

Jądra atomowe jako obiekty kwantowe

- Wprowadzenie
- Potencjał jądrowy
- Spin i moment magnetyczny
- Stany energetyczne nukleonów w jądrze
- Prawo rozpadu

Jądra atomowe jako obiekty kwantowe

- Magnetyczny Rezonans Jądrowy
jako przejaw kwantowej natury
jądra atomowego

Warunki fizyczne w jądrach atomowych

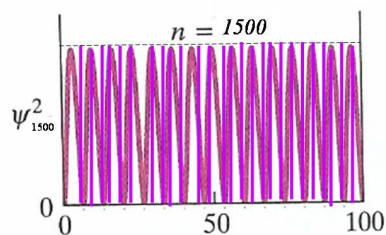
- gęstość $\sim 10^{14} \text{ g/cm}^3$
- temperatura $0 \dots 10^{12} \text{ K}$
- obroty $\sim 10^{22} \text{ 1/s}$
- natężenie pola elektrycznego 10^{18} V/m
-

Wprowadzenie – Czy jądro jest obiektem kwantowym?

Hipoteza dualizmu falowo-korpuskularnego:

$$P(V) = |\Psi|^2$$

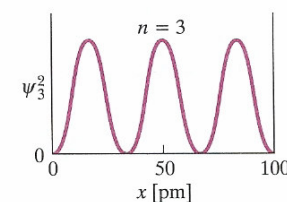
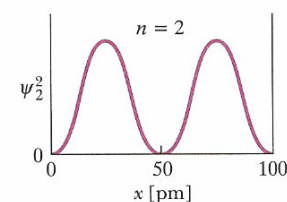
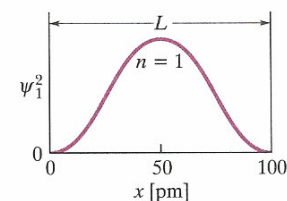
makrocząstka
opis klasyczny



$$\lambda \ll L$$

$$\lambda = \hbar / p = \hbar / \sqrt{2ME_k}$$

mikrocząstka
opis kwantowy



$$\lambda \cong L$$

Długość fali nukleonu $\hat{\lambda} = \hbar / p = \hbar / \sqrt{2ME_k}$

$$E_k \approx 10 \text{ MeV} \quad M \approx 940 \text{ MeV}/c^2$$

$$\hat{\lambda} = \hbar c / \sqrt{2Mc^2 E_k} = 197 \text{ MeV fm} / \sqrt{2 \cdot 940 \cdot 10} \text{ MeV}$$

$$\hat{\lambda} \approx 1,4 \text{ fm}$$

$$\text{Promień jądra: } R = r_0 A^{1/3} = 1,25 A^{1/3}$$

$$A = 100 \quad R = 5,8 \text{ fm}$$

$$\hat{\lambda} \cong R$$

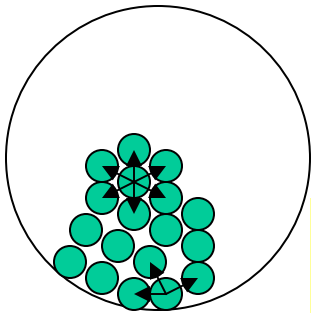
Nukleony w jądrach – opis w ramach nierelatywistycznej mechaniki kwantowej

Potencjał jądrowy

Związek siły z energią potencjalną

$$F_x = -\frac{\partial E_p}{\partial x}; F_y = -\frac{\partial E_p}{\partial y}; F_z = -\frac{\partial E_p}{\partial z};$$

Zależność potencjału od odległości

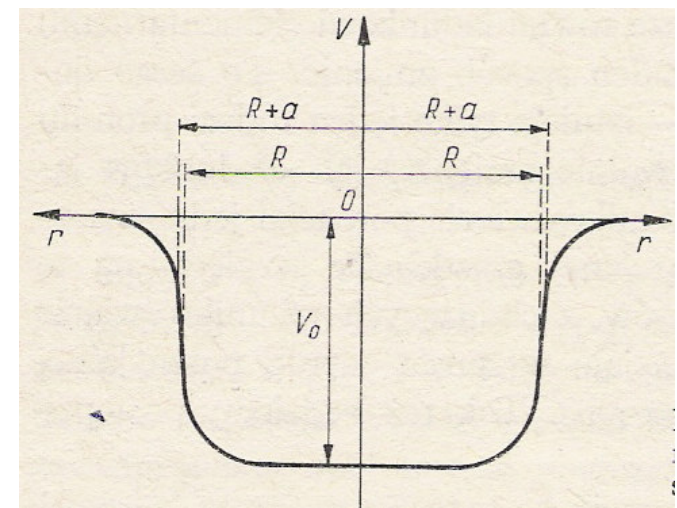


$$V(r) = -\frac{V_0}{1 + e^{\frac{r-R}{a}}}$$

dla dużych r $V(r) \rightarrow 0$

dla $r = 0$ $V(r) \approx -V_0$

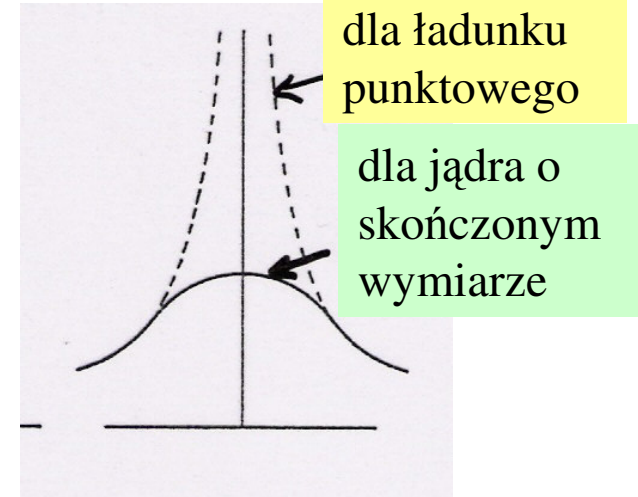
Potencjał Woods-Saxona



Potencjał kulombowski

Dla ładunku punktowego

$$V_c(r) = \frac{+(Z-1)e^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{r}$$

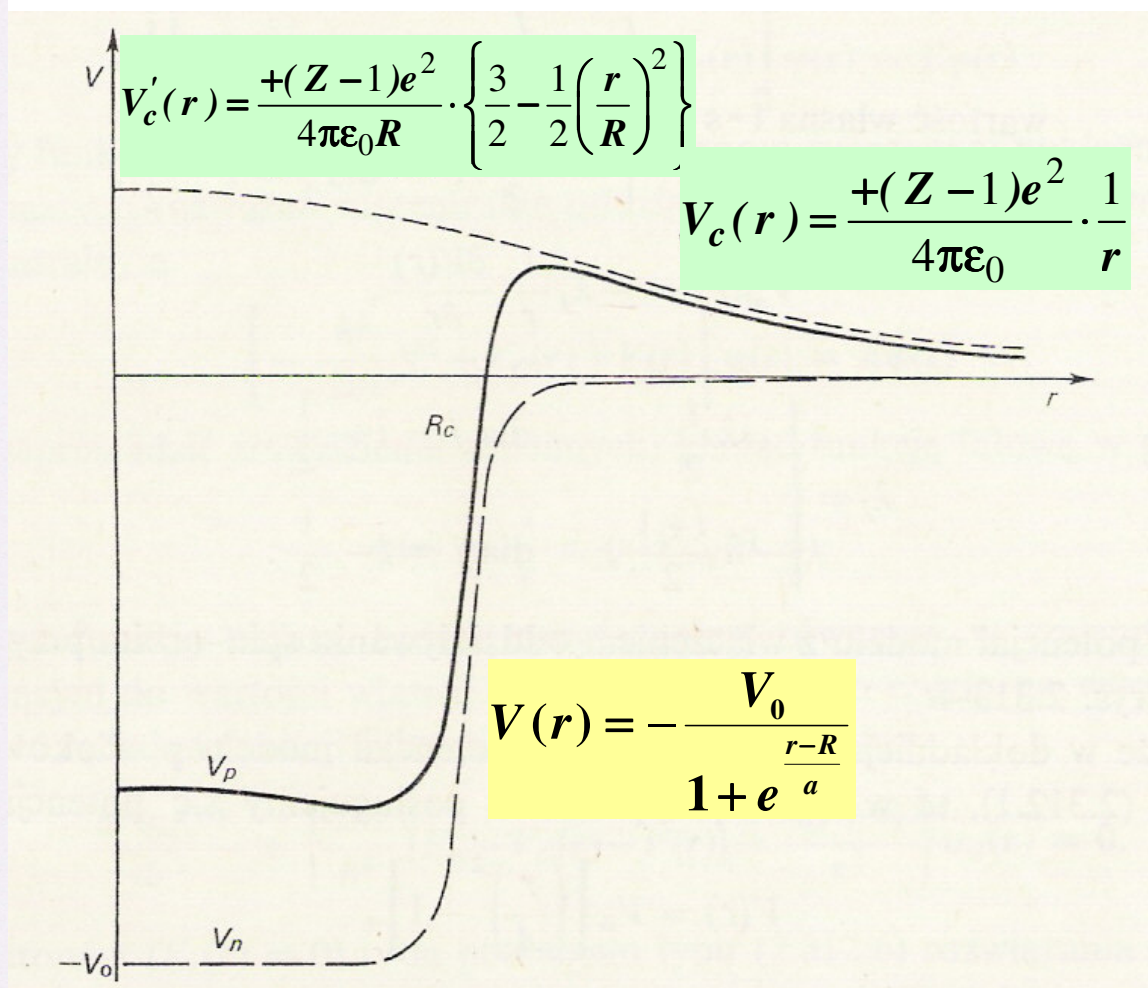
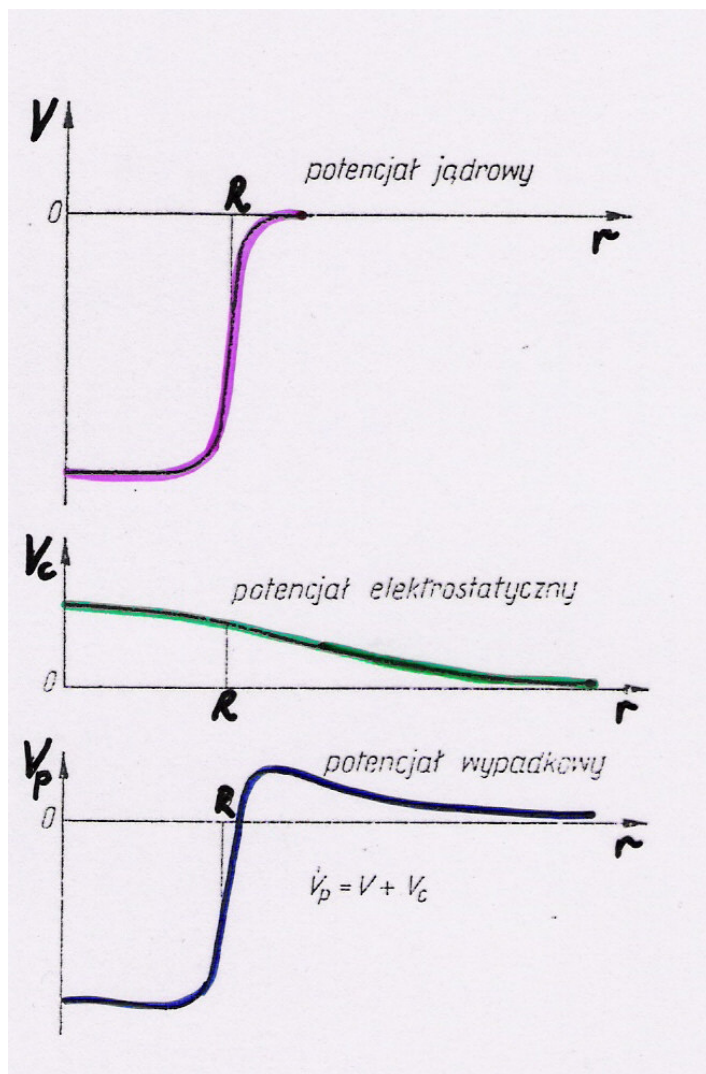


Dla jądra o skończonym wymiarze

$$r < R \quad V'_c(r) = \frac{+(Z-1)e^2}{4\pi\epsilon_0 R} \cdot \left\{ \frac{3}{2} - \frac{1}{2} \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right\}$$

$$r \geq R \quad V_c(r) = \frac{+(Z-1)e^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{r}$$

Potencjał dla neutronów i protonów



Spin nukleonu $\vec{s}$

wektor $\vec{s} = \vec{s}_0 \hbar$

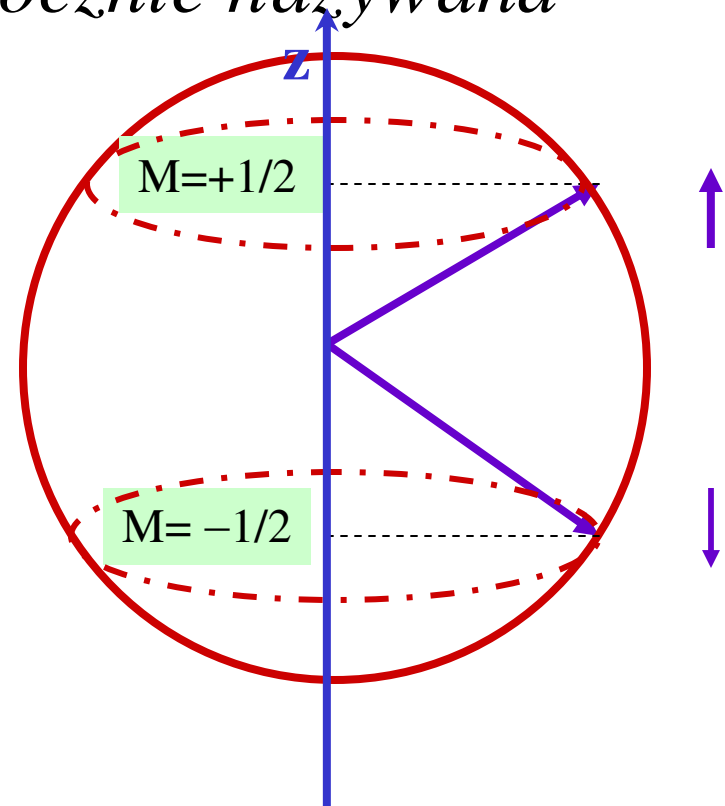
$$|\vec{s}_0|^2 = s(s+1)$$

$s = 1/2$ - liczba kwantowa potocznie nazywana spinem nukleonu

Kwantyzacja przestrzenna

$$s_z = M \hbar$$

$$M = +1/2, -1/2$$



Orbitalny moment pędu nukleonu $\vec{L}$

Klasycznie $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$

Kwantowo $|\vec{L}|^2 = l(l+1)\hbar^2$

$l = 0, 1, 2, \dots$

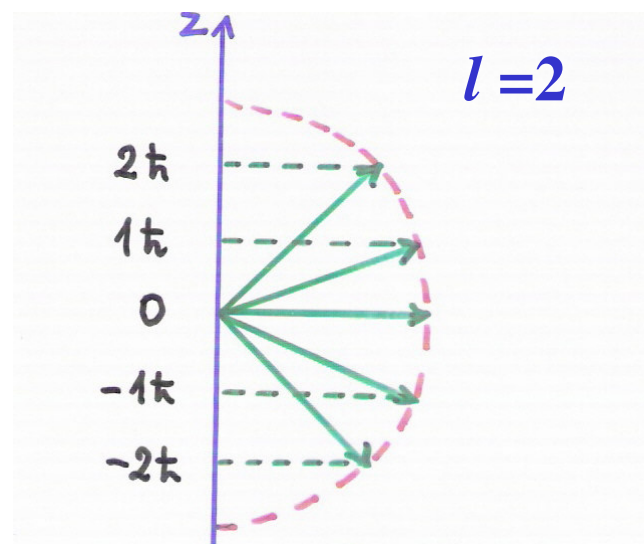
l - liczba kwant. orbitalnego momentu pędu
nukleonu

Kwantyzacja przestrzenna

$$L_z = m \hbar$$

$$m = l, l-1, \dots, 0, \dots, -l$$

$2l+1$ wartosci



Spin jądra $\vec{I}$

= całkowity moment pędu jądra w układzie Ś.M.

= wektorowa suma przyczynków od orbitalnych i spinowych momentów pędu nukleonów

$$\vec{I} = \vec{I}_0 \hbar$$

$$|\vec{I}_0|^2 = I(I+1)$$

I - liczba kwantowa potocznie nazywana spinem jądra

A - parzyste I - całkowite (0, 1, 2,...)

A - nieparzyste I - połówkowe (1/2, 3/2, ...)

Spin jądra $\vec{I}$

Kwantyzacja przestrzenna

$$I_z = M \hbar$$

$$M = I, I-1, \dots, 0, \dots, -I$$

$2I+1$ wartosci

Parzystość funkcji falowej

Stany jądrowe są opisane przez funkcje falowe o określonej parzystości

$P = +1$ parzystość dodatnia

$$\Psi(\vec{-r}) = \Psi(\vec{r})$$

$P = -1$ parzystość ujemna

$$\Psi(\vec{-r}) = -\Psi(\vec{r})$$

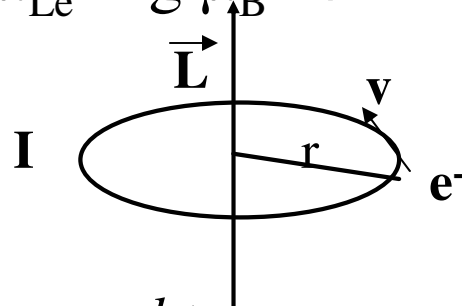
Moment magnetyczny orbitalny

Klasycznie: $|\vec{\mu}_L| = I S = ev/(2\pi r) \pi r^2 = evr/2$

$$|\vec{\mu}_L| = e |\vec{L}|/(2m)$$

Kwantowo:

$$\mu_{Le} = g \mu_B L / \hbar$$



$$\mu_{Lp} = g \mu_N L / \hbar$$

g_L - czynnik Landego

μ_B - magneton Bohra

μ_N - magneton jądrowy

w praktyce moment magnetyczny (rzut na oś kwantyzacji dla $m=+l$)

$$\mu_{Le} = g_L \mu_B l$$

$$\mu_{Lp} = g_L \mu_N l$$

Doświadczenie:

$$g_L = 1$$

Moment magnetyczny e^-

$$\vec{\mu}_{se} = g \mu_B \vec{s}_0 \quad \vec{s}_0 = \vec{s} / \hbar$$

g - czynnik Landego

μ_B - magneton Bohra

$$\mu_B = e \hbar / (2m_e) = 5,79 \cdot 10^{-11} \text{ MeV/T}$$

*w praktyce moment magnetyczny $\mu_{se} = g \mu_B s$
(rzut na oś kwantyzacji dla $M=+1/2$)*

Doświadczenie:	$g = -2,00232$ $\mu_{se} / \mu_B = -1,00116$
Teoria klasyczna:	$g = -1$
Teoria Diraca:	$g = -2$
Elektrodynamika kwantowa:	$g = -2,00232$

Moment magnetyczny p

$$\vec{\mu}_{sp} = g \mu_N \vec{s}_0 \quad \vec{s}_0 = \vec{s} / \hbar$$

g - czynnik Landego

μ_N - magneton jądrowy

$$\mu_N = e \hbar / (2m_p) = 3,152 \cdot 10^{-8} \text{ eV/T}$$

*w praktyce moment magnetyczny $\mu_{sp} = g \mu_N s$
(rzut na oś kwantyzacji dla $M=+1/2$)*

Doświadczenie:

$$g = 5,586$$

$$\mu_{sp} / \mu_N = 2,793$$

proton = uud

$$q = +2/3 + 2/3 - 1/3 = 1$$

Moment magnetyczny n

$$\vec{\mu}_{\text{sn}} = g \mu_{\text{N}} \vec{s}_0 \quad \vec{s}_0 = \vec{s} / \hbar$$

g - czynnik Landego

μ_{N} - magneton jądrowy

$$\mu_{\text{N}} = e \hbar / (2m_{\text{p}}) = 3,152 \cdot 10^{-8} \text{ eV/T}$$

*w praktyce moment magnetyczny $\mu_{\text{sn}} = g \mu_{\text{N}} s$
(rzut na oś kwantyzacji dla $M=+1/2$)*

Doświadczenie:

$$g = -3,826$$

$$\mu_{\text{sn}} / \mu_{\text{N}} = -1,913$$

neutron = udd

$$q = +2/3 - 1/3 - 1/3 = 0$$

Moment magnetyczny jądra

określony przez $\vec{\mu}_s$ i $\vec{\mu}_L$ nukleonów

$$\vec{\mu}_I = g_I \mu_N \vec{I}_0 \quad \vec{I}_0 = \vec{I} / \hbar$$

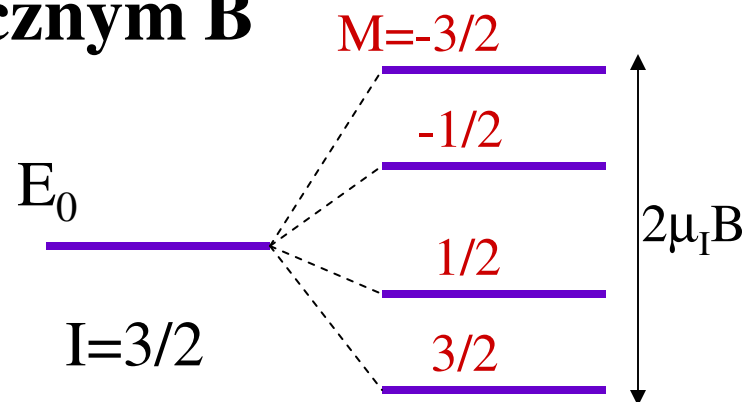
g_I - jądrowy czynnik g

μ_N - magneton jądrowy

w praktyce moment magnetyczny $\mu_I = g_I \mu_N I$

Jądro w polu magnetycznym B

$$\begin{aligned} E &= E_0 - \vec{\mu}_I \cdot \vec{B} \\ &= E_0 - g_I \mu_N \vec{I}_0 \cdot \vec{B} \\ &= E_0 - g_I \mu_N M B \end{aligned}$$



$$V(r) = \left\{ \begin{aligned} &V_0(r) + \\ &+ V_{ss}(r) \frac{\vec{s}_1 \vec{s}_2}{\hbar^2} + \\ &+ V_T(r) \frac{3 \frac{(\vec{s}_1 \vec{r})(\vec{s}_2 \vec{r})}{r^2} - \vec{s}_1 \vec{s}_2}{\hbar^2} + \\ &+ V_{LS}(r) \frac{(\vec{s}_1 + \vec{s}_2) \vec{L}}{\hbar^2} + \dots \end{aligned} \right.$$

Potencjał
oddziaływania
nukleon-nukleon

- krótkozasięgowy
- silnie przyciągający na $r \sim 2\text{fm}$, ale odpychający dla $r \sim 0.2\text{fm}$
- nie zależy od ładunku
- zależy od względnego ustawienia spinów
- ma charakter niecentralny

Równanie Schrödingera

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\Psi(x, y, z) + V(x, y, z)\Psi(x, y, z) = E\Psi(x, y, z)$$

$$V(x, y, z) = V\left(\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}\right) \quad \text{potencjał o symetrii sferycznej}$$

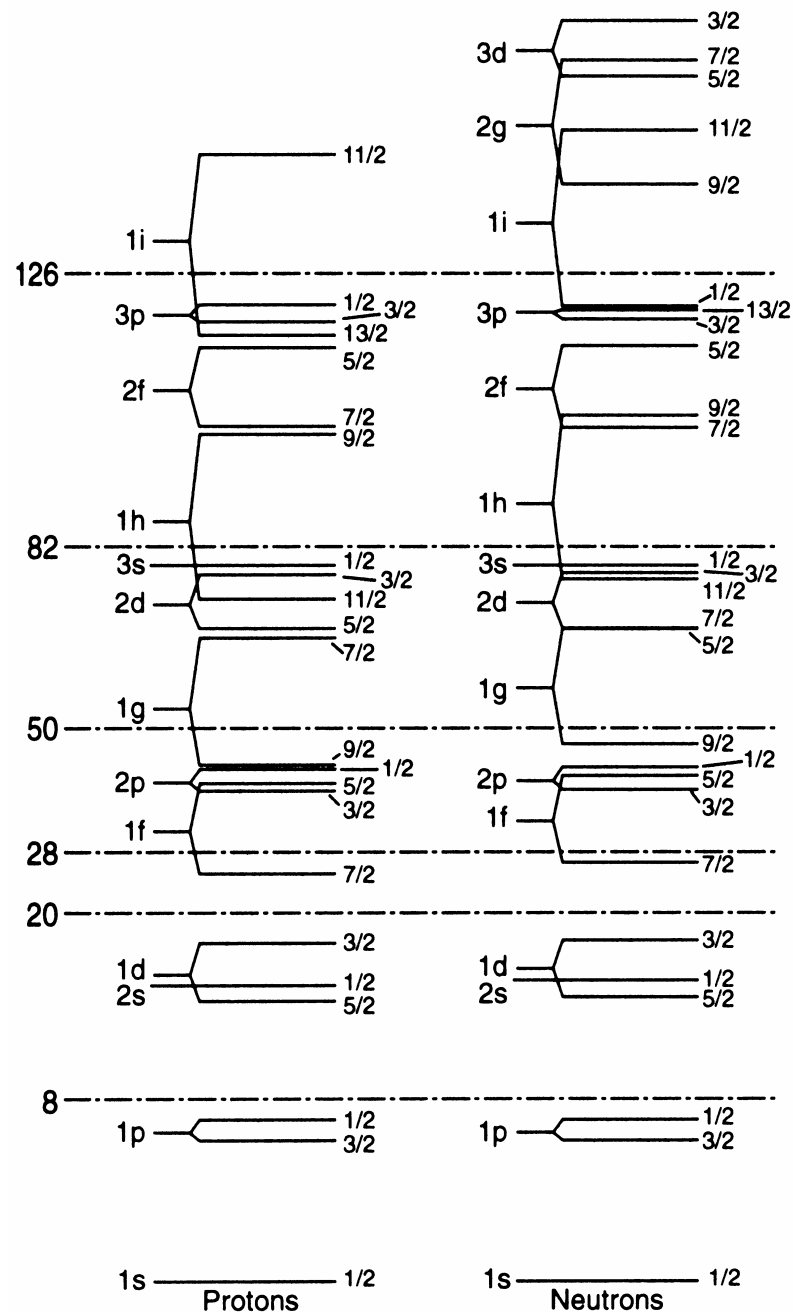
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\vartheta^2}\right]\Psi(r, \theta, \vartheta) + V(r)\Psi(r, \theta, \vartheta) = E\Psi(r, \theta, \vartheta)$$

$$\Psi(r, \theta, \vartheta) = R(r)Y(\theta, \vartheta)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)\right] + \left[V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right]R = ER$$

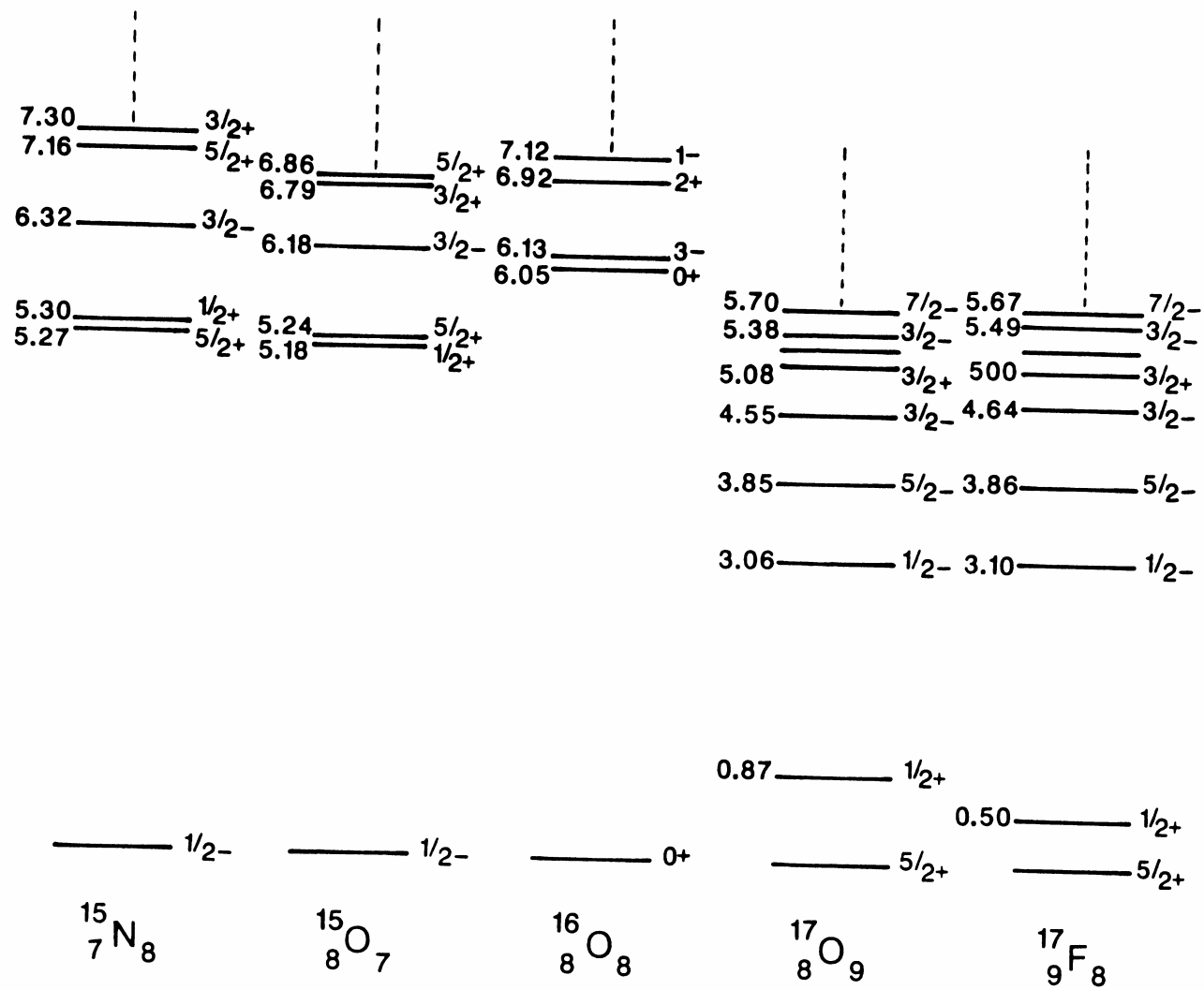
$$R(r) = \frac{u(r)}{r}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u(r)}{dr^2} + \left(V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right)u(r) = Eu(r)$$



Energie stanów własnych nukleonów

Schemat poziomów jąder



Szerokość poziomów jądrowych

Zasada nieoznaczoności Heisenberga

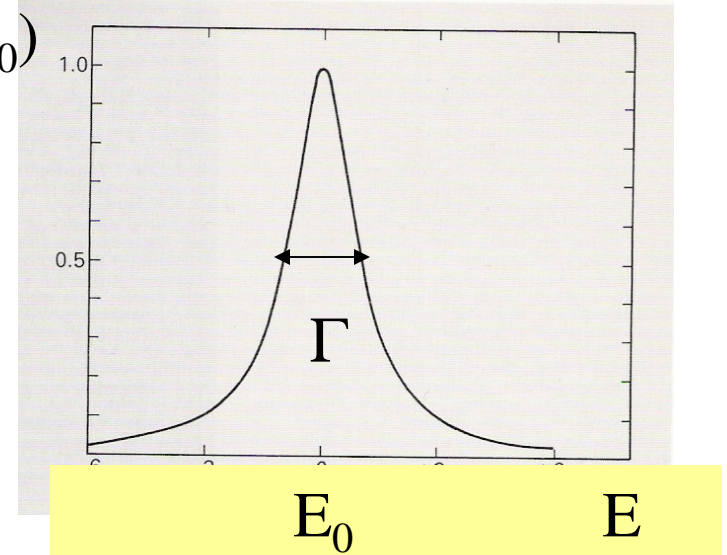
$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar$$

$$\Gamma \cdot \tau = \hbar$$

$$P(E) = \frac{\Gamma}{2\pi} \frac{1}{(E - E_0)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}}$$

$$\Gamma = \frac{\hbar}{\tau} = \frac{6.58 \cdot 10^{-22} \text{ MeV} \cdot \text{s}}{\tau}$$

$P(E)/P(E_0)$



Prawo rozpadu

N_0 i N liczba jąder w czasie 0 i t

Założenie:

1. liczba jąder zmniejsza się w skutek rozpadu

2. w $(t, t+dt)$ ubytek $-dN = \lambda N dt$

λ - stała rozpadu [s^{-1}]

Prawo zaniku:

$$N = N_0 e^{-\lambda t}$$

Prawo rozpadu

Okres połowicznego zaniku: $T_{1/2}$

$$N \rightarrow N/2 \quad \text{dla} \quad t \rightarrow t + T_{1/2}$$

$$\begin{aligned} N(t + T_{1/2}) &= N_0 e^{-\lambda(t + T_{1/2})} = N(t)/2 \\ &= N_0/2 e^{-\lambda t} \end{aligned}$$

$$e^{\lambda T_{1/2}} = 2$$

$$T_{1/2} = \ln 2 / \lambda \approx 0.693 / \lambda$$

Czas życia: $\tau = T_{1/2} / \ln 2 \approx 1.44 T_{1/2}$

Magnetyczny Rezonans Jądrowy jako przejaw kwantowej natury jądra atomowego

Własności magnetyczne mają jądra o nieparzystej liczbie nukleonów, np. ^1H , ^{13}C , ^{15}N , ^{19}F , ^{31}P oraz jądra o nieparzystej liczbie neutronów i nieparzystej liczbie protonów, np. ^2H , ^{14}N . Nie posiadają takich własności jądra o spinie $I = 0$, np. ^4He , ^{12}C , ^{16}O , ^{40}Ca , ^{56}Fe , ...

Dla niektórych atomów, m. in. Hg, Cu, C i S oraz cząsteczek, np. H_2O , CaO , LiCl , CO_2 , NH_3 pole wywołane przez powłoki elektronowe znika w położeniu jądra atomowego, gdyż momenty magnetyczne poszczególnych powłok elektronowych sumują się do zera ($\mu_J = 0$).

Moment magnetyczny jądra

określony przez $\vec{\mu}_s$ i $\vec{\mu}_L$ nukleonów

$$\vec{\mu}_I = g_I \mu_N \vec{I}_0 \quad \vec{I}_0 = \vec{I} / \hbar$$

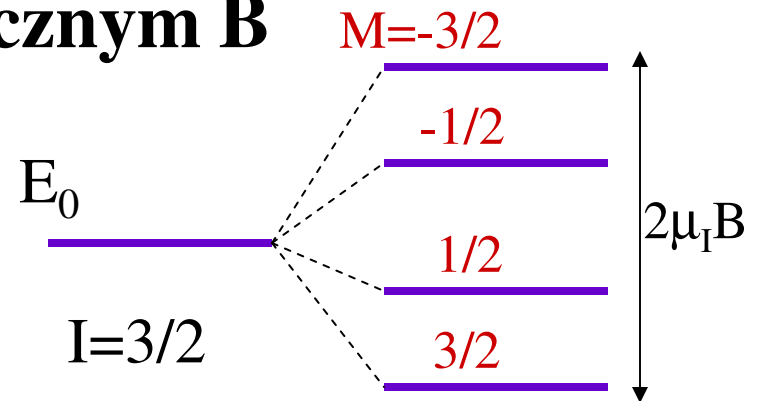
g_I - jądrowy czynnik g

μ_N - magneton jądrowy

w praktyce moment magnetyczny $\mu_I = g_I \mu_N I$

Jądro w polu magnetycznym $\mathbf{B}$

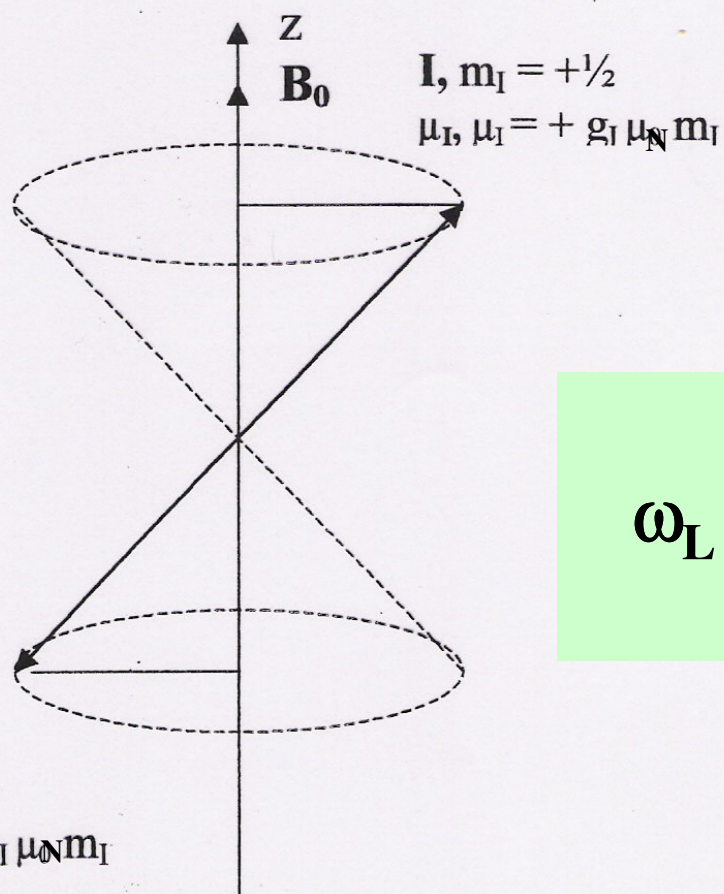
$$\begin{aligned} E &= E_0 - \vec{\mu}_I \cdot \vec{B} \\ &= E_0 - g_I \mu_N \vec{I}_0 \cdot \vec{B} \\ &= E_0 - g_I \mu_N M B \end{aligned}$$



Jądro ^1H (proton) w zewnętrznym polu B_0

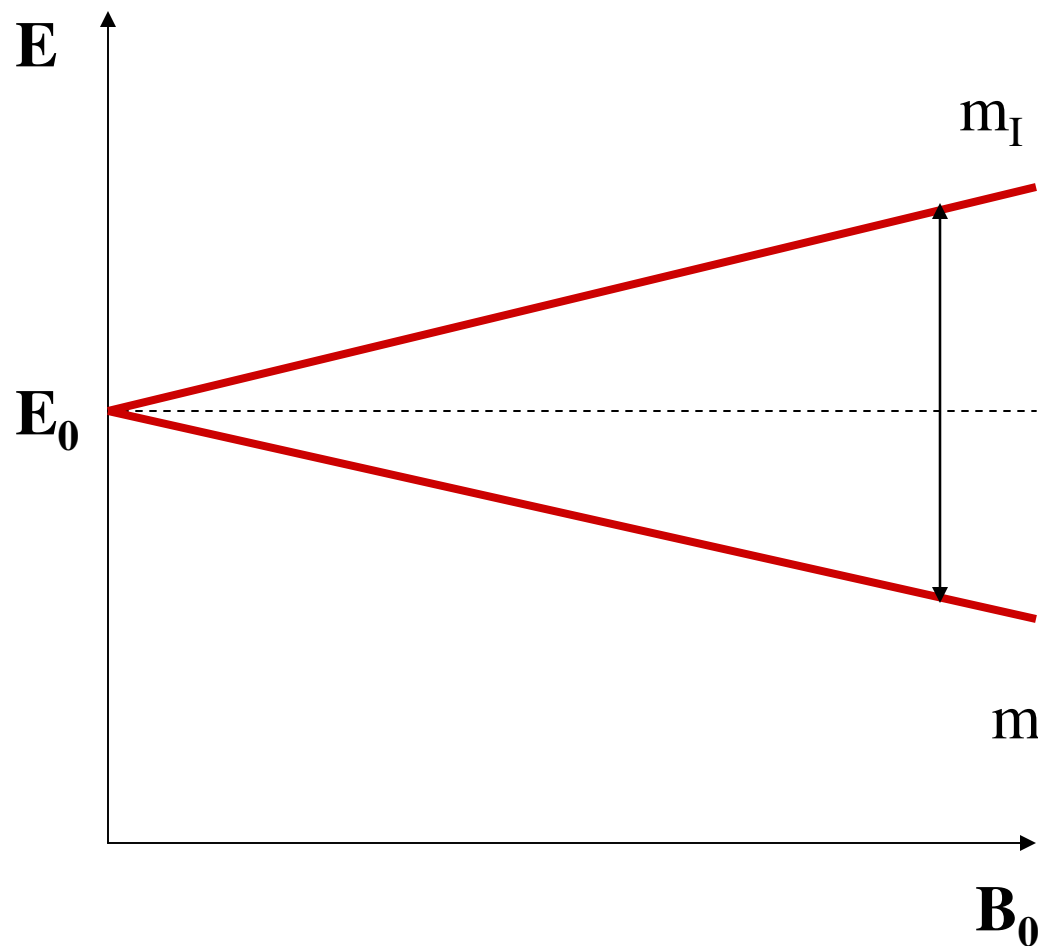
$$\mu = \mu_I$$

$$E = -\mu_I \cdot B_0$$



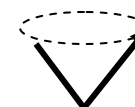
$$\omega_L = g_I \mu_N m_I B_0 / \hbar$$

Rozszczepienie poziomów jądrowych ^1H w zewnętrznym polu B_0



$$\Delta m_I = 1$$

$$\Delta E = \hbar \omega_L = g_I \mu_N \Delta m_I B_0$$



ΔE rośnie z B_0

**Zmiana orientacji
spinu i dipolowego momentu magnetycznego**

$$\mathbf{B}_1(t) = \mathbf{B}_1 \cos(\omega_L t)$$

$$\mathbf{B}_1 \perp \mathbf{B}_0$$

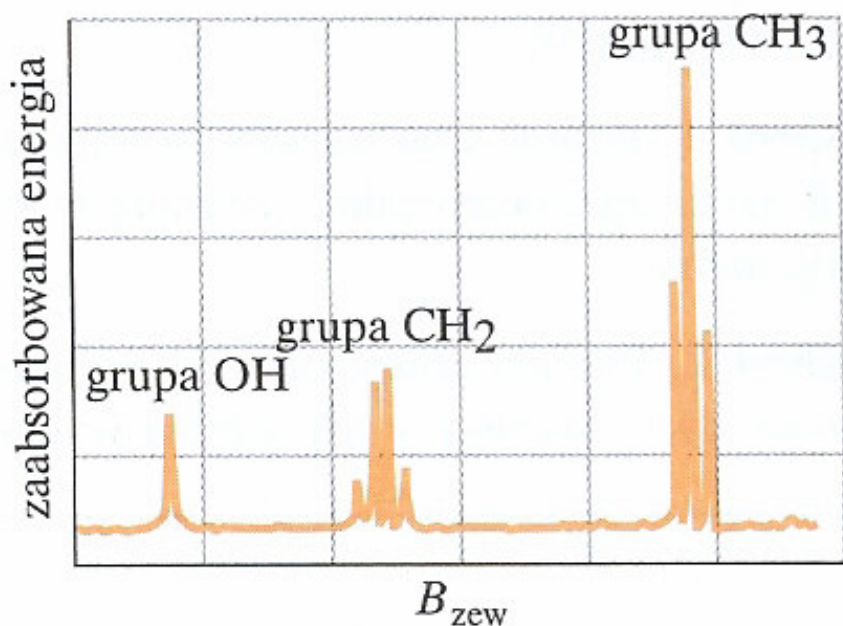
$$\text{dla } ^1\text{H} \quad \Delta m_I = \pm 1$$

Wyznaczanie μ_I przez pomiar ω_L

$$\omega_L = g_I \mu_N \Delta m_I B_0 / \hbar \quad \Delta m_I = \pm 1$$

$$\omega_L = \mu_I \cdot B_0 / (I)$$

Wykorzystanie NMR do identyfikacji nieznanych związków



Widmo NMR dla etanolu

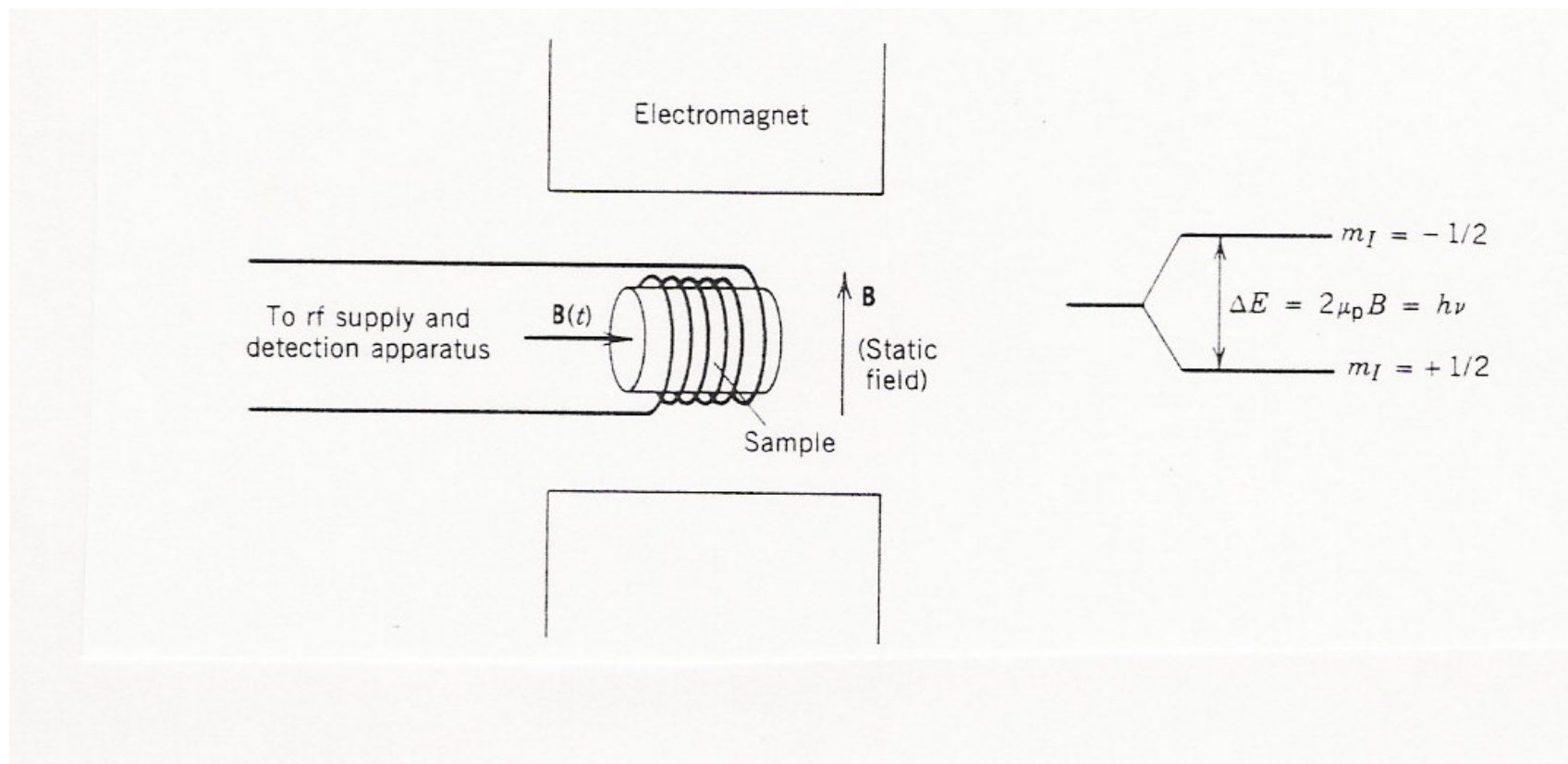
$$\hbar \omega_L = g_I \mu_N \Delta m_I (\mathbf{B}_{zew} + \mathbf{B}_{lok})$$

$\mathbf{B}_{lok}$ – pochodzące od momentów magnetycznych atomów i jąder w otoczeniu protonu

ω_L – jest charakterystyczna dla danego rodzaju jąder, ale jest inna dla danego rodzaju jąder występujących w różnych grupach

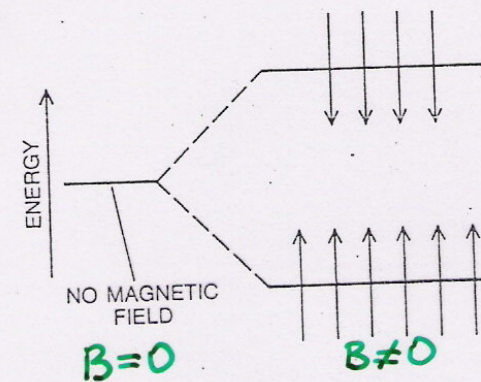
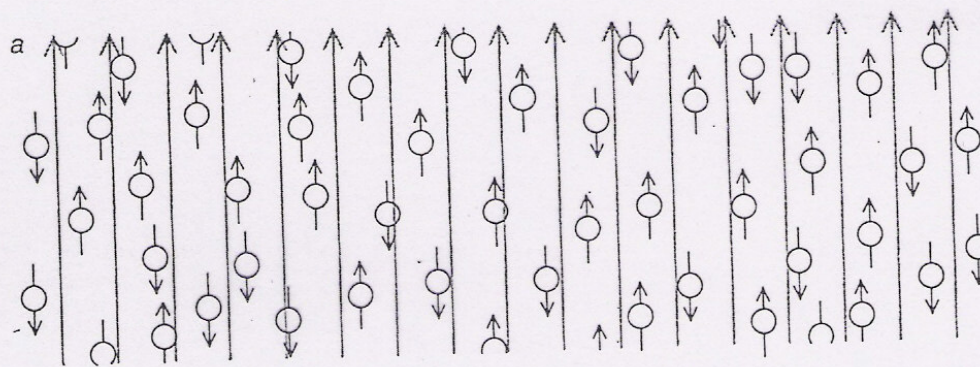
Zasada badania

Magnetycznego Rezonansu Jądrowego

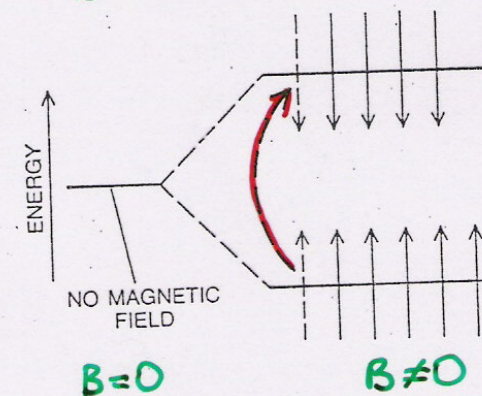
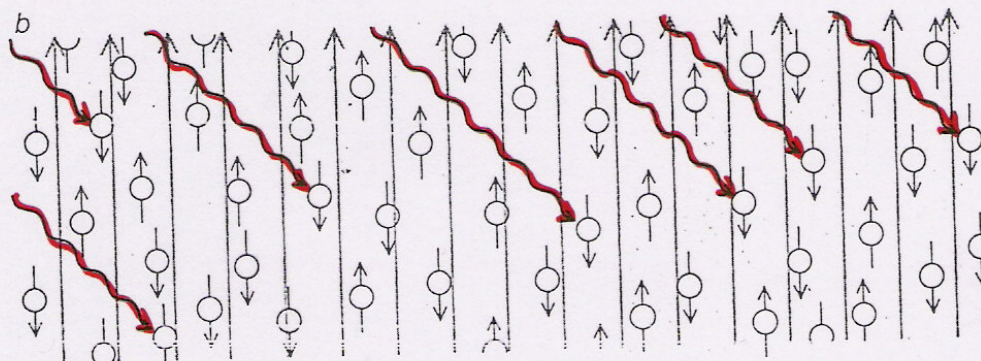


Przejścia rezonansowe dla jąder ^1H

$B_1 = 0$



$B_1 \perp B_0$



Stopień zróżnicowania obsadzeń podpoziomów, pomiędzy którymi zachodzą przejścia rezonansowe.

W stanie równowagi termodynamicznej:

$$N(-1/2) / N(+1/2) = \exp(-\Delta E/kT) = \exp(-g_I \mu_N B_0 / kT)$$

k- stała Boltzmanna

Dla jąder ^1H o $I = 1/2$

w polu $B_0 = 1 \text{ T}$ i temperaturze $T = 300 \text{ K}$

$$N(-1/2) = N(+1/2) \cdot 0,9999932.$$

W próbce makroskopowej:

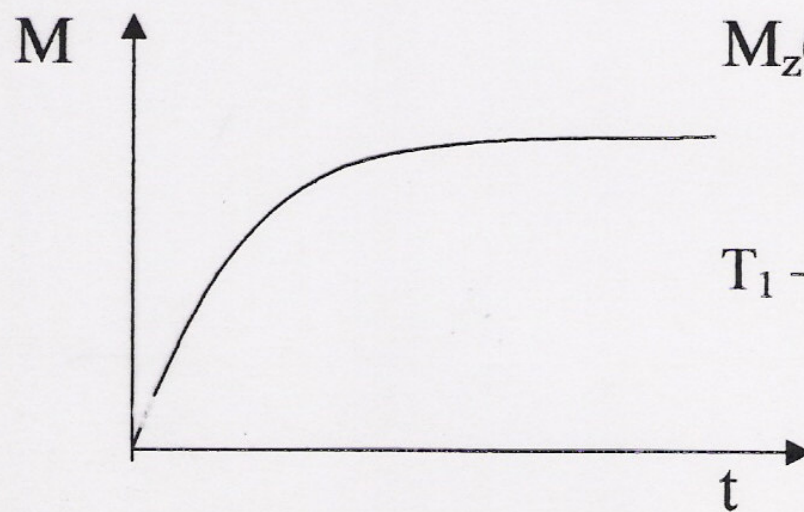
1 cm^3 wody zawiera około $7 \cdot 10^{22}$ jąder ^1H , a więc w stanie o $m_I = +1/2$ jest o około $N_0 = 5 \cdot 10^{17}$ jąder więcej niż w stanie o $m_I = -1/2$.

$$N(-1/2) / N(+1/2) \text{ zależy od } B_0 \text{ i } T$$

Wektor magnetyzacji M

1. dla $B = 0$ $M_0 = 0$ (chaotyczny ruch cieplny)
2. dla $B = B_0 \neq 0$ Proces relaksacji podłużnej
magnetyzacja rośnie wykładniczo do wypadkowej

$$M_0 = \sum (\mu_I)_z \neq 0 \quad M_{0x} = M_{0y} = 0$$

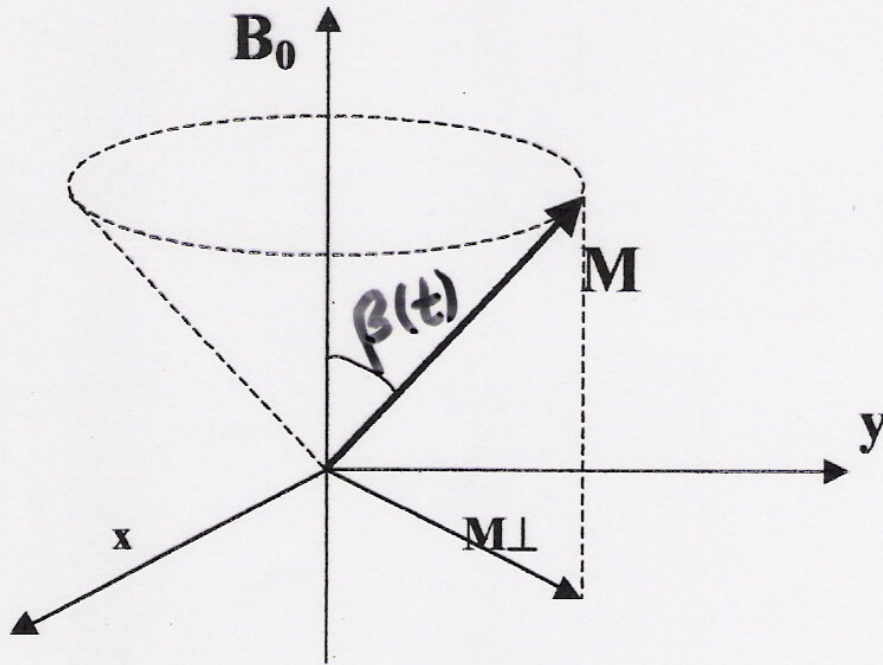


$$M_z(t) = M_0(1 - e^{-t/T_1})$$

T_1 – czas relaksacji podłużnej

3. dla $\mathbf{B}_1 \perp \mathbf{B}_0$ i $\mathbf{B}_1(t) = B_1 \cos(\omega_L t)$

odchylenie magnetyzacji od kierunku $\mathbf{B}_0$ o kąt $\beta(t)$



$$M_{\perp}(t) = M_0 e^{-t/T_2}$$

Relaksacja poprzeczna

Obrazowanie NMR

Jeśli próbka jest umieszczona w cewce indukcyjnej, to zmienne w czasie pole magnetyczne pochodzące od magnetyzacji spowoduje indukcję napięcia w cewce. Amplituda sygnału napięcia jest proporcjonalna do częstości rezonansowej ω_L i do wielkości magnetyzacji. Sygnał pochodzi tylko od magnetyzacji w stanie precesji (od składowych poprzecznych), a więc trwa w czasie do chwili, gdy magnetyzacja nie powróci do stanu równowagi poprzez proces relaksacji.

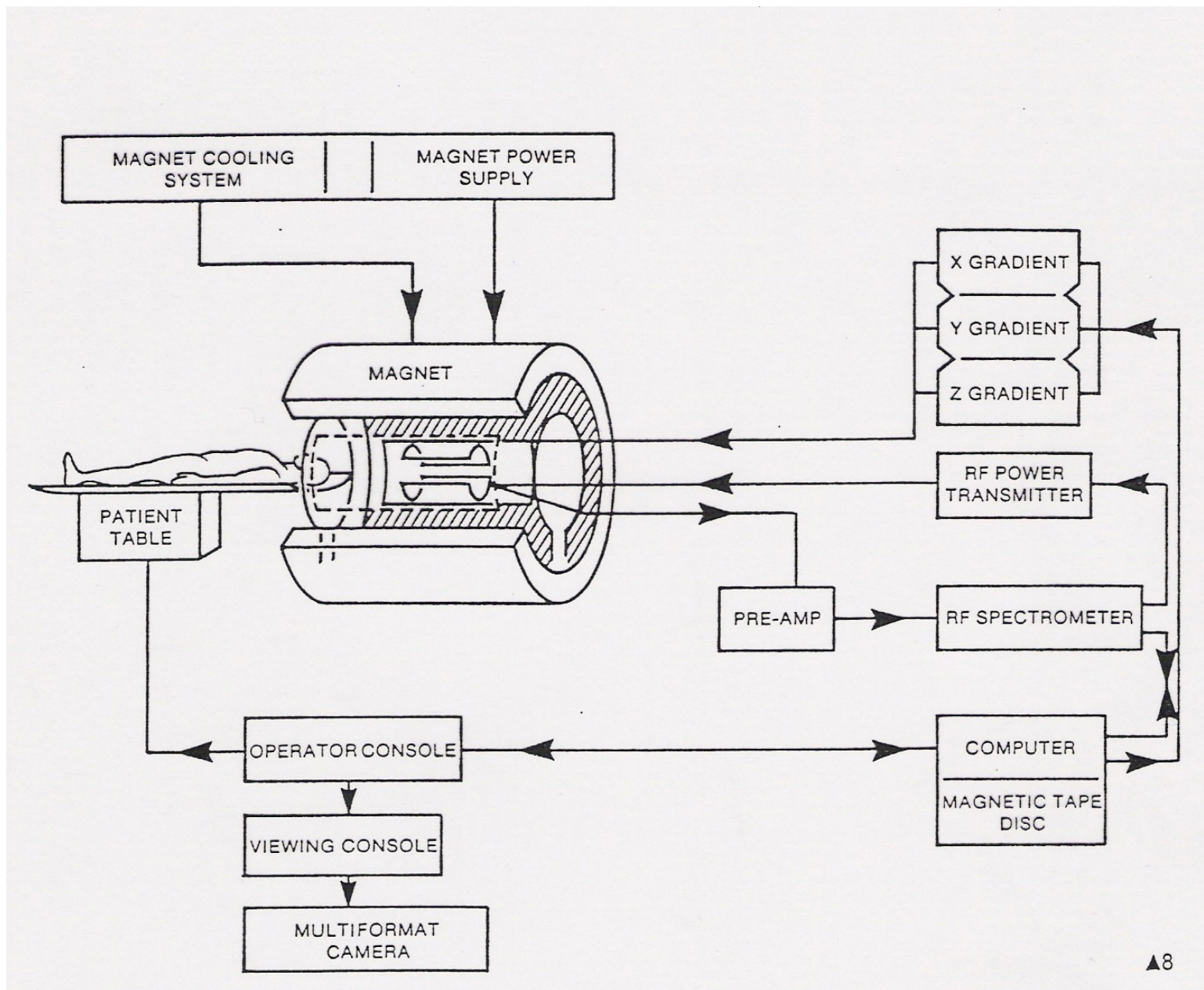
Obrazowanie NMR

Częstość rezonansowa jest charakterystyczna dla danego rodzaju jąder i ona określa położenie linii w widmie NMR dla danego jądra. Szerokość linii w widmie NMR określona jest przez czas relaksacji poprzecznej T_2 . Intensywność linii zależy od czasu relaksacji podłużnej T_1 .

Stopień szarości obrazu zależy od amplitudy sygnału, a więc od gęstości protonów w próbce, czasów T_1 i T_2 . Czasy T_1 i T_2 zależą od otoczenia w jakim się znajduje jądro wodoru, a więc różnicują tkanki i stany chorobowe.

Częstość rezonansowa dla danego rodzaju jąder, ale występujących w różnych grupach jest inna. Przesunięcie chemiczne częstości wynika z ekranowania zewnętrznego pola magnetycznego przez elektrony.

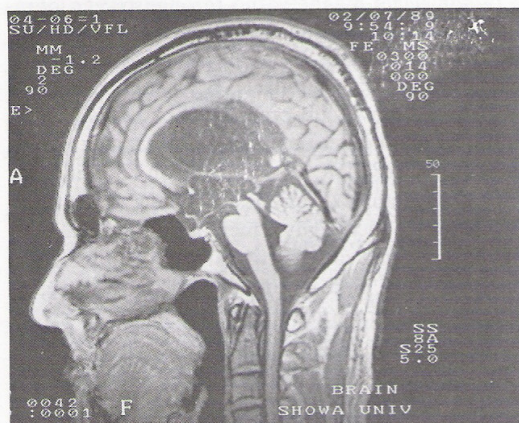
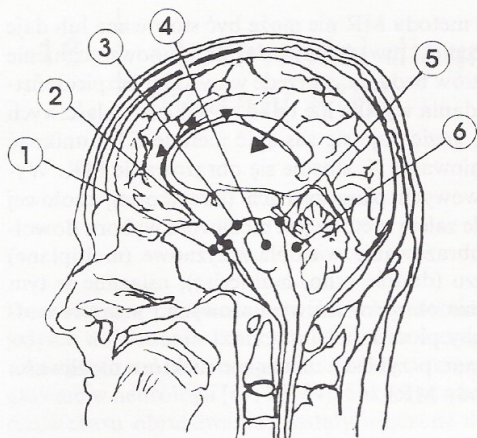
Budowa tomografu NMR



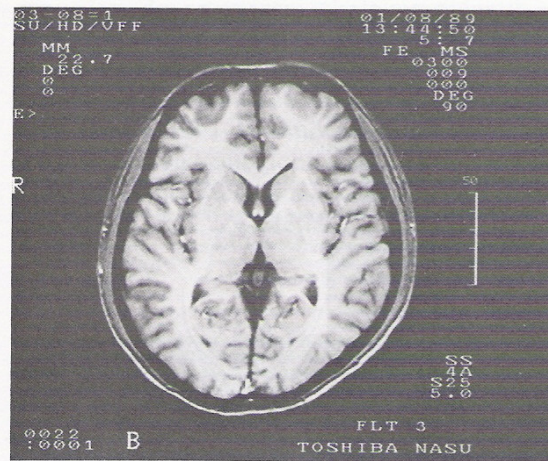
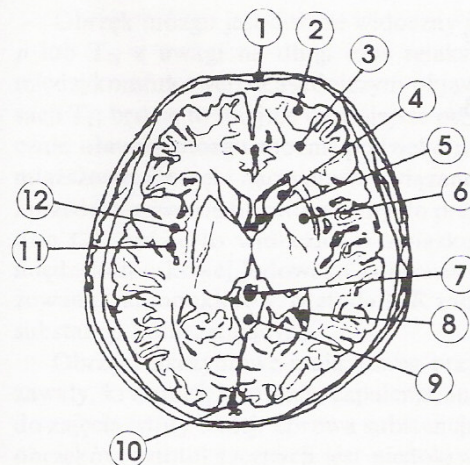


Tomograf NMR
z polem $B=1,5\text{ T}$

Obrazy NMR w diagnostyce medycznej



Ryc. 16.2. Przekrój strzałkowy głowy. Metoda FE, parametry: $T_R = 300$ ms, $T_E = 14$ ms, obraz zależny od T_1 , warstwa 5 mm, matryca 256×256 , FOV 25 cm, 8 NAQ. Wodogłowic: ← komora mózgowa poszerzona, ► ciało modzelowate ścięzione. (1) gruczołowa część przysadki, (2) przedni płat przysadki, (3) nerw wzrokowy, (4) most, (5) wodociąg mózgu, (6) komora czwarta.



Ryc. 16.3. Przekrój poprzeczny głowy (norma). Metoda FE, parametry: $T_R = 300$ ms, $T_E = 9$ ms, obraz zależny od T_1 , warstwa 3 mm, matryca 256×256 , FOV 25 cm, 4 NAQ. (1) skóra głowy, (2) istota szara, (3) istota biała, (4) jądro ogoniaste, (5) tylny róg komory bocznej, (6) skorupa jądra soczewkowatego, (7) szyszynka, (8) przedni róg komory bocznej, (9) zbiornik mózdkowo-rdzeniowy, (10) zatoka górna, (11) tętnica mózgowa środkowa (jasna).

Obrazy NMR w diagnostyce medycznej

