

# Delta shape viewer ツール の使い方

関連製品:核磁気共鳴装置(NMR)

## はじめに

弊社NMR解析ソフトウェアDeltaのver.6 にてshape viewerの機能が大幅に追加された。shape viewerは、パルスの位相やラジオ波強度の確認、およ びそれらのパルスの励起プロファイルをシミュレーションすることができるツールである。本アプリケーションノートではshape viewerの使い方について 説明する。

#### shape viewer を起動する

shape viewerはDeltaを立ち上げたときに最初に出てくるウィンドウから補助ツール>計算機>shape viewer、あるいは分光計のコントロール画面から ツール>shape viewerをクリックすることで起動することができる。





🔗 Shapeビューワ

# 各パラメータの説明

日本電子株式会社

		File	
基本的なパラメータにつ			
①shape file	パルスのラジオ波強度および位相の時間変化の情報を含んだshape fileを指定する。		
②⊐イル	LFあるいはHFのコイルを指定する。	(2)⊐イル	LF1
③核種	核種を指定する。	。 ③ 核種	Carbon13
④Square reference 90	プローブファイルの矩形波の90度パルス幅が自動的に入力される。		
⑤Square reference	プローブファイルの矩形波の90度パルス幅に対応するattenuatorが自動的に入力される。		10.000000[us]
⑥Target pulse	見たいパルスのパルス幅を指定する。	Square reference atn	10.000000[dB]
⑦Target angle	見たいパルスのflip angleを指定する。	Target pulse	
⑧Target atn	④-⑦から適切なattenuator値が計算される。	Target angle	90.000000[deg]
⑨Diff. power	プローブファイルのattenuator値と実際に用いるattenuatorの違いを計算する。	8 Target atn	10.000000[dB]
①Est. ΔB <sub>0</sub>	予想される励起範囲が出力される。	Diff. power from the reference	100.000000[%] (0.000000[dB])
①B1 max	ラジオ波強度の最大値が出力される。	DEst. ΔBo excitation bandwidth	154.711000[kHz]
shape file の種類によっ	ては上で挙げたパラメータ以外の入力が要求される場合、あるいは他のパラメータが出力	Integral ratio	100.000000[%]
される場合もある。		1 B1 max	25.000000[kHz]
		Calculated angle	

#### Shapeの表示

shape file を指定すると、各shapeのラジオ波強度、位相、offsetの時間変化が表示される。横軸が時間となっており、縦軸が上からラジオ波強度、位相、offsetとなっている。位相については360度以上の位相を用いる場合には折り返されて表示される。



#### 励起プロファイルのシミュレーション

設定したパルスの励起プロファイルをシミュレーションすることが可能である。シミュレーションのパラメータについて説明する。 ① Simulation type 1D (ΔB<sub>0</sub>)、1D (ΔB<sub>1</sub>)、2Dの3種類から指定する。詳細は後述。 ② Initial magnetization Mx, My, Mzのうちから磁化の初期状態を指定する。 ③ ΔB<sub>0</sub> Sim. Width 励起範囲 (Width) およびシミュレーションの細かさ (points) を指定する。 ④ ΔB<sub>1</sub>/B<sub>1</sub> Sim. range ラジオ波強度のずれの範囲 (start, stop) を指定し、シミュレーションの細かさ (step) を指定する。

#### 1D シミュレーション (ΔB<sub>0</sub>)

設定したパルスを照射した際、中心周波数からずれた周波数 (ΔB<sub>0</sub>) において励起効率がどのように変化するかをシミュレーションする。Fig. 2に矩形 波inversionパルスの1D (ΔB<sub>0</sub>) 励起プロファイルを示す。横軸がΔB<sub>0</sub> (kHz)であり、上から位相 (deg)、横磁化の大きさ (x磁化およびy磁化の二乗平 均)、x磁化 (緑) およびy磁化 (赤)の大きさ、z磁化の大きさを示す。Inversionパルス、すなわちz磁化を-zまで回転させるパルスを打ったためこの図で 最も重要なのはz磁化であり、矩形波inversionパルスの場合だと下に行くほど励起効率がよく、中心周波数からずれたときに励起効率が大きく下が ることが分かる。このように1D sシミュレーション (ΔB<sub>0</sub>) によってパルスの励起範囲の広さを見積もることが可能である。

🖇 Shapeປັ່ງ-7 File				-
square.shape	2	10-	RF 1D 2D	
コイル 核種	None 🕴	sbundance	0000 0000 0000 0000 0000 0000 0000	
Square reference 90 Square reference atn Target pulse Target angle Target atn	10.00000[us] 10.000000[d8] 20.000000[us] 180.000000[deg] 10.000000[d8]	bundance	<sup>→</sup> 構磁化 <sup>→</sup> 3	
Diff. power from the reference Est. Δ80 excitation bandwidth Integral ratio B1 max	100.00000(%) (0.00000(d8)) 77.355500[kHz] 100.000000(%) 25.000000[kHz]	bundance a	×/y磁化	
Simulation type ID (ΔBe Initial magnetization Mz Width ΔBe Sim. width 200.000 X Range-marker	Points 000(kHz]   501	abundance a	² <sup>™</sup> z磁化	
Sta	rt Simulation	1	90.0 80.0 70.0 X : kilohertz	0 66.0 56.0 46.0 30.0 28.0 10.0 0 -10.0 -20.0 -30.0 -40.0 -58.0 -66.0 -70.0 -80.0 -90.0 -1

Figure 2 矩形波inversion パルスの励起効率の周波数依存性のシミュレーション

# 1D シミュレーション (ΔB<sub>1</sub>)

設定したパルスを照射した際、ラジオ波強度がずれた場合 (ΔB<sub>1</sub>) に中心周波数における励起効率がどのように変化するかをシミュレーションする。 Fig. 3に矩形波inversionパルスの1D (ΔB<sub>1</sub>) 励起プロファイルを示す。横軸がラジオ波強度のずれ (ΔB<sub>1</sub>/B<sub>1</sub>) であり、上から位相 (deg)、横磁化の大き さ (x磁化およびy磁化の二乗平均)、x磁化 (緑) およびy磁化 (赤) の大きさ、z磁化の大きさを示す。Inversionパルス、すなわちz磁化を-zまで回転させ るパルスを打ったためこの図で最も重要なのはz磁化であり、ラジオ波強度がずれた場合に励起効率が大きく下がることが分かる。このように1D シ ミュレーション (ΔB<sub>1</sub>) によってパルスのラジオ波強度のずれへの耐久性を見積もることが可能である。



Figure 3 矩形波inversion パルスの励起効率のラジオ波強度依存性のsimulation

## 2D シミュレーション

上で説明した1Dシミュレーション ( $\Delta B_0$ ) と1D シミュレーション ( $\Delta B_1$ ) を同時に行い、横磁化の大きさ (x磁化およびy磁化の二乗平均)、x磁化の大きさ、 y磁化の大きさ、z磁化の大きさを2次元の等高線の図として表示する。縦軸がラジオ波強度のずれ ( $\Delta B_1/B_1$ )、横軸が励起範囲 ( $\Delta B_0$ ) となっており、磁 化の大きさが-0.9以下の部分を赤 (-0.9) - 黄色 (-1.0) で、0.9以上の部分を青 (0.9) - 緑 (1.0) で着色している。Fig. 4に矩形波inversionパルスの2D 励 起プロファイルを示す。Inversionパルス、すなわちz磁化を-zまで回転させるパルスを打ったためこの図で最も重要なのはz磁化であり、励起範囲が 狭く、ラジオ波の強度への耐久性も低いことが分かる。このように2D シミュレーションによってパルスの励起範囲およびラジオ波強度のずれへの耐 久性の両方を同時に見積もることが可能である。



Figure 4 矩形波inversion パルスの励起効率の2D simulation

## まとめ

・shape viewerによってパルスのラジオ波強度および位相の時間変化を見ることが可能である。

・パルスの励起効率をシミュレーションによって見積もることが可能である。

・シミュレーションには1D(ΔB<sub>0</sub>)、1D(ΔB<sub>1</sub>)、2Dの三種類があり、それぞれ中心周波数からのずれ、ラジオ波強度のずれ、あるいはその両方につい て励起効率の変化を見積もることが可能である。

> Copyright © 2023 JEOL Ltd. このカタログに掲載した商品は、外国為替及び外国貿易法の安全輸出管理の規制品に該当する場合がありますので、輸出するとき、または日本国外に持ち出すときは当社までお問い合わせください。



本社·昭島製作所 〒196-8558 東京都昭島市武蔵野3-1-2 TEL: (042) 543-1111(大代表) FAX: (042) 546-3353 www.jeol.co.jp ISO 9001·ISO 14001 認証取得



東京事務所 〒100-0004 東京都千代田区大手刺2丁目1番1号 大手利野村ビル
果務統括センター TEL: 03-6262-3564 FAX: 03-6262-3589
デマンド推進本部 TEL: 03-6262-3560 FAX: 03-6262-3577
SI営業本部 SI販促室 TEL: 03-6262-3567 FAX: 03-6262-3577
セミコンダクタ・ソリューションセールス部 TEL: 03-6262-3567
産業機器営業部 TEL: 03-6262-3570
MEソリューション販促室 TEL: 03-6262-3571
SE書業戦略本部 SE営業グループ TEL: 04-2542-2383 (本社: 昭島製作所)