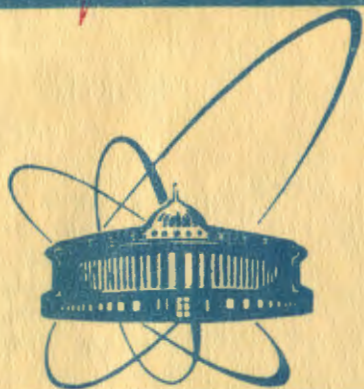


910/82

22/11-82



сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

е
7

P13-81-748

М.Ю.Либург, И.Страхота

ПРОГРАММА ДЛЯ ВОССТАНОВЛЕНИЯ СПЕКТРА
ПОГЛОЩЕНИЯ ЯМР ПО СИГНАЛАМ
С ВЫХОДА Q- МЕТРА

1981

Степень поляризации мишеней с ориентированными ядрами может быть определена по характерным параметрам спектра поглощения ядерного магнитного резонанса /ЯМР/, таким, как интегральная интенсивность /1/, первый /3/ и второй /2/ моменты линии, отношение интенсивностей различных участков спектра /1/. Сигналы ЯМР, выделяемые с помощью Q-метров - приборов, широко применяемых для измерения ядерной поляризации мишеней, искажены за счет вкладов, обусловленных дисперсией /1,4/. Целью настоящей работы было создание программ для ЭВМ, с помощью которых, используя информацию о параметрах измерительной системы и экспериментальные данные, полученные с помощью Q-метра, можно восстановить спектр поглощения ЯМР.

1. СЧЕТНЫЕ ФОРМУЛЫ

Q-метр представляет собой устройство для регистрации изменений модуля импеданса настроенного колебательного контура, в катушке индуктивности которого находится мишень. Обычно предполагается, что для индуктивной части полной проводимости контура справедливо /1/

$$i\omega L = i\omega L_0 [1 + 4\pi\eta\chi(\omega)], \quad /1/$$

$$\chi(\omega) = \chi'(\omega) - i\chi''(\omega), \quad /2/$$

где $\chi'(\omega)$ - дисперсия; $\chi''(\omega)$ - поглощение; L_0 - собственная индуктивность катушки; ω - циклическая частота; η - фактор заполнения катушки парамагнетиком.

Компоненты комплексной ядерной восприимчивости /2/ связаны соотношениями Крамерса-Кронига /1/. Для дальнейшего нам понадобится одно из них:

$$\chi'(\omega) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\chi''(\omega_1) \cdot \omega_1}{\omega_1^2 - \omega^2} d\omega_1, \quad /3/$$

интеграл \int понимается в смысле его главного значения.

В Q-метрах, применяемых для измерения поляризации ядер, приемный колебательный контур всегда содержит кабель, связывающий катушку индуктивности, расположенную внутри криостата, с входной частью измерительной аппаратуры. Длина кабеля подбирается кратной полуволне на частоте наблюдения ЯМР. Наст-

ройка приемного колебательного контура осуществляется емкостью, подключенной к "теплому" концу кабеля. В зависимости от способа подключения реализуется последовательный или параллельный распределенные колебательные контуры и, в связи с этим, принципиально различные Q-метры^{/4/}.

Относительные изменения модуля импеданса приемного контура, связанные с парамагнитной восприимчивостью:

$$m = \frac{|Z(\omega)| - |Z_0(\omega)|}{|Z_0(\omega)|} \quad /4/$$

где $|Z_0| = |Z|$ при $\chi'' = \chi' = 0$, по крайней мере, в первом приближении представляют собой спектр поглощения ЯМР. Однако вклад, обусловленный дисперсией, служит источником систематических ошибок при измерении ядерной поляризации мишеней^{/4/}.

Выражения для полных импедансов последовательного /все величины - с индексом s / и параллельного /все величины - с индексом p / распределенных контуров как функций частоты питающего генератора и компонент ядерной восприимчивости могут быть представлены в виде^{/4/}

$$Z_s = \rho \frac{\lambda + A_s}{\lambda B + 1} \cdot \frac{B + \xi_s}{\xi_s} \quad /5/$$

$$Z_p = \rho \frac{\lambda + B}{\lambda + A_p} \cdot \frac{1}{B + \xi_p} \quad /6/$$

В формулах /5/ и /6/ использованы следующие обозначения:

$$\lambda = (i\omega L + R) / \rho,$$

где L - индуктивность катушки; $i\omega L$ вычисляется по формуле /1/; R - активное сопротивление катушки; ρ - волновое сопротивление кабеля;

$$\xi = (i\omega C + G) \times \rho,$$

где C - емкость конденсатора контура; G - активная проводимость конденсатора;

$$B = \text{th } 2\gamma \ell, \quad A = \frac{1 + \xi B}{B + \xi},$$

где $\gamma = \alpha + i\beta$ - постоянная распространения кабеля / α - затухание, β - коэффициент фазы/; ℓ - длина кабеля.

Для нашей цели необходимо выразить парамагнитное поглощение в виде функции от параметров измерительного контура и амплитуды наблюдаемого спектра. Заметим прежде, что с ядерной восприимчивостью линейно связано приращение параметра λ . Если представить

$$\lambda = \lambda_0 + \Delta\lambda, \quad /7/$$

где $\lambda_0 = \lambda |_{\chi' = \chi'' = 0}$, то согласно определению /7/ и формуле /1/

$$\chi'' \equiv \operatorname{Re}(\Delta\lambda) = \frac{4\pi\omega L\eta}{\rho} \cdot \chi'',$$

$$\chi' \equiv \operatorname{Im}(\Delta\lambda) = \frac{4\pi\omega L\eta}{\rho} \cdot \chi',$$

/8/

В некоторых Q-метрах применяется фазовая автоподстройка /ФАП/ контура^{5/}. Путем непрерывного изменения емкости конденсатора уменьшается сдвиг фазы между вынужденными колебаниями контура и генератора. При этом хотя и уменьшается влияние дисперсии, однако спектр, получаемый на выходе Q-метра, остается искаженным^{4/}. Мы предполагаем, что регистрация сигнала в цепи обратной связи позволяет извлечь данные о текущих значениях емкости $C(\omega)$. В выражении для m согласно /4/ для Q-метра с ФАП следует различать A, ξ и A_0, ξ_0 , отвечающие разным наборам $C(\omega)$ и $C_0(\omega)$, то есть

$$A_0 = A |_{\chi' = \chi'' = 0},$$

$$\xi_0 = \xi |_{\chi' = \chi'' = 0}.$$

Согласно /4/, /5/ и /7/ имеем

$$m_s = \left| \frac{\lambda + A_s}{\lambda_0 + A_{s0}} \right| \cdot \left| \frac{\lambda_0 + B^{-1}}{\lambda + B^{-1}} \right| \cdot \left| \frac{(B + \xi_s)\xi_{s0}}{(B + \xi_{s0})\xi_s} \right| - 1. \quad /9/$$

Введем обозначение

$$\Omega_s = \left| \frac{\lambda + A_s}{\lambda_0 + A_{s0}} \right| \cdot \left| \frac{\lambda_0 + B^{-1}}{\lambda + B^{-1}} \right|. \quad /10/$$

Тогда из /9/ получим

$$\Omega_s = (m_s + 1) \left| \frac{(B + \xi_{s0})(\lambda_0 + A_{s0})\xi_s}{(B + \xi_s)(\lambda_0 + A_s)\xi_{s0}} \right|. \quad /11/$$

Для Q-метра без ФАП, то есть при $\xi_s = \xi_{s0}, A_s = A_{s0}$,

$$\Omega_s = m_s + 1. \quad /12/$$

Из /11/ следует

$$\Omega_s = \left| \frac{1 + \Delta\lambda \cdot F}{1 + \Delta\lambda \cdot D} \right|, \quad /13/$$

где $F = 1/(\lambda_0 + A_s)$, $D = 1/(\lambda_0 B + 1)$.

Легко убедиться в том, что /13/ представляет собой квадратное уравнение относительно χ'' из /8/: $a(\chi'')^2 + b(\chi'') + c = 0$, с коэффициентами

$$a = \Omega_s^2 \cdot |D|^2 - |F|^2,$$

$$b = 2[\operatorname{Re}(D) \cdot \Omega_s^2 - \operatorname{Re}(F)],$$

$$c = \Omega_s^2 - 1 + (x')^2 \cdot a - 2[\operatorname{Im}(D) \cdot \Omega_s^2 - \operatorname{Im}(F)] \cdot x'.$$

Из двух решений этого уравнения, записанных в стандартной форме, следует взять то, которое соответствует положительному значению квадратного корня. Величина Ω_s должна быть вычислена согласно /12/ или /13/ в зависимости от того, включена ФАП в данном Q-метре или нет. Тем же способом можно вывести аналогичные выражения для Q-метра с параллельным контуром.

Таким образом удается получить счетную формулу, позволяющую находить значение функции

$$x''(\omega) = \Phi[m_s(\omega), x'(\omega)]$$

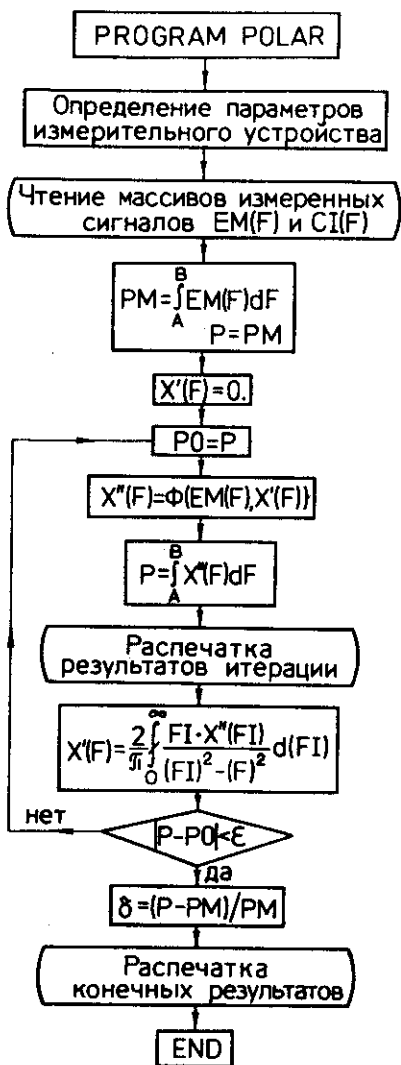
при данной совокупности параметров Q-метра любого типа.

2. ПРОГРАММЫ ДЛЯ ЭВМ

Блок-схема вычислительного процесса показана на рисунке. В программу необходимо ввести данные о параметрах измерительного контура, типе Q-метра, спектре ЯМР, выделяемый с помощью Q-метра-ЕМ(F) /F - частота/, а также соответствующий ему массив значений СИ(F), если применена ФАП.

Путем последовательных приближений вычисляется спектр $x''_n(F)$, для чего используются значения $x'_{n-1}(F)$, полученные в предыдущей итерации. Для нулевого приближения полагаем $x'_0(F) = 0$ на всем интервале частот. В последующих итерациях функции $x'_n(F)$ вычисляются на основе соотношения /2/. Поскольку функция $x''(\omega)$ быстро спадает на концах некоторого интервала частот, конечные пределы интегрирования от ω_a до ω_b выбирались так, что $\omega_b - \omega_a \geq 5\Delta$, где Δ - полуширина спектра поглощения ЯМР. Далее область интегрирования разбивалась на три отрезка так, что один из них содержал особую точку подынтегральной функции /2/. Промежуточные значения $x''(\omega)$ на этом отрезке задавались в виде квадратичной интерполяции; для вычисления интеграла в смысле главного значения использовалась стандартная программа-функция САИСНУ^{6/}. На двух других отрезках интегрирование выполнялось по методу Симпсона.

В конце каждого n-го шага итераций вычисляется P_n , пропорциональная степени поляризации. По критерию $|P_n - P_{n-1}| < \epsilon$ / ϵ - заданный параметр точности/ заканчивается счет. Конеч-



ными результатами расчетов будут: спектр поглощения $x''(\omega)$; дисперсия $x'(\omega)$; P - величина, пропорциональная поляризации, и δ - поправка к "измеренному" значению поляризации.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

Для проверки программы POLAR массивы данных $EM(F)$ и $CI(F)$ были рассчитаны по отдельной программе¹⁴, где спектр поглощения $x''(\omega)$ задавался в виде гауссовой функции. В результате сравнения функции $x''(\omega)$ с $x''_c(\omega)$, вычисленной по программе POLAR, установлено: в точке максимумов x'' и x''_c совпадали с точностью до четвертого знака после запятой, на уровне полуширины линии совпадение было с точностью до третьего знака и только на краях спектров, где амплитуды составляли 10^{-4} от амплитуд в максимумах, значение x''_c отличалось от x'' на $\pm 6\%$. Убедившись в том, что спектр поглощения восстанавливается достаточно хорошо, мы проверили возможность использования программы для измерения поляризации по интегральной интенсивности $x''_c(\omega)$. Для этого необходимо было обрабатывать массив данных для спектра малой амплитуды, имитирующего ЯМР для спинов в термическом равнове-

сии, и массив данных, соответствующий высокой ядерной поляризации. Найденное значение коэффициента усиления E_c , равное отношению интегральных интенсивностей восстановленных спектров, отличалось от истинного значения E в среднем не более, чем на 0,2% при $E=500$.

Приведенные результаты типичны для случаев, когда в программе POLAR использовались те значения параметров измерительного контура, с которыми были рассчитаны "экспериментальные" данные $EM(F)$ и $SI(F)$. Вся совокупность значений параметров должна удовлетворять как значению частоты собственного резонанса контура, так и добротности. Во всяком случае, произвольные вариации емкости, индуктивности и т.д., такие, что значение резонансной частоты остается прежним, но величина добротности контура изменяется на 2%, приводят к относительной ошибке в определении интегральной интенсивности спектра $\approx 4\%$.

Авторы благодарят проф. Ю.М.Казаринова за интерес к работе, а также Н.С.Борисова, В.Н.Матафонова и А.Б.Неганова за полезные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Абрагам А. Ядерный магнетизм. ИЛ, М., 1963.
2. Abragam A. et al. J.Magn. Resonance, 1973, 10, p. 322.
3. Roinal Y., Bouffard V. J.Magn.Resonance, 1975, 18, p. 304.
4. Либург М.Ю., Матафонов В.Н. ОИЯИ, P13-81-365, Дубна, 1981.
5. Киселев Ю.Ф., Матафонов В.Н. ОИЯИ, P13-10101, Дубна, 1976.
6. Мазный Г.Л. Программирование на БЭСМ-6 в системе "Дубна" /под ред. Н.Н.Говоруна/. "Наука", М., 1978.

Рукопись поступила в издательский отдел
26 ноября 1981 года.