

# F62 Kernresonanzspektroskopie

## Fortgeschrittenen-Praktikum

Nils Schmitt   Timo Kleinbek

Physikalisches Institut

14.12.2018



UNIVERSITÄT  
HEIDELBERG  
ZUKUNFT  
SEIT 1386

Relaxationszeit  
oooooooooooo

Chemische Verschiebung  
oooo

Bildgebende Verfahren  
oooooooooooo

Diskussion  
oooo

# Inhaltsübersicht

Relaxationszeit

Chemische Verschiebung

Bildgebende Verfahren

Diskussion

Relaxationszeit

●oooooooooooo

Chemische Verschiebung

oooo

Bildgebende Verfahren

oooooooooooo

Diskussion

oooo

# Inhaltsübersicht

Relaxationszeit

Chemische Verschiebung

Bildgebende Verfahren

Diskussion

Relaxationszeit  
○●○○○○○○○○○○

Chemische Verschiebung  
○○○○

Bildgebende Verfahren  
○○○○○○○○○○

Diskussion  
○○○○

## Physikalischer Hintergrund

- Teilchen mit Spin  $S \neq 0$  befindet sich in externem Feld  $\vec{B}_0$
- Energieaufspaltung durch parallele bzw. antiparallele Ausrichtung

$$\Delta E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}_0$$

- Ungleichmäßige Besetzung der anti-/parallelen Zustände  
 $\Rightarrow$  Magnetisierung

$$\vec{M} = \frac{1}{V}(N_+ - N_-)|\vec{\mu}| \vec{e}_z$$

# Physikalischer Hintergrund

- Drehmoment  $\vec{\tau} = \vec{M} \times \vec{B}_0$
- Differentialgleichung  $\frac{d\vec{M}_{\perp}}{dt} = -\gamma \vec{M}_{\perp} \times \vec{B}_0$

## Rotation mit Larmorfrequenz

$$\omega_L = \gamma B_0$$

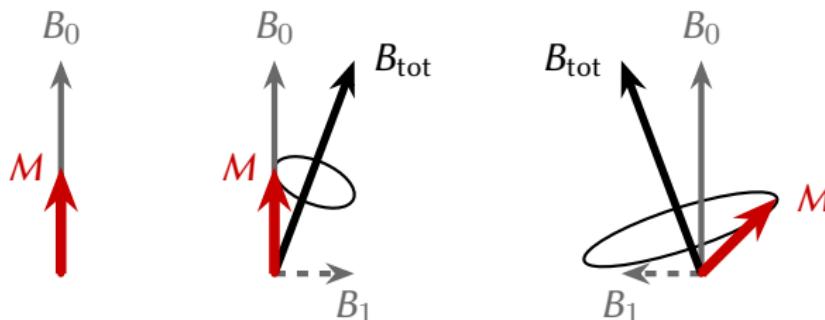


Abbildung: Auslenkung der Magnetisierung

Relaxationszeit

○○○●○○○○○○○○

Chemische Verschiebung

○○○○

Bildgebende Verfahren

○○○○○○○○○○

Diskussion

○○○○

# Physikalischer Hintergrund

- $90^\circ$  und  $180^\circ$  Pulse drehen Magnetisierung
- Messung der Magnetisierung durch Induktion

# Physikalischer Hintergrund

- Zeitliche Änderung der Magnetisierung

$$\frac{\partial \vec{M}}{\partial t} = \frac{\partial \vec{M}_{\text{rot}}}{\partial t} + \gamma \vec{B}_0 \times \vec{M}$$

- Lösungen

$$M_{\parallel}(t) = M_0 \left( 1 - 2 \cdot e^{-\frac{t}{T_1}} \right)$$

$$M_{\perp}(t) = M_0 \cdot e^{-\frac{t}{T_2}}$$

$T_2$ : Spin-Spin Relaxationszeit

$T_1$ : Spin-Gitter Relaxationszeit

Relaxationszeit

oooooooo●oooooooo

Chemische Verschiebung

oooo

Bildgebende Verfahren

oooooooooooo

Diskussion

oooo

## Versuchsaufbau

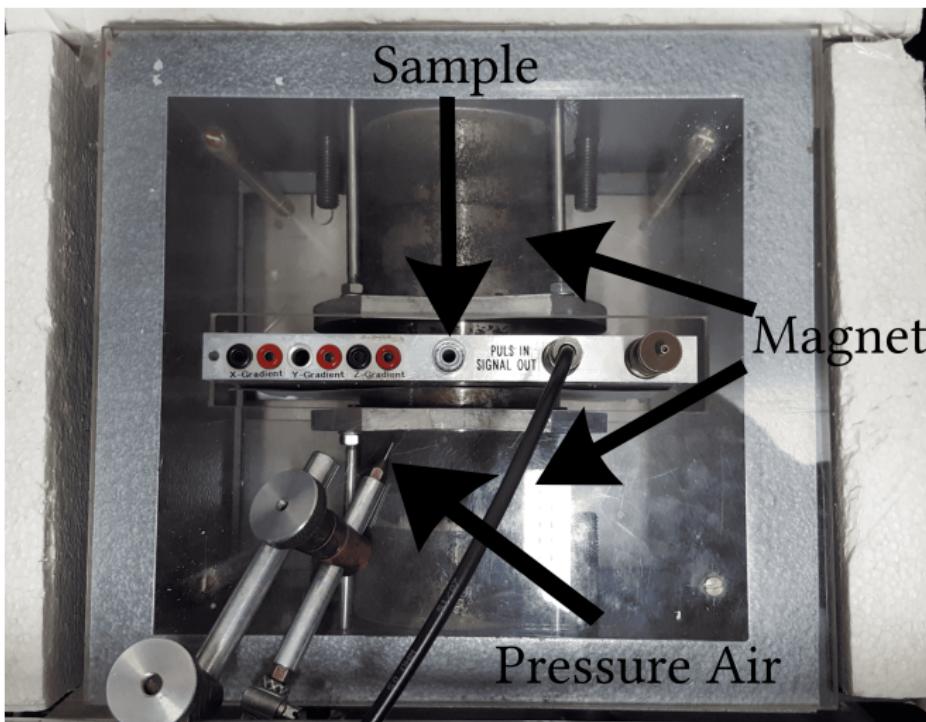


Abbildung: Magnet

Relaxationszeit  
oooooooo●oooooooo

Chemische Verschiebung  
oooo

Bildgebende Verfahren  
oooooooooooo

Diskussion  
oooo

# Messung

Messung der Spin-Spin Relaxationszeit  $T_2$   
mit der Spin-Echo-Methode

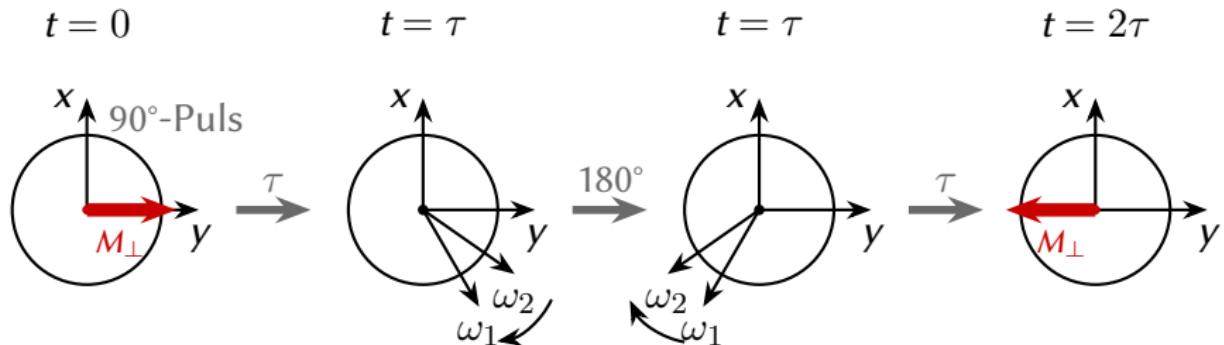


Abbildung: Spin-Echo-Methode

Relaxationszeit

oooooooo●ooooo

Chemische Verschiebung

oooo

Bildgebende Verfahren

oooooooooooo

Diskussion

oooo

# Messung

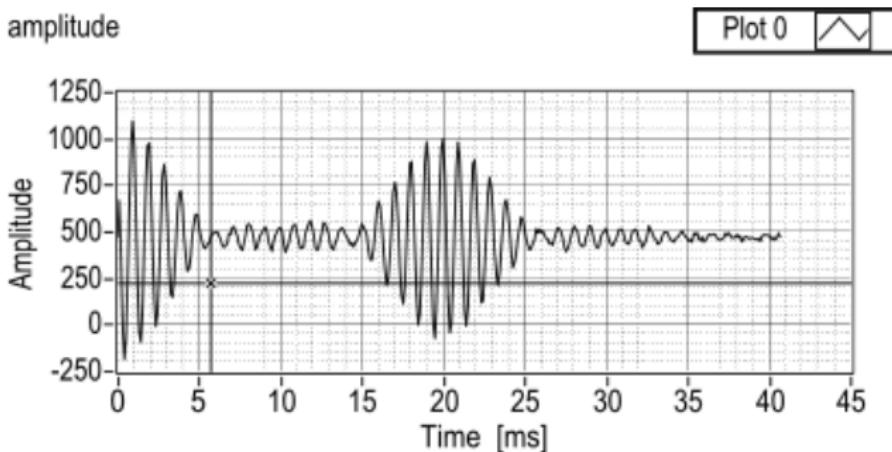


Abbildung: Signal Spin-Echo-Methode [[script\\_nmr](#)]

Relaxationszeit  
oooooooo●oooo

Chemische Verschiebung  
oooo

Bildgebende Verfahren  
oooooooooooo

Diskussion  
oooo

## Messung

Messung der Spin-Spin Relaxationszeit  $T_2$   
mit der Carr-Purcell-Methode

$$t = \begin{cases} (2n+1)\tau : & 180^\circ \text{ Puls} \\ (2n)\tau : & \text{kohärentes Signal} \end{cases}$$

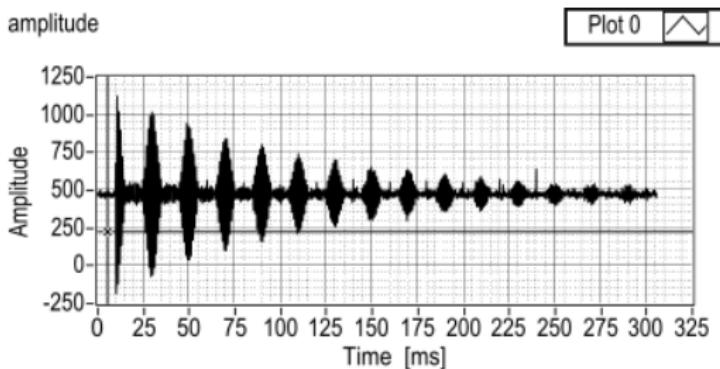
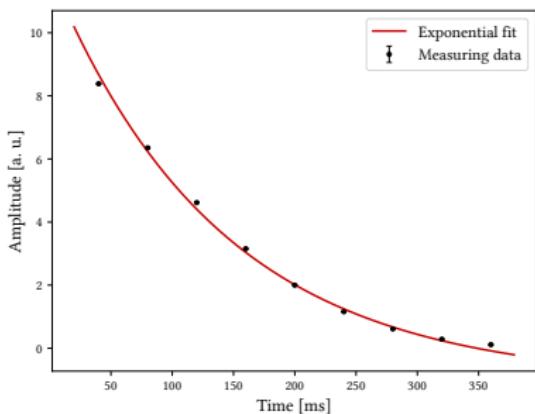


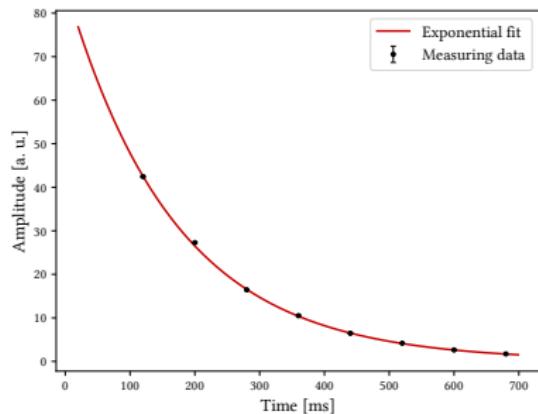
Abbildung: Signal Carr-Purcell-Methode [[script\\_nmr](#)]

# Messung

$$M_{\perp}(t) = M_0 \cdot e^{-\frac{t}{T_2}}$$



(a) Spin-Echo



(b) Carr-Purcell

Abbildung: Relaxationszeit  $T_2$

Relaxationszeit  
oooooooooooo●oo

Chemische Verschiebung  
oooo

Bildgebende Verfahren  
oooooooooooo

Diskussion  
oooo

# Messung

## Messung der Spin-Gitter Relaxationszeit $T_1$

- Drehung von  $\vec{M}_{\parallel}$  mit  $180^\circ$  Puls nach  $t = \tau$

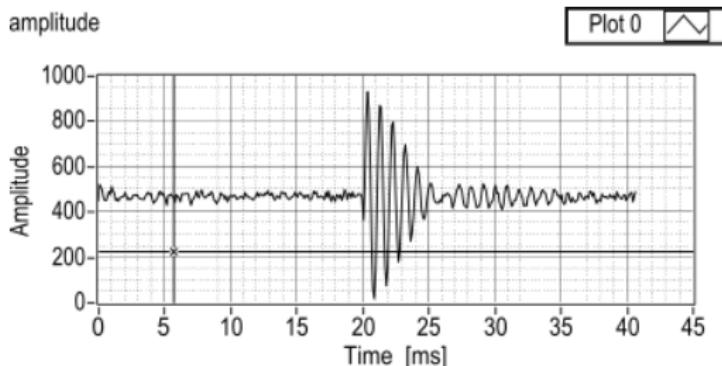


Abbildung: Spin-Gitter Relaxation [`script_nmr`]

Relaxationszeit

oooooooooooo●○

Chemische Verschiebung

○○○○

Bildgebende Verfahren

oooooooooooo

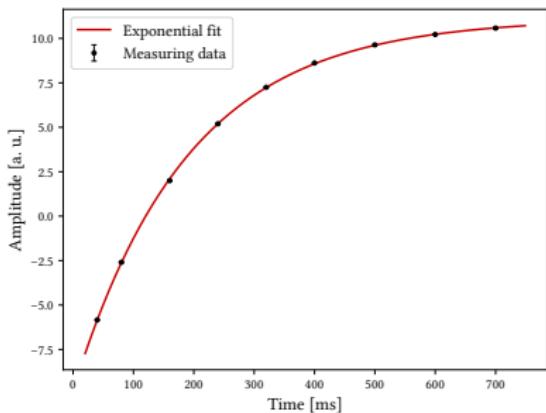
Diskussion

○○○○

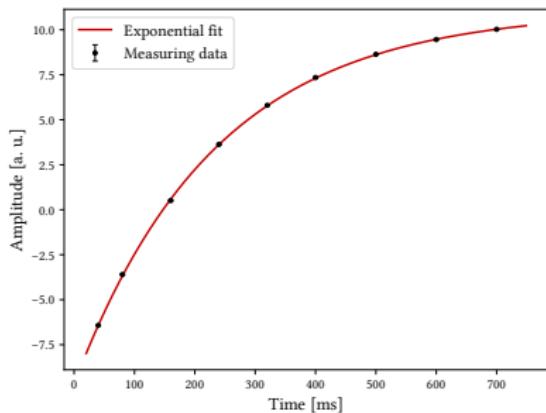
## Messung

Messung der Spin-Gitter Relaxationszeit  $T_1$ :

$$M_{||}(t) = M_0 \left( 1 - 2 \cdot e^{-\frac{t}{T_1}} \right)$$



(a) Gd 500



(b) Gd 600

Abbildung: Relaxationszeit  $T_1$

Relaxationszeit

oooooooooooo●

Chemische Verschiebung

oooo

Bildgebende Verfahren

oooooooooooo

Diskussion

oooo

# Ergebnisse

Sample	$T_1$ [ms]	$T_2$ , Spin-Echo [ms]	$T_2$ , Carr-Purcell [ms]
Gd500	$190.0 \pm 0.6$	$154.2 \pm 0.9$	$170.1 \pm 0.4$
Gd600	$234.3 \pm 0.5$	$186.5 \pm 0.9$	$198.2 \pm 0.7$

Tabelle: Gemessene Relaxationszeiten

## Schlussfolgerung

- $T_{\text{Gd}500} < T_{\text{Gd}600}$
- $T_2 < T_1$
- $T_{\text{Spin-Echo}} < T_{\text{Carr-Purcell}}$

Relaxationszeit  
oooooooooooo

Chemische Verschiebung  
●ooo

Bildgebende Verfahren  
oooooooooooo

Diskussion  
oooo

# Inhaltsübersicht

Relaxationszeit

Chemische Verschiebung

Bildgebende Verfahren

Diskussion

Relaxationszeit  
oooooooooooo

Chemische Verschiebung  
○●○○

Bildgebende Verfahren  
oooooooo

Diskussion  
oooo

# Physikalischer Hintergrund

- Abschirmung durch Elektronen führt zu

$$\omega_i = \omega_L(1 - \sigma_i)$$

## Abweichung zu Referenzstoff TMS

$$\delta_i = \frac{\omega_{TMS} - \omega_i}{\omega_L}$$

- Messung des Frequenzspektrums  
⇒ Probe in Rotation versetzen

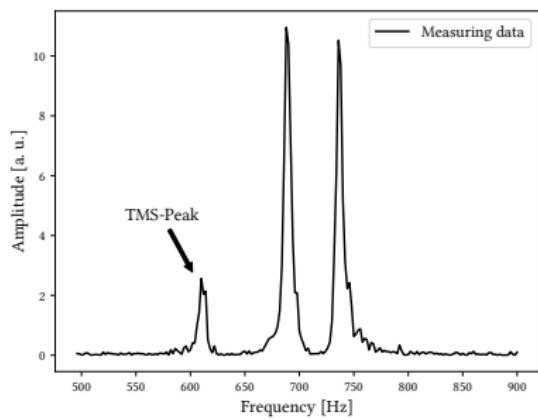
Relaxationszeit  
○○○○○○○○○○○○

Chemische Verschiebung  
○○●○

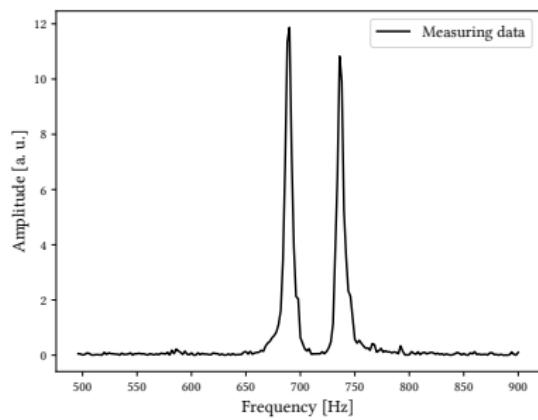
Bildgebende Verfahren  
○○○○○○○○○○

Diskussion  
○○○○

# Messung



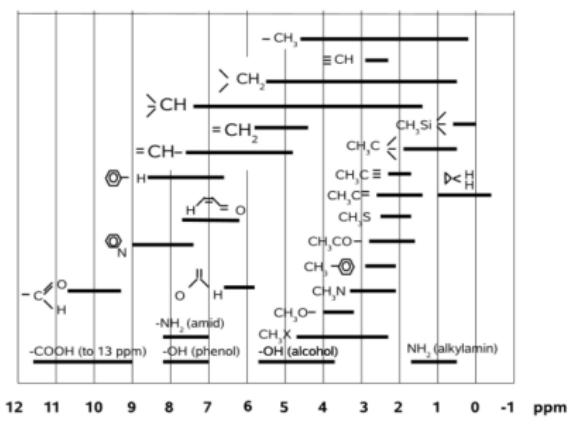
(a) mit TMS-Peak



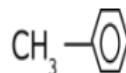
(b) ohne TMS

Abbildung: Fluoroaceton

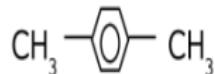
# Physikalischer Hintergrund

(a)  $\delta_i$  relativ zu TMS

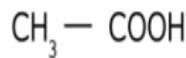
toluol



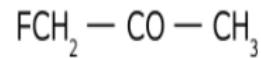
p-xylol



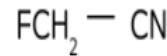
acetic acid



fluoroacetone



fluoroacetonitril



(b) Verwendete Moleküle

Abbildung: Chemische Verschiebung [script\_nmr]

Relaxationszeit  
oooooooooooo

Chemische Verschiebung  
oooo

Bildgebende Verfahren  
●oooooooo

Diskussion  
oooo

# Inhaltsübersicht

Relaxationszeit

Chemische Verschiebung

Bildgebende Verfahren

Diskussion

# Physikalischer Hintergrund

- Bildgebende Messverfahren benötigen  $\vec{B}_0$  und Gradientenfelder:

$$\vec{B}_0 = (0, 0, B_0)$$

$$\vec{B}_x = (0, 0, G_x x)$$

$$\vec{B}_y = (0, 0, G_y y)$$

$$\vec{B}_z = (0, 0, G_z z)$$

- Mögliche Messmethoden:
  - Frequenz Methode
  - Phasen Methode

# Physikalischer Hintergrund

## Frequenz Methode:

- $\vec{M}_\perp$  wird durch  $90^\circ$  Puls generiert
- Einmaliges Einschalten des Gradientenfeld  
 $\Rightarrow$  Ortsabhängige Larmorfrequenz  $\omega_L$

## Phasen Methode:

- $\vec{M}_\perp$  wird durch  $90^\circ$  Puls generiert
- Mehrmaliges Einschalten des Gradientenfeld  
 $\Rightarrow$  Phasendifferenz zwischen Kernen an unterschiedlichen Orten

# Physikalischer Hintergrund

Kombination von Phasen/Frequenz Methode für 2D

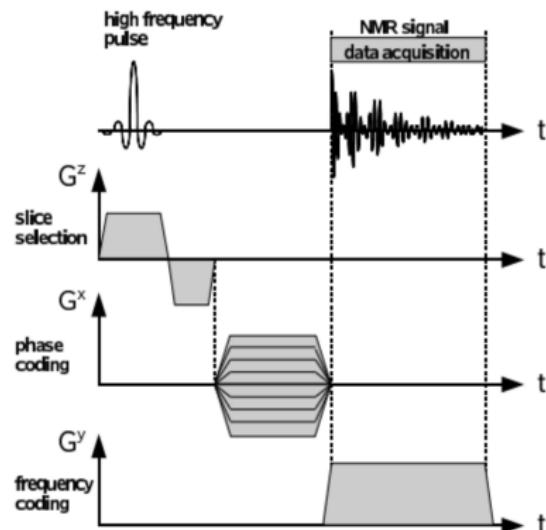


Abbildung: 2D Bildgebung [`script_nmr`]

Relaxationszeit  
oooooooooooo

Chemische Verschiebung  
oooo

Bildgebende Verfahren  
oooo●oooo

Diskussion  
oooo

## 1-Dim. Messung

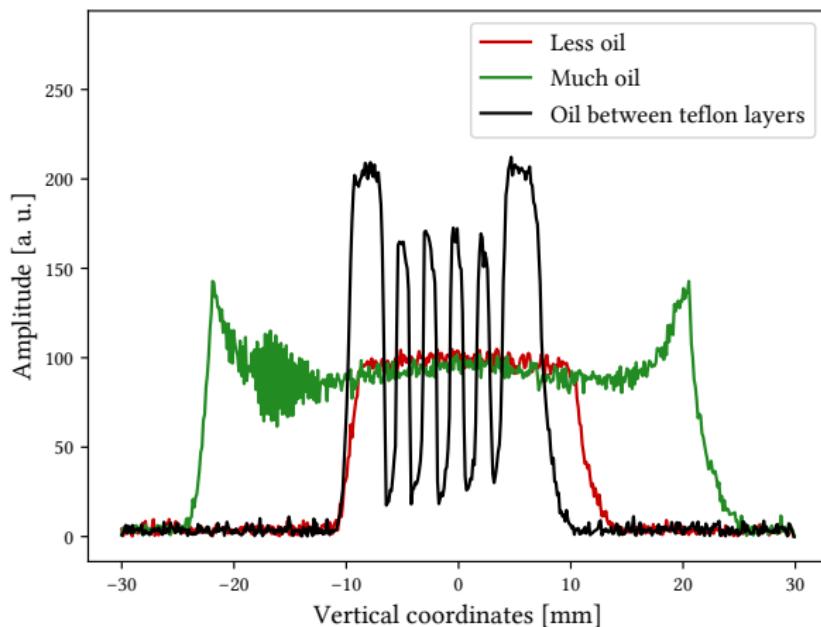


Abbildung: Öl in Reagenzglas

Relaxationszeit  
oooooooooooo

Chemische Verschiebung  
oooo

Bildgebende Verfahren  
oooo●oooo

Diskussion  
oooo

## 1-Dim. Messung

Fick'sches Gesetz:

$$\frac{dc}{dt} = D \frac{d^2 c}{dx^2}$$

⇒ „zerlaufende“ Gaußfunktion

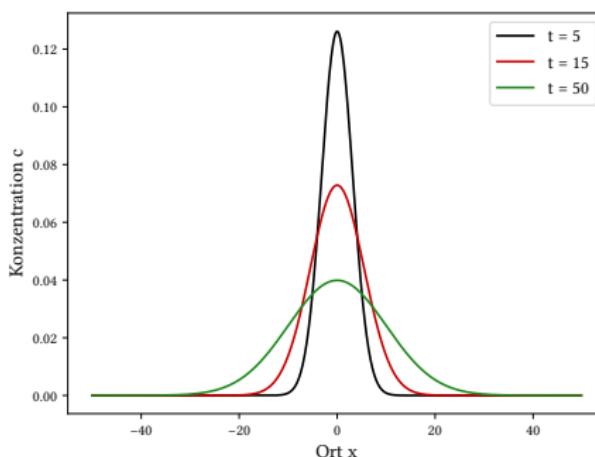


Abbildung: Diffusionsprozess

Relaxationszeit  
oooooooooooo

Chemische Verschiebung  
oooo

Bildgebende Verfahren  
oooooooo●oooo

Diskussion  
oooo

## 1-Dim. Messung

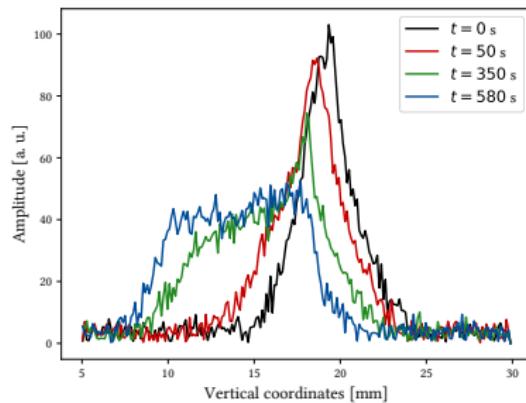


Abbildung: Versickerungsprozess von Öl in Sand

### Schlussfolgerung

Diffusion spielt untergeordnete Rolle (Gravitation)

Relaxationszeit  
oooooooooooo

Chemische Verschiebung  
oooo

Bildgebende Verfahren  
oooooooo●ooo

Diskussion  
oooo

## 2-Dim. Messung

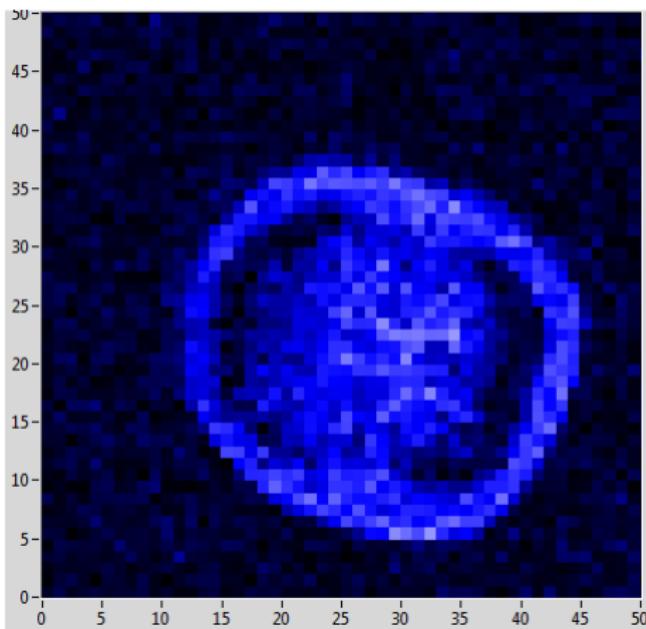


Abbildung: Chillischote

Relaxationszeit  
oooooooooooo

Chemische Verschiebung  
oooo

Bildgebende Verfahren  
oooooooo●○

Diskussion  
oooo

## 2-Dim. Messung

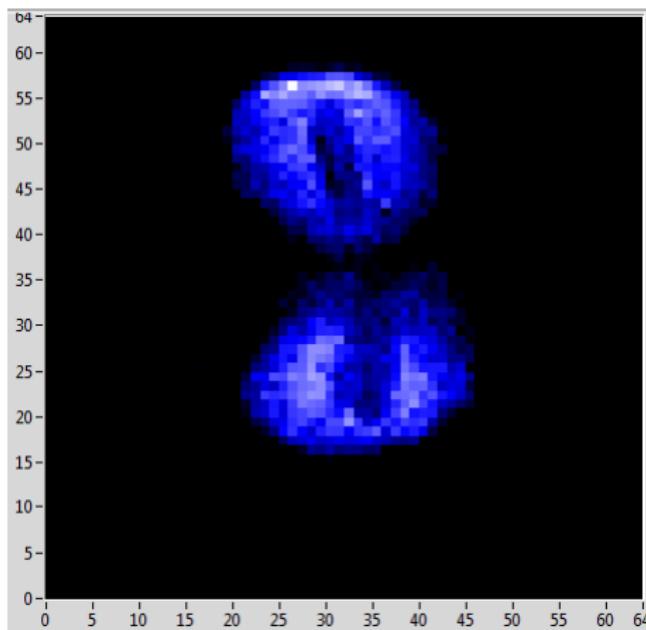


Abbildung: Erdnuss

Relaxationszeit  
oooooooooooo

Chemische Verschiebung  
oooo

Bildgebende Verfahren  
oooooooo●

Diskussion  
oooo

## 2-Dim. Messung

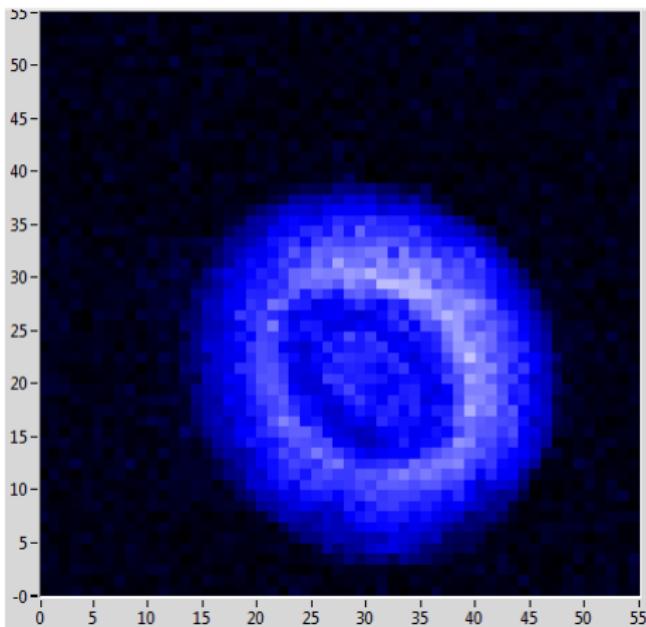


Abbildung: Olive

Relaxationszeit  
oooooooooooo

Chemische Verschiebung  
oooo

Bildgebende Verfahren  
oooooooooooo

Diskussion  
●ooo

# Inhaltsübersicht

Relaxationszeit

Chemische Verschiebung

Bildgebende Verfahren

Diskussion

Relaxationszeit  
oooooooooooo

Chemische Verschiebung  
oooo

Bildgebende Verfahren  
oooooooo

Diskussion  
○●○○

## Fazit

### Contra

- Inhomogener Magnet
- Temperaturschwankungen

### Pro

- Komponenten des ersten Messgeräts sind sichtbar
- Einblick in 2D Bildgebung
- Gute Einführung in Methode moderner Medizin

Relaxationszeit  
oooooooooooo

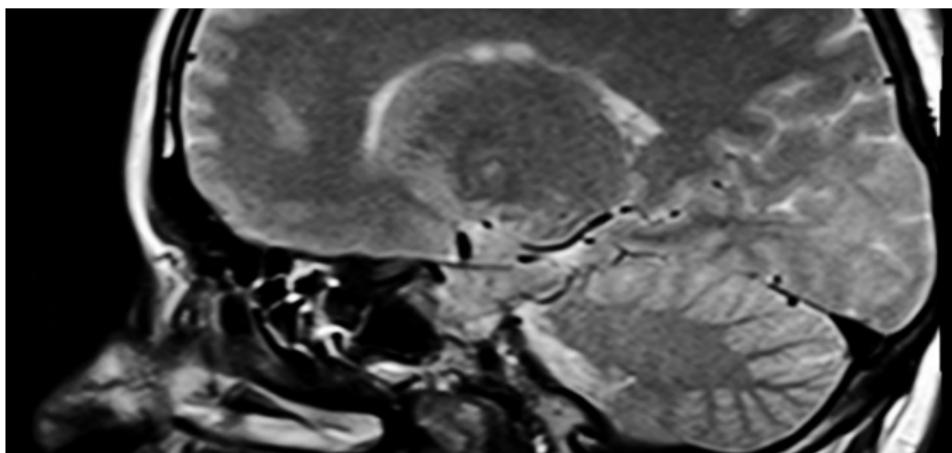
Chemische Verschiebung  
oooo

Bildgebende Verfahren  
oooooooo

Diskussion  
oo●○

# Anwendung

## Medizinischer Bereich



Quelle: <http://www.gesundmed.de/diagnose/magnet-resonanz-tomografie-mrt-kerspintomografie/>

**Abbildung:** MRT

Relaxationszeit  
oooooooooooo

Chemische Verschiebung  
oooo

Bildgebende Verfahren  
oooooooo

Diskussion  
oooo●

# Literatur I