ЖЭТФ, 2003, том 124, вып. 1 (7), стр. 89–95

О КООРДИНАТЕ ОСОБОЙ ТОЧКИ ВРЕМЕННЫХ КОРРЕЛЯЦИОННЫХ ФУНКЦИЙ СИСТЕМЫ ЯДЕРНЫХ МАГНИТНЫХ МОМЕНТОВ КРИСТАЛЛА

В. Е. Зобов [*]

Институт физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук
660036, Красноярск, Россия

М. А. Попов

Красноярский государственный университет
660041, Красноярск, Россия

Поступила в редакцию 25 декабря 2002 г.

Проверяется гипотеза о наличии особых точек на оси мнимого времени у корреляционной функции системы с диполь-дипольным взаимодействием ядерных спинов кристалла. В рамках теории самосогласованного флуктуирующего поля с учетом главных поправок, связанных с корреляцией локальных полей, получен результат для этой координаты, выраженный через отношения решеточных сумм. Экспериментальные значения этой координаты рассчитаны по крыльям спектра поглощения ядерного магнитного резонанса в кристалле BaF_2 при направлениях магнитного поля вдоль трех кристаллографических осей. Хорошее согласие теоретических и экспериментальных значений свидетельствует в пользу гипотезы.

PACS: 76.20.+q

1. ВВЕДЕНИЕ

Ядерные магнитные системы кристаллов являются удобными объектами изучения неравновесной статистической физики систем многих частиц. Дело в том, что, во-первых, известна точная форма взаимодействия — диполь-дипольная, во-вторых, магнитная система хорошо изолирована от решетки, в-третьих, можно управлять состоянием системы с помощью резонансного радиочастотного поля и следить за ним методами ядерного магнитного резонанса (ЯМР). Одной из важных характеристик таких систем служит скорость установления равновесия между подсистемами при наличии большой расстройки резонансных частот, которая определяется крыльями спектров корреляционных функций. Это обстоятельство стимулировало их изучение. В ряде экспериментальных работ было обнаружено, что частотная зависимость крыльев спектров описывается простой экспоненциальной функцией (см., например, [1–3], а также анализ других экспериментов в [4]) вместо ожидаемой функции Гаусса [5]. Необычность такой формы крыла спектра заключается в том, что соответствующая корреляционная функция должна иметь особые точки на оси мнимого времени, что, в свою очередь, может служить указанием на новый тип коллективных эффектов в таких системах. К сожалению, низкая точность регистрации слабого сигнала на крыле спектра оставляет сомнения в интерпретации его формы.

Теоретические исследования [6] подтвердили возможность существования у корреляционных функций жестких спиновых решеток при высоких температурах особых точек на оси мнимого времени, по крайней мере, для решеток большой размерности d. Отличие формы крыла спектра от распределения Гаусса обусловлено флуктуациями во времени локального магнитного поля на спине, происходящими вследствие переворотов создающих это поле соседних спинов. В свою очередь, причиной переворотов служит внутреннее взаимодействие между спинами (диполь-дипольное или обменное). Координату особой точки удается достаточно легко рассчитать [6–9]

[*] E-mail: rsa@iph.krasn.ru

в приближении самосогласованного флуктуирующего локального поля для решеток большой размерности, т. е. в том случае, когда можно пренебречь корреляцией локальных полей. Задача об изменении этой координаты при уменьшении размерности пространства пока не решена.

В предыдущих работах [10, 11] нами найдены первые члены разложения по обратной размерности пространства для координаты особой точки автокорреляционной функции (АКФ) гейзенберговской модели с изотропным взаимодействием ближайших соседей. При этом экспериментальные данные [1–3] получены для ядерных магнитных систем кристаллов с диполь-дипольным взаимодействием. Оно отличается, во-первых, анизотропией, во-вторых, необходимостью учета дальних соседей. Оба этих фактора рассматриваются в настоящей работе при нахождении координаты особой точки.

В разд. 2 в приближении самосогласованного флуктуирующего поля выписывается простое нелинейное уравнение для АКФ, учитывающее аксиальную симметрию диполь-дипольного взаимодействия в спиновом пространстве, вычисляется координата особой точки его решения и выводится формула изменения этой координаты при малом изменении коэффициентов ряда по степеням времени для АКФ. В разд. 3 рассчитываются первые поправки к координате особой точки вследствие корреляции локальных полей, возникающей при уменьшении размерности пространства. В разд. 4 теоретические результаты сравниваются с экспериментальными.

2. УРАВНЕНИЯ ДЛЯ АВТОКОРРЕЛЯЦИОННЫХ ФУНКЦИЙ

Рассмотрим систему ядерных магнитных моментов со спином $I = 1/2$, образующих правильную решетку размерности d. Динамика спинов в сильном постоянном магнитном поле определяется секулярной частью диполь-дипольного взаимодействия с гамильтонианом [5]

$$\mathcal{H} = \sum_{i\neq j} b_{ij}\left[I_i^z I_j^z - \frac{1}{2}(I_i^x I_j^x + I_i^y I_j^y)\right], \qquad (1)$$

где

$$b_{ij} = \frac{\gamma^2\hbar(1-3\cos^2\theta_{ij})}{2r_{ij}^3},$$

θ_{ij} — угол межъядерного вектора $\mathbf{r}_{ij}$ с постоянным магнитным полем, I_i^α — α-компонента ($\alpha = x, y, z$) векторного оператора спина в узле i. Зависящие от времени корреляционные функции двух спинов, расположенных в узлах решетки i и j, при высокой температуре определены выражением [5]

$$\Gamma_{\alpha ij}(t) = \frac{\mathrm{Sp}\left\{\exp(i\mathcal{H}t)I_i^\alpha \exp(-i\mathcal{H}t)I_j^\alpha\right\}}{\mathrm{Sp}\left\{(I_i^\alpha)^2\right\}}. \qquad (2)$$

При $i \neq j$ получаем перекрестную корреляционную функцию, а при $i = j$ — автокорреляционную. В силу трансляционной симметрии решетки у АКФ будем опускать индекс «ii». Учитывая аксиальную симметрию гамильтониана относительно спиновых компонент, будем использовать обозначения $\Gamma_x(t) = \Gamma_y(t) = X(t)$. Автокорреляционные функции (2) могут быть разложены в степенные ряды

$$\Gamma_\alpha(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n M_{2n\alpha} t^{2n}}{(2n)!}, \qquad (3)$$

где n-й коэффициент разложения определяется через $2n$-кратный коммутатор

$$M_{2n\alpha} = \frac{\mathrm{Sp}\left\{[\mathcal{H},[\mathcal{H},\ldots[\mathcal{H},I_i^\alpha]\ldots]I_i^\alpha\right\}}{\mathrm{Sp}\left\{(I_i^\alpha)^2\right\}}. \qquad (4)$$

Как известно [5], $M_{2n\alpha}$ является моментом порядка $2n$ спектральной плотности соответствующей АКФ.

Из-за сложности описания многочастичной системы с сильными взаимодействиями точных уравнений для АКФ не получено. Предложено много приближенных вариантов уравнений. В частности, в работах [12, 13] для АКФ выведена система нелинейных интегральных уравнений

$$\frac{d}{dt}\Gamma_\alpha(t) = -\int_0^t G_\alpha(t-t_1)\Gamma_\alpha(t_1)\,dt, \qquad (5)$$

ядра которых представлены в виде ряда по неприводимым одетым скелетным диаграммам с возрастающим числом вершин. Каждый член ряда выражается через многократный временной интеграл от произведений функций $\Gamma_x(t)$ и $\Gamma_z(t)$. Были найдены все вклады, соответствующие диаграммам с двумя и четырьмя вершинами.

Система уравнений (5) была исследована в работах [6] в приближении решеток бесконечной размерности, соответствующем приближению самосогласованного флуктуирующего локального поля. В этом пределе уравнения для АКФ отвечают усредненной прецессии магнитного момента в трехмерном гауссовском случайном локальном поле, корреляционные функции которого выражаются через спиновые АКФ следующим образом:

$$\langle\omega_\alpha(t)\omega_\alpha(0)\rangle = \langle\omega_\alpha^2\rangle\Gamma_\alpha(t), \qquad (6)$$

где

$$\langle\omega_x^2\rangle = \langle\omega_y^2\rangle = \frac{S_1}{4}, \quad \langle\omega_z^2\rangle = S_1, \quad S_1 = \sum_j b_{ij}^2.$$

Для рядов $G_{\alpha 0}(t)$ указаны мажорирующие ряды, а также установлено существование у АКФ особых точек на оси мнимого времени. В окрестности ближайшей особой точки с координатой τ_0 главная часть имеет вид

$$\Gamma_\alpha(t) \approx A_\alpha(\tau_0 + it)^{-2}. \tag{7}$$

Координата особой точки, оцененная по спектральным моментам от второго до десятого порядка, имеет значение

$$\tau_0 = \frac{2.77}{M_{2x}^{1/2}}, \tag{8}$$

где $M_{2x} = 5S_1/4$ — второй момент спектра функции $\Gamma_x(t)$.

При конечной размерности пространства в ряде для ядра следует учитывать дополнительные члены

$$\delta G_\alpha(t) = G_\alpha(t) - G_{\alpha 0}(t),$$

содержащие петли из связей и многократные взаимодействия соседних спинов. Эти поправки, отражающие корреляцию локальных полей, исчезают в пределе $d \to \infty$. Естественно ожидать, что при достаточно большой размерности пространства относительные изменения моментов АКФ $M_{2n\alpha}$ и координаты особой точки τ_c после учета дополнительных членов будут малыми, порядка $\varepsilon \sim 1/d$,

$$M_{2n\alpha} = M_{2n\alpha}^{(0)} - \varepsilon M_{2n\alpha}^{(1)} + \ldots, \quad \tau_c = \tau_0 + \varepsilon\delta\tau_c + \ldots$$

Координата τ_c особой точки, равная радиусу сходимости ряда по степеням времени, может быть определена как предел отношения моментов

$$\tau_c^2 = \lim_{n\to\infty} \frac{M_{2(n-1)\alpha}}{M_{2n\alpha}} 2n(2n-1) = \\ = \tau_0^2 \lim_{n\to\infty} \frac{1 - \varepsilon M_{2(n-1)\alpha}^{(1)}/M_{2(n-1)\alpha}^{(0)} + \ldots}{1 - \varepsilon M_{2n\alpha}^{(1)}/M_{2n\alpha}^{(0)} + \ldots}.$$

Тогда

$$2\frac{\delta\tau_c}{\tau_0} = \lim_{n\to\infty} \left(\frac{M_{2n\alpha}^{(1)}}{M_{2n\alpha}^{(0)}} - \frac{M_{2(n-1)\alpha}^{(1)}}{M_{2(n-1)\alpha}^{(0)}} \right). \tag{9}$$

Ввиду сложности рядов $G_{\alpha 0}(t)$ даже первые поправки $M_{2n}^{(1)}$ линейные по ε найти очень трудно. Поэтому для оценки $\delta\tau_c$ возьмем приближенный вариант уравнения для $\Gamma_\alpha(t)$, допускающий вычисления моментов высокого порядка. В случае диполь-дипольного взаимодействия (1) усилиями многих авторов [3, 4, 8, 9, 14–18] установлено, что хорошее приближение получается, если провести полный учет взаимодействия между z-компонентами спина (продольного) при минимально необходимом учете xx- и yy-взаимодействий (поперечных). Для АКФ x-компоненты спина возьмем уравнение Андерсона–Вейсса [19], описывающее прецессию спина в гауссовском продольном поле, перенормируем это поле для обеспечения правильного значения второго момента M_{2x} и определим его корреляционную функцию (6) через АКФ z-компоненты спина [4, 8, 9]:

$$X(t) = \exp\left\{ \int_0^t \int_0^{t_1} \Gamma_z(t_2)\, dt_1 dt_2 \right\}. \tag{10}$$

Здесь и далее в формулах мы перешли к мнимому безразмерному времени $t \to it(5S_1/4)^{-1/2}$, сохранив за ним прежнее обозначение. После такой замены показатель в выражении (10) стал положительным, а коэффициент M_{2x} перед интегралом — равным единице. Для АКФ z-компоненты будем использовать уравнение

$$\Gamma_z(t) = 1 + \frac{2}{5} \int_0^t \int_0^{t_1} X^2(t_2)\, dt_1 dt_2, \tag{11}$$

которое, как показано ниже, дает для положения особой точки на оси мнимого времени незначительное отличие по сравнению с использованным нами ранее уравнением [4, 8, 9]

$$\Gamma_z(t) = 1 + \frac{2}{5} \int_0^t \int_0^{t_1} X^2(t_2)\Gamma_z(t_1 - t_2)\, dt_1 dt_2, \tag{12}$$

но упрощает расчеты.

Поскольку ядром уравнения (11) является $X^2(t)$, обозначим последнее через $Y(t)$ и получим для него с помощью (10) дифференциальное уравнение

$$\frac{d}{dt} Y(t) = 2Y(t) \int_0^t \Gamma_z(t_1)\, dt_1 = \\ = 2Y(t) \left\{ t + \frac{2}{5} \int_0^t \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} Y(t_3)\, dt_1 dt_2 dt_3 \right\}. \tag{13}$$

Подставим в уравнение (13) $Y(t)$ в виде ряда

$$Y(t) = \sum_{n=0}^{\infty} t^{2n} Y_{2n}. \tag{14}$$

Приравняв коэффициенты при равных степенях времени, получим рекуррентное уравнение

$$Y_{2n} = \frac{1}{n} Y_{2n-2} + \frac{2}{5n} \sum_{k=0}^{n-2} \frac{Y_{2k} Y_{2(n-k-2)}}{(2k+1)(2k+2)(2k+3)}. \quad (15)$$

Координата особой точки, равная радиусу сходимости ряда (14), может быть определена с учетом степени полюса (7) как предел отношения

$$\tau_0^2 = \lim_{n\to\infty} \frac{Y_{2n-2}(2n+2)(2n+3)}{Y_{2n}(2n-1)2n}. \quad (16)$$

Решая рекуррентное уравнение (15), находим по формуле (16)

$$\tau_0 = \frac{2.69}{M_{2x}^{1/2}}.$$

Тогда как при использовании уравнения (12) со сверткой получается

$$\tau_0 = \frac{2.68}{M_{2x}^{1/2}}.$$

Оба эти значения отличаются от более точного (8) на 3 %. Такое различие практически не скажется на величине поправок $\delta\tau_c$, поэтому при их расчете мы будем пользоваться простейшим уравнением.

3. РАСЧЕТ ПОПРАВОК К КООРДИНАТЕ ОСОБОЙ ТОЧКИ КОРРЕЛЯЦИОННОЙ ФУНКЦИИ

Рассмотрим функцию $\Gamma_x(t)$ как производящую функцию решеточных фигур, образованных связями b_{ij}. Основанием для этого служит структура выражения для моментов (4), каждый коммутатор с $\mathcal{H}$ в котором добавляет связь b_{ij} к уже построенной фигуре. Более детально правила построения фигур рассмотрены в [6, 10, 11]. Решение системы уравнений (10) и (11) нулевого приближения служит производящей функцией корневых деревьев, построенных из двойных связей. На этих деревьях двойные связи от zz-взаимодействий (z-поля уравнения (10)) чередуются со связями от xx- и yy-взаимодействий (изменения z-полей, описываемые уравнением (11)). У них из каждого узла может отходить любое число ветвей, которые не имеют пересечений, что может выполняться при $d \to \infty$. При построении фигур на решетках конечной размерности есть вероятность, что ветви пересекутся или непосредственно у узла, из которого растут, приводя к многократному взаимодействию соседей, или у отдаленного узла, образуя петлю из связей. У дерева с подобным фрагментом весовой множитель, полученный при его построении путем вычисления исходных многократных коммутаторов (4), не совпадает с таковым, полученным при пересечении от механического наложения ветвей, построенных независимо по уравнениям (10) и (11) и размещенных на реальной решетке. Поэтому последние следует исключить и заменить на деревья с правильным весом.

Для теоретической оценки изменения координаты особой точки АКФ вследствие описанных изменений величины моментов будем рассматривать размерность d пространства переменной величиной. Выберем d достаточно большим, тогда вероятность пересечения мала, и мы можем ограничиться простейшими пересечениями: четырехкратным взаимодействием соседей и петлей в виде треугольника из четырех связей. Такие вклады содержатся уже в четвертом моменте АКФ. Пересечения с участием большего числа связей дают более высокий порядок малости по $1/d$ [9, 10]. В случае диполь-дипольного взаимодействия и $d = 3$ об их малости свидетельствует соотношение величин решеточных сумм [2, 20, 21].

3.1. Четырехкратное взаимодействие соседей

В случае не очень большого числа соседей для повышения точности основного приближенного уравнения, как показано в работе [3], следует заменить функцию Андерсона–Вейсса (10) на произведение

$$P_i(t) = \prod_j F_{ij}(t), \quad (17)$$

$$F_{ij}(t) = 1 + \frac{b_{ij}^2}{S_1} \int_0^t \int_0^{t_1} F_{ij}(t_2) \Gamma_{zj/i}(t_1 - t_2)\, dt_1 dt_2, \quad (18)$$

где $\Gamma_{zj/i}(t)$ — АКФ z-компоненты спина j, у которого исключено взаимодействие со спином i, поле на котором рассматривается,

$$\Gamma_{zj/i}(t) = 1 + \frac{2}{5} \sum_{k\neq i,j} \frac{b_{jk}^2}{S_1} \times \\ \times \int_0^t \int_0^{t_1} \frac{P_j(t_2) P_k(t_2)}{F_{ij}(t_2) F_{jk}^2(t_2)} \Gamma_{zj/i}(t_1 - t_2)\, dt_1 dt_2. \quad (19)$$

В ядре этого интегрального уравнения дополнительно исключено повторное взаимодействие спинов j и k.

Продифференцируем по времени квадрат функции $P_{ij}(t)$ (17):

$$\frac{d}{dt} P_i^2(t) = 2P_i^2(t) \sum_{j\neq i} \frac{1}{F_{ij}(t)} \frac{d}{dt} F_{ij}(t). \quad (20)$$

Легко проверить с учетом (17)–(20), что при пренебрежении вкладом отдельного взаимодействия b_{ij}^2 по сравнению с суммой S_1 мы возвращаемся к уравнению нулевого приближения (13). С точностью до первой поправки от этих вкладов находим

$$Y(t) = P_i^2(t) = Y_0(t) - \frac{S_2}{S_1^2} Y_1(t).$$

Здесь

$$S_2 = \sum_j b_{ij}^4,$$

а $Y_1(t)$ является решением уравнения

$$\frac{d}{dt} Y_1(t) = 2Y_1(t) \int\limits_0^t \Gamma_z(t_1)\, dt_1 + \frac{4}{5} Y_0(t) \int\limits_0^t \int\limits_0^{t_1} \int\limits_0^{t_2} Y_1(t_3)\, dt_1 dt_2 dt_3 + C \frac{dY_0(t)}{dt} \int\limits_0^t \int\limits_0^{t_1} \Gamma_z(t_2)\, dt_1 dt_2 + \\ + \frac{4}{5} D Y_0(t) \int\limits_0^t \int\limits_0^{t_1} \int\limits_0^{t_2} Y_0(t_3)\, dt_1 dt_2 dt_3 + \frac{8}{5} A Y_0(t) \int\limits_0^t \int\limits_0^{t_1} \int\limits_0^{t_2} Y_0(t_3)\, dt_1 dt_2 dt_3 \int\limits_0^{t_3} \int\limits_0^{t_4} \Gamma_z(t_5)\, dt_4 dt_5 - \\ - 2BY_0(t) \int\limits_0^t \Gamma_z(t - t_1)\, dt_1 \int\limits_0^{t_1} \int\limits_0^{t_2} \Gamma_z(t_3)\, dt_2 dt_3, \quad (21)$$

в котором $\Gamma_z(t)$ определяется через $Y_0(t)$ с помощью уравнения (11). В уравнении (21) введены коэффициенты A, B, C и D с целью выделения вкладов различной природы. Вклад, соответствующий исключению четырехкратного взаимодействия соседей вследствие пересечения ветвей дерева, выходящих из одного узла, получаем при $A = 3/2$, $C = 1$, $D = 1$, $B = 0$. При $A = 0$, $C = 0$, $D = 0$, $B = 1$ получаем вклад четырехкратного взаимодействия с правильным весом, входящий поэтому с другим знаком. Этот вклад проистекает от второй итерации в уравнении (18).

3.2. Треугольник из четырех связей

Простейшие петли в виде треугольника возникают по двум причинам. Во-первых, из-за вклада перекрестной корреляционной функции $\Gamma_{zjk}(t)$ в корреляторе локального поля на выделенном спине в выражениях (10) и (17). Во-вторых, как результат одновременного действия поля от третьего спина на оба спина, связанных поперечным (флип-флоп) взаимодействием в ядрах интегральных уравнений (11) и (19) для $\Gamma_z(t)$. В однопетлевом приближении получаем

$$Y(t) = Y_0(t) - \frac{S_3}{S_1^2} Y_1(t),$$

где

$$S_3 = \sum_{i,j} b_{ij}^2 b_{ik} b_{jk},$$

$Y_0(t)$ — нулевое приближение (13), а для поправки первого порядка $Y_1(t)$ получаем уравнения вида (21) со следующими значениями параметров: $A = 1$, $B = 0$, $C = 0$, $D = 1$.

Структуру уравнения (21) легко понять на языке производящих функций корневых деревьев со встроенным в них фрагментом с пересечением ветвей. Слагаемые правой части с коэффициентами A, B, C и D представляют вклад соответствующего фрагмента с пересечением, присоединенного к корню дерева. Если же пересечение произошло у отдаленного узла дерева, то необходимая цепочка связей, ведущая от корня к фрагменту, набирается с помощью первых двух членов правой части уравнения посредством итераций. Напомним, что мы работаем в линейном по пересечениям приближении, т. е. предполагаем, что на дереве не более одного пересечения. Вследствие этого допущения и трансляционной инвариантности узлов в решетке вид выражения для фрагмента не зависит от его места на дереве, хотя его вклад в $Y_1(t)$, естественно, зависит от длины ведущей к нему цепи.

3.3. Расчет поправок

Подставим ряды (14) для функций $Y_0(t)$ и $Y_1(t)$ в уравнение (21). Для коэффициентов $Y_{2n}^{(1)}$ функции $Y_1(t)$ получаем рекуррентное уравнение

$$
\begin{aligned}
Y_{2n}^{(1)} = \frac{1}{n}Y_{2n-2}^{(1)} + \frac{2}{5n}\sum_{k=0}^{n-2}\frac{Y_{2k}^{(0)}Y_{2(n-k-2)}^{(1)} + Y_{2k}^{(1)}Y_{2(n-k-2)}^{(0)}}{(2k+1)(2k+2)(2k+3)} + D\left(Y_{2n}^{(0)} - \frac{1}{n}Y_{2n-2}^{(0)}\right) + \frac{C}{2}\left(1-\frac{1}{n}\right)Y_{2n-2}^{(0)} + \\
+ \frac{C}{5n}\sum_{k=0}^{n-2}\frac{2(n-k-2)Y_{2k}^{(0)}Y_{2(n-k-2)}^{(0)}}{(2k+1)(2k+2)(2k+3)(2k+4)} + \frac{2A}{5n}\sum_{k=0}^{n-3}\frac{Y_{2k}^{(0)}Y_{2(n-k-3)}^{(0)}}{(2k+3)(2k+4)(2k+5)} + \\
+ \frac{8A}{25n}\sum_{k=0}^{n-4}\sum_{p=0}^{n-k-4}\frac{Y_{2p}^{(0)}Y_{2k}^{(0)}Y_{2(n-k-p-4)}^{(0)}}{(2p+1)(2p+2)(2p+3)(2p+4)(2k+2p+5)(2k+2p+6)(2k+2p+7)} - \\
- \frac{B}{6n}Y_{2n-4}^{(0)} - \frac{4B}{5n}\sum_{k=0}^{n-3}\frac{(2k)!}{(2k+5)!}Y_{2k}^{(0)}Y_{2(n-k-3)}^{(0)} - \\
- \frac{4B}{25n}\sum_{k=0}^{n-4}\sum_{p=0}^{k}\frac{(2k-2p)!(2p)!}{(2k+7)!}Y_{2p}^{(0)}Y_{2(k-p)}^{(0)}Y_{2(n-k-4)}^{(0)}.
\end{aligned}
\tag{22}
$$

Вычислим по этому уравнению коэффициенты $Y_{2n}^{(1)}$ для разных вкладов, а затем по формуле (9) соответствующие поправки к координате особой точки. Поправка вследствие исключения запрещенного четырехкратного взаимодействия соседей ($A = 3/2$, $B = 0$, $C = 1$, $D = 1$) равна

$$\frac{S_2}{S_1^2}\,\frac{\delta\tau_c}{\tau_0} = 1.507\frac{S_2}{S_1^2}, \tag{23}$$

поправка вследствие добавления разрешенного четырехкратного взаимодействия соседей ($A = 0$, $B = 1$, $C = 0$, $D = 0$) —

$$\frac{S_2}{S_1^2}\,\frac{\delta\tau_c}{\tau_0} = -0.124\frac{S_2}{S_1^2}, \tag{24}$$

поправка вследствие учета корреляции полей в виде треугольника из четырех связей ($A = 1$, $B = 0$, $C = 0$, $D = 1$) —

$$\frac{S_3}{S_1^2}\,\frac{\delta\tau_c}{\tau_0} = 0.55\frac{S_3}{S_1^2}. \tag{25}$$

4. СРАВНЕНИЕ С ЭКСПЕРИМЕНТОМ

Главная часть (7) в окрестности ближайшей особой точки определяет крыло спектра АКФ

$$g(\omega) \approx A_\alpha|\omega|\exp\left(-|\omega|\tau_c\right). \tag{26}$$

Более того, поскольку особенности всех временных корреляционных функций рассматриваемой спиновой системы должны быть в одной и той же точке, показатель экспоненты в (26) будет одинаков. В том числе и для спектра поглощения ЯМР — образа Фурье от корреляционной функции полного спина системы [5].

Экспериментально крыло спектра поглощения ЯМР было исследовано в работе [3] в монокристалле BaF_2 при направлениях магнитного поля вдоль кристаллографических осей [111], [110] и [100]. Частотная зависимость спектра при расстройках от центра спектра, больших $2.2\sqrt{M_2}$ (для [100] уже с $2.1\sqrt{M_2}$), где $M_2 = 9S_1/4$, хорошо описывается экспоненциальной функцией (26) (это выражается в том, что приведенные на рис. 3 работы [3] в полулогарифмических координатах экспериментальные точки ложатся на прямую). Значения показателя экспоненты τ_e в (26), при которых достигается наилучшее согласие с экспериментом на интервале расстроек от $2.2\sqrt{M_2}$ до $3\sqrt{M_2}$, приведены в таблице в виде отношения к предельному теоретическому значению τ_0 (8). Среднеквадратичная погрешность увеличивается от 0.5 % в ориентации [111] до 2 % в ориентации [100] вследствие уменьшения отношения сигнал/шум при увеличении ширины линии ЯМР. Однако реальная точность определения τ_e ниже, во-первых, из-за систематических искажений, вносимых спектрометром на крыле, во-вторых, поскольку простая зависимость (26) достигается в пределе $\omega \to \infty$, т. е. в недоступной из-за помех области спектра. При приближении же к центру спектра начинает сказываться отклонение его формы от зависимости (26).

Вернемся к теоретическим результатам. Собирая поправки (23)–(25), получаем

$$\frac{\tau_c}{\tau_0} = 1 + 1.38\frac{S_2}{S_1^2} + 0.55\frac{S_3}{S_1^2}. \tag{27}$$

Отношения экспериментальных τ_e и теоретических τ_c значений координат особых точек корреляционных функций к предельному значению τ_0 (8) для трех направлений магнитного поля

Направление поля	τ_e/τ_0	τ_c/τ_0
[111]	1.10	1.14
[110]	1.24	1.25
[100]	1.33	1.34

Подставив значения решеточных сумм для простой кубической решетки из работы [2], находим величины этого отношения для трех основных ориентаций магнитного поля, представленные в таблице. Точность этих величин трудно оценить, поскольку разложение (27) является асимптотическим по $1/d$. Ошибку вследствие замены полного уравнения (5) на упрощенные (10) и (11), а также ошибку определения радиуса сходимости ряда по его коэффициентам мы оцениваем в 2–3 %.

Результаты, приведенные в таблице, демонстрируют хорошее согласие теоретических и экспериментальных значений координат особых точек корреляционных функций во всех трех ориентациях поля. При этом следует подчеркнуть, что ориентационная зависимость второго момента, являющаяся частотным масштабом спектра, не влияет на приведенные в таблице отношения. Их величина зависит не от среднего квадрата локальных полей, а от степени коррелированности этих полей, выраженной в (27) через отношения разных решеточных сумм. Совпадение двух независимых оценок координаты показывает, с одной стороны, что те ошибки, величину которых мы затруднялись оценить, невелики. С другой стороны, сами величины полученных отношений координат могут свидетельствовать о том, что при уменьшении размерности пространства от $d = \infty$ до $d = 3$ особая точка хоть и сдвигается, но не уходит на бесконечность. Окончательный вывод можно будет сделать, увеличив точность теоретических расчетов и экспериментальных измерений.

В заключение заметим, что результат (27) может быть применен к экспериментам, выполненным с другими кристаллами и при других ориентациях поля после подстановки соответствующих значений решеточных сумм.

Авторы признательны Ю. Н. Иванову и А. И. Лившицу за предоставленные экспериментальные спектры ЯМР. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 02-02-17463).

ЛИТЕРАТУРА

1. D. A. McArthur, E. L. Hahn, and R. E. Walstedt, Phys. Rev. **188**, 609 (1969).
2. H. T. Stokes and D. C. Ailion, Phys. Rev. B **15**, 1271 (1977).
3. В. Е. Зобов, М. А. Попов, Ю. Н. Иванов, А. И. Лившиц, ЖЭТФ **115**, 285 (1999).
4. В. Е. Зобов, А. А. Лундин, О. Е. Родионова, ЖЭТФ **120**, 619 (2001).
5. А. Абрагам, *Ядерный магнетизм*, Изд-во иностр. лит., Москва (1963).
6. В. Е. Зобов, ТМФ **77**, 426 (1988); **84**, 111 (1990).
7. M. Blume and J. Hubbard, Phys. Rev. B **1**, 3815 (1970).
8. A. A. Lundin, A. V. Makarenko, and V. E. Zobov, J. Phys.: Condens. Matter **2**, 10131 (1990).
9. В. Е. Зобов, А. А. Лундин, ЖЭТФ **106**, 1097 (1994).
10. В. Е. Зобов, ТМФ **123**, 116 (2000).
11. В. Е. Зобов, М. А. Попов, ТМФ **131**, 491 (2002).
12. P. Résibois and M. De Leener, Phys. Rev. **152**, 305 (1966).
13. P. Borckmans and D. Walgraef, Physica **35**, 80 (1967); Phys. Rev. **167**, 282 (1968).
14. P. Borckmans and D. Walgraef, Phys. Rev. B **7**, 563 (1973).
15. G. Sauermann and M. Wiegand, Physica B **103**, 309 (1981).
16. Г. Е. Карнаух, А. А. Лундин, Б. Н. Провоторов, К. Т. Сумманен, ЖЭТФ **91**, 2229 (1986).
17. М. И. Булгаков, А. Д. Гулько, Ф. С. Джепаров и др., Письма в ЖЭТФ **58**, 614 (1993).
18. Б. Н. Провоторов, Т. П. Кулагина, Г. Е. Карнаух, ЖЭТФ **113**, 967 (1998) .
19. P. W. Anderson and P. R. Weiss, Rev. Mod. Phys. **25**, 269 (1953).
20. W. F.Wurzbach and S. Gade, Phys. Rev. B **6**, 1724 (1972).
21. В. Е. Зобов, М. А. Попов, ЖЭТФ **103**, 2129 (1993); **108**, 1450 (1995).