

# 流动系统中的激光增强固体和液体 $^{129}\text{Xe}$ 核磁共振信号<sup>\*</sup>

周 欣<sup>†</sup> 罗 军 孙献平 曾锡之 刘买利 刘午阳

(中国科学院武汉物理与数学研究所, 波谱与原子分子物理国家重点实验室, 武汉 430071)

(2001 年 8 月 1 日收到, 2002 年 3 月 7 日收到修改稿)

在流动系统中, 用半导体阵列激光器在低磁场下抽运 Cs 原子, 由自旋交换碰撞产生极化的 $^{129}\text{Xe}$  气体, 在 SY-80M 核磁共振谱仪中, 冻成固体和液体后的极化度分别为 2.16% 和 1.45%, 和相同条件下未光泵的 $^{129}\text{Xe}$  极化度相比, 分别增强 6000 和 5000 倍. 为将激光增强固体和液体 $^{129}\text{Xe}$  用于量子计算提供了基础和可能. 并对输运和相变过程中极化损失作了讨论.

关键词: 光泵, 激光极化, 核磁共振信号, 光和原子相互作用

PACC: 3280B, 3510D, 3325, 3490

## 1. 引 言

超极化的 $^{129}\text{Xe}$  不仅在磁共振成像<sup>[1-4]</sup>和表面物理<sup>[5-9]</sup>中有重要的应用, 而且人们试图应用于量子计算机中<sup>[10]</sup>. 自从 1998 年 Chuang<sup>[11, 12]</sup>利用核磁共振(NMR)技术实现两量子位的 Grover<sup>[13]</sup>搜索算法, 近年来基于液态核磁共振技术的量子计算得到迅速的发展. 目前存在的困难是: 1) 核磁共振的探测灵敏度低; 2) 液态 NMR 信号的信噪比随量子位增加指数下降. 因此 NMR 量子计算机向多量子位扩展遇到困难. 解决的主要方案就是利用激光极化增强 NMR 信号的技术<sup>[10, 14]</sup>.

Divincenzo 等人提出的“固态”的量子计算机方案受到普遍的注意<sup>[15]</sup>. 我们用激光增强的自旋体系, 在流动系统中观测到激光增强的固体和液体 $^{129}\text{Xe}$  信号, 并对输运和相变过程中极化损失作了简要的讨论, 为激光增强液态和固态量子计算机提供数据和技术准备.

## 2. 实 验

实验装置如图 1 所示, 首先关闭  $K_2$ , 开  $K_1, K_3$ ,

$K_4$  阀门, 用真空泵将整个系统的真空度抽至  $2 \times 10^{-3}\text{Pa}$ . 然后关  $K_1, K_4$ , 开  $K_2, K_3$  阀门充  $1 \times 10^5\text{Pa}$  天然 Xe 气体(26.44% 的 $^{129}\text{Xe}$ )至装有 Cs 金属的光泵室中, 然后关上所有阀门. 光泵室置于由 Helmholtz 线圈产生的场强为  $25 \times 10^{-4}\text{T}$  ( $B$ ), 温度为  $33(\pm 2)\text{K}$  (由绑在光泵室外的加热电阻线圈产生)的环境中. 如图 2 根据 Cs 灯的  $D_2$  线以及我们所测半导体激光器(Opto Power Co. Model OPC-D015-850-FCPS)波长与温度、电流关系图, 其中半导体阵列激光器的功率为 15W, 将其设置在电流为 29.8A、温度为  $33^\circ\text{C}$  状态下, 此时激光波长为 852.1nm.

激光经扩束器、格兰棱镜、1/4 波片和会聚透镜后变成圆偏振光, 激光的方向与光泵室中 Cs 所处  $25 \times 10^{-4}\text{T}$  的磁场( $B$ )方向是平行的, 激光抽运光泵室中的 Cs 原子 25min. 经过高度电子极化的 Cs 原子与 $^{129}\text{Xe}$  发生自旋交换碰撞, 产生高度极化 $^{129}\text{Xe}$  气体. 开  $K_4$  阀门, 将极化的 $^{129}\text{Xe}$  气体输运到预冷却至 172K 的 SY-80M 核磁共振谱仪探头中, 再降温至 142K 冻成固体, 由于用  $90^\circ$  脉冲采的信号过强, 超过了接收机信号接收的范围, 信号被饱和截止, 所以以较小角度( $11^\circ$ ) 单次采样测极化固体 $^{129}\text{Xe}$  的 NMR 信号. 然后再升温至 176K, 以同样的方法测量极化液体 $^{129}\text{Xe}$  的 NMR 信号. 而没有经过光泵的信号均用

<sup>\*</sup> 国家自然科学基金(批准号: 19874073)和中国科学院知识创新工程项目(批准号: KJ92-W1)资助的课题.

<sup>†</sup> Tel: +86-27-87867796; Fax: +86-27-87885291; E-mail: xinzhou@wipm.ac.cn

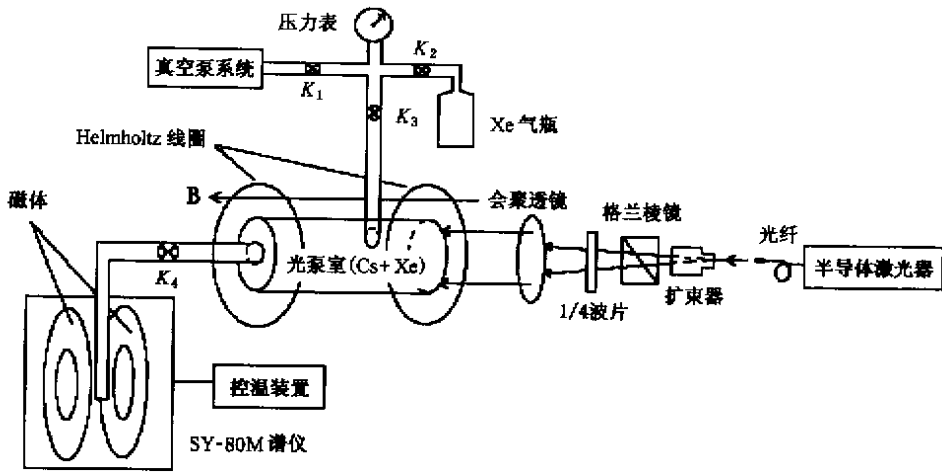


图 1 实验装置图

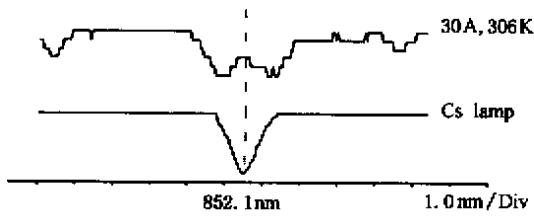


图 2 半导体激光器波长与温度、电流关系图

90°脉冲采的. 为了减少在运输过程中<sup>129</sup>Xe 在管壁上的壁弛豫, 以减少<sup>129</sup>Xe 核极化的损失. 我们将样品管内壁、连接样品管和光泵室的玻璃管内壁, 和光泵室均经有机硅涂壁处理.

### 3. 结果和讨论

图 3 (a) 所示, 是没有激光极化的<sup>129</sup>Xe 固体信号, 信噪比 (SNR) 为 4.5; 图 3 (b) 是激光极化增强的<sup>129</sup>Xe 固体信号, SNR 为 1500. 图 4 (a) 是没有激光极化的<sup>129</sup>Xe 液体信号, SNR 为 3.4; 图 4 (b) 是激光极化增强的<sup>129</sup>Xe 的液体信号, SNR 为 1550.

根据 Abragan<sup>[16]</sup> 所给的磁化矢量和核自旋极化度的关系, 激光增强因子可以表示成

$$f = \frac{P_L}{P_B} = \frac{I_L}{I_B}, \quad (1)$$

其中  $P_L$  是经激光极化后核的极化度,  $P_B$  是热平衡条件下核的极化度;  $I_L, I_B$  分别是激光极化和热平衡条件下 NMR 信号谱峰的积分强度. 根据谱图和 (1) 式, 经采样脉冲偏转角换算, 可得出激光极化的<sup>129</sup>Xe 固体和液体的增强因子  $f$  分别为 6000 和 5000.

而热平衡条件下的极化度为

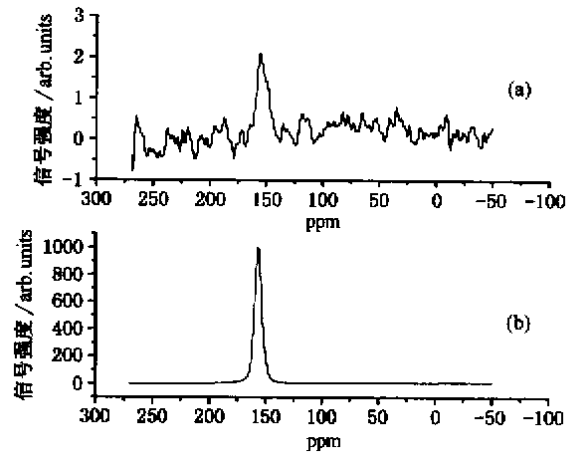


图 3 <sup>129</sup>Xe 固体信号谱图

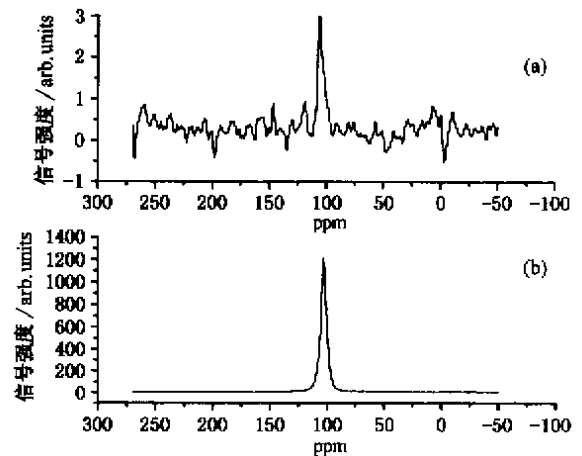


图 4 <sup>129</sup>Xe 液体信号谱图

$$P_B = \frac{N_h - N_l}{N_h + N_l} \approx \frac{\gamma h B_0}{4\pi kT}, \quad (2)$$

式中,  $N_h$  和  $N_l$  分别是上下能级的原子核的集居数,  $\gamma$  是核的旋磁比,  $h$  是普朗克常数,  $k$  是 Boltzmann 常数,  $B_0$  是磁场强度,  $T$  为绝对温度. 因此 142K 和 176K 时在 SY-80M 谱仪(1.879T)中<sup>129</sup>Xe 的极化度分别为  $3.5 \times 10^{-6}$  和  $2.9 \times 10^{-6}$ . 激光极化<sup>129</sup>Xe 气体的极化度与相同温度和磁场条件下的热平衡极化度相比, 可以达到  $10^3$ — $10^5$  倍的增强<sup>[4, 17, 18]</sup>. 根据(1)式和固体及液体激光增强倍数, 可以推算出对应的激光增强后, 固体和液体极化度分别为 2.16% 和 1.45%.

我们的实验结果为将激光增强固体和液体<sup>129</sup>Xe 用于量子计算提供了基础和可能. 在我们的实验中因为极化度比热平衡条件下的极化度大大提高了, 并且不依赖于谱仪的磁场强度, 所以我们还观测到了液体和气体<sup>129</sup>Xe 的辐射阻尼信号. 在此基础上我们也发现了, 激光极化的<sup>129</sup>Xe 和 HCl 气体混合冻成固体后增强的<sup>1</sup>H 的信号, 为向固体量子计算迈了第一步. 在激光光泵自旋交换过程中, 其<sup>129</sup>Xe 核自旋的极化度的建立表达式为<sup>[19]</sup>

$$P_{Xe}(t) = \frac{\Gamma_{SE} P_{Alk} (1 - e^{-(\Gamma_{SE} + \Gamma_{wall})t})}{\Gamma_{SE} + \Gamma_{wall}}, \quad (3)$$

式中  $\Gamma_{SE}$  表示 Cs 与<sup>129</sup>Xe 核的自旋交换率, 与 Cs 原子密度有关.  $\Gamma_{wall}$  是<sup>129</sup>Xe 核自旋极化在样品管的壁弛豫率,  $P_{Alk}$  为碱原子的电子自旋极化度. 激光极化

<sup>129</sup>Xe 的核自旋极化度主要依赖于碱原子极化度、自旋交换率以及壁弛豫率. 在我们的流动系统实验中, 激光增强倍数不像用窄线宽的钛宝石激光器光泵封闭的样品泡那么高, 其极化度下降的主要原因有: 1) 极化的<sup>129</sup>Xe 气体在输运过程中, 由于磁场的不均匀导致核极化的损失; 2) <sup>129</sup>Xe 泡壁的弛豫减小了极化度; 3) 由于半导体激光器的线宽为 3nm, 而 Cs 原子的吸收线宽在  $1 \times 10^5$  Pa 的天然 Xe 气中仅为 30G, 因而有效光泵功率大约只有 0.125W, 远远小于用窄线宽的钛宝石激光器光泵时碱原子的极化度; 4) 相变过程中也存在极化度的损失<sup>[20]</sup>.

在我们的实验中, 要进一步提高极化度, 需要采取如下的措施: 1) 极化的<sup>129</sup>Xe 在输运过程中尽量保持在均匀磁场中, 并且沿着静磁场的磁力线方向流动; 2) 增加样品泡中的气压, 增大 Cs 原子吸收谱线的碰撞展宽, 提高实际光泵的吸收功率; 3) 缩短相变的时间.

## 4. 结 论

本文在低场光泵流动系统中获得极化的固态和液体<sup>129</sup>Xe 信号, 其信噪比均大于 1500, 极化度分别为 2.16% 和 1.45%, 相应的激光增强倍数分别为 6000 和 5000 倍. 本文描述了激光增强<sup>129</sup>Xe 流动系统, 并且实验结果可为超极化<sup>129</sup>Xe 固体和液体应用于量子计算提供技术准备.

- [1] Albert M S, Cates G D, Driehuys B, Happer W, Saam B, Springer C S and Wishnia A 1994 *Nature* **370** 199
- [2] de Lange E E, Mugler J P, Driehuys B, Brookeman J R, Cates G D, Berr S S, Bryant R G, Daniel T M, de Lang E E, Downs J H, Erickson C J, Happer W, Hinton D P, Kassel N F, Maier T, Philips C D, Saam B T, Sauer K L and Wagshul M E 1997 *Magn. Reson. Med.* **37** 809
- [3] Song Y Q, Gaede H D, Pietraq̃ T, Barrall G A, Chingas G C, Ayers M R and Pines A 1995 *J. Magn. Reson.* **A** **115** 127
- [4] Sun X, Hu H and Zeng X 1999 *Appl. Magn. Reson.* **16** 363
- [5] Bowers C R, Long H W, Pietrass T, Gaede H C and Pines A 1993 *Chem. Phys. Lett.* **205** 168
- [6] Gaede H C, Song Y Q, Taylor R E, Munson E J, Reimer J A and Pines A 1995 *Appl. Magn. Reson.* **8** 373
- [7] Navon G, Song Y Q, Rõm T, Applet S, Taylor R E and Pines A 1996 *Science* **271** 1848
- [8] Pietraq̃ T, Seydoux R and Pines A 1998 *J. Magn. Reson.* **133** 299

- [9] Rõm T, Appelt S, Seydoux R, Hahn E L and Pines A 1997 *Phys. Rev. B* **55** 11604
- [10] Chuang I L, Gershenfeld N, Kubinec M G and Leung D W 1998 *Proc. R. Soc. Lond. A* **454** 447
- [11] Chuang I L, Gershenfeld N and Kubinec M 1995 *Phys. Rev. Lett.* **80** 3048
- [12] Chuang I L et al 1998 *Nature* **393** 143
- [13] Grover L K 1997 *Phys. Rev. Lett.* **79** 325
- [14] Verhulst A S, Liivak O, Sherwood M H, Vieth H M and Chuang I L 2001 *Appl. Phys. Lett.* **79** 2480
- [15] Divincenzo D P 1995 *Science* **270** 255
- [16] Abragam A 1961 *The Principles of Nuclear Magnetism* (Oxford: Oxford University Press) p275
- [17] Sun X, Hu H, Zeng X et al 1999 *Chin. Phys. Lett.* **16** 408
- [18] Zeng X, Wu C, Zhao M et al 1991 *Chem. Phys. Lett.* **182** 538
- [19] Rosen M S, Chupp T E and Coulter K P 1999 *Rev. Scie. Instrum.* **70** 1546

- [ 20 ] Cates G D , Benton D R , Gatzke M , Happer W , Hasson K C and Newbury N R 1990 *Phys. Rev. Lett.* **65** 2591

## Solid and liquid $^{129}\text{Xe}$ NMR signals enhanced by spin-exchange optical pumping under flow<sup>\*</sup>

Zhou Xin Luo Jun Sun Xian-Ping Zeng Xi-Zhi Liu Mai-Li Liu Wu-Yang

( *State Key Laboratory of Magnetic Resonance and Atomic and Molecular Physics , Wuhan Institute of Physics and Mathematics , Chinese Academy of Sciences , Wuhan 430071 , China* )

( Received 1 August 2001 ; revised manuscript received 7 March 2002 )

### Abstract

Laser-polarized  $^{129}\text{Xe}$  gas was produced by spin-exchange with Cs atom optically pumped with diode laser array in a low field under flow. The nuclear spin polarizations of the solid and liquid  $^{129}\text{Xe}$  frozen from the laser-polarized  $^{129}\text{Xe}$  gas were 2.16% and 1.45% respectively in the SY-80M NMR spectrometer, which corresponded to the enhancements of 6000 and 5000 compared to those without optical pumping under the same conditions. It could provide the base and possibility for quantum computers using laser-enhanced solid and liquid  $^{129}\text{Xe}$ . Polarization loss of transport and state change also was discussed in this paper.

**Keywords** : optical pumping , laser-polarization , NMR signals , atom and photon interactions

**PACC** : 3280B , 3510D , 3325 , 3490

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China ( Grant No. 19874073 ) and National Knowledge Innovation Program of Chinese Academy of Sciences ( Grant No. KJCX2-W1 ).