

О. Н. Глотова, Н. Я. Синявский, Б. Ногай

## ГЕОМЕТРИЧЕСКАЯ ФАЗА ЯКР-СИГНАЛОВ

28

Исследована нециклическая геометрическая фаза сигналов ядерного квадрупольного резонанса (ЯКР-сигналов), обусловленная траекторией движения ядерной намагниченности под действием радиочастотных импульсов. Получены аналитические выражения для геометрических фаз ЯКР-сигналов в случае ядер со спином  $I = 3/2$ . Для экспериментальной части исследований использовался порошкообразный образец  $KClO_3$ . Предложен альтернативный вариант нутационного эксперимента, позволяющий определять параметр асимметрии  $\eta$  из положений частотных сингулярностей нутационного фазового спектра.

*The non-cyclic geometric phase of nuclear quadrupole resonance (NQR) signals, which is induced by the trajectory of nuclear magnetization motion upon the external pulse r.f. excitation, was studied. Analytical expressions for the geometric phases of NQR signals were obtained for the case of nuclei with spin  $I = 3/2$ . The powder sample of  $KClO_3$  was served as a material for experimental part of studies reported. It was proposed an alternative variant of the nutation experiment, which allows one to obtain the asymmetry parameter  $\eta$  on the base of locations of frequency singularities in the nutation phase spectrum.*

**Ключевые слова:** ядерный квадрупольный резонанс, геометрическая фаза, нутации, параметр асимметрии.

**Key words:** nuclear quadrupole resonance, geometric phase, nutation, asymmetry parameter.

Первый эксперимент чистого ядерного квадрупольного резонанса (ЯКР), иллюстрирующий проявление фазы Берри [1] при механическом вращении образца, был выполнен Тико [2], использовавшим монокристалл хлората натрия, в котором квадрупольные ядра хлора ориентированы вдоль оси симметрии кристалла, являющейся здесь осью квантования. В работе [3] эксперимент Тико для чистого ЯКР был распространен на случай порошка и параметра асимметрии, не равного нулю, и сделана попытка практического использования проявления фазы Берри в чистом ЯКР для определения параметра асимметрии тензора ГЭП на ядрах со спином  $I = 3/2$  в порошках. В работе [4] была исследована геометрическая фаза в ЯМР-системе с двумя уровнями, где циклическая эволюция создавалась «нерезонансным»  $2\pi$ -импульсом.

Целью настоящей работы стало исследование влияния незамкнутой траектории движения ядерной намагниченности на фазу сигналов в нерезонансных импульсных экспериментах ЯКР на ядрах со спинами  $I = 3/2$  в порошкообразных образцах.



Траектория движения ядерной намагниченности в спиновом пространстве при воздействии р.ч. импульса определяется нутацией намагниченности вокруг эффективного поля, зависящего от амплитуды зондирующего импульса и величины расстройки частоты от резонанса. Рассмотрим случай ядер со спином  $I = 3/2$  и с неаксиальной симметрией тензора градиента электрического поля  $\eta \neq 0$ . Для расчета воздействия на спиновую систему р.ч. импульса с расстройкой частоты  $\Delta\omega$  относительно резонанса необходимо решить нестационарное уравнение Шрёдингера во временном интервале  $0 \leq t \leq t_w$ , где  $t_w$  — длительность импульса. Волновую функцию можно представить в виде:

$$\psi = \sum_{m=-1}^{m=+1} C_m(t) \varphi_m \exp(-iE_m t / \hbar), \quad (1)$$

где  $\varphi_m$  — ортогональные собственные функции квадрупольного гамильтониана  $H_Q$ ;  $E_m$  — уровни энергии квадрупольного взаимодействия. Коэффициенты  $C_m(t)$  в выражении (1) определяются решением нестационарного уравнения Шрёдингера

$$i\hbar\dot{\psi} = [H_Q + H_1(t)]\psi \quad (2)$$

в интервале  $0 \leq t \leq t_w$ . Используя свойства ортогональности собственных функций  $\varphi_m$ , из уравнения (2) получаем систему уравнений для  $C_m$ :

$$i\hbar \frac{dC_m}{dt} = \sum_n V_{mn} C_n \cdot \exp(-i\omega_{mn}t),$$

где  $\omega_{mn} = (E_m - E_n) / \hbar$  — частоты переходов между уровнями энергии. Гамильтониан взаимодействия с р.ч. полем запишется в виде  $\vec{H}_1 = -\gamma\hbar(\vec{B}_1 \cdot \vec{I}) \cos \omega t$ , где  $\omega = \omega_{\pm} + \Delta\omega$  — частота спектрометра;  $\Delta\omega$  — расстройка частоты спектрометра относительно резонанса.

После нахождения решения для  $C_m(t)$  полная фаза сигнала индукции, состоящая из геометрической и динамической фаз, может быть рассчитана [5] по формуле

$$\Phi_t = \Phi_g + \Phi_d = \arg \langle \psi(0) | \psi(t_w) \rangle,$$

тогда нециклическая геометрическая фаза получается в виде

$$\Phi_g = \arctan \left[ (\Delta\omega / \omega_n) \tan(\omega_n t_w / 2) \right] - \Delta\omega t_w / 2 = 1 / 2 \Omega; \quad (3)$$

$\Phi_d = \Delta\omega t_w / 2$  — динамическая фаза. Здесь

$$\omega_n = \sqrt{\Delta\omega^2 + 4(A_x^2 + A_y^2 + A_z^2)} = \sqrt{\Delta\omega^2 + \omega_1^2};$$

$$\omega_1 \text{ — частота Раби; } A_x = \frac{\gamma B_1 (\eta + 3)}{4\sqrt{3}\rho} \sin \theta \cos \varphi; \quad A_y = \frac{\gamma B_1 (\eta - 3)}{4\sqrt{3}\rho} \sin \theta \sin \varphi;$$

$A_z = \frac{\gamma B_1 \eta}{2\sqrt{3}\rho} \cos \theta$ ;  $\rho = \sqrt{1 + \eta^2} / 3$  и  $\Omega$  — телесный угол, образованный траекторией конца вектора единичной намагниченности на сфере еди-



ничного радиуса и геодезической кривой, проведенной через конечную и начальную точку движения. Величину этого телесного угла можно рассчитать также чисто геометрически — как интеграл

$$\Omega = 2 \int_{\theta_1}^{\theta_2} \sin \theta \arccos \left( \frac{\tan \theta_1}{\tan \theta} \right) d\theta, \quad (4)$$

где

$$\theta_1 = \arctan \left[ \cos(\omega_n t_w / 2) \tan \theta_2 \right], \quad \theta_2 = \arccos(\Delta\omega / \omega_n).$$

Интегрирование выражения (4) приводит к формуле (3) для телесного угла.

Для случая возбуждения спиновой системы с помощью двух резонансных ( $\pi/2$  и  $\pi$ ) импульсов и нерезонансного р. ч. импульса переменной длительности  $t_w$ , включаемого после резонансного  $\pi$ -импульса, геометрическая фаза сигнала спинового эха в зависимости от длительности нерезонансного импульса  $t_w$  и величины расстройки частоты  $\Delta\omega$  получается в виде

$$\Phi_g = \arctan(\Delta\omega \tan(\omega_n t_w / 2) / (\omega_1 \tan(\omega_n t_w / 2) - \omega_n)) \quad (5)$$

и представляет собой телесный угол, образованный траекторией конца вектора единичной намагниченности и отрезком геодезической линии, соединяющей на сфере начальную и конечную точки траектории.

Формула (5) совпадает с выражением для площади получаемого сферического треугольника.

Формулы для фаз, приведенные выше, получены для одной ориентации ( $\theta$  и  $\varphi$ ) р. ч. катушки относительно главных осей тензора ГЭП на ядре. В эксперименте регистрируется фаза, усредненная по всем кристаллитам (по углам  $\theta$  и  $\varphi$ ), имеющим собственные фазы.

Экспериментальные ЯКР-измерения на ядрах  $^{35}\text{Cl}$  были выполнены на импульсном ЯКР-спектрометре Testmag Apollo с программным обеспечением NTNMR. Фазы сигналов спинового эха находились в процессе обработки с помощью известного алгоритма автоматической коррекции фазы после фурье-преобразования. Затем фаза разворачивалась в монотонно нарастающую с помощью процедуры *unwrap*. В эксперименте изменялась частота заполнения и длительность нерезонансного импульса  $t_w$ . Измерения выполнялись на порошкообразном образце  $\text{KClO}_3$  при комнатной температуре.

На рисунке 1 приведены зависимости геометрической фазы сигналов для случая возбуждения спиновой системы с помощью двух резонансных ( $\pi/2$  и  $\pi$ ) импульсов и нерезонансного р. ч. импульса переменной длительности  $t_w$ , включаемого после резонансного  $\pi$ -импульса, для разных расстроек частоты спектрометра от резонанса. Сплошными линиями показаны соответствующие симуляции, выполненные для порошка. Усреднение фаз в порошке приводит к тому, что зависимости  $\Phi_g$  от  $t_w$  для разных расстроек частоты являются линейными. В этом эксперименте измерение сигнала синхронизовано с концом резонансного  $\pi/2$ -импульса, поэтому здесь регистрируется не полная, а геометрическая фаза. В эксперименте с синхронизацией измерений с концом импульса  $t_w$  регистрируется не геометрическая, а полная фаза  $\Phi_t$ .

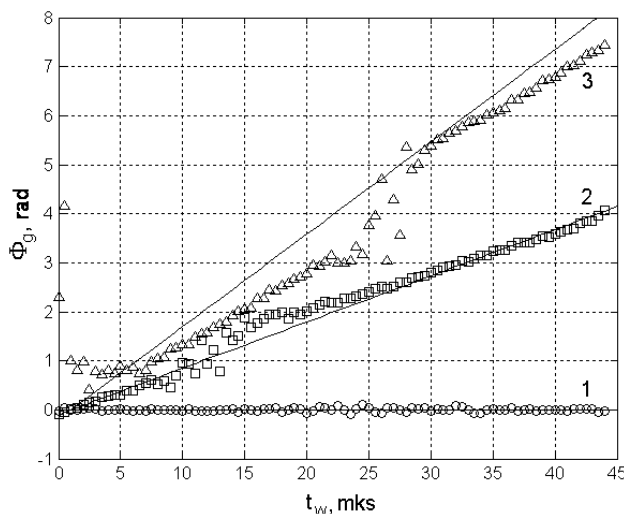


Рис. 1. Зависимость геометрической фазы ЯКР  $^{35}\text{Cl}$  эха в  $\text{KClO}_3$  от длительности нерезонансного импульса  $t_w$  для  $\Delta\nu=0$  (1), 15 (2) и 30 кГц (3)

На рисунке 2 показано изменение полной фазы  $\Phi_t$  с изменением длительности импульса  $t_w$  в нутационном эксперименте с одним р.ч. импульсом для случая  $\Delta\nu = 30$  кГц. Затухание амплитуды колебаний фазы  $\Phi_t$  обусловлено затуханием амплитуды сигнала в нутационном эксперименте для порошка. Как следует из моделирования и эксперимента, уменьшение амплитуды колебаний полной фазы со временем  $t_w$  является не таким быстрым, как уменьшение амплитуды сигнала в нутационном эксперименте. Это позволит улучшить разрешение частотных сингулярностей в нутационном спектре  $\Phi_t(\omega_n)$ , полученном после фурье-преобразования функции  $\Phi_t(t_w)$ , а следовательно, повысить точность определения параметра асимметрии  $\eta$  для ядер со спином  $I = 3/2$  из нутационного эксперимента.

Колебания фазы  $\Phi_t(t_w)$  для порошка не являются гармоническими, т.е. в спектре  $\Phi_t(\omega_n)$  будут содержаться гармоники нутационных частот  $\omega_n$ .

Таким образом, в данной работе получены аналитические выражения для нециклических геометрических фаз сигналов ЯКР в зависимости от длительности р.ч. импульсов и расстройки частоты для спина  $I = 3/2$ . Выполненные симуляции зависимостей фаз сигналов хорошо совпадают с экспериментом для порошкообразных образцов. Показано, что при синхронизации измерений с началом р.ч. импульса регистрируется геометрическая фаза, а при синхронизации с концом р.ч. импульса — сумма геометрической и динамической фаз. Геометрическая фаза носит монотонно нарастающий с увеличением длительности р.ч. импульса характер. Полная фаза в зависимости от  $t_w$  имеет колебательный характер, с частотой нутации ядерной намагниченности в порошке.

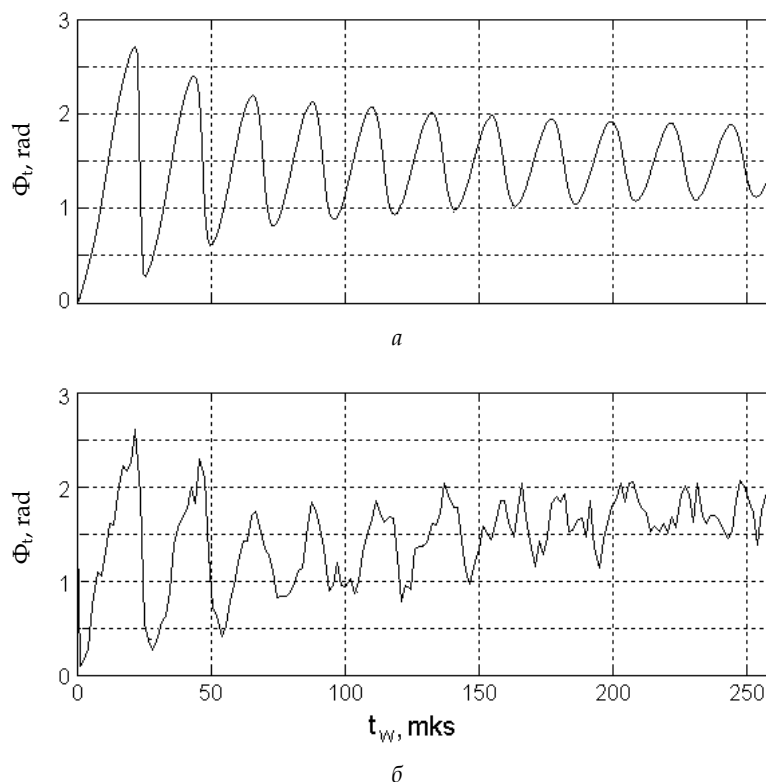


Рис. 2. Изменение полной фазы в нутационном эксперименте ЯКР  $^{35}\text{Cl}$  с одним р. ч. импульсом для  $\Delta\nu = 30$  кГц в порошке  $\text{KClO}_3$ :  
*a* – симуляция для идеального сигнала; *б* – эксперимент

Потеря когерентности сигнала вследствие произвольного накопления геометрических фаз, вызванного различными факторами, может рассматриваться как новый механизм релаксации, который следует учитывать в ЯМР- и ЯКР-экспериментах.

#### Список литературы

1. Berry M. V. Quantal phase factors accompanying adiabatic changes // Proc. R. Soc. Ser. A 392. London, 1984. P. 45–57.
2. Тычко R. Adiabatic rotational splittings and Berry's phase in nuclear quadrupole resonance // Phys. Rev. Lett. 1987. Vol. 58. P. 2281–2284.
3. Sinyavsky N., Mackowiak M., Schmidt C. Manifestation of Berry's Phase in NQR Spectra of Rotating Powder Samples // Z. Naturforsch. 2008. Vol. 63a. P. 81–87.
4. Лусин В.Н., Федорук Г.Г., Хаймович Е.П. Изучение топологической фазы в двухуровневой-системе с помощью ЯМР эха // Письма в ЖЭТФ. 1989. Т. 50. Вып. 4. С. 205–207.
5. Mukunda N., Simon R. Quantum kinematic approach to the geometric phase. I. General formalism // Ann. Phys. (N. Y.). 1993. Vol. 228. P. 205–268.



### Об авторах

Ольга Николаевна Глотова — асп., университет им. А. Мицкевича, Познань, Польша, e-mail: olga\_rf@mail.ru

Николай Яковлевич Синявский — д-р физ.-мат. наук, проф., Балтийский федеральный университет им. И. Канта, e-mail: n\_sinyavsky@mail.ru

Болеслав Ногай — д-р, проф., университет им. А. Мицкевича, Познань, Польша, e-mail: nogaj@amu.edu.pl

### Authors

Olga Glotova — PhD student, A. Mickiewicz University, Poznan, Poland, e-mail: olga\_rf@mail.ru

Nikolai Sinyavsky — PhD, professor, I. Kant Baltic Federal University, e-mail: n\_sinyavsky@mail.ru

Boleslav Nogaj — PhD, professor, A. Mickiewicz University, Poznan, Poland, e-mail: nogaj@amu.edu.pl

33

УДК 539.143+539.183

*В. Е. Пониматкин, А. А. Шпилевой, В. А. Утц*

### О КОНТРОЛЕ РАБОТЫ РАДИОПЕРЕДАЮЩЕЙ СИСТЕМЫ НА ИЗЛУЧЕНИЕ

*На основе анализа принципов работы антенной системы на излучение разработан способ оперативной оценки аварийности, положенный в основу предлагаемого устройства. Внедрение количественной оценки эффективности работы передающей системы позволит решить проблему автоматического контроля работы радиостанций при воздействии негативных факторов.*

*On the basis of the analysis of principles of antennas' system work on radiation the way of their operative emergency definition taken as a principle the developed device is developed. Introduction of a quantitative estimation of transmit system efficacy, will allow to solve a problem of automatic radio stations' control under influence of negative factors.*

**Ключевые слова:** антенна, волновое сопротивление, линия передачи, коэффициент отражения, радиостанция.

**Key words:** antenna, wave resistance, transmitting line, coefficient of reflection, radio station.

Известно, что работа системы связи существенно зависит от подведенной к передающей антенне мощности, а следовательно, от режима работы линии передачи [1]. Антенна представляет собой, как правило, двухпроводную линию, разомкнутую на конце, в которой создается режим как бегущих, так и стоячих волн. За счет этого в линиях передачи возникает перенапряжение, достигающее трехкратного от напря-