

微波波导传输特性及 ESR 微波探测

冯磊 06300190031

(上海市复旦大学物理系 200433)

摘要: 微波频率波段的光探测技术现在很普及,尤其是在自旋共振领域,这里主要讨论 DPPH 的电子自旋共振。DPPH 通常用来标定自旋谱仪的性能。电子自旋的概念首先由 Pauli 在 1924 年提出,电子微波自旋共振谱仪是利用具有未成对电子的物质在静磁场作用下对电磁波的共振吸收原理而设计的,采用微波探测,通过波导传输。在这里我首先就传输线中各微波器件的性能做一个简要的测量和数值计算模拟并加以比较,进而讨论 DPPH 在我们的微波实验系统中测得的各个物理量,通过对共振吸收图像的数值处理,讨论其共振线形。

关键词: 微波器件性能 微波调制 DPPH ESR(电子自旋共振) 共振线型

引言:

电子自旋的概念首先由 Pauli 在 1924 年提出,1945 年苏联科学家柴伏依斯基首先利用微波场观测到共振谱线。本实验所用的微波为频率 9.845GHz 的 TE 波。采用的传输波导为 $a=23\text{mm}$, $b=10\text{mm}$ 的内层镀银的长方形波导,其内壁光洁,内耗极小。同时通过各个波导器件如:衰减器、环形器、单螺调配器、短路活塞以及匹配负载等构成微波传输线路。各个器件的传输特点会在第一部分详细讨论。同时样品置于谐振腔内,加以横向 $340 \pm 25\text{mT}$ 的磁场和同向低频扫场 ($\leq 5\text{mT}$) 构成 ESR 探测波导线,同时利用晶体检波器输出共振信号。通过 ESR 共振探测可提供物质结构的丰富信息,可根据共振条件测量基本参数 g 因子,进而由 g 张量的对称性,从而判断配位体的空间结构;通过其精细结构研究电子自旋和核自旋之间的相互作用;由共振信号的强度来测定自旋浓度,并通过饱和和特性线宽线型来研究弛豫机制,将在本篇第二部分讨论。

1. 微波器件传输特性

在引言中已经提到本实验所用的波导为方形波导,横向线度分别为 23mm 和 10mm,固定频率为 9.845GHz。由此方形波导的传输特点:

$$k_g = \sqrt{\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 - \left(\frac{m\pi}{a}\right)^2 - \left(\frac{n\pi}{b}\right)^2} \quad (1)$$

对于此频率下的电磁波只能传输 TE_{10} 模式的电磁波:

$$\begin{cases} E_x = 0 \\ E_y = i \frac{\pi c k_0}{a k_c^2} B_0 \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sin(\omega t - k_g z) \\ E_z = 0 \\ B_x = -i \frac{\pi k_g}{a k_c^2} B_0 \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sin(\omega t - k_g z) \\ B_y = 0 \\ B_z = B_0 \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sin(\omega t - k_g z) \end{cases} \quad (2)$$
$$\begin{cases} B_x = -i \frac{\pi k_g}{a k_c^2} B_0 \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sin(\omega t - k_g z) \\ B_y = 0 \\ B_z = B_0 \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sin(\omega t - k_g z) \end{cases} \quad (3)$$

其特点是电场传输方向分量为零。由以上 (1) 可得理论的传输波长为 40.7mm。

I 短路活塞传输特性:

短路活塞事实上就是一个可调探入的金属全反射器,对于电磁波的反射率定义为:

$$\Gamma = \left| \frac{\rho - 1}{\rho + 1} \right| \quad (4)$$

其中 ρ 就是下表一中的驻波比(VSWR)。

表 I 短路活塞匹配测量波长、驻波比

Max-Position(mm)	Min-Position(mm)	VSWR
78.02	88.7	40
98.62	109.0	37.5
119.9	129.42	43
139.5	149.97	40

VSWR(theoretic)= ∞ 短路活塞位置: 20.364mm

我们用 1000kHz 的方波调制入射电磁波,通过调节测量线的位置可以测得驻波的波长和驻波比。因此可以得到实际波导中传输的 TE_{10} 波波长为: $\lambda_g = 41.0\text{mm}$, 与理论值偏差极小。同时通过驻波比可得短路活塞的反射率为: $\Gamma = 95\%$ 。同样的线路我很换上匹配负载时, $\text{VSWR}=1$, 可见匹配负载可以毫无反射地吸收电磁波,正好与短路活塞相反。

II 衰减器的衰减特性:

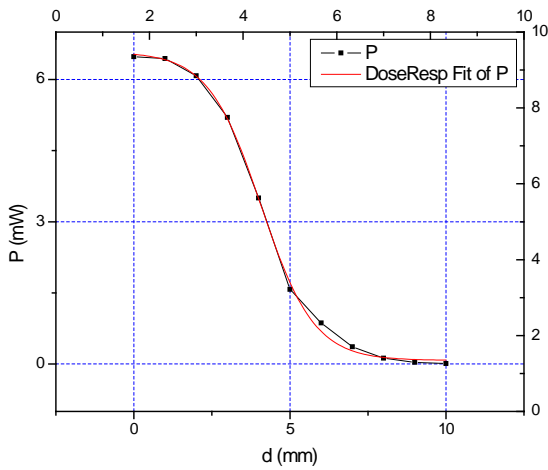


图 1 实验测得衰减器的衰减特性，横轴为探入深度，纵轴为光功率。为一 S 衰减曲线。拟合相关性系数为 0.999。

衰减器事实上是由波导插入波导中的金属片或者圆柱构成，图 1 中就是随着衰减器探入深度，通过光功率的变化。可见呈现出“S”形衰减。这样的结果与我们理论模拟的结果十分吻合。模拟结果见图 2 所示，结构为同等大小的完美导体波导模型，其中插入直径为 2mm 的 Cu 柱。

III 魔 T 传输特性：

魔 T 是微波分束波导中最为复杂的一种波导。这里仅对魔 T 加以讨论，对于 H-T 波导和 H-E 波导有类似的特性。魔 T 见图 3 的结构。分别从四个接口入射 TE_{10} 波，可以在其他的接口探测其传输情况。其中表 II 显示了实验测量和理论模拟的对比情况，可以看到，实验测得的传输特性基本与理论模拟所得的结果符合。其中从 2、3 号口入射是等

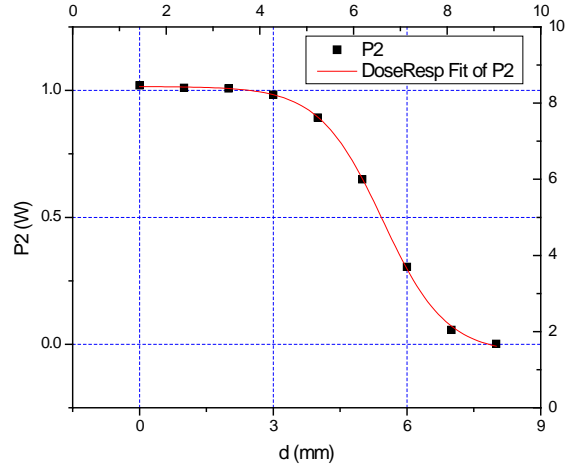


图 2 理论模拟衰减器的衰减特性，横轴为探入深度，纵轴为光功率。为一 S 衰减曲线。拟合相关性系数为 0.999。

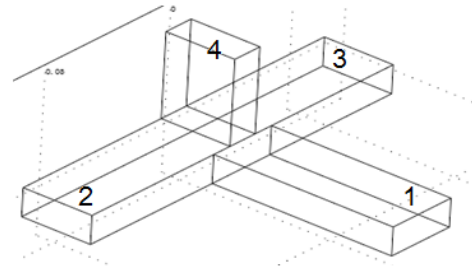


图 3 魔 T 结构

价的，故而我们只做了一组实验，即只从 2 号口入射。相对与每组实验我们都做了相应的对照模拟，其结果基本符合实验。存在的偏差主要是由于模拟时采用的边界条件为理想导体，并且默认其 $\epsilon_r=1$ 、 $\mu_r=1$ 所引

表 II 魔 T 波导特性

No.	1	2	3	4	Simulation
1(measurement)	-5.2mW	1.79mW (34.4%)	1.79mW (34.4%)	0mW	
1(calculation)	-1W	0.315W (31.5)	0.303W (30.3%)	0.00307W (0.3%)	
2(measurement)	1.7mW (32.7%)	-5.2mW	1.12mW (21.5%)	2.22mW (42.7%)	
2(calculation)	0.275W (27.5%)	-1W	0.215W (21.5%)	0.517W (51.8%)	
3(measurement)	0mW	2.08mW (40%)	2.08mW (40%)	-5.2mW	
3(calculation)	0.002624W (0.26%)	0.413W (41.3%)	0.487W (48.7%)	-1W	

备注：其中的负数功率表示入射功率，正功率表示出射功率。

起的。表 II 还显示, 对于第 1 组的模拟, 2、3 号口的模拟输出不相等, 这其实是由于三角剖分时, 剖分不够密集造成的计算误差。通过进一步的剖分应该可以解决, 但是过密的剖分会大大增加计算量。

对于以上所有的波导元件, 所有经过分束的微波仍然为 TE_{10} 模式, 而且传输波长不变, 这就保证了在传输线中微波性质的保存。

2. DPPH 的 ESR(电子自旋共振)微波探测

具有未配对电子的 DPPH 置于横向静磁场 B_H 中时, 由于电子自旋与外加的磁场的相互作用, 导致电子基态能级分裂, 有:

$$\Delta E = g\mu_B B_H \quad (5)$$

其中 $\mu_B = 9.27 \times 10^{-24} \text{J/T}$ 。当垂直于 B_H 方向所加的电磁波的能量满足 $h\nu = \Delta E$ 时, 未成对电子会在 Zeeman 能级之间跃迁, 跃迁的选择定则是电子自旋量子数变化 $\Delta m = \pm 1$, 发生自旋共振。由于热平衡电子遵循 M-B 分布, 它们的概率是相等的, 故而更多的电子在低能级上, 共振的统计结果是较低能级的电子跃迁到高能级上。

在宏观上, 对一个自旋体系, 它是满足 Bloch 方程的:

$$\begin{cases} \frac{dM_z}{dt} = \gamma(\vec{B} \times \vec{M})_z - \frac{M_z - M_z^0}{t_1} \\ \frac{dM_x}{dt} = \gamma(\vec{B} \times \vec{M})_x - \frac{M_x - 0}{t_2} \\ \frac{dM_y}{dt} = \gamma(\vec{B} \times \vec{M})_y - \frac{M_y - 0}{t_2} \end{cases} \quad (6)$$

\vec{B} 为 z 方向的外磁场 B_z 和垂直的交变磁场 $2\vec{B}_1 \cos \omega t$ 之和, γ 为旋磁比 (对于 DPPH, $\gamma = -28.06 \text{GHz/T}$), M_z^0 为 z 方向磁化强度的热平衡值。弛豫是自旋体系受外界电磁波扰动后由不平衡恢复到平衡态的过程。 t_1 和 t_2 分别代表磁化强度的纵向分量和横向分量返回热平衡值所需的弛豫时间, 故分别称为纵向和横向弛豫时间。纵向弛豫起因于自旋体系与它所依附的晶格之间以非辐射形式交换能量, 所以 t_1 又称自旋-晶格弛豫时间, 它与体系的温度密切相关; 横向弛豫则是由于自旋体系内部自旋-自旋之间交换能量, 所以 t_2 也称为自旋-自

旋弛豫时间, 它与自旋的浓密度密切相关。对于我们实验中所用的 DPPH 自由基, 由于其基本没有轨道角动量, 所以 $t_1 \gg t_2$ 。

在 ω 较低时, 可得 Bloch 方程的稳态解, 从而把微观的共振吸收与样品的宏观动态磁化率 χ 的实部 χ' 和虚部 χ'' 联系起来:

$$\begin{cases} \chi' = \frac{1}{2} \chi_0 \omega_0 \frac{t_2^2 (\omega_0 - \omega)}{1 + (\omega_0 - \omega)^2 t_2^2 + \gamma^2 B_1^2 t_1 t_2} \\ \chi'' = \frac{1}{2} \chi_0 \omega_0 \frac{t_2^2}{1 + (\omega_0 - \omega)^2 t_2^2 + \gamma^2 B_1^2 t_1 t_2} \end{cases} \quad (7)$$

B_1 是圆频率为 ω (50Hz) 的横向磁场强度, $\chi_0 = \frac{M_z^0}{B_0}$ 为稳态磁化率, χ' 与磁场同相位的色散信号相联系, 称为色散磁化率, χ'' 与相位滞后 $\pi/2$ 信号联系, 称为吸收磁化率, ω_0 为共振时的圆频率。

对于添加了样品的谐振腔, 等效地可以看作具有阻抗 Z_0 的微波电阻:

$$Z_0 = R_0 + i\omega_0 L_0 (1 + 4\pi\chi)$$

$$= (R_0 + 4\pi\omega_0 L_0 \chi') + i\omega_0 L_0 (1 + 4\pi\chi'')$$

因此, 其吸收功率应当正比于 $\text{Re}Z_0$:

$$f(\omega) \propto \frac{\omega_0 t_2^2}{1 + (\omega_0 - \omega)^2 t_2^2 + \gamma^2 B_1^2 t_1 t_2} \quad (8)$$

应此, 测得的线型应当是 Lorentz 线型。

在第一部分利用短路活塞测量波导中传输波长时, 我们提到了低频的方波调制, 然后通过晶体检波器, 可以检测波导传输线中微波振幅信号并且在示波器上输出。其实对于 ESR 的探测, 就是利用 DPPH 的未成对电子自旋在横向磁场下能级分裂引起的共振吸收对 TE_{10} 波振幅进行的调制, 同样通过晶体检波器就可以输出其共振信号, 再利用这些信号提供的信息做测量。测量所得信号图像经过数值处理, 如图 4 所示。

i 因此在 340mT 下, 固定微波频率 9.845GHz 时, 由 (5) 可得:

$$g = 2.077$$

DPPH 的理论值为 2.0036, 偏差不到 1%。

ii 通过实际测量共振谱线半高宽: $\Delta t = 0.845 \text{ms}$ 总的迟豫时间:

$$t = \frac{1}{2t_1} + \frac{1}{t_2} = \frac{g\mu_B}{h} \Delta B$$

由于 $t_1 \gg t_2$, 且对于 Lorentz 线型, $\gamma^2 B_1^2 t_1 t_2 \ll 1$, 固有:

$$t_2 = \frac{2}{\Delta \omega} = \frac{2}{(\omega_1 - \omega_0) \Delta B \Delta t} = 8.28\text{ns}$$

iii 对于用自选系统振幅调制的微波，我们用微波中测量驻波波长的方法，也可以得到系统中微波波长 $\lambda_g = 41.2\text{mm}$ ，与第一部分的测量几乎完全一样。这样我们由谐振腔的驻波模式可得（ l 为谐振腔的长度）：

$$\lambda_g = \frac{2\sqrt{\epsilon_r}}{\sqrt{\left(\frac{1}{a}\right)^2 + \left(\frac{2}{l}\right)^2}}$$

可得： $l = 23.2\text{mm}$ 。

iv 共振信号的线型我们已经提到理论上应当为 Lorentz 线型，实际测量过程中发现并不完全是这样的。

无论是对于 Gauss 线型还是 Lorentz 线型，其二阶微分曲线应当是对称的，我们从

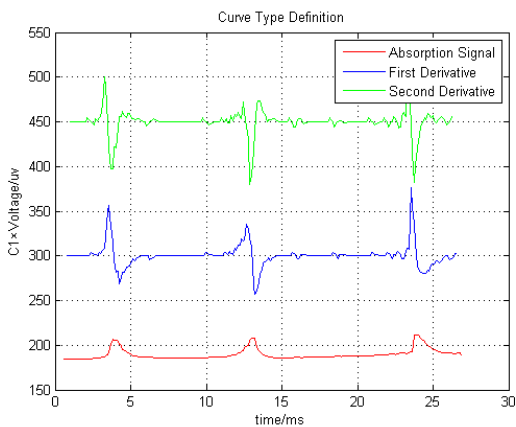


图 4 第三条红色曲线为共振信号图像数值处理后得到的共振信号曲线，第二、第一条为其一阶微分和二阶微分图形。横轴为时间，单位为毫秒；纵轴为 Voltage 线性放大后的图形。

图 4 中可以看到只有中间的二阶微分图形对称，但两边的两个信号并不对称。更像是几个信号的混合。Lorentz 线型的最大斜率比为 4，Gauss 线型的最大斜率比为 2.2。对于中间的对称信号我们可以得到最大斜率比为：3.15，介于 4 和 2 之间，所以很难确定具体是 Lorentz 型还是 Gauss。

表 III 共振线型最大斜率比

No.	1	2	3		
B/A	1.06	4.48	3.15	0.789	6.81

备注：对于 3 号峰的最大斜率比显然有些失真，其主要原因在于对图像的数值处理的失真。

因此在处理的过程中我们采用混合线型，用 Lorentz 和 Gauss 线型的叠加，对于图 4 中的 1 号峰进行拟合可得（如图 5）：

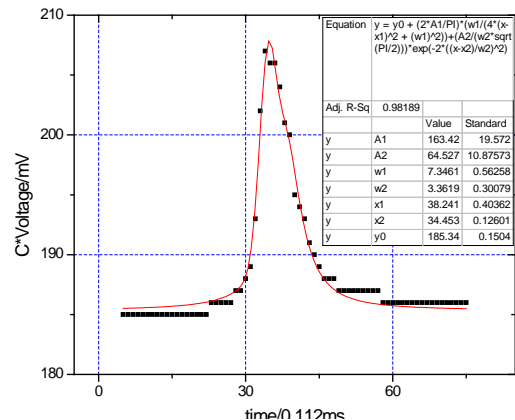


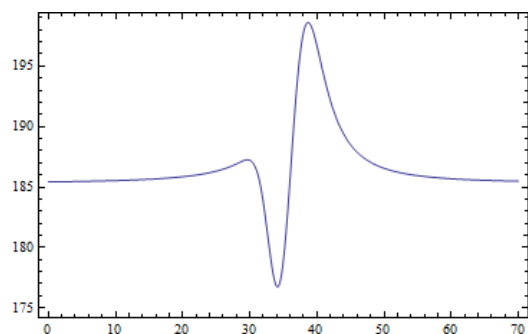
图 5 共振信号拟合

拟合相关性系数可达 0.98189，符合的很好。

另外这也有利于信号的解释。电磁波通过 DPPH 时，其圆频率会发生一个很小的移动，在示波器上显示就是对于时间 t 的平移，我们在图 5 的拟合中可得这一平移为：

$$\Delta t = 0.424\text{ms}$$

那么通过单螺适配器改变他们的相对相位可有色散信号（图 6），这与我们观测到得色散信号十分吻合。



图表 6 通过拟合计算所得色散信号

结论：

本实验中首先我们测量了各种微波器件的微波传输特性，同时我们也对这些器件

做了数值模拟，两者符合的很好。而且我们也可以从模拟结果的电分量图和磁分量图可以看到无论如何分束，所得的还是 TE_{10} 波，良好地保持了其特性。同时利用微波波幅低频调制的原理，利用 DPPH 的自旋共振吸收来调制微波，从而在示波器上可以看到低频的吸收信号。并且通过这些信号提供的信息可以测得 DPPH 的 g 因子以及迟豫时间。另外通过对共振图像的数值处理，可以将图像数值化，进而进行吸收线型的分析。我们从分析中看出，这样的吸收线型事实上是多个 Lorentz 很 Gauss 线型的叠加，并不是单一的 Lorentz 线型。同时利用二者叠加的原理拟合了数值处理后的共振峰，得出了色散信号的模拟图像，这也与我们的观察十分符

合。需要说明的一点是，以上所有的微波波导模拟都是在 Comsol Multiphysics 下完成的，共振图像的处理采用 Matlab 的 image toolbox 编程完成。

参考文献：

- 【1】F. Bloch, Phys. Rev. 70, 460(1946).
- 【2】Philip H. Rieger, Electron Spin Resonance, Published by The Royal Society of Chemistry, Cambridge CB4 0WF, UK, 2007.
- 【3】裘祖文, 电子自旋波普, 科学出版社, 1980.
- 【4】蔡圣善、朱耘, 电动力学, 高等教育出版社, 2002.