Ludwig-Maximilians-Universität
München

Fortgeschrittenenpraktikum in
Experimentalphysik
P3B

NMR-B: Gepulste Kernspinresonanz
Vorbereitung

Horst Fenske und Jan-Philipp Christ

München, den 17. August 2022

Inhaltsverzeichnis

1 Stichworte zur Vorbereitung

- Blochkugel: Ein beliebiger Zustand eines Zwei-Niveau-Systems kann dargestellt werden durch eine 2×2-Dichtematrix der Form

  $$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \tilde{\rho}_{12} \\ \tilde{\rho}_{21} & \rho_{22} \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^2$$

  Diese Matrix ist abhängig von drei voneinander unabhängigen reellen Parametern, da einerseits die Normierungsbedingung $\rho_{11} + \rho_{22} = 1$ und andererseits $\tilde{\rho}_{12} = \tilde{\rho}_{21}^*$ gilt.
  Deshalb ist eine Identifikation/ Umparametrisierung dieser Matrix zu einem reellen Vektor mit drei Komponenten zulässig. Man wählt

  $$\begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \cdot \mathrm{Re}\,(\tilde{\rho}_{12}) \\ 2 \cdot \mathrm{Im}\,(\tilde{\rho}_{12}) \\ \rho_{22} - \rho_{11} \end{pmatrix}$$

  und stellt fest, dass reine Zustände des Zwei-Niveau-Systems in dieser Parametrisierung auf der Oberfläche der Einheitskugel, der Blochkugel, liegen.

- Gyromagnetisches Verhältnis: Das Vorhandensein eines Kernspins $\vec{I}$ führt zu einem magnetischen Moment $\vec{\mu}$. Die können über das gyromagnetische Verhältnis γ in Verbindung gebracht werden:

  $$\vec{\mu} = \gamma \vec{I}$$

- Die Energieniveaus eines Systems mit Spin $\vec{S}$ spalten beim Anlegen eines Magnetfelds auf. Die Energiedifferenz zwischen benachbarten Niveaus ist dabei proportional zur Stärke B_0 des angelegten Magnetfeldes.

- Energieniveaubesetzung (Boltzmann-Statistik): Die Energieniveaus eines Zwei-Niveau-Systems (in unserem Fall: Spin-$\frac{1}{2}$-System) sind um $\Delta E = \hbar\omega_0 := \hbar\gamma B_0$ getrennt, und für die Besetzungszahlen N_1, N_2 des Zustands 1 bzw. 2 (mit $N_1 + N_2 = \text{const.}$) gilt:

  $$\frac{N_2}{N_1} = e^{\frac{\hbar\omega_0}{k_B T}}$$

  Für hohe Temperaturen strebt also das Zwei-Niveau-System gegen eine Gleichbesetzung der beiden Zustände.

- Die Zeitentwicklung eines Zustands $|\psi\rangle = c_1|\downarrow\rangle + c_2|\uparrow\rangle$ ist gegeben durch:

  $$|\psi(t)\rangle = c_1|\downarrow\rangle + e^{i\omega_0 t} c_2|\uparrow\rangle$$

  Anschaulich gewinnt dies durch Visualisierung des zu $|\psi(t)\rangle$ korrespondierenden Bloch-Vektors Bedeutung, der um die w-Achse präzediert mit Präzessionsfrequenz ω_0. Die Richtung des Blochvektors kann dabei mit der Richtung der Magnetisierung identifiziert werden.

- $\pi/\frac{\pi}{2}-$Puls: Es handelt sich bei beiden um hochfrequente, möglichst nahresonante (Frequenz $\approx \omega_0$) Pulse. Die Pulsdauer des $\pi-$Pulses ist so gewählt ist, dass $|\uparrow\rangle$ zu $|\downarrow\rangle$ und $|\downarrow\rangle$ zu $|\uparrow\rangle$ übergeht, die des $\frac{\pi}{2}-$Pulses ist so gewählt, dass $|\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\rangle$ beide in einen Überlagerungszustand mit gleicher Besetzungswahrscheinlichkeit (in der Äquatorialebene der Blochkugel) übergehen .

- 1D-Bildgebung über Fourier-Transformation: Dabei handelt es sich um ein Verfahren, um ausgehend vom empfangenen Signal Rückschlüsse auf die Position (und insbesondere Dichte) der Protonen in einem Material zu ziehen. Es wird ein linearer Magnetfeldgradient angelegt, der im Vorfeld vermessen wird, sodass ein bijektiver Zusammenhang zwischen Magnetfeld und Position (entlang des Gradienten) besteht. Fouriertransformiert man das Signal, so bekommt man wegen der Abhängigkeit der Larmor-Frequenz vom Magnetfeld für unterschiedliche Orte unterschiedliche Frequenzen, und kann somit aus dem Frequenzspektrum auf die Protonenverteilung in einem Material schließen.

2 Aufgaben im Text

- Abschätzugng von $\frac{N_2}{N_1}$:
  Mit Gleichung (7) aus dem Skript und $\omega_0 = \gamma B$ folgt sofort:

  $$\frac{N_2}{N_1} = e^{\frac{\hbar\omega_0}{k_B T}} \approx 1.000003405 \Rightarrow N_1 \approx N_2$$

- Lösen der Differentialgleichung (10) mit neuen Randbedingungen:
  Die Lösung muss erfüllen: $M(t=0) = -M_z^{\max}$ und $\lim_{t\to\infty} M(t) = +M_z^{\max}$. Aus der ersten Bedingung folgt $-M_z^{\max} = X + Y$, aus der zweiten $M_z^{\max} = X$. Insgesamt also $Y = -2M_z^{\max}$ und $X = M_z^{\max}$, womit die neue Lösung lautet:

  $$M(t) = M_z^{\max}(1 - 2e^{-t/T_1})$$