

学校编码: 10384

分类号_____密级_____

学号: 33120130154213

UDC_____

廈門大學

博 士 学 位 论 文

基于模式识别的不均匀磁场下高分辨核磁共振波谱新方法

Pattern recognition based high-resolution NMR spectroscopy under inhomogeneous magnetic fields

韦芝良

指导教师姓名: 陈忠 教授

专业名称: 电磁场与微波技术

论文提交日期: 2015年 月

论文答辩时间: 2015年 月

学位授予日期: 2015年 月

答辩委员会主席:

评 阅 人:

2015年 月

厦门大学学位论文原创性声明

本人呈交的学位论文是本人在导师指导下,独立完成的研究成果。本人在论文写作中参考其他个人或集体已经发表的研究成果,均在文中以适当方式明确标明,并符合法律规范和《厦门大学研究生学术活动规范(试行)》。

另外,该学位论文为()课题(组)的研究成果,获得()课题(组)经费或实验室的资助,在()实验室完成。(请在以上括号内填写课题或课题组负责人或实验室名称,未有此项声明内容的,可以不作特别声明。)

声明人(签名):

年 月 日

厦门大学博硕士学位论文摘要库

厦门大学学位论文著作权使用声明

本人同意厦门大学根据《中华人民共和国学位条例暂行实施办法》等规定保留和使用此学位论文，并向主管部门或其指定机构送交学位论文(包括纸质版和电子版)，允许学位论文进入厦门大学图书馆及其数据库被查阅、借阅。本人同意厦门大学将学位论文加入全国博士、硕士学位论文共建单位数据库进行检索，将学位论文的标题和摘要汇编出版，采用影印、缩印或者其它方式合理复制学位论文。

本学位论文属于：

- ()1. 经厦门大学保密委员会审查核定的保密学位论文，于年
月 日解密，解密后适用上述授权。
- ()2. 不保密，适用上述授权。

(请在以上相应括号内打“√”或填上相应内容。保密学位论文应是已经厦门大学保密委员会审定过的学位论文，未经厦门大学保密委员会审定的学位论文均为公开学位论文。此声明栏不填写的，默认为公开学位论文，均适用上述授权。)

声明人(签名)：

年 月 日

厦门大学博硕士学位论文摘要库

专用缩写词英汉对照表

缩写	英文	中文
COSY	Correlation spectroscopy	相关谱
CS	Compressed sensing	压缩感知
DDF	Dipolar distant field	远程偶极场
EPSI	Echo planar spectroscopic imaging	平面回波谱成像
FDM	Filter diagonalization method	滤波对角化方法
FID	Free induction decay	自由感应衰减
FSE	Fast spin echo	快速自旋回波
FT	Fourier transformation	傅里叶变换
HSQC	Heteronuclear single-quantum correlation	异核单量子相关
iDQC	Intermolecular double-quantum coherence	分子间二量子相干
iMQC	Intermolecular multi-quantum coherence	分子间多量子相干
iSQC	Intermolecular single-quantum coherence	分子间单量子相干
iZQC	Intermolecular zero-quantum coherence	分子间零量子相干
LBI	Line broadening interference	谱线增宽相干
LW	Line width	线宽
MAS	Magic angle spinning	魔角旋转
MF	Magnifying factor	放大因子
MQC	Multi-quantum coherence	多量子相干
MRI	magnetic resonance imaging	磁共振成像
NMR	nuclear magnetic resonance	核磁共振
PFT	Pulse fourier transformation	脉冲傅里叶变换
PHASICS	Partial homogeneity assisted inhomogeneity correction spectroscopy	基于局部均匀的磁场不均匀校正谱
PR	Pattern recognition	模式识别
SECSY	Spin echo correlation spectroscopy	自旋回波相干谱
SNR	Signal-to-noise ratio	信噪比
TOCSY	Total correlation spectroscopy	全相关谱
ZQC	Zero-quantum coherence	零量子相干

厦门大学博硕士学位论文摘要库

目录

专用缩写词英汉对照表	i
中文摘要	xi
ABSTRACT	xiii
第一章 绪论	1
1.1 引言	1
1.2 核磁共振波谱技术	2
1.2.1 二维谱实验时间	3
1.2.2 超快速时空编码技术	6
1.3 传统高分辨技术	12
1.3.1 分子内零量子与自旋回波相关谱技术	14
1.3.2 分子间多量子相干技术	16
1.3.3 基于超快速时空编码的高分辨技术	19
1.4 论文结构	23
第二章 基于局部均匀的磁场不均匀校正方法	25
2.1 引言	25
2.2 原理与方法	26
2.2.1 理论分析	26
2.2.2 实验准备	29
2.3 实验结果与讨论	30
2.3.1 单方向磁场不均匀实验	30
2.3.2 三维磁场不均匀实验	33
2.3.3 生物样品实验	34
2.4 本章小结	38
第三章 谱线增宽相干方法	39

3.1 引言	39
3.2 原理与方法	40
3.2.1 LBI-I	41
3.2.2 LBI-II	45
3.2.3 LBI-III.....	46
3.2.4 协同相干.....	49
3.2.5 实验准备.....	51
3.3 实验结果与讨论	53
3.3.1 Z^1 不均匀实验	53
3.3.2 $Z^1 \sim Z^7$ 不均匀实验	57
3.3.3 低浓度样品实验.....	59
3.3.4 协同相干实验.....	60
3.3.5 分层样品实验.....	61
3.3.6 信噪比量化分析实验.....	62
3.4 本章小结	65
第四章 基于反式 k 空间的超快速二维谱	67
4.1 引言	67
4.2 原理与方法	69
4.2.1 理论分析.....	69
4.2.2 实验准备.....	76
4.3 实验结果与讨论	77
4.3.1 不均匀磁场实验.....	77
4.3.2 均匀场实验.....	82
4.3.3 多体素 COSY 实验.....	84
4.3.4 化学反应实验.....	85
4.4 本章小结	87
第五章 全文总结和展望	89
5.1 全文总结	89

5.2 展望.....	90
参考文献.....	93
论文发表情况	103
致谢.....	107

厦门大学博硕士论文摘要库

厦门大学博硕士学位论文摘要库

CONTENT

Acronyms	i
Chinese abstract.....	xi
English abstract.....	xiii
Chapter 1 Preface.....	1
1.1 Introduction	1
1.2 Theory of NMR	2
1.2.1 Time expense of 2D NMR	3
1.2.2 Ultrafast spatiotemporal encoding technique.....	6
1.3 Convnetional high-resolution techniques.....	12
1.3.1 Zero-quantum coherence and spin echo correlated spectroscopy.....	14
1.3.2 Intermolecular multi-quantum coherence	16
1.3.3 Ultrafast techniques	19
1.4 Dissertation structure	23
Chapter 2 Partial homogeneity based correction spectroscopy	25
2.1 Introduction	25
2.2 Theory and methods	26
2.2.1 Theoretical analyses	26
2.2.2 Experiment settings.....	29
2.3 Results and discussion	30
2.3.1 Single-axial inhomogeneity experiment	30
2.3.2 Triple-axial inhomogeneity experiment	33
2.3.3 Biological tissue experiment.....	34
2.4 Summary	38
Chapter 3 Line broadening interference	39

3.1 Introduction	39
3.2 Theory and methods	40
3.2.1 LBI-I	41
3.2.2 LBI-II	45
3.2.3 LBI-III.....	46
3.2.4 Synchronous interference.....	49
3.2.5 Experiment settings.....	51
3.3 Results and discussion	53
3.3.1 Z^1 inhomogeneity experiment.....	53
3.3.2 $Z^1 \sim Z^7$ inhomogeneity experiment.....	57
3.3.3 Low-concentration experiment	59
3.3.4 Synchronous interference experiment.....	60
3.3.5 Layered sample experiment	61
3.3.6 SNR comparison experiment	62
3.4 Summary	65
Chapter 4 Inverse-k-space based ultrafast spectroscopy	67
4.1 Introduction	67
4.2 Theory and methods	69
4.2.1 Theoretical analyses.....	69
4.2.2 Experimental settings.....	76
4.3 Results and discussion	77
4.3.1 Inhomogeneity experiment	77
4.3.2 Homogeneity experiment.....	82
4.3.3 Multi-voxel COSY experiment.....	84
4.3.4 Chemical reaction experiment	85
4.4 Summary	87
Chapter 5 Summary and prospect	89
5.1 Summary	89

5.2 Prospect	90
References	93
Publications	103
Acknowledgements	107

厦门大学博硕士学位论文摘要库

厦门大学博硕士学位论文摘要库

作者姓名：韦芝良

论文题目：基于模式识别的不均匀磁场下高分辨核磁共振波谱方法

作者简介：韦芝良，男，1989年7月出生，2013年9月师从于厦门大学陈忠教授，于2015年 月获博士学位。

中 文 摘 要

核磁共振（NMR）波谱技术具有非侵入、无损伤以及高分辨率（提供化学位移及标量偶合等分子水平信息）的特点，被广泛应用于化学结构鉴定、生物蛋白质分子三维结构解析及医药检测等众多领域。然而，高分辨的核磁共振波谱通常要求高度均匀且稳定的磁场条件。这种要求在很多时候是无法满足的，例如存在磁化率不连续的生物组织内部及不同组织的分界面。因此，不均匀磁场条件下的高分辨核磁共振波谱方法研究具有重要的意义。本文利用局部磁场均匀性、谱线增宽相干及时空编码技术在不均匀磁场下获取谱图，进而以模式识别为基础设计相应的校正算法，从而重构出高分辨一维或者二维核磁共振波谱。主要研究内容如下：

一、由于不均匀磁场带来的谱线增宽随着待检测样品尺寸的增长而趋于严重，故而在足够小的样品体素内磁场是均匀的。借助于三维梯度对样品的三个正交方向进行编码（一维频率编码与二维相位编码），从而获取对应于小体素的一系列一维波谱。在这一系列的高分辨波谱中，同一共振的谱峰之间存在不均匀磁场引起的频率差。此时，引入模式识别以自动识别不均匀磁场引起的频率差，并通过圆周移位的方式完成校正。校正后，通过累加投影就可以提供高分辨的磁共振一维谱。与该校正算法配套施用的脉冲序列仅包含单个射频脉冲，对脉冲角度不准有一定的适应能力。

二、不均匀磁场条件下磁共振波谱面临的主要问题是谱线增宽引起谱峰混叠，进而导致信息损失。在间接维演化的过程中施加梯度，可以使谱线不再沿着产生相互混叠的方向增宽，从而避免混叠，保留高分辨信息。按间接维施加梯度的不同，该方法可以分为三种。三种方法产生的谱图经过模式识别校正后可提供

Degree papers are in the “[Xiamen University Electronic Theses and Dissertations Database](#)”.

Fulltexts are available in the following ways:

1. If your library is a CALIS member libraries, please log on <http://etd.calis.edu.cn/> and submit requests online, or consult the interlibrary loan department in your library.
2. For users of non-CALIS member libraries, please mail to etd@xmu.edu.cn for delivery details.