

УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

# Квантовая радиофизика

Лекция 3

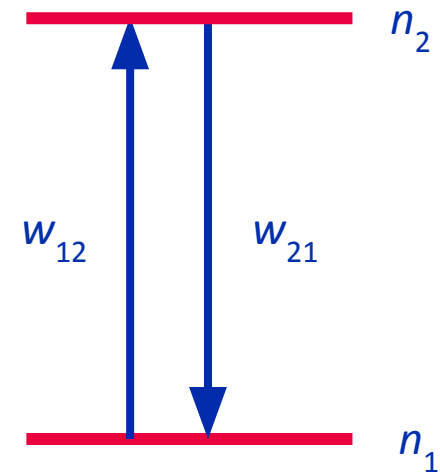
Санкт-Петербург, 2017

# Релаксация



# Релаксация спинового ансамбля

- Величина намагниченности определяется разницей 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



## 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

$$\begin{aligned} N &= n_1 + n_2 \\ \frac{d\Delta n(t)}{dt} &= -\Delta n(t)(w_{12} + w_{21}) + N(w_{21} - w_{12}) \end{aligned}$$



# Неравновесная намагниченность

- Исходя из начальных условий

$$\frac{d\Delta n(t)}{dt} = -(w_{12} + w_{21})(\Delta n(t) - \Delta n(0))$$

- Тогда с учетом пропорциональности намагниченности разности заселенностей

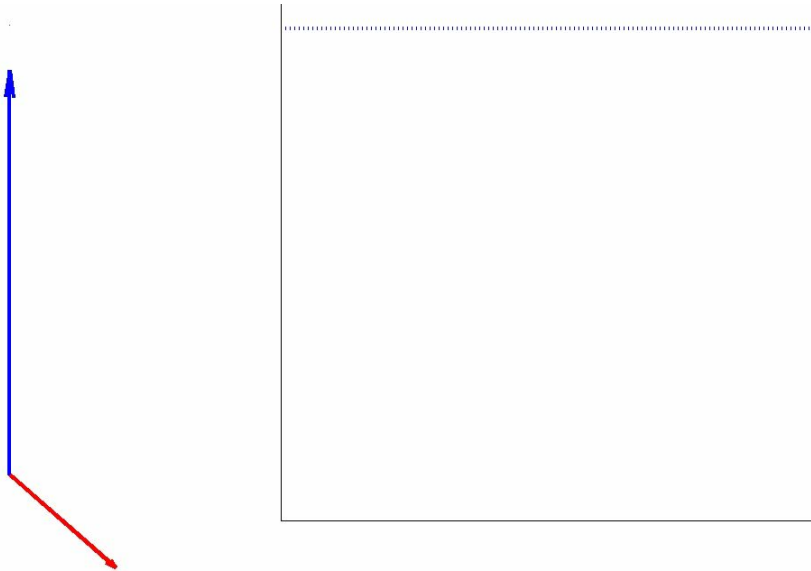
$$\frac{dM_z(t)}{dt} = -\frac{M_z(t) - M_0}{T_1}$$



# Продольная намагниченность

- Интегрируя полученное уравнение

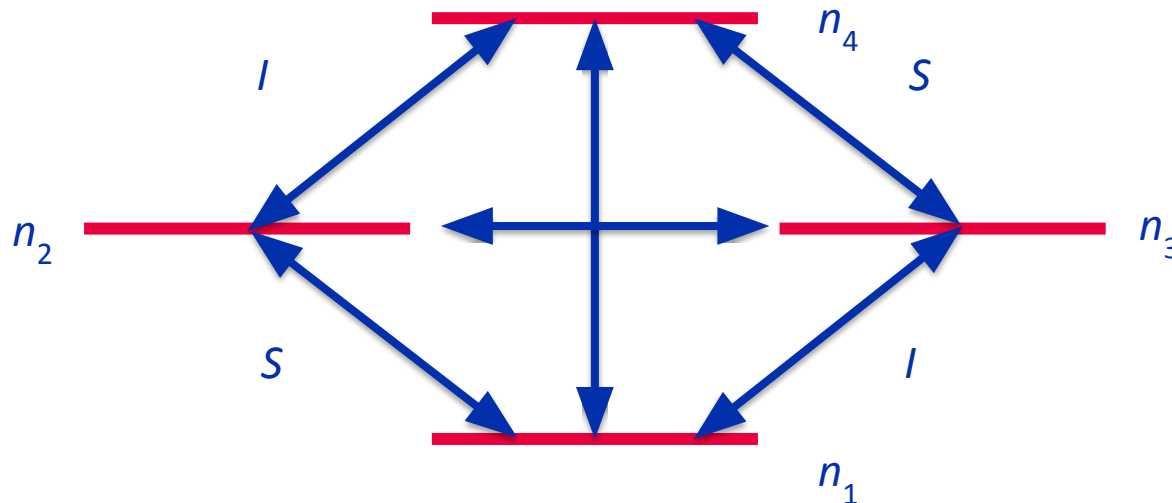
$$M_z(t) = M_0 - (M_0 - M_z(0))e^{-\frac{t}{T_1}}$$





# Релаксация двух спиновых ансамблей

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





## Заселенность энергетического уровня

- Заселенность уровня  $n_1$

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

- 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

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

$$N = n_1 + n_3 + n_2 + n_4$$



## 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

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

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

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



# Анализ уравнений

❶ Собственная релаксация: зависимость  $I_z$  от  $(I_z - I_z(0))$

❷ Релаксация пропорциональна

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

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

❹ Неэкспоненциальная релаксация



# Анализ уравнений

❶ Эффект кросс-релаксации: зависимость  $I_z$  от  $(S_z - S_z(0))$

❷ Кросс-релаксация пропорциональна

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

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

❹ Кроме того, существует дополнительная кросс-релаксация между ансамблем  $I$  и состоянием  $2/S$  с константами  $\Delta_I$  и  $\Delta_S$



# Уравнения Соломона

С учетом констант

$$\begin{aligned}\frac{dI_z}{dt} &= -R_I(I_z - I_z(0)) \\ &\quad -\sigma_{IS}(S_z - S_z(0)) - \Delta_I 2IS \\ \frac{dS_z}{dt} &= -R_S(S_z - S_z(0)) \\ &\quad -\sigma_{IS}(I_z - I_z(0)) - \Delta_S 2IS \\ \frac{d2IS}{dt} &= -R_{IS} 2IS \\ &\quad -\Delta_I(I_z - I_z(0)) - \Delta_S(S_z - S_z(0))\end{aligned}$$





# 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

$$K(t, \tau) = \overline{F(t)F^*(t - \tau)}$$

- ✓  $J(\omega_{ij})$  – Фурье-образ  $K(\tau)$
- ✓ Пусть  $F$  будет полем, испытываем частицей в окружении хаотического движения других частиц
- ✓ Рассмотрим простое хаотическое колебание частицы из одного положения в другое
- ✓ Частица будет создавать в точке рассмотрения тестовой частицы поля  $B_f^1$  или  $B_f^2$



## Время корреляции

- ❶ Хаотически колеблющуюся частицу можно с какой-то вероятностью обнаружить в одном или другом состоянии
- ❷ Аналогично анализу заселенностей можно написать уравнения для вероятностей пребывания частицы в одном или другом состоянии и получить

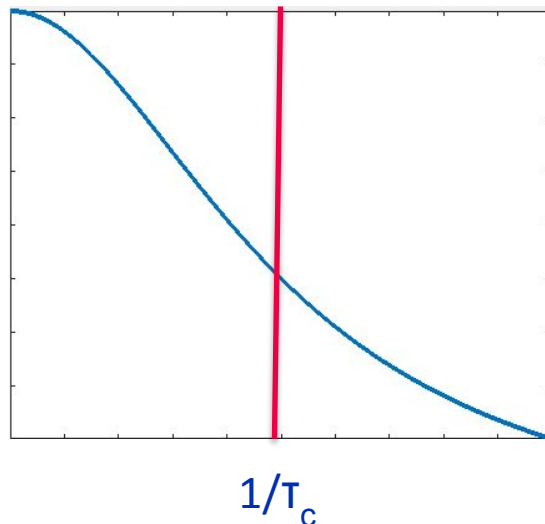
$$K(\tau) \sim e^{-\frac{\tau}{T_c}}$$

- ❸  $T_c$  – время корреляции – показывает, насколько быстро хаотическое движение теряет заданную конфигурацию

## Связь с плотностью мощности излучения

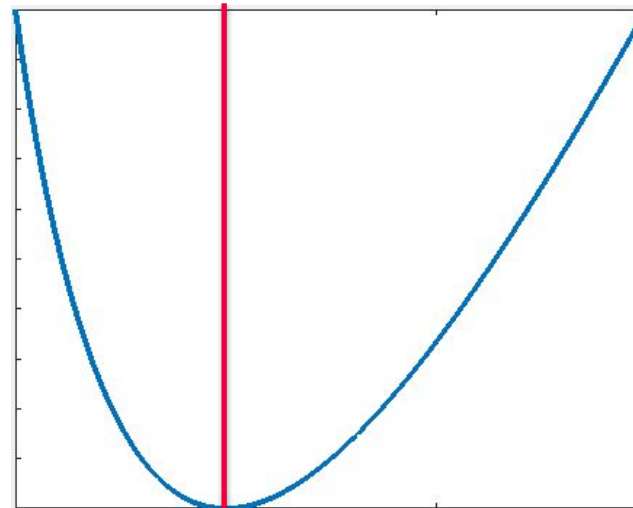
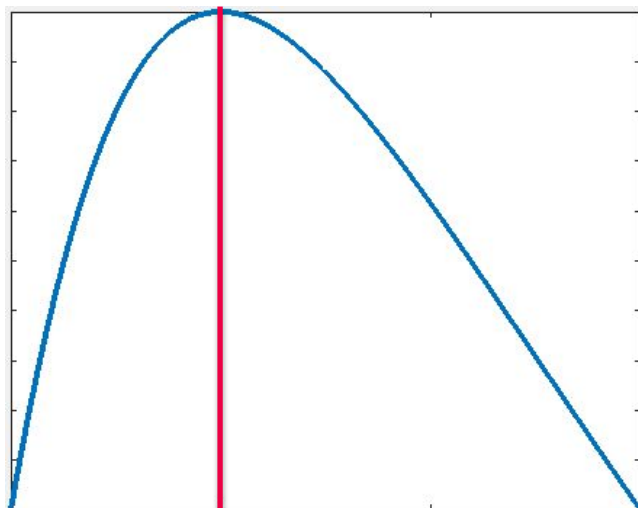
- Спектральная плотность для экспоненциальной функции корреляции

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



## Связь с релаксацией

- Для релаксационных переходов важна плотность на частоте релаксационных переходов
- Зависимость  $R$  и  $T_1$  от времени корреляции





# 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





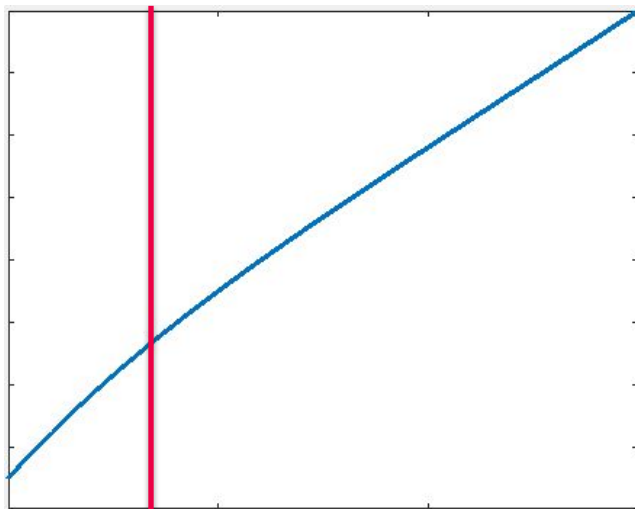
## Поперечная релаксация без продольной

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

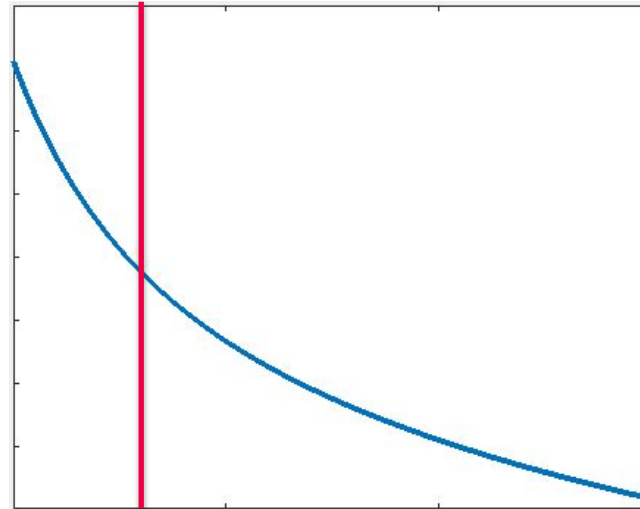
$$J(\omega) \sim \tau_c + \frac{\tau_c}{1 + \tau_c^2 \omega^2}$$

# Поперечная релаксация без продольной

- Зависимость вероятности перехода и времени релаксации от времени корреляции



$\omega T_c \sim$   
1



$\omega T_c \sim$   
1



## Поперечная и продольная релаксация

- Медленное молекулярное движение  $\omega\tau_c \gg 1$ 
  - Крупные молекулы
  - Длительная продольная релаксация, быстрая поперечная релаксация
- Быстрое молекулярное движение  $\omega\tau_c \ll 1$ 
  - 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)

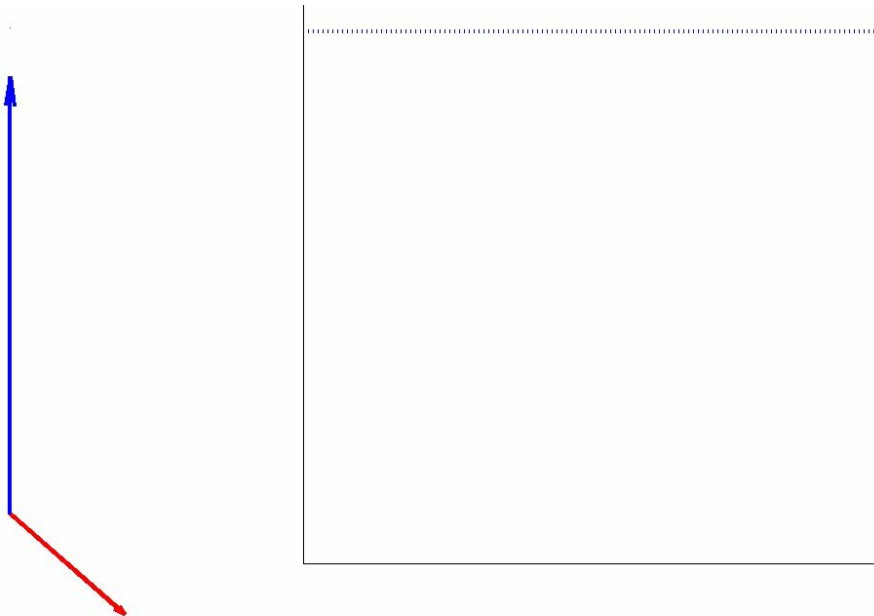
$$\frac{dM_x(t)}{dt} = -\frac{M_x(t)}{T_2}$$
$$\frac{dM_y(t)}{dt} = -\frac{M_y(t)}{T_2}$$



# Поперечная намагниченность

- Интегрируя уравнения с учетом выражения для прецессирующей намагниченности

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

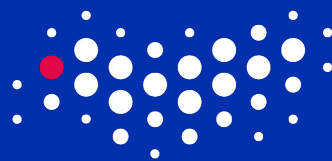




# Суммарная намагниченность

- Поведение намагниченности после подачи РЧ импульса





УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

**Спасибо за внимание!**

Санкт-Петербург, 2017