 dell'atomo di idrogeno

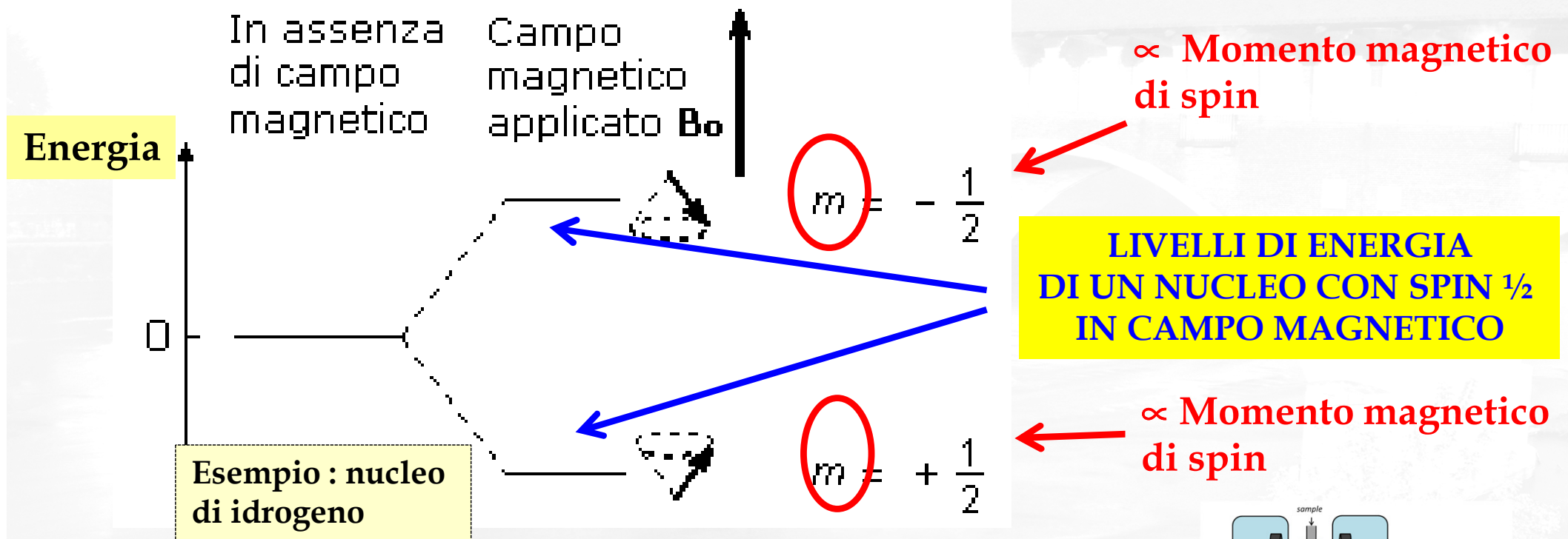
ATOMI E NUCLEI
 SONO SISTEMI
 QUANTISTICI

Un sistema quantistico non può assumere (in modo continuo) **tutti i valori di energia**

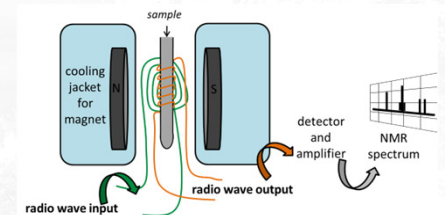
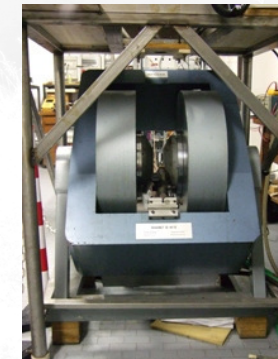
Struttura energetica nucleare



Livelli di energia quantizzati del nucleo : EFFETTO "ZEEMAN" DEL CAMPO MAGNETICO



Ciascun livello energetico corrisponde a un valore del momento magnetico di spin (classicamente può essere pensato come derivante dalla rotazione del protone intorno al proprio asse)



Sorgente di campo magnetico :
SC o elettromagnete



Il fenomeno della risonanza



Il concetto di risonanza

- Consiste in una risposta “aumentata” dei sistemi
(molla, ponti, chitarra/microfono, nuclei, elettroni, molecole,...)

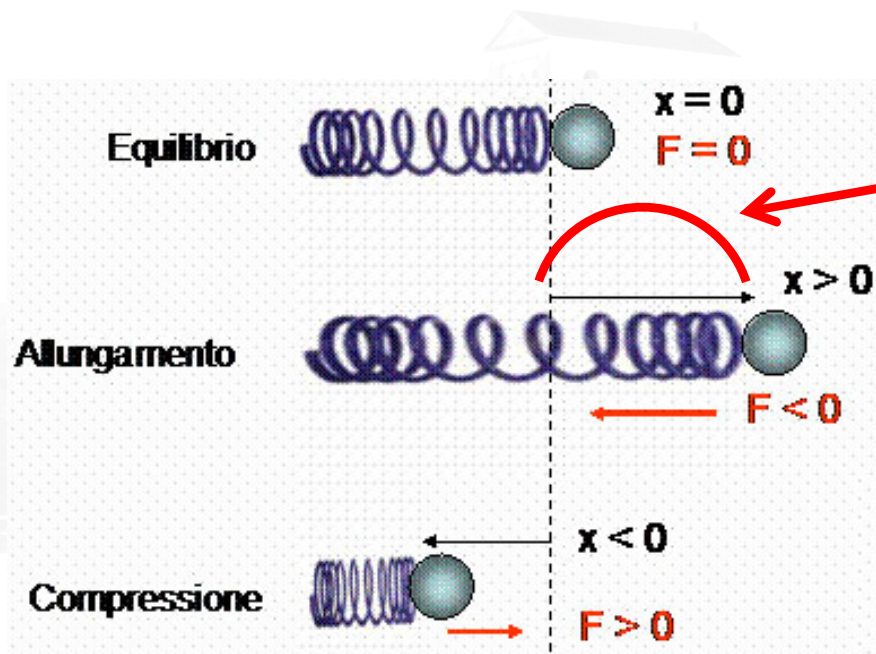
sollecitati da una azione esterna

agente a frequenze proprie dei sistemi stessi

Quando si ha risonanza

c'è un picco nella risposta del sistema

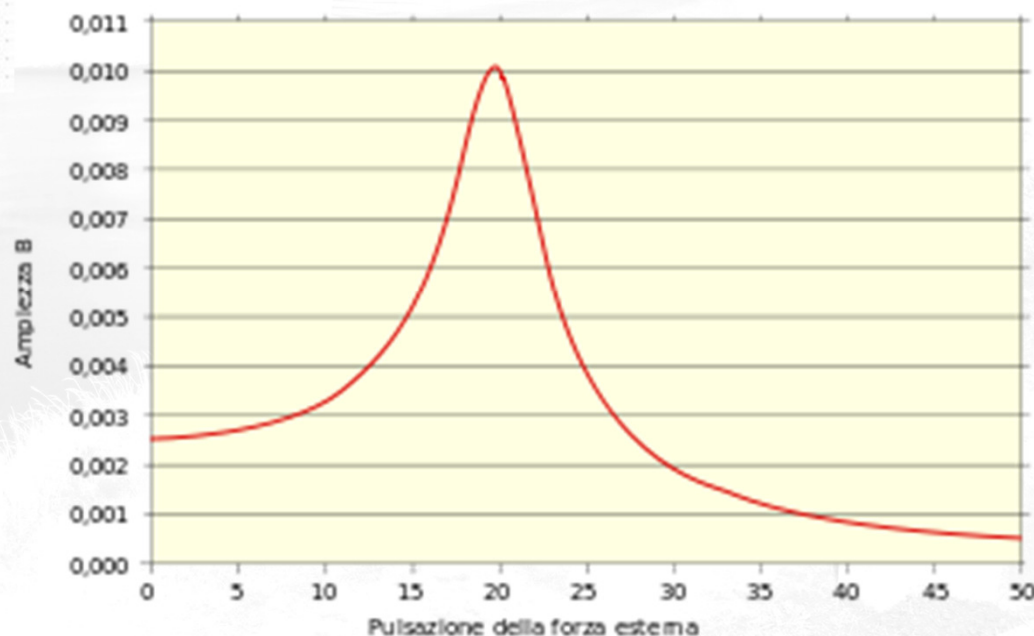
Risonanza nel moto di una molla



**AMPIEZZA DELLA MOLLA
(MAX ALLUNGAMENTO)**

RISONANZA DELLA MOLLA

Ampiezza dell'oscillatore forzato



Se la molla viene **“forzata”** dall'esterno **alla sua frequenza, aumenta l'ampiezza** della sua oscillazione

Risonanza del suono

RISONANZA SONORA : effetto Larsen in chitarre amplificate

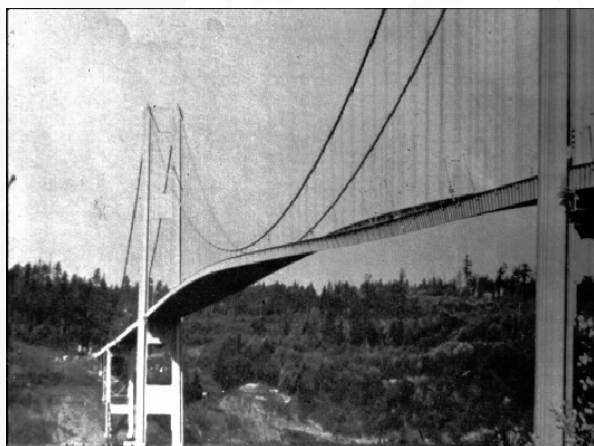
20 Hz - 500 Hz



Risonanza : lo «strano» caso dei ponti

RISONANZA MECCANICA :

Ponte di Tacoma che oscilla e poi crolla causa vento a circa 67 km/h





Risonanza : lo «strano» caso dei ponti

GALE CAUSES
BRIDGE
TO SWAY



Riassumendo :

concetti base per la NMR

- campo magnetico
- magnetismo nei materiali e dei nuclei
- livelli energetici discreti dei nuclei
 - il fenomeno della risonanza



Risonanza Magnetica Nucleare : due possibili descrizioni

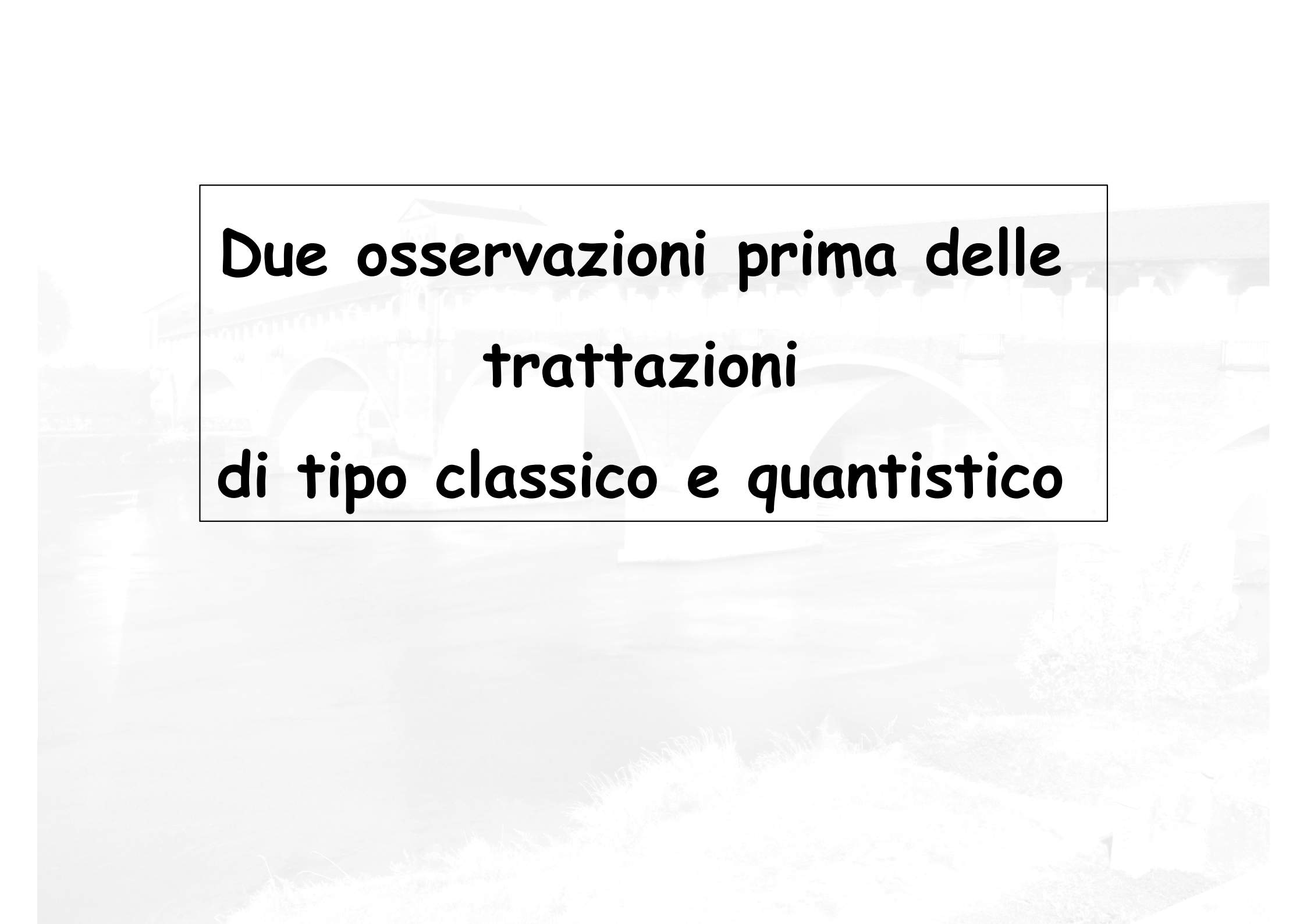
Due modi equivalenti per descriverla utilizzando la :

1) Fisica classica

2) Fisica quantistica

ma

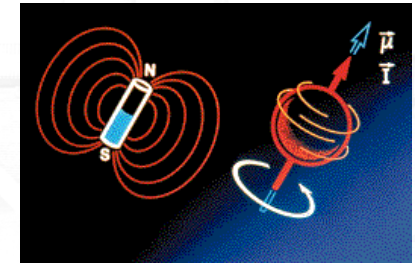
la descrizione classica, in generale, puo' fallire !!



**Due osservazioni prima delle
trattazioni
di tipo classico e quantistico**

Osservazioni generali sulla NMR

- La RMN è una tecnica spettroscopica:
- Risonante ($\omega_0 = \gamma B_0$ e $B_1 \ll B_0$)
- Microscopica (studia le interazioni magnetiche e/o elettriche che si manifestano tra nuclei atomici, atomi e molecole)
- Radiofrequenza (4-500 MHz)
- È ampiamente utilizzata nel campo della Fisica dello stato solido e dei liquidi, nella Chimica e nel settore farmaceutico
- Dal 1975 trova applicazioni in medicina in alternativa alla TAC
- La risoluzione spaziale (≈ 1 mm) non dipende della lunghezza d'onda della radiazione utilizzata
- Non utilizza radiazioni ionizzanti
- Consente immagini assiali, sagittali e coronali

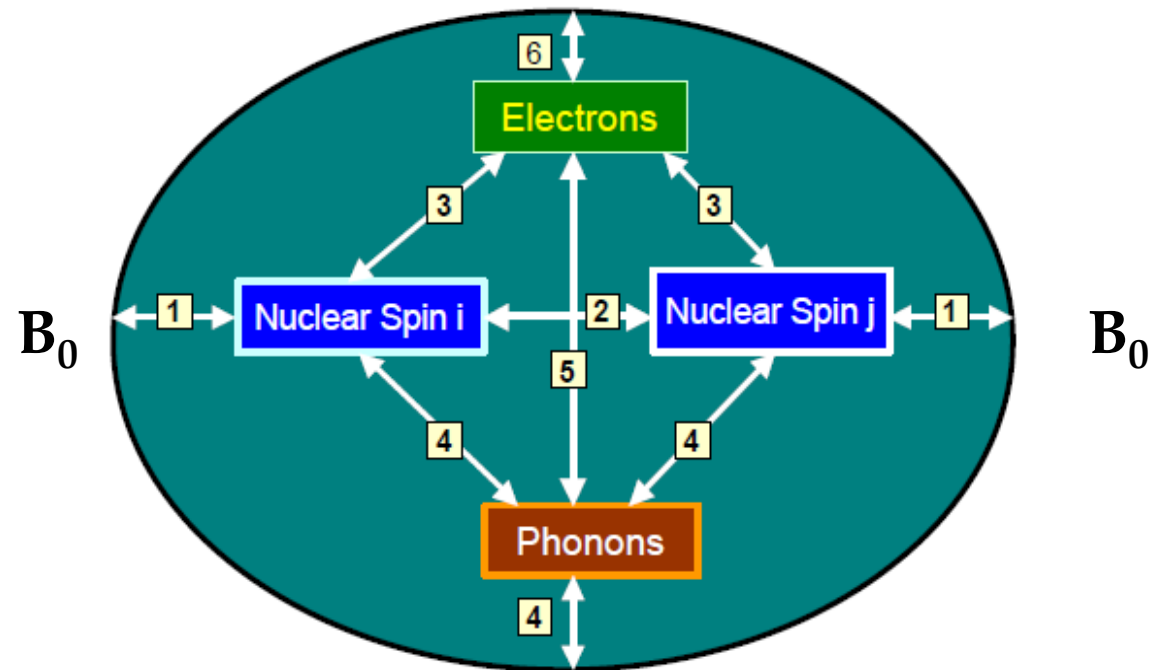


MRI Timeline

- 1946 MR phenomenon - Bloch & Purcell
- 1952 Nobel Prize - Bloch & Purcell
- 1950-70 NMR developed as analytical tool
- 1972 Computerized Tomography
- 1973 Backprojection MRI - Lauterbur
- 1975 Fourier Imaging - Ernst
- 1977 Echo-planar imaging - Mansfield
- 1980 FT MRI demonstrated - Edelstein
- 1986 Gradient Echo Imaging - NMR Microscope
- 1987 MR Angiography - Dumoulin
- 1991 Nobel Prize - Ernst
- 1992 Functional MRI
- 1994 Hyperpolarized ^{129}Xe Imaging
- 2003 Nobel Prize - Lauterbur & Mansfield

Nota generale sui parametri fisici e sul nucleo come sonda "locale"

3 quantità NMR principali: spettro, tempo di rilassamento nucleare spin-spin T_2 (fuori equilibrio), tempo di rilassamento nucleare spin-reticolo T_1 (ritorno all'equilibrio)



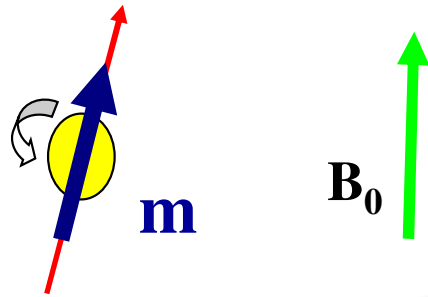
- I nuclei sono **sonde locali** \Leftrightarrow sensibili, *ad esempio*, alle **interazioni iperfini**
- Si possono studiare i **campi magnetici locali & la dinamica di spin**

In MRI e rilassometria NMR \Rightarrow sensibilità alle proprietà magnetiche, dinamica di spin e moti molecolari



Risonanza Magnetica Nucleare : visione classica

Trattazione (semi) classica della NMR



Nucleo	Spin	$\gamma/2\pi$ (MHz/T)	Abb.Nat. [%]	Sens. rel.
^1H	1/2	42.576	99.98	1
^{13}C	1/2	10.71	1.1	$1.6 \cdot 10^{-2}$
^{17}O	5/2	5.77	0.04	$3 \cdot 10^{-2}$
^{14}N	1	3.08	99.63	10^{-3}
^{23}Na	3/2	11.26	100	$9 \cdot 10^{-2}$
^{31}P	1/2	17.23	100	$6.6 \cdot 10^{-2}$
^{19}F	1/2	40.055	100	0.83

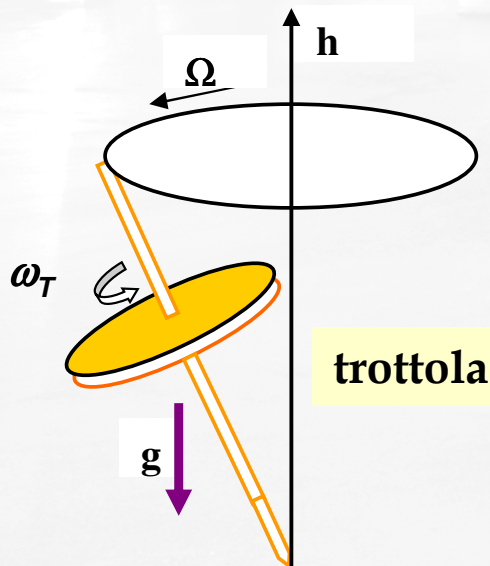
$$L = \hbar I$$

(L = momento angolare,
 I =spin nucleare)

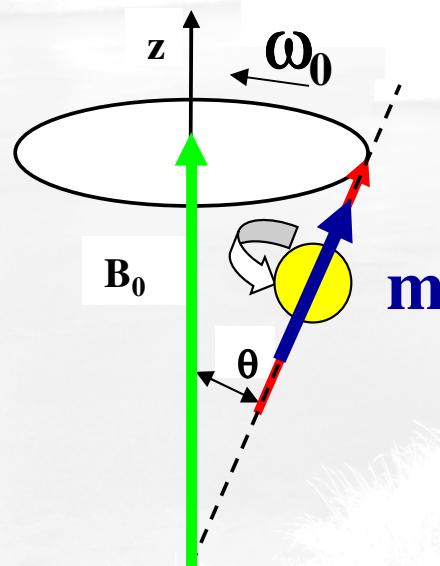
mom. magn.: $m = \gamma L$

($\gamma = q/2m$, rapp. giromagn)

Spin isolato, momento magnetico m , magnetizzazione M
Energia Zeeman $E_z = -m \cdot B_0$ & precessione di Larmor



$$\Omega = M g b / (I \omega_T)$$



spin o magnetizzazione

Se il campione (il momento magnetico) è immerso in un campo magnetico statico B_0 si genera una coppia

$$m \times B_0 = \gamma L \times B_0$$

che determina la precessione attorno a B_0 con :

$$\omega_L = \omega_0 = \gamma B_0$$

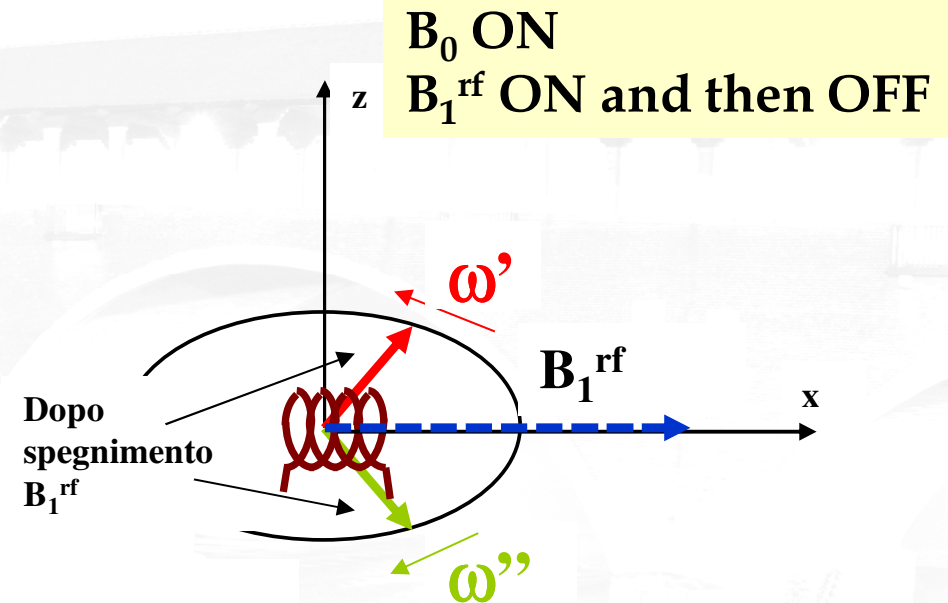
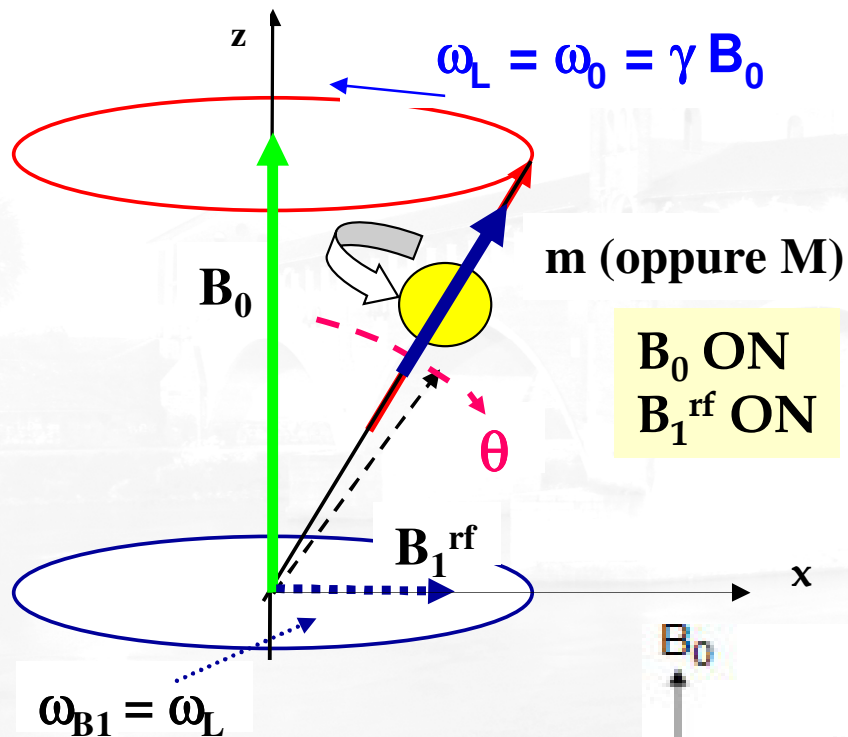
Dalla soluzione dell'equazione di moto classica :

$$\partial L / \partial t = \gamma L \times B_0$$

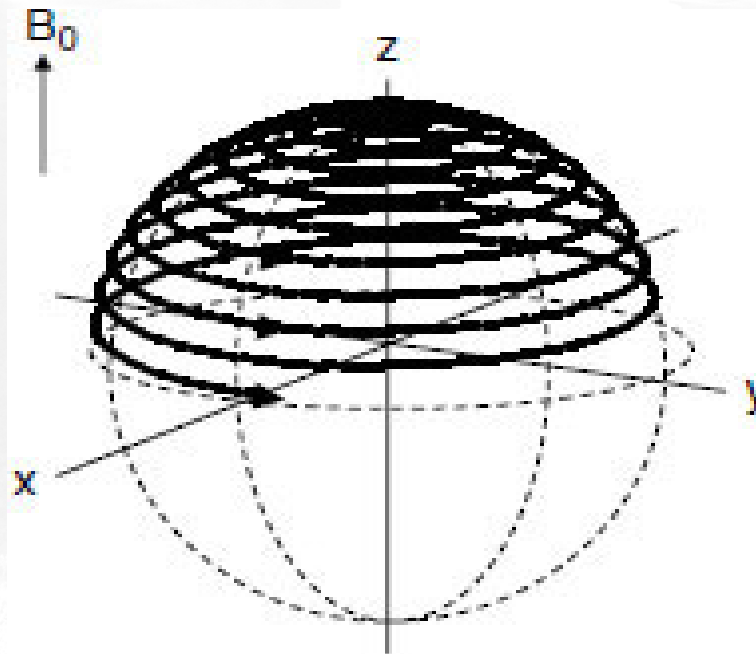
$$\partial m / \partial t = \gamma \mu \times B_0$$

Applicazione di B_0 e $B_1^{rf} \Rightarrow$ risonanza

Ulteriore campo magnetico a radiofrequenza B_1^{rf} e perpendicolare a B_0



NMR «pulsata»
 B_1^{rf} è un impulso
ed è dato da (ad es.):
 $B_1^{rf} = B_1^{rf} \cos(\omega_L t) \hat{u}_x$



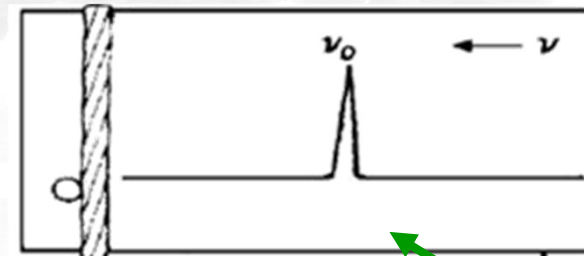
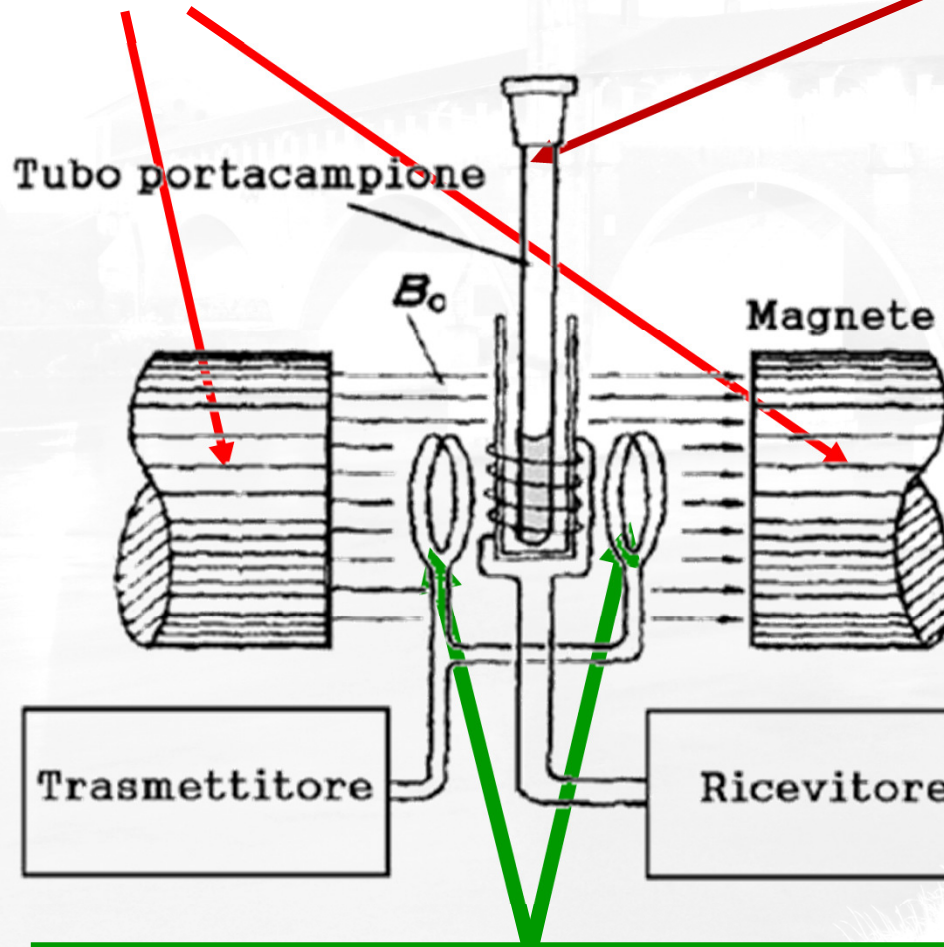
Moto della **componente z**
della magnetizzazione
nucleare M : **composizione**
di due precessioni

Apparato di misura e segnale NMR



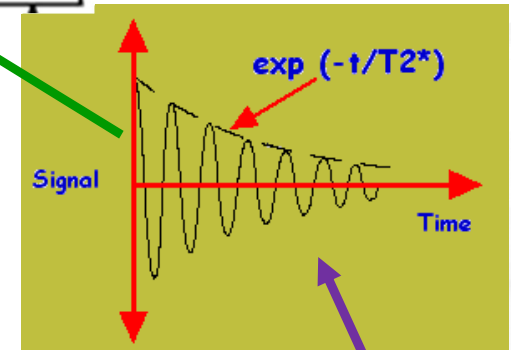
Magnete che genera un **campo magnetico statico B_0**

Provetta contenente il **campione** da misurare



spettro finale

FT



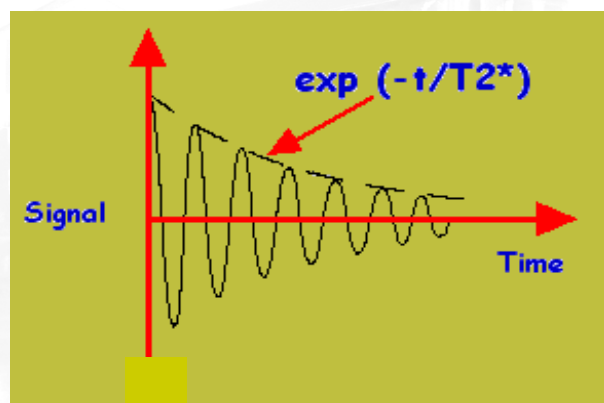
Bobine che generano un **campo magnetico a radiofrequenza B_1**

Segnale (ΔV) dal ricevitore \Rightarrow
Trasformata di Fourier \Rightarrow **spettro**,
tempi di rilassamento nucleare T_1 e T_2

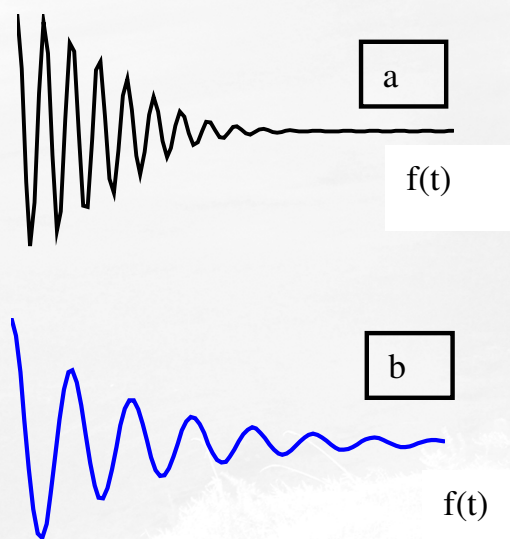
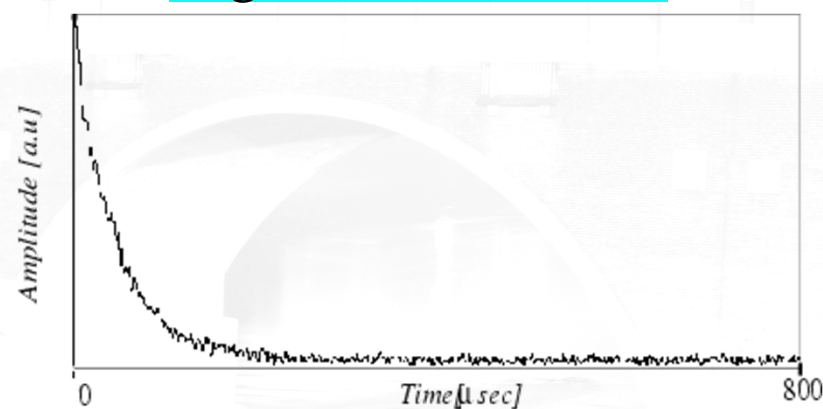
Segnale NMR

Risultato esperimento NMR : **segnale elettrico (ddp, ΔV)**
da **TUTTO** il campione raccolto sullo schermo del computer

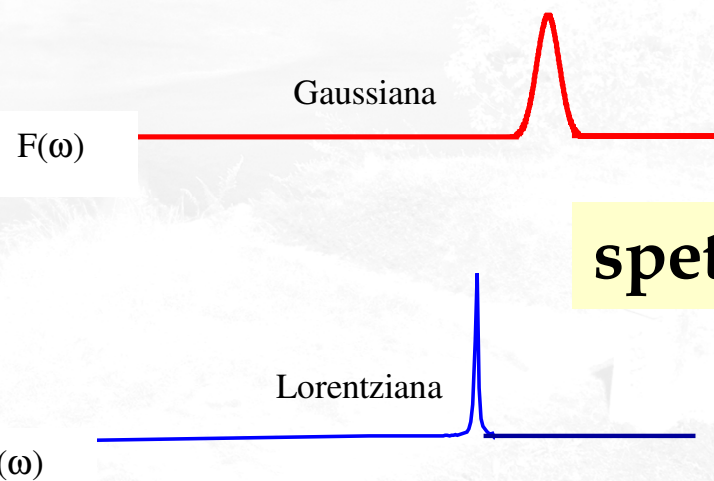
Segnale originario



Segnale demodolato



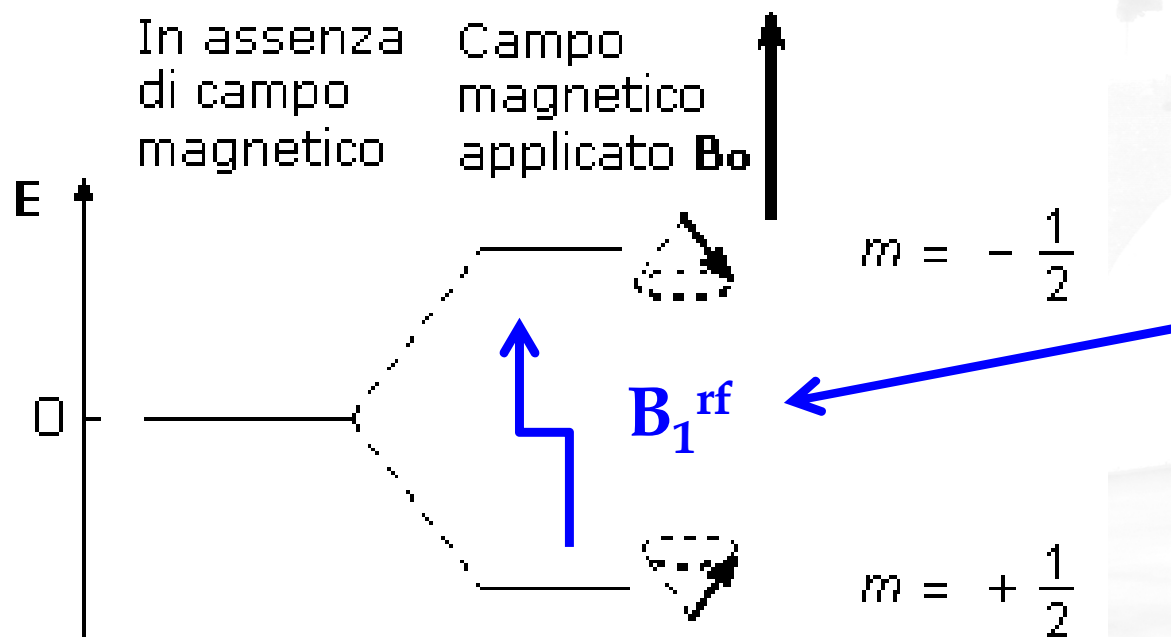
Fourier
Transform



spettri

NMR : descrizione quantistica

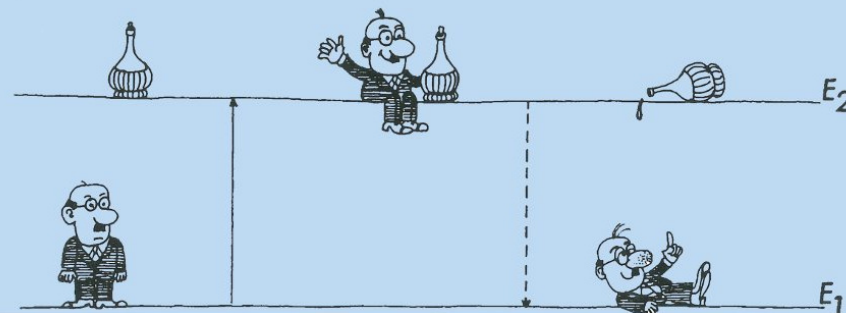
Nel **nucleo** i livelli sono quantizzati quindi il sistema può **assorbire energia solo se l'energia fornita dall'esterno è pari alla differenza di energia fra livelli**



B_1^{rf} fornisce un "quanto" di energia pari alla separazione fra i livelli : **risonanza !!**

Dopo aver applicato il campo B_0 statico si applica un campo B_1 , a radiofrequenza, tramite un segnale elettrico inviato su una bobina attorno al "campione"

Chianti Workshop
Opening New Doors for Magnetic Resonance



NMR pulsata, assorbimento di energia : spettro

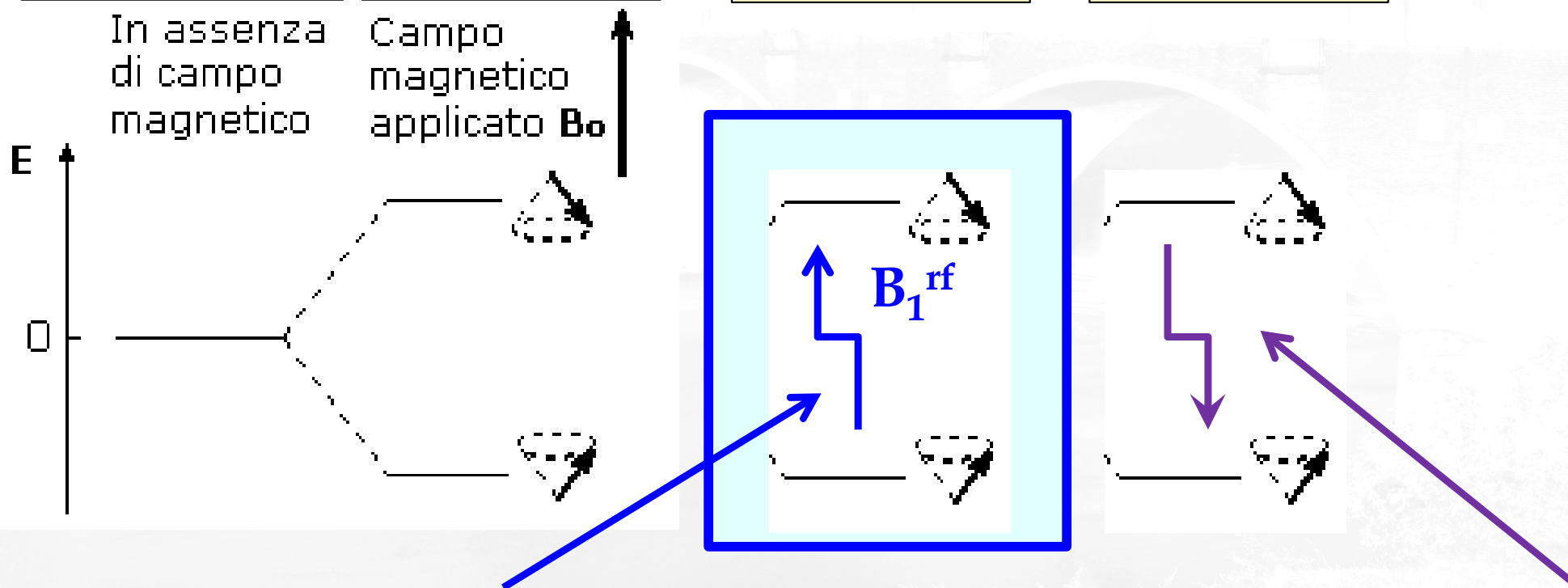


Step 0 :
 B_0 statico OFF
 $B_{1\text{rf}}$ OFF

Step 1 :
 B_0 statico ON
 $B_{1\text{rf}}$ OFF

Step 2 :
 B_0 statico ON
 $B_{1\text{rf}}$ ON

Step 3 :
 B_0 statico ON
 $B_{1\text{rf}}$ OFF



$B_{1\text{rf}}$ fornisce un "quanto" di energia : **risonanza !!**

Rilassamento verso lo stato fondamentale : dal segnale (ΔV) si ottengono lo spettro e i **tempi di rilassamento**

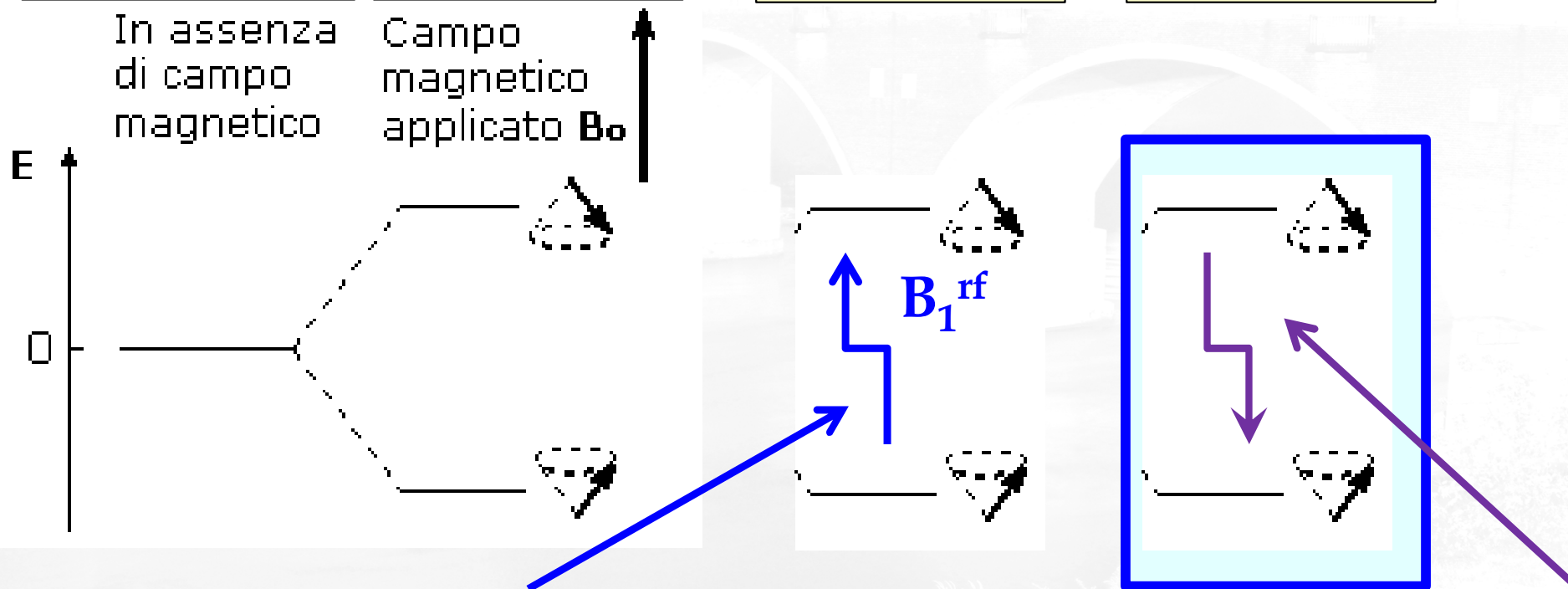
NMR pulsata : tempi di rilassamento

Step 0 :
 B_0 statico OFF
 B_1^{rf} OFF

Step 1 :
 B_0 statico ON
 B_1^{rf} OFF

Step 2 :
 B_0 statico ON
 B_1^{rf} ON

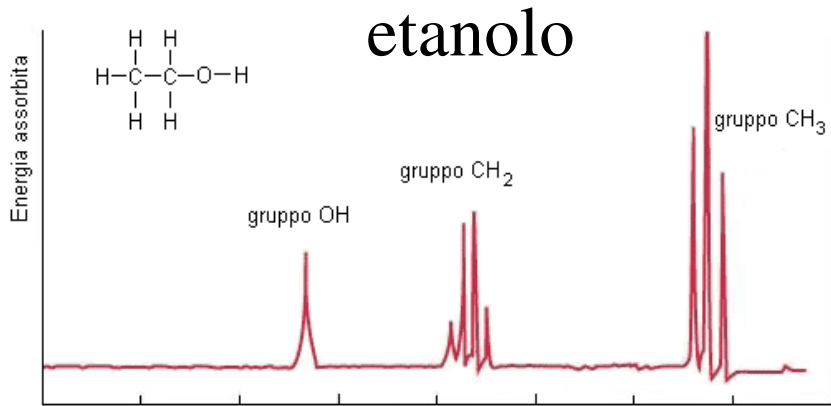
Step 3 :
 B_0 statico ON
 B_1^{rf} OFF



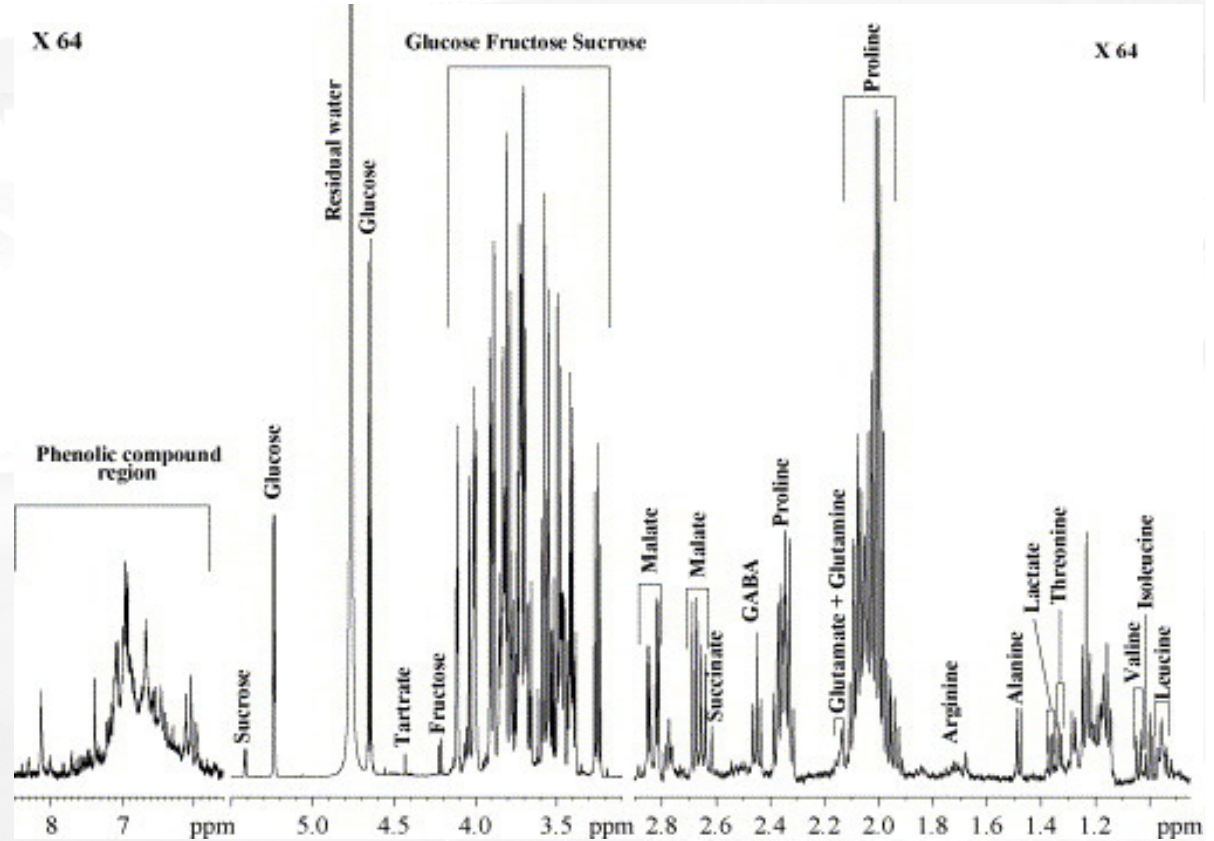
B_1^{rf} fornisce un
"quanto" di
energia : **risonanza !!**

Rilassamento verso lo stato fondamentale :
dal segnale (ΔV) si ottengono lo spettro e i
tempi di rilassamento verso l'equilibrio
(T_1) e di fuori equilibrio (T_2)

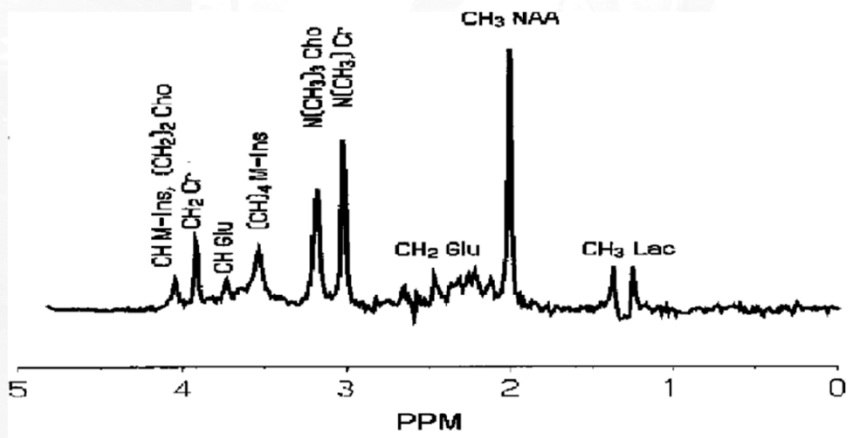
Spettri NMR (FT di s(t))



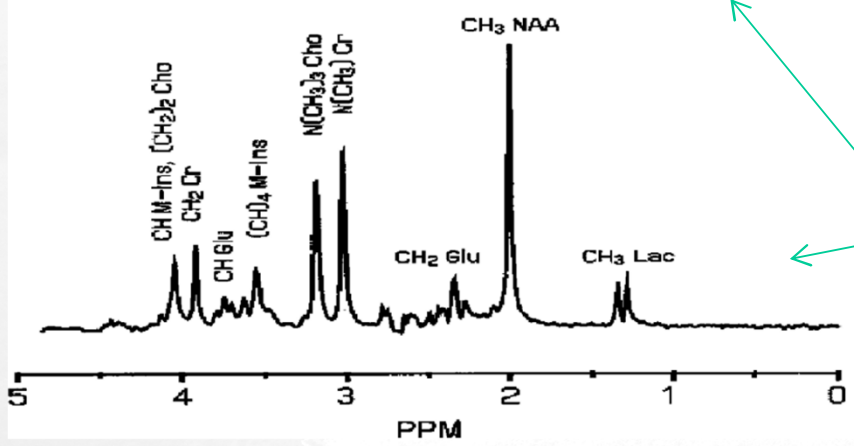
X 64



vino

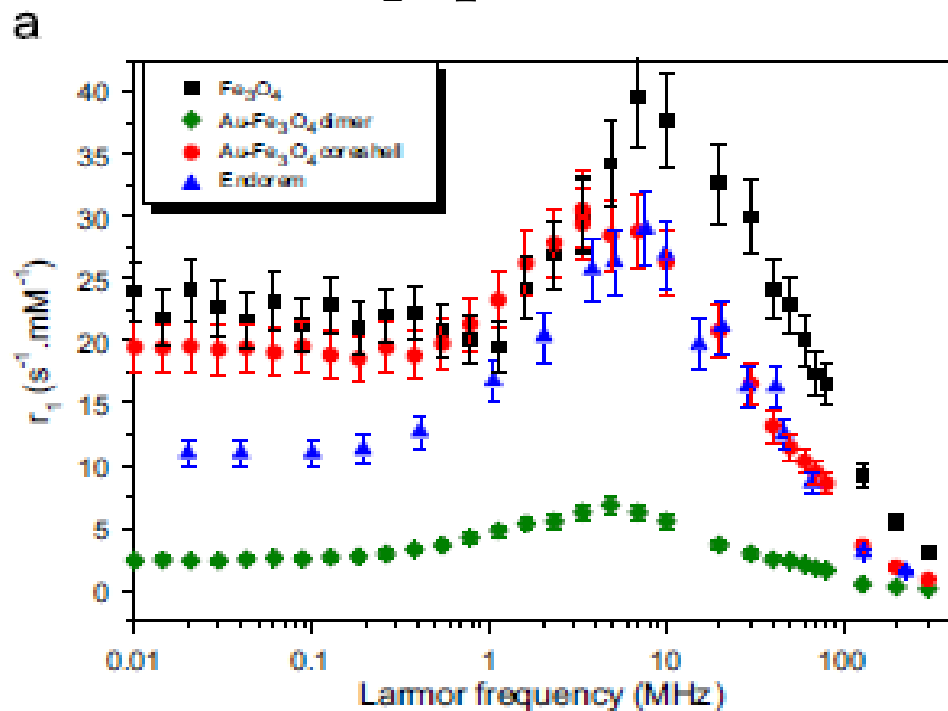


cervello

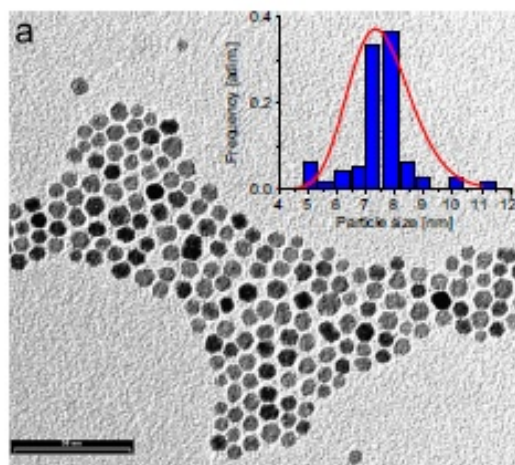
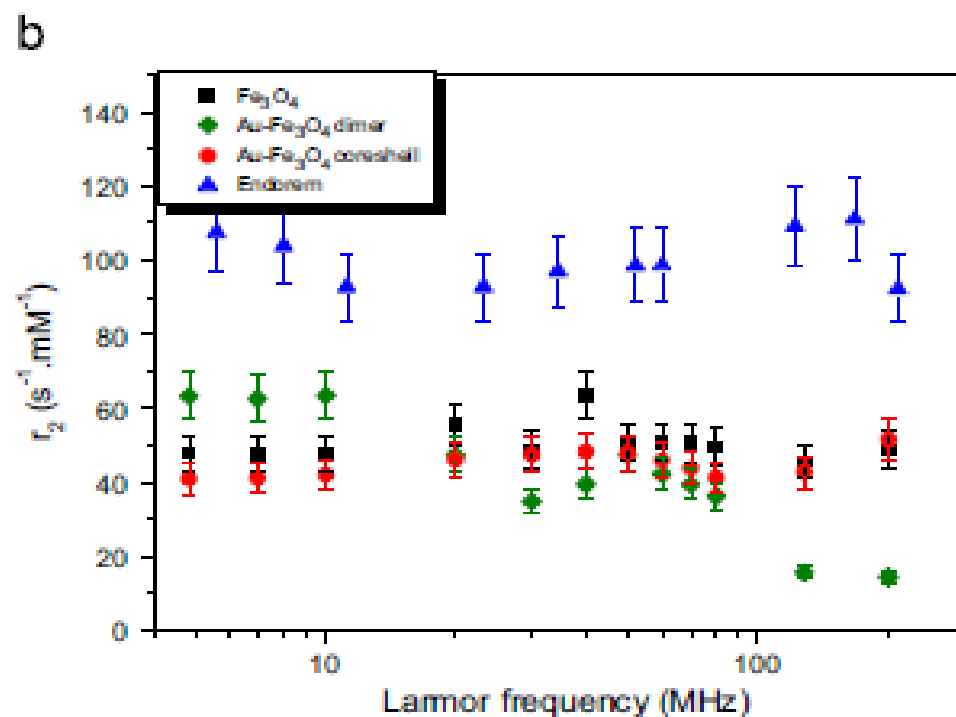


Tempi di rilassamento nucleari : rilassometria NMR

da T_1 spin-reticolo



da T_2 spin-spin



Magnetite sample

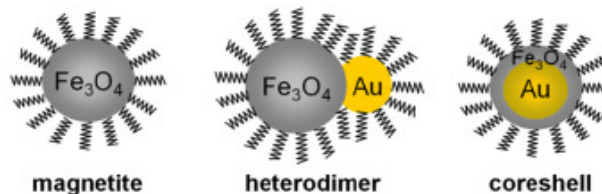


Fig. 1. Representative sketch of the investigated samples. The "zig-zag" segments represent oleylamine coating.



Come nel caso della fisica classica in generale, anche in NMR fallisce la trattazione classica :

- nella spiegazione degli spettri e dei tempi di rilassamento nucleari nel **caso di sistemi quantistici**
- in generale nella spiegazione puntuale dei **fenomeni di fuori equilibrio** (tempo di rilassamento nucleare trasverso T_2)

Caso I. Interazione iperfine nucleo-elettrone

Probe relaxation:

Depends on the possibility to exchange energy with the surrounding



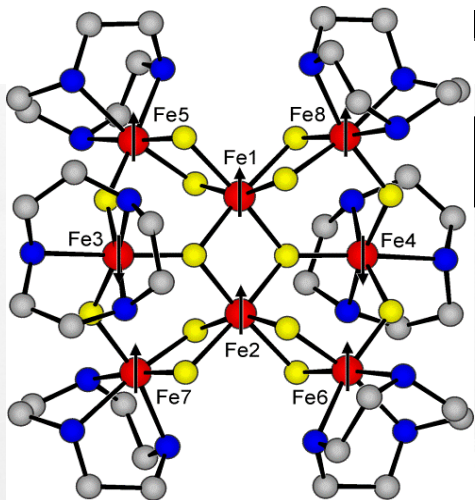
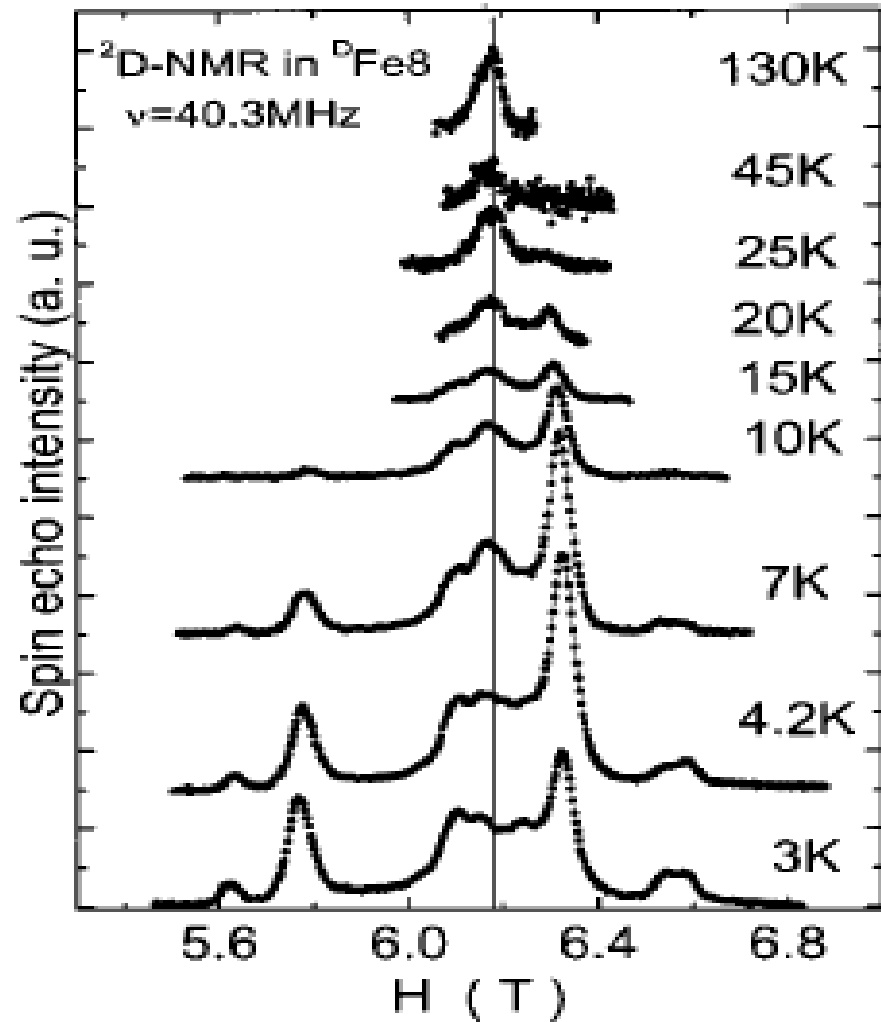
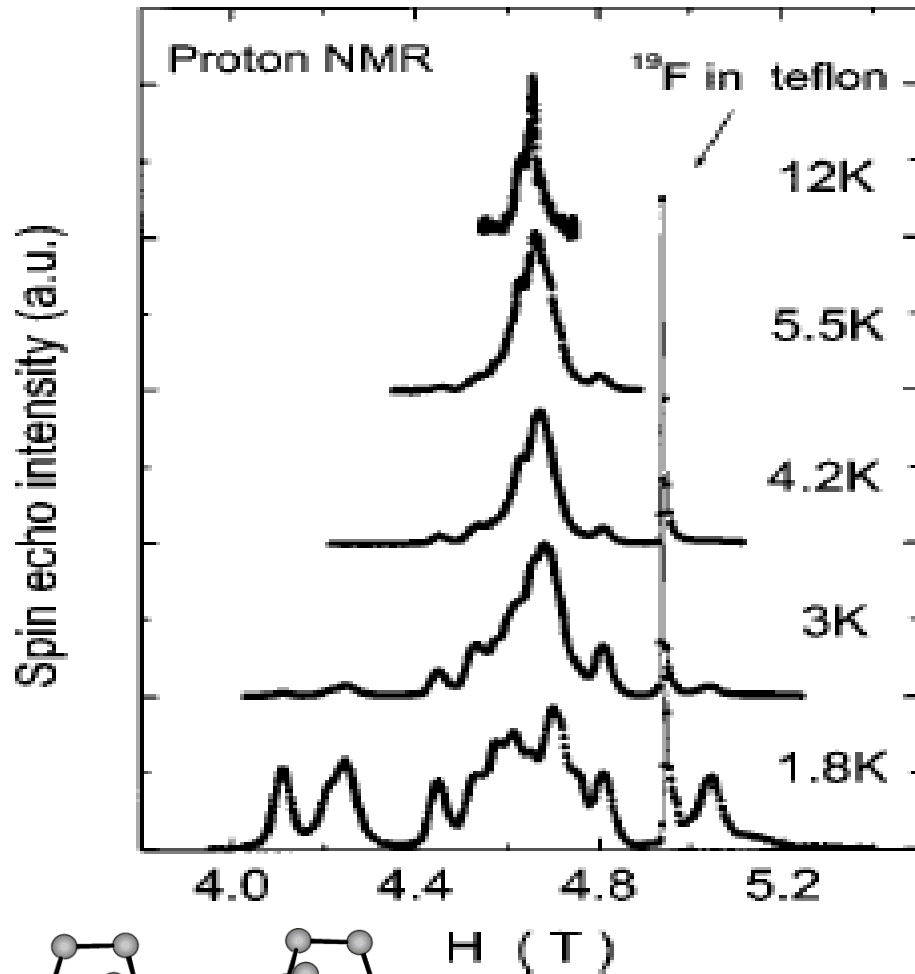
Fluctuations of the local field induced by NANOPARTICLES



^1H is a LOCAL PROBE through the EYES of HF INTERACTION!!



Fisica dello stato solido : spettri NMR (Fe8)



Fe8, magnete molecolare : sistema con $S=10$ nel «ground state»

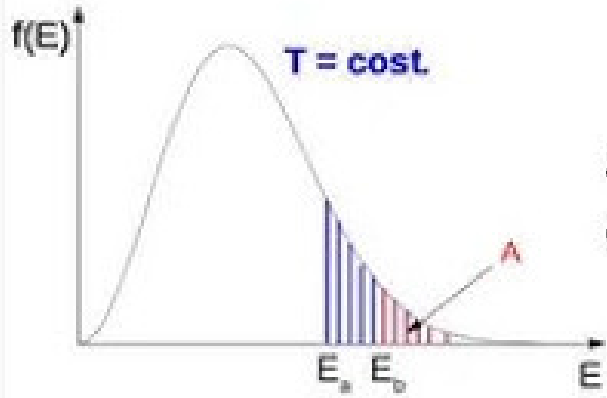
Righe shiftate : la causa è l'**interazione iperfne di contatto** (orbitali e-n "sovrapposti") che non ha analogo classico. L'**interazione iperfne di dipolo** (che ha analogo classico) "allarga" le righe

Caso 2. funzione di correlazione spazio-temporale

$$PV = \frac{1}{3} Nmv^2 = \text{cost. } T \quad \Rightarrow \quad PV = \frac{2}{3} E_C = \text{cost. } T$$

IQ

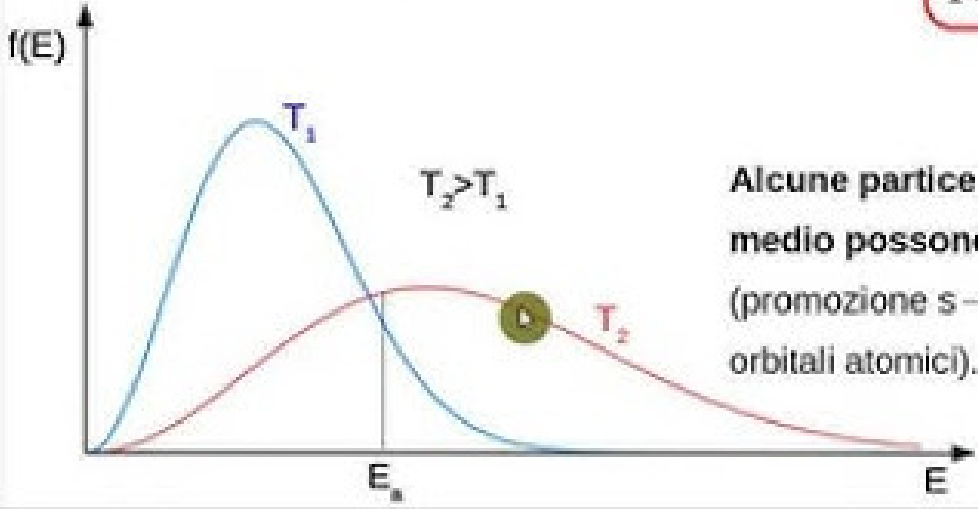
Oltre a $f(v)$ esiste una funzione di distribuzione $f(E)$ che dipende da T



$$A = \int_{E_0}^{\infty} f(E) dE$$

A rappresenta la frazione (N/N_{tot}) di particelle con $E > E_0$ calcolabile con buona approssimazione con la formula:

$$\frac{N}{N_{tot}} = e^{-\frac{E_0}{kT}}$$



Alcune particelle con energia più alta del valore medio possono iniziare un processo (promozione $s \rightarrow p$ di un elettrone nella ibridazione di orbitali atomici).

Meccanica statistica :
 distribuzione di Boltzmann per sistemi a livelli discreti

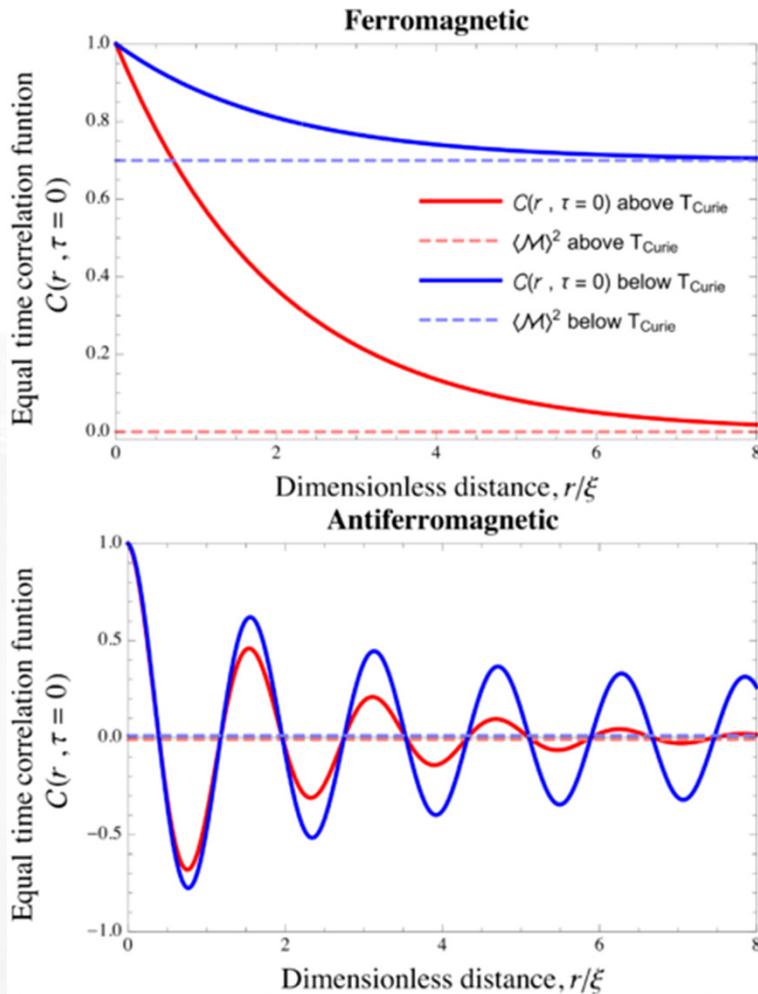
La distribuzione di Boltzmann descrive la funzione di distribuzione per la frazione di particelle N_i/N che occupa uno stato i -esimo con energia E_i :

$$\frac{N_i}{N} = \frac{g_i e^{-E_i/k_B T}}{Z(T)}$$

$$Z(T) = \sum_i g_i e^{-E_i/k_B T}$$

Caso 2. funzione di correlazione spazio-temporale

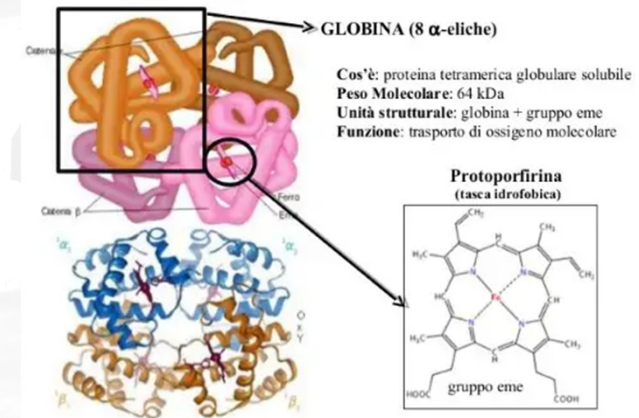
Fornisce informazioni sul moto dei momenti magnetici elettronici e/o nucleari, quando sono correlati da interazioni



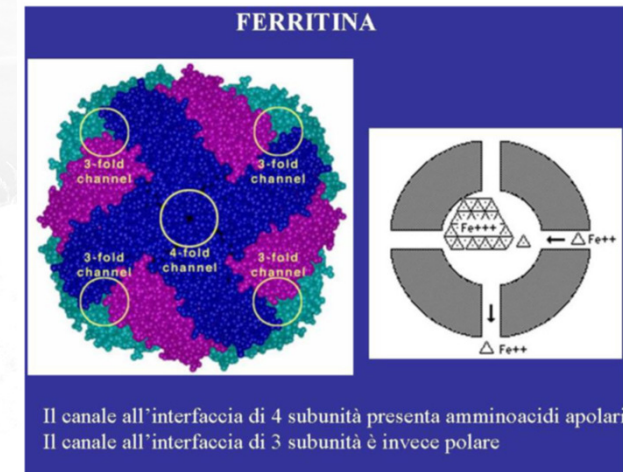
“Esempi” del corpo umano :

- emoglobina deossigenata
- ferritina

STRUTTURA dell' EMOGLOBINA (Hb)

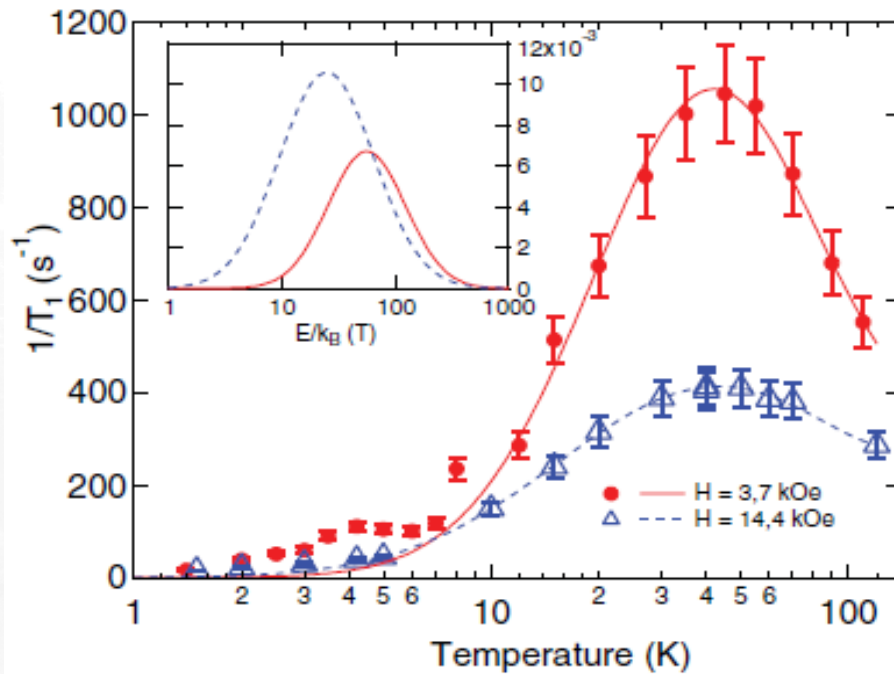


Esempi di **funzioni di correlazione di spin a tempo fissato per materiali ferromagnetici e antiferromagnetici**



Tempi di rilassamento nucleare spin-spin T_2 (fuori equilibrio) e spin-reticolo T_1 (di ritorno all'equilibrio)

Campione di ferrite Fe_3O_4
(5 nm diametro)



$$\frac{1}{T_1}(T) = A\chi(T)T \frac{\tau_c(T, E)}{1 + \omega_L^2 \tau_c^2(T, E)}$$

Espressione esatta :

$$\frac{1}{T_1}(T) = A\chi(T)T \int_0^\infty P(E) \frac{\tau_c(T, E)}{1 + \omega_L^2 \tau_c^2(T, E)} dE,$$

Rateo di rilassamento spin-reticolo $1/T_1$:
proporzionale ad una funzione Lorentziana
 (più precisamente alla trasformata di Fourier **della funzione di correlazione** spazio-temporale)



Alcune applicazioni della Risonanza Magnetica Nucleare

1. Chimica, biochimica, struttura delle proteine

2. Petrofisica,

[https://it.wikipedia.org/wiki/Risonanza_magnetica_nucleare#](https://it.wikipedia.org/wiki/Risonanza_magnetica_nucleare#Risonanza_magnetica_nucleare_in_petrofisica)

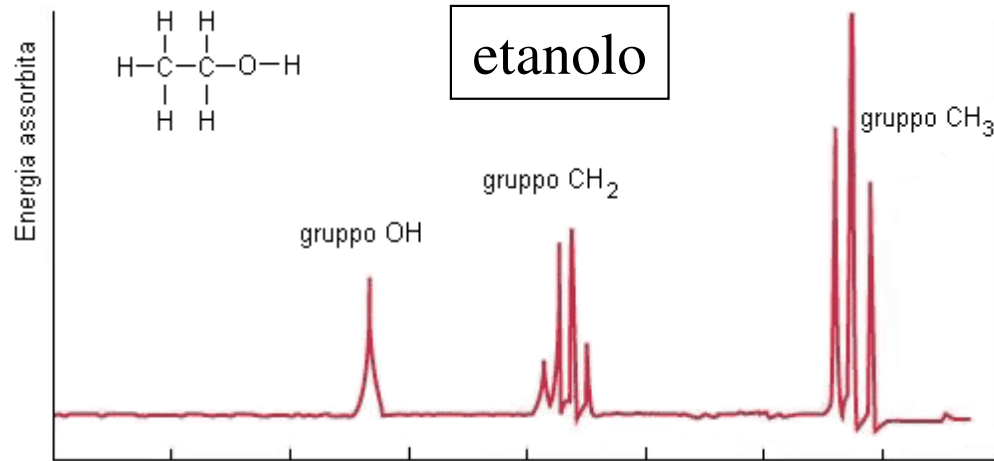
[Risonanza_magnetica_nucleare_in_petrofisica](https://it.wikipedia.org/wiki/Risonanza_magnetica_nucleare_in_petrofisica)

3. Geofisica applicata

4. Magnetic Resonance Imaging

5. Quantum computation and simulation

NMR ad alta risoluzione : struttura chimica



J-coupling

(in nuclear chemistry and nuclear physics, *J*-coupling is an indirect interaction between two nuclear spins that arises from hyperfine interactions between the nuclei and local electrons)

chemical shift

(la nube elettronica provoca cioè una modulazione locale del campo applicato, detta schermatura. Il campo effettivo residuo viene indicato : $B_0 (1-\sigma)$)

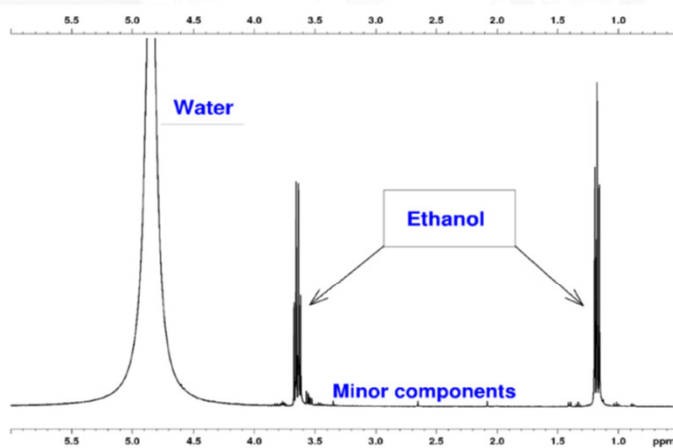


FIGURE 2 Typical proton NMR spectrum of wine sample without water and ethanol suppression

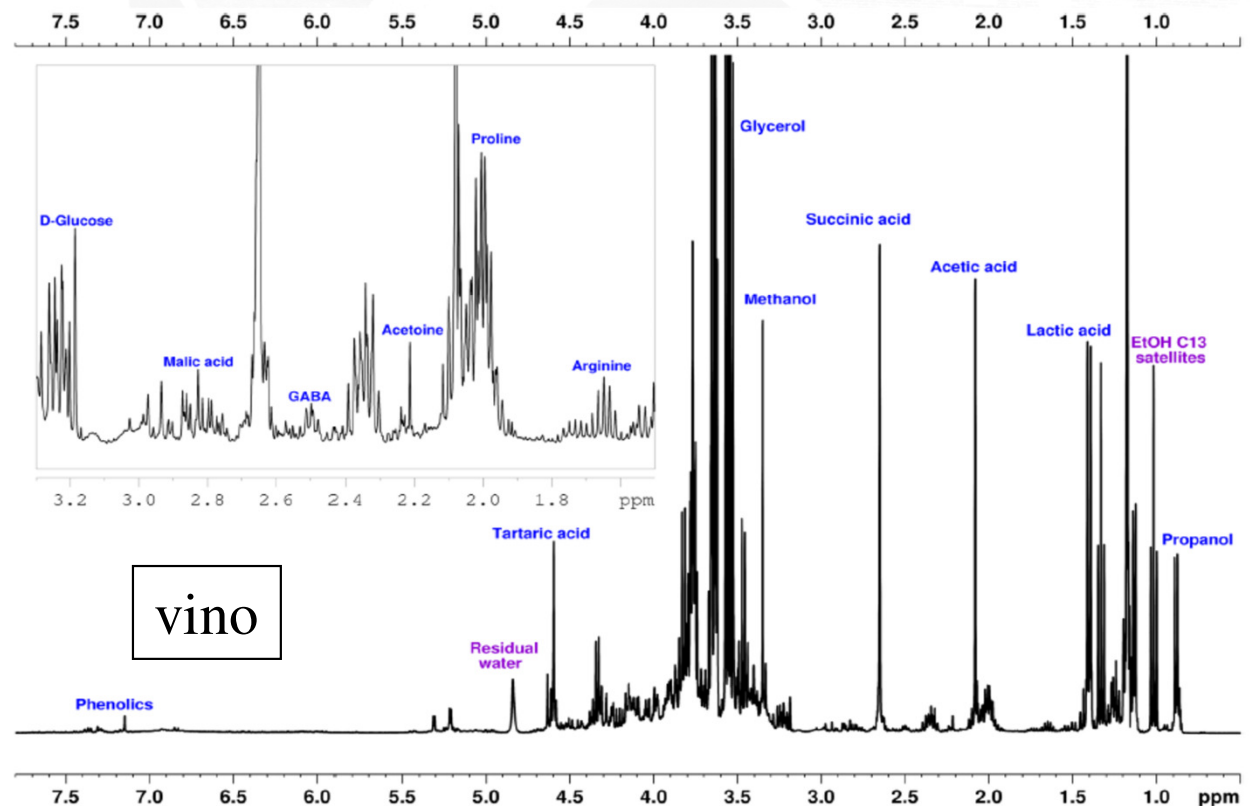


FIGURE 3 Typical proton NMR spectrum of wine sample with water and ethanol suppression

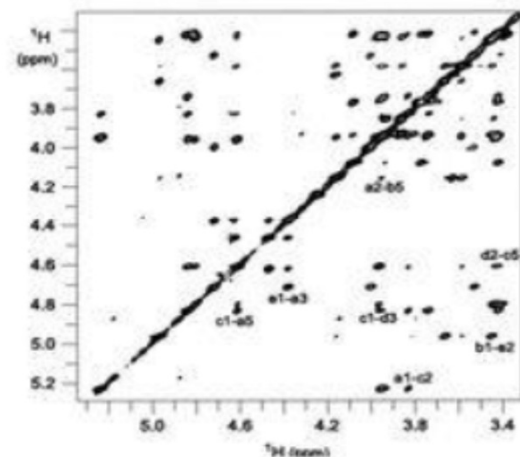
Spettroscopia NMR delle proteine

La **spettroscopia a risonanza magnetica nucleare di proteine** (di solito abbreviata in **NMR di proteine**) è un campo della biologia strutturale nel quale la spettroscopia NMR è di solito usata per ottenere informazioni sulla struttura e le dinamiche delle proteine.



Esistono una molteplicità di tecniche che contribuiscono alla determinazione strutturale di proteine in soluzione.

La determinazione strutturale con NMR rimane comunque un problema di non semplicissima soluzione.



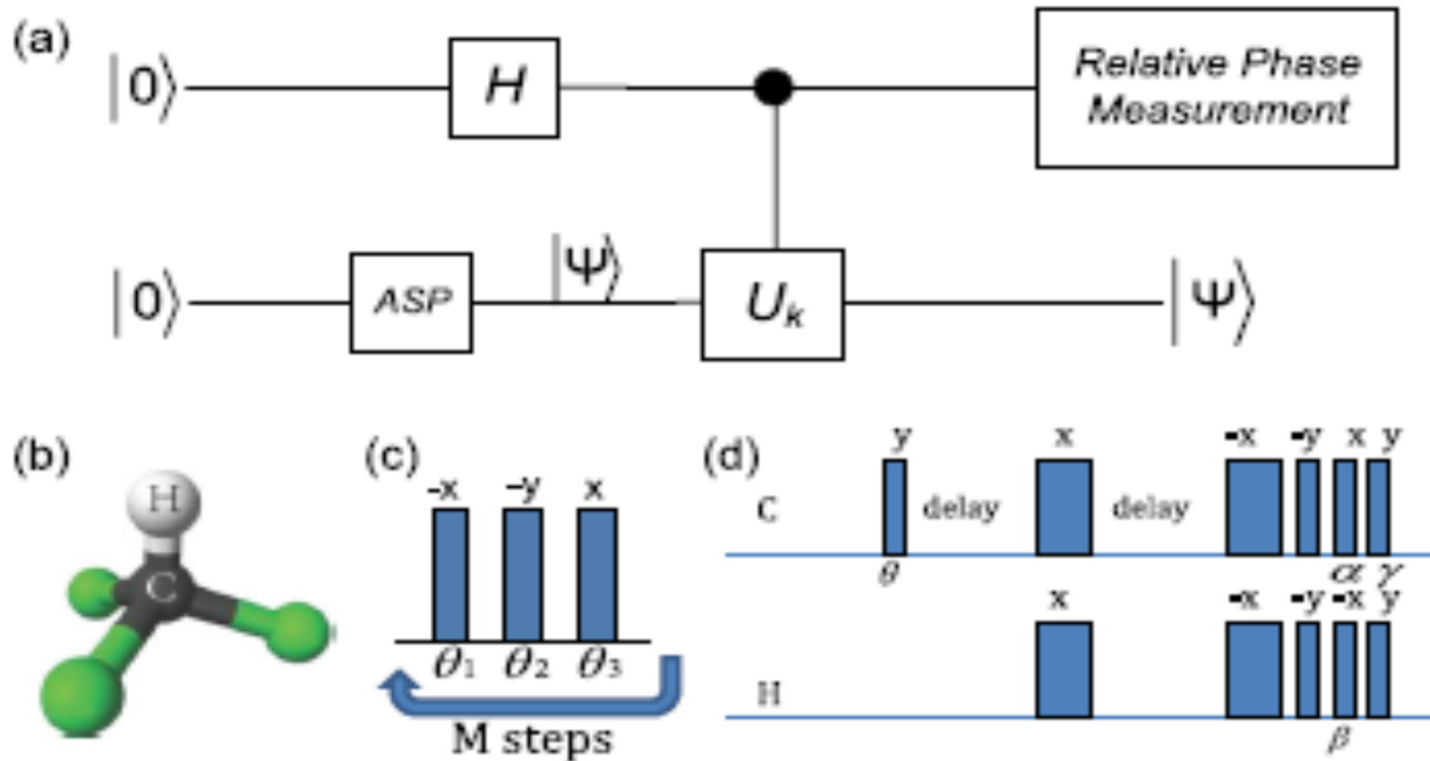
Quantum simulation

PRL 104, 030502 (2010)

PHYSICAL REVIEW LETTERS

week ending
22 JANUARY 2010

NMR Implementation of a Molecular Hydrogen Quantum Simulation
with Adiabatic State Preparation



Molecola di cloroformio $CHCl_3$ (^{13}C labeled) utilizzata per simulare, sotto opportuni impulsi NMR, la configurazione quantistica di stato fondamentale della molecola di idrogeno H_2

Risonanza Magnetica per Immagini

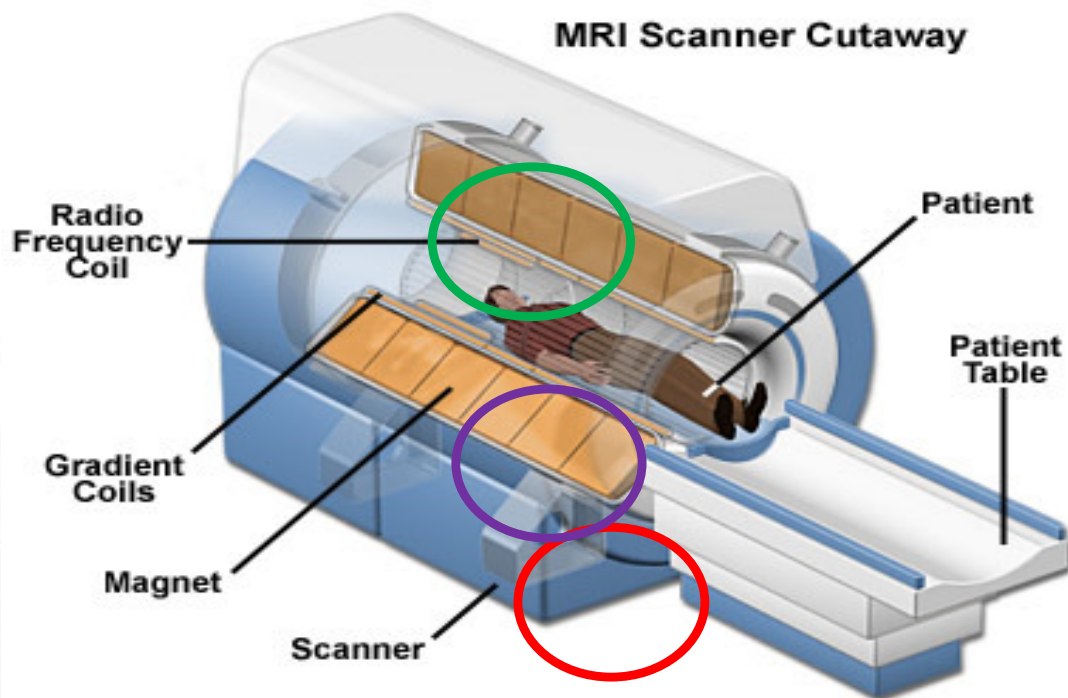
Nella NMR semplice si ha segnale elettrico proveniente da TUTTO IL CAMPIONE

Nella MRI si aggiungono gradienti di campo magnetico (cioè una variazione di campo lungo le 3 direzioni xyz) per avere segnali diversi da ciascun punto del campione



*Campo magnetico 1.5 Tesla
cioè frequenza di risonanza
di circa 63 MHz*

Risonanza Magnetica per Immagini



Segnale MRI :

$$s(t) = A \rho_n e^{-\frac{TE}{T_2^{(*)}}} \left(1 - e^{-\frac{TR}{T_1}}\right) e^{-bD}$$

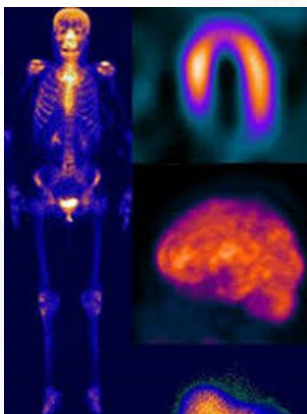
Nella RMI si ha :

- 1) Campo magnetico B_0 statico (come in RMN)
- 2) Campo magnetico B_1 a rf (come in RMN)
- 3) **gradienti di campo** magnetico (diverso da RMN)
- 4) un **potente computer** per programmare le sequenze di impulsi elettrici a radio-frequenza da inviare alla bobina che avvolge il corpo e per l'elaborazione di immagini

Confronto RMI con altre tecniche

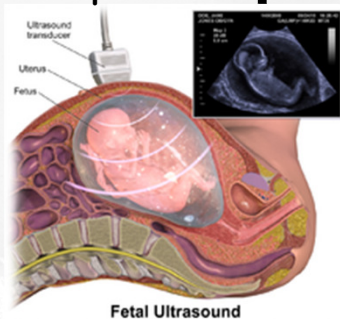
Medicina Nucleare:

- * Bassa risoluzione spaziale
- * Bassa risoluzione temporale
- * Alta sensibilità
- * Agenti : radionuclidi



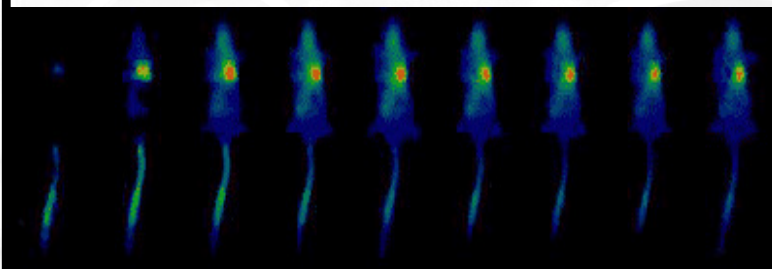
Ultrasuoni

- Non-invasiva
- Bassa risoluzione spaziale
- Buona risoluzione temporale
- Bassa sensibilità
- Facile da usare



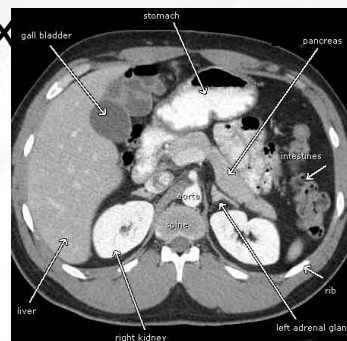
Imaging ottico:

- Bassa risoluzione spaziale
- Bassa risoluzione temporale
- Alta sensibilità
- Agenti: molecole luminescenti



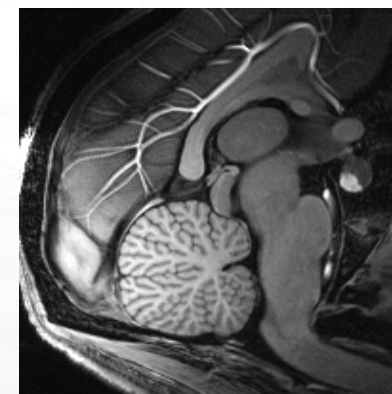
Raggi-X (CT):

- Buona risoluzione spaziale
- Buona risoluzione temporale
- Bassa sensibilità
- Agenti : raggi-X



RMI:

- **Non-invasiva**
- Buona risoluzione spaziale
- Buona risoluzione temporale
- Bassa sensibilità
- **Agenti : nuclei endogeni**



Tipiche immagini MRI

$$\text{Segnale MRI: } s(t) = A \rho_n e^{-\frac{TE}{T_2^{(*)}}} (1 - e^{-\frac{TR}{T_1}}) e^{-bD}$$

Pesatura in :

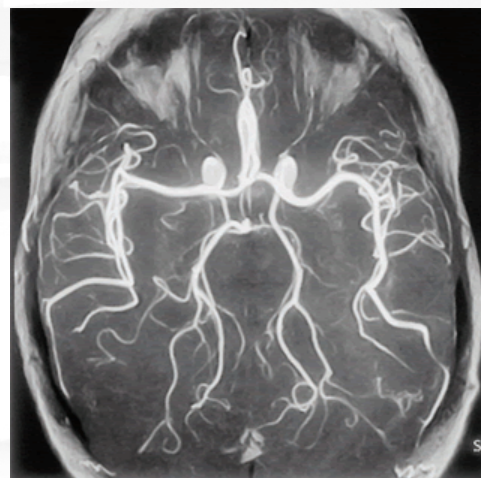
- Densità nuclei
- T_1
- T_2



"total body"



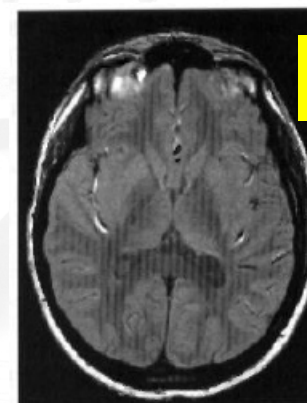
cuore



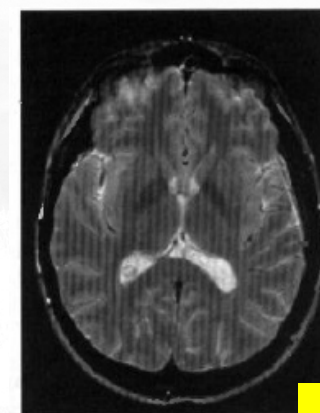
Angiografia



ginocchio

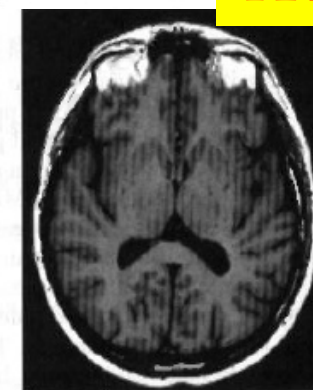


SDW



(b)

T2W



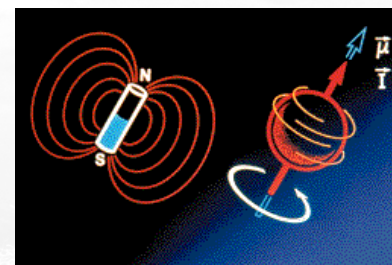
(c)

T1W

Immagini "funzionali" con RMI : effetto del tempo T_2 di fuori equilibrio

In tempo reale, si possono studiare :

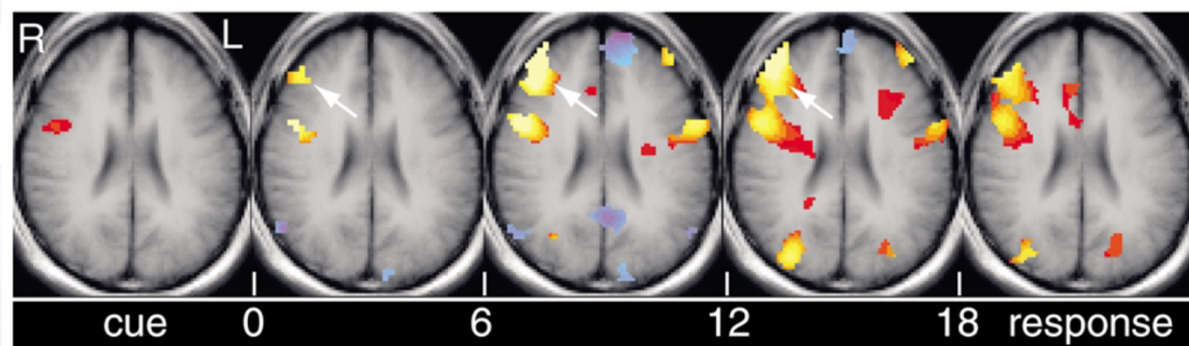
- Reazioni a stimoli visivi, acustici, sensoriali in genere
- Funzionalità regolari (es. metabolismo) dell'organismo
- Funzionalità compromesse



Psichiatria

Schizofrenia: deficit cognitivi nei domini del lobo frontale

Stimolazione di tali domini con la ripetizione a memoria di parole



MALATI

Time

IFG (BA 44)

0.5

0

10

20

30

40

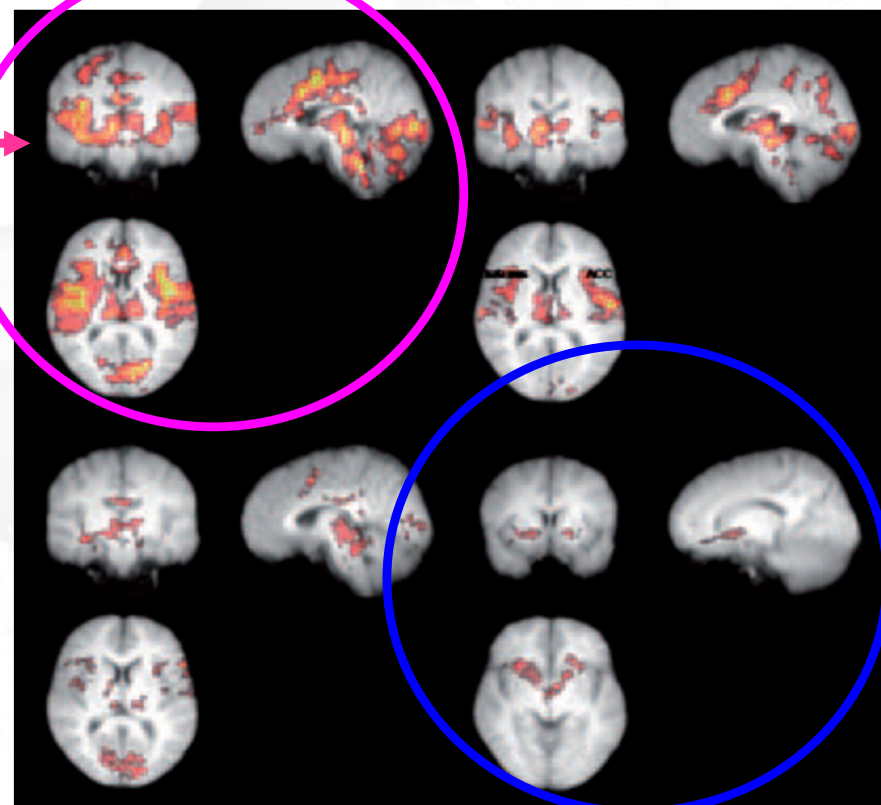
— Patients

- - Controls

SANI

Farmacologia

*Attività cerebrale in seguito ad uno stimolo termico
applicato alla pelle*



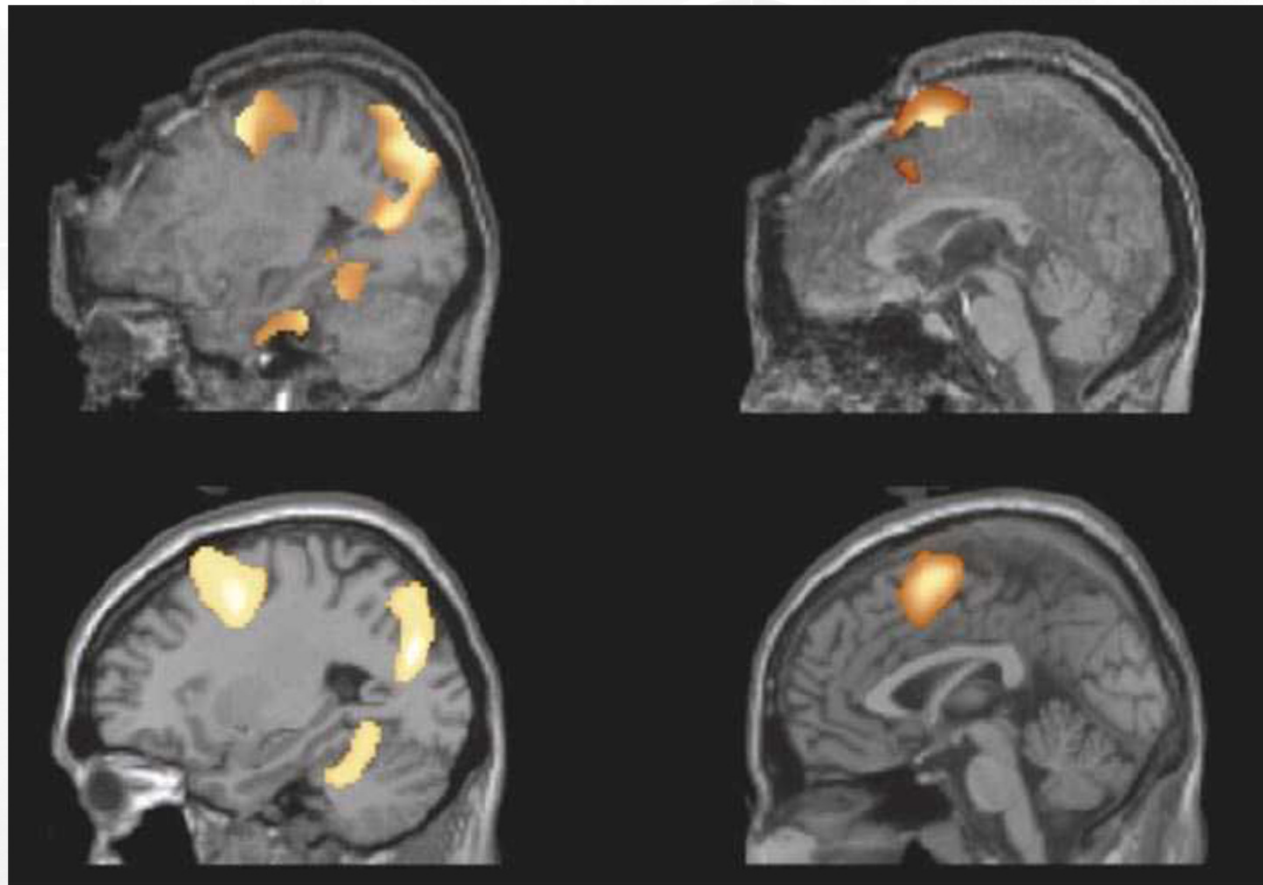
*e dopo l'infusione di
remifetamil, un farmaco
che limita il dolore*

Determinazione dello stato di consapevolezza di pazienti in stato vegetativo



... pazienti in stato vegetativo rispondono a stimoli esterni come persone sane ...

Ascoltando una partita di tennis... ..



PAZIENTE

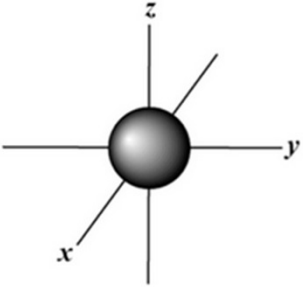
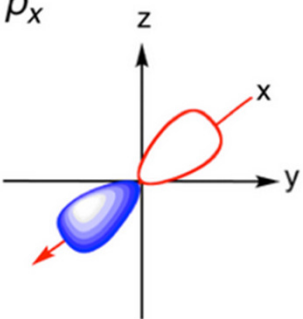
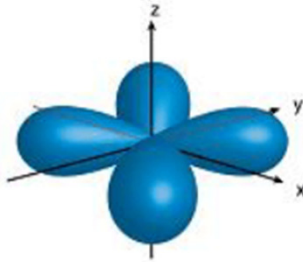
**CONTROLLO
(SANO)**

The end

Any questions ??



Orbitali atomici

Principal Quantum # (n)	Angular Momentum Quantum # (l)	Letter	Orbital Shape Diagram
1	0	s	
2	1	p	p_x 
3	2	d	
4	3	f	