

УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

Квантовая радиофизика

Лекция 12

Санкт-Петербург, 2017



Диффузия в экспериментах ЯМР

- Уравнения Блоха-Торри (диффузия)

$$\frac{d\mu_{\perp}}{dt} = -i\gamma(\mathbf{G} \cdot \mathbf{r})\mu_{\perp} + \nabla\mathbf{D}\nabla\mu_{\perp}$$

- Изотропная диффузия

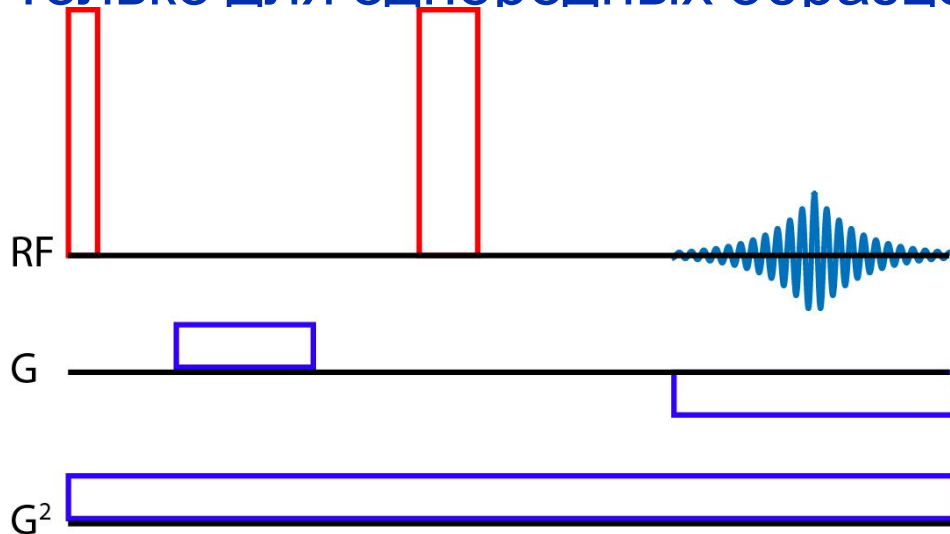
$$b = \gamma^2 \int_0^t \left[\int_0^{\tau} G(t') dt' \right]^2 d\tau$$

- Анизотропная диффузия

$$b_{ij} = \int_0^t \left[\int_0^{\tau} G_{x_i}(t') dt' \right] \left[\int_0^{\tau} G_{x_j}(t') dt' \right] d\tau$$

Градиенты второго порядка

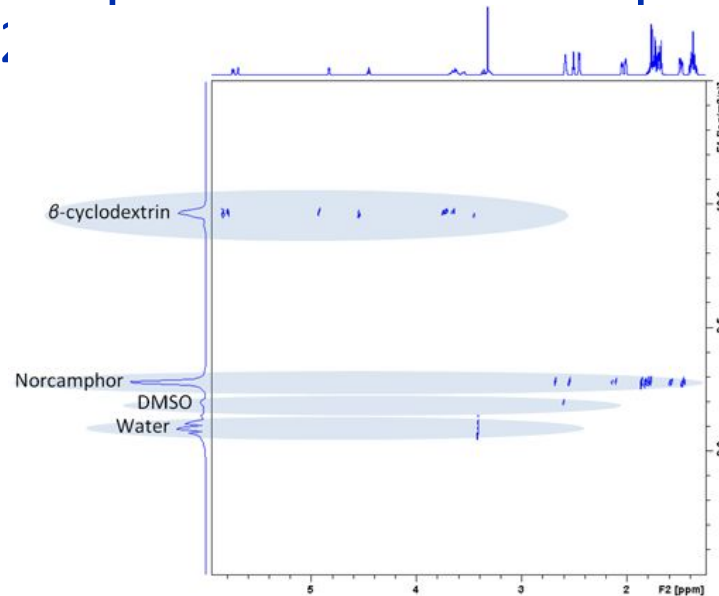
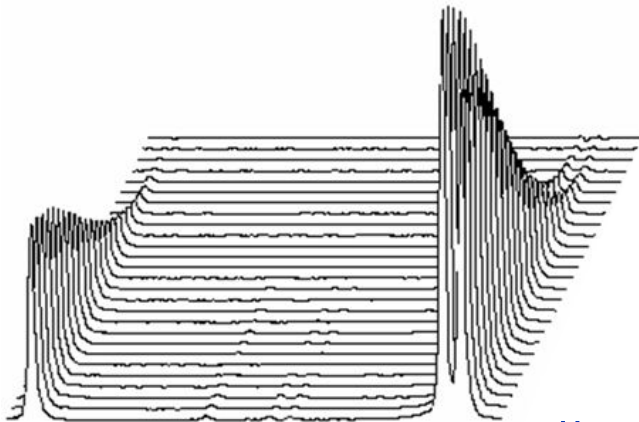
- Метод измерения диффузии с применением градиентов магнитного поля с квадратичной зависимостью от координат
- Только для однородных образцов





DOSY

- Вид представления экспериментов по измерению диффузии в качестве :



- использует двойное преобразование Фурье/Лапласа

Экспериментальн ые помехи при измерении движения



Экспериментальные помехи

- Radiation damping
- Неоднородность поля
- Температурная нестабильность
- Фоновые градиенты

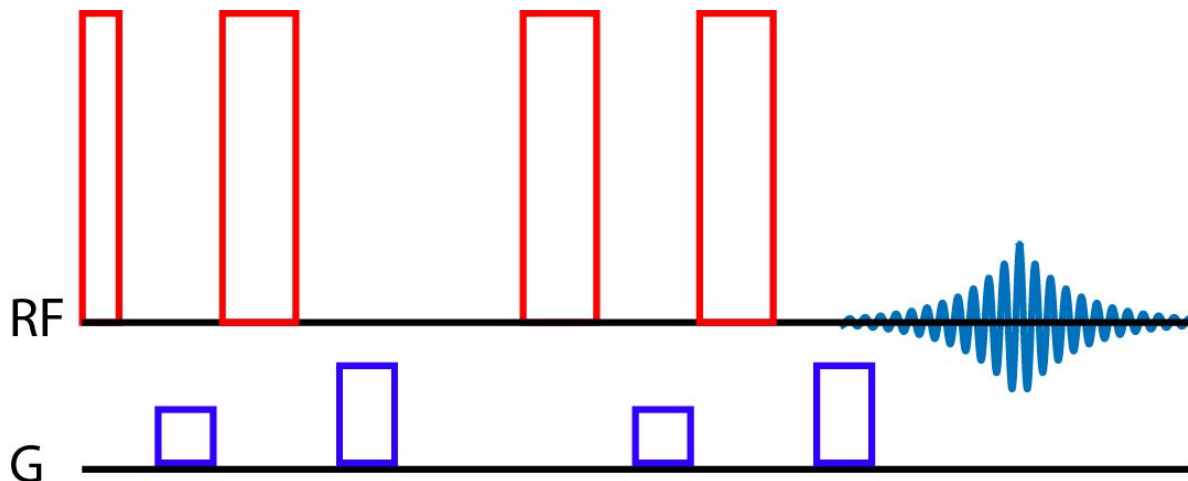


Фоновые градиенты

- Дополнительные члены

$$b = \gamma^2 \int_0^t \left[\int_0^\tau G(t') dt' \right]^2 d\tau$$

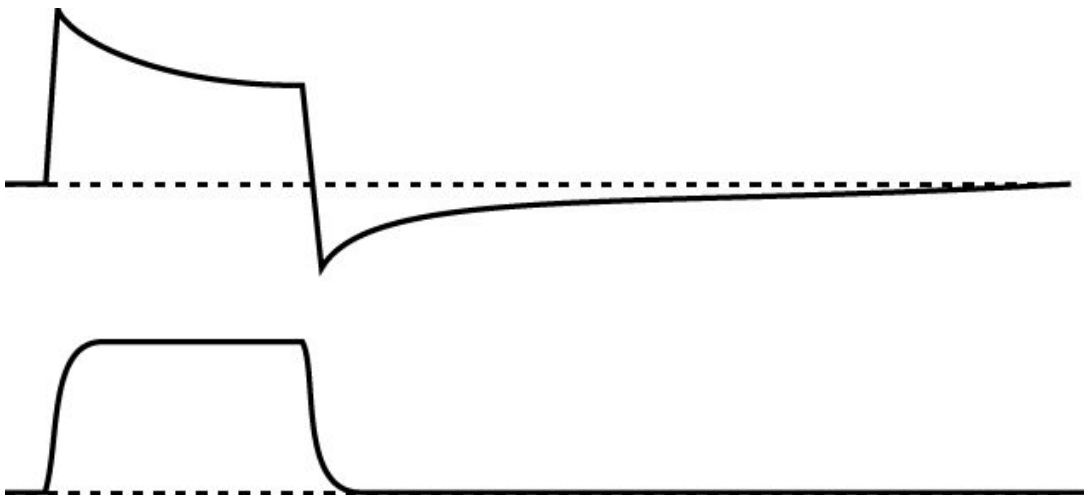
- Использовать импульсы градиентов специальной формы





Вихревые токи

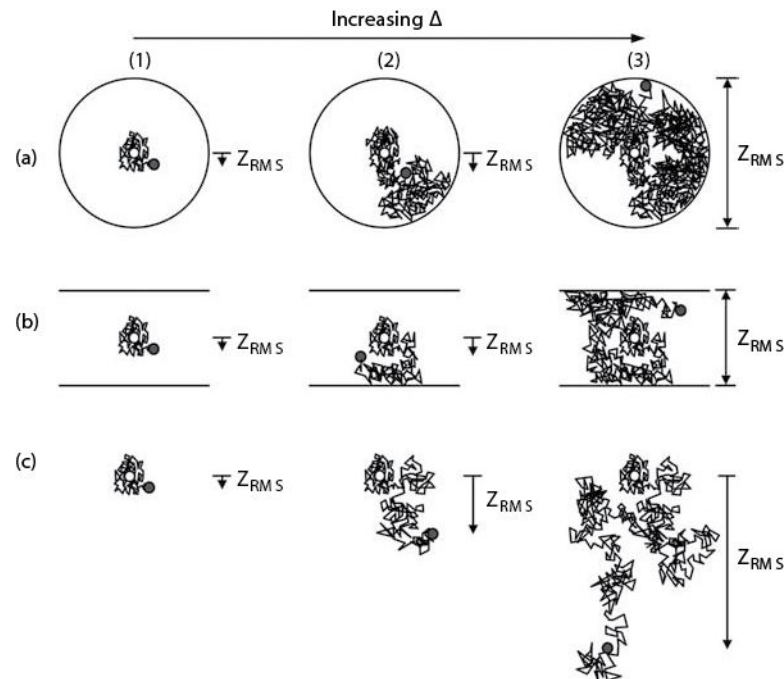
- Вихревые токи в экспериментах с градиентами магнитного поля
- Неравномерность накопления фазы
- Изменение формы импульса градиента



Диффузия в замкнутых пространствах

Ограниченная диффузия в ЯМР

- Наличие физических ограничений для движения частиц приводит к ограничению подвижности





Фазовое q -пространство

- Введение q -пространства для оценки подвижности частиц
- Вводится через рассмотрение уравнений диффузии для вероятности перемещения частицы

$$q = \int G(t)x(t) dt$$

- Фазовый сдвиг переместившейся частицы
$$\Delta\varphi(x - x_0) = q(x - x_0)$$



Пропагатор частицы

- $P(x_0, x_1, \Delta)$ – вероятность частицы, находящейся в точке x_0 сместиться за время Δ в точку x_1
- При использовании понятия пропагатора изменение сигнала ЯМР вследствие диффузии можно записать
- Описывает движение в системе

$$E(q, \Delta) = \int \int \rho(x_0) P(x_0, x_1, \Delta) e^{iq(x_1 - x_0)} dx_1 dx_0$$



Пропагатор смещения частицы

- Так как в выражении для E есть усреднение по начальному положению, то можно рассматривать усредненный пропагатор – функцию смещения частицы
- Кроме того можно рассматривать только однородные объекты, то есть с постоянным $\rho(x_0)$

$$r = x_1 - x_0$$

$$E(q, \Delta) = \int P(r, \Delta) e^{iqr} dr$$

- Таким образом, изменение сигнала ЯМР является Фурье-образом усредненного пропагатора



Измерение пропагатора

- При малых временах измерения Δ можно измерить пропагатор и связать его с среднеквадратичным смещением частицы (или с коэффициентом самодиффузии)

$$P(r, \Delta) = \int E(q, \Delta) e^{-iqr} dq$$

- В случае свободной гауссовой диффузии полуширина функции пропагатора

$$P(r, \Delta)_{1/2} = 4\sqrt{D(\Delta)\Delta \ln(2)}$$



Приближение длительного Δ

- При наличии ограниченной диффузии, например между параллельными плоскостями можно решить уравнение диффузии для пропагатора
- Тогда для длительного Δ

$$E(q, \infty) = |\text{sinc}(\pi q 2a)|^2$$

- a – расстояние между плоскостями