

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ «НОВОСИБИРСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ
ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ».

Физический факультет

Кафедра общей физики

Щудро Тимофей Алексеевич

КУРСОВАЯ РАБОТА

**Оптимальные параметры индукционной катушки в резонансном
контуре датчика высокой мощности для ЯМР спектроскопии твердого
тела.**

Электромагнитный практикум, 2 курс, группа №18303

Научный руководитель:

Оценка научного руководителя

«_____» _____ 20__ г.

Преподаватель практикума

Оценка преподавателя практикума

«_____» _____ 20__ г.

Куратор практикума

Итоговая оценка

«_____» _____ 20__ г.

Аннотация

В данной курсовой работе исследована ячейка датчика высокой мощности для ЯМР спектроскопии импульсным методом. Объяснена роль каждого из элементов резонансного контура, а также выяснены оптимальные параметры катушки в этом контуре, ответственной за короткий РЧ-импульс. Также представлена идея для расширения диапазона измеряемых полей и увеличения верхней границы рабочей частоты датчика.

Ключевые слова: ЯМР, импульсный метод ЯМР спектроскопии, ячейка датчика высокой мощности, параметры резонансного контура.

Оглавление

Аннотация	2
Введение	4
Явление ядерного магнитного резонанса.....	4
Импульсная методика ЯМР.....	6
Описание установки	7
Ячейка ЯМР.....	8
Расчет оптимальных параметров контура	9
Заключение	11
Список литературы	11

Введение

Для изучения различных параметров химических веществ, в основном белков, используется метод спектроскопии ядерного магнитного резонанса. ЯМР представляет собой спектроскопический метод, основанный на изучении магнитных свойств атомных ядер. Некоторые ядра при помещении в сильное магнитное поле способны резонировать на характеристичных частотах в радиочастотном диапазоне электромагнитного спектра. Небольшие изменения указанной резонансной частоты предоставляют детальную информацию о молекулярной структуре исследуемых соединений. В данной работе используется импульсная методика ЯМР, описанная ниже.

Целью данной работы является определение наиболее оптимальных параметров катушки в контуре ячейки датчика, а также изучение зависимости характеристик посылаемого импульса от элементов цепи.

Явление ядерного магнитного резонанса

Суть явления ЯМР заключается в том, что если воздействовать на магнитные ядра переменным магнитным полем, частота которого равна разнице энергий между энергетическими уровнями ядра, то магнитные ядра начинают переходить с одного уровня на другой, при этом поглощая энергию переменного поля. Регистрация таких переходов и составляет основу спектроскопии ЯМР.

Возможность регистрации спектров ЯМР основана на существовании у некоторых ядер ненулевого спина (собственного момента количества движения). Спин представляет собой чисто квантовую характеристику ядра, при помещении ядра с полуцелым спином в магнитное поле B ядерный магнитный момент начинает прецессировать вокруг направления B при ориентации оси прецессии либо параллельно, либо антипараллельно B . При этом частота прецессии зависит от типа ядра, помещенного в магнитное поле, и от индукции магнитного поля:

$$\nu_0 = \gamma B_0 / 2\pi$$

где ν_0 – так называемая ларморова частота, γ – гиромагнитное отношение, которое является характеристичным для каждого ядра, B_0 – индукция магнитного поля.

Рассмотрим поведение ядра с полуцелым спином ($s = \frac{1}{2}$), помещенного в магнитное поле. Наличие спина приводит к существованию двух квантовых состояний, которые часто представляют как соответствующие положению спина, направленного «вверх» (α) или «вниз» (β) (Рис. 1). В отсутствие внешнего магнитного поля эти два состояния являются вырожденными и их заселенности равны. Помещение ядра в магнитное поле приводит к тому, что спиновое состояние α , в котором спин направлен по полю, будет энергетически более выгодно, чем состояние β .

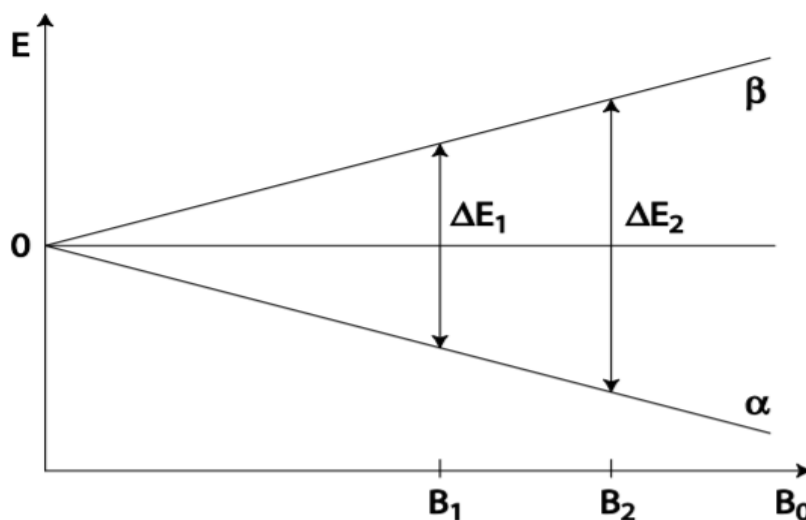


Рис. 1 Зависимость энергии разных квантовых состояний от внешнего магнитного поля

Величина расщепления уровней будет пропорциональна силе внешнего магнитного поля. Таким образом, в равновесии в соответствии с распределением Больцмана заселенность состояния со спином, направленным по полю, будет выше заселенности состояния со спином, направленным «вниз». Как и во всех видах спектроскопии, ядро, находящееся в нижнем по энергии состоянии, может повысить свою энергию и перейти в менее энергетически-выгодное состояние путем поглощения электромагнитного излучения. Энергия поглощенного кванта в этом случае

должна в точности соответствовать энергии расщепления уровней в магнитном поле ΔE , и эта энергия связана с частотой электромагнитного излучения:

$$\Delta E = h\nu_0 = h\gamma B_0/2\pi$$

Очевидно, что чем больше энергия расщепления уровней в магнитном поле ΔE , тем больше будет разность заселенностей этих (Рис. 1) уровней и, как следствие, количество поглощаемой энергии, от которого непосредственно зависит чувствительность метода.

Импульсная методика ЯМР

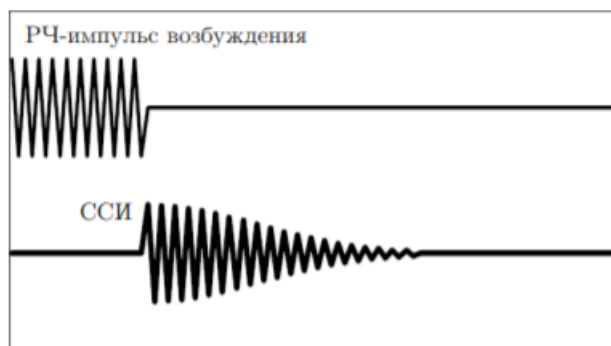


Рис. 2 Импульсная методика ЯМР

Как уже упоминалось выше, данной работе используется импульсная методика, представленная на рис. 2. Она заключается в воздействии на ядра, содержащиеся в образце, коротким радиочастотным импульсом. Стремясь вернуться в состояние теплового равновесия, ядерные спины начинают рассеивать полученную ими избыточную энергию в виде радиоизлучения. Его и регистрирует катушка нашего датчика в виде интерферограммы – суперпозиции затухающих гармонических колебаний. В ЯМР такие интерферограммы называют сигналом спада свободной индукции (ССИ). Частота заполнения радиочастотного импульса должна быть близка к частоте прецессии ядер. А разность этих частот должна быть меньше чем $1/\Delta T$, где ΔT – длительность радиочастотного импульса возбуждения.

Описание установки

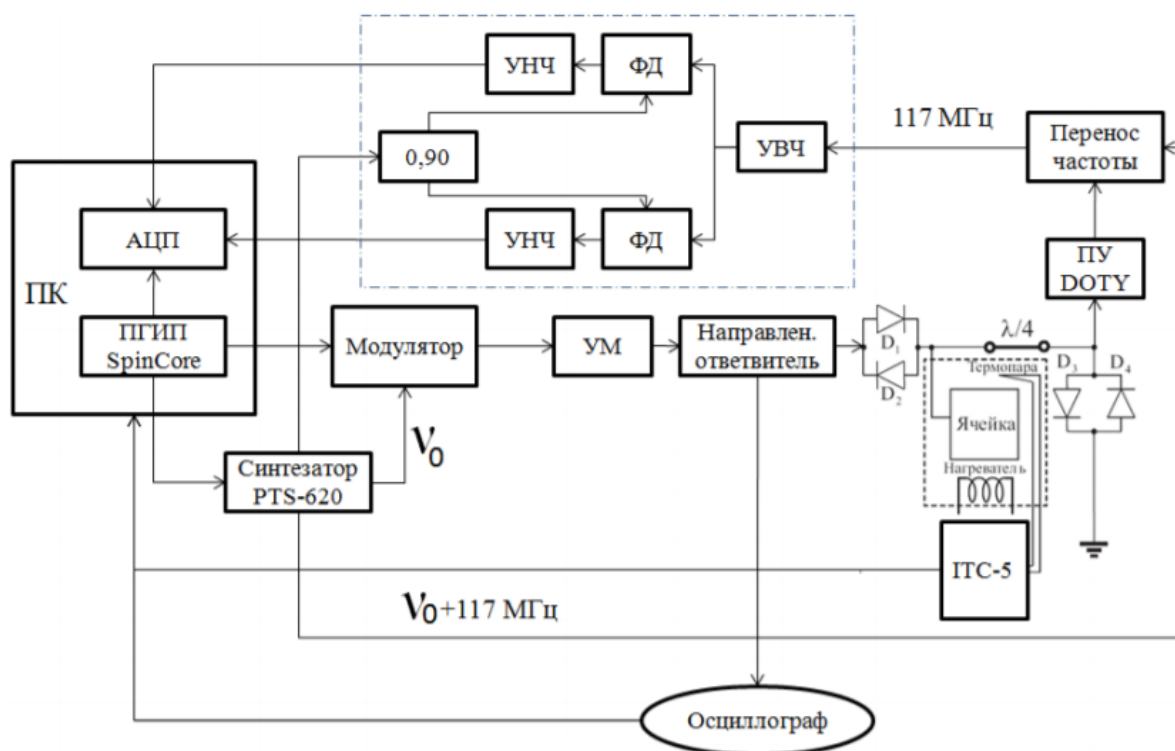


Рис. 3 Блок схема спектрометра

На рис. 3 приведена блок-схема одного канала двухканального спектрометра. Для генерации видеоимпульсов различной длительности и скважности используется специализированная PCI-плата, разработанная компанией «SpinCore». Импульсы с генератора видеоимпульсов и непрерывный синусоидальный сигнал с выхода синтезатора частоты PTS-D620 поступают на импульсный модулятор, в котором формируется радиоимпульс. Синтезатор частоты PTS-D620 на основе цифрового прямого синтеза частоты позволяет синтезировать частоты от 10 до 620 МГц и заданной фазой сигнала. Сформированные на выходе модулятора радиоимпульсы (амплитуда $\sim 0.2\text{В}$) поступают на широкополосный усилитель мощности (УМ). Мощные высокочастотные импульсы $\sim 100 - 200\text{В}$ с выхода усилителя мощности подаются на блок согласования и на два защитных встречных диода. Сигнал спиновой системы, возникающий в катушке резонансной ячейки, поступает на вход малошумящего предусилителя, имеющего коэффициент усиления $\sim 20\text{ дБ}$. Предусилитель и блок согласования находятся в непосредственной

близости от резонансной ячейки. Дальнейшее усиление сигнала ЯМР происходит в усилителе высокой частоты (УВЧ) на промежуточной частоте $\nu = 117$ МГц, либо на несущей частоте в режиме прямого усиления. Во избежание длительного времени восстановления радиочастотного тракта после мощного импульса во время действия радиочастотного импульса усилитель высокой частоты (УВЧ) блокируется. После необходимого усиления сигнал поступает на квадратурный фазовый детектор (ФД). Далее низкочастотный сигнал усиливается до 0.1-1 В и поступает на вход двухканального аналогово цифрового преобразователя, выполненного в виде PCI платы.

Ячейка ЯМР

Схема ячейки датчика представлена на рис. 4.

$$R_0 = R_1 + R_3 = 0,0105 \text{ Ом}$$

$$R_2 = 0,0112 \text{ Ом}$$

$$L_2 = 1,39 \cdot 10^{-8} \text{ Гн}$$

$$C_2 = 1,5 - 52 \text{ пФ}$$

$$C_1 = 40 \text{ пФ}$$

$$\omega = 64,5 \text{ мГц}$$

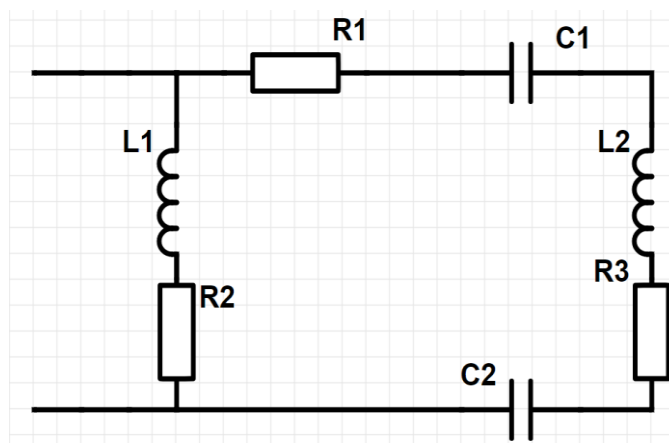


Рис. 4 Резонансный контур для генерации радиочастотного импульса и регистрации ССИ.

Ячейка (датчик) ЯМР является, по сути, центральной частью ЯМР оборудования. Ячейка ЯМР представляет из себя резонансный контур, функционал которого заключается в создании поперечного магнитного поля для возбуждения спиновой системы ядер и детектировании магнитной индукции, возникающей в результате прецессирующих ядерных магнитных моментов. Конденсатор C_1 , а также катушка L_1 отвечают за согласование контура с длинной линией датчика. Переменный конденсатор C_2 нужен для подстройки цепи на резонансную частоту. На вход цепи подается меандр, с мощностью 1 кВт и длительностью сигнала 2мс. Резонансный контур

работает на известной частоте прецессии исследуемого вещества ω . В целях увеличения добротности контура для соединения элементов цепи используется полый проводник с общим сопротивлением R_1 . Также для понижения активной части сопротивления исследуемой катушки L_2 , она изготавливается из серебра. Активные сопротивления катушек, а также сопротивление полого проводника, в связи с их небольшой величиной, измерены с помощью Вольт-Ампер метра.

Расчет оптимальных параметров контура

Прежде всего конденсатор C_1 должен быть способен согласовать контур с 50 Ом-ной линией датчика, отсюда его ёмкость составила $C_1 = 40$ пФ.

Далее найдём зависимость амплитуды импульса от индуктивности катушки. Изменение магнитного поля и, следовательно, потока магнитного поля, согласно закону Фарадея вызывает дополнительную ЭДС и дополнительный ток в колебательном контуре датчика.

$$|\varepsilon| = N \left| \frac{d\phi}{dt} \right|$$

где N – количество витков катушки, ϕ – поток магнитного поля через сечение соленоида. Так как длина катушки на порядок больше диаметра, можно воспользоваться выражениями для индуктивности соленоида и поля внутри него.

$$L = \mu_0 n^2 V \qquad B = \mu_0 n I$$

Мощность источника выделяется на активных элементах цепи, то есть на резисторах R_1 и R_2 равна:

$$P = |I|_1^2 R_1 + |I|_2^2 R_2$$

$$P = R_2 \left| \frac{I}{1 + \frac{R_1 + i\omega L_1}{R_2 + i\left(\omega L_2 - \frac{1}{\omega C_1} - \frac{1}{\omega C_2}\right)}} \right|^2 + R_1 \left| \frac{I}{1 + \frac{R_2 + i\left(\omega L_2 - \frac{1}{\omega C_1} - \frac{1}{\omega C_2}\right)}{R_1 + i\omega L_1}} \right|^2$$

Здесь введено переобозначение $R_1 = R_1 + R_3$.

Отсюда можно найти модуль полного тока в цепи:

$$|I|^2 = P / \left(\frac{R_2}{\left| 1 + \frac{R_2 + i\omega L_1}{R_1 + i(\omega L_2 - \frac{1}{\omega C_1} - \frac{1}{\omega C_2})} \right|^2} + \frac{R_1}{\left| 1 + \frac{R_1 + i(\omega L_2 - \frac{1}{\omega C_1} - \frac{1}{\omega C_2})}{R_2 + i\omega L_1} \right|^2} \right)$$

Зная общий ток, найдем модуль тока, и затем поле в катушке L_2 :

$$|I|_{L_2} = |I| / \left(\left| 1 + \frac{R_1 + i(\omega L_2 - \frac{1}{\omega C_1} - \frac{1}{\omega C_2})}{R_2 + i\omega L_1} \right| \right)$$

$$B = \mu_0 n |I| / \left(\left| 1 + \frac{R_1 + i(\omega L_2 - \frac{1}{\omega C_1} - \frac{1}{\omega C_2})}{R_2 + i\omega L_1} \right| \right)$$

Из зависимости поля от индуктивности несложно увидеть, что при увеличении значения индуктивности возрастает амплитуда импульса, которую способен обеспечить датчик.

Таким образом далее стоит вопрос о максимальном значении индуктивности, при котором с помощью изменения ёмкости конденсатора C_2 удастся настроить резонансную частоту таким образом, чтобы она совпадала с частотой прецессии исследуемого вещества, в нашем случае 64,5 мГц. Для ответа на этот вопрос запишем условие резонанса в контуре: мнимая часть общего сопротивления должна равняться нулю

$$\left(-\omega L_1 - \omega L_2 - \frac{1}{\omega C} \right) \left(R_1 R_2 + \frac{L_1}{C} - \omega^2 L_1 L_2 \right) + (R_1 + R_2) \left(\omega R_2 L_1 + \omega R_1 L_2 - \frac{R_1}{\omega C} \right) = 0$$

$$, \text{ где } C = \frac{C_1 C_2}{C_1 + C_2}.$$

Решая это уравнение относительно L_2 , можно увидеть, что это парабола, максимум которой находится в точке

$$L_m = \frac{\sqrt{L_1^4 \omega^4 - 4L_1^2 R_2^2 \omega^2 + R_1^4}}{2CL_1 \omega^2} = \frac{\sqrt{L_1^4 \omega^4 - 4L_1^2 R_2^2 \omega^2 + R_1^4}}{2 \frac{C_1 C_2}{C_1 + C_2} \cdot L_1 \omega^2}$$

Отсюда видно, что максимальное значение индуктивности соответствует минимальному значению ёмкости C_2 , которое составляет 1,5 пФ. Таким образом, оптимальное значение индуктивности составляет $L_2 = 1,1 * 10^{-6}$ Гн.

Заключение

В ходе работы было выяснена роль переменного, а также согласующего конденсаторов в контуре ячейки датчика. Сделаны выводы по поводу необходимых параметров катушки. Эти результаты успешно применимы на практике при включении данной катушки в цепь.

Замечания:

- Тот факт, что датчик является частью резонансного контура, снижает диапазон измерения полей, перекрываемый одним датчиком, а также ограничивает сверху рабочую частоту. Предлагается разделить датчик, фиксирующий ССИ и контур, генерирующий РЧ-импульс.

Список литературы

1. Эрнст Р., Боденхаузен Дж., Вокаун А. ЯМР в одном и двух измерениях. М.: Мир, 1990
2. АВТОМЕТРИЯ. 2015. Т. 51, № 1. Импульсный магнитометр на основе ядерного магнитного резонанса Г.В. Карпов.
3. Анализ спектров ЯМР высокого разрешения к.х.н., н.с. В. В. Новиков 2009
4. Спектроскопия ЯМР в исследованиях электронных и магнитных свойств сильно коррелированных систем Геращенко А.П.