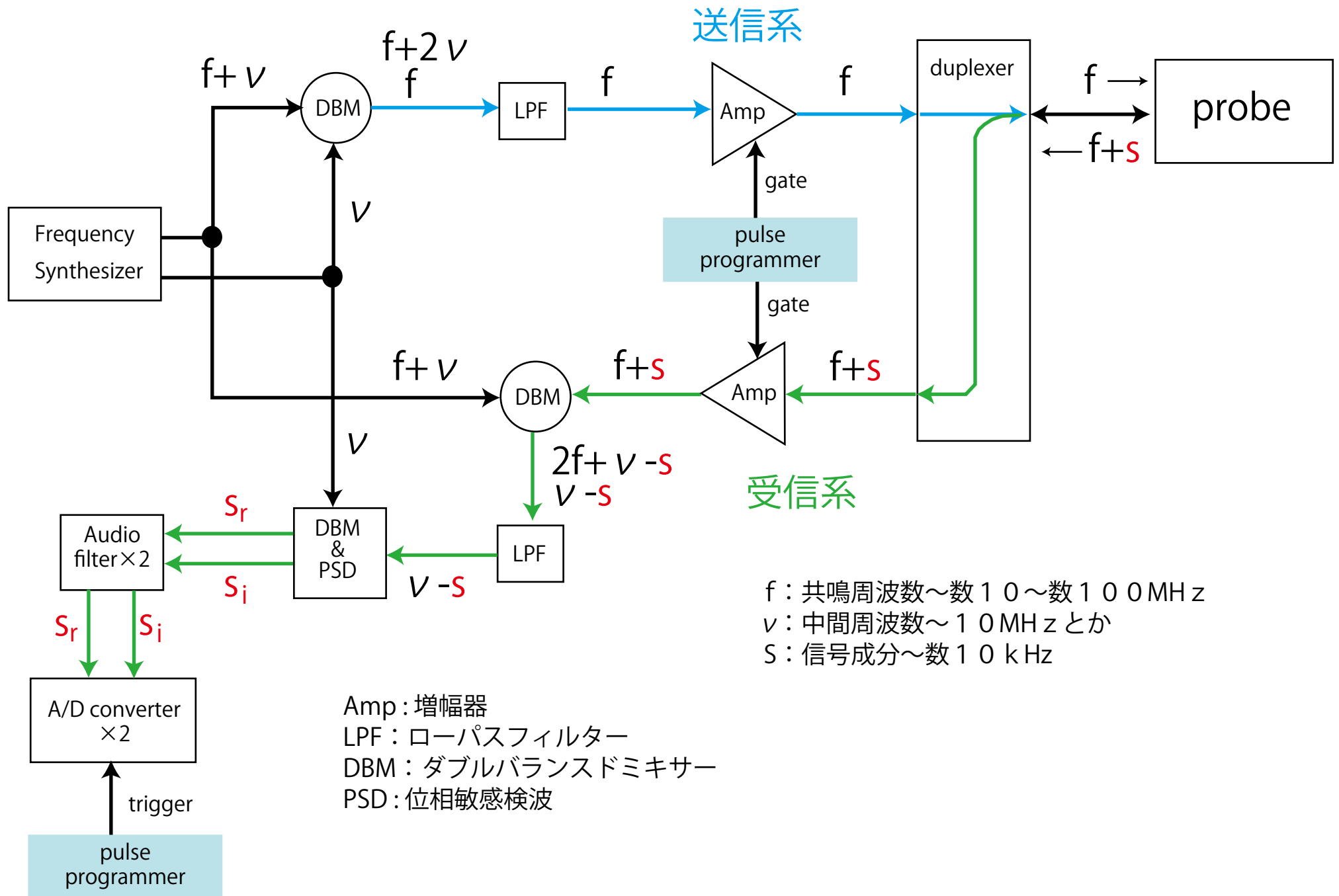


入門 (NMR のハード～測定と処理)



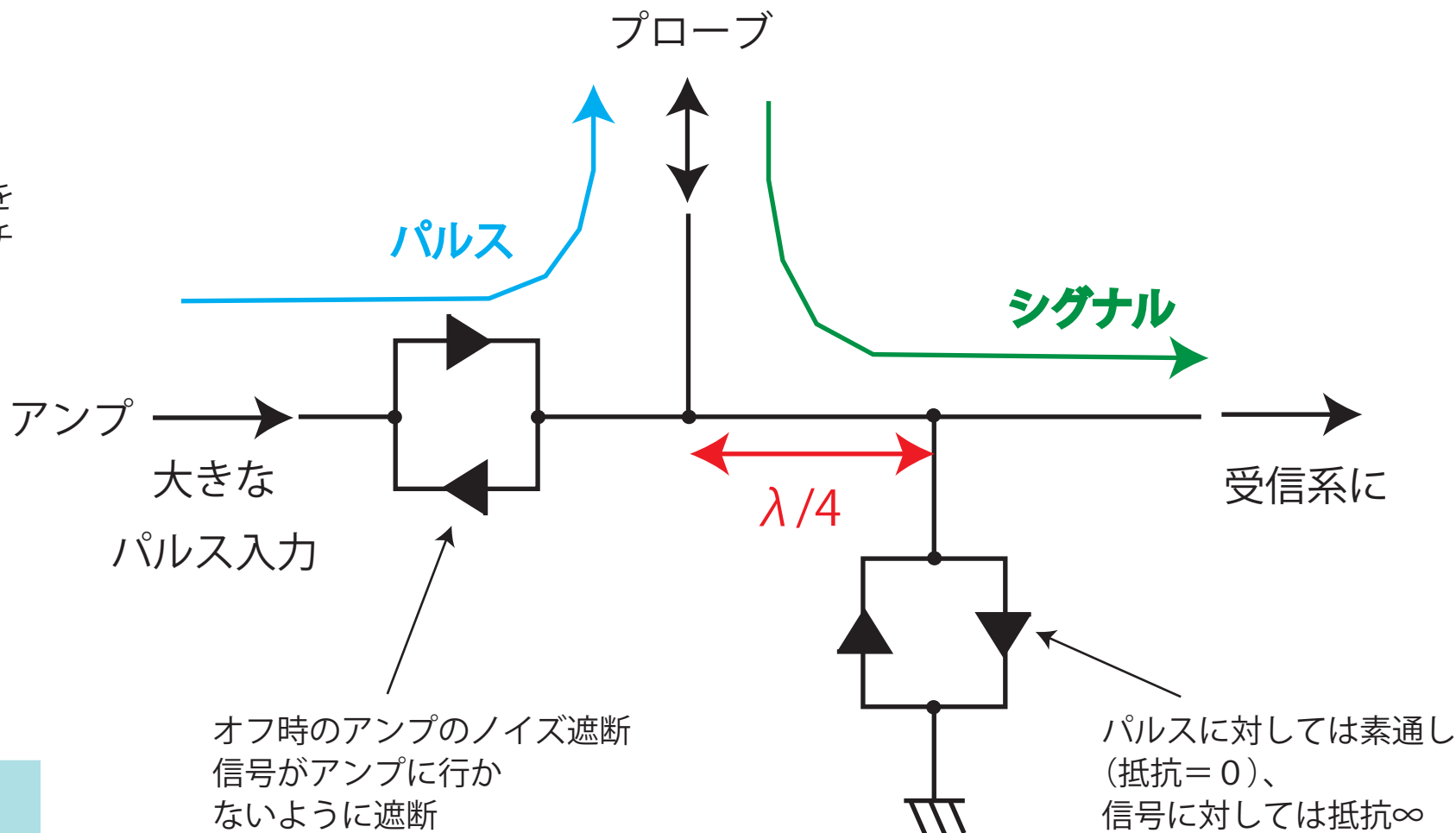
そこにあるのはお宝か…
それともゴミ??

NMR送受信系

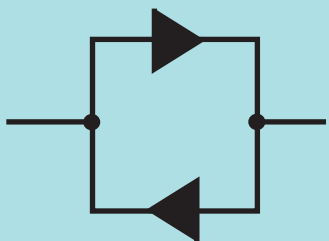


Duplexer

大電圧パルスと
小電圧NMR信号を
振り分けるスイッチ

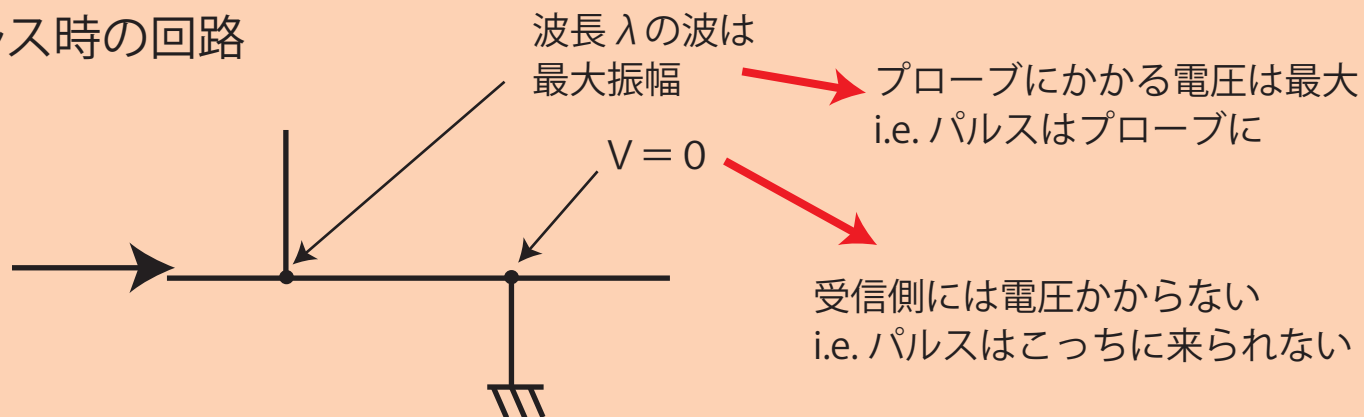


クロスダイオード

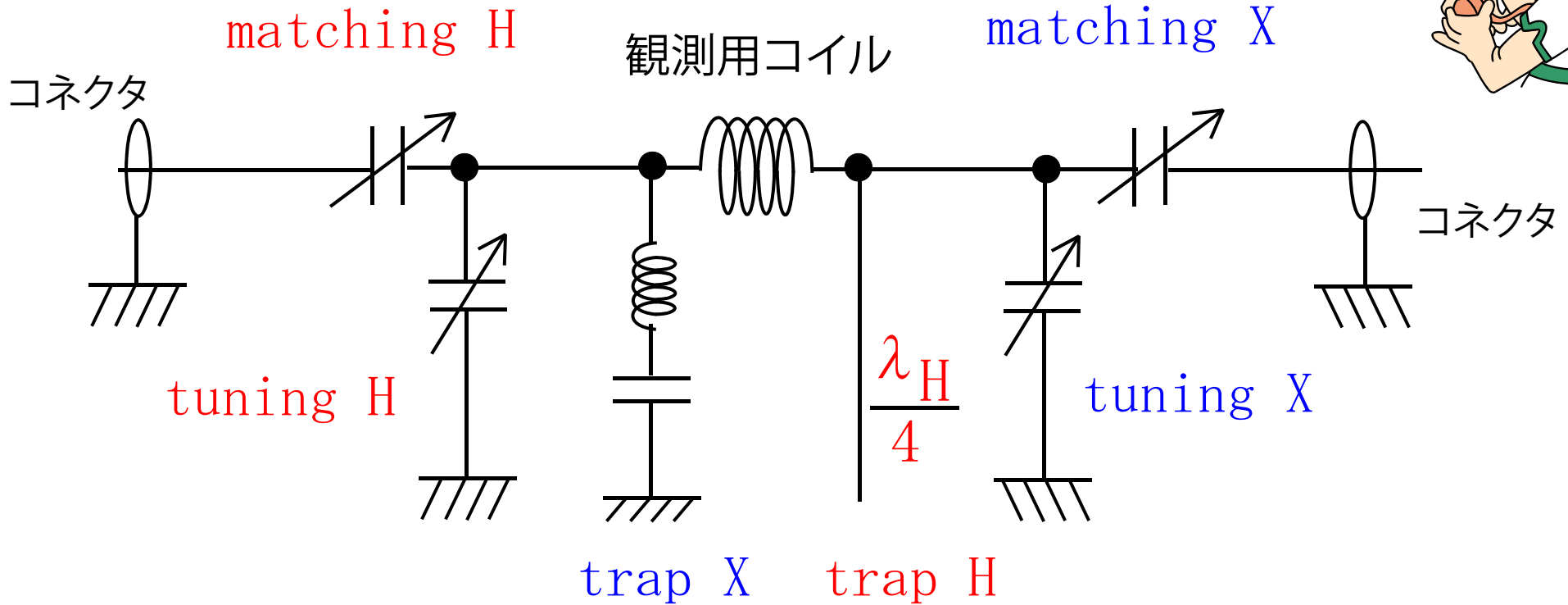


ダイオード：
0.5 V以上の直流は
素通り、それ以下は
通らない

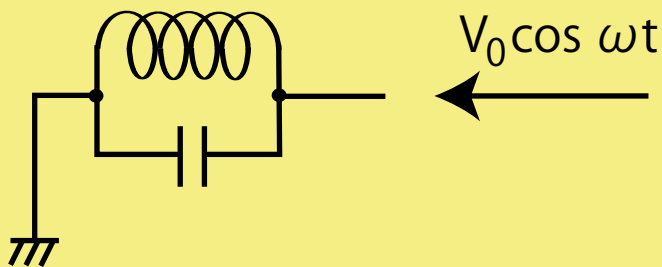
パルス時の回路



NMRプローブ



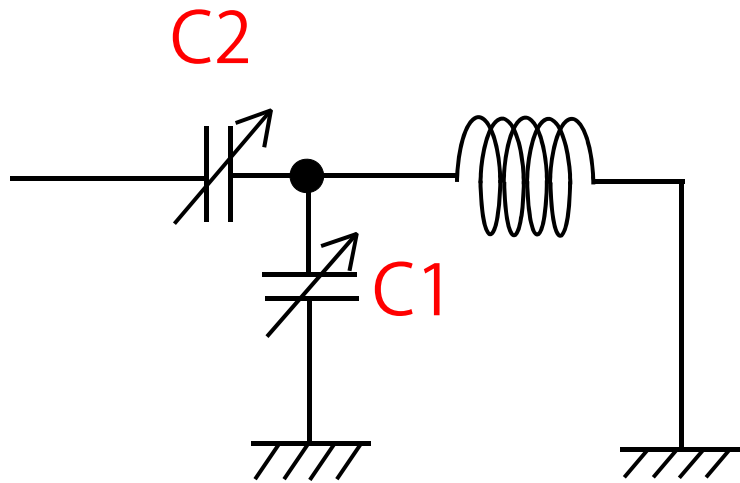
基本は並列共振サーキット



電圧がかかると...

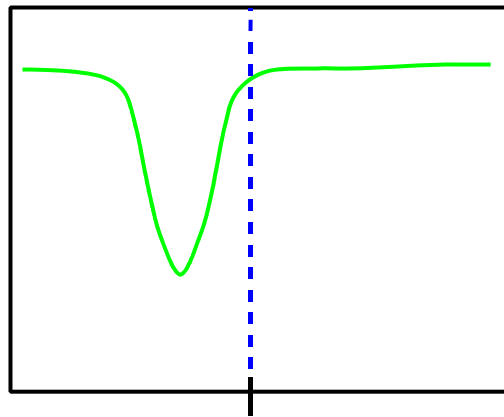
コイル: 磁場を発生 (磁界エネルギーが溜まる)
 コンデンサ: 電気溜まる (電界エネルギーが溜まる)
 交流なので、お互いに溜めたり放したりする。
 その放出・貯留タイミングが ω とうまく合うと、
共振が起こる

TuningとMatching

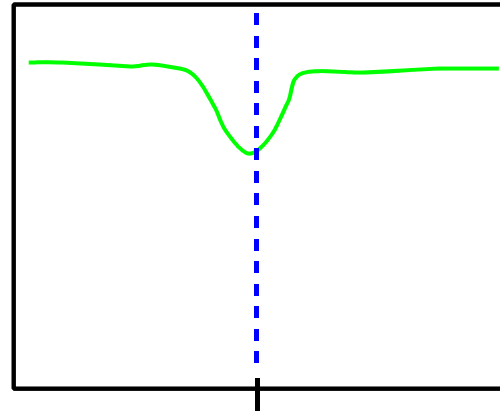


Tuning : 共鳴周波数に同調すること

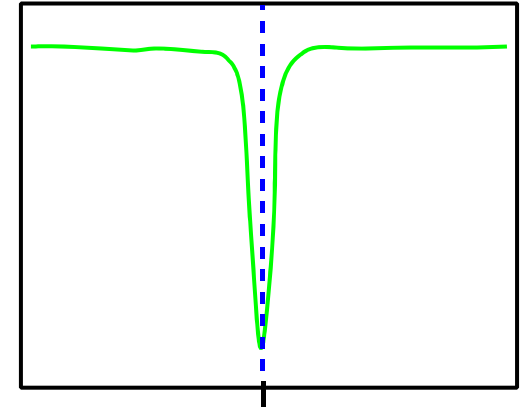
Matching : 入出力のカップリングを合わせること



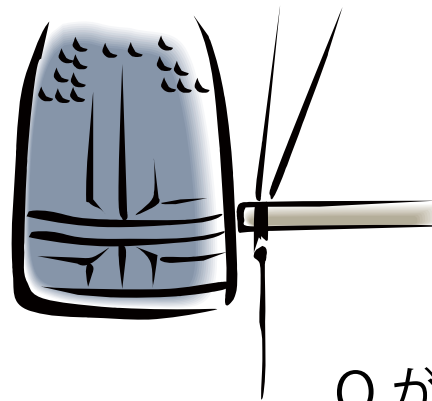
→
C1



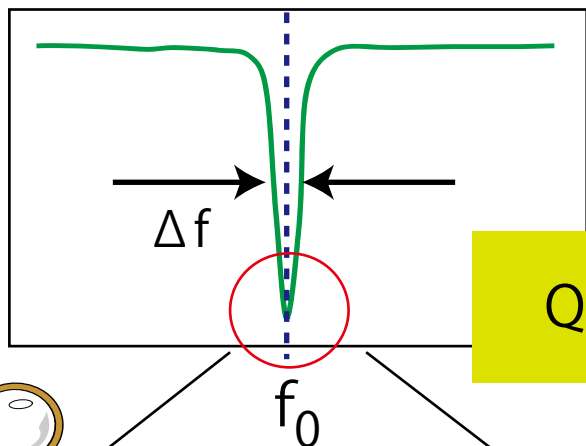
→
C2



Q 値と SN とデッドタイム



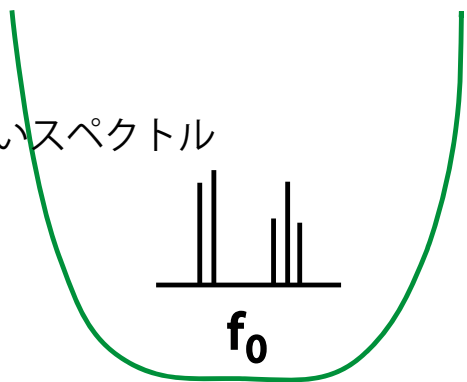
Q が大きいということは
変換効率が良いということ



$$Q = f_0 / \Delta f$$

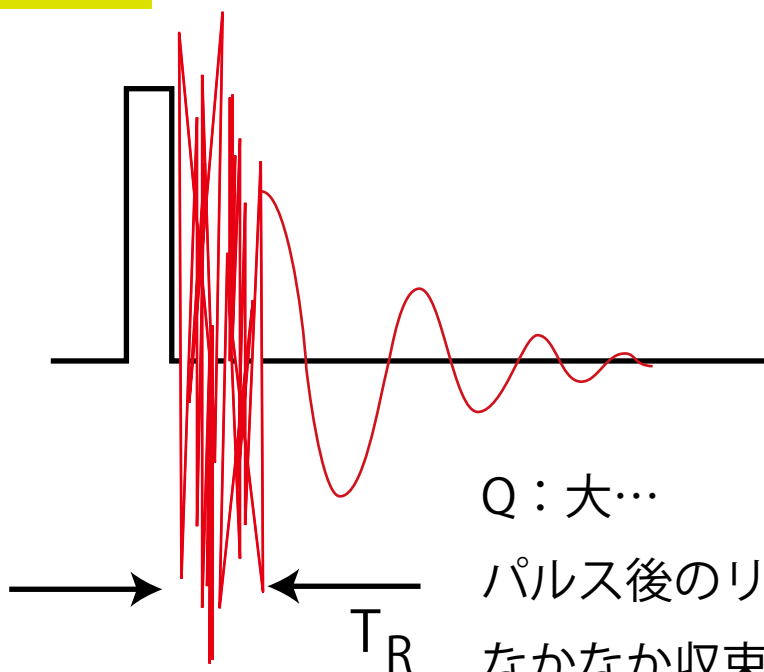


測定したいスペクトル



$$SN \propto Q^{1/2}$$

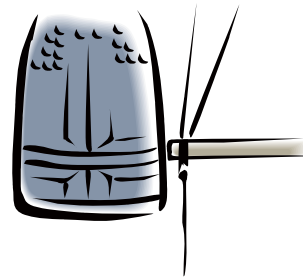
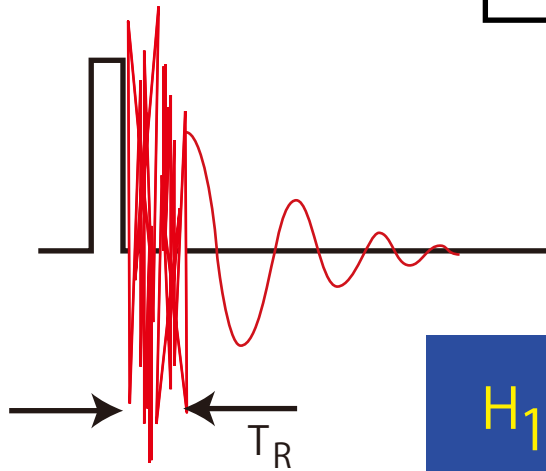
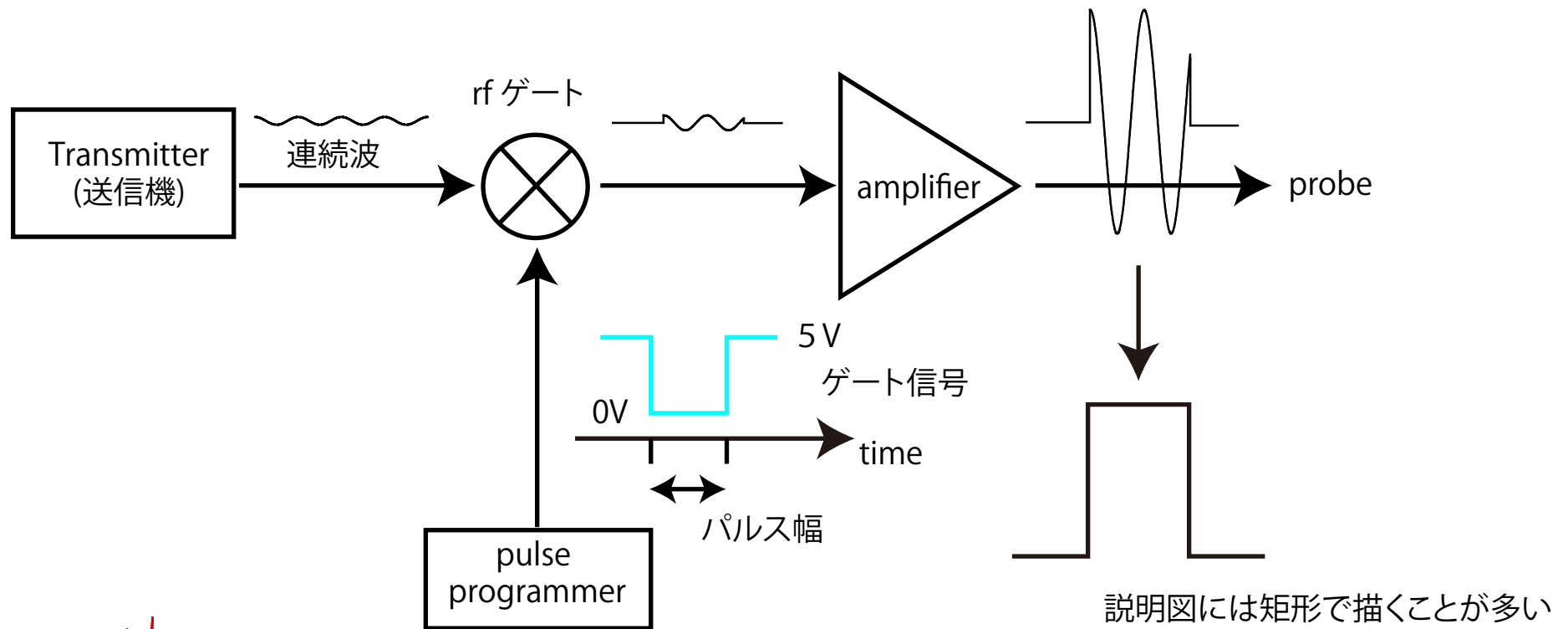
Q : 大…
NMR 信号を電気信号に
変換する効率がいい



Q : 大…
パルス後のリングングが
なかなか収束しない

$$T_R \propto Q$$

rf パルス

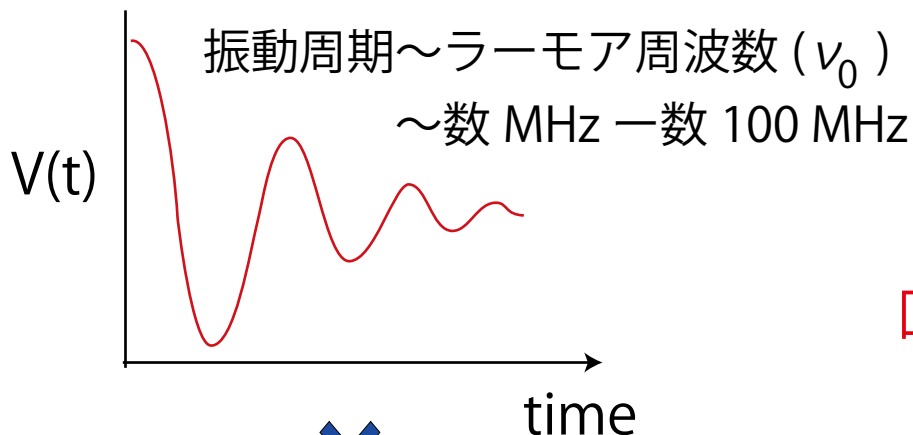
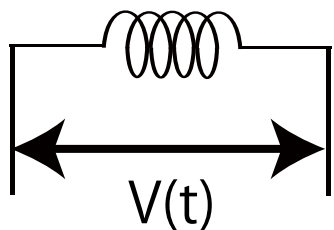


$$H_1 \propto (PQ / V f_0)^{1/2} \propto (PT_R / V)^{1/2}$$

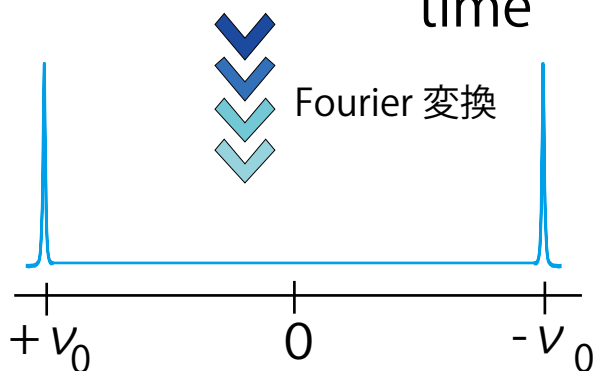
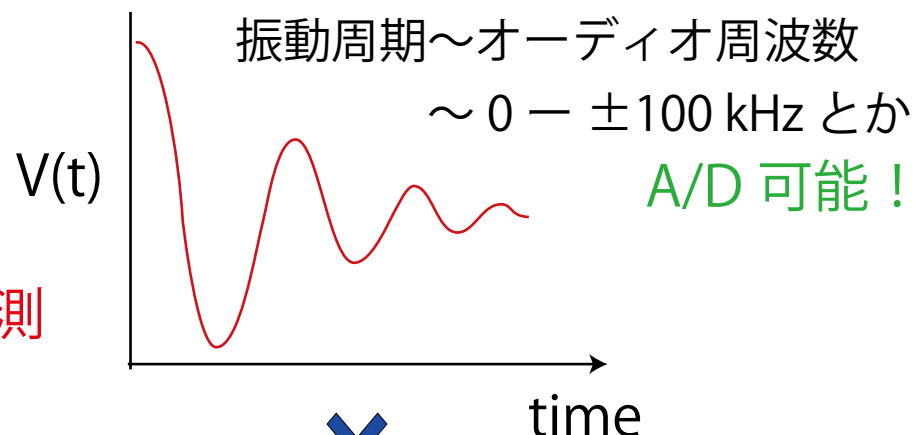
rf磁場強度

P: アンプのW数
V: コイルの体積

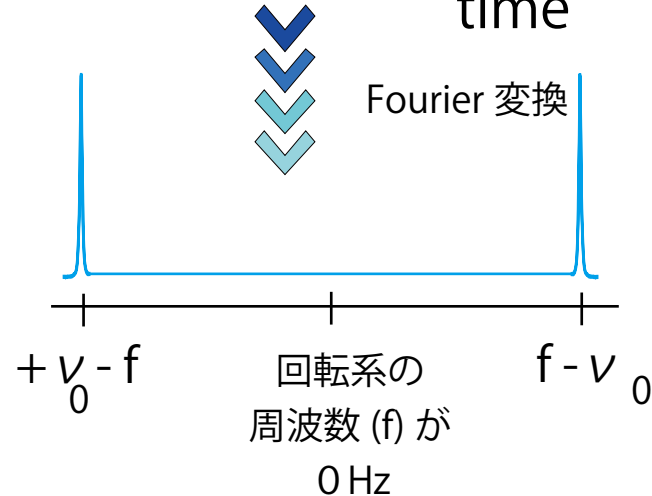
位相敏感検波 (PSD)-1



➡➡➡
回転系で観測



例えば+が正しいとして

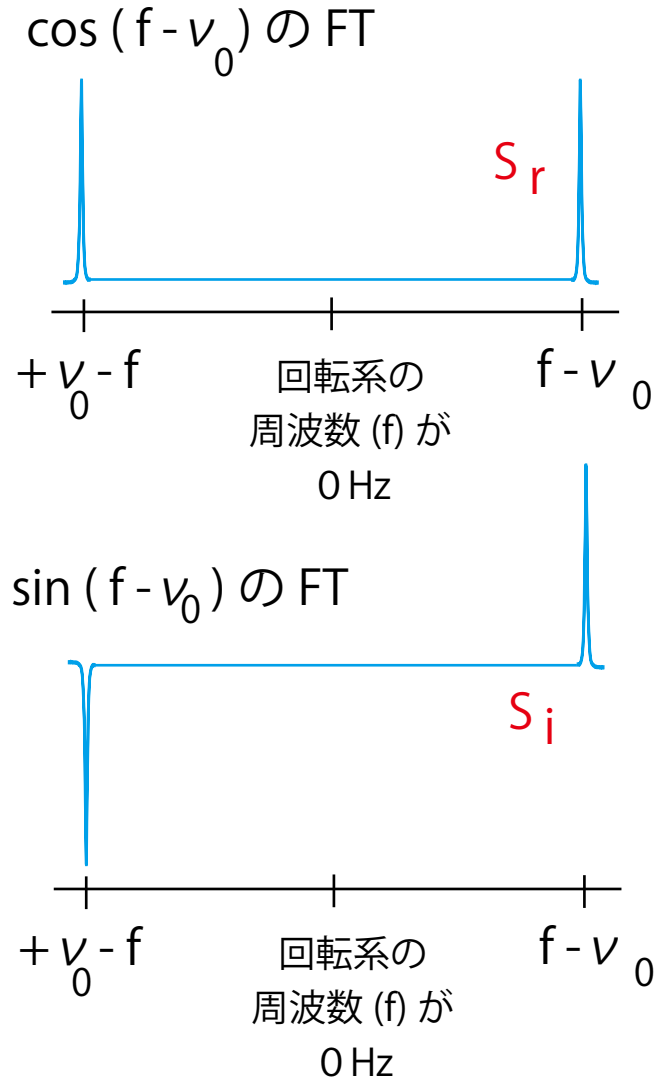


±はその核の磁気回転比の正負から判断可能なので、これでOKなのだけれども、、、数100MHzとかをデジタル化出来るNMR向けのA/D変換器は未だない

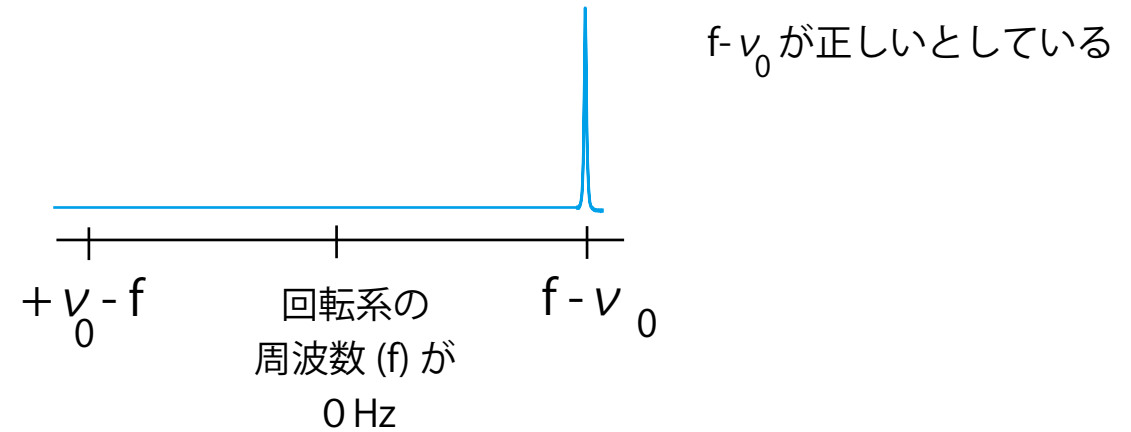
ν_0 の値は判っていないので、実験者が選んだ回転系の周波数 (f) との差の正負は判らない



位相敏感検波 (PSD)-2



(注) $S_r + S_i$

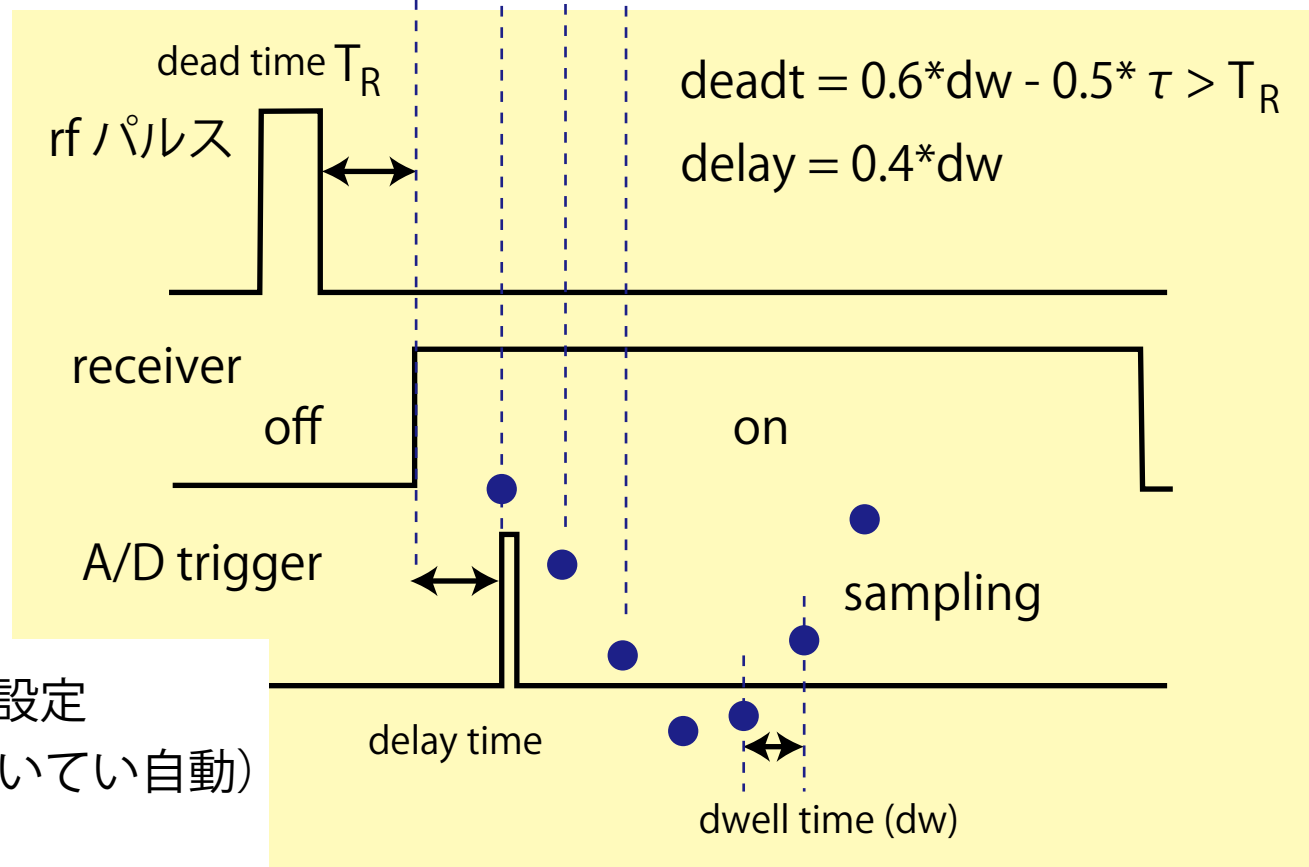
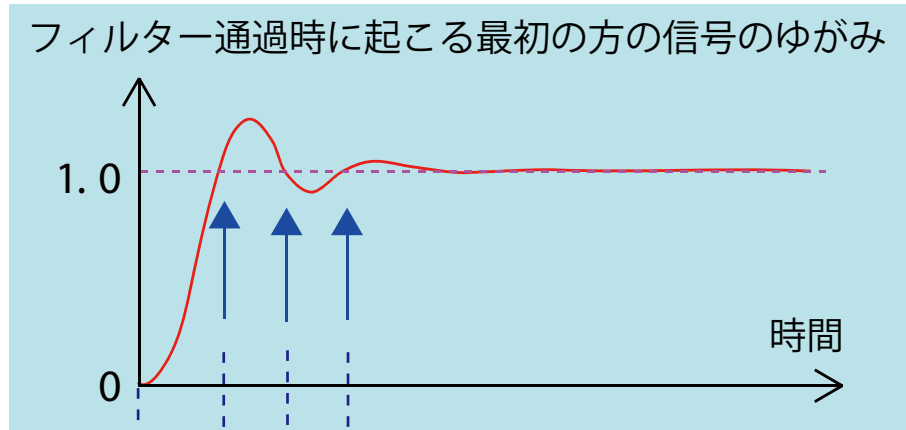
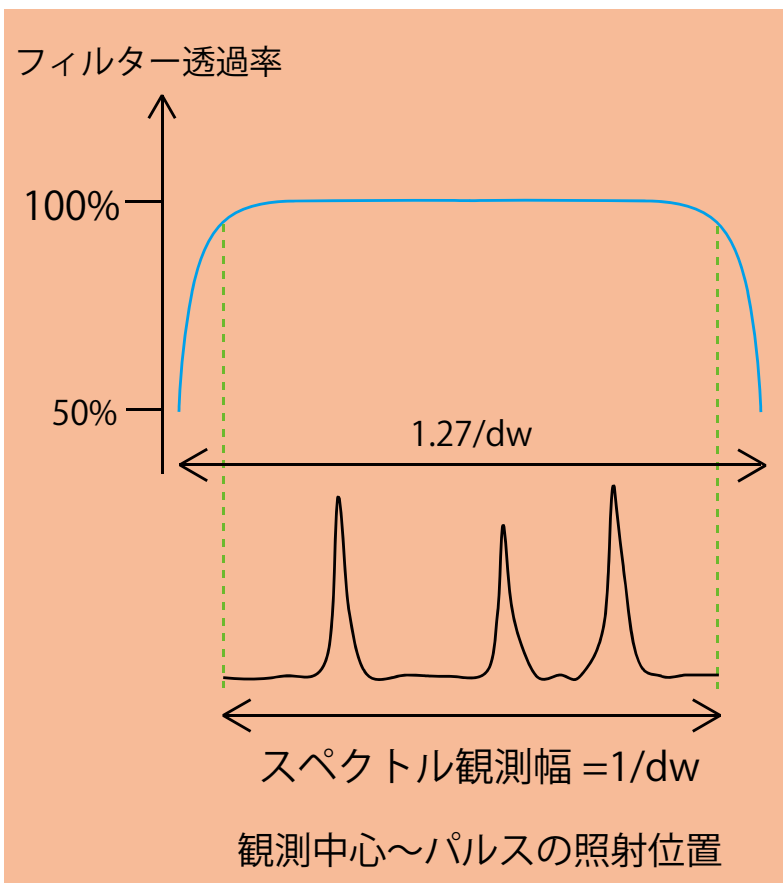


回転系の周波数からの差 (正負) を決めるには、cos と sin の両方が必要

NMR では位相敏感検波 (PSD) 法を用いて、1 つの $V(t)$ 信号から cos/sin 信号を分けている

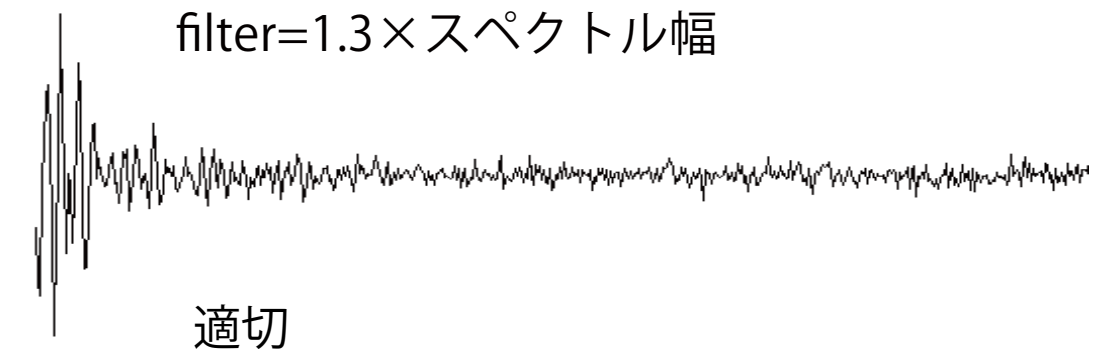
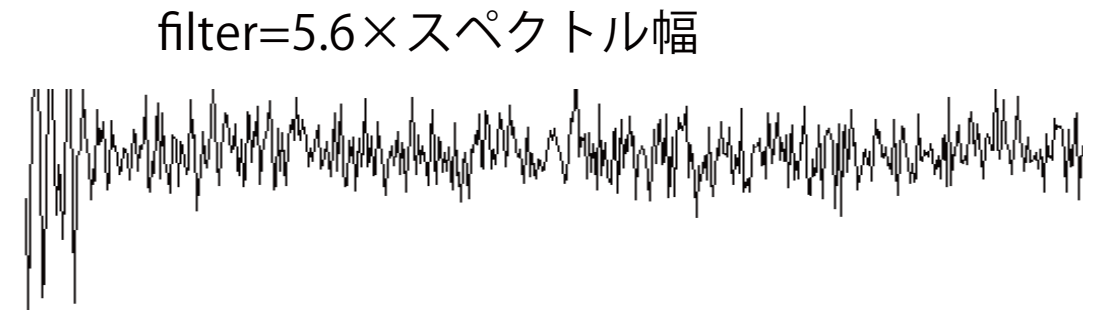
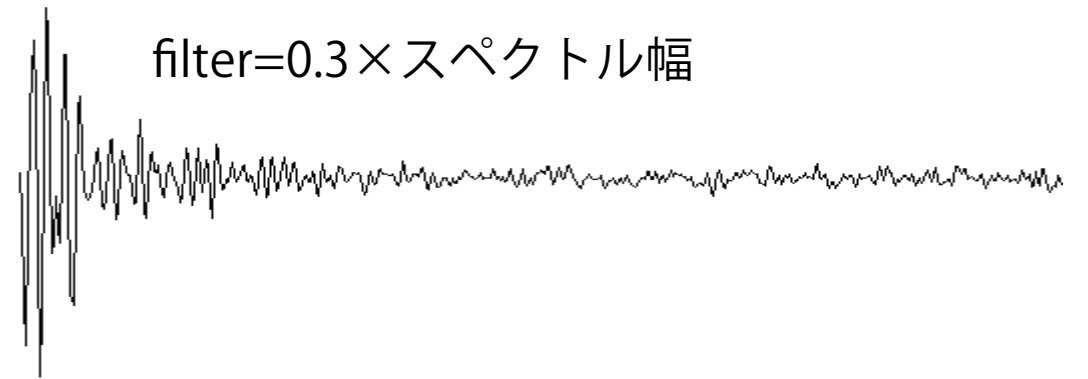
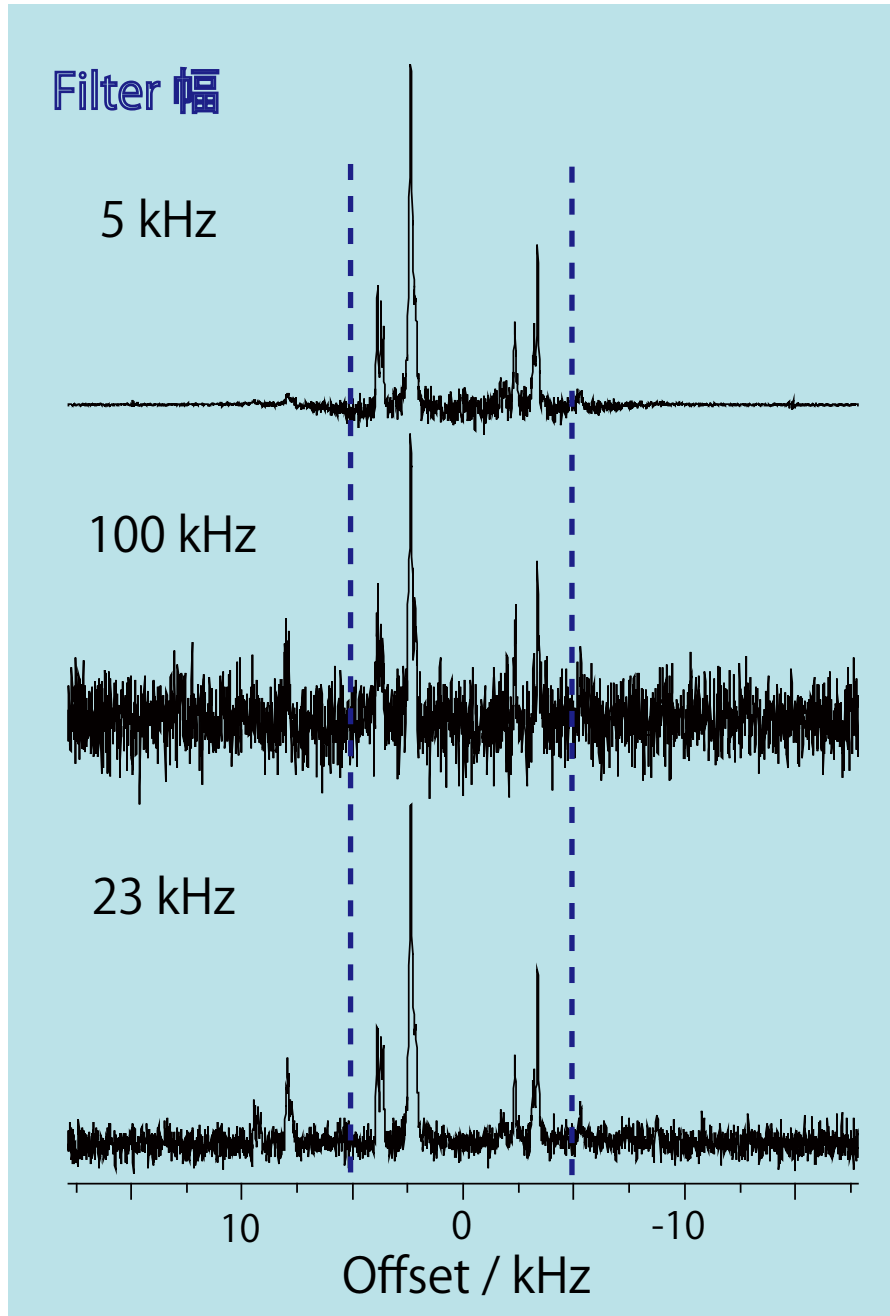
注) 実際は単純な足し算ではない。位相補正を参照してください。

デッドタイム / audio フィルター / サンプルング間隔



- 1) 自分のスペクトル幅に合った dw を設定
- 2) オーディオフィルター幅を設定 (たいてい自動)
- 3) dead/delay を適切に設定

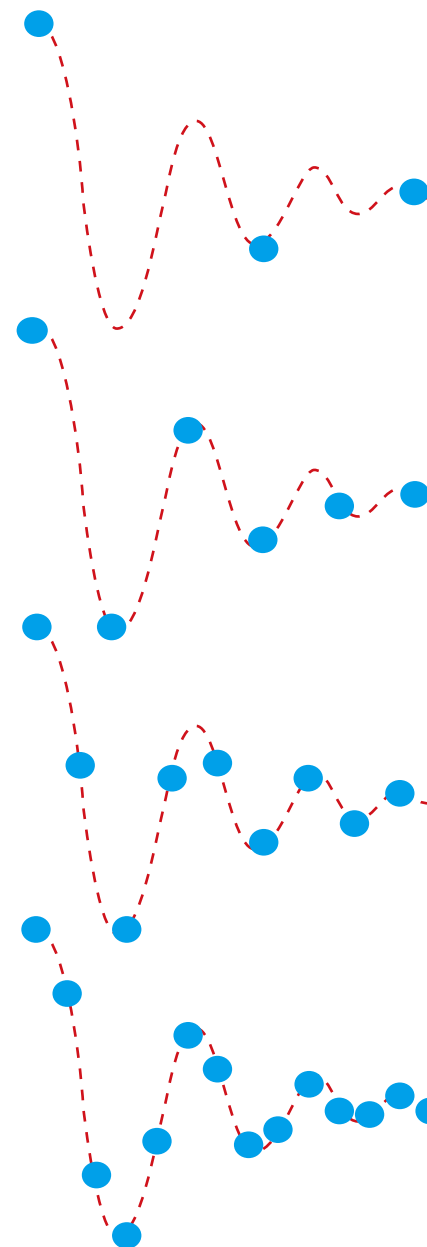
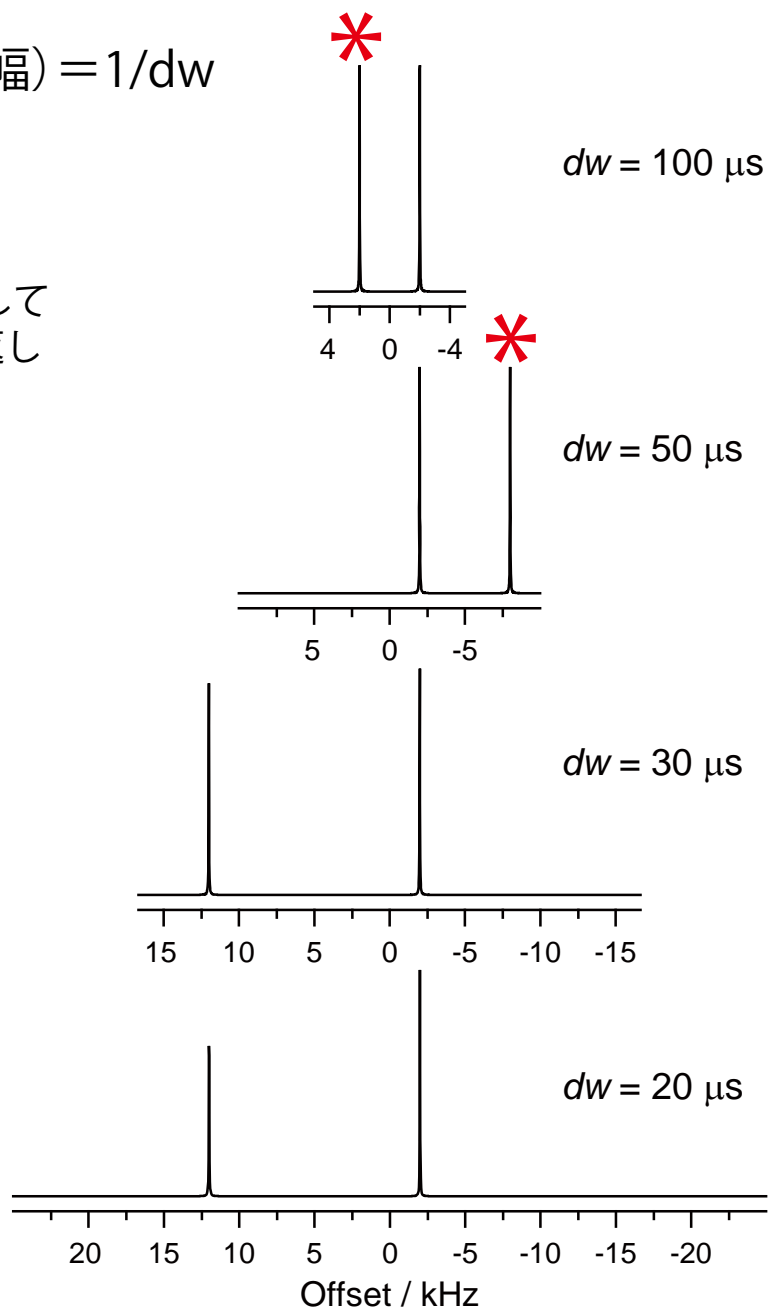
Audio フィルターの効果



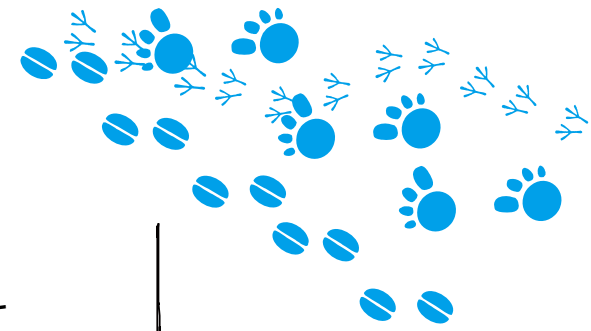
サンプリング間隔 (dw) の設定と折り返しピーク

観測スペクトル帯域 (幅) = $1/dw$

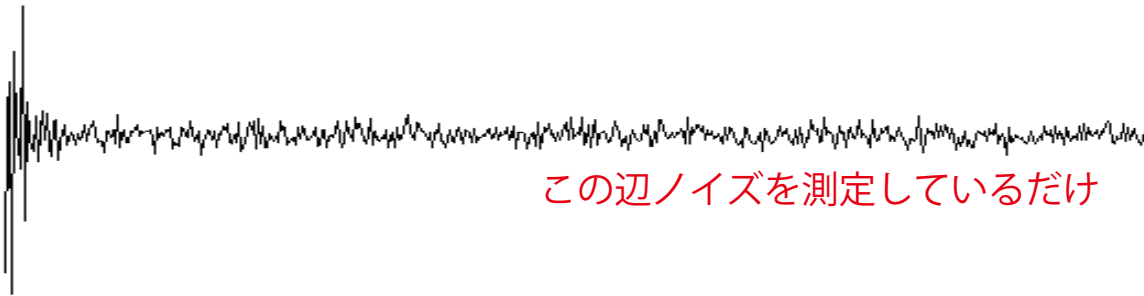
*: 観測帯域の外にはみ出してしまったピークの折り返し



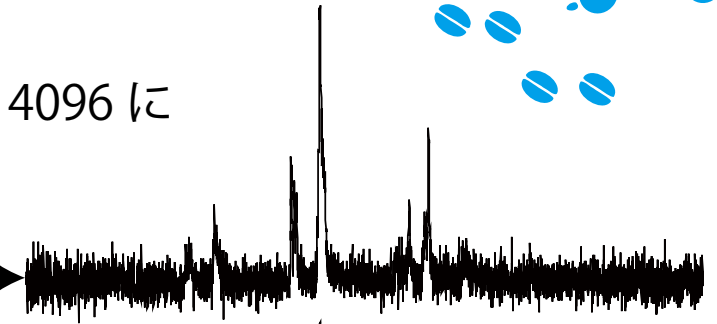
何ポイント測定するのか…



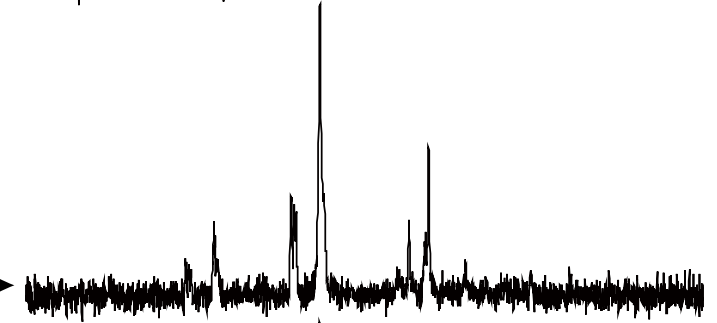
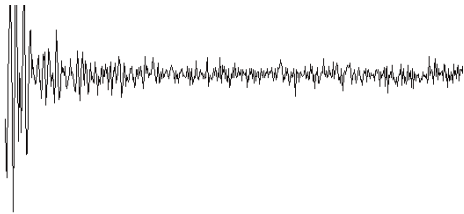
2056 点測定 + ゼロフィルで 4096 に



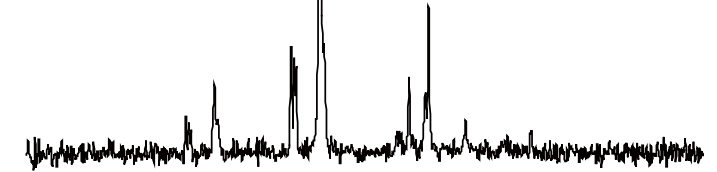
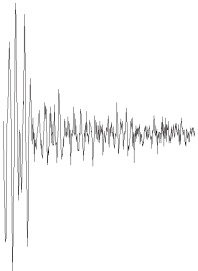
この辺ノイズを測定しているだけ



1024 点測定 + ゼロフィルで 4096 に

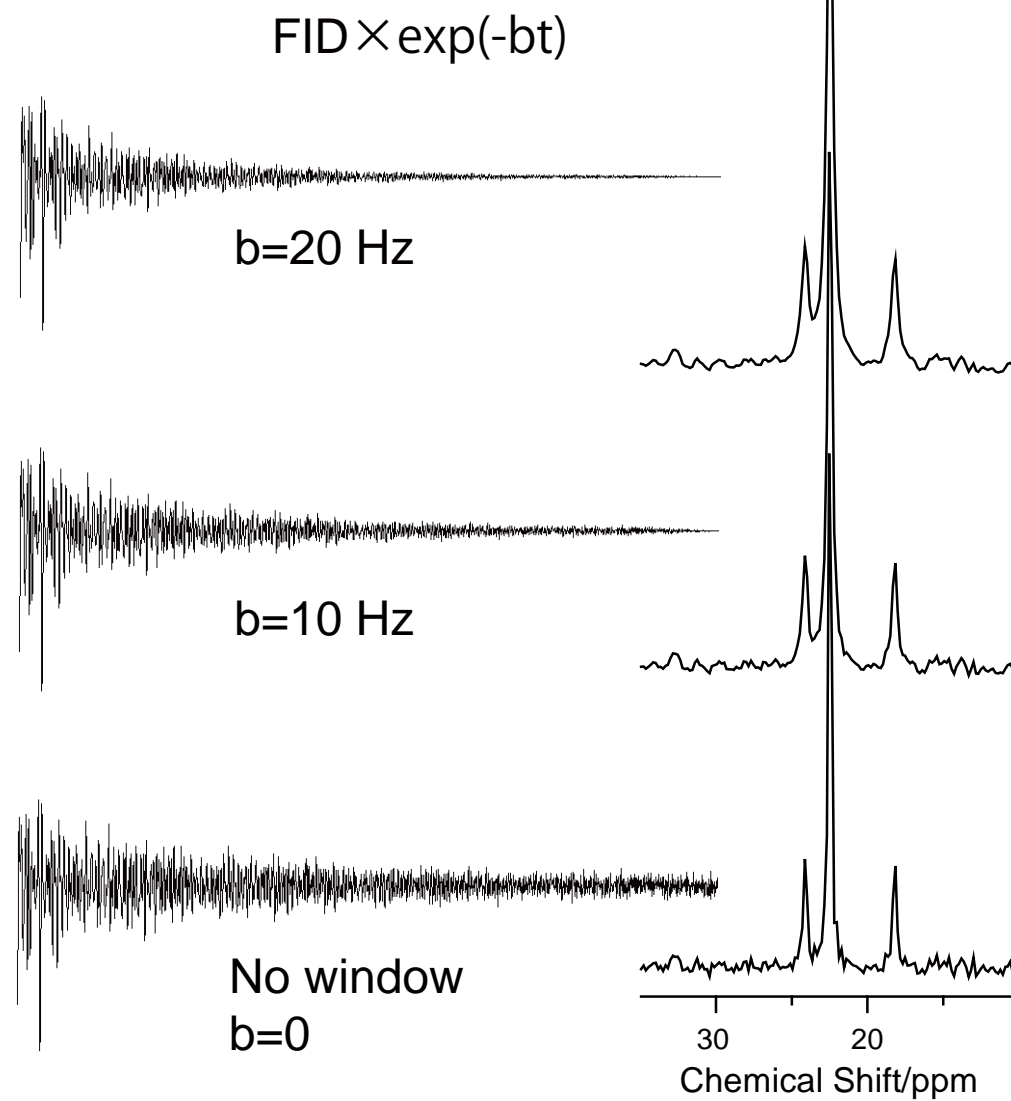
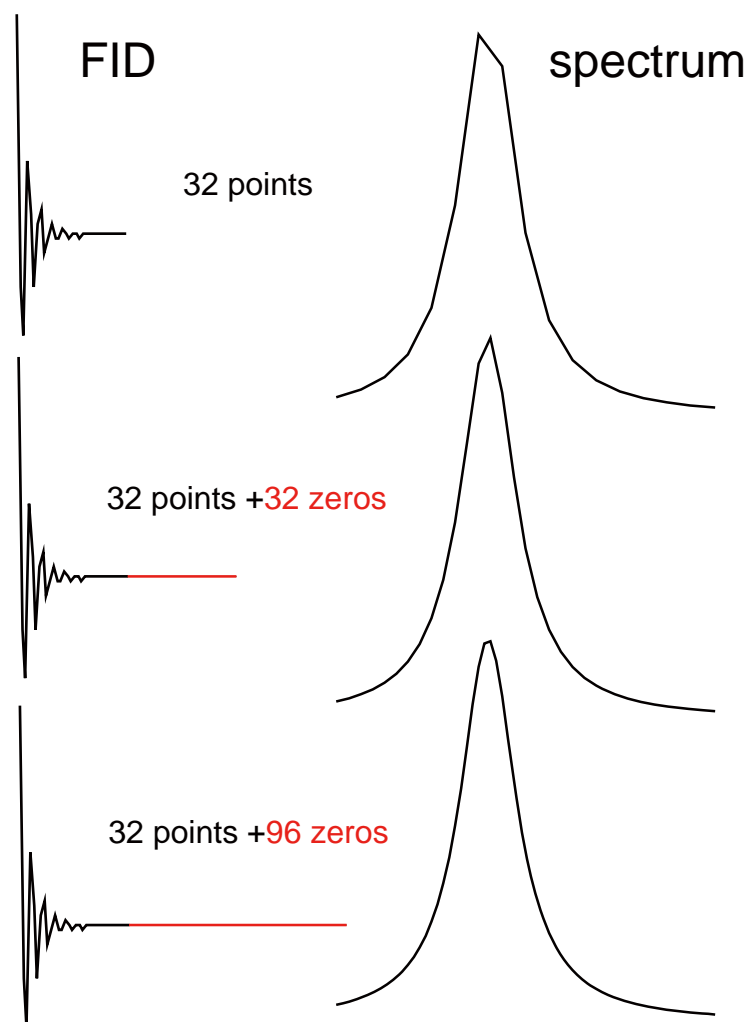


400 点測定 + ゼロフィルで 4096 に

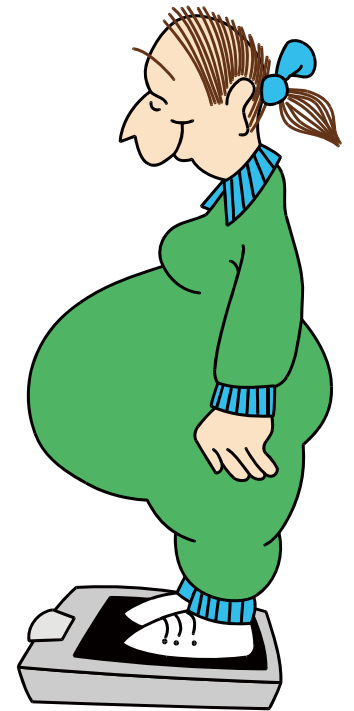
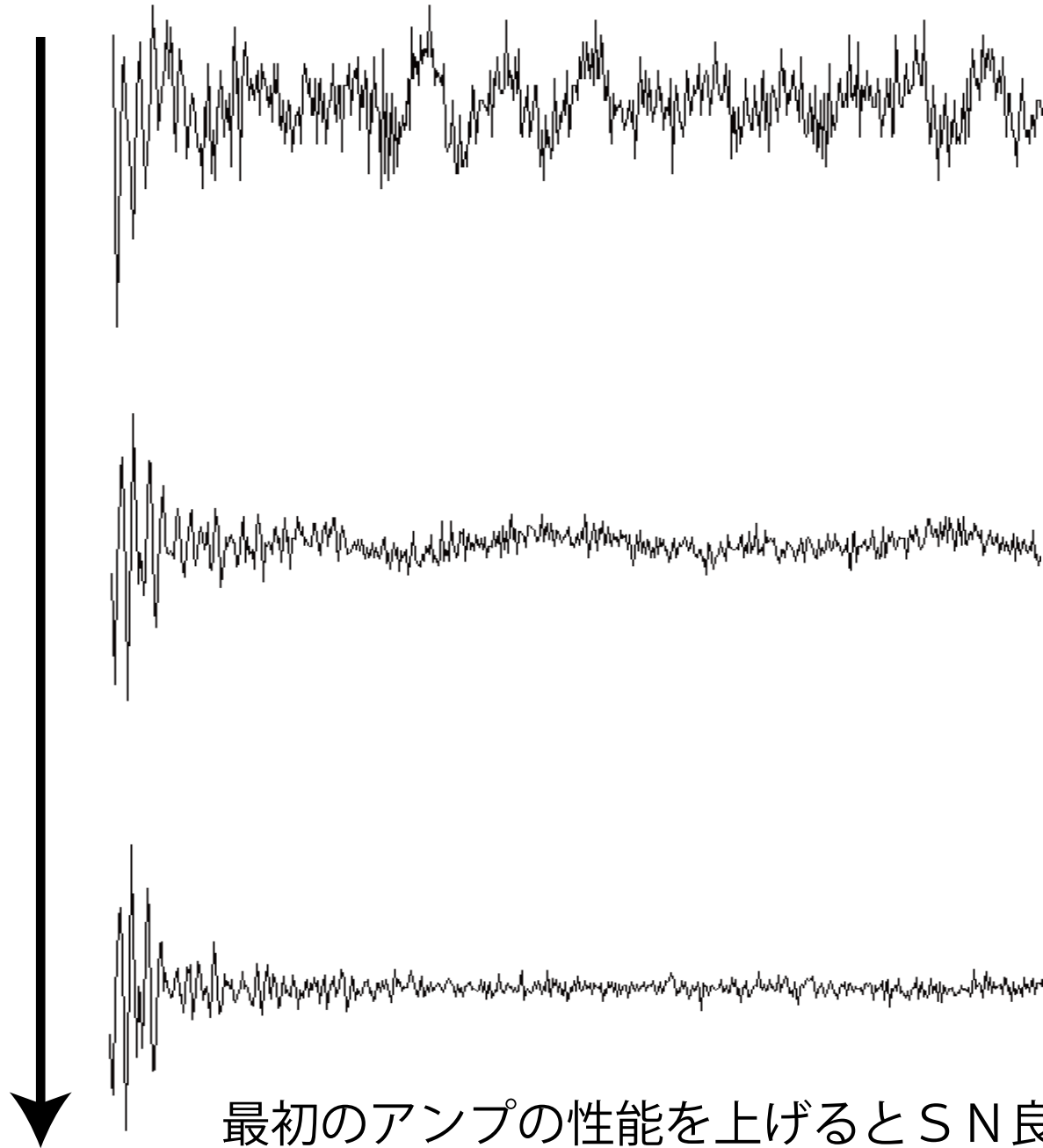


15 10 5 0 -5 -10 -15
Offset / kHz

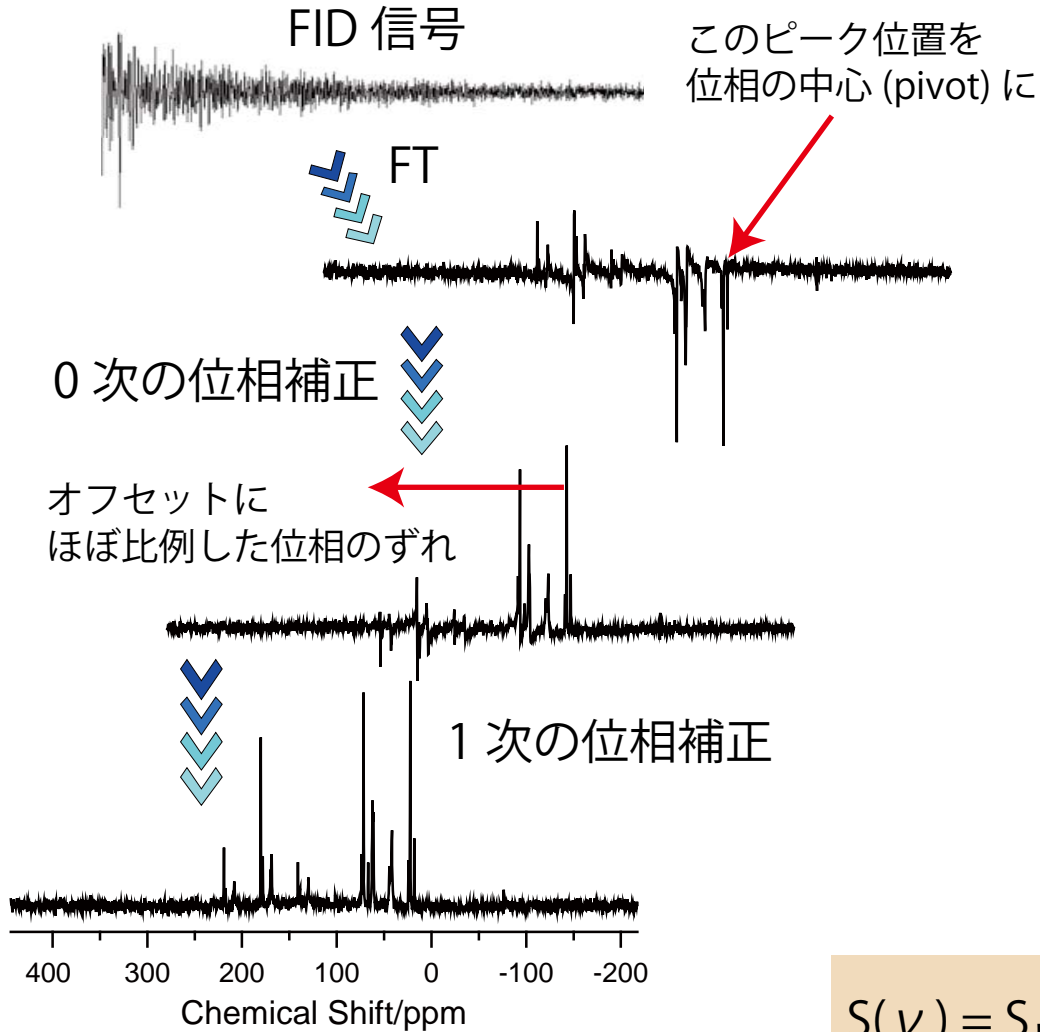
Zero fill とウィンドウ処理



信号増幅器の設定も大事

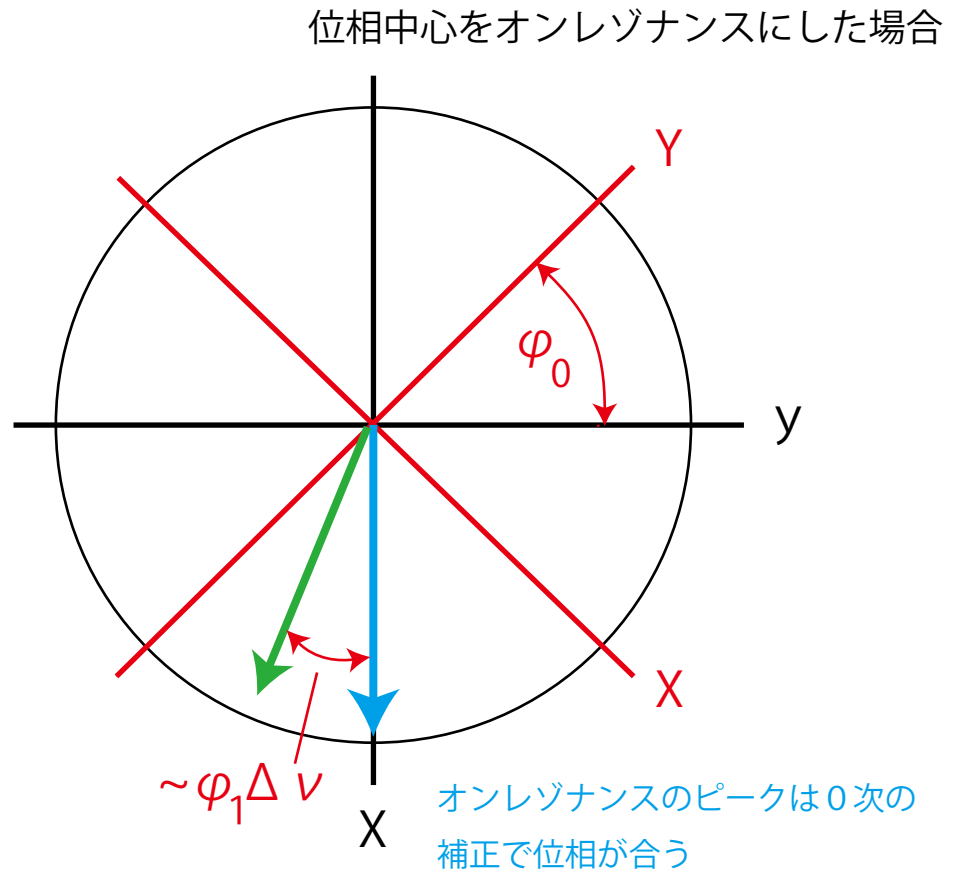


オフレゾナンスと位相補正



x-y: 送信系 (パルス) の位相

X-Y: 受信系の XY



$$S(\nu) = S_r(\nu) \cos(\varphi_0 + \varphi_1 \Delta \nu) + S_i(\nu) \sin(\varphi_0 + \varphi_1 \Delta \nu)$$

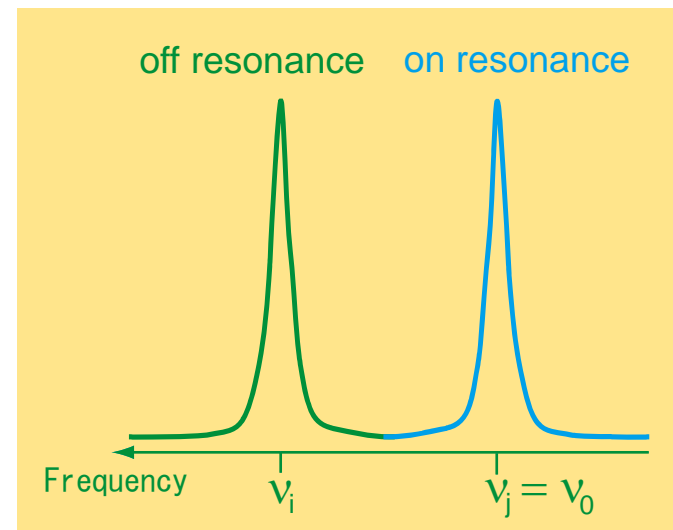
φ_1 の原因:

- 1) dead/delay 間の磁化の回転
- 2) パルス有効磁場の XY 平面からのずれ

これもオフセットに linear と仮定している

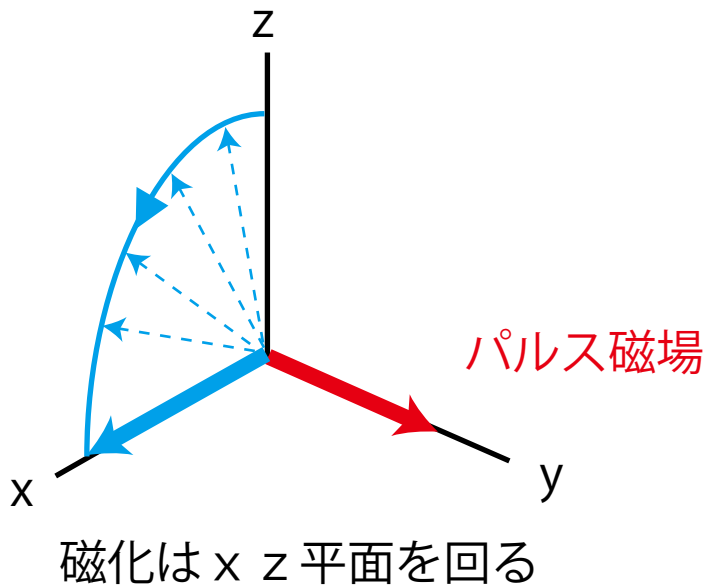
オフレゾナンスとオンレゾナンス

パルスの照射位置（搬送波の周波数 ν_0 ）と
ぴったり同じ周波数の NMR 信号
～オンレゾナンス信号

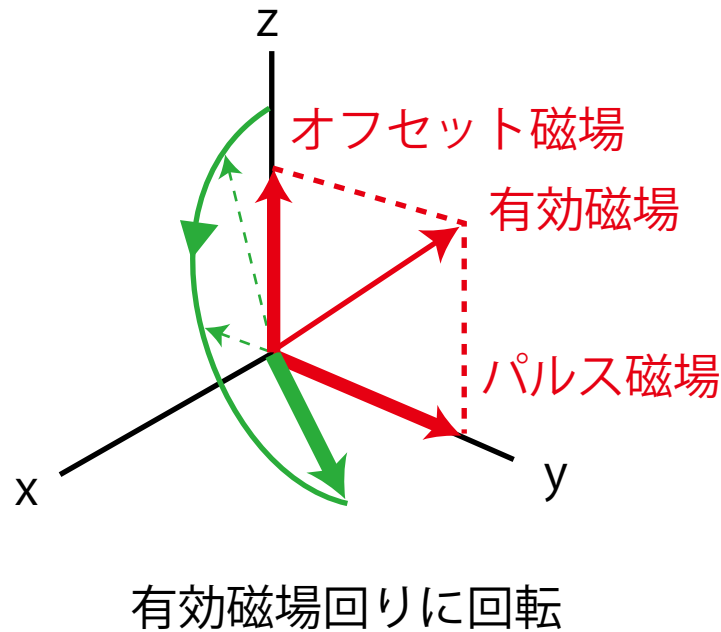


y-pulse に対する応答

1) on resonance



2) off resonance



90 度パルスは不完全になり、異なるオフセットの横磁化は XY 平面に散らばる



ピークの位相がずれる



FT 後に位相補正が必要

測定～処理の流れのまとめ

