

Κύριες έννοιες της φυσικής  
για την  
Απεικόνιση Πυρηνικού μαγνητικού  
Συντονισμού  
Magnetic Resonance Imaging (MRI)

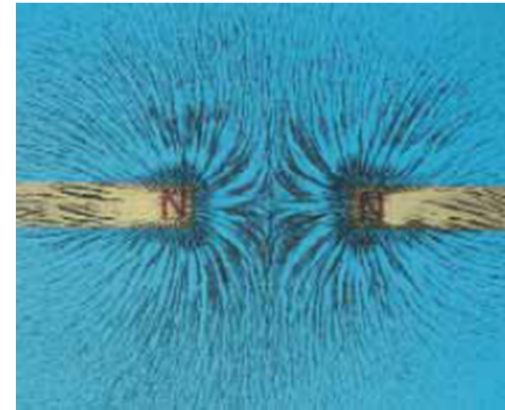
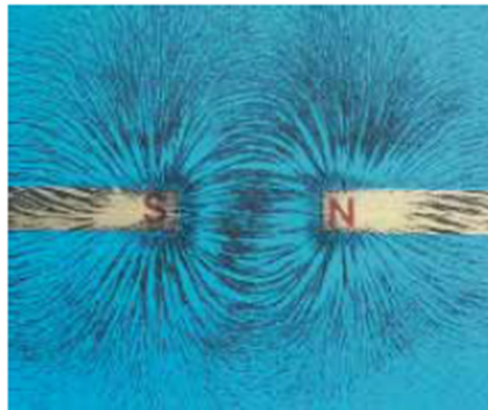
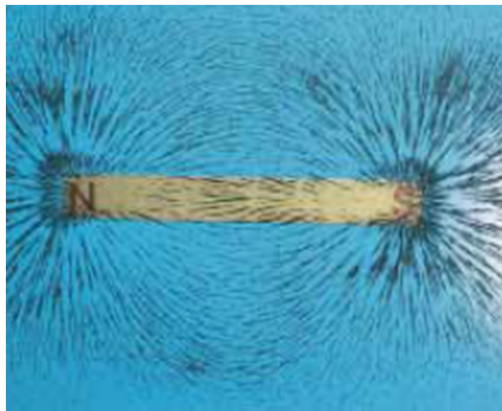
# Αναφορές

- Ορισμένες από τις αρχικές σελίδες που αφορούν το μαγνητικό πεδίο βασίζονται σε υλικό της Κ. Πανταβού

# Μαγνητικό πεδίο

## Μαγνητικοί πόλοι

- Βόρειος και Νότιος πόλος
- Δεν έχει απομονωθεί μαγνητικό μονόπολο

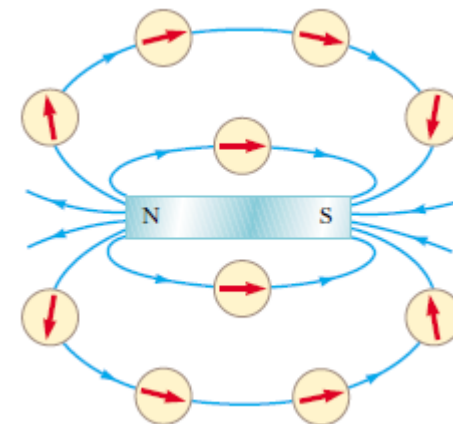


# Μαγνητικό πεδίο

## Ένταση

- Συμβολίζεται με **B**
- Διανυσματικό μέγεθος (κατεύθυνση ίδια με την κατεύθυνση της μαγνητικής βελόνας)
- Μονάδα μέτρησης 1 Tesla (1T) ή 1 Gauss ( $1 \text{ G}=10^{-4} \text{ T}$ )
- Ορίζεται από την δύναμη που ασκεί σε ένα φορτισμένο σώμα που κινείται με ταχύτητα  $u$  μέσα σε ένα μαγνητικό πεδίο

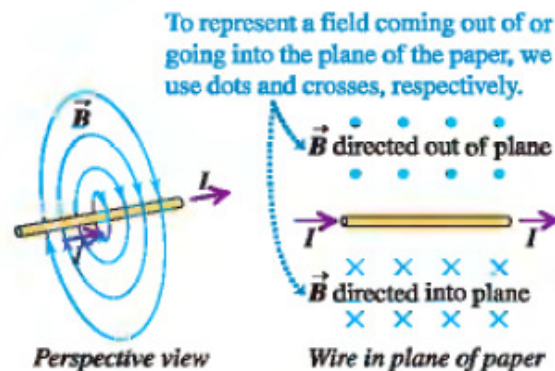
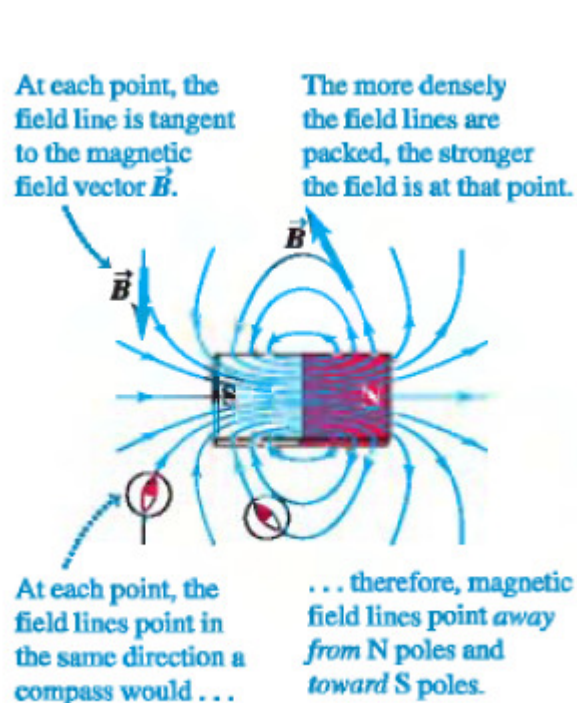
- ✓ Το μαγνητικό πεδίο είναι ένα διανυσματικό πεδίο



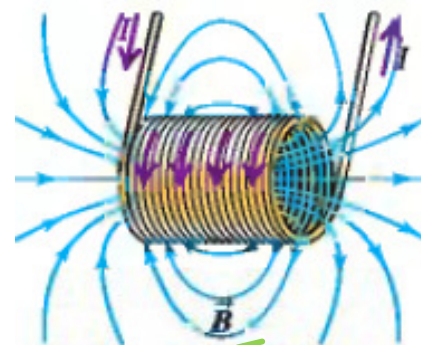
# Μαγνητικό πεδίο

## Δυναμικές γραμμές

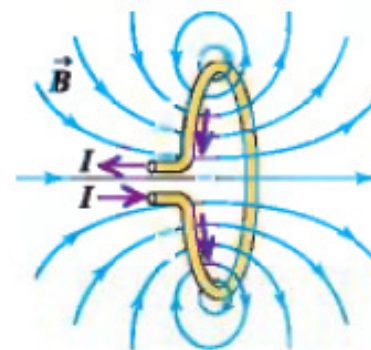
- Β εφαπτόμενο στις δυναμικές γραμμές
- Έξω από τον μαγνήτη ξεκινούν από τον Βόρειο και καταλήγουν στον Νότιο πόλο



Μαγνητικό πεδίο γύρω από ευθύγραμμο ρευματοφόρο αγωγό



Μαγνητικό πεδίο γύρω από πηνίο που διαρρέεται από ρεύμα



Μαγνητικό πεδίο γύρω από κυκλικό ρευματοφόρο αγωγό

# Μαγνητικό πεδίο

- **Μαγνητική δύναμη** (ασκείται σε ένα φορτισμένο σώμα ( $q$ ) που κινείται με ταχύτητα  $u$  μέσα σε ένα μαγνητικό πεδίο)  $i$ :
- Είναι ανάλογη του φορτίου  $q$  και της ταχύτητας  $u$  του σωματιδίου
- Το μέγεθος και η κατεύθυνσή της εξαρτάται από το μαγνητικό πεδίο **B**
- Όταν ένα φορτίο  $q$  κινείται παράλληλα στις δυναμικές γραμμές η δύναμη που δέχεται από το μαγνητικό πεδίο είναι μηδέν
- Όταν η ταχύτητα του φορτίου  $q$  σχηματίζει γωνία  $\theta$  με τις δυναμικές γραμμές η μαγνητική δύναμη είναι κάθετη στο επίπεδο που ορίζουν η ταχύτητα  $u$  και η ένταση  $B$  του μαγνητικού πεδίου και το μέτρο της είναι ανάλογο της γωνίας  $\theta$

# Μαγνητικό πεδίο

## Μαγνητική δύναμη

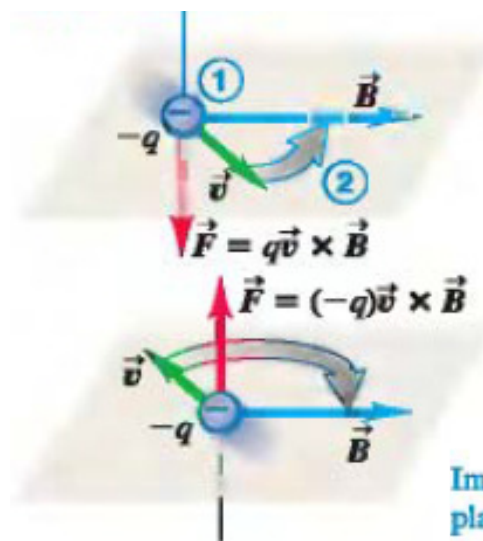
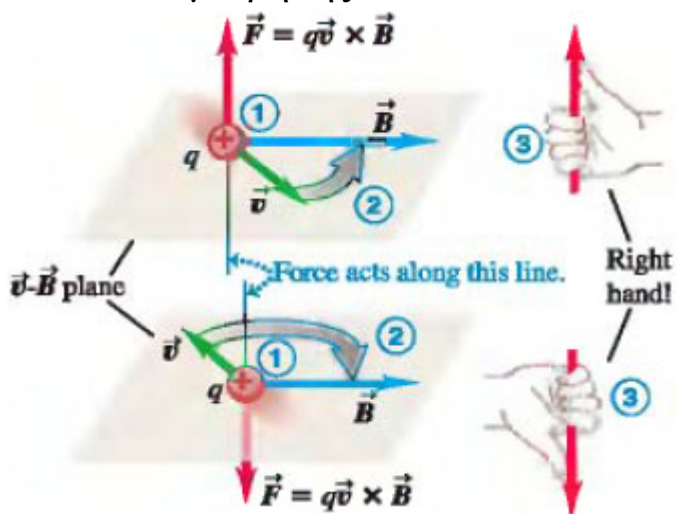
Σε φορτίο  $q$

Μέτρο:

$$\mathbf{F} = q\mathbf{u} \times \mathbf{B}$$

Κατεύθυνση: καθορίζεται από τον κανόνα του δεξιού χεριού

Μονάδα μέτρησης:  $1\text{N/A}\cdot\text{m}$



- ✓ Η κατεύθυνση της δύναμης που ασκείται σε αρνητικό φορτίο είναι αντίθετη από αυτή που ασκείται σε θετικό

Imagine turning  $\vec{v}$  toward  $\vec{B}$  in the  $\vec{v}$ - $\vec{B}$  plane (through the smaller angle).

# Μαγνητική δύναμη Σε ευθύγραμμο ρευματοφόρο αγωγό

Μέτρο:

$$\mathbf{F} = I \mathbf{L} \times \mathbf{B}$$

Όπου  $L$  το μήκος του αγωγού με κατεύθυνση την κατεύθυνση του ρεύματος

Force  $\vec{F}$  on a straight wire carrying a positive current and oriented at an angle  $\phi$  to a magnetic field  $\vec{B}$ :

- Magnitude is  $F = IB_{\perp} = IB \sin \phi$ .
- Direction of  $\vec{F}$  is given by the right-hand rule.

Απόδειξη: Η ολική δύναμη που ασκείται σε όλα τα φορτία του αγωγού θα είναι

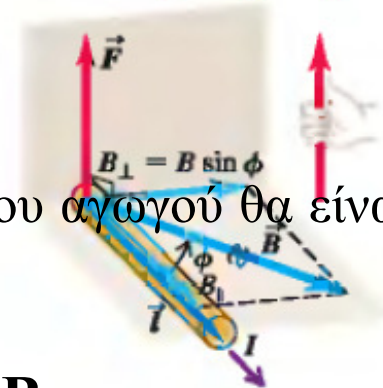
- ✓ Εφαρμόζεται μόνο στην περίπτωση ομογενούς μαγνητικού πεδίου

$$\mathbf{F} = (nAL)q\mathbf{u} \times \mathbf{B} = (nqA\mathbf{u})L \times \mathbf{B} \Rightarrow \mathbf{F} = I \mathbf{L} \times \mathbf{B}$$

Όπου  $A \cdot L$  όγκος σύρματος,  $n$  αριθμός φορτίων ανά μονάδα μήκους του αγωγού

Κατεύθυνση: καθορίζεται από τον κανόνα του δεξιού χεριού

Μονάδα μέτρησης:  $1\text{N/A}\cdot\text{m}$

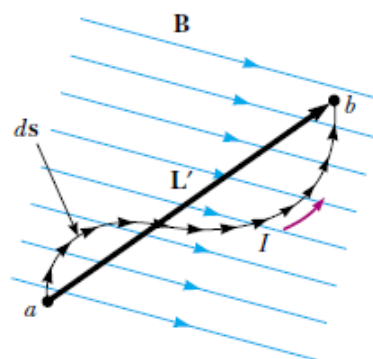
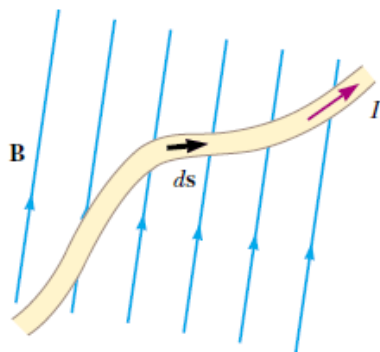




# Μαγνητική δύναμη σε ρευματοφόρο αγωγό

$$d\mathbf{F} = I \, d\mathbf{s} \times \mathbf{B} \Rightarrow$$

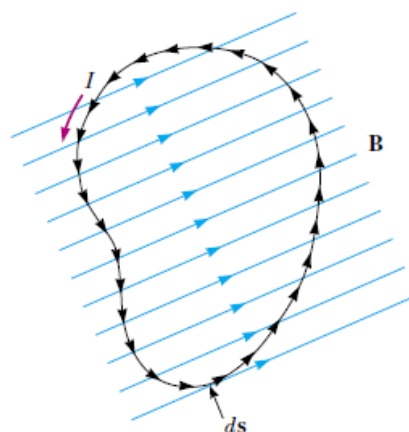
$$\mathbf{F} = I \int_a^b d\mathbf{s} \times \mathbf{B}$$



$$\mathbf{F} = I \left( \int_a^b d\mathbf{s} \right) \times \mathbf{B} \Rightarrow$$

$$\mathbf{F} = I \mathbf{L}' \times \mathbf{B}$$

Η μαγνητική δύναμη που δέχεται ένας κυρτός ρευματοφόρος αγωγός όταν βρίσκεται σε ομογενές μαγνητικό πεδίο είναι ίση με την δύναμη που θα δεχόταν αν ήταν ευθύγραμμος με μήκος ίσο με την απόσταση των άκρων του  $\mathbf{L}$ .

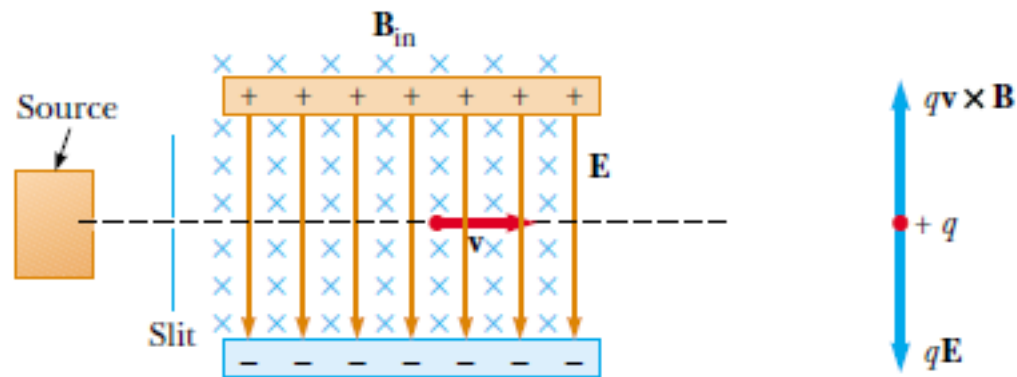


$$\mathbf{F} = I \left( \oint d\mathbf{s} \right) \times \mathbf{B} = 0$$

Η συνολική μαγνητική δύναμη που δέχεται ένας κλειστός ρευματοφόρος αγωγός όταν βρίσκεται σε ομογενές μαγνητικό πεδίο είναι μηδέν.

- Όταν ένα φορτισμένο σωματίδιο κινείται εντός ηλεκτρικού και μαγνητικού πεδίου, δέχεται δύο δυνάμεις.
- Η ολική δύναμη είναι το διανυσματικό άθροισμα της ηλεκτρικής δύναμης  $\mathbf{F}_E = \mathbf{E} \cdot q$  και της μαγνητικής δύναμης  $\mathbf{F}_B = q \cdot \mathbf{u} \times \mathbf{B}$ .
- Καθοδικός σωλήνας: Χρησιμοποιείται μαγνητικό πεδίο ώστε να αποκλίνει η δέσμη ηλεκτρονίων

$$\mathbf{F} = q \cdot (\mathbf{E} + \mathbf{u} \times \mathbf{B})$$



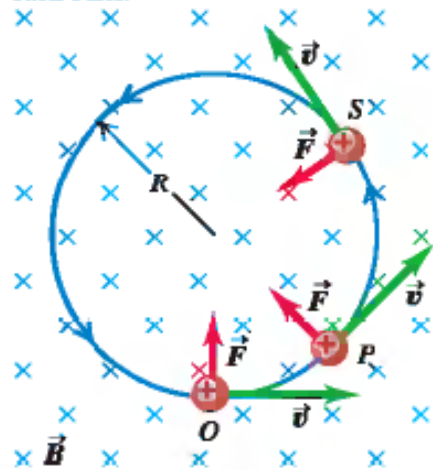
# Κίνηση φορτίου σε μαγνητικό πεδίο

## Ομογενές μαγνητικό πεδίο

A) ταχύτητα κάθετη στις δυναμικές γραμμές

B) ταχύτητα που σχηματίζει γωνία  $\theta$  με τις δυναμικές γραμμές

A charge moving at right angles to a uniform  $\vec{B}$  field moves in a circle at constant speed because  $\vec{F}$  and  $\vec{v}$  are always perpendicular to each other.



$$\sum F = ma_c$$

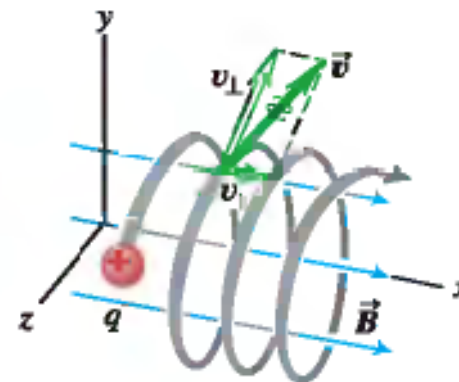
$$F_B = qvB = \frac{mv^2}{r}$$

$$r = \frac{mv}{qB}$$

$$\omega = \frac{v}{r} = \frac{qB}{m}$$

$$T = \frac{2\pi r}{v} = \frac{2\pi}{\omega} = \frac{2\pi m}{qB}$$

This particle's motion has components both parallel ( $v_{\parallel}$ ) and perpendicular ( $v_{\perp}$ ) to the magnetic field, so it moves in a helical path.

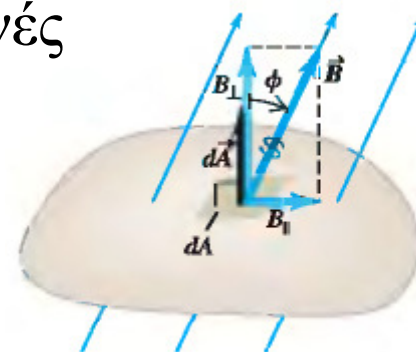


# Μαγνητική Ροή

- Ορισμός: Δια μέσου επιφάνειας εβαδού  $A$  που βρίσκεται εντός  $B$ , διέρχεται μαγνητική ροή  $\Phi$
- Αν η επιφάνεια είναι επίπεδο και το  $B$  είναι ομογενές

$$\Phi = BA \cos \varphi = \mathbf{B} \cdot \mathbf{A}$$

- Στη γενική περίπτωση  $\Phi = \int_{\text{επιφάνεια}} \mathbf{B} \cdot d\mathbf{A}$



- Βαθμωτό μέγεθος, Μονάδα μέτρησης 1 Weber (1Wb)
- Η ολική μαγνητική ροή κλειστής επιφάνειας είναι μηδέν, ισοδύναμα: δεν υπάρχουν μαγνητικά μονόπολα

$$\Phi = \oiint \mathbf{B} \cdot d\mathbf{A} = 0$$

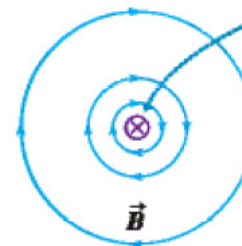
Νόμος του Gauss για  
το μαγνητικό πεδίο

# Πηγές Μαγνητικών πεδίων

## Κινούμενο ηλεκτρικό φορτίο

Η ένταση σε σημείο P του μαγνητικού πεδίου

$$\mathbf{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{q \mathbf{u} \times \mathbf{r}}{r^2}$$



Όπου  $\mu_0/4\pi$  σταθερά αναλογίας,  $q$  το ηλεκτρικό φορτίο που δημιουργεί το πεδίο,  $u$  η ταχύτητα της πηγής,  $r$  το διάνυσμα θέσης του σημείου από την πηγή

Κατεύθυνση έντασης: κανόνας δεξιού χεριού

# Πηγές Μαγνητικών πεδίων

Ρευματοφόρος αγωγός στοιχειώδους μήκους

Η ένταση σε σημείο P του μαγνητικού πεδίου δίνεται από τη σχέση

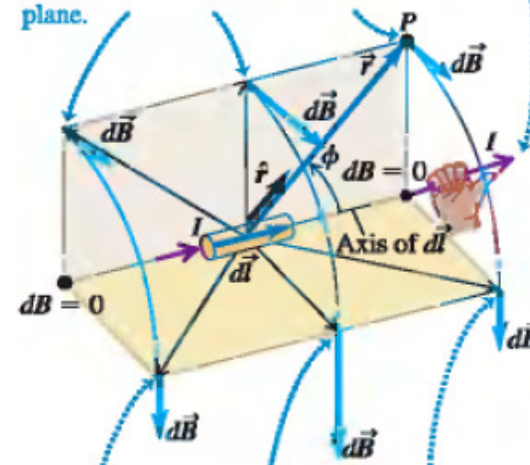
$$\mathbf{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \int \frac{I d\mathbf{l} \times \mathbf{r}}{r^2}$$

Νόμος των Biot και Savart

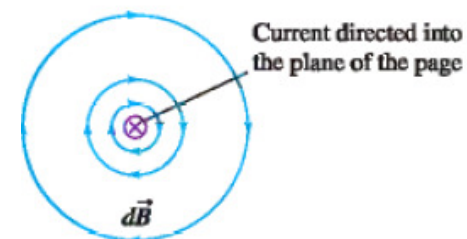
Κατεύθυνση έντασης: κανόνας δεξιού χεριού

**Right-hand rule for the magnetic field due to a current element:** Point the thumb of your right hand in the direction of the current. Your fingers now curl around the current element in the direction of the magnetic field lines.

For these field points,  $\vec{r}$  and  $d\vec{l}$  both lie in the beige plane, and  $d\vec{B}$  is perpendicular to this plane.



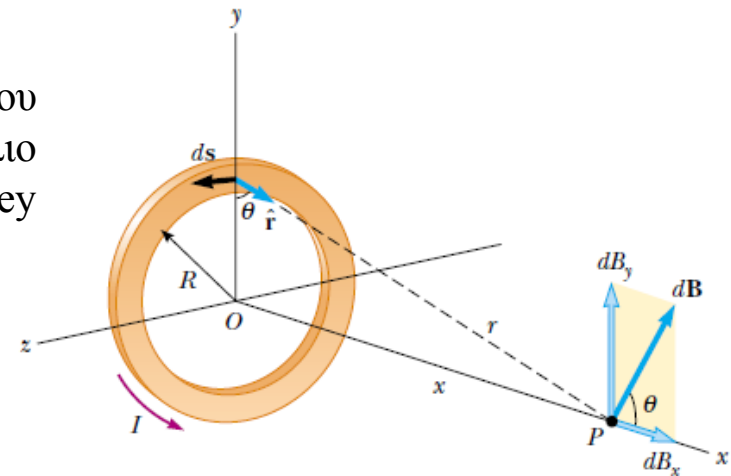
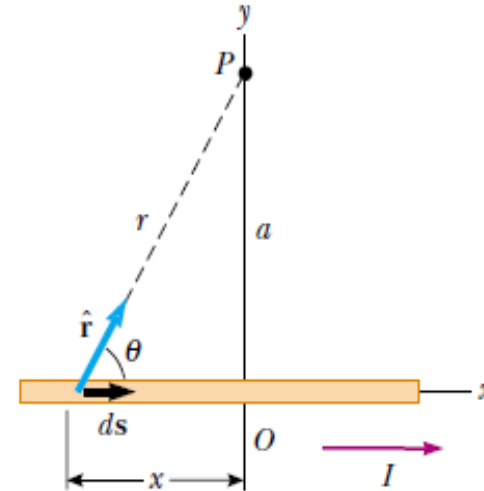
For these field points,  $\vec{r}$  and  $d\vec{l}$  both lie in the gold plane, and  $d\vec{B}$  is perpendicular to this plane.



# Μαγνητικό πεδίο

## Εφαρμογές

1. Να υπολογιστεί η ένταση του μαγνητικού πεδίου σε σημείο  $P$  που δημιουργείται από ευθύγραμμο αγωγό που διαρρέεται από ρεύμα έντασης  $I$ . (serwey 30.1 p 929)
2. Να υπολογιστεί η ένταση του μαγνητικού πεδίου σε σημείο  $P$  που δημιουργείται από δακτύλιο ακτίνας  $R$  που διαρρέεται από ρεύμα  $I$ . (serwey 30.3 p 931)



# Νόμος Ampère

- Αντικαθιστά τον νόμο των Biot-Savart όταν έχουμε συμμετρία
- Αποτελεί το ανάλογο του νόμου του Gauss στο μαγνητικό πεδίο
- Χρησιμοποιείται για να υπολογίζει το μαγνητικό πεδίο που προκαλείται από κατανομές ρευμάτων μεγάλης συμμετρίας ή να καθορίζει κατανομές ρευμάτων που προκαλούν συγκεκριμένη μορφή μαγνητικών πεδίων

$$\oint \mathbf{B} \cdot d\mathbf{l} = \mu_0 \cdot I_{\text{encl}}$$





# Σύνοψη

- Δύναμη ηλεκτρικού φορτίου σε μαγνητικό πεδίο

$$\mathbf{F} = q\mathbf{u} \times \mathbf{B}$$

- Δύναμη πάνω σε ευθύγραμμο ρευματοφόρο αγωγό μήκους  $L$

$$\mathbf{F} = I \mathbf{L} \times \mathbf{B}$$

- Δύναμη σε ρευματοφόρο αγωγό

$$\mathbf{F} = I \int_a^b d\mathbf{s} \times \mathbf{B}$$

- Δύναμη σε φορτίο εντός ηλεκτρικού και μαγνητικού πεδίου

$$\mathbf{F} = q \cdot (\mathbf{E} + \mathbf{u} \times \mathbf{B})$$

- Μαγνητική ροή

$$\Phi = \mathbf{B} \cdot \mathbf{A} \cdot \cos \varphi = \mathbf{B} \cdot \mathbf{A}$$

- Νόμος του Gauss

$$\oint \mathbf{B} \cdot d\mathbf{A} = 0$$

- Νόμος Biot-Savart

$$\mathbf{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \int \frac{I d\mathbf{l} \times \mathbf{r}}{r^2}$$

- Νόμος Ampère

$$\oint \mathbf{B} \cdot d\mathbf{l} = \mu_0 \cdot I_{\text{encl}}$$

# Μαγνητισμός – Ενταση μαγνητικού πεδίου

- Ενταση μαγνητικού πεδίου (ΜΠ)  $\mathbf{B}$ : υπολογίζεται βάσει της δύναμης  $\mathbf{F}_B$  που ασκεί το ΜΠ σε ηλεκτρικό φορτίο  $q$  που κινείται με ταχύτητα  $\mathbf{v}$ .
- $\mathbf{F}_B = q\mathbf{v} \times \mathbf{B}$
- Μονάδες: Tesla =  $\text{N Cb}^{-1} \text{m}^{-1} \text{sec} = \text{N Ampere}^{-1} \text{m}^{-1}$
- 1 Tesla =  $10^4$  Gauss
- Υπεραγώγιμος μαγνήτης: 30T
- MRI σταθερό B:  $\sim 1.5\text{T}$
- Μαγνητικό πεδίο γης: 0.5 Gauss  $\sim 0.5 \times 10^{-4} \text{T}$

# Δύναμη σε ρευματοφόρο αγωγό

- Εστω ευθύγραμμος ρευματοφόρος αγωγός με διατομή  $A$ , μήκος  $L$  και πυκνότητα φορτίων ανά όγκο  $n$ , που βρίσκεται σε ομογενές μαγνητικό πεδίο  $\mathbf{B}$ . Τότε η δύναμη που ασκείται στον αγωγό από το  $\mathbf{B}$  είναι:

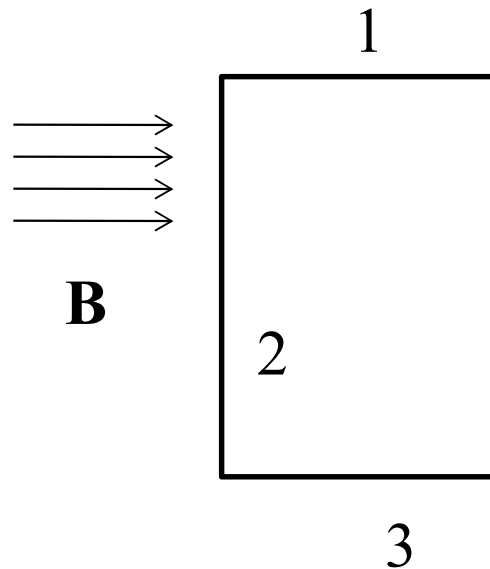
$$\mathbf{F} = (q\mathbf{v} \times \mathbf{B})nAL = I\mathbf{L} \times \mathbf{B}$$

- Αν ο αγωγός δεν είναι ευθύγραμμος:

$$d\mathbf{F} = Id\mathbf{s} \times \mathbf{B} \Rightarrow \mathbf{F} = I \int_a^b d\mathbf{s} \times \mathbf{B} = I \left( \int_a^b d\mathbf{s} \right) \times \mathbf{B} = I \vec{AB} \times \mathbf{B}$$

- $\rightarrow$  Η δύναμη  $F$  που ασκείται από ομογενές  $\mathbf{B}$  σε ρευματοφόρο αγωγό οποιουδήποτε σχήματος από το σημείο  $A$  στο  $B$ , είναι ίση με τη δύναμη που θα ασκείτο σε ευθύγραμμο αγωγό από το  $A$  στο  $B$ .
- Η συνισταμένη δύναμη σε κλειστό ρευματοφόρο αγωγό οποιουδήποτε σχήματος που βρίσκεται σε ομογενές  $\mathbf{B}$  είναι  $0$ .

# Ροπή σε κλειστό ρευματοφόρο αγωγό σε ομογενές $\mathbf{B}$



$$F_1 = F_3 = 0$$

$$\text{Μέτρο των δυνάμεων: } F_2 = F_4 = IaB$$

Οι  $F_2, F_4$  αποτελούν ζεύγος

(αντίθετες αλλά με διαφορετικό σημείο εφαρμογής)

Η ροπή του ζεύγους ως προς τον άξονα από το ΚΜ του κλειστού αγωγού:

$$\tau = F_2 \frac{b}{2} + F_4 \frac{b}{2} = I \underbrace{ab}_A B = IAB$$

- Εστω ρευματοφόρος βρόγχος εντός ομογενούς  $\mathbf{B}$ , όπως στο σχήμα
- Στην γενική περίπτωση,  $\boldsymbol{\tau} = I\mathbf{A} \times \mathbf{B}$ .

- Η ποσότητα  $\mu=IA$  καλείται **μαγνητική διπολική ροπή**
- Προφανώς ,  $\boldsymbol{\tau}=\boldsymbol{\mu}\times\mathbf{B}$
- Η σχέση αυτή ισχύει για κάθε ρευματοφόρο βρόγχο οποιουδήποτε σχήματος και προσανατολισμού σε σχέση με το  $\mathbf{B}$ .
- Μονάδες της  $\boldsymbol{\mu}$ :  $\text{Am}^2=\text{N}\cdot\text{m Tesla}^{-1}=\text{Joule/Tesla}$
- ( $\text{Tesla}=\text{N Cb}^{-1} \text{m}^{-1} \text{sec}=\text{N Ampere}^{-1} \text{m}^{-1}$  )
- Δυναμική ενέργεια μαγνητικού διπόλου σε  $\mathbf{B}$ :  $U=-\boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{B} \rightarrow$ 
  - Ένας κλειστός ρευματοφόρος αγωγός θα έχει ελάχιστη δυναμική ενέργεια, όταν η  $\boldsymbol{\mu}$  είναι παράλληλη στο  $\mathbf{B}$  και μέγιστη  $U$  όταν  $\boldsymbol{\mu}$  και  $\mathbf{B}$  αντιπαράλληλα.

# Ο γυρομαγνητικός λόγος $\gamma$ στην κλασική φυσική

- Εστω φορτισμένο στερεό σώμα με ροπή αδρανείας που περιστρέφεται γύρω από τον άξονα του με  $\omega$
- Τότε μπορούμε να υπολογίσουμε:
  - την στροφορμή  $\mathbf{L}$  του λόγω ιδιοπεριστροφής (= ροπή αδρανείας  $\cdot \omega$ ) και
  - την μαγνητική ροπή  $\boldsymbol{\mu}$  (λόγω του φορτίου του)
- συνδέονται με μία σταθερά  $\gamma$  που ονομάζεται γυρομαγνητικός λόγος
  - $\boldsymbol{\mu} = \gamma \mathbf{L}$

# Παράδειγμα

- Υπολογίστε το  $\gamma$  για κυκλική λεπτή στεφάνη ακτίνας  $R$ , μάζας  $M$  με φορτίο  $Q$ .

# Μαγνητική διπολική ροπή φορτισμένου στοιχειώδους σωματιδίου

- Η  $\mu$  ενός στοιχειώδους σωματιδίου με φορτίο  $q$  παράγεται λόγω:
  - της περιφοράς του (αν πρόκειται για ηλεκτρόνιο) – τροχιακή στροφορμή και
  - της ιδιοπεριστροφής του (spin)



# Μαγνητική διπολική ροπή του ηλεκτρονίου του ατόμου Υδρογόνου (H): Κλασσική θεώρηση

- Εστω ηλεκτρόνιο με φορτίο  $q$  που περιφέρεται γύρω από τον πυρήνα του ατόμου σε κυκλική τροχιά ακτίνας  $r$ ,
  - Τότε δημιουργείται ρεύμα έντασης  $I$ .
- Η τροχιακή στροφορμή ενός σωματιδίου και η μαγνητική ροπή  $\boldsymbol{\mu}$  (λόγω του φορτίου του) συνδέονται με μία σταθερά  $\gamma$

$$\left. \begin{aligned} I = \frac{qv}{2\pi r} \Rightarrow \boldsymbol{\mu} = I\mathbf{A} = \frac{qv}{2\pi r} \pi r^2 = \frac{qvr}{2} \\ \mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \Rightarrow |L| = mrv \end{aligned} \right\} \Rightarrow \frac{\boldsymbol{\mu}}{L} = \frac{q}{2m} = \gamma$$

- Βάσει του ατομικού μοντέλου του Bohr:

- $m_e = 9.1 \cdot 10^{-31}$  kgr

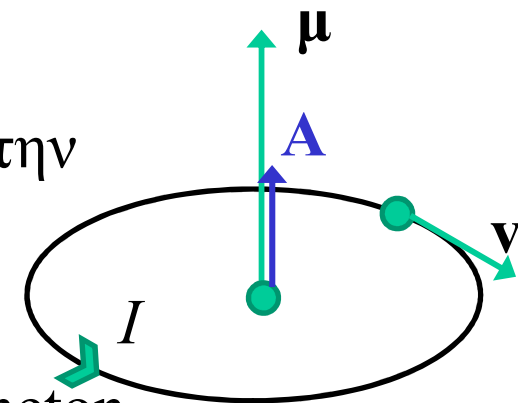
- $e = 1.6 \cdot 10^{-17}$  C

- $R = 5 \cdot 10^{-11}$  m

- Θεωρώντας την δύναμη Coulomb ίση με την κεντρομόλο:

- $I = 1.1 \cdot 10^{-3}$  Ampere

- $\mu_B = I \cdot A = 9.3 \cdot 10^{-24}$  Amp·m : Bohr Magneton



$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 9.274 \cdot 10^{-24} \text{ Joule} \cdot \text{Tesla}^{-1} = 5.8 \cdot 10^{-5} \text{ eV} \cdot \text{Tesla}^{-1}$$

- Ένα άτομο H θα έχει εντός εξωτερικού  $\mathbf{B}$  θα έχει
  - ελάχιστη δυναμική ενέργεια  $U$ , όταν η  $\mu_z$  είναι παράλληλη στο  $\mathbf{B}$  και
  - μέγιστη  $U$  όταν  $\mu_z$  και  $\mathbf{B}$  αντιπαράλληλα

# Κβαντικοί αριθμοί του ηλεκτρονίου

- Η κατάσταση ενός ηλεκτρονίου περιγράφεται πλήρως από 4 κβαντικούς αριθμούς:
  - $n$ : κύριος κβαντικός αριθμός
  - $l=0,1,2,\dots,n-1$ , δευτερεύων, αζιμουθιακός κβαντικός αριθμός τροχιακής στροφορμής
    - Καθορίζει τους υποφλοιούς της κάθε στοιβάδας
    - Το μέτρο της Τροχιακής στροφορμής  $L$  είναι κβαντισμένο:  
 $L=(h/2\pi)\sqrt{l(l+1)}$ :

$$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar, l = 0, 1, \dots, n-1$$

- Συμβολισμοί:  $l=0,1,2,3,\dots \rightarrow s, p, d, f, \dots$ , αντίστοιχα

- Μαγνητικός κβαντικός αριθμός  $m_l = -l, \dots, 0, \dots, +l$ .
  - Καθορίζει τα **τροχιακά** του κάθε υποφλοιού
  - Η  $z$  συνιστώσα της  $L$  είναι επίσης κβαντισμένη

$$L_z = m_l \hbar, \quad |m_l| \leq l$$

- Κβαντικός αριθμός του spin  $m_s = +1/2$  ή  $-1/2$

# Στοιβάδες και υποστοιβάδες

- Σε άτομο με πολλά  $e$  (δηλ. όχι το άτομο  $H$ ) κάθε τροχιακό έχει τη δική του ενέργεια
- Απαγορευτική αρχή του Pauli (1900 – 1958, Νομπελ φυσικής 1954):
  - Σε ένα άτομο δε μπορεί να υπάρχουν 2  $e$  με ίδιους και τους 4 κβαντικούς αριθμούς, ή ισοδύναμα:
  - Κάθε τροχιακό δε μπορεί να περιέχει  $> 2 e$ .

$n$	$l$	$m_l$	$e^-$	$e^-$
1	0	0	2	2
2	0	0	2	8
2	1	-1	6	
		0		
		1		
3	0	0	2	18
	1	-1	6	
		0		
		1		
	2	-2	10	
		-1		
		0		
		1		
		2		

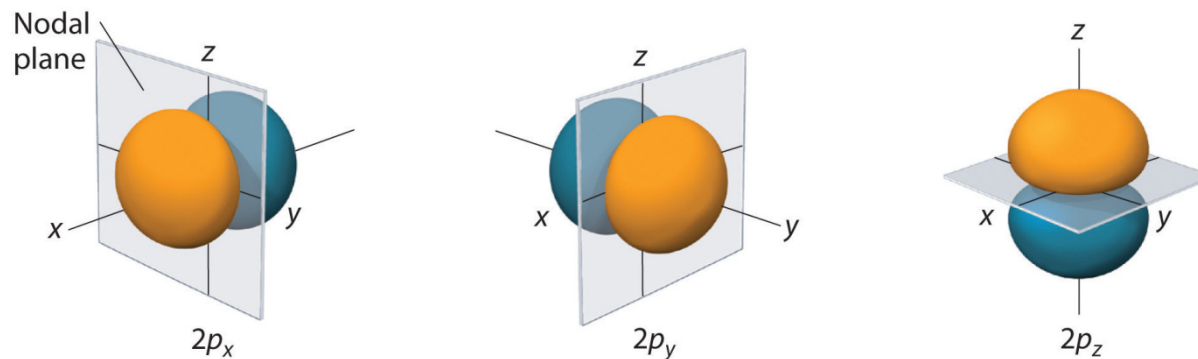
# Συμβολισμοί

$n$	$l$	$m_l$	Spectroscopic Notation	Shell
1	0	0	$1s$	$K$
2	0	0	$2s$	$L$
2	1	-1, 0, 1	$2p$	
3	0	0	$3s$	$M$
3	1	-1, 0, 1	$3p$	
3	2	-2, -1, 0, 1, 2	$3d$	
4	0	0	$4s$	$N$

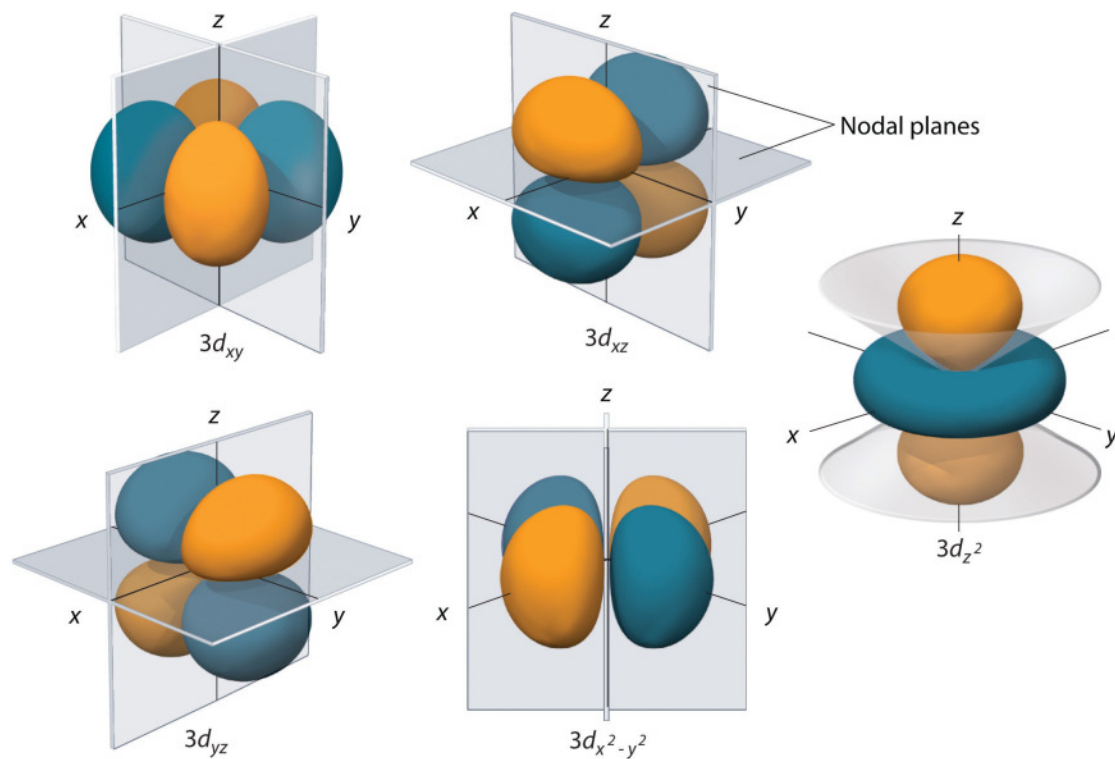


# Η έννοια του τροχιακού (orbital)

- Είναι το κβαντομηχανικό ισοδύναμο της τροχιάς
- Λόγω της αρχής του Pauli, στην κβαντ/κη ορίζεται, αντί της τροχιάς του  $e$ , περιοχή του χώρου που υπάρχει πιθανότητα  $>0$  να βρεθεί το  $e$ .



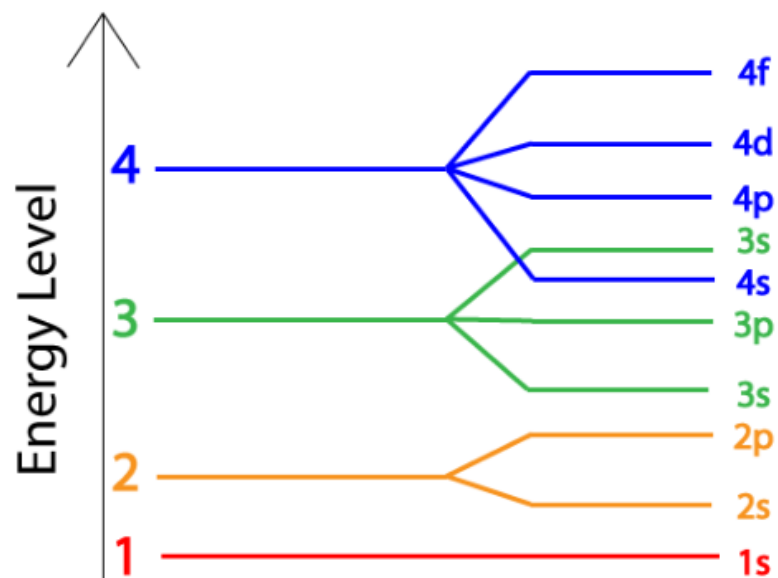
Οι xyz συνιστώσες του τροχιακού 2p για το άτομο H



## Τα 5 τροχιακά 3d για το άτομο Η

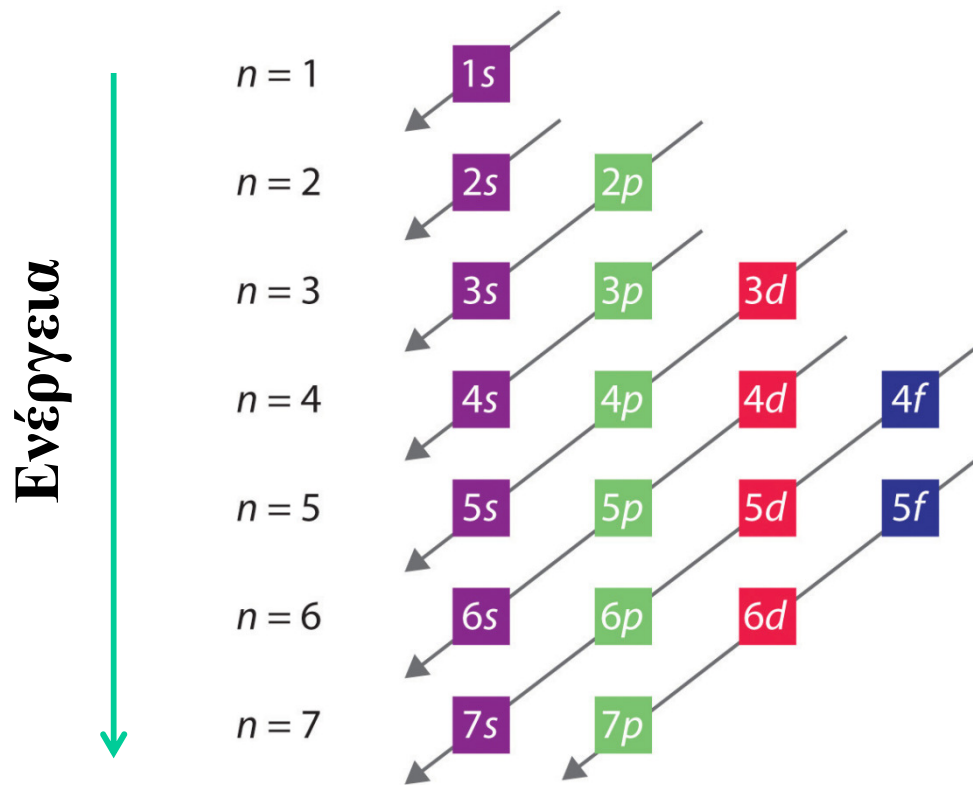
[https://2012books.lardbucket.org/books/principles-of-general-chemistry-v1.0/s10-the-structure-of-atoms.html#averill\\_1.0-ch06\\_s05\\_s05\\_f02](https://2012books.lardbucket.org/books/principles-of-general-chemistry-v1.0/s10-the-structure-of-atoms.html#averill_1.0-ch06_s05_s05_f02)

- Οι ενεργειακές στάθμες των τροχιακών για τις 4 πρώτες στοιβάδες, σε απουσία εξωτερικού μαγνητικού πεδίου
- Οι χαμηλότερες ενεργειακές στάθμες συμπληρώνονται πρώτες



<https://revisionscience.com/a2-level-level-revision/chemistry-level-revision/atomic-structure-bonding-periodicity/electrons-filling-subshells-and-orbitals>

- Συμπλήρωση των ατομικών τροχιακών με ηλεκτρόνια



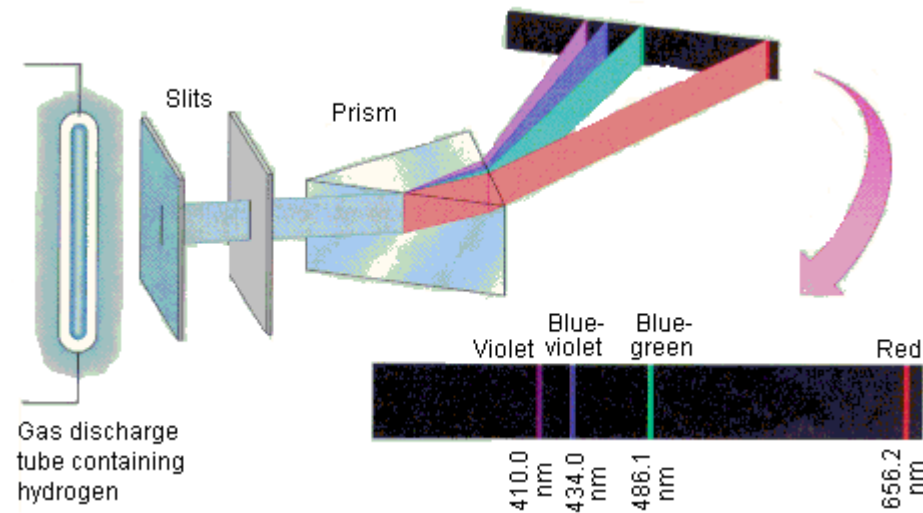
Element	Total Electrons	Orbital Diagram	Electron Configuration
<b>Li</b>	<b>3</b>		<b><math>1s^2 2s^1</math></b>
<b>Be</b>	<b>4</b>		<b><math>1s^2 2s^2</math></b>
<b>B</b>	<b>5</b>		<b><math>1s^2 2s^2 2p^1</math></b>
<b>C</b>	<b>6</b>		<b><math>1s^2 2s^2 2p^2</math></b>
<b>N</b>	<b>7</b>		<b><math>1s^2 2s^2 2p^3</math></b>
<b>NE</b>	<b>10</b>		<b><math>1s^2 2s^2 2p^6</math></b>
<b>Na</b>	<b>11</b>		<b><math>1s^2 2s^2 2p^6 3s^1</math></b>

<https://revisionscience.com/a2-level-level-revision/chemistry-level-revision/atomic-structure-bonding-periodicity/electrons-filling-subshells-and-orbitals>

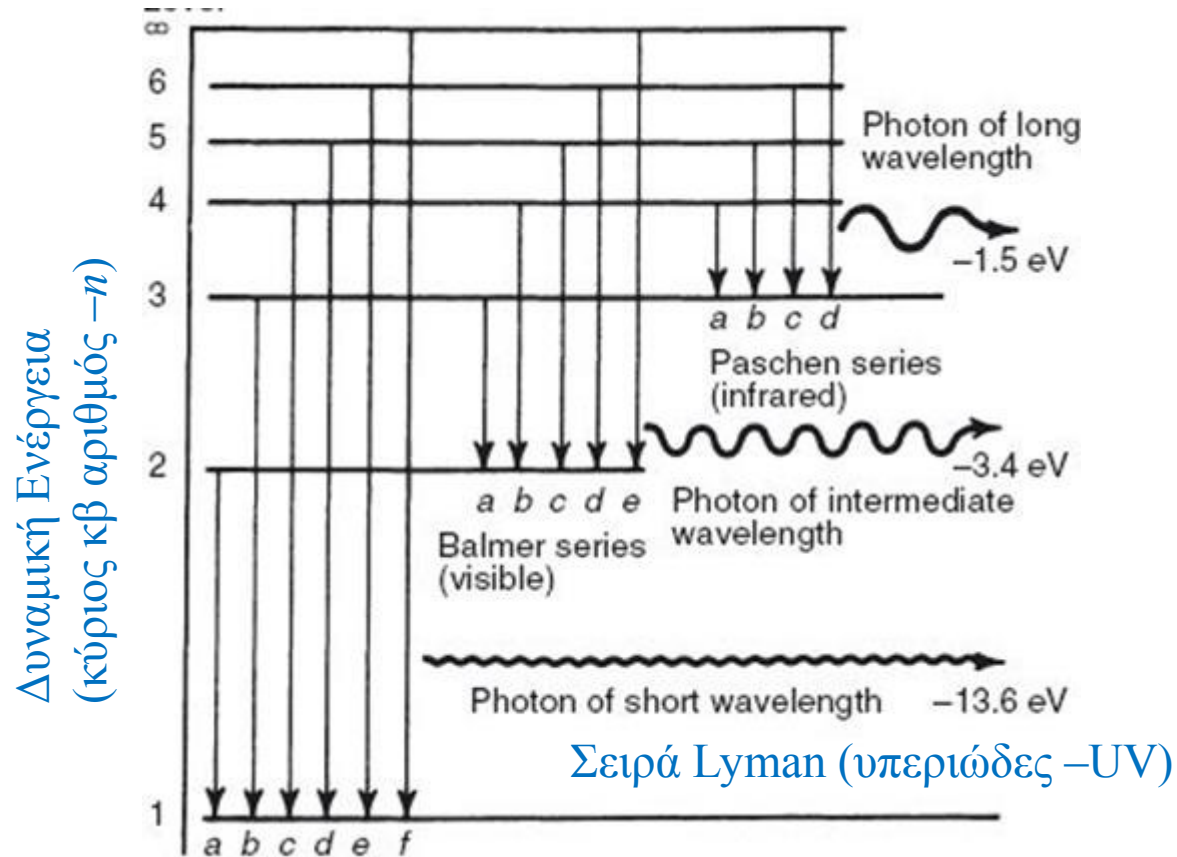
- Παράδειγμα: Να συμπληρωθούν τα ηλεκτρόνια του C ( $Z=6$ ):
  - $1s^2 2s^2 2p^2$ .
  - (Αρχή του Hund: τα e προτιμούν να είναι μόνα τους σε τροχιακά, με  $spin=+1/2$ )

# Αρχή της φασματοσκοπίας εκπομπής

- Από τα κύρια πειράματα που οδήγησαν στη κβαντική θεωρία
- Ένα δοχείο που περιέχει Η στα μόρια του οποίου παρέχεται ενέργεια ώστε να μπορούν να διεγερθούν



# Χαρακτηριστική ακτινοβολία ατόμων



- Τα μήκη κύματος  $\lambda$  για τις χαρακτηριστικές ακτινοβολίες εκπομπής που παράγονται με αποδιέγερση μεταξύ διαφορετικών στοιβάδων



# Υπολογισμός χαρακτηριστικών ενεργειών ατόμων

- Βάσει κύριου κβαντικού αριθμού, για το άτομο Η

$$\frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

- Σταθερά Rydberg:  $R=10^{-7} \text{ m}^{-1}$
- Για άλλα άτομα με ατομικό αριθμό  $Z$  (=αρ. πρωτονίων)

$$\frac{1}{\lambda} = Z^2 R \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

# Γυρομαγνητικός λόγος $\gamma$ στοιχειώδους σωματιδίου

- Η τροχιακή στροφορμή ενός σωματιδίου και η μαγνητική ροπή  $\boldsymbol{\mu}$  (λόγω του φορτίου του) συνδέονται με μία σταθερά  $\gamma$  που ονομάζεται γυρομαγνητικός λόγος:

$$\left. \begin{aligned} I = \frac{qv}{2\pi r} \Rightarrow \boldsymbol{\mu} = I\mathbf{A} = \frac{qv}{2\pi r} \pi r^2 = \frac{qvr}{2} \\ \mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \Rightarrow |L| = mrv \end{aligned} \right\} \Rightarrow \frac{\mu}{L} = \frac{q}{2m} = \gamma$$

- Τροχιακή στροφορμή  $L = n(h/2\pi)$

- Για τη Z συνιστώσα της τροχιακής στροφορμής L ισχύει:

$$\mu_z = \gamma L_z = \frac{-e}{2m_e} m_l \frac{h}{2\pi} = m_l \frac{-e}{2m_e} \hbar = -m_l \underbrace{\frac{e\hbar}{2m_e}}_{\text{Bohr's Magnetron}}$$

# Ιδιοπεριστροφή - spin

- Η ιδιο-περιστροφή ενός στοιχειώδους σωματίδιου προκαλεί ιδιο-στροφορμή.
  - Στην κβαντομηχανική ονομάζεται Spin
  - Το spin δε μπορεί να μετρηθεί, αλλά μόνο το μέτρο του και μία από τις συνιστώσες του (έστω ότι αυτή είναι η Z)
- Μέτρο spin για ηλεκτρόνιο στο άτομο H:  $S = \sqrt{3} \frac{\hbar}{2}$
- για την Z συνιστώσα του spin ισχύει:  $S_z = \pm m_s \hbar$

- Για το ηλεκτρόνιο
  - $m_s = +1/2$ ,  $\rightarrow S_z$  παράλληλη στο Z
  - $m_s = -1/2$ ,  $\rightarrow S_z$  αντι-παράλληλη στο Z
- Η z συνιστώσα λόγω σπιν παράγει (περίπου) 2x μεγαλύτερη  $\mu$  από την τροχιακή στροφορμή

$$\mu_{s,z} = g\gamma S_z = 2\gamma m_s \hbar = 2 \frac{e}{2m_e} m_s \hbar = \pm \frac{\hbar}{2}$$

- Ο παράγοντας g (electron spin g-factor) έχει τιμή σχεδόν 2:  $g=2.0023$

## μ ιδιοπεριστροφής φορτισμένου σωματιδίου

- Εστω στοιχειώδες σωματίδιο με φορτίο  $q$  που περιστρέφεται γύρω από τον άξονα του. Τότε μπορούμε να θεωρήσουμε ότι το φορτίο  $q$  περιφέρεται σε κυκλική τροχιά ακτίνας  $r$ , δημιουργώντας ρεύμα έντασης  $I$ .
- Η στροφορμή ενός σωματιδίου λόγω ιδιοπεριστροφής και η μαγνητική ροπή  $\mu$  (λόγω του φορτίου του) συνδέονται με την σταθερά  $\gamma$  που ονομάζεται γυρομαγνητικός λόγος

$$\left. \begin{aligned} I = \frac{qv}{2\pi r} \Rightarrow \mu = IA = \frac{qv}{2\pi r} \pi r^2 = \frac{qvr}{2} \\ \mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \Rightarrow |L| = mrv \end{aligned} \right\} \Rightarrow \frac{\mu}{L} = \frac{q}{2m} = \gamma$$

- Η σχέση αυτή ισχύει αρκεί η κατανομή της μάζας και του φορτίου να είναι οι ίδιες στο στοιχειώδες σωματίο.

# Φαινόμενο Zeeman

# Βασικές έννοιες του Πυρηνικού μαγνητικού Συντονισμού

- $\mu$ : διάνυσμα μαγνητικής ροπής: Κάθε φορτισμένο σωματίο που εκτελεί περιφορά ή περιστροφή παρουσιάζει διάνυσμα μαγνητικής ροπής
- Το  $\mu$  μετριέται σε μαγνητόνες (erg/gauss). Λόγω της διαφοράς μάζας η μαγνητόνη του p είναι 1836 φορές μικρότερη από τη μαγνητόνη του Bohr (για το e).

$$\mu_N = \frac{e\hbar}{2m_p c} = 5.05 \cdot 10^{-27} \text{ Joule} \cdot \text{Tesla}^{-1} = 3.152 \cdot 10^{-8} \text{ eV} \cdot \text{Tesla}^{-1}$$



# Κβαντομηχανική προσέγγιση του φαινομένου

- Πολλοί ατομικοί πυρήνες έχουν ιδιοστροφορμή (spin) με μέτρο

$$S = \sqrt{I(I+1)}\hbar$$

- $I$ : κβ αριθ. πυρηνικού spin
- Το μέτρο της στροφορμής καθορίζεται από την τιμή του αντίστοιχου κβαντικού αριθμού  $l \rightarrow$  το μέτρο της στροφορμής είναι κβαντισμένο
- Η προβολή του spin στον  $Z$  άξονα είναι επίσης κβαντισμένη

$$S_z = m_s \hbar, m_s = -I, -I + 1, \dots, I$$

- Όπου  $m_s$  ακέραιος που ονομάζεται μαγνητικός κβαντικός αριθμός
- Προφανώς  $|S_z| < |S|$ , που ικανοποιεί την αρχή της απροσδιοριστίας.

- Αν το σωματίδιο έχει spin  $\mathbf{S}$ , τότε  $\boldsymbol{\mu} = \gamma \mathbf{S}$ , όπου

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{g_p \mu_N}{\hbar} \mathbf{S} = \gamma \mathbf{S}$$

- $\gamma$  ο γυρομαγνητικός λόγος, σταθερά για κάθε σωματίδιο, με μονάδα MHz/T
- $g_p = 5.585$  g-factor, για το πρωτόνιο p
- Ο κλασικός ορισμός της δυναμικής ενέργειας  $E$  ενός μαγνητικού διπόλου μαγνητικής ροπής  $\boldsymbol{\mu}$ , μέσα σε ένα σταθερό ομογενές μαγνητικό πεδίο  $\mathbf{B}_0$  δίνεται από τη σχέση:

$$E = -\vec{\boldsymbol{\mu}} \cdot \vec{B}_0 = -\gamma \hbar m_s B_0$$

- Αφού η  $I_z$  είναι κβαντισμένη, ομοίως κβαντισμένη θα είναι και η  $E$ .
- Για σωματίδιο με spin=1/2, όπου up και down δηλώνει σωματίδιο με  $I_z$  παράλληλο και αντιπαράλληλο με το  $\mathbf{B}_0$ .

$$\left\{ \begin{array}{l} m = \frac{1}{2} \Rightarrow I_z = \frac{\hbar}{2} \Rightarrow E_{up} = -\frac{\gamma\hbar B_0}{2} \\ m = -\frac{1}{2} \Rightarrow I_z = -\frac{\hbar}{2} \Rightarrow E_{down} = \frac{\gamma\hbar B_0}{2} \end{array} \right.$$

- Η διαφορά των δύο ενεργειακών σταθμών είναι  $\Delta E$

$$\Delta E = E_{down} - E_{up} = \gamma\hbar B_0$$

- Άρα αν ένα σωματίδιο με  $I_z$  παράλληλη στο  $B_0$  προσλάβει  $\gamma$  με  $E_\gamma$ , τότε μπορεί να αλλάξει ο προσανατολισμός του  $I_z$ .  $\rightarrow$  Το σωματίδιο συντονίζεται με τη συχνότητα Larmor.

$$E_\gamma = \Delta E = \gamma\hbar B_0 = h\nu = \hbar\omega$$

- Όπως είδαμε η συχνότητα Larmor για το H είναι στην κλίμακα Mhz → απαιτούνται ραδιοκύματα και όχι ιονίζουσα ακτινοβολία.
- Κατανομή των καταστάσεων του spin:

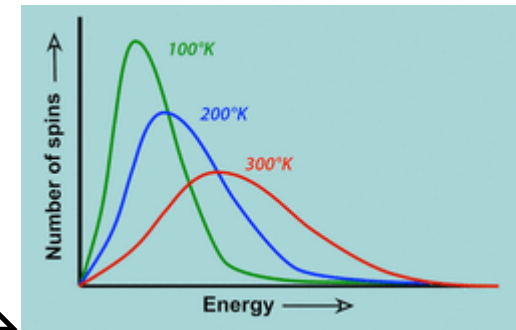
– Όταν ένας πληθυσμός από  $n$  στοιχειώδη δίπολα βρεθεί εντός εξωτερικού μαγνητικού πεδίου  $\mathbf{B}_0$ , ένας αριθμός  $n_{up}$  θα έχει  $I_z$  παράλληλη με το  $\mathbf{B}_0$  και ένας αριθμός σωματιδίων  $n_{down}$  θα έχει  $I_z$  αντιπαράλληλη με το  $\mathbf{B}_0$ .

– Ισχύει, σύμφωνα με την κατανομή Boltzmann:

$$\frac{n_{up}}{n_{down}} = e^{-\frac{\Delta E}{kT}} = e^{-\frac{\gamma \hbar B_0}{kT}}$$

– Δεδομένου ότι  $n = n_{up} + n_{down}$  (tanha=a για  $\alpha \rightarrow 0$ )

$$n_{up} - n_{down} = n \frac{1 - e^{-\frac{\gamma \hbar B_0}{kT}}}{1 + e^{-\frac{\gamma \hbar B_0}{kT}}} \Rightarrow \frac{n_{up} - n_{down}}{n} = \tanh\left(\frac{\gamma \hbar B_0}{2kT}\right) \cong \frac{\gamma \hbar B_0}{2kT}$$

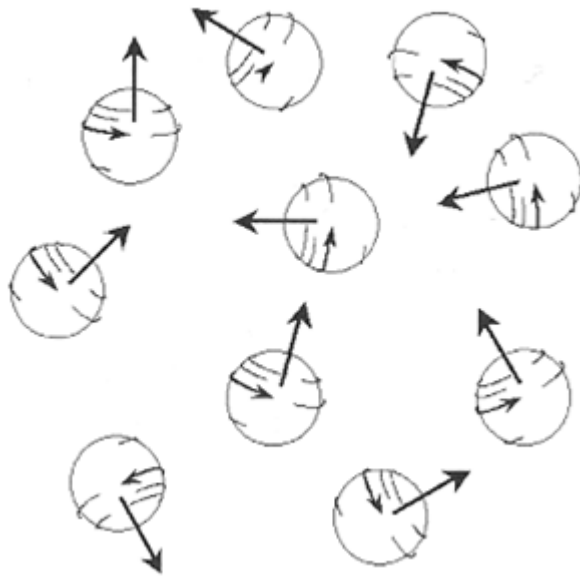


- Για  $\mathbf{B}_0=3\text{T}$  το πλεόνασμα των πρωτονίων που είναι προσανατολισμένα παράλληλα με το  $\mathbf{B}_0$  είναι 10 ανά 1.000.000.
- Συνολική μαγνήτιση  $\mathbf{M}$  δείγματος ορίζεται ως το διανυσματικό άθροισμα των επί μέρους μαγνητικών ροπών  $\mu$ .
  - Εντός σταθερού μαγνητικού πεδίου  $\mathbf{B}_0$ , οι εγκάρσιες συνιστώσες  $\mu_{xy}$  της μαγνήτισης των πυρήνων αλληλοεξουδετερώνονται
  - η συνολική  $\mathbf{M}$  οφείλεται στη διαφορά του αριθμού των πυρήνων με μαγνητική ροπή παράλληλη και αντιπαράλληλη με το  $\mathbf{B}_0$ .

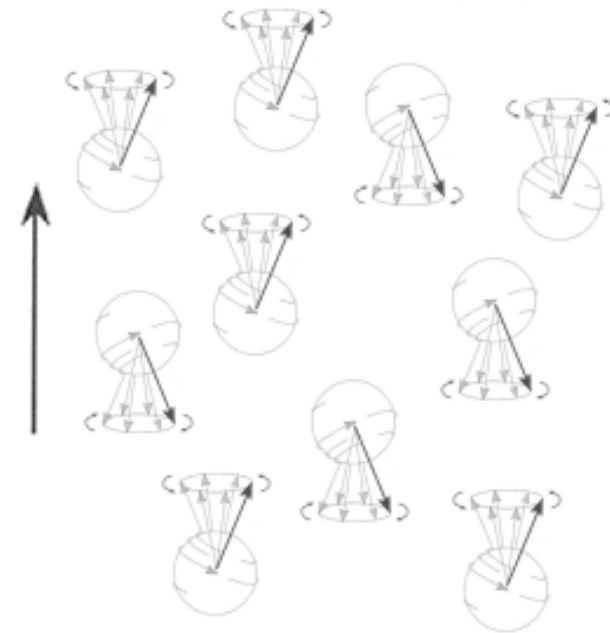
$$\mathbf{M} = (n_{up} - n_{down}) \gamma \hbar m \vec{k} \cong \frac{n \gamma \hbar}{4kT} \mathbf{B}_0, \vec{k} = \frac{\mathbf{B}_0}{\|\mathbf{B}_0\|}$$

- $\rightarrow$  Οι παράγοντες που επηρεάζουν τη συνολική μαγνήτιση είναι ο αριθμός των πυρήνων με spin  $\neq 0$ , η θερμοκρασία του δείγματος και η ένταση του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου.

# Συνοψίζοντας τα προηγούμενα



Πυρήνες πριν την εφαρμογή  
εξωτερικού μαγνητικού πεδίου  $\mathbf{B}_0$ .  
Μηδενική συνολική μαγνήτιση  $M$   
παράλληλα με το  $\mathbf{B}_0$



Πυρήνες μετά την εφαρμογή του  
εξωτερικού μαγνητικού πεδίου  $\mathbf{B}_0$ .  
Μη μηδενική συνολική μαγνήτιση  
 $M$  παράλληλα με το  $\mathbf{B}_0$ .

# Κλασική θεώρηση της κίνησης της $\mu$ εντός εξωτερικού $\mathbf{B}$

- Η κλασική θεώρηση του φαινομένου της κίνησης της  $\mu$  εντός εξωτερικού  $\mathbf{B}$ , είναι παρόμοια με την κίνηση της στροφορμής  $\mathbf{L}$  περιστρεφόμενου σώματος μάζας  $m$  εντός του πεδίου βαρύτητας  $\mathbf{g}$ :

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = \mathbf{r} \times m\mathbf{g}$$

- Η  $\mathbf{L}$  ανάλογο της  $\mu$ ,  $\mathbf{r}$  το διάνυσμα θέσης,  $\mathbf{g}$  το ανάλογο του  $\mathbf{B}_0$ .
- Οι αντίστοιχες εξισώσεις ονομάζονται Εξισώσεις Bloch

- Χρησιμοποιούνται για να περιγράψουν την πολύπλοκη κίνηση της  $\mu$  υπό την επίδραση πολλαπλών μαγνητικών πεδίων (παδία κλίσης σε διαφορετικούς άξονες, παλμοσειρές διαφόρων γωνικών κλπ)
- Θα μελετήσουμε μόνο την κίνηση υπό την επίδραση μόνο εξωτερικού  $\mathbf{B}_0$ .



## Εξισώσεις Bloch υπό την επίδραση του $B_0$

- Στατικό μαγνητικό πεδίο επαγωγής  $\mathbf{B}_0$  εξασκεί στη μαγνητική ροπή  $\boldsymbol{\mu}$  ενός πυρήνα με μη μηδενικό spin ροπή στρέψης  $\mathbf{C}$  που προκαλεί τη μεταβολή της στροφορμής του με ρυθμό ίσο με την εξασκούμενη ροπή στρέψης.

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{C} = \boldsymbol{\mu} \times \mathbf{B}_0 = \frac{d\mathbf{J}}{dt} \\ \mathbf{J} = \frac{\boldsymbol{\mu}}{\gamma} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \frac{d\boldsymbol{\mu}}{dt} = \gamma \boldsymbol{\mu} \times \mathbf{B}_0$$

- Αναλύοντας την εξίσωση της κίνησης της μαγνητικής ροπής ενός πυρήνα σε καγνητικό πεδίο  $(0,0,B_0)$  παίρνουμε:

$$\frac{d\boldsymbol{\mu}}{dt} = \gamma \boldsymbol{\mu} \times \mathbf{B}_0 \Rightarrow \begin{cases} \frac{d\mu_x}{dt} = \gamma B_0 \mu_y \\ \frac{d\mu_y}{dt} = -\gamma B_0 \mu_x \\ 0 \end{cases}$$

- Η λύση των παραπάνω εξισώσεων είναι η ακόλουθη:

$$\mu_x(t) = \mu_x(0) \cos(\omega_0 t + \varphi)$$

$$\mu_y(t) = \mu_y(0) \sin(\omega_0 t + \varphi)$$

$$\mu_z(t) = \mu_z(0)$$

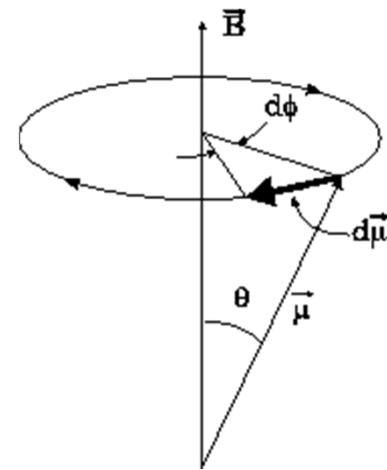
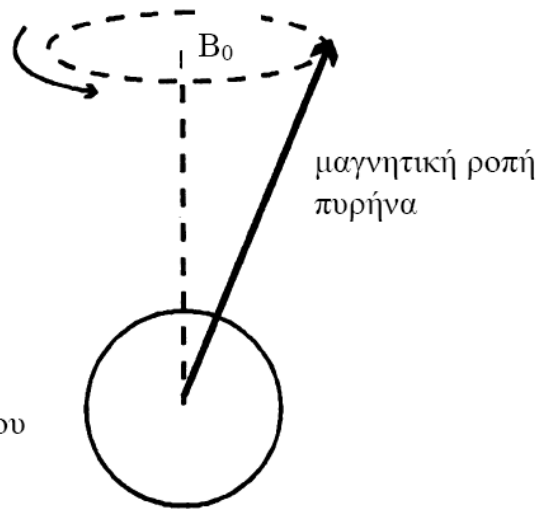
- Η μαγνητική διπολική ροπή εκτελεί μεταπτωτική κίνηση (*precession*) με γωνιακή ταχύτητα (Larmor)  $\omega_0$ :

$$\omega_{Larmor} = \gamma B_0, f_{Larmor} = \frac{\gamma}{2\pi} B_0$$

- $\gamma$  = γυρομαγνητικός λόγος που συνδέει την περιστροφή Larmor με το εξωτερικά εφαρμοζόμενο μαγνητικό πεδίο.
- Πυρήνες διαφορετικών στοιχείων έχουν διαφορετικό  $\gamma$ .
  - Για υδρογόνο  $\gamma/2\pi = 42.57$  MHz/Tesla.

μεταπτωτική  
περιστροφική  
κίνηση  
(precession)

πυρήνας  
υδρογόνου



- Αν ο μαζικός αριθμός  $A$  είναι περιττός  $\rightarrow$  spin ημιακέραιο

Μαζικός αριθμός $A$	Ατομικός αριθμός $Z$	spin
Περιττός		Ημιακέραιο
Άρτιος	Περιττός	Ακέραιο
Άρτιος	Άρτιος	0

## Παραδείγματα μαγνητικών ιδιοτήτων πυρήνων

Πυρήνας	Spin	Mhz/T	%
$^1\text{H}$	$\frac{1}{2}$	42,57	99,98
$\text{H}_2$	1	6,54	0,015
$^{13}\text{C}$	$\frac{1}{2}$	10,71	1,108
$^{12}\text{C}$	0	-	98
$^{14}\text{N}$	1	3,08	99,63
$^{15}\text{N}$	$\frac{1}{2}$	-4,31	0,37
$^{16}\text{O}$	0	0	99,96
$^{17}\text{O}$	$\frac{5}{2}$	-5,77	0,037