Вестник
МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
№ 4 — 1970

УДК 538.113

Р. М. УМАРХОДЖАЕВ

МОДУЛЯЦИОННАЯ ПОПРАВКА БЛОХА—ЗИГЕРТА

Вычислена величина поправки (модуляционной) Блоха—Зигерта при работе с произвольным индексом модуляции, записаны модуляционные уравнения в виде уравнений Блоха во «вращающейся» системе координат.

Известно, что при работе с в. ч. полем линейной поляризации $H_1 \cos \omega t$ [1] частота резонансного перехода отличается от частоты ларморовой прецессии ω_0 на величину $\frac{\gamma\left(\frac{1}{2}H_1\right)^2}{4\omega}$, т. е. на эффект Блоха—Зигерта [1].

Рассмотрим аналогичные поправки к величине расстройки $\Delta\omega_0 = \omega_0 - \omega$, возникающие при наблюдении сигналов ЯМР с помощью модуляционных методов [2].

При модуляции поля H_z полем $H_m = H_m \cos pt$ уравнения Блоха во «вращающейся» системе координат имеют вид [1, 2, 3]

$$\begin{gathered} \dot{v} + \delta_2 v - \Delta\omega'_{оэ} u = -\gamma u_1 M z, \\ \dot{u} + \delta_2 u + \Delta\omega'_{оэ} v = 0, \\ \dot{M}_z + \delta_1 M_z - \gamma H_1 v = \delta_1 M_0, \end{gathered} \tag{1}$$

где

$$\delta_1 = \frac{1}{T_1}, \quad \delta_2 = \frac{1}{T_2}, \quad \Delta\omega_{оэ} = \omega_{оэ} - \omega + \gamma H_m \cos pt = \Delta\omega_{оэ} + \gamma H_m \cos pt,$$

$\omega_{оэ}$ — частота прецессии, равная ларморовой частоте прецессии ω_0 при работе с в. ч. полем круговой поляризации и $\omega_0 + \frac{\gamma^2\left(\frac{1}{2}H_1\right)^2}{4\omega}$ в случае в. ч. поля линейной поляризации. Остальные обозначения обычные.

Сделав замену $v = -a \cos\varphi - b \sin\varphi$, $u = a \sin\varphi - b \cos\varphi$ и $\varphi =$

$= \int \gamma H_m dt = \frac{\gamma H_m}{p} \sin pt$, перейдем к системе координат «постоянной» расстройки $\Delta\omega_{оэ}$.

$$\dot{a} + \delta_2 a - b\Delta\omega_{оэ} = \gamma H_1 M_z \cos\varphi,$$

$$\dot{b} + \delta_2 b + a\Delta\omega_{оэ} = \gamma H_1 M_z \sin\varphi,$$

$$\dot{M}_z + \delta_1 M_z = \delta_1 M_0 - a\gamma H_1 \cos\varphi - b\gamma H_1 \sin\varphi. \qquad (2)$$

Согласно [4], уравнения (2) суть уравнения Блоха во «вращающейся» системе координат при модуляции фазы или частоты в. ч. генератора и по форме записи совпадают с уравнениями Блоха в лабораторной системе координат; роль $\omega_{0э}$ выполняет расстройка $\Delta\omega_{0э}$, роль компонентов в. ч. поля — $H_1 \cos\varphi$ и — $H_1 \sin\varphi$.

Заменой $a = -A_1 \cos mpt + B_1 \sin mpt$, $b = -A_1 \sin mpt - B_1 \cos mpt$ перейдем к эквивалентной «вращающейся» системе координат (1):

$$\dot{A}_1 + \delta_2 A_1 - B_1 (\Delta\omega_{оэ} + mp) = -\gamma H_1 M_z \sum_{-\infty}^{+\infty} I_n \cos(n-m) pt,$$

$$\dot{B}_1 + \delta_2 B_1 + A_1 (s\omega_{оэ} + mp) = -\gamma H_1 M_t \sum_{-\infty}^{+\infty} I_n \sin(n-m) pt, \qquad (3)$$

$$\dot{M}_z + \delta_1 M_z - \gamma H_1 A_1 \sum_{-\infty}^{+\infty} I_n \cos(n-m) pt - \gamma H_1 B_1 \sum_{-\infty}^{+\infty} I_n \sin(n-m) pt = \delta_1 M_0,$$

где $I_n(\beta)$ — функция Бесселя первого рода от аргумента $\beta = \gamma H_m / p$ индекса модуляции.

Учитывая резонансный характер компонента с номером $m = n$, удовлетворяющим условию резонанса $s\omega_{оэ} + mp = 0$ и $(\Delta\omega_0 + mp)$, $\delta_1, \delta_2 \ll \ll |n-m| p$; при $n \neq m$ из (3) для медленно-меняющихся амплитуд получим

$$\dot{A} + \delta_2 A - B\left(\Delta\omega_{оэ} + \frac{1}{2}\frac{\gamma^2 H_1^2}{p} \sum_{n \neq m} \frac{In^2}{n-m} + mp\right) = -\gamma M_z u_1 I_m,$$

$$\dot{B} + \delta_2 B + A\left(\Delta\omega_0 + \frac{1}{2}\frac{\gamma^2 u_1^2}{p} \sum_{n \neq m} \frac{In^2}{n-m} + mp\right) = 0,$$

$$\dot{M}_z + \delta_1 M_z - \gamma H_1 I_n A = \delta_1 M_0.$$

Член $\frac{1}{2}\frac{\gamma^2 H_1^2}{p} \sum_{n \neq m} \frac{I_n^2}{n-m}$ — модуляционная поправка Блоха—Зигерта.

Амплитуда действующего в. ч. поля для m-го резонанса равна $H_{1э} = H_1 I_m$.

Частота нутации Ω при работе в m-ом резонансе:

$$\Omega^2 = \left[\Delta\omega_{оэ} + \frac{1}{2}\frac{\gamma^2 H_1^2}{p} \sum_{n \neq m} \frac{I_n{}^2}{n-m} + mp\right]^2 + (\gamma H_1 I_m)^2.$$

Стационарное решение есть

$$A_0 = \frac{-\gamma H_1 I_m M_0}{\delta_2 \left\{1 + \frac{[\Delta\omega_{оэ}(1+\alpha)+mp]}{\delta_2^2} + \frac{\gamma^2 (H_1 I_m)^2}{\delta_1\delta_2}\right\}},$$

$$B_0 = -A\frac{\Delta\omega_{оэ}(1+\alpha)+mp}{\delta_2}, \qquad (4)$$

$$M_z = M_0 \frac{1+\frac{[\Delta\omega_{оэ}(1+\alpha)+mp]^2}{\delta_2^2}}{1+\frac{[\Delta\omega_{оэ}(1+\alpha)+mp]^2}{\delta_2^2} + \frac{\gamma^2 (H_1 I_m)^2}{\delta_1\delta_2}},$$

где

$$\alpha = \frac{\gamma^2 H_1^2}{2\Delta\omega_{оэ} p} \sum_{n \neq m} \frac{In^2}{n-m},$$

A_0 имеет максимум $A_0 = \frac{1}{2} M_0 \sqrt{\frac{\delta_1}{\delta_2}}$ при $\Delta\omega_{оэ}(1+\alpha)+mp = 0$ и $\frac{\gamma^2 (H_1 I_m^2)}{\delta_1\delta_2} = 1$. Принимаемый сигнал m-го резонанса есть сигнал A (поглощение) или B (дисперсия), в случае модуляции фазы или частоты в. ч. генератора он при модуляции поля H_z записывается выражением

$$v = \sum_{-\infty}^{+\infty} I_n [A\cos(n-m)pt + B\sin(n-m)pt],$$

$$u = \sum_{-\infty}^{+\infty} I_n [-A\sin(n-m)pt + B\cos(n-m)pt].$$

В частном случае при $m = -1$ и приеме на частоте p

$$v = (I_0 + I_2) A\cos pt + (I_0 - I_2) B\sin pt,$$

если частоты $\omega \pm p$ попадают в полосу пропускания $s\omega$ входного каскада приемника, т. е. $p < \Delta\omega$ и $v = I_0 A\cos pt + I_0 B\sin pt$, если $p > \Delta\omega$.

При $\alpha \ll 1$ решение (4) переходит в формулу Владимирского [2].

Оценим величину поправки α для частного случая $m = -1$, тогда

$$\alpha = \frac{\gamma^2 H_1^2}{2s\omega_{оэ} p} \sum_{n \neq 1} \frac{I_n^2}{1+n}.$$

При $\frac{\gamma(H_1 I_1)}{\delta_1\delta_2} = 1$, учитывая $Q = \frac{1}{2}\omega_0 T_2 = \frac{\omega_0}{\delta_2}$ ($\delta_1 = \delta_2$, $\Delta\omega_{оэ} \sim p$), получим

$$\alpha \approx \frac{1}{2}\left(\frac{\omega_0}{\Delta\omega_{оэ}}\right)^2 \frac{1}{(Q2I_1)^2} \sum_{n \neq 1} \frac{I_n^2}{1+n}.$$

Для случая $\beta \ll 1$:

$$\alpha \approx \frac{1}{2}\left(\frac{\omega_0}{\Delta\omega_{оэ}}\right)^2 \frac{1}{(Q\beta)^2},$$

β не может быть сколь угодно малой. Действительно, модуляционная структура наблюдается при $\delta_2^x = \frac{1}{T_i^x} \ll p$ [2], где $\frac{1}{T_i^x}$ — ширина линии ЯМР.

При работе с $\beta \ll 1$ $\left(\text{но } \frac{\gamma^2 \left(H_1 \frac{\beta}{2}\right)^2}{\delta_1 \delta_2} \sim 1\right)$ ширина δ_2^x центрального сигнала определяется полем $H_1 I_0 \approx H_1$. Таким образом, β должно удовлетворять условию $\frac{2\sqrt{\delta_1\delta_2}}{\beta} < p$, δ_2 может определяться неоднородностью магнитного поля. При невыполнении условия $\frac{2\sqrt{\delta_1\delta_2}}{\beta} < p$ первые боковые сигналы будут наблюдаться на «крыльях» уширенного полем H_1 центрального сигнала.

Зависимость α от β и Q лучше показать на примере. Пусть $\omega_0 = 2\pi \cdot 100 \cdot 10^6$ *гц*, $p \approx \Delta\omega_{оэ} = 2\pi \cdot 5 \cdot 10^3$ *гц*.

Тогда, если $\beta \sim 1{,}85$ ($I_1 \sim \max$) $\sum\limits_{n \neq 1} \frac{I_n^2}{1+n} \sim 0{,}2$, то при $Q \sim 10^8$ (разрешение 10^{-8}) $\alpha \sim 3 \cdot 10^{-9}$, при $Q \sim 10^6$ $\alpha \sim 3 \cdot 10^6$.

Если $\beta \sim 0{,}1$, $\sum\limits_{n-1} \frac{I_n^2}{1+n} \sim 1$, то при $Q \sim 10^8$ $\alpha \sim 2 \cdot 10^{-2}$ и $\Delta\omega_{0э} - p \sim 2\pi \cdot 10^{-2}$ *гц*, при $Q \sim 10^6$ $\alpha \sim 2 \cdot 10^{-2}$ и $\Delta\omega_{оэ} - p \sim 2\pi \cdot 10^2$ *гц*.

Если $\beta \sim 0{,}01$ $\sum\limits_{n \neq 1} \frac{I_n^2}{1+n} \sim 1$, то при $Q \sim 10^8$ $\alpha \sim 2 \cdot 10^2$ и $\Delta\omega_{оэ} - p \sim 2\pi \cdot 10^2$ *гц*. В двух последних случаях $H \sim 250$ *мл·гаусс*. Отметим, что при $\beta \sim 2{,}4$, $\alpha = 0$, а при работе с $m = 0$ величина $\alpha \equiv 0$ в силу симметричного расположения полей $H_1 I_n$ относительно центрального резонанса.

Таким образом, чем выше Q и β (g^0—2,4), тем меньше величина модуляционной поправки Блоха—Зигерта.

Тождественность уравнения (4) и уравнения Блоха во «вращающейся» системе координат без применения дополнительной н. ч. модуляции позволяет применить к компоненту с номером $\Delta\omega_{оэ}(1+\alpha) + mp = 0$ все известные методы измерения времен релаксации.

При условии $\delta_1\delta_2 \ll |n-m| p$, $n \neq m$, необходимом для получения модуляционной структуры, значения времен релаксации, измеренные на спектрометре с применением метода боковых полос, совпадают с результатами измерений, проведенных без применения модуляционных методов [5].

ЛИТЕРАТУРА

1. Лёше А. Ядерная индукция. М., ИЛ., 1963.
2. Владимирский К. В. ЖЭТФ, **6**, 412, 1958.
3. Андерсон В. Сб. ЯМР и ЭПР-спектроскопия. М., «Мир», 1964.
4. Halback Helv. Phys. Acta, **29**, 37, 1956.
5. Иевская И. М., Умарходжаев Р. М., Быстров Г. А. «Вестн. Моск. ун-та», физ., астрон., № 2, 1968.

Поступила в редакцию
9.7 1969 г.

НИИЯФ