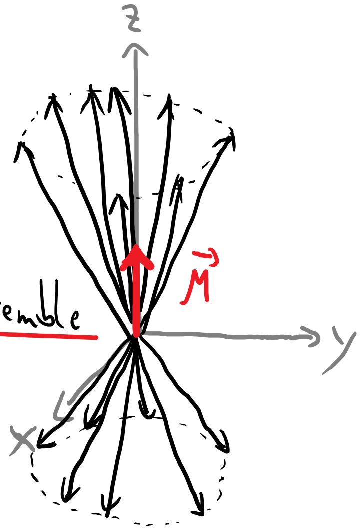
Makroskopische Magnetisierung

Tuesday, November 28, 2017 12:50 PM

↳ resultierender Magnetisierungsvektor aller magn. Momente eines Spintyps ~ Ensemble



Makroskopische Magnetisierung

$$\boxed{\vec{M} = \sum \vec{\mu}_s} \Longrightarrow \begin{cases} M_x = N \cdot \langle \hat{S}_x \rangle \\ M_y = N \cdot \langle \hat{S}_y \rangle \\ M_z = N \cdot \langle \hat{S}_z \rangle \end{cases}$$

im thermischen GGW

↳ longitudinale Magnetisierung (LM) $M_z = M_0 > 0$ (Polarisation)

transversale Magnetisierung (TM) $M_x, M_y = 0$ (Kohärenz)

Bloch-Gleichungen

Differentialgleichungssystem zur Beschreibung der zeitlichen Entwicklung von $\vec{M}$:

$$\boxed{\begin{aligned} \dot{M}_x &= \gamma \left(\vec{M} \times \vec{B} \right)_x - \frac{M_x}{T_2} \\ \dot{M}_y &= \gamma \left(\vec{M} \times \vec{B} \right)_y - \frac{M_y}{T_2} \\ \dot{M}_z &= \gamma \left(\vec{M} \times \vec{B} \right)_z - \frac{M_z - M_0}{T_1} \end{aligned}}$$

Rotierendes KS

Tuesday, November 28, 2017 1:27 PM

Bsp.: statisches Magnetfeld, keine Relaxation

$$\vec{B} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B_0 \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{aligned} \dot{M}_x(t) &= \omega_{0s} M_y(t) \\ \dot{M}_y(t) &= -\omega_{0s} M_x(t) \\ \dot{M}_z(t) &= 0 \end{aligned}$$

Lösung:

$$M_x(t) = M_x(0) \cos(\omega_0 t) + M_y(0) \sin(\omega_0 t)$$

$$M_y(t) = M_y(0) \cos(\omega_0 t) - M_x(0) \sin(\omega_0 t)$$

$$M_z(t) = M_z(0)$$

Larmor-Präzession der transversalen Magnetisierung

$\Rightarrow$ rotierendes KS: (Vereinfachung: $M_y(0) = 0$)

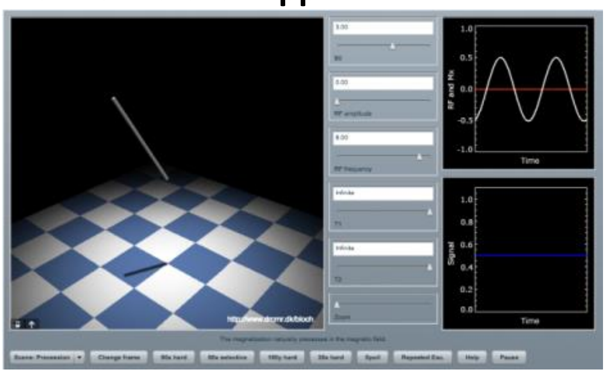
rotiert mit ω_{MW} um z-Achse

$$M'_x(t) = M_x(0) \cos(\Omega_0 t)$$

$$M'_y(t) = -M_x(0) \sin(\Omega_0 t)$$

$$\Omega_0 = \omega_{MW} - \omega_0$$

Bloch Simulator App



http://www.drcmr.dk/BlochSimulator/

Relaxation (phänomenologisch)

Tuesday, November 28, 2017 1:46 PM

zusätzlich: $B_1 \parallel x \rightarrow \vec{B} = \begin{pmatrix} 2\cos\omega_{mw}t \\ 0 \\ B_0 \end{pmatrix}$

$\hookrightarrow$ im RKS: $\vec{B}' = \begin{pmatrix} B_1 \\ 0 \\ B_0 \end{pmatrix}$ nur zirkular polarisierte Komponente mit gleichem Umlaufsinn wie RKS

$$\dot{M}'_x(t) = \Omega_0 M'_y(t)$$
$$\dot{M}'_y(t) = -\Omega_0 M'_x(t) + \gamma B_1 M_z(t)$$
$$\dot{M}_z(t) = -\gamma B_1 M'_y(t)$$

$\hookrightarrow$ mw-Feld rotiert $\vec{M}$ um x-Achse

mit Relaxation:

$$\dot{M}'_x(t) = \Omega_0 M'_y(t) - \frac{M'_x(t)}{T_2}$$
$$\dot{M}'_y(t) = -\Omega_0 M'_x(t) + \gamma B_1 M_z(t) - \frac{M'_y(t)}{T_2}$$
$$\dot{M}_z(t) = -\gamma B_1 M'_y(t) - \frac{M_z(t) + M_0}{T_1}$$

T_2: Zeitkonstante, mit der TM ins GGW zurückkehrt (Abbau der Phasenkohärenz)

T_1: ..., mit der LM ins GGW zurückkehrt (Aufbau der Polarisation; Abbau falls $M_z > M_0$)

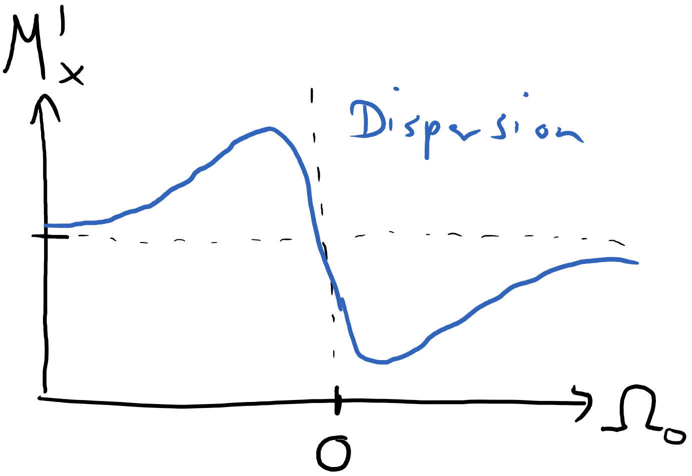
Resonanz

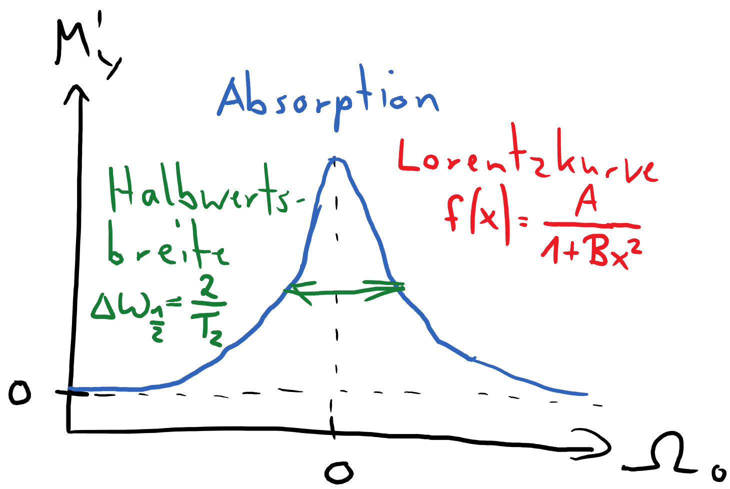
Monday, December 4, 2017 10:22 AM

stationärer Zustand: $\frac{d\vec{M}}{dt} = 0 \quad (t \to \infty)$

↳ Resonanzgleichungen

$$\boxed{\begin{aligned} M'^{\infty}_x &= M_0 \frac{\omega_1 \Omega_0 T_2^2}{1+\Omega_0^2 T_2^2 + \omega_1^2 T_1 T_2} \\ M'^{\infty}_y &= M_0 \frac{\omega_1 T_2}{1+\Omega_0^2 T_2^2 + \omega_1^2 T_1 T_2} \\ M^{\infty}_z &= M_0 \frac{1+\Omega_0^2 T_2^2}{1+\Omega_0^2 T_2^2 + \omega_1^2 T_1 T_2} \end{aligned}}$$





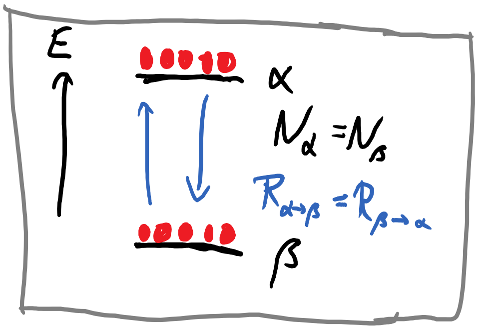
⇒ Detektion der EPR-Absorption senkrecht zu Anregungsfeld (im RKS)
bzw. 90° phasenverschoben dazu (im Labor-KS)

Sättigung

Monday, December 4, 2017 10:45 AM

M_z^∞ beschreibt Reduktion der longitudinalen Magnetisierung $\longrightarrow$ Polarisationsverlust

$\hookrightarrow$ Sättigung



für $\Omega_0 = 0$ (on-resonance)

Fall 1: $T_1 = T_2$ (meist in Lösung gegeben)

- keine Sättigung wenn $\omega_1 \ll \frac{1}{T_1}$ $(\omega_1 T_1 \ll 1)$

$$M_y'^\infty = M_0 \cdot \omega_1 T_1 \; ; \qquad M_z^\infty \simeq M_0$$

- Sättigung, wenn $\omega_1 \gg \frac{1}{T_1}$ $(\omega_1 T_1 \gg 1)$

$$M_y'^\infty \approx 0 \; ; \qquad M_z^\infty \approx 0$$

Fall 2: $T_1 \gg T_2$ (meist in Festkörpern)

$\hookrightarrow$ T_1 bestimmt Sättigung
T_2 bestimmt (homogene) Linienbreite

Relaxation (mechanistisch)

Monday, December 4, 2017 11:10 AM

Immer gilt: $\boxed{T_2 < T_1}$

T_1 resultiert aus <u>Spin-Gitter-Relaxation</u>

Spin relaxiert aus angeregtem in Grundzustand

↳ |Zeeman| Energiedifferenz muss von Gitter aufgenommen werden

⇒ Strahlungsfreie Relaxation durch WW mit Gitter (z.B. Phonon)

T_2 resultiert durch <u>Spin-Spin-Relaxation</u>

2 Spins unterliegen Flip-Flop-Prozess $\alpha\beta \leftrightarrow \beta\alpha$

(dipolares Alphabet "B")

↳ kein Energiebeitrag ("spin-interner" Prozess)

⇒ Spins verlieren Phaseninformation

<u>Aber</u>: Auch Spin-Gitter-Relaxation zerstört Phaseninformation des Spins

↳ T_2 wird immer durch T_1 begrenzt