1-799

сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

4648/2-81

14/9-81

Р17-81-406

В.Ф.Лось

КИНЕТИКА ПРИМЕСНОГО СПИНА В МАГНЕТИКАХ

1981

1. ВВЕДЕНИЕ

Теория магнетиков с примесными атомами /примесными спинами/ развита в ряде работ. При этом магнетик с примесными спинами описывался в рамках определенной модели /обычно гейзенберговской/. Так, например, в работах [1,2] развита теория гейзенберговского ферромагнетика с примесным спином при низких температурах, $T \ll T_c$/ T_c- температура Кюри/. В работах [3,4] рассмотрена динамика примесного спина в гейзенберговском ферромагнетике в широкой области температур вплоть до $T \sim T_c$.

В настоящем сообщении магнетик с примесным спином рассматривается с помощью эквивалентного спинового гамильтониана, который был предложен в работах [5,6]. Такой подход позволяет исследовать поведение примесного спина, не конкретизируя вид магнитной среды /матрицы/, с которой он взаимодействует, а также учитывать любую требуемую степень оператора этого спина $\vec{S}_0$ в гамильтониане взаимодействия его со средой. В качестве нулевого приближения принимается взаимодействие примесного спина со средним полем, обусловленным взаимодействием примесного спина с остальными спинами системы. Взаимодействие с флуктуациями этого среднего поля рассматривается как возмущение.

Выход за рамки гейзенберговской модели /что иногда бывает необходимым/, т.е. учет в гамильтониане нелинейных по $\vec{S}_0$ членов, может приводить, как будет видно из дальнейшего, к качественному изменению спектра примесного спина. В случае малой нелинейности спектр становится слегка неэквидистантным в отличие от эквидистантного /без учета флуктуаций среды/ спектра в гейзенберговской модели. Если вклад нелинейных по $\vec{S}_0$ членов не мал по сравнению с членами, описывающими гейзенберговский обмен, спектр примесного спина изменяется более существенным образом. Отметим, что взаимодействие с флуктуациями среднего поля может приводить к неэквидистантности спектра или даже к качественному его изменению /например, при расположении примесного спина между подрешетками гейзенберговского антиферромагнетика [7]/ уже в случае линейного по $\vec{S}_0$ взаимодействия [2-4] /в отличие от осциллятора [8,9] /.

Отличие спектра примесного спина от эквидистантного /даже в гейзенберговской модели за счет флуктуаций/ ведет к существенному усложнению его динамики. Ниже приведены кинетические уравнения для матрицы плотности примесного спина в случае ма-

© 1981 Объединенный институт ядерных исследований Дубна

Объединенный институт ядерных исследований БИБЛИОТЕКА

лой нелинейности спектра. С помощью этих уравнений получены замкнутые системы дифференциальных уравнений, описывающие кинетику поперечных и продольных компонент примесного спина при произвольной его величине S_0. Поскольку каждая такая система содержит $2S_0$ уравнений, кинетика примесного спина описывается в общем случае набором $2S_0$ экспонент.

Отметим, что полученные результаты, описывающие кинетику примесного спина, справедливы в широкой области температур, включая и окрестность фазового перехода второго рода в магнетике, в которой еще выполняется неравенство $\tau_{rel} \gg t_0$ / τ_{rel} - величина порядка времени релаксации, обусловленной взаимодействием примесного спина со средой, t_0 - характерное время релаксации для магнитной среды/.

2. ГАМИЛЬТОНИАН СИСТЕМЫ

Рассмотрим магентик, у которого магнитные моменты атомов обусловлены спинами недостроенных внутренних электронных оболочек. Пусть среди магнитных атомов кристалла имеются примесные атомы, у которых величины спина и /или/ обменного взаимодействия с атомами магнитной матрицы отличаются от соответствующих величин для атомов матрицы. Концентрацию таких примесных атомов будем считать малой и поэтому ограничимся рассмотрением магнетика /диэлектрика/ с одним примесным атомом /примесным спином/.

Будем характеризовать низший энергетический уровень E_0 рассматриваемой системы атомов в нулевом приближении /в отсутствие взаимодействия между атомами/ набором собственных значений m_n операторов z -компонент спинов недостроенных внутренних оболочек атомов S_n^z /n обозначает номер атома/ в основном стационарном состоянии. Относительно орбитальных моментов атомов предполагаем, что они "заморожены", т.е. что кристаллическое поле полностью снимает вырождение основного состояния по направлению орбитального момента. Уровень E_0 является вырожденным, поскольку m_n может принимать $(2S_n+1)$ значений для каждого атома / S_n - величина спина n -го атома/. Будем предполагать также, что все возбужденные уровни рассматриваемой системы отделены щелью от уровня E_0. Рассматривая взаимодействие электронов разных атомов как возмущение, рассмотрим расщепление уровня E_0 под влиянием этого возмущения.

Как известно [5,6], расщепление уровня E_0 в любом порядке теории возмущений может быть найдено с помощью эквивалентного гамильтониана $\tilde{H}$, который представляет собой самосопряженный оператор, действующий в линейном пространстве собственных волновых функций невозмущенного гамильтониана системы. Поскольку

собственные волновые функции гамильтониана нулевого приближения можно рассматривать как функции от m_n, то эквивалентный гамильтониан для рассматриваемой системы представляется функцией от операторов всех спинов системы

$$\tilde{H} = \tilde{H}(\vec{S}_0, \vec{S}_1, \ldots, \vec{S}_N), \qquad /1/$$

где $\vec{S}_0$ - оператор примесного спина, расположенного в узле или междоузлии, обозначаемом индексом 0, $\vec{S}_n$ - операторы спинов атомов магнитной матрицы / n =1, ..., N /.

Эквивалентный гамильтониан $\tilde{H}$ является инвариантным относительно преобразований, которые оставляют неизменным исходный гамильтониан системы. Будем учитывать кроме электростатических сил, которые не зависят от ориентации спинов, магнитные взаимодействия электронов /спин-спиновое и спин-орбитальное/. Тогда $\tilde{H}$ должен быть инвариантным относительно преобразования отражения времени $t \to -t$, а также относительно канонического/оставляющего неизменными перестановочные соотношения для спиновых операторов/ преобразования

$$\vec{S}_n \to -\vec{S}_n\,;\; i \to -i \qquad (n = 0,1,\ldots,N)\,. \qquad /2/$$

Очевидно, что гамильтониан /1/ можно представить в виде ряда по степеням спиновых операторов, причем из-за упомянутых свойств инвариантности каждый член разложения должен содержать четное число спиновых операторов, а коэффициенты разложения должны быть вещественными функциями радиус-векторов положений атомов в кристалле и индексов спиновых координат. Из эрмитовости $\tilde{H}$ следует, что коэффициенты разложения должны быть симметричными относительно одновременной перестановки индексов спиновых координат из исходного порядка в обратный в каждой группе индексов, относящейся к одному радиус-вектору положения. Например, для члена разложения типа

$$\sum_{\alpha_1\alpha_2 nn'} G_{\alpha_1\alpha_2}(n,n')\, S_n^{\alpha_1} S_{n'}^{\alpha_2} \quad (\alpha_1, \alpha_2 = x,y,z;\; n,n' = 0,1,\ldots,N)$$

имеем

$$G_{\alpha_1\alpha_2}(n,n') = G_{\alpha_2\alpha_1}(n',n) = G_{\alpha_2\alpha_1}(n,n')\,.$$

Коэффициенты разложения преобразуются как тензоры относительно допускаемых симметрией системы преобразований спиновых индексов и координат. Отметим, что рассматриваемое разложение должно быть совместно с областью определения невозмущенных волновых функций системы, которая определяется набором m_n и поэтому не может, например, содержать члена с $(S_n^x)^{2S_n+1}$.

Будем рассматривать в дальнейшем динамику примесного спина. С этой целью сгруппируем члены упомянутого разложения $\tilde{H}$ при одинаковых степенях оператора примесного спина $\vec{S}_0$. Таким образом, получим следующее разложение эквивалентного гамильтониана по степеням $\vec{S}_0$:

$$\tilde H(\vec S_0,\vec S_1,\dots,\vec S_N) = \tilde H_0(\vec S_1,\dots,\vec S_N) + \sum_\alpha \tilde H_0^\alpha(\vec S_1,\dots,\vec S_N) S_0^\alpha +$$
$$+ \sum_{\alpha_1\alpha_2} \tilde H_0^{\alpha_1\alpha_2}(\vec S_1,\dots,\vec S_N) S_0^{\alpha_1} S_0^{\alpha_2} + \dots = A(\vec S_0)\tilde H_0(\vec S_1,\dots,\vec S_N)\,. \qquad /3/$$

Здесь введен символический оператор $A(\vec S_0)$ разложения $\tilde H$ по степеням S_0^α, который определяется разложением /3/ с любой требуемой степенью приближения по оператору S_0^α. Функции $\tilde H_0(\vec S_1,\dots,\vec S_N)$, $\tilde H_0^\alpha(\vec S_1,\dots,\vec S_N),\dots$, как указывалось выше, могут быть представлены в виде разложений по операторам спинов атомов матрицы.

Учитывая /3/, представим теперь гамильтониан рассматриваемой спиновой системы в виде

$$\tilde H = H_0 + H_S + H_i\ ;$$
$$H_0 = [A(\vec S_0) - 1] < \tilde H_0(\vec S_1,\dots,\vec S_N) >_S\ ;$$
$$H_S = \tilde H_0(\vec S_1,\dots,\vec S_N)\ ; \qquad /4/$$
$$H_i = [A(\vec S_0) - 1][\tilde H_0(\vec S_1,\dots,\vec S_N) - < \tilde H_0(\vec S_1,\dots,\vec S_N)>_S]\ .$$

Здесь $<\dots>_S$ обозначает квантовостатистическое усреднение по состояниям спиновой среды /описываемой гамильтонианом H_S /, с которой взаимодействует примесный спин, причем эта среда предполагается находящейся в состоянии статистического равновесия. Однако поскольку ниже температуры перехода магнетика в упорядоченное спиновое состояние имеет место вырождение состояния статистического равновесия, будем /когда это необходимо/ подразумевать под $<\dots>_S$ квазисреднее [10], т.е.

$$<\dots>_S = \lim_{\nu\to 0}[\,Sp_S\, e^{-\lambda(H_S+h_\nu)}\,]^{-1}\ Sp_S[\,e^{-\lambda(H_S+h_\nu)}\dots],\quad (\lambda = \frac{1}{k_S T}),$$

причем сначала производится переход к термодинамическому пределу $V\to\infty (N\to\infty)$, а затем вычисляется предел $\nu\to 0$. Гамильтониан h_ν описывает взаимодействие спинов матрицы с некоторыми внешними магнитными полями /источниками/, включаемыми в систему для нарушения инвариантности H_S относительно преобразования /2/. Индекс ν описывает набор параметров, характеризующих источники, причем при $\nu\to 0$ величина этих внешних полей становится бесконечно малой.

Таким образом, гамильтониан H_0 описывает малую подсистему /примесный спин/, находящуюся в некотором эффективном магнитном поле, обусловленном взаимодействием с большой термодинамически равновесной спиновой средой /термостатом/. Гамильтониан

H_i описывает взаимодействие примесного спина с флуктуациями среды. Будем рассматривать далее слабо связанный примесный спин, т.е. спин, у которого взаимодействие со спинами матрицы значительно слабее взаимодействия спинов матрицы друг с другом, и считать H_i возмущением.

Гамильтониан /4/ позволяет исследовать поведение примесного спина в достаточно общем случае, не конкретизируя матрицу и учитывая любую требуемую степень оператора $\vec S_0$ в H_0 и H_i.

Ограничимся для простоты в дальнейшем случаем одноосного магнетика с осью анизотропии, направленной вдоль оси z. В этом случае с точностью до квадратичных по $\vec S_0$ членов гамильтониан H_0 принимает вид

$$H_0 = aS_0(S_0+1) - \omega^0 S_0^z + b(S_0^z)^2\ ;$$
$$a = <\tilde H_0^{xx}(\vec S_1,\dots,\vec S_N)>_S\ ;\quad \omega^0 = -<\tilde H_0^z(\vec S_1,\dots,\vec S_N) + \qquad /5/$$
$$+ i\tilde H_0^{xy}(\vec S_1,\dots,\vec S_N)>_S\ ;\quad b = <\tilde H_0^{zz}(\vec S_1,\dots,\vec S_N)>_S - a\,.$$

Здесь благодаря одноосной симметрии $<\tilde H_0^{xx}(\vec S_1,\dots,\vec S_N)>_S = <\tilde H_0^{yy}(\vec S_1,\dots,\vec S_N)>_S$, $<\tilde H_0^{xy}(\vec S_1,\dots,\vec S_N)>_S = -<\tilde H_0^{yx}(\vec S_1,\dots,\vec S_N)>_S$, причем $<\tilde H_0^{xy}(\vec S_1,\dots,\vec S_N)>_S$ равно нулю или чисто мнимой величине. Например, первый член разложения $\tilde H_0^{xy}(\vec S_1,\dots,\vec S_N)$ по операторам спинов матрицы равен $'G_{xy}(0,0) = -'G_{yx}(0,0) = 'G_{yx}(0,0) = 0$.

Отметим, что можно легко учитывать в случае необходимости и следующие члены разложения H_0 по $\vec S_0$.

Собственные значения оператора /5/ имеют вид

$$\omega_m = aS_0(S_0+1) - \omega^0 m + bm^2\,, \qquad /6/$$

где m - собственные значения оператора S_0^z, соответствующие собственным функциям $|m>$ $(m = S_0, S_0-1,\dots,-S_0)$.

В дальнейшем будем рассматривать слабо связанный примесный спин в случае слабой нелинейности, когда $|b| << |\omega^0|$ /при $\omega^0=0$ в антиферромагнетике будем полагать и $b=0$/ в гамильтониане /5/ и

$$H_i = \sum_\alpha S_0^\alpha[\tilde H_0^\alpha(\vec S_1,\dots,\vec S_N) - <\tilde H_0^\alpha(\vec S_1,\dots,\vec S_N)>_S]\,. \qquad /7/$$

Динамика слабо связанного примесного спина в случае, когда нелинейные по $\vec S_0$ члены не малы по сравнению с линейным, будет подробно рассмотрена в другом месте с учетом влияния флуктуаций среднего поля.

3. КИНЕТИЧЕСКИЕ УРАВНЕНИЯ ДЛЯ ПОПЕРЕЧНЫХ КОМПОНЕНТ ПРИМЕСНОГО СПИНА

Рассмотрим кинетическое уравнение для усредненных операторов приместного спина

$$\langle S_0^{\alpha}\rangle = \mathrm{Sp}_0[S_0^{\alpha}\rho_0(t)],$$

где $\mathrm{Sp}_0(\ldots)$ обозначает шпур по состояниям малой подсистемы /примесного спина/, $\rho_0(t) = \mathrm{Sp}_S\rho(t)$ - статистический оператор для примесного спина /$\rho(t)$ - статистический оператор всей системы/.

Эти уравнения имеют вид

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle S_0^{\alpha}\rangle = \sum_{mm'}(S_0^{\alpha})_m^{m'}\frac{\partial}{\partial t}[\rho_0(t)]_{m'}^{m}, \qquad /8/$$

и могут быть получены с помощью уравнения для матрицы плотности.

В работе[11] было получено точное кинетическое уравнение для матрицы плотности подсистемы, взаимодействующей с термостатом. В частности, в предельном случае больших времен $t \sim \tau_{rel} \gg t_0$ во втором приближении теории возмущений по взаимодействию это уравнение имеет редфилдовский вид[12]

$$\frac{\partial}{\partial t}[\rho_0(t)]_m^n = i(\omega_n - \omega_m)[\rho_0(t)]_m^n - \sum_{n_1}\{B_{n_1}^{n}[\rho_0(t)]_m^{n_1} +$$

$$+ (B_{n_1}^{m})^*[\rho_0(t)]_{n_1}^{n}\} + \sum_{n_1 m_1} B_{n_1 m}^{n m_1}[\rho_0(t)]_{m_1}^{n_1}, \quad (t \sim \tau_{rel} \gg t_0). \qquad /9/$$

Здесь ω_n, ω_m - собственные значения гамильтониана H_0 /4/, который, как отмечалось, будем далее брать в виде, даваемом выражением /5/ /соответствующие собственные значения даются формулой /6//.

$$B_{n_1}^{n} = i\int_{-\infty}^{\infty}d\omega'\sum_{n'}(\omega_{n'} - \omega_n + \omega' + i\epsilon)^{-1}\phi_{n_1 n'}^{n' n}(\omega'), \quad \epsilon \to +0,$$

$$B_{n_1 m}^{n m_1} = i\int_{-\infty}^{\infty}d\omega'\left(\frac{1}{\omega_n - \omega_{n_1} + \omega' + i\epsilon} + \frac{1}{\omega_{m_1} - \omega_m - \omega' + i\epsilon}\right)\phi_{n_1 m}^{n m_1}(\omega'). \qquad /10/$$

Матричные элементы в /9/ и /10/ берутся на собственных функциях H_0, а функция $\phi_{nm'}^{n'm}(\omega)$ является фурье-образом корреляционной функции для взаимодействия

$$\phi_{nm'}^{n'm}(\omega) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}e^{i\omega t}\langle (H_i(t))_n^{n'}(H_i(0))_{m'}^{m}\rangle_S dt,$$

$$H_i(t) = e^{iH_S t}H_i e^{-iH_S t}, \qquad /11/$$

причем

$$e^{-\lambda\omega}\phi_{nm'}^{n'm}(\omega) = \phi_{m'n}^{mn'}(-\omega); \quad [\phi_{nm'}^{n'm}(\omega)]^* = \phi_{mn'}^{m'n}(\omega). \qquad /12/$$

Уравнение /9/ справедливо при $\langle H_i\rangle_S = 0$, что выполняется для гамильтониана /4/.

Рассмотрим сначала уравнение для $\langle S_0^{\pm}\rangle$ ($S_0^{\pm} = S_0^x \pm iS_0^y$). Учитывая известные выражения для матричных элементов операторов спина в используемом представлении, в котором S_0^z диагонален, получим из уравнения /8/

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle S_0^{+}\rangle = \sum_{m=S_0}^{-S_0+1}(S_0^{+})_m^{m-1}\frac{\partial}{\partial t}[\rho_0(t)]_{m-1}^{m},$$

$$(S_0^{+})_m^{m-1} = (S_0^{-})_{m-1}^{m} = \sqrt{(S_0+m)(S_0-m+1)}. \qquad /13/$$

Используя выражения /6/, /7/, /9-12/ и пренебрегая в выражениях /10/ для коэффициентов кинетического уравнения несущественными для них нелинейными поправками к частотам ($|b| \ll |\omega^0|$), получим следующее уравнение для $[\rho_0(t)]_{m-1}^{m}$:

$$\frac{\partial}{\partial t}[\rho_0(t)]_{m-1}^{m} = -[i(\omega^0 + b - 2bm) + P_m][\rho_0(t)]_{m-1}^{m} +$$

$$+ B_{m+1\,m-1}^{m\quad m}[\rho_0(t)]_m^{m+1} + B_{m-1\,m-1}^{m\quad m-2}[\rho_0(t)]_{m-2}^{m-1}, \qquad /14/$$

где

$$P_m = B_m^m + (B_{m-1}^{m-1})^* - B_{m\,m-1}^{m\,m-1} = i(P_1 + 2P_2 - 2mP_2) +$$

$$+ \{[S_0(S_0+1) - m^2](1 + e^{-\lambda\omega^0}) + (2m-1)e^{-\lambda\omega^0}\}\Gamma' + \Gamma'',$$

$$B_{m+1\,m-1}^{m\quad m} = (S_0^{+})_{m+1}^{m}(S_0^{+})_m^{m-1}e^{-\lambda\omega^0}\Gamma', \qquad /15/$$

$$B_{m-1\,m-1}^{m\quad m-2} = (S_0^{+})_{m-1}^{m-2}(S_0^{+})_m^{m-1}\Gamma'.$$

Здесь введены обозначения

$$P_1 = \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\phi_{\omega}^{+-}(\omega)}{\omega^0 - \omega}d\omega + \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\phi_{\omega}^{zz}(\omega)}{\omega}d\omega, \quad \Gamma' = \frac{\pi}{2}\phi_{\omega}^{+-}(\omega^0), \qquad /16/$$

$$P_2=\frac{1}{4}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{(e^{-\lambda\omega}-1)\,\phi_{\omega}^{+-}(\omega)}{\omega^0-\omega}d\omega-\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{\phi_{\omega}^{zz}(\omega)}{\omega}d\omega\,;\ \Gamma''=\pi\phi_{\omega}^{zz}(0)\,,$$

где $\phi_{\omega}^{\alpha\alpha'}(\omega)$ $(\alpha,\alpha'=z,z;+,-\,;-,+)$ обозначает фурье-компоненты временных корреляционных функций вида

$$\phi^{\alpha\alpha'}(t)=\langle\tilde{\tilde{H}}{}_0^{\alpha}(\vec S_1(t),\dots,\vec S_N(t))\,\tilde{\tilde{H}}{}_0^{\alpha'}(\vec S_1(0),\dots,\vec S_N(0))\rangle_S\,,$$

$$\tilde{\tilde{H}}{}_0^{\alpha}(\vec S_1(t),\dots,\vec S_N(t))=\tilde H_0^{\alpha}(\vec S_1(t),\dots,\vec S_N(t))\ - \qquad /17/$$

$$-\langle\tilde H_0^{\alpha}(\vec S_1(t),\dots,\vec S_N(t))\rangle\ ,\ \vec S_n(t)=e^{iH_St}\vec S_n e^{-iH_St},\ \ \tilde H_0^{\pm}=\tilde H_0^{x}\pm i\tilde H_0^{y},$$

$\int$ обозначает главное значение интеграла.

При получении выражений /14/-/16/ принималась во внимание симметрия корреляционных функций /17/ в рассматриваемом случае одноосного кристалла

$$\phi^{xx}(t)=\phi^{yy}(t)\,;\quad \phi^{xy}(t)=-\phi^{yx}(t),\quad \phi^{zx}(t)=\phi^{yz}(t)=0 \qquad /18/$$

и симметрия, обусловленная свойствами /12/.

Из выражений /13/-/15/ следует такое уравнение для $\langle S_0^+\rangle$:

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle S_0^+\rangle=-i(\omega^0+b+P_1+2P_2)\langle S_0^+\rangle+2i(b+P_2)\langle S_0^zS_0^+\rangle\ -$$

$$-\{[S_0(S_0+1)(1+e^{-\lambda\omega^0})-e^{-\lambda\omega^0}]\Gamma'+\Gamma''\}\langle S_0^+\rangle\ - \qquad /19/$$

$$-2e^{-\lambda\omega^0}\Gamma'\langle S_0^zS_0^+\rangle+(1+e^{-\lambda\omega^0})\Gamma'\langle(S_0^z)^2S_0^+\rangle\ +$$

$$+e^{-\lambda\omega^0}\Gamma'\langle S_0^+S_0^+S_0^-\rangle+\Gamma'\langle S_0^-S_0^+S_0^+\rangle\,.$$

Далее будем использовать соотношения

$$S_0^+S_0^-=S_0(S_0+1)+S_0^z-(S_0^z)^2\,,$$

$$S_0^-S_0^+=S_0(S_0+1)-S_0^z-(S_0^z)^2\,, \qquad /20/$$

$$[S_0^{\pm},(S_0^z)^n]=[(S_0^z\mp1)^n-(S_0^z)^n]S_0^{\pm}\,,$$

где $[\dots,\dots]$ обозначает коммутатор. Величины $(S_0^z\pm1)^n$ можно представить в виде рядов

$$(S_0^z\pm1)^n=\sum_{k=0}^{n}(\pm1)^kC_k^n(S_0^z)^{n-k}\,, \qquad /21/$$

где $C_k^n=\dfrac{n!}{k!\,(n-k)!}$ - биноминальные коэффициенты.

Принимая во внимание соотношения /20/, /21/, кинетическое уравнение /19/ можно записать в следующем виде:

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle S_0^+\rangle=-[i(\omega^0+b+P_1+2P_2)+(e^{-\lambda\omega^0}\Gamma'+\Gamma'')]\langle S_0^+\rangle\ +$$

$$+[2i(b+P_2)+(e^{-\lambda\omega^0}-1)\Gamma']\langle S_0^zS_0^+\rangle\,. \qquad /22/$$

Уравнение /22/ сводится к уравнению Блоха[13] в двух случаях. Если величина примесного спина $S_0=\frac{1}{2}$, то имеем $S_0^zS_0^+=\frac{1}{2}S_0^+$ и уравнение /22/ приобретает вид

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle S_0^+\rangle=-[i(\omega^0+P_1+P_2)+\frac{1}{2}(1+e^{-\lambda\omega^0})\Gamma'+\Gamma'']\langle S_0^+\rangle;\ (S_0=\frac{1}{2}).$$

Пусть теперь температура спиновой среды удовлетворяет условию $S_0\lambda|\omega^0|\ll1$, а величина S_0 произвольна. В этом случае величины $\langle S_0^+\rangle$ и $\langle S_0^zS_0^+\rangle$ являются величинами первого порядка малости по $\lambda\omega^0$. Сохраняя в уравнении /22/ только величины первого порядка по $\lambda\omega^0$, видим, что оно приводится к уравнению Блоха только при условии $\Gamma'+\Gamma''\gg2|b+P_2|$. Таким образом,

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle S_0^+\rangle=-[i(\omega^0+P_1)+\Gamma'+\Gamma'']\langle S_0^+\rangle\,,$$

$$(S_0\lambda|\omega^0|\ll1,\ \Gamma'+\Gamma''\gg2|b+P_2|). \qquad /23/$$

Величины Γ' и Γ'' описывают уширение уровней примесного спина /обусловленное взаимодействием его с флуктуациями среды/ как за счет конечного времени жизни спина в квантовом состоянии (Γ'), так и за счет модуляции частоты перехода из одного состояния в другое (Γ'') /подробнее см.[2-4]/.

Следовательно, при высоких температурах уравнение /22/ сводится к уравнению Блоха, если уширение уровней примесного спина значительно превышает неэквидистантность соседних уровней $2|b+P_2|$ и ею можно пренебречь.

В общем случае для описания кинетики $\langle S_0^+\rangle$ необходимо иметь кинетическое уравнение для $\langle S_0^zS_0^+\rangle$, которое будет содержать $\langle(S_0^z)^2S_0^+\rangle$ и т.д. Таким образом, будем иметь систему зацепляющихся линейных дифференциальных уравнений первого порядка для средних $g_n\equiv\langle(S_0^z)^nS_0^+\rangle$.

Получим эту систему уравнений в виде уравнения для g_n. Уравнение для такого среднего имеет вид

$$\frac{\partial}{\partial t}g_n=\sum_{m=S_0}^{-S_0+1}m^n(S_0^+)_m^{m-1}\frac{\partial}{\partial t}[\rho_0(t)]_{m-1}^{m}\,. \qquad /24/$$

Используя выражения /14/, /15/, /20/, /21/, можно представить уравнение /24/ в следующем виде:

$$\frac{\partial}{\partial t} g_n = -[i(\omega^0 + P_1 + 2P_2 + b) + e^{-\lambda\omega^0}\Gamma' + \Gamma'']g_n +$$

$$+[2i(b+P_2) + (e^{-\lambda\omega^0} - 1)\Gamma']g_{n+1} + \Gamma' \sum_{k=1}^{n}{}' C_k^n \{[S_0(S_0+1) \times$$

$$\times(1-e^{-\lambda\omega^0}) + 2e^{-\lambda\omega^0}]g_{n-k} - (1+3e^{-\lambda\omega^0})g_{n-k+1} +$$

$$+ (e^{-\lambda\omega^0} - 1)g_{n-k+2}\} + \Gamma' \sum_{k=2}^{n}{}'' C_k^n \{[S_0(S_0+1)(1+e^{-\lambda\omega^0}) - \qquad /25/$$

$$-2e^{-\lambda\omega^0}]g_{n-k} + (3e^{-\lambda\omega^0} - 1)g_{n-k+1} - (e^{-\lambda\omega^0} + 1)g_{n-k+2}\}.$$

Здесь $\sum_{k=1}^{n}{}'$ обозначает сумму по нечетным k, а $\sum_{k=2}^{n}{}''$ - сумму по четным k.

Система уравнений /25/ оказывается замкнутой и содержит $2S_0$ уравнений благодаря операторному равенству

$$[\prod_{m=S_0}^{-S_0+1} (S_0^z - m)] S_0^+ = 0.$$

Рассмотрим, например, случай, когда $S_0 = 1$. В этом случае система /25/ состоит из двух связанных уравнений: уравнения /22/ и уравнения

$$\frac{\partial}{\partial t} g_1 = -[i(\omega^0 - b + P_1) + (3 + 2e^{-\lambda\omega^0})\Gamma' + \Gamma'']g_1 + 2\Gamma' g_0. \qquad /26/$$

Общее решение системы двух уравнений, /22/, /26/, имеет вид

$$\langle S_0^+ \rangle = a_0^{(1)} e^{-i\omega_1 t} + a_0^{(2)} e^{-i\omega_2 t} \quad ;$$

$$\langle S_0^z S_0^+ \rangle = a_1^{(1)} e^{-i\omega_1 t} + a_1^{(2)} e^{-i\omega_2 t} \quad .$$

Здесь

$$\omega_{1,2} = \omega^0 + P_1 + P_2 - \frac{i}{2}[3(1+e^{-\lambda\omega^0})\Gamma' + 2\Gamma''] \pm \qquad /27/$$

$$\pm \sqrt{(b+P_2)^2 + \frac{\Gamma'^2}{4}[8(1-e^{-\lambda\omega^0}) - (3+e^{-\lambda\omega^0})^2] - i\Gamma'(b+P_2)(1-e^{-\lambda\omega^0})} \; -$$

корни соответствующего характеристического уравнения, $a_0^{(1,2)}$, $a_1^{(1,2)}$ - решения соответствующей однородной системы уравнений при $\omega=\omega_1$ и $\omega=\omega_2$ соответственно, зависящие, вообще говоря, от двух произвольных постоянных, причем

$$\frac{a_0^{(1,2)}}{a_1^{(1,2)}} = \frac{\omega_{1,2} - \omega^0 - P + b + i(3+2e^{-\lambda\omega^0})\Gamma' + i\Gamma''}{2i\Gamma'}. \qquad /28/$$

Таким образом, в рассматриваемом случае $/S_0=1/$ кинетика усредненных поперечных компонент примесного спина описывается двумя экспонентами с комплексными частотами.

Исследуем подробнее кинетику примесного спина в этом случае. Если выполняется неравенство

$$2|P_2 + b| \gg 3\Gamma' + \Gamma'', \qquad /29/$$

то, пренебрегая вторым слагаемым подкоренного выражения в /27/ и раскладывая квадратный корень, получим

$$\omega_1 = \omega^0 + P_1 + 2P_2 + b - i[(2+e^{-\lambda\omega^0})\Gamma' + \Gamma''],$$

$$\omega_2 = \omega^0 + P_1 - b - i[(1+2e^{-\lambda\omega^0})\Gamma' + \Gamma'']. \qquad /30/$$

Подстановка /30/ в /28/ дает

$$\left|\frac{a_0^{(1)}}{a_1^{(1)}}\right| \approx \frac{|P_2 + b|}{\Gamma'}, \qquad |a_0^{(2)}| \approx |a_1^{(2)}|.$$

Выражения /30/ представляют собой частоты переходов между уровнями примесного спина ($Re\omega_1$ и $Re\omega_2$) и их уширения ($Im\omega_1$ и $Im\omega_2$), причем выражения для уширений находятся в согласии с общей теорией ширин линий Вайскопфа и Вигнера[14]. Благодаря условию /29/, разность частот $|Re\omega_1 - Re\omega_2| = 2|P_2+b|$ значительно больше их уширений, так что частоты хорошо разделены.

Отметим, что формулы /30/ при $b=0$ формально совпадают с выражениями для частот и уширений линий тонкой структуры спектра возбуждений примесного спина в гейзенберговском ферромагнетике /для $S_0 = 1$/, исследованного в работах [3,4] с помощью равновесных двухвременных корреляционных функций.

Совпадение становится полным, если в выражениях для ω^0, P_1, P_2, Γ', Γ'' положить $H_0^\alpha(\vec{S}_1,\ldots,\vec{S}_N) = -\sum_n I'_{0n} S_n^\alpha$ /I'_{0n} - интеграл обменного взаимодействия примесь-матрица/, $\tilde{H}_0^{\alpha_1\alpha_2}(\vec{S}_1,\ldots,\vec{S}_N) = 0$, $\tilde{H}_0(\vec{S}_1,\ldots,\vec{S}_N) = -\frac{1}{2}\sum_{nn'} I_{nn'}\vec{S}_n\vec{S}_{n'}$ /$I_{nn'} > 0$ - интеграл обменного взаимодействия для спинов матрицы ферромагнетика/. Такие замены в гамильтонианах /5/, /7/ и H_S соответствуют переходу к гейзенберговскому ферромагнетику с намагниченностью, направленной вдоль оси z.

Пусть теперь выполняется обратное соотношение

$|P_2+b| \ll \Gamma'$

и температура достаточно высока ($k_BT \gg |\omega^0|$). Тогда выражения /27/, /28/ примут вид

$$\omega_1=\omega^0+P_1-i(\Gamma'+\Gamma''),\quad \omega_2=\omega^0+P_1-i(5\Gamma'+\Gamma''),$$

$$\left|\frac{a_0^{(1)}}{a_1^{(1)}}\right|\approx 2,\qquad \left|\frac{a_0^{(2)}}{a_1^{(2)}}\right|\approx\frac{|P_2+b|}{2\Gamma'}.$$

Если пренебречь неэквидистантностью спектра по сравнению с ширинами линий /т.е. положить, например, $P_2+b=0$ /, то кинетика примесного спина описывается одной экспонентой с $\mathrm{Re}\,\omega_1=\omega^0+P_1$ и уширением $\mathrm{Im}\,\omega_1=\Gamma'+\Gamma''$, что согласуется с уравнением /23/ и результатами работ[2-4].

В случае произвольного S_0 необходимо решать систему уравнений /25/, состоящую из $2S_0$ уравнений. Следовательно, в общем случае кинетика примесного спина описывается набором $2S_0$ экспонент. Нетрудно найти действительные части частот осцилляции $\langle S_0^+\rangle$ /частоты переходов между уровнями энергии спина/ в случае, когда проявляется тонкая структура спектра примесного спина, т.е.

$$\Gamma(m)\ll 2\,|P_2+b|\,, \qquad /31/$$

где $\Gamma(m)$ - уширение линии, соответствующей переходу между уровнями $m-1, m$. Из выражений /14/, /15/ /если положить в них Γ', $\Gamma''=0$ / следует, что эти частоты определяются выражением

$$\omega_m=\omega^0+P_1+2P_2(1-m)+b(1-2m)\,,$$

$$m=S_0\,,\,S_0-1,\dots,-S_0+1\,.$$

Этот результат /при $b=0$ / с учетом ширин линий получен в работах[2-4], где также показано, что мнимые части частот осцилляции в случае, когда выполняется неравенство /31/, даются выражением

$$\Gamma(m)=[\,2(S_{0\,m}^{+\,m-1})^2-1]\Gamma'+\Gamma'',\qquad (k_BT\gg S_0\,|\omega^0|)\,. \qquad /32/$$

Выражение /32/ можно получить и непосредственным вычислением ширины линии по теории Вайскопфа-Вигнера[14].

4. КИНЕТИКА ПРОДОЛЬНОЙ КОМПОНЕНТЫ ПРИМЕСНОГО СПИНА

Будем исходить из уравнения

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle S_0^z\rangle=\sum_{m=S_0}^{-S_0} m\,\frac{\partial}{\partial t}[\rho_0(t)]_m^m\,. \qquad /33/$$

С помощью выражений /6/, /7/, /9/-/12/, /18/ получаем следующее кинетическое уравнение для диагональной части матрицы плотности примесного спина:

$$\frac{\partial}{\partial t}[\rho_0(t)]_m^m=\{(S_{0\,m+1}^{+\,m})^2[e^{-\lambda\omega^0}(\rho_0(t))_{m+1}^{m+1}-(\rho_0(t))_m^m]+$$

$$+(S_{0\,m}^{+\,m-1})^2[(\rho_0(t))_{m-1}^{m-1}-e^{-\lambda\omega^0}(\rho_0(t))_m^m]\}\Gamma'\,. \qquad /34/$$

Используя /20/, /33/, /34/, приходим к уравнению, описывающему кинетику $\langle S_0^z\rangle$, следующего вида:

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle S_0^z\rangle=\{S_0(S_0+1)(1-e^{-\lambda\omega^0})-(1+e^{-\lambda\omega^0})\langle S_0^z\rangle+$$

$$+(e^{-\lambda\omega^0}-1)\langle(S_0^z)^2\rangle\}\Gamma'. \qquad /35/$$

Нетрудно видеть, что уравнение /35/ сводится к уравнению Блоха[13] при $S_0=\frac{1}{2}$ и при $\lambda|\omega^0|S_0\ll 1$ / S_0 - произвольное/.

В общем случае для описания кинетики $\langle S_0^z\rangle$ нужно рассмотреть уравнение для $g'_n\equiv\langle(S_0^z)^n\rangle$

$$\frac{\partial}{\partial t}g'_n=\sum_{m=S_0}^{-S_0} m^n\,\frac{\partial}{\partial t}[\rho_0(t)]_m^m\,.$$

С помощью выражений /20/, /21/, /34/ это уравнение можно записать в виде следующей системы уравнений:

$$\frac{\partial}{\partial t}g'_n=\{\sum_{k=1}^{n}{}'\,C_k^n[S_0(S_0+1)(1-e^{-\lambda\omega^0})g'_{n-k}-$$

$$-(1+e^{-\lambda\omega^0})g'_{n-k+1}+(e^{-\lambda\omega^0}-1)g'_{n-k+2}]+ \qquad /36/$$

$$+\sum_{k=2}^{n}{}''\,C_k^n[S_0(S_0+1)(1+e^{-\lambda\omega^0})g'_{n-k}+(e^{-\lambda\omega^0}-1)g'_{n-k+1}-$$

$$-(e^{-\lambda\omega^0}+1)g'_{n-k+2}]\}\Gamma'.$$

Система уравнений /36/ оказывается замкнутой и содержит $2S_0$ уравнений, т.к. имеет место соотношение

$$\prod_{m=S_0}^{-S_0}(S_0^z-m)=0\,.$$

Таким образом, в общем случае кинетика $\langle S_0^z\rangle$ описывается набором $2S_0$ экспонент.

ЛИТЕРАТУРА

1. Изюмов Ю.А., Медведев М.В. Теория магнитоупорядоченных кристаллов с примесями. "Наука", М., 1970.
2. Кривоглаз М.А., Лось В.Ф. УФЖ, 1970, 15, с. 85.
3. Los V.F. Phys.Stat.Sol., 1974, 63B, p. 727.
4. Лось В.Ф. ФНТ, 1977, 3, с. 172.
5. Боголюбов Н.Н. Лекції з квантової статистики. Київ, 1949; Боголюбов Н.Н. Избранные труды в трех томах. "Наукова думка", Киев, 1970, т. 2.
6. Тябликов С.В. Методы квантовой теории магнетизма, "Наука", М., 1975.
7. Иванов М.А. ФТТ, 1972, 14, с. 562.
8. Дыкман М.И., Кривоглаз М.А. ЖЭТФ, 1973, 64, с. 993.
9. Лось В.Ф. ТМФ, 1978, 35, с. 247.
10. Боголюбов Н.Н. ОИЯИ, Д-788, Дубна, 1961; В кн.: Статистическая физика и квантовая теория поля. "Наука", М., 1973.
11. Лось В.Ф. ДАН СССР, 1978, 240, с. 1078.
12. Сликтер Ч. Основы теории магнитного резонанса. "Мир", М., 1967.
13. Wangsness R.K., Bloch F. Phys.Rev., 1953, 89, p. 728.
14. Weisskopf V., Wigner E. Zs. Phys., 1930, 63, p. 54; 1930, 65, p. 18.

Рукопись поступила в издательский отдел
16 июня 1981 года.