

К ТЕОРИИ СТАЦИОНАРНЫХ СИГНАЛОВ ЯМР В УСЛОВИЯХ БОЛЬШОГО ДИНАМИЧЕСКОГО СДВИГА ЧАСТОТЫ

М.И. Куркин

Установлена причина расхождения теории де Жанна и др. [1] с экспериментальными результатами [2, 3].

Одной из особенностей ядерных спиновых систем с динамическим сдвигом частоты (ДСЧ) является зависимость частоты ЯМР от величины проекции ядерной намагниченности m_n на ее равновесное направление z [1]:

$$\omega_n = \omega_n - \omega_p m^z / m_0, \quad (1)$$

где ω_n – частота ЯМР без учета ДСЧ, ω_p – параметр ДСЧ, который в цитированных ниже экспериментальных работах [2, 3] был порядка $10 - 10^2$ МГц, m_0 – равновесная величина m . С этой зависимостью связана следующая характерная особенность поведения стационарных сигналов ЯМР в поперечных радиочастотных (РЧ) полях.

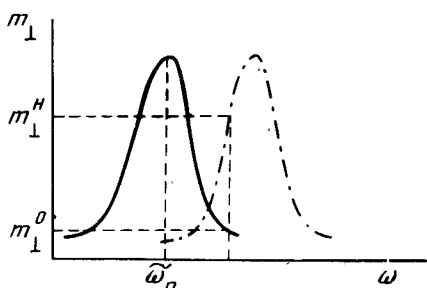


Рис. 1. Положение линии ЯМР для насыщенного (пунктир) и ненасыщенного (сплошная линия) состояний ядерной спиновой системы в поперечном РЧ поле

Пусть частота РЧ поля $\omega > \tilde{\omega}_n$, но $(\omega - \tilde{\omega}_n) < \omega_p$. Тогда, как показано на рис. 1, наряду с обычным состоянием, которому отвечают нерезонансные вынужденные колебания m_{\perp}^0 малой амплитуды (ненасыщенное состояние), может существовать состояние с большой амплитудой колебаний m_{\perp}^H , отвечающее сдвинутой линии ЯМР при меньшем значении величины m^z (насыщенное состояние).

Существование двух стационарных состояний m в поперечном РЧ поле подтверждено экспериментально в работах [2, 3]. Один из методов исследования таких состояний связан с наблюдением частоты антиферромагнитного резонанса (АФМР), которая из-за сверхтонкого взаимодействия электронных и ядерных спинов также оказывается зависящей от величины m^z [4]. Процесс смещения частоты АФМР при насыщении ядерной спиновой системы РЧ полем показан на рис. 2, взятом из работы [3].

Смещенная линия АФМР, соответствующая насыщенному состоянию m , возникает при мощности насыщающего РЧ поля $P = P_{кр}$. Возникнув,

она остается и при $P < P_{кр}$, исчезая при $P < (P_{1/2} - \Delta P)$. В интервале $(P_{1/2} - \Delta P) \leq P \leq (P_{1/2} + \Delta P)$ существуют две линии АФМР, отвечающие насыщенному и ненасыщенному состояниям m . В работе [1] были проанализированы условия существования таких двух стационарных состояний m в поперечном РЧ поле в предположении, что форма линии ЯМР является гауссовой. В этом случае амплитуда вынужденных колебаний m в нерезонансном РЧ поле экспоненциально убывает с увеличением расстройки $(\omega - \tilde{\omega}_n)$, поэтому для мощности $P_{кр}$ в [1] получилась экспоненциально большая величина

$$P_{кр} \sim \exp \{ (\omega - \tilde{\omega}_n)^2 / \Delta \Omega^2 \}, \quad (2)$$

где $\Delta \Omega$ — ширина линии ЯМР. В случае лоренцевой линии ЯМР амплитуда вынужденных колебаний m убывает с увеличением расстройки $(\omega - \tilde{\omega}_n)$ по степенному закону, поэтому для $P_{кр}$ следует ожидать гораздо меньших значений, чем следует из формулы (2). Ниже приводятся соображения, по которым форму линии ЯМР для рассматриваемого случая предпочтительнее считать лоренцевой, и приводятся результаты расчетов величин $P_{кр}$ и $P_{1/2}$.

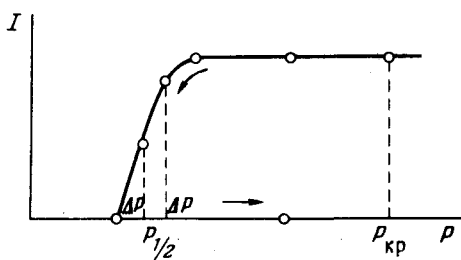


Рис. 2. Процесс возникновения и исчезновения насыщения ЯМР при изменении мощности насыщающего РЧ поля по данным АФМР [3]

Как было показано в [1], ДСЧ можно рассматривать как результат корреляций в движении ядерных спинов за счет взаимодействия Сула — Накамуры \mathcal{H}_{SN} [5]. Можно показать, что эти корреляции полностью подавляют неоднородности сверхтонких полей на расстояниях

$$\rho < r_0, \quad (3)$$

где r_0 — радиус взаимодействия \mathcal{H}_{SN} , который для антиферромагнетиков типа "легкая плоскость" порядка 10^{-5} см [4]. Таким образом частоты ЯМР для ядерных спинов в объеме с размерами $\rho \leq r_0$ (он содержит до 10^9 спинов) могут отличаться только за счет релаксационных процессов, т.е. соответствующая линия ЯМР является однородно уширенной.

Гауссова форма линии ЯМР соответствует случайному разбросу частот $\tilde{\omega}_n$ (1) и обычно имеет место для неоднородно уширенных линий. Однородно уширенные линии чаще всего имеют лоренцеву форму, которая описывает линию ЯМР в стационарном режиме, когда движение m подчиняется уравнениям Блоха [6]. Эти уравнения во вращающейся вмес-

те с РЧ полем системе координат имеют вид [6]:

$$\begin{aligned}\dot{m}^x &= (\tilde{\omega}_n - \omega) m^y - m^x / T_2, \\ \dot{m}^y &= -(\tilde{\omega}_n - \omega) m^x + \omega_1 m^z - m^y / T_2, \\ \dot{m}^z &= -\omega_1 m^y + (m^z - m_0) / T_1,\end{aligned}\quad (4)$$

где ω_1 — амплитуда РЧ поля с учетом эффекта усиления [4] в единицах частоты. В стационарном режиме $\dot{m}^a = 0$ и система (4) приводится к одному уравнению:

$$\Delta z = -\omega_1^2 T_1 T_2 / [1 + \omega_1^2 T_1 T_2 + (\Delta\omega - \omega_p \Delta z)^2 T_2^2], \quad (5)$$

где $\Delta\omega = (\omega_n - \omega - \omega_p)$, $\Delta z = (m^z - m_0) / m_0$.

Уравнение (5) по виду совпадает с известным уравнением для нелинейного одномерного осциллятора [7]. Анализ его приводит к следующим результатам. Три вещественных корня (5) существуют при значениях $\Delta\omega$, лежащих в интервале:

$$\Delta\omega_1 \leq \Delta\omega \leq \Delta\omega_2, \quad (6)$$

где величины $\Delta\omega_{1,2}$ при $\omega_1^2 T_1 T_2 \ll 1$ определяются выражениями:

$$\Delta\omega_1 = -\frac{1}{T_2} (\omega_p T_2 \omega_1^2 T_1 T_2), \quad (7)$$

$$\Delta\omega_2 = -\frac{3}{T_2} (\omega_p T_2 \omega_1^2 T_1 T_2 / 4)^{1/3}. \quad (8)$$

Произведение $\omega_p T_2$ обычно порядка $10^3 - 10^4$, поэтому неравенство $\Delta\omega_{1,2} T_2 \gg 1$ может иметь место при $\omega_1^2 T_1 T_2 \ll 1$.

Наименьший вещественный корень

$$\Delta z_1 = \Delta\omega / \omega_p \quad (9)$$

соответствует насыщенному состоянию ядерной спиновой системы, а наибольший корень

$$\Delta z_2 = -(\omega_1 / \Delta\omega)^2 (T_1 / T_2) \quad (10)$$

— ненасыщенному состоянию. Можно показать, что промежуточный корень отвечает неустойчивому состоянию m . Обращаем внимание, что величина Δz_1 (9) определяется расстройкой $\Delta\omega$ и в первом приближении не зависит от амплитуды РЧ поля ω_1 .

Критическое значение мощности $P_{1/2}$ (рис.2) определяется величиной $\Delta\omega_1$ (7):

$$P_{1/2} \sim \omega_1^2 = - \frac{\Delta\omega_1}{\omega_p} \frac{1}{T_1 T_2}, \quad (11)$$

что совпадает со значением, найденным в [1]. Для $P_{кр}$ из (8) имеем

$$P_{кр} \sim \omega_1^2 = \frac{4}{27} \frac{(-\Delta\omega_2 T_2)^3}{\omega_p T_2} \frac{1}{T_1 T_2}. \quad (12)$$

Эта величина растет пропорционально $\Delta\omega_2^3$, а не экспоненциально, как было найдено в [1] (см. формулу (2)).

В работах [2, 3] малая величина экспериментальных значений $P_{кр}$ по сравнению с величиной, которую дает формула (2), связывалась с влиянием примесей. Выше было показано, что для лоренцевых линий величина $P_{кр}$ (12) оказывается достаточно малой и в случае идеальных кристаллов. Тем не менее роль примесей при переходах между ненасыщенным и насыщенным состояниями должна быть существенной, так как такие переходы являются фазовыми переходами первого рода и происходят путем образования зародышей новой фазы. Границы между двумя фазами являются пространственно неоднородными образованиями и для анализа их свойств требуется специальное рассмотрение.

В заключение я хочу выразить глубокую благодарность В.А.Тулину за многократные обсуждения данной проблемы ряд ценных замечаний, без которых выполнение данной работы вряд ли было возможно.

Институт физики металлов
Академии наук СССР
УНЦ

Поступила в редакцию
11 октября 1978 г.

Литература

- [1] P.G. de Gennes, P.Pincus, F.Hartmann-Boutron, J.M.Winter. Phys. Rev., **129**, 1105, 1963.
- [2] A.M.Portis, G.L.Witt, A.J.Neeger. J. Appl. Phys., **34**, 1052, 1963.
- [3] В.А.Тулин. Кандидатская диссертация, Москва, 1970.
- [4] Е.А.Туров. М.П.Петров. "Ядерный магнитный резонанс в ферро- и антиферромагнетиках", М., изд. Наука, 1969.
- [5] H.Suhl. Phys. Rev., **109**, 606, 1958; T.Nakamura. Prog. Theor. Phys., **20**, 542, 1958.
- [6] А.Абрагам. "Ядерный магнетизм", М., ИИЛ, 1963.
- [7] Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. "Механика", М., изд. Наука, 1965.