

脉冲核磁共振与成像

徐若涵*

物理学院 2100011868

本次实验我们探究了脉冲核磁共振与核磁共振成像技术。我们观察了脉冲核磁共振的共振频率和自旋回波现象，使用了 CPMG 序列来测量不同浓度 CuSO_4 样品的横向弛豫时间 T_2 ，并使用 $\pi - \tau - \frac{\pi}{2}$ 序列测量了纵向弛豫时间 T_1 。此后我们进行了不同形状样品的核磁共振成像，并探究了弛豫时间加权成像的技术。

关键词: 脉冲核磁共振，自旋回波，CPMG 序列，核磁共振成像，弛豫时间加权，相位编码

I. 实验背景

核磁共振 (NMR, Nuclear Magnetic Resonance) 是一种基于原子核在磁场中与射频场相互作用的技术，其原理依赖于原子核自旋在特定频率下的共振吸收现象。共振频率和退激的时间尺度与物质种类、结构和环境有关，故可利用核磁共振探测物质的结构。

核磁共振技术早期依赖连续波核磁共振波谱仪 (CW-NMR)，但其灵敏度低且耗时长。随着技术进步，脉冲傅里叶核磁共振仪 (PFT-NMR) 逐渐成为主流。脉冲核磁共振通过施加短时强射频脉冲激发原子核自旋系统，使大量原子核同时进入非平衡态，随后在弛豫过程中释放电磁信号。与传统连续波核磁共振 (CW-NMR) 相比，脉冲法通过傅里叶变换对接收的信号进行快速解析，不仅能高效获取频谱信息，还可精确测量横向弛豫时间 (T_2) 和纵向弛豫时间 (T_1)，从而显著提升检测灵敏度和时间效率。这一技术突破使得核磁共振从单纯的化学分析工具拓展至动态生物过程研究领域。

核磁共振成像 (MRI, Magnetic Resonance Imaging) 的实现则进一步结合了梯度磁场与空间编码技术。例如，1973 年 P.C. Lauterbur 提出的投影重建法，利用梯度磁场对氢质子信号进行空间定位，首次实现了水分子分布的二维成像。此后，Peter Mansfield 开发的快速平面成像技术大幅缩短扫描时间，使得人体器官与组织的实时可视化成为可能。在医学应用中，不同组织的 T_1 和 T_2 差异成为图像对比度的来源。例如，肿瘤因含水量高导致 T_2 弛豫时间延长，在 T_2 加权成像中呈现高信号，从而为疾病诊断提供依据。

本实验即利用脉冲核磁共振仪器，测定了不同浓度 CuSO_4 溶液的弛豫时间 (T_1 和 T_2)，并进一步探究了结合梯度磁场进行空间编码，对几种不同样品实现了 T_2 加权的样品成像。

II. 实验原理

A. 脉冲核磁共振

量子力学的一个经典结果是一个具有磁矩的原子核在外加静磁场 B_0 中会发生 **Lamor 进动**，其频率为 **Lamor 频率**：

$$\omega_0 = \gamma B_0$$

*2100011868@stu.pku.edu.cn

其中 γ 是核的旋磁比, B_0 是外加静磁场的强度。这时如果在静磁场之外施加一个射频脉冲 $B_1(t)$, 其频率 ω 接近 Lamor 频率, 则核自旋会发生共振吸收 (费米黄金定则), 进而使得核自旋的取向发生翻转。这个问题可以由基于经典力学的半唯象的 Bloch 方程描述。不过, 对于单个 1/2 自旋, 其实可以直接用量子力学来描述 (Rabi 共振): 考虑一个初始处于平衡 (自旋朝向上) 的态, 严格求解薛定谔方程, 得到翻转概率的 Rabi 解,

$$P(t) = \omega_r^2 \frac{\sin^2\left(\sqrt{\omega_r^2 + \delta\omega^2} \frac{t}{2}\right)}{\omega_r^2 + \delta\omega^2}$$

其中 $\omega_r = \gamma B_1$ 为 **Rabi 频率**, 失谐频率 $\delta\omega = \omega - \omega_0$ 。容易发现当射频场频率等于 Lamor 频率时, 翻转概率最大, 此时翻转频率就是 ω_r 。这样, 我们可以通过调节射频脉冲的强度和持续时间来控制核自旋翻转的角度 ($\theta = \omega_r \tau = \gamma B_1 \tau$), 这就是 PFT-NMR 的核心原理。

原子核在进动的同时, 还会因为与环境相互作用导致发生弛豫, 会缓慢地回到平衡态。弛豫的过程分为两种: 纵向弛豫和横向弛豫。纵向弛豫是指核自旋在 z 轴方向上恢复到平衡态的过程, 横向弛豫是指核自旋在 $x - y$ 平面上恢复到平衡态的过程。纵向弛豫时间 T_1 和横向弛豫时间 T_2 分别定义为弛豫过程的时间常数。 T_1 和 T_2 的物理意义是核自旋在平衡态附近的涨落时间尺度, 其大小与物质的性质有关。 T_1 和 T_2 的测量方法有很多种, 例如可以直接观测其自由感应衰减信号 (free inductive decay, FID) 来获取。

实际测量 T_2 最常用的方法是自旋回波 (spin echo, SE) 技术和 CPMG 脉冲序列等。SE 技术的原理是利用 $\frac{\pi}{2} - \tau - \pi$ 脉冲序列, 先将自旋翻转到 $x - y$ 平面上, 然后等待时间 τ , 在此期间自旋会因为局部磁场的不同而发生相位差, 导致信号衰减。然后施加一个 π 脉冲, 将自旋翻转到 $-x - y$ 平面上, 此时自旋的相位差会被反转, 从而在 τ 时刻重新聚焦, 产生一个回波信号。这个回波信号的强度与横向弛豫时间 T_2 有关。CPMG 脉冲序列则是将 SE 技术进行多次重复, 形成一个脉冲序列, 可以更好地测量 T_2 。

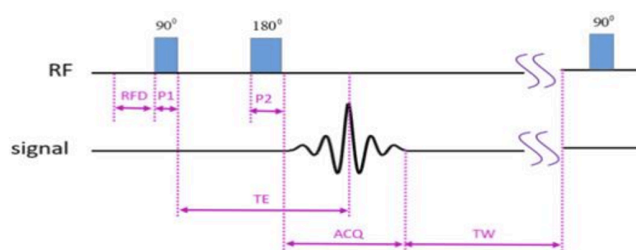


图 1 SE 测量 T_2 原理示意图

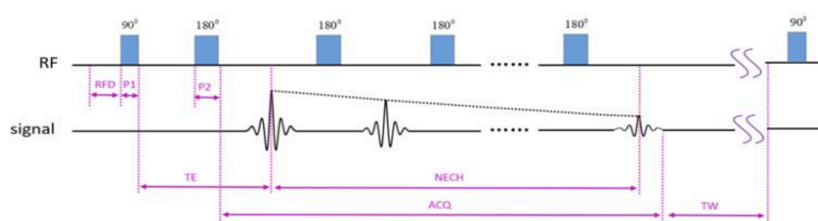


图 2 CPMG 序列测量 T_2 原理示意图

测量 T_1 的常用方法是 $\pi - \tau - \frac{\pi}{2}$ 的反转回复 (inversion recovery, IR) 脉冲序列。该序列的原理是先施加一个 π 脉冲将自旋翻转到 $-z$ 方向, 然后等待时间 τ , 在此期间自旋会因为局部磁场的不同而发生相位差, 导致信号衰减。然后施加一个 $\frac{\pi}{2}$ 脉冲, 将自旋翻转到 $x - y$ 平面上, 读取得到此时的信号。通过调节 τ 的时间, 可以得到不同 τ 下的信号强度, 从而拟合出 T_1 的值。

B. 核磁共振成像

核磁共振成像的基本原理是通过施加梯度磁场和射频脉冲，对样品中的核自旋进行空间编码，从而获得样品的空间分布信息。MRI 的成像过程可以分为以下几个步骤：

1. z 方向通过施加梯度场 $B_z(z)$ 对样品进行空间编码，使得不同位置的核自旋具有不同的 Lamor 频率。这样，在施加 $\frac{\pi}{2}$ 射频脉冲时，只有特定 z 处的核自旋会发生共振吸收，产生信号，从而实现了 z 方向选层效果。完成后撤去梯度场和射频脉冲。
2. y 方向通过梯度场实现相位编码。施加 $\frac{\pi}{2}$ 射频脉冲后，选中的层中的核磁矩处于 $x-y$ 平面上，此时再施加一个 y 方向不均匀的梯度场 $B_z(y) = y * G_y$ ，持续时间 t_y ，由于进动速度 $\omega_y = \gamma B_z(y)$ 不同，会使得不同 y 位置的核自旋具有不同的相位差 $\Phi_y = \exp(i\omega_y t_y)$ 。通过多次调节不同的 B_y ，可以获得 y 方向的空间编码信息。
3. 再施加 x 方向不均匀的梯度场 $B_z(x) = x * G_x$ ，持续时间 t_x ，直接测量 M_{xy} 信号。由于不同位置的核自旋具有不同的 Lamor 频率 $\omega_x = \gamma B_z(x)$ ，因此可以通过傅里叶变换将信号转换为空间分布信息。

考虑弛豫过程，最终得到的信号为

$$S(t_x, t_y) = \int dx dy e^{i(\omega_x t_x + \omega_y t_y)} \rho(x, y) e^{-\frac{t}{T_2}}$$

对它做傅里叶变换，就得到 T_2 加权的 $\rho(x, y)$ 成像。

III. 实验内容与结果分析

本实验使用的核磁仪器为自动化程度较高的 EDUMR20-015V-I 核磁共振实验仪。由于本实验中的磁体对温度极为敏感，实验前需要开机预热 90 min，直到磁体温度稳定到 32°C 左右，波动小于 0.01°C。此后开启仪器进行数据采集。

A. 采集 FID 信号

使用的样品为 CuSO_4 溶液，浓度为 0.5%。将样品放入仪器，按照操作手册进行调节，测得中心频率 $f_0 = 633789.04 \text{ Hz}$ 。扫描得到 $\frac{\pi}{2}$ 脉冲宽度为 $P_1 = 19 \mu\text{s}$ ， π 脉冲宽度为 $P_2 = 38 \mu\text{s}$ 。在此参数下测得的 FID 信号如下：

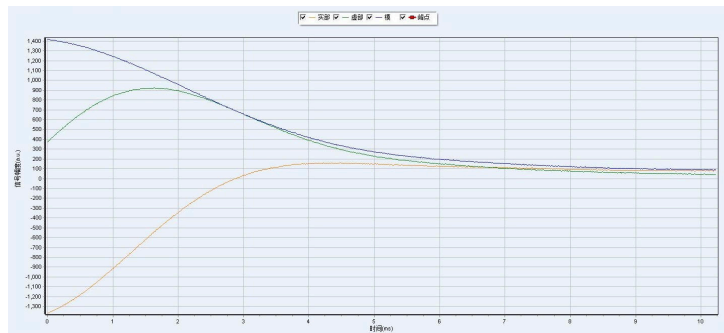


图 3 FID 信号

由于没有震荡行为，可知中心频率比较准确。

B. 观察自旋回波现象

使用 $\frac{\pi}{2} - \tau - \pi$ 脉冲序列, 调节 $2\tau = 10ms$, 测得回波信号如下:

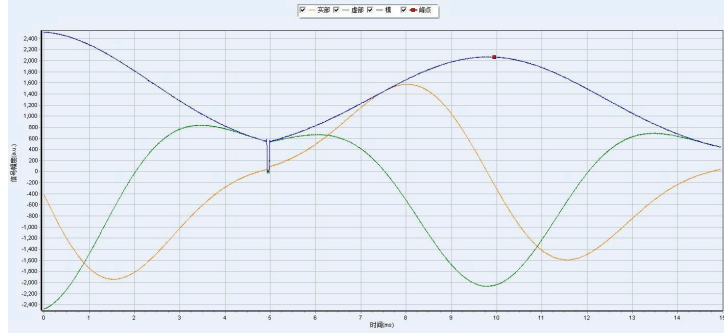


图 4 自旋回波信号

可以看到回波信号虽然有明显衰减, 但是还是比 FID 信号强得多。这是因为 $T_2 > T_2^*$. 接下来, 我们利用 CPMG 序列来测量不同样品的 T_2 .

C. 利用 CPMG 序列测量 T_2

这里使用的样品为不同浓度的 CuSO_4 溶液, 浓度分别为 0.5%、1%、2%。使用 CPMG 序列, 调节回波间隔(采用 $\tau = 2.2ms$)和等待时间使得波形较好, 无毛刺. 测得不同浓度下的回波峰值信号如下:

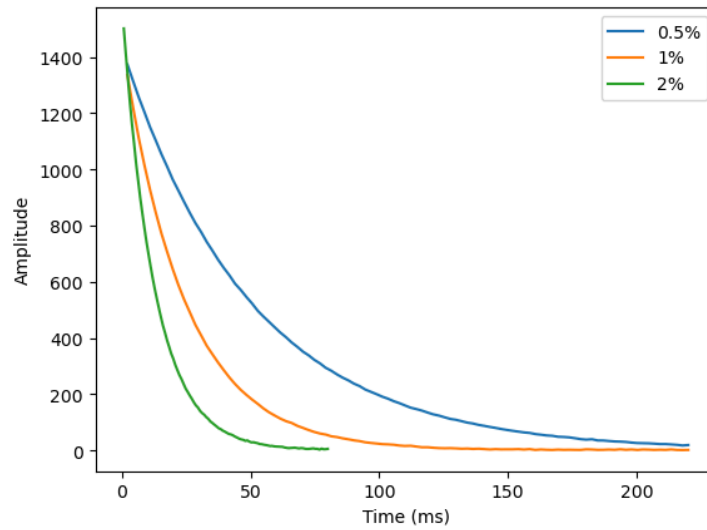


图 5 不同浓度下的 CPMG 信号

可见随着浓度增加, 信号衰减速度增加。我们假设信号衰减符合指数衰减规律 $S(t) = S_0 e^{-\frac{t}{T_2}}$, 因此采取对数作图, 并采取线性拟合(由于衰减后期非常接近 0 而误差较大, 故拟合时只取了前 20 个数据点, 不考虑后期数据), 得到不同浓度下的 T_2 值, 结果如表 1 和图 6 所示。由拟合结果可知, 数据呈现非常良好的线性关系, 这说明指数衰减的模型比较符合实际。此外, 浓度越大, T_2 值越小, 这与我们预期一致。进一步地, 浓度增加一倍时弛豫时间近似缩短一半。

这个结果可以这样理解: 横向弛豫过程本质上是一种退相干过程, 弛豫时间依赖于核自旋与环境作用的强度, 浓度增加意味着顺磁性离子增多, 分子间的相互作用增强, 从而加速了横向弛豫的过程。

表 1 使用 CPMG 信号拟合求 T_2

浓度	斜率/ ms^{-1}	截距	T_2/ms	r value
0.5%	-0.019995	7.269114	50.0115	-0.999985
1%	-0.041299	7.287192	24.2133	-0.999990
2%	-0.079819	7.376999	12.5281	-0.999990

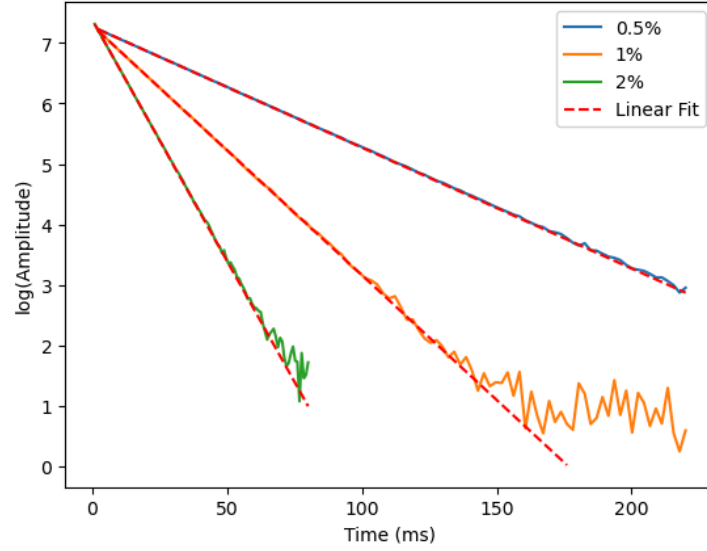


图 6 不同浓度下的 CPMG 信号对数作图及线性拟合

D. 利用 IR 序列测量 T_1

使用 $\pi - \tau - \frac{\pi}{2}$ 的 IR 脉冲序列，调节 τ ，类似地读取信号如下图所示：

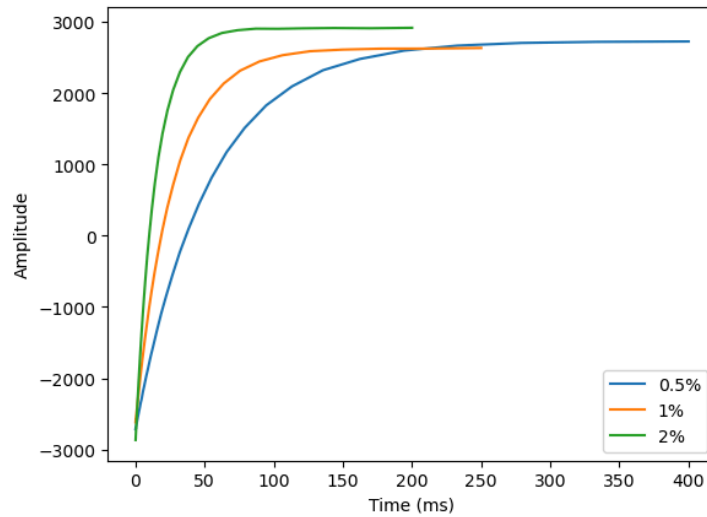


图 7 不同浓度下的 IR 信号

这里可以发现不同浓度的平衡极化量略有不同，可能是由于 Cu^{2+} 的磁矩耦合引起的。所以这里的数据处理应该为：取每一组数据的最大值（加上一个小量以防止数值溢出）作为平衡极化，然后扣除平衡极化后取对数作图，并作线性拟合(和上面一样，这里只取了前 20 组数据拟合)：

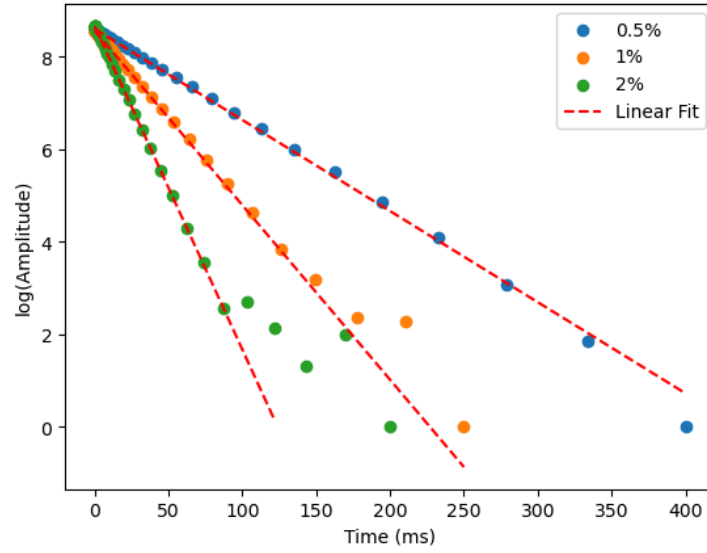


图 8 不同浓度下的 IR 信号对数作图及线性拟合

表 2 使用 IR 信号拟合求 T_1

浓度	斜率/ ms^{-1}	截距	T_1/ms	r value
0.5%	-0.019691	50.7845	8.6027	-0.9984
1%	-0.037730	26.5038	8.5673	-0.9992
2%	-0.069911	14.3037	8.6665	-0.9998

从测量结果可以看到, T_1 的大小同样随着浓度增大而减小, 与 T_2 类似。此外, T_1 总是大于 T_2 , 这是显然合理的, 因为总角动量要求 $M_z = M_0$ 时必须有 $M_{xy} = 0$, 但另一方面 $x - y$ 平面的自旋如果相位失配可以有 $M_z \neq M_0$ 但 $M_{xy} = 0$ 的情况出现, 所以 T_2 的弛豫时间应该小于 T_1 的弛豫时间。

E. 核磁共振成像

这里使用自旋回波法对 0.5%CuSO₄溶液进行成像。按照软件说明书的指示, 先进行 Prescan, 再用 Scout 粗扫描, 软件能够自动校准中心频率, 其余参数保持默认。完成后, 将样品中插入三角形和六边形有机玻璃棱柱成像。需要注意的是, 如果样品弛豫时间较短, 可能会导致图像信噪比很低, 这时需要适当增加采样平均次数 (默认为 6 次), 但是采样时间也会大大增加, 因此必须做一个权衡。

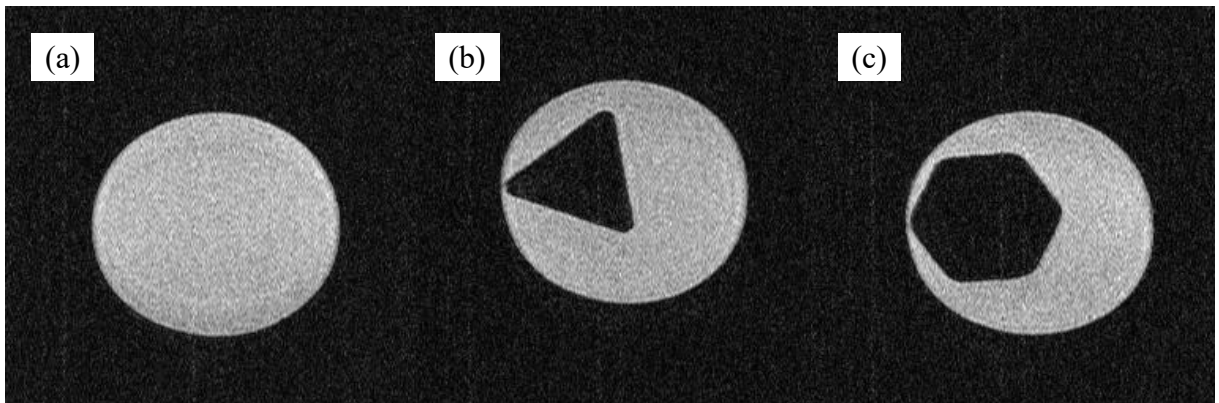


图 9 不同样品的 MRI 成像: (a)0.5%CuSO₄溶液, (b)插入三角形有机玻璃棱柱, (c)插入六边形棱柱

图 9 展示了这几种样品的成像结果。由于有机玻璃为固体，其核自旋弛豫时间较短，因此在图像上显示为黑色，这是一种 T_2 加权效果。可以看到，三角形和六边形都有清晰的边角，说明成像的空间分辨率较为良好。此外，图片的信噪比尚可接受，说明取 6 次平均的做法是合理的。

接下来，我们通过同时对不同浓度的样品成像来更清楚地展示 T_2 加权成像的效果。我们将装有 0.5% CuSO_4 的小试管分别插入含有 1% 和 2% CuSO_4 的试管中，进行成像。由于不同浓度的样品弛豫时间不同，因此在图像上显示的亮度也不同。我们可以通过调节成像参数来观察不同浓度样品的成像效果。为了获得充分的信噪比，对 1% 和 2% CuSO_4 的样品我们分别取了 12 次和 24 次平均。成像结果如下：

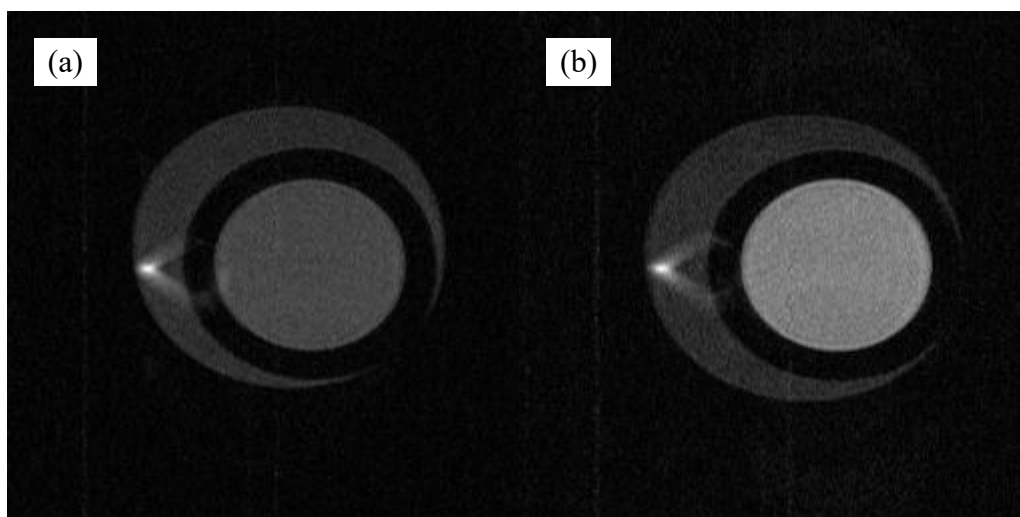


图 10 不同浓度下的成像结果。

(a)为 0.5% 溶液插入 1% 溶液，(b)为 0.5% 溶液插入 2% 溶液

可以看到，装有 0.5% CuSO_4 的试管在图像上显示为亮色，而装有 1% 和 2% CuSO_4 的试管则显示为暗色（其中 2% 样品最暗）。这正是因为不同浓度的样品弛豫时间不同，导致它们在成像时的信号强度不同，从而实现了 T_2 加权成像。如果要通过普通的光学成像来观察这些样品（尤其是无色溶液），将会很难分辨出它们的浓度差异。而通过核磁共振成像，我们可以清晰地看到不同浓度样品的成像效果，这正是核磁共振成像技术的优势所在。

在这两张图中我们还可以看到一个亮斑，这应该这是由于试管反射聚焦射频辐射，导致局部射频场强增加的原因。如果想要消除这个亮斑，理论上可以通过对齐并旋转两个试管来实现，但我们没有做详细的探究。

IV. 实验总结

本次实验我们探究了脉冲核磁共振与核磁共振成像技术。我们观察了脉冲核磁共振的共振频率和自旋回波现象，使用了 CPMG 序列来测量不同浓度 CuSO_4 样品的横向弛豫时间 T_2 ，并使用 IR 序列测量了纵向弛豫时间 T_1 ，探讨了两种弛豫时间的大小关系及其随浓度的变化。此后我们进行了不同形状样品的核磁共振成像，探究了成像的分辨率，并探究了弛豫时间加权成像的技术。

通过本次实验，我们对脉冲核磁共振的基本原理和应用有了更深入的理解。核磁共振成像技术能够在不损伤样品、无电离辐射的情况下，对其内部结构进行观察，且能获得一些普通光谱学难以获得的性质（如弛豫时间、化学位移等），的确是一种重要的工具。

V. 思考题

A. 装着样品的圆形试管的一维剖面图应该是什么样子的曲线?

理论上实空间 $x-y$ 剖面应该是圆形均匀分布的。如果考虑其傅里叶变换 $S(t_x, t_y)$, 将会得到一个类似 Airy disk 的函数乘以一个指数衰减因子:

$$\int_{r < r_0} dx dy \exp(i(x\gamma G_x t_x + y\gamma G_y t_y)) e^{-\alpha t} = 2\pi r_0 \frac{J_1\left(\gamma r_0 \sqrt{(G_x t_x)^2 + (G_y t_y)^2}\right)}{\gamma \sqrt{(G_x t_x)^2 + (G_y t_y)^2}} e^{-\alpha t}$$

这是一个震荡衰减的函数。

B. 实空间图像的空间分辨率由什么因素决定?

主要的影响因素: 磁场梯度 (影响空间编码的准确性, 直接决定了分辨率), 采样数量 (影响傅里叶变换的数据点数量, 直接影响分辨率), 成像时间 (影响信噪比, 会间接影响分辨率), 样品的性质 (影响弛豫时间和信号强度, 进而影响信噪比)。

C. 如何实现被 T_2 加权的核密度 $\rho(x, y, T_2)$?

实际上, 我们实现的 MRI 已经是被 T_2 加权的成像了。我们可以通过调节成像参数来实现不同的 T_2 加权成像。例如, 调节回波间隔和等待时间, 可以改变成像的对比度和亮度, 从而实现不同的 T_2 加权成像。