

**СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА**

Л 55

P13-88-308

М.Ю.Либург

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ
ПОЛЯРИЗАЦИОННЫХ ПАРАМЕТРОВ
ДЕЙТРОННОЙ ПОЛЯРИЗОВАННОЙ МИШЕНИ
ПО ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМ ДАННЫМ**

1988

Твердотельные мишени с поляризованными ядрами дейтерия широко используются в экспериментальной физике высоких энергий. Тем не менее проблему определения степени дейтронной поляризации до сего времени нельзя считать решенной. Для мишеней с поляризованными протонами такая задача решается хорошо опробованным и ставшим традиционным способом: измеряется отношение интегральной интенсивности спектра магнитного резонанса от протонов, высокая поляризация которых получена динамическим методом, к той же величине для случая, когда протонные спины находятся в тепловом равновесии с решеткой. Однако амплитуда дейтронного магнитного резонанса (ДМР) для состояния термического равновесия настолько мала (почти в 100 раз, по сравнению с амплитудой протонного при одинаковых температуре и магнитном поле), что этот метод становится ненадежным в условиях случайных помех и наводок в экспериментальных залах ускорителей. В настоящее время степень поляризации дейтронной мишени во многих случаях определяется по отношению интенсивностей двух компонент полного спектра поглощения ДМР. При этом задача сводится к представлению полного спектра в виде суммы двух кривых, каждая из которых описывает поглощение энергии при резонансном переходе между соседними уровнями магнитной энергии. В решении такой задачи существует два разных подхода. Первый состоит в детальном расчете компонент как функций, зависящих от 4 ÷ 6 параметров, варьируя которые, ищут наиболее подходящее решение ^{1, 2/}. Во втором подходе экспериментальный спектр поглощения ДМР последовательными приближениями разделяется на две компоненты, функция формы которых удовлетворяет самым общим критериям ^{3, 4/}. Впервые такой метод разработан и применен в ^{3/}. В первом случае процедура определения поляризации требует больших затрат времени на ЭВМ, а во втором — недостаточно хорошо обоснована и надежна.

В предлагаемой работе приводится описание процедуры обработки спектров, позволяющей получить значение параметров функции формы линии поглощения ДМР. Эти параметры выбраны так, что не зависят от степени ядерной поляризации. Знание этих констант позволяет быстро вычислить поляризационные параметры дейтронной поляризованной мишени по легко измеряемым характеристикам экспериментально полученного спектра ДМР. Выводы данной работы проверены на примере обработки спектров ДМР, полученных от дейтронов, содер-

жащихся в веществах, применяемых для дейтронной поляризованной замороженной мишени^{/4,8/}: этандиола (CD₂OD)₂ и пропандиола-1,2 C₃D₈(OD)₂.

1. ПОЛЯРИЗАЦИОННЫЕ ПАРАМЕТРЫ ДЕЙТРОННОЙ МИШЕНИ

В рассматриваемом случае ось квантования направлена вдоль внешнего магнитного поля Н. Пусть n(1), n(0), n(-1) — относительные заселенности уровней энергии со значением магнитного квантового числа m = 1, 0, -1 соответственно. Тогда для компонент P_i и P_{ij} для вектора и тензора поляризации имеем^{/5/}:

$$P_3 = n(1) - n(-1) \equiv P, \quad P_1 = P_2 = 0, \quad (1)$$

$$A \equiv -2P_{11} = -2P_{22} = P_{33} = n(1) + n(-1) - 2n(0) = 1 - 3n(0). \quad (2)$$

Поляризация P и выстроенность A — поляризационные параметры, полностью описывающие состояние поляризованного ансамбля.

В твердом теле при низкой температуре в состоянии внутреннего равновесия спиновой системы заселенности уровней соответствуют больцмановскому распределению: n(m) ~ e^(-E_m/kT_s). Спиновая температура T_s может значительно отличаться (в 300 ÷ 400 раз, например, для высокой степени дейтронной поляризации) от температуры решетки. Собственные значения энергии дейтрона в магнитном поле Н, направленном вдоль оси Z, зависят от магнитного квантового числа m = <I_z>^{/6/}:

$$E_m = -\mu H m + \frac{e^2 q Q}{8} (3 \cos^2 \theta - 1) (3 m^2 - 2). \quad (3)$$

Первое слагаемое в (3), пропорциональное μ — магнитному моменту ядра, описывает зеемановское расщепление. Второе — взаимодействие квадрупольного момента ядра eq с градиентом электрического поля молекулы. Выражение (3) получено в первом порядке теории возмущений, в предположении аксиальной симметрии тензора градиента электрического поля, eQ — значение тензора вдоль главной оси, направление которой выбрано вдоль OD- или CD-связей и составляет угол θ с направлением внешнего магнитного поля. Выражение (3) удобно представить в виде

$$E_m = E_0 - E_1 m + E_2 m^2. \quad (4)$$

Член, пропорциональный m², на два-три порядка меньше остальной части суммы для дейтронов в диолах. Поэтому для большинства случаев, представляющих практический интерес, можно считать:

$$E_m = E_0 - E_1 m = E_0 - \mu H m. \quad (5)$$

С учетом распределения, обозначив x = μH/kT_s, получим для P и A из (1) и (2):

$$P = (e^{-x} - e^x) e^{E_0/kT_s} \cdot z^{-1}, \quad A = (e^{-x} - e^x - 2) e^{E_0/kT_s} \cdot z^{-1}. \quad (6)$$

Здесь z⁻¹ — статистическая сумма. Поскольку число состояний спиновой системы всегда конечно, статистическая сумма конечна и при T_s < 0. При этом система характеризуется инверсной заселенностью уровней и поляризация P < 0. Из (6), вводя обозначение r = th(μH/2kT_s), получим (формулы Бриллюэна):

$$P = \frac{4r}{3 + r^2}; \quad A = r \cdot P = \frac{4r^2}{3 + r^2}. \quad (7)$$

Отличные от нуля компоненты спиновой матрицы плотности в диагональном представлении имеют вид

$$\rho_{11} = n(1) = \frac{(1+r)^2}{3+r^2}; \quad \rho_{22} = n(0) = \frac{1-r^2}{3+r^2}; \quad \rho_{33} = n(-1) = \frac{(1-r)^2}{3+r^2}.$$

Таким образом, при сделанном выше предположении все поляризационные параметры мишени могут быть выражены через r.

Формулы для P и A через E_m из (4) были получены Л.И.Лапидусом^{/7/}. Согласно этим формулам, (7), в подавляющем большинстве случаев, является хорошим приближением, соответствующие поправки к которому можно легко вычислить. Об этом будет сказано ниже.

2. ПАРАМЕТРЫ СПЕКТРА ДМР

При выполнении условий наблюдения ядерного резонанса радиочастотное поле индуцирует переходы между соседними уровнями зеемановской энергии (правила отбора Δm = ± 1). Квадрупольное взаимодействие приводит к уширению этих уровней, которые, кроме того,

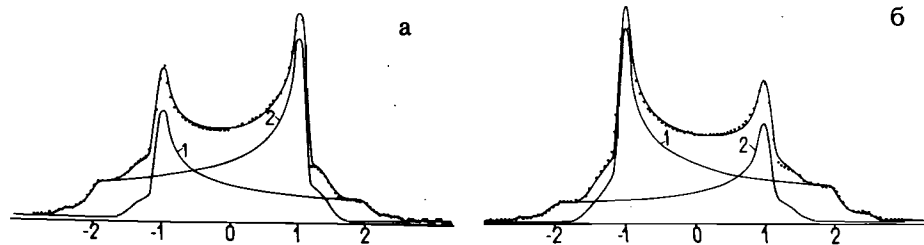


Рис. 1. Спектр поглощения ДМР (точки), аппроксимируемый расчетной кривой (сплошная линия), полученной, в свою очередь, как сумма кривых 1 и 2. По горизонтальной шкале отложены значения $x = (\nu - \nu_D) / \nu_Q$, где ν — текущая частота, $\nu_D = \mu H / \hbar$ — центральная частота наблюдения ДМР, $\nu_Q = (3e^2 q Q / 4\hbar)$ — квадрупольная частота; а — положительная, б — отрицательная поляризации.

становятся неэквидистантными (рис. 1). Полный спектр поглощения ДМР представляет собой суперпозицию двух составляющих 1 и 2 (рис. 1), описывающих спектр поглощения при переходах $m = -1 \rightarrow m = 0$ и $m = 0 \rightarrow m = 1$. Если влияние радиочастотного поля на заселенности уровней пренебрежимо мало, то естественно считать, что интегральные интенсивности I_1 и I_2 компонент пропорциональны разности населенностей соответствующих уровней. Пусть найдено: $R = I_2 / I_1$, тогда, поскольку

$$R = e^x \quad \text{и} \quad r = \frac{R - 1}{R + 1}, \quad (8)$$

поляризационные параметры могут быть вычислены по формулам (7) или, как в других работах, по формулам

$$P = \frac{R^2 - 1}{R^2 + R + 1}; \quad A = \frac{R - 1}{R + 1} P. \quad (9)$$

Найдем соотношения, устанавливающие связь между параметрами спектра поглощения ДМР и r (или R).

Предположим (детальный анализ экспериментальных данных подтверждает это предположение^{1,2/}), что искомые компоненты $\phi(x)$ спектра $\Phi(x)$ могут быть представлены функциями, переходящими одна в другую при зеркальном (относительно оси Y) отображении:

$$\Phi(x) = \phi(-x) + R \cdot \phi(+x), \quad (10)$$

где $x = (\nu - \nu_D) / \nu_Q$.

Разделив обе части (10) на

$$\int \Phi(x) dx = (R + 1) \int \phi(x) dx,$$

где интегрирование производится по всему спектру, получим выражение, в которое войдут только нормированные функции:

$$F(x) = \frac{f(-x)}{R + 1} + R \frac{f(x)}{R + 1}. \quad (11)$$

Найдем теперь выражение для симметричной F^s и антисимметричной F^a частей $F(x)$:

$$F^s = \frac{F(x) + F(-x)}{2} = f^s, \quad (12)$$

$$F^a = \frac{F(x) - F(-x)}{2} = r f^a. \quad (12a)$$

Таким образом, нормированный спектр ДМР

$$F(x) = f^s + r f^a \quad (13)$$

может быть представлен в виде линейной комбинации симметричной и антисимметричной частей некоторой, характерной для данного вещества функции:

$$f(x) = f^s + f^a.$$

Вид $f(x)$ не зависит от степени поляризации мишени, по крайней мере в области изменений этой величины, достаточной для практических применений.

Независимость F^s от r означает, в частности, что $2F_{\max}^s = F(-1) + F(1)$ (рис. 1) пропорциональна интегральной интенсивности спектра поглощения $\int \Phi(x) dx$. В работах^{1,4/} эта закономерность замечена в процессе обработки экспериментальных данных, а в^{4/} это свойство

уже использовалось в качестве критерия отсутствия искажений получаемых спектров ДМР.

Из (12а) видно, что

$$2|F_{\max}^a| = F(1) - F(-1).$$

Поделив это равенство почленно на F_{\max}^a и обозначив

$$V_f \equiv [f(1) - f(-1)]/[f(1) + f(-1)],$$

получим

$$V_F = r \cdot V_f, \quad (14)$$

где

$$V_F \equiv [F(1) - F(-1)]/[F(1) + F(-1)].$$

Если V известно, то r легко вычисляется по отношению разности к сумме амплитуд $\Phi(x)$ в пиках, согласно (10), (11) и (14). В качестве второго уравнения получим соотношение между первыми моментами M_F и M_f функций $F(x)$ и $f(x)$ соответственно. Из (11) имеем

$$M_F = \int x F(x) dx = r \int x f(x) dx = r \cdot M_f. \quad (15)$$

Наконец, из (14) и (15) получаем

$$D = V_f/M_f = V_F/M_F. \quad (16)$$

Подчеркнем, что V_f, M_f — параметры функции $f(x)$ — постоянные для данного вещества мишени.

3. ПРОЦЕДУРА РАСЧЕТА

По существу цель расчета состоит в построении функции $f(x)$, для чего используется спектр поглощения $\Phi(x)$ и величина D , взятая из совокупности числовых значений, характерной для данного вещества.

Для каждого D расчет начинается с преобразования спектра, с тем чтобы непосредственно вычисленный первый момент M_F был равен $M'_F = V_F/D$ (см. (14)). Это достигается помещением начала координат

($x = 0$) в точку, лежащую на середине расстояния между пиками, и добавлением к спектру линейной функции $y(x) = \beta x$, где β — малый параметр.

В области $-2 \leq x < 1$ искомая функция аппроксимируется кривой

$$f(x) = K \left(\frac{C_1}{\sqrt{1-x/a_1}} + \frac{C_2}{\sqrt{1-x/a_2}} \right) + C_0. \quad (17)$$

Коэффициенты $C_1 + C_2 = 1$ пропорциональны вкладам CD- и OD-связей в интенсивность спектра поглощения ДМР. Масштабные делители a_1 и a_2 связаны между собой: $a_1/a_2 = \nu_{\text{CD}}^{\text{OD}}/\nu_{\text{OD}}^{\text{CD}}$, где $\nu_{\text{CD}}^{\text{OD}}$ и $\nu_{\text{OD}}^{\text{CD}}$ — квадрупольные частоты для CD- и OD-связей. Очевидно, имеет место соотношение

$$a_1 C_1/a_2 C_2 = r, \quad (18)$$

где r — отношение числа CD к числу OD-связей в молекуле: $r = 2$ для этандиола и $r = 3$ для пропандиола. Коэффициент K находится последовательными приближениями: в первом он вычисляется из условия равенства

$$G = 2[F^s(x) - F^s(0)],$$

где "параметр вогнутости" $f(x)$: $G = f(x) + f(-x) - 2f(0)$ для $x < 1$.

В окрестности пика и в области $|x| < 1$ значения $f(x)$ находятся вычитанием:

$$f(x) = 2F^s - f(-x).$$

При всех прочих значениях аргумента функции $f(x)$ и $2F^s(x)$ совпадают.

В последующих приближениях значения K уточняются так, чтобы выполнялось равенство

$$V_f/D = M_f.$$

Критерием правильности построенной функции служит величина относительного среднеквадратичного отклонения f^s от F^s (см. (12)), которая, как правило, не превышает 2%.

Для определения r имеем

$$r = (r_M + r_B)/2,$$

где

$$r_B = B_F / B_f, \quad r_M = M_F / M_f.$$

Достоверность величины r оценивается по совпадению функции

$$F_c = \frac{1}{2} [(1 - r) \cdot f(x) + (1 + r) \cdot f(-x)]$$

со спектром поглощения ДМР по критерию минимума χ^2 .

4. РЕЗУЛЬТАТЫ

Описанная выше процедура расчета поляризационных параметров применялась для обработки спектров ДМР, полученных на установке дейтронной поляризованной замороженной мишени^{/8/}, используемой на ускорителе ИФВЭ (Серпухов).

Выделенные аппаратурой спектры ДМР были вначале обработаны по методу, описанному в^{/9/}, с тем чтобы вычислить по ним истинные спектры поглощения (рис. 2). Дальнейшая обработка полученных данных показала, что параметры функции $f(x)$ были близкими для положительной и отрицательной поляризаций, что подкрепляет уверенность в правильности расчета спектра поглощения.

Приведем результаты обработки 20 спектров ДМР, из которых 6 получено на этандиоле и 14 — на пропандиоле-1,2.

Прежде всего, установлено, что соотношение (18) действительно выполняется: попытки задавать параметрами C_1, C_2, a_1, a_2 значения,

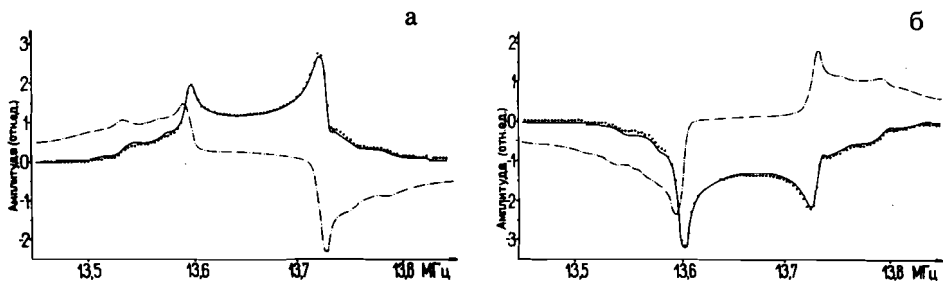


Рис. 2. Спектр поглощения ДМР (сплошная линия), рассчитанный по аппаратурному спектру (точки) вычитанием из него вклада, нелинейно связанного с дисперсией (штрихпунктирная линия); а — положительная и б — отрицательная поляризации соответственно. Попытка обработать аппаратурный спектр по описываемой в работе процедуре приводит к тому, что параметры $f(x)$ для спектров, соответствующих поляризациям разных знаков, не совпадают.

не отвечающие (18), приводили к возрастанию χ^2 . Далее, найдено, что величина отношения $\nu_{QD}^{CD} / \nu_{QD}^{OD} = a_1 / a_2 = 0,83 \pm 0,03$ позволяет получить наименьшее значение χ^2 при обработке спектров обоих веществ, что находится в хорошем согласии с результатом детального анализа^{/1, 2/}. Таким образом, из 4 параметров свободным остается только один. Если в качестве такового выбрать a_1 , то наилучшим значением для него окажется $a_1 = 0,93 \pm 0,03$. Определив интервал частот между пиками и используя a_1 , получим для $4/3 \nu_Q = (168 \pm 5)$ кГц, что также, в пределах ошибок, согласуется с данными работ^{/1, 2/}.

Параметр D может изменяться в довольно широких пределах от спектра к спектру: от $0,93 \times 10^{-2}$ до $0,32 \times 10^{-2}$ для этандиола и от $1,56 \times 10^{-2}$ до $0,70 \times 10^{-2}$ для пропандиола-1,2. Тем не менее для величины B получено: $B = 0,57 \pm 0,01$ для этандиола, $B = 0,631 \pm 0,007$ для пропандиола-1,2, и разброс значений D обусловлен в большей мере разбросом величины M_F . Последнее приводит к заключению о том, что те из величин, которые зависят от амплитуды спектра, измеряются гораздо точнее, чем те, что связаны с координатами характерных точек.

В силу сказанного оперативный метод определения поляризационных параметров дейтронной мишени основан на амплитудных соотношениях. После накопления спектра ДМР программой для микроЭВМ предусматривается расчет r по формуле (14), где для B берется значение, отличающееся от приведенного выше на величину поправки, учитывающей искажения спектра, связанные с дисперсией.

Обработка экспериментальных данных по полной программе — выделение спектра поглощения и затем поиск $f(x)$ по минимуму χ^2 — позволяет вычислять поляризационные параметры мишени с относительной точностью не хуже чем $1,5 \div 2,0$ %. Точность измерения поляризации оперативным методом отличается от результатов подробного расчета в среднем на 2,5%, хотя в особо неблагоприятных условиях это отличие может составлять 5%.

Необходимо сделать важные замечания.

1. Изложенный выше метод расчета поляризационных параметров полностью применим для спиновых систем, в которых заселенности уровней магнитной энергии полностью обусловлены только зеемановским взаимодействием. Как уже было сказано, влияние квадрупольного расщепления на параметры мишени изучалось в^{/7/}. Там же получено выражение для измеряемой асимметрии спектра $P_{изм.}$. Аналогичное выражение можно получить для $r_{изм.}$:

$$r_{изм.} = r - \frac{1 - r^2}{2r} \cdot \frac{E_2}{kT_s},$$

где $E_2 = h \cdot \nu_Q$, τ определено в (7) и переходит в $\tau_{изм}$, если $E_2 \ll \ll kT_g$. Оценка второго слагаемого дает примерно $(1,5 \div 2) \cdot 10^{-4}$ для этандиола и пропандиола-1,2, что намного меньше указанной выше точности.

В тех случаях, когда вклад квадрупольного расщепления становится ощутимым, можно рекомендовать следующий способ вычисления поляризации и выстроенности. Можно, например, воспользоваться формулой

$$R_{изм} = \left[e^{\frac{(E_1 - E_2)/kT_g}{2}} - 1 \right] / \left[1 - e^{\frac{(E_1 - E_2)/kT_g}{2}} \right]$$

для отыскания значения T_g . Для E_1 и E_2 имеются все данные, что позволяет вычислить A и P , используя (1) и (2).

2. В работе не обсуждалась возможность учета параметра асимметрии тензора градиента электрического поля молекулы, взаимодействующего с квадрупольным моментом ядра. Для рассматриваемых веществ влияние этого параметра достаточно мало^{/2/}. При необходимости он может быть учтен.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Метод расчета параметров поляризованной мишени, описанный выше, обладает определенными достоинствами, по сравнению с ранее примененным: не требует больших затрат времени на ЭВМ, прост, надежен, достаточно обоснован и обеспечивает разумную точность рассчитываемых величин.

2. Параметры формы спектра могут быть использованы:

- а) в оперативном методе измерения поляризации мишени,
- б) для оценки возможного вклада квадрупольного расщепления в величину измеряемой поляризации,
- в) для расчета поляризационных параметров мишени и в том случае, когда этот вклад достаточно велик.

3. Хотя вся процедура расчета параметров опробована на примере поляризованных ядер дейтерия, несомненно, она может быть применена как для дейтронов в других веществах, так и для других ядер со спином $I \geq 1$, представляющих интерес для поляризационных экспериментов.

Автор благодарит всех сотрудников группы поляризованных мишеней ЛЯП ОИЯИ за сотрудничество и помощь. Особую признательность автор выражает В.Н.Матафонову за предоставление спектров ДМР высокого качества.

ЛИТЕРАТУРА

1. Hamada O. et al. – NIM, 1981, 189, p.561.
2. Беляев А.А. Препринт ХФТИ 87-27, М.: ЦНИИатоминформ, 1987.
3. Поляков В.В. и др. Препринт ОИЯИ, P1-83-519, Дубна, 1983.
4. Борисов Н.С. и др. – ЖЭТФ, 1984, 87, вып. 12, с. 2234.
5. Немец О.Ф., Ясногорский А.М. Поляризационные явления в ядерной физике. Киев: Наукова думка, 1980.
6. Абрагам А. Ядерный магнетизм. М.: ИЛ, 1963, с.218.
7. Липидус Л.И. ОИЯИ, P2-84-267, Дубна, 1984.
8. Борисов Н.С. и др. ОИЯИ, P1-85-292, Дубна, 1985.
9. Либург М.Ю., Страхота И. ОИЯИ, P13-81-748, Дубна, 1981.

Рукопись поступила в издательский отдел
6 мая 1988 года.