

Математическое моделирование спектров сигналов ядерного магнитного резонанса для исследования конденсированных сред в экспресс-режиме

С.С. Макеев¹, В.Д. Купцов¹, В.В. Давыдов^{1,2}, В.И. Дудкин³

¹Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Политехническая 29, Санкт-Петербург, Россия, 195251

²Всероссийский научно-исследовательский институт фитопатологии, ул. Институт 5, Большие Вяземы, Московская область, Россия, 143050

³Санкт-Петербургский государственный университет телекоммуникаций им. профессора М.А. Бонч-Бруевича, просп. Большевиков 22/1, Санкт-Петербург, Россия, 193232

Аннотация. В статье обоснована необходимость разработки математической модели для преобразования регистрируемого сигнала ЯМР с использованием модуляционной методики в спектр для проведения новых исследований. Проведено сравнение различных способов описания формы регистрируемых сигналов ЯМР для определения структуры линии и решения различных практических задач. Разработана математическая модель для представления сигнала ЯМР в форме спектра с учётом особенностей его регистрации от конденсированных сред. Представлены спектры расчетных и экспериментальных сигналов ЯМР. Проведено их сопоставление.

1. Введение

Развитие научно-технического прогресса привело к появлению большого числа задач, которое необходимо решать при контроле состояния конденсированных сред [1-6]. Наибольшие сложности возникают при разработке быстрых и надежных методов экспресс-контроля состояния конденсированных сред [1-6]. Это связано с тем, что после экспресс-контроля необходимо получить подтверждение о выявленном в среде отклонении от стандартного на приборах высокого разрешения в стационарной лаборатории [5-11]. По этой причине измерения, которые используются для экспресс-контроля не должны вносить изменений в физическую структуру и химический состав исследуемой среды. Для всех выполнение этого условия возможно только при использовании для экспресс-контроля приборы, принцип работы которых основан на явлении ядерного магнитного резонанса (ЯМР).

Остальные типы приборов (оптические, ультразвуковые, рентгеновские и т.д.) для экспресс-контроля конденсированных сред это условие могут обеспечить только при работе с определенным классом сред [12-20].

Проведенные исследования показали, что при экспресс-контроле состояния конденсированной среды методом ЯМР сигнал от неё регистрируется с использованием модуляционной методики в слабом магнитном поле - значение индукции менее 0.1 Тл [5, 10]. 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 должен быть больше 4 кг) не позволяют обеспечить необходимую погрешность измерения (не более 1 %) для получения достоверных результатов при проведении исследований в экспресс-режиме [5, 10, 21, 22].

Одним из недостатков использования модуляционной методики при экспресс-контроле состояния конденсированных сред является отсутствие адекватной теоретической модели, которая позволяет воспроизводить форму линии регистрируемого сигнала ЯМР в слабом поле и расшифровывать информацию, которая содержится в ней. Например, определять структуру сигнала или состав компонент, из которых состоит исследуемая среда. Проведенные исследования показали, что это существенно ограничивает возможности экспресс-контроля состояния конденсированных сред методом ЯМР в месте взятия пробы. Одним из возможных вариантов решения этой задачи является использование спектрального анализа сигналов ЯМР. Поэтому целью данной работы является разработка методики, позволяющей воспроизводить спектры сигналов ЯМР, регистрируемых в условиях модуляции слабого магнитного поля в межполюсном пространстве малогабаритного ЯМР релаксометра. Это позволит расширить возможности использования малогабаритного ЯМР релаксометра для экспресс-контроля конденсированных сред.

2. 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-релаксометра описывается уравнениями Блоха [23-27]:

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

где $\Delta\omega = \omega_0 - \omega_{nmr}$ — расстройка частоты контура регистрации сигнала ЯМР ω_{nmr} от частоты прецессии намагниченности в поле H_0 ($\omega_0 = \gamma H_0$), χ_0 — статическая ядерная магнитная восприимчивость, T_1 и T_2 — времена продольной и поперечной релаксации жидкой среды, t — время.

В работах [23-31] 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 ω_{nmr} . 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 [28-31]:

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

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

где $a = \gamma \frac{dH_z}{dt} = d\left(\frac{\Delta\omega}{dt}\right)$ — скорость изменения расстройки магнитного поля, T_2^* — эффективное время поперечной релаксации, v_0 и u_0 — максимальное значение амплитуд регистрируемого сигнала поглощения и дисперсии ЯМР.

В зависимости от решаемых задач при исследовании конденсированных сред в ЯМР спектрометрах регистрируется сигнал поглощения или дисперсии, форма линии которого описывается с использованием (2) или (3). В работах [28-31] 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 $T=19.1$ °С.

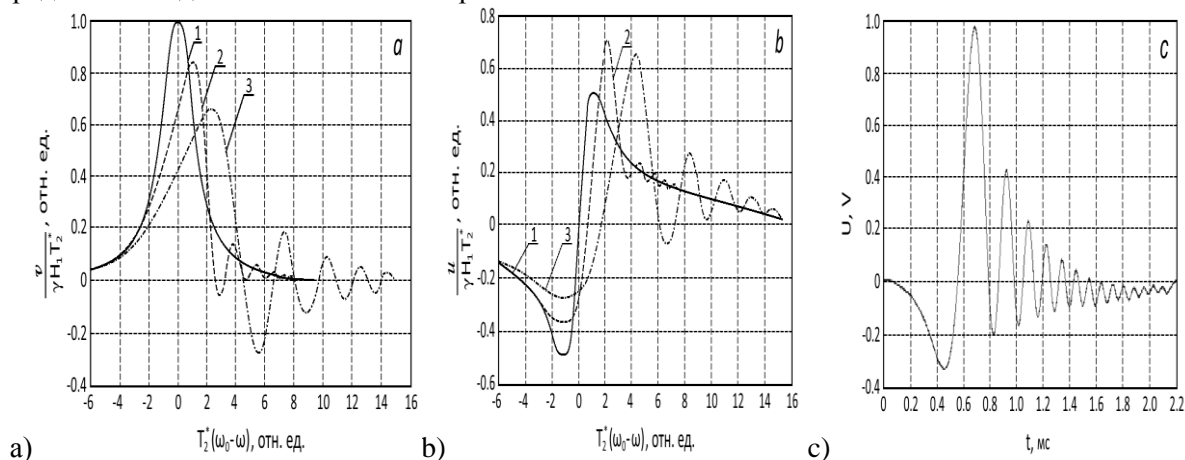


Рисунок 1. Сигналы ЯМР от воды: а) и б) – расчет использованием (2) и (3) - графикам 1, 2 и 3 соответствуют значения $a^{1/2} \cdot T_2^*$: 0; 1; 2; в) – зарегистрированный сигнал ЯМР в слабом поле ($B_0 = 0.074$ Тл) с использованием модуляционной методики.

Анализ представленных на рис. 1 зависимостей показывает, что форма линии сигналов ЯМР при определенных параметрах модуляции поля H_0 представляет собой набор пиков («виглей»), 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, регистрируемых с использованием модуляционной методикой, был предложен способ определения времени поперечной релаксации T_2 по спаду огибающей, которая может быть описана зависимостью $\exp(-t/T_2^*)$. В этом случае в соответствии с теорией, рассмотренной в [23-27] значения T_2 определяются из следующего соотношения:

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

где ΔH – неоднородность магнитного поля в зоне размещения катушки регистрации сигнала ЯМР. 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 в [28-31] был сделан вывод - в случае необходимости для описания формы линии регистрируемого с использованием модуляционной методикой сигнала ЯМР можно применять (2) и (3). Дальнейшие исследования в этом направлении не проводились.

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 методикой значение поля генерации H_1 автодинного детектора устанавливается по максимуму отношения сигнал/шум (S/N) [5? 10? 21? 22]. Кроме того, значение максимума S/N соответствует $\Delta\omega=0$ (регистрация на резонансной частоте). В этом случае многие авторы, подставляли в (1) значение $\Delta\omega=0$ и система уравнений упрощалась. Проведенные эксперименты показали, в слабых магнитных полях необходимо в (1) учитывать магнитное поле в катушке модуляции H_m , которое изменяется по заданному закону. Наиболее целесообразно использовать следующий режим модуляции магнитного поля H в межполюсном пространстве малогабаритного ЯМР спектрометра-релаксометра.

$$H = H_0 + H_m \sin(\omega_m t), \quad (5)$$

где ω_m — частота модуляции.

Кроме того, в уравнениях (1) необходимо также учесть модуляцию слабого магнитного поля H_0 в намагниченности исследуемой среды M . Новое соотношение для M необходимо записать в следующем виде:

$$M = \chi_0 (H_0 + H_m \sin(\omega_m t)) \quad (6)$$

В работах [32, 33] подробно рассмотрены уравнения, получаемые после подстановки. Также обосновано математическое соотношение для построения формы сигнала ЯМР, регистрируемого с использованием автодинного детектора:

$$G(t) = F(t) \left(\frac{A}{A+B} v^2(t) + \frac{B}{A+B} u^2(t) \right)^{1/2} \quad (7)$$

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

Проведенные исследования показали, что значение зависимость коэффициента $F(t)$ от времени для получения соответствия между результатами эксперимента и расчета необходимо подбирать для каждого случая изменения параметров среды, изменения температуры, изменения соотношения между концентрациями сред, если среда представляет собой смесь и т.д. Этот факт в случае исследования в экспресс-режиме неизвестной среды или смеси сред, приведет к большим временным задержкам при получении результата или ошибкам при интерпретации результатов. Использование спектрального анализа сигналов ЯМР позволяет исключить при проведении экспресс-контроля эту проблему.

3. Методика построения спектров сигналов ЯМР и сравнение результатов расчета с экспериментом.

На рис. 2 в качестве примера представлены формы сигналов поглощения $v(t)$ и дисперсии $u(t)$, а также сигнала ЯМР $G(t)$ с использованием (1), (5), (6) и (7). Численные решения уравнений (1) получены 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; $N = 6.6 \cdot 10^{29}$ м⁻³; $I = 1/2$; $\mu = 1.4 \cdot 10^{-26}$ Дж/Тл; $k = 1.38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К; $B_0 = 74$ мТл; $T = 291.8$ К). Так как при регистрации сигнала ЯМР в слабом магнитном поле параметры автодинного детектора и модулирующего магнитного поля настраиваются на максимум S/N. В этом случае в формировании сигнала ЯМР $G(t)$ принимают участие сигналы $v(t)$ и $u(t)$.

На рис. 3 (а и б) представлены спектры сигналов $v(t)$ и $u(t)$, которые получены при использовании для описания их форм соотношение (2) и (3). На рис. 3.с представлен спектр сигнала $G(t)$ для описания его формы использовалось следующее соотношение (7), в которое были подставлены (2) и (3).

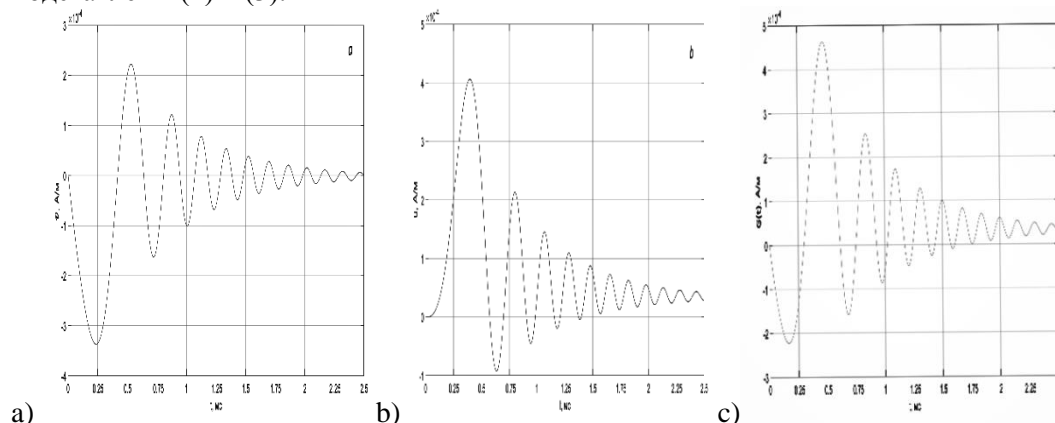


Рисунок 2. Расчетные формы сигналов ЯМР от воды: а) – поглощения; б) – дисперсии; в) – суммарный при одинаковом вкладе сигналов поглощения и дисперсии.

На рис. 4 представлен спектр сигнала $G(t)$ для описания его формы использовалось следующее соотношение, которое отображает форму ЯМР, регистрируемую в эксперименте с использованием модуляционной [28, 30]:

$$U = U_0 \exp\left(-\frac{t}{T_2}\right) \cos\left(\omega_0 t + \frac{1}{2} \gamma \frac{dH}{dt} t^2\right) \quad (8)$$

С учетом (5) соотношение (8) приобретает следующий вид:

$$U = U_0 \exp\left(-\frac{t}{T_2}\right) \cos\left(\omega_0 t + \frac{1}{2}\gamma H_m \omega_m \cos(\omega_m t) t^2\right) \quad (9)$$

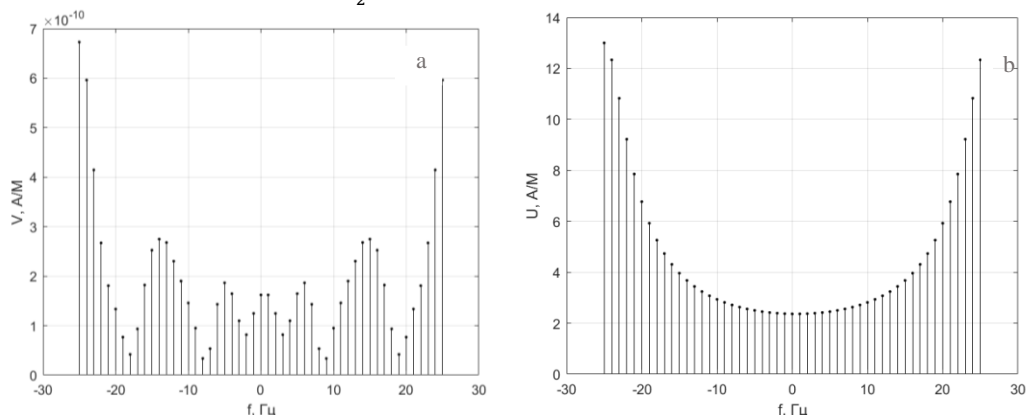


Рисунок 3. Спектры сигналов ЯМР от воды: а) – поглощения; б) – дисперсии.

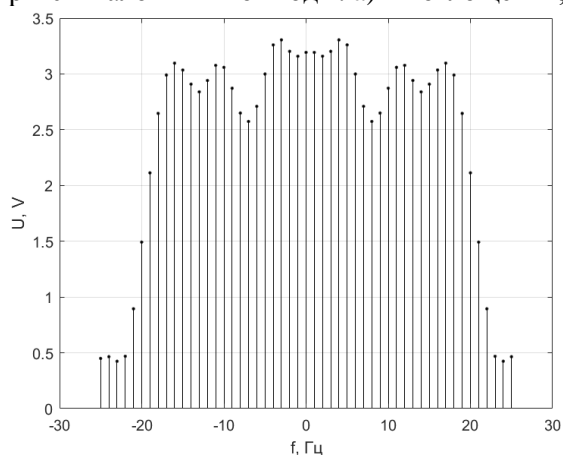


Рисунок 4. Спектр сигнала ЯМР от воды при описании его формы соотношением (9).

Анализ полученных зависимостей на рис. 2 показывает, что они отображают характер физических процессов, соответствующих эксперименту. Но проведенные нами дополнительные расчеты показали, что в предложенном выше описании $G(t)$ формы сигнала ЯМР, который рассматривался рядом авторов, при его регистрации с использованием других методик, с увеличением t через каждые $T_m/2$ происходит изменения фазы в форме линии $G(t)$ на 180° 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, отмеченные ранее сложности с выбором коэффициента $F(t)$ не позволяет в полном объеме отображать результаты эксперимента. Поэтому проводить сравнение результатов теории и эксперимента не совсем корректно. Это подтверждается, анализом полученных спектров на рис. 3. Спектры сигналов поглощения (рис. 3.а) и дисперсии (рис. 3.б) и сигнала $G(t)$ (рис. 3.с) не соответствует экспериментальному спектру. Также не соответствует экспериментальному спектру, спектр сигнала, представленный на рис. 4.

Поэтому нами предлагается для описания рассчитанных сигналов ЯМР (поглощения, дисперсии и $G(t)$) использовать дискретное преобразование Фурье:

$$y_k = \sum_{n=0}^{N-1} x_n e^{-j2\pi kn/N} \quad (10)$$

где $n = 0, 1, 2, \dots, N-1$, x_n - входная последовательность данных, N – количество элементов входной последовательности данных x_n ,

Гармоники спектра располагаются на оси частот с дискретом $\Delta f = f_s / N$, где f_s – частота дискретизации исходной последовательности x . Частота дискретизации определяется

следующим образом. Пусть τ длительность сигнала ЯМР. Тогда f_s можно вычислить, используя следующее соотношение:

$$f_s = N/\tau \quad (11)$$

В случае, когда N является степенью двойки, DFT вычисляется по алгоритму FFT (Fast Fourier Transform), который выполняется значительно быстрее дискретного преобразования Фурье и требует меньшее количество вычислительных ресурсов.

Дискретное преобразование Фурье симметрично относительно частоты Найквиста, равной $f_s/2$, что позволяет объединить гармоники с номерами $(N/2-k)$ и $(N/2+k)$. В результате объединения гармоник получается односторонний комплексный спектр с частотами от 0 до $f_s/2$, что соответствует индексам $k=0 \dots (N/2-1)$. Масштабированный односторонний комплексный спектр дискретной входной последовательности x_n определяется выражением:

$$y_k = \begin{cases} y_0 & k = 0 \\ \sqrt{2} \frac{y_k}{N} & k = 1, 2, \dots \left\lfloor \frac{N}{2} - 1 \right\rfloor \end{cases} \quad (12)$$

В соотношении (12) операция в скобках $\lfloor N/2 - 1 \rfloor$ означает округление до ближайшего наименьшего целого. Соответственно, амплитудный спектр $S(f) = |y_k|$ – модуль одностороннего комплексного спектра, фазовый спектр $\Phi(f) = \arg y_k$ – его аргумент, где $f = k \Delta f$.

На рис. 5 представлены спектры (амплитудный и фазовый) сигнала ЯМР, зарегистрированного от пробы воды, полученные с использованием соотношения (10) - (12). На рис. 6 представлены спектры от расчетной формы сигнала ЯМР о воды (рис. 2.с).

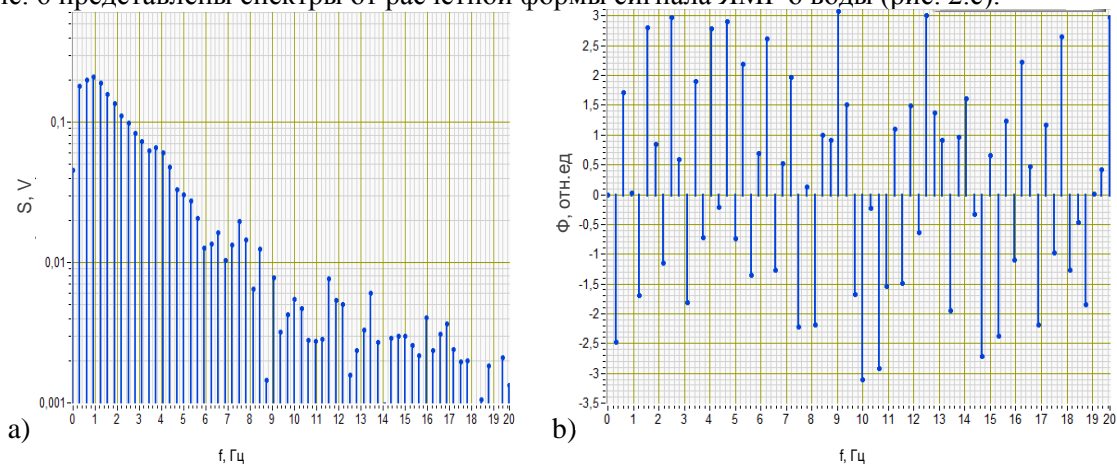


Рисунок 5. Спектры от экспериментального сигнала ЯМР, зарегистрированного от воды: а) – амплитудный; б) – фазовый.

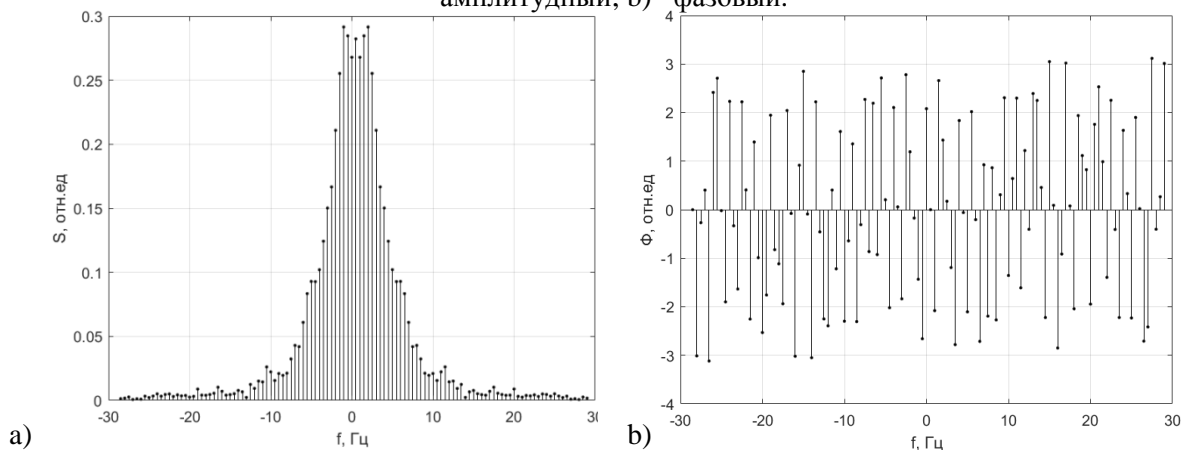


Рисунок 6. Спектры от рассчитанного сигнала ЯМР для воды: а) – амплитудный; б) – фазовый.

Анализ представленных на рис. 5 и 6 спектров показывает, что предложенная нами методика моделирования спектров сигналов ЯМР позволяет получить хорошее совпадение теоретических и экспериментальных данных. Это позволяет её применять для эффективного экспресс-контроля конденсированных сред.

4. Заключение

В результате проведенных экспериментов было установлено, что разработанная методика моделирования спектров сигнала ЯМР с использованием (10) – (12) не имеет ограничений по использованию. Для её применения необходимо зарегистрировать сигнал ЯМР от среды, содержащей ядра с магнитными моментами, например, на резонансной частоте протонов. Построить экспериментальный спектр сигнала ЯМР. Рассчитать спектры сигналов поглощения и дисперсии с использованием численного решения (1) с учетом измеренных констант релаксации T_1 и T_2 . Подобрать весовые коэффициенты для спектров сигналов поглощения и дисперсии построить суммарный спектр, который должен совпасть с экспериментальным спектром. Значения весовых коэффициентов определяют вклад в структуру сигнала ЯМР сигналов поглощения и дисперсии. С учетом того, что при регистрации сигнала ЯМР при максимальном отношении сигнал/шум сигнал поглощения всегда больше сигнала дисперсии [23, 27-31], весовые коэффициенты определяются однозначно.

5. Литература

- [1] Муссил, В.В. Экспресс-метод определения показателя преломления жидкостей / В.В. Муссил, В.В. Пилипенко, Е.Т. Лемешевская, К.Д. Керемжанов // Приборы и техника эксперимента. – 2011. – № 3. – С. 113-115.
- [2] Боченин, В.И. Количественный рентгенофазовый экспресс-анализ сыпучих сырьевых материалов по регистрации дифракционного и характеристического излучения / В.И. Боченин // Дефектоскопия. – 2007. – № 11. – С. 83-87.
- [3] Davydov, V.V. Nutation line shape for the nonstationary regime of magnetic resonance flowmeter - relaxometer / V.V. Davydov, V.I. Dudkin, N.S. Myazin // Journal of Communications Technology and Electronics. – 2016. – Vol. 61(10). – P. 1159-1165.
- [4] Neronov, Yu.I. Determination of the Temperature Dependence of the Shielding of Water Protons and a Method for Estimating the Temperature of Living Tissues / Yu.I. Neronov // Measurement Techniques. – 2017. – Vol. 60(1). – P. 96-102.
- [5] Rykin, E.V. The development of a new method for making justified decisions by municipal authorities in the management of territories on the basis of the results of the environmental express-control of the state of various media / E.V. Rykin, A.V. Moroz, K.J. Smirnov, V.V. Davydov, V.V. Yushkova // MATEC Web of Conference. – 2018. – Vol. 245. – P. 12002.
- [6] Давыдов, В.В. Метод исследования магнитной восприимчивости коллоидных растворов в феррофлюидных ячейках / В.В. Давыдов, Е.Н. Величко, Н.С. Мязин, В.Ю. Рудь // Приборы и техника эксперимента. – 2018. – № 1. – С. 102-108.
- [7] Васильев, Н.С. Статистический Фурье-спектрометр для проведения экспресс-анализа химических веществ / Н.С. Васильев, Ил.С. Поляк, Ис.С. Поляк, А.А. Есаков, А.Н. Морозов, С.Е. Табалин // Приборы и техника эксперимента. – 2015. – № 1. – С. 181-184.
- [8] Архипов, В.В. Малогабаритные Фурье-спектрометры общего назначения: устройство и исследование / В.В. Архипов // Приборы и техника эксперимента. – 2012. – № 6. – С. 91-94.
- [9] Неронов, Ю.И. Разработка ЯМР-релаксометра для определения динамики намагниченности протонов воды живых тканей и его использование для оценки возрастных изменений / Ю.И. Неронов, Д.Д. Косенков // Журнал технической физики. – 2019. – Т. 89, № 7. – С. 1118-1122.
- [10] Давыдов, В. В. Многофункциональный малогабаритный ядерно-магнитный спектрометр / В.В. Давыдов, Н.С. Мязин // Измерительная техника. – 2017. – № 2. – С. 58-62.

- [11] D'yachenko, S.V. NMR studies of the sedimentation of ferromagnetic nanoparticles in a magnetic fluid / S.V. D'yachenko, I.S. Kondrashkova, A.I. Zhernovoi // *Technical Physics*. – 2017. – Vol. 62(1). – P. 1602-1604.
- [12] Davydov, V.V. On the sensitivity of running-fluid NMR magnetometer / V.V. Davydov, V.I. Dudkin, A.A. Petrov, N.S. Myazin // *Technical Physics Letters*. – 2016. – Vol. 42(7). – P. 692-696.
- [13] Neronov, Yu.I. Determination of the difference in shielding by protons in water and hydrogen and an estimate of the absolute shielding by protons in water / Yu.I. Neronov, N.N. Seregin // *Measurement Techniques*. – 2013. – Vol. 55(11). – P. 1287-1293.
- [14] Davydov, R.V. Simulation of femtosecond pulsed laser ablation of metals / R.V. Davydov, V.I. Antonov // *Journal of Physics: Conference Series*. – 2016. – Vol. 769 (1). – P. 012060.
- [15] Davydov, R.V. Equation of state for computer simulation of metal ablation by femtosecond laser pulses / R.V. Davydov, V.I. Antonov // *Journal of Physics: Conference Series*. – 2017. – Vol. 929(1). – P. 012040.
- [16] Grebenikova, N.M. The universal optical method for condition control of flowing medium / N.M. Grebenikova, K.J. Smirnov, V.V. Artemiev, V.V. Davydov, S.V. Kruzhalov // *Journal of Physics: Conference Series*. – 2018. – Vol. 1038(1). – P. 012089.
- [17] Nepomnyashchaya, E.K. Spectroscopic techniques to study the immune response in human saliva / E.K. Nepomnyashchaya, E.A. Savchenko, E.N. Velichko, E.T. Bogomaz // *Journal of Physics: Conference Series*. – 2018. – Vol. 956(1). – P. 012009.
- [18] Davydov, R.V. Monitoring of flowing media state by refraction phenomenon / R.V. Davydov, V.I. Antonov, A.V. Moroz // *Proceedings of the IEEE International Conference on Electrical Engineering and Photonics*. – 2018. – Vol. 8564378. – P. 236-239.
- [19] Baranov, M.A. Methods of non-destructive testing in studies of self-organization processes in protein films / M.A. Baranov, E.N. Velichko, E.T. Aksenov // *Journal of Physics: Conference Series*. – 2017. – Vol. 917(1). – P. 062059.
- [20] Давыдов, В.В. Метод определения дефектов на внутренних стенках трубопровода по распределению скорости текущей жидкости / В.В. Давыдов, С.В. Кружалов, Н.М. Гребеникова, К.Я. Смирнов // *Измерительная техника*. – 2018. – № 4. – С. 33-39.
- [21] Давыдов, В.В. Измерение магнитной восприимчивости и константы Кюри коллоидных растворов в феррофлюидных ячейках методом ядерного магнитного резонанса / В.В. Давыдов, Н.С. Мязин // *Измерительная техника*. – 2017. – № 5. – С. 55-59.
- [22] Myazin, N.S. New method for determining concentrations of the mixture components during rapid control / N.S. Myazin, S.E. Logunov, V.V. Davydov, V.Yu. Rud', N.M. Grebenikova, V.V. Yushkova // *Journal of Physics: Conference Series*. – 2017 – Vol. 929(1). – P. 012064.
- [23] Leshe, A. Nuclear induction / A. Leshe // *Veb Deutscher Verlag Der Wissenschaften*. – Berlin, 1963. – 864 p.
- [24] Bloch, F. Nuclear induction / F Bloch // *Phys. Rev.* – 1946. – Vol. 70(7). – P. 460-476.
- [25] Bloch, F. The nuclear induction experiment / F. Bloch, W.W. Hansen, F. Packard // *Phys. Rev.* – 1946. – Vol. 70(7). – P. 474-488.
- [26] Packard, M.E. Free nuclear induction in the Earth's magnetic field / M.E. Packard, R.H. Varian // *Phys. Rev.* – 1954. – Vol. 93(8). – P. 941-952.
- [27] Abragam, A. The principles of nuclear magnetism / A. Abragam – Oxford UK: Qxford at the Clarendon Press, 1961. – 646 p.
- [28] Бородин, П.М. Ядерный магнитный резонанс / П.М. Бородин, М.И. Володичев, В.В. Москалев, А.А. Морозов – Л.: Издательство Ленинградского университета, 1982. – 346 с.
- [29] Zhernovoi, A.I. Nuclear magnetic resonance in a flowing liquid / A.I. Zhernovoi, G.D. Latyshev // *Consultants Bureau – New York*, 1965. – 246 p.
- [30] Чижик, В.И. Ядерная магнитная релаксация / В.И. Чижик // Л.: Издательство Ленинградского университета, 1991. – 358 с.
- [31] Мефед, А.Е. Ядерный магнитный резонанс в модулированном эффективном поле / А.Е. Мефед // *ЖЭТФ*. – 1984. – Т. 86, № 1. – С. 302-312.

- [32] Myazin, N.S. On the possibility of recording absorption spectra in weak magnetic fields by the method of nuclear magnetic resonance / N.S. Myazin, V.V. Davydov, V.V. Yushkova, V.Yu. Rud // Journal of Physics: Conference Series. – 2018. – Vol. 1038(1). – P. 012088.
- [33] Myazin, N.S. Features of formation of structure of a nuclear magnetic resonance signal in weak magnetic field / N.S. Myazin, V.V. Davydov // Journal Physics: Conference Series. – 2018. – 1135(1). – P. 012061.

The mathematical modeling of spectra of nuclear magnetic resonance signals for investigation of condensed media in express mode

S.S. Makeev¹, V.D. Kuptsov¹, V.V. Davydov^{1,2}, V.I. Dudkin³

¹Higher School of applied physics and space technologies, Peter the Great Saint Petersburg Polytechnic University, Polytechnicheskaya street 29, Saint Petersburg, Russia, 195251

²All-Russian Research Institute of Phytopathology, Institut street 5, Bolshie Vyazemy, Moscow Region, Russia, 143050

³The Bonch-Bruевич Saint Petersburg State University of Telecommunications, Bolshhevikov ave. 22/1, Saint Petersburg, Russia 193232

Abstract. In article the necessity of developing a mathematical model for converting the recorded NMR signal using a modulation technique into the spectrum for new investigations is substantiated. The comparison of various methods for describing the shape of the registration NMR signals to determine the line structure and various practical tasks solve is performed. A mathematical model for to represent the NMR signal in the form of a spectrum, taking into account the features of its registration from condensed matter is developed. Spectra of calculated and experimental NMR signals are presented. Its comparison is carried out.