

Концентрационная зависимость крыльев дипольно-уширенной линии магнитного резонанса в магниторазбавленных решетках

В.Е. Зобов¹⁾, М.М. Кучеров²⁾

¹⁾Институт физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук, 660036 Красноярск; e-mail: rsa@iph.krasn.ru.

²⁾Институт космических и информационных технологий Сибирского федерального университета, 660074 Красноярск

Исследуются особенности временных автокорреляционных функций (АКФ) магниторазбавленных спиновых систем с диполь-дипольным взаимодействием (ДДВ), которые определяют высокочастотные асимптотики автокорреляционных функций и крылья линии магнитного резонанса. В приближении самосогласованного флуктуирующего локального поля выведены нелинейные уравнения для автокорреляционных функций, усредненных по независимому случайному расположению спинов (магнитных атомов) в диамагнитной решетке с разной концентрацией спинов. Уравнения учитывают специфику диполь-дипольного взаимодействия. Во-первых, вследствие его аксиальной симметрии в сильном постоянном магнитном поле автокорреляционные функции продольных и поперечных спиновых компонент описываются разными уравнениями. Во-вторых, дальнедействующий характер диполь-дипольного взаимодействия учтен разделением вкладов в локальное поле от далеких и близких спинов. Получены рекуррентные уравнения для коэффициентов разложений автокорреляционных функций по степеням времени. По ним найдено численное значение координаты ближайшей особой точки автокорреляционной функции на оси мнимого времени, равное радиусу сходимости этих разложений. Показано, что в случае сильного разбавления наблюдается логарифмическая концентрационная зависимость координаты особой точки, обусловленная наличием кластеров близких спинов, доля которых мала, но вклад в модуляционную частоту велик. В качестве примера рассмотрен кристалл кремния с разной концентрацией ^{29}Si при направлениях магнитного поля вдоль трех кристаллографических осей.

Введение

Форма линии магнитного резонанса – это пример очень сложной задачи о динамике системы многих тел без явного малого параметра. Образ Фурье формы линии – спад свободной прецессии выражается через временную корреляционную функцию компоненты суммарного спина, перпендикулярной внешнему постоянному сильному магнитному полю [1]. В магниторазбавленных системах возникают дополнительные трудности, связанные с необходимостью учета случайного неоднородного распределения спинов по решетке и усреднения по нему корреляционных функций [1-5]. Тем не менее, такие системы часто применяются для изучения проблем неравновесной статистической физики, таких как эргодичность, термализация, спиновый транспорт и многочастичная локализация, интерес к которым возрос в последнее время [5 - 8].

В качестве примера магниторазбавленных систем обычно фигурируют системы электронных спинов вследствие большей чувствительности ЭПР [9]. В ЯМР объектом исследования часто являются системы редких изотопов ^{13}C и ^{29}Si . В качестве интересного примера приведем работу [10], в которой измерены спектры ЯМР ^{19}Si в кристаллах кремния, обогащённых этим изотопом в разных концентрациях. Хотя ядерные спины дают бо-

лее слабый сигнал, зато спиновая динамика определяется диполь-дипольным взаимодействием (ДДВ). Поскольку в системах электронных спинов в дополнение к ДДВ заметную роль, как правило, играют обменное взаимодействие и неоднородное уширение, что усложняет задачу.

Для сильно разбавленных спиновых систем Андерсон [1, 2] предложил теорию формы линии, сводящуюся к суммированию спектров пар спинов. Его теория наглядно объяснила превращение широкой линии Гаусса регулярной спиновой системы в узкую линию Лоренца. Такой подход получил широкое распространение в приложениях [5, 11, 12]. Однако в таком приближении однородная спиновая система заменяется неоднородной системой пар спинов. В работах [3, 5, 13] было учтено «флип-флоп» взаимодействие между спинами разных пар, которое приводит к модуляции локального поля на спинах пар, с одной стороны, и к установлению равновесия в системе, с другой. В работе [13] применен метод функции памяти, для которой предложен физически аргументированный вид с параметрами, определенными по первым членам концентрационного разложения ССП. Выполнен расчет ССП и спектров ЯМР при разных концентрациях спинов и получено хорошее согласие центральной части спектров с экспериментом [10].

В регулярных (магнитно-концентрированных) решетках был развит метод самосогласованного учета модуляции локальных полей, приводящий к самосогласованным уравнениям для спиновых автокорреляционных функций (АКФ) [14 - 18]. Такой подход хорошо зарекомендовал себя при вычислении крыльев спектров корреляционных функций. Крылья спектра имеют экспоненциальную частотную зависимость, которая определяется через координату ближайшей особой точки АКФ на оси мнимого времени. В свою очередь, эта координата может быть рассчитана через радиус сходимости ряда по степеням времени для АКФ. После включения поправок, учитывающих свойства реальных решеток, получено хорошее согласие с экспериментами как в гомоядерных [19, 20], так и в гетероядерных [21 - 23] системах с ДДВ. Крылья спектров корреляционных функций играют важную роль в определении медленных процессов установления равновесия в спиновых системах. Их роль возрастает в неоднородных системах. В работе [24] мы оценили концентрационную зависимость указанной координаты для магниторазбавленной системы с изотропным спин-спиновым взаимодействием. Однако для сравнения с экспериментами важно решить также и более сложную задачу об изменении координаты особой точки АКФ систем с ДДВ при магнитном разбавлении, которая не рассматривалась до настоящего времени.

В предлагаемой работе нами получены уравнения для АКФ в приближении самосогласованного флуктуирующего поля, учитывающие аксиальную симметрию ДДВ, и рас-

считаны изменение координаты особой точки АКФ на оси мнимого времени при магнитном разбавлении. При выводе уравнений выполнено усреднение по независимому заполнению узлов с учетом разделение в исходной регулярной решетке вкладов от ближайших соседей и от остальных спинов. Необходимость такого разделения обусловлена различным проявлением вкладов близких спинов в двух случаях. В теории формы центра линии при увеличении реального времени их вклад усредняется до нуля вследствие быстрых осцилляций. Тогда как в теории высокочастотных асимптотик АКФ при увеличении мнимого времени их вклад монотонно растёт.

2. Уравнения для временных автокорреляционных функций

Возьмем исходную регулярную решетку и будем заменять магнитные атомы на диамагнитные в случайно выбранных узлах. Будем предполагать, что заполнение разных узлов независимое, а вероятность сохранения в узле магнитного атома равна средней концентрации магнитных атомов $c = N_M / N$, где N_M - число магнитных атомов, а N - полное число узлов решетки. Воспользуемся представлением чисел заполнения n_j узла j : $n_j = 1$ если в узле j расположен спин и $n_j = 0$ если немагнитный атом [3-5, 13]. После усреднения получаем $\langle n_j \rangle = c$.

Как известно [1], в немагнитических диамагнитных твёрдых телах основной причиной уширения спектра поглощения ЯМР является секулярная часть межъядерного диполь-дипольного взаимодействия (ДДВ), полностью определяющего динамику ядерной спиновой системы:

$$H = \sum_{i \neq j} n_i n_j b_{ij} \left[I_i^z I_j^z - \xi (I_i^x I_j^x + I_i^y I_j^y) \right], \quad (1)$$

где $b_{ij} = \gamma^2 \hbar (1 - 3 \cos^2 \theta_{ij}) / 2r_{ij}^3$ - константа ДДВ, \vec{r}_{ij} - вектор, соединяющий спины i и j , θ_{ij} - угол, образуемый вектором \vec{r}_{ij} с постоянным внешним магнитным полем, I_i^α - α -компонента ($\alpha=x, y, z$) векторного оператора спина в узле i , $I = 1/2$. ξ - параметр, введенный для удобства теоретического анализа: $\xi = 1/2$ в рассматриваемом случае ДДВ, $\xi = -1$ в системах с изотропным спин-спиновым взаимодействием [24]. Здесь и ниже энергия выражается в частотных единицах.

Зависящие от времени автокорреляционные функции спина (АКФ), расположенного в узле решетки i , при высокой температуре определены выражением

$$\Gamma_{\alpha i}(t) = Tr \left\{ \exp(iHt) I_i^\alpha \exp(-iHt) I_i^\alpha \right\} / Tr \left\{ (I_i^\alpha)^2 \right\}. \quad (2)$$

АКФ можно разложить в ряд по степеням времени:

$$\Gamma_{ai}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n M_{2n\alpha} t^{2n} / (2n)! \quad (3)$$

Как известно, $M_{2n\alpha}$ является моментом порядка $2n$ спектральной плотности соответствующей АКФ. В частности:

$$M_{2z} = cS_1, \quad M_{2x} = (1 + \xi^2)cS_1, \quad S_1 = \sum_j b_{ij}^2 \quad (4)$$

Точные выражения получены только для нескольких первых моментов. Поэтому для расчета АКФ применяют различные приближенные подходы. В аксиально-симметричном гамильтониане (1) главную роль играет zz-взаимодействие (взаимодействие спиновых компонент, параллельных магнитному полю). Если пренебречь вторым слагаемым в (1) (взаимодействием поперечных компонент спинов или «флип-флоп» взаимодействием), положив $\xi = 0$, то находим

$$\Gamma_{xi}(t) = \prod_j \cos(n_j b_{ij} t) \quad (5)$$

После усреднения по заполнению узлов получим

$$\Gamma_x(t) = \prod_j \{(1 - c) + c \cos(b_{ij} t)\} \quad (6)$$

В регулярных решетках ($c=1$) при большом числе соседей из (5) получаем функцию Гаусса:

$$\Gamma_x(t) \approx \exp(-S_1 t^2 / 2) \quad (7)$$

При сильном разбавлении ($c \ll 1$) из (6) можно получить [3, 13] функцию Лоренца

$$\Gamma_x(t) \approx \exp(-Bt), \quad (8)$$

где $B = (2/3)D_A$, а $D_A = (2\pi^2 / 3\sqrt{3})\gamma^2 \hbar c$ - ширина линии ЯМР по Андерсону [1, 2].

Андерсон использовал приближение изолированных пар спинов. Для корреляционной функции суммарного момента пары $I_1^x + I_2^x$ находим

$$\Gamma_x(t) = \cos[(1 + \xi)b_{12}t], \quad (9)$$

тогда как для АКФ одного из спинов пары находим

$$\Gamma_{x1}(t) = \cos b_{12}t \cos \xi b_{12}t \quad (10)$$

Разница двух функций обусловлена перекрестной корреляционной функцией операторов I_1^x и I_2^x

$$\Gamma_{x12}(t) = -\sin(b_{12}t) \sin(\xi b_{12}t) \quad (11)$$

Ширину линии Андерсона D_A получаем при $\xi = 1/2$.

Теория Андерсона [1, 2] хорошо описывает суженный центр спектра. Однако крыло линии Лоренца от (8) должно быть обрезано, поскольку функция (6) имеет моменты конечной величины. Для одной пары частота обрезания $(1 + \xi)b$, где b - константа ДДВ спинов на минимальном расстоянии в решетке. Исследование регулярных систем показало, что крыло простирается значительно дальше резонансной частоты взаимодействующей пары соседних спинов в решетке. Большая частота на крыле набирается при суммировании частот прецессии спинов в локальных полях. Суммирование происходит через модуляцию этих полей вследствие флип-флоп процессов. Этот механизм сохранится и при магнитном разбавлении. Изменение ориентаций спинов, создающих локальное поле, будем описывать АКФ $\Gamma_{zj}(t)$ (2), и при включении флип-флоп взаимодействия заменим в произведении (5) косинус на функцию $F_{ij}^{(1)}(t)$, заданную уравнением

$$\frac{d}{dt} F_{ij}^{(1)}(t) = -b_{ij}^2 \int_0^t \Gamma_{zj/i}(t') F_{ij}^{(1)}(t-t') dt', \quad (12)$$

где $\Gamma_{zj/i}(t)$ - АКФ (2) z -компоненты спина j , у которой исключено взаимодействие со спином i , поле на котором рассматривается.

В уравнении (12) мы не стали учитывать то, что взаимодействие между поперечными спиновыми компонентами увеличит второй момент АКФ (4). Такой учет может быть сделан перенормировкой констант ДДВ [19], т.е. заменой в (12) b_{ij}^2 на $(1 + \xi^2)b_{ij}^2$. Вместе с тем в изолированной паре поменяется форма АКФ на произведение косинусов (10). Причина в переходе поляризации на соседний спин и её возврате. Такой процесс играет важную роль в изолированной паре, но при наличии большого числа соседей возвратом поляризации можно пренебречь. С другой стороны, взаимодействие между поперечными спиновыми компонентами приведет к коррелированности между вкладами от разных спинов в произведении (5). Для решеток с большим координационным числом эффект от такой корреляции незначителен и может быть учтен перенормировкой констант b_{ij} , как было показано в работе [19]. Обоснование в том, что при большом числе соседей время затухания АКФ определяется их совместным действием. На таких временах не успевает проявиться корреляция вследствие взаимодействия только двух спинов. Эта причина сохранится и при расчете координаты ближайшей особой точки на оси мнимого времени, поскольку её величина также коллективный эффект. Перенормировки параметров и учет поправок будет проведен в дальнейшем при сравнении с экспериментом. В настоящей работе мы ограничимся простейшими уравнениями, поскольку хотим сосредоточиться на качественной стороне задачи.

Константа ДДВ (1) спадает с расстоянием по степенному закону, поэтому каждый спин взаимодействует, формально говоря, со всеми остальными. Однако взаимодействие с Z ближайшими соседями намного сильнее взаимодействия с дальним окружением [25]. Вклад от большого числа дальних соседей будем учитывать в виде вклада от гауссовского локального поля

$$D_i(t) = \exp\left\{-\sum_{j \in Z} n_j b_{ij}^2 \int_0^t \int_0^{t'} \Gamma_{zj}(t'') dt' dt''\right\}. \quad (13)$$

Тогда как действие ближайших соседей будем учитывать в том же приближении, что в работе [19], полагая независимость вкладов от каждого из Z ближайших соседей:

$$F_j(t) = \prod_f \left[(1 - n_f) + n_f F_{jf}^{(1)}(t) \right] D_j(t), \quad (14)$$

где $F_{jf}^{(1)}(t)$ - определенный уравнением (12) вклад в изменение корреляционной функции спина в узле j со стороны направления на решетке, ведущего к спину f .

Для $\Gamma_{zj}(t)$ и $\Gamma_{zj/i}(t)$ возьмем уравнения, выведенные в [19], и преобразуем их с учетом магнитного разбавления к следующему виду:

$$\frac{d}{dt} \Gamma_{zj}(t) = -\frac{1}{2} \sum_f b_{jf}^2 n_f \int_0^t F_{f/j}(t') F_{j/f}(t') \Gamma_{zj}(t-t') dt', \quad (15)$$

$$\frac{d}{dt} \Gamma_{zj/i}(t) = -\frac{1}{2} \sum_{f(\neq i)} b_{jf}^2 n_f \int_0^t F_{f/ji}(t') F_{j/fi}(t') \Gamma_{zj/i}(t-t') dt'.$$

Система уравнений (12) - (15) развивает идеи работ [3, 13] по учету модуляции локального поля в магниторазбавленных системах. Введенный нами самосогласованный учет АКФ позволяет провести анализ нелинейных свойств системы на оси мнимого времени в добавление к выполненному в [13] анализу релаксации АКФ на реальной оси времени. Переходя к усреднению уравнений (12) - (15) по случайному расположению спинов, отметим, что граница разделения на близкие и дальние спины зависит от решаемой задачи. Для расчета центра спектра выполняется исследование затухания корреляционной функции на оси реального времени. Здесь в качестве масштаба выступает ширина спектра D_A , линейная по концентрации и равная по порядку величины взаимодействию спинов на среднем расстоянии [1-5, 10, 13]. Вклады в корреляционную функцию от слагаемых, содержащих пары на меньшем расстоянии («близкие»), затухнут из-за быстрых осцилляций во времени. Поэтому число таких мест в исходной регулярной решетке (число «близких» спинов) растет при разбавлении и во много раз превзойдет координационное число этой решетки. Наоборот, при расчете крыльев спектра мы исследуем рост корреляционной

функции на оси мнимого времени. В этом случае вклад от близких пар монотонно растет, поэтому в качестве близких спинов следует брать ближайших соседей исходной решетки.

На основании сказанного, возьмем простую модельную спиновую систему, у которой каждый спин имеет небольшое число Z ближайших соседей с равной константой взаимодействия b , и большое количество слабовзаимодействующих дальних соседей с суммарным вкладом δ^2 в решеточную сумму S_1 (4): $\delta^2 = S_1 - Zb^2$. В дальнейшем тексте будем использовать следующие обозначения для зависящего от концентрации второго момента АКФ:

$$M_2(c) = cZb^2 + c\delta^2 \text{ и } M_2(1) = Zb^2 + \delta^2 = S_1.$$

В качестве примера в таблице приведены значения введенных параметров для системы ^{29}Si в кристалле кремния [10] при трех основных ориентациях магнитного поля относительно кристаллографических осей. При расчетах использованы решеточные суммы из работы [26]. Из сравнения вкладов во второй момент от ДДВ спинов на разных расстояниях мы взяли $Z = 1$ при ориентации [111] и $Z = 4$ при ориентациях [110] и [100].

Таблица 1. Параметры модельной системы, используемые при расчетах АКФ в кристалле кремния.

ориентация	Z	$b^2 / M_2(1)$	$\delta^2 / M_2(1)$
[111]	1	0,635	0,365
[110]	4	0,204	0,187
[100]	4	0,067	0,732

Для указанной модельной системы, выполнив усреднение уравнений (12) - (15) по случайному расположению спинов в приближении независимого заполнения узлов, получим уравнения для усредненных функций:

$$F(t) = \langle F_j(t) \rangle = [Y(t)]^Z D(t), \quad \Gamma_z(t) = \langle \Gamma_{zj}(t) \rangle, \quad \Gamma'_z(t) = \langle \Gamma_{zj/i}(t) \rangle, \quad (16)$$

где

$$D(t) = \exp\left\{-c\delta^2 \int_0^t \int_0^{t'} \Gamma_z(t'') dt' dt''\right\}, \quad (17)$$

а функция

$$Y(t) = [1 + c(\langle F_{jj}^{(1)}(t) \rangle - 1)], \quad (18)$$

удовлетворяет уравнению

$$\frac{d}{dt}Y(t) = -b^2 \int_0^t \Gamma'_z(t_1)[Y(t-t_1) - (1-c)]dt_1. \quad (19)$$

Две другие функции удовлетворяют уравнениям:

$$\frac{d}{dt}\Gamma_z(t) = -\frac{1}{2}cZb^2 \int_0^t Y^{2Z-2}(t_1)D^2(t_1)\Gamma_z(t-t_1)dt_1 - \frac{1}{2}c\delta^2 \int_0^t Y^{2Z}(t_1)D^2(t_1)\Gamma_z(t-t_1)dt_1, \quad (20)$$

$$\frac{d}{dt}\Gamma'_z(t) = -\frac{1}{2}c(Z-1)b^2 \int_0^t Y^{2Z-3}(t_1)D^2(t_1)\Gamma'_z(t-t_1)dt_1 - \frac{1}{2}c\delta^2 \int_0^t Y^{2Z-1}(t_1)D^2(t_1)\Gamma'_z(t-t_1)dt_1.$$

Выполненные ранее [16-23] исследования нелинейных уравнение для АКФ в регулярных решетках ($c=1$) показали наличие особых точек на оси мнимого времени. В окрестности ближайших к началу координат особых точек АКФ имеет вид

$$\Gamma_\alpha(t) \approx \frac{A_\alpha}{(it \pm \tau_0)^2}. \quad (21)$$

В частности, для системы двух уравнений (17) и (20) при $b=0$ в работе [18] найдено значение координаты особой точки $\tau_0^2 = 6,81/M_2(1)$. Формально, если заменить $M_2(1)$ на $M_2(c) = c\delta^2$, это решение может описывать изменение координаты особой точки при большом разбавлении.

В общем случае при $b \neq 0$ и магнитном разбавлении вид функций (16) – (20) изменится. Однако у них, по-прежнему, будет наблюдаться особенность в одной и той же точке мнимой оси, поскольку все эти функции связаны системой уравнений. Координату особой точки τ_0 определим через радиус сходимости рядов по степеням времени вида (3) для этих функций. С этой целью подставим в уравнения (16) – (20) указанные ряды входящих в него функций. Для коэффициентов получим рекуррентные уравнения:

$$\begin{aligned} D_{n+1} &= c\delta^2 \sum_{k=0}^n \binom{2n+1}{2k} D_{n-k} G_k, & Y_{n+1} &= b^2 \sum_{k=0}^n K_{n-k} Y_k - b^2(1-c)K_n, \\ G_{n+1} &= cb^2 Z \frac{1}{2} \sum_{k=0}^n P_{n-k}^{(2Z-2)} G_k + c\delta^2 \frac{1}{2} \sum_{k=0}^n P_{n-k}^{(2Z)} G_k, \\ K_{n+1} &= cb^2 Z \frac{1}{2} \sum_{k=0}^n P_{n-k}^{(2Z-3)} K_k + c\delta^2 \frac{1}{2} \sum_{k=0}^n P_{n-k}^{(2Z-1)} K_k, \end{aligned} \quad (22)$$

где Y_n , D_n , - коэффициенты порядка $2n$ рядов (3) одноименных функций, G_n -

соответствующий коэффициент для $\Gamma_z(t)$, K_n - для $\Gamma'_z(t)$, а $P_n^{(m)}$ - коэффициент для произведения $Y^m(t)D^2(t)$.

3. Расчет и обсуждение

Решая уравнения (22) численно, координату ближайшей особой точки будем вычислять по формуле Д'Аламбера, как предел отношения соседних членов ряда (3) для $\Gamma_z(t)$. Результаты расчета с параметрами из таблицы 1 показаны на рис. 1 и рис. 2.

На рис.1 приведены зависимости координаты особой точки решения системы (16 - 20) $\tau_0\sqrt{M_2(c)} = \tau_0\sqrt{c(Zb^2 + \delta^2)}$ от $\delta^2 / M_2(1)$ при трех концентрациях: $c=1$, $c=0.1$ и $c=0.01$. При $\delta^2 / M_2(1) \rightarrow 1$ кривые сходятся к пределу $\tau_0 = \sqrt{6,81/M_2(c)}$ (21). В этом пределе, проанализированном выше, концентрационная зависимость определяется соответствующей зависимостью второго момента и имеет вид $\tau_0 \sim 1/\sqrt{c}$. При этом исчезает зависимость от Z , поскольку $b \rightarrow 0$. Зависимость $\tau_0 \sim 1/\sqrt{c}$ мы видим на рис. 2 в ориентации [100] при достаточно больших концентрациях.

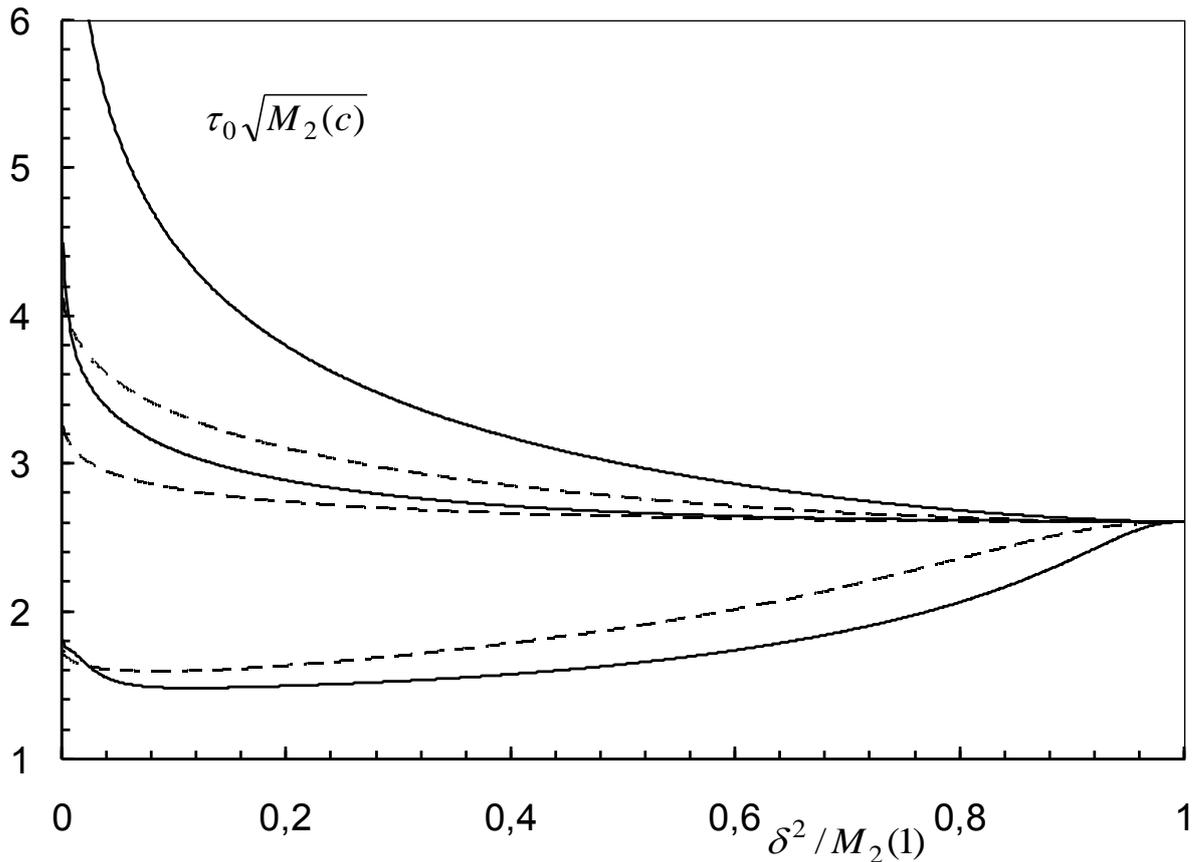


Рис. 1. Зависимости координаты особой точки (в единицах $(M_2(c))^{-1/2}$) от $\delta^2 / M_2(1)$ при $Z = 1$ (сплошные линии) и $Z = 4$ (штриховые линии) при трех значениях концентрации (сверху вниз (1; 0.1; 0.01)).

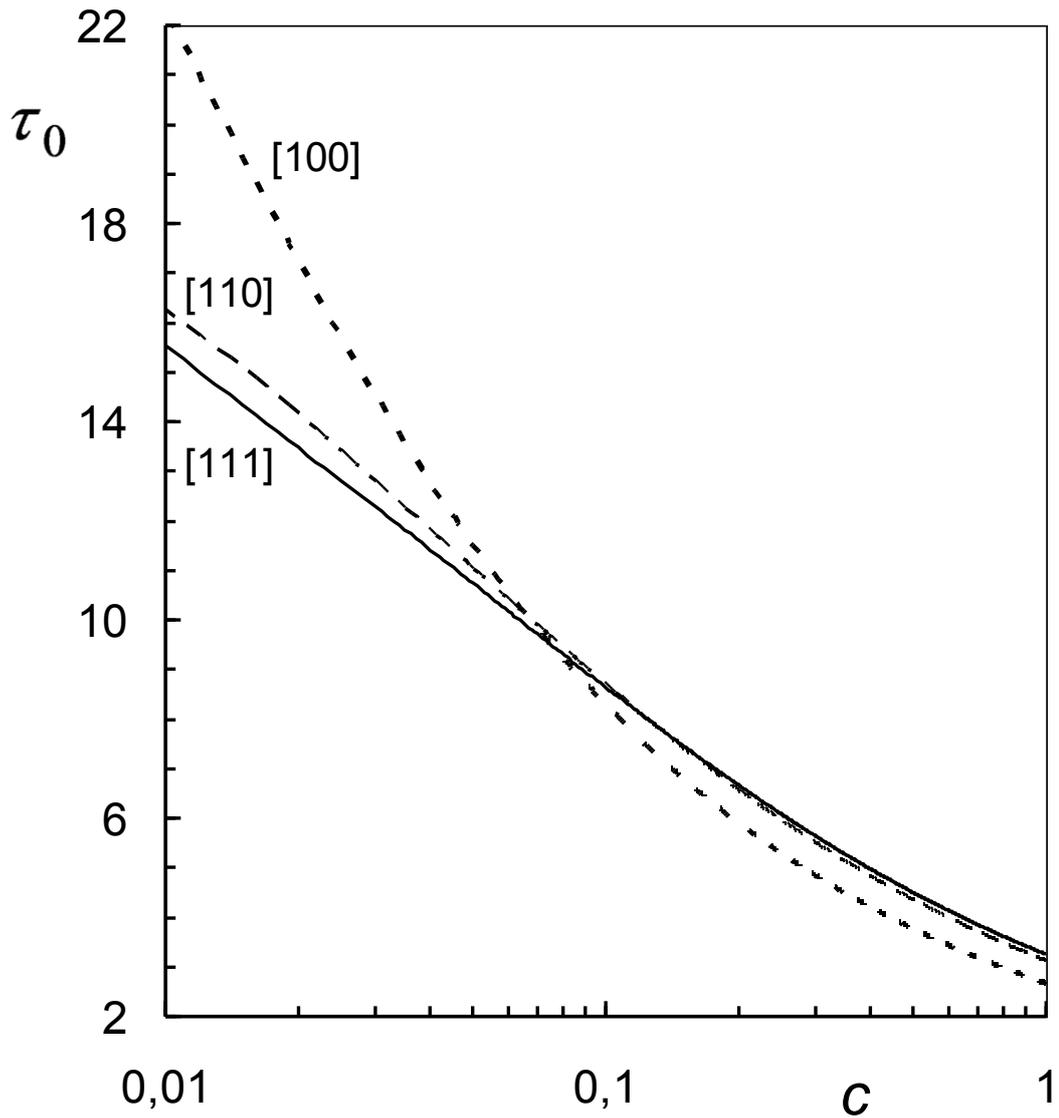


Рис. 2. Зависимости координаты особой точки (в единицах $(M_2(1))^{-1/2}$) от концентрации при трех основных ориентациях магнитного поля относительно кристаллографических осей кристалла кремния с параметрами, приведенными в табл.1.

При $\delta^2 / M_2(1) \rightarrow 0$ предел величины $\tau_0 \sqrt{M_2(c)} = \tau_0 b \sqrt{cZ}$ зависит от числа соседей. В этом пределе при $Z = 1$ получаем спиновую систему, состоящую из изолированных пар (10). Соответствующие осциллирующие функции не имеют особых точек на оси мнимого времени, поэтому $\tau_0 \rightarrow \infty$ при $\delta^2 / M_2(1) \rightarrow 0$. При $Z = 4$ в этом пределе τ_0 стремится к конечному значению, поскольку для АКФ сохраняются нелинейные самосогласованные уравнения. Такие уравнения, получающиеся в приближении решеток Бете, были исследованы нами для изотропного спин-спинового взаимодействия [24].

Из рис.1 видно, что зависимость τ_0 от концентрации не сводится к концентрационной зависимости второго момента, если мы отходим от границы $\delta^2 / M_2(1) = 1$. Найдем вид этой зависимости при соотношении $Zb^2 \gg \delta^2$, при выполнении которого важную роль играют близкие пары спинов. Их быстро осциллирующий на оси реального времени вклад $\langle F_{j\bar{j}}^{(1)}(t) \rangle \sim \cos bt$ на оси мнимого времени $t = i\tau$ превращается в быстрорастущий вклад $\langle F_{j\bar{j}}^{(1)}(t) \rangle \sim chb\tau \sim e^{b\tau} / 2$. Однако одна пара не даст сингулярность. Особая точка у решения нелинейных уравнений (19) возникает при объединении сигналов многих пар. Пока $\Gamma_z(t) \sim 1$ и $\Gamma'_z(t) \sim 1$ уравнения (17) и (19) остаются линейными. Нелинейный характер уравнений и быстрый рост функций проявится при $\Gamma_z(t) > 1$. Согласно уравнению (20) это начнется при

$$\frac{1}{2} c Z b^2 \int_0^{\tau_1} \int_0^{\tau_1} Y^{2Z-2}(\tau_2) D^2(\tau_2) d\tau_1 d\tau_2 + \frac{1}{2} c \delta^2 \int_0^{\tau_1} \int_0^{\tau_1} Y^{2Z}(\tau_2) D^2(\tau_2) d\tau_1 d\tau_2 > 1. \quad (23)$$

Подынтегральные выражения в (23) возьмем для оценок в следующем виде:

$(c/2)^m \exp(2mb\tau + c\delta^2\tau^2)$, где $m = Z - 1$ в первом интеграле и $m = Z$ во втором.

Выполнив приближенное вычисление интегралов, получим уравнение для оценки координаты:

$$W(Z) \exp[a(Z)\tau_0 + c\delta^2\tau_0^2] = 1, \quad (24)$$

где

$$a(Z) = \begin{cases} 2b & \text{при } Z = 1 \\ 2(Z-1)b & \text{при } Z > 1 \end{cases}, \quad W(Z) = \begin{cases} \frac{\delta^2}{4b^2} \left(\frac{c}{2}\right)^3 & \text{при } Z = 1 \\ \frac{Z}{4(Z-1)^2} \left(\frac{c}{2}\right)^{2Z-1} & \text{при } Z > 1 \end{cases}. \quad (25)$$

Решив уравнение (24), находим искомую оценку координаты особой точки на оси мнимого времени

$$\tau_0 = \frac{-2 \ln W(Z)}{a(Z) + [a^2(Z) - 4c\delta^2 \ln W(Z)]^{1/2}}. \quad (26)$$

Отсюда получаем логарифмическую концентрационную зависимости координаты особой точки АКФ следующего вида:

$$\tau_0 \sim \frac{\nu}{b} \ln \frac{1}{c} + R. \quad (27)$$

В полулогарифмических координатах рис. 2 такой зависимости соответствуют отрезки прямых, которые мы наблюдаем в области сильного разбавления $c \ll 1$. Коэффициенты ν

и R , определенные согласно (26), качественно правильно передают зависимости τ_0 от параметров b , δ^2 и Z , наблюдаемые на рис.1 и рис.2. Во-первых, уменьшение τ_0 с ростом δ^2 , поскольку функция $D(t)$ также дает вклад в рост ядра уравнения (19) и смещает величину τ_0 в сторону уменьшения. Во-вторых, τ_0 уменьшается также и при увеличении Z , поскольку увеличение показателя степени $Y(t)$ ускоряет рост ядра уравнения (19). С другой стороны, такое увеличение показателя степени приводит к ослаблению зависимости τ_0 от δ^2 с ростом Z . К сожалению, наша грубая оценка не дает количественного согласия с результатами численного решения сложных нелинейных уравнений.

Таким образом, при магнитном разбавлении центральная часть спектра АКФ трансформируется из формы, описываемой кривой Гаусса с экспоненциальными крыльями в форму, описываемую кривой Лоренца с экспоненциальными крыльями. Как известно, ширина спектра зависит от концентрации по линейному закону [1-5, 10, 13] и определяется спинами, которые располагаются на расстояниях, близких к среднему. Таких спинов – спинов «массы», большинство и они играют важную роль при установлении равновесия между частями системы. Мы получили, что показатель экспоненты крыла ($\omega > 0$) имеет логарифмическую зависимость от концентрации:

$$g(\omega) \sim \exp(-\tau_0\omega) \sim \exp\left\{-\frac{v\omega}{b} \ln \frac{1}{c}\right\} = c^{\frac{v\omega}{b}}. \quad (28)$$

Физически это означает, что большая частота возникает в системе из-за объединения частот многих пар ($k \sim \omega/b$) вследствие модуляции локального поля. Вероятность образования одной пары равна c , а k пар - c^k . Хотя вероятность мала, но вклад в модуляционную частоту велик, поэтому далекое крыло спектра определяется редкими кластерами близких спинов. Для сравнения отметим, что при последовательном наращивании модуляционной частоты в регулярной решетке складываются $k \sim \omega/\omega_{loc}$ средних локальных частот $\omega_{loc} \sim \sqrt{M_2}$.

Рассмотренная нами область крыла спектра должна наблюдаться при частотах, превосходящих резонансную частоту пары соседних спинов в решетке. В упомянутом выше эксперименте [10] в кристалле кремния эта часть спектра маскируется шумами при малых концентрациях. Для количественного расчета уверенно наблюдаемой части спектра предстоит к системе уравнений для АКФ добавить уравнения для перекрестных корреляционных функций, уделить большее внимание величинам коэффициентов в

уравнениях и выполнить численные расчеты, аналогичные расчетам, проведенным в работах [13, 27].

О форме далекого крыла можно судить по скоростям медленных процессов насыщения резонансным полем и релаксации, подобным тем, что наблюдались в работе [9]. Наличие модуляционного крыла у спинов «массы», вытекающее из развитой выше теории, может служить объяснением наблюдавшейся экспоненциальной формы спиновых пакетов [9]. Эта теория позволяет несколько иначе взглянуть на механизм насыщения на крыле спектра. Ранее в работах [5, 11], полагалось, что резонансное поле, приложенное на крыле спектра, действует на резонансную ему пару близких спинов. После выполняемого в [9] изменения места приложения резонансного поля с одного крыла на противоположное это поле действует на ту же или аналогичную пару. Скорость такого процесса лимитируется обменом энергией между парами и «массой». При новом механизме резонансное поле, приложенное на крыле спектра, действует на крыло линии спина массы. Его модуляционная частота соответствует некоторой близкой паре (или парам), связанной с данным спином массы. Вероятность поворота мала, поскольку пар мало. После указанного изменения резонансной частоты поля это поле действует на другой спин массы, связанный с той же парой (или близкой), и поворачивает ее в исходное состояние. Процесс сопровождается обменом энергией между спинами массы и не нуждается в обмене энергией между парами и массой. Для количественного сравнения нашей теории с экспериментом предстоит провести учет неоднородного уширения, играющего важную роль в спектроскопии ЭПР.

1. А. Абрагам, *Ядерный магнетизм*, ИИЛ, Москва (1963).
2. P.W. Anderson, *Phys. Rev.* **82**, 342 (1951).
3. Ф.С. Дзепаров, А.А. Лундин, Т.Н. Хазанович, *ЖЭТФ* **92**, 554 (1987).
4. E.B. Fel'dman, S. Lacelle, *J. Chem. Phys.* **104**, 2000 (1996).
5. F.S. Dzheparov. *J. Phys.: Conf. Ser.* **324**, 012004 (2011).
6. J. Eisert, M. Friesdorf, C. Gogolin, *Nature Physics* **11**, 124 (2015);
7. R. Nandkishore, D.A. Huse, *Ann. Rev. Condens. Matter. Phys.* **6**, 15 (2015)].
8. D.A. Abanin, W. De Roeck, F. Huveneers, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 256803 (2015).
9. В.А. Ацаркин, Г.А. Васнева, В.В. Демидов, *ЖЭТФ* **91**, 1523 (1986).
10. H. Hayashi, K.M. Itoh, L.S. Vlasenko, *Phys. Rev. B* **78**, 153201 (2008).
11. Ф.С. Дзепаров, Э.Б. Фельдман, *Изв. АН СССР, сер. физ.* **52**, 455 (1988).
12. A.A. Nevzorov, J.H. Freed, *J. Chem. Phys.*, **112**, 1425 (2000).
13. Ф.С. Дзепаров, Д.В. Львов, М.А. Веретенников, *Письма в ЖЭТФ* **98**, 543 (2013).

14. P. Borckmans, D. Walgraef, *Physica* **35**, 80 (1967); *Phys. Rev.* **167**, 282 (1968).
15. M. Blume, J. Hubbard, *Phys. Rev. B.* **1**, 3815 (1970).
16. V.E. Zobov, *Phys. Letters A*, **119**, 315 (1986).
17. В.Е. Зобов. *ТМФ* **77**, 426 (1988); **84**, 111 (1990).
18. A.A. Lundin, A.V. Makarenko, V.E. Zobov, *J.Phys.: Condens. Matter* **2**, 10131 (1990).
19. В.Е. Зобов, М.А. Попов, Ю.Н. Иванов, А.И. Лифшиц, *ЖЭТФ*, **115**, 285 (1999).
20. В.Е. Зобов, М.А. Попов, *ЖЭТФ* **124**, 89 (2003).
21. В.Е. Зобов, А.А. Лундин, *ЖЭТФ* **106**, 1097 (1994).
22. В.Е. Зобов, А.А. Лундин, О.Е. Родионова, *ЖЭТФ* **120**, 619 (2001).
23. В.Е. Зобов, М.А. Попов, *ЖЭТФ* **127**, 877 (2005).
24. В.Е. Зобов, М.М. Кучеров, *Письма в ЖЭТФ* **103**, 780 (2016).
25. А.А. Лундин, Б.Н. Провоторов, *ЖЭТФ*, **70**, 2201 (1976).
26. H. T. Stokes, D.C. Ailion, *Phys. Rev. B.* **15**, 1271 (1977).
27. F.S. Dzheparov, D.V. Lvov, M.A. Veretennikov. Phase relaxation in magnetically diluted crystals. Pp. 18-25 in “Actual Problems of Magnetic Resonance and Its Application. XVI Intern. Youth Scientific School. Program, Lecture Notes, Proceedings.” Kazan State University 2013.