УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

Квантовая радиофизика

Лекция 2

Санкт-Петербург, 2018

Ядерная намагниченность

- У большого (>10^6) набора ядер с ненулевым спином, помещенного во внешнее постоянное магнитное поле, существует ненулевой магнитный момент
- Величина магнитного момента определяется индукцией магнитного поля, гиромагнитным отношением ядра, числом ядер, спином и температурой ансамбля

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

Намагниченность ^{1}H в воде

- Для ядра водорода

$$M_0 = N\frac{\gamma\hbar^2}{4kT}\omega_0$$

- 1 мл воды $N = 6.62\times10^{22}$ протонов
- $\hbar = 1.054\times10^{-34}$ Дж×с
- $\gamma = 2.675\times10^{8}$ Рад/с*Тл
- ν_0=63.86 МГц, $\omega_0 = 4.013\times10^{8}$ Рад/с
- $k = 1.381\times10^{-23}$ Дж/К
- $T = 293$ K
- $M_0 = 4.89\times10^{-9}$ А×м^2

Уравнения Блоха

- Движение ядерной намагниченности описывается уравнениями Блоха в стационарной или вращающейся системе координат

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

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

Намагниченность в лабораторной системе координат

- В лабораторной системе координат намагниченность прецессирует с ларморовой частотой, пропорциональной величине магнитного поля и гиромагнитному отношению ядра

$$\omega_0 = \gamma B_0$$

- Разность фаз прецессии всех элементарных намагниченностей приводит к нулевому среднему значению равновесной поперечной намагниченности и ненулевому значению продольной = M_0

Намагниченность во вращающейся системе координат

- В системе координат, вращающейся вокруг направления магнитного поля с частотой ω_0 в присутствии переменного магнитного поля круговой поляризации частоты ω_0, перпендикулярного постоянному магнитному полю намагниченность совершает поворот вокруг эффективного поля
- Воздействие импульса переменного магнитного поля на систему характеризуется углом поворота

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

Спад свободной индукции

- После воздействия РЧ-импульса на продольную намагниченность возникает поперечная составляющая намагниченности, которая вращается вокруг B_0 частотой ω_0

$$\mu_{\perp} = M_0 \sin\theta \, e^{-i\omega_0 t}$$

- При наличии приёмной РЧ катушки в ней возникает ЭДС

$$\xi \sim M_0 \omega_0 \sin\theta \, e^{-i\omega_0 t}$$

- Для ранее рассчитанного M_0 – порядок мкВ

Сравнение с величиной излучения

- Средняя мощность излучения диполя

$$P = \frac{\mu_0 {\omega_0}^4 {M_0}^2}{12\pi c^3}$$

- ω_0 = 4.013×10^{8} Рад/с
- M_0 = 4.89 ×10^{-9} А×м^{2}
- μ_0 = 4π×10^{-7} Гн/м
- P = 7.66×10^{-16} Вт
- На 1 Ом, U = 28 нВ

Потеря энергии через излучение

- Рассмотрим, как система будет терять энергию через вычисленное выше излучение
- При угле поворота 90° вся намагниченность переходит в перпендикулярную, соответственно сообщается энергия

$$E = M_0 B_0$$

- Для 1 мл воды при 20° С в поле 1.5 Т $E = 7.33 \times 10^{-9}$ Дж
- При излучении с $P = 7.66 \times 10^{-16}$ Вт требуется около 110 дней для возвращения в состояние равновесия
- Реальное время возвращения < 1 минуты

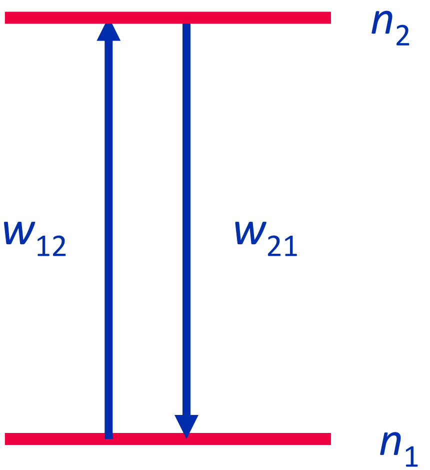
ITMO UNIVERSITY

Релаксация

ITsMOre than a UNIVERSITY

Релаксация спинового ансамбля

- Рассмотрим динамику величины намагниченности с точки зрения разницы заселенности энергетических уровней
- Между энергетическими уровнями возможны переходы с вероятностью перехода w_{nm}
- Рассмотрим на примере простой системы со спином I=1/2 с двумя энергетическими уровнями



Распределение Больцмана

- Населенность энергетического уровня

$$n_m^0 = N \frac{e^{-\frac{E_m}{kT}}}{\sum_{m=-1/2}^{m=+1/2} e^{-\frac{E_m}{kT}}}$$

- С учетом $E_m = -\gamma\hbar m B_0$ и разложения числителя и знаменателя в ряд с опущением квадратичных и выше членов
- Для примера с 1 мл воды $\gamma\hbar B_0/kT \sim 10^{-5}$

Разница заселенностей

- Населенность энергетических уровней

$$n_1^0 = \frac{N}{2}\left(1 + \frac{\gamma\hbar B_0}{2kT}\right)$$

$$n_2^0 = \frac{N}{2}\left(1 - \frac{\gamma\hbar B_0}{2kT}\right)$$

- Равновесная разница заселенностей

$$\Delta n^0 = \frac{N\gamma\hbar B_0}{2kT}$$

Неравновесная заселенность

- Процесс выравнивания заселенностей

$$\frac{dn_1(t)}{dt} = -n_1(t)w_{12} + n_2(t)w_{21}$$

- С учетом аналогичного уравнения для n_2 и $N=n_1+n_2$

$$\frac{d\Delta n(t)}{dt} = -\Delta n(t)(w_{12} + w_{21}) + N(w_{21} - w_{12})$$

- В состоянии равновесия

$$\Delta n(\infty)(w_{12} + w_{21}) = N(w_{21} - w_{12})$$

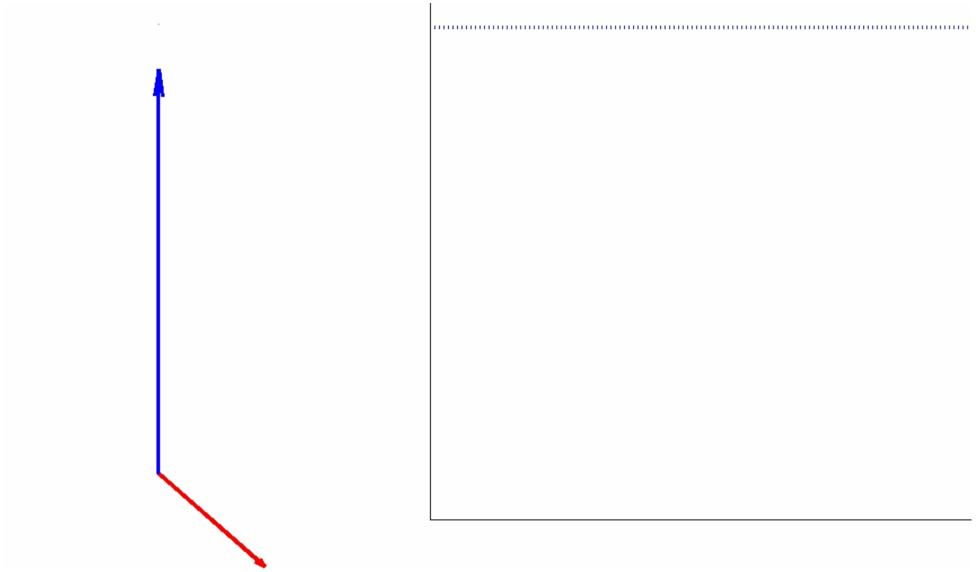
Неравновесная намагниченность

- В неравновесном случае
$$\frac{d\Delta n(t)}{dt} = -(w_{12} + w_{21})(\Delta n(t) - \Delta n(\infty))$$
- Тогда с учетом пропорциональности намагниченности разности заселенностей
$$\frac{dM_z\,(t)}{dt} = -\frac{M_z\,(t) - M_0}{T_1}$$

Продольная намагниченность

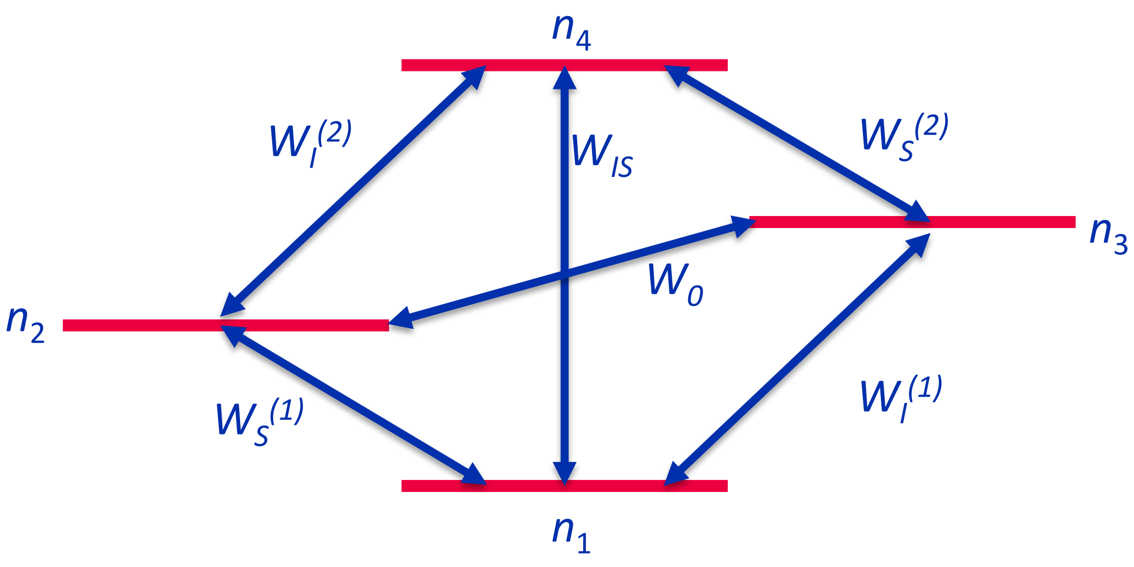
- Интегрируя полученное уравнение

$$M_z(t) = M_0 - (M_0 - M_z(0))e^{-\frac{t}{T_1}}$$



Релаксация двух спиновых ансамблей

- Рассмотрим на примере простой системы с двумя спинами I=1/2 и S=1/2



Заселенность энергетического уровня

- Заселенность уровня n_1

$$\frac{dn_1}{dt} = -n_1 w_I^{(1)} - n_1 w_s^{(1)} - n_1 w_{IS} + n_2 w_S^{(1)} + n_3 w_I^{(1)} + n_4 w_{IS}$$

- Аналогичные уравнения можно написать для остальных уровней

Спиновые намагниченности

- Рассмотрим намагниченности спиновых ансамблей

$$S_z = n_1 - n_2 + n_3 - n_4$$
$$I_z = n_1 - n_3 + n_2 - n_4$$

- И дополнительные заселенности

$$2IS = n_1 - n_2 - n_3 + n_4$$
$$N = n_1 + n_3 + n_2 + n_4$$

Населенности уровней

- С учетом выражений для заселенности уровней

$$n_1 = (N + I_z + S_z + 2IS)/4$$
$$n_2 = (N + I_z - S_z - 2IS)/4$$
$$n_3 = (N - I_z + S_z - 2IS)/4$$
$$n_4 = (N - I_z - S_z + 2IS)/4$$

Временная эволюция намагниченностей

- Продифференцируем I_z по времени и выразим его через новые величины (с учетом выражения намагниченностей через заселенности)

$$\frac{dI_z}{dt} = -\left(w_I^{(1)} + w_I^{(2)} + w_{IS} + w_0\right) I_z$$
$$-(w_{IS} - w_0)S_z - \left(w_I^{(1)} - w_I^{(2)}\right) 2IS$$

Уравнения Соломона

- С учетом начальных условий

$$\frac{dI_z}{dt} = -\left(w_I^{(1)} + w_I^{(2)} + w_{IS} + w_0\right)(I_z - I_z(0)) - (w_{IS} - w_0)(S_z - S_z(0)) - \left(w_I^{(1)} - w_I^{(2)}\right) 2IS$$

$$\frac{dS_z}{dt} = -\left(w_S^{(1)} + w_S^{(2)} + w_{IS} + w_0\right)(S_z - S_z(0)) - (w_{IS} - w_0)(I_z - I_z(0)) - \left(w_S^{(1)} - w_S^{(2)}\right) 2IS$$

$$\frac{d2IS}{dt} = -\left(w_S^{(1)} + w_S^{(2)} + w_{IS} + w_0\right) 2IS - \left(w_I^{(1)} - w_I^{(2)}\right)(I_z - I_z(0)) - \left(w_S^{(1)} - w_S^{(2)}\right)(S_z - S_z(0))$$

Анализ уравнений

- Собственная релаксация: зависимость I_z от $(I_z - I_z(0))$
- Релаксация пропорциональна

$$R_I = \left(w_I^{(1)} + w_I^{(2)} + w_{IS} + w_0\right)$$

- Существует независимо от возможностей перехода системы S и независимо от возможности переходов 2-3 или 1-4

Анализ уравнений

- Эффект кросс-релаксации: зависимость I_z от $(S_z\text{-}S_z(0))$
- Кросс-релаксация пропорциональна

$$\sigma_{IS} = (w_2 - w_0)$$

- То есть при наличии переходов 1-4 или 2-3 неравновесное состояние спинов в одной системе будет воздействовать на релаксацию второй системы

Анализ уравнений

- Кроме того, существует дополнительная кросс-корреляционная релаксация между ансамблем *I* и состоянием 2*IS* с константой Δ_I

$$\Delta_I = \left(w_I^{(1)} - w_I^{(2)}\right)$$

- Аналогично для системы S

$$\Delta_S = \left(w_S^{(1)} - w_S^{(2)}\right)$$

Уравнения Соломона

- С учетом констант

$$\frac{dI_z}{dt} = -R_I(I_z - I_z(0)) -\sigma_{IS}(S_z - S_z(0)) - \Delta_I 2IS$$

$$\frac{dS_z}{dt} = -R_S(S_z - S_z(0)) -\sigma_{IS}(I_z - I_z(0)) - \Delta_S 2IS$$

$$\frac{d2IS}{dt} = -R_{IS}2IS -\Delta_I(I_z - I_z(0)) - \Delta_S(S_z - S_z(0))$$

Присутствующие эффекты

- В общем случае – неэкспоненциальная релаксация
- При наличии кросс-релаксации возмущение одной системы будет приводить к неравновесному состоянию второй
- Наличие кросс-релаксации требует наличия переходов 1<->4 и 2<->3, существующих при диполь-дипольном взаимодействии между спиновыми ансамблями
- Кросс-релаксация приводит к эффекту Оверхаузера

Скорость релаксации

- От чего зависят вероятности переходов между уровнями (а следовательно, и константы релаксации)?
- Вероятность перехода можно записать, как
$$w_{ij} = A_{ij} * Y * J(\omega_{ij})$$
- A_{ij} определяют возможность перехода между уровнями
- Y определяют величину взаимодействия, вызывающего переходы
- $J(\omega_{ij})$ определяет плотность мощности случайного процесса на частоте перехода

Связь с функцией корреляции

- Функция корреляции
$$K(t,\tau) = \overline{F(t)F^*(t-\tau)}$$
- Для стационарных стохастических систем (то есть, если вероятность найти систему в определенном состоянии постоянна) *K* не зависит от *t.*
- $J(\omega_{ij})$ – Фурье-образ $K(\tau)$

Время корреляции

- Функция корреляции показывает, насколько система «похожа на саму себя». Максимальна в нуле и минимальна при больших τ

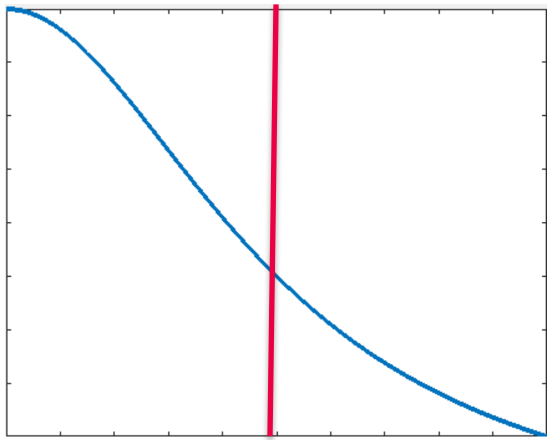
$$K(\tau) \sim e^{-\frac{\tau}{\tau_c}}$$

- τ_c – время корреляции – показывает, насколько быстро хаотическое движение теряет заданную конфигурацию
- Время корреляции увеличивается при увеличении размера молекулы или вязкости, уменьшается с ростом температуры

Связь с плотностью мощности излучения

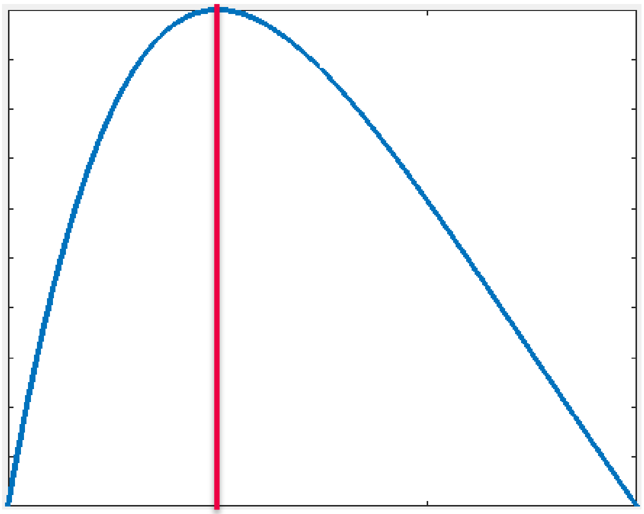
- Спектральная плотность для экспоненциальной функции корреляции

$$J(\omega) \sim \frac{\tau_c}{1+\tau_c^2\omega^2}$$

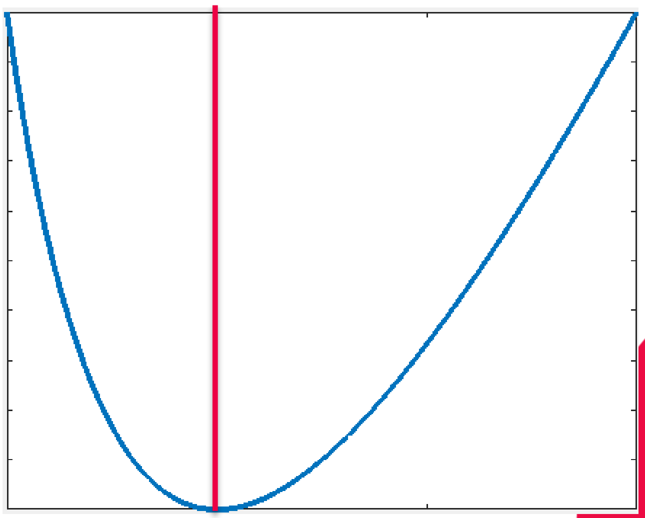


Связь с релаксацией

- Для релаксации продольной намагниченности важна только плотность на частоте энергетических переходов
- Зависимость R и T_1 от времени корреляции τ_c



$\omega\tau_c$~1



$\omega\tau_c$~1

Механизмы релаксации

- Какие хаотические движения создают поля на резонансной частоте переходов? Насколько сильны эти поля?
- Парамагнитные вещества
  - Наличие неспаренного электрона
  - Дипольное взаимодействие

$$Y \sim \left(\frac{\mu\gamma}{r^3}\right)^2$$

Механизмы релаксации

- Спин-спиновые взаимодействия
  - Дипольное взаимодействие

$$Y \sim \left(\frac{\mu\gamma_1\gamma_2}{r^3}\right)^2$$

- Анизотропия химического сдвига
  - Наличие флуктуаций направления магнитного поля и переориентации намагниченности вследствие разницы направлений

Поперечная релаксация

- Смена поперечной составляющей намагниченности связана с разрушением когерентности спинового ансамбля
- Разрушение когерентности связано с переориентацией частиц, а следовательно все рассуждения о скорости энергетических переходов, сделанные для продольной составляющей намагниченности, справедливы для поперечной

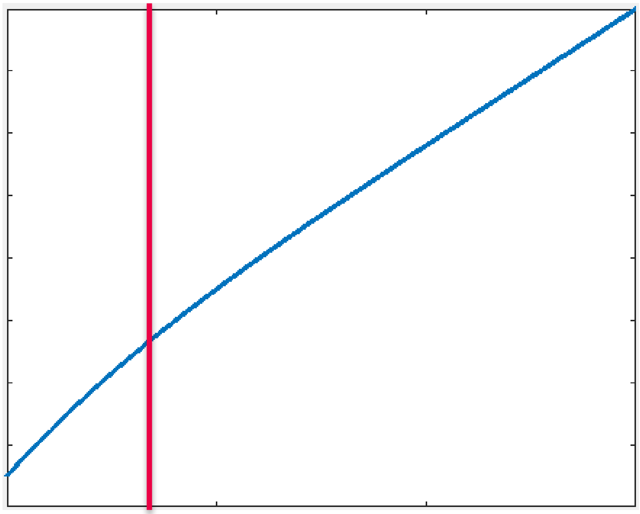
Поперечная релаксация без продольной

- Кроме механизмов, влияющих на вероятность переходов, когерентность может быть потеряна вследствие наличия дополнительного постоянного магнитного поля
- Вследствие этого

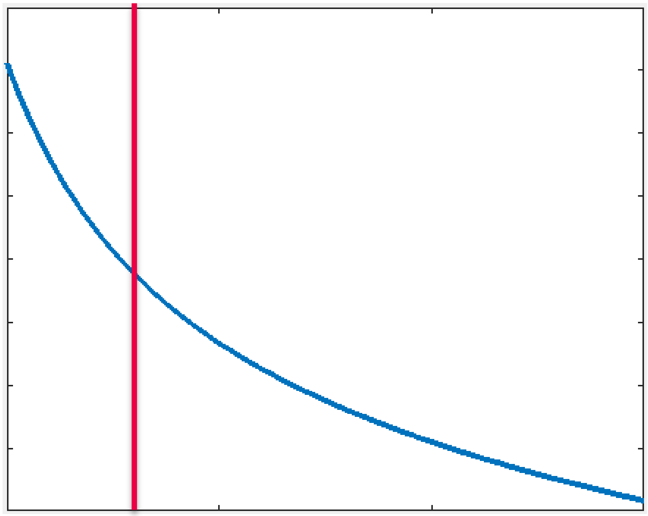
$$J(\omega) \sim \tau_c + \frac{\tau_c}{1 + \tau_c^2 \omega^2}$$

Поперечная релаксация без продольной

- Зависимость вероятности перехода и времени релаксации от времени корреляции



$\omega\tau_c \sim 1$



$\omega\tau_c \sim 1$

Поперечная и продольная релаксация

- Медленное молекулярное движение $\omega\tau_c >> 1$
  - Крупные молекулы
  - Длительная продольная релаксация, быстрая поперечная релаксация
- Быстрое молекулярное движение $\omega\tau_c << 1$
  - Малые молекулы, высокие температуры
  - Равенство продольной и поперечной релаксации

Поперечная намагниченность

- Так как механизмы релаксации похожи, логично предположить похожую зависимость поперечной и продольной намагниченности
- Феноменологически (в уравнениях Блоха)

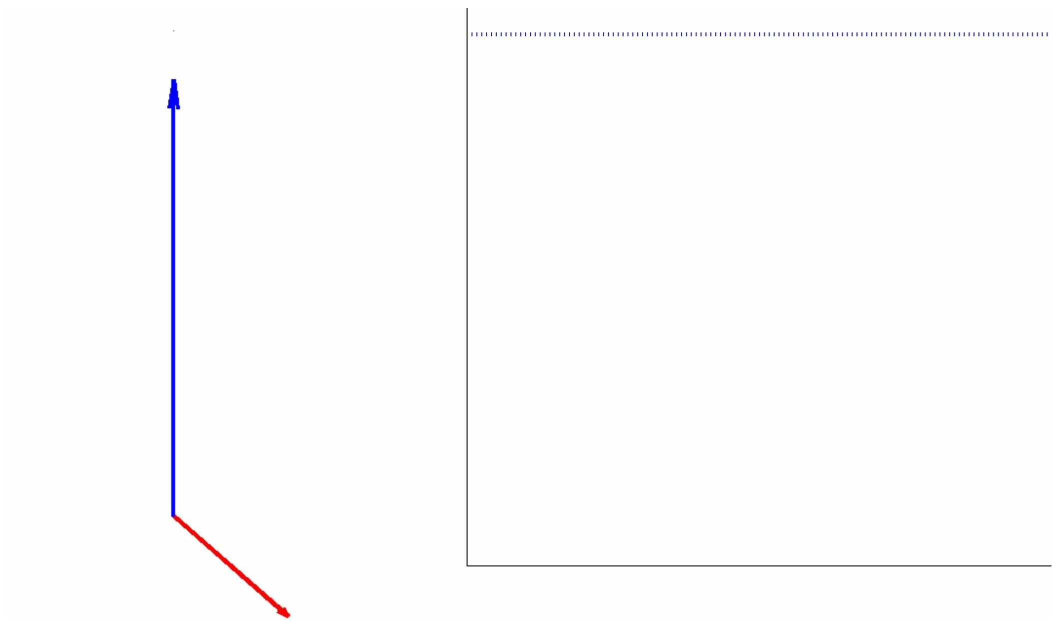
$$\frac{dM_x(t)}{dt} = -\frac{M_x(t)}{T_2}$$

$$\frac{dM_y(t)}{dt} = -\frac{M_y(t)}{T_2}$$

Поперечная намагниченность

- Интегрируя уравнения с учетом выражения для прецессирующей намагниченности

$$M_\perp(t) = M_\perp(0)e^{-\frac{t}{T_2}}$$



Суммарная намагниченность

- Поведение намагниченности после подачи РЧ импульса

УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

Спасибо за внимание!

Санкт-Петербург, 2018