сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

Р17-81-408

В.Ф.Лось

СПЕКТРАЛЬНОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ВОЗБУЖДЕНИЙ ПРИМЕСНОГО СПИНА В МАГНЕТИКАХ. II

1981

В данном сообщении подробно исследована /с тем же H_0, что и в предыдущей работе /1/ / динамика слабо связанного примесного спина в магнетиках в случае линейного по оператору примесного спина S_0 взаимодействия с флуктуациями среды. Получены замкнутые системы уравнений для спектральных представлений корреляционных функций примесного спина, которые дают возможность получить спектральное распределение возбуждений примесного спина в магнетиках при любых соотношениях между параметрами формы линии спектрального распределения. Найдены решения этих систем уравнений /состоящих из $2S_0$ или $2S_0+1$ уравнений, где S_0 - величина спина примесного атома/ в некоторых частных случаях.

Получены также кинетические уравнения для двухвременных корреляционных функций оператора примесного спина. Эти уравнения оказываются удобными для исследования динамики примесного спина в случаях, когда из цепочки уравнений трудно получить аналитическое решение.

ЛИНЕЙНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ПРИМЕСНОГО СПИНА С ФЛУКТУАЦИЯМИ СРЕДЫ

Для перехода к случаю линейного по $\vec{S}_0$ взаимодействия с флуктуациями среды необходимо в выражении для H_i сохранить только первый член разложения по оператору примесного спина, т.е. в общих формулах для "массового" супероператора $\hat{M}(\omega + i\epsilon)$, полученных выше, нужно произвести замену:

$$[A(\vec{S}_0)-1]\tilde{H}_0(\vec{S}_1,\dots,\vec{S}_N) \to \sum_{a} S_0^{a}\tilde{H}_0^{a}(\vec{S}_1,\dots,\vec{S}_N).$$

Тогда матричный элемент $\hat{M}(\omega)$/1.22/* примет вид

$$[\hat{M}(\omega)]_{nm}^{n'm'} = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \sum_{j=\pm 1} \Big\{ \frac{1}{4}\Big[\frac{(S^{+}_{0\, n+\frac{1}{2}(j+1)}{}^{n+\frac{1}{2}(j-1)})^2 e^{-\lambda\omega'\frac{1}{2}(1-j)}}{\omega - \omega_{n+j} + \omega_m - j\omega'} +$$

* Здесь и далее в подобных случаях цифра 1 означает ссылку на работу /1/, последующие - номер формулы в этой работе.

$$
+\frac{\left(S_{0\,m+\frac12(j+1)}^{+\,m+\frac12(j-1)}\right)^2 e^{-\lambda\omega'\frac12(1-j)}}{\omega-\omega_n+\omega_{m+j}+j\omega'}\Big]\phi_\omega^{+}(\omega')\delta_{nn'}\delta_{mm'}+
$$

$$
+\Big[\frac{n(n-m)}{\omega-\omega_n+\omega_m-\omega'}+\frac{m(m-n)}{\omega-\omega_n+\omega_m+\omega'}\Big]\phi_\omega^{zz}(\omega')\delta_{nn'}\delta_{mm'}- \qquad /1/
$$

$$
-\frac{1}{4}S_{0\,n+\frac12(j+1)}^{+\,n+\frac12(j-1)}S_{0\,m+\frac12(j+1)}^{+\,m+\frac12(j-1)}e^{-\lambda\omega'\frac12(1-j)}\Big(\frac{1}{\omega+\omega_{n+j}+\omega_m-j\omega'}+
$$

$$
+\frac{1}{\omega-\omega_n+\omega_{m+j}+j\omega'}\Big)\phi_\omega^{+-}(\omega')\delta_{n',n+j}\,\delta_{m',m+j}\Big\},
$$

где

$$
\phi_\omega^{\alpha\alpha'}(\omega)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}e^{i\omega t}\,dt\,\langle\tilde{\tilde H}_0^{\alpha}(\vec S_1(t),\dots,\vec S_N(t))\tilde{\tilde H}_0^{\alpha'}(\vec S_1(0),\dots,\vec S_N(0))\rangle_S ,
$$

причем в рассматриваемом случае одноосной симметрии

$$
\langle\tilde H_0^{x}(\vec S_1,\dots,\vec S_N)\rangle_S=\langle\tilde H_0^{y}(\vec S_1,\dots,\vec S_N)\rangle_S=0.
$$

Напомним, что выражения для частот ω_n нужно здесь брать без нелинейных поправок $|b=0|$.

Корреляционную функцию для поперечных компонент примесного спина /1.17/ перепишем в виде $|\omega\approx\omega^0|$

$$
S_{+-}^{\omega}(\omega)=-\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\sum_{m=S_0}^{-S_0+1}\phi(m,\omega+i\epsilon);
$$

$$
\phi(m,\omega+i\epsilon)=(\rho_0)_m^m(S_0^+)_m^{m-1}\sum_{m'=S_0}^{-S_0+1}[\hat G(\omega+i\epsilon)]_{m-1\,m}^{m'-1\,m'}(S_0^-)_{m'-1}^{m'} . \qquad /2/
$$

Учитывая выражение для матричного элемента $\hat M(\omega)$ /1/, можно записать систему уравнений /1.24/ /которая определяет $S_{+-}^{\omega}(\omega)$/ в виде следующей системы уравнений для функции $\phi(m,\omega+i\epsilon)$:

$$
[\hat G^{-1}(\omega+i\epsilon)]_{m-1\,m}^{m-1\,m}\phi(m,\omega+i\epsilon)+\sum_{j=\pm1}[\hat G^{-1}(\omega+i\epsilon)]_{m-1\,m}^{m-1+j,m+j}\times \qquad /3/
$$

$$
\times\frac{(S_0^+)_m^{m-1}}{(S_0^+)_{m+j}^{m+j-1}}e^{-j\lambda\omega^0}\phi(m+j,\omega+i\epsilon)=(S_{0\,m}^{+\,m-1})^2(\rho_0)_m^m .
$$

Входящие в /3/ в качестве коэффициентов матричные элементы обратного к $\hat G(\omega+i\epsilon)$ супероператора $\hat G^{-1}(\omega+i\epsilon)$ определяются согласно /1.11/, /1.16/, /1/ в рассматриваемой области частот $\omega\approx\omega^0$ следующими выражениями:

$$
\hat G^{-1}(\omega+i\epsilon)=\mathrm{Re}\,\hat G^{-1}(\omega+i\epsilon)+i\,\mathrm{Im}\,\hat G^{-1}(\omega+i\epsilon),
$$

$$
\mathrm{Re}[\hat G^{-1}(\omega+i\epsilon)]_{m-1\,m}^{m-1\,m}=\omega-\omega(m)-P(m),
$$

$$
P(m)=P_1+2P_2(1-m),
$$

$$
P_1=\frac12\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\phi_\omega^{+-}(\omega)}{\omega^0-\omega}\,d\omega+\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\phi_\omega^{zz}(\omega)}{\omega}\,d\omega,
$$

$$
P_2=\frac14\int_{-\infty}^{\infty}\frac{(e^{-\lambda\omega}-1)\phi_\omega^{+-}(\omega)}{\omega^0-\omega}\,d\omega-\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\phi_\omega^{zz}(\omega)}{\omega}\,d\omega,
$$

$$
\mathrm{Im}[\hat G^{-1}(\omega+i\epsilon)]_{m-1\,m}^{m-1\,m}=\Gamma_1(m),
$$

$$
\Gamma_1(m)=\frac12\Gamma'[(S_{0\,m}^{+\,m-1})^2(1+e^{-\lambda\omega^0})+(S_{0\,m+1}^{+\,m})+(S_{0\,m-1}^{+\,m-2})^2e^{-\lambda\omega^0}]+\Gamma'',
$$

$$
\mathrm{Im}[\hat G^{-1}(\omega+i\epsilon)]_{m-1\,m}^{m-1+j,m+j}=\gamma_j(m),\qquad \mathrm{Re}[\hat G^{-1}(\omega+i\epsilon)]_{m-1\,m}^{m-1+j,m+j}=0,
$$

$$\gamma_j(m) = -\left(S_0^{+}\right)^{m+\frac{1}{2}(j-3)}_{m+\frac{1}{2}(j-1)} \left(S_0^{+}\right)^{m+\frac{1}{2}(j-1)}_{m+\frac{1}{2}(j+1)} e^{-\lambda\omega^0 \frac{1}{2}(1-j)}\,\Gamma', \qquad /4/$$

$$\Gamma' = \frac{\pi}{2}\,\phi^{+-}_{\omega}(\omega^0), \quad \Gamma'' = \pi\,\phi^{zz}_{\omega}(0).$$

Система уравнений /3/ конечна /содержит $2S_0$ уравнений/ в отличие от аналогичной системы для осциллятора /2,3/. В некоторых частных случаях она может быть решена аналитически.

Рассмотрим ситуацию, когда реализуется неравенство /1.23/ /в рассматриваемом случае линейного взаимодействия этому соответствует неравенство $\Gamma_1(m) \ll 2|b+P_2|$/. Как указывалось выше, недиагональные матричные элементы супероператора $\hat{G}^{-1}(\omega+i\epsilon)$ пропорциональны $\Gamma_1(m)$ /это видно и из выражений /4//, а функции $\phi(m+j,\omega+i\epsilon) \approx \frac{1}{2|b+P_2|}$ в области частот $\omega \approx \omega(m)$. Выбирая в качестве нулевого приближения функцию

$$\phi^0(m,\omega+i\epsilon) = \frac{(\rho_0)^m_m \left(S^{+\,m-1}_{0\;m}\right)^2}{\omega-\omega(m)-P(m)+i\Gamma_1(m)}$$

и решая систему уравнений /3/ методом итераций по малому параметру $\frac{\Gamma_1(m)}{2|P_2+b|}$, получим с точностью до членов первого порядка по этому параметру следующее выражение для корреляционной функции /2/:

$$S^{\omega}_{+-}(\omega) = \frac{1}{\pi Z}\sum_{m=S_0}^{-S_0+1} e^{\lambda\omega^0 m} \left(S^{+\,m-1}_{0\;m}\right)^2 \frac{\Gamma_1(m)}{\Omega^2(m)+\Gamma_1^2(m)} \times$$

$$\times\left[1+\sum_{j=\pm1}\gamma_j(m)\,\frac{S^{+\,m+j-1}_{0\;m+j}}{S^{+\,m-1}_{0\;m}}\,\frac{\Omega(m)\Omega(m+j)-\Gamma_1(m)\Gamma_1(m+j)}{\Gamma_1(m)\,\Gamma_1(m+j)} \times\right.$$

$$\left.\times\frac{\Gamma_1(m+j)}{\Omega^2(m+j)+\Gamma_1^2(m+j)}\right], \qquad \Gamma_1(m) \ll 2|P_2+b|, \qquad /5/$$

$$\Omega(m) = \omega-\omega(m)-P(m).$$

Первое слагаемое выражения /5/ описывает набор линий тонкой структуры спектрального распределения возбуждений примесного спина и соответствует общему результату /1.25/, /1.26/.

Поправочные члены порядка $\frac{\Gamma_1(m)}{2|P_2+b|}$ дают небольшую асимметрию отдельных линий, изменение их интенсивности и небольшой сдвиг максимумов относительно точек $\Omega(m)=0$.

Отметим, что в отличие от осциллятора /2,3/ уже линейное взаимодействие с флуктуациями приводит к неэквидистантности спектра примесного спина /помимо неэквидистантности, обусловленной нелинейным членом в H_0 с коэффициентом b/ и тонкой структуре /за счет $2P_2$/. Таким образом, тонкая структура спектра возникает, например, в гейзенберговской модели $|b=0|$ ферромагнетика с примесными спинами за счет взаимодействия с флуктуациями среды /4,5/.

Также в отличие от осциллятора уширение линий в случае линейного взаимодействия с флуктуациями обусловлено как переходами между уровнями примесного спина /описывается членами с корреляционной функцией $\phi^{+-}_{\omega}(\omega^0)$/, так и модуляцией частоты перехода /член с функцией $\phi^{zz}_{\omega}(0)$/.

В случае произвольного соотношения между параметрами формы линии спектрального распределения примесных возбуждений система уравнений /31/ может быть решена аналитически при небольшой величине спина примесного атома S_0. Например, при $S_0=1/2$ в сумме /21/ имеется только один член с $m=1/2$, система уравнений /31/ состоит из одного уравнения для функции $\phi(\frac{1}{2},\omega+i\epsilon)$ и результат имеет вид /см. также /4/ /

$$S^{\omega}_{+-}(\omega) = \frac{1}{\pi}\,\frac{1}{1+e^{-\lambda\omega^0}}\,\frac{\Gamma_1(\frac{1}{2})}{(\omega-\omega^0-P_1-P_2)^2+\Gamma_1^2(\frac{1}{2})} \qquad (S_0=\frac{1}{2},\ \omega\approx\omega^0),$$

$$\Gamma_1(\tfrac{1}{2}) = \tfrac{1}{2}(1+e^{-\lambda\omega^0})\,\Gamma'+\Gamma''.$$

Итак, при $S_0=\frac{1}{2}$ имеем, как и следовало ожидать /двухуровневая система/, одну линию спектрального распределения примесных возбуждений.

При $S_0=1$ сумма /2/ содержит две функции, $\phi(1,\omega+i\epsilon)$ и $\phi(0,\omega+i\epsilon)$. Решая систему двух уравнений для этих функций, к которой сводится в этом случае система /3/, и подставляя результат в /2/, получим

$$S^{\omega}_{+-}(\omega)=\frac{2\,\mathrm{sh}(\frac{\lambda\omega^0}{2})}{\pi\,\mathrm{sh}(\frac{3}{2}\lambda\omega^0)}\,\frac{A(\omega)}{B(\omega)},\quad (S_0=1,\ \omega\approx\omega^0),$$

$$A(\omega)=\Gamma_1(1)[e^{\lambda\omega^0}\Omega^2(0)+e^{\lambda\omega^0}\Gamma_1^2(0)+\Gamma_1(0)\Gamma_1(1)-e^{-\lambda\omega^0}\Gamma_1^2]+ \qquad /6/$$

$$+\Gamma_1(0)[\Omega^2(1)-\Gamma_1^2]+2\Gamma_1[\Gamma_1(1)\Gamma_1(0)-\Omega(1)\Omega(0)-e^{-\lambda\omega^0}\Gamma_1^2],$$

$$B(\omega)=[\Omega(1)\Omega(0)-\Gamma_1(1)\Gamma_1(0)+e^{-\lambda\omega^0}\Gamma_1^2]^2+[\Gamma_1(1)\Omega(0)+\Gamma_1(0)\Omega(1)],$$

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

$$\Gamma_1(1)=(1+2e^{-\lambda\omega^0})\Gamma'+\Gamma'',\ \Gamma_1(0)=(2+e^{-\lambda\omega^0})\Gamma'+\Gamma'',\ \Gamma_1=2\Gamma'.$$

При $\lambda|\omega^0|\ll 1$ это выражение упрощается и формально совпадает для $b=0$ с выражением, полученным в [4], хотя является более общим, т.к. магнитная матрица не конкретизируется /в [4] рассмотрен случай гейзенберговского ферромагнетика/.

Выражение /6/ описывает некоторую сложную кривую. Легко показать, что при $2|b+P_2|\gg\Gamma_1(1),\ \Gamma_1(0)$ это выражение сводится к выражению /5/ для $S_0=1$, т.е. описывает тонкую структуру спектрального распределения, состоящего в данном случае из двух линий.

В противоположном предельном случае

$$\Gamma_1(m)\gg 2|b+P_2|, \qquad /7/$$

когда тонкая структура не проявляется, спектральное распределение, описываемое выражением /6/, является плавным. При $\lambda|\omega^0|\ll 1$ формула /6/ принимает вид /см. также [4]/

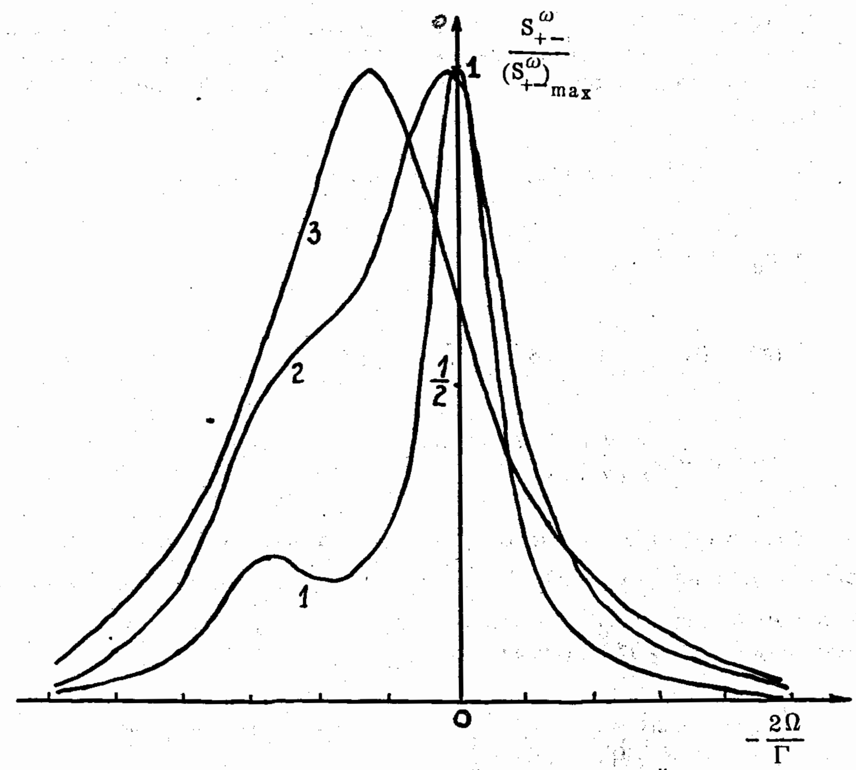
$$S^{\omega}_{+-}(\omega)=\frac{4}{3\pi}\,\frac{\Gamma_1'-\Gamma_1}{\Omega'^2+(\Gamma_1'-\Gamma_1)^2},\quad S_0=1,\ \lambda|\omega^0|\ll 1,\ \Gamma_1'\gg 2|P_2+b|,$$

$$\Gamma_1'=3\Gamma'+\Gamma''. \qquad /8/$$

На рисунке приведена функция /6/ для различных температур в области $T\ll T_c$ /T_c – температура Кюри/, включая и область сильного возбуждения примесного спина $\omega^0\lesssim k_BT\ll k_BT_c$ в случае гейзенберговского ферромагнетика, в котором образуются низколежащие /в полосе спиновых волн/ квазилокальные спиновые возбуждения. В этом случае при $\omega^0>0$ главный вклад в уширение дает величина Γ', которую можно представить в виде

$$\Gamma'=\frac{(1+n_0)\Gamma}{2S_0},\qquad \text{где}\quad n_0=(e^{\lambda\omega^0}-1)^{-1},$$

а Γ – величина, не зависящая от температуры; величиной Γ'' при



Зависимости приведенной спектральной корреляционной функции $\frac{S^{\omega}_{+-}}{(S^{\omega}_{+-})_{max}}$ от $\frac{2\Omega}{\Gamma}$ $|\Omega=\omega-\omega^0-P_1|$ для $S_0=1$, $\frac{P_2}{\Gamma}=3$ при различных температурах ($1-n_0=1/3$, $k_BT=0{,}72\omega^0$; $2-n_0=1$, $k_BT=1{,}45\,\omega^0$; $3-n_0=3$, $k_BT=3{,}45\omega^0$). Масштаб по оси абсцисс соответствует $\frac{4}{3}\frac{P_2}{\Gamma}$.

построении графиков пренебрегаем, а P_2 практически не зависит от температуры [5].

Аналогичным образом может быть рассмотрена корреляционная функция /1.17/ для поперечных компонент оператора примесного спина

$$S^{\omega}_{zz}(\omega) = -\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\sum_{m=S_0}^{-S_0}\phi'(m,\omega+i\epsilon)(m-\langle S_0^z\rangle_0), \quad \omega = 0,$$

$$\phi'(m,\omega+i\epsilon) = (\rho_0)_m^m \sum_{m'=S_0}^{-S_0}(m'-\langle S_0^z\rangle_0)[\bar{\hat{G}}(\omega+i\epsilon)]_{mm}^{m'm'}. \qquad /9/$$

Система /1.27/, определяющая эту функцию, с учетом выражения /2/ для матричного элемента "массового" супероператора может быть переписана в виде системы уравнений для функции $\phi'(m, \omega+i\epsilon)$:

$$[\omega + i\Gamma'(m)]\phi'(m,\omega+i\epsilon) + i\sum_{j=\pm 1}\gamma_j'(m)\,e^{-\lambda\omega^0 j}\phi'(m+j,\omega+i\epsilon) =$$

$$= (\rho_0)_m^m(m-\langle S_0^z\rangle_0), \qquad /10/$$

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

$$\gamma_j'(m) = -[(S_0^+)_{m+\frac{1}{2}(j+1)}^{m+\frac{1}{2}(j-1)}]^2 e^{-\frac{1}{2}\lambda\omega^0(1-j)}\Gamma'.$$

Система /10/ содержит $(2S_0+1)$ уравнений. Ее нетрудно решить для небольших S_0. Например, при $S_0=\frac{1}{2}$, решая систему двух уравнений для $\phi'(\frac{1}{2},\omega+i\epsilon)$ и $\phi'(-\frac{1}{2},\omega+i\epsilon)$ и подставляя найденное решение в /9/, получим

$$S^{\omega}_{zz}(\omega) = \frac{1}{4\pi\,\mathrm{ch}^2\frac{\lambda\omega^0}{2}}\,\frac{\Gamma_z}{\omega^2+\Gamma_z^2}, \quad \Gamma_z = (1+e^{-\lambda\omega^0})\Gamma', \ (S_0=\frac{1}{2}). \qquad /11/$$

Отметим, что модуляционное уширение Γ'' не входит в выражение для корреляционной функции $S^{\omega}_{zz}(\omega)$.

В общем случае при произвольных /больших/ S_0 нахождение аналитического решения систем уравнений /3/, /10/ может быть затруднительным. Тогда эти системы можно решать численно /для конкретного S_0/ с помощью вычислительной машины.

Для нахождения корреляционных функций примесного спина в магнетике может быть полезным другой подход, основанный на рассмотрении кинетических уравнений для двухвременных корреляционных функций операторов примесного спина. Такой подход, как будет видно из дальнейшего, позволяет найти аналитическое решение для произвольного S_0 тогда, когда с помощью систем уравнений для спектральных представлений корреляционных функций найти решение сложно /например, в случае /7/, когда тонкая структура $S^{\omega}_{+-}(\omega)$ не проявляется/.

КИНЕТИЧЕСКИЕ УРАВНЕНИЯ ДЛЯ КОРРЕЛЯЦИОННЫХ ФУНКЦИЙ ПРИМЕСНОГО СПИНА

Рассмотрим двухвременную корреляционную функцию $S_{+-}(t)$ /1.3/, которую при условии /1.5/ можно представить в виде

$$S_{+-}(t) = \langle S_0^+\hat{g}'(t)S_0^-\rangle_0, \quad \hat{g}'(t) = P e^{-i\hat{L}t}P. \qquad /12/$$

Для дальнейшего удобно переписать выражение /12/ следующим образом:

$$S_{+-}(t) = \sum_{m=S_0}^{-S_0+1}(\rho_0)_m^m (S_0^+)_{m}^{m-1})^2\,\Phi(m,t),$$

$$\Phi(m,t) = \sum_{m'=S_0}^{-S_0+1}\frac{(S_0^-)_{m'-1}^{m'}}{(S_0^+)_m^{m-1}}[\hat{g}'(t)]_{m-1\,m}^{m'-1\,m'}. \qquad /13/$$

Уравнение, описывающее эволюцию корреляционной функции /12/, /13/, т.е. кинетическое уравнение для супероператора $\hat{g}'(t)$, имеет следующий вид [3,6]:

$$i\frac{\partial}{\partial t}[\hat{g}'(t)]_{nm}^{n'm'} = (\omega_n-\omega_m)[g'(t)]_{nm}^{n'm'} +$$

$$+\sum_{n_1m_1}[\hat{M}(\omega_{n_1}-\omega_{m_1}+i\epsilon)]_{nm}^{n_1m_1}[\hat{g}'(t)]_{n_1m_1}^{n'm'} \quad (t-\tau \gg t_0). \qquad /14/$$

Здесь матричные элементы берутся на собственных функциях S_0^z, "массовый" супероператор $\hat{M}(\omega)$ берется во втором приближении теории возмущений по H_i /см. /9//.

Рассматривая линейное по S_0 взаимодействие примесного спина с флуктуациями среды и используя для матричного элемента $\hat{M}(\omega)$ выражение /1/, а также учитывая /4/, /13/, получим такое уравнение для функции $\Phi(m,t)$:

$$\frac{\partial}{\partial t}\Phi(m,t) = -i[\omega(m)+P(m)-i\Gamma_1(m)]\Phi(m,t) + (S_0^+)_{m+1}^{m})^2\times$$

$$\times\Gamma'\Phi(m+1,t) + (S_0^+)_{m-1}^{m-2})^2 e^{-\lambda\omega^0}\Gamma'\Phi(m-1,t), \quad \Phi(m,0) = 1. \qquad /15/$$

Удобно ввести вместо функции $\Phi(m,t)$ дискретно изменяющегося аргумента m функцию непрерывно изменяющегося параметра x

$$\Phi'(x,t) = \frac{1}{Z} \sum_{m=S_0}^{-S_0+1} (S_{0\,m}^{+\,m-1})^2 \Phi(m,t) e^{mx},$$

которая, как видно из выражения /40/, определяет искомую корреляционную функцию $S_{+-}(t)$ при $x=\lambda\omega^0$.

Уравнение /15/ может быть переписано в виде дифференциального уравнения для $\Phi'(x,t)$:

$$\frac{\partial}{\partial t}\Phi'(x,t) + \alpha(x)\frac{\partial}{\partial x}\Phi'(x,t) + \beta(x)\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Phi'(x,t) = \gamma(x)\,\Phi'(x,t),$$

$$\alpha(x) = -2i(b+P_2) + (2e^{-\lambda\omega^0} - 3e^{-x} + e^{x-\lambda\omega^0})\Gamma',$$

$$\beta(x) = -(1+e^{-\lambda\omega^0} - e^{-x} - e^{x-\lambda\omega^0})\Gamma', \qquad /16/$$

$$\gamma(x) = -i(\omega^0 + b + P_1 + 2P_2) + (e^{-\lambda\omega^0} - 2e^{-x})\Gamma' +$$

$$+ S_0(S_0+1)\beta(x) - \Gamma'',$$

$$\Phi'(x,0) = \frac{1}{Z} \sum_{m=S_0}^{-S_0+1} (S_{0\,m}^{+\,m-1})^2 e^{mx}.$$

Заменой переменных

$$e^{-x} = y, \quad e^{-\lambda\omega^0} = y_0$$

уравнение /16/ приводится к уравнению для функции, определяющей корреляционную функцию $S_{+-}(t)$ при $y \approx y_0$, вида

$$y(y-1)(y-y_0)\frac{\partial^2\Phi_1}{\partial y^2} + y(4y-3y_0+a-1)\frac{\partial\Phi_1}{\partial y} - \qquad /17/$$

$$-c(y)\Phi_1 + \frac{1}{\Gamma'}\frac{\partial}{\partial t}\Phi_1 = 0,$$

$$a = \frac{2i(b+P_2)}{\Gamma'}, \qquad c(y) = -i\frac{1}{\Gamma'}(\omega^0 + b + P_1 + 2P_2) + y_0 -$$

$$-2y + S_0(S_0+1)\frac{1}{y}(y-1)(y-y_0) - \frac{\Gamma''}{\Gamma'},$$

$$\Phi_1(y,0) = \frac{1}{Z}\sum_{m=S_0}^{-S_0+1}(S_{0\,m}^{+\,m-1})^2 y^{-m}, \qquad /17/$$

$$\Phi_1(y,t) = \frac{1}{Z}\sum_{m=S_0}^{-S_0+1}(S_{0\,m}^{+\,m-1})^2 \Phi(m,t) y^{-m}.$$

Решение уравнения /17/ будем искать в интересующей нас области $y \approx y_0$.

Рассмотрим случай высоких температур $/|\lambda\omega^0| \ll 1/$ и положим $y_0 = 1$. Пусть реализуется также условие /7/, т.е. $|a| \ll 1$. Найдем решение уравнения /17/ в нулевом приближении по параметру a /положим $a = 0$ /. Разделяя переменные подстановкой

$$\Phi_1(y,t) = F(y,\lambda)e^{-\lambda t},$$

придем в рассматриваемом случае / $a=0$, $y_0=1$, $y \approx 1$/ к уравнению Эйлера

$$(y-1)^2\frac{\partial^2 F}{\partial y^2} + 4(y-1)\frac{\partial F}{\partial y} - cF = 0, \qquad y \approx 1,$$

$$c = \frac{1}{\Gamma'}[\lambda - i(\omega^0 + P_1) - \Gamma' - \Gamma'']. \qquad /18/$$

Решение уравнения /18/ имеет вид

$$F(y,\lambda) = C_1(\lambda)(y-1)^{r_1} + C_2(\lambda)(y-1)^{r_2}, \quad r_{1,2} = \frac{-3 \pm \sqrt{9+4c}}{2},$$

где $C_1(\lambda)$, $C_2(\lambda)$ - величины, не зависящие от y.

Поскольку функция $\Phi_1(y,t)$ при $y \to 1$ стремится к величине, не зависящей от y, то для удовлетворения этому условию положим $c=0$ /это определяет параметр λ/ и возьмем только решение $r_1 = 0$. Учитывая также начальное условие /44/ и полагая $y=1$, получим окончательно следующее выражение для корреляционной функции в рассматриваемом случае:

$$S_{+-}(t) = \frac{2}{3}S_0(S_0+1)\exp\{[-i(\omega^0 + P_1) - \Gamma' - \Gamma'']t\}. \qquad /19/$$

Спектральное представление этой функции имеет вид

$$S_{+-}^{\omega}(\omega) = \frac{2}{3\pi}S_0(S_0+1)\frac{\Gamma'+\Gamma''}{(\omega-\omega^0-P_1)^2 + (\Gamma'+\Gamma'')^2}, \quad \Gamma'+\Gamma'' \gg 2|P_2+b|. \qquad /20/$$

Уравнение /17/ может быть использовано для нахождения корреляционной функции и в других предельных случаях, рассмотренных в предыдущем разделе, а также в общем случае путем численного расчета на вычислительной машине.

Рассмотрим теперь двухвременную корреляционную функцию $S_{zz}(t)$, определяемую выражением /13/. При выполнении условия /1.5/ эту функцию можно представить в виде

$$S_{zz}(t) = \sum_{m=S_0}^{-S_0} (\rho_0)_m^m \, m\phi(m,t),$$

$$\phi(m,t) = \sum_{m'=S_0}^{-S_0} [\hat{g}'(t)]_{mm}^{m'm'} \, (m' - \langle S_0^z \rangle_0).$$

Из кинетического уравнения /14/ и выражения для матричного элемента "массового" супероператора /1/ получаем следующее уравнение эволюции для функции $\phi(m,t)$:

$$\frac{\partial}{\partial t}\phi(m,t) = -\Gamma'(m)\phi(m,t) - \sum_{j=\pm 1} \gamma'(m)\phi(m+j,t), \quad \phi(m,0) = (m - \langle S_0^z \rangle_0). \qquad /21/$$

Введем величины

$$N_n(t) = \sum_{m=S_0}^{-S_0} (\rho_0)_m^m \, m^n \phi(m,t)$$

и рассмотрим сначала уравнение для $N_0(t)$.

Используя выражение /37/ для $\Gamma'(m)$, $\gamma_j'(m)$ и выражение для матричного элемента оператора S_0^+, получим из уравнения /21/

$$\frac{\partial}{\partial t} N_0(t) = 0, \qquad N_0(0) = 0,$$

т.е. $N_0(t) = 0$.

Таким же образом, учитывая, что $N_0(t) = 0$, запишем уравнение для $N_1(t) \equiv S_{zz}(t)$:

$$\frac{\partial}{\partial t} N_1(t) = -\Gamma'[(1 + e^{-\lambda\omega^0})N_1(t) + (1 - e^{-\lambda\omega^0})\, N_2(t)],$$

$$N_1(0) = \langle (S_0^z)^2 \rangle_0 - (\langle S_0^z \rangle_0)^2, \qquad /22/$$

$$\langle (S_0^z)^2 \rangle_0 = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial (\lambda\omega^0)^2}.$$

Вообще уравнение для $N_n(t)$ может быть записано в виде следующей цепочки уравнений:

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

$$-(1 + e^{-\lambda\omega^0})\, N_{n-k+1}(t) + (e^{-\lambda\omega^0} - 1)N_{n-k+2}(t)] +$$

$$+ \sum_{k=2}^{n}{}'' C_k^n [S_0(S_0+1)(1 + e^{-\lambda\omega^0})N_{n-k}(t) + (e^{-\lambda\omega^0} - 1)N_{n-k+1}(t) -$$

$$-(e^{-\lambda\omega^0} + 1)N_{n-k+2}(t)] \}\Gamma', \qquad N_0(t) = 0,$$

$$N_n(0) = \langle (S_0^z)^{n+1} \rangle_0 - \langle (S_0^z)^n \rangle_0 \langle S_0^z \rangle_0 . \qquad /23/$$

Здесь $C_k^n = \frac{n!}{k!(n-k)!}$ - биноминальные коэффициенты, $\sum_{k=1}^{n}{}'$ содержит только нечетные k, $\sum_{k=2}^{n}{}''$ - только четные k.

Система уравнений /23/ аналогична системе кинетических уравнений для $\langle (S_0^z)^n \rangle$, полученной в работе [7]. Она является замкнутой и содержит $2S_0$ уравнений, т.к.

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

Например, при $S_0 = 1/2$ имеем $(S_0^z)^2 = \frac{1}{4}$, $N_2(t) = 0$ и из уравнения /22/ получаем /11/.

При $S_0 = 1$ имеем систему двух уравнений для $N_1(t)$ и $N_2(t)$, поскольку $(S_0^z)^3 = S_0^z$ и $N_3(t) = N_1(t)$.

В случае произвольного S_0 корреляционная функция $S_{zz}(t)$ описывается суперпозицией $2S_0$ экспонент, а ее спектральное представление $S_{zz}^{\omega}(\omega)$ - суммой $2S_0$ лоренцевых кривых.

При высоких температурах, $S_0\lambda|\omega^0| \ll 1$, можно пренебречь в уравнении /22/ членом с $N_2(t)$, тогда для произвольного S_0 имеем

$$S_{zz}(t) = \frac{1}{3} S_0(S_0+1)\, e^{-\Gamma_1(t)} \qquad (S_0\lambda|\omega^0| \ll 1),$$

$$S_{zz}^{\omega}(\omega) = \frac{1}{3\pi} S_0(S_0+1) \frac{\Gamma_1}{\omega^2 + \Gamma_1^2}.$$

Отметим, что динамику корреляционной функции $S_{zz}(t)$ значительно проще анализировать с помощью кинетических уравнений, чем с помощью системы уравнений /10/.

Для дальнейшего анализа спектрального распределения примесных возбуждений необходимо конкретизировать вид магнитной матрицы, с которой взаимодействует примесный спин. Это дает возможность исследовать зависимость величин ω^0, P_1, P_2, Γ', Γ'' от параметров среды /температуры, магнитного поля и т.д./.

Кроме того, для конкретной матрицы могут возникать дополнительные условия симметрии, приводящие к интересным особенностям спектра примесного спина. Так, если примесный спин расположен строго между подрешетками гейзенберговского антиферромагнетика, то $\omega^0 = 0$, $b=0$ и, как можно показать, $P_1 + P_2 = 0$. Таким образом, в этом случае

$$\omega(m) + P(m) = P_2(1-2m)$$

и спектр примесного спина является квадрупольным /см. также[8] /, т.е.

$$\tilde{\omega}_m = a + P_2 m^2 \ ,$$

где a не зависит от m.

ЛИТЕРАТУРА

1. Лось В.Ф., Коростиль А.М. Р17-81-407, Дубна, 1981.
2. Дыкман М.И., Кривоглаз М.А. Препринт ИТФ-78-69Р.
3. Лось В.Ф. ТМФ, 1978, 35, с. 113; 1978, 35, с. 247.
4. Лось В.Ф. ФНТ, 1977, 3, с. 172.
5. Кривоглаз М.А., Лось В.Ф. УФЖ, 1970, 15, с. 85.
6. Лось В.Ф. ТМФ, 1979, 39, с. 393.
7. Лось В.Ф. ФНТ, 1981, 7, с. 336.
8. Иванов М.А. ФТТ, 1972, 14, с. 562.

Рукопись поступила в издательский отдел
16 июня 1981 года.