

ТЕОРИЯ ШИРИНЫ ЯДЕРНЫХ ЗЕЕМАНОВСКИХ УРОВНЕЙ В ТВЕРДОМ ОРТОВОДОРОДЕ

К. Валясек, А. Л. Куземский

Вычисляется ширина зеемановских уровней ядерных спинов в твердом ортоводороде. Используется уравнение для неравновесных средних значений операторов, характеризующих неравновесное состояние спиновой системы, взаимодействующей с либронной системой как с термостатом. Это уравнение выводится с помощью метода неравновесного статистического оператора Д. Н. Зубарева. Корреляционные функции для либронной подсистемы, входящие в выражение для ширины, вычисляются в бозевском приближении.

1. ВВЕДЕНИЕ

Изолированная система невзаимодействующих ядерных спинов молекулярного кристалла ортоводорода во внешнем постоянном магнитном поле обладает дискретным зеемановским энергетическим спектром. Взаимодействие с другими степенями свободы кристалла приводит к тому, что зеемановские уровни становятся квазидискретными, приобретая конечную ширину Γ , связанную с продолжительностью жизни τ соотношением $\Gamma \sim 1/\tau$. Заметим, что представление о квазистационарных состояниях справедливо, когда ширины квазидискретных уровней малы по сравнению с расстоянием между ними. Уширение зеемановских уровней в твердом ортоводороде при низких температурах может быть обусловлено несколькими физическими причинами (взаимодействия с колебаниями решетки, с либронной подсистемой и т. п.). Оценки показывают, что при низких температурах взаимодействием с колебаниями решетки можно пренебречь и учитывать лишь взаимодействие с либронной системой.

При низких температурах система молекул ортоводорода, образующих жесткую ГЦК-решетку и связанных только электрическим квадруполь-квадрупольным взаимодействием, описывается гамильтонианом [1]

$$\mathcal{H}_L = \sum_{ij} \sum_{m,n} \gamma_{ij}^{mn} O_i^m O_j^n. \quad (1)$$

Здесь первая сумма берется по всем узлам ГЦК-решетки, γ_{ij}^{mn} — константы связи квадруполь-квадрупольного взаимодействия, определенные в [1]. Операторы O_i^m связаны с операторами компонент квадрупольного момента молекулы и равны

$$\begin{aligned} O_i^0 &= 3(J_i^z)^2 - 2, \\ O_i^{\pm 1} &= J_i^z J_i^{\pm} + J_i^{\pm} J_i^z, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} O_i^{\pm 2} &= (J_i^{\pm})^2, \\ J_i^{\pm} &= J_i^x \pm iJ_i^y, \end{aligned} \quad (2)$$

где J_i — оператор момента количества движения i -й молекулы ($J = 1$), где в качестве оси квантования z_i взята ось симметрии молекулы i . В основном состоянии молекулярная решетка твердого ортоводорода состоит из четырех простых кубических подрешеток, в каждой из которой молекулы трансляционно и ориентационно эквивалентны. Оси симметрии молекул направлены вдоль четырех различных осей симметрии кристалла третьего порядка, совпадающих с главными диагоналями куба ГЦК-решетки. В приближении молекулярного поля найдено [1, 2], что состояние с $J_i^z = 0$ лежит ниже состояний с $J_i^z = \pm 1$ и является основным. Расчеты показывают, [1, 3—5], что вблизи основного состояния, т. е. в ориентационно упорядоченной фазе, существуют коллективные возбуждения, называемые либронами, которые связаны с переходами ($J_i^z = 0$) \rightarrow ($J_i^z = \pm 1$). Вследствие анизотропного характера электрического квадруполь-квадрупольного взаимодействия щель в энергетическом спектре либронов равна примерно 10° К. Ширина либронной зоны порядка 5° К (заметим, что энергия перехода ($J_i = 1$) \rightarrow ($J_i = 3$) равна 860° К).

В настоящей работе вычисляется уширение зеемановских уровней ядерных спинов, происходящее из-за взаимодействия с либронной системой как с термостатом. Как и при изучении продольной ядерной спин-либронной релаксации [5—7] в твердом ортоводороде, будем считать, что взаимодействие между спиновой и либронной подсистемами складывается из внутримолекулярного диполь-дипольного взаимодействия между ядерными спинами протонов и $\mathbf{I}_i \cdot \mathbf{J}_i$ -взаимодействия, модулированного квадрупольным взаимодействием. Межмолекулярное диполь-дипольное взаимодействие не учитывается (см. также [7]).

Хотя, по-видимому, эту задачу можно решить на основе теории возмущений для функций Грина [8], мы вычислим ширины зеемановских ядерных уровней с помощью уравнения для неравновесных средних, поскольку хорошо известно, что уравнения для неравновесных средних эквивалентны уравнениям для соответствующих равновесных функций Грина. Это есть выражение принципа Онзагера, широко применяемого в теории неравновесных процессов. В работе Д. Н. Зубарева и авторов [9] с помощью метода неравновесного статистического оператора [10—12] было получено соответствующее уравнение для неравновесных средних значений операторов, характеризующих неравновесное состояние подсистемы, взаимодействующей с термостатом. С помощью этого уравнения можно очень просто вычислять сдвиг энергии и затухание, что будет видно и для настоящей задачи.

2. ГАМИЛЬТониАН СИСТЕМЫ

Мы рассматриваем ядерную спиновую систему во внешнем постоянном магнитном поле, взаимодействующую с либронной системой. Гамильтониан полной системы запишем в виде [6]

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_s + \mathcal{H}_L + V. \quad (3)$$

Здесь $\mathcal{H}_s = -a \sum_i I_i^z$ — зеемановский гамильтониан ядерных спинов, I_i^z — оператор z компоненты суммарного ядерного спина молекулы ($I = 1$) в узле i , ось квантования — внешнее магнитное поле H_0 , $a = \gamma H_0$, где γ — гиромагнитный коэффициент; \mathcal{H}_L — гамильтониан либронной системы (1). Оператор взаимодействия V имеет вид

$$V = V_{dd} + V_{I,J}, \quad (4)$$

где

$$V_{dd} = \sum_i \left\{ -d \cdot \mathbf{I}_i^2 \cdot \mathbf{J}_i^2 + \frac{3}{2} d (\mathbf{I}_i \cdot \mathbf{J}_i) + 3d (\mathbf{I}_i \cdot \mathbf{J}_i)^2 \right\} \quad (5)$$

— оператор внутримолекулярного взаимодействия протонов молекулы. Заметим, что в отличие от (1) осью квантования для \mathbf{J}_i в выражении (5) является внешнее магнитное поле H_0 .

$$V_{I,J} = -c \sum_i \mathbf{I}_i \cdot \mathbf{J}_i \quad (6)$$

— оператор $\mathbf{I} \cdot \mathbf{J}$ -взаимодействия, причем \mathbf{J}_i в (6) также квантуется по H_0 . Используются обозначения

$$c = 2\mu_i H'; \quad d = \frac{4}{5}\mu_i^2 \langle r^{-3} \rangle,$$

определение и численное значение которых см. в работе [6]. Оператор взаимодействия V (4) можно представить в следующей форме:

$$V = \frac{3}{4} d \sum_i \sum_{m,n=-2}^2 q_i^m O_i^{-m} - c \sum_i \mathbf{I}_i \cdot \mathbf{J}_i, \quad (7)$$

где по аналогии с (2) мы ввели операторы q_i^m , равные

$$\begin{aligned} q_{i0} &= 2[(I_i^z)^2 - 2/3], \\ q_{i\pm 1} &= I_i^\pm I_i^z + I_i^z I_i^\pm, \\ q_{i\pm 2} &= (I_i^\pm)^2, \\ I_i^\pm &= I_i^x \pm iI_i^y. \end{aligned} \quad (8)$$

Заметим еще раз, что операторы O_i^m в (7) имеют вид (2), но осью квантования для оператора \mathbf{J}_i является направление внешнего магнитного поля H_0 . При расчете ширины зеемановских уровней в настоящей работе мы ограничимся в (7) членами, которые не приводят к перемешиванию [13] состояний с различными $I_i^z = \lambda$, где $-1 \leq \lambda \leq 1$.

$$V = \frac{3}{4} d \sum_i q_i^0 O_i^0 - c \sum_i I_i^z \cdot J_i^z. \quad (9)$$

Поскольку $[I_i^z, V] = 0$, то это означает, что взаимодействие в виде (9) не приводит к продольной ядерной спин-либронной релаксации [5]. Это соответствует ограничению упругим рассеянием либронов на ядерных спинах и физически оправдано, поскольку щель в спектре либронов много больше расстояния между ядерными зеемановскими уровнями. Удобно

ВВЕСТИ С ПОМОЩЬЮ СООТНОШЕНИЯ

$$I_i^z = \sum_{\lambda} \lambda a_{i\lambda}^+ a_{i\lambda} = \sum_{\lambda} \lambda n_{i\lambda}, \quad (10)$$

$a_{i\lambda}^+$, $a_{i\lambda}$ — операторы порождения и уничтожения спина в узле i с z -компонентой равной λ . Можно показать, что эти операторы удовлетворяют следующим коммутационным соотношениям:

$$\begin{aligned} [a_{i\lambda}, a_{j\sigma}] &= [a_{i\lambda}^+, a_{j\sigma}^+] = 0, \\ [a_{i\lambda}, a_{j\sigma}] &= \delta_{ij} \delta_{\lambda\sigma} \left(1 - \sum_{\nu} a_{i\nu}^+ a_{i\nu} \right) - \delta_{ij} a_{i\sigma}^+ a_{i\lambda}, \end{aligned} \quad (11)$$

причем $a_{i\lambda} \cdot a_{i\sigma}^+ = 0$ для $\lambda \neq \sigma$; $a_{i\lambda}^+ \cdot a_{i\sigma}^+ = a_{i\lambda} \cdot a_{i\sigma} = 0$. С использованием (10) перепишем \mathcal{H}_s и V в виде (см. работу [9])

$$\mathcal{H}_s = \sum_{i\lambda} E_{\lambda}(i) a_{i\lambda}^+ a_{i\lambda}; \quad E_{\lambda}(i) = -a\lambda, \quad (12)$$

$$V = \sum_{i\lambda} \Phi_{\lambda}(i) a_{i\lambda}^+ a_{i\lambda}, \quad (13)$$

где

$$\Phi_{\pm 1} = \frac{1}{2} d \cdot O_i^0 \mp c J_i^z; \quad \Phi_0(i) = -d \cdot O_i^0. \quad (13a)$$

3. УРАВНЕНИЕ ДЛЯ НЕРАВНОВЕСНЫХ СРЕДНИХ

Чтобы получить уравнение для неравновесных средних [9], воспользуемся методом неравновесного статистического оператора Д. Н. Зубарева [10—12]. Исходим из гамильтониана (3), в котором \mathcal{H}_s , \mathcal{H}_L и V взяты соответственно в форме (12), (1) и (13). В качестве набора переменных, описывающих неравновесное состояние спиновой системы с гамильтонианом \mathcal{H}_s , возьмем неравновесные средние значения операторов $a_{i\lambda}$, $a_{i\lambda}^+$, $n_{i\lambda}$ [9]. Либронную систему, находящуюся в равновесии при температуре $\theta = 1/\beta$, будем рассматривать как термостат и описывать гамильтонианом \mathcal{H}_L (1).

Введем квазиравновесное распределение [10—12]

$$\rho_q(t, 0) = e^{-S(t, 0)}, \quad (14)$$

где

$$S(t, 0) = \Phi(t) + \sum_{i\lambda} \{ f_{i\lambda}(t) a_{i\lambda} + f_{i\lambda}^*(t) a_{i\lambda}^+ + F_{i\lambda}(t) n_{i\lambda} \} + \beta \mathcal{H}_L, \quad (15)$$

$$\Phi = \ln \text{Sp} \exp \left\{ - \sum_{i\lambda} \{ f_{i\lambda}(t) a_{i\lambda} + f_{i\lambda}^*(t) a_{i\lambda}^+ + F_{i\lambda}(t) n_{i\lambda} \} - \beta \mathcal{H}_L \right\}. \quad (15a)$$

Первый аргумент у $\rho_q(t, 0)$ указывает на неявную зависимость его от времени, второй — через представление Гейзенберга; $f_{i\lambda}(t)$, $f_{i\lambda}^*(t)$, $F_{i\lambda}(t)$ — параметры, сопряженные с $\langle a_{i\lambda}^+ \rangle_q$, $\langle a_{i\lambda} \rangle_q$, $\langle n_{i\lambda} \rangle_q$ в смысле неравновесной термодинамики [10—12], $\langle \dots \rangle_q = \text{Sp}(\rho_q \dots)$. $S(t, 0)$ можно назвать оператором энтропии, поскольку $\langle S(t, 0) \rangle_q$ есть энтропия.

Неравновесный статистический оператор $\rho(t, 0)$ строим следующим образом:

$$\rho(t, 0) = \exp \{ - \widetilde{S(t, 0)} \}, \quad (16)$$

где

$$\overline{S(t, 0)} = \varepsilon \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\varepsilon t_1} U_{t_1} S(t + t_1, 0) U_{t_1}^+ = -\varepsilon \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\varepsilon t_1} U_{t_1} \ln \rho_q(t + t_1, 0) U_{t_1}^+ \quad (16a)$$

— квазиинвариантная часть оператора энтропии, $\varepsilon \rightarrow +0$ после термодинамического предельного перехода при вычислении средних, $U_i = \exp(-t\mathcal{H}/i\hbar)$ — оператор эволюции. Параметры $f_{i\lambda}(t)$, $f_{i\lambda}^*(t)$, $F_{i\lambda}(t)$ определяются из условий

$$\langle a_{i\lambda} \rangle = \langle a_{i\lambda} \rangle_q; \langle a_{i\lambda}^+ \rangle = \langle a_{i\lambda}^+ \rangle_q; \langle n_{i\lambda} \rangle = \langle n_{i\lambda} \rangle_q, \quad (17)$$

где $\langle \dots \rangle = \text{Sp}(\rho(t, 0) \dots)$ — усреднение с неравновесным статистическим оператором (16). Выполнение условий (17) обеспечивает сохранение нормировки после взятия квазиинвариантной части. Энтропия системы равна

$$S(t) = \langle S(t, 0) \rangle = \Phi(t) + \sum_{i\lambda} \{ \langle a_{i\lambda} \rangle f_{i\lambda}(t) + \langle a_{i\lambda}^+ \rangle f_{i\lambda}^*(t) + \langle n_{i\lambda} \rangle F_{i\lambda}(t) \} + \langle \mathcal{H}_L \rangle \beta. \quad (15b)$$

Поэтому можно сказать, что средние величины в (15b) имеют смысл некоторых обобщенных термодинамических координат, а $f_{i\lambda}$, $f_{i\lambda}^*$, $F_{i\lambda}$ — термодинамических сил.

Усредняя с неравновесным статистическим оператором (16) уравнение движения для $a_{i\lambda}$

$$i \frac{da_{i\lambda}}{dt} = [a_{i\lambda}, \mathcal{H}] = E_{i\lambda}(i) a_{i\lambda} + \frac{1}{i} [a_{i\lambda}, V]$$

и ограничиваясь вторым порядком по малости взаимодействия, получим аналогично тому, как это было сделано в работах [9, 14], уравнение

$$i \frac{d\langle a_{i\lambda} \rangle}{dt} = E_{i\lambda}(i) \langle a_{i\lambda} \rangle + \frac{1}{i} \int_{-\infty}^0 \langle [[a_{i\lambda}, V] V(t_1)] \rangle_q e^{\varepsilon t_1} dt_1. \quad (18)$$

Здесь $V(t_1)$ обозначает представление взаимодействия оператора V . Заметим, что при получении уравнения (18) использовалось условие $\langle \varphi_{i\lambda}(i) \rangle_q = 0$. Этого всегда можно достичь следующим образом. Добавим и вычтем в гамильтониане $\mathcal{H} = \mathcal{H}_s + \mathcal{H}_L + V$ величину $\langle \varphi_{i\lambda}(i) \rangle_q$. Введем, кроме того, величины $O_i^{o'} = O_i^o - \langle O_i^o \rangle_q$ и $J_i^{z'} = J_i^z - \langle J_i^z \rangle_q$. Тогда вместо (12) и (13) будем иметь

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_s &= \sum_{i\lambda} E_{i\lambda}'(i) a_{i\lambda}^+ a_{i\lambda}; \quad E_{i\lambda}'(i) = -a \cdot \lambda + \langle \varphi_{i\lambda}(i) \rangle_q, \\ V &= \sum_{i\lambda} \varphi_{i\lambda}'(i) a_{i\lambda}^+ a_{i\lambda}; \quad \varphi_{i\lambda}'(i) = \varphi_{i\lambda}(i) - \langle \varphi_{i\lambda}(i) \rangle_q, \end{aligned} \quad (19)$$

и следовательно, $\langle \varphi_{i\lambda}'(i) \rangle_q = 0$. Поэтому можно считать, что мы имеем дело с перенормированными величинами, у которых для сокращения обозначений опущены штрихи. Перенормировка (19) позволяет, кроме того, найти расстояние между пиками резонансной линии ЯМР в твердом

ортоводороде. Нетрудно поверить, что расстояние между пиками $\delta\nu$ равно

$$\delta\nu = \left| \frac{3}{2} d (3 \cos^2 \theta - 1) \langle O^0 \rangle \right|,$$

где $O^0 = 3(J_z)^2 - 2$, θ — угол между осью квантования для J_z^2 и направлением внешнего магнитного поля. Усредняя $\delta\nu$ по всем направлениям, получим выражение

$$\overline{\delta\nu} = \frac{3}{2} d \langle 2 - (J_z)^2 \rangle,$$

которое совпадает со значением $\overline{\delta\nu}$, приведенным в работе [15] (см. также [17]).

4. ШИРИНА ЗЕЕМАНОВСКИХ УРОВНЕЙ

Будем следовать работе [9]. Раскроем двойной коммутатор в правой части уравнения (18). Тогда получим

$$\begin{aligned} i \frac{d \langle a_{i\lambda} \rangle}{dt} = & E_\lambda(i) \langle a_{i\lambda} \rangle + \frac{1}{i} \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\epsilon t_1} \langle \Phi_\lambda(i), \Phi_\lambda(i, t_1) \rangle_q \langle a_{i\lambda} \rangle + \\ & + \frac{1}{i} \sum_{j \neq i} \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\epsilon t_1} \langle [\Phi_\lambda(i), \Phi_\sigma(j, t_1)] \rangle_q \langle a_{j\sigma}^+ a_{j\sigma} a_{i\lambda} \rangle_q. \end{aligned} \quad (20)$$

Следуя работе [9] ограничимся в (20) линейным членом по $\langle a_{i\lambda} \rangle$ (обсуждение этого приближения см. в работе [9])

$$i \frac{d \langle a_{i\lambda} \rangle}{dt} = E_\lambda(i) \langle a_{i\lambda} \rangle + \frac{1}{i} \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\epsilon t_1} \langle \Phi_\lambda(i), \Phi_\lambda(i, t_1) \rangle_q \langle a_{i\lambda} \rangle. \quad (21)$$

Вводя спектральную интенсивность $\langle \Phi_\lambda(i) | \Phi_\lambda(i) \rangle_\omega$ (см. [8, 16])

$$\langle \Phi_\lambda(i) | \Phi_\lambda(i) \rangle_\omega = \int_{-\infty}^{\infty} \langle \Phi_\lambda(i), \Phi_\lambda(i, t) \rangle_q e^{i\omega t} dt,$$

преобразуем уравнение (21) к виду

$$i \frac{d \langle a_{i\lambda} \rangle}{dt} = E_\lambda(i) \langle a_{i\lambda} \rangle + K_\lambda(i) \langle a_{i\lambda} \rangle, \quad (22)$$

где

$$K_\lambda(i) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\langle \Phi_\lambda(i) | \Phi_\lambda(i) \rangle_\omega}{\omega + i\epsilon}. \quad (23)$$

Заметим, что $\langle \Phi_\lambda(i) | \Phi_\lambda(i) \rangle_\omega \geq 0$. Введем теперь сдвиг энергии $\Delta E_\lambda(i)$ и затухание $\Gamma_\lambda(i)$ зеемановского уровня λ с помощью соотношения

$$K_\lambda(i) = \Delta E_\lambda(i) - \frac{i\Gamma_\lambda(i)}{2}, \quad (24)$$

$$\Delta E_\lambda(i) = P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\omega} \langle \Psi_\lambda(i) | \Phi_\lambda(i) \rangle_\omega \ll E_\lambda(i),$$

$$\Gamma_\lambda(i) = 2\pi \langle \Phi_\lambda(i) | \Phi_\lambda(i) \rangle_{\omega=0}. \quad (25)$$

Удобно ввести вместо $\Gamma_\lambda(i)$ усредненную величину

$$\Gamma_\lambda = \frac{1}{N_0} \sum_i \Gamma_\lambda(i), \quad (26)$$

где $N_0 = 4N$ — полное число молекул в кристалле, N — число элементарных ячеек. Используя (13), (13а), получим для затухания (26)

$$\Gamma_0 = \frac{2\pi}{N_0} \cdot d^2 \sum_i \langle O_i^0 | O_i^0 \rangle_{\omega=0}, \quad (27)$$

$$\Gamma_{\pm 1} = \frac{2\pi}{N_0} \sum_i \left\{ \frac{d^2}{4} \langle O_i^0 | O_i^0 \rangle_{\omega=0} \mp cd \langle O_i^0 | J_i^z \rangle_{\omega=0} + c^2 \langle J_i^z | J_i^z \rangle_{\omega=0} \right\}. \quad (28)$$

Эти выражения записаны в системы координат, в которой внешнее магнитное поле H_0 является осью квантования как для ядерного спинового момента \mathbf{I}_i , так и для механического момента количества движения \mathbf{J}_i . В ориентационно упорядоченной фазе ось квантования z момента J_i^z совпадает с одной из четырех главных диагоналей куба ГЦК-решетки. Поэтому необходимо перейти от системы координат, связанной с внешним магнитным полем, к системе координат, связанной с подрешетками. Можно показать, что в подрешеточной системе координат выражения (27), (28) переписутся в виде

$$\Gamma_0 = \frac{2\pi}{N_0} d^2 \sum_{\alpha, \mathbf{R}_\alpha} \sum_{m, n=-2}^2 R_{nm}(\omega_\alpha) \langle O^m(\mathbf{R}_\alpha) | O^n(\mathbf{R}_\alpha) \rangle_{\omega=0}, \quad (29)$$

$$\begin{aligned} \Gamma_{\pm 1} = \frac{2\pi}{N_0} \sum_{\alpha, \mathbf{R}_\alpha} \left\{ \frac{d^2}{4} \sum_{m, n=-2}^2 R_{nm}(\omega_\alpha) \langle O^m(\mathbf{R}_\alpha) | O^n(\mathbf{R}_\alpha) \rangle_{\omega=0} \mp \right. \\ \left. \mp cd \sum_{n=-1}^1 \sum_{m=-2}^2 S_{nm}(\omega_\alpha) \langle O^m(\mathbf{R}_\alpha) | J^n(\mathbf{R}_\alpha) \rangle_{\omega=0} + \right. \\ \left. + c^2 \sum_{m, n=-1}^1 T_{nm}(\omega_\alpha) \langle J^m(\mathbf{R}_\alpha) | J^n(\mathbf{R}_\alpha) \rangle_{\omega=0} \right\}, \quad (30) \end{aligned}$$

где $\alpha = 1, 2, 3, 4$ — индекс подрешетки и $i \rightarrow (\alpha, \mathbf{R}_\alpha)$. Матрицы преобразования имеют вид

$$R_{nm}(\omega_\alpha) = k_n k_m D_{0n}^{2*}(\omega_\alpha) D_{0m}^{2*}(\omega_\alpha) — матрица (5 \times 5),$$

$$S_{nm}(\omega_\alpha) = -l_n k_m D_{0n}^{1*}(\omega_\alpha) D_{0m}^{2*}(\omega_\alpha) — матрица (3 \times 5),$$

$$T_{nm}(\omega_\alpha) = l_n l_m D_{0n}^{1*}(\omega_\alpha) D_{0m}^{1*}(\omega_\alpha) — матрица (3 \times 3),$$

$$D_{0m}^{1*}(\omega_\alpha) = \left(\frac{4\pi}{2l+1} \right)^{1/2} (-1)^m Y_{lm}(\theta_\alpha, 0).$$

Коэффициенты k_m и l_n равны: $k_0 = -1$; $k_{\pm 1} = \pm \sqrt{3/2}$; $k_{\pm 2} = -\sqrt{3/2}$; $l_0 = 1$; $l_{\pm 1} = \mp 1/2$; $\omega_\alpha = (\theta_\alpha, \varphi_\alpha)$ — аксиальный и азимутальный углы оси квантования в подрешетке α в системе координат, связанной с внешним магнитным полем.

5. КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ФУНКЦИИ ДЛЯ ЛИБРОННОЙ ПОДСИСТЕМЫ В БОЗЕВСКОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

Перейдем к вычислению входящих в выражения для затухания (29), (30) спектральных интенсивностей корреляционных функций либронной подсистемы.

Исходим из гамильтониана (1)

$$\mathcal{H}_L = \sum_{ij} \sum_{m,n=-2}^2 \gamma_{ij}^{mn} O_i^m O_j^n.$$

Введем следуя работе [1] операторы

$$\begin{aligned} a_i &= (1/\sqrt{2}) [1 - (J_i^z)^2] J_i^-, \\ b_i &= (1/\sqrt{2}) [1 - (J_i^z)^2] J_i^+ \end{aligned} \quad (31)$$

и комплексно сопряженные им операторы a_i^+ и b_i^+ . Эти операторы, действуя на состояние с $J_i^z = 0$, переводят его в состояние с $J_i^z = \pm 1$

$$\begin{aligned} a_i^+ |J_i^z = 0\rangle &= |J_i^z = +1\rangle, \\ b_i^+ |J_i^z = 0\rangle &= |J_i^z = -1\rangle. \end{aligned}$$

Можно показать, что эти операторы удовлетворяют следующим коммутационным соотношениям [1]:

$$\begin{aligned} [a_i, a_j^+] &= (1 - 2n_{ai} - n_{bi}) \delta_{ij}, \\ [b_i, b_j^+] &= (1 - n_{ai} - 2n_{bi}) \delta_{ij}, \\ [a_i, b_j^+] &= -b_i^+ a_i \delta_{ij}; \quad [b_i, a_j^+] = -a_i^+ b_i \delta_{ij}, \\ [a_i, b_j] &= [a_i^+, b_j] = 0. \end{aligned} \quad (32)$$

Операторы J_i^\pm, J_i^z можно выразить через операторы a_i, b_i

$$\begin{aligned} J_i^z &= a_i^+ a_i - b_i^+ b_i; \quad (J_i^z)^2 = a_i^+ a_i + b_i^+ b_i, \\ J_i^+ &= \sqrt{2}(a_i^+ + b_i); \quad J_i^- = \sqrt{2}(a_i + b_i^+), \end{aligned} \quad (33)$$

и таким образом, в силу (2) имеем

$$\begin{aligned} O_i^0 &= 3(a_i^+ a_i + b_i^+ b_i) - 2, \\ O_i^{+1} &= \sqrt{2}(a_i^+ - b_i); \quad O_i^{-1} = (O_i^{+1})^+, \\ O_i^{+2} &= 2a_i^+ b_i; \quad O_i^{-2} = (O_i^{+2})^+. \end{aligned} \quad (33a)$$

При вычислении спектральных интенсивностей в (29), (30) мы ограничимся приближением, когда операторы a_i, a_i^+, b_i, b_i^+ можно рассматривать как операторы, подчиняющиеся бозевским перестановочным соотношениям

$$\begin{aligned} [a_i, a_j^+] &= [b_i, b_j^+] = \delta_{ij}, \\ [a_i, b_j^+] &= [b_i, a_j^+] = [a_j, b_i] = [a_i^+, b_j^+] = 0. \end{aligned} \quad (34)$$

Это отвечает предположению $\langle n_a \rangle \ll 1$ и $\langle n_b \rangle \ll 1$, справедливому при низких температурах. Подставляя операторы (33a) в гамильтониан (1) и

ограничиваясь только билинейными членами, получим

$$\mathcal{H}_L^{(2)} = 2 \sum_{ij} \{ \gamma_{ij}^{00} [2 - 3(a_j^+ a_j + b_j^+ b_j)] + \gamma_{ij}^{+1,-1} (a_i^+ - b_i) (a_j - b_j^+) + \gamma_{ij}^{+1,+1} (a_i^+ - b_i) (a_j^+ - b_j) \} + \text{э. с.} \quad (35)$$

Перейдем к фурье-представлению для операторов a_i , b_i :

$$\begin{aligned} a(\mathbf{R}_\alpha) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_\alpha} a_\alpha(\mathbf{k}), \\ b(\mathbf{R}_\alpha) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_\alpha} b_\alpha(\mathbf{k}). \end{aligned} \quad (36)$$

Имеем далее

$$\begin{aligned} \gamma_{\alpha\beta}^{+1,-1}(\mathbf{R}_\alpha - \mathbf{R}_{\beta'}) &= \frac{19\Gamma}{4} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{R}_\alpha - \mathbf{R}_{\beta'})} f_{\alpha\beta}(\mathbf{k}), \\ \gamma_{\alpha\beta}^{+1,+1}(\mathbf{R}_\alpha - \mathbf{R}_{\beta'}) &= \frac{19\Gamma}{4} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{R}_\alpha - \mathbf{R}_{\beta'})} g_{\alpha\beta}(\mathbf{k}), \end{aligned} \quad (37)$$

где ограничились приближением ближайших соседей и ввели обозначение [1]

$$\sum_{\mathbf{R}_{\beta'}} \gamma_{\alpha\beta}^{00}(\mathbf{R}_\alpha - \mathbf{R}_{\beta'}) = -\frac{19\Gamma}{12}.$$

С использованием (36), (37) гамильтониан (35) представим в форме

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_L^{(2)} &= 19\Gamma \sum_{\alpha, \mathbf{k}} \{ a_\alpha^+(\mathbf{k}) a_\alpha(\mathbf{k}) + b_\alpha^+(\mathbf{k}) b_\alpha(\mathbf{k}) \} + \frac{19\Gamma}{2} \sum_{\alpha, \beta, \mathbf{k}} \{ g_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) [a_\alpha^+(-\mathbf{k}) - b_\alpha(\mathbf{k})] [a_\beta^+(\mathbf{k}) - b_\beta(-\mathbf{k})] + g_{\alpha\beta}^*(\mathbf{k}) [a_\alpha(\mathbf{k}) + b_\alpha^+(-\mathbf{k})] [a_\beta(-\mathbf{k}) - b_\beta^+(\mathbf{k})] + f_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) [a_\alpha^+(-\mathbf{k}) - b_\alpha(\mathbf{k})] [a_\beta(-\mathbf{k}) - b_\beta^+(\mathbf{k})] + f_{\alpha\beta}^*(\mathbf{k}) \times \\ &\quad \times [a_\alpha(\mathbf{k}) - b_\alpha^+(-\mathbf{k})] [a_\beta^+(\mathbf{k}) - b_\beta(-\mathbf{k})] \}. \end{aligned} \quad (38)$$

Гамильтониан (38) можно диагонализировать [8] и следовательно найти спектр коллективных возбуждений, называемых либронами. Это позволяет с помощью теоремы Вика вычислить необходимые корреляционные функции для либронной подсистемы. Действительно, каноническим преобразованием

$$\begin{aligned} a_\alpha(\mathbf{k}) &= \sum_{\mu} \{ u_{\alpha\mu}(\mathbf{k}) c_\mu(\mathbf{k}) + v_{\alpha\mu}(\mathbf{k}) c_\mu^+(-\mathbf{k}) \}, \\ b_\alpha(\mathbf{k}) &= \sum_{\mu} \{ u_{\alpha\mu}^*(\mathbf{k}) c_\mu(\mathbf{k}) + v_{\alpha\mu}^*(\mathbf{k}) c_\mu^+(-\mathbf{k}) \}, \end{aligned} \quad (39)$$

где $c_\mu(\mathbf{k})$, $c_\mu^+(\mathbf{k})$ — новые бозе-операторы, гамильтониан (38) приводится к диагональному виду

$$\mathcal{H}_L^{(2)} = \sum_{\mu, \mathbf{k}} \varepsilon_\mu(\mathbf{k}) c_\mu^+(\mathbf{k}) c_\mu(\mathbf{k}) + E_0, \quad (40)$$

где

$$\varepsilon_\mu(\mathbf{k}) = 19\Gamma [1 + 2\varphi_\mu(\mathbf{k})]^{1/2} = 19\Gamma \omega_\mu(\mathbf{k}) \quad (40a)$$

— спектр либронов, $\omega_\mu(\mathbf{k})$ — частоты либронов, $\mu = 1, 2, \dots, 8$.

$$E_0 = \frac{1}{2} \sum_{\mu, \mathbf{k}} \varepsilon_\mu(\mathbf{k}) - \frac{5N_0}{6} 19\Gamma.$$

Величины $u_{\alpha\mu}(\mathbf{k})$ и $v_{\alpha\mu}(\mathbf{k})$ имеют вид

$$u_{\alpha\mu}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} V_{\alpha\mu}(\mathbf{k}) \frac{\omega_\mu(\mathbf{k}) - 1}{\sqrt{\omega_\mu(\mathbf{k})}},$$

$$v_{\alpha\mu}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} V_{\alpha\mu}(\mathbf{k}) \frac{\omega_\mu(\mathbf{k}) + 1}{\sqrt{\omega_\mu(\mathbf{k})}}.$$

Здесь $V_{\alpha\mu}(\mathbf{k})$ — элементы унитарной матрицы, для которых имеют место уравнения

$$\sum_{\alpha} \{V_{\alpha\mu}^* V_{\alpha\lambda} + V_{\alpha\mu} V_{\alpha\lambda}^*\} = \delta_{\mu\lambda},$$

$$\sum_{\mu} V_{\alpha\mu} V_{\beta\mu}^* = \delta_{\alpha\beta}; \quad \sum_{\mu} V_{\alpha\mu} V_{\beta\mu} = \sum_{\mu} V_{\alpha\mu}^* V_{\beta\mu}^* = 0,$$

а также равенство

$$\sum_{\alpha\beta} \{V_{\alpha\mu}^*(\mathbf{k}) V_{\beta\lambda}(\mathbf{k}) f_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) - V_{\alpha\mu}^*(\mathbf{k}) V_{\beta\lambda}^*(\mathbf{k}) g_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) +$$

$$+ V_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) V_{\beta\lambda}^*(\mathbf{k}) f_{\alpha\beta}^*(\mathbf{k}) - V_{\alpha\mu}(\mathbf{k}) V_{\beta\lambda}(\mathbf{k}) g_{\alpha\beta}^*(\mathbf{k})\} = \varphi_\lambda(\mathbf{k}) \delta_{\mu\lambda}.$$

Операторы $a_\alpha(\mathbf{k})$ и $b_\alpha(\mathbf{k})$ выражаются через $c_\mu(\mathbf{k})$, $c_\mu^+(\mathbf{k})$ следующим образом:

$$a_\alpha(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \sum_{\mu} V_{\alpha\mu}(\mathbf{k}) \frac{1}{\sqrt{\omega_\mu(\mathbf{k})}} \{[\omega_\mu(\mathbf{k}) + 1] c_\mu(\mathbf{k}) + [\omega_\mu(\mathbf{k}) - 1] c_\mu^+(-\mathbf{k})\},$$

$$b_\alpha(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \sum_{\mu} V_{\alpha\mu}^*(\mathbf{k}) \frac{1}{\sqrt{\omega_\mu(\mathbf{k})}} \{[\omega_\mu(\mathbf{k}) + 1] c_\mu(\mathbf{k}) + [\omega_\mu(\mathbf{k}) - 1] c_\mu^+(-\mathbf{k})\}. \quad (41)$$

Покажем теперь, как вычисляются корреляционные функции. Рассмотрим для примера функцию $\langle O^0(\mathbf{R}_\alpha) | O^0(\mathbf{R}_\alpha) \rangle_{\omega=0}$

$$\sum_{\mathbf{R}_\alpha} \langle O^0(\mathbf{R}_\alpha) | O^0(\mathbf{R}_\alpha) \rangle_{\omega=0} = \sum_{\mathbf{k}} \langle O_\alpha^0(\mathbf{k}) | O_\alpha^0(-\mathbf{k}) \rangle_{\omega=0} =$$

$$= \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \{ \langle a_\alpha^+(\mathbf{k}) | a_\alpha^+(-\mathbf{k}) \rangle_{-\omega} \langle a_\alpha(-\mathbf{k}_1) | a_\alpha(\mathbf{k}_1) \rangle_{\omega} +$$

$$+ \langle a_\alpha(\mathbf{k}) | a_\alpha^+(\mathbf{k}) \rangle_{-\omega} \langle a_\alpha^+(\mathbf{k}_1) | a_\alpha(\mathbf{k}_1) \rangle_{\omega} +$$

$$+ \langle b_\alpha^+(\mathbf{k}) | b_\alpha^+(-\mathbf{k}) \rangle_{-\omega} \langle b_\alpha(-\mathbf{k}_1) | b_\alpha(\mathbf{k}_1) \rangle_{\omega} +$$

$$+ \langle b_\alpha(\mathbf{k}) | b_\alpha^+(\mathbf{k}) \rangle_{-\omega} \langle b_\alpha^+(\mathbf{k}_1) | b_\alpha(\mathbf{k}_1) \rangle_{\omega} +$$

$$+ \langle a_\alpha^+(\mathbf{k}) | b_\alpha^+(-\mathbf{k}) \rangle_{-\omega} \langle a_\alpha(-\mathbf{k}_1) | b_\alpha(\mathbf{k}_1) \rangle_{\omega} +$$

$$+ \langle a_\alpha(\mathbf{k}) | b_\alpha^+(\mathbf{k}) \rangle_{-\omega} \langle a_\alpha^+(\mathbf{k}_1) | b_\alpha(\mathbf{k}_1) \rangle_{\omega} +$$

$$+ \langle b_\alpha^+(\mathbf{k}) | a_\alpha^+(-\mathbf{k}) \rangle_{-\omega} \langle b_\alpha(-\mathbf{k}_1) | a_\alpha(\mathbf{k}_1) \rangle_{\omega} +$$

$$+ \langle b_\alpha(\mathbf{k}) | a_\alpha^+(\mathbf{k}) \rangle_{-\omega} \langle b_\alpha^+(\mathbf{k}_1) | a_\alpha(\mathbf{k}_1) \rangle_{\omega} \}. \quad (42)$$

Переходя к операторам $c_\mu(\mathbf{k})$, $c_\mu^+(\mathbf{k})$, можно вычислить входящие в (42) спектральные интенсивности. Приведем для примера следующие две спект-

ральные интенсивности:

$$\begin{aligned} \langle a_{\alpha}^{+}(\mathbf{k}) | a_{\alpha}^{+}(-\mathbf{k}) \rangle_{\omega} &= \int_{-\infty}^{\infty} \langle a_{\alpha}^{+}(-\mathbf{k}) a_{\alpha}^{+}(\mathbf{k}, t) \rangle e^{i\omega t} dt = \\ &= \frac{1}{4} \sum_{\mu} (V_{\alpha\mu}^{*}(\mathbf{k}))^2 \frac{\omega_{\mu}^2(\mathbf{k}) - 1}{\omega_{\mu}(\mathbf{k})} \left\{ \frac{\delta(\omega - \varepsilon_{\mu}(\mathbf{k}))}{e^{\beta\varepsilon_{\mu}(\mathbf{k})} - 1} + \frac{e^{\beta\varepsilon_{\mu}(\mathbf{k})} \delta(\omega + \varepsilon_{\mu}(\mathbf{k}))}{e^{\beta\varepsilon_{\mu}(\mathbf{k})} - 1} \right\}, \end{aligned} \quad (43)$$

$$\begin{aligned} \langle a_{\alpha}(\mathbf{k}) | b_{\alpha}^{+}(\mathbf{k}) \rangle_{\omega} &= \frac{1}{4} \sum_{\mu} V_{\alpha\mu}^2(\mathbf{k}) \left\{ \frac{(\omega_{\mu}(\mathbf{k}) + 1)^2}{\omega_{\mu}(\mathbf{k})} \frac{\delta(\omega - \varepsilon_{\mu}(\mathbf{k}))}{(e^{\beta\varepsilon_{\mu}(\mathbf{k})} - 1)} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{(\omega_{\mu}(\mathbf{k}) - 1)^2 e^{\beta\varepsilon_{\mu}(\mathbf{k})}}{\omega_{\mu}(\mathbf{k})} \frac{\delta(\omega + \varepsilon_{\mu}(\mathbf{k}))}{(e^{\beta\varepsilon_{\mu}(\mathbf{k})} - 1)} \right\}. \end{aligned} \quad (43a)$$

6. РЕЗУЛЬТАТЫ

Можно проверить, что выражение для затухания Γ_0 , Γ_{\pm} (29), (30), в которых спектральные интенсивности вычисляются по типу (42), (43) и (43a) имеют вид

$$\Gamma_0 = \frac{2\pi d^2}{N^2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1} \sum_{\mu, \mu'} F_{\mu\mu'}^{(+)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) G_{\mu\mu'}^{(1)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1), \quad (44)$$

где

$$\begin{aligned} F_{\mu\mu'}^{(+)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) &= \delta(\varepsilon_{\mu}(\mathbf{k}) - \varepsilon_{\mu'}(\mathbf{k}_1)) \frac{\omega_{\mu}(\mathbf{k}) \omega_{\mu'}(\mathbf{k}_1) + 1}{\omega_{\mu}(\mathbf{k}) \omega_{\mu'}(\mathbf{k}_1) (e^{\beta\varepsilon_{\mu}(\mathbf{k})} - 1) (e^{\beta\varepsilon_{\mu'}(\mathbf{k}_1)} - 1)} \times \\ &\times \{ (\omega_{\mu}(\mathbf{k}) + 1) (\omega_{\mu'}(\mathbf{k}_1) + 1) e^{\beta\varepsilon_{\mu}(\mathbf{k})} + (\omega_{\mu}(\mathbf{k}) - 1) (\omega_{\mu'}(\mathbf{k}_1) - 1) e^{\beta\varepsilon_{\mu'}(\mathbf{k}_1)} \} \end{aligned} \quad (45)$$

и

$$\begin{aligned} G_{\mu\mu'}^{(1)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) &= \frac{1}{4} \sum_{\alpha} \left\{ \frac{9}{4} R_{00}(\omega_{\alpha}) [|V_{\alpha\mu}(\mathbf{k})|^2 |V_{\alpha\mu'}(\mathbf{k}_1)|^2 + V_{\alpha\mu}^2(\mathbf{k}) V_{\alpha\mu'}^{*2}(\mathbf{k}_1)] + \right. \\ &\quad \left. + 6R_{2,0}(\omega_{\alpha}) [|V_{\alpha\mu}(\mathbf{k})|^2 (V_{\alpha\mu}^2(\mathbf{k}_1) + V_{\alpha\mu'}^{*2}(\mathbf{k}_1))] + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} R_{+2,+2}(\omega_{\alpha}) [V_{\alpha\mu}^2(\mathbf{k}) V_{\alpha\mu'}^2(\mathbf{k}_1) + V_{\alpha\mu}^{*2}(\mathbf{k}) V_{\alpha\mu'}^{*2}(\mathbf{k}_1)] + \right. \\ &\quad \left. + R_{-2,+2}(\omega_{\alpha}) [|V_{\alpha\mu}(\mathbf{k})|^2 |V_{\alpha\mu'}(\mathbf{k}_1)|^2] \right\} \end{aligned} \quad (46)$$

— фактор, учитывающий подрешеточную структуру кристалла ортоводо-рода

$$\Gamma_{\pm 1} = \frac{2\pi}{N^2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1} \sum_{\mu, \mu'} \left\{ \frac{d^2}{4} F_{\mu\mu'}^{(+)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) G_{\mu\mu'}^{(1)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) + \frac{c^2}{4} F_{\mu\mu'}^{(-)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) G_{\mu\mu'}^{(2)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) \right\}, \quad (47)$$

где

$$\begin{aligned} F_{\mu\mu'}^{(-)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) &= \delta(\varepsilon_{\mu}(\mathbf{k}) - \varepsilon_{\mu'}(\mathbf{k}_1)) \frac{\omega_{\mu}(\mathbf{k}) + \omega_{\mu'}(\mathbf{k}_1)}{\omega_{\mu}(\mathbf{k}) \omega_{\mu'}(\mathbf{k}_1) (e^{\beta\varepsilon_{\mu}(\mathbf{k})} - 1) (e^{\beta\varepsilon_{\mu'}(\mathbf{k}_1)} - 1)} \times \\ &\times \{ (\omega_{\mu}(\mathbf{k}) + 1) (\omega_{\mu'}(\mathbf{k}_1) + 1) e^{\beta\varepsilon_{\mu}(\mathbf{k})} - (\omega_{\mu}(\mathbf{k}) - 1) (\omega_{\mu'}(\mathbf{k}_1) - 1) e^{\beta\varepsilon_{\mu'}(\mathbf{k}_1)} \} \end{aligned} \quad (48)$$

и

$$G_{\mu\mu'}^{(2)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) = \frac{1}{4} \sum_a T_{00}(\omega_a) [V_{a\mu}^2(\mathbf{k}) V_{a\mu'}^{*2}(\mathbf{k}_1) - |V_{a\mu}(\mathbf{k})|^2 |V_{a\mu'}(\mathbf{k}_1)|^2]$$

— фактор, зависящий от структуры решетки. Для того чтобы явно выделить температурную зависимость, будем предполагать, что можно пренебречь зависимостью $G_{\mu\mu'}^{(1,2)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1)$ от \mathbf{k} и \mathbf{k}_1 . Введем плотность спектра (см. также работы [5, 7]), численные значения которой приведены в работе [4],

$$g(\omega) = \frac{1}{8} \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_{\omega_{\mu}(\mathbf{k})=\omega} \frac{dS}{|\nabla_{\mathbf{k}}\omega_{\mu}(\mathbf{k})|}, \quad (49)$$

где Ω — объем элементарной ячейки. Переходя от суммирования к интегрированию в (45), (47)

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_{\Omega^*} d^3k,$$

где Ω^* — объем первой зоны Бриллюэна, окончательно получим

$$\Gamma_0 = \frac{2\pi d^2}{19\Gamma} \cdot 64 \sum_{\mu\mu'} F_{\mu\mu'}^{(+)}(\beta) G_{\mu\mu'}^{(1)}, \quad (50)$$

$$\Gamma_{\pm 1} = \frac{2\pi d^2}{19\Gamma} \cdot 16 \cdot \sum_{\mu\mu'} F_{\mu\mu'}^{(+)}(\beta) G_{\mu\mu'}^{(1)} + \frac{2\pi c^2}{19\Gamma} \cdot 64 \sum_{\mu\mu'} F_{\mu\mu'}^{(-)}(\beta) G_{\mu\mu'}^{(2)}, \quad (51)$$

где

$$F_{\mu\mu'}^{(\pm)}(\beta) = 2 \int_{\omega_{\min}}^{\omega_{\max}} \frac{d\omega e^{\beta 19\Gamma\omega}}{(e^{\beta 19\Gamma\omega} - 1)^2} \left\{ \begin{matrix} (\omega^2 + 1)^2/\omega^2 \\ 1 \end{matrix} \right\} g_{\mu}(\omega) g_{\mu'}(\omega), \quad (52)$$

где $(\omega_{\max} - \omega_{\min})$ — ширина зоны либронных волн [4], $F_{\mu\mu'}^{(\pm)}(\beta)$ — функции, отражающие температурную зависимость ширины зеемановских ядерных уровней, $G_{\mu\mu'}^{(1,2)}$ — величины, учитывающие сложную подрешеточную структуру кристалла ортоводорода (ср. с [5]). В области низких температур (52) имеет вид

$$F_{\mu\mu'}^{(\pm)}(\beta) = 2 \int_{\omega_{\min}}^{\omega_{\max}} d\omega e^{-\beta 19\Gamma\omega} \left\{ \begin{matrix} (\omega^2 + 1)^2/\omega^2 \\ 1 \end{matrix} \right\} g_{\mu}(\omega) g_{\mu'}(\omega). \quad (52a)$$

Величины $F_{\mu\mu'}^{(\pm)}$ и $G_{\mu\mu'}^{(1,2)}$ необходимо вычислять численным образом.

7. ОБСУЖДЕНИЕ

Физическое содержание полученного результата состоит в том, что изоляция системы ядерных спинов приводит к разбросу ларморовских частот, вследствие чего линия магнитного резонансного поглощения приобретает некоторую ширину, примерно равную $\overline{\delta\nu}$. Температурная и структурная зависимости следует из (44) и (47). Необходимо отметить, что при строгом вычислении ширины и формы линии ядерного магнитного поглощения, помимо рассмотренных взаимодействий, необходимо принять во внимание межмолекулярное диполь-дипольное взаимодействие и взаимодействие с фононами. В рассматриваемом интервале температур (много

ниже температуры фазового перехода, равной примерно $1,5^\circ \text{K}$) взаимодействие с либронами преобладает над межмолекулярным диполь-дипольным взаимодействием. Хорошо известно, что твердый водород относится к группе веществ с так называемой тонкой структурой резонансной линии [17, 18, глава VII]. В самом деле, расстояние между протонами в молекуле H_2 равно $0,75 \cdot 10^{-8} \text{ см}$, а расстояние между молекулами в твердом водороде равно $3,75 \cdot 10^{-8} \text{ см}$. Поскольку диполь-дипольное взаимодействие убывает с расстоянием как R^{-3} , то в первом приближении молекулу водорода можно рассматривать как изолированную и вычислять ее энергетические уровни во внешнем постоянном магнитном поле. Порядок величины взаимодействия между ядерной системой и либронами определяется величинами d и c , характеризующими внутримолекулярное диполь-дипольное и спин-орбитальное взаимодействия, ответственные за тонкую структуру резонансной линии. Эти взаимодействия для жесткой решетки много больше межмолекулярного диполь-дипольного взаимодействия. Эксперимент [18, см. также 15] показывает, что при достаточно высоких температурах, когда молекулы вращаются почти свободно, наблюдается единственная линия поглощения, что, по-видимому, связано с усреднением внутримолекулярного взаимодействия. С понижением температуры ротационное движение ортомолекул упорядочивается, интенсивность этой линии снижается и начинает проявляться тонкая структура [15, 17—22]. Заметим, что межмолекулярное диполь-дипольное взаимодействие можно учесть таким же образом, как и взаимодействие (7).

Итак, с помощью метода неравновесного статистического оператора удастся довольно просто вычислить сдвиг энергии и ширину зеемановских уровней ядерных спинов в твердом ортоводороде. По-видимому, подобные расчеты можно провести и для ряда других конкретных задач.

В заключение нам хотелось бы поблагодарить Д. Н. Зубарева и Н. М. Плакиду за полезные обсуждения.

Объединенный институт
ядерных исследований

Поступила в редакцию
1 июня 1970 г.

Литература

- [1] I. C. Raich, R. D. Etters. Phys. Rev., **168**, 425, 1968.
- [2] H. Miyagi, T. Nakamura. Progr. Theor. Phys., **37**, 641, 1967.
- [3] S. Nomma, K. Okada, H. Matsuda. Progr. Theor. Phys., **38**, 767, 1967.
- [4] T. Matsubara, H. Ueyama. Progr. Theor. Phys., **38**, 784, 1967.
- [5] К. Валясек, А. Л. Куземский. ТМФ, **4**, 383, 1970.
- [6] T. Moriya, K. Motizuki. Progr. Theor. Phys., **18**, 183, 1957.
- [7] S. Nomma. Progr. Theor. Phys., **40**, 1, 1968.
- [8] С. В. Тябликов. Методы квантовой теории магнетизма, «Наука», 1965.
- [9] Д. Н. Зубарев, А. Л. Куземский, К. Валясек. ТМФ, **5**, 280, 1970.
- [10] Д. Н. Зубарев. ДАН СССР, **140**, 92, 1961, ДАН СССР, **162**, 532, 1965; ДАН СССР, **162**, 1794, 1965; ДАН СССР, **164**, 537, 1965; Препринт 69-6, ИТФ, Киев, 1969.
- [11] Д. Н. Зубарев, В. П. Калашников. ТМФ, **1**, 137, 1969, Препринт Р4-4957, ОИЯИ, 1970.
- [12] Д. Н. Зубарев. Препринт Р4-4886, ОИЯИ, 1970; Р4-4920, ОИЯИ, 1970.
- [13] Ч. Сликтер. Основы теории магнитного резонанса, «Мир», 1966.
- [14] К. Валясек, А. Л. Куземский. ТМФ, **4**, 264, 1970.
- [15] L. I. Amstutz, H. Meyer, S. M. Myers, D. C. Rorer. Phys. Rev., **181**, 589, 1969.

- [16] Д. Н. Зубарев. УФН, 71, 71, 1960.
[17] F. Reif, E. M. Purcell. Phys. Rev., 91, 631, 1953.
[18] А. Абрагам. Ядерный магнетизм, ИЛ, 1963.
[19] J. Hatton, B. V. Rollin. Proc. Roy. Soc., A199, 222, 1949.
[20] T. Nakamura. Progr. Theor. Phys., 14, 135, 1955.
[21] G. W. Smith, R. M. Housley. Phys. Rev., 117, 732, 1960.
[22] J. R. Gaines, E. M. de Castro, D. White. Phys. Rev. Lett., 13, 425, 1964.
-

**THEORY OF ZEEMAN LEVEL WIDTHS OF NUCLEAR SPINS
IN SOLID ORTHO-HYDROGEN**

K. Walasek, A. L. Kuzemsky

The Zeeman level widths of nuclear spins in solid ortho-hydrogen are calculated. The treatment is based on the equation for the non-equilibrium averages of operators characterizing the non-equilibrium states of the spin system, weakly coupled to a libron system, which is considered as a thermal bath. This equation was obtained with the aid of the method of non-equilibrium statistical operator developed by D. N. Zubarev. Spectral functions for the libron system are calculated in the Bose approximation.
