Д. И. Кадыров, И. Г. Шапошников, К кинетике намагничивания парамагнетика, *Докл. АН СССР*, 1969, том 189, номер 1, 77–80

Доклады Академии наук СССР
1969. Том 189, № 1

УДК 538.113 **ФИЗИКА**

Д. И. КАДЫРОВ, И. Г. ШАПОШНИКОВ

К КИНЕТИКЕ НАМАГНИЧИВАНИЯ ПАРАМАГНЕТИКА

(Представлено академиком С. В. Вонсовским 31 III 1969)

1. Рассмотрим задачу: найти зависимость от времени макроскопического магнитного момента $\mathbf{M}(t)$ парамагнетика, находящегося под воздействием приложенного магнитного поля $\mathbf{H}(t)$, зависимость которого от времени задана.

2. Воспользуемся предложенной Робертсоном [1] схемой получения уравнений движения для макроскопических физических величин (эта схема была уже использована ее автором [2] для рассмотрения некоторых вопросов магнитной кинетики). Ограничимся случаем, когда в рассматриваемой большой физической системе нет макроскопического механического движения и все характеризующие ее макроскопические величины однородны в пространстве. Обозначим через $F_1(t), F_2(t), \ldots$ какие-либо из этих величин, независимые между собой и обеспечивающие вместе с внешними параметрами $V_1(t), V_2(t), \ldots$ полное макроскопическое описание состояний, проходимых рассматриваемой системой при интересующем нас процессе. Пусть $F_r = \bar{f}_r$, $r = 1, 2, \ldots$, где f_r — некоторые микроскопические величины, операторы $\hat{f}_r$ которых не содержат времени, и черта обозначает усреднение по упомянутым состояниям. Функции $V_r(t)$, $r = 1, 2, \ldots$, заданы; функции $F_r(t)$, $r = 1, 2, \ldots$, подлежат определению. Схема [1] приводит к следующим точным уравнениям движения для $F_r(t)$, $r = 1, 2, \ldots$:

$$\dot{F}_r(t) = -i\,\mathrm{Sp}\,[\hat{f}_r\hat{\hat{L}}(t)\hat{\sigma}(t)] - \int_{t_0}^{t} dt'\,\mathrm{Sp}\,\{\hat{f}_r\hat{\hat{L}}(t)\hat{\hat{T}}(t,t')[\hat{\hat{1}} - \hat{\hat{P}}(t')]\hat{\hat{L}}(t')\hat{\sigma}(t')\} \tag{1}$$

при том условии, что

$$\hat{\rho}(t_0) = \hat{\sigma}(t_0). \tag{2}$$

Здесь $\hat{\hat{L}}(t)\ldots \equiv [\hat{\mathscr{H}}(t), \ldots]$, где $\hat{\mathscr{H}}(t)$ — гамильтониан системы и [,] — коммутатор; $\hat{\rho}$ — статистический оператор системы;

$$\hat{\sigma}(t) \equiv \{\mathrm{Sp}\exp[-\Sigma\beta_r(t)\hat{f}_r]\}^{-1}\exp[-\Sigma\beta_r(t)\hat{f}_r], \tag{3}$$

где $\beta_r(t) = \beta_r[F_1(t), F_2(t), \ldots]$, $r = 1, 2, \ldots,$ — макроскопические величины, определяемые системой уравнений

$$\mathrm{Sp}\,(\hat{\sigma}\hat{f}_r) = F_r, \quad r = 1, 2, \ldots; \tag{4}$$

$\hat{\hat{1}}$ единичный оператор;

$$\hat{\hat{P}}(t)\ldots \equiv \Sigma\,[\partial\hat{\sigma}(t)/\partial F_r(t)]\,\mathrm{Sp}\,(\hat{f}_r\ldots); \tag{5}$$

$\hat{\hat{T}}(t, t')$ определяется уравнением

$$\frac{\partial}{\partial t'}\hat{\hat{T}}(t,t') = i\hat{\hat{T}}(t,t')\,[\hat{\hat{1}} - \hat{\hat{P}}(t')]\,\hat{\hat{L}}(t') \tag{6}$$

с начальным условием $\hat{\hat{T}}(t, t) = \hat{\hat{1}}$. Уравнения (1) получаются непосредственно из уравнения Ноймана $\dot{\hat{\rho}} = -i\hat{\hat{L}}\hat{\rho}$ (положено $\hbar = 1$). Оператор $\hat{\sigma}$ не является статистическим оператором системы и, следовательно, не удовлетворяет уравнению Ноймана; он входит в рассмотрение при определении величин β_r (мы назовем их сопряженными с величинами F_r) уравнениями (4), которые, таким образом, не содержат в себе никаких физических предположений.

3. Представляет интерес изучение процессов, начинающихся с равновесия, так что $\hat{\rho}(t_0) = \{\mathrm{Sp}\exp[-T^{-1}\hat{\mathscr{H}}(t_0)]\}^{-1}\exp[-T^{-1}\hat{\mathscr{H}}(t_0)]$, где T — температура (положено $k=1$). Для того чтобы схема ([1]) была пригодна для рассмотрения таких процессов, должно быть $\Sigma\beta_r(t_0)\hat{f}_r = T^{-1}\hat{\mathscr{H}}(t_0)$. Мы сделаем, однако, допущения более специальные, но физически более ясные: мы будем считать, что

$$\hat{\mathscr{H}}(t) = \Sigma\,\alpha_r(t)\hat{f}_r \equiv \Sigma\,\hat{\mathscr{H}}_r(t), \tag{7}$$

где величины $\alpha_r(t)$ характеризуют внешние условия, в которых находится рассматриваемая система (и, следовательно, выражаются через внешние параметры $V_r(t)$) и что в равновесии

$$\beta_r^{\text{равн}} = \alpha_r^{\text{равн}}T^{-1}, \tag{8}$$

так что $\hat{\sigma}^{\text{равн}} = \hat{\rho}^{\text{равн}}$, чем, очевидно, обеспечивается (2) для процессов рассматриваемого типа. Мы будем пользоваться такой терминологией: о системе с $\hat{\mathscr{H}}$ из (7) будем говорить, что она состоит из подсистем (частей) с гамильтонианами $\hat{\mathscr{H}}_r$, а величины β_r^{-1}, обратные сопряженным с $F_r = \overline{f}_r$, будем называть обобщенными температурами этих подсистем; если для каких-либо подсистем $\alpha_r = 1$, т. е. $\hat{\mathscr{H}}_r = f_r$, то соответствующие величины β_r^{-1} назовем температурами этих подсистем.

4. Обратимся теперь к поставленной в п.1 задаче в рамках ограничений, принятых в начале п. 2. Будем считать, что единственным внешним воздействием на парамагнитный образец является воздействие со стороны приложенного поля, и запишем гамильтониан образца в этом поле в виде

$$\hat{\mathscr{H}}(t) = -\mathbf{H}(t)\cdot\vec{\hat{\mathscr{M}}} + \hat{\mathscr{U}} + \hat{\mathscr{H}}_L, \tag{9}$$

где $\vec{\hat{\mathscr{M}}}$ — оператор полного магнитного момента парамагнетика, к $\hat{\mathscr{H}}_L$ отнесены все немагнитные степени свободы, а в $\hat{\mathscr{U}}$ включены все внутренние взаимодействия, связанные с магнитными степенями свободы. Первую из выделенных таким образом подсистем назовем зеемановской, вторую — подсистемой взаимодействий, третью — решеткой; совокупность зеемановской подсистемы и подсистемы взаимодействий можно назвать спин-системой. До начального момента t_0 приложенное поле не менялось, и парамагнетик был в равновесии; начиная с t_0, поле заданным образом меняется со временем. Нас интересует $\mathbf{M}(t)$ для $t > t_0$.

Входящую в (3) сумму $\Sigma\beta_r\hat{f}_r$ удобно записать в виде

$$\Sigma\beta_r\hat{f}_r = \boldsymbol{\beta}_M\cdot\vec{\hat{\mathscr{M}}} + \beta\hat{\mathscr{U}} + \beta_L\hat{\mathscr{H}}_L = \beta(-\mathbf{H}^*\cdot\vec{\hat{\mathscr{M}}} + \hat{\mathscr{U}} + \hat{\mathscr{H}}_L^*), \tag{10}$$

где

$$\mathbf{H}^* \equiv -\beta^{-1}\boldsymbol{\beta}_M, \qquad \hat{\mathscr{H}}_L{}^* \equiv \beta^{-1}\beta_L\hat{\mathscr{H}}_L; \tag{11}$$

согласно (8), в равновесии $\boldsymbol{\beta}_M^{\text{равн}} = -T^{-1}\mathbf{H}$, $\beta^{\text{равн}} = \beta_L^{\text{равн}} = T^{-1}$, $\mathbf{H}^{*\text{равн}} = \mathbf{H}$, $\hat{\mathscr{H}}_L^{*\text{равн}} = \hat{\mathscr{H}}_L$. Имея в виду возможность наличия у парамагнетика естественной анизотропии, полагаем

$$\vec{\hat{\mathscr{M}}} = \overline{\overline{g}}\cdot\mathbf{I}, \tag{12}$$

где $\mathbf{I}$ — полный механический момент и $\overline{\overline{g}}$ — гидромагнитный тензор.

5. Теперь можно было бы писать (1) для $\mathbf{M} = \overline{\vec{\hat{\mathscr{M}}}}$, $U \equiv \overline{\hat{\mathscr{U}}}$, $H_L \equiv \overline{\hat{\mathscr{H}}_L}$ в качестве F_r. Однако применительно к нашей задаче целесообразнее воспользоваться уравнениями движения для $F_r = \mathbf{M}$, U, H_L, несколько отли-

чающимися от (1), которые получаются, если повторить рассмотрение, приводящее в схеме ([1]) к уравнениям (1), но вместо оператора $\hat{\hat{P}}$ из (5) использовать оператор

$$\hat{\hat{\mathcal{P}}} \ldots \equiv (\partial\hat{\sigma}/\partial\mathbf{M})\cdot \mathrm{Sp}(\hat{\vec{\mathcal{M}}}\ldots) + (\partial\hat{\sigma}/\partial H_L)\,\mathrm{Sp}(\hat{\mathcal{H}}_L\ldots), \tag{13}$$

отличающийся от $\hat{\hat{P}}$ отсутствием члена с $\hat{\mathcal{U}}$. При помощи (12) и соотношения

$$\dot{U} = \mathbf{H}\cdot\dot{\mathbf{M}} - \dot{H}_L, \tag{14}$$

непосредственно вытекающего из (9) и уравнения Ноймана, видоизмененная указанным образом схема ([1]) дает

$$\dot{F}(t) = \delta_{F\mathbf{M}}\,|\overline{\overline{g}}|\,\{[(\overline{\overline{\overline{g}}}^{-1}\cdot\overline{\overline{g}}^{-1})\mathbf{M}]\times[\mathbf{H}(t) - \mathbf{H}^*)]\} -$$
$$- \int\limits_{-\infty}^{\infty} dt' K_{\hat{f}\hat{\vec{\mathcal{M}}}}(t, t')\,[\mathbf{H}^*(t') - \mathbf{H}(t')] - \int\limits_{-\infty}^{\infty} dt' K_{\hat{f}\hat{\mathcal{H}}_L}(t, t')\,[\beta(t') - \beta_L(t')] \tag{15}$$

с $F \equiv \mathbf{M}, H_L$ и $\hat{f} \equiv \vec{\mathcal{M}}, \hat{\mathcal{H}}_L$; здесь

$$K_{\hat{f}\hat{\vec{\mathcal{M}}}}(t, t') \equiv \theta(t - t')\,\mathrm{Sp}\{\hat{f}\hat{\hat{L}}(t)\,\hat{\hat{T}}(t, t')\,[\hat{\hat{1}} - \hat{\hat{\mathcal{P}}}(t')]\,[\hat{\vec{\mathcal{M}}}, \hat{\sigma}(t')]\} +$$
$$+ i\iint\limits_{-\infty}^{\infty} d\tau\, d\tau'\theta(t - \tau)\,\mathrm{Sp}\{\hat{f}\hat{\hat{L}}(\tau)\,\hat{\hat{T}}(t, \tau)[\partial\hat{\sigma}(\tau)/\partial U(\tau)]\}\,u(\tau, \tau')\times$$
$$\times\{-\delta(\tau' - t')\,|\overline{\overline{g}}|\,([(\overline{\overline{\overline{g}}}^{-1}\cdot\overline{\overline{g}}^{-1})\cdot\mathbf{M}(t')]\times\mathbf{H}(t')) +$$
$$+ \theta(\tau' - t')\,\mathrm{Sp}(\hat{\mathcal{U}}\hat{\hat{L}}(\tau')\,\hat{\hat{T}}(\tau', t')\,[\hat{\hat{1}} - \hat{\hat{\mathcal{P}}}(t')]\,[\hat{\vec{\mathcal{M}}}, \hat{\sigma}(t')])\}, \tag{16}$$

$$K_{\hat{f}\hat{\mathcal{H}}_L}(t, t') \equiv \{\theta(t - t')\,\mathrm{Sp}(\hat{f}\hat{\hat{L}}(t)\,\hat{\hat{T}}(t, t')\,[\hat{\hat{1}} - \hat{\hat{\mathcal{P}}}(t')]\,[\hat{\mathcal{H}}_L, \hat{\sigma}(t')]) +$$
$$+ i\iint\limits_{-\infty}^{\infty} d\tau\, d\tau'\theta(t - \tau)\,\theta(\tau' - t')\,\mathrm{Sp}\{\hat{f}\hat{\hat{L}}(t)\,\hat{\hat{T}}(t, \tau)\,[\partial\hat{\sigma}(\tau)/\partial U(\tau)]\}\,u(\tau, \tau')\times$$
$$\times\mathrm{Sp}(\hat{\mathcal{U}}\hat{\hat{L}}(\tau')\,\hat{\hat{T}}(\tau', t')\,[\hat{\hat{1}} - \hat{\hat{\mathcal{P}}}(t')]\,[\hat{\mathcal{H}}_L, \hat{\sigma}(t')])\}\,\beta^{-1}(t'). \tag{17}$$

$\theta(t - t') \equiv 1$ для $t' < t$ и 0 для $t' > t$, функция $u(t, t')$ определяется уравнением

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} d\tau\, u(t, \tau)\, u^{-1}(\tau, t') = \delta(t - t'), \tag{18}$$

где

$$u^{-1}(t, t') \equiv \delta(t - t') - i\theta(t - t')\,\mathrm{Sp}\{\hat{\mathcal{U}}\hat{\hat{L}}(t)\,\hat{\hat{T}}(t, t')\,[\partial\hat{\sigma}(t')/\partial U(t')]\}, \tag{19}$$

и для удобства дальнейших вычислений принято $t_0 = -\infty$. Интегро-дифференциальными уравнениями (15), в которых $\mathbf{H}^*$, β и β_L нужно выразить через $\mathbf{M}$, U, H_L согласно общей схеме ([1]), и соотношением (14) дается решение обсуждаемой задачи.

6. Уравнения (15) точные; в частности, при их выводе не предполагалось, что состояния, проходимые системой, в каком-либо смысле близки к равновесным. Однако для применения этих уравнений к конкретным случаям нужно вычислять величины K, а это выполнимо, конечно, только в тех или иных приближениях. Перечислим здесь некоторые обстоятельства, которые могут дать повод к различным приближениям: если $|\beta_M|$ и β малы, то в разложении $\hat{\sigma}$ по β можно ограничиться одним или двумя шагами (высокотемпературное приближение); если решетку можно считать все время остающейся в равновесии, то $\beta_L = \mathrm{const}\,(t)$, что существенно упро-

щает задачу; если $\mathbf{H}(t)$ изменяется медленно, можно пренебречь эффектами памяти, и уравнения задачи становятся дифференциальными; если переменная часть $\mathbf{H}(t)$ мала, становится пренебрежимым обусловленный ею вклад в зависимость величин K от времени. Разумеется, в каждом конкретном случае возможность того или иного из этих приближений должна быть обоснована соответствующей количественной оценкой.

7. Можно показать, что если возможны все только что перечисленные приближения, то (15) и (14) приводят к следующим уравнениям для нахождения $\mathbf{M}(t)$:

$$\dot{\mathbf{M}} = g\,[(\bar{\bar{c}}^{-1}\cdot\mathbf{M})\times(\mathbf{H} - \bar{\bar{N}}\cdot\mathbf{M})] - \bar{\bar{\varkappa}}\cdot(\mathbf{M} - \beta\bar{\bar{c}}\cdot\mathbf{H}) - \boldsymbol{\varkappa}(\beta - \beta_0); \tag{20}$$

$$\dot{\beta} = b^{-1}\mathbf{H}\cdot\dot{\mathbf{M}} = -\alpha(\beta - \beta_0) - \boldsymbol{\lambda}\cdot(\mathbf{M} - \beta\bar{\bar{c}}\cdot\mathbf{H}); \tag{21}$$

здесь

$$g \equiv {}^1/_3\, nj(j+1)\,|g|, \tag{22}$$

где n — число магнитных частиц, предполагаемых одинаковыми и находящимися в эквивалентных положениях, и i — квантовое число механического момента отдельной частицы; c и N — характеристики парамагнетика, входящие в равновесную магнитную восприимчивость:

$$\bar{\bar{\chi}}^{\text{равн}} = \beta\bar{\bar{c}} - \beta^2\bar{\bar{c}}\cdot\bar{\bar{N}}\cdot\bar{\bar{c}} + \ldots, \tag{23}$$

где точки обозначают дальнейшие члены разложения по β; b — константа магнитной теплоемкости, которая входит в выражение для V:

$$U = -b\beta + \ldots; \tag{24}$$

через β_0 обозначено постоянное значение β_L; $\bar{\bar{\varkappa}}$, $\boldsymbol{\varkappa}$, α, $\boldsymbol{\lambda}$ — кинетические коэффициенты (между $\boldsymbol{\varkappa}$ и $\boldsymbol{\lambda}$ есть связь, вытекающая из соотношений Онзагера). При получении уравнений (20) и (21) второй порядок разложения по β учтен только в динамическом члене уравнения (20), где пренебрежение членом с $\bar{\bar{N}}$ привело бы к выпадению из рассмотрения новых эффектов, обусловленных тем, что направление второго множителя в векторном произведении не совпадает с направлением $\mathbf{H}$. Для парамагнетика без естественной анизотропии ($\bar{\bar{c}} = c\bar{\bar{1}}$, $\bar{\bar{N}} = N\bar{\bar{1}}$) уравнения (20) и (21) совпадают с соответствующими уравнениями наиболее общего варианта феноменологической теории парамагнитной релаксации (см. ([3])), которые, в свою очередь, содержат в себе в качестве частных случаев уравнение Блоха и все известные его модификации. Следует, однако, отметить то обстоятельство, что уравнения фономенологической теории получены для малых значений, характеризующих неравновесность величин $\mathbf{M} - \beta c\mathbf{H}$ и $\beta - \beta_0$, уравнения же (20) и (21) не предполагают такого ограничения.

Пермский государственный университет
им. А. М. Горького

Поступило
24 III 1969

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] B. Robertson, Phys. Rev., 144, 151 (1966). [2] B. Robertson, Phys. Rev., 153, 391 (1967). [3] И. Г. Шапошников, Радиоспектроскопия, Тр. Естеств.-научн. инст. Пермск. гос. унив. им. А. М. Горького, 6 (1969).