

Nr. 49

## **Messung von Diffusionskonstanten mittels gepulster Kernspinresonanz**

Sara Krieg  
sara.krieg@udo.edu

Marek Karzel  
marek.karzel@udo.edu

Durchführung: 07.12.2020

Abgabe: ??

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Theorie</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Durchführung</b>	<b>3</b>
<b>3</b>	<b>Auswertung</b>	<b>3</b>
3.1	Bestimmung der Spin-Gitter Relaxationszeit . . . . .	3
3.2	Bestimmung der Spin-Spin Relaxationszeit . . . . .	4
3.2.1	Meiboom-Gill-Methode . . . . .	4
3.2.2	Carr-Purcell-Methode . . . . .	5
3.3	Bestimmung der Magnetfeldgradientenstärke . . . . .	5
3.4	Bestimmung der Diffusionskonstante . . . . .	6
3.5	Bestimmung des Molekülradius . . . . .	7
<b>4</b>	<b>Diskussion</b>	<b>7</b>

## 1 Theorie

$$M_z(\tau) = M_0 \left( 1 - 2 \exp \left( -\frac{\tau}{T_1} \right) \right) \quad (1)$$

$$M_{x,y}(\tau) = M_0 \exp \left( -\frac{2\tau}{T_2} \right) \quad (2)$$

$$M_{x,y}(2\tau) = M_0 \exp \left( -\frac{2\tau}{T_2} \right) \exp \left( -\frac{2}{3} D \gamma^2 G^2 \tau^3 \right) \quad (3)$$

## 2 Durchführung

## 3 Auswertung

Zunächst wird eine Justage für eine möglichst große Amplitude des FID und eine Minimierung des Imaginärteils durchgeführt. Diese führt zu folgenden Werten

$$\omega_L = 0 \text{ MHz}, \quad (4)$$

$$\phi = 0^\circ \quad (5)$$

für die Larmorfrequenz  $\omega_L$  und die Phase  $\phi$ . Die Pulsängen des  $90^\circ$  und des  $180^\circ$  ergeben sich zu

$$\Delta t_{90} = 0 \mu\text{s}, \quad (6)$$

$$\Delta t_{180} = 0 \mu\text{s}. \quad (7)$$

Die Temperaturmessungen zu Beginn der Messungen und als Abschluss dieser, ergeben als Temperaturen innerhalb des Magneten:

$$T_{\text{Beginn}} = 0^\circ\text{C}, \quad (8)$$

$$T_{\text{Ende}} = 0^\circ\text{C}. \quad (9)$$

### 3.1 Bestimmung der Spin-Gitter Relaxationszeit

In diesem Abschnitt soll die Spin-Gitter Relaxationszeit  $T_1$  bestimmt werden. Hierzu wurde die Spannungsamplitude der induzierten Spannung für verschiedene Pulsabstände  $\tau$  gemessen. Die Messwerte sind in Tabelle 1 zu finden.

Diese Messwerte wurden graphisch dargestellt in Abbildung ... . Mit der Gleichung (1) wird eine Ausgleichsrechnung anhand von

**Tabelle 1:** Messwerte zur Bestimmung der Relaxationszeit  $T_1$ . Es wurde die Spannungsamplitude  $U$  für verschiedene Pulsabstände  $\tau$  gemessen.

$\tau / \text{ms}$	$U / \text{V}$	$\tau / \text{V}$	$U / \text{V}$
0	0	0	0
0	0	0	0
0	0	0	0
0	0	0	0
0	0	0	0
0	0	0	0
0	0	0	0
0	0	0	0
0	0	0	0
0	0	0	0
0	0	0	0

$$U(\tau) = U_0 \left( 1 - 2 \exp \left( -\frac{\tau}{T_1} \right) \right) + U_1$$

durchgeführt. Dabei dient  $U_1$  zum Ausgleich der Nulllinie. Die Parameter der Ausgleichsrechnung ergeben sich mittels *python* zu:

$$U_0 = (0 \pm 0) \text{ V}, \quad (10)$$

$$T_1 = (0 \pm 0) \text{ ms}, \quad (11)$$

$$U_1 = (0 \pm 0) \text{ V}. \quad (12)$$

### 3.2 Bestimmung der Spin-Spin Relaxationszeit

Die Bestimmung der Relaxationszeit  $T_2$  erfolgt mithilfe der Meiboom-Gill-Methode. Anschließend wird die Carr-Purcell-Methode betrachtet, die allerdings kein Ergebnis für  $T_2$  liefern kann.

#### 3.2.1 Meiboom-Gill-Methode

Das von der Meiboom-Gill Methode gelieferte Signal ist in Abbildung ... zu sehen. Mithilfe der Funktion `scipy.signal.find_peaks`[4] ZITIEREN werden die Peaks mit positiver Spannungsamplitude  $U$  aus dem Signal herausgefiltert. Die Bestimmung der Peaks erfolgt dabei über die CSV-Datei des Signals. Die so erhaltenen Messwerte sind in Tabelle 2 aufgeführt und in Abbildung ... graphisch dargestellt.

Mit der Gleichung (2) wird eine Ausgleichsrechnung anhand von

$$U(t) = U_0 \exp \left( -\frac{t}{T_2} \right) + U_2$$

**Tabelle 2:** Herausgefilterte Peaks des Signals zur Bestimmung von  $T_2$ .

$t / \text{second}$	$U / \text{V}$	$t / \text{s}$	$U / \text{V}$
0	0	0	0
0	0	0	0
0	0	0	0
0	0	0	0
0	0	0	0
0	0	0	0
0	0	0	0
0	0	0	0
0	0	0	0
0	0	0	0

durchgeführt, wobei  $t = 2\tau$  gilt und  $U_2$  die Verschiebung der Nulllinie ist. Die Parameter der Ausgleichsrechnung ergeben sich mittels *python* zu:

$$U_0 = (0 \pm 0) \text{ V}, \quad (13)$$

$$T_2 = (0 \pm 0) \text{ s}, \quad (14)$$

$$U_2 = (0 \pm 0) \text{ V}. \quad (15)$$

### 3.2.2 Carr-Purcell-Methode

Um genaue Ergebnisse zu erhalten, ist eine exakte Einstellung der Pulslänge für den  $180^\circ$ -Puls notwendig. Dies ist in der Praxis nicht umsetzbar und würde zu großen Fehlern führen. Es ergibt sich aus dieser Methode demnach lediglich ein Signal, das in Abbildung .. zu sehen ist.  $T_2$  kann daraus nicht bestimmt werden.

### 3.3 Bestimmung der Magnetfeldgradientenstärke

Zur Bestimmung der Gradientenstärke  $G$  wird das gut sichtbare Echo in Abbildung ... fouriertransformiert.

Die Fouriertransformation erfolgt mittels *numpy*[3] und ergibt ein Spektrum, welches in Abbildung ... zu sehen ist.

Mit dem Durchmesser des Proberöhrchens  $d = 4,2 \text{ mm}$ , dem gyromagnetischem Verhältnis für Protonen  $\gamma = 2,67 \cdot 10^8 \text{ T/s}$  und dem Durchmesser des Halbkreises im Spektrum des Echos  $d_f \approx 0 \text{ Hz}$  ergibt sich  $G$  zu

$$G = \frac{2\pi d_f}{\gamma d} = 0 \frac{\text{T}}{\text{m}}.$$

### 3.4 Bestimmung der Diffusionskonstante

Zur Bestimmung der Diffusionskonstante  $D$  werden die gemessenen Spannungsamplituden  $U$  für verschiedene Pulsabstände  $\tau$  aus Tabelle... in Abbildung ... graphisch dargestellt.

**Tabelle 3:** Gemessene Spannungsamplituden  $U(\tau)$  zur Bestimmung der Diffusionskonstante  $D$ .

$\tau / \text{ms}$	$U / \text{V}$	$\tau / \text{ms}$	$U / \text{V}$
0	0	0	0
0	0	0	0
0	0	0	0
0	0	0	0
0	0	0	0
0	0	0	0
0	0	0	0
0	0	0	0
0	0	0	0
0	0	0	0

Mit der Gleichung (3) wird eine Ausgleichsrechnung anhand von

$$U(2\tau) = U_0 \exp\left(-\frac{2\tau}{T_2}\right) \exp\left(-\frac{2}{3}D\gamma^2 G^2 \tau^3\right) + U_3$$

durchgeführt.

Die Parameter der Ausgleichsrechnung ergeben sich mittels *python* zu:

$$U_0 = (0 \pm 0) \text{ V}, \quad (16)$$

$$D = (0 \pm 0) \text{ m}^2/\text{s}, \quad (17)$$

$$U_3 = (0 \pm 0) \text{ V}. \quad (18)$$

Um die  $\tau^3$ -Abhängigkeit zu überprüfen kann noch eine lineare Regression mit

$$\ln(U(\tau)) - \frac{2\tau}{T_2} = a\tau^3 + b \quad (19)$$

durchgeführt werden. Dies ist in Abbildung ... zu sehen. Die Regressionsparameter ergeben sich zu

$$a = (0 \pm 0) / \text{s}^3,$$

$$b = 0 \pm 0,$$

womit die  $\tau^3$ -Abhängigkeit in etwa bestätigt werden kann...

### 3.5 Bestimmung des Molekylradius

Der Molekylradius kann mithilfe der Stokes-Formel bestimmt werden:

$$D = \frac{k_B T}{6\pi\eta r} \Leftrightarrow r = \frac{k_B T}{6\pi\eta D}.$$

Mit  $T = 300\text{ K}$  und einer Viskosität  $\eta = 890,2\text{ }\mu\text{Pa s}$ [1] ergibt sich ein Molekylradius von

$$r = (0 \pm 0)\text{ m.} \quad (20)$$

Zur Berechnung eines Vergleichswertes wird angenommen, dass die Moleküle in einer hexagonal dichtesten Kugelpackung angeordnet sind. Die Raumfüllung beträgt dort 74 %. Mit einer Molekülmasse von  $m = \frac{M_{\text{mol}}}{N_A} = 2,99 \cdot 10^{-26}\text{ kg}$  und einer Dichte von  $\rho = 995\text{ kg/m}^3$ [2] ergibt sich

$$r_{\text{hcp}} = \left( \frac{m \cdot 0.74}{\frac{4}{3}\pi\rho} \right)^{\frac{1}{3}} = 1,74 \cdot 10^{-10}\text{ m.} \quad (21)$$

## 4 Diskussion

### Literatur

- [1] Mordechai Sokolov und William A. Wakeham Joseph Kestin. „Viscosity of liquid water in range -8°C to 150°C“. In: *Journal of Physical and Chemical Reference Data* 7.3 (1978). DOI: 10.1063/1.555581.
- [2] Natinal Library of Medicine. URL: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Water#datasheet=LCSS&section=Solubility>.
- [3] Travis E. Oliphant. „NumPy: Python for Scientific Computing“. In: *Computing in Science and Engineering* 9.3 (2007). URL: <https://www.numpy.org>.
- [4] Pauli Virtanen u. a. „SciPy 1.0: Fundamental Algorithms for Scientific Computing in Python“. In: *Nature Methods* 17 (2020), S. 261–272. DOI: 10.1038/s41592-019-0686-2.