УДК 548 : 537.611.43

О ЗАВИСИМОСТИ КРЫЛЬЕВ СПЕКТРА АВТОКОРРЕЛЯЦИОННОЙ ФУНКЦИИ ГЕЙЗЕНБЕРГОВСКОГО ПАРАМАГНЕТИКА ОТ АНИЗОТРОПИИ ГАМИЛЬТОНИАНА

В. Е. Зобов, О. В. Фалалеев

На основании известных нелинейных интегродифференциальных уравнений для автокорреляционных функций при высоких температурах найдена зависимость показателя экспоненты, описывающей крылья спектра, от анизотропии спинового гамильтониана.

В настоящее время известно более десятка экспериментальных работ, выполненных методами магнитного резонанса в парамагнетиках, в которых найденные частотные зависимости спектральных плотностей спиновых корреляционных функций на крыле удается описать простой экспонентой (см., например, [1-7]). Часть из этих работ [1-3] выполнена в системах с изотропным обменным взаимодействием, тогда как другая часть [4-7] — в системах с дипольным взаимодействием, которое можно рассматривать как частный случай анизотропного обменного взаимодействия. Недавно в работе [8] указанная экспоненциальная зависимость была нами получена теоретически для изотропной гейзенберговской модели в пределе высоких температур и большого числа ближайших соседей. В настоящей работе аналогичные исследования проводятся для систем с аксиально-симметричным анизотропным гейзенберговским гамильтонианом. При этом определяется как сам вид частотной зависимости на крыле, так и ее изменение с изменением анизотропии гамильтониана, характеризуемой параметром

$$a = 2 \sum_j (\mathcal{J}^x_{ij})^2 \Big/ \sum_j \{(\mathcal{J}^x_{ij})^2 + (\mathcal{J}^z_{ij})^2\}, \tag{1}$$

где $\mathcal{J}^x_{ij} = \mathcal{J}^y_{ij}$; $\mathcal{J}^z_{ij}$ — обменные интегралы; i, j — индексы узлов решетки.

Рассмотрим автокорреляционные функции ($\hbar=1$)

$$\Gamma_\alpha(t) = \mathrm{Sp}\,\{\exp(i\mathcal{H}t)\, S^\alpha_i \exp(-i\mathcal{H}t)\, S^\alpha_i\}/\mathrm{Sp}\,(S^\alpha_i)^2, \tag{2}$$

где $\alpha = x,\ z$, и их разложения по степеням времени

$$\Gamma_\alpha(t) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n M^\alpha_{2n} t^{2n} \Big/ (2n)\,! \tag{3}$$

Воспользуемся полученными в работе [9] нелинейными интегродифференциальными уравнениями для этих функций, которые при сохранении первого члена ряда для ядра могут быть записаны в следующем виде:

$$\frac{d}{dt}\Gamma_x(t) = -\int_0^t \Gamma_x(t')\,\Gamma_z(t')\,\Gamma_x(t-t')\,dt',$$

$$\frac{d}{dt}\Gamma_z(t) = -a\int_0^t \Gamma_x^2(t')\,\Gamma_z(t-t')\,dt'. \tag{4}$$

Мы перешли к безразмерным переменным с помощью множителя

$$M_2^x = \frac{4}{3} S(S+1) \sum_j \{(\mathcal{J}_{ij}^x)^2 + (\mathcal{J}_{ij}^z)^2\}. \tag{5}$$

Подставив (3) в (4), получаем рекуррентные уравнения для моментов

$$M_{2n+2}^x = \sum_{k=0}^{n} M_{2n-2k}^x \sum_{m=0}^{k} \binom{2k}{2m} M_{2m}^z M_{2k-2m}^x,$$

$$M_{2n+2}^z = a \sum_{k=0}^{n} M_{2n-2k}^z \sum_{m=0}^{k} \binom{2k}{2m} M_{2m}^x M_{2k-2m}^x. \tag{6}$$

Выражения для моментов до 22-го порядка были найдены по (6) в виде многочленов по степеням параметра a

$$M_{2n}^\alpha = \sum_{m=0}^{m=n} C_{nm}^\alpha a^m. \tag{7}$$

Например, $M_2^x = 1$, $M_2^z = a$; $M_4^x = 2 + a$, $M_4^z = 2a + a^2$; коэффициенты C_{20m}^α и C_{22m}^α представлены в таблице.

Коэффициенты многочленов (7) для моментов M_{20}^α и M_{22}^α

m	C_{10}^x	C_{11}^x	C_{10}^z	C_{11}^z
0	16796	58786	0	0
1	1722236924	39262630154	81662152	987369656
2	22167488433	880694716150	8486261966	267020456416
3	44421190680	2587596207625	37464193902	1792387906802
4	27656285574	2312685259652	40365848388	2792415799312
5	6732233527	811559499839	14971385190	1542125090024
6	709113381	125467207485	1992000382	342173145374
7	28223789	9022562645	75216932	28764754460
8	131152	238286125	351264	651029844
9	1	524387	90	1400850
10		1	1	110
11				1

Исследуем теперь решение системы (4) на плоскости комплексной временно́й переменной. Как и в изотропном случае [8], оно имеет на мнимой оси особенности. $\Gamma_\alpha(t)$ в окрестностях ближайших особенностей в точках $\pm i\tau_0(a)$ имеет вид

$$\Gamma_\alpha(t) \approx 6\sqrt{M_2^\alpha/a}\,(it \pm \tau_0(a))^{-2}. \tag{8}$$

Поскольку координата $\tau_0(a)$ ближайших особых точек определяет радиус сходимости ряда (3), то она может быть найдена на основании (8) как предел при $n \to \infty$ последовательности значений

$$\tau_{2n}^\alpha = [12(2n+1)!\sqrt{M_2^\alpha/a}/M_{2n}^\alpha]^{1/(2n+2)}. \tag{9}$$

По формулам (7) и (9) были рассчитаны M_{2n}^α и τ_{2n}^α до $n=11$ при разных a. Имеет место достаточно быстрая сходимость τ_{2n}^α к предельному значению $\tau_0(a)$, общему для x и z проекций. Результаты для τ_{22}^x и τ_{22}^z в зависимости от $\lg a$ показаны на рисунке точками. Размеры точки перекрывают различия τ_{22}^α и τ_{20}^α при $\alpha = x$, z и, как мы оцениваем, их отличие от $\tau_0(a)$. Прямая линия проведена по формуле

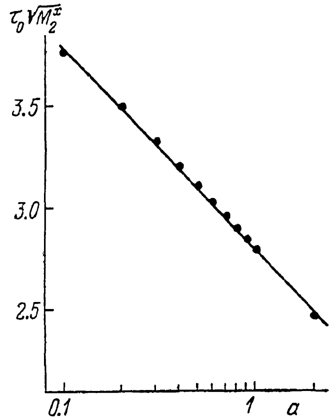
$$\tau_0(a) = \tau_0(1) - \lg a \tag{10}$$

через точку τ_0 (1), соответствующую изотропному случаю $a=1$. По нашим оценкам, $\tau_0(1)=2.781\pm0.0005$. Из рисунка видно, что зависимость координаты особой точки от параметра анизотропии a хорошо описывается эмпирической формулой (10).

Наконец, для высокочастотных асимптотик спектральных плотностей автокорреляционных функций, которые определяются их видом (8) в окрестностях ближайших особенностей, имеем

$$g_\alpha(\omega)\approx 6\,|\,\omega\,|\,\sqrt{M_2^x/a}\,\exp\{-\,|\,\omega\,|\,\tau_0(a)\}. \qquad (11)$$

Из (11) получаем в согласии с экспериментом для спектральной плотности экспоненциальные крылья при произвольной анизотропии гамильтониана. При изменении анизотропии изменяется показатель в экспоненте, который определяется координатой особой точки на мнимой оси. Ближе всего к началу координат эта точка располагается в случае xy-модели ($a=2$). При переходе к изотропному ($a=1$) случаю и далее к случаю дипольного гамильтониана ($a=0.4$) она удаляется и, наконец, для модели Изинга ($a=0$) уходит на бесконечность.



Зависимость координаты ближайшей особой точки от параметра анизотропии $a=M_2^z/M_2^x$.

Литература

[1] Walstedt R. E. // Phys. Rev. B. 1972. V. 5. N 9. P. 3782—3787.
[2] Landesman A. // Ann. Phys. (Fr.). 1973. V. 8. N 1. P. 53—79.
[3] Cusumano C., Troup G. J. // Phys. St. Sol. (b). 1974. V. 65. N 2. P. 655—663.
[4] McArthur D. A., Hahn E. L., Walstedt R. E. // Phys. Rev. 1969. V. 188. N 2. P. 609—638.
[5] Булгаков М. И., Гулько А. Д., Оратовский Ю. А., Тростин С. С. // ЖЭТФ. 1971. Т. 61. № 2. С. 667—677.
[6] Garroway A. N. // J. Magn. Reson. 1979. V. 34. N 2. P. 283—293.
[7] Сафин В. А., Скребнев В. А., Винокуров В. М. // ЖЭТФ. 1984. Т. 87. № 6. С. 1889—1893.
[8] Zobov V. E. // Phys. Lett. A. 1986. V. 119. N 6. P. 315—316.
[9] Borckmans P., Walgraef D. // Phys. Rev. 1968. V. 167. N 2. P. 282—288.

Институт физики им. Л. В. Киренского
СО АН СССР
Красноярск

Поступило в Редакцию
15 июня 1988 г.