1995 ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА Том 37, № 11
1995 SOLID STATE PHYSICS Vol. 37, N 11

УДК 539.143.43

КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ СВОЙСТВА СИГНАЛА СВОБОДНОЙ ИНДУКЦИИ ПРИ СТОХАСТИЧЕСКОМ ВОЗБУЖДЕНИИ

С.А.Баруздин

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет,
197376, Санкт-Петербург, Россия
(Поступила в Редакцию 17 января 1995 г.
В окончательной редакции 27 мая 1995 г.)

Рассматриваются статистические свойства сигнала свободной индукции при возбуждении неоднородно уширенной спиновой системы белым гауссовым шумом. Определяются корреляционная функция этого сигнала и его дисперсия. Отмечается нелинейный характер преобразования случайного процесса спиновой системой.

Возбуждение сигналов магнитного резонанса может осуществляться монохроматическими сигналами, как это делается в спектроскопии медленного прохождения, и импульсными сигналами, применяемыми в Фурье-спектроскопии. В последнем случае осуществляется одновременное возбуждение всей линии поглощения за счет соответствующего выбора длительности радиоимпульса. При этом мощность возбуждения значительно возрастает, поскольку энергия возбуждения сосредоточена в узком интервале действия радиоимпульса. Увеличение же длительности радиоимпульса приводит к сужению его спектра. Для разрешения этой проблемы вместо коротких дельтаобразных радиоимпульсов можно использовать широкополосные сигналы, которые могут быть как случайными [1], так и детерминированными. Так, хорошо известен метод возбуждения спинового эха двумя сигналами с линейной частотной модуляцией [2], позволяющий снизить мощность сигналов возбуждения на несколько порядков. Особенно важно это при исследовании неоднородно уширенных линий поглощения, ширина которых в ЯМР может достигать нескольких десятков мегагерц. В качестве примера можно привести резонанс ядер ^{59}Co в ферромагнитных сплавах.

Присущая спиновым системам нелинейность приводит к искажению наблюдаемых спектров и проявляется в возникновении эффектов насыщения и уширения линий. Для получения неискаженных спектров требуется достаточно слабое возбуждение [3].

Интерес к проблеме нелинейности спиновой системы и моделированию на ее основе различных процессов, происходящих в сложных нелинейных системах, отмечался в [2]. Нелинейные свойства спиновой системы могут успешно изучаться при использовании модели белого гауссова шума в качестве источника возбуждения [1,3,4]. Такое стохастическое возбуждение может использоваться как в одномерной, так и в двумерной импульсной спектроскопии. В последнем случае получают дополнительную информацию об объекте исследований [3].

Целью настоящей работы является определение корреляционной функции сигнала свободной индукции (ССИ) спиновой системы, возбуждаемой финитными выборками белого гауссова шума.

В отличие от [1,4] будем рассматривать неоднородно уширенную спиновую систему. Также будем полагать, что длительность выборки случайного процесса τ значительно меньше времен релаксации T_1 и T_2 рассматриваемой системы. Это дает право перейти от уравнений Блоха к уравнению движения магнитного момента [5,6].

Пусть на спиновую систему, находящуюся в неоднородном магнитном поле с индукцией $B_z\mathbf{e}_{z'}$, на интервале $|t| \leqslant \tau/2$ действует магнитное поле с круговой поляризацией

$$\mathbf{B}_1(t) = B(t)\cos[\omega_0 t + \varphi(t)]\mathbf{e}_{x'} - B(t)\sin[\omega_0 t + \varphi(t)]\mathbf{e}_{y'},$$

где $B(t)$ и $\varphi(t)$ — функции, описывающие закон изменения амплитуды и фазы колебания; ω_0 — частота колебания, совпадающая с центральной частотой неоднородно уширенной линии поглощения.

Уравнения движения вектора намагниченности во вращающейся с частотой ω_0 системе координат имеют вид

$$\frac{dm_+}{dt} = \left(\frac{dm_-}{dt}\right)^* = i\Omega m_+ - i\tilde{R}(t)m_z,$$

$$\frac{dm_z}{dt} = -\frac{i}{2}R^*(t)m_+ + \text{ c.c.}, \tag{1}$$

где $m_\pm = m_x \mp i m_y$; m_x, m_y, m_z — компоненты вектора намагниченности во вращающейся системе координат;

$$\tilde{R}(t) = \gamma B_x(t) - i\gamma B_y(t) = \gamma B(t)\cos\varphi(t) - i\gamma B(t)\sin\varphi(t);$$

$\Omega = \gamma B_z - \omega_0 = \omega - \omega_0$; γ — гиромагнитное отношение.

Будем полагать, что $\tilde{R}(t)$ — комплексный белый гауссов шум с математическим ожиданием $\langle\tilde{R}(t)\rangle = 0$ и с корреляционной функцией

$$K_{\tilde{R}}(\xi_1, \xi_2) = \langle\tilde{R}(\xi_1)R^*(\xi_2)\rangle = N_0\delta(\xi_1 - \xi_2). \tag{2}$$

Следует отметить, что белый шум с корреляционной функцией (2) является математической моделью с бесконечной дисперсией. В экспериментах может использоваться полосовой белый шум с равномерной спектральной плотностью мощности в ограниченной полосе частот $\omega_0 \pm w$ вокруг центральной частоты линии поглощения ω_0, имеющий конечную дисперсию. Полосовой белый шум имеет корреляционную функцию вида $N_0 \sin c(\cdot)$, отличную от (2). Однако если выбрать полосу частот $2w$ большей, чем полоса частот исследуемой системы, то корреляционную функцию полосового белого шума можно приближенно заменить выражением (2).

Комплексная огибающая ССИ определяется интегрированием по частоте изохромат $m_+(t,\Omega)$, вычисленных в Приложении,

$$\tilde{m}(t) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} g(\Omega) m_+(t,\Omega) d\Omega =$$

$$= M_0 \int\limits_{-\infty}^{\infty} g(\Omega)[a_1(\Omega) + a_3(\Omega) + \ldots] e^{i\Omega t} d\Omega, \tag{3}$$

$$a_1(\Omega) = -i \int\limits_{-\tau/2}^{\tau/2} \tilde{R}(\xi_1) e^{-i\Omega\xi_1} d\xi_1,$$

$$a_3(\Omega) = -\frac{i}{2} \int\limits_{-\tau/2}^{\tau/2} d\xi_1 \int\limits_{-\tau/2}^{\xi_1} d\xi_2 \int\limits_{-\tau/2}^{\xi_2} d\xi_3 \tilde{R}(\xi_1) e^{-i\Omega\xi_1} \times$$

$$\times \left[R_2^*(\xi_2) \tilde{R}(\xi_3) e^{-i\Omega(\xi_3 - \xi_2)} + \text{ c.c.} \right],$$

M_0 — статическая намагниченность, $g(\Omega)$ — низкочастотный эквивалент неоднородно уширенной линии поглощения.

Из (3) следует, что отклик спиновой системы $\tilde{m}(t)$ нелинейно связан с возбуждением. Лишь при слабом возбуждении, когда $a_3(\Omega) \ll a_1(\Omega)$, эта связь носит линейный характер.

Отметим, все моменты нечетного порядка отклика $\tilde{m}(t)$ равны нулю. Это следует из равенства нулю всех нечетных моментов гауссова процесса [7]. Следовательно, среднее $\langle \tilde{m}(t) \rangle = 0$ и $\langle \tilde{m}^3(t) \rangle = 0$. Последнее свидетельствует о симметричности функции распределения отклика.

Что касается самого закона распределения плотности вероятности, то в результате нелинейных преобразований гауссова случайного процесса свойство гауссовости в общем случае утрачивается. Однако если негауссовский случайный процесс с временем корреляции τ_{cor} воздействует на инерционную линейную систему с постоянной времени τ_c, то процесс на выходе такой системы приближается к гауссовскому. Это приближение тем лучше, чем сильнее выполняется неравенство $\tau_c \gg \tau_{\text{cor}}$. Роль инерционной системы выполняет неоднородно уширенная линия поглощения, описываемая функцией $g(\Omega)$ в (3). При этом $\tau_c \approx w_c^{-1}$, где w_c — ширина линии поглощения. Отмеченное неравенство в в случае белого шума хорошо выполняется.

Таким образом, можно приближенно считать отклик $\tilde{m}(t)$ гауссовым случайным процессом, который исчерпывающим образом определяется математическим ожиданием $\langle \tilde{m}(t) \rangle$ и корреляционной функцией

$$K_{\tilde{m}}(t,u) = \langle \tilde{m}(t) m^*(u) \rangle. \tag{4}$$

В дальнейшем при определении сопряженной компоненты $m^*(u)$ будем обозначать переменную интегрирования по частоте через Ω_1, а переменные интегрирования по времени — через η.

Для вычисления корреляционной функции ССИ (4) необходимо выполнить усреднение

$$S(\Omega,\Omega_1)=\langle a_1(\Omega)a_1^*(\Omega_1)+a_1(\Omega)a_3^*(\Omega_1)+a_3(\Omega)a_1^*(\Omega)+a_3(\Omega)a_3^*(\Omega_1)+\ldots\rangle. \quad (5)$$

В дальнейшем ограничимся в (5) первыми тремя слагаемыми, учитывающими второй и четвертый моменты возбуждающего процесса. Второй момент при этом соответствует линейному приближению в (3), а четвертые моменты учитывают нелинейные эффекты.

Вычисление первого слагаемого в (5) не вызывает затруднений

$$\langle a_1(\Omega)a_1^*(\Omega_1)\rangle = N_0\int\limits_{-\tau/2}^{\tau/2} e^{-i(\Omega-\Omega_1)\xi_1}d\xi_1. \quad (6)$$

При вычислении последующих слагаемых в (5) моменты четвертого порядка комплексного гауссова процесса преобразуются через вторые моменты [7]. Усреднение второго слагаемого в (5) приводит к соотношению

$$\langle a_1(\Omega)a_3^*(\Omega_1)\rangle = -\frac{N_0^2}{2}\int\limits_{-\tau/2}^{\tau/2}d\xi_1\int\limits_{-\tau/2}^{\tau/2}d\eta_1\int\limits_{-\tau/2}^{\eta_1}d\eta_2\int\limits_{-\tau/2}^{\eta_2}d\eta_3 e^{i(\Omega_1\eta_1-\Omega\xi_1)}\times$$

$$\times\left[(f_1+f_2)e^{i\Omega_1(-\eta_2+\eta_3)}+(f_1+f_3)e^{i\Omega_1(\eta_2-\eta_3)}\right], \quad (7)$$

где

$$f_1=\delta(\xi_1-\eta_1)\delta(\eta_2-\eta_3),$$

$$f_2=\delta(\xi_1-\eta_3)\delta(\eta_2-\eta_1),\quad f_3=\delta(\xi_1-\eta_2)\delta(\eta_3-\eta_1).$$

В результате дальнейших преобразований (7) можно записать

$$\langle a_1(\Omega)a_3^*(\Omega_1)\rangle = -\frac{N_0^2}{2}\int\limits_{-\tau/2}^{\tau/2}\left(\xi_1+\frac{\tau}{2}\right)e^{i(\Omega_1-\Omega)\xi_1}d\xi_1 -$$

$$-\frac{N_0^2}{4}\int\limits_{-\tau/2}^{\tau/2}d\eta_1\int\limits_{-\tau/2}^{\eta_1}d\eta_3 e^{i(\Omega_1-\Omega)\eta_3}. \quad (8)$$

После аналогичного усреднения третьего слагаемого в (5) полученные результаты (6), (8) в соответствии с (3)–(5) следует проинтегрировать по частотам

$$K_{\tilde m}(t,u)=M_0^2\int\limits_{-\infty}^{\infty}\int\limits_{-\infty}^{\infty}g(\Omega)g(\Omega_1)S(\Omega,\Omega_1)e^{i\Omega t-i\Omega_1 u}d\Omega d\Omega_1.$$

Поскольку при определении $S(\Omega, \Omega_1)$ в (5) учитывались лишь первые члены ряда, то выражение для корреляционной функции ССИ будет носить приближенный характер

$$\dot{K}_{\tilde{m}}(t,u) \approx (2\pi M_0)^2 N_0 [K_1(t,u) + K_2(t,u)],$$

$$K_1(t,u) = \int\limits_{-\tau/2}^{\tau/2} G(t-\xi_1) G^*(u-\xi_1) d\xi_1,$$

$$K_2(t,u) = -N_0 \int\limits_{-\tau/2}^{\tau/2} \left(\xi_1 + \frac{\tau}{2}\right) G(t-\xi_1) G^*(u-\xi_1) d\xi_1 -$$

$$- \frac{N_0}{2} \int\limits_{-\tau/2}^{\tau/2} d\xi_1 \int\limits_{-\tau/2}^{\xi_1} d\xi_3 G(t-\xi_3) G^*(u-\xi_3), \tag{9}$$

где

$$G(t) = (1/2\pi) \int\limits_{-\infty}^{\infty} g(\Omega) \exp(i\Omega t) d\Omega$$

— обратное преобразование Фурье от функции $g(\Omega)$.

$K_1(t,u)$ в (9) соответствует линейному преобразованию случайного процесса в спиновой системе. Этот режим имеет место в случае, когда $N_0\tau \ll 1$, при этом можно не принимать во внимание $K_2(t,u)$. В свою очередь соотношение (9), полученное в приближении четвертых моментов возбуждающего процесса, удовлетворительно описывает корреляционную функцию при $N_0\tau \ll 4$, когда еще можно пренебречь влиянием шестых моментов возбуждающего процесса. В рассматриваемом приближении нелинейные эффекты обусловлены кубическим членом в методе последовательных приближений (3), поскольку квадратичный член для ССИ равен нулю.

Полученный результат дает возможность определить дисперсию ССИ

$$D(t) = K_{\tilde{m}}(t,t) \approx (2\pi M_0)^2 N_0 [K_1(t,t) + K_2(t,t)], \tag{10}$$

характеризующую его среднюю мощность, поскольку $\langle \tilde{m}(t) \rangle = 0$, и исследовать ее свойства.

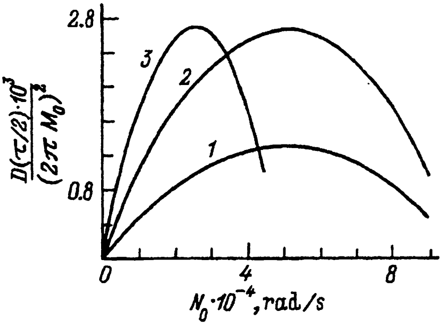
В качестве примера рассмотрим лоренцеву форму линии поглощения [2,6]

$$g(\Omega) = \frac{a}{\pi} \frac{1}{\Omega^2 + a^2}, \tag{11}$$

где a — параметр, определяющий ширину линии.

Лоренцевой форме линии (11) соответствует

$$G(t) = \exp(-a|t|). \tag{12}$$



Зависимость нормированной дисперсии сигнала свободной индукции от спектральной плотности мощности N_0 для $t = \tau/2$.

$a/2\pi$ (MHz) и τ (μs) соответственно равны: *1* — 1.5 и 10, *2* — 0.75 и 10, *3* — 0.375 и 20.

Практический интерес представляет дисперсия ССИ по окончании импульса возбуждения, когда $t \geqslant \pi/2$. После подстановки (12) в (10) получим выражение для дисперсии ССИ

$$D(t) \approx (2\pi M_0)^2 \frac{N_0}{2a} \left\{ e^{-2a\left(t-\frac{\tau}{2}\right)} - e^{-2a\left(t+\frac{\tau}{2}\right)} - \right.$$

$$\left. - N_0 \left[\left(\tau - \frac{1}{4a}\right) e^{-2a\left(t-\frac{\tau}{2}\right)} - \left(\frac{\tau}{2} - \frac{1}{4a}\right) e^{-2a\left(t+\frac{\tau}{2}\right)} \right] \right\}. \qquad (13)$$

На рисунке представлена зависимость нормированной дисперсии ССИ $D(t)/(2\pi M_0)^2$ от спектральной плотности мощности N_0 случайного процесса $\tilde{R}(t)$ для $t = \tau/2$ при различных значениях длительности выборки случайного процесса τ и ширины линии поглощения a. При малых значениях N_0 эта зависимость носит линейный характер. В дальнейшем с ростом N_0 начинает проявляться нелинейность, связанная с влиянием $K_2(t,t)$ в (10). Характеристика имеет максимум.

Если длительность выборки возбуждения $\tau \geqslant 2\pi/a$, то выражение (13) можно упростить

$$D(t) \approx (2\pi M_0)^2 \frac{N_0}{2a} [1 - N_0\tau] e^{-2a\left(t-\frac{\tau}{2}\right)}.$$

В этом случае экстремальное значение дисперсии достигается при $N_0 = 1/2\tau$. Для $t = \tau/2$ этот максимум равен

$$D_{\max}\left(\frac{\tau}{2}\right) = \frac{(2\pi M_0)^2}{8a\tau}.$$

Следует отметить, что полученное выражение (13), а также график нормированной дисперсии, представленный на рисунке, удовлетворительно описывают дисперсию ССИ при $N_0\tau \ll 4$, т.е. до области максимума. Дальнейшее увеличение $N_0\tau$ требует учета моментов более высокого порядка.

Полученное значение дисперсии можно сравнить с мощностью ССИ при возбуждении коротким прямоугольным дельтаобразным радиоимпульсом с длительностью $\tau_\delta < 2\pi/a$ и амплитудой B

$$P(t) = (2\pi M_0)^2 \sin^2 \alpha G^2(t), \quad \alpha = \gamma B \tau_\delta.$$

При лоренцевой форме линии мощность огибающей ССИ для $t = 0$ равна

$$P(0) = (2\pi M_0)^2 \sin^2 \alpha.$$

ПРИЛОЖЕНИЕ

Решение системы (1) представим в матричном виде

$$M(t) = A(t, t_0)M(t_0), \tag{П1}$$

где $A(t, t_0)$ — переходная матрица, $M(t_0)$ — вектор начальных условий,

$$M = \begin{pmatrix} m_+ \\ m_- \\ m_z \end{pmatrix}, \quad M(t_0) = M\left(-\frac{\tau}{2}\right) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ M_0 \end{pmatrix}.$$

В результате воздействия случайного процесса на спиновую систему происходит его нелинейное преобразование. Система (1) не имеет в общем случае точного аналитического решения, однако ее приближенное решение может быть найдено методом последовательных приближений (7). Для этого целесообразно предварительно преобразовать компоненты вектора намагниченности

$$m_\pm(t) = e^{\pm i\Omega(t-t_0)} m'_\pm(t), \tag{П2}$$

$$m_z(t) = m'_z(t). \tag{П3}$$

Для новых переменных уравнение движения (1) преобразуется к виду

$$\frac{dM'}{dt} = Q(t)M', \tag{П4}$$

$$M' = \begin{pmatrix} m'_+ \\ m'_- \\ m'_z \end{pmatrix},$$

$$Q(t) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i\tilde{R}(t)e^{-i\Omega(t-t_0)} \\ 0 & 0 & iR^*(t)e^{i\Omega}(t-t_0) \\ -\frac{i}{2}e^{i\Omega(t-t_0)}R^*(t) & \frac{i}{2}e^{-i\Omega(t-t_0)}\tilde{R}(t) & 0 \end{pmatrix}.$$

Решение (П4) представим в форме, аналогичной (П1),

$$M'(t) = A'(t, t_0)M'(t_0),$$

$$M'(t_0) = M'\left(-\frac{\tau}{2}\right) = M\left(-\frac{\tau}{2}\right).$$

Матрицу $A'(t, t_0)$ определим методом последовательных приближений [8]

$$A'(t, t_0) = I + \int_{t_0}^{t} d\xi_1 Q(\xi_1) + \int_{t_0}^{t} d\xi_1 \int_{t_0}^{\xi_1} d\xi_2 Q(\xi_1)Q(\xi_2) + \dots\ , \tag{П5}$$

где I — единичная матрица.

Переходя к исходным переменным с помощью (П2), (П3), можно определить элементы $a_{kl}(t, t_0)$ матрицы $A(t, t_0)$ через элементы $a'_{kl}(t, t_0)$ матрицы $A'(t, t_0)$ (П5). Затем с помощью (П1) определяется состояние вектора $M(\tau/2)$ в момент окончания импульса возбуждения.

Для определения состояния вектора M по окончании импульса возбуждения на интервале $t \geqslant \tau/2$ следует решить систему (1) для $\tilde{R}(t) = R^*(t) = 0$. Для этого интервала решение может быть представлено в виде

$$M(t) = B\left(t, \frac{T}{2}\right) M\left(\frac{T}{2}\right),$$

$$B\left(t, \frac{T}{2}\right) = \begin{pmatrix} e^{i\Omega\left(t-\frac{\tau}{2}\right)} & 0 & 0 \\ 0 & e^{-i\Omega\left(t-\frac{\tau}{2}\right)} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{П6})$$

В результате с помощью (П1), (П6) определяется комплексная поперечная компонента вектора намагниченности $m_+(t)$, ответственная за формирование ССИ. Эта компонента является изохроматой, поскольку зависит как от времени, так и от частоты Ω

$$m_+(t, \Omega) = M_0 a_{13}(\Omega) e^{i\Omega\left(t-\frac{\tau}{2}\right)},$$

где

$$a_{13}(\Omega) = a'_{13}(\Omega) e^{i\Omega\tau} = [a_1(\Omega) + a_3(\Omega) + \ldots] e^{i\Omega\frac{\tau}{2}},$$

$$a_1(\Omega) = -i \int\limits_{-\tau/2}^{\tau/2} \tilde{R}(\xi_1) e^{-i\Omega\xi_1} d\xi_1,$$

$$a_3(\Omega) = -\frac{i}{2} \int\limits_{-\tau/2}^{\tau/2} d\xi_1 \int\limits_{-\tau/2}^{\xi_1} d\xi_2 \int\limits_{-\tau/2}^{\xi_2} d\xi_3 \tilde{R}(\xi_1) e^{-i\Omega\xi_1} \times$$

$$\times \left[R_2^*(\xi_2) \tilde{R}(\xi_3) e^{-i\Omega(\xi_3-\xi_2)} + \text{c.c.}\right].$$

Список литературы

[1] Ernst R.R. J. Magn. Res. **3**, 10 (1970).
[2] Куркин М.И., Туров Е.А. ЯМР в магнитоупорядоченных веществах и его применения. М. (1990). 248 с.
[3] Эрнст Р., Боденхаузен Дж., Вокаун А. ЯМР в одном и двух измерениях. М. (1990). 711 с.
[4] Knight W.R., Kaiser R. J. Magn. Res. **48**, 293 (1982).
[5] Сликтер Ч. Основы теории магнитного резонанса. М. (1981). 448 с.
[6] Цифринович В.И. Расчет сигналов эха. Новосибирск (1986). 112 с.
[7] Ван Трис Г. Теория обнаружения, оценок и модуляции. М. (1977). Т. 3. 664 с.
[8] Гантмахер Ф.Р. Теория матриц. М. (1971). 576 с.