

Precessão do Spin em Campo Magnético

Monica A Caracanhas

30/11/2020

Momento de dipolo magnético:

- Classicamente temos a seguinte relação válida para uma partícula carregada:

$$\mu = \frac{q}{2m} \mathbf{S}$$

μ é o momento de dipolo, q a carga da partícula, m a massa, e $\mathbf{S}$ seu momento angular devido à rotação (spinning).

- Em mecânica quântica temos que adicionar uma constante adimensional “ g ” específica para cada partícula:

$$\mu = g \frac{q}{2m} \mathbf{S} = g \frac{q\hbar}{2m} \frac{\mathbf{S}}{\hbar}$$

- fator “ $q\hbar/(2m)$ ” tem unidades de momento de dipolo.

magneton de Born: $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 5.78 \times 10^{-11} \frac{\text{MeV}}{\text{Tesla}}$

magneton nuclear: $\mu_N = \frac{e\hbar}{2m_p} = 3.15 \times 10^{-14} \frac{\text{MeV}}{\text{Tesla}}$

Representaremos as constantes pelo fator γ

$$\boldsymbol{\mu} = \gamma \mathbf{S} \qquad \gamma = \frac{gq}{2m}$$

Se considerarmos a partícula no campo magnético $\mathbf{B}$, teremos o Hamiltoniano para o sistema de Spin:

$$H_S = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = -\gamma \mathbf{B} \cdot \mathbf{S} = -\gamma (B_x \hat{S}_x + B_y \hat{S}_y + B_z \hat{S}_z)$$

Em particular, para o campo na direção z, $\vec{B} = B\hat{z}$ teremos:

$$H_S = -\gamma B \hat{S}_z$$

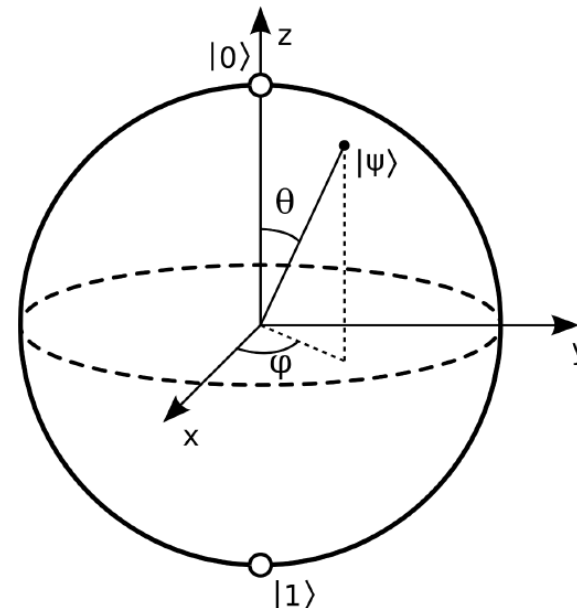
Dado o Hamiltoniano

$$H_S = -\gamma B \hat{S}_z$$

Equação autovalor-autovetor correspondente:

$$H_S|+\rangle = -\frac{\gamma B \hbar}{2}|+\rangle$$

$$H_S|-\rangle = +\frac{\gamma B \hbar}{2}|-\rangle$$



$$|\psi\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |0\rangle + e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} |1\rangle$$

Considere o spin em tempo zero apontando na direção especificada pelos ângulos (θ_0, ϕ_0)

$$|\chi(0)\rangle = \cos \frac{\theta_0}{2} |+\rangle + \sin \frac{\theta_0}{2} e^{i\phi_0} |-\rangle$$

Evolução temporal do estado

$$\mathcal{U}(t, 0) = \exp\left(-\frac{iH_{St}}{\hbar}\right) = \exp\left(-\frac{i(-\gamma Bt)\hat{S}_z}{\hbar}\right)$$

Considere o operador unitário (definido pelo vetor unitário $\mathbf{n}$ e ângulo α) dado por

$$R_{\mathbf{n}}(\alpha) = \exp\left(-\frac{i\alpha\hat{S}_{\mathbf{n}}}{\hbar}\right) \quad \hat{S}_{\mathbf{n}} \equiv \mathbf{n} \cdot \mathbf{S}$$

Quando atuar sobre o estado de spin, este operador rotaciona esse estado por um ângulo α em torno do eixo definido pelo vetor $\mathbf{n}$.

Comparando os operadores unitários $R_{\mathbf{n}}(\alpha)$ e $\mathcal{U}(t, 0)$,

concluimos que $\mathcal{U}(t, 0)$ seria o gerador das rotações de um ângulo $(-\gamma Bt)$ em torno do eixo z.

Atuando $\mathcal{U}(t, 0)$ sobre o estado inicial $|\chi(0)\rangle$ teremos:

$$H_S|\pm\rangle = \mp\frac{\gamma B\hbar}{2}|\pm\rangle$$

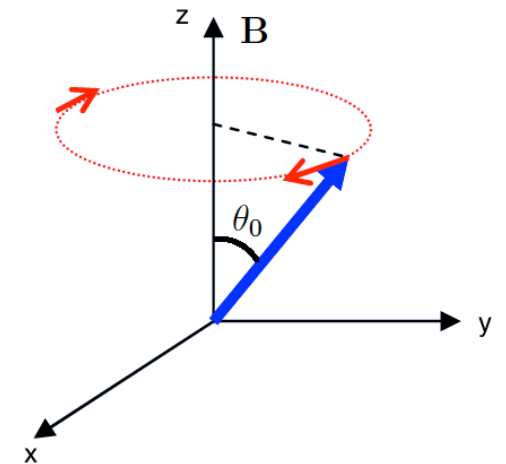
$$\begin{aligned} |\chi(t)\rangle &= e^{-iH_S t/\hbar} |\chi(0)\rangle = e^{-iH_S t/\hbar} \left(\cos \frac{\theta_0}{2} |+\rangle + \sin \frac{\theta_0}{2} e^{i\phi_0} |-\rangle \right) \\ &= \cos \frac{\theta_0}{2} e^{+i\gamma B t/2} |+\rangle + \sin \frac{\theta_0}{2} e^{i\phi_0} e^{-i\gamma B t/2} |-\rangle \end{aligned}$$

Fatorizando o fator de fase que multiplica o auto-estado $|+\rangle$:

$$|\chi(t)\rangle = e^{+i\gamma B t/2} \left(\cos \frac{\theta_0}{2} |+\rangle + \sin \frac{\theta_0}{2} e^{i(\phi_0 - \gamma B t)} |-\rangle \right) \quad \text{- fator de fase global é irrelevante.}$$

Teremos o estado do spin em tempo t definido pelos ângulos:

$$\theta(t) = \theta_0 \quad \phi(t) = \phi_0 - \gamma B t$$



Precessão de Larmor

Na teoria do eletromagnetismo o momento de dipolo experimenta um torque $\boldsymbol{\tau}$ devido ao campo magnético

$$\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\mu} \times \mathbf{B}$$

Equação da mecânica clássica para taxa de variação do momento angular devido ao torque:

$$\frac{d\mathbf{S}}{dt} = \boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\mu} \times \mathbf{B} = \gamma \mathbf{S} \times \mathbf{B}$$

$$\frac{d\mathbf{S}}{dt} = -\gamma \mathbf{B} \times \mathbf{S}$$

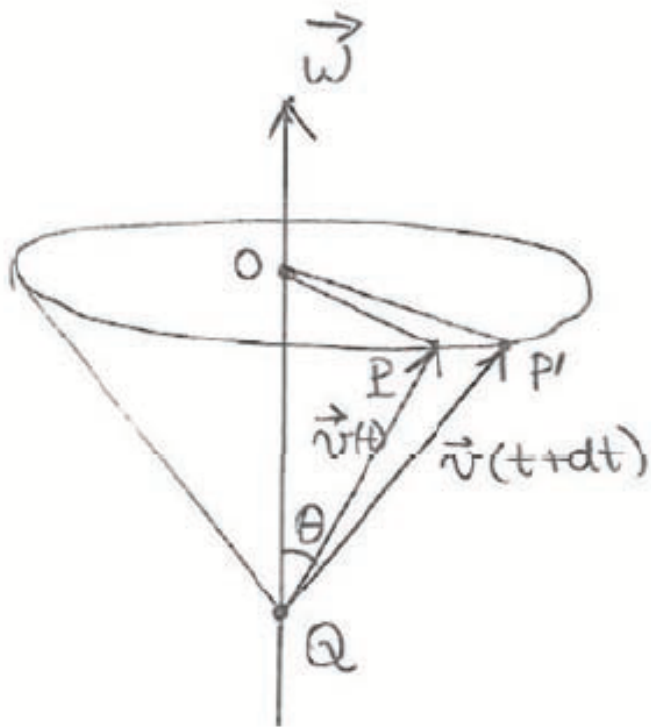
Equação mostra que o vetor dependente do tempo $\mathbf{S}$ rotaciona com velocidade angular dada por:

$$\boldsymbol{\omega}_L = -\gamma \mathbf{B}$$

- Frequência de Larmor.

Um vetor $\mathbf{v}$ rotacionando com velocidade angular $\boldsymbol{\omega}$ satisfaz a equação diferencial

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{v}$$



$$\angle POP' = \omega dt$$

$$|OP| = |OP'| = v \sin \theta$$

$$|PP'| = (\omega dt) v \sin \theta$$

$$\vec{PP'} = \vec{\omega} \times \vec{v} dt$$

O Hamiltoniano do spin no campo magnético por ser escrito em termos de $\boldsymbol{\omega}_L$

$$H_S = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = -\gamma \mathbf{B} \cdot \mathbf{S} = \boldsymbol{\omega}_L \cdot \mathbf{S}$$

Para campos magnéticos estáticos (independentes do tempo), $\boldsymbol{\omega}_L$ independe de t. Podemos reescrever o operador evolução temporal:

$$\mathcal{U}(t, 0) = \exp(-iH_S t/\hbar) = \exp\left(-i \frac{\boldsymbol{\omega}_L \cdot \mathbf{S}}{\hbar} t\right)$$

ou ainda, considerando a projeção do spin na direção de $\boldsymbol{\omega}_L \rightarrow \boldsymbol{\omega}_L = \omega_L \mathbf{n}$, $\mathbf{n} \cdot \mathbf{n} = 1$

$$\mathcal{U}(t, 0) = \exp\left(-i \frac{\omega_L t \hat{S}_n}{\hbar}\right) = R_n(\omega_L t)$$

O operador de evolução temporal $\mathcal{U}(t, 0)$ rotaciona os estados de spin pelo ângulo “ $\omega_L t$ ” em torno do eixo $\mathbf{n}$

$H_S = \boldsymbol{\omega}_L \cdot \mathbf{S} \rightarrow$ o estado de spin precessiona com velocidade angular $\boldsymbol{\omega}_L$.

Valor esperado do operador $\mathbf{S} \rightarrow \langle \mathbf{S} \rangle$ no estado $|\chi(t)\rangle$

Consideramos a partícula de spin $\frac{1}{2}$ no campo magnético uniforme $\mathbf{B}$:

$$\vec{B} = B\hat{z}$$

teremos o Hamiltoniano na forma matricial

$$H_S = -\gamma B \hat{S}_z = -\gamma B \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Equação autovalor-autovetor correspondente (autovetores de H_S serão os mesmo de S_z):

$$H_S |\pm\rangle = \mp \frac{\gamma B \hbar}{2} |\pm\rangle$$

$$E_+ = -\frac{\gamma B \hbar}{2}$$

$$E_- = +\frac{\gamma B \hbar}{2}$$

- a energia é menor quando o momento de dipolo é paralelo ao campo (como no eletromagnetismo clássico).

As constantes a e b podem ser determinadas através da condição inicial

$$|\chi(0)\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

Lembrando que $|a|^2 + |b|^2 = 1$, escolheremos

$$a = \cos(\theta/2) \quad b = \sin(\theta/2)$$

Então:

$$|\chi(t)\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) & e^{i\frac{\gamma B t}{2}} \\ \sin(\theta/2) & e^{-i\frac{\gamma B t}{2}} \end{pmatrix}$$

Componente **x**:

$$\langle S_x \rangle = \langle \chi(t) | S_x | \chi(t) \rangle = (\cos(\theta/2) e^{-i \frac{\gamma B t}{2}} \quad \sin(\theta/2) e^{i \frac{\gamma B t}{2}}) \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) e^{i \frac{\gamma B t}{2}} \\ \sin(\theta/2) e^{-i \frac{\gamma B t}{2}} \end{pmatrix}$$

$$= \frac{\hbar}{2} (\cos(\theta/2) e^{-i \frac{\gamma B t}{2}} \quad \sin(\theta/2) e^{i \frac{\gamma B t}{2}}) \begin{pmatrix} \sin(\theta/2) e^{-i \frac{\gamma B t}{2}} \\ \cos(\theta/2) e^{i \frac{\gamma B t}{2}} \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \langle S_x \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin \theta \cos(\gamma B t)$$

Componente **y**:

$$\langle S_y \rangle = \langle \chi(t) | S_y | \chi(t) \rangle = (\cos(\theta/2) e^{-i \frac{\gamma B t}{2}} \quad \sin(\theta/2) e^{i \frac{\gamma B t}{2}}) \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) e^{i \frac{\gamma B t}{2}} \\ \sin(\theta/2) e^{-i \frac{\gamma B t}{2}} \end{pmatrix}$$

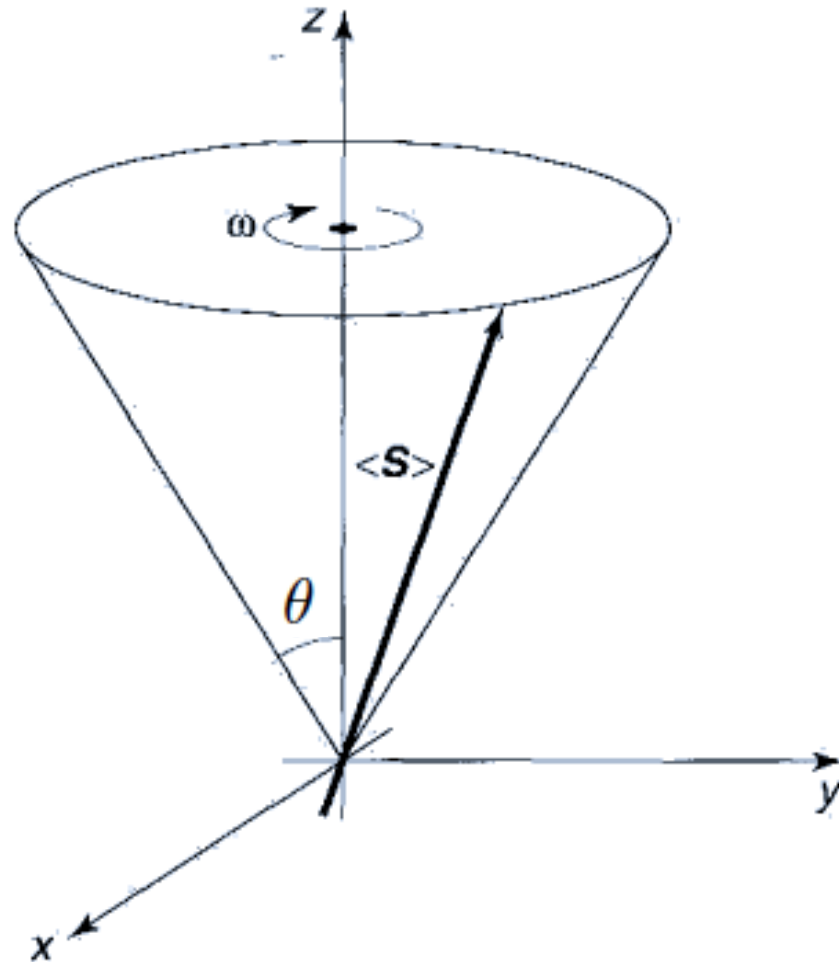
$$\Rightarrow \langle S_y \rangle = -\frac{\hbar}{2} \sin \theta \sin(\gamma B t)$$

Componente **z**:

$$\begin{aligned} \langle S_z \rangle &= \langle \chi(t) | S_z | \chi(t) \rangle = (\cos(\theta/2) e^{-i \frac{\gamma B t}{2}} \quad \sin(\theta/2) e^{i \frac{\gamma B t}{2}}) \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) e^{i \frac{\gamma B t}{2}} \\ \sin(\theta/2) e^{-i \frac{\gamma B t}{2}} \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar}{2} (\cos(\theta/2) e^{-i \frac{\gamma B t}{2}} \quad \sin(\theta/2) e^{i \frac{\gamma B t}{2}}) \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) e^{i \frac{\gamma B t}{2}} \\ -\sin(\theta/2) e^{-i \frac{\gamma B t}{2}} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \langle S_z \rangle = \frac{\hbar}{2} \cos \theta$$

Temos que $\langle \mathbf{S} \rangle$ faz um ângulo fixo θ em relação ao eixo z , e precessiona na direção do campo com a frequência de Larmor $\boldsymbol{\omega} = \boldsymbol{\omega}_L = \gamma \mathbf{B}$



Magnetic Resonance Imaging

Based on work on nuclear magnetic resonance by Edward Purcell, who worked at MIT's radiation laboratory, and Felix Bloch. They got the Nobel prize for this work in 1952.

The human body is mostly composed of water molecules. In those we have many hydrogen atoms, whose nuclei are protons and are the main players through their magnetic dipole moments (nuclear dipoles).

With a given external and large constant magnetic field B_0 , at a given temperature, there is a net alignment of nuclear spins along B_0 . This is called the "longitudinal magnetization". For all intents and purposes we have a net number of spins in play.

We apply a 90° pulse so that we get the spins to rotate with Larmor frequency ω_0 in the (x, y) plane. These rotating dipoles produce an oscillating magnetic field which is a signal that can be picked up by a receiver. The magnitude of the signal is proportional to the proton density. This is the first piece of information and allows differentiation of tissues.

The typical MRI machine has a B_0 of about 2T (two tesla or 20,000 gauss). This requires a superconducting magnet with cooling by liquid helium. In addition there are about three gradient magnets, each of about 200 gauss. They change locally the value of B_0 and thus provide spatial resolution as the Larmor frequency becomes spatially dependent. One can thus attain spatial resolutions of about half a millimetre! MRI's are considered safe, as there is no evidence of biological harm caused by very large static magnetic fields.