

^{14}N 核四极共振的偏共振效应*

夏佑林 叶朝辉

中国科学院武汉物理研究所波谱与原子分子物理国家重点实验室, 武汉 430071

1993 年 5 月 4 日收到

用虚拟 $1/2$ 自旋算符讨论了核四极共振 (NQR) 中自旋 $I = 1$ 的自旋系统对激发脉冲宽度和频率偏置的响应。用单脉冲和双脉冲来观测的核四极共振信号与理论预期相符合。此外还证明, 若只考虑射频场在分子电场梯度 (EFG) 张量主轴坐标系 (PAS) 中的一个轴上的分量(即有效射频场分量)的作用, 就可用 NMR 矢量模型来处理 $I = 1$ 的核自旋系统。

PACC: 7660; 3225; 3240

一、引言

如果一个长的偏共振的射频脉冲施加于一个处在高场中的 $I = 1/2$ 自旋系统, 那么在几倍 $T_{2\rho}$ ($T_{2\rho}$ 为旋转坐标系里的横向弛豫时间) 的时间以后, 自旋系统就处于亚稳态, 即磁化矢量将被锁定在其有效场方向。横向磁化强度和纵向磁化强度分别可用单脉冲和双脉冲观测到^[1-4]。由 Redfield 的自旋温度假设^[5]可以得出,

$$M_x = \frac{M_0 \omega_1 \Delta \omega}{\omega_1^2 + (\Delta \omega)^2}, \quad M_y = 0, \quad M_z = \frac{M_0 (\Delta \omega)^2}{\omega_1^2 + (\Delta \omega)^2}. \quad (1)$$

对于 $I = 3/2$ 且 $\eta = 0$ 的核自旋系统, McDowell 等用含时微扰论得出了类似的结论^[2,5]。最近 Osokin^[6] 和 Marino 等^[7] 为了提高核四极共振信号探测灵敏度, 分别用自旋锁定回波序列 (SLSE) 和强偏共振疏状脉冲序列 (SORC) 研究了 ^{14}N 核自旋系统对频率偏置和射频场强的响应, 发现一些用(1)式难于解释的实验现象。本文用虚拟 $1/2$ 自旋算符计算了 $I = 1$ 且 $\eta \neq 0$ 的核自旋系统对激发脉冲宽度和频率偏置的响应, 得到了系统处于亚稳态时信号强度的计算公式。并且指出, 如果只考虑射频场在电场梯度张量主轴坐标系中的一个轴上的分量(即有效射频场分量)的作用, 就可用 NMR 矢量模型来处理 $I = 1$ 且 $\eta \neq 0$ 的核四极共振自旋系统。

二、理论计算

对于 ^{14}N ($I = 1$ 且 $\eta \neq 0$) 的零场核四极共振自旋系统, 我们用虚拟 $1/2$ 自旋算符

* 国家自然科学基金资助的课题

体系来计算磁化强度的时间演化。不考虑弛豫和偶极相互作用, Hamiltonian 为

$$H = H_q + H_{rf}. \quad (2)$$

在电场梯度主轴坐标系中,核四极相互作用 Hamiltonian 为

$$H_q = K[3I_z^2 - I(I+1) + \eta(I_x^2 - I_y^2)], \quad (3)$$

其中 $K = e^2qQ/4$, H_q 在 I_z^2 表象可以对角化,其本征函数和本征能量分别为

$$\begin{aligned} |1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle), & E_1 &= K(1 + \eta), \\ |2\rangle &= |0\rangle, & E_2 &= -2K, \\ |3\rangle &= \frac{i}{\sqrt{2}}(|+\rangle - |-\rangle), & E_3 &= K(1 - \eta). \end{aligned} \quad (4)$$

其中 $|+\rangle, |0\rangle$ 和 $|-\rangle$ 表示 I_x 的本征态。

由虚拟 $1/2$ 自旋算符定义^[8,10],在 I_z^2 表象里可将 H_q 写成

$$H_q = \omega_p I_p^2 + \frac{\omega_q - \omega_r}{3}(I_z^2 - I_x^2), \quad (5)$$

$p, q, r = 12, 23, 31$, 且可循环置换

其中

$$\begin{aligned} \omega_{12} &= E_1 - E_2 = K(3 + \eta), \\ \omega_{23} &= E_2 - E_3 = -K(3 - \eta), \\ \omega_{31} &= E_3 - E_1 = -2\eta K, \end{aligned}$$

ω_{ij} 为 $|i\rangle$ 态到 $|j\rangle$ 态的跃迁能量。在 H_q 中第一项和第二项相互对易, 这给计算带来许多方便。

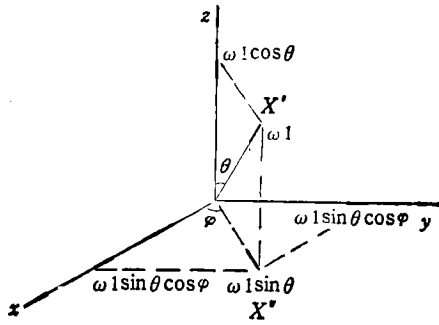


图1 射频场在分子电场梯度主轴坐标系中的分解

射频场与核自旋相互作用 Hamiltonian 可表示为

$$\begin{aligned} H_{rf} &= -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{H}_1 \\ &= -\omega_1(\sin \theta \cos \varphi I_x + \sin \theta \sin \varphi I_y \\ &\quad + \cos \theta I_z) \cos(\omega t + \phi) \\ &= -2\omega_1 \cos(\omega t + \phi) \sum_{p=12,23,31} R_p I_p^2. \end{aligned} \quad (6)$$

其中 $R_{12} = \sin \theta \cos \varphi$, $R_{23} = \sin \theta \sin \varphi$, $R_{31} = \cos \theta$, θ, φ 分别为射频场在电场梯度

主轴坐标系中的极角和方位角,如图1所示。 ω, ϕ 则分别为射频场的频率和相位。

在核四极相互作用表象里^[10](旋转坐标系)

$$\tilde{H} = U^+ H U - i\hbar U^+ \frac{\partial U}{\partial t} \quad (7)$$

其中 $U = e^{-iH_q t}$, 于是

$$\tilde{H} = \Delta\omega_p I_p^2 + \frac{\Delta\omega_q - \Delta\omega_r}{3}(I_z^2 - I_x^2) - \omega_{1x}(I_x^2 \cos \phi + I_y^2 \sin \phi). \quad (8)$$

其中 $\Delta\omega_p, \Delta\omega_q$ 和 $\Delta\omega_r$ 为频率偏置 $\Delta\omega_p = \omega_p - \omega$, $\omega_{1x} = \omega_1 R_p$ 为 x^p 轴方向的有效

射频场强度。

热平衡态下的密度矩阵为^[3]

$$\rho_{e,q} \propto e^{-H_q/4T}. \quad (9)$$

利用高温近似和略去无关项变为

$$\rho_{e,q} = H_q. \quad (10)$$

由于 H_q 中的两项相互对易,而且(5)式中第二项也不影响后面的计算,为书写简单计算可略去第二项。于是

$$H_q = \omega_p I_z^2, \quad \Delta H_q = \Delta\omega_p I_z^2, \quad \rho_{e,q} = \omega_p I_z^2. \quad (11)$$

实际上这是因为 ^{14}N 的三个跃迁频率相差很远,所以每一对跃迁都可作为一孤立体系对待,因而类似于一个 $I = 1/2$ 的自旋体系。

1. 偏共振时的横向分量

设沿 x' 方向施加一个长为 τ_1 , 频率偏置为 $\Delta\omega = \Delta\omega_p$ 的射频脉冲,如图 2(a)。在脉冲期间,核四极相互作用表象里的 Hamiltonian

为

$$H = -\omega_p I_z^2 + \Delta\omega_p I_z^2. \quad (12)$$

令

$$U_1 = \exp(i\alpha I_z^2)$$

其中

$$\alpha = \arctan \frac{\omega_{1e}}{\Delta\omega_p}.$$

于是

$$H_1 = U_1^\dagger H U_1 = \omega_p I_z^2, \quad (13)$$

其中

$$\omega_p = \sqrt{\omega_{1e}^2 + (\Delta\omega_p)^2}.$$

那么

$$\begin{aligned} \rho(\tau_1) &= \exp(-iH\tau_1)\rho_{e,q}\exp(iH\tau_1) = U_1 \exp(-iH_1\tau_1)U_1^\dagger \rho_{e,q}U_1 \exp(iH_1\tau_1)U_1^\dagger \\ &= \omega_p \{-I_z^2 \sin \alpha \cos \alpha [1 - \cos(\omega_p \tau_1)] + I_z^2 \sin \alpha \sin(\omega_p \tau_1) \\ &\quad + I_z^2 [\cos^2 \alpha + \sin^2 \alpha \cos(\omega_p \tau_1)]\}. \end{aligned} \quad (14)$$

由上式可看出,不含 $\omega_p \tau_1$ 的项来自于平行于有效场 $H_{\text{eff}} = \omega_{1e}i - \Delta\omega_p k$ 的磁化矢量的贡献,由于 $\tau_1 \ll T_{1\rho}$, 该项衰减相当缓慢,可以不考虑弛豫的影响;而含有 $\omega_p \tau_1$ 的项来自于垂直有效场 H_{eff} 的磁化矢量的贡献,它绕有效场 H_{eff} 以频率 ω_p 进动,由于 $\tau_1 \sim T_{2\rho}$, 将受横向弛豫的影响。于是考虑弛豫后,上式可重写为

$$\begin{aligned} \rho(\tau_1) &= \omega_p \{-I_z^2 \sin \alpha \cos \alpha [1 - \cos(\omega_p \tau_1) \exp(-\tau_1/T_{2\rho})] \\ &\quad + I_z^2 \sin \alpha \sin(\omega_p \tau_1) \exp(-\tau_1/T_{2\rho}) \\ &\quad + I_z^2 [\cos^2 \alpha + \sin^2 \alpha \cos(\omega_p \tau_1) \exp(-\tau_1/T_{2\rho})]\}. \end{aligned} \quad (15)$$

其中 $T_{2\rho}$ 为旋转坐标系里的横向弛豫时间,即由于自旋-自旋相互作用的影响而使得磁化强度呈指数衰减形式。

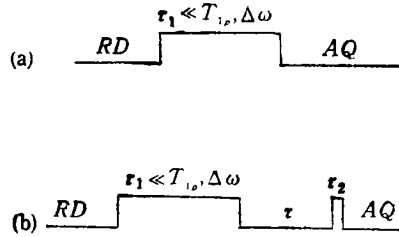


图2 单脉冲和双脉冲分别用以观测横向磁化强度和纵向磁化强度。其中双脉冲序列中的第二个脉冲的频率偏置为0

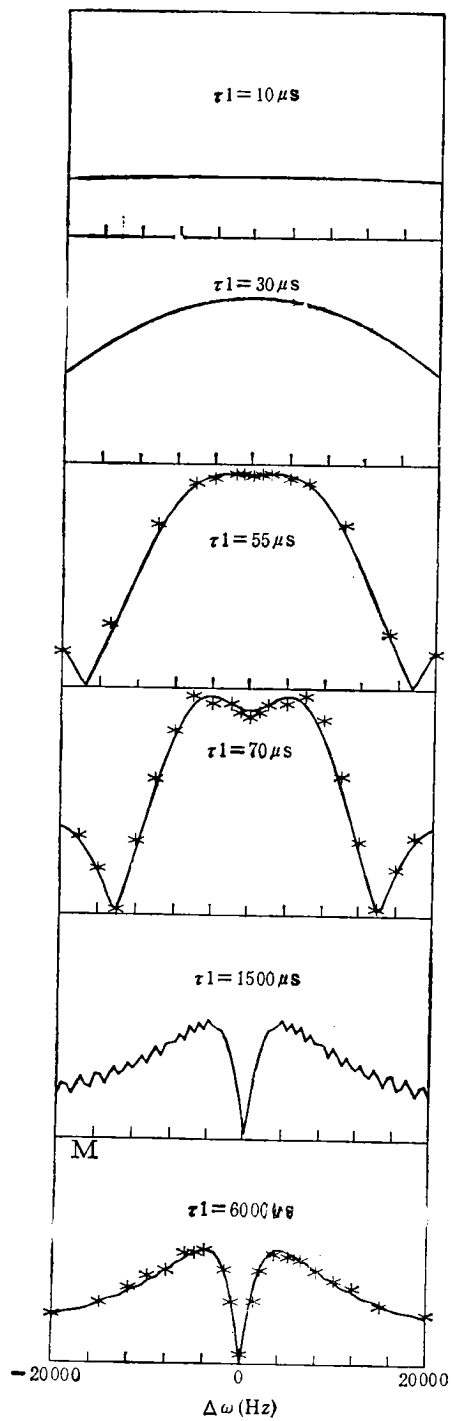


图3 单脉冲所激发的信号强度随脉冲宽度 τ_1 和频率偏置 $\Delta\omega$ 的变化. $\omega_1 = 6000\text{Hz}$, $T_{sp} = 5\text{ms}$.
* 为实验点

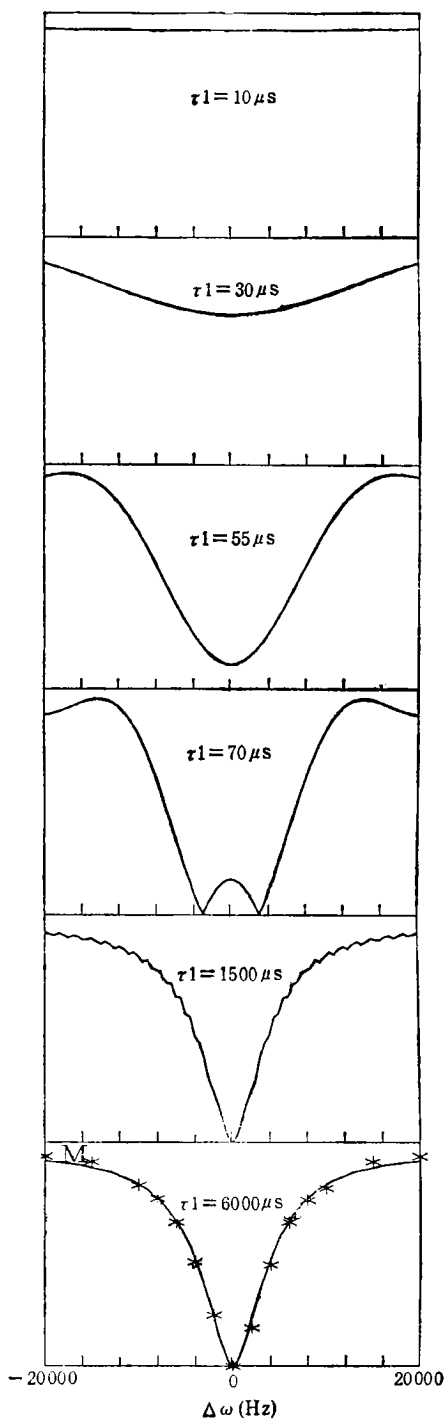


图4 双脉冲后信号强度随脉冲宽度 τ_1 和频率偏置 $\Delta\omega$ 的变化曲线. $\omega_1 = 6000\text{Hz}$, $T_{sp} = 5\text{ms}$,
 $\tau_2 = 60\mu\text{s}$. * 为实验点

正交相位检波可得相敏信号为

$$M = R_p \text{tr}[\rho(I_x^? + iI_y^?)], \quad (16)$$

对于多晶或粉末样品,再进行粉末平均得相敏信号为

$$\bar{M} = M_x^? + iM_y^? = |M|e^{i\psi}. \quad (17)$$

其中

$$|M| = \sqrt{(M_x^?)^2 + (M_y^?)^2},$$

$$\psi = \arctan M_y^? / M_x^?,$$

$$M_x^? = -\frac{\omega_p}{8\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi R_p \sin \alpha \cos \alpha [1 - \cos(\omega_e \tau_1) \exp(-\tau_1/T_{2\rho})] \sin \theta d\theta d\varphi,$$

$$M_y^? = \frac{\omega_p}{8\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi R_p \sin \alpha \sin(\omega_e \tau_1) \exp(-\tau_1/T_{2\rho}) \sin \theta d\theta d\varphi,$$

$|M|$ 为信号强度, ψ 为信号相位。

对于二重积分容易证明:

$$\begin{aligned} \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi f(R_{12}) \sin \theta d\theta d\varphi &= \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi f(R_{23}) \sin \theta d\theta d\varphi \\ &= \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi f(R_{31}) \sin \theta d\theta d\varphi. \end{aligned} \quad (18)$$

于是(17)式中的二重积分中可取 $R_p = R_{31} = \cos \theta$, 因而可简化为单重积分。

图 3 给出了不同宽度 τ_1 的脉冲所激发的信号强度随频率偏置的变化曲线。 $\omega_1 = 6000\text{Hz}$, $T_{2\rho} = 5\text{ms}$ 。由图 3 可见, $\tau_1 = 10\mu\text{s}$ 时,基本上是均匀激发的,信号强度随频率偏置的变化很小,但信号强度较弱; $\tau_1 = 55\mu\text{s}$ 时, $2\pi\omega_1\tau_1 = 119^\circ$, 对应于共振时获得最大信号强度的脉冲翻转角,在这里当 $|\Delta\omega| \leq \omega_1 = 6000\text{Hz}$ 时,还基本上是均匀激发的,当 $|\Delta\omega| > \omega_1$ 时,信号强度下降很快;当 $\tau_1 = 70\mu\text{s}$ 时,中心点的信号强度还低于 $|\Delta\omega| = 4000\text{Hz}$ 时的信号强度;当 τ_1 再增加时,两翼出现振荡;当 $\tau_1 = 6000\mu\text{s}$ 时,自旋系统基本上已处于亚稳态,即多晶样品中各个分子的磁化矢量已基本锁定在其有效场 H_{eff} 方向。

2. 偏共振时的纵向分量

为了观测纵向分量,也即(15)式中的 $I_x^?$ 分量,必须再加一个脉冲,且要让 $I_x^?, I_y^?$ 分量充分衰减掉,就用如图 2(b) 中的两脉冲序列,第二个脉冲的频率偏置为 0。

由于 T_1 较长(在 77K 时, NaNO_2 的 $T_1 \approx 81\text{s}$, $T_2 \approx 5.7\text{ms}$) $\tau(\tau \ll T_1)$ 时间的延时对 $I_x^?$ 分量没有影响,而 $\tau \gg T_2$, 所以 $I_x^?, I_y^?$ 分量衰减掉了。由(15)式有

$$\rho(\tau_1 + \tau) = \omega_p [\cos^2 \alpha + \sin^2 \alpha \cos(\omega_e \tau_1) \exp(-\tau_1/T_{2\rho})] I_x^?,$$

那么

$$\begin{aligned} \rho(\tau_1 + \tau + \tau_2) &= \exp(-iH_{\text{eff}}\tau_2) \rho(\tau_1 + \tau) \exp(iH_{\text{eff}}\tau_2) \\ &= \omega_p [\cos^2 \alpha + \sin^2 \alpha \cos(\omega_e \tau_1) \exp(-\tau_1/T_{2\rho})] \\ &\quad \times [I_x^? \cos(\omega_1 \tau_2) + I_y^? \sin(\omega_1 \tau_2)]. \end{aligned} \quad (19)$$

类似于(17)式可得

$$M_x^p = \frac{\omega_p}{8\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi R_p [\cos^2\alpha + \sin^2\alpha \cos(\omega_e \tau_1) \exp(-\tau_1/T_{2p})] \\ \times \sin(\omega_1 \tau_2) \sin\theta d\theta d\varphi, \\ M_y^p = 0. \quad (20)$$

图 4 给出了在不同脉冲宽度 τ_1 下的两脉冲序列所激发的信号强度随频率偏置 $\Delta\omega$ 的变化曲线。 $\omega_1 = 6000\text{Hz}$, $T_{2p} = 5\text{ms}$, $\tau_2 = 60\mu\text{s}$ 。由图 4 可见, $\tau_1 = 10\mu\text{s}$ 时, 信号强度随频率偏置的变化较小, 并且强度较大, 这是因为第一个脉冲只使磁化矢量发生了少量的偏转, 因而用第二个脉冲作用观测 I_x^p 分量时, 信号强度就较大; 随着 τ_1 加长, 自旋系统逐渐向亚稳态过渡; 当 $\tau_1 = 6000\mu\text{s}$ 时, 自旋系统已基本处于亚稳态, 即多晶样品中的每个分子的磁化矢量都锁定在其有效场方向。

三、亚稳态时的信号强度

从(15)式可见只要 τ_1 较长 ($\tau_1 \approx 5T_{2p}$), 自旋系统就处于亚稳态, 即每个分子的磁化矢量锁定在其各自的有效场方向, 这时信号强度将近似地不随 τ_1 变化。之所以是亚稳态, 是由于磁化矢量被锁定后还将受旋转坐标系里的自旋-晶格弛豫时间的影响, 最终将达到稳态。由(15)式可得系统处于亚稳态时的横向磁化强度为

$$M_x^p = -\frac{\omega_p}{8\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi R_p \sin\alpha \cos\alpha \sin\theta d\theta d\varphi \\ = -\frac{\omega_p}{2} \int_0^\pi \frac{\omega_1 \Delta\omega \cos^2\theta}{\omega_1^2 \cos^2\theta + (\Delta\omega)^2} \sin\theta d\theta \\ = -\frac{\omega_p \Delta\omega}{2\omega_1} \left[1 - \frac{\Delta\omega}{\omega_1} \arctan \frac{\omega_1}{\Delta\omega} \right], \quad (21a)$$

$$M_y^p = 0. \quad (21b)$$

用两脉冲可观测纵向磁化强度, 由(20)式可得两脉冲后系统处于亚稳态时的纵向磁化强度为

$$M_x^p = \frac{\omega_p}{8\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi R_p \cos^2\alpha \sin(\omega_1 \tau_2) \sin\theta d\theta d\varphi \\ = \frac{\omega_p}{2} \int_0^\pi \frac{(\Delta\omega)^2 \cos\theta \sin(\omega_1 \tau_2 \cos\theta)}{\omega_1^2 \cos^2\theta + (\Delta\omega)^2} \sin\theta d\theta, \quad (22a)$$

$$M_y^p = 0. \quad (22b)$$

显然这时观测到的纵向分量已与第二个脉冲有关, 已经不是纯粹的纵向分量。

亚稳态的横向磁化强度也可只考虑射频场在电场梯度张量主轴坐标系中的一个轴上的分量 ω_{1e} (有效射频场分量) 的作用, 如图 1, 再利用(1)式和矢量模型得出。由(1)式, 在 x 轴上测得的信号强度(单脉冲后)为

$$M_x = M_0 \Delta\omega \omega_{1e} / [\omega_{1e}^2 + (\Delta\omega)^2], \quad (23)$$

而线圈方向测得的信号强度为 $R_p M_x$, 再粉末平均就可得(21)式。

亚稳态时的纵向磁化强度可用两脉冲观测到。第一个脉冲后, 由(1)式得 z 方向的磁

化强度为

$$M_x = M_0(\Delta\omega)^2 / [\omega_1^2 + (\Delta\omega)^2], \quad (24)$$

在第二个脉冲作用下, M_x 绕 x 轴旋转 $\omega_1\tau_2$ 角度. 于是在 x 方向测得的信号强度为

$$M_x = M_x \sin(\omega_1\tau_2), \quad (25)$$

投影到线圈所在方向 x' , 得信号强度为 $R_x M_x$, 然后粉末平均就可得(22)式.

对于 $\eta = 0$ 的核四极共振系统, 射频场的作用与 $\eta \neq 0$ 时不相同. $\eta = 0$ 时, 射频场的 x, y 分量(如图 1)可激发同一个跃迁, 因此有效射频场强为 $\omega_1 \sin\theta$. 于是文献[2]在处理粉末样品的亚稳态信号强度时, 将射频场往 xoy 平面投影, 得 x'' 方向的射频场强为 $\omega_1 \sin\theta$. 于是在单脉冲和双脉冲后测得的信号强度 ($\tau_1 \geq 5T_{2\rho}$) 分别是

$$G_1 = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{\omega_1 \Delta\omega \sin^2\theta}{\omega_1^2 \sin^2\theta + (\Delta\omega)^2} \sin\theta d\theta - \frac{\Delta\omega}{\omega_1} \left[1 - \frac{1}{2} \frac{(\Delta\omega)^2}{\omega_1 \omega_r} \ln \left(\frac{\omega_r + \omega_1}{\omega_r - \omega_1} \right) \right], \quad (26)$$

$$G_2 = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{(\Delta\omega)^2 \sin\theta}{\omega_1^2 \sin^2\theta + (\Delta\omega)^2} \sin\theta d\theta - \frac{\pi}{2} \left(\frac{\Delta\omega}{\omega_1} \right)^2 \left(1 - \frac{|\Delta\omega|}{\omega_r} \right), \quad (27)$$

其中 $\omega_r^2 = \omega_1^2 + (\Delta\omega)^2$.

实际上(27)式中的被积函数应该再乘上一个 $\sin(\omega_1\tau_2 \sin\theta)$ 因子, 因为第二个脉冲对所有的分子并不都是 $\pi/2$ 脉冲.

因此对于 $I = 1$ 且 $\eta \neq 0$ 的核四极共振的自旋系统信号强度的计算, 如果只考虑射频场在电场梯度张量主轴坐标系中的一个轴上的分量的作用, 即有效射频场分量的作用, 利用 NMR 中的矢量模型就可求解亚稳态时的信号强度. 并且可以推广, 如果只考虑有效射频场分量的作用, 那么 NMR 中的矢量模型就可应用于 $I = 1$ 且 $\eta \neq 0$ 的核四极共振自旋系统的时间演化和各种自旋操作.

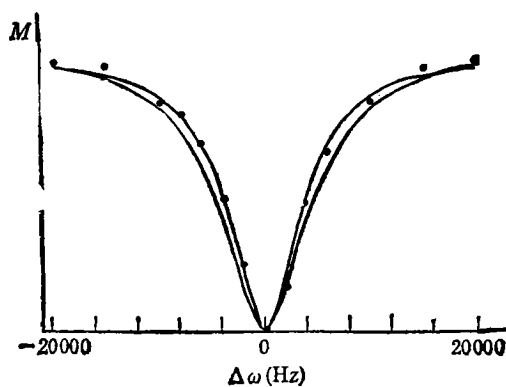
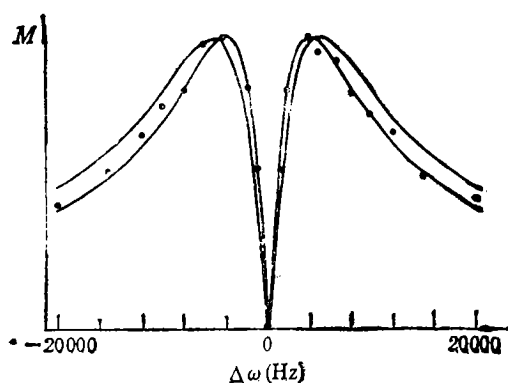


图5 亚稳态时横向磁化强度随频率偏置 $\Delta\omega$ 的变化
的两种计算方式的比较. $\omega_1 = 6000\text{Hz}$. ●为实验点.

图6 亚稳态时纵向磁化强度随频率偏置 $\Delta\omega$ 的变化
的两种计算方式之比较. $\omega_1 = 6000\text{Hz}$, $\tau_2 = 60\mu\text{s}$.
●为实验点.

图 5, 图 6 分别给出了两种计算方式下,核四极共振自旋系统处于亚稳态时横向磁化强度和纵向磁化强度随频率偏置 $\Delta\omega$ 的变化曲线.与实验点符合较好的曲线分别由(21), (22)式给出,与实验点有偏差的曲线分别由(26),(27)式给出.从以上的分析和实验结果可看出(26), (27)式不适合于描述 $I = 1$ 且 $\eta \neq 0$ 的核四极共振系统处于亚稳态时的横向磁化强度和纵向磁化强度随频率偏置的变化.

四、实 验

本实验是用自制的零场核四极共振探头在 Bruker WP-80 谱仪上进行的.样品为多晶 NaNO_2 , 样品量约为 15g, 样品和线圈都浸在液氮里.共振频率 $\omega_0 = 3.757\text{MHz}$. 射频场强 $\omega_1 = 6000\text{Hz}$. 脉宽为 $55\mu\text{s}$ 时可得最大信号强度.所有实验的恢复延时 $RD = 400\text{s} = 5T_1$. 由于灵敏度较高,累加次数 $NS = 4$. 由图 3—图 6 可看出实验结果与理论计算符合较好.

五、结 论

本文用虚拟 $1/2$ 自旋算符计算了 $I = 1$ 的核四极共振系统的信号强度随脉冲宽度和频率偏置的变化,得到了信号强度随脉冲宽度和频率偏置的变化和自旋系统处于亚稳态时的信号强度的计算公式,并且指出文献[2]中的计算公式不适合于 $I = 1$ 且 $\eta \neq 0$ 的核四极共振自旋系统.计算和实验表明如果只考虑射频场在电场梯度主轴坐标系中一个轴上的分量作用,即有效射频场分量作用,NMR 中的矢量模型就可应用于 $I = 1$ 且 $\eta \neq 0$ 的核四极共振自旋系统.

- [1] T. P. Das and A. K. Saha, *Phys. Rev.*, **98**(1955), 516.
- [2] J. C. Pratt, P. Raghunathan, and C. A. McDowell, *J. Magn. Reson.*, **20**(1975), 313.
- [3] C. P. Slitcher and W. C. Holton, *Phys. Rev.*, **122**(1961), 1701.
- [4] W. I. Goldberg, *Phys. Rev.*, **128**(1962), 1554.
- [5] J. C. Pratt, P. Raghunathan, and C. A. McDowell, *J. Chem. Phys.*, **61**(1974), 1016.
- [6] D. Ya. Osokin, *Sov. Phys. JETP*, **57**(1) (1983), 69.
- [7] S. S. Kim, J. R. P. Jayakody, and R. A. Marino, *Z. Naturforsch.*, **47a** (1992), 415.
- [8] S. Vega and A. Pines, *J. Chem. Phys.*, **66**(1977), 5624.
- [9] S. Vega, *J. Chem. Phys.*, **68**(1978), 5518.
- [10] V. L. Ermakov and D. Ya. Osokin, *Mol. Phys.*, **53**(1984), 1335.

OFFSET EFFECTS OF ^{14}N NUCLEAR QUADRUPOLEAR RESONANCE

XIA YOU-LIN YE CHAO-HUI

*Laboratory of Magnetic Resonance and Atomic and molecular Physics, Wuhan Institute
of Physics, Academia Sinica, Wuhan 430071*

(Received 4 May 1993)

ABSTRACT

The NQR responses of the nuclear spin system with $I = 1$ to frequency offsets and pulse widths are examined with fictitious $1/2$ -spin operator formalism. The transverse magnetization and longitudinal magnetization are observed with one pulse and two pulses sequence, respectively. The experimental results measured with NQR probe are consistent with theoretical calculations. It is shown that the NMR vector model can be applied to the NQR system for $I = 1$ when the rf excitation is introduced on one axis in EFG principal axis frame.

PACC: 7660; 3225; 3240