Спиновая температура и ядерная намагниченность

$$\frac{n_m}{n_{m'}} = e^{-\frac{E_m - E_{m'}}{k_B T_I}} = e^{-\frac{\hbar\omega_0 (m' - m)}{k_B T_I}} \qquad (*)$$

$$\Downarrow$$

$$\frac{n_m - n_{m+1}}{n_m} = 1 - e^{-\frac{\hbar\omega_0}{k_B T_I}} \cong \frac{\hbar\omega_0}{k_B T_I}$$

высокотемпературное приближение

$$n_m \cong \frac{1}{2I+1} \qquad n_m - n_{m+1} \cong \frac{1}{2I+1}\frac{\hbar\omega_0}{k_B T_I}$$

Из (*) следует $\frac{n_m}{n_I} = e^{-\frac{\hbar\omega_0 (I - m)}{k_B T_I}} \Rightarrow n_m = n_I e^{-\frac{\hbar\omega_0 I}{k_B T_I}} e^{\frac{\hbar\omega_0 m}{k_B T_I}}$

$$\sum_{m=-I}^{I} n_m = 1 \quad \Rightarrow \quad n_I e^{-\frac{\hbar\omega_0 I}{k_B T_I}} = \frac{1}{\sum\limits_{m=-I}^{I} e^{\frac{\hbar\omega_0 m}{k_B T_I}}}$$

Ядерная намагниченность $$M = \gamma\hbar \sum_{m=-I}^{I} m n_m N_0$$

число спинов в единице объема

$$M = \frac{\gamma\hbar N_0 \sum\limits_{m=-I}^{I} m e^{\frac{\hbar\omega_0 m}{k_B T_I}}}{\sum\limits_{m=-I}^{I} e^{\frac{\hbar\omega_0 m}{k_B T_I}}}$$

В высокотемпературном приближении

$$M=\gamma\hbar N_0\frac{\hbar\omega_0}{k_BT_I}\frac{\sum\limits_{m=-I}^{I}m^2}{2I+1}=\frac{1}{3}\gamma\hbar^2N_0\omega_0I(I+1)\frac{1}{k_BT_I}$$

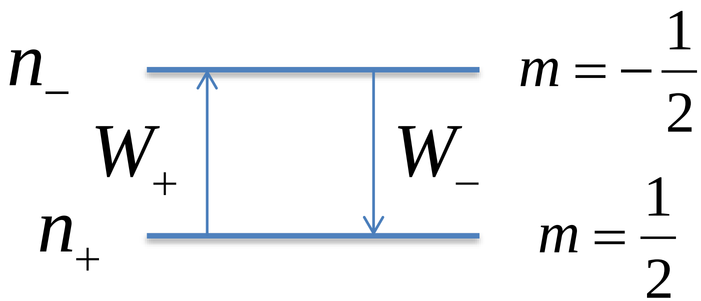
$$=\frac{1}{3}\gamma^2\hbar^2N_0I(I+1)\frac{B_0}{k_BT_I}$$

$$\alpha_I=\frac{\hbar}{k_BT_I}$$ - обратная спиновая температура

Спин-решеточная релаксация в твердых телах

Решетка=термостат с температурой T_l

Двухуровневая система – спин I=1/2



В равновесии $$\frac{n_-^0}{n_+^0} = e^{-\frac{\hbar\omega_0}{k_B T_l}}$$

Контакт с решеткой – динамическое равновесие

$$n_+^0 W_+ = n_-^0 W_- \quad \Longrightarrow \quad \frac{W_+}{W_-} = \frac{n_-^0}{n_+^0} = e^{-\frac{\hbar\omega_0}{k_B T_l}}$$

Релаксация

$$\frac{dn_+}{dt} = -n_+ W_+ + n_- W_-$$

$$\frac{dn_-}{dt} = -n_- W_- + n_+ W_+$$

$$\Delta n = n_+ - n_-$$

$$\Delta n^0 = n_+^0 - n_-^0$$

$$n_+ + n_- = 1$$

$$n_+^0 + n_-^0 = 1$$

$$\frac{d\Delta n}{dt} = -2(\Delta n - \Delta n^0)\overline{W} \qquad \overline{W} = \frac{W_+ + W_-}{2}$$

Вывод релаксационного уравнения

$$\frac{dn_+}{dt} = -n_+W_+ + n_-W_-$$

-

$$\frac{dn_-}{dt} = -n_-W_- + n_+W_+$$

$$\frac{d\Delta n}{dt} = (-n_+W_+ + n_-W_+ - n_-W_+ + n_-W_-) + (n_-W_- - n_+W_- + n_+W_- - n_+W_+)$$

$$= -2\Delta n\overline{W} + (-W_+ + W_-) + (n_+^0W_+ - n_-^0W_- - n_-^0W_+ + n_-^0W_+) +$$

$$(n_+^0W_+ - n_-^0W_- + n_+^0W_- - n_+^0W_-) = -2\Delta n\overline{W} + (-W_+ + W_-) +$$

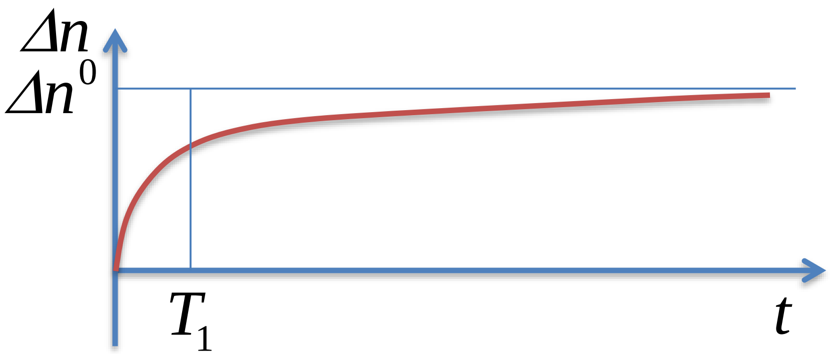
$$2\Delta n^0\overline{W} + (W_+ - W_-) = 2(\Delta n^0 - \Delta n)\overline{W}$$

Релаксационное уравнение вида

$$\frac{d\Delta n}{dt} = -\frac{\Delta n - \Delta n^0}{T_1} \qquad T_1 = \frac{1}{2\overline{W}}$$

Решение

$$\Delta n = [\Delta n(t=0) - \Delta n^0]e^{-\frac{t}{T_1}} + \Delta n^0$$



Для рассмотренного случая

Рассмотрение справедливо для любого спина.

В высокотемпературном приближении

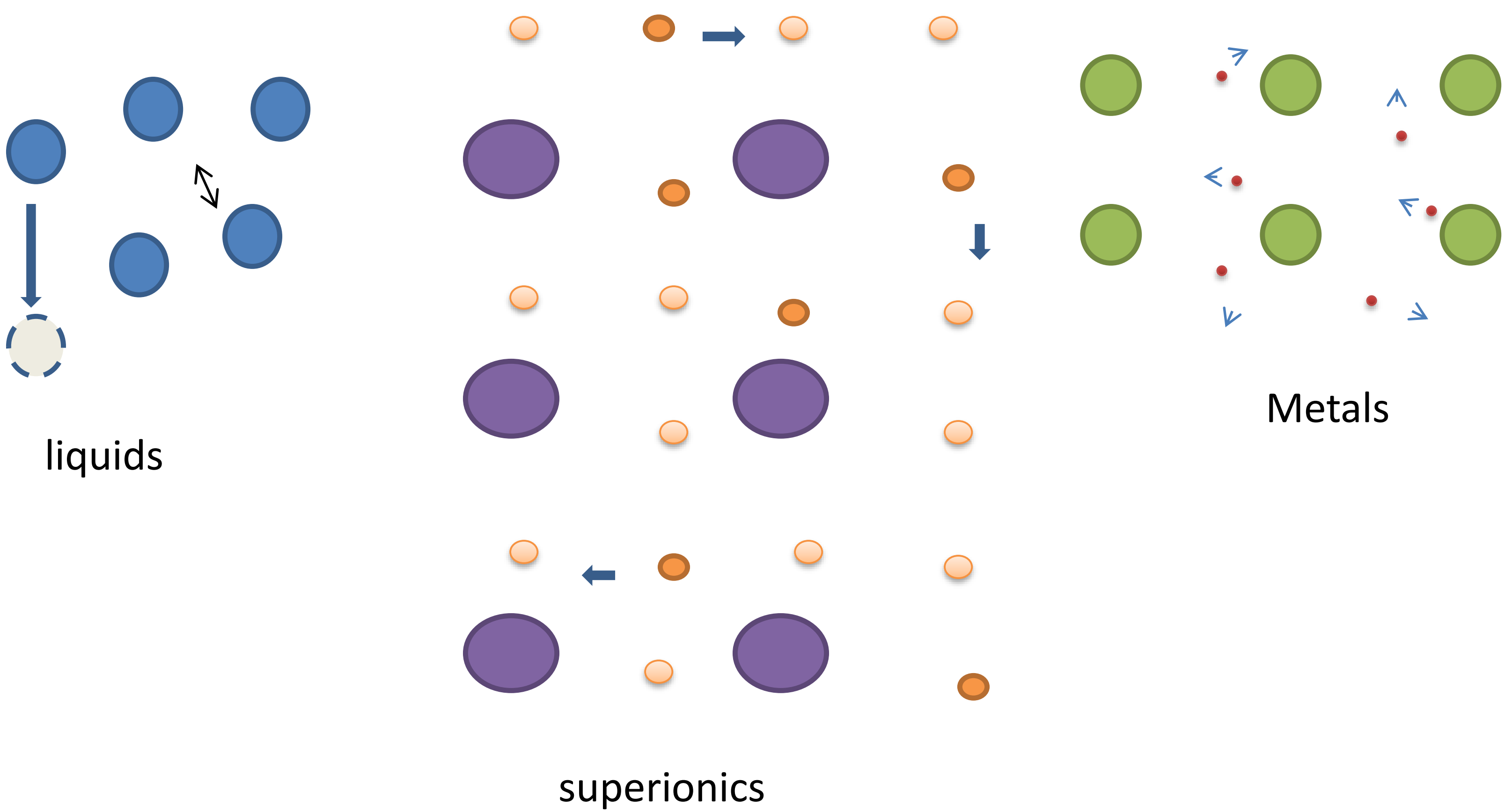
$$\frac{d\alpha_I}{dt} = -\frac{\alpha_I - \alpha_l}{T_1} \qquad \frac{dM_z}{dt} = -\frac{M_z - M_z^0}{T_1}$$

Спин-решеточная релаксация в твердых телах идет за счет излучения и поглощения фононов ядерной спин-системой.
Для квадрупольных ядер: Колебания решетки индуцируют переменные электрические поля, которые вызывают переходы в ядерной спин-системе между зеемановскими уровнями.
Для дипольных уровней: реально релаксация идет за счет присутствующих в материале парамагнитных примесей и спиновой диффузии (рассмотрим позднее).

Спин-спиновая релаксация идет преимущественно за счет спин-спинового взаимодействия (диполь-дипольного).

Исключение – суперионики и быстрое молекулярное движение.

Спиновая релаксация в невязких жидкостях, твердых телах с высокой атомной подвижностью и металлах



Движения в решетке описываются на классическом языке.

Корреляционные функции

$$f(\Delta t) = \int_t V_{ik}(t) V_{ik}(t + \Delta t) dt \qquad\qquad f(\Delta t) = \int_t B_i(t) B_i(t + \Delta t) dt$$

Квадрупольная релаксация Дипольная релаксация

Для простейшего приближения одного времени корелляции

$$f(\Delta t) \propto e^{-\Delta t / \tau_c}$$

Время корреляции имеет смысл времени между последовательными прыжками атомов в жидкости, атомов в суперионике, электронов проводимости в металле.

В рамках приближения быстрого движения или сильного сужения резонансных линий продольная и поперечная релаксации являются экспоненциальными и описываются одинаковыми временами релаксации

$$T_1 = T_2$$

Уравнения Блоха

Система уравнений для ядерной намагниченности под действием магнитных полей:

$$\vec{B}_0, \vec{B}_x, \vec{B}_{loc}$$

$\vec{B}_{loc}$ - причина релаксации

$\vec{B}_0, \vec{B}_x$ - приводят к движению вектора намагниченности $\vec{M}$

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = \gamma[\vec{M} \times (\vec{B}_0 + \vec{B}_x)] = \gamma[\vec{M} \times \vec{B}_\Sigma] \qquad \vec{B}_0 + \vec{B}_x = \vec{B}_\Sigma$$

$$\frac{dM_x}{dt} = \gamma(M_y B_\Sigma^z - M_z B_\Sigma^y) - \frac{M_x}{T_2}$$

$$\frac{dM_y}{dt} = \gamma(M_z B_\Sigma^x - M_x B_\Sigma^z) - \frac{M_y}{T_2}$$

$$\frac{dM_z}{dt} = \gamma(M_x B_\Sigma^y - M_y B_\Sigma^x) - \frac{M_z - M_z^0}{T_1}$$

Стационарные решения уравнений Блоха

$$\frac{dM_x}{dt} = \frac{dM_y}{dt} = \frac{dM_z}{dt} = 0$$

Во вращающейся системе координат стационарные решения имеют вид:

$$M_{x'}^{st} = \frac{\gamma \Delta\omega (B_x^0/2) T_2^2}{1 + \Delta\omega^2 T_2^2 + \gamma^2 (B_x^0/2)^2 T_1 T_2} M_z^0$$

$$M_{y'}^{st} = \frac{\gamma (B_x^0/2) T_2}{1 + \Delta\omega^2 T_2^2 + \gamma^2 (B_x^0/2)^2 T_1 T_2} M_z^0$$

$$M_z^{st} = \frac{1 + \Delta\omega^2 T_2^2}{1 + \Delta\omega^2 T_2^2 + \gamma^2 (B_x^0/2)^2 T_1 T_2} M_z^0$$

$$M_x^{st} = M_{x'}^{st} \cos\omega t - M_{y'}^{st} \sin\omega t \qquad M_y^{st} = M_{y'}^{st} \cos\omega t + M_{x'}^{st} \sin\omega t$$

Обозначения: $M_{x'}^{st} = u$ $\qquad -M_{y'}^{st} \dfrac{\gamma}{|\gamma|} = v$

Можно показать, что v характеризует мощность, отбираемую от внешнего генератора, и называется поглощением, а u называется дисперсией.

Из формулы для $-M_{y'}^{st}\dfrac{\gamma}{|\gamma|}=v$ следует, что поглощение описывается лоренцевской кривой

$$g(\omega)=\frac{\Delta}{\pi}\frac{1}{(\omega_0-\omega)^2+\Delta^2}$$

с полушириной

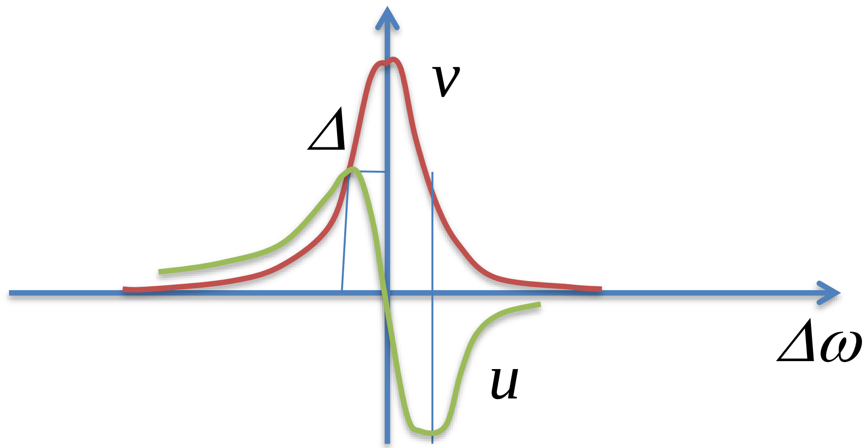
$$1+\Delta\omega^2T_2^2+\gamma^2(B_x^0/2)^2T_1T_2=\{\Delta\omega^2+\frac{1}{T_2^2}[1+\gamma^2(B_x^0/2)^2T_1T_2]\}T_2^2$$

$$\Downarrow$$

$$\Delta=\frac{1}{T_2}[1+\gamma^2(B_x^0/2)^2T_1T_2]^{1/2}$$

$$\gamma^2(B_x^0/2)^2T_1T_2<<1 \quad \Rightarrow \quad \Delta=\frac{1}{T_2}$$

$\gamma^2(B_x^0/2)^2T_1T_2>1$ - ширина резонансной линии неограниченно возрастает, что не верно



Насыщение: $\gamma^2 (B_x^0/2)^2 T_1 T_2 > 1 \Rightarrow M_z^{st} < M_z^0$

Насыщение в твердом теле

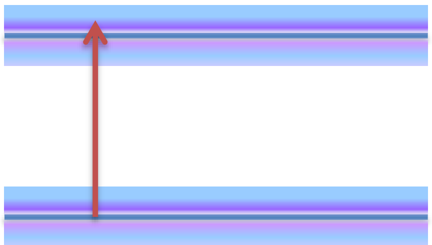
$$\frac{d\alpha_I}{dt} = -\frac{\alpha_I - \alpha_l}{T_1} \quad + \quad \frac{d\alpha_I}{dt} = -W_{eff}\alpha_I \Rightarrow \frac{d\alpha_I}{dt} = -\frac{\alpha_I - \alpha_l}{T_1} - W_{eff}\alpha_I$$

$$\frac{d\alpha_I^{st}}{dt} = 0 \Rightarrow \qquad \alpha_I^{st} = \frac{1}{1 + W_{eff}T_1}\alpha_l \qquad M_z^{st} = \frac{1}{1 + W_{eff}T_1}M_z^0$$

Уравнения, как и решение уравнений Блоха, верно только строго в резонансе.

Теория Провоторова

Два энергетических резервуара: зеемановский и низкочастотный, с медленным обменом энергией



Δ - ширина энергетического уровня

Зеемановский резервуар – совокупная энергия взаимодействия ядерных спинов с магнитным полем, низкочастотный резервуар –совокупная энергия взаимодействия спинов друг с другом.

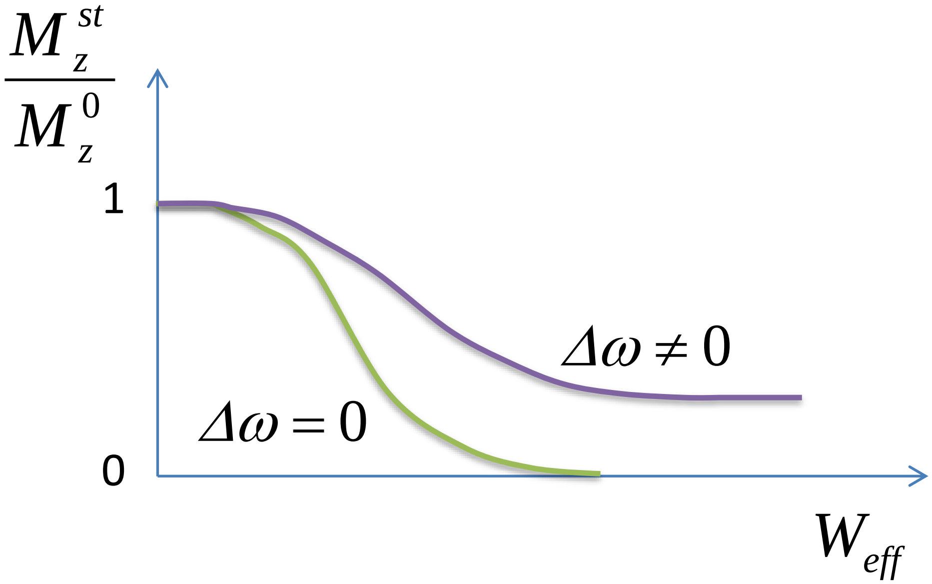
Взаимодействие между резервуарами идет за счет несекулярной части спин-спинового взаимодействия. Это медленный процесс.

$$\omega \neq \omega_0 \qquad \Delta\omega = \omega_0 - \omega$$

Энергия $\hbar\omega_0$ идет в зеемановский резервуар, а энергия $\hbar\Delta\omega$ идет в низкочастотный резервуар.

Теплоемкость зеемановского резервуара $(\propto \omega_0^2)$ намного больше, чем низкочастотного $(\propto \Delta^2)$.

Если $\omega \neq \omega_0$ низкочастотный резервуар перегревается или переохлаждается и препятствует переходам между зеемановскими уровнями.



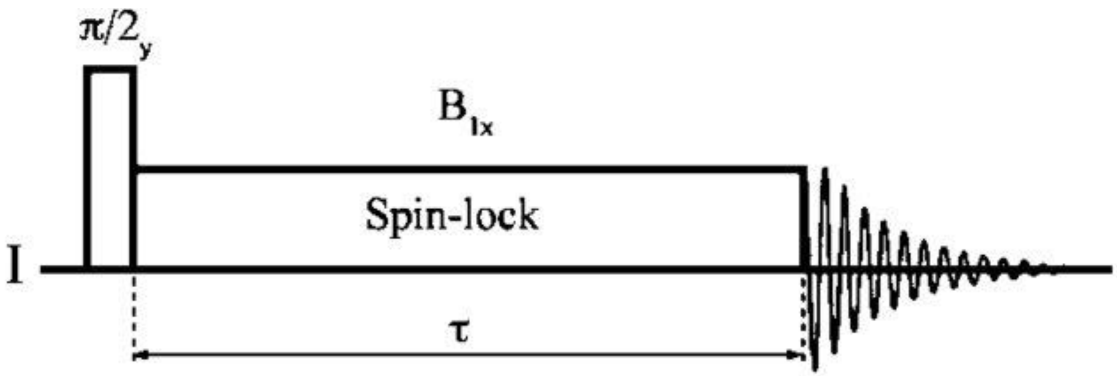
Квантование во вращающейся системе координат

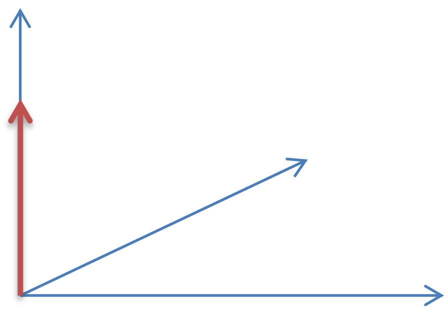
Еще более сильное переменное магнитное поле.

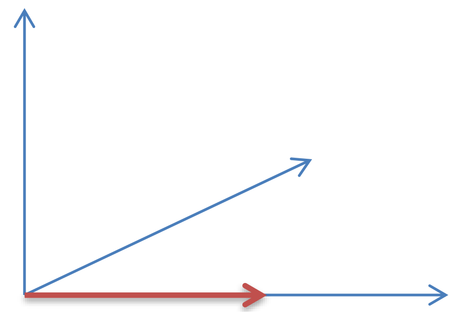
Во вращающейся системе координат в условиях строгого резонанса $\Delta\omega = 0$

$$\vec{B}_{eff} = \vec{B}_{x'} \qquad B_{x'} = \frac{1}{2} B_x^0 \qquad \omega_1 = \gamma B_{eff}$$

Если $\omega_1 >> \Delta$, то во вращающейся системе координат возникнет система уровней, аналогичная зеемановскому расщеплению в лабораторной системе координат. Распределение ядерных спинов по уровням в условиях равновесия будет подчиняться распределению Больцмана.







$$\Delta n \propto \alpha_l$$

Сразу после поворота намагниченности

$$\omega_0 \alpha_l = \omega_1 \alpha_{I\rho}$$ ⇨ Большая разность заселенностей уровней во вращающейся системе координат

$T_{1\rho}$ - время спин-решеточной релаксации во вращающейся системе координат