сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

P17-81-407

В.Ф.Лось

СПЕКТРАЛЬНОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ВОЗБУЖДЕНИЙ ПРИМЕСНОГО СПИНА В МАГНЕТИКАХ. I

1981

1. ВВЕДЕНИЕ

В работе [1] была предложена методика исследования динамики спина примесного атома в магнетиках, основанная на разложении эквивалентного спинового гамильтониана [2,3] по оператору примесного спина $\vec{S}_0$. Эта методика позволяет описывать поведение примесного спина, не конкретизируя магнитную среду /матрицу/, с которой он взаимодействует. Кроме того, такое рассмотрение дает возможность учитывать любую требуемую степень оператора $\vec{S}_0$ в гамильтониане системы, т.е. выйти за рамки гейзенберговской модели. В случае малой нелинейности гамильтониана по $\vec{S}_0$ в [1] была рассмотрена кинетика слабо связанного примесного спина.

В данной работе рассмотрена динамика слабо связанного примесного спина в магнетиках с помощью равновесных двухвременных корреляционных функций для операторов примесного спина. Рассмотрение, как и в [1], проводится с использованием эквивалентного спинового гамильтониана.

Получены общие формулы, описывающие динамику примесного спина в произвольном магнитном кристалле при любом по степени $\vec{S}_0$ взаимодействии примесного спина со средой.

Получены также некоторые достаточно общие результаты для спектра примесного спина без конкретизации вида возмущения, т.е. взаимодействия спина с флуктуациями эффективного поля матрицы /тонкая структура спектра/. Гамильтониан нулевого приближения H_0 /взаимодействие спина с эффективным полем матрицы/ считается при этом слабо нелинейным по $\vec{S}_0$.

Все полученные результаты справедливы в широкой области температур, включая и окрестность фазового перехода в магнетике, в которой еще выполняется неравенство $\tau \gg t_0$ /τ - величина порядка времени релакции примесного спина, t_0 - характерное время корреляции флуктуаций среды/.

2. НЕКОТОРЫЕ ОБЩИЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ДЛЯ ДИНАМИКИ ПРИМЕСНОГО СПИНА В МАГНЕТИКАХ

Будем рассматривать магнетик /диэлектрик/ с примесными атомами, у которых величина спина S_0 и обменное взаимодействие со спинами атомов матрицы отличаются от соответствующих величин для атомов матрицы. Гамильтониан такой системы с одним примесным спином можно представить в следующем общем виде[1]:

$$H = H_0 + H_S + H_i,$$

$$H_0 = [A(\vec{S}_0) - 1] < \tilde{H}_0(\vec{S}_1, \dots, \vec{S}_N) >_S,$$

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

$$H_i = [A(\vec{S}_0) - 1][\tilde{H}_0(\vec{S}_1, \dots, \vec{S}_N) - < \tilde{H}_0(\vec{S}_1, \dots, \vec{S}_N) >_S].$$

Здесь $\vec{S}_n$ $(n = 1, \dots, N)$ - оператор спина атома матрицы на n-м узле решетки /примесный спин считается расположенным в узле или между узлами с индексом 0/; $<\dots>_S$ обозначает квантовостатистическое усреднение по состояниям равновесной спиновой среды /считается выполненным переход к термодинамическому пределу $V \to \infty$, $N \to \infty$ /, с которой взаимодействует примесный спин, т.е. усреднение с гамильтонианом H_S /в случае вырождения состояния равновесия $<\dots>_S$ обозначает квазисреднее[4] /; $A(\vec{S}_0)$ - символический оператор разложения эквивалентного спинового гамильтониана всей системы,

$$\tilde{H}(\vec{S}_0, \vec{S}_1, \dots, \vec{S}_N) = A(\vec{S}_0)\tilde{H}_0(\vec{S}_1, \dots, \vec{S}_N) = \tilde{H}_0(\vec{S}_1, \dots, \vec{S}_N) +$$

$$+ \sum_{\alpha} \tilde{H}_0^{\alpha}(\vec{S}_1, \dots, \vec{S}_N) S_0^{\alpha} + \sum_{\alpha_1 \alpha_2} \tilde{H}_0^{\alpha_1 \alpha_2}(\vec{S}_1, \dots, \vec{S}_N) S_0^{\alpha_1} S_0^{\alpha_2} + \dots, \qquad /2/$$

где α, α_1, α_2 обозначают x, y, z. Операторные функции $\tilde{H}_0(\vec{S}_1, \dots, \vec{S}_N)$, $\tilde{H}_0^{\alpha}(\vec{S}_1, \dots, \vec{S}_N)\dots$ представляют собой ряды по степеням спиновых операторов. Разложение эквивалентного гамильтониана $\tilde{H}(\vec{S}_0, \vec{S}_1, \dots, \vec{S}_N)$ в ряд по степеням всех спиновых операторов системы содержит только члены с четным числом спиновых операторов, что следует из инвариантности его относительно операции отражения времени. Коэффициенты этого разложения являются вещественными /не операторными/ функциями координат узлов кристалла и спиновых индексов α и преобразуются как тензоры относительно преобразований спиновых индексов и координат узлов, допускаемых симметрией системы. Кроме того, из условия 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 узлу. Более подробно эквивалентный гамильтониан описан в работе[1]. Отметим, что в гамильтониане /1/ учтены и релятивистские взаимодействия /спин-спиновое и спин-орбитальное/.

Таким образом, гамильтониан нулевого приближения H_0 описывает примесный спин, находящийся в эффективном поле спинов атомов матрицы, гамильтониан H_i - взаимодействие примесного спина с флуктуациями эффективного поля.

Рассмотрим теперь двухвременные корреляционные функции для компонент операторов примесного спина

$$S_{\alpha\alpha'}(t) = < \tilde{S}_0^{\alpha}(t) \tilde{S}_0^{\alpha'}(0) >, \qquad /3/$$

где

$$< \dots > = (\mathrm{Sp}\, e^{-\lambda H})^{-1} \; \mathrm{Sp}(e^{-\lambda H} \dots), \quad \lambda = \frac{1}{k_B T},$$

$$\tilde{S}_0^{\alpha}(t) = e^{i\hat{L}t} \tilde{S}_0^{\alpha}, \quad \tilde{S}_0^{\alpha} = S_0^{\alpha} - < S_0^{\alpha} >, \qquad /4/$$

$$\hat{L}A = HA - AH -$$

лиувиллевский супероператор, действующий на некоторый оператор A.

Спектральное распределение $S_{\alpha\alpha'}^{\omega}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} S_{\alpha\alpha'}(t)\, dt$ корреляционных функций /3/ для случая слабо связанного примесного спина /взаимодействие его со спинами матрицы значительно слабее взаимодействия спинов матрицы между собой/ при условии, что температура не слишком низка,

$$k_B T \gg \tau^{-1}, \qquad /5/$$

может быть представлено в виде[5]:

$$S_{\alpha\alpha'}^{\omega}(\omega) = \frac{i}{2\pi}(1 - \eta e^{-\lambda\omega})^{-1} < \{ \tilde{S}_0^{\alpha}, [\bar{\hat{G}}(\omega + i\epsilon) - \bar{\hat{G}}(\omega - i\epsilon)] \tilde{S}_0^{\alpha'} \}_{\eta} >_0, \qquad /6/$$

где

$$\{A, B\} = AB - \eta BA, \; \eta = \pm 1, \; \tilde{S}_0^{\alpha} = S_0^{\alpha} - < S^{\alpha} >_0, \; < \dots >_0 = (\mathrm{Sp}_0\, e^{-\lambda H_0})^{-1} (\mathrm{Sp}_0\, e^{-\lambda H_0} \dots) -$$

- усреднение с гамильтонианом H_0, $\bar{\hat{G}}(\omega)$ - усредненный по состояниям спиновой среды супероператор $1/(\omega - \hat{L})$,

$$\bar{\hat{G}}(\omega) = P \frac{1}{\omega - \hat{L}} P,$$

который преобразуется к следующему выражению:

$$\bar{\hat{G}}(\omega) = \frac{P}{\omega - P\hat{L}P - \hat{M}(\omega)}, \quad \hat{M}(\omega) = P\hat{L}_i Q \frac{1}{\omega - Q\hat{L}Q} Q\hat{L}_i P. \qquad /7/$$

Здесь $P \equiv \langle \dots \rangle_S = (Sp\, e^{-\lambda H_S})^{-1} (Sp_S\, e^{-\lambda H_S} \dots)$, причем $P^2=P, Q=1-P$, $\hat{L}=\hat{L}_0+\hat{L}_S+\hat{L}_i$ /соответственно членам гамильтониана /1/ и определению /4//, $\hat{L}_S P = 0$, $P\hat{L}_0 Q = Q\hat{L}_0 P = 0$, $P\hat{L}_i P = 0$. "Массовый" супероператор $\hat{M}(\omega)$ может быть разложен в ряд

$$\hat{M}(\omega) = P\hat{L}_i \sum_{n=1}^{\infty} [\, Q \frac{1}{\omega - \hat{L}_0 - \hat{L}_s} Q\hat{L}_i\,]^n P, \qquad /8/$$

который можно рассматривать как ряд теории возмущений в случае быстрой релаксации спиновой среды:

$$\tau \gg t_0,$$

где τ определяется гамильтонианом H_i, t_0 - характерная частота релаксации среды, описываемой H_S.

Во втором приближении теории возмущений из выражений /1/, /8/ следует

$$\hat{M}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' P[\hat{A}(\vec{S}_0)-1]_{\omega'} \frac{1}{\omega - \hat{L}_0 - \omega'} [\hat{A}(\vec{S}_0)-1]_0 \phi_\omega(\omega') P. \qquad /9/$$

Здесь $\phi_\omega(\omega')$ обозначает фурье-компоненту корреляционной функции

$$\phi(t) = \langle \tilde{\tilde{H}}_0(\vec{S}_1(t), \dots, \vec{S}_N(t))\, \tilde{\tilde{H}}_0(\vec{S}_1(0), \dots, \vec{S}_N(0)) \rangle_S,$$

$$\tilde{\tilde{H}}_0(\vec{S}_1, \dots, \vec{S}_N) = \tilde{H}_0(\vec{S}_1, \dots, \vec{S}_N) - \langle \tilde{H}_0(\vec{S}_1, \dots, \vec{S}_N) \rangle_S,$$

$$\vec{S}_n(t) = e^{iH_S t}\, \vec{S}_n\, e^{-iH_S t},$$

на которую действуют супероператоры $[\hat{A}(S_0)-1]_\omega$ по правилу

$$[\hat{A}(\vec{S}_0)-1]_\omega A = [A(\vec{S}_0)-1]A - e^{-\lambda\omega} A[A(\vec{S}_0)-1], \qquad /10/$$

причем каждый из двух таких супероператоров, входящих в выражение /9/, действует на один из операторов $\tilde{\tilde{H}}_0(\vec{S}_1, \dots, \vec{S}_N)$ согласно определению /2/. При получении /9/ принималось во внимание известное соотношение для корреляционных функций

$$e^{-\lambda\omega} \phi_\omega(\omega) = \phi_\omega(-\omega).$$

Из выражений /6/, /7/ следует, что супероператор

$$P\hat{L}P = P\hat{L}_0 P \qquad /11/$$

определяет спектр примесного спина в эффективном поле спиновой матрицы, а $\hat{M}(\omega \pm i\epsilon)$ определяет сдвиги уровней /действительная часть: $\mathrm{Re}\hat{M}(\omega \pm i\epsilon)$ / и их уширение /мнимая часть/, обусловленные взаимодействием с флуктуациями среды.

Для определения спектрального распределения /6/ необходимо вычислить матричные элементы супероператора $\hat{\tilde{G}}(\omega)$ на волновых функциях примесного спина. Эти матричные элементы можно определить с помощью системы уравнений

$$\sum_{n_1 m_1} [\hat{G}^{-1}(\omega)]_{nm}^{n_1 m_1} \hat{\tilde{G}}_{n_1 m_1}^{n' m'}(\omega) = \delta_{nn'} \delta_{mm'}, \qquad /12/$$

где $\hat{G}^{-1}(\omega) = \omega - P\hat{L}P - \hat{M}(\omega)$ - супероператор, обратный к $\hat{\tilde{G}}(\omega)$ /см. /7//. Матричные элементы обратного супероператора могут быть вычислены с помощью выражений /4/, /9/-/11/. При этом следует иметь в виду, что действие какого-либо супероператора $\hat{D}$ на обычный оператор A /в результате чего получается оператор C / определяется следующим образом:

$$C_k^{\ell} = \sum_{k', \ell'} \hat{D}_{k\ell}^{k'\ell'} A_{k'}^{\ell'}, \qquad /13/$$

т.е. матричный элемент супероператора определяется четырьмя индексами / $A_k^{\ell'}$ - матричный элемент оператора/. Подробнее алгебра супероператоров описана в [6].

Умножая равенство /12/ на матричный элемент оператора примесного спина $(\tilde{S}_0^{\alpha})_{n'}^{m'}$ и суммируя по n', m', получаем удобную для дальнейшего систему уравнений

$$\sum_{n_1 m_1} [\hat{G}^{-1}(\omega)]_{nm}^{n_1 m_1} \sum_{n' m'} [\hat{\tilde{G}}(\omega)]_{n_1 m_1}^{n' m'} (\tilde{S}_0^{\alpha})_{n'}^{m'} = (\tilde{S}_0^{\alpha})_n^m. \qquad /14/$$

Будем рассматривать в дальнейшем кристаллы с одноосной симметрией. Выберем ось $0z$ в качестве оси симметрии. Тогда, ограничиваясь квадратичными по S_0^{α} членами, гамильтониан H_0 можно представить с точностью до C-числа в виде [1]

$$H_0 = -\omega^0 S_0^z + b(S_0^z)^2,$$

$$\omega^0 = -\langle \tilde{H}_0^z(\vec{S}_1, \dots, \vec{S}_N) + i\tilde{H}_0^{xy}(\vec{S}_1, \dots, \vec{S}_N) \rangle_S, \qquad /15/$$

$$b = \langle \tilde{H}_0^{zz}(\vec{S}_1, \dots, \vec{S}_N) \rangle_S - \langle \tilde{H}_0^{xx}(\vec{S}_1, \dots, \vec{S}_N) \rangle_S.$$

Величины ω^0 и b являются действительными числами / H_0^{xy} в рассматриваемом одноосном кристалле - либо нуль, либо чисто мнимая величина/, причем будем считать, что нелинейность мала, т.е. $|b| \ll |\omega^0|$ /при $\omega^0=0$, например, когда примесный спин расположен строго между решетками антиферромагнетика, необходимо полагать и $b=0$ /. Отметим, что можно было бы легко учесть при необходимости и следующие члены разложения H_0.

Выберем в качестве полной системы функций для вычисления $\langle \dots \rangle_0$ в формуле /6/ собственные функции оператора H_0 /т.е.

собственные функции S_0^z /. Тогда собственные значения H_0 определяются выражением

$$\omega_m = -\omega^0 m + bm^2; \; m = (S_0, S_0-1, \dots, -S_0), \qquad /16/$$

где m - собственное значение S_0^z, соответствующее собственной функции $|m\rangle$.

В этом представлении корреляционные функции $S_{+-}^{\omega}(\omega)$ и $S_{zz}^{\omega}(\omega)$, которые представляют наибольший интерес, могут быть представлены с помощью /6/, /15/, /16/ в виде /см. также [5] /

$$S_{+-}^{\omega}(\omega) = -\frac{1}{\pi}\,\frac{n(\omega)+1}{n(\omega^0)+1}\,\mathrm{Im}\sum_{m,m'=S_0}^{-S_0+1}(\rho_0)_m^m (S_0^+)_m^{m-1} \times$$

$$\times[\hat{\bar{G}}(\omega+i\epsilon)]_{m-1m}^{m'-1m'}(S_0^-)_{m'-1}^{m'}, \qquad /17/$$

$$S_{zz}^{\omega}(\omega) = -\frac{2}{\pi}(1+e^{-\lambda\omega})^{-1}\,\mathrm{Im}\sum_{m,m'=S_0}^{-S_0}(\rho_0)_m^m (m-\langle S_0^z\rangle_0) \times$$

$$\times[\hat{\bar{G}}(\omega+i\epsilon)]_{mm}^{m'm'}(m'-\langle S_0^z\rangle_0),$$

где

$$\rho_0 = (Sp_0 e^{-\lambda H_0})^{-1} e^{-\lambda H_0}, \; (S_0^+)_m^{m-1} = (S_0^-)_{m-1}^m = \sqrt{(S_0+m)(S_0-m+1)}\,.$$

Матричный элемент супероператора /11/ согласно /4/, /13/, /16/ определяется выражением

$$\hat{L}_{0_{nm}}^{n'm'} = (\omega_n - \omega_m)\delta_{nn'}\delta_{mm'}\,. \qquad /18/$$

Рассмотрим сначала корреляционные функции /17/, пренебрегая взаимодействием примесного спина с флуктуациями среды /т.е. пренебрегая "массовым" супероператором/. В этом предельном случае из выражений /14/, /16/-/18/ следуют выражения для корреляционных функций:

$$S_{+-}^{\omega}(\omega) = \frac{1}{Z}\sum_{m=S_0}^{-S_0+1} e^{\lambda\omega^0 m}(S_0+m)(S_0-m+1)\delta(\omega-\omega(m)),$$

$$S_{zz}^{\omega}(\omega) = \frac{1}{Z}\sum_{m=S_0}^{-S_0} e^{\lambda\omega^0 m}(m-\langle S_0^z\rangle_0)^2\,\delta(\omega), \qquad /19/$$

$$\omega(m) = \omega_{m-1} - \omega_m = \omega^0 + b(1-2m)\,.$$

При получении выражений /19/ отбрасывались нелинейные поправки к ω_m в $n(\omega_m)$, $(\rho_0)_m^m$, так что

$$Z = \sum_{m=S_0}^{-S_0} e^{\lambda\omega^0 m} = \frac{\mathrm{sh}[\lambda\omega^0(S_0+\frac{1}{2})]}{\mathrm{sh}(\lambda\omega^0/2)},$$

$$\langle S_0^z\rangle_0 = \frac{1}{Z}\,\frac{\partial Z}{\partial\lambda\omega^0} = (S_0+\frac{1}{2})\,\mathrm{cth}[\lambda\omega^0(S_0+\frac{1}{2})] - \frac{1}{2}\,\mathrm{cth}\,\frac{\lambda\omega^0}{2}\,.$$

Таким образом, в рассмотренном предельном случае ($H_i=0$) корреляционная функция $S_{+-}^{\omega}(\omega)$ описывает набор дельтаобразных линий тонкой структуры спектра возбуждений примесного спина в эффективном поле, обусловленном взаимодействием со спинами матрицы. Эти линии соответствуют различным m $|m=(S_0,\dots,-S_0+1)|$ и отстоят друг от друга на расстояние $2b$. Число линий тонкой структуры равно $2S_0$, так что она может проявляться только при $S_0>½$. Если $S_0>½$, но температура низка $/k_BT \ll |\omega^0|/$, спектр практически состоит из одной линии, соответствующей $m=S_0$ при $\omega^0>0$ и $m=-S_0+1$ при $\omega^0<0$. При повышении температуры начинают проявляться и другие линии.

Отметим, что полученная тонкая структура обусловлена нелинейностью гамильтониана H_0 по S_0^z. В гейзенберговской модели /b=0/ уровни энергии примесного спина эквидистантны и спектр возбуждений состоит из одной линии на частоте ω^0.

Корреляционная функция $S_{zz}^{\omega}(\omega)$ представляет собой в рассмотренном случае один дельтаобразный пик на частоте $\omega=0$.

Учет взаимодействия примесного спина с флуктуациями среды может существенно изменить описанное выше спектральное распределение корреляционных функций, поскольку взаимодействие H_i приводит к сдвигу и уширению линий тонкой структуры спектра возбуждений примесного спина.

При возрастании ширин линий/например,при повышении температуры/линии начнут перекрываться и вместо тонкой структуры может возникнуть единое уширенное распределение, вообще говоря, сложной формы.

Матричный элемент "массового" супероператора /9/ определяется матричным элементом супероператора

$$\hat{K}(t) = [\hat{A}(\vec{S}_0)-1]_{\omega'} e^{-i\hat{L}_0 t}[\hat{A}(\vec{S}_0)-1]_0\,,$$

поскольку, например для $\hat{M}(\omega+i\epsilon)$, имеем

$$\hat{M}(\omega+i\epsilon) = \frac{1}{i}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega' P\int_0^{\infty}e^{i(\omega-\omega'+i\epsilon)t}\,\hat{K}(t)\,\phi_{\omega}(\omega')\,dt\,P\,. \qquad /20/$$

Используя правила /4/, /10/, /13/, получим

$$[\hat{K}(t)]^{n'm'}_{nm} = \{[A(\vec{S}_0)-1]e^{-iH_0t}[A(\vec{S}_0)-1]\}^{n'}_{n} e^{i\omega_m t}\,\delta_{mm'} +$$

$$+ e^{-\lambda\omega'} e^{-i\omega_n t}\{[A(\vec{S}_0)-1]e^{iH_0t}[A(\vec{S}_0)-1]\}^{m}_{m'}\delta_{nn'} -$$

$$- e^{i(\omega_m-\omega_{n'})t}[A(\vec{S}_0)-1]^{n'}_{n}[A(\vec{S}_0)-1]^{m}_{m'} - \qquad /21/$$

$$- e^{-\lambda\omega'} e^{i(\omega_{m'}-\omega_{n'})t}[A(\vec{S}_0)-1]^{n'}_{n}[A(\vec{S}_0)-1]^{m}_{m'}\ .$$

Вследствие одноосной симметрии /анизотропией в базисной плоскости пренебрегаем/ необходимо учитывать в выражении /21/ только такие комбинации компонент оператора S_0^α, даваемые операторами $A(\vec{S}_0)-1$, которые сводятся к степеням оператора S_0^z. Таким образом, в первых двух слагаемых выражения /21/ нужно сохранить только диагональные матричные элементы с $n'=n$, $m'=m$ соответственно.

Окончательно выражение для матричного элемента "массового" супероператора имеет вид /согласно /20/, /21//

$$[\hat{M}(\omega)]^{n'm'}_{nm} = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \Big\{ \sum_{n_1} \Big[\frac{[A(\vec{S}_0)-1]^{n_1}_{n}[A(\vec{S}_0)-1]^{n}_{n_1}}{\omega-\omega_{n_1}+\omega_m-\omega'} +$$

$$+ \frac{[A(\vec{S}_0)-1]^{n_1}_{m}[A(\vec{S}_0)-1]^{m}_{n_1}}{\omega-\omega_n+\omega_{n_1}+\omega'}\Big]\delta_{nn'}\delta_{mm'} - [A(\vec{S}_0)-1]^{n'}_{n}[A(\vec{S}_0)-1]^{m}_{m'}\times$$

$$\times\Big(\frac{1}{\omega-\omega_{n'}+\omega_m-\omega'} + \frac{1}{\omega-\omega_n+\omega_{m'}+\omega'}\Big)\Big\}\phi_\omega(\omega')\ . \qquad /22/$$

Рассмотрим теперь один предельный случай, который позволит в рамках проведенного нами достаточно общего рассмотрения /без конкретизации H_i/ получить спектральное распределение возбуждений примесного спина. Пусть реализуется неравенство

$$\Gamma(m) \ll |\tilde{\omega}(m)-\tilde{\omega}(m-1)| = \Delta(m)\,, \qquad /23/$$

где $\Gamma(m)$ - уширение линии перехода $m \rightleftarrows m-1$, обусловленное мнимой частью $\hat{M}(\omega+i\epsilon)$, а $\tilde{\omega}(m)$ - перенормированная за счет действительной части $\hat{M}(\omega+i\epsilon)$ энергия, соответствующая переходу $m \rightleftarrows m-1$. Таким образом, неравенство /23/ соответствует случаю, когда уширение линий тонкой структуры, обусловленное взаимодействием H_i, значительно меньше расстояния между ними /перенормированного за счет H_i/.

Рассмотрим корреляционную функцию $S^\omega_{+-}(\omega)$ и запишем выражение /14/ при $n=m-1$, $S_0^\alpha = S_0^-$ в следующем виде:

$$[\hat{G}^{-1}(\omega+i\epsilon)]^{m-1m}_{m-1m}\sum_{m'}[\bar{\hat{G}}(\omega+i\epsilon)]^{m'-1m'}_{m-1m}(S_0^-)^{m'}_{m'-1} = (S_0^-)^{m}_{m-1} -$$

$$- \sum_{\substack{m_1\neq m\\ n_1\neq m-1}} [\hat{G}^{-1}(\omega+i\epsilon)]^{n_1m_1}_{m-1m}\sum_{m'}[\bar{\hat{G}}(\omega+i\epsilon)]^{m'-1m'}_{n_1m_1}(S_0^-)^{m'}_{m'-1}\ , \qquad /24/$$

где матричные элементы, как указывалось, берутся на собственных функциях S_0^z.

Нетрудно видеть, что при выполнении неравенства /23/ сумма в правой части /24/ содержит малый параметр $\frac{\Gamma(m)}{\Delta(m)} \ll 1$. В самом деле, величина $[\hat{G}^{-1}(\omega+i\epsilon)]^{n_1m_1}_{m-1m}$ /$n_1\neq m-1$, $m_1\neq m$/ пропорциональна $\Gamma(m)$, поскольку ω и $\hat{L}_0$ диагональны /см. /18//, а величины $[\bar{\hat{G}}(\omega+i\epsilon)]^{m'-1m'}_{n_1m_1}$ /$n_1\neq m-1$, $m_1\neq m$/ пропорциональны $\frac{1}{\Delta(m)}$. Последнее следует из того, что указанные величины содержат в знаменателе детерминант системы уравнений /24/, корни которого определяют частоты линий тонкой структуры $\tilde{\omega}(m)$ при выполнении неравенства /23/, и из того, что рассматриваются частоты $\omega\approx\tilde{\omega}(m)$.

Используя малый параметр $\Gamma(m)/\Delta(m)$, будем решать систему уравнений /24/ методом итераций. В качестве первого приближения положим

$$\sum_{m'}[\bar{\hat{G}}(\omega+i\epsilon)]^{m'-1m'}_{m-1m}(S_0^-)^{m'}_{m'-1} = \frac{(S_0^-)^{m}_{m-1}}{[\hat{G}^{-1}(\omega+i\epsilon)]^{m-1m}_{m-1m}}\ .$$

Подставляя это выражение в выражение /17/ для $S^\omega_{+-}(\omega)$, получим в актуальной области частот $\omega\approx\omega^0$ следующее выражение для корреляционной функции:

$$S^\omega_{+-}(\omega) = \frac{1}{\pi Z}\sum_{m=S_0}^{-S_0+1} e^{\lambda\omega^0 m}\big((S_0^+)^{m-1}_{m}\big)^2\,\frac{\Gamma(m)}{[\omega-\omega(m)-P(m)]^2+\Gamma^2(m)}\ . \qquad /25/$$

Здесь введены обозначения:

$$P(m) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \sum_{n_1}\Big\{\frac{[A(\vec{S}_0)-1]^{n_1}_{m-1}[A(\vec{S}_0)-1]^{m-1}_{n_1}}{\omega^0-\omega_{n_1}+\omega_m-\omega'} +$$

$$+ \frac{[A(\vec{S}_0)-1]^{n_1}_{m}[A(\vec{S}_0)-1]^{m}_{n_1}}{\omega^0-\omega_{m-1}+\omega_{n_1}+\omega'}\Big\}\phi_\omega(\omega')\,, \qquad /26/$$

$$\Gamma(m) = \pi\sum_{n_1}\{[A(\vec{S}_0)-1]^{n_1}_{m-1}[A(\vec{S}_0)-1]^{m-1}_{n_1}\phi_\omega(\omega^0-\omega_{n_1}+\omega_m) +$$

$$+[A(\vec{S}_0)-1]^{n_1}_{m}\,[A(\vec{S}_0)-1]^{m}_{n_1}\,\phi_\omega(\omega_{m-1}-\omega_{n_1}-\omega^0)\} -$$

$$-2\pi[A(\vec{S}_0)-1]^{m-1}_{m-1}\,[A(\vec{S}_0)-1]^{m}_{m}\,\phi_\omega(0),$$

где $\int$ обозначает главное значение интеграла и отброшены несущественные здесь нелинейные поправки к частотам.

Таким образом, в рассмотренном предельном случае, когда выполняется неравенство /23/, спектральное распределение возбуждений примесного спина состоит из набора лоренцевых линий тонкой структуры с ширинами $\Gamma(m)$ и максимумами, сдвинутыми относительно частот $\omega(m)$ на величины $P(m)$. Сдвиги и уширение линий обусловлены взаимодействием с флуктуациями среды и выражаются через корреляционную функцию среды $\phi_\omega(\omega)$. Ширина линий обусловлена как переходами между уровнями примесного спина /конечным временем жизни/, так и модуляцией частоты перехода, возникающей из-за флуктуаций среды. Модуляционное уширение описывается членами с $\phi_\omega(0)$ в выражении /26/ для $\Gamma(m)$.

В общем случае, когда неравенство /23/ не имеет места, для определения спектрального распределения примесных возбуждений /т.е. решения системы уравнений /24// необходимо рассмотреть конкретный механизм взаимодействия примесного спина с флуктуациями среды.

Для нахождения корреляционной функции $S^{\omega}_{zz}(\omega)$ удобно пользоваться системой уравнений /14/ при $n=m$, $\tilde{S}^{a}_{0}=S^{z}_{0}-\langle S^{z}_{0}\rangle_0$, т.е.

$$\sum_{n_1 m_1}[\hat{G}^{-1}(\omega+i\epsilon)]^{n_1 m_1}_{mm}\sum_{m'}[\bar{\hat{G}}(\omega+i\epsilon)]^{m'm'}_{n_1 m_1}(m'-\langle S^z_0\rangle_0)=m-\langle S^z_0\rangle_0. \qquad /27/$$

ЛИТЕРАТУРА

1. Лось В.Ф. ФНТ, 1981, 7, с.336.
2. Боголюбов Н.Н. Избранные труды в трех томах. "Наукова думка", Киев, 1970, т.2.
3. Тябликов С.В. Методы квантовой теории магнетизма. "Наука", М., 1975.
4. Боголюбов Н.Н. ОИЯИ, Д-788, Дубна, 1961; В кн.: Статистическая физика и квантовая теория поля. "Наука", М.,1973.
5. Лось В.Ф. ФНТ, 1977, 3, с.172.
6. Zwanzig R. Physica, 1964, 30, p.1109.

Рукопись поступила в издательский отдел
16 июня 1981 года.

Лось В.Ф. Спектральное распределение возбуждений примесного спина в магнетиках. I — P17-81-407

С помощью равновесных двухвременных корреляционных функций развита общая теория, описывающая динамику примесного спина в магнетике /не конкретизированном/. Получена тонкая структура спектра примесного спина.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1981

Los V.F. Spectral Distribution of Impurity Spin Excitations in Magnetic Materials. I — P17-81-407

By means of equilibrium two-time correlation functions the general theory that describes the dynamics of impurity spin in magnetic material (nondefined) is developed. The fine structure of impurity spin spectrum is obtained.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1981

Перевод аннотации О.С.Виноградовой.