

Обращение времени в двухчастотных методах ЯКР

© В.С. Гречишкин, В.В. Коростелев

Калининградский государственный университет,
236041 Калининград, Россия

(Поступила в Редакцию 21 октября 1996 г.
В окончательной редакции 3 февраля 1997 г.)

Теоретически рассматривается обращение времени для сигналов ядерного квадрупольного резонанса для ядерного спина 5/2 при двухчастотном воздействии.

Впервые двухчастотные методы предложены в ЯКР в 1962 г. [1]. Согласно гипотезе спиновой температуры, недиагональные элементы матрицы плотности необратимо затухают при спин-спиновой релаксации. Однако специально разработанная импульсная последовательность позволяет восстановить затухающую со временем T_2 прецессирующую намагниченность в любой момент времени, меньший, чем T_1 .

1. Результаты

Здесь используется следующая последовательность для обращения времени [2] (при этом сохранены обозначения [2]).

1) В момент времени $t = 0$ подается радиочастотный $\pi/2$ импульс. Его гамильтониан имеет вид

$$H_{RF}(t) = -2\gamma H_1 J_x [\cos(\omega_1 t_u) + \cos(\omega_2 t_u)], \quad (1)$$

где γ — гиромагнитное отношение ядра, H_1 — амплитуда радиочастотного импульса, J_x — спиновый оператор, ω_1 и ω_2 — частоты переходов $\pm 1/2 \rightarrow \pm 3/2$ и $\pm 3/2 \rightarrow \pm 5/2$.

2) В момент $T_a \gg T_2$ подается импульс $(\pi/2, 0y)$. Сразу за ним следует радиочастотный импульс вида (1), но его длительность T_b должна быть $T_b > 2T_a$ при условии $T_b \gg T_2$.

3) В момент $T_a + T_b$ выключается радиочастотный импульс и подается импульс $(-\pi/2, 0y)$.

Задача нахождения отклика в одночастичном приближении решается в энергетическом представлении. Гамильтониан системы имеет вид

$$H = H'_Q + H_{RF}(t), \quad H_{RF}(t) \gg H'_Q. \quad (2)$$

Секулярная часть квадрупольного гамильтониана H'_Q коммутирует с оператором возмущения J_x . Секулярное приближение оператора H'_Q соответствует случаю аксиальной симметрии градиента электрического поля кристалла ($\eta = 0$).

Отклик на двухчастотное возмущение выражается через формальное решение уравнения эволюции для матрицы плотности

$$\rho(t) = U\rho(0)U^{-1}, \quad (3)$$

$$\langle J_x \rangle = \text{Sp}(\rho(t)J_x). \quad (4)$$

Сигнал индукции от двухчастотного импульсного возмущения оказывается восстановленным в момент $T_c = 0.5T_b - T_a$

$$T_{\text{ind}}(\omega_2) = ((5)^{1/2}/2) [25ab - 9bd + ((5)^{1/2}/4)fc] \times \sin[\omega_2(T_c - (T_b/2 - T_a))], \quad (5)$$

$$T_{\text{ind}}(\omega_1) = ((2)^{1/2}) [-25bc + 9fd - fe] \times \sin[\omega_1(T_c - (T_b/2 - T_a))], \quad (6)$$

где a, b, c, d, e, f — матричные элементы оператора эволюции системы за время действия импульсов,

$$a = (5/13) \cos \alpha + (8/13), \quad b = [(5)^{1/2} \iota \sin \alpha] / (13)^{1/2},$$

$$c = [2(10)^{1/2}(\cos \alpha - 1) / 13], \quad d = \cos \alpha,$$

$$e = (8/13) \cos \alpha + (5/13),$$

$$f = [(8)^{1/2} \iota \sin \alpha / (13)^{1/2}], \quad \alpha = [(13)^{1/2} / 2] \gamma H_1 t_u.$$

Таким же способом при соответствующем приготовлении системы могут быть восстановлены сигналы основного и дополнительного эха.

2. Обсуждение

Явление обращения времени, первоначально известное как парадокс Лошмидта в классических системах, было впервые обнаружено экспериментально и объяснено теоретически в квантовых спиновых системах (в ЯМР, фотонном и фононном эхе [1–4]). Теоретически обращение времени следует из инвариантности матричных элементов гамильтониана относительно вращений. Эта инвариантность предполагает, что матричные элементы оператора преобразуются при симметрии в комплексно-сопряженные величины. Как показал Вигнер, это соответствует обращению времени [5].

Для случая ЯКР необходимым условием обращения времени является нулевой параметр асимметрии тензора градиента электрического поля кристалла, что возможно только в сильных радиочастотных полях. Полученные результаты (5), (6) указывают на теоретическую возможность наблюдения явления обращения времени в экспериментах по ЯКР.

Список литературы

- [1] В.С. Гречишкин. Ядерные квадрупольные взаимодействия в твердых телах. Наука, М. (1973). С. 61.
- [2] А. Абрагам. Ядерный магнетизм: порядок и беспорядок. Мир, М. (1984). С. 61.
- [3] Дж. Уо. Новые методы ЯМР в твердых телах. Мир, М. (1978). С. 66.
- [4] В.А. Голенищев-Кутузов, В.В. Самарцев, Б.М. Хабибуллин. Импульсная оптическая и акустическая когерентная спектроскопия. Наука, М. (1988). С. 57.
- [5] Л. Биденхарн, Дж. Лаук. Угловой момент в квантовой физике. Мир, М. (1984). Т. 1. С. 90.