Zeitschrift: Archives des sciences [1948-1980]

Herausgeber: Société de Physique et d'Histoire Naturelle de Genève

Band: 10 (1957)

Heft: 6: Colloque Ampère

Artikel: Équations macroscopiques de la résonance quadrupolaire et applications

Autor: Lurçat, François

DOI: https://doi.org/10.5169/seals-738792

Equations macroscopiques de la résonance quadrupolaire et applications

par François Lurçat

Laboratoire d'Electronique et Radioélectricité, Université de Paris

---

En résonance magnétique nucléaire, on utilise les équations macroscopiques de Bloch [1] pour étudier les phénomènes d'induction, le déplacement de fréquence dû à la composante du champ radiofréquence tournant dans le mauvais sens, etc. Ces équations ont été obtenues initialement sans l'aide de la mécanique quantique, mais on sait qu'elles s'obtiennent également à l'aide de l'équation quantique:

$$\frac{d\langle A\rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar}\langle[\mathcal{H}, A]\rangle \tag{1}$$

où $\mathcal{H}$ est l'hamiltonien d'un noyau placé dans le champ magnétique et $\langle A \rangle$ la valeur moyenne de la grandeur A. (On néglige les phénomènes de relaxation.)

En résonance quadrupolaire, on peut obtenir de même les équations macroscopiques [2, 3] à l'aide de l'équation (1), $\mathcal{H}$ étant l'hamiltonien d'un noyau placé dans un gradient de champ électrique d'axe Oz et un champ magnétique perpendiculaire à Oz:

$$\mathcal{H} = \hbar\,\omega_0\left(I_z^2 - \frac{1}{3}I(I+1)\right) - \frac{1}{2}\gamma\hbar\,(H^+I^- + H^-I^+)$$

$$\omega_0 = \frac{3\,e\,q\,Q}{4\,I\,(2\,I-1)},\quad H^{\pm} = H_x \pm i\,H_y,\quad I^{\pm} = I_x \pm i\,I_y\,.$$

Nous examinerons le cas le plus simple, celui de noyaux de spin $I = 1$. On écrit les équations d'évolution des quantités:

$$y_{10} = \langle I_z\rangle,\quad y_{1,\pm1} = \langle \mp I^{\pm}\rangle,\quad y_{20} = \left\langle \sqrt{\frac{2}{3}}\left(3\,I_z^2 - I\,(I+1)\right)\right\rangle$$

$$y_{2,\pm1} = \langle \mp\left(I_z I^{\pm} + I^{\pm} I_z\right)\rangle\quad y_{2,\pm2} = \langle (I^{\pm})^2\rangle.$$

Ces équations d'évolution sont:

$$
(2)\quad \begin{cases}
\dfrac{d}{dt} y_{1,\pm 1} = \pm\, i\,\omega_0\, y_{2,\pm 1} - \dfrac{i\gamma}{2} \mathrm{H}^{\pm} \sqrt{2}\, y_{10} \\[2mm]
\dfrac{d}{dt} y_{2,\pm 1} = \pm\, i\,\omega_0\, y_{1,\pm 1} - \dfrac{i\gamma}{2} \left(\mathrm{H}^{\pm} \sqrt{6}\, y_{20} + 2\,\mathrm{H}^{\mp}\, y_{2,\pm 2}\right) \\[2mm]
\dfrac{d}{dt} y_{10} = \qquad\qquad - \dfrac{i\gamma}{2} \sqrt{2} \left(\mathrm{H}^{-} y_{11} + \mathrm{H}^{+} y_{1,-1}\right) \\[2mm]
\dfrac{d}{dt} y_{20} = \qquad\qquad - \dfrac{i\gamma}{2} \sqrt{6} \left(\mathrm{H}^{+} y_{2,-1} + \mathrm{H}^{-} y_{21}\right) \\[2mm]
\dfrac{d}{dt} y_{2,\pm 2} = \qquad\qquad - \dfrac{i\gamma}{2}\, 2\, \mathrm{H}^{\pm}\, y_{2,\pm 1}
\end{cases}
$$

Pour les intégrer, on utilise la transformation analogue à celle qui conduit en résonance magnétique aux « coordonnées tournantes »:

$$
\begin{cases}
y_{1,\pm 1} = \overset{*}{y}_{1,\pm 1} \cos \omega_0 t \pm i\, \overset{*}{y}_{2,\pm 1} \sin \omega_0 t \\
y_{2,\pm 1} = \pm\, i\, \overset{*}{y}_{1,\pm 1} \sin \omega_0 t + \overset{*}{y}_{2,\pm 1} \cos \omega_0 t \\
y_{k\mu} = \overset{*}{y}_{k\mu} \quad (\mu \neq \pm 1)\,.
\end{cases}
$$

En portant cette transformation dans (2), en supposant que le champ $\mathrm{H}_x = \mathrm{H}_1 \cos \omega_0 t$, $\mathrm{H}_y = \mathrm{H}_z = 0$ a la fréquence de résonance, et en remplaçant dans les seconds membres des équations obtenues les coefficients rapidement variables par leurs valeurs moyennes (approximation analogue à celle qui consiste, en résonance magnétique, à négliger la composante du champ radiofréquence qui tourne dans le mauvais sens), on obtient, en tenant compte des conditions initiales:

$$
\begin{cases}
\dfrac{d}{dt} \overset{*}{y}_{21} = - \dfrac{i\gamma}{2} \mathrm{H}_1 \left(\sqrt{\dfrac{3}{2}}\, \overset{*}{y}_{20} + \overset{*}{y}_{22}\right) \\[2mm]
\dfrac{d}{dt} \overset{*}{y}_{22} = - \dfrac{i\gamma}{2} \mathrm{H}_1\, \overset{*}{y}_{21} \\[2mm]
\dfrac{d}{dt} \overset{*}{y}_{20} = - \dfrac{i\gamma}{2} \mathrm{H}_1\, 2 \sqrt{\dfrac{3}{2}}\, \overset{*}{y}_{21} \\[2mm]
\overset{*}{y}_{1,\pm 1} = \overset{*}{y}_{10} = 0 \quad \overset{*}{y}_{21} = \overset{*}{y}_{2,-1} \quad \overset{*}{y}_{22} = \overset{*}{y}_{2,-2}\,.
\end{cases}
$$

L'intégration de ces équations fournit les résultats suivants: l'aimantation est

$$
\mathrm{M}_x = \left(\frac{1}{2}\, \chi\, \frac{\omega_0}{\gamma}\right) \sin\left(\gamma\, \mathrm{H}_1 t\right) \sin \omega_0 t\,, \qquad \mathrm{M}_y = \mathrm{M}_z = 0
$$

où χ est la susceptibilité magnétique statique; c'est-à-dire que l'amplitude du signal d'induction est deux fois plus faible, à fréquence égale, en résonance quadrupolaire (pour $I = 1$) qu'en résonance magnétique. Le tenseur moment quadrupolaire (macroscopique) est:

$$D_{zz} = D_{zz}^{(0)}\left(\frac{1}{4} + \frac{3}{4}\cos(\gamma H_1 t)\right) \cdot \quad D_{xx} = -\frac{1}{2} D_{zz}^{(0)} \cdot \quad D_{yy} = D_{zz}^{(0)}\left(\frac{1}{4} - \frac{3}{4}\cos(\gamma H_1 t)\right)$$

$$D_{xy} = D_{xz} = 0 \qquad D_{yz} = \frac{3}{4} D_{zz}^{(0)} \sin(\gamma H_1 t) \cos \omega_0 t \, .$$

Enfin, si on tient compte des coefficients rapidement variables qu'on a assimilés ci-dessus à la valeur moyenne, on trouve que la fréquence de résonance est déplacée; le déplacement relatif est donné par

$$\frac{\delta\omega}{\omega_0} = \frac{(\gamma H_1)^2}{4\,\omega_0^2}$$

alors qu'en résonance magnétique on a, à la même fréquence et avec la même amplitude du champ radiofréquence, un déplacement quatre fois plus petit [8]:

$$\frac{\delta\omega}{\omega_0} = \frac{(\gamma H_1)^2}{16\,\omega_0^2} \, .$$

Les équations macroscopiques s'écrivent et s'intègrent de façon analogue pour les noyaux de spin $\frac{3}{2}$, $\frac{5}{2}$, etc. [3]. Elles permettent l'étude des phénomènes d'induction en résonance quadrupolaire, prévus par M. le Professeur Kastler [4] et découverts par Hahn-Herzog [5] et Bloom-Norberg [6]. Signalons que Bloom, Hahn et Herzog [7] ont obtenu, à l'aide d'une méthode différente, d'autres équations macroscopiques.

1. Bloch, *Phys. Rev.*, *70*, 1946, p. 460.
2. Lurçat, *C. R.*, *238*, 1954, p. 1386.
3. —— Thèse, Paris, 1956.
4. Kastler, *Experientia*, VIII/1, 1952, p. 1.
5. Hahn, Herzog, *Phys. Rev.*, *93*, 1954, p. 639.
6. Bloom, Norberg, *Phys. Rev.*, *93*, 1954, p. 638.
7. Bloom, Hahn, Herzog, *Phys. Rev.*, *97*, 1955, p. 1699.
8. Bloch, Siegert, *Phys. Rev.*, *57*, 1940, p. 522.