

#### Квантовая радиофизика <sub>Лекция 1</sub>



## **Небольшое вступление**



#### О чем будет курс?

- Принципы наблюдения квантовых магнитных явлений в радиочастотном диапазоне
- **ЯМР**, ЭПР, ЯКР





#### Где применить ЯМР

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





Обзорная лекция по квантовой механике и атомной физике ЯМР





# **Ядерный магнитный** резонанс

- На данный момент существует два описания ядерного магнитного резонанса: «практическое» и «теоретическое»
- Теоретическое описывает поведение частиц и их распределение по квантовым энергетическим уровням
- Практическое описывает поведение макроскопической намагниченности в радиочастотном поле



#### Ядерный спин

- Общий момент двух описаний существование ядерной макроскопической намагниченности у групп ядер с ненулевым спином
- Ненулевой ядерный спин возникает вследствие нескомпенсированности нуклонных (протонных и нейтронных) спинов
- При наличии у ядра спина у него есть собственный магнитный момент



#### Спин и изотопный состав

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



### Природное содержание изотопов

- Для наблюдения ЯМР имеет большое значение также естественное содержание изотопа
- Природное содержание: <sup>1</sup>H 99.98%, <sup>13</sup>C 1.1%, <sup>17</sup>O 0.04%
- Природное содержание: <sup>12</sup>C 98.9%, <sup>16</sup>O 99.76%, <sup>18</sup>O 0.2%

#### 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...
- Связанный магнитный момент (полный)

$$|\mu| = -\gamma \hbar \sqrt{I(I+1)}$$



#### Зеемановское расщепление

- Потенциальная энергия частицы с магнитным моментом во внешнем постоянном магнитном поле зависит от её ориентации относительно поля
- Детектируемые уровни энергии (собственные состояния) частицы при этом будут определяться величиной проекции спина на направление магнитного поля (z)
- *m*=-2/+1...+2/+1, всего 2/+1 состояний

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



#### Зеемановское расщепление

• Энергия собственных состояний частицы определяется взаимодействием с магнитным полем

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

 Результат – равноотстоящие энергетические уровни с частотой перехода между соседними уровнями

$$\omega_0 = \gamma B_0$$





#### Переходы между энергетическими уровнями

- Расчет вероятностей перехода показывает, что переходы возможны только между соседними энергетическими уровнями
- Кроме того, переходы возможны только при перпендикулярности переменного магнитного поля постоянному



#### Ядро атома водорода

- 1 протон
- /=1/2, m=-1/2...+1/2
- Природное содержание: 99.98%,
- $\gamma$ = 26.75x10<sup>7</sup> Pag/(c\*Tл) = 42.57 МГц/Тл



#### Распределение Больцмана

 Согласно распределению Больцмана при наличии большого числа частиц энергетические уровни Зеемановского расщепления будут иметь разное ожидаемое заселения

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

• Для поля в 1.5 Т разница в 0,001%





#### Квантовая реальность

- При этом нельзя сказать, что больше частиц заселяет верхний уровень, чем нижний (если только не провести непосредственное измерение энергии всех частиц)
- Сами частицы всегда пребывают (описываются волновой функцией) суперпозиции состояний, а вся система – суперпозицией всех возможных комбинаций всех частиц



### Ожидаемые классические следствия

- В среднем разница между вероятностями заселенностей энергетических уровней приведет к появлению макроскопической намагниченности
- Величина намагниченности

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

• Природное содержание изотопа определяет N в  $M_{\odot}$ 





# **Ядерный магнитный** резонанс

- Сами частицы всегда пребывают (описываются волновой функцией) суперпозиции состояний, а вся система – суперпозицией всех возможных комбинаций всех частиц
- Воздействие переменным магнитным полем на систему частиц вызывает её переход в другое состояние





#### Переходы и излучение

- После воздействия на систему РЧ энергией и переходе её в неравновесное состояние она стремится вернуться в равновесное состояние
- Процесс перехода в равновесное состояние – релаксация сопровождается спонтанными и вынужденными переходами и излучением РЧ энергии





#### Переходы и излучение

- Центральный вклад в релаксацию взаимодействие с окружающими частицами (изначально – с кристаллической решеткой), флуктуирующими на резонансных частотах системы
- Такой процесс релаксации спинрешеточная релаксация





#### Излучение и волны

- Стоит отметить, что излучение вследствие релаксации чрезвычайно низкая (~нВ) величина и не объясняет величину принимаемого сигнала ЯМР (~мВ)
- С квантовой точки зрения величина описывается передачей энергии через виртуальные фотоны
- С классической точки зрения излучение наблюдается в дальнем поле, сигнал ЯМР – в ближнем





### Центральный пункты

- У некоторых изотопов есть спин и связанный с ним магнитный момент
- Совокупность магнитных моментов образует макроскопическую намагниченность
- Возможно резонансное воздействие на систему магнитным РЧ полем, перпендикулярным постоянному магнитному полю





#### Спасибо за внимание!