



УДК 539.143.43:621.391.26

С. А. Баруздин

Санкт-Петербургский государственный электротехнический
университет "ЛЭТИ" им. В. И. Ульянова (Ленина)

Моделирование возбуждения спинового эха импульсами с произвольным законом модуляции

Рассмотрен метод решения уравнения движения вектора намагниченности в импульсном магнитном поле с произвольным законом модуляции на основе ступенчатой аппроксимации комплексной огибающей. С использованием этого метода проведено моделирование возбуждения сигналов спинового эха импульсами с амплитудной и амплитудно-частотной модуляцией.

Спиновое эхо, импульсы возбуждения, произвольный закон модуляции, форма эха, фотонное эхо, переходная матрица

Поведение вектора намагниченности во внешнем магнитном поле описывается уравнениями Блоха [1]–[3]. Если длительности импульсов возбуждения $\tau \ll T_1, T_2$, где T_1, T_2 – времена продольной и поперечной релаксации соответственно, то процессами релаксации можно пренебречь. Тогда уравнение движения вектора намагниченности изохроматы во вращающейся с частотой ω_0 системе координат можно представить в виде

$$\frac{d\mathbf{M}(t, \Omega)}{dt} = F(t, \Omega)\mathbf{M}(t, \Omega), \quad (1)$$

где

$$\mathbf{M}(t, \Omega) = \begin{bmatrix} \tilde{M}(t, \Omega) \\ \tilde{M}^*(t, \Omega) \\ M_z(t, \Omega) \end{bmatrix}$$

– вектор намагниченности; $\Omega = \omega - \omega_0$ – расстройка частоты ω относительно несущей частоты радиоимпульса ω_0 , совпадающей с центральной частотой неоднородно уширенной линии поглощения;

$$F(t, \Omega) = \begin{bmatrix} i\Omega & 0 & -i\tilde{R}(t) \\ 0 & -i\Omega & i\tilde{R}^*(t) \\ -i\tilde{R}^*(t)/2 & i\tilde{R}(t)/2 & 0 \end{bmatrix}, \quad (2)$$

причем \tilde{M}, \tilde{M}^* – комплексные поперечные компоненты вектора намагниченности; M_z – его

продольная компонента; $\tilde{R}(t) = \gamma\tilde{B}(t)$ – комплексная огибающая импульса возбуждения, выраженная в единицах круговой частоты (γ – гиромагнитное отношение; \tilde{B} – комплексная поперечная компонента вектора магнитной индукции); "*" – символ комплексного сопряжения.

Формальное решение (1) при заданном на симметричном интервале $|t| \leq \tau/2$ импульсе $\tilde{R}(t)$ в матричном виде:

$$\mathbf{M}(\tau/2, \Omega) = A(\tau/2, -\tau/2, \Omega)\mathbf{M}(-\tau/2, \Omega), \quad (3)$$

где $\mathbf{M}(-\tau/2, \Omega)$ – вектор начальных условий для момента начала импульса; $A(\tau/2, -\tau/2, \Omega)$ – переходная матрица состояния системы для момента окончания импульса.

Уравнение (1) представляет собой систему линейных дифференциальных уравнений с переменными в общем случае коэффициентами $\tilde{R}(t)$ и $\tilde{R}^*(t)$. Точное аналитическое решение (1) удается получить только при $\tilde{R}(t) = \text{const}$, т. е. для простых радиоимпульсов с прямоугольной огибающей. Также точное аналитическое решение можно найти в случае кусочно-постоянных коэффициентов, например при возбуждении фазоманипулируемыми импульсами [4]. В [5] предложен метод решения уравнения (1) для импульсов с линейной частотной модуляцией (ЛЧМ) на ос-

нове ступенчатой аппроксимации линейного закона изменения частоты.

В настоящей статье решение системы (1) на основе ступенчатой аппроксимации обобщается на случай произвольного закона модуляции импульса возбуждения.

В общем случае импульс возбуждения длительностью τ с произвольным законом модуляции может быть представлен в виде $r(t) = R(t)\cos\Psi(t)$, где $R(t)$ – закон изменения амплитуды импульса при амплитудной модуляции (АМ); $\Psi(t)$ – полная фаза. В полной фазе обычно выделяют линейно изменяющуюся со временем компоненту $\psi(t) = \omega_0 t + \theta(t)$, где $\theta(t)$ – угловая модуляция импульса (частотная модуляция (ЧМ) или фазовая модуляция (ФМ)). Тогда комплексная огибающая импульса, фигурирующая в (1), имеет вид $\tilde{R}(t) = R(t)\exp[i\theta(t)]$. По известной полной фазе можно определить мгновенную частоту импульса

$$\omega(t) = d\Psi/dt = \omega_0 + d\theta/dt = \omega_0 + \Delta\omega(t),$$

где $\Delta\omega(t)$ – отклонение мгновенной частоты от несущей.

Для решения системы (1) проведем ступенчатую аппроксимацию параметров импульса возбуждения с шагом Δt , удовлетворяющим теореме отсчетов Котельникова $\Delta t \leq f_B/2$, где f_B – граничная частота спектра функции $\tilde{R}(t)$. При этом длительность импульса τ делится на $2N+1$ интервал, на каждом из которых задаются значения $R_n = R(n\Delta t)$, $\theta_n = \theta(n\Delta t)$ и $\Delta\omega_n = \Delta\omega(n\Delta t)$, $n = -N, -N+1, \dots, N$.

Переходная матрица состояния в (3) определяется последовательным перемножением переходных матриц элементарных импульсов с учетом законов изменения их параметров от импульса к импульсу:

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

где A_n – переходная матрица, соответствующая элементарному импульсу. Поскольку переходная матрица элементарного импульса A_n построена в его собственной системе координат, вращающейся с частотой $\omega_n = \omega_0 + \Delta\omega_n$, для перехода в общую систему координат, вращающуюся с несущей частотой ω_0 , необходимо каждый раз домножать A_n на диагональную матрицу A'_n с элементами $a'_{11} = a_{22}^* = \exp(-i\Delta\omega_n \Delta t)$; $a'_{33} = 1$.

Элементы матрицы A_n имеют вид

$$\begin{cases} a_{22}^* = a_{11} = \frac{R_n^2 + (R_n^2 + 2\Omega_n^2)\cos\beta_n\Delta t}{2\beta_n^2} + i\frac{\Omega_n \sin\beta_n\Delta t}{\beta_n}; \\ a_{21}^* = a_{12} = \frac{\tilde{R}_n^2}{\beta_n^2} \sin^2\left(\frac{\beta_n\Delta t}{2}\right); \\ a_{23}^* = a_{13} = \frac{2\tilde{R}_n\Omega_n}{\beta_n^2} \sin^2\left(\frac{\beta_n\Delta t}{2}\right) - i\frac{\tilde{R}_n \sin\beta_n\Delta t}{\beta_n}; \\ a_{32}^* = a_{31} = \frac{\tilde{R}_n^*\Omega}{\beta_n^2} \sin^2\left(\frac{\beta_n\Delta t}{2}\right) - i\frac{\tilde{R}_n^* \sin\beta_n\Delta t}{2\beta_n}; \\ a_{33} = \frac{\Omega_n^2 + R_n^2 \cos\beta_n\Delta t}{\beta_n^2}, \end{cases} \quad (5)$$

где

$$\Omega_n = \Omega - \Delta\omega_n; \quad \beta_n = \sqrt{R_n^2 + \Omega_n^2}; \quad \tilde{R}_n = R_n \exp(i\varphi_n),$$

причем φ_n – начальная фаза элементарного радиоимпульса. При ступенчатой аппроксимации закона изменения частоты $\Delta\omega_n$ фаза комплексной огибающей $\theta(t)$, интегрально связанная с частотой, аппроксимируется кусочно-линейными функциями. При этом $\varphi_n = \theta_n - \Delta\omega_n n \Delta t$.

Комплексная огибающая сигнала двухимпульсного эха находится интегрированием всех изохромат с весами, определяемыми функцией низкочастотного эквивалента неоднородно уширенной линии поглощения $g(\Omega)$ с шириной $\Delta\omega_L$ [6]:

$$\begin{aligned} \tilde{M}_e(t) = M_0 \int_{-\infty}^{\infty} g(\Omega) a_{12}^{(2)}(\Omega) a_{23}^{(1)}(\Omega) \times \\ \times \exp\left[i\Omega\left(t - 2t_2 + \frac{\tau_1}{2}\right)\right] d\Omega, \end{aligned} \quad (6)$$

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

Комплексная огибающая трехимпульсного (стимулированного) эха определяется выражением [7]

$$\begin{aligned} \tilde{M}_{st}(t) = M_0 \int_{-\infty}^{\infty} g(\Omega) a_{13}^{(3)}(\Omega) a_{32}^{(2)}(\Omega) a_{23}^{(1)}(\Omega) \times \\ \times \exp\left[i\Omega\left(t - t_3 - t_2 + \frac{\tau_1 + \tau_2 - \tau_3}{2}\right)\right] d\Omega. \end{aligned} \quad (7)$$

После подстановки вычисленных в явном виде на основе (4) и (5) элементов матриц $A^{(j)}$ в выражения (6) и (7) получают комплексные огибающие эхосигналов.

В отличие от известных пакетов Mathcad и Matlab, позволяющих численно решать системы дифференциальных уравнений для одной частоты неоднородно уширенной спиновой системы, предложенный метод дает аналитическое решение сразу для всего диапазона частот. Кроме того, использование аппарата переходных матриц состояния позволяет определять отклик, соответствующий рассматриваемому эхо, а не полному отклику спиновой системы. В результате предложенный метод характеризуется большей скоростью вычислений.

Для иллюстрации предложенного метода проведем моделирование возбуждения стимулированного спинового эха. Объект моделирования – тонкие ферромагнитные пленки кобальта с резонансом ядер ^{59}Co . Эти пленки имеют центральную частоту линии поглощения 216 МГц при ширине $\Delta f = 10$ МГц. Неоднородно уширенная линия поглощения $g(\Omega)$ моделируется гауссовской функцией со среднеквадратическим отклонением $\sigma_g = 10^7 \pi$ рад/с. При определении переходных матриц импульсов с модуляцией принято $2N + 1 = 201$.

На рис. 1 представлены огибающие импульсов возбуждения двухимпульсного спинового эха (кривые $\tilde{M}_e(t)$). На рис. 1, а представлен алгоритм возбуждения, соответствующий зеркальной задержке первого импульса [6], [7]. В качестве этого импульса взят импульс с линейно спадающей амплитудой (АМ) $\tilde{R}_1(t) = R_{1\max}(0.5 - t/\tau_1)$ с па-

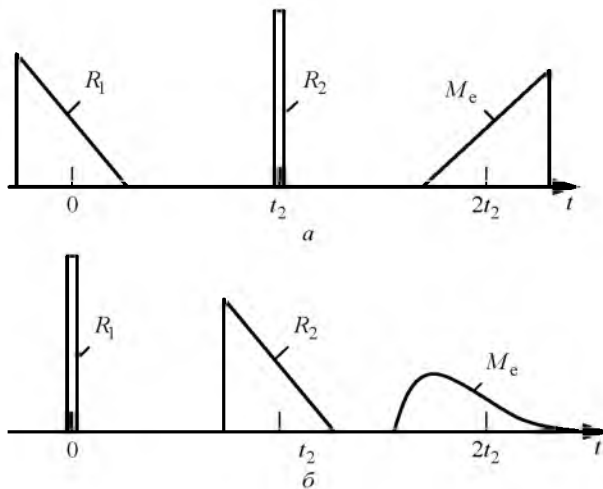


Рис. 1

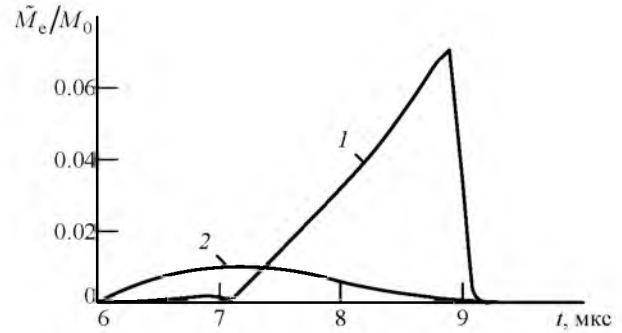


Рис. 2

раметрами: $R_{1\max} = 5 \cdot 10^5$ рад/с, $\tau_1 = 2$ мкс, $\theta_1(t) = 0$. Второй импульс $\tilde{R}_2(t)$ имеет оптимальную амплитуду, соответствующую $\alpha_2 = R_2\tau_2 = \pi$, $\tau_2 = 0.1$ мкс, $\theta_2(t) = 0$. Нормированная на M_0 огибающая двухимпульсного эха (6) представлена на рис. 2 (кривая 1). Указанные параметры первого импульса соответствуют малосигнальному режиму, при котором нелинейные искажения еще слабо проявляются и эхо повторяет форму исходного сигнала в зеркальном виде с задержкой на время $2t_2$ (рис. 1, а).

Если поменять местами первый и второй импульсы (рис. 1, б), то форма эха будет соответствовать автовертке второго импульса (рис. 2, кривая 2). В этом случае $\alpha_1 = \pi$, поэтому необходимо изменить параметры короткого импульса:

$$\alpha_1 = R_1\tau_1 = \pi/2, \quad \theta_2(t) = 0, \quad \theta_1(t) = \pi/2.$$

В заключение рассмотрим результаты моделирования возбуждения трехимпульсного (стимулированного) эха импульсами со сложным законом модуляции АМ-ЛЧМ (рис. 3). Для создания переменного магнитного поля использован параллельный резонансный контур, в катушке индуктивности которого расположено возбуждаемое вещество. Контур является нагрузкой усилителя, на вход которого поступает радиочастотный импульс с несущей частотой ω_0 , равной резонансной частоте контура. Низкочастотный эквивалент модуля коэффициента передачи резонансного усилителя имеет вид

$$K(\Omega) = K_{\max} / \sqrt{1 + (2Q\Omega/\omega_0)^2}, \quad (8)$$

где K_{\max} – коэффициент усиления усилителя на резонансной частоте; Q – эквивалентная добротность контура.

В процессе моделирования рассмотрен алгоритм возбуждения трехимпульсного эха, когда на

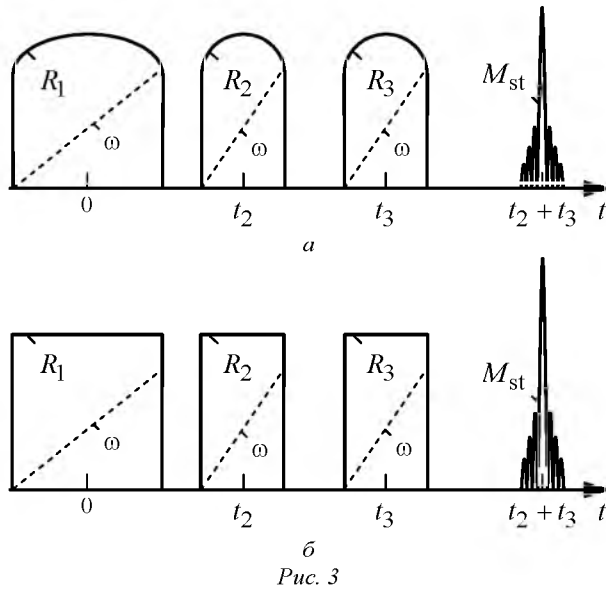


Рис. 3

вход резонансного усилителя поступает напряжение в виде ЛЧМ-импульса

$$u(t) = U \cos(\omega_0 t + \mu t^2 / 2)$$

с комплексной огибающей

$$\tilde{U}(t) = U \exp(i \mu t^2 / 2),$$

где U – амплитуда импульса; $\mu = 2\omega_d / \tau_j$; $|t| \leq \tau_j / 2$; ω_d – девиация частоты. На интервале действия импульса его частота меняется по линейному закону: $\omega(t) = \omega_0 + \mu t$ (рис. 3, штриховые линии).

На выходе усилителя из-за неравномерности амплитудно-частотной характеристики возникает амплитудная модуляция в соответствии с (8):

$$U_{\text{out}}(t) = U_{\text{max}} / \sqrt{1 + (2Q\mu t / \omega_0)^2},$$

где U_{max} – амплитуда в центре импульса. Таким образом, исходный ЛЧМ-импульс с постоянной амплитудой приобретает на выходе резонансного усилителя амплитудную модуляцию. Магнитное поле, возбуждающее вещество, создается током, протекающим через катушку индуктивности контура. При $Q \gg 1$ форма тока совпадает с формой напряжения на контуре. В результате комплексная огибающая АМ-ЛЧМ-импульса, определяющая элементы матрицы $F(t, \Omega)$ (2), имеет вид

$$\tilde{R}(t) = R / \sqrt{1 + (2Q\mu t / \omega_0)^2} \exp(i \mu t^2 / 2),$$

где R – максимальное значение амплитуды в центре импульса.

На рис. 3, а представлены огибающие трех АМ-ЛЧМ-импульсов R_1, R_2, R_3 и стимулированного эха M_{st} . Параметры импульсов возбуждения:

$$R_1 = 5 \cdot 10^5 \text{ рад/с}, \quad R_2 = R_3 = 1.5 \cdot 10^6 \text{ рад/с};$$

$$\tau_1 = 10 \text{ мкс}, \quad \tau_2 = \tau_3 = \tau_1 / 2; \quad t_2 = 8 \text{ мкс},$$

$$t_3 = 14 \text{ мкс}; \quad \mu_1 = 2\pi \cdot 10^{12} \text{ рад/с}^2, \quad \mu_2 = \mu_3 = 2\mu_1.$$

Девиация частоты $\omega_d = 10^7 \pi$ рад/с одинакова у всех трех импульсов и равна ширине неоднородно уширенной линии. Эквивалентная добротность контура $Q = 20$, что соответствует одинаковой полосе частот неоднородно уширенной линии и резонансного контура. Нормированная на M_0 огибающая стимулированного эха (7) представлена на рис. 4 (кривая 2). Для сравнения на рис. 3, б представлены огибающие имеющих те же параметры возбуждающих ЛЧМ-импульсов в отсутствие АМ и получаемая при этом нормированная огибающая. Амплитуды импульсов равны максимальным амплитудам АМ-ЛЧМ-импульсов на рис. 3, а. Нормированная огибающая стимулированного эха для этого случая показана на рис. 4 (кривая 1). Как видно из представленных графиков, в отсутствие АМ амплитуда эха больше, чем в первом случае, за счет большего возбуждения периферийных участков линии. Форма эха близка к форме автокорреляционной функции ЛЧМ-сигнала, описываемой функцией $\sin x/x$.

Результаты моделирования свидетельствуют о том, что разработанный метод позволяет моделировать возбуждение спинового эха импульсами с различными видами модуляции, в том числе смешанными. Результаты описанной работы могут быть использованы при подготовке экспериментов с использованием спинового эха и при интерпретации их результатов, а также при разработке спиновых процессоров обработки радиосигналов. Также результаты работы могут быть применены к анализу формы фотонного эха,

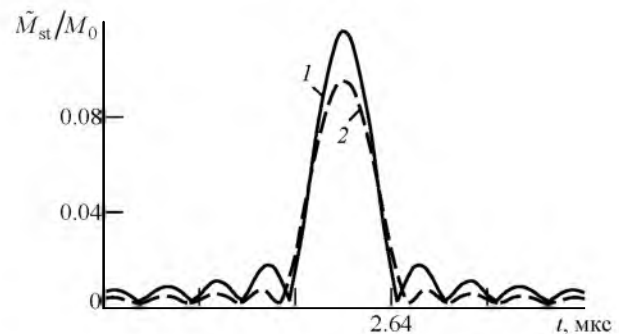


Рис. 4

наблюдаемого в световом диапазоне и являющегося аналогом спинового эха. В этом случае магнитно-дипольное взаимодействие заменяется электродипольным и вместо уравнений (1) ис-

пользуются оптические уравнения Блоха [7], с математической точки зрения идентичные обычным уравнениям Блоха.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Дудкин В. И., Пахомов Л. Н. Квантовая электроника. СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2012. 496 с.
2. Эрнст Р., Боденхаузен Дж., Вокаун А. ЯМР в одном и двух измерениях. М.: Мир, 1990. 709 с.
3. Блюмих Б. Основы ЯМР. М.: Техносфера, 2011. 256 с.
4. Баруздин С. А. Стимулированное спиновое эхо при возбуждении псевдослучайными импульсами // ФТТ. 2005. Т. 47, № 12. С. 2116–2120.
5. Баруздин С. А. Возбуждение спинового эха импульсами с линейной частотной модуляцией // ЖТФ. 2015. Т. 85, вып. 3. С. 84–88.
6. Баруздин С. А. Нелинейное эхо и обработка сигналов. СПб.: Изд-во СПбГЭТУ "ЛЭТИ", 2011. 187 с.
7. Калиникос Б. А., Устинов А. Б., Баруздин С. А. Спин-волновые устройства и эхопроцессоры / под ред. В. Н. Ушакова. М.: Радиотехника, 2013. 216 с.

S. A. Baruzdin

Saint-Petersburg state electrotechnical university "LETI"

The simulation of spin echo excitation by pulses with arbitrary modulation

The method of solving the equations of motion of the magnetization vector in a pulsed magnetic field with arbitrary modulation based on stepwise approximation of the complex envelope. Using this method simulated excitation of spin echo signals from pulses of the amplitude-frequency and amplitude modulation.

Spin echo, excitation pulses, arbitrary modulation law, photon echo, echo form, the transition matrix

Статья поступила в редакцию 3 марта 2015 г.