

О влиянии неоднородного магнитного поля на высокочастотные асимптотики корреляционных функций спиновых решеток

В. Е. Зобов⁺¹⁾, М. М. Кучеров*

⁺ Институт физики им. Л.В. Киренского, Федеральный исследовательский центр Красноярский научный центр СО РАН, 660036 Красноярск, Россия

* Институт космических и информационных технологий Сибирского федерального университета, 660074 Красноярск, Россия

Поступила в редакцию 18 января 2018 г.

После переработки 14 марта 2018 г.

Исследованы особые точки спиновых автокорреляционных функций (АКФ) на оси мнимого времени, координаты которых определяют показатели экспоненциальных асимптотик в высокочастотной области. Показано, что случайно распределенные неоднородные магнитные поля увеличивают крылья спектров АКФ и, тем самым, ускоряют нагревание системы при воздействии на нее переменных магнитных полей, которые применяют для создания эффективных гамильтонианов или при насыщении неоднородно уширенных линий ЭПР.

DOI: 10.7868/S0370274X18090072

В настоящее время возрос интерес к исследованию высокочастотного поведения динамических корреляционных функций [1–6]. Причина в обнаружении возможности создания новых состояний вещества с помощью зависящего от времени внешнего воздействия [7–13]. В том числе, создания топологических состояний [8, 9, 11, 13], временных кристаллов [12], а также моделирования одних квантовых систем при помощи других [7]. Для увеличения времени существования созданных состояний необходимо оценивать зависимость скорости нагревания системы от параметров внешнего воздействия. В работах [1–6] проведена такая оценка для высокочастотной асимптотики скорости и получена экспоненциальная зависимость от частоты внешнего воздействия.

Экспоненциальная частотная зависимость высокочастотных асимптотик спиновых корреляционных функций (КФ) является следствием наличия у них особых точек на оси мнимого времени, теорию которых мы разработали в статьях [14–22]. Координата τ_0 ближайшей особой точки определяет показатель экспоненты $\exp(-\tau_0|\omega|)$. Нами была исследована зависимость координаты особой точки от размерности пространства для систем с взаимодействием между ближайшими соседями [17, 18], а также с диполь-дипольным взаимодействием (ДДВ) [19, 20]. В одномерных спиновых системах особые точки отсутствуют [23] и корреляционные функции имеют более сильные частотные зависимости: $\sim \exp(-\omega^2)$ для

XY-модели [24] и $\sim \exp(-|\omega| \ln |\omega|)$ для XXZ-модели [25]. В трехмерных решетках получено хорошее согласие теоретических результатов с экспериментальными: как в гомоядерных [19], так и в гетероядерных [20] системах. Наконец, в работах [21, 22] мы исследовали концентрационную зависимость τ_0 в магниторазбавленных спиновых решетках.

В указанных работах мы рассматривали спиновые системы в однородном магнитном поле. Однако не меньший интерес вызывает динамика спиновых систем в неоднородном магнитном поле. Во-первых, при увеличении неоднородности наблюдается переход из термализованного состояния в многочастичное локализованное состояние [26]. При этом существенно меняются многие свойства спиновых систем [27–31]. Во-вторых, в магниторазбавленных системах электронных спинов с неоднородно уширенными линиями ЭПР поглощение энергии переменного магнитного поля и установление спиновой температуры происходит иначе, чем в однородных системах [32]. При описании указанных процессов широко используется понятие спинового пакета – совокупности спинов, имеющих одинаковую ларморову частоту [32, 33]. В работе [33] из экспериментальных данных по насыщению линии ЭПР найдено, что крылья спектра спинового пакета спадают по экспоненциальному закону. В настоящей работе мы исследуем влияние неоднородного магнитного поля на координаты ближайших особых точек КФ на оси мнимого времени, которые определяют высокочастотные асимптотики КФ и, тем самым, медленные

¹⁾e-mail: rsa@iph.krasn.ru

процессы релаксации и крылья спектра спинового пакета.

Рассмотрим систему спинов с секулярной частью ДДВ и неоднородным зеемановским взаимодействием:

$$H = \sum_i \omega_i S_{zi} + \sum_{i \neq j} b_{ij} S_{zi} S_{zj} - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} b_{ij} S_{+i} S_{-j}, \quad (1)$$

где $b_{ij} = \gamma^2 \hbar (1 - 3 \cos^2 \theta_{ij}) / 2r_{ij}^3$ – константа ДДВ, \mathbf{r}_{ij} – вектор, соединяющий спины i и j , θ_{ij} – угол, образуемый вектором \mathbf{r}_{ij} с постоянным внешним магнитным полем, $S_{\alpha i}$ – α -компонента ($\alpha = x, y, z$) векторного оператора спина в узле i , $S_{\pm j} = S_{xj} \pm iS_{yj}$. Здесь и ниже энергия выражается в частотных единицах. Будем предполагать, что ларморовы частоты спинов ω_i принимают случайные значения. Наиболее часто используются два вида распределения:

1) нормальный закон распределения:

$$P(\omega_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi W^2}} \exp\left(-\frac{(\omega_i - \omega_0)^2}{2W^2}\right), \quad (2)$$

где ω_0 – средняя частота, W^2 – дисперсия.

2) равномерное распределение в интервале $[-W\sqrt{3}, W\sqrt{3}]$ с той же дисперсией.

Автокорреляционную функцию спина (АКФ), расположенного в узле решетки j , зададим в высокотемпературном приближении следующей формулой

$$\Gamma_{\alpha j}(t) = \text{Tr} \{ \exp(iH_j t) S_{\alpha j} \exp(-iH_j t) S_{\alpha j} \} / \text{Tr} \{ (S_{\alpha j})^2 \}, \quad (3)$$

где $H_j = H - \omega_j S_{zj}$ – гамильтониан в системе координат, вращающейся с ларморовой частотой спина j [34]. Для АКФ возьмем за основу систему уравнений работы [16]:

$$\Gamma_x(t) = \exp\left\{-B^2 \int_0^t \int_0^{t'} \Gamma_z(t'') dt' dt''\right\}, \quad (4)$$

$$\frac{d}{dt} \Gamma_z(t) = -\frac{1}{2} B^2 \int_0^t D^2(t_1) \Gamma_z(t - t_1) dt_1, \quad (5)$$

где $B^2 = \frac{1}{N} \sum_{i \neq j} b_{ij}^2$, а $\Gamma_{\alpha}(t) = \langle \Gamma_{\alpha j}(t) \rangle$ – АКФ, усредненная по распределению ларморовых частот. Для нормального распределения

$$D(t) = \exp(-W^2 t^2 / 2) \Gamma_x(t). \quad (6)$$

Для равномерного распределения

$$D(t) = \frac{\sin \sqrt{3} W t}{\sqrt{3} W t} \Gamma_x(t). \quad (7)$$

Система уравнений получена в приближении самосогласованного флуктуирующего во времени локального поля (СФП). Уравнение (4) описывает усредненную прецессию спина в поле, заданном гауссовским случайным процессом, корреляционная функция которого определена уравнением (5) через флип-флоп перевороты спинов с разными ларморовыми частотами.

В магниторазбавленных системах ядерных спинов важную роль играют пары спинов, расположенных в соседних узлах решетки на минимальном расстоянии. Например, сигнал от таких пар виден на спектре ЯМР ^{29}Si в кристалле кремния [35, 36], а вкладом от таких пар определяется концентрационная зависимость крыльев спектра ЯМР [22]. В магниторазбавленных системах электронных спинов ситуация другая. Электронный магнитный момент больше ядерного в 1000 раз, поэтому у пар электронных спинов, расположенных на минимальном расстоянии, резонансные частоты могут превосходить не только ширину спектра ЭПР, но и среднюю ларморову частоту ω_0 [37]. Тем более, что величину этих частот зачастую задают не только ДДВ, но и обменные взаимодействия. По этой причине при расчете спектра ЭПР мы не будем учитывать такие пары спинов. Введем расстояние R , при превышении которого спектр пар попадает в границы спектра ЭПР, и параметр $\delta^2 = \sum_{|r_{ij}| > R} b_{ij}^2$. Параметр δ^2 будем рассматривать как эмпирический параметр. В этом случае в уравнениях (4) и (5) возьмем $B^2 = c\delta^2$, где c – концентрация спинов, равная отношению числа магнитных атомов (спинов) к полному числу узлов решетки. Теперь $\Gamma_{\alpha}(t) = \langle \Gamma_{\alpha j}(t) \rangle$ – АКФ, усредненная не только по распределению ларморовых частот, но и по независимому расположению спинов, занимающих узлы решетки с вероятностью s .

Выполненные ранее [15, 16] исследования нелинейных уравнений для АКФ (4)–(5) без неоднородного уширения ($W^2 = 0$) показали наличие особых точек на оси мнимого времени. В окрестности ближайших к началу координат особых точек АКФ имеет вид

$$\Gamma_{\alpha}(t) \approx \frac{A_{\alpha}}{(it \pm \tau_0)^2}. \quad (8)$$

В работе [16] найдено значение координаты ближайшей особой точки $\tau_0 = 2.61/B$. При $W^2 \neq 0$, подставив (8) в (4)–(5) и приравняв коэффициенты при сингулярных членах, находим для случая нормального распределения (6)

$$A_z = 2/B^2, \quad A_x = \exp(-W^2 \tau_0^2 / 2) \sqrt{24}/B^2,$$

$$A_D = \sqrt{24}/B^2, \tag{9}$$

а для равномерного распределения (7)

$$A_z = 2/B^2, A_x = \frac{6\sqrt{2}W\tau_0}{B^2 \operatorname{sh}\sqrt{3}W\tau_0}, A_D = \sqrt{24}/B^2. \tag{10}$$

Найдем оценку для величины τ_0^2 при $W^2/B^2 \gg 1$. Начнем с нормального распределения (6). Рассмотрим на оси мнимого времени $t = i\tau$ линеаризованный вариант системы уравнений (4)–(6)

$$\Gamma_z(i\tau) = 1 + \frac{1}{2}B^2 \int_0^\tau \int_0^{\tau_1} D^2(i\tau_2) d\tau_1 d\tau_2 \approx \approx \frac{B^2}{8M_2^2\tau^2} \exp(M_2\tau^2), \tag{11}$$

$$D(i\tau) = \exp(M_2\tau^2/2), \tag{12}$$

где $M_2 = B^2 + W^2$, а для интеграла от функции ошибок мнимого аргумента взято асимптотическое значение. Функции (11) и (12) не имеют особых точек на конечном расстоянии от начала координат. Появление таких особенностей обусловлено нелинейностью уравнений (4)–(6). Нелинейность проявится при тех значениях мнимого времени, при которых в показателе экспоненты для $D(i\tau)$ (6) нелинейный вклад от $\Gamma_x(t)$ превзойдет линейный (12). Отсюда получаем условие

$$\frac{B^4}{32M_2^3\tau^2} \exp(M_2\tau^2) \geq \frac{M_2\tau^2}{2}, \tag{13}$$

которое приводит к уравнению для оценки τ_0

$$M_2\tau_0^2 = 2 \ln \left(\frac{4M_2}{B^2} M_2\tau_0^2 \right). \tag{14}$$

Из (14) находим искомую оценку

$$M_2\tau_0^2 = 2 \ln \left\{ \frac{8M_2}{B^2} \ln \left(\frac{4M_2}{B^2} \right) \right\} + b_1. \tag{15}$$

Константа b_1 в (15) будет определена ниже из сравнения с результатом численного расчета.

Для равномерного распределения (7) тем же способом найдем уравнение для оценки τ_0

$$2\sqrt{3}W\tau_0 = 2 \ln \left(\frac{12W^2}{B^2} \right) + 3 \ln \left(2\sqrt{3}W\tau_0 \right). \tag{16}$$

Заменим в (16) W^2 на $M_2 = B^2 + W^2$. Такая замена не скажется на асимптотике $W^2/B^2 \gg 1$, но позволит избежать нефизичной расходимости при $W^2 = 0$. После чего из (16) находим искомую оценку

$$\tau_0\sqrt{M_2} = \frac{1}{\sqrt{3}} \ln \left\{ \frac{12M_2}{B^2} \left(2 \ln \frac{12M_2}{B^2} \right)^{3/2} \right\} + b_2. \tag{17}$$

Точную величину координаты особой точки τ_0 определим через радиус сходимости рядов по степеням времени для АКФ:

$$\Gamma_z(t) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n Z_n t^{2n} / (2n)!, \tag{18}$$

$$D(t) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n D_n t^{2n} / (2n)!$$

по формуле

$$\tau_0^2 = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{2n(2n+1)Z_{n-1}}{Z_n}. \tag{19}$$

Рекуррентные уравнения для коэффициентов получим, подставив ряды (18) в уравнения (4)–(5) и приравняв коэффициенты при равных степенях времени:

$$X_{n+1} = B^2 \sum_{k=0}^n \binom{2n+1}{2k} X_{n-k} Z_k,$$

$$D_n = \sum_{k=0}^n \binom{2n}{2k} X_{n-k} P_k, \tag{20}$$

$$D_n^{(2)} = \sum_{k=0}^n \binom{2n}{2k} D_{n-k} D_k, Z_{n+1} = B^2 \frac{1}{2} \sum_{k=0}^n D_{n-k}^{(2)} Z_k,$$

где для нормального распределения $P_k = (W^2/2)^k (2k)!/k!$, а для равномерного – $P_k = (3W^2)^k / (2k+1)$. Результаты расчета приведены на рис. 1.

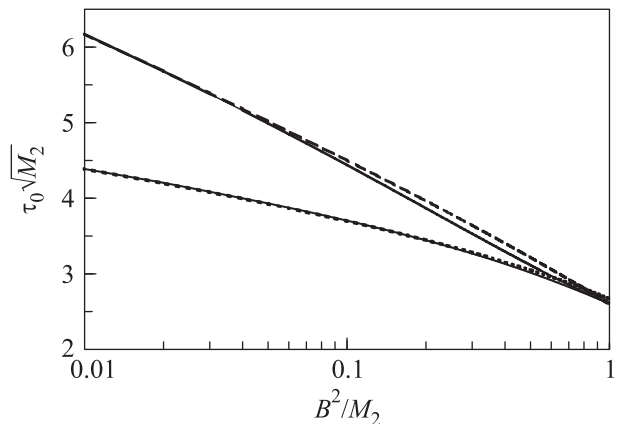


Рис. 1. Зависимости координат особых точек $\tau_0\sqrt{M_2}$ от отношения B^2/M_2 . Сплошные линии – результаты численного расчета по формуле (19) (нижняя линия – для нормального распределения, верхняя линия – для равномерного); пунктирная линия проведена по формуле (15) при $b_1 = 2.3$, штриховая – по формуле (17) при $b_2 = -0.22$

Как видно из рисунка, полученные выше для оценки τ_0 формулы (15) и (17) хорошо представляют рассчитанные зависимости, соответственно, при $b_1 = 2.3$ и $b_2 = -0.22$. Эти формулы позволяют описать зависимости координаты особой точки от величины неоднородного уширения и от концентрации.

После выполнения преобразования Фурье от функции $\Gamma_x(t)$ (8)–(10) для высокочастотной асимптотики спектра АКФ спина находим

$$g_x(\omega) \cong A_x |\omega| \exp(-\tau_0 |\omega|), \quad (21)$$

где для величины координаты особой точки τ_0 можно использовать формулы (15), (17) или результаты расчета, приведенные на рисунке.

В магниторазбавленных системах с неоднородно уширенными линиями ЭПР формула (21) при $B^2 = c\delta^2$ определяет крылья спектра спинового пакета. Крыло спадает по экспоненциальному закону. При этом масштаб частотной зависимости определяется неоднородным уширением, т.е. с ростом неоднородного уширения увеличивается протяженность крыльев спинового пакета. Причина в том, что форма крыла определяется модуляцией локального поля на спине вследствие флип-флоп взаимодействия спинов окружения, создающих это поле посредством zz -взаимодействия. Большая разница ларморовых частот флиширующих спинов дает большой вклад в частоту такой модуляции. Это означает, что поглощение энергии СВЧ поля с частотой Ω на крыле спинового пакета с резонансной (ларморовой) частотой ω_j сопровождается флип-флоп переворотами окружающих спинов. При этом энергия расстройки $\omega = \Omega - \omega_j$ переходит в энергию т. н. резервуара локальных полей [32, 38], образованного ДДВ и разностями зеемановских энергий спинов с различными ларморовыми частотами. Таким образом, изложенная выше теория объясняет, во-первых, сохранение при большом неоднородном уширении протяженных крыльев спектров спиновых пакетов, обуславливающих достаточно быстрое установление общей спиновой температуры в резервуаре локальных полей, наблюдаемое экспериментально [32]. Во-вторых, она объясняет экспоненциальную форму крыльев спектров спиновых пакетов, наблюдающуюся в эксперименте [33].

Теория может быть применена к оценкам нагрева спиновых систем под воздействием периодически изменяющегося во времени магнитного поля или периодических последовательностей импульсов переменного магнитного поля. Необходимые выражения, связывающие скорости процессов со спиновыми корреляционными функциями, выведены в работе [39].

Полученные выше результаты позволяют оценить зависимость высокочастотных асимптотик от неоднородного магнитного поля. Используемое приближение СФП является строгим для решеток бесконечной размерности [18]. Для трехмерных решеток эффект исключенного объема и учет петель из связей [17–20] приведет к увеличению координаты особой точки на оси мнимого времени. Полученный результат нужно скорее рассматривать в качестве приближенной оценки сверху для высокочастотной асимптотики КФ (для нахождения более точной границы следует перейти к более сложным уравнениям, выведенным в работах [15, 16]). Наконец, для полного описания поглощения энергии высокочастотного поля и описания перехода из термализованного состояния в многочастичное локализованное состояние предстоит получить оценку для скорости распространения энергии по неоднородной спиновой системе (диффузия или кросс-релаксация) и вывести соответствующие кинетические уравнения.

1. D. A. Abanin, W. De Roeck, and F. Huvneers, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 256803 (2015).
2. T. Mori, T. Kuwahara, and K. Saito, *Phys. Rev. Lett.* **116**, 120401 (2016).
3. T. Kuwahara, *New J. Phys.* **18**, 053034 (2016).
4. D. A. Abanin, W. De Roeck, W. W. Ho, and F. Huvneers, *Phys. Rev. B* **95**, 014112 (2017).
5. W. W. Ho, I. Protopopov, and D. A. Abanin, arXiv:1706.07207.
6. F. Machado, G. D. Meyer, D. V. Else, C. Nayak, and N. Y. Yao, arXiv:1708.01620.
7. I. Georgescu, S. Ashhab, and F. Nori, *Rev. Mod. Phys.* **86**, 153 (2014).
8. M. Bukov, L. D'Alessio, and A. Polkovnikov, *Adv. Phys.* **64**, 139 (2015).
9. A. Eckardt and E. Anisimovas, *New J. Phys.* **17**, 093039 (2015).
10. Е. И. Кузнецова, Э. Б. Фельдман, Д. Э. Фельдман, *УФН* **186**(6), 647 (2016).
11. A. Eckardt, *Rev. Mod. Phys.* **89**, 011004 (2017).
12. S. Choi, J. Choi, R. Landig, G. Kucsko, H. Zhou, J. Isoya, F. Jelezko, S. Onoda, H. Sumiya, V. Khemani, C. Keyserlingk, N. Y. Yao, E. Demler, and M. D. Lukin, *Nature* **543**, 221 (2017).
13. K. Li, Y. Wan, L.-Y. Hung, T. Lan, G. Long, D. Lu, B. Zeng, and R. Laflamme, *Phys. Rev. Lett.* **118**, 080502 (2017).
14. V. E. Zobov, *Phys. Lett. A* **119**, 315 (1986).
15. В. Е. Зобов, *ТМФ* **84**, 111 (1990).
16. A. A. Lundin, A. V. Makarenko, and V. E. Zobov, *J. Phys.: Condens. Matter* **2**, 10131 (1990).

17. В. Е. Зобов, ТМФ **123**, 116 (2000).
18. В. Е. Зобов, М. А. Попов, ТМФ **136**, 463 (2003).
19. В. Е. Зобов, М. А. Попов, ЖЭТФ **124**, 89 (2003).
20. В. Е. Зобов, М. А. Попов, ЖЭТФ **127**, 877 (2005).
21. В. Е. Зобов, М. М. Кучеров, Письма в ЖЭТФ **103**, 780 (2016).
22. В. Е. Зобов, М. М. Кучеров, ЖЭТФ **151**, 174 (2017).
23. H. Araki, Commun. Math. Phys. **14**, 120 (1969).
24. U. Brandt and K. Jacoby, Z. Physik B **26**, 245 (1977).
25. A. A. Lundin and V. E. Zobov, Physica A **115**, 185 (1982).
26. D. A. Abanin and Z. Papić, Ann. Phys. (Berlin) **529**, 1700169 (2017).
27. P. Ponte, A. Chandran, Z. Papić, and D. A. Abanin, Ann. Phys. **353**, 196 (2015).
28. A. De Luca, I. Rodrguez-Arias, M. Muller, and A. Rosso, Phys. Rev. B **94**, 014203 (2016).
29. T. Ishii, T. Kuwahara, T. Mori, and N. Hatano, arXiv:1712.03367.
30. K. X. Wei, C. Ramanathan, and P. Cappellaro, Phys. Rev. Lett. **120**, 070501 (2018).
31. В. Е. Зобов, А. А. Лундин, Письма в ЖЭТФ **105**, 499 (2017).
32. В. А. Ацаркин, М. И. Родак, УФН **107**(1), 3 (1972).
33. В. А. Ацаркин, Г. А. Васнева, В. В. Демидов, ЖЭТФ **91**, 1523 (1986).
34. Ф. С. Джепаров, А. А. Лундин, Т. Н. Хазанович, ЖЭТФ **92**, 554 (1987).
35. H. Hayashi, K. M. Itoh, and L. S. Vlasenko, Phys. Rev. B **78**, 153201 (2008).
36. Ф. С. Джепаров, Д. В. Львов, М. А. Веретенников, Письма в ЖЭТФ **98**, 543 (2013).
37. Э. В. Авагян, В. А. Ацаркин, Г. А. Васнева, ЖЭТФ **85**, 1790 (1983).
38. S. Clough and C. A. Scott, J. Phys. C **1**, 919 (1968).
39. Ю. Н. Иванов, Б. Н. Провоторов, Э. Б. Фельдман, ЖЭТФ **75**, 1847 (1978).