



Магнетно-резонантни имиџинг

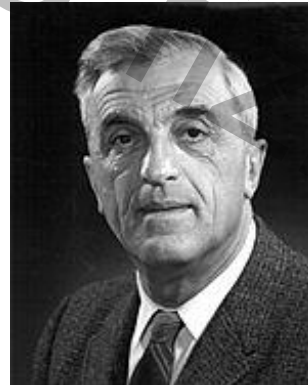
Предавање 1. Основе НМР

Основни принципи НМР

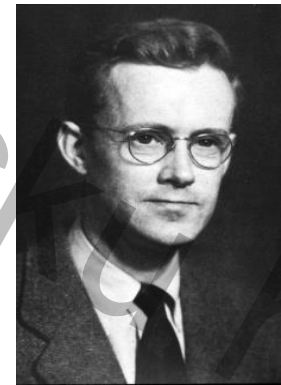
- Феномен резонантне апсорпције електромагнетног зрачења из радиофреквентне области од стране језгара чији је укупни магнетни момент различит од нуле.



1943.



1945.



Магнетни момент и магнетизација

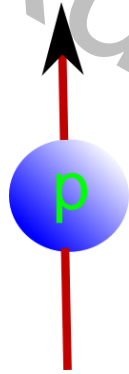
- Магнетни момент нуклеона

$$\vec{\mu} = \left(\frac{e}{2m_p} \right) \vec{s} = \gamma \vec{s}$$

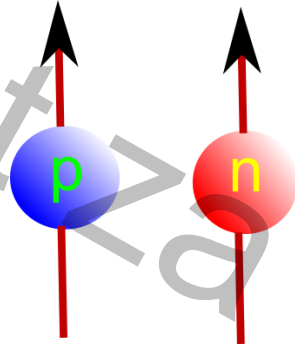
- Магнетни момент језгра је сума магнетних момената протона и неутрона, водећи рачуна о правилу спаривања.

Магнетни момент језра

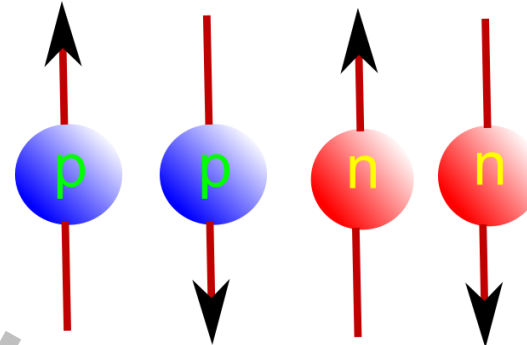
- Сабирају се само спинови истих честица



$$S(\text{H}) = \frac{1}{2}$$



$$S(\text{}^2\text{H}) = 1$$



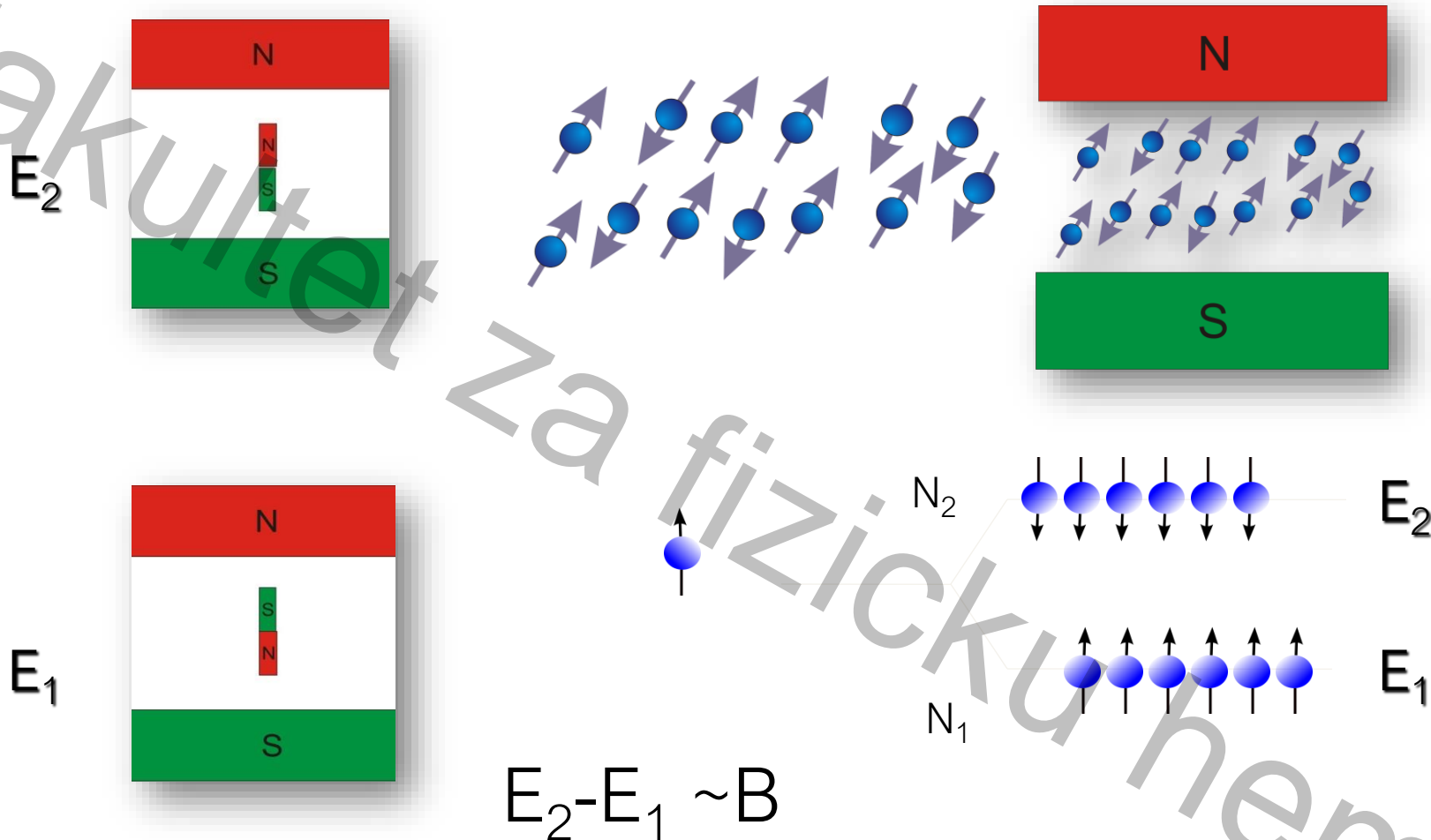
$$S(\text{}^4\text{He}) = 0$$

- Језгра са парним број протона и неутрона немају укупан спин
- ...са непарним бројевима протона и неутрона целобројан спин
- ...остала полубројан спин

НМР особине неких језгара

Језгро	Спин (I)	Жиромагнетни однос $\gamma/2$ (rad/Ts)	Заступљеност у природи	Релативна осетљивост
^1H	1/2	42.6	99.985	1
^2H	1	6.5	0.015	0.0096
^{13}C	1/2	10.7	1.11	0.0096
^{14}N	1	3.1	99.63	0.001
^{15}N	1/2	-4.3	0.37	0.001
^{17}O	5/2	-5.8	0.037	0.029
^{19}F	1/2	40.1	100	0.83
^{23}Na	3/2	10.9	100	0.093
^{31}P	1/2	17.2	100	0.066
^{39}K	3/2	2.0	93.08	0.0005

Спинови у магнетном пољу



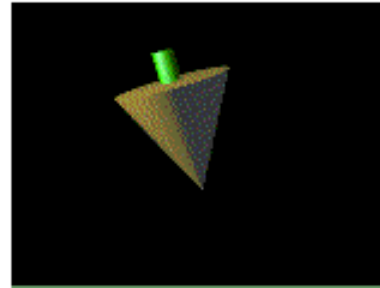
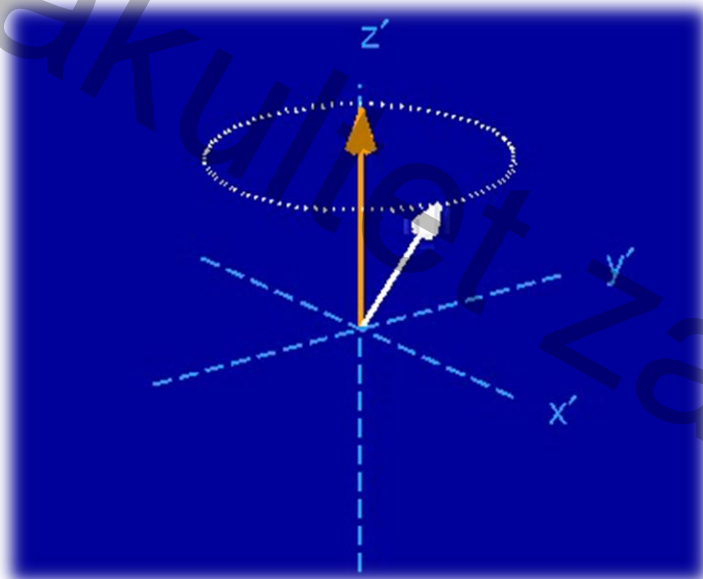
$$E_2 - E_1 \sim B$$

$$N_1 - N_2 \uparrow \text{ када } B \uparrow$$

Магнетизација у узорку

- $\vec{M} = \sum \vec{\mu}_i$
- У одсуству магнетног поља укупна магнетизација у узорку једнака је нули.
- $\vec{M} = 0, B=0$

Прецесија и Ларморова једначина



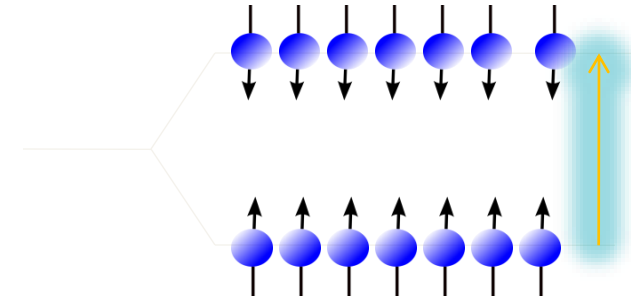
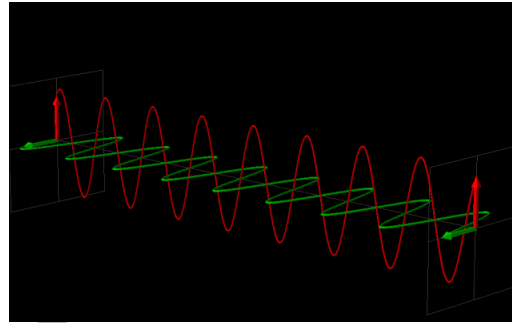
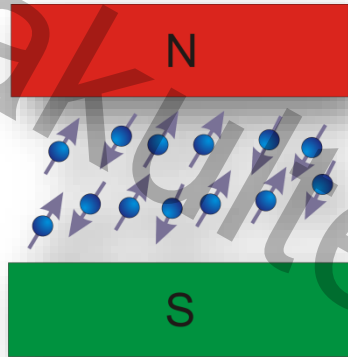
$$\omega = -\gamma B$$

$$\omega = -2\pi\nu = 2\pi\gamma B$$

Фреквенција којом магнени момент прецесује око правца поља једнака је фреквенцији прелаза између два енергетска стања.

$$E_2 - E_1 = h\nu = h\omega/2\pi = \gamma B/2\pi$$

Увођење ексцитације и магнетна резонанција



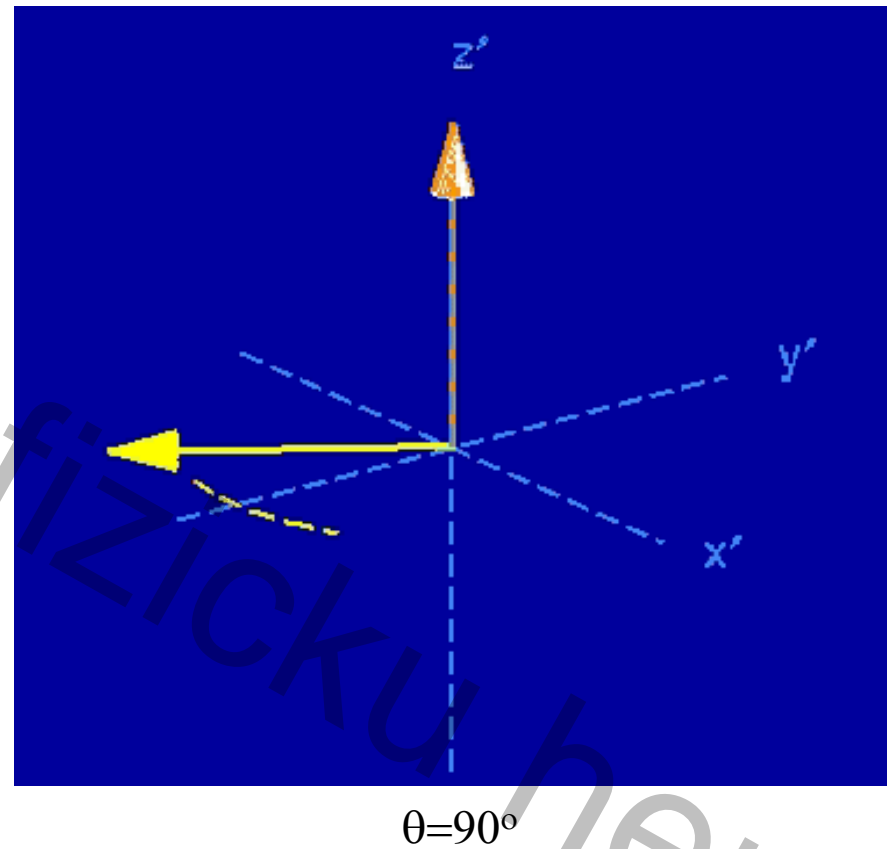
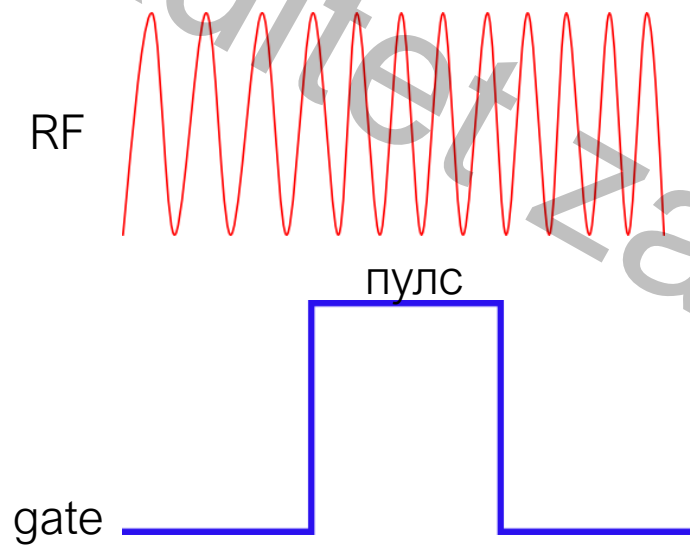
$$B_1 = B_{01} \sin(\omega t) = B_{01} \sin \theta$$

Електромагнетни талас фреквенције једнаке Ларморовој фреквенцији

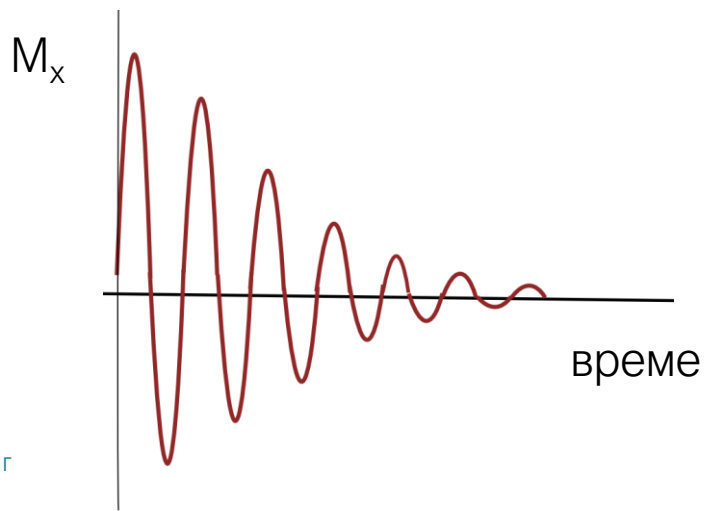
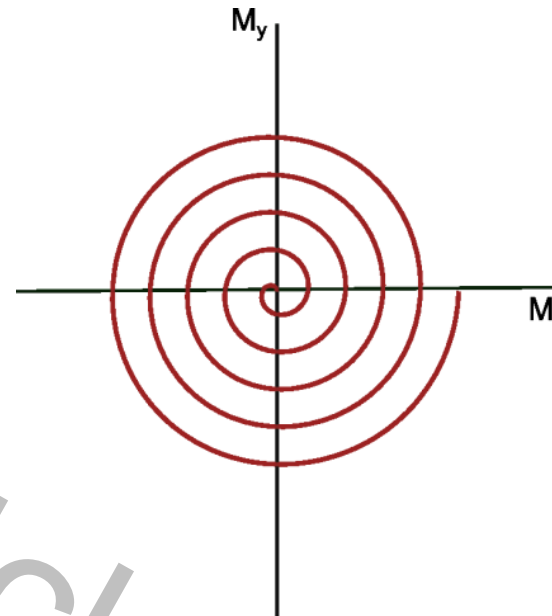
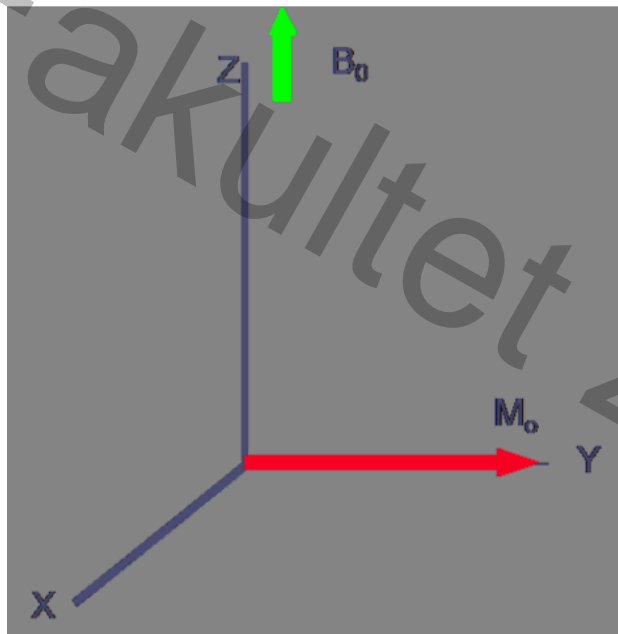
B_{01} је амплитуда вектора магнетног поља

θ је угао за који B_1 обара магнетизацију ка xy равни

- РФ поље се примењује у **пулсном** режиму

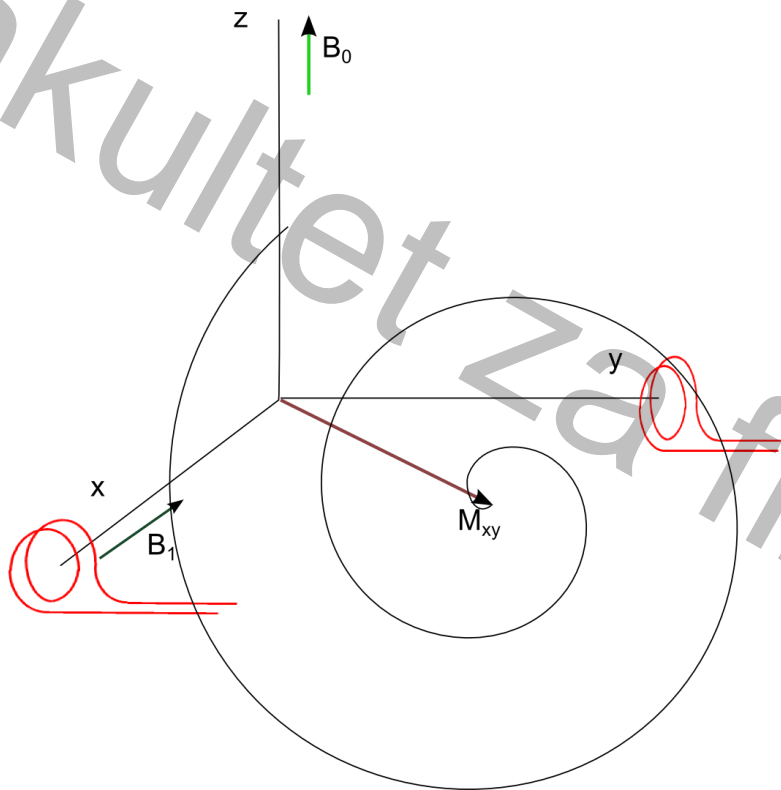


Понашање магнетизације после пулса од 90°

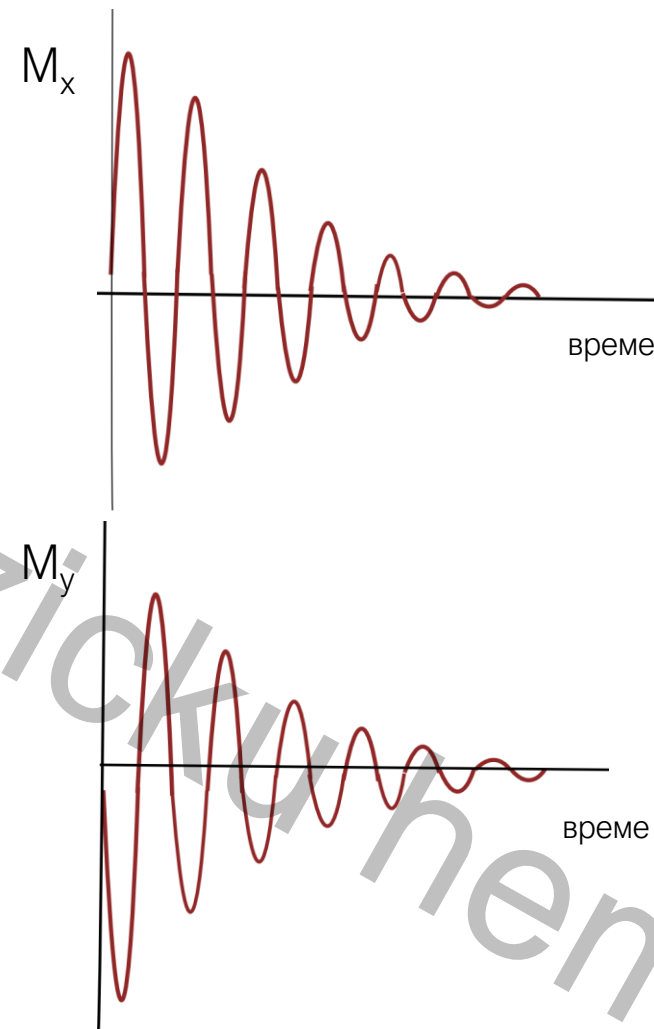


$$M_x = M_0 \sin(\omega t + \phi) e^{-t/T_2}$$

Детекција магнетизације

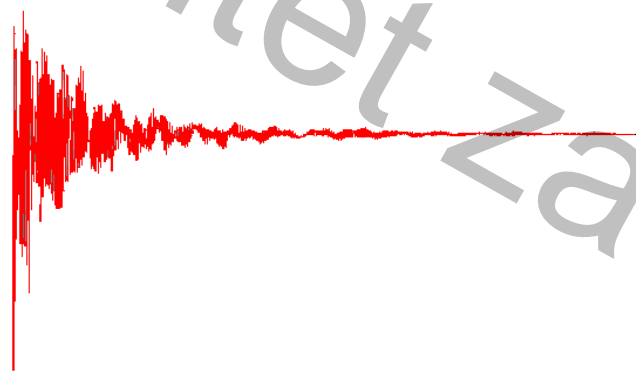


$$M_y = -M_0 \cos(\omega t + \phi) e^{-t/T_2}$$
$$M_x = M_0 \sin(\omega t + \phi) e^{-t/T_2}$$



FID је НМР сигнал

Шта са комплексним FID сигналом?



→
време

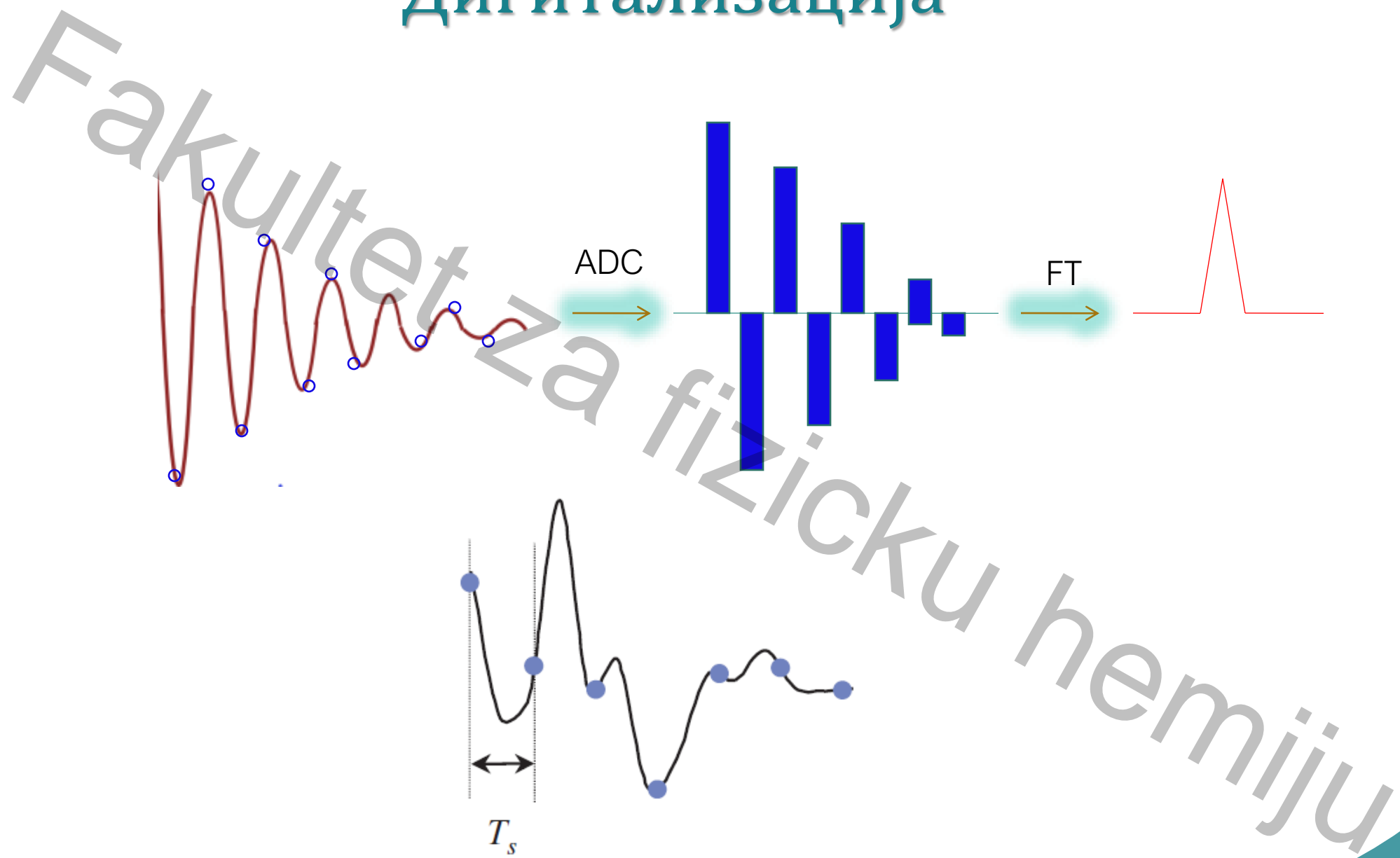
FID цикличног хексапептида

- ? Компоненте
- ? Интезитети
- ? Фреквенције



$$I(t) \rightarrow I(\nu)$$

Дигитализација



Дигитализација-некоректно узорковање



Фуријеова трансформација

- Свака периодична функција (у овом случају времена) може се представити као:

- $f(t) = \frac{a_0}{2} + a_1 \cos(t) + a_2 \cos(2t) + a_3 \cos(3t) + \dots + b_1 \sin(t) + b_2 \sin(2t) + b_3 \sin(3t) + \dots$

- $F(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) e^{-i\omega t} dt$

- $e^{-i\omega t} = \cos(\omega t) + i \sin(\omega t)$

- $Re(F(\omega)) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) \cos(\omega t) dt$ $Im(F(\omega)) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) \sin(\omega t) dt$

Дискретна (DFT) и брза Фуријеова трансформација (FFT)

- После дигитализације сигнал садржи коначан број тачака па интеграл у изразу за FT преводимо у суму

$$(DFT(f))_j = D_j = \sum_{k=0}^{N-1} f_k e^{-\frac{2\pi i j \cdot k}{N}}$$

$$(DFT^{-1}(D))_k = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} f_k e^{\frac{2\pi i j \cdot k}{N}}$$

Где је N нормализациони фактор. Број калкулација неопходан за комплетну трансформацију је $N(N - 1) \approx N^2$

Ако је N паран број DFT се може разбити на два дела – на трансформацију са парним и трансформацију са непарним бројевима. Број израчунавања је сада

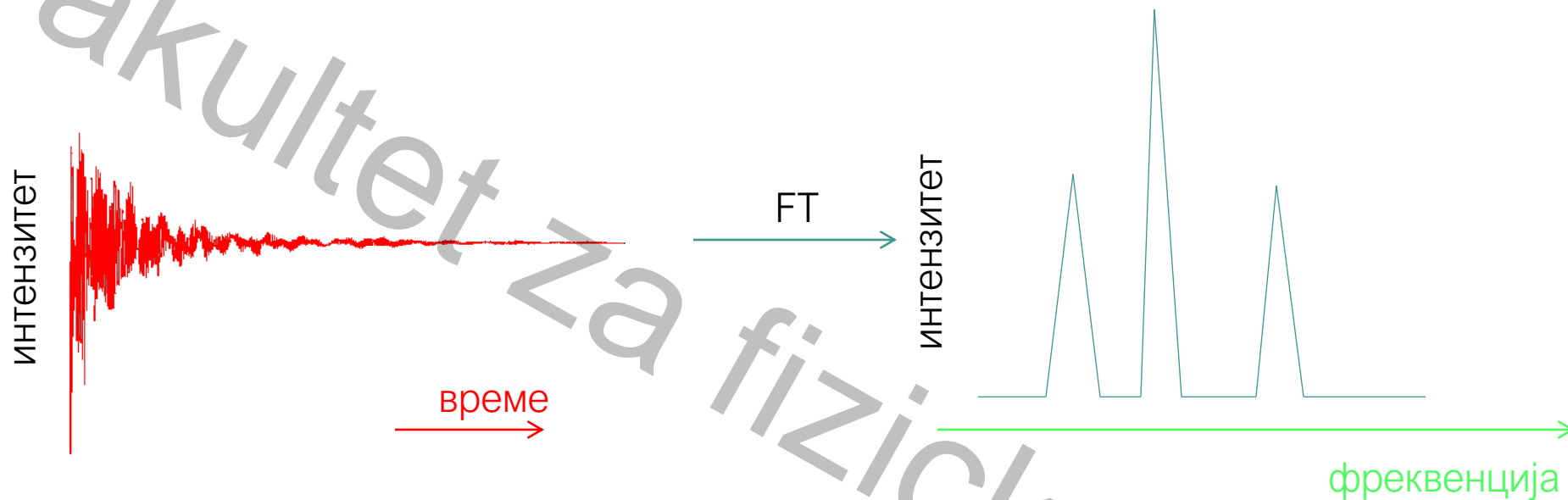
$$2 \left(\frac{N}{2}\right)^2 = \frac{N^2}{2}$$

- Ако је $N = 2^k$ где је $k = 1, 2, 3, \dots$ број израчунавања се своди на приближно
$$N \log_2 N$$

Нпр за $N=512$ број израчунавања је 2^9 , што убрзава рачун $512/9$ пута.

Fakultet za fizicku hemiju

Фуријеова трансформација (2)



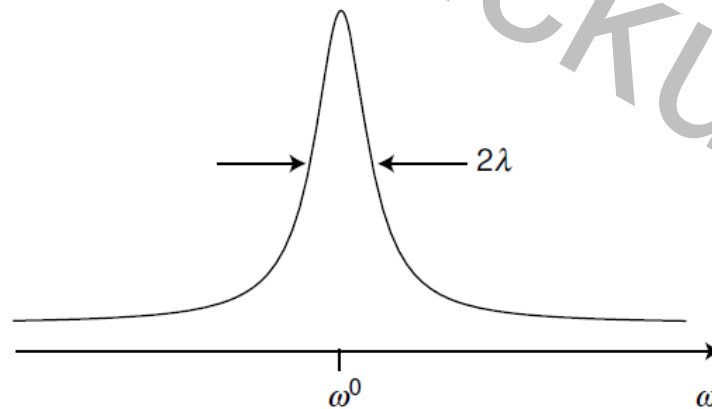
Особине спектралне линије

- Облик спектралне линије је најближи лоренцијану

$$S(\omega) = \frac{\lambda}{\lambda^2 + (\omega - \omega_0)^2}$$

λ је константа брзине кохерентног распада

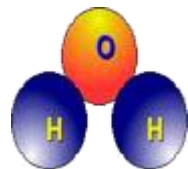
$$\lambda = \frac{1}{T_2}$$



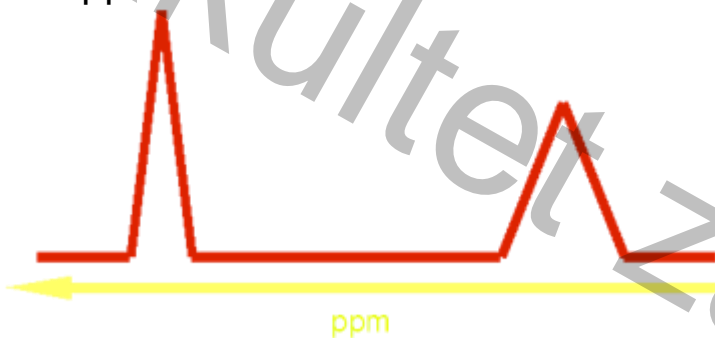
Хемијски померај

- МРИ „види“ све протоне
- Због различитог електронског окружења протони у молекулима „осећају“ различито магнетно поље.
- Тај ефекат се испољава у виду малих разлика у резонантним фреквенцијама и назива се хемијски померај.

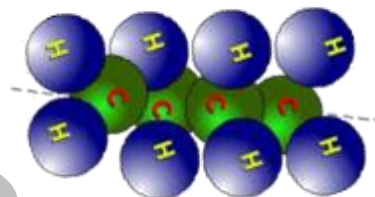
Хемијски померај



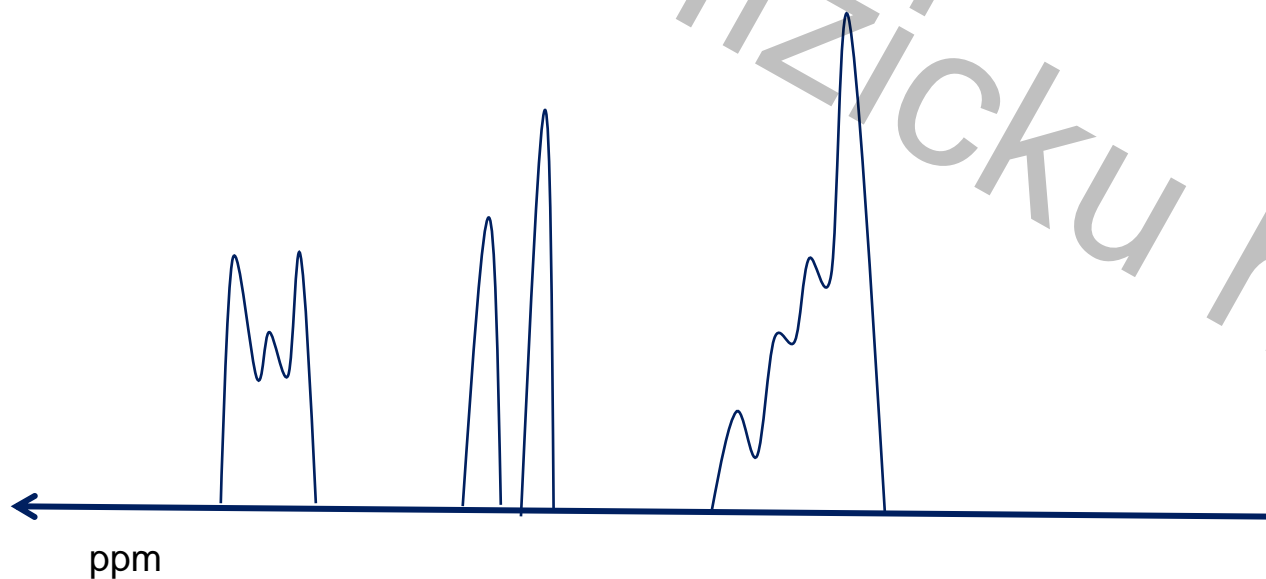
вода



маст



$$\delta = \frac{\nu - \nu_{ref}}{\nu_{ref}}$$

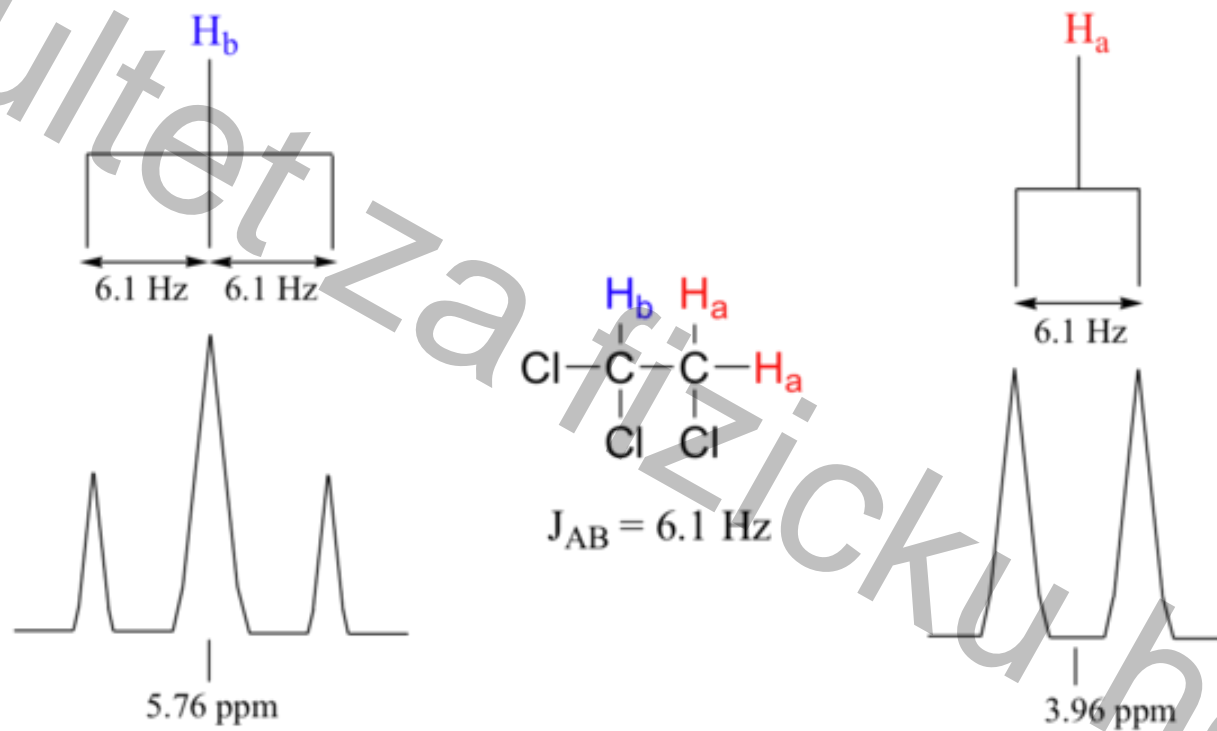


Референтна једињења

-TMS

-Na⁺триметилсилил пропионат

Спрезање спинова

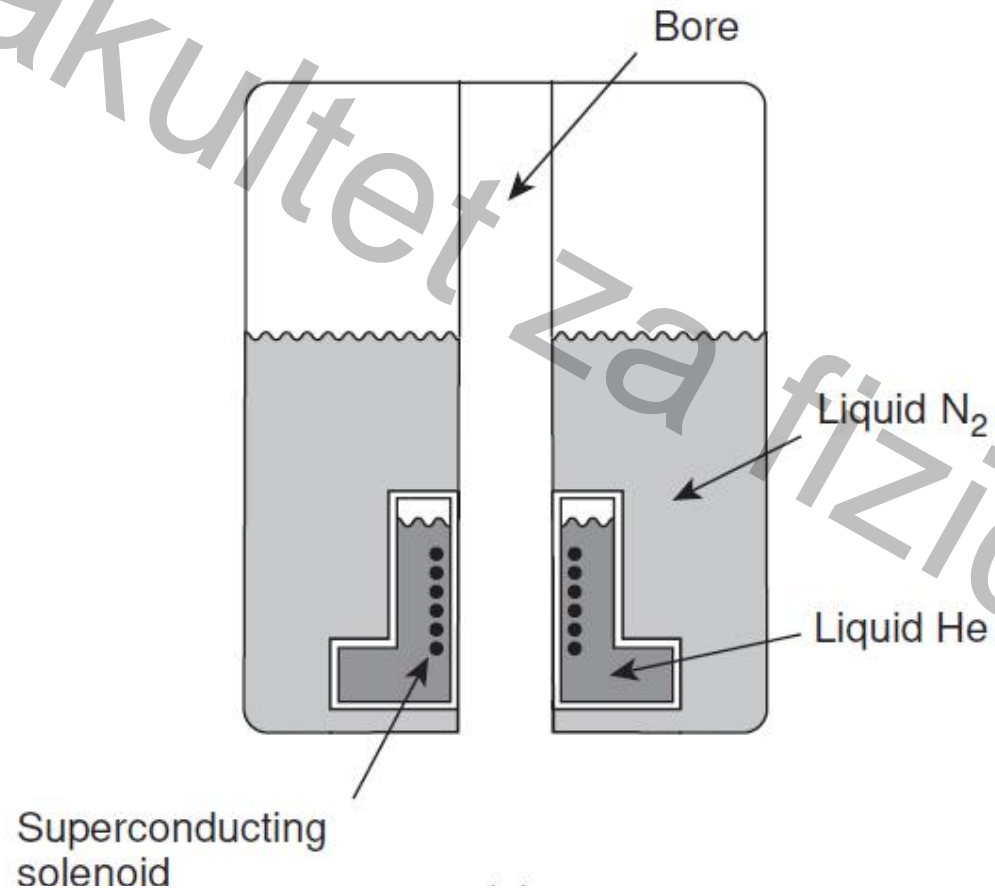


За једињења јесноставне структуре и спектар је једноставан

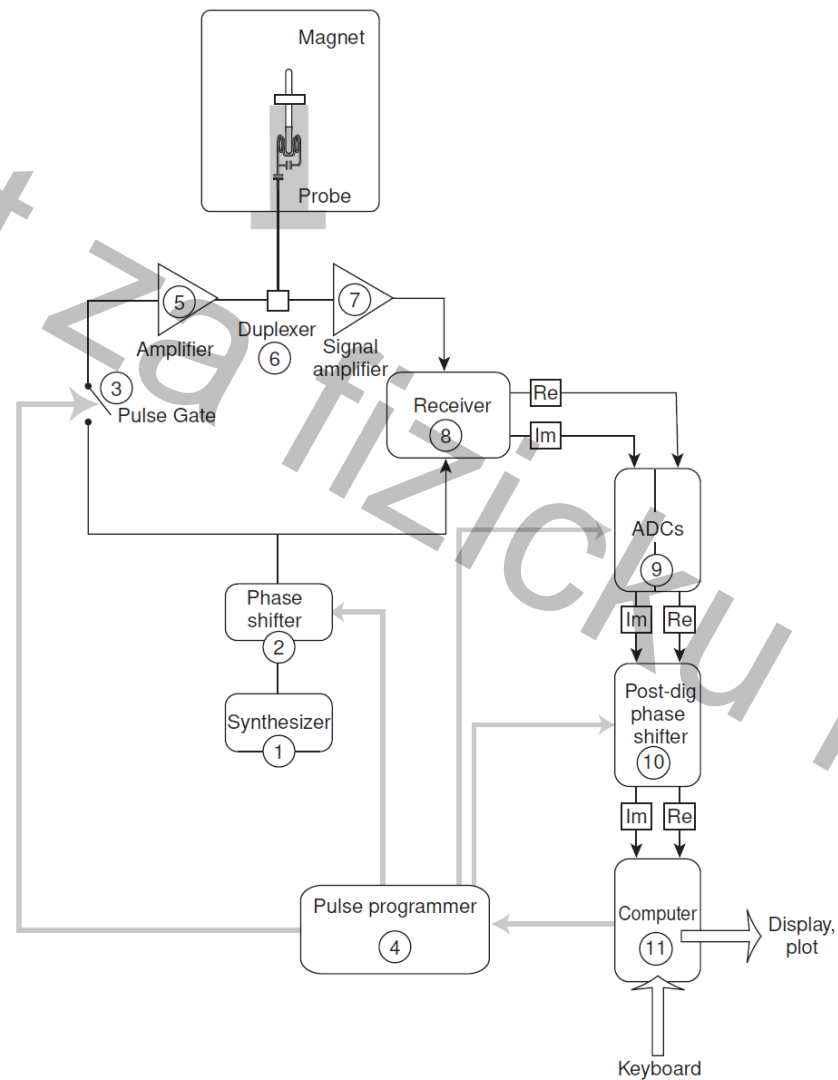


$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$

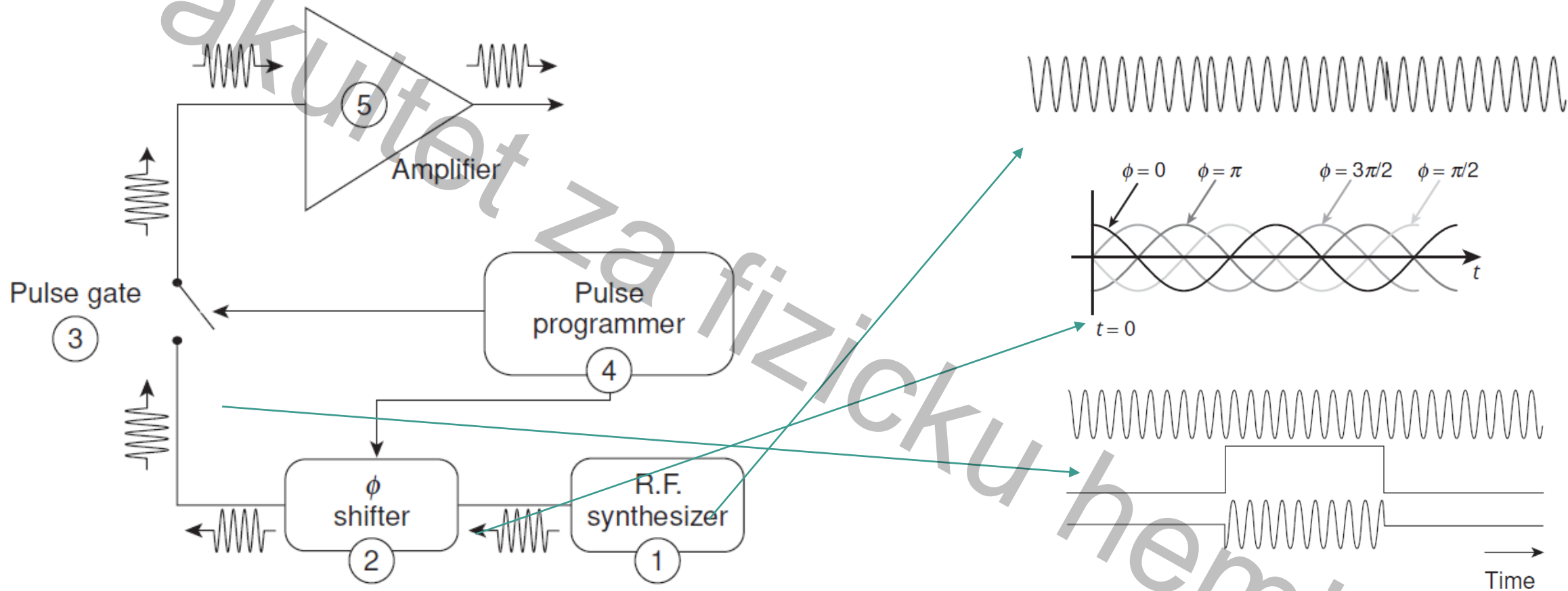
HMP уређај



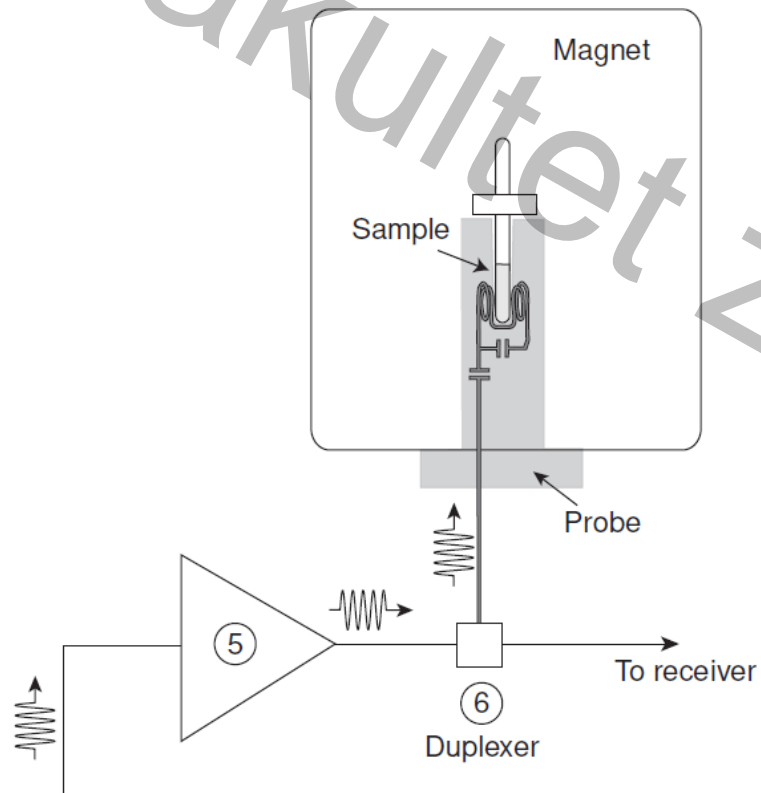
NMR сонда (проба)



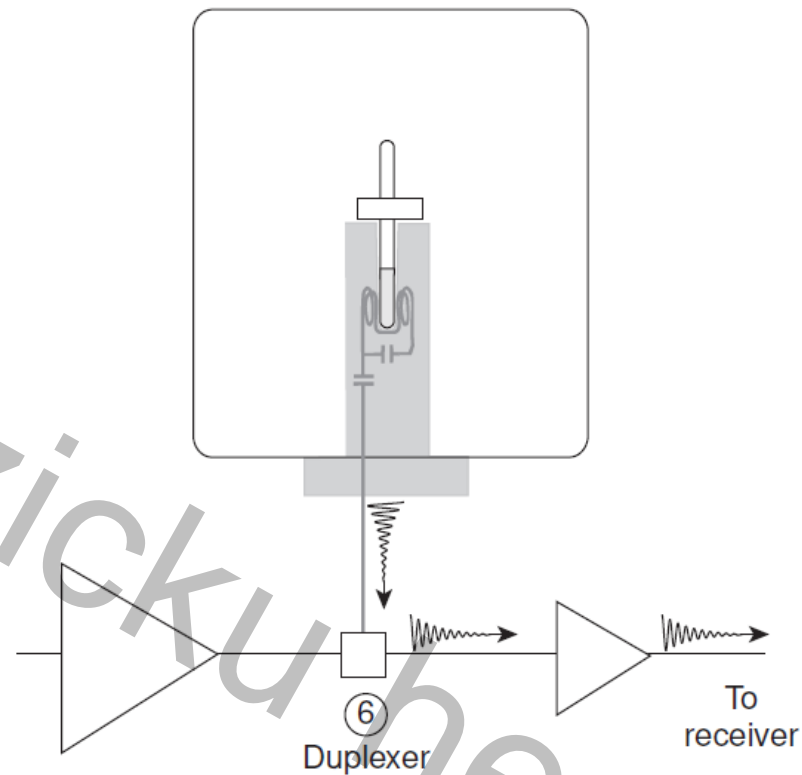
РФ трансмитер



Дуплексер

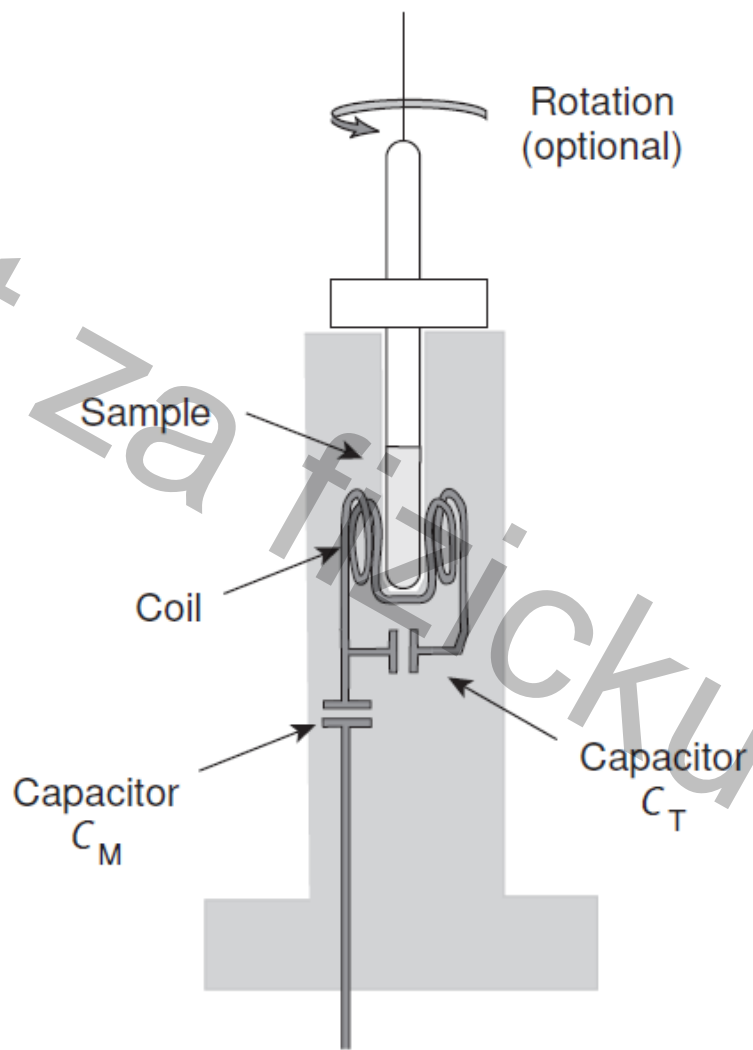


Трансмитујући мод



Примајући мод

„Тјуновање“ пробе



Одељак за пријем сигнала

