УДК 530. 182 СТРОБОСКОПИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ГОДОГРАФА НАМАГНИЧЕННОСТИ ПРИ НЕЛИНЕЙНОМ ЯМР

Угулава А.¹, Чхаидзе С.¹, Чоторлишвили Л.², Хуцишвили К.¹

 Факультет точных и естественных наук тбилисского государственного университета им. И. Джавахишвили. Грузия, Тбилиси, 0179, пр. И.Чавчавадзе, 3.

2. Institute for Physik, Martin-Luther-University, Halle-Wittenberg, Heinrich-Damerow-Str.4, 06120 Halle, Germany – Researcher.

Аннотация:

Исследованы годографы намагниченности нелинейного ЯМР в условиях резонанса на несмешенной частоте. Показано, что в зависимости от значений амплитуды переменного поля и величины сдвига получаются частоты топологически различающиеся годографы, отделенные друг от друга сепаратрисой. что множество точек Показано, годографа полученные стробоскопическим методом, хаотична. Показано также, что изменение zсоставляющей намагниченности имеет форму солитонов хаотично меняющих знак.

Ключевые слова: нелинейная динамика, стохастичность, нелинейный резонанс

Введение

Исследования нелинейного магнитного резонанса в магнитоупорядоченных веществах ведутся уже давно [1], однако интерес к ним не только не утихает, но и увеличивается в связи с обнаружением в магнетиках новых физических явлений [2-9]. С другой стороны, не ослабевает интерес и к хаотической динамике гамильтоновых систем [10-12]. Поэтому, рассмотрение любых вопросов находящихся на стыке этих двух областей (к которой относится и настоящая работа), на наш взгляд, является весьма актуальным. В частности, большинство спин систем нелинейны и с точки зрения их применимости для прикладных задач в квантовом компьютере весьма пермпективны [13-17]. Нелинейность принципиальная проблема для управляемых состояний. Заметим, что для линейной системы в постоянном магнитном поле, вектор намагниченности может управляться с помощью переменного радиочастотного поля, в то время как для нелинейных систем ситуация в корне отлична.

В магнитоупорядоченных кристаллах при достаточно низких температурах, возникает сдвиг частоты прецессии 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 [18] было показано, что при выполнении условия $\omega_1 = \omega_p$, где ω_p - равновесная величина динамического сдвига, $\omega_1 = \eta \gamma H_1$, H_1 - амплитуда линейно поляризованного переменного поля, приложенного в поперечной плоскости, η - коэффициент усиления, γ - гиромагнитное отношение, движение вектора *m* во вращающейся системе координат становится апериодическим – период движения логарифмически расходится $T_c \sim \ln \frac{|\omega_1 - \omega_p|}{\omega}$. Траектория

по которой движется конец вектора (годограф) **m** в этом случае, является сепаратрисой, отделяющей топологически различающиеся траектории. В работе [19] теоретически было показано, что при возмущении сепаратрисного годографа периодическим (низкочастотным) РЧ полем, может возникнуть стохастическое движение. Обычно стохастическое движение в гамильтоновых системах проявляется в хаотичности точек пересечения траектории

ISSN 1512-1461

возмущенного движения с невозмущенной. Для этого очевидно необходимо выполнение условия $\omega_p >> v >> \frac{\omega_p}{\ln \frac{\omega_p}{\left|\omega_1 - \omega_p\right|}}$, которое обеспечивает многократное пересечение траектории

с сепаратрисой в области ее "самопересечения". Отмеченное выше условие может выполняться лишь засчет расходящегося логарифма. Однако даже при большой точности

совпадения частот ω_1 и ω_p , частотный интервал между ω_p и $\frac{\omega_p}{\ln \frac{\omega_p}{|\omega_1 - \omega_p|}}$ является не так уж

большим и, поэтому, применение метода пересечения траекторий на практике становится затруднительным. Нами предлогается простой, но эффективный метод обнаружения стохастичности движения – стробоскопический метод. Цель нашей статьи – показать при каких условиях движение намагниченности становится хаотическим и неуправляемым.

Уравнения движения намагниченности при нелинейном ЯМР

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

$$\boldsymbol{H}_{1}(\mathbf{t}) = \boldsymbol{H}_{1} \cos \omega t , \quad \boldsymbol{H}_{1} \perp \boldsymbol{H}$$
(1)

И

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

Направим H_1 вдоль оси x и запишем систему нелинейных дифференциальных уравнений, описывающих движение ядерной намагниченности с учетом динамического сдвига частоты прецессии во вращающейся с частотой ω вокруг оси z системе координат, в виде¹

$$x = (\Delta - \omega_p z)y + v_1 y \cos vt,$$

$$\dot{y} = -(\Delta - \omega_p z)x + \frac{1}{2}\omega_1 z - v_1 x \cos vt,$$

$$= -\frac{1}{2}\omega_1 y, \quad v_1 = \gamma h, \quad \Delta = \omega - \omega_0, \quad \omega_0 = \gamma H.$$
(3)

Здесь мы ввели безразмерные компоненты намагниченности $\alpha = \frac{m_{\alpha}}{m}$, где $m = |\mathbf{m}|, \alpha = x, y, z$.

ż

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

¹ Исследование модели Бозе-Хаббарда также сводится к рассмотрению уравнений такого типа [20].

Динамический сдвиг частоты прецессии при определенных условиях возникает и при изучении движения намагниченности сверхтекучего He³ [21].

Здесь же отметим, что в последнее время интенсивно исследуются магнитные свойства органических соединений, в состав которых входят т.н. магнитные молекулы Магнитными молекулами называются молекулы, которые обладают стабильной намагниченностью чисто молекулярного происхождения, такой же как в обычных магнитных веществах [22]. Магнитный порядок обеспечен обменным взаимодействием между входящими в них атомами. Спиновый гамильтониан магнитной молекулы представляют в виде $\hat{\mathscr{H}} = Dz^2$, что соответствует динамическому сдвигу частоты Dz, имеющего порядок терагерца.

релаксаций. Ω - неоднородная ширина линии. Систему (3) исследуем при условии слабости продольного поля ($v_1 \ll \omega_p$).

Исследуем невозмущенную систему, получающуюся из (3) при $v_1 = 0$. Легко убедиться, что невозмущенная система имеет два интеграла движения

$$\int x^2 + y^2 + z^2 = 1 \tag{4}$$

$$\int \omega_p z^2 - \omega_1 x = \omega_p \tag{5}$$

Первый из этих интегралов (4) соответствует сохранению величины полного магнитного момента, а второй (5) – сохранению полной магнитной энергии. Здесь мы предположили выполненым условие резонанса на несмещенной частоте $\Delta = 0$, а за начальное условие взяли x(0) = y(0) = 0, z(0) = 1. Эти соотношения задают определенные поверхности: (4) – единичную сферу, а (5) - параболический цилиндр с образующими вдоль оси *у*. Годографы вектора *m* являются замкнутыми кривыми, получающимся пересечением этих поверхностей.

При $\omega_1 \neq \omega_p$ годографы разделяются на два типа: 1) $\omega_1 < \omega_p$ - пересечение состоит из двух контуров, симметрично расположенных по разные стороны плоскости (x; y), 2) $\omega_1 > \omega_p$ - пересечение состоит из одного контура, дважды пересекающего плоскость (x; y). При $\omega_1 = \omega_p$ траектория имеет вид симметричной пространственной восьмерки с самопересечением на оси x при x = -1 (Рис.1). Однопараметрическое (параметр ω_1) семейство восьмерок образует сепаратрису невозмущенного движения, разделяющую пространство на две области по типу принадлежащих им траекторий.

Воспользовавшись интегралами движения (4) и (5), невозмущенную ($v_1 = 0$) систему уравнений (3) можно свести к уравнению

$$\dot{z} = -\frac{1}{2}\omega_p \left[-(1-z^2) \left(1 - \frac{\omega_1^2}{\omega_p^2} - z^2 \right) \right]^{1/2}.$$
(6)

Решение уравнений (6) сводится к эллиптическим функциям Якоби *сп* и *dn* (косинус и дельта амплитуды), соответственно.



Рис.1. Семейство годографов вектора $r = m/|m_0|$ в условиях резонанса на несмещенной частоте. 1). $\omega_1 < \omega_p$. Две замкнутые кривые, расположенные симметрично относительно плоскости (x, y). 2). $\omega_1 > \omega_p$. Кривая "похожая" на пространственную восьмерку, дважды пересекающая плоскость (x, y). 3). $\omega_1 = \omega_p$. Пространственная восьмерка с самопересечением на оси x при x = -1, играющая роль сепаратрисы.

Для периодов движения по замкнутым траекториям в случае $\omega_1 < \omega_p$ можно получить соответсвенно

ISSN 1512-1461

$$T_{-} = \left(\frac{4}{\omega_{p}}\right) K\left(\frac{\omega_{1}}{\omega_{p}}\right) \qquad \qquad \omega_{1} < \omega_{p}$$

$$\tag{7}$$

И

$$T_{+} = \left(\frac{8}{\omega_{p}}\right) K\left(\frac{\omega_{p}}{\omega_{l}}\right) \qquad \qquad \omega_{l} > \omega_{p} \qquad (8)$$

где *K*(*k*) - полный эллиптический интеграл первого рода. Отсюда для периода движения вблизи сепаратрисы $\omega_1 \approx \omega_p$ лолучим

$$T_{c} = T_{+} \approx 2T \approx \frac{8}{\omega_{1}} \ln \frac{4\omega_{1}}{\left|\omega_{1} - \omega_{p}\right|}.$$
(9)

Следовательно, при приближении к сепаратрисе период движения логарифмически расходится. Правая часть уравнений (3) в точке (-1,0,0) (т.е. вблизи узла восьмерки) превращается в нуль. Это означает, что вблизи этой точки движение замедляется. Очевидно, что такого рода движение происходит вблизи сепаратрисного годографа (Рис.1). Таким образом, вблизи сепаратрисы движение неравномерно – около точки (-1,0,0) оно замедляется, а остальная часть годографа преодолевается сравнительно быстро так, что полное время одного оборота определяется выражением (9). Временная зависимость zкомпоненты намагниченности будет иметь форму инстантона [23]. $\omega_1 = \omega_p$ определяет

бифуркационное значение амплитуды переменного поля.

Заметим, что при $\Delta = 0$ условие резонанса выполняется не в начале движения (в точке (0,0,1)), а при достижении особой точки (-1,0,0). Очевидно, что особенности движения намагниченности вблизи особой точки обусловлены выполнением условия резонанса в этой точке.

Рассмотрим теперь случай резонанса на смещенной частоте $\Delta - \omega_p = 0$. В этом случае условие резонанса выполняется в начале движения в точке (0,0,1). В экспериментах по ЯМР в веществах с большим динамическим сдвигом резонансное условие подбирается именно в такой форме. Интегралы движения в этом случае приобретают вид:

$$x^2 + y^2 + z^2 = 1 \tag{10}$$

$$\omega_p (1-z)^2 = \omega_1 x \tag{11}$$

Легко убедиться, что контуры пересечений двух поверхностей (10) и (11) являются топологически однотипными замкнутыми кривыми и поэтому с точки зрения динамической стохастичности не представляют интереса. Ниже мы будем рассматривать лишь случай резонанса на несмещенной частоте ($\Delta = 0$).

Анализ результатов компьютерного моделирования

Для анализа приведенных выше рассуждений и исследования влияния возмущения на движение ядерной намагниченности, были моделированы исходные уравнения (1), описывающие динамику спин-системы. Моделирование проводилось в среде Simulink математического пакета MATLAB. При моделировании мы пользовались стробоскопическим методом, согласно которому наблюдение за движением вектора намагниченности производилось не непрерывно, а в течение отдельных малых, периодически следующих один за другим, интервалов времени.

На Рис.2 представлены годографы далекие от сепаратрисы ($\omega_1 \neq \omega_n$). Стробоскопическим методом поставленные точки расположены по годографу периодически. По мере приближения к сепаратрисе $(\omega_1 \rightarrow \omega_p)$ они становятся хаотическими (Рис.3). В случае $\omega_1 \approx \omega_p$ и $v_1 = 0$ хаотические точки охватывают только верхнюю часть сепаратрисной восьмерки, а после включения возмущения ($v_1 = 10^{-4} Hz$) движение происходит по всей сепаратрисной восьмерке. Стробоскопические точки годографа хаотичны и в этом случае. Следовательно, роль медленно меняющегося возмущения сводится к регулярному изменению местоположения точки самопересечения сепаратрисной восьмерки.

Таким образом, стохастическое множество точек возникает вблизи особой точки (-1,0,0), при преодолении которой движение становится нелредсказуемым – все четыре воэможные направления, проходящие через особую точку становятся равновероятными. Заметим, что множество точек оказалось стохастической несмотря на то, что внешние воздействия на систему являются строго периодическими.



Рис.2. Стробоскопические точки годографа, далекого от сепаратрисы ($\omega_1 \neq \omega_p$). ."+" и "." соответствуют случаям $\omega_1 = 800Hz$, $\omega_p = 1000Hz$, $v_1 = 0$ и $\omega_1 = 1000Hz$, $\omega_p = 800Hz$, $v_1 = 0$, соответственно. В обоих случаях множество стробоскопических точек расположены периодично.



Рис.3. Стробоскопические точки сепаратрисного годографа: 1) $\omega_1 = \omega_p = 1000 Hz$, $v_1 = 0$. Хаотические точки расположены по верхней части годографа ("+"). 2) $\omega_1 = \omega_p = 1000 Hz$, $v_1 = 10^{-4} Hz$. Хаотические точки расположены по всему сепаратрисному годографу (".").

В результате численного интегрирования (1) для z(t) при движении вблизи сепаратрисы получено решение в форме периодической последовательности инстантонов (Рис.4). В случае $\omega_1 - \omega_p \rightarrow -0$ все инстантоны положительны, в то время как при

 $\omega_1 - \omega_p \to +0$ в периодической последовательности происходит поочередная смена знака инстантонов. К индентичному результату можно прийти также и с помощью прямого построения графиков эллиптических функций Якоби, являющихся решениями уравнения (6).



Рис.4. Изменение z компоненты ядерной намагниченности при моделировании для близкой к сепаратрисе



Рис.5. Изменение z компоненты вектора ядерной намагниченности при моделировании для сепаратрисной траектории ($\omega_p = \omega_1 = 1000 Hz$, $v_1 = 10^{-4} Hz$)

На Рис.5 показан фрагмент картины изменения знака m_z во время моделирования уже при включенном периодическом возмущении ($v_1 = 10^{-4} Hz$). Беспорядочная смена знака ядерной намагниченности свидетельствует о возникновении стохастичности при переходе через точку ветвления.

Таким образом, годограф вектора ядерной намагниченности при нелинейном ЯМР на несмещенной частоте в условиях $\omega_1 \approx \omega_p$ обладают свойствами сепаратрисы, Это служит основой для появления множества хаотических точек на стробоскопической картине сепаратрисного годографа (Рис.3), а также для хаотической смены знака инстантонов *z* составляющей намагниченности (Рис.5).

Благодарности

Авторы выражают благодарность Национальному Научному Фонду Грузии, при поддержке которого велась работа над этим проектом.

Литература

- 1. Туров Е.А., Петров М.П. Ядерный магнитный резонанс в ферро- и антиферромагнетиках. Наука. М., 1988.
- 2. Chui S.T. Phys. Rev. 1997, **B55**, 3688.
- 3. Waintal X., Parcollet O. Phys.Rev. Lett. 2005, 94, 247206.
- 4. Xiao D., Tsoi M., Niu Q. J. Appl. Phys. 2006, 99, 013903.
- 5. van Saarloos W. Phys. Rep. 2003, 386, 29.
- 6. Филиппов Б. Н. ФНТ. 2002, **28**, 991.
- 7. Bertotti G., Magni A., Mayergoys L.D. Serpico C. J. Appl. Phys. 2002, 91, 7559.
- 8. Туров Е.А., Николаев В.В. УФН, 2005, **48**, 431.
- 9. Угулава А.И., Чоторлишвили Л.Л., Токликишвили З.З. ФНТ, 2008.. 34, 418.
- 10. Семенцов Д.И., Шутый А.М. УФН. 2007, 50, 793.
- 11. Lichtenberg A.J. and Lieberman M.A. Regular and Stochastic Motion. Springer-Verlag. New York, 1983.
- 12. Zaslavsky G.M. Hamiltonian Chaos and Fractional Dynamics. Oxford University Press, Oxford. 2005.
- 13. Mabuchi H., Doherty A. Science. 2002, 298, 1372.
- 14. Hood C.J., Lynn T.W., Doherty A.C. et al., Science, 2000, 287, 1447.
- 15. Raimond J., Brune M., Haroche S. Rev. Mod. Phys. 2001, 73, 565.
- 16. Chotorlishvili L., Toklikishvili Z. Phys. Latt. A. 2008, 372, 2806.
- 17. Chotorlishvili L., Toklikishvili Z., Berakdar J. Phys. Latt. A. 2009, 373, 231.
- 18. Туров Е.А., Куркин М.И., Николаев В.В. ЖЭТФ. 1973, **64**, 283.
- 19. Угулава А.И. Радиофизика. 1987, **30,** 748.
- 20. Strzys M.P., Graefe E.M., Korsch H.J. New Journal of Physics. 2008, 10, 1.
- 21. Leggett A.J. Rev. Mod. Phys. 1975, 47, 331.
- 22. D.Gatteschi, R. Sessoli, J.Villain. Molecular Nanomagnets. Oxford University Press, Oxford. 2006.
- 23. Угулава А.И. ФНТ. 1987, **13**, 227.

Article received: 2010-03-17