

## К теории нутации спинов

К.М. Салихов

Казанский физико-технический институт, Федеральный исследовательский центр “Казанский научный центр РАН”

Адрес: 420029, ул. Сибирский тракт, 10/7, Казань, 420029, Татарстан, Российская Федерация

### Аннотация

Для простейших систем парамагнитных частиц рассмотрен отклик спинов на внезапное включение переменного магнитного поля (“нутация”). Проведен детальный анализ зависимости “нутации” от характера возбуждения спинов переменным полем. В предельных случаях неселективного возбуждения спинов или селективного по частоте возбуждения перехода между спиновыми состояниями получены аналитические решения для временной зависимости намагниченности спинов.

В случае неселективного возбуждения сильным переменным полем движение спинов при внезапном включении поля представляет собой нутацию, описанную Торри. При этом нутация во вращающейся системе координат происходит с частотой Раби переменного поля, и частота нутации не зависит от величины спина парамагнитных частиц.

В случае селективного возбуждения резонансного перехода конец вектора намагниченности во вращающейся системе координат движется по эллипсу в плоскости, перпендикулярной вектору поляризации переменного поля. Частота движения по эллипсу оказывается больше частоты Раби, например, для частиц со спином  $S=1$  больше в  $\sqrt{2}$  раз. Несмотря на отличие траектории движения конца вектора намагниченности в предельных случаях неселективного возбуждения и селективного возбуждения резонансного перехода, в обоих случаях движение спинов можно назвать нутацией, круговой и эллиптической, соответственно.

В условиях, когда спиновые взаимодействия сопоставимы с энергией взаимодействия спинов с переменным полем, движение намагниченности спинов не описывается нутацией по Торри. Движение спинов в этой ситуации можно называть «нутацией» только для краткости речи. Показано, что движение намагниченности при “нутации” описывается как сумма вкладов, осциллирующих с разными частотами. Эти частоты могут быть рассчитаны численно для любого спин-гамильтониана. В этом случае “нутация” не сводится к нутации Торри, основанной на уравнениях Блоха. В этой ситуации применение уравнений Блоха для описания движения вектора намагниченности спинов не обосновано.

Предложены уравнения для вектора намагниченности, которые в отличие от уравнений Блоха, правильно описывают нутацию взаимодействующих спинов.

На основе численных расчетов в работе проведен детальный анализ нутации для двух простейших систем: парамагнитные частицы со спином  $S=1$  и пары парамагнитных со спинами  $S=1/2$ .

### Литература.

1. H.C. Torry, Phys. Rev. **76**, 1059- (1949)
2. A.V. Astashkin, A. Schweiger, Chem. Phys. Letters, **174**, 595-602 (1990)
3. A. Schweiger, G. Jeschke, Principle of pulse electron paramagnetic resonance, Oxford, University Press (2001)
4. S.S.Kim and S.I.Weissman, J. Magn. Reson. **24**, 167-169 (1976)
5. R. Furrer, E. Fujara, C. Lange, D. Stehlik, H.M. Vieth and W. Vollmann, Chem. Phys. Letters **75**, 332 (1980)
6. R. Hanaishi, Ya. Ohba, K. Akiyama, S. Yamauchi, M. Iwaizumi, J. Chem. Phys. **103**, 4819-4822 (1995)