

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ
БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ»

ЯДЕРНЫЙ МАГНИТНЫЙ РЕЗОНАНС И ЯМР-ТОМОГРАФИЯ

Учебное пособие для вузов

Составитель
С. Г. Кадменский

Издательско-полиграфический центр
Воронежского государственного университета
2012

ВВЕДЕНИЕ

Основные литературные источники, которые обычно используются в качестве учебных пособий при изучении явления ядерного магнитного резонанса (ЯМР) и его применения в исследованиях структуры различных конденсированных сред и в ядерной медицине, весьма ограничены по числу и труднодоступны. Поэтому данное учебное пособие, ориентированное на анализ фундаментальных свойств ядерного магнетизма и ядерного магнитного резонанса, а также описание наиболее распространенных способов их применения, включая современную медицинскую ЯМР-томографию, может оказаться весьма полезным для широкого круга студентов и специалистов.

1. ИСТОРИЯ РАЗВИТИЯ МЕТОДОВ ЯМР

Развитие методов ядерного магнитного резонанса генетически связано с тем фактом, что ларморовские частоты ω_0 ядерных магнитных подуровней, возникающих при помещении атомных ядер во внешнее однородное и стационарное магнитное поле, оказываются лежащими в диапазоне частот, соответствующих частотам ω высокочастотных магнитных полей, которые могут быть созданы при использовании стандартных радиотехнических средств. Заметим, что соответствующие ларморовские частоты $\omega_0^{\text{эл}}$ для электронных магнитных подуровней в атомах и молекулах превосходят ядерные ларморовские частоты ω_0 примерно в 2000 раз, что делает весьма проблематичным экспериментальное получение высокочастотных переменных магнитных полей с частотами $\omega \approx \omega_0^{\text{эл}}$.

Использование методов ЯМР началось достаточно давно. Еще до войны в 1939 году Раби продемонстрировал явление ЯМР при исследовании отклонения пучков нейтронов во внешних магнитных полях для определения дипольного магнитного момента нейтрона. Это явление связано с опрокидыванием вектора спина нейтрона, ориентированного в однородном и постоянном магнитном поле с индукцией \vec{B}_0 , при резонансном поглощении нейтроном кванта высокочастотного магнитного поля с индукцией \vec{B}_1 , перпендикулярной вектору \vec{B}_0 . В дальнейшем метод Раби [1] был применен и для молекулярных пучков, что позволило измерять не только магнитные дипольные моменты, но и спины различных ядер. Наконец, позже метод ЯМР был использован для прецизионного определения напряженностей как внешних, так и внутренних магнитных полей широкого круга конденсированных сред.

где проекция I_z на ось Z спина ядра \vec{I} принимает при квантовомеханическом рассмотрении [6] значения $\hbar I_z$; здесь \hbar – постоянная Планка, а I_z – безразмерная величина, которая меняется через единицу на интервале $-I \leq I_z \leq I$, где положительно определенная величина I , называемая спином ядра и имеющая целые и полуцелые значения, определяет наблюдаемые значения вектора во второй степени спина ядра $\vec{I}^2 = \hbar^2 I(I+1)$. Если до включения магнитного поля \vec{B}_0 все состояния ядер со спином I и его различными проекциями I_z были вырождены (т.е. их энергии не зависели от I_z), то после включения этого поля, как видно из формулы (2), происходит снятие вырождения и энергетический спектр ядра принимает вид, представленный на рис. 1 для $g_I > 0$.

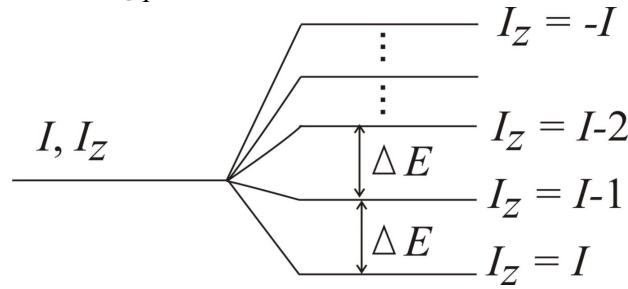


Рис. 1

При этом расстояние ΔE между соседними магнитными подуровнями, отличающимися по I_z на ± 1 , определяется формулой

$$\Delta E = \hbar |\omega_0| = \hbar |\gamma_I| B_0, \quad (3)$$

где величина $|\omega_0|$ совпадает с модулем ларморовской частоты, которая вводится при описании [7] классической прецессии магнитного дипольного момента ядра $\vec{\mu}$ вокруг вектора магнитной индукции \vec{B}_0 .

Второй эффект связан с появлением действующей на ядро во внешнем магнитном поле силы \vec{F} , проекции которой на оси α ($\alpha = X, Y, Z$) системы координат имеют вид

$$F_\alpha = -\nabla_\alpha \tilde{E} = \mu_z \frac{dB_0}{dx_\alpha}. \quad (4)$$

Из формулы (4) следует, что сила \vec{F} отличается от нуля только в случае неоднородного магнитного поля, когда величина его магнитной индукции \vec{B}_0 зависит от координат X, Y и Z .

Наконец, третий эффект связан с появлением во внешнем магнитном поле действующего на ядро момента сил \vec{P} :

$$\vec{P} = [\vec{\mu}, \vec{B}_0]. \quad (5)$$

Тогда изменение полного момента количества движения ядра, совпадающего с его полным спином \vec{I} , под действием момента сил \vec{P} может быть описано в рамках классической механики с помощью обобщенного уравнения Ньютона [7]:

$$\frac{d\vec{I}}{dt} = \vec{P} = [\vec{\mu}, \vec{B}_0]. \quad (6)$$

2.2. Ларморовская прецессия

Умножая уравнение (6) на γ_I , можно получить уравнение для магнитного дипольного момента $\vec{\mu}$:

$$\frac{d\vec{\mu}}{dt} = \gamma_I [\vec{\mu}, \vec{B}_0]. \quad (7)$$

Если вектор $\vec{\mu}(t)$ представить как $\vec{\mu}(t) = \vec{e}_x \mu_x(t) + \vec{e}_y \mu_y(t) + \vec{e}_z \mu_z(t)$, где \vec{e}_x , \vec{e}_y , \vec{e}_z – единичные орты осей координат X , Y , Z соответственно, то уравнение (7) можно представить в виде системы трех уравнений для проекций $\mu_x(t)$, $\mu_y(t)$, $\mu_z(t)$:

$$\begin{cases} \frac{d\mu_x}{dt} = \gamma_I \mu_y B_0, \\ \frac{d\mu_y}{dt} = -\gamma_I \mu_x B_0, \\ \frac{d\mu_z}{dt} = 0. \end{cases} \quad (8)$$

Умножая второе уравнение в формуле (8) на мнимую единицу i и складывая его с первым уравнением, можно получить уравнение для величины $A(t) = \mu_x(t) + i\mu_y(t)$:

$$\frac{dA(t)}{dt} = i\omega_0 A(t), \quad (9)$$

где

$$\omega_0 = -\gamma_I B_0. \quad (10)$$

При использовании начального условия $\mu_x(0) = \mu_0$, $\mu_y(0) = 0$ решение уравнения (9) представляется как

$$A(t) = \mu_{\perp} e^{i\omega_0 t}; \quad \mu_x(t) = \mu_{\perp} \cos \omega_0 t, \quad \mu_y(t) = \mu_{\perp} \sin \omega_0 t, \quad (11)$$

где μ_{\perp} – начальное значение поперечной по отношению к оси Z компоненты вектора дипольного момента $\vec{\mu}$. В то же время решение третьего уравнения в формуле (8) имеет вид

$$\mu_z(t) = \mu_{\parallel} = \text{const}, \quad (12)$$

где μ_{\parallel} – начальное значение продольной по отношению к оси Z компоненты вектора $\vec{\mu}$.

Тогда временная зависимость вектора магнитного дипольного момента $\vec{\mu}(t)$, определяемая формулами (11) и (12), соответствует ларморовской прецессии вектора $\vec{\mu}$ вокруг вектора \vec{B}_0 с угловой скоростью ω_0 , называемой ларморовской частотой. Как было показано выше, модуль этой частоты $|\omega_0|$ фигурирует в формуле (4) для расстояний между соседними магнитными подуровнями ядра во внешнем магнитном поле \vec{B}_0 .

Как видно из табл. 2, ларморовские частоты $|\omega_0|$ при изменении вектора магнитной индукции B_0 внешнего однородного и постоянного во времени магнитного поля от 0,15 Тл до 2 Тл для ядра 1H_1 и от 1 Тл до 3 Тл для ядра $^{31}P_{15}$ лежат в радиотехнических диапазонах $6,4 \leq |\omega_0| \leq 85,2$ МГц и $17,2 \leq |\omega_0| \leq 51,7$ МГц соответственно.

Таблица 2

Ядра	1H_1	1H_1	1H_1	1H_1	1H_1	1H_1	$^{31}P_{15}$	$^{31}P_{15}$	$^{31}P_{15}$	$^{31}P_{15}$
Внешнее поле B_0 (Тл)	0,15	0,35	0,5	1	1,5	2	1	1,5	2	3
Частота $ \omega_0 $ (МГц)	6,4	14,9	21,3	42,6	63,9	85,2	17,2	25,9	34,5	51,7

2.3. Ядерный парамагнетизм

Рассмотрим равновесное состояние системы тождественных атомных ядер со спином $I \neq 0$ в однородном и постоянном во времени внешнем магнитном поле \vec{B}_0 при температуре T_0 . Функция распределения $W(I_z)$ проекций I_z спинов ядер для этого состояния носит характер распределения Гиббса, зависящего от энергии \tilde{E} (2) ядра в поле \vec{B}_0 [5]:

$$W(I_z) = C \exp\left(-\frac{\tilde{E}}{kT_0}\right) = C \exp(a I_z), \quad (13)$$

где $a = \frac{\hbar \gamma_I B_0}{kT_0}$. Нормировочная константа C находится из условия нормировки распределения (13) и имеет значение