



МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ имени М.В. Ломоносова

Константинова Елизавета Александровна

***Введение в теорию Ядерного Магнитного
Резонанса***

Уравнения БЛОХА

$$\mathbf{M}_0 = \chi \mathbf{H}_0,$$

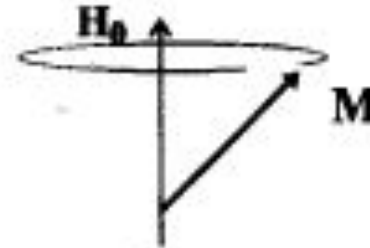
где $\chi = \frac{Ng_N^2 \beta_N^2 I(I+1)}{3kT}$

$$\frac{d\mathbf{M}}{dt} = \gamma \mathbf{M} \times \mathbf{H}$$

$$\mathbf{H} = \{0, 0, H_0\} = \text{const}, \quad \omega_0 = \gamma H_0$$

$$\begin{cases} \frac{dM_x}{dt} = \omega_0 M_y, \\ \frac{dM_y}{dt} = -\omega_0 M_x, \\ \frac{dM_z}{dt} = 0. \end{cases}$$

$$\begin{aligned} M_x(t) &= M_x(0) \cos \omega_0 t + M_y(0) \sin \omega_0 t, \\ M_y(t) &= -M_x(0) \sin \omega_0 t + M_y(0) \cos \omega_0 t, \\ M_z(t) &= M_z(0). \end{aligned}$$



Уравнения БЛОХА

$$\frac{dM_x}{dt} = \omega_0 M_y - \frac{M_x}{T_2}, \quad \frac{dM_z}{dt} = -\frac{(M_z - M_0)}{T_1}.$$

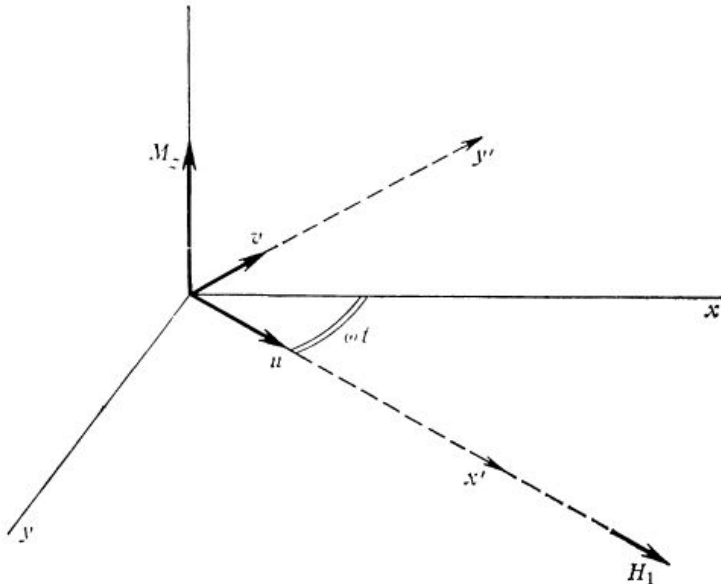
$$\frac{dM_y}{dt} = -\omega_0 M_x - \frac{M_y}{T_2},$$

$$\frac{dM_z}{dt} = -\frac{(M_z - M_0)}{T_1}.$$

$$\frac{dM_x}{dt} = -\frac{M_x}{T_2},$$

$$\frac{dM_y}{dt} = -\frac{M_y}{T_2}.$$

Вращающаяся система координат



$$\mathbf{M}' = i'u + j'v + k'M_z,$$

$$\mathbf{H}'_1 = i'H_1,$$

$$\omega' = -\omega k'.$$

$$\frac{d\mathbf{M}}{dt} = \gamma_N (\mathbf{M} \times \mathbf{H}_0) + \gamma_N (\mathbf{M} \times \mathbf{H}_1) - \frac{(iM_x + jM_y)}{T_2} - \frac{k(M_z - M_0)}{T_1},$$

где i, j, k — единичные векторы вдоль осей x, y, z и

$$\mathbf{H}_1 = H_1 (i \cos \omega t - j \sin \omega t).$$

Вращающаяся система координат

$$\mathbf{M}' = i'u + j'v + k'M_z,$$

$$\mathbf{H}'_1 = i'H_1,$$

$$\boldsymbol{\omega}' = -\omega \mathbf{k}'.$$

$$i' \frac{du}{dt} + j' \frac{dv}{dt} + k' \frac{dM_z}{dt}.$$

$$\frac{d\mathbf{i}'}{dt} = \boldsymbol{\omega}' \times \mathbf{i}'. \quad \frac{d\mathbf{M}}{dt} = \left(i' \frac{du}{dt} + j' \frac{dv}{dt} + k' \frac{dM_z}{dt} \right) + \left(u \frac{di'}{dt} + v \frac{dj'}{dt} + M_z \frac{dk'}{dt} \right) =$$

$$= \frac{\delta \mathbf{M}'}{\delta t} + \boldsymbol{\omega}' \times \mathbf{M}'.$$

$$\frac{\delta \mathbf{M}'}{\delta t} = \gamma_N \mathbf{M}' \times (\mathbf{H}'_0 + \boldsymbol{\omega}' / \gamma_N) + \gamma_N (\mathbf{M}' \times \mathbf{H}'_1) - \frac{i'u + j'v}{T_2} - \frac{k'(M_z - M_0)}{T_1}$$

Компоненты вектора \mathbf{M}' равны соответственно

$$\frac{du}{dt} = (\omega_0 - \omega) v - \frac{u}{T_2},$$

$$\frac{dv}{dt} = -(\omega_0 - \omega) u + \gamma_N H_1 M_z - \frac{v}{T_2},$$

$$\frac{dM_z}{dt} = -\gamma_N H_1 v - \frac{(M_z - M_0)}{T_1}.$$

Вращающаяся система координат

$$u = M_0 \frac{\gamma_N H_1 T_2^2 (\omega_0 - \omega)}{1 + T_2^2 (\omega_0 - \omega)^2 + \gamma_N^2 H_1^2 T_1 T_2},$$

$$v = M_0 \frac{\gamma_N H_1 T_2}{1 + T_2^2 (\omega_0 - \omega)^2 + \gamma_N^2 H_1^2 T_1 T_2},$$

$$M_z = M_0 \frac{1 + T_2^2 (\omega_0 - \omega)^2}{1 + T_2^2 (\omega_0 - \omega)^2 + \gamma_N^2 H_1^2 T_1 T_2}.$$

ВВЕДЕНИЕ

ЯМР — это физическое явление, используемое для изучения свойств молекул материи путем облучения ядер атомов радиоволнами в магнитном поле

Использование ЯМР

- *Химический анализ:* структура и динамика молекул
- *Материаловедение:* характеристики физических свойств материалов
- *Получение изображений в медицине:* магнитно-резонансная томография (самая большая область применения)
- *Химическая инженерия:* измерение диффузии, сечений потока и распределения скоростей
- *Картаж* в геофизике и разведка нефти: получение характеристик углеводородов в горных породах
- *Контроль процесса производства и качества продукции* при помощи ЯМР со слабым полем и односторонних ЯМР-сенсоров

ОБОРУДОВАНИЕ для ЭПР

Получение изображения: ЯМР-томограф, состоящий из магнита, радиочастотного передатчика, приемника, модулятора для магнитных градиентных полей и компьютера

- Контроль процесса производства и качества: компьютерный спектрометр или *мобильный ЯМР-спектрометр* с соответствующими ЯМР-сенсорами

Спектроскопия:
ЯМР-
спектрометр,
состоящий из
магнита, СВЧ-
источника,
приемника и
компьютера



История ЯМР:

Стоимость некоторых услуг
в ЯМР:

Спектроскопия 250 000-4000
000 Евро

Получение изображений
250 000-2000 000 Евро

ЯМР для контроля процесса
производства и качества
25 000-100 000 Евро

Дипломная работа 20 000
Евро

Кандидатская диссертация,
включая стоимость
оборудования 200 000 Евро

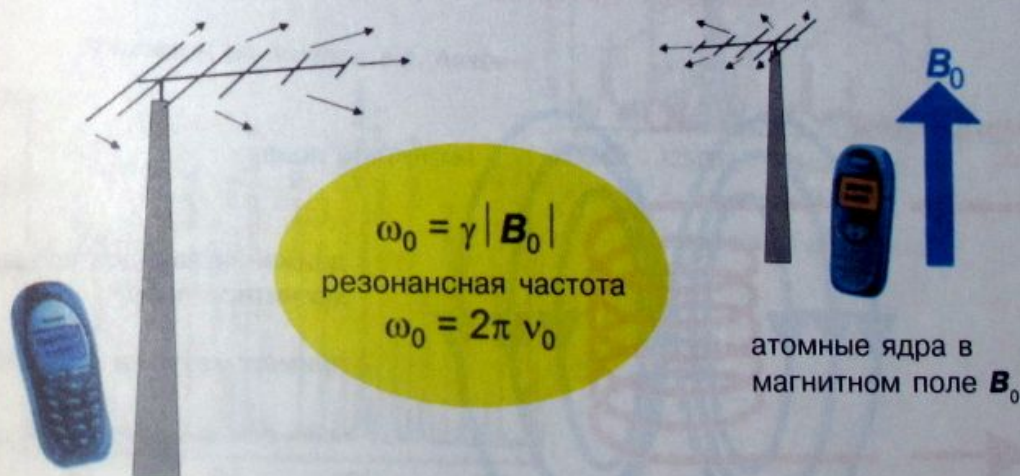
- 1945: Первое успешное определение сигналов ЯМР **Феликсом Блохом** (Felix Bloch) (Стэнфорд) и **Эдвардом Парселлом** (Edward Purcell) (Гарвард): Нобелевская премия в области физики в 1952 г.
- 1949: Открытие Эрвином Ханом (Erwin Hahn) *ЯМР-эха*
- 1951: Открытие *химических сдвигов* Дж.Т. Арнольдом (J.T. Arnold) и Ф.С. Ю (F.C. Yu)
- 1951: Открытие *непрямого спин-спинового взаимодействия* У.Дж. Проктором (W.G. Proctor)
- 1953: *ЯМР поля Земли* для каротажа Шлюмбергера-Долла (Schlumberger-Doll)
- 1966: Введение *метода Фурье в обработку спектра ЯМР* **Ричардом Эрнстом** (Richard Ernst), Нобелевская премия в области химии в 1991 г.
- 1971: *Двумерный ЯМР* Жана Жене (Jean Jeener), позже — многомерный ЯМР Ричарда Эрнста
- 1972: Получение *ЯМР-изображений* **Полом Лотербюром** (Paul Lauterbur) и **Питером Мэнсфилдом** (Peter Mansfield), Нобелевская премия по медицине в 2003 г.
- 1975: *Мультиквантовый ЯМР* и спектроскопия, разработанная Т. Хэши (T. Hachi), позднее — **Алексом Пайнезом** (Alex Pines) и Ричардом Эрнстом
- 1977: *ЯМР-спектроскопия высокого разрешения для твердых тел* Джона Во (John Waugh), Эда Стеджскела (Ed Stejskal) и Джека Шефера (Jack Schaefer)
- 1979: *Двумерный обменный ЯМР* Жана Жене. **Курт Вютрих** (Kurt Wuthrich) применил его для анализа белков в молекулярной биологии, Нобелевская премия по химии в 2002 г.
- 1980: *Односторонний ЯМР* для контроля процесса производства и для медицинских целей **Джаспера Джэксона** (Jasper Jackson)
- 1984: Гиперполяризация ксенона **Вильямом Хэппером** (William Harper)
- 1995: Коммерциализация ЯМР-каротажа компанией NUMAR

Основные принципы ЯМР

- При воздействии внешнего магнитного поля атомные ядра могут получать и испускать радиоволны. Их частота ν_0 пропорциональна силе B_0 магнитного поля: $\omega_0 = 2\pi\nu_0 = \gamma B_0$
- Коэффициентом пропорциональности является *гиромагнитное отношение* γ . Это величина, постоянная для данного ядерного изотопа
- Содержание некоторых изотопов в природе и соответствующие частоты излучения приведены ниже:

ядерные изотопы	содержание в природе	ν_0 при $B_0 = 1,0$ Тл
^1H	99,98%	42,57 МГц
^{14}N	99,63%	3,08 МГц
^{19}F	100,00%	40,05 МГц
^{13}C	1,108%	10,71 МГц
^{129}Xe	26,44%	11,78 МГц

ЯМР как форма телекоммуникации
в магнитном поле



ЯМР-спектрометр

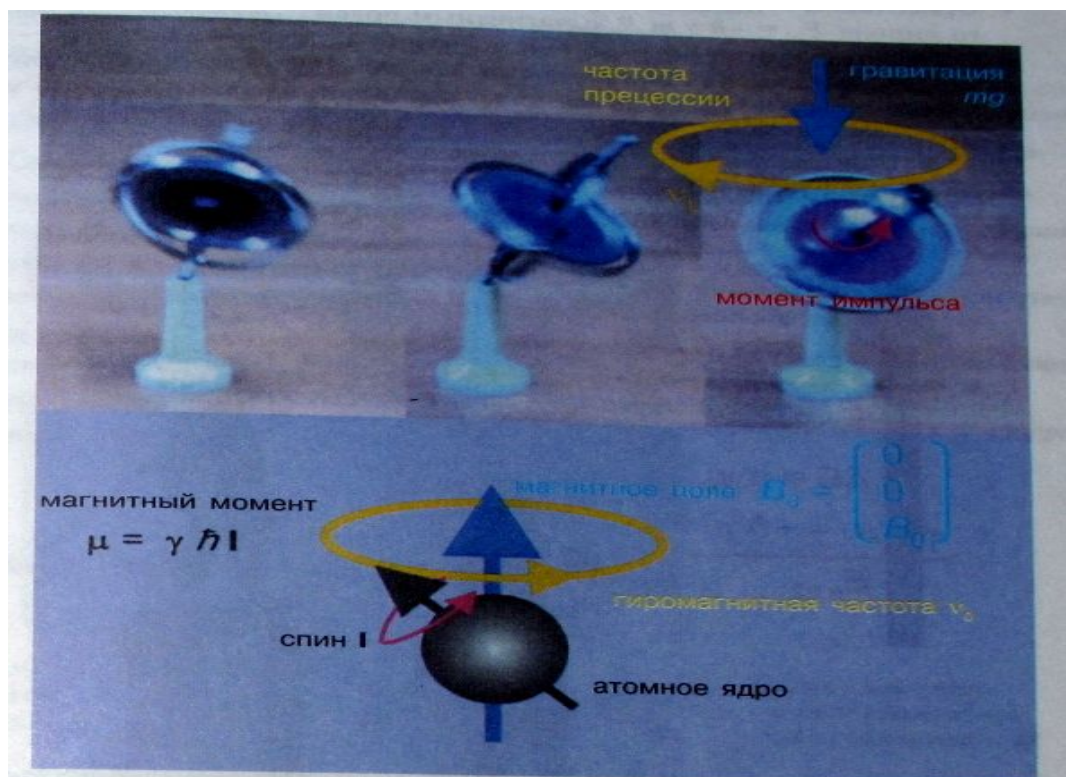
атомные ядра в
магнитном поле B_0

Химический сдвиг

- Индуцированное магнитное поле приводит к сдвигу резонансной частоты:
$$\omega_L = 2\pi\nu_L = \gamma(1 - \sigma)B_0$$
- Величина σ — *постоянная магнитного экранирования* для данной химической группы
- Величина $\delta = (\nu_L - \nu_{\text{эт}})/\nu_{\text{эт}}$ — это *химический сдвиг* данной группы. Он не зависит от силы магнитного поля B_0
- Химический сдвиг можно вычислить по таблицам инкрементов химического сдвига, а также на основе законов квантовой механики
- Величина $\nu_{\text{эт}}$ — это эталонная частота, например, резонансная частота тетраметилсилана (ТМС) для ЯМР ^1H и ^{13}C
- В разных группах химических элементов величина химического сдвига различается
- В жидкостях резонансный сигнал обычно имеет ширину 0,1 Гц
- Распределение резонансных частот образует *ЯМР-спектр*
- ЯМР-спектр отображает структуру молекулы, так же как распространение радиоволн на определенной территории говорит о географических особенностях местности
- Выявление ЯМР-спектра молекул в растворах является стандартным методом анализа для последующего химического синтеза

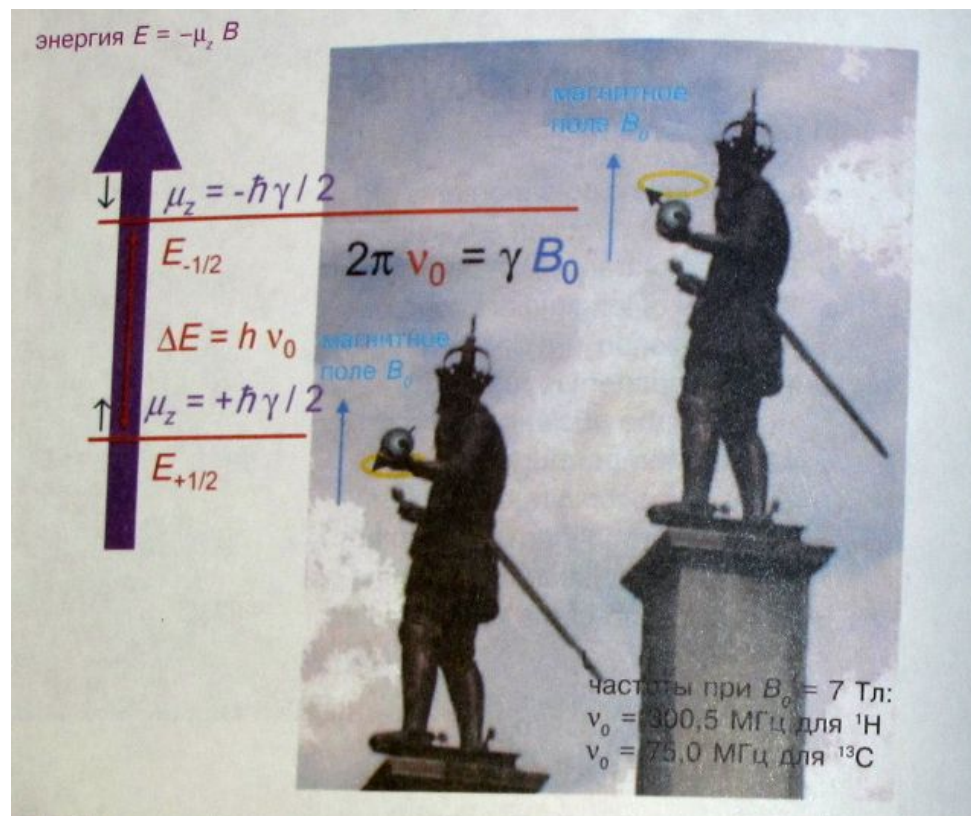
Ядерный магнетизм

- В образце вещества можно обнаружить примерно 10^{23} атомных ядер на моль
 - Некоторые атомные ядра обладают свойствами *магнитного диполя*
 - Например: ^1H , ^2H , ^{13}C , ^{14}N , ^{19}F , ^{31}P , ^{129}Xe
 - Так как атомные ядра состоят из небольшого количества элементарных частиц, к ним нельзя применять законы классической физики. В них действуют законы *квантовой механики*
 - Согласно положениям квантовой механики, элементарный магнитный диполь с дипольным моментом m также имеет *момент импульса $\hbar I$* , или *спин I*
 - В законах физики элементарных частиц используется постоянная Планка h или $\hbar = h/(2\pi)$
 - Классическим объектом, имеющим момент импульса, является *вращающийся волчок*
 - Вращающийся в гравитационном поле волчок формально подчиняется тем же законам, что и спин в магнитном поле: он прецессирует вокруг направления поля
- В ЯМР частота прецессии называется *гиромагнитной (ларморовой) частотой*



- Согласно принципу неопределенности Гейзенберга, можно измерить только составляющую спина в направлении магнитного поля
- Из квантовой механики известно, что спин со *спиновым квантовым числом* I может принимать $2I + 1$ стабильных ориентаций в магнитном поле
- Проекция момента импульса спина на направление магнитного поля пропорциональна *магнитному квантовому числу* m , где $m = I, I - 1, \dots, -I$
- Уравнение $I = 1/2$ верно для ядер ^1H , ^{13}C , ^{19}F , ^{31}P , ^{129}Xe , а $I = 1$ — для ядер ^2H , ^{14}N
- Для ядра со спином $I = 1/2$ возможны две ориентации его проекции по отношению к оси магнитного поля: \uparrow и \downarrow

- Ориентации отличаются по энергии взаимодействия ядерного магнитного диполя $E_m = -\hbar \gamma m B_0$ с магнитным полем
- Согласно формуле Бора $\Delta E = h \nu_0$, разница энергий $\Delta E = E_{-1/2} - E_{+1/2} = \hbar \gamma B_0$, связанная с ориентациями, соответствует частоте $\omega_0 = 2\pi \nu_0 = \gamma B_0$
- В этом случае ν_0 является частотой прецессии ядерного спина в магнитном поле



Ядерная намагниченность в условиях ТД равновесия

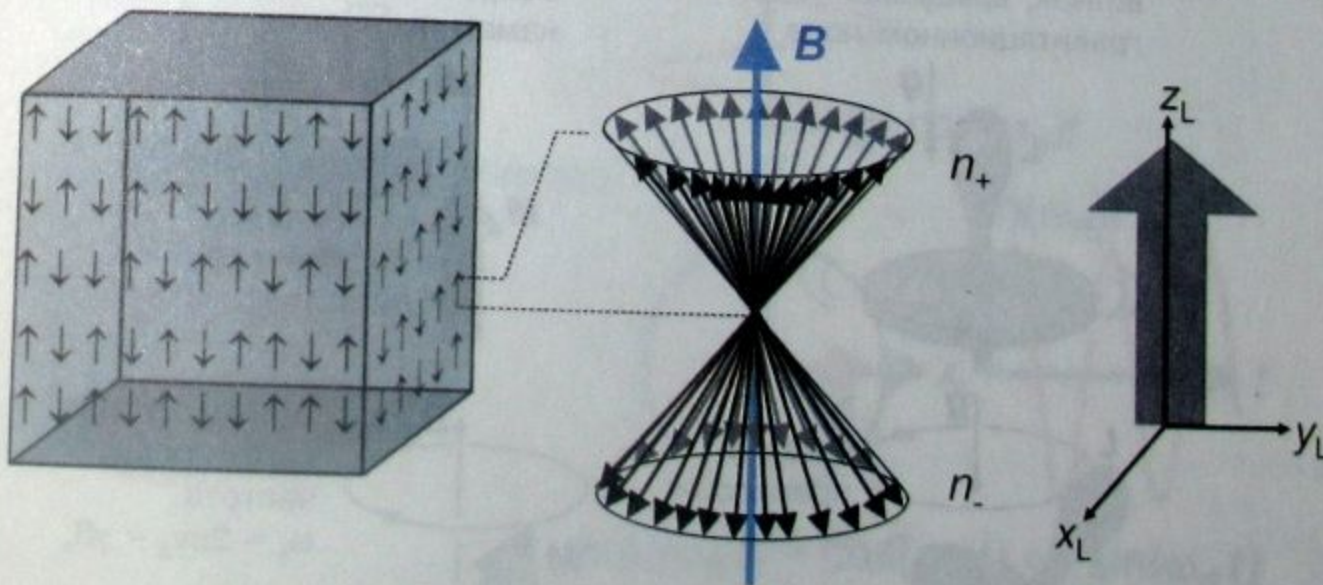
- Все магнитные дипольные моменты складываются как векторы; их составляющие в каждом направлении пространства являются аддитивными
- Сумма поперечных компонентов (если таковые имеются) равна нулю
- Сумма продольных компонентов создает *продольную намагниченность*
- Эти компоненты называются *магнитной поляризацией ядер* или *ядерной намагниченностью*
- При комнатной температуре только около 10^8 спинов из 10^{23} способствуют макроскопическому ядерному намагничиванию образца
- В состоянии термодинамического равновесия ядерная намагниченность ориентирована параллельно направлению магнитного поля
- Направление магнитного поля совпадает с направлением оси z лабораторной системы координат ЛСК (индекс L)

Макроскопическое намагничивание

макроскопический
образец: 10^{23} ядерных
спинов

$$n/n_+ = \exp\{-\Delta E/k_B T\}$$

сумма векторов:
макроскопическая
намагниченность \mathbf{M}



Уравнение Блоха

- Когда намагниченность M не совпадает с осью z_L , она прецессирует вокруг z_L с частотой ν_0 , аналогично прецессии вращающегося волчка в гравитационном поле g
- Эта прецессия описана уравнением для магнитного *вращающегося волчка*:

$$\frac{d}{dt} \mathbf{M} = \gamma \mathbf{M} \times \mathbf{B}$$

- Согласно этому уравнению, любое изменение $d\mathbf{M}$ намагниченности M перпендикулярно \mathbf{M} и \mathbf{B} ; следовательно, \mathbf{M} прецессирует
- В общем, любое макроскопическое прецессирующее движение является затухающим. Поэтому Феликс Блох ввел феноменологические члены затухания:

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} 1/T_2 & 0 & 0 \\ 0 & 1/T_2 & 0 \\ 0 & 0 & 1/T_1 \end{pmatrix}$$

Конечное уравнение и является *уравнением Блоха*,

$$\frac{d}{dt} \mathbf{M} = \gamma \mathbf{M} \times \mathbf{B} - \mathbf{R} (\mathbf{M} - \mathbf{M}_0)$$

где M_0 — начальная намагниченность, T_1 — время продольной релаксации, T_2 — время поперечной релаксации

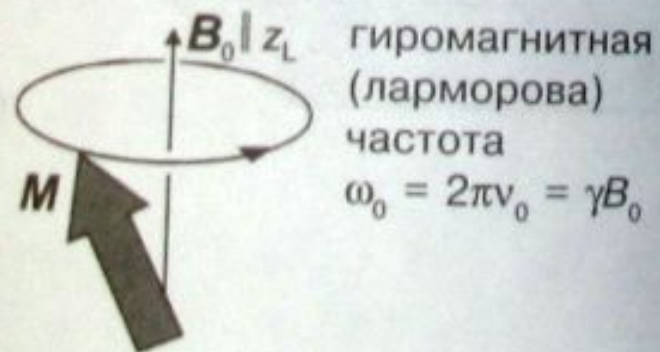
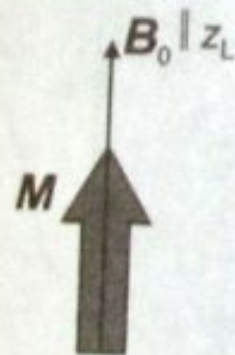
Примечание: уравнение Блоха выражает левое вращение поперечной намагниченности. Но для удобства в этой работе, как и в большинстве литературы, будет рассматриваться правое вращение

Прецессия ядерной намагниченности

волчок, вращающийся в гравитационном поле



макроскопическая ядерная намагниченность



Контактная ядерная намагниченность

- Ядерная намагниченность может быть отклонена от направления z_L поляризации магнитного поля B_0 посредством радиочастотного (РЧ) излучения
- Таким образом происходит генерация магнитного поля, которое вращается вокруг B_0 с частотой $\omega_{\text{рч}}$
- Для максимального взаимодействия вращающегося поля с ядерной намагниченностью выбирается режим резонанса $\omega_{\text{рч}} = \omega_0$
- Так как $\nu_0 = \omega_0/2\pi$ — радиочастота, вращающееся магнитное поле является электромагнитной радиочастотной волной
- Высокочастотные электромагнитные волны излучаются передающими антеннами или колебательными электронными РЧ-контурами
- Электронный осциллятор состоит из катушки с индуктивностью L , конденсатора с емкостным сопротивлением C и резистора с сопротивлением R
- Катушка генерирует линейно поляризованное осциллирующее магнитное поле $2B_1 \sin \omega_{\text{рч}} t$
- Две ортогональных линейно поляризованных волны $\cos \omega_{\text{рч}} t$ и $\sin \omega_{\text{рч}} t$ генерируют вращающуюся волну
- Линейно поляризованная волна $\sin \omega_{\text{рч}} t$ может быть разложена на волну правого вращения $1/2 \exp\{i \omega_{\text{рч}} t\}$ и волну левого вращения $1/2 \exp\{-i \omega_{\text{рч}} t\}$
- Чтобы оптимально использовать осциллирующее магнитное поле, образец исследуемого вещества помещают внутрь катушки

Вращающаяся система координат

- При преобразовании одной системы координат в другую меняется точка наблюдения, то есть они изменяются математически, но не физически
- Так как прецессия ядерной намагниченности является вращательным движением и РЧ-возбуждение является вращающейся волной, намагниченность проще изучать во *вращающейся системе координат* (ВСК)
- Собака на кольцевой дороге помещена в *лабораторную систему координат* (ЛСК): для нее велосипеды движутся по кольцу с угловой скоростью $\omega_{рч}$ и $\omega_{рч} + \Omega$
- Велосипедисты видят местность вокруг из ВСК. Они находятся в состоянии покоя в соответствующей ВСК
- Для велосипедиста слева внизу местность вращается против направления движения его велосипеда с угловой скоростью $-\omega_{рч}$
- Для велосипедиста слева внизу верхний велосипедист едет с угловой скоростью Ω в его ВСК
- Вектор, соединяющий центр кольцевой дороги и точку, в которой находятся велосипедисты, совпадает с вектором намагниченности в поперечной плоскости xy
- Угловая скорость ВСК относительно ЛСК соответствует частоте $\omega_{рч}$ РЧ-волны

Координатное преобразование



лабораторная система
координат x_L, y_L, z_L : собака
смотрит на
велосипедистов

вращающаяся система
координат x, y, z :
велосипедист слева внизу
смотрит на собаку

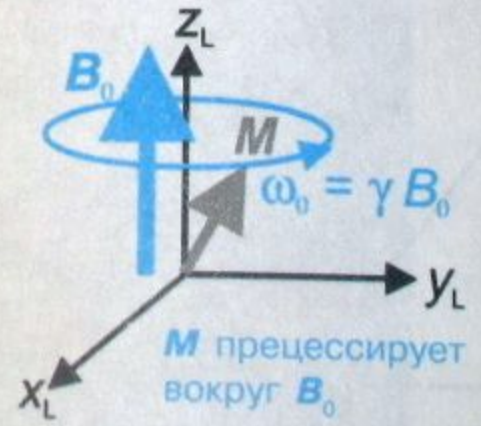


Радиочастотные импульсы

- В системе координат, которая вращается с частотой ω_0 вокруг оси z , намагниченность M остается в состоянии покоя, даже если она не параллельна магнитному полю B_0
- Если намагниченность не вращается, то в данной системе координат нет активного магнитного поля, создающего вращающий момент намагниченности
- При резонансе $\omega_{\text{рч}} = \omega_0$ и РЧ-поле B_1 не зависит от времени и является статичным при повороте в ВСК
- В ВСК, которая вращается в ЛСК с $\omega_{\text{рч}} = \omega_0$ вокруг B_0 , намагниченность вращается вокруг поля B_1 с частотой $\omega_1 = \gamma |B_1|$ аналогично вращению в ЛСК вокруг поля B_0 с частотой $\omega_0 = \gamma |B_0|$
- Если B_1 поворачивается в импульсном режиме за время t_n , то 90° импульс определяется для $\omega_1 t_n = 90^\circ$, а 180° импульс для $\omega_1 t_n = 180^\circ$
- Фаза φ_0 вращающегося РЧ-поля $B_1 \exp\{i \omega_{\text{рч}} t + i \omega_0 t\}$ определяет направление поля B_1 в плоскости xu в ВСК
- Используя эту фазу, намагниченность можно вращать в ВСК вокруг разных осей, например, 90_y° означает положительное вращение на 90° вокруг оси y в ВСК, а 180_x° — положительное вращение вокруг оси x

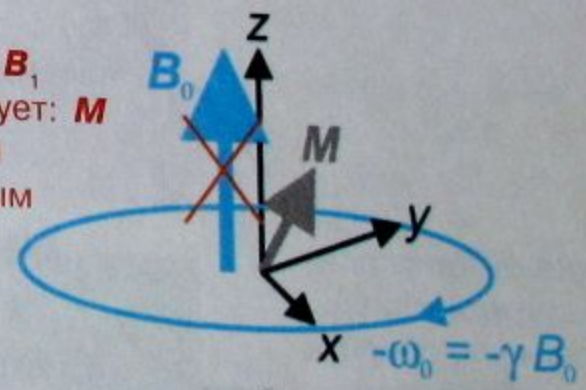
Действие РЧ-импульса

лабораторная система координат

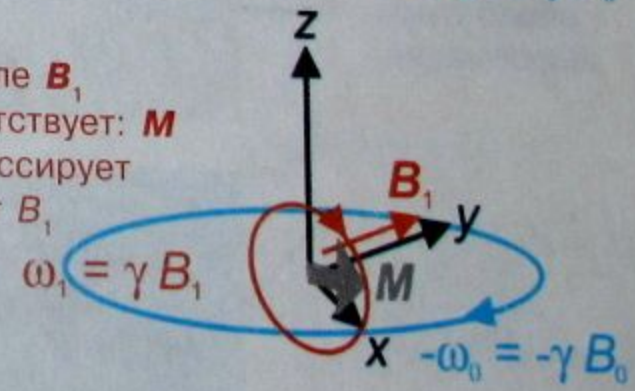


вращающаяся система координат

РЧ-поле B_1 отсутствует: M остается статичным



РЧ-поле B_1 присутствует: M прецессирует вокруг B_1

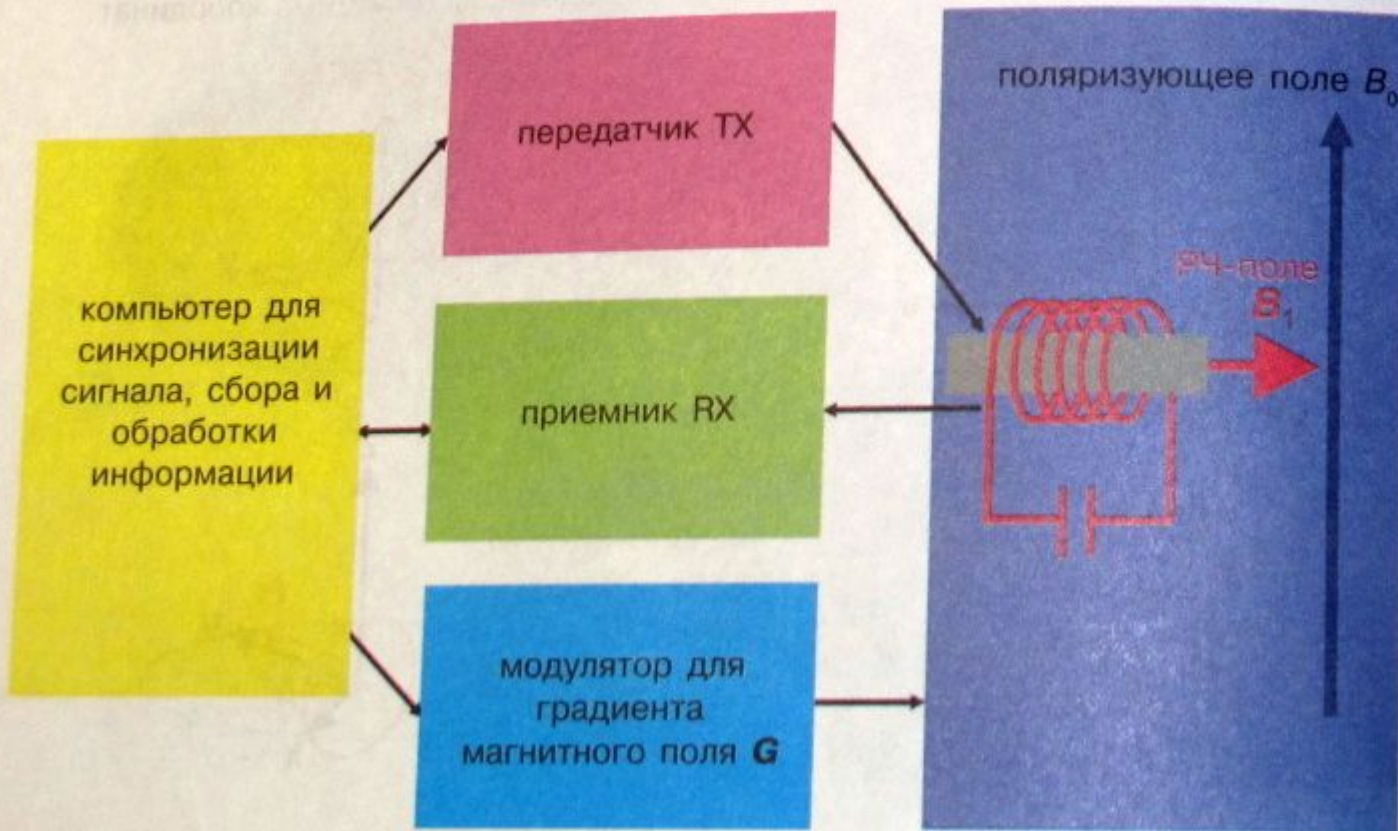


90°-ный импульс: $\omega_1 t_{\text{и}} = \pi/2$
 180°-ный импульс: $\omega_1 t_{\text{и}} = \pi$

ЯМР-спектрометр

- Образец помещается в магнитное поле B_0 внутри РЧ-катушки, которая является частью *РЧ-осциллятора*, настроенного на частоту $\omega_{рч}$
- Осциллятор, контролируемый компьютером, соединяется с *РЧ-передатчиком* (ТХ) или с *приемником* (RX)
- РЧ-импульс в 90° из передатчика изменяет направление намагниченности с z_L , сонаправленного с B_0 , в поперечную плоскость
- Под воздействием импульса поперечные компоненты намагниченности прецессируют вокруг оси z_L в ЛСК с частотой ω_0
- Согласно принципу динамо, прецессирующая намагниченность индуцирует электрическое напряжение в катушке, осциллирующей с частотой ω_0
- В приемнике этот сигнал смешивается с соответствующей волной с частотой $\omega_{рч}$, и тогда аудиосигнал определенной частоты отфильтровывается для приема
- Этот этап является переходом во *вращающуюся систему координат*
- В зависимости от фазы $\phi_0 = 0^\circ$ и 90° основной волны $\sin(\omega_{рч}t + \phi_0)$, в ВСК измеряются *квадратурные составляющие* поперечной намагниченности $\sin(\omega_0 - \omega_{рч})t$ и $\cos(\omega_0 - \omega_{рч})t$, соответственно
- Обычно оба компонента квадратуры измеряются одновременно
- Для получения изображений и измерений потока спектрометр оснащен переключаемыми градиентными полями в направлениях x_L , y_L и z_L в ЛСК

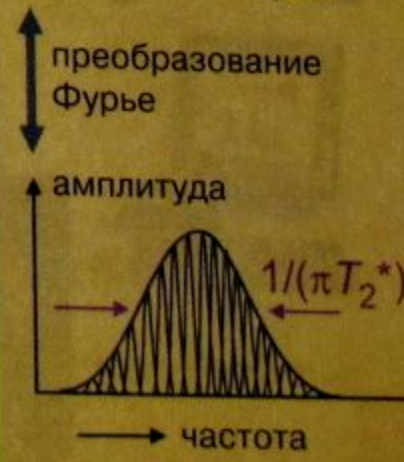
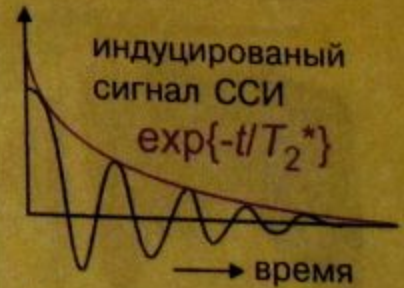
Оборудование спектрометра



Импульсное возбуждение

- За пределами магнитного поля моменты ядерного магнитного диполя ориентированы в пространстве случайным образом
- При помещении образца в магнитное поле B_0 , продольная намагниченность M_0 образует параллель с B_0 за константу времени T_1 , определяемую согласно распределению Больцмана $M_z(t) = M_0(1 - \exp\{-t/T_1\})$ для ядерных магнитных моментов
- РЧ-импульс под углом 90° от передатчика поворачивает намагниченность в плоскость, перпендикулярную направлению z магнитного поля B_0 в ВСК
- После РЧ-импульса поперечные составляющие намагничивания M_i прецессируют вокруг оси z в ВСК с различными частотами $\Omega_i = \omega_{Li} - \omega_{рч}$
- Каждая составляющая M_i соответствует различным химическим сдвигам или другим особенностям образца с различным полем магнитной поляризации
- Векторная сумма составляющих поперечной намагниченности затухает в течение константы времени T_2^* благодаря интерференции составляющих с различными частотами прецессии Ω_i
- T_2^* — это время поперечной релаксации, которое определяется зависящими или не зависящими от времени локальными магнитными полями
- Затухание сигнала часто экспоненциально: $M_{xy}(t) = M_z(0) \exp\{-t/T_2^*\}$
- Сигнал, индуцируемый в катушке после возбуждения импульса — это спад свободной индукции (ССИ)
- Анализ частоты ССИ при помощи преобразования Фурье дает возможность получения ЯМР-спектра с шириной линии $\Delta\Omega = 1/(\pi T_2^*)$

Метод Фурье для ЯМР

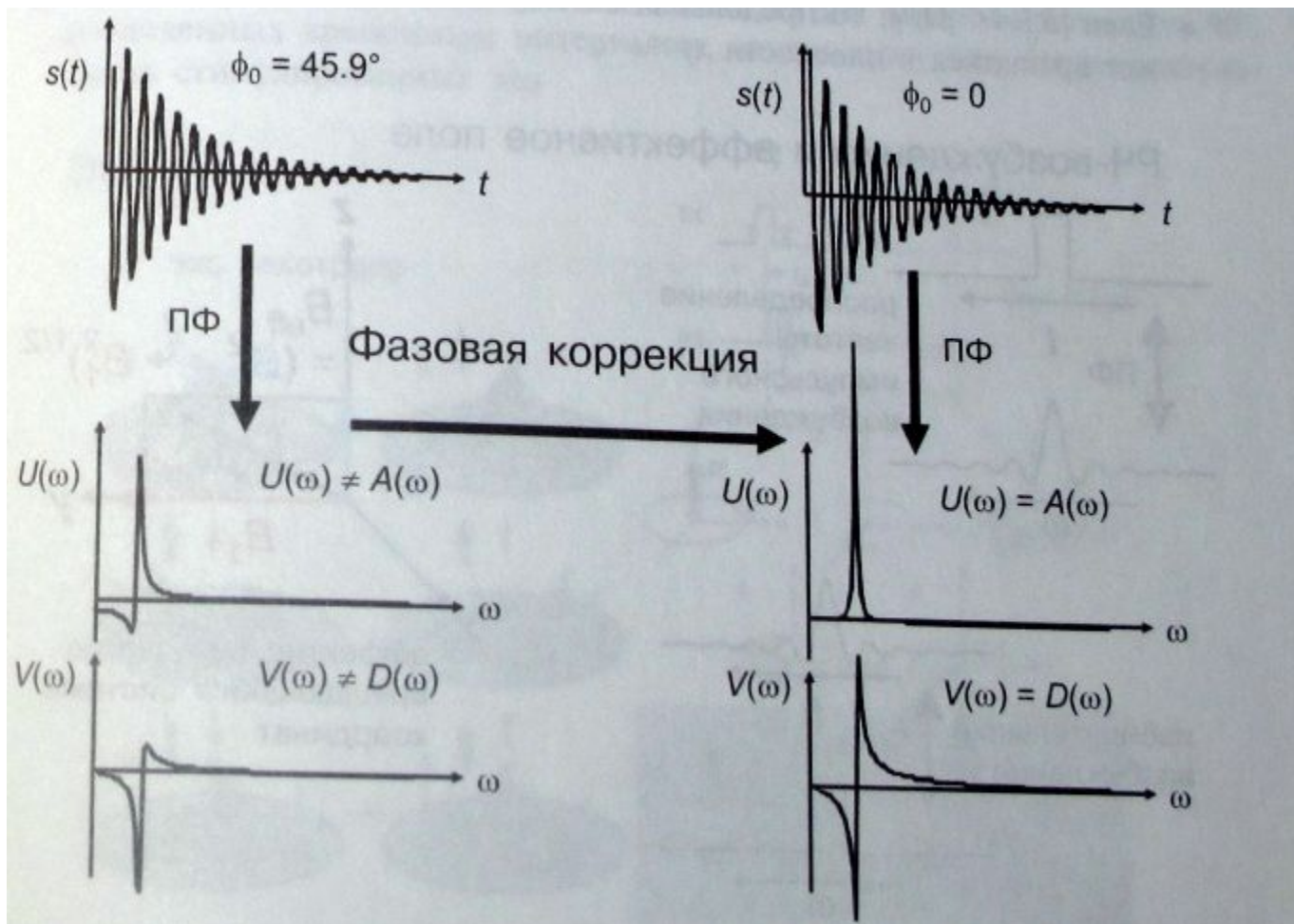


Преобразование Фурье

- При изучении теплопроводности Фурье ввел преобразование, названное впоследствии его именем
- *Преобразование Фурье (ПФ)* — это разложение функции $s(t)$ на гармонические волны $\exp\{i\omega t\} = \cos \omega t + i \sin \omega t$ с изменяющейся частотой ω
- В процессе ЯМР спад свободной индукции $s(t)$ преобразуется в спектр $S(\omega)$ синусоидных и косинусоидных волн: $S(\omega) = \int s(t) \exp\{-i\omega t\} dt$
- *Спектр* $S(\omega) = U(\omega) + i V(\omega)$ состоит из действительной части $U(\omega)$ и мнимой части $V(\omega)$
- Часто используется только магнитный спектр $|S(\omega)| = [U(\omega)^2 + V(\omega)^2]^{1/2}$
- Преобразование Фурье аналогично трансформации акустического сигнала в оттенки звука при прослушивании
- Для дискретного преобразования Фурье существует быстрый алгоритм, который был заново открыт в 1965 году Дж.У. Кули (J.W. Cooley) и Дж.У. Тьюки (J.W. Tukey)
Алгоритм требует дискретного представления функции времени $s(t)$ и спектра $S(\omega)$ с шагом Δt и $\Delta\omega$ переменных t и ω
Абсцисса дискретного спектра аналогична клавиатуре пианино
Амплитуда спектра аналогична громкости заданного тона
В ЯМР с импульсным возбуждением преобразование Фурье является частью процесса обработки информации
Импульсный ЯМР также называется *ЯМР-Фурье-спектроскопия*
Произведение двух Фурье-сопряженных переменных, например, t и ω , всегда дает угол. Он называется *фазой*.

Обработка сигнала

- В зависимости от фазы ϕ_0 вращающейся системы координат, ССИ измеряется как сумма импульсных откликов $s(t) = s(0) \exp\{-[1/T_2 - i\Omega]t + i\phi_0\}$ для каждой компоненты намагниченности с различными Ω в ВСК
- При $\phi_0 = 0$ действительной частью $U(\omega)$ преобразования Фурье $S(\omega)$ является абсорбционный сигнал $A(\omega)$, а мнимой частью $V(\omega)$ — дисперсионный сигнал $D(\omega)$
- При $\phi \neq 0$ абсорбционная и дисперсионная компоненты смешиваются в $U(\omega)$ и $V(\omega)$, а суммарный комплексный спектр $S(\omega) = U(\omega) + iV(\omega) = [A(\omega) + iD(\omega)]\exp\{i\phi_0\}$ должен быть скорректирован в фазе путем умножения на $\exp\{-i\phi_0\}$
- Фазовая коррекция ϕ_0 состоит из частотно-зависимого и частотно-независимого членов
- Частотно-независимый член корректируется с помощью программного обеспечения перед получением данных с использованием РЧ базовой фазы спектрометра
- Частотно-зависимый член определяется временем, в течение которого сигнал проходит через спектрометр, а также мертвым временем приемника после импульсного возбуждения
- Для оптимального разрешения требуется чисто абсорбционная мода спектра
- Частотная фазовая коррекция спектра является обычной процедурой в процессе обработки информации в ЯМР-спектроскопии высокого разрешения



Таким образом, есть принципиальное сходство методов ЭПР и ЯМР, заключающееся в условиях парамагнитного резонанса. Но система регистрации сигнала поглощения различна в этих двух методах.