ФИЗИЧЕСКАЯ АППАРАТУРА И ЕЁ ЭЛЕМЕНТЫ
PHYSICAL EQUIPMENT AND ITS ELEMENTS

УДК 537.811 PACS: 07.55.Db
EDN: LVWEJM

Магнитная система поляризатора ядер ксенона

А. С. Лагутин, Г. Ю. Григорьев

Представлена модель магнитной системы и верифицированный расчет распределения магнитной индукции в ее объеме. Данная система будет частью установки для получения гиперполяризованного по ядерным спинам ^{129}Xe путем оптической накачки паров рубидия с последующим спиновым обменом с атомами изотопа благородного газа. Представлена визуализация магнитного поля, создаваемого системой из четырех колец с различным числом витков. Верификация расчетной модели показала соответствие с данными эксперимента.

Ключевые слова: магнитное поле, однородность поля, гиперполяризованный ксенон.

DOI: 10.51368/1996-0948-2023-3-92-96

Введение

В поляризаторе ксенона порция требуемой газовой смеси загружается в ячейку SEOP (Spin Exchange Optical Pumping), содержащую некоторое количество рубидия, нагревается и оптически накачивается лазером в присутствии внешнего магнитного поля.

Как только магнитные моменты ядер ксенона за счет столкновений с магнитно ориентированными (≈100 %) магнитными моментами атомов рубидия достигают нужного уровня поляризации, процесс SEOP останавливается и газ переносится в переносной накопитель. Ключевыми параметрами, влияющими на степень поляризации магнитных моментов ядер ^{129}Xe, являются плотность паров Rb, состав газовой смеси в ячейке SEOP, время накачки, величина и однородность постоянного магнитного поля (B_0), спектральная ширина и мощность лазерной линии, а также методы хранения и транспортировки ^{129}Xe. Подробное описание функций и характеристик основных узлов поляризатора ксенона-129 приведено в обзорах и монографиях [1–4] и многочисленных оригинальных работах, например, в публикациях [5, 6].

В частности, постоянное магнитное поле B_0 необходимо для преодоления вырождения вращательных квантовых состояний, чтобы обеспечить селективную оптическую накачку подуровней Rb. Оно также необходимо для ЯМР-измерений намагниченности ядер ^{129}Xe. С целью минимизации времени T_1 для улучшения максимально возможной поляризации и времени жизни их гиперполяризованного состояния и для того, чтобы минимизировать затухание T_2 для максимизации отношения «сигнал-шум» при измерении ЯМР, поле B_0 должно быть оптимизировано для обеспечения необходимой однородности (~5×10^{-4} в объеме ~1000 см^3 согласно работам [7–9]). Для этого магнитная система, создающая и поддерживающая поле B_0 должна быть тщательно спроектирована и отрегулирована [10, 11].

В современных вариантах поляризаторов ^{129}Xe поле B_0 в диапазоне от 2 до 5 мТл соз-

Лагутин Александр Сергеевич, доцент, д.ф.-м.н.
E-mail: alex_lagutin@mail.ru
Григорьев Геннадий Юрьевич, д.ф.-м.н., профессор.
E-mail: grigoriev_gy@nrcki.ru
Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт».
Россия, 123182, Москва, пл. Курчатова, 1.

Статья поступила в редакцию 14.02.2023
Принята к публикации 10.03.2023

© Лагутин А. С., Григорьев Г. Ю., 2023

дается либо разнообразными модификациями катушек Гельмгольца [7, 9, 12], либо тонкими соленоидами [5]. Каждое из этих двух направлений реализации магнитных систем (МС) поляризаторов ксенона имеет свои достоинства и недостатки.

В первом случае (соосные катушки типа колец Гельмгольца) появляется возможность очень просто как визуально, так и аппаратными средствами контролировать основные параметры процесса SEOP, такие как плотность паров рубидия и степень его поляризации, юстировку оптической системы с ячейкой SEOP и пр. за счет практически свободного доступа к самой ячейке. Однако при этом габариты МС становятся достаточно большими (объем порядка 1 м^3), что диктуется необходимостью обеспечить высокую степень однородности поля B_0 (не менее 10^{-3}) в объеме ячейки SEOP, превышающим 1000 см^3. Последнее требование обусловлено достижением необходимой (на настоящий момент времени) производительности не менее 1–3 л/час гиперполяризованного ядерному спину ^{129}Xe до степени не менее 50 %. В отличие от МС на основе соосных многовитковых катушек, соленоидальные МС намного более компактны и, в принципе, имеют лучшую однородность при меньших габаритах. Однако непосредственный доступ к ячейке невозможен, что сильно снижает возможность контроля процесса SEOP. Цель данной работы – разработать оптимальную МС поляризатора ^{129}Xe, предназначенную для работы с ячейкой SEOP объемом 0,5–1 л, основываясь на современном опыте их расчетов и конструирования.

Модель магнитной системы

Моделирование и численные расчеты были проведены в интерактивной среде COMSOL Multiphysics. Моделирование проводилось для магнитной системы (МС), состоящей из 4 соосных многовитковых катушек, подключенных последовательно к источнику тока. Для формирования магнитного поля в создаваемой установке была предложена конструкция МС, детальные параметры магнитной системы приведены в таблице.

Таблица

Расчётные параметры магнитной системы

Номер катушки	Средний радиус обмотки, м	Расстояние от центра, м	Число витков
1	0,25	0,235	217
2	0,25	0,085	150
3	0,25	-0,085	150
4	0,25	-0,235	217

Использованные в модели габариты и относительное расположение катушек вдоль оси МС должны обеспечить достаточно однородное (~10^{-4}) поле в ячейке SEOP диаметром 0,06 м и длиной 0,20 м, расположенной на оси МС в ее центре, а число витков – величину магнитной индукции порядка 5×10^{-3} Тл при токе 5 А.

Оптимизация модельной МС осуществлялась с использованием двух различных подходов. В рамках первого варьировались размеры катушек и их относительное расположение. В рамках второго подхода анализировалось влияние числа витков в отдельных секциях на распределение магнитной индукции по рабочему объему МС.

Результаты и верификация

На рис. 1 представлено распределение магнитного поля по оси МС в масштабе, соответствующим длине цилиндра-имитатора ячейки SEOP.

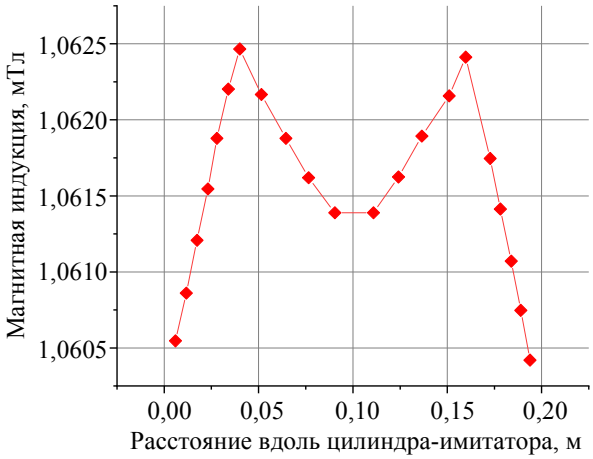

Рис. 1. Распределение магнитной индукции вдоль оси МС в пределах цилиндра-имитатора при токе 1 А. Символы – расчет, сплошная линия – интерполяция

Надежную оценку степени неоднородности магнитного поля дает его распределении по оси МС в пределах цилиндра-имитатора ячейки SEOP (см. рис. 1). Как видно, в объеме ячейки SEOP около 600 см^3 вариация поля B_0 не превышает $\approx 5\times10^{-4}$, чего вполне достаточно для обеспечения эффективного процесса передачи поляризации от спинов рубидия к спинам ядер ^{129}Xe. Отметим, что дальнейшая оптимизация МС по данному параметру нецелесообразна, поскольку был достигнут компромисс между габаритами МС и ячейки SEOP.

Визуализация пространственного распределения магнитной индукции во всем объеме МС представлена на рис. 2, тогда как рис. 3 демонстрирует изменения магнитной индукции внутри и на поверхности цилиндра-имитатора.

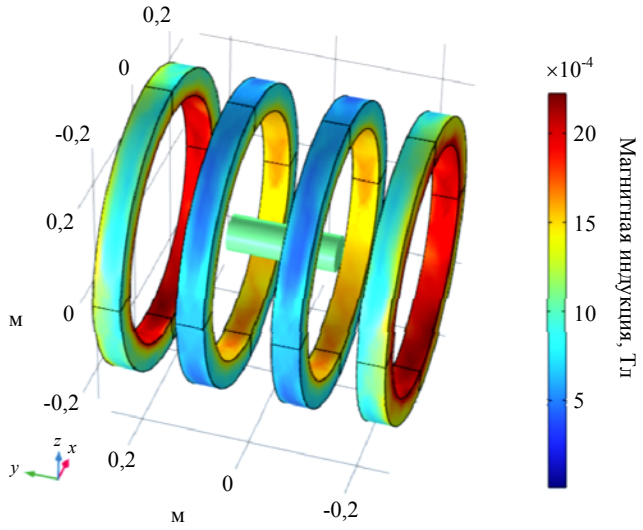

Рис. 2. Распределение поверхностной плотности магнитной индукции при токе 1 А

С целью проверки адекватности выбранной модели расчетов МС было проведено сравнение данных моделирования с экспериментальными параметрами 3-х катушечной МС, разработанной в University of Nottingham для поляризатора N-XEUS и исследованной в работе [11]. Преимущество такой магнитной системы заключалось в том, что между катушками оставалось больше пространства, чтобы оператор мог поместить оптическую ячейку в печь во время загрузки ячейки, не теряя при этом значительной однородности по длине оптической ячейки.

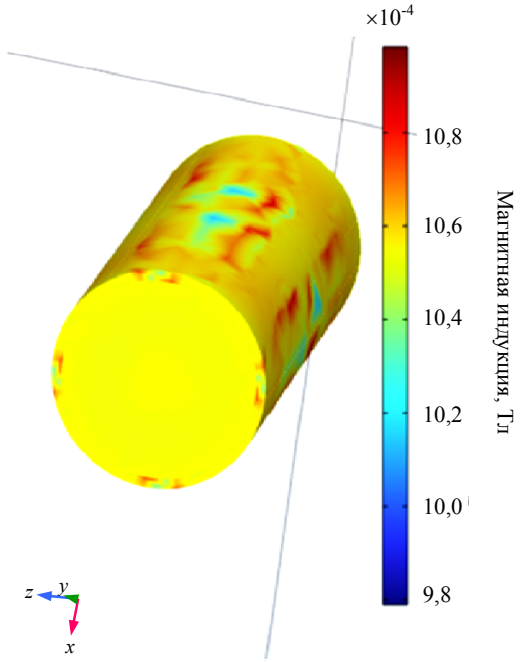

Рис. 3. Распределение плотности магнитной индукции в объеме цилиндра-имитатора

Сравнение экспериментальных данных [11] и наших расчетов (см. рис. 4) однозначно указывает на адекватность использованной модели численного моделирования, что позволяет рекомендовать использованный в данной работе подход при расчетах других магнитных систем, состоящих из соосных многовитковых катушек с произвольным числом витков.

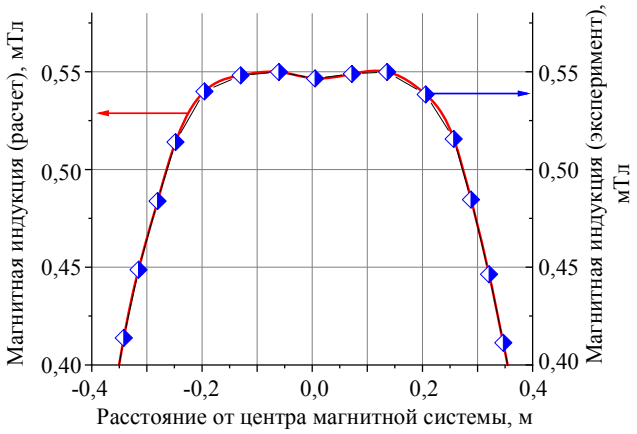

Рис. 4. Сравнение экспериментальных данных [11] и расчета, сделанного для трехкатушечной магнитной системы поляризатора ксенона. Ток в МС равен 1 А

Заключение

Предложена модель для численного расчета распределения магнитной индукции в

магнитной системе, состоящей из нескольких соосных многовитковых катушек. Проведена верификация данной модели путем сравнения с экспериментальными данными. Результаты исследований будут полезны при разработке инновационного поляризатора ядер ксенона-129 для применения в магнитно-резонансной томографии.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Григорьев Г. Ю., Лагутин А. С.* / Журнал технической физики. 2022. Т. 92. № 9. С. 1277.

2. *Barskiy D. A., Coffey A. M., Nikolaou P., Mikhaylov D. M., Goodson B. M., Branca R. T., Lu G. J., Shapiro M. G., Telkki V-V., Zhivonitko V. V., Koptyug I. V., Salnikov O. G., Kovtunov K. V., Bukhtiyarov V. I., Rosen M. S., Barlow M. J., Safavi S., Hall I. P., Schröder L., Chekmenev E. Y.* / Chem. Eur. Jour. 2017. Vol. 23. P. 725.

3. *Albert M. S., Hane F. T.* Hyperpolarized and Inert Gas MRI: From Technology to Application in Research and Medicine. – Amsterdam: Elsevier, 2017.

4. *Meersmann T., Brunner E.* Hyperpolarized 129Xe Magnetic Resonance: Concepts, Production, Techniques and Applications. – Cambridge: Royal Society of Chemistry, 2015.

5. *Birchall J. R., Nikolaou P., Coffey A. M., Kidd B. E., Murphy M., Molway M., Bales L. B., Goodson B., Irwin R. K., Barlow M. J., Chekmenev E. Y.* / Anal. Chem. 2020. Vol. 92. P. 4309.

6. *Skinner J., Ranta K., Coffey A. M., Nikolaou P., Rosen M. S., Chekmenev E. Y., Morris P. G., Barlow M. J., Goodson B. M.* / J. Magn Reson. 2020. Vol. 312. P. 106686.

7. *Plummer J. W., Emami K., Dummer A., Woods J. C., Walkup L. L., Cleveland Z. I.* / J. Magn Reson. 2020. Vol. 320. P. 106845.

8. *Birchall J. R., Irwin R. K., Chowdhury M. R. H., Nikolaou P., Goodson B. M., Barlow M. J., Shcherbakov A., Chekmenev E. Y.* / Anal. Chem. 2021. Vol. 93. P. 3883.

9. *Pałasz T., Mikowska L., Głowacz B., Olejniczak Z., Suchanek M., Dohnalik T.* / Acta physica polonica A. 2019. Vol. 136. № 6. P. 1008.

10. *Луганский Л. Б.* / Журнал технической физики. 1986. Т. 56. № 5. С. 884.

11. *Skinner J. G.* PhD thesis: Optimisation of xenon-rich stopped-flow spin-exchange optical pumping for functional lung imaging. – Nottingham, 2016.

12. *Fuliwara H., Imai H., Kimura A.* / Analytical sciences. The Japan Society for Analytical Chemistry. 2019. Vol. 35. P. 869.

PACS: 07.55.Db

Magnetic system of the xenon core polarizer

A. S. Lagutin and G. Y. Grigoriev

National Research Center “Kurchatov Institute”
Kurchatov Square, 1, Moscow, 123182, Russia
E-mail: alex_lagutin@mail.ru

Received 14.02.2023; accepted 10.03.2023

A model of a magnetic system and a verified calculation of the distribution of magnetic induction in its volume are presented. This system will be part of an installation for producing ^{129}Xe hyperpolarized along nuclear spins by optical pumping of rubidium vapor followed by spin exchange with noble gas isotope atoms. A visualization of the magnetic field created by a system of four rings with a different number of turns is presented. Verification of the computational model showed excellent compliance with the experimental data.

Keywords: magnetic field, field uniformity, hyperpolarized xenon.

DOI: 10.51368/1996-0948-2023-3-92-96

REFERENCES

1. Grigoriev G. Y. and Lagutin A. S., Technical Physics **92** (9), 1277 (2022) [in Russisan].
2. Barskiy D. A., Coffey A. M., Nikolaou P., Mikhaylov D. M., Goodson B. M., Branca R. T., Lu G. J., Shapiro M. G., Telkki V-V., Zhivonitko V. V., Koptyug I. V., Salnikov O. G., Kovtunov K. V., Bukhtiyarov V. I., Rosen M. S., Barlow M. J., Safavi S., Hall I. P., Schröder L. and Chekmenev E. Y., Chem. Eur. Jour. **23**, 725 (2017).
3. Albert M. S. and Hane F. T., Hyperpolarized and Inert Gas MRI: From Technology to Application in Research and Medicine. Amsterdam, Elsevier, 2017.
4. Meersmann T. and Brunner E., Hyperpolarized 129Xe Magnetic Resonance: Concepts, Production, Techniques and Applications. Cambridge, Royal Society of Chemistry, 2015.
5. Birchall J. R., Nikolaou P., Coffey A. M., Kidd B. E., Murphy M., Molway M., Bales L. B., Goodson B., Irwin R. K., Barlow M. J. and Chekmenev E. Y., Anal. Chem. **92**, 4309 (2020).
6. Skinner J., Ranta K., Coffey A. M., Nikolaou P., Rosen M. S., Chekmenev E. Y., Morris P. G., Barlow M. J. and Goodson B. M., J. Magn Reson. **312**, 106686 (2020).
7. Plummer J. W., Emami K., Dummer A., Woods J. C., Walkup L. L. and Cleveland Z. I., J. Magn Reson. **320**, 106845 (2020).
8. Birchall J. R., Irwin R. K., Chowdhury M. R. H., Nikolaou P., Goodson B. M., Barlow M. J., Shcherbakov A. and Chekmenev E. Y., Anal. Chem. **93**, 3883 (2021).
9. Pałasz T., Mikowska L., Głowacz B., Olejniczak Z., Suchanek M. and Dohnalik T., Acta physica polonica A. **136** (6), 1008 (2019).
10. Luganskii L. B., Zhurnal tekhnicheskoi fiziki **56** (5), 884 (1986).
11. Skinner J. G., PhD thesis: Optimisation of xenon-rich stopped-flow spin-exchange optical pumping for functional lung imaging. Nottingham, 2016.
12. Fuliwara H., Imai H. and Kimura A., Analytical sciences. The Japan Society for Analytical Chemistry **35**, 869 (2019).