

## ФИЗИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ В ЭЛЕКТРОННЫХ ПРИБОРАХ

УДК 538.94

### СТРУКТУРА ЛИНИИ ЯДЕРНОГО МАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА В МАЛОГАБАРИТНОМ СПЕКТРОМЕТРЕ

© 2021 г. В. В. Давыдов<sup>a, b, \*</sup>, В. И. Дудкин<sup>c</sup>, Н. С. Мязин<sup>a</sup>, Д. И. Николаев<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,  
ул. Политехническая, 29, Санкт-Петербург, 195251 Российская Федерация

<sup>b</sup>Всероссийский научно-исследовательский институт фитопатологии,  
р.п. Большие Вяземы Московской обл., 143050 Российская Федерация

<sup>c</sup>Санкт-Петербургский государственный университет телекоммуникаций им. проф. М.А. Бонч-Бруевича,  
просп. Большевиков, 22, Санкт-Петербург, 193232 Российская Федерация

\*E-mail: Davydov\_vadim66@mail.ru

Поступила в редакцию 08.04.2019 г.

После доработки 24.02.2020 г.

Принята к публикации 06.03.2020 г.

Исследованы особенности формирования линии ядерного магнитного резонанса, регистрируемого с использованием модуляционной методики в слабом магнитном поле ( $B < 0.1$  Тл) от малого объема конденсированной среды. Предложена новая модель описания структуры линии регистрируемого сигнала ядерного магнитного резонанса в слабом магнитном поле. Полученные результаты показали, что установленные нами соотношения для описания структуры линии сигнала ядерного магнитного резонанса, регистрируемого в слабом поле, позволяют учитывать при ее формировании вклады от сигналов поглощения и дисперсии. Проведено сопоставление результатов расчета и экспериментов.

DOI: 10.31857/S0033849421020042

#### ВВЕДЕНИЕ

Проводимые в настоящее время исследования в радиотехнике и электронике и реализуемые на их основе разработки в большинстве случаев направлены на решение прикладных задач. Одной из актуальных среди них является разработка быстрых и надежных методов экспресс-контроля (ЭК) состояния конденсированных сред [1–5]. Результаты ЭК состояния среды в месте взятия пробы наиболее востребованы перед проведением различных физических и химических экспериментов (особенно после длительного хранения среды, перемены емкости или транспортировки), во время экологического мониторинга труднодоступных мест водных объектов и их прибрежных зон. Кроме того, они востребованы в случаях контроля качества различной продукции как на стадиях ее производства, так и перед потреблением (например, бензин, моторные масла и пр.) и во многих других направлениях [3–10]. Накладываемые в соответствии с мировыми стандартами ограничения на вес измерительного прибора для проведения ЭК конденсированных сред существенно затрудняют использование различных методов измерения, а также создают дополнительные проблемы при разработке самих приборов.

Одним из наиболее перспективных решений задачи ЭК состояния конденсированных сред являются разработки приборов с использованием явления ядерного магнитного резонанса [4–12].

Проведенные нами исследования, а также опыт эксплуатации приборов, предназначенных для ЭК параметров конденсированных сред, показали, что другие методы, используемые для решения данных задач ЭК, имеют по сравнению с ЯМР ряд существенных недостатков [1–3, 6, 9]. Они менее информативны по числу измеряемых параметров среды и предназначены в основном для тестирования только небольшого числа сред (например, вода, жиры или моторное масло). Кроме того, проведенные исследования методом ЯМР не вносят необратимых изменений в физическую структуру и химический состав пробы среды по сравнению с другими методами. Это позволяет получать подтверждения результатов исследований методом ЯМР во время проведения ЭК состояния конденсированной среды в месте взятия пробы на стационарных спектрометрах высокого разрешения (ЯМР, ЭПР, рентгеновских и т.д.) в специализированных лабораториях. Необходимо также отметить, что конденсированную среду из пробы после ее исследований методом ЯМР можно использовать по непосредствен-

ному назначению [1, 4–6, 9, 10]. Поэтому в настоящее время расширению числа функциональных задач, которые можно решать при ЭК состояния среды в месте взятия пробы, используя явление ЯМР, уделяется повышенное внимание.

При проведении ЭК состояния конденсированной среды методом ЯМР сигнал от нее регистрируется с использованием модуляционной методики в слабом магнитном поле — значение индукции менее 0.1 Тл [2, 6, 7]. Другие способы регистрации сигнала ЯМР в слабом магнитном поле в малогабаритной магнитной системе прибора (расстояние между полюсами не превышает 15 мм, вес конструкции магнитной системы не должны быть больше 4 кг) не позволяют обеспечить необходимую погрешность измерения (не более 1%) для получения достоверных результатов при проведении исследований в экспресс-режиме [4, 6, 7, 9].

Одним из недостатков использования модуляционной методики при ЭК состояния конденсированных сред является отсутствие теоретической модели, которая позволяет воспроизводить форму линии регистрируемого сигнала ЯМР в слабом поле и определять ее структуру. Полученные ранее нами экспериментальные результаты показали, что это существенно ограничивает возможность ЭК состояния конденсированных сред методом ЯМР в месте взятия пробы. Целью данной работы является разработка теоретической модели, позволяющей воспроизводить форму линии регистрируемого сигнала ЯМР в условиях модуляции слабого магнитного поля в межполюсном пространстве малогабаритного ЯМР-спектрометра.

### 1. УРАВНЕНИЯ ДВИЖЕНИЯ ВЕКТОРА ЯДЕРНОЙ НАМАГНИЧЕННОСТИ В УСЛОВИЯХ МОДУЛЯЦИИ СЛАБОГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ

Движение продольных и поперечных компонент вектора намагниченности конденсированной среды в катушке регистрации ЯМР-спектрометра описывается уравнениями Блоха [13–16]:

$$\begin{aligned} dM_x/dt + M_x/T_2 + \Delta\omega M_y &= 0, \\ dM_y/dt + M_y/T_2 - \Delta\omega M_x + \gamma H_1 M_z &= 0, \\ dM_z/dt + M_z/T_1 - \chi_0 H_0/T_1 - \gamma H_1 M_y &= 0, \end{aligned} \quad (1)$$

где  $\Delta\omega = \omega_0 - \omega_{\text{ЯМР}}$  — расстройка частоты контура регистрации сигнала ЯМР  $\omega_{\text{ЯМР}}$  от частоты прецессии намагниченности в поле  $H_0$  ( $\omega_0 = \gamma H_0$ ),  $\chi_0$  — статическая ядерная магнитная восприимчивость,  $T_1$  и  $T_2$  — время продольной и поперечной релаксации жидкой среды соответственно,  $t$  — время.

В работах [15–19] представлены аналитические решения (1), полученные с использованием

замены переменных в  $M_x$  и  $M_y$  компонентах вектора намагниченности и переходом во вращающуюся систему координат с частотой  $\omega_{\text{ЯМР}}$ . Данные решения получены для различных условий (быстрое прохождение через резонанс, быстрое адиабатическое прохождение через резонанс и т.д.), в которых происходит регистрация сигнала ЯМР. В ЯМР-спектрометрах при исследовании конденсированных сред, находящихся в стационарном состоянии, в большинстве случаев используется линейное изменение магнитного поля. Для данного изменения величины поля  $H_0$  в новых компонентах вектора намагниченности  $v(t)$  и  $u(t)$  (поглощение и дисперсия) из решения (1) при быстром адиабатическом прохождении через резонанс были получены следующие соотношения [15–19]:

$$v(t) = v_0 \exp(-t/T_2^*) \cos(at^2/2), \quad (2)$$

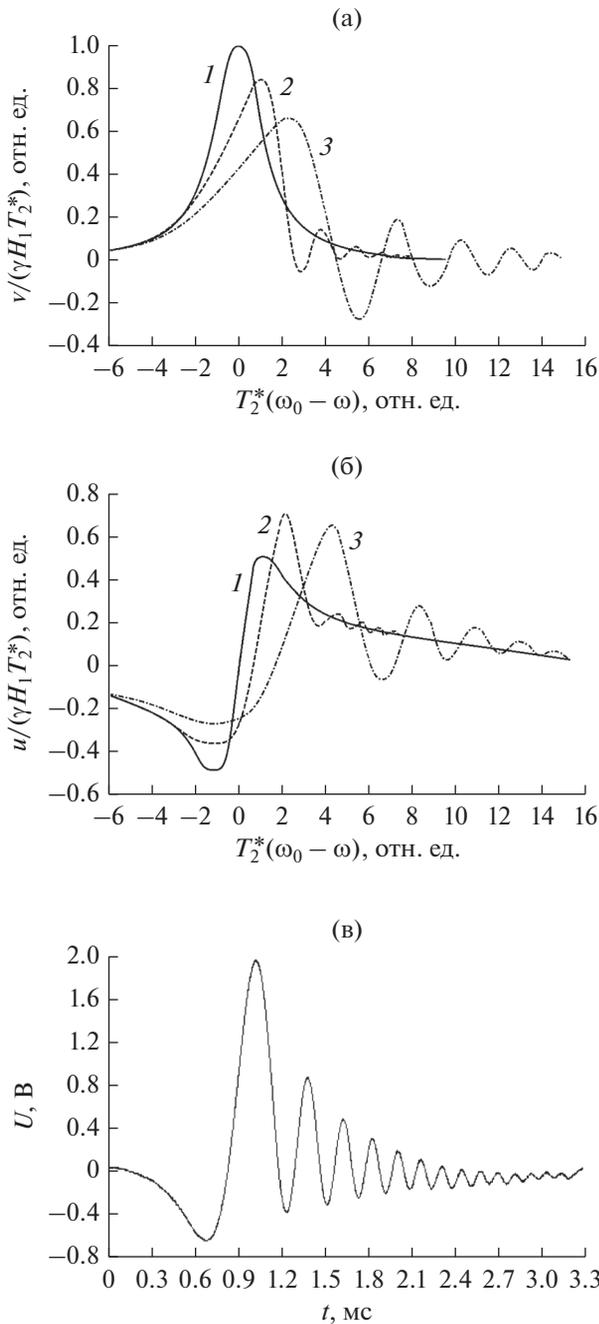
$$u(t) = u_0 \exp(-t/T_2^*) \sin(at^2/2), \quad (3)$$

где  $a = \gamma \frac{dH_z}{dt} = d\left(\frac{\Delta\omega}{dt}\right)$  — скорость изменения рас-

стройки магнитного поля,  $T_2^*$  — эффективное время поперечной релаксации,  $v_0$  и  $u_0$  — максимальное значение амплитуд регистрируемого сигнала поглощения и дисперсии ЯМР соответственно.

В зависимости от решаемых задач при исследовании конденсированных сред в ЯМР-спектрометрах регистрируется сигнал поглощения или дисперсии, форма линии которого описывается с помощью уравнений (2) или (3) соответственно. В работах [15–19] для различных сред, находящихся в стационарном состоянии, приведены примеры зарегистрированных сигналов ЯМР (поглощения и дисперсии) и их расчетные зависимости, полученные с помощью (2) и (3), а также показано соответствие теории эксперименту. При сравнении сигналов ЯМР, зарегистрированных с использованием модуляционной методики, от воды, находящейся как в стационарном, так и в текущем состоянии, с расчетами, выполненными с помощью (2) и (3) при линейном изменении  $H_0$ , наблюдается их внешнее сходство. На рис. 1 в качестве примера представлены данные зависимости при  $T = 19.1^\circ\text{C}$ .

Анализ представленных на рис. 1 зависимостей показывает, что форма линии сигналов ЯМР при определенных параметрах модуляции поля  $H_0$  представляет собой набор пиков (виглей) [17, 19–21], амплитуды которых со временем затухают по экспоненте. По этой причине в работах [1, 19–22] для исследования различных сред, находящихся как в стационарном, так и в текущем состоянии, с помощью сигналов ЯМР, регистриру-



**Рис. 1.** Расчет сигналов ЯМР от воды с использованием формул (2) (а) и (3) (б) при  $a^{1/2}T_2^* = 0$  (1), 1 (2) и 2 (3), а также зарегистрированный сигнал ЯМР в слабом поле ( $B_0 = 0.074$  Тл) с использованием модуляционной методики (в).

емых с использованием модуляционной методики, был предложен способ определения времени поперечной релаксации  $T_2$  по спаду огибающей, которая аппроксимируется зависимостью  $\exp(-t/T_2^*)$ . В этом случае в соответствии с теорией, рассмот-

ренной в [16–18], значения  $T_2$  определяются из следующего соотношения:

$$\frac{1}{T_2} = \frac{1}{T_2^*} + \frac{\gamma \Delta H}{\pi}, \quad (4)$$

где  $\Delta H$  – неоднородность магнитного поля в зоне размещения катушки регистрации сигнала ЯМР.

В ЯМР-спектрометрах и расходомерах-релаксо-метрах, подробно рассмотренных в [1, 11, 12, 19, 21], контроль состояния текущей среды осуществлялся по измеренным константам релаксации  $T_2$  (с использованием (4)) и  $T_1$  (методом Суриана) [21]. Воспроизводить форму линии регистрируемого сигнала ЯМР в данных приборах нет необходимости, так как основным параметром, который они должны измерять, является расход жидкости  $q$ . Но по причине того, что полученные результаты определения  $T_2$  с использованием (4) совпадали в пределах погрешности измерения со значениями  $T_2$ , полученными на других приборах, авторами [17–21] был сделан вывод – в случае необходимости для описания формы линии регистрируемого с использованием модуляционной методики сигнала ЯМР можно применять (2) и (3). Дальнейшие исследования в этом направлении не проводили.

В слабом магнитном поле (значение индукция  $B_0 < 0.1$  Тл) для обеспечения регистрации сигнала ЯМР от различных ядер, обладающих магнитным моментом, содержащихся в исследуемой среде с использованием модуляционной методики значение поля генерации  $H_1$  автодиноного детектора устанавливается по максимуму отношения сигнал/шум (С/Ш) [2, 4, 6, 7]. В этом случае регистрируемый автодиномным детектором сигнал ЯМР от конденсированной среды является суммой сигналов поглощения и дисперсии. Кроме того, нами было установлено, что в малогабаритном ЯМР-спектрометре для регистрации сигнала ЯМР с отношением С/Ш  $> 1.3$  между параметрами магнитных полей должны выполняться следующие соотношения:

$$\gamma H_m > 10 \Delta f_{\text{ЯМР}}, \quad (5)$$

$$T_m > 5T_2, \quad (6)$$

где  $H_m$  – амплитуда поля модуляции,  $T_m$  – период модуляции поля  $H_0$ . Естественная ширина линии  $\Delta f_{\text{ЯМР}}$  сигнала ЯМР определяется следующим образом [1, 15–20]:

$$\Delta f_{\text{ЯМР}} = 1/T_2. \quad (7)$$

В случае невыполнения хотя бы одного из соотношений (5) или (6) регистрация сигнала ЯМР будет крайне затруднена. Проведенные нами эксперименты показали, что ни при каких значениях  $H_1$ ,  $H_m$  и  $f_m$ , удовлетворяющих соотношениям (5) и (6), обеспечить при регистрации сигнала ЯМР

условие быстрого адиабатического прохождения через резонанс, при котором были получены (2) и (3), невозможно. При регистрации сигнала ЯМР в малогабаритном ЯМР-спектрометре можно реализовать только быстрое прохождение через резонанс. Для значений параметров магнитных полей  $H_1$ ,  $H_m$  и  $f_m$ , соответствующих данному режиму, и экспериментально измеренных значений времен релаксации  $T_1$  и  $T_2$  различных сред нами с использованием (2) и (3) были выполнены расчеты формы линии сигналов ЯМР. Полученные результаты показали, что ни при каких значениях  $H_1$ ,  $H_m$  и  $f_m$ , удовлетворяющих соотношениям (5) и (6), невозможно получить при расчете форму линии сигнала ЯМР, соответствующую экспериментальным исследованиям конденсированной среды в слабом магнитном поле. Поэтому для решения данной задачи на основании результатов, проведенных ранее экспериментов [2, 4, 6, 7, 11, 12] предлагаем следующее. В уравнениях Блоха (1), которые описывают движение вектора намагниченности, необходимо учесть особенности регистрации сигнала ЯМР с использованием модуляционной методики в слабом магнитном поле с помощью новых коэффициентов. При использовании модуляционной методики магнитное поле  $H$  между полюсами магнитов изменяется в соответствии со следующим соотношением:

$$H = H_0 + H_m \sin(\omega_m t), \quad (8)$$

где  $H_0$  – постоянное магнитное поле,  $H_m$  – поле катушки модуляции,  $\omega_m$  – частота модуляции.

В этом случае изменение расстройки частоты поля от резонанса  $\Delta\omega$  в системе уравнений Блоха (1) будет иметь следующую зависимость:

$$\Delta\omega = \gamma H_0 + \gamma H_m \sin(\omega_m t) - \omega_{\text{ЯМР}}. \quad (9)$$

Одной из особенностей регистрации сигнала ЯМР в слабом магнитном поле с использованием модуляционной методики является то, что она должна осуществляться только на частоте резонанса ( $\omega_{\text{ЯМР}} = \omega_0 = \gamma H_0$ ). Для большинства исследуемых сред в случае отстройки частоты регистрации сигнала ЯМР  $\omega_{\text{ЯМР}}$  от частоты резонанса  $\omega_0$  отношение С/Ш может стать меньше 1.3. При таком значении отношения С/Ш работа схемы накопления сигнала ЯМР в ЯМР-спектрометрах и магнетометрах становится неэффективной [2, 4, 10]. Это не позволяет проводить различные измерения с погрешностью не более 1%. С учетом данного обстоятельства соотношение (9) преобразуется в следующую функцию:

$$\Delta\omega = \gamma H_m \sin(\omega_m t). \quad (10)$$

Выражение (10) является новым коэффициентом для уравнений Блоха (1), значения величин  $H_m$ ,  $\omega_m$  в котором определяется с учетом соотношений (5)–(7).

Еще один новый коэффициент, который мы вводим в уравнения Блоха (1), связан с необходимостью учета в намагниченности исследуемой среды  $M$  модуляции слабого магнитного поля  $H_0$ . Новое соотношение для  $M$ , которое подставляется в (1), необходимо записать в следующем виде:

$$M = \chi_0(H_0 + H_m \sin(\omega_m t)), \quad (11)$$

где  $\chi_0 = NI(I+1)\mu^2/3kT$  – статистическая ядерная магнитная восприимчивость,  $N$  – концентрация парамагнитных частиц;  $\mu$  – магнитный момент частицы;  $k$  – постоянная Больцмана;  $T$  – абсолютная температура.

После подстановки новых коэффициентов (10) и (11) в уравнения Блоха (1), они принимают следующий вид:

$$\begin{aligned} du(t)/dt + u(t)/T_2 + \gamma H_m \sin(\omega_m t)v(t) &= 0, \\ dv(t)/dt + v(t)/T_2 - \\ - \gamma H_m \sin(\omega_m t)u(t) + \gamma H_1 M_z(t) &= 0, \\ dM_z(t)/dt + M_z(t)/T_1 - M/T_1 - \gamma H_1 v(t) &= 0. \end{aligned} \quad (12)$$

Система уравнений (12) решается относительно компонент  $v(t)$ ,  $u(t)$  и  $M_z(t)$  с учетом начальных условий  $M_z(0) = \chi_0 H_0$ ,  $v(0) = 0$ ,  $u(0) = 0$ .

На рис. 2 представлены сигналы поглощения  $v(t)$  и дисперсии  $u(t)$ , полученные при численном решении уравнений (12) с использованием пакета Mathematica при значениях магнитных полей и констант релаксации  $T_1$  и  $T_2$ , соответствующих эксперименту ( $T_1 = 1.47$  с;  $T_2 = 1.36$  мс;  $f_m = 10$  Гц;  $B_m = 0.52$  мТл;  $N = 6.6 \times 10^{29}$  м<sup>-3</sup>;  $I = 1/2$ ;  $\mu = 1.4 \times 10^{-26}$  Дж/Тл;  $k = 1.38 \times 10^{-23}$  Дж/К;  $B_0 = 74$  мТл;  $T = 291.8$  К).

На рис. 3 представлена форма линии сигнала ЯМР  $G(t)$ , соответствующая сумме  $v(t)$  и  $u(t)$ , так как при его регистрации в слабом магнитном поле параметры автодинного детектора и модулирующего магнитного поля настраиваются на максимум С/Ш и в его формировании принимают участие сигналы поглощения и дисперсии.

Анализ полученных зависимостей на рис. 2 и 3 показывает, что они отображают характер физических процессов, соответствующих эксперименту. Но проведенные нами дополнительные расчеты показали, что в предложенном выше описании формы линии  $G(t)$  сигнала ЯМР, который рассматривался рядом авторов, при его регистрации с использованием других методик при увеличении  $t$  через каждые  $T_m/2$  происходят изменения фазы в форме линии  $G(t)$  на  $180^\circ$  и последовательное уменьшение амплитуды пиков. В эксперименте через каждые полпериода  $T_m/2$  поля модуляции  $H_0$  регистрируется один и тот же сигнал ЯМР. Данное несоответствие теории и эксперимента объясняется тем, что автодинный детектор является интегральным измерительным устройством

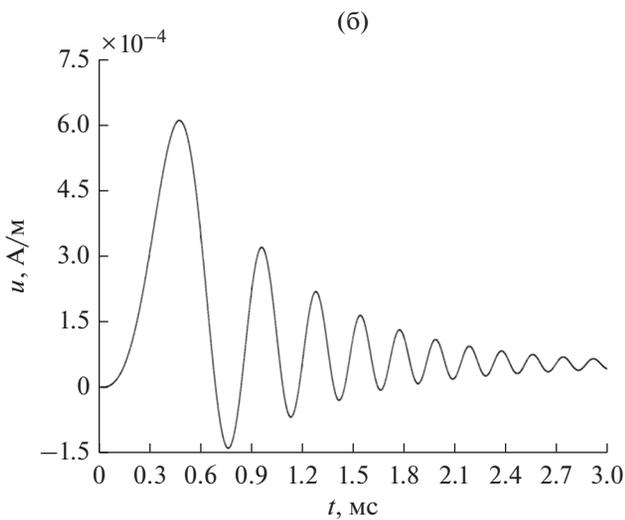
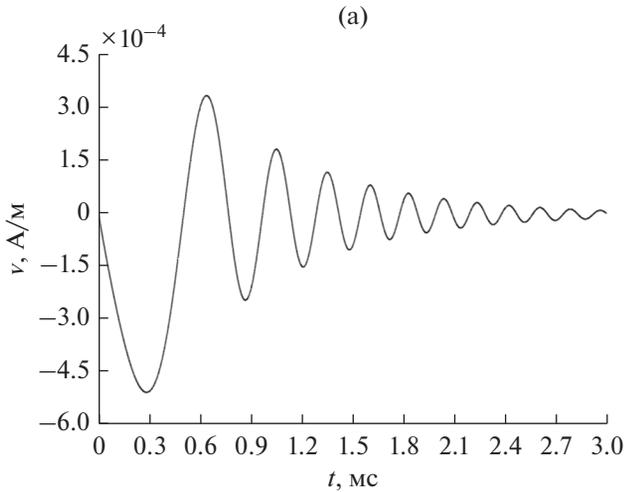


Рис. 2. Расчетные формы линии от воды сигналов поглощения (а) и дисперсии (б).

(регистрируемая амплитуда сигнала ЯМР пропорциональна сумме квадратов амплитуд сигналов  $v(t)$  и  $u(t)$ ). Поэтому форму линии  $G(t)$  регистрируемого сигнала ЯМР в слабом магнитном поле мы предлагаем описывать следующим соотношением:

$$G(t) = F(t) \left( \frac{A}{A+B} v^2(t) + \frac{B}{A+B} u^2(t) \right)^{1/2}, \quad (13)$$

где  $v(t)$ ,  $u(t)$  – сигналы поглощения и дисперсии,  $A$  и  $B$  – коэффициенты, определяющие вклад в регистрируемый сигнал ЯМР от сигналов поглощения и дисперсии,  $F(t)$  – коэффициент, учитывающий изменения фазы.

## 2. РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЙ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 4 представлены результаты сравнения формы пиков (виглей) регистрируемого сигнала

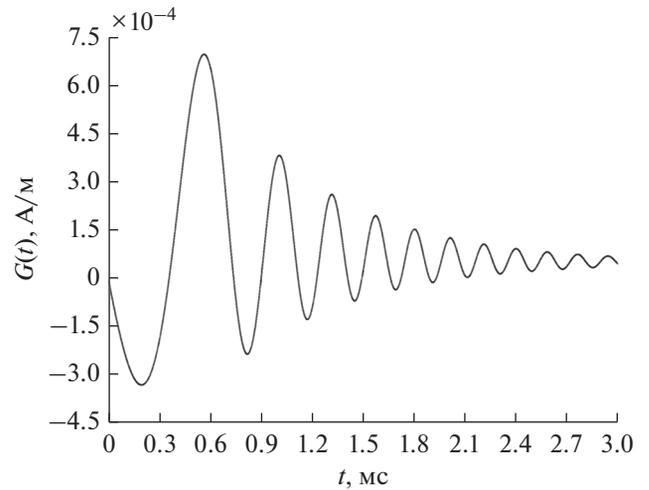


Рис. 3. Расчетная форма линии сигнала ЯМР от воды при одинаковом вкладе в ее формирование сигналов поглощения и дисперсии.

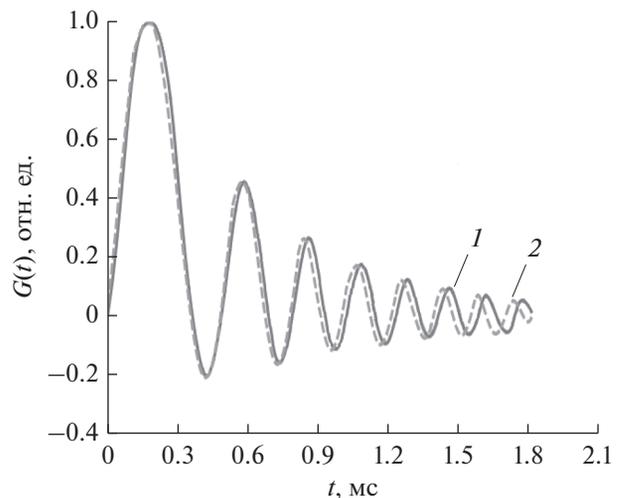


Рис. 4. Форма линии сигнала ЯМР от водопроводной воды: 1 – эксперимент, 2 – расчет.

ЯМР с расчетом их формы в линии, которые выполнены с использованием (13). При проведении расчета в (13) учтены особенности регистрации сигнала ЯМР автодинным детектором. В качестве конденсированной среды использовалась водопроводная вода при  $T = 19.4^\circ\text{C}$ . Для расчета  $G(t)$  численные значения сигналов поглощения и дисперсии  $v(t)$  и  $u(t)$  были получены из решения системы уравнений (12) при значениях магнитных полей и констант релаксации  $T_1$  и  $T_2$ , которые соответствуют эксперименту.

Анализ представленных на рис. 4 зависимостей показывает, что предложенное в данной работе соотношение (13), в котором используются решения уравнений Блоха (12) с новыми коэффи-

циентами, позволяет воспроизводить форму линии регистрируемого сигнала ЯМР с помощью модуляционной методики с погрешностью не более 3% (до пятого пика). Несовпадение теоретического расчета формы линии  $G(t)$  с экспериментом на начальном участке сигнала ЯМР (от  $t = 0$  до начала первого пика при  $G(t) = 0$ ), объясняется тем, что предложенная нами теория описания движения компонент вектора намагниченности в слабом поле не может учесть все нестационарные процессы, которые возникают в работе схемы автодинного детектора (при его настройке, на начальном этапе регистрации сигнала ЯМР и т.д.).

Необходимо также отметить, что полученный нами результат впервые предоставил возможность определять вклад сигналов поглощения и дисперсии в регистрируемый сигнал ЯМР от конденсированной среды с использованием модуляционной методики в слабом магнитном поле, находящейся как в стационарном, так и в текущем состоянии.

Кроме того, предложенная нами модель позволила разработать новую методику описания формы линии регистрируемого сигнала ЯМР от смеси, образованной несколькими средами, которые не вступили между собой в химическую реакцию, а образовали конгломерат (например, смесь двух бензинов или бензин и керосин и т.д.). В этом случае регистрируемый сигнал ЯМР от такой смеси в силу особенностей работы автодинного детектора (измерительное устройство интегрального типа) представляет собой сумму сигналов ЯМР от каждой из ее компонент. Используя предложенный нами метод, можно провести разделение регистрируемого сигнала ЯМР от смеси на сигналы от образующих ее компонент. Тогда форму линии регистрируемого сигнала ЯМР от смеси  $G(t)$  можно представить следующим соотношением:

$$G(t) = F_m(t) \sqrt{\frac{A_m}{A_m + B_m} v_m^2(t) + \frac{B_m}{A_m + B_m} u_m^2(t)} = \quad (14)$$

$$= \sum_{i=1}^k F_i(t) V_i N_i \sqrt{\frac{A_i}{A_i + B_i} v_i^2(t) + \frac{B_i}{A_i + B_i} u_i^2(t)}, \quad (15)$$

$$\sum_{i=1}^k V_i = V_r,$$

где  $A$ ,  $B$  — коэффициенты, определяющие вклад сигналов поглощения и дисперсии в сигнал ЯМР,  $F_i(t)$  — изменение фазы ( $m$  — смесь,  $i$  — компоненты смеси),  $N_i$  — число протонов в единицу объема для сред, образующих смесь,  $V_i$  — объем каждой из компонент в смеси,  $V_r$  — объем катушки регистрации малогабаритного ЯМР-спектрометра.

Полученные выражения (14) и (15) позволили впервые определять состав данной смеси и концентрацию в ней компонент при ЭК ее состояния в месте взятия пробы методом ЯМР. Особенность

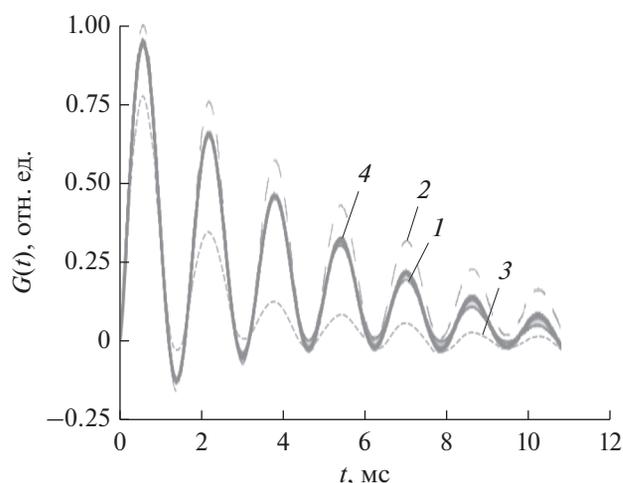


Рис. 5. Формы линий сигналов ЯМР от смеси бензинов АИ-95 и А-76 в пропорции 75 : 25% (1, 4) и от чистых бензинов АИ-95 (2) и А-76 (3), полученные экспериментально (1) и в результате расчета (2–4).

в использовании данного метода заключается в том, что все сигналы ЯМР, как от смеси, так и от ее компонент формируются в одних и тех же полях  $H_0$ ,  $H_1$  и  $H_m$ . Поэтому полученные решения для  $v(t)$  и  $u(t)$  из уравнений Блоха (12) как для смеси, так и для ее компонент, будут отличаться между собой только по константам релаксации  $T_1$  и  $T_2$ , при значениях которых решалось уравнение (12). Для исследуемой смеси  $T_1$  и  $T_2$  определяются по регистрируемому от нее сигналу ЯМР [4, 6, 7, 10]. Также известны значения констант релаксации  $T_1$  и  $T_2$  одной из компонент смеси (за нее выдается сама смесь, например, за бензин АИ-95). Константы релаксации остальных компонент смеси, а также их объемы, содержащиеся в исследуемой среде, подбираются так, чтобы выполнялись соотношения (14) и (15). Температура исследуемой смеси известна. После выполнения данных соотношений по установленным значениям  $T_1$  и  $T_2$  определяются компоненты смеси, а по  $V_i$  — их относительные концентрации.

На рис. 5 представлены результаты сравнения формы пиков (виглей) зарегистрированного сигнала ЯМР от смеси бензинов АИ-95 и А-76 в пропорции 75 к 25% с расчетами формы пиков в линиях сигналов ЯМР от чистых бензинов АИ-95 и А-76, а также их смеси в отмеченной выше пропорции, выполненными с использованием (14) с учетом особенностей регистрации сигнала ЯМР автодинным детектором при их построении.

Анализ полученных результатов на рис. 5 показывает, что расчетная форма линии сигнала ЯМР от смеси двух бензинов совпадает с экспериментальной зависимостью с погрешностью не бо-

лее 3% (до пятого пика). Кроме того, рассчитанные с использованием (14) и (15) относительные концентрации бензинов АИ-95 и А-76 в исследуемых смесях совпали в пределах погрешности измерений с массовыми пропорциями, которые были использованы для приготовления из них данных смесей перед экспериментом. Это подтверждает достоверность предложенного нами метода.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Полученные результаты показывают, что предложенная нами теоретическая модель с использованием уравнений Блоха во вращающейся системе координат с новыми коэффициентами позволяет впервые воспроизводить структуру линии регистрируемого сигнала ЯМР в слабом магнитном поле с использованием модуляционной методики.

Предложенный нами новый метод, разработанный на основе данной теоретической модели, позволяет получать информацию о составе исследуемой среды в месте взятия пробы при проведении экспресс-контроля малогабаритным ЯМР-спектрометром и принимать обоснованное решение о дальнейшем ее использовании без дополнительных исследований пробы в стационарной лаборатории. Ранее в [4, 5, 7, 10] результаты исследований, полученные при ЭК конденсированной среды в месте взятия пробы, давали только информацию о наличии в ней отклонения от стандартного состояния и требовались дополнительные исследования в стационарной лаборатории для принятия достоверного решения по дальнейшему использованию среды.

Необходимо также отметить, что предложенная теоретическая модель для описания структуры линии позволяет с использованием ЯМР-спектрометров (с модуляционной методикой регистрации сигнала ЯМР) более эффективно проводить фундаментальные научные исследования изменения вкладов сигналов поглощения и дисперсии в структуру регистрируемого сигнала ЯМР от конденсированной среды, находящейся как в стационарном, так и текущем состоянии при изменении ее времен продольной  $T_1$  и поперечной  $T_2$  релаксации. Эти исследования позволяют получить дополнительную информация о релаксационных механизмах в среде, а также решить сложнейшую задачу, связанную с разработкой новых

жидких сред с заданными значениями  $T_1$  и  $T_2$  для ЯМР-магнитометров на текущей жидкости [22].

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Дудкин В.И., Пахомов Л.Н. Квантовая электроника. СПб.: Изд-во Политех. ун-та, 2012.
2. Давыдов В.В., Мязин Н.С., Давыдова Т.И. // Дефектоскопия. 2017. № 7. С. 52–61.
3. Авербах В.С., Лебедев А.В., Манаков С.А., Бредихин В.В. // Изв. вузов. Радиофизика. 2013. Т. 56. № 3. С. 149.
4. Karshev A.Yu., Vologdin V.A., Davydov V.V. // J. Phys.: Conf. Ser. 2015. V. 643. № 1. P. 012108.
5. Васильев Н.С., Поляк Ин.С., Поляк Иг.С. и др. // ПТЭ. 2015. № 1. С. 181.
6. Давыдов В.В., Дудкин В.И., Карсеев А.Ю., Вологдин В.А. // Журн. прикл. спектроскопии. 2015. Т. 82. № 6. С. 898.
7. Давыдов В.В., Величко Е.Н., Дудкин В.И., Карсеев А.Ю. // ПТЭ. 2015. № 2. С. 72.
8. Вознесенский С.С., Гамаюнов Е.П., Попик А.Ю., Коротенко А.А. // ПТЭ. 2014. № 3. С. 97.
9. Neronov Y.I., Karshenboim S.G. // Phys. Lett. A. 2003. V. 318. № 1–2. P. 126.
10. Filippov A.V., Rudakova M.A., Skirda V.D. // Magnetic Resonance in Chemistry. 2012. V. 50. № 2. P. 114.
11. Давыдов В.В., Семенов В.В. // РЭ. 1999. Т. 44. № 12. С. 1528.
12. Давыдов В.В., Дудкин В.И., Мязин Н.С. // РЭ. 2016. Т. 61. № 10. С. 1026.
13. Bloch F. // Phys. Rev. 1946. V. 70. № 7. P. 460.
14. Bloch F., Hansen W.W., Packard F. // Phys. Rev. 1946. V. 70. № 7. P. 474.
15. Абрагам А. Ядерный магнетизм. М.: Изд-во иностр. лит., 1963.
16. Леше А. Ядерная индукция. М.: Изд-во иностр. лит., 1963.
17. Бородин П.М., Володичев М.И., Москалев В.В., Морозов А.А. Ядерный магнитный резонанс. Л.: Изд-во ЛГУ, 1982.
18. Чижик В.И. Ядерная магнитная релаксация. Л.: ЛГУ, 1991.
19. Жерновой А.И. Ядерно-магнитные расходомеры. Л.: Машиностроение, 1985.
20. Жерновой А.И. // Изв. вузов. Физика. 2008. Т. 51. № 10. С. 84.
21. Жерновой А.И., Латышев Г.Д. Ядерный магнитный резонанс в проточной жидкости. М.: Атомиздат, 1964.
22. Давыдов В.В., Дудкин В.И., Карсеев А.Ю. // ЖТФ. 2015. Т. 85. № 3. С. 138.