

09;12

О возбуждении квадрупольного спинового эха

© И.В. Золотарев, А.С. Ким, П.Г. Нейфельд

Пермский государственный университет
Пермский филиал РНЦ "Прикладная химия"

Поступило в Редакцию 27 сентября 1999 г.

Впервые теоретически и экспериментально рассмотрено возбуждение квадрупольного спинового эха последовательностью радиочастотных импульсов с частотами заполнения, равными ω_Q и $\omega_Q \pm \Delta\omega_Q$, где ω_Q — резонансная частота возбуждаемого перехода, $\Delta\omega_Q$ — расстройка в пределах полуширины линии ядерного квадрупольного резонанса. Показано, что в этом случае амплитуда наблюдаемых сигналов не зависит от величины расстройки, а местоположения сигналов эха зависят от временных интервалов между импульсами, величины $\Delta\omega_Q/\omega_Q$ и знака расстройки.

Экспериментальное наблюдение [1] и теоретическое рассмотрение [2] квадрупольного спинового эха предполагают периодическое воздействие на образец, содержащий квадрупольные ядра, радиочастотными импульсами с частотой заполнения, равной резонансной частоте ω_Q возбуждаемого перехода, и регистрацию сигналов эха на этой же частоте.

В работе [3] экспериментально изучено поведение ядерной спин-системы при периодическом воздействии на образец радиочастотными импульсами с частотой заполнения, равной $\omega_Q \pm \Delta\omega_Q$, где $\Delta\omega_Q$ — расстройка в пределах полуширины линии ЯКР (ядерного квадрупольного резонанса) и регистрации сигналов отклика на этой же частоте.

В данной работе рассмотрено воздействие на спин-систему радиочастотной импульсной последовательностью с частотами заполнения, равными ω_Q и $\omega_Q \pm \Delta\omega_Q$. Регистрация сигналов эха ведется на резонансной частоте.

Рассмотрим вариант на примере трехимпульсного возбуждения стимулированного эха.

Сначала подается первый радиочастотный (РЧ) импульс с частотой заполнения, равной ω_Q , через время τ_1 — второй РЧ импульс с частотой заполнения, равной $\omega_Q + \Delta\omega_Q$, и через время τ_2 — третий РЧ импульс с

частотой заполнения, равной $\omega_Q - \Delta\omega_Q$. Величина $\Delta\omega_Q$ устанавливается одинаковой. Регистрацию сигналов эха в обоих вариантах проводят на резонансной частоте ω_Q .

Если воздействовать на квадрупольную спин-систему по данной импульсной программе, то наблюдаются сигналы эха с амплитудами:

$$\begin{aligned} \text{а) } E_{m,m-1}^{(1)} &= 2(I'_x)_{m,m-1} \left\{ c_1(x_i) \omega_{m,m-1} \sin \omega_{m,m-1} \right. \\ &\quad \left. \times \left\{ t - \left[\left(2 - \frac{\Delta\omega_{m,m-1}}{\omega_{m,m-1}} \right) \tau_1 - 2\tau_2 \frac{\Delta\omega_{m,m-1}}{\omega_{m,m-1}} \right] \right\} \right\} \quad (1) \end{aligned}$$

в момент времени $t_1 = \left(2 - \frac{\Delta\omega_{m,m-1}}{\omega_{m,m-1}} \right) \tau_1 - 2\tau_2 \frac{\Delta\omega_{m,m-1}}{\omega_{m,m-1}}$;

$$\begin{aligned} \text{б) } E_{m,m-1}^{(2)} &= 2(I'_x)_{m,m-1} \left\{ c_2(x_i) \omega_{m,m-1} \sin \omega_{m,m-1} \right. \\ &\quad \left. \times \left\{ t - \left[\left(2 - \frac{\Delta\omega_{m,m-1}}{\omega_{m,m-1}} \right) \tau_1 + \left(1 - \frac{\Delta\omega_{m,m-1}}{\omega_{m,m-1}} \right) \tau_2 \right] \right\} \right\} \quad (2) \end{aligned}$$

в момент времени $t_2 = \left(2 - \frac{\Delta\omega_{m,m-1}}{\omega_{m,m-1}} \right) \tau_1 + \left(1 - \frac{\Delta\omega_{m,m-1}}{\omega_{m,m-1}} \right) \tau_2$;

$$\begin{aligned} \text{в) } E_{m,m-1}^{(3)} &= 2(I'_x)_{m,m-1} \left\{ c_3(x_i) \omega_{m,m-1} \sin \omega_{m,m-1} \left\{ t - \left[2\tau_2 - \frac{\Delta\omega_{m,m-1}}{\omega_{m,m-1}} \tau_1 \right] \right\} \right\} \\ &\quad (3) \end{aligned}$$

в момент времени $t_3 = 2\tau_2 - \frac{\Delta\omega_{m,m-1}}{\omega_{m,m-1}} \tau_1$;

$$\begin{aligned} \text{г) } E_{m,m-1}^{(4)} &= 2(I'_x)_{m,m-1} \left\{ c_4(x_i) \omega_{m,m-1} \sin \omega_{m,m-1} \right. \\ &\quad \left. \times \left\{ t - \left[\left(1 - \frac{\Delta\omega_{m,m-1}}{\omega_{m,m-1}} \right) \tau_1 + 2\tau_2 \right] \right\} \right\} \quad (4) \end{aligned}$$

в момент времени $t_4 = \left(1 - \frac{\Delta\omega_{m,m-1}}{\omega_{m,m-1}} \right) \tau_1 + 2\tau_2$;

$$\begin{aligned} \text{д) } E_{m,m-1}^{(5)} &= 2(I'_x)_{m,m-1} \left\{ c_5(x_i) \omega_{m,m-1} \sin \omega_{m,m-1} \right. \\ &\quad \left. \times \left\{ t - \left[\left(2 - \frac{\Delta\omega_{m,m-1}}{\omega_{m,m-1}} \right) \tau_1 + 2\tau_2 \right] \right\} \right\} \quad (5) \end{aligned}$$

в момент времени $t_5 = \left(2 - \frac{\Delta\omega_{m,m-1}}{\omega_{m,m-1}} \right) \tau_1 + 2\tau_2$.

Здесь $(I'_x)_{m,m-1}$ — элемент матрицы оператора I_x в представлении квадрупольного гамильтониана \mathbf{H}_Q ; $c_i(x_i)$ являются тригонометрическими функциями угловых длительностей радиочастотных импульсов; $\omega_{m,m-1}$ — резонансная частота ω_Q возбуждаемого перехода; $\Delta\omega_{m,m-1}$ — расстройка от резонансной частоты в пределах полуширины линии ЯКР; τ_1 и τ_2 — временные интервалы между первым и вторым и между вторым и третьим импульсами, m — магнитное квантовое число.

Такое трехимпульсное возбуждение спин-системы приводит к тому, что амплитуды сигналов практически не зависят от величины расстройки, а местоположения сигналов зависят от временных интервалов τ_1 и τ_2 (как в [1,2]) между возбуждающими импульсами и дополнительно от величины $\frac{\Delta\omega_{m,m-1}}{\omega_{m,m-1}}$ (обратной величины добротности линии) и знака расстройки.

При $\Delta\omega_{m,m-1} \rightarrow 0$ получаем выражения (1)–(5) для амплитуд и местоположений сигналов эха, как в [2].

Экспериментальное наблюдение проведено с помощью многочастотного импульсного спектрометра ЯКР на ядрах ^{63}Cu в $\text{Y}_1\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-d}$ ($d > 0$) на резонансной частоте 31.12 МГц ($T=297\text{ K}$). Ширина этой линии ЯКР составляет $\sim 200\text{ kHz}$. Величину расстройки необходимо устанавливать меньше 100 kHz. При больших значениях τ_1 и τ_2 наблюдаются сдвиги (относительно сигналов типа Хана) в местоположениях сигналов эха.

Такое возбуждение ядерной спин-системы позволит получить дополнительную информацию о структуре и строении химических соединений, исследование которых ранее было затруднительно.

Список литературы

- [1] Hahn E.L. // Phys. Rev. 1950. V. 80. N 4. P. 580–594.
- [2] Das T.P., Saha A.K. // Phys. Rev. 1954. V. 93. N 4. P. 749–756.
- [3] Осокин Д.Я. // ЖЭТФ. 1983. Т. 84. № 1. С. 118–122.