

СТОХАСТИЧЕСКИЙ СЛОЙ В НЕЛИНЕЙНОМ ЯМР

А. И. Угулава

Исследуется ЯМР при сильном динамическом сдвиге резонансной частоты. Показано, что при определенном значении амплитуды накачки происходит бифуркационное изменение характера движения намагниченности. Соответствующая траектория, имеющая форму пространственной восьмерки, является сепаратрисой, вблизи нее слабое продольное переменное поле приводит к образованию стохастического слоя.

1. В магнитоупорядоченных кристаллах при достаточно низких температурах, как известно [1], возникает сдвиг частоты процессии ядерной намагниченности  $m$ , пропорциональный продольной составляющей  $m_z$  (динамический сдвиг). В условиях ЯМР появление динамического сдвига приводит к существенно нелинейному характеру движения  $m$ . Так, например, в работе [2] было показано, что при выполнении условия  $\omega_1 = \omega_p$ , где  $\omega_p$  — равновесная величина динамического сдвига,  $\omega_1 = \eta\gamma H_1$ ,  $H_1$  — амплитуда линейно поляризованного переменного поля, приложенного в поперечной плоскости,  $\eta$  — коэффициент усиления,  $\gamma$  — гиромагнитное отношение, движение вектора  $m$  во вращающейся системе координат становится аperiodическим (период  $T \rightarrow \infty$ ). Траектория, по которой движется конец вектора  $m$  в этом случае, является сепаратрисой, отделяющей топологически различающиеся траектории. Ниже будет показано, что при возмущении сепаратрисной траектории продольным гармоническим полем в ее окрестности образуется узкая область стохастического движения — стохастический слой [3].

2. Направим ось  $z$  вдоль суммарного поля  $H = H_0 + H_{loc}$ , где  $H_0$  и  $H_{loc}$  есть соответственно внешнее и внутреннее магнитостатические поля на ядре. Предположим, что на ядерную спин-систему действуют также переменные поля

$$H_1(t) = H_1 \cos \omega t, \quad H_1 \perp H \tag{1}$$

и

$$h(t) = h \cos \nu t, \quad h \parallel H. \tag{2}$$

Направив  $H_1$  вдоль оси  $x$ , запишем систему нелинейных дифференциальных уравнений, описывающую движение ядерной намагниченности с учетом динамического сдвига частоты процессии во вращающейся с частотой  $\omega$  вокруг оси  $z$  системе координат, в виде

$$\dot{x} = (\Delta - \omega_p z)y + \nu_1 y \cos \nu t, \quad \dot{y} = -(\Delta - \omega_p z)x + (1/2)\omega_1 z - \nu_1 x \cos \nu t, \tag{3}$$

$$\dot{z} = -(1/2)\omega_1 y, \quad \nu_1 = \gamma h, \quad \Delta = \omega - \omega_0, \quad \omega_0 = \gamma H.$$

Здесь мы ввели безразмерные компоненты намагниченности  $\alpha = m_\alpha/m$ , где  $m = |m|$ ,  $\alpha = x, y, z$ .

Наше рассмотрение, проводимое в пренебрежении эффектами релаксаций и магнитостатической неоднородности локального поля, справедливо в случае импульсных полей с длительностью  $\tau \ll T_1, T_2, 2\pi/\Omega$ , где  $T_1$  и  $T_2$  — времена продольной и поперечной релаксаций,

$\Omega$  — неоднородная ширина линии. Систему (3) исследуем при условии слабости продольного поля ( $v_1 \ll \omega_p$ ).

3. Сначала займемся исследованием невозмущенной системы, получающейся из (3) при  $v_1 = 0$ . Легко убедиться, что невозмущенная система имеет два интеграла движения\*

$$x^2 + y^2 + z^2 = 1 \quad (4)$$

и

$$\frac{(\Delta - \omega_p z)^2}{\omega_1 \omega_p} - x - 1 = a, \quad (5)$$

которые задают определенные поверхности: (4) — единичную сферу, а (5) — параболический цилиндр с образующими вдоль оси  $y$ . Величина  $a$  при  $\Delta = 0$  определяет расстояние между вершиной параболического цилиндра и поверхностью сферы. Траектории движения конца вектора  $m$  являются замкнутыми кривыми, получающимися пересечением этих поверхностей.

Рассмотрим сперва случай  $\Delta = 0$ , когда параболический цилиндр симметричен относительно плоскости  $(x; y)$ . При  $a \neq 0$  траектории разделяются на два типа: 1)  $a > 0$  — пересечение состоит из двух контуров, симметрично расположенных по разные стороны плоскости  $(x; y)$ , 2)  $a < 0$  — пересечение состоит из одного контура, дважды пересекающего плоскость  $(x; y)$ . При  $a = 0$  траектория имеет вид симметричных пространственных восьмерок с самопересечением на оси  $x$  при  $x = -1$  (рис. 1). Однопараметрическое (параметр  $\omega_1$ ) семейство восьмерок образует сепаратрису невозмущенного движения, разделяющую пространство на две области по типу принадлежащих им траекторий.

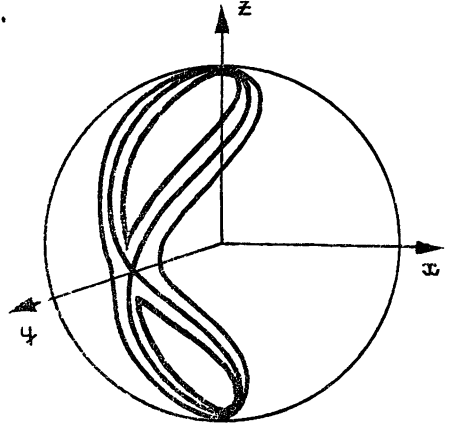


Рис. 1.

В случае  $\Delta \neq 0, \pm 1$  плоскость симметрии параболического цилиндра сдвигается на расстояние  $\Delta/\omega_p$  по оси  $z$ , а сепаратрисы приобретают форму несимметричных пространственных восьмерок.

В случае  $\Delta \rightarrow \pm 1$  один из кружков восьмерок стягивается к точке. В результате сепаратриса исчезает — получаем семейство однотипных траекторий.

Ниже для простоты мы рассмотрим случай  $\Delta = 0$ .

Воспользовавшись интегралами движения (4) и (5), невозмущенную систему можно свести к уравнению для полярного угла  $\theta$  между направлением намагниченности и осью  $z$ :

$$\dot{\theta} = \frac{\omega_p}{2 \sin \theta} \sqrt{-(\cos^2 \theta - \cos^2 \theta_-)(\cos^2 \theta - \cos^2 \theta_+)}, \quad (6)$$

где

$$\cos \theta_{\pm} = \zeta_{\pm}, \quad (7)$$

$$\zeta_{\pm}^2 = r(a+1) - \frac{r^2}{2} \pm \sqrt{\left[r(a+1) - \frac{r^2}{2}\right]^2 - r^2[(a+1)^2 - 1]}.$$

\* Второй интеграл движения —  $a$  связан с интегралом энергии во вращающейся системе координат соотношением  $E = \frac{1}{2} \eta H_1 m \left[ a + 1 - \frac{(\omega - \omega_0)^2}{\omega_1 \omega_p} \right]$ .

Решение (6) можно записать в виде

$$\theta = \arccos \left\{ \zeta_+ \operatorname{cn} \left[ \frac{1}{2} \sqrt{\zeta_+^2 - \zeta_-^2} \omega_p t; \frac{\zeta_+}{\sqrt{\zeta_+^2 - \zeta_-^2}} \right] \right\}, \quad a < 0; \quad (8)$$

$$\theta = \arccos \left\{ \zeta_+ \operatorname{dn} \left[ \frac{|\zeta_+|}{2} \omega_p t; \frac{\sqrt{\zeta_+^2 - \zeta_-^2}}{\zeta_+} \right] \right\}, \quad a > 0, \quad (9)$$

где  $\operatorname{cn}$  и  $\operatorname{dn}$  (эллиптические функции Якоби) — соответственно косинус амплитуды и дельта амплитуды.

Для периодов движения можно получить [2]

$$T_- = \frac{8}{\omega_p \sqrt{\zeta_+^2 - \zeta_-^2}} K \left( \frac{\zeta_+}{\sqrt{\zeta_+^2 - \zeta_-^2}} \right), \quad a < 0; \quad (10)$$

$$T_+ = \frac{4}{\omega_p \zeta_+} K \left( \frac{\sqrt{\zeta_+^2 - \zeta_-^2}}{\zeta_+} \right), \quad a > 0, \quad (11)$$

где  $K(k)$  — полный эллиптический интеграл 1-го рода. Отсюда для периода траекторий, близких к сепаратрисе ( $a \rightarrow 0$ ), с учетом (7) получим

$$T_{(a)} = T_- \simeq 2T_+ = \frac{8}{\sqrt{\omega_1 (2\omega_p - \omega_1)}} \ln \frac{4\omega_p^2}{|a| \omega_1^2}. \quad (12)$$

Так, при приближении к сепаратрисе периоды логарифмически расходятся.

Ниже мы будем интересоваться сепаратрисной траекторией, проходящей через естественные начальные значения  $x(0) = y(0) = 0$ ,  $z(0) = 1$ . Тогда из (5) для  $a$  получим

$$a = (\omega_p - \omega_1) / \omega_1, \quad (13)$$

откуда следует, что близость к сепаратрисе в этом случае определяется условием  $\omega_1 \simeq \omega_p$ . Так,  $\omega_1 = \omega_p$  определяет бифуркационное значение амплитуды переменного поля.

4. Приступим теперь к исследованию влияния возмущения. Для этого заметим, что возмущение приводит к изменению интеграла движения невозмущенной системы  $a$ . Тогда, выбрав за новые переменные  $a$  и  $\theta$ , уравнения движения для возмущенной системы на основе (3) с помощью (5), (12) можно записать в виде

$$\dot{a} = V(\theta, \dot{\theta}; t), \quad \dot{\theta} = \omega(a) + O(v_1/\omega_p), \quad (14)$$

где

$$V(\theta, \dot{\theta}; t) = \tilde{v}_1(\dot{\theta}; t) \sin \theta, \quad \omega(a) = 2\pi/T(a), \quad (15)$$

$$\tilde{v}_1(\dot{\theta}; t) = (v_1/\omega_p) \dot{\theta} \cos vt.$$

В выражении для возмущения  $V(\theta, \dot{\theta}; t)$  угловую скорость  $\dot{\theta}(t)$  можно аппроксимировать с помощью невозмущенных решений (8) и (9) и рассматривать как заданную функцию. При таком рассмотрении система (14) описывает движение нелинейного осциллятора, находящегося под действием заданного переменного поля  $\tilde{v}_1(\dot{\theta}; t)$ . Роль частоты и амплитуды осциллятора играют  $\omega(a)$  и  $a$  соответственно. С помощью непосредственного дифференцирования выражений (8) и (9) и последующего предельного перехода  $a \rightarrow 0$  можно убедиться, что  $z(t)$  вблизи сепаратрисы представляет собой последовательность импульсов формы

$\omega_p/2 \operatorname{ch}(\omega_p t/2)$  и с интервалом повторения  $T_{\pm}(a)$ . Это означает, что конец вектора  $m$ , двигаясь по сепаратрисе, за короткое время  $\simeq 2\pi/\omega_1$  проходит основную часть траектории и, дойдя до точки поворота на время  $T_{\pm}(a)$ , приостанавливается. Спектр скорости  $\dot{\theta}(t)$  содержит  $n_0 \simeq \omega_p T(a) \gg 1$  количество кратных  $n\omega$  гармоник с приблизительно одинаковыми, порядка  $\omega(a)$ , амплитудами.

Следуя [3], границы стохастического движения мы установим с помощью критерия перекрытия резонансов (критерий Чирикова). Для определенности предположим, что  $v \leq \omega_p$ . Тогда в нелинейно-колебательной системе (14) условие резонанса может осуществиться лишь на высоких обертонах внутренней частоты  $n\omega(a_n) = v$ , где  $n$  — целое число,  $n_0 \geq n \gg 1$ ,  $a_n$  — некоторое значение амплитуды, отвечающее  $n$ -му резонансу. По мере раскачивания системы амплитуда будет уходить от значения  $a_n$  на определенное расстояние  $\delta a_n$ . Вслед за ним будет уходить и частота, образуя расстройку  $n$ -го резонанса  $\delta\omega_n$ . Согласно критерию Чирикова стохастическое движение будет иметь место, если расстройка  $\delta\omega_n$  так велика, что частота достигает область одного из соседних резонансов, определяемых из условий  $(n \pm 1) \times \omega(a_{n \pm 1}) = v$ . Очевидно, критерий стохастичности движения можно записать в виде

$$\delta\omega_n \gtrsim |\omega(a_n) - \omega(a_{n \pm 1})|. \quad (16)$$

Изменение амплитуды, вызванное действием резонансной компоненты возмущения, можно определить из уравнения

$$\delta a_n = \frac{V_n}{n |\omega(a_n) - \omega(a_n + \delta a_n)|} = \frac{V_n}{n |d\omega/da_n| \delta a_n}, \quad (17)$$

$$V_n \simeq (v_1/\omega_p) \omega(a_n),$$

откуда для  $\delta a_n$  получим

$$\delta a_n = \sqrt{V_n/n |d\omega/da_n|}. \quad (18)$$

Соответствующее изменение частоты будет

$$\delta\omega_n \simeq \left| \frac{d\omega}{da_n} \right| \delta a_n = \sqrt{V_n \left| \frac{d\omega}{da_n} \right| / n}. \quad (19)$$

Для частотного расстояния между соседними резонансами из условия резонанса получим

$$|\omega(a_n) - \omega(a_{n \pm 1})| \simeq \omega^2(a_n)/v. \quad (20)$$

С помощью (12), (19), (20) критерий стохастичности движения (16) можно привести к форме

$$\sqrt{v v_1 / \omega_p^2 |a|} \gtrsim 1 \quad (21)$$

или же с учетом (13) —

$$\omega_p - (v v_1 / \omega_p) \leq \omega_1 \leq \omega_p + (v v_1 / \omega_p). \quad (22)$$

Выражения (21) и (22) определяют ширину стохастического слоя (рис. 2).

5. Обсудим возможности экспериментального изучения движения намагниченности в области стохастического слоя.

С этой целью рассмотрим случай невозмущенной системы, когда движение происходит по сепаратрисе. Заметим, что в случае  $\omega_1 = \omega_p$  движение намагниченности будет затормаживаться против оси  $x$ . Сле-

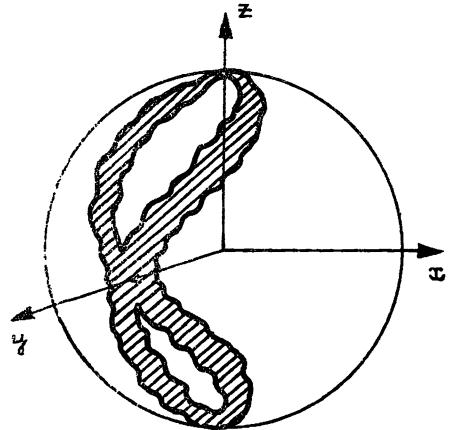


Рис. 2.

довательно, действие импульса, длительность  $\tau$  которого удовлетворяет условию  $T(a) \gtrsim \tau \gtrsim 2\pi/\omega_1$ , будет аналогично действию  $\pi/2$ -импульса. Сигнал затухания свободной процессии, как известно, зависит от поперечной составляющей намагниченности в момент окончания импульса, и поэтому по окончании импульса можно наблюдать сигнал затухания свободной процессии, обусловленный неоднородным уширением (поперечной релаксацией). Существенно, что если длительность импульса находится в интервале  $T(a) \gtrsim \tau \gtrsim 2\pi/\omega_1$ , то сигнал свободной индукции не будет зависеть от самой длительности  $\tau$ . В возмущенной системе в результате возникновения стохастического слоя по окончании действия « $\pi/2$ -импульса» конец вектора намагниченности, направленного вдоль оси  $y$ , будет разбрасываться на расстояниях порядка  $v v_1/\omega_p$ . Это, в свою очередь, вызовет относительный разброс сигнала спада свободной процессии того же порядка.

Продолжая рассмотрение движения намагниченности вблизи сепаратрисы, рассмотрим случай, когда  $\tau = T(a)$ . В случае невозмущенного движения легко видеть, что если  $\omega_1 - \omega_p \rightarrow -0$ , то по окончании импульса вектор намагниченности окажется в исходном состоянии (направленный вдоль оси  $z$ ), а если  $\omega_1 - \omega_p \rightarrow +0$ , — в противоположном к исходному (против оси  $z$ ). Поэтому по окончании импульса в случае  $\omega_1 - \omega_p \rightarrow -0$ , естественно, не будет никакого сигнала, а в случае  $\omega_1 - \omega_p \rightarrow +0$  будет наблюдаться сигнал спада продольной намагниченности, обусловленный спин-решеточной релаксацией (продольная релаксация). Таким образом, при переходе  $\omega_1$  через значение  $\omega_p$  сигнал спада будет внезапно появляться. В возмущенной системе, когда вблизи сепаратрисы возникает стохастический слой, появление сигнала при  $\omega_1 \simeq \omega_p$  будет несколько «размытым». Область «размытости» по  $\omega_1$  будет определяться соотношением (22).

Автор выражает благодарность Л. Л. Буишвили и Г. М. Заславскому за полезные советы.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Боровик-Романов А. С., Буньков Ю. М., Думеш Б. С., Куркин М. И., Петров М. П., Чекмарев В. П. — УФН, 1984, 142, вып. 4, с. 537
2. Туров Е. А., Куркин М. И., Николаев В. В. — ЖЭТФ, 1973, 64, вып. 1, с. 283.
3. Заславский Г. М. Стохастичность динамических систем. — М.: Наука, 1984.

Тбилисский государственный  
университет

Поступила в редакцию  
5 августа 1985 г.

#### STOCHASTIC LAYER IN NONLINEAR NMR

*A. I. Ugulava*

NMR in the presence of dynamic shift of the resonance frequency (nonlinear NMR) is investigated. The motion of the magnetization changed bifurcationally under the critical value of the amplitude of pumping. Corresponding trajectory is a separatrix which looks like spatial eight. It is shown that weak longitudinal pumping forms stochastic layer close to the separatrix.