

VL14. Spin-Bahn-Kopplung (III)

- 14.1. Spin-Bahn-Kopplung
- 14.2. Paschen-Back Effekt

VL15. Wasserstoffspektrum

- 15.1. Lamb Shift
- 15.2. Hyperfeinstruktur

VL16. Hyperfeinstruktur

- 16.1. Magnetische Resonanz
- 16.2. Kernspinresonanz
- 16.3. Elektronenspinresonanz

Vorlesung 16:

Roter Faden:

Magnetische Resonanz

Elektronspinresonanz (ESR)

**Kernspinresonanz(NMR=Nuclear Magnetic
Resonance)**

Medical Imaging (Kernspintomographie)

Folien auf dem Web:

<http://www-ekp.physik.uni-karlsruhe.de/~deboer/>

**Siehe auch: Demtröder, Experimentalphysik 3,
Springerverlag**

Vollständiges Termschema des H-Atoms

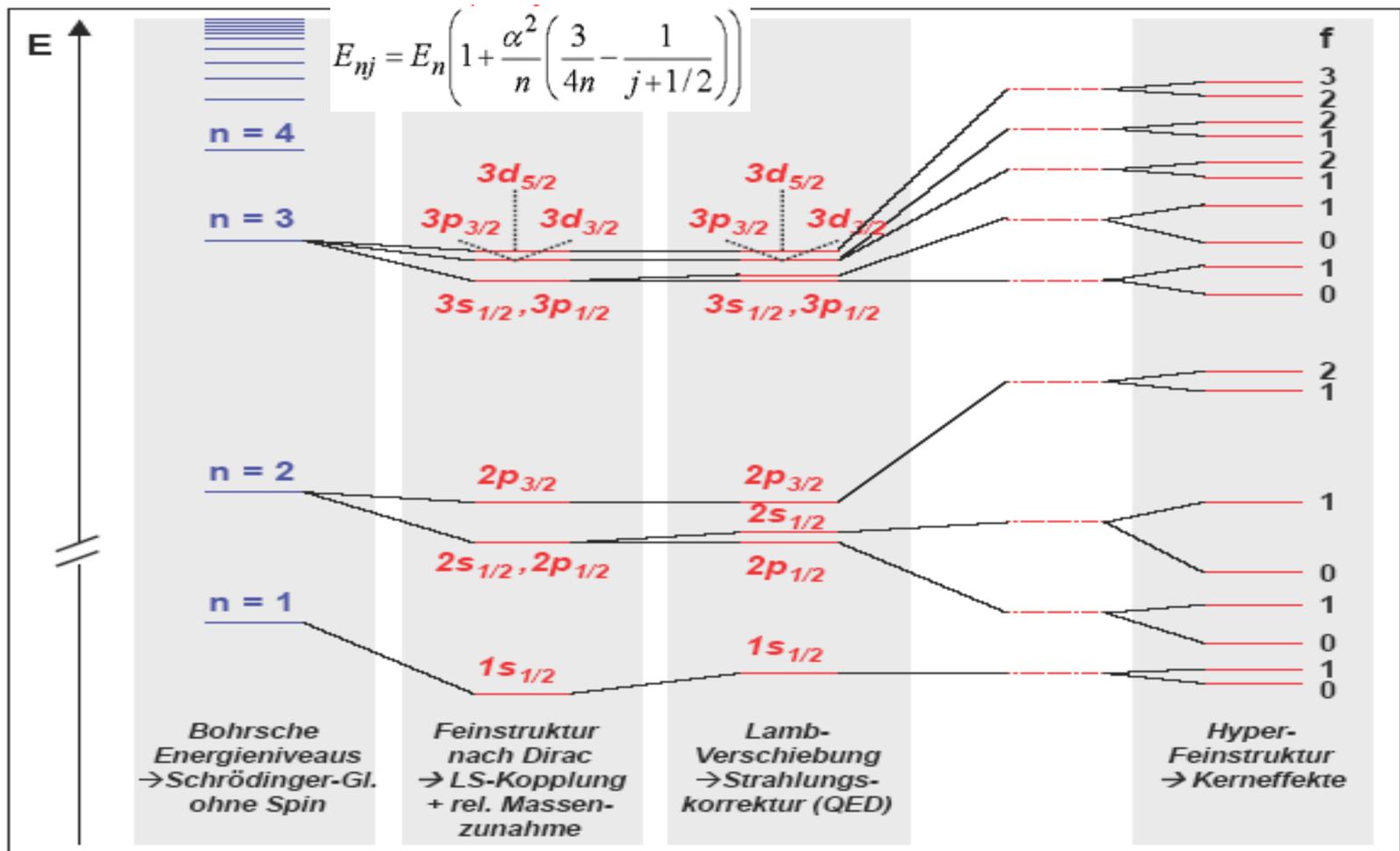
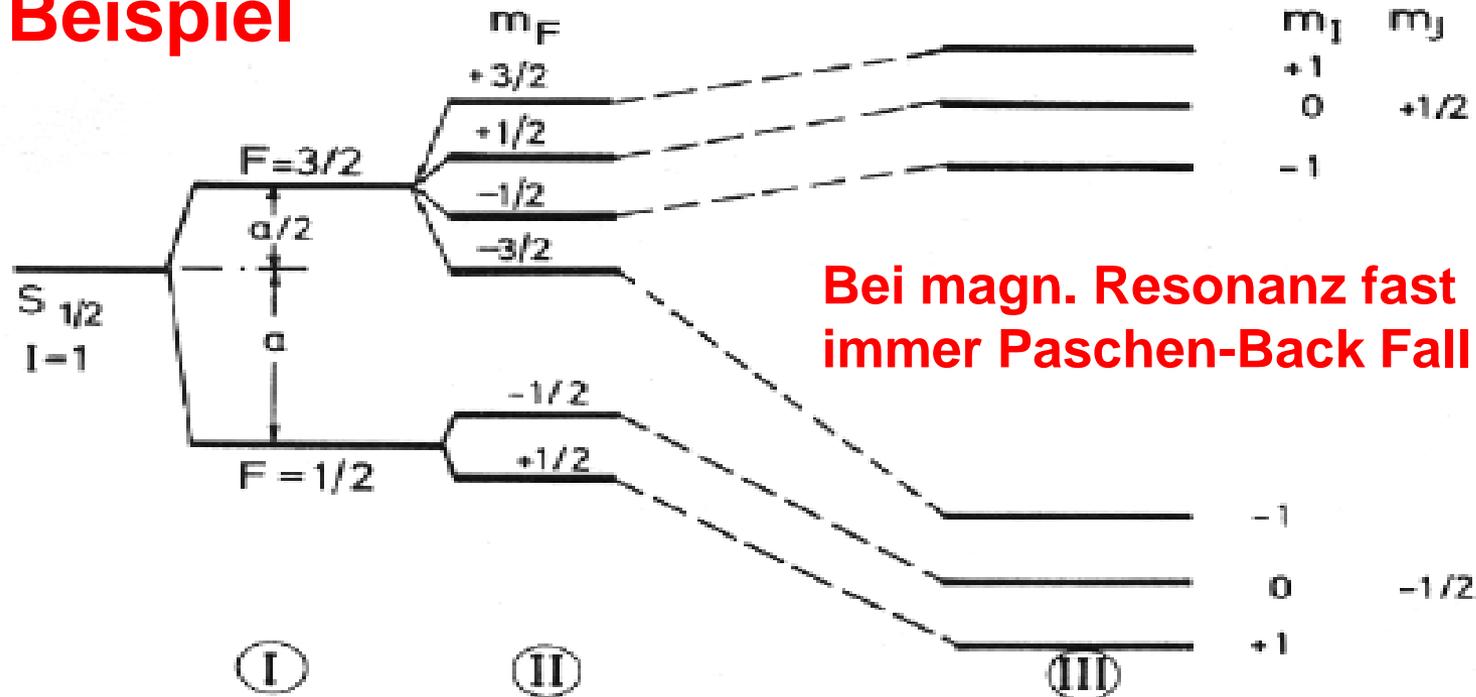


Abbildung 4.19: Vollständiges Termschema des Wasserstoffatoms mit allen bisher bekannten Wechselwirkungen. Die Fein- und Hyperfeinstruktur, sowie die Lamb-Shift sind aus Gründen der Übersichtlichkeit nicht maßstabsgerecht gezeichnet.

Hyperfeinstruktur im starken Magnetfeld

Beispiel



Bei magn. Resonanz fast immer Paschen-Back Fall

Abb. 20.11. Hyperfeinstruktur eines Zustandes $S_{1/2}$ und $I=1$ ohne Feld (I), im schwachen Feld (II) – das ist der Zeeman-Effekt der Hyperfeinstruktur – und im starken Feld (III), das ist der Paschen-Back-Effekt der Hyperfeinstruktur. Beim Übergang vom schwachen zum starken Feld geht der Zeeman-Effekt der Hyperfeinstruktur also in die Hyperfeinstruktur des Zeeman-Effektes über

Hyperfinestruktur im starken Magnetfeld

$$\Delta E_{\text{HFS}} = \underbrace{+ g_J \mu_B m_J B_0}_{\text{Zeemann-Effekt H\u00fclle}} \quad \underbrace{- g_I \mu_K m_I B_0}_{\text{Zeemann-Effekt Kern}} \quad + \underbrace{a m_I m_J}_{\text{Hyperfine-WW.}}$$

Zeemann-Effekt
H\u00fclle

Zeemann-Effekt
Kern

Hyperfine-WW.
Entkoppelte \vec{I} und \vec{J}
Aus Vektormodell

Bei starkem Magnetfeld wieder Paschen-Back Effekt,
d.h. keine Kopplung zum gesamten Drehimpuls F ,
sondern Kernspin richtet sich im \u00e4u\u00dferen statt inneren
Magnetfeld

Achtung:

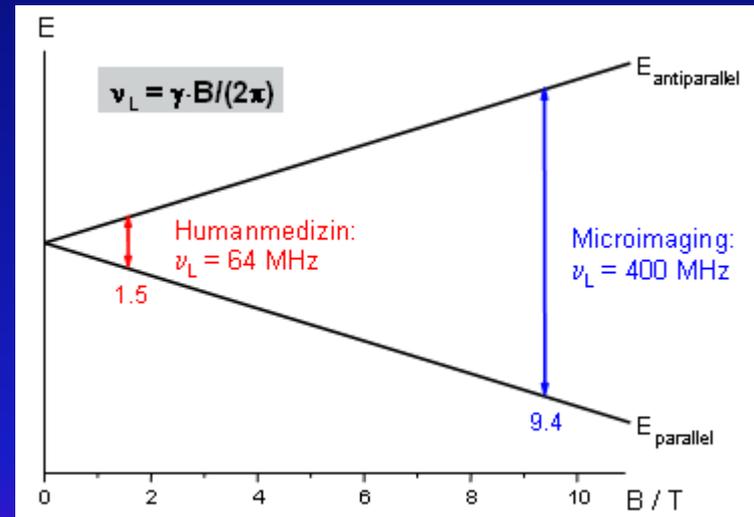
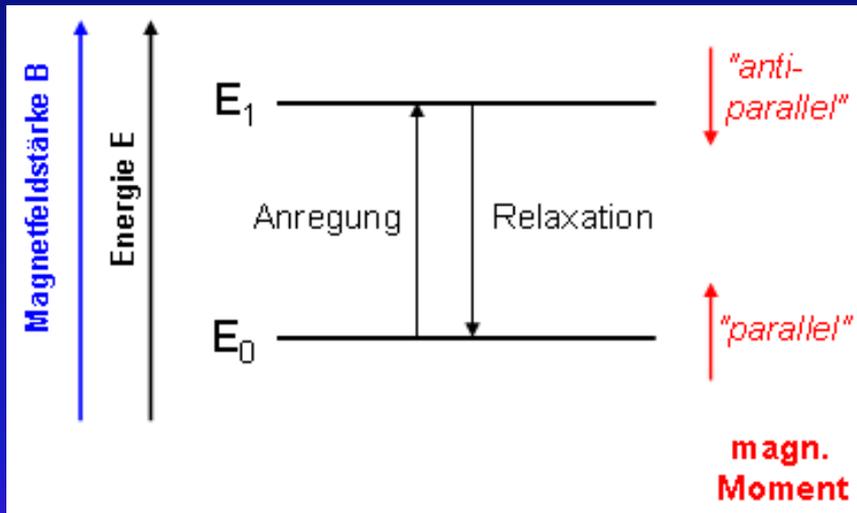
- Vorzeichen m_I richtet sich nach \vec{B}_0
- B_J kann aber \parallel oder $\uparrow\downarrow$ sein und das Vorzeichen des ΔE bestimmen

$$a = \frac{g_I \mu_K B_J}{\sqrt{j(j+1)}}$$

Transversale
Komponenten von
 B_J durch schnelle
Pr\u00e4zession von J
im Mittel null.

Kernspinresonanz

Beobachte Spin-Flip Übergänge zwischen Zeeman-Niveaus eines Kerns durch Einstrahlung mit Photonen, d.h. elektromagn. Energie, die mit einem magn. Wechselfeld der Freq. γB_0 erzeugt werden kann.



Bei Kernspinresonanz oder NMR (NMR=Nuclear Magnetic Resonance) Frequenz der Photonen im MHz Bereich (Radiofrequenzen)

Empfindlichkeit steigt mit B/T

$$\frac{N_+}{N_-} = 1 - \frac{g\mu_B B}{k_B T}$$

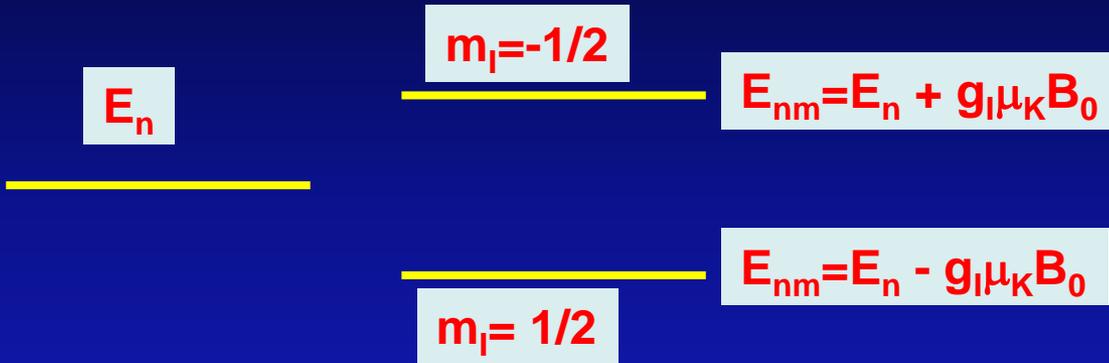
Verteilung der Teilchen im thermischen Gleichgewicht über Energieniveaus gegeben durch Boltzmannverteilung: $N \propto \exp(-E/kT)$

$$N_- - N_+ = N_- \left[1 - \left(1 - \frac{g\mu_B B}{k_B T} \right) \right] = \frac{N g \mu_B B}{2 k_B T} \quad (2.6)$$

Signal $\propto N_- - N_+ \propto B/T$

NMR

$$E_{nm} = E_n - g_I \mu_K m_I B_0$$



$$|\Delta E| = h\nu = g_I \mu_K B_0 = \gamma B_0$$

Frequenz des Wechselfeldes entspricht Larmorfrequenz γB_0
(=Präzessionsfrequenz des Spins)

Präzession (Spin)

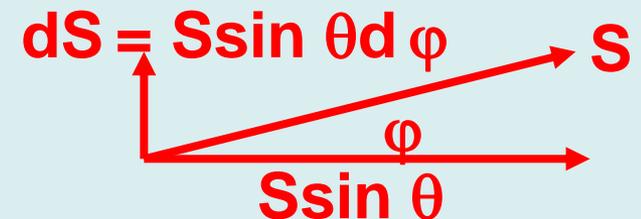
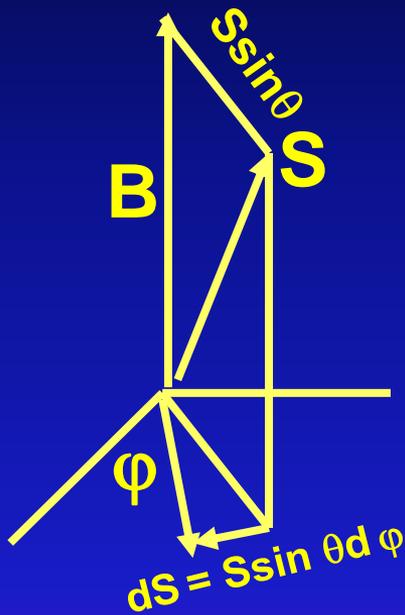
Beobachtung: Spin nicht parallel B, sondern dreht sich in horizontaler Ebene.

Erklärung:

Magnetfeld übt Drehmoment in horizontaler Richtung aus und $M = \mu \times B = -g_S (e/2m) B S \sin \theta = \gamma B S \sin \theta$ schiebt $S \sin \theta$ in die horizontale Richtung! $\gamma = g_S (e/2m) = \text{gyromagn. Verhältnis.}$ Präzessionsfrequenz aus

$M = dS/dt = S \sin \theta d\varphi/dt = S \sin \theta \omega_L$ oder

$\omega_L = M / S \sin \theta = -\gamma B \sin \theta / S \sin \theta = -\gamma B$



Magnetisches Wechselfeld muss senkrecht Hauptfeld stehen!

Wie kann man die Kegelöffnung, die j um B beschreibt, vergrößern? (vergrößern von B vergrößert nur $\omega_{\text{präz.}}$)

Antwort: Veränderung durch ein zu B zusätzliches B' -Feld mit $B' \perp B$

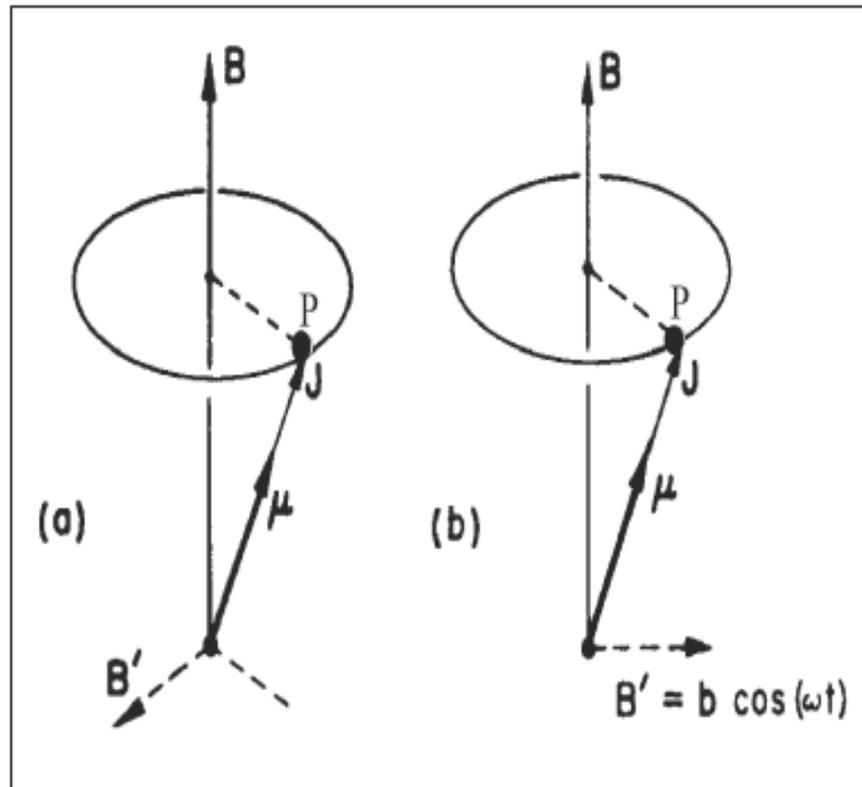


Abbildung 42:

Änderung der Präzessionswinkel durch horizontales Feld (a) oder durch oszillierendes Feld (b)

Kommt j bei P vorbei (das geschieht

$\frac{\omega_{\text{präz.}} z}{2\pi}$ mal in der Sekunde), wirke B' in der gezeigten Richtung.

z.B. $B' = B_0 \cdot \cos \omega_{\text{präz.}} \cdot t$. Start wie im Bild mit $t=0$.

→ Überlagerung durch Kegelöffnung von j um B' . Da j bei $P \perp B'$ ist B' Normalenvektor zu der Ebene, in der j den Kegelöffnungswinkel zu B ändert.

Magnetische Resonanz, wenn $\omega = \text{Präzessionsfreq.}$

NMR Spektrometer

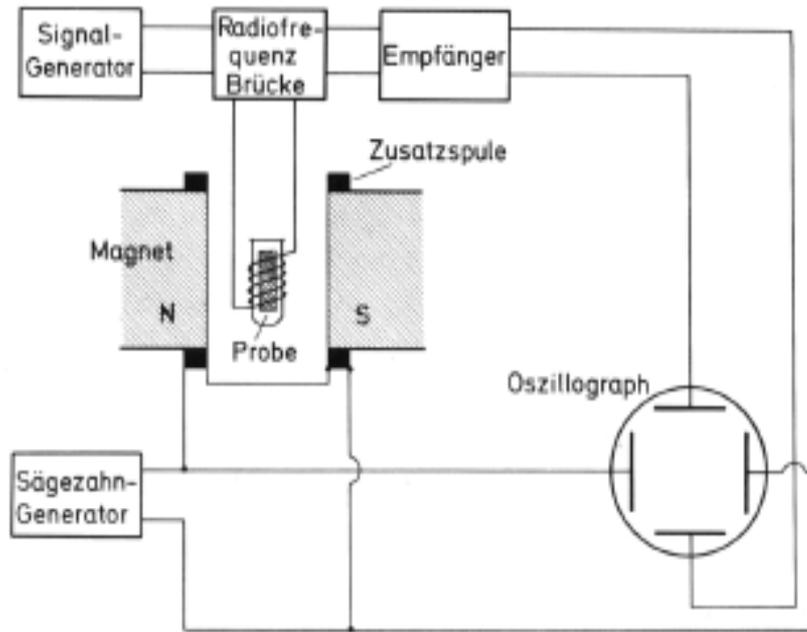


Abb. 20.18. Schema einer einfachen Kernspin-Resonanz-Apparatur. Die Probe befindet sich im Reagenzglas zwischen den Polschuhen eines homogenen Magneten. Das hochfrequente B_1 -Feld wird über eine Brücke und eine Induktionsspule eingestrahlt. Zum besseren Nachweis der Resonanz kann das B_0 -Feld durch eine Zusatzspule moduliert werden

B statisch und homogen und RF-Frequenz wird variiert (NMR)
oder umgekehrt (ESR)

Resonanz: Leistungsabfall am Empfänger

Bei NMR RF-Feld durch Spule möglich, da kapazitive Verluste ($\propto 1/\omega C$) nicht zu groß. Bei ESR im Mikrowellen Bereich Transport des RF-Feldes nur durch Hohlleiter und Resonanz in einem Mikrowellenkavität

NMR Spektrum

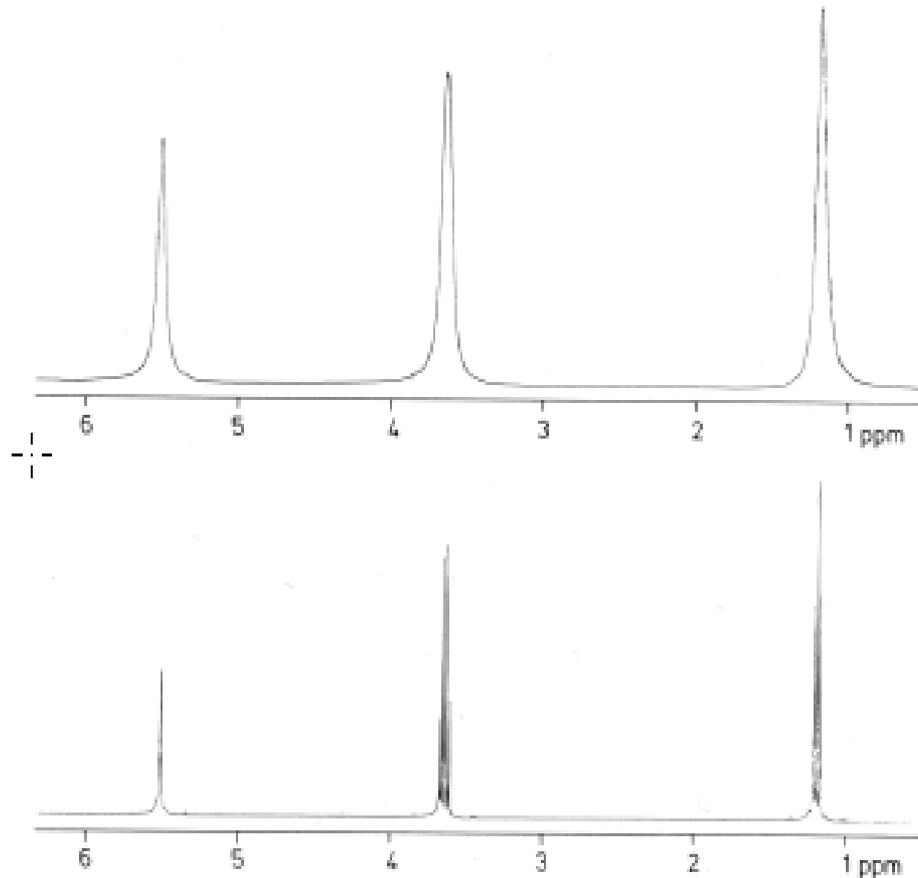


Abb. 20.20. Kernspinresonanz von Aethylalkohol, C_2H_5OH . Aufgetragen ist die Signalintensität am Empfänger als Funktion der Übergangsfrequenz. Diese ist in ppm (parts per million) relativ zu einem geeigneten Standard gemessen. Man sieht im oberen Teilbild 3 Signale mit dem Flächenverhältnis 1:2:3. Sie gehören zu den Protonenspins in der OH-, der CH_2 - und der CH_3 -Gruppe mit 1, 2 und 3 Protonen. Durch die unterschiedliche chemische Bindung unterscheiden sich die Resonanzfrequenzen der Protonen in den verschiedenen Bindungen um einige ppm. – Im unteren Teilbild ist dasselbe Spektrum mit höherer Auflösung gemessen. Das CH_2 -Signal ist jetzt durch indirekte Kernspin-Wechselwirkung mit den Protonen der CH_3 -Gruppe in ein Quartett aufgespalten, das CH_3 -Signal durch indirekte Wechselwirkung mit den CH_2 -Protonen in ein Triplett. – Die Protonen der OH-Gruppe werden rasch zwischen verschiedenen Molekülen ausgetauscht. Dadurch wird indirekte Wechselwirkung ausgemittelt und die Linie bleibt einfach

Magnetische Resonanz

"electron paramagnetic resonance" (EPR)
"nuclear magnetic resonance" (NMR)

Paramagnetische
Stoffe haben
ungepaarte
Elektronenspins

\vec{B} → Energieaufspaltung → Absorption HF

ESR/EPR: Energiedifferenz der Nachbarniveaus:

$$\Delta E = g_S \mu_B B_0 \quad (\text{für reinen Spinmagnetismus})$$

$$\nu = 28.026 \text{ GHz} \times B_0 \frac{1}{\text{Tesla}} \quad (\text{Mikrowellen / cm-Wellen})$$

NMR: Energiedifferenz Nachbarniveaus

$$\Delta E = g_I \mu_K B_0 \quad (\text{Paschen-Back-Fall})$$

$$\nu = 7.62 \text{ MHz} \times g_I B_0 \frac{1}{\text{Tesla}} \quad (\text{Radiowellen})$$

Anwendungen Magnetischer Resonanz

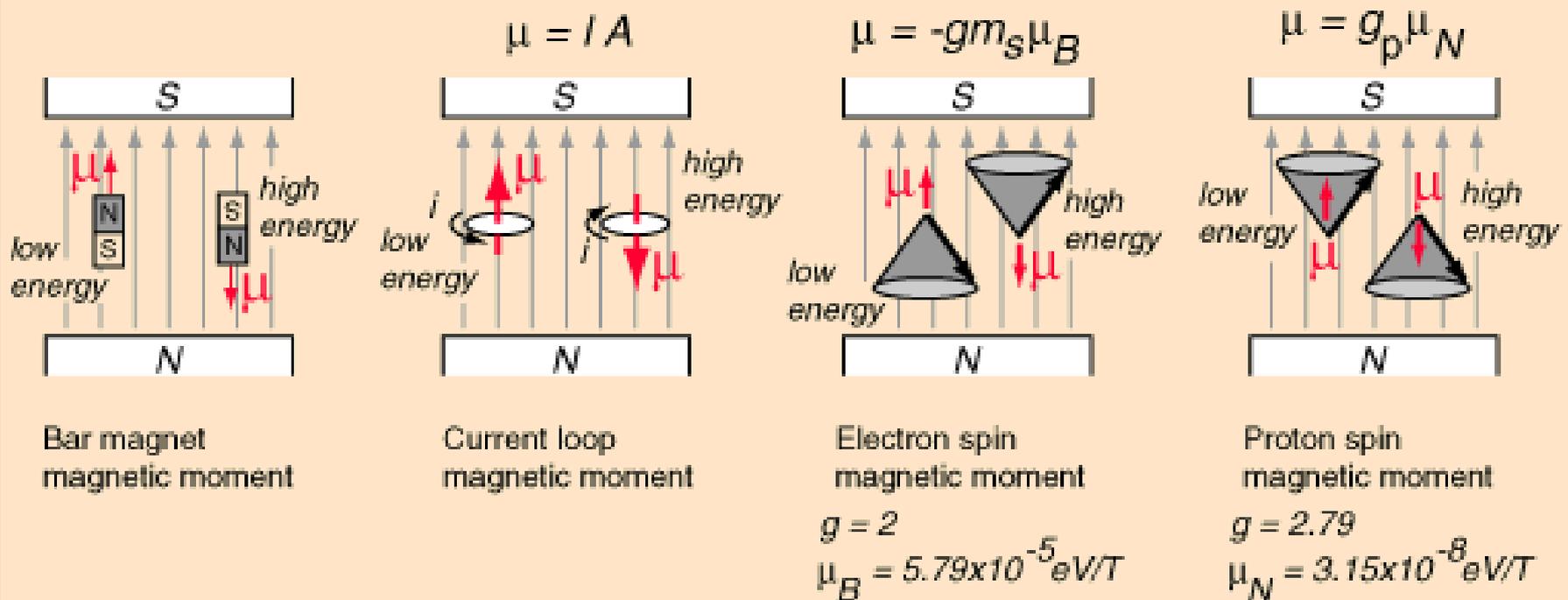
ESR/NMR:

Untersuchungen aller Art von paramagnetischen Zentren
($S \neq 0$) in Festkörperphysik und Chemie
(Einfluss Umgebung auf e^- ;
Beobachtung Änderung Valenzzustand ...)

NMR:

Konzentrationsmessung von Isotopen z. B. in der Medizin
„Kern-Spin-Tomographie“ (Umgebung mischt weniger mit)

Vergleich NMR und ESR



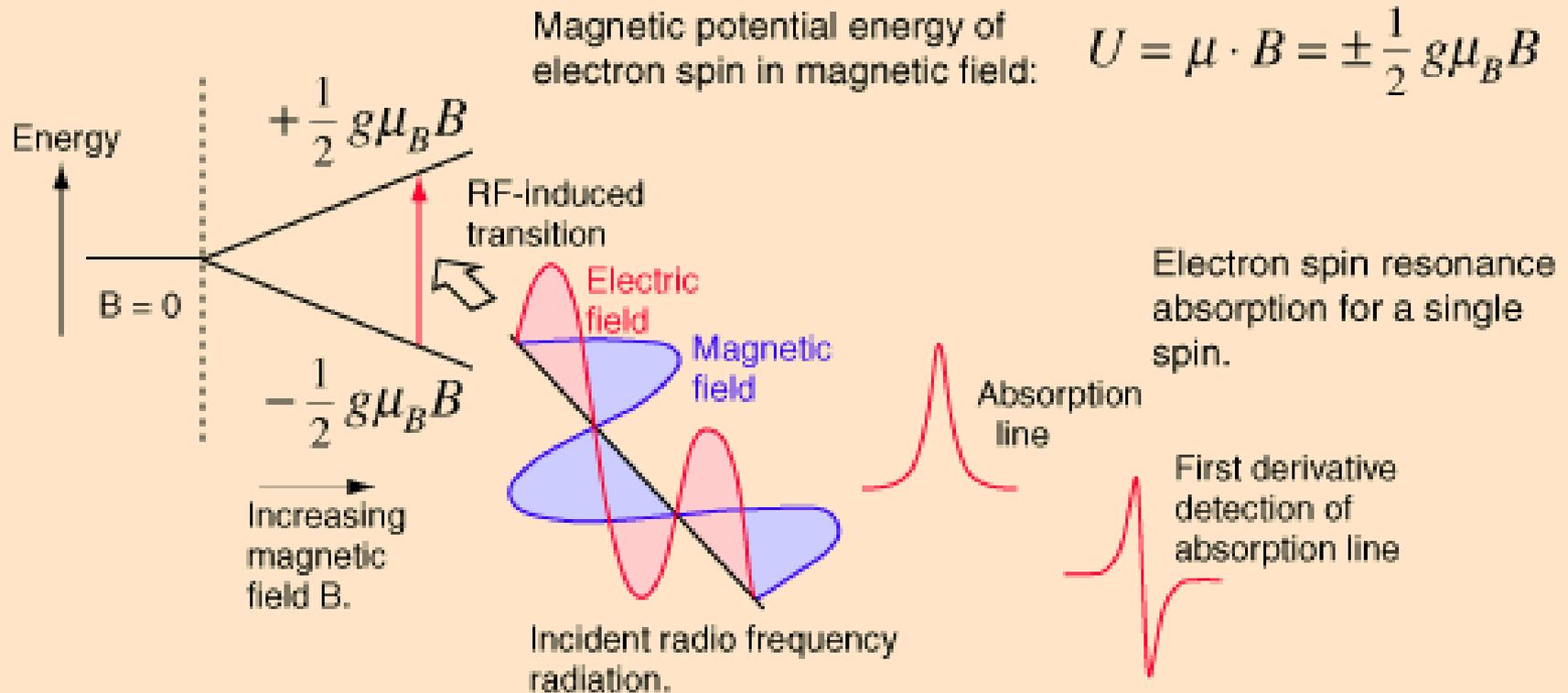
$$\omega_{\text{electron spin}} = \frac{2\mu_e B}{\hbar} = \frac{2 \cdot 2 \cdot \frac{1}{2} (5.79 \times 10^{-5} \text{ eV/T})(1\text{T})}{6.58 \times 10^{-16} \text{ eV} \cdot \text{s}} = 1.7608 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$$

$$\nu = \frac{\omega}{2\pi} = 28.025 \text{ GHz} \quad \text{Larmor frequency für 1 T}$$

$$\omega_{\text{proton spin}} = \frac{2\mu_p B}{\hbar} = \frac{2(2.79)(3.15 \times 10^{-8} \text{ eV/T})(1\text{T})}{6.58 \times 10^{-16} \text{ eV} \cdot \text{s}} = 2.6753 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$$

$$\nu = \frac{\omega}{2\pi} = 42.5781 \text{ MHz} \quad \text{Larmor frequency für 1 T}$$

Elektronenspinresonanz (ESR)



If the radio frequency excitation was supplied by a klystron at 20 GHz, the magnetic field required for resonance would be 0.71 Tesla, a sizable magnetic field typically supplied by a large laboratory magnet.

ESR-Spektrometer

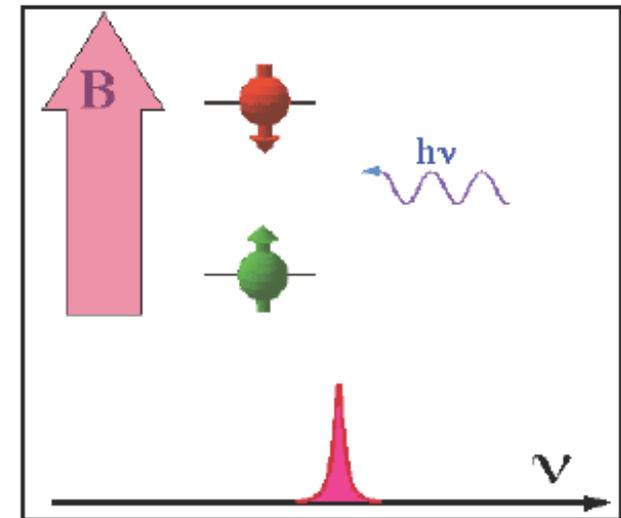
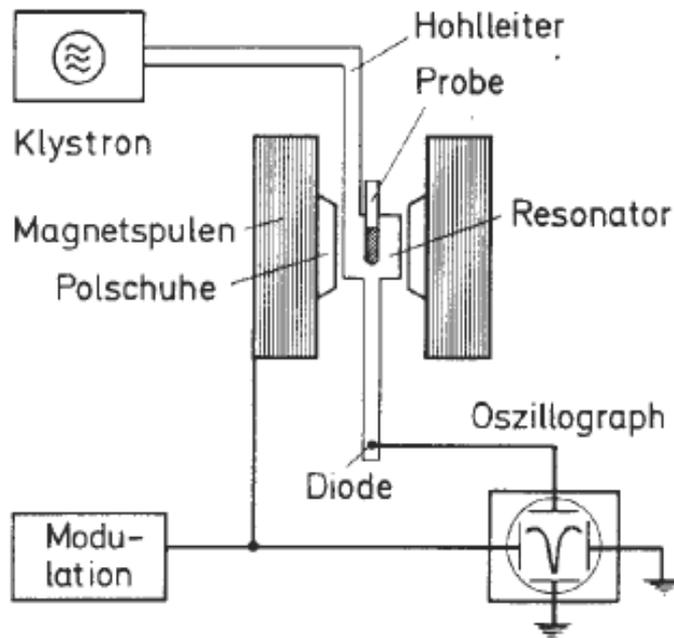
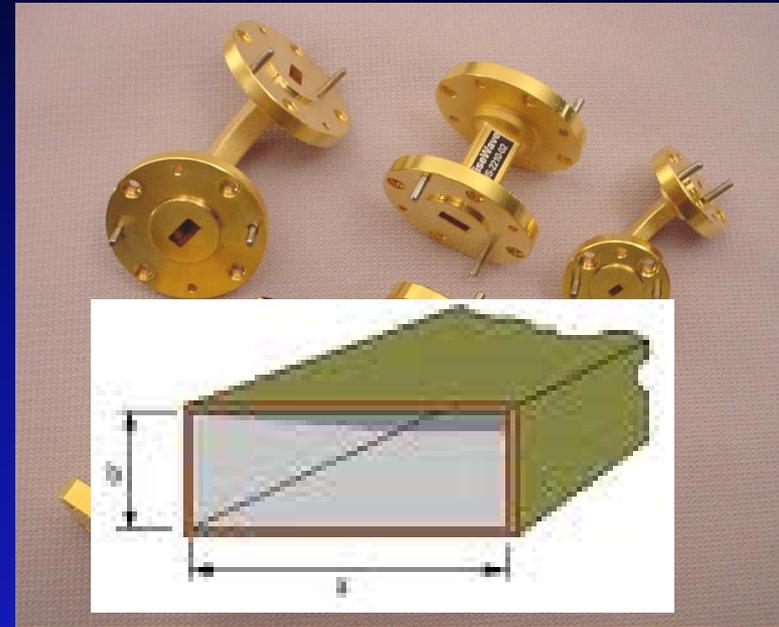


Abbildung 56: Schematische Darstellung des Versuchs. Die Spannung an den Spulen des Modulationsfeldes wird an die x -Ablenkung und das Signal der Diode an die y -Ablenkung eines Oszillographen gelegt. Im Falle der Resonanz nimmt das Signal in der Diode ab, da dem Feld Energie entzogen wird. Aus Haken Wolf, Atomphysik

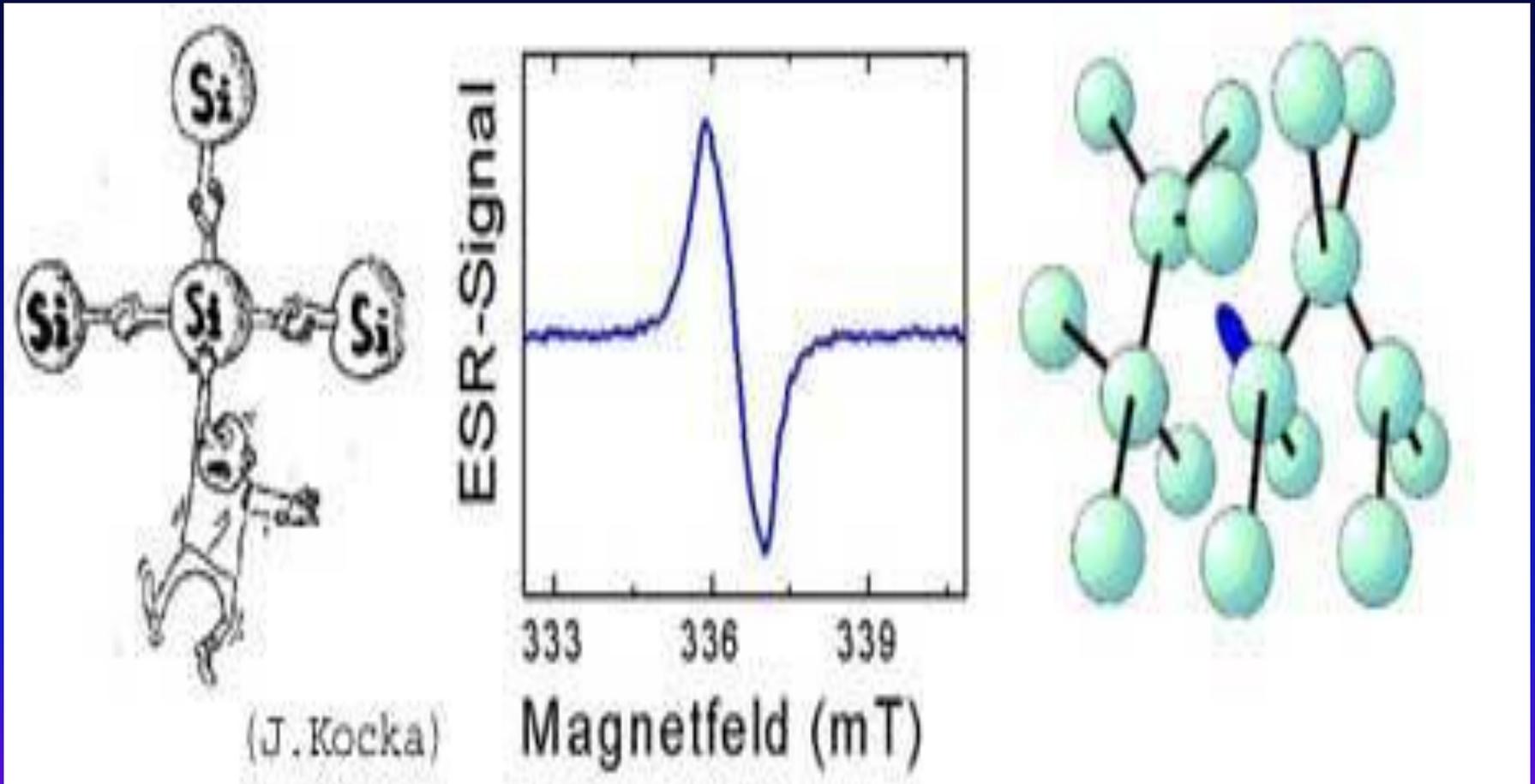
Energieabsorption bei der Resonanzfrequenz

ESR Spektrometer und Hohlleiter



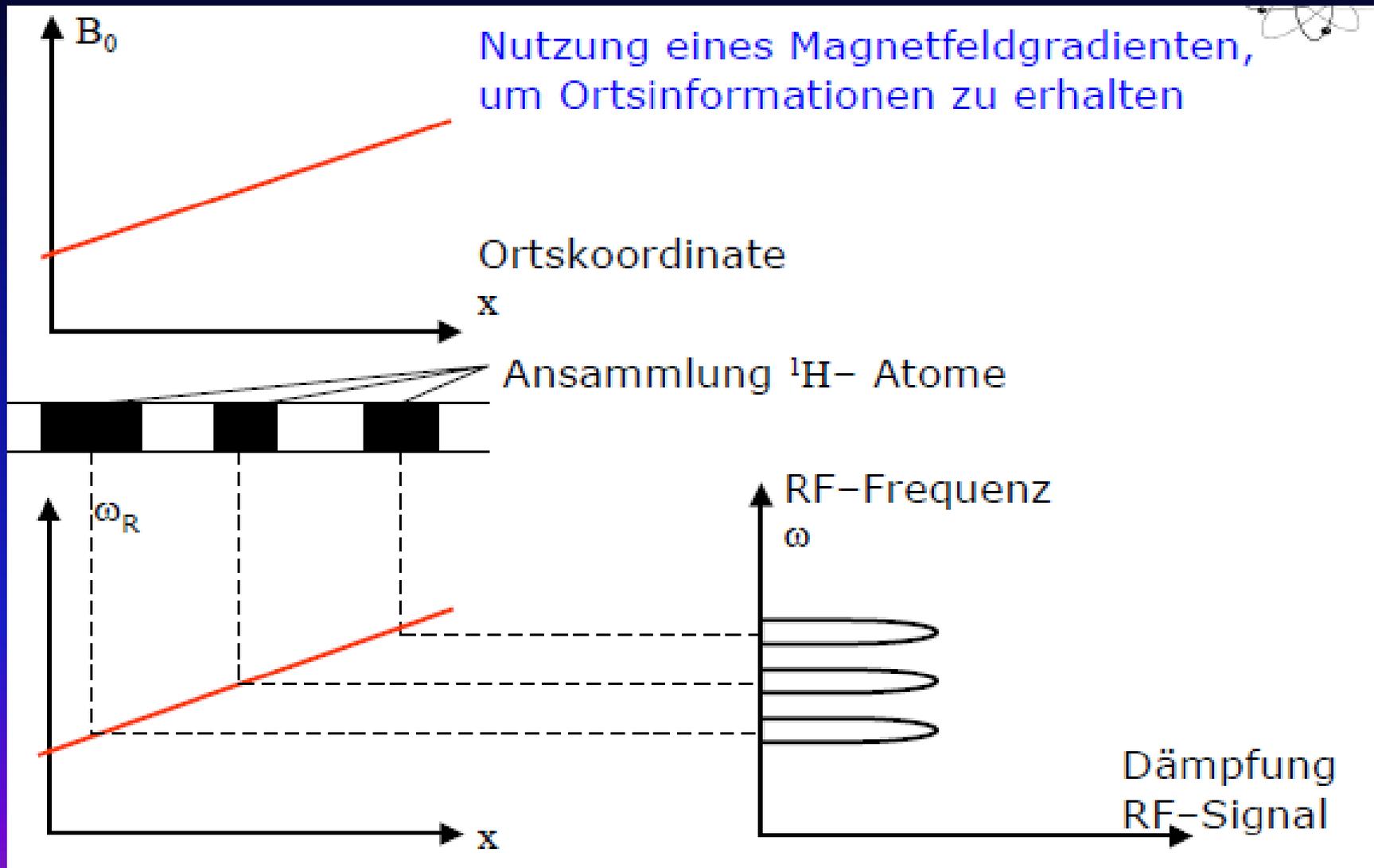
In waveguides the electric and magnetic fields are confined to the space within the guides. Thus no power is lost to radiation. Since the guides are normally filled with air, dielectric losses are negligible.

ESR Spektrum



Silicon dangling bond - its ESR signal - and structure in the Si-lattice

Prinzip der Kernspintomographie



Tricks der Kernspintomographie

Verschiedene Projektionen + Computer \Rightarrow 3D-Bild

Trick:

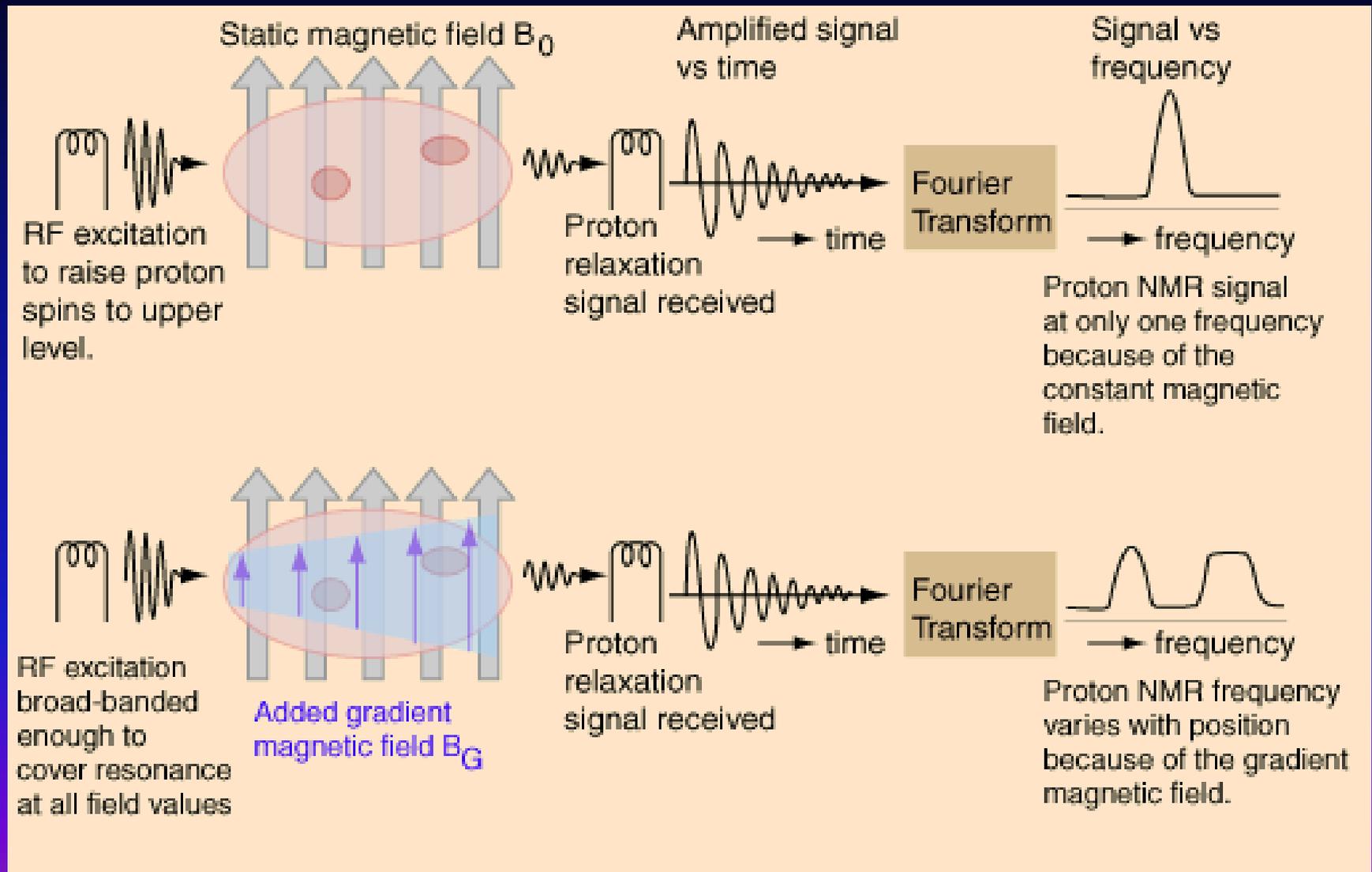
kurzer HF-Puls und Messung der von den Kernen erzeugten HF-Strahlung + Fourieranalyse

Für Interessierte:

Fourier-Transformationen in NMR, siehe z.B.

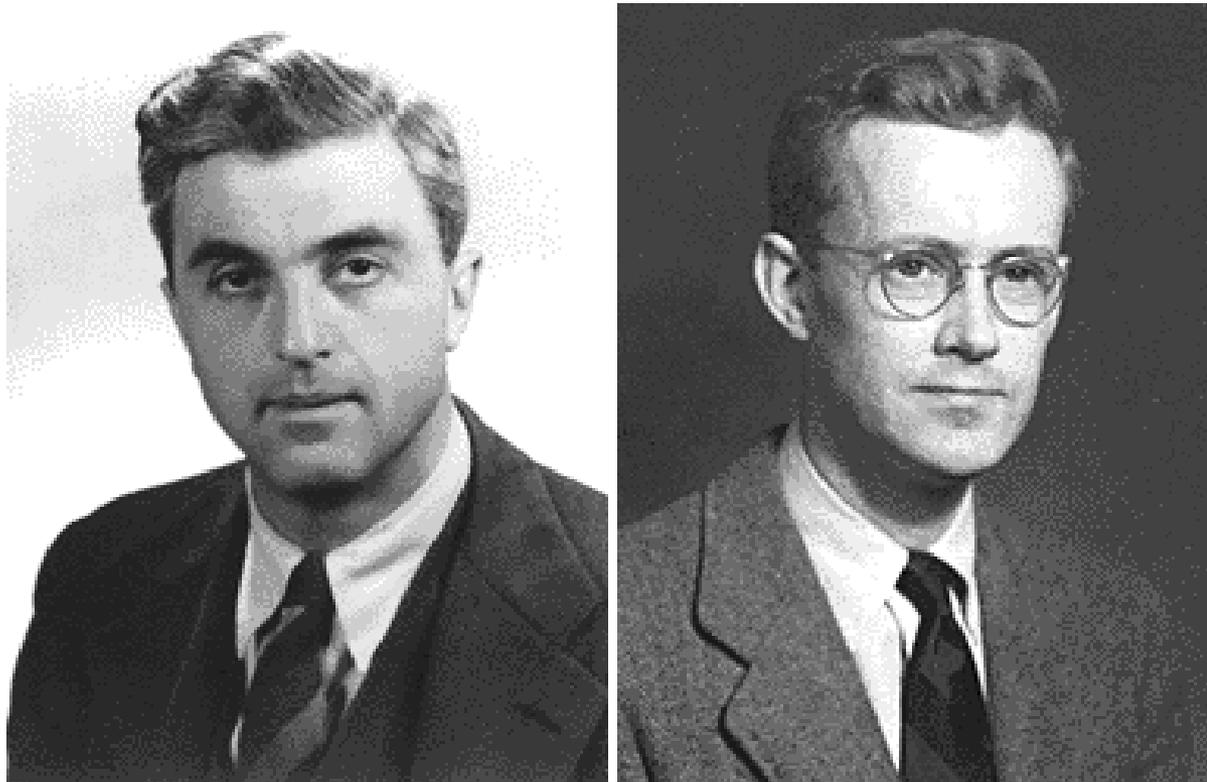
<http://www.cis.rit.edu/htbooks/nmr/inside.htm>

Gepulste Kernspinresonanz



Anfang der NMI (Nuclear Magnetic Imaging)

The foundations for imaging using magnetic resonance were laid in 1946 by Bloch and Purcell; Bloch at Stanford, studying liquids, and Purcell at Harvard, in solids. Though they received Nobel prizes for their discover, it was not until 1973 that nuclear magnetic resonance (NMR) was used to generate images.



[READ MORE ABOUT THE HISTORY OF MRI](#)

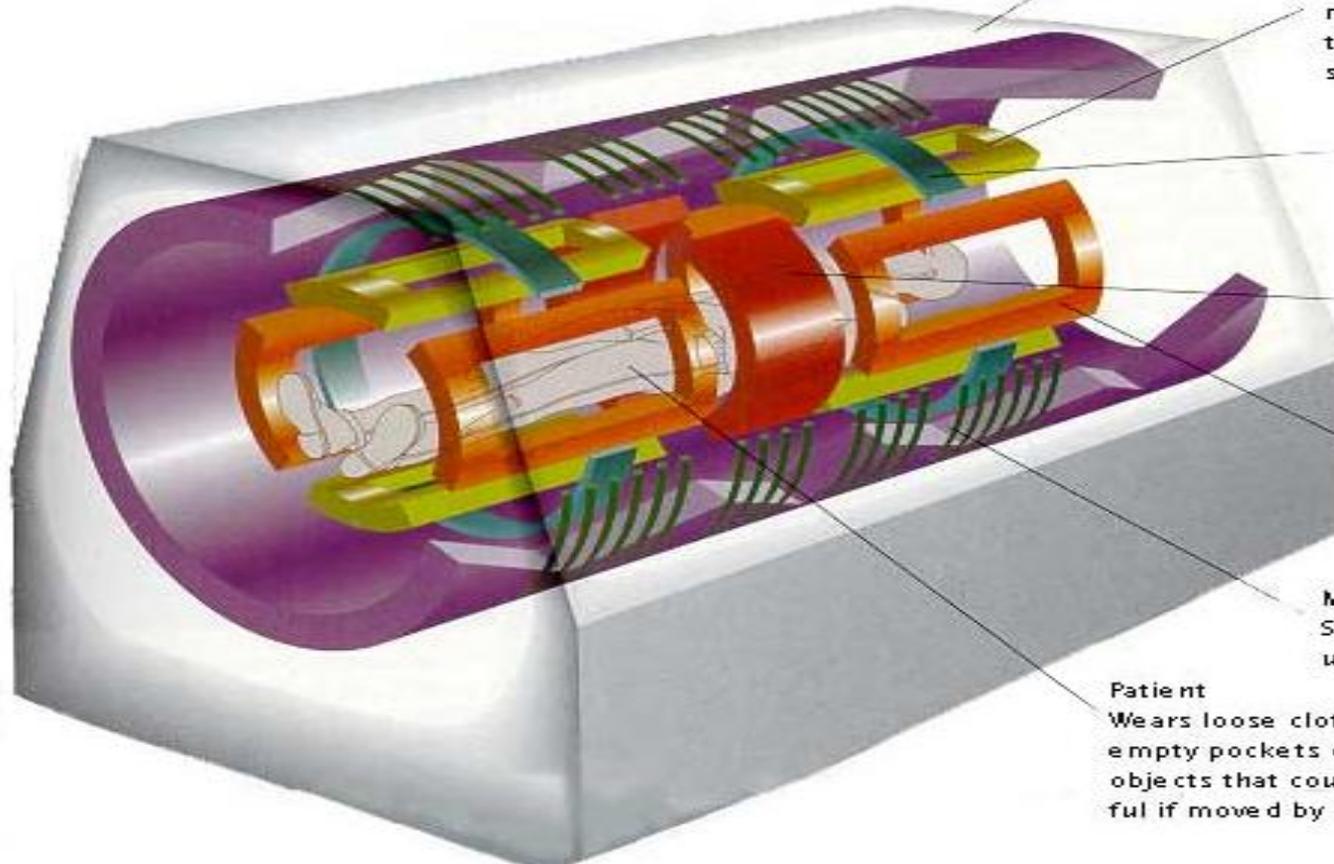
History of MRI

In 1990 Roy and Sherrington's paper 'On the regulation of blood supply of the brain' suggested that neural activity was accompanied by a regional increase in cerebral blood flow. Until 1990 there was no way of non-invasively measuring the flow of blood in cortical areas. Ogawa and Lee at the AT and T Bell Laboratories working on rodents discovered that the oxygenation level of blood acts as a contrast agent in MR images. They demonstrated that signals received from vessels were changed by drug-induced changes in blood flow from the brain. It was suggested that this is a consequence of changing the content of deoxyhemoglobin in the blood.

MRI scanner

CREATING REFINED ANATOMICAL IMAGES

Within the metallic cocoon of an MRI scanner, the patient is surrounded by four electromagnetic coils and the components of a transceiver



Scanner
Uses electromagnets and radio signals to produce cross-sectional images

Y Coil
Creates varying magnetic field from top to bottom across scanning tube

Z Coil
Creates varying magnetic field from head to toe within scanning tube.

Transceiver
Sends radio signals to protons and receives signals from them.

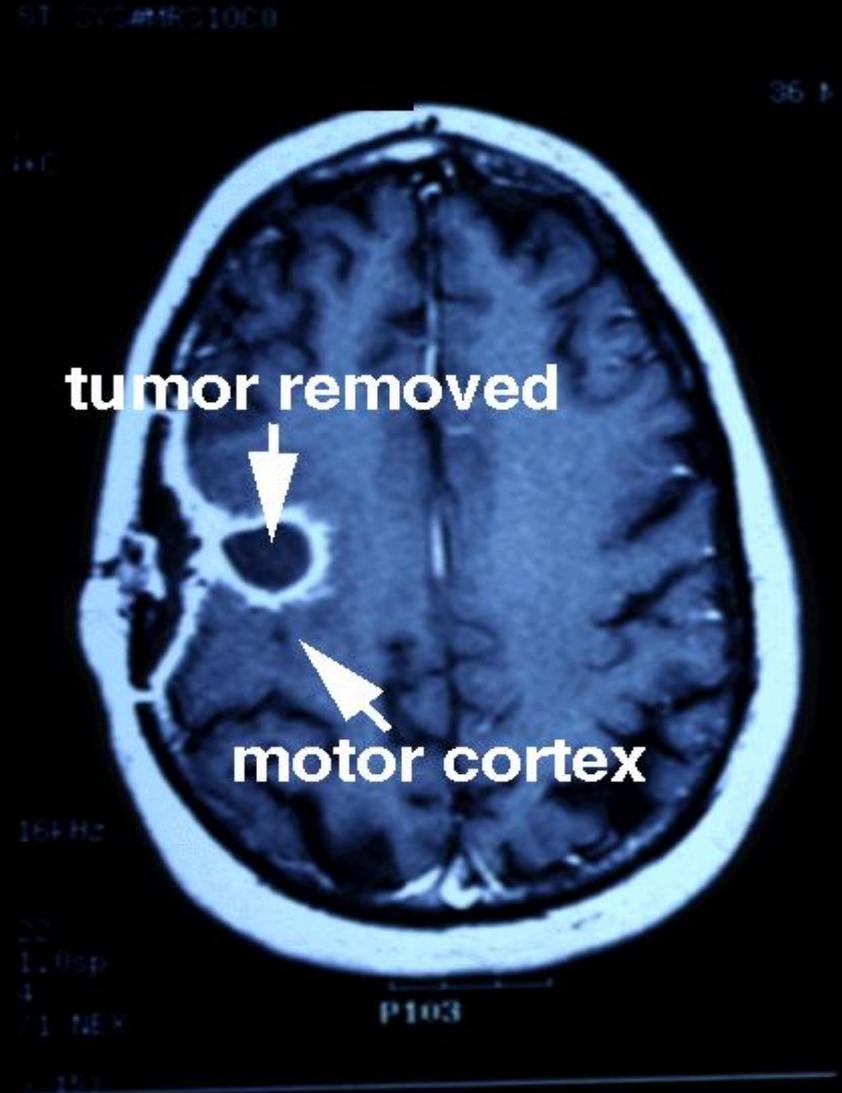
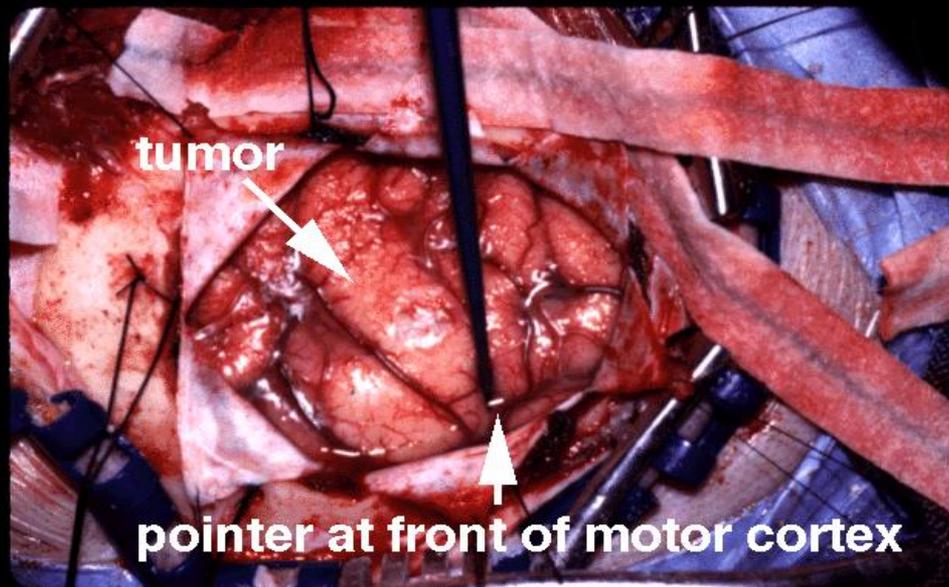
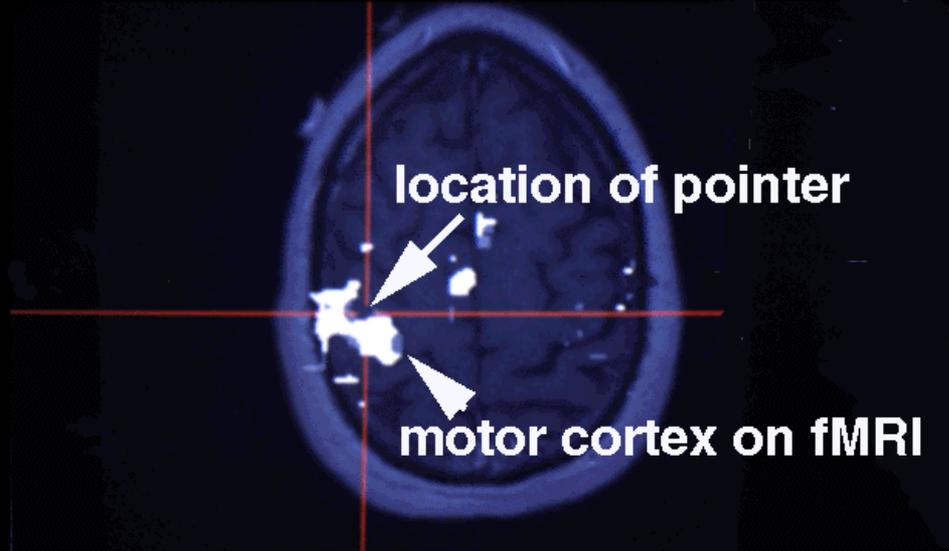
X coil
Creates varying magnetic field from left to right across scanning tube.

Main Coil
Surrounds patient with uniform magnetic field.

Patient
Wears loose clothing; must empty pockets of metallic objects that could prove harmful if moved by magnetic force

<http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/hframe.html>

functional MRI (=interactive MRI) Beispiel für "image guided robotic surgery"



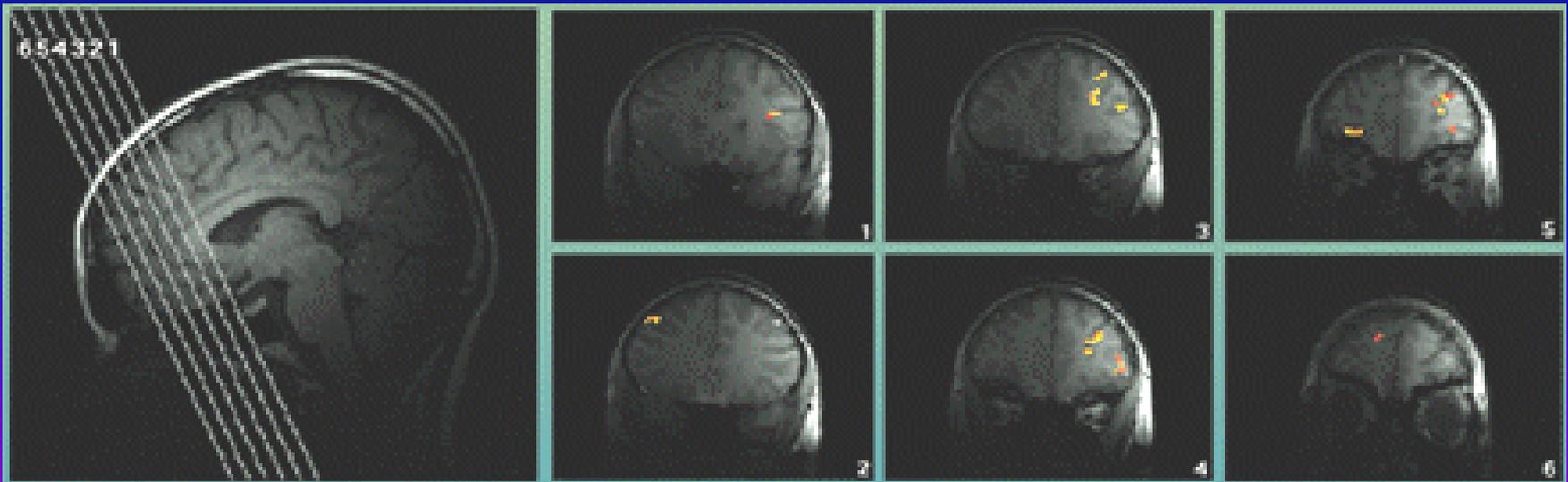
Violent Video Games Trigger Unusual Brain Activity in Aggressive Adolescents

Adolescents with disruptive behavior disorders (DBD) have different brain structure and brain activation patterns than nonaggressive adolescents.

When watching violent video games, aggressive adolescents had less brain activation than the nonaggressive control group.

Normal adolescents previously exposed to greater amounts of violent media also exhibited differences in brain function.

Adolescents with DBD showed abnormal development of the brain's frontal lobes.



Zum Mitnehmen

Aufspaltung der Spektrallinien im Magnetfeld kann im optischen Bereich (normaler und anomaler) Zeeman-Effekt, im Mikrowellenbereich (ESR) und Radiobereich (NMR) beobachtet werden.

NMR führt zu interessanten Anwendungen als 3D Imaging im Bereich der Medizin