УДК 621.396.96:621.391

ОСОБЕННОСТИ СИГНАЛОВ СПИНОВОГО ЭХА В ФЕРРОМАГНИТНЫХ ПОЛИКРИСТАЛЛАХ

О.В.Соколов

ON SPIN ECHO SIGNALS' PECULARITIES IN FERROMAGNETIC POLYCRYSTALS

O.V.Sokolov

ЗАО «ЭЛСИ», Великий Новгород, o-v-sokolov@mail.ru

Исследована зависимость сигнала спинового эха в ферромагнитных поликристаллах от уровня радиочастотного сигнала. Для двухимпульсного эха на ядрах со спином $\frac{1}{2}$ показана эквивалентность подходов, использующих уравнение Шредингера и уравнения Блоха без учета релаксации. Расчет проведен с помощью вычисления мультипликативного интеграла в нулевом приближении. При условии равновероятности всех направлений внутреннего постоянного магнитного поля в ферромагнитных монокристаллах путем усреднения получена зависимость величины спинового эха от площади радиочастотного импульса.

Ключевые слова: ферромагнитный поликристалл, спиновое эхо, мультипликативный интеграл, спектры сигналов, усреднение по направлению

In this paper we investigate the dependence of the amplitude of spin echo signal on the level of radio-frequency signal in ferromagnetic polycrystals. For the double-impulse echo for nuclei with spin $\frac{1}{2}$ we get equivalence of the methods that involve Shrodinger equation and Bloch equations with no relaxation. In order to obtain the result we use the multiplicative integral calculation in zero approximation. Supposing all the directions of internal constant magnetic field in ferromagnetic polycrystals are equally probable we get the dependence of spin echo value on radio-frequency impulse area by averaging.

Keywords: ferromagnetic polycrystals, spin echo, multiplicative integral, signal spectra, direction averaging

Импульсное возбуждение ЯМР применяется в Фурье-спектроскопии высокого разрешения, а также в устройствах обработки информации (эхо-процессорах). Методы ЯМР- и ЭПР-спектроскопии позволяют изучать особенности электронной и кристаллической структуры и динамических процессов в твердых телах, не доступные другим экспериментальным методикам. В настоящее время они широко и успешно применяются также в медицине, биологии и других областях, где требуется методы интроскопии. Спиновые эхо-процессоры (СЭП), принцип действия которых основан на явлениях спинового или светового эха, отличаются простотой изготовления и настройки, относительно малыми габаритами. В [1,2] рассматривается возбуждение спинового эха случайными сигналами типа белого шума.

Мы рассмотрим импульсное возбуждение спинового эха в поликристаллическом образце, в каждом монокристалле которого существует внутреннее постоянное магнитное поле, направленное случайным образом. Будем исследовать случай, когда ядра имеют спин $\frac{1}{2}$. При воздействии на образец двух радиочастотных импульсов внешнего магнитного поля наблюдается спиновое эхо (рис.1). В качестве первого импульса используется произвольный радиочастотный импульс, а второй — очень короткий импульс типа дельта-функции.

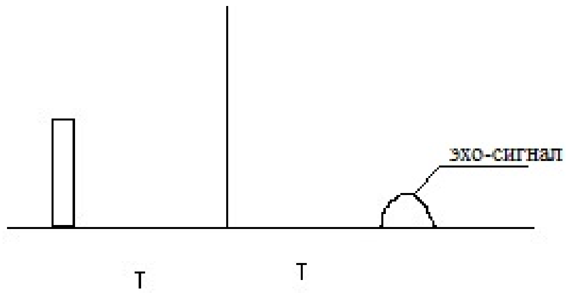

Рис.1. Схема образования спинового эха при воздействии на образец двух импульсов внешнего магнитного поля

Поведение спина ядра в магнитном поле описывается уравнением Шредингера

$$i\hbar\frac{d\Psi}{dt}=\widetilde{H}\Psi, \tag{1}$$

где Ψ — двумерный спинор,

$$\widetilde{H}=-\gamma\vec{s}\cdot\vec{H} \tag{2}$$

— гамильтониан системы, $\hbar$ — постоянная Планка, γ — гиромагнитное отношение,

$$\vec{s}=\frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$$

— оператор спина, $\sigma_x,\sigma_y,\sigma_z$ — спиновые матрицы Паули, $\vec{H}$ — напряженность магнитного поля.

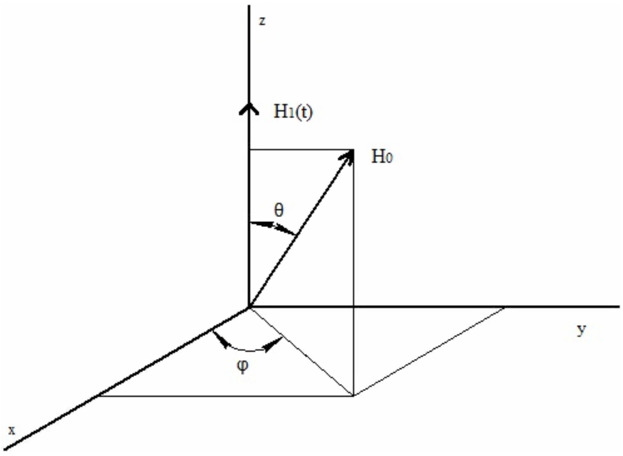

Рис.2. Положение внешнего радиочастотного и внутреннего постоянного магнитных полей относительно декартовой системы координат

Если совместить ось z с внешним радиочастотным полем, а направление внутреннего поля относительно оси z определить сферическими углами θ,φ, то составляющие $\vec{H}$ вдоль координатных осей будут

$$H_x = H_0 \sin\theta\cos\varphi,$$
$$H_y = H_0 \sin\theta\sin\varphi, \quad (4)$$
$$H_z = H_0 \cos\theta + H_1(t),$$

где H_0 и $H_1(t)$ — напряженность внутреннего постоянного и внешнего радиочастотного магнитных полей.

В результате для эволюции спинора получается следующее уравнение

$$\frac{d\Psi}{dt} = A(t)\Psi, \quad (5)$$

где

$$A(t) = \begin{pmatrix} \frac{i}{2}\left(R(t)+\omega_0\cos\theta\right) & \frac{i}{2}\omega_0\sin\theta e^{-i\varphi} \\ \frac{i}{2}\omega_0\sin\theta e^{i\varphi} & -\frac{i}{2}\left(R(t)+\omega_0\cos\theta\right) \end{pmatrix}, \quad (6)$$

$R(t) = \gamma H_1(t), \omega_0 = \gamma H_0$.

Представим матрицу $A(t)$ в виде суммы постоянной матрицы

$$A_0 = \begin{pmatrix} \frac{i}{2}\omega_0\cos\theta & \frac{i}{2}\omega_0\sin\theta e^{-i\varphi} \\ \frac{i}{2}\omega_0\sin\theta e^{i\varphi} & -\frac{i}{2}\omega_0\cos\theta \end{pmatrix} \quad (7)$$

и матрицы

$$A_1 = \begin{pmatrix} \frac{i}{2}R(t) & 0 \\ 0 & -\frac{i}{2}R(t) \end{pmatrix}, \quad (8)$$

тогда фундаментальную матрицу уравнения (5) можно записать в виде [3]

$$X = X_0 \cdot X_1, \quad (9)$$

где X_0 — решение уравнения

$$\frac{dX_0}{dt} = A_0 \cdot X_0, \quad (10)$$

а X_1 — решение уравнения

$$\frac{dX_1}{dt} = V \cdot X_1. \quad (11)$$

Матрица V определяется соотношением:

$$V = X_0^{-1} \cdot A_1 \cdot X_0. \quad (12)$$

Поскольку матрица A_0 постоянная, следовательно, функционально-коммутативная, то решение (10) может быть представлено в форме

$$X_0 = \exp\left(\int_0^t A_0(\tau)d\tau\right) =$$
$$= \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1+\cos\theta)e^{\frac{1}{2}\omega_0 t} + \frac{1}{2}(1-\cos\theta)e^{-\frac{1}{2}\omega_0 t} & \frac{1}{2}\sin\theta e^{-i\varphi}e^{\frac{1}{2}\omega_0 t} - \frac{1}{2}\sin\theta e^{-i\varphi}e^{-\frac{1}{2}\omega_0 t} \\ \frac{1}{2}\sin\theta e^{i\varphi}e^{\frac{1}{2}\omega_0 t} - \frac{1}{2}\sin\theta e^{i\varphi}e^{-\frac{1}{2}\omega_0 t} & \frac{1}{2}(1-\cos\theta)e^{\frac{1}{2}\omega_0 t} + \frac{1}{2}(1+\cos\theta)e^{-\frac{1}{2}\omega_0 t} \end{pmatrix}. \quad (13)$$

Тогда элементы матрицы V имеют вид:

$$V_{11} = \frac{1}{2}iR(t)\cos^2\theta + \frac{1}{4}i\sin^2\theta\left(R(t)e^{-i\omega_0 t} + R(t)e^{i\omega_0 t}\right),$$
$$V_{12} = \frac{1}{2}iR(t)\sin(\theta)\cos(\theta)e^{-i\phi} - \frac{1}{4}i\sin(\theta)\cos(\theta)e^{-i\phi}\times$$
$$\times\left(R(t)e^{-i\omega_0 t} + R(t)e^{i\omega_0 t}\right) + \frac{1}{4}i\sin(\theta)e^{-i\phi}\left(R(t)e^{i\omega_0 t} - R(t)e^{-i\omega_0 t}\right),$$
$$V_{21} = \frac{1}{2}iR(t)\sin(\theta)\cos(\theta)e^{i\phi} - \frac{1}{4}i\sin(\theta)\cos(\theta)e^{i\phi}\times \quad (14)$$
$$\times\left(R(t)e^{-i\omega_0 t} + R(t)e^{i\omega_0 t}\right) + \frac{1}{4}i\sin(\theta)e^{i\phi}\left(R(t)e^{-i\omega_0 t} - R(t)e^{i\omega_0 t}\right),$$
$$V_{22} = -\frac{1}{2}iR(t)\cos^2\theta - \frac{1}{4}i\sin^2\theta\left(R(t)e^{-i\omega_0 t} + R(t)e^{i\omega_0 t}\right).$$

Поскольку в общем случае $R(t)$ — произвольная финитная функция, фундаментальная матрица решений уравнения (11) в общем виде может быть представлена с помощью мультипликативного интеграла

$$X_1 = \int_0^{\curvearrowright t} V(\tau)d\tau. \quad (15)$$

Нахождение точного значения мультипликативного интеграла в данном случае сопряжено с большими математическими трудностями в связи с функциональной некоммутативностью матрицы V:

$$[V(t), V(t')] \neq 0. \quad (16)$$

В нулевом приближении мультипликативный интеграл может быть заменен матричной экспонентой

$$X_1 = \exp\left(\int_0^t V(\tau)d\tau\right). \quad (17)$$

Получаем следующие выражения для элементов матрицы X_1

$$\begin{aligned}
&\left(X_1\right)_{11}=\left[\frac{1}{2}iF\cos^2\theta+\frac{1}{4}i\sin^2\theta\left(S+S^*\right)\right]b+a,\\
&\left(X_1\right)_{12}=\left[\frac{1}{2}iF\sin(\theta)\cos(\theta)e^{-i\phi}-\frac{1}{4}i\sin(\theta)\cos(\theta)e^{-i\varphi}\left(S+S^*\right)+\right.\\
&\left.+\frac{1}{4}i\sin(\theta)e^{-i\varphi}\left(S^*-S\right)\right]b,\\
&\left(X_1\right)_{21}=\left[\frac{1}{2}iF\sin(\theta)\cos(\theta)e^{i\varphi}-\frac{1}{4}i\sin(\theta)\cos(\theta)e^{i\varphi}\left(S+S^*\right)+\right.\\
&\left.+\frac{1}{4}i\sin(\theta)e^{i\varphi}\left(S-S^*\right)\right]b,\\
&\left(X_1\right)_{22}=a-\left[\frac{1}{2}iF\cos^2\theta+\frac{1}{4}i\sin^2\theta\left(S+S^*\right)\right]b,
\end{aligned}\tag{18}$$

где

$$\begin{aligned}
&F=\int_0^t R(\tau)d\tau,\ S=\int_0^t R(\tau)e^{-i\omega_0\tau}d\tau,\ S^*=\int_0^t R(\tau)e^{i\omega_0\tau}d\tau,\\
&a=\cos\frac{Q}{2},\ b=\frac{2\sin\dfrac{Q}{2}}{Q},\ Q=\sqrt{F^2\cos^2\theta+|S|^2\sin^2\theta}.
\end{aligned}\tag{19}$$

После действия обоих импульсов волновая функция системы будет

$$\Psi=D_2K_2D_1K_1\Psi_0,\tag{20}$$

где Ψ_0 — волновая функция системы в начальный момент времени, K_1 и K_2 — фундаментальная матрица X за время действия первого и второго импульса, D_1 и D_2 — фундаментальная матрица X за промежуток между первым и вторым импульсом и за время после окончания второго импульса.

В начальном состоянии спин ядра считаем направленным по внутреннему постоянному магнитному полю, поэтому

$$\Psi_0=\begin{pmatrix}\cos\left(\dfrac{\theta}{2}\right)e^{-i\varphi}\\ \sin\left(\dfrac{\theta}{2}\right)\end{pmatrix}.\tag{21}$$

Когда внешнее радиочастотное поле не действует на систему, ее уравнение эволюции совпадает с (10), поэтому элементы матрицы D_1

$$\begin{aligned}
&\left(D_1\right)_{11}=\frac{1}{2}(1+\cos\theta)e^{\frac{1}{2}\omega_0(T-\tau_1)}+\frac{1}{2}(1-\cos\theta)e^{-\frac{1}{2}\omega_0(T-\tau_1)},\\
&\left(D_1\right)_{12}=\frac{1}{2}\sin\theta e^{-i\varphi}e^{\frac{1}{2}\omega_0(T-\tau_1)}-\frac{1}{2}\sin\theta e^{-i\varphi}e^{-\frac{1}{2}\omega_0(T-\tau_1)},\\
&\left(D_1\right)_{21}=\frac{1}{2}\sin\theta e^{i\varphi}e^{\frac{1}{2}\omega_0(T-\tau_1)}-\frac{1}{2}\sin\theta e^{i\varphi}e^{-\frac{1}{2}\omega_0(T-\tau_1)},\\
&\left(D_1\right)_{22}=\frac{1}{2}(1-\cos\theta)e^{\frac{1}{2}\omega_0(T-\tau_1)}+\frac{1}{2}(1+\cos\theta)e^{-\frac{1}{2}\omega_0(T-\tau_1)}.
\end{aligned}\tag{22}$$

Аналогично

$$\begin{aligned}
&\left(D_2\right)_{11}=\frac{1}{2}(1+\cos\theta)e^{\frac{1}{2}\omega_0(t-T)}+\frac{1}{2}(1-\cos\theta)e^{-\frac{1}{2}\omega_0(t-T)},\\
&\left(D_2\right)_{12}=\frac{1}{2}\sin\theta e^{-i\varphi}e^{\frac{1}{2}\omega_0(t-T)}-\frac{1}{2}\sin\theta e^{-i\varphi}e^{-\frac{1}{2}\omega_0(t-T)},\\
&\left(D_2\right)_{21}=\frac{1}{2}\sin\theta e^{i\varphi}e^{\frac{1}{2}\omega_0(t-T)}-\frac{1}{2}\sin\theta e^{i\varphi}e^{-\frac{1}{2}\omega_0(t-T)},\\
&\left(D_2\right)_{22}=\frac{1}{2}(1-\cos\theta)e^{\frac{1}{2}\omega_0(t-T)}+\frac{1}{2}(1+\cos\theta)e^{-\frac{1}{2}\omega_0(t-T)}.
\end{aligned}\tag{23}$$

В качестве второго импульса возьмем короткий сигнал площадью π

$$R_2(t)=\pi\delta(t),\tag{24}$$

тогда

$$F_2=\pi,\ S_2=\pi,\ S_2^*=\pi,\ Q_2=\pi,\ a_2=0,\ b_2=\frac{2}{\pi}\tag{25}$$

и

$$K_2=\begin{pmatrix}i & 0\\ 0 & -i\end{pmatrix}.\tag{26}$$

Намагниченность вдоль оси z

$$M_z=\Psi^H(\gamma s_z)\Psi,\tag{27}$$

где Ψ^H — эрмитово сопряженный спинор.

Вычислив (27), получим выражение, не зависящее от φ. Выберем из него только слагаемые, относящиеся к двухимпульсному эху (содержащие $e^{i\omega_0(t-2T)}$).

Считая, что все направления внутреннего постоянного поля равновероятны, найдем намагниченность во всем поликристаллическом образце путем усреднения по сферическим углам θ, φ

$$\overline{M}_z=\int g(\omega_0)d\omega_0\int_0^\pi\frac{\sin\theta}{2}d\theta\int_0^{2\pi}\frac{1}{2\pi}d\varphi\widetilde{M}_z,\tag{28}$$

где $g(\omega_0)$ — ширина неоднородно уширенной линии.

Так как $\widetilde{M}_z$ не зависит от угла φ, то интегрирование по нему проводится элементарно. При интегрировании по углу θ сделаем замену переменной $p=\cos\theta$

$$\overline{M}_z=\int g(\omega_0)d\omega_0\int_{-1}^{1}\frac{1}{2}dp\widetilde{M}_z.\tag{29}$$

В $\widetilde{M}_z$ можно сразу опустить члены, содержащие множителем нечетную степень p, так как при интегрировании в симметричных пределах они дадут ноль. Тогда

$$\begin{aligned}
&\overline{M}_z=\int g(\omega_0)d\omega_0\times\\
&\times\int_{-1}^{1}\frac{1}{2}dp\frac{i\hbar\gamma}{4}\left(S^*e^{i\omega_0(t-2T)}-Se^{-i\omega_0(t-2T)}\right)\frac{\sin Q}{Q}\left(1-p^2\right)^2.
\end{aligned}\tag{30}$$

Вместо уравнения Шредингера для волновой функции системы можно использовать уравнения Блоха непосредственно для намагниченности. Был проведен расчет без учета релаксации и зависимость $\widetilde{M}_z$ от угла θ полностью аналогична (30). Влияние релаксационных процессов на величину и форму эхо-сигнала было изучено в [4].

Если частота заполнения радиоимпульса ω_1 близка к центральной частоте ω_0, и выполняется условие $\tau_1 >> \frac{1}{\omega_1}$, то

$$|S(\omega_0)| >> F. \quad (31)$$

Тогда

$$Q = |S|\sin\theta, \quad (32)$$

и интеграл преобразуется к следующему виду

$$\overline{M}_z = \int \frac{i\hbar\gamma}{4} g(\omega_0)\left(S^* e^{i\omega_0(t-2T)} - S e^{-i\omega_0(t-2T)}\right) d\omega_0 \times$$
$$\times \int_0^1 dp \frac{\sin\left(|S|\sqrt{1-p^2}\right)}{|S|}\left(1-p^2\right)^{\frac{3}{2}}. \quad (33)$$

Замена переменной

$$z = \sqrt{1-p^2} \quad (34)$$

сводит внутренний интеграл к виду

$$\int_0^1 dz \frac{\sin(|S|z)}{|S|\sqrt{1-z^2}} z^4. \quad (35)$$

Значение последнего интеграла выражается через специальные функции Струве $\left(\widetilde{H}_0, \widetilde{H}_1\right)$

$$\frac{|S|^2 + \left(|S|^2 - 3\right)\left(\frac{1}{2}|S|\widetilde{H}_0(|S|) - \widetilde{H}_1(|S|)\right)}{|S|^4}. \quad (36)$$

Возьмем радиочастотный импульс с прямоугольной огибающей

$$R_1(t) = A\sin(\omega_1 t), \quad (37)$$

тогда

$$S = \int_0^{\tau_1} A\sin(\omega_1\tau) e^{-i\omega_0\tau} d\tau =$$
$$= \frac{A\left(i\omega_0 e^{-i\omega_0\tau_1}\sin(\omega_1\tau_1) + \omega_1 e^{-i\omega_0\tau_1}\cos(\omega_1\tau_1) - \omega_1\right)}{\omega_0^2 - \omega_1^2}. \quad (38)$$

Будем считать, что в пределах ширины спектра S неоднородно уширенная линия остается постоянной, поэтому при интегрировании можно положить

$$g(\omega_0) = g_0 = \text{const}. \quad (39)$$

Если подставить (38) в (36) и проинтегрировать в (33) по ω_0, то конечного аналитического результата ввиду сложности подынтегрального выражения получить не удается. Поэтому было применено численное интегрирование в пределах ширины спектра сигнала S.

Так как величина эха максимальна в момент времени $t = 2T$, интересна зависимость $\left|\overline{M}_z(t=2T)\right|$ от амплитуды радиочастотного поля A. На рис.3 показана эта зависимость, рассчитанная при $\omega_1 = 10^7 c^{-1}, \tau_1 = 10^{-5} c$. Величина модуля эхо-сигнала отложена в относительных единицах. По оси абсцисс отложено произведение $A\tau_1$.

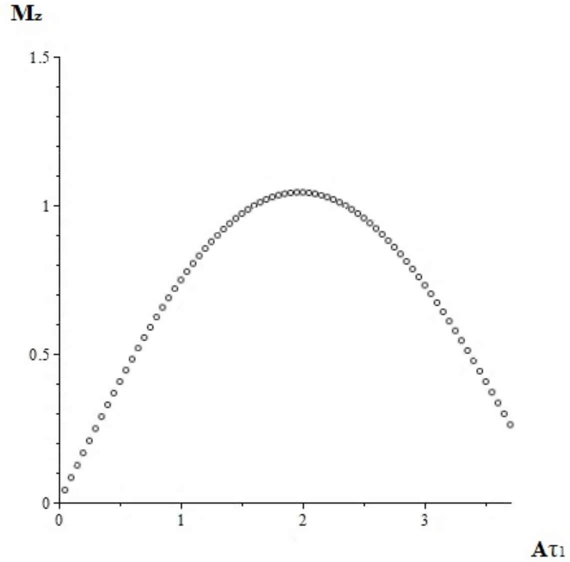

Рис.3. Зависимость амплитуды эхо-сигнала от площади радиочастотного импульса

Так как при вычислении мультипликативного интеграла было использовано нулевое приближение, то полученные результаты справедливы приблизительно до уровня радиочастотного сигнала $A\tau_1 = \pi$. При более высоких уровнях радиочастотного сигнала для расчета величины эха необходимо использовать следующие приближения для мультипликативного интеграла. При этом появятся спектры сигнала на частоте, сдвинутой по отношению к частоте ω_0. Величина сдвига будет зависеть от величины радиочастотного сигнала [5].

1. Баруздин С.А. Амплитудные характеристики возбуждения стимулированного фотонного эха шумовыми и когерентными импульсами // Квантовая электроника. 2001. Т.31. №8. С.719-722.
2. Рассветалов Л.А. Амплитудные характеристики эхо-процессора при стохастическом возбуждении // Вестник НовГУ. 2004. № 26. С. 81-84.
3. Гантмахер Ф.Р. Теория матриц. М.: Наука, 1967. 576 с.
4. Ковалевский М.М., Соколов О.В. Влияние релаксационных процессов на величину и форму эхо-сигнала // ЖТФ. 2009. Т.79. №4. С.14-18.
5. Ильин Э.В., Ковалевский М.М. К теории явлений светового эха // Известия РАН. Сер. физическая. 2002. Т.66. №3. С.361-364.

References

1. Baruzdin S.A. Amplitudnye kharakteristiki vozbuzhdeniia stimulirovannogo fotonnogo ekha shumovymi i kogerentnymi impul'sami [Amplitude characteristics of stimulated photon echo induced by noise and coherent pulses]. Kvantovaia elektronika – Quantum Electronics, 2001, vol.31, no.8, pp. 719-722.
2. Rassvetalov L.A. Amplitudnye kharakteristiki ekho-protsessora pri stokhasticheskom vozbuzhdenii [Amplitude characteristics of an echo processor at stochastic excitation]. Vestnik Novgorodskogo Gosudarstvennogo Universiteta – Vestnik of Yaroslav the Wise Novgorod State University, 2004, no. 26, pp. 81-84.
3. Gantmakher F. R. Teoriia matrits [Theory of matrices]. Moscow, “Nauka” Publ., 1967. 576 p.
4. Kovalevskii M. M., Sokolov O. V. Vliianie relaksatsionnykh protsessov na velichinu i formu ekho-signala [The influence of relaxation processes on the value and shape of the echo signal]. Zhurnal tekhnicheskoi fiziki – Technical Physics, 2009, vol. 79, no. 4, pp. 14-18.
5. Il'in E. V., Kovalevskii M. M. K teorii iavlenii svetovogo ekha [Toward a theory of the light echo phenomena]. Izvestiia RAN. Ser. Fizicheskaia – Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics, 2002, vol. 66, no. 3, pp. 361-364.