

УДК 530.143.43

© 1991

ОСОБЕННОСТИ СИГНАЛОВ ЭХА, ОБУСЛОВЛЕННЫЕ НЕОДНОРОДНОСТЯМИ АМПЛИТУДЫ ВОЗБУЖДАЮЩИХ ИМПУЛЬСОВ

И. Г. Килиптари, М. И. Куркин

С помощью численных методов расчета проведено исследование формы сигналов ядерного спинового эха при различных значениях неоднородности частот ЯМР и коэффициентов усиления по радиочастотному (РЧ) полю. Поведение сигналов эха подчиняется ряду простых закономерностей, которым удалось дать наглядную физическую интерпретацию. Предсказывается существование сигналов эха нового типа с необычными свойствами.

В настоящее время методика спинового эха широко используется при исследовании целого ряда явлений, таких как ядерное, электронное, циклотронное, световое и других видов эха [1-4]. Кроме того, некоторые эффекты при нелинейной дифракции, например обращение волнового фронта [5], также могут рассматриваться как эхо-отклик. Наиболее простым объектом для изучения сигналов эха является система ядерных спинов. В этом случае сигналы эха представляют собой импульсное электромагнитное излучение на частоте ЯМР, возникающее после воздействия на систему импульсов электромагнитного поля. На рис. 1 приведена осциллограмма двухимпульсного ядерного спинового эха в чистом гцк Со.

Первый импульс возбуждает прецессию ядерных спинов, с которой связано электромагнитное излучение образца, получившее название сигнала свободной прецессии. Оно существует в течение некоторого времени после окончания первого импульса, пока действие различных неоднородностей не нарушит когерентность в прецессии отдельных спинов. Процесс потери когерентности обычно называют распадом свободной прецессии [6].

Второй импульс производит такие изменения в системе, что упомынутая когерентность начинает восстанавливаться, благодаря чему вновь возникает электромагнитное излучение, которое и называется сигналом эха. Отметим, что распад прецессии сопровождается ростом энтропии подобно всякому равновесному процессу. Напротив, при восстановлении когерентности энтропия системы убывает, как это имеет место в процессах, происходящих в живых организмах. В качестве «пищи», необходимой для борьбы с возрастанием энтропии, в данном случае используется второй импульс.

Свойства сигналов эха (интенсивность, форма, частотный спектр) в значительной степени зависят от параметров возбуждающих импульсов, что позволяет использовать явление эха в устройствах для хранения и обработки информации [7]. При разработке таких устройств обычно возникают проблемы, связанные с потреблением энергии, конкурентоспособностью и пр., которые следует решать для каждого вида сигналов эха по отдельности. Однако существуют и общие проблемы, которые удобно изучать с помощью наиболее простых систем, в частности на системе ядерных спинов.

В настоящей работе представлены результаты численного расчета формы сигналов ядерного спигового эха при различных значениях неоднородности частот ЯМР и амплитуды переменного РЧ поля в образце. Реальными объектами, на которых могут быть реализованы соответствующие условия, являются многодоменные ферромагнетики [8]. Наши расчеты продолжают исследования, начатые в [8-10]. Полученные результаты

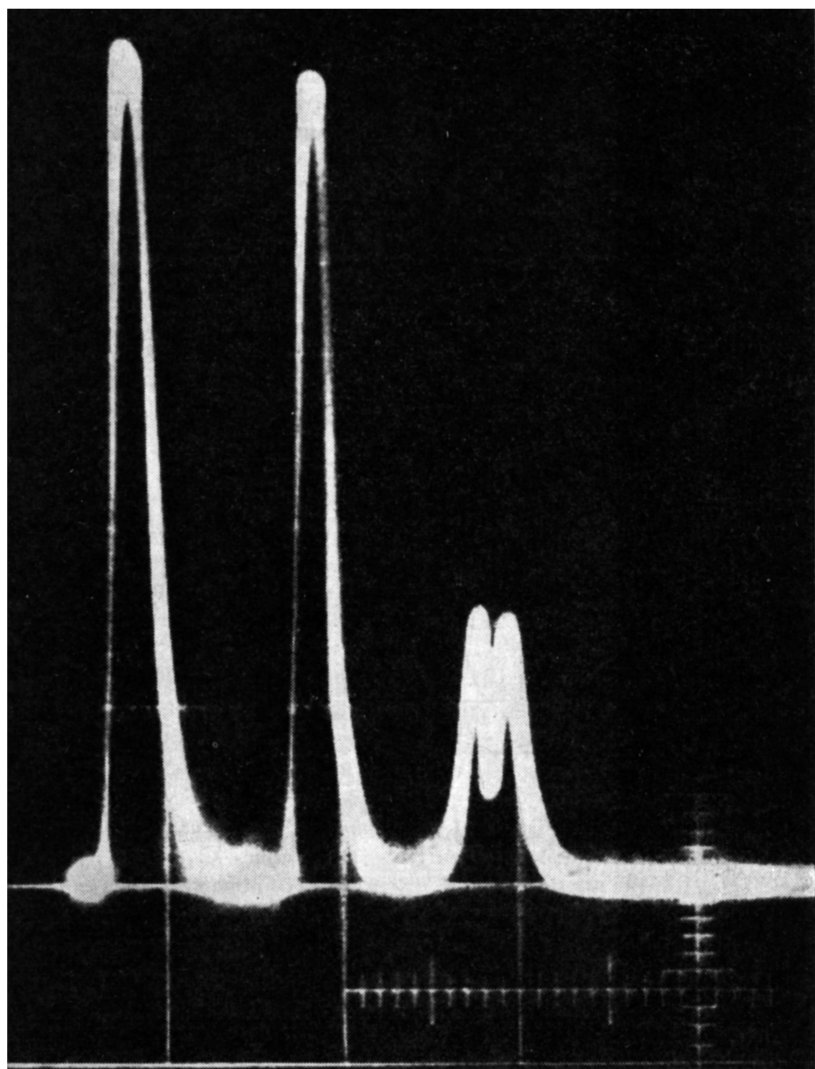


Рис. 1. Осциллограмма сигналов эха от ядер ^{59}Co в чистом гцк Co при возбуждении линии ЯМР импульсами длительностью $\tau_1 = \tau_2 = 2.8$ мкс на частоте 218 МГц ($T = 77$ К).

свидетельствуют о том, что, несмотря на громоздкость исходных выражений, в поведении сигналов эха можно выделить ряд простых закономерностей и дать им наглядную интерпретацию.

Исходные выражения и процедура расчета

Интенсивность сигнала свободной прецессии ядерных спинов в магнетиках как функция времени t определяется модулем следующего выражения [8, 9]:

$$I(t) = \left| \int_0^{\infty} \eta F(\eta) d\eta \int_{-\infty}^{\infty} g(\Delta\omega) m^+(\eta, \Delta\omega, t) d(\Delta\omega) \right|, \quad (1)$$

где $m^+ = m_x + im_y$ — циркулярная проекция ядерной намагниченности \mathbf{m} ; $F(\eta)$ — функция распределения ядерных спинов по коэффициентам усиления η ; $g(\Delta\omega)$ — функция распределения спинов по частотам ЯМР ω_n (функция формы линии ЯМР); $\Delta\omega = \omega - \omega_n$; ω — частота РЧ поля и им-

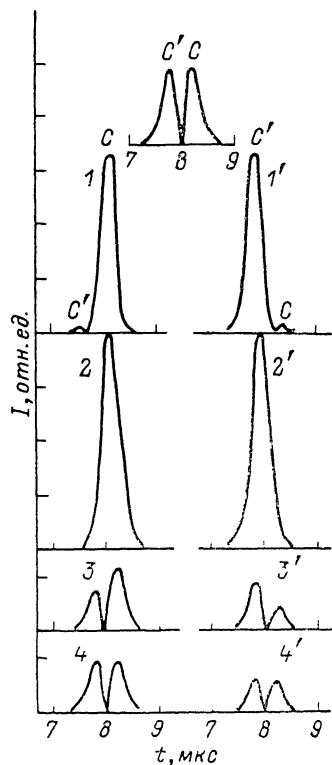
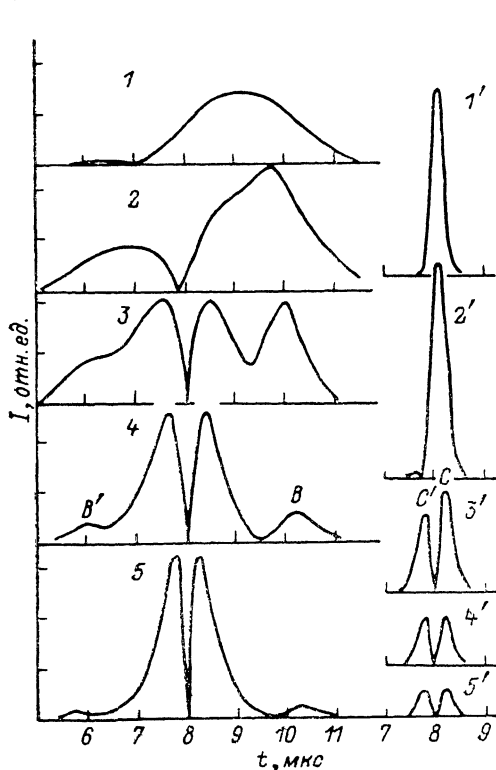


Рис. 2. Зависимость формы сигналов эха от углов поворота возбуждающими импульсами.

Рис. 3. Зависимость формы сигнала эха при $\Delta\omega_{1,2} \tau_{1,2} \lesssim \pi$ и больших углах поворота $\alpha_{1,2} = \gamma H_{1,2} \Delta\tau_{1/2} \times \tau_{1/2} > \pi$ от отношения $\alpha_2/\alpha_1 = k$: 1.00 (вверху), 1.07 (1), 1.21 (2), 1.50 (3), 2.14 (4), 0.93 (1'), 0.82 (2'), 0.66 (3'), 0.47 (4').

$\Delta\omega_{1/2} = 6 \cdot 10^3 \text{ c}^{-1}$, $\tau_{12} = 8 \text{ мкс}$, $\Delta\eta_{1/2} = 500$, $H_1 = H_2$. Слева: $\tau_1 = \tau_2 = 2.0 \text{ мкс}$ ($\Delta\omega_{1/2} \tau_{1,2} \gg \pi$), $\gamma H_1 = 10^3$ (1), $2 \cdot 10^3$ (2), $3.5 \cdot 10^3$ (3), $7 \cdot 10^3$ (4), $1.2 \cdot 10^4 \text{ c}^{-1}$ (5); справа: $\tau_1 = \tau_2 = 0.1 \text{ мкс}$ ($\Delta\omega_{1/2} \tau_{1,2} \lesssim \pi$), $\gamma H_1 = 2 \cdot 10^4$ (1'), $4 \cdot 10^4$ (2'), $7 \cdot 10^4$ (3'), $1.4 \cdot 10^5$ (4'), $2.4 \cdot 10^5 \text{ c}^{-1}$ (5').

Расчетные значения параметров: $\Delta\omega_{1/2} = 6 \cdot 10^3 \text{ c}^{-1}$, $\tau_{12} = 8 \text{ мкс}$, $\Delta\eta_{1/2} = 500$, $\gamma H_1 = \gamma H_2 = 1.4 \cdot 10^5 \text{ c}^{-1}$, $\tau_1 = 0.1 \text{ мкс}$.

пульсов. При воздействии на систему двух импульсов с амплитудами РЧ поля H_1 и H_2 , длительностями τ_1 и τ_2 , временем задержки τ_{12} компонента m^+ во вращающейся с частотой ω системе координат описывается выражением [9]

$$m^+(\eta, \Delta\omega, t) = -\frac{1}{2} m_0 \left[\frac{4\omega_1 \omega_2^2 \Delta\omega}{\Omega_1^2 \Omega_2^2} \sin^2 \frac{\Omega_1 \tau_1}{2} \sin^2 \frac{\Omega_2 \tau_2}{2} - i \frac{2\omega_1 \omega_2^2}{\Omega_1 \Omega_2^2} \sin \Omega_1 \tau_1 \sin^2 \frac{\Omega_2 \tau_2}{2} \right] \exp \{i \Delta\omega (\tau_{12} - t)\}, \quad (2)$$

где

$$\omega_{1,2} = \gamma H_{1,2} \eta, \quad \Omega_{1,2} = [\omega_{1,2}^2 + \Delta\omega^2]^{1/2}, \quad (3)$$

t — время, отсчитываемое от момента выключения второго импульса; γ — ядерное гироманнитное отношение; m_0 — равновесная ядерная на-

магнитность. В качестве $g(\Delta\omega)$ и $F(\eta)$ использовались распределения типа Гаусса

$$g(\Delta\omega) = \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \frac{1}{\Delta\omega_{1/2}} \exp\left\{-\frac{\Delta\omega^2}{1.44\Delta\omega_{1/2}^2}\right\}, \quad (4)$$

$$F(\eta) = \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \frac{1}{\Delta\eta_{1/2}} \exp\left\{-\frac{\eta^2}{1.44\Delta\eta_{1/2}^2}\right\}, \quad (5)$$

где $\Delta\omega_{1/2}$, $\Delta\eta_{1/2}$ — полуширины соответствующих распределений.

Расчет проводился на ЭВМ по стандартным программам с относительной точностью 10^{-5} . Результаты расчета для абсолютного значения интенсивности сигналов приведены на рис. 2, 3. Обращаем внимание на следующие особенности в поведении сигналов эха.

При выполнении условия $\Delta\omega_{1,2}\tau_{1,2} \gg \pi$ с ростом амплитуды РЧ поля $H_{1,2}$ наблюдается расщепление сигнала сначала на две, а потом на четыре компоненты (рис. 2, 1–5). Временной интервал между компонентами A и A' хорошо описывается формулой

$$\Delta t_{AA'} = 2(1/\gamma H_{1,2}\Delta\eta_{1/2} + 1/\Delta\omega_{1/2}), \quad (6)$$

а интервал между компонентами B и B' зависит только от длительности возбуждающих импульсов $\tau_{1,2}$ ($\tau_1 = \tau_2$)

$$\Delta t_{BB'} = 2\tau_{1,2}. \quad (7)$$

В случае сравнительно коротких импульсов, удовлетворяющих условию $\Delta\omega_{1,2}\tau_{1,2} \leq \pi$, с ростом $H_{1,2}$ сигнал эха расщепляется на две компоненты C и C' (рис. 2, 1'–5'). Величина этого расщепления определяется только неоднородным уширением $\Delta\omega_{1/2}$ и описывается формулой

$$\Delta t_{CC'} = 2/\Delta\omega_{1/2}, \quad (8)$$

которая является предельным случаем (6) при $\gamma H_{1,2}\Delta\eta_{1/2} \gg \Delta\omega_{1/2}$.

Вместе с тем интенсивность компонент C и C' существенно зависит от соотношения между углами поворота спинов возбуждающими импульсами $\alpha_{1,2} = \gamma H_{1,2}\Delta\eta_{1/2}\tau_{1,2}$ (рис. 3).

Обсуждение результатов

Условия формирования сигналов A , A' и B , B' . Для объяснения поведения упомянутых сигналов воспользуемся аналогиями с другими известными сигналами эха. Аналогом компонент A и A' является расщепленный при больших углах поворота сигнал эха, впервые исследованный Мимсом [10]. В данном случае он обусловлен спинами с частотами ЯМР, удовлетворяющими условию

$$|\Delta\omega| = |\omega - \omega_n| \approx \gamma H_{1,2}\Delta\eta_{1/2}. \quad (9)$$

Компоненты B и B' представляют собой сигналы эха от спинов, характеризующихся гораздо большими расстройками

$$|\Delta\omega| \gg \gamma H_{1,2}\Delta\eta_{1/2}. \quad (10)$$

Механизм формирования этих сигналов аналогичен краевому (или одноимпульсному) эхо, которое исследовал Блум [6]. Он основан на возможности скомпенсировать распад прецессии во время действия первого импульса за счет процессов восстановления когерентности после окончания второго импульса (компонента B), а распад прецессии в промежутке между импульсами — аналогичными процессами во время действия второго импульса (компонента B'). В принципе за счет описанного механизма могут появляться дополнительные сигналы в моменты времени $t = \tau_{12} \pm (\tau_1 + \tau_2)$, однако их интенсивность должна быть значительно меньше интенсивности компонент B и B' .

Условия формирования сигналов C и C' . Сложное поведение компонент C и C' (рис. 2, 1'—5' и рис. 3) при $\Delta\omega_{1,2}\tau_{1,2} \ll \pi$ обусловлено тем, что формирование этих сигналов в общем случае происходит за счет трех различных механизмов. Первый из них — обычный механизм Хана, связанный со спинами, для которых углы поворота во время действия импульсов удовлетворяют условию

$$\alpha_{1,2} = \gamma H_{1,2} \tau_{1,2} \ll \pi/2. \quad (11)$$

Второй и третий механизмы обеспечивают формирование сигналов эха от спинов с большими коэффициентами усиления $\eta \approx \Delta\eta_{1/2}$ и следующими углами поворота

$$\alpha_{1,2} = \gamma H_{1,2} \Delta\eta_{1/2} \tau_{1,2} \gg \pi. \quad (12)$$

При этом второй механизм связан с наличием первого слагаемого в (2), которое пропорционально $\Delta\omega$ и обеспечивает формирование двугорбого эха Мимса. Действительно, в этом случае можно выделить две группы спинов с расстройками $+|\Delta\omega|$ и $-|\Delta\omega|$, которые прецессируют навстречу друг другу во вращающейся системе координат и приводят к формированию двугорбого сигнала [10].

Сигнал третьего типа описывается вторым слагаемым в (2), амплитуда которого не зависит от $\Delta\omega$. Это означает, что его формирование происходит за счет тех проекций спинов, которые прецессируют в плоскости (z, y) (предполагается, что $\mathbf{H}_{1,2} \parallel \mathbf{x}$). Характерной особенностью этого сигнала является то, что распад прецессии имеет место как во время действия первого импульса (за счет неоднородностей η), так и в промежутке между импульсами (за счет неоднородностей частоты ЯМР ω_n). Поскольку указанные типы неоднородностей совершенно различны по своей природе, то потеря когерентности во время действия первого импульса не может быть восстановлена при выключенном РЧ поле, и наоборот, как это имеет место при формировании компонент B и B' . Таким образом, для сигнала исследуемого типа потеря когерентности, возникающая во время действия первого импульса, может быть восстановлена только вторым импульсом, а потеря когерентности в промежутке между импульсами — после окончания второго импульса.

На первый взгляд может показаться, что максимум интенсивности рассматриваемого сигнала должен наблюдаться при возбуждении одинаковыми импульсами. Однако если второй импульс полностью компенсирует действие первого, вектор намагниченности окажется в равновесном положении, как до воздействия на систему РЧ импульсов. Отсюда следует, что при одинаковых импульсах данный механизм не может обеспечить формирование сигнала эха, т. е. для его возникновения необходимо, чтобы второй импульс не полностью компенсировал действие первого. С другой стороны, импульсы не должны сильно отличаться друг от друга; в противном случае степень когерентности, восстановления вторым импульсом, может оказаться недостаточной для появления результирующей намагниченности. Ниже будут рассмотрены некоторые другие особенности исследуемых сигналов, которые делают их непохожими на известные импульсные сигналы ЯМР.

На рис. 4 показана взаимная ориентация спинов в момент времени $t = \tau_{12}$ при возбуждении системы импульсами равной амплитуды ($H_1 = H_2$), но различной длительности. С увеличением разности $\Delta\tau = |\tau_1 - \tau_2|$ растут как угол θ , определяющий отклонение \mathbf{m} от оси z , так и неоднородность ориентации спинов по этому углу $\delta\theta$. В результате с ростом $\Delta\tau$ интенсивность эха будет сначала возрастать в связи с увеличением θ , а затем убывать из-за возрастания $\delta\theta$.

Другая особенность рассматриваемых сигналов заключается в том, что фазы эха при $\tau_1 - \tau_2 > 0$ и $\tau_1 - \tau_2 < 0$ различаются на π , поскольку проекции соответствующих спинов на ось y имеют разный знак. Все это позволяет объяснить характер изменения формы сигналов эха (рис. 3).

Прежде всего напомним, что при одинаковых длительностях и амплитудах возбуждающих импульсов сигнал эха возникает в результате наложения обычного эха Хана и двугорбного эха Мимса, причем одногорбое эхо складывается с правой компонентой эха Мимса и вычитается из его левой компоненты, что приводит к асимметрии сигнала в области промежуточных значений $H_{1,2}$ (рис. 2, 2', 3'). По мере возрастания амплитуды РЧ импульсов вклад одногорбного сигнала в результирующую интенсивность уменьшается и эхо принимает симметричную двугорбую форму (рис. 2, 4', 5'). Если длительности импульсов отличаются друг от друга ($\tau_1 \neq \tau_2$), появляется сигнал нового типа, который накладывается на ранее рассмотренные сигналы. В частности, в области больших значений $H_{1,2}$ при выполнении условия $\tau_2 > \tau_1$ дополнительный сигнал складывается с правой компонентой эха Мимса и вычитается из его левой компоненты, в результате чего резко усиливается асимметрия сигнала (рис. 3, 1—3). При $\tau_2 < \tau_1$ фаза нового сигнала меняется на противоположную, вследствие чего он складывается с левой компонентой эха Мимса и вычитается из правой. Поэтому асимметрия формы результирующего сигнала меняет знак (рис. 3, 1'—3').

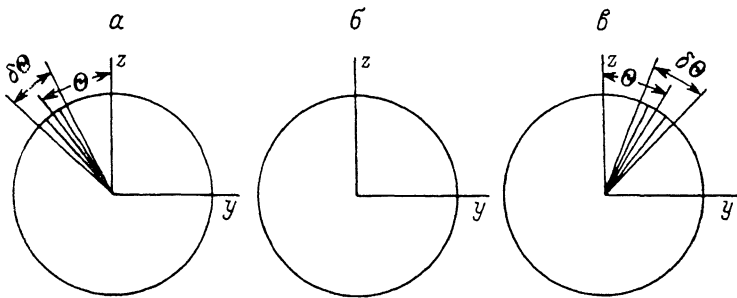


Рис. 4. Взаимная ориентация спинов в момент, соответствующий максимальной интенсивности сигнала эха нового типа ($t = \tau_{12}$), при $H_1 = H_2$ и различных длительностях возбуждающих импульсов: $\tau_1 > \tau_2$ (а), $\tau_1 = \tau_2$ (б), $\tau_1 < \tau_2$ (в).

В заключение сформулируем основные требования, предъявляемые к возбуждающим импульсам, которые необходимы для наблюдения сигналов нового типа.

1) Импульсы должны быть как можно более короткими, чтобы за время их действия неоднородное уширение $\Delta\omega_{1/2}$ не успевало бы проявиться

$$\Delta\omega_{1/2}\tau_{1,2} \ll 1. \quad (13)$$

Чем меньше произведение в левой части (13), тем слабее вклад двугорбного эха Мимса в результирующую интенсивность сигнала.

2) Разброс коэффициентов усиления $\Delta\eta_{1/2}$ должен быть достаточно большим, чтобы выполнялось условие

$$\alpha_{1,2} = \gamma H_{1,2} \Delta\eta_{1/2} \tau_{1,2} \gg 2\pi. \quad (14)$$

В этом случае произойдет полный распад сигнала индукции за время действия первого импульса. Условию (14) удовлетворяют ядерные спины в доменных границах ферромагнетиков.

3) Амплитуда импульсов $H_{1,2}$ должна быть по возможности большей. С ростом $H_{1,2}$ уменьшается вклад в сигнал эха от спинов с малыми значениями η , для которых $\gamma H_{1,2} \eta \tau_{1,2} \ll \pi/2$. С этими спинами связано возникновение эха Хана.

4) Углы поворота изохромат под действием первого ($\alpha_1 = \gamma H_1 \Delta\eta_{1/2} \tau_1$) и второго ($\alpha_2 = \gamma H_2 \Delta\eta_{1/2} \tau_2$) импульсов должны отличаться друг от друга, однако это различие должно быть не слишком велико, чтобы выполнялось условие

$$\gamma \Delta\eta_{1/2} |H_1 \tau_1 - H_2 \tau_2| \approx \pi. \quad (15)$$

В этом случае, согласно рис. 4, восстановление когерентности вторым импульсом будет достаточным для появления результирующей намагниченности и одновременно вектор \mathbf{m} будет иметь максимальную проекцию на поперечную плоскость (x , y).

Наличие резкой зависимости интенсивности от разности углов $\Delta\alpha = |\alpha_1 - \alpha_2|$ является характерной особенностью сигналов нового типа. Согласно выражениям (14), (15), область изменения углов α_1 и α_2 , в пределах которой может наблюдаться этот сигнал, удовлетворяет условию

$$|\Delta\alpha|/\alpha_1 \ll 1. \quad (16)$$

По этому признаку его и следует выделять экспериментально.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Hahn E. L. // Phys. Rev. 1950. V. 80. N 4. P. 580—594.
- [2] Kaplan D. E., Hill R. M., Herrmann G. F. // Phys. Rev. Lett. 1968. V. 20. N 21. P. 1156—1158.
- [3] Herrmann G. F., Hill R. M., Kaplan D. E. // Phys. Rev. 1967. V. 156. N 1. P. 118—133.
- [4] Маныкин Э. А., Самарцев А. В. // Оптическая эхо-спектроскопия. М.: Наука, 1984.
- [5] Зельдович Б. Я., Пилипецкий Н. Ф., Шпунов В. В. // Обращение волнового фронта. М.: Наука, 1985.
- [6] Bloom A. L. // Phys. Rev. 1955. V. 98. N 4. P. 1105—1111.
- [7] Mims W. B. // Proc. IEEE. 1963. V. 51. N 8. P. 1127—1135.
- [8] Stearns M. B. // Phys. Rev. 1967. V. 162. N 2. P. 496—509.
- [9] Нугралиев Т. X., Москалев В. В. // Вестник ЛГУ. 1980. № 16. В. 3. С. 45—51.
- [10] Mims W. B. // Phys. Rev. 1966. V. 141. N 2. P. 499—502.

Тбилисский государственный университет

Поступило в Редакцию
6 февраля 1990 г.