

Электронный парамагнитный резонанс (10.0 баллов) Магнитный момент

Условие

Задача 3. Электронный парамагнитный резонанс (10.0 баллов)

Магнитный момент

Магнитный момент $\mathbf{m}$ плоского контура с током — это векторная величина, определяемая как произведение силы тока I , площади контура S и единичного вектора нормали $\mathbf{n}$, перпендикулярного плоскости контура:

$$\mathbf{m} = IS\mathbf{n}.$$

Направление вектора магнитного момента устанавливается по правилу буравчика: если вращать ручку буравчика в направлении тока в контуре, то поступательное движение буравчика покажет направление $\mathbf{m}$.

3.1 По круговому витку радиуса R протекает электрический ток, при этом виток обладает магнитным моментом $\mathbf{m}$. Найдите индукцию магнитного поля $\mathbf{B}_0$ в центре витка.

3.2 Тот же виток помещается во внешнее однородное магнитное поле с индукцией $\mathbf{B}$ так, что вектор магнитного момента составляет угол φ с направлением $\mathbf{B}$. Найдите модуль механического момента сил $\mathbf{M}$, действующего на виток со стороны внешнего магнитного поля.

3.3 Виток медленно поворачивается во внешнем однородном магнитном поле $\mathbf{B}$ так, что направление его магнитного момента $\mathbf{m}$ изменяется от положения, когда $\mathbf{m}$ направлен по полю ($\mathbf{m} \uparrow \mathbf{B}$), до положения, когда $\mathbf{m}$ направлен против поля ($\mathbf{m} \downarrow \mathbf{B}$). Найдите механическую работу A сил со стороны магнитного поля при таком повороте.

Электронный парамагнитный резонанс

Если заряженная частица вращается или движется по замкнутой траектории, то у неё имеется механический момент, а вместе с ним возникает и магнитный момент. При этом выполняется универсальное гиромагнитное отношение, которое показывает, как связаны между собой магнитный и механический момент частицы.

Пусть электрон в атоме движется по круговой орбите так, что его орбитальный момент импульса относительно центра равен $\mathbf{L}$. Такое движение можно рассматривать как эквивалент кругового электрического тока, который обладает магнитным моментом $\mathbf{m}$. Между магнитным моментом и моментом импульса выполняется гиромагнитное соотношение

$$\mathbf{m} = -g_L \frac{e}{2m_e} \mathbf{L},$$

где e — элементарный заряд, m_e — масса электрона, а g_L — так называемый множитель Ландэ.

3.4 Найдите множитель Ландэ g_L для кругового орбитального движения электрона.

Электронный парамагнитный резонанс (ЭПР) — это явление, при котором вещество с неспаренными электронами поглощает электромагнитное излучение (обычно СВЧ-диапазона), если оно находится в постоянном магнитном поле. Такое поглощение происходит не всегда, а только при строго определенной частоте, поэтому его называют резонансным.

Представим, что атом содержит во внешней оболочке один неспаренный электрон с нулевым орбитальным моментом. У такого электрона есть собственный момент вращения — спин. Когда образец с веществом помещается в постоянное магнитное поле соленоида с индукцией B , то относительно него спин может ориентироваться двумя способами: вдоль направления магнитного поля с проекцией момента импульса $+\hbar/2$, или против него с проекцией $-\hbar/2$. Эти два положения обладают разной энергией, поэтому между ними возможен переход. В дальнейшем считайте, что множитель Ландэ для спина g_S в два раза больше, чем для орбитального движения электрона. Образец облучают электромагнитной волной с фиксированной круговой частотой ω , которая может заставить электрон переходить между двумя состояниями с разными проекциями спина, а затем медленно меняют величину индукции внешнего магнитного поля, фиксируя изменение интенсивности поглощения электромагнитных волн.

3.5 Найдите частоту внешнего электромагнитного излучения ω и рассчитайте ее численное значение, если максимум поглощения пришелся на индукцию магнитного поля $B_0 = 350$ мТл.

Теперь атомы того же типа внедрены в неизвестное вещество, из которого изготовлен сердечник для соленоида.

3.6 Указанное в предыдущем пункте магнитное поле достигалось при силе тока в обмотке соленоида $I_0 = 1,50$ А. Определите новое значение силы тока I в обмотке соленоида для резонансного поглощения, если магнитная проницаемость неизвестного вещества равна $\mu = 1,25$.

Термодинамическое равновесие

Пусть сердечник, помещенный в тоже самое магнитное поле, находится в состоянии термодинамического равновесия при температуре $T = 50$ К, а полное число внедренных атомов составляет $N = 1,00 \cdot 10^{20}$. Обозначим через n_0 разность между количеством атомов, находящихся на нижнем N_1 и верхнем N_2 энергетических уровнях.

3.7 Рассчитайте n_0 при заданных условиях.

При взаимодействии электромагнитного поля с веществом происходят три процесса:

1) Поглощение — атом с более низкого энергетического уровня E_1 переходит на более высокий уровень E_2 с поглощением фотона, при этом количество переходов с нижнего уровня в единицу времени определяется выражением:

$$\frac{dN_1}{dt} = -B_{12}\rho N_1,$$

где ρ — плотность электромагнитного излучения;

2) Вынужденное излучение – под действием внешнего фотона атом с более высокого энергетического уровня E_2 переходит на более низкий уровень E_1 с излучением другого фотона, при этом количество переходов с верхнего уровня в единицу времени определяется выражением:

$$\frac{dN_2}{dt} = -B_{21}\rho N_2;$$

3) Спонтанный переход – самопроизвольный переход атома с верхнего на нижний уровень с испусканием фотона, при этом количество переходов с верхнего уровня в единицу времени определяется выражением:

$$\frac{dN_2}{dt} = -A_{21}N_2.$$

Константы B_{12}, B_{21}, A_{21} называются коэффициентами Эйнштейна. Планк показал, что в состоянии термодинамического равновесия плотность энергии равновесного электромагнитного излучения описывается формулой:

$$\rho = \frac{2\hbar\omega^3}{\pi c^3} \frac{1}{\exp\left(-\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - 1}.$$

3.8 Докажите, что $B_{12} = B_{21}$.

Наличие внешнего источника микроволнового поля

В начальный момент времени система находится в термодинамическом равновесии при указанной выше температуре. Затем включается источник микроволнового излучения таким образом, чтобы плотность электромагнитного излучения ρ в образце оставалась постоянной во времени, а ее величина такова, что спонтанными переходами в системе можно пренебречь.

3.9 Найдите аналитическую зависимость разности $n(t)$ между количеством атомов, находящихся на нижнем и верхнем энергетических уровнях, в зависимости от времени t , считая, что $k = B_{12}\rho$.

3.10 Известно, что разность между количеством атомов, находящихся на нижнем и верхнем энергетических уровнях, через время $\tau = 1,00$ с после включения источника изменилась ровно в 2 раза. Рассчитайте при данных условиях мощность микроволнового источника излучения в начальный момент времени.

В действительности поглощение и вынужденное излучение не являются единственными процессами, в результате которых электрон, находящийся на верхнем уровне, теряет свою избыточную энергию. Большую роль играют процессы релаксации, в результате которых избыток энергии передается окружающему веществу, ведь именно благодаря им осуществляется равновесное распределение по энергетическим уровням.

Процесс релаксации для уровня 1 выглядит как непрерывные переходы с уровня 1 на уровень 2 и обратно, тоже самое справедливо для уровня 2. При этом члены, описывающие релаксацию для уровня 1, записываются через константы α_1 и α_2 следующим образом

$$\frac{dN_1}{dt} = -\alpha_1 N_1 + \alpha_2 N_2,$$

а, следовательно, аналогичное соотношение можно записать и для уровня 2.

3.11 Пусть для данного вещества $\alpha_1 + \alpha_2 = 0,670 \cdot 10^{-3} \text{ с}^{-1}$. Рассчитайте при данных условиях мощность микроволнового источника излучения в установившемся режиме измерения спектра методом электронного парамагнитного резонанса.

Математическая подсказка для задач теоретического тура

Вам может понадобиться знание следующих формул: $\int x^n dx = \frac{x^{n+1}}{n+1} + C$, где $n \neq -1$ — константа, C — произвольная постоянная;

$\int \frac{dx}{x} = \ln|x| + C$, где C — произвольная постоянная;

$\int \frac{dx}{(a^2+x^2)^{3/2}} = \frac{x}{a^2\sqrt{a^2+x^2}} + C$, где a — константа, C — произвольная постоянная;

$$(1+x)^\gamma \approx 1 + \gamma x + \frac{\gamma(\gamma-1)}{2}x^2, \text{ для } |x| \ll 1 \text{ и любых } \gamma;$$

$$\tan x \approx \sin x \approx x, \text{ для } |x| \ll 1;$$

$$\ln(1+x) \approx x, \text{ для } |x| \ll 1.$$

Список физических констант

Ускорение свободного падения $g = 9,80 \text{ м/с}^2$;

Универсальная газовая постоянная $R = 8,31 \text{ Дж/(моль} \cdot \text{К)}$;

Скорость света в вакууме $c = 3,00 \cdot 10^8 \text{ м/с}$;

Приведенная постоянная Планка $\hbar = 1,05 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}$;

Постоянная Больцмана $k_B = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ Дж/К}$;

Магнитная постоянная $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ Гн/м}$;

Электрическая постоянная $\varepsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-12} \text{ Ф/м}$;

Постоянная Стефана-Больцмана $\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ Вт/(м}^2 \cdot \text{К}^4)$;

Элементарный заряд $e = 1,60 \cdot 10^{-19} \text{ Кл}$;

Масса электрона $m_e = 9,11 \cdot 10^{-31} \text{ кг}$.

Решение

Задача 3. Электронный парамагнитный резонанс (10.0 баллов) Магнитный момент

3.1 Площадь кругового витка радиуса R равна

$$S = \pi R^2 \quad (1)$$

и при протекании по нему тока I модуль его магнитного момента равен

$$m = I\pi R^2. \quad (2)$$

Магнитная индукция в центре кругового витка определяется выражением

$$B_0 = \frac{\mu_0 I}{2R}, \quad (3)$$

откуда следует, что

$$\mathbf{B}_0 = \frac{\mu_0 \mathbf{m}}{2\pi R^3}. \quad (4)$$

3.2 Если $\mathbf{B}$ лежит в плоскости витка, то, анализируя пары сил Ампера, действующих на противоположные относительно вектора индукции магнитного поля элементы витка, можно показать, что модуль суммарного момента сил составляет

$$M = mB. \quad (5)$$

В общем случае магнитный момент $\mathbf{m}$ образует с полем угол φ . Разложим $\mathbf{B}$ на составляющие: одну в плоскости витка, а другую перпендикулярную ей. Очевидно, что перпендикулярная составляющая не создает момента сил, вызывая растяжение или сжатие витка, а так как проекция вектора $\mathbf{B}$ на плоскость витка составляет

$$B_{\parallel} = B \sin \varphi, \quad (6)$$

то модуль результирующего момента сил Ампера равен

$$M = mB \sin \varphi. \quad (7)$$

3.3 Элементарная работа dA при малом повороте витка на угол $d\varphi$ равна

$$dA = Md\varphi. \quad (8)$$

При повороте витка от состояния, когда $\mathbf{m} \uparrow\uparrow \mathbf{B}$, до положения $\mathbf{m} \uparrow\downarrow \mathbf{B}$, угол изменяется от 0 до π , а полная работа определяется интегралом

$$A = \int_0^\pi M d\varphi = 2mB. \quad (9)$$

Электронный парамагнитный резонанс

3.4 Пусть электрон вращается по круговой орбите радиуса R с периодом T , тогда его движение можно представить как круговой ток силой

$$I = \frac{e}{T} \quad (10)$$

и магнитным моментом

$$m = I\pi R^2. \quad (11)$$

Момент импульса электрона при движении по круговой траектории со скоростью v равен

$$L = m_e v R, \quad (12)$$

откуда, принимая во внимание выражение для периода обращения

$$T = \frac{2\pi R}{v}, \quad (13)$$

получаем

$$g_L = 1. \quad (14)$$

В векторном соотношении между магнитным и механическим моментами необходимо учитывать знак в силу отрицательности заряда электрона.

3.5 Согласно п. 3.3 для переворота спина необходимо совершить работу (9), что вместе с формулой в условии для магнитного момента дает

$$A = g_s B_0 \frac{e\hbar}{2m_e}, \quad (15)$$

которая совершается за счет энергии фотона

$$E = \hbar\omega, \quad (16)$$

то есть выполняется закон сохранения энергии

$$E = A. \quad (17)$$

Таким образом, используя $g_s = 2g_L = 2$, получаем

$$\omega = \frac{eB_0}{m_e} = 6,15 \cdot 10^{10} \text{ с}^{-1}, \quad (18)$$

что равно так называемой Ларморовской циклической частоте вращения электрона в магнитном поле.

3.6 В отсутствие сердечника магнитное поле в соленоиде пропорционально силе тока, то есть

$$B_0 \propto I_0, \quad (19)$$

а при наличии сердечника магнитное поле также пропорционально магнитной проницаемости вещества

$$B \propto \mu I. \quad (20)$$

Резонанс наступает при одинаковой величине магнитной индукции, поэтому

$$I = \frac{I_0}{\mu} = 1,2 \text{ А}. \quad (21)$$

Термодинамическое равновесие

3.7 В состоянии термодинамического равновесия распределение электронов в атоме по энергетическим уровням подчиняется распределению Больцмана, поэтому

$$\frac{N_2}{N_1} = \exp \left(-\frac{\hbar\omega}{k_B T} \right), \quad (22)$$

а с другой стороны полное число атомов известно и равно

$$N = N_1 + N_2. \quad (23)$$

Таким образом, из (22) и (23) получаем при условии $\hbar\omega \ll k_B T$

$$n_0 = \frac{\hbar\omega}{2k_B T} N = 4,68 \cdot 10^{17}. \quad (24)$$

3.8 В состоянии термодинамического равновесия скорости переходов вверх и вниз должны быть одинаковы, так как количество атомов на энергетических уровнях изменяться не должно, в частности для нижнего уровня имеем

$$\frac{dN_1}{dt} = -B_{12}\rho N_1 + A_{21}N_2 + B_{21}\rho N_2 = 0, \quad (25)$$

откуда для плотности энергии электромагнитного излучения получаем

$$\rho = \frac{A_{21}}{B_{21} \left(\frac{N_1 B_{12}}{N_2 B_{21}} - 1 \right)}. \quad (26)$$

Учитывая соотношение (22) и сравнивая с формулой Планка, заключаем, что

$$B_{12} = B_{21}. \quad (27)$$

Наличие внешнего источника микроволнового поля

3.9 С учетом равенства коэффициентов Эйнштейна и пренебрежения спонтанными переходами, уравнение (25) переписывается в виде

$$\frac{dN_1}{dt} = -kN_1 + kN_2, \quad (28)$$

которое с учетом (23) дает

$$\frac{dn}{dt} = -2kn. \quad (29)$$

Используя начальное условие $n(0) = n_0$, получаем решение уравнения (29) в виде

$$n(t) = n_0 \exp(-2kt). \quad (30)$$

Интересно отметить, что под действием внешнего источника переменного поля с течением времени разность в количестве атомов на двух уровнях падает до нуля. **3.10** Из формулы (30) следует, что

$$k = \frac{\ln 2}{2\tau}. \quad (31)$$

Так как при переходе каждого атома с нижнего уровня на верхний поглощается один квант энергии переменного поля $\hbar\omega$, а при каждом обратном переходе такая же энергия выделяется, то выражение, описывающее поглощение энергии E переменного поля в сердечнике имеет вид

$$\frac{dE}{dt} = kn\hbar\omega, \quad (32)$$

а это означает, что в начальный момент времени мощность источника равна

$$P = \frac{dE}{dt}(0) = \frac{n_0 \hbar\omega \ln 2}{2\tau} = 1,05 \text{ мВт}. \quad (33)$$

3.11 Рассмотрим случай отсутствия внешнего поля, тогда приведенное в условии уравнение для уровня 1 переписывается в виде

$$\frac{dn}{dt} = N(\alpha_2 - \alpha_1) - n(\alpha_1 + \alpha_2). \quad (34)$$

Поскольку уравнение (34) должно включать в себя условие термодинамического равновесия, то при обращении слева производной в ноль равновесная концентрация должна быть равна n_0 , откуда следует, что

$$N = n_0 \frac{(\alpha_1 + \alpha_2)}{(\alpha_2 - \alpha_1)}. \quad (35)$$

Подставляя (35) в (34) и добавляя член из (29), получаем уравнение для n с учетом наличия переменного поля

$$\frac{dn}{dt} = -2kn - (n - n_0)(\alpha_1 + \alpha_2). \quad (36)$$

Так как требуется определить мощность источника в стационарном режиме, то и разность в числе атомов на нижнем и верхнем уровне должна быть постоянной, то есть $dn/dt = 0$, откуда следует

$$n = \frac{n_0}{1 + \frac{2k}{(\alpha_1 + \alpha_2)}}. \quad (37)$$

Мощность источника по-прежнему определяется уравнением (42) и с учетом того, что $2k \gg (\alpha_1 + \alpha_2)$, окончательно получаем

$$P = \frac{1}{2} n_0 \hbar \omega (\alpha_1 + \alpha_2) = 1,01 \text{ мкВт}. \quad (38)$$

Обратите внимание, что в отличие от 3.10 мощность источника не зависит от плотности энергии электромагнитного поля, это так называемый режим насыщения.

	Содержание	Баллы	
3.1	Формула (1): $S = \pi R^2$	0.2	0.8
	Формула (2): $m = I\pi R^2$	0.2	
	Формула (3): $B_0 = \frac{\mu_0 I}{2R}$	0.2	
	Формула (4): $B_0 = \frac{\mu_0 m}{2\pi R^3}$	0.2	
3.2	Формула (5): $M = mB$	0.2	0.6
	Формула (6): $B_{\parallel} = B \sin \varphi$	0.2	
	Формула (7): $M = mB \sin \varphi$	0.2	
3.3	Формула (8): $dA = Md\varphi$	0.2	0.4
	Формула (9): $A = 2mB$	0.2	
3.4	Формула (10): $I = \frac{e}{T}$	0.2	1.0
	Формула (11): $m = I\pi R^2$	0.2	
	Формула (12): $L = m_e v R$	0.2	
	Формула (13): $T = \frac{2\pi R}{v}$	0.2	
	Формула (14): $g_L = 2$	0.2	

3.5	Формула (15): $A = g_s B_0 \frac{e\hbar}{2m_e}$	0.2	1.0
	Формула (16): $E = \hbar\omega$	0.2	
	Формула (17): $E = A$	0.2	
	Формула (18): $\omega = \frac{eB_0}{m_e}$	0.2	
	Численное значение в формуле (18): $\omega = 6,15 \cdot 10^{10} \text{ с}^{-1}$	0.2	
3.6	Формула (19): $B_0 \propto I_0$	0.2	0.8
	Формула (20): $B \propto \mu I$	0.2	
	Формула (21): $I = \frac{I_0}{\mu}$	0.2	
	Численное значение в формуле (21): $I = 1,2 \text{ А}$	0.2	
3.7	Формула (22): $\frac{N_2}{N_1} = \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)$	0.2	1.0
	Формула (23): $N = N_1 + N_2$	0.2	
	Формула (24): $n_0 = \frac{\hbar\omega}{2k_B T} N$	0.3	
	Численное значение в формуле (24): $n_0 = 4,68 \cdot 10^{17}$	0.3	
3.8	Формула (25): $-B_{12}\rho N_1 + A_{21}N_2 + B_{21}\rho N_2 = 0$	0.4	1.0
	Формула (26): $\rho = \frac{A_{21}}{B_{21}\left(\frac{N_1 B_{12}}{N_2 B_{21}} - 1\right)}$	0.4	
	Использование формулы (22)	0.2	
3.9	Формула (28): $\frac{dN_1}{dt} = -kN_1 + kN_2$	0.2	0.6
	Формула (29): $\frac{dn}{dt} = -2kn$	0.2	
	Формула (30): $n(t) = n_0 \exp(-2kt)$	0.2	
3.10	Формула (31): $k = \frac{\ln 2}{2\tau}$	0.2	0.8
	Формула (32): $\frac{dE}{dt} = kn\hbar\omega$	0.2	
	Формула (33): $P = \frac{n_0\hbar\omega \ln 2}{2\tau}$	0.2	
	Численное значение в формуле (33): $P = 1,05 \text{ мВт}$	0.2	
3.11	Формула (34): $\frac{dn}{dt} = N(\alpha_2 - \alpha_1) - n(\alpha_1 + \alpha_2)$	0.3	2.0
	Формула (35): $N = n_0 \frac{(\alpha_1 + \alpha_2)}{(\alpha_2 - \alpha_1)}$	0.3	
	Формула (36): $\frac{dn}{dt} = -2kn - (n - n_0)(\alpha_1 + \alpha_2)$	0.3	
	Формула (37): $n = \frac{n_0}{1 + \frac{2k}{(\alpha_1 + \alpha_2)}}$	0.3	
	Формула (38): $P = \frac{1}{2}n_0\hbar\omega(\alpha_1 + \alpha_2)$	0.3	
	Численное значение в формуле (38): $P = 1,01 \text{ мкВт}$	0.5	
Итого			10.0