

# BIOMOLEKULÁRIS SZERKEZET ÉS DINAMIKA: RÁDIÓSPEKTROSKÓPIÁK, NMR, ESR, MRI

KELLERMAYER MIKLÓS

## Atomi, molekuláris rendszerek elemi mágnesként viselkedhetnek

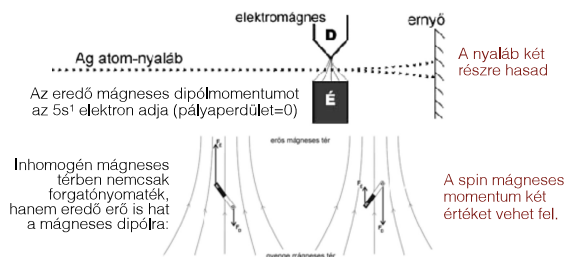
### Stern-Gerlach kísérlet (1922)



Otto Stern  
(1888-1969)



Walther Gerlach  
(1889-1979)



### Mágneses magrezonancia ("nuclear magnetic resonance", NMR) Nobel-díj, 1952



Isidor Rabi  
(1898-1988)



Felix Bloch  
(1905-1983)



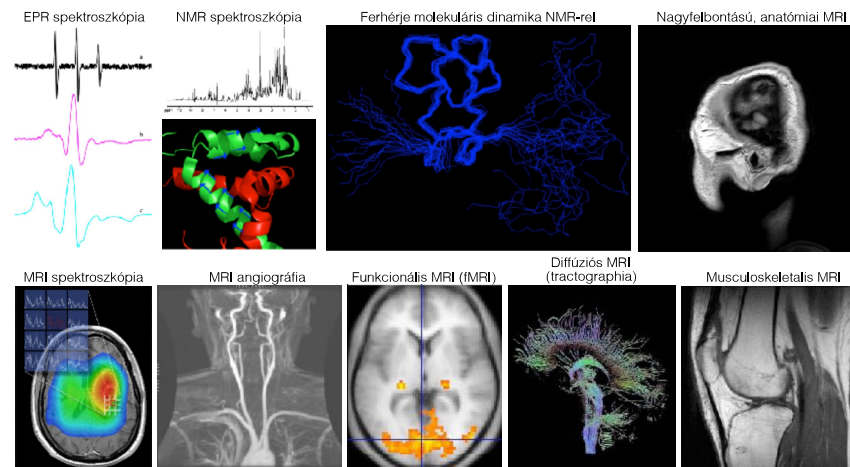
Edward Mills Purcell  
(1912-1997)

Mágneses rezonancia: Mágneses térbe helyezett minta általi, rezonancia-abszorpció jellegű elektromágneses energia elnyelése.

## "Rádióspektroszkópiák":

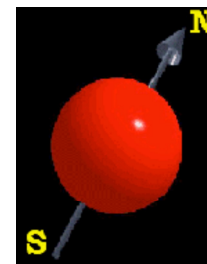
forradalmasították a fizikát, kémiát, biológiát és orvostudományt

- Elektronspin rezonancia (ESR, elektron paramágneses rezonancia - EPR)
- Mágneses magrezonancia (NMR, MRI)



## Eredő spinnel rendelkező rendszerek: elemi mágneselek

- Elemi részecskék (p, n, e) saját *spinnel* rendelkeznek.
- Elemi részecskék száma és bizonyos rendező elvek (pl. Pauli-elv) miatt *eredő spin* léphet fel.
- Atommag: páratlan tömegszám - feles magspin ( $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{15}\text{N}$ ,  $^{19}\text{F}$ ,  $^{31}\text{P}$ ); páros tömegszám, páratlan rendszám - magspin egész; páros tömegszám és rendszám - magspin zérus.
- Elektron: eredő elektronspin stabil párosítatlan elektront tartalmazó rendszerekben (pl. szabad gyökök).
- Töltés és *eredő spin* miatt *mágneses momentum* lép fel.



Pörgettyűmodell

### Magmágneses momentum:

$$M_N = \gamma_N L$$

$\gamma_N$  = atommag giromágneses hányadosa (mágneses momentum és perdület aránya)

$L$  = magspin ( $L = \sqrt{l(l+1)}\hbar$ ), ahol  $l$  = eredő spinkvantumszám.

### Elektronspin mágneses momentuma:

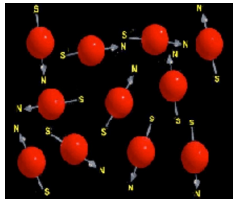
$$M_e = -g\mu_B \sqrt{S(S+1)}$$

$g$  = elektron  $g$ -faktora (a mágneses momentum és giromágneses hányados kapcsolatát leíró dimenzió nélküli arányszám)

$\mu_B$  = Bohr magneton (az elektron mágneses dipólusmomentum egysége)

$S$  = spinkvantumszám

# Mágneses térben a spinek orientálódnak

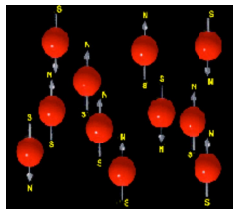


## Mágneses tér hiányában:

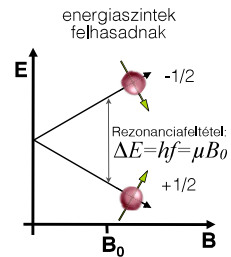
elemi mágnesek orientációja random

Paramágnesség: külső mágneses tér hatására fellépő mágneseztettség (mágneses dipólok orientációja).

## Mágneses térben:

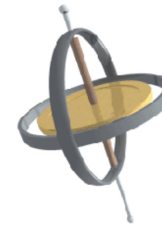


elemi mágnesek orientálódnak  
B<sub>0</sub>  
parallel  
antiparallel

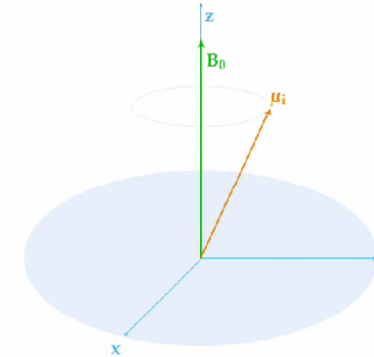


Edward Purcell, 1946

# Az orientált spinek precessziós mozgást végeznek



Pörrgettyű, giroszkóp



Precessziós vagy Larmor frekvencia:

$$\omega_0 = \gamma B_0$$

$$f_{Larmor} = \frac{\gamma}{2\pi} B_0$$

Rezonanciafeltétel:

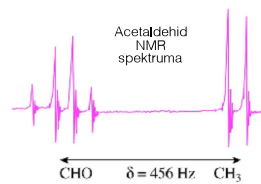
$$\Delta E = \frac{h\omega_0}{2\pi}$$



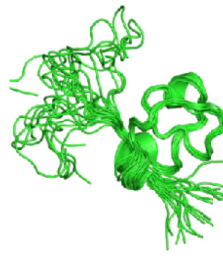
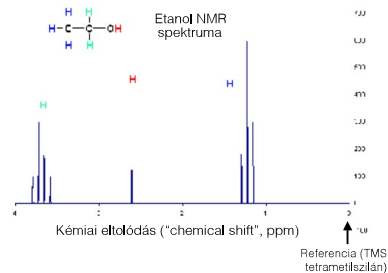
Felix Bloch, 1946

# NMR spektroszkópia

- NMR spektroszkópia vagy Mágneses Rezonancia Spektroszkópia (MRS)
- Spektroszkópai módszer az atommagok körüli lokális mágneses tér mérésére. A mágneses térbe helyezett atommagok rezonanciafrekvenciáit mérjük meg.
- NMR spektrométer: Folyékony He által hűtött mágnes, nagy mágneses téror (spektrális felbontás a térorrel egyenesen arányos)
- NMR spektrum: elnyelt elektromágneses sugárzás intenzitása frekvencia függvényében.
- "NMR-vonal" görbe alatti területe az abszorbeáló atommagok számával arányos.
- Elektronfelhő (i.e., annak szerkezete) befolyásolja a lokális mágneses teret: frekvenciaeltérést elhangolódik ("kémiai eltolódás"). Kémiai szerkezetmeghatározás lehetősége.
- Fehérje NMR: dinamika mérésének lehetősége, rendezetlen fehérje elemek detektálása



900 MHz NMR, 21,1 T mágnes



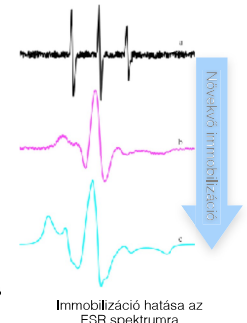
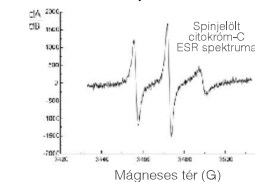
Somatomedin B domén (szuperponált szerkezetek)

# ESR spektroszkópia

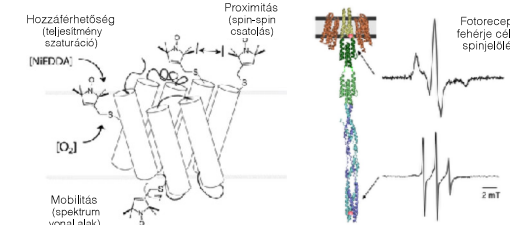
- Elektronspin rezonancia (ESR) vagy elektron paramágneses rezonancia (EPR) spektroszkópia
- Spektroszkópai módszer a páratlan elektront tartalmazó anyagok vizsgálatára.
- ESR spektrum: elnyelt elektromágneses sugárzás intenzitása a mágneses tér függvényében.
- NMR-énél alacsonyabb mágneses tér, de nagyobb elektromágneses sugárzási frekvenciák (mikrohullám).
- Spin-jelölés: stabil párosítatlan elektront tartalmazó vegyülettel való jelölés. "Site-directed" (célzott) spinjelölés: pontmutációval tervezetten bevitt reaktív aminosav oldalláncok (-SH) spinjelölése.
- Mozgási (rotációs) sebességek mérési lehetősége a 10<sup>-4</sup> - 10<sup>-2</sup> s időtartományban.



Jevgenyij Zavoisky, 1944



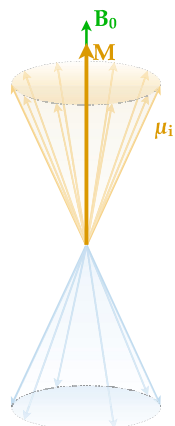
## "Site-directed" (célzott) spinjelölés



# Makroszkópos mágnesezettség

Különböző energiaszinteken spintöbbslet miatt

Alacsony energiájú állapot  
parallel a proton esetében



$B_0$  = mágneses tér  
 $M$  = makroszkópikus  
mágnesezettség

A nagy (parallel) ill.  
alacsony (antiparallel)  
energiájú spinállapotok  
aránya:

$$\frac{N_{antiparallel}}{N_{parallel}} = e^{-\frac{\Delta E}{k_B T}}$$

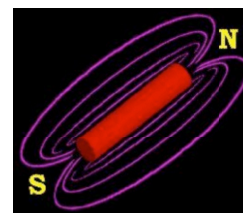
(Boltzmann-eloszlás)

MRI-ben alkalmazott mágneses térerő:  
Föld mágneses térerőjének 20-50  
ezerszerese

Nagy energiájú állapot  
antiparallel a proton esetében

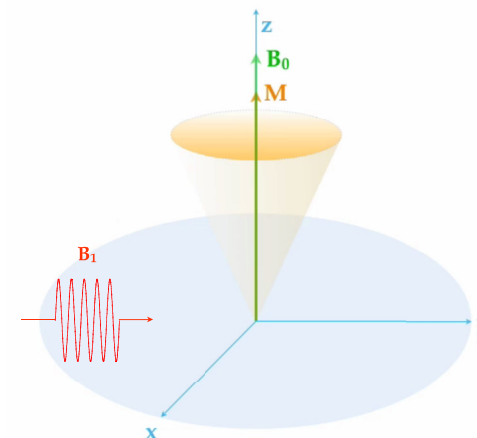
# Gerjesztés

Rezonancia feltétel: Larmor frekvencia

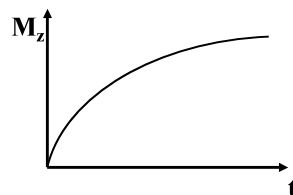
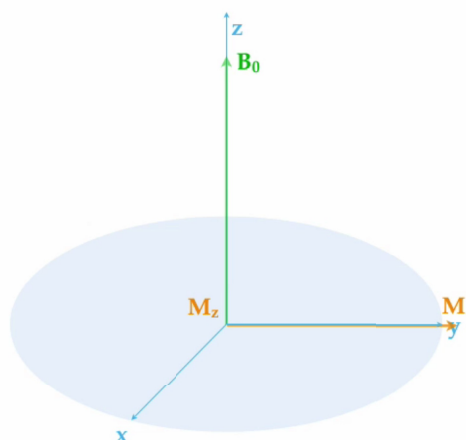


$B_0$  = mágneses tér  
 $M$  = makroszkópikus mágnesezettség  
 $B_1$  = besugárzott elektromágneses tér

MRI-ben alkalmazott  
elektromágneses sugárzás:  
Rádiófrekvencia

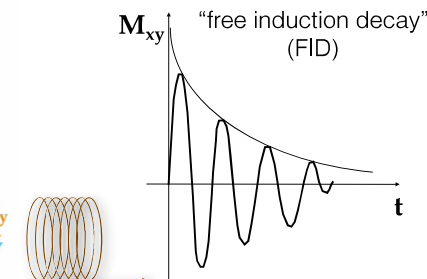
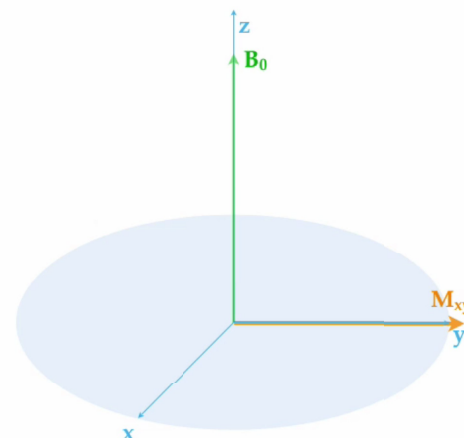


## Spin-rács relaxáció T1 vagy longitudinális relaxáció



T1 relaxációs idő:  
elemi mágnes (proton) és  
környezete közötti kölcsönhatásra utal

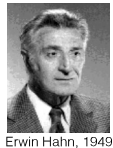
## Spin-spin relaxáció T2 vagy tranzverzális relaxáció



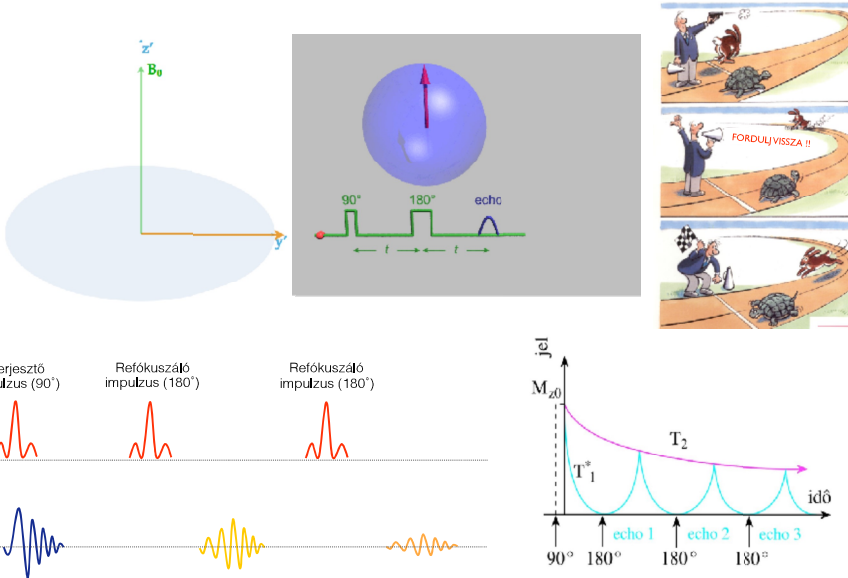
T2 relaxációs idő:  
elemi mágnesek (protonok)  
közötti kölcsönhatásra utal

# Spin-echo kísérlet

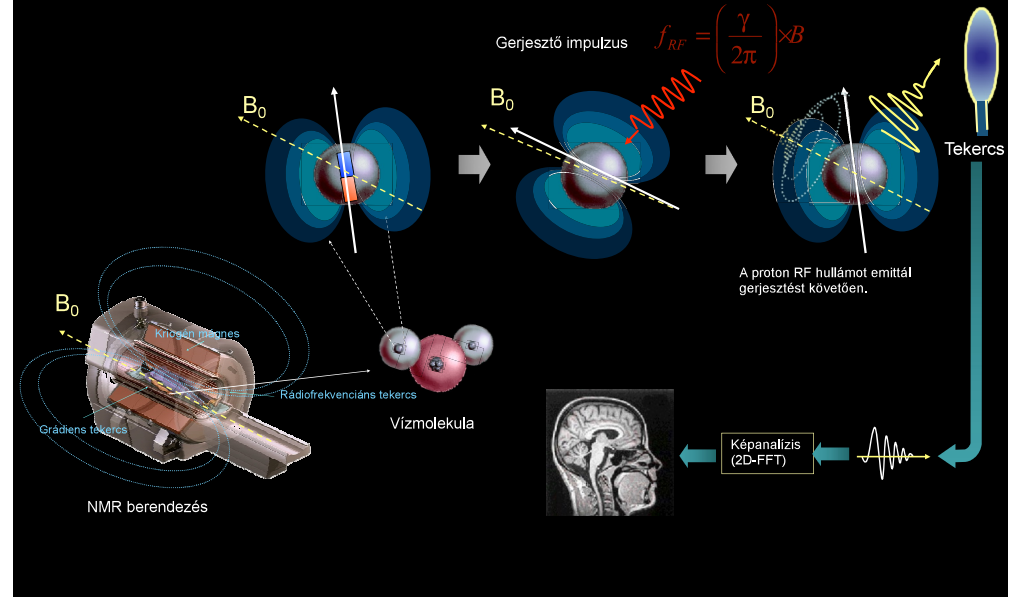
Ismétlődő gerjesztő és fókuszáló impulzusok: spin-echo szekvencia



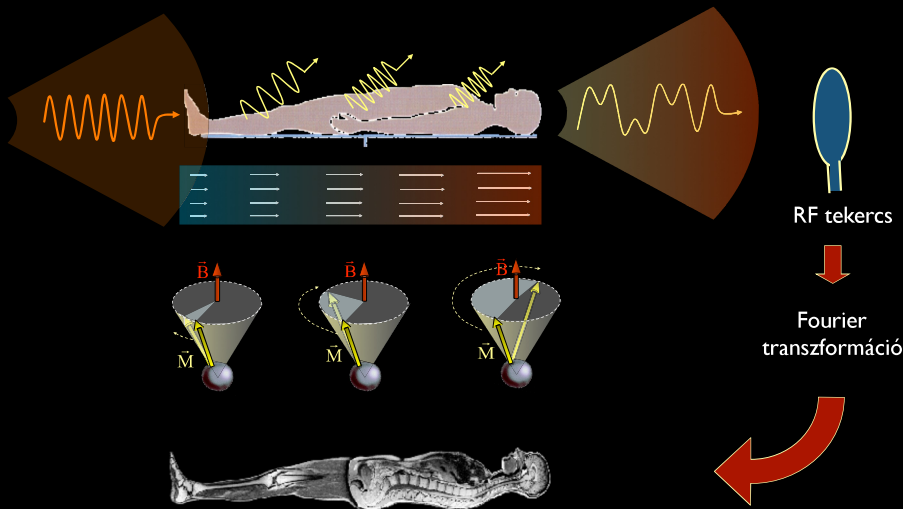
Erwin Hahn, 1949



# MRI: az emberi test makroszkópikus mágnesezettségét hozza létre

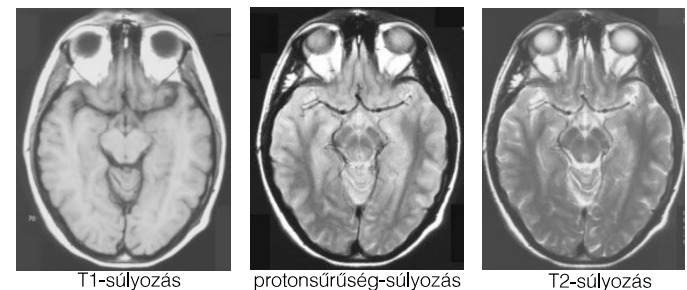
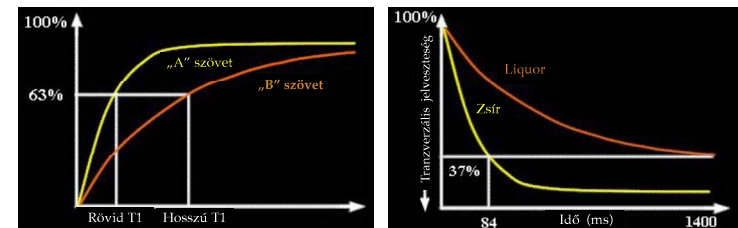


# MRI: térbeli kódolás és képrekonstrukció a precesszió térfüggő frekvenciaváltozásán alapul



# MRI képképzés

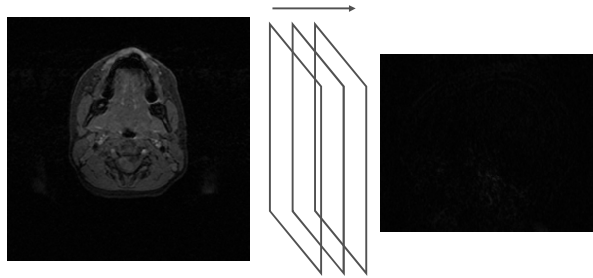
Színkontraszt اسپنسűrűség és relaxációs idők alapján



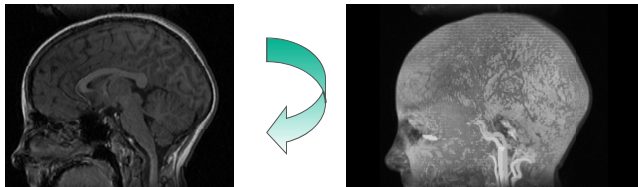


# MRI: 3D információ

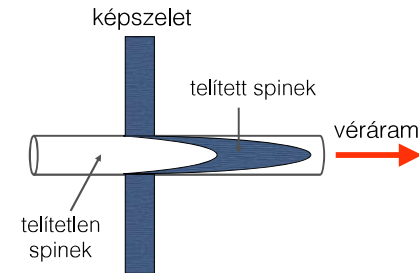
Újraszeletelés  
merőleges síkban



Térbeli projekció  
(„volume rendering”)



# Az MRI több mint anatómiai képalkotás Non-invazív angiográfia



## MRI mozgókép

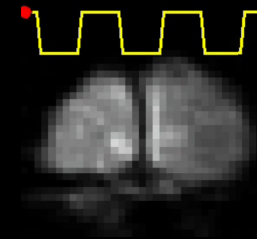
Nagy időfelbontású felvételek alapján



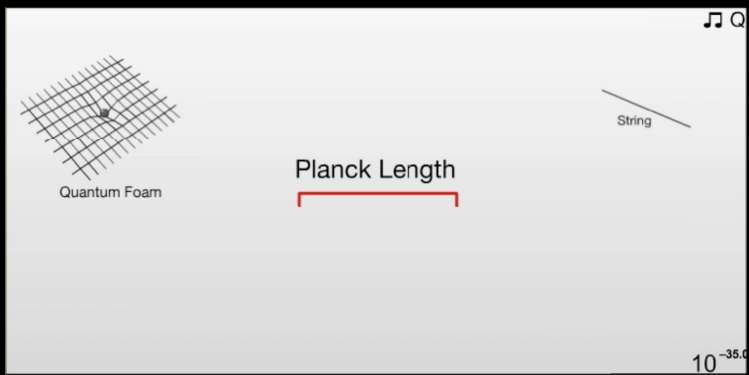
Aortabillentyű nyílása-záródása

## Funkcionális MRI (fMRI)

Élettani folyamattal szinkron felvett  
Nagy időfelbontású képsorozat



Villogó fény hatása a látókéregre



Copy and Michael Huang (<http://howbig.net>)