УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

Квантовая радиофизика

Лекция 11

Санкт-Петербург, 2017

Движение частиц в экспериментах ЯМР

- Пространственная зависимость вводится градиентом магнитного поля

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

- Макроскопическое движение

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

- Уравнения Блоха-Торри (диффузия)

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

Диффузия в ЯМР

Диффузия в ЯМР

- Решение уравнений Блоха-Торри для одномерной изотропной диффузии

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

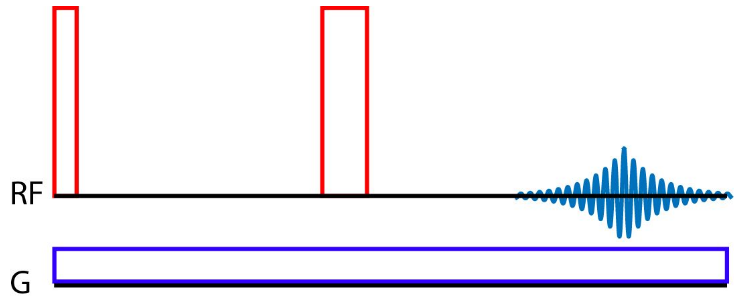
- В терминах эффективного градиента

$$b = \gamma^2 \int_0^t \left[\int_0^{\tau} G(t`)dt` \right]^2 d\tau$$

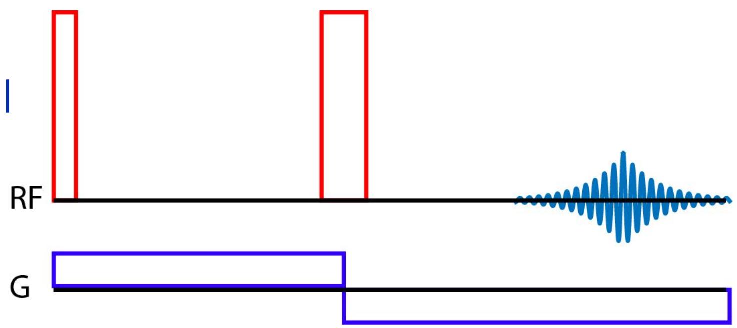
Эффективный градиент

- Направление градиента магнитного поля с точки зрения создаваемого набега фазы

- Фактический градиент



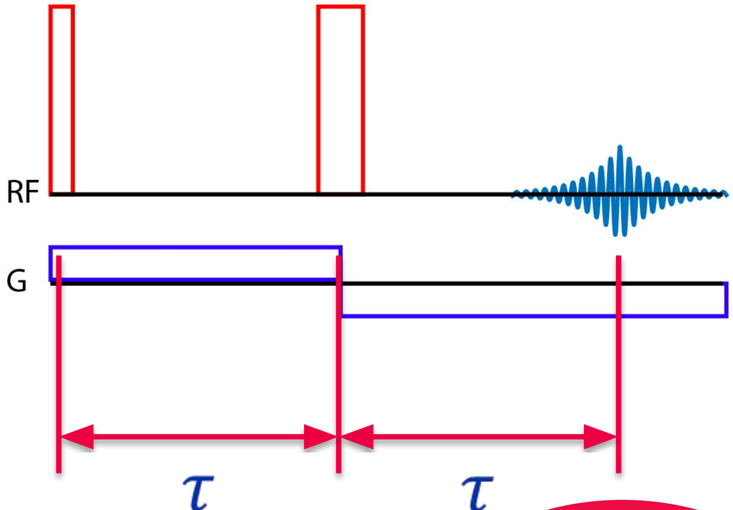
- Эффективный градиент



Постоянный градиент

- Диффузная взвешенность вследствие постоянного градиента

$$b = \gamma^2 \int_0^t \left[\int_0^\tau G(t`)dt` \right]^2 d\tau$$

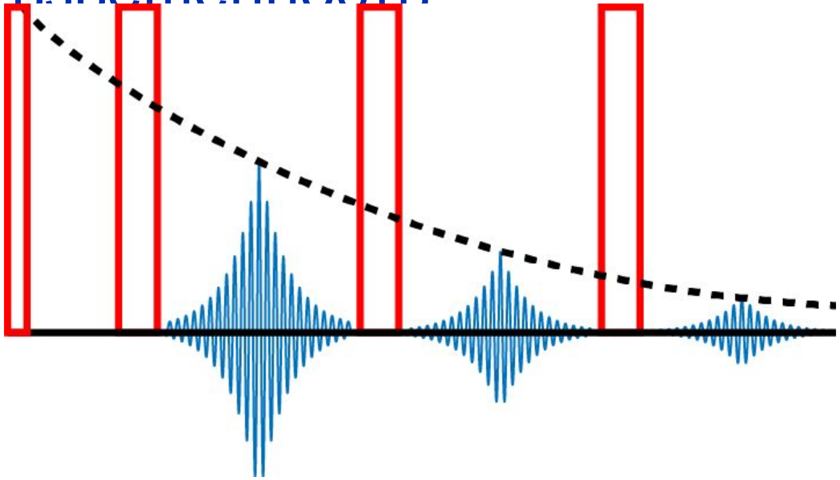


- Амплитуда сигнала

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

Ошибка в измерении T_2

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

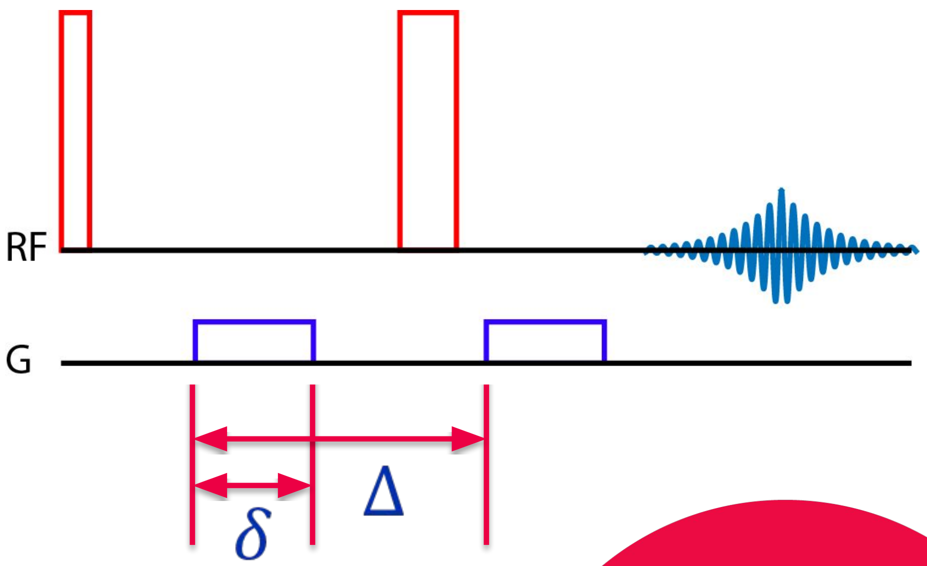


$$\mu_\perp \sim e^{-\frac{t_n}{T_2}} e^{-\frac{t_n{}^3}{12n^2} D\gamma^2 G^2}$$

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 τ, Δ, δ, 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

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

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

Анизотропная диффузия

- Уравнение Блоха-Торри

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

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

Влияние анизотропной диффузии

- Решение уравнений Блоха-Торри

$$\mu_\perp = \mu_\perp(0)A(t)e^{-i\gamma\int_0^t(\boldsymbol{G}\cdot\boldsymbol{r})dt`}$$

$$\mu_\perp = \mu_\perp(0)e^{-i\gamma\int_0^t(\boldsymbol{G}\cdot\boldsymbol{r})dt`}e^{-\mathbf{b}:\mathbf{D}}$$

$$\mathbf{b}:\mathbf{D} = \sum_{x_i=x,y,z}\sum_{x_j=x,y,z} D_{x_i x_j}\int_0^t\left[\int_0^\tau G_{x_i}(t`)dt`\right]\left[\int_0^\tau G_{x_j}(t`)dt`\right]d\tau$$

Измерение анизотропной диффузии

- b-матрица определяет величину диффузной 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

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

Решение системы уравнений

- Результаты 6 измерений

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

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

- Можно вычислить псевдоинверсную матрицу для B и таким образом вычислить **d**