

СТАТИСТИЧЕСКАЯ ДИНАМИКА СПИНОВЫХ СИСТЕМ И β -ЯМР-СПЕКТРОСКОПИЯ

*Ю.Г.Абов, А.Д.Гулько, Ф.С.Джепаров,
С.В.Степанов, С.С.Тростин*

Институт теоретической и экспериментальной физики, Москва

Рассмотрены экспериментальные исследования по спиновой динамике примесных ядер в кристаллах, выполненные методом β -ЯМР, а также связанные с этим теоретические работы. В частности, обсуждается спектр спиновых флуктуаций, эффект корреляции локальных полей на примесных спинах, процессы типа спиновой диффузии в неупорядоченных системах и влияние на них внешних переменных полей и собственного теплового поступательного движения ядер.

Experimental investigations of the spin dynamics of the impuritive nuclei in crystals carried out by means of the β -NMR-technique and related theoretical works are considered. Particularly, we discuss spin-fluctuation spectrum, correlations of the local magnetic fields on impuritive spins, processes like spin diffusion in the disordered systems including the influence of the external alternating fields and thermal translational motion of the nuclei.

1. ВВЕДЕНИЕ

Кинетика спиновых систем принадлежит к наиболее разработанным разделам статистической механики. С экспериментальной стороны это прежде всего обусловлено высочайшей чувствительностью методов ядерного магнитного резонанса (ЯМР) [1,2]. Для теоретического анализа существенно, что спиновые системы зачастую хорошо отделены от прочих степеней свободы, а гамильтониан диполь-дипольных взаимодействий достаточно сложен, чтобы обеспечить эргодичность многоспиновых систем, и в то же время настолько прост, что, например, задача трех спинов во многих случаях допускает аналитическое решение. Чрезвычайно существенно также, что при типичных условиях спиновая температура почти бесконечна и равновесные состояния почти тривиальны. Кинетика же неравновесных состояний, тем не менее, остается весьма сложной и содержательной. Для иллюстрации достигнутого прогресса отметим реализованное экспериментально

обращение эволюции (омоложение) ядерных дипольных систем [3,4], эргодичность которых была вполне надежно доказана другими опытами [5].

Однако и стандартный ЯМР не лишен недостатков. Одно из основных его ограничений состоит в том, что наблюдаемой величиной является полная намагниченность какого-либо сорта спинов [5], сводящаяся в типичных условиях к корреляционной функции

$$G_T^{\alpha\beta}(t) = \langle I_T^\alpha(t) I_T^\beta \rangle_0 / \langle I_T^\beta I_T^\beta \rangle_0, \quad I_T^\alpha = \sum_i^N I_i^\alpha,$$

$$\alpha = x, y, z, \quad \langle \dots \rangle_0 = \text{Tr}(\dots) / \text{Tr} 1,$$

где I_i^α есть α -компонента i -го спина из рассматриваемой подсистемы, а гейзенберговская зависимость от времени определяется, как обычно, секулярной частью диполь-дипольного взаимодействия. В результате такой фундаментальный процесс, как перераспределение поляризации между различными ядрами подсистемы, проявляется весьма косвенно.

Метод β -ЯМР-спектроскопии впервые позволил весьма детально исследовать этот процесс непосредственно. Кроме того, благодаря высокой чувствительности метода удалось значительно глубже изучить такую стандартную и фундаментальную характеристику, как функцию формы линии ЯМР.

В основе метода β -ЯМР лежит изучение эволюции поляризации $\langle I_0^z(t) \rangle$ примесного короткоживущего β -активного ядра (β -ядра) по анизотропии его β -излучения [6]. Как правило, подобные процессы протекают экспоненциально, поскольку как релаксация окружающих спинов кристалла, так и распространение фононов идут гораздо быстрее. Поэтому было чрезвычайно важно найти такие системы, в которых ядро-зонд почти совпадает по g -фактору с одним из стабильных изотопов, причем спиновые степени свободы этой системы хорошо отделены от колебательных мод кристалла. В подсистеме, образованной β -ядром и спинами с близким ему g -фактором, существует аддитивный интеграл движения — проекция суммарного спина на постоянное внешнее поле — $\sum_{i=0}^N I_i^z$. В обычных условиях

можно считать, что вначале, в момент образования ядра-зонда, поляризовано только оно. Потом поляризация переходит на ближайшие спины подсистемы с последующим ее перемещением как назад, на β -ядро, так и на более удаленные примесные ядра, что типично для процессов диффузионного типа, при которых $\langle I_0^z(t \rightarrow \infty) \rangle$ существенно неэкспоненциально. Подобные перераспределения плотностей аддитивных интегралов движения

(ПАИД) являются важнейшими процессами во всей физической кинетике. Это обусловлено как исключительной ролью аддитивных интегралов движения в равновесной теории [6], так и относительной медленностью эволюции ПАИД, в результате чего все более быстрые процессы подстраиваются к ним [7—9].

Первую и пока единственную из известных спиновую подсистему вышеуказанного типа образуют β -ядра ${}^8\text{Li}$ и примесных ядер ${}^6\text{Li}$ в кристалле LiF [10—12]. Важнейшей особенностью этой подсистемы является случайное распределение ядер ${}^6\text{Li}$ в кристалле. В результате перенос поляризации по ним можно отнести к случайным блужданиям в неупорядоченных средах (СБНС) — одному из новейших разделов статистической механики (см., например, [13]). Здесь имеется в виду статистическая неупорядоченность среды в противопоставление динамической неупорядоченности, характерной, например, для канонической теории газов и жидкостей. Перенос по одной фиксированной конфигурации примесей описывается теорией, использующей представление о динамической неупорядоченности ориентаций спинов в кристалле [14], и в результате получаются сравнительно простые кинетические уравнения. Задачей СБНС является получение их решений, усредненных по ансамблю статистических конфигураций примеси. Анализ работы [15] показывает, что данная проблема приводит к весьма общим нелокальным, нелинейным и неперенормируемым полевым и суперполевым теориям. С другой стороны, ее пропагаторы представимы функциональными интегралами, напоминающими фейнмановскую теорию полярона, но с значительно более сложным действием. Это родство задач СБНС с общими фундаментальными проблемами теоретической физики является мощным стимулом наших исследований.

Среди интересных результатов отметим, что начальный участок кинетики деполяризации ядра-зонда в системе ${}^8\text{Li}$ - ${}^6\text{Li}$ дает прямую информацию о временном фурье-образе корреляционной функции $\langle I_j^+(t) I_0^-(t) I_j^+ I_0^- \rangle_0$, недоступной для столь детального изучения другими экспериментальными методами. При этом оказалось, что имеет место специфическая корреляция локальных полей, которая, на первый взгляд, выглядит как нарушение центральной предельной теоремы теории вероятностей.

Данный обзор содержит обсуждение основных общезначимых принципов и результатов данного круга исследований. За более подробной информацией по частным вопросам мы отсылаем читателя к оригинальным работам.

2. β -ЯМР-СПЕКТРОСКОПИЯ

Бета-излучение поляризованных ядер подчиняется закону

$$W(\vartheta) \sim 1 + \alpha p_0 \cos \vartheta,$$

где $W(\vartheta)$ — вероятность испускания β -частицы под углом ϑ к поляризации \vec{p} β -активного ядра, α — ядерная константа. Поэтому, создавая в веществе поляризованные β -активные ядра (β -ядра) и исследуя зависимость углового распределения их β -излучения от времени, внешнего постоянного и радиочастотного магнитных полей, температуры и давления, можно изучать эволюцию поляризации β -ядер и тем самым исследовать ряд процессов, обусловленных сверхтонкими и дипольными взаимодействиями.

Метод был предложен Ф.Л.Шапиро [16] и реализован в работах [17,18] для изучения спинов и дипольных и квадрупольных моментов β -ядер. Впоследствии метод стал применяться для исследования конденсированных сред, где он имеет значительные преимущества как перед классическим ЯМР, так и перед другими ядерными методиками (возмущенные угловые γ -корреляции и эффект Мессбауэра) в исследовании ряда явлений [19,20].

Наши исследования проводились на реакторах ИТЭФ \rightarrow и МИФИ. Для получения β -ядер использовалась реакция ${}^7\text{Li}(\vec{n}, \gamma){}^8\text{Li}$ на тепловых поляризованных нейтронах. Непосредственно после этой реакции спиновая матрица плотности β -ядер имеет вид

$$\rho(t=0) = \frac{1}{2I_0 + 1} \left(1 + \frac{3p_0(t=0)}{I_0(I_0 + 1)} I_0^z \right), \quad \vec{p}_0 = \text{Tr}(\vec{I}_0 \rho), \quad (1)$$

где \vec{I}_0^z — оператор спина, а \vec{p}_0 — поляризация. Внешнее поле \mathcal{H}_0 считается направленным по оси z .

Схема β -ЯМР-спектрометра изображена на рис.1. Поляризованный пучок нейтронов с плотностью $\sim 4 \cdot 10^6$ нейтр./ $(\text{см}^2 \cdot \text{с})$ получался отражением от намагниченного кобальтового зеркала. Электроны β -распада регистрировались независимо двумя сцинтилляционными счетчиками, расположенными по обеим сторонам образца в зазоре электромагнита.

Обычно угловая асимметрия β -излучения вычисляется по формуле

$$\epsilon = (N(0^\circ) - N(180^\circ)) / (N(0^\circ) + N(180^\circ)),$$

где $N(0^\circ)$ и $N(180^\circ)$ — числа электронов β -распада, зарегистрированных β -счетчиком для двух ориентаций нейтронной поляризации (и β -ядер) относительно внешнего стационарного поля \mathcal{H}_0 . Асимметрия ϵ пропорциональна поляризации $P_{00}(t) = \langle p_0(t) \rangle_c$ ансамбля β -ядер, усредненной по их распределению в образце. Необходимо также учесть усред-

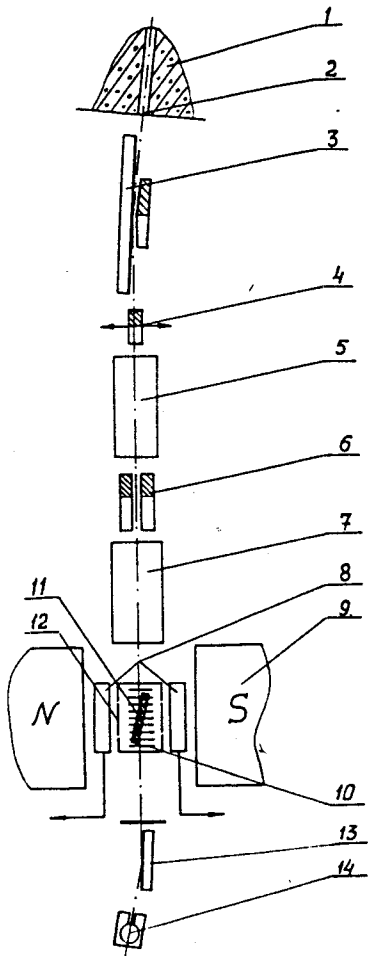


Рис. 1. Схема β -ЯМР-спектрометра: 1 — защита реактора, 2 — коллиматор, 3 — кобальтовое зеркало-поляризатор, 4 — прерыватель пучка, 5 — спин-флиппер (NS и $N'S'$ — магниты, ϕ — токовая фольга), 6 — коллиматоры, 7 — магнит ведущего поля, 8 — β -счетчики, 9 — магнит ЯМР, 10 — РЧ-катушка, 11 — исследуемый образец, 12 — криостат или термостат, 13 — кобальтовое зеркало-анализатор, 14 — нейтронный счетчик

нение по времени τ_{irr} облучения образца нейтронами и по времени $\Delta t = t_{n+1} - t_n$, $n = 0, 1, 2, \dots$ последующего счета β -частиц в n -м канале временного анализатора:

$$\begin{aligned} \varepsilon(t_n + \frac{\Delta t}{2}) &= \\ \varepsilon_0 \cdot \int_{-\tau_{\text{irr}}}^0 dt \int_0^{t_{n+1}} dt e^{-\lambda_0(t-\tau)} P_{00}(t-\tau) &= \\ = \frac{\int_{-\tau_{\text{irr}}}^0 dt \int_0^{t_{n+1}} dt e^{-\lambda_0(t-\tau)} P_{00}(t-\tau)}{\int_{-\tau_{\text{irr}}}^0 dt \int_0^{t_n} dt e^{-\lambda_0(t-\tau)}}. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь λ_0 — вероятность β -распада, ε_0 — предельное, то есть в отсутствие деполаризации, значение асимметрии. Дифференциальные по времени изме-

рения проводились при $\lambda_0 \Delta t \ll 1$ и $\lambda_0 \tau_{\text{irr}} \gg 1$. Зависимости от внешних магнитных полей и температуры исследовались в интегральном режиме со счетом электронов распада в одном временном канале длительностью τ_{obs} . При этом измерялась асимметрия $\bar{\varepsilon} = \varepsilon(t_0 + \Delta t/2)$ с $t_0 = 0$, $\Delta t = \tau_{\text{obs}} \gg \lambda_0^{-1}$. В случае $\lambda_0 \tau_{\text{irr}} \gg 1$ и $\lambda_0 \tau_{\text{obs}} \gg 1$

$$\bar{\varepsilon} = -\varepsilon_0 \lambda_0^2 \frac{\partial P_{00}(\lambda_0)}{\partial \lambda_0}, \quad \text{где } P_{00}(\lambda) = \int_0^{\infty} dt \cdot \exp(-\lambda t) P_{00}(t). \quad (3)$$

Исследовались монокристаллические ориентированные образцы LiF размером $60 \times 40 \times 2$ мм с кристаллографическими плоскостями (100), (110) и

(111), параллельными большой поверхности образца, которая, в свою очередь, была перпендикулярна направлению стационарного магнитного поля. Концентрация изотопа ${}^6\text{Li}$ составляла 3,21(3)%. Для нагревания образец помещался в специальный термостат. Период $T_{1/2}$ полураспада ядер равен 0,84 с ($\lambda_0 = \ln 2/T_{1/2} = 0,825 \text{ с}^{-1}$). Спины ядер ${}^8\text{Li}$, ${}^6\text{Li}$, ${}^7\text{Li}$ и ${}^{19}\text{F}$ равны, соответственно, $I_0 = 2$, $I_{I \neq 0} = 1$, $L = 3/2$, $F = 1/2$, а g -факторы — $g({}^8\text{Li}) = 0,8267$, $g({}^6\text{Li}) = 0,8220$, $g_L = 2,171$, $g_F = 5,257$. Везде, где возможно, мы будем пренебрегать несущественным различием g -факторов ${}^8\text{Li}$ и ${}^6\text{Li}$: $g({}^8\text{Li}) \approx g({}^6\text{Li}) \approx g_I = 0,824$.

3. ФАЗОВАЯ РЕЛАКСАЦИЯ И ЯМР β -АКТИВНЫХ ЯДЕР ${}^8\text{Li}$ В LiF

В парамагнитных ядерных спиновых системах фазовая релаксация (ФР) почти полностью определяется коллективными многочастичными эффектами. Современные исследования ФР разделяются на несколько направлений. Первое представляет собой простое прагматическое описание этого явления в терминах функций памяти и нескольких первых моментов резонансной линии, то есть первых производных по времени от коррелятора $g(t) = \langle I_+(t)I_- \rangle_0 / \langle I_+I_- \rangle_0$ при $t = 0$ (см. [21] и цитированную там литературу). Во втором направлении большое внимание уделяется осцилляциям этого коррелятора в гомоядерных системах [21,22]. Третья группа исследований направлена на объяснение [23,24] экспоненциального поведения спектральной плотности спиновых флуктуаций или, другими словами, функции формы линии ЯМР (ФФ ЯМР)

$$g(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} g(t) \cos(\omega t) \frac{dt}{2\pi} \quad (4)$$

при больших ω , обнаруженное экспериментально в [25], и в меньшем диапазоне изменения $g(\omega)$ в работах, изложенных в разделе 1.Б.д.3 монографии [21]. Четвертое важное направление было заложено в работах [26—28], где в теорию фазовой релаксации была введена модель нормального случайного процесса (МНСП) для описания флуктуаций локальных полей. Первоначально она была применена для объяснения эффекта сужения движением. При этом спад свободной индукции

$$g(t) = \langle \exp \left[i \int_0^t d\tau \hat{\omega}_I(\tau) \right] \rangle_0$$

представлялся в виде $g(t) \approx \exp \left[- \int_0^t d\tau (t - \tau) \Lambda(\tau) \right]$,

где $\Lambda(\tau) = \langle \hat{\omega}_I(\tau) \hat{\omega}_I(0) \rangle_0$, $\Lambda(0) = \langle \hat{\omega}_I^2 \rangle_0 = M_2$. Здесь M_2 — второй момент ФФ

ЯМР, а $\hat{\omega}_l(\tau)$ — оператор локального поля на ядре. Если характерное время

$\tau_c \sim \int_0^{\infty} dt \Lambda(\tau) / M_2$ флуктуаций локального поля изменяется от $\tau_{c0} \gg 1/\sqrt{M_2}$ (статические локальные поля) до $\tau_{c0} \ll 1/\sqrt{M_2}$ (быстрое движение спинов матрицы), то $g(t)$ меняется от гауссовой функции $g_G(t) = \exp(-M_2 t^2/2)$ до экспоненты $g_L(t) = \exp(-\Gamma t)$, $\Gamma \sim M_2 \tau_c$, убывающей более медленно при больших t . Обычно для качественного описания прыжков ядер используют $\Lambda(\tau) = M_2 \exp(-|\tau|/\tau_c)$, а для рассмотрения гладкой (типа «флип-флоп» переворотов) эволюции локальных полей применяется $\Lambda(\tau) = M_2 \exp(-\tau^2/2\tau_c^2)$. Если выбрать $\Lambda(\tau) = M_2 \text{ch}^{-2}(\tau/\tau_c)$, то можно получить аналитическое выражение для $g(t)$ в элементарных функциях.

На наш взгляд, к настоящему времени возможности теории Андерсона — Вейсса — Кубо выявлены далеко не полностью, поскольку 1) до сих пор нет удовлетворительного решения задачи о движении спина в трехмерном флуктуирующем поле, и 2) при анализе спиновых корреляторов примесных ядер, когда локальное поле одномерно, недостаточно полно привлекались представления общей теории необратимых процессов. Первый из этих дефектов частично покрывается работами В.Е.Зобова [24], который также показал, что в пределе большого числа соседей (точнее — бесконечной размерности) флуктуации локальных полей являются нормальным случайным процессом. Устранению второго дефекта посвящена работа [29], где впервые измерена ФФ ЯМР примесных ядер в широком диапазоне $g_0(\omega) \geq 10^{-5} \cdot g_0(\omega = 0)$ при различных ориентациях магнитного поля и обнаружено, что при моделировании движения локальных полей на примесных ядрах реалистичским нормальным случайным процессом получается хорошее описание экспериментальных данных, если при вычислении коррелятора этих полей $\Lambda(t)$ адекватно учесть, что он определяется эволюцией z -компонент спинов основных ядер кристалла (матрицы), причем при малых t он является аналитической функцией t^2 , а далее с ростом t проявляется коллективный характер спиновой эволюции ядер матрицы, причем сначала $\ln \Lambda(t) \propto -t$, а длинновременная асимптотика $\Lambda(t)$ оказывается диффузионной: $\Lambda(t \rightarrow \infty) \propto t^{-3/2}$, поскольку суммарная z -компонента каждого сорта спинов матрицы является аддитивным интегралом движения.

Спиновый гамильтониан системы $^8\text{Li}-^6\text{Li}$ в LiF можно записать в виде

$$H = H_0 + H_I + H_{IF} + H_{IL}, \quad H_0 = H_F + H_L + H_{FL}$$

$$H_A = \frac{1}{4} \sum_{\substack{\mathbf{x}, \mathbf{q} \\ \mathbf{x} \neq \mathbf{q}}} b_{\mathbf{x}\mathbf{q}}^A (3A_x^z A_{\mathbf{q}}^z - \vec{A}_{\mathbf{x}} \vec{A}_{\mathbf{q}}), \quad H_{AB} = \frac{1}{4} \sum_{\substack{\mathbf{x}, \mathbf{q} \\ \mathbf{x} \neq \mathbf{q}}} b_{\mathbf{x}\mathbf{q}}^{AB} A_x^z B_{\mathbf{q}}^z. \quad (5)$$

Здесь и далее векторы \mathbf{r} , \mathbf{q} , \mathbf{x} , \mathbf{y} и \mathbf{z} задают допустимые положения ядер, пробегая значения из соответствующих ГЦК подрешеток кристалла LiF. Индексы A и B нумеруют тип подрешетки и спина, принимая значения F , L и I , где $F = 1/2$, $L = 3/2$ для ядер ^{19}F и ^7Li , а $I = I_0 = 2$ и $I_{\mathbf{q} \neq 0} = 1$ — спины ^8Li и ^6Li соответственно. Коэффициенты диполь-дипольного взаимодействия имеют вид [30]:

$$b_{\mathbf{x}\mathbf{q}}^{AB} = \omega_{AB} \tilde{b}_{\mathbf{x}\mathbf{q}}, \quad b_{\mathbf{x}\mathbf{q}}^A = b_{\mathbf{x}\mathbf{q}}^{AA}, \quad \omega_{AB} = \frac{g_A g_B \beta_n^2}{\hbar d^3}, \quad \tilde{b}_{\mathbf{x}\mathbf{q}} = \frac{1 - 3 \cos^2 \vartheta_{\mathbf{x}\mathbf{q}}}{|\mathbf{x} - \mathbf{q}|^3}. \quad (6)$$

Здесь $\vartheta_{\mathbf{x}\mathbf{q}}$ есть полярный угол вектора $\mathbf{x} - \mathbf{q}$, а $d = 2,01 \text{ \AA}$ — минимальное расстояние между Li и F в LiF ($\omega_{IF} = 2\pi(2,05 \text{ кГц})$, $\omega_{IL} = 2\pi(0,85 \text{ кГц})$, $\omega_{II} = 2\pi(0,322 \text{ кГц})$).

В МНСП сигнал свободной индукции примесного спина $g_0(t)$ аппроксимируется первыми членами кумулянтного разложения:

$$g_0(t) = \langle I_{-} I_{+} T \exp(-i \int_0^t \hat{\omega}_0(\tau) d\tau) \rangle_0 / \langle I_{-} I_{+} \rangle_0 \approx \exp\left(-\int_0^t (t - \tau) \Lambda_{00}(\tau) d\tau\right),$$

$$\Lambda_{00}(\tau) = \langle \hat{\omega}_0(\tau) \cdot \hat{\omega}_0 \rangle_0, \quad (7)$$

причем при расчете $\Lambda_{00}(\tau)$ пренебрегается влиянием примесных спинов на спины матрицы. Здесь и далее в этом разделе мы не учитываем влияние ядер ^6Li на β -ядро в силу малости их концентрации. Предполагая, что β -ядро находится в начале координат, локальное поле в единицах частоты можно записать в виде

$$\hat{\omega}_0 = \sum_{A=F, L} \hat{\omega}_0^{(A)}, \quad \hat{\omega}_0^{(A)} = \sum_{\mathbf{x} \in A} b_{0\mathbf{x}}^{IA} \cdot A_{\mathbf{x}}^z.$$

Соответственно

$$\Lambda_{00}(t) = \sum_{A=F, L} \Lambda_{00}^{(A)}(t),$$

$$\Lambda_{00}^{(A)}(t) = \langle \hat{\omega}_0^{(A)}(t) \cdot \hat{\omega}_0^{(A)}(0) \rangle_0 = \frac{A(A+1)}{3} \sum_{\mathbf{x} \in A} \sum_{\mathbf{y} \in A} b_{0\mathbf{x}}^{IA} G_{\mathbf{xy}}^A(t) b_{\mathbf{y}0}^{IA}. \quad (8)$$

Простейшее, но качественно правильное представление для пропагатора спиновой диффузии $G_{xy}^A(t) = \langle A_x^z(t)A_y^z \rangle_0 / \langle (A_x^z)^2 \rangle_0$ можно получить на основе уравнений [14,29]:

$$\begin{aligned} \partial G_{xy}^A / \partial t_{\text{eff}}^A &= -\sum_z A_{xz}^A \cdot G_{zy}^A, \quad G_{xy}^A(t=0) = \delta_{xy}, \\ A_{xy}^A &= -v_{xy}^A + \delta_{xy} \sum_z v_{zx}^A, \quad x, y, z \in A\text{-й подрешетке,} \end{aligned} \quad (9)$$

где v_{xy}^A — вероятность переноса поляризации между двумя спинами A :

$$\begin{aligned} v_{xy}^A &= \frac{\pi A(A+1)}{6} (\omega_{AA} \tilde{b}_{xy}^A)^2 g_{cA}(\omega=0) = \frac{(\tilde{b}_{xy}^A)^2}{\tau_{cA} \sigma^F}, \\ \sigma^F \equiv \sigma^L &= \sum_z (\tilde{b}_{xz}^A)^2, \quad \frac{1}{\tau_{cA}} = \sum_z v_{xz}^A. \end{aligned} \quad (10)$$

Здесь τ_{cA} есть время корреляции («флип-флоп» переворотов) спинов A .

Эффективное время $t_{\text{eff}}^{(A)}(t) = \int_0^t (t-\tau) g_{cA}(\tau) \frac{d\tau}{T_{2A}}$ сглаживает пропагатор спи-

новой диффузии на малых временах $t \leq T_{2A}$ ($T_{2A} = \int_0^\infty g_{cA}(\tau) d\tau$ — время фазо-

вой релаксации спинов A). Выбор $g_{cA}(\tau)$ в виде $\exp(-M_{2A}\tau^2)$, $\text{ch}^{-2} \sqrt{M_{2A}}\tau$,

или $(1 + \frac{2}{3} M_{2A}\tau^2)^{-3/2}$, где M_{2A} — «односпиновый» второй момент ФФ

ЯМР ядер матрицы [12], практически не оказывает влияния на конечный

результат. Если выбрать $g_{cA}(\tau)$ в виде гауссиана, то $T_{2F} = \sqrt{\frac{\pi}{4M_{2F}}} = 6,3$ мкс,

$T_{2L} = \sqrt{\frac{\pi}{4M_{2L}}} = 14,2$ мкс, $\tau_{cF} = \left(\frac{\sqrt{\pi}}{12} F(F+1) \omega_{FF}^2 \sigma^{FF} / \sqrt{M_{2F}} \right)^{-1} = 175$ мкс и

$\tau_{cL} = 530$ мкс аналогично. Эти значения отвечают ориентации $\vec{H}_0 // [001]$

кристалла во внешнем магнитном поле \mathcal{H}_0 . Формулы для $g_{cA}(\tau)$ наиболее

точные при малых $M_{2A}\tau^2$ и качественно правильно передают затухание

$g_{cA}(\tau \rightarrow \infty)$, причем вычисленный на их основе коэффициент спиновой диффузии для кристалла CaF_2 удовлетворительно согласуется с экс-

периментом [31]. Реально в работе [29] использовалось не точное решение уравнений (8)—(10), а гораздо более простые и удобные формулы

$$\Lambda_{00}^{(A)}(t) = \tilde{\Lambda}_{00}^{(A)}(t_{\text{eff}}^{(A)}) = M_{2IA} \left[(1 - \gamma_A) \cdot \exp \left(- \frac{\alpha_A t_{\text{eff}}^{(A)}}{\tau_{cA}} \right) + \frac{\gamma_A}{(1 + \beta_A t_{\text{eff}}^{(A)} / \tau_{cA})^{3/2}} \right],$$

$$M_{2IA} = \langle (\omega_0^{(A)})^2 \rangle_0 \quad (11)$$

Коэффициенты α_A , β_A и γ_A определялись из условий совпадения истинных значений $\partial \tilde{\Lambda}_{00}^{(A)}(t_{\text{eff}}^{(A)}) / \partial t_{\text{eff}}^{(A)}|_{t=0}$, $\int_0^\infty dt \tilde{\Lambda}_{00}^{(A)}(t)$ и асимптотики $\tilde{\Lambda}_{00}^{(A)}(t \rightarrow \infty)$ с соответствующими величинами, определяемыми формулой (11) (см. [29]).

Результаты расчетов $g_0(\omega)$ для разных кристаллографических ориентаций показаны на рис.2 вместе с экспериментальными данными. Впервые без подгонки параметров было достигнуто хорошее согласие с экспериментом в интервале изменения $g_0(\omega)$ на 4—5 порядков. Это можно рассматривать как убедительный довод в пользу моделирования поведения локального поля матрицы нормальным случайным процессом.

Использование различных пробных функций для $g_{cA}(\tau)$ приводит к практически неотличимым кривым ФФ ЯМР ядер ^8Li на рис.2. Высокочастотные асимптотики $g_0(\omega \rightarrow \infty)$, соответствующие этим функциям, экспоненциальны и различаются численными параметрами. Но выход на них в наших экспериментах не достигается, то есть велика роль преасимптотических членов. Отметим в этой связи, что теория В.Е.Зобова [23] также достаточно правильно передает наклоны крыльев $g_0(\omega)$ в полулогарифмическом масштабе.

Хотя истинная асимптотика ФФ ЯМР $g_0(\omega \rightarrow \infty)$ в современных экспериментах пока не достигается, тем не менее на рубеже 70-х годов сложилось мнение, что она экспоненциальна. По литературе видно, что теоретики приложили значительные усилия для доказательства этого факта. По-видимому, основные трудности в этом чисто психологические и связаны с традицией интерпретировать результаты ЯМР на основе сравнения с гауссовой и лоренцевой линиями. На наш взгляд, экспоненциальность крыльев $g(\omega)$ совершенно естественна. Хорошо известно, что все производные $d^n g(t) / dt^n$ при $t = 0$ конечны, а вместе с ними конечны и все моменты $\int d\omega \cdot \omega^n g(\omega)$. Нет сомнений, что $g(t)$ является гладкой функцией. ФФ ЯМР $g(\omega)$ неотрицательна. Поэтому из общих свойств преобразования Фурье [32] следует, что $g(t)$ как функция комплексного переменного может иметь осо-

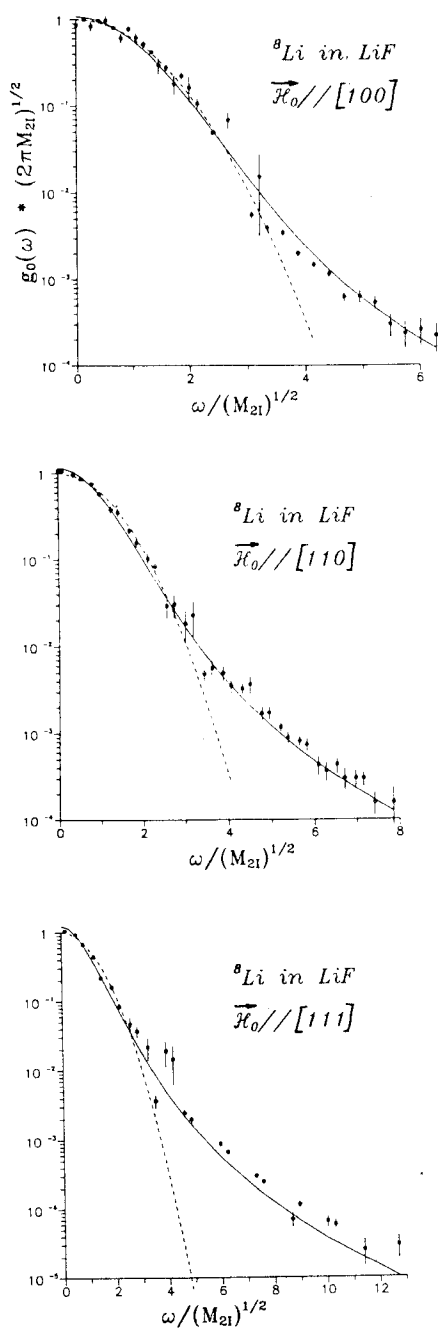


Рис. 2. Функции формы ЯМР β -активных ядер ${}^8\text{Li}$ в кристаллах LiF в зависимости от частоты сканирующего радиочастотного поля при различных ориентациях кристаллов в магнитном поле $H_0 = 2984,9(3)$ Гс при комнатной температуре. Погрешность в значении поля лимитировалась его однородностью в образце ($\approx 10^{-5}$). Концентрация парамагнитных центров не превышает 10^{-5} . Сплошные кривые — результат расчета $g_0(\omega)$ по формулам (4), (7) — (11). Пунктирные линии — гауссианы с теоретическими вторыми моментами ФФ ЯМР $M_{21}/(2\pi)^2 = \langle \hat{\omega}_0^2 \rangle_0 / (2\pi)^2 = 14; 5,13$ и $2,17$ кГц² при $\vec{H}_0 // [001], \vec{H}_0 // [011]$ и $\vec{H}_0 // [111]$ соответственно

бенности только при чисто мнимых t . Ближайшая из них к $t = 0$ и определяет экспоненциальную асимптотику ФФ ЯМР. Лоренцева функция не обладает конечными моментами, а гауссова $g(t)$ имеет особенность только на бесконечности, поэтому они обе исключительны и не годятся для интерпретации общей ситуации. Таким образом, экспоненциальность $g(\omega \rightarrow \infty)$ оказывается совершенно естественным обстоятельством, и задачей теории, скорее, является не доказательство этого факта, а определение конкретных параметров асимптотики.

Специфика задачи о форме линии состоит в том, что в ней не известен спектр гамильтониана и первичной является временная картина, причем реально известны только несколько первых производных от изучаемых корреляционных функций при $t = 0$. В этих условиях

можно указать по крайней мере три важных априорных принципа, определяющих преимущество использования МНСП над методом функций памяти (МФП) [33]:

1) В пределе медленных флуктуаций МНСП дает гауссову линию в очень хорошем согласии с точным решением. То же самое справедливо для мгновенного распределения локального поля. Для получения аналогичных результатов в МФП необходимы значительно более сложные построения.

2) МНСП является простейшим обобщением нормального статистического распределения локальных магнитных полей, причем использует физически прозрачную гипотезу о характере их движения. В МФП нет подобно-го наглядного образа.

3) При анализе самой МНСП методом функций памяти в низшем порядке теории возмущений по взаимодействию спин — поле и при реалистических выражениях для корреляторов локальных полей типа (11) получаются неправильные асимптотики $g_0(\omega)$ как для высоких, так и для низких частот, а также для $\langle I_0^+(t \rightarrow \infty)I_0^- \rangle_0$.

Результаты работы [29] распространяют эти аргументы на произвольные значения частот и показывают, что гипотеза о нормальных флуктуациях локального поля вместе с общими принципами теории необратимых процессов дает хорошее и сравнительно элементарное описание фазовой релаксации примесных ядер, удобное для интерпретации экспериментальных данных, причем развитый подход оказывается практически нечувствительным к деталям, вводимым модельно зависящим образом.

4. ФУНКЦИИ ФОРМЫ КРОСС-РЕЛАКСАЦИИ ЯДЕР ${}^8\text{Li}$ И ${}^6\text{Li}$ В LiF

Обычно многоспиновые корреляционные функции связаны с наблюдаемыми величинами косвенно — посредством уравнений движения. Например, перенос поляризации по системе примесных ядер описывается уравнениями [14]:

$$\dot{p}_{\mathbf{r}0} = -\sum_{\mathbf{q}} (v_{\mathbf{q}\mathbf{r}}p_{\mathbf{r}0} - v_{\mathbf{r}\mathbf{q}}p_{\mathbf{q}0}), \quad p_{\mathbf{r}0}(t=0) = \delta_{\mathbf{r}0}, \quad (12)$$

где $p_{\mathbf{r}0}(t) = \text{Tr} (I_{\mathbf{r}}^z(t)I_0^z) / \text{Tr} (I_0^z)^2$ — поляризация примесного ядра, находящегося в узле \mathbf{r} , при условии, что первоначально было поляризовано ядро «0»; $v_{\mathbf{r}\mathbf{q}}$ — вероятность переноса поляризации между примесными ядрами, находящимися в узлах \mathbf{r} и \mathbf{q} решетки (суммирование в (12) проводится только по примесным ядрам). Существенно, что $v_{\mathbf{r}0}$ пропорциональны функциям формы кросс-релаксации (ФФ КР) (см. также (22)):

$$g_{r_0}^-(\Delta_{r_0}) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dt}{2\pi} \exp(i\Delta_{r_0}t) \cdot g_{r_0}^-(t),$$

$$g_{r_0}^-(t) = \langle I_{\mathbf{r}}^+(t) I_0^-(t) I_0^+ I_{\mathbf{r}}^- \rangle_0 / \langle I_{\mathbf{r}}^+ I_0^- I_0^+ I_{\mathbf{r}}^- \rangle_0. \quad (13)$$

Разупорядоченные спиновые системы более, чем упорядоченные, подходят для экспериментальных исследований того, как функции $g_{r_0}^-(\Delta_{r_0})$ зависят от расстояния r между ядрами, и расстройки $\Delta_{r_0} = \Omega_{\mathbf{r}} - \Omega_0$, где $\Omega_{\mathbf{r}}$ — ларморовская частота ядра, находящегося в узле \mathbf{r} . В самом деле, если бы примесные ядра были бы упорядочены в правильную подрешетку, то поляризация ансамбля β -ядер при $p_{00}(t) \geq 1/e$ убывала бы экспоненциально:

$$p_{00}(t) \approx \exp\left(-\sum_{\mathbf{r}} \nu_{r_0} t\right). \quad (14)$$

В этом случае кинетика деполяризации $p_{00}(t)$ определяется одним числом $\sum_{\mathbf{r}} \nu_{r_0}$, и изучить зависимость $g_{r_0}^-$ от \mathbf{r} оказывается трудно. Напротив, если примесные ядра распределены случайно и их концентрация $c \ll 1$ мала, поляризация β -ядер после их усреднения $\langle \dots \rangle_c$ по положению в кристалле имеет вид [14]:

$$\langle p_{00}(t) \rangle_c = \exp(-M_0(t) - M_1(t)),$$

$$M_0(t) = c \sum_{\mathbf{r}} \left[\frac{1 - \exp[-(\xi_{\mathbf{r}} + 1)\nu_{r_0} t]}{\xi_{\mathbf{r}} + 1} \right], \quad \xi_{\mathbf{r}} = \frac{I_0(I_0 + 1)}{I_{\mathbf{r}}(I_{\mathbf{r}} + 1)}. \quad (15)$$

Оказывается, что $M_1(t)/M_0(t) < 0,01 + 0,1$ при $M_0(t) \leq 1$ и $g_{r_0}^-(\Delta_{r_0}) \approx g_{r_0}^-(0)$ [12,14]. В действительности отношение $M_1(t)/M_0(t)$ зависит от магнитного поля [14]. Формула (15) гораздо сложнее (14) и приводит к более информативному сравнению с экспериментом.

Помимо функций $g_{r_0}^-(\omega)$, β -ЯМР предоставляет экспериментальную возможность исследовать и корреляционные функции

$$g_{r_0}^+(t) = \langle I_{\mathbf{r}}^+(t) I_0^+(t) I_0^- I_{\mathbf{r}}^- \rangle_0 / \langle I_{\mathbf{r}}^+ I_0^+ I_0^- I_{\mathbf{r}}^- \rangle_0, \quad (16)$$

поскольку они определяют интенсивность двухспинового «флип-флип» резонанса на частоте, равной сумме ларморовских частот ${}^8\text{Li}$ и ${}^6\text{Li}$ [12]. Как правило, двухспиновые корреляционные функции аппроксимируют выражением

$$g_{\mathbf{r}\mathbf{q}}^{\pm}(t) \approx g_{\mathbf{r}}(t) \cdot g_{\mathbf{q}}(t), \quad g_{\mathbf{r}}(t) = \langle I_{\mathbf{r}}^{+}(t) I_{\mathbf{r}}^{-} \rangle_0 / \langle I_{\mathbf{r}}^{+} I_{\mathbf{r}}^{-} \rangle_0 = g_{\mathbf{r}}(-t), \quad (17)$$

точным при $\mathbf{r} - \mathbf{q} \rightarrow \infty$.

В рамках модели АВК эволюция локальных полей моделируется нормальным случайным процессом, и, таким образом, для $g_{\mathbf{r}0}^{\pm}(t)$ мы получаем

$$\begin{aligned} g_{\mathbf{r}0}^{\pm}(t) &= \exp \left(-\int_0^t d\tau (t - \tau) [\Lambda_{00}(\tau) \pm 2\Lambda_{\mathbf{r}0}(\tau) + \Lambda_{\mathbf{r}\mathbf{r}}(\tau)] \right) \equiv \\ &\equiv \exp \left(-2 \int_0^t d\tau (t - \tau) [\Lambda_{00}(\tau) \pm \Lambda_{\mathbf{r}0}(\tau)] \right). \end{aligned} \quad (18)$$

Эффект корреляции локальных магнитных полей (то есть нарушение аппроксимации (17)) выражается в том, что корреляционная функция полей, создаваемых спинами матрицы на ядрах примеси, $\Lambda_{\mathbf{r}0}(t) = \langle \hat{\omega}_{\mathbf{r}}(t) \hat{\omega}_0(0) \rangle_0$ отлична от нуля при $\mathbf{r} \neq 0$.

По аналогии с (8) можно записать выражение для $\Lambda_{\mathbf{r}0}(t)$ в виде

$$\begin{aligned} \Lambda_{\mathbf{r}0}(t) &= \sum_{A=F, I} \Lambda_{\mathbf{r}0}^{(A)}(t), \\ \Lambda_{\mathbf{r}0}^{(A)}(t) &= \langle \hat{\omega}_{\mathbf{r}}^{(A)}(t) \hat{\omega}_0^{(A)}(0) \rangle_0 = \frac{A(A+1)}{3} \sum_{\mathbf{x} \in A} \sum_{\mathbf{y} \in A} b_{\mathbf{r}\mathbf{x}}^{IA} G_{\mathbf{x}\mathbf{y}}^A(t) b_{\mathbf{y}0}^{AI}. \end{aligned} \quad (19)$$

Используя для нахождения $\Lambda_{\mathbf{r}0}^{(A)}(t)$ преобразование Фурье на решетке, можно получить следующее выражение:

$$\begin{aligned} \Lambda_{\mathbf{r}0}^{(A)}(t) &= \frac{A(A+1)}{3} \int_B \frac{\Omega d^3 k}{(2\pi)^3} |b^{IA}(\mathbf{k})|^2 \exp [i\mathbf{k}\mathbf{r} - \mathcal{A}^A(\mathbf{k})t_{\text{eff}}^{(A)}], \\ \mathcal{A}^A(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{x} \in A} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{y}-\mathbf{x})} \mathcal{A}_{\mathbf{y}\mathbf{x}}^A, \quad b^{IA}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{x} \in A} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} b_{0\mathbf{x}}^{IA}. \end{aligned} \quad (20)$$

Здесь B — зона Бриллюэна, $\Omega = 2d^3$ — объем элементарной ячейки в кристалле LiF.

Наиболее сильная корреляция локальных полей (или отличие от нуля функции $\Lambda_{\mathbf{r}0}^{(A)}(t)$) проявляется при небольших расстояниях между кросс-релаксирующими спинами. В противоположном пределе, при $\mathbf{r} \rightarrow \infty$, ФФ КР сводится к свертке двух ФФ ЯМР:

$$g_{\mathbf{r}0}^{-}(\omega) \rightarrow g_{CR}(\omega) = \int d\omega_1 g_0(\omega - \omega_1) g_0(\omega_1). \quad (17a)$$

Первые из полученных нами экспериментальных данных по корреляции локальных полей приведены на рис.3 для $\mathcal{H}_0^A / [001]$. Видно, что они соответствуют линии заметно более узкой, чем функция $g_{CR}(\omega)$, вычислен-

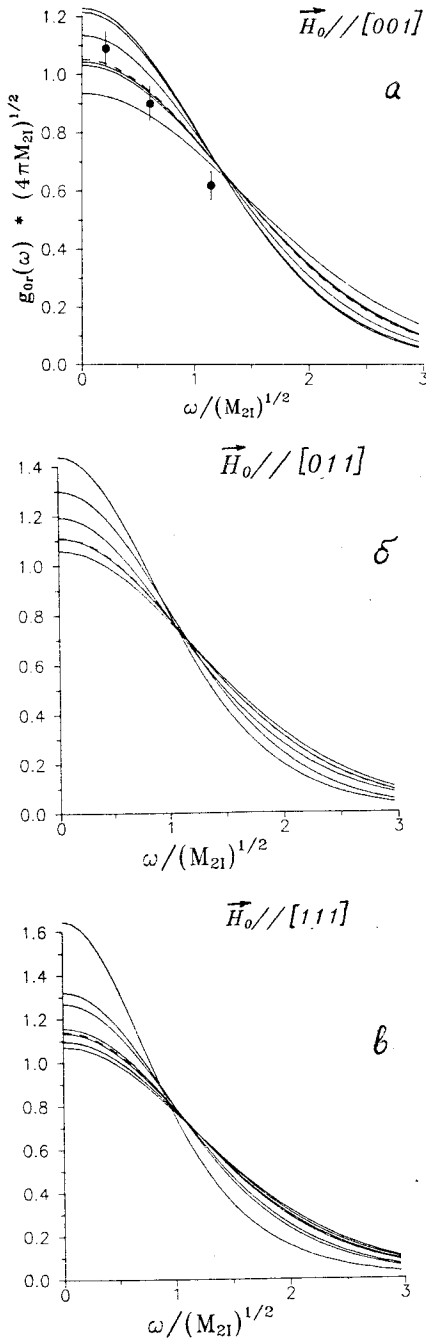


Рис. 3. Функции формы кросс-релаксации спинов ^8Li и ^6Li в LiF. Кривые соответствуют различным взаимным расположениям пары ядер ^8Li и ^6Li в кристалле. Вектор \vec{r} соединяет кросс-релаксирующие ядра. Пунктирные линии отвечают разведению ядер на бесконечное расстояние, при этом $g_{r \rightarrow \infty, 0}(\omega)$ является сверткой двух ФФ ЯМР. Точками показаны результаты подгонки экспериментальных данных по кинетике деполяризации ядер ^8Li в системе ^8Li - ^6Li в полях 218, 643 и 1200 Гс. Обработка проводилась на основе формулы (15), но без учета эффекта корреляции локальных полей, то есть все ν_{r0} считались пропорциональными единственному параметру $g_{CR}(\omega)$, который считался подгоночным. Величина ошибки $g_{CR}(\omega)$ на рисунке включает в себя как статистическую неопределенность, так и погрешность в измерении концентрации изотопа ^6Li

ная как свертка двух линий ЯМР согласно (17) и (17а). Аналогичный эффект сужения линии виден и при других ориентациях кристалла в магнитном поле (рис.3,4) и следует из согласия теории (рис.3,б) с экспериментальными данными (рис.5) в полях 153,3 и 643 Гс.

Существенно, что при всех трех кристаллографических ориентациях ФФ ЯМР $g_0(\omega)$ почти гауссова в достаточно широкой области вблизи вершины $g_0(\omega) > 10^{-2} \cdot g_0(\omega = 0)$. Это может рассматриваться как иллюстрация центральной предельной теоремы (ЦПТ) теории вероятностей: локальное поле на β -ядре складывается из большого числа (≥ 6) приблизительно одинаково распределенных

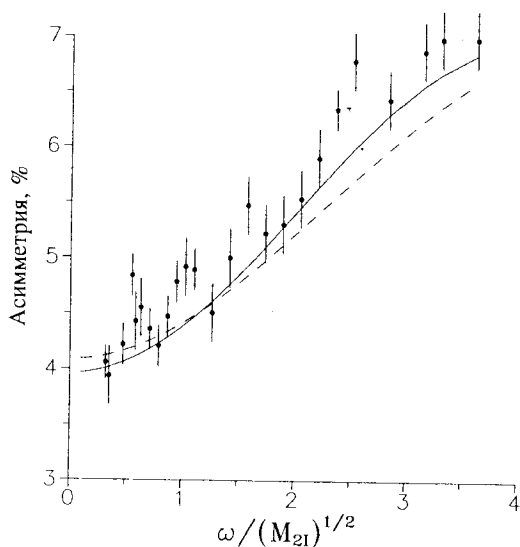


Рис. 4. Зависимость интегральной асимметрии β -излучения ядер ${}^8\text{Li}$ от расстройки (магнитного поля) в LiF. $\vec{H}_0 // [110]$, $\tau_{\text{irr}} = \tau_{\text{obs}} = 4,1$ с, $\epsilon_0 = 7,36(12)\%$. Сплошная линия проведена с учетом эффекта корреляции локальных полей, пунктир — без учета

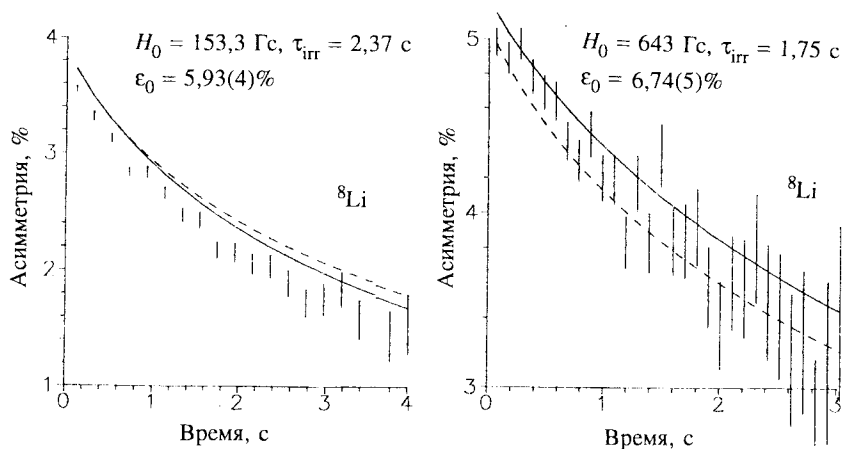


Рис. 5. Зависимости асимметрии β -излучения ядер ${}^8\text{Li}$ от времени в LiF в разных магнитных полях при $\vec{H}_0 // [111]$. Сплошные линии проведены с учетом эффекта корреляции локальных полей, пунктир — без учета

вкладов от ближайших спинов матрицы. На основе формул (17) можно было бы ожидать, что ФФ КР должна быть «еще более гауссовой». В действительности же мы показали, что комбинация формул (18) и (19) приводит к такому результату, который при попытке заменить все ФФ КР $g_{r_0}(\omega)$ некоторой одной, не зависящей от \mathbf{r} функцией формы ведет к существенному сужению и искажению ФФ КР в сравнении с оценкой (17) и, тем самым, выглядит как нарушение ЦПТ. В целом из результатов этого раздела следует, что наш вариант модели случайного процесса дает не только хорошее описание формы линии ЯМР, но и хорошо описывает более сложный эффект корреляции локальных полей на примесных спинах.

5. ДЕЛОКАЛИЗАЦИЯ ПОЛЯРИЗАЦИИ В ПРОСТРАНСТВЕННО-НЕУПОРЯДОЧЕННОЙ СИСТЕМЕ ЯДЕР ^8Li - ^6Li

В работах [10,20] экспериментально показано, что в кристаллах LiF в полях $\mathcal{H}_0 > 150$ Гс деполяризация (точнее, делокализация поляризации) ядер ^8Li происходит за счет кросс-релаксации (КР) с ядрами ^6Li . Кинетика этого процесса описывается уравнениями [14]:

$$\frac{\partial p_i}{\partial t} = -\sum_j (v_{ji} p_i - v_{ij} p_j), \quad p_i(t=0) = \delta_{i0}, \quad (21)$$

где p_i — поляризация i -го примесного ядра. Скорости переходов v_{ij} имеют вид

$$\begin{aligned} v_{ij} &= \frac{v_{ij}^0 r_0^6}{r_{ij}^6} (1 - 3 \cdot \cos^2 \vartheta_{ij})^2, \quad i \neq 0 \neq j, \quad v_{ii} = 0, \\ v_{j0} &= \frac{v_{ij}^1 r_0^6}{r_{j0}^6} (1 - 3 \cdot \cos^2 \vartheta_{j0})^2, \quad v_{0j} = \xi \cdot v_{j0}, \quad \xi = \frac{I_0(I_0 + 1)}{I_j(I_j + 1)} \Big|_{\varphi \neq 0} = 3, \\ v_{ij}^0 &= \frac{\pi}{6} (g_I^2 \beta_n^2 / \hbar r_0^3)^2 \cdot S(S+1) \cdot g_{ij}^-(0), \\ v_{ij}^1 &= \frac{\pi}{6} (g_I^2 \beta_n^2 / \hbar r_0^3)^2 \cdot S(S+1) \cdot g_{ij}^-(\Delta). \end{aligned} \quad (22)$$

Здесь Δ — разность ларморовских частот ядер ^8Li и ^6Li . Далее мы пренебрегаем корреляцией локальных полей, полагая $v_{ij}^0 = v_0$, $v_{ij}^1 = v_1$. В представлении чисел заполнения [14,34], в котором вводится величина $\tilde{P}_{xy}(t)$ — поляризация узла x кристалла в момент времени t при условии, что в момент $t = 0$ был поляризован только узел y , уравнения (21) переходят в

$$\frac{\partial \tilde{P}_{xy}}{\partial t} = - \sum_z (n_z v_{zx} \tilde{P}_{xy} - n_x v_{xz} \tilde{P}_{zy}), \quad \tilde{P}_{xy}(t=0) = \frac{n_y}{c} \delta_{xy}. \quad (23)$$

Здесь $v_{xz} = v_{ij}(\mathbf{r}_i = \mathbf{x}, \mathbf{r}_j = \mathbf{z})$, n_x — число заполнения узла \mathbf{x} , равное 1 или 0, если узел \mathbf{x} занят или нет спином ${}^6\text{Li}$; в узле \mathbf{y} помещен ${}^8\text{Li}$. Среднее по конфигурациям $\langle n_z \rangle = c$, где c — безразмерная концентрация изотопа ${}^6\text{Li}$. С теоретической точки зрения рассматриваемая задача состоит в вычислении поляризации $P_{00}(t)$ β -ядер ${}^8\text{Li}$, усредненной по случайному распределению спинов ${}^8\text{Li}$ и ${}^6\text{Li}$ в кристалле. Обзор проблем, связанных с расчетом таких величин, содержится в [13,14]. Естественный временной масштаб в рассматриваемой задаче задается ферстеровской константой β_0 , определяемой соотношением:

$$\langle \exp(-\sum_i v_{ij} t) \rangle_c = \exp(-\sqrt{\beta_0} t), \quad j \neq 0, \quad \beta_0 = \frac{512}{243} \pi^3 c^2 v_0, \quad (24)$$

которое справедливо для ГЦК-решетки в пределе малой концентрации, в котором $c \rightarrow 0$, но $\beta_0 t$ конечно. При $\beta_1 t \leq 1$ и $\beta_1 \sim \beta_0$ удовлетворительное решение задачи можно получить на основе концентрационного разложения [34,14], которое приводит к представлению:

$$P_{00}(t) = \exp(-\sqrt{\beta_1 t} / (\xi + 1) - \alpha \beta_1 t), \quad \beta_1 = \beta_0 v_1 / v_0. \quad (25)$$

Параметр α зависит от \mathcal{H}_0 и может быть рассчитан на основе формул и графиков, приведенных в [34,14]. При $\mathcal{H}_0 = 0$, $v_1 = v_0$ и $\xi = 3$ получается $\alpha = 0,013$. Формула (25) точна вплоть до членов $\sim c^2$ включительно.

В случае, когда спины ${}^6\text{Li}$ образуют правильную решетку, задача переноса по ним решается в квадратурах, и в итоге получается, что длинновременная асимптотика диффузионна: $P_{00}(t) \sim t^{-3/2}$. Случайные системы неизмеримо сложнее, и первые точные теоретические результаты об асимптотике [42] получены совсем недавно. Как ожидалось, она тоже диффузионна. Впервые аналитически это утверждение было получено в работе [35] (см. также [14]) в рамках сформулированной в ней полуфеноменологической теории. В основе этой теории лежит тот факт, что усредненный пропагатор $P_{xy}(\lambda)$ удовлетворяет уравнению

$$\lambda P_{xy} = \delta_{xy} - \sum_z (N_{zx} P_{xy} - N_{xz} P_{zy}), \quad N_{xz} = N_{xz}(\lambda), \quad P_{xy} = P_{xy}(\lambda), \quad (26)$$

очень похожему на лаплас-образ уравнения (23):

$$\lambda \tilde{P}_{xy} = \frac{n_y}{c} \delta_{xy} - \sum_z (n_z v_{zx} \tilde{P}_{xy} - n_x v_{xz} \tilde{P}_{zy}). \quad (27)$$

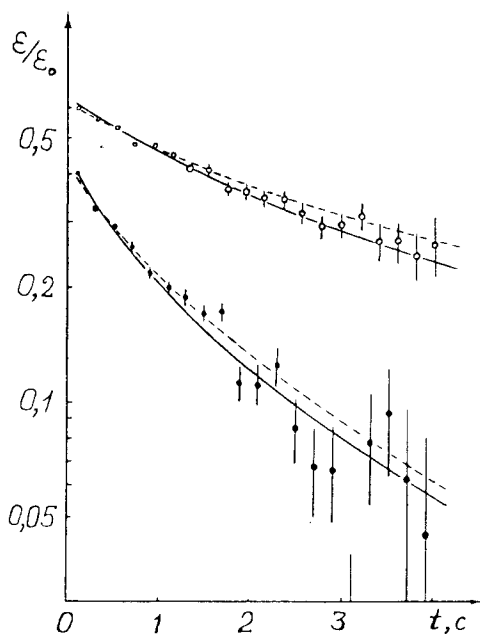
После введения гипотезы, о том, что ядра $N_{zx}(\lambda)$ должны описывать и более простые процессы, чем базовый (27), подбирается такой процесс, для которого конфигурационное усреднение проводится точно. Отсюда определяются ядра $N_{zx}(\lambda)$, и затем из уравнения (26) рассчитывается P_{xy} . В этом анализе необходим последовательный учет как того, что узел y можно считать достоверно занятым спином ${}^8\text{Li}$, тогда как в прочей среде один примесный спин приходится в среднем на $1/c$ узлов решетки, так и некоторых тонких аналитических свойств функций памяти, связанных с дальнедействием диполь-дипольного взаимодействия. В результате сшивки первых двух членов асимптотик — больших и умеренных времен — в [35,14] было получено

$$P_{00}(t) = Q_0(t) + \xi \frac{1 - Q_0(t)}{(\mu\beta_0(t + \tau))^{3/2}} \left(1 + \frac{\Phi}{(\mu\beta_0(t + \tau))^{1/2}} \right), \quad (28)$$

где $Q_0(t) = \exp(-\sqrt{\beta_1}t)$, $\Phi = 2,09$, $\mu = 0,889$, $\mu\beta_0\tau = 5,11$. За обсуждением более позднего развития теории мы отсылаем читателя к работам [14,42].

Время жизни ${}^8\text{Li}$ ограничено ($T_{1/2} = 0,84$ с), поэтому изучение временного развития процесса делокализации поляризации ${}^8\text{Li}$ в системе ${}^8\text{Li}$ - ${}^6\text{Li}$ в LiF, и, следовательно, возможность измерения асимптотического (диффузионного) режима существенно зависят от скорости КР, пропорциональной ФФ КР. Варьирование этой скорости в полях $\mathcal{H}_0 \approx 150$ Гс можно обеспечить выбором кристаллографической ориентации образца, изменением плотности спинов ${}^6\text{Li}$ или искусственным изменением ширины резонансных линий ${}^8\text{Li}$ и ${}^6\text{Li}$ путем воздействия на кристалл LiF сильными (то есть с амплитудами, превышающими амплитуды локальных полей в кристалле) РЧ-полями (сужение по методу Блоха). Вызываемое этими полями движение спинов сужает функцию формы ядерного магнитного резонанса (ФФ ЯМР) $g_0(\omega)$ и ФФ КР $g_{CR}(\omega)$, являющуюся сверткой ФФ ЯМР ${}^8\text{Li}$ и ${}^6\text{Li}$. Сужение эффективно (то есть все скорости v_{ij} увеличиваются), пока $g_{CR}(\Delta) \approx g_{CR}(0)$, где Δ — разность ларморовских частот ядер ${}^8\text{Li}$ и ${}^6\text{Li}$. При очень узких линиях $g_{CR}(\Delta) \ll g_{CR}(0)$, и спиновые динамики этих ядер независимы, поскольку при $\mathbf{r}_i \sim |\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_l| v_{i0} \ll v_{kl}$, $i \neq 0$, $k \neq 0 \neq 1$. В отсутствие сужения ФФ ЯМР и ФФ КР близки к гауссианам, так как время фазовой релаксации ядер ${}^8\text{Li}$ и ${}^6\text{Li}$ меньше времени «флип-флоп» процес-

Рис. 6. Зависимость асимметрии β -излучения ядер ${}^8\text{Li}$ от времени в LiF : (○) — естественная КР при $\vec{H}_0 // [111]$, $H_0 = 153,4$ Гс, $\tau_{\text{итт}} = 2,37$ с, $\epsilon_0 = 5,93(4)\%$; (●) — ускоренный КР процесс при $\vec{H}_0 // [111]$, $H_0 = 153,4$ Гс, $\tau_{\text{итт}} = 2,4$ с, $\epsilon_0 = 6,19(4)\%$. Сплошные линии — расчет по ф-ле (28), пунктир — по ф-ле (25)



сов ядер окружения. Отметим, что при наличии сужения в обсуждаемых ниже экспериментах различие этих времен еще более увеличивается, поэтому далее будем полагать ФФ ЯМР и ФФ КР гауссианами со вторыми моментами, связанными соотношением $M_{2CR} = M_{2I}({}^8\text{Li}) + M_{2I}({}^6\text{Li}) \approx 2M_{2I}({}^8\text{Li})$.

Для исследования сужения ФФ ЯМР на образец накладывалось слабое сканирующее РЧ-поле с амплитудой H_1 и частотой ω , варьируемой вблизи значений ларморовских частот ${}^8\text{Li}$ и ${}^6\text{Li}$.

Экспериментальные данные по измерению ФФ ЯМР ядер ${}^8\text{Li}$ и их кинетики деполаризации в кристаллах LiF при естественном и ускоренном процессах КР приведены на рис.6. При их подгонке зависимостями (25), (28) учитывалась связь величин β_1 и β_0 : $\beta_1 = \beta_0 \exp(-\Delta^2/2M_{2CR})$, где Δ — разность ларморовских частот ${}^8\text{Li}$ и ${}^6\text{Li}$ (в поле 153,4 Гс $\Delta = 2\pi$ (0,55 кГц)). Поэтому фактически фитирование производилось по одному параметру — β_0 . Зависимости $\epsilon(t)$ обрабатывались совместно с соответствующими интегральными по времени измерениями $\tilde{\epsilon}(\nu)$ как функции частоты РЧ-поля.

То, что экспериментальные значения β_0 и β_1 при ориентации $\vec{H}_0 // [111]$ в отсутствие ускорения оказались несколько больше теоретических, связано с корреляцией локальных полей (см. разд.4). При сужении линий расхождение расчетных и измеренных значений β_0 и β_1 несколько возрастает (см. табл. в [12] и ее обсуждение). Тем не менее можно признать согласие теории с экспериментом удовлетворительным во всей

области изученных времен, т.е. при $\beta_0 t \leq 15$. Существенно, что при $\beta_0 t \leq 5$ формула (25) и ее аналог из разд.4 дают столь точное совпадение с экспериментом, что могут, по-видимому, применяться для получения структурной информации о веществе.

6. ДЕЛОКАЛИЗАЦИЯ И ГИБЕЛЬ ПОЛЯРИЗАЦИИ ПОД ВЛИЯНИЕМ ДВУХСПИНОВОГО РЕЗОНАНСА

Деполаризация вследствие КР в условиях РЧ-облучения на частоте, равной сумме ларморовских частот ${}^8\text{Li}$ и ${}^6\text{Li}$, описывается уравнениями [12]:

$$\frac{\partial p_i}{\partial t} = -\sum_j (v_{ji} p_i - v_{ij} p_j) - \sum_j (\mu_{ji} p_i + \mu_{ij} p_j), \quad p_i(t=0) = \delta_{i0}, \quad (29)$$

где скорости элементарных резонансных двухспиновых переходов определяются соотношениями

$$\begin{aligned} \mu_{ij} &= \mu_{ij}^0 (r_0 / r_{ij})^6 (3 \sin 2\vartheta_{ij})^2, \\ \mu_{ij}^0 &= \frac{\pi}{6} \left(\frac{\mathcal{H}_1}{\mathcal{H}_0} \right)^2 \left(\frac{g_i g_j \beta_n^2}{\hbar r_0^3} \right)^2 I_i (I_i + 1) g_{ij}^+ (\omega - \omega_i - \omega_j). \end{aligned} \quad (30)$$

Здесь $g_{ij}^+(\Delta)$ — функция формы линии двухспинового резонанса, которая аппроксимировалась сверткой гауссовых ФФ ЯМР; g_i и ω_i — g -фактор и ларморовская частота i -го спина из системы ${}^8\text{Li}$ – ${}^6\text{Li}$, \mathcal{H}_1 — амплитуда вращающегося РЧ-поля. Анализ первых членов концентрационного разложения дает [12]:

$$\begin{aligned} P_{00}(t) &= \langle p_0(t) \rangle_c = \exp(-\sqrt{\beta_e} t / 2 - \alpha_e \beta_e t), \\ \beta_e &= \beta_1 \left(1 + \frac{27}{4} \sqrt{\gamma} \right)^2, \quad \alpha_e = 0,014 (1 + 21,5 \sqrt{\gamma}), \end{aligned} \quad (31)$$

$$\gamma = \mu_{i0}^0 / v_0 \propto (\mathcal{H}_1 / \mathcal{H}_0)^2 \ll 1.$$

Здесь учтено, что $\xi = 3$, $\beta_0 \approx \beta_1$ и значение α_e приведено для $\mathcal{H}_0 = 153,4$ Гс. Расчет произведен в главном порядке по γ . Формула (31) указывает на то, что относительное изменение $\delta\beta / \beta_1 = (\beta_e - \beta_1) / \beta_1 = \text{const} \cdot \sqrt{\gamma}$ эффективной скорости деполаризации в неупорядоченной системе значительно больше, чем отношение элементарных скоростей $\mu_{i0}^0 / v_0 \sim \gamma \ll 1$. Физическая сущность этого эффекта усиления процесса

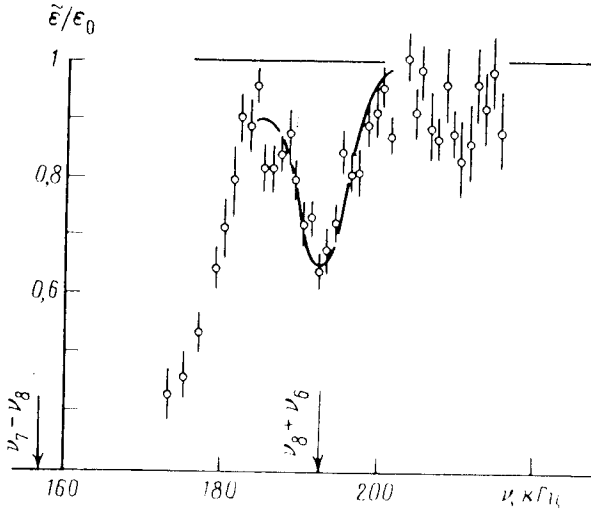


Рис. 7. β -ЯМР-спектр ядер ${}^8\text{Li}$ в LiF в области двухспинового резонанса $\omega = \omega_I + \omega_S$. $\vec{H}_0/[111]$, $H_0 = 153,4$ Гс. $\nu = \omega/2\pi$ — частота сканирующего РЧ-поля с амплитудой $H_1 = 10,4$ Гс. $\tau_{\text{irr}} = 2,4$ с, $\tau_{\text{obs}} = 4,1$ с, $\epsilon_0 = 6,19(4)\%$. Кривые, проведенные на основе формул (25) и (28), практически совпадают

деполяризации в том, что двухспиновый резонанс, нарушая закон сохранения $\sum_i p_i = 1$, присущий КР, дает возможность осуществления полной

деполяризации в близко расположенных парах ядер ${}^8\text{Li}$ — ${}^6\text{Li}$ (именно такие пары определяют поведение $P_{00}(t)$ при $\beta_e t \leq 1$).

Отметим, что указанная причина, а с ней и сам эффект усиления, связанные с тем, что более слабый процесс нарушает законы сохранения сильного процесса, должны быть достаточно общими в физике релаксационных процессов.

Измеренная форма линии двухспинового резонанса $\omega_I + \omega_S$ и зависимость асимметрии β -излучения ϵ от времени и от амплитуды H_1 (при $\omega = \omega_I + \omega_S$) приведены на рис.7—9. Сплошные кривые на рисунках соответствуют значению $\beta_1 = 1,32(2) \text{ с}^{-1}$. Теоретическое значение $\beta_1 = 1,06 \text{ с}^{-1}$. Возможная причина различия этих величин указывалась в разд.4. Данные по $\epsilon(t)$ удовлетворительно описываются формулами (31) вплоть до $\beta_1 t \approx 5$. Зна-

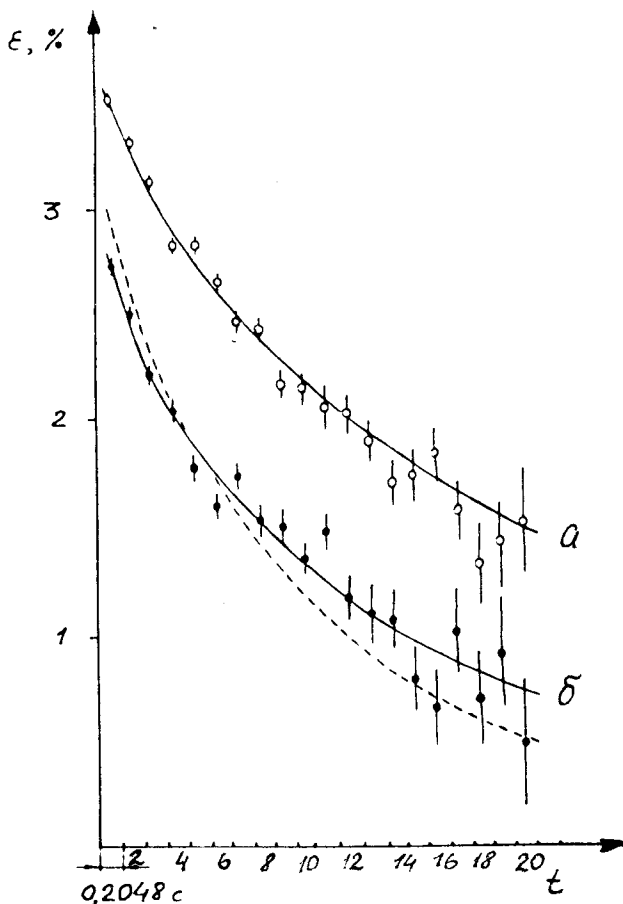


Рис. 8. Зависимость асимметрии β -излучения ядер ${}^8\text{Li}$ от времени в LiF . $\vec{H}_0 // [111]$, $H_0 = 153,4$ Гс, $\tau_{\text{ит}} = 2,4$ с, $\epsilon_0 = 5,93(4)\%$: (o) — естественная КР в системе ${}^8\text{Li}$ - ${}^6\text{Li}$ (без наложения РЧ-поля); (•) — при наложении РЧ-поля на частоте $(\omega_1 + \omega_S)/2\pi = 192,8$ кГц и с амплитудой $H_1 = 10,4$ Гс. Сплошные линии — расчет по формуле (31), пунктир — результат подгонки в предположении, что эффект усиления отсутствует, т.е. резонансная деполаризация является моноэкспоненциальной. Экспериментальная оценка второго момента резонанса $\omega_1 + \omega_S$ дает $(5,5 \pm 1,5)$ кГц², что несколько превосходит значение $2M_{2I} = 4,3$ кГц² вследствие корреляции локальных полей. Если процесс деполаризации был обусловлен квадрупольными взаимодействиями ${}^8\text{Li}$ с дефектами кристалла на частоте $2\omega_1 \approx \omega_1 + \omega_S$, то значение должно быть $\sim 8,6$ кГц².

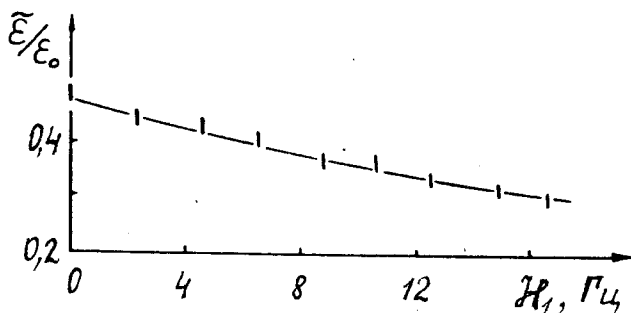


Рис. 9. Зависимость асимметрии β -излучения ядер ${}^8\text{Li}$ в LiF от амплитуды H_1 РЧ-поля на частоте 204 кГц двухспинового резонанса $\omega = \omega_I + \omega_S$ в поле $H_0 = 162,7$ Гс, $\vec{H}_0 \parallel [111]$, $\tau_{\text{irr}} = 2,45$ с, $\tau_{\text{obs}} = 3$ с, $\epsilon_0 = 5,69(4)\%$. Обработка данных проводилась по формулам (31)

чение численного коэффициента перед $\sqrt{\gamma}$ в выражении для β_e , полученное в результате подгонки, равно 6,0(3), тогда как его теоретическое значение 6,75. По-видимому, это превышение связано с пренебрежением в расчете «запрещенным» объемом ($\sim r_0^3$) для ${}^6\text{Li}$ вокруг β -ядра ${}^8\text{Li}$.

7. ДЕПОЛЯРИЗАЦИЯ ВСЛЕДСТВИЕ КРОСС-РЕЛАКСАЦИИ ПРИ НАЛИЧИИ ТРАНСЛЯЦИОННОЙ ДИФФУЗИИ ЯДЕР ЛИТИЯ

Влияние пространственного движения ионов лития на процесс делокализации поляризации в системе ${}^8\text{Li}-{}^6\text{Li}$ кристалла LiF становится существенным при температурах $T > 500$ К. С ростом T эффективность КР увеличивается, поскольку пространственная диффузия ядер лития начинает опережать спин-спиновую делокализацию поляризации. Основным механизмом релаксации становится передача поляризации спином ${}^6\text{Li}$, сблизившимся с ${}^8\text{Li}$, и последующий перенос поляризации вдали вследствие пространственного разбегания этих ядер [12].

Для количественного описания данного процесса концентрационное разложение, развитое для случая статического беспорядка, было обобщено для учета трансляционного, пространственно некоррелированного движения ядер. В главном порядке по концентрации c ядер ${}^6\text{Li}$

$$\langle p_0(t) \rangle = e^{-M(t)}, \quad M(t) = c \sum_{\mathbf{r}} [1 - p_0^{(1)}(\mathbf{r}, t)]. \quad (31)$$

Здесь $p_0^{(1)}(\mathbf{r}, t)$ — поляризация ядра ${}^8\text{Li}$, взаимодействующего только с одним спином ${}^6\text{Li}$, который в момент t отделен вектором \mathbf{r} от ${}^8\text{Li}$, и при учете предшествующих трансляционных движений обоих спинов [12]. В представлении Лапласа $p_0^{(1)}(\mathbf{r}, \lambda)$ рассчитывается на основе уравнений

$$\begin{aligned} \lambda p_0^{(1)}(\mathbf{r}, \lambda) &= 1 - v_{\mathbf{r}0} p_0^{(1)} + \xi v_{\mathbf{r}0} p_0^{(1)} - 2\hat{\kappa} p_0^{(1)}, \\ \lambda p_1^{(1)}(\mathbf{r}, t) &= -\xi v_{\mathbf{r}0} p_1^{(1)} + v_{\mathbf{r}0} p_0^{(1)} - 2\hat{\kappa} p_1^{(1)}, \\ \hat{\kappa} f(\mathbf{r}) &= \kappa f(\mathbf{r}) - \frac{\kappa}{Z} \sum_{\mathbf{r}_1} f(\mathbf{r} + \mathbf{r}_1). \end{aligned} \quad (32)$$

Здесь в определении оператора прыжкового переноса $\hat{\kappa}$ фигурирует сумма по $Z = 12$ ближайших соседей в литиевой подрешетке, а коэффициент 2 при $\hat{\kappa}$ учитывает то, что движутся оба спина ${}^8\text{Li}$ и ${}^6\text{Li}$.

В случае медленных движений, когда частота κ прыжков ионов лития мала в сравнении со скоростью v_1 кросс-релаксации, в пределе сплошной среды главная поправка по κ к статическому пределу ($M(t, \kappa = 0) = \sqrt{\beta_1 t}/2$) совпадает с квазиклассическим приближением для пропагатора вблизи его особой точки $\cos^2 \vartheta_{\mathbf{r}0} = 1/3$, в которой вероятность КР (см. (22)) обращается в ноль [12]. В итоге для $\xi = 3$ получается:

$$M(t) = \sqrt{\beta_1 t}/2 + 1,69c\kappa^{3/4}v_1^{1/4}t. \quad (32a)$$

По смыслу вывода это выражение справедливо, пока второй член мал в сравнении с первым, то есть при $\kappa^{3/4}v_1^{-1/4}t^{1/2} \ll 1$. В случае, когда $\kappa^{3/4}v_1^{-1/4}t^{1/2} \gg 1$ и $\kappa/v_1 \ll 1$ для вычисления $M(t)$ можно воспользоваться методом, развитым в теории рассеяния медленных частиц (теория длины рассеяния) [36]. Оказывается при этом, что $M(t)$ имеет тот же вид, что и (32a), но с несколько бóльшим численным коэффициентом (равным 1,76) во втором члене. При сопоставлении теории с экспериментом различием этих коэффициентов пренебрегалось.

Для случая быстрых движений ($\kappa \gg v_1$) можно построить разложение для $M(t)$ в цепную дробь по v_1/κ . При этом в главном порядке по v_1/κ получается $M(t) = Zc v_1 t$, где $Z = 12$. Более точные формулы для эффективного координационного числа Z приведены в [12].

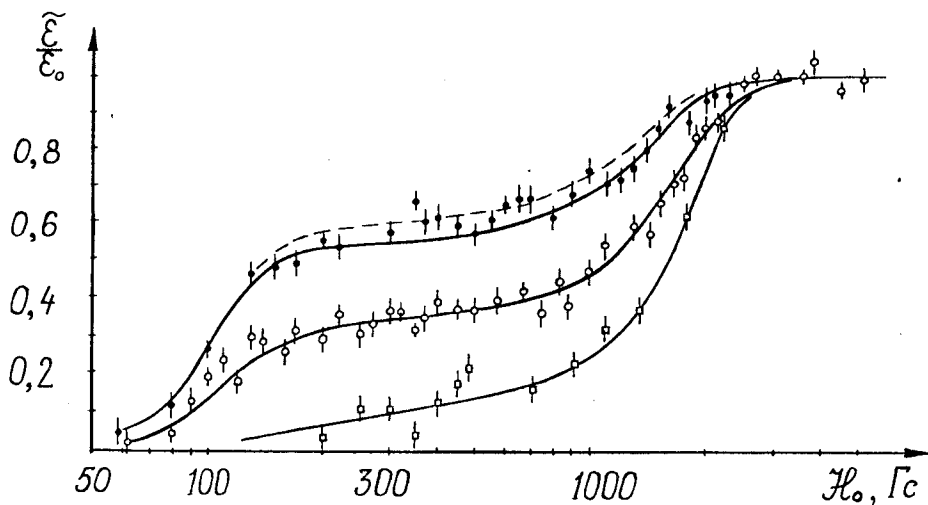


Рис. 10. Зависимость асимметрии β -излучения ядер ^8Li в LiF от магнитного поля $\vec{H}_0 // [110]$ при разных температурах образца, $\tau_{\text{irr}} = \tau_{\text{obs}} = 4,1$ с, $\epsilon_0 = 7,36(12)\%$: (●) — 296 К, $M_{2CR} = 6,4(4)$ кГц², (○) — 540 К, $M_{2CR} = 7,5(4)$ кГц², (□) — 577 К, $M_{2CR} = 7,1(4)$ кГц². Теоретическое значение M_{2CR} для ориентации $[110]$ составляет 10,2 кГц²

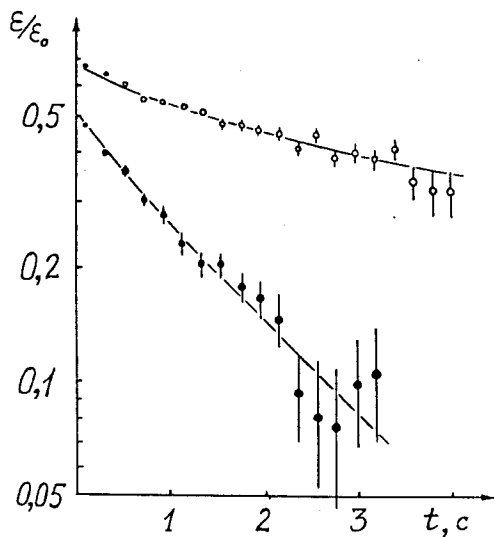


Рис. 11. Зависимость асимметрии β -излучения ядер ^8Li от времени в кристалле LiF , $H_0 = 200$ Гс, $\vec{H}_0 // [110]$, $\tau_{\text{irr}} = \tau_{\text{obs}} = 4,1$ с, $\epsilon_0 = 7,36(12)\%$, при разных температурах: (○) — 296 К, (●) — 540 К

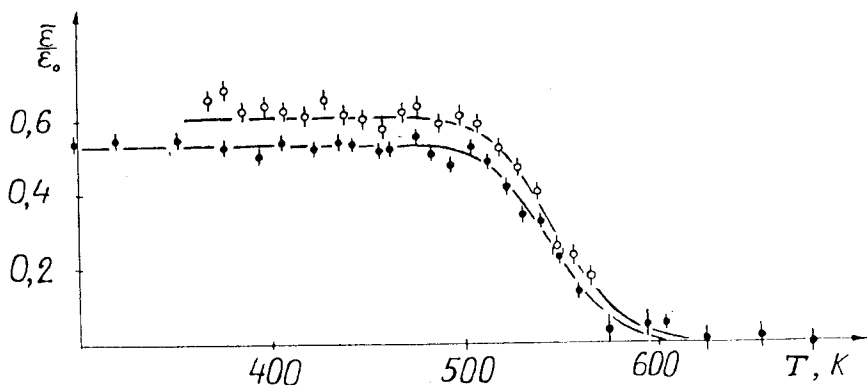


Рис. 12. Зависимость асимметрии β -излучения ядер ${}^8\text{Li}$ от температуры кристаллов LiF, $H_0 = 200$ Гс, $\tau_{\text{ит}} = 2,4$ с, $\epsilon_0 = 7,36(12)\%$: (○) — $\vec{H}_0 // [100]$ (●) — $\vec{H}_0 // [110]$

На рис.10—12 представлены экспериментальные и расчетные данные по влиянию температуры кристаллов LiF на деполаризацию примесных β -активных ядер ${}^8\text{Li}$. Оно становится существенным при температурах образцов $T > 500$ К. Зависимости $\epsilon(t)$ (рис.11) подтверждают предсказываемое изменение кинетики деполаризации ${}^8\text{Li}$ от $\ln P_{00} \sim -\sqrt{\beta_1 t}$, имеющей место в отсутствие движений при комнатных температурах, к $\ln P_{00} \sim -\beta_1 t/c$, реализующейся в случае достаточно быстрого движения ядер лития при $T > 600$ К. Обработка всех данных производилась совместно с использованием аррениусовской аппроксимации для частоты трансляционных перескоков лития:

$$\kappa = c_v \tau_v^{-1}, \quad c_v = \exp(S_f/k - h_f/kT),$$

$$\tau_v^{-1} = \nu_D \exp(S_m/k - h_m/kT), \quad (33)$$

где c_v — концентрация вакансий лития, τ_v^{-1} — частота их прыжков, ν_D дебаевская частота в LiF, S_f и S_m — энтропии, а h_f и h_m — энтальпии образования и миграции вакансии лития соответственно, k — постоянная Больцмана, T — температура.

Учитывалось также квадрупольное взаимодействие ${}^8\text{Li}$ с диффундирующими вакансиями лития, константа взаимодействия с последними на минимальном расстоянии сближения считалась равной

$\beta_Q = 3\omega_Q = 2\pi \cdot 11,7(4)$ кГц [20, 37]. В полях меньше 150 Гс принималась во внимание деполяризация, связанная с кросс-релаксацией ^8Li с ^7Li и ^{19}F .

Обработку $\tilde{\epsilon}(\mathcal{H}_0)$ при $g_{CR}(\Delta) \approx g_{CR}(0)$ и $\kappa = 0$ можно проводить в приближении сплошной среды (ПСС), когда сумма $M^{(1)}(t) = \frac{c}{\xi + 1} \sum_{\mathbf{r}} (1 - \exp(-(\xi + 1)v_{r0}t))$ заменяется на интеграл. При этом $M^{(1)}(t) = \sqrt{\beta_1 t / (\xi + 1)}$ в (31). ПСС справедливо, когда $c \rightarrow 0$, а $\beta_1 t$ конечно, или, что то же самое, $c \ll 1$ и $\exp(-(\xi + 1)v_1 t) \ll 1$. В больших полях последнее неравенство нарушается, и расчет с использованием точного выражения для $M^{(1)}(t)$ приводит к более сильной зависимости поляризации от \mathcal{H}_0 . Результат обработки $\tilde{\epsilon}(\mathcal{H}_0)$ при $T = 300$ К с учетом указанного уточнения и в предположении о гауссовости ФФ КР с варьируемым вторым моментом M_{2CR} представлен на рис.10 сплошной линией и дает несколько большее значение $M_{2CR} = 6,4(4)$ кГц², чем подгонка в рамках ПСС (5,9(4) кГц²). Теоретическая величина M_{2CR} для жесткой решетки в пренебрежении корреляцией локальных полей равна 10,2 кГц². Фитирование данных по параметрам β_0 и M_{2CR} (при наличии связи $\beta_1 = \beta_0 \exp(-\Delta^2/2M_2^0)$, Δ — разность ларморовских частот ^8Li и ^6Li) приводит, как видно, к лучшему согласию с экспериментом (штриховая линия на рис.10, $M_{2CR} = 5,9(4)$ кГц², $\beta_0 = 0,68(2)$ с⁻¹ при $\beta_0^{\text{теор}} = 0,71$ с⁻¹), но расхождение в M_{2CR} остается значительным. Отдельно была обработана кривая $\tilde{\epsilon}(\mathcal{H}_0)$ при комнатной температуре без использования ПСС и при учете эффекта корреляции локальных полей. В разд.4 показано, что при этом получается значительно лучшее согласие между теоретической и экспериментальной линиями по их форме, но в целом расчетные скорости релаксации оказываются несколько больше измеренных.

Из экспериментальных данных нельзя независимо определить κ_0 и h , однако определяется отношение $h/\ln \kappa_0 = 0,104(1)$, где h измерено в эВ, а κ_0 в с⁻¹. По физическому смыслу при температуре $T_0 = h/(\kappa \ln \kappa_0) \approx 540$ К время $(\kappa c^{2/3})^{-1}$ перемещения лития на расстояние, равное среднему расстоянию ($\sim r_0 c^{1/3}$) между ядрами ^6Li в LiF, сравнивается с обратной скоростью $(v_1 c^2)^{-1}$ КР двух спинов ^8Li и ^6Li , находящихся на среднем расстоянии. Это приводит к соотношению $\kappa c^{2/3} \sim v_0 c^2$ (или в рассматриваемом случае κ

$\kappa \sim 1 \text{ с}^{-1}$), определяющему область наибольшей чувствительности метода β -ЯМР по отношению к трансляционным движениям ядер. При использовании значения $\nu_D = 1,5 \cdot 10^{13} \text{ с}^{-1}$ [38] и суммы $S_f + S_m = 2,3k$ [39] получим $\kappa_0 = 1,8 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$ и $h = 1,58 \text{ эВ}$, что согласуется с данными, полученными другими методами.

8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотрим некоторые направления будущих исследований.

ФФ ЯМР весьма сложно зависит от разных параметров спиновой системы матрицы. Тем не менее можно считать, что в наших экспериментах теория проверена довольно полно для случая, когда магнитные моменты ядер примеси меньше, чем у ядер матрицы. Ясно, что в противоположном пределе необходимо учесть влияние примеси на эволюцию спинов матрицы, что заметно усложняет теорию. Поэтому было бы интересно найти границу применимости нашей теории в этом направлении.

Ситуация с изучением ФФ КР и корреляции локальных полей значительно сложнее прежде всего потому, что формула (25) имеет весьма ограниченную область применимости по отношению β_0/β_1 и, тем самым, по величине внешнего магнитного поля. В частности, она недостаточна для изучения крыльев линии. Поэтому в ближайшее время целесообразна более детальная проверка полевых и временных зависимостей теории при разных ориентациях кристаллов в умеренных магнитных полях. Было бы интересно выяснить, в какой мере на основе подобных зависимостей можно решать обратную задачу об изучении корреляций в пространственном расположении спинов ${}^6\text{Li}$.

Поле исследований по длинновременной асимптотике случайных блужданий в неупорядоченных средах выглядит чрезвычайно обширным. Прежде всего необходим экспериментальный прогресс в этой области. В теории могут быть перспективны дальнейшие исследования асимптотически точно решаемых моделей (см., напр. [40,41]) с целью сближения их с реалистическими системами, анализ полевых [15] и T -матричных [14] представлений для пропагаторов и, наконец, прямое численное моделирование подобных процессов. Именно этим методом в работе [42] впервые была доказана диффузионность длинновременной асимптотики СБНС при дипольном переносе и определен коэффициент диффузии для изотропного варианта процесса.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Абрагам А., Гольдман М. — Ядерный магнетизм. Порядок и беспорядок. М.: Мир, 1982, т.1,2.
2. Эрнст Р., Боденхаузен Дж., Вокаун А. — ЯМР в одном и двух измерениях. М.: Мир, 1990.
3. Rhim W.K., Pines A., Wough J.S. — Phys. Rev. Lett., 1970, vol.25, p.220; Phys. Rev., 1971, vol.B3, p.684.
4. Zhang S., Meier V.H., Ernst R.R. — Phys. Rev. Lett., 1992, vol.69, p.2149.
5. Гольдман М. — Спиновая температура. М.: Мир, 1969.
6. Ландау Л.Д., Лифшиц И.М. — Статистическая физика. М.: Наука, 1976, ч.1.
7. Боголюбов Н.Н. — ЖЭТФ, 1946, т.16, с.691.
8. Балееску Р. — Равновесная и неравновесная статистическая механика. М.: Мир, 1978, т.1,2.
9. Dorfman J.R. — Physica, 1980, vol.A106, p.77.
10. Булгаков М.И., Боровлев С.П., Гулько А.Д. и др. — Препринт ИТЭФ №150, М., 1976.
11. Fujara F., Stoeckmann H.-J., Ackermann H. et al. — Z. Phys. B, 1980, vol.37, p.151.
12. Абов Ю.Г., Булгаков М.И., Боровлев С.П. и др. — ЖЭТФ, 1991, т.99(3), с.962.
13. Boushand J.Ph., Georges A. — Phys. Rep., 1990, vol.185, p.127.
14. Джепаров Ф.С. — ЖЭТФ, 1991, т.99(3), с.982.
15. Джепаров Ф.С., Шестопал В.Е. — Изв. вузов, сер. Физика, 1987, т.30(6), с.77.
16. Шапиро Ф.Л. — УФН, 1958, т.65, №1, с.133.
17. Connor D. — Phys. Rev. Lett., 1959, vol.3, No.9, p.429.
18. Abov Yu.G., Yermakov O.N., Gul'ko A.D. et al. — Nucl. Phys., 1962, vol.34, p.505.
19. Ackermann H., Heitjans P., Stoeckmann H.-J. — Top. Curr. Phys., 1983, vol.31, p.291.
20. Абов Ю.Г., Гулько А.Д., Джепаров Ф.С., Тростин С.С. — β -ЯМР спектроскопия. В кн.: Некоторые проблемы современной ядерной физики. М.: Наука, 1989, с.193.
21. Абрагам А., Гольдман М. — Ядерный магнетизм: порядок и беспорядок. М.: Мир, 1984, т.1.
22. Карнаух Г.Е., Лундин А.А., Провоторов Б.Н., Сумманен К.Т. — ЖЭТФ, 1986, т.91(12), с.2229.
23. Зобов В.Е., Лундин А.А. — ЖЭТФ, 1994, т.104, с.1097.
24. Зобов В.Е. — Диссертация на соискание ученой степени доктора физ.-мат. наук, Красноярск, 1992.
25. Булгаков М.И., Гулько А.Д., Оратовский Ю.А., Тростин С.С. — ЖЭТФ, 1971, т.61, с.667.
26. Anderson P.W., Weiss P.R. — Rev. Mod. Phys., 1953, vol.25, p.269.
27. Kubo R. — J. Phys. Soc. Jap., 1954, vol.9, p.935.
28. Kubo R. — J. Phys. Soc. Jap., 1962, vol.17, p.1100.
29. Булгаков М.И., Гулько А.Д., Джепаров Ф.С. и др. — Письма в ЖЭТФ, 1993, т.58, с.614.

30. Абрагам А. — Ядерный магнетизм. М.: ИИЛ, 1961, гл.Х.
31. Gates J.V., Potter W.H. — Phys. Rev. B, 1977, vol.15, p.4143.
32. Мигдал А.Б. — Качественные методы квантовой теории. М.: Наука, 1975.
33. Dzheparov F.S. — VI-th Int. School on Neutron Physics. Lectures. Dubna, 1991, vol.2, p.58.
34. Джепаров Ф.С., Смелов В.С., Шестопап В.Е. — Письма в ЖЭТФ, 1980, т.32, с.51.
35. Джепаров Ф.С. — Радиоспектроскопия, 1980, т.13, с.135.
36. Александров И.В. — Теория магнитной релаксации. М.: Наука, 1975.
37. Булгаков М.И., Боровлев С.П., Гулько А.Д. и др. — Письма в ЖЭТФ, 1978, т.27, с.481.
38. Кучин В.А., Ульянов В.Л. — Упругие и неупругие свойства кристаллов. М.: Энергоатомиздат, 1986.
39. Lazaridou M., Varotsos C., Alexopoulos K., Varostos P. — J. Phys. C, 1985, vol.18, p.3891.
40. Джепаров Ф.С., Шестопап В.Е. — ТМФ, 1993, т.94, с.496.
41. Джепаров Ф.С., Шестопап В.Е. — Письма в ЖЭТФ, 1994, т.60, с.178.
42. Джепаров Ф.С., Львов Д.В., Нечаев К.К., Шестопап В.Е. — Письма в ЖЭТФ, 1995, т.62, №8, с.639.