

**Квантовые методы в медицине:  
ЯМР – ядерный магнитный  
резонанс, ЭПР – электронный  
парамагнитный резонанс**

Лектор: к.т.н., доц. Якимов А.Н.  
Кафедра медицинской и биологической  
физики, медицинской информатики,  
биостатистики  
Луганский государственный медицинский  
университет

# Спектры испускания атомов

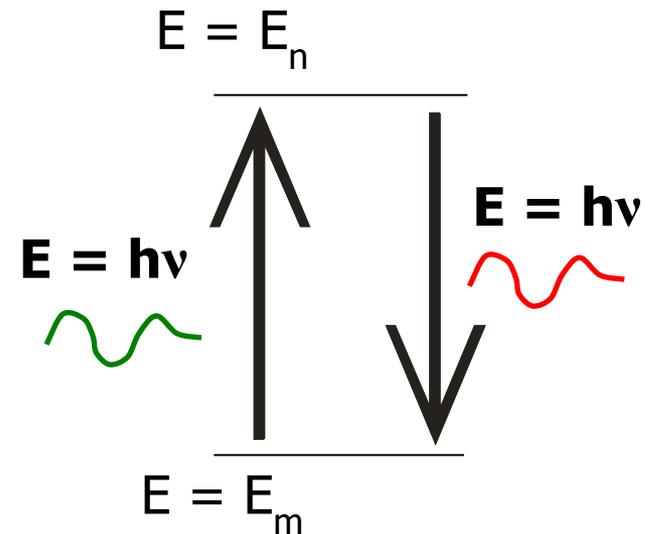
700 нм

400 нм

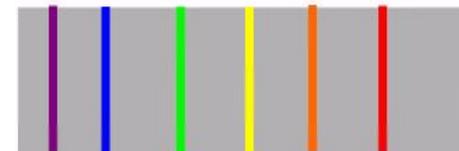


# Догадки Борна

- Атомы большую часть времени находятся в **стационарном состоянии** не поглощая и не испуская излучения.
- Когда атом переходит из одного стационарного состояния в другое, то **освобождается** (или **поглощается**) **квант** электромагнитного поля с энергией в точности равной разности энергий между этими двумя состояниями.
- В связи с этим **спектры** излучения всех атомов представлены **линиями** с дискретными частотами. То есть **излучение атомов** не непрерывное, а **квантованное**.



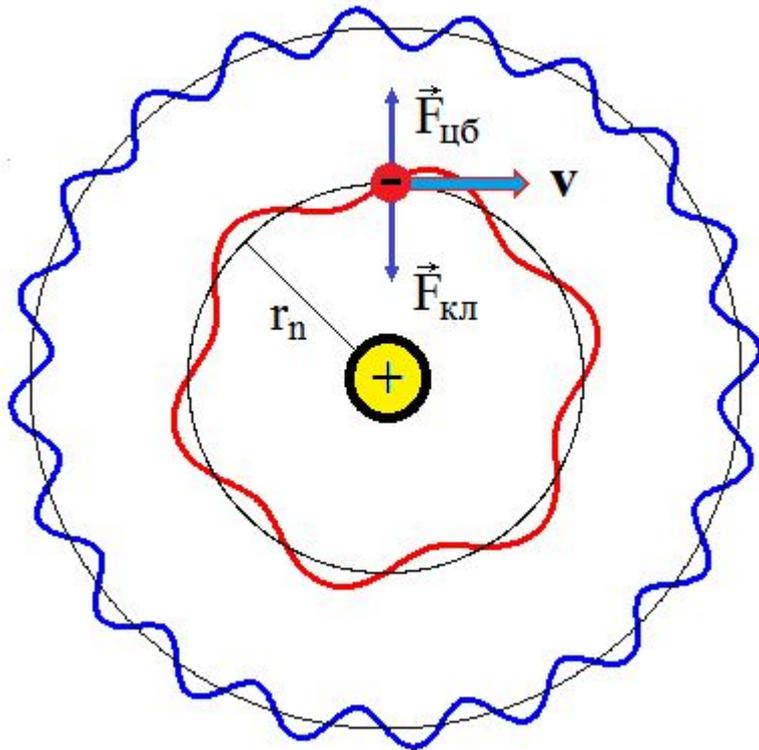
$$h\nu = \Delta E = E_n - E_m$$



# Стационарные состояния атомов

- Находясь на орбите электрон имеет некоторую скорость, а значит обладает волновыми свойствами:

$$\lambda_B = \frac{h}{m_e v}$$



- Условие равновесия электрона на орбите:

$$E_{кл} = -F_{цб}$$

- Условие квантования радиусов орбиты:

$$L = 2\pi r_n = n\lambda_B$$

где  $n$  – номер орбиты (главное квантовое число),  $r_n$  – радиус  $n$ -й орбиты электрона

# Стационарные состояния атомов

- Кулоновская сила:  $F_{кл} = k \frac{q_1 q_2}{r^2} = -\frac{e \cdot Ze}{4\pi \epsilon_0 r^2} = -\frac{e^2 Z}{4\pi \epsilon_0 r^2}$

- Центробежная сила:  $F_{цб} = ma_{цб} = \frac{m_e v^2}{r}$

$$E_{кл} = -F_{цб} \Rightarrow \frac{m_e v^2}{r} = \frac{e^2 Z}{4\pi \epsilon_0 r^2} \Rightarrow \frac{m_e v^2}{2} = \frac{e^2 Z}{8\pi \epsilon_0 r^2}$$

$$E_{полн} = E_{кин} + E_{пот} = \frac{mv^2}{2} + k \frac{q_1 q_2}{r} = \frac{e^2 Z}{8\pi \epsilon_0 r} - \frac{e^2 Z}{4\pi \epsilon_0 r} = -\frac{e^2 Z}{8\pi \epsilon_0 r}$$

$$r_n = \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi e^2 m_e Z} n^2$$

- радиус n-й  
Боровской орбиты

$$E_n = -\frac{me^4 Z^2}{8\epsilon_0^2 h^2 n^2}$$

- энергия электрона  
на n-й орбите

Частота излучаемого  
(поглощаемого)  
излучения для перехода

$m \rightarrow n$

$$\nu = R' c Z^2 \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

$$R' = 1,097 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}$$

- постоянная Ридберга

□ Таким образом, поглощение электромагнитного излучения является **резонансным**: оно происходит, когда частота приложенного поля соответствует разности энергий между двумя квантовыми состояниями атома:

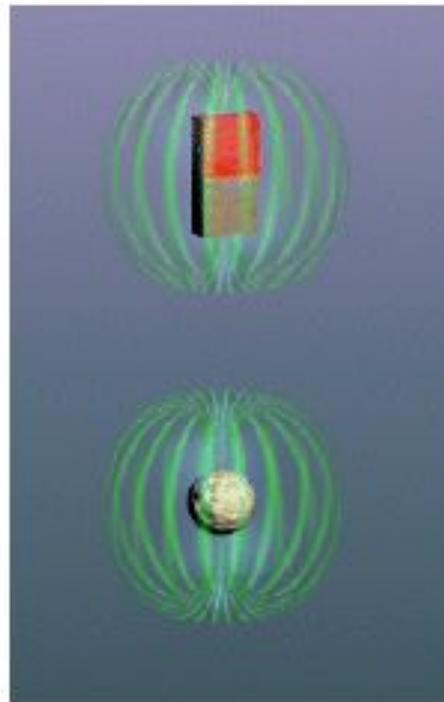
$$\nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{E}{h} = \frac{E_2 - E_1}{h}$$

□ **Магнитный резонанс** требует приложения к атомам вещества двух магнитных полей: постоянного магнитного и переменного электромагнитного (в радио- или микроволновом диапазоне).

□ Данным методом позволяет изучить энергетические уровни, ассоциированные со спиновым вращательным моментом ядер и электронов: ЯМР – ядерный магнитный резонанс и ЭСР/ЭПР – электронный спиновый (парамагнитный) резонанс.

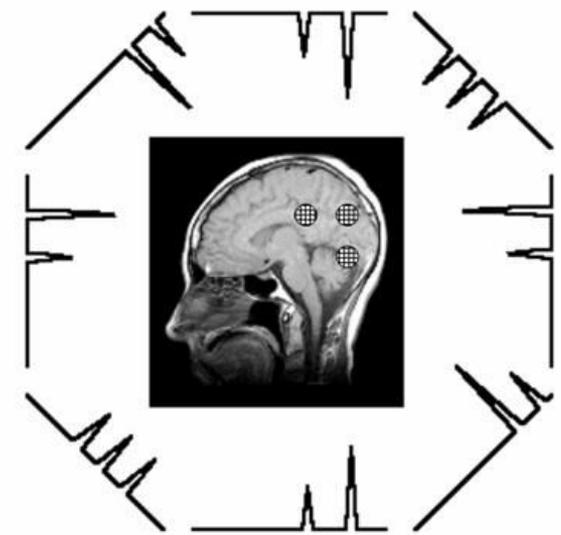
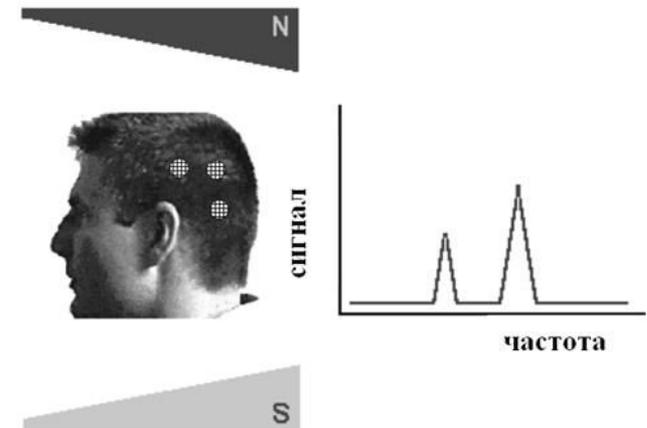
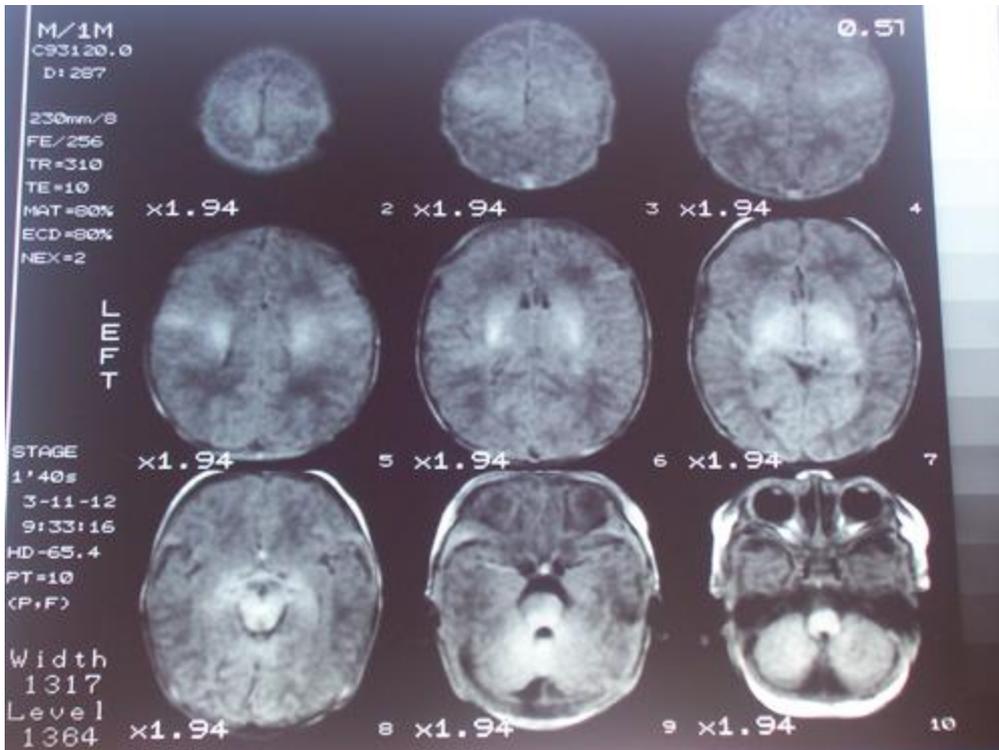
# ЯДЕРНЫЙ МАГНИТНЫЙ РЕЗОНАНС

## ЯМР-спектроскопия



# Сферы применения спектроскопии ЯМР

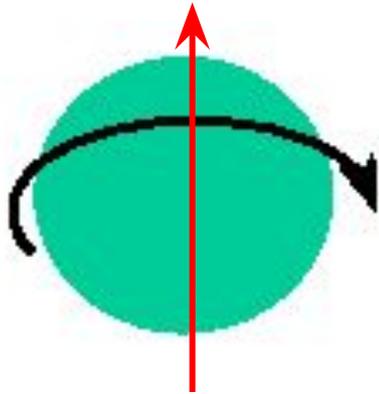
- Изучение **строения** и **свойств** органических и неорганических соединений.
- Изучение динамических свойств молекул (таутомерия, изомерия).
- **Исследование процессов** (кинетика, термодинамика, титрование).
- **Определение структуры** биомакромолекул
  - Изучение белок-лигандных взаимодействий (ЯМР-скрининг биологически активных соединений)
  - Мониторинг состава биологических жидкостей (метабономика)
- **Визуализация объектов** живой и неживой природы (ЯМР-томография)
  - Мониторинг процессов, происходящих в живом организме (in-vivo спектроскопия)
  - Исследование функциональной активности мозга (f-MRI)



*ЯМР – томография головного мозга*

# ЯДЕРНЫЙ СПИН

Некоторые атомы обладают свойством, называемым «**СПИН**».



Это ядро ведет себя как если бы оно вращалось

Каждое имеющее спин атомное ядро может находиться в  $(2I+1)$  спиновых состояниях, где  $I$  – спиновое квантовое число.

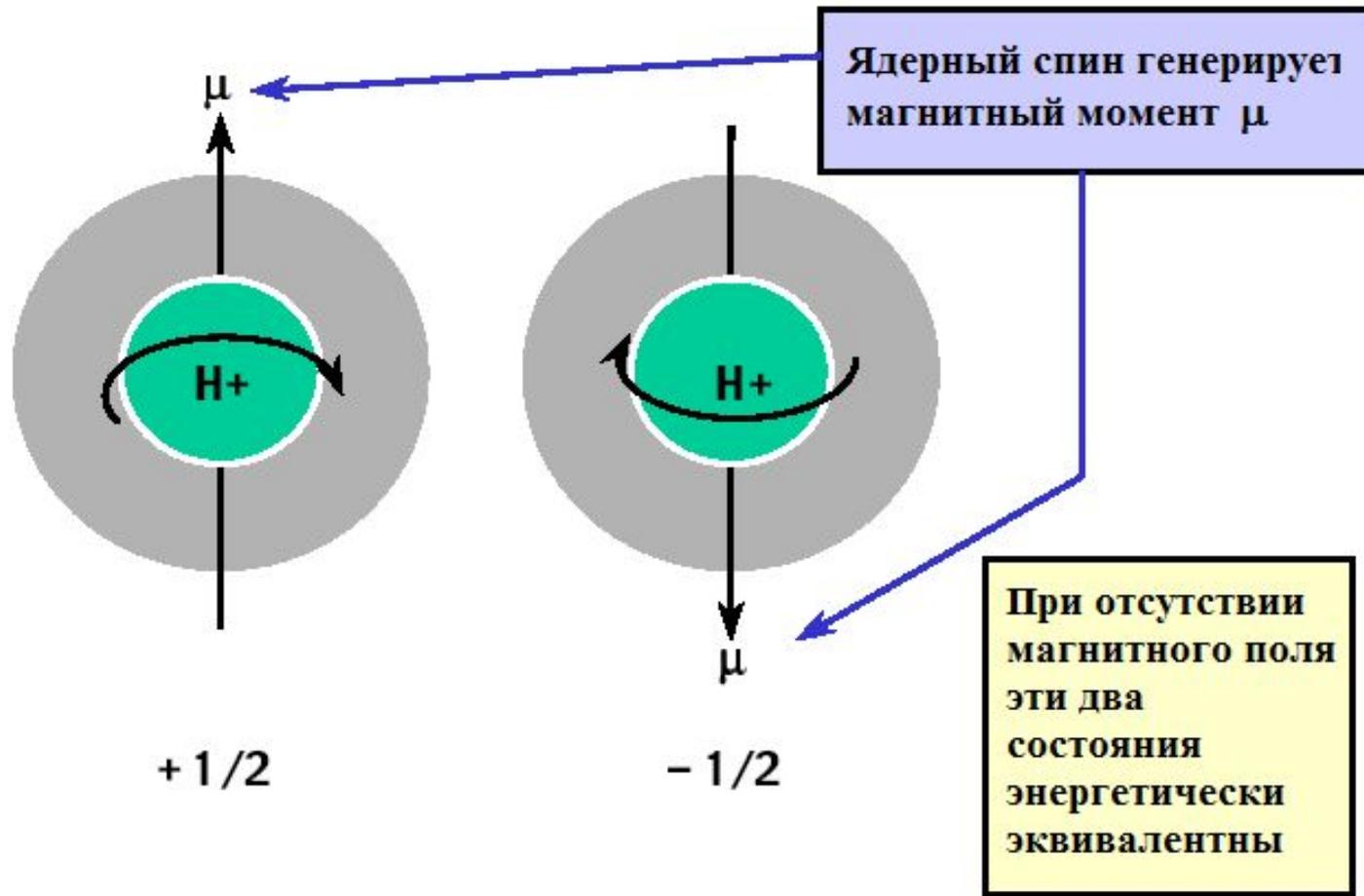
# Спиновые квантовые числа для основных ядер



Элемент	$^1\text{H}$	$^2\text{H}$	$^{12}\text{C}$	$^{13}\text{C}$	$^{14}\text{N}$	$^{16}\text{O}$	$^{17}\text{O}$	$^{19}\text{F}$
Ядерное спиновое число (I)	$1/2$	1	0	$1/2$	1	0	$5/2$	$1/2$
Число ВОЗМОЖНЫХ СОСТОЯНИЙ СПИНА	2	3	0	2	3	0	6	2

Ядерным спином обладают только элементы с нечетным количеством нуклонов, т.е. с нечетным атомным числом.

## ЯДРО ВОДОРОДА ИМЕЕТ ДВА СПИНОВЫХ СОСТОЯНИЯ

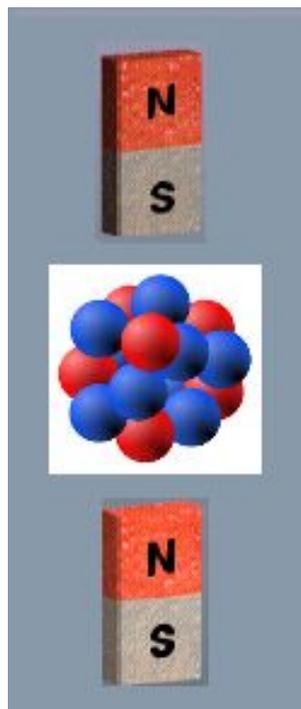


Вращающийся заряд создает кольцевой ток, генерирующий магнитный момент  $\mu$ , параллельный вращательному моменту  $J$ :

$$\vec{\mu} = \gamma \vec{J} \quad (\gamma - \text{гиромангнитное соотношение})$$

# ЯВЛЕНИЕ РЕЗОНАНСНОГО ПОГЛОЩЕНИЯ

Поглощение энергии ядрами,  
обладающими спином, в магнитном поле

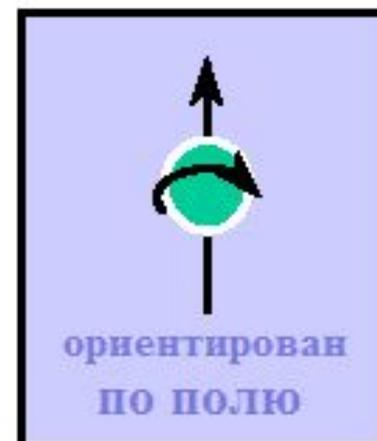
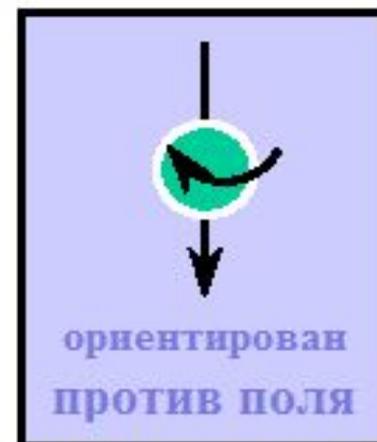


# ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ УРОВНИ ЯДЕРНЫХ СПИНОВ

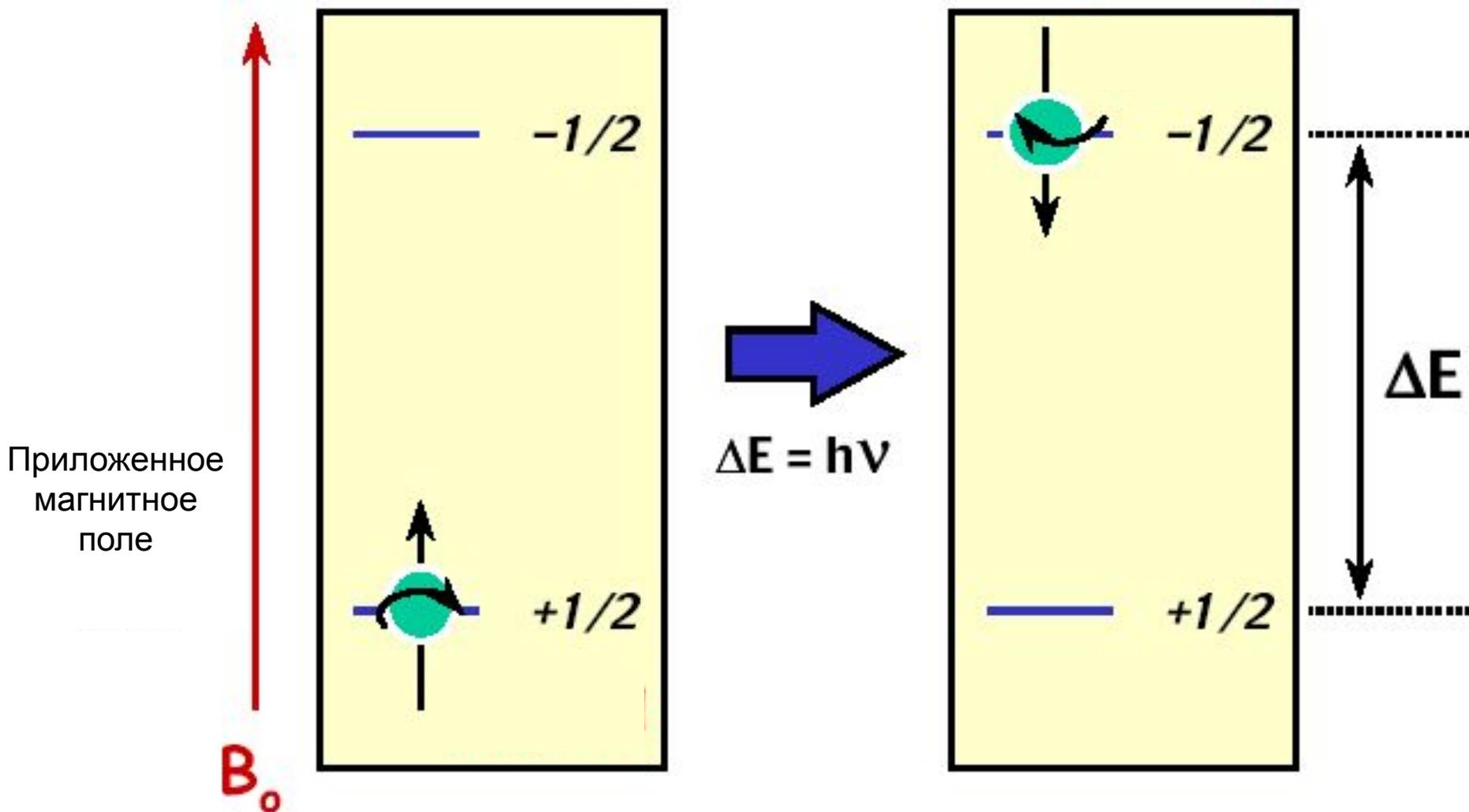
В магнитном поле ( $B_0$ )  
2 спиновых состояния  
обладают разными  
энергиями

Энергия

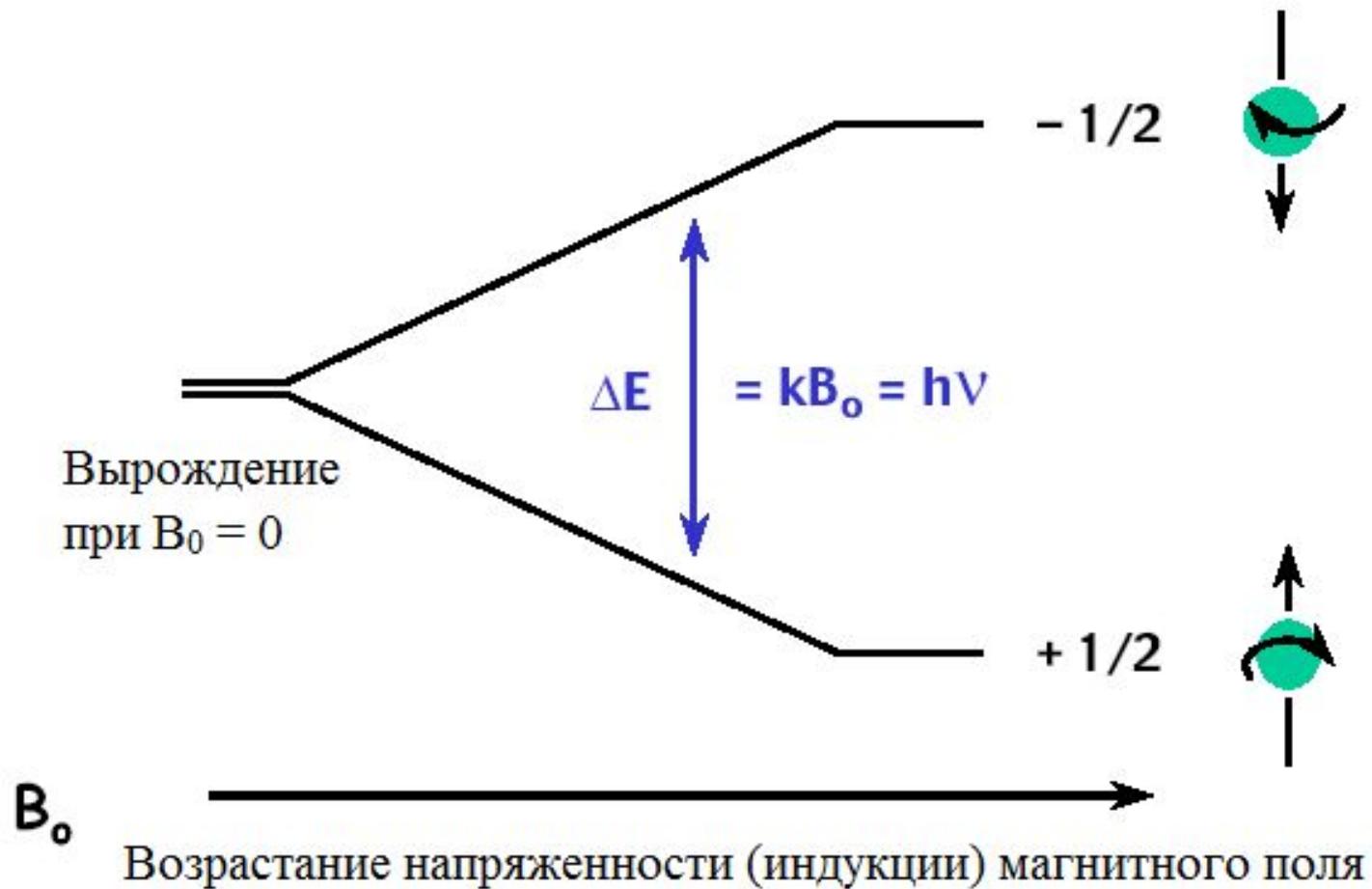
$B_0$



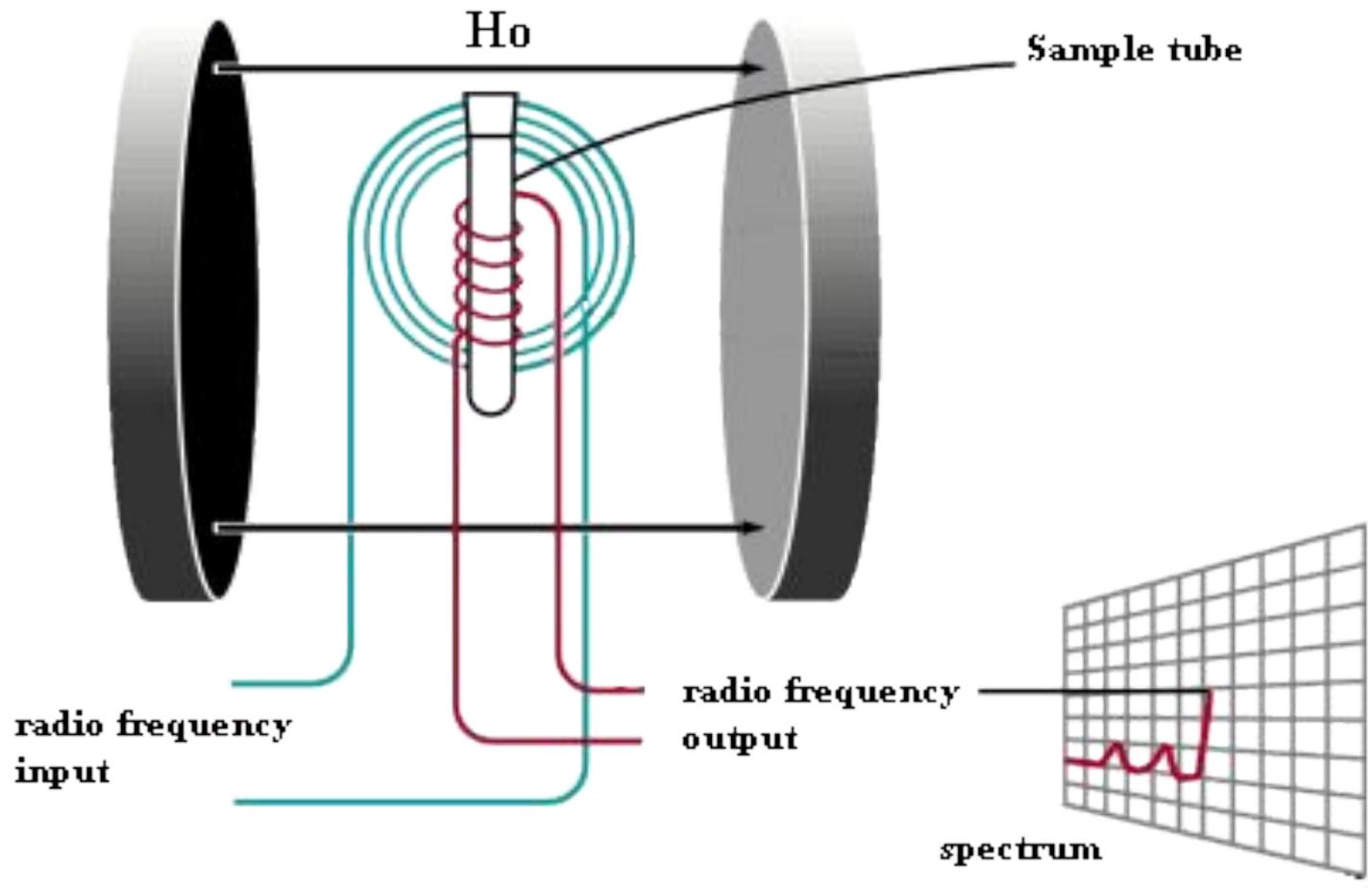
# РАДИОЧАСТОТНОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ ЭНЕРГИИ



# РАЗНОСТЬ ЭНЕРГИЙ ЗАВИСИТ ОТ $B_0$



# Принципиальное устройство ЯМР-спектрометра



# Резонансные частоты для $^1\text{H}$ and $^{13}\text{C}$

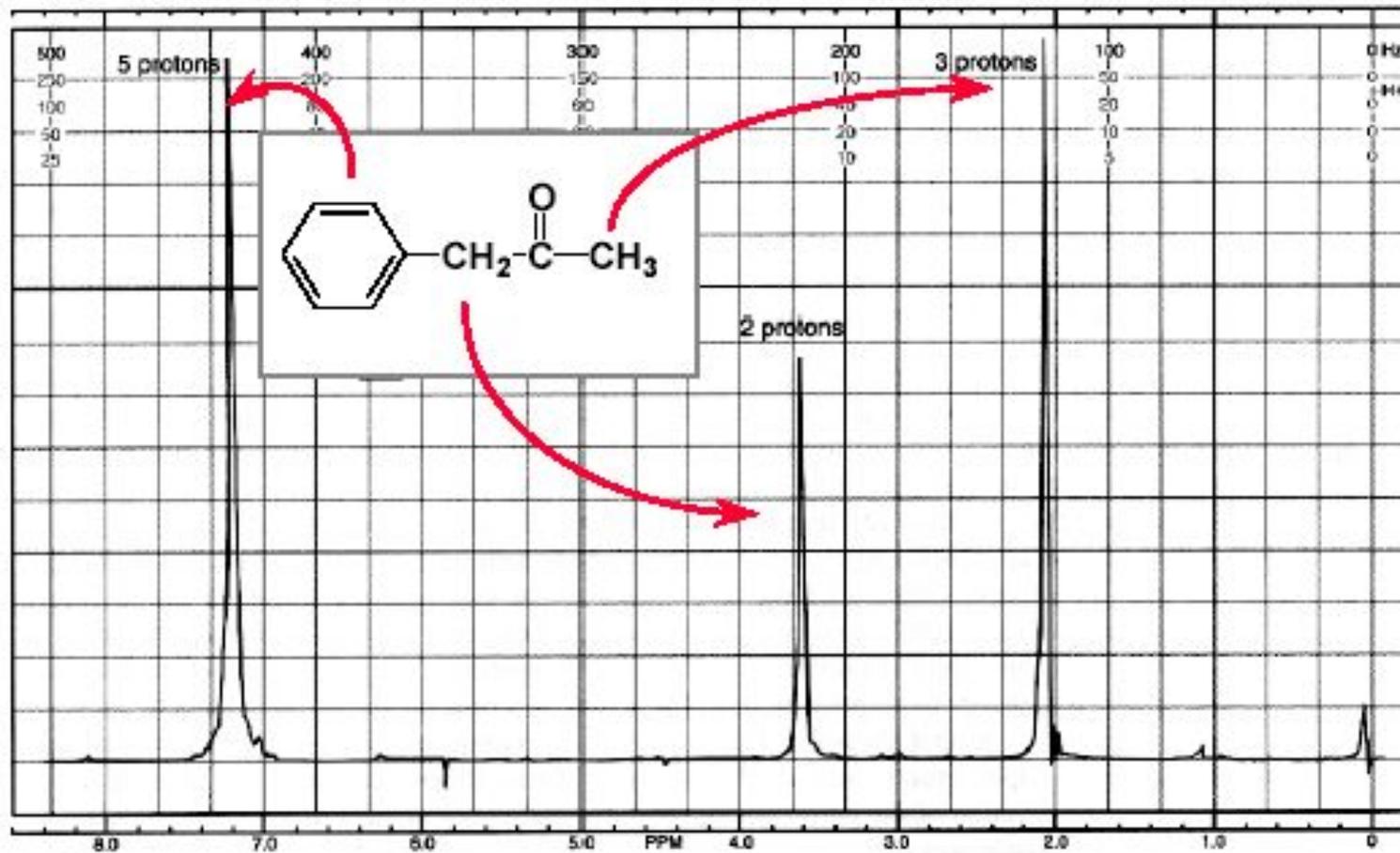
Изотоп                      Содержание                      B0 (Тесла)                      Частота (МГц)

$^1\text{H}$	99.98%	1.00	42.6
		2.35	100.0
		7.05	300.0

$^{13}\text{C}$	1.108%	1.00	10.7
		2.35	25.0
		7.05	75.0

# $^1\text{H}$ ЯМР спектр фенилацетона

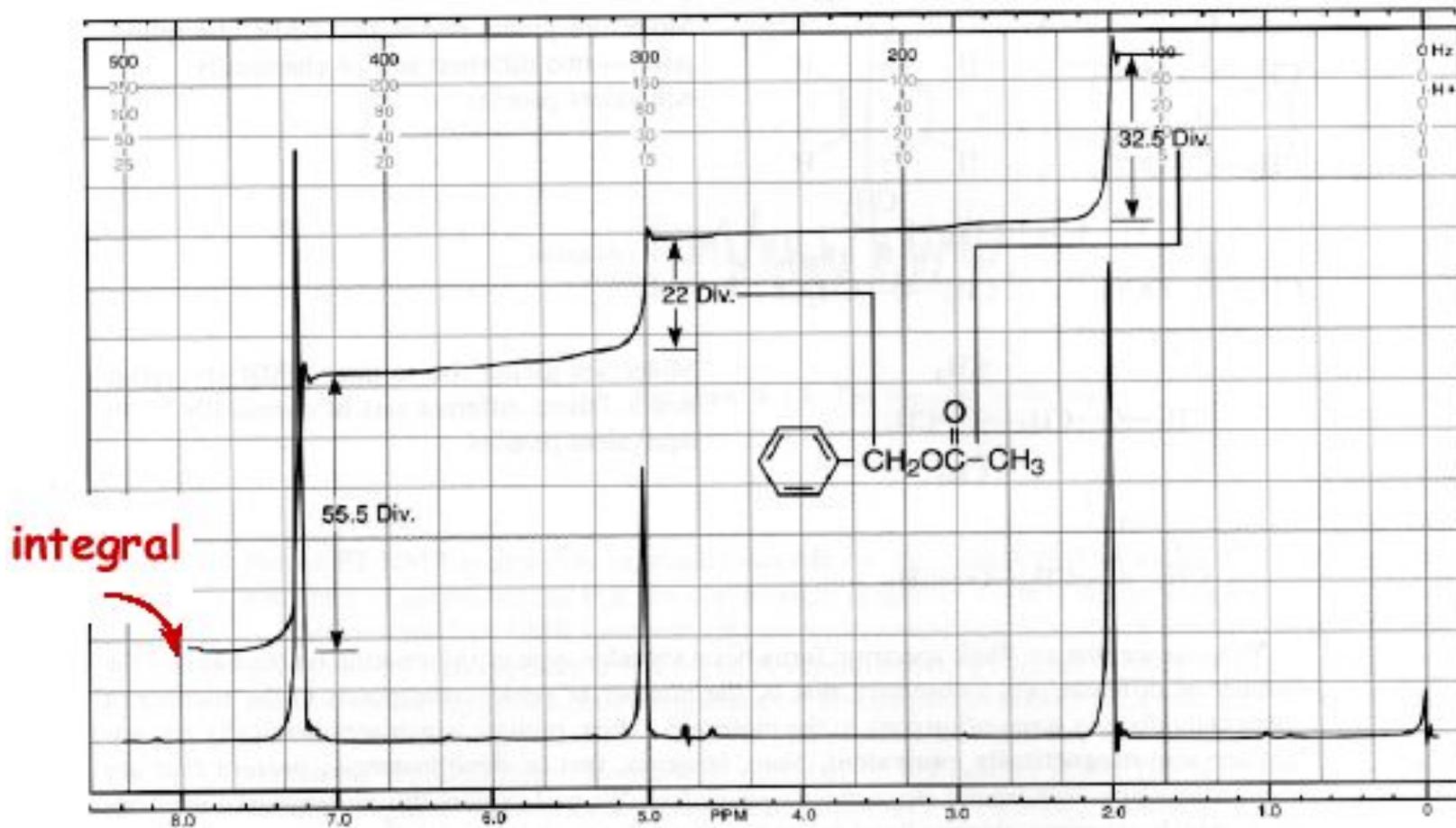
Каждый вид водорода поглощает энергию на разных частотах



Частота

# АНАЛИЗ ВЫСОТЫ ЯМР-ПИКОВ

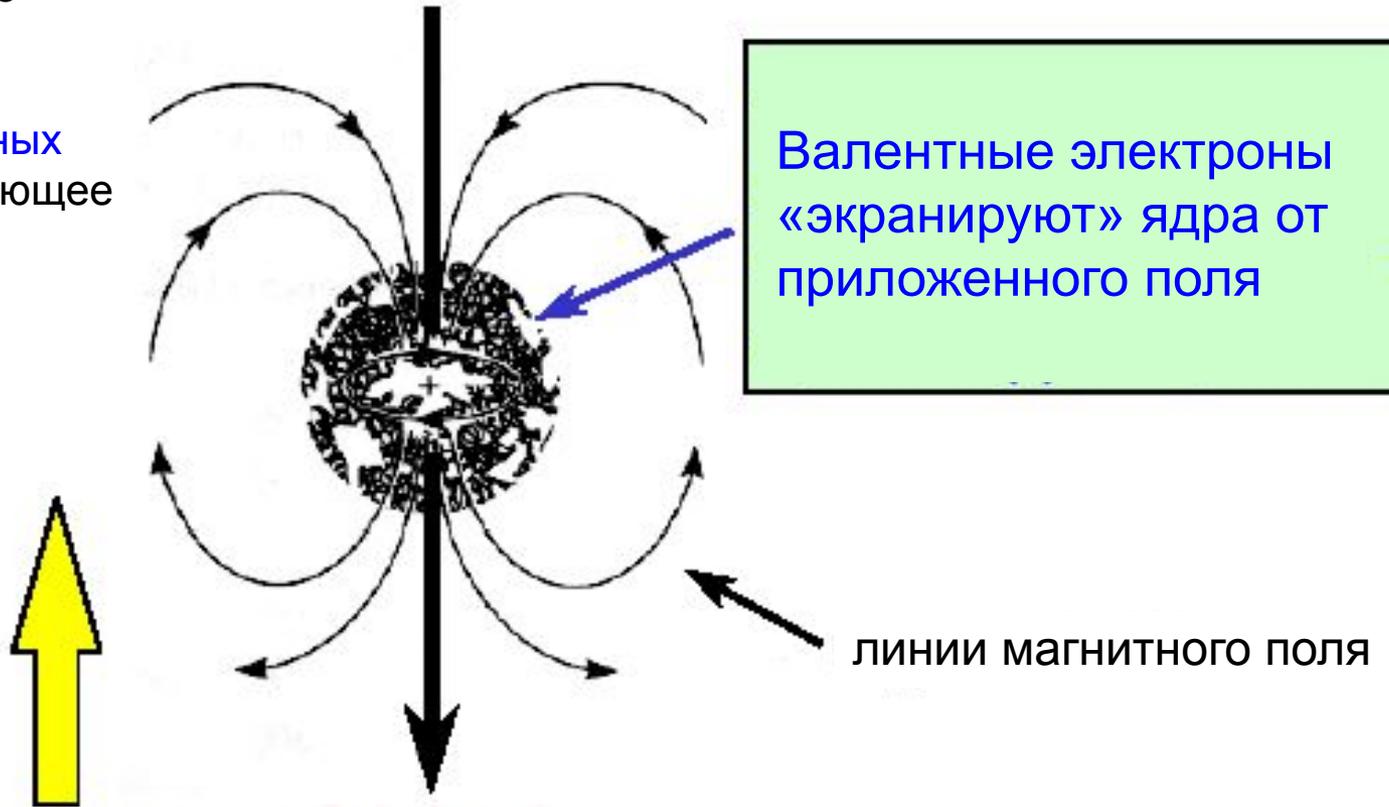
Высота (площадь) пиков пропорциональна числу ядер водорода



$$55 : 22 : 33 = \underline{5 : 2 : 3}$$

# ДИАМАГНИТНАЯ АНИЗОТРОПИЯ

Приложенное поле вызывает индуцированное вращение валентных электронов, создающее дополнительное магнитное поле, противоположное внешнему полю.



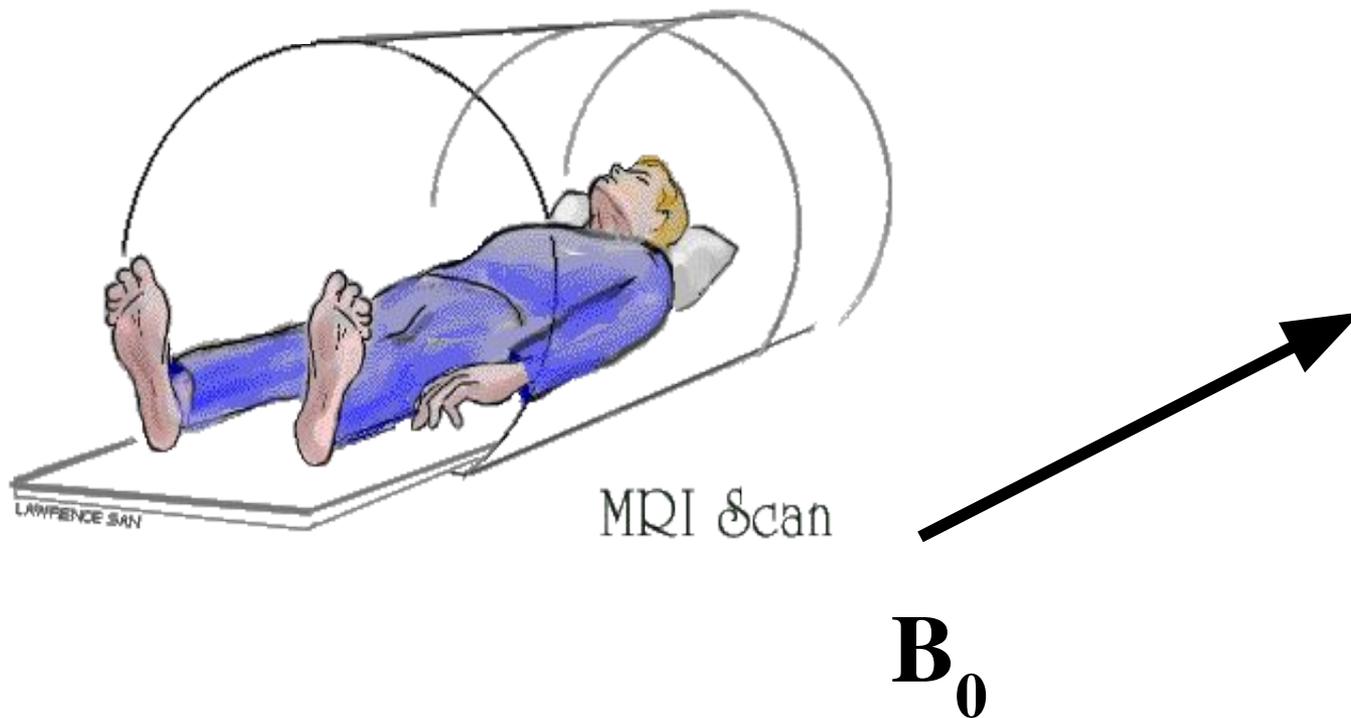
$B_0$  приложенное       $B$  индуцированное  
(противоположно  $B_0$ )

Магнитное поле электронов вычитается из поля, создаваемого ядрами

# ЯМР-томография



# Основное магнитное поле



# ЯМР-томография

В ЯМР-томографии используются 3 магнитных поля.

Первое является статическим  $B_0 = \text{const}$ , которое

1) поляризует образец:

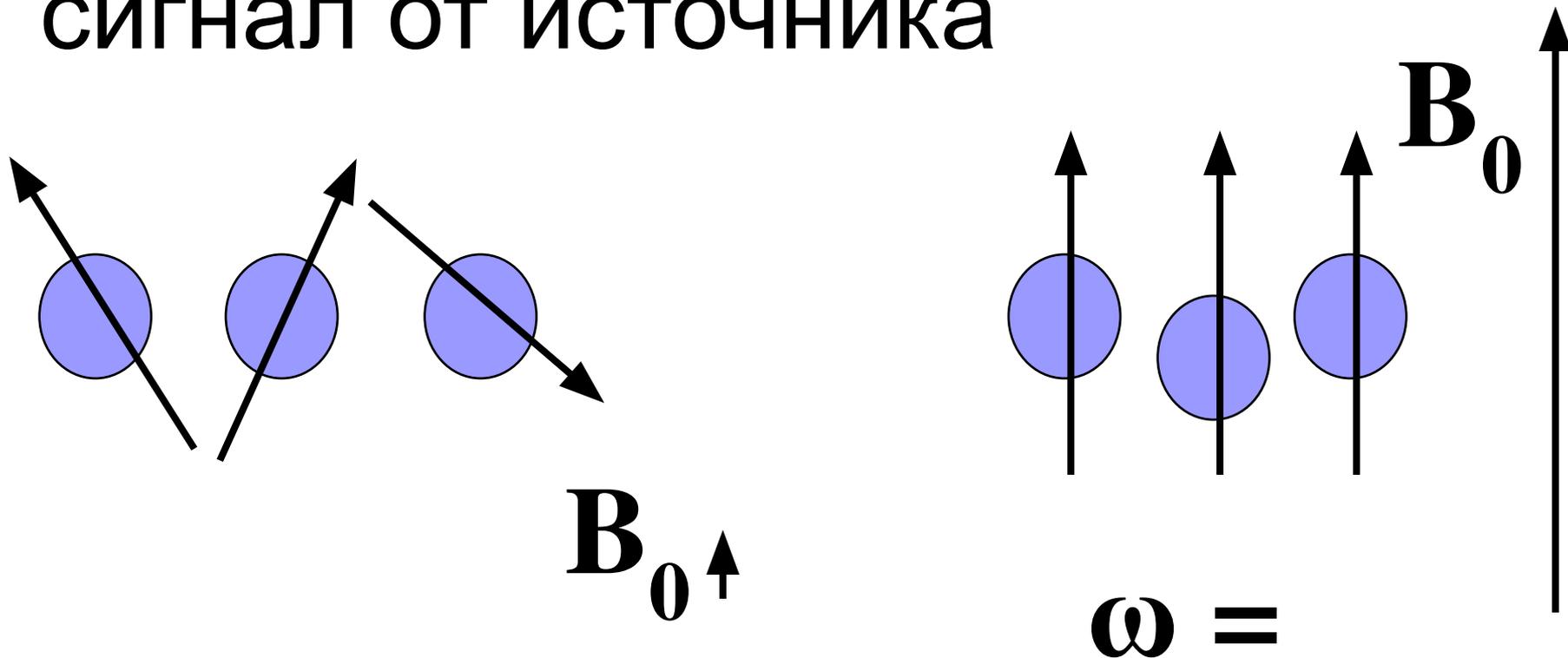
$$M(x, y, z) \sim \rho(x, y, z) \quad \text{плотность } ^1\text{H}$$

2) определяет резонансные частоты:  $\omega = \gamma B$

$\gamma$  является постоянной для каждого вида ядер:

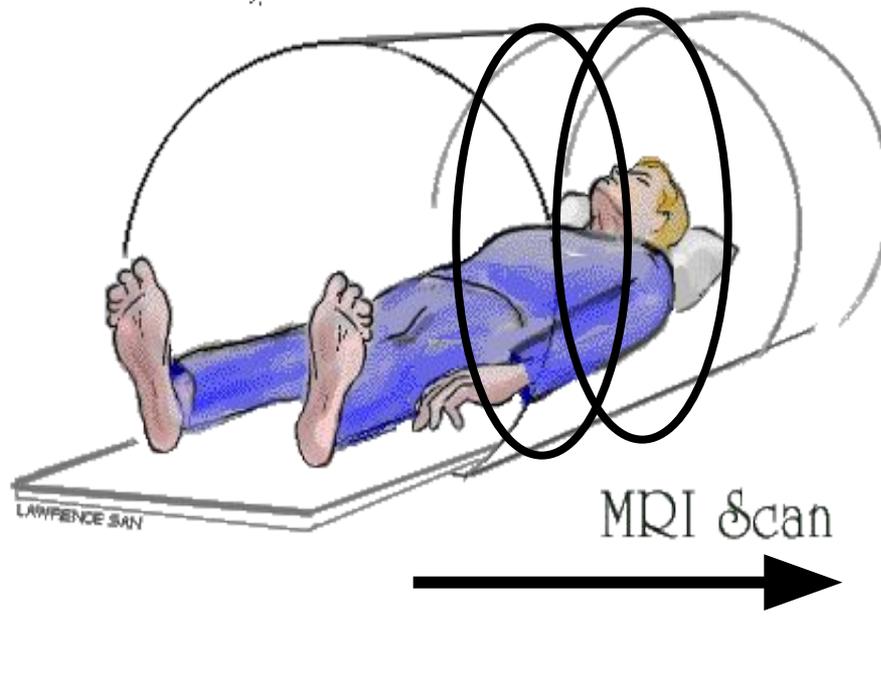
$$\frac{\gamma}{2\pi} = 42.57 \text{ МГц/Тл для } ^1\text{H}$$

# Спин протонов создает сигнал от источника



64 МГц для  $H^+$  при 1.5 Тл  $\gamma B$

# Второе магнитное поле : RF-поле



RF-катушка окружает пациента и создает поле создает слабое поле  $B_1$  с резонансной частотой  $\omega$ , перпендикулярное полю  $B_0$ . Это второе поле «возбуждает» ядра.

Возбуждение (поглощение энергии)

происходит на частоте  $\omega(x,y,z) = \gamma B_0(x,y,z)$  <sub>26</sub>

# *ЯМР-резонанс*

Пространственное положение области сканирования задается с помощью катушек, создающих **градиентное поле** вокруг пациента (3D - магнитное поле).