

Capítulo 1

Introducción

La resonancia magnética nuclear es un fenómeno físico basado en las propiedades magnéticas de los núcleos atómicos. El término *resonancia magnética nuclear*¹ hace referencia a una serie de métodos que se ayudan del fenómeno de la resonancia magnética para estudiar propiedades de moléculas.

La espectroscopía de resonancia magnética nuclear es un experimento basado en éste fenómeno. Consiste en aplicar un campo magnético uniforme a la muestra, con el fin de alinear los campos magnéticos de diferentes núcleos en la dirección de éste campo externo, para luego irradiarla con un pulso electromagnético de corta duración y adquirir la respuesta del material. La naturaleza de ésta respuesta depende de diversos factores, como el entorno de los átomos de la muestra. Observando e interpretando el espectro de ésta respuesta, se puede deducir la estructura molecular de la muestra y algunas de sus propiedades. Ésta técnica es usada frecuentemente en química orgánica, inorgánica y bioquímica.

1.1. Motivación. Estado del arte

La resonancia magnética nuclear fue desarrollada durante el siglo XX. En 1938, Isidor Rabi observó el fenómeno en haces moleculares [1], y en 1946 Felix Bloch y Edward Mills Purcell mejoraron la técnica, por lo que recibieron el premio Nobel de física en 1952.

A lo largo de la segunda mitad del siglo XX, los métodos y la maquinaria usada para realizar experimentos RMN se fue perfeccionando a medida

¹RMN o NMR por sus siglas en inglés, *nuclear magnetic resonance*.

que avanzaba la tecnología, y actualmente existen en el mercado máquinas capaces de crear campos magnéticos estables de 21 *Tesla* y resonancias a 800 *MHz*.

1.2. Objetivos

Este proyecto final de carrera se enmarca en un proyecto de la empresa *AD Telecom*, cuyo objetivo es fabricar una máquina de bajo coste capaz de realizar espectroscopias de resonancia magnética nuclear. Este proyecto está subdividido en 3 partes:

1. Implementación del Hardware analógico de un instrumento de análisis químico mediante técnicas de RMN.
2. Diseño, Test e Implementación en VHDL de algoritmos para la obtención de espectros de Resonancia Magnética Nuclear utilizando técnicas superresolutivas en frecuencia.
3. Sistema de control para un equipo de análisis RMN basado en un microprocesador de 32 bits.

La primera parte consiste en el desarrollo del hardware que realiza el experimento de RMN y obtiene una señal como respuesta; la segunda parte se centra en el procesado de la señal adquirida, y la tercera parte se dedica al control del hardware y a la presentación de los resultados al usuario.

En este PFC se ha desarrollado la segunda parte del proyecto, dedicada al procesado de señal. Las máquinas de RMN que actualmente hay en el mercado se basan en el uso de tecnología de alta precisión para obtener resultados correctos, por lo que su coste es extremadamente elevado, del orden de millones de euros. El objetivo del proyecto de *AD Telecom* es obtener una máquina con un coste mucho más pequeño, por lo que hay que usar materiales de bajo coste y el procesado de señal adquiere una gran importancia para la obtención de buenos resultados.

Al enfocar el diseño con el fin de minimizar el coste, es de esperar que la calidad de la señal obtenida no sea tan buena como sería deseable. El objetivo de este proyecto fin de carrera es desarrollar técnicas que, ayudándose de diversos métodos de procesado de señal, permitan obtener un espectro de una calidad comparable a la de los equipos comerciales actuales a partir de

las señales obtenidas, compensando las posibles distorsiones y demás efectos no deseados que pueda haber.

Se ha desarrollado una aplicación con *MATLAB* que replica la funcionalidad de los programas de análisis RMN existentes, en el que se ha implementado también todos los métodos de procesado y análisis espectral propuestos en este PFC, para facilitar la simulación y la comparación de los resultados obtenidos con los distintos métodos. También se ha implementado parte del trabajo de procesado en lenguaje *VHDL* y se han llevado a cabo pruebas con una placa prototipo de circuito integrado.

1.3. Desglose de capítulos

En el segundo capítulo se presentan los fundamentos teóricos de la resonancia magnética. Se desarrolla un modelo matemático que explica el fenómeno físico que se produce durante un experimento de espectroscopía de RMN.

En el tercer capítulo se explica cómo se realiza la adquisición de la medida y el procesado que se le aplica a la señal hasta su paso por un conversor A/D.

El cuarto capítulo está destinado al procesado de la señal a frecuencia intermedia. Se presenta la teoría del muestreo a frecuencia intermedia y los resultados que se obtienen al promediar señales para mejorar la relación señal a ruido.

El quinto capítulo se dedica al análisis espectral. En él se presentan diversos métodos de estimación espectral y su clasificación en métodos paramétricos y no paramétricos.

En el sexto capítulo se desarrolla la teoría del análisis espectral en una dimensión basado en la transformada de Fourier que se aplica habitualmente a las señales obtenidas con los espectrómetros disponibles en el mercado actualmente.

El séptimo capítulo se destina al análisis de la principal distorsión que aparecerá en las señales obtenidas, la debida a la no homogeneidad del campo magnético uniforme existente en el equipo de resonancia magnética. Se desarrolla un modelo teórico de éste tipo de distorsión y se proponen y analizan diversos métodos para la ecualización de la misma.

El octavo capítulo se dedica al desarrollo teórico de diversos estimadores espectrales de alta resolución. También se presentan los resultados obtenidos al aplicar estos métodos a señales de RMN.

En el noveno capítulo se explica cómo se ha llevado a cabo la implementación en VHDL y la síntesis en FPGA de la adquisición y promediado de señales digitales y su integración en el resto del sistema.

El último capítulo está dedicado a las conclusiones del proyecto y planes de futuro.