

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

Physikalischer Hintergrund

- Teilchen mit Spin $S \neq 0$ befindet sich in externem Feld \vec{B}_0
- Dipolmoment

$$\vec{\mu} = \hbar\gamma \cdot \vec{S}$$

- Energieaufspaltung durch parallele bzw. antiparallele Ausrichtung

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

- Ungleichmäßige Besetzung der anti-/parallelen Zustände (Fermi-Dirac Verteilung) \Rightarrow Boltzmann Näherung

$$\frac{N_+}{N_-} = e^{\frac{2\Delta E}{k_B T}}$$

- 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

$$\omega_L = \gamma B_0$$

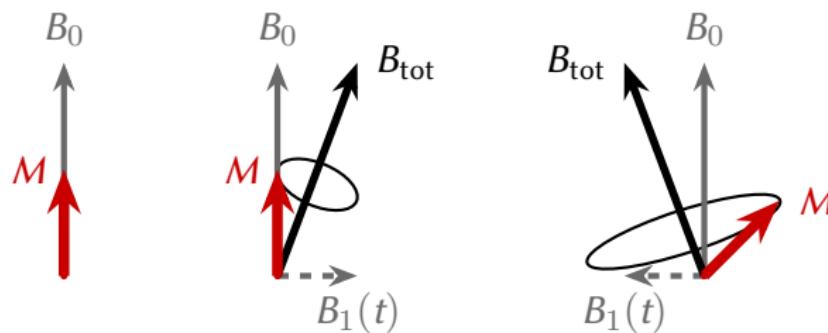


Abbildung: Auslenkung der Magnetisierung

Physikalischer Hintergrund

- 90° und 180° Pulse drehen Magnetisierung
- Messung der Magnetisierung durch Induktion
- Messbare Frequenz $\omega_{\text{working}} = \omega_{\text{Puls}} - \omega_{\text{Signal}}$

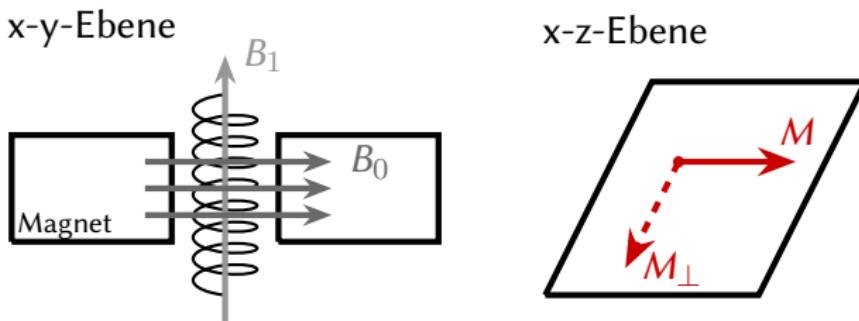


Abbildung: Drehung der Magnetisierung

Physikalischer Hintergrund

- Zeitliche Änderung der Magnetisierung

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

- Bloch-Gleichungen

$$\frac{dM_{\perp}(t)}{dt} = \gamma(\vec{B} \times \vec{M})_{\perp} - \frac{M_{\perp}(t)}{T_2}$$

$$\frac{dM_{\parallel}(t)}{dt} = \gamma(\vec{B} \times \vec{M})_{\parallel} - \frac{M_{\parallel}(t) - M_0}{T_1}$$

⇒ Lösungen

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

$$M_{\perp}(t) = M_{\perp}(0) \cdot e^{-\frac{t}{T_2}}$$

T_1 : Spin-Gitter Relaxationszeit T_2 : Spin-Spin Relaxationszeit

Versuchsaufbau

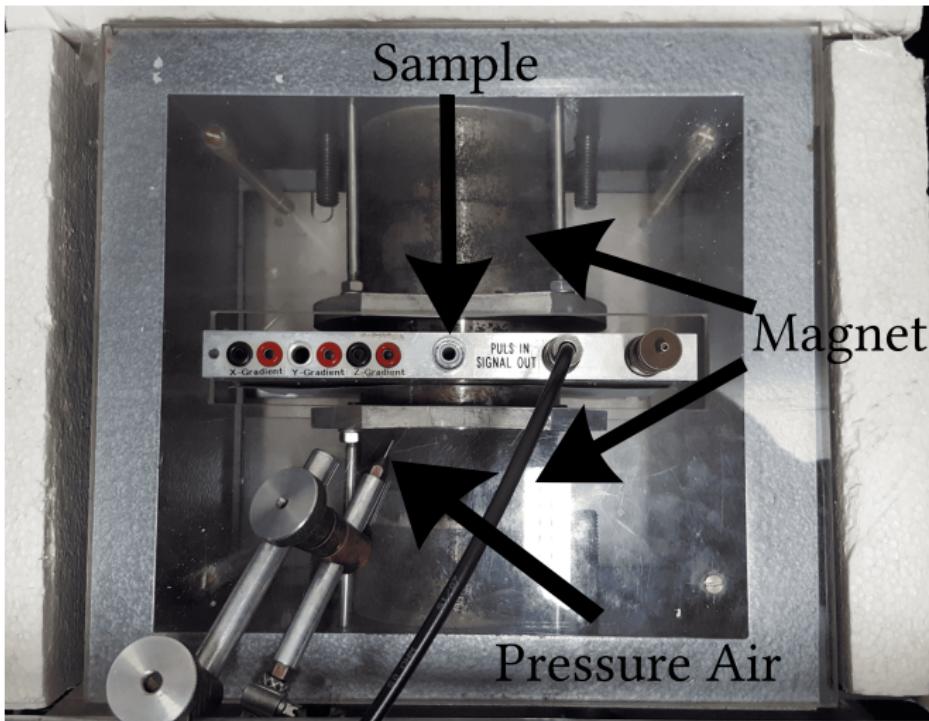


Abbildung: Magnet

Messung

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

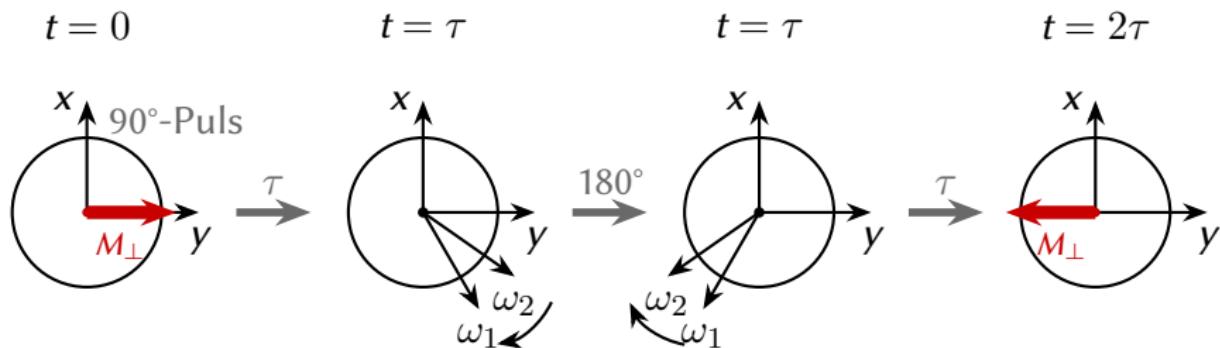


Abbildung: Spin-Echo-Methode

Messung

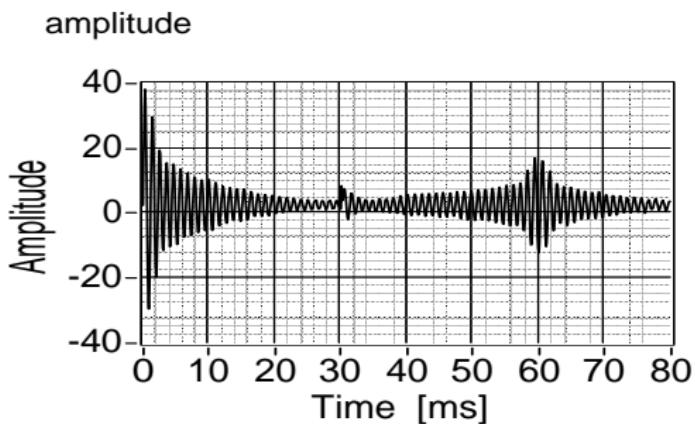


Abbildung: Signal Spin-Echo-Methode

Relaxationszeit
oooooooo●oooo

Chemische Verschiebung
oooo

Bildgebende Verfahren
oooooooooooo

Diskussion
oooo

Messung

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

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

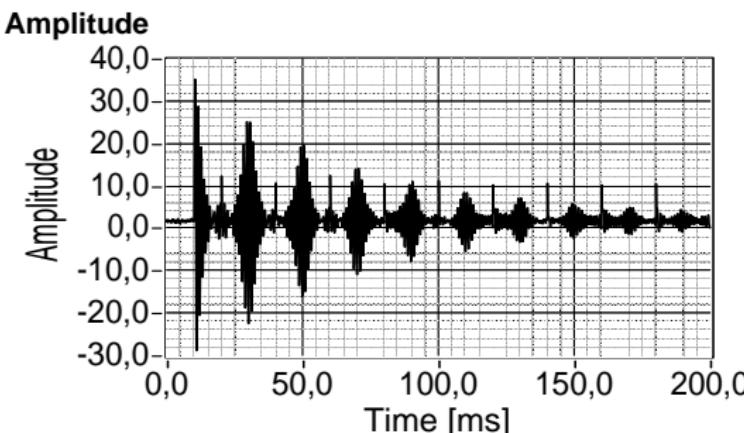


Abbildung: Signal Carr-Purcell-Methode

Relaxationszeit

oooooooooooo●ooo

Chemische Verschiebung

oooo

Bildgebende Verfahren

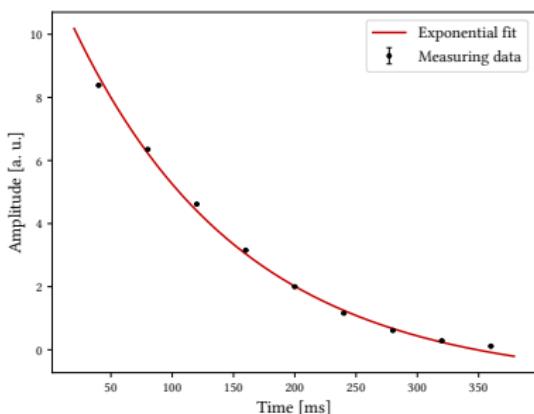
oooooooooooo

Diskussion

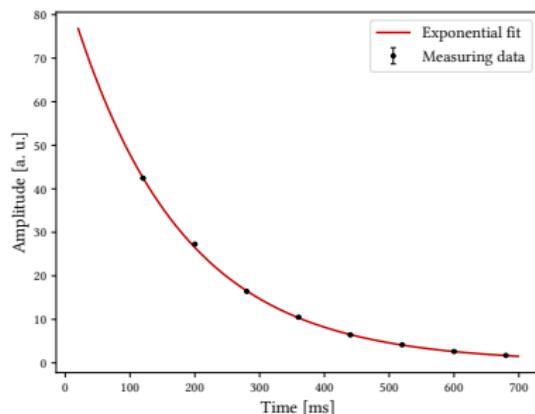
oooo

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 90° Puls nach $t = \tau$

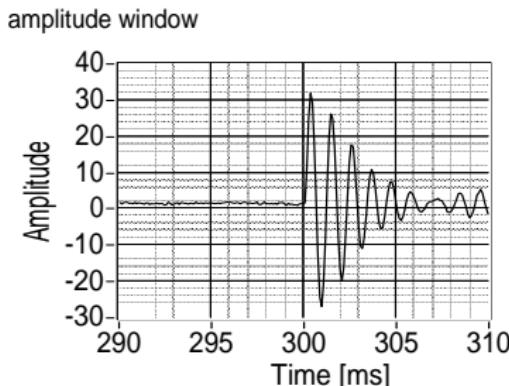
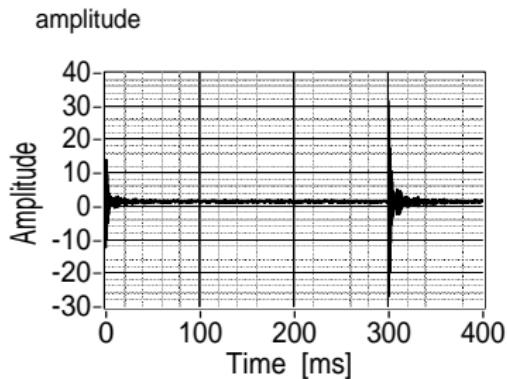
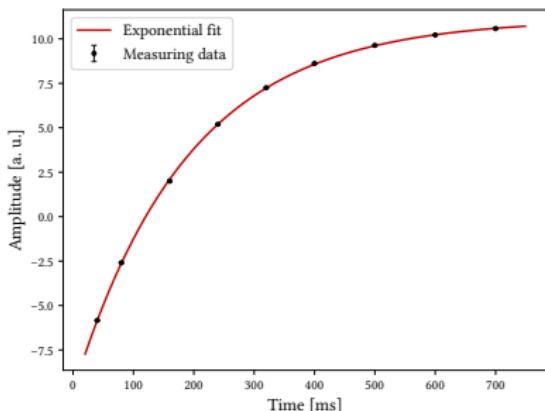


Abbildung: Spin-Gitter Relaxation

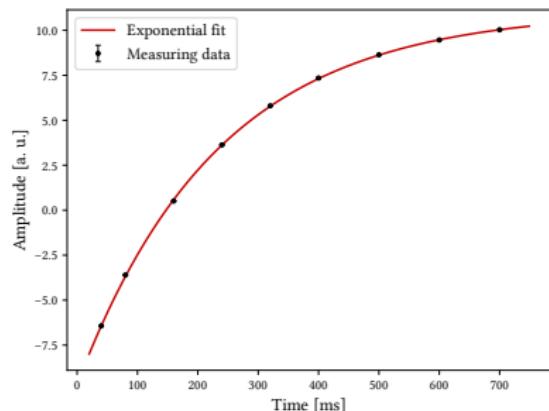
Messung

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

Ergebnisse

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

Tabelle: Gemessene Relaxationszeiten

Schlussfolgerung

- $T_{\text{Spin-Echo}} < T_{\text{Carr-Purcell}}$
- $T_2 < T_1$
- $T_{\text{Gd500}} < T_{\text{Gd600}}$

Relaxationszeit
oooooooooooo

Chemische Verschiebung
●○○○

Bildgebende Verfahren
oooooooooooo

Diskussion
○○○○

Inhaltsübersicht

Relaxationszeit

Chemische Verschiebung

Bildgebende Verfahren

Diskussion

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

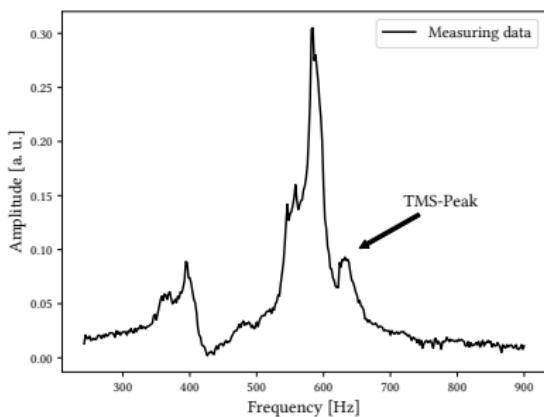
Relaxationszeit
○○○○○○○○○○○○

Chemische Verschiebung
○○●○

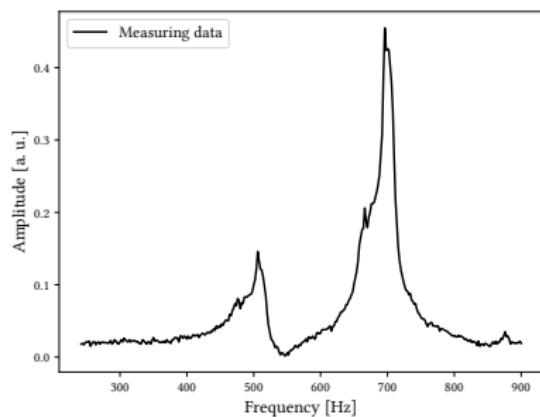
Bildgebende Verfahren
○○○○○○○○○○

Diskussion
○○○○

Messung



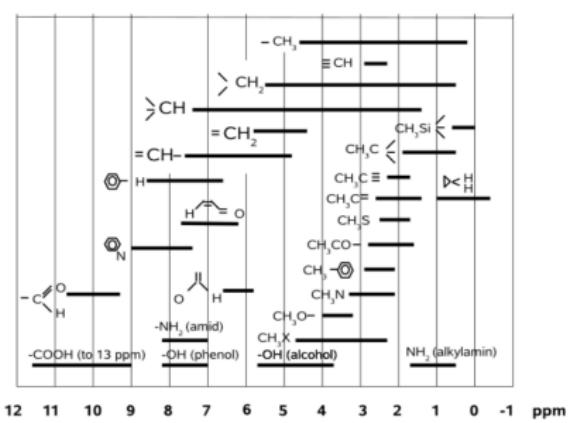
(a) mit TMS-Peak



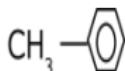
(b) ohne TMS

Abbildung: Essigsäure

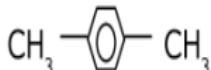
Physikalischer Hintergrund

(a) δ ; relativ zu TMS

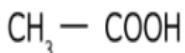
toluol



p-xylol



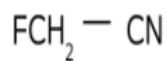
acetic acid



fluoroacetone



fluoroacetonitril



(b) Verwendete Moleküle

Abbildung: Chemische Verschiebung [script_nmr]

Relaxationszeit
oooooooooooo

Chemische Verschiebung
oooo

Bildgebende Verfahren
●oooooooooooo

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 sinc Puls generiert
- Einmaliges Einschalten des Gradientenfeld
 \Rightarrow Ortsabhängige Larmorfrequenz ω_L

Phasen Methode:

- \vec{M}_\perp wird durch sinc Puls generiert
- Mehrmaliges Einschalten des Gradientenfeld
 \Rightarrow Phasendifferenz der Kerne an unterschiedlichen Orten

Physikalischer Hintergrund

Kombination von Phasen/Frequenz Methode für 2D

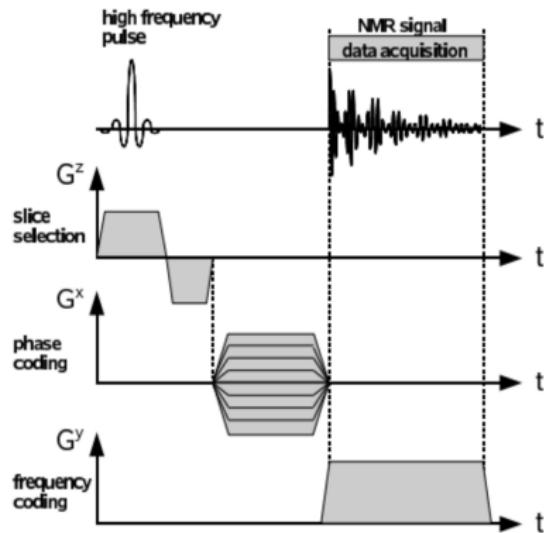


Abbildung: 2D Bildgebung [script_nmr]

Relaxationszeit
○○○○○○○○○○○○○○

Chemische Verschiebung
○○○○

Bildgebende Verfahren
○○○●○○○○○○

Diskussion
○○○○

Eindimensionale Messung

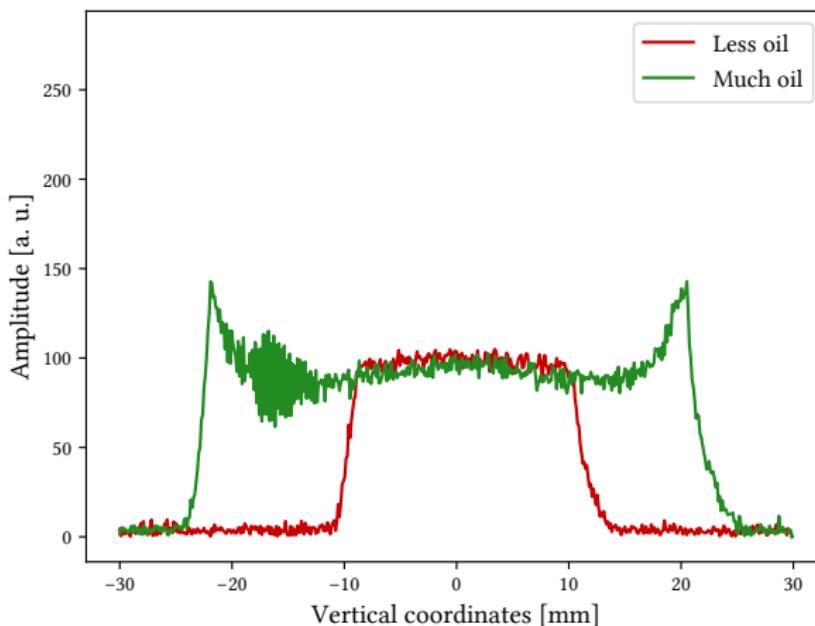


Abbildung: Öl in Reagenzglas

Relaxationszeit
oooooooooooo

Chemische Verschiebung
oooo

Bildgebende Verfahren
oooo●oooo

Diskussion
oooo

Eindimensionale Messung

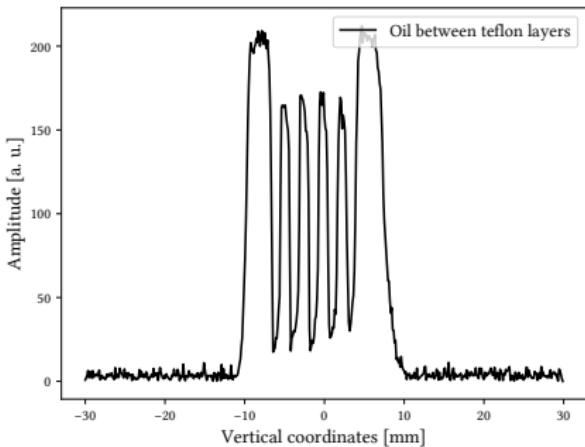
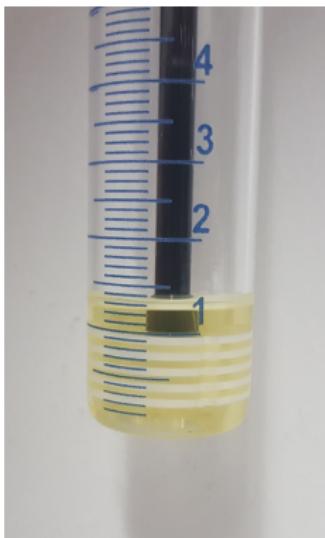


Abbildung: Öl zwischen Teflon in Reagenzglas

Eindimensionale Messung

Diffusionsgleichung:

$$\frac{\partial c(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c(x, t)}{\partial x^2}$$

⇒ „zerlaufende“ Gaußfunktion

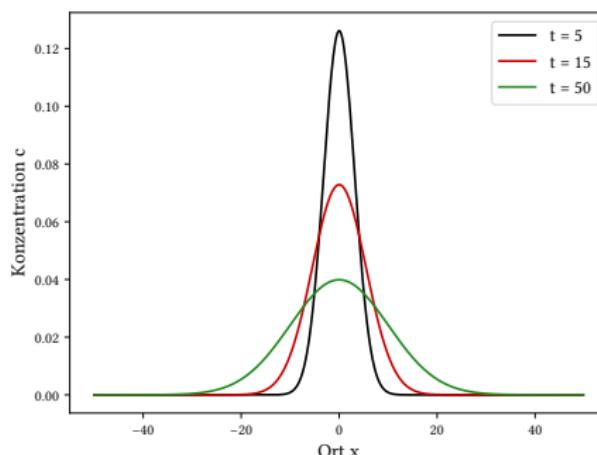


Abbildung: Diffusionsprozess

Eindimensionale Messung

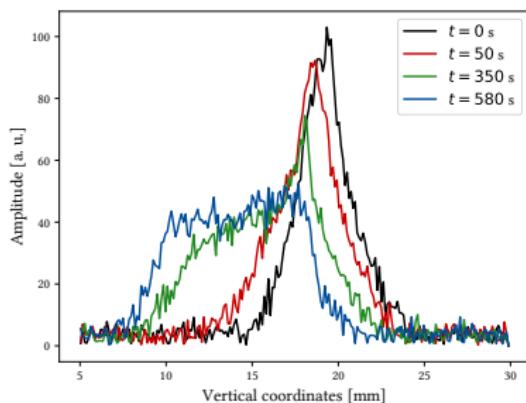


Abbildung: Versickerungsprozess von Öl in Sand

Schlussfolgerung

Diffusion spielt untergeordnete Rolle (Gravitation)

Relaxationszeit
oooooooooooo

Chemische Verschiebung
oooo

Bildgebende Verfahren
oooooooo●ooo

Diskussion
oooo

Zweidimensionale Messung

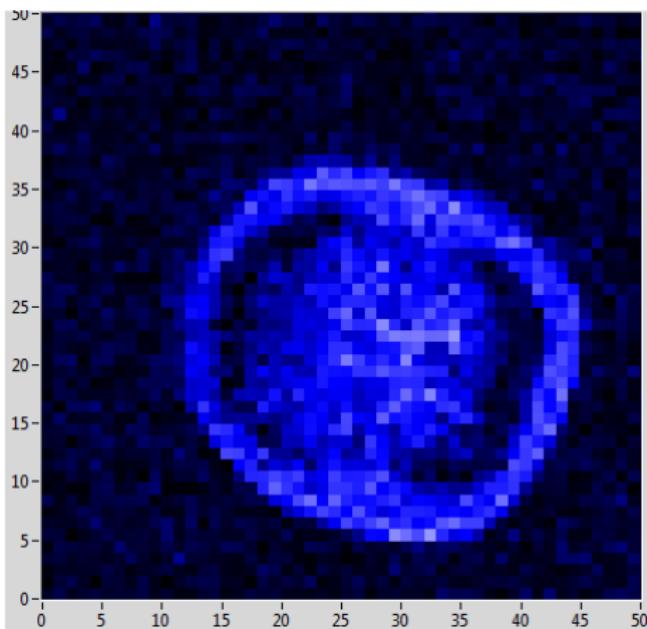


Abbildung: Chilischote

Relaxationszeit
oooooooooooo

Chemische Verschiebung
oooo

Bildgebende Verfahren
oooooooo●○

Diskussion
oooo

Zweidimensionale Messung

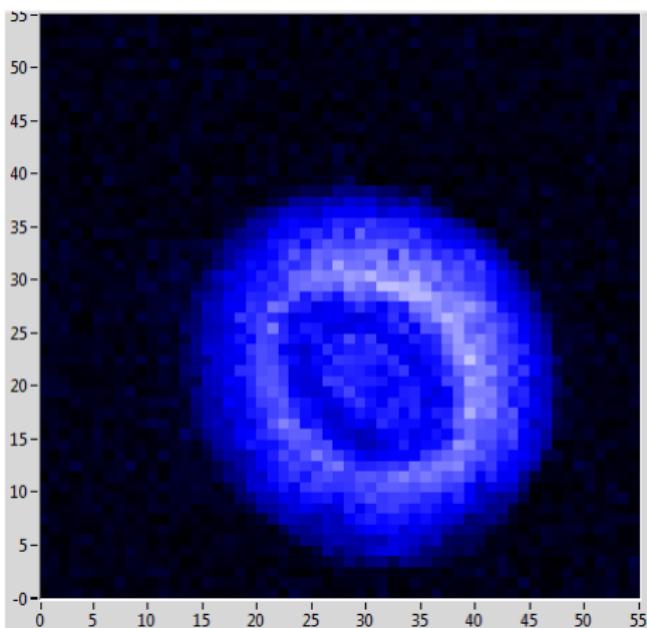


Abbildung: Olive

Relaxationszeit
oooooooooooo

Chemische Verschiebung
oooo

Bildgebende Verfahren
oooooooo●

Diskussion
oooo

Zweidimensionale Messung

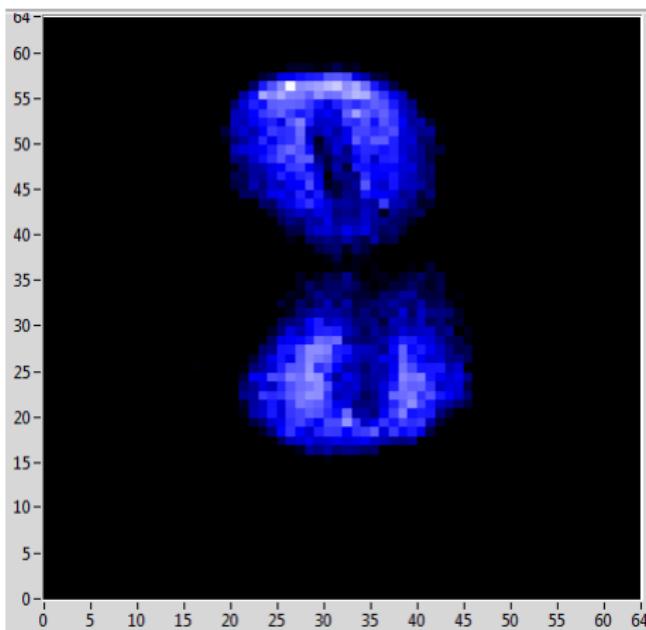


Abbildung: Erdnuss

Relaxationszeit
oooooooooooo

Chemische Verschiebung
oooo

Bildgebende Verfahren
oooooooooooo

Diskussion
●ooo

Inhaltsübersicht

Relaxationszeit

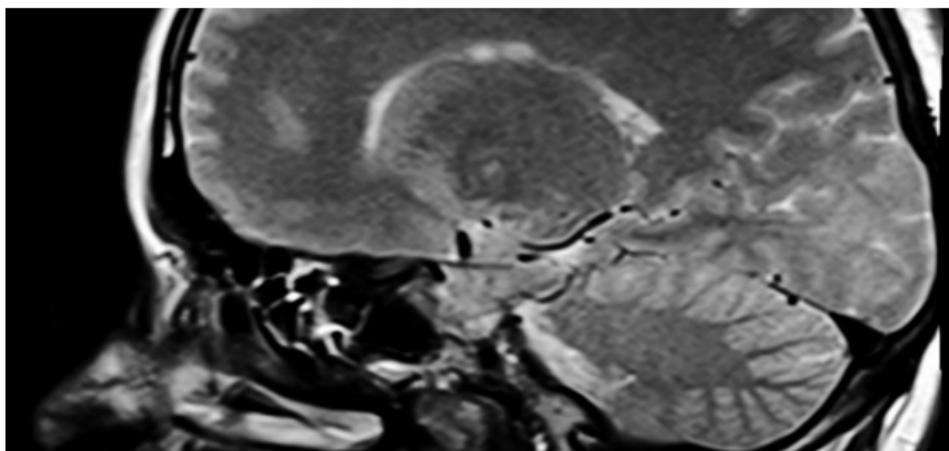
Chemische Verschiebung

Bildgebende Verfahren

Diskussion

Anwendung

Medizinischer Bereich



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

Abbildung: MRT

Fazit

-

- Inhomogener Magnet ($\Delta B/B \sim 10^{-5}$)
- Temperaturschwankungen

+

- Komponenten des ersten Messgeräts sind sichtbar
- Einblick in die 2D Bildgebung
- Guten Einführung in einen Bereich der modernen Medizin

Relaxationszeit
oooooooooooo

Chemische Verschiebung
oooo

Bildgebende Verfahren
oooooooooooo

Diskussion
oooo●

Literatur I