И. Г. Шапошников, Д. И. Кадыров, К теории продольной парамагнитной релаксации, *Докл. АН СССР*, 1974, том 217, номер 6, 1293–1295

Доклады Академии наук СССР
1974. Том 217, № 6

УДК 538.113 **ФИЗИКА**

И. Г. ШАПОШНИКОВ, Д. И. КАДЫРОВ

К ТЕОРИИ ПРОДОЛЬНОЙ ПАРАМАГНИТНОЙ РЕЛАКСАЦИИ

(Представлено академиком С. В. Вонсовским 10 XII 1973)

1. Рассмотрим нормальный парамагнетик в приложенном магнитном поле, имеющем вид

$$\mathbf{H}=\{H_1\cos\omega t,\quad H_1\sin\omega t,\ H_0\} \tag{1}$$

в лабораторной системе координат. Пусть выполняются условия

$$\zeta\equiv H_1/H_0\ll 1, \tag{2}$$

$$H_0/H_i\gg 1, \tag{3}$$

где H_i — константа внутреннего поля. Поставим задачу о нахождении при этих условиях зависимости от времени продольной составляющей M_z макроскопического магнитного момента $\mathbf{M}$, ограничившись случаем, когда спиновую систему можно считать изолированной от решетки ($T_{sr}\omega\gg 1$, где T_{sr} — время спин-решеточной релаксации).

2. Будем рассматривать спиновую систему как совокупность двух взаимодействующих между собой подсистем: зеемановской с обратной температурой α и подсистемы взаимодействий с обратной температурой β. Примем следующую схему неравновесностей в спиновой системе: равновесие отсутствует внутри поперечной части зеемановской подсистемы и между зеемановской подсистемой и подсистемой взаимодействий. Будем характеризовать эти неравновесности соответственно величинами $M_{x,y}-CH_{x,y}\alpha$ и $\alpha-\beta$, где C — константа Кюри. Так как продольная часть зеемановской подсистемы и подсистема взаимодействий предполагаются проходящими через равновесные состояния, то в высокотемпературном приближении

$$M_z=CH_0\alpha, \tag{4}$$

$$U=-b\beta, \tag{5}$$

где U — макроскопическая энергия подсистемы взаимодействий и b — константа Ван-Флека; выражение (5) получается стандартными методами термодинамики, ср. [1] (заметим, что оно остается таким же и тогда, когда подсистема взаимодействий проходит через неравновесные состояния, см. [2]).

3. Естественно попробовать взять в качестве макроскопических внутренних параметров спиновой системы величины α, β и M_x, M_y. В силу (4) их можно заменить на величины $\mathbf{M}$ и β, для которых мы и будем теперь искать уравнения движения.

4. С учетом (4) параметры неравновесности $M_{x,y}-CH_{x,y}\alpha$ и $\alpha-\beta$ могут быть выражены через компоненты вектора $\mathbf{m}\equiv\mathbf{M}-C\mathbf{H}\beta$. Сделав это, напишем релаксационную часть $\mathbf{M}$ в виде

$$-\varkappa\cdot\mathbf{m} \tag{6}$$

и ограничимся на основании (2) приближением, в котором релаксационный тензор $\varkappa$ можно считать не зависящим от времени. Выражение (6), в рамках феноменологической теории очевидное в предположении слабой неравновесности (ср. [1]), было получено также в [2] квантовым путем без такого предположения. Не учитывая для простоты возможную анизотропию гиромагнитного отношения и пользуясь термодинамическим соотношением

$$dU=\mathbf{H}\cdot d\mathbf{M} \tag{7}$$

(см. [1]), при помощи (6) и (5) находим уравнения движения для $\mathbf{M}$ и β:

$$\dot{\mathbf{M}}=-\gamma\mathbf{H}\times\mathbf{M}-\varkappa\cdot(\mathbf{M}-C\mathbf{H}\beta), \tag{8}$$

$$\dot{\beta}=b^{-1}\mathbf{H}\cdot[\varkappa\cdot(\mathbf{M}-C\mathbf{H}\beta)]. \tag{9}$$

5. Из результатов квантовой теории [2] видно, что в поле (1) при условиях (2) и (3) тензор $\varkappa$ можно приближенно считать имеющим в лабораторной системе координат вид

$$\begin{Bmatrix} \varkappa, & 0, & 0 \\ 0, & \varkappa, & 0 \\ 0, & 0, & 0 \end{Bmatrix} \tag{10}$$

с $\varkappa=\varkappa(H_0)$; для парамагнетика, лишенного естественной макроскопической анизотропии, это непосредственно следует из соображений симметрии (ср. [1]) и из того обстоятельства, что при условии (3) продольная релаксация в постоянном поле, происходящая без участия решетки, должна быть очень медленной. Подставив (10) в (8) и (9) и перейдя для удобства к вращающейся системе координат, получим уравнения движения в виде

$$\dot{u}=-\varkappa u-\Delta v+\zeta\varkappa CH_0\beta, \tag{11}$$

$$\dot{v}=\Delta u-\varkappa v-\zeta\omega_0 M_z, \tag{12}$$

$$\dot{M}_z=\zeta\omega_0 v, \tag{13}$$

$$\dot{\beta}=\zeta\varkappa b^{-1}H_0(u-\zeta CH_0\beta); \tag{14}$$

здесь u и v — поперечные компоненты $\mathbf{M}$ во вращающейся системе и $\omega_0\equiv-\gamma H_0$, $\Delta\equiv\omega_0-\omega$ (для определенности принято $\gamma<0$). Из (11) и (12) видно, что поперечная релаксация в постоянном поле является экспоненциальной с временем релаксации $\varkappa^{-1}\equiv T_2$.

6. Если подставить в (11)—(14) величины u, v, M_z и β в виде рядов по степеням малого параметра ζ, то легко убедиться в том, что для $t\gg T_2$ разложения правых частей уравнений (11) и (12) начинаются с первой степени, а левых частей — с третьей степени параметра ζ. На этом основании пренебрегаем в (11) и (12) левыми частями и при помощи получающихся алгебраических уравнений выражаем u и v через M_z и β. Подстановка найденных выражений в (13) и (14) с учетом (4) и соотношения $H_i^2=b/c$ (см. [1, 2]) дает для $t\gg T_2$ уравнения движения для α и β, которые позволяют решить поставленную в п.1 задачу

$$\dot{\alpha}=-W\left(\alpha-\frac{\Delta}{\omega_0}\beta\right), \tag{15}$$

$$\dot{\beta}=W\frac{\Delta}{\omega_i^2}(\omega_0\alpha-\Delta\beta), \tag{16}$$

где

$$W\equiv\omega_1^2 g, \tag{17}$$

$$g\equiv\varkappa/(\varkappa^2+\Delta^2)$$

и $\omega_{1,i}\equiv-\gamma H_{1,i}$; из (11) и (12) следует, что g определяет форму линии поперечного поглощения в приближении линейного ответа (разумеется, лоренцевой эта линия будет только в том случае, если $\varkappa$ не зависит от H_0).

7. Уравнения (15) и (16) по форме совпадают с уравнениями Провоторова в лабораторной системе координат для случая, когда спиновую систему можно считать изолированной от решетки (см. ([3])), по содержанию же отличаются от них более полным учетом спин-спиновых взаимодействий; роль решетки может быть без труда учтена в рамках того же общего подхода ([1], [2]). Таким образом, этот подход дает возможность очень простым путем получить уравнения, несколько более общие, чем уравнения Провоторова, довольно широко используемые при изучении ядерного магнитного резонанса в твердых телах (см. ([3])).

Отдел физики полимеров
Уральского научного центра Академии наук СССР
Пермь

Поступило
25 XI 1973

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] *И. Г. Шапошников,* Радиоспектроскопия, Сборн. 6, Тр. Естеств.-научн. инст. Пермского унив., т. 12, в. 3, 39 (1969); Proc. Congress Ampere XVII, Amsterdam – London, 1973, p. 374. [2] *Д. И. Кадыров, И. Г. Шапошников,* ДАН, т. 189, № 1, 77 (1969); C. R., Ser. B, v. 271, 611 (1970); Физ. мет. и металловед., т. 29, № 1, 58 (1970). [3] *M. Goldman,* Spin Temperature and Nuclear Magnetic Resonance in Solids, Oxford, 1970. (Русск. пер. М. Гольдман, Спиновая температура и ЯМР в твердых телах, М., 1972).