

Форма линии резонанса в магниторазбавленной системе с произвольной пространственной размерностью

Ф. С. Джепаров¹⁾, И. В. Каганов

Институт теоретической и экспериментальной физики, 117259 Москва, Россия

Поступила в редакцию 31 января 2002 г.

Вычислен третий ($\propto C^2$) член концентрационного разложения сигнала свободной индукции в магниторазбавленных системах с произвольной целочисленной пространственной размерностью $d \leq 3$ и для ряда значений параметра a , характеризующего относительную интенсивность флип-флоп-процессов. На основе концентрационного разложения построено естественное обобщение теории Андерсона-Вейсса-Кубо, развитой первоначально для описания магнитного резонанса упорядоченных систем по значениям второго и четвертого моментов. Произведено сравнение с недавними измерениями сигнала поглощения в квазидвумерных средах. Обсуждаются возможности описания обменного сужения.

PACS: 05.40.-a, 46.65.+g, 76.20.+q, 76.30.-v

1. Функция формы линии и связанный с ней фурье-преобразованием сигнал свободной индукции (ССИ) входят в число наиболее важных наблюдаемых явлений в физике магнитного резонанса. При исследовании систем ядерных спинов, выстроенных в кристаллическую решетку, очень важно знание первых моментов нормированной функции формы линии, в особенности второго и четвертого. Та же самая информация содержится в первых трех членах разложения ССИ в ряд по квадрату времени [1]. В теории формы линии неупорядоченных (магниторазбавленных) систем электронных спинов аналогичное значение имеют первые ($\propto C$ и $\propto C^2$) члены разложения в ряд по степеням концентрации C парамагнитных центров [2]. Несмотря на важность этих величин, третий ($\propto C^2$) член концентрационного разложения до сих пор не был вычислен. Знание первых членов этого разложения приобретает особую актуальность в связи с появлением новых экспериментов, где исследуется спектр ЭПР от примесных парамагнитных центров, распределенных на поверхности твердого тела [3, 4]. В настоящей работе мы исследовали третий член концентрационного разложения ССИ магниторазбавленной системы и рассмотрели вытекающие следствия для простейшей модели ССИ дипольной системы, введенной ранее в работах [5, 6], и для других целей – в [7]. Расчеты проведены для образцов с произвольной целочисленной размерностью $d \leq 3$ и в широком диапазоне изменения параметра a , определяющего отношение изотропной и так называемой $z-z$ частей диполь-дипольного взаимодействия.

2. Пусть парамагнитные центры (ПЦ) случайно распределены в кристаллической d -мерной решетке с объемом элементарной ячейки Ω . Сигнал свободной индукции

$$G(t) = \langle \langle S^+(t) S^- \rangle_0 \rangle_c / \langle \langle S^+ S^- \rangle_0 \rangle_c, \quad (1)$$

где

$$S^\pm = \sum_r n_r S_r^\pm, \quad S_r^\pm = S_r^x \pm i S_r^y,$$

$$S^+(t) = e^{iH_d t} S^+ e^{-iH_d t},$$

n_r – число заполнения ($n_r = (0)1$, если узел \mathbf{r} решетки (не)заполнен спином S_r [2]), $\langle \cdots \rangle_0 = \text{Tr}(\cdots)/\text{Tr}1$ (гиббсово среднее в высокотемпературном приближении), $\langle \cdots \rangle_c$ – символ усреднения по конфигурациям пространственного распределения спинов (то есть по числам заполнения n_r), H_d – секулярная часть диполь-дипольного взаимодействия, имеющая вид

$$H_d = \frac{3}{4} \sum_{r,q} n_r n_q A(\mathbf{r}, \mathbf{q}) (S_r^z S_q^z - \frac{a}{3} \mathbf{S}_r \mathbf{S}_q). \quad (2)$$

Здесь $A(\mathbf{r}, \mathbf{q}) = \hbar \gamma^2 (1 - 3 \cos^2 \vartheta_{rq}) / |\mathbf{r} - \mathbf{q}|^3$, γ – гиромагнитное отношение, а ϑ_{rq} – угол между $\mathbf{r} - \mathbf{q}$ и статическим внешним полем \mathbf{H}_0 . Параметр $a = 0$ в модели Андерсона и $a = 1$ в случае чисто дипольного взаимодействия. При других значениях a гамильтониан (2) соответствует системе с анизотропным аксиально-симметричным g -фактором. Далее для всех ПЦ $S = 1/2$.

Разложим ССИ в ряд по числам заполнения n_x и проведем конфигурационное усреднение в предполо-

¹⁾e-mail: dzheparov@itep.ru

жении независимости чисел заполнения в разных узлах [2]. С точностью до членов $\propto O(C_d^3)$

$$G(t) = 1 + C_d \int d^d r_1 (2K_{01}(t) - 1) + \quad (3)$$

$$+ \frac{C_d^2}{2} \int d^d r_1 d^d r_2 (2K_{012}(t) - 2K_{01}(t) - 2K_{02}(t) + 1),$$

где C_d – d -мерная плотность распределения (концентрация) ПЦ, а

$$K_{01}(t) = \langle e^{iH_{01}t} S_0^+ e^{-iH_{01}t} (S_0^- + S_1^-) \rangle_0,$$

$$K_{012}(t) = \langle e^{iH_{012}t} S_0^+ e^{-iH_{012}t} (S_0^- + S_1^- + S_2^-) \rangle_0.$$

Здесь, в соответствие с (2),

$$H_{ij} = \frac{1}{2} A_{ij} (3S_i^z S_j^z - a \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j), \quad (4)$$

$$H_{012} = H_{01} + H_{02} + H_{12},$$

причем $A_{ij} = A(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$. Взаимодействие $A_{ij} \propto |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^{-3}$. Поэтому во всех членах концентрационного разложения можно сделать замену переменных интегрирования $\mathbf{r}_i \rightarrow t^{1/3} \mathbf{r}_i$, которая изгоняет время из подынтегральных выражений и выявляет тот факт, что m -й член в (3) пропорционален $(C_d t^{d/3})^m$. То есть разложение в (3) проводится по безразмерному параметру $(D_d t)^{d/3} = C_d \int d^d r_1 (1 - 2K_{01}(t))$ [8], и оно может быть представлено в форме

$$G(t) = 1 - (D_d t)^{d/3} + \frac{1}{2} \xi_d(a) (D_d t)^{2d/3} + O((D_d t)^d). \quad (5)$$

Расчет функций $\xi_d(a)$ является первой целью дальнейшего анализа.

В работе [2] показано, что

$$K_{01}(t) = \langle \exp(iH_{01}^z t) S_0^+ \exp(-iH_{01}^z t) S_0^- \rangle_0 = \quad (6)$$

$$= \frac{1}{2} \cos\left(\frac{3}{4} A_{01} t\right).$$

Существенно, что как $K_{01}(t)$, так и D_d не зависят от a . Это свойство обобщает теорему [1] о независимости второго момента от изотропного взаимодействия.

3. Для расчета $K_{012}(t)$ мы применили диагонализацию трехчастичного гамильтониана H_{012} . В силу аксиальной симметрии все трехспиновое пространство состояний с размерностью $N_3 = (2S + 1)^3 = 8$ естественно классифицировать по собственным значениям M оператора $S^z = S_0^z + S_1^z + S_2^z$, причем значения энергии $E^{(M)}$ не зависят от знака M . Последнее следует, например, из инвариантности H_{012} к вращению $R = \exp(i\pi S^y)$ в спиновом пространстве на угол

π вокруг оси Y . Собственные значения и векторы оператора H_{012} для $M = \pm 3/2$ очевидны:

$$|3/2\rangle = |\uparrow\rangle|\uparrow\rangle|\uparrow\rangle, \quad |-3/2\rangle = |\downarrow\rangle|\downarrow\rangle|\downarrow\rangle, \quad (7)$$

$$E^{(\pm 3/2)} = \frac{1}{4} (A_{01} + A_{02} + A_{12}).$$

Подпространства с $M = \pm 1/2$ трехмерны и, например, при $M = 1/2$ образованы линейными комбинациями векторов $|\psi_\alpha\rangle = S_\alpha^- |3/2\rangle$, $\alpha = 0, 1, 2$, матрица гамильтониана $Q_{\alpha\beta} = \langle \psi_\alpha | H_{012} | \psi_\beta \rangle$ действительна и симметрична при традиционном выборе матриц Паули, а ее собственные векторы $|\alpha\rangle$, удовлетворяющие уравнению

$$Q|\alpha\rangle = E_\alpha^{(1/2)} |\alpha\rangle,$$

можно выбрать действительными. В подпространстве с $M = -1/2$ удобен базис $|\phi_\alpha\rangle = R|\psi_\alpha\rangle$. При этом $\langle \phi_\alpha | H_{012} | \phi_\beta \rangle = \langle \psi_\alpha | H_{012} | \psi_\beta \rangle$. Теперь, учитывая, что $G(t)$ является действительной функцией, вводя матрицы $J_{\alpha\beta}^i = \langle \phi_\alpha | S_i^- | \psi_\beta \rangle$, $J = \sum_{i=0}^2 J^i$ и вектор $|\psi\rangle = \sum_{\beta=0}^2 |\psi_\beta\rangle$, приходим к представлению

$$\text{Re} K_{012}(t) = \frac{1}{4} \left(\sum_{\alpha=0}^2 W_\alpha (\cos(\mu_\alpha t) - 1) + \right. \quad (8)$$

$$\left. + \sum_{\alpha=0}^1 \sum_{\beta=\alpha+1}^2 Z_{\alpha\beta} (\cos(\nu_{\alpha\beta} t) - 1) \right) + \frac{1}{2} =$$

$$= \sum_{j=1}^6 \gamma_j (\cos(\lambda_j t) - 1) + \frac{1}{2},$$

где $W_\alpha = \langle \psi | \alpha \rangle \langle \alpha | \psi_0 \rangle$, $Z_{\alpha\beta} = J_{\alpha\beta} J_{\beta\alpha}^0$, $\mu_\alpha = E_\alpha^{(1/2)} - E^{(3/2)}$, а $\nu_{\alpha\beta} = E_\alpha^{(1/2)} - E_\beta^{(1/2)}$. Последнее соотношение в (8) определяет параметры γ_j и λ_j , которые будут использованы ниже.

Диагонализация матриц $Q_{\alpha\beta}$ проводилась численно, причем для решения характеристического уравнения на собственные значения $E_\alpha^{(1/2)}$ использовались формулы Кардано.

Для уменьшения объема численных интегрирований в (3) использовались сферические координаты (например, при $d = 3$ $\mathbf{r}_j = r_j (\sin \theta_j \cos \phi_j, \sin \theta_j \sin \phi_j, \cos \theta_j)$), а затем вводилась замена переменных $r_1 = R \cos \alpha$, $r_2 = R \sin \alpha$. В результате в подынтегральном выражении для C_d^2 -члена в (3) зависимость от R остается только в аргументах косинуса, в частности,

$$\text{Re} K_{012}(t) = \sum_{j=1}^6 \gamma_j (\cos(\lambda_j^0 t / R^3) - 1) + \frac{1}{2}, \quad (9)$$

где $\lambda_j^0 = \lambda_j(R=1)$. Далее верхний индекс нуль всюду опускается. После этого интеграл по R вычислялся аналитически, а остальные интегралы – численно.

При $d=3$ для D_3 получается известный результат Андерсона: $D_3 = \frac{2\pi^2}{3\sqrt{3}} C_3 \gamma^2 \hbar$, а

$$\xi_3 = \frac{9}{16\pi^3} \int_0^\pi d\phi d\theta_1 d\theta_2 \sin\theta_1 \sin\theta_2 \int_0^{\pi/2} d\alpha \sin^2 2\alpha \times \\ \times \left(2 \sum_{j=1}^6 \gamma_j \lambda_j^2 \ln |\lambda_j| - \right. \\ \left. - \frac{9}{8} A_{01}^2 \ln \left| \frac{3}{4} A_{01} \right| - \frac{9}{8} A_{02}^2 \ln \left| \frac{3}{4} A_{02} \right| \right). \quad (10)$$

Рассмотрим теперь малые размерности: $d=2$ и $d=1$. В этом случае выражение (5) содержит зависимость от ориентации постоянного поля \mathbf{H}_0 относительно образца. Мы ограничимся ситуацией, когда в эксперименте все направления поля равновероятны и усредним по ним формулу (5), записав результат как

$$\bar{G}(t) = 1 - (\bar{D}at)^{d/3} + \frac{\bar{\xi}_d(a)}{2} (\bar{D}at)^{2d/3} + O((\bar{D}at)^d). \quad (11)$$

Для анализа в случае поверхностного распределения спинов введем β – угол между проекцией \mathbf{H}_p поля \mathbf{H}_0 на плоскость и самим \mathbf{H}_0 и θ – угол между вектором \mathbf{r} в плоскости и \mathbf{H}_0 . Ясно, что $\cos\theta = \cos\beta \cos\phi$, где ϕ – полярный угол \mathbf{r} в плоскости, отсчитываемый от \mathbf{H}_p . Учтем также, что $\cos\theta_{r_1 r_2} = (r_1 \cos\theta_1 - r_2 \cos\theta_2)/r_{12}$ и $r_{12}^2 = r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos(\phi_2 - \phi_1)$. Тогда, аналогично случаю $d=3$, получаем, что $\bar{D}_2 = \beta_2 \gamma^2 \hbar C_2^{3/2}$, где [3]

$$\beta_2 = 4.647 = \quad (12)$$

$$= \frac{3}{32} \left(\Gamma\left(\frac{1}{3}\right) \int_0^{\pi/2} d\sin\beta \int_0^{2\pi} d\phi |1 - 3\cos^2\beta \cos^2\phi|^{2/3} \right)^{3/2},$$

а $\bar{\xi}_2$ приобретает форму

$$\bar{\xi}_2 = \frac{3\Gamma(2/3)}{16\beta_2^{4/3}} \int_0^{\pi/2} d\sin\beta \int_0^{2\pi} d\phi_1 d\phi_2 \int_0^{\pi/2} d\alpha \sin 2\alpha \times \\ \times \left[\left| \frac{3}{4} A_{01} \right|^{4/3} + \left| \frac{3}{4} A_{02} \right|^{4/3} - \sum_{j=1}^6 \gamma_j |\lambda_j|^{4/3} \right]. \quad (13)$$

Если $d=1$, то есть спины расположены вдоль линии, образующей угол θ с полем \mathbf{H}_0 , то $A_{ij} = (1 - 3\cos^2\theta)/r_{ij}^3$, и $\bar{D}_1 = \beta_1 \gamma^2 \hbar C_1^3$, а

$$\beta_1 = 6\pi^3 \left(\int_0^{\pi/2} \frac{d\theta}{\Gamma\left(\frac{1}{3}\right)} \sin\theta \cdot |1 - 3\cos^2\theta|^{1/3} \right)^3 = 6.348,$$

$$\bar{\xi}_1 = \frac{\pi}{2\sqrt{3}\beta_1^{2/3}\Gamma(2/3)} \int_0^{\pi/2} d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\alpha \times \\ \times \left[\left| \frac{3}{4} A_{01} \right|^{2/3} + \left| \frac{3}{4} A_{02} \right|^{2/3} - \sum_{j=1}^6 \gamma_j |\lambda_j|^{2/3} \right]. \quad (14)$$

В результате численных расчетов получаются следующие значения:

a :	0.2	0.4	0.6	0.8	1.0	1.2	1.4	1.6
ξ_3 :	1.01	1.03	1.05	1.08	1.11	1.13	1.15	1.18
$\bar{\xi}_2$:	1.07	1.11	1.15	1.19	1.22	1.25	1.27	1.29
$\bar{\xi}_1$:	1.16	1.20	1.25	1.28	1.32	1.35	1.37	1.40

(15)

Значения $\xi_d(a=0)$ удобнее рассчитать на основе того очевидного факта, что модель Андерсона является точно решаемой при всех d , и при фиксированной ориентации внешнего поля [9]

$$G_A(t) = G(t, a=0) = \exp(-(Dat)^{d/3}), \\ (Dat)^{d/3} = C_d \int d^d r_1 (1 - \cos(3A_{01}t/4)). \quad (16)$$

Отсюда $\bar{\xi}_d(a=0) = \overline{(D_d^{d/3})^2} / (\bar{D}_d^{d/3})^2$, где черта сверху означает усреднение по направлениям \mathbf{H}_0 , и

$$\xi_3(0) = 1, \quad \bar{\xi}_2(0) = 1.027, \quad \bar{\xi}_1(0) = 1.062. \quad (17)$$

4. Полученные результаты могут быть непосредственно использованы для определения параметра a в экспериментальных исследованиях по измерению крыла формы линии резонанса при $d < 3$. Действительно, если записать разложение (11) в форме $\bar{G}(t) = \sum_{m \geq 0} q_m (\bar{D}at)^{dm/3}$, то после перевода в частотное представление имеем:

$$g_d(\omega) = \int_0^\infty \frac{dt}{\pi} e^{-\varepsilon t} \cos(\omega t) G(t) = \\ = -\frac{1}{\pi\omega} \sum_{m \geq 1} q_m \Gamma\left(1 + \frac{dm}{3}\right) \left(\frac{\bar{D}_d}{\omega}\right)^{dm/3} \sin(\pi dm/6), \quad (18)$$

где $\varepsilon \rightarrow +0$. Те члены разложения (18), в которых $dm/3$ является четным целым числом, не дают вклада в степенную по $1/\omega$ асимптотику. Поэтому на крыле линии

$$g_3(\omega) = \frac{1}{\pi\omega} \left(\frac{D_3}{\omega}\right)^2 \left(1 + O\left(\left(\frac{D_3}{\omega}\right)^2\right)\right), \quad (19)$$

$$g_2(\omega) = \frac{1}{\pi\omega} \left(\Gamma\left(\frac{5}{3}\right) \sin\left(\frac{\pi}{3}\right) \left(\frac{\bar{D}_d}{\omega}\right)^{2/3} - \frac{\bar{\xi}_2}{2} \Gamma\left(\frac{7}{3}\right) \sin\left(\frac{2\pi}{3}\right) \left(\frac{\bar{D}_d}{\omega}\right)^{4/3} + O\left(\left(\frac{\bar{D}_d}{\omega}\right)^{8/3}\right) \right),$$

$$g_1(\omega) = \frac{1}{\pi\omega} \left(\Gamma\left(\frac{4}{3}\right) \sin\left(\frac{\pi}{6}\right) \left(\frac{\bar{D}_d}{\omega}\right)^{1/3} - \frac{\bar{\xi}_1}{2} \Gamma\left(\frac{5}{3}\right) \sin\left(\frac{\pi}{3}\right) \left(\frac{\bar{D}_d}{\omega}\right)^{2/3} + O\left(\frac{\bar{D}_d}{\omega}\right) \right).$$

Очевидно, что зависимость от ξ_d при $d = 3$ отсутствует, а случай $d = 2$ наиболее удобен для измерения $\bar{\xi}_d(a)$, поскольку здесь велик разрыв между первыми двумя ($\propto \omega^{-5/3}$ и $\propto \omega^{-7/3}$) и третьим ($\propto \omega^{-11/3}$) членами асимптотики.

Первый ($\propto \omega^{-5/3}$) член разложения $g_2(\omega \rightarrow \infty)$ ранее рассматривался в [10].

5. В настоящее время развит ряд методов получения удовлетворительных аппроксимаций при всех t и ω для ССИ $G(t)$ и функции формы $g_d(\omega)$ на основе метода функций памяти [2] или кумулянтных и кластерных разложений [5, 6]. Здесь мы ограничимся обсуждением одного из простейших подходов [7, 5, 6], вводящего учет наиболее существенных свойств неупорядоченных систем в известную теорию Андерсона-Вейсса-Кубо (АВК) [11, 12], развитую первоначально для описания сужения линии движением. В основе этого подхода лежит тот факт, что если в рамках точно решаемой модели Андерсона приближенно вычислить ССИ, применив для него гауссово приближение с точным вторым моментом $\bar{M}_2 = \frac{9}{16} \sum_r n_r A(r)$ в фиксированной конфигурации, а затем усреднить результат по неупорядоченностям, то получается функционально правильный результат

$$G(t, a = 0) = \langle \exp(-\bar{M}_2 t^2 / 2) \rangle_c = \exp(-(B_d t)^{d/3}),$$

а все отличие от точного решения состоит в замене $D_d \rightarrow B_d = bD_d$, где $b \approx 1$. Если ввести в теорию еще и временные флуктуации в предположении, что локальное поле $\omega_l(t)$ является нормальным случайным процессом, то есть

$$\langle \omega_l(t) \omega_l(t_1) \rangle = M_2 f(|t - t_1|),$$

то дополнительно получается качественно правильная асимптотика $\ln G(\bar{D}_d t \gg 1) \propto -(\bar{D}_d t)^{d/6}$. В целом данная теория приводит в следующем представлении для ССИ:

$$G(t) = \exp \left(- \left(2B_d^2 \int_0^t d\tau (t - \tau) F(B_d \tau) \right)^{d/6} \right). \quad (20)$$

При выводе этой формулы предполагается, что наиболее существенные пространственные флуктуации сосредоточены во втором моменте \bar{M}_2 и поэтому достаточно принять, что функция $F(B_d \tau)$, отражающая наличие временных флуктуаций локальных полей, такова, что $F(B_d \tau) = f(|\tau|) = \langle f(|\tau|) \rangle_c$.

Напомним, что ССИ упорядоченной системы в теории АВК имеет вид:

$$G_0(t) = \exp(-M_2 \int_0^t d\tau (t - \tau) F_0(\tau)). \quad (21)$$

Эта формула дает удовлетворительное описание формы линии даже при простейшем выборе $F_0(t) = \exp(-(kt)^2/2)$, если параметр k определяется по теоретическим значениям второго (M_2) и четвертого (M_4) моментов.

Для неупорядоченной системы простейшим является выбор $F(x) = \exp(-(q_d x)^{d/3})$. При этом воспроизводится структура разложения (5), обеспечивается неотрицательность функции формы, а параметры B_d и q_d можно восстановить по первым двум членам концентрационного разложения, то есть по D_d и ξ_d . Мы применим эту программу непосредственно к (5) для $d = 3$ и к (11) для $d = 2$. Очевидно, что при этом $B_3 = D_3$ и $B_2 = \bar{D}_2$, а небольшой расчет приводит к значениям

$$q_3 = 3(\xi_3 - 1), \quad q_2 = ((10/3)(\bar{\xi}_2 - 1))^{3/2}. \quad (22)$$

Случай $d = 1$ требует более тщательного анализа, и мы его здесь не рассматриваем. Это связано с тем, что среди случайных ориентаций одномерной системы есть такие, которые выстроены вблизи магического направления $\theta = \arccos(1/\sqrt{3})$. Эволюция в них сильно замедлена, и в итоге $g_1(\omega \rightarrow 0) \propto \ln(1/\omega)$.

В заключение данного раздела приведем значения положения $\Delta(a)$ правого экстремума экспериментально наблюдаемого сигнала поглощения

$$g'(\omega) = \partial g(\omega) / \partial \omega$$

для различных значений q_2 при $d = 2$ (по определению $g''(\Delta) = 0$):

$1/q_2$:	1	2	4	8	16	32
Δ/\bar{D}_2 :	0.011	0.026	0.070	0.114	0.143	0.162

6. В приложении к стандартному дипольному взаимодействию, когда $a = 1$, формулы (22) и (15) дают значения $q_3 = 0.33$ и $q_2 = 0.63$. Подгонка экспериментальных данных из работы [3] в области, где изучавшийся объект рассматривался как двумерный, приводит к величине $q_2 = q_2^{exp} \approx 0.05$ со значимым

отличием как от значения $q_2 = 0$, так и от значения $q_2 = 0.63$. Подобная малая величина для параметра, моделирующего флуктуации локальных полей, была получена и в самой работе [3] в несколько иной математической модели ССИ, но на тот момент времени теоретические предсказания для данного параметра отсутствовали. Для уточнения природы выявленных таким образом отклонений от чисто дипольной эволюции требуются дополнительные исследования.

7. В заключение обсудим на качественном уровне описание обменного сужения. В простейшей версии достаточно рассмотреть предел $G(t, a \rightarrow \infty)$, что непосредственно моделирует дальнедействующее взаимодействие РККИ.

Обменное сужение традиционно описывалось в рамках математической модели (21). Поскольку M_2 не зависит от a , а $M_4 \propto a^2$, то $G(t, a \gg 1) = G_0(t) = \exp(-w_0 t)$, где $w_0 \sim \sqrt{M_2}/a$. Здесь фигурирует средний по конфигурациям примеси M_2 , причем, насколько нам известно, в основополагающих работах это предполагалось по умолчанию. В работе [7] авторы вводили учет пространственных и временных флуктуаций локальных полей в трехмерной системе на основе модели, которую в наших обозначениях представляет формула (20) с $F(x) = \exp(-ca^2 x^2/2)$, где $c \sim 1$. Очевидно, что при этом получается

$$G(t, a \gg 1) = G_1(t) = \exp(-(w_1 t)^{d/6}),$$

где $w_1 \sim D_d/a$. Эта формула тоже предсказывает обменное сужение, но явный вид ССИ и линия резонанса имеют совершенно иную форму. Однако на опыте в широком диапазоне параметров наблюдаются чисто лоренцевы линии в согласии с более простым ССИ $G_0(t)$, что, в частности, в области обменного сужения было проверено в [3].

На наш взгляд, причина, по которой обменно суженные линии оказываются практически лоренцевыми, состоит в следующем. ССИ соответствует эволюции системы, начальное состояние которой имеет вид

$$\rho = \exp(-\beta S_x) / \text{Tr} \exp(-\beta S_x), \quad (23)$$

где S_x — оператор x -компоненты полного момента системы. При больших a и $t > \tau_c \propto 1/a$ система пребывает в квазиравновесии, которое является равновесием относительно обменной части взаимодействия H^{ex} . Таковым является именно состояние (23), поскольку H^{ex} коммутирует с оператором полного спина: $[H^{ex}, S] = 0$. Поэтому для правильного

описания обменного сужения можно применить стандартную проекционную технику [13] с выбором “существенной” части матрицы плотности в форме (23) (где теперь $\beta = \beta(t)$), что после стандартных вычислений снова воспроизводит лоренцеву форму обменно суженной линии резонанса. Концептуальная важность квазиравновесия (23) уже отмечалась ранее в работе [14], но примененные там методы расчета самого времени T_2 устарели, и, по-видимому, методы нашей работы приведут к несколько иным параметрическим зависимостям. Мы предполагаем рассмотреть этот вопрос в отдельной статье. Отметим также, что картина существенно усложняется при экспоненциальной зависимости обменного взаимодействия от расстояния между спинами: вследствие хаотического пространственного распределения ПЦ квазиравновесие (23) будет применимо только к тем из них, которые попадают в достаточно большие обменно-связанные кластеры.

Благодарим за полезные обсуждения В. А. Ацаркина и В. В. Демидова. Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты # 99-02-17440 и # 00-15-96656).

1. А. Абрагам, М. Гольдман, *Ядерный магнетизм: порядок и беспорядок*, М.: Мир, 1984.
2. Ф. С. Джепаров, А. А. Лундин, Т. Н. Хазанович, *ЖЭТФ* **92**, 554 (1987).
3. В. А. Ацаркин, Г. А. Васнева, В. В. Демидов и др., *Письма в ЖЭТФ* **72**, 530 (2000).
4. V. A. Atsarkin, V. V. Demidov, G. A. Vasneva et al., *J. Magn. Res.* **149**, 85 (2001).
5. Ф. С. Джепаров, Е. К. Хеннер, *ЖЭТФ* **104**, 3667 (1993).
6. Ф. С. Джепаров, И. В. Каганов, Е. К. Хеннер, *ЖЭТФ* **112**, 596 (1997).
7. Е. С. Гринберг, Б. И. Кочелаев, Г. Г. Халиуллин, *ФТТ* **23**, 397 (1981).
8. Ф. С. Джепаров, В. С. Смелов, В. Е. Шестопал, *Письма в ЖЭТФ* **32**, 51 (1980).
9. E. B. Fel'dman and S. Lacelle, *J. Chem. Phys.* **104**, 2000 (1996).
10. А. А. Лундин, в сб. *Современные методы ЯМР и ЭПР в химии твердого тела*, Черноголовка, 1990, стр. 137.
11. P. W. Anderson, and P. R. Weiss, *Rev. Mod. Phys.* **25**, 269 (1953).
12. R. Kubo, *J. Phys. Soc. Jpn.* **17**, 1100 (1962).
13. K. Kawasaki and J. D. Gunton, *Phys. Lett.* **40A**, 35 (1972).
14. Н. С. Бендиашвили, Л. Л. Буишвили, М. Д. Звиададзе, *ФТТ* **10**, 1224 (1968).