

Metal Fiziđi

Ders Notları

Ders İeriđi

- Manyetik Rezonans
- İnce Yapı Yarılmaması
- İnce Yapı Etkileşme Enerjisi
- Hareket Denklemleri

Manyetik Rezonans

Burada çekirdek ve elektronların spin açısal momentumlarının dinamik etkileri anlatılacaktır. manyetik Rezonansı birbirinden farklı şekillerde araştırabiliriz.

NMR: Nükleer manyetik Rezonans

NQR : Nükleer Quadrupol Rezonans

EPR : Elektron paramanyetik Rezonans

ESR : Elektron spin Rezonans

Nükleer manyetik Rezonans:

manyetik momenti μ_z , açısal momentumu $\hbar I$ olan bir çekirdeği B_0 olan bir manyetik alan içine yerleştirelim. manyetik alan içinde, çekirdeğin manyetik momenti ile manyetik alan etkileşerek enerjisini oluşturmaktadırlar.

$$\mu_z = \gamma \hbar I_z$$

olduğundan;

$$U = -B_0 \gamma \hbar I_z = -B_0 \gamma \hbar m_l$$

$$m_l = -l, -l + 1, \dots, l - 1, l$$

Eğer $I=1/2$ ise, manyetik alanla etkileşme sonunda iki enerji düzeyi ortaya çıkmaktadır.

$$m_I = -1/2 \rightarrow U = \frac{\gamma B_0 \hbar}{2}$$

$$m_I = +1/2 \rightarrow U = -\frac{\gamma B_0 \hbar}{2}$$

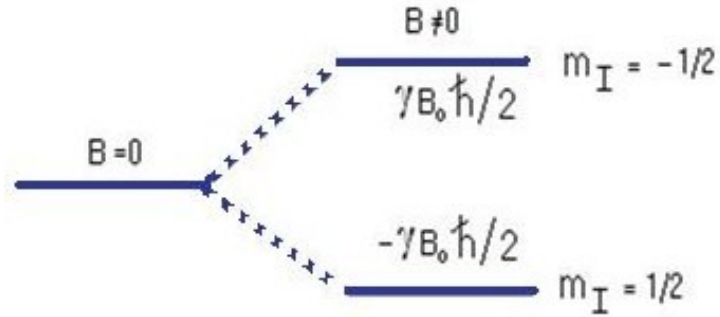
enerjilerine sahip iki enerji düzeyi karşımıza çıkmaktadır.

Bu iki enerji düzeyi arasındaki enerji farkı:

$$\Delta E = \hbar \omega_0 = \hbar B_0 \gamma$$

Buradan $\omega_0 = B_0 \gamma$

Bu temel manyetik rezonans soğurması için en önemli koşuldur.



İnce Yapı Yarılması

İnce yapı yarılması, çekirdeğin manyetik momenti ile elektronunu manyetik momenti arasındaki etkileşme sonucunda ortaya çıkmaktadır.

Çekirdekdeki durgun bir gözlemciye göre, etkileşmeye çekirdeğin etrafında dönen elektronun yarattığı manyetik alan neden olmaktadır.

Eğer elektron, $L \neq 0$ olan bir durumda ise, çekirdek etrafında bir elektron akımı oluşacaktır. Eğer $L=0$ ise, elektronun spin açısal momentumundan dolayı spin elektron akımı oluşacaktır.

Elektronun $\lambda_e = \frac{\hbar}{mc}$ (Compton Dalgaboyu) yarıçaplı bir yörüngede hareket etmesi

sonucu $\mu_e = \frac{e\hbar}{2mc}$ değerinde bir manyetik momenti vardır.

$$I \propto (e/T) \propto e \frac{c}{\lambda_e}$$

$$B = \frac{I}{\lambda_e \cdot c} \cong \frac{e}{\lambda_e^2}$$

$$(B \propto \frac{I}{r \cdot c})$$

Çekirdekteki bir gözlemcinin, elektron etrafındaki λ_e^3 hacminde bir elektronu bulabilme olasılığı $P \approx |\psi(0)|^2 \cdot \lambda_e^3$ tür.

Bu duruma göre, çekirdekten gözlenen ortalama manyetik alan;

$$\vec{B} = P \cdot B \approx e |\psi(0)|^2 \cdot \lambda_e$$

$$\vec{B} \approx \mu_B \cdot |\psi(0)|^2$$

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc} = \frac{1}{2} \lambda_e \cdot e$$

İnce Yapı Etkileşme Enerjisi

Bu etkileşme enerjisini hesaplarken B alanı ile çekirdeğin manyetik momentini birbiriyle çarpmamız gerekir.

$$U = -\vec{\mu}_I \cdot \vec{B} = -\vec{\mu}_I \cdot \vec{\mu}_B \cdot |\psi(0)|^2$$

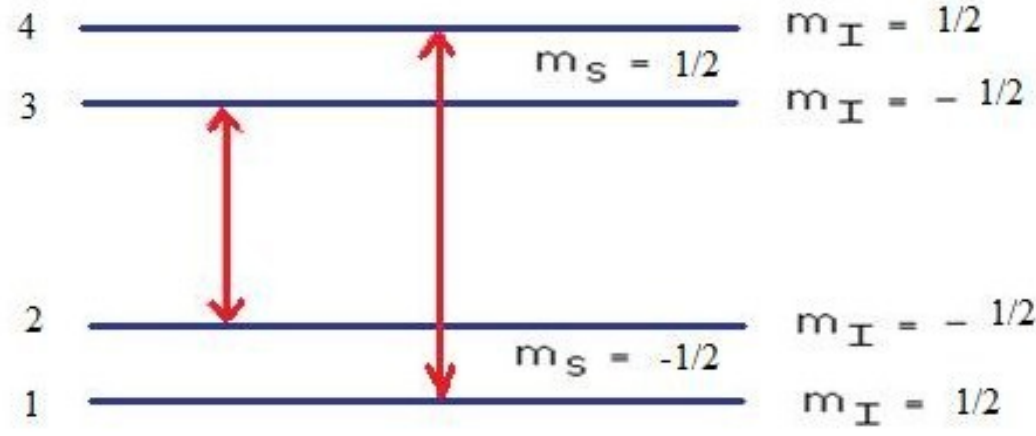
$$U = \gamma \hbar \mu_B |\psi(0)|^2 \cdot \vec{I} \cdot \vec{S}$$

Burada I çekirdeğin spin'idir.

$$U = a \cdot \vec{I} \cdot \vec{S}$$

Burada 'a' ince yapı sabitidir.

$\Psi(0)$: Elektron dalga fonksiyonunun çekirdekteki değeridir.



Burada m_S ve m_L kuantum katsayılarıyla tanımlanan 4 düzey vardır. Geçiş kurallarına göre bu düzeylerden 1 ile 4, 3 ile 2 arasında geçiş olmaktadır. $W = \gamma H_0 \pm a/2\hbar$ frekansında bir ışınım yayınlanmaktadır. Hidrojen’de bu frekans 1420 MHz dir.

Proton için γ ’nın değeri:

$$\gamma = 2.675 \times 10^4 \text{ rad /sn.Gauss}$$

$$\gamma = 2.675 \times 10^8 \text{ rad /sn.Tesla}$$

$$\gamma \text{ (MHz)} = 4.258 B_0 \text{ (Kilogauss) veya } \gamma \text{ (MHz)} = 42.58 B_0 \text{ (Tesla)}$$

$$1 \text{ Tesla} = 10^4 \text{ Gauss}$$

Aynı frekans değerini ESR için hesaplırsak

$$\gamma \text{ (GHz)} = 2.80 B_0 \text{ (Kilogauss)} \text{ veya } \gamma \text{ (GHz)} = 28.0 B_0 \text{ (Tesla)}$$

Burada Proton'un manyetik momenti;

$$\mu_p = 1.411 \times 10^{-23} \text{ erg/Gauss veya } \mu_p = 1.411 \times 10^{-26} \text{ Joule /Tesla ,}$$

$$\mu_n = 5.051 \times 10^{-24} \text{ erg /Gauss}$$

Bazı serbest atom veya iyonların çekirdek spin'leri ve ince yapı sabitleri tablo'da verilmektedir.

Çekirdek	H ¹	Li ⁷	Na ²³	K ³⁹	K ⁴¹
I	1/2	3/2	3/2	3/2	3/2
a (Gauss)	507	144	310	83	85
a (MHz)	1420	402	886	231	127

Çok güçlü bir manyetik alandaki serbest atom veya iyonların enerji düzeyleri, temel olarak Zeeman olayına uygun olarak yarıma göstermektedir. Bu güçlü manyetik alanda ince yapı etkileşmesi, $U'=a.m_s.m_l$ denkleminde uygun olarak yeni yarımlar meydana gelmektedir. Şimdi manyetik alanda $S=1/2$ ve $I=1/2$ olan bir sistem düşünelim. Bu sistemdeki elektronik geçişler için $\Delta m_s = \pm 1$, $\Delta m_l = 0$ koşulu gerçekleşmelidir.

Hareket Denklemleri

Açısal momentumun zamanla değişimi, dönme momentine eşittir.

$$\frac{d\vec{J}}{dt} = \vec{N}$$

$$\hbar \frac{d\vec{I}}{dt} = \vec{\mu} \times \vec{B}_a$$

$$\vec{\mu} = \gamma \hbar \vec{I}$$

olduğundan veya

$$\frac{d\vec{\mu}}{dt} = \gamma (\vec{\mu} \times \vec{B}_a)$$

Çekirdeğin mıknatıslanması, manyetik momentlerinin çekirdek üzerinden toplamlarının alınmasıyla bulunmaktadır.

$$\vec{M} = \sum_i \vec{\mu}_i \text{ olarak yazılır.}$$

Bir tek izotopla ilgileniyorsak γ bir tek değere sahiptir.

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = \gamma (\vec{M} \times \vec{B}_a)$$

Biz çekirdeği $\vec{B}_a = B_0 \hat{Z}$ manyetik alanının içine yerleştirirsek; ısısal denge sıcaklığı olan T'de \vec{M} , mıknatıslanması \hat{Z} doğrultusunda olmalıdır.

- ❑ Nükleer manyetik rezonans, fizik ve kimyanın en önemli araştırma konularından biridir.
- ❑ Organik maddelere NMR uygulanması, örnekteki su molekülünün proton rezonansına eşdeğerdir. NMR görüntülemenin en temel konusu H₂O'daki proton rezonansı olmayıp, bunun yanında C, N, O, F, Na, P, K 'da biyolojik bakımdan oldukça yoğun ilgi konusudur. Bu konu ile ilgili çalışmalarda örneğin, spin yoğunluğu, spin örgü durulma zamanı (T₁), spin- spin durulma zamanları ölçülerek örneklerin yapısal özellikleri ortaya çıkarılmaya çalışılır.
- ❑ NMR yönteminin önemli uygulamalarından birisi de çeşitli gıda maddeleriyle, yakıtlardaki H₂O oranının ortaya çıkarılmasıdır.
- ❑ İnsan vücudunun %55-60 arasında suyu içermesi, bunun NMR teknikleriyle incelenebileceğini ortaya koymaktadır.
- ❑ NMR görüntüleme tekniğinin ilk uygulamaları 1970'li yıllarda yapılmıştır.
- ❑ Standart NMR çalışmalarında temiz bir sinyal elde edebilmek için oldukça homojen bir manyetik alan gerekmektedir. Fakat bunu bir örneğin çevresinde gerçekleştirmek oldukça zordur. Bu nedenle örneğin çevresinde düzenli olarak değişebilen bir manyetik alan kullanılmıştır.
- ❑ NMR görüntüleme yöntemleri CT-x- ışını tarama yöntemlerine karşı oldukça iyi bir alternatif oluşturmuşlardır.

Bu iki görüntüleme yöntemini birbiriyle karşılaştırırsak;
MRI, CT-x-ışını tarama yöntemine göre daha duyarlıdır:

Vücudun herhangi bir yerindeki patolojik deformasyon yeterince büyük değilse, CT-x- ışını tarama yöntemi, o bölgeye lokalize edip bulmada oldukça güçlük çekmektedir. Buna karşın NMR-görüntüleme yöntemi, vücudun herhangi bir noktasındaki yerel H₂O (proton) yoğunluğunu hesaplayabildiğinden, patolojik bozulmanın başlangıcındaki durumlarda bile, bu bozulma yoğunluğu hakkında bilgi verebilmekte, bu ise kanserde erken teşhis açısından oldukça büyük bir önem taşımaktadır.

- ❑ Sağlık fiziğinde CT-x-ışını tarama tekniğine alternatif, sadece MRI tekniği olmayıp ultra ses dalgaları kullanılarak yapılan ultrasonik görüntüleme yöntemi de teşhiste kullanılmaktadır.
- ❑ NMR-tekniği, katı maddeleri ve patolojik örnekleri makroskopik düzeyde incelemektedir. Gelecekte NMR tekniğinin mikroskopik düzeyde kullanılabilmesi ve NMR mikroskobunun bulunmasıyla bu yöndeki araştırmalar, önemli bir ivme kazanacaktır.