

KAJIAN KOMPUTASI POLA GELOMBANG RESONANSI MAGNET INTI (NMR) DENGAN TRANSFORMASI FOURIER

Fapriilia Khusnul^{1,*}, Salomo², Muhammad Hamdi²

¹Mahasiswa Program Studi S1 Fisika

²Dosen Jurusan Fisika

Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam,

Universitas Riau Kampus Bina Widya

Jl. Prof. Muchtar Luthfi Pekanbaru, 28293, Indonesia

*Email: Fapriilia.khusnul@gmail.com

ABSTRACT

Research on nuclear magnetic resonance (NMR) modeling has been done with computational approach. This study aims to determine the shape of signals and spectra of some of the combined nuclear spins. The physical parameters were determined using Fourier transformation equation modeled with the wolfram mathematical software 9.0. The relaxation time of the 1/2 nuclear spin was varied according to the nuclear state of cancer tissue. This produces a cosine wave pattern for the signal at $T_2 = 0.11$ ms. Variations of this in chemical shift (Δ) and J-coupling (J) for modeling were performed in 9 times. The spectrum of one spin is generated at the value of $\Delta = 0.001$ Hz and $J = 0$ Hz, the spectrum of two spins at $\Delta = 849,001$ Hz and $J = 24$ Hz. These results can be applied to research interests for the medical world and as reference data for research standards.

Keywords: Modeling, NMR, Fourier transform, signal, and waveform.

ABSTRAK

Telah dilakukan penelitian tentang pemodelan pola gelombang resonansi magnet inti (NMR) dengan pendekatan komputasi. Kajian ini bertujuan untuk menentukan bentuk sinyal dan spektrum dari beberapa spin gabungan inti. Parameter-parameter fisis ditentukan menggunakan persamaan transformasi fourier yang dimodelkan dengan perangkat lunak wolfram matematika 9.0. Waktu relaksasi dari spin inti 1/2 divariasikan sesuai keadaan inti jaringan kanker. Menghasilkan pola gelombang kosinus untuk sinyal pada nilai $T_2=0,11$ ms. Variasi nilai pergeseran kimia (Δ) dan J-coupling (J) untuk pemodelan dilakukan sebanyak 9 kali. Spektrum dari satu spin dihasilkan pada nilai $\Delta=0,001$ Hz dan $J= 0$ Hz, spektrum dua spin pada nilai $\Delta=849,001$ Hz dan $J= 24$ Hz. Hasil ini dapat diaplikasikan pada kepentingan riset untuk dunia medis dan sebagai data standar referensi penelitian.

Kata kunci : Pemodelan, NMR, transformasi Fourier, sinyal, dan pola gelombang.

PENDAHULUAN

Resonansi magnetik adalah suatu resonansi absorpsi, terjadi serapan gelombang elektromagnetik secara drastis apabila frekuensi gelombang itu tepat sama dengan yang diperlukan untuk mengeksitasi atom [1]. Resonansi dari inti-inti akan memberikan pola gelombang yang disebut sinyal. Pemodelan menggunakan software matematika 9.0 dengan memecahkan persamaan transformasi Fourier, menghasilkan sinyal NMR yang berupa

peluruhan induksi bebas (FID). Komponen x dan y dari FID dapat dihitung dengan berpikir tentang evolusi magnetisasi selama waktu akuisisi. Asumsikan bahwa magnetisasi dimulai sekitar sumbu $-x$ yang akan berotasi pada getaran 900. nilai magnetisasi dari komponen x dan y pada Gambar 1. Terlihat bahwa magnetisasi dari komponen x dan y adalah:

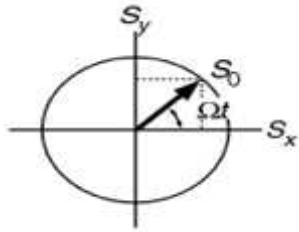
$$M_x = M_0 \cos \Omega t \quad (1)$$

$$M_y = M_0 \sin \Omega t \quad (2)$$

Sinyal yang dideteksi sebanding dengan magnetisasi, berikut adalah deteksi sinyal pada komponen x dan y:

$$S_x(t) = S_0 \cos \Omega t \quad (3)$$

$$S_y(t) = S_0 \sin \Omega t \quad (4)$$



Gambar 1. Magnetisasi sinyal.

Dimana S_0 memberikan keseluruhan ukuran sinyal yang merupakan fungsi dari waktu sebagai $S_x(t)$ ini sesuai bahwa sinyal timbul dari vector rotasi S_0 pada frekuensi Ω , komponen x memberikan vector S_x dan S_y . Seperti ditunjukkan pada Gambar 1.

Menggunakan transformasi Fourier maka $S_x(t)$ dan $S_y(t)$ merupakan bagian real dan $S(t)$ merupakan bagian imajiner:

$$S(t) = S_x(t) + iS_y(t) \quad (5)$$

$$S(t) = S_0 \cos \Omega t + iS_0 \sin \Omega t \quad (6)$$

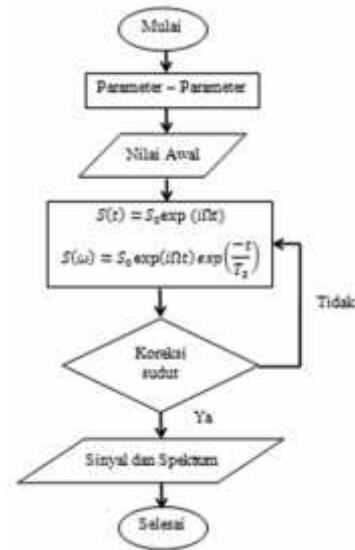
$$S(t) = S_0 \exp(i\Omega t) \quad (7)$$

Perlu diperhatikan bahwa sinyal domain waktu adalah kompleks dengan bagian real dan imajiner sesuai yang dengan komponen x dan y pada sinyal. Magnetisasi transversal meluruh dari waktu ke waktu, oleh peluruhan eksponensial dengan T_2 konstan terhadap waktu. peluruhan eksponensial ditunjukkan pada Gambar 1. Sehingga sinyal menjadi:

$$S(\omega) = S_0 \exp(i\Omega t) e^{-\frac{t}{T_2}} \quad (8)$$

METODE PENELITIAN

Penelitian ini menggunakan perangkat lunak wolfram matematika 9.0 yang memodelkan pola gelombang dinamik spin inti dalam bentuk sinyal. Diagram alir dalam penelitian ini digunakan untuk menganalisis gelombang dinamik spin inti yang menekankan pada bentuk pemodelan. Diagram alir pemodelan pada Gambar 2.



Gambar 2. Flowchart pemodelan.

HASIL DAN PEMBAHASAN

Hasil penelitian memperoleh pola gelombang spin gabungan inti dalam bentuk sinyal fungsi dari waktu. Proses perhitungan pada penelitian ini meliputi parameter pada spektroskopi NMR yang dilakukan dengan simulasi dan pemodelan menggunakan komputer dan perangkat lunak matematika 9.0.

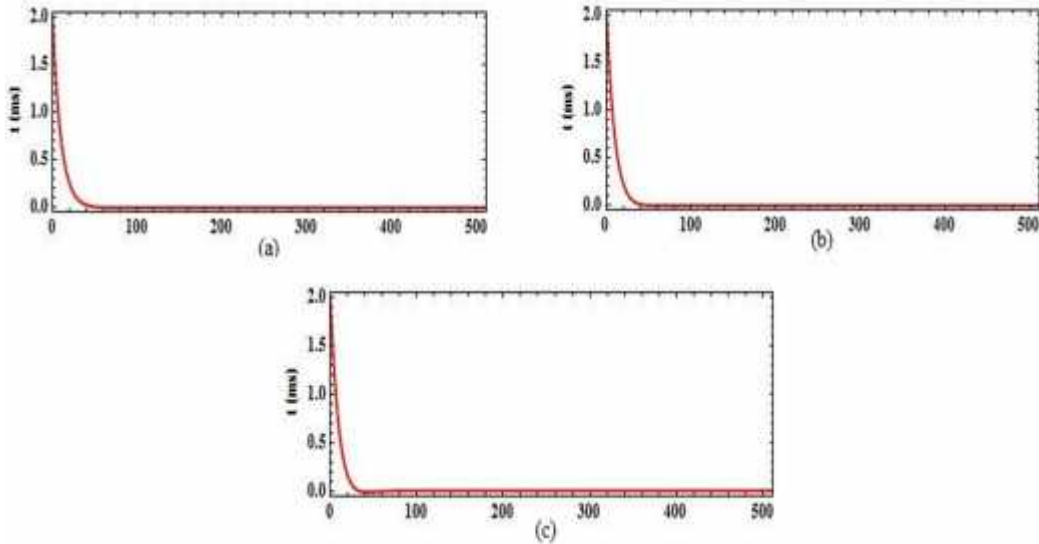
Analisa pola gelombang dinamik spin inti dengan spektroskopi NMR menggunakan transformasi fourier.

Pola Gelombang diamati dengan menerapkan waktu relaksasi (T_2), nilai pergeseran kimia (Δ), dan J -coupling dari spin

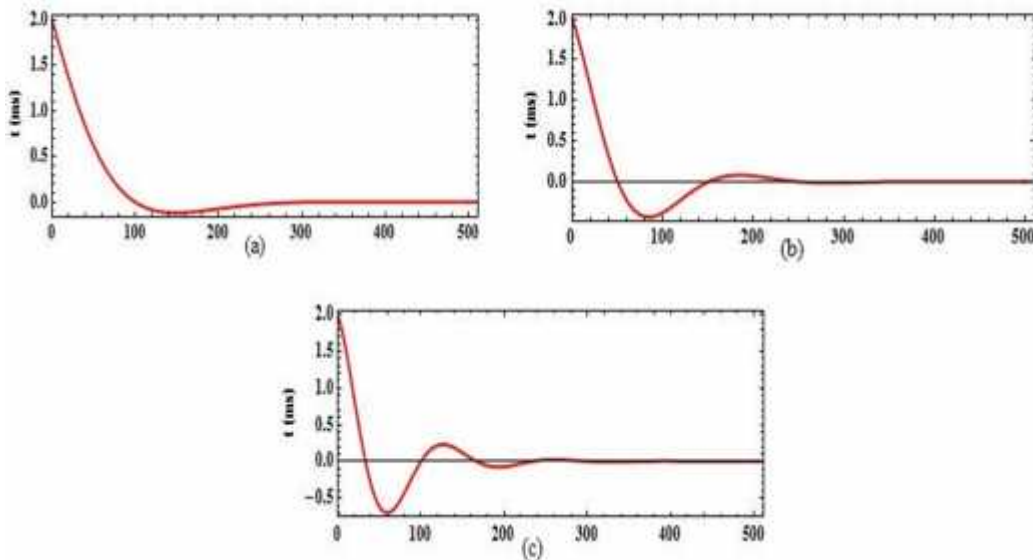
inti. Masing-masing nilainya divariasikan dari nilai minimum hingga maksimum untuk melihat pola gelombang resonansi yang terjadi.

Parameter waktu relaksasi dalam simulasi memiliki karakteristik yaitu dengan nilai minimum 0.01, nilai medium 0.11, nilai maksimum 0.50 dan range 0.05 dengan satuan

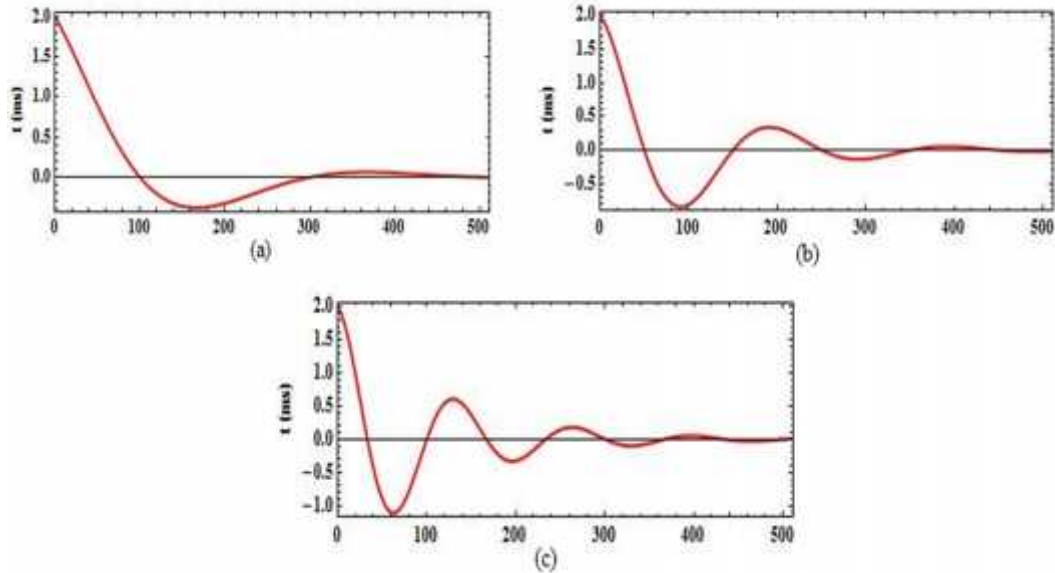
dalam mS (microsekon). Nilai T_2 , Δ , dan J diubah secara bersamaan sebanyak 9 kali mulai dari 0.01 mS sampai 0.11 mS, sedangkan Δ bernilai 5.001 Hz sampai 15.001 Hz dan J bernilai konstan 0 Hz. Hasil pemodelan dapat dilihat pada Gambar 3, 4 dan 5.



Gambar 3. Grafik pola gelombang NMR pada nilai $J= 0$ Hz (a) $T_2= 0.01$ mS dan $\Delta=5.001$ Hz (b) $T_2= 0.01$ mS dan $\Delta=10.001$ Hz (c) $T_2= 0.01$ mS dan $\Delta=15.001$ Hz.



Gambar 4. Grafik pola gelombang NMR pada nilai $J= 0$ Hz (a) $T_2= 0.06$ mS dan $\Delta=5.001$ Hz (b) $T_2= 0.06$ mS dan $\Delta=10.001$ Hz (c) $T_2= 0.06$ mS dan $\Delta=15.001$ Hz.



Gambar 5. Grafik pola gelombang NMR pada nilai $J= 0$ Hz (a) $T_2= 0.11$ mS dan $\Delta=5.001$ Hz (b) $T_2= 0.11$ mS dan $\Delta=10.001$ Hz (c) $T_2= 0.11$ mS dan $\Delta=15.001$ Hz.

Berdasarkan hasil simulasi pola gelombang spin yang diperoleh, maka dapat dilihat dari Gambar 1 bahwa pada nilai $T_2= 0.01$ mS sinyal mengalami penurunan secara eksponensial. Keadaan sinyal masih bernilai besar yaitu 2.0 mS. Pola gelombang atau sinyal belum terlihat pada waktu ini. Hasil simulasi nilai $T_2= 0.06$ mS yang dapat dilihat pada Gambar 2, menyebabkan keadaan sinyal semakin berkurang. Akibatnya terdapat beberapa puncak yang bernilai positif dan negatif. Bentuk pola gelombang sudah mulai terlihat pada waktu ini.

Pada nilai $T_2= 0.01$ mS belum terlihat pola gelombang dan $T_2= 0.06$ mS sudah mulai terlihat pola gelombang, sedangkan $T_2= 0.11$ mS menunjukkan pola gelombang atau sinyal yang mengalami penurunan secara eksponensial. Sinyal membentuk pola gelombang kosinus dengan 2 gelombang yang terdiri dari sinyal bernilai positif dan negatif.

Menganalisa gelombang spin gabungan inti melalui gelombang atenuasi bebas dan spektrum frekuensi

Spektrum NMR merupakan spektrum kompleks, bagian utamanya adalah kekuatan medan magnet yang diukur dengan pergeseran kimia pada garis bawah dengan satuan ppm.

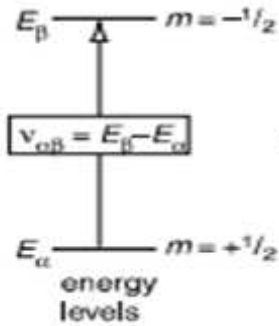
Spektrum NMR juga mendapat informasi tambahan mengenai *J-Coupling*, yaitu jarak antara puncak spektrum dalam satuan frekuensi [1].

Parameter *chemical shift* (Δ) dalam simulasi memiliki karakteristik yaitu dengan nilai minimum 0.001, nilai tengah 500, nilai maksimum 1000 dan range 1 dengan satuan Hz. Parameter *J-coupling* (J) memiliki karakteristik dengan nilai minimum 0, nilai tengah 0, nilai maksimum 1000 dan range 1 dengan satuan Hz. Nilai Δ dan J diubah secara bersamaan sebanyak 9 kali. Nilai Δ mulai dari 0 Hz sampai 1000 Hz, J bernilai 0 Hz dan 24 Hz dan T_2 bernilai konstan 0.11 ms.

Satu spin

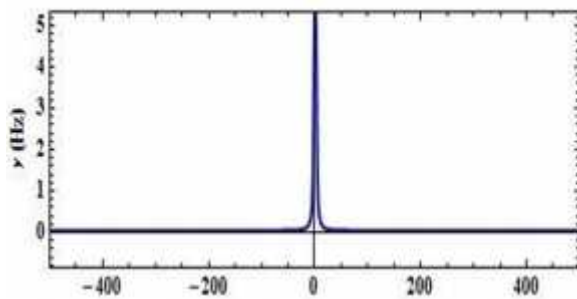
Terdapat dua level energi untuk *single* spin atau satu pasangan spin, ditandai dengan nilai m yang berbeda yaitu α dan β , dari mekanika

kuantum dapat dilihat 2 level energinya yaitu E_α dan E_β :



Gambar 6. Transisi antara dua level energi yang diizinkan dari spin setengah (Keeler, 2002).

Level energi *single* spin menghasilkan spektrum pada Gambar 7.



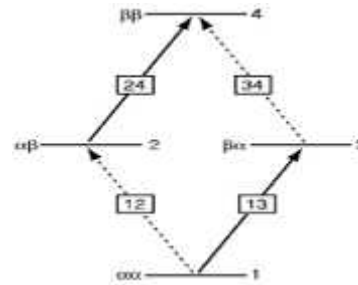
Gambar 7. Nilai parameter $\Delta = 0,001$ Hz dan $J = 0$ Hz untuk spektrum NMR.

Kadaan spin setengah yang diperbolehkan mengalami pertukaran terhadap m adalah diantara dua level energi, yaitu $(+\frac{1}{2} - (-\frac{1}{2})) = 1$. Nilai $\Delta m = \pm 1$ disebut juga dengan transisi *single-quantum* [2]. Transisi antara dua level energi ini menghasilkan spektrum pada Gambar 7. Garis *single* pada frekuensi larmor dari spin dan *coupling* tidak memberikan efek pada frekuensi digaris ini, sehingga *J-Coupling* bernilai 0 pada simulasi.

Dua Spin

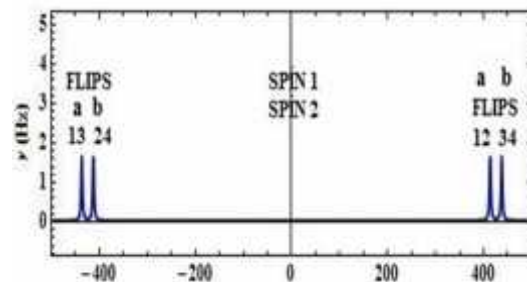
Menurut *selection rule* jika $\Delta m = \pm 1$, maka nilai M hanya dapat bertukar 1 kali yaitu *up* atau *down*. Artinya transisi yang

diperbolehkan dari system dua spin yaitu diantara level 1-2, 3-4, 1-3 dan 2-4. Level energinya ditunjukkan pada Gambar 8.



Gambar 8. Level energi dari 2 sistem spin (Keeler, 2002).

Transisi yang diperbolehkan dari Gambar 8 yaitu, garis tebal untuk transisi spin 1 yang mengalami perpindahan dan garis putus-putus untuk transisi spin 2 yang mengalami perpindahan. Transisi 1-2 melibatkan spin 2 yaitu dari α ke β , sedangkan spin 1 tetap pada keadaan α . Transisi ini dikatakan bahwa spin 2 aktif dan spin 1 pasif. Spin 2 juga berputar untuk transisi 1-3 sehingga ada 2 transisi dari keadaan 1 (α). Transisi pada Gambar 8 menghasilkan spektrum pada Gambar 9.



Gambar 9. Nilai parameter $\Delta = 849,001$ Hz dan $J = 24$ Hz untuk spektrum NMR.

Terdapat dua atau lebih transisi dalam sistem 2 spin, hal ini tidak diperbolehkan oleh ketentuan *selection rule*. Sistem 2 spin memiliki $\Delta m = \pm 1$. Kedua spin pada keadaan 1 (α) mengalami perpindahan menghasilkan transisi 1-2 dan 1-3. Meskipun kedua transisi memiliki spin pasif dan aktif yang berbeda, hal ini tetap tidak diperbolehkan.

KESIMPULAN

Nilai 0,01 ms pada percobaan waktu relaksasi (T_2) dan pergeseran kimia dengan nilai $\nu = 10,001$ Hz, menghasilkan sinyal yang mengalami penurunan secara eksponensial. Pola gelombang belum terlihat pada percobaan ini. Pola gelombang terbentuk dari nilai $T_2=0,11$ ms dan $\nu = 10,001$ Hz, dengan demikian semakin besar waktu relaksasi maka pola gelombang yang dihasilkan akan semakin banyak dan rapat. Sinyal dan spektrum untuk 1 spin dengan 1 transisi level energi, dihasilkan dari percobaan *chemical shift* (Δ) dan *J-Coupling* (J) pada nilai $\Delta=0,001$ Hz dan $J=0$ Hz. Spektrum dari 2 spin dengan transisi 4 level energi dihasilkan pada nilai $\Delta=849,001$ Hz dan $J=24$ Hz.

UCAPAN TERIMA KASIH

Penulis berterima kasih kepada bapak Drs. salomo, M.Si. dan bapak Dr. Muhammad Hamdi, M.Si. selaku Dosen pembimbing yang telah banyak memberikan masukan dan saran untuk kesempurnaan karya ilmiah ini.

DAFTAR PUSTAKA

1. Soedjojo, P. (2001). *Azas-Azas Ilmu Fisika Jilid 4 Fisika Modern*. Yogyakarta: Universitas Gajah Mada.
2. Keeler, J. (2002). *Understanding NMR Spectroscopy*. Department of Chemistry : University of Cambridge.