щего множителя вблизи момента формирования эха и от соотношения времени поперечной обратимой релаксации T_2^* и T (τ_2). Период модуляции T (τ_2) имеет определенное значение для различных сигналов эха, что также существенно в определении формы откликов системы. Например, для $I=5$ Co^{60} при $\tau_2^э=7\tau_{1/3}$, $9\tau_{1/2}$ период модуляции квадрупольными взаимодействиями имеет значение $\pi/2a$, а при $\tau_2^э=\tau_1-2\pi/a$, при $\tau_2^э=\tau_1/8$, $3\tau_1/8$, $5\tau_1/8$, $7\tau_{1/8}$, $9\tau_{1/8}$ $-\pi/8a$, при $\tau_2^э=7\tau_{1/4}$, $\tau_{1/4}$, $\pi/4a$ и т. д. В результате форма сигналов эха в принципе в различные моменты времени отличается. Что касается эха при $\tau_1/10$, $3\tau_1/10$, $7\tau_1/10$, $9\tau_1/10$, то они не модулированы вообще.

Наблюдение эха в УРГИ является информативным в исследованиях электрических квадрупольных взаимодействий в ферромагнетиках. Эффект модуляции амплитуды эха с изменением τ_1, а также определенная зависимость ее от соотношения ω_1 и a, чувствительность к знаку a, наконец, форма сигнала эха в принципе позволяют получить богатую информацию о величинах a и ω_1. Изменение ориентации монокристалла изменяет угол θ и, следовательно, влияет на эффект модуляции.

Литература

[1] *Callaghan P. T., Johnston P. D., Stone N. J.* J. Phys. C.: Sol. St. Phys., 1974, vol. 7, p. 3161—3181.

[2] *Wilson G. V. H., Chaplin D. H.* Hyp. Int., 1981, vol. 10, p. 1081—1100.

[3] *Шахмуратова Л. Н.* Изв. АН СССР, 1986, т. 50, № 12, с. 2296—2303.

[4] *Back P. J., Chaplin D. H., Foster H. R., Stewart G. A., Wilson G. V. H.* Hyp. Int., 1985, vol. 22, p. 193—198.

[5] *Foster H. R., Cooke P., Chaplin D. H., Lynam P., Wilson G. V. H.* Phys. Rev. Let 1977, vol. 38, N 26, p. 1546—1549.

[6] *Abe H., Yasuoka H., Hirai A.* J. Phys. Soc. Jap., 1966, vol. 21, N 1, p. 77—89.

Казанский государственный педагогический институт
Казань

Поступило в Редакцию
25 января 1988 г.

УДК 537.635, 539.2

Физика твердого тела, том 30, в. 6, 1988
Solid State Physics, vol. 30, № 6, 1988

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СПЕКТРАЛЬНОЙ ДИФФУЗИИ В СТЕКЛАХ: НЕЛИНЕЙНОЕ РЕЗОНАНСНОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ И ВЫЖЖЕННАЯ ДЫРА

Д. А. Паршин, В. Н. Соловьев

Известно, что многие свойства стекол при низких температурах обусловлены существованием в них так называемых двухуровневых систем (ДУС) [1]. В настоящей работе проведены численные расчеты нелинейного резонансного поглощения и выжженной дыры. Этим вопросам посвящено много работ [2-4], однако количественная теория при больших интенсивностях развита недостаточно. Связано это с тем, что рассматриваемые эффекты осложнены явлением спектральной диффузии — случайного изменения во времени энергии разонансной ДУС e за счет взаимодействия с тепловыми ДУС (расстояние между уровнями, энергии которых $E\leqslant T$, где T — температура) [2-4]. Взаимодействие переменного поля частоты ω с резонансной ДУС характеризуются матричным элементом $\hbar F/2$ для перехода между уровнями, где F есть не что иное как частота Раби для резонансной ДУС (частота когерентных осцилляций заселенности ДУС под действием резонансного возмущения). Другим параметром теории является ширина γ уровней резонансной ДУС, обусловленная испусканием и поглощением фононов с энергией e. Взаимодействие с тепловыми ДУС имеет характерную величину $1/\tau_d = D^2 PT/\hbar\rho v^2$, где P — плотность состояний ДУС, ρ — плотность стекла, v — средняя скорость звука, D — некоторое среднее значение деформационного потенциала. Наконец, важна частота скачков тепловых ДУС Γ_0, равная $\Gamma_0 \simeq D^2 T^3/\rho\hbar^4 v^5$. В типичной для эксперимента ситуации имеем $\gamma \ll \Gamma_0 \ll \sqrt{\Gamma_0/\tau_d}$. Для нее и будут проведены все расчеты.

Рассмотрим систему из N равновероятно распределенных в объеме V тепловых ДУС. Радиус-вектор r_i i-й тепловой ДУС определяется тройкой чисел: (x_i, y_i, z_i), задаваемой генератором случайных чисел (ГСЧ). В начало системы координат поместим резонансную ДУС. Среднее расстояние между тепловыми ДУС $r_0 = (3V/4\pi N)^{1/3}$. Изменение собственной частоты резонансной ДУС, обусловленное взаимодействием с тепловыми соседями, равно

$$\Delta\omega(t) = \sum_{i=1}^{N} J_0 \left(\frac{r_0}{r_i}\right)^3 \xi_i(t). \tag{1}$$

Здесь ξ_i — случайная функция времени, описываемая телеграфным процессом. Она попеременно принимает значения $+1$ и -1 в случайные моменты времени. Средняя частота скачков равна Γ_0. Заметим, что $1/\tau_d \simeq J_0$.

Времена жизни соответственно резонансной и тепловой ДУС равны $1/\gamma$ и $1/\Gamma_0 \ll 1/\gamma$. В течение временного интервала $\Delta t = 1/\Gamma_0 N$ случайно выбранная ГСЧ тепловая ДУС совершает скачок. На следующем шаге переворачивается какая-нибудь другая (или та же самая) тепловая ДУС и т. д. На каждом i-м шаге для данного z решается система уравнений для диагональной n и недиагональной f компонент матрицы плотности резонансной ДУС [4]

$$\left.\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial t} &= -\gamma(n - n_0) - F\,\mathrm{Re}\,f, \\ \frac{\partial\,\mathrm{Re}\,f}{\partial t} &= F\left(n - \frac{1}{2}\right) + s\,\mathrm{Im}\,f - \frac{\gamma}{2}\,\mathrm{Re}\,f, \\ \frac{\partial\,\mathrm{Im}\,f}{\partial t} &= -s\,\mathrm{Re}\,f - \frac{\gamma}{2}\,\mathrm{Im}\,f. \end{aligned}\right\} \tag{2}$$

Здесь $n_0 = [\exp(e/T+1)]^{-1}$ — равновесная заселенность верхнего уровня резонансной ДУС; $z = \omega - e/\hbar$ — величина отстройки резонансной ДУС; $s = z - \Delta\omega(t)$.

Для численного решения системы (2) использована неявная схема интегрирования. Для уравнения $du/dt + \psi(u, t) = 0$ она имеет вид $u^{i+1} = u^i + \frac{\Delta t}{2}(\psi^i + \psi^{i+1})$ [5].

В моменты времени $t = k/\gamma$ $(k = 1, 2, \ldots)$ находятся средние

$$\mathrm{Re}\,\langle f\rangle_k = \frac{\Delta t}{k/\gamma} \sum_{i=1}^{k/\gamma} \mathrm{Re}\,f^i, \tag{3}$$

$$\langle n - n_0\rangle_k = \frac{\Delta t}{k/\gamma} \sum_{i=1}^{k/\gamma} (n^i - n_0). \tag{4}$$

Проверяется также неравенство, имеющее место в стационарном случае

$$\mathrm{Re}\,\langle f\rangle_k = -\frac{\gamma}{F}\langle n - n_0\rangle \tag{5}$$

и вытекающее из первого уравнения системы (2). Если средние (3) и (4) на k-м и $(k+1)$-м отрезках времени равны в пределах заданной точности, а также с той же степенью точности выполняется равенство (5), определяется «стационарный» коэффициент поглощения для резонансной ДУС с фиксированной расстройкой z

$$\alpha(z) = -\frac{2}{F}\,\mathrm{Re}\,\langle f\rangle. \tag{6}$$

Далее расчет производится для другого $\alpha(z)$, и суммарный коэффициент поглощения $\alpha(F)$ для заданной конфигурации тепловых ДУС находится интегрированием $\alpha(z)$ по всем z (дающим существенный вклад). Затем расчет повторяется для новой случайной конфигурации и полученные результаты усредняются.

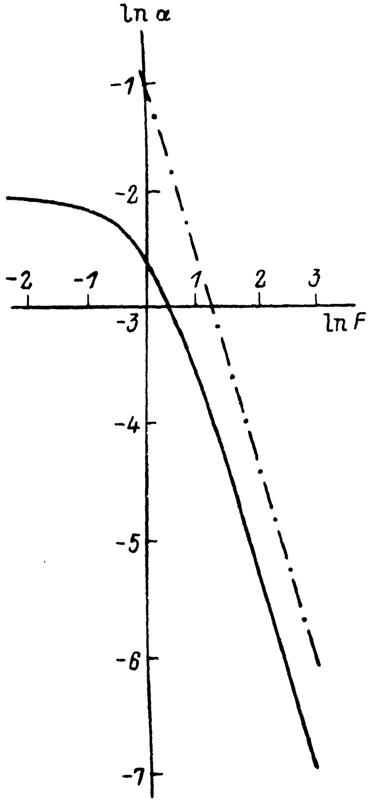

Рис. 1. Зависимость нелинейного коэффициента поглощения в стационарном случае.

Штрихпунктирной прямой проведена зависимость $\alpha \sim F^{-2}$.

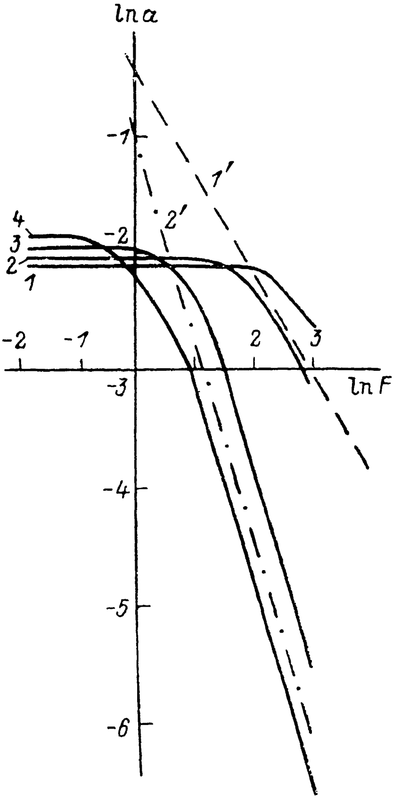

Рис. 2. Нестационарный случай.

Кривая *1* соответствует длительности импульса $t=\Gamma_0^{-1}/10$, *2* — $t=\Gamma_0^{-1}/5$, *3* — $t=\Gamma_0^{-1}$, *4* — $t=4\Gamma_0^{-1}$. Штриховая линия отвечает зависимости $\alpha \sim F^{-1}$, штрихпунктирная — зависимости $\alpha \sim F^{-2}$.

В нестационарном режиме усреднение (3) и расчет коэффициента поглощения производились для текущего значения времени $t=(1, 2, \ldots)\,\Delta t$.

Для формы выжженной дыры имеем [4]

$$\Delta Q = \left\langle \int de\,\Delta n_{\omega - e/\hbar}(t)\,\delta(\omega_1 - e/\hbar - \Delta\omega(t)) \right\rangle_t = \langle \Delta n_{\omega-\omega_1+\Delta\omega(t)}(t) \rangle \equiv \Delta Q(\omega - \omega_1), \tag{7}$$

где ω_1 — частота пробного импульса малой интенсивности, а $\Delta n_z(t) = n - n_0$ в момент времени t для резонансной ДУС с отстройкой, равной z. Из (7) следует алгоритм расчета. Действительно, найдем $\Delta n(t)$ для всех возможных значений отстройки z. Тогда, согласно (7), для каждого момента времени следует выбрать такое Δn, для которого имеет место равенство $\omega - \omega_1 + \Delta\omega(t) = z$. Интеграл по всем t для выбранных таким образом Δn и определяет форму выжженной дыры.

Расчеты проводились для следующего набора данных: число тепловых ДУС $N=50$, $\Gamma_0=1$, $\gamma=0.1$, $J_0=10$, шаг при интегрировании по отстройке

$dz=0.3$, число конфигураций, по которым проводилось усреднение 10, точность расчета $\simeq 5\%$.

Результаты расчета приведены на рис. 1—3. Из рис. 1 видно, что, начиная с критического значения поля $F_c \simeq \sqrt{\gamma/\tau_l}$ [4], коэффициент поглощения α убывает с ростом интенсивности $\sim F^{-2}$, т. е. обратно пропорционально интенсивности. В ряде опытов наблюдалась зависимость F^{-1} [2]. Дело, видимо, заключается в том, что в выполненных экспериментах дли-

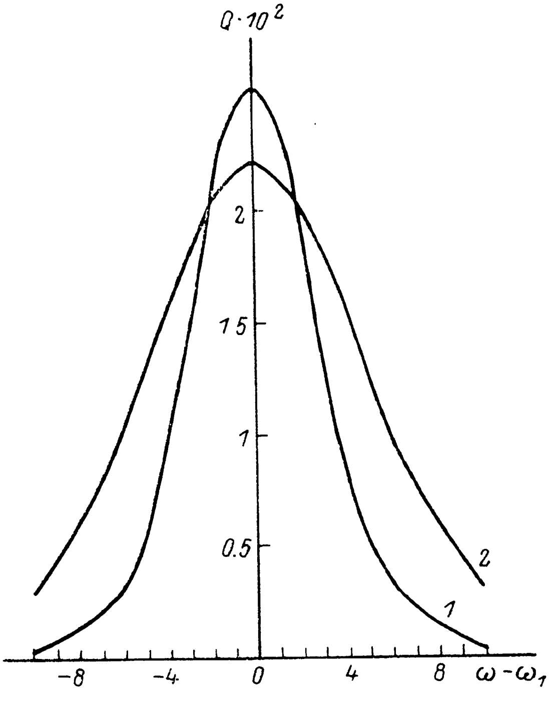

Рис. 3. Форма выжженной дыры в стационарном случае.
1 — при $F=0.2 < F_c$, 2 — при $F=3 > F_c$.

тельность импульса была достаточно малой, так что не устанавливалось настоящего стационарного режима. Об этом свидетельствуют данные нестационарного поглощения. Из рис. 2 следует, что на малых временах (длительностях импульса) $t < 1/\gamma$, $1/\Gamma_0$, для коэффициента поглощения имеет место зависимость $\alpha \sim F^{-1}$, тогда как начиная с времен $t > 1/\Gamma_0$ зависимость коэффициента поглощения стремится к виду $\alpha \sim F^{-2}$.

Форма выжженной дыры (рис. 3) не является лоренцевой, что следовало бы из решения обычных уравнений Блоха. Видно, что с ростом интенсивности ширина дыры возрастает и при $F > F_c$ ее значение равно $\Delta \simeq 1/\tau_d$, что хорошо согласуется с оценками [4].

Авторы выражают благодарность Ю. М. Гальперину, В. Л. Гуревичу, В. И. Козубу иа полезное обсуждение результатов работы.

Литература

[1] Amorphous solids: Low—temperature properties. Ed. by W. A. Phillips. Berlin—Heidelberg—New York: Springer—Verlag, 1981. p. 165.
[2] *Hunklinger S., Arnold W.* Ultrasonic Properties of Glasses at Low Temperatures — Physical Acoustics, 1976, vol. 12, p. 155—215.
[3] *Black J. L., Halperin B. I.* Phys. Rev. B, 1977, vol. 16, N 7, p. 2879—2893.
[4] *Гуревич В. Л., Гальперин Ю. М., Паршин Д. А.* ЖЭТФ, 1984, т. 87, № 6, с. 2178—2192; Письма ЖЭТФ, 1987, т. 45, № 2, с. 85—88.
[5] *Поттер Д.* Вычислительные методы в физике. М.: Мир, 1975. 392 с.

Криворожский государственный
педагогический институт
Кривой Рог

Поступило в Редакцию
28 января 1988 г.