УДК 539.143.43.001

САМОСОГЛАСОВАННОЕ ДВИЖЕНИЕ ЯДЕРНОЙ НАМАГНИЧЕННОСТИ В МАГНИТОУПОРЯДОЧЕННЫХ ВЕЩЕСТВАХ

В. П. Чекмарёв, Н. И. Суслов, В. Б. Удальцов

Проведен численный анализ динамики самосогласованного движения ядерной намагниченности в магнитоупорядоченных веществах при низких температурах при различных соотношениях между шириной гауссовой линии ЯМР и величиной параметра самосогласованности. Приведенные результаты дают основания полагать, что стационарное состояние усредненной поперечной ядерной намагниченности является осциллирующим. Результаты расчетов представлены в виде аппроксимирующих функций, удобных для качественного анализа.

Упорядоченная электронная система магнетика и парамагнитная ядерная связаны сверхтонким взаимодействием [1]. По этой причине свободное движение ядерной намагниченности в магнитных веществах является самосогласованным. Дело в том, что за счет сверхтонкого поля, действующего со стороны ядер на электронную систему, колебания ядерной намагниченности вызывают колебания электронной намагниченности, которые в свою очередь создают обратное сверхтонкое поле на ядрах [2].

Рассмотрим систему уравнений, описывающую свободное движение намагниченности отдельной ядерной изохроматы для ферромагнитного образца в виде шара, намагниченного до насыщения внешним постоянным магнитным полем вдоль оси z, без релаксационных слагаемых [3]

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \omega_n y - (P\bar{y})\, z\,, \\ \dot{y} &= (P\bar{x})\, z - \omega_n x\,, \\ \dot{z} &= (P\bar{y})\, x - (P\bar{x})\, y\,. \end{aligned} \tag{1}$$

Здесь x, y и z — компоненты намагниченности рассматриваемой изохроматы, нормированные на равновесное значение ядерной намагниченности m_0 (например, $x = m_x/m_0$); ω_n — частота ЯМР изохроматы; $\bar{x}$ и $\bar{y}$ — усредненные значения соответствующих поперечных компонент изохромат, так как упорядоченная электронная система в эффективном радиусе обменного взаимодействия чувствует лишь некоторое усредненное поле со стороны неоднородно-уширенной системы ядерных спинов, параметр

$$P = \gamma_n \eta A m_0 \tag{2}$$

определяет зависимость величины обратного сверхтонкого поля на ядрах от свойств вещества и температуры,[1] γ_n — ядерное гиромагнитное отношение, η — коэффициент усиления [1], A — константа сверхтонкого взаимодействия. Уравнения (1) показывают, что в рассматриваемых условиях движение каждой изохроматы зависит от величины усредненной ядерной намагниченности.[2]

В случае микронеоднородного уширения линии ЯМР, наиболее существенного для реальных магнетиков и, в особенности, для поликристаллов, когда характерный радиус неоднородности сверхтонкого поля много меньше, чем эффективный радиус обменного взаимодействия, величины $\bar{x}$ и $\bar{y}$ в (1) можно вычислить, усредняя величины x и y изохромат с функцией формы линии ЯМР $g(\omega_n)$. Например,

$$\bar{y} = \int_0^\infty y g(\omega_n)\, d\omega_n\,. \tag{3}$$

При этом, учитывая случайный характер разброса частот ЯМР ω_n, в качестве $g(\omega_n)$ целесообразно выбрать функцию распределения Гаусса

$$g(\omega_n) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{(\omega_n - \omega_{n0})^2}{2\sigma^2}\right\}. \tag{4}$$

Качественный анализ уравнений движения (1) для случая $\sigma \gg P$ показывает, что неоднородное уширение линии ЯМР может привести к полной расфазировке поперечной ядерной намагниченности ($\bar{x}$, $\bar{y} \to 0$) и, как следствие, к устранению самосогласованного характера движения изохромат. Рассматриваемая ситуация в конечном итоге аналогична высокотемпературному случаю. В противоположном предельном случае $\sigma \ll P$ задача сводится к случаю макронеоднородного уширения. При этом можно ожидать, что корреляция движения изохромат, обусловленная самосогласованным характером их движения, полностью подавит неоднородное уширение и приведет к возникновению максимального ДСЧ ЯМР, равного P [5, 6].

Найти аналитическое решение интегрально-дифференциальных уравнений (1) в общем виде представляется затруднительным.[3]

В настоящей работе приведены результаты численного анализа зависимости усредненной поперечной ядерной намагниченности $\bar{y}$ от времени при различных значениях двух параметров задачи P и σ и при однородных для всех изохромат начальных условиях

$$y_0 = 1\,, \quad x_0 = z_0 = 0\,. \tag{5}$$

Анализ производился во вращающейся системе координат, связанной с частотой центра линии ЯМР. При этом из условий симметрии начальных условий, формы линии ЯМР, а также траекторий движения изохромат, расположенных симметрично относительно центра линии ЯМР, следует, что $\bar{x} = 0$. Это означает, что величина усредненной поперечной ядерной намагниченности совпадает с $\bar{y}$

---

[1] При достаточно высоких температурах ($m_0 \to 0$) обратным сверхтонким полем на ядрах можно пренебречь ($P \to 0$). В этом случае уравнения (1), как и в случае немагнитных веществ, описывают традиционную прецессию ядерной намагниченности рассматриваемой изохроматы с частотой ω_n вокруг направления постоянного магнитного поля [4].

[2] В качественных монокристаллах, когда неоднородностью частоты ЯМР в радиусе обменного взаимодействия можно пренебречь (макронеоднородное уширение), выполняется $\bar{y} = y$ и $\bar{x} = x$. При этом самосогласованное движение ядерной намагниченности (1) также представляет собой прецессию, но с частотой $\omega_n - P_z$, где параметр P (2) совпадает с величиной максимального динамического сдвига частоты (ДСЧ) ЯМР [1, 2].

[3] Результаты аналитического анализа рассматриваемой модели при условии $z = 1$, сильно упрощающем характер самосогласованного движения ядерной намагниченности, приведены в [3, 7].

и при выбранных начальных условиях (5) эффект ДСЧ ЯМР полностью исключается.

Целью работы являлось исследование динамики двух конкурирующих эффектов: неоднородного уширения линии ЯМР, описываемого параметром σ (4), и корреляции движения изохромат, описываемой параметром P (2).

При вычислении зависимости $\bar{y}(T)$ использовался тот факт, что система (1) при постоянном значении $\bar{y}$ и $\bar{x}=0$ имеет аналитическое решение

$$x = \frac{fy_0 - (P\bar{y})\,z_0}{f_1}\sin\psi_T + x_0\cos\psi_T\,,$$

$$y = \frac{f^2y_0 - f(P\bar{y})\,z_0}{f_1^2}\cos\psi_T - \frac{fx_0}{f_1}\sin\psi_T + \frac{f(P\bar{y})\,z_0 + (P\bar{y})^2\,y_0}{f_1^2}\,,$$

$$z = \frac{(P\bar{y})^2\,z_0 - f(P\bar{y})\,y_0}{f_1^2}\cos\psi_T + \frac{(P\bar{y})\,x_0}{f_1}\sin\psi_T + \frac{f(P\bar{y})\,y_0 + f^2z_0}{f_1^2}\,, \tag{6}$$

где f — частота рассматриваемой изохроматы во вращающейся системе координат, связанной с частотой центра линии ЯМР; x_0, y_0 и z_0 — начальные условия при $\Delta T=0$; параметры ψ_T и f_1 определяются следующими выражениями:

$$\psi_T = 2\pi f_1\Delta T\,,\quad f_1 = \sqrt{f^2 + (P\bar{y})^2}\,.$$

Вычисления производились методом пошагового пересчета величин x, y и z для каждой изохроматы из выбранной группы по формулам (6). При этом значение $\bar{y}$ в течение интервала времени пересчета ΔT полагалось постоянным. Количество изохромат в группе и пределы интегрирования в (3) выбирались на основе предварительных расчетов из условия, чтобы абсолютная погрешность вычисления, связанная с дискретностью частот изохромат и конечностью пределов интегрирования, не превышала 10^{-6}. Так, при $\sigma=0.7$ МГц интегрирование проводилось в пределах от нуля до 5 МГц (учитывая симметрию задачи) через 0.01 МГц, т. е. рассматривалось движение группы из 1001-й изохроматы. Вычисления производились на ЭВМ СМ 1420.

Результаты вычисления зависимостей $\bar{y}(T)$ показывают, что при увеличении параметра P от нуля до значений порядка σ скорость распада усредненной поперечной ядерной намагниченности $\bar{y}$ замедляется, что эквивалентно эффективному сужению линии ЯМР (рис. 1, *а*). Более того, при дальнейшем увеличении P корреляция движения изохромат приводит к тому, что значение $\bar{y}$ после некоторого переходного процесса осциллирует около некоторого постоянного значения $\bar{y}0$ (рис. 1, *б*). При этом с увеличением параметра P растет как значение $\bar{y}0$, так и частота осцилляций, а амплитуда осцилляций уменьшается. Наконец, при условии $P \gg \sigma$ значение $\bar{y}$ мало отличается от начального значения $\bar{y}=1$.

Анализ зависимостей $\bar{y}(T)$, вычисленных при различных значениях P и σ, показал, что при $P>\sigma$ после некоторого переходного процесса (2—3 периода осцилляций) зависимости $\bar{y}(T)$ удовлетворительно аппроксимируются выражением

$$\bar{y}(T) = \bar{y}_0 + [C + \varphi(T)]\cos 2\pi FT\,, \tag{7}$$

где значения $\bar{y}0$, C и F зависят только от величин P и σ. Особый интерес представляет выявление характера зависимости $\varphi(T)$ в (7). Оказалось, что для каждой из зависимостей $\bar{y}(T)$ можно подобрать такие значения $\bar{y}0$ и C, что зависимость $\varphi(T)$ имеет вид

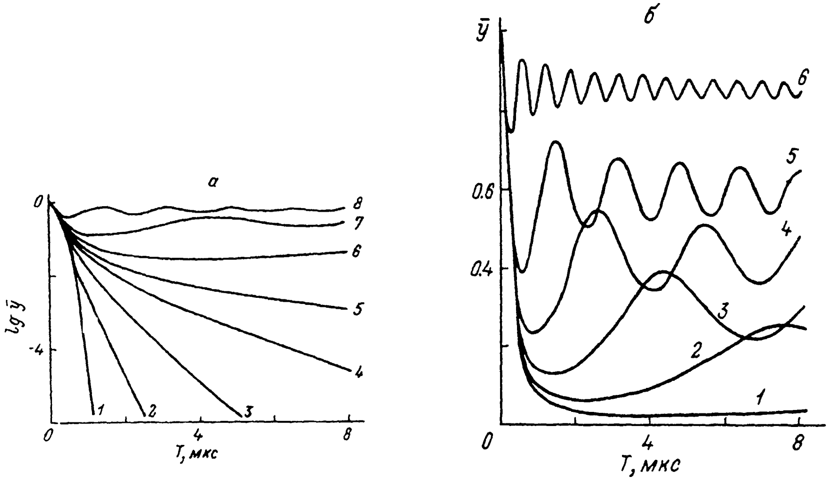

Рис. 1. Зависимости усредненного значения поперечной ядерной намагниченности $\bar{y}$ от времени T при различных значениях параметра самосогласованности P (2).

Ширина гауссовой линии ЯМР $\sigma = 0.7$ МГц. *а*: *1* — $P = 0$, *2* — 0.2, *3* — 0.4, *4* — 0.5, *5* — 0.55, *6* — 0.6, *7* — 0.7, *8* — 1 МГц; *б*: *1* — $P = 0.6$, *2* — 0.64, *3* — 0.7, *4* — 0.8, *5* — 1, *6* — 1.8 МГц.

$$\varphi(T) = B \exp\left\{-\frac{T}{D}\right\}. \tag{8}$$

На рис. 2 показана типичная зависимость $\ln \varphi(T)$ для $P = 1.8$ МГц и $\sigma = 0.7$ МГц. При этом $\bar{y}_0 = 0.868$, $C = 0.0174$, $B = 0.0556$, $D = 3.196$ мкс, а $F = 1.56$ МГц. Таким образом, есть основания полагать, что стационарное состояние $\bar{y}$ при больших T является осциллирующим.

Учитывая, что ошибка одношаговых методов вычисления может накапливаться со временем [8], мы провели дополнительные вычисления зависимостей среднего значения $\bar{y}_0$ (рис. 3, *а*), периода осцилляций T_0 (рис. 3, *б*), а также амплитуд отдельных осцилляций от величины интервала пересчета ΔT при различных значениях параметров задачи P и σ. При этом каждая из зависимостей $\bar{y}(T)$ вычислялась тремя методами, различающимися значением величины $\bar{y}$, полагаемой постоянной в течение интервала пересчета в выражениях (6). В первом методе вычислений в качестве $\bar{y}$ в (6) использовалось «стартовое» значение $\bar{y}(T)$, во втором методе — «финишное» значение $\bar{y}(T + \Delta T)$, а в третьем методе — среднее арифметическое между $\bar{y}(T)$ и $\bar{y}(T + \Delta T)$. Естественно, что два последних метода вдвое увеличивают время расчета, так как для определения значения $\bar{y}(T + \Delta T)$ для каждого шага пересчета необходимы вспомогательные вычисления, которые выполнялись первым, «стартовым», методом.

Полученные результаты показали, что при уменьшении шага пересчета ΔT

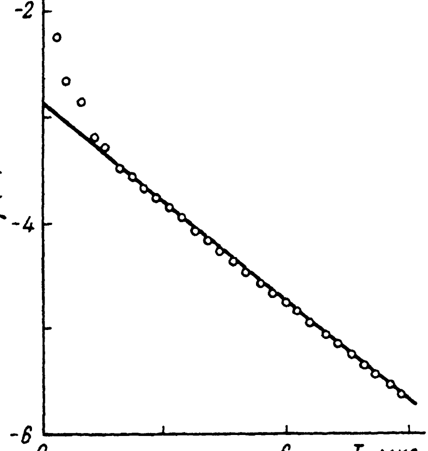

Рис. 2. Временнáя зависимость функции $\varphi(T)$ (7).

Точки — результаты вычислений, прямая линия соответствует (8).

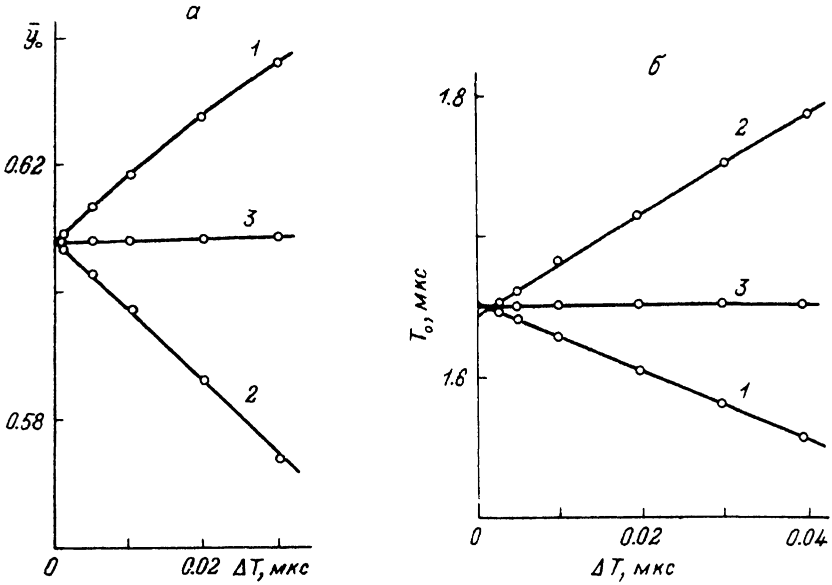

Рис. 3. Зависимости среднего значения y_0 (*а*) и периода осцилляций T_0 (*б*) функции $y(T)$ от шага пересчета ΔT при различных методиках вычислений. $P = 1$ МГц, $\sigma = 0.7$ МГц.

величины интересующих параметров, вычисленные каждым из перечисленных методов, сходятся к определенным значениям. При этом различие между значениями амплитуд отдельных осцилляций, значениями $\bar{y}_0$ (рис. 3, *а*) и T_0 (рис. 3, *б*), вычисленными различными методами при $\Delta T \to 0$, составляет менее 1%. Аналогичный результат был получен при анализе сходимости результата вычислений значений $\bar{y}(T)$ для случая $P < \sigma$ (рис. 1). Однако зависимость $\bar{y}$ от интервала пересчета ΔT была более сильной.

В настоящей работе основное внимание было уделено выявлению зависимостей среднего значения поперечной ядерной намагниченности $\bar{y}_0(P, \sigma)$ и частоты осцилляций $F(P, \sigma)$ (7) как наиболее важных величин для импульсных ЯМР экспериментов.

Вычисления показали, что как при уменьшении ширины линии ЯМР σ, так и при увеличении параметра самосогласованности P величина $\bar{y}_0$ стремится к единице. Более того, есть основания полагать, что величина $\bar{y}_0$ зависит лишь от отношения σ/P, так как все результаты вычислений, проведенных при всевозможных значениях параметров P и σ, построенные в координатах $\bar{y}_0$ и σ/P, легли на одну кривую (рис. 4). Этот вывод хорошо согласуется и с соображениями размерности величины $\bar{y}_0$.

Была предпринята попытка аппроксимировать полученную зависимость $\bar{y}_0(\sigma/P)$ простейшими функциями. Оказалось, что эта зависимость в диапазоне $0 \leqslant \sigma/P \leqslant 0.9$ с погрешностью менее 1% описывается функцией (рис. 4)

$$\bar{y}_0 = \exp\left\{-\left(\frac{\sigma}{P}\right)^2\right\}. \tag{9}$$

Полученное выражение наглядно иллюстрирует уменьшение среднего значения поперечной ядерной намагниченности при заметном отличии величины σ/P от нуля, что в рассматриваемых условиях может привести к уменьшению амплитуды сигнала ядерного спинового эха.

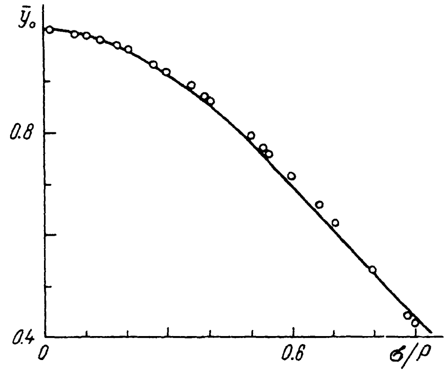

Рис. 4. Зависимость среднего значения $\bar{y}_0$ осциллирующей функции $\bar{y}(T)$ от отношения σ/P.

Непрерывная кривая соответствует (9).

Частота осцилляций F (7) — величина размерная, поэтому зависимость F (σ, P) предполагалась более сложной. Приведенные зависимости величины F от σ (рис. 5, *а*) показывают, что при $\sigma \to 0$ величина F стремится к значению параметра самосогласованности P, а при увеличении ширины линии ЯМР σ значения частот осцилляций зависимостей $\bar{y}(T)$ уменьшаются, причем степень уменьшения F также зависит от величины параметра P.

Схожесть вида зависимости $F(\sigma)$ при $P = 1$ МГц (рис. 5, *а*) и зависимости $\bar{y}(\sigma/P)$ (рис. 4) позволила предположить, что простейшей функцией, достаточно хорошо аппроксимирующей зависимость $F(P, \sigma)$, является функция

$$F = P \exp\left\{- \left(\frac{\sigma}{P}\right)^2\right\}. \tag{10}$$

Графики этой зависимости приведены на рис. 5 непрерывными кривыми. Видно, что и в рассматриваемом случае погрешность аппроксимации также менее 1%.

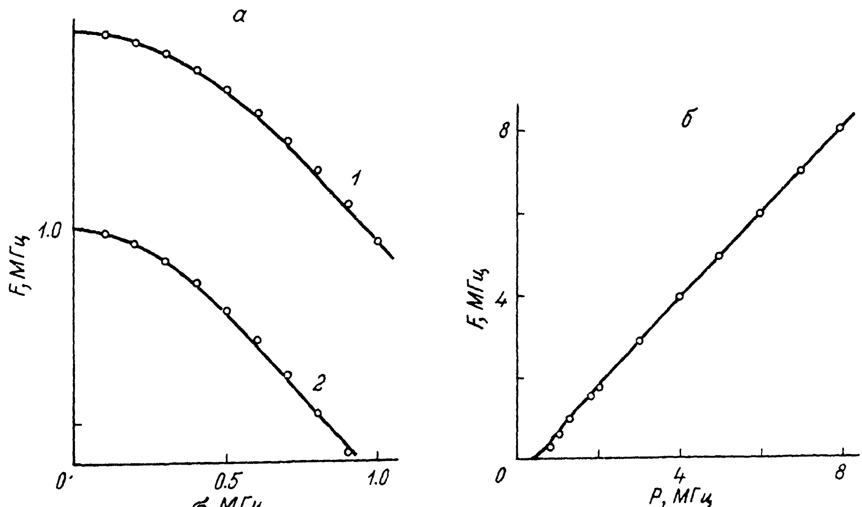

Рис. 5. Зависимость частоты осцилляций от ширины гауссовой линии ЯМР σ (*а*) при $P = 1$ (*1*), 1.5 МГц, (*2*) и от величины параметра самосогласованности P при $\sigma = 0.7$ МГц (*б*).

Непрерывная кривая соответствует (10).

При увеличении значения параметра самосогласованности P частота осцилляций всегда растет (рис. 5, *б*). Аппроксимация серии зависимостей $F(P)$ при различных σ функцией (10) подтверждает правомерность ее выбора.

Результаты, полученные в данной работе, хорошо соответствуют результатам качественного анализа динамики самосогласованного движения ядерной намагниченности в магнетиках в предельных случаях [4, 5] и являются одним из первых шагов в понимании низкотемпературных импульсных ЯМР экспериментов [9, 10].

Авторы благодарны М. И. Куркину за многочисленные обсуждения результатов работы.

Список литературы

[1] Туров Е. А., Петров М. П. Ядерный магнитный резонанс в ферро- и антиферромагнетиках. М.: Наука, 1969. 260 с.
[2] Туров Е. А., Куркин М. И. Проблемы магнитного резонанса. М.: Наука, 1978. С. 271—288.
[3] Цифринович В. И., Краснов И. В. // ЖЭТФ. 1980. Т. 78. № 5. С. 1760—1766.
[4] Леше А. Ядерная индукция. М.: ИЛ, 1963. 684 с.
[5] Куркин М. И. // Письма в ЖЭТФ. 1978. Т. 28. № 11. С. 675—678.
[6] Куркин М. И. // Автореф. докт. дис. Свердловск, ИФМ, 1984.
[7] Цифринович В. И. // ФТТ. 1981. Т. 23. № 12. С. 3521—3525.
[8] Шум Т. Решение инженерных задач на ЭВМ. М.: Мир, 1982. 235 с.
[9] Буньков Ю. М., Пунккинен М., Юлинен Е. Е. // ЖЭТФ. 1978. Т. 74. № 3. С. 1170—1176.
[10] Чекмарев В. П., Петров М. П., Петров А. А. // ФТТ. 1979. Т. 21. № 4. С. 1095—1101; № 9. С. 2641—2646.

Электротехнический институт связи
им. В. А. Бонч-Бруевича
Санкт-Петербург

Поступило в Редакцию
8 июля 1991 г.
В окончательной редакции
21 октября 1991 г.