

УДК 539.143

© 1990

СТАТИСТИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ СПЕКТРАЛЬНОЙ ПЛОТНОСТИ КОРРЕЛЯЦИОННОЙ ФУНКЦИИ ПРОДОЛЬНЫХ КОМПОНЕНТ СПИНОВ В МАГНИТОРАЗБАВЛЕННЫХ ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ

В. К. Хеннер, Е. К. Хеннер

Для расчета корреляционной функции продольных компонентов спинов, определяющей многие процессы в динамике спиновых систем, использован метод концентрации разложения функции памяти. Рассмотрены ситуации высоких и низких температур дипольной подсистемы, отсутствия и наличия неоднородного уширения.

Теория магнитной спектроскопии многоспиновых систем содержит небольшое число фундаментальных корреляционных функций, описывающих динамику таких систем [1, 2]. Это прежде всего функция формы линии магнитного резонанса $g(\omega)$ — спектральная плотность корреляционной функции поперечных компонент спинов $\langle\{S_+(t), S_-\}\rangle$, $q(\omega)$ — спектральная плотность корреляционной функции продольных компонент спинов $\Sigma\langle\{S_z^i(t), S_z^j}\rangle$ и немногие другие (например, автокорреляционная функция дипольной энергии, описывающая процесс установления равновесия в спиновой системе). Точный расчет таких функций невозможен; приближение времен корреляции, в котором временные функции полагают экспоненциальными с некоторой невычисляемой скоростью затухания, имеет весьма ограниченную ценность. Метод моментов, многократно использовавшийся для оценки таких функций, не дает, строго говоря, информации об их виде; применительно к магниторазбавленным системам он неоднократно подвергался серьезной критике (особенно отчетливо сформулированной в [3]). Существенный прогресс в теории магнитного резонанса в твердых телах с малой концентрацией спинов был связан со статистической теорией Андерсона [1, 4], которая после ряда обобщений [5-7] пригодна как в высокотемпературном приближении (ВТП), так и при умеренно низких температурах подсистемы взаимодействий.

Функция $q(\omega)$ играет важнейшую роль в теории спин-решеточной релаксации ядер через парамагнитные примеси, теории динамической поляризации ядер посредством так называемого динамического охлаждения [1, 2, 8], при изучении процессов спинового переноса между случайно распределенными парамагнитными центрами [9]. Однако последовательной статистической теории этой функции, подобной теории Андерсона для формы линии магнитного резонанса, не существует. Метод Андерсона в оригинальном варианте не может быть в этом случае полезен, так как он пригоден лишь для учета анизотропной части взаимодействия (зз-части), которая вообще не может обусловить временную эволюцию коррелятора $\langle\{S_z^i(t), S_z^j}\rangle$ (фигурные скобки означают антикоммутатор).

В ряде работ [10-13] для оценки $q(\omega)$ использовался метод моментов. В обсуждаемой задаче его недостатки особенно отчетливо проявляются при наличии неоднородного уширения [8, 13, 14]. Указанные теоретические работы соответствуют ВТП, хотя физические проблемы, в которых фигурирует $q(\omega)$, чаще всего не соответствуют этому приближению. Учет

охлаждения подсистемы спин-спиновых взаимодействий (спин-спинового резервуара) представляет собой достаточно сложную теоретическую задачу.

В работе [6] для расчета формы линии магнитного резонанса в магниторазбавленных системах в ВТП был развит статистический метод концентрационного разложения функции памяти. Впоследствии были развиты различные варианты метода концентрационного разложения для решения той же задачи в случае низких температур [7], изучалась термодинамика магниторазбавленных спиновых систем [15]. В настоящей работе метод концентрационного разложения функций памяти используется для расчета $q(\omega)$ как при высоких, так и при низких температурах в случаях чисто дипольного (однородного) и неоднородного уширения. В последнем случае мы ограничимся ситуацией быстрой спектральной диффузии, считая, что все спиновые пакеты имеют одинаковую температуру. В конкретных расчетах принято: значение спина $S=1/2$, образец сферической формы, распределение электронных спинов по образцу некоррелированное.

1. Основные соотношения

Гамильтониан рассматриваемой системы имеет вид

$$H = H_z + H_{ss} = \omega_0 S_z + (H'_{ss} + H_\Delta), \quad (1)$$

где ω_0 — зеемановская частота, H'_{ss} — секулярная часть электронного диполь-дипольного взаимодействия. Последнее слагаемое в (1) описывает неоднородное уширение линии ЭПР, обусловленное разбросом электронных g -факторов и называемое иногда неоднородным уширением 1-го рода [1]; $H_\Delta = -\sum_i n_i \Delta_i S_z^i$, где Δ_i — сдвиг частоты резонанса i -го спина (считаем $\sum_i \Delta_i = 0$), n_i — число заполнения i -го узла решетки, $n_i = 0$ или 1.

В случае быстрой спектральной диффузии в системе реализуется квазиравновесие в форме [1, 8]

$$\sigma = \exp(-\beta_z H_z - \beta_{ss} H_{ss}) / \text{Sp} \exp(-\beta_z H_z - \beta_{ss} H_{ss}), \quad (2)$$

где β_z — обратная температура зеемановского резервуара, β_{ss} — обратная температура спин-спинового резервуара (ССР). Обсуждаемая корреляционная функция имеет вид

$$\begin{aligned} q(\omega) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} q(t) e^{i\omega t} dt, \quad q(t) = \sum_j q_j(t) = \\ &= \sum_j \langle n_j \langle \langle \{ S_z^j(t), S_z^j \} \rangle \rangle \rangle_c. \end{aligned} \quad (3)$$

Термодинамическое среднее $\langle \dots \rangle$ соответствует матрице плотности (2); $\langle \dots \rangle_\Delta$ — усреднение по сдвигам частот Δ_i , обуславливающих неоднородное уширение; $\langle \dots \rangle_c$ — конфигурационное усреднение по распределению спинов по узлам решетки; $S_z^j(t) = e^{iH_{ss}t} S_z^j e^{-iH_{ss}t}$. «Незеемановскую» часть гамильтониана запишем в форме

$$H_{ss} = \frac{1}{2} \sum_{km} n_k n_m \hat{A}_{km} - \sum_k n_k \Delta_k S_z^k,$$

где \hat{A}_{km} — секулярная часть гамильтониана двухспинового диполь-дипольного взаимодействия.

Функция памяти $K_j(t)$, соответствующая корреляционной функции $q_j(t)$, вводится согласно уравнению [1]

$$\frac{dq_j(t)}{dt} = - \int_0^t K_j(t-t') q_j(t') dt', \quad (4)$$

$q(\omega)$ может быть выражена через действительную и мнимую части лапласового преобразования функции памяти

$$q(\omega) = \frac{1}{4\pi} \sum_j \frac{R_j(\omega)}{R_j^2(\omega) + [\omega + I_j(\omega)]^2}, \quad (5)$$

где $R_j(\omega) = \text{Re } K_j(\varepsilon - i\omega)$, $I_j(\omega) = \text{Im } K_j(\varepsilon - i\omega)$ ($\varepsilon \rightarrow 0^+$ после вычисления $R_j(\omega)$, $I_j(\omega)$). Как показано в [6], концентрационное разложение $q(t)$ позволяет построить концентрационное разложение $K(\lambda)$ и найти $R(\omega)$, $I(\omega)$.

Концентрационное разложение $q(t)$ следует из разложения $\langle \{S_z^j(t), S_z^j\} \rangle$ по числам заполнения, детально описанного в [6, 7]. Во втором порядке разложение $q_j(t)$ по числам заполнения имеет структуру

$$q_j(t) = \langle n_j [\varphi_j(n_j = 1) + \sum_k n_k (\varphi_{jk}(n_j = 1, n_k = 1) - \varphi_j(n_j = 1))] \rangle, \quad (6)$$

где $\varphi_j = \langle \langle \{S_z^j(t), S_z^j\} \rangle \rangle_{\Delta_j}$ — одночастичное среднее, $\varphi_{jk} = \langle \langle \{S_z^j(t), S_z^j\} \rangle \rangle_{\Delta_j, \Delta_k}$ — двухчастичное. Выражение (6) допускает конфигурационное усреднение; при некоррелированном распределении спинов по узлам решетки $\langle n_j \rangle_c = f$, $\langle n_j n_k \rangle_c = f^2$ ($j \neq k$), где $f = N/N_{\text{узл}}$ — концентрация спинов. После вычисления термодинамических средних и конфигурационного усреднения получаем (считая, что распределение спинов по узлам и распределение неоднородных полей независимы)

$$q_j(t) = \frac{1}{4} + \frac{1}{8} (1 - p^2) f \sum_k \left\langle \frac{a_{jk}^2}{e_{jk}^2} \times \frac{\text{ch}(\frac{1}{2} \beta_{ss} e_{jk}) [\cos(e_{jk} t) - 1]}{\exp(-\beta_{ss} e_{jk}) \left[(1 + p^2) \text{ch}\left(\frac{1}{2} \beta_{ss} d_{jk}\right) + 2p \text{sh}\left(\frac{1}{2} \beta_{ss} d_{jk}\right) \right] + (1 - p^2) \text{ch}\left(\frac{1}{2} \beta_{ss} e_{jk}\right)} \right\rangle_{\Delta}, \quad (7)$$

где

$$a_{jk} = \frac{\gamma^2 \hbar}{2r_{jk}^3} (1 - 3 \cos^2 \theta_{jk}), \quad d_{jk} = \Delta_j + \Delta_k, \quad e_{jk} = \sqrt{a_{jk}^2 + (\Delta_j - \Delta_k)^2}, \quad p = -\text{th} \frac{\beta_{ss} \omega_0}{2}.$$

Непосредственный расчет $q(\omega)$ по формулам (7), (3) невозможен. Необходимо так перестроить концентрационное разложение, чтобы иметь удовлетворительную длинновременную асимптотику. Один из возможных вариантов такой перестройки дает метод функций памяти.

Выполним преобразование Лапласа формулы (7) и воспользуемся связью преобразований Лапласа $q_j(t)$ и $K_j(\lambda)$, следующей из (4), $K_j(\lambda) = q_j(t=0)/q_j(\lambda) - \lambda$, после чего в главном порядке концентрационного разложения получим выражение для лапласового преобразования функции памяти

$$K_j(\lambda) = \frac{1}{2} (1 - p^2) \lambda f \sum_k \left\langle \frac{a_{jk}^2}{\lambda^2 + e_{jk}^2} \times \frac{\text{ch}(\frac{1}{2} \beta_{ss} e_{jk})}{\exp(-\beta_{ss} e_{jk}) \left[(1 + p^2) \text{ch}\left(\frac{1}{2} \beta_{ss} d_{jk}\right) + 2p \text{sh}\left(\frac{1}{2} \beta_{ss} d_{jk}\right) \right] + (1 - p^2) \text{ch}\left(\frac{1}{2} \beta_{ss} e_{jk}\right)} \right\rangle_{\Delta}. \quad (8)$$

Для получения точных количественных результатов следует отделить действительную и мнимую части выражения (8), задать распределение

локальных неоднородных полей (информацию о нем дает ненасыщенная линия ЭПР при высоких температурах) и произвести численные расчеты получившихся решеточных сумм и усреднение по распределению неоднородных полей. Такой путь, однако, практически неприемлем. Известно, что асимптотическую оценку выражений типа (5), (8) можно получить в приближении сплошной среды и выборе некоторых модельных распределений неоднородных полей. Ниже мы рассмотрим несколько случаев — высоких и низких температур ССР, отсутствия или наличия неоднородного уширения.

2. Высокие температуры ССР

При высокой температуре подсистемы взаимодействий и произвольном значении зеемановской температуры формула (8) дает

$$K_j(\lambda) = \frac{1}{4} f(1-p^2) \lambda \sum_k \left\langle \frac{a_{jk}^2}{\lambda^2 + a_{jk}^2 + (\Delta_j - \Delta_k)^2} \right\rangle_{\Delta_k}. \quad (9)$$

Рассмотрим два случая.

а) Отсутствие неоднородного уширения. Полагая $\Delta_j = 0$, $\Delta_k = 0$ и переходя от суммирования по k к интегрированию и положив в конце вычислений $\varepsilon = 0$, получим

$$R = \frac{1}{12} (1-p^2) D, \quad D = \frac{2\pi^2}{3\sqrt{3}} C \gamma^2 \hbar, \quad I = 0, \quad (10)$$

где D — полуширина линии магнитного резонанса в системе с малой концентрацией спинов. При получении (10) считалось, что образец сферичен и все узлы кристаллографически эквивалентны, при этом $K_j(\lambda)$ не зависит от j . Величина D пропорциональна объемной концентрации спинов C и не зависит от поляризации p ; $q(\omega)$ имеет вид

$$q(\omega) = \frac{N}{4\pi} \frac{1/12 (1-p^2) D}{[1/12 (1-p^2) D]^2 + \omega^2}, \quad (11)$$

т. е. является лоренцианом с шириной, зависящей от поляризации.

б) Наличие неоднородного уширения. Введем функцию $f_k(\Delta)$ ($\int f(\Delta) d\Delta = 1$), описывающую распределение неоднородных полей. При выполнении усреднения $\langle \dots \rangle_{\Delta}$ есть две возможности. Первая — ограничиться в (9) усреднением по Δ_k и представить (переходя от суммирования к интегрированию)

$$q(\omega) = \frac{1}{4\pi} N \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \frac{R(\omega, x)}{R^2(\omega, x) + [\omega + I(\omega, x)]^2} dx, \quad (12)$$

где

$$R(\omega, x) = \frac{1}{12} (1-p^2) D |\omega| \int_{|y-x| < \omega} f(y) \frac{dy}{\sqrt{\omega^2 - (y-x)^2}},$$

$$I(\omega, x) = -\frac{1}{12} (1-p^2) D \omega \int_{|y-x| > \omega} f(y) \frac{dy}{\sqrt{(y-x)^2 - \omega^2}}. \quad (13)$$

Вторая возможность — усреднить в (9) последовательно по Δ_k и Δ_j и представить

$$q(\omega) = \frac{1}{4\pi} N \frac{R(\omega)}{R^2(\omega) + [\omega + I(\omega)]^2}, \quad (14)$$

где

$$R(\omega) = \frac{1}{12} (1-p^2) D |\omega| \iint_{|y-x| < \omega} \frac{f(x) f(y) dx dy}{\sqrt{\omega^2 - (y-x)^2}},$$

$$I(\omega) = -\frac{1}{12} (1 - p^2) D \omega \int \int_{|y-x| > \omega} \frac{f(x)f(y) dx dy}{\sqrt{(y-x)^2 - \omega^2}}. \quad (15)$$

В [6] при расчете формы линии ЭПР наличие в каждом порядке концентрационного разложения аддитивного сдвига частоты сделало более приемлемым первый путь. В нашей задаче такой сдвиг отсутствует и оба пути в принципе равноправны.

Рассмотрим простейшую модель $f(\Delta)$: прямоугольное распределение, когда $f(\Delta) = 1/2\sigma$ при $|\Delta| < \sigma$ и $f(\Delta) = 0$ при $|\Delta| > \sigma$. Интегралы, входящие в (15), достаточно просто вычисляются

$$R(\omega) = \frac{1}{12} D (1 - p^2) \varphi_{\Pi} \left(\frac{|\omega|}{2\sigma} \right), \quad I(\omega) = -\frac{1}{12} D (1 - p^2) \psi_{\Pi} \left(\frac{\omega}{2\sigma} \right), \quad (16)$$

где

$$\varphi_{\Pi}(\alpha) = \begin{cases} \alpha(\pi - 2\alpha), & \alpha \leq 1, \\ 2\alpha \left(\arcsin \frac{1}{\alpha} + \sqrt{\alpha^2 - 1} - \alpha \right), & \alpha \geq 1, \end{cases}$$

$$\psi_{\Pi}(\alpha) = \begin{cases} \alpha \left[\ln \frac{1 + \sqrt{1 - \alpha^2}}{1 - \sqrt{1 - \alpha^2}} - 2\sqrt{1 - \alpha^2} \right], & \alpha \leq 1, \\ 0, & \alpha \geq 1. \end{cases} \quad (17)$$

Реально наблюдаемые распределения локальных неоднородных полей часто близки к гауссовому [8], $f(\Delta) = \exp(-\Delta^2/2\sigma^2)/\sqrt{2\pi}\sigma$. При этом формулы (15) приводятся к виду (16), где вместо $\varphi_{\Pi}(\alpha)$, $\psi_{\Pi}(\alpha)$ фигурируют

$$\varphi_{\Gamma}(\alpha) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \alpha \int_0^1 \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} \exp(-\alpha^2 x^2),$$

$$\psi_{\Gamma}(\alpha) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \alpha \int_1^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{x^2-1}} \exp(-\alpha^2 x^2). \quad (18)$$

Значения φ_{Π} и φ_{Γ} , ψ_{Π} и ψ_{Γ} при одинаковых α , разумеется, различны, но высоко- и низкочастотные асимптотики их очень близки: при $\alpha = |\omega|/2\sigma \ll 1$

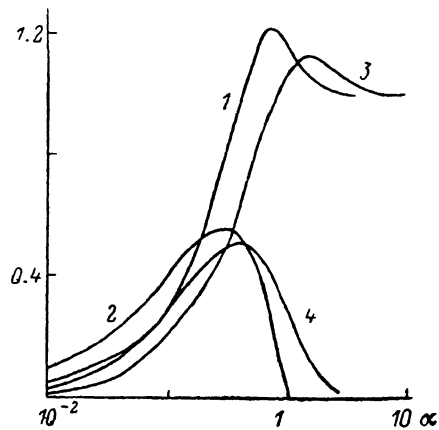
$$\varphi_{\Pi} \approx \pi\alpha, \quad \varphi_{\Gamma} \approx \sqrt{\pi}\alpha, \quad \psi_{\Pi} \approx -2\alpha \ln \alpha,$$

$$\psi_{\Gamma} \approx (-2/\sqrt{\pi})\alpha \ln \alpha,$$

при $\alpha \gg 1$

$$\varphi_{\Pi} \approx 1, \quad \varphi_{\Gamma} \approx 1, \quad \psi_{\Pi} = 0,$$

$$\psi_{\Gamma} \approx (-1/\sqrt{\pi}) \exp(-\alpha^2).$$



Функции $\varphi(\alpha)$, $\psi(\alpha)$ для прямоугольного и гауссового распределений неоднородных локальных полей: φ_{Π} (1), ψ_{Π} (2), φ_{Γ} (3), ψ_{Γ} (4).

Численный расчет, произведенный по формулам (12), (13), с одной стороны, и по формулам (14), (16)–(18) — с другой, показывает практическое совпадение значений $q(\omega)$ во всем диапазоне частот при различных соотношениях σ и D как для прямоугольного, так и для гауссового распределений, т. е. оба способа усреднения по неоднородным полям практически эквивалентны.

Таким образом, функция $q(\omega)$ имеет достаточно сложную форму, зависящую от распределения локальных полей. Высокочастотные крылья $q(\omega)$ при $|\omega| \gg \sigma$, однако, всегда лоренцевы. Отметим, что используемый нами вариант метода концентрационного разложения не позволяет реалистически передать $q(\omega)$ в области очень низких частот $|\omega| \ll D$, так как при очень больших временах функция $q(t)$, описывающая процесс диффузионного типа, заведомо неэкспоненциальна [16]. Трудности с пе-

редачей низкочастотной части присущи и существующим теориям формы линии резонанса в магнитоизлученных системах.

В заключение этого раздела приведем выражение для $q(\omega)$ с использованием функций φ и ψ

$$q(\omega) = \frac{3}{\pi} \frac{N}{(1-p^2)D} \frac{\varphi(\omega/2\sigma)}{\varphi^2\left(\frac{\omega}{2\sigma}\right) + \left[\frac{24}{1-p^2} \frac{\sigma}{D} \frac{\omega}{2\sigma} - \psi\left(\frac{\omega}{2\sigma}\right) \right]^2}. \quad (19)$$

Поведение функций φ и ψ иллюстрирует рисунок.

3. Низкие температуры ССР

Во многих физических задачах, упомянутых выше, используется динамическое охлаждение ССР накачкой СВЧ полем крыла линии ЭПР. В ходе этого процесса в условиях высокой начальной спиновой поляризации есть все основания ожидать выхода ССР за пределы ВТП. Для магнитоизлученной системы ВТП ограничено условием $|\beta_{ss}| |(\gamma^2 \hbar / \rho^3)| \ll 1$, где ρ — кратчайшее расстояние между спинами, входящими в ССР («радиус обрезания» ССР); по порядку величины ρ — кратчайшее расстояние между узлами решетки. Указанное условие является очень жестким, так как при малой концентрации спинов характерной энергией является не $\gamma^2 \hbar / \rho^3 \approx E_{\text{ex. coc}}$, а энергия взаимодействия спинов на среднем расстоянии $\bar{E} = f E_{\text{ex. coc}}$. Метод концентрационного разложения, примененный в [7, 15] к исследованию динамических и термодинамических свойств спиновых систем, позволяет продвинуться в область температур, для которой выполняется значительно более мягкое условие $|\beta_{ss} \bar{E}| \ll 1$ (область $\bar{E} < |\beta_{ss}^{-1}| < E_{\text{ex. coc}}$ мы называем в данной работе низкотемпературной). Насколько нам известно, в этом случае расчеты обсуждаемого коррелятора ранее не делались.

Поскольку в общем случае формулы слишком громоздки, ограничимся двумя предельными случаями — отсутствия неоднородного уширения и сильным неоднородным уширением (много больше однородного). Выражение для $q(\omega)$ имеет в методе функций памяти вид (5) независимо от значений температур подсистем (вне ВТП они входят в R_j, I_j).

а) Отсутствие неоднородного уширения. Имеем формулу, аналогичную (9)

$$K_j(\lambda) = \frac{1}{4} (1-p^2) \lambda f \sum_k \frac{a_{jk}^2}{\lambda^2 + a_{jk}^2} \times \\ \times \frac{(1 + \tau_{jk}^2)(1 + \tau_{jk})}{1 - \tau_{jk} + 2\tau_{jk}^2 - p^2 \tau_{jk} (2 - \tau_{jk} + \tau_{jk}^2)}, \quad (20)$$

где $\tau_{jk} = \text{th}(1/4 \beta_{ss} a_{jk})$. Переходя от суммирования к интегрированию в интеграле, определяющем мнимую часть функции памяти, получим бесконечное число полюсов, приводящее к очень сложному и неудобному в обращении выражению для $I_j(\omega)$. При $\omega \gg D$ выполняется, однако, соотношение $|I_j(\omega)| \ll \omega$, а при $\omega \leq D$ $I_j(\omega) = \beta_{ss} D \omega G_j$, где G_j не зависит от ω и по величине порядка единицы. Так как $D \approx \bar{E}$, а $|\beta_{ss} \bar{E}| \ll 1$, то можно сделать вывод, что $|I_j(\omega)| \ll \omega$ для всех значений частоты и

$$q_j(\omega) = \frac{f}{4\pi} \frac{R_j(\omega)}{R_j^2(\omega) + \omega^2}. \quad (21)$$

Для $R_j(\omega)$ получаем (как и в ВТП, $R_j(\omega)$ в отсутствие неоднородного уширения не зависит от j)

$$R(\omega) = \frac{1}{12} D (1-p^2) \frac{(1 + \tau^2) [1 + 3\tau^2 + p^2 \tau^2 (3 + \tau^2)]}{(1 + 2\tau^2 + p^2 \tau^2)^2 - \tau^2 (1 + 2p^2 + p^2 \tau^2)}, \quad (22)$$

где $\tau = \text{th}(\beta_{ss}\omega/4)$. Формулы (21), (22) описывают нереленцеву функцию, форма которой зависит от температуры ССР и поляризации. На малых частотах при $\tau^2 \ll 1$ $R \approx (1-p^2)D/12$, на высоких при $\tau^2 \approx 1$ $R \approx D/12$, т. е. в обоих случаях R не зависит от ω и q (ω имеет лоренцевы асимптотики, принадлежащие, однако, разным лоренцианам. Поскольку $\beta_{ss}\omega = \beta_{ss}D(\omega/D)$, а метод применим при $|\beta_{ss}|D \ll 1$, то первая асимптотика справедлива при $\omega \ll D$, а вторая при $\omega/D \gg |\beta_{ss}D|^{-1}$, т. е. лишь на очень высоких частотах.

б) Сильное неоднородное уширение. Общее рассмотрение в этом случае весьма сложно. Ограничимся лишь ситуацией, когда $|a_{jk}| \ll |\Delta_j - \Delta_k|$, $|\beta_{ss}a_{jk}| \ll 1$, т. е. низкотемпературна лишь «неоднородная» часть подсистемы H_{ss} . Проводя усреднение по распределению неоднородных полей вторым из способов, описанных в разделе 2б, получим $q(\omega)$ в виде (14), где, однако

$$R(\omega) = \frac{1}{12} (1-p^2) D |\omega| \iint_{|y-x| < \omega} \frac{f(x)f(y) \left(1 - \text{th} \frac{\beta_{ss}x}{2} \text{th} \frac{\beta_{ss}y}{2}\right) dx dy}{\sqrt{\omega^2 - (y-x)^2} \left(1 + p \text{th} \frac{\beta_{ss}x}{2}\right) \left(1 + p \text{th} \frac{\beta_{ss}y}{2}\right)},$$

$$I(\omega) = -\frac{1}{12} (1-p^2) D \omega \iint_{|y-x| > \omega} \frac{f(x)f(y) \left(1 - \text{th} \frac{\beta_{ss}x}{2} \text{th} \frac{\beta_{ss}y}{2}\right) dx dy}{\sqrt{(y-x)^2 - \omega^2} \left(1 + p \text{th} \frac{\beta_{ss}x}{2}\right) \left(1 + p \text{th} \frac{\beta_{ss}y}{2}\right)}.$$
(23)

В двух предельных случаях — высоких и низких температур — формулы (23) допускают упрощение. При $|\beta_{ss}\sigma| \ll 1$ (высокотемпературное приближение) приходим к результатам, изложенным в разделе 2б; в противоположном случае $|\beta_{ss}\sigma| \gg 1$ получаем (для гауссового распределения неоднородных полей)

$$R(\omega) = \frac{1}{6} D \varphi_r \left(\frac{|\omega|}{2\sigma} \right), \quad I(\omega) = -\frac{1}{6} D \psi_r \left(\frac{\omega}{2\sigma} \right),$$
(24)

где φ_r, ψ_r определяются формулами (18). Численный расчет интегралов, входящих в (23), при $|\beta_{ss}\sigma| \approx 1$ показывает, что $R(\omega), I(\omega)$ сохраняют и в этой области характерные частотные зависимости, отраженные на рисунке. Отметим, что формулы (23) справедливы при $|\beta_{ss}D| \ll 1$, т. е. когда дипольная подсистема не является низкотемпературной. Условие $|a_{jk}| \ll |\Delta_j - \Delta_k|$ на уровне макровеличин соответствует, по-видимому, условие $D \ll \sigma$.

4. Обсуждение результатов

При высоких температурах подсистемы взаимодействий функция $q(\omega)$ оказывается при отсутствии неоднородного уширения лоренцевой (формула (11)). Это согласуется с известными оценками, выполненными методом моментов [8, 10-13]. Однако эти оценки для магнитоэластических систем малоубедительны и получение простой формулы (11) статистическим методом представляется полезным.

Более сложна ситуация при наличии сильного неоднородного уширения. Первоначальные оценки методом моментов в этом случае привели к выводу о том, что скорость смешивания ядерного зеемановского резервуара и электронного резервуара локальных полей, определяемая значением функции $q(\omega_I)$ на частоте ядерного резонанса, практически не зависит от соотношения ω_I и σ [11, 12]. Экспериментальная проверка [14] не подтвердила этого заключения. Зависимость скорости эволюции ядерного зеемановского резервуара в обсуждаемом процессе от неоднородного уширения полностью передается величиной $q(\omega_I)$; при $\omega_I \gg D \omega_I \gg I(\omega_I)$, $R(\omega_I)$, и $q(\omega_I) \approx NR(\omega_I)/4\pi\omega_I^2$, т. е. зависимость от σ передается функцией $\varphi(\alpha)$.

Эта зависимость, как видно из рисунка, достаточно сильная. $\varphi(\omega_I/2\sigma)$ имеет максимум при $\omega_I \approx \sigma$, что физически разумно, так как условием хорошего теплового контакта обсуждаемых подсистем является близость ядерной резонансной частоты и электронного локального поля [8], которое в этом случае порядка σ . Отметим, что существует модифицированный расчет $q(\omega_I)$ методом моментов [13], лучше учитывающий неоднородное уширение, чем первоначальный вариант; однако статистический метод дает прямую информацию о спектральных плотностях корреляционных функций, а метод моментов — лишь косвенную, не очень достоверную при низких концентрациях спинов.

Предсказания статистической теории при низких температурах (раздел 3) могут помочь разобраться в том, выходит ли подсистема спин-спиновых взаимодействий в каждом конкретном процессе за пределы высокотемпературного приближения.

Список литературы

- [1] Абрагам А. Ядерный магнетизм. М.: ИЛ, 1963. 551 с.
- [2] Гольдман М. Спиновая температура и ЯМР в твердых телах. М.: Мир, 1972. 342 с.
- [3] Гринберг Е. С., Кочелаев Б. И., Халиуллин Г. Г. // ФТТ. 1981. Т. 23. № 2. С. 397—404.
- [4] Anderson P. W. // Compt. Rend. 1951. V. 82. N 3. P. 342—354.
- [5] Grant W. J. C., Strenberg W. J. P. // Phys. Rev. 1964. V. 135. N 3A. P. A715—A726.
- [6] Джепаров Ф. С., Лундин А. А., Хазанович Т. Н. // ЖЭТФ. 1987. Т. 92. № 2. С. 554—567.
- [7] Dzheparov F. S., Henner E. K. // Phys. St. Sol. (b). 1989. V. 151. N 2. P. 663—674. (Препринт ИТЭФ. 1987. № 10); Препринт ИТЭФ. 1989. № 109.
- [8] Ацаркин В. А. Динамическая поляризация ядер в твердых диэлектриках. М.: Наука, 1980. 195 с.
- [9] Салихов К. М., Семенов А. Г., Цветков Ю. Д. Электронное спиновое эхо и его применение. Новосибирск: Наука, 1976. 342 с.
- [10] Меликия М. Г. // ФТТ. 1968. Т. 10. № 3. С. 858—860.
- [11] Бендиашвили И. С., Буишвили Л. Л., Звиададзе М. Д. // ЖЭТФ. 1970. Т. 58. № 2. С. 597—600.
- [12] Goldman M., Cox S. J. F., Bouffard V. // J. Phys. C. 1974. V. 7C. N 10. P. 2940—2960.
- [13] Буишвили Л. Л., Метревели И. М., Фокина Н. П. // ЖЭТФ. 1981. Т. 80. № 2. С. 678—688.
- [14] Ацаркин В. А., Демидов В. В. // ЖЭТФ. 1980. Т. 79. № 4. С. 1438—1450.
- [15] Хеннер Е. К. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 9. С. 2569—2575.
- [16] Форстер Д. Гидродинамические флуктуации, нарушенная симметрия и корреляционные функции. М.: Атомиздат, 1980. 288 с.

Пермский государственный
педагогический институт
Пермь

Поступило в Редакцию
28 апреля 1989 г.
В окончательной редакции
25 сентября 1989 г.