

ХАОТИЧЕСКИЙ РЕЖИМ В НЕЛИНЕЙНОМ ЯМР

В.С.Рухлов

Исследованы условия хаотизации отклика ядерной спиновой системы в антиферромагнетиках на периодическое импульсное воздействие. На основе одномерного отображения, моделирующего спиновую динамику, построена фазовая диаграмма, содержащая области периодического и хаотического движения.

Ряд проблем ЯМР в магнетиках с большим динамическим сдвигом частоты (ДСЧ) связан с вопросами устойчивости. В частности, в работах ¹ проанализированы условия возникновения стохастических динамических режимов импульсного ЯМР в бездиссипативном пределе. Нашей целью является рассмотрение качественно иной ситуации, в которой диссипацией пренебречь нельзя. Будет изучена нелинейная динамика акустической ядерной моды в легкоплоскостных и кубических антиферромагнетиках, возбуждаемых стационарной периодической последовательностью прямоугольных радиочастотных (РЧ) импульсов.

1. Рассмотрим случай поперечной накачки, в котором реализуются максимальные значения коэффициента усиления $\eta = H_n/|\vec{H}|$, где H_n - величина сверхтонкого поля на ядре. При этом постоянное магнитное поле \vec{H} , определяющее равновесную ориентацию магнитных моментов подрешеток, и перпендикулярное ему РЧ поле $\vec{H}_1(t) = 2\vec{h}\cos\omega t$ с амплитудой $2|h| \ll |\vec{H}|$ и частотой ω лежат в плоскости с малой магнитной анизотропией. Наиболее простую форму уравнения движения ядерной намагниченности \vec{m} подрешетки имеют в собственной вращающейся системе координат ²

$$\begin{aligned} \dot{m}_x &= -(\omega - \omega_n^0 + \omega_p m_z/m_0)m_y - (m_x - \chi\eta h)/T_2 \\ \dot{m}_y &= (\omega - \omega_n^0 + \omega_p m_z/m_0)m_x + \omega_1 m_z - m_y/T_2 \\ \dot{m}_z &= -\omega_1 m_y - (m_z - m_0)/T_1 \end{aligned} \quad (1)$$

где $\omega_n^0 \approx \gamma H_n$ - несмещенная частота ЯМР, ω_p - равновесная величина ДСЧ, $\omega_1 = \gamma\eta h$ - амплитуда резонансной циркулярно поляризованной компоненты усиленного РЧ поля в частотных единицах, χ и $m_0 \simeq \chi H_n$ - статическая магнитная восприимчивость и равновесная величина намагниченности ядер подрешетки, $T_1 \gg T_2$ - времена продольной и поперечной релаксации, γ - ядерное гиромагнитное отношение.

2. Поскольку основной причиной неоднородного уширения линии ЯМР в реальных образцах считается разброс значений ω_p ², ядерную спиновую систему промоделируем однопараметрическим семейством осцилляторов. Ограничим длительности импульса T_i и паузы T_p неравенствами $T_i \ll T_{1,2}$ и $T_p \gg T_2$, что позволяет исключить из рассмотрения переменные $m_{x,y}$. Чтобы не учитывать диффузию ядерной спиновой температуры, протекающую с характерным временем T_d , исследуем два предельных случая.

а) В пределе медленной диффузии $T_d \gg T_i, T_p, T_1$, мы имеем дело с ансамблем невзаимодействующих осцилляторов с различными ω_p . Решение уравнений (1) в консервативном приближении хорошо известно ³. Вводя новую переменную $z = m_z/m_0$, с учетом релаксации во время паузы получаем одномерное отображение, связывающее значения z на входе двух следующих друг за другом импульсов

$$z_{n+1} = 1 - a + az_n \left\{ 1 - \frac{2\bar{\omega}_1^2}{\rho(Y; g_2^n, g_3^n) + [\bar{\omega}_1^2 + (z_n + d)^2]/3} \right\}, \quad (2)$$

где $\rho(Y; g_2^2, g_3^2)$ - функция Вейерштрасса ⁴ с инвариантами $g_j^2 = g_j(z_n)$, $g_3(z) = 4\tilde{\omega}_1^4 z^2 - \frac{8}{3}\tilde{\omega}_1^2 z(z+d)[\tilde{\omega}_1^2 + (z+d)^2] + (\frac{2}{3})^3[\tilde{\omega}_1^2 + (z+d)^2]^3$, $g_2(z) = -8\tilde{\omega}_1^2 z(z+d) + \frac{4}{3}[\tilde{\omega}_1^2 + (z+d)^2]^2$; $a = \exp(-T_p/T_1)$, $\tilde{\omega}_1 = \omega_1/\omega_p$, $d = (\omega - \omega_n^0)/\omega_p$, $Y = \omega_p T_i/2$. Для простоты ограничимся анализом относительно слабого насыщения $\Delta z = 1 - z \ll 1$ в приближении $\tilde{\omega}_1 \ll 1$, когда (2) можно аппроксимировать отображением

$$\zeta_{n+1} = a[\zeta_n - \cos(b\zeta_n + \phi)] \equiv f(\zeta_n), \quad (3)$$

где в области больших расстройк $(\tilde{\omega}_1^2/(z+d)^2 \ll 4|z+d|/27z \leq 1)$

$$\zeta = \zeta_1 = \Delta z(1+d)^2/\tilde{\omega}_1^2 - a/(1-a), \quad b = b_1 = \omega_p T_i \tilde{\omega}_1^2/(1+d)^2, \\ \phi = \phi = -\omega_p T_i(1+d)[1 - a\tilde{\omega}_1^2/(1-a)(1+d)^3], \quad (4)$$

а в области малых расстройк $(|z+d| \leq z^{1/3}\tilde{\omega}_1^{2/3}/2 \ll 1)$

$$\zeta = \zeta_2 = \Delta z/\tilde{\omega}_1^{2/3} - a/(1-a), \quad b = b_2 = 3^{1/4}\omega_p T_i \tilde{\omega}_1^{2/3}/6, \\ \phi = \phi_2 = b_2[(6-5a)/(1-a) - (1+d)/\tilde{\omega}_1^{2/3}] \quad (5)$$

б) В пределе быстрой диффузии, $T_i \ll T_d \ll T_p$, T_1 , за время $t \gg T_d$ после импульса успевает установиться однородная ядерная спиновая температура. Отображения для однородной z получаются усреднением по разбросу ω_p и приводятся к виду (3). В рассматриваемых системах $\omega_p = 2\pi\nu_p$ намного превышает неоднородную ширину линии $\Delta\nu$, т. е. $\Delta\nu/\nu_p^0 \ll 1$, где ν_p^0 - соответствует центру смещенной линии ЯМР. Поэтому в рамках сделанных приближений учет неоднородности ω_p оказывается существенным только в аргументе косинуса отображения (3). В предположении гауссовости равновесной формы линии

$$\zeta = \zeta_j = \zeta_j \exp(\kappa_j), \quad b = b_j^- = b_j \exp(-\kappa_j). \quad (6)$$

Здесь $j = 1, 2$ - соответствуют областям больших и малых расстройк, $\kappa_1 = (\pi\Delta\nu T_i)^2/4 \ln 2$, $\kappa_2 = \kappa_1/12 \cdot 3^{1/2}$, а входящая в ζ_j, b_j величина ω_p соответствует центру равновесной линии ЯМР, т.е. $\omega_p = \omega_p^0 = 2\pi\nu_p^0$.

3. Диссипация характеризуется тангенсом угла наклона $0 < a < 1$ огибающих функции $f(\zeta)$. При итерациях изображающая точка притягивается конечной областью фазового пространства

$$|\zeta| \leq a/(1-a), \quad (7)$$

в которой осуществляется баланс между поглощаемой спинами энергией, зависящей от периода осцилляций $2\pi/b$ и фазы ϕ функции $f(\zeta)$, и энергией, отдаваемой спинами в решетку. Результаты исследования числа и устойчивости 1-циклов отображения (3) можно представить в виде фазовой диаграммы на плоскости параметров (b, ϕ) , имеющей период по ϕ , равный 2π . Семейство бифуркационных кривых (тонкие линии на рис.1), определяемых соотношениями $\phi_L(b) = 2\pi(L+1/4) \pm \Delta\phi(b)$, $\Delta\phi(b) = \sqrt{(\frac{ab}{1-a})^2 - 1} - \arctg\sqrt{(\frac{ab}{1-a})^2 - 1}$, где $b \geq 1/a - 1$, L - целое число, делит плоскость параметров (b, ϕ) на области, в которых отображение (3) имеет $k = 2n+1$ ($n = 1, 2, 3, \dots$) фиксированных точек. Эти кривые пересекаются в пороговых точках с координатами $b_k = (1 + \varphi_k^2)^{1/2}/(a-1)$, $\phi_{kL} = \pi[4L + (-1)^{(k+1)/2}]/2$ где $\varphi_k < \varphi_{k+2}$ - множество неотрицательных решений уравнения $\varphi = \text{tg}\varphi$, причем $\varphi_3 = 0$. Смена устойчивости 1-циклов происходит при изменениях управляемых физических параметров, в результате которых траектория движения по плоскости (b, ϕ) пересекает бифуркационные кривые (толстые линии на рис. 1), заданные уравнениями $\tilde{\phi}_L(b) = 2\pi(L-1/4) \pm \Delta\tilde{\phi}(b)$, $\Delta\tilde{\phi}(b) = \frac{1+a}{1-a}\sqrt{(\frac{ab}{1+a})^2 - 1} - \arctg\sqrt{(\frac{ab}{1+a})^2 - 1}$, где $b \leq 1/a + 1$, L - целое число. Эти кривые

являются границами областей, содержащих $n = 1, 2, 3, \dots$ неустойчивых 1-циклов на ниспадающих участках $f(\zeta)$. Они пересекаются в пороговых точках $\tilde{b}_n = (1 + \tilde{\varphi}_n^2)^{1/2}(1/a + 1)$, $\tilde{\varphi}_{nL} = \pi[4L + (-1)^n]/2$, где $\tilde{\varphi}_n < \tilde{\varphi}_{n+1}$ - множество неотрицательных решений уравнения $\tilde{\varphi} = -\text{tg}(\frac{1+a}{1-a}\tilde{\varphi})$, причем $\tilde{\varphi}_1 = 0$. При $(\frac{ab}{1+a})^2 \gg 1$ устойчивые 1-циклы могут наблюдаться только в узких интервалах на границах притягивающей области (7). Ширина этих интервалов $(1+a)^2/2ab^2(1-a)$ имеет минимум при $a = 1/3$.

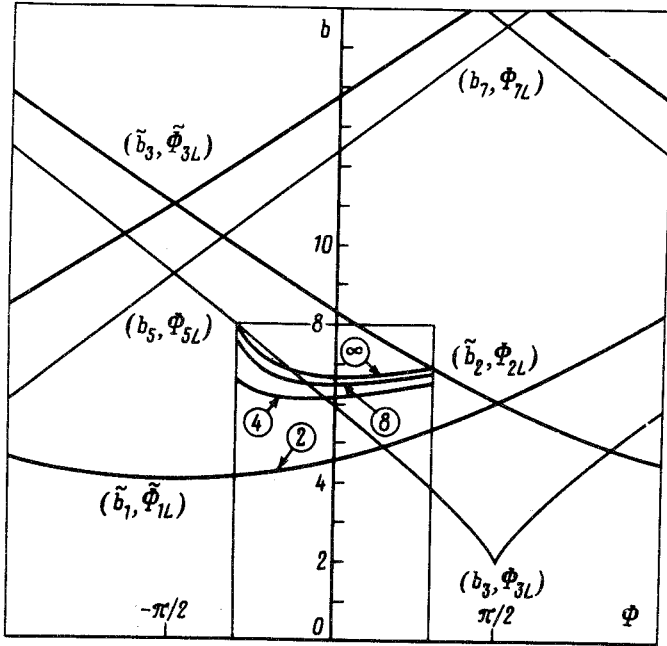


Рис. 1. Элементы фазовой диаграммы отображения (3) на плоскости (b, ϕ) при $a = 1/3$. В прямоугольнике $0 \leq b \leq 8$, $-0,9 \leq \phi \leq 0,9$ стрелками указаны отрезки бифуркационных кривых удвоения периода (численное моделирование). В соответствующем кружке указан результирующий период

Исследование более сложных внутренних бифуркаций предельных множеств и их объединений проведено численными методами. В рамке на рис. 1 показан фрагмент фазовой диаграммы для единичного осциллятора в пределе медленной диффузии, в котором наблюдается переход Фейгенбаума⁵. Он получен для отображения (3) при $a = 1/3$ с равновесным $\zeta = -1/2$ в качестве начального значения. На рис. 2 дан пример бифуркационной диаграммы и поведения показателя Ляпунова λ , полученных при увеличении параметра b для $\phi = \text{const} = 0$. В областях значений b , где $\lambda > 0$, имеет место хаос, прерываемый окнами периодичности. Причем, в области $b > 1/a + 1$ амплитуда изменений ζ может приближаться по величине к ширине притягивающей области (7).

4. Проведенный анализ показывает, что:

а) в пределе медленной диффузии следствием неоднородного уширения является сосуществование осцилляторов с различными аттракторами. Обусловленный этим динамический разброс значений m_x модифицирует (вплоть до расщепления) форму линии ЯМР и делает ее, вообще говоря, зависящей от времени (числа поданных РЧ импульсов). При $\tilde{\omega}_1^2, \tilde{\omega}_1^{2/3} > \Delta\nu(1-a)/2\nu_p^0 a$ в области больших и малых расстройк, соответственно, динамический разброс частот осцилляторов может значительно превышать равновесную неоднородную ширину. В этом случае

наблюдаемые сдвиг, ширина и форма линии ЯМР имеют чисто динамический, неравновесный характер. Из определений (4), (5) и пороговых значений b , можно найти амплитуды РЧ полей, необходимых для появления описанных здесь эффектов. Оценки, сделанные для CsMnF_3 , RbMnF_3 , MnCO_3 на основе данных ⁶⁻⁹, при длительностях импульсов $T_i \sim 1 - 10$ мкс и паузы $T_p \sim T_i$ дают величины порядка $10^{-1} - 10^2$ Э.

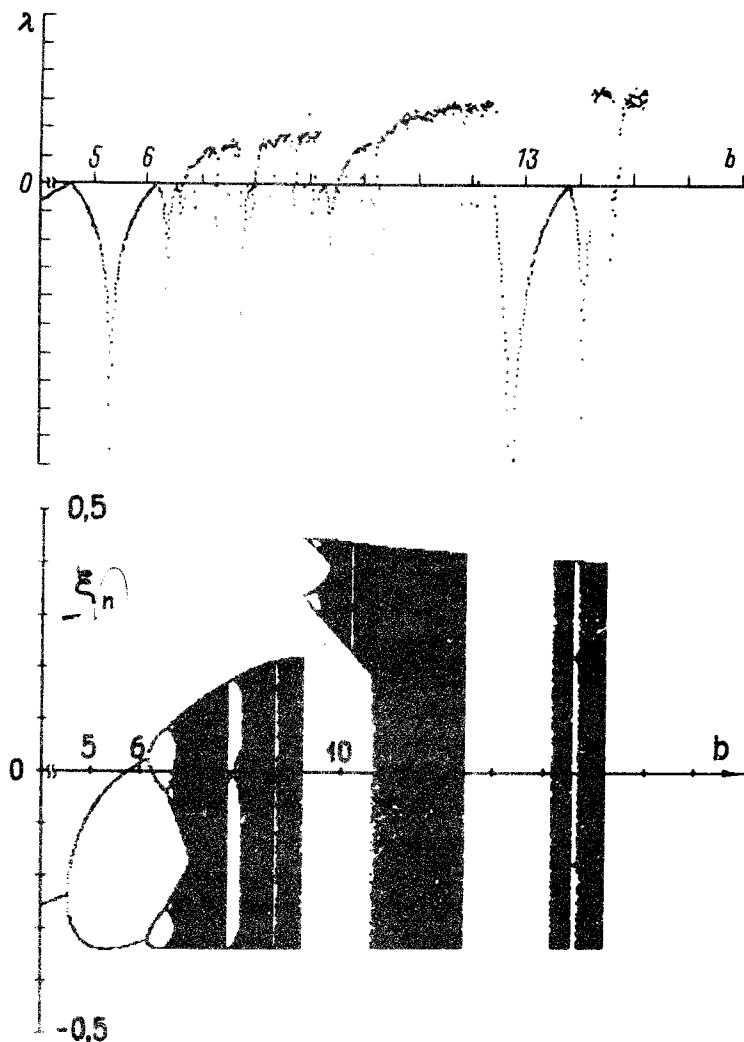


Рис. 2. Вверху - показатель Ляпунова (в произвольных единицах) как функция параметра b . Внизу - бифуркационная диаграмма. Отложены 10^3 значений λ_n для каждого значения b на интервале $4 \leq b \leq 15.3$ с шагом 0,02 в стационарном режиме

б) В пределе быстрой диффузии ширина и форма линии ЯМР с рассматриваемой степенью точности остаются равновесными, в то время как ДСЧ может быть либо фиксированным, либо изменяться во времени периодически или хаотическим образом. Вследствие немонотонной зависимости b от T_i максимальная эффективность возбуждения импульсами фиксированной амплитуды достигается при длительностях $T_{i1} \approx (2 \ln 2)^{1/2} / \pi \Delta \nu$ в области больших и при $T_{i2} \approx 6 T_{i1} / 3^{1/4}$ в области малых расстройк. Соответствующие пороговые значения амплитуд РЧ импульсов, получаемые из $b_1^- \approx 2(2 \ln 2/e)^{1/2} (\nu_p^0 / \Delta \nu) (\omega_1 / \omega_p^0)^2$, $b_2^- \approx b_1^- (\omega_1 / \omega_p^0)^{-4/3}$

(см. (б)), имеют тот же порядок величины, что и в пределе медленной диффузии.

Для наблюдения описанных нами явлений может быть использован метод спинового эха¹⁰. При этом информация о распределении продольных компонент ядерной намагниченности заключена в спектральном составе эхо-сигнала. Ее можно получить так же из анализа сигнала свободной индукции. В области значительного перегрева ядерной спиновой системы может быть использован метод индикации ЯМР по выбросам поглощаемой СВЧ мощности, предложенной в¹¹.

Автор благодарит Г.Б.Тейтельбаума за полезные обсуждения.

Литература

1. Бушвили Л.Л., Угулава А.И. ФТТ, 1983, 25, 2370; Кесаев В.И., Угулава А.И. ФТТ, 1985, 27, 1259; Алексеев К.Н., Берман Г.П., Цифринович В.И. ЖЭТФ, 1990, 97, 1277.
2. Туров Е.А., Куркин М.И. Кн.: Проблемы магнитного резонанса 1978, М., Наука, с. 271.
3. Туров Е.А., Куркин М.И., Николаев В.В. ЖЭТФ, 1973, 64, 283.
4. Абрамович М., Стиган И. Справочник по специальным функциям. 1979, М., Наука.
5. Шустер Г. Детерминированный хаос. Введение. 1988, М.: Мир.
6. Heeger A.J., Teaney D.T. J. Appl. Phys., 1964, 35, 846.
7. Welsh L.V. Phys. Rev., 1967, 156, 370.
8. Петров М.П., Смоленский Г.А., Петров А.А., Степанов С.И. ФТТ, 1975, 15, 184.
9. Буньков Ю.М., Думеш Б.С. ЖЭТФ, 1975, 68, 1161.
10. Боровик-Романов А.С., Буньков Ю.М., Думеш Б.С., Куркин М.И., Петров М.П., Чекмарев В.П. УФН, 1984, 142, 537.
11. Свистов Л.Е., Смирнов А.И. ЖЭТФ, 1982, 82, 941.