

# Az atommag mágneses momentumának mérése

Márton Nagy

Eötvös University, Department of Atomic Physics

2016. február 3.

Financed from the financial support ELTE won  
from the Higher Education Restructuring Fund of the Hungarian Government

## 1. Elméleti háttér

A mag-mágneses rezonancia (NMR) és az elektronspin-rezonancia (ESR) elméleti leírása, kísérleti módszertana számos közös vonást mutat. A következőkben ezért a mágneses momentum rezonancia-elnyelése elméletének közös alapjait fektetjük le, amely mindkét jelenségkörre érvényes.

### 1.1. Mágneses momentum és impulzusmomentum

Tekintsünk egy részecskét (elektron, nukleon, atommag, vagy akár atom vagy molekula), amelynek teljes impulzusmomentuma,  $\hat{\mathbf{J}}$  és mágneses momentuma,  $\hat{\boldsymbol{\mu}}$  arányos egymással:

$$\boldsymbol{\mu} = \gamma \cdot \mathbf{J} \quad \Leftrightarrow \quad \hat{\boldsymbol{\mu}} = \gamma \cdot \hat{\mathbf{J}}.$$

Az összefüggés a klasszikus mennyiségekre és a kvantummechanikai operátorokra egyaránt fennáll. A  $\gamma$  a *giromágneses arány*, értéke a különböző esetekben más és más.

A  $\gamma$  nagyságrendjét egyszerű becsléssel meg lehet határozni. Egy klasszikus, pontszerű,  $m$  tömegű és  $q$  töltésű részecskének, mely  $v$  sebességgel mozog egy  $r$  sugarú körpályán,  $J = mvr$  impulzusmomentuma van, és mágneses momentumot is kelt: áramjárta hurokra definíciószerűleg  $\mu = I \cdot A$ , ahol  $I$  az áram és  $A$  a felület, ebből:

$$\mu = I \cdot A = qv \frac{1}{2\pi r} \cdot r^2 \pi = \frac{qvr}{2}, \quad J = mvr \quad \Rightarrow \quad \mu = \frac{q}{2m} J.$$

Ebből tehát egy részecske klasszikus mozgására

$$\gamma = \frac{q}{2m}, \tag{1}$$

nyilván ugyanez igaz akkor is, ha több, azonos töltés/tömeg arányú részecskénk van.

A (nem feltétlenül elemi) kvantum-részecskéknek saját impulzusmomentumuk (spin-jük) van, mely alapvetően nem térbeli mozgásból származik. Ezt  $\hbar$  egységekben szoktuk mérni; érdemes bevezetni a dimenziótlan  $j$  impulzusmomentum-kvantumszámot:  $J = \hbar j$ . Részecskékre, atomokra, stb. a fenti egyszerű (1) reláció már nem igaz, de ad némi fogalmat a mágneses momentum nagyságrendjéről.

Az elektron feles spinű részecske, tehát impulzusmomentumának nagysága  $J_e = \hbar/2$  (azaz  $j = 1/2$ ), mágneses momentumának nagysága pedig a tapasztalat szerint

$$\mu_e = g_e \frac{e}{2m_e} J_e = g_e \frac{e}{2m_e} \frac{\hbar}{2} \equiv g_e \mu_B j, \quad \text{ahol} \quad \mu_B \equiv \frac{e\hbar}{2m_e} \approx 9,27 \cdot 10^{-24} \text{ J/T}. \quad (2)$$

Nukleonokra, magokra pedig

$$\mu = g \frac{e}{2m_p} J = g \frac{e\hbar}{2m_p} j \equiv g \mu_N j, \quad \text{ahol} \quad \mu_N \equiv \frac{e\hbar}{2m_p} \approx 5,05 \cdot 10^{-27} \text{ J/T}. \quad (3)$$

A  $\mu_B$  neve *Bohr-magneton*, a  $\mu_N$  neve *magneton*. A  $g$  neve egyszerűen  $g$ -faktor, de néha ezt is hívják giromágneses aránynak. A feles spinű töltött részecskék relativisztikus hullámeqyenletéből, a Dirac-egyenletből  $g = 2$  érték adódik. Elektronra a mért érték  $g_e \approx 2,002322$ , ennek kettőtől eltérő voltát a kvantumtérelmélet magyarázza meg. Protonra a mérések szerint  $g_p \approx 5,585486$ , neutronra pedig  $g_n \approx -3,826085$ ; ezek (noha egységnyi nagyságrendűek, vagyis (1) jó nagyságrendet adott) egyáltalán nem egyenlők 2-vel. Ez arra utal, hogy a nukleonok összetett részecskék (ma már tudjuk, hogy kvarkokból állnak). Atommagokra a  $g$ -faktor teljesen változatos értékeket vehet fel.

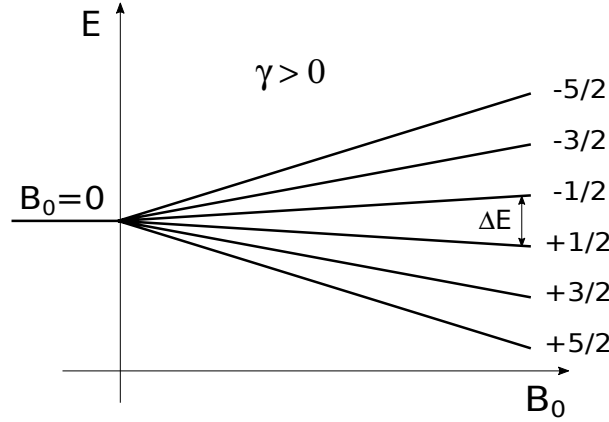
## 1.2. Mágneses momentum mágneses térben

Egy  $J = \hbar j$  impulzusmomentumú (spinű) részecskének ismert módon  $2j + 1$  lehetséges állapota van egy adott tengely irányú impulzusmomentum-vetület lehetséges értékeinek (sajátértékeinek) megfelelően. A forgásszimmetria miatt legtöbbször feltehetjük, hogy külső hatások hiányában ezen sajátértékek szerint az energiaszintek elfajultak. Ha egy külső sztatikus  $\mathbf{B}_0$  mágneses teret kapcsolunk be, ez a degeneráció megszűnik, a nívók felhasadnak. Az egyszerűség kedvéért a  $z$  tengelyt a  $\mathbf{B}_0$  mágneses tér irányában vegyük fel, ekkor a mágneses térrel való kölcsönhatás operátora:

$$\hat{K} = -\hat{\boldsymbol{\mu}}\mathbf{B}_0 = -\gamma\hat{\mathbf{J}}\mathbf{B}_0 \equiv -\gamma B_0 \hat{J}_z.$$

A  $\hat{J}_z$  sajátállapotait ugyebár az  $m$  mágneses kvantumszám különbözteti meg, ezeken az állapotokon a  $\hat{K}$  hatása is egyszerű:

$$\hat{J}_z |m\rangle = m\hbar |m\rangle, \quad \hat{K} |m\rangle = E_m |m\rangle, \quad \text{ahol} \quad E_m = -\gamma\hbar B_0 m.$$



1. ábra. Egy mágneses tér nélkül hatszorosan degenerált energiaszint felhasadása mágneses térben.

A szomszédos nívók közötti különbség  $\Delta E = |\gamma| \hbar B_0$ . (Előfordulnak olyan esetek, ilyen pl. a neutron is, amikor  $\gamma$  előjele negatív.) Illusztrációként az 1.2. ábrán egy  $j = 5/2$  spinű rendszerben az energiaszintek mágneses tértől való függését láthatjuk. Ha mérni szeretnénk a rendszer mágneses momentumát (vagy a  $\gamma$  giromágneses tényezőjét), akkor érdemes adott külső mágneses térben megmérni a  $\Delta E$  energiakülönbséget.

Ha a  $\mathbf{B}_0$  tér mellett egy  $\mathbf{B}_1(t)$  időben változó mágneses térrel is hatunk a rendszerre, akkor bizonyos nívók között átmeneteket hozhatunk létre. Tisztán harmonikus perturbáció esetén a Hamilton-operátorhoz adódó korrekció:

$$\hat{H}'(t) = -\hat{\boldsymbol{\mu}}\mathbf{B}_1(t) = -\hat{\boldsymbol{\mu}}\mathbf{B}_1 \cos(\omega t) \equiv \hat{V} \cos(\omega t), \quad \text{ahol} \quad \hat{V} = -\hat{\boldsymbol{\mu}}\mathbf{B}_1.$$

Mint ismeretes, ilyenkor az időegységre eső  $W$  átmeneti valószínűség (a perturbációszámítás első rendjében)

$$W_{m \rightarrow m'} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle m | \hat{V} | m' \rangle \right|^2 \delta(E_{m'} - E_m - \hbar\omega). \quad (4)$$

Idézzük fel, hogy az impulzusmomentum-algebrában az  $m$  kvantumszámot  $\pm 1$ -gyel változtató  $\hat{J}_{\pm}$  „léptetőoperátorok” kifejezése:  $\hat{J}_{\pm} = \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y$ . Innen adódik, hogy a  $\hat{J}_x$  és  $\hat{J}_y$  operátorok az  $|m\rangle$  sajátállapotot a  $|m+1\rangle$  és  $|m-1\rangle$  állapotok kombinációjába viszik, valamint tudjuk, hogy a  $\hat{J}_z$  operátor pedig nem változtatja  $m$ -et. Így tehát a (4) képletből leszűrhetjük, hogy hogy  $\mathbf{B}_1$ -nek csak a  $\mathbf{B}_0$ -ra merőleges komponense idéz elő átmeneteket (mivel  $z$  irányát  $\mathbf{B}_0$  irányába vettük), és csak a szomszédos  $m$  kvantumszámú állapotok között lehet átmenet:  $m \rightarrow m' = m \pm 1$ . (Ez persze csak a perturbációszámítás első rendjében igaz.) A Dirac-delta biztosítja az energiamegmaradást; ebből a következő ún. rezonancia-feltétel adódik:

$$\hbar\omega = \Delta E = |\gamma| \hbar B_0 \quad \Leftrightarrow \quad \omega = |\gamma| B_0.$$

Érdekes, hogy az  $\omega$  körfrekvenciára vonatkozó kifejezésből kiesett a Planck-állandó. Ez jellemzően olyan kvantummechanikai összefüggéseknél történik, melyeket klasszikus megfontolásokkal is meg lehet kapni; esetünkben is ez lesz a helyzet, mint nemsokára belátjuk.

### 1.3. Mágneses momentum klasszikus mozgása

A fenti kvantummechanikai érvelésből kapott  $\omega = |\gamma| B_0$  feltétel jobb megértése érdekében röviden klasszikusan is megvizsgáljuk egy mágneses momentummal (és impulzusmomentummal) rendelkező részecske és a fentebb látott fajta mágneses tér kölcsönhatását.

#### 1.3.1. Mozgásegyenlet, sztatikus tér

A klasszikus mechanika szerint  $\mathbf{B}$  mágneses térben a mágneses momentumra  $\mathbf{M} = \boldsymbol{\mu} \times \mathbf{B}$  forgatónyomaték hat. Legyen a részecskénk  $\gamma$  giromágneses tényezője adott, ekkor tehát mechanikai impulzusmomentumára a következő egyenlet vonatkozik:

$$\frac{d\mathbf{J}}{dt} = \boldsymbol{\mu} \times \mathbf{B} \quad \Rightarrow \quad \frac{d\boldsymbol{\mu}}{dt} = \boldsymbol{\mu} \times (\gamma \mathbf{B}). \quad (5)$$

Fontos, hogy ez az összefüggés tetszőleges időfüggő  $\mathbf{B}(t)$  tér esetén is érvényes. Fontos továbbá, hogy a  $\boldsymbol{\mu}$ -vel való skalárszorzás alapján azonnal látható, hogy  $\boldsymbol{\mu}$  nagysága változatlan marad, akármilyen külső  $\mathbf{B}(t)$  tér esetén. (Ez klasszikusan is kijött most; meg is lepődnénk, ha a kvantummechanikai képben  $\boldsymbol{\mu}$  nagyságának változnia kéne, ez kvantum-részecskékre nem képzelhető el.)

Ennek az (5) egyenletnek a megoldására gyakran jó módszer egy forgó koordinátarendszerre való áttérés. Mint a mechanikából ismert, egy  $\mathbf{A}(t)$  időfüggő vektornak a laboratóriumi (álló) rendszerben vett  $\frac{d\mathbf{A}(t)}{dt}$  időderiváltja és egy állandó  $\boldsymbol{\Omega}$  szögsebességgel forgó rendszerben mért  $\left. \frac{\delta \mathbf{A}(t)}{\delta t} \right|_{\boldsymbol{\Omega}}$  időderiváltja között a

$$\frac{d\mathbf{A}}{dt} = \left. \frac{\delta \mathbf{A}}{\delta t} \right|_{\boldsymbol{\Omega}} + \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{A} \quad (6)$$

összefüggés áll fenn. Tehát a forgó rendszerben a mágneses momentum mozgásegyenlete

$$\frac{d\boldsymbol{\mu}}{dt} = \boldsymbol{\mu} \times (\gamma \mathbf{B}) \quad \Rightarrow \quad \left. \frac{\delta \boldsymbol{\mu}}{\delta t} \right|_{\boldsymbol{\Omega}} = \boldsymbol{\mu} \times (\gamma \mathbf{B} + \boldsymbol{\Omega}) \equiv \boldsymbol{\mu} \times \mathbf{B}'_{\text{eff}}, \quad \text{ahol} \quad \mathbf{B}'_{\text{eff}} = \mathbf{B}' + \frac{\boldsymbol{\Omega}}{\gamma}.$$

Ez az egyenlet hasonlít a nyugvó rendszerben érvényes mozgásegyenlethez, csak itt a  $\mathbf{B}$  tér helyébe a  $\mathbf{B}'_{\text{eff}} = \mathbf{B}' + \frac{\boldsymbol{\Omega}}{\gamma}$  „effektív mágneses teret” kell írni, mely az alkalmazott  $\mathbf{B}$  térnek a forgó koordinátarendszerben felírt komponenseiből ( $\mathbf{B}'$ ) és egy „látszólagos”  $\boldsymbol{\Omega}/\gamma$  térből áll össze.

Egy adott fizikai folyamatot tetszőleges koordinátarendszerben leírhatjuk, választhatunk most is olyat, ami kényelmes. Sztatikus,  $\mathbf{B}(t) = \mathbf{B}_0$  tér esetén célszerű a  $\boldsymbol{\Omega} = -\gamma \mathbf{B}_0$

választás, ekkor az effektív mágneses tér,  $\mathbf{B}'_{\text{eff}}$  zérus, azaz a forgó rendszerben a  $\boldsymbol{\mu}$  mágneses momentum nem mozog. Eszerint tehát a mágneses momentum sztatikus  $\mathbf{B}_0$  térben a laboratóriumi rendszerben

$$|\omega| \equiv \omega_L = \gamma B_0$$

szögsebességgel forog (precesszál) a  $\mathbf{B}_0 = \mathbf{B}'_0$  tér körül. Ezt az  $\omega_L$  frekvenciát a spin Larmor-féle körfrekvenciájának hívják a  $\mathbf{B}_0$  térben. Megjegyzendő, hogy a precesszió közben a  $\boldsymbol{\mu}$  mágneses momentumnak a  $\mathbf{B}_0$ -lal bezárt szöge, így a mágneses momentum  $-\boldsymbol{\mu}\mathbf{B}_0$  energiája változatlan marad.

### 1.3.2. Harmonikus időfüggésű mágneses tér hatása

A korábbi kvantummechanikai tárgyalásban láttuk, hogy ha a homogén  $\mathbf{B}_0$  térhez egy erre merőleges, harmonikus időfüggésű kis  $\mathbf{B}_1(t) = \mathbf{B}_1 \cos(\omega t)$  teret adunk, átmenetek indulnak meg a sajátállapotok között. Vizsgáljuk meg ezt az esetet klasszikusan is!

Az egyszerűség kedvéért megint vegyük a  $z$  tengelyt a  $\mathbf{B}_0$  tér irányába, valamint vegyük úgy, hogy  $\mathbf{B}_1$  az  $x$  tengely irányába mutat. Láttuk, hogy forgó terekkel könnyebb számolni, ezért az  $x$  irányban lineárisan polarizált  $\mathbf{B}_1(t)$  teret bontsuk fel az  $x$ - $y$  síkban két ellentétes irányban forgó, cirkulárisan polarizált tér összegére:

$$\mathbf{B}_1(t) = \begin{pmatrix} B_1 \cos(\omega t) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} B_1 \cos(\omega t) \\ B_1 \sin(\omega t) \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} B_1 \cos(\omega t) \\ -B_1 \sin(\omega t) \\ 0 \end{pmatrix}.$$

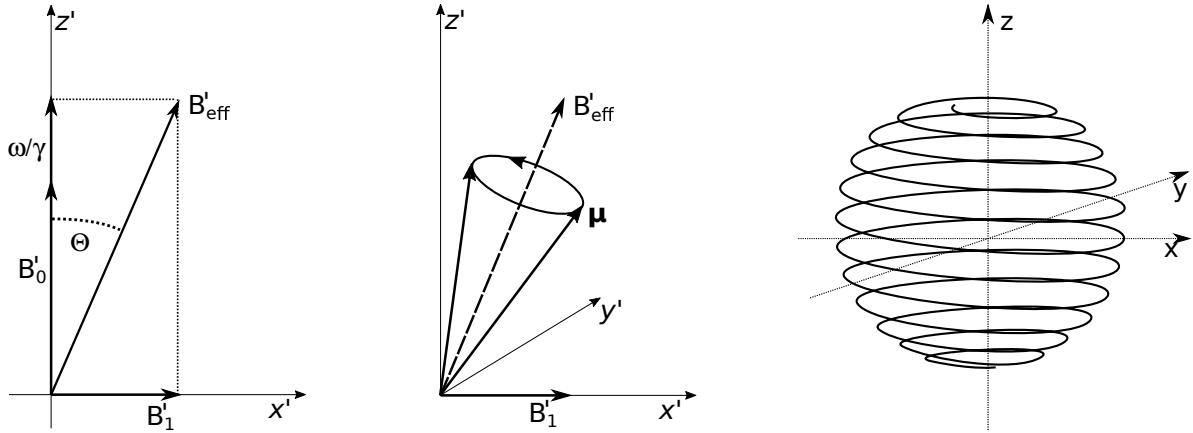
A továbbiakban ki fog derülni, hogy a két cirkulárisan polarizált komponens közül csak annak lesz lényeges szerepe, ami a  $\mathbf{B}_0$  sztatikus térben precesszáló mágneses momentummal egyirányban forog, az ellenkező irányban forgó tér hatása elhanyagolható lesz. Ezért most a cirkulárisan polarizált

$$B_{1x}(t) = B_1 \cos(\omega t), \quad B_{1y}(t) = B_1 \sin(\omega t), \quad B_{1z}(t) = 0$$

tér hatását fogjuk vizsgálni. A fentiek alapján használjunk olyan forgó  $K'$  koordinátarendszert, ahol  $\mathbf{B}_1(t)$  időfüggése (forgása) megszűnik, azaz legyen a (6) egyenletbeli szögsebesség nagysága  $\Omega = \omega$ ! Ebben a rendszerben  $\mathbf{B}_0 = \mathbf{B}'_0$  és  $\mathbf{B}_1$  is sztatikus terek (az időmérést indítsuk úgy, hogy a forgó rendszerben  $\mathbf{B}'_1$  az  $x'$  irányba mutasson), de a fentieknek megfelelően fellép egy  $z$  irányú,  $\omega/\gamma$  nagyságú látszólagos mágneses tér:

$$\left. \frac{\delta \boldsymbol{\mu}}{\delta t} \right|_{\omega} = \boldsymbol{\mu} \times \mathbf{B}'_{\text{eff}}, \quad \text{ahol} \quad \mathbf{B}'_{\text{eff}} = \begin{pmatrix} B_1 \\ 0 \\ B_0 + \omega/\gamma \end{pmatrix}.$$

A forgó koordinátarendszerbeli effektív teret az 1.3.2. ábra bal oldalán láthatjuk. Ebben a rendszerben tehát a mágneses momentum mozgása egy, a  $\mathbf{B}'_{\text{eff}}$  körüli precesszió



2. ábra. Bal oldal: Az effektív mágneses tér összetevői forgó koordináta-rendszerben, szinuszos cirkuláris perturbáció esetén. Középen: A mágneses momentum precessziója az effektív tér körül a forgó rendszerben. Jobb oldalon: A  $\mu$  végpontjának pályája rezonancia esetén a laboratóriumi rendszerben.

lesz, az 1.3.2. ábrán láthatónak megfelelően. Ha kezdetben a mágneses momentum a  $\mathbf{B}_0$  irányába (azaz  $z$  irányba) mutat, akkor a  $\mathbf{B}_1$  tér bekapcsolása után a mágneses momentumnak a  $\mathbf{B}_0$ -lal bezárt szöge periodikusan változik 0 és  $2\Theta$  között, ahol

$$\tan\Theta = \frac{B_1}{B_0 + \omega/\gamma}.$$

Mivel most is feltettük, hogy  $B_1 \ll B_0$ , a változás (azaz  $\Theta$ ) mindig kicsi lesz, kivéve, ha az  $\omega$  frekvenciával éppen eltaláljuk az  $\omega_L = -\gamma B_0$  Larmor-frekvencia környékét. Az  $\omega = \omega_L = -\gamma B_0$  esetben  $\mathbf{B}_{\text{eff}} = \mathbf{B}'_1$ , azaz a forgó rendszerben a mágneses momentum  $\mathbf{B}'_1$  körül precesszál, úgy, hogy iránya minden periódus alatt a  $\mathbf{B}_0$  térrel egyirányú állásról azzal ellentétesre változik, majd vissza. Mivel  $B_1 \ll B_0$ , ez a precesszió sokkal lassabb, mint  $\mathbf{B}_1$  forgása. Tehát laboratóriumi (nyugvó) rendszerben a mágneses momentum mozgását úgy lehet elképzelni, mint egy  $\mathbf{B}_0$  körüli gyors forgást, melynek során a  $\mu$  és  $\mathbf{B}_0$  közötti szög lassan változik  $0^\circ$  és  $180^\circ$  között, ahogy az 1.3.2. ábrán látható.

Azt látjuk tehát, hogy az  $|\omega| = \gamma B_0$  frekvencia a klasszikus leírásban is kitüntetett: ha a statikus  $\mathbf{B}_0$  térre ilyen frekvenciájú külső mágneses teret szuperponálunk, akkor a mágneses momentum  $\mathbf{B}_0$  térbeli energiája a szélső határok,  $\mu B_0$  és  $-\mu B_0$  között változik. A kvantummechanikai leírásban látott perturbációs számításos érvelés azt mondta, hogy ilyen frekvencián átmenetek lesznek a különböző állapotok között. Kérdés, hogy milyen módszerrel lehetne adott  $B_0$  nagyságú statikus mágneses térben tehát ezt az  $\omega$  frekvenciát — melyet, nemsokára belátható okokból, rezonanciafrekvenciának nevezünk — megmérni; ennek mérésével információt szerezhetünk a  $\gamma$  giromágneses arányról.

## 2. A rezonanciafrekvencia mérése

Minél nagyobb a  $B_0$  sztatikus tér értéke, annál nagyobb az  $\omega_L$  rezonanciafrekvencia, és mint látni fogjuk, annál pontosabb mérésre van lehetőség. Nagyságrendileg néhány tesla (T) mágneses tér használata reális. Elektronspin ( $\mu_e \approx \mu_B$ ) esetén  $B_0 = 1$  T térben a rezonanciafrekvencia ebből kb.  $1,4 \cdot 10^{10}$  Hz (ez kb.  $\lambda = 2,1$  cm hullámhossznak, azaz a mikrohullámok tartományának felel meg), magok esetén pedig a  $\mu_N$  mag-magneton értéke a mérvadó; pl. protonra (a  $g_p$ -nek a (3)-ban felírt értékéből)  $B_0 = 1$  T esetén a rezonanciafrekvencia kb. 42 MHz, azaz itt a rádióhullámok tartományában mozgunk.

Az  $\omega_L$  rezonanciafrekvencia keresése kétféleképpen történhet: vagy a perturbáló tér frekvenciája állandó, és a  $B_0$  tér nagyságát változtatva érjük el a rezonanciát, vagy fordítva. Magrezonancia esetén mindkét módszer használható, elektronrezonancia esetében gyakorlatilag csak az első, mivel a mikrohullámok frekvenciáját sokkal nehezebb megbízhatóan változtatni, mint a mágneses teret.

A rezonancia észlelésére (azaz annak megállapítására, hogy az alkalmazott  $\omega$  frekvencia mikor éppen egyenlő az  $\omega_L$  Larmor-frekvenciával) több módszer is kínálkozik:

- Szabad részecskék esetén, ha azok haladó mozgást végeznek inhomogén mágneses térben, a mágneses momentum megváltozása a pálya megváltozását idézi elő (ez a Rabi-féle molekulanyaláb-módszer).
- Kondenzált anyagokban a rezonancia során a külső térből elnyelt energiát lehet észlelni. A továbbiakban ezt részletesen megtárgyaljuk, és a labormérés során is ezzel a módszerrel dolgozunk.
- Detektálható a koherensen precesszáló mágneses momentumok (ld. az előző 1.3.2. szakasz) által létrehozott változó mágneses tér. Ezen az elven alapulnak az ún. spin-echo kísérletek; ezt a módszert röviden áttekintjük a szakasz végén.

### 2.1. Energia-abszorpció kondenzált anyagokban, spin-relaxációk

Mindeddigi tárgyalásunk során a spineket (mágneses momentumokat) mint elszigetelt rendszereket tekintettük. A valóságban ezek kölcsönhatásban állnak a környező közeggel. Az alábbiakban az egyszerűség kedvéért  $j = 1/2$  spinű,  $g\mu_0 j = \frac{1}{2}g\mu_0$  mágneses momentumú részecskékkal foglalkozunk. (Magokra  $\mu_0 = \mu_N$ , elektronokra  $\mu_0 = \mu_B$ ).

Egy  $B_0$  sztatikus térben egy ilyen spinnek két állapota lehetséges, a  $|m = +1/2\rangle \equiv |\uparrow\rangle$ , illetve a  $|m = -1/2\rangle \equiv |\downarrow\rangle$  állapotok, ezek energiái  $E_\uparrow = -\frac{1}{2}g\mu_0 B_0$ , illetve  $E_\downarrow = \frac{1}{2}g\mu_0 B_0$ . Legyen ezek betöltöttsége az idő függvényében  $N_\uparrow(t)$  és  $N_\downarrow(t)$ . Az összes spinek (részecskék)  $N_0$  száma állandó; a betöltöttségek különbségét pedig jelöljük  $n(t)$ -vel:

$$N_0 = N_\uparrow(t) + N_\downarrow(t) = \text{const}, \quad n(t) \equiv N_\uparrow(t) - N_\downarrow(t).$$

Hőmérsékleti egyensúlyban  $n(t) \equiv n_T$  konstans, és  $n_T > 0$ , hiszen az alacsonyabb energiájú állapot valószínűbb.  $T$  hőmérsékleten a kanonikus eloszlást használva, némi rendezéssel azt kapjuk, hogy:

$$N_{\uparrow T} = A \exp\left(\frac{g\mu_0 B_0}{2k_B T}\right), \quad N_{\downarrow T} = A \exp\left(-\frac{g\mu_0 B_0}{2k_B T}\right) \Rightarrow n_T = N_0 \text{th}\left(\frac{g\mu_0 B_0}{2k_B T}\right).$$

Szobahőmérsékleten a  $k_B T$  kb. 0,024 eV.  $B_0 = 1$  T esetén magokra a jellemző  $g\mu_N B_0$  értéke tipikusan kb.  $2 \cdot 10^{-26}$  J (azaz  $1,3 \cdot 10^{-7}$  eV), elektronokra pedig  $\mu_B B_0$  értéke kb.  $10^{-23}$  J ( $6,2 \cdot 10^{-5}$  eV). Ebből leszűrhetjük, hogy a betöltöttségek különbsége ( $n_T = N_{\uparrow T} - N_{\downarrow T}$ ) mindenképpen kicsi az összes spin számához ( $N_0 = N_{\uparrow} + N_{\downarrow}$ ) képest<sup>1</sup>.

### 2.1.1. Energia-abszorpció

A hőmérsékleti egyensúlyt a spineknek a környezettel való kölcsönhatása alakítja ki. Mi történik, ha a fentebb látott típusú, az  $\omega_L = |\gamma| B_0 = |g| \mu_0 B_0$  rezonanciafrekvenciával rezgő  $\mathbf{B}_1$  teret kapcsolunk a rendszerre? Ilyenkor az 1.2. szakaszban látottaknak megfelelően átmenetek jönnek létre a  $|\uparrow\rangle$  és a  $|\downarrow\rangle$  állapotok között, mindkét irányban egyenlő valószínűséggel ( $W_{\uparrow \rightarrow \downarrow} = W_{\downarrow \rightarrow \uparrow}$ ). Azaz ez a külső perturbáció felborítja a hőmérsékleti egyensúlyt: kiegyenlíteni igyekszik a betöltöttségeket. A spineknek egymással illetve a környezettel való kölcsönhatása viszont fenntartani igyekszik a Boltzmann-eloszlást. Ez azt eredményezi, hogy ha éppen  $\omega_L$  frekvenciájú a külső tér, akkor abból folyamatosan energia megy át a közegbe: a  $B_1$  tér a spinek átfordításával munkát végez rajtuk (hiszen egyensúlyi helyzetben  $N_{\downarrow T} > N_{\uparrow T}$ ), a spineknek a környezettel való kölcsönhatása pedig ezt az átadott energiát végső soron a környezetbe disszipálja.

Ha tehát a spinrendszer eloszlása kiegyenlítettebb, mint a termikus eloszlásból adódna (mint ahogy tehát a külső  $B_1$  perturbáció hatására ez így is lesz), akkor a spinek a környezetbe energiát adnak le. A hőmérsékleti egyensúlyból kitérített rendszernek az egyensúlyhoz való tartását relaxációs idővel szokták jellemezni: a  $T_1$  spin-rács relaxációs idő azt jellemzi, hogy a hőmérsékleti egyensúlyt felborító külső perturbáció megszűnte után milyen időállandóval tart a spin-eloszlás a hőmérsékleti egyensúlyhoz.

Ha a spineknek a környezethez való csatolása elég erős a külső perturbációhoz képest, akkor a spin-rács relaxációs idő sokkal rövidebb, mint amennyi idő alatt a spinek eloszlása a ( $W_{\uparrow \downarrow}$  időegységenkénti valószínűségű átmeneteket előidéző) perturbáció miatt kiegyenlítődne:  $T_1 W_{\uparrow \downarrow} \ll 1$ . Ekkor a spinrendszer a perturbáció bekapcsolása után is közel lesz a termikus egyensúlyhoz, azaz a fentiek alapján folyamatos energia-abszorpciót

<sup>1</sup> Ha észben tartjuk, hogy az elektronspinekre jellemző rezonanciafrekvenciák a mikrohullámok tartományában, a magspinekre jellemzőek pedig rádióhullám-tartományban vannak, és felidézzük, hogy szobahőmérsékletű testek hőmérsékleti sugárzása jellemzően az infravörös tartományban van (ami sokkal nagyobb frekvencia, mint akár a mikrohullámoké, akár a rádióhullámoké), akkor ez alapján egyből, a fenti konkrét számok ismerete nélkül is levonhatjuk azt a következtetést, hogy szobahőmérsékleten a betöltöttségek különbsége nagyon kicsi lesz az összes spin számához képest.



figyelhetünk meg. A rezonancia mérése szempontjából ez a kívánatos helyzet. Ha azonban  $B_1$  növelésével a  $W_{\uparrow\downarrow}$  valószínűséget annyira megnöveljük, hogy  $W_{\uparrow\downarrow}T_1 \simeq 1$  lesz, akkor ez már nem teljesül: az eloszlás eltávolodik a hőmérsékleti egyensúlytól, és az abszorpció lecsökken. Ezt a jelenséget hívjuk *telítésnek*. Magok esetén  $T_1$  akár másodperc nagyságrendű is lehet, így a telítés könnyen előfordulhat: ezen úgy segítenek, hogy vagy  $B_1$ -et csökkentik, vagy a spineknek a környezethez való csatolását erősítik (hogy  $T_1$  csökkenjen), pl. paramágneses sók hozzáadásával. Elektronspin-rezonancia esetén a telítés ritkán fordul elő: az elektronspinek csatolása a környezethez általában sokkal erősebb, mint a magspineké; a  $T_1$  relaxációs idő itt általában  $10^{-9}$  s nagyságrendű.

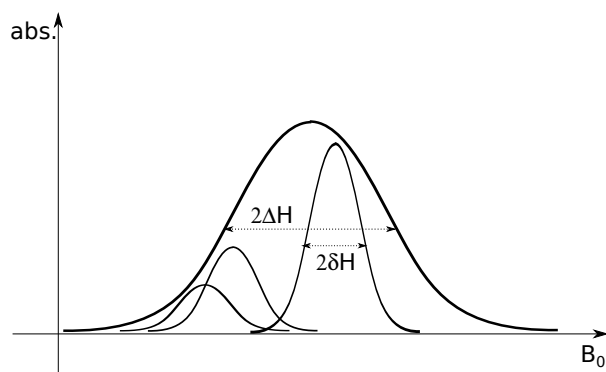
Az energiaabszorpciót a spinek 1.2. szakaszban látott kvantummechanikai tárgyalása alapján tehát meg lehet érteni. A klasszikus tárgyalásban (1.3.2. szakasz) ez a jelenség úgy érthető, hogy csak az  $\omega_L$  frekvencia környékén fogja a perturbáló  $\mathbf{B}_1$  tér lényegesen változtatni a mágneses momentum  $\mathbf{B}_0$  térrel vett kölcsönhatásban tárolt energiáját. Itt is elmondhatjuk tehát, hogy ha  $\omega \approx \omega_L$ , akkor a mágneses momentumnak jelentős energia adódhat át, ami végső soron elnyelődik a közegben. A kvantummechanikai tárgyalás azért mindenképpen valóságosabb képet ad.

### 2.1.2. Az abszorpció frekvenciafüggése, a rezonancia-jel alakja

Eddig azt láttuk, hogy (a kvantummechanikai tárgyalás alapján) csak az  $\omega = \omega_L$  egyenlőség teljesülése esetén lesz abszorpció, vagyis ha a gerjesztő (perturbáló)  $\mathbf{B}_1$  tér  $\omega$  frekvenciájának függvényében vizsgáljuk az energiaabszorpciót, akkor egy Dirac-delta-szerű függést kapunk. A valóságban mért abszorpciós görbének azonban mindig van valamilyen vonalszélessége. Ennek kétféle oka van: az egyik az ún. *homogén vonalkiszélesedés*, amely a magasabb energiájú állapotok véges  $\delta t$  élettartamából adódik, a másik az ún. *inhomogén kiszélesedés*, amely a mágneses tér inhomogenitásai miatt lép fel.

A homogén vonalkiszélesedés oka, hogy a véges  $\delta t$  élettartamú gerjesztett állapotoknak a Heisenberg-féle határozatlansági reláció folyamánaként  $\delta E \approx \hbar/\delta t$  energiabizonytalansága van. A gerjesztett állapot (ami itt tulajdonképpen a magasabb energiájú  $|\uparrow\rangle$  állapot) élettartama szoros kapcsolatban van a relaxációs idővel, durván szólva  $\delta t \approx T_1$ . Adott  $B_0$  mágneses térben tehát az  $\omega_L$  körüli  $\delta\omega \approx \delta E/\hbar \approx 1/\delta t$  frekvenciatartományban is számottevő abszorpció figyelhető meg. Ennek a vonalkiszélesedésnek megfelelő jelalak tipikusan a rezgésstanban is tanult Lorentz-görbe  $(\frac{1}{1+(\omega-\omega_L)^2/(\delta\omega)^2})$ .

A rezonancia-görbe kiszélesedésének másik oka, hogy a közegben lévő spinek által érzékelt sztatikus mágneses tér nem egyforma. Ez származhat a külső  $B_0$  tér inhomogenitásából is, de sokkal jelentősebb effektust okoz az, hogy még homogén külső tér esetén is az anyagminta belsejében pontról pontra változó lokális belső mágneses tér van (ennek jellemző fluktuációja legyen  $\delta B_{\text{lok}}$ ), ez  $\delta\omega = \gamma\delta B_{\text{lok}}$  kiszélesedést okoz. Például dipól-dipól kölcsönhatás esetén egy  $\mu$  mágneses momentumú spin a tőle  $r$  távolságban lévő szomszédos spin helyén  $\delta H = \mu/r^3$  teret létesít. Elektronokra  $\mu \approx \mu_B$ , így  $r = 10^{-10}$  m esetén kb.  $\Delta B = 0,002$  T értékűnek adódik. Mivel  $B_0$  néhány tized (vagy esetleg



3. ábra. Homogén ( $\delta B$ ) és inhomogén ( $\Delta B$ ) kiszélesedés: az egymáshoz képest eltolódott vonalak széles burkológörbéje adja a teljes, inhomogén módon kiszélesedett vonalakot.

néhány)  $T$  nagyságú, ezért az abszorpciós vonal mérhetően kiszélesedik. Sokszor emiatt a rezonanciagörbe struktúrájának észleléséhez a spinek távolságát meg kell növelni — folyadékok esetén az oldat koncentrációjának csökkentésével, szilárd anyag esetén a paramágneses ionoknak valamilyen diamágneses hordozóba való beágyazásával.

Az inhomogén kiszélesedéshez tartozó görbealak tipikusan Gauss-görbe lenne, de a homogén kiszélesedés miatti Lorentz-görbék fellelése miatt inkább olyan görbe alakul ki, ami sok, homogén kiszélesedéshez tartozó  $\delta\omega$  frekvenciaszélességű Lorentz-görbe burkológörbéje. Szokás tetszőleges görbe esetén bevezetni a  $T_2 = \frac{1}{\gamma\Delta H}$  relaxációs időt a megfigyelt szélesség leírására. A 2.1.2. ábra a különböző kiszélesedéseket szemlélteti.

## 2.2. A mag-mágneses rezonancia vegyészeti és orvosi alkalmazásai

Egy hidrogént tartalmazó molekula szerkezetéről sok információt nyerhetünk a proton mag-mágneses rezonancia-spektrumának meghatározásából. A különböző kötésekben, molekulacsoportokban és atomok közelében található protonok különböző lokális mágneses teret éreznek, és ennek megfelelően különböző frekvenciákon rezonálnak. Ez jellemző helyen található rezonancia-vonalak megjelenését okozza. Emellett a protonok — a vegyérték-elektronokon keresztül — egymással is kölcsönhatnak. Attól függően, hogy ez a kölcsönhatás növeli vagy csökkenti a lokális mágneses teret (ezt a spinek beállása határozza meg), a vonalak tovább hasadnak, multipletteket hozva létre. A spektrum egyszerű mérésén túl az eljárás finomítható azzal is, hogy egyszerre többféle gerjesztőfrekvenciát használunk, egy-egy vonalat telítésbe véve (ld. 2.1.1. szakasz). Így az ezen csoport által felhasított más vonalak felhasadása megszűnik, és az összetartozó multiplettek megkereshetők. A spektrum teljes kiértékelésével legtöbbször még bonyolult molekulák szerkezete is feltérképezhető, általában komplex vizsgálatok részeként.

A proton mellett még néhány további atommag is jól használható molekulaszervezet-

meghatározásra: ilyen a deuteron, a fluor, a foszfor és a  $^{13}\text{C}$ . Ez utóbbi különösen fontos a szerves molekulák vizsgálatánál.

A mérési módszerek és a számítógépes adatfeldolgozás fejlődésének eredményeképpen a mag-mágneses rezonancia az orvosi diagnosztika egyik leghatékonyabb eszközévé vált. A „mérés” során a páciens egy szolenoid által létrehozott közel homogén mágneses térben foglal helyet. A tér inhomogenitásának nagyon pontosan meghatározott változtatásával a test belsejének különböző szeletein hoznak létre rezonanciát (az a tartomány, ahol a mágneses tér nagysága, és ennek megfelelően a rezonanciafrekvencia megegyezik a gerjesztési frekvenciával, mindig egy kétdimenziós felület). A mérést nagyon sokszor, különböző állású síkokra elvégezve a test háromdimenziós elnyelési térképe meghatározható, így, akár csak egy röntgenképnél, láthatóvá válnak az egyes szervek illetve azok esetleges elváltozásai. A vizsgálati módszer nagy előnye, hogy nagyon pontos képet ad mindenféle roncsolás vagy sugárzási károsodás nélkül.

### 2.3. Kitekintés: nagyfelbontású impulzusüzemű berendezések

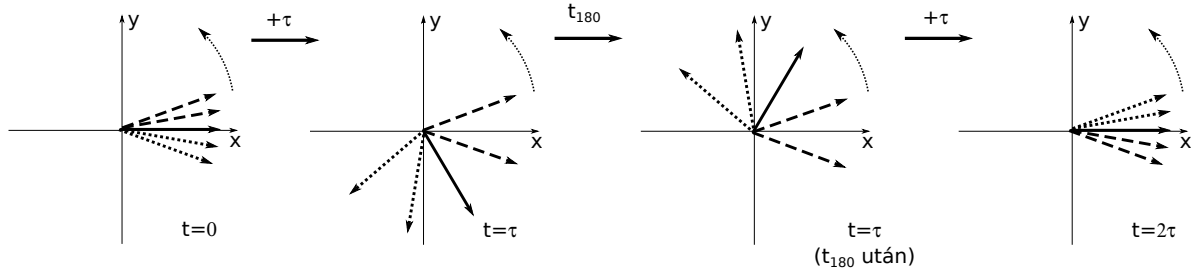
A laboratóriumban az energiaabszorpción alapuló mag-mágneses rezonanciamérés egy egyszerű demonstrációjával fogunk dolgozni. Ez egy egyszerű, folyamatos üzemű berendezés, melynek működése közben a rezonancia során a minta energiát nyel el a gerjesztő térből. Ennek több problémája is van:

- A gerjesztőfrekvenciát nagyon nagy stabilitással, lassan kell változtatni, ami technikailag nehézkes. Előnyösebb egy állandó frekvencia használata.
- Csak kis gerjesztőteljesítmény használható, mert a minta könnyen telítésbe megy.
- Nincs egyszerű lehetőség a jel/zaj viszony javítására.

Az utóbbi két ok miatt a ritkán előforduló, vagy nehezen gerjeszthető atommagok mérése szinte lehetetlenné válik, mert a mérendő jel egyszerűen nem emelkedik ki a zajból.

A modern mérőberendezések impulzusüzeműek: ezzel mindhárom fenti problémát kiküszöbölik. Az ipari, orvosi, illetve magas szintű kutatási alkalmazásokban ezek mára teljesen kiszorították a folyamatos üzemű berendezéseket.

Az impulzusüzemű mérés során először egy nagy (néhány kW) teljesítményű, rövid (néhány száz  $\mu\text{s}$ ) ideig tartó, a Larmor-frekvencia közelében lévő impulzust adunk a mintára. Rezgéstánból ismert, hogy egy ilyen impulzus frekvenciaspektruma széles (szélessége nagyjából az impulzus időtartamának reciproka), azaz tekinthetjük úgy, hogy a teljes mérni kívánt frekvenciatartományt, a minta összes, egymáshoz közeli rezonanciafrekvenciáját egyszerre gerjesztjük. A detektálás során a mintában keletkezett mágnesezettség időfüggését mérjük, ami természetesen  $T_1$  időállandóval lecseng. A mágnesezettség időfüggése a minta rezonanciaspektrum-szerkezetének Fourier-transzformáltja (mivel koherensen gerjesztettük a teljes vonalrendszert), azaz a mért mágnesezettséget



4. ábra. A mágneses momentumok időbeli változásának szemléltetése a spin-echo kísérletekben.

Fourier-transzformálva megkapjuk a rezonanciaspektrumot. A mérés teljes ideje legfeljebb másodperc nagyságrendű: sok jelet összeadva jelentősen javítható a jel/zaj viszony.

## 2.4. Kitekintés: spin-echo kísérletek

A teljesség kedvéért röviden ismertetjük a 2. szakaszban említett spin-echo technikát is. Ennek megértéséhez a spinek mozgásának klasszikus tárgyalását (ld. 1.3. szakasz) használjuk, ami vonatkozik a kvantummechanikai operátorok időátlagára is.

A spin-echo technika impulzusüzemű: kezdetben az anyagminta  $\mathbf{B}_0$  sztatikus,  $z$  irányú térben van. A mérés során  $x$  irányú,  $B_1$  amplitúdójú,  $\omega_L = \gamma B_0$  Larmor-frekvenciájú, adott  $t$  hosszúságú gerjesztést adunk a mintára. Mint eddig is,  $B_1 \ll B_0$ , továbbá  $t \gg 1/\omega_L$ . Adjunk a mintára először egy

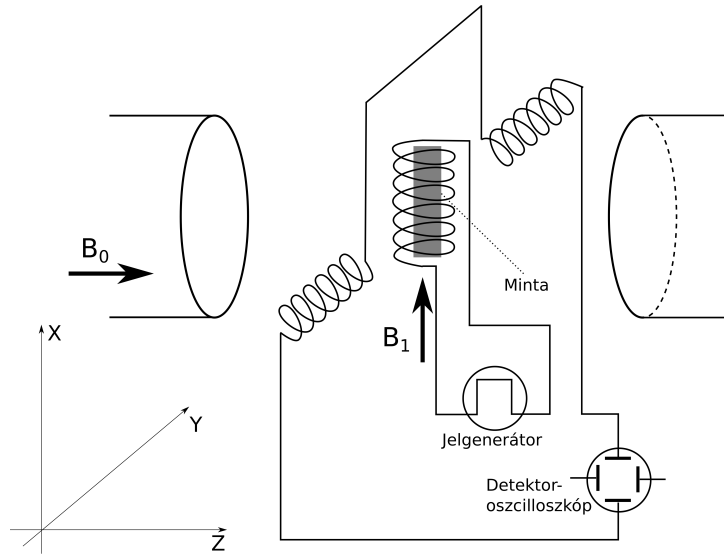
$$t_{90^\circ} \equiv \frac{\pi/2}{\gamma B_1}$$

ideig tartó, ún.  $90^\circ$ -os impulzust. Ennek hatására a 2.4. ábrának megfelelően a mágneszettség (minden spin) az  $x$ - $y$  síkba fordul, és  $\omega_L$  frekvenciával precesszálni kezd. A jelenséget detektálhatjuk egy  $y$  irányú tekercsel, melyben ez a precesszió feszültséget indukál. Egy tipikus spin-echo mérési összeállítást mutat a 2.4. ábra. Az egyes spinek Larmor-frekvenciája kicsit különböző a 2.1.2. szakaszban tárgyaltaknak megfelelően (karakterisztikusan  $\Delta\omega = \gamma\Delta B_{\text{lok}}$ , a mágneses tér lokális fluktuációi miatt). Ez azt okozza, hogy némelyik spin lemarad, némelyik pedig előresiet: az eredő mágneszettség könnyen végiggondolhatóan a 2.1.2. szakaszban bevezetett  $T_2$  időállandóval lecsökken, ennek megfelelően csökken az  $y$  irányú tekercsben mért indukált feszültség.

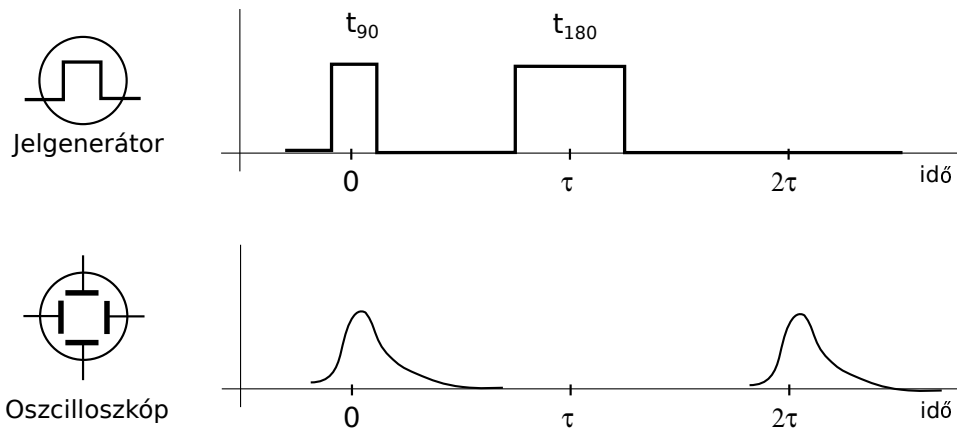
Egy tetszőlegesen választott  $\tau$  időtartam után (amely  $T_2$  nagyságrendjébe esik, esetleg nagyobb nála) a mintára egy

$$t_{180^\circ} \equiv \frac{\pi}{\gamma B_1}$$

ideig tartó, ún.  $180^\circ$ -os gerjesztő impulzust adva (technikailag  $t_{180^\circ}$  sokkal rövidebb, mint  $\tau$ ) a spinek az  $x$  tengely körül  $180^\circ$ -kal átfordulnak (feltettük, hogy a gerjesztő  $\mathbf{B}_1$  tér



5. ábra. Egy tipikus spin-echo berendezés elvi felépítése.



6. ábra. A spin-echo kísérletben kiadott gerjesztő jelek és a „visszavert” jelek.

az  $x$  tengely irányába mutat). Ennek hatására az  $x$ - $y$  síkban forgó spinek közül azok kerülnek előre, amelyek eddig lemaradtak, és azok hátra, amelyek előresiettek.

Az eddig szétartó spinek tehát újból összetartanak, mivel a lokális mágneses tér fluktuációi ugyanazok maradtak. A  $\tau$  időtartam eltelte után újból teljesen koherensen precesszálnak a spinek: a szétartásnak megfelelő folyamat időben mintegy időben visszafelé játszódik le, és a mérőtekercsben ismét nagy eredő indukált feszültséget kapunk. A gerjesztő impulzusok és a mért jelek idődiagramja a 3.1. ábrán látható. A spin-echo elnevezés onnan adódik, hogy a mintára  $t = 0$  időben adott gerjesztés a  $\tau$ -val későbbi jele mintegy „visszaverődve”,  $2\tau$  idő elteltével újra megfigyelhető jelet, „visszhangot” ad.

A folyamat ismétélhető: újabb  $180^\circ$ -os impulzust kiadva a  $3\tau$  és az  $5\tau$  időpontokban, visszhangjeleket látunk a  $4\tau$  és a  $6\tau$  időpontokban is. Ez utóbbi jelek amplitúdója a relaxációs folyamatok miatt ( $T_1$ ) egyre kisebb lesz, így ezen kísérleti módszerrel közvetlenül kimérhető a  $T_1$  relaxációs idő.

### 3. A mag-mágneses rezonancia mérése a laboratóriumi gyakorlaton

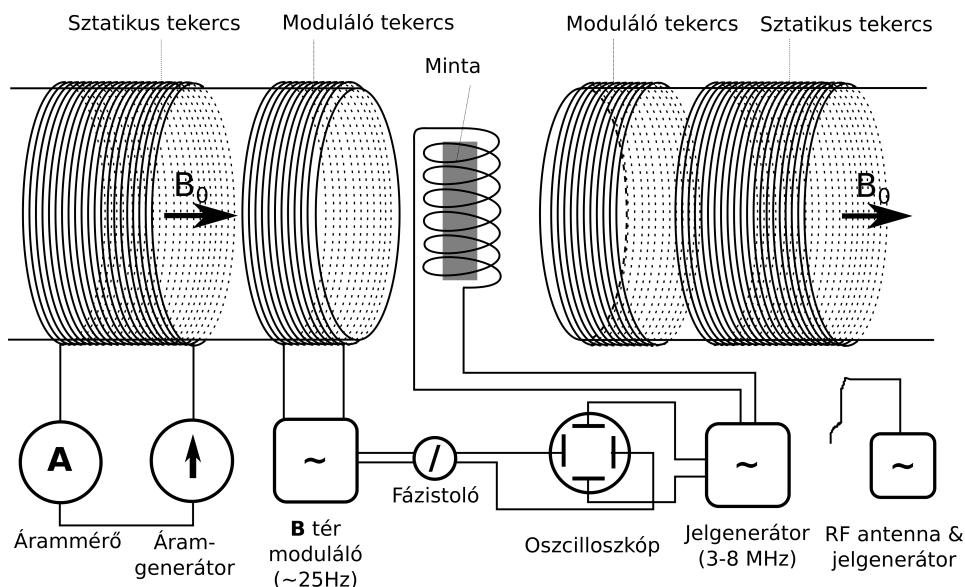
A labormérés célja a mag-mágneses rezonancia jelenségének demonstrációja, az ehhez kapcsolódó alapjelenségek vizsgálata és mérések végzése. A berendezés felépítése követi a „demonstráció” filozófiáját: a gyári, nagy felbontású műszerekkel ellentétben a rendszer egyszerű alapelemekből áll, melyek így részletesen áttekinthetők és a rendszer működése ennek révén megérthető.

#### 3.1. A mérőműszer rövid leírása

A rezonancia homogén mágneses teret igényel, amit egy több ezer menetes, nagy méretű vasmagos tekercs hozunk létre,  $0,5\text{--}2$  amperes egyenáramot átfolyatva rajta. Azért, hogy a rezonancia könnyebben észrevehető legyen, ezt az egyenáramot (és ezáltal a mágneses teret) moduláljuk:  $25$  Hz frekvenciával a mágneses teret értékének egy-két százalékaival, szinuszos időfüggéssel változtatjuk (ehhez egy külön tekercs van beépítve a mágnesbe).

A rezonanciajelenség miatt fellépő abszorpció mérésére ugyanazt a tekercset használjuk, mint amivel magát a rádiófrekvenciás gerjesztést létrehozuk. A tekercs oszcillátor-kapcsolásba van kötve, ezen oszcillátor amplitúdójának csökkenése jelzi az abszorpciót. A rezonanciát oszcilloszkópon jelenítjük meg: a vízszintes tengelyen a homogén mágneses tér modulációját, a függőleges tengelyen pedig az oszcillátor által mért abszorpciót használjuk az elektronsugár eltérítésére. Amikor a homogén mágneses tér éppen eléri a rezonanciát (ezt az oszcillátor időben állandó frekvenciája határozza meg), az abszorpciós csúcs megjelenik az oszcilloszkópon. A mérésnél kétfajta mintát használunk: protonrezonanciához paramágneses sóval (rézgáliccal) kevert vizet, illetve a fluor rezonanciájának bemutatásához teflon mintát.

Fontos körülmény, hogy a teret moduláló tekercs nagy induktivitása miatt a rá adott feszültség egyáltalán nincs egy fázisban a rajta folyó árammal: ahhoz, hogy az oszcilloszkóp vízszintes tengelyén valóban a moduláló tér (vagyis a moduláló tekercsen folyó áram) aktuális értéke jelenjen meg, a hangfrekvenciás feszültség fázisát ”kézzel” el kell tolni, mielőtt ráadjuk az oszcilloszkóp vízszintes tengelyére.



7. ábra. A laborban használt berendezés egyszerűsített diagramja. A homogén áram és a teret moduláló áram valójában mindkét oldali tekercseken végigfut, az áttekinthetőség kedvéért az egyik (jobb) oldali tekercsekről lehangtunk ezen vezetékek jelöléseit.

### 3.2. A berendezés bekapcsolása

A mérés első néhány lépése a következőképpen zajlik:

- Kapcsoljuk be a rádiófrekvenciás oszcillátort — a hozzá tartozó hálózati adapter bedugásával. Néhány másodperc múlva a műszer elején lévő (egyetlen) mutató ki-lendül, a jelzett normál értékre. Ezen a műszeren a továbbiakban csak a gerjesztési frekvenciát kell változtatni, a doboz oldalán található koronggal.
- Következő lépés az elektromágnes bekapcsolása. Bekapcsolás előtt győződjünk meg, hogy az áramszabályzó (a tápegység elején található csavarógomb) a legkisebb áramhoz tartozó állásban van. Ezután kapcsoljuk be az árammérő multimétert (ez közel természetesen közel nullát kell, hogy mutasson), majd kapcsoljuk be az elektromágnes tápegységét, a doboz hátulján található kapcsolóval! Ellenőrizzük, hogy az áramszabályzó forgatógomb eltekerésével áram kezd folyni a tekercsen, amit az árammérő mutat!
- Kapcsoljuk be a homogén mágneses tér modulációjára szolgáló generátort, a doboz hátulján található kapcsológombbal. Bekapcsolás után nyomjuk meg a „Reset” gombot, ami után stabilan kialakul a rezgés: a frekvencia 25 Hz (bal oldali kijelző), a feszültség 12-15 V (jobb oldali kijelző).

- Kapcsoljuk be az oszcilloszkópot a piros bekapcsoló gombbal! Ha eddig minden rendben van, akkor az oszcilloszkópon bemelegedés után egy vízszintes, enyhén zajos jelnek kell megjelennie.
- Helyezzük be a víz mintát (enyhén kékes árnyalatú üvegampulla) az oszcillátor tekercsbe! A tekercsnek pontosan az elektromágnes pofái között középen kell lennie, a mintának pedig a gerjesztő tekercsben, teljesen betolva.
- Keressük meg a rezonanciát! Állítsunk be az oszcillátoron a frekvenciaállító gombbal körülbelül 6 MHz frekvenciát (a gombon lévő skáláról nagyjából leolvasható az érték)! Növeljük az áramot lassan körülbelül 1,5 A értékig az elektromágnesen! Az abszorpciós csúcsnak 1,3 A környékén át kell vonulnia az oszcilloszkóp képernyőjén.
- Kapcsoljuk be az oszcillátor (rádió)frekvenciájának mérésére szolgáló jelgenerátort a műszer hátulján található gombbal!
- A mágneses tér mérésére szolgáló ballisztikus galvanométert csatlakoztassuk a hálózati feszültségre. Ennek kijelzése tükrös rendszerű, amit fénycsíkként kell látnunk a műszer számlapján. (A fénycsík közepén lévő sötét vonal jelzi a mért értéket.)

A mérés során ellenőrizni szeretnénk a rezonanciajelenséggel kapcsolatos néhány alapvető várakozást (mondhatni, egyszerűbb elméleti jóslatot). A rezonancia a gerjesztő frekvenciához, illetve a mágneses térhez kapcsolódik, ezeket a mennyiségeket tehát meg kell mérnünk.

Az oszcillátor frekvenciájának mérését úgy végezzük, hogy összehasonlítjuk a jelgenerátor által keltett ismert frekvenciával: kölcsönvesszük a rádiótechnikának azt az igen hatékony ötletét, hogy két közeli rádiófrekvenciás jel összege jól mérhető, kisfrekvenciás lebegést kelt. A jelgenerátor jele egy „antennán”, egy rövid szabad dróton keresztül csatlakozik az oszcillátor jeléhez. A jelgenerátor frekvenciáját a kijelzőn olvashatjuk le, MHz egységekben. Értékét az „up” illetve „down” gombokkal állíthatjuk durva lépésekben, illetve a „fine” gombbal finoman. Frekvenciamérés kezdésekor állítsuk a rezgésamplitúdót a legnagyobb értékre! Változtassuk durva lépésekkel a frekvenciát, és keressük meg azt a pillanatot, amikor az oszcilloszkópon (villanásszerűen) megjelenik a lebegés. A finomállítóval keressük meg a lebegést pontosabban — ekkor a nagy intenzitás miatt a jelgenerátor amplitúdóját csökkentjük. (Ez a művelet egy kis gyakorlatot igényel — probléma esetén a laborvezető segítséget nyújt.)

A mágneses teret ballisztikus galvanométerrel mérjük, egy apró tekercsben indukálódott feszültségen keresztül. Ez a következőképpen működik. A Maxwell-egyenletek alapján egy tekercsben indukálódott feszültség időintegrála megegyezik a tekercs által körülvevett mágneses fluxus megváltozásával. Ha a tekercsnek ohmikus ellenállása van, akkor az arányosság az áram időbeli integráljára is igaz. A galvanométer, nevének megfelelően, ez utóbbit, az átáramlott elektromos töltést méri, az értéket pedig a fénycsík



kilendülésével mutatja. A mérést úgy végezzük, hogy a próbatekercset behelyezzük az elektromágnes pofái közé, majd mikor a kijelző lengése lecsillapodik, kirántjuk. A maximális kilendülés értékéből meghatározható a mágneses tér nagysága, a 3,025 mT/osztás (korábban meghatározott kalibrációs konstans) figyelembevételével.

### 3.3. Mérési feladatok

**1. feladat: protonrezonancia mérése.** 12-14 pontban mérjük meg a protonminta rezonanciafrekvenciáját és az ehhez tartozó mágneses teret, nagyjából egyenletesen szétosztva az oszcillátor által átfogott teljes frekvenciatartományban (3,5 MHz – 8 MHz). Igazoljuk a lineáris összefüggést! Határozzuk meg a proton  $g$ -faktorát!

**2. feladat: Fluor-rezonancia összehasonlító mérése.** 3-4 mérési pontban határozzuk meg a fluor és proton  $g$ -faktorának arányát! A mérést tehát úgy végezzük, hogy a mágneses teret állandónak tartva mérjük a proton és a fluor rezonanciájához tartozó frekvenciákat, így az arányból kiesik a mágneses tér hibája. A fluor  $g$ -faktora 5-10%-kal kisebb a protonénál, ez segít a fluor gyengébb rezonanciájának megtalálásában.

**3. feladat: Szisztematikus hibabecslés.** Részletezzük a mérés során előforduló szisztematikus mérési hibák forrásait, azok becsült értékét és a becslés (vagy meghatározás) módszerét! Cél természetesen a főbb hibaforrások felkutatása és meghatározása, ezért ha valamelyik hibaforrás elhanyagolható, akkor ennek rövid indoklása elegendő. Fontos viszont, hogy az esetlegesen lényeges hibaforrásokat (mágneses tér- és frekvenciamérés, oszcillátor frekvenciastabilitása, leolvasási hibák, stb.) pontosan, esetleg több módszerrel becsüljük, és meghatározzuk hatásukat a mérési eredményre (például a  $g$ -faktorokra). Ez a kérdéskör azért szerepel külön feladatként, mert a mérési összeállítás átláthatósága és egyszerűsége miatt az összes hibaforrás a mérés ideje alatt megkereshető.

**4. feladat: Mágneses tér inhomogenitásának becslése.** A rezonanciajelenség akkor figyelhető meg jól, ha a mágneses tér homogén: az inhomogenitás kiszélesíti a csúcsot, csökkenti az amplitúdóját (és ezzel rontja a jel/zaj viszonyt). Mérjük meg, vagy adjunk felső becslést arra, hogy a berendezésben használt mágneses tér mennyire inhomogén, például mekkora a mágneses tér eltérése a minta szélén az átlagtól, vagy 1 cm-re a mágnes közepétől! (Az inhomogenitás itteni „definíciója” szabadon választható úgy, hogy kényelmes legyen, lényeges, hogy mérése pontosan végrehajtható és reprodukálható legyen.) Használjunk két módszert: a becslést közvetlenül, a minta középtől való elmozdulásával, illetve a csúcs látható szélességéből is meghatározhatjuk. Írjuk le pontosan, hogy az oszcilloszkópon megjelenő jelhez hogyan viszonyítunk, azaz például az oszcilloszkóp ernyőjének egy osztásához tartozó frekvenciakülönbséget hogyan határozzuk meg!

### 3.4. Jellemző problémák, hibalehetőségek

Néhány tipikus probléma gyakran előfordul a mérés során. Ezekre, illetve néhány, esetlegesen veszélyforrást rejtő hibalehetőségre térünk most ki.

- Az elektromágnes áramkörét **soha, semmilyen körülmények között** ne szakítsuk meg, illetve ügyeljünk arra, hogy ez figyelmetlenségből se történjen meg! Az elektromágnesnek nagyon nagy induktivitása van, az áramkör megszakításával keletkező feszültséglökés áramütést vagy a tápegység tönkremenetelét eredményezheti!
- A minta néha kicsúszik az oszcillátor gerjesztőtekercséből. Ezt ellenőrizzük időnként.
- Frekvenciaméréskor a jelgenerátor amplitúdóját csavarjuk fel! Bosszantó lehet, ha a lebegést azért nem találjuk, mert nem ad jelet a jelgenerátor. A rezonanciajel mérésekor az amplitúdót csökkentjük le, hogy ne okozzon felesleges zajt!
- Kisebb frekvenciákon, 4,5 MHz alatt a jel gyengülni kezd, aminek oka a gerjesztőtekercs hatásfokának csökkenése. Ebben a tartományban csak a proton rezonanciája látszik. A csúcs megtalálható az egész tartományban, a legkisebb (3,5 MHz) frekvenciáig, itt kellő figyelemmel végezzük a mérést. A frekvenciamérés is kényelmetlenné válik ebben a tartományban (az „antenna” egyre gyengébb hatásfoka a bűnös). Tény, hogy a mérés elvégezhető itt is, ne adjuk fel a keresgélést. Segít, ha kézzel valaki megfogja a jelgenerátor kimenetét, az „antenna” szerepét eljátszva.
- A gerjesztőtekercs mindig pontosan középen legyen (legfőképpen a homogén mágneses tér irányában nézve) a mágnespofák között. Ez fontos a mérés reprodukálhatóságához; a mágnesvas fém anyagának és a tekercsnek a kapacitív csatolása frekvenciaeltolódást, ezzel a csúcs elmozdulását okozhatja (ez utóbbi probléma felmerül a homogenitásmérésnél is).
- Ha a hanggenerátor frekvenciáját, vagy a fázistolást nem pontosan állítjuk be, akkor az oszcilloszkóp vízszintes tengelyére adott hangfrekvenciás feszültség nem lesz egy fázisban a moduláló mágneses térrel (ld. 3.1. szakasz). Ez könnyen végiggondolható módon azt eredményezi, hogy egy valódi csúcs helyett két csúcsot fogunk látni. Ügyeljünk erre!

### 3.5. A felkészültséget ellenőrző kérdések

1. Mi a mag-mágneses rezonancia jelensége?
2. Mi a mag-mágneses rezonanciafrekvencia mérési módszere?
3. Mi a mágneses tér meghatározásának mérési elve és módszere?

4. Mi a proton ill. mag rezonanciafrekvenciája és a mágneses tér közötti összefüggés?
5. Mik a homogén mágneses tér létrehozásának feltételei, módszerei, technikai nehézségei és veszélyei?
6. Milyen feltételek kelljenek ahhoz, hogy a rezonancia-jelenség létrejöjjön, és azt megfigyelhessük?
7. Mit jelent a  $g$ -faktor? Hogyan történik a  $g$ -faktor meghatározása?
8. Mi az atommag és az elektron rezonanciafrekvenciája közötti nagyságrendi összefüggés állandó mágneses térben?
9. A frekvencia és a mágneses tér milyen tartományába esik a rezonanciajelenség létrejötte?
10. Hogyan becsülhetjük meg a különböző hibák nagyságát (mérési, leolvasási, statisztikai, mérőművi...)? Melyek a fontos hibaforrások a  $g$ -faktor mérésénél?
11. Melyek a  $g$ -faktorok arányának mérésénél lényeges hibaforrások?
12. Melyek azok a kábelcsatlakozások a mérésben, amelyeket semmiképpen sem szabad megbontani?

## Hivatkozások

- [1] J. Keeler (2005). Understanding NMR Spectroscopy. John Wiley & Sons. ISBN 0-470-01786-4.