

Титульная страница будет оформлена в Word

Название диссертации: «АНАЛИЗ ЭВОЛЮЦИИ ЯДЕРНОЙ НАМАГНИЧЕННОСТИ В МНОГОЭХОВЫХ ЯМР И МРТ ИМПУЛЬСНЫХ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЯХ»

# Оглавление

Список используемых сокращений	5
Введение	6
<b>1 Обзор литературы</b>	<b>10</b>
1.1 Основные типы импульсных последовательностей	10
1.2 Феноменологические уравнения Блоха	14
1.3 РЧ импульсы в МР и ЯМР томографии	16
1.4 Методы расчета амплитуды спинового эха	20
1.5 Влияние диффузии	26
1.6 Влияние взаимодействия спинов	29
<b>2 Эволюция намагниченности в длинных периодических РЧ импульсных последовательностях: формализм производящих функций</b>	<b>33</b>
2.1 Формализм производящих функций	33
2.1.1 Понятие производящей функции	33
2.1.2 Общий случай периодического гамильтониана	34
2.2 Расчет ПФ для одного изохромата	35
2.3 ПФ для эхо-амплитуд	38
2.3.1 Применение теории конфигураций для анализа эхо-сигналов	38
2.3.2 ПФ для МРТ СPMG эхо-амплитуд	39
2.3.3 Циклирование фазы РЧ импульсов в МРТ СPMG последовательности	42
2.3.4 МРТ СPMG последовательности с конечным числом импульсов. Послеимпульсное спиновое эхо	43
2.3.5 Учет фазокодирующего градиента в МРТ	45

2.3.6	ПФ для СPMG эхо-амплитуд в ЯМР каротаже . . . . .	47
2.4	МРТ последовательности FE типа . . . . .	49
2.4.1	Нескомпенсированный градиент ( $\int_0^{TR} G(t) \neq 0$ ) . . . . .	49
2.4.2	Скомпенсированный градиент ( $\int_0^{TR} G(t) = 0$ ) . . . . .	50
2.5	Сравнение с экспериментом . . . . .	51
2.6	Основные преимущества формализма ПФ . . . . .	54
<b>3</b>	<b>Вывод точных, асимптотических и аппроксимационных выражений</b>	
	<b>для эхо-амплитуд на примере МРТ СPMG спинового эха</b>	<b>55</b>
3.1	Точные выражения для МРТ СPMG спинового эха . . . . .	56
3.1.1	Общий случай: произвольные $\alpha$ , $T_1$ и $T_2$ . . . . .	56
3.1.2	Частный случай: равные времена спиновой релаксации $T_1 = T_2$ . . . . .	57
3.1.3	Частный случай: $0^\circ$ и $180^\circ$ углы рефокусирования . . . . .	58
3.1.4	Частный случай: $90^\circ$ угол рефокусирования . . . . .	58
3.2	Асимптотическое поведение МРТ СPMG эхо-амплитуд . . . . .	59
3.2.1	Равные времена спиновой релаксации $T_1 = T_2$ , угол рефокусирования $\alpha \neq 0, \pi$ . . . . .	60
3.2.2	$T_1 > T_2$ , угол рефокусирования $\alpha \neq 0, \pi$ . . . . .	61
3.2.3	$T_1 < T_2$ , угол рефокусирования $\alpha \neq 0, \pi$ . . . . .	65
3.3	Аналитические аппроксимации для МРТ СPMG эхо-амплитуд . . . . .	67
3.3.1	Случай 1: $T_2 \leq T_1$ , наличие осцилляций . . . . .	71
3.3.2	Случай 2: $T_2 \leq T_1$ , отсутствие осцилляций . . . . .	73
3.3.3	Случай 3: $T_2 > T_1$ , наличие осцилляций . . . . .	74
3.3.4	Случай 4: $T_2 > T_1$ , отсутствие осцилляций . . . . .	76
3.4	Анализ точности приближенных уравнений . . . . .	77
<b>4</b>	<b>Анализ эволюции неравновесной намагниченности. Разделение интегральной и мультиплетной ядерной поляризации при помощи анализа фазы намагниченности спинового эха</b>	<b>83</b>
<b>5</b>	<b>Приложения</b>	<b>88</b>
5.1	Приложение А. Вывод уравнения (3.13) . . . . .	88
5.2	Приложение Б. Вывод уравнения (3.14) . . . . .	90

5.3	Приложение В. Вывод уравнения (3.17) . . . . .	91
5.4	Приложение Г. Вывод уравнения (3.20) . . . . .	93
5.5	Приложение Д. Вывод уравнения (3.25) . . . . .	94
5.6	Приложение Е. Вывод уравнения (3.42) . . . . .	97
	<b>Основные результаты и выводы</b>	<b>101</b>
	<b>Благодарности</b>	<b>102</b>

# Список используемых сокращений

- ЯМР - ядерный магнитный резонанс
- МП - матрица плотности
- МРТ - магнитно-резонансная томография
- ПФ - производящая функция
- РЧ - радиочастотный
- СВ - собственный вектор
- СЗ - собственное значение
- СР - последовательность Карра-Парселла (от англ. Carr-Purcell)
- СРМГ - последовательность Карра-Парселла-Мейбума-Гилла (от англ. Carr-Purcell-Meiboom-Gill)
- FID - спад свободной индукции (от англ. Free Induction Decay)
- FE - градиентное эхо (от англ. Field Echo)
- FFE - быстрое градиентное эхо (от англ. Fast Field Echo)
- SE - спиновое эхо (от англ. Spin Echo)

# Введение

Томография ядерного магнитного резонанса, или магнитно-резонансная томография, широко применяется для медицинских и биологических исследований. В то же время этот метод является перспективным и для исследования химических реакций *in situ* [1], потоков, процессов массопереноса [2], структуры и свойств различных веществ и материалов [1, 2, 3]. В основе современных методов ЯМР томографии лежат специальные последовательности РЧ импульсов, в т.ч. методы, в которых некоторая комбинация РЧ импульсов повторяется периодическим образом; примером последних могут служить широко используемые мультиэховые последовательности. При этом большинство существующих методов основаны, как правило, на использовании простого для анализа отклика спиновой системы на цепочку  $90^0$ - или  $180^0$ - резонансных РЧ импульсов [4, 5, 6, 7, 8]. В то же время известно, что спиновое эхо может формироваться при любом угле поворота намагниченности под действием РЧ поля [9, 10, 11]. Более того, использование меньших углов поворота оказывается более целесообразным, например, в высокополевых МР томографах, где цепочка РЧ  $180^0$ -импульсов может вызвать нежелательную радиационную и тепловую нагрузку на пациента. Использование произвольных углов поворота актуально еще и потому, что не требует тщательной предварительной калибровки образца, что позволяет уменьшить общее время сканирования [12, 13]. Понимание поведения спинового эха при произвольном угле поворота особенно важно для ЯМР-каротажа [14, 15] и при исследовании материалов мобильными ЯМР-анализаторами [16, 17], где используются слабые магнитные поля со значительной неоднородностью, так что реальные углы поворота существенно отличаются от своих номинальных значений.

Теория отклика спиновой системы на импульсные методы хорошо развита [18, 19, 20], а доступные экспериментальные результаты весьма обширны. Между тем поведение намагниченности в периодических последовательностях РЧ импульсов представля-

ет собой лишь частный случай эволюции системы с зависящим от времени спиновым гамильтонианом. Вычисление же эволюции МП системы, описываемой периодическим гамильтонианом, в общем случае может оказаться достаточно сложной задачей. Некоторые из имеющихся теоретических подходов основаны на анализе собственных значений соответствующих операторов эволюции вектора намагниченности [21, 22], другие предполагают непосредственное вычисление МП рекурсивными методами [23, 24, 25, 26] либо применимы только в асимптотическом режиме [22]. Недостаток большинства данных подходов состоит в том, что, в конечном счете, они используют численные методы и не дают какого-либо общего аналитического результата. Всегда, однако, предпочтительнее работать с явными аналитическими выражениями, поскольку они позволяют прояснить природу изучаемого явления.

В связи с этим интерес представляет работа [27], авторы которой получили некоторые общие аналитические результаты, применив метод ПФ, хорошо известный в комбинаторике и теории вероятностей [28, 29]; так например, данный подход широко используется для разрешения рекуррентных соотношений. Одно из важных преимуществ данного подхода состоит в том, что ПФ для эхо-сигналов несет в себе всю информацию об импульсной последовательности и соответствующих ей сигналах (можно показать, что построение соответствующей ПФ аналогично дискретному преобразованию Фурье). В частности, в работе [27] была рассмотрена МРТ CPMG последовательность с резонансными  $90^\circ$  и  $\alpha$  возбуждающим и рефокусирующими импульсами соответственно, для которой в случае невзаимодействующих спинов  $1/2$  при отсутствии спиновой релаксации и диффузии авторами была получена не только ПФ, но также точные и асимптотические выражения для самих эхо-амплитуд. Для случая наличия спиновой релаксации также была получена соответствующая ПФ, однако ни точные, ни асимптотические результаты непосредственно для спинового эха получены не были; нерезонансный случай также не был рассмотрен. Между тем, хотя из ПФ возможно получить величину эхо-сигнала с любым порядковым номером как численно, так и аналитически [27], желательно иметь аналитическое выражение для самих эхо-амплитуд в явном виде, поскольку оно может дать представление о зависимости поведения спинового эха от параметров импульсной последовательности.

Целью настоящей работы являлось дальнейшее развитие формализма производящих функций для описания многоэховых ЯМР и МРТ - импульсных последовательно-

стей.

В первой главе диссертации дан обзор литературы по современным теоретическим подходам к описанию поведения намагниченности в периодических РЧ импульсных последовательностях. В начале главы кратко рассмотрены основные типы импульсных последовательностей, применяемые в ЯМР и МР томографии, затем приводятся общие теоретические положения и методы описания подобных экспериментов, а также обсуждается влияние различных факторов (параметров РЧ импульса, диффузии и взаимодействия спинов) на формирование эхо-сигналов.

Вторая глава посвящена вопросу применения метода ПФ для описания поведения систем, описываемых периодическим гамильтонианом. В частности, данный подход использован для описания эволюции ядерной намагниченности в периодических многоэховых последовательностях РЧ импульсов с произвольными углом рефокусирования и отстройкой от резонанса. В предположении прямоугольных РЧ импульсов, невзаимодействующих спинов и отсутствия спиновой диффузии рассчитана ПФ для отдельного изохромата в МРТ СPMG импульсной последовательности. ПФ для самих МРТ СPMG эхо-амплитуд находится с помощью последующего усреднения по частотным изохроматам. Соответствующая ПФ получена и для другого важного типа МРТ импульсной последовательности - FE. В этой же главе показано, как полученные результаты могут быть применены для анализа данных, получаемых в ЯМР-каротаже и при исследовании материалов портативными ЯМР-анализаторами. В заключении главы проводится сравнение теории с экспериментом.

В третьей главе результаты предыдущей главы применяются для получения явных аналитических результатов для амплитуд спинового эха. На примере бесконечной периодической МРТ СPMG импульсной последовательности производится вывод точных выражений для эхо-сигналов, а также уравнений, описывающих асимптотическое поведение спинового эха. Показано, что эхо-амплитуды могут быть выражены через хорошо известные аналитические функции - полиномы Лежандра. В то же время оказывается, что форма асимптотических выражений существенно зависит от параметров задачи. В той же главе получены аналитические аппроксимации, описывающие доасимптотические (т.е. лежащие вне области асимптотического режима) эхо-сигналы, вид которых свидетельствует о том, что в зависимости от параметров последовательности в поведении эхо-амплитуд могут проявляться осцилляции. В заключении раздела будет прове-



ден анализ всех приближенных уравнений и сравнение их с точными выражениями.

Четвертая глава диссертации затрагивает вопросы анализа эволюции неравновесной ядерной намагниченности в периодических импульсных последовательностях. В частности, на примере двух спинов  $1/2$  (гомоядерный случай), связанных слабым скалярным взаимодействием, под действием СPMG последовательности со  $180^0$  неселективными рефокусирующими импульсами показано, что мультиплетная и интегральная поляризации способны продуцировать сигналы в разных фазах, и таким образом, разделены.

В конце диссертации приведены приложения, основные результаты и выводы, а также список цитируемой литературы.

# Глава 1

## Обзор литературы

### 1.1 Основные типы импульсных последовательностей

Основные идеи получения пространственной информации методами современной МР томографии состоят в применении градиента магнитного поля для создания разброса частот ЯМР в различных элементах объема [30], реконструкции изображения с помощью Фурье-преобразования [31, 32, 33, 34], а также использования периодических последовательностей РЧ импульсов [4, 5, 6, 7, 8].

В первых импульсных ЯМР экспериментах использовался только один РЧ импульс, после которого детектировался сигнал FID. Однако такой метод обладает существенным недостатком, связанным с тем, что регистрация FID непосредственно после импульса невозможна ввиду наличия у детектора мертвого времени. Этот недостаток отсутствует в методах спинового эха, в которых эхо-сигнал следует спустя некоторое время после двух РЧ импульсов [35]. Существует два способа измерения скоростей спиновой релаксации методами спинового эха. Первый метод предполагает измерение времени поперечной спиновой релаксации  $T_2$  с помощью регистрации одиночного эхо-сигнала, следующего спустя некоторое время после двух РЧ импульсов, промежуток времени между которыми варьируется (эхо Хана) [35]. Хотя данный метод весьма прост, в настоящее время широкое распространение получил второй способ, использующий многоимпульсные периодические последовательности с фиксированными параметрами, при этом в одной импульсной цепочке регистрируются несколько эхо-сигналов [4, 5].

В основе всего многообразия многоимпульсных периодических методов [6, 7, 8] лежат два основных типа последовательностей: SE и FE. Наибольшей популярностью пользуются методы первого типа, поскольку, во-первых, эхо-сигнал следует непосредственно за импульсом, и во-вторых, они менее чувствительны к локальным неод-

нородностям магнитного поля [4, 5, 6, 7].

В последовательностях SE-типа используется цепочка одинаковых эквидистантных РЧ импульсов (рефокусирующие импульсы), которым предшествует возбуждающий импульс. Временной промежуток между рефокусирующими импульсами  $TE$  в два раза больше времени между возбуждающим и первым рефокусирующим импульсом. Спиновое эхо формируется в середине периода между импульсами (рис. 1.1a). В методах МРТ формирование эхо-сигналов происходит за счет включенного между импульсами градиента магнитного поля, де/рефазирующего поперечную намагниченность (дефазирувание - «расхождение», рефазирувание - «схождение» различных изохромат). В методах ЯМР-каротажа [14, 15] и при исследовании материалов портативными ЯМР-сканерами [16, 17] градиент не используется, а де/рефазирувание намагниченности происходит за счет локальных неоднородностей магнитного поля.

В стандартной последовательности SE-типа - СР последовательности

$$\alpha_x^{ex} - TE/2 - \alpha_x^{ref} - TE - \alpha_x^{ref} - TE - \dots \quad (1.1)$$

( $\alpha$  - угол поворота импульса, верхние индексы «ex» и «ref» обозначают «возбуждающий» (от англ. excitation) и «рефокусирующий» (от англ. refocusing) импульсы соответственно, нижние индексы указывают фазу импульса) - фазы возбуждающего и рефокусирующих импульсов совпадают [4]. Как правило, используются резонансные рефокусирующие импульсы с углом поворота  $\alpha^{ref} = 180^0$ , поскольку анализ поведения намагниченности в этом случае особенно прост. Неидеальности импульсов (возникающие, например, из погрешностей калибровки и локальных неоднородностей магнитного поля), а также диффузия в неоднородном магнитном поле усложняют анализ и вносят ошибки в определяемые из эксперимента параметры. Было, однако, показано [5], что модифицированная последовательность - СРМГ последовательность

$$\alpha_{-y}^{ex} - TE/2 - \alpha_x^{ref} - TE - \alpha_x^{ref} - TE - \dots, \quad (1.2)$$

в которой рефокусирующие импульсы приложены под  $90^0$  к возбуждающему, позволяет существенно снизить чувствительность формирующихся сигналов к влиянию случайных факторов. В то же время известно, что спиновое эхо может формироваться при любом угле поворота намагниченности под действием РЧ поля [9, 10, 11]. Кроме того, по причинам, отмеченным во введении, использование произвольных углов рефокусирования иногда оказывается более предпочтительным.

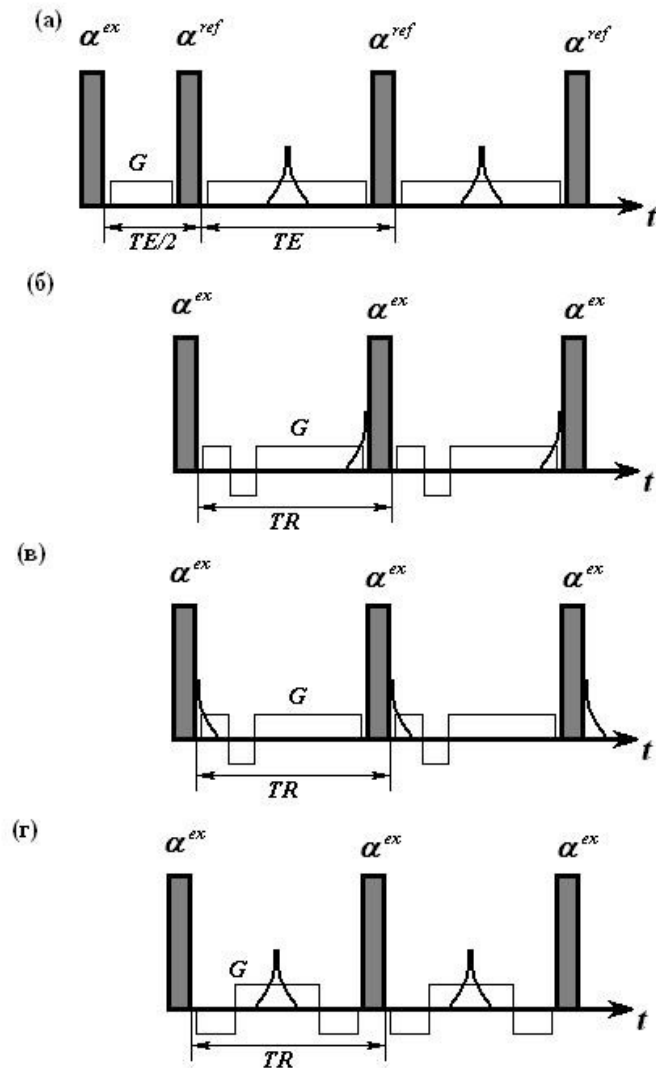


Рис. 1.1: Основные типы импульсных последовательностей: SE (а), ECHO-FE (б), FID-FE (в), rephased FFE (г). К спиновой системе прикладывается цепочка эквидистантных РЧ импульсов (номинальный угол поворота  $\alpha^{ref}$  или  $\alpha^{ex}$  для SE и FE типов последовательностей соответственно), между которыми включен градиент магнитного поля  $G$ . В случае последовательности SE-типа имеется также предварительный возбуждающий импульс (номинальный угол поворота  $\alpha^{ex}$ ). Подробнее в тексте.

В последовательностях другого, FE-типа, используется цепочка эквидистантных РЧ импульсов, а сигналы регистрируются либо непосредственно перед (ECHO-FE) (рис. 1.1б), либо непосредственно после (FID-FE) (рис. 1.1в) РЧ импульсов. Например, для обычно используемой FE-последовательности  $90^\circ$  резонансных РЧ импульсов во втором случае существенна продольная релаксация, влияющая на долю намагниченности, приносимой  $90^\circ$  импульсом в ее поперечную компоненту, и изображение  $T_1$ -взвешенным, в то время как в первом случае усиливается роль  $T_2$ -релаксации. Тот или иной тип взвешенности изображения позволяет увеличить контраст между различными областями

на томограмме благодаря различиям во временах релаксации тканей. Тип взвешенности изображения также зависит от угла поворота РЧ импульсов. Кроме того, общая площадь под градиентом магнитного поля, прикладываемым между импульсами, может быть как нулевой (rephased FFE, рис. 1.1г), так и не равной нулю (рис. 1.1б, в) в зависимости от конкретного метода [6, 7, 8].

Преимущество многоимпульсных методов по сравнению с эхом Хана состоит также в том, что первые допускают множество способов модификаций, что ведет к большому их разнообразию [6, 7, 19]. Так, например, для увеличения доли того или иного типа взвешивания изображения широко используются предварительные импульсы, должным образом «подготавливающие» намагниченность: инвертирующие  $180^0$  импульсы (методы Inversion-Recovery [6, 7, 36, 37]), насыщающие  $90^0$  импульсы (методы Partial Saturation, Saturation-Recovery [6, 7]) и др. [6, 7] Также возможны различные временные схемы приложения РЧ импульсов [6, 7], в т.ч. использование неэквидистантных импульсов [38, 39, 40, 41]. Другой важный способ модификации импульсных последовательностей предполагает варьирование фазы импульсов. Например, выше было отмечено, что одно лишь изменение фазы возбуждающего импульса на  $90^0$  существенно влияет на чувствительность эхо-сигналов к ошибкам в параметрах импульса [5]. Широко используется циклирование фазы РЧ импульсов [42, 43, 44, 45, 46]. Так в работе [43] было найдено, что амплитуды эхо-сигналов в СР последовательности с циклированием фазы рефокусирующих импульсов

$$\alpha_x^{ex} - TE/2 - \alpha_x^{ref} - TE - \alpha_{-x}^{ref} - TE - \alpha_x^{ref} - TE - \alpha_{-x}^{ref} - TE - \dots \quad (1.3)$$

совпадают с амплитудами в соответствующей СРМГ последовательности без альтерации фазы импульсов. Напротив, при подобном варьировании фазы рефокусирующих импульсов в СРМГ последовательности

$$\alpha_{-y}^{ex} - TE/2 - \alpha_x^{ref} - TE - \alpha_{-x}^{ref} - TE - \alpha_x^{ref} - TE - \alpha_{-x}^{ref} - TE - \dots \quad (1.4)$$

последняя фактически переходит в СР последовательность без вариации фаз импульсов. Таким образом, циклирование фазы рефокусирующих импульсов также может быть использовано для получения сигналов большей интенсивности [45, 46]. Кроме того, циклирование фазы импульсов широко используется в последовательностях FE типа для подавления нежелательных эффектов, обусловленных поперечной интерференцией

(ликвидации остаточной поперечной намагниченности перед очередным импульсом при большой частоте их повторения) [19].

## 1.2 Феноменологические уравнения Блоха

Спин представляет собой квантовую степень свободы, поэтому ЯМР томографию необходимо рассматривать методами квантовой механики. Однако можно показать [19, 47, 48], что в случае невзаимодействующих спинов  $1/2$  возможно классическое рассмотрение эволюции намагниченности с помощью феноменологического уравнения Блоха, учитывающего спиновую релаксацию:

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = \gamma [\vec{M} \times \vec{B}] - \vec{i} \frac{M_x}{T_2} - \vec{j} \frac{M_y}{T_2} - \vec{k} \frac{M_z - M_{eq}}{T_1} . \quad (1.5)$$

Здесь первое слагаемое в правой части описывает прецессию вектора намагниченности  $\vec{M}$  вокруг приложенного к спиновой системе магнитного поля  $\vec{B}$ ,  $\gamma$  - гиромагнитное отношение ЯМР чувствительного ядра; следующие два члена учитывают релаксацию поперечных компонент намагниченности  $M_x$  и  $M_y$  ( $T_2$  - время поперечной спиновой релаксации), последний член задает релаксацию продольной компоненты намагниченности  $M_z$  к ее равновесному значению  $M_{eq}$  ( $T_1$  - время продольной спиновой релаксации);  $\vec{i}$ ,  $\vec{j}$  и  $\vec{k}$  - единичные вектора, направленные соответственно вдоль осей  $x$ ,  $y$  и  $z$  лабораторной системы координат. Уравнение (1.5) является исходным при анализе импульсных МРТ последовательностей.

Рассмотрим, например, СР или СРМГ импульсную последовательность. Различие между ними состоит лишь в различных начальных условиях для вектора намагниченности, обеспечиваемое разными фазами возбуждающего импульса. Один период (от эха до эха) данных последовательностей включает в себя половину межимпульсного интервала, поворот рефокусирующим импульсом и еще половину межимпульсного интервала. В случае несвязанных спинов, достаточно коротких прямоугольных РЧ импульсов (когда их воздействие может быть сведено к мгновенному повороту вектора намагниченности) и при отсутствии трансляционной диффузии с помощью уравнения (1.5) может быть получено следующее рекуррентное соотношение, связывающее векторы намагниченности для некоторого изохромата в момент регистрации  $n$ -го и  $(n + 1)$ -го эхо-сигналов соответственно (здесь и далее, если специально не оговорено, анализ проводится во

вращающейся с частотой РЧ поля системе координат):

$$\vec{m}_{n+1} = \mathbf{Q} \mathbf{P} \mathbf{Q} \vec{m}_n + (\mathbf{Q} \mathbf{P} + \mathbf{E}) \vec{S}_{eq}, \quad (1.6)$$

где  $\mathbf{E}$  - единичная матрица  $3 \times 3$ ,

$$\vec{m}_n = (m_n^+, m_n^-, m_{zn})^T, \quad (1.7)$$

$$m_n^+ = m_n^{-*} = m_{xn} + i m_{yn} \quad (1.8)$$

(индексы «\*» и «Т» обозначают комплексное сопряжение и транспонирование соответственно),  $m_{xn}$ ,  $m_{yn}$  и  $m_{zn}$  представляют собой соответственно  $x$ ,  $y$  и  $z$  компоненты вектора намагниченности (измеренные в единицах равновесной намагниченности  $M_{eq}$ ) в момент регистрации  $n$ -го эха, т.е. точно в середине периода между  $n$ -ым и  $(n+1)$ -ым импульсами. Матрица

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \sqrt{\xi_2} U & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{\xi_2} U^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{\xi_1} \end{pmatrix} \quad (1.9)$$

и вектор

$$\vec{S}_{eq} = (0, 0, 1 - \sqrt{\xi_1})^T \quad (1.10)$$

описывают поведение намагниченности за половину периода между импульсами, т.е. прецессию и релаксацию к равновесию. Здесь также использованы следующие обозначения:

$$U = e^{-i\psi}, \quad (1.11)$$

$\psi$  - набег фазы для данного изохромата за полупериод между импульсами,

$$\xi_{12} = \exp \{-TE/T_{1,2}\}, \quad (1.12)$$

$T_1$  и  $T_2$  - времена спин-решеточной и спин-спиновой релаксации соответственно. Матрица

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} -\lambda^2 & \mu^2 & 2\mu\lambda \\ \mu^2 & -\lambda^{*2} & 2\mu\lambda^* \\ \mu\lambda & \mu\lambda^* & |\lambda|^2 - \mu^2 \end{pmatrix} \quad (1.13)$$

задает поворот РЧ импульсом,  $\lambda$  и  $\mu$  представляют собой следующие величины:

$$\lambda = \sin \varphi \sin \frac{\alpha}{2} + i \cos \frac{\alpha}{2}, \quad (1.14)$$

$$\mu = \cos \varphi \sin \frac{\alpha}{2}, \quad (1.15)$$

где

$$\alpha = \alpha^{ref} \sqrt{1 + (\Delta\omega/\omega_1)^2}, \quad (1.16)$$

$\alpha^{ref} = \omega_1 \tau$  - номинальный угол рефокусирования РЧ импульсом,  $\omega_1 = \gamma B_1$ ,  $B_1$  - амплитуда РЧ поля,  $\gamma$  - гиромагнитное отношение,  $\tau$  - длительность импульса,  $\Delta\omega$  - отстройка от резонанса для данного элемента объема в момент импульса (заметим, что при наличии градиента магнитного поля между импульсами  $\Delta\omega$  не совпадает с отстройкой от резонанса в межимпульсный период);

$$\varphi = \arctan(\Delta\omega/\omega_1) . \quad (1.17)$$

В общем случае нерезонансных рефокусирующих РЧ импульсов с отстройкой от резонанса  $\Delta\omega$  матрица  $\mathbf{P}$  описывает поворот на угол  $\alpha$  вокруг эффективного магнитного поля, угол наклона которого к поперечной плоскости составляет  $\varphi$ . Иногда в литературе матрицу  $\mathbf{Q P Q}$  называют матрицей Карра-Парселла.

Как было отмечено выше, для кодирования пространственной информации в МР томографии используются градиенты магнитного поля [6, 7, 30], включаемые между импульсами. Таким образом, частота прецессии намагниченности вокруг магнитного поля зависит от положения спина в образце. В ЯМР-каротаже [14, 15] и при использовании портативных ЯМР-анализаторов [16, 17] внешние градиенты магнитного поля не используются, а разброс частот прецессии происходит от локальных неоднородностей магнитного поля. Регистрируемый сигнал представляет собой сигнал от некоторой области (элемента объема, воксела (от англ. voxel)), так что рассчитываемая из уравнения (1.5) намагниченность должна быть еще усреднена по этой области, т.е. по соответствующему диапазону частот прецессии. Для достаточно длинных цепочек РЧ импульсов такая задача в общем случае становится трудновыполнимой.

### 1.3 РЧ импульсы в МР и ЯМР томографии

Прямоугольные РЧ импульсы наиболее часто используются в методах ЯМР томографии [6, 7]. При этом, как правило, номинальные углы поворота возбуждающего и рефокусирующих импульсов в СР и СРМГ импульсных последовательностях выбираются равными  $90^0$  и  $180^0$  соответственно [4, 5, 6, 7]. Это связано с тем, что при этом в



резонансе намагниченность максимальным образом укладывается в поперечную плоскость при возбуждении и полностью остается там при рефокусировании, что в свою очередь увеличивает величину регистрируемого сигнала, определяемого поперечной намагниченностью. Однако, как можно видеть из уравнения (1.13), вне резонанса импульс поворачивает вектор намагниченности вокруг эффективного магнитного поля, величина и угол наклона к поперечной плоскости которого зависят от отстройки от резонанса  $\Delta\omega$  (уравнения (1.16) и (1.17)). Таким образом, в поперечную плоскость попадает меньше намагниченности, что снижает уровень сигнала. Кроме того, при наличии разброса отстройки от резонанса по образцу (за счет локальных неоднородностей магнитного поля) затрудняется анализ эволюции общей намагниченности. Между тем, частотный спектр прямоугольного импульса амплитуды  $\omega_1 = \gamma B_1$  и длительности  $\tau$  представляет собой *sinc*-функцию:

$$\int_{-\tau/2}^{\tau/2} \omega_1 e^{i\Delta\omega t} dt = \omega_1 \tau \frac{\sin \frac{\Delta\omega\tau}{2}}{\frac{\Delta\omega\tau}{2}} = \alpha_{nom} \operatorname{sinc} \left( \frac{\Delta\omega\tau}{2} \right), \quad (1.18)$$

где  $\alpha_{nom} = \omega_1 \tau$  - номинальный угол поворота импульса. Таким образом, полоса частот, возбуждаемых прямоугольным импульсом, составляет порядка  $\delta(\Delta\omega) \simeq \pm 4\pi/\tau$  [6, 19].

Из сказанного следует, что использование длинных прямоугольных импульсов меньшей амплитуды  $\omega_1$  при заданном номинальном угле поворота (и, следовательно, большей длительности; так называемые «мягкие» адиабатические импульсы) позволяет повысить их селективность. Однако в этом случае приближение мгновенного поворота импульсом становится хуже, поскольку возрастает роль эволюции намагниченности во время самого импульса [45, 49, 50, 51, 52, 53]. Селективное возбуждение среза заданной толщины также возможно путем использования импульса *sinc*-формы и постоянного градиента магнитного поля во время импульса [6, 54]. Другой пример повышения селективности возбуждения - замена одного возбуждающего импульса серией коротких импульсов с малым углом поворота [55, 56], при которой в спектре возбуждаемых частот вырезаются определенные области, зависящие от частоты приложения импульсов.

Напротив, воздействие коротких («жестких») импульсов большой амплитуды РЧ поля при заданном угле поворота может рассматриваться как мгновенный поворот намагниченности вокруг эффективного магнитного поля. Однако высокая амплитуда РЧ поля нежелательна как в медицинских приложениях МРТ, где предпочтительнее снизить высокую радиационную и тепловую нагрузку на пациента, так и при использова-

нии портативных ЯМР-спектрометров, где технически сложно генерировать такие РЧ импульсы [16, 17]. С ростом амплитуды РЧ поля селективность импульса снижается, что может быть и преимуществом, поскольку возбуждение полосы частот большей ширины позволяет увеличить интенсивность сигнала и, как результат, привести к лучшему отношению сигнал-шум. Сгладить эффект неодинакового поворота намагниченности при наличии разброса отстройки от резонанса  $\Delta\omega$  по образцу и возникающих отсюда ошибок анализа эксперимента (когда обработка данных соответствует идеальному резонансному случаю при широком диапазоне отстроек от резонанса в действительности) позволяет использование составных импульсов [19, 57, 58, 59, 60, 61, 62]. В этом случае воздействие комбинации прямоугольных импульсов может быть представлено как поворот намагниченности вокруг некоторой результирующей оси (если только общая длительность данной комбинации по-прежнему позволяет пренебречь спиновой релаксацией, диффузией, взаимодействием спинов и т.д.). При этом в такие импульсные «сэндвичи» встроен некоторый компенсационный механизм, что делает их менее чувствительными к неидеальности условий эксперимента. Так  $180_x^0$  РЧ импульс может быть заменен комбинацией импульсов  $90_y^0 - 180_x^0 - 90_y^0$  [57, 60, 63], однако, например, степень инвертирования продольной намагниченности в методах Inversion-Recovery для  $180_x^0$  импульса зависит квадратично, а для комбинации  $90_y^0 - 180_x^0 - 90_y^0$  - от четвертой степени относительной ошибки в амплитуде РЧ поля/ длительности РЧ импульса, так что в последнем случае соответствующие ошибки инвертирования снижаются с 20% до 1%. Использование составных импульсов может позволить не только составлять карты  $\Delta\omega$ , но также по фазе регистрируемого сигнала определять локальные значения  $\omega_1$  [62]. Уменьшить ошибки, вызванные неидеальностью эксперимента, возможно также путем использования импульсов со сложным профилем, рассчитываемым численными методами [64, 65, 66].

Интересный результат получен авторами работы [67]. Они показали, что последовательность коротких нерезонансных импульсов с некоторой фиксированной отстройкой от резонанса  $\Delta\omega$  эквивалентна модифицированной последовательности коротких резонансных импульсов с углом поворота

$$\cos \alpha_e = \cos \alpha \cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi = \cos \left( \frac{\alpha^{ref}}{|\cos \varphi|} \right) \cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi , \quad (1.19)$$

независимо от наличия релаксационных и диффузионных эффектов.

При использовании прямоугольных импульсов с заданным углом поворота необходимая длительность импульса рассчитывается из длительности  $180^\circ$  РЧ импульса. В свою очередь, подбор длительности  $180^\circ$  РЧ импульса осуществляется таким образом, чтобы последующий сигнал FID был минимален либо через инвертирование соответствующей спектральной линии. Для реализации данного способа необходимо, чтобы временной промежуток между импульсами составлял около  $5T_1$  для релаксации намагниченности, так что при достаточно длинном  $T_1$  на это может потребоваться значительное время. В связи с этим возможно также определять длительность  $360^\circ$  РЧ импульса, поскольку в этом случае время, требуемое для восстановления равновесной намагниченности, минимально [63]. Другой способ калибровки состоит в однократном приложении цепочки импульсов известной длительности и нахождения периода осцилляций амплитуды сигналов FID, из которого затем рассчитывается требуемая длительность импульса [68, 69]. Недостаток данного метода - неприменимость его для образцов со слишком коротким  $T_2^*$  (временем поперечной спиновой релаксации, включающем неоднородную ширину):  $T_2^*$  должно превосходить мертвое время детектора по крайней мере во столько же раз, сколько используется импульсов.

В работе [13] предложен метод одновременного определения угла поворота импульса  $\alpha$  и времени спин-решеточной релаксации  $T_1$ , пригодный для образцов с длинными  $T_1$  и короткими  $T_2^*$ . Авторы применяют периодическую последовательность  $N + 1$  одинаковых импульсов, варьируя временной интервал  $TR$  между импульсами. При достаточно коротком  $T_2^*$  амплитуда сигнала FID  $S_n$  ( $n$  - номер импульса, после которого измеряется сигнал FID, нумерация начинается с  $n = 0$ ) определяется выражением

$$S_n \propto m_{zn} e^{-\frac{t_p}{T_2^*}} \sin \alpha \quad (1.20)$$

( $t_p$  - момент времени измерения FID после импульса), причем

$$m_{zn} = m_{st} + (1 - m_{st}) e^{-nTR/T_{app}} , \quad (1.21)$$

$$\frac{1}{T_{app}} = \frac{1}{T_1} - \frac{\ln(\cos \alpha)}{TR} , \quad (1.22)$$

$$m_{st} = \frac{1 - e^{-TR/T_1}}{1 - e^{-TR/T_1} \cos \alpha} \quad (1.23)$$

- стационарное значение продольной намагниченности. Отсюда следует, что

$$\sum_{n=1}^N \frac{m_{zn} - m_{st}}{1 - m_{st}} = \sum_{n=1}^N \frac{S_n - S_{st}}{S_0 - S_{st}} = \frac{1 - e^{-NTR/T_{app}}}{1 - e^{-TR/T_{app}}} , \quad (1.24)$$

При достаточно большом числе импульсов можно считать  $e^{-NTR/T_{app}} \ll 1$  и  $S_{st} \approx S_N$ . Следовательно, извлечь информацию об  $T_{app}$  можно, находя разницу между измеренными сигналами FID  $S_n$  и последним значением  $S_N$ , нормируя полученные величины на первое значение  $S_0$  и суммируя их. Выбирая вначале для импульсной цепочки  $TR \ll T_1$ , получим  $e^{-TR/T_{app}} \approx \cos \alpha$ , что с помощью уравнения (1.24) позволяет получить угол поворота импульсов  $\alpha$ . Повторяя затем эксперимент с большим  $TR$ , можно определить также и  $T_1$ .

## 1.4 Методы расчета амплитуды спинового эха

Согласно уравнению (1.6), расчет амплитуды спинового эха может быть осуществлен рекуррентным образом с последующим усреднением намагниченности по частотным изохроматам. Однако аналитическое выражение для больших номеров эхо-сигнала весьма громоздко, поэтому такой расчет может быть проведен только численным образом. Между тем целесообразным является наличие какого-либо аналитического результата, поскольку это позволяет прояснить природу формирования сигналов.

Рассмотрим, например, СР или СРМГ импульсную последовательность, при этом спины будем считать невзаимодействующими, также пренебрежем трансляционной диффузией в градиенте поля. Как было отмечено выше, один период данных последовательностей (от эха до эха) включает в себя половину межимпульсного интервала, в течение которого намагниченность прецессирует вокруг оси  $z$  и релаксирует к равновесному значению (равновесная намагниченность направлена вдоль оси  $z$ ), поворот РЧ импульсом и еще половину межимпульсного интервала. При отсутствии спиновой релаксации эволюция некоторого изохромата может быть представлена как результирующий поворот намагниченности вокруг некоторой эффективной оси, положение которой среди прочего зависит и от отстройки от резонанса  $\Delta\omega$  [22]. В асимптотическом режиме основной вклад в эхо-сигналы вносит только компонента намагниченности, лежащая вдоль данной оси. Так при номинальных  $180_x^0$ -угле рефокусирования и  $90^0$  возбуждающем импульсе, фаза которого  $y$  и  $-y$  альтернируется, асимптотика разницы соответствующих эхо-сигналов  $m_{xn} = S_{ny} - S_{n-y}$  (индекс  $x$  при  $m_{xn}$  обозначает фазу эхо-сигнала, индекс

$\pm y$  при  $S_{n \pm y}$  соответствует фазе возбуждающего импульса) имеет вид:

$$m_{x\infty}(\Delta\omega, \omega_1) \approx \frac{\omega_1 \sin(\Omega t_{90})}{\Omega \left[ 1 + \left[ \frac{\Omega}{\omega_1} \sin \psi \cot \frac{\Omega t_{180}}{2} + \frac{\Delta\omega}{\omega_1} \cos \psi \right]^2 \right)}, \quad (1.25)$$

$$\Omega = \sqrt{\omega_1^2 + \Delta\omega^2}, \quad (1.26)$$

где  $t_{90}$  и  $t_{180}$  - длительности  $90^\circ$  и  $180^\circ$  - импульсов соответственно,  $\psi$  - набег фазы за половину периода между импульсами, в отсутствие градиента равная  $TE \times \Delta\omega/2$ . При  $T_1 = T_2 = T$  данное асимптотическое выражение необходимо умножить еще на  $e^{-nTE/T}$ , поскольку в этом случае релаксация не влияет на положение эффективной оси, но лишь укорачивает длину вектора намагниченности.

В сущности, авторы работы [22] применили подход, родственной методу, предложенному в [21], где анализировались СЗ  $s_i$  и СВ  $\vec{v}_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) матрицы Карра-Парселла. Такой анализ лежит в основе одного из способов разрешения рекурсии (1.6):

$$\vec{m}_n = \sum_i \frac{b_i}{1 - s_i} \vec{v}_i + \sum_i \left[ a_i - \frac{b_i}{1 - s_i} \right] \vec{v}_i s_i^n, \quad (1.27)$$

где  $a_i$  и  $b_i$  - соответственно коэффициенты в разложении начального вектора намагниченности  $\vec{m}_0$  и вектора  $(\mathbf{QP} + \mathbf{E}) \vec{S}_{eq}$  по  $\vec{v}_i$ :

$$\vec{m}_0 = \sum_i a_i \vec{v}_i, \quad (1.28)$$

$$(\mathbf{QP} + \mathbf{E}) \vec{S}_{eq} = \sum_i b_i \vec{v}_i. \quad (1.29)$$

Первый член в выражении (1.27) соответствует стационарному значению вектора намагниченности для данного изохромата, в то время как второй задает зависимость от номера эхо-сигнала.

Решение характеристического уравнения на СЗ матрицы Карра-Парселла может дать либо все вещественные СЗ  $s_i$ , либо одно вещественное и два комплексно-сопряженных СЗ [21]. Это означает, что в поведении эхо-амплитуд возможны осцилляции. Так при  $T_1 = T_2 = T$  одно из СЗ равно  $e^{-TE/T}$  (соответствующий СВ определяет положение оси результирующего поворота намагниченности за один период эволюции, не зависящее от конкретного значения  $T$ ), а два других СЗ - комплексно-сопряженные - определяют вращение вектора намагниченности вокруг данной оси. При  $T_1 \neq T_2$  спад эхо-амплитуд представляет собой некоторую взвешенную сумму  $T_1$ - и  $T_2$ -релаксаций.

Так для  $\Delta\omega \approx \pi/TE$  и  $\cos \alpha \leq 0$  соответствующие СЗ матрицы Карра-Парселла были получены в работе [21]. Анализ данных СЗ позволяет сделать вывод о том, что в асимптотическом режиме поведение спинового эха определяется фактором  $B^n$ , где

$$B = \frac{\xi_1 - \xi_2}{2} \cos \alpha - \sqrt{\left(\frac{\xi_1 - \xi_2}{2}\right)^2 \cos^2 \alpha + \xi_1 \xi_2} \quad (1.30)$$

(заметим, что в статье [21] выбор соответствующего СЗ был сделан неверно, что не отражается на сути работы). В общем случае спад эхо-сигналов не является моноэкспоненциальным. Недостаток данного подхода состоит не только в том, что необходимо решить кубическое характеристическое уравнение на СЗ матрицы Карра-Парселла, но и в том, что выражение (1.27) еще необходимо усреднить по частотным изохроматам. Данная задача является весьма трудоемкой и в общем случае до сих пор не была решена.

Наглядное представление о формировании спинового эха дает теория конфигураций [10, 70, 71, 72]. Согласно данной теории намагниченность некоторого спинового изохромата после ряда РЧ импульсов и периодов прецессии может быть представлена в виде ряда Фурье, основная частота которого равна приращению фазы поперечной компоненты намагниченности за межимпульсный период либо за половину этого периода (уравнение (2.27) главы 2). Каждое слагаемое этого ряда Фурье соответствует определенной «конфигурации», включающей в себя все возможные фазовые пути с одинаковой разницей между общим числом периодов дефазирования и общим числом периодов рефазирования, причем число таких конфигураций возрастает после каждого очередного импульса. Наглядно процесс формирования спинового эха может быть представлен с помощью фазовой диаграммы (рис. 1.2). Очередной РЧ импульс определенным образом, зависящим от угла поворота, «разбивает» каждую из конфигураций на три компоненты, которые в последующем межимпульсном периоде ведут себя по-разному: одна компонента эволюционирует как продольная намагниченность  $M_z$  (релаксация с  $T_1$ ) без изменения фазы, вторая компонента соответствует поперечной намагниченности (релаксация с  $T_2$ ), фаза которой импульсом не меняется и продолжает увеличиваться (дефазирование); наконец, третья компонента также соответствует поперечной намагниченности (релаксация с  $T_2$ ), но импульс меняет знак ее фазы, так что в новом межимпульсном интервале эта компонента теперь уменьшает свою фазу по абсолютной величине (рефазирование). Эти компоненты, комбинируясь меж-

ду собой, формируют конфигурации, на которые могут быть разложены последующие эхо-сигналы. Вклад в сигналы спинового эха вносит только одна (так называемая «нулевая») конфигурация, для которой к моменту интересующего сигнала число участков дефазирования равно числу участков рефазирования. Расчет амплитуды спинового эха сводится к рассмотрению всех возможных фазовых путей, составляющих данную конфигурацию [73, 74, 75], подсчетом числа соответствующих участков дефазирования, рефазирования и «продольного» состояния, учету эволюции каждой компоненты на каждом участке и, таким образом, представляет собой комбинаторную задачу.

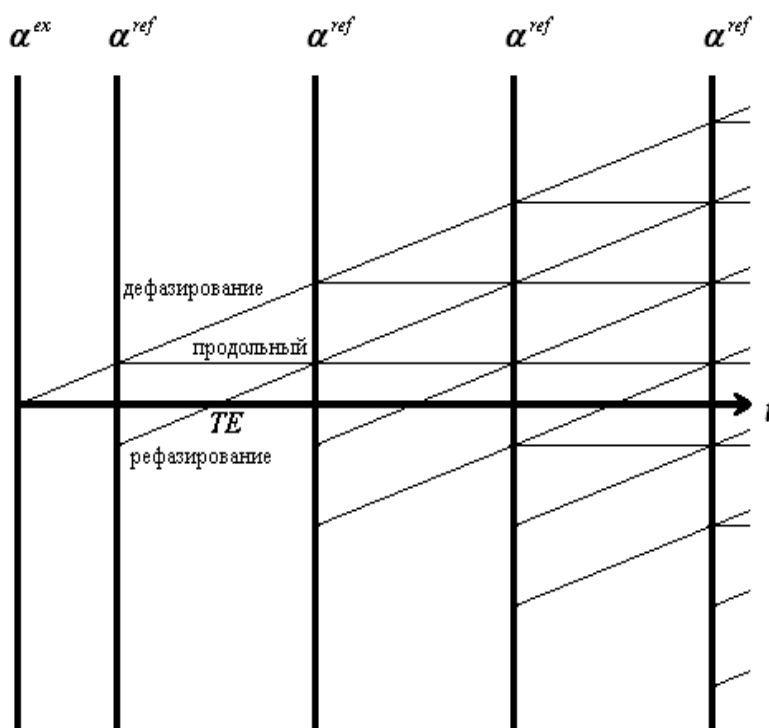


Рис. 1.2: Фазовая диаграмма для CPMG последовательности с углами возбуждения и рефокусирования  $\alpha^{ex}$  и  $\alpha^{ref}$  соответственно. Жирные вертикальные линии соответствуют РЧ импульсам, тонкие линии соответствуют различным конфигурациям. [6, 10]

На разделении отдельных фазовых путей основано, в частности, выделение некоторых отдельных составляющих спинового эха [74, 75, 76]. Например, если после очередно-

го рефокусирующего импульса дефазирование сменяется рефазированием и наоборот, то данный фазовый путь обеспечивает вклад «прямого» эха; название идет от идеи Хана [35] о том, что роль  $\pi$ -импульсов состоит в инвертировании фазы намагниченности. Если фазовый путь содержит участки с «продольным» состоянием, то он называется «стимулированным» эхом; в зависимости от числа таких «продольных» участков здесь также возможна дальнейшая классификация [74, 75]. И если в случае идеальных резонансных  $180^\circ$ -рефокусирующих импульсов спиновое эхо содержит только вклад прямого эха, то при нерезонансных импульсах с произвольным углом рефокусирования существенным становится вклад стимулированного эха, причем роль его становится определяющей для эхо-сигналов с большим порядковым номером [75].

Даже при использовании номинальных рефокусирующих  $\pi$ -импульсов реальный угол поворота намагниченности отличается от  $180^\circ$  ввиду неоднородности РЧ поля и нерезонансных эффектов (уравнение (1.16)), и, таким образом, спад эхо-амплитуд представляет собой некоторую смесь  $T_1$ - и  $T_2$ -релаксаций [21, 22, 46, 73, 77]. Анализ истинного поведения спинового эха может быть осуществлен, например, нахождением соответствующих поправок, связанных с ненулевой отстройкой от резонанса  $\Delta\omega \neq 0$  путем разложения в ряд Тейлора [46, 77], либо путем изучения различных фазовых путей изохромат, вносящих вклад в спиновое эхо. Последний метод был использован в работе [73], где было показано, что в случае рефокусирующего угла  $\alpha = 90^\circ$  наблюдается подразделение между четными и нечетными СРМГ эхо-сигналами, причем вклад  $T_2$ -релаксации в амплитуды спинового эха меняется только при переходе от эха с нечетным порядковым номером  $2k - 1$  к эху с четным порядковым номером  $2k$  ( $k = 1, 2, \dots$ ), в то время как вклад  $T_2$ -релаксации для двух последовательных эх с номерами  $2k$  и  $2k + 1$  ( $k = 1, 2, \dots$ ) одинаков, см. также [78].

Весьма продуктивные подходы для расчета эхо-амплитуд изложены в работах [25, 26]. Так в работе [25] показано, что рассмотрение задачи в Фурье-пространстве (сопряженном координатному пространству) приводит к достаточно простой рекурсивной процедуре для аналитического и численного вычисления эхо-амплитуд. Ключевая идея данной работы заключается в том, что вектор намагниченности в Фурье-пространстве представляет собой сумму конечного числа дельта-функций и сохраняет такую форму на каждом шаге. Изотропная диффузия, поперечная и продольная релаксация наряду с глобальным транспортом также были приняты во внимание. Похожий подход пред-



ложен в работе [26], где эволюция намагниченности рассматривается в прямом (координатном) пространстве, однако требуется интегрирование по пространству координат. Главный недостаток данных и многих других подходов (см. например [23, 24]) - лежащая в их основе рекурсивность и отсутствие явного аналитического результата.

В связи с этим представляет интерес работа [27], в которой получены некоторые общие аналитические выражения, применимые для описания поведения спинового эха для МРТ СРМГ последовательности резонансных импульсов с  $90^\circ$  возбуждающим и произвольным рефокусирующим  $\alpha$  углами. В частности, в данной работе рекурсия (1.6) была разрешена с помощью метода ПФ. ПФ для последовательности (в общем случае с бесконечным числом элементов) величин  $M_0, M_1, \dots, M_n, \dots$  определяется как функция комплексного переменного  $z$  следующим образом:

$$f(z) = M_0 + M_1 z + \dots + M_n z^n + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} M_n z^n, \quad (1.31)$$

где  $|z| < 1$ . Последнее условие обеспечивает сходимость ряда с ограниченными коэффициентами при  $z^n$ . Полагая  $z = e^{i\vartheta}$  ( $0 \leq \vartheta < 2\pi$ ) либо  $z = e^{-s}$  ( $s > 0$ ), можно видеть, что ПФ (1.31) в действительности представляет собой дискретное преобразование Фурье либо преобразование Лапласа соответственно. Таким образом, элемент  $M_n$  с произвольным порядковым номером  $n$  может быть легко вычислен из ПФ с помощью стандартного Фурье-преобразования последней. Преимущество данного подхода состоит также в том, что усреднение по различным частотным изохроматам может быть выполнено непосредственно в самой ПФ. Метод ПФ широко применяется в теории вероятностей и при решении комбинаторных задач [28, 29]. Это особенно показательно, поскольку, как было отмечено выше, вычисление сигналов спинового эха сводится к подсчету различных фазовых путей, вносящих вклад в нулевую конфигурацию, и представляет собой комбинаторную задачу. Наиболее ярким результатом работы [27] стало точное

$$M_{xn} = \frac{1}{2} \left[ \sum_{k=0}^n P_k(\cos \alpha) - 2 \cos \alpha \sum_{k=0}^{n-1} P_k(\cos \alpha) + \sum_{k=0}^{n-2} P_k(\cos \alpha) \right] \quad (1.32)$$

и асимптотическое ( $n \sin \alpha \gg 1, 0 \leq \alpha \leq \pi$ )

$$M_{xn} \approx \sin \frac{\alpha}{2} - \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \frac{\sqrt{\sin \alpha} \cos(\alpha - \pi/4)}{\sin \frac{\alpha}{2} n^{3/2}}, \quad (1.33)$$

выражения для МРТ СРМГ эхо-амплитуд в случае несвязанных спинов  $1/2$  при отсутствии спиновой релаксации и диффузии (намагниченность приведена в единицах равновесной намагниченности  $M_{eq}$ ). В случае угла рефокусирования от  $\pi$  до  $2\pi$  в выражениях

(1.32) и (1.33) вместо  $\alpha$  следует использовать  $2\pi - \alpha$ . Для случая конечных скоростей спиновой релаксации также была получена соответствующая ПФ, однако нерезонансный случай рассмотрен не был. Кроме того, хотя из ПФ возможно получить величину эхо-сигнала с любым порядковым номером как численно, так и аналитически [27], тем не менее целесообразно иметь явное аналитическое выражение непосредственно для самих эхо-амплитуд, дающее представление о зависимости их поведения от параметров импульсной последовательности.

## 1.5 Влияние диффузии

Диффузия спинов в неоднородном магнитном поле вызывает дополнительный сдвиг фазы поперечной намагниченности по отношению к неподвижным спинам. К примеру, для последовательностей SE-типа это приводит к неполному рефокусированию намагниченности очередным РЧ импульсом. Таким образом, диффузия вызывает дополнительный спад эхо-амплитуд [70, 71, 79]. При наличии диффузии для анализа поведения намагниченности в лабораторной системе координат следует использовать модифицированные уравнения Блоха-Торри [80]:

$$\frac{\partial \vec{M}}{\partial t} = \gamma [\vec{M} \times \vec{B}] + \vec{\nabla}^T \cdot \mathbf{D} \cdot \vec{\nabla} \vec{M} - \vec{i} \frac{M_x}{T_2} - \vec{j} \frac{M_y}{T_2} - \vec{k} \frac{M_z - M_{eq}}{T_1}, \quad (1.34)$$

где  $\mathbf{D}$  - тензор диффузии,  $\vec{\nabla} = \left( \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right)^T$ . Диффузионный член становится существенным в случае, когда неоднородность магнитного поля в образце велика и существенна скорость диффузии. Уравнение (1.34) должно быть дополнено соответствующими начальными и граничными условиями. Как правило, в качестве начального условия выбирается равенство намагниченности равновесному значению  $\vec{M}(\vec{r}, t) = M_{eq} \vec{k}$ .

При количественном анализе обычно рассматривают достаточно короткие импульсы, так что воздействие импульса по-прежнему сводится к мгновенному повороту намагниченности (уравнение (1.13)). Таким образом, диффузия проявляет себя в течение межимпульсного периода. Наиболее простым для анализа является случай неограниченной изотропной диффузии  $\mathbf{D} = D \cdot \mathbf{E}$  в линейном градиенте магнитного поля  $\vec{G}$ , когда  $\vec{B}(\vec{r}) = (B_0 + \vec{G}, \vec{r}) \vec{k}$ . В этом случае эволюция вектора намагниченности между импульсами во вращающейся с частотой РЧ поля системе координат описывается

уравнениями:

$$\frac{\partial M^+(\vec{\mathbf{r}}, t)}{\partial t} = D\nabla^2 M^+(\vec{\mathbf{r}}, t) - i\gamma (\vec{\mathbf{G}}, \vec{\mathbf{r}}) M^+(\vec{\mathbf{r}}, t) - \left( i\Delta\omega_0 + \frac{1}{T_2} \right) M^+(\vec{\mathbf{r}}, t) \quad (1.35)$$

$$\frac{\partial M_z(\vec{\mathbf{r}}, t)}{\partial t} = D\nabla^2 M_z(\vec{\mathbf{r}}, t) - \frac{M_z(\vec{\mathbf{r}}, t) - M_{eq}}{T_1}, \quad (1.36)$$

где  $\Delta\omega_0 = \gamma B_0$ . Во втором из приведенных уравнений также пренебрегается зависимостью равновесной намагниченности  $M_{eq}$  от магнитного поля, что оправдано при небольших градиентах. Рассмотрение ЯМР-отклика в предположении неограниченной изотропной диффузии в линейном градиенте магнитного поля лежит в основе стандартных методов измерения коэффициентов диффузии [4, 35, 81].

Рассмотрим, например, FE импульсную последовательность с межимпульсным интервалом  $TR$ . В работе [71] предложено общее решение уравнений (1.35) и (1.36) в виде дискретного ряда Фурье (ниже намагниченность приведена в единицах равновесной намагниченности):

$$m^+(\vec{\mathbf{r}}, t) \equiv m^+(\theta, t) = e^{-i\Delta\omega_0 t} \sum_{p=-\infty}^{\infty} b_p E_{2,p}(t) e^{-i\theta(p + \frac{t}{TR})}, \quad (1.37)$$

$$m_z(\vec{\mathbf{r}}, t) \equiv m_z(\theta, t) = 1 - e^{-\frac{t}{T_1}} + \sum_{p=-\infty}^{\infty} c_p E_{1,p}(t) e^{-ip\theta}, \quad (1.38)$$

с основной частотой

$$\theta \equiv \theta(\vec{\mathbf{r}}) = \gamma (\vec{\mathbf{G}}, \vec{\mathbf{r}}) TR \quad (1.39)$$

и

$$E_{2,p}(t) = \exp \left\{ -\frac{t}{T_2} - D\gamma^2 G^2 TR^3 \left[ \frac{1}{3} \left( \frac{t}{TR} \right)^3 + p \left( \frac{t}{TR} \right)^2 + p^2 \frac{t}{TR} \right] \right\}, \quad (1.40)$$

$$E_{1,p}(t) = \exp \left\{ -\frac{t}{T_1} - D\gamma^2 G^2 TR^3 p^2 \frac{t}{TR} \right\}, \quad (1.41)$$

$p$  - индекс, пробегаящий целые значения; коэффициенты  $b_p$  и  $c_p$  могут быть определены из начальных условий рекурсивным образом.

Для каждой моды в разложениях (1.37) и (1.38) пространственная (частотная) зависимость заключена в фазовых множителях  $e^{-i(p + \frac{t}{TR})\theta}$  и  $e^{-ip\theta}$  для  $M^+$  и  $M_z$  соответственно. Сразу после импульса  $p$ -ая мода намагниченности может быть охарактеризована пространственным волновым вектором  $\vec{\mathbf{k}}_p = p\gamma TR \vec{\mathbf{g}}$  [79]. Между импульсами волновой вектор остается постоянным для продольных мод и линейно возрастает от  $\vec{\mathbf{k}}_p$  до  $\vec{\mathbf{k}}_{p+1}$  для поперечных. Величины  $E_{1,p}(t)$  и  $E_{2,p}(t)$  описывают искажения каждой моды,

обусловленные спиновой релаксацией и диффузией между импульсами. Присутствие пропорциональных  $p^2$  членов в показателях экспонент величин (1.40) и (1.41) делает высокие моды более чувствительными к диффузии. Очередной импульс, действуя на  $p$ -ую моду, генерирует моды с номерами  $p$  и  $-p$ . Таким образом, эволюция между импульсами связывает  $(p - 1)$ -ую и  $p$ -ую моды, а поворот импульсов  $p$ -ую и  $-p$ -ую, так что после  $n$  циклов импульсной последовательности все моды с номерами между  $-n$  и  $n$  окажутся связанными [79].

Отсюда, в частности, следует, что при наличии диффузии различные фазовые пути модулируются диффузией по-разному, причем результирующая модуляция вклада, обусловленного некоторым фазовым путем, определяется им в целом, а не только общим числом «продольных» и «поперечных» участков, как это имело бы место только при наличии спиновой релаксации, но без диффузии [70, 82, 83]. Таким образом, наличие диффузии значительно усложняет задачу вычисления эхо-амплитуд.

На разделении вкладов различных фазовых путей в спиновое эхо основаны ряд методов измерения коэффициента диффузии с помощью импульсных последовательностей. Это может быть достигнуто, например, путем использования неэквидистантных импульсов (т.е. непериодических импульсных последовательностей) [83], а также путем наблюдения эхо-сигналов в прерванных импульсных последовательностях (последовательностях с конечным числом импульсов, когда изучаются сигналы, следующие после последнего импульса и обусловленные конфигурациями более высоких (ненулевого) порядков) [84, 85].

По сравнению с FE-последовательностями, влияние диффузии на эхо-амплитуды в стандартной CPMG последовательности с номинальными резонансными  $180^\circ$  рефокусирующими импульсами менее выражено [82]. Это связано с тем, что в таких условиях основной вклад в эхо-сигналы определяется прямым эхом, которому соответствуют моды с номерами  $p = 0$  и  $\pm 1$  и которое поэтому значительно менее модулируется диффузией по сравнению со стимулированным эхом, которому соответствуют более высокие моды, т.е. рефокусирование намагниченности весьма эффективно. Так для указанной стандартной CPMG последовательности при неограниченной изотропной диффузии в линейном градиенте магнитного поля спад эха определяется фактором

$$m_n^+ \propto \exp \left\{ -n \left( \frac{TE}{T_2} + \frac{1}{12} D \gamma^2 G^2 T E^3 \right) \right\}, \quad (1.42)$$

что используется в стандартных методах измерения коэффициентов диффузии [6]. Напротив, в FE-последовательностях сигналы FID определяются стимулированным эхом, и влияние диффузии более существенно.

В случае ограниченной диффузии (при наличии отражающей стенки) спад эхосигналов уменьшается, при этом также существенно форма и размер доступного объема (поры) [81, 86, 87]. Оказывается, что в этом случае диффузионное искажение эхосигналов определяется параметром  $S/V$ , где  $S$  - площадь поверхности поры, а  $V$  ее объем [88, 89]. Таким образом, анализ поведения эхо-амплитуд в случае ограниченной диффузии может быть использован для характеристики размера и геометрии пор [86]. Также важна и форма градиента магнитного поля [86]: так если в случае неограниченной диффузии в линейном градиенте магнитного поля неограниченно возрастает от точки к точке, то, например, при cos-форме градиента магнитное поле остается ограниченным по величине, так что присутствие отражающей стенки более существенно для первого варианта и менее значимо для второго [86].

## 1.6 Влияние взаимодействия спинов

Рассмотренные выше классические приемы анализа эхо-амплитуд применимы для изучения эхо-сигналов от невзаимодействующих спинов, например, разбавленных ядер типа  $^{13}\text{C}$  или  $^{15}\text{N}$ . Взаимодействие спинов модулирует амплитуды спинового эха, что может привести к неправильной интерпретации экспериментальных данных [90, 91, 92]. В этом случае необходимо рассматривать спиновую систему, оперируя непосредственно спиновой МП  $\vec{\rho}$  (вектор в пространстве Лиувилля) и спиновым гамильтонианом:

$$\frac{d}{dt}\vec{\rho}(t) = -i\hat{H}\vec{\rho}(t) - \hat{\Gamma}\{\vec{\rho}(t) - \vec{\rho}_0\} , \quad (1.43)$$

где  $\hat{H}$  - супероператор коммутации с соответствующим спиновым гамильтонианом,  $\hat{\Gamma}$  - релаксационный супероператор,  $\vec{\rho}_0$  - равновесный оператор плотности [19, 93]. Однако размерность соответствующего пространства Лиувилля быстро возрастает с ростом числа спинов: так, например, в случае  $N$  спинов  $1/2$  вектор МП в пространстве Лиувилля содержит  $4^N$  компонент, и уже для двух спинов  $1/2$  размерность соответствующих суперматриц в пространстве Лиувилля составляет  $16 \times 16$ . Данное обстоятельство значительно усложняет анализ.

В качестве ортогональных базисных операторов  $\{B_s\}$ , которыми натянуто пространство Лиувилля в случае  $N$  спинов  $I_k = 1/2$  ( $k$  - индекс ядра), могут выступать всевозможные произведения

$$B_s = 2^{q-1} \prod_{k=1}^N (I_{ki})^{a_{ks}} \quad , \quad (1.44)$$

где  $i = x, y$  или  $z$ ,  $q$  - число операторов в произведении,  $a_{ks} = 1$  для  $q$  спинов и  $a_{ks} = 0$  для остальных  $N - q$  спинов [19]. В эксперименте непосредственно измеряются только поперечные компоненты намагниченности  $I_{kx}$  и  $I_{ky}$ , однако сложность анализа состоит в том, что один период импульсной последовательности, содержащий РЧ импульс и период свободной прецессии, в общем случае перемешивает все базисные операторы [19].

Так в случае СРМГ последовательности неселективных РЧ импульсов с произвольным углом рефокусирования в другой фазе приемника возникает сигнал («эхо вне фазы»), обусловленный взаимодействием спинов и отсутствующий в случае несвязанных спинов [90, 94]. Известно также, что при наличии только начальной мультиплетной поляризации спинов в двухимпульсной последовательности (неселективный РЧ импульс) -  $TE/2$ -( $180^\circ$  неселективный РЧ импульс) спустя время  $TE/2$  после второго импульса также возникает сигнала «эха вне фазы» [94], в то время как сигнал, обусловленный интегральной (равновесной) поляризацией, регистрируется в фазе («эхо в фазе»). При этом максимальная величина сигнала «эха вне фазы» достигается при  $45^\circ$  угле поворота возбуждающего импульс; для сравнения, оптимальный угол возбуждения для «эха в фазе» составляет  $90^\circ$  [94]. Для термически равновесных спиновых систем мультиплетная поляризация равна нулю, и составляющая сигнала, определяемая мультиплетной поляризацией, не содержит фона, что дает возможность, например, повысить отношение сигнал/шум. Соотношение двух типов поляризаций можно подобрать, выбирая подходящую систему: использование химической поляризации ядер (ХПЯ) [95], эффекта Оверхаузера [96], индуцируемой параводородом поляризация (ИПП) [97].

В случае слабого гетероядерного скалярного спин-спинового взаимодействия между спинами  $I$  и  $S$  (например, между  $^1H$  и  $^{15}N$ ,  $^1H$  и  $^{13}C$ ), когда разница химических сдвигов ядер относительно велика (по сравнению с константой спин-спинового взаимодействия  $J$ ) и импульсы подаются в резонансе к ядру  $I$ , модуляция спинового эха, обусловленная влиянием гетероядра  $S$ , сводится к нерезонансным эффектам (член гамильтониана

пропорциональный  $J S_z$ ) и наклону эффективного магнитного поля, ощущаемого ядром  $I$ , к поперечной плоскости. Однако наличие небольших отклонений от величины угла рефокусирования  $180^\circ$  может компенсировать эти нерезонансные эффекты, приводя к моноэкспоненциальному спаду эхо-сигналов [98].

В гомоядерном случае Фурье-преобразование огибающей эхо-сигналов дает спектр спин-эхо или  $J$ -спектр, в котором проявляется мультиплетная структура без химических сдвигов с ширинами линий, определяемыми величиной  $1/T_2$  [19]. Однако и здесь возможно подавление модуляций эхо-сигналов, причем здесь могут быть рассмотрены две предельных ситуации. Во-первых, при хорошо откалиброванных «жестких» импульсах ( $\omega_1 \gg \Delta\omega$ ;  $\Delta\omega$  здесь соответствует разнице химических сдвигов, поскольку импульс подается в резонансе к одному из ядер) сигналы эха практически не модулированы, если частота повторения импульсов достаточно велика по сравнению с разницей химических сдвигов ( $2\Delta\omega \times TE \ll 1$ , здесь  $TE$  включает длительность импульса), т.е. спины ведут себя как если бы они были магнитно эквивалентными [91, 99, 100, 101]. По мере уменьшения скорости приложения импульсов роль спин-спинового взаимодействия возрастает, и при  $2\Delta\omega \times TE \gg 1$  наблюдается обычная модуляция спинового эха на частоте константы спин-спинового взаимодействия  $J$  [101]. Во-вторых, в случае хорошо откалиброванных «мягких» импульсов ( $\omega_1 \ll \Delta\omega$ ) кумулятивное воздействие нерезонансных эффектов на модуляцию спин-спиновым взаимодействием может иметь драматический характер, поскольку для значительного влияния уже достаточно разницы химических сдвигов  $\Delta\omega \sim J$ . Модуляции могут быть погашены даже в случае небольших частот повторения импульсов ( $2\Delta\omega \times TE > 1$ ) [90, 101, 102]: скалярное взаимодействие тушится, кроме как вблизи точек  $\Delta\omega \times TE = \pi k$  ( $k$  - целое число), когда набеги фазы за два последовательных периода между импульсами гасят друг друга, так что амплитуда модуляций спинового эха спин-спиновым взаимодействием максимальна [90, 101]. Наконец, при умеренно сильных РЧ импульсах ( $\omega_1 \sim \Delta\omega$ ) тушение также может иметь место, если частота приложения импульсов удовлетворяет условию  $\Delta\omega \times TE \neq \pi k$  ( $k$  - целое число) [90, 103]. В случае сильного скалярного спин-спинового взаимодействия модуляции эхо-амплитуд все-таки проявляются, хотя с ростом  $J$  подавлять модуляции лучше, используя длинные мягкие импульсы [92, 104].

Таким образом, к настоящему времени в литературе имеется огромное число публикаций, посвященных импульсным методам ЯМР и МРТ, многие из которых рассматривают вопросы влияния различных аспектов на поведение эхо-сигналов в многоимпульсных последовательностях, однако рамки настоящей работы не позволяют в полной мере представить всю имеющуюся информацию. Тем не менее, даже простейшая из релевантных проблем - вычисление отклика системы невзаимодействующих спинов на периодическую цепочку импульсов с произвольным углом поворота в отсутствие трансляционной диффузии в неоднородном магнитном поле - до сих пор не была полностью решена. Ниже среди прочего будет приведено полное решение указанной задачи, для чего будет обобщен и применен метод ПФ, впервые предложенный в [27]. Тот же подход будет использован для анализа эволюции системы слабо связанных спинов  $1/2$  под действием CPMG последовательности с углом рефокусирования  $180^\circ$ .



## Глава 2

# Эволюция намагниченности в длинных периодических РЧ импульсных последовательностях: формализм производящих функций

В данной главе рассматривается вопрос применимости формализма ПФ для анализа поведения систем, описываемых периодическим гамильтонианом. В частности, данный подход использован для описания эволюции ядерной намагниченности под влиянием периодических многоэховых последовательностей РЧ импульсов с произвольными углом рефокусирования и отстройкой от резонанса. В предположении прямоугольных РЧ импульсов, несвязанных спинов  $1/2$  и отсутствия трансляционной диффузии рассчитаны ПФ для отдельных изохромат и эхо-амплитуд в последовательностях CPMG- и FE-типов.

Основные результаты данной главы опубликованы в работах [105] и [106].

## 2.1 Формализм производящих функций

### 2.1.1 Понятие производящей функции

Повторим определение ПФ, данное в разделе 1.4. ПФ для последовательности (в общем случае с бесконечным числом элементов) величин  $M_0, M_1, \dots, M_n, \dots$  определяется как функция комплексного переменного  $z$  следующим образом:

$$f(z) = M_0 + M_1 z + \dots + M_n z^n + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} M_n z^n, \quad (2.1)$$

где  $|z| < 1$ , что обеспечивает сходимость ряда с ограниченными коэффициентами при  $z^n$ . Таким образом, ПФ содержит полную информацию сразу обо всех величинах  $M_n$ .

Одно из преимуществ данного подхода состоит в том, что ПФ для набора величин, связанных неким рекуррентным соотношением, зачастую имеет сравнительно простой аналитический вид, в то время как явное выражение для  $M_n$  не может быть получено аналитически либо является весьма сложным. Так, например, форма ПФ для полиномов Лежандра

$$f(z) = \sum_{k=0}^{\infty} P_k(x) z^k = \frac{1}{\sqrt{1-2xz+z^2}} \quad (2.2)$$

значительно проще формы самих полиномов Лежандра.

Полагая  $z = e^{i\vartheta}$  ( $0 \leq \vartheta < 2\pi$ ) либо  $z = e^{-s}$  ( $s > 0$ ), можно видеть, что ПФ (2.1) в действительности представляет собой дискретное преобразование Фурье либо преобразование Лапласа соответственно. Таким образом, элемент  $M_n$  с произвольным порядковым номером  $n$  может быть легко вычислен из ПФ с помощью стандартного Фурье-преобразования последней или, другими словами, путем нахождения следующего интеграла:

$$M_n = \frac{1}{2\pi i} \oint f(z) \frac{dz}{z^{n+1}}. \quad (2.3)$$

Другой способ получения  $M_n$  численно или аналитически - разложение ПФ в ряд Тейлора в точке  $z = 0$  - следует из самого определения ПФ (2.1):

$$M_n = \frac{1}{n!} \left. \frac{d^n}{dz^n} f(z) \right|_{z=0}. \quad (2.4)$$

### 2.1.2 Общий случай периодического гамильтониана

Рассмотрим эволюцию МП в пространстве Лиувилля, в котором МП представляет собой вектор, составленный из ее элементов. Обозначим МП после  $n$ -го периода гамильтониана как  $\vec{\rho}_n$ . Знание гамильтониана и, таким образом, эволюции МП за один его период, позволяет связать  $\vec{\rho}_n$  и  $\vec{\rho}_{n+1}$  с помощью некоторого рекуррентного соотношения, которое зачастую имеет следующий линейный вид:

$$\vec{\rho}_{n+1} = \mathbf{A}\vec{\rho}_n + \vec{B}, \quad (2.5)$$

где  $\mathbf{A}$  и  $\vec{B}$  не зависят от  $n$ . Отсюда непосредственно легко получить соответствующую ПФ для МП  $\vec{\rho}_n$ . Для этого домножим обе стороны уравнения (2.5) на  $z^n$  и выполним суммирование от  $n = 0$  до бесконечности. Слева при этом получим

$$\frac{1}{z} (\vec{\rho}_1 z + \vec{\rho}_2 z^2 + \vec{\rho}_3 z^3 + \dots) = \frac{1}{z} (\vec{f}(z) - \vec{\rho}_0), \quad (2.6)$$

где

$$\vec{f}(z) = \vec{\rho}_0 + \vec{\rho}_1 z + \dots + \vec{\rho}_n z^n + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \vec{\rho}_n z^n \quad (2.7)$$

представляет собой ПФ для МП, в то время как суммирование справа дает

$$\mathbf{A}(\vec{\rho}_0 + \vec{\rho}_1 z + \dots + \vec{\rho}_n z^n + \dots) + \vec{B}(1 + z + \dots + z^n + \dots) = \mathbf{A}\vec{f}(z) + \frac{1}{1-z}\vec{B}. \quad (2.8)$$

Разрешение полученного уравнения относительно ПФ  $\vec{f}(z)$  дает

$$\vec{f}(z) = (\mathbf{E} - z\mathbf{A})^{-1} \left( \vec{\rho}_0 + \frac{z}{1-z}\vec{B} \right) \quad (2.9)$$

( $\mathbf{E}$  - единичный оператор). Как будет указано ниже, в пренебрежении диффузионными процессами для многих стандартных периодических МРТ и ЯМР последовательностей РЧ импульсов имеют место рекуррентные соотношения типа (2.5), и, таким образом, соответствующие ПФ могут быть легко получены с помощью уравнения (2.9). Более того, ПФ для различных импульсных последовательностей могут быть затабулированы подобно тому, как это сделано для Фурье- и Лаплас-образов различных функций. Эта аналогия особенно показательна, поскольку, как было отмечено выше, ПФ фактически представляет собой аналог Фурье- (Лаплас-) образа дискретной величины  $\vec{\rho}_n \equiv \vec{\rho}(n)$ . В свою очередь, наличие ПФ значительно упрощает вычисление (численное или аналитическое) МП  $\vec{\rho}_n$  и, в конечном счете, решение обратной задачи по извлечению необходимых параметров из экспериментальных данных.

Наконец, стационарная МП  $\vec{\rho}_n$  ( $n \rightarrow \infty$ ) также может быть легко найдена из ПФ:

$$\vec{\rho}_{st} = \lim_{n \rightarrow \infty} \vec{\rho}_n = \lim_{z \rightarrow 1} \left( (1-z)\vec{f}(z) \right). \quad (2.10)$$

## 2.2 Расчет ПФ для одного изохромата

В качестве примера периодической РЧ импульсной последовательности рассмотрим СРМГ последовательность

$$\alpha_{-y}^{ex} - TE/2 - \alpha_x^{ref} - TE - \alpha_x^{ref} - TE - \dots \quad (2.11)$$

с произвольными углом поворота возбуждающего ( $\alpha^{ex}$ ) и рефокусирующего ( $\alpha^{ref}$ ) импульсов; нижние индексы  $-y$  и  $x$  обозначают фазы (во вращающейся с частотой РЧ

поля системе координат) возбуждающего и рефокусирующих импульсов соответственно,  $TE$  - межимпульсный период (время эха). Мы рассмотрим систему невзаимодействующих спинов, когда для описания эволюции вектора намагниченности применимы феноменологические уравнения Блоха (1.5). Также будем измерять намагниченность в единицах равновесной намагниченности  $M_{eq}$ . Нас будет интересовать сигнал спинового эха точно в середине межипульсного периода. Как можно видеть, в этом случае один период данной последовательности имеет вид  $TE/2 - \alpha_x^{ref} - TE/2$ , и, таким образом, эволюция одного спина за один период складывается из следующих этапов: прецессия вокруг оси  $z$ , также сопровождающаяся релаксацией намагниченности, затем - поворот РЧ импульсом, приложенным вдоль оси  $x$ , и снова прецессия вокруг оси  $z$  с одновременной спиновой релаксацией. Возбуждающий же импульс служит для задания начального условия, т.е. компонент вектора намагниченности перед первым периодом последовательности. Обозначим эту начальную намагниченность сразу после возбуждающего импульса как  $\vec{m}_0 = (m_0^+, m_0^-, m_{z0})^T$ , где  $m_0^+ = m_{x0} + i m_{y0}$ ,  $m_0^- = m_{x0} - i m_{y0}$ , индекс  $\mathbf{T}$  означает транспонирование. Всюду далее мы будем рассматривать прямоугольные РЧ импульсы и считать их достаточно короткими, чтобы их воздействие могло быть сведено к мгновенному повороту намагниченности; влияние диффузии также не будет учитываться.

В рамках данных допущений может быть получено рекуррентное соотношение (1.6), связывающее векторы намагниченности  $\vec{m}_n$  и  $\vec{m}_{n+1}$  для некоторого изохромата в момент регистрации  $n$ -го и  $(n+1)$ -го эхо-сигналов соответственно. Можно видеть, что рекуррентное соотношение (1.6) имеет ту же форму, что и соотношение (2.5), и, следовательно, соответствующая ПФ для величин  $\vec{M}_n$  может быть легко найдена с помощью уравнения, аналогичного уравнению (2.9). Опуская промежуточные выкладки, приведем конечное выражение для ПФ (поскольку регистрируемый сигнал определяется поперечной компонентой намагниченности  $m_n^+$ , здесь и далее приводится только соответствующая поперечная компонента ПФ  $f^+(z) = f_x(z) + i f_y(z)$ ):

$$f^+(z) \equiv f^+(z, \omega_1, \Delta\omega, U) = \frac{D_0 m_0^+ + R_1 U + R_2 U^2 + R_3 U^3}{D_0 + D_1 U^2 + D_2 U^4}, \quad (2.12)$$

где

$$R_1 = z \xi_2 \frac{\lambda^*}{\lambda} R_3 = 2z^2 \xi_2^{3/2} \mu \lambda^* \left[ \frac{1 - z \xi_1}{1 - z} - \xi_1^{1/2} (1 - m_{z0}) \right], \quad (2.13)$$

$$R_2 = [1 - z \xi_1 (|\lambda|^2 - \mu^2)] m_0^+ + z \xi_2 \mu^2 (1 + z \xi_1) m_0^-, \quad (2.14)$$

$$D_0 = \left(\frac{\lambda^*}{\lambda}\right)^2 D_2 = z \xi_2 \lambda^{*2} (1 - z \xi_1), \quad (2.15)$$

$$D_1 = 1 - z^3 \xi_1 \xi_2^2 - z (\xi_1 - z \xi_2^2) (|\lambda|^2 - \mu^2). \quad (2.16)$$

Выражение (2.12) задает ПФ для некоторого выбранного изохромата. Стационарная намагниченность для данного изохромата может быть легко найдена с помощью уравнения (2.10):

$$m_{st}^+ = \frac{2\mu U \sqrt{\xi_2} (1 - \xi_1) (\xi_2 \lambda^* + \lambda U^2)}{(D_0 + D_1 U^2 + D_2 U^4)|_{z=1}} \quad (2.17)$$

при наличии спиновой релаксации и

$$m_{st}^+ = \frac{m_{x0} + m_{z0} \frac{\lambda U + \lambda^* U^{-1}}{2\mu}}{1 + \left(\frac{\lambda U + \lambda^* U^{-1}}{2\mu}\right)^2} \quad (2.18)$$

- в отсутствие релаксации ( $T_1 = T_2 = \infty$ , т.е.  $\xi_1 = \xi_2 = 1$ ). Последнее выражение согласуется с известным результатом (1.26) [22].

Рассчитаем теперь сами величины  $m_n^+$  для определенного изохромата из ПФ, используя уравнение (2.4). Для этого заметим, что ПФ (2.12) представляет собой дробно-рациональную функцию, в числителе которой стоит полином 3-ей, а в знаменателе - 4-ой степени  $z$ , и, следовательно, ее производная  $n$ -го порядка может быть легко найдена и представлена в виде некоторой кратной суммы. Конечный результат для  $m_n^+$  имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} m_n^+ &= (\xi_1 \xi_2)^{n/2} [m_0^+ V_n + s_1 V_{n-1} + s_2 V_{n-2}] + 2\xi_2^{1/2} \mu \lambda U \left( \sum_{r=0}^{n-1} V_k - \xi_1 \sum_{r=0}^{n-2} V_k \right) \\ &\quad + 2\xi_2^{3/2} \mu \lambda^* U^{-1} \left( \sum_{r=0}^{n-2} V_k - \xi_1 \sum_{r=0}^{n-3} V_k \right), \end{aligned} \quad (2.19)$$

где

$$s_1 = [\chi \lambda^{*2} U^{-2} - \chi^{-1} (|\lambda|^2 - \mu^2)] m_0^+ + \chi \mu^2 m_0^- + 2\mu \lambda U (1 - m_{z0}), \quad (2.20)$$

$$s_2 = -\lambda^{*2} U^{-2} m_0^+ + \mu^2 m_0^- + 2\chi \mu \lambda^* U^{-1} (1 - m_{z0}), \quad (2.21)$$

$$\begin{aligned} V_k &= (\xi_1 \xi_2)^{k/2} \sum_{r+2p+3q=k} \frac{1}{r!p!q!} [\chi^{-1} (|\lambda|^2 - \mu^2) - \chi (\lambda^2 U^2 - \lambda^{*2} U^{-2})]^r \times \\ &\quad \times [-\chi^2 (|\lambda|^2 - \mu^2) + \lambda^2 U^2 + \lambda^{*2} U^{-2}]^p \chi^q, \end{aligned} \quad (2.22)$$

$$\chi = \sqrt{\xi_2 / \xi_1} = \exp \left\{ -\frac{TE}{2} \left( \frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right) \right\}. \quad (2.23)$$

Наконец, определим начальные условия, задаваемые возбуждающим прямоугольным импульсом с номинальным углом поворота  $\alpha^{ex} = \omega_1 \tau_1$  ( $\tau_1$  - длительность возбуждающего импульса) и отстройкой от резонанса  $\Delta\omega$ , приложенным вдоль направления  $-y$ :

$$m_{x0} = \cos \varphi \sin \left( \alpha^{ex} \sqrt{1 + (\Delta\omega/\omega_1)^2} \right), \quad (2.24)$$

$$m_{y0} = -\sin 2\varphi \sin^2 \left( \frac{\alpha^{ex}}{2} \sqrt{1 + (\Delta\omega/\omega_1)^2} \right), \quad (2.25)$$

$$m_{z0} = \cos^2 \varphi \cos \left( \alpha^{ex} \sqrt{1 + (\Delta\omega/\omega_1)^2} \right) + \sin^2 \varphi. \quad (2.26)$$

Следует заметить, что приведенные результаты также применимы и для составных импульсов, если под  $\alpha$  (выражение (1.16)) и  $\varphi$  (выражение (1.17)) понимать угол поворота вокруг результирующей оси поворота и угол наклона ее к поперечной плоскости соответственно.

## 2.3 ПФ для эхо-амплитуд

### 2.3.1 Применение теории конфигураций для анализа эхо-сигналов

На первый взгляд, непосредственное использование рекурсии (1.6) более предпочтительно для вычисления намагниченности, поскольку выражение для ПФ (2.12), а вместе с ним и выражение для  $m_n^+$  для определенного изохромата, является достаточно сложным. Однако последовательный расчет намагниченности при больших номерах  $n$  может быть только численным, в то время как наличие аналитического результата, пусть даже сложного и громоздкого, является более желаемым, поскольку позволяет пролить свет на механизм формирования эхо-сигнала. К тому же использование аналитических выражений значительно упрощает решение обратной задачи по извлечению необходимых параметров из экспериментальных данных.

Более того, для получения результатов для наблюдаемых эхо-амплитуд (здесь и далее под термином «эхо-амплитуда» мы подразумеваем общую комплексную намагниченность, возникающую в образце в момент регистрации эхо-сигнала) выражения (2.12) и (2.19) дополнительно необходимо усреднить по неоднородной ширине. Данная процедура весьма трудоемка при непосредственном использовании рекуррентного соотношения (1.6), но не представляет значительной сложности при использовании ПФ: усреднение по частотным изохроматам может быть выполнено непосредственно в ПФ.

Для усреднения по различным изохроматам мы привлекаем теорию конфигураций [10, 70, 71, 72], согласно которой в момент эха намагниченность  $m_n^+$  для определенного изохромата можно разбить на несколько конфигураций, причем такое разбиение представляет собой не что иное, как разложение в дискретный ряд Фурье:

$$m_n^+ \equiv m_n^+(\omega_1, \Delta\omega, U) = \sum_{k=-2n}^{2n} M_{nk}^+(\omega_1, \Delta\omega) e^{-k\psi} = \sum_{k=-2n}^{2n} M_{nk}^+(\omega_1, \Delta\omega) U^k \quad (2.27)$$

( $M_{n-2n}^+(\omega_1, \Delta\omega) = M_{n1-2n}^+(\omega_1, \Delta\omega) = 0$  при  $n \neq 0$ ). Разложение (2.27) непосредственно следует и из самого рекуррентного соотношения (1.6), а также из уравнений (2.19) - (2.22). Следовательно, ПФ (2.12) в свою очередь можно разбить на конфигурации:

$$\begin{aligned} f^+(z, \omega_1, \Delta\omega, U) &= \sum_{n=0}^{\infty} m_n^+(\omega_1, \Delta\omega, U) z^n \\ &= \sum_{k=-\infty}^{+\infty} F_k^+(z, \omega_1, \Delta\omega) e^{-k\psi} = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} F_k^+(z, \omega_1, \Delta\omega) U^k, \end{aligned} \quad (2.28)$$

где  $k$ -ая конфигурация

$$F_k^+(z, \omega_1, \Delta\omega) \equiv F_k^+(z) = \sum_{n \geq |k|/2}^{\infty} M_{nk}^+(\omega_1, \Delta\omega) z^n \quad (2.29)$$

зависит только от параметров импульса, в то время как быстро осциллирующий множитель  $U^k$  определяется отстройкой от резонанса между импульсами (см. уравнение (1.11)), которая может отличаться от отстройки от резонанса во время импульса  $\Delta\omega$  (например, из-за включения градиента магнитного поля между импульсами).

Выражение (2.28) можно рассматривать как разложение ПФ в ряд Лорана по степеням  $U$ . Отсюда следует, что  $k$ -ая конфигурация  $F_k^+(z, \omega_1, \Delta\omega)$  может быть вычислена следующим способом:

$$F_k^+(z, \omega_1, \Delta\omega) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{|U|=1} \frac{f^+(z, \omega_1, \Delta\omega, U)}{U^{k+1}} dU, \quad (2.30)$$

который может быть рассчитан с помощью теории вычетов [109].

### 2.3.2 ПФ для МРТ СРМГ эхо-амплитуд

В МРТ импульсных последовательностях между импульсами прикладывается, как правило, линейный градиент магнитного поля [6, 7, 8], поэтому отстройка от резонанса, а вместе с ней и набег фазы за полупериод между импульсами, зависит от координат:

$$\psi = \psi_{MPT}(\vec{r}) = \left( \Delta\omega + \gamma \vec{G}, \vec{r} \right) \frac{TE}{2}. \quad (2.31)$$

Если разброс  $\psi_{MPT}$  достаточно широк, то усреднение намагниченности по неоднородной ширине (частотным изохромам), индуцируемой градиентом магнитного поля, сводится к выделению нулевой конфигурации  $M_{n_0}^+(\omega_1, \Delta\omega)$  из общего ряда (2.27), поскольку все остальные члены с  $k \neq 0$  усредняются до нуля из-за быстро осциллирующих множителей  $U^k$ . Это можно сделать, например, собрав все члены при  $U^0$  в уравнении для  $m_n^+$  (2.19). Соответственно сказанному, усреднение ПФ сводится к выделению нулевой конфигурации  $F_0^+(z, \omega_1, \Delta\omega)$  из общего ряда (2.28), что позволяет значительно упростить форму ПФ.

Поскольку из всех величин  $M_{n_k}^+(\omega_1, \Delta\omega) \equiv M_{n_k}^+$  нас будут интересовать только  $M_{n_0}^+ = M_{x_{n_0}} + i M_{y_{n_0}}$ , то всюду далее, если специально не оговорено, индекс «0» будет опущен, и под эхо-амплитудами будет подразумеваться величина  $M_n^+ = M_{x_n} + i M_{y_n}$ ; отметим также, что в этих обозначениях  $m_{x_0} = M_{x_{00}} \equiv M_{x_0}$  и  $m_{y_0} = M_{y_{00}} \equiv M_{y_0}$ .

Используя выражение (2.30), для  $F_0(z)$  получаем следующий результат:

$$\begin{aligned} F_0^+(z) &= \sum_{n=0}^{\infty} M_n^+ z^n = \frac{M_{x_0}}{2} \left[ 1 + \sqrt{\frac{X}{Y}} \right] + i \frac{M_{y_0}}{2} \left[ 1 + \sqrt{\frac{Y}{X}} \right], \\ X &= (1 + z\xi_2) [1 - z(\xi_1 + \xi_2) (\cos \alpha \cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi) + z^2 \xi_1 \xi_2], \\ Y &= (1 - z\xi_2) [1 - z(\xi_1 - \xi_2) (\cos \alpha \cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi) - z^2 \xi_1 \xi_2], \end{aligned} \quad (2.32)$$

где все обозначения сохраняют тот же смысл, что и раньше. Подчеркнем, что  $F_0^+(z)$  представляет собой ПФ для эхо-амплитуд  $M_n^+$ , т.е. для комплексной намагниченности  $m_n^+$ , усредненной по частотным изохромам. Параметры возбуждающего импульса проявляются здесь только в начальных условиях  $M_{x_0}$  и  $M_{y_0}$  (уравнения (2.24) и (2.25)). Таким образом, в действительности ПФ (2.32) описывает как СРМГ, так и СР импульсные последовательности, равно как и последовательности с произвольной фазой возбуждающего импульса - нужно лишь выбрать соответствующие начальные условия. Более того, как будет показано ниже, полученный результат может быть применен и к последовательностям с циклированием фазы рефокусирующих импульсов, когда фаза  $n$ -го рефокусирующего импульса равна  $(n-1)\phi$ , т.е. линейно зависит от номера импульса.

Можно видеть, что если определить эффективный угол поворота  $\alpha_e$  как

$$\cos \alpha_e = \cos \alpha \cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi = \cos \left( \frac{\alpha^{ref}}{|\cos \varphi|} \right) \cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi, \quad (2.33)$$

то ПФ (2.32) принимает форму, аналогичную той, которая имела бы место в резонансе



( $\Delta\omega = 0$ , т.е.  $\varphi = 0$ ). Таким образом, нерезонансный случай ( $\Delta\omega \neq 0$ ) полностью аналогичен резонансному ( $\Delta\omega = 0$ ) с переопределенным углом поворота  $\alpha_e$ . Данный результат впервые был получен в работе [67] и естественно следует из формы ПФ (2.32).

Также определим стационарную амплитуду спинового эха из ПФ (2.32):

$$M_{st}^+ = M_{x0} \left| \sin \frac{\alpha_e}{2} \right| \quad (2.34)$$

в отсутствие спиновой релаксации ( $T_1 = T_2 = \infty$ , т.е.  $\xi_1 = \xi_2 = 1$ ) и  $M_{st}^+ = 0$  при наличии спиновой релаксации ( $T_1, T_2 \neq \infty$ , т.е.  $\xi_{1,2} \neq 1$ ).

Наконец, сделаем следующее замечание. Эволюция продольной компоненты намагниченности между импульсами может быть представлена как релаксация «старой» намагниченности к нулю (в рекурсии (1.6) задается матрицей  $\mathbf{Q}$ ) и одновременный рост «новой» равновесной намагниченности (не зависящей от  $U$  и поэтому содержащей только нулевую конфигурацию продольной намагниченности; в рекурсии (1.6) задается вектором  $\vec{S}_{eq}$ ). После приложения рефокусирующего импульса эта «новая» продольная намагниченность частично повернется в поперечную плоскость, но за следующие пол-периода между импульсами полностью дефазуруется и не даст вклада в очередной эхо-сигнал. Очевидно также, что это выросшая за некий межимпульсный период «новая» продольная намагниченность не даст вклада и во все последующие эхо-сигналы, поскольку ее полная эволюция к моменту очередного сигнала будет содержать нечетное число полупериодов между импульсами и, следовательно, не может быть рефокусирована очередным РЧ импульсом. По той же причине МРТ СPMG эхо-сигнал не зависит от  $m_{z0} \equiv M_{z0}$ . Данное утверждение также непосредственно следует из разложения ПФ для определенного изохромата  $f^+(z)$  по конфигурациям. Действительно, оказывается, что только нечетные конфигурации  $F_{2k+1}^+(z, \omega_1, \Delta\omega)$  содержат вклад, обусловленный вектором  $\vec{S}_{eq}$  и  $m_{z0} \equiv M_{z0}$ , в то время как нулевая конфигурация  $F_0^+(z, \omega_1, \Delta\omega)$  от последних не зависит (см. уравнения (2.49) и (2.50) ниже). Таким образом, в МРТ спиновое эхо вносит вклад только поперечная намагниченность, полная предыстория которой тянется с самого начала последовательности, а вновь растущая во время каждого межимпульсного периода намагниченность не дает вклада ни в одно из последующих эхо-сигналов. В дальнейшем это замечание понадобится нам для некоторых качественных объяснений полученных результатов, когда эволюцию продольной компоненты намагниченности мы будем рассматривать только как релаксацию к нулевому значению, а

учет вновь растущей продольной компоненты производиться не будет.

### 2.3.3 Циклирование фазы РЧ импульсов в МРТ СPMG последовательности

Положим, фаза рефокусирующего импульса в МРТ СPMG последовательности линейно зависит от его номера и равна  $(n - 1)\phi$ , тогда матрица поворота  $n$ -ым рефокусирующим импульсом может быть представлена в виде

$$\mathbf{P}_n = \mathbf{\Lambda}^{-(n-1)} \mathbf{P} \mathbf{\Lambda}^{n-1}, \quad (2.35)$$

где

$$\mathbf{\Lambda} = \begin{pmatrix} e^{i\phi} & 0 & 0 \\ 0 & e^{-i\phi} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (2.36)$$

а матрица  $\mathbf{P}$  - матрица поворота РЧ импульсом с нулевой фазой, определенная в уравнении (1.13). Тогда рекуррентное соотношение между  $\vec{m}_n$  и  $\vec{m}_{n+1}$  записывается следующим образом:

$$\begin{aligned} \vec{m}_{n+1} &= \mathbf{Q} \mathbf{P}_{n+1} \mathbf{Q} \vec{m}_n + (\mathbf{Q} \mathbf{P}_{n+1} + \mathbf{E}) \vec{S}_{eq} \\ &= \mathbf{Q} \mathbf{\Lambda}^{-n} \mathbf{P} \mathbf{\Lambda}^n \mathbf{Q} \vec{m}_n + (\mathbf{Q} \mathbf{\Lambda}^{-n} \mathbf{P} \mathbf{\Lambda}^n + \mathbf{E}) \vec{S}_{eq}. \end{aligned} \quad (2.37)$$

Замечая, что матрицы  $\mathbf{Q}$  и  $\mathbf{\Lambda}$  коммутируют, представим данное уравнение в следующем виде:

$$\vec{m}_{n+1} = \mathbf{\Lambda}^{-n} \mathbf{Q} \mathbf{P} \mathbf{Q} \mathbf{\Lambda}^n \vec{m}_n + (\mathbf{\Lambda}^{-n} \mathbf{Q} \mathbf{P} \mathbf{\Lambda}^n + \mathbf{E}) \vec{S}_{eq}, \quad (2.38)$$

или, вводя величины

$$\vec{\tilde{m}}_n = \mathbf{\Lambda}^{n-1/2} \vec{m}_n = (e^{i(n-1/2)\phi} m_n^+, e^{-i(n-1/2)\phi} m_n^-, m_{zn})^T, \quad (2.39)$$

$$\tilde{\mathbf{Q}} = \mathbf{Q} \mathbf{\Lambda}^{1/2} = \begin{pmatrix} \sqrt{\xi_2} U e^{i\phi/2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{\xi_2} U^{-1} e^{-i\phi/2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{\xi_1} \end{pmatrix}, \quad (2.40)$$

окончательно запишем

$$\vec{\tilde{m}}_{n+1} = \tilde{\mathbf{Q}} \mathbf{P} \tilde{\mathbf{Q}} \vec{\tilde{m}}_n + (\tilde{\mathbf{Q}} \mathbf{P} + \mathbf{\Lambda}^{1/2}) \mathbf{\Lambda}^n \vec{S}_{eq} = \tilde{\mathbf{Q}} \mathbf{P} \tilde{\mathbf{Q}} \vec{\tilde{m}}_n + (\tilde{\mathbf{Q}} \mathbf{P} + \mathbf{E}) \vec{S}_{eq}. \quad (2.41)$$

В последнем равенстве учтено, что  $\mathbf{\Lambda}^k \vec{S}_{eq} = \vec{S}_{eq}$ . Можно видеть, что соотношение (2.41) полностью аналогично рекурсии (1.6). Также заметим, что  $\tilde{\mathbf{Q}}$  может быть получена

из  $\mathbf{Q}$ , определенной уравнением (1.9), путем простой замены  $U \rightarrow U e^{i\phi/2}$ , и, таким образом, становятся очевидными следующие результаты для полной ( $f^{c+}(z, \omega_1, \Delta\omega, U)$ ) и усредненной по изохроматам ( $F_0^{c+}(z, \omega_1, \Delta\omega)$ ) ПФ при наличии циклирования фазы рефокусирующих импульсов:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \tilde{m}_n^+ z^n = e^{-i\phi/2} \sum_{n=0}^{\infty} m_n^+ z^n e^{in\phi} = f^+(z, \omega_1, \Delta\omega, U e^{i\phi/2}), \quad (2.42)$$

$$f^{c+}(z, \omega_1, \Delta\omega, U) = \sum_{n=0}^{\infty} m_n^+ z^n = e^{i\phi/2} f^+(z e^{-i\phi}, \omega_1, \Delta\omega, U e^{i\phi/2}), \quad (2.43)$$

и

$$\sum_{n=0}^{\infty} \tilde{M}_n^+ z^n = e^{-i\phi/2} \sum_{n=0}^{\infty} M_n^+ z^n e^{in\phi} = F_0^+(z, \omega_1, \Delta\omega), \quad (2.44)$$

$$F_0^{c+}(z, \omega_1, \Delta\omega) = \sum_{n=0}^{\infty} M_n^+ z^n = e^{i\phi/2} F_0^+(z e^{-i\phi}, \omega_1, \Delta\omega), \quad (2.45)$$

где функции  $f^+(x_1, x_2, x_3, x_4)$  и  $F_0^+(x_1, x_2, x_3)$  определены выше (уравнения (2.12) и (2.32) соответственно;  $x_1, x_2, x_3$ , и  $x_4$  - внутренние переменные). Другими словами, все результаты, верные для  $M_n^+$ , также применимы к величине  $\tilde{M}_n^+ = e^{i(n-1/2)\phi} M_n^+$ . Например, при  $\phi = \pi$ , т.е. когда фазы рефокусирующих импульсов поочередно равны  $x$  и  $-x$ , имеем  $\tilde{M}_n^+ = i(-1)^{n+1} M_n^+ = (-1)^n (M_{yn} - i M_{xn})$ , и СРМГ импульсная последовательность эффективно превращается в СР последовательность и наоборот, что находится в полном согласии с результатами, представленными в работе [43].

### 2.3.4 МРТ СРМГ последовательности с конечным числом импульсов. Послеимпульсное спиновое эхо

ПФ для определенного изохромата (2.12) содержит полную информацию сразу обо всех конфигурациях и их вкладах в сигналы спинового эха. Поэтому с помощью данной ПФ может быть рассмотрена даже более общая задача, когда импульсная последовательность обрывается после  $n$ -го рефокусирующего импульса, но сохраняется временная схема для градиента магнитного поля. В этом случае послеимпульсные эхо-сигналы продолжают регистрироваться в моменты времени  $t = (n + \frac{k}{2}) \times TE$ ,  $k = 0, 1, 2, \dots$  (здесь мы пренебрегаем длительностью возбуждающего и рефокусирующих РЧ импульсов). Действительно, в отсутствие рефокусирующих импульсов зависимость поперечной компоненты  $m^+$  от времени  $t$  описывается следующим образом

$$m^+(t) = m_n^+ e^{-t/T_2} e^{-i(\Delta\omega + \gamma \vec{G} \cdot \vec{r})t} = m_n^+ \xi_2^{t/TE} U^{2t/TE}, \quad (2.46)$$

включающем прецессию вокруг оси  $z$  и релаксацию к нулю. Здесь  $m_n^+$  - поперечная намагниченность для данного изохромата в момент последнего «нормального» эхо-сигнала, регистрируемого через время  $TE/2$  после последнего рефокусирующего импульса с порядковым номером  $n$ . Принимая во внимание разложение (2.27), далее запишем:

$$m^+(t) = \xi_2^{\frac{t}{TE}} \sum_{k=-2n}^{2n} M_{nk}^+(\omega_1, \Delta\omega) U^{k+\frac{2t}{TE}} = \xi_2^{\frac{t}{TE}} \sum_{k=-2n}^{2n} M_{n-k}^+(\omega_1, \Delta\omega) U^{-k+\frac{2t}{TE}}. \quad (2.47)$$

Таким образом, в моменты времени  $t = k \times TE/2$ ,  $k = 1, 2, \dots$  после последнего «нормального» эхо-сигнала  $M_{n0}^+(\omega_1, \Delta\omega)$  будут наблюдаться сигналы, обусловленные рефокусированием ненулевых конфигураций  $M_{n-k}^+(\omega_1, \Delta\omega)$ , которое теперь осуществляется только за счет градиента магнитного поля. Амплитуда такого послеимпульсного эхо-сигнала будет равна  $M_{nk}^{+after}(\omega_1, \Delta\omega) \equiv M_{nk}^{+after} = \xi_2^{k/2} M_{n-k}^+(\omega_1, \Delta\omega)$  (индекс *after* обозначает «after-pulses echo», т.е. послеимпульсные эхо-сигналы). В свою очередь, величина  $M_{n-k}^+(\omega_1, \Delta\omega)$  может быть рассчитана из  $F_{-k}^+(z, \omega_1, \Delta\omega)$  разложением последней в ряд Тейлора или с помощью стандартного преобразования Фурье, выбирая  $z$  на единичном круге. Другими словами, ненулевые конфигурации в разложении (2.28) полной ПФ (2.12) в действительности являются ПФ для послеимпульсных эхо-амплитуд:

$$F_{-k}^+(z) = \sum_{n \geq k/2}^{\infty} M_{n-k}^+ z^n = \xi_2^{-k/2} \sum_{n=0}^{\infty} M_{nk}^{+after} z^n, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (2.48)$$

где  $M_{nk}^{+after} = 0$  при  $k > 2n$ . Заметим, что суммирование в уравнении (2.48) осуществляется не по порядковому номеру послеимпульсного эхо-сигнала  $k$ , а по номеру рефокусирующего импульса  $n$ , на котором обрывается последовательность.

Используя уравнение (2.30), можно получить следующий результат для  $F_{-k}(z)$ :

$$F_{-2k}^+(z) = [U_1(z)]^k [F_0^+(z) - (1 - \delta_{k0}) M_0^+], \quad (2.49)$$

$$F_{-2k+1}^+(z) = z \xi_2^{1/2} \frac{\mu}{\lambda^*} [U_1(z)]^k \left[ \frac{1}{1-z} - \xi_1^{1/2} \frac{1-m_{z0}}{1-z\xi_1} \right] \times \left[ 2\delta_{k0} - 1 + \frac{(1-z^2\xi_2^2)(|\lambda|^2 - \mu^2 - z\xi_1)}{\sqrt{XY}} \right], \quad (2.50)$$

где

$$U_1(z) = -\frac{D_1}{2D_2} + \frac{\sqrt{D_0^2 - 4D_1D_2}}{2D_2} = -\frac{D_1}{2D_2} + \frac{\sqrt{XY}}{2D_2}, \quad (2.51)$$

а  $F_0^+(z)$ ,  $X$  и  $Y$  определены в уравнении (2.32). Заметим также, что  $X$ ,  $Y$ ,  $D_0$ ,  $D_1$  и  $D_2$  также являются функциями переменной  $z$ .

Используя данные выражения, можно составить и такую ПФ  $F_n^{+after}(y, \omega_1, \Delta\omega) \equiv F_n^{+after}(y)$  для послеимпульсных эхо-амплитуд  $M_{nk}^{+after}$  в СРМГ последовательности с  $n$  рефокусирующими импульсами, в которой суммирование осуществляется по номеру эхо-сигнала  $k$  при фиксированном  $n$ :

$$\begin{aligned}
F_n^{+after}(y) &= \sum_{k=0}^{\infty} M_{nk}^{+after} y^n = \\
&= \frac{1}{n!} \frac{\partial^n}{\partial z^n} \left[ M_0^+ + \frac{F_0^+(z) - M_0^+ + y^{-1} \xi_2^{-1/2} U_1^{-1}(z) F_{-1}^+(z)}{1 - y^2 \xi_2 U_1(z)} \right] \Big|_{z=0} = \\
&= \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{dz}{z^{n+1}} \left[ M_0^+ + \frac{F_0^+(z) - M_0^+ + y^{-1} \xi_2^{-1/2} U_1^{-1}(z) F_{-1}^+(z)}{1 - y^2 \xi_2 U_1(z)} \right], \quad (2.52)
\end{aligned}$$

где для сходимости ряда  $|y| < 1$ ; при записи последних равенств были приняты во внимание уравнения (2.3) и (2.4). Амплитуда послеимпульсных эхо-сигналов  $M_{nk}^{+after}$ ,  $k = 0, 1, \dots$  также может быть найдена из выражения (2.19) для намагниченности для отдельного изохромата путем нахождения коэффициента при  $U^{-k}$  и умножения его на  $\xi_2^{k/2}$ .

Заметим, что послеимпульсные эхо-сигналы будут наблюдаться также и в моменты времени, которые в бесконечной последовательности соответствуют очередному рефокусирующему импульсу ( $k$  - нечетное). Как следует из выражения (2.50), такие эхо-сигналы не зависят от поперечных компонент начальной намагниченности  $m_{x0}$  и  $m_{y0}$ , но только от ее продольной компоненты  $m_{z0}$  (см. замечание в конце пункта 2.3.2), и обусловлены рефокусированием градиентом магнитного поля.

### 2.3.5 Учет фазокодирующего градиента в МРТ

При записи рекуррентного соотношения (1.6) и усреднении намагниченности и ПФ по частотным изохроматам нами предполагалось, что один и тот же градиент магнитного поля  $\vec{G}$  включен между РЧ импульсами начиная с временного промежутка между возбуждающим и первым рефокусирующим импульсами. В действительности же для получения двумерных томограмм в МРТ используются два градиента магнитного поля. Для кодирования  $x$ -направления используется считывающий градиент  $G_x$ , включаемый во время всех межимпульсных интервалов. Для кодирования направления  $y$  используется фазокодирующий градиент  $G_y$ , включаемый только между возбуждающим и

первым рефокусирующим импульсами. Таким образом, наличие нескомпенсированного набега фазы за промежуток времени между возбуждающим и первым рефокусирующим импульсами при усреднении по частотным изохроматам должно было бы привести к полному усреднению намагниченности до нуля.

Набег фазы, обусловленный фазокодирующим градиентом  $G_y \neq 0$  может быть учтен путем включения его в начальное условие на намагниченность, т.е. заменой  $M_0^+$  на  $U_y M_0^+$ , где введено обозначение

$$U_y = \exp\{-i\gamma G_y y \times TE/2\} = \exp\{-i k_y y\} , \quad (2.53)$$

$$k_y = \gamma G_y \times TE/2 . \quad (2.54)$$

Соответствующая поправка должна также быть внесена в ПФ (2.12) и (2.32). В ходе измерения в действительности регистрируется сигнал не точно в середине межимпульсного периода, а охватывается некоторый временной промежуток  $\delta t$  в окрестности данного момента времени:

$$m_n^+(t) = m_n^+(0) e^{-i\Delta\omega t - \frac{t}{T_2}} U_x(t) , \quad (2.55)$$

$$U_x(t) = \exp\{-i\gamma G_x x t\} = \exp\{-i k_x x\} , \quad (2.56)$$

$$k_x = \gamma G_x t , \quad (2.57)$$

$-\delta t/2 \leq t \leq \delta t/2$ , и  $m_n^+(0)$  - намагниченность точно посередине межимпульсного периода, для которых выше была получена ПФ (2.12). Кроме того, одна и та же импульсная последовательность повторяется несколько (обычно 128, 256 или 512) раз для различных величин фазокодирующего градиента  $G_y$ . Таким образом, в ходе МРТ эксперимента сначала заполняется  $k$ -пространство: измерение сигнала от времени  $t$  эквивалентно измерению от  $k_x \equiv k_x(t)$ , а измерение зависимости от величины  $G_y$  - измерению от  $k_y$ . Последующее двумерное преобразование Фурье позволяет построить  $xy$ -изображение сканируемой области [6]. В результате такого двумерного преобразования Фурье указанная поправка, сделанная в выражениях для ПФ (2.12) и (2.32), исчезает и, следовательно, не влияет на результат. Возможны, однако, артефакты (дефекты) получаемых изображений, которые могут возникнуть после Фурье-преобразования из-за ненулевой отстройки от резонанса  $\Delta\omega \neq 0$ , спин-спиновой релаксации (т.е. из-за наличия множителя  $e^{-i\Delta\omega t - \frac{t}{T_2}}$  в уравнении (2.55)), конечности временного окна  $\delta t$  и дискретности

набора фазокодирующих градиентов. Однако возможность их возникновения - особенность метода МР томографии как такового и ни в коей мере не является свойством рассматриваемого подхода.

### 2.3.6 ПФ для СРМГ эхо-амплитуд в ЯМР каротаже

В противоположность МР томографии, в ЯМР каротаже отдельный изохромат имеет одну и ту же отстройку от резонанса  $\Delta\omega = \Delta\omega(\vec{r})$  в течение всей импульсной последовательности, и де/рефазирование изохромат происходит не за счет прикладываемого градиента магнитного поля, а за счет локальных неоднородностей магнитного поля, так что набег фазы за половину периода между рефокусирующими импульсами для некоторого изохромата составляет

$$\psi = \psi_{\text{Logging}}(\vec{r}) = \Delta\omega(\vec{r}) \frac{TE}{2}. \quad (2.58)$$

Таким образом, одна и та же отстройка от резонанса  $\Delta\omega$  входит и в  $F_k^+(z, \omega_1, \Delta\omega)$ , и в  $U^k$  в разложении (2.28), и усреднение по различным изохроматам теперь не может быть сведено к простому исключению всех членов с  $k \neq 0$  (ненулевых конфигураций), а необходимо работать с полной ПФ (2.12), взвешивая ее с функцией  $\omega_1$ - и  $\Delta\omega$ -распределения  $s(\omega_1, \Delta\omega)$  и интегрируя:

$$F_{\text{echo}}^+(z) = \int \int f^+(z, \omega_1, \Delta\omega, e^{-i\frac{TE}{2}\Delta\omega}) s(\omega_1, \Delta\omega) d\omega_1 d\Delta\omega \quad (2.59)$$

(индекс «echo» означает, что полученная ПФ относится к эхо-амплитудам). Тем не менее мы полагаем, что наличие ПФ (2.12) для отдельного изохромата, пусть даже и достаточно громоздкой, все же значительно упрощает вычисления, поскольку такое усреднение по  $\Delta\omega$  и  $\omega_1$  может быть проведено один раз непосредственно в ПФ (2.12).

Более того, коэффициенты  $F_k^+(z, \omega_1, \Delta\omega)$  в уравнении (2.28) представляют собой некоторые функции величин вида  $\Delta\omega/\omega_1$  и  $\sqrt{1 + (\Delta\omega/\omega_1)^2}$ , гораздо слабее зависящие от  $\Delta\omega$  по сравнению с быстро осциллирующим множителем  $U^k = e^{-ik\Delta\omega TE/2}$ . В связи с этим даже в случае ЯМР каротажа вклад ненулевых конфигураций в общую амплитуду спинового эха с высокой точностью может быть опущен, при условии, однако, что ширина  $\Gamma$   $\Delta\omega$ -распределения достаточно широка:

$$\frac{1}{4\pi} \Gamma \times TE \gg 1. \quad (2.60)$$

Тогда в уравнении (2.59) вместо полной ПФ  $f^+(z, \omega_1, \Delta\omega, e^{-i\frac{TE}{2}\Delta\omega})$  можно использовать полученную ранее ПФ для МРТ СPMG эхо-амплитуд (2.32). Результаты численной проверки данного утверждения для однородного (прямоугольного) и гауссова  $\Delta\omega$ -распределений приведены на рис. 2.1, из которого видно, что согласие эхо-амплитуд, полученных данными двумя методами, улучшается с ростом ширины  $\Delta\omega$ -распределения и удлинением  $TE$ .

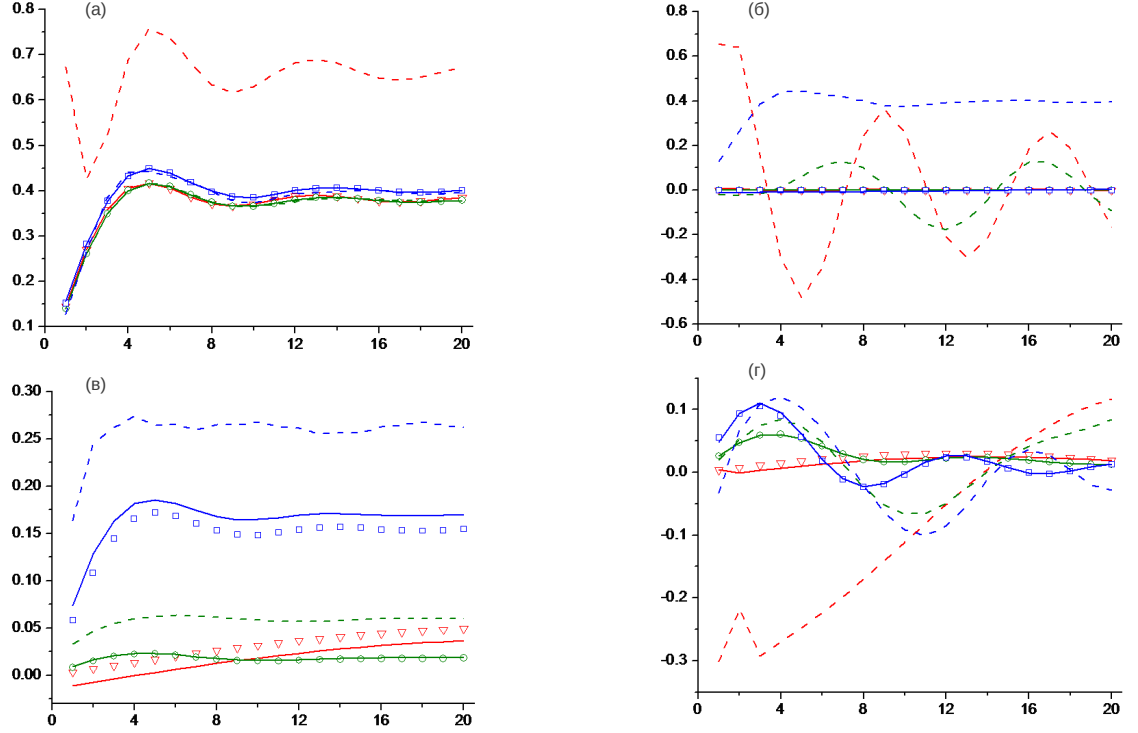


Рис. 2.1: Сравнение усредненных по неоднородной ширине эхо-амплитуд, полученных из полной ПФ (2.12) ( $\bar{m}_{x,yn}/\bar{m}_0$ , линии) и нулевой конфигурации (2.32) ( $\bar{M}_{x,yn}/\bar{m}_0$ , точки), ось абсцисс соответствует номеру эха  $n$ ; случай ЯМР каротажа. Параметры расчета:  $\alpha^{ex} = \alpha^{ref} = \pi/4$ ,  $T_1 = T_2 = \infty$ , диапазон  $\Delta\omega$  составил  $\pm 10\omega_1$  с шагом  $10^{-3}\omega_1$ ; гауссово  $\Delta\omega$ -распределение  $\delta^{-1}\pi^{-1/2} \exp\{-(\Delta\omega - \Delta\omega_0)^2/\omega_1^2\delta^2\}$  с  $\delta = 5$  (зеленые линии и точки) и  $0.5$  (красные линии и точки), однородное (прямоугольное)  $\Delta\omega$ -распределение (синие линии и точки);  $\omega_1 \times TE = 5\pi$  (сплошные линии) и  $0.5\pi$  (пунктирные линии). (а)  $\Delta\omega_0/\omega_1 = 0$ ,  $x$ -компонента; (б)  $\Delta\omega_0/\omega_1 = 0$ ,  $y$ -компонента; (в)  $\Delta\omega_0/\omega_1 = 10$ ,  $x$ -компонента; (г)  $\Delta\omega_0/\omega_1 = 10$ ,  $y$ -компонента.

По той же причине при анализе послеимпульсных эхо-сигналов в ЯМР каротаже можно, как и в случае МРТ, рассматривать только соответствующие конфигурации  $F_{-k}^+(z)$  (уравнения (2.49) и (2.50)), а не полную ПФ (2.12).



## 2.4 МРТ последовательности FE типа

Ниже представлены ПФ для амплитуд эхо-сигналов для бесконечных МРТ последовательностей FE типа

$$\alpha_x^{ex} - TR - \alpha_x^{ex} - TR - \alpha_x^{ex} - TR - \dots \quad (2.61)$$

( $TR$  - межимпульсный интервал (от англ. repetition time); индекс  $x$  обозначает фазу импульсов) с произвольными отстройкой от резонанса  $\Delta\omega$  и номинальным углом поворота возбуждающих РЧ импульсов  $\alpha^{ex}$ , между которыми прилагается градиент магнитного поля  $G(t)$ . Мы рассмотрим два случая, в первом из которых предполагается, что площадь под градиентом за один межимпульсный интервал  $\int_0^{TR} G(t) \neq 0$  (случай некомпенсированного градиента; рис. 1.1б и в), а во втором -  $\int_0^{TR} G(t) = 0$  (случай скомпенсированного градиента; рис. 1.1г). Вывод всех приведенных ниже ПФ для FE-эха полностью аналогичен выводу ПФ для CPMG-эха, изложенному в разделах 2.2, 2.3.1 и 2.3.2; усреднение по частотным изохромам также было сведено к рассмотрению только соответствующих нулевых конфигураций ПФ, которые и приведены ниже. Как и выше, всюду, если специально не оговорено, намагниченность измеряется в единицах равновесной намагниченности  $M_{eq}$ .

### 2.4.1 Нескомпенсированный градиент ( $\int_0^{TR} G(t) \neq 0$ )

#### ПФ для FID

Для сигналов FID, измеряемых сразу после  $\alpha$ -импульсов, ПФ имеет следующий вид:

$$F_0^+(z) = \sum_{n=0}^{\infty} M_n^+ z^n = \frac{\mu}{\lambda^* (1-z)} \left[ 1 + \frac{(\cos \alpha_e - z\xi_1)(1 - z^2\xi_2^2)}{\sqrt{XY}} \right], \quad (2.62)$$

где все обозначения ( $\mu$ ,  $\lambda^*$ ,  $\alpha_e$ ,  $\xi_{1,2}$ ,  $X$  и  $Y$ ) аналогичны использованным выше для CPMG последовательности с соответствующими переобозначениями  $\alpha^{ref} \rightarrow \alpha^{ex}$  и  $TE \rightarrow TR$ . Отметим, что суммирование в данном уравнении начинается с  $n = 0$ : здесь  $n$  - номер импульса, предшествующего FID, и нумерация импульсов начинается с нуля.

Стационарная амплитуда сигнала может быть получена в соответствии с выражением (2.10) и равна

$$M_{st}^+ = \frac{\mu}{\lambda^*} \left[ 1 + \frac{(\cos \alpha_e - \xi_1) \sqrt{1 - \xi_2^2}}{\sqrt{(1 - \xi_1 \cos \alpha_e)^2 - \xi_2^2 (\xi_1 - \cos \alpha_e)^2}} \right], \quad (2.63)$$

в отличие от случая СРМГ последовательности, где ненулевое стационарное значение могло появиться только при отсутствии спиновой релаксации. Выражение (2.63) совпадает с хорошо известным результатом [6].

## ПФ для ЕСНО

Для сигналов, измеряемых непосредственно перед  $\alpha$ -импульсом, т.е. эхо-сигналов (ЕСНО), ПФ имеет следующий вид:

$$F_0^+(z) = \sum_{n=1}^{\infty} M_n^+ z^n = \frac{\mu}{\lambda(1-z)} \left[ 1 - \frac{(1 - z\xi_1 \cos \alpha_e)(1 - z^2 \xi_2^2)}{\sqrt{XY}} \right], \quad (2.64)$$

где все обозначения ( $\mu$ ,  $\lambda^*$ ,  $\alpha_e$ ,  $\xi_{1,2}$ ,  $X$  и  $Y$ ) аналогичны использованным выше для СРМГ последовательности с соответствующими переобозначениями  $\alpha^{ref} \rightarrow \alpha^{ex}$  и  $TE \rightarrow TR$ . В уравнении (2.64)  $M_n^+$  соответствует сигналу, предшествующему  $n$ -ому импульсу. Заметим также, что первый сигнал отсутствует ( $M_1^+ = 0$ ), что естественно ожидать ввиду наличия нескомпенсированной площади под градиентом в конце первого периода и потому полного дефазирования намагниченности. Однако уже второй сигнал отличен от нуля:

$$M_2^+ = 2 \xi_2^2 \mu^3 \lambda^*, \quad (2.65)$$

что связано с накоплением уникальной предыстории у каждого изохромата.

Стационарная амплитуда сигнала, полученная в соответствии с выражением (2.10), равна

$$M_{st}^+ = \frac{\mu}{\lambda} \left[ 1 - \frac{(1 - \xi_1 \cos \alpha_e) \sqrt{1 - \xi_2^2}}{\sqrt{(1 - \xi_1 \cos \alpha_e)^2 - \xi_2^2 (\xi_1 - \cos \alpha_e)^2}} \right], \quad (2.66)$$

и совпадает с хорошо известным результатом [6].

### 2.4.2 Скомпенсированный градиент ( $\int_0^{TR} G(t) = 0$ )

В случае, когда площадь под прилагаемым градиентом магнитного поля за один период между импульсами обращается в нуль, отпадает необходимость усреднения ПФ по изохроматам. Предположим, что не только полная площадь под градиентом между импульсами равна нулю, но также  $\int_0^{TR/2} G(t) = 0$ , т.е. сигнал формируется в середине межимпульсного интервала. В этом случае может быть найдено следующее выражение

для ПФ:

$$F^+(z) = \sum_{n=0}^{\infty} M_n^+ z^n = \frac{2\mu\sqrt{\xi_2}(1 - z\xi_1) \left( U_0^{1/2}\lambda + z\xi_2 U_0^{-1/2}\lambda^* \right)}{(1 - z)(D_0 U_0^{-1} + D_1 + D_2 U_0)}, \quad (2.67)$$

где коэффициенты  $D_0, D_1, D_2$  определены выражениями (2.15) и (2.16) с соответствующими переобозначениями  $\alpha^{ref} \rightarrow \alpha^{ex}$  и  $TE \rightarrow TR$ , а величина  $U_0 = e^{-i\Delta\omega TR}$  учитывает набег фазы в течение межимпульсного интервала за счет отстройки от резонанса.

Стационарная намагниченность, рассчитанная с помощью уравнения (2.10), составляет

$$M_{st}^+ = \frac{2\mu\sqrt{\xi_2}(1 - \xi_1) \left( U_0^{1/2}\lambda + \xi_2 U_0^{-1/2}\lambda^* \right)}{(D_0 U_0^{-1} + D_1 + D_2 U_0)|_{z=1}}. \quad (2.68)$$

## 2.5 Сравнение с экспериментом

Нами было проведено сравнение приведенных выше теоретических результатов с экспериментальными данными. Для этого в МТЦ СО РАН совместно с А.А. Савеловым и И.В. Коптюгом были выполнены два ЯМР эксперимента. Первый спин-эховый эксперимент был выполнен на томографе Bruker Tomikon S50 (0.5 T), в качестве исследуемого образца использовался водный раствор медного купороса  $CuSO_4$ . Была применена последовательность CPMG со следующими параметрами: резонансные прямоугольные РЧ импульсы с  $\omega_1 = 3140$  рад/с, возбуждающим и рефокусирующим углами поворота  $\alpha^{ex} = \alpha^{ref} = \pi/2$  и временем эха  $TE = 15$  мс. В ходе данного эксперимента было приложено восемь рефокусирующих импульсов, восемь эхо-сигналов было зарегистрировано.

Наилучшее соответствие экспериментальных и расчетных эхо-амплитуд наблюдается при  $T_1 = T_2 = 268$  мс, что находится в хорошем согласии с данными, полученными стандартным путем ( $T_1 = 273$  мс, резонансная CPMG последовательность с  $\alpha^{ex} = \pi/2$  и  $\alpha^{ref} = \pi$  в комплексе с методами Inversion-Recovery). Как видно из рис. 2.2, наблюдается хорошее соответствие между теоретическими, рассчитанными из ПФ (2.32), и наблюдаемыми в эксперименте эхо-амплитудами.

Второй эксперимент был выполнен при 300 МГц на Bruker DRX-300 ЯМР-спектрометре, оборудованном приставкой для ЯМР-микротомографии, в качестве образца использовалась водопроводная вода. Номинальные углы поворота рефокусирующих импульсов были выбраны равными  $\alpha^{ex} = \alpha^{ref} = \pi/4$ . Амплитуда РЧ магнитного поля

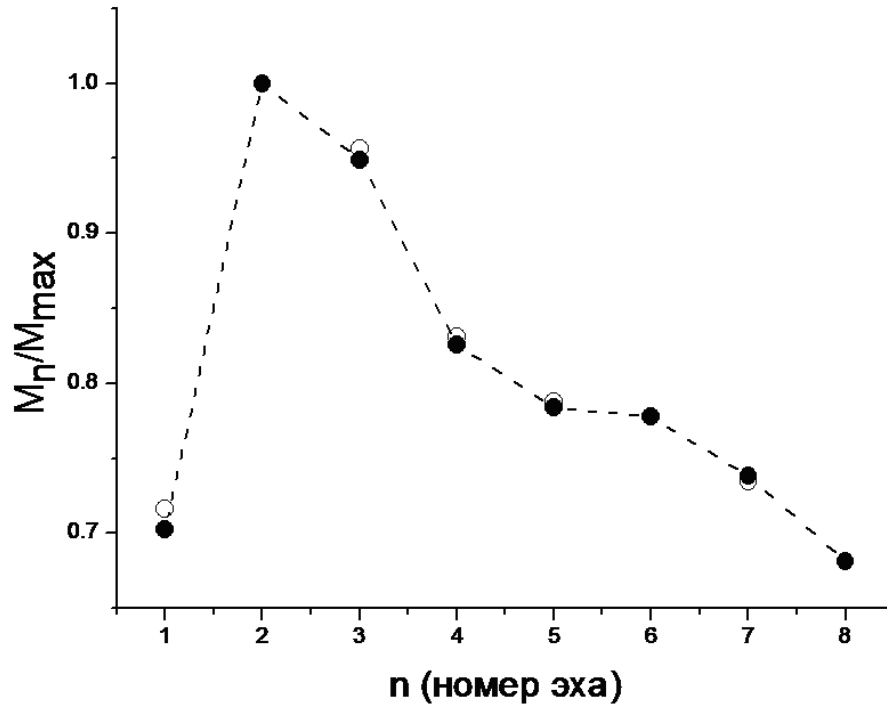


Рис. 2.2: Экспериментальные (пустые кружки) и теоретически рассчитанные (закрашенные кружки и пунктирная линия) зависимости амплитуды эха от его номера. Возбуждение и рефокусирование в резонансе ( $\Delta\omega = 0$  рад/с), амплитуда РЧ поля  $\omega_1 = 2\pi \cdot 500$  рад/с, углы возбуждения и рефокусирования равны  $\pi/2$ .  $T_2^{stand} = 273$  мс,  $T_1^{GF} = T_2^{GF} = 268$  мс (индексы «stand» и «GF» обозначают «стандартный метод» и «метод ПФ» соответственно).

составила  $\omega_1 = 22430$  рад/с, время эха -  $TE = 780$  мкс, было зарегистрировано 32 эхосигнала. В рамках данного опыта было проведено два измерения: одно - в резонансе, второе - с отстройкой от резонанса  $\Delta\omega = 37700$  рад/с. Поскольку для воды  $T_1 \sim T_2 \sim 1$  с  $\gg TE$ , спиновой релаксацией можно было пренебречь. Результаты сравнения экспериментальных и теоретических эхо-амплитуд представлены на рис. 2.3. Как можно видеть,

наблюдается удовлетворительное согласие теории и эксперимента даже для отстройки от резонанса, сравнимой с амплитудой РЧ поля. Небольшие отклонения теоретического эха от экспериментального мы объясняем неоднородностями РЧ магнитного поля в образце.

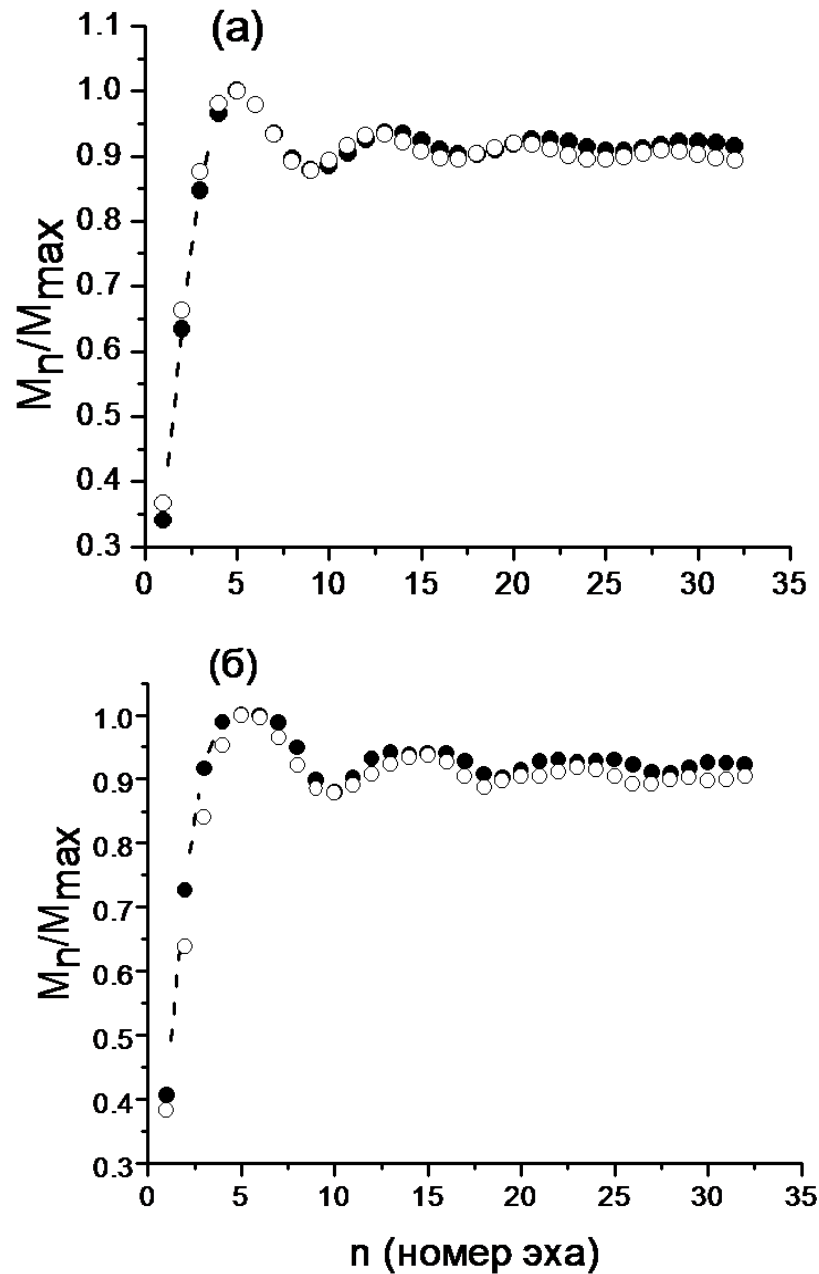


Рис. 2.3: Экспериментальные (пустые кружки) и теоретически рассчитанные (закрашенные кружки и пунктирная линия) зависимости амплитуды эха от его номера. Амплитуда РЧ поля  $\omega_1 = 22430$  рад/с, номинальные углы возбуждения и рефокусирования равны  $\pi/4$ ,  $T_1, T_2 \sim 3$  с  $\gg TE = 780$  мкс; (а) возбуждение и рефокусирование в резонансе ( $\Delta\omega = 0$  рад/с); (б) отстройка от резонанса  $\Delta\omega = 37700$  рад/с.

## 2.6 Основные преимущества формализма ПФ

В заключение главы перечислим основные преимущества предлагаемого подхода на основе формализма ПФ. Данный метод может быть использован при анализе поведения спиновых систем, описываемых периодическим гамильтонианом, особенно он эффективен при рассмотрении периодических последовательностей РЧ импульсов.

В действительности ПФ представляет собой аналог Фурье- или Лаплас-образа дискретной величины  $M_n$  и содержит полную информацию сразу обо всех величинах  $M_n$ . В то время как выражение для  $M_n$  может быть весьма громоздким или не может быть получено вообще, зачастую ПФ может быть получена аналитически и имеет при этом достаточно простой вид. В свою очередь, величина  $M_n$  с произвольным номером  $n$  может быть рассчитана из ПФ численно или аналитически разложением ее в ряд Тейлора в точке  $z = 0$  либо путем стандартного преобразования Фурье. Стационарное значение величины  $M_n$  при  $n \rightarrow \infty$  также может быть легко получено из ПФ. Следующее важное преимущество данного подхода заключается в том, что усреднение по частотным изохроматам может быть проведено единожды непосредственно в самой ПФ. Наконец, наличие ПФ позволяет существенно упростить решение обратной задачи по извлечению параметров системы из экспериментальных данных.

## Глава 3

# Вывод точных, асимптотических и аппроксимационных выражений для эхо-амплитуд на примере МРТ СРМГ спинового эха

В данной главе на примере бесконечной периодической МРТ СРМГ импульсной последовательности будет произведен вывод точных выражений для эхо-амплитуд, а также уравнений, описывающих асимптотическое поведение спинового эха. Также будут получены аналитические аппроксимации, описывающие доасимптотические эхо-сигналы. В частности, будет показано, что в зависимости от параметров последовательности в поведении амплитуд спинового эха могут проявляться осцилляции. В заключении раздела будет проведено численное сравнение полученных приближенных и точных выражений. Все результаты, полученные в данной главе, основаны на ПФ (2.32), полученной в предыдущей главе. Кроме того, поскольку выше было сделано замечание об эквивалентности случаев резонансных и нерезонансных рефокусирующих импульсов, всюду далее мы будем рассматривать резонансный случай с углом рефокусирования  $\alpha^{ref} = \alpha$  в пределах от 0 до  $\pi$ ; результаты для  $\alpha$  в диапазоне от  $\pi$  до  $2\pi$  могут быть получены путем замены  $\alpha$  на  $2\pi - \alpha$  в соответствующих уравнениях, что следует непосредственно из вида ПФ (2.32). Также поскольку речь идет о суммарной поперечной намагниченности, индексы «0» (указывающие на принадлежность к нулевой конфигурации) и «+» будут опущены. Намагниченность по-прежнему измеряется в единицах равновесной намагниченности  $M_{eq}$ .

Точное выражение для намагниченности для отдельного изохромата для СРМГ импульсной последовательности было получено выше (уравнение (2.19)). В случае МРТ,

где после усреднения намагниченности учитывается лишь нулевая конфигурация в разложении (2.27), для получения эхо-амплитуд в общем выражении (2.19) необходимо обратить коэффициенты при  $U^0$ . В данном разделе будет приведен другой вывод точного выражения для эхо-амплитуд, основанный на использовании не полной, но предварительно усредненной ПФ (2.32), т.е. нулевой конфигурации в разложении (2.28). Использование усредненной ПФ также более удобно для вывода приближенных выражений для общего эхо-сигнала.

Основные результаты данной главы опубликованы в работе [106].

## 3.1 Точные выражения для МРТ СРМГ спинового эха

### 3.1.1 Общий случай: произвольные $\alpha$ , $T_1$ и $T_2$

Перепишем ПФ (2.32) для МРТ СРМГ эхо-амплитуд в следующем виде:

$$F(z) = \frac{M_{x0}}{2} \left[ 1 + \frac{X}{\sqrt{XY}} \right] + i \frac{M_{y0}}{2} \left[ 1 + \frac{Y}{\sqrt{XY}} \right]. \quad (3.1)$$

Для вывода точного выражения для МРТ СРМГ эхо-амплитуд используем ПФ для полиномов Лежандра (2.2) и представим  $1/\sqrt{XY}$  в следующей форме:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{XY}} &= \sum_{k,l,m=0}^{\infty} P_k \left( \frac{\xi_1 + \xi_2}{2\sqrt{\xi_1\xi_2}} \cos \alpha \right) P_m \left( \frac{\xi_1 - \xi_2}{2i\sqrt{\xi_1\xi_2}} \cos \alpha \right) \times \\ &\times P_l(0) i^{l+m} (\xi_1\xi_2)^{\frac{k+m}{2}} \xi_2^l z^{k+l+m}. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Подставляя данное разложение в ПФ (2.32) и собирая в полученном выражении коэффициенты при  $z^n$ , получим следующее выражение для амплитуды сигнала  $M_n$ :

$$\begin{aligned} \frac{M_{xn}}{M_{x0}} &= \frac{(\xi_1\xi_2)^{n/2}}{2} [\delta_{n0} + (S_n + \chi S_{n-1}) - (\chi^{-1} + \chi)(S_{n-1} + \chi S_{n-2}) \cos \alpha + \\ &+ (S_{n-2} + \chi S_{n-3})], \\ \frac{M_{yn}}{M_{y0}} &= \frac{(\xi_1\xi_2)^{n/2}}{2} [\delta_{n0} + (S_n - \chi S_{n-1}) - (\chi^{-1} - \chi)(S_{n-1} - \chi S_{n-2}) \cos \alpha - \\ &- (S_{n-2} - \chi S_{n-3})], \end{aligned} \quad (3.3)$$

где

$$\begin{aligned} S_n &= \sum_{0 \leq k+2p \leq n} P_k \left( \frac{\chi^{-1} + \chi}{2} \cos \alpha \right) P_{n-k-2p} \left( \frac{\chi^{-1} - \chi}{2i} \cos \alpha \right) \times \\ &\times C_{2p}^p \frac{i^{n-k} (-1)^p \chi^{2p}}{2^{2p}}, \end{aligned} \quad (3.4)$$



параметр  $\chi$  определен в уравнении (2.23); при выводе данных уравнений было принято во внимание, что  $P_{2r+1}(0) = 0$  и  $P_{2r}(0) = (-1)^r C_{2r}^r / 2^{2r}$ ,  $r = 0, 1, \dots$ ;  $C_p^q = p! / (q!(p-q)!)$  - биномиальный коэффициент.

Уравнение (3.3) представляет собой явное замкнутое выражение для МРТ СРМГ эхо-амплитуд. Таким образом, амплитуды эхо-сигналов могут быть представлены в виде суммы произведений хорошо известных функций - полиномов Лежандра, которые встроены во многие математические компьютерные программы, используемые при расчетах. Однако число членов в уравнении (3.3) растет с номером эхо-сигнала как  $n^2$ , а при учете того, что полином Лежандра  $P_k(x)$  в свою очередь представляет собой сумму степеней  $x$  с некоторыми коэффициентами, - то как  $n^4$ . Можно сказать, что единственное достоинство полученного точного выражения - аналитическая форма, и его использование при вычислении эхо-амплитуд имеет смысл, только если требуется точный аналитический результат. В противном случае гораздо проще вычислять величины  $M_n$  непосредственно из ПФ (2.32), численно разлагая ее в ряд Тейлора в точке  $z = 0$  или с помощью преобразования Фурье; даже 1000 и более эхо-амплитуд могут быть легко рассчитаны таким образом. Однако для более ясного понимания поведения спинового эха в зависимости от порядкового номера сигнала целесообразно иметь аналитические результаты, в частности - асимптотические и аппроксимационные уравнения.

### 3.1.2 Частный случай: равные времена спиновой релаксации $T_1 = T_2$

В случае равных времен спиновой релаксации  $T_1 = T_2$  ( $\xi_1 = \xi_2 = \xi$ ,  $\chi = 1$ ) форма ПФ (2.32) для МРТ СРМГ эхо-амплитуд несколько упрощается:

$$F(z)|_{\xi_1, 2=\xi} = \frac{M_{x0}}{2} \left[ 1 + \frac{\sqrt{1 - 2\xi z \cos \alpha + \xi^2 z^2}}{1 - \xi z} \right] + i \frac{M_{y0}}{2} \left[ 1 + \frac{1 - \xi z}{\sqrt{1 - 2\xi z \cos \alpha + \xi^2 z^2}} \right]. \quad (3.5)$$

Используя ПФ для полиномов Лежандра (2.2) для разложения выражения (3.5) по степеням  $z$  и собирая коэффициенты при  $z^n$ , получим следующее выражение для амплитуды сигнала  $M_n$ :

$$M_{xn} = \frac{M_{x0} \xi^n}{2} \left[ \delta_{n0} + P_n(\cos \alpha) - P_{n-1}(\cos \alpha) + 4 \sin^2 \frac{\alpha}{2} \sum_{k=0}^{n-1} P_k(\cos \alpha) \right], \quad (3.6)$$

$$M_{yn} = \frac{M_{y0} \xi^n}{2} [\delta_{n0} + P_n(\cos \alpha) - P_{n-1}(\cos \alpha)],$$

где  $P_k(y)$  - полиномы Лежандра ( $y$  - внутренняя переменная); уравнение (3.6) также может быть получено из общего случая (3.3).

В отличие от общего выражения (3.3), выражение (3.6) не содержит кратных сумм, и число слагаемых растет как  $n$  ( $n^2$ , если рассматривать полиномы Лежандра как одинарные суммы). Однако цена такого уменьшения вычислительных затрат - предположение  $T_1 = T_2$ , что зачастую весьма приближенно.

### 3.1.3 Частный случай: $0^0$ и $180^0$ углы рефокусирования

При угле рефокусирования  $\alpha = 0$ , что эквивалентно отсутствию рефокусирующих импульсов, сигналы спинового эха не формируются вовсе. Этот очевидный результат также может быть получен из ПФ (2.32) и общего выражения для эхо-амплитуд (3.3).

Другой хорошо известный результат может быть получен при  $\alpha = \pi$ , когда ПФ (2.32) принимает простую форму

$$F(z)|_{\alpha=\pi} = \frac{M_{x0}}{1 - \xi_2 z} + i \frac{M_{y0}}{1 + \xi_2 z} \quad (3.7)$$

и, следовательно, амплитуда сигналов спинового эха имеет вид:

$$M_n = \xi_2^n [M_{x0} + i(-1)^n M_{y0}] \propto \exp\{-nTE/T_2\}. \quad (3.8)$$

Таким образом, при  $180^0$  угле рефокусирования спад спинового эха - моноэкспоненциальный и определяется временем спин-спиновой релаксации  $T_2$ . Данное обстоятельство делает угол  $\alpha = 180^0$  удобным для измерения  $T_2$ , что и применяется в стандартных импульсных последовательностях [4, 5, 6, 7, 8].

### 3.1.4 Частный случай: $90^0$ угол рефокусирования

При угле рефокусирования  $\alpha = \pi/2$  и произвольных  $T_1$  и  $T_2$  форма ПФ несколько упрощается:

$$\begin{aligned} F(z)|_{\alpha=\pi/2, 3\pi/2} &= \frac{M_{x0}}{2} \left[ 1 + \sqrt{\frac{(1 + \xi_2 z)(1 + \xi_1 \xi_2 z^2)}{(1 - \xi_2 z)(1 - \xi_1 \xi_2 z^2)}} \right] \\ &+ i \frac{M_{y0}}{2} \left[ 1 + \sqrt{\frac{(1 - z\xi_2)(1 - \xi_1 \xi_2 z^2)}{(1 + z\xi_2)(1 + \xi_1 \xi_2 z^2)}} \right] \\ &= \frac{M_{x0}}{2} \left[ 1 + \frac{(1 + \xi_2 z)(1 + \xi_1 \xi_2 z^2)}{\sqrt{(1 - \xi_2^2 z^2)(1 - \xi_1^2 \xi_2^2 z^4)}} \right] \\ &+ i \frac{M_{y0}}{2} \left[ 1 + \frac{(1 - \xi_2 z)(1 - \xi_1 \xi_2 z^2)}{\sqrt{(1 - \xi_2^2 z^2)(1 - \xi_1^2 \xi_2^2 z^4)}} \right]. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Учитывая, что

$$\frac{1}{\sqrt{(1 - \xi_2^2 z^2)(1 - \xi_1^2 \xi_2^2 z^4)}} = \sum_{k,m=0}^{\infty} P_{2k}(0) P_{2m}(0) (i \xi_2 z)^{2k} (i \xi_1 \xi_2 z^2)^{2m}, \quad (3.10)$$

представим эхо-амплитуды  $M_n$  в следующем виде:

$$\begin{aligned} \frac{M_{xn}}{M_{x0}} &= \frac{(\xi_1 \xi_2)^{n/2}}{2} \left( \delta_{n0} + \tilde{S}_{2[\frac{n}{2}]} + \tilde{S}_{2[\frac{n-2}{2}]} \right) \left( \cos^2 \frac{\pi n}{2} + \chi \sin^2 \frac{\pi n}{2} \right), \\ \frac{M_{yn}}{M_{y0}} &= \frac{(\xi_1 \xi_2)^{n/2}}{2} \left( \delta_{n0} + \tilde{S}_{2[\frac{n}{2}]} - \tilde{S}_{2[\frac{n-2}{2}]} \right) \left( \cos^2 \frac{\pi n}{2} - \chi \sin^2 \frac{\pi n}{2} \right), \end{aligned} \quad (3.11)$$

где

$$\tilde{S}_{2m} = S_{2m}|_{\alpha=\pi/2} = \left( \frac{\chi}{2} \right)^{2m} \sum_{k=0}^{[\frac{m}{2}]} \left( \frac{\chi^2}{2} \right)^{2k} C_{2k}^k C_{2m+4k}^{m+2k}, \quad (3.12)$$

$\chi$  определено выражением (2.23),  $[k]$  обозначает целую часть числа  $k$ . Выражение (3.11) также может быть получено и из общего случая (3.3).

## 3.2 Асимптотическое поведение МРТ СРМГ эхо-амплитуд

Как будет показано ниже, асимптотическое поведение спинового эха существенно зависит от параметров импульсной последовательности. Здесь могут быть выделены следующие случаи и подслучаи. Во-первых, при  $\alpha = 0$  точный результат состоит в том, что эхо не формируется вовсе (см. раздел 3.1.3). Во-вторых, при  $\alpha = \pi$  поведение эхо-амплитуд определяется уравнением (3.8), которое также является точным результатом. При  $\alpha \neq 0, \pi$  точное выражение для эхо-амплитуд (3.3) весьма громоздко, но асимптотические уравнения сравнительно просты, при этом вид их зависит от соотношения времен спиновой релаксации  $T_1$  и  $T_2$ . Таким образом, третий и четвертый случаи - соответственно  $T_1 = T_2, \alpha \neq 0, \pi$  и  $T_1 > T_2, \alpha \neq 0, \pi$ . В последнем случае еще необходимо отдельно выделять подслучаи  $\alpha = \pi/2$  и  $\alpha \neq \pi/2$ . Наконец, пятый случай - теоретически возможный вариант  $T_1 < T_2, \alpha \neq 0, \pi$  (теоретическим пределом для  $T_2$  является  $2T_1$ , достигаемый при отсутствии адиабатического вклада в спиновую релаксацию [20, 107, 108]). Подробный анализ всех приведенных ситуаций (за исключением рассмотренных выше случаев  $\alpha = 0$  и  $\pi$ ) проводится ниже. Подразделение в зависимости от соотношения  $T_1$  и  $T_2$  обусловлено тем, как изменяется наклон вектора намагниченности к поперечной плоскости в процессе релаксации: не изменяется при  $T_1 = T_2$ , увеличивается при  $T_1 > T_2$  и уменьшается при  $T_1 < T_2$  (в соответствии с замечанием, сделанным

в конце раздела 2.3.2, релаксация вектора намагниченности может быть представлена как стремление ее к нулю без учета вновь растущей в каждом межимпульсном периоде новой продольной намагниченности).

### 3.2.1 Равные времена спиновой релаксации $T_1 = T_2$ , угол рефокусирования $\alpha \neq 0, \pi$

При  $T_1 = T_2$  ( $\xi_1 = \xi_2 = \xi$ ,  $\chi = 1$ ) ПФ для эхо-амплитуд принимает вид (3.5), а асимптотическое поведение сигналов эха описывается уравнением (см. Приложение А)

$$M_n^+ \approx \xi^n \left\{ M_{x0} \left[ \sin \frac{\alpha}{2} - \frac{\cos \left( n\alpha - \frac{\pi}{4} \right)}{2\sqrt{\pi n^3 \tan \frac{\alpha}{2}}} \right] + i M_{y0} \sqrt{\frac{\tan \frac{\alpha}{2}}{\pi n}} \cos \left( n\alpha + \frac{\pi}{4} \right) \right\}, \quad (3.13)$$

верным для  $\alpha$  в диапазоне  $(0, \pi)$  и  $n \sin \alpha \gg 1$ .

Качественно уравнение (3.13) может быть объяснено следующим образом. Как было отмечено выше (раздел 2.3.2), при рассмотрении поведения эхо-амплитуд можно считать, что намагниченность релаксирует не к равновесному, а к нулевому значению. Тогда при  $T_1 = T_2$  релаксация лишь уменьшает длину вектора намагниченности, но не влияет на его наклон к  $xy$ -плоскости, и, следовательно, условие  $T_1 = T_2 \neq \infty$  проявляется лишь в наличии общего множителя  $\xi^n$  в уравнении (3.13). Таким образом, для объяснения осцилляций можно полагать  $T_1 = T_2 = \infty$  ( $\xi = 1$ ). Очевидно, что для одного полного поворота намагниченности вокруг оси  $x$  требуется приложить  $2\pi/\alpha$  рефокусирующих импульсов, т.е. должны наблюдаться затухающие осцилляции с периодом  $2\pi/\alpha$ , что и имеет место в действительности. На рис. 3.1 продемонстрировано такое осцилляторное поведение эхо-сигналов.

Очевидно также, что только  $M_{xn}$  может включать ненулевое стационарное значение ( $M_{xst} = M_{x0} \sin(\alpha/2)$ ), поскольку РЧ импульсы вращают намагниченность вокруг оси  $x$ , сохраняя неизменной  $x$ -компоненту намагниченности, но вращая  $y$ - и  $z$ -компоненты. Стационарное значение  $\sin(\alpha/2)$  для СРМГ последовательности с  $M_{x0} = 1$  и  $M_{y0} = 0$  - хорошо известный результат [10], полученный, однако, численно и для произвольного  $\alpha$  строго не подтвержденный. Напротив, уравнение (3.13) было выведено нами аналитически, используя подход на основе ПФ.

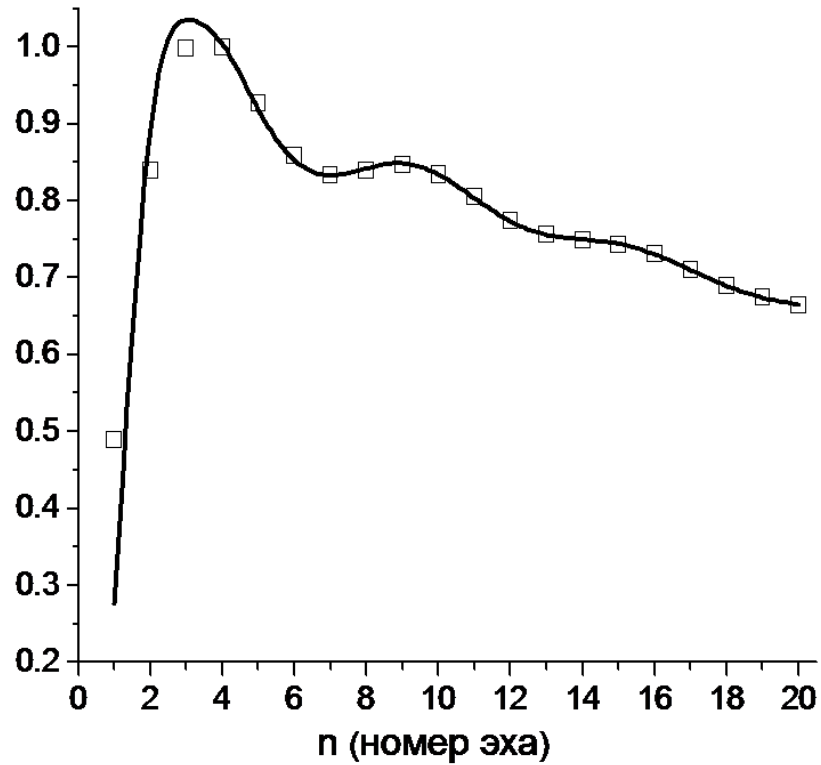


Рис. 3.1: Точные (пустые квадраты) и приближенные (сплошная линия) эхо-амплитуды ( $x$ -компонента), нормированные на максимальное точное эхо ( $M_{n_{max}}, n_{max} = 4$ );  $T_1 = T_2$  ( $\chi = 1$ ), угол рефокусирования  $\alpha = \pi/3$ ,  $\xi_1 = \xi_2 = 0.98$ .

### 3.2.2 $T_1 > T_2$ , угол рефокусирования $\alpha \neq 0, \pi$

Угол рефокусирования  $\alpha = \pi/2$

При  $T_1 > T_2$  и  $90^\circ$  рефокусирующем импульсе ПФ для эхо-амплитуд принимает форму (3.9), а асимптотическое поведение сигналов эха описывается уравнениями (см.

Приложение Б):

$$\frac{M_{xn}}{M_{x0}} \approx \frac{(\xi_1 \xi_2)^{n/2}}{\sqrt{\pi n (1 - \chi^2)}} \left[ \cos^2 \frac{\pi n}{2} + \chi \sin^2 \frac{\pi n}{2} \right], \quad (3.14)$$

$$\frac{M_{yn}}{M_{y0}} \approx \frac{(\xi_1 \xi_2)^{n/2}}{\sqrt{\pi n (1 + \chi^2)}} \left[ \cos \frac{\pi n}{2} - \chi \sin \frac{\pi n}{2} \right]. \quad (3.15)$$

Таким образом, при  $T_1 > T_2$  и  $\alpha = \pi/2$  спад амплитуд эха определяется эффективным временем релаксации  $2T_1 T_2 / (T_1 + T_2)$  и не является чисто экспоненциальным. Этому может быть дано следующее объяснение.

Рассмотрим один период последовательности от эха до эха. Давая качественное объяснение, мы не будем учитывать дефазирование различных изохромат. Тогда рефокусирующий импульс, приложенный вдоль оси  $x$ , полностью удаляет  $y$ -компоненту вектора намагниченности из поперечной плоскости и полностью укладывает туда  $z$ -компоненту. Поэтому, следующий эхо-сигнал будет определяться только теми компонентами вектора намагниченности, которые в момент текущего эха направлены вдоль осей  $x$  и  $z$ . Поскольку мы предполагаем строгое неравенство  $T_1 > T_2$  и нас интересует асимптотика эхо-амплитуд, то вкладом  $x$ -компоненты следует пренебречь, поскольку она не поворачивается импульсом и потому релаксирует с  $T_2$  в течение всего периода последовательности. Напротив,  $z$ -компонента первую половину периода релаксирует с  $T_1$ , а после импульса укладывается в поперечную плоскость и релаксирует уже с  $T_2$ . Следовательно, в асимптотическом режиме поведение эхо-сигналов определяется множителем  $(\sqrt{\xi_1 \xi_2})^n$ .

Кроме того, отметим важность условия  $T_1 \neq T_2$ , благодаря которому можно было пренебречь вкладом  $x$ -компоненты в последующий эхо-сигнал. Оно содержится в асимптотике  $x$ -компоненты эха: при  $T_1 \rightarrow T_2$  ( $\chi \rightarrow 1$ ) выражение (3.14) расходится. Для асимптотики  $y$ -компоненты эха (3.15) данное условие менее критично: согласно предложенному выше качественному объяснению, в отличие от  $x$ -компоненты,  $y$ -компонента не содержит вклада, остающегося в поперечной плоскости. Тем не менее, как будет показано ниже (см. раздел 3.3.1), условие  $T_1 \neq T_2$  важно для асимптотики обеих поперечных компонент.

Также заметим, что согласно уравнениям (3.14) и (3.15) имеет место подразделение на четные и нечетные сигналы [73, 78], как показано на рис. 3.2. Это также обусловлено тем, что  $90^\circ$  рефокусирующие импульсы возвращают продольную намагниченность

на ось  $z$ , а  $y$ -компоненту - в поперечную плоскость через два периода последовательности. Принимая во внимание полученную асимптотику, можно записать следующее соотношение для эхо-амплитуд:

$$\begin{aligned} \left| \frac{M_{x\ 2k+1}}{M_{x\ 2k}} \right| &= \left| \frac{M_{y\ 2k+1}}{M_{y\ 2k}} \right| = \xi_2 = e^{-TE/T_2}, \\ \left| \frac{M_{x\ 2k+2}}{M_{x\ 2k+1}} \right| &\approx \left| \frac{M_{y\ 2k+2}}{M_{y\ 2k+1}} \right| \approx \xi_1 = e^{-TE/T_1} \end{aligned} \quad (3.16)$$

(знак равенства в первом уравнении следует из точных выражений для эхо-амплитуд (3.3) и (3.11)). Таким образом, СРМГ импульсная последовательность с  $90^\circ$  рефокусирующим импульсом дает весьма простой способ одновременного измерения  $T_1$  и  $T_2$ , в то время как стандартный СРМГ метод с  $\alpha = \pi$  - только  $T_2$ .

### Угол рефокусирования $\alpha \neq \pi/2$

Более сложная ситуация имеет место при произвольном угле рефокусирования  $\alpha \neq 0, \pi/2, \pi$ . Так можно показать, что при достаточно коротких (но все же конечных) временах спин-спиновой релаксации  $T_2$  поведение эхо-амплитуд определяется фактором  $e^{-TE/T_1} \cos \alpha$ . Действительно, рассмотрим один период СРМГ последовательности (от эха до эха) с резонансными рефокусирующими РЧ импульсами с произвольным углом поворота  $\alpha \neq 0, \pi/2, \pi$ . Мы также предположим, что  $T_2$  достаточно короткое, так что можно считать, что за первые половину периода к моменту очередного импульса поперечная намагниченность полностью исчезает. Тогда величина следующего эхо-сигнала будет определяться продольной намагниченностью, частично повернутой в  $xy$ -плоскость РЧ импульсом, и, следовательно, поведение эхо-амплитуд в целом также будет определяться поведением  $z$ -намагниченности. В свою очередь эволюция продольной компоненты за один период описывается множителем  $e^{-TE/T_1} \cos \alpha$  ( $T_1$ -релаксация и поворот импульсом). Таким образом, можно ожидать, что асимптотическое поведение спинового эха будет иметь вид  $M_{x,y n} \propto [\exp(-TE/T_1) \cos \alpha]^n$ , т.е. не смотря на очень короткое  $T_2$ , спад эхо-сигнала может длиться достаточно долго. Такая ситуация действительно имеет место на практике [110, 111].

Асимптотика эхо-амплитуд для рассматриваемого случая выведена в Приложении

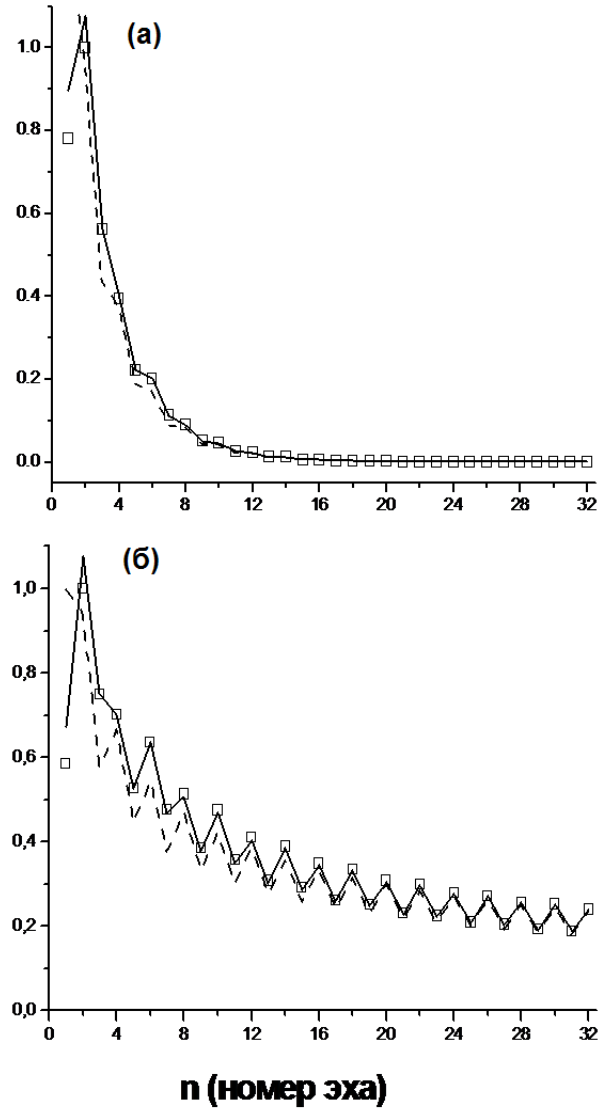


Рис. 3.2: Точные (пустые квадраты), асимптотические (пунктирная линия) и аналитически аппроксимированные (сплошная линия) эхо-амплитуды ( $x$ -компонента);  $\chi = 0.75$ , угол рефокусирования  $\alpha = \pi/2$ ,  $T_1 = \infty$  ( $\xi_1 = 1$ ). (а)  $M_n$ , нормированные на максимальное точное эхо ( $M_{n_{max}}$ ,  $n_{max} = 2$ ); (б) для лучшей демонстрации последних эхо-сигналов показаны величины  $\widetilde{M}_n = (\xi_1 \xi_2)^{-n/2} M_n$ , нормированные на точное значение  $\widetilde{M}_{n_{max}}$ .

В и имеет следующий вид:

$$\frac{M_{xn}}{M_{x0}} \approx (\xi_1 \xi_2)^{n/2} \frac{b^n}{2\sqrt{\pi n}} \sqrt{\frac{(b + \chi)(b - \chi^{-1} \cos \alpha)}{(b - \chi)(b - \frac{1}{2}(\chi^{-1} - \chi) \cos \alpha)}}, \quad (3.17)$$

$$\frac{M_{yn}}{M_{y0}} \approx -(\xi_1 \xi_2)^{n/2} \frac{b^n}{4\sqrt{\pi n^3}} \sqrt{\frac{(b - \chi)(b - \frac{1}{2}(\chi^{-1} - \chi) \cos \alpha)}{(b + \chi)(b - \chi^{-1} \cos \alpha)}}, \quad (3.18)$$



где

$$b = \left( \left| \frac{\chi^{-1} - \chi}{2} \cos \alpha \right| + \sqrt{\frac{(\chi^{-1} - \chi)^2}{4} \cos^2 \alpha + 1} \right) \frac{\cos \alpha}{|\cos \alpha|}. \quad (3.19)$$

Данный результат находится в согласии с выводами, полученными в работе [21], где путем анализа собственных значений матрицы Карра-Парселла для  $\Delta\omega = \pi/TE$  показано, что спад эха определяется фактором  $(b\sqrt{\xi_1\xi_2})^n$ . При этом, однако, используемый нами подход показал, что в асимптотическом режиме спад эхо-амплитуд не является чисто экспоненциальным, но еще и включает некоторую степень  $n$  в знаменателе. В частности, при  $T_2 \ll T_1$ ,  $TE$  ( $\xi_2 \ll \xi_1$ ,  $\chi \ll 1$ ) и  $|\cos \alpha|/\chi \gg 2$  можно записать  $b\sqrt{\xi_1\xi_2} \approx \exp(-TE/T_1) \cos \alpha$ , что соответствует замечанию относительно асимптотики в случае коротких  $T_2$  и  $\alpha \neq 0, \pi/2, \pi$ , сделанному выше. Асимптотика спинового эха для рассматриваемого случая продемонстрирована на рис. 3.3 и 3.4.

### 3.2.3 $T_1 < T_2$ , угол рефокусирования $\alpha \neq 0, \pi$

Теоретический предел для времени поперечной спиновой релаксации  $T_2 < 2T_1$ , хотя случай  $T_1 < T_2$  ( $\chi > 1$ ) весьма экзотичен [20]. Асимптотическое поведение в этом случае имеет вид (см. Приложение Г):

$$\frac{M_{xn}}{M_{x0}} \approx (\xi_1\xi_2)^{n/2} \frac{\chi^n}{\sqrt{2\pi n}} \left| \tan \frac{\alpha}{2} \right| \sqrt{\frac{\chi + \chi^{-1}}{\chi - \chi^{-1}}}, \quad (3.20)$$

$$\frac{M_{yn}}{M_{y0}} \approx (\xi_1\xi_2)^{n/2} \frac{(-\chi)^n}{\sqrt{2\pi n}} \left| \tan \frac{\alpha}{2} \right| \sqrt{\frac{\chi - \chi^{-1}}{\chi + \chi^{-1}}}. \quad (3.21)$$

Как можно видеть из уравнений (3.20) и (3.21), в рассматриваемом случае асимптотика спинового эха определяется фактором  $(\chi\sqrt{\xi_1\xi_2})^n = \xi_2^n$ , т.е.  $T_2$ -релаксацией и не является чисто экспоненциальной.

В отличие от рассмотренного выше случая  $T_1 > T_2$ ,  $\alpha \neq 0, \pi$ , в рассматриваемом случае асимптотики (3.20) и (3.21) верны и при  $\alpha = \pi/2$ ,  $T_1 < T_2$ . Это связано с тем, что в противоположность сделанному для случая  $T_1 > T_2$  замечанию (см. раздел 3.2.2), при  $T_1 < T_2$  и любом  $\alpha \neq 0, \pi$  в асимптотическом режиме можно опустить поворачиваемую импульсом часть намагниченности, релаксация которой за один период представляет собой смесь  $T_1$  и  $T_2$ -релаксаций, но рассматривать только ту часть намагниченности, которая все время остается в поперечной плоскости и релаксирует с временем  $T_2$  в течение всего периода последовательности (для качественного объяснения мы пренебрегаем

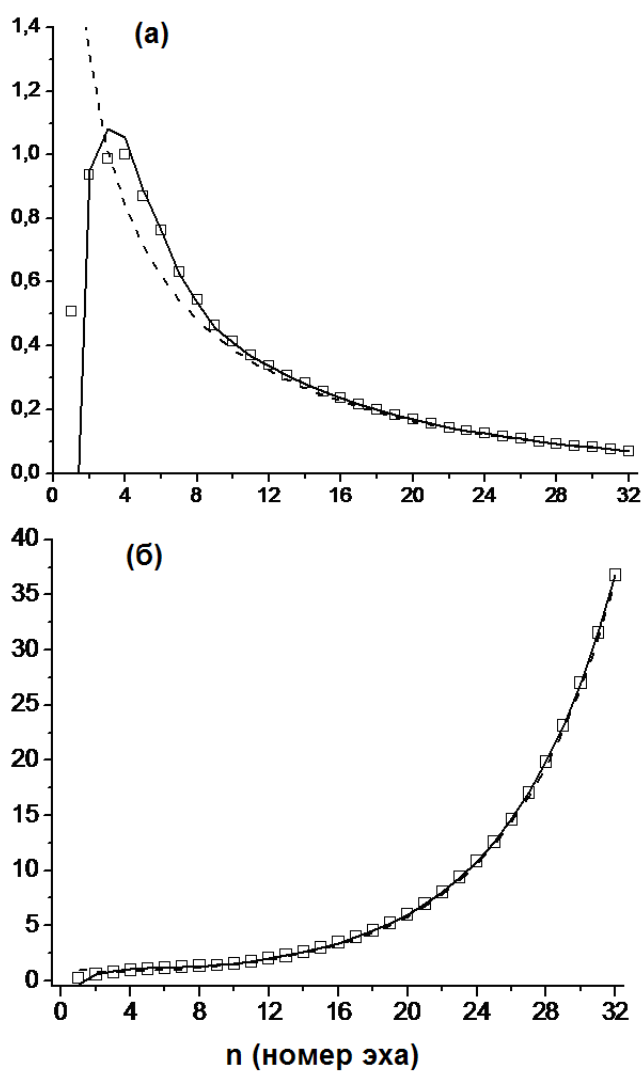


Рис. 3.3: Точные (пустые квадраты), асимптотические (пунктирная линия) и аналитически аппроксимированные (сплошная линия) эхо-амплитуды ( $x$ -компонента);  $\chi = 0.80$ , угол рефокусирования  $\alpha = 2\pi/9$ ,  $T_1 = \infty$  ( $\xi_1 = 1$ ). (а)  $M_n$ , нормированные на максимальное точное эхо ( $M_{n_{max}}$ ,  $n_{max} = 4$ ); (б) для лучшей демонстрации последних эхосигналов показаны величины  $\widetilde{M}_n = (\xi_1 \xi_2)^{-n/2} M_n$ , нормированные на точное значение  $\widetilde{M}_{n_{max}}$ .

дефазированием различных изохромат). Асимптотика спинового эха для рассматриваемого случая показана на рис. 3.5 и 3.6.

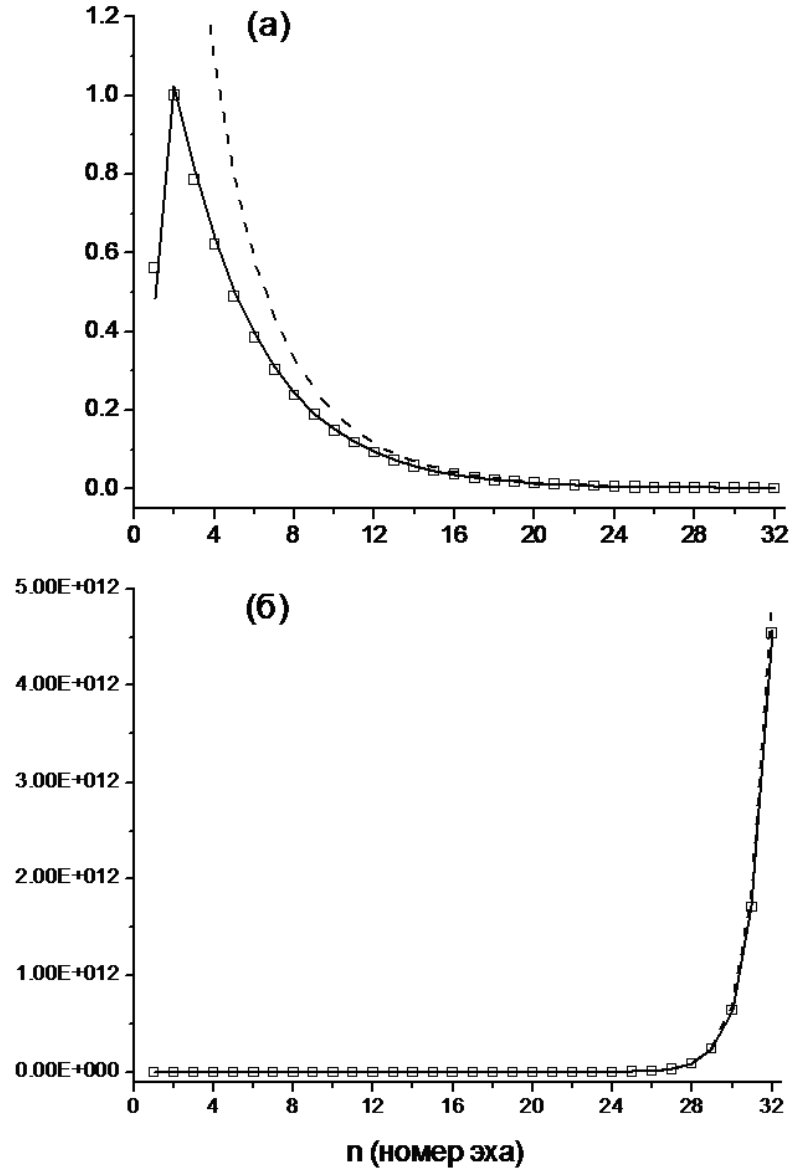


Рис. 3.4: Точные (пустые квадраты), асимптотические (пунктирная линия) и аналитически аппроксимированные (сплошная линия) эхо-амплитуды ( $x$ -компонента);  $\chi = 0.30$ , угол рефокусирования  $\alpha = 2\pi/9$ ,  $T_1 = \infty$  ( $\xi_1 = 1$ ). (а)  $M_n$ , нормированные на максимальное точное эхо ( $M_{n_{max}}$ ,  $n_{max} = 2$ ); (б) для лучшей демонстрации последних эхосигналов показаны величины  $\widetilde{M}_n = (\xi_1 \xi_2)^{-n/2} M_n$ , нормированные на точное значение  $\widetilde{M}_{n_{max}}$ .

### 3.3 Аналитические аппроксимации для МРТ СPMG ЭХО-АМПЛИТУД

Выше приведены асимптотические уравнения для эхо-амплитуд при различных углах рефокусирования  $\alpha$  соотношениях времен спиновой релаксации  $T_1$  и  $T_2$ . Однако оказывается, что асимптотический режим может начинаться достаточно поздно, когда

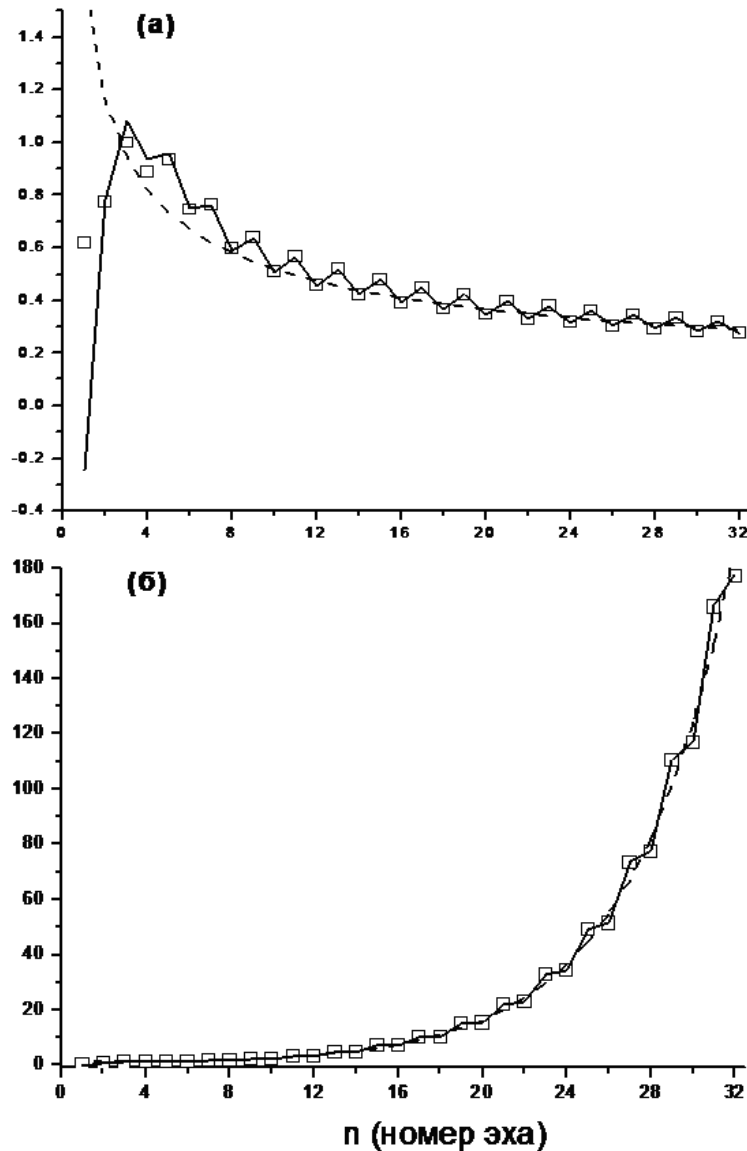


Рис. 3.5: Точные (пустые квадраты), асимптотические (пунктирная линия) и аналитически аппроксимированные (сплошная линия) эхо-амплитуды ( $x$ -компонента);  $\chi = 0.8^{-1}$ , угол рефокусирования  $\alpha = 2\pi/9$ ,  $T_2 = \infty$  ( $\xi_2 = 1$ ). (а)  $M_n$ , нормированные на максимальное точное эхо ( $M_{n_{max}}$ ,  $n_{max} = 3$ ); (б) для лучшей демонстрации последних эхосигналов показаны величины  $\widetilde{M}_n = (\xi_1 \xi_2)^{-n/2} M_n$ , нормированные на точное значение  $\widetilde{M}_{n_{max}}$ .

отношение сигнал-шум в эксперименте может быть весьма низким. Можно использовать точную аналитическую формулу (3.3) для эхо-амплитуд, однако, как было отмечено выше, оно достаточно неудобно для вычислений и не является наглядным для понимания поведения эхо-амплитуд. Таким образом, актуальна проблема получения неких более простых аналитических выражений, описывающих поведение спинового

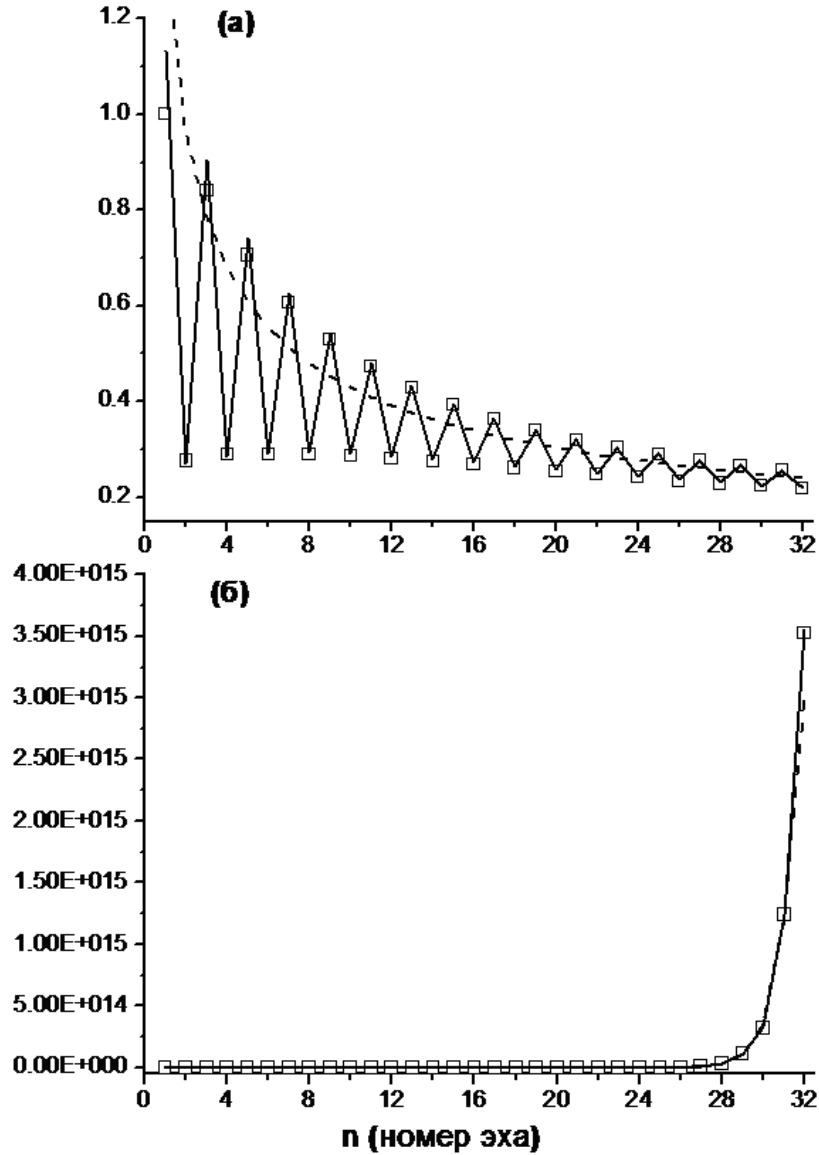


Рис. 3.6: Точные (пустые квадраты), асимптотические (пунктирная линия) и аналитически аппроксимированные (сплошная линия) эхо-амплитуды ( $x$ -компонента);  $\chi = 0.3^{-1}$ , угол рефокусирования  $\alpha = 2\pi/9$ ,  $T_2 = \infty$  ( $\xi_2 = 1$ ). (а)  $M_n$ , нормированные на максимальное точное эхо ( $M_{n_{max}}, n_{max} = 1$ ); (б) для лучшей демонстрации последних эхосигналов показаны величины  $\widetilde{M}_n = (\xi_1 \xi_2)^{-n/2} M_n$ , нормированные на точное значение  $\widetilde{M}_{n_{max}}$ .

эха в доасимптотическом режиме. Ниже мы приводим такие аналитические аппроксимации для эхо-амплитуд. Вид и вывод данных выражений (см. Приложения Д и Е) подразделяется на четыре случая в зависимости от соотношения между  $T_1$  и  $T_2$  и того, больше или меньше параметр  $\chi$  некоторого критического значения  $\chi_0$ , где

$$\chi_0 = (1 - \sin \alpha) / |\cos \alpha| . \quad (3.22)$$

Такое подразделение было сделано для более точной оценки возникающих при соответствующем выводе интегралов, в то время как в точном выражении (3.3) для эхо-амплитуд никакого подразделения, очевидно, нет. Выделение четырех случаев может быть объяснено следующим образом. При  $T_1 \neq T_2$  релаксация не только уменьшает величину вектора намагниченности, но также меняет угол наклона его к поперечной плоскости. Так при  $T_2 < T_1$  намагниченность, повернутая импульсом по направлению к  $xy$ -плоскости, возвращается релаксацией по направлению к оси  $z$ , а при  $T_2 > T_1$  - «прижимается» к поперечной плоскости. Таким образом, релаксация меняет число импульсов, необходимых для одного полного оборота намагниченности вокруг оси  $x$  (ср. с замечанием в разделе 3.2.1). Кроме того, может оказаться, что релаксация вообще не позволит намагниченности повернуться вокруг оси  $x$ , т.е. при некотором соотношении между  $T_1$ ,  $T_2$ ,  $TE$  и  $\alpha$  осцилляторное поведение эхо-амплитуд исчезает. Для одного изохромата это соответствует ситуации, когда все собственные значения матрицы Карра-Парселла (матрицы  $\mathbf{Q P Q}$  в рекурсии (1.6)) действительны, в то время как в противоположном («осцилляторном») случае имеется одно действительное и два комплексно-сопряженных собственных значения [21]. С учетом усреднения по частотным изохроматам переход от «осцилляторного» случая к «неосцилляторному» описывается критическим значением  $\chi_0$ . С математической точки зрения, данный порог для параметра  $\chi$  возникает из различного расположения особых точек ПФ (2.32) на комплексной плоскости. Условие для проявления осцилляций в поведении спинового эха имеет вид

$$|\ln \chi| < \ln \chi_0^{-1}, \quad (3.23)$$

в то время как при

$$|\ln \chi| \geq \ln \chi_0^{-1} \quad (3.24)$$

осцилляции эхо-сигналов для практически важной ситуации  $T_2 \leq T_1$  отсутствуют (ниже будет показано, что в теоретически возможном случае  $T_2 > T_1$  [20] всегда имеет место альтерация четных и нечетных эхо-амплитуд). В целом же оказывается, что поведение спинового эха существенно неэкспоненциально, причем если первые эхо-сигналы могут быть аппроксимированы суммой нескольких (до трех) экспонент, то спад более поздних эхо-амплитуд происходит быстрее. Данное утверждение согласуется с выводами,

сделанными авторами работы [82] из результатов численных симуляций и проделанных опытов.

### 3.3.1 Случай 1: $T_2 \leq T_1$ , наличие осцилляций

При  $T_2 \leq T_1$  и  $|\ln \chi| < \ln \chi_0^{-1}$  ( $\alpha \neq 0, \pi$ ) нами была получена следующая аналитическая аппроксимация для эхо-амплитуд (см. Приложение Д):

$$\begin{aligned} \frac{M_{xn}}{M_{x0}} &\approx A_1 \frac{(\xi_1 \xi_2)^{n/2} b^n}{2} p_1^{1/2} \left\{ \epsilon I_0 \left[ \frac{np_1}{2} \right] + (1 - \epsilon) I_1 \left[ \frac{np_1}{2} \right] \right\} e^{-np_1/2} \\ &+ A_2 \frac{(-1)^n (\xi_1 \xi_2)^{n/2}}{4\epsilon b^n} p_2^{1/2} \left\{ I_0 \left[ \frac{np_2}{2} \right] + (2\epsilon - 1) I_1 \left[ \frac{np_2}{2} \right] \right\} e^{-np_2/2} \\ &- A_3 \frac{(\xi_1 \xi_2)^{n/2}}{2n^{3/2} \sqrt{\pi}} \cos \left( n\beta - \frac{\rho}{2} \right), \end{aligned} \quad (3.25)$$

$$\begin{aligned} \frac{M_{yn}}{M_{y0}} &\approx \frac{(-1)^{2\epsilon} (\xi_1 \xi_2)^{n/2} b^n}{4A_1 n^{2\epsilon-1}} p_1^{\frac{5}{2}-2\epsilon} \left\{ 2(1 - \epsilon) I_0 \left[ \frac{np_1}{2} \right] - I_1 \left[ \frac{np_1}{2} \right] \right\} e^{-np_1/2} \\ &- \frac{(-1)^{n+2\epsilon} (\xi_1 \xi_2)^{n/2}}{4A_2 b^n n^{2-2\epsilon}} p_2^{2\epsilon-\frac{1}{2}} \left\{ (2\epsilon - 1) I_0 \left[ \frac{np_2}{2} \right] - I_1 \left[ \frac{np_2}{2} \right] \right\} e^{-np_2/2} \\ &+ \frac{(\xi_1 \xi_2)^{n/2}}{A_3 \sqrt{\pi n}} \operatorname{Re} \left\{ \left( 1 - \frac{\kappa}{n} \right) \exp \left[ i \left( n\beta + \frac{\rho}{2} \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.26)$$

Здесь  $I_0[t]$  и  $I_1[t]$  - модифицированные функции Бесселя 1-го рода ( $t$  - внутренняя переменная), и

$$A_1 = \sqrt{\frac{(b + \chi)(b - \chi^{-1} \cos \alpha)}{(b - \chi)(b - \frac{1}{2}(\chi^{-1} - \chi) \cos \alpha)}}, \quad (3.27)$$

$$A_2 = \sqrt{\frac{(1 - \chi b)(b + \chi \cos \alpha)}{(1 + \chi b)(b - \frac{1}{2}(\chi^{-1} - \chi) \cos \alpha)}}, \quad (3.28)$$

$$A_3 = \frac{\left( 1 - \frac{1}{4}(\chi^{-1} + \chi)^2 \cos^2 \alpha \right)^{1/4}}{\sqrt{2} \sin \frac{\alpha}{2}}, \quad (3.29)$$

$$\beta = \arccos \left( \frac{\chi^{-1} + \chi}{2} \cos \alpha \right), \quad (3.30)$$

$$\rho = \arctan \frac{1 + \frac{1}{4}(\chi^{-1} + \chi)^2 \cos \alpha}{\frac{1}{2} |\chi^{-1} - \chi| \sqrt{1 - \frac{1}{4}(\chi^{-1} + \chi)^2 \cos^2 \alpha}}, \quad (3.31)$$

$$p_1 = \frac{|b|}{\chi} - 1, \quad (3.32)$$

$$p_2 = \frac{1}{\chi |b|} - 1, \quad (3.33)$$

$$\epsilon = \frac{3}{4} + \frac{1}{4} \frac{\cos \alpha}{|\cos \alpha|}, \quad (3.34)$$

$$\begin{aligned} \kappa = & \{ (\chi^{-1} - \chi) \cos \alpha \sin \beta [ (\chi^{-1} + \chi) \cos \beta - 2 ] + \\ & + 2i [ (\chi^{-1} + \chi) \left( \cos^2 \beta - 2 \sin^4 \frac{\alpha}{2} \right) \cos \beta - 2 ] \} / [ 8 (\chi^{-1} + \chi) \sin^2 \alpha \sin \beta ] \end{aligned} \quad (3.35)$$

Первый член в уравнениях (3.25) и (3.26) описывает спад эха с фактором  $\sqrt{\xi_1 \xi_2} b$ , второй - с фактором  $\sqrt{\xi_1 \xi_2}/b$ , а третий - затухающие осцилляции с периодом  $2\pi/\beta$ . Можно видеть, что период осцилляций в третьем члене зависит от соотношения между  $T_1$ - и  $T_2$ -релаксацией, в соответствии со сделанным выше замечанием.

Заметим также, что  $|b|^{-1} \leq 1 \leq |b|$ , так что при  $T_1 \neq T_2$  и  $\alpha \neq \pi/2$  с возрастанием  $n$  первый член в аппроксимации становится доминирующим. Учитывая данное обстоятельство, а также используя разложение

$$I_\nu [t] \approx \frac{e^t}{\sqrt{2\pi t}} \left( 1 + \frac{1 - 4\nu^2}{8t} + \dots \right), \quad t \gg 1, \quad (3.36)$$

из аналитических аппроксимаций (3.25) и (3.26) могут быть получены соответствующие асимптотические уравнения (3.17) и (3.18), а также следующее условие для начала асимптотического режима:

$$\frac{n}{2} \left( \frac{|b|}{\chi} - 1 \right) \gg 1. \quad (3.37)$$

Напротив, поведение первых эхо-сигналов с номерами  $n \ll 2(-1 + |b|/\chi)^{-1}$  приближенно описывается суммой одной-двух экспонент и затухающих осцилляций:

$$\begin{aligned} \frac{M_{xn}}{M_{x0}} & \approx A_1 \frac{\epsilon (\xi_1 \xi_2)^{n/2} b^n}{2} p_1^{1/2} + A_2 \frac{(-1)^n (\xi_1 \xi_2)^{n/2}}{4\epsilon b^n} p_2^{1/2} - A_3 \frac{(\xi_1 \xi_2)^{n/2}}{2n^{3/2} \sqrt{\pi}} \cos \left( n\beta - \frac{\rho}{2} \right) \quad (3.38) \\ \frac{M_{yn}}{M_{y0}} & \approx -(1 - \epsilon) \frac{(\xi_1 \xi_2)^{n/2} b^n}{2A_1} p_1^{3/2} - \left( \epsilon - \frac{1}{2} \right) \frac{(-1)^n (\xi_1 \xi_2)^{n/2}}{2A_2 b^n} p_2^{3/2} + \\ & + \frac{(\xi_1 \xi_2)^{n/2}}{A_3 \sqrt{\pi n}} \operatorname{Re} \left\{ \left( 1 - \frac{\kappa}{n} \right) \exp \left[ i \left( n\beta + \frac{\rho}{2} \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.39)$$

Рассматриваемый случай включает в себя частный случай равных времен спиновой релаксации  $T_1 = T_2$ ,  $\alpha \neq 0, \pi$ , когда  $|b| = 1$  и условие (3.37) вообще невыполнимо. В этом частном случае приведенная аппроксимация для  $x$ -компоненты непосредственно дает асимптотическое поведение эхо-амплитуд (уравнение (3.13)), а для  $y$ -компоненты - с небольшой поправкой (член, содержащий  $\kappa$  в качестве множителя), исчезающей при

$$n \sin \alpha \gg 1. \quad (3.40)$$

Последнее условие есть условие наступления асимптотического режима при  $T_1 = T_2$ ,  $\alpha \neq 0, \pi$  (уравнение (3.13)).



Наконец, к осцилляторному случаю также относится и частный случай  $\alpha = \pi/2$  (и, следовательно,  $\beta = \pi/2$ ). В этом частном случае асимптотическое поведение эхо-амплитуд (3.14) и (3.15) может быть получено из приведенных аппроксимаций, устремляя  $\alpha$  к  $\pi/2-0$  или  $\pi/2+0$ . Отсюда следует, что условие для применимости асимптотики при  $\alpha = \pi/2$  следующее:

$$\frac{n}{2} (\chi^{-1} - 1) \gg 1. \quad (3.41)$$

Таким образом, можно видеть, что при выводе асимптотики случай одновременного  $T_1 = T_2$  и  $\alpha = \pi/2$  должен рассматриваться сначала как стремление  $T_1$  к  $T_2$  (т.е.  $\chi \rightarrow 1$ ), а затем - стремление  $\alpha \rightarrow \pi/2$ , иначе можно получить расходящиеся выражения (см. комментарии в разделе 3.2.2).

Рис. 3.1, 3.2 и 3.3 демонстрируют хорошее согласие приближенных и точных эхо-амплитуд в рассматриваемом случае.

### 3.3.2 Случай 2: $T_2 \leq T_1$ , отсутствие осцилляций

При  $T_2 \leq T_1$  и  $|\ln \chi| \geq \ln \chi_0^{-1}$  ( $\alpha \neq \pi/2$ ) нами была получена следующая аналитическая аппроксимация для эхо-амплитуд (см. Приложение E):

$$\begin{aligned} \frac{M_{xn}}{M_{x0}} \approx & A_1 \frac{(\xi_1 \xi_2)^{n/2} b^n}{4} p_3^{1/2} \left\{ I_0 \left[ \frac{n p_3}{2} \right] + I_1 \left[ \frac{n p_3}{2} \right] \right\} e^{-n p_3/2} \\ & + A_2 \frac{(-1)^n (\xi_1 \xi_2)^{n/2}}{4 \epsilon b^n} p_2^{1/2} \left\{ I_0 \left[ \frac{n p_2}{2} \right] + (2\epsilon - 1) I_1 \left[ \frac{n p_2}{2} \right] \right\} e^{-n p_2/2} \\ & - A_4 \frac{(\xi_1 \xi_2)^{n/2} c^n}{4 n^{2-2\epsilon}} p_4^{2\epsilon - \frac{1}{2}} \left\{ (2\epsilon - 1) I_0 \left[ \frac{n p_4}{2} \right] - I_1 \left[ \frac{n p_4}{2} \right] \right\} e^{-n p_4/2}, \end{aligned} \quad (3.42)$$

$$\begin{aligned} \frac{M_{yn}}{M_{y0}} \approx & - \frac{(\xi_1 \xi_2)^{n/2} b^n}{4 A_1} p_3^{3/2} \left\{ I_0 \left[ \frac{n p_3}{2} \right] - I_1 \left[ \frac{n p_3}{2} \right] \right\} e^{-n p_3/2} \\ & - \frac{(-1)^{n+2\epsilon} (\xi_1 \xi_2)^{n/2}}{4 A_2 b^n n^{2-2\epsilon}} p_2^{2\epsilon - \frac{1}{2}} \left\{ (2\epsilon - 1) I_0 \left[ \frac{n p_2}{2} \right] - I_1 \left[ \frac{n p_2}{2} \right] \right\} e^{-n p_2/2} \\ & + \frac{(\xi_1 \xi_2)^{n/2} c^n}{4 \epsilon A_4} p_4^{1/2} \left\{ I_0 \left[ \frac{n p_4}{2} \right] + (2\epsilon - 1) I_1 \left[ \frac{n p_4}{2} \right] \right\} e^{-n p_4/2}, \end{aligned} \quad (3.43)$$

где

$$A_4 = \sqrt{\frac{(c + \chi) \left( \frac{1}{2} (\chi^{-1} + \chi) \cos \alpha - c \right)}{(c - \chi) (\chi^{-1} \cos \alpha - c)}}, \quad (3.44)$$

$$p_3 = bc - 1, \quad (3.45)$$

$$p_4 = \frac{|c|}{\chi} - 1, \quad (3.46)$$

$$c = \left( \frac{\chi^{-1} + \chi}{2} |\cos \alpha| - \sqrt{\frac{(\chi^{-1} + \chi)^2}{4} \cos^2 \alpha - 1} \right) \frac{\cos \alpha}{|\cos \alpha|}. \quad (3.47)$$

В соответствии с приведенными аппроксимациями, поведение спинового эха вновь может быть описано тремя членами, дающими следующие факторы спада соответственно:  $b\sqrt{\xi_1\xi_2}$ ,  $\sqrt{\xi_1\xi_2}/b$  и  $c\sqrt{\xi_1\xi_2}$ . Заметим, что  $|b|^{-1} \leq |c| \leq |b|$ , так что при  $\alpha \neq 0, \pi/2, \pi$  (и, следовательно,  $T_1 \neq T_2$  в соответствии с условием  $|\ln \chi| \geq \ln \chi_0^{-1}$ ) с возрастанием номера эха  $n$  первый член приведенной аппроксимации начинает доминировать над остальными двумя членами и определяет асимптотическое поведение эхо-амплитуд (уравнения (3.17) и (3.18)), при этом условие наступления асимптотического режима может быть записано в следующем виде:

$$\frac{n}{2}(bc - 1) \gg 1, \quad (3.48)$$

в то время как первые эхо-сигналы с номерами  $n \ll 2(bc - 1)^{-1}$  введут себя как сумма одной-трех экспонент:

$$\begin{aligned} \frac{M_{xn}}{M_{x0}} &\approx A_1 \frac{(\xi_1\xi_2)^{n/2} b^n}{4} p_3^{1/2} + A_2 \frac{(-1)^n (\xi_1\xi_2)^{n/2}}{4\epsilon b^n} p_2^{1/2} - \left(\epsilon - \frac{1}{2}\right) A_4 \frac{(\xi_1\xi_2)^{n/2} c^n}{2} p_4^{3/2} \\ \frac{M_{yn}}{M_{y0}} &\approx -\frac{(\xi_1\xi_2)^{n/2} b^n}{4A_1} p_3^{3/2} - \left(\epsilon - \frac{1}{2}\right) \frac{(-1)^n (\xi_1\xi_2)^{n/2}}{2A_2 b^n} p_2^{3/2} + \frac{(\xi_1\xi_2)^{n/2} c^n}{4\epsilon A_4} p_4^{1/2}. \end{aligned} \quad (3.50)$$

Рассматриваемый случай включает в себя частный случай  $\alpha = 0$  и  $\pi$ , когда  $bc = 1$  и условие (3.48) не выполняется. В этом случае приведенная аппроксимация воспроизводит точный результат (3.8). Заметим, что случай одновременного  $T_1 = T_2$  и  $\alpha = 0$  или  $\pi$  - неосцилляторный, т.е. должен рассматриваться сначала как стремление  $\alpha$  к 0 или  $\pi$ , а затем - стремление  $T_1 \rightarrow T_2$ , иначе можно получить расходящиеся выражения (см. раздел 3.2.1).

Рис. 3.4 демонстрирует хорошее согласие приближенных и точных эхо-амплитуд в рассматриваемом случае.

### 3.3.3 Случай 3: $T_2 > T_1$ , наличие осцилляций

При  $T_2 > T_1$  и  $|\ln \chi| < \ln \chi_0^{-1}$  ( $\alpha \neq 0, \pi$ ) нами были получены следующая аналитическая аппроксимация для эхо-амплитуд:

$$\begin{aligned} \frac{M_{xn}}{M_{x0}} &\approx \tilde{A}_1 \frac{(\xi_1\xi_2)^{n/2} \chi^n}{2} p_5^{1/2} I_0 \left[ \frac{np_5}{2} \right] e^{-np_5/2} \\ &\quad - \tilde{A}_2 \frac{(\xi_1\xi_2)^{n/2} (-\chi)^n}{4} p_6^{3/2} \left\{ I_0 \left[ \frac{np_6}{2} \right] - I_1 \left[ \frac{np_6}{2} \right] \right\} e^{-np_6/2} \\ &\quad - A_3 \frac{(\xi_1\xi_2)^{n/2}}{2n^{3/2} \sqrt{\pi}} \cos \left( n\beta - \frac{\pi - \rho}{2} \right), \end{aligned} \quad (3.51)$$

$$\begin{aligned}
\frac{M_{yn}}{M_{y0}} \approx & -\frac{(\xi_1 \xi_2)^{n/2} \chi^n}{4\tilde{A}_1 n} p_5^{1/2} I_1 \left[ \frac{n p_5}{2} \right] e^{-n p_5/2} \\
& + \frac{(\xi_1 \xi_2)^{n/2} (-\chi)^n}{4\tilde{A}_2} p_6^{1/2} \left\{ I_0 \left[ \frac{n p_6}{2} \right] + I_1 \left[ \frac{n p_6}{2} \right] \right\} e^{-n p_6/2} \\
& + \frac{(\xi_1 \xi_2)^{n/2}}{A_3 \sqrt{\pi n}} \operatorname{Re} \left\{ \left( 1 - \frac{\kappa}{n} \right) \exp \left[ i \left( n \beta + \frac{\pi - \rho}{2} \right) \right] \right\}, \quad (3.52)
\end{aligned}$$

(вывод данных выражений полностью аналогичен выводу соответствующих уравнений для случая 1 и в настоящей работе опущен). Здесь

$$\tilde{A}_1 = \sqrt{\frac{\chi + \chi^{-1}}{\chi - \chi^{-1}} \cdot 2 \tan^2 \frac{\alpha}{2}}, \quad (3.53)$$

$$\tilde{A}_2 = \sqrt{\frac{\chi + \chi^{-1}}{\chi - \chi^{-1}} \cdot \frac{1}{2} \cot^2 \frac{\alpha}{2}}, \quad (3.54)$$

$$p_5 = \chi \tilde{b} - 1, \quad (3.55)$$

$$p_6 = \frac{\chi}{\tilde{b}} - 1, \quad (3.56)$$

$$\tilde{b} = \left| \frac{\chi^{-1} - \chi}{2} \right| \cos \alpha + \sqrt{\frac{(\chi^{-1} - \chi)^2}{4} \cos^2 \alpha + 1}, \quad (3.57)$$

$\rho$  определено уравнением (3.31), и  $A_3$  - уравнением (3.29).

Первые два члена в уравнениях (3.51) и (3.52) описывают спад эхо-сигналов с фактором  $\sqrt{\xi_1 \xi_2} \chi = \xi_2$ , т.е. определяются  $T_2$ -релаксацией, третий член описывает затухающие осцилляции с периодом  $2\pi/\beta$ . Заметим, однако, что на данные затухающие осцилляции будут накладываться более сильные альтерации четных и нечетных эхо-амплитуд, вызванные формой первых двух членов, а именно их одинаковым фактором спада (в противоположность ситуации, имевшей место в рассмотренных выше случаях 1 и 2).

В рассматриваемом случае асимптотика эхо-амплитуд (уравнения (3.20) и (3.21)) для  $x$ -компоненты определяется первым членом, а для  $y$ -компоненты - вторым, поэтому несколько различны и условия наступления асимптотического режима для двух компонент намагниченности:

$$\frac{n}{2} (\chi \tilde{b} - 1) \gg 1 \quad (3.58)$$

для  $x$ -компоненты и

$$\frac{n}{2} \left( \frac{\chi}{\tilde{b}} - 1 \right) \gg 1 \quad (3.59)$$

для  $y$ -компоненты. Заметим, что здесь нет необходимости отдельно выделять частный случай  $\alpha = \pi/2$  в соответствии с замечанием, сделанным в разделе 3.2.3.

Напротив, первые эхо-сигналы ведут себя как сумма одной экспоненты и затухающих осцилляций.

$$\frac{M_{xn}}{M_{x0}} \approx \frac{(\xi_1 \xi_2)^{n/2} \chi^n}{2} \left( \tilde{A}_1 p_5^{1/2} - \tilde{A}_2 \frac{(-1)^n}{2} p_6^{3/2} \right) - A_3 \frac{(\xi_1 \xi_2)^{n/2}}{2n^{3/2} \sqrt{\pi}} \cos \left( n\beta - \frac{\pi - \rho}{2} \right) \quad (3.60)$$

$$\frac{M_{yn}}{M_{y0}} \approx \frac{(\xi_1 \xi_2)^{n/2} (-\chi)^n}{4\tilde{A}_2} p_6^{1/2} + \frac{(\xi_1 \xi_2)^{n/2}}{A_3 \sqrt{\pi n}} \operatorname{Re} \left\{ \left( 1 - \frac{\kappa}{n} \right) \exp \left[ i \left( n\beta + \frac{\pi - \rho}{2} \right) \right] \right\} \quad (3.61)$$

Заметим, что частный случай  $T_1 = T_2$ ,  $\alpha \neq 0$ ,  $\pi$  не включен в рассматриваемый случай только потому, что при этом аппроксимации (3.51) и (3.52) переходят в аппроксимации (3.25) и (3.26) соответственно.

Рис. 3.5 демонстрирует хорошее согласие приближенных и точных эхо-амплитуд в рассматриваемом случае.

### 3.3.4 Случай 4: $T_2 > T_1$ , отсутствие осцилляций

При  $T_2 > T_1$  и  $|\ln \chi| \geq \ln \chi_0^{-1}$  ( $\alpha \neq \pi/2$ ) нами были получены следующая аналитическая аппроксимация для эхо-амплитуд:

$$\begin{aligned} \frac{M_{xn}}{M_{x0}} \approx & \tilde{A}_1 \frac{(\xi_1 \xi_2)^{n/2} \chi^n}{4\epsilon} p_7^{1/2} \left\{ I_0 \left[ \frac{np_7}{2} \right] + (2\epsilon - 1) I_1 \left[ \frac{np_7}{2} \right] \right\} e^{-np_7/2} \\ & - \tilde{A}_2 \frac{(\xi_1 \xi_2)^{n/2} (-\chi)^n}{4n^{2-2\epsilon}} p_8^{2\epsilon - \frac{1}{2}} \left\{ (2\epsilon - 1) I_0 \left[ \frac{np_8}{2} \right] - I_1 \left[ \frac{np_8}{2} \right] \right\} e^{-np_8/2} \\ & - \tilde{A}_4 \frac{(\xi_1 \xi_2)^{n/2} c^n}{4} p_3^{3/2} \left\{ I_0 \left[ \frac{np_3}{2} \right] - I_1 \left[ \frac{np_3}{2} \right] \right\} e^{-np_3/2}, \end{aligned} \quad (3.62)$$

$$\begin{aligned} \frac{M_{yn}}{M_{y0}} \approx & - \frac{(\xi_1 \xi_2)^{n/2} \chi^n}{4\tilde{A}_1 n^{2-2\epsilon}} p_7^{2\epsilon - \frac{1}{2}} \left\{ (2\epsilon - 1) I_0 \left[ \frac{np_7}{2} \right] - I_1 \left[ \frac{np_7}{2} \right] \right\} e^{-np_7/2} \\ & + \frac{(\xi_1 \xi_2)^{n/2} (-\chi)^n}{4\tilde{A}_2 \epsilon} p_8^{1/2} \left\{ I_0 \left[ \frac{np_8}{2} \right] + (2\epsilon - 1) I_1 \left[ \frac{np_8}{2} \right] \right\} e^{-np_8/2} \\ & + \frac{(\xi_1 \xi_2)^{n/2} c^n}{4\tilde{A}_4} p_3^{1/2} \left\{ I_0 \left[ \frac{np_3}{2} \right] + I_1 \left[ \frac{np_3}{2} \right] \right\} e^{-np_3/2}, \end{aligned} \quad (3.63)$$

(вывод данных выражений полностью аналогичен выводу соответствующих уравнений для случая 2 и в настоящей работе опущен). Здесь

$$\tilde{A}_4 = \frac{\cos \alpha}{|\cos \alpha|} \sqrt{\frac{(\chi + c) \left( \frac{1}{2} (\chi^{-1} + \chi) \cos \alpha - c \right)}{(\chi - c) (\chi \cos \alpha - c)}}, \quad (3.64)$$

$$p_7 = 2(1 - \epsilon) \frac{\chi}{|b|} + (2\epsilon - 1) \chi |c| - 1, \quad (3.65)$$

$$p_8 = (2\epsilon - 1) \frac{\chi}{|b|} + 2(1 - \epsilon) \chi |c| - 1. \quad (3.66)$$

Первые два члена в уравнениях (3.62) и (3.63) описывают спад эхо-амплитуд с фактором  $\sqrt{\xi_1 \xi_2} \chi = \xi_2$ , а третий - с фактором  $\sqrt{\xi_1 \xi_2} c$ . Поскольку при  $T_1 < T_2$  имеем  $\chi \geq |c|$ , то, как и в предыдущем случае, поведение эхо амплитуд в основном определяется  $T_2$ -релаксацией. При этом, однако, в действительности в поведении эхо-сигналов будут все же проявляться сильные альтерации четных и нечетных эхо-амплитуд, вызванные формой первых двух членов, а именно их одинаковым фактором спада (в противоположность ситуации, имевшей место в рассмотренных выше случаях 1 и 2), хотя ради сходства терминологии данный случай и назван неосцилляторным.

При  $\alpha \neq 0$ ,  $\pi$  асимптотическое поведение эхо-амплитуд (уравнения (3.20) и (3.21)) определяется первым членом для  $x$ -компоненты и вторым - для  $y$ -компоненты. Отсюда условия для наступления асимптотического режима имеют следующий вид:

$$\frac{n}{2} \left[ 2(1 - \epsilon) \frac{\chi}{|b|} + (2\epsilon - 1) \chi |c| - 1 \right] \gg 1 \quad (3.67)$$

для  $x$ -компоненты и

$$\frac{n}{2} \left[ (2\epsilon - 1) \frac{\chi}{|b|} + 2(1 - \epsilon) \chi |c| - 1 \right] \gg 1 \quad (3.68)$$

для  $y$ -компоненты.

Напротив, первые эхо-сигналы ведут себя как сумма одной-двух экспонент:

$$\frac{M_{xn}}{M_{x0}} \approx \frac{(\xi_1 \xi_2)^{n/2} \chi^n}{4} \left( \frac{\tilde{A}_1}{\epsilon} p_7^{1/2} - \tilde{A}_2 (-1)^n p_8^{3/2} (2\epsilon - 1) \right) - \tilde{A}_4 \frac{(\xi_1 \xi_2)^{n/2} c^n}{4} p_3^{3/2}, \quad (3.69)$$

$$\frac{M_{yn}}{M_{y0}} \approx \frac{(\xi_1 \xi_2)^{n/2} \chi^n}{4} \left( -\frac{1}{\tilde{A}_1} p_7^{3/2} (2\epsilon - 1) + \frac{(-1)^n}{\tilde{A}_2 \epsilon} p_8^{1/2} \right) + \frac{(\xi_1 \xi_2)^{n/2} c^n}{4 \tilde{A}_4} p_3^{1/2}. \quad (3.70)$$

При  $\alpha = 0$  и  $\pi$ , когда  $\sqrt{\xi_1 \xi_2} \chi = \sqrt{\xi_1 \xi_2} c = \xi_2$ , приведенная аппроксимация воспроизводит точный результат (3.8).

Рис. 3.6 демонстрирует хорошее согласие приближенных и точных эхо-амплитуд в рассматриваемом случае.

### 3.4 Анализ точности приближенных уравнений

Для анализа точности полученных асимптотических уравнений и аналитических аппроксимаций мы составили таблицы 3.1 и 3.2, в которых представлены номера  $x$  и  $y$ -компонент эхо-сигналов, начиная с которых соответствующее приближенное выражение

удовлетворительным образом соотносится с точным выражением. В качестве критерия удовлетворительной точности было выбрано следующее условие:

$$\delta = \left| \frac{M_n^{ap}}{M_n^{ex}} - 1 \right| \leq 0.05 \quad (3.71)$$

(верхние индексы «ар» и «ex» обозначают приближенное (асимптотическое или аналитически аппроксимированное (от англ. approximate)) и точное (от англ. exact) эхо соответственно. Кроме того, поскольку случай  $T_2 > T_1$  является весьма экзотическим [20], мы исключили его из рассмотрения и ограничились только ситуацией  $T_2 \leq T_1$  ( $\chi \leq 1$ ).

Результаты численного анализа были занесены в таблицы 3.1 и 3.2 с помощью формата данных вида  $n_1/n_2(n_3)/n_4$ , что означает следующее. До первой косой черты идут данные, относящиеся к асимптотическим уравнениям, после первой косой черты и до второй - данные, относящиеся к аналитическим аппроксимациям, наконец, число после второй косой черты характеризует сами точные выражения. Числа  $n_1$  и  $n_2$  - это номера эхо-сигналов, начиная с которых критерий (3.71) выполняется соответственно для асимптотик и аналитических аппроксимаций; эти числа не приведены, если они превышают 100, а на соответствующем месте стоит прочерк. Число  $n_3$  в скобках - это фактический номер эхо-сигнала, начиная с которого соответствующая аналитическая аппроксимация с удовлетворительной точностью соответствует точным эхо-амплитудам;  $n_3$  приведено только при  $n_3 < n_2, n_4$ . Появление номера  $n_3$  вызвано следующим обстоятельством. Для некоторых ячеек таблицы наблюдается удовлетворительное согласие аппроксимаций и точных выражений, начиная с номера эха  $n_3$ , однако для последующих эхо-сигналов имеется несколько выпадающих значений  $\delta > 0.05$ . Оказывается, что подобное обстоятельство имеет место, если эхо-амплитуда мала, т.к. соответствующая аналитическая аппроксимация также дает малую величину эхо-сигнала того же порядка, но, тем не менее, ее точности не хватает для удовлетворительной оценки. Мы полагали, что если  $M_n/M_{n_{max}} \leq 0.01$ , то даже при значительном  $\delta$  (если оно выпадает из общего ряда) можно считать, что имеет место удовлетворительное согласие точных и приближенных уравнений. Наконец, число  $n_4$  представлено для наглядности сравнения и обозначает номер эхо-сигнала, начиная с которого эхо-амплитуда спадает в 100 раз по сравнению со своим максимальным значением (рассчитано для  $T_1 = \infty$ );  $n_4$  не приведено, если оно превышает 100, а на его месте указан прочерк. Граница между

осцилляторным (справа от границы) и неосцилляторным (слева от границы) случаями выделена жирным шрифтом. Углы рефокусирования  $\alpha = 0$  и  $\pi$  не представлены, поскольку для них существует точный результат, который воспроизводится аналитической аппроксимацией.

Таблица 3.1: Точность асимптотических и аналитически приближенных выражений для различных значений  $\chi = \sqrt{\xi_2/\xi_1}$  и  $\alpha$ , выраженная посредством чисел  $n_1, n_2, n_3$  и  $n_4$ ;  $x$ -компонента (при  $\chi = 1$ , т.е.  $T_1 = T_2$ , асимптотическая форма и аналитическая аппроксимация совпадают).

$\alpha$ ( $^\circ$ )	$\chi$										
	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1	
10	-/1 -/	-/1 -/	-/1 -/	-/1 -/	-/1 -/	-/1 -/	-/1 -/	-/1 -/	<b>72/1</b> -/	<b>14/27</b> -/	16/16 -/
20	-/1 /77	-/1 /79	-/1 /84	-/1 /92	78/1 -/	48/1 -/	<b>25/12</b> -/	<b>7/12</b> -/	22/9 -/	8/8 -/	
30	-/2 /34	-/2 /36	94/2 /38	51/2 /40	<b>29/2</b> /48	<b>15/18</b> /58	5/8 /75	12/6 -/	31/6 -/	6/6 -/	
40	-/2 /20	-/2 /21	44/2 /32	<b>23/2</b> /24	<b>11/13</b> /28	4/5 /34	9/4 /44	16/5 /63	34/5 -/	5/5 -/	
50	-/2 /13	50/2 /13	<b>21/4</b> /14	<b>9/11</b> /16	4/2 /19	7/2 /23	8/4 /29	15/4 /43	36/4 /82	4/4 -/	
60	96/2 /9	<b>23/4</b> /9	<b>8/9</b> /10	3/2 /12	6/2 /14	7/3 /17	12/3 /22	18/4 /32	41/4 /62	3/3 -/	
70	<b>38/2</b> /7	<b>8/9</b> /7	5/2 /8	5/2 /9	5/2 /11	9/3 /13	15/3 /17	21/3 /25	45/3 /49	3/3 -/	
80	<b>8/8</b> /5	5/2 /6	6/2 /6	9/4 /7	9/4 /9	13/3 /11	21/3 /14	27/3 /21	57/3 /41	3/3 -/	
90	<b>16/8</b> <b>(2)/3</b>	20/4 /5	20/4 /5	20/6 /7	20/6 /7	24/3 /9	28/3 /18	36/3 /18	64/3 /35	1/1 -/	
100	<b>9/9</b> /5	6/4 /5	10/4 /5	12/6 (5)/7	20/8 (4)/5	28/12 (4)/7	42/18 (3)/11	74/34 (3)/17	-/90 (2)/32	2/2 -/	
110	<b>39/2</b> /6	<b>10/10</b> /7	6/4 /7	8/4 /7	12/6 /8	16/8 (6)/9	24/12 (2)/11	41/20 (2)/15	96/50 (2)/29	2/2 -/	
120	96/1 /8	<b>25/5</b> /8	<b>12/11</b> /9	8/6 /9	8/60 /10	12/6 (4)/11	18/8 (2)/12	30/16 (2)/16	72/38 (2)/29	2/2 -/	
130	-/2 /11	51/1 /11	<b>23/6</b> /11	<b>14/12</b> /11	10/8 /12	10/6 /13	16/8 (2)/13	26/12 (2)/17	58/31 (2)/29	2/2 -/	
140	-/2 /14	-/1 /14	46/1 /15	<b>26/8</b> /15	<b>17/15</b> /15	14/10 /17	14/8 /17	24/12 (2)/18	52/2 /29	2/2 -/	
150	-/1 /20	-/1 /20	96/1 /21	54/1 /21	<b>34/8</b> /21	<b>24/20</b> /21	18/12 /21	24/12 (2)/19	50/28 (2)/27	2/2 -/	
160	-/1 /30	-/1 /31	-/1 /31	-/1 /30	83/1 /28	55/6 (1)/26	<b>38/23</b> <b>(7)/22</b>	<b>28/18</b> <b>(10)/17</b>	50/30 (2)/27	2/2 -/	
170	-/1 /28	-/1 /25	-/1 /19	-/1 /11	-/1 /7	-/1 /7	-/1 /9	<b>91/18</b> <b>(1)/13</b>	<b>60/38</b> <b>(2)/25</b>	2/2 -/	

Таблица 3.2: Точность асимптотических и аналитически приближенных выражений для различных значений  $\chi = \sqrt{\xi_2/\xi_1}$  и  $\alpha$ , выраженная посредством чисел  $n_1, n_2, n_3$  и  $n_4$ ;  $y$ -компонента.

$\alpha$ ( $^\circ$ )	$\chi$									
	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1
10	-/1 /-	-/1 /-	-/1 /-	-/1 /-	-/1 /-	-/1 /-	-/2 /-	-/2 /-	<b>64/86</b> /-	-/23 (6)/-
20	-/1 /76	-/1 /73	-/1 /70	-/1 /66	-/3 /62	-/7 /59	<b>73/37</b> /55	<b>33/41</b> /48	78/37 (2)/47	-/3 /-
30	-/2 /34	-/1 /33	-/1 /31	-/8 /29	<b>82/7</b> /28	<b>43/52</b> /26	23/26 /25	40/10 /22	99/50 (2)/31	56/3 /-
40	-/2 /9	-/2 /19	-/8 /18	<b>64/6</b> /17	<b>32/38</b> /16	18/17 /15	22/11 (3)/16	48/7 (2)/16	-/62 (2)/32	-/2 /2
50	-/2 /13	-/8 /12	<b>59/6</b> /12	<b>27/31</b> /11	15/12 /9	18/7 (3)/11	32/6 /12	60/2 /19	-/94 (2)/33	99/2 /-
60	-/2 /9	<b>66/6</b> /9	<b>25/27</b> /8	13/10 /7	18/3 /7	27/12 (5)/10	50/8 (5)/10	86/38 (1)/16	-/- (1)/30	26/2 /-
70	-/8 /7	<b>24/25</b> /6	12/8 (3)/5	19/5 /6	29/5 /8	49/27 (1)/9	74/43 (7)/11	-/83 (1)/16	-/12 (1)/31	71/1 /-
80	<b>24/25</b> /5	28/2 /4	31/4 /6	44/16 (4)/6	70/34 (3)/8	-/65 (3)/10	-/63 (2)/12	-/40 (1)/16	-/1 /32	60/1 /-
90	<b>20/4</b> <b>(2)/3</b>	20/4 /5	20/4 /5	20/3 /7	20/3 /7	20/3 /9	24/2 /11	29/1 /16	45/1 /28	5/1 /-
100	<b>27/26</b> /5	16/5 /5	29/16 (2)/4	42/21 (2)/6	64/34 (3)/8	91/14 (3)/9	-/14 (3)/11	-/32 (5)/17	-/86 (7)/31	50/1 /-
110	-/7 /6	<b>30/28</b> /6	19/14 /6	22/13 /5	32/13 (6)/7	42/23 (3)/9	67/33 (3)/10	98/54 (8)/15	-/44 (8)/30	44/3 /-
120	8/2 /8	<b>70/23</b> /8	<b>34/32</b> /8	24/19 /7	25/15 /6	31/15 (7)/10	43/20 (3)/11	72/38 (7)/17	-/86 (3)/29	15/1 /-
130	-/2 /11	-/6 /10	<b>67/27</b> /10	<b>41/37</b> /10	31/24 /9	30/18 /8	37/18 (11)/13	58/24 (8)/14	-/60 (8)/28	47/1 /-
140	-/2 /14	-/2 /14	-/14 /14	<b>75/31</b> /13	<b>51/46</b> /13	41/30 /12	39/22 /15	54/22 (4)/17	-/48 (9)/34	54/1 /-
150	-/1 /20	-/1 /20	-/1 /20	-/1 /20	<b>99/38</b> /19	<b>70/31</b> /18	56/40 /18	54/28 /23	96/40 (13)/34	18/1 /-
160	-/1 /31	-/1 /31	-/1 /31	-/1 /31	-/1 /31	-/48 /30	-/74 /29	<b>86/58</b> /30	93/41 (25)/35	89/8 /-
170	-/1 /30	-/1 /33	-/1 /38	-/1 /44	-/1 /50	-/1 /55	-/7 /58	-/98 /59	-/- /61	-/15 /-

Можно видеть, что по мере увеличения  $|\cos \alpha|$  начало асимптотического режима отодвигается все дальше (номер  $n_1$ ). Учитывая, что

$$M_n(\xi_1, \xi_2, \alpha) = (\xi_1 \xi_2)^{n/2} \widetilde{M}_n(\chi, \alpha) = \xi_1^n \chi^n \widetilde{M}_n(\chi, \alpha), \quad (3.72)$$

то при низких  $\chi$  уровень эхо-сигнала невысок, и при  $|\cos \alpha|$ , близких к 1, эхо-сигналы,



с которых начинается асимптотический режим, уже могут лежать значительно ниже уровня шума.

При фиксированном  $\alpha$  по мере уменьшения  $\chi$  начало асимптотического режима сначала приближается, а при дальнейшем уменьшении  $\chi$  - вновь отодвигается. Наименьший номер  $n_1$  лежит вблизи границы между осцилляторным и неосцилляторным случаями. Это соответствует условиям применимости асимптотических уравнений (3.37) и (3.48): при  $\chi_0 < \chi \leq 1$  (осцилляторный случай) номер начала асимптотики  $n_{as} = 2(b\chi^{-1} - 1)^{-1}$  снижается по мере уменьшения  $\chi$ , в то время как при  $\chi \leq \chi_0 \leq 1$  (неосцилляторный случай) соответствующий номер начала асимптотики  $n_{as} = 2(bc - 1)^{-1}$  увеличивается по мере уменьшения  $\chi$ .

Что касается аналитических аппроксимаций, их удовлетворительное действие в целом начинается гораздо раньше (номера  $n_2$  и  $n_3$  в таблицах 3.1 и 3.2), чем асимптотический режим (номер  $n_1$  в таблицах 3.1 и 3.2). Кроме того, соответствие между аналитически аппроксимированными и точными эхо-амплитудами в целом хуже для  $M_{yn}$ , чем для  $M_{xn}$ . Это вызвано особенностями возникающих при выводе аппроксимаций интегралов, подвергаемых оценке. Вблизи точки  $\chi = \chi_0$  аналитическая аппроксимация также становится хуже, но все-таки достаточно хорошо описывает поведение спинового эха. В этой области оценка соответствующих интегралов (см. Приложения Д и Е) должна быть проведена несколько другим способом (вместо модифицированных функций Бесселя 1-го рода появляются другие специальные функции), однако это имеет смысл только в малой области вблизи точки  $\chi = \chi_0$  и не было проделано в данной работе дабы не усложнять анализ.

Наличие погрешностей в работе аналитических аппроксимаций вызвано также следующим обстоятельством. При оценке соответствующих интегралов (см. Приложения Д и Е) нами учитывалась корреляция лишь двух из шести точек ветвления ПФ (точки 8 и 9, 13 и 14 на рис. 5.2 (Приложение Д); точки 6' и 7', 8' и 9', 11' и 12' на рис. 5.3 (Приложение Е)). В то же время, к примеру, вблизи границы между осцилляторным и неосцилляторным случаями точки 6 и 11 на рис. 5.2, а также точки 7' и 8' на рис. 5.3 сближаются, и это также должно быть принято во внимание для достижения более высокой точности, однако мы пренебрегли данным обстоятельством. В области одновременного  $\chi \rightarrow 1$  ( $T_2 \rightarrow T_1$ ) и  $|\cos \alpha| \rightarrow 1$  еще больше особых точек ПФ подходят близко друг к другу, а именно точки 6, 8, 9, 11 на рис. 5.2 (Приложение Д) и точки 6',

7', 8', 9' на рис. 5.3 (Приложение Е), что также было нами упущено из виду. Можно рассчитать следующие поправки к полученным аналитическим аппроксимациям, однако это делает уравнения более сложными и громоздкими. Мы полагаем, что в случае, когда интерес представляет точная аналитическая формула для первых эхо-амплитуд, может быть использовано точное выражение (3.3), последующие же эхо-сигналы могут быть с хорошей точностью аппроксимированы предложенными уравнениями. Если же достаточно иметь только численные значения величин  $M_n$ , то самый простой путь их вычисления - непосредственное использование ПФ путем разложения ее в ряд Тейлора в точке  $z = 0$  (уравнение (2.4)) либо Фурье-преобразования.

Рис. 3.1, 3.2, 3.3 и 3.4 демонстрируют хорошее согласие точных и приближенных эхо-амплитуд в областях, где достаточно учесть корреляцию только двух особых точек.

## Глава 4

# Анализ эволюции неравновесной намагниченности. Разделение интегральной и мультиплетной ядерной поляризации при помощи анализа фазы намагниченности спинового эха

Основные результаты данной главы опубликованы в работе [112].

В предыдущих главах был развит общий метод анализа многоимпульсных МРТ последовательностей, основанный на формализме производящих функций. В данном же разделе подобный анализ будет проведен для описания эволюции системы двух взаимодействующих спинов  $1/2$  в многоэховых цепочках. Такая эволюция способна породить как интегральную, так и мультиплетную поляризацию спинов.

Как было отмечено выше, для нахождения соответствующей ПФ необходимо задать начальное состояние системы (начальную МП) и эволюцию за один период импульсной цепочки. Последнее, в свою очередь, определяется гамильтонианом спиновой системы. Мы рассмотрим частный случай двух неравновесно поляризованных спинов  $I_1 = I_2 = 1/2$  (гомоядерный случай), связанных слабым скалярным взаимодействием, в сильном магнитном поле  $B_0$  с периодически прилагаемым вдоль оси  $x$  РЧ магнитным полем амплитуды  $B_1$ , для которого

$$\hat{H}_{pr} = -\omega_1 \hat{I}_{1z} - \omega_2 \hat{I}_{2z} + J \hat{I}_{1z} \hat{I}_{2z} \quad \text{и} \quad \hat{H}_{rf} = -\omega_{rf} (\hat{I}_{1x} + \hat{I}_{2x}) \quad (4.1)$$

- гамильтонианы, описывающие соответственно эволюцию системы между импульсами ( $\omega_1$  - частота прецессии  $i$ -го спина в поле  $B_0$ ,  $J$  - константа спин-спинового взаи-

модействия) и воздействие неселективным рефокусирующим импульсом,  $\omega_{rf} = \gamma B_1$  - частота прецессии спинов вокруг РЧ поля,  $\gamma$  - гиромагнитное отношение исследуемых ядер; для простоты мы пренебрегаем релаксационными процессами. Отсюда с помощью уравнения (1.43) несложно получить рекуррентное соотношение между МП в момент регистрации  $n$ -го и  $(n + 1)$ -го эхо-сигналов:

$$\hat{\rho}_{n+1} = \hat{Q}\hat{P}_x(\alpha^{rf})\hat{Q}\hat{\rho}_n\hat{Q}^{-1}\hat{P}_x^{-1}(\alpha^{rf})\hat{Q}^{-1} = \hat{A}\hat{\rho}_n\hat{A}^{-1}. \quad (4.2)$$

Здесь матрицы  $\hat{Q}$  и  $\hat{P}_x(\alpha^{rf})$  описывают эволюцию за полупериод между импульсами и поворот рефокусирующим импульсом соответственно:

$$\hat{Q} = \exp\left\{-i\hat{H}_{pr}TE/2\right\}, \quad (4.3)$$

$$\hat{P}_x(\alpha^{rf}) = \exp\left\{-i\hat{H}_{rf}\tau\right\} = \exp\left\{i\alpha^{rf}\left(\hat{I}_{1x} + \hat{I}_{2x}\right)\right\}, \quad (4.4)$$

где, как и ранее,  $\tau$  - длительность рефокусирующего импульса,  $TE$  - время эха,  $\alpha^{rf} = \omega_{rf}\tau$  - угол поворота рефокусирующим импульсом, индекс  $x$  обозначает фазу рефокусирующего импульса, и  $\hat{A} = \hat{Q}\hat{P}_x(\alpha^{rf})\hat{Q}$ . Из определения ПФ (2.1) и соотношения (4.2) следует, что

$$\hat{f} - z\hat{A}\hat{f}\hat{A}^{-1} = \hat{\rho}_0, \quad (4.5)$$

где  $\hat{\rho}_0$  - МП после воздействия возбуждающим импульсом:

$$\hat{\rho}_{0CPMG} = \hat{P}_{-y}(\alpha^{ex})\hat{\sigma}\hat{P}_{-y}^{-1}(\alpha^{ex}), \quad (4.6)$$

$$\hat{\rho}_{0CP} = \hat{P}_x(\alpha^{ex})\hat{\sigma}\hat{P}_x^{-1}(\alpha^{ex}), \quad (4.7)$$

где индексы «CPMG» и «CP» указывают на CPMG или CP последовательность соответственно,  $\hat{P}_{-y}(\alpha^{ex})$  - оператор поворота возбуждающим импульсом на угол  $\alpha^{ex}$ , приложенным вдоль  $-y$ -направления, - определяется аналогично (4.4) с той разницей, что  $\hat{I}_{ix}$  следует заменить на  $-\hat{I}_{iy}$ ,  $\alpha^{ref}$  - на  $\alpha^{ex}$ ;  $\sigma$  - спиновая МП системы до воздействия РЧ импульсами.

Поскольку регистрируемый эхо-сигнал обеспечивается поперечной намагниченностью, то интерес представляет не сама матричная ПФ, но ее компоненты  $f_x$  и  $f_y$ :

$$f_{x,y} = Tr\left\{\left(\hat{I}_{1x,y} + \hat{I}_{2x,y}\right)\hat{f}\right\} = \sum_{n=0}^{\infty} z^n Tr\left\{\left(\hat{I}_{1x,y} + \hat{I}_{2x,y}\right)\hat{\rho}_n\right\} = \sum_{n=0}^{\infty} z^n M_{nx,y}. \quad (4.8)$$

К сожалению, даже после сделанных упрощений, нахождение ПФ для произвольного значения рефокусирующего угла  $\alpha^{ref}$  - весьма сложная и громоздкая задача. Действительно, ПФ может быть найдена из рекурсии (4.2) как

$$\hat{f}(z) = \left( \hat{E} - z \hat{A} \right)^{-1} \hat{\rho}_0, \quad (4.9)$$

где  $\hat{E}$  - единичная суперматрица, и  $\hat{A}_{kl, nm} = \hat{A}_{kn} \left( \hat{A}^{-1} \right)_{ml}$ , однако уже для двух спинов 1/2 ПФ в пространстве Лиувилля представляет собой вектор, содержащий 16 компонент, а размер суперматриц -  $16 \times 16$ . Следовательно, при произвольном угле рефокусирования обращение суперматрицы  $\left( \hat{E} - z \hat{A} \right)$  может быть проведено только численно, и, таким образом, теряется важное преимущество рассматриваемого подхода - аналитический вид ПФ. Ниже рассмотрен наиболее простой случай  $\alpha^{ref} = \pi$ , когда удается получить ПФ в простом аналитическом виде.

Представим спиновую МП до приложения РЧ импульсов  $\hat{\sigma}$  следующим образом:

$$\hat{\sigma} = K_1 \hat{I}_{1z} + K_2 \hat{I}_{2z} + K_{12} \hat{I}_{1z} \hat{I}_{2z} + \hat{X}_0, \quad (4.10)$$

где  $\hat{X}_0$  обозначает ту часть  $\hat{\sigma}$ , которая, как оказывается, в рассматриваемом частном случае не дает вклада в сигналы спинового эха. При угле поворота возбуждающим импульсом  $\alpha^{ex}$   $x$ - и  $y$ -компоненты ПФ принимают следующую форму:

$$f_x^{CPMG}(z) = (K_1 + K_2) \frac{1 - z \cos \phi}{1 - 2z \cos \phi + z^2} \sin \alpha^{ex}, \quad (4.11)$$

$$f_y^{CPMG}(z) = -\frac{K_{12}}{2} \frac{z \sin \phi}{1 + 2z \cos \phi + z^2} \sin 2\alpha^{ex}, \quad (4.12)$$

$$f_x^{CP}(z) = -\frac{K_{12}}{2} \frac{z \sin \phi}{1 - 2z \cos \phi + z^2} \sin 2\alpha^{ex}, \quad (4.13)$$

$$f_y^{CP}(z) = (K_1 + K_2) \frac{1 + z \cos \phi}{1 + 2z \cos \phi + z^2} \sin \alpha^{ex}, \quad (4.14)$$

где  $\phi = J \times TE/2$ . Как можно видеть, данная ПФ не требует усреднения по частотным изохроматам, что связано с выбранным значением угла рефокусирования. Кроме того, из уравнений (4.11)-(4.14) следует, что различные типы поляризаций обуславливают различные фазы эхо-сигнала. Так в случае CPMG последовательности  $M_{xn}$  - «эхо в фазе» - определяется интегральной поляризацией, в то время как  $M_{yn}$  - «эхо вне фазы» - мультиплетной поляризацией. В случае CP последовательности ситуация противоположная:  $M_{xn}$  - «эхо вне фазы» - определяется мультиплетной поляризацией, в то время как  $M_{yn}$  - «эхо в фазе» - интегральной поляризацией.

Из ПФ (4.11)-(4.14) можно получить и сами эхо-амплитуды:

$$M_{xn}^{CPMG} = (K_1 + K_2) \sin \alpha^{ex} \cos n\phi, \quad (4.15)$$

$$M_{yn}^{CPMG} = K_{12} \frac{(-1)^n}{2} \sin 2\alpha^{ex} \sin n\phi, \quad (4.16)$$

$$M_{xn}^{CP} = -\frac{K_{12}}{2} \sin 2\alpha^{ex} \sin n\phi, \quad (4.17)$$

$$M_{yn}^{CP} = (K_1 + K_2) (-1)^n \sin \alpha^{ex} \cos n\phi. \quad (4.18)$$

Как можно видеть, оба типа сигнала модулированы спин-спиновым взаимодействием, так что поведение амплитуд сигналов носит осцилляторный характер с периодом, определяемым константой спин-спинового взаимодействия  $J$ . Можно также отметить, что для двух компонент эхо-сигнала различны и оптимальные для увеличения амплитуды сигналов углы поворота возбуждающим импульсом  $\alpha^{ex}$ :  $\alpha^{ex} = \pi/2$  для «эха в фазе» и  $\alpha^{ex} = \pi/4$  для «эха вне фазы», в то время как при  $\alpha^{ex} = \pi/2$  сигнал вне фазы отсутствует, что является известным фактом в ЯМР неравновесных систем [113].

Таким образом, вклад мультиплетной поляризации может быть полностью отделен от вклада интегральной поляризации, поскольку они дают сигналы спинового эха в разной фазе. Это дает принципиальную возможность использовать сигналы эха вне фазы для проведения экспериментов по ЯМР-томографии с использованием неравновесно поляризованных молекул. Данный вывод может иметь практическую значимость еще и потому, что, во-первых, во многих случаях неравновесная поляризация ядер имеет только мультиплетную компоненту, и, во-вторых, для систем, находящихся в термодинамическом равновесии, мультиплетная поляризация равна нулю.

Отсюда непосредственно следует, что сигнал эха вне фазы не содержит каких-либо фоновых вкладов от равновесной поляризации и обусловлен только неравновесно поляризованными молекулами. Этот факт открывает широкие возможности для использования неравновесной поляризации ядер в ЯМР-томографии. Например, в случае протонов сигнал эха вне фазы свободен от вкладов воды, часто используемой в качестве растворителя, а также присутствующей в живых тканях. В связи с этим использование неравновесно поляризованных систем может решить важную в ЯМР-томографии проблему устранения вкладов воды в изображении. Можно ожидать, что восстановление изображений по сигналам эха вне фазы увеличит как чувствительность, так и контраст изображений ввиду отсутствия сигналов от равновесно поляризованных молекул. Значительная мультиплетная поляризация может быть создана химическими методами,

такими как ХПЯ и ИПП, либо при помощи воздействия на спиновую систему, изначально находящуюся в равновесии, РЧ импульсами. Все упомянутые методы являются хорошо отработанными и могут быть реализованы при проведении эксперимента по ЯМР-томографии.

# Глава 5

## Приложения

### 5.1 Приложение А. Вывод уравнения (3.13)

Рассмотрим МРТ СPMG последовательность резонансных импульсов с произвольным углом рефокусирования  $\alpha$ , лежащем в диапазоне  $(0, \pi)$  при равных временах спиновой релаксации  $T_1 = T_2$  ( $\xi_1 = \xi_2 = \xi$ ). Соответствующая ПФ для эхо-амплитуд принимает форму (3.5), а точное выражение для эхо-амплитуд имеет вид (3.6). Используя интегральное представление полиномов Лежандра [109]

$$P_n(\cos \alpha) = \frac{1}{\pi \sqrt{2}} \int_{-\alpha}^{\alpha} \frac{e^{i(n+1/2)\theta}}{\sqrt{\cos \theta - \cos \alpha}} d\theta \quad (5.1)$$

перепишем уравнение (3.6) для  $n \geq 1$  в следующем виде:

$$M_{xn} = M_{x0} \frac{\xi^n}{2i\pi\sqrt{2}} \int_{-\alpha}^{\alpha} \left[ \frac{e^{in\theta}}{\sin \frac{\theta}{2}} \sqrt{\cos \theta - \cos \alpha} - \frac{2 \sin^2 \frac{\alpha}{2}}{\sin \frac{\theta}{2} \sqrt{\cos \theta - \cos \alpha}} \right] d\theta, \quad (5.2)$$

$$M_{yn} = M_{y0} \frac{i\xi^n}{\pi\sqrt{2}} \int_{-\alpha}^{\alpha} e^{in\theta} \frac{\sin \frac{\theta}{2}}{\sqrt{\cos \theta - \cos \alpha}} d\theta. \quad (5.3)$$

Изменим путь интегрирования так, как показано на рис. 5.1. Тогда на участке 1-2  $\theta = -\alpha + iy$ ,  $y = 0 \div \infty$  и на участке 3-4  $\theta = \alpha + iy$ ,  $y = \infty \div 0$ , в то время как на участке 2-3 интеграл обращается в нуль ввиду того, что  $y = \infty$ . Принимая во внимание направление обхода, запишем для  $n \gg 1$

$$\begin{aligned} \frac{M_{xn}}{M_{x0}} &\approx \frac{\xi^n}{2\pi\sqrt{2}} \left\{ \int_0^\infty e^{-ny} \left[ \frac{e^{-in\alpha}}{-\sin \frac{\alpha}{2}} \sqrt{iy \sin \alpha} - \frac{e^{in\alpha}}{\sin \frac{\alpha}{2}} \sqrt{-iy \sin \alpha} \right] dy \right. \\ &\quad \left. + \int_{-\alpha}^{\alpha} \frac{2i \sin^2 \frac{\alpha}{2}}{\sin \frac{\theta}{2} \sqrt{\cos \theta - \cos \alpha}} d\theta \right\} \\ &= \frac{\xi^n}{2\pi\sqrt{2}} \left\{ -\frac{\sqrt{2}\pi}{n^{3/2} \sqrt{\tan \frac{\alpha}{2}}} \cos \left( n\alpha - \frac{\pi}{4} \right) + \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \frac{2i \sin^2 \frac{\alpha}{2}}{\sin \frac{\theta}{2} \sqrt{\cos \theta - \cos \alpha}} d\theta \right\}. \quad (5.4) \end{aligned}$$



Полагая в последнем интеграле  $\theta = r e^{i\varphi}$ ,  $r \rightarrow 0$ ,  $\varphi = \pi \div 0$  (т.е. совершая обход точки  $\theta = 0$  по часовой стрелке), окончательно получим

$$\frac{M_{xn}}{M_{x0}} \approx \xi^n \left[ \sin \frac{\alpha}{2} - \frac{1}{2\sqrt{\pi \tan \frac{\alpha}{2}}} \frac{\cos \left( n\alpha - \frac{\pi}{4} \right)}{n^{3/2}} \right]. \quad (5.5)$$

Аналогично для  $y$ -компоненты имеем при  $n \gg 1$

$$\begin{aligned} \frac{M_{yn}}{M_{y0}} &\approx -\frac{\xi^n}{\pi\sqrt{2}} \int_0^\infty e^{-ny} \left[ e^{-in\alpha} \frac{-\sin \frac{\alpha}{2}}{\sqrt{iy \sin \alpha}} - e^{in\alpha} \frac{\sin \frac{\alpha}{2}}{\sqrt{-iy \sin \alpha}} \right] dy \\ &= \sqrt{\frac{\tan \frac{\alpha}{2}}{\pi}} \frac{\cos \left( n\alpha + \frac{\pi}{4} \right)}{n^{1/2}}. \end{aligned} \quad (5.6)$$

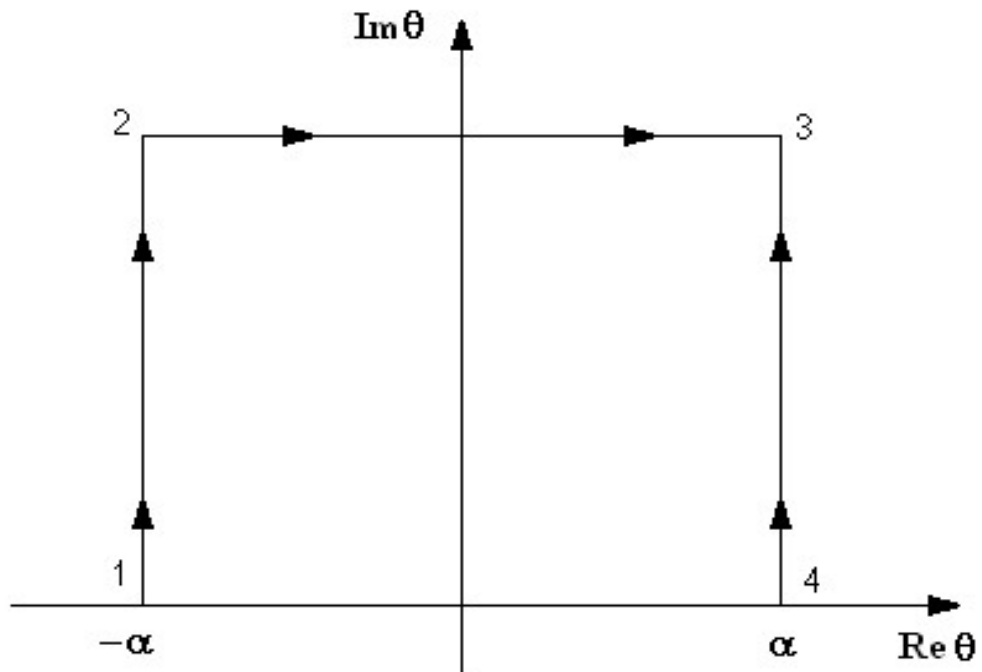


Рис. 5.1: Путь интегрирования для случая  $\alpha$  в диапазоне  $(0, \pi)$  и  $T_1 = T_2$  ( $\chi = 1$ ).

Учет следующих поправок в уравнениях (5.5) и (5.6) (членов, спадающих как  $n^{-5/2}$  и  $n^{-3/2}$  соответственно) и условие их малости по отношению к основным членам дает условие  $n \sin \alpha \gg 1$  для применимости асимптотик (5.5) и (5.6).

## 5.2 Приложение Б. Вывод уравнения (3.14)

Рассмотрим МРТ СРМГ импульсную последовательность с углом поворота рефокусирующих импульсов  $\alpha = \pi/2$  при строгом неравенстве  $T_2 < T_1$  ( $\xi_2 < \xi_1$ ). Соответствующая ПФ для эхо-амплитуд принимает форму (3.9). Вводя новую переменную  $y = z\sqrt{\xi_1\xi_2}$ , представим ПФ (3.9) в следующем виде:

$$F(y) = \frac{M_{x0}}{2} \left[ 1 + \sqrt{\frac{(1+\chi y)(1+y^2)}{(1-\chi y)(1-y^2)}} \right] + i \frac{M_{y0}}{2} \left[ 1 + \sqrt{\frac{(1-\chi y)(1-y^2)}{(1+\chi y)(1+y^2)}} \right], \quad (5.7)$$

где  $\chi$  определено выражением (2.23),  $\chi < 1$  при  $T_2 < T_1$ . Мы рассмотрим только  $x$ -компоненту комплексных эхо-амплитуд, поскольку все выкладки для  $y$ -компоненты аналогичны. В соответствии с теории функций комплексных переменных  $M_{xn}$  ( $n \geq 1$ ) может быть вычислено с помощью следующего контурного интеграла (см. уравнение (2.3)):

$$\frac{M_{xn}}{M_{x0}} = \frac{1}{2} \frac{(\xi_1\xi_2)^{n/2}}{2\pi i} \oint \sqrt{\frac{(1+\chi y)(1+y^2)}{(1-\chi y)(1-y^2)}} \frac{dy}{y^{n+1}} \quad (5.8)$$

Числитель и знаменатель подкорневого выражения в данном уравнении имеют следующие нули:  $\pm\chi^{-1}$ ,  $\pm i$ ,  $\pm 1$ . Полагая  $y = e^{i\theta}$ , заметим, что контур интегрирования содержит четыре особые точки, и выражение (5.8) может быть переписано в следующем виде:

$$\begin{aligned} \frac{M_{xn}}{M_{x0}} &= \frac{(\xi_1\xi_2)^{n/2}}{2\pi} \operatorname{Re} \int_0^\pi \left[ \frac{(1+\chi e^{i\theta})(1+e^{2i\theta})}{(1-\chi e^{i\theta})(1-e^{2i\theta})} \right]^{1/2} e^{-in\theta} d\theta = \\ &= \frac{(\xi_1\xi_2)^{n/2}}{2\pi} \operatorname{Re} \left\{ e^{i\pi/4} \int_0^{\pi/2} \left[ \frac{\cos\theta(1+\chi e^{i\theta})}{\sin\theta(1-\chi e^{i\theta})} \right]^{1/2} e^{-in\theta} d\theta + \right. \\ &\quad \left. + e^{-i\pi/4} \int_{\pi/2}^\pi \left[ -\frac{\cos\theta(1+\chi e^{i\theta})}{\sin\theta(1-\chi e^{i\theta})} \right]^{1/2} e^{-in\theta} d\theta \right\}. \end{aligned} \quad (5.9)$$

Здесь во втором интеграле было принято во внимание, что при обходе точки  $\theta = \pi/2$  ( $y = i$ ) набег фазы составил  $-\pi/2$ . Делая замену переменной во втором интеграле

$\theta = \pi - x$  ( $\theta \rightarrow \pi - \theta$ ), получим следующее уравнение

$$\frac{M_{xn}}{M_{x0}} = \frac{(\xi_1 \xi_2)^{n/2}}{2\pi} \operatorname{Re} \left\{ e^{i\pi/4} \int_0^{\pi/2} \left[ \frac{\cos \theta (1 + \chi e^{i\theta})}{\sin \theta (1 - \chi e^{i\theta})} \right]^{1/2} e^{-in\theta} d\theta + \right. \\ \left. + e^{-i\pi/4 - in\pi} \int_0^{\pi/2} \left[ \frac{\cos \theta (1 - \chi e^{-i\theta})}{\sin \theta (1 + \chi e^{-i\theta})} \right]^{1/2} e^{in\theta} d\theta \right\}. \quad (5.10)$$

При  $n \rightarrow \infty$  множитель  $e^{in\theta}$  является быстро осциллирующим, так что основной вклад в интегралы определяется областью  $\theta$  вблизи нуля ( $\theta \rightarrow 0$ , так что  $\cot \theta \rightarrow 1/\theta$ ), т.е.

$$\frac{M_{xn}}{M_{x0}} \approx \frac{(\xi_1 \xi_2)^{n/2}}{2\pi} \left[ \sqrt{\frac{1+\chi}{1-\chi}} + \sqrt{\frac{1-\chi}{1+\chi}} \cos n\pi \right] \int_0^{\pi/2} \frac{\cos(n\theta - \pi/4)}{\sqrt{\theta}} d\theta. \quad (5.11)$$

Вновь делая замену  $\theta \rightarrow n\theta$  и используя

$$\int_0^\infty \frac{\sin x}{\sqrt{x}} dx = \int_0^\infty \frac{\cos x}{\sqrt{x}} dx = \sqrt{\frac{\pi}{2}}, \quad (5.12)$$

получим уравнение (3.14).

### 5.3 Приложение В. Вывод уравнения (3.17)

Рассмотрим МРТ СРМГ импульсную последовательность с углом поворота рефокусирующих импульсов  $\alpha \neq 0, \pi/2, \pi$  при строгом неравенстве  $T_2 < T_1$  ( $\xi_2 < \xi_1, \chi < 1$ ).

Вводя новую переменную  $y = z\sqrt{\xi_1 \xi_2}$ , представим ПФ (2.32) в следующем виде:

$$F(y) = \frac{M_{x0}}{2} \left[ 1 + \sqrt{\frac{X(y)}{Y(y)}} \right] + i \frac{M_{y0}}{2} \left[ 1 + \sqrt{\frac{Y(y)}{X(y)}} \right], \\ X(y) = (1 + y\chi) [1 - y(\chi^{-1} + \chi) \cos \alpha + y^2], \\ Y(y) = (1 - y\chi) [1 - y(\chi^{-1} - \chi) \cos \alpha - y^2], \quad (5.13)$$

причем согласно уравнению (2.3)

$$M_n^+ = \frac{(\xi_1 \xi_2)^{n/2}}{2\pi i} \oint F(y) \frac{dy}{y^{n+1}}. \quad (5.14)$$

Мы рассмотрим только  $x$ -компоненту намагниченности, поскольку выкладки для  $y$ -компоненты полностью аналогичны.

Вначале мы предположим, что  $0 < \alpha < \pi/2$  ( $\cos \alpha > 0$ ), тогда помимо особых точек

$\pm 1/\chi$ , лежащих за пределами единичного круга, ПФ имеет еще четыре особые точки:

$$\begin{aligned}
y_1 &= \frac{\chi^{-1} + \chi}{2} \cos \alpha + \sqrt{\frac{1}{4} (\chi^{-1} + \chi)^2 \cos^2 \alpha - 1}, \\
y_2 &= \frac{\chi^{-1} + \chi}{2} \cos \alpha - \sqrt{\frac{1}{4} (\chi^{-1} + \chi)^2 \cos^2 \alpha - 1}, \\
y_3 &= -\frac{\chi^{-1} - \chi}{2} \cos \alpha + \sqrt{\frac{1}{4} (\chi^{-1} - \chi)^2 \cos^2 \alpha + 1}, \\
y_4 &= -\frac{\chi^{-1} - \chi}{2} \cos \alpha - \sqrt{\frac{1}{4} (\chi^{-1} - \chi)^2 \cos^2 \alpha + 1}.
\end{aligned} \tag{5.15}$$

Точка  $y_4 < -1$  лежит вне, а точка  $0 < y_3 < 1$  - внутри единичного круга. Положение точек  $y_1$  и  $y_2$  зависит от величины параметра  $x = \frac{1}{2} (\chi^{-1} + \chi) \cos \alpha$ : если  $x \leq 1$ , то обе точки  $y_1$  и  $y_2$  лежат на окружности единичного радиуса ( $|y_1| = |y_2| = 1$ ), в противном случае  $y_1 > 1$  лежит вне, а  $0 < y_2 < 1$  - внутри единичного круга. Легко показать, что  $|y_3| < |y_2|$  при любых  $x$ . Действительно, данное утверждение очевидно при  $x \leq 1$ , в то время как при  $x > 1$  желаемое неравенство может быть представлено в следующем виде:

$$\sqrt{x^2 + p} - \sqrt{x^2 - 1 + p} < x - \sqrt{x^2 - 1}, \tag{5.16}$$

где  $p = \sin^2 \alpha$ . При  $p = 0$  ( $\alpha = 0$ ) обе стороны неравенства (5.16) совпадают, однако этот случай не входит в область рассмотрения, поскольку выше мы предположили  $\alpha \neq 0$ . Для любого значения  $p > 0$  производная левой стороны неравенства (5.16) по  $p$  имеет вид

$$\frac{1}{2\sqrt{x^2 + p}} - \frac{1}{2\sqrt{x^2 - 1 + p}} < 0, \tag{5.17}$$

и, таким образом, левая сторона неравенства (5.16) уменьшается с увеличением величины  $p$ , откуда и следует искомый результат  $y_3 < y_2$ .

Полагая  $y = y_3 e^{i\theta}$  из уравнений (5.13) и (5.14) при произвольном  $x$  получим:

$$\frac{M_{xn}}{M_{x0}} = \frac{(\xi_1 \xi_2)^{n/2}}{2\pi y_3^n} \operatorname{Re} \left\{ \int_0^\pi \left[ \frac{(1 + \chi y_3 e^{i\theta}) (y_3 e^{i\theta} - y_1) (y_3 e^{i\theta} - y_2)}{(1 - \chi y_3 e^{i\theta}) (y_3 e^{i\theta} - y_4) y_3 (1 - e^{i\theta})} \right]^{1/2} e^{-in\theta} d\theta \right\} \tag{5.18}$$

При  $n \rightarrow \infty$  множитель  $e^{in\theta}$  является быстро осциллирующим, так что основной вклад

в данный интеграл определяется областью  $\theta$  вблизи нуля, т.е.

$$\begin{aligned}
\frac{M_{xn}}{M_{x0}} &\approx \frac{(\xi_1 \xi_2)^{n/2}}{2\pi y_3^n} \left[ \frac{(1 + \chi y_3)(y_3 - y_1)(y_3 - y_2)}{2(1 - \chi y_3)(y_3 - y_4)y_3} \right]^{1/2} \int_0^\pi \frac{\cos(n\theta - \frac{\pi}{4})}{\sqrt{\theta}} d\theta \\
&\approx \frac{(\xi_1 \xi_2)^{n/2}}{2\pi y_3^n n^{1/2}} \left[ \frac{(1 + \chi y_3)(y_3 - y_1)(y_3 - y_2)}{2(1 - \chi y_3)(y_3 - y_4)y_3} \right]^{1/2} \int_0^\infty \frac{\cos(\theta - \frac{\pi}{4})}{\sqrt{\theta}} d\theta \\
&= \frac{(\xi_1 \xi_2)^{n/2} b^n}{2\sqrt{\pi n}} \sqrt{\frac{(b + \chi)(b - \chi^{-1} \cos \alpha)}{(b - \chi)(b - \frac{1}{2}(\chi^{-1} - \chi) \cos \alpha)}}, \tag{5.19}
\end{aligned}$$

где было принято во внимание равенство (5.12), а  $b$  определяется выражением (3.19).

Рассматривая случай  $\pi/2 < \alpha < \pi$  ( $\cos \alpha < 0$ ) аналогичным образом, приходим к уравнению (3.17).

## 5.4 Приложение Г. Вывод уравнения (3.20)

Рассмотрим МРТ СРМГ импульсную последовательность с углом поворота рефокусирующих импульсов  $\alpha \neq 0, \pi$  при строгом неравенстве  $T_2 > T_1$  ( $\xi_2 > \xi_1, \chi > 1$ ). Вводя новую переменную  $y = z\sqrt{\xi_1 \xi_2}$ , представим ПФ (2.32) в виде (5.13), причем эхоамплитуды  $M_n^+$  могут быть рассчитаны с помощью уравнения (5.14). Мы рассмотрим только  $x$ -компоненту намагниченности, поскольку выкладки для  $y$ -компоненты полностью аналогичны.

Вначале мы предположим, что  $0 < \alpha \leq \pi/2$  ( $\cos \alpha \geq 0$ ), тогда помимо особых точек  $\pm 1/\chi$ , лежащих внутри единичного круга, ПФ имеет еще четыре особые точки (5.15), расположение которых по отношению к единичному кругу в рассматриваемом случае следующее. Точка  $y_3 > 1$  лежит вне, а точка  $-1 < y_4 < 0$  - внутри единичного круга. Положение точек  $y_1$  и  $y_2$  зависит от величины параметра  $x = \frac{1}{2}(\chi^{-1} + \chi) \cos \alpha$ : если  $x \leq 1$ , то обе точки  $y_1$  и  $y_2$  лежат на окружности единичного радиуса ( $|y_1| = |y_2| = 1$ ), в противном случае  $y_1 > 1$  лежит вне, а  $0 < y_2 < 1$  - внутри единичного круга. Легко показать, что  $|y_4| < |y_2|$  при любых  $x$  (выкладки полностью аналогичны тем, что сделаны в Приложении В при доказательстве неравенства (5.16)). Кроме того, путем непосредственного сравнения можно убедиться, что  $\chi^{-1} < |y_4|$ .

Полагая  $y = \chi^{-1} e^{i\theta}$  из уравнений (5.13) и (5.14) при произвольном  $x$  получим:

$$\frac{M_{xn}}{M_{x0}} = \frac{(\xi_1 \xi_2)^{n/2} \chi^n}{2\pi} \operatorname{Re} \left\{ \int_0^\pi \left[ \frac{(1 + e^{i\theta})(e^{i\theta} - \chi y_1)(e^{i\theta} - \chi y_2)}{(1 - e^{i\theta})(e^{i\theta} - \chi y_3)(\chi y_4 - e^{i\theta})} \right]^{1/2} e^{-in\theta} d\theta \right\} \tag{5.20}$$

При  $n \rightarrow \infty$  множитель  $e^{in\theta}$  является быстро осциллирующим, так что основной вклад

в данный интеграл определяется областью  $\theta$  вблизи нуля, т.е.

$$\begin{aligned}
\frac{M_{xn}}{M_{x0}} &\approx \frac{(\xi_1 \xi_2)^{n/2} \chi^n}{2\pi} \left[ \frac{2(1-\chi y_1)(1-\chi y_2)}{(1-\chi y_3)(\chi y_4-1)} \right]^{1/2} \int_0^\pi \frac{\cos(n\theta - \frac{\pi}{4})}{\sqrt{\theta}} d\theta \\
&\approx \frac{(\xi_1 \xi_2)^{n/2} \chi^n}{2\pi n^{1/2}} \left[ \frac{2(1-\chi y_1)(1-\chi y_2)}{(1-\chi y_3)(\chi y_4-1)} \right]^{1/2} \int_0^\infty \frac{\cos(\theta - \frac{\pi}{4})}{\sqrt{\theta}} d\theta \\
&= \frac{(\xi_1 \xi_2)^{n/2} \chi^n}{\sqrt{2\pi} n^{1/2}} \sqrt{\frac{\chi + \chi^{-1}}{\chi - \chi^{-1}}} \tan \frac{\alpha}{2}.
\end{aligned} \tag{5.21}$$

где было принято во внимание равенство (5.12). Рассматривая случай  $\pi/2 \leq \alpha < \pi$  ( $\cos \alpha \leq 0$ ) аналогичным образом, приходим к уравнению (3.20). Из данного вывода, в частности, следует, почему случай  $\alpha = \pi/2$  не выделяется особо при строгом неравенстве  $T_2 > T_1$ : при  $90^\circ$  угле рефокусирования помимо особых точек (5.15) на единичной окружности всегда есть две особые точки  $\pm \chi^{-1}$  внутри единичного круга, в отличие от ситуации, имеющей место при  $T_2 < T_1$ .

## 5.5 Приложение Д. Вывод уравнения (3.25)

Рассмотрим МРТ СРМГ импульсную последовательность с произвольным углом поворота рефокусирующих импульсов  $\alpha$ . Будем также полагать, что  $T_2 \leq T_1$  ( $\xi_2 \leq \xi_1$ ,  $\chi \leq 1$ ) и выполняется условие (3.23), т.е.  $\chi > \chi_0$  и  $\alpha \neq 0, \pi$ . Вводя новую переменную  $y = z\sqrt{\xi_1 \xi_2}$ , представим ПФ (2.32) в виде (5.13), причем эхо-амплитуды  $M_n^+$  могут быть рассчитаны с помощью уравнения (5.14). При наложенных ограничениях не все из особых точек (5.15) ПФ (5.13) действительны, а именно точки  $y_1$  и  $y_2$  лежат на окружности единичного радиуса. Предположим вначале, что  $\cos \alpha \geq 0$ , поскольку случай  $\cos \alpha < 0$  может быть рассмотрен аналогичным образом. Полагая  $y = e^{i\theta}$ , с помощью уравнения (5.14) для  $n \geq 1$  получим:

$$M_n^+ = \frac{(\xi_1 \xi_2)^{n/2}}{4\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \left( M_{x0} \sqrt{\frac{X(e^{i\theta})}{Y(e^{i\theta})}} + i M_{y0} \sqrt{\frac{Y(e^{i\theta})}{X(e^{i\theta})}} \right) e^{-in\theta} d\theta. \tag{5.22}$$

Изменим путь интегрирования так, как показано на рис. 5.2. При обходе особых точек необходимо учитывать соответствующий набег фазы, как показано на том же рисунке (мы рассмотрим только  $x$ -компоненту намагниченности, поскольку выкладки для  $y$ -компоненты полностью аналогичны). Принимая во внимание также направление интегрирования, легко показать, что в общее выражение (5.22) вносят вклад только следующие интегралы:

$$\int_{-\pi}^{\pi} = 2 \left\{ \int_9^8 - \int_{14}^{13} + \left( \int_{11}^{10} - \int_6^5 \right) \right\} \tag{5.23}$$

(индексы обозначают направление интегрирования, под всеми интегралами понимаются их главные значения). Обозначим  $y_1 = e^{i\beta}$ , где  $\beta$  определено выражением (3.30), и рассмотрим каждый из этих интегралов отдельно. Всюду ниже под  $I_k[t]$  мы подразумеваем модифицированные функции Бесселя 1-го рода  $k$ -го порядка.

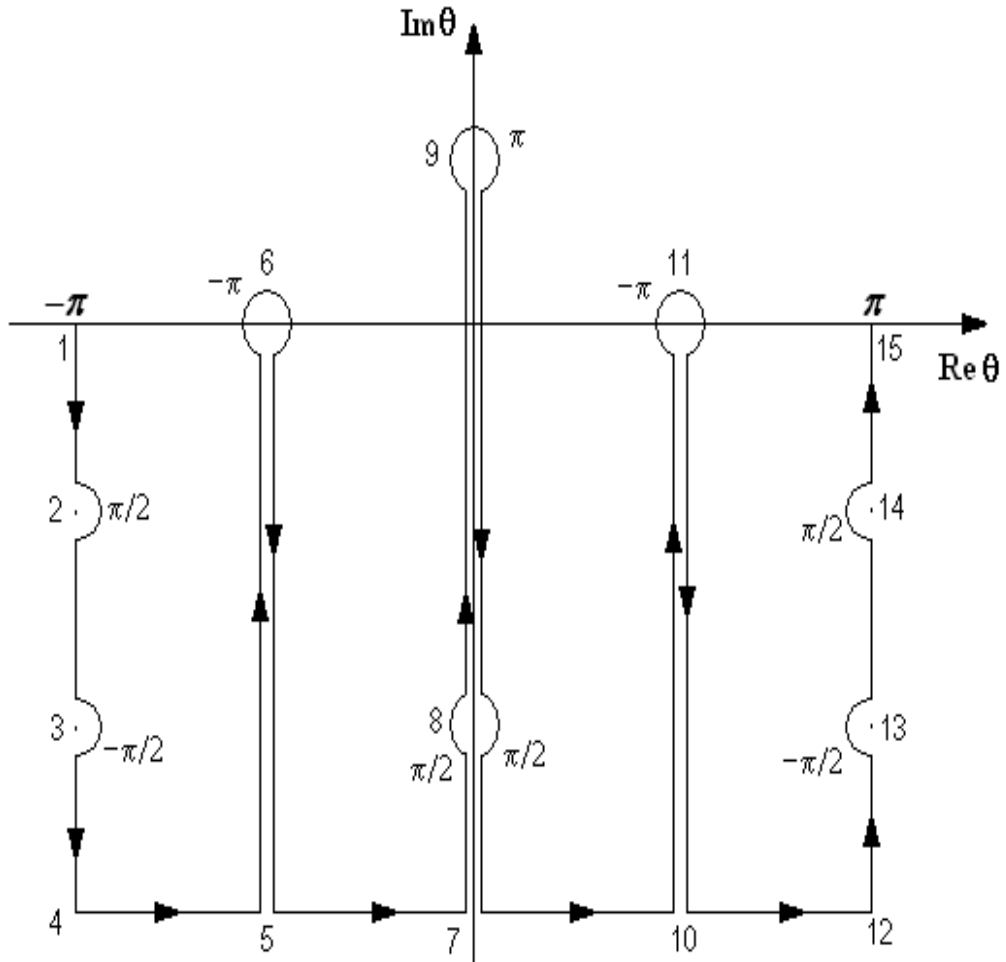


Рис. 5.2: Путь интегрирования для случая  $\cos \alpha > 0$  и  $\chi_0 < \chi \leq 1$ . Контур обходит точки ветвления ПФ (2.32), рядом с которыми указаны соответствующие набегги фазы для  $x$ -компоненты.

**Интегрирование от точки 9 до точки 8.** Полагая  $\theta = -i \ln y_3 - it$ , представим интеграл  $\int_9^8$  в следующем виде:

$$\int_9^8 \sqrt{\frac{X}{Y}} e^{-in\theta} d\theta = -\frac{i e^{i\pi/2}}{y_3^n} \int_0^{\ln \frac{1}{\chi y_3}} \sqrt{\frac{\left(\frac{1}{\chi y_3} + e^t\right) (y_3 e^t - y_1) (y_3 e^t - y_2)}{\left(\frac{1}{\chi y_3} - e^t\right) y_3 (e^t - 1) (y_3 e^t - y_4)}} e^{-nt} dt. \quad (5.24)$$

При  $n \gg 1$  интеграл (5.24) может быть оценен следующим образом:

$$\begin{aligned} \int_9^8 \sqrt{\frac{X}{Y}} e^{-in\theta} d\theta &\approx \frac{1}{y_3^n} \sqrt{\frac{\left(\frac{1}{\chi y_3} + 1\right) (y_3 - y_1) (y_3 - y_2)}{y_3 (y_3 - y_4)}} \int_0^{\frac{1}{\chi y_3} - 1} \frac{e^{-nt} dt}{t^{1/2} \left(\frac{1}{\chi y_3} - 1 - t\right)^{1/2}} \\ &= \frac{\pi}{y_3^n} \sqrt{\frac{\left(\frac{1}{\chi y_3} + 1\right) (y_3 - y_4 - 2 \cos \beta)}{y_3 - y_4}} I_0 \left[ \frac{n}{2} \left(\frac{1}{\chi y_3} - 1\right) \right] \exp \left[ -\frac{n}{2} \left(\frac{1}{\chi y_3} - 1\right) \right] \end{aligned} \quad (5.25)$$

**Интегрирование от точки 14 до точки 13.** Полагая  $\theta = \pi - i \ln(-y_4) - it = \pi + i \ln y_3 - it$ , представим интеграл  $\int_{14}^{13}$  в следующем виде:

$$\int_{14}^{13} \sqrt{\frac{X}{Y}} e^{-in\theta} d\theta = -\frac{i e^{-i\pi/2}}{y_4^n} \int_0^{\ln \frac{y_3}{\chi}} \sqrt{\frac{\left(\frac{y_3}{\chi} - e^t\right) (e^t + y_1 y_3) (e^t + y_2 y_3)}{\left(\frac{y_3}{\chi} + e^t\right) (e^t - 1) (y_3^2 + e^t)}} e^{-nt} dt \quad (5.26)$$

При  $n \gg 1$  интеграл (5.26) может быть оценен следующим образом:

$$\begin{aligned} \int_{14}^{13} \sqrt{\frac{X}{Y}} e^{-in\theta} d\theta &\approx -\frac{1}{y_4^n} \sqrt{\frac{(1 + y_1 y_3) (1 + y_2 y_3)}{\left(\frac{y_3}{\chi} + 1\right) (y_3^2 + 1)}} \int_0^{\frac{y_3}{\chi} - 1} \frac{\left(\frac{y_3}{\chi} - 1 - t\right)^{1/2}}{t^{1/2}} e^{-nt} dt \\ &= -\frac{\pi}{2 y_4^n} \left(\frac{y_3}{\chi} - 1\right) \sqrt{\frac{(1 + y_1 y_3) (1 + y_2 y_3)}{\left(\frac{y_3}{\chi} + 1\right) (y_3^2 + 1)}} \\ &\times \left\{ I_0 \left[ \frac{n}{2} \left(\frac{y_3}{\chi} - 1\right) \right] + I_1 \left[ \frac{n}{2} \left(\frac{y_3}{\chi} - 1\right) \right] \right\} \exp \left[ -\frac{n}{2} \left(\frac{y_3}{\chi} - 1\right) \right]. \end{aligned} \quad (5.27)$$

**Интегрирование от точки 11 до точки 10 и от точки 6 до точки 5.** Полагая  $\theta = \beta - it$ , представим интеграл  $\int_{11}^{10}$  в следующем виде:

$$\int_{11}^{10} \sqrt{\frac{X}{Y}} e^{-in\theta} d\theta = -i e^{-in\beta} \int_0^\infty \sqrt{\frac{\left(\frac{1}{\chi} + e^{i\beta} e^t\right) (e^t - 1) (e^{2i\beta} e^t - 1)}{\left(e^{i\beta} e^t - \frac{1}{\chi}\right) (e^{i\beta} e^t - y_3) (e^{i\beta} e^t - y_4)}} e^{-nt} dt \quad (5.28)$$

При  $n \gg 1$  интеграл (5.28) может быть оценен следующим образом:

$$\begin{aligned} \int_{11}^{10} \sqrt{\frac{X}{Y}} e^{-in\theta} d\theta &\approx -i e^{-in\beta} \sqrt{\frac{\left(\frac{1}{\chi} + e^{i\beta}\right) e^{i\beta} (e^{i\beta} - e^{-i\beta})}{\left(e^{i\beta} - \frac{1}{\chi}\right) (e^{i\beta} - y_3) (e^{i\beta} - y_4)}} \int_0^\infty t^{1/2} e^{-nt} dt \\ &= -\frac{i e^{-in\beta}}{2n^{3/2}} \sqrt{\frac{\pi (1 + \chi e^{i\beta}) \sin \beta}{(\chi e^{i\beta} - 1) \left(\sin \beta - \frac{i}{2} (\chi^{-1} - \chi) \cos \alpha\right)}}. \end{aligned} \quad (5.29)$$



Интеграл  $\int_6^5$  оценивается аналогичным образом. Легко видеть, что

$$\int_{11}^{10} - \int_6^5 = 2\text{Re} \int_{11}^{10} = -\frac{\left(1 - \frac{1}{4}(\chi^{-1} + \chi)^2 \cos^2 \alpha\right)^{1/4}}{\sin \frac{\alpha}{2}} \sqrt{\frac{\pi}{2n^3}} \cos\left(n\beta - \frac{\rho}{2}\right), \quad (5.30)$$

где  $\rho$  определяется выражением (3.31).

Таким образом, конечное выражение для аналитической аппроксимации  $x$ -компоненты эхо-амплитуд при  $\cos \alpha \geq 0$ ,  $\alpha \neq 0$ ,  $T_2 \leq T_1$  и  $\chi > \chi_0$  принимает следующую форму:

$$\begin{aligned} \frac{M_{xn}}{M_{x0}} (\xi_1 \xi_2)^{-n/2} &\approx \frac{b^n}{2} \sqrt{\frac{(b + \chi) \left(b + \frac{1}{b} - 2 \cos \beta\right)}{\chi \left(b + \frac{1}{b}\right)}} I_0 \left[ \frac{n}{2} \left(\frac{b}{\chi} - 1\right) \right] e^{-\frac{n}{2} \left(\frac{b}{\chi} - 1\right)} \\ &+ \frac{(-1)^n}{4b^n} \sqrt{\frac{\left(b + \frac{1}{b} + 2 \cos \beta\right)}{\left(\frac{1}{\chi b} + 1\right) \left(b + \frac{1}{b}\right)}} \left(\frac{1}{\chi b} - 1\right) \left\{ I_0 \left[ \frac{n}{2} \left(\frac{1}{\chi b} - 1\right) \right] + I_1 \left[ \frac{n}{2} \left(\frac{1}{\chi b} - 1\right) \right] \right\} \\ &\times e^{-\frac{n}{2} \left(\frac{1}{\chi b} - 1\right)} - \frac{\left(1 - \frac{1}{4}(\chi^{-1} + \chi)^2 \cos^2 \alpha\right)^{1/4}}{2\sqrt{2\pi} \sin \frac{\alpha}{2}} \frac{\cos\left(n\beta - \frac{\rho}{2}\right)}{n^{3/2}}, \end{aligned} \quad (5.31)$$

где  $b$  определено выражением (3.19). Комбинируя результат (5.31) с уравнением для случая  $\cos \alpha < 0$ , рассмотренным аналогичным образом, приходим к уравнению (3.25).

## 5.6 Приложение Е. Вывод уравнения (3.42)

Рассмотрим МРТ СРМГ импульсную последовательность с произвольным углом поворота рефокусирующих импульсов  $\alpha$ . Будем также полагать, что  $T_2 \leq T_1$  ( $\xi_2 \leq \xi_1$ ,  $\chi \leq 1$ ) и выполняется условие (3.24), т.е.  $\chi \leq \chi_0$  и  $\alpha \neq \pi/2$ . Вводя новую переменную  $y = z\sqrt{\xi_1 \xi_2}$ , представим ПФ (2.32) в виде (5.13), причем эхо-амплитуды  $M_n^+$  могут быть рассчитаны с помощью уравнения (5.14). При наложенных ограничениях все особые точки (5.15) ПФ (5.13) действительны. Предположим вначале, что  $\cos \alpha > 0$ , поскольку случай  $\cos \alpha < 0$  может быть рассмотрен аналогичным образом. Полагая  $y = e^{i\theta}$ , с помощью уравнения (5.14) для  $n \geq 1$  получим уравнение (5.22).

Изменим путь интегрирования так, как показано на рис. 5.3. При обходе особых точек необходимо учитывать соответствующий набег фазы, как показано на том же рисунке (мы рассмотрим только  $x$ -компоненту намагниченности, поскольку выкладки для  $y$ -компоненты полностью аналогичны). Принимая во внимание также направление интегрирования, легко показать, что в общее выражение (5.22) вносят вклад только

следующие интегралы:

$$\int_{-\pi}^{\pi} = 2 \left\{ \int_{7'}^{6'} + \int_{9'}^{8'} - \int_{12'}^{11'} \right\} \quad (5.32)$$

(индексы обозначают направление интегрирования, под всеми интегралами понимаются их главные значения, штрихи у индексов использованы, чтобы отличать контур интегрирования, показанный на рис. 5.3 от контура на рис. 5.2). Всюду ниже под  $I_k[t]$  мы подразумеваем модифицированные функции Бесселя 1-го рода  $k$ -го порядка.

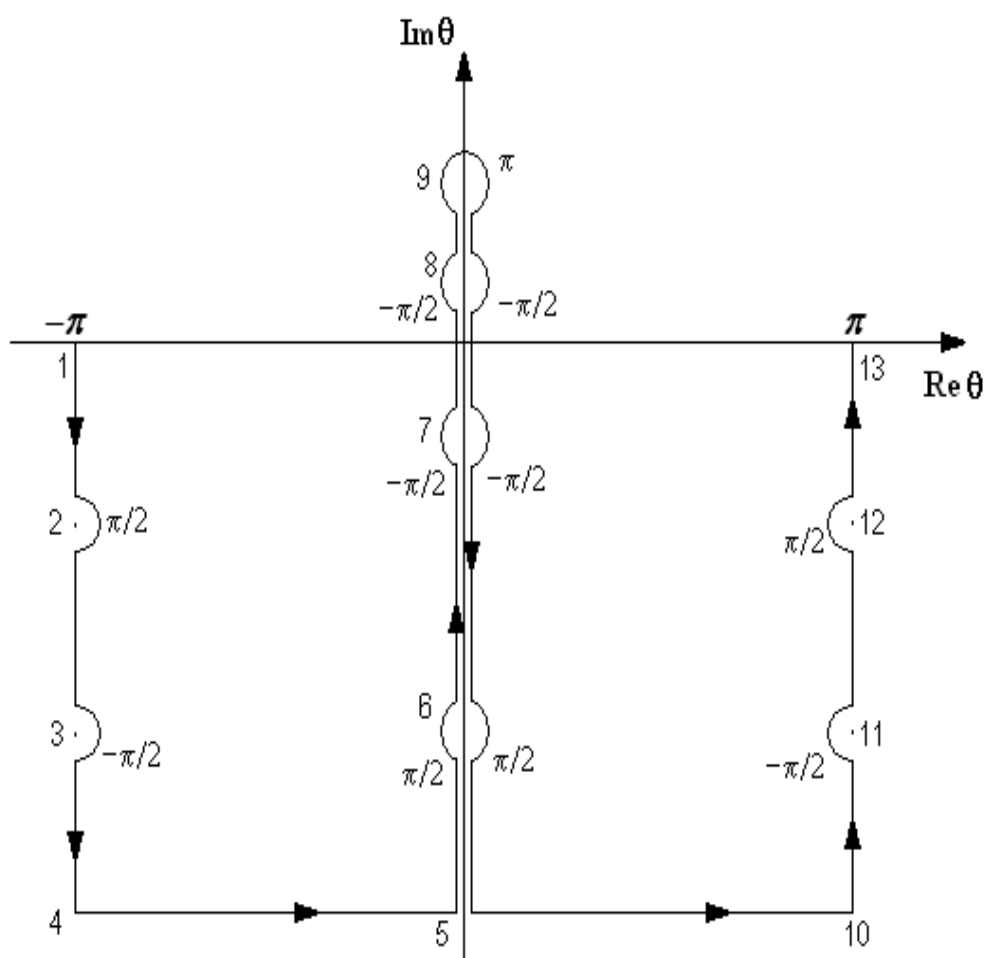


Рис. 5.3: Путь интегрирования для случая  $\cos \alpha > 0$  и  $\chi \leq \chi_0 \leq 1$ . Контур обходит точки ветвления ПФ (2.32), рядом с которыми указаны соответствующие набег фазы для  $x$ -компоненты.

Интеграл  $\int_{12'}^{11'}$  соответствует интегралу (5.26), оценка которого приведена в Приложении Д (выражение (5.27)). Рассмотрим каждый из оставшихся интегралов отдельно.

**Интегрирование от точки 7' до точки 6'.** Полагая  $\theta = -i \ln y_1 - it = i \ln y_2 - it$ , представим интеграл  $\int_{7'}^{6'}$  в следующем виде:

$$\int_{7'}^{6'} \sqrt{\frac{X}{Y}} e^{-in\theta} d\theta = -\frac{i e^{-i\pi/2}}{y_1^n} \int_0^{\ln \frac{y_2}{\chi}} \sqrt{\frac{\left(\frac{y_2}{\chi} + e^t\right) y_1 (e^t - 1) (y_1 e^t - y_2)}{\left(\frac{y_2}{\chi} - e^t\right) (y_1 e^t - y_3) (y_1 e^t - y_4)}} e^{-nt} dt \quad (5.33)$$

При  $n \gg 1$  интеграл (5.33) может быть оценен следующим образом:

$$\begin{aligned} \int_{7'}^{6'} \sqrt{\frac{X}{Y}} e^{-in\theta} d\theta &\approx -\frac{1}{y_1^n} \sqrt{\frac{\left(\frac{1}{\chi} + y_1\right) (y_1 - y_2)}{(y_1 - y_4) (y_1 - y_3)}} \int_0^{\frac{y_2}{\chi} - 1} \frac{t^{1/2} e^{-nt} dt}{\left(\frac{y_2}{\chi} - 1 - t\right)^{1/2}} \\ &= -\frac{\pi \left(\frac{y_2}{\chi} - 1\right)}{2y_1^n} \sqrt{\frac{\left(\frac{1}{\chi} + y_1\right) (y_1 - y_2)}{(y_1 - y_4) (y_1 - y_3)}} \times \\ &\times \left\{ I_0 \left[ \frac{n}{2} \left(\frac{y_2}{\chi} - 1\right) \right] - I_1 \left[ \frac{n}{2} \left(\frac{y_2}{\chi} - 1\right) \right] \right\} \exp \left[ -\frac{n}{2} \left(\frac{y_2}{\chi} - 1\right) \right]. \end{aligned} \quad (5.34)$$

**Интегрирование от точки 9' до точки 8'.** Полагая  $\theta = -i \ln y_3 - it$ , представим интеграл  $\int_{9'}^{8'}$  в следующем виде:

$$\int_{9'}^{8'} \sqrt{\frac{X}{Y}} e^{-in\theta} d\theta = -\frac{i e^{i\pi/2}}{y_3^n} \int_0^{\ln \frac{y_2}{y_3}} \sqrt{\frac{\left(\frac{1}{\chi} + y_3 e^t\right) (y_1 - y_3 e^t) \left(\frac{y_2}{y_3} - e^t\right)}{\left(\frac{1}{\chi} - y_3 e^t\right) (e^t - 1) (y_3 e^t - y_4)}} e^{-nt} dt. \quad (5.35)$$

При  $n \gg 1$  интеграл (5.35) может быть оценен следующим образом:

$$\begin{aligned} \int_{9'}^{8'} \sqrt{\frac{X}{Y}} e^{-in\theta} d\theta &\approx \frac{1}{y_3^n} \sqrt{\frac{\left(\frac{1}{\chi} + y_3\right) (y_1 - y_3)}{\left(\frac{1}{\chi} - y_3\right) (y_3 - y_4)}} \int_0^{\frac{y_2}{y_3} - 1} \frac{\left(\frac{y_2}{y_3} - 1 - t\right)^{1/2}}{t^{1/2}} e^{-nt} dt \\ &= \frac{\pi \left(\frac{y_2}{y_3} - 1\right)}{2y_3^n} \sqrt{\frac{\left(\frac{1}{\chi} + y_3\right) (y_1 - y_3)}{\left(\frac{1}{\chi} - y_3\right) (y_3 - y_4)}} \times \\ &\times \left\{ I_0 \left[ \frac{n}{2} \left(\frac{y_2}{y_3} - 1\right) \right] + I_1 \left[ \frac{n}{2} \left(\frac{y_2}{y_3} - 1\right) \right] \right\} \exp \left[ -\frac{n}{2} \left(\frac{y_2}{y_3} - 1\right) \right]. \end{aligned} \quad (5.36)$$

Таким образом, конечное выражение для аналитической аппроксимации  $x$ -компо-

ненты эхо-амплитуд при  $\cos \alpha > 0$ ,  $T_2 \leq T_1$  и  $\chi \leq \chi_0$  принимает следующую форму:

$$\begin{aligned}
\frac{M_{xn}}{M_{x0}} (\xi_1 \xi_2)^{-n/2} &\approx \frac{b^n}{4} \sqrt{\frac{(b+\chi) \left(\frac{1}{c} - \frac{1}{b}\right)}{(b-\chi) \left(b + \frac{1}{b}\right)}} (bc-1) \\
&\times \left\{ I_0 \left[ \frac{n}{2} (bc-1) \right] + I_1 \left[ \frac{n}{2} (bc-1) \right] \right\} e^{-\frac{n}{2}(bc-1)} - \frac{c^n}{4} \sqrt{\frac{\left(\frac{c}{\chi} + 1\right) \left(\frac{1}{c} - c\right)}{\left(\frac{1}{c} - \frac{1}{b}\right) (1+bc)}} \left(\frac{c}{\chi} - 1\right) \\
&\times \left\{ I_0 \left[ \frac{n}{2} \left(\frac{c}{\chi} - 1\right) \right] - I_1 \left[ \frac{n}{2} \left(\frac{c}{\chi} - 1\right) \right] \right\} e^{-\frac{n}{2}\left(\frac{c}{\chi} - 1\right)} + \frac{(-1)^n}{4b^n} \sqrt{\frac{(b+c) \left(\frac{1}{bc} + 1\right)}{\left(\frac{1}{\chi b} + 1\right) \left(b + \frac{1}{b}\right)}} \\
&\times \left(\frac{1}{\chi b} - 1\right) \left\{ I_0 \left[ \frac{n}{2} \left(\frac{1}{\chi b} - 1\right) \right] + I_1 \left[ \frac{n}{2} \left(\frac{1}{\chi b} - 1\right) \right] \right\} e^{-\frac{n}{2}\left(\frac{1}{\chi b} - 1\right)}, \tag{5.37}
\end{aligned}$$

где  $b$  определено выражением (3.19), а  $c$  - выражением (3.47). Комбинируя результат (5.37) с уравнением для случая  $\cos \alpha < 0$ , рассмотренным аналогичным образом, приходим к уравнению (3.42).

# Основные результаты и выводы

1. Обобщен метод анализа спиновых систем с периодическим гамильтонианом, основанный на формализме производящих функций. Для невзаимодействующих спинов в отсутствие диффузии получены производящие функции для импульсных последовательностей типа спинового эха и градиентного эха с произвольными отстройкой от резонанса и углами поворота РЧ импульсов. Установлено, что нерезонансный случай эквивалентен резонансному с переопределенным углом рефокусирования.

2. Проведено сравнение теории с результатами двух экспериментов по спиновому эху с углами поворота РЧ импульсов  $\pi/2$  и  $\pi/4$ . Во втором случае сравнение проведено как для резонансного, так и для нерезонансного случаев. Показано, что теоретические эхо-амплитуды хорошо соответствуют экспериментальным.

3. Для СРМГ эхо-амплитуд получены как точные, так и асимптотические явные аналитические выражения. Показано, что форма асимптотических выражений определяется разностью скоростей  $T_1$  и  $T_2$ -релаксации и эффективным углом рефокусирования.

4. Получены аналитические аппроксимации, с высокой точностью описывающие СРМГ эхо-сигналы в широком диапазоне параметров. Установлены условия осцилляционного затухания спинового эха и затухания эхо-сигналов без осцилляций.

5. Рассмотрена эволюция АХ-системы двух гомоядерных скалярно связанных спинов  $1/2$  в СРМГ последовательности неселективных РЧ импульсов с углом рефокусирования  $180^\circ$  и произвольным углом возбуждения в пренебрежении релаксацией. Показано, что в этом случае вклады интегральной и мультиплетной поляризаций в эхо-сигнал имеют разную фазу и могут быть разделены, что может найти применение в МРТ с использованием неравновесной поляризации.

# Благодарности

Автор выражает глубокую признательность, в первую очередь, своему научному руководителю д.ф.-м.н., проф. Никите Николаевичу Лукзену, а также к.ф.-м.н. Андрею Александровичу Савелову, д.х.н. Игорю Валентиновичу Коптюгу, д.ф.-м.н. Константину Львоичу Иванову и д.ф.-м.н., проф. Докторову Александру Борисовичу, совместно с которыми были получены результаты данной работы, и благодарит д.ф.-м.н. Виталия Алексеевича Морозова за ценные замечания.

# Литература

- [1] Коптюг, И.В., Сагдеев, Р.З. Нетрадиционные приложения метода ЯМР-томографии // Успехи химии. - 2003. - Т. 72. - № 2. - С. 183–212.
- [2] Коптюг, И.В., Сагдеев, Р.З. Применение метода ЯМР-томографии для исследования процессов транспорта вещества // Успехи химии. - 2002. - Т. 71. - № 10. - С. 899–948.
- [3] Коптюг, И.В., Сагдеев, Р.З. Современные физико-химические приложения ЯМР-томографии. Специфика метода и его применение для исследования объектов, содержащих жидкости // Успехи химии. - 2002. - Т. 71. - № 7. - С. 672–699.
- [4] Carr, H.Y., Purcell, E.M. Effects of diffusion on free precession in nuclear magnetic resonance experiments // Phys. Rev. - 1954. - V. 94. - P. 630–638.
- [5] Meiboom, S., Gill, D. Modified spin-echo method for measuring nuclear relaxation times // Rev. Sci. Instrum. - 1958. - V. 29. - P. 688–691.
- [6] M.T. Vlaardingerbroek, J.A. den Boer, Magnetic resonance imaging: theory and practice. - Springer, 1996. - 489 p.
- [7] Hashemi, R.H., Bradley, W.G., Lisanti, Ch.J. MRI: the basics. - 3rd ed. - Lippincott Williams & Wilkins, 2000. - 400 p.
- [8] Nitz, W.R. Fast and ultrafast non-echo-planar MR imaging techniques // Eur. Radiol. - 2002. - V. 12. - P. 2866–2882.
- [9] Hennig, J. Multiecho imaging sequences with low refocusing flip angles // J. Magn. Reson. - 1988. - V. 78. - P. 397–407.
- [10] Hennig, J. Echoes - how to generate, recognize, use or avoid them in MR-imaging sequences // Concepts in Magn. Reson. - 1991. - V. 3. - P. 125–143.

- [11] Hennig, J., Weigel, M., Scheffler, K. Multiecho sequences with variable refocusing flip angles: optimization of signal behavior using smooth transitions between pseudo steady states (TRAPS) // *Magn. Reson. Med.* - 2003. - V. 49. - P. 527–535.
- [12] Mills, T.C., Ortendahl, D.A., Hylton, N.M., Crooks, L.E., Carlson, J.W., Kaufman, L. Partial flip angle MR imaging // *Radiology.* - 1987. - V. 162. - P. 531–539.
- [13] Mastikhin, I.V. Rapid determination of the RF pulse flip angle and spin-lattice relaxation time for materials imaging // *J. Magn. Reson.* - 2005. - V. 172. - P. 231–237.
- [14] G.R. Coates, L. Xiao, M.G. Prammer, *NMR Logging Principles and Applications*, Halliburton Energy Services, Houston, 1999.
- [15] Woessner, D.E. The early days of NMR in the southwest // *Concepts Magn. Reson.* - 2001. - V. 13. - P. 77–102.
- [16] B. Blümich, *NMR imaging of materials.* - Clarendon Press, Oxford, 2000. - 568 p.
- [17] Blümich, B., Perlo, J., Casanova, F. Mobile single-sided NMR // *Prog. Nucl. Magn. Reson. Spectr.* - 2008. - V. 52. - P. 197–269.
- [18] Абрагам, А. Ядерный магнетизм: пер. с англ. / Под ред. Г.В. Скродцкого - М.: Издательство иностранной литературы, 1963. - 552 с.
- [19] Эрнст, Р., Боденхаузен, Дж., Вокаун, А. ЯМР в одном и двух измерениях: пер. с англ. / Под ред. К.М. Салихова - М.: Мир, 1990. - 712 с.
- [20] M.H. Levitt, *Spin dynamics: basics of Nuclear Magnetic Resonance*, 2nd ed. - Wiley, 2008. - 744 p.
- [21] Bull, T.E. Effect of RF inhomogeneities on spin-echo measurements // *Rev. Sci. Instrum.* - 1974. - V.45. - P. 232–242.
- [22] Hürlimann, M.D., Griffin, D.D. Spin dynamics of Carr-Purcell-Meiboom-Gill-like sequences in grossly inhomogeneous  $B_0$  and  $B_1$  fields and application to NMR logging // *J. Magn. Reson.* - 2000. - V. 143. - P. 120–135.
- [23] Das, T.P., Roy, D.K. Spin echoes with four pulses — an extension to n pulses // *Phys. Rev.* - 1955. - V. 98. - P. 525–531.



- [24] Goelman, G., Prammer, M.G. The CPMG pulse sequence in strong magnetic field gradients with application to oil-well logging // *J. Magn. Reson. A.* - 1995. - V. 113. - P. 11–18.
- [25] Kiselev, V.G. Calculation of diffusion effect for arbitrary pulse sequences // *J. Magn. Reson.* - 2003. - V. 164. - P. 205–211.
- [26] Zur, Yu. An algorithm to calculate the NMR signal of a multi spin-echo sequence with relaxation and spin-diffusion // *J. Magn. Reson.* - 2004. - V. 171. - P. 97–106.
- [27] Lukzen, N.N., Savelov, A.A. Analytical derivation of multiple spin echo amplitudes with arbitrary refocusing angle // *J. Magn. Reson.* - 2007. - V. 185. - P. 71–76.
- [28] A. Korn, M. Korn, *Mathematical Handbook for scientists and engineers*, McGraw-Hill Book Company, Inc., New York Toronto London, 1961.
- [29] Wilf, H.S. *Generatingfunctionology*, 2nd edition. - Academic Press, 1994. - viii+226 p.
- [30] Lauterbur, P.C. Image formation by induced local interaction: examples employing nuclear magnetic resonance // *Nature.* - 1973. - V. 242. - P. 190-191.
- [31] Ernst, R.R., Anderson, W.A. Application of Fourier transform spectroscopy to magnetic resonance // *Rev. Sci. Instrum.* - 1966. - V. 37. - P. 37–102.
- [32] Kumar, A., Welti, D., Ernst, R.R. NMR Fourier Zeugmatography // *J. Magn. Reson.* - 1975. - V. 18. - P. 69–83.
- [33] Edelstein, W.A., Hutchison, J.M.S., Johnson, G., Redpath, T. Spin warp NMR imaging and applications to human whole-body imaging // *Phys. Med. Biol.* - 1980. - V. 25. - P. 751–756.
- [34] den Boeft, J.H., van Uijent, C.M.J., Holzscherer, C.D. Multiple-slice NMR imaging by three-dimensional Fourier zeugmatography // *Phys. Med. Biol.* - 1984. - V. 29. - P. 857–867.
- [35] Hahn, E.L. Spin echoes // *Phys. Rev.* - 1950. - V. 20. - N. 4. - P. 580–594.

- [36] Dixon, W.T., Sardashti, M., Castillo, M., Stomp, G.P. Multiple inversion recovery reduces static tissue signal in angiograms // *Magn. Res. Med.* - 1991. - V. 18. - P. 257–268.
- [37] Does, M.D. Relaxation-selective magnetization preparation based on  $T_1$  and  $T_2$  // *J. Magn. Reson.* - 2005. - V. 172. - P. 306–311.
- [38] Uhrig, G.S. Keeping a quantum bit alive by optimized  $\pi$ -pulse sequences // *Phys. rev. Lett.* - 2007. - V. 98. - P. 100504-1–100504-4.
- [39] Lee, H.-L., Nayak, K. Stabilization of alternating  $TR$  steady-state free precession sequences // *J. Magn. Reson.* - 2008. - V. 195. - P. 211–218.
- [40] Jenista, E.R., Stokes, A.M., Branca, R.T., Warren, W.S. Optimized, unequal pulse spacing in multiple echo sequences improves refocusing in magnetic resonance // *J. Chem. Phys.* - 2009. - V. 131. - P. 204510-1–204510-7.
- [41] Hsu, J.-J., Glover, G.H. Rapid MRI method for mapping the longitudinal relaxation time // *J. Magn. reson.* - 2006. - V. 181. - P. 98–106.
- [42] Bodenhausen, G., Kogler, H., Ernst, R.R. Selection of coherence-transfer-pathways in NMR pulse experiments // *J. Magn. reson.* - 2011. - V. 209. - P. 183–194.
- [43] F. Bălibanu, K. Hailu, R. Eymael, D.E. Demco, and B. Blümich, Nuclear magnetic resonance in inhomogeneous magnetic fields, *J. Magn. Reson.* 145 (2000) 246–258.
- [44] Le Roux, P. Non-CPMG Fast Spin Echo with full signal // *J. Magn. Reson.* - 2002. - V. 155. - P. 278–292.
- [45] Yip, G.N.B., Zuiderweg, E.R.P. A phase cycle scheme that significantly suppresses offset-dependent artifacts in the  $R_2$ -CPMG  $^{15}N$  relaxation experiment // *J. Magn. Reson.* - 2004. - V. 171. - P. 25–36.
- [46] Bain, A.D., Anand, C.K., Nie, Z. Exact solution of the CPMG pulse sequence with phase variation down the echo train: application to  $R_2$  measurements // *J. Magn. reson.* - 2011. - V. 209. - P. 183–194.
- [47] Bloch, F. Nuclear induction // *Phys. Rev.* - 1946. - V. 70. - P. 460–474.

- [48] Сликтер, Ч. Основы теории магнитного резонанса: пер. с англ. - 2-е изд., пересмотр., доп., испр. / Под. ред. Г.В. Скряцкого - М.: Мир, 1981. - 448 с.
- [49] Hajduk, P.J., Horita, D.A., Lerner, L.A. Theoretical analysis of relaxation during shaped pulses. I. The effects of short  $T_1$  and  $T_2$  // J. Magn. Res. A - 1993. - V. 103. - P. 40–52.
- [50] Ross, A., Czisch, M., King, G.C. Systematic errors associated with the CPMG pulse sequence and their effect on motional analysis of biomolecules // J. Magn. Reson. - 1997. - V. 124. - P. 355–365.
- [51] Raddi, A., Klose, U. Relaxation effects on transverse magnetization using RF pulses long compared to  $T_2$  // J. Magn. Res. - 2000. - V. 144. - P. 108–114.
- [52] Sun, Z., Bartha, R. Enhanced diffusion weighting generated by selective adiabatic pulse trains // J. Magn. Reson. - 2007. - V. 188. - P. 35–40.
- [53] Issa, B. Design of self-refocused pulses under short relaxation times // J. Magn. Reson. - 2009. - V. 198. - P. 151–159.
- [54] Bottomley, P.A. Spatial localization in NMR spectroscopy in vivo // Ann. N. Y. Acad. Sci. - 1987. - V. 508. - P. 333–348.
- [55] Bodenhausen, G., Freeman, R., Morris, G.A. A simple pulse sequence for selective excitation in Fourier Transform NMR // J. Magn. Reson. - 1976. - V. 23. - P. 171–175.
- [56] Todica, M., Fechete, R., Blümich, B. Selective NMR excitation in strongly inhomogeneous magnetic fields // J. Magn. Reson. - 2003. - V. 164. - P. 220–227.
- [57] Levitt, M.H., Freeman, R. Compensation for pulse imperfections in NMR spin-echo experiments // J. Magn. Reson. - 1981. - V. 43. - P. 65–80.
- [58] Tycko, R. Broadband population inversion // Phys. Rev. Lett. - 1983. - V. 51. - P. 775–777.
- [59] Tycko, R., Cho, H.M., Schneider, E., Pines, A. Composite pulses without phase distortion // J. Magn. Reson. - 1985. - V. 61. - P. 90–101.

- [60] Levitt, M.H. Composite pulses // *Prog. Nuc. Magn. Reson. Spectrosc.* - 1986. - V. 18. - P. 61–122.
- [61] Shaka, A.J., Rucker, S.P., Pines, A. Iterative Carr-Purcell trains // *J. Magn. Reson.* - 1988. - V. 77. - P. 606–611.
- [62] Hürlimann, M.D. Carr-Purcell sequences with composite pulses // *J. Magn. Reson.* - 2001. - V. 152. - P. 109–123.
- [63] H. Günter, *NMR spectroscopy: basic principles, concepts, and applications in chemistry*, 2nd ed. - Wiley & Sons, 1995. - xx +588 p.
- [64] Skinner, T.E., Reiss, T.O., Luy, B., Khaneja, N., Glaser, S.J. Application of optimal control theory to the design of broadband excitation pulses for high resolution NMR // *J. Magn. Reson.* - 2003. - V. 163. - P. 8–15.
- [65] Khaneja, N., Reiss, T., Kehlet, C., Schulte-Herbrüggen, T., Glaser, S.J. Optimal control of coupled spin dynamics: design of NMR pulse sequences by gradient ascent algorithms // *J. Magn. Reson.* - 2005. - V. 172. - P. 296–305.
- [66] Braun, M., Glaser, S.J. Cooperative pulses // *J. Magn. Reson.* - 2010. - V. 207. - P. 114–123.
- [67] Freed, D.E., Hürlimann, M.D., Scheven, U.M. The equivalence between off-resonance and on-resonance pulse sequences and its application to steady-state free precession with diffusion in inhomogeneous fields // *J. Magn. Reson.* - 2003. - V.162. - P. 328–335.
- [68] Metz, K.R., Boehmer, J.P., Bowers, J.L., Moore, J.P. Rapid rotating-frame imaging using an RF pulse (RIPT) // *J. Magn. Reson. B* - 1994. - V.103. - P. 152–161.
- [69] Canet, D. Radiofrequency field gradient experiments // *Prog. NMR Spectrosc.* - 1997. - V. 30. - P. 101–135.
- [70] Woessner, D.E. Effects of diffusion in Nuclear Magnetic Resonance spin-echo experiments // *J. Chem. Phys.* - 1961. - V. 34 - P. 2057–2061.
- [71] Kaiser, R., Bartholdi, E., Ernst, R.R. Diffusion and field-gradient effects in NMR Fourier spectroscopy // *J. Chem. Phys.* - 1974. - V. 60. - P. 2966–2979.

- [72] Nelson, R.J., Maguire, Y., Caputo, D.F., Leu, G., Kang, Y., Pravia, M., Tuch, D., Weinstein, Y.S., Cory, D.G. Counting echoes: application of a complete reciprocal - space description on NMR spin dynamics // Concepts in Magn. Reson. - 1998. - V. 10. - P. 331–341.
- [73] Bain, A.D., Randall, E.W. Hahn spin echoes in large static gradients following a series of  $90^0$  pulses // J. Magn. Reson. - 1996. - V. 123. - P. 49–55.
- [74] Hürlimann, M.D. Diffusion and relaxation effects in general stray field NMR experiments // J. Magn. Reson. - 2001. - V. 148. - P. 367–378.
- [75] Song, Y.-Q. Categories of coherence pathways for the CPMG sequence // J. Magn. Reson. - 2002. - V. 157. - P. 82–91.
- [76] Goelman, G., Prammer, M.G. The CPMG pulse sequence in strong magnetic field gradients with application to oil-well logging // J. Magn. Reson. A - 1995. - V. 113. - P. 11–18.
- [77] Bain, A.D., Anand, C.K., Nie, Z. Exact solution to the Bloch equations and application to the Hahn echo // J. Magn. reson. - 1984. - V. 58. - P. 370–388.
- [78] Marble, A.E. Optimization of echo amplitudes resulting from a series of  $90^0$  pulses in an inhomogeneous static field // J. Magn. Reson. - 2012. - V. 216. - P. 37–42.
- [79] Freed, D.E., Scheven, U.M., Zielinski, L.J., Sen, P.N., Hürlimann, M.D. Steady-state free precession experiments and exact treatment of diffusion in a uniform gradient // J. Chem. Phys. - 2001. - V. 115. - P. 4249–4258.
- [80] Torrey, H.C. Bloch equations with diffusion terms // Phys. Rev. - 1956. - V. 104. - P. 563–565.
- [81] Callaghan, P.T. Principles of nuclear magnetic resonance microscopy / Oxford Univ. Press, Oxford, 1991. - 492 p.
- [82] Hürlimann, M.D. Diffusion and relaxation effects in general stray field NMR experiments // J. Magn. Reson. - 2001. - V. 148. - P. 367–378.
- [83] Song, Y.-Q., Tang, X. A one-shot method for measurement of diffusion // J. Magn. Reson. - 2004. - V. 170. - P. 136–148.

- [84] Lowe, I.J., Wysong, R.E. DANTE ultrafast imaging sequence (DUFIS) // J. Magn. Reson. B - 1993. - V. 101. - P. 106–109.
- [85] Heid, O., Deimling, M., Huk, W. QUEST - a quick echo split NMR imaging technique // Magn. Reson. Med. - 1993. - V. 29. - P. 280–283.
- [86] Zielinski, L.J., Sen, P.N., Relaxation of nuclear magnetization in a nonuniform magnetic field gradient and a restricted geometry // J. Magn. Reson. - 2000. - V. 147. - P. 95–103.
- [87] Hagslätt, H., Jönsson, B., Nydén, M., Söderman, O. Predictions of pulsed field gradient NMR echo-decays for molecules diffusing in various restrictive geometries. Simulations of diffusion propagators based on a finite element method // J. Magn. Reson. - 2003. - V. 161. - P. 138–147.
- [88] de Swiet, T.H., Sen, P.N. Decay of nuclear magnetization by bounded diffusion in a constant field gradient // J. Chem. Phys. - 1994. - V. 100. - P. 5597–5604.
- [89] Sen, P.N., Andre, A., Axelrod, S. Spin echoes of nuclear magnetization diffusing in a constant magnetic field gradient and in a restricted geometry // J. Chem. Phys. - 1999. - V. 111. - P. 6548–6555.
- [90] Dittmer, J., Bodenhausen, G. Quenching echo modulations in NMR spectroscopy // Chem. Phys. Chem. - 2006. - V. 7. - P. 831–836.
- [91] Tošner, Z., Škoch, A., Kowalewski, J. Behavior of two almost identical spins during the CPMG pulse sequence // Chem. Phys. Chem. - 2010. - V. 11. - P. 638–645.
- [92] Segawa, T.F., Baishya, B., Bodenhausen, G. Transverse relaxation of scalar-coupled protons // Chem. Phys. Chem. - 2010. - V. 11. - P. 3343–3354.
- [93] Levitt, M.H., Di Bari, L. The homogeneous master equation and the manipulation of relaxation networks // Bull. Magn. Reson. - 1994. V. 16. - P. 94–114.
- [94] Bittl, R., Zech, S.G. Pulsed EPR spectroscopy on short-lived intermediates in Photosystem I // Biochim. Biophys. Acta. - 2001. - V. 1507. - P. 194–211.
- [95] Бучаченко, А.Л., Сагдеев, Р.З., Салихов, К.М. Магнитные и спиновые эффекты в химических реакциях. - Новосибирск.: Наука, 1978. - 297 с.

- [96] Hausser, K.H., Stehlik, D. Solution-state Dynamic Nuclear Polarization at high magnetic field // *Adv. Magn. Reson.* - 1968. - V. 3. - P. 79–139.
- [97] Natterer, J., Bargon, J. Parahydrogen induced polarization // *Prog. Nucl. Magn. Reson. Spectrosc.* - 1997. - V. 31. - P. 293–315.
- [98] Dittmer, J., Bodenhausen, G. Multiple refocusing in NMR spectroscopy: compensation of pulse imperfections by scalar couplings // *Chem. Phys. Chem.* - 2004. - V. 5. - P. 1750–1754.
- [99] Gutowsky, H.S., Vold, R.L., Wells, E.J. Theory of chemical exchange effects in magnetic resonance // *J. Chem. Phys.* - 1965. - V. 43. - P. 4107–4125.
- [100] Allerhand, A. Analysis of Carr–Purcell spin-echo NMR experiments on multiple-spin systems. I. The effect of homonuclear coupling // *J. Chem. Phys.* - 1966. - V. 44. - P. 1–9.
- [101] Gopalakrishnan, K., Aeby, N., Bodenhausen, G. Quenching and recoupling of echo modulations in NMR Spectroscopy // *Chem. Phys. Chem.* - 2007. V. 8. - P. 1791–1802.
- [102] R. Freeman, H.D.W. Hill, in: L.M. Jackman, F.A. Cotton (Eds.), *Dynamic NMR spectroscopy*, Academic Press, New York, 1975.
- [103] Aeby, N., Bodenhausen, G. Determination of transverse relaxation rates of individual spins while quenching echo modulations due to homonuclear scalar couplings // *Chem. Phys. Lett.* - 2008. - V. 463. - P. 418–421.
- [104] Barrère, C., Thureau, P., Thévand, A., Viel, S. A convenient method for measurements of transverse relaxation rates in homonuclear scalar coupled spin systems // *Chem. Commun.* - 2011. - V. 47. - P. 9209–9211.
- [105] Lukzen, N.N., Petrova, M.V., Koptyug, I.V., Savelov, A.A., Sagdeev, R.Z. The generating functions formalism for the analysis of spin response to the periodic trains of RF pulses. Echo sequences with arbitrary refocusing angles and resonance offsets // *J. Magn. Reson.* - 2009. - V. 196. - P. 164–169.

- [106] Petrova, M.V., Doktorov, A.B., Lukzen, N.N. CPMG echo amplitudes with arbitrary refocusing angle: explicit expressions, asymptotic behavior, approximations // J. Magn. Reson. - 2011. - V. 212. - P. 330–343.
- [107] Laird, B.B., Budimir, J., Skinner, J.L. Quantummechanical derivation of the Bloch equations: Beyond the weak coupling limit // J. Chem. Phys. - 1991. - V. 94. - P. 4391–4404.
- [108] Laird, B.B., Skinner, J.L.  $T_2$  can be greater than  $2T_1$  even at finite temperature // J. Chem. Phys. - 1991. - V. 94. - P. 4405–4410.
- [109] Лаврентьев, М.А., Шабат, Б.В. Методы теории функции комплексного переменного: Учебн. пособие для ун-тов. - 5-е изд., испр. - М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1987. - 688 с.
- [110] Franzoni, M.B., Levstein, P.R. Manifestations of the absence of spin diffusion in multipulse NMR experiments on diluted dipolar solids // Phys. Rev. B. - 2005. - V. 72. - P. 235410-1–235410-5.
- [111] Franzoni, M.B., Levstein, P.R., Raya, J., Hirschinger, J. Hole burning in polycrystalline  $C_{60}$ : an answer to the long pseudocoherent tails // Phys. Rev. B. - 2008. - V. 78. - P. 115407-1–115407-5.
- [112] Иванов, К.Л., Петрова, М.В., Лукзен, Н.Н., Сагдеев, Р.З. Разделение интегральной и мультиплетной ядерной поляризации с помощью анализа фазы намагниченности спинового эха // Доклады АН, Физическая химия. - 2009. - Т. 427. - С. 211–214.
- [113] Salikhov, K.M., Kandrashkin, Yu.E., Salikhov, A.K. Peculiarities of free induction and primary spin echo signals for spin correlated radical pairs // Appl. Magn. Reson. - 1992. - V. 3. - P. 199–216.