

УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

Квантовая радиофизика

Лекция 5

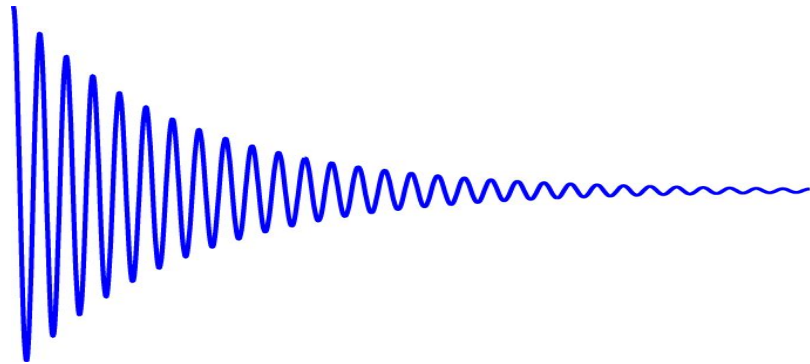
Санкт-Петербург, 2017

Практическая ЯМР-спектроскопия

Спад намагниченности и его спектр

- Спад свободной индукции (FID)

$$S(t) = S_0 e^{i\omega_0 t} e^{-\frac{t}{T_2}}$$



- Преобразование Фурье

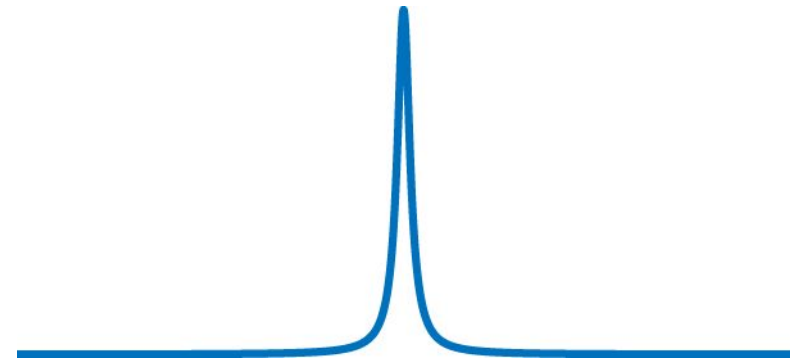
$$S(\omega) = S_0 \frac{\frac{1}{T_2} + i(\omega - \omega_0)}{(\omega - \omega_0)^2 + \frac{1}{T_2^2}}$$



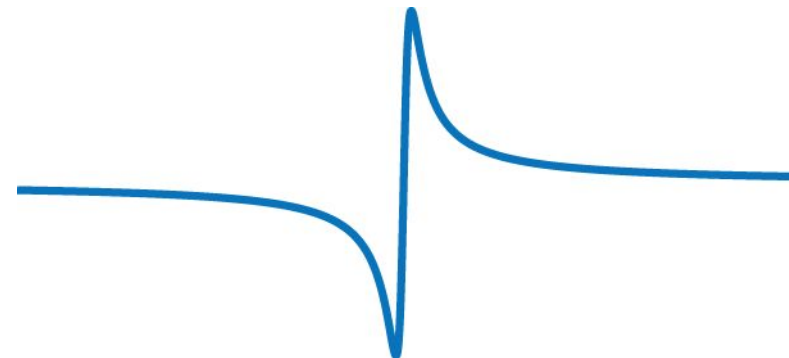
Поглощение и дисперсия

- Вещественная и мнимая части спектра

$$A(\omega) = S_0 \frac{\frac{1}{T_2}}{(\omega - \omega_0)^2 + \frac{1}{T_2^2}}$$



$$D(\omega) = S_0 \frac{(\omega - \omega_0)}{(\omega - \omega_0)^2 + \frac{1}{T_2^2}}$$





Фаза спектра

- Неизвестная начальная фаза сигнала

$$S(t) = S_0 e^{i\varphi} e^{i\omega_0 t} e^{-\frac{t}{T_2}}$$

- Спектр сигнала

$$S(\omega) = S_0 e^{i\varphi} e^{i\omega_0 t} e^{-\frac{t}{T_2}}$$

$$S(\omega) = S_0 [(A(\omega) \cos \varphi - D(\omega) \sin \varphi)] \\ + iS_0 [(D(\omega) \cos \varphi + A(\omega) \sin \varphi)]$$



Составляющие спектра

- Взаимоперпендикулярные компоненты $A(\omega)$ и $D(\omega)$
- При $\varphi=0$

$$S(\omega) = S_0[A(\omega) + iD(\omega)]$$

- При $\varphi=\pi$

$$S(\omega) = S_0[-D(\omega) + iA(\omega)]$$

- Квадратурное детектирование

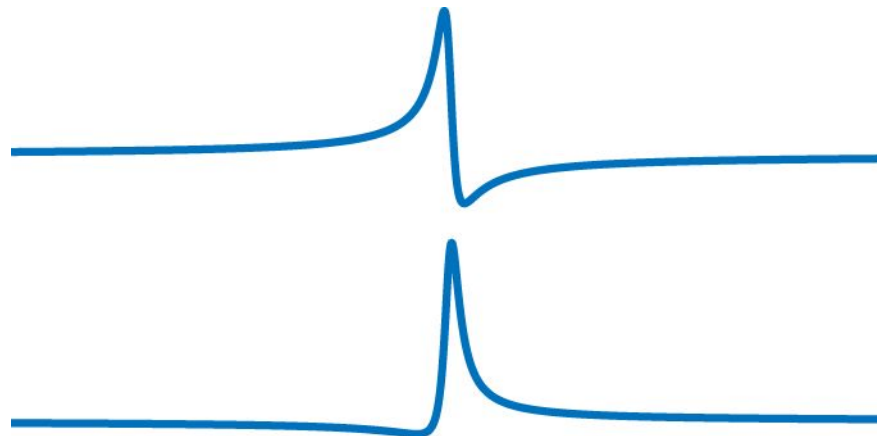
Фазирование спектра

- Детектирование сигналов

$$S_x(\omega) = S_0[(A(\omega) \cos \varphi - D(\omega) \sin \varphi)]$$

$$S_y(\omega) = S_0[(D(\omega) \cos \varphi + A(\omega) \sin \varphi)]$$

- Спектр комплексного сигнала





Коррекция фазы

- Нулевой порядок

$$S_{corr}(\omega) = e^{-i\varphi_1} (S_x + iS_y)$$

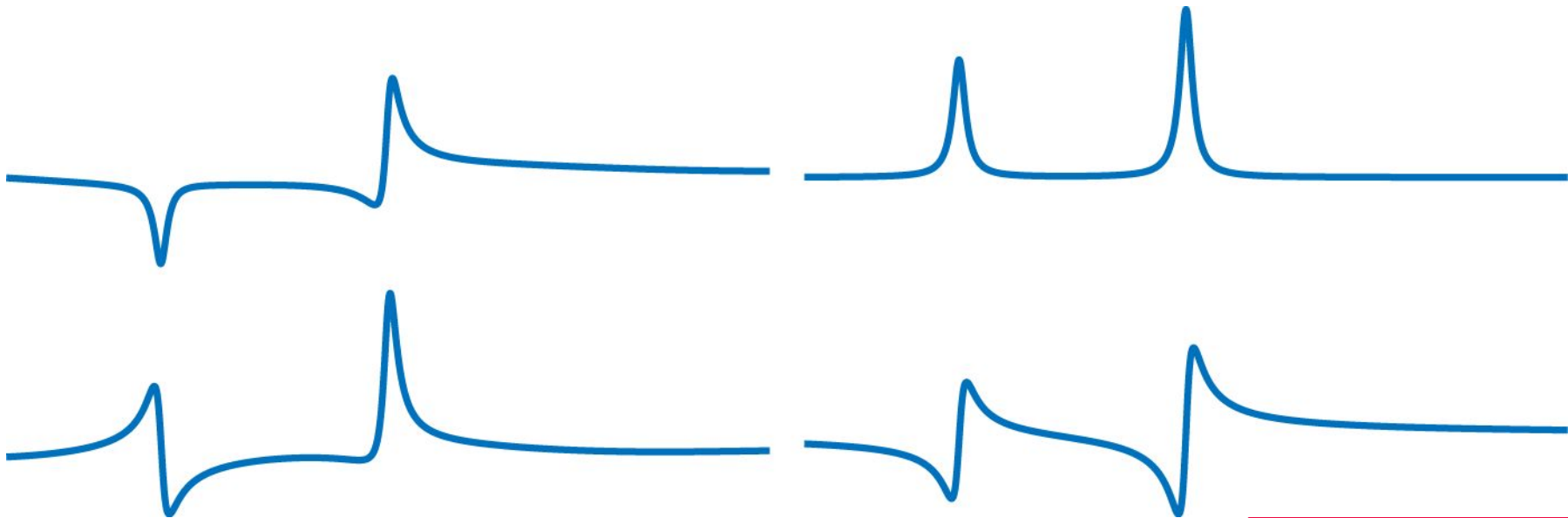
- Первый порядок (для частичной коррекции нерезонансных эффектов)

$$S_{corr}(\omega) = e^{-i\varphi_2\omega} (S_x + iS_y)$$



Коррекция спектров

- Два порядка коррекции фазы





Связь релаксации и формы линии

- Спектр поглощения

$$A(\omega) = S_0 \frac{\frac{1}{T_2}}{(\omega - \omega_0)^2 + \frac{1}{T_2^2}}$$

- Полуширина на половине высоты

$$\frac{1}{2} A(\omega_0) = A(\omega) \quad \rightarrow \quad \frac{1}{T_2} = \Delta\omega$$

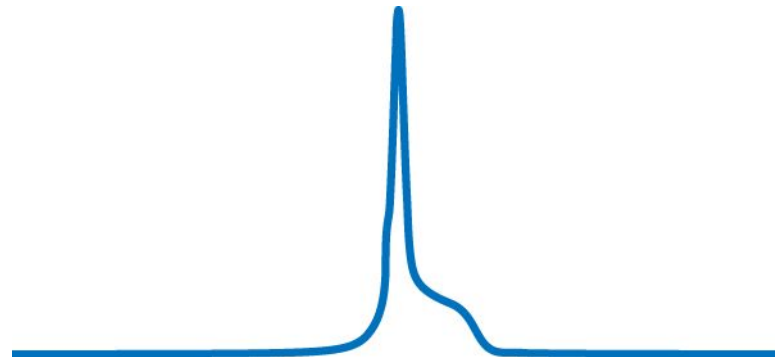


Форма линии и однородность поля

- В реальных спектрах при малых неоднородностях B_0 – однородное уширение линии

$$\frac{1}{T_2^*} = \Delta\omega = \gamma\Delta B_0$$

- Неоднородное уширение линии



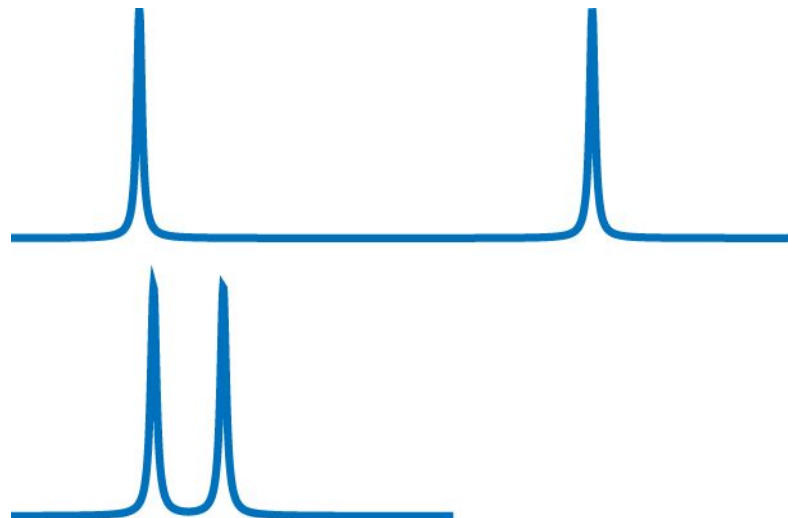


Ширина спектра

- Теорема Найквиста – полоса пропускания спектра определяется частотой оцифровки

$$\frac{1}{\Delta t} = 2\pi\Delta\omega$$

- Aliasing



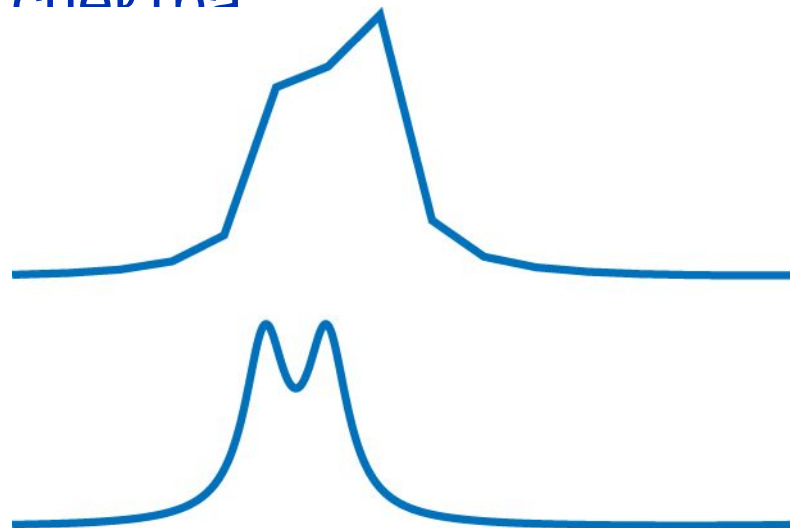


Разрешение в спектре

- Аналогично частоте оцифровки

$$\frac{1}{2\pi\Delta\omega} = T_{dig}$$

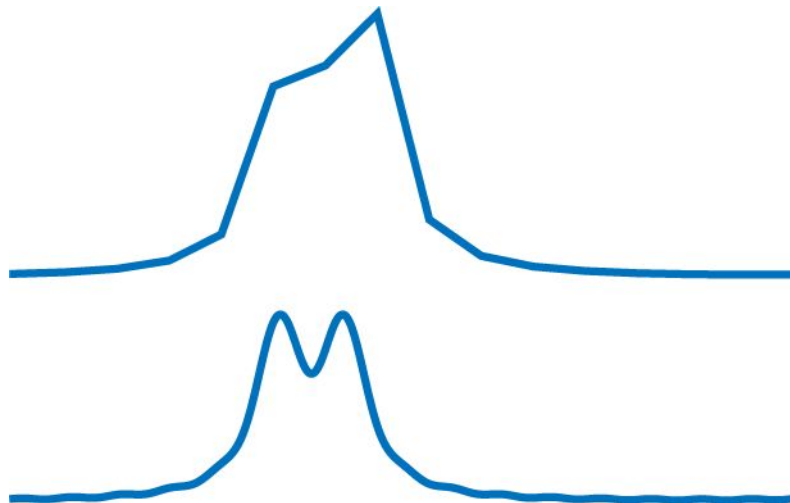
- Длина записи сигнала влияет на цифровое разрешение спектра





Дополнение нулями

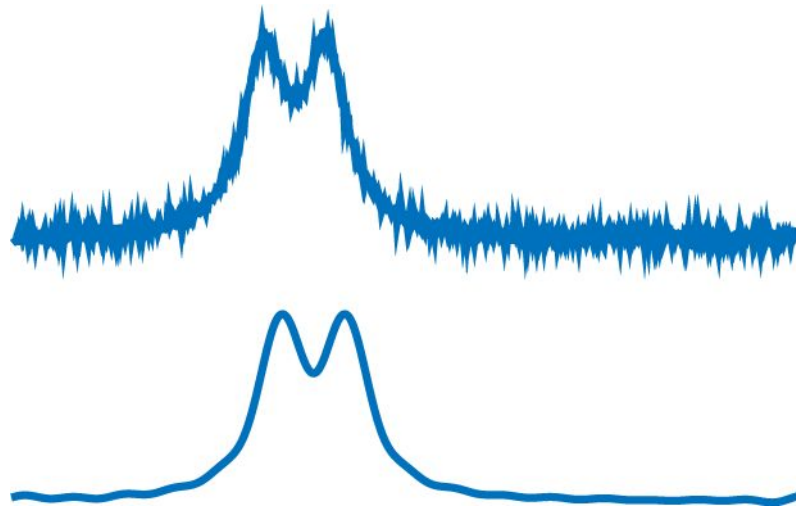
- Искусственное увеличение T_{dig}





Шум при дополнении нулями

- Меньшая мощность шума





Соотношение сигнал/шум

- ❌ При сложении двух стохастических сигналов их мощности интенсивность растет $\sim N$
- ✅ При сложении когерентных сигналов складываются их амплитуды, соответственно мощность растет $\sim N^2$
- ✅ Таким образом, соотношение сигнал/шум при накоплении сигнала (ЯМР, в том числе) растет пропорционально \sqrt{N}