

3 Die Grundlagen der Kernspinresonanz

Das Verfahren der Kernspinresonanz wurde in kondensierter Phase erstmals 1946 von Bloch (18) und Purcell (19) angewendet, nachdem es bereits rund 10 Jahre früher von Rabi (20) zur Messung des gyromagnetischen Verhältnisses von Kernen an Gasatomen benutzt worden war. Das Phänomen der Kernspinresonanz kann mit Hilfe der Quantenmechanik oder der Klassischen Elektrodynamik erklärt werden: die Quantenmechanik wird zur Beschreibung eines mikroskopischen Systems herangezogen, während die Klassische Elektrodynamik zur Betrachtung eines Ensembles von Spins angewendet wird. Um den Ursprung der Kernspinresonanz zu erklären, wird im folgenden ein kurzer Einblick in die Quantenmechanik gegeben.

3.1 Quantenmechanische Betrachtung des kernmagnetischen Momentes im äußeren Magnetfeld

Die quantenmechanische Zustandsgleichung für den nicht-relativistischen Fall wird Schrödinger-Gleichung genannt und lautet:

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \mathbf{H} \psi(\vec{r}, t), \quad (3-1)$$

wobei ψ die den Zustand eines quantenmechanischen Systems beschreibende Wellenfunktion, \hbar das Planck'sche Wirkungsquantum und \mathbf{H} den Hamiltonoperator darstellen. Wird \mathbf{H} als zeitunabhängig angenommen, kann die Gleichung in einen orts- und einen zeitabhängigen Anteil separiert werden. Der ortsabhängige Anteil der Eigenwertgleichung lautet:

$$\mathbf{H} \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}). \quad (3-2)$$

Die Energieeigenwerte E charakterisieren die stationären Zustände wie z.B. die Orbitale in Atomen des Schalenmodells. Der Übergang von einem Zustand $\psi(1)$ mit dem Energieeigenwert $E(1)$ in den Zustand $\psi(2)$ mit dem dazugehörigen Energieeigenwert $E(2)$ führt zur Emission oder Absorption von Energiequanten mit der Energie $E_{\text{quant}} = |E(1) - E(2)|$.

Dieser Effekt, der zu diskreten Spektrallinien führen kann, wird beispielsweise in Emissions- oder Absorptionsspektren beobachtet.

3.1.1 Der Zeeman-Effekt

Alle Atomkerne mit einer ungeraden Anzahl von Protonen und/oder Neutronen (z.B. ^1H , ^{13}C , ^{31}P , ^{23}Na) besitzen in ihrem Grundzustand einen von Null verschiedenen Kerndrehimpuls oder Kernspin \vec{I} . Das damit verbundene Dipolmoment $\vec{\mu}$ ist gegeben durch

$$\vec{\mu} = \gamma \vec{I} = \gamma \hbar \vec{I}, \quad (3-3)$$

wobei γ das gyromagnetische Verhältnis des Korns ist und \vec{I} der Kerndrehimpulsoperator. Wird ein solches kernmagnetisches Moment im äußeren Magnetfeld betrachtet, so beobachtet man den Zeeman-Effekt, der sich durch eine Aufspaltung von Spektrallinien äußert. Quantenmechanisch wird von der Aufhebung der Entartung von Energiewerten gesprochen. Nach dem Korrespondenzprinzip kann dieser Effekt in erster Näherung durch den ungestörten, nicht-relativistischen Hamilton-Operator (Zeeman-Operator) eines kernmagnetischen Moments im äußeren Magnetfeld erklärt werden, der für ein konstantes Magnetfeld in z-Richtung wie folgt lautet:

$$\mathbf{H}_{0,z} = -\gamma \vec{B}_0 \mathbf{I}_z, \quad (3-4)$$

wobei \vec{B}_0 das Magnetfeld und \mathbf{I}_z die z-Komponente des Drehimpulsoperators darstellen.

Die Schrödinger-Gleichung für eine solche stationäre Hamilton-Funktion kann durch Betrachtung des Drehimpulsoperators in Energieeigenwertgleichungen überführt werden. Die verschiedenen Verfahren zum Auffinden der Eigenwertgleichungen für Drehimpulsoperatoren sind in der Standardliteratur (21), (22), (23), (24) detailliert beschrieben.

Man erhält als Eigenwertgleichungen der Eigenfunktionen ψ_{I_m} für den Drehimpulsoperator \vec{I} und dessen z-Komponente:

$$\vec{I}^2 \psi_{I_m} = I(I+1)\psi_{I_m}, \quad (3-5)$$

$$\mathbf{I}_z \psi_{I_m} = m\psi_{I_m}, \quad (3-6)$$

wobei die Eigenwerte des Drehimpulsoperators die Werte $I=0,1,2,3\dots$ oder $I=\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2} \dots$ annehmen können. Für einen gegebenen Wert von I sind folglich nur diskrete Werte erlaubt, wobei die magnetische Quantenzahl m die Werte $-I, -I+1, \dots, -1, 0, 1, \dots, I-1, I$ annehmen kann. Somit ergeben sich insgesamt $2I+1$ Einstellmöglichkeiten des Drehimpulsvektors \vec{I} .

Mit Hilfe der Eigenwertgleichungen können die diskreten Energieeigenwerte E_m der Schrödinger-Gleichung gefunden werden:

$$E_m = \hbar\omega_L \cdot m , \quad (3-7)$$

mit der Larmor(kreis)frequenz

$$\vec{\omega}_L = -\gamma\vec{B}_0 . \quad (3-8)$$

Für den Wasserstoffkern, dessen Drehimpulsquantenzahl $\frac{1}{2}$ ist, nimmt m die Werte $-\frac{1}{2}$ und $\frac{1}{2}$ an. Daher existieren zwei Energieniveaus mit der Energiedifferenz:

$$\Delta E = \gamma\hbar B_0 , \quad (3-9)$$

d.h. es können Energiequanten bei der Larmorfrequenz induziert absorbiert und emittiert werden; dieser Effekt zeichnet die Kernspinresonanz aus.

3.2 Molekulare Wechselwirkungen

Die Einstrahlung elektromagnetischer Wechselfelder, deren Frequenzen die Resonanzbedingung (3-8) erfüllen, verändert die Besetzungszahlen der beiden Energieniveaus. Überwiegend Dipol-Dipol-Wechselwirkungen mit anderen Kernen (Gitter) ermöglichen den strahlungslosen Transfer der Anregungsenergie auf die Umgebung und damit die Rückkehr ins thermische Gleichgewicht (Spin-Gitter-Wechselwirkung). Die charakteristische Zeitkonstante hierfür heißt longitudinale Relaxationszeit T_1 . Die reziproke Relaxationszeit wird als longitudinale Relaxationsrate R_1 bezeichnet. Sie setzt sich aus einem intra- und einem intermolekularen Anteil zusammen. Die intermolekulare Dipol-Dipol-Wechselwirkung zwischen Spins wird sowohl durch Rotation und Translation von Molekülen als auch durch Oszillation von Molekülteilen gegeneinander - wobei es sich hier um eine

intramolekulare Wechselwirkung handelt - hervorgerufen.

3.2.1 Spin-Rotation-Wechselwirkung

Kohärente molekulare Rotationen generieren ein magnetisches Feld, das mit dem Kernspin in Wechselwirkung stehen kann. Man spricht von der sogenannten Spin-Rotation-Wechselwirkung. Ihre Existenz führt zu einer qualitativen Modifizierung des Kernspektrums (Aufhebung der Entartung) und darf daher auf keinen Fall vernachlässigt werden, obwohl ihr Anteil an der Gesamtenergie relativ gering ist.

3.2.2 Dipol-Dipol-Wechselwirkung

Befinden sich in der Umgebung des betrachteten Atomkerns ungepaarte Elektronen oder Atomkerne, die ebenfalls ein magnetisches Dipolmoment besitzen, so muß die magnetische Dipol-Dipol-Wechselwirkung berücksichtigt werden. Der Hamiltonoperator \mathbf{H}_{DD} für zwei wechselwirkende Kerne ist ein Tensor 2. Stufe, der den Spin $\vec{\mathbf{I}}$ des beobachteten Kerns mit dem kernspezifischen gyromagnetischen Verhältnis γ_I und dem Spin $\vec{\mathbf{S}}$ mit dem kernspezifischen gyromagnetischen Verhältnis γ_S des wechselwirkenden Kerns bzw. Elektrons verknüpft:

$$\mathbf{H}_{DD} = \mu_0 \hbar^2 \gamma_I \gamma_S r_{IS}^{-3} \left[\vec{\mathbf{I}} \cdot \vec{\mathbf{S}} - \frac{3(\vec{\mathbf{I}} \cdot \vec{r}_{IS})(\vec{\mathbf{S}} \cdot \vec{r}_{IS})}{r_{IS}^2} \right] \quad (3-10)$$

wobei r_{IS} den Abstand der Kerne und μ_0 die magnetische Induktionskonstante darstellen. Da die Spur des Hamilton-Operators verschwindet, wirkt sich diese Wechselwirkung im Falle kleiner Moleküle in Flüssigkeiten nicht auf die Larmorfrequenz aus. Es sei aber erwähnt, daß beide Dipole ein magnetisches Dipolfeld $\vec{\mathbf{B}}_{DD}$ erzeugen, dessen z-Komponente folgende Form aufweist:

$$B_{DD,z} = \pm \mu_0 \frac{\mu_S}{r_{IS}^3} (3 \cos^2 \theta - 1), \quad (3-11)$$

wobei θ den Winkel zwischen \vec{r}_{IS} und $\vec{\mathbf{B}}_0$ bezeichnet und μ_S der Betrag des zum Spin $\vec{\mathbf{S}}$ dazugehörigen magnetischen Moments ist. Das Vorzeichen hängt vom Spinstatus des Wechselwirkungspartners $\vec{\mathbf{S}}$ ab.

Die Bewegungen der Spins in dem untersuchten Volumen werden als die eines Ensembles betrachtet. Zu Beginn der Betrachtung des Spinensembles ist die Wechselwirkung zwischen den Spins maximal. Mit der Zeit nimmt die Wechselwirkung ab bis sie schließlich verschwindend gering wird. Bei einem Vorliegen eines stationären Zustands läßt sich die zeitliche Abnahme der Wechselwirkung zwischen den Spins mit einer Autokorrelationsfunktion beschreiben. Sind die Prozesse stochastischer Natur (Brown'sche Molekularbewegung), so ist die Abnahme der Korrelation eine monoton fallende Zeitfunktion. Als charakteristische Zeitkonstante für die Abnahme der Dipol-Dipol-Wechselwirkung dient die Autokorrelationszeit τ_c (siehe 3.2.5).

3.2.3 Skalare Kopplung

Eine weitere charakteristische Zeitkonstante ist die transversale Relaxationszeit T_2 , welche die Dephasierung der Spins charakterisiert (Spin-Spin-Wechselwirkung). Die dazugehörige Relaxationsrate ist die transversale Relaxationsrate R_2 . Neben der dipolaren Kopplung zweier Kernspins \vec{I} und \vec{S} findet man eine indirekte Kopplung zweier Spins, die durch Elektronen kovalenter Bindungen zustande kommt: die skalare Kopplung oder auch Spin-Spin-Kopplung. Die Wechselwirkung der Bindungselektronen mit dem Kernspin ist unabhängig vom äußeren Magnetfeld und führt daher bei jeder Feldstärke zur gleichen Aufspaltung. In Flüssigkeiten wird die Anisotropie der Kopplung durch die Bewegung des Moleküls herausgemittelt. Der isotrope Anteil ist in Flüssigkeiten beobachtbar und läßt sich mit Hilfe einer skalaren Kopplungskonstante beschreiben.

Tabelle 3.1 gibt zusammenfassend eine Übersicht der wichtigsten Wechselwirkungen:

WECHSELWIRKUNG	BETROFFENE KOMPONENTEN	RELAXATIONS-PROZESSE
Spin-Spin-Wechselwirkung	M_x, M_y	Transversale Relaxationszeit T_2
Spin-Gitter-Wechselwirkung	M_x, M_y, M_z	Longitudinale Relaxationszeit T_1 Transversale Relaxationszeit T_2

Tab. 3.1 Übersicht der Wechselwirkungen und der jeweils betroffenen Komponenten des Magnetisierungsvektors \vec{M} (vgl. 3.3.2) und daraus resultierende Prozesse.

3.2.4 Chemische Verschiebung (Chemical Shift)

Der Effekt, welcher zur Verschiebung von Kernspinresonanzen in einer chemischen Umgebung führt, wird als „Chemical Shift“ bezeichnet. Eine solche chemische Verschiebung

wurde erstmals von W. G. Proctor et al. (25) und W. C. Dickson (26) nachgewiesen. Die Resonanzfrequenz ändert sich dabei auf charakteristische Weise. Für das Wasserstoffatom ist die wichtigste physikalische Ursache die diamagnetische Abschirmung des Magnetfeldes am Kernort durch die Elektronenverteilung. Die Stärke der chemischen Verschiebung wird mit Hilfe der Abschirmkonstanten σ und mit dem resultierenden effektiven Feld \vec{B}_{eff} angegeben, die durch

$$\vec{B}_{\text{eff}} = (1 - \sigma)\vec{B}_0 \quad (3-12)$$

definiert ist. Die resultierende Resonanzbedingung ergibt sich damit zu:

$$\vec{\omega} = -\gamma(1 - \sigma)\vec{B}_0. \quad (3-13)$$

Der Hamilton-Operator \mathbf{H}_{CS} für die chemische Verschiebung läßt sich mit Hilfe eines Abschirmtensors 2. Stufe \mathbf{s}_T angeben, da bei asymmetrischer elektronischer Umgebung die Stärke der Abschirmung relativ zur Feldrichtung variiert:

$$\mathbf{H}_{\text{CS}} = -\gamma\hbar \vec{B} \cdot \mathbf{s}_T \cdot \vec{I}. \quad (3-14)$$

In Flüssigkeiten geht die Richtungsabhängigkeit der Abschirmung aufgrund der Rotation der Moleküle verloren.

Die chemische Verschiebung wird in der Spektroskopie ausgenutzt. Da eine Absolutbestimmung der Frequenzverschiebung meßtechnisch sehr schwierig ist, wird die Verschiebung relativ zu der Referenzlinie des Tetramethylsilans mit der Frequenz ω_R gemessen und die Differenz $(\omega - \omega_R)$ der Resonanzfrequenzen wird durch eine dimensionslose Konstante relativ zur Betriebsfrequenz $\omega_0 = \gamma B_0$ des Tomographen in „parts

per million“ (ppm) angegeben: $\delta = \frac{\omega - \omega_R}{\omega_0} \cdot 10^6$. So ergibt sich eine Skala, die unabhängig

von der Spektrometerfrequenz ist. In der Bildgebung ist die chemische Verschiebung eher unerwünscht, da sie eine Verschiebung der Fettanteile des Gewebes verursacht. Daher ist eine Fettunterdrückung bei der Arbeit mit höheren Feldstärken unumgänglich.

3.2.5 Quantenmechanische Betrachtung der Relaxationsmechanismen

Der Austausch zwischen zwei Zeeman-Niveaus kann auch mit Photonen der zeitlich statistisch schwankenden lokalen magnetischen Induktion erfolgen, wie sie von der Gesamtheit der benachbarten Kerne mit Spin \vec{I} und/oder ungepaarten Elektronen mit Spin \vec{S} hervorgerufen werden. In beiden Fällen lassen sich Übergangswahrscheinlichkeiten aus einer zeitabhängigen Störungsrechnung 1. Ordnung nach Dirac gewinnen und die Relaxationsraten $1/T_1$ und $1/T_2$ sind dann als Kombination solcher Übergangswahrscheinlichkeiten darstellbar. Wird beispielhaft ein Spin \vec{I} betrachtet, erfährt er von möglicherweise vorhandenen Spins \vec{S} ungepaarter Elektronen mit magnetischen Momenten $\vec{\mu}$ ganz klassisch dipolare lokale Zusatzfelder $\vec{B}_{\text{lok}}(\vec{r}(t))$, wobei der jeweilige Verbindungsvektor $\vec{r}(t)$ eine zeitlich schwankende Größe ist. Existiert in der durch die Fouriertransformation zu ermittelnden Spektraldichtefunktion $J(\omega)$ an der Stelle ω_0 eine endliche Amplitude, so entsteht eine Übergangswahrscheinlichkeit.

Zur Durchführung dieser Rechnung müssen zwei Annahmen gemacht werden: über die Art der Wechselwirkung (beispielsweise Dipol-Dipol-, elektrische Quadrupol-, Skalar-, auch Fermi-Kontakt-, Spin-Bahn-Wechselwirkung, ...) ausgedrückt in Kombinationen der Komponenten der dazugehörigen dimensionslosen Operatoren \vec{I} , \vec{S} und über die Art der Bewegung der die Spins tragenden Ionen, Atome, Moleküle bzw. Molekülteile (beispielsweise rotatorische Diffusion, translatorische Diffusion, Oszillation, Ersetzungsstöße innerhalb einer Hydrathülle, ...). Mit diesen Annahmen kann man im Gesamt-Hamilton-Operator $\mathbf{H}=\mathbf{H}_0+\mathbf{H}'(t)$ mit \mathbf{H}_0 als Zeeman-Operator den Störoperator $\mathbf{H}'(t)$ immer darstellen als $\mathbf{H}'(t)=\sum \mathbf{A}_j \cdot \mathbf{F}_j(t)$. Wobei \mathbf{A}_j nur Kombinationen der Komponenten \vec{I} , \vec{S} enthält, d.h.

die Annahme über die Art der Wechselwirkung und $\mathbf{F}_j(t)$ nur die zeitlich statistisch schwankenden Raumkoordinaten $\vec{r}(t)$, d.h. die Annahme über die Art der Relativbewegung.

Beispiel 1: Für die magnetische Dipol-Dipol-Wechselwirkung beinhaltet die oben angegebene Summe fünf Terme, die für $j=0$ zur Übergangsfrequenz 0, für $j=\pm 1$ zur Übergangsfrequenz ω_0 und für $j=\pm 2$ zur Übergangsfrequenz $2\omega_0$ führen. In diesem Fall ergeben sich die gesuchten Relaxationsraten zu

$$\frac{1}{T_{1,II}} = \frac{2\gamma_I^4 \hbar^2 N_I \tau_c}{d^3} [0,2 \cdot f(\omega_0 \tau_c) + 0,8 \cdot f(2\omega_0 \tau_c)], \quad (3-15)$$

$$\frac{1}{T_{1,IS}} = \frac{3/4 \gamma_I^2 \gamma_S^2 \hbar^2 N_S \tau_c}{d^3} [0,2 \cdot f(\omega_0 \tau_c) + 0,8 \cdot f(2\omega_0 \tau_c)], \quad (3-16)$$

$$\frac{1}{T_{2,II}} = \frac{2\gamma_I^4 \hbar^2 N_I \tau_c}{d^3} [0,3 \cdot f(0) + 0,5 \cdot f(\omega_0 \tau_c) + 0,2 \cdot f(2\omega_0 \tau_c)], \quad (3-17)$$

$$\frac{1}{T_{2,IS}} = \frac{3/4 \gamma_I^2 \gamma_S^2 \hbar^2 N_I \tau_c}{d^3} [0,3 \cdot f(0) + 0,5 \cdot f(\omega_0 \tau_c) + 0,2 \cdot f(2\omega_0 \tau_c)], \quad (3-18)$$

mit $0 \leq f(\dots) \leq 1$, $0 \leq [\dots] \leq 1$ abhängig von der Art der Diffusion und dem Abstand d der Spins.

Beispiel 2: Für eine rotatorische Diffusion (=Debye'sches Bild), wie in der Behandlung des parelektrischen Verhaltens, nehmen die Funktionen $f(\dots)$ die einfache Gestalt an:

$$f^{\text{rot}}(\omega_0 \tau_c^{\text{rot}}) = \frac{1}{1 + (\omega_0 \tau_c^{\text{rot}})^2}, \quad \tau_c = 4\pi \eta r^3 / k_B T, \quad (3-19)$$

mit der Viskosität η , der Boltzmann-Konstante k_B und der absoluten Temperatur T .

3.3 Klassische Betrachtung der Magnetisierung im äußeren Magnetfeld

Bisher wurde das Verhalten eines Spinsystems im äußeren Magnetfeld betrachtet, wohingegen die NMR-Methodik immer Spin-Ensembles untersucht. Im Anschluß wird gezeigt, wie ein solches Ensemble klassisch zu beschreiben ist.

3.3.1 Die Boltzmann-Verteilung

In einer makroskopischen Probe werden die Energieniveaus gemäß der Boltzmann-Statistik populiert, d.h. im thermischen Gleichgewicht ist die Besetzung gegeben durch:

$$\frac{N_{-1/2}}{N_{1/2}} = \exp\left(-\frac{\Delta E_N}{k_B T}\right), \quad (3-20)$$

wobei $N_{-1/2}$ und $N_{1/2}$ die Anzahl der parallel und antiparallel zur Feldrichtung orientierten z-Komponente der Spins darstellen (siehe Abbildung 3.1).

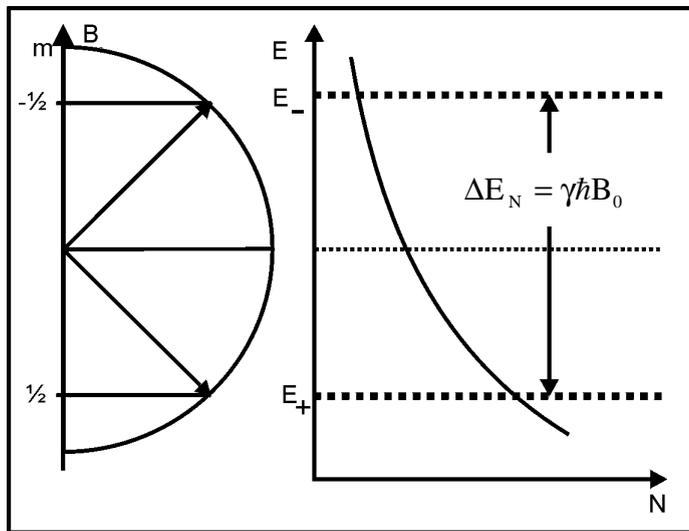


Abb. 3.1 Ausrichtung der z-Komponente des Kernspins in einem äußeren Magnetfeld und Verteilung auf die Energieniveaus nach Boltzmann.

3.3.2 Der Magnetisierungsvektor

Da für Magnetfelder das Superpositionsprinzip gilt, können die magnetischen Momente der Spins einer Probe als Isochromaten betrachtet und summiert werden. Für N magnetische Momente folgt die Magnetisierung dann zu:

$$\vec{M} = \sum_j^N \vec{\mu}_j \cdot \frac{1}{V} \quad (3-21)$$

und ist damit der Magnetisierungsvektor für ein isochromatisches Spin-Ensemble. Der Betrag der Nettomagnetisierung M_0 ergibt sich aus der Boltzmann-Verteilung:

$$M_0 = \frac{1}{2} N \gamma \hbar \tanh \left(-\frac{\gamma \hbar B_0}{2k_B T} \right). \quad (3-22)$$

Das Spin-Ensemble bildet demzufolge einen Magnetisierungsvektor \vec{M} , dessen Bewegungsgleichung auch klassisch beschrieben werden kann, und unter Zuhilfenahme der irreversiblen Ausgleichsterme ergeben sich die im Anschluß behandelten Bloch'schen Gleichungen.

3.3.3 Die Bloch'schen Gleichungen

Wird der Magnetisierungsvektor \vec{M} aus seiner parallel zum externen Feld \vec{B}_0 gerichteten Orientierung ausgelenkt, ergibt sich folgendes Drehmoment pro Volumen:

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{M}}{dt} = \vec{M} \times \vec{B}_0. \quad (3-23)$$

Dieses Drehmoment versetzt den Magnetisierungsvektor in eine Präzessionsbewegung um die magnetische Feldrichtung. Die Kreisfrequenz für ein statisches Magnetfeld \vec{B}_0 in z-Richtung ist wieder die Larmorfrequenz entsprechend der Gleichung (3-8).

Die Präzessionsbewegung unterliegt Energie- und Drehimpulsverlusten, die von F. Bloch zum ersten Mal mit Hilfe der longitudinalen Relaxationszeit T_1 und der transversalen Relaxationszeit T_2 empirisch beschrieben wurden (18).

3.3.4 Die Bloch'schen Gleichungen im Laborsystem

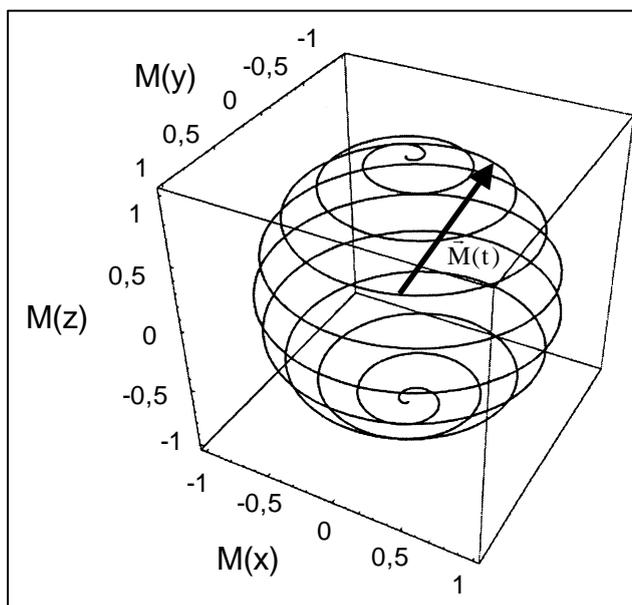


Abb. 3.2 Die Bewegung des Magnetisierungsvektors $\vec{M}(t)$ nach einer kurzen Störung ergibt sich aus den Bloch'schen Gleichungen. Die Pfeilspitze des Vektors verläuft in einer spiralförmigen Bahn, wobei sie an die Oberfläche einer Kugel gebunden ist.

Die Bewegungsgleichung enthält zusätzlich zur Form (3-23) Relaxationsterme und sieht dann im Laborsystem wie folgt aus:

$$\begin{pmatrix} \dot{M}_x \\ \dot{M}_y \\ \dot{M}_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/T_2 & \gamma B_0 & 0 \\ \gamma B_0 & 1/T_2 & 0 \\ 0 & 0 & -1/T_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_x \\ M_y \\ M_z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ M_0/T_1 \end{pmatrix} \quad (3-24)$$

mit der Gleichgewichtsmagnetisierung M_0 .

Wird nun senkrecht zum permanenten Feld \vec{B}_0 ein magnetisches Wechselfeld der Form $\vec{B}_1(t) = B_1 \cos(\omega_0 t) \vec{e}_x + B_1 \sin(\omega_0 t) \vec{e}_y$ mit der Frequenz $\omega_0 = -\gamma B_0$ und einer zeitlichen Dauer $t_{\text{HF}} \ll T_1, T_2$ eingestrahlt, so liefern die Bloch'schen Gleichungen für diese kurzen Einstrahlzeiten folgende Lösungen:

$$\begin{pmatrix} M_x(t_{\text{HF}}) \\ M_y(t_{\text{HF}}) \\ M_z(t_{\text{HF}}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_0 \sin(\omega_0 t_{\text{HF}}) \sin(\omega_1 t_{\text{HF}}) \\ -M_0 \cos(\omega_0 t_{\text{HF}}) \sin(\omega_1 t_{\text{HF}}) \\ M_0 \cos(\omega_1 t_{\text{HF}}) \end{pmatrix} \quad (3-25)$$

mit der Kreisfrequenz ω_1 des \vec{B}_1 -Feldes.

Der Magnetisierungsvektor $\vec{M}(t)$ ist demnach zeitabhängig und folgt einer in der Abbildung 3.2 dargestellten Spiralbahn, welche an die Kugeloberfläche gebunden ist.

Bei dem NMR-Experiment setzt sich das Magnetfeld aus dem statischen Magnetfeld \vec{B}_0 und einem durch elektromagnetische Radiofrequenzstrahlung erzeugten zeitabhängigem Magnetfeld \vec{B}_1 zusammen. Das Koordinatensystem wird allgemein so festgelegt, daß sich das Feld \vec{B} aus der Summe der beiden Felder ergibt:

$$\vec{B} = \begin{pmatrix} B_1 \cos \omega t \\ B_1 \sin \omega t \\ B_0 \end{pmatrix}. \quad (3-26)$$

3.3.5 Die Bloch'schen Gleichungen im rotierenden System

Mit der Einführung eines rotierenden Koordinatensystems, in dem \vec{B} stationär ist, gilt:

$$M_x = M_{y'} \cos \omega t - M_{x'} \sin \omega t, \quad (3-27)$$

$$M_y = -M_{x'} \cos \omega t - M_{y'} \sin \omega t. \quad (3-28)$$

Die Bloch'schen Gleichungen vereinfachen sich durch die Transformation in dieses Koordinatensystem zu:

$$\begin{pmatrix} \frac{dM_{x'}}{dt} \\ \frac{dM_{y'}}{dt} \\ \frac{dM_z}{dt} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\Omega M_{y'} - \frac{M_{x'}}{T_2} \\ \Omega M_{x'} - \gamma B_1 M_z - \frac{M_{y'}}{T_2} \\ -\gamma B_1 M_{y'} + \frac{M_0 - M_z}{T_1} \end{pmatrix} \quad (3-29)$$

mit $\Omega = \omega_L - \omega$.

3.3.6 Ideale Pulsanregung

Aus diesem Gleichungssystem läßt sich die Wirkung eines mit der Larmorfrequenz eingestrahlten Hochfrequenz-Impuls (HF-Puls) auf die Magnetisierung in bezug auf das rotierende Koordinatensystem angeben. Unter Vernachlässigung der Relaxationsterme erhält man für ein HF-Feld mit der Amplitude B_1 , das für eine Zeit t_{HF} in y' -Richtung eingestrahlt wird, die Magnetisierung $M_{x'}(t_{\text{HF}})$ als

$$M_{x'}(t_{\text{HF}}) = M_z(t=0) \sin(\gamma B_1 t_{\text{HF}}). \quad (3-30)$$

Daraus definiert sich der sogenannte Flipwinkel φ als

$$\varphi = \gamma B_1 t_{\text{HF}}. \quad (3-31)$$

Nach Anwendung des HF-Pulses in y' -Richtung liegt die Magnetisierung in den Komponenten

$$\begin{pmatrix} M_{x'}(t_{\text{HF}}) \\ M_{y'}(t_{\text{HF}}) \\ M_z(t_{\text{HF}}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_0 \sin \varphi \\ 0 \\ M_0 \cos \varphi \end{pmatrix} \quad (3-32)$$

vor. Die zeitliche Änderung der Magnetisierung in der $x'y'$ -Ebene des rotierenden Bezugssystems läßt sich mit Hilfe des nachfolgenden Gleichungssystems beschreiben:

$$M_{x'}(t_{\text{HF}} + t) = M_0 \sin \varphi \cos(\Omega t) \exp\left(-\frac{t}{T_2}\right), \quad (3-33)$$

$$M_{y'}(t_{\text{HF}} + t) = M_0 \sin \varphi \sin(\Omega t) \exp\left(-\frac{t}{T_2}\right), \quad (3-34)$$

wobei $\Omega = \omega_0 - \omega$ ist.

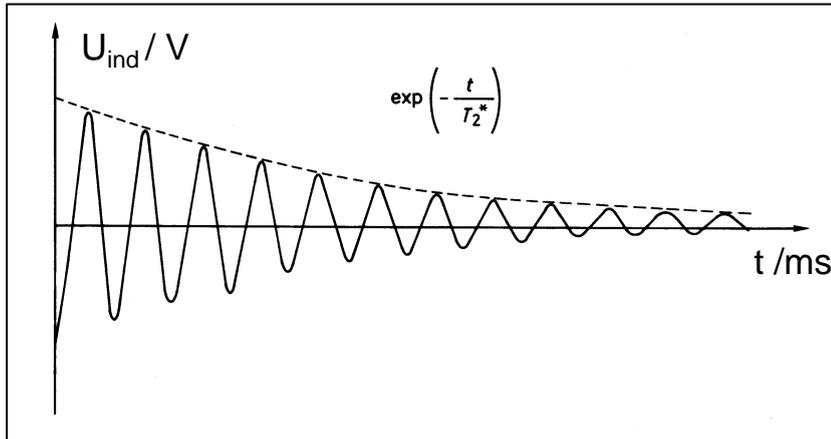


Abb. 3.3 FID (free induction decay). Die Quermagnetisierung $M_{x'y'}$ induziert in der Empfängerspule eine Wechselspannung U_{ind} .

Dieses Verhalten heißt freier Induktionszerfall (FID: **F**ree **I**nduction **D**ecay) und fällt mit einer Zeitkonstante T_2^* ab, auf die später noch genauer eingegangen wird, (vgl. Abbildung 3.3). Nach einer HF-Pulsanregung induziert die präzedierende Quermagnetisierung $M_{x'y'}$ ihrerseits eine schwache Wechselspannung der Empfangsspule. Dieses induzierte Signal stellt das Kernresonanzsignal $S(t)$ dar und hat die Form einer gedämpften Schwingung. Wird die transversale Magnetisierung $M_{x'y'}$ als komplexe Zahl

$$M_{x'y'} = M_{x'} + iM_{y'} \quad (3-35)$$

definiert, vereinfachen sich die Gleichungen für den besonderen Fall $\varphi=90^\circ$ zu:

$$M_{x'y'}(t) = M_0 \exp\left(-i\omega_0 t - \frac{t}{T_2}\right). \quad (3-36)$$

Der Realteil der komplexen Fouriertransformierten der Quermagnetisierung $M_{x'y'}$ beschreibt die Frequenzabhängigkeit von $M_{x'}$ (Dispersionslinie) aus Gleichung (3-35) und der Imaginärteil die von $M_{y'}$ (Absorptionslinie):

$$M_x(\omega) = \gamma B_1 M_0 \frac{T_2^2 (\omega_0 - \omega)}{1 + (\omega_0 - \omega)^2 T_2^2 + \gamma^2 B_1^2 T_1 T_2}, \quad (3-37)$$

$$M_y(\omega) = \gamma B_1 M_0 \frac{T_2}{1 + (\omega_0 - \omega)^2 T_2^2 + \gamma^2 B_1^2 T_1 T_2}. \quad (3-38)$$

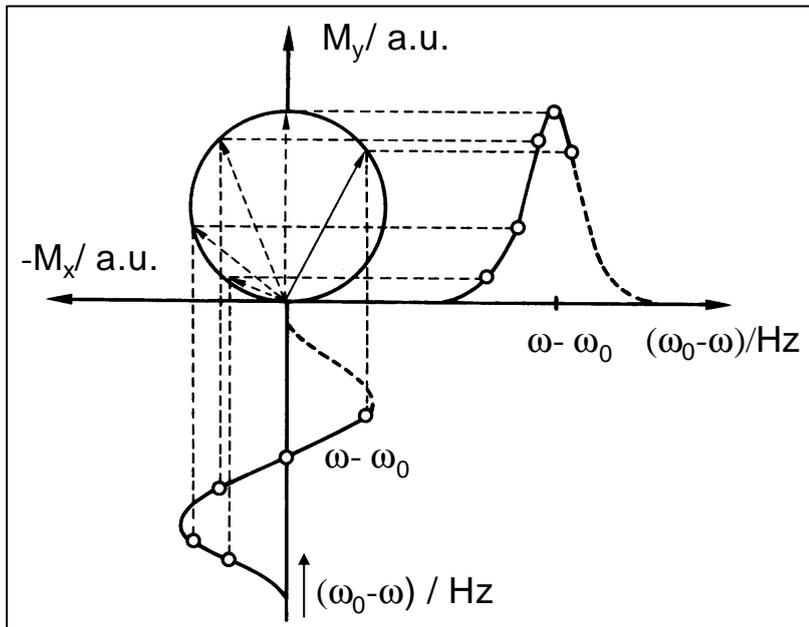


Abb. 3.4 Transversale Magnetisierung im rotierenden Koordinatensystem in Abhängigkeit von $\omega_0 - \omega$ und Zerlegung in Absorptions- und Dispersionslinie aus Gleichungen (3-37) und (3-38).

3.4 Relaxationsprozesse

Im folgenden Abschnitt wird die Erzeugung des FID und des Spin-Echos beschrieben. Die Intensität der Spin-Echos als Funktion der Zeit ermöglicht die Bestimmung der oben genannten Relaxationsparameter.

3.4.1 Die longitudinale Relaxationszeit T_1

Die longitudinale Relaxation wird durch die Zeit T_1 charakterisiert. Diese Zeit gibt die Geschwindigkeit für den Übergang des gestörten Systems in den Gleichgewichtszustand an. Dieser wird dadurch erreicht, daß das Spinsystem an die Umgebung, das sogenannte Gitter, Energie verliert. Im Nachfolgenden wird ein Verfahren zur Messung von T_1 beschrieben. Die z-Komponente der Magnetisierung M_z im rotierenden Koordinatensystem, die durch einen Hochfrequenzpuls in den Zustand $M_z(0) = -M_0$ invertiert wurde, verhält sich in einem in z-Richtung ausgerichteten statischen Magnetfeld B_0 wie folgt:

$$M_z(t) = M_0 \left(1 - 2e^{-\left(\frac{t}{T_1}\right)} \right). \quad (3-39)$$

Dieser exponentielle Verlauf wird zur Bestimmung der longitudinalen Relaxationszeit (Inversion-Recovery-Experiment) gemessen (vgl. Abbildung. 3.5). Nach einem 180° -Puls, der die Magnetisierung invertiert, klappt ein 90° -Puls die Magnetisierung in die Nachweisebene, und es wird in der Empfängerspule eine Spannung induziert. Nach genügend langer Erholungszeit (Recovery-Zeit) kann das Experiment mit einem anderen Zeitabstand zwischen 180° - und 90° -Puls wiederholt werden. Multiple Wiederholungen dieser Sequenz mit unterschiedlichen Zeithabständen tasten den zeitlichen Verlauf des Wiederaufbaus der Magnetisierung ab.

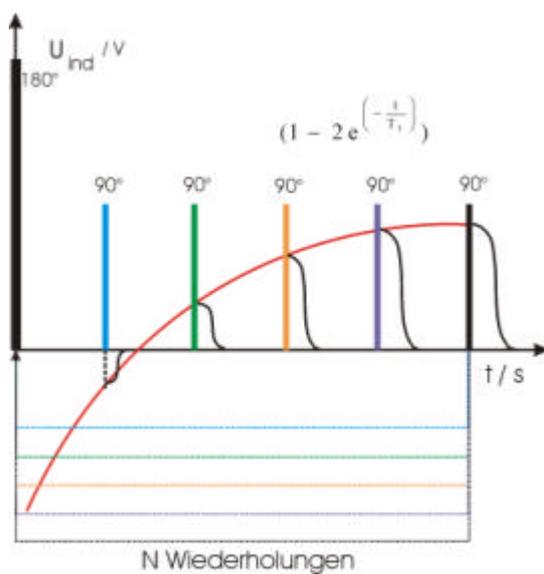


Abb. 3.5 Inversion-Recovery-Sequenz zur Messung der T_1 -Relaxationszeit. Ein 180° -HF-Puls invertiert die Magnetisierung. Ein 90° -Puls dreht die Magnetisierung in die Nachweisebene. Wird das Experiment nach genügend langer Erholungszeit (Recovery-Zeit) mit einem anderen Zeitabstand zwischen 180° und 90° -Puls wiederholt, kann der zeitliche Verlauf des Wiederaufbaus der Magnetisierung abgetastet werden.

3.4.2 Die transversale Relaxationszeit T₂

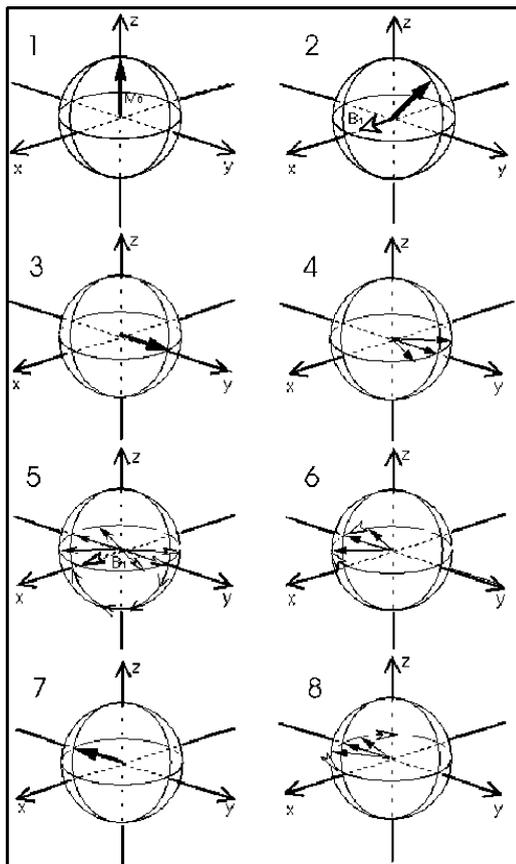


Abb. 3.6 Die Magnetisierung M_0 parallel zu B_0 wird durch einen 90° -Puls (B_1) um die x Achse in die xy -Ebene gedreht. Fig. 2 zeigt einen intermediären Zustand. Die Magnetisierung in der xy -Ebene (3) nimmt wegen der Dephasierung der magnetischen Momente ab (4). Ein 180° -Puls dreht die Spins um die x -Achse (5). Die Spins rephasieren (6). Formation des Spin-Echos zur Zeit T_E nach dem 90° -Puls (7) und anschließende Dephasierung (8).

Die transversale Relaxation wird durch die transversale Relaxationszeit T_2 charakterisiert. Diese beschreibt das zeitliche Verhalten der Magnetisierung in der xy -Ebene. Die magnetischen Momente, die in der xy -Ebene die transversale Magnetisierung erzeugen, laufen aufgrund der geringfügig verschiedenen Larmorfrequenzen in der direkten Nachbarschaft auseinander, verteilen sich isotrop in der xy -Ebene und löschen die Magnetisierung vollständig. Die Halbwertsbreite des Absorptionssignals und der zeitliche Verlauf des FIDs sind abhängig von der T_2 -Relaxationszeit. Dies gilt nur im idealisierten Fall, in dem es keine Feldinhomogenitäten ΔB_0 in \vec{B}_0 gibt. Im realen Fall liegt ein inhomogenes \vec{B}_0 -Feld vor, welches wegen unterschiedlicher Präzessionsfrequenzen zu einer Dephasierung führt und somit zu einem schnelleren Abfall des Signals. Die transversale Relaxation kann näherungsweise beschrieben werden durch:

$$\frac{1}{T_2^*} = \frac{\gamma \Delta B_0}{2} + \frac{1}{T_2}. \quad (3-40)$$

Die effektive Relaxationszeit T_2^* ist daher immer kürzer als die idealisierte T_2 -Zeit. Die Bestimmung der realen transversalen Relaxationszeit erfolgt mit dem Spin-Echo-Experiment von Hahn (vgl. Abbildung 3.6) (27). Im magnetfeldfreien Raum sind die Spins stochastisch orientiert, weshalb im thermischen Gleichgewicht die mittlere makroskopische Magnetisierung gleich Null ist. Dagegen entsteht in einem statischen Magnetfeld durch die Ausrichtung der Spins die makroskopische Magnetisierung M_0 parallel zur z-Richtung der angelegten magnetischen Induktion. Wird die Magnetisierung in einem rotierenden Koordinatensystem in die xy-Ebene geklappt, dephasieren die Spins zunehmend. Nach einem Invertierungspuls von 180° rephasieren die Spins wieder und es wird nach der Zeit T_E das Hahn'sche Spin-Echo beobachtet.

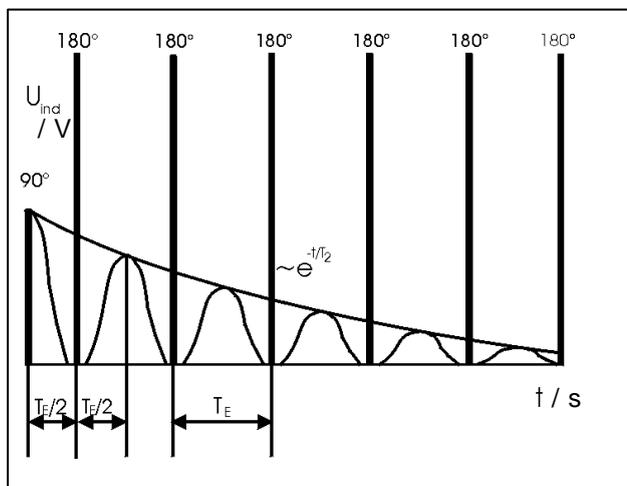


Abb. 3.7 Carr-Purcell-Sequenz zur Bestimmung der transversalen Relaxationszeit T_2 . Einem 90° -HF-Puls folgen mehrere 180° -RF-Pulse, welche die dephasierete Magnetisierung wieder zusammenlaufen lassen.

Im Gegensatz dazu können die Wechselwirkungen der Spins mit den fluktuierenden Feldern der Umgebung (Brown'sche Molekularbewegung) nicht kompensiert werden, weshalb die Amplituden der Echos mit der Zeit abnehmen (28), (29). Die Abfolge von einem 90° -Puls und aufeinanderfolgenden 180° -Pulsen trägt den Namen Carr-Purcell-Experiment und ist in Abbildung 3.7 schematisch dargestellt.

3.5 NMR-Bildgebung

Für die Bildrekonstruktion werden Gradientenfelder verwendet. Dabei handelt es sich um zusätzliche Magnetfelder, deren Feldstärke linear von der jeweiligen Ortskoordinate abhängt. Damit keine Bildverzeichnungen entstehen, müssen die Gradientenstärken so gewählt werden, daß die lokalen Feldänderungen größer sind als die lokalen Feldinhomogenitäten ΔB_0 . Typische Werte liegen bei klinischen Geräten zwischen 1 und 25 mT/m.

Durch Überlagerung des homogenen Magnetfeldes $\vec{B}_0 = |\vec{B}_0| \vec{e}_z$ mit einem linearen Gradientenfeld $\vec{G}(t) = (G^x(t), G^y(t), G^z(t)) = \left(\frac{\partial B_z}{\partial x}, \frac{\partial B_z}{\partial y}, \frac{\partial B_z}{\partial z} \right)$ wird die Larmorfrequenz nach Gleichung (3-8) ortsabhängig:

$$\vec{\omega}_L = -\gamma(\vec{B}_0 + (\vec{G} \cdot \vec{r})\vec{e}_z). \quad (3-41)$$

Die Bewegungsgleichungen für diesen Fall können aus Gleichung (3-24) abgeleitet werden. Hierzu wird das Gleichungssystem in das mit ω_0 rotierende Koordinatensystem überführt. Mit kurzen Anregungsdauern $t_{\text{HF}} \ll T_1, T_2$ resultieren folgende Bewegungsgleichungen:

$$\begin{pmatrix} \dot{M}_x \\ \dot{M}_y \\ \dot{M}_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{G} \cdot \vec{r} & -B_{1,y} \\ -\vec{G} \cdot \vec{r} & 0 & B_{1,x} \\ B_{1,y} & -B_{1,x} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_x \\ M_y \\ M_z \end{pmatrix}. \quad (3-42)$$

In der Näherung für kleine Flipwinkel kann die Längsmagnetisierung $M_z = M_0$ approximiert werden, wodurch die dritte Komponente des Gleichungssystems (3-42) entkoppelt werden kann. Mit Gleichung (3-41) und dem komplexen B_1 -Vektor $B_1 = B_{1,x} + iB_{1,y}$ kann das Gleichungssystem (3-42) in eine transversale Bewegungsgleichung überführt werden:

$$\dot{M}_{xy} = -i\gamma \vec{G} \cdot \vec{r} M_{xy} + i\gamma B_1 M_0. \quad (3-43)$$

Wegen der Zeitabhängigkeit von \vec{G} und B_1 und mit der Randbedingung $M(\vec{r}, t) = (0, 0, M_0)$ lautet die allgemeine Lösung:

$$M_{xy}(\vec{r}, t) = i\gamma M_0 \int_0^{t_{\text{HF}}} B_1(t) \exp\left(-i\gamma \vec{r} \int_t^{t_{\text{HF}}} \vec{G}(\tau) d\tau\right) dt. \quad (3-44)$$

Mit der Definition des Ortsfrequenzvektors

$$\vec{k}(t) = -\gamma \int_t^{t_{\text{HF}}} \vec{G}(\tau) d\tau \quad (3-45)$$

kann Gleichung (3-44) umformuliert werden zu:

$$M_{xy}(\vec{r}, t) = i\gamma M_0 \int_0^{t_{\text{HF}}} B_1(t) e^{-i\vec{k}(t)\vec{r}} dt. \quad (3-46)$$

Für den Fall eines während der Anregungsphase konstanten Schichtgradienten $\vec{G} = (0, 0, G_z)$ und bei gleichzeitiger Substitution von t durch k , lautet die Lösung:

$$M_{xy}(z, t_{\text{HF}}) = i \frac{M_0}{G_z} \int_{k_0}^{k_{\text{HF}}} B_1(k) e^{ikz} dk. \quad (3-47)$$

Daraus geht hervor, daß das Schichtprofil $M_{xy}(z)$ das Fourier-Integral von $B_1(t)$ ist. Idealerweise folgt die transversale Magnetisierung nach der Anregung einer räumlichen Rechteckfunktion: $M_{xy}(z, t_{\text{HF}}) = M_0 \sin(\varphi)$ für $|z| \leq d_{\text{schicht}}/2$ und 0 für $|z| > d_{\text{schicht}}/2$, wobei d_{schicht} die Schichtdicke ist. Als Fouriertransformierte erhält man aus einer solchen Funktion bekanntermaßen eine Sinc-Funktion:

$$B_1(k) = iG_z d_{\text{schicht}} \frac{\sin(kd_{\text{schicht}}/2)}{kd_{\text{schicht}}/2} \sin \varphi. \quad (3-48)$$

Durch die Anregung eines HF-Pulses mit einer Sinc-förmigen Amplitudenmodulation unter einem konstanten Gradienten G^z wird eine selektive Anregung von Spins innerhalb einer Beobachtungsschicht erreicht.

Nach der Anregung resultiert eine Phasendispersion von M_{xy} entlang des Schichtprofils. Für einen symmetrischen HF-Puls muß daher nach der Anregungsperiode ein Gradient umgekehrten Vorzeichens und halber Gradientenfläche zur Rephasierung angelegt werden.

3.5.1 Ortskodierung

Im vorangegangenen Abschnitt wurde durch das Gradientenfeld eine lineare Abhängigkeit der Resonanzfrequenz zum Ort entlang der Feldachse hergestellt und durch die Anwendung eines

HF-Pulses eine selektive Anregung von Spins innerhalb einer Schicht erreicht. Dieses Prinzip wird gleichermaßen zur räumlichen Kodierung innerhalb dieser Beobachtungsschicht durch transversale Gradientenfelder genutzt. Für den sogenannten Auslesegradienten G^x ist die Resonanzfrequenz vom Ort entlang der x -Achse abhängig:

$$\omega_x = -\gamma G^x x. \quad (3-49)$$

Der Vorgang der Bildkodierung kann in einem zum Ortsraum komplementären k -Raum beschrieben werden, dessen Variable gemäß Gleichung (3-45) definiert wird. Bei Anlegen eines konstanten Gradienten G^x ist im rotierenden Koordinatensystem

$$k_x(t) = -\gamma G^x t \quad (3-50)$$

als linear von der Zeit abhängige Größe festgelegt. Das in der Spule induzierte Signal $S(t)$ ist die Summe aller Spins entlang der x -Richtung, die mit unterschiedlichen Resonanzfrequenzen präzedieren:

$$S(t) = \int \rho(x) e^{-i\omega_x t} dx, \quad (3-51)$$

mit der Protonendichte ρ . Unter Verwendung der k -Variablen aus Gleichung (3-50) lautet Gleichung (3-51):

$$S(k_x) = \int \rho(x) e^{-i2\pi k_x x} dx. \quad (3-52)$$

Das Signal $S(k_x)$ unter einem konstanten Auslesegradienten ist demnach die Fouriertransformierte der Spindichte. Die Spindichteverteilung kann durch die Invertierung des Fourierintegrals extrahiert werden:

$$\rho(x) = \int S(k_x) e^{i2\pi k_x x} dx. \quad (3-53)$$

3.5.2 Phasenkodierung

Die räumliche Kodierung in y -Richtung wird durch einen konstanten linearen Gradienten G^y , den sogenannten Phasengradienten erreicht. Dieser Gradient wird nach der Anregung der

Spins und vor der Akquisition des Signals geschaltet. Daraus resultiert eine lineare Phase der Spins ϕ_y entlang der y-Richtung proportional zur Fläche unter dem Kodiergradienten G^y :

$$\phi_y = \gamma G^y y t_y, \quad (3-54)$$

wobei t_y die Gradientenwirkzeit ist. Dies impliziert analog zum vorangegangenen Abschnitt eine k-Raumkoordinate in y-Richtung:

$$k_y(t) = -\gamma G^y t_y. \quad (3-55)$$

Variation der Amplitude des Phasenkodiergradienten bei konstantem t_y verursacht eine Verschiebung der Position in k_y -Richtung. Durch die Inkrementierung des Phasenkodiergradienten und wiederholte Anregung kann so der k-Raum zeilenweise abgetastet werden. Das so gemessene Signal S hängt nun von zwei k-Raum-Variablen k_x und k_y ab:

$$S(k_x, k_y) = \int_y \int_x \rho(x, y) e^{-i2\pi k_x x} e^{-i2\pi k_y y} dx dy. \quad (3-56)$$

Die Protonendichte-Verteilung kann demnach durch die 2-dimensionale inverse Fouriertransformation (2D FT) bestimmt werden:

$$\rho(x, y) = \int_{k_y} \int_{k_x} S(k_x, k_y) e^{i2\pi k_x x} e^{i2\pi k_y y} dk_x dk_y. \quad (3-57)$$

3.5.3 Point-Spread-Funktion

Durch den Digitalisierungsvorgang des analogen MR-Signals im Analogdigitalkonverter (ADC) wird der k-Raum an diskreten äquidistanten Punkten abgetastet. Der k-Raum besteht demnach aus einer Matrix von an diesen Punkten bestimmten Signalwerten. Daraus resultieren allgemeine Eigenschaften der Abbildung, die durch die Angabe einer einzigen Funktion, der Point-Spread-Funktion P_{PSF} , wiedergegeben werden kann.

Als Ausgangspunkt für die Herleitung von P_{PSF} dient Gleichung (3-53). Durch den Samplingprozeß wird das Signal an definierten äquidistanten Punkten diskretisiert. Das

gemessene diskrete Signal S ist daher ein Produkt aus dem analogen MR Signal \tilde{S} und einer Samplingfunktion D_{sample} :

$$S(k) = \tilde{S}(k)D_{\text{sample}}(k), \quad (3-58)$$

mit

$$D_{\text{sample}}(k) = \sum_{l=-\infty}^{+\infty} U(l_{\text{matrix}}) \delta(k - k_{l_{\text{matrix}}}), \quad (3-59)$$

wobei l_{matrix} der Index über die Datenpunkte ist. Die Stufenfunktion U erfüllt die Bedingung $U(l_{\text{matrix}}) = 1$ für $|l_{\text{matrix}}| \leq N_{\text{matrix}}/2$ und 0 für $|l_{\text{matrix}}| > N_{\text{matrix}}/2$ und trägt damit der endlichen Dauer des Samplingprozesses Rechnung. N_{matrix} ist die Anzahl der gesampelten Datenpunkte. Gleichung (3-58) und (3-59) in Gleichung (3-53) eingesetzt ergibt somit:

$$\rho(x) = \int_k \tilde{S}(k) \left(\sum_{l=-\infty}^{+\infty} U(l_{\text{matrix}}) \delta(k - k_{l_{\text{matrix}}}) \right) e^{-i2\pi kx} dk. \quad (3-60)$$

Unter Ausnutzung des Konvolutionstheorems der Fouriertransformation kann das Integral als eine Faltung des Objekts $\tilde{\rho}$ mit einer Funktion P_{PSF} geschrieben werden:

$$\rho(x) = \tilde{\rho} \otimes P_{\text{PSF}}, \quad (3-61)$$

wobei $\tilde{\rho}$ die FT von \tilde{S} ist und P_{PSF} definiert ist als:

$$P_{\text{PSF}}(x) = \sum_{l=-\infty}^{+\infty} U(l_{\text{matrix}}) \delta(k - k_{l_{\text{matrix}}}) e^{-i2\pi kx} dk. \quad (3-62)$$

Unter der Ausführung des Fourier-Shift-Theorems ergibt sich für P_{PSF} :

$$P_{\text{PSF}}(x) = \sum_{l=-\infty}^{+\infty} U(l_{\text{matrix}}) e^{-i2\pi k_{l_{\text{matrix}}} x}. \quad (3-63)$$

Bei der Definition von U wurde angenommen, daß der k -Raum symmetrisch abgetastet wird. Unter Berücksichtigung einer asymmetrischen Abtastung mit einer unteren Grenze k_{\min} und einer oberen Grenze k_{\max} ist die allgemeine Form von P_{PSF} :

$$P_{\text{PSF}}(x) = \sum_{k_{\text{matrix}}=k_{\min}}^{k_{\max}} e^{-i2\pi k_{\text{matrix}} x}. \quad (3-64)$$

Die Funktion P_{PSF} beinhaltet die für die Abbildung relevanten Objekt- und Sequenzeigenschaften. Insbesondere beinhaltet sie die Kontrastfaktoren der Abbildung. Die im MR-Bild auftretenden Intensitäten werden vollständig durch die Faltung der dem Objekt zugrunde liegenden Protonendichte mit der P_{PSF} beschrieben. Für den Fall der symmetrischen k -Raum-Akquisition gilt unter Verwendung von (3-50) $k_{\min} = -k_{\max} = -\gamma G^x T_{\text{ADC}}/2$, wobei T_{ADC} die Akquisitionsdauer ist, und P_{PSF} lautet:

$$P_{\text{PSF}}(x) = \frac{\sin(N_{\text{matrix}} \pi \Delta k x)}{\sin(\pi \Delta k x)} \sim \frac{\sin(N_{\text{matrix}} \pi \Delta k x)}{\pi \Delta k x}, \quad (3-65)$$

mit $\Delta k = 2k_{\max}/N_{\text{matrix}}$. Die Funktion wird als Dirichlet'scher Kernel bezeichnet und kann für große Werte von N_{matrix} durch eine Sinc-ähnliche Funktion approximiert werden. Ein punktförmiges Objekt, repräsentiert durch eine δ -Funktion mit Zentrum im Ursprung, wird folglich als eine Sinc-ähnliche Funktion mit Zentrum im Ursprung abgebildet. Diese Funktion hat eine effektive Breite Δx von:

$$\Delta x = \frac{1,2\pi}{\gamma G^x T_{\text{ADC}}}. \quad (3-66)$$

Die Nulldurchgänge von P_{PSF} liegen mit $n2\pi/\Delta k$ an den Lokalisationen der benachbarten Pixel, so daß durch die diskretisierte P_{PSF} das punktförmige Objekt durch eine δ -Funktion im Bild repräsentiert wird.

Im Anschluß an dieses Kapitel wird die Anwendung des hier beschriebenen Verfahrens zur Messung und Berechnung physikalischer Parameter erläutert, die von großer Wichtigkeit für die Tumordiagnostik sind.