

# 双态系统 (II)

Two-state Quantum Systems (II)

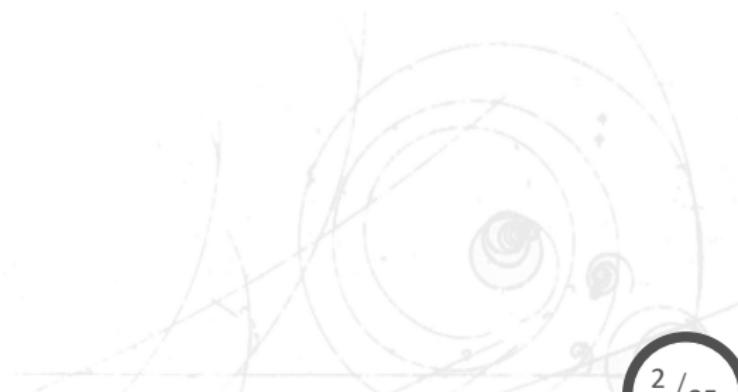
物理学院 2018 级 杨佳宇

2020 年 3 月 4 日

# 目录

## Contents

- 量子共振
- 拉莫旋进
- 磁共振
- 核磁共振的应用



# 量子共振

## 量子共振问题的概述

经典的共振模型：

一个振动系统有自己的固有频率  $\omega_0$ ，外部有个频率为  $\omega$  的驱动力，当  $\omega$  非常接近  $\omega_0$  时，振动的速度与驱动力相位一致，振动系统与驱动系统之间有效地交换能量，振动的振幅趋于极大。

在量子系统中：

固有频率相当于两个定态的能级间隔：

$$\omega_0 = \frac{E_a - E_b}{\hbar}$$

而外加驱动力一般是外加的交变电磁场。当外加电磁场振荡频率  $\omega$  与固有频率  $\omega_0$  相等的时候，就会引起受激吸收和受激发射。

# 量子共振

## 双态系统的量子共振

对于一个双态系统，取能量本征态为基，哈密顿量的矩阵可以写成：

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_a & 0 \\ 0 & E_b \end{pmatrix}$$

外来的驱动项设为：

$$D(t) = D_0 \cos \omega t = \frac{D_0}{2} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})$$

包括外来驱动的哈密顿量修正为：

$$H = \begin{pmatrix} E_a & -\frac{D_0}{2} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) \\ -\frac{D_0}{2} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) & E_b \end{pmatrix}$$

# 量子共振

## 双态系统的量子共振

薛定谔方程可以写为：

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} C_a \\ C_b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_a & -\frac{D_0}{2}(e^{\mathrm{i}\omega t} + e^{-\mathrm{i}\omega t}) \\ -\frac{D_0}{2}(e^{\mathrm{i}\omega t} + e^{-\mathrm{i}\omega t}) & E_b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_a \\ C_b \end{pmatrix}$$

可以将薛定谔方程写成分量形式：

$$\begin{cases} \mathrm{i}\hbar \frac{\partial C_a}{\partial t} = E_a C_a - \frac{D_0}{2}(e^{\mathrm{i}\omega t} + e^{-\mathrm{i}\omega t}) C_b \\ \mathrm{i}\hbar \frac{\partial C_b}{\partial t} = E_b C_b - \frac{D_0}{2}(e^{\mathrm{i}\omega t} + e^{-\mathrm{i}\omega t}) C_a \end{cases}$$

在没有外场的时候， $C_a(t)$  和  $C_b(t)$  原本都是定态概率幅：

$$C_a(t) = \gamma_a e^{-\mathrm{i}E_a t / \hbar}, C_b(t) = \gamma_b e^{-\mathrm{i}E_b t / \hbar}$$

# 量子共振

## 双态系统的量子共振

再考虑外场，只需要将  $\gamma_a$  和  $\gamma_b$  看做时时间  $t$  的函数即可。由此可以得到：

$$\begin{cases} \mathrm{i}\hbar \frac{\partial C_a}{\partial t} = \mathrm{i}\hbar \frac{\partial \gamma_a}{\partial t} e^{-\mathrm{i}E_a t/\hbar} + \gamma_a E_a e^{-\mathrm{i}E_a t/\hbar} \\ \mathrm{i}\hbar \frac{\partial C_b}{\partial t} = \mathrm{i}\hbar \frac{\partial \gamma_b}{\partial t} e^{-\mathrm{i}E_b t/\hbar} + \gamma_b E_b e^{-\mathrm{i}E_b t/\hbar} \end{cases}$$

将上式代入薛定谔方程：

$$\begin{cases} \mathrm{i}\hbar \frac{\partial \gamma_a}{\partial t} = -\frac{D_0}{2} [e^{-\mathrm{i}(\omega-\omega_0)t} + e^{\mathrm{i}(\omega+\omega_0)t}] \gamma_b \\ \mathrm{i}\hbar \frac{\partial \gamma_b}{\partial t} = -\frac{D_0}{2} [e^{\mathrm{i}(\omega-\omega_0)t} + e^{-\mathrm{i}(\omega+\omega_0)t}] \gamma_a \end{cases}$$

式中： $\omega_0 = \frac{E_a - E_b}{\hbar}$

# 量子共振

## 双态系统的量子共振

其中  $\omega + \omega_0$  项为反共振项，振荡的非常快，在一段时间的平均效果趋于 0。 $\omega - \omega_0$  项为共振项，在共振状态附近振荡的相对缓慢。我们关心的是共振状态附近体系的振荡情况，因此我们可以舍去反共振项：

$$\begin{cases} \mathrm{i}\hbar \frac{\partial \gamma_a}{\partial t} = -\frac{D_0}{2} e^{-\mathrm{i}(\omega-\omega_0)t} \gamma_b \\ \mathrm{i}\hbar \frac{\partial \gamma_b}{\partial t} = -\frac{D_0}{2} e^{\mathrm{i}(\omega-\omega_0)t} \gamma_a \end{cases} \quad (1)$$

将  $\gamma_a$  和  $\gamma_b$  变量分离，可以得到：

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 \gamma_a}{\partial t^2} + \mathrm{i}(\omega - \omega_0) \frac{\partial \gamma_a}{\partial t} + \left(\frac{D_0}{2\hbar}\right)^2 \gamma_a = 0 \\ \frac{\partial^2 \gamma_b}{\partial t^2} - \mathrm{i}(\omega - \omega_0) \frac{\partial \gamma_b}{\partial t} + \left(\frac{D_0}{2\hbar}\right)^2 \gamma_b = 0 \end{cases} \quad (2)$$

这就是描绘量子共振的微分方程，与经典的振动方程相比，一次项系数变成了纯虚数。

# 量子共振

## 拉比严格解

(2) 式为两个二阶常系数线性齐次微分方程, 设:

$$\gamma_i = A_i e^{\lambda_i t} \quad (i = a, b)$$

代入(2)可以得到相应的特征方程:

$$\begin{cases} \lambda_a^2 + i(\omega - \omega_0)\lambda_a + \left(\frac{D_0}{2\hbar}\right)^2 = 0 \\ \lambda_b^2 - i(\omega - \omega_0)\lambda_b + \left(\frac{D_0}{2\hbar}\right)^2 = 0 \end{cases}$$

它们的特征根为:

$$\begin{cases} \lambda_a^{(\pm)} = \frac{i}{2} \left[ -(\omega - \omega_0) \pm \sqrt{(\omega - \omega_0)^2 + (D_0/\hbar)^2} \right] = \frac{i}{2}(-\Delta\omega \pm \omega_R) \\ \lambda_b^{(\pm)} = \frac{i}{2} \left[ (\omega - \omega_0) \pm \sqrt{(\omega - \omega_0)^2 + (D_0/\hbar)^2} \right] = \frac{i}{2}(\Delta\omega \pm \omega_R) \end{cases}$$

其中  $\Delta\omega = \omega - \omega_0$  为频率失谐量,  $\omega_R = \sqrt{(\Delta\omega)^2 + (D_0/\hbar)^2}$  称为拉比频率 (Rabi frequency)。

# 量子共振

## 拉比严格解

于是我们就得到了(2)式的通解：

$$\begin{cases} \gamma_a = A_1 e^{\lambda_a^+ t} + A_2 e^{\lambda_a^- t} = e^{-\frac{i}{2}\Delta\omega t} (A_1 e^{\frac{i}{2}\omega_R t} + A_2 e^{-\frac{i}{2}\omega_R t}) \\ \gamma_b = B_1 e^{\lambda_b^+ t} + B_2 e^{\lambda_b^- t} = e^{\frac{i}{2}\Delta\omega t} (B_1 e^{\frac{i}{2}\omega_R t} + B_2 e^{-\frac{i}{2}\omega_R t}) \end{cases} \quad (3)$$

(3)式中的 $A_1$ 、 $A_2$ 、 $B_1$ 、 $B_2$ 为待定常量，需要由体系的初始条件来确定，即需要知道双态系统的初态。

我们考虑初始时系统完全处于b态的情况：

$$\gamma_a = 0, \gamma_b = 1$$

根据(1)式可以得到：

$$\frac{\partial \gamma_a}{\partial t} = \frac{iD_0}{2\hbar}, \frac{\partial \gamma_b}{\partial t} = 0$$

# 量子共振

## 拉比严格解

将初条件代入(3)式，可以解出四个待定常量：

$$A_1 = \frac{D_0}{2\hbar\omega_R}, A_2 = -\frac{D_0}{2\hbar\omega_R}, B_1 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\Delta\omega}{\omega_R}\right), B_2 = \frac{1}{2} \left(-\frac{\Delta\omega}{\omega_R}\right)$$

所以：

$$\begin{cases} \gamma_a(t) = \frac{iD_0}{\hbar\omega_R} e^{-i\Delta\omega t/2} \sin\left(\frac{\omega_R t}{2}\right) \\ \gamma_b(t) = e^{i\Delta\omega t/2} \left[ \cos\left(\frac{\omega_R t}{2}\right) + \frac{i\Delta\omega}{\omega_R} \sin\left(\frac{\omega_R t}{2}\right) \right] \end{cases}$$

它们的模方，也就是概率为：

## 跃迁概率

$$\begin{cases} P_a(t) = |\gamma_a(t)|^2 = \left(\frac{D_0}{\hbar\omega_R}\right)^2 \sin^2\left(\frac{\omega_R t}{2}\right) \\ P_b(t) = |\gamma_b(t)|^2 = 1 - \left(\frac{D_0}{\hbar\omega_R}\right)^2 \sin^2\left(\frac{\omega_R t}{2}\right) \end{cases}$$

# 量子共振

## 弱场情形

弱场情形指外加的电磁场很弱，作用时间  $t$  又不长，满足  $\frac{D_0 t}{2\hbar} \ll 1$ 。

我们继续讨论系统初始完全处于定态  $b$  的情形，仍有：

$$\gamma_a(0) = 0, \gamma_b(0) = 1$$

在弱场近似下，系统将偏离此状态不远。对于我们之前得到的 (1) 式：

$$\begin{cases} \mathrm{i}\hbar \frac{\partial \gamma_a}{\partial t} = -\frac{D_0}{2} e^{-\mathrm{i}\Delta\omega t} \gamma_b \\ \mathrm{i}\hbar \frac{\partial \gamma_b}{\partial t} = -\frac{D_0}{2} e^{\mathrm{i}\Delta\omega t} \gamma_a \end{cases} \quad (1)$$

我们可以将其近似为：

$$\begin{cases} \mathrm{i}\hbar \frac{\partial \gamma_a}{\partial t} = -\frac{D_0}{2} e^{-\mathrm{i}\Delta\omega t} \\ \mathrm{i}\hbar \frac{\partial \gamma_b}{\partial t} \approx 0 \end{cases}$$

对第一式积分，可以得到：

$$\gamma_a(t) = \frac{D_0}{2\hbar} \left( \frac{1 - e^{-\mathrm{i}\Delta\omega t}}{\Delta\omega} \right)$$

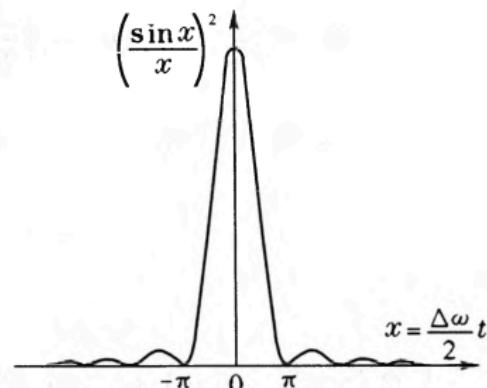
# 量子共振

## 弱场情形

在  $0 \rightarrow t$  时间内，系统从  $|b\rangle$  态跃迁到  $|a\rangle$  态的概率为：

$$P_a(t) = |\gamma_a|^2 = \left(\frac{D_0}{\hbar\Delta\omega}\right)^2 \sin^2\left(\frac{\Delta\omega t}{2}\right) = \left(\frac{D_0 t}{2\hbar}\right)^2 \left[\frac{\sin(\Delta\omega t/2)}{\Delta\omega t/2}\right]^2$$

式中的第二个因子告诉了我们这个双态量子系统吸收辐射场能量的谱线宽度，这个因子是 sinc 函数的平方，与光学中的单缝衍射因子有相同的形式，如下图所示，当宗量  $\Delta\omega t/2 = \pi$  的时候趋于 0。因此我们可以认为满足此式的  $\Delta\omega$  为吸收和发射谱线的宽度。



# 量子共振

## 弱场情形

另外，可以利用谐振子的能量得到

$$\Delta E = \hbar \Delta \omega$$

再结合  $\Delta \omega t / 2 = \pi$ ，并将时间  $t$  改写为  $\Delta t$ ，理解为跃迁时刻的不确定度，可以推出：

$$\Delta E \cdot \Delta t = 2\pi \hbar = h$$

这在形式上很像海森堡能量-时间不确定性关系，但是在细节上并不完全等同，赵凯华老师认为这可以作为对能量-时间不确定性关系的其中一种解释。

# 量子共振

## 共振情形

我们现在来讨论严格满足共振条件的情形。此时：

$$\Delta\omega = 0, \omega_R = \frac{D_0}{\hbar}$$

仍然讨论初态完全处于定态  $|b\rangle$  的情形，之前已经解出了拉比严格解：

$$\begin{cases} \gamma_a(t) = \frac{iD_0}{\hbar\omega_R} e^{-i\Delta\omega t/2} \sin\left(\frac{\omega_R t}{2}\right) \\ \gamma_b(t) = e^{i\Delta\omega t/2} \left[ \cos\left(\frac{\omega_R t}{2}\right) + \frac{i\Delta\omega}{\omega_R} \sin\left(\frac{\omega_R t}{2}\right) \right] \end{cases}$$

将共振条件代入可得，共振时：

$$\begin{cases} \gamma_a(t) = i \sin\left(\frac{D_0}{2\hbar}t\right) \\ \gamma_b(t) = \cos\left(\frac{D_0}{2\hbar}t\right) \end{cases}$$

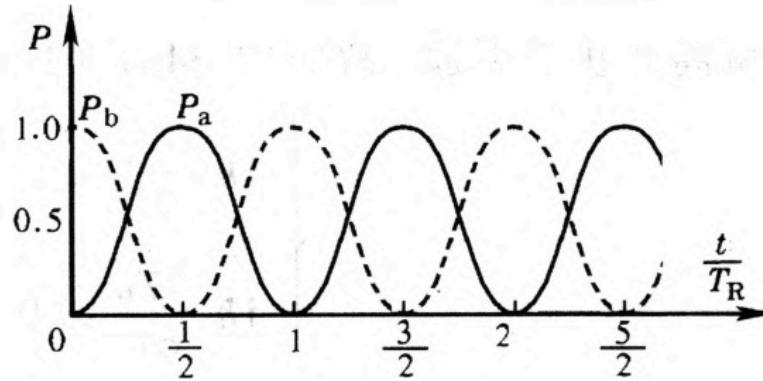
# 量子共振

## 共振情形

在以后的时刻系统处在两态的概率为：

$$\begin{cases} P_a(t) = |\gamma_a(t)|^2 = \sin^2\left(\frac{D_0}{2\hbar}t\right) \\ P_b(t) = |\gamma_b(t)|^2 = \cos^2\left(\frac{D_0}{2\hbar}t\right) \end{cases}$$

可见，系统在  $|a\rangle$  和  $|b\rangle$  之间来回振荡，拉比频率  $\omega_R = \frac{D_0}{\hbar}$ ，拉比周期为  $T_R = \frac{2\pi\hbar}{D_0}$ ，如下图所示。每  $T_R/2$  的时间系统完全跃迁一次。



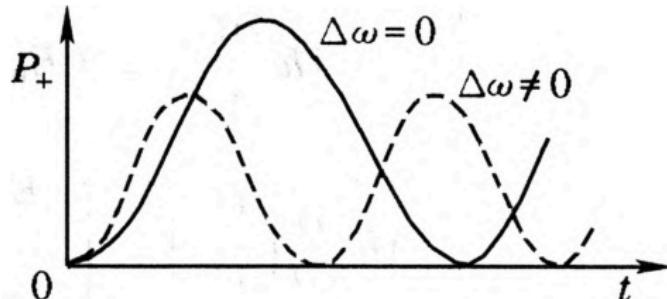
# 量子共振

## 普遍情形

对于普遍情形，仍考虑初态完全处于定态  $|b\rangle$  的情形，概率在之前已经严格解出，其中  $\omega_R = \sqrt{(\Delta\omega)^2 + (D_0/\hbar)^2}$ :

$$\begin{cases} P_a(t) = |\gamma_a(t)|^2 = \left(\frac{D_0}{\hbar\omega_R}\right)^2 \sin^2\left(\frac{\omega_R t}{2}\right) \\ P_b(t) = |\gamma_b(t)|^2 = 1 - \left(\frac{D_0}{\hbar\omega_R}\right)^2 \sin^2\left(\frac{\omega_R t}{2}\right) \end{cases}$$

从图中可以很明显的看出，在一般情况下跃迁概率仍然呈周期性变化，但随着  $\Delta\omega$  的增大，振荡的幅度和周期都在减小。而  $P_a$  的振荡幅度小于 1，意味着系统任何时刻都有概率处于  $|b\rangle$ ，不会完全跃迁。



# 拉莫旋进

任意取向自旋态的概率幅

考虑一个自旋  $\frac{1}{2}$  的粒子，也可以将它看作是一个双态系统。

它处在自旋态  $|s\rangle$ ，我们通常取  $z$  方向的自旋分量  $\hat{s}_z$  的本征态  $|\uparrow\rangle$  和  $|\downarrow\rangle$ ，并将  $|s\rangle$  在这组基下展开：

$$|s\rangle = C_{\uparrow} |\uparrow\rangle + C_{\downarrow} |\downarrow\rangle$$

其中， $C_{\uparrow} = \langle \uparrow | s \rangle$ ,  $C_{\downarrow} = \langle \downarrow | s \rangle$

或者说，在  $\hat{s}_z$  表象中：

$$|s\rangle = \begin{pmatrix} C_{\uparrow} \\ C_{\downarrow} \end{pmatrix}$$

这里，就显然有：

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

# 拉莫旋进

任意取向自旋态的概率幅

在量子力学中，我们一般都说粒子处于某个自旋态  $|s\rangle$ 。

当我们说自旋指向某个方向  $\vec{a}$  的时候，其实是在说粒子的自旋态是算符  $\hat{s}_a$  的本征态，且为其中本征值为  $\frac{\hbar}{2}$  对应的本征态。

下面我们取球坐标系，并以  $z$  轴为极轴，假设粒子自旋指向  $(\theta, \varphi)$  方向， $\theta$  为与  $z$  轴的夹角，将它的态矢写作：

$$|s(\theta, \varphi)\rangle = \begin{pmatrix} C_{\uparrow}(\theta, \varphi) \\ C_{\downarrow}(\theta, \varphi) \end{pmatrix}$$

自然有：

$$|s(0, 0)\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |s(\pi, 0)\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

我们可以利用坐标旋转来得到：

$$|s(\theta, \varphi)\rangle = \begin{pmatrix} C_{\uparrow}(\theta, \varphi) \\ C_{\downarrow}(\theta, \varphi) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2} \end{pmatrix}$$

# 拉莫进

现在将自旋指向  $(\theta, \varphi)$  的一个粒子放在一个沿  $z$  方向的磁场  $\vec{\mathcal{B}}$  中。  
自旋磁矩  $\vec{\mu}_M$  与磁场  $\vec{\mathcal{B}}$  之间的相互作用能为：

$$E = -\vec{\mu}_M \cdot \vec{\mathcal{B}}$$

考虑到  $\vec{\mu}_M = \gamma \vec{S}$ , 体系的哈密顿量为：  $\hat{H} = -\gamma \mathcal{B} \hat{S}_z$   
在  $|\uparrow\rangle$  和  $|\downarrow\rangle$  下的矩阵为：

$$H = -\gamma \mathcal{B} \frac{\hbar}{2} \sigma_z = -\mu_M \mathcal{B} \sigma_z = \begin{pmatrix} -\mu_M \mathcal{B} & 0 \\ 0 & \mu_M \mathcal{B} \end{pmatrix}$$

从而，薛定谔方程为：

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} C_{\uparrow} \\ C_{\downarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\mu_M \mathcal{B} & 0 \\ 0 & \mu_M \mathcal{B} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{\uparrow} \\ C_{\downarrow} \end{pmatrix}$$

# 拉莫进

将薛定谔方程写成分量形式：

$$\begin{cases} \mathrm{i}\hbar \frac{\partial C_{\uparrow}}{\partial t} = -\mu_M \mathcal{B} C_{\uparrow} \\ \mathrm{i}\hbar \frac{\partial C_{\downarrow}}{\partial t} = \mu_M \mathcal{B} C_{\downarrow} \end{cases}$$

当磁场  $\mathcal{B}$  恒定时，对上式直接进行积分可得：

$$\begin{cases} C_{\uparrow}(t) = C_{\uparrow}(0) e^{\mathrm{i}\mu_M \mathcal{B} t / \hbar} \\ C_{\downarrow}(t) = C_{\downarrow}(0) e^{-\mathrm{i}\mu_M \mathcal{B} t / \hbar} \end{cases}$$

$t = 0$  时粒子的自旋指向  $(\theta, \varphi)$ ，即初条件为：

$$\begin{pmatrix} C_{\uparrow}(t=0) \\ C_{\downarrow}(t=0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{-\mathrm{i}\varphi/2} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{\mathrm{i}\varphi/2} \end{pmatrix}$$

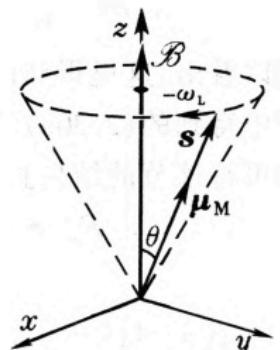
# 拉莫旋进

将初条件代入积分结果，可以解出在恒定磁场中粒子的自旋态随时间的演化：

## Larmor precession

$$|s(t)\rangle = \begin{pmatrix} C_{\uparrow} \\ C_{\downarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{-i(\varphi - \omega_L t)/2} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i(\varphi - \omega_L t)/2} \end{pmatrix}$$

其中  $\omega_L = \frac{2\mu_M \mathcal{B}}{\hbar}$ ，也与经典电磁学中磁偶极子在外磁场中拉莫旋进的角速度一致。



# 磁共振

对于一个自旋  $\frac{1}{2}$  粒子，我们如果不仅仅在  $z$  方向加一个恒定磁场  $\mathcal{B}_z$ ，还在  $x$  方向加上一个交变磁场：

$$\mathcal{B}_x = \mathcal{B}_0 \cos \omega t = \frac{\mathcal{B}_0}{2} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})$$

哈密顿矩阵应改写为：

$$H = -\mu_M (\mathcal{B}_z \sigma_z + \mathcal{B}_x \sigma_x) = \mu_M \begin{pmatrix} -\mathcal{B}_z & \frac{\mathcal{B}_0}{2} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) \\ \frac{\mathcal{B}_0}{2} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) & \mathcal{B}_z \end{pmatrix}$$

薛定谔方程可以写为：

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} C_{\uparrow} \\ C_{\downarrow} \end{pmatrix} = \mu_M \begin{pmatrix} -\mathcal{B}_z & \frac{\mathcal{B}_0}{2} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) \\ \frac{\mathcal{B}_0}{2} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) & \mathcal{B}_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{\uparrow} \\ C_{\downarrow} \end{pmatrix}$$

# 磁共振

将薛定谔方程写成分量形式：

$$\begin{cases} \mathrm{i}\hbar \frac{\partial C_{\uparrow}}{\partial t} = -\mu_M \mathcal{B}_z C_{\uparrow} + \frac{\mu_M \mathcal{B}_0}{2} (e^{\mathrm{i}\omega t} + e^{-\mathrm{i}\omega t}) C_{\downarrow} \\ \mathrm{i}\hbar \frac{\partial C_{\downarrow}}{\partial t} = \mu_M \mathcal{B}_z C_{\downarrow} + \frac{\mu_M \mathcal{B}_0}{2} (e^{\mathrm{i}\omega t} + e^{-\mathrm{i}\omega t}) C_{\uparrow} \end{cases}$$

对比之前求解  $|a\rangle$ 、 $|b\rangle$  双态系统的共振问题时得到的方程：

$$\begin{cases} \mathrm{i}\hbar \frac{\partial C_a}{\partial t} = E_a C_a - \frac{D_0}{2} (e^{\mathrm{i}\omega t} + e^{-\mathrm{i}\omega t}) C_b \\ \mathrm{i}\hbar \frac{\partial C_b}{\partial t} = E_b C_b - \frac{D_0}{2} (e^{\mathrm{i}\omega t} + e^{-\mathrm{i}\omega t}) C_a \end{cases}$$

可见二者形式几乎一模一样，假设  $t = 0$  时粒子处于  $|\uparrow\rangle$  自旋态，直接将拉比严格解套用过来，可以得到  $0 \rightarrow t$  时间间隔内粒子从  $|\uparrow\rangle$  跃迁到  $|\downarrow\rangle$  的概率，其中  $\omega_L = \frac{2\mu_M \mathcal{B}_z}{\hbar}$ ,  $b = \frac{\mu_M \mathcal{B}_0}{\hbar}$ ：

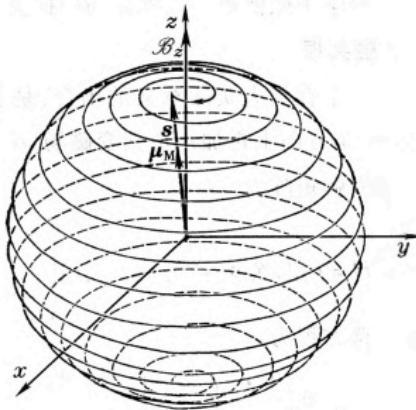
## 跃迁概率

$$P_{|\uparrow\rangle \rightarrow |\downarrow\rangle}(t) = \frac{b^2}{(\omega - \omega_L)^2 + b^2} \sin^2 \left[ \frac{1}{2} \sqrt{(\omega - \omega_L)^2 + b^2} t \right]$$

# 磁共振

上式表明，跃迁概率以拉比角频率  $\omega_R = \sqrt{(\omega - \omega_L)^2 + b^2}$  周期性变化，共振时  $\omega_L = \omega$ ，跃迁概率变化的幅度为 1，非共振情形下跃迁概率变化的幅度和周期都随着  $\Delta\omega = |\omega - \omega_L|$  的增大而减小。

如图所示，自旋态在  $|\uparrow\rangle$  和  $|\downarrow\rangle$  之间的振荡相当于自旋矢量极角在  $0$  与  $\pi$  之间的振荡，也就相当于自旋矢量的章动，拉比角频率  $\omega_R$  实际上相当于章动角频率。共振时章动幅度最大，可以到  $\pi$ ，在偏离共振时章动还没到  $\pi$  就返回了。



# 核磁共振的应用

## 基本原理

对于一个自旋  $\frac{1}{2}$  的粒子，原本自旋态是不影响能量的，能级与空间波函数相关，不同能量对应着  $\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}$  的不同本征值。

在外加一个恒定磁场  $B_z$  之后，自旋磁矩与磁场存在相互作用，附加的相互作用能的哈密顿矩阵为：

$$H = -\gamma B \frac{\hbar}{2} \sigma_z = -\mu_M B \sigma_z = \begin{pmatrix} -\mu_M B_z & 0 \\ 0 & \mu_M B_z \end{pmatrix}$$

这个矩阵是对角的，所以  $|\uparrow\rangle$  和  $|\downarrow\rangle$  也是这个附加哈密顿量的能量本征态，它们具有不同的能量。

对  $\hat{H}_0$  的一个本征态，空间波函数相同，自旋态可能是  $|\uparrow\rangle$  或者  $|\downarrow\rangle$ ，原本它们具有相同的能量，但外加磁场后这些态的能量加上了不同的附加能量——能级分裂了。

# 核磁共振的应用

## 基本原理

随后我们又在加上恒定磁场  $B_z$  的基础上，再加上一个交变磁场  $B_x$ 。这个外加交变场可以与体系进行能量交换。我们已经得到了：

$$P_{|\uparrow\rangle \rightarrow |\downarrow\rangle}(t) = \frac{b^2}{(\omega - \omega_L)^2 + b^2} \sin^2 \left[ \frac{1}{2} \sqrt{(\omega - \omega_L)^2 + b^2} t \right]$$

可见在共振的时候，体系可以从交变场中吸收能量跃迁到分裂出来的能级中较高的那个，或者释放能量给交变场，跃迁到分裂出来的较低的能级上。

## 总结

一个恒定磁场使自旋系统能级分裂；

一个达到共振频率的交变磁场使其在分裂出来的能级中跃迁。

# 核磁共振的应用

## 原子核磁矩的测定

对于原子核，其中的质子和中子都是自旋角动量为  $\frac{\hbar}{2}$  的费米子，他们也有磁矩。原子的磁矩一般用玻尔磁子  $\mu_B$  为单位衡量，原子核的磁矩一般用核磁子  $\mu_N$  衡量：

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 9.2740154 \times 10^{-24} \text{ J/T}$$

$$\mu_N = \frac{e\hbar}{2m_p} = \frac{1}{1836}\mu_B = 5.0508 \times 10^{-27} \text{ J/T}$$

实验测定，质子 p 和中子 n 的磁矩分别为：

$$\mu_p = 2.793\mu_N, \mu_n = -1.9135\mu_N$$

精确地测定各种原子核的磁矩，对于核力的研究和原子核结构模型的建立都有重要的意义。

1938 年拉比首先用分子束核磁共振法研究并精确地测量了原子核的磁矩，为此他获得了 1944 年诺贝尔物理奖。

# 核磁共振的应用

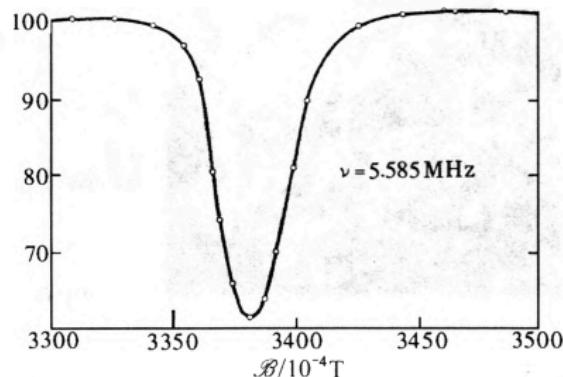
## 原子核磁矩的测定

让分子束或原子束通过强度可调整的恒定磁场  $B$ , 可使得其能级分裂, 在数千高斯下核能级的裂距一般在射频波段。

然后再令固定频率的射频无线电波通过束流, 波长能量被粒子吸收, 用以产生能级跃迁, 检测无线电波强度随磁场的改变, 可以在共振处看到显著的吸收峰, 此时  $\omega = \omega_L = \frac{2\mu_M B_z}{\hbar}$ 。

这一方法曾经用来测量过很多原子核的磁矩, 测量误差只有 0.01% 至 0.1%, 而在目前精确度还要更高。

下图是  ${}^7\text{Li}$  原子束的核磁共振吸收峰。



# 核磁共振的应用

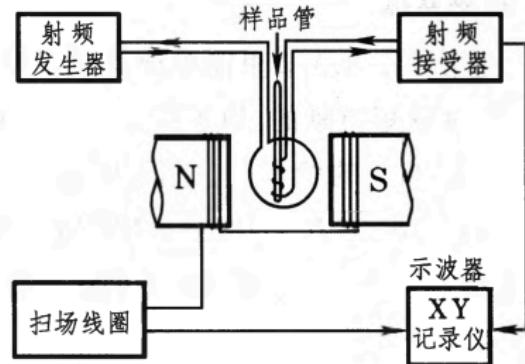
## 原子核磁矩的测定

束流的方法有其不便之处，布洛赫和珀塞尔发现，固体、液体中也能观察到核磁共振吸收的现象。

在磁场中能级分裂后，粒子按玻耳兹曼分布律分布在各能级上，上能级粒子少下能级粒子多，在与波场交换能量时吸取大于付出，二者之间的差额表现为共振吸收。

布洛赫和珀塞尔二人因发展了核磁共振的新方法和有关的新发现，分享了 1952 年诺贝尔物理奖。

下图是目前常用的核磁共振仪的示意图。



# 核磁共振的应用

## 核磁共振氢谱

1950 年普洛克特和虞福春在一次精密测量  $^{14}\text{N}$  核磁矩的实验中发现，对不同的  $^{14}\text{N}$  化合物，它的共振磁场值有微小的移动，同时狄更孙在  $^{19}\text{F}$  的化合物中也看到类似的现象。

这现象叫做化学位移。化学位移是化合物分子中的电子屏蔽作用造成的，这种作用使各原子核实际“感受”的磁场比外加的磁场小一些，要靠外磁场稍大一点来补偿。

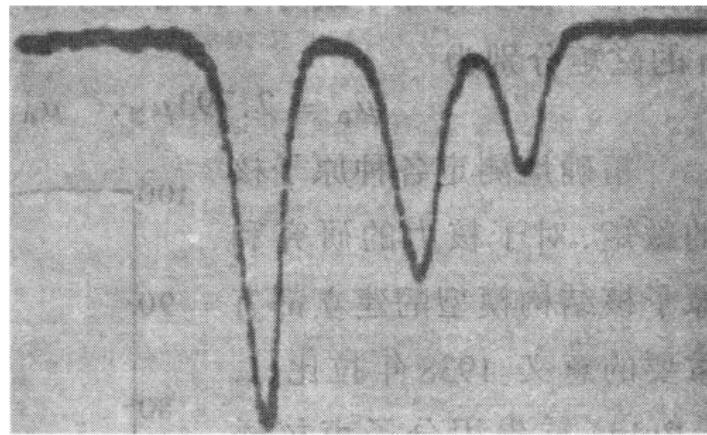
处在不同化合物或同一化合物不同化学环境中的同类原子核，因受到电子屏蔽作用强弱不同，具有不同的化学位移。

可见，核磁共振谱线的化学位移提供了某种原子在分子中位置的信息，它成为研究分子结构很有效的工具。

# 核磁共振的应用

## 核磁共振氢谱

例如酒精分子  $CH_3 - CH_2 - OH$  中 6 个氢原子分属于三个原子团，它们各有各的化学环境，故酒精的核磁共振曲线中有三个吸收峰。酒精的核磁共振曲线如下图所示。

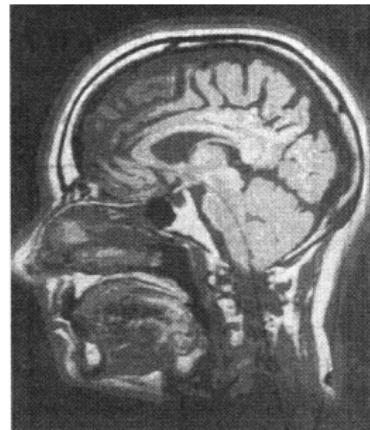


# 核磁共振的应用

## 自旋成像技术

过去诊断人体内部的病变只能靠计算机辅助 X 射线层析技术 (CT)，1980 年以后“自旋成象”技术走向临床应用阶段。

“自旋成象”的原理是质子的核磁共振。人体的软组织中水和脂肪都含有氢，各点的质子密度及质子周围环境的不同，使核磁共振信号的强度和宽度等特征不同。若按空间的位置逐点做出共振信号，则能反映人体组织结构的形状。

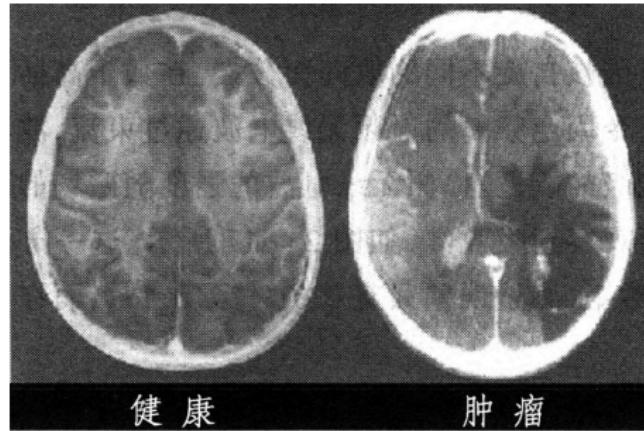


# 核磁共振的应用

## 自旋成像技术

但逐点测量信号太麻烦，所以实际上是逐片扫描。将患者的躯体放到一个大线圈内，线圈产生一个高度均匀的磁场，然后再加上一个强度随空间位置均匀改变的“梯度场”进行扫描。当躯体的某一截面上磁场值达到与质子共振的条件时，就产生共振信号。这些信号经过计算机整理，即可组成该截面的图象。

今天，核磁共振层析术已成为医学上一种普遍使用的重要诊断手段。



# 参考资料

## References

- 新概念物理教程 · 量子物理, 赵凯华, 罗蔚茵
- The Feynman Lectures on Physics · Quantum Mechanics
- Introduction to Quantum Mechanics, David J. Griffiths
- [https://en.wikipedia.org/wiki/Zeeman\\_effect](https://en.wikipedia.org/wiki/Zeeman_effect)  
[https://en.wikipedia.org/wiki/Laser\\_detuning](https://en.wikipedia.org/wiki/Laser_detuning)  
[https://en.wikipedia.org/wiki/Nuclear\\_magnetic\\_resonance](https://en.wikipedia.org/wiki/Nuclear_magnetic_resonance)

# Thanks for listening!!

# Thanks for listening!!

