

С. А. Баруздин, Я. С. Камерцева
 Санкт-Петербургский государственный электротехнический
 университет "ЛЭТИ" им. В. И. Ульянова (Ленина)

Моделирование возбуждения спинового эха импульсами с дискретной частотной модуляцией

Приведены результаты моделирования возбуждения спинового эха импульсами с дискретной частотной модуляцией. Показано, что использование таких импульсов вместо традиционных коротких радиоимпульсов позволяет на несколько порядков снизить мощность возбуждения без потерь в амплитуде эха.

Спиновое эхо, импульсы возбуждения, дискретная частотная модуляция, уменьшение мощности

Спиновое эхо как импульсный метод наблюдения сигналов ядерного магнитного резонанса (ЯМР) используется в настоящее время в физике и в химии для исследования свойств различных объектов, а также в медицинской диагностике (магнитно-резонансная томография) [1], [2]. Для возбуждения спинового эха обычно используют простые радиоимпульсы, спектр которых перекрывает спектр частот ЯМР. Мощность импульсов возбуждения зависит от многих факторов и может достигать нескольких киловатт.

Для снижения мощности импульсов возбуждения можно использовать сложные модулированные импульсы и шум [3]–[5]. Однако при этом остается открытым вопрос, можно ли в данном случае возбуждать спиновое эхо такой же амплитуды, как и при возбуждении простыми импульсами. Обеспечение возбуждения максимальной амплитуды эха важно, так как обычно сигналы ЯМР имеют достаточно низкий уровень, зачастую соизмеримый с уровнем собственных шумов регистрирующей аппаратуры.

Настоящая статья посвящена моделированию режимов возбуждения спинового эха импульсами с дискретной частотной модуляцией, у которых длительность и ширина спектра являются независимыми параметрами.

Анализ эхосигналов основан на решении уравнений Блоха [6] на интервалах действия импульсов возбуждения и на свободных от них интервалах. В результате решение для интервала, на котором возникает эхо, может быть определено последовательным решением системы дифференциальных уравнений для различных интервалов времени. Указанное решение целесообразно представить в матричном виде, используя аппарат переходных матриц состояния [7].

Сигнал эха индуцируется поперечной компонентой вектора намагниченности, поэтому интерес представляет состояние комплексной поперечной компоненты вектора намагниченности $\tilde{M}(t, \Omega)$ вектора $\mathbf{M}(t, \Omega)$, где Ω – расстройка частоты относительно несущей.

Комплексная огибающая сигнала двухимпульсного эха определяется интегрированием всех изохромат с весами, определяемыми функцией низкочастотного эквивалента неоднородно уширенной линии поглощения $g(\Omega)$ с шириной $\Delta\omega_{\Pi}$ [8]:

$$\tilde{M}_e(t) = M_0 \int_{-\infty}^{\infty} g(\Omega) a_{12}^{(2)}(\Omega) a_{23}^{(1)}(\Omega) \times \\ \times \exp \left[i\Omega \left(t - 2t_2 + \frac{\tau_1}{2} \right) \right] d\Omega, \quad (1)$$

где M_0 – равновесная величина вектора намагниченности; $a_{kl}^{(j)}(\Omega)$ – элемент переходной матрицы для j -го импульса возбуждения; t_j – задержка j -го импульса относительно первого; τ_j – длительность j -го импульса, $j = 1, 2$.

Комплексная огибающая трехимпульсного (стимулированного) эха определяется выражением

$$\tilde{M}_{ст}(t) = M_0 \int_{-\infty}^{\infty} g(\Omega) a_{13}^{(3)}(\Omega) a_{32}^{(2)}(\Omega) a_{23}^{(1)}(\Omega) \times \\ \times \exp \left[i\Omega \left(t - t_3 - t_2 + \frac{\tau_1 + \tau_2 - \tau_3}{2} \right) \right] d\Omega. \quad (2)$$

После подстановки элементов матриц $A^i = \{a_{kl}^i\}$, $k, l = \overline{1, 3}$, в их явном виде в выражения (1) и (2) получают комплексные огибающие эхосигналов.

Сигнал с линейной частотной модуляцией (ЛЧМ) описывается выражением

$$r(t) = R \cos(\omega_0 t + \mu t^2 / 2),$$

где R , ω_0 – амплитуда и несущая частота импульса; $\mu = 2\omega_d / \tau_j$; $|t| \leq \tau_j / 2$, причем ω_d – девиация частоты.

Его комплексная огибающая имеет вид

$$\bar{R}(t) = R \exp(i\mu t^2 / 2). \quad (3)$$

В пределах ЛЧМ-импульса частота меняется по линейному закону, т. е. $\omega(t) = \omega_0 + \mu t$.

Определить переходную матрицу для такого импульса не удастся, так как уравнения Блоха в этом случае представляют собой систему линейных дифференциальных уравнений с переменными коэффициентами и не имеют аналитического решения. Для получения указанного решения следует перейти к уравнениям с кусочно-постоянными коэффициентами, для чего заменить закон изменения частоты на ступенчатый, т. е. заменить непрерывную линейную модуляцию частоты на ее ступенчатую аппроксимацию.

Эту аппроксимацию можно также рассматривать как дискретную частотную модуляцию (ДЧМ) реального импульса возбуждения. При ДЧМ ЛЧМ-импульсы длительностью τ_j делятся на $2N + 1$ элементарных импульсов длительностью $\tau = \tau_j / (2N + 1)$. При этом частота в пределах n -го элементарного импульса составляет

$$\omega_n = \omega_0 + n\Delta\omega, \quad n = \overline{-N, N}, \quad \Delta\omega = \omega_d / N.$$

Кроме того, для описания сигнала с ДЧМ по (3) необходимо, чтобы начальные фазы элементарных импульсов изменялись по закону $\varphi_n = -n^2 \Delta\omega \tau / 2$. Для максимального сжатия ДЧМ-импульсов необходимо, чтобы несущие частоты ω_0 и девиации частоты ω_d всех импульсов были одинаковыми, а длительности связаны соотношением $\tau_2 = \tau_3 = \tau_1 / 2$. При этом элементарные импульсы второго и третьего ДЧМ-сигналов будут в два раза короче элементарных импульсов первого [5], [7]. В дальнейших расчетах положено $2N + 1 = 101$.

Для определения переходной матрицы состояния, соответствующей ДЧМ-импульсу, необходимо последовательно перемножить переходные матрицы элементарных импульсов с учетом зако-

нов изменения частоты и начальной фазы от импульса к импульсу:

$$A = A'_N A_N \cdots A'_n A_n \cdots A'_{-N} A_{-N}, \quad (4)$$

где A'_n – матрица перехода в общую для всех частиц исходную систему координат, A_n – переходная матрица, соответствующая элементарному импульсу, определенному в собственной системе координат.

Для центрального элементарного импульса, имеющего частоту ω_0 , матричные элементы матрицы A_0 имеют вид

$$\begin{cases} a_{11} = a_{22}^* = \frac{R^2 + (R^2 + 2\Omega^2) \cos \beta \tau}{2\beta^2} + i \frac{\Omega \sin \beta \tau}{\beta}; \\ a_{12} = a_{21}^* = \frac{\bar{R}^2}{\beta^2} \sin^2 \left(\frac{\beta \tau}{2} \right); \\ a_{13} = a_{23}^* = \frac{2\bar{R}\Omega}{\beta^2} \sin^2 \left(\frac{\beta \tau}{2} \right) - i \frac{\bar{R} \sin \beta \tau}{\beta}; \\ a_{31} = a_{32}^* = \frac{\bar{R}^* \Omega}{\beta^2} \sin^2 \left(\frac{\beta \tau}{2} \right) - i \frac{\bar{R}^* \sin \beta \tau}{2\beta}; \\ a_{33} = \frac{\Omega^2 + R^2 \cos \beta \tau}{\beta^2}, \end{cases} \quad (5)$$

где $\beta^2 = R^2 + \Omega^2$; $\bar{R} = R \exp(i\varphi)$ (φ – начальная фаза радиоимпульса). Амплитуда импульсов $R = \gamma B$, рад/с, где γ – гиромагнитное отношение; B – амплитуда магнитной индукции импульса возбуждения.

В общем случае матрица A_n может быть получена из (5) при следующих определениях:

$$\Omega_n = \Omega - n\Delta\omega; \quad \beta_n = R^2 + \Omega_n^2; \quad \varphi_n = -n^2 \Delta\omega \tau / 2.$$

Поскольку A_n является переходной матрицей элементарного импульса в его собственной системе координат, вращающейся с частотой $\omega_n = \omega_0 + n\Delta\omega$, то для перехода в общую систему координат, вращающуюся с несущей частотой ω_0 , необходимо для каждого импульса домножить A_n на диагональную матрицу A'_n с элементами $a_{11} = a_{22}^* = \exp(in\Delta\omega\tau)$; $a_{33} = 1$.

Процедура (4) проводится для первого, второго и третьего ДЧМ-импульсов, в результате чего определяются необходимые матричные элементы переходной матрицы. После этого определяется комплексная огибающая двухимпульсного и трехимпульсного эха по формулам (1) и (2) соответственно.

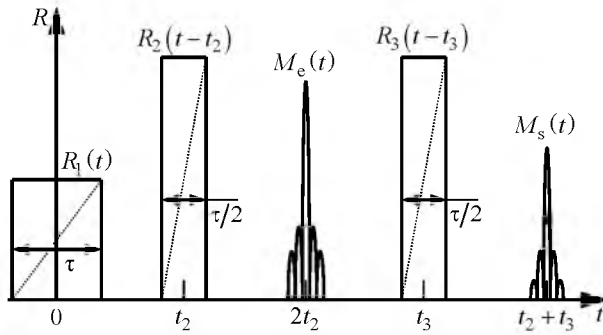


Рис. 1

На рис. 1 представлен алгоритм, осуществляющий максимальное сжатие ЛЧМ-сигналов. Наклонные штриховые линии символизируют линейное изменение частоты. Двухимпульсное эхо, совпадающее по форме с корреляционной функцией ЛЧМ-сигнала, формируется в момент времени $2t_2$ при когерентном сложении элементарных эхооткликов, последовательно возбуждаемых двумя ЛЧМ-сигналами. Наряду с двухимпульсным эхо в момент времени $t_2 + t_3$ возникает трехимпульсное эхо.

Исследования проводились при условии, что длительности сигналов возбуждения удовлетворяют условию $\tau_j \ll T_1, T_2$, где T_1 и T_2 – времена продольной и поперечной релаксаций спиновой системы соответственно. Наряду с этим выполнялись условия $t_j \ll T_1, T_2$, потому процессы релаксации можно было не учитывать.

Объектом моделирования являлись тонкие полукристаллические ферромагнитные пленки кобальта с резонансом ядер ^{59}Co . Эти пленки имеют центральную частоту линии поглощения 217 МГц с шириной $\Delta f = 10$ МГц. Неоднородно уширенная линия поглощения $g(\Omega)$ моделировалась гауссовской функцией со среднеквадратическим отклонением $\sigma_g = 10\pi$ рад/мкс. Длительности импульсов составляли $\tau_1 = 10$ мкс, $\tau_2 = \tau_3 = 5$ мкс; момент появления двухимпульсного эха $t_2 = 7.85$ мкс; промежуток между двухимпульсным и трехимпульсным откликами $t_3 = 21.65$ мкс.

На рис. 2 представлено соотношение спектра ДЧМ-сигнала $S_e(\Omega)$ и неоднородно уширенной линии поглощения $g(\Omega)$ при девиации частоты 10π рад/мкс. Форма модуля спектральной плотности ДЧМ-импульсов с большой базой приближается к прямоугольной.

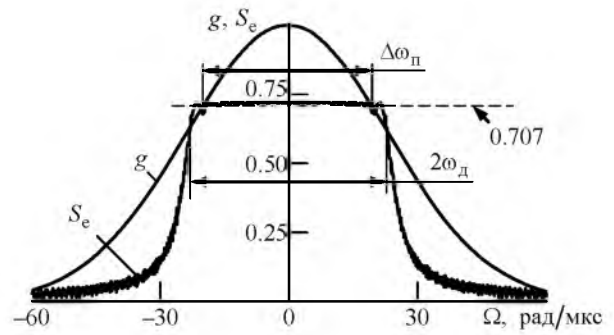


Рис. 2

В рассматриваемом случае возбуждалась только часть неоднородной уширенной линии поглощения, попадающая в полосу пропускания $2\omega_d$. Это ограничивает максимальную нормированную амплитуду двухимпульсного эха значением

$$\int_{-\omega_d}^{\omega_d} g(\Omega) d\Omega = \int_{-10\pi}^{10\pi} g(\Omega) d\Omega = 0.683.$$

Максимальное значение нормированной амплитуды двухимпульсного эха в классическом алгоритме возбуждения короткими 90° и 180° импульсами равно 1 [8], однако реальные импульсы конечной длительности возбуждают эхо меньшей амплитуды. Для трехимпульсного эха классический алгоритм возбуждения тремя короткими 90° импульсами позволяет получить максимальную нормированную амплитуду эха, равную 0.5, однако при конечной длительности импульсов она не достигает этого значения.

При увеличении девиации частоты до 30π рад/мкс спектр импульса становится настолько широким, что практически вся неоднородно уширенная линия поглощения возбуждается. Тогда максимальная амплитуда двухимпульсного эха ограничивается значением

$$\int_{-30\pi}^{30\pi} g(\Omega) d\Omega = 0.997.$$

На рис. 3 представлены зависимости нормированного корреляционного пика двухимпульсного эха M_K от амплитуды второго ДЧМ-импульса R_2 при трех значениях девиации частоты: 10π (кривая 1), 20π (кривая 2) и 30π рад/мкс (кривая 3). Амплитуда первого ДЧМ-импульса R_1 в каждом случае устанавливалась оптимальной и составляла, соответственно, 1.7, 2.4 и 2.9 рад/мкс.

Из представленных зависимостей следует, что с увеличением ширины спектра импульсов воз-

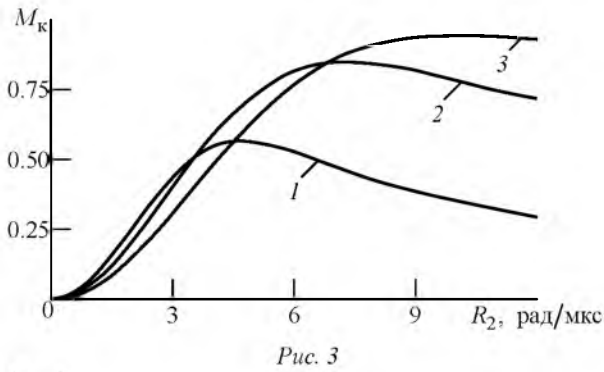


Рис. 3

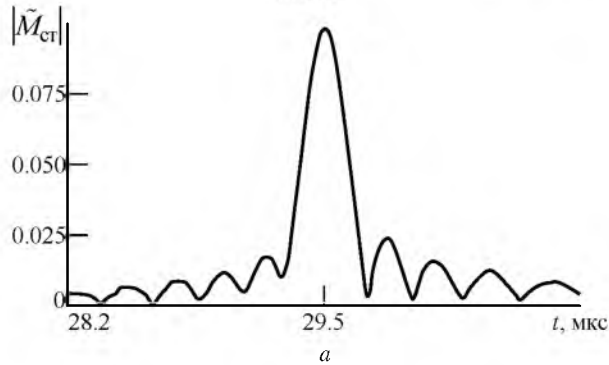


Рис. 4

буждения повышается возбуждаемая доля неоднородно уширенной линии поглощения. Как следствие, при этом увеличивается максимально возможное значение амплитуды эхоотклика.

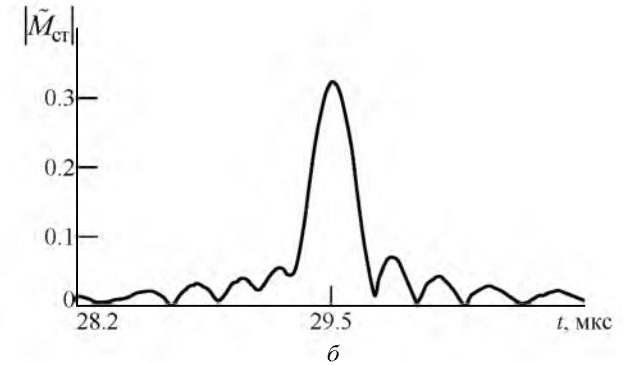
Амплитуда и форма эха существенным образом зависят от амплитуды возбуждающих импульсов. В связи с этим рассмотрим вид трехимпульсного эхоотклика при различных значениях амплитуды первого ДЧМ-импульса R_1 . Девиация частоты импульсов возбуждения в данном случае $\omega_d = 10\pi$ рад/мкс.

На рис. 4, а представлен выходной сигнал в линейном режиме (при $R_1 = 0.8$ рад/мкс, $R_2 = R_3 = 1.0$ рад/мкс), в котором практически все спектральные компоненты фиксируются в активной среде без нелинейных искажений и эхоотклик повторяет по форме корреляционную функцию ЛЧМ-сигнала. Амплитуда эха в таком режиме слишком мала, для ее увеличения необходимо повышать амплитуды входных сигналов возбуждения. Рис. 4, б соответствует получению корреляционного пика эха, равного 0.322. Для получения такой амплитуды потребовалось установить $R_1 = 1.6$ рад/мкс, $R_2 = R_3 = 2.2$ рад/мкс. Дальнейшее увеличение амплитуд ДЧМ-сигналов приводит к уменьшению уровня стимулированного эха и появлению искажений в его форме.

Более детальную картину изменения амплитуды эхоотклика можно получить, рассмотрев зави-

симости амплитуды корреляционного пика огибающей стимулированного эха $M_k = |M_{ct}(t_2 + t_3)|$ от амплитуды ДЧМ-импульсов возбуждения.

На рис. 5 представлены зависимости амплитуды эха от амплитуды R_3 при $R_1 = 1.6$ рад/мкс и трех разных значениях амплитуды второго импульса R_2 . Из них следует, что с увеличением амплитуды третьего ДЧМ-сигнала уровень корреляционного пика огибающей эха сначала возрас-



тает, достигая определенного значения, а затем спадает. Наибольшее значение эхоотклика при девиации частоты 10π рад/мкс достигается при $R_1 = 1.6$ рад/мкс, $R_2 = R_3 = 2.2$ рад/мкс и составляет 0.322. При больших значениях входных сигналов режим становится нелинейным.

Исследования режимов достижения максимальных значений эхоотклика при других значениях девиации частоты позволяют заключить, что с ростом девиации частоты ДЧМ-импульсов максимальная амплитуда эхоотклика возрастает, однако при условии возрастания амплитуд импульсов (рис. 6, кривая 1: $\omega_d = 10\pi$ рад/мкс, $R_2 = R_3 = 2.2$ рад/мкс; кривая 2: $\omega_d = 30\pi$ рад/мкс, $R_2 = R_3 = 4.0$ рад/мкс), т. е. характеристики возбуждения смещаются в сторону больших амплитуд импульсов. При увеличении девиации частоты

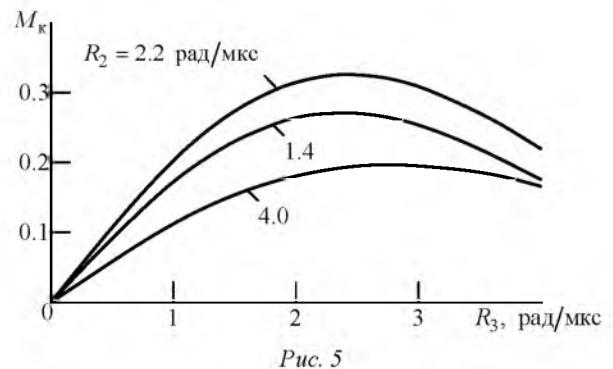


Рис. 5

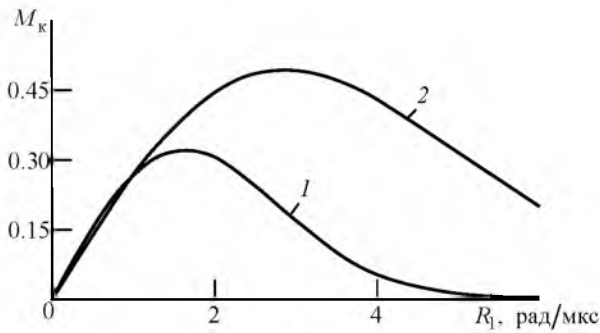


Рис. 6

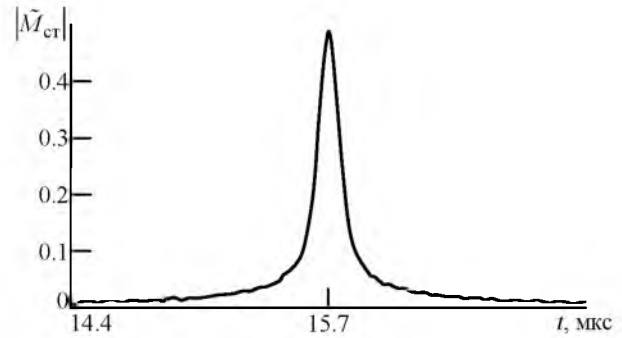


Рис. 7

ты ДЧМ-импульсов амплитудные характеристики в области максимальных значений становятся более пологими.

Максимальное значение амплитуды эхосигнала, полученное в трехимпульсном режиме, равно 0.493 (рис. 7) и обеспечивается ДЧМ-импульсами с амплитудными параметрами $R_1 = 2.9$ рад/мкс, $R_2 = R_3 = 6.0$ рад/мкс и девиацией частоты $\omega_d = 30\pi$ рад/мкс. Длительность эхосигнала (ширина центрального лепестка по уровню 0.707 от максимального значения) в рассматриваемом случае равна 0.09 мкс.

При исследовании амплитуды и формы эхоотклика спиновой системы установлено, что эхоотклик существенным образом зависит от амплитуды и от девиации частоты ДЧМ-импульсов возбуждения. При достаточно малом значении амплитуды ДЧМ-сигнала практически все спектральные компоненты фиксируются без нелинейных искажений и эхоотклик спиновой системы повторяет по форме корреляционную функцию ЛЧМ-сигнала. Однако амплитуда эха при этом мала и для ее увеличения необходимо увеличивать амплитуду входных импульсов, что, в свою очередь, приводит к появлению нелинейных искажений формы эхосигнала. В результате исследований определены оптимальные параметры ДЧМ-импульсов возбуждения, при которых амплитуда эха достигает максимального значения, а искажения формы эха незначительны.

Результаты сравнения максимальной амплитуды эха при возбуждении ДЧМ-сигналами с ам-

плитудой эха в классическом алгоритме возбуждения приведены в таблице. По приведенным данным можно определить выигрыш в мощности входных импульсов при возбуждении сложными сигналами. Так, например при возбуждении системы двумя ДЧМ-импульсами, получено значение амплитуды эхоотклика $M_e = 0.563$. Указанное значение достигается при приведенных в таблице параметрах ДЧМ-импульсов. В классическом же алгоритме возбуждения полученной амплитуде эха соответствует длительность Δ -образного импульса 0.1 мкс. Размах Δ -образных импульсов возбуждения при этом составляет

$$R_1 = \alpha_1 / \tau = \pi / (2\tau) = \pi / (2 \cdot 0.1) = 15.7 \text{ рад/мкс};$$

$$R_2 = \alpha_2 / \tau = \pi / 0.1 = 31.4 \text{ рад/мкс}.$$

Таким образом, при использовании в качестве сигналов возбуждения ДЧМ-импульсов возможно снизить уровень пиковой мощности сигналов возбуждения. В двухимпульсном режиме получается выигрыш более чем в 20 раз по амплитуде первого импульса (400 раз по мощности) и в 14 раз по амплитуде второго импульса. В трехимпульсном режиме выигрыш составляет более чем в 44 раза по амплитуде первого импульса и в 33 раза по амплитуде второго и третьего импульсов возбуждения.

В классическом алгоритме возбуждения Δ -образными импульсами при стремлении длительности импульсов возбуждения к нулю нормированное максимальное значение двухимпульсного эха равно 1, а трехимпульсного – 0.5, в то время как в

Нормированная амплитуда эха	Δ -Образные радиоимпульсы				ДЧМ-Импульсы, $\tau_1 = 10$ мкс; $\tau_2 = \tau_3 = \tau_1/2$			
	τ	R_1	R_2	R_3	ω_d	R_1	R_2	R_3
	мкс	рад/с			рад/с			
Двухимпульсное эхо								
0.563	0.1	15.7	31.4	–	10π	1.7	4.8	–
0.94	0.0224	70	140.0	–	30π	2.9	10	–
Трехимпульсное эхо								
0.32	0.1	15.7	15.7	15.7	10π	1.6	2.2	2.2
0.493	0.0236	133.0	133.0	133.0	30π	2.9	4.0	4.0

исследуемом алгоритме возбуждения ДЧМ-импульсами получены максимальные значения эха равные 0.94 и 0.493 соответственно. Следовательно, при возбуждении спиновой системы вместо Δ -образных импульсов возбуждения можно использовать ЛЧМ-сигналы, которые позволяют не только снизить мощность входных сигналов

возбуждения, но и достичь высоких значений амплитуд спинового эха.

Проведенные исследования показали, что ДЧМ-сигнал по своим характеристикам несколько не уступает дельтаобразному импульсу и потому может широко использоваться в различных приложениях ЯМР, в частности в магнитно-резонансной томографии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Дудкин В. И., Пахомов Л. Н. Квантовая электроника. СПб.: Изд-во Политехн. ун-та. 2012. 496 с.
2. Хорнак Д. Основы МРТ / пер. с англ. Изд-во технологического ин-та Рочестера. 2003 // URL: <http://euromedcompany.ru/materialy-po-tomographii/osnovy-mrt/>
3. Paff J., Blumich B. Observation of a spin echo with wight noise excitation // Phys. Rev. A. 1991. Vol. 43, № 7. P. 3640–3644.
4. Баруздин С. А. Насыщение двухуровневых систем в условиях импульсного стохастического резонанса // ЖТФ. 1999. Т. 69, № 12. С. 65–69.
5. Мимс В. Детектирование радиолокационных сигналов с частотно-модулированным заполнением посредством электронного спинового эха // ТИИЭР. 1963. Т. 5, № 8. С. 1127–1135.
6. Эрнст Р., Боденхаузен Дж., Вокаун А. ЯМР в одном и двух измерениях. М.: Мир, 1990. 709 с.
7. Баруздин С. А. Нелинейное эхо и обработка сигналов. СПб.: Изд-во СПбГЭТУ "ЛЭТИ", 2011. 187 с.
8. Калиникос Б. А., Устинов А. Б., Баруздин С. А. Спин-волновые устройства и эхо-процессоры / под ред. В. Н. Ушакова. М.: Радиотехника, 2013. 216 с.

S. A. Baruzdin, Ya. S. Kamertseva
Saint Petersburg state electrotechnical university "LETI"

The simulation of spin echo excitation by pulses with discrete frequency modulation

Results of simulation of spin echo excitation by pulses with discrete frequency modulation are given. It is shown that the use of such pulses instead of traditional short radio-frequency pulses allows reducing on some orders the excitation power without loss in echo amplitude.

Spin echo, excitation pulses, discrete frequency modulation, power reduction

Статья поступила в редакцию 15 сентября 2014 г.