

Исследование термоэда α (рис. 2) показало, что в образце с $x=0.14$ на температурной зависимости $\alpha(T)$ обнаруживается особенность. Рассчитана диффузионная часть термоэда; показано, что в образце с $x=0.14$ имеет место эффект увлечения дырок фононами; обнаружено, что фононная доля термоэда начинает проявляться с 25 К, при ~ 7 К проходит через максимум. Совпадение максимумом α и $\alpha_{\text{фон}}$ по температурной шкале говорит в пользу того, что в исследованном образце $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ ($x=0.14$) до температуры граничного рассеяния в переносе тепла, как и в эффекте увлечения, участвуют длинноволновые фононы, т. е. имеет место активное рассеяние коротковолновых фононов на точечных дефектах. Отсутствие эф-

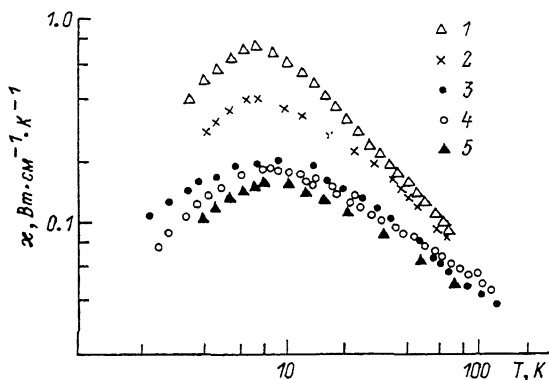


Рис. 1. Температурная зависимость теплопроводности в твердых растворах $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$.

x : 1 — 0, 2 — 0.05, 3 — 0.1, 4 — 0.14, 5 — 0.2.

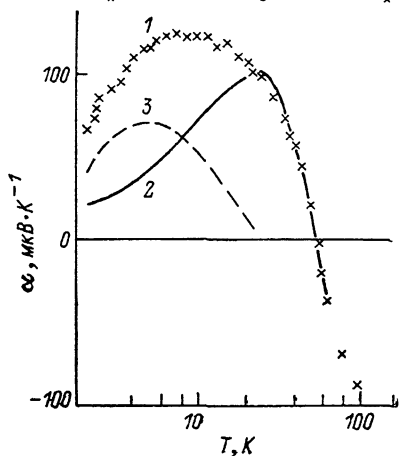


Рис. 2. Температурная зависимость термоэда в $\text{Cd}_{0.14}\text{Hg}_{0.86}\text{Te}$.

1 — эксперимент, 2 — расчетная диффузионная термоэд, 3 — термоэд увлечения.

фекта увлечения в других образцах, возможно, связано с тем, что они обладали n -типом проводимости с чрезвычайно высоким значением подвижности электронов.

Л и т е р а т у р а

[1] Тамарин П. В., Косарев В. В., Ивлев В. С. // ФТТ. 1971. т. 13. № 6. С. 1814—1818.

Институт физики АН АзССР
Баку

Поступило в Редакцию
9 июня 1988 г.
В окончательной редакции
30 сентября 1988 г.

УДК 539.143.43

Физика твердого тела, том 31. в. 2, 1989
Solid State Physics. vol. 31. № 2, 1989

ФОРМА СИГНАЛА СОЛИД-ЭХА В ЯМР ТВЕРДОГО ТЕЛА

Н. А. Сергеев, А. В. Сапига, Д. С. Рябушкин

В настоящее время расчет формы сигнала двухимпульсного эха в ЯМР твердого тела из-за многочастичного характера задачи проводится главным образом в виде степенного ряда по t и τ (τ — временной интервал между

импульсами, t — текущее время после второго импульса) [1-5]. Медленная сходимость такого ряда позволяет удовлетворительно описать форму сигнала эха только при малых τ и вблизи его максимума.

В данной работе предлагается простой метод получения аналитического выражения для формы сигнала двухимпульсного эха и, в частности, солид-эха, в основу которого положен формализм Мори [6], успешно использовавшийся ранее для расчета формы спада свободной прецессии (ССП) [7-9].

Сигнал двухимпульсного эха ($90^\circ - \tau - R - t$) определяется выражением [1]

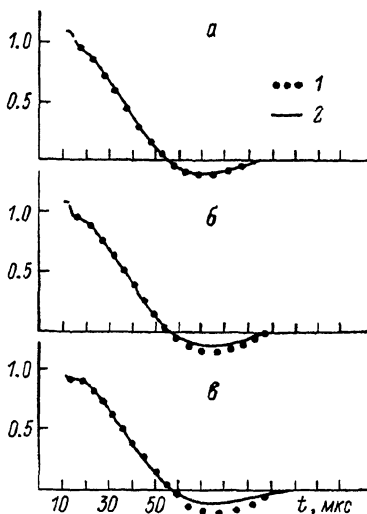
$$V(\tau, t) = \langle I_x(t) | R I_x(\tau) R^{-1} | I_x \rangle / \langle I_x | I_x \rangle, \quad (1)$$

где R — оператор, описывающий действие второго радиочастотного импульса,

$$| I_x(t) \rangle = e^{i t L} | I_x \rangle, \quad (2)$$

$L = [\mathcal{H}, \dots]$ — супероператор Лиувилля [7, 10], \mathcal{H} — гамильтониан взаимодействия ядерной спиновой системы. Внутреннее произведение двух произвольных лиувиллевских векторов $| A \rangle$ и $| B \rangle$ определяется как [6, 7, 10].

Теоретические (1) и экспериментальные (2) сигналы солид-эха в монокристалле $\text{CaF}_2 \cdot \text{H}_2\text{O} \parallel [111]$, $\tau = 10$ (1), 15 (2), 20 мкс (3).



$$\langle A | B \rangle = \text{Sp} (A+B) = \langle B | A \rangle^*. \quad (3)$$

Если ввести ортогональный набор векторов $| k \rangle$ ($| 0 \rangle = | I_x \rangle$) [7]

$$| k \rangle = \left(1 - \sum_{m=0}^{k-1} \frac{| \langle m | \langle m | \rangle |}{\langle m | m \rangle} \right) L^k | I_x \rangle$$

то вектор состояния $| I_x(t) \rangle$ может быть представлен в виде [7]

$$| I_x(t) \rangle = \sum_{k=0}^{\infty} G_k(t) | k \rangle. \quad (4)$$

Функции $G_k(t)$ удовлетворяют следующей системе уравнений [7]:

$$\begin{aligned} -i \frac{dG_0}{dt} &= \nu_0^2 G_1, & -i \frac{dG_1}{dt} &= G_0 + \nu_1^2 G_2 \\ &\dots & & \dots \\ -i \frac{dG_k}{dt} &= G_{k-1} + \nu_k^2 G_{k+1}, & & \dots \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь $\nu_k^2 = \langle k+1 | k+1 \rangle / \langle k | k \rangle$ — величины, выражающиеся через моменты M_n спектра поглощения ЯМР, и, в частности, $\nu_0^2 = M_2$, $\nu_1^2 = (M_4 - M_2^2) / M_2$ [7]. В (4) и (5) функция $G_0(t)$ описывает форму СПП. Подставляя (4) в (1), получим

$$V(\tau, t) = \sum_{k, l=0}^{\infty} G_k(t) G_l(\tau) \frac{\langle k | l \rangle}{\langle 0 | 0 \rangle} \quad (6)$$

где $| l \rangle = R | l \rangle R^{-1}$.

Для сигнала солид-эха $R = \exp(-i\pi I_x/2)$, и прямое вычисление начальных коэффициентов $\langle k | l \rangle / \langle 0 | 0 \rangle$ для гамильтониана диполь-

дипольного взаимодействия приводит к следующему выражению для сигнала эха в гомоядерных спиновых системах:

$$V(\tau, t) = G_0(\tau) G_0(t) + \frac{1}{M_2} \frac{dG_0}{d\tau} \frac{dG_0}{dt} + \dots \quad (7)$$

Функции $G_k(t)$, $k \geq 0$ при малых t ведут себя как t^k . Поэтому следует ожидать, что при малых t и τ для описания формы сигнала солид-эха можно ограничиться лишь несколькими первыми членами ряда (6).

Справедливость полученных выражений (6) и (7) нетрудно проверить на примере изолированной двухспиновой системы ($I_1 = I_2 = 1/2$), для которой $G_0(t) = \cos(bt)$ ($b^2 = M_2^b$, M_2^b — второй момент спектра ЯМР двухспиновой системы) [1, 11]. Подставляя $G_0(t)$ в (7), получим хорошо известный результат $V(\tau, t) = \cos[b(t - \tau)]$ [11]. Учесть межмолекулярное диполь-дипольное взаимодействие между парами можно феноменологически, если взять $G_0(t)$ в виде

$$G_0(t) = \exp(-M_2^y t^2) \cos(bt), \quad (8)$$

где M_2^y — межмолекулярный вклад в полный второй момент. Подставляя (8) в (7), получим для амплитуды сигнала солид-эха $V(2\tau)$ (с точностью до членов $\sim \tau^6$)

$$V(2\tau) \simeq \exp(-M_2^y \tau^2) [1 + \tau^2 M_2^y \cos^2(b\tau)], \quad (9)$$

что полностью совпадает с результатом, полученным в [12].

Выражение (7) было использовано нами для анализа особенностей формирования солид-эха в твердых телах, не имеющих выделенных спиновых групп. В этом случае, как показано в [8, 13], форма ССП хорошо описывается функцией

$$G_0(t) = J_1(2\sqrt{m_2} t) / \sqrt{m_2} t, \quad (10)$$

где $J_1(x)$ — функция Бесселя первого порядка. Используя (10) и (7), мы построили зависимости сигнала солид-эха от τ для монокристалла CaF_2 (см. рисунок). Там же приведены экспериментальные результаты. Из сравнения теоретических и экспериментальных кривых следует, что при $\tau < 20$ мкс первые два члена ряда (7) хорошо описывают форму сигнала солид-эха и, в частности, интересную особенность поведения максимума сигнала эха: при увеличении τ максимум эха сдвигается от точки $t = \tau$ в сторону меньших времен.

Л и т е р а т у р а

- [1] Mansfield P. // Progr. NMR Spectr. 1971. V. 8. N 1. P. 41—101.
- [2] Powles J. G., Strange J. H. // Proc. Phys. Soc. 1963. V. 82. N 1. P. 6—15.
- [3] Mansfield P. // Phys. Rev. 1965. V. 137. N 3. P. A961—A974.
- [4] Moskvich Yu. N., Sergeev N. A., Dotsenko G. I. // Phys. St. Sol. (a). 1975. V. 30. N 1. P. 409—417.
- [5] Рябушкин Д. С., Сергеев Н. А. // Изв. вузов, физика. 1984. Т. 12. С. 3—6.
- [6] Mori H. // Progr. Theor. Phys. 1965. V. 34. P. 399—410.
- [7] Lado F., Memory J. D., Parker G. // Phys. Rev. 1971. V. B4. N 5. P. 1406—1422.
- [8] Engelsberg M., Lowe I. J. // Phys. Rev. 1975. V. 12. N 9. P. 3547—3552.
- [9] Сергеев Н. А., Рябушкин Д. С., Сапига А. В. Радиоспектроскопия. Пермь, 1987. С. 236.
- [10] Абрагам А., Гольдман М. Ядерный магнетизм: порядок и беспорядок. М., 1984. Т. 1. Гл. 1.
- [11] Powles J. G., Mansfield P. // Phys. Lett. 1962. V. 2. N 2. P. 58—59.
- [12] Кучеров М. М., Блюменфелд А. Л. // ФТТ. 1976. V. 18. № 9. P. 2838—2840.
- [13] Bolotov B. M., Aksenov D. A., Polyakov A. I., Senshin S. P. // Phys. St. Sol. (b). 1987. V. 139. N 1. P. K137—K140.

Симферопольский государственный
университет им. М. В. Фрунзе
Симферополь

Поступило в Редакцию
7 июня 1988 г.
В окончательной редакции
5 октября 1988 г.