УДК 539.144.43

© Физика твердого тела, том 37, № 8, 1995
Solid State Physics, vol. 37, N 8, 1995

ВРЕМЕННЫЕ КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ФУНКЦИИ СИСТЕМЫ ЯДЕРНЫХ СПИНОВ ПРИ БОЛЬШИХ ПОЛЯРИЗАЦИЯХ

Э.Б.Фельдман, А.К.Хитрин

Институт химической физики Российской академии наук,
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия
(Поступило в Редакцию 20 декабря 1994 г.)

Системы ядерных спинов при низких спиновых температурах интересны как своим необычным поведением [1], так и тем, что именно в них достигнуты рекордно низкие температуры — менее 1 nK [2]. Мы рассмотрим случай диэлектриков, где практически единственным межъядерным взаимодействием является диполь-дипольное

$$H = -\omega_0 \sum_i S_i^z + \sum_{i<j} b_{ij}(3S_i^z S_j^z - S_i S_j). \tag{1}$$

Здесь $\omega_0 = \gamma H_0$ — частота ларморовской прецессии во внешнем поле H_0, γ — гиромагнитное отношение, b_{ij} — константы диполь-дипольного взаимодействия. При больших поляризациях ядерных спинов естественным методом описания является переход к спин-волновому представлению [3,4], когда (1) заменяется гамильтонианом слабо неидеального бозе-газа магнонов

$$H = \sum_k \varepsilon_k a_k^+ a_k + \frac{1}{4N} \sum_{kpq} \Gamma_{kp}^q a_{k-q}^+ a_{p+q}^+ a_k a_p, \tag{2}$$

где a_k^+, a_k — операторы рождения и уничтожения магнонов с волновым вектором k, N — число спинов (узлов решетки), а спектр ε_k и амплитуды рассеяния Γ_{kp}^q выражаются через фурье-компоненты b_k констант диполь-дипольного взаимодействия

$$\varepsilon_k = \omega_0 - b_0 - \frac{1}{2} b_k, \qquad \Gamma_{kp}^q = b_{p+q} + b_{q-k} + 2b_q + 2b_{p+q-k}. \tag{3}$$

Отклонение поляризации от единицы пропорционально плотности магнонов $p = 1 - 2n/N$, $n = \sum_k n_k = \sum_k \langle a_k^+ a_k \rangle$, а числа заполнения в равновесии даются распределением Планка

$$n_k = \left\{ \exp[\beta(\varepsilon_k - \mu)] - 1 \right\}^{-1}. \tag{4}$$

Здесь спиновая температура β и химический потенциал μ играют роль двух независимых термодинамических параметров (ту же, что зеемановская и дипольная температуры) в обычном представлении.

Измеряемые динамические характеристики системы могут быть легко выражены через различные временные корреляционные функции, вычисление которых и представляет собой основную проблему спиновой динамики. Ввиду сложности задачи чаще всего приходится ограничиваться лишь более или менее правдоподобными предположениями о поведении таких корреляторов [5]. Упрощение, возникающее за счет перехода к спин-волновому представлению, позволяет непосредственно вычислять корреляционные функции. Легче всего это сделать для не слишком длинных времен $t < \delta^{-1}$, где $\delta \sim \omega_{\text{loc}}(1-p)$ — обратное время жизни магнонов, определяемое процессами столкновений, а $\omega_{\text{loc}} \sim |\varepsilon_k - \omega_0|$ — характерная частота диполь-дипольных взаимодействий. В этом случае можно пренебречь взаимодействием магнонов и все интересующие нас величины выразить через спектр ε_k идеального газа магнонов.

В качестве примера ниже мы вычислим автокорреляционную функцию z-компоненты спина в узле (такой коррелятор возникает, в частности, в задаче о скорости кросс-релаксации и форме линии ЯМР примесных ядер)

$$g(t) = \frac{1}{2}\Big\langle S_i^z(t)S_i^z(0) + S_i^z(0)S_i^z(t)\Big\rangle \approx \frac{1}{2}\Bigg\langle\Bigg(\frac{1}{2} - \frac{1}{N}\sum_{ki} a_k^+(t)a_i(t)\Bigg)\times$$

$$\times\Bigg(\frac{1}{2} - \sum_{mn} a_m^+ a_n\Bigg)\Bigg\rangle + c.c. \approx \frac{p^2}{4} + \frac{1}{N^2}\sum_{km} n_k(n_m+1)\cos\Big[(\varepsilon_k - \varepsilon_m)t\Big]. \quad (5)$$

Временная зависимость операторов определяется гамильтонианами (1), (2).

а) Высокие спиновые температуры. С помощью динамической поляризации ядер [1] можно привести спиновую систему в состояние с поляризацией, близкой к единице. При этом спиновая температура остается высокой по сравнению с диполь-дипольным взаимодействием $\beta\omega_{\text{loc}} \ll 1$ (рассматриваемый случай соответствует низкой зеемановской и высокой дипольной температурам). Тогда числа заполнения в (5) одинаковы $n_k = n/N$, и корреляционную функцию (с точностью до членов порядка n/N включительно) можно представить в виде

$$g(t) = \frac{1}{4} - \frac{n}{N} + \frac{n}{N}C(t)C^*(t), \quad C(t) = \frac{1}{N}\sum_k e^{i\varepsilon_k t}. \quad (6)$$

Это выражение содержит суммирование по магнонному спектру (3). Спектр имеет сложный анизотропный вид и может быть получен численным счетом. Качественно его можно рассматривать как сумму двух слагаемых: вклада от ближайших соседей, который для простой кубической решетки и $H_0 \parallel [001]$ имеет вид

$$\varepsilon_k = A\Big\{2\cos(k_2 a) - \cos(k_x a) - \cos(k_y a)\Big\}, \quad (7)$$

где $A = \gamma^2\hbar/2a^3$, a — период решетки и вклада с больших расстояний, приводящего к сингулярности при $k \to 0$ [1]. Для указанной ориентации приближение ближайших соседей (7) является довольно хорошим [4]. В этом случае суммирование в (6) может быть выполнено аналитически и коррелятор принимает вид

$$g(t) = \frac{1}{4} - \frac{n}{N} + \frac{n}{N} J_0^2(2At) J_0^4(At), \tag{8}$$

где $J_0(x)$ — функция Бесселя. При $t \gg A^{-1}$ эта корреляционная функция осциллирует с частотами, кратными A, а амплитуда осцилляций затухает как $(\pi At)^{-3}$.

b) Низкие спиновые температуры. Состояния с низкой спиновой температурой $\beta\omega_{\rm loc} \gg 1$ могут быть получены, если провести частичное размагничивание системы с большой начальной поляризацией. При этом поляризация может оставаться большой. В этом случае коррелятор принимает вид

$$g(t) = \frac{1}{4} - \frac{n}{N} + \frac{1}{2}\Big\{C(t)B(t) + C^*(t)B^*(t)\Big\}, \tag{9}$$

где $C(t)$ дается выражением (6), а

$$B(t) = \frac{1}{N}\sum_k n_k e^{-i\varepsilon_k t}. \tag{10}$$

В случае низких температур заняты лишь состояния вблизи дна зоны, и для вычисления $B(t)$ мы можем воспользоваться разложением спектра вблизи минимума [4]. Эта часть коррелятора имеет более простой вид в частотном представлении. Переходя в (10) от суммирования к интегрированию и учитывая (4), найдем что фурье-образ $B(t)$ имеет вид

$$F_B(\omega) \sim \begin{cases} (\omega - \omega_m)^\alpha / \Big[\exp(\beta(\omega - \omega_m - \mu)) - 1\Big], & \omega > \omega_m, \\ 0, & \omega < \omega_m, \end{cases} \tag{11}$$

где для ориентации $H_0 \parallel [001]$ (регулярный минимум на границе зоны Бриллюэна) $\alpha = 1/2, \omega_m = \omega_0 - 4.844$ A, для ориентации $H_0 \parallel [111]$ (сингулярный минимум при $k \to 0$) $\alpha = 3/2$, $\omega_m = \omega_0 - \frac{4}{3}\pi A$, а химический потенциал $\mu \leqslant 0$ отсчитывается от дна зоны ω_m.

При временах $t \gg \delta^{-1}$ как в случае низких, так и в случае высоких температур следует ожидать диффузионного затухания зависящей от времени части корреляционной функции $(g(t) - g(\infty)) \sim t^{-3/2}$.

Работа выполнена при поддержке Международного научного фонда (грант N NJ5000).

Список литературы

[1] Абрагам А., Гольдман М. Ядерный магнетизм: порядок и беспорядок. М. (1984). Т. 2. 360 с.
[2] Hakonen P.J., Vuorinen R.T., Martikainen J.E. Phys. Rev. Lett. **70**, *18*, 2818 (1993).
[3] Фельдман Э.Б., Хитрин А.К. ЖЭТФ **98**, *9*, 967 (1990).
[4] Фельдман Э.Б., Хитрин А.К. ЖЭТФ **105**, *11*, 1515 (1994).
[5] Goldman M., Cox S.F.J., Bouffard V. J.Phys. **70**, *16*, 2940 (1974).