УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

Квантовая радиофизика

Лекция 1

Санкт-Петербург, 2018

Небольшое вступление

О чем будет курс?

- Взаимодействие частиц с электромагнитными полями определяется их магнитными и электрическими моментами
- Для ядер и электронов чаще всего выделяют дипольные и квадрупольные моменты
- Взаимодействие соответствующего момента с полем приводит к отдельному эффекту
- **ЯМР**, ЭПР, ЯКР

Где применить ЯМР

- Аналитические технологии
- Медицинские технологии
- Контроль качества
- Судебная экспертиза
- Георазведка
- Археология

Магнитный момент ядра

- У некоторых ядер существует ненулевой спин
- Ненулевой ядерный спин возникает вследствие нескомпенсированности нуклонных (протонных и нейтронных) спинов
- При наличии у ядра спина у него есть собственный магнитный момент

$$\boldsymbol{\mu} = -\gamma \boldsymbol{J}$$

- Где γ – гиромагнитное отношение

Магнитный момент ядра

- Проекция магнитного момента на какую-либо ось координат (например, *z*) может принимать только дискретные значения

$$\mu_z = -\gamma\hbar m$$

- Где m – магнитное квантовое число, принимающее значения от *–I,(-I+1)…,(I-1),I* (здесь, I – спин ядра)

Спин и изотопный состав

- Наличие спина определятся рассматриваемым изотопом
- ЯМР-чувствительные изотопы: ^{1}H, ^{2}H, ^{3}He, ^{6}Li, ^{7}Li, ^{9}Be, ^{10}B, ^{11}B, ^{13}C, ^{14}N, ^{15}N, ^{17}O, ^{19}F…
- ЯМР-нечувствительные изотопы: ^{4}He, ^{12}C, ^{16}O, ^{18}O…

Ядерный магнитный момент

- Четное количество протонов и нейтронов: нулевой спин I=0
- Нечетное количество протонов и нейтронов: целый спин I=1, I=3, I=4…
- Нечетное количество или протонов или нейтронов: полуцелый спин I=1/2, I=3/2…

Взаимодействие ядра с полем

- Взаимодействие магнитного поля **B** с магнитным моментом описывается их скалярным произведением

$$\hat{\mathcal{H}} = -(\hat{\boldsymbol{\mu}}\mathbf{B})$$

- То есть при выборе направления оси вдоль магнитного поля (величина поля B_0)

$$\hat{\mathcal{H}} = -\hat{\boldsymbol{\mu}}_z B_0$$

Взаимодействие ядра с полем

- Подстановка собственных значений $\boldsymbol{\mu_z}$ даёт возможность получить значения энергии состояний, в которых может пребывать ядро в магнитном поле

$$E_m = -\gamma\hbar m B_0$$

- Вероятность переходов между уровнями *m* и *m'* под действием внешнего переменного поля вдоль оси *i* определяется как

$$W_{m\,m'} \sim |\langle m|\hat{\boldsymbol{\mu}}_i|m'\rangle|^2$$

Взаимодействие ядра с полем

- Если переменное поле параллельно постоянному

$$W_{m\,m'} \sim |\langle m|\hat{\boldsymbol{\mu}}_z|m'\rangle|^2$$

$$\langle m|\hat{\boldsymbol{\mu}}_z|m'\rangle = m'\langle m|m'\rangle$$

- Так как собственные вектора образуют ортонормированную систему

$$\langle m|m'\rangle = \delta_{m\,m'}$$

- То есть вероятность перехода между различными уровнями равна 0

Взаимодействие ядра с полем

- Если переменное поле перпендикулярно постоянному

$$W_{m\,m'} \sim |\langle m|\widehat{\boldsymbol{\mu}}_x|m'\rangle|^2$$

- Однако проекции оператора спина на оси *x* или *y* не определены одновременно с проекцией на ось *z*
- Можно выразить проекции через операторы повышения/понижения

$$\hat{I}_\pm = \hat{I}_x \pm i\hat{I}_y$$

Взаимодействие ядра с полем

- Для операторов повышения/понижения справедливо

$$\hat{I}_{\pm}|m\rangle = \sqrt{(I \mp m)(I \pm m + 1)}\left|m \pm 1\right\rangle$$

- Тогда

$$\langle m|\widehat{\boldsymbol{\mu}}_x|m'\rangle = c_1\langle m|m' + 1\rangle + c_2\langle m|m' - 1\rangle$$

- То есть, переходы будут осуществляться только между соседними уровнями, то есть с

$$\Delta m = 1$$

Взаимодействие ядра с полем

- Так как разрешены переходы только с Δm=1, то энергия перехода в системе с любым значением полного спина (и соответственно с любым количеством магнитных подуровней) будет равна

$$\Delta E = -\gamma\hbar B_0$$

- Соответственно, в частота переходов будет определяться

$$\omega_0 = \gamma B_0$$

Переходы между энергетическими уровнями

- Оценка вероятностей перехода показывает, что переходы возможны только между соседними энергетическими уровнями
- Кроме того, переходы возможны только при перпендикулярности переменного магнитного поля постоянному
- Частота переходов определяется величиной магнитного поля и гиромагнитным отношением ядра изотопа

Полуклассическое описание ЯМР

- Рассмотрим систему большого числа ядер водорода в магнитном поле
- *I*=1/2, m=-1/2,+1/2
- Согласно распределению Больцмана при наличии большого числа частиц энергетические уровни будут иметь разное ожидаемое заселения

$$\frac{N_+}{N_-} = e^{-\frac{\hbar\omega_0}{kT}}$$

Макроскопическая намагниченность

- У большого числа частиц с нескомпенсированным спином в постоянном магнитном поле существует макроскопический магнитный момент
- Величина макроскопического магнитного момента (макроскопическая намагниченность)

$$M_0 \approx N \frac{\gamma^2 \hbar^2 I(I+1)}{3kT} B_0$$

Намагниченность в магнитном поле

- 2й закон Ньютона в угловой форме гласит, что изменение углового момента равно моменту силы

$$\frac{dl}{dt} = \tau$$

- С другой стороны, магнитный момент для набора частиц пропорционален угловому с коэффициентом пропорциональности γ

$$\mu = \gamma l$$

Намагниченность в магнитном поле

- Кроме того магнитный момент определяется, как

$$\boldsymbol{\tau} = [\boldsymbol{\mu} \times \boldsymbol{B}_0]$$

- Таким образом

$$\frac{d\boldsymbol{\mu}}{dt} = \gamma[\boldsymbol{\mu} \times \boldsymbol{B}_0]$$

Уравнения Блоха

- В координатах (при условии $|\boldsymbol{B}|=B_z=B_0$, $B_x=B_y=0$)

$$\frac{d\mu_x}{dt} = \gamma \mu_y B_0$$

$$\frac{d\mu_y}{dt} = -\gamma \mu_x B_0$$

$$\frac{d\mu_z}{dt} = 0$$

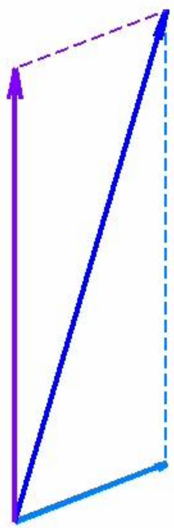
Продольная и поперечные составляющие

- z-компонента намагниченности не меняется
- Поперечные составляющие

$$\frac{d^2\mu_x}{dt^2} + (\gamma B_0)^2\mu_x = 0$$

$$\frac{d^2\mu_y}{dt^2} + (\gamma B_0)^2\mu_y = 0$$

Продольная и поперечная составляющие



- Заменим две поперечные составляющие одной комплексной

$$\mu_{\perp} = \mu_x + i\mu_y$$

- Тогда уравнение движения запишется

$$\frac{d^2\mu_{\perp}}{dt^2} + (\gamma B_0)^2\mu_{\perp} = 0$$

- Решение уравнения – вращающаяся намагниченность

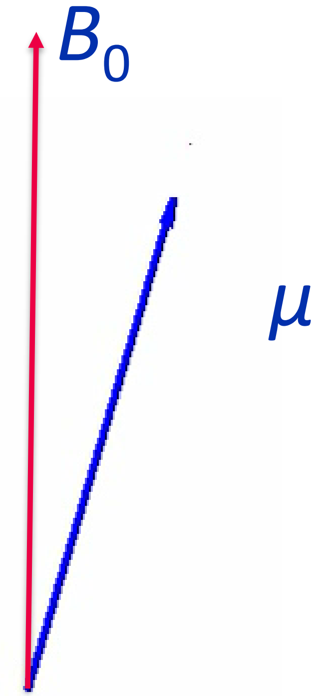
$$\mu_{\perp} = \mu_0 e^{-i\gamma B_0 t}$$

Ларморова прецессия

- В итоге, z-компонента не меняется, а x- и y-компоненты совершают гармонические колебания с частотой

$$\omega_0 = \gamma B_0$$

- То есть, вектор намагниченности совершает прецессию



Вращающаяся система координат, РЧ поле

Вращающаяся система координат

- Перепишем уравнение движения намагниченности во вращающейся системе координат *x'*, *y'*, *z'* (с частотой вращения Ω)

$$\left(\frac{d\boldsymbol{\mu}}{dt}\right)_{rot} = \left(\frac{d\boldsymbol{\mu}}{dt}\right) + [\boldsymbol{\mu} \times \boldsymbol{\Omega}]$$

- Тогда

$$\left(\frac{d\boldsymbol{\mu}}{dt}\right)_{rot} = \left[\boldsymbol{\mu} \times \left(\mathbf{B}_0 + {}^{\boldsymbol{\Omega}}/_{\gamma}\right)\right]$$

Вращающаяся система координат

- В координатах и при условии наличия только поля B_0

$$\frac{d\mu_{x'}}{dt} = \mu_{y'}(\gamma B_0 - \Omega)$$

$$\frac{d\mu_{y'}}{dt} = -\mu_{x'}(\gamma B_0 - \Omega)$$

$$\frac{d\mu_{z'}}{dt} = 0$$

Дополнительное переменное магнитное поле

- Рассмотрим действие переменного магнитного поля
- Поле круговой поляризации B_1 направлено вдоль оси x'

$$\boldsymbol{B}_{rf} = B_1(\boldsymbol{x}\cos(\Omega t) + \boldsymbol{y}\sin(\Omega t))$$

- Суммарное поле

$$\boldsymbol{B}_{tot} = \boldsymbol{z}B_0 + {}_1(\boldsymbol{x}\cos(\Omega t) + \boldsymbol{y}\sin(\Omega t))$$

Уравнения Блоха с учетом РЧ магнитного поля

- Теперь условия $B_x=B_y=0$ не выполняются

$$\frac{d\mu_{x'}}{dt} = \mu_{y'}(\gamma B_0 - \Omega)$$

$$\frac{d\mu_{y'}}{dt} = -\mu_{x'}(\gamma B_0 - \Omega) + \mu_{z'}\gamma B_1$$

$$\frac{d\mu_{z'}}{dt} = -\mu_{y'}\gamma B_1$$

Переменное поле Ларморовой частоты

- При условии $\Omega=\omega_0$

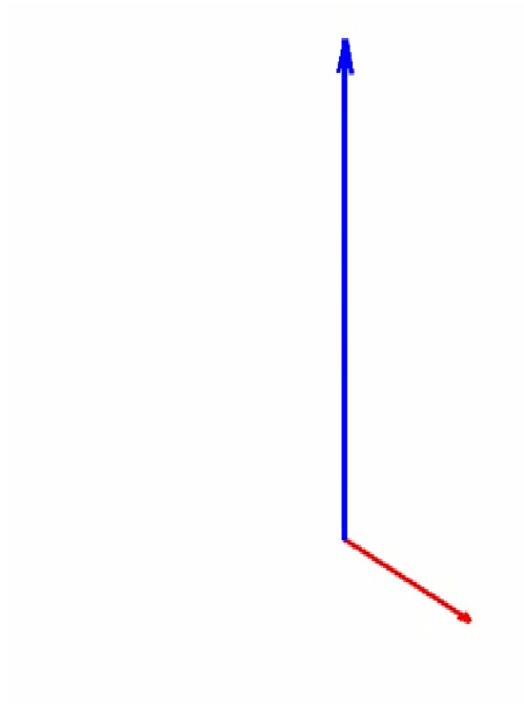
$$\frac{d\mu_{x'}}{dt} = 0$$

$$\frac{d\mu_{y'}}{dt} = \mu_{z'}\gamma B_1$$

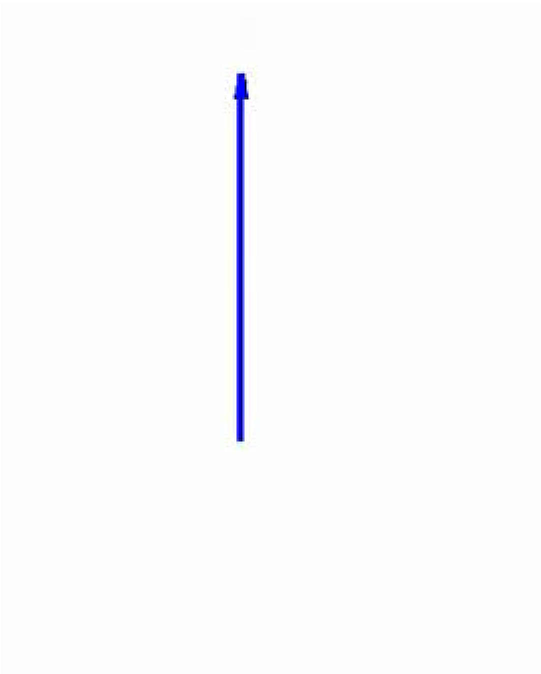
$$\frac{d\mu_{z'}}{dt} = -\mu_{y'}\gamma B_1$$

Вращение во вращающейся системе координат

- Решение – аналогичное решению уравнений Блоха для свободной намагниченности
- Вращение происходит во вращающейся системе координат, вокруг поля B_1
- Вращение с частотой $\omega_1 = \gamma B_1$



Вращение в лабораторной системе координат



- При переходе в лабораторную систему координат происходит совмещение двух вращений
- При частоте РЧ поля $\Omega=\omega_0$ вращение происходит по спиральной траектории

Эффективное поле и нутация

- В более общем случае при $\Omega \neq \omega_0$ вращение намагниченности во вращающейся системе координат происходит вокруг эффективного поля B_{eff}

$$\boldsymbol{B}_{eff} = \boldsymbol{B}_0 + \frac{\boldsymbol{\Omega}}{\gamma} + B_1 \boldsymbol{x}'$$

- Само B_{eff} тоже вращается вокруг $\mathbf{B}_0$, таким образом суммарное движение намагниченности представляет собой движение по поверхности двух вращающихся конусов - нутацию

Угол поворота

- При кратковременном резонансном облучении ($\Omega=\omega_0$) и равновесном начальном положении намагниченности ($\mu_z(0)=M_0$, $\mu_z(0)=0$)

$$\mu_{y'} = M_0 \sin \gamma B_1 t$$

$$\mu_{z'} = M_0 \cos \gamma B_1 t$$

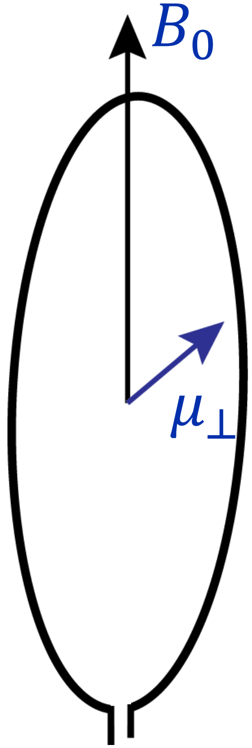
- Для импульса РЧ поля длительностью τ можно ввести параметр угла поворота

$$\theta = \gamma B_1 \tau$$

Сигнал индукции

Намагниченность в приёмной катушке

- До сих пор намагниченность рассматривалась в свободном пространстве, поместим намагниченность в проводящее кольцо, находящееся в плоскости *z-x*
- Согласно закону электромагнитной индукции переменное магнитное поле будет создавать ЭДС в кольце
- Так как μ_z постоянно, то будем рассматривать только $\mu_\perp$



Намагниченность в приёмной катушке

- Согласно теореме взаимности наводимое ЭДС

$$\xi = -\frac{\delta}{\delta t}\left(B_{loop} \cdot m\right)$$

- Где B_{loop} - поле, в центре кольца, создаваемое единичным током, проходящим через кольцо радиуса a

$$B_{loop} = \frac{\mu_0}{2a}$$

Сигнал свободной индукции

- С учетом того, что производная берется только между намагниченностью и полем кольца и намагниченность вращается с частотой ω_0

$$\xi = m\omega_0 \frac{\mu_0}{2a} \sin(\omega_0 t)$$