Übungsblatt 12 :

Aufgabe 1: Das Hahn-Echo

In der letzten Vorlesung haben wir kennen gelernt das nach einem $\pi/2$-Puls die Magnetisierungsvektoren mit ihren verschiedenen Offsetfrequenzen $\Delta\omega$ ($\Delta\omega = \omega_L - \omega_{MW}$) um die z-Achse rotieren, auseinander laufen und so ein zerfallendes FID-Signal verursachen. Je breiter das Spektrum im Frequenzraum, desto schneller der Zerfall in der Zeitdomäne. Bei den breiten Festkörper Spektren die wir üblicherweiße haben in der EPR, zerfällt das FID-Signal in der Tot-Zeit nach einem Puls in der nicht detektiert werden kann. Dieses Problem kann mit der Hahn-Echo Sequenz (Abbildung 1) umgangen werden.

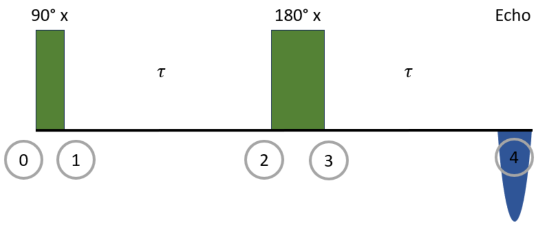

Abbildung 1: Die Hahn Echo-Sequenz.

$$\overrightarrow{M}(t_{n+1}) = \boldsymbol{R} \cdot \overrightarrow{M}(t_n) \tag{1}$$

$$\overrightarrow{M} = \begin{pmatrix} M_x \\ M_y \\ M_z \end{pmatrix} \qquad \boldsymbol{R_x} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\alpha) & -\sin(\alpha) \\ 0 & \sin(\alpha) & \cos(\alpha) \end{pmatrix} \qquad \boldsymbol{R_z} = \begin{pmatrix} \cos(\alpha) & -\sin(\alpha) & 0 \\ \sin(\alpha) & \cos(\alpha) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{2}$$

Gleichung 1 ist die numerische Lösung der Blochgleichungen unter vernachlässigung der Relaxation. Mit ihr lässt sich die Magnetisierung zu einem Zeitpunkt t_{n+1} aus der Magnetisierung zum vorherigen Zeitpunkt t_n berechnen. $\boldsymbol{R}$ sind die Rotationsmatrizen die in der Gleichung 2 gezeigt sind. Setzen Sie für die Pulse die entsprechenden Winkel und für die freien Evolutionszeiten $\Delta\omega \cdot t$ für α ein.

i) Berechnen Sie die Magnetisierungen zu den Zeitpunkten 1-4 startend von einer Magnetisierung von $\overrightarrow{M}(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ M_0 \end{pmatrix}$ zum Zeitpunkt 0.

Aufgabe 2: T2-Relaxations Messung

Wenn wir nun zusätzlich die Relaxation während den freien Evolutionsperioden berücksichtigen wollen können wir die Relaxation der Magnetisierung durch folgende Gleichung berechnen.

$$\overrightarrow{M_x}(t_{n+1})_{relaxed} = \overrightarrow{M_x}(t_{n+1}) \cdot \exp(-\frac{dt}{T_2}) \tag{3}$$

$$\overrightarrow{M_y}(t_{n+1})_{relaxed} = \overrightarrow{M_y}(t_{n+1}) \cdot \exp(-\frac{dt}{T_2}) \tag{4}$$

$$\overrightarrow{M_z}(t_{n+1})_{relaxed} = M_0 - (M_0 - \overrightarrow{M_z}(t_{n+1})) \cdot \exp(-\frac{dt}{T_1}) \tag{5}$$

wobei das Zeitintervall dt wie folgt definiert ist: $dt = t_{n+1} - t_n$

i) Wie ist die Magnetisierung zum Zeitpunkt 4 in Abbildung 1 unter berücksichtigung der Relaxation gegeben? Benutzen Sie dafür immer ihre Ergebnisse aus Aufgabenteil 1 und vernachlässigen Sie die Relaxation während den Pulsen.

ii) Sie messen ein Hahn Echo eines unbekannten Radikals mit einem Interpulsdelay τ von $\tau = 400\ ns$. Zum Zeitpunkt des Echos beträgt der Wert der Magnetisierung nur noch genau $1/3$ des Ursprungswerts M_0 direkt nach des ersten Pulses. Welche $T2$-Zeit hat dieses Radikal? (Tipp: Setzen Sie in ihr Ergebnis aus Aufgabenteil 2i) ein)

iii) Tatsächlich können Sie die Magnetisierung direkt nach dem Puls wegen der Totzeit nicht bestimmen, fällt Ihnen ein Experiment ein wie Sie dennoch $T2$ bestimmen könnten?

Aufgabe 3: T1-Relaxations Messung

Mit der in Abbildung 2 gezeigten Sequenz lässt sich die Relaxationszeit $T1$ bestimmen. Die Sequenz wird als Inversionrecovery Experiment bezeichnet.

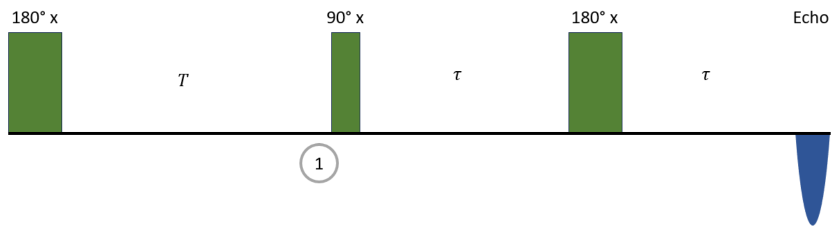

Abbildung 2: Die Inversion-Recovery Sequenz.

i) Bestimmen Sie die Magnetisierung zum Zeitpunkt 1 in Abbildung 2 mit einer Start Magnetisierung von $\overrightarrow{M}(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ M_0 \end{pmatrix}$. Gehen Sie dafür erst wie in Aufgabe 1 vor und berücksichtigen Sie anschließend die Relaxation mit Gleichung 3-5.

ii) Ihnen sei ein Radikal mit einer longitudinalen Relaxationszeit von $T1 = 3\ \mu s$ gegeben. Für welches T ist die Magnetisierung zum Zeitpunkt 1 in Abbildung 2 gerade 0? Setzen Sie dafür in Ihr Ergebnis von Aufgabenteil 3 i) ein.

iii) Was muss während der Inversion-Recovery Sequenz varriert werden um $T1$ experimentell zu bestimmen.

Trigonometrische Identität: $\sin(\theta)^2 + cos(\theta)^2 = 1$