

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА



С 36
П-12

20/5-75
P4 - 8209

205/2-75

А.Павликовски, И.Л.Бухбиндер, А.Л.Куземский

ДИФФУЗИЯ ЯДЕРНОГО МАГНИТНОГО МОМЕНТА
В РАЗБАВЛЕННЫХ СПЛАВАХ

1974

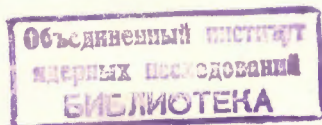
ЛАБОРАТОРИЯ
ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

P4 - 8209

А.Павликовски,* И.Л.Бухбиндер, А.Л.Куземский

ДИФФУЗИЯ ЯДЕРНОГО МАГНИТНОГО МОМЕНТА
В РАЗБАВЛЕННЫХ СПЛАВАХ

* Институт физики Шленского университета,
Катовице (Польша).



Павликовский А., Бухбиндер И.Л., Куземский А.Л.

P4 - 8209

Диффузия ядерного магнитного момента в разбавленных сплавах

Развита последовательное микроскопическое описание ядерной магнитной релаксации в разбавленных сплавах металлов. Показано, что вследствие магнитного диполь-дипольного взаимодействия спинов ядер основной решетки и спинов примеси в системе ядерных спинов возникает неоднородное распределение и потому наблюдаемое время релаксации существенно обусловлено спиновой диффузией. Даны выражения для времени продольной релаксации в некоторых случаях.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований
Дубна, 1974

Pawlikowski A., Buchbinder I.L., Kuzemsky A.L. P4 - 8209

Spin Diffusion of the Nuclear Magnetic Moment in Dilute Alloys

A successive microscopic description of the nuclear magnetic relaxation in dilute alloys is developed. It is shown, that due to the dipolar interaction between host nuclear spins and impurity spins, a nonuniform distribution in the host nuclear spin system will occur and consequently the macroscopic relaxation time will be strongly determined by the spin diffusion. The expressions for the relaxation time in certain cases are given.

Communications of the Joint Institute for Nuclear Research.
Dubna, 1974

§1. Введение

Исследование магнитных примесей в немагнитных металлах представляет весьма интересную и важную задачу. Связано это, в основном, с тем, что малая примесь атомов переходных металлов к немагнитному металлу может приводить к довольно значительному изменению их свойств, часто не зависящему от концентрации примесей. Например, электронная теплоемкость такой системы может в низкотемпературной области возрасти в несколько раз, или может возрасти на несколько порядков термоэлектродвижущая сила. Магнитными же примесями обусловлен характерный для разбавленных сплавов механизм электросопротивления, эффективность которого понижается при повышении температуры. Этот механизм ответствен за так называемый эффект Кондо, состоящий в наличии минимума электросопротивления при низких температурах у ряда металлов ¹⁻⁴. Влияние примесных спинов также весьма чувствительно сказывается на сверхпроводимости и магнитосопротивлении металлов.

Однако, может быть, наиболее прямо сказывается присутствие примесей на электронных и ядерных резонансных и релаксационных характеристиках разбавленных сплавов. С другой стороны, изучение широкого круга резонансных и релаксационных явлений в разбавленных сплавах является одним из наиболее важных источников экспериментальной информации о них ^{1, 2, 5, 6-10}. С помощью резонансных и релаксационных измерений с высокой степенью точности определены большинство параме-

тров взаимодействия в таких системах, их относительный вклад в наблюдаемые характеристики, прослежена динамика системы и изучено влияние примесей на электронный спектр и плотность состояний. Большой интерес при изучении разбавленных сплавов представляет электронный спиновый резонанс и релаксация^{/2, 11-16/} поскольку измерения положения и ширины линии ЭПР позволяют, в принципе, прямо измерить постоянную $s-d$ взаимодействия между электронами проводимости и примесью /заметим, что дело осложняется эффектом "узкого горла", связанным с тем, что из-за большой величины параметра $s-d$ обмена существует большой отток энергии от электронов проводимости к локальным спином^{/2/} /. Ситуация здесь несколько отличается от ЯМР. Это обусловлено тем, что ядра слабо связаны с электронной подсистемой основного металла, в то время как локальные спины вносят в нее весьма большое локализованное возмущение и в этом смысле фактически являются частью электронной подсистемы/. Более того, даже если величина смешивания локализованных электронов и электронов проводимости мала и можно говорить о двух отдельных системах $s-$ и $d-$ электронов, все равно резонансная частота локализованных моментов очень близка к резонансной частоте электронов проводимости и потому динамические эффекты здесь весьма существенны. Кроме того, можно ожидать заметного влияния орбитальных эффектов и кристаллического поля^{/2/}. Все это делает изучение электронного спинового резонанса и релаксации весьма важным для разбавленных сплавов^{/2, 11-16/}.

Не менее полезной для изучения локализованных моментов в разбавленных сплавах оказалась техника ЯМР^{/2/}. Тому были две существенные причины. Прежде всего оказалось, что ядра основного металла, близкие к примеси, весьма чувствительны к локальному возмущению спиновой плотности /благодаря сверхтонкому взаимодействию/ и зарядовой плотности /благодаря ядерному квадрупольному взаимодействию/. Во-вторых, ядерная релаксация сильно зависит от особенностей спектра низколежащих возбуждений электронной системы и потому может давать весьма полезную информацию о дина-

мическом аспекте примесной задачи. В случае магнитной примеси определяющую роль играет изменение спиновой плотности электронов проводимости вблизи примеси, а в случае примеси немагнитного атома переходного металла - зарядовой плотности. Изучению магнитных^{/9/} и немагнитных^{/10/} и почти магнитных примесей посвящено много работ. Для всех случаев было найдено, что скорость релаксации увеличивается по сравнению с чистым металлом. Хотя с современной точки зрения различие между магнитной и немагнитной примесью в металле довольно искусственно, тем не менее считается, что $s-d$ обменный гамильтониан Кондо довольно хорошо учитывает влияние примесей на релаксационные процессы в таком металле как Cu с примесями Mn, Fe, Cr. Надо заметить, что, по-видимому, это справедливо выше температуры Кондо^{/2/}.

Изучают как резонанс и релаксацию ядер локальных моментов в металлах^{/17, 18/}, так и очень тесно связанный с этим вопрос о релаксации ядер основного металла вследствие присутствия малого количества примесей^{/19, 20/}. В данной работе мы будем рассматривать только второй вопрос, хотя способ вывода выражения для времени релаксации столь же пригоден для описания и первого процесса и электронной спиновой релаксации.

Задача о выводе выражения для времени продольной ядерной спин-решеточной релаксации рассматривалась многими авторами^{/20, 21/}, однако, по нашему мнению, магнитная релаксация в разбавленных сплавах имеет некоторое отличие от релаксации в однородных системах, на что в предыдущих работах не обращалось внимания. Это отличие связано с тем, что за счет диполь-дипольного взаимодействия спина ядра и спина примеси ядерные спины основного металла, находящиеся вблизи примеси, быстро приходят в равновесие с решеткой, а находящиеся на более далеком расстоянии - медленно. Поэтому в системе ядерных спинов возникает неоднородное распределение и необходимо учитывать спиновую диффузию^{/22/}, как и в случае электронной релаксации^{/12, 16/}.

Последовательному микроскопическому рассмотрению указанной задачи и посвящена настоящая работа.

§2. Гамильтониан системы и основные соотношения

Рассмотрим систему ядерных спинов \vec{I} основного металла, взаимодействующих с внешним магнитным полем H_0 , между собой и с магнитными примесями и электронами проводимости. Гамильтониан системы имеет вид /6, 20, 21/

$$H = H_n + H_e + H_m + H_{ne} + H_{me} + H_D, \quad /2.1/$$

где индекс n относится к ядрам металла растворителя, индекс m - к магнитным примесям и индекс e - к электронам проводимости. Здесь

$$H_n = \sum_i h \omega_n I_i^z + \sum_{i \neq j} A_{ij} (I_i^z I_j^z - 1/2 I_i^+ I_j^-) \quad /2.2/$$

- гамильтониан зеемановского и диполь-дипольного взаимодействий /22/ ядер основного металла,

$$H_e = \sum_{k\sigma} \epsilon_{k\sigma} a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} \quad /2.3/$$

- гамильтониан системы электронов проводимости,

$$H_m = \sum_a h \omega_m S_a^z \quad /2.4/$$

- зеемановский гамильтониан спинов примесей,

$$H_{ne} = K \sum_i \vec{I}_i \cdot \vec{\sigma}(\vec{R}_i), \quad K = -8\pi/3 \gamma_e \gamma_n h^2 \quad /2.5/$$

- оператор сверхтонкого взаимодействия,

$$H_{me} = J_{sd} / N \sum_a \vec{S}_a \cdot \vec{\sigma}(\vec{R}_a) \quad /2.6/$$

- оператор s-d-обменного взаимодействия между спином примеси и спинами электронов проводимости. Таким образом, мы предполагаем, что примеси можно рассматривать, при температурах и магнитных полях много больших, чем характерные для эффекта Кондо, как хорошо определенные локализованные спины. Как хорошо из-

вестно, гамильтониан, совпадающий с точностью до членов второго порядка с гамильтонианом Андерсона, получается из него с помощью канонического преобразования Шриффера-Вольфа /1-4/

$$H_D = h \sum_{j\alpha} \sum_{\mu\nu} \Phi_{j\alpha}^{\mu\nu} I_j^\mu S_\alpha^\nu, \quad (\mu, \nu = x, y, z) \quad /2.7/$$

- гамильтониан диполь-дипольного и псевдодипольного взаимодействий ядра и спина примеси /6, 20/. Псевдодипольное взаимодействие /обозначаемое символически $H_{ne}^D \cdot H_{me}^D$ / является одним из трех возможных механизмов косвенного взаимодействия /два других $H_{ne}^D \cdot H_{me}^D$ и $H_{ne} \cdot H_{me}^D$ / и наиболее существенным из них /20/. Выражение для псевдодипольного взаимодействия имеет вид

$$H_{mn}^{PD} = \sum_{i,j} B_{ij} \vec{I}_i (\vec{S}_j - \hat{r}_{ij} (\hat{r}_{ij} \cdot \vec{S}_j)).$$

Полное выражение для величины B_{ij} приведено в работе /6/. Как показано в этой работе, на больших расстояниях B_{ij} по структуре подобно произведению контактного потенциала и пространственной части взаимодействия РККИ

$$B_{ij} \approx B \cos(k_F r_{ij} + \phi_B) / (2k_F r_{ij})^3. \quad /2.8/$$

Обычно псевдодипольное взаимодействие меньше контактного. Оценки /6/ для ^{205}Tl дают $B \approx 1/3 K$. Для Cu это будет тем более справедливо, поскольку его масса много меньше, чем у Tl . С учетом сказанного, явное выражение для H_D можно представить в форме

$$H_D = \gamma_n \gamma_m h \sum_{i\alpha} 1/r_{i\alpha}^3 \{ I_i^z \delta S_\alpha^z (1 - 3 \cos^2 \theta_{i\alpha}) - 3/2 \sin \theta_{i\alpha} \cos \theta_{i\alpha} e^{-i\phi_{i\alpha}} I_i^+ \delta S_\alpha^z - 3/2 \sin \theta_{i\alpha} \cos \theta_{i\alpha} e^{i\phi_{i\alpha}} I_i^- \delta S_\alpha^z \} \times \\ \times \{ 1 + B \cos(2k_F r_{i\alpha} + \phi_B) / 8k_F^3 \}, \quad /2.9/$$

где $\delta S_{\alpha}^z = S_{\alpha}^z - \langle S^z \rangle$. Мы произвели здесь выделение среднего поля в /2.9/ и /2.5/. При этом гамильтониан свертонного взаимодействия переписется в виде

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{ne} &= -8\pi/3 \gamma_e \gamma_n h^2 \sum_{jp} (\vec{I}_j \vec{\sigma}_p) \delta(\vec{R}_j - \hat{\vec{r}}_p) = \\ &= K \sum_{jp} \{ (I_j^+ \sigma_p^- + I_j^- \sigma_p^+) \delta(\vec{R}_j - \hat{\vec{r}}_p) + (\sigma_p^z \delta(\vec{R}_j - \hat{\vec{r}}_p) - \\ &- \langle \sigma_p^z \delta(\vec{R}_j - \hat{\vec{r}}_p) \rangle) I_j^z \}. \end{aligned}$$

Здесь

$$\sum_p \vec{\sigma}(\hat{\vec{r}}_p) \delta(\vec{R}_i - \hat{\vec{r}}_p) = \sum_{ss'} \sum_{kk'} \langle s | \vec{\sigma} | s' \rangle \psi_k^*(0) \psi_k(0) a_{ks}^+ a_{k's'}$$

С учетом сделанного выделения среднего поля зеемановская частота ω_n сдвинется на величину Ω_i , т.е. $\hbar \sum_i (\omega_n + \Omega_i) I_i^z$, где

$$\Omega_i = \sum_{\alpha} \gamma_n \gamma_m h / r_{i\alpha}^3 \{ 1 + B \cos(2k_{F i \alpha} r_{i\alpha} + \phi_B) / 8k_{F i \alpha}^3 \} \langle S^z \rangle -$$

$$- K \sum_p \langle \sigma_p^z \delta(\vec{R}_i - \hat{\vec{r}}_p) \rangle = \sum_{\alpha} \Phi_{i\alpha}^{zz} \langle S_{\alpha}^z \rangle. \quad /2.10/$$

Учет сдвига частоты Ω_i , ($\Omega_i \ll \omega_n$) имеет существенное значение при расчете коэффициента диффузии, к вычислению которого мы и перейдем.

§3. Уравнение для неравновесных средних

Нашей целью является последовательный микроскопический вывод уравнения для обратной спиновой температуры зеемановской подсистемы $\beta_n(\vec{r}, t)$, релаксирующей к равновесию после отключения внешнего переменного

го поля. Воспользуемся для этого работой /23/, методу расчета которой мы здесь будем следовать. В этой работе, с помощью метода неравновесного статистического оператора Зубарева /24/ выведены кинетические уравнения, описывающие процессы спиновой диффузии в случае квадрупольного резонанса ядер со спином 3/2. В отличие от предшествующих работ, в этой статье была учтена диффузия энергии резервуара диполь-дипольных взаимодействий (DDP).

Представим гамильтонианы /2.1/ в следующем виде:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_z + \mathcal{H}_{dd} + \mathcal{H}_t + V, \quad /3.1/$$

где

$$\mathcal{H}_z(\vec{r}) = \sum_i I_i^z h (\omega_n + \Omega_i) \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \quad /3.2/$$

- оператор плотности зеемановской энергии,

$$\mathcal{H}_{dd} = \sum_{i \neq j} A_{ij} (I_i^z I_j^z - 1/2 I_i^+ I_j^-) \quad /3.3/$$

- секулярная часть оператора диполь-дипольного взаимодействия,

$$\mathcal{H}_t = \mathcal{H}_e + \mathcal{H}_m + \mathcal{H}_{me} \quad /3.4/$$

- гамильтониан термостата, $V = \mathcal{H}_D$. Следуя /23/, выберем в качестве величин, описывающих неравновесное состояние, операторы $\mathcal{H}_z(\vec{r})$ и \mathcal{H}_{dd} . Тогда, согласно методу НСО, оператор энтропии будет иметь вид

$$S(t, 0) = \Phi(t) + \beta \mathcal{H}_t + \beta_d \mathcal{H}_{dd} + \int d^3r \beta_n(\vec{r}, t) \mathcal{H}_z(\vec{r}), \quad /3.5/$$

где β_d и β - соответственно температура DDP и термостата. Далее, согласно /24/, можно построить НСО, соответствующий оператору энтропии /3.5/, а затем получить уравнение для неравновесных средних от $\mathcal{H}_z(\vec{r})$ и \mathcal{H}_{dd} или для соответствующих обратных температур. Для нас существенно только уравнение для $\langle \mathcal{H}_z(\vec{r}) \rangle^t$, поскольку в отсутствие внешнего переменного поля уравнения для

$\beta_n(\vec{r})$ и β_d расцепляются и их можно изучать отдельно. Расчеты, аналогичные расчетам в /23/, приводят к уравнению вида

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle H_z(\vec{r}) \rangle^t = - \sum_{\mu, \nu} \frac{\partial}{\partial X_\mu} L^{\mu\nu}(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial X_\nu} \beta_n(\vec{r}) +$$

/3.6/

$$+ (\beta_n(\vec{r}) - \beta) L_1(\vec{r}),$$

где

$$L^{\mu\nu}(\vec{r}) = \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\epsilon t_1} \int d\lambda \int d^3r' \langle J_\mu(\vec{r}) e^{-\lambda S(t, 0)} \times$$

/3.7/

$$\times J_\nu(\vec{r}', t_1) e^{\lambda S(t, 0)} \rangle_q^t,$$

$$L_1(\vec{r}) = \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\epsilon t_1} \int d\lambda \int d^3r' \langle K(\vec{r}) e^{-\lambda S(t, 0)} \times$$

/3.8/

$$\times K(\vec{r}', t_1) e^{\lambda S(t, 0)} \rangle_q^t$$

- обобщенные кинетические коэффициенты. Здесь

$$\vec{J}(\vec{r}) = 1/2i \sum_{k \neq \ell} A_{k\ell} \vec{r}_{k\ell} \omega_n \delta(\vec{r} - \vec{r}_k) I_k^+ I_\ell^-$$

/3.9/

$$K(\vec{r}) = 1/i\hbar [H_z(\vec{r}), V].$$

/3.10/

Связь параметра $\beta_n(\vec{r}, t)$ и неравновесного среднего $\langle H_z(\vec{r}) \rangle^t$ дается соотношением $\langle H_z(\vec{r}) \rangle^t = \langle H_z(\vec{r}) \rangle_q^t$. Среднее берется с квазиравновесным статистическим оператором $\langle \dots \rangle_q^t = \text{Sp} [\exp(S(t, 0)) \dots]$. Уравнение /3.6/

есть уравнение диффузионного типа, описывающее наиболее полным образом локальные изменения зеемановской энергии вследствие релаксационных процессов и процессов переноса в системе с гамильтонианом /2.1/. Уравнение /3.6/ очень сложно в своей общей форме и для получения решения требует использования определенных приближений. Такого рода приближения рассматриваются в следующих разделах.

§4. Вычисление коэффициента диффузии

Для того чтобы выразить неравновесное среднее $\langle H_z(\vec{r}) \rangle^t$ через $\beta_n(\vec{r}, t)$, применим высокотемпературное приближение, т.е. будем полагать, что $\hbar\omega_n \ll kT$. Как правило, это приближение очень хорошо выполняется в теории магнитного резонанса. Тогда из /3.6/ получим

$$\frac{\partial}{\partial t} \beta_n(\vec{r}) = \sum_{\mu, \nu} \frac{\partial}{\partial X_\mu} D^{\mu\nu}(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial X_\nu} \beta_n(\vec{r}) - (\beta_n(\vec{r}) - \beta) R(\vec{r}),$$

/4.1/

где

$$D^{\mu\nu}(\vec{r}) = \omega_d / \hbar^2 \sqrt{\pi} \sum_{\ell} A_{r\ell}^2 (r^\mu - r_\ell^\mu) (r^\nu - r_\ell^\nu) \times$$

/4.2/

$$\times \exp[-(\Omega_r - \Omega_\ell)^2 / 4\omega_d^2]$$

- коэффициент диффузии. Выражение для величины $R(\vec{r})$ приводится в следующем разделе. При выводе /4.2/ было использовано гауссовское приближение для спиновой корреляционной функции ядер. Это приближение состоит в следующем. При расчете выражения

$$\text{Sp} I_k^+ I_\ell^- I_m^+(t) I_n^-(t) = (\text{Sp} I^+ I^-)^2 f(t) \delta_{kn} \cdot \delta_{mn} \exp[it/\hbar(\Omega_\ell - \Omega_k)]$$

/4.3/

считается, что величина $f(t)$, которая является Фурье-образом кривой кросс-релаксации, может быть аппроксимирована выражением

$$f(t) = \omega_d / \sqrt{2\pi} \exp[-1/2(\omega_d^2 t^2)], \quad /4.4/$$

где

$$\hbar^2 \omega_d^2 = S_p \mathcal{H}_{dd}^2 / S_p(I^z)^2. \quad /4.5/$$

Из уравнений /4.1/, /4.2/ видно, что при релаксации ядерной намагниченности по оси z , которая является функцией положения, вследствие дипольного взаимодействия, возникает возможность переноса ядерной намагниченности /т.е. избытка спина/ и, следовательно, имеет место диффузия ядерного магнитного момента. Таким образом, ядра при спиновой диффузии не передвигаются, диффундирует лишь избыток проекции спина ядра /25/.

Так как концентрация магнитных примесей предполагается достаточно низкой, то на каждую примесь приходится большое количество ядер основной решетки. В этом случае можно считать, что каждое ядро эффективно взаимодействует только с одной примесью. Рассмотрим один примесный ион, расположенный в начале координат, тогда вектор \vec{r} в выражении /4.2/ отсчитывается от этого иона. Мы ограничимся случаем кубического монокрystalла; при этом симметрический тензор $D^{\mu\nu}(\vec{r})$, составляющие которого зависят от углов, составляемых внешним полем с осями кристалла, сведется к скаляру $D(\vec{r})$. При малых значениях r величина $D(r)$ убывает одновременно с r . Физически это связано с тем, что зеемановские частоты ядер, близких к примеси, значительно отличаются друг от друга вследствие магнитного поля, вызываемого примесью. Это затрудняет так называемые flip-flop - переходы соседних ядер, т.к. при таком переходе не будет сохраняться суммарная зеемановская энергия спинов. В выражении /4.2/ это описывается экспоненциальным множителем, наличие которого приводит к понятию диффузионного барьера вокруг каждой примеси, внутри которого диффузия ядерного спина сильно затруднена /25/. В самом деле, на больших расстояниях от примеси разность частот $(\Omega_r - \Omega_\ell)$ мала по сравнению с ω_d и $D(r)$ не зависит от r . Вблизи примесей сдвиги частот

велики, и $D(r)$ с приближением к ним быстро убывает. Характеристикой изменения $D(r)$ вблизи примеси служит радиус диффузионного барьера, δ - расстояние от примеси, на котором сдвиг уровней $(\Omega_r - \Omega_\ell)$, обусловленный ей, равен ядерной диполь-дипольной ширине ЯМР ω_d . При решении уравнений диффузии /25/ понятия диффузионного барьера и его радиуса, связанные с использованием для $f(t)$ гауссовой аппроксимации, естественно приводят к моделированию функции $D(r)$ в виде прямоугольной ямы:

$$D(r) = \begin{cases} \text{const} = D & \text{при } r > \delta \\ 0 & \text{при } r < \delta \end{cases}; D = \frac{\omega_d}{3h^2 \sqrt{\pi}} \sum A_{k\ell}^2 r_{k\ell}^2. \quad /4.6/$$

Оценим величину диффузионного барьера. Для соседних ядер, расположенных по радиусу от примеси на расстоянии постоянной решетки a друг от друга $(\Omega(\delta) - \Omega(\delta+a)) = \omega_d$. Величина $\omega_d \approx 6\gamma_n^2 h a^{-3}$. Таким образом,

$$\gamma_n \gamma_n h \langle S^z \rangle \frac{a}{\delta^3} \left\{ 3 \frac{1 + B \cos(2\delta k_F + \phi_B)}{\delta} - \right. \quad /4.7/$$

$$\left. - B \sin(2\delta k_F + \phi_B) k_F \right\} = 6\gamma_n^2 h a^{-3}.$$

Для простоты пренебрежем членами порядка B . Тогда получим

$$\delta = a [\gamma_m / \gamma_n \langle S^z \rangle]^{1/4}. \quad /4.8/$$

Вообще говоря, эффективное среднее значение S^z зависит от $\beta_n(r, t)$. Чаще всего выполняется условие, при котором $\tau_e \omega_d \gg 1$, где τ_e обозначает время спин-решеточной релаксации величины S^z /25/. Это условие озна-

чает, что за время переориентации ядерного спина благодаря диполь-дипольным взаимодействиям с соседними ядрами спин примеси не меняет ориентации $\langle S^z \rangle \approx 1$. Справедливо же это тогда, когда дипольная энергия ядра значительно превышает ширину электронных уровней. Модель прямоугольной ямы сильно упрощает уравнение диффузии /4.1/, решение которого для некоторых случаев рассматривается в следующем разделе.

§5. Время продольной релаксации ядерного момента

С учетом приближения прямоугольной ямы уравнение /4.1/ переписывается в виде

$$\frac{\partial}{\partial t} \beta(\vec{r}, t) = D \Delta \beta_n(\vec{r}, t) - (\beta_n(\vec{r}, t) - \beta) (R_0 + R_1(\vec{r}) + R_2(\vec{r})), \quad /5.1/$$

$$R_0 = \frac{2K^2}{h^2} \sum_{kk'pp'} \psi_k^* \psi_k \psi_p^* \psi_p \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} f(\omega - \omega_0) G_{kk'pp'}^1(\omega), \quad /5.2/$$

$$G_{kk'pp'}^1(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle a_{k\downarrow}^+ a_{k'\uparrow} a_{p\uparrow}^+ (t) a_{p'\downarrow}(t) \rangle, \quad /5.3/$$

$$R_1(\vec{r}) = -\frac{4K}{h} \sum_{kk'a} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} f(\omega - \omega_0) \text{Re}(\psi_k^* \psi_k G_{kk'a}^{+-}(\omega) \Phi_{ra}^{+z}), \quad /5.4/$$

$$G_{kk'a}^{+-}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle a_{k\uparrow}^+ a_{k'\downarrow} \delta S_a^z(t) \rangle, \quad /5.5/$$

$$R_2(\vec{r}) = 9/2 (\gamma_n \gamma_m h)^2 \sum_a \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} f(\omega - \omega_0) G_{aa}(\omega) \times \left\{ 1 + \frac{B \cos(2k_F |\vec{r} - \vec{r}_a| + \phi_B)}{8k_F^3} \right\}^2 \frac{\sin^2 \theta_{ra} \cos^2 \theta_{ra}}{|\vec{r} - \vec{r}_a|^6}, \quad /5.6/$$

$$G_{aa}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle \delta S_a^z \delta S_a^z(t) \rangle.$$

Здесь $f(\omega - \omega_0)$ - функция формы линии ЯМР, интеграл от которой нормирован на единицу. Величина R_0^{-1} дает время релаксации Корринги /22, 25/, величина R_1 обусловлена корреляцией между спинами электронов проводимости и спинами примеси и характеризуется сильной анизотропией. Величина R_2 существенно определяется рассеянием на флуктуациях спинов примесей и имеет наиболее важное значение в данном расчете. Связано это с тем, что основные характерные особенности задачи полностью проявляются в изотропном случае, который обычно и рассматривается в большинстве работ. В изотропном приближении $R_1 = 0$, а величина R_2 приводится к следующему виду

$$R_2(r) = \sum_a C \left\{ 1 + \frac{B \cos(2k_F |\vec{r} - \vec{r}_a| + \phi_B)}{8k_F^3} \right\}^2 \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}_a|^6}, \quad /5.7/$$

где

$$C = 3/5 (\gamma_n \gamma_m h)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} f(\omega - \omega_0) G_{aa}(\omega). \quad /5.8/$$

Даже в этом приближении решение уравнения диффузии /5.1/ представляет большие трудности из-за наличия осциллирующего фактора в виде $\cos(2k_F |\vec{r} - \vec{r}_a| + \phi_B)$ в /5.7/ и может исследоваться только численно. Чтобы избежать этого, в настоящем качественном рассмотрении положим $B=0$. В силу соображений, указанных в §2, это всегда может быть сделано в первом приближении. Тогда решение уравнения /5.1/ может быть в стационарном случае для центральной симметрии выражено через бесселевы функции /25/. Согласно вычислениям, сделанным в работе /25/, наблюдаемое /макроскопическое/ время продольной ядерной спин-решеточной релаксации, определяемое суммарным потоком ядерного магнитного поля через сферу радиуса R за 1 сек, равно

$$T_1^{-1} = R_0^{-1} + 4\pi DNF. \quad /5.9/$$

Здесь N - число примесей, а величина F имеет вид

$$F = \begin{cases} 0,7b & \text{при } b > \delta \\ 1/3(b/\delta)^3 b & \text{при } b < \delta, \end{cases} \quad /5.10/$$

где $b = (C/D)^{1/4}$.

Как видно из соотношений /5.9/ и /5.10/, характер поведения времени релаксации и его величина сильно зависят от конкретного соотношения величин b /определяющейся корреляционной функцией $G_{\alpha\alpha}(\omega)$ / и δ /определяющейся $\langle S^z \rangle$ / и от температуры для каждого данного сплава. Таким образом, мы получили, что задача о релаксации ядерного момента свелась к задаче нахождения величины F . Ясно, что, если $\delta \ll b$, наличие диффузионного барьера не играет никакой роли; если же $b < \delta$, диффузионный барьер очень существен и должен приводить к замедлению релаксации. Другими словами, качественно b представляет собой то расстояние, до которого эффективна непосредственная релаксация ядер /25/. Следует отметить, что порядок времени, требуемого для переноса значения магнитного момента на расстояние r в твердом теле, равен $\tau_D \approx Dr^{-2}$, что для $r = 10^{-6}$ составляет величину $\tau_D \approx 1$ сек.

§6. Заключение

Из вышесказанного видно, что квантостатистический вывод выражения для времени продольной релаксации ядерного магнитного момента в разбавленных сплавах приводит к результату, совершенно отличному от предыдущих. Связано это с тем, что до сих пор ядерная релаксация в разбавленных сплавах описывалась на осно-

вании квантовомеханической формулы для вероятности перехода теории возмущений второго порядка /20,21/. Учет спиновой диффузии приводит к совершенно отличному выражению /5.9/, которое, в применении к разбавленным сплавам переходных металлов, составляет главный результат работы. Заметим, что наш вывод имеет общий характер и может быть использован для описания других релаксационных явлений в разбавленных сплавах. Особый интерес при этом представляют вопросы, связанные с динамическим эффектом "узкого горла" во взаимодействующей подсистеме электронов, на что указано в работах /2,20/. До сих пор неясно, должен ли учитываться эффект "узкого горла" при расчете динамической восприимчивости локальных моментов в задаче о продольной релаксации ядер основной решетки. Как показано в /20/, эффекты такого рода исключительно сильно меняют порядок величины релаксационного времени T_1 . Подобные вопросы изучались в работе /26/, для случая релаксации на фононах с учетом фононного "узкого горла". Метод, развитый в этой работе, по-видимому, будет также полезен для рассматриваемой здесь системы разбавленных сплавов.

В следующей работе мы предполагаем провести расчет входящих в выражение /5.9/ корреляционных функций, в частности, функции $G_{\alpha\alpha}(\omega)$, определяющейся мнимой частью примесной восприимчивости, и проделать численные оценки. Поэтому мы также надеемся вернуться к обсуждению эффекта "узкого горла", представляющего для разбавленных сплавов очень важную и интересную задачу.

В заключение авторы выражают глубокую благодарность проф. Вольфгангу Гетце и проф. Конраду Фишеру за интересные и стимулирующие обсуждения проблемы разбавленных сплавов.

Литература

1. А.А.Абрикосов. УФН, 97, 403 /1969/.
2. J.Kondo, A.J.Heeger. Solid State Phys., ed. F.Zeitl, D.Turnbull v. 23, Academic Press, 1969.

3. J.R.Schrieffer. *J.Appl.Phys.*, 38, 1143, 1967.
4. K.Fischer. *Springer Tracts in Modern Physics*. vol. 54, Springer-Verlag, Berlin, 1970; *Phys.Stat.Sol.*, 46, 11, 1971.
5. F.Gautier. *Lectures at Summer School of Magnetism*. Warszawa, 1970.
6. N.Bloembergen, T.J.Rowland. *Acta Metallurgica*, 1, 731, 1953; *Phys.Rev.*, 97, 1679, 1955.
7. W.D.Knight. *Solid State Phys.*, ed. F.Zeitz, D.Turnbull v. 2 Academic Press, 1956; Y.Yafet, *ibid.*, v. 14, 1959.
7. V.Jaccarino. *Theory of magnetism in transition metals*. p. 335, Academic Press, New York, 1967.
9. L.B.Welsh, A.J.Heeger, M.A.Jensen. *J.Appl.Phys.*, 39, 696, 1968; R.E.Levine. *Phys.Lett.*, 28A, 504, 1969; A.Narath, A.C.Gissard. *Phys.Rev.*, 183, 391, 1969; G.Gladstone. *J.Appl.Phys.*, 41, 1150, 1970; D.O.Ostenburg et al., *Phys.Lett.*, 30A, 130, 1969.
10. A.Narath. *Phys.Rev.*, 163, 232, 1967.
11. H.J.Spencer, S.Doniach. *Phys.Rev.Lett.*, 18, 994, 1967; S.Doniach. *J.Phys. Chem.Solids.*, 29, 2169, 1968.
12. W.Brenig, W.Gotze, P.Wolffle. *Phys.Rev.*, B2, 4533, 1970; *Z.Physik*, 235, 59, 1970.
13. B.Giovannini, R.Orbach. *Phys.Rev.*, B2, 4517, 1970.
14. M.B.Walker. *Phys.Rev.*, B1, 3690, 1970.
15. W.Gotze, P.Wolffle. *J.Low.Temp.Phys.*, 5, 575, 1971.
16. J.Zitkova-Wilcox. *Sol.St.Comm.*, 12, 1109, 1973.
17. R.E.Walstedt, A.Narath. *Phys.Rev.*, B6, 4118, 1972.
18. R.E.Walstedt, L.R.Walker. *Phys.Rev.*, B9, 4857, 1974.
19. O.J.Lumpkin. *Phys.Rev.*, 164, 324, 1967; P.Bernier et al. *J. de Physique*, 32, C1-513, 1971; M.R.Mc Henry et al., *Phys.Rev.Lett.*, 27, 426, 1971; F.Y.Fradin. *Phys.Rev.Lett.*, 26, 1033, 1971.
20. B.Giovannini, P.Pincus, G.Gladstone, A.J.Heeger. *J. de Physique*, 32, C1-163, 1971.
21. B.Giovannini, A.J.Heeger. *Sol.St.Comm.*, 7, 287, 1969; *J.Solyom. Z.Physik*, 238, 195, 1970; C.Ebner, C.C.Sung. *Phys.Rev.*, B8, 5226, 1973.
22. А.Абрагам. *Ядерный магнетизм*. ИЛ, Москва, 1963.
23. И.Л.Бухбиндер, А.Р.Кессель. *ЖЭТФ*, 65, 1498/1973/.
24. Д.Н.Зубарев. *Неравновесная статистическая термодинамика*. "Наука", М., 1971.
25. Г.Р.Хуцишвили. *УФН*, 87, 211 /1965/; 96, 441 /1968/.
26. I.L.Buchbinder, T.Paszkwicz. *J.Phys.*, C7, 279, 1974.

Рукопись поступила в издательский отдел
15 августа 1974 года.