

Título em Português: Implementação de um Método de Relaxometria 2D por Ressonância Magnética no Espectrômetro de Ressonância Magnética Digital (DMRS)

Título em Inglês: implementation of a 2d relaxometry method by magnetic resonance on the digital magnetic resonance spectrometer (dmrs)

Autor: Maria Vitória Lima da Silva

Instituição: Universidade de São Paulo

Unidade: Instituto de Física de São Carlos

Orientador: Alberto Tannus

Área de Pesquisa /
SubÁrea: Física Geral

Agência Financiadora: Outros

Implementação de um Método de Relaxometria 2D por Ressonância Magnética no Espectrômetro de Ressonância Magnética Digital (DMRS)

Maria Vitória Lima da Silva; Julia Marcolan; Alberto Tannús

Instituto de Física de São Carlos (IFSC), Universidade de São Paulo (USP)

e-mail mariavitoria2022@usp.br

Objetivos

A Ressonância Magnética Nuclear (RMN) é uma técnica não invasiva, que inclui a Relaxometria como uma de suas aplicações. A Relaxometria por RMN é realizada no domínio do tempo, e permite a obtenção de informações úteis sobre a dinâmica e a estrutura de átomos e moléculas do tecido ou material estudado a partir dos tempos de relaxação T_1 (longitudinal ou spin-spin) e T_2 (transversal ou spin-rede).

Existem sequências de pulso tradicionais, como a Carr-Purcell-Meiboom-Gill (CPMG), para medida de T_2 , e a Inversion-Recovery (IR), para medida de T_1 , que foram previamente implementadas no Espectrômetro de Ressonância Magnética Digital (DMRS) [1]. O DMRS, desenvolvido pelo Centro de Imagens e Espectroscopia por Ressonância Magnética (CIERMag), utiliza *Field-Programmable Gate Arrays* (FPGAs) permitindo um hardware flexível e re-configurável [2]. O CIERMag também criou o *Python Magnetic Resonance Framework* (PyMR), para suprir a necessidade de um *software* de RMN para planejamento e execução de experimentos [3], e desenvolveu a linguagem F para facilitar a programação das sequências de pulso de RMN, [1].

O objetivo deste trabalho é implementar um método 2D de Relaxometria por RMN para obtenção simultânea de T_1 e T_2 no DMRS.

Métodos e Procedimentos

No contexto do CIERMag, um método abrange todas as etapas do experimento, desde o pré-processamento até o processamento de

dados [1]. A implementação do método 2D no DMRS envolveu a programação da sequência IR-CPMG na linguagem F e o desenvolvimento de scripts de validação e processamento dos dados em Python.

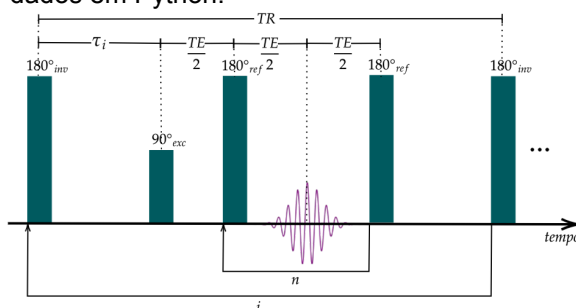


Figura 1. Diagrama da sequência de pulsos IR-CPMG. TE é o tempo ao eco, TR é o tempo de repetição, n varia de 1 ao número de ecos. τ_i é o tempo de inversão da repetição i .

O método IR-CPMG, ilustrado na Fig. (1), combina as sequências IR e CPMG. O primeiro pulso de radiofrequência (RF) é um pulso de 180° , que inverte a magnetização do eixo z para -z. Em seguida, há um período de espera τ durante o qual a magnetização começa a relaxar de volta ao equilíbrio térmico no eixo z. Esse tempo de recuperação varia a cada repetição para mapear a recuperação da magnetização. Após o tempo τ_i , é aplicado um pulso de 90° (pulso de excitação), que transfere a magnetização para o plano transversal, onde os spins começam a perder coerência de fase. Após um tempo $TE/2$ são aplicados pulsos de 180° de refocalização e o eco é formado.

Os experimentos foram feitos no Instituto de Física de São Carlos (IFSC), com um magneto permanente de 0,5463 T, operando a 23,256 MHz para núcleos de Hidrogênio (H^1). Os

pulsos de RF foram calibrados previamente, assim como a frequência de operação do espectrômetro. As amostras utilizadas foram de 1 ml de CuSO₄ 10g/L com NaCl 2g/L e 1ml de CuSO₄ 10g/L. Os experimentos de IR, CPMG e IR-CPMG foram repetidos 5 vezes para cada amostra e os valores de T_1 e T_2 foram calculados como a média dos valores obtidos.

Resultados

A parte superior da Fig. (2) contém a recuperação exponencial da magnetização longitudinal para as amostras de CuSO₄ 10 g/L com NaCl 2 g/L e CuSO₄ 10 g/L e na parte inferior o decaimento exponencial da magnetização transversal para ambas.

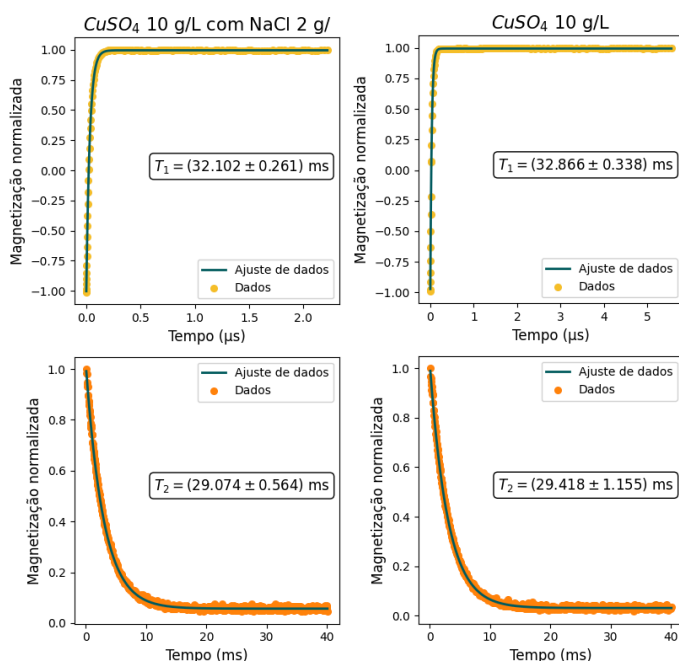


Figura 2. Gráficos dos comportamentos das magnetizações longitudinal e transversal obtidos com IR-CPMG.

A Tab. (1) mostra um comparativo dos tempos de relaxação obtidos com os métodos convencionais, i.e., IR e CPMG, e os obtidos com o método 2D implementado neste trabalho.

Tabela 1. Tempos de relaxação obtidos com os métodos IR, CPMG e IR-CPMG.

CuSO ₄ 10 g/L + NaCl 2 g/L		CuSO ₄ 10 g/L	
IR	CPMG	IR	CPMG
T_1 (ms)	T_2 (ms)	T_1 (ms)	T_2 (ms)
32,948±0,543	29,093±0,096	32,505 ± 0,092	29,104 ± 0,199
IR-CPMG		IR-CPMG	
T_1 (ms)	T_2 (ms)	T_1 (ms)	T_2 (ms)
32,102±0,261	29,074±0,564	32,866±0,338	29,418±1,155

Conclusões

O DMRS, com o PyMR e a Linguagem F, é uma abordagem atual e que simplifica a criação e implementação de técnicas de RMN. Os resultados obtidos com o método IR-CPMG, implementado no DMRS, para T_1 e T_2 das duas amostras são consistentes com os resultados obtidos com IR e CPMG, dentro do desvio padrão, confirmando a precisão e aplicabilidade do método implementado.

Agradecimentos

Agradeço ao Prof. Dr. Alberto Tannús e à M^a. Julia Marcolan, pela oportunidade e orientação, e à toda a equipe do CIERMag. Ao IFSC-USP pela infraestrutura para o desenvolvimento do projeto e pelo financiamento, mediante convênio com a Universidade de Minnesota (UMN) (e-convênio 41778), com apoio do National Institutes of Health (NIH), Processo USP/IFSC nº 2017.1.579.76.7.

Referências

- [1] TEIXEIRA, J. M. Digital magnetic resonance spectrometer (DMRS) from CIERMag: calibration and relaxometry measurements methodology. 112 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2022.
- [2] MARTINS M. J., VIDOTO E. L. G., TANNÚS A. inventors; Universidade de São Paulo, assignee. Espectrômetro para uso em sistemas de ressonância magnética e sistemas de ressonância magnética. Brazil Patent No. BR102015000624-1. 2015.
- [3] PIZETTA, D. C. PyMR : um framework para programação de sistemas de ressonância magnética. 130 p. Tese (Doutorado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2018.

Implementation of a 2D Relaxometry Method by Magnetic Resonance on the Digital Magnetic Resonance Spectrometer (DMRS)

Maria Vitória Lima da Silva; Julia Marcolan; Alberto Tannús

Instituto de Física de São Carlos (IFSC), Universidade de São Paulo (USP)

e-mail mariavitoria2022@usp.br

Objectives

Nuclear Magnetic Resonance (NMR) is a non-invasive technique that includes Relaxometry as one of its applications. NMR Relaxometry is performed in the time domain and provides useful information about the dynamics and structure of atoms and molecules in the studied tissue or material by measuring the relaxation times T_1 (longitudinal or spin-lattice) and T_2 (transverse or spin-spin).

Traditional pulse sequences, such as Carr-Purcell-Meiboom-Gill (CPMG) for measuring T_2 and Inversion-Recovery (IR) for measuring T_1 , have already been implemented on the Digital Magnetic Resonance Spectrometer (DMRS) [1]. The DMRS, developed by the Centro de Imagens e Espectroscopia por Ressonância Magnética (CIERMag), uses Field-Programmable Gate Arrays (FPGAs), allowing for flexible and reconfigurable hardware [2]. CIERMag has also created the Python Magnetic Resonance Framework (PyMR) to address the need for NMR software for experiment planning and execution [3] and developed the F language to facilitate the programming of NMR pulse sequences [1].

The objective of this work is to implement a 2D NMR Relaxometry method for the simultaneous acquisition of T_1 and T_2 on the DMRS.

Methods and Procedures

In the context of CIERMag, a method encompasses all stages of the experiment, from pre-processing to data processing [1]. The implementation of the 2D method on the DMRS

involved programming the IR-CPMG sequence in the F language and developing scripts for data validation and processing in Python.

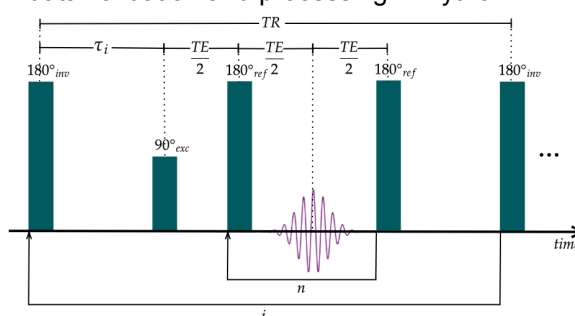


Figure 1. Diagram of the IR-CPMG pulse sequence. TE is the echo time, TR is the repetition time, n varies from 1 to the number of echoes. τ_i is the inversion time of repetition i .

The IR-CPMG method, illustrated in Fig. 1, combines the IR and CPMG sequences. The first radiofrequency (RF) pulse is a 180° pulse, which inverts the magnetization from the z-axis to -z. Following this, there is a waiting period τ_i during which the magnetization begins to relax back to thermal equilibrium along the z-axis. This recovery time varies with each repetition to map the magnetization recovery. After the time τ_i , a 90° pulse (excitation pulse) is applied, transferring the magnetization to the transverse plane, where the spins start to lose phase coherence. After a time of $TE/2$, 180° refocusing pulses are applied, and the echo is formed.

The experiments were conducted at the Instituto de Física de São Carlos (IFSC) using a 0.5463 T permanent magnet, operating at 23.256 MHz for Hydrogen (^1H) nuclei. The RF pulses were pre-calibrated, as well as the spectrometer's operating frequency. The

samples used were 1 ml of CuSO_4 10g/L with NaCl 2g/L and 1 ml of CuSO_4 10g/L. The IR, CPMG, and IR-CPMG experiments were repeated 5 times for each sample, and the T_1 and T_2 values were calculated as the average of the obtained values.

Results

The top part of Fig. 2 shows the exponential recovery of longitudinal magnetization for the CuSO_4 10 g/L with NaCl 2 g/L and CuSO_4 10 g/L samples. The bottom part displays the exponential decay of transverse magnetization for both samples.

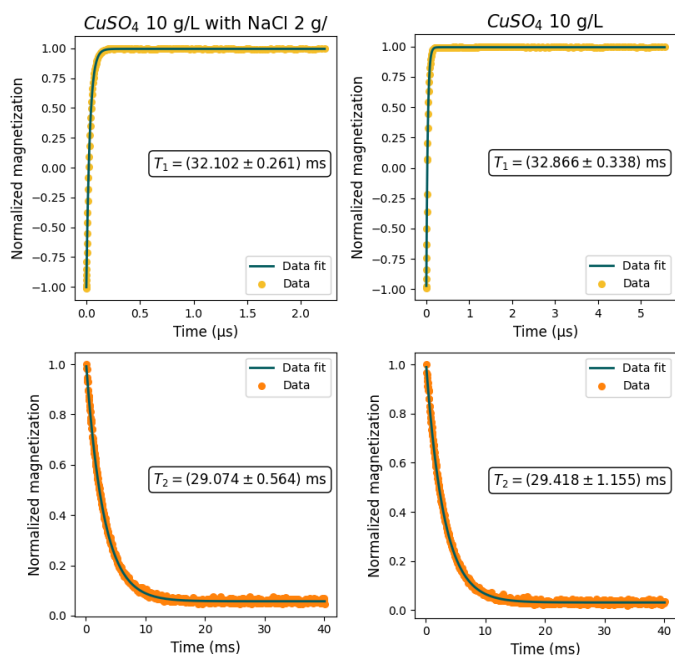


Figure 2. Graphs of the longitudinal and transverse magnetization behaviors obtained with IR-CPMG.

Table 1. shows a comparison of relaxation times obtained with conventional methods, i.e., IR and CPMG, and those obtained with the 2D method implemented in this work.

Table 1. Relaxation times obtained with the IR, CPMG, and IR-CPMG methods.

CuSO_4 10 g/L + NaCl 2 g/L		CuSO_4 10 g/L	
IR	CPMG	IR	CPMG
T_1 (ms)	T_2 (ms)	T_1 (ms)	T_2 (ms)
$32,948 \pm 0,543$	$29,093 \pm 0,096$	$32,505 \pm 0,092$	$29,104 \pm 0,199$
IR-CPMG		IR-CPMG	
T_1 (ms)	T_2 (ms)	T_1 (ms)	T_2 (ms)
$32,102 \pm 0,261$	$29,074 \pm 0,564$	$32,866 \pm 0,338$	$29,418 \pm 1,155$

Conclusions

The DMRS, along with PyMR and the F Language, represents a modern approach that simplifies the creation and implementation of NMR techniques. The results obtained with the IR-CPMG method implemented on the DMRS for T_1 and T_2 of the two samples are consistent with those obtained using IR and CPMG, within the standard deviation, confirming the accuracy and applicability of the implemented method.

Acknowledgments

I would like to thank Prof. Dr. Alberto Tannús and Ms. Julia Marcolan for the opportunity and guidance, and the entire CIERMag team. Also to IFSC-USP for the infrastructure provided for the project development and for the funding, through the agreement with the University of Minnesota (UMN) (e-agreement 41778), with support from the National Institutes of Health (NIH), Process USP/IFSC No. 2017.1.579.76.7.

References

- [1] TEIXEIRA, J. M. Digital magnetic resonance spectrometer (DMRS) from CIERMag: calibration and relaxometry measurements methodology. 112 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2022.
- [2] MARTINS M. J., VIDOTO E. L. G., TANNÚS A. inventors; Universidade de São Paulo, assignee. Espectrômetro para uso em sistemas de ressonância magnética e sistemas de ressonância magnética. Brazil Patent No. BR102015000624-1. 2015.
- [3] PIZETTA, D. C. PyMR : um framework para programação de sistemas de ressonância magnética. 130 p. Tese (Doutorado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2018.