

- Bd 30a. S.1707-1714.
 7. Andrew B.R., Eades R.G. // Proc. Roy. Soc. 1953. V. A 218. P. 537.
 8. Steenwinkel R. // Z. Naturforsch. 1969. Bd 24a. S. 1526-1531.

УДК 539.143.43

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

ФОРМА ЛИНИИ ЯМР В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ С МОЛЕКУЛЯРНОЙ ПОДВИЖНОСТЬЮ

Трансформация спектров ЯМР при наличии движения магнитных ядер в кристаллической решетке представляет собой одну из наиболее фундаментальных проблем магнитного резонанса. Для ее решения использовались различные подходы [1-3]. В ряде работ (см., напр., [4-6]) рассматривалась трансформация тонкой структуры спектров магнитного резонанса выделенных спиновых групп. В более общем случае [7-10], когда в спектре ЯМР отсутствует тонкая структура, исследовались изменения гауссовой и прямоугольной линии под влиянием движений. В реальных твердых телах форма линии отличается от гауссовой и прямоугольной и поэтому в [11] было предложено использовать для анализа изменений формы линии ЯМР при наличии движения метод, подобный методу моментов Ван-Флека [12]. Сущность метода состоит в вычислении начальных коэффициентов a_n ("моментов") разложения формы спада свободной прецессии $G(t)$ в ряд Тейлора по t :

$$G(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(it)^n}{n!} a_n . \quad (1)$$

Начальные коэффициенты ряда (1) могут быть вычислены точно практически для любых спиновых систем и моделей молекулярной (атомной) подвижности. В частности, для модели случайных прыжков по N положениям равновесия в [13-14] получено

$$\begin{aligned} a_0 &= 1; & a_1 &= 0; \\ a_2 &= M_2; & a_3 &= i\Delta M_2 / \tau_c; & a_4 &= M_4 - \Delta M_2 / \tau_c^2, \end{aligned} \quad (2)$$

где M_2 и M_4 - второй и четвертый моменты линии поглощения ЯМР "жесткой" решетки; ΔM_2 - разность вторых моментов линий поглощения

жесткой и динамической решеток; τ_c - время корреляции, характеризующее молекулярную подвижность.

В настоящей работе рассматривается задача восстановления формы линии ЯМР по нескольким начальным коэффициентам a_n . В идейном плане данная работа является обобщением работ /I5-I7/ на случай динамических кристаллических решеток.

В /I5-I7/ показано, что выражение для формы линии может быть записано в виде

$$f(\omega) = \text{Re } F(\omega), \quad (3)$$

где

$$F(\omega) = \frac{1}{S + \frac{v_0^2}{S - i\omega_1 + \frac{v_1^2}{S - i\omega_2 + \frac{v_2^2}{S - i\omega_3 + \dots}}}}, \quad (4)$$

$S = i(\omega_0 - \omega)$, ω_0 и ω - соответственно резонансная и текущая частоты; явный вид начальных коэффициентов v_n^2 и ω_n , которые однозначно связаны с a_n , приведен в приложении.

Если по аналогии с /I6/ предположить, что начиная с некоторого номера l все v_n^2 и ω_n ($n \geq l$) равны v_l^2 и ω_l , то бесконечную дробь в (4) можно вычислить так:

$$K_l = \frac{v_l^2}{S - i\omega_l + K_l}$$

Отсюда находим

$$K_l = -\frac{S - i\omega_l}{2} \pm \sqrt{\frac{(S - i\omega_l)^2}{4} + v_l^2}$$

Рассмотрим три первых приближения вычисления $f(\omega)$

1) При $l = 0$ (все ω_n равны нулю, все v_n^2 равны M_2) находим из (3)

$$f^{(0)}(\Delta\omega) = \frac{1}{2v_0} \sqrt{1 - \Delta\omega^2/4v_0^2},$$

где $\Delta\omega = \omega - \omega_0$.

Следовательно, в нулевом приближении форма линии определяется только M_2 и не зависит от движения магнитных ядер.

2) При $l = 1$ (все ω_n равны ω_1 , v_n^2 ($n=2, 3, \dots$) равны v_1^2) из (3) следует

$$f^{(1)}(\Delta\omega) = \frac{\nu_0^2 (\delta + R)}{[2\nu_0^2 + J\Delta\omega - \Delta\omega^2]^2 + (\Delta\omega)^2(\delta + R)^2}, \quad (5)$$

где

$$\begin{aligned} \delta &= -i\nu_1; & R &= T_1 \cos\left(\frac{\varphi}{2}\right); & J &= T_1 \sin\left(\frac{\varphi}{2}\right); \\ \operatorname{tg} \varphi &= 2\delta\Delta\omega / (\Delta\omega^2 - \delta^2 - 4\nu_1^2); \\ T_1 &= [(\delta^2 + 4\nu_1^2 - \Delta\omega^2)^2 + 4\delta^2\Delta\omega^2]^{1/4}. \end{aligned}$$

В качестве конкретного примера рассмотрим случай, когда линия имеет гауссову форму, и положим в (2) $\Delta M_2 = M_2$ (диффузионная подвижность магнитных ядер). Используя приведенные в приложении выражения для коэффициентов a_n , находим

$$f^{(1)}(\Delta\omega) = \frac{(1/\sqrt{Q} + R_1)}{(2 + J_1 x - x^2)^2 + x^2(1/\sqrt{Q} + R_1)}, \quad (6)$$

где $R_1 = R/\sqrt{M_2}$, $J_1 = J/\sqrt{M_2}$, $x = \Delta\omega/\sqrt{M_2}$, $Q = M_2\tau_c^2$.

На рис. I приведена зависимость формы линии ЯМР от частоты молеку-

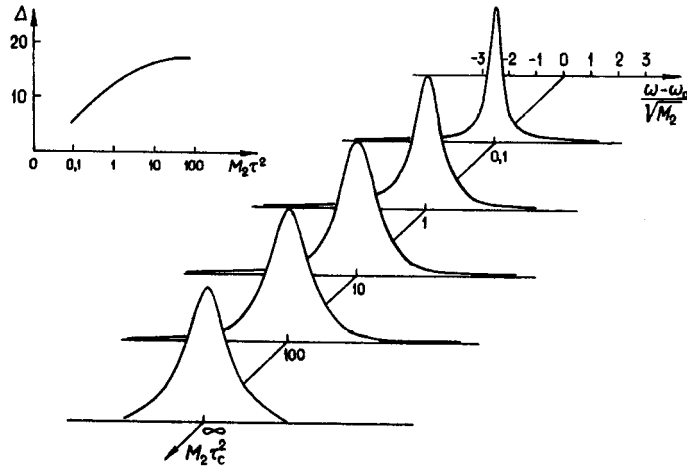


Рис. I. Зависимость формы линии ЯМР от частоты молекулярного движения, построенная по формуле (6)

лярного движения, построенная по формуле (6). В качестве переменной фигурирует x , в качестве параметра — Q . Здесь же приведена зависимость полуширины линии Δ от Q .

3). В случае $l = 2$ (все ω_n ($n = 3, 4, \dots$) равны ω_2 и все ν_n^2 равны ν_2^2) имеем

$$f^{(2)}(\Delta\omega) = \frac{f_1 + f_2}{f_3 + f_4}, \quad (7)$$

где

$$f_1 = [\Delta\omega(J - \Delta\omega) + \delta(p + R) + 2\nu_1^2] [(p + R)(\nu_0^2 - \Delta\omega^2) - \delta\Delta\omega(\Delta\omega - J)],$$

$$f_2 = [\delta J - \Delta\omega(\delta + p + R)] [(\Delta\omega - J)(\Delta\omega^2 - \nu_0^2) - \delta\Delta\omega(p + R) - 2\nu_1^2\Delta\omega],$$

$$f_3 = (p + R)(\nu_0^2 - \Delta\omega^2) - \delta\Delta\omega(\Delta\omega - J),$$

$$f_4 = (\Delta\omega - J)(\Delta\omega^2 - \nu_0^2) - \delta\Delta\omega(p + R) - 2\nu_1^2\Delta\omega,$$

$$p = -i\omega_2, \quad R = T_2 \cos(\psi/2), \quad J = T_2 \sin(\psi/2),$$

$$T_2 = [(\rho^2 + 4\nu_2^2 - \Delta\omega^2)^2 + 4\rho^2\Delta\omega^2]^{1/4},$$

$$\operatorname{tg} \psi = 2\rho\Delta\omega / (\Delta\omega^2 - \rho^2 - 4\nu_2^2).$$

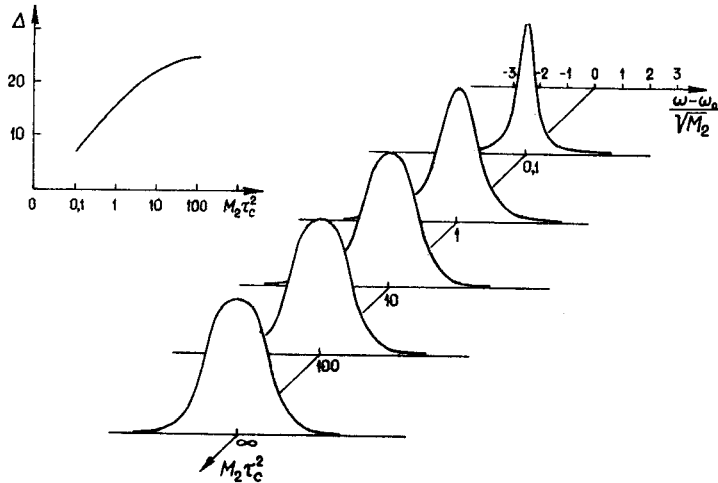


Рис. 2. Зависимость формы линии ЯМР от частоты молекулярного движения, построенная по формуле (7)

При гауссовой форме линии и $\Delta M_2 = M_2$ из (7) следует

$$f_1 = (Bx + LG + 4)[G(1-x^2) + xLB],$$

$$f_2 = (BL - xG)B(1-x^2),$$

$$f_3 = G(1-x^2) + xLB,$$

$$f_4 = (1-x^2)B - x(LG + 4),$$

$$L = 1/\sqrt{Q}, \quad B = J_1 - x, \quad G = 2/\sqrt{Q} + R_1, \quad J_1 = J/\sqrt{M_2}, \quad R_1 = R/\sqrt{M_2}.$$

Динамика формы линии во втором приближении представлена на рис.2.

В жестком случае ($\tau_c \rightarrow \infty$) полученные выше формулы переходят в выражения, приведенные в [7].

В заключение отметим, что изложенная методика восстановления линии поглощения ЯМР динамических решеток может быть относительно просто обобщена для учета более высоких коэффициентов a_n в разложении (I).

Приложение

$$v_0^2 = a_2; \quad v_1^2 = (a_2 a_4 - a_3^2 - a_2^3)/a_2^2; \quad v_2^2 = (A_1 + A_2 + A_3 + A_4)/B_1,$$

$$A_1 = a_6 - 2(\omega_1 + \omega_2)a_5 + v_0^4 \omega_2^2,$$

$$A_2 = a_4 [2(\omega_1 \omega_2 - v_0^2 - v_1^2) + (\omega_1 + \omega_2)^2],$$

$$A_3 = a_3 [2v_0^2 \omega_2 - 2(\omega_1 + \omega_2)(\omega_1 \omega_2 - v_0^2 - v_1^2)],$$

$$A_4 = a_2 [(\omega_1 \omega_2 - v_0^2 - v_1^2)^2 - 2v_0^2 \omega_2 (\omega_1 + \omega_2)],$$

$$B_1 = a_4 - 2a_3 \omega_1 + a_2 (\omega_1^2 - 2v_0^2) + v_0^4.$$

$$\omega_1 = a_3/a_2; \quad \omega_2 = (a_3^3 + a_5 a_2^2 - 2a_2 a_3 a_4)/(a_4 a_2^2 - a_2 a_3^2 - a_2^4).$$

$$a_0 = 1; \quad a_1 = 0; \quad a_2 = M_2; \quad a_3 = iM_2/\tau_c;$$

$$a_4 = 3M_2^2 - M_2/\tau_c^2; \quad a_5 = i(10M_2^2/\tau_c - M_2/\tau_c^3);$$

$$a_6 = 15M_2^3 - 25M_2^2/\tau_c^2 + M_2/\tau_c^4.$$

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Абрагам А. Ядерный магнетизм. М.: ИЛ, 1963. - 551 с.
2. Александров И.В. Теория магнитной релаксации. М.: Наука, 1975. - 399 с.
3. Бурштейн А.И. Лекции по курсу "Квантовая кинетика". Новосибирск: Наука, 1968. - 256 с.
4. Корст Н.Н., Анциферова Л.И. // УФН. 1978. Т.126. С.67-99.
5. Зобов В.Е. // Радиоспектроскопия твердого тела. Красноярск, 1974. С.22-30.
6. Сергеев Н.А. // Ядерный магнитный резонанс и внутренние движения в кристаллах. Красноярск, 1981. С.15-39.
7. Anderson P.W., Weiss P.R. // Rev.Mod.Phys. 1953. V.25. P.269-276.
8. Anderson P.W. // J.Phys.Soc.Japan. 1954. V.9. P.315-339.
9. Kubo R., Tomita K. // J.Phys.Soc.Japan. 1954. V.9. P.888-919.
10. Дундин А.А., Провоторов Б.Н. // ЖЭТФ. 1976. Т.70, Вып.6. С.2201-2210.
11. Lowe I.J., Vollmers K.W., Punkkinen M. // Proc. I Specialized Colloque AMPERE. Krakow, 1973. P.70-82.
12. Van-Vleck J.H. // Phys.Rev. 1948. V.74. P.1163-1183.
13. Lowe I.J. // Proc.IV AMPERE International Summer School. Pula, 1977. P.343-388.
14. Сергеев Н.А., Рябушкин Д.С. // Изв. вузов. Физика. 1982. № 7. С.48-52.
15. Lado F., Memory J.D., Parker G.W. // Phys.Rev. 1971. V.4. P.1406-1411.
16. Engelsberg M., Lowe I.J. // Phys.Rev. 1975. V.12. P.3547-3552.
17. Engelsberg M., Nai-Cheng Chao // Ibid. P.5043-5050.

УДК 539.143.43

Ф.Л.Аухадеев, А.В.Егоров, Р.Ш.Жданов, А.А.Кудряшов, М.С.Тагиров,
М.А.Теплов
Казанский университет

ЯМР ^3He в ТИТАНЕ

Физическое состояние ^3He , внедренного в металлы, изучено недостаточно /1/. Экспериментальные работы на эту тему содержат противоречивые выводы о формах удержания ^3He в металле, так как использовались методы, не дающие однозначную информацию /2-6/. Наличие магнитного момента ядра ^3He позволяет воспользоваться одним из наиболее информативных методов - ядерным магнитным резонансом (ЯМР). Мы получили, по-видимому, впервые убедительные свидетельства атомарно-дисперсионного распределения ^3He в металлическом титане.

ЯМР ^3He в титане обнаруживает типично "твердотельный" характер -