

СПИНОВАЯ ДИНАМИКА В ТВЕРДЫХ НИЗКОКОНЦЕНТРИРОВАННЫХ ПАРАМАГНЕТИКАХ

Ф. С. Джепаров, И. В. Каганов, Е. К. Хеннер

*Институт теоретической и экспериментальной физики
117259, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 25 октября 1996 г.

На основе развитого ранее авторами метода кластерного разложения корреляционных функций рассчитаны сигналы свободной индукции для двухспиновых кластеров, «массы» и для всей спиновой системы в целом при реальном диполь-дипольном взаимодействии. Внутрикластерные взаимодействия, порождающие дискретный спектр, учтены точно, а внекластерные — на основе теории фазовой релаксации Андерсона-Вейса-Кубо (АВК). Рассчитаны соответствующие функции формы линии резонанса. До выделения кластеров анализ типа АВК в пределе медленных флуктуаций локальных полей удовлетворительно согласуется с точными результатами, которые получаются в модели дипольных взаимодействий Андерсона, но этот же анализ ведет к существенному качественному отличию ($\exp(-Dt)$ переходит в $\exp(-\sqrt{D}t)$) при реалистичных скоростях флуктуаций и $Dt > 1$. После выделения кластеров это различие сглаживается. Спад свободной индукции почти экспоненциален до $Dt \sim 10$, а неэкспоненциальность долговременной асимптотики наступает позже. Этот результат не претерпевает существенных изменений при усложнении анализа с повышением максимального ранга кластеров до трех и выше.

1. ВВЕДЕНИЕ

Теория магнитной спектроскопии многоспиновых систем использует относительно небольшое число фундаментальных корреляционных функций и их спектральных плотностей, полностью описывающих динамику таких систем. На заре становления теории магнитного резонанса все обсуждение, в принципе, сводилось к изучению формы линии и спин-решеточной релаксации, исчерпывающим образом описываемых двумя-тремя такими функциями.

В настоящее время ситуация существенно изменилась [1–4]. В частности, прямому измерению теперь доступны некоторые свойства многоспиновых корреляционных функций, определяющих, например, многоспиновые когерентности [2] и скорости флип-флоп-переходов [4] в ядерных спиновых системах. С другой стороны, экспериментальные [5, 6] и теоретические [7, 8] исследования спектрального и пространственного переноса в магниторазбавленных ЭПР-системах стимулировали разработку нового метода кластерных разложений [3], который использует многоспиновые корреляционные функции физически выделенных групп спинов — кластеров — и в принципе позволяет построить адекватную теорию таких процессов.

Точный расчет корреляционных функций кластеров при реальном взаимодействии пока невозможен. Поэтому в настоящей работе, имея в виду проблемы спиновой динамики магниторазбавленных систем, мы обратились вначале к точно решаемой модели Андерсона [9], которая до настоящего времени служит основным источником надежной информации для магниторазбавленных систем (см., например, [10, 11] и цитированную

там литературу). Модель Андерсона не учитывает влияния временных флуктуаций локальных полей на процессы в системе. Поэтому мы далее ввели и рассмотрели простейшую модель, которая принимает это явление во внимание в духе теории Андерсона–Вейса–Кубо (АВК) [12, 13] и опирается на кластерный анализ [3]. На этом пути были получены явные интегральные представления для функции спада свободной индукции, причем обнаружилось расхождение между предсказаниями модели Андерсона и новой более реалистичной моделью. Заметим, однако, что результаты двух подходов согласуются в пределе медленных флуктуаций и для полного сигнала свободной индукции.

В основе нашего анализа лежат следующие соображения. Кластерное разложение (очень кратко, подробности см. в [3]) выглядит следующим образом. Кластер ранга l — группа из l спинов, в силу чисто геометрических причин взаимодействующих друг с другом сильнее, чем с любым спином, не входящим в группу. Для однозначности разбиения вводятся ортогональные кластеры — каждый спин содержится не более чем в одном таком кластере. Разложение по ортогональным кластерам осуществляется следующим образом: из физических соображений фиксируется k — старший ранг кластеров, рассматриваемых в задаче, выделяются все кластеры этого ранга, затем ранга $k - 1$ и т. д. Оставшаяся после выделения всех кластеров часть системы называется «массой». В качестве физического критерия выбора k в [3] предложена квазиоднородность массы, понимаемая как возможность описывать ее термодинамику в приближении сплошной среды. До выделения кластеров дипольная теплоемкость в этом приближении бесконечна, а после кластерного разбиения дипольная теплоемкость массы становится конечной и определяется взаимодействиями на средних расстояниях. Совершенно аналогично ведет себя и второй момент линии поглощения. Поэтому можно предположить, что время установления равновесия в массе порядка характерного времени флип-флоп-перехода и что оно соотносится со временем фазовой релаксации приблизительно так же, как в регулярных системах. Флуктуирующие локальные поля, создаваемые окружением на спинах массы и на кластерах, значительно ближе к нормальному случайному процессу, чем поля на спинах до выделения кластеров. Учет же внутрикластерных взаимодействий можно провести точно.

Далее мы уделяем значительное внимание поперечной корреляционной функции $G(t)$ — функции спада свободной индукции, классической в теории магнитного резонанса. Ее спектральная плотность дает функцию формы линии поглощения, а кластерное разложение этой плотности выражает функции формы линии поглощения относительно независимо эволюционирующих частей системы.

Мы ограничились высокотемпературным приближением, поскольку специфика неупорядоченных систем весьма полно проявляется уже в этом пределе. Ряд вычислений в модели Андерсона проведен для произвольного спина. Это представляет интерес для возможного сопоставления с результатами численного моделирования, которое в силу ограниченности современных вычислительных возможностей, как правило, проводится для классических спинов [14, 15].

2. КОНФИГУРАЦИОННОЕ УСРЕДНЕНИЕ КОРРЕЛЯЦИОННЫХ ФУНКЦИЙ

Всюду ниже мы считаем, что изучаемая спиновая система состоит из примесных спинов, хаотически распределенных по решетке.

В представлении чисел заполнения [16] и в высокотемпературном приближении поперечная корреляционная функция имеет вид [1]

$$G(t) = \langle S^+(t) \rangle / \langle S^+(0) \rangle = \langle \langle S^+(t) S^- \rangle_0 \rangle_c / \langle \langle S^+ S^- \rangle_0 \rangle_c, \quad (1)$$

где $\langle \dots \rangle_0 = \text{Sp}(\dots) / \text{Sp}1$, $S^\pm \equiv S^x \pm iS^y = \sum_j n_j S_j^\pm$, n_j — число заполнения узла j ($n_j = 0$ или 1), $\langle \dots \rangle_c$ — символ конфигурационного усреднения,

$$S^+(t) = \exp\{iH_d t\} S^+ \exp\{-iH_d t\},$$

H_d — гамильтониан спин-спинового взаимодействия. В модели Андерсона

$$H_d = \frac{3}{2} \sum_{i < j} A_{ij} n_i n_j S_i^z S_j^z,$$

где $A_{ij} \equiv \hbar \gamma^2 (1 - 3 \cos^2 \vartheta_{ij}) / r_{ij}^3$ — дипольное взаимодействие. Более общее взаимодействие, которое реализуется в типичных условиях, описывается секулярной частью дипольного гамильтониана и имеет вид

$$H_d = \frac{1}{2} \sum_{i < j} A_{ij} n_i n_j (3S_i^z S_j^z - \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j).$$

По своему смыслу функция $G(t)$ аддитивно-одночастична и поэтому разлагается на сумму вкладов от кластеров ранга l :

$$G(t) = \sum_{l=1}^k G_l(t),$$

где $G_l(t) \equiv \langle \langle S_l^+(t) \rangle_0 \rangle_c / \langle \langle S^+(0) \rangle_0 \rangle_c$.

Здесь и далее k — максимальный выбранный ранг ортогональных кластеров [3], а индексы i, j обозначают узлы решетки.

Кластерное разложение аддитивно-одночастичного оператора A имеет вид

$$A \equiv \sum_i n_i \alpha_i = \sum_{l=1}^k \sum_{i_1 < \dots < i_l} Z_l(\mathbf{r}_{i_1}, \dots, \mathbf{r}_{i_l}) \sum_{p=1}^l \alpha(\mathbf{r}_{i_p}), \quad (2)$$

где Z_l — число заполнения ортогонального кластера, размещенного в узлах $\mathbf{r}_{i_1}, \dots, \mathbf{r}_{i_l}$ [3], причем $l = 1$ и $Z_1(\mathbf{r})$ сопоставляются спину из массы и его числу заполнения. В модели Андерсона

$$n_0 S_0^+(t) = n_0 \exp(iH_d t) S_0^+ \exp(-iH_d t) = n_0 S_0^+ \prod_{j \neq 0} \exp\left(\frac{3}{2} i A_{0j} S_j^z n_j t\right),$$

поэтому

$$n_0 \langle S_0^+(t) S^- \rangle_0 = \frac{2}{3} n_0 s (s+1) \prod_{j \neq 0} \{1 + n_j [B_j(t, s) - 1]\}, \quad (3)$$

где s — спин частиц системы,

$$B_j(t, s) \equiv \frac{1}{2s+1} \sum_{\sigma=-s}^s \exp\left(\frac{3}{2} i t A_{0j} \sigma\right) = \frac{\sin[(3/2)t A_{0j} (s+1/2)]}{(2s+1) \sin((3/4)t A_{0j})}.$$

При выводе (3), как обычно, учтено, что для произвольной функции $\varphi(n_x)$ справедливо тождество $\varphi(n_x) \equiv \varphi(0) + n_x[\varphi(1) - \varphi(0)]$. Приближение сплошной среды соответствует пределу, когда относительная концентрация спинов $f \equiv \langle n_j \rangle_c \rightarrow 0$, но плотность $C = fn$ (n — объемная концентрация узлов решетки) остается конечной, а суммы по решетке заменяются на интегралы по всему пространству. При этом

$$G_l(t) = \left\langle \frac{n^{l-1} N}{(l-1)!} \int d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_l Z_l(0, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_l) \langle S_0^+(t) S_0^- \rangle_0 \right\rangle_c \frac{1}{\langle \langle S^+ S^- \rangle_0 \rangle_c}. \quad (4)$$

Здесь N — количество узлов в кристалле.

С учетом (3) видно, что конфигурационное среднее сводится к выражению

$$\left\langle Z_l(0, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_l) \prod_{j \neq 0} \{1 + n_j [B_j(t, s) - 1]\} \right\rangle_c.$$

Вычислим сначала

$$\left\langle \tilde{Z}_l(0, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_l) \prod_{j \neq 0} \{1 + n_j [B_j(t, s) - 1]\} \right\rangle_c,$$

где \tilde{Z}_l — число заполнения неортогонального кластера ранга l . Учитывая некоррелированность распределения спинов по узлам, получим в приближении сплошной среды

$$\begin{aligned} & \left\langle \tilde{Z}_l(0, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_l) \prod_{j \neq 0} \{1 + n_j [B_j(t, s) - 1]\} \right\rangle_c = \\ & = \left\langle \tilde{Z}_l(0, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_l) \right\rangle_c \prod_{m=2}^l B_{r_m}(t, s) \exp \left\{ -C \int_{\mathbf{q} \notin V_{0 \dots r_l}} d\mathbf{q} [1 - B_{\mathbf{q}}(t, s)] \right\}, \end{aligned} \quad (5)$$

где $V_{0 \dots r_l}$ — запрещенный объем кластера \tilde{Z}_l — область, внутри которой не должно быть других спинов кроме тех, из которых состоит кластер, чтобы не нарушалось условие его существования.

Учитывая, что $Z_l = 0$, а $\tilde{Z}_l \neq 0$, только если \tilde{Z}_l входит в состав некоторого кластера более высокого ранга, имеем рекуррентное соотношение

$$Z_l(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_l) = \tilde{Z}_l(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_l) - \sum_{m=1}^{k-l} \sum_{\substack{k_1 < \dots < k_m \\ k_j \notin V_{r_1 \dots r_l}}} Z_{l+m}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_l, \mathbf{r}_{k_1}, \dots, \mathbf{r}_{k_m}). \quad (6)$$

Отсюда следуют соответствующие формулы для $\langle \dots \rangle_c$ и формальный переход к пределу сплошной среды. Если два аргумента у числа заполнения кластера совпадают, оно равно нулю.

Формула (6) позволяет вычислять $\langle Z_l \rangle_c$ последовательно от максимального значения $l = k$ до $l = 1$, поскольку

$$\left\langle \tilde{Z}_l(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_l) \right\rangle_c = f^l \exp \{-fnV_r\}$$

при $f \ll 1$ [3].

Пользуясь соотношениями (4)–(6), можно вычислить вклад $G_l(t)$ в корреляционную функцию от кластеров любого ранга.

3. КЛАСТЕРНОЕ РАЗЛОЖЕНИЕ ФУНКЦИЙ ФОРМЫ ЛИНИИ И СПАДА СВОБОДНОЙ ИНДУКЦИИ В МОДЕЛИ АНДЕРСОНА

Примем, что верхний индекс у $G(t)$ и ее фурье-образа $g(\Delta)$ обозначает максимальный ранг выделенных кластеров k . Как обычно, андерсоновская ширина линии

$$D = \frac{2\pi^2}{3\sqrt{3}} \hbar C \gamma^2$$

определяет характерный временной масштаб задачи. Предполагается нормировка

$$\sum_{l=1}^k G_l^k(0) = 1.$$

При этом $G_l^k(0)$ имеет смысл вероятности попадания спина в ортогональный кластер ранга l , если максимальный ранг выделенных кластеров равен k .

Если $k = 1$, т. е. если система рассматривается в целом, без выделения кластеров, то $Z_1(\mathbf{r}) = n_r$ и

$$G_1^1(t) = \exp(-F_s D t), \quad (7)$$

где

$$F_s \equiv \frac{\int d\mathbf{r} [1 - B_r(t, s)]}{\int d\mathbf{r} [1 - B_r(t, 1/2)]} = \frac{2}{2s + 1} \sum_{\sigma=-s}^s |\sigma|.$$

Напомним, что все рассматриваемые корреляционные функции инвариантны к обращению времени. Поэтому здесь и далее предполагается, что $t \geq 0$. Вычисляя F_s , получим для полужелого и для целого спина соответственно

$$F_s = s + \frac{1}{2}, \quad F_s = \frac{2s(s+1)}{2s+1} = \left(s + \frac{1}{2}\right) \left[1 - \frac{1}{(2s+1)^2}\right]. \quad (8)$$

Таким образом, поведение спада свободной индукции качественно одинаково для любого значения спина. При $s = 1/2$ формула (7) совпадает с известным выражением [9]; при $s \rightarrow \infty$ имеем $G_1^{1cl}(t) = \exp(-DLt)$, где $L\hbar = \hbar\sqrt{s(s+1)}$ — момент импульса частицы. Соответствующая соотношению (7) функция формы линии поглощения — лоренциан с полушириной DF_s .

Заметим, что классический предел (8) можно получить и непосредственным интегрированием с последующим усреднением уравнения движения классического спина в модели Андерсона

$$\dot{\mu}_m^+ = \frac{3}{2} \sum_j' i A_{mj} L_j^z \mu_m^+ n_j$$

для компоненты $\mu_m^+ \equiv \mu_m^x + i\mu_m^y$ магнитного момента в m -ом узле решетки с учетом постоянства во времени $\mu_j^z = \gamma L_j^z$. Штрих у знака суммы (произведения) здесь и далее означает отсутствие диагонального члена с A_{mm} . Усреднение по конфигурациям выполняется так же, как и в квантовом случае, термодинамическое усреднение сводится к усреднению L_j по направлениям.

Рассмотрим теперь ситуацию, когда максимальный ранг кластера $k = 2$ (выделим пары и таким образом учтем существующую в системе неоднородность). Используя (4)–(6), получим, что

$$G_2^2(t) = C \int dr B_r(t, s) \exp \left\{ -CV_{0r} - C \int_{q \notin V_{0r}} dq [1 - B_q(t, s)] \right\} = \\ = \exp(-F_s Dt) C \int dr B_r(t, s) \exp \left\{ -C \int_{q \in V_{0r}} dq B_q(t, s) \right\}. \quad (9)$$

В работе [3] показано, что запрещенный объем двухспинового кластера можно представить в форме

$$V_{0r} = \frac{4\pi}{3\kappa} \frac{\bar{\chi}}{\chi_{0r}} r^3,$$

где $\chi_{0r} \equiv 1 - 3 \cos^2 \vartheta_{0r}$,

$$\bar{\chi} \equiv \int_0^1 d\xi |1 - 3\xi^2| = \frac{4}{3\sqrt{3}},$$

а $\kappa \equiv G_2^2(0) = 0.58 \pm 0.01$ — доля спинов в парах.

Точное вычисление асимптотики $G_2^2(t)$ затруднено сложной конфигурацией объема V_{0r} , однако для получения полуколичественного результата во втором из интегралов (9) заменим $r^3 \rightarrow r^3 |\chi_{0r}|$, $q^3 \rightarrow q^3 |\chi_{0q}|$, после чего примем, что объем, получившийся из запрещенного после этих преобразований, имеет форму шара. Заметим, что сравнительно небольшое расстояние между спинами пары, образующей запрещенный объем, по отношению к характерному размеру этого объема делает несущественным вопрос о положении его центра, который мы поместим в нуле. После элементарного интегрирования по угловым переменным и замен радиальных переменных, упрощающих аргументы косинусов, получим для спина $s = 1/2$

$$G_2^2(t) = \exp(-Dt) \frac{2Dt}{\pi} \int_0^\infty \frac{dx}{x^2} \cos x \exp \left\{ -\frac{2Dt}{\pi} \int_{\kappa x}^\infty \frac{dy}{y^2} \cos y \right\}. \quad (10)$$

Подчеркнем, что в (10) $\cos y$ и $\cos x$ происходят непосредственно из $B_r(t, 1/2)$ и $B_q(t, 1/2)$. Асимптотика (10) при $Dt \gg 1$ определяется точкой перевала $\kappa x_0 = \pi/2$ и имеет вид

$$G_2^2(t) \sim \frac{4\kappa}{\pi} \sqrt{Dt} \exp[-Dt(1 - \delta)] \cos \frac{\pi}{2\kappa},$$

где $\delta \equiv 2/(5\pi) \ll 1$. Другой способ расчета, учитывающий угловые зависимости в (9) и принимающий за шар сам запрещенный объем V_{0r} , дает еще меньшее значение δ . Поскольку $G(t) = G_2^2(t) + G_1^2(t) = \exp(-Dt)$, на больших временах функции $G_2^2(t)$ и $G_1^2(t)$ в модели Андерсона убывают с одинаковыми скоростями и противоположны по знаку.

Найдем фурье-преобразование от $G_2^2(t)$ — функцию формы линии пар:

$$g_2^2(\Delta) \equiv \frac{1}{\pi} \operatorname{Re} \int_0^\infty G_2^2(t) e^{i\Delta t} dt.$$

Подставляя сюда (9) и вычисляя интеграл по t с учетом того, что $B_r(t, s) = b(r/t^{1/3}, s)$, получаем

$$g_2^2(\Delta) = \frac{1}{\pi} C \int dr b(r, s) \left\{ C^2 \left\{ V_{0r} + \int_{q \notin V_{0r}} dq [1 - b(q, s)] \right\}^2 - \Delta^2 \right\} \times \\ \times \left\{ C^2 \left\{ V_{0r} + \int_{q \notin V_{0r}} dq [1 - b(q, s)] \right\}^2 + \Delta^2 \right\}^{-2}. \quad (11)$$

Проводя замену

$$V_{0r} + \int_{q \notin V_{0r}} dq [1 - b(q, s)] \rightarrow \sqrt{V_{0r}^2 + \left\{ \int dq [1 - b(q, s)] \right\}^2},$$

которая точна для малых и больших значений r (и вносит, как показано ниже, небольшую погрешность при $\Delta/D \leq 1$), получим для случая $s = 1/2$

$$g_2^2(\Delta) = \frac{1}{\pi D} \exp \left(-\frac{\pi_1}{\sqrt{1 + \Delta^2/D^2}} \right) \left(1 + \frac{\Delta^2}{D^2} \right)^{-2} \left(\frac{\Delta^2}{D^2} + \frac{1}{\pi_1} \sqrt{1 + \frac{\Delta^2}{D^2}} \right), \quad (12)$$

где $\pi_1 \equiv 2/(\pi\kappa) = 1.1$. То же выражение получается при аналогичной аппроксимации и непосредственно из (10). В классическом пределе вместо (12) имеем

$$g_2^{2cl}(\Delta) = \frac{1}{2\pi\pi_1^2 DL} \left\{ 1 - \exp \left[-\frac{2\pi_1}{\sqrt{1 + \Delta^2/(DL)^2}} \right] - \frac{2\pi_1\Delta^2}{(DL)^2} \times \right. \\ \left. \times \exp \left[-\frac{2\pi_1}{\sqrt{1 + \Delta^2/(DL)^2}} \right] \left[1 + \frac{\Delta^2}{(DL)^2} \right]^{-3/2} \right\}. \quad (13)$$

Мы провели прямой численный анализ представления (11) для изотропного взаимодействия (A_{0r} не зависит от угла ϑ_{0r}) при $s = 1/2$. Результат качественно совпал с (12), а количественное расхождение не превысило 10% и было сосредоточено в области $\Delta \leq D$. Аналогичные величины для массы $G_1^2(t)$, $g_1^2(\Delta)$ получаются, очевидно, вычитанием (12), (13) из фурье-преобразования (7).

Поведение функций формы линии пар, массы и системы в целом для случаев $s = 1/2$ и $s = \infty$ представлено на рис. 1, 2.

Линия поглощения (12) отлична от нуля в центре и имеет там широкое плато (со слабо выраженным минимумом) при $\Delta = 0$. В классическом пределе функция формы линии (13) имеет только один максимум в центре. С физической точки зрения это различие в значительной степени определяется тем, какую форму имеет огибающая линий, соответствующих данному состоянию ближайшего спина — для спина $s \geq 1$ линия поглощения имеет только один максимум в центре. Из (12), (13) следует, что пары исчерпывают крыло линии (ср. [3]).

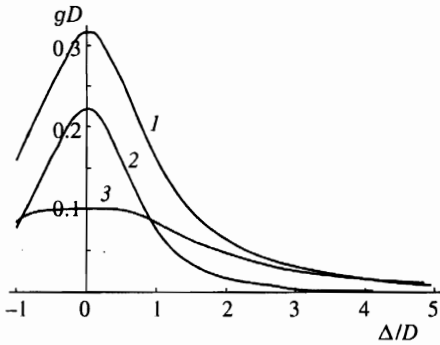


Рис. 1

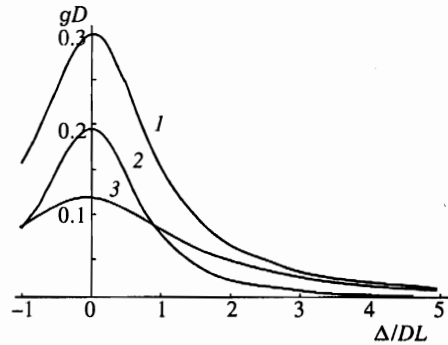


Рис. 2

Рис. 1. Кластерное разложение функции формы линии. Спин 1/2; 1 — $g_1^1 D$, 2 — $g_1^2 D$, 3 — $g_2^2 D$

Рис. 2. Кластерное разложение функции формы линии. Классический предел; 1 — $g_1^{1cl} DL$, 2 — $g_1^{2cl} DL$, 3 — $g_2^{2cl} DL$

4. УЧЕТ ВРЕМЕННЫХ ФЛУКТУАЦИЙ В ПРИБЛИЖЕНИИ НОРМАЛЬНОГО СЛУЧАЙНОГО ПРОЦЕССА

Если в модели Андерсона аппроксимировать сигнал свободной индукции (3) гауссовой функцией с точным вторым моментом, положив

$$\langle S_j^+(t) S_j^- \rangle_0 = \frac{2}{3} s(s+1) \exp\left(-\frac{1}{2} M_{2j} t^2\right), \tag{14}$$

$$M_{2j} \equiv \frac{3}{4} s(s+1) \sum'_m A_{mj}^2 n_m,$$

то после выполнения конфигурационного усреднения получается, что

$$G(t) = \prod'_j \left\{ 1 + f \left[\exp\left(-\frac{3}{8} s(s+1) A_{0j}^2 t^2\right) - 1 \right] \right\} = \exp\left(-\sqrt{\frac{2}{\pi}} Dt F_s\right), \quad f \ll 1. \tag{15}$$

В случае $s = 1/2$ эти формулы были получены ранее в работах [7, 8]. Показатель экспоненты в них для спада свободной индукции весьма близок к правильному (7) и меньше его в 1.25 раза. Эта точность удивительно высока для столь грубой аппроксимации.

Как известно, гауссов временной спад соответствует нормальному распределению статических локальных полей. Если же в духе теории АВК аппроксимировать временные флуктуации локальных полей нормальным случайным процессом, то получается, что

$$\langle S_0^+(t) S_0^- \rangle_0 = \frac{2}{3} s(s+1) \exp[-\Phi_0(t)], \tag{16}$$

где

$$\Phi_0(t) = \int_0^t d\tau (t - \tau) \langle \omega_{10}(\tau) \omega_{10} \rangle_0,$$

$\omega_{l_0} = (3/2) \sum'_m A_{m0} n_m S_m^z$ — локальное поле на спине 0. Определим корреляционную функцию $K(t)$ локального поля $\omega_{l_0}(t)$ соотношением

$$\langle \omega_{l_0}(t) \omega_{l_0} \rangle_0 = M_{20} K(t), \quad K(0) = 1. \quad (17)$$

Формулы (16), (17) отличаются от стандартной версии теории АВК тем, что M_{20} и $K(t)$ зависят от реализации случайного распределения примесей в решетке.

Локальное поле флуктуирует благодаря флип-флоп-переходам и, таким образом, $K(t)$ характеризует их статистические свойства. Поскольку скорости флуктуаций спинов зависят от особенностей их взаимодействия, функция $K(t)$ различна для разных реализаций распределения спинов в решетке. Однако эта зависимость от конфигурации слабее, чем зависимость от конфигурации момента M_{20} . Если пренебречь более слабой зависимостью, положив функцию $K(t)$ независимой от конфигурации, и определить

$$I(t) = \int_0^t d\tau (t - \tau) K(\tau),$$

то соотношение (16) можно усреднить по конфигурациям и получить, что [3]

$$G(t) = \exp \left[-2DF_s \sqrt{I(t)/\pi} \right]. \quad (18)$$

При

$$t \gg \tau_{c0} \equiv \int_0^\infty d\tau K(\tau)$$

отсюда следует

$$\ln G(t \gg \tau_{c0}) = -2DF_s \sqrt{t\tau_{c0}/\pi},$$

что согласуется с выводами работы [17], полученными из других соображений.

Аппроксимация АВК справедлива, если локальное поле складывается из немалого числа приблизительно одинаково распределенных слагаемых. Используемый нами способ выделения кластеров приводит к тому, что наиболее сингулярная часть взаимодействий включается во внутрикластерные взаимодействия и учитывается точно. Поэтому после отделения кластеров локальные поля, создаваемые на спинах массы и на кластерах окружающими спинами, становятся гораздо ближе к нормальному процессу, и в результате синтеза теории АВК и кластерного разложения должны получиться результаты гораздо более точные, чем (15). Ниже мы сформулируем эти результаты и проверим их путем сравнения в пределе $\tau_c D \gg 1$ с точно решаемой моделью Андерсона.

Выделим из системы пары и рассмотрим 2-кластер, составленный из спинов S_0 и S_1 . Гамильтониан этой пары

$$H_p = A_{01} \left(S_0^z S_1^z - \frac{1}{4} S_0^+ S_1^- - \frac{1}{4} S_0^- S_1^+ \right) + \omega_{l_0}(t) (S_0^z + S_1^z).$$

Здесь, как и ранее, мы пренебрегаем зависимостью создаваемого внешними по отношению к паре спинами поля от координаты спина в кластере.

При $s = 1/2$ уравнения движения для спинов 0, 1 пары легко интегрируются и в результате

$$\langle S_0^+(t)S^- \rangle = \frac{1}{2} \cos\left(\frac{3}{4}A_{01}t\right) \exp[-M_{20}I(t)], \quad (19)$$

а для спина массы остается справедливой формула (16).

В этом разделе мы пренебрегаем флуктуациями коррелятора $K(t)$. Более общий случай рассмотрен в следующем разделе.

Подставим (19) в (4) и выполним конфигурационное усреднение так же, как в (5), с учетом того, что число заполнения узла j спином из 2-кластера есть

$$n_j^c \equiv \sum_q Z_2(r_j, q),$$

а число заполнения этого же узла спином массы $n_j^m \equiv n_j - n_j^c$. В результате для функций спада свободной индукции от пар и от массы получим выражения:

$$G_2^2(t) = C \int dr \cos \frac{3A_{0r}t}{4} \exp(-CV_{0r}) \exp \left\{ -C \int_{q \notin V_{0r}} dq \left(1 - \exp \left[-\frac{9}{16} A_q^2 I(t) \right] \right) \right\},$$

$$G_1^2(t) = \exp \left[-\frac{2}{\sqrt{\pi}} D \sqrt{I(t)} \right] - C \int dr \exp \left[-\frac{9}{16} A_{0r}^2 I(t) - CV_{0r} \right] \times$$

$$\times \exp \left\{ -C \int_{q \notin V_{0r}} dq \left(1 - \exp \left[-\frac{9}{16} A_q^2 I(t) \right] \right) \right\}. \quad (20)$$

Обсудим свойства корреляционной функции $K(t)$, определенной формулой (17). Она построена из продольных компонент спиновых операторов. Коррелятор

$$q(t) \equiv \langle \langle S_i^z(t) S_i^z \rangle_0 \rangle_c / \langle \langle (S_i^z)^2 \rangle_0 \rangle_c$$

при малых Dt ведет себя как $\exp(-Dt/3)$, что следует из анализа первого члена разложения по концентрации. Функция $K(t)$ убывает с характерным временем τ_c , где τ_c^{-1} — скорость флуктуаций. В упорядоченных системах $\tau_c D \sim 4$ (см. [18] и цитированную там литературу), так что для флип-флоп-перехода в массе и в парах в центральной части линии мы вправе ожидать такого же соотношения.

Сумма $\sum_{i=1}^{N_s} S_i^z n_i$ (суммирование по спинам) является интегралом движения, поэтому естественно ожидать, что долговременная асимптотика является диффузионной т. е. $q(t \gg \tau_c) \sim (Dt)^{-3/2}$. При промежуточных значениях t (в диапазоне $1/2 \geq q(t) \geq 0.1$) поведение $q(t)$, по-видимому, удовлетворительно передается ферстеровской экспонентой $\exp(-U\sqrt{Dt})$, где константа $U \sim 1$ [16]. Поведение $K(t)$ качественно аналогично поведению $q(t)$. Следовательно, влияние диффузионного хвоста на функцию $I(t)$ мало, по крайней мере в трехмерных системах. Влияние начального чисто экспоненциального участка также несущественно. Поэтому далее в численных оценках мы, как правило, считаем $K(t) = \exp(-\sqrt{t/\tau_c})$.

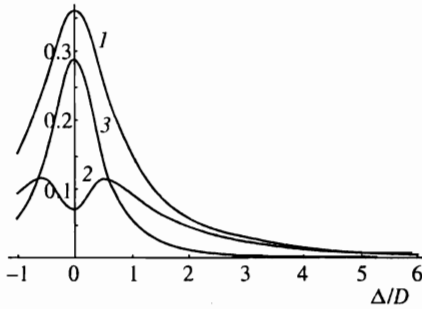


Рис. 3. Кластерное разложение функции формы линии. Время корреляции $\tau_c = 4/D$; спин $s = 1/2$; 1 — gD , 2 — $g_2^2 D$, 3 — $g_1^2 D$

В результате отличие τ_c^{-1} от нуля проявляется только при $tD \sim 10$ и, тем самым, не сильно сказывается на форме линии.

При $\tau_c^{-1} = 0$ имеем $I(t) = t^2/2$ и, делая фурье-преобразование (20), интегрируя по t и оставляя главные члены по r в числителе и знаменателе получившихся подинтегральных выражений так же, как при выводе (12), получаем после несложных преобразований

$$g_2^2(\Delta) = \frac{D}{\pi D_\delta^2} \exp\left(-\frac{\pi_1 D/D_\delta}{\sqrt{1 + \Delta^2/D_\delta^2}}\right) \left(1 + \frac{\Delta^2}{D_\delta^2}\right)^{-2} \left(\frac{\Delta^2}{D_\delta^2} + \frac{1}{\pi_1} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sqrt{1 + \frac{\Delta^2}{D_\delta^2}}\right), \tag{21}$$

$$g_1^2(\Delta) = \frac{1}{\pi} \frac{D_\delta}{D_\delta^2 + \Delta^2} - \frac{1}{\pi^2 \pi_1} \int_0^\infty \frac{dy}{\sqrt{y}} \exp\left(-\frac{\pi_1^2}{2} y\right) \frac{D^2 + y(D_\delta^2 - \Delta^2)}{[D^2 + y(D_\delta^2 + \Delta^2)]^2}.$$

Здесь $D_\delta \equiv \sqrt{2/\pi} D$ — скорость убывания $G_1^1(t) = \exp(-D_\delta t)$ в рассматриваемой модели без выделения кластеров [3]. Нетрудно увидеть, что при $\Delta \gg D$, $g_1^2(\Delta) \sim 1/\Delta^3$, а $g_2^2(\Delta) = D/\pi \Delta^2$, т. е. пары исчерпывают крыло линии, а асимптотика $g(\Delta)$ совпадает с таковой в модели Андерсона. Функции (21) практически совпадают с полученными в модели Андерсона и в центральной части линии. Для иллюстрации влияния $\tau_c^{-1} \neq 0$ на функции формы линии вычислим $g(\Delta) = g_2^2(\Delta) + g_1^2(\Delta)$ — функцию формы линии системы в приближении нормального случайного процесса при $\tau_c^{-1} = D/4$, $s = 1/2$. Соответствующие графики приведены на рис. 3. Видно, что наличие флуктуаций имеет некоторое влияние на центр линии. Как и следовало ожидать, более медленное убывание $G(t)$ приводит к увеличению значения $g(0)$ по сравнению со случаем отсутствия флуктуаций. Поведение функции $g_2^2(\Delta)$ вблизи нуля представляет промежуточный вариант между $\tau_c^{-1} = 0$ и $\tau_c^{-1} = \infty$. В последнем случае $g_2^2(0) = 0$ [3].

Преобразуя переменные интегрирования и запрещенный объем в (20) так же, как при получении формулы (10), получаем явное интегральное представление для функций

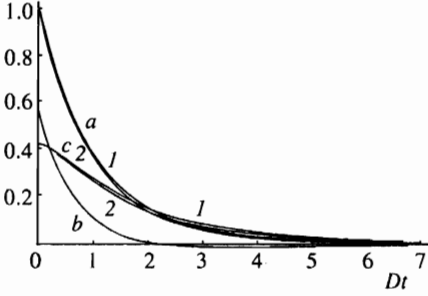


Рис. 4. Кластерное разложение спада свободной индукции: 1 — время корреляции $\tau_c = 4/D$, 2 — модель Андерсона; a — полный сигнал, b — сигнал от пар, c — сигнал от массы

спада свободной индукции:

$$\begin{aligned}
 G_2^2(t) &= \frac{2}{\pi} \kappa D \sqrt{I(t)} \exp \left[-\frac{2}{\sqrt{\pi}} D \sqrt{I(t)} \right] \operatorname{Re} \int_0^\infty \frac{dx}{x^2} \times \\
 &\times \exp \left\{ \frac{t}{\kappa \sqrt{I(t)}} \left[ix - \frac{2\kappa}{\pi} \frac{DI(t)}{t} \int_x^\infty \frac{dy}{y^2} \exp(-y^2) \right] \right\}, \\
 G_1^2(t) &= \exp \left[-\frac{2}{\sqrt{\pi}} D \sqrt{I(t)} \right] \left\{ 1 - \frac{2\kappa}{\pi} D \sqrt{I(t)} \int_0^\infty \frac{dx}{x^2} \times \right. \\
 &\times \left. \exp \left[-\frac{x^2}{\kappa^2} - \frac{2}{\pi} D \sqrt{I(t)} \int_x^\infty \frac{dy}{y^2} \exp(-y^2) \right] \right\}.
 \end{aligned} \tag{22}$$

Графики функций (22) и их суммы $G(t)$ для ферстеровского вида $K(t)$ и $\tau_c D = 4$ приведены на рис. 4. Там же для сравнения приведены графики этих функций в модели Андерсона.

Исследуем их долговременные асимптотики. Асимптотика $G_1^2(t)$ может быть найдена по методу Лапласа представлением входящего в нее интеграла в форме

$$\int_0^\infty d\psi [\psi'(x)]^{1/\kappa^2 - 1} \exp \left[-\frac{2}{\pi} D \sqrt{I(t)} \psi \right],$$

где

$$\psi(x) \equiv \int_0^x dy \exp \left(-\frac{1}{y^2} \right),$$

и имеет вид

$$\begin{aligned}
 G_1^2(t \gg \tau_c) &\sim \exp \left[-\frac{2}{\sqrt{\pi}} D \sqrt{I(t)} \right] \times \\
 &\times \left\{ 1 - \kappa \Gamma \left(\frac{1}{\kappa^2} \right) \left[\frac{D \sqrt{I(t)}}{\pi} \right]^{1-1/\kappa^2} \left[\ln \left(D \sqrt{I(t)} \right) \right]^{3(1/\kappa^2 - 1)/2} \right\}.
 \end{aligned} \tag{23}$$

Напомним, что $I(t \gg \tau_c) \sim 2t\tau_c$ при конечном τ_c и $I(t \rightarrow \infty) \sim t^2/2$ при $\tau_c^{-1} = 0$.

Если $\tau_c^{-1} = 0$, асимптотика $G_2^2(t)$ находится представлением входящего в эту функцию интеграла в виде

$$\operatorname{Re} \int_0^\infty d\psi \frac{d\zeta}{d\psi} \exp\left(-\frac{\sqrt{2}}{\pi} Dt\psi\right),$$

где $\psi(x)$ определяется так же, как при выводе (23), а

$$\zeta(x) \equiv \int_0^x dx \exp\left\{\frac{i\sqrt{2}}{\kappa x}\right\}.$$

В результате

$$G_2^2(Dt \gg 1, \tau_c^{-1} = 0) \sim -\frac{\kappa^2 Dt}{\pi} \exp\left(-\sqrt{\frac{2}{\pi}} Dt\right) \sin\left(\frac{\sqrt{2 \ln Dt}}{\kappa}\right) [\ln(Dt)]^{-1}. \quad (24)$$

Сравнивая (23), (24) с (7) и асимптотикой (10), можно видеть хорошее согласие между моделью Андерсона и приближением нормального случайного процесса в пределе медленных флуктуаций. На промежутке $0 \leq Dt \leq 10$ различие между результатами этих двух моделей настолько мало, что не видно на графиках, однако относительное различие не убывает с увеличением t , что приводит к заметному различию соответствующих функций формы линии вблизи $\Delta = 0$.

Основное различие между приближением нормального случайного процесса при $\tau_c = \infty$ и точной в этом случае моделью Андерсона состоит в различии скорости убывания сигнала свободной индукции пар на

$$\left(\left(1 - \frac{2}{5\pi}\right) - \sqrt{\frac{2}{\pi}}\right) \left(\frac{2}{\pi}\right)^{-1/2} = 9.4\%.$$

Функции $G_2^2(t)$ совпадают с равномерной точностью 5% в диапазоне $0 \leq Dt \leq 10$. Фурье-преобразования $g_2^2(\Delta)$ имеют наибольшее различие при $\Delta = 0$ (относительное различие 7%), оно убывает с ростом Δ и становится меньше 1.5% при $\Delta \geq D$. Полный спад свободной индукции совпадает с андерсоновским с еще большей точностью. Таким образом, отделение 2-кластеров привело к радикальному изменению точности результата $G(t) = \exp(-\sqrt{2/\pi} Dt)$, который следует из (18) при $\tau_c^{-1} = 0$.

Для того чтобы найти асимптотику $G_2^2(t)$ при конечных τ_c , представим входящий в нее интеграл (после замены переменных $x \rightarrow 1/x$, $y \rightarrow 1/y$) в виде

$$\operatorname{Re} \int_0^\infty dx \exp\left[\sqrt{\frac{t}{2\kappa^2\tau_c}} f(x)\right],$$

где

$$f(x) \equiv \frac{i}{x} - \frac{4\kappa D\tau_c}{\pi} \int_0^x dy \exp\left(-\frac{1}{y^2}\right).$$

При этом

$$G_2^2(t \rightarrow \infty) \sim \frac{4 \cdot 2^{1/4}}{\sqrt{\pi}} \kappa^{3/2} D \tau_c^{3/4} t^{1/4} \exp\left(-\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{\pi}} D \sqrt{t \tau_c}\right) \times \\ \times \operatorname{Re} \left\{ \exp\left(f(x_0) \sqrt{\frac{t}{2\kappa^2 \tau_c}}\right) \sqrt{\frac{-1}{f''(x_0)}} \right\}. \quad (25)$$

Здесь x_0 — точка перевала функции $f(x)$ — наиболее удаленная от нуля стационарная точка, удовлетворяющая уравнению

$$\frac{i}{x^2} + \frac{4\kappa D \tau_c}{\pi} \exp\left(-\frac{1}{x^2}\right) = 0.$$

Асимптотика (25) легко находится в пределе $D \tau_c \rightarrow 0$, тогда

$$x_0 = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\kappa D \tau_c}} \frac{1-i}{\sqrt{2}}$$

и

$$G_2^2(Dt \gg 1) \sim (2\pi \kappa^3 Dt)^{1/4} \cos\left(\sqrt{\frac{4Dt}{\pi \kappa}} - \frac{\pi}{8}\right) \exp\left(-\sqrt{\frac{4Dt}{\pi \kappa}} - 2\sqrt{\frac{2}{\pi}} D \sqrt{t \tau_c}\right). \quad (26)$$

Таким образом, затухание функции спада свободной индукции от пар существует даже в пределе бесконечно быстрых флуктуаций — за счет конфигурационного усреднения движений в парах. По мере увеличения τ_c точка x_0 монотонно движется к нулю и при $D \tau_c = 4$ равна $x_0 = 0.845 - 0.331i$. В этом случае

$$G_2^2(t \rightarrow \infty) \sim 1.42(Dt)^{1/4} \cos(0.779\sqrt{Dt}) \exp(-3.43\sqrt{Dt}). \quad (27)$$

При дальнейшем уменьшении скорости флуктуаций точка x_0 очень медленно,

$$x_0 \sim \exp\left\{-\frac{i\pi/4}{\ln(D\tau_c)}\right\} / \sqrt{\ln(D\tau_c)},$$

смещается по направлению к действительной оси. При этом

$$f(x_0) \sim i\sqrt{\ln(D\tau_c)} - \frac{\pi/4}{\sqrt{\ln(D\tau_c)}}.$$

Из сравнения (23) и (27) вытекает асимптотика

$$G(t) \sim \exp\left(-2\sqrt{\frac{2}{\pi}} D \sqrt{t \tau_c}\right)$$

при $t \gg \tau_c$ (ср. [3]), причем выход на нее происходит при $t/\tau_c \sim 6$, до этого спад приблизительно экспоненциален.

Итак, существующие в системе два характерных времени определяют соответственно коротко- и долговременную асимптотики функций спада свободной индукции.

5. СПЕКТР СКОРОСТЕЙ ФЛУКТУАЦИЙ ЛОКАЛЬНЫХ ПОЛЕЙ

При вычислении продольного коррелятора локальных полей $K(t)$ на данном спине до сих пор мы пренебрегали зависимостью $K(t)$ от локального окружения этого спина. Проанализируем эту зависимость для оценки нашего приближения и уточнения вида этой функции.

Перевороты спинов, принадлежащих крылу резонансной линии (в основном спинов пар), обусловлены главным образом двумя процессами: двухспиновым в парах, находящихся на одном участке резонансной линии шириной порядка D , и четырехспиновым, связывающим спины на крыле линии со спинами в ее центре. Второй процесс имеет более высокий порядок, но он является резонансным относительно дипольного гамильтониана изолированной пары и позволяет передавать энергию на большие расстояния по спектру [3, 5]. Ясно, что характерное время $\tau_c(\omega)$ флип-флоп-переходов, порождающих флуктуации локального поля от спинов на крыле линии, больше $\tau_c(0)$ в центре линии и возрастает с увеличением резонансной частоты спинов ω относительно центра линии. При $\omega \gg D$ фактически ω — собственная частота пары, которой принадлежит рассматриваемый спин.

Матричный элемент двухспинового процесса по порядку величины есть A_{0x} , где $0, x$ — пространственные положения двух взаимно резонансных пар, а четырехспинового — A_{0q}^2/ω , где q — координата спина массы или пары из центра линии [3]. Мы рассматриваем $\omega \gg D$, так как $\tau_c(D)$ порядка τ_c — характерного времени флип-флоп-перехода в центральной части линии. Характерное взаимодействие пар с массой по величине больше, чем межпарное [3], так что четырехспиновым межпарным процессом можно пренебречь, поскольку он принципиально не отличается от процесса пары-масса.

Обозначим символом W_m скорость процесса пара-масса, W_p — скорость процесса пара-пары. Тогда скорость переворота спина пары есть

$$W = W_m + W_p = U_m \sum_{q \neq r} \frac{A_{0q}^2 A_{0r}^2}{D\omega^2} Z_1(q) Z_1(r) + U_p \sum_x \frac{A_{0x}^2}{D} Z_{2\omega}(x). \quad (28)$$

Здесь U_m и U_p — коэффициенты порядка единицы, $Z_{2\omega}(x)$ — число заполнения узла x парой с частотой ω . Мы пренебрегаем размером пары по сравнению с расстоянием от нее до других объектов и принимаем, что характерная скорость фазовой релаксации, определяющей W_m и W_p , совпадает с D и одинакова во всей системе (таким образом (28) — следующее, по сравнению с рассмотренным в предыдущем разделе, приближение с точки зрения учета разброса скоростей процессов в системе). Характерное время флип-флоп-перехода

$$\tau_c(\omega) = \left\langle \int_0^{\infty} dt \exp(-Wt) \right\rangle_c,$$

а коррелятор локальных полей от спина 0 запишем как

$$K_0(t) \equiv \exp(-Wt) = \exp(-W_p t) \exp(-W_m t) \equiv K_{0p}(t) K_{0m}(t).$$

Расцепим для оценки $\langle e^{-Wt} \rangle_c \approx \langle K_{0p} \rangle_c \langle K_{0m} \rangle_c$. Здесь мы берем конфигурационное среднее при фиксированной частоте. Для первой экспоненты, не учитывая корре-

ляций во взаимном расположении пар, нетрудно получить

$$\langle K_{0p}(t) \rangle_c = \langle \exp(-W_p t) \rangle_c \approx \exp\left(-U_1 \frac{D^2}{\omega^2} \sqrt{Dt}\right), \quad (29)$$

где $U_1 > 0$ — константа.

Для вычисления асимптотики $\langle \exp(-W_m t) \rangle_c$ заметим сначала, что из-за того что характерное взаимодействие пар с массой по величине больше, чем межпарное [3], а спины на крыле относительно немноги, мы внесем небольшую погрешность, заменив в (28) $Z_1(q) \rightarrow n_q$. Условие $q \neq r$ является короткодействующей корреляцией, так что при нахождении долговременной асимптотики им можно пренебречь, однако эта корреляция сильная (запрет), поэтому проведем более последовательный анализ.

Рассмотрим величину

$$\tau_m(\alpha) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left\langle \int_0^{\infty} dt \exp(i\varepsilon t + t^\alpha - W_m t) \right\rangle_c, \quad (30)$$

где $\text{Re } \varepsilon > 0$, $\text{Im } \varepsilon > 0$, $0 \leq \alpha < 1$. Интеграл под знаком предела сходится по любому контуру в правом верхнем квадранте комплексной плоскости. Представим

$$W_m = U_m \sum_{q \neq r}' \frac{A_{0q}^2 A_{0r}^2}{D\omega^2} n_q n_r$$

как

$$W_m = \frac{U_m}{D\omega^2} \left(\sum_q' A_{0q}^2 n_q \right)^2 - \frac{U_m}{D\omega^2} \sum_q' A_{0q}^4 n_q,$$

запишем

$$\exp \left[-\frac{U_m}{D\omega^2} \left(\sum_q' A_{0q}^2 n_q \right)^2 \right]$$

как гауссов интеграл, чтобы получить линейный по числам заполнения показатель экспоненты, повернем контур интегрирования в (30) на $+\pi/2$, выполним конфигурационное усреднение и сделаем замену переменных интегрирования. В результате в пределе $\varepsilon \rightarrow 0$ получим

$$\begin{aligned} \tau_m(\alpha) = & \sqrt{\frac{i}{4\pi}} \int_0^{\infty} dt \exp[(it)^\alpha] t^{1/6} \int_{-\infty}^{\infty} dy \times \\ & \times \exp \left\{ t^{1/3} \left[\frac{i}{4} y^2 - \frac{CU_m^{1/4}}{D^{1/4} \sqrt{\omega}} \int dq \left(1 - \exp \left(\frac{iA_q^4}{t^{1/3}} - iA_q^2 y \right) \right) \right] \right\}. \end{aligned}$$

Асимптотика внутреннего интеграла — $\exp(-U_1 t^{1/3})$, $\text{Re } U_1 > 0$, так что граничное значение существования $\tau_m(\alpha)$ равно $\alpha = 1/3$. Таким образом, долговременная асимптотика корреляционной функции локальных полей за счет четырехспинового взаимодействия есть

$$\ln \langle K_{0m}(t) \rangle_c = \ln \langle \exp(-W_m t) \rangle_c = -U_2 \left(\frac{D^3 t}{\omega^2} \right)^{1/3}, \quad (31)$$

U_2 — константа, $\text{Re } U_2 > 0$. Сравнивая с (29), видим, что характерное время флип-флоп-перехода $\tau_c(\omega) \sim \omega^2$ на крыле резонансной линии.

Коррелятор локальных полей

$$\langle \omega_l(t)\omega_l \rangle = \sum_{jq} n_j n_q \langle \omega_l^j(t)\omega_l^q \rangle,$$

где ω_l^j — поле от спина в узле j . Предположим, что поля от разных спинов не коррелируют. Тогда

$$\langle \omega_l(t)\omega_l \rangle = \sum_j n_j \langle \omega_l^j(t)\omega_l^j \rangle = \sum_j' \frac{9}{16} A_{0j}^2 n_j K_j(t), \quad K_j(0) = 1. \quad (32)$$

Функция распределения локальных статических полей в рассматриваемой системе $\varphi(\omega) = \langle \delta(\omega^2 - M_2) \rangle_c$ имеет вид

$$\varphi(\omega) = \frac{D}{\pi\omega^3} \exp\left(-\frac{D^2}{\pi\omega^2}\right), \quad \int_0^\infty d\omega^2 \varphi(\omega) = 1. \quad (33)$$

Записывая (32) в форме

$$\langle \omega_l(t)\omega_l \rangle = \sum_{j\omega}' \frac{9}{16} A_{0j}^2 n_{j\omega} K_j(t),$$

где $n_{j\omega}$ — число заполнения узла j спином со статическим локальным полем на нем ω , пренебрегая короткодействующими пространственными корреляциями $n_{j\omega}$ между собой и приводя к безразмерному виду переменные интегрирования, получим вместо (22)

$$\begin{aligned} G_2^2(t) &= \exp\left(-\frac{2}{\sqrt{\pi}} D \langle \langle \sqrt{I_j(t)} \rangle_c \rangle_\omega\right) \frac{2\kappa}{\pi} \sqrt{Dt} \cdot \text{Re} \int_0^\infty \frac{dx}{x^2} \times \\ &\times \exp\left\{\sqrt{Dt} \left(i\kappa^{-1}x - \frac{2}{\pi} \int_x^\infty \frac{dy}{y^2} \langle \langle \exp\left(-\frac{DI_j(t)}{t} y^2\right) \rangle_c \rangle_\omega\right)\right\}, \\ G_1^2(t) &= \exp\left(-\frac{2}{\sqrt{\pi}} D \langle \langle \sqrt{I_j(t)} \rangle_c \rangle_\omega\right) \left(1 - \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{dx}{x^2} \langle \exp[-D^2 x^2 I(x, t)] \rangle_c \times \right. \\ &\times \left. \exp\left\{-\frac{2}{\pi} \int_{\kappa x}^\infty \frac{dy}{y^2} \langle \langle \exp[-y^2 D^2 I_j(t)] \rangle_c \rangle_\omega\right\}\right). \end{aligned} \quad (34)$$

Здесь

$$I_j(t) \equiv \int_0^t d\tau (t - \tau) K_j(\tau),$$

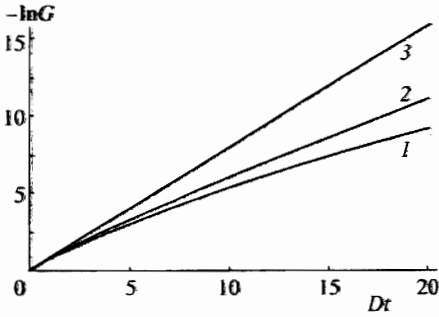


Рис. 5. Характерный вид $-\ln G(t)$: 1 — случай постоянного времени флип-флоп-перехода, 2 — замедление его на крыле резонансной линии, 3 — $\tau_c = \infty$

$I(x, t)$ определяется как $I_j(t)$ при условии, что j — спин с локальным полем на нем Dx (x — безразмерная частота $x = 3A_{0r}/4D$ в (20)), $\langle \dots \rangle_c$ здесь означает, что проводится конфигурационное усреднение с фиксированной величиной статического локального поля ω .

$$\langle X(\omega) \rangle_\omega \equiv \int_0^\infty d\omega^2 \varphi(\omega) X(\omega).$$

Нас интересуют главным образом долговременные асимптотики (34), так как наличие медленно флуктуирующих объектов, для учета которых мы и предприняли исследование в этом разделе, начинает сказываться на поведении функции спада свободной индукции именно на больших временах.

В выражении для $G_2^2(t)$ в (34) основной вклад в величину

$$\left\langle \left\langle \exp \left\{ -\frac{DI_j(t)}{t} y^2 \right\} \right\rangle \right\rangle_\omega$$

дают те конфигурации и частоты, для которых $I_j(t)$ минимально, т. е. когда спин, порождающий функцию $I_j(t)$, находится в центре линии. Удельный вес таких конфигураций порядка единицы, так что асимптотика интеграла в (34) в выражении для $G_2^2(t)$ такая же, как и в (22). Интеграл в скобках в выражении (34) для $G_1^2(t)$ при возрастании t убывает, что видно уже из того, что учет медленных объектов ведет к эффективному увеличению $I(t)$, а это ускоряет убывание рассматриваемого интеграла (см. (23)).

Для оценки $\langle \langle \sqrt{I_j(t)} \rangle \rangle_\omega$ заметим, что, внося конфигурационное усреднение под знак корня, мы только немного увеличиваем эту функцию (асимптотика по t , впрочем, остается той же, что следует, например, из равномерной по ω ограниченности относительной дисперсии $\tau_c(\omega)$). Таким образом,

$$\frac{2}{\sqrt{\pi}} D \langle \langle \sqrt{I_j(t)} \rangle \rangle_\omega \sim J(t) \equiv \frac{2}{\sqrt{\pi}} D \int_0^\infty d\omega^2 \varphi(\omega) \sqrt{\int_0^t d\tau (t - \tau) \langle e^{-W\tau} \rangle_c}.$$

Используя (29) и (31), найдем, что основной вклад в асимптотику по t дает область больших ω , а значит, то слагаемое в показателе $\langle e^{-W\tau} \rangle_c$, которое связано с четырех-спиновым процессом. В результате при $Dt \rightarrow \infty$

$$\langle \langle \sqrt{I_j(t)} \rangle \rangle_\omega \sim K \sqrt{Dt} \ln(Dt). \tag{35}$$

Здесь K — константа, $K > 0$, причем выход на эту асимптотику происходит при $t/\tau_c > 10^1$ из-за медленности убывания функции $\langle K_{0m}(t) \rangle_c$. До этого $\langle \langle \sqrt{I_j(t)} \rangle_c \rangle_\omega \sim \sim Dt$. На рис. 5 показана зависимость от времени величины $J(t)$, качественно описывающей поведение $-\ln G(t)$. В качестве характерных вариантов выбраны

$$\langle e^{-W\tau} \rangle_c = \exp\left(-\sqrt{\tau/\tau_{c0}}\right), \quad \langle e^{-W\tau} \rangle_c = \exp\left\{-\left[t/\tau_c(\omega)\right]^{1/3}\right\}$$

— случаи постоянного характерного времени флип-флоп-перехода и характерного замедления его на крыле резонансной линии. Здесь $\tau_c(\omega) = \tau_{c0}(1 + \omega^2/D^2)$, $\tau_{c0}D = 4$, как и раньше.

Из изложенного ясно, что на очень больших временах поведение $G_1^2(t)$, $G_2^2(t)$ близко к (23), (27), а на средних временах общий экспоненциальный множитель этих функций убывает примерно как $\exp(-UDt)$, $U \sim 1$, т. е. быстрее, чем в модели постоянной скорости флуктуаций. Отсюда следует, что на малых и средних временах поведение $G(t)$ неплохо описывается моделью Андерсона и лишь в пределе очень больших времен становится корневой экспонентой. Отметим здесь же, что, как видно из (34), для наличия осцилляций в сигнале пар достаточно присутствия в локальном поле переменной составляющей со скоростью флуктуаций $1/\tau_c \sim D/4$, именно она и определяет характер этих осцилляций. Это связано с тем, что они возникают как следствие конфигурационного усреднения движений в пространственно ограниченных парах, а внешняя по отношению к паре среда обеспечивает монотонное затухание сигнала свободной индукции и подавление вклада в него внутривпарных движений тем большее, чем меньше в создаваемом ей поле доля флуктуирующего. Чем быстрее флуктуирует спин, тем меньше его вклад в сигнал свободной индукции. Каждый спин в ограниченном объеме как бы «размазан» по пространству и вклад его в сигнал свободной индукции определяется теми участками, которые дают минимальный вклад; вклад остальных участков быстро затухает. Это — специфический эффект нерегулярной системы. Чем дальше спины от точки, где наблюдается поле от них, тем больше вероятность появления среди них такого, который дает медленно флуктуирующее поле из большей части области своей размазки, что определит скорость затухания $G(t)$. Это и приводит к различию влияния разброса скоростей флуктуаций в системе на эффект затухания, связанный с наличием бесконечных расстояний, и эффект осцилляций, связанный с конечными расстояниями.

6. ОЦЕНКА ВКЛАДА КЛАСТЕРОВ ВЫСШИХ РАНГОВ В КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ФУНКЦИИ

Проведение вычислений в более высоком порядке кластерного разложения (выделение троек) не приводит к изменению результатов, по крайней мере при наличии в системе флуктуаций локальных полей. Действительно, сравнивая (5) и (20), видим, что выражение для функции спада свободной индукции от троек имеет вид

$$G_3^3(t) \sim \exp\left[-\frac{2}{\sqrt{\pi}}D\sqrt{I(t)}\right] C^2 \int dr_1 dr_2 \cos\left(\frac{3}{4}A_{r_1}t\right) \cos\left(\frac{3}{4}A_{r_2}t\right) \times \\ \times \exp\left\{-C \int_{q \in V_{0r_1r_2}} dq \exp\left[-\frac{9}{16}A_q^2 I(t)\right]\right\}, \quad (36)$$

где $V_{0r_1r_2}$ — запрещенный объем тройки спинов. Учитывая, что

$$2C \int_{q \in V_{0r_1r_2}} dq \exp \left[-\frac{9}{16} A_q^2 I(t) \right] > C \int_{q \in V_{0r_1}} dq \times \\ \times \exp \left[-\frac{9}{16} A_q^2 I(t) \right] + C \int_{q \in V_{0r_2}} dq \exp \left[-\frac{9}{16} A_q^2 I(t) \right],$$

получаем после замены переменных

$$G_3^3(t) < \exp \left(-\frac{2}{\sqrt{\pi}} D \sqrt{I(t)} \right) \times \\ \times \left[C \int dr \cos \left(\frac{3}{4} A_r \frac{t}{2} \right) \exp \left\{ -C \int_{q \in V_{0r}} dq \exp \left(-\frac{9}{16} A_q^2 \frac{I(t)}{4} \right) \right\} \right]^2.$$

Выражение в квадратных скобках есть интеграл в формуле для G_2^2 в (22) с точностью до числового коэффициента с заменой $t \rightarrow t/2$, $\tau_c \rightarrow \tau_c/2$ при больших t . Но из (25)–(27) и последующих формул в конце разд. 4 видно, что асимптотика этого интеграла имеет вид $\exp(-\beta\sqrt{Dt})$, где $\beta > 0$ слабо зависит от τ_c . Таким образом,

$$G_3^3(t) \sim G_2^2(t) \exp \left[-\beta (\sqrt{2} - 1) \sqrt{Dt} \right]$$

и в долговременном пределе вкладом троек можно пренебречь. Использование выражений настоящего раздела для $G_l^k(t)$ не меняет этого вывода. Рассуждение оказывается неверным только в случае полного отсутствия флуктуаций в системе. Тогда отсутствует затухание за счет усреднения внутрикластерных движений по конфигурациям и, как видно из сравнения (20) и (24), порядок k кластерного разложения дает степень $(Dt)^k$ перед основной экспонентой $\exp(-\sqrt{2/\pi}Dt)$, и все порядки в целом могут привести к перенормировке показателя этой экспоненты, что естественно, если вспомнить, что в этом случае точна модель Андерсона с $G(t) = \exp(-Dt)$.

С другой стороны, при малых и средних t вклад троек подавлен их малой концентрацией [3], так что их учет в функции формы линии резонанса может сказаться в виде числовой поправки к коэффициенту в асимптотике пар на далеком крыле, но там вообще существен только факт исчерпания крыла линии кластерами, что достигается уже при $k = 2$.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе проведен количественный анализ основной проблемы теории функции формы линии и спада свободной индукции в магниторазбавленной спиновой системе как на основе точно решаемой модели Андерсона, так и в приближении нормального случайного процесса для локальных полей. В пределе медленных флуктуаций оба подхода практически совпадают. Временные флуктуации спинов на крыле линии поглощения обеспечиваются в основном четырехспиновым процессом, возникающим

во втором порядке теории возмущений, причем соответствующая функция корреляции локального поля убывает значительно медленнее, чем функции, обычно применяемые для описания таких процессов в пространственно-регулярных средах [18]. В системе существуют весьма медленные флуктуации, которые не дают существенного вклада в долговременные асимптотики из-за своего малого статистического веса, но приводят к сильному замедлению выхода на асимптотику, в результате чего полная функция спада свободной индукции системы на значительных временах может быть описана моделью Андерсона.

Данный результат весьма важен и нетривиален. Дело в том, что обычно в спиновой кинетике пространственно-регулярных систем лоренцева линия возникает в пределе малых времен корреляции, т. е. быстрых флуктуаций локальных полей. Это утверждение справедливо почти при любом типе взаимодействия и любой размерности пространства. В магниторазбавленных системах и в модели Андерсона механизм появления лоренцевой линии совершенно иной. Здесь, наоборот, бесконечно большое время корреляции, и лоренцева линия появляется, только если взаимодействие убывает с расстоянием как $1/r^d$, где d — размерность пространства. Известно, что при сужении в результате движения лоренцева линия не модифицируется, если движение имеет характер некоррелированных столкновений. В действительности временные флуктуации локальных полей гладкие, и поэтому адекватность модели Андерсона для немалых времен удивительна.

Более простая модель, чем использованная в настоящей работе, основывается на предположении, что поле на каждой спине может быть аппроксимировано нормальным случайным процессом, причем от конфигурации зависит только второй момент [3]. Для спада свободной индукции при этом получается

$$G(t) = \exp \left[-\sqrt{\frac{2}{\pi}} D \sqrt{2I(t)} \right]. \quad (37)$$

В этой модели лоренцева линия меняет форму и сколь угодно сильно сужается по мере роста скорости флуктуаций локальных полей $1/\tau_c$. В пределе медленных флуктуаций соотношение (37) удовлетворительно согласуется с моделью Андерсона, однако в случае реалистичных τ_c на средних временах результат этой модели сильно расходится с выводами кластерного анализа, которые гораздо ближе к результату Андерсона.

Полная функция спада свободной индукции экспоненциальна на малых и средних временах и становится корневой экспонентой на больших, причем время выхода на асимптотику существенно связано с видом корреляционной функции локальных полей от самых медленных объектов в системе. Фактически происходит сильное замедление выхода спада свободной индукции на асимптотику.

Развитие методов кластерных разложений позволило показать, что регулярная процедура выделения сильно взаимодействующих групп спинов из системы приводит к адекватному описанию многих явлений, причем достаточен уже второй порядок разложения, так как третий приводит лишь к незначительной поправке.

Существующие теории спада свободной индукции не претендовали на описание его на средних и больших временах. Проведенное нами рассмотрение даст предсказание характера спада свободной индукции практически на всех временах, что делает возможной экспериментальную проверку адекватности построенной в данной работе модели реальным процессам в низкоконцентрированной спиновой системе.

Литература

1. А. Абрагам, М. Гольдман, *Ядерный магнетизм, порядок и беспорядок*, Мир, Москва (1984).
2. Р. Эрнст, Дж. Боденхаузен, А. Вокаун, *ЯМР в одном и двух измерениях*, Мир, Москва (1990).
3. Ф. С. Джепаров, Е. К. Хеннер, *ЖЭТФ* **104**, 3667 (1993).
4. Ю. Г. Абов, А. Д. Гулько, Ф. С. Джепаров и др., *ЭЧАЯ* **26**, 1654 (1995).
5. В. А. Ацаркин, Г. А. Васнева, В. В. Демидов, *ЖЭТФ* **91**, 1523 (1986).
6. Э. В. Авагян, В. А. Ацаркин, Г. А. Васнева, *ЖЭТФ* **85**, 1790 (1983).
7. D. A. Drobolt and P. A. Fedders, *Phys. Rev. B* **37**, 3440 (1988).
8. Ф. С. Джепаров, Э. Б. Фельдман, *Изв. АН СССР, сер. физ.* **52**, 455 (1988).
9. P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **82**, 342 (1951).
10. Ф. С. Джепаров, Е. К. Хеннер, *ЖЭТФ* **96**, 1844 (1989).
11. E. V. Feldman and S. Lacelle, *J. Chem. Phys.* **104**, 2000 (1996).
12. P. W. Anderson and P. R. Weiss, *Rev. Mod. Phys.* **25**, 269 (1953).
13. R. Kubo, *J. Phys. Soc. Jap.* **17**, 1100 (1962).
14. M. Tanaka, Y. Aoyama, and Y. Yamamoto, *J. Phys. Soc. Jap.* **59**, 32 (1990).
15. A. G. Demenev and E. K. Henner, in *Extend. Abstracts of XXVII Congress Ampere, Kazan (1994)*, p. 196.
16. Ф. С. Джепаров, *ЖЭТФ* **99**, 982 (1991).
17. Ф. С. Джепаров, А. А. Лундин, Т. Н. Хазанович, *ЖЭТФ* **92**, 554 (1987).
18. F. S. Dzheparov and S. V. Stepanov, in *«Muons and pions in matter», Proc. III Int. Symposium on muon and pion interactions with matter, Dubna (1995)*, p. 247.