

УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

Квантовая радиофизика

Лекция 4

Санкт-Петербург, 2018



Ядерная намагниченность

- У большого (>10⁶) 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

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



Уравнения Блоха

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

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



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 = M₀

T.MOre than a



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 ω₀

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

🔮 При наличии приёмной РЧ катушки в ней возникает ЭДС

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



Релаксация продольной составляющей намагниченности

- ✓ Из анализа разностей заселенности изолированного спинового ансамбля следует, что намагниченность будет возвращаться к величине M_0 $\frac{dM_z(t)}{dt} = -\frac{M_z(t) - M_0}{T_1}$
- После интегрирования

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



Поперечная намагниченность

Релаксация поперечной компоненты намагниченности феноменологически описывается путём введения в уравнения Блоха релаксационных членов

$$\frac{dM_{x}(t)}{dt} = -\frac{M_{x}(t)}{T_{2}}$$
$$\frac{dM_{y}(t)}{dt} = -\frac{M_{y}(t)}{T_{2}}$$

После интегрирования и приведения к форме М

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

IT.MOre than a

UNIV



Спад намагниченности и его спектр

Спад свободной индукции (FID) t

$$S(t) = S_0 e^{i\omega_0 t} e^{-\overline{T_2}}$$

🔮 Преобразование Фурье



$$S(\omega) = S_0 \frac{\frac{1}{T_2} + i(\omega - \omega_0)}{(\omega - \omega_0)^2 + \frac{1}{T_2^2}}$$



Поглощение и дисперсия





Константы химического экранирования

Результат внесения возмущения описывается корректировкой поля, в котором осуществляется прецессия ядерной намагниченности (локального поля)

$$B_{loc} = (1 - \sigma)B_0$$

 σ – константа химического экранирования определяет сдвиг частоты наблюдаемого пика ЯМР в зависимости от химического окружения



Измерение экранирования

✓ Магнитноэквивалентные состояния (CH₃-CH₂-OH)





Макроскопические псевдорелаксационные эффекты





Время релаксации T_2^*

Для ускоренного затухания можно ввести своё эффективное время релаксации Т₂^{*}

$$\frac{1}{T_2^*} = \frac{1}{T_2} + \gamma \Delta B_0$$

- Т₂^{*} не связано с молекулярным движением и спинспиновыми взаимодействиями, а отображает степень неоднородности используемого магнитного поля
- Возможен шимминг по длине FID

Обратная связь приёмного контура с намагниченностью

- При наличии конечного сопротивления приёмной системы, наводимое ЭДС будет создавать конечной ток в приёмной катушке, пропорциональный ЭДС
- В свою очередь, ток создаёт пропорциональное магнитное поле, отстающее от вращения намагниченности на π/2

 $H_r = kM\sin\theta$











Уравнения Блоха с учетом обратной связи

Рассмотрим уравнение Блоха для продольной компоненты намагниченности в присутствии поля обратной связи и в отсутствии других РЧ полей

 $\frac{dM_z}{dt} = \gamma M_x k M_0^2 \sin(\theta) \cos(\phi)$ $-\gamma M_y k M_0^2 \sin(\theta) \sin(\phi)$

ITsMOre than a UNIVERSITY



Обратная связь с намагниченностью

Уравнения для обратной связи с намагниченностью в отсутствии релаксации

$$\frac{dM_z}{dt} = \gamma k \sin^2(\theta) M_0^2$$
$$\frac{d\theta}{dt} = -\gamma k M_0 \sin(\theta) \qquad k = 2\pi Q f$$



Обратная связь с учетом релаксации

Решение для намагниченности

 $M_{z} = M_{0} \tanh(\gamma k M_{0}(t - t_{0}))$ $M_{y} = -M_{0} \operatorname{sech}(\gamma k M_{0}(t - t_{0})) \sin(\phi)$ $M_{\chi} = M_{0} \operatorname{sech}(\gamma k M_{0}(t - t_{0})) \cos(\phi)$ © Следствие – искажение формы линии ЯМР



Многоимпульсные методы ЯМР



ITSMOre than a UNIVERSIT

Спад намагниченности и его спектр



Одноимпульсная спектроскопия



- Измерение химического сдвига
- ✓ Измерение T₂^{*} или T₂



Измерение Т₁

🔮 Последовательность 90-90



Величина сигнала

Продольная намагниченность до второго РЧ-импульса

$$M_{z}(90_{-2}) = M_{0} \left(1 - e^{-\frac{T}{T_{1}}} \right)$$

Интенсивность сигнала после второго РЧ-импульса

$$M_{x}(90_{+2}) = M_{0}\left(1 - e^{-\frac{T}{T_{1}}}\right)$$

Последовательное насыщение





Продольная намагниченность в квазистационарном состоянии

🔮 Последовательность α-α

$$M_{Z}(0_{+}) = M_{0} \cos \alpha \frac{\left(1 - e^{-\frac{TR}{T_{1}}}\right)}{\left(1 - \cos \alpha e^{-\frac{TR}{T_{1}}}\right)}$$
$$M_{\chi}(0_{+}) = M_{0} \sin \alpha \frac{\left(1 - e^{-\frac{TR}{T_{1}}}\right)}{\left(1 - \cos \alpha e^{-\frac{TR}{T_{1}}}\right)}$$



Интенсивность сигнала

✓ Зависимость от соотношения TR/T₁





Сигнал в квазистационарном состоянии

Ø При α=90°

$$M_{x}(0_{+}) = M_{0} \left(1 - e^{-\frac{TR}{T_{1}}} \right)$$

🔮 Угол Эрнста

$$\cos \alpha_E = e^{-\frac{TR}{T_1}}$$



Инверсия-восстановление

🔮 Последовательность 180-90





Инверсия-восстановление

🔮 Амплитуда сигнала

$$M_x(90_+) = M_0 \left(1 - 2e^{-\frac{TI}{T_1}} \right)$$

🔮 Нуль-метод

$$T_1 = \frac{TI_0}{\ln 2}$$



Спиновое эхо

✓ Спад сигнала с постоянной времени Т₂*





Эхо в последовательности 90-90





Эхо в последовательности 90-180

- 🔮 Амплитуда сигнала
- $M_x(t,\Delta\omega) = M_0 \cos(\Delta\omega[\tau_1 \tau_2])$
- Любое распределение частотЛюбое разнесение импульсов





Спиновое эхо

• Поведение намагниченности







IT_SMOre than a UNIVERSITY

Релаксация при 90-180

🔮 Амплитуда сигнала

$$M_{\chi}(2\tau) = M_0 e^{-\frac{2\tau}{T_2}}$$





Последовательность 90-180-180-...

Возможна вторая и более высокие рефокусировки намагниченности



IT:MOre than a

UNIVERSITY

Стимулированное эхо 90-90-90

Второе эхо в последовательности 90-90-90





Стимулированное эхо 90-90-90

🔮 Амплитуда сигнала

$$M_{\chi}(2\tau) = \frac{M_0}{2} e^{-\frac{T}{T_1}} e^{-\frac{2\tau}{T_2}}$$



Сигналы в последовательности α-α-α

🔮 5 сигналов эха







УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

Спасибо за внимание!

Санкт-Петербург, 2018