



Санкт-Петербургский государственный университет
Физический факультет
Кафедра ядерно-физических методов исследования



Сыромятников

Арсений Владиславович

*Физика магнетизма и
рассеяние поляризованных и
неполяризованных нейтронов*

Лекция 3. Магнитные свойства ядер. Ядерный магнитный и ядерный квадрупольный резонансы.

Сверхтонкая структура атомных уровней

Магнитный момент ядра

Na

Терм	L	S	J	g	m_J	gm_J
$3^2S_{1/2}$	0	1/2	1/2	2	1/2; -1/2	1; -1
$3^2P_{1/2}$	1	1/2	1/2	2/3	1/2; -1/2	1/3; -1/3
$3^2P_{3/2}$	1	1/2	3/2	4/3	3/2; 1/2; -1/2; -3/2	2; 2/3; -2/3; -2

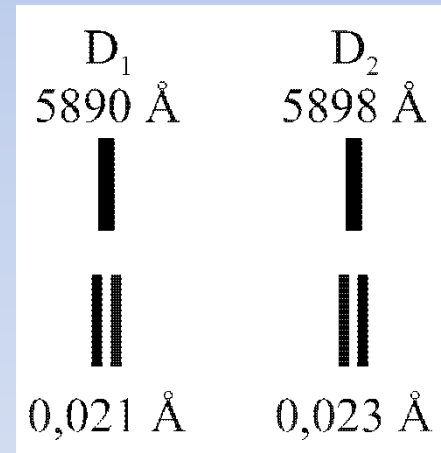
$$\frac{\mu}{L} = -\frac{e}{2m_e c}$$

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c}$$

$$\mu_{\text{яд}} = \frac{e\hbar}{2m_p c} = \frac{m_e}{m_p} \mu_B \approx \frac{1}{1836} \mu_B$$

$$\mu_I^z = g_I \mu_{\text{яд}} m_I$$

$$m_I = I, I - 1, \dots, -I$$



Взаимодействие ядра с электронной оболочкой

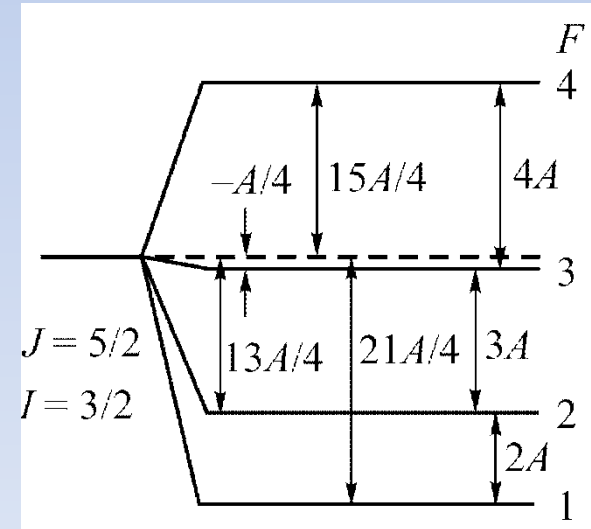
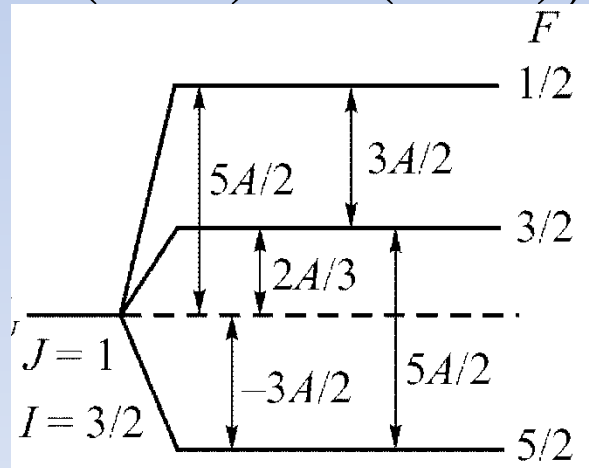
$$\mathcal{H}_{hf} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{H}_{electrons} = A\mathbf{J} \cdot \mathbf{I}$$

$$\mathbf{F} = \mathbf{J} + \mathbf{I}$$

$$\mathbf{F}^2 = \mathbf{J}^2 + \mathbf{I}^2 + 2\mathbf{J} \cdot \mathbf{I}$$

$$\langle A\mathbf{J} \cdot \mathbf{I} \rangle = \frac{A}{2} (F(F+1) - I(I+1) - J(J+1))$$

Элемент	Z	Терм основного состояния	H(0), Э		
			$^2S_{1/2}$	$^2P_{1/2}$	$^2P_{3/2}$
Li	3	$2^2S_{1/2}$	$1,3 \cdot 10^5$		
Na	11	$3^2S_{1/2}$	$4,5 \cdot 10^5$	$4,2 \cdot 10^4$	$2,5 \cdot 10^4$
K	19	$4^2S_{1/2}$	$6,3 \cdot 10^5$	$7,9 \cdot 10^4$	$4,6 \cdot 10^4$
Rb	37	$5^2S_{1/2}$	$1,3 \cdot 10^6$	$1,6 \cdot 10^5$	$8,6 \cdot 10^4$
Cs	55	$6^2S_{1/2}$	$2,1 \cdot 10^6$	$2,8 \cdot 10^5$	$1,3 \cdot 10^5$



$$E(F) - E(F-1) = AF$$

$$F = (I+J), (I+J-1), (I+J-2), \dots, |I-J|$$

расстояния между уровнями $(I+J) : (I+J-1) : (I+J-2) : \dots$

Эффект Зеемана для сверхтонкой структуры

$$\mu_F = \mu_J \cos \varphi_{FJ} + \mu_I \cos \varphi_{FI} \approx \mu_J \cos \varphi_{FJ}$$

$$\mu_J = g_J \mu_B \sqrt{J(J+1)}$$

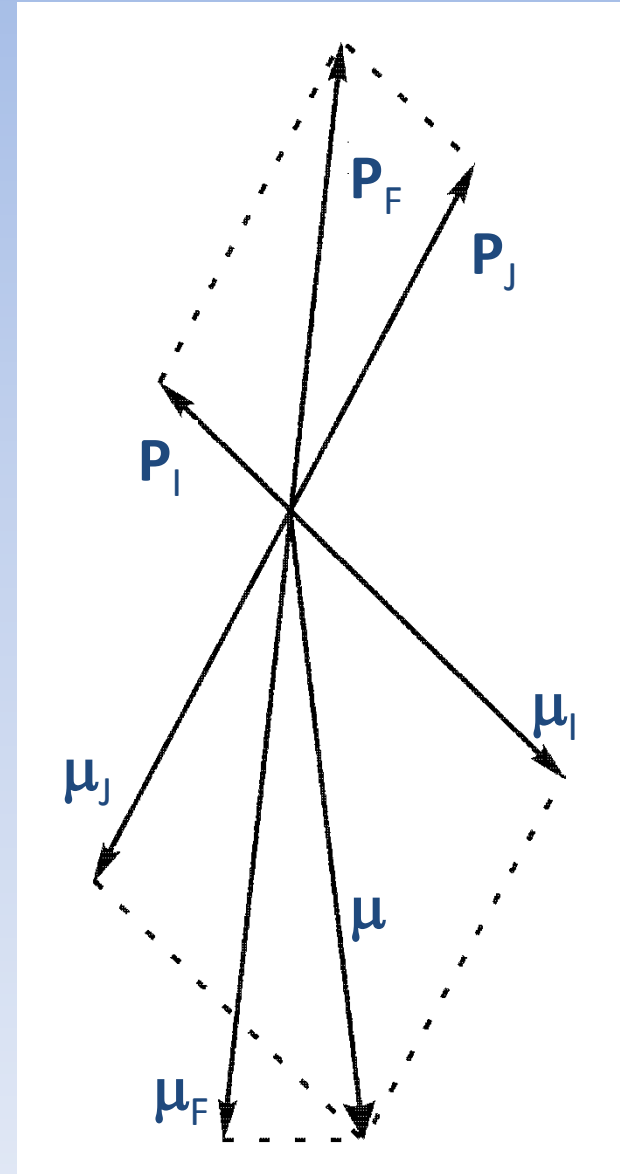
$$\mu_I = g_I \mu_{\text{яд}} \sqrt{I(I+1)}$$

$$\cos \varphi_{FJ} = \frac{F(F+1) + J(J+1) - I(I+1)}{2\sqrt{F(F+1)}\sqrt{J(J+1)}}$$

$$\mu_F = g_F \mu_B \sqrt{F(F+1)}$$

$$g_F = g_J \frac{F(F+1) + J(J+1) - I(I+1)}{2F(F+1)}$$

$$\mu_{FH} = g_F \mu_B m_F$$

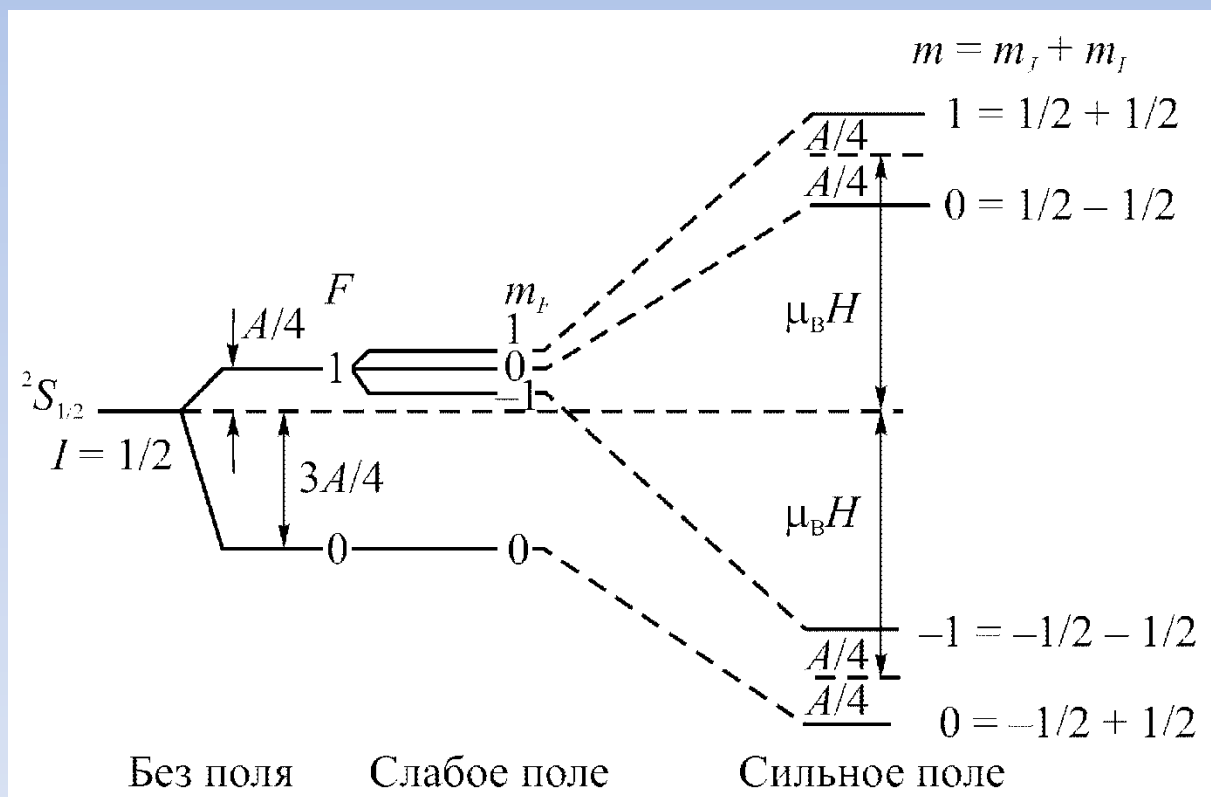


Эффект Зеемана для сверхтонкой структуры

$$\mu_B H \ll \mu_{\text{яд}} H_{el}$$

$$H \ll \frac{\mu_{\text{яд}}}{\mu_B} H_{el} \approx 10^{-3} H_{el}$$

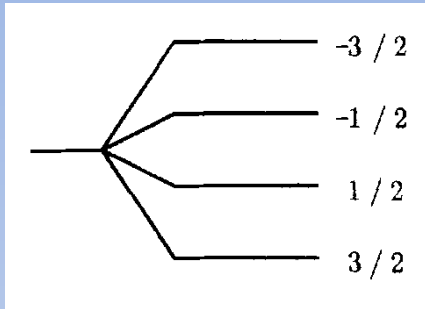
$$E_Z = g_F \mu_B m_F H$$



$$\mu_B H \gg \mu_{\text{яд}} H_{el}$$

$$E_Z = g_J \mu_B m_J H - g_I \mu_{\text{яд}} m_I H + A m_I m_J$$

Магнитный резонанс

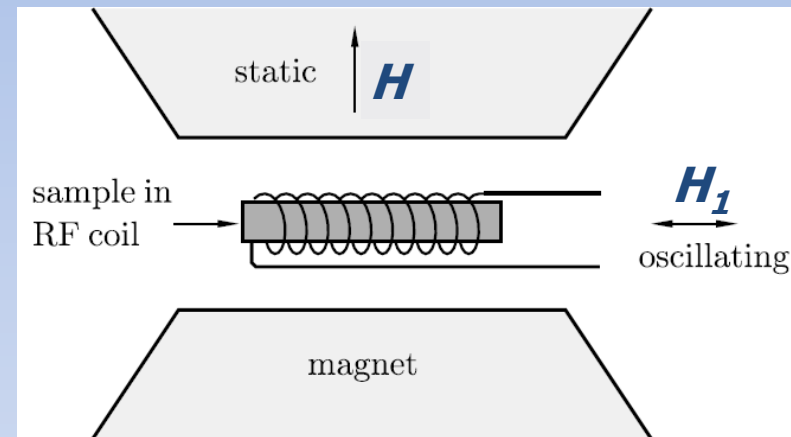


$$E_Z = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{H} = -\gamma \hbar L_z H$$

$$\hbar \omega_0 = \gamma \hbar H \quad \Rightarrow \quad \boxed{\omega_0 = \gamma H}$$

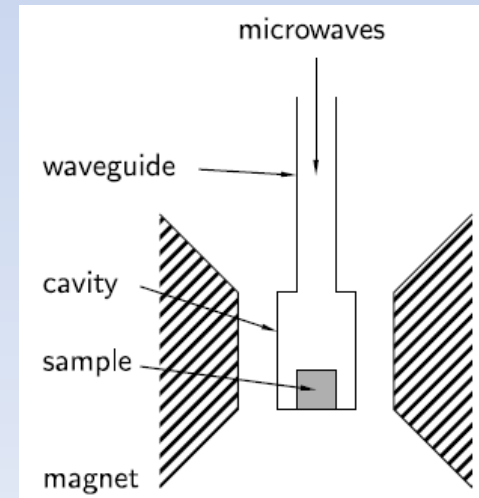
Ядерный (пара)магнитный резонанс (ЯМР, NMR)

$$\omega_0 \sim \frac{\mu_{\text{яд}}}{\hbar} H \sim 10^7 \text{ Гц} \quad H \sim 1 \text{ Т}$$



Электронный парамагнитный резонанс (ЭПР, ESR)

$$\omega_0 \sim \frac{\mu_B}{\hbar} H \sim 10^{10} \text{ Гц} \quad H \sim 1 \text{ Т}$$



Ядерный магнитный резонанс.

Взаимодействие ядра с окружением

Магнитное диполь-дипольное взаимодействие.
Уширение линий резонанса в твердых телах

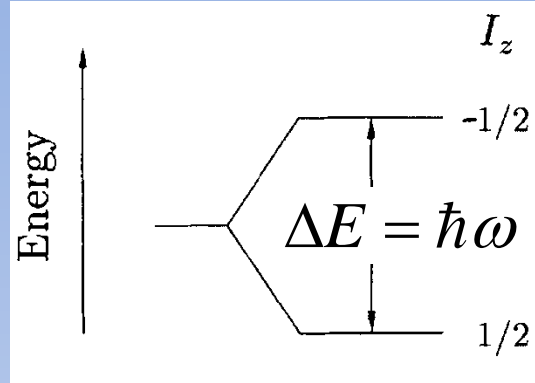
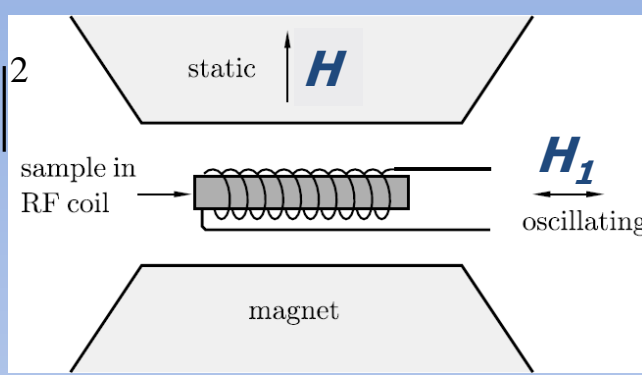
$$\frac{\mu_I}{r^3} \sim 50 \text{ Oe} \quad r \sim 1 \text{ \AA}$$

Электронное магнитное экранирование.
Химический сдвиг.

$$H_{local} = H - \sigma_{dia} H = H (1 - \sigma_{dia}) \quad \sigma_{dia} \sim 10^{-5} \div 10^{-2}$$

Спин-спиновое взаимодействие (косвенная ядерная связь)

$$|\langle \psi_- | H_1 | \psi_+ \rangle|^2 = |\langle \psi_+ | H_1 | \psi_- \rangle|^2$$



$$\frac{dN_+(t)}{dt} = WN_-(t) - WN_+(t)$$

$$\frac{dN_-(t)}{dt} = WN_+(t) - WN_-(t)$$

$$M_z(t) = \frac{1}{2}(N_+(t) - N_-(t))$$

$$\frac{dM_z(t)}{dt} = -2WM_z(t) \Rightarrow M_z(t) = M_z(0)e^{-2Wt}$$

$$E(t) = E_+N_+(t) + (E_+ + \hbar\omega)N_-(t)$$

$$= \frac{N_+(t) + N_-(t)}{2}(2E_+ + \hbar\omega) - \frac{N_+(t) - N_-(t)}{2}\hbar\omega = \text{const} - \hbar\omega M_z(t)$$

$$\frac{dE(t)}{dt} = 2W\hbar\omega M_z(t)$$

$$\frac{dM_z(t)}{dt} = -2WM_z(t) + \frac{M_0 - M_z(t)}{T_1} = 0$$

$$M_z(t) = \frac{M_0}{1 + 2WT_1}$$

$$\frac{dE(t)}{dt} = 2W\hbar\omega \frac{M_0}{1 + 2WT_1}$$

Ядерный магнитный резонанс

$$V = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{H}$$

$$\frac{d\boldsymbol{\mu}}{dt} = \frac{i}{\hbar} (V\boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\mu}V) = -\frac{i}{\hbar} ((\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{H})\boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\mu}(\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{H}))$$

$$(\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{H})\mu_k - \mu_k(\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{H}) = \sum_j (\mu_j H_j \mu_k - \mu_k \mu_j H_j)$$

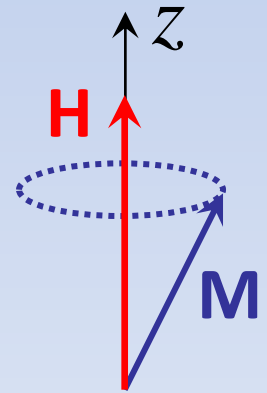
$$= \sum_j H_j (\mu_j \mu_k - \mu_k \mu_j) = \sum_j H_j i\gamma\hbar \varepsilon_{jkn} \mu_n = -i\gamma\hbar [\mathbf{H} \times \boldsymbol{\mu}]_k$$

$$\frac{d\boldsymbol{\mu}}{dt} = \gamma [\boldsymbol{\mu} \times \mathbf{H}] \quad \Rightarrow \quad \boxed{\frac{d\mathbf{M}}{dt} = \gamma [\mathbf{M} \times \mathbf{H}]}$$

$$\omega_L = \gamma H$$

$$\frac{dM_x}{dt} = \omega_L M_y \quad \frac{dM_y}{dt} = -\omega_L M_x \quad \frac{dM_z}{dt} = 0$$

$$M_x = M_{\perp} \sin(\omega_L t + \varphi) \quad M_y = M_{\perp} \cos(\omega_L t + \varphi) \quad M_z = M_{\parallel}$$



$$M_{0z} = M_0 = M_S \tanh\left(\frac{\mu_B H}{k_B T}\right)$$

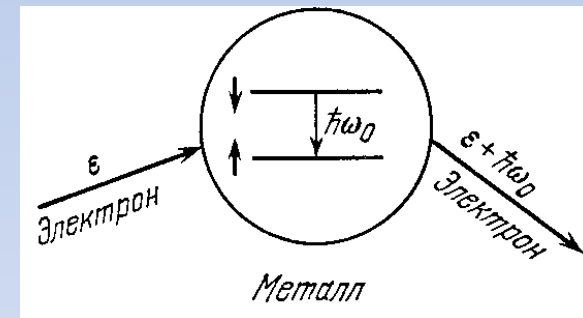
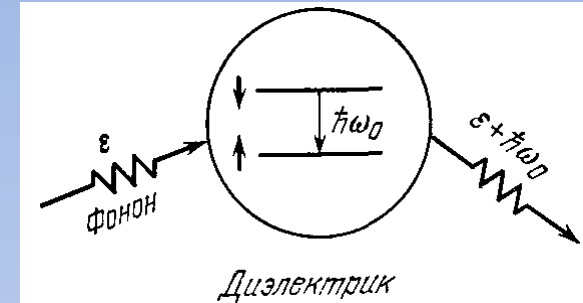
$$M_{0x} = M_{0y} = 0$$

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

$$\int_0^{M_z} \frac{dM_z}{M_0 - M_z} = \int_0^t \frac{dt}{T_1} \quad \Rightarrow \quad \ln \frac{M_0}{M_0 - M_z} = \frac{t}{T_1}$$

$$M_z(t) = M_0 \left(1 - e^{-t/T_1}\right)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dM_z}{dt} = \gamma [\mathbf{M} \times \mathbf{H}]_z + \frac{M_0 - M_z}{T_1} \\ \frac{dM_x}{dt} = \gamma [\mathbf{M} \times \mathbf{H}]_x - \frac{M_x}{T_2} \\ \frac{dM_y}{dt} = \gamma [\mathbf{M} \times \mathbf{H}]_y - \frac{M_y}{T_2} \end{array} \right.$$



Уравнения
Блоха

$$\frac{dM_z}{dt} = 0 \quad \frac{dM_x}{dt} = \gamma H M_y - \frac{M_x}{T_2} \quad \frac{dM_y}{dt} = -\gamma H M_x - \frac{M_y}{T_2}$$

$$M_x = m e^{-t/\tau} \sin(\omega t + \varphi) \quad M_y = m e^{-t/\tau} \cos(\omega t + \varphi)$$

$$\omega \cos(\omega t + \varphi) - \frac{1}{\tau} \sin(\omega t + \varphi) = \gamma H \cos(\omega t + \varphi) - \frac{1}{T_2} \sin(\omega t + \varphi)$$

$$\omega = \gamma H = \omega_L \quad \tau = T_2$$

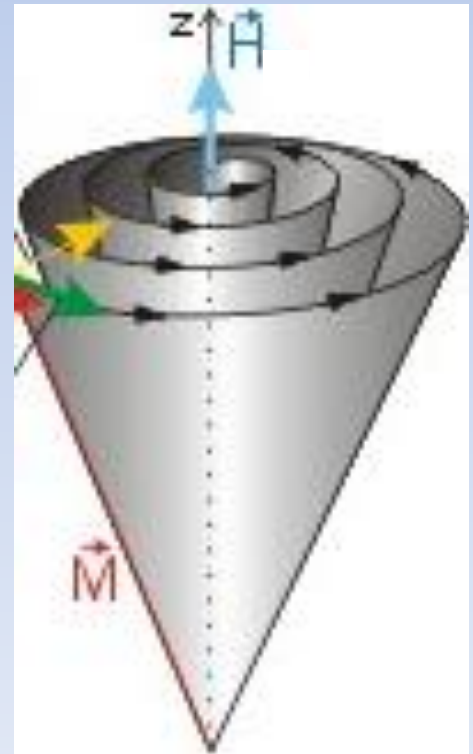
$$M_x = m e^{-t/T_2} \sin(\omega_L t + \varphi)$$

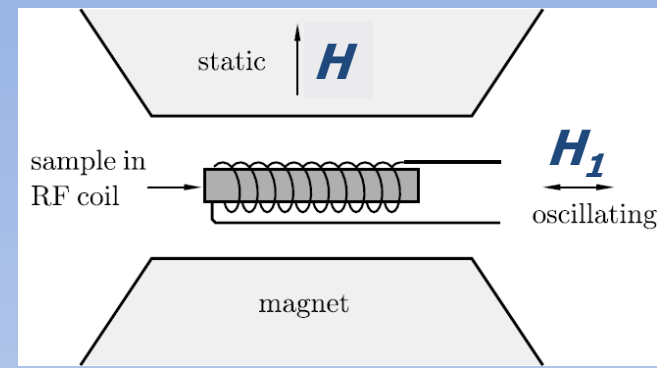
$$M_y = m e^{-t/T_2} \cos(\omega_L t + \varphi)$$

$T_2 < T_1$ в твердых телах

основной вклад в T_2 вносит

диполь-дипольное взаимодействие





$$\omega_L = \frac{g_I \mu_{\text{яд}} H}{\hbar}$$

$$\mathbf{H} = \mathbf{e}_z H + \mathbf{e}_x 2H_1 \cos \omega t$$

вращение
против час. стр.

$$\begin{cases} H_x = H_1 \cos \omega t \\ H_y = H_1 \sin \omega t \end{cases}$$

$$M_{\pm} = M_x \pm iM_y$$

$$\begin{cases} \frac{dM_+}{dt} = -i\gamma H M_+ + i\gamma H_1 M_z e^{-i\omega t} \\ \frac{dM_-}{dt} = i\gamma H M_- - i\gamma H_1 M_z e^{i\omega t} \\ \frac{dM_z}{dt} = i \frac{\gamma H_1}{2} (M_+ e^{i\omega t} - M_- e^{-i\omega t}) \end{cases}$$

вращение
по час. стр.

$$\begin{cases} H_x = H_1 \cos \omega t \\ H_y = -H_1 \sin \omega t \end{cases}$$

$$M_{\pm} = M_z \frac{\gamma H_1}{\omega_L - \omega} e^{\mp i\omega t}$$

$$M_z = \text{const}$$

$$\mathbf{H} = \mathbf{e}_z H + \mathbf{e}_x 2H_1 \cos \omega t$$

$$M_z = M_0 \frac{1 + T_2^2 (\omega_L - \omega)^2}{1 + T_2^2 (\omega_L - \omega)^2 + (\omega_L H_1 / H)^2 T_1 T_2}$$

$$M_x = M_0 \frac{\omega_L H_1 T_2}{H} \frac{T_2 (\omega_L - \omega) \cos \omega t + \sin \omega t}{1 + T_2^2 (\omega_L - \omega)^2 + (\omega_L H_1 / H)^2 T_1 T_2}$$

$$M_y = M_0 \frac{\omega_L H_1 T_2}{H} \frac{\cos \omega t - T_2 (\omega_L - \omega) \sin \omega t}{1 + T_2^2 (\omega_L - \omega)^2 + (\omega_L H_1 / H)^2 T_1 T_2}$$

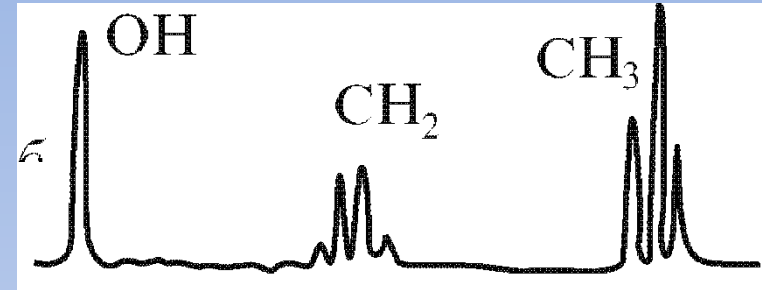
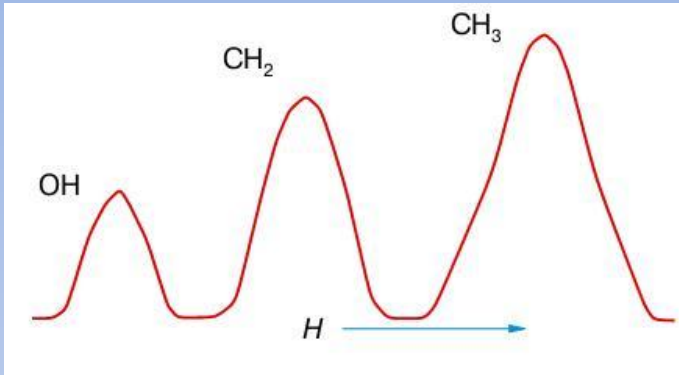
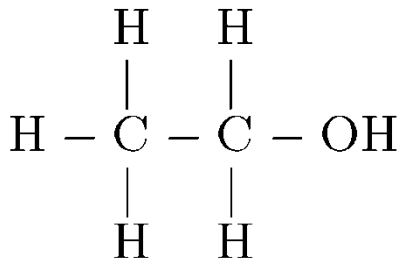
$$P(\omega) = \frac{\omega}{2\pi} \int_0^{2\pi/\omega} \dot{M}_x H_x dt = \frac{\omega M_0 H_1 (\omega_L H_1 / H) T_2}{1 + T_2^2 (\omega_L - \omega)^2 + (\omega_L H_1 / H)^2 T_1 T_2}$$

$$\omega_L = \frac{g_I \mu_{\text{яд}} H}{\hbar}$$

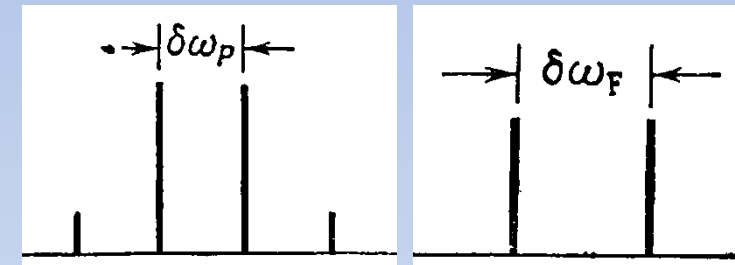
$$P(\omega = \omega_L) = \frac{M_0 H}{T_1} \frac{(\omega_L H_1 / H)^2 T_1 T_2}{1 + (\omega_L H_1 / H)^2 T_1 T_2}$$

насыщение поглощения
при увеличении H_1

Примеры применения ЯМР



$$E_{s-s} = h\nu \quad \nu < 1000 \text{ Гц}$$

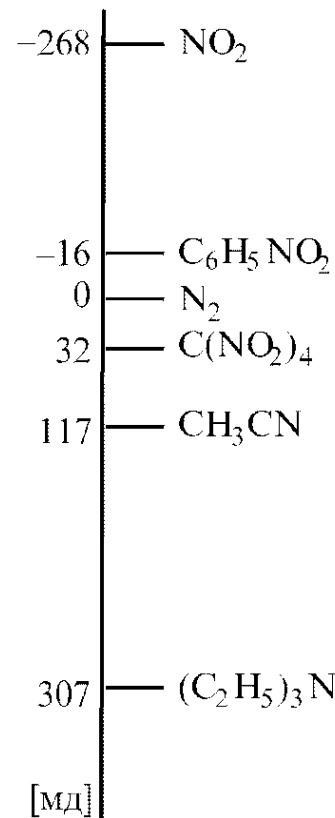
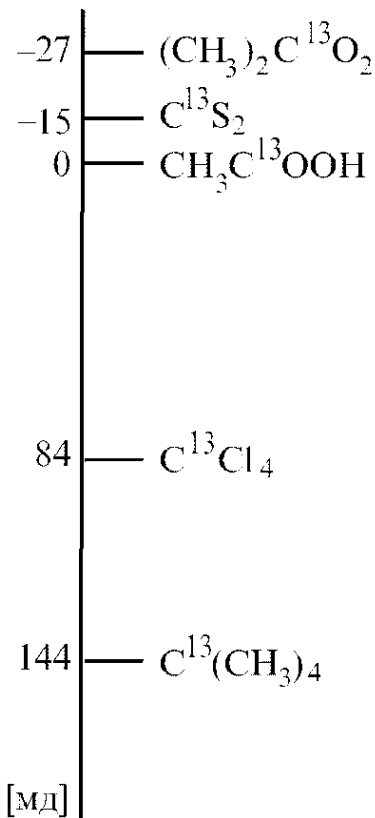
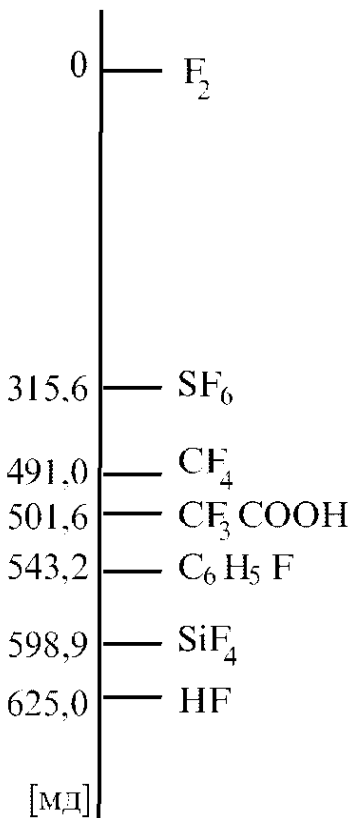


молекула PF_3

$$\delta\omega_F = \frac{\gamma_F}{\gamma_P} \delta\omega_P$$

косвенное в3-е
ядер в жидкости

$$A_{12} (\mu_1 \cdot \mu_2)$$

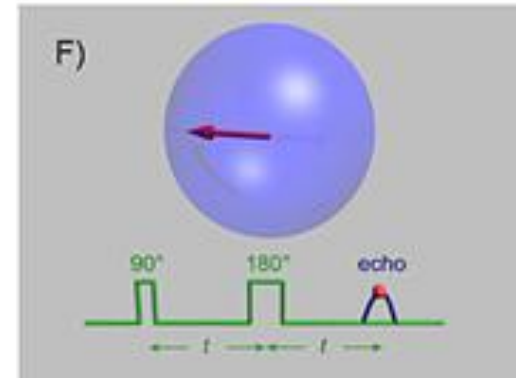
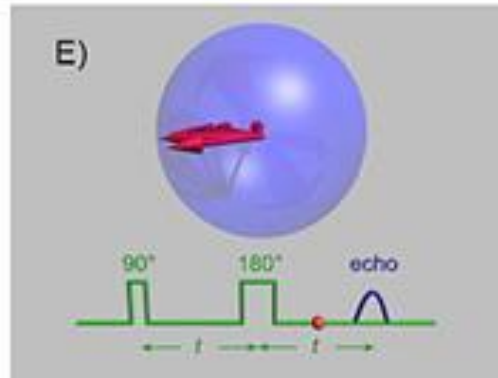
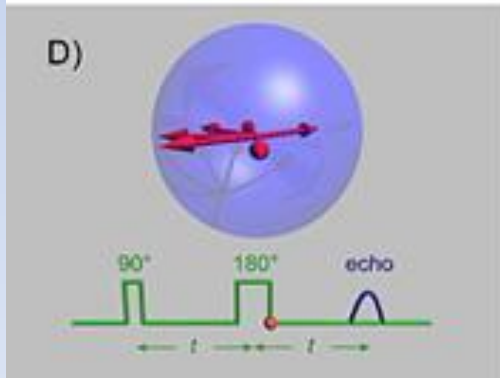
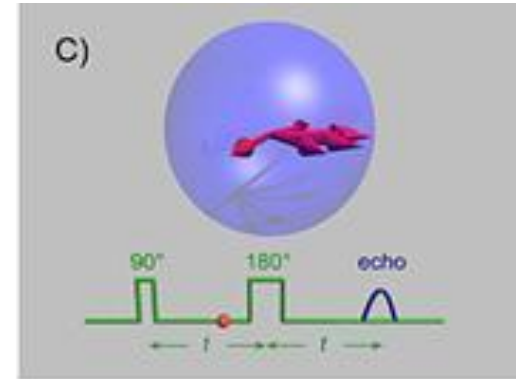
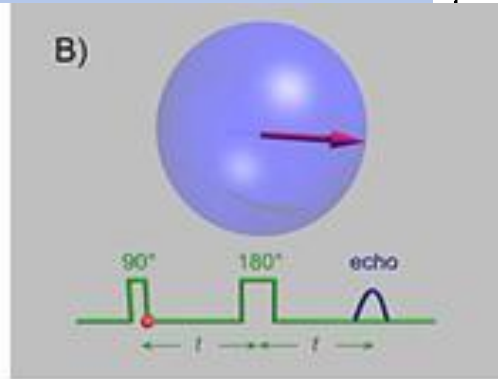
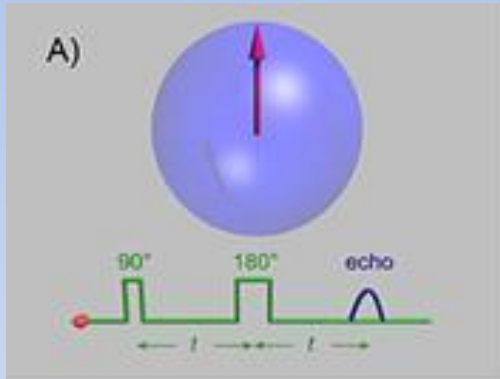
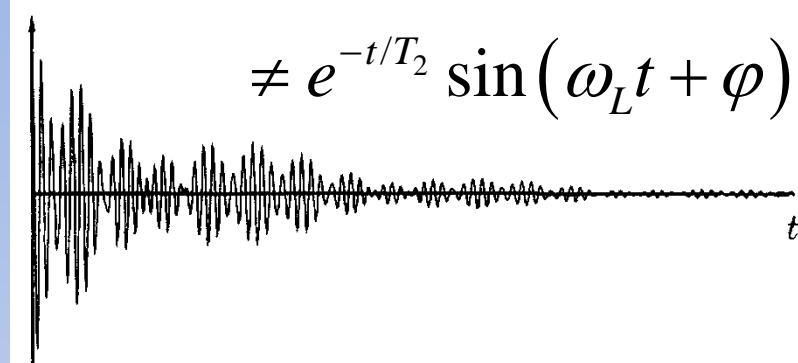


Импульсный ЯМР. Спиновое эхо.

Определение времен релаксации

T_2

$$I(2t) = I(0)e^{-2t/T_2}$$



T_1 последовательность $\pi, \pi/2$

$$M_z(t) = M_0(1 - e^{-t/T_1})$$

Ядерный квадрупольный резонанс

$$E = \int d\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) V(\mathbf{r})$$

$$V(\mathbf{r}) = V_0 + x \left(\frac{\partial V}{\partial x} \right)_0 + y \left(\frac{\partial V}{\partial y} \right)_0 + z \left(\frac{\partial V}{\partial z} \right)_0 + \frac{x^2}{2} \left(\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} \right)_0 + \frac{y^2}{2} \left(\frac{\partial^2 V}{\partial y^2} \right)_0 + \frac{z^2}{2} \left(\frac{\partial^2 V}{\partial z^2} \right)_0 + \dots$$

$$E = \frac{1}{2} q_{xx} eQ_{xx} + \frac{1}{2} q_{yy} eQ_{yy} + \frac{1}{2} q_{zz} eQ_{zz}$$

$$q_{xx} + q_{yy} + q_{zz} = 0 \quad \text{уравнение Лапласа}$$

аксиальная симметрия $q_{xx} = q_{yy} = -\frac{1}{2} q_{zz}$

$$E = \frac{1}{4} eQ q_{zz} \quad eQ = 2eQ_{zz} - eQ_{yy} - eQ_{xx}$$

$$\int d\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) x = 0$$

$$\int d\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) y = 0$$

$$\int d\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) z = 0$$

$$q_{uu} = \left(\frac{\partial^2 V}{\partial u^2} \right)_0$$

$$eQ_{uu} = \int d\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) u^2$$

$$u = x, y, z$$

поворот на угол θ вокруг оси X

$$q_{zz} \rightarrow q_{zz} \cos^2 \theta + q_{yy} \sin^2 \theta = \frac{q_{zz}}{2} (3 \cos^2 \theta - 1)$$

$$E = \frac{1}{8} eQq_{zz} (3 \cos^2 \theta - 1)$$

$$eQ \rightarrow \frac{2eQ(J+1)}{2J-1}$$

$$E = \frac{eQq_{zz}}{4J(2J-1)} (3J_z^2 - J(J+1))$$

$$\cos^2 \theta = \frac{M^2}{J(J+1)}$$

неаксиальная симметрия

$$E = \frac{eQq_{zz}}{4J(2J-1)} \left(3J_z^2 - J(J+1) + \left| \frac{q_{xx} - q_{yy}}{q_{zz}} \right| (J_x^2 - J_y^2) \right)$$

Особенности и применение ЯКР

- В отличие от ЯМР, частоты ЯКР определяются непосредственно **структурой кристалла**
- Частоты ЯКР определяются **электронной плотностью** атомов, содержащих рассматриваемые ядра
- Наиболее точный способ **определения T_c**
- Один из основных методов изучения **движений в кристаллах**