



XII Ogólnopolska Konferencja  
**KRYSTAŁY MOLEKULARNE 2000**



Wydział Fizyki i Techniki Jądrowej AGH  
**KRAKÓW**

20–23 września 2000 r.

## BADANIE RUCHÓW MOLEKULARNYCH METODĄ SOLID-ECHA

P. Bilski<sup>a)</sup>, N.A. Sergeev<sup>b)</sup>, J. Wąsicki<sup>a)</sup>

<sup>a)</sup> Instytut Fizyki Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza, Poznań.

<sup>b)</sup> Instytut Fizyki Uniwersytetu Szczecińskiego, Szczecin

Metoda solid-echa polega na poddaniu ciała stałego zawierającego spiny jądrowe działaniu dwóch impulsów pola  $\mathbf{B}_1$  o częstości radiowej  $\omega_1$  przesuniętych w fazie o  $90^\circ$ .

Jeżeli w badanej próbce występować będą ruchy molekularne, wówczas analiza sygnału solid-echa, będącego odpowiedzią układu spinów jądrowych na przyłożone impulsy może dostarczyć informacji o wartościach czasu korelacji  $\tau_c$ . Jednak, aby uczynić tę metodę użytecznym narzędziem w badaniu reorientacji molekularnych należy określić, jaki wpływ na sygnał solid-echa mieć będzie szerokość impulsów( $t_1, t_2$ ) o częstości radiowej, albo inaczej wartość przykładanego pola  $\mathbf{B}_1$ .

W przypadku silnych radioimpulsów ( $\omega_1 \gg M_2^{1/2}$ ), sygnał solid-echa jest opisany następującym równaniem [1]:

$$V(t, t_2, \tau, t_1) \cong \beta \exp\left\{-\frac{1}{2} \overline{M_2} \left[t - \left(2\tau + t_2 - \frac{t_1}{2}\right)\right]^2 - \Delta M_2 \tau_c \left(t - \frac{3t_1}{4} - t_2\right)\right\} \quad (1)$$

Maksimum amplitudy sygnału solid-echa występuje w chwili  $t_e$ :

$$t_e = 2\tau + t_2 - \frac{t_1}{2} - \frac{\Delta M_2}{M_2} \tau_c \quad (2)$$

Wstawiając tą zależność do (1) otrzymujemy następujące wyrażenie na maksimum amplitudy solid-echa ( $M_2^{1/2} \tau_c \ll 1$ ,  $\omega_1 \gg M_2^{1/2}$ ):

$$V(t_e, t_2, \tau, t_1) \cong \beta \exp\left[-\Delta M_2 \tau_c \left(2 - \frac{5t_1}{4\tau}\right)\right] \quad (3)$$

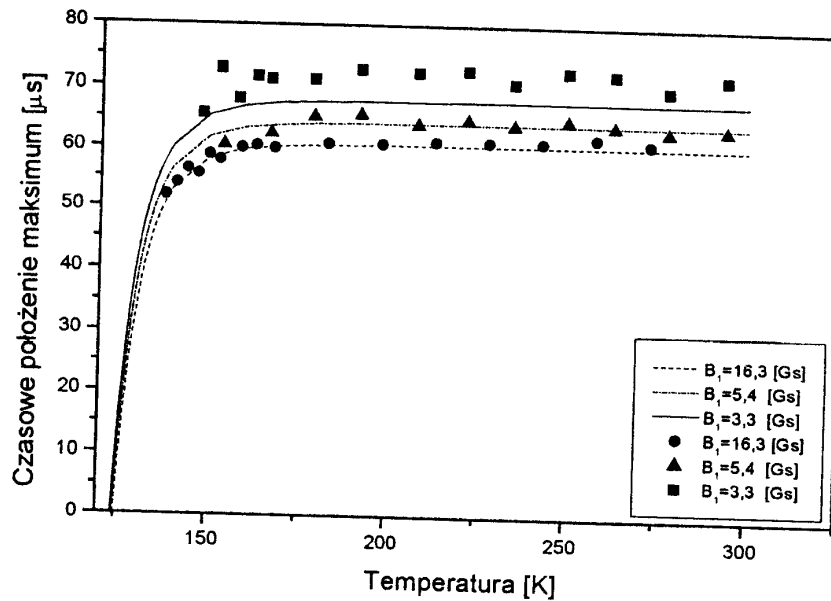
Rozważmy teraz przypadek radioimpulsów, dla których  $\omega_1 \geq M_2^{1/2}$  i  $\omega_1 \tau_c \ll 1$ . Można pokazać, że wówczas:

$$V(t, t_2, \tau, t_1) \cong \beta \exp\left\{-\frac{3}{8} \frac{\overline{M_2}}{\omega_1^2} - \frac{1}{2} \overline{M_2} \left[t - \left(2\tau + t_2 - \frac{t_1}{2}\right)\right]^2 - \Delta M_2 \tau_c \left(t - \frac{t_1}{2} - \frac{t_2}{4}\right)\right\} \quad (4)$$

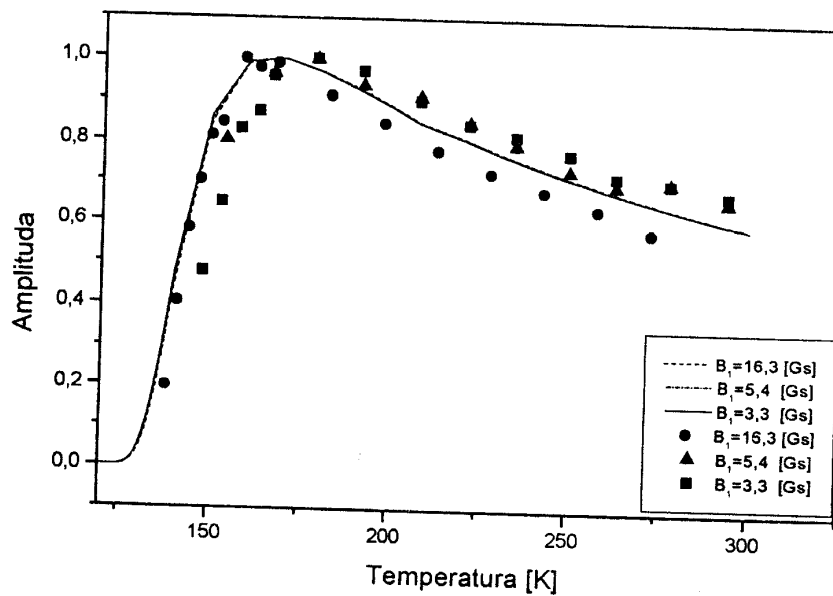
oraz

$$V(t_e, t_2, \tau, t_1) \cong \beta \exp\left[-\frac{1}{2} \frac{\overline{M_2}}{\omega_1^2} - \Delta M_2 \tau_c \left(2 - \frac{4t_1 - 3t_2}{4\tau}\right)\right] \quad (5)$$

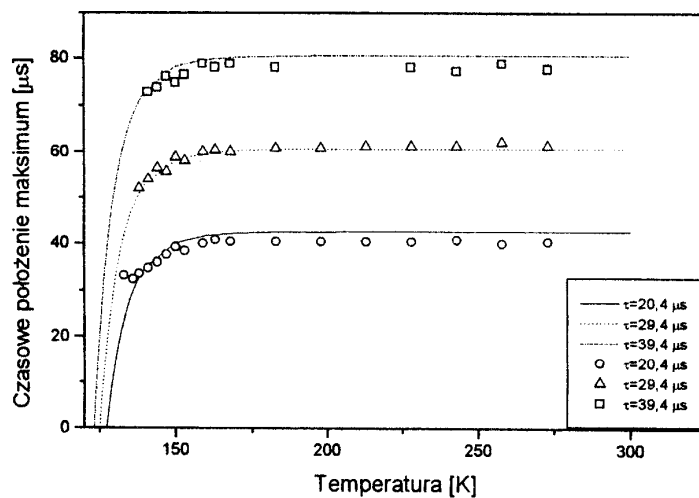
Na rysunkach 1–4 przedstawiono temperaturowe zależności amplitudy i czasowego położenia maksimum solid-echa dla polikrystalicznej próbki  $NH_4Cl$  w funkcji pola  $\mathbf{B}_1$ , jak też odległości między impulsami  $\tau$ . Dane eksperymentalne przedstawione są za pomocą punktów, natomiast krzywe teoretyczne wykonane na podstawie wzorów (2) i (5) zaznaczone są liniami. Wykresy pokazują dobrą zgodność pomiędzy teorią, a eksperymentem.



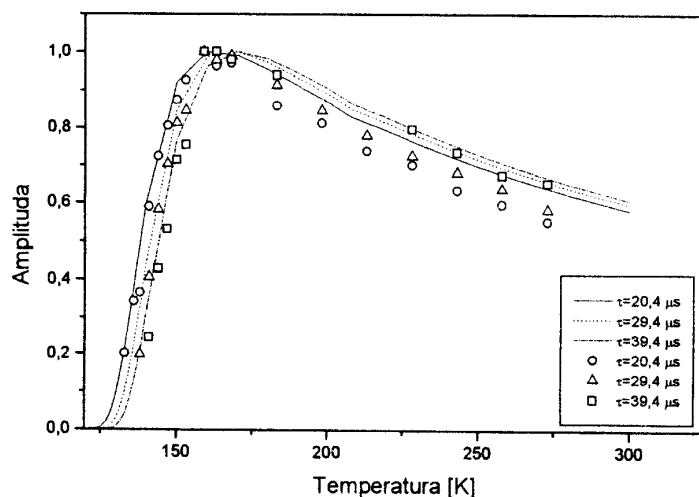
*Rys.1. Zależność temperaturowa czasowego położenia maksimum dla próbki polikrystalicznej  $\text{NH}_4\text{Cl}$  dla różnych wartości pola  $B_1$  (szerokości impulsów), przy stałej wartości odległości pomiędzy impulsami  $\tau = 29,4 \mu\text{s}$ . Linie: ciągła, przerywana i kropkowana to krzywe teoretyczne wyznaczone na podstawie równania (2). Punkty przedstawiają dane eksperymentalne.*



*Rys.2. Zależność temperaturowa amplitudy sygnału solid-echa dla próbki polikrystalicznej  $\text{NH}_4\text{Cl}$  dla różnych wartości pola  $B_1$  (szerokości impulsów), przy stałej wartości odległości pomiędzy impulsami  $\tau = 29,4 \mu\text{s}$ . Linie: ciągła, przerywana i kropkowana to krzywe teoretyczne wyznaczone na podstawie równania (5). Punkty przedstawiają dane eksperymentalne.*



Rys.3. Zależność temperaturowa czasowego położenia maksimum dla próbki polikrystalicznej  $\text{NH}_4\text{Cl}$  dla różnych odległości między impulsami  $\tau$ , przy stałej wartości pola  $B_1=16,31$  [Gs]. Linie: ciągła, przerywana i kropkowana to krzywe teoretyczne wyznaczone na podstawie równania (2). Punkty przedstawiają dane eksperymentalne.



Rys.4. Zależność temperaturowa amplitudy sygnału solid - echa dla próbki polikrystalicznej  $\text{NH}_4\text{Cl}$  dla różnych odległości między impulsami  $\tau$ , przy stałej wartości pola  $B_1=16,31$  [Gs]. Linie: ciągła, przerywana i kropkowana to krzywe teoretyczne wyznaczone na podstawie równania (5). Punkty przedstawiają dane eksperymentalne.

#### Literatura:

- [1] Biłski P., Sergeev N.A., Wąsicki J.: „Materiały XXXI Ogólnopolskiego Seminarium NMR” pp. 139–142, Kraków, IFJ 1999; Abstrakt RAMIS’99, Poznań-Kiekrz (1999) P.–56; *Appl. Magn. Res.*, **18** (2000).
- [2] Sergeev N.A., „Effects of the finite pulse widths on solid echo signals” *Solid State NMR*, **10**, 45-51 (1997).
- [3] Slichter C.P., *Principles of Magnetic Resonance*, Springer, Berlin, (1980).