

УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

# Квантовая радиофизика

Лекция 11

Санкт-Петербург, 2017



# Движение частиц в экспериментах ЯМР

- Пространственная зависимость вводится градиентом магнитного поля

$$B_z = B_0 + (\mathbf{G} \cdot \mathbf{r})$$

- Макроскопическое движение

$$\mu_{\perp}(t, x) = \mu_{\perp}(0) e^{-i\gamma \left( x_0 \int G dt + \frac{\partial x}{\partial t} \int G t dt + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 x}{\partial t^2} \int G t^2 dt + \dots \right)}$$

- Уравнения Блоха-Торри (диффузия)

$$\frac{d\mu_{\perp}}{dt} = -i\gamma(\mathbf{G} \cdot \mathbf{r})\mu_{\perp} + \nabla \mathbf{D} \nabla \mu_{\perp}$$

# Диффузия в ЯМР



## Диффузия в ЯМР

- Решение уравнений Блоха-Торри для одномерной изотропной диффузии

$$\mu_{\perp} = \mu_{\perp}(0) e^{-i\gamma x \int_0^t G(t) dt} e^{-Db}$$

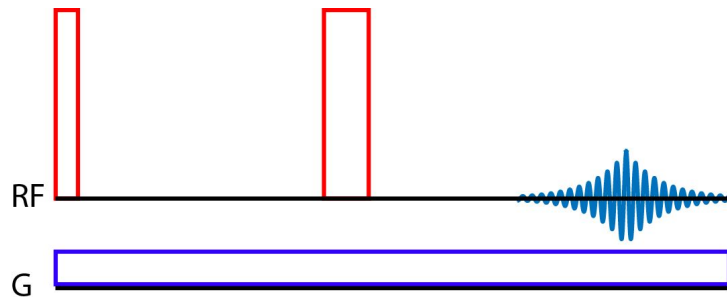
- В терминах эффективного градиента

$$b = \gamma^2 \int_0^t \left[ \int_0^{\tau} G(t') dt' \right]^2 d\tau$$

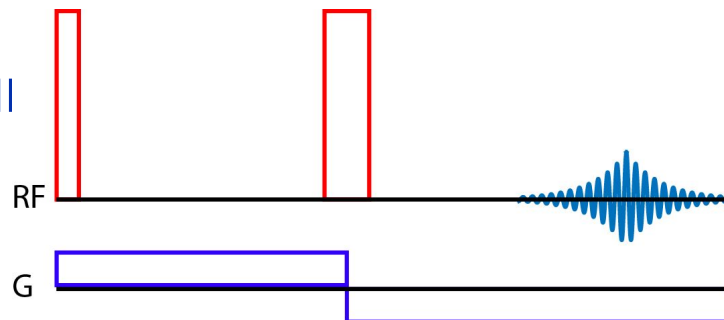
# Эффективный градиент

- Направление градиента магнитного поля с точки зрения создаваемого набега фазы

- Фактический градиент



- Эффективный градиент



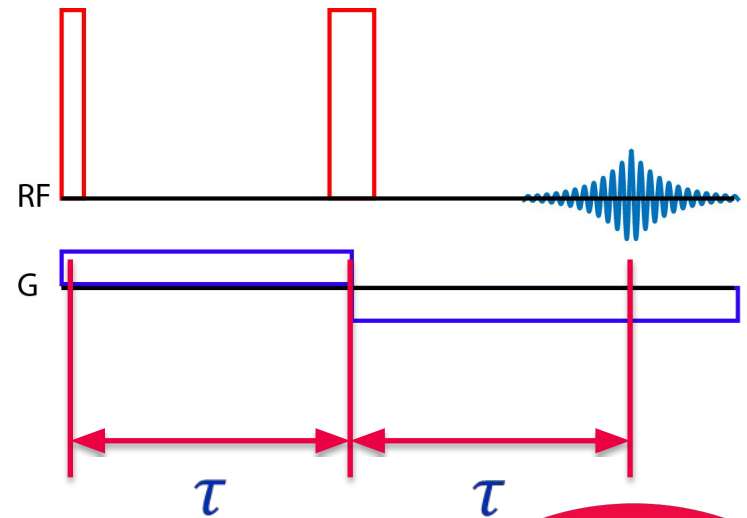
# Постоянный градиент

- Диффузная взвешенность вследствие постоянного градиента

$$b = \gamma^2 \int_0^t \left[ \int_0^\tau G(t') dt' \right]^2 d\tau$$

- Амплитуда сигнала

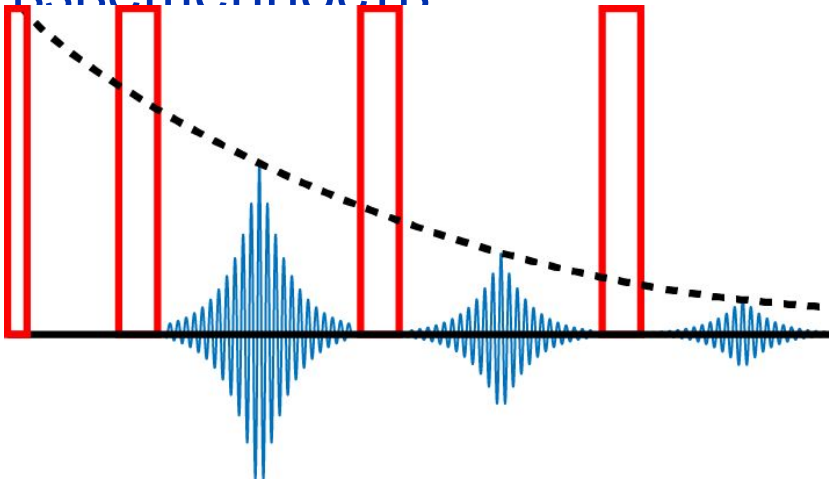
$$\mu_{\perp} \sim e^{-\frac{2}{3} D \gamma^2 G^2 \tau^3}$$



## Ошибка в измерении $T_2$

- При наличии неучтенного градиента магнитного поля в CPMG-последовательности возникает дополнительная

взвешенность

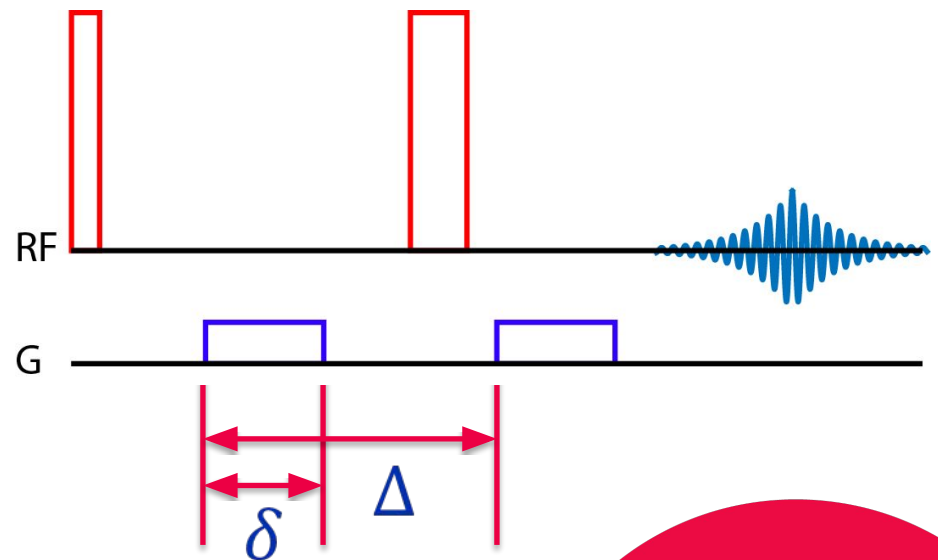


$$\mu_{\perp} \sim e^{-\frac{t_n}{T_2}} e^{-\frac{t_n^3}{12n^2} D \gamma^2 G^2}$$

# Импульсный градиент

- Измерение диффузии методом спинового или стимулированного эха
- Амплитуда сигнала

$$\mu_{\perp} \sim e^{-D\gamma^2 G^2 \delta^2 \left(\Delta - \frac{\delta}{3}\right)}$$







## Измерение диффузии

- 2 эксперимента с одинаковыми параметрами  $\tau$ ,  $\Delta$ ,  $\delta$ , но различной величиной градиента ( $b_2=0$ ,  $b_1=b_1$ )

$$\ln \left( \frac{\mu_{\perp 1}}{\mu_{\perp 2}} \right) = -b_1 D = -D \gamma^2 G^2 \delta^2 \left( \Delta - \frac{\delta}{3} \right)$$



# Анизотропная диффузия

- Уравнение Блоха-Торри

$$\frac{d\mu_{\perp}}{dt} = -i\gamma(\mathbf{G} \cdot \mathbf{r})\mu_{\perp} + \nabla \mathbf{D} \nabla \mu_{\perp}$$

$$\nabla \mathbf{D} \nabla = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D_{xx} & D_{xy} & D_{xz} \\ D_{yx} & D_{yy} & D_{yz} \\ D_{zx} & D_{zy} & D_{zz} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} = \sum_{x_i=x,y,z} \sum_{x_j=x,y,z} D_{x_i x_j} \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_j}$$



# Анизотропная диффузия

- Уравнение Блоха-Торри

$$\frac{d\mu_{\perp}}{dt} = -i\gamma(\mathbf{G} \cdot \mathbf{r})\mu_{\perp} + \nabla \mathbf{D} \nabla \mu_{\perp}$$

$$\nabla \mathbf{D} \nabla = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D_{xx} & D_{xy} & D_{xz} \\ D_{yx} & D_{yy} & D_{yz} \\ D_{zx} & D_{zy} & D_{zz} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} = \sum_{x_i=x,y,z} \sum_{x_j=x,y,z} D_{x_i x_j} \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_j}$$



# Влияние анизотропной диффузии

- Решение уравнений Блоха-Торри

$$\mu_{\perp} = \mu_{\perp}(0) A(t) e^{-i\gamma \int_0^t (\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) dt'}$$

$$\mu_{\perp} = \mu_{\perp}(0) e^{-i\gamma \int_0^t (\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) dt'} e^{-\mathbf{b} : \mathbf{D}}$$

$$\mathbf{b} : \mathbf{D} = \sum_{x_i=x,y,z} \sum_{x_j=x,y,z} D_{x_i x_j} \int_0^t \left[ \int_0^{\tau} G_{x_i}(t') dt' \right] \left[ \int_0^{\tau} G_{x_j}(t') dt' \right] d\tau$$



# Измерение анизотропной диффузии

- $b$ -матрица определяет величину диффузионной взвешенности

$$b_{ij} = \int_0^t \left[ \int_0^{\tau} G_{x_i}(t') dt' \right] \left[ \int_0^{\tau} G_{x_j}(t') dt' \right] d\tau$$

- При наличии эксперимента с  $b_{ij}=0$

$$\ln \left( \frac{\mu_{\perp 1}}{\mu_{\perp 0}} \right) = -\mathbf{b} : \mathbf{D}$$



## Вычисление элементов тензора самодиффузии

- Величина сигнала – линейная комбинация из 6 неизвестных переменных

$$\ln \left( \frac{\mu_{\perp 1}}{\mu_{\perp 0}} \right) = - \sum_{x_i=x,y,z} \sum_{x_j=x,y,z} D_{x_i x_j} \int_0^t \left[ \int_0^{\tau} G_{x_i}(t') dt' \right] \left[ \int_0^{\tau} G_{x_j}(t') dt' \right] d\tau$$

- Тогда для, например, 6 измерений с различными направлениями градиентов можно записать

$$\mathbf{a} = \mathbf{Bd}$$



# Решение системы уравнений

- Результаты 6 измерений

$$\mathbf{a} = \mathbf{B}\mathbf{d}$$

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} b_{xx}^1 & b_{xx}^2 & \dots \\ b_{xy}^1 & b_{xy}^2 & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad \mathbf{a} = \begin{pmatrix} \ln\left(\frac{\mu_{\perp 1}}{\mu_{\perp 0}}\right) \\ \ln\left(\frac{\mu_{\perp 2}}{\mu_{\perp 0}}\right) \\ \vdots \end{pmatrix} \quad \mathbf{d} = (D_{xx} \quad D_{xy} \quad \dots)$$

- Можно вычислить псевдоинверсную матрицу для  $\mathbf{B}$  и таким образом вычислить  $\mathbf{d}$