УРАВНЕНИЯ МАГНИТНОЙ ДИНАМИКИ

Д. И. КАДЫРОВ, И. Г. ШАПОШНИКОВ
(СССР, Пермь)

1. Для теории магнитного резонанса и релаксации представляет интерес следующая задача: парамагнитный диэлектрик находится в заданном приложенном магнитном поле $\vec{H}(t)$; какова зависимость от времени макроскопического магнитного момента парамагнетика $\vec{\mathcal{M}}(t)$ после некоторого начального момента, в котором он находился в равновесии (для удобства этот начальный момент мы примем равным $-\infty$). Было много попыток найти общий подход к этой задаче как на квантовом пути (начиная с [1]), так и на феноменологическом (начиная с [2]). Здесь будут сообщены результаты такого рода попытки, основанной на использовании несколько модифицированной квантовой схемы получения уравнений движения для термодинамических координат, предложенной Робертсоном [3].

2. Напишем гамильтониан парамагнитного образца в виде

$$\hat{\mathcal{H}} = -\hat{H}\hat{\vec{\mathcal{M}}} + \hat{\mathcal{U}} + \hat{\mathcal{H}}_L, \tag{1}$$

где $\hat{\vec{\mathcal{M}}}$ — оператор магнитного момента; $\hat{\mathcal{H}}_L$ включает только немагнитные степени свободы и $\hat{\mathcal{U}}$ все внутренние взаимодействия, связанные с магнитными степенями свободы. Чтобы учесть возможность наличия естественной анизотропии, примем, что механический момент $\hat{\vec{\mathcal{J}}}$ связан с $\hat{\vec{\mathcal{M}}}$ соотношением

$$\hat{\vec{\mathcal{M}}} = g\hat{\vec{\mathcal{J}}}, \tag{2}$$

где g — гиромагнитный тензор.

Будем говорить, что система с гамильтонианом (1) состоит из трех частей: зеемановской системы с гамильтонианом $-\vec{H}\hat{\vec{\mathcal{M}}}$, системы взаимодействий с гамильтонианом $-\hat{\mathcal{U}}$ и решетки с гамильтонианом $-\hat{\mathcal{H}}_L$; зеемановскую систему и систему взаимодействий вместе взятые можно назвать спиновой системой.

3. Значения макроскопической величины $\vec{\mathbf{M}}$, характеризующие состояния, которые система проходит при рассматриваемом процессе, являются средними значениями микроскопической величины $\vec{\mathcal{M}}$ в этих состояниях:

$$\vec{\mathbf{M}} \equiv \langle\hat{\vec{\mathcal{M}}}\rangle = \mathrm{Sp}\,(\hat{\rho}\hat{\vec{\mathcal{M}}}), \tag{3}$$

где $\hat{\rho}$ — статистический оператор системы.

Нам нужны уравнения движения для $\vec{M}(t)$. Но в общем случае $\vec{M}$ не есть единственная величина, дающая полное макроскопическое описание упомянутых состояний. Поэтому мы должны искать уравнения движения для всех таких макроскопических величин (мы будем называть их термодинамическими координатами). Возникает вопрос: как должны быть выбраны термодинамические координаты? Универсального подхода к такого рода выборам не существует, в каждом конкретном случае он должен делаться на основании тех или иных интуитивных соображений, удачность же его будет определяться степенью согласия между теорией и экспериментом. Теория, результаты которой здесь излагаются, строится в том предположении, что за термодинамические координаты могут быть приняты величины $\vec{M}$, U, H_L, где

$$U \equiv \langle \hat{\mathscr{U}} \rangle = \mathrm{Sp}\,(\hat{\rho}\hat{\mathscr{U}}), \tag{4}$$

$$H_L \equiv \langle \hat{\mathscr{H}}_L \rangle \equiv \mathrm{Sp}\,(\hat{\rho}\hat{\mathscr{H}}_L), \tag{5}$$

величины U и H_L мы назовем, соответственно, макроскопическими энергиями системы взаимодействий и решетки.

4. В обсуждаемой теории существенное значение имеют некоторые вспомогательные макроскопические величины, определяемые уравнениями

$$\mathrm{Sp}\,(\hat{\sigma}\hat{\vec{\mathscr{M}}}) = \vec{\mathbf{M}}, \tag{6}$$

$$\mathrm{Sp}\,(\hat{\sigma}\hat{\mathscr{U}}) = U, \tag{7}$$

$$\mathrm{Sp}\,(\hat{\sigma}\hat{\mathscr{H}}_L) = H_L, \tag{8}$$

$$\hat{\sigma} \equiv [\mathrm{Sp}\exp(-\vec{\boldsymbol{\beta}}_M\hat{\vec{\mathscr{M}}} - \beta\hat{\mathscr{U}} - \beta_L\hat{\mathscr{H}}_L)]^{-1}\exp(-\vec{\boldsymbol{\beta}}_M\hat{\vec{\mathscr{M}}} - \beta\hat{\mathscr{U}} - \beta_L\hat{\mathscr{H}}_L). \tag{9}$$

Мы будем называть β_L и β обратными температурами решетки и системы взаимодействий, $\vec{\beta}_M$ обобщенной обратной температурой зеемановской системы.

Нужно подчеркнуть, что $\hat{\sigma}$ не есть статистический оператор нашей (или какой-либо иной) системы и не является решением уравнений Ноймана. Уравнения (6)—(8) не содержат в себе никаких физических предположений, они только определяют величины $\vec{\beta}_M$, β, β_L. Что же касается этих величин, то относительно них мы делаем следующее предположение: если система находится в равновесии при температуре T, то имеют место соотношения

$$\beta^{\text{равн}} = T^{-1}, \tag{10}$$

$$\beta_L^{\text{равн}} = T^{-1}, \tag{11}$$

$$\boldsymbol{\beta}_M^{\text{равн}} = -T^{-1}\mathbf{H}; \tag{12}$$

согласно (6)—(9) и (1), этим предположением обеспечиваются обычные гиббсовы выражения для равновесных значений величин $\vec{M}$, U. H_L.

5. Эволюция нашей системы дается уравнением Ноймана

$$\dot{\hat{\rho}} = -iL\hat{\rho} \tag{13}$$

с начальным условием

$$\hat{\rho}(-\infty) = \{\mathrm{Sp}\exp[-T^{-1}\hat{\mathscr{H}}(-\infty)]\}^{-1}\exp[-T^{-1}\hat{\mathscr{H}}(-\infty)], \tag{14}$$

где $\hat{\hat{L}}\ldots \equiv [\hat{\mathscr{H}}, \ldots]$ и принято $\hbar=1$, $k=1$. Используя (1)—(14) и более ничего, можно получить следующие уравнения движения для величин $\vec{M}$, U, H_L:

$$\dot{\vec{M}}(t) = |g|\,\{[\widetilde{(g^{-1}g^{-1})}\vec{M}(t)][\vec{H}(t) - \vec{H}^*(t)]\} -$$

$$- \int_{-\infty}^{\infty} dt' K_{\vec{\mathscr{M}}\vec{\mathscr{M}}}(t, t')[\vec{H}^*(t') - \vec{H}(t')] - \int_{-\infty}^{\infty} dt' K_{\vec{\mathscr{M}}\mathscr{H}_L}(t, t')[\beta(t') - \beta_L(t')], \tag{15}$$

$$\dot{H}_L(t) = -\int_{-\infty}^{\infty} dt' K_{\mathscr{H}_L, \vec{\mathscr{M}}}(t, t') [\vec{H}^*(t') - \vec{H}(t')] -$$

$$- \int_{-\infty}^{\infty} dt' K_{\mathscr{H}_L \mathscr{H}_L}(t, t') [\beta(t') - \beta_2(t')], \tag{16}$$

$$\dot{U}(t) = \vec{H}(t)\vec{M}(t) - \dot{H}_L(t), \tag{17}$$

где

$$\vec{H}^* = -\beta^{-1}\vec{\beta}_M \tag{18}$$

и величины $K_{ff'}$ даются сложными выражениями, содержащими $\hat{\mathscr{H}}$ и $\hat{\sigma}$.

6. Уравнения (15)—(17) точные; в частности, они получены без предположения о том, что состояния системы в каком-либо смысле близки к равновесным. Но эти уравнения настолько сложны, что едва ли могут быть использованы практически. Однако в очень большом количестве вопросов магнитного резонанса и релаксации законно приближение высоких магнитных температур (β и $|\beta_M|$ малы), а решетку можно считать находящейся все время в равновесии ($\beta_L = \text{const} \equiv \beta_0$).

В этих приближениях уравнения (15)—(17) превращаются в систему линейных интегро-дифференциальных уравнений с ядрами $K_{ff'}$. Эта система уже пригодна для практического использования при условии наличия эффективной методики вычисления (конечно, приближенного) ядер $K_{ff'}$. При достаточно малой переменной части приложенного магнитного поля вычисление этих ядер сводится с вычислению двухвременных температурных запаздывающих функций Грина, составленных из спиновых и фононных операторов, с усреднением по равновесному статистическому оператору решетки. Для вычисления таких функций Грина нами была построена теория возмущений, которая, в отличие от теории возмущений Тябликова и Бонч-Бруевича, оперирует не с невозмущенными энергиями частиц, а с их точными комплексными «энергиями», включающими затухание, и поэтому не приводит к расходимостям.

7. Если, кроме приближений высоких магнитных температур и постоянной температуры решетки, можно еще считать переменную часть приложенного магнитного поля достаточно медленно меняющейся, то уравнения (15)—(17), после вычисления ядер, приводят к следующим дифференциальным уравнениям:

$$\dot{\vec{M}} = g[(C^{-1}\vec{M})(\vec{H} - N\vec{M})] - \varkappa(\vec{M} - \beta C\vec{H}) - \vec{\varkappa}(\beta - \beta_0), \tag{19}$$

$$\dot{\beta} = -b^{-1}\dot{\vec{M}}(\vec{H} - N\vec{M}) - \vec{\lambda}(\vec{M} - \beta C\vec{H}) - \alpha(\beta - \beta_0), \tag{20}$$

здесь

$$g \equiv (^1/_3) nj(j+1)|g|, \tag{21}$$

где n — число магнитных частиц (предполагаемых одинаковыми и занимающими эквивалентные положения) и j — квантовое число механического момента одной частицы; C, N и b возникают из разложений

$$\chi^{\text{равн}} = \beta C - \beta^2 CNC + \ldots, \tag{22}$$

$$U = -\beta b + \ldots, \tag{23}$$

тензор $\varkappa$, $\vec{\varkappa}$, $\vec{\lambda}$, α — кинетические коэффициенты ($\vec{\varkappa}$ и $\vec{\lambda}$ связано между собой в силу соотношений Онзагера). Для случая отсутствия естественной анизотропии и в приближении закона Кюри ($N=0$) уравнения (19) и (20) совпадают с уравнениями существующей феноменологической теории парамагнитной релаксации (см. [4]), из которых в частных случаях получаются уравнения Блоха и все известные их модификации.

Резюме

Предложенная Робертсоном квантовая схема нахождения уравнений движения для термодинамических координат несколько изменена и использована для получения системы интегро-дифференциальных уравнений, позволяющих найти зависимость от времени макроскопического магнитного момента парамагнитного диэлектрика, находящегося в заданном приложенном магнитном поле. В приближениях высоких магнитных температур и постоянной температуры решетки эта система становится линейной. Для вычисления входящих в нее ядер построена теория возмущений для двухвременных температурных спиновых функций Грина, оперирующая с точными значениями энергии частиц и учитывающая затухание. Показано, что для достаточно медленно меняющейся переменной части приложенного магнитного поля линейная система интегродифференциальных уравнений превращается в систему дифференциальных уравнений, обобщающих уравнения существующей феноменологической теории парамагнитной релаксации на случай наличия естественной анизотропии.

ЛИТЕРАТУРА

1. *J. Waller.* Z. Phys., **79**, 370 (1932).
2. *H. B. G. Casimir, F. K. Du Pré.* Physica, **5**, 507 (1938).
3. *B. Robertson.* Phys. Rev., **144**, 151 (1966).
4. *И. Г. Шапошников.* Радиоспектроскопия, **6** (Труды ЕНИ ПГУ), 1969.

РОЛЬ ОТКРЫТИЯ Е. К. ЗАВОЙСКИМ ЭПР В РАЗВИТИИ ФИЗИКИ

У. Х. КОПВИЛЛЕМ
(СССР, Казань)

Прошло четверть века с момента открытия Е. К. Завойским электронного магнитного резонанса [1]. И на сегодняшний день ЭПР стал одним из наиболее могущественных и популярных методов физических, химических и биологических исследований. Что касается самого факта наблюдения ЭПР в различных новых веществах и примесях, в настоящее время этот процесс стал уже приобретать характер обычного производственного процесса, требующего высокой квалификации и соблюдения определенных известных инструкций. Поэтому может показаться, что в настоящее время для науки открытие ЭПР имеет лишь историческое значение, причем значение этого исторического события должно быть оценено по количеству тех исследователей и тех работ, которые посвящены наблюдению ЭПР на новых объектах сегодня и в будущем.

Цель данной работы — анализ той совокупности физических идей, которые сопровождали открытие ЭПР, исследовать, насколько это возможно, роль этих идей в процессе развития некоторых областей физики за четверть века, а также сделать некоторые прогнозы о значении этих идей в будущем развитии физики. По нашему мнению, именно эта совокупность идей является основным итогом открытия ЭПР.

ЭПР как алгоритм для поиска новых резонансов и как проявление **свойств квантовой динамики L_3-неприводимой алгебры Ли третьего**