

Э. КУНДЛА

## ОБ ОДНОМ ЭКСПЕРИМЕНТЕ ЯМР, ВЫЯВЛЯЮЩЕМ СВЯЗЬ РЕДКИХ ЯДЕР С ИХ СОСЕДАМИ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ

Обмен поляризациями между многочисленными спинами  $I$  и редкими спинами  $S$  в твердых телах при выполнении условия Хартманна—Хана [1] носит осцилляционный характер [2, 3], обязанный членам типа  $a_{nm}I_{n\pm}S_{m\mp}$  в гамильтониане спин-системы. Эти члены, описывающие связь между  $I$ - и  $S$ -спинами, обусловлены диполь-дипольным и спин-спиновым взаимодействиями и, очевидно, прежде всего взаимодействиями между  $S$ -спином и ближайшими к нему  $I$ -спинами. Появление осцилляций позволяет определить величину связи и, тем самым, получить ценную информацию о ближайшем окружении редких спинов в твердых телах [2, 3]. Однако реализация подобного эксперимента связана с рядом технических и интерпретационных трудностей [4].

В настоящей статье теоретически рассматривается один из вариантов эксперимента ЯМР, позволяющий также определить связь редкого спина с его соседями. Основная идея его (высказанная Дж. Уо [5]) заключается в следующем: за определенный промежуток времени неравновесная намагниченность  $S$ -спина изменяется в условиях спин-локинга  $I$ -спинов под магическим углом. В это время эффективно устраняется диполь-дипольное взаимодействие между  $I$ -спинами [6], являющееся основным способом диффузии энергии в системе  $I$ -спинов. С момента окончания спин-локинга регистрируется сигнал  $S$ -спина в условиях развязки его от  $I$ -спинов [7]. Положения линий в спектре двукратного преобразования Фурье [8] полученного сигнала определяются константами связи  $S$ -спина с ближайшими соседями.

Результаты эксперимента, отличающегося от вышеописанного, в основном, только применением последовательности из 4-импульсных циклов [9] вместо спин-локинга под магическим углом, приведены в [4].

### 1. Постановка задачи

Рассматриваемый эксперимент состоит из следующих трех этапов:

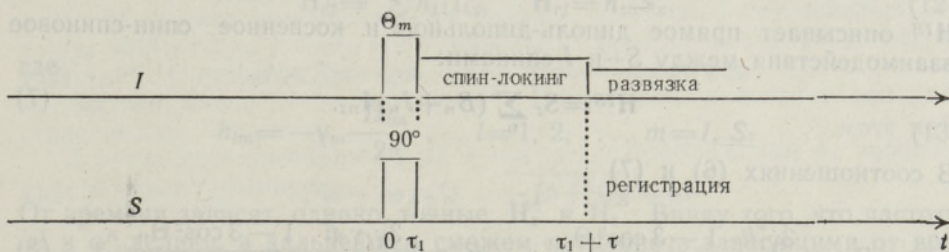


Схема эксперимента

I. Подготовительный этап: на спин-систему, находящуюся в равновесном состоянии в сильном постоянном магнитном поле, воздействуют два ВЧ импульса, один из которых поворачивает намагниченность  $S$ -спинов на  $90^\circ$ , а другой изменяет намагниченность  $I$ -спинов на магический угол  $\Theta_m$ .

II. Спин-локинг: в течение времени  $\tau$   $I$ -спины подвергаются воздействию ВЧ поля, обеспечивающего выполнение условия т. н. спин-локинга под магическим углом.

III. Регистрация:  $I$ -спины под воздействием сильного ВЧ поля развязываются от  $S$ -спинов, и сигнал последних регистрируется.

Происходящие при этом изменения оператора плотности  $\rho$ , характеризующего состояние спин-системы, подчиняются уравнению

$$\dot{\rho} = -i\mathcal{L}(\mathbf{H})\rho. \quad (1)$$

Действие супероператора  $\mathcal{L}(\mathbf{H})$  на любой оператор  $\mathbf{Q}$  соответствует определению

$$\mathcal{L}(\mathbf{H})\mathbf{Q} = [\mathbf{H}, \mathbf{Q}], \quad (2)$$

где  $\mathbf{H}$  является гамильтонианом системы.

Во внешних сильном постоянном ( $z$ -направление) и ВЧ полях гамильтониан  $\mathbf{H}$  выбирается в виде суммы нескольких слагаемых

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_z^I + \mathbf{H}_z^S + \mathbf{H}_d^I + \mathbf{H}^{IS} + \mathbf{H}_{rf}^I(t) + \mathbf{H}_{rf}^S(t). \quad (3)$$

Здесь первый член учитывает взаимодействие  $I$ -спинов с постоянным магнитным полем и косвенное спин-спиновое взаимодействие между  $I$ -спинами:

$$\mathbf{H}_z^I = -\sum_i \omega^I \mathbf{I}_{iz} + \sum_i \omega^I \sum_{h=x,y,z} \sigma_{ihz}^I \mathbf{I}_{ih} + \sum_{i < j} J_{ij}^I \vec{\mathbf{I}}_i \vec{\mathbf{I}}_j. \quad (4)$$

Хотя в образце могут находиться  $S$ -спины различных по своему окружению типов, достаточно наблюдать за поведением лишь одного из них, предполагая, что взаимодействие между  $S$ -спинами вследствие их низкой концентрации отсутствует. Этим оправдывается выбор  $\mathbf{H}_z^S$  в виде

$$\mathbf{H}_z^S = -\omega^S \mathbf{S}_z + \omega^S \sum_{h=x,y,z} \sigma_{hz}^S \mathbf{S}_h. \quad (5)$$

$\mathbf{H}_d^I$  учитывает секулярную часть прямой диполь-дипольной связи между  $I$ -спинами:

$$\mathbf{H}_d^I = \sum_{i < j} B_{ij} \left( \mathbf{I}_{iz} \mathbf{I}_{jz} - \frac{1}{3} \vec{\mathbf{I}}_i \vec{\mathbf{I}}_j \right). \quad (6)$$

$\mathbf{H}^{IS}$  описывает прямое диполь-дипольное и косвенное спин-спиновое взаимодействия между  $S$ - и  $I$ -спинами:

$$\mathbf{H}^{IS} = \mathbf{S}_z \sum_n (B_n + J_n) \mathbf{I}_{nz}. \quad (7)$$

В соотношениях (6) и (7)

$$B_{ij} = \frac{3\gamma_I^2 \hbar}{2} \frac{1 - 3 \cos^2 \Theta_{ij}}{r_{ij}^3}; \quad B_n = \frac{3\gamma_I \gamma_S \hbar}{2} \frac{1 - 3 \cos^2 \Theta_n}{r_n^3}. \quad (8)$$



Следует подчеркнуть, что гамильтониан  $H^{IS}$  учитывает взаимодействие  $S$ -спина только с ближайшими к нему  $I$ -спинами, т. е.  $n$  пробегает все значения, при которых либо  $B_n$ , либо  $J_n$  достаточно велики.

Последние два члена в гамильтониане (3) описывают влияние ВЧ полей соответственно на  $I$ - и  $S$ -спины.

Отметим, что уравнение (1) с гамильтонианом (3) не учитывает релаксации спин-системы, т. е. предполагает абсолютно жесткую кристаллическую решетку [10].

В качестве равновесного в постоянном магнитном поле оператора плотности выбирается оператор

$$\rho_0 = (\text{Sp } 1)^{-1} [1 - \beta (\sum_i \omega^I I_{iz} + \omega^S S_z)]. \quad (9)$$

Как видно, в (9) учтены лишь доминирующие члены гамильтониана и высокотемпературное приближение [10].

Содержание всех обозначений в (4)–(9) традиционное.

## 2. Изменение состояния спин-системы во время подготовительного этапа

Во время подготовительного этапа ( $t = 0 - \tau_1$ ) спин-система подвергается воздействию ВЧ полей

$$\vec{H}(t) = i(2H_{1I} \cos \omega^I t + 2H_{1S} \cos \omega^S t). \quad (10)$$

Как известно, действие импульсов ВЧ поля часто сводится только к повороту намагниченностей на определенный угол во вращающейся системе координат. Несмотря на это, в настоящем параграфе показывается ход решения кинетического уравнения с целью письменной формулировки условий допустимости вышеназванного подхода и для последовательности изложения.

Итак, для облегчения определения состояния спин-системы к концу подготовительного этапа все операторы в (1) преобразуем по формуле

$$Q = R^{-1} Q R^{+1}, \quad R^{+1} = \exp \left[ \pm i t (\omega^I \sum_i I_{iz} + \omega^S S_z) \right]. \quad (11)$$

Легко проверить, что члены гамильтонианов  $H_d^{II}$  и  $H^{IS}$ , а также начальное состояние  $\rho_0$  коммутируют с (11).

Если пренебречь прямыми взаимодействиями ВЧ полей с частотами  $\omega^I$  и  $\omega^S$  на  $S$ - и  $I$ -спины соответственно, а также членами с частотами  $2\omega^I$  и  $2\omega^S$ , то  $\tilde{H}_{rf}^I$  и  $\tilde{H}_{rf}^S$  перестанут зависеть от времени

$$\tilde{H}_{rf}^I = \sum_i h_{1I} I_{ix}, \quad \tilde{H}_{rf}^S = h_{1S} S_x, \quad (12)$$

где

$$h_{lm} = -\gamma_m \frac{H_{lm}}{2\pi}, \quad l = 1, 2, \dots, m = I, S. \quad (13)$$

От времени зависят, однако, точные  $\tilde{H}_z^I$  и  $\tilde{H}_z^S$ . Ввиду того, что частоты  $\omega^I$  и  $\omega^S$  велики, в дальнейшем сможем пренебречь зависящими от времени членами в  $\tilde{H}_z^I$  и  $\tilde{H}_z^S$ , принимая

$$\tilde{\mathbf{H}}_z^I = -\sum_i \omega^I \mathbf{I}_{iz} + \sum_i \delta_{izz}^I \mathbf{I}_{iz} + \sum_{i < j} J_{ij} \vec{\mathbf{I}}_i \vec{\mathbf{I}}_j, \quad (14)$$

$$\tilde{\mathbf{H}}_z^S = -\omega^S \mathbf{S}_z + \delta_{zz}^S \mathbf{S}_z, \quad (15)$$

где

$$\delta^m = \omega^m \sigma^m, \quad m = I, S. \quad (16)$$

Для дальнейшего упрощения выкладок потребуем, чтобы амплитуды ВЧ полей были много больше амплитуд т. н. локальных полей, вызванных химическими сдвигами, диполь-дипольными и спин-спиновыми взаимодействиями в местах расположения любых спинов образца:

$$|h_{1I}|, |h_{1S}| \gg |h_L|, \quad (17)$$

$$h_L = \delta_{izz}^I, \delta_{zz}^S, B_{ij}, B_n, J_{ij}, J_n.$$

Подчеркнем, что условия (17) еще не оправдывают применения решения преобразованного кинетического уравнения в виде

$$\tilde{\rho}(t) = e^{-it\mathcal{L}(\tilde{\mathbf{H}}_{rf}^I + \tilde{\mathbf{H}}_{rf}^S)} \rho_0, \quad (18)$$

трактуемого как поворот намагниченностей во вращающейся системе координат. Чтобы (18) обрело действительный смысл, необходимо кроме того, соблюдение условия

$$|h_L \tau_1| \ll 1. \quad (19)$$

Если, при этом, выполняются соотношения

$$h_{1I} \tau_1 = \Theta_m, \quad h_{1S} \tau_1 = \frac{1}{2} \pi, \quad (20)$$

то из (18) имеем, что в конце подготовительного этапа состояние спин-системы выражается как

$$\tilde{\rho}(\tau_1) = (\text{Sp } 1)^{-1} \{1 - \beta[\omega^I (\cos \Theta_m \sum_i \mathbf{I}_{iz} - \sin \Theta_m \sum_i \mathbf{I}_{iy}) - \omega^S \mathbf{S}_y]\}. \quad (21)$$

### 3. Изменение состояния спин-системы во время спин-локинга

Во время второго этапа на спин-систему воздействует ВЧ поле

$$\vec{H}(t) = j2H_2 \cos(\omega_2 t + \omega^I \tau_1), \quad (22)$$

частота и амплитуда которого удовлетворяют условиям

$$\cos \Theta_m = \frac{\Omega}{h_{ef}} = \sqrt{\frac{1}{3}}; \quad |\omega_2 - \omega^S| \gg |h_{2S}|. \quad (23)$$

При этом

$$h_{ef} = \sqrt{\Omega^2 + h_{2I}^2}; \quad \Omega = \omega_2 - \omega^I, \quad (24)$$

а за начало отсчета времени в (22) (и далее в этом параграфе) принимается начальный момент этапа спин-локинга. Вторым условием (23)



оправдывается пренебрежение прямым влиянием ВЧ поля (22) на состояние  $S$ -спина.

Рассмотрим изменение состояния спин-системы на II этапе. В-первых, подвергнем все операторы  $\tilde{Q}$  преобразованию

$$Q_R = R_1^{-1} \tilde{Q} R_1^{+1}; \quad R_1^{\pm 1} = \exp(\pm i t \Omega \sum_i I_{iz}) \quad (25)$$

с целью устранить временную зависимость гамильтониана  $\tilde{H}_{rf}^I(t)$ , описывающего взаимодействие ВЧ поля (22) с  $I$ -спинами. Заметим, что оператор  $\tilde{Q}(\tau_1)$ , являющийся здесь оператором начального состояния, не изменяется с преобразованием (25).

Во-вторых, ко всем полученным операторам применим преобразование

$$Q_T = T^{-1} Q_R T^{+1}; \quad T^{\pm 1} = \exp(\pm i \Theta_m \sum_i I_{ix}). \quad (26)$$

Это преобразование можно трактовать как поворот  $z$ -оси по эффективному полю во вращающихся координатах. Теперь начальное состояние  $\tilde{Q}(\tau_1)$  принимает вид

$$Q_T(0) = (\text{Sp } 1)^{-1} [1 - \beta(\omega^I \sum_i I_{iz} - \omega^S S_y)], \quad (27)$$

а также изменяются выражения для всех членов гамильтониана.

Наконец, целесообразно провести еще одно преобразование (соответствующее вращению с частотой  $h_{ef}$  вокруг  $z$ -оси в наклоненной системе координат)

$$Q_K = K^{-1} Q_T K^{+1}; \quad K^{\pm 1} = \exp(\mp i t h_{ef} \sum_i I_{iz}). \quad (28)$$

Последнее преобразование не изменяет оператора начального состояния  $Q_T(0)$ . Некоторые же слагаемые гамильтонианов  $H_{dK}^{II}$  и  $H_K^{IS}$  приобретают, однако, зависимость от времени с частотой  $h_{ef}$ . В дальнейшем предполагается, что частота  $h_{ef}$  достаточно велика для того, чтобы не учитывать влияния зависящих от времени членов гамильтониана на состояние спин-системы. Это требует выполнения условия

$$|h_{ef}| \gg |h_L|. \quad (29)$$

В данном приближении

$$H_{dK}^{II} = 0, \quad (30)$$

т. е. спин-локинг под магическим углом с достаточно интенсивным ВЧ полем эффективно исключает диполь-дипольное взаимодействие между  $I$ -спинами. Остаются, однако, диполь-дипольное и спин-спиновое взаимодействия между  $S$ - и  $I$ -спинами, а также спин-спиновое взаимодействие между  $I$ -спинами.

В результате преобразований и принятых приближений из решения кинетического уравнения

$$Q(t) = e^{-it\mathcal{Q}(H_{\text{lock}})} Q_T(0) \quad (31)$$

для состояния спин-системы в конце II этапа получаем выражение

$$\rho_K(\tau) = (\text{Sp } 1)^{-1} \{1 - \beta \omega^I \sum_i I_{iz} - \beta \omega^S (S_y \cos \tau b - S_x \sin \tau b)\}, \quad (32)$$

где

$$b = \delta_{zz} + \sqrt{\frac{1}{3}} \sum_n (J_n + B_n) I_{nz}. \quad (33)$$

При выводе (32)  $H_{lock}$  выбиралось в виде

$$H_{lock} = \sqrt{\frac{1}{3}} \sum_i \delta_{izz} I_{iz} + \sum_{i < j} J_{ij} I_{iz} I_{jz} + [\delta_{zz} + \sqrt{\frac{1}{3}} \sum_n (J_n + B_n) I_{nz}] S_z, \quad (34)$$

т. е. в целях математического упрощения здесь, в дополнение к выше-сказанному, опущены члены типа  $J_{ij} I_{i\pm} I_{j\mp}$ . Ясно, что это означает устранение одного из механизмов спиновой диффузии в системе  $I$ -спинов. Поскольку  $J_{ij}$  — сравнительно небольшая величина (порядка  $10$  гц в случае протонов в качестве  $I$ -спинов), то, вероятно, неточности, вызванные ошибками в параметрах ВЧ импульсов, превышают ошибки, связанные с неучетом спиновой диффузии за счет спин-спинового взаимодействия. Отметим, что в случае достаточно большого химического сдвига между  $i$  и  $j$  спинами пренебрежение членами  $J_{ij} I_{i\pm} I_{j\mp}$  вполне оправдано.

#### 4. Об изменении состояния спин-системы во время регистрации

Во время регистрации сигнала  $S$ -спина образец находится под влиянием ВЧ поля

$$\vec{H}(t) = i 2 H_3 \cos[\omega^I t + (\omega^I \tau_1 + \omega^S \tau)]. \quad (35)$$

За начало отсчета времени здесь принимается момент окончания спин-локинга.

Аналогично предыдущим этапам и в настоящем случае пренебрегаем зависящими от времени членами в  $\tilde{H}_z^I$  и  $\tilde{H}_z^S$  и учитываем прямое влияние ВЧ поля (35) только на  $I$ -спины

$$\tilde{H}_{rf}^I = \sum_i h_{3I} I_{ix}, \quad \tilde{H}_{rf}^S = 0. \quad (36)$$

Однако решение кинетического уравнения отличается от (18) не только начальным состоянием ( $\tilde{\rho}(\tau)$  вместо  $\rho_0$ ), но и гамильтонианом, являющимся аргументом супероператора  $\exp[-it\mathcal{Q}(\mathbf{H}_{reg})]$ . Так, интервал регистрации (теоретическая длительность от  $0$  до  $\infty$ ) не отвечает условию типа (19), обязательному в случае пренебрежения влиянием локальных полей. Поэтому, приступая к определению характера изменения состояния спин-системы, применим ко всем операторам во вращающихся координатах преобразование

$$\mathbf{Q}_V = \mathbf{V}^{-1} \tilde{\mathbf{Q}} \mathbf{V}^{+1}; \quad \mathbf{V}^{\pm 1} = \exp[\mp it(h_{3I} \sum_i I_{ix} + \delta_{zz}^S S_z)] \quad (37)$$

и на основе предположения о том, что частота  $h_{3I}$  достаточно велика, пренебрежем всеми зависящими от времени членами в  $\mathbf{H}_V$ . В результате преобразования (37) начальное состояние не изменяется, а вид полученного супероператора  $\exp[-it\mathcal{Q}(\mathbf{H}_{reg})]$ , где



$$\mathbf{H}_{\text{reg}} = \sum_{i < j} \left( J_{ij} - \frac{1}{3} B_{ij} \right) \vec{\mathbf{I}}_i \vec{\mathbf{I}}_j, \quad (38)$$

свидетельствует о развязке  $S$ -от  $I$ -спинов. Соответственно, слагаемые  $\tilde{\rho}(\tau)$ , содержащие только операторы  $S$ -спина, без изменения входят в состав  $\rho_V(t)$ .

Далее заметим следующее:

1) В силу выражений

$$\cos \tau C_n \mathbf{I}_{nz} = \mathbf{I} \cos \frac{1}{2} \tau C_n, \quad \sin \tau C_n \mathbf{I}_{nz} = 2 \mathbf{I}_{nz} \sin \frac{1}{2} \tau C_n,$$

$$C_n = \sqrt{\frac{1}{3}} (J_n + B_n)$$

разложения  $\cos \tau b$  и  $\sin \tau b$  в (32) по параметрам ближайших соседей обладают только одним слагаемым (соответственно,  $\mathbf{I} \cos \tau \delta_{zz}^S \prod_n \cos \frac{1}{2} \tau C_n$  и  $\mathbf{I} \sin \tau \delta_{zz}^S \prod_n \cos \frac{1}{2} \tau C_n$ ), не содержащим по крайней мере одного оператора  $\mathbf{I}_{nz}$ . Операторы  $\mathbf{I}_{nz}$  с произвольным значением  $n$  содержатся в остальных слагаемых только в первой степени.

2) Переход от  $\rho_K(\tau)$  к  $\tilde{\rho}(\tau)$  сопровождается заменой всех  $\mathbf{I}_{nz}$  на  $\sqrt{\frac{1}{3}} [\mathbf{I}_{nz} + \sqrt{2} (\mathbf{I}_{ny} \cos \tau \Omega + \mathbf{I}_{nz} \sin \tau \Omega)]$ , при этом степень оператора с конкретным индексом  $n$  не изменяется.

3) На каждом шагу своего влияния супероператор  $\exp[-it\Omega(\mathbf{H}_{\text{reg}})]$  с (38) либо не изменяет комбинацию спиновых операторов в  $\tilde{\rho}(\tau)$ , либо заменяет по крайней мере одну компоненту  $\mathbf{I}_{nk}$  на  $\mathbf{I}_{nk'}$  ( $k, k' = x, y, z$ ), не повышая ее степени.

Из вышесказанного можно сделать вывод, что «с точки зрения» сигнала

$$S(t) \sim \gamma_S \frac{d}{dt} \text{Sp} \{ [\mathbf{S}_y \cos[\omega_0^S t + \omega^S(\tau + \tau')] - \mathbf{S}_x \sin[\omega_0^S t + \omega^S(\tau + \tau')]] \rho_V(t) \}, \quad (39)$$

индуцируемого  $S$ -спином в приемной катушке, направленной по  $y$ -оси лабораторных координат, существенной является только часть  $\rho_V^S(t)$  оператора плотности

$$\rho_V^S(t) = (\text{Sp } 1)^{-1} \beta \omega_0^S [\mathbf{S}_y \cos \tau \delta_{zz}^S - \mathbf{S}_x \sin \tau \delta_{zz}^S] \prod_n \cos \frac{1}{2} \tau C_n. \quad (40)$$

$$\text{В (39)} \quad \omega_0^S = \omega^S - \delta_{zz}^S. \quad (41)$$

## 5. О структуре спектра двукратного преобразования Фурье

Наблюдаемый в данном эксперименте частотный спектр  $S$ -спина получается Фурье-преобразованием сигнала  $S(t)$ , накопленного во время регистрации. Однако при преобразовании (39) с  $\rho_V(t)$  в виде (40) появляются две трудности. Во-первых, значение интеграла на верхнем



пределе интегрирования ( $\infty$ ) оказывается неопределенным, и, во-вторых, амплитуда появляющейся линии (центр в положении  $\omega = \omega_0^S$ ) оказывается бесконечной. Причиной этих трудностей является игнорирование релаксации  $S$ -спина за время регистрации. Релаксация, естественно, приводит к нулевому значению интеграла на верхнем его пределе, что и будет принято в дальнейшем; амплитуда линии принимает также конечное значение. При учете релаксации (по крайней мере для случая, когда действие супероператора релаксации на  $S_k$  сводится к умножению на постоянную) амплитуда  $A(\tau)$  линии была бы пропорциональна выражению

$$i \frac{\text{Sp}(S_y^2)}{\text{Sp}(1)} \beta \omega^S \gamma_s \omega_0^S e^{i(\omega_0^S \tau + \omega^S \tau_1 - \varphi)} \prod_n \cos \frac{1}{2} \tau C_n. \quad (42)$$

Из (42) видно, что величина амплитуды является функцией длительности  $\tau$  интервала спин-локинга. Подвергая ее преобразованию Фурье, получаем частотный спектр двукратного преобразования  $A(\omega)$ .

При определении  $A(\omega)$  исходя из (42) появляются аналогичные трудности, связанные с тем, что не учитывалась релаксация во время спин-локинга. Здесь значение интеграла на верхнем пределе также принимается равным нулю.

Фурье-преобразованием  $A(\tau)$  выявляется положение центров линий в частотном спектре  $A(\omega)$ :

$$\omega = \omega_0^S + \frac{1}{2} \omega_k, \quad (43)$$

где величины  $\omega_k$  — различные комбинации из всех возможных  $C_n$ . Например, в случае двух ближайших соседей  $\omega_1 = C_1 + C_2$ ,  $\omega_2 = C_1 - C_2$ ,  $\omega_3 = -C_1 + C_2$ ,  $\omega_4 = -C_1 - C_2$ .

Следовательно, линии в спектре двукратного преобразования Фурье расположены симметрично относительно  $\omega_0^S$  и число их  $k = 2^n$ . Положения линий определяются константами связи между  $S$ -спином и его ближайшими соседями, т. е. рассмотренный эксперимент позволяет получать информацию об этих константах.

### Заключение

Теоретически изучен частотный спектр ЯМР, полученный двукратным преобразованием Фурье сигнала редких ядер двухкомпонентной спиновой системы твердого образца. Рассмотренный эксперимент включает три этапа: импульсную подготовку состояния спиновой системы, спин-локинг многочисленных ядер под магическим углом и, наконец, регистрацию сигнала редких ядер в условиях развязки их от многочисленных соседей.

Выяснено, что положения линий в спектре двукратного преобразования Фурье определяются константами связи между редкими ядрами и ближайшими к ним многочисленными ядрами. Таким образом, рассмотренный эксперимент позволяет изучать ближайшее окружение редких ядер в твердых телах.

### ЛИТЕРАТУРА

1. Hartmann, S., Hahn, E. L., Phys. Rev., **128**, 2042 (1962).
2. Müller, L., Kumar, A., Baumann, T., Ernst, R. R., Phys. Rev. Letters, **32**, 1402 (1974).



3. Hester, R. K., Ackerman, J. L., Cross, V. R., Waugh, J. S., Phys. Rev. Letters, **34**, 993 (1975).
4. Hester, R. K., Ackerman, J. L., Neff, B. L., Waugh, J. S., Phys. Rev. Letters, **36**, 1081 (1976).
5. Waugh, J. S., частное сообщение.
6. Lee, M., Goldburg, W. I., Phys. Rev. **140 A**, 1261 (1965).
7. Pines, A., Gibby, M. G., Waugh, J. S., J. Chem. Phys., **59**, 569 (1973).
8. Aue, W. P., Bartholdi, E., Ernst, R. R., J. Chem. Phys., **64**, 2229 (1976).
9. Haeberlen, U., Waugh, J. S., Phys. Rev., **175**, 453 (1968).
10. Wang, C. H., Ramshaw, J. D., Phys. Rev., **B6**, 3253 (1972).

Институт кибернетики  
Академии наук Эстонской ССР

Поступила в редакцию  
28/X 1976

E. KUNDLA

### UHES TMR-EKSPERIMENDIST, KUS ILMNEB MONOKRISTALLI MADALAKONTSENTRATSIOONILISTE TUUMADE INTERAKTSIOON NAABERTUUMADEGA

Kirjeldatakse kahekomponendilise spinnsüsteemi (palju *I*- ja vähe *S*-tuumi) käitumist katses, mis koosneb kolmest järjestikusest etapist, s. o. sobiva algseisu tekitamisest, *I*-tuumade nn. *spin-locking*'ust maagilise nurga all ja *S*-tuumade signaali registreerimisest nende samaaegse lahtisidestamisega *I*-tuumadest. Selgub, et joonte asendid registreeritud signaalist kahekordse Fourier' teisendusega saadud spektris sõltuvad *S*-tuuma ja tema naaber-*I*-tuumade vaheliste interaktsioonide konstantidest.

E. KUNDLA

### ON A SOLID STATE NMR EXPERIMENT IN WHICH A COUPLING APPEARS BETWEEN RARE AND NEIGHBOURING ABUNDANT NUCLEI

The evolution of the state of a two-component (abundant *I* and rare *S* nuclei) spin system in a three-step experiment is described. The successive experimental steps are the initial state preparation, the magic angle spin-locking of *I* nuclei, and the *S*-spin signal registration with simultaneous decoupling of *I*-nuclei. It becomes evident that the double Fourier spectra line positions depend on the coupling constants between *S* and neighbouring *I* nuclei.