



Рис. 5. Результат применения шаблона-макроса для нормально распределенных данных

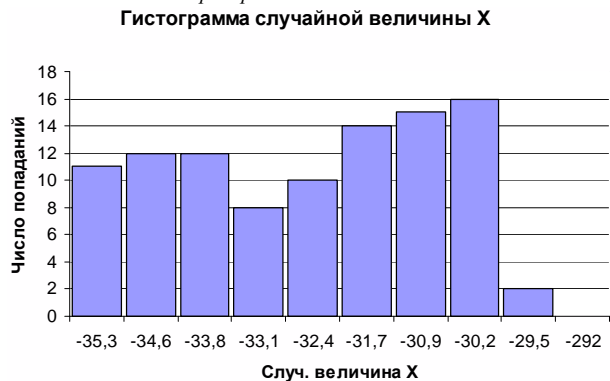


Рис. 6. Результат применения шаблона-макроса для данных, не подчиняющихся нормальному распределению

Студентам предлагается также рассчитать значения стандартизированной асимметрии и эксцесса. Нахождение этих значений в диапазоне от -2 до 2 также позволяет предварительно судить о распределении, близком к нормальному.

Рассматриваемый учебно-методический комплекс успешно применяется на кафедре с 2006 года. Как показала практика, представление индивидуальной работы по описанной схеме достаточно эффективно воспринимается студентами, демонстрирует им современные возможности информационных технологий в обработке и анализе медико-биологических данных.

Такая концепция междисциплинарного интегративного метода обучения как целостная педагогическая система, используемая в процессе обучения медицинской физики и медицинской информатики, дает положительные результаты и повышает интерес студентов к изучению статистики.

Важной учебно-прикладной задачей, успешно решаемой в ходе выполнения данной индивидуальной работы, является повышение образовательного уровня будущих специалистов-медиков в области использования современных

информационных технологий. Отмечено также, что в студенческих работах по другим дисциплинам стали грамотно использоваться статистические технологии обработки результатов исследований и, еще обучаясь в ВУЗе, студенты обращают внимание на корректную постановку эксперимента, выбор числа испытуемых с точки зрения статистической обработки данных и получения достоверных результатов.

Таким образом, можно сделать вывод о высокой эффективности применения данного комплекса заданий для организации индивидуальной работы студентов в рамках изучения медицинской физики и информатики.

Список использованной литературы:

1. Галченкова И.С. Анализ медико-биологических и социально-психологических данных в ППП STATISTICA и приложении Excel, регрессионный анализ // Математика. Физика. Методика преподавания. Материалы и доклады научно-практической конференции 18 апреля 2008 года. – Смоленск: изд-во ВА ВПО ВС РФ, 2008.
2. Леонов В.П., Ижевский П.В. Об использовании прикладной статистики при подготовке диссертационных работ по медицинским и биологическим специальностям. – Бюлл. ВАК №5 РФ 1997.
3. Медична інформатика: програма навчальної дисципліни для студентів вищих медичних закладів освіти III-IV рівнів акредитації. – К., 2005.
4. Медична і біологічна фізика: програма навчальної дисципліни для студентів вищих медичних закладів освіти III-IV рівнів акредитації. – К., 2005.
5. Орлов А.И. О применении статистических методов в медико-биологических исследованиях // Вестник Академии медицинских наук СССР. – 1987. – № 2.
6. Орлов А.И. О современных проблемах внедрения прикладной статистики и других статистических методов // Заводская лаборатория. – 1991. – № 1.
7. Соціальна медицина та організація охорони здоров'я: програма навчальної дисципліни для студентів стоматологічних факультетів вищих закладів освіти III-IV рівнів акредитації. – Тернопіль: Укрмедкнига, 2000.
8. Юшко Г.Н. Научно-дидактические основы организации самостоятельной работы студентов в условиях рейтинговой системы обучения: Автореф. дисс. канд. пед. наук: 13.00.08 теория и методика профессионального образования / Рост. гос. ун-т. – Ростов-н/Д, 2001.

The article in question looks into the process of individual students' studies. It offers the statistics on the knowledge evaluation of the students of the Medical-biological specialization. The authors provide the educational and methodical complex that has been created and implemented at the Department of Medical Physics and Informational Studies to organize the process of students individual studies.

Key words: higher education, individual work, medical statistics.

Отримано: 30.08.2010

УДК 373.5.16:53

Г. П. Чуйко, О. М. Яремчук

Чорноморський державний університет імені Петра Могили

КЛАСИЧНО-КВАНТОВИЙ ОПИС ЯДЕРНОГО МАГНІТНОГО РЕЗОНАНСУ ЯК МЕТОД ВИКЛАДАННЯ

Математична модель взаємодії ядерних спінових магнітних моментів із зовнішнім стаціонарним магнітним полем за умови додаткової дії радіочастотного електромагнітного поля, яка побудована в цій роботі, є виразно і навмисне еkleктичною. З одного боку вона класична, бо ґрунтується на класичних рівняннях Лармора та Блоха для руху магнітних моментів, використовує такі поняття як прецесія та нутація магнітних моментів. З іншого боку модель враховує деякі суто квантові властивості спінових магнітних моментів як-от дискретність та обмеженість їх проекцій на напрям зовнішнього магнітного поля, квантування модуля ядерного спінового моменту тощо. Така еkleктичність моделі використана як методичний прийом викладання складного фізичного явища – ядерного магнітного резонансу (ЯМР).

Ключові слова: спінові магнітні моменти, прецесія, нутація, ядерний магнітний резонанс, методичний прийом викладання.

1. Вступ, постановка задачі

Математична модель взаємодії ядерних магнітних моментів, які знаходяться в стаціонарному магнітному полі, за умови додаткової взаємодії із радіочастотною електромагніт-

ною хвилею, включно з випадком ядерного магнітного резонансу (ЯМР), фактично є математичною моделлю фізико-математичних основ сучасної магніторезонансної інтроскопії (МРІ), включно з її медичним відгалуженням – магніторезона-

сною томографією (МРТ). Викладати ці питання у середній та вищій школі доволі складно, з огляду на їх суто квантовий характер, що значно звужує наочність процесу.

Автори представленої роботи мали за мету побудову такої математичної моделі ЯМР та супутніх ефектів, яка зберігала б максимум наочності, притаманній класичній теоретичній фізиці, враховуючи в необхідній мірі також і квантовий характер явища, за додаткової умови збереження також і певного рівня математичної доказовості результатів. При цьому вважається прийнятною «мішана», класично-квантова, по суті навіть еkleктична, будова математичної моделі явища.

Модель побудована у системі комп'ютерної математики MAPLE (version 12), втім відповідні програмні коди не включені прямо в текст публікації за методикою, яка традиційно притаманна джерелам, котрі використовували вищезгадану [1, 2] або схожі системи комп'ютерної математики [3], оскільки не вони перебувають у фокусі уваги цієї роботи.

2. Ядерні спінові моменти – квантовий опис

Відомо, що фізичні тіла складаються з атомів, які мають ядра та електронні оболонки. Ядра атомів, у свою чергу, складаються з нуклонів (протонів та нейтронів). Протон (p), як і нейтрон (n), мають власні механічні моменти імпульсів, – так звані спіни. Разом з механічними моментами імпульсу, обидва нуклони мають також магнітні моменти (\mathbf{m}_j), пропорційні спіновим механічним моментам (\mathbf{s}_j):

$$\mathbf{m}_j = \gamma_j \mathbf{s}_j, \quad (2.1)$$

причому коефіцієнт пропорційності (γ_j) отримав назву гіромагнітного фактору.

Ядерні спінові магнітні моменти вимірюються в ядерних магнетонах Бора – природних одиницях магнітного моменту ядра:

$$\mu_N = \frac{|e|\hbar}{2M_p} \approx 5.05 \cdot 10^{-27} \text{ Am}^2, \quad (2.2)$$

де $M_p \approx 1.67 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$ – маса спокою протону.

Можливі значення проекції вектору ядерного магнітного моменту \mathbf{m}_j на довільно обрану в просторі вісь (звичайно це вісь Oz, уздовж якої передбачається спрямувати зовнішнє магнітне поле з індукцією \mathbf{B}_0) приймають лише обмежений дискретний ряд значень, іншими словами, такі проекції квантуються:

$$\mu_{jz} = g_j \mu_N m_j \quad (-j \leq m_j \leq j), \quad (2.3)$$

де m_j – так зване квантове спінове магнітне число: ціле, або напівціле; j – так зване ядерне спінове число; g_j – безрозмірний коефіцієнт, який називають ядерним фактором Ланде (табл. 1).

Квантується також і модуль вектора спінового ядерного моменту:

$$\mu_j = g_j \mu_N \sqrt{j(j+1)}, \quad (2.4)$$

Згідно з виразом (2.3) кількість можливих проекцій ядерного магнітного моменту на напрям зовнішнього магнітного поля дорівнює $2j + 1$.

Наприклад, для ядра водню, яке складається з одного протону, $j = 1/2$. Отже, його магнітне квантове число може мати лише два можливих значення: $m_j = \pm 1/2$. Відповідно ядерний магнітний момент протону може мати лише дві можливі проекції на напрям зовнішнього магнітного поля: момент зорієнтований або по полю, або проти поля.

Таблиця 1.

Квантові характеристики деяких ядер [4]

Ядра	¹ H	² H	⁷ Li	⁹ Be	¹⁴ N	¹⁷ O	¹⁹ F	²⁷ Al
j	1/2	1	3/2	3/2	1	5/2	1/2	5/2
g_j	5.5854	0.8574	2.1709	-0.7849	0.4035	-0.7575	5.2572	1.4566
γ_j (МГц/T)	42.57	6.535	1.655	5.987	3.077	5.772	40.07	11.10

На відміну від магнітного моменту електрону, фактор Ланде g_j для ядерних магнітних моментів не піддається теоретичним оцінкам і визначається лише експериментально (див. табл. 1). Ядерні гіромагнітні фактори γ_j також досі визначаються виключно експериментальним шляхом.

3. Прецесія ядерних спінових моментів у зовнішньому магнітному полі: класична прецесія Лармора

У відсутності зовнішнього магнітного поля ядерні магнітні моменти зорієнтовані у випадкових напрямках (рис. 1а) [5]. Якщо ж вмикається зовнішнє магнітне поле індукції \mathbf{B}_0 , то вектори магнітних моментів ядер \mathbf{m} починають специфічний рух навколо силових ліній магнітного поля (напряму вектора \mathbf{B}_0), який називають прецесією (рис. 1б). При цьому частина ядерних магнітних моментів зорієнтована уздовж магнітних силових ліній, а інша частина – проти них (рис. 1б). Тут і надалі опускатимемо індекс «j» у позначеннях вектору спінового ядерного моменту та його компонентів, бо цей індекс лише засвідчує вже відому нам з виразів (2.3, 2.4) залежність відповідних величин від спінового ядерного числа.

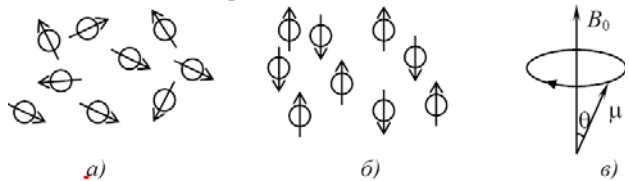


Рис. 1. Поведінка ядерних спінових моментів у зовнішньому магнітному полі

Розглянемо прецесію спінових моментів на основі рівняння Лармора [6], яке легко отримується з основного рівняння орбитального руху. У зовнішньому магнітному полі з індукцією \mathbf{B}_0 на ядерний магнітний момент \mathbf{m} діє момент сили $[\mathbf{m} \times \mathbf{B}_0]$, який з іншого боку дорівнює похідній по часу від спінового механічного моменту імпульсу. Звідси, з урахуванням співвідношення між механічним та магнітним моментами (2.1), й отримуємо відоме рівняння Лармора – рівняння руху спінового ядерного магнітного моменту в магнітному полі:

$$\frac{d\mathbf{m}}{dt} = \gamma [\mathbf{m} \times \mathbf{B}_0]. \quad (3.1)$$

Якщо магнітне поле спрямовано уздовж осі Oz, то вектори поля та моменту мають такі проекції $(0, 0, B_0)$ та (μ_x, μ_y, μ_z) відповідно. Перепишемо векторне рівняння (3.1) у вигляді системи з трьох диференціальних рівнянь

$$\frac{d\mu_x(t)}{dt} = \gamma \mu_y(t) B_0; \quad \frac{d\mu_y(t)}{dt} = -\gamma \mu_x(t) B_0; \quad \frac{d\mu_z(t)}{dt} = 0; \quad (3.2)$$

і отримуємо її загальні розв'язки:

$$\begin{aligned} \mu_x(t) &= C_1 \sin(\gamma B_0 t) + C_2 \cos(\gamma B_0 t); \quad \mu_y(t) = \\ &= C_1 \cos(\gamma B_0 t) - C_2 \sin(\gamma B_0 t); \quad \mu_z(t) = C_3; \end{aligned} \quad (3.3)$$

де C_1, C_2, C_3 – деякі сталі інтегрування.

Визначимо поздовжню (відносно напрямку магнітного поля) та нормальну компоненти вектору ядерного магнітного моменту, а також кут нахилу вектору ядерного спінового моменту до напрямку поля, тобто кут прецесії θ :

$$\begin{aligned} \mu_l(t) &= C_3; \quad \mu_n(t) = \sqrt{C_1^2 + C_2^2}; \\ \theta &= \arccos\left(\frac{C_3}{\sqrt{C_1^2 + C_2^2 + C_3^2}}\right); \end{aligned} \quad (3.4)$$

Як видно з (3.4), поздовжня компонента μ_l – проекція ядерного магнітного моменту на напрям магнітного поля (вісь Oz) – залишається незмінною в часі, тобто константою, інтегралом руху. Крім того, незмінними в часі, інтегралами руху, є також модуль нормальної компоненти μ_n – величини проекції вектору моменту на площину xOy та кут прецесії θ . Отже:

- кут прецесії θ , позначений на рис.1в, зберігається під час руху ядерного магнітного моменту як і проекція моменту \mathbf{m}_r на напрям поля;
- кінець вектору-проекції ядерного магнітного моменту на площину xOy (\mathbf{m}_n – нормальна компонента вектору спінового моменту) обертається в цій площині з частотою $\Omega_L = \gamma B_0$, яка отримала назву ларморової частоти;
- вектор ядерного магнітного моменту ($\mathbf{m} = \mathbf{m}_r + \mathbf{m}_n$) під час руху описує в просторі конус з кутом процесії θ при вершині, як це показано на рис. 1 в.

Такий рух, який характеризується зазначеними вище властивостями, має назву ларморової прецесії. Кут при вершині прецесійного конусу легко визначити з квантових виразів (2.3 та 2.4):

$$\theta = \arccos\left(\frac{m}{\sqrt{j(j+1)}}\right). \quad (3.5)$$

Для протонного ядерного спінового моменту (ядра водню), як було зазначено вище, $m = \pm j = \pm 1/2$. Отже, можна визначити два можливих значення для кутів при вершинах прецесійних конусів тих протонів, які відповідно прецесують "по полю" (індекс1), та "проти поля" (2):

$$\theta_1 = \arccos\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right); \quad \theta_2 = \pi - \arccos\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right); \quad (3.6)$$

Неважко бачити також, що вирази (2.3, 2.4) дозволяють визначити числові значення констант інтегрування. Зокрема, для ядер водню (протонів) маємо:

$$C_1 = C_2 = C_3 = 1/2.$$

Зобразимо залежності кутів прецесії $\theta_{1,2}$ від кута повороту ($\varphi = \Omega_L t$) пропорційного часу. Вони виглядають достатньо тривіально як і належить інтегралам руху:

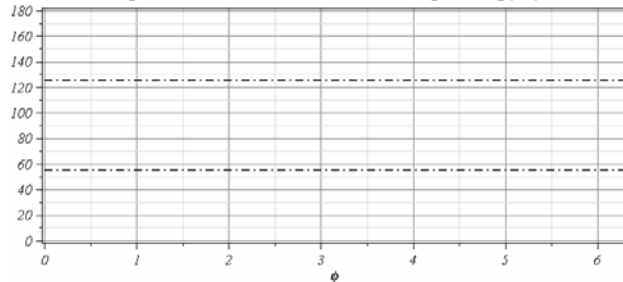


Рис. 2. Залежність кутів прецесії від кута повороту (часу)

Проілюструємо також конуси ларморової прецесії магнітних моментів навколо напрямку магнітного поля (вісь Oz) для двох можливих орієнтацій спіну:

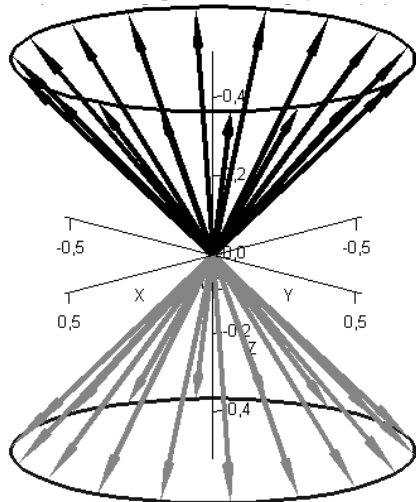


Рис. 3. Конуси ларморової прецесії

Отже, у зовнішньому постійному магнітному полі з індукцією \mathbf{B}_0 ядерні магнітні моменти прецесують з ларморовою частотою, яка пропорційна індукції поля $\Omega_L = \gamma B_0$. Іс-

точно, що ця частота не залежить від початкових умов (констант інтегрування), отже, є однаковою для всіх ядерних спінових моментів з однаковим гіромагнітним фактором γ .

Якщо ввести неінерціальну систему координат, яка б оберталася навколо осі Oz з кутовою швидкістю $\Omega_L = \gamma B_0$, то у такій системі координат інтегралами руху є всі три компоненти вектора ядерного спінового моменту, отже, й сам цей вектор [6], а також кути прецесії (3.6).

4. Нутація та резонанс ядерних спінових моментів у зовнішньому магнітному полі за умови додаткової дії радіочастотного електромагнітного поля

Припустимо тепер, що на ядерний спіновий момент, який прецесує в зовнішньому постійному магнітному полі з частотою Лармора, додатково ззовні діє ще змінне в часі магнітне поле радіочастотної електромагнітної хвилі. Задля спрощення аналізу припустимо також, що така електромагнітна хвиля поляризована циркулярно, отже вектор індукції її змінного магнітного поля обертається з деякою частотою (ω) в площині xOy нормальній до осі Oz, маючи при цьому амплітуду $B \ll B_0$ [6]. Циркулярно поляризовану хвилю завжди можна розкласти на дві взаємно нормальні гармонічні компоненти із зсувом по фазі, які дорівнюють $\pi/2$, та деякою початковою фазою (α), значення якої ми оберемо дещо пізніше:

$$B_x(t) = B \sin(\omega t + \alpha), \quad B_y(t) = B \cos(\omega t + \alpha); \quad B_z(t) = 0; \quad (4.1)$$

Знов запишемо векторне рівняння Лармора у вигляді системи з трьох диференціальних рівнянь, нехтуючи у першому та другому рівняннях малими змінними доданками пропорційними B порівняно з доданками пропорційними індукції головного магнітного поля B_0 , після чого отримаємо таку систему рівнянь:

$$\left. \begin{aligned} \frac{d\mu_x(t)}{dt} &= \gamma \mu_y(t) B_0; & \frac{d\mu_y(t)}{dt} &= -\gamma \mu_x(t) B_0; \\ \frac{d\mu_z(t)}{dt} &= \gamma B (\mu_x(t) \cos(\omega t + \alpha) - \mu_y(t) \sin(\omega t + \alpha)). \end{aligned} \right\} \quad (4.2)$$

Система (4.2) відрізняється від системи (3.2) лише відносно малим, бо пропорційним B , змінним осцилюючим доданком у правій частині третього рівняння. Розв'яжемо систему диференціальних рівнянь (4.2):

$$\left. \begin{aligned} \mu_x(t) &= C_1 \sin(\gamma B_0 t) + C_2 \cos(\gamma B_0 t); & \mu_y(t) &= C_1 \cos(\gamma B_0 t) - C_2 \sin(\gamma B_0 t); \\ \mu_z(t) &= C_3 - \frac{\gamma B}{\gamma B_0 - \omega} (C_1 \cos(\gamma B_0 t - \omega t - \alpha) - C_2 \sin(\gamma B_0 t - \omega t - \alpha)). \end{aligned} \right\} \quad (4.3)$$

Запишемо рішення рівняння Лармора для нормальної та поздовжньої компонент ядерного магнітного моменту:

$$\left. \begin{aligned} \mu_n(t) &= \sqrt{C_1^2 + C_2^2}; \\ \mu_t(t) &= C_3 - \frac{\Omega_n}{\Omega_L - \omega} (C_1 \cos(\Omega_L t - \omega t - \alpha) - C_2 \sin(\Omega_L t - \omega t - \alpha)). \end{aligned} \right\} \quad (4.4)$$

З останнього виразу (4.4) видно, що нормальна компонента вектору спінового ядерного моменту (μ_n) залишається за своїм модулем незмінною в часі (інтегралом руху), і так само, як і у відсутності радіочастотного поля, обертається з ларморовою частотою ($\Omega_L = \gamma B_0$) у нормальній до силових ліній головного магнітного поля площині xOy.

Та втім поздовжня компонента вектору ядерного спінового моменту (μ_t) більше не є константою (C_3), маючи осцилюючі в часі доданки до цієї константи, пропорційні індукції радіочастотного магнітного поля (B_1), як це видно з рівняння (4.3).

У виразі (4.4) були також зроблені деякі підстановки [6]: $\Omega_L = \gamma B$ – частота Лармора (прецесії), $\Omega_n = \gamma B$ – так звана частота нутації, причому, як вже зазначалося вище: $\Omega_n \ll \Omega_L$.

Спростимо вираз (4.4), користуючись відомою з тригонометрії [7] формулою:

$$a \sin(\phi) + b \cos(\phi) = \sqrt{a^2 + b^2} \sin(\phi + \arctg(\frac{b}{a})). \quad (4.5)$$

Звідки маємо для поздовжньої компоненти ядерного спінового моменту:

$$\mu_z(t) = C_3 + \left(\frac{\Omega_n \sqrt{C_1^2 + C_2^2}}{\omega - \Omega_L} \right) \sin((\omega - \Omega_L)t - \alpha + \arctg(\frac{C_2}{C_1})). \quad (4.6)$$

Зараз зручно обрати початкову фазу α радіочастотної хвилі з такої умови калібрування:

$$-\alpha + \arctg(\frac{C_2}{C_1}) = 0, \quad (4.7)$$

що додатково спрощує вираз (4.6) до такого вигляду:

$$\mu_z(t) = C_3 + \left(\frac{\Omega_n \sqrt{C_1^2 + C_2^2}}{\omega - \Omega_L} \right) \sin((\omega - \Omega_L)t). \quad (4.8)$$

З останнього виразу ясно видно, що поздовжня компонента спінового ядерного магнітного моменту отримала гармонічний доданок до свого стаціонарного незбуреного значення (C_3) з амплітудою пропорційною відношенню частоти нутації Ω_n до дисбалансу частот $(\omega - \Omega_L)$ електромагнітної хвилі та ларморової прецесії. Цей доданок виникає за рахунок збурення руху ядерних спінових моментів електромагнітним полем.

Позначимо відносний дисбаланс частот як $\eta = \frac{\omega - \Omega_L}{\Omega_n}$, а пропорційний часу кут нутації як $\Phi = \Omega_n t$.

Тоді вираз (4.8) переписеться у такому вигляді:

$$\mu_z(t) = C_3 + \left(\frac{\sqrt{C_1^2 + C_2^2}}{\eta} \right) \sin(\eta\Phi). \quad (4.9)$$

Отже, для кута прецесії можна отримати такий вираз, який пов'язує цей кут з дисбалансом частот (η) та часом (через кут нутації $\Phi = \Omega_n t$):

$$\theta(\eta, t) =$$

$$= \arccos \left(\frac{C_3 + \frac{\sqrt{C_1^2 + C_2^2} \sin(\eta\Omega_n t)}{\eta}}{\sqrt{C_1^2 + C_2^2 + \left(C_3 + \frac{\sqrt{C_1^2 + C_2^2} \sin(\eta\Omega_n t)}{\eta} \right)^2}} \right). \quad (4.10)$$

Спростимо вираз (4.10) підстановкою числових значень констант і визначимо кути прецесії для двох можливих орієнтацій спіну:

$$\left. \begin{aligned} &\theta_1(\eta, t) = \\ &= \arccos \left(\frac{\sqrt{2} \sin(\eta\Omega_n t) + \eta}{\sqrt{2(\sin(\eta\Omega_n t))^2 + 2\sqrt{2} \sin(\eta\Omega_n t) + 3\eta^2}} \right), \\ &\theta_2(\eta, t) = \\ &= \pi - \arccos \left(\frac{\sqrt{2} \sin(\eta\Omega_n t) + \eta}{\sqrt{2(\sin(\eta\Omega_n t))^2 + 2\sqrt{2} \sin(\eta\Omega_n t) + 3\eta^2}} \right) \end{aligned} \right\} \quad (4.11)$$

Неважко помітити, що зміна знаку розбалансу частот (перехід η через нульове значення, тобто резонанс частот) змінює значення обох кутів прецесії таким способом, що верхній конус прецесії змінюється на нижній, і навпаки:

$$\left. \begin{aligned} &\theta_1(-\eta) = \theta_2(\eta), \\ &\theta_2(-\eta) = \theta_1(\eta). \end{aligned} \right\} \quad (4.12)$$

що легко перевіряється безпосередніми обчисленнями.

5. Великі дисбаланси частот, нерезонансна взаємодія (нутації)

Зобразимо графічно вирази (4.11) для кута прецесії в різні моменти часу, відліченого в одиницях періоду нутації $T_n = 2\pi / \Omega_n$ значно більшого ніж період прецесії $T_L = 2\pi / \Omega_L$, як функції відносно великого розбалансу частот: $\eta \gg 1$ (рис. 4).

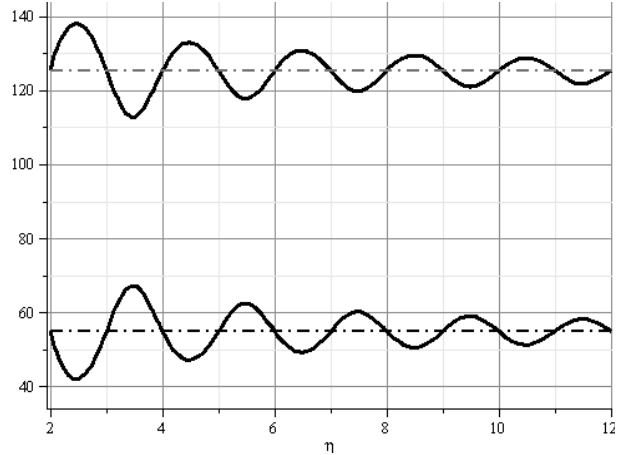


Рис. 4а. Залежність кута прецесії від розбалансу частот у момент $t = T_n/2$

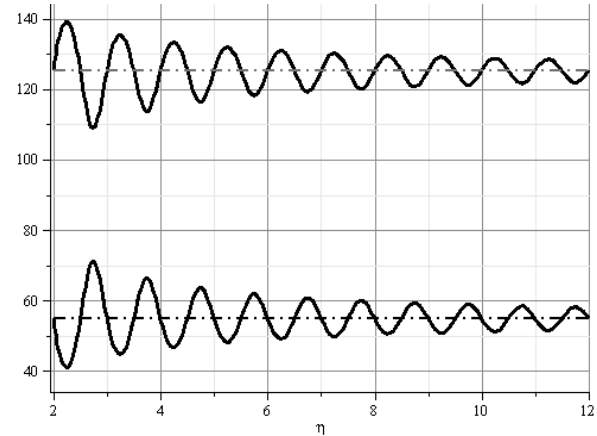


Рис. 4б. Залежність кута прецесії від розбалансу частот у момент $t = T_n$

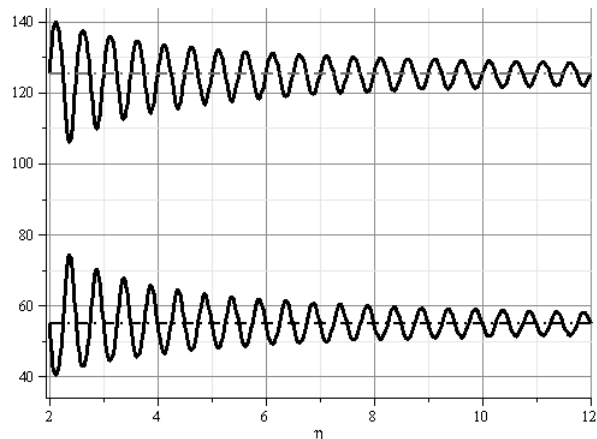


Рис. 4в. Залежність кута прецесії від розбалансу частот у момент $t = 2T_n$

Як видно з графіків, за умови великих відносних розбалансів частот виникають так звані нутації – повільні (порівняно з прецесією) коливання величини кута прецесії навколо незбурених стаціонарних значень, залежні від часу та величини відносного розбалансу. Амплітуда нутацій зростає зі зменшенням дисбалансу частот.

Сутність нутацій як відносно малих відхилень кутів прецесії від стаціонарних незбурених значень добре видно на полярних графіках, де представлені залежності величин

нутацій від часу (кута нутації) за умови різних дисбалансів частот (рис. 5).

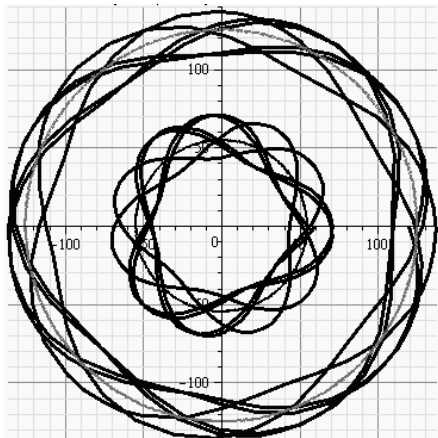


Рис. 5а. Нутації кутів прецесії за відносного дисбалансу $\eta = 2.76$

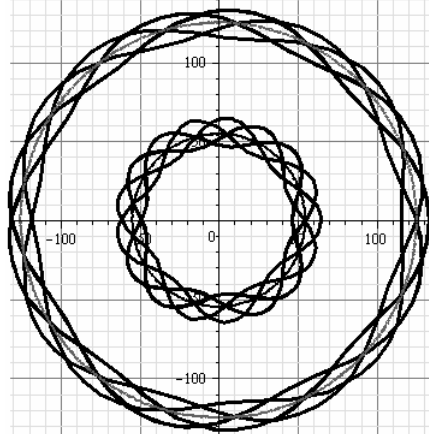


Рис. 5б. Нутації кутів прецесії за відносного дисбалансу $\eta = 4.25$

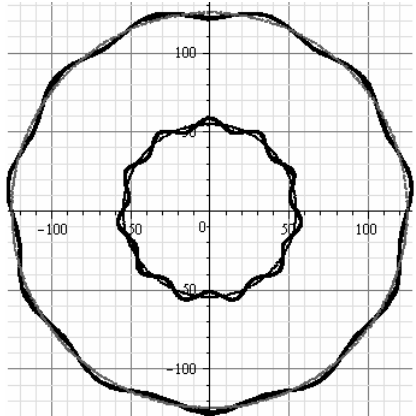


Рис. 5в. Нутації кутів прецесії за відносного дисбалансу $\eta = 11.0$

Як видно з наведених вище графіків, за умови відносно великих дисбалансів частот ($\eta > 1$) взаємодія ядерних спінових магнітних моментів з радіочастотним полем зводиться до відносно повільних (порівняно з ларморовою прецесією) нутацій кутів прецесії навколо незбурених стаціонарних значень з амплітудою, яка монотонно зменшується із збільшенням дисбалансу частот. Сукупності траєкторій кінців векторів спінового магнітного моменту, які перебувають у двох різних можливих орієнтаціях щодо магнітного поля, не перетинаються між собою навіть за умови $t \rightarrow \infty$, якщо дисбаланс частот достатньо великий.

6. Малі дисбаланси частот, магнітний резонанс

За умови малих дисбалансів частот, тобто в умовах близьких до резонансу частот, графіки залежностей (4.11) виглядають дещо інакше (рис. 6).

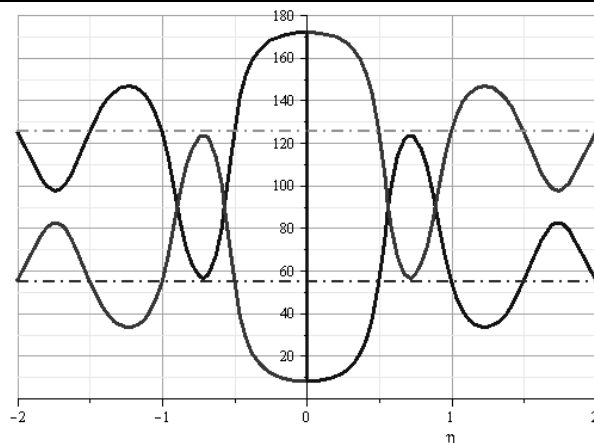


Рис. 6а. Залежність кута прецесії від розбалансу частот у момент $t = T_n$

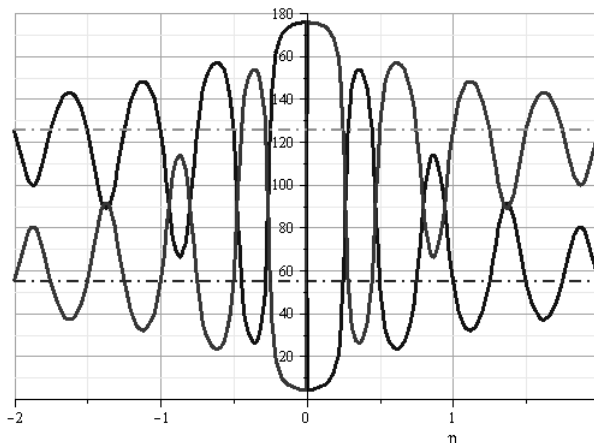


Рис. 6б. Залежність кута прецесії від розбалансу частот у момент $t = 2T_n$

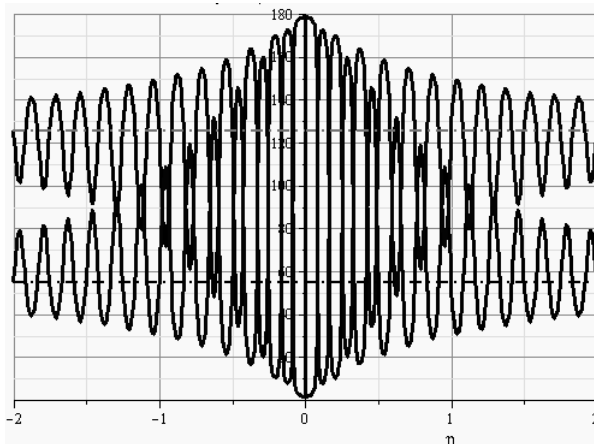


Рис. 6в. Залежність кута прецесії від розбалансу частот у момент $t = 6T_n$

Як видно з графіків, траєкторії кінців векторів ядерних спінових моментів, котрі перебувають у двох різних можливих орієнтаціях щодо зовнішнього стаціонарного магнітного поля, перетинаються та «заплутуються». Нутації перетворюються на повноцінну, хоча й повільну, додаткову прецесію векторів спінових моментів навколо напрямку вектора індукції радіочастотного магнітного поля $|\mathbf{B}| \ll |\mathbf{B}_0|$, розташованого в площині xOy нормальній до силових ліній головного магнітного поля паралельних осі Oz (отже $\mathbf{B} \perp \mathbf{B}_0$).

Основна, швидка з частотою Лармора навколо напрямку вектора \mathbf{B}_0 , та додаткова, повільна з частотою нутації навколо напрямку вектора \mathbf{B} , прецесії за умов резонансу частот призводять до послідовних переходів векторів ядерних спінових моментів з однієї можливої орієнтації стосовно зовнішнього стаціонарного магнітного поля до іншої, і

навпаки. Зрозуміло, що такі переходи супроводжуються або поглинанням енергії електромагнітної хвилі, або навпаки, виділенням енергії у вигляді електромагнітної хвилі.

Ілюстрація двох одночасних різношвидкісних прецесій навколо взаємно перпендикулярних напрямів представлена на рис. 7, де зображені конуси ларморової прецесії (точками) та конус нутаційної прецесії (суцільною лінією).

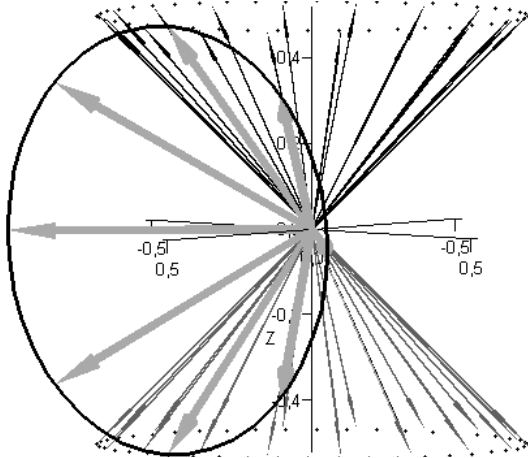


Рис. 7. Конуси прецесій: ларморової та нутаційної

7. Квантовий опис ядерного магнітного резонансу

З квантової точки зору явище ядерного магнітного резонансу досить повно описане у [8], де розглядається задача про квантову систему, яка здатна перебувати тільки у двох можливих квантових станах, з векторами стану $|\Psi_1\rangle, |\Psi_2\rangle$, і яка знаходиться під дією періодичного в часі збурення.

Нестационарне рівняння Шредінгера в умовах дії періодичного збурення з боку електромагнітного поля можна записати у такому виді:

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} = \left(\hat{H}_0 + \hbar\gamma B \cos(\omega t) \right) |\Psi\rangle, \quad (7.1)$$

де \hat{H}_0 – незбурений стаціонарний гамільтоніан, з властивостями:

$$\hat{H}_0 |\Psi_1\rangle = \hbar\omega_1 |\Psi_1\rangle; \quad \hat{H}_0 |\Psi_2\rangle = \hbar\omega_2 |\Psi_2\rangle, \quad (7.2)$$

$\varepsilon_1 = \hbar\omega_1, \varepsilon_2 = \hbar\omega_2$ – енергії двох можливих станів (рівні енергії) системи.

Розв’язок рівняння (7.1) шукають у вигляді:

$$|\Psi(t)\rangle = c_1(t) \exp(-i\omega_1 t) |\Psi_1\rangle + c_2(t) \exp(-i\omega_2 t) |\Psi_2\rangle. \quad (7.3)$$

Враховуючи, що $\omega_2 - \omega_1 = \Omega_L, \gamma B = \Omega_n$, і позначаючи абсолютний дисбаланс частот як $\Omega = \omega - \Omega_L$ задачу (7.1) можна звести до такої системи диференціальних рівнянь:

$$\frac{dc_1(t)}{dt} = \frac{i\Omega_n}{2} \exp(i\Omega t) c_2(t); \quad \frac{dc_2(t)}{dt} = \frac{i\Omega_n}{2} \exp(-i\Omega t) c_1(t) \quad (7.4)$$

з такими початковими умовами:

$$c_1(0) = 1; \quad c_2(0) = 0. \quad (7.5)$$

Розв’язок задачі (7.4,7.5) для коефіцієнту $c_2(t)$, квадрат модуля якого визначає ймовірність резонансних переходів між енергетичними станами системи, можна записати у такому вигляді:

$$c_2(t) = \frac{-i\Omega_n \exp(-i\Omega t) \sin\left(\frac{\sqrt{\Omega_n^2 + \Omega^2}}{2} t\right)}{\sqrt{\Omega_n^2 + \Omega^2}}. \quad (7.6)$$

Ймовірність резонансного збудження системи таким чином визначається таким фактором:

$$p(t, \Omega) = |c_2(t)|^2 = \left(\frac{\Omega_n^2}{\Omega_n^2 + \Omega^2} \right) \left(\sin\left(\frac{t\sqrt{\Omega_n^2 + \Omega^2}}{2} \right) \right)^2. \quad (7.7)$$

Варто зауважити, що в [8] у відповідному виразі для ймовірності збудження на с. 163 (задача №180) припущено прикрої друкарської помилки – частота нутації в чисельни-

ку фігурує в першому ступеню замість другого, що не забезпечує навіть правильної розмірності величини (7.7).

Перепишемо вираз для ймовірності (7.7) в уже звичних термінах відносного дисбалансу частот $\eta = \frac{\omega - \Omega_L}{\Omega_n}$ та кута нутації $\Phi = \Omega_n t$, який змінюється на 2π через кожен період нутації $T_n = \frac{2\pi}{\Omega_n}$:

$$p(\eta, \Phi) = \frac{\left(\sin\left(\frac{\Phi\sqrt{1+\eta^2}}{2} \right) \right)^2}{1+\eta^2}. \quad (7.8)$$

Залежність ймовірності резонансного збудження (7.8) від дисбалансу частот (η) та від часу (через кут нутації Φ) зображена на рис. 8. Залежності ймовірностей резонансних переходів з перегортанням ядерного спінового моменту (верхні криві) у порівнянні з ймовірностями збереження спінового стану (нижні криві) для різних моментів часу представлені на рис. 9.

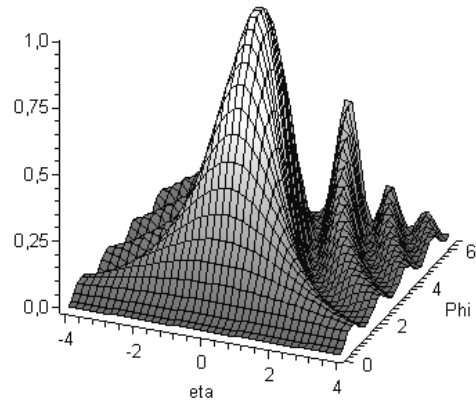


Рис. 8. Ймовірність резонансних переходів як функція дисбалансу частот та часу

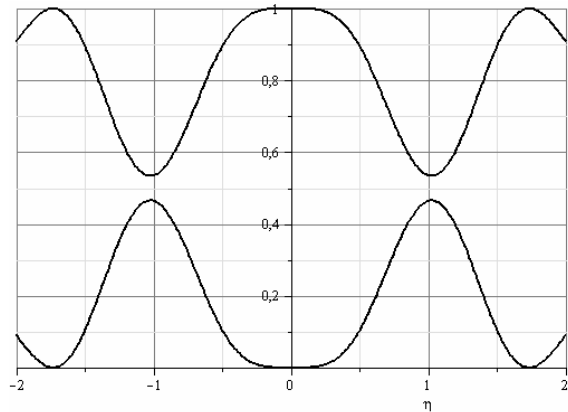


Рис. 9а. Ймовірності резонансного переходу та збереження спінового стану як функції розбалансу частот у момент $t = T_n$

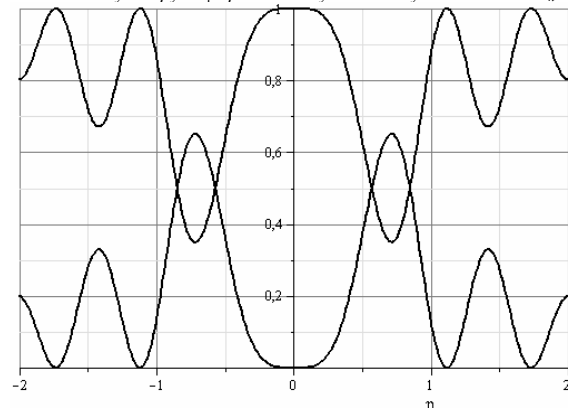


Рис. 9б. Ймовірності резонансного переходу та збереження спінового стану як функції розбалансу частот у момент $t = 2T_n$

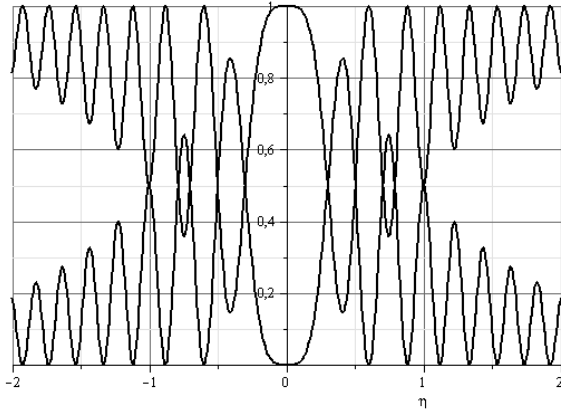


Рис. 9в. Ймовірності резонансного переходу та збереження спінового стану як функції розбалансу частот у момент $t = 6Tn$

Варто звернути увагу на якісну подібність графіків рис. 6 та 9, з якої виникає безпосередній зв'язок між ймовірностями резонансних переходів та кутами прецесії.

8. Перехід до системи спінових моментів, вектор ядерної намагніченості

Розглянемо велику систему, яка складається з величезної кількості ядерних спінових магнітних моментів – ансамбль спінів [6]. Якщо такий ансамбль складається з протонів, як це найчастіше й буває у практиці магніторезонансної томографії (МРТ), то кожен з протонів може мати лише $2j + 2 = 2$ можливих конусів прецесії. Отже, поздовжня компонента спінового магнітного моменту \mathbf{m}_i може бути зорієнтована або по зовнішньому магнітному полю, або проти поля. Введемо у розгляд сумарний магнітний момент протонів як векторну суму:

$$\mathbf{M} = \sum_k^{N \rightarrow \infty} \mathbf{m}_{i,k}, \quad (8.1)$$

де індексом $k = 1, 2, \dots, N$ нумеруються протони (спінові ядерні моменти).

На перший погляд може здатися, що вектор намагніченості \mathbf{M} є нульовим з причин симетрії: нібито рівні кількості спінових магнітних моментів зорієнтовані як по зовнішньому полю, так і проти поля. Втім так було б лише за умови рівних енергій цих двох можливих станів ($\varepsilon_1 = \hbar\omega_1 = \varepsilon_2 = \hbar\omega_2$).

Взаємодія ядерних магнітних моментів із зовнішнім магнітним полем, так званий квантовий ефект Зеемана, призводить до того, що ці енергії відрізняються на величину $\varepsilon_2 - \varepsilon_1 = \hbar\Omega_L$, причому меншою є енергія спінових моментів зорієнтованих по полю. Отже, за вимогами розподілу Больцмана, таких спінових ядерних моментів (n_1) трохи більше ніж спінових моментів зорієнтованих проти поля ($n_2 = N - n_1$):

$$\frac{n_1}{n_2} = \exp\left(\frac{\hbar\gamma B_0}{k_0 T}\right) > 1, \quad (8.2)$$

де (\hbar, k_0, T) – відповідно константи Дірака-Планка, Больцмана та абсолютна температура системи. За умов $T = 298K$, $B_0 = 1T$ відношення (8.2) дорівнює приблизно 1.000003, тобто з кожного мільйону протонів лише на три протони більше прецесують в напрямі магнітного поля, аніж кількість протонів, які прецесують проти поля [6].

Як наслідок, вектор намагніченості \mathbf{M} хоча й малий, та все ж таки не нульовий, і спрямований по напрямку головного магнітного поля (так званий ядерний парамагнетизм):

$$\mathbf{M} = \chi \mathbf{B}_0, \quad (8.3)$$

де χ – коефіцієнт ядерної парамагнітної сприйнятливості. Власне вся магніторезонансна томографія заснована на відмінності цього коефіцієнту від нуля, отже на несиметричності розподілу ядерних спінових моментів по двом можливим орієнтаціям (рис. 10).

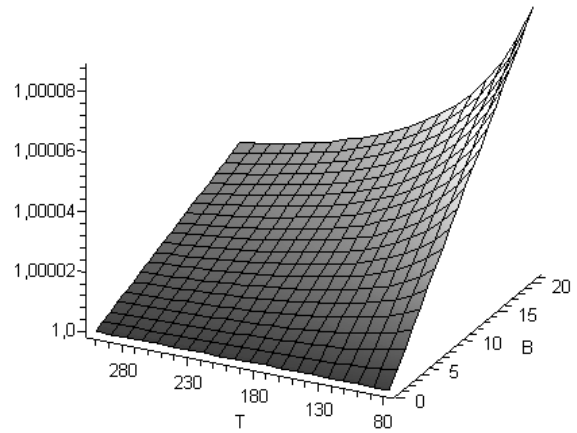


Рис. 10. Залежність співвідношення ядерних спінів $\left(\frac{n_1}{n_2} > 1\right)$ з різними орієнтаціями від температури (T, K) та магнітного поля (B, T)

9. Релаксація збудженої системи ядерних магнітних спінових моментів (рівняння Блоха)

Припустимо, що в момент часу $t = 0$ різко змінюється напрям головного магнітного поля: $\mathbf{B}_0 \rightarrow \mathbf{B}_z$, причому новий напрям поля співпадає з віссю Oz , а кут поміж старим та новим напрямками поля дорівнює φ . Отже, в момент часу $t = 0$ вектор намагніченості дорівнює $\mathbf{M}_0 = \chi \mathbf{B}_0$ у той час як при $t \rightarrow \infty$ матимемо $\mathbf{M}_\infty = \chi \mathbf{B}_z$. Залежність вектору намагніченості від часу задається феноменологічними рівняннями Блоха [6]:

$$\frac{d\mathbf{M}(t)}{dt} = \gamma[\mathbf{M}(t) \times \mathbf{B}_z] - \frac{(M_z(t) - \chi B_z)\mathbf{e}_z}{T_1} - \frac{(M_x(t)\mathbf{e}_x + M_y(t)\mathbf{e}_y)}{T_2^*}, \quad (9.1)$$

де $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$ – одиничні орти уздовж відповідних координатних осей, а T_1, T_2^* – пара констант розмірності часу, які характеризують релаксацію двох компонент ядерного спінового моменту: відповідно поздовжньої (T_1) та поперечної (T_2^*).

У рівнянні Блоха (9.1) перший фактор у правій частині описує Ларморову прецесію вектору ядерної намагніченості навколо напрямку магнітного поля, а решта чинників враховують процеси релаксації збудженої системи, тобто процесу її переходу зі старого в новий стан.

Запишемо векторне рівняння Блоха у вигляді такої системи диференціальних рівнянь:

$$\left. \begin{aligned} \frac{dM_x(t)}{dt} &= \gamma B_z M_y(t) - \frac{M_x(t)}{T_2^*}; \\ \frac{dM_y(t)}{dt} &= -\gamma B_z M_x(t) - \frac{M_y(t)}{T_2^*}; \\ \frac{dM_z(t)}{dt} &= -\frac{M_z(t) - \chi B_z}{T_1} \end{aligned} \right\} \quad (9.2)$$

із такими початковими умовами:

$$\left. \begin{aligned} M_x(0) &= M_0 \sin(\varphi) \cos(\alpha); \\ M_y(0) &= M_0 \sin(\varphi) \sin(\alpha); \\ M_z(0) &= M_0 \cos(\varphi); \end{aligned} \right\} \quad (9.3)$$

де α – кут, який проекція вектора намагніченості \mathbf{M}_0 на площину xOy складала з віссю координат Ox .

Знайдемо рішення системи рівнянь Блоха (9.2) сумісні з початковими умовами (9.3), так само як і всюди вище в таких випадках, за допомогою системи комп'ютерної математики Maple 12, і запишемо його у вигляді вектора-стовпчика:

$$\mathbf{M}(t) = \begin{pmatrix} \exp\left(-\frac{t}{T_2^*}\right)M_0 \sin(\varphi)(\cos(\alpha)\cos(\gamma B_z t) + \sin(\alpha)\sin(\gamma B_z t)) \\ \exp\left(-\frac{t}{T_2^*}\right)M_0 \sin(\varphi)(-\cos(\alpha)\sin(\gamma B_z t) + \sin(\alpha)\cos(\gamma B_z t)) \\ \chi B_z + \exp\left(-\frac{t}{T_1}\right)(M_0 \cos(\varphi) - \chi B_z) \end{pmatrix} \quad (9.4)$$

Звідси вже неважко отримати нормальну (поперечну) та поздовжню компоненти вектору ядерної намагніченості:

$$M_n(t) = M_0 \sin(\varphi) \exp\left(-\frac{t}{T_2^*}\right); \quad (9.5)$$

$$M_l(t) = \chi B_z + (M_0 \cos(\varphi) - \chi B_z) \exp\left(-\frac{t}{T_1}\right).$$

Отже, нормальна компонента вектору намагніченості обертається навколо напрямку магнітного поля з частотою Лармора ($\Omega_L = \gamma B_z$) одночасно експоненціальне згасаючи з часом. У той же час поздовжня компонента того ж вектору безперервно змінює своє значення від $M_0 \cos(\varphi)$ до χB_z на інтервалі часу $t = (0 \dots \infty)$, як це видно з виразу (9.5). Як результат складання цих рухів кінець вектора намагніченості описує в просторі спіральну лінію, подібну до представленої графіком (рис. 11), параметри якого були спеціально підібрані так:

$$M_0 = 1; \Omega_L = 1; \varphi = \pi / 3; \sin(\alpha) = \cos(\alpha) = 1 / \sqrt{2}; 1 / T_1 = 0.08; 1 / T_2^* = 0.04. \quad (9.6)$$

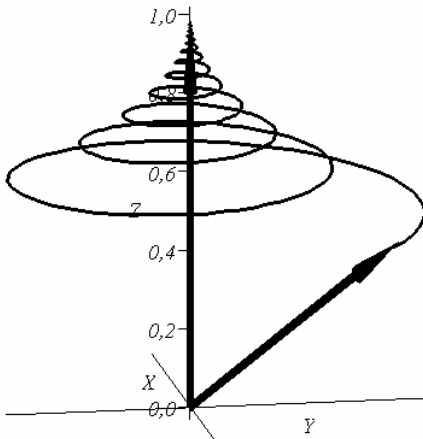


Рис. 11. Траєкторія кінця вектору (годограф) ядерної намагніченості в інтервалі часу $t = (0 \dots 3T_2^*)$

Як видно з рис.11 за час порівняльний з характерним часом поперечної спінової релаксації вектор ядерної намагніченості практично повністю змінює орієнтацію в просторі від початкового напрямку $\mathbf{M}_0 = \chi \mathbf{B}_0$ до кінцевого напрямку $\mathbf{M}_\infty = \chi \mathbf{B}_z$, здійснюючи при цьому певну кількість обертів навколо фінішного напрямку магнітного поля (прецесія спінової намагніченості навколо осі Oz поступово припиняється внаслідок асимптотичного експоненціального згасання поперечної компоненти).

Оцінімо швидкість зменшення прецесійного кута внаслідок релаксації:

$$\theta = \arccos \frac{\chi B_z + (M_0 \cos(\varphi) - \chi B_z) \exp\left(-\frac{t}{T_1}\right)}{\sqrt{\left(M_0 \sin(\varphi) \exp\left(-\frac{t}{T_2^*}\right)\right)^2 + \left(\chi B_z + (M_0 \cos(\varphi) - \chi B_z) \exp\left(-\frac{t}{T_1}\right)\right)^2}}. \quad (9.7)$$

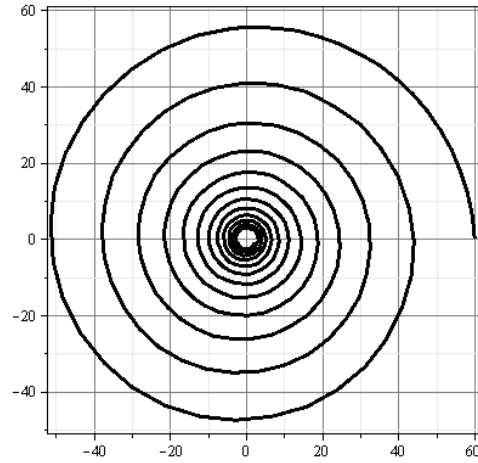


Рис. 12. Зумовлена релаксацією зміна кута прецесії вектору ядерної намагніченості в інтервалі часу $t = (0 \dots 3T_2^*)$ (полярна система координат)

Втім, резонансне поглинання радіочастотного електромагнітного сигналу системою ядерних спінових моментів можливе лише доти, доки існує прецесія вектору ядерної намагніченості. Ансамбль протонів здатний випромінювати так званий сигнал-відлуння лише за умови існування ненульового кута прецесії.

Задля отримання суттєвого сигналу-відлуння треба якось відхилити вектор намагніченості $\mathbf{M}(t)$ від напрямку магнітного поля (осі Oz), тоді зростає величина поперечної компоненти цього вектору $\mathbf{M}_n(t)$. Саме така «технологія» – основа успішних вимірів ядерного магнітного резонансу в речовині.

Список використаних джерел:

1. Дьяконов В.П. Maple 8 в математике, физике и образовании. Полное руководство пользователя. – М.: СОЛОН-Пресс, 2003. – 636 с.
2. Баганов Є.О. Методи розрахунків на ЕОМ. Навчальний посібник для студентів напрямку 090500 «Енергетика». – Херсон: Олді-плюс, 2009. – 288 с.
3. Головацький В.А. Система комп'ютерної алгебри Mathematica 5. Навчальний посібник. – Чернівці: Рута, 2008. – 352 с.
4. Лабораторный практикум по физике / Под ред. Барсукова К.А, Уханова Ю.И. – М.: Высшая школа, 1988. – 148 с.
5. Марусина М.Я., Казначеева А.О. Современные виды томографии. Учебное пособие. – СПб: СПбГУ ИТМО, 2006. – 132 с.
6. Сизиков В.С. Устойчивые методы обработки результатов измерений. Учебное пособие. – СПб.: СпецЛит, 1999. – 240 с.
7. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике (для научных работников и инженеров). – М.: Наука, 1974. – 832 с.
8. Флюгге З. Задачи по квантовой механике. Т.2. / перевод с англ. к.ф.-м.н, доцента Б.А. Лысова, под ред. д.ф.-м.н, проф. А.А. Соколова). – М.: Мир,1974. – 312 с.

The mathematical model of interaction of nuclear spin magnetic moments with the external stationary magnetic field under condition of additional act by the radio frequency electromagnetic field, which is built in present paper, is distinctly and intentionally eclectic. It is classic in one hand being based on classic Lamoure's and Bloch's equations for the motion of magnetic moments, using such notions as precession and nutation of magnetic moments. In other hand this model takes into account some specific quantum properties of spin magnetic moments, such as discrete values and known limitation of their projections on the direction of the external magnetic field, quantum properties of the modules of nuclear spin moments and others like that. Such eclecticism of the model is used as a methodical reception for the learning of the difficult physical phenomenon – nuclear magnetic resonance.

Key words: spin magnetic moments, precession, nutation, nuclear magnetic resonance, methodical reception of learning.

Отримано: 30.06.2010