

## ОРИГИНАЛЬНЫЕ СТАТЬИ

УДК 512.942 + 539.12; 539.21; 530.15 (043.5)

© В. И. Тарханов

## ВЕКТОРНЫЕ НОСИТЕЛИ ИНФОРМАЦИИ В НЕОДНОРОДНО УШИРЕННОЙ ДВУХУРОВНЕВОЙ ЯМР-СИСТЕМЕ

Для описания массивов информации, формируемых при резонансном взаимодействии импульсов радиочастотного магнитного поля с неоднородно уширенной двухуровневой ядерной спиновой системой, предлагается использовать динамический подход в сочетании с математической оболочкой соответствующей геометрической алгебры Клиффорда. Это позволяет ввести понятие векторных носителей информации и рассматривать эволюцию спиновой системы одновременно в четырех различных ракурсах, связанных между собой формализмом параметров Кэли—Клейна. Понятие когерентности обобщается с учетом различий в пространственной ориентации и в собственных частотах резонанса носителей. Показано, что информация о параметрах импульсов возбуждающей последовательности, вводимая в спиновую систему, многократно резервируется и далеко не всегда оказывается доступной для считывания. Описанный подход позволяет рассчитывать все потоки информации, формируемые в произвольной неоднородно уширенной двухуровневой системе в условиях произвольного многоимпульсного эксперимента, а также необходимые и достаточные условия их вывода при заданном способе детектирования.

## ВВЕДЕНИЕ

Резонансное взаимодействие импульсного когерентного электромагнитного излучения с веществом лежит в основе многих процессов переноса и преобразования информации, используемых как в системах связи, так и в научно-исследовательских информационно-измерительных комплексах. Особый интерес представляют среды, в которых релаксация индуцируемых излучением колебательных, вращательных или волновых процессов происходит достаточно медленно. Они могут быть использованы для промежуточного хранения информации о параметрах прикладываемого импульсного излучения с целью ее дальнейшего преобразования или детектирования. Способность хранить информацию позволяет говорить о наличии в таких средах эффектов памяти.

Нами проведен анализ процессов формирования и преобразования массивов информации при записи, хранении и считывании многомерных сигналов в устройствах памяти на основе нестационарных когерентных явлений в неоднородно уширенной 2-уровневой системе. В качестве модели использован эффект магнитного резонанса на ядрах со спином  $1/2$ , находящихся в пространственно неоднородном внешнем статическом магнитном поле. Такая модель типична для многих задач спектроскопии, томографии и функциональной электроники радиочастотного диапазона.

Ограничение областью магнитного резонанса является непринципиальным и имеет в основном методологический характер. Другие механизмы

реализации аналогичных эффектов можно найти в работах [1–3].

Эффекты магнитного резонанса отличаются от других резонансных явлений (например, оптического диапазона) тремя важными особенностями, которые облегчают интерпретацию экспериментально регистрируемых сигналов:

- 1) величина регистрируемых сигналов в них всегда пропорциональна числу ядер в образце;
- 2) вероятность спонтанных переходов в ЯМР-системах пренебрежимо мала;
- 3) возможно фазочувствительное детектирование сигналов.

## ПРИМЕНЕННЫЙ МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ

Для анализа процессов ввода, хранения, преобразования и вывода информации использован динамический подход в сочетании с математическим аппаратом алгебры Клиффорда  $G_{3,0}$  [4–6], построенной на ортах трехмерного евклидова пространства  $\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}$ . В матричном представлении эта некоммутативная алгебра реализуется в виде алгебры матриц размера  $2 \times 2$ , что хорошо согласуется с представлением соответствующих операторов спектроскопического подхода.

Несомненным преимуществом алгебры  $G_{3,0}$  является 8-элементный мультивекторный базис [4–6], допускающий описание рассматриваемых движений в различных ракурсах: в евклидовом базисе

$$\{1, \mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}\}, \quad (1)$$

в унитарном (спинорном) базисе

$$\left\{ \begin{aligned} P &= \frac{1}{2}(1 + \mathbf{z}), & (\mathbf{x}P) &= \frac{1}{2}(\mathbf{x} - i\mathbf{y}), \\ N &= \frac{1}{2}(1 - \mathbf{z}), & (\mathbf{x}N) &= \frac{1}{2}(\mathbf{x} + i\mathbf{y}), \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

или в смешанных ненормированном сферическом

$$\{1 = P + N, \quad \mathbf{z} = P - N, \quad (\mathbf{x}P), \quad (\mathbf{x}N)\} \quad (3)$$

и модифицированном сферическом

$$\{P, N, \mathbf{x}, \mathbf{y}\} \quad (4)$$

базисах, которые получают друг из друга путем линейного комбинирования базисных элементов. В алгебре  $G_{3,0}$  наряду с мультивекторными понятиями скаляров, векторов, бивекторов (ориентированных площадей) и псевдоскаляров (ориентированных объемов) естественным образом вводятся понятия паравекторов, кватернионов и спиноров. Все они связаны между собой через параметры Кэли—Клейна, представляющие собой комплексные координаты унитарного кватерниона в базисе (2).

### ФИЗИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Структура модели такова. В пространственно неоднородном статическом магнитном поле ансамбль невзаимодействующих частиц со спином  $1/2$  и гиромангнитным отношением  $\gamma$  расслаивается на *изохроматы*. Их число  $\tilde{N} = \Gamma T_2$  определяется произведением полуширины  $\Gamma$  неоднородно уширенной линии ЯМР-образца на время поперечной релаксации  $T_2$ , ограничивающее разрешающую способность детектора в частотном измерении.

Каждая изохромата характеризуется макроскопическим вектором равновесной намагниченности  $M_0 \mathbf{z}$  и частотой ЯМР  $\omega$  (расстройкой относительно центра распределения  $\delta = \omega - \omega_0$ ). Направление статического магнитного поля принимается за орт  $\mathbf{z}$  лабораторной системы координат (ЛСК). Вдоль орта  $\mathbf{x}$  этой же системы прикладываются импульсы линейно поляризованного радиочастотного магнитного поля.

Последовательность возбуждающих импульсов выводит векторы намагниченности из состояния равновесия, отклоняя их от орта  $\mathbf{z}$  и задавая в момент окончания последнего импульса последовательности некоторое распределение их продольных и поперечных составляющих.

Оставленные в покое векторы намагниченности свободно прецессируют в статическом магнитном поле. При этом их продольные составляющие покоятся, а поперечные наводят в катушке индук-

тивности приемного контура медленно затухающие сигналы спада свободной индукции (ССИ).

Внешнее детектирующее устройство (например, катушка индуктивности) суммирует сигналы ССИ, создавая условия для их интерференции. Как правило, интерференция оказывается деструктивной, т. е. сигналы ССИ взаимно гасят друг друга. Однако для последовательностей из двух и более когерентных импульсов, разделенных интервалами свободной прецессии, могут возникать состояния конструктивной интерференции, получившие название *сигналов спинового эха*. Число таких состояний, их относительные амплитуды, формы огибающей и взаимное расположение во времени определяется структурой последовательности возбуждающих импульсов и их основными параметрами. К формированию эхо-сигналов приводит и изменение знака градиента величины статического магнитного поля.

Способность сигналов ССИ многократно вступать в состояния конструктивной интерференции свидетельствует о внутренней согласованности законов движения векторов намагниченности различных изохромат на всех этапах возбуждения и регистрации, а также о наличии механизмов сохранения *когерентности* этих движений, несмотря на различие в резонансных частотах.

*Когерентность* здесь следует понимать в обобщенном смысле, расширенном с учетом

- различия собственных резонансных частот изохромат;
- возможности хранения информации как в статическом (в продольных составляющих), так и в динамическом (в поперечных составляющих) состояниях;
- возможностей обмена информацией между этими состояниями под действием радиоимпульсов.

Такое обобщение допускает несколько различных форм существования когерентности, не все из которых доступны непосредственному детектированию.

Мерой исходной когерентности служит согласованная ориентация единичных векторов равновесной намагниченности всего ансамбля изохромат вдоль орта  $\mathbf{z}$  лабораторной системы координат (ЛСК). Единичная длина этих векторов соответствует максимально достижимой когерентности перед началом эксперимента. Отличный от единицы скалярный множитель, учитывающий вес каждого изохроматического канала в процессах преобразования информации, может не учитываться при описании вынужденных и свободных вращений единичного вектора намагниченности, но будет учтен на этапе вывода информации на детектор.

Эволюция векторов намагниченности ансамбля изохромат под действием последовательности возбуждающих импульсов рассматривается как

совокупность трех независимо протекающих процессов:

- вынужденных и свободных чистых трехмерных вращений;
- однородного экспоненциального разрушения поперечных составляющих векторов намагниченности всех изохромат с постоянной времени  $T_2$  под действием процессов поперечной релаксации;
- однородного экспоненциального восстановления равновесной продольной намагниченности с постоянной времени  $T_1$  под действием процессов продольной релаксации.

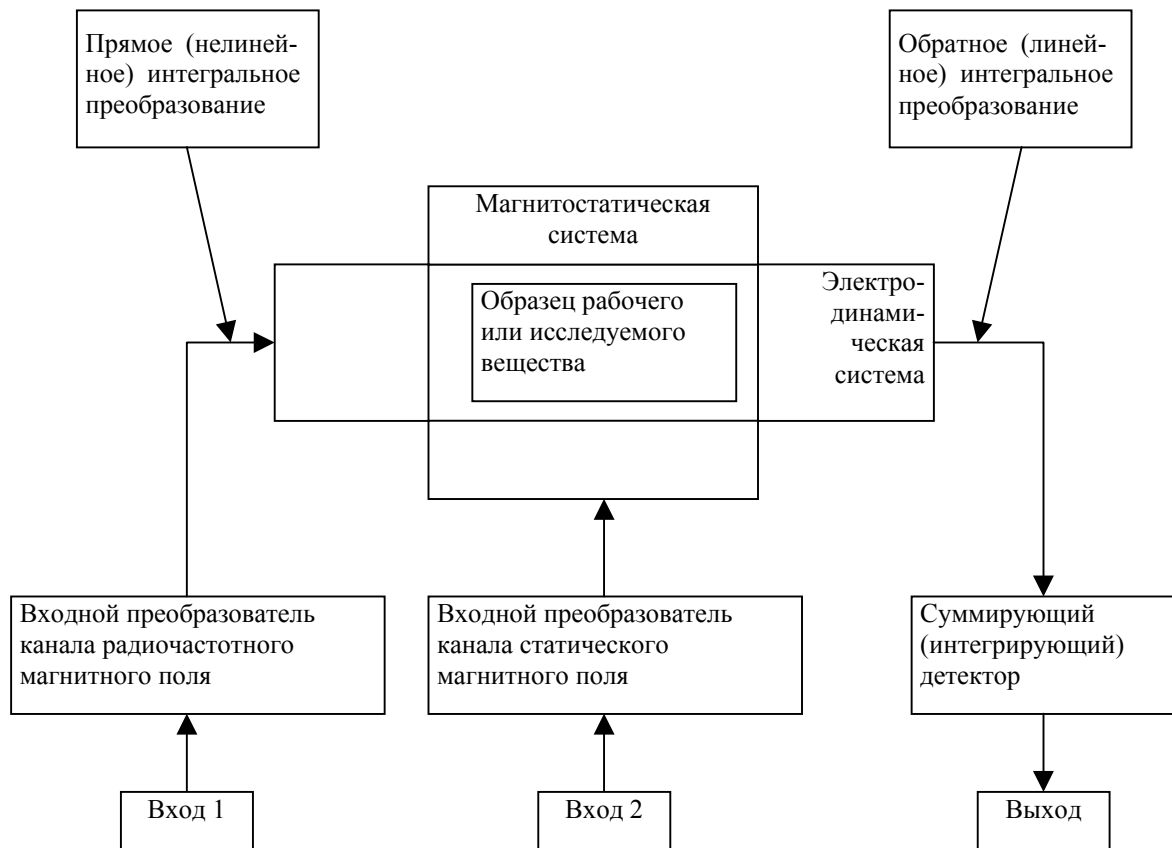
Действие процессов релаксации во время импульсов не учитывается. Допущение о независимости указанных процессов упростило анализ их роли в формировании потоков информации. Чистые трехмерные вращения единичного вектора намагниченности произвольной изохроматы при анализе заменяются более простыми эквивалентными уравнениями движения соответствующего унитарного кватерниона [5–9]. Это позволяет избежать трудоемкого сшивания начальных и конечных условий для составляющих намагниченностей на границах каждого радиоимпульса.

## ИНФОРМАЦИОННОЕ ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ

Общая картина процессов информационного обмена в рассматриваемой модели сводится к следующему.

Резонансная неоднородно уширенная 2-уровневая среда в исходном равновесном состоянии характеризуется распределением единичных векторов намагниченности входящих в ее состав изохромат, все из которых ориентированы вдоль орта  $z$ . Под действием радиоимпульсов они совершают индивидуальные вынужденные вращения вокруг несовпадающих осей на индивидуальные углы. В интервалах свободной прецессии они совершают свободные вращения вокруг орта  $z$ , но с индивидуальными угловыми скоростями. При этом удобно отдельно сопоставлять статические продольные составляющие векторов намагниченности и их динамические поперечные составляющие, испытывающие однородное воздействие соответствующих процессов релаксации.

Рассматриваемая среда связана с внешним миром двумя входами (через магнитостатическую и электродинамическую системы) и одним выходом, как показано на рисунке.



Общая схема импульсного ЯМР-эксперимента

Через магнитостатическую систему в спиновую систему поступает информация о величине и пространственной ориентации внешнего статического магнитного поля, а также о величине и пространственной ориентации градиента его величины. Обычно градиент величины статического поля выбирают линейным (постоянным в пространстве), но он может быть постоянным, переменным или импульсным во времени.

Трехмерные пространства, в которых задается ориентация статического магнитного поля и ориентация градиента его величины, независимы. Поэтому информационное пространство магнитостатического канала связи шестимерно. Этот канал используют для структурирования образца в смысле распределения (перераспределения) его элементов (вокселей) по изохроматическим слоям (в частотном измерении).

Электродинамическая система ориентируется относительно магнитостатической так, чтобы прикладываемое через нее линейно поляризованное радиочастотное магнитное поле было ортогонально орту  $z$ . Ориентацию линейно поляризованного радиочастотного магнитного поля выделяют ортом  $x$  лабораторной системы координат. Во вращающейся системе координат (ВСК) направление приложения возмущающего (статического) поля в плоскости  $x'y'$  определяется начальной фазой радиоимпульса.

Этот информационный канал в принципе также является шестимерным. Однако требование ортогональности статического и радиочастотного магнитных полей (при их коллинеарности резонансные эффекты отсутствуют!) уменьшает эту размерность до 5.

По обоим каналам связи информация в спиновую систему вводится в виде распределений параметров векторных полей. Эти поля суммируются во вращающейся с несущей частотой радиоимпульса системе координат и задают ось и угол вращения для каждой изохроматы.

Вектор намагниченности каждой изохроматы интегрально и независимо воспринимает действие всей последовательности возбуждающих импульсов через изменения величины и ориентации результирующего вектора локального магнитного поля, в котором он находится. Этим осуществляется перевод информации из временной области в частотную. Однако это преобразование не совпадает с прямым преобразованием Фурье (из-за нарушения принципа суперпозиции для неколлинеарных составляющих локального магнитного поля).

Для описания взаимодействия указанных векторных полей со спиновой системой оказалось удобным использовать формализм параметров Кэли—Клейна [4–9], которые легко выражаются через ось и угол вращения для каждого конкретно-

го вектора намагниченности. Такой способ описания вращений является наиболее элегантным [4] для сложных и составных вращений и позволяет:

- 1) описывать вращения в общем виде независимо от начальных условий;
- 2) рассматривать вращение как преобразование распределений;
- 3) сравнивать результаты неоднородных вращений (вокруг неколлинеарных осей) в единой системе координат.

Последнее свойство позволило выразить информационный потенциал простого или составного радиоимпульса через распределения значений двух комплексных параметров  $\alpha$  и  $\beta$ , не зависящие от места импульса в возбуждающей последовательности и от состояния спиновой системы к моменту его приложения.

Таким образом, исходная когерентность (согласованность пространственных ориентаций векторов намагниченности) под действием импульсных воздействий дробится и перераспределяется между регистрами [9] системы в соотношениях, указываемых операторами ввода информации [9], т. е. задаваемыми параметрами прикладываемых радиоимпульсов. В результате в каждом из регистров системы накапливается достаточно большое число векторных носителей информации (составляющих исходной единичной намагниченности), объединенных определенными траекториями переноса когерентности. Эти порции информации хранятся в виде решеток в частотном измерении в статическом регистре продольных составляющих и подвергаются непрерывным линейным фазовым деформациям в динамических регистрах поперечных составляющих.

Приемная часть электродинамической системы интегрально воспринимает сигналы эдс индукции, наводимые всеми поперечными составляющими намагниченностей всего набора изохромат, т. е. просматривает одновременно все доступные траектории переноса когерентности, и осуществляет преобразование информации из частотной области во временную.

Регистрация сигналов магнитного резонанса осуществляется в отсутствии возбуждающих импульсов. Сочетание режима свободной прецессии с интегральным выводом обеспечивает естественную реализацию обратного преобразования Фурье (с весом).

При использовании синхронного (фазочувствительного) детектирования конкретная ориентация оси катушки в плоскости  $xу$  не имеет принципиального значения. Чистый сигнал поглощения может быть получен подбором фазы опорного синусоидального напряжения непосредственно при регистрации или позже при обработке данных на ЭВМ. В этом случае на выход системы может

поступить информация лишь с траекторий переноса когерентности, завершающихся в одном из регистров поперечных составляющих, например ассоциируемым с уровнем когерентности +1 [6].

Необходимым условием правильного вывода информации является группировка всех динамических носителей информации на данной траектории переноса когерентности около одного значения фазы с шириной распределения, не превышающей  $\pi$ . Этому способствует взаимная компенсация линейных деформаций фазовых спектров данной группы носителей в интервале времени, предназначенном для вывода информации. В этом случае амплитуда и форма эхо-сигнала определяются произведением операторов ввода информации [9] от различных импульсов последовательности, действующих на данной траектории.

Достаточным условием вывода информации с рассматриваемой траектории является ограничение величиной  $\pi$  нелинейных деформаций фазового спектра носителей, связанных с нерезонансным характером ввода информации.

Информация, хранящаяся в регистре продольных составляющих, на выход устройства не выводится. Для ее считывания необходимо перевести ее в регистры поперечных составляющих, предварительно очистив их дополнительным импульсом градиента магнитного поля. Перенос осуществляется с помощью дополнительного считывающего 90-градусного импульса.

Однако и в этом случае на выход поступает не вся переписанная из регистра продольных составляющих информация. Отсутствие в регистрах поперечных составляющих соответствующих опорных решеток приводит к делению носителей информации на сходящиеся и расходящиеся по фазе группы. Сходящиеся по фазе группы могут приводить к формированию эхо-сигналов. Для считывания информации из расходящихся групп требуется приложить дополнительный 180-градусный считывающий импульс.

Таким образом, информация о параметрах импульсов возбуждающей последовательности, вводимая в спиновую систему, многократно резервируется и далеко не всегда оказывается доступной для считывания.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработанный нами метод позволяет рассчитывать все потоки информации, формируемые в неоднородно уширенной 2-уровневой системе в условиях произвольного многоимпульсного эксперимента, а также необходимые и достаточные условия их вывода при заданном способе детектирования.

По изложенному алгоритму создана программа численного моделирования эволюции спиновой системы, позволяющая анализировать спектры собственных значений операторов ввода информации для простых и составных радиоимпульсов с различными законами ступенчатой модуляции параметров, а также изучать зависимость формы сигналов спада свободной индукции, первичного и стимулированного эха от изменения любых параметров простых и составных радиоимпульсов независимо от их местоположения в составе возбуждающей последовательности при любых значениях основных параметров спиновой системы.

Описанный подход представляется полезным для решения множества практических задач в области ЯМР-спектроскопии, магнитной резонансной томографии и функциональной электроники. Он может рассматриваться также в качестве ключа к освоению качественно новых методов обработки информации — квантовых вычислений на основе ЯМР.

Введенная здесь концепция векторных носителей информации и голографического способа их детектирования за счет эффектов конструктивной интерференции сигналов от их динамических составляющих может оказаться полезной для практического использования в информационно-измерительной аппаратуре большого класса других нестационарных когерентных явлений, описанных в работах [1–3].

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Bachmann P., Sauer K., Wallis G.* Zeitliche Phasenmischungsechos // *Fortschritte der Physik*. 1972. V. 20, N 3. P. 147–199.
2. *Korpel A., Chatterjee M.* Nonlinear Echoes, Phase Conjugation, Time Reversal, and Electronic Holography // *Proc. IEEE*. 1981. V. 69, N 12. P. 1539–1556.
3. *Копвиллем У.Ч., Пранц С.В.* Поляризационное эхо. М.: Наука, 1985. 192 с.
4. *Казанова Г.* Векторная алгебра. М.: Мир, 1979. 119 с.
5. *Дудкин В.И., Тарханов В.И.* Применение алгебры Клиффорда для описания импульсных методов магнитного резонанса // *Труды ЛПИ*. 1982. № 387, С. 67–72.
6. *Тарханов В.И.* Геометрическая алгебра, ЯМР и обработка информации. СПб.: Изд-во СПбГПУ, 2002. 214 с.
7. *Дудкин В.И., Петрунькин В.Ю., Тарханов В.И.* Анализ сигналов спинового эха в многоимпульсном эксперименте // *Радиотехника и электроника*, 1984. Т. 29, № 4. С. 732–740.

8. Дудкин В.И., Страхолис А.А., Тарханов В.И. Особенности обработки импульсных радиосигналов в спиновых процессорах // Труды ЛПИ. 1986. № 422. С. 50–54.
9. Дудкин В.И., Петрунькин В.Ю., Тарханов В.И. Механизм обработки информации в спиновом процессоре // ЖТФ. 1988. Т. 58, вып. 9. С. 1738–1745.

*Санкт-Петербургский государственный политехнический университет*

Материал поступил в редакцию 7.10.2002.

## **VECTOR DATA MEDIUM IN AN INHOMOGENEOUSLY BROADENED TWO-LEVEL NMR SYSTEM**

**V. I. Tarkhanov**

*Saint-Petersburg State Polytechnic University*

A dynamical approach in combination with the proper geometric Clifford algebra is proposed to describe information flows formed during resonance application of rf magnetic field pulses to an inhomogeneously broadened two-level nuclear spin system. It permits one to introduce a notion of vector data medium and to follow spin system evolution in four different ways, which are connected through the formalism of Cayle—Klein parameters. The notion of coherence is generalized to include differences in space orientations and resonance frequencies for elements of the vector data medium. It is shown that information about pulse parameters of an excitation sequence is written in a spin system with manifold redundancy and by no means is always available for reading. The approach allows one to calculate all information flows which are formed in an arbitrary inhomogeneously broadened two-level system under conditions of any multipulsed experiment as well as necessary and sufficient conditions for their reading for a given way of detection.