Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

О. А. Индюков, М. А. Попов, О высокотемпературной функции релаксации спиновой системы при квадратичном вкладе флуктуаций в резонансную частоту, *ТМФ*, 1999, том 121, номер 2, 316–328

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf812>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 3.85.5.30

26 апреля 2023 г., 15:35:25

О ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ФУНКЦИИ РЕЛАКСАЦИИ СПИНОВОЙ СИСТЕМЫ ПРИ КВАДРАТИЧНОМ ВКЛАДЕ ФЛУКТУАЦИЙ В РЕЗОНАНСНУЮ ЧАСТОТУ

Исследуется форма высокотемпературной функции релаксации спиновой системы при квадратичной связи резонансной частоты с гауссовским случайным процессом. В общем случае она приведена к интегральному выражению от бесконечного вспомогательного ряда. Для N -экспоненциального гаусс-марковского процесса задача сведена к решению системы из $2N$ линейных уравнений. Анализ действия флуктуаций для компактности выполнен на форме линии магнитного резонанса – фурье-образе функции релаксации. Как для одноэкспоненциального процесса, так и для многоэкспоненциального в кристалле с релаксационным типом динамики в области непрерывного фазового перехода выявлена немонотонная зависимость асимметричной однородно уширенной резонансной линии от скорости флуктуаций.

ВВЕДЕНИЕ

Высокая чувствительность частоты магнитного резонанса Ω к величине магнитного поля на резонирующем спине широко используется [1] для исследования в конденсированных средах как локальной структуры, так и подвижности атомов и их спинов, вызывающей флуктуации Ω . Связанная преобразованием Фурье с формой резонансной линии и наблюдаемая при импульсном воздействии на спиновую систему образца, функция релаксации (спад свободной прецессии) в приближении Андерсона [2, 3] задается соотношением

$$G(t) = \left\langle \exp \left\{ -i \int_0^t \Omega(t_1) dt_1 \right\} \right\rangle, \quad (1)$$

где угловые скобки обозначают усреднение по испытываемым резонансной частотой флуктуациям. При выводе (1) для спиновой системы использовалось высокотемпературное приближение (приближение Ван-Флека) и полагалось пренебрежимо малым взаимодействие, приводящее к переходам между задаваемыми сильным постоянным магнитным полем энергетическими уровнями (адиабатическое приближение).

*Красноярский государственный университет, Красноярск, Россия.
E-mail: root@iph.krasnoyarsk.su

Для объяснения многих эффектов в спиновой динамике: сужения резонансной линии обменным взаимодействием [2] и тепловыми флуктуациями [3], спинового эха [4], крыльев спектров [5] и т.п. — успешным оказался учет в резонансной частоте линейного вклада флуктуаций (назовем их решеточными) $\Omega(t) = \Omega_0 + \Omega_1 \eta(t)$, описываемых в случае высокой плотности и наличия дальнего действия в решеточной системе образца стационарным гауссовским случайным процессом с $\langle \eta \rangle = 0$. Однако во многих случаях действие флуктуаций не может быть сведено к линейному вкладу, например, в спиновых системах с обменным взаимодействием выше билинейного [6] или в системах, облучаемых сильным радиочастотным полем [7]. Кроме того, отсутствие нечетных слагаемых в разложении Ω по η характерно для спинов, находящихся в частных позициях ячейки кристалла. Поэтому в данной работе действие таких флуктуаций на высокотемпературную функцию релаксации спиновой системы исследуется при их квадратичном вкладе в резонансную частоту, когда $\Omega(t) = \Omega_0 + \Omega_1 \eta(t) + \Omega_2 \eta(t)^2 / 2$.

1. ОБЩИЙ ПОДХОД

Представим функцию релаксации в виде ряда

$$G(t) = \exp\{-i\Omega_0 t\} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \left\langle \left\{ \int_0^t \left[\Omega_1 \eta(t_1) + \frac{\Omega_2 \eta(t_1)^2}{2} \right] dt_1 \right\}^n \right\rangle. \quad (2)$$

Для расчета n -го слагаемого в (2) обратимся к n -мерной характеристической функции

$$\Phi_n\{\lambda\} \equiv \Phi(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n) = \prod_{k=1}^n \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\lambda_k \eta(t_k)) d\eta(t_k) \right\} P_n\{\eta\},$$

где $P_n\{\eta\} \equiv P(\eta(t_1), \eta(t_2), \dots, \eta(t_n))$ — n -мерная плотность вероятности случайного процесса. Знание $\Phi_n\{\lambda\}$ позволяет найти среднее произведения k решеточных переменных при $k \leq n$:

$$\langle \eta_1^{m_1} \eta_2^{m_2} \dots \eta_k^{m_k} \rangle = i^{-n_k} \frac{\partial^{n_k} \Phi_n}{\partial \lambda_1^{m_1} \partial \lambda_2^{m_2} \dots \partial \lambda_k^{m_k}} \Big|_{\lambda_1 = \lambda_2 = \dots = \lambda_n = 0}, \quad (3)$$

где

$$n_k = \sum_{j=1}^k m_j.$$

Для гауссовского случайного процесса с $\langle \eta(t) \rangle = 0$ характеристическая функция

$$\Phi_n\{\lambda\} = \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{k,m=1}^n \lambda_k C_{km} \lambda_m \right\}, \quad (4)$$

где $C_{km} = \langle \eta(t_k) \eta(t_m) \rangle$ – элементы корреляционной матрицы $\hat{C}$ [8]. Соответственно корреляционные функции произведений нечетного числа решеточных переменных равны нулю, а четного числа представимы, как следует из (3) и (4), в виде сумм произведений парных корреляционных функций, полученных всевозможными спариваниями [9]:

$$\left\langle \prod_{k=1}^{2n} \eta(t_k) \right\rangle = \sum_{k=2}^{2n} \langle \eta(t_1) \eta(t_k) \rangle \langle \eta(t_2) \dots \eta(t_{k-1}) \eta(t_{k+1}) \dots \eta(t_{2n}) \rangle.$$

Поскольку корреляционная функция n -го слагаемого в (2) содержит сумму произведений случайных величин вида

$$\sum_{m=0}^n \binom{n}{m} \Omega_1^m \Omega_2^{n-m} \prod_{k=1}^m \eta(t_k) \prod_{l=m+1}^n \eta(t_l)^2,$$

то при графическом отображении процедуры спаривания случайную величину из первого произведения можно представить одновалентной вершиной, из второго произведения – двухвалентной [10], а парные корреляционные функции – соединяющими эти вершины ребрами. Связанная часть всех получаемых графов равна [11]

$$\frac{1}{2}[n!C_n + (n-1)!O_n], \quad (5)$$

где

$$C_n = \Omega_1^2 \Omega_2^{n-2} \prod_{k=1}^n \left\{ \int_0^t dt_k \right\} \langle \eta(t_1) \eta(t_2) \rangle \langle \eta(t_2) \eta(t_3) \rangle \dots \langle \eta(t_{n-1}) \eta(t_n) \rangle$$

– цепочка n -го порядка,

$$O_n = \Omega_2^n \prod_{k=1}^n \left\{ \int_0^t dt_k \right\} \langle \eta(t_1) \eta(t_2) \rangle \langle \eta(t_2) \eta(t_3) \rangle \dots \langle \eta(t_n) \eta(t_1) \rangle$$

– петля n -го порядка. Название каждой отдельной диаграммы обусловлено совпадением или несовпадением начального и конечного моментов времени в последовательности перемножаемых корреляционных функций. Если петли порождены исключительно квадратичным вкладом флуктуаций, то цепочки начиная с $n = 3$ порождены совместно и квадратичным, и линейным вкладами флуктуаций. Цепочка с $n = 2$ обусловлена исключительно линейным вкладом флуктуаций.

С помощью (5) сумму всех связанных и несвязанных диаграмм в (2) можно представить согласно теореме Майера [12] в виде

$$G(t) = \exp\{-i\Omega_0 t + F_C(t) + F_O(t)\},$$

где

$$F_C(t) = \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(-i)^n}{2} C_n, \quad F_O(t) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-i)^n}{2n} O_n.$$

Из этого соотношения при $\Omega_2 = 0$ следует известное выражение [1–3]

$$G(t) = \exp \left\{ -i\Omega_0 t - \Omega_1^2 \int_0^t (t - t_1) \langle \eta(t_1) \eta(0) \rangle dt_1 \right\}. \quad (6)$$

Рассмотрим вспомогательный ряд

$$R(t_a, t_b|t) = \langle \eta(t_a) \eta(t_b) \rangle + \sum_{n=1}^{\infty} (-i\Omega_2)^n \prod_{k=1}^n \left\{ \int_0^t dt_k \right\} \langle \eta(t_a) \eta(t_1) \rangle \langle \eta(t_1) \eta(t_2) \rangle \dots \langle \eta(t_n) \eta(t_b) \rangle,$$

позволяющий рассчитать вклады цепочек и петель через соотношения

$$F_C(t) = -\frac{\Omega_1^2}{2} \int_0^t \int_0^t R(t_1, t_2|t) dt_2 dt_1, \quad F_O(t) = -\frac{i\Omega_2}{2} \int_0^t R(t_1, t_1|t_1) dt_1. \quad (7)$$

Из определения этого ряда следует, что он подчиняется уравнению

$$R(t_a, t_b|t) + i\Omega_2 \int_0^t \langle \eta(t_a) \eta(t_1) \rangle R(t_1, t_b|t) dt_1 = \langle \eta(t_a) \eta(t_b) \rangle \quad (8a)$$

или

$$R(t_a, t_b|t) + i\Omega_2 \int_0^t R(t_a, t_1|t) \langle \eta(t_1) \eta(t_b) \rangle dt_1 = \langle \eta(t_a) \eta(t_b) \rangle. \quad (8b)$$

Равенство

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(\omega) \exp\{i\omega(t_a - t_b)\} d\omega = f\left(-i\frac{\partial}{\partial t_a}\right) \delta(t_a - t_b)$$

($\delta(t)$ – функция Дирака) позволяет для стационарного случайного процесса преобразовать интегральное уравнение (8a) в дифференциальное

$$\begin{aligned} R(t_a, t_b|t) + i\Omega_2 K\left(-i\frac{\partial}{\partial t_a}\right) \int_0^t \delta(t_a - t_1) R(t_1, t_b|t) dt_1 = \\ = \left[1 + i\Omega_2 K\left(-i\frac{\partial}{\partial t_a}\right) \right] R(t_a, t_b|t) = \langle \eta(t_a) \eta(t_b) \rangle \end{aligned} \quad (9a)$$

и уравнение (8b) в дифференциальное уравнение

$$\left[1 + i\Omega_2 K\left(i\frac{\partial}{\partial t_b}\right) \right] R(t_a, t_b|t) = \langle \eta(t_a) \eta(t_b) \rangle, \quad (9b)$$

где $K(\omega)$ – фурье-образ решеточной корреляционной функции $\langle \eta(t) \eta(0) \rangle$ и учтено, что $\{t_a, t_b\} \in (0, t)$.

Если недифференцируемую переменную рассматривать как параметр, а по дифференцируемой совершить прямое и затем обратное преобразования Фурье, то решение уравнений (9) можно получить в виде

$$\begin{aligned} R(t_a, t_b|t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{K(\omega)}{1 + i\Omega_2 K(\omega)} \exp\{i\omega(t_a - t_b)\} d\omega + \\ &\quad + \sum_{m,n} a_{mn} \exp\{i(\omega_m t_a - \omega_n t_b)\} = \\ &= \sum_m k_m \exp\{i\omega_m(t_a - t_b)\} + \sum_{m,n} a_{mn} \exp\{i(\omega_m t_a - \omega_n t_b)\}, \end{aligned} \quad (10)$$

где ω_m и ω_n – корни характеристического уравнения

$$1 + i\Omega_2 K(\omega) = 0, \quad k_m = i \operatorname{Res} \left\{ \frac{K(\omega_m)}{1 + i\Omega_2 K(\omega_m)} \right\} \theta\{\operatorname{Im}[\omega_m(t_a - t_b)]\},$$

функция Хевисайда $\theta(x)$ используется для исключения неохваченных контуром интегрирования в (10) полюсов подынтегральной функции, коэффициенты a_{mn} определяются подстановкой (10) в уравнения (8), форма решения однородной части уравнений (9) приведена для случая некратных корней.

2. ФУНКЦИЯ РЕЛАКСАЦИИ И ГАУСС-МАРКОВСКИЙ ПРОЦЕСС

В случае гаусс-гауссовского процесса, $\langle \eta(t)\eta(0) \rangle = \exp(-\beta t^2)$, у характеристического уравнения имеется бесконечное число корней, а ряд (10) не удастся просуммировать. Решение упрощается, если $K(\omega)$ является рациональной дробью. Например, для многоэкспоненциального гаусс-марковского процесса

$$\langle \eta(t)\eta(0) \rangle = \sum_{n=1}^N p_n \exp(-\alpha_n |t|).$$

Четность

$$K(\omega) = 2 \sum_{n=1}^N \frac{p_n \alpha_n}{\alpha_n^2 + \omega^2}$$

по ω позволяет для случая некратных корней характеристического уравнения искать решение уравнений (8) в виде

$$R(t_a, t_b|t) = \sum_{m=1}^N [k_m \exp(-\lambda_m |t_a - t_b|) + a_m^+ \exp(\lambda_m t_a) + a_m^- \exp(-\lambda_m t_a)], \quad (11)$$

где суммирование проводится по решениям характеристического уравнения $1 + i\Omega_2 K(i\lambda) = 0$ только с $\operatorname{Re}\{\lambda\} > 0$, а коэффициенты частного решения дифференциального уравнения

$$k_m = i \frac{\alpha_m^2 - \lambda_m^2}{2\Omega_2 \lambda_m} \prod_{\substack{n=1 \\ n \neq m}}^N \frac{\alpha_n^2 - \lambda_m^2}{\lambda_n^2 - \lambda_m^2}.$$

Подстановка (11) в уравнения (8) и выравнивание коэффициентов перед экспонентами с равными показателями приводят к системе из $2N$ линейных уравнений для $\{a_m^\pm\}$

$$\sum_{m=1}^N \left[\frac{k_m \exp(\lambda_m(t_b - t))}{\alpha_n + \lambda_m} + \frac{a_m^+ \exp(\lambda_m t)}{\alpha_n - \lambda_m} + \frac{a_m^- \exp(-\lambda_m t)}{\alpha_n + \lambda_m} \right] = 0,$$

$$\sum_{m=1}^N \left[\frac{k_m \exp(-\lambda_m t_b)}{\alpha_n + \lambda_m} + \frac{a_m^+}{\alpha_n + \lambda_m} + \frac{a_m^-}{\alpha_n - \lambda_m} \right] = 0.$$

Заменой

$$a_m^\pm = \exp\left(\mp \frac{\lambda_m t}{2}\right) \frac{b_m^+ \pm b_m^-}{2}$$

эта система разделяется на две независимые системы из N уравнений каждая,

$$\sum_{m=1}^N A_{nm}^\pm b_m^\pm = d_n^\pm,$$

где

$$A_{nm}^\pm = \frac{\exp(\frac{\lambda_m t}{2})}{\alpha_n - \lambda_m} \pm \frac{\exp(-\frac{\lambda_m t}{2})}{\alpha_n + \lambda_m},$$

$$d_n^\pm = - \sum_{m=1}^N \frac{k_m}{\alpha_n + \lambda_m} \{ \exp[\lambda_m(t_b - t)] \pm \exp[-\lambda_m t_b] \}.$$

Расчет матриц $\hat{B}^\pm$, обратных к $\hat{A}^\pm$, позволяет представить вспомогательный ряд в виде

$$R(t_a, t_b|t) = \sum_{m=1}^N k_m \exp(-\lambda_m |t_a - t_b|) =$$

$$= \sum_{m=1}^N \left\{ b_m^+ \operatorname{ch} \left[\lambda_m \left(t_a - \frac{t}{2} \right) \right] + b_m^- \operatorname{sh} \left[\lambda_m \left(t_a - \frac{t}{2} \right) \right] \right\} =$$

$$= \sum_{m,n=1}^N \left\{ D_{mn}^+(t) \operatorname{ch} \left[\lambda_m \left(t_a - \frac{t}{2} \right) \right] \operatorname{ch} \left[\lambda_n \left(t_b - \frac{t}{2} \right) \right] + \right.$$

$$\left. + D_{mn}^-(t) \operatorname{sh} \left[\lambda_m \left(t_a - \frac{t}{2} \right) \right] \operatorname{sh} \left[\lambda_n \left(t_b - \frac{t}{2} \right) \right] \right\},$$

где

$$D_{mn}^\pm(t) = -2k_n \exp\left(-\frac{\lambda_n t}{2}\right) \sum_{l=1}^N \frac{B_{ml}^\pm(t)}{\alpha_l + \lambda_n}.$$

В соответствии с (7) вклады цепочек и петель представляются выражениями

$$F_C(t) = -\Omega_1^2 \left[\sum_{m=1}^N k_m \frac{\lambda_m t + \exp(-\lambda_m t) - 1}{\lambda_m^2} + 2 \sum_{m,n=1}^N D_{mn}^+(t) \frac{\text{sh}(\frac{\lambda_m t}{2}) \text{sh}(\frac{\lambda_n t}{2})}{\lambda_m \lambda_n} \right],$$

$$F_O(t) = -\frac{i\Omega_2}{2} \left\{ t \sum_{m=1}^N k_m + \sum_{m,n=1}^N \int_0^t \left[D_{mn}^+(t_1) \text{ch}\left(\frac{\lambda_m t_1}{2}\right) \text{ch}\left(\frac{\lambda_n t_1}{2}\right) + \right. \right.$$

$$\left. \left. + D_{mn}^-(t_1) \text{sh}\left(\frac{\lambda_m t_1}{2}\right) \text{sh}\left(\frac{\lambda_n t_1}{2}\right) \right] dt_1 \right\}.$$

Приведем решение для одноэкспоненциального процесса $\langle \eta(t)\eta(0) \rangle = p \exp(-\alpha|t|)$:

$$R(t_a, t_b|t) = \frac{p\alpha}{\lambda} \left(\exp[-\lambda|t_a - t_b|] + \frac{2}{D(t)} \left\{ \text{ch}[\lambda(t_a - t_b)] - \right. \right.$$

$$\left. \left. - \frac{\alpha + \lambda}{\alpha - \lambda} \text{ch}[\lambda(t_a + t_b - t)] \exp(\lambda t) \right\} \right),$$

где $\lambda = [\alpha(\alpha + i2\Omega_2 p)]^{1/2}$, $D(t) = [(\alpha + \lambda)/(\alpha - \lambda)]^2 \exp(2\lambda t) - 1$. Соответственно для вкладов цепочек и петель (7) имеем

$$F_C(t) = \frac{\Omega_1^2 p \alpha}{\lambda^2} \left[-t + \frac{2\alpha}{\lambda} \frac{\alpha \text{ch}(\lambda t) + \lambda \text{sh}(\lambda t) - \alpha}{2\alpha \lambda \text{ch}(\lambda t) + (\alpha^2 + \lambda^2) \text{sh}(\lambda t)} \right], \quad (12)$$

$$F_O(t) = \frac{\alpha t}{2} - \frac{1}{2} \ln \left[\text{ch}(\lambda t) + \frac{\alpha^2 + \lambda^2}{2\alpha \lambda} \text{sh}(\lambda t) \right]. \quad (13)$$

Эти выражения совпадают с выражениями, полученными при $p = 1$ методом кинетического уравнения для плотности вероятности [13], что можно считать проверкой развитого в настоящей работе подхода.

3. ФОРМА ЛИНИИ МАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА И СКОРОСТЬ ФЛУКТУАЦИЙ

Компактный анализ воздействия флуктуаций можно провести на форме резонансной линии

$$g(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} G(t) \exp(i\omega t) dt$$

с помощью соотношений (12) и (13) при $p = 1$. В случае статических флуктуаций ($\alpha = +0$) резонансная линия представляет собой асимметричное распределение резонансных частот

$$g(\omega) = \left\{ \frac{8\pi}{\Omega_1^2 + 2\Omega_2(\omega - \Omega_0)} \right\}^{1/2} \exp \left\{ -\frac{\Omega_1^2 + \Omega_2(\omega - \Omega_0)}{\Omega_2^2} \right\} \times$$

$$\times \text{ch} \left\{ \frac{\Omega_1 [\Omega_1^2 + 2\Omega_2(\omega - \Omega_0)]^{1/2}}{\Omega_2^2} \right\}, \quad \Omega_1^2 + 2\Omega_2(\omega - \Omega_0) > 0,$$

$$g(\omega) = 0, \quad \Omega_1^2 + 2\Omega_2(\omega - \Omega_0) < 0,$$

Рис. 1

демонстрируемое сплошной линией на рис. 1. При расчете были зафиксированы значения $\Omega_0 = 0$ и $\Omega_2 = 1$, а варьировалась величина Ω_1 : $10^{-1/2}$ для рис. 1а, $10^{1/2}$ для рис. 1б. В области высших частот $g(\omega)$ спадает по экспоненциальному закону (без по-

тери общности полагаем $\Omega_1 > 0$ и $\Omega_2 > 0$, знак Ω_1 не влияет на $g(\omega)$, для $\Omega_2 < 0$ резонансную линию можно получить симметричным отражением линии, анализируемой для случая $\Omega_2 > 0$ относительно частоты Ω_0), переходящему в гауссовский спад при $\Omega_2 = +0$. В области низших частот резонансная линия оканчивается сингулярностью корневого типа в точке $\omega = \Omega_0 - \Omega_1^2/2\Omega_2$. При $\Omega_2 \ll \Omega_1$ корневая сингулярность уходит далеко в область отрицательных частот и ее интегральный вес спадает по экспоненциальному закону, а в центре спектра форма линии

$$g(\omega) \approx \left\{ \frac{2\pi}{\Omega_1^2 + 2\Omega_2(\omega - \Omega_0)} \right\}^{1/2} \exp \left\{ -\frac{(\omega - \Omega_0)^2}{2[\Omega_1^2 + \Omega_2(\omega - \Omega_0)]} \right\}$$

близка к гауссовской, но с асимметрией и сдвигом максимума к точке $\omega \approx \Omega_0 - \Omega_2$. Для наблюдения такой трансформации спектра необходимо варьировать как величину, так и направление постоянного магнитного поля относительно кристаллографических осей исследуемого образца.

Динамические флуктуации существенно изменяют форму резонансной линии, как это видно на рис. 1 для различных $\alpha > 0$: 10^{-1} – штриховая линия, 1 – пунктирная линия, 10 – штрих-пунктирная линия. В первую очередь флуктуации подавляют корневую сингулярность, тем самым уширяя спектр. И лишь затем с ростом скорости α проявляется их сужающее действие [1, 3], приводящее к перемещению пика к средней частоте

$$\langle \omega \rangle = (2\pi)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} \omega g(\omega) d\omega = \Omega_0 + \frac{\Omega_2}{2}.$$

Быстрым по сравнению с Ω_2 флуктуациям ($\Omega_2/\alpha = +0$) отвечает симметричная резонансная линия, описываемая известным выражением (6).

Такое поведение ширины линии можно понять из оценки $\text{Re}\{-[F_C(t) + F_O(t)]/t\}$ при $t \gg \alpha^{-1}$. Вклады цепочек, $\Omega_1^2\alpha/(\alpha^2 + 4\Omega_2^2)$, и петель,

$$\frac{\alpha}{2} \left[\sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4\Omega_2^2}{\alpha^2}} \right)} - 1 \right],$$

являются немонотонными функциями скорости флуктуаций, сначала растущими с ростом α , а затем спадающими. Из оценки же $\text{Im}\{-[F_C(t) + F_O(t)]/t\}$ при $t \gg \alpha^{-1}$ следует, что вклады цепочек, $-\Omega_1^2\Omega_2/(\alpha^2 + 4\Omega_2^2)$, и петель,

$$\frac{\Omega_2}{2\sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4\Omega_2^2}{\alpha^2}} \right)}},$$

в сдвиг максимума линии являются монотонными функциями α .

В целом спектр магнитного резонанса немонотонно зависит от квадратичного вклада флуктуаций решеточной системы в резонансную частоту. Замедление флуктуаций приводит к смещению и асимметрии резонансной линии и в однородном постоянном магнитном поле. Численное решение уравнения (8) для гаусс-гауссовского процесса выявило те же закономерности.

4. РЕЗОНАНСНАЯ ЛИНИЯ И НЕПРЕРЫВНЫЙ ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД В КРИСТАЛЛЕ С РЕЛАКСАЦИОННЫМ ТИПОМ ДИНАМИКИ

Замедление флуктуаций характерно для окрестности непрерывного фазового перехода [14]. За исключением узкой окрестности температуры перехода $|T - T_c|/T_c < 10^{-4} - 10^{-3}$ [15], поведение решеточной системы успешно описывается термодинамической теорией Ландау, позволяющей рассматривать движение атомов как стационарный гауссовский случайный процесс. Для его описания воспользуемся простейшей формой неполного термодинамического потенциала [14]

$$\Phi[\eta_r] = \Phi_0 + \int \left\{ \frac{A\eta_r^2}{2} + \frac{B\eta_r^4}{4} + \frac{D(\nabla\eta_r)^2}{2} \right\} dr,$$

где $A = a(T - T_c)$, $a > 0$, $B > 0$, $D > 0$, ∇ – набла-оператор.

Атомы хаотически движутся относительно положений равновесия

$$\langle \eta_r \rangle = \text{Re} \left\{ \left(-\frac{A}{B} \right)^{1/2} \right\} \equiv \eta_0,$$

определяемых из условия

$$\frac{\delta \Phi}{\delta \eta_r} = 0.$$

С помощью уравнения движения

$$\frac{d}{dt} \frac{\delta \Phi}{\delta \dot{\eta}_r} = -\frac{\delta \Phi}{\delta \eta_r} - \frac{\delta \Psi}{\delta \dot{\eta}_r}$$

($\dot{\eta} = d\eta/dt$, $\Psi[\dot{\eta}_r] = \int \{\Gamma \dot{\eta}_r^2/2\} dr$ – диссипативная функция) и диссипативно-флуктуационной теоремы [14] можно найти корреляционную функцию для флуктуаций $\eta'_r(t) = \eta_r(t) - \eta_0$ решетки с релаксационным типом динамики ($\delta \Phi/\delta \dot{\eta}_r \approx 0$):

$$\langle \eta'_r(t) \eta'_r(0) \rangle = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \langle \eta_r'^2 \rangle_\omega \cos(\omega t) d\omega, \quad \langle \eta_r'^2 \rangle_\omega = \frac{v}{8\pi^3} \int \frac{T\Gamma dk}{A_k^2 + \Gamma^2 \omega^2}, \quad (14)$$

где $A_k = A + 3B\eta_0^2 + Dk^2$, v – объем элементарной ячейки в неупорядоченной фазе, интегрирование по волновым векторам k производится внутри первой зоны Бриллюэна, константа Больцмана полагается равной единице.

Форма корреляционной функции после интегрирования по частоте

$$\langle \eta'_r(t) \eta'_r(0) \rangle = \frac{vT}{16\pi^3} \int \frac{\exp(-\frac{A_k|t|}{\Gamma})}{A_k} dk$$

указывает на то, что движение атомов в данном случае описывается многоэкспоненциальным гаусс-марковским процессом с дисперсией скоростей флуктуаций $\alpha_k = A_k/\Gamma$. Решение уравнений (8) приведенным в разделе 2 аналитическим методом из-за того, что

Рис. 2

$N \rightarrow \infty$, становится невозможным. Поэтому обратимся к результатам численного моделирования.

На рис. 2 приведены резонансные линии, рассчитанные для неупорядоченной фазы $\eta_0 = 0$. Были зафиксированы следующие величины: $\Omega(\eta) = \eta + \eta^2/2$, $T_c = v = a =$

$\Gamma = 1$, $Q = (6\pi^2/v)^{1/3}$ – дебаевский волновой вектор. Варьировалась величина D : 10^{-1} для рис. 2а, 1 – для рис. 2б. Температурному отклонению от точки фазового перехода $T - T_c$ придавались следующие значения: 0 – сплошная линия, $10^{-3/2}$ – штриховая, 10^{-1} – пунктирная, $10^{-1/2}$ – штрих-пунктирная, 1 – штриховая с двойным пунктиром. Отличие формы резонансных линий в упорядоченной фазе ($\eta_0 \neq 0$) сводится к сдвигу по частоте вследствие того, что $\Omega_0 = \Omega(\eta_0)$, и относительному росту линейного вклада флуктуаций в результате того, что $\Omega_1 = \partial\Omega(\eta_0)/\partial\eta_0$.

В целом температурное развитие асимметрии линии, ее смещение и изменение ширины в пределах каждой из фаз отвечают представлениям, полученным в предыдущем разделе. Статическими в точке T_c остаются только флуктуации с $k = 0$, а остальные уменьшают температурную область сужения линии в окрестности точки фазового перехода вплоть до ее исчезновения с ростом D , тем самым восстанавливая типичную для случая линейного вклада флуктуаций в резонансную частоту монотонность роста ширины линии при приближении к значению T_c .

Такое поведение резонансной линии можно понять и с помощью оценки вкладов цепочек и петель на больших временах:

$$C_n \approx t\Omega_1^2\Omega_2^{n-2}\langle\eta_r'^2\rangle_0^{n-1}, \quad O_n \approx \frac{t\Omega_2^n}{\pi} \int_0^\infty \langle\eta_r'^2\rangle_\omega^n d\omega.$$

При оценке C_n учтено, что в спектре колебаний “мягкой” решеточной системы при $T \neq T_c$ присутствует щель. В результате получаем

$$F_C(t) \approx -\Delta_C t, \quad \Delta_C = \frac{\Omega_1^2}{2(\langle\eta_r'^2\rangle_0^{-1} + i\Omega_2)},$$

$$F_O(t) \approx -\Delta_O t, \quad \Delta_O = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty \ln(1 + i\Omega_2\langle\eta_r'^2\rangle_\omega) d\omega.$$

В отличие от случая линейного вклада флуктуаций, вклад цепочек в ширину линии $\text{Re}\{\Delta_C\}$ исчезает при приближении к T_c из-за неограниченного роста $\langle\eta_r'^2\rangle_0$. В то же время вклад петель остается отличным от нуля: $\Delta_O = (\lambda - \alpha_0)/2$, $\lambda = (\alpha_0^2 + i\Omega_2 T/\Gamma)^{1/2}$ при $D = 0$. С ростом D корреляционные функции $\langle\eta_r'^2\rangle_\omega$ спадают согласно (14), что приводит к ослаблению выявленных в предыдущем разделе эффектов и уменьшению температурной области их возможного наблюдения.

Особенности развития резонансной линии при приближении к точке фазового перехода благодаря квадратичному вкладу решеточных флуктуаций в резонансную частоту спиновой системы позволяют по-иному взглянуть на экспериментальные результаты работ, в которых появление асимметрии линии интерпретировалось как проявление предшественников перехода – долгоживущих кластеров последующей фазы [16].

Благодарности. Авторы признательны В. Е. Зобову за полезные обсуждения.

Список литературы

- [1] *А. Абрагам*. Ядерный магнетизм. М.: ИЛ, 1963.
- [2] *P. W. Anderson, P. R. Weiss*. Rev. Mod. Phys. 1953. V. 25. P. 269.
- [3] *P. W. Anderson*. J. Phys. Soc. Japan. 1954. V. 9. P. 316.
- [4] *W. B. Mims*. Phys. Rev. 1968. V. 168. P. 370.
- [5] *В. Е. Зобов, А. А. Лундин*. Письма в ЖЭТФ. 1986. Т. 43. С. 418.
- [6] *Э. Л. Нагаев*. Магнетики со сложными обменными взаимодействиями. М.: Наука, 1988.
- [7] *У. Хеберлен, М. Меринг*. ЯМР высокого разрешения в твердых телах. М.: Мир, 1980; *U. Haeberlen*. High Resolution NMR in Solids: Selective Averaging. New York–San Francisco–London: Academic Press, 1976; *M. Mehring*. High Resolution in NMR Spectroscopy in Solids. Berlin–Heidelberg–New York: Springer-Verlag, 1976.
- [8] *И. Н. Коваленко, Н. Ю. Кузнецов, В. М. Шуренков*. Случайные процессы. Киев: Наукова Думка, 1983.
- [9] *R. Kubo, M. Toda, N. Hashitsume*. Statistical physics. II. Berlin–Heidelberg: Springer-Verlag, 1985.
- [10] *В. А. Емеличев, О. И. Мельников, В. И. Сарванов, Р. И. Тышкевич*. Лекции по теории графов. М.: Наука, 1990.
- [11] *В. Е. Зобов, М. А. Попов*. ТМФ. 1995. Т. 102. С. 305.
- [12] *Дж. Уленбек, Дж. Форд*. Лекции по статистической механике. М.: Мир, 1965.
- [13] *J. Luczka*. J. Phys. A. 1988. V. 21. P. 3063.
- [14] *Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц*. Статистическая физика. Часть 1. М.: Наука, 1976.
- [15] *В. Л. Гинзбург*. ФТТ. 1960. Т. 2. С. 2031.
- [16] *R. L. Armstrong*. Progr. in NMR Spectroscopy. 1989. V. 21. P. 151.

Поступила в редакцию 18.I.1999 г.,
после доработки 13.IV.1999 г.