

## Delta shape viewer ツールの使い方

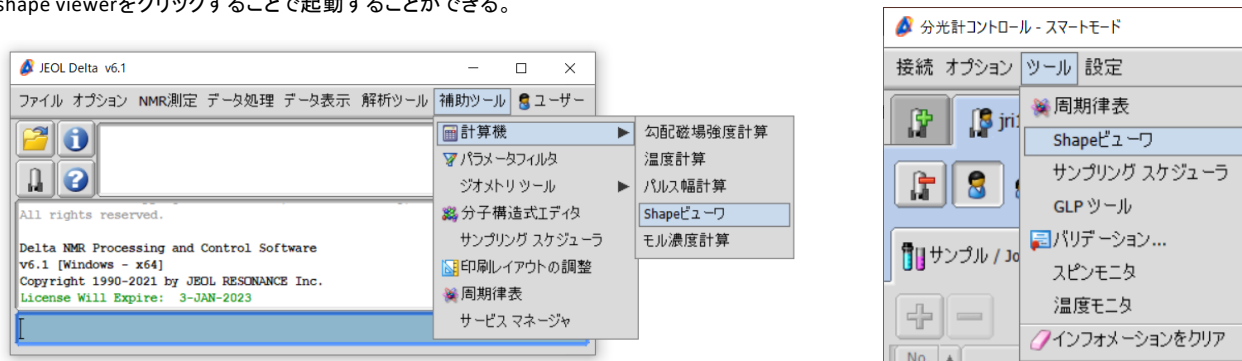
関連製品: 核磁気共鳴装置(NMR)

### 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。

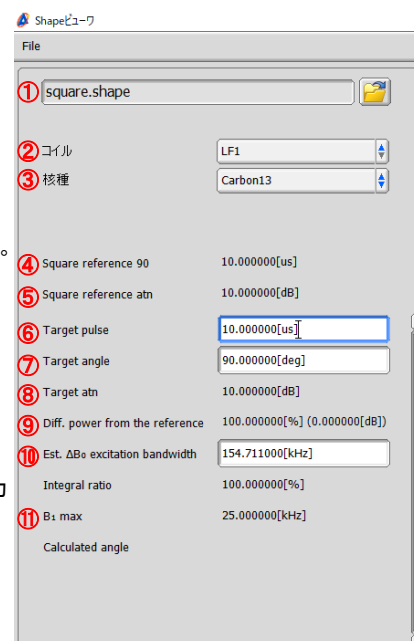


### 各パラメータの説明

基本的なパラメータについて説明する。

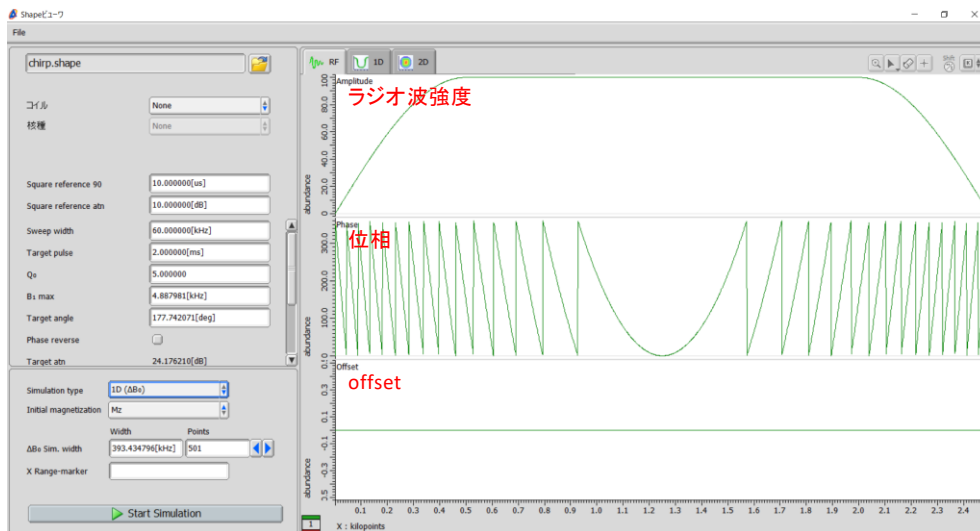
- |                         |  |
|-------------------------|--|
| ① shape file            | パルスのラジオ波強度および位相の時間変化の情報を含んだshape fileを指定する。    |
| ② コイル                   | LFあるいはHFのコイルを指定する。                             |
| ③ 核種                    | 核種を指定する。                                       |
| ④ Square 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。                |
| ⑤ Square 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。 |
| ⑥ Target pulse          | 見たいパルスのパルス幅を指定する。                              |
| ⑦ Target angle          | 見たいパルスのflip angleを指定する。                        |
| ⑧ Target atn            | ④-⑦から適切なattenuator値が計算される。                     |
| ⑨ Diff. 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。 |
| ⑩ Est. $\Delta B_0$ ... | 予想される励起範囲が出力される。                               |
| ⑪ B1 max                | ラジオ波強度の最大値が出力される。                              |

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される場合もある。



## 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。

- ①Simulation type 1D ( $\Delta B_0$ )、1D ( $\Delta B_1$ )、2Dの3種類から指定する。詳細は後述。
- ②Initial magnetization Mx, My, Mzのうちから磁化の初期状態を指定する。
- ③ $\Delta B_0$  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 $\Delta B_1/B_1$  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 ( $\Delta B_0$ )

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 ( $\Delta B_0$ ) 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 ( $\Delta B_0$ ) 励起プロファイルを示す。横軸が $\Delta B_0$  (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行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のが分かる。このように1Dシミュレーション ( $\Delta B_0$ ) 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。

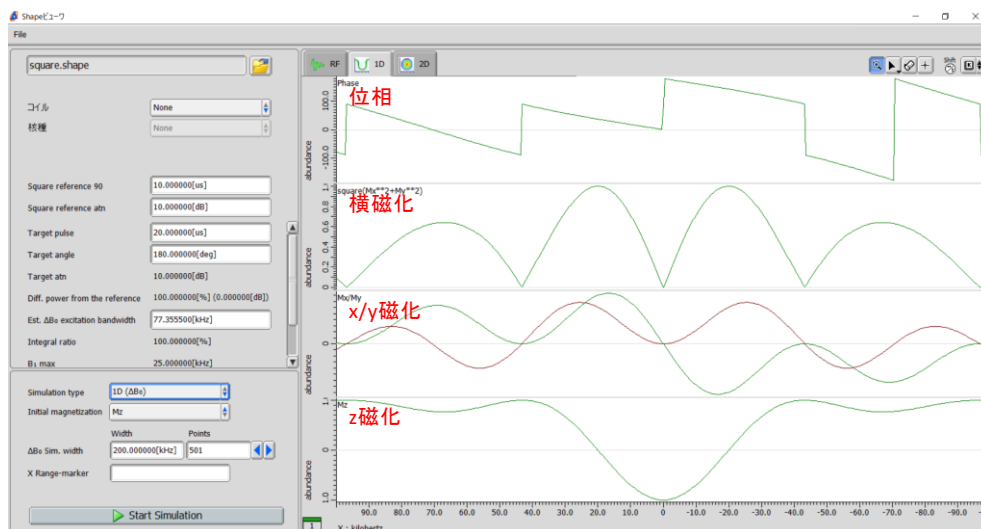


Figure 2 矩形波inversionパルスの励起効率の周波数依存性のシミュレーション

## 1D シミュレーション ( $\Delta B_1$ )

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 ( $\Delta B_1$ ) 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 ( $\Delta B_1$ ) 励起プロファイルを示す。横軸がラジオ波強度のずれ ( $\Delta B_1/B_1$ ) 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行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 ( $\Delta B_1$ ) 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。

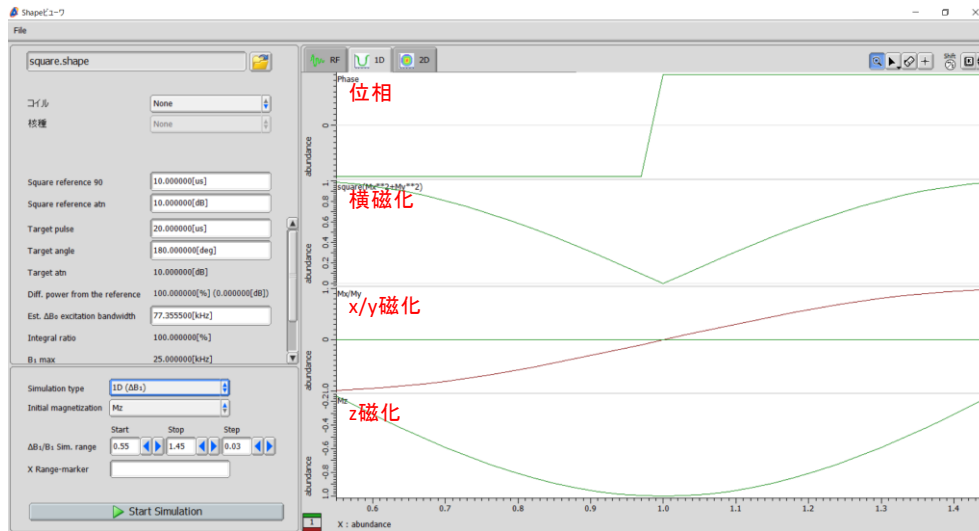


Figure 3 矩形波inversionパルスの励起効率のラジオ波強度依存性のsimulation

## 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行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。

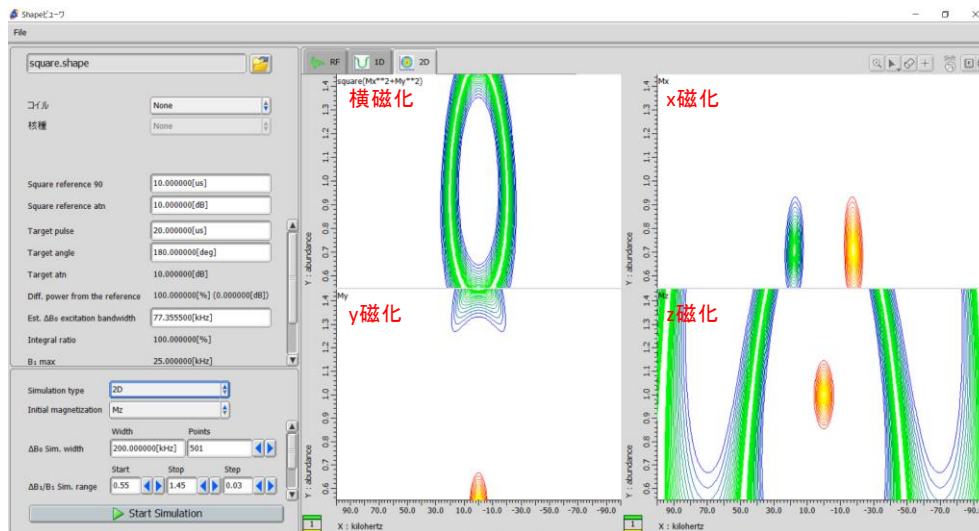


Figure 4 矩形波inversionパルスの励起効率の2D simulation

## 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 ( $\Delta B_0$ )、1D ( $\Delta B_1$ )、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。

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。 Copyright © 2023 JEOL Ltd.

