

ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНАЯ ГРАНИЦА ДЛЯ СКОРОСТИ НАГРЕВАНИЯ ПЕРИОДИЧЕСКИ УПРАВЛЯЕМЫХ СПИНОВЫХ СИСТЕМ

В. Е. Зобов^{a}, М. М. Кучеров^b*

^a *Институт физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук
660036, Красноярск, Россия*

^b *Институт космических и информационных технологий Сибирского федерального университета
660074, Красноярск, Россия*

Поступила в редакцию 6 ноября 2018 г.,
после переработки 22 ноября 2018 г.
Принята к публикации 22 ноября 2018 г.

Для системы ядерных спинов твердого тела при наличии неоднородного магнитного поля найдена строгая граница для скорости нагревания системы под воздействием высокочастотного магнитного поля, которое применяют, например, для создания эффективных гамильтонианов. Рассмотрена автокорреляционная функция (АКФ) спина, вращающегося в локальном поле, флуктуации которого заданы гауссовским случайным процессом. Корреляционная функция случайного поля взята в виде суммы статического неоднородного вклада и зависящего от времени вклада, выраженного самосогласованным образом через АКФ спина. Исследованы особые точки АКФ на оси мнимого времени, координаты которых определяют показатели экспоненциальных асимптотик в высокочастотной области. Получены зависимости координат от неоднородности поля при различных приближениях. Показано, что крыло спектра АКФ в кумулянтном приближении служит строгой верхней границей для крыла спектра АКФ и, следовательно, для скорости нагревания системы при воздействии на нее переменных магнитных полей. Установлено, что случайно распределенные неоднородные магнитные поля увеличивают крылья спектров АКФ и, тем самым, ускоряют нагревание системы.

DOI: 10.1134/S0044451019040187

1. ВВЕДЕНИЕ

Перспективным способом изучения сложных квантовых систем является их моделирование на других квантовых системах [1–3]. Бурное развитие такого направления в настоящее время связано с развитием экспериментальных методов когерентного управления квантовыми системами [2–7], такими, как ионы и атомы в ловушках, электронные парамагнитные центры в твердых телах и сверхпроводящие системы. Для получения эффективного гамильтониана, необходимого для моделирования, к системе прикладывают мощные периодические воздействия, например, лазерные импульсы, импульсы радиочастотных или сверхвысокочастотных полей. Для описания эволюции

систем применяют теорию Флоке или Магнуса [8–11]. Нужная эволюция системы под действием среднего гамильтониана сопровождается ее паразитным нагреванием высшими гармониками. От скорости нагревания зависит длительность этапа моделирования и, тем самым, эффективность метода. В работах [12–17] найдены качественные оценки для границы скорости нагревания, показавшие ее экспоненциальное замедление при увеличении частоты осцилляций.

Практическое применение преобразования гамильтонианов импульсами радиочастотных полей было реализовано еще в 70-х гг. для получения спектров ЯМР высокого разрешения в твердых телах [18, 19] и получило название «спиновая алхимия». Термодинамическая теория образования квазиравновесного состояния системы при малых временах и последующего нагревания была разработана в работах [20, 21] и объяснила результаты эксперимен-

* E-mail: rsa@iph.krasn.ru

тов. Для скорости нагревания были выведены формулы, выражавшие ее через спиновые временные корреляционные функции, хотя расчет самих этих функций выполнен не был. Преимущество систем ядерных спинов по сравнению с другими квантовыми системами состоит в известных взаимодействиях, достаточной изолированности от других подсистем, возможности управления и наблюдения методами ЯМР. Поэтому в таких системах удастся перейти от качественных оценок границ для скорости нагревания к количественным оценкам. В настоящей работе мы найдем строгую оценку, выраженную, как это принято, через второй момент спектра ЯМР.

В основу данной работы положено хорошо зарекомендовавшее себя в таких системах представление флуктуирующего во времени локального поля на спинах гауссовским случайным процессом. Такое приближение было предложено в работах Андерсона [22], Кубо [23] и обусловлено большим числом независимых вкладов со стороны спинов, окружающих каждый спин. Этот подход был эффективно применен к решению задач спиновой динамики, например, в работах [22–26]. В указанных работах корреляционная функция гауссовского поля выбиралась из физических соображений. Мы, следуя работам [27, 28], будем задавать эту функцию самосогласованным образом через автокорреляционные функции (АКФ) спинов [29–31]. Ранее мы применили такой подход к объяснению экспоненциальных крыльев спектров различных корреляционных функций гомоядерных систем [32–34], гетероядерных систем [35], магниторазбавленных систем [36, 37] и спиновых пакетов [38]. Сейчас с помощью этого метода мы найдем строгие границы для скорости поглощения энергии высокочастотного поля при наличии неоднородного магнитного поля. Такое поле существенно изменяет динамику спиновых систем, например, по мнению многих авторов (см. обзор [39]), может вызывать переход системы из термализованного состояния в многочастичное локализованное состояние, характеризуемое замедлением распространения энергии внутри системы. С другой стороны, из качественных оценок, выполненных в работах [16, 38], следует, что неоднородное магнитное поле ведет к росту высокочастотных асимптотик АКФ. Проблема влияния неоднородного магнитного поля на динамику спиновых систем нуждается в дальнейшем изучении.

Структура настоящей статьи следующая. В разд. 2 мы рассматриваем движение магнитного момента в гауссовском случайном поле и анали-

зируем соотношение между АКФ, полученными с помощью различных приближений. В разд. 3 мы изучаем влияние неоднородного магнитного поля на АКФ. Координаты их ближайших особых точек на оси мнимого времени рассчитаны через радиусы сходимости рядов для АКФ по степеням времени. Выполнено сравнение зависимостей этих координат от величины неоднородного уширения для решений разных уравнений. В разд. 4 обсуждаются полученные результаты. Наконец, в Приложении выведены аппроксимирующие функции для указанных зависимостей координат, рассчитанных численно.

2. ГАУССОВСКОЕ СЛУЧАЙНОЕ ЛОКАЛЬНОЕ ПОЛЕ

Рассмотрим вращение магнитного момента $\boldsymbol{\mu}(t)$ в гауссовском случайном магнитном поле $\mathbf{h}(t)$. Уравнение движения можно записать в виде [30, 31]

$$\frac{d}{dt} \boldsymbol{\mu}(t) = \hat{h}(t) \boldsymbol{\mu}(t), \quad (1)$$

где матрица оператора $\hat{h}(t)$ имеет одинаковый вид:

$$\hat{h}(t) = \begin{pmatrix} 0 & -h^z(t) & h^y(t) \\ h^z(t) & 0 & -h^x(t) \\ -h^y(t) & h^x(t) & 0 \end{pmatrix}, \quad (2)$$

как для обычных векторов $\boldsymbol{\mu}$, так и для векторных операторов $\boldsymbol{\mu} = \gamma \mathbf{S}$ в квантовомеханическом случае.

Будем искать решение уравнения (1) в виде ряда по числу операторов (матриц) поля. Таким путем для АКФ получаем

$$\Gamma_{\alpha}^{\alpha}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^t dt_1 \times \\ \times \int_0^{t_1} dt_2 \dots \int_0^{t_{2n-1}} dt_{2n} \langle \hat{h}(t_1) \hat{h}(t_2) \dots \hat{h}(t_{2n}) \rangle_{\alpha\alpha}, \quad (3)$$

где скобки $\langle \dots \rangle$ обозначают усреднение по реализациям гауссовского случайного поля, а стоящий внизу индекс « $\alpha\alpha$ » — матричный элемент произведения матриц. Например, для произведения двух матриц получаем

$$\langle \hat{h}(t_1) \hat{h}(t_2) \rangle_{xx} = -g_z(t_1 - t_2) - g_y(t_1 - t_2),$$

где мы ввели обозначение для корреляционной функции проекции поля в разные моменты времени

$$\langle h^{\alpha}(t_1) h^{\alpha}(t_2) \rangle = g_{\alpha}(t_1 - t_2). \quad (4)$$

Среднее от произведения нечетного числа гауссовых переменных обращается в нуль, а среднее от произведения четного числа является суммой по всевозможным спариваниям одноименных проекций. В общем случае результат усреднения зависит от набора проекций и последовательности их расположения в произведении. Это усложнение связано с непрерывностью поворотов вокруг разных осей.

Исключение составляет частный случай поля, направленного вдоль одной оси. Если, например, $h^z \neq 0, h^x = h^y = 0$, то ряд (3) легко суммируется в экспоненциальную функцию

$$\Gamma_{0x}(t) = \exp \left\{ - \int_0^t \int_0^{t'} g_z(t'') dt' dt'' \right\}. \quad (5)$$

Такой результат обусловлен зависимостью величины слагаемого в (3) не от взаимного расположения разных пар, а лишь от временного интервала между моментами действия спаренных проекций. В так называемом кумулянтном приближении это условие распространяется на трехкомпонентное поле, что ведет к результату

$$\Gamma_{cx}(t) = \exp \left\{ - \int_0^t \int_0^{t'} (g_z(t'') + g_y(t'')) dt' dt'' \right\}. \quad (6)$$

В общем случае, сгруппировав члены полученного после усреднения в (3) ряда по различным схемам спаривания и выполнив частичное суммирование, как это описано в работах [27, 30, 31], мы получаем для АКФ систему интегральных уравнений

$$\frac{d}{dt} \Gamma_\alpha(t) = - \int_0^t G_\alpha(t-t_1) \Gamma_\alpha(t_1) dt_1, \quad (7)$$

где функция памяти представлена в виде ряда по числу пар с различной схемой спаривания. Выражения для вкладов в $G_\alpha(t)$, содержащих от 2 до 4 пар, приведены в работе [31]. Например, в простейшем случае одной пары имеем уравнение

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \Gamma_{1x}(t) = & - \int_0^t \{g_z(t-t_1) \Gamma_{1y}(t-t_1) + \\ & + g_y(t-t_1) \Gamma_{1z}(t-t_1)\} \Gamma_{1x}(t_1) dt_1. \end{aligned} \quad (8)$$

Иначе, АКФ (3) может быть представлена в виде ряда по степеням времени

$$\Gamma_\alpha(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} M_{2n\alpha} t^{2n}. \quad (9)$$

Коэффициенты $M_{2n\alpha}$ являются моментами спектра функции АКФ (3) [40]. В случае статических гауссовских полей

$$g_\alpha(t) = \langle h_\alpha^2 \rangle \equiv \Delta_\alpha^2 \quad (10)$$

коэффициенты рядов (3) и (9) совпадают, тогда как в общем случае это не так. Каждый член ряда (3) является произведением рядов по степеням времени функций $g_\alpha(t)$.

Проиллюстрируем соотношение коэффициентов рядов для (6), (8) и для решения уравнения (7) на примере изотропного постоянного гауссовского поля $g_x(t) = g_y(t) = g_z(t) = \Delta^2$. В этом случае находим

$$M_{c2n} = \frac{(2n)!}{n!} \Delta^{2n}, \quad M_{1,2n} = \frac{(2n)!}{n!(n+1)!} 2^n \Delta^{2n},$$

тогда как точные значения для ряда (3) в этом случае [23, 30, 31]

$$M_{2n} = \frac{2(2n+1)!}{2^n n! 3} \Delta^{2n}.$$

Имеет место соотношение (при $n > 1$)

$$M_{c2n} > M_{2n} > M_{1,2n}, \quad (11)$$

которое отражает условия вывода соответствующих выражений. В уравнении (8) просуммирована часть ряда (3), тогда как в кумулянтном выражении (6) взяты все варианты спаривания, но с завышенными коэффициентами.

Вернемся к зависящему от времени гауссовскому полю и зададим его в самосогласованном приближении. В этом приближении [27, 31, 32] корреляционные функции поля выразим через АКФ спинов

$$g_\alpha(t) = \Delta_\alpha^2 \Gamma_\alpha(t). \quad (12)$$

Временные ряды (9) для разных функций удобно сравнивать после перехода к мнимому времени $t = i\tau$, когда эти ряды становятся рядами с положительными членами. Выберем для определенности направление осей координат так, чтобы выполнялось условие

$$\Delta_z^2 \geq \Delta_y^2 \geq \Delta_x^2. \quad (13)$$

Тогда для гарантированного получения для АКФ приближения с максимальными коэффициентами, $X(t)$, следует в кумулянтном приближении (6) взять самосогласованным образом такую же функцию $X(t)$ для поля, т. е. записать уравнение

$$X(t) = \exp \left\{ -(\Delta_z^2 + \Delta_y^2) \int_0^t \int_0^{t'} X(t'') dt' dt'' \right\}. \quad (14)$$

Полученное уравнение Блума–Хаббарда [28] имеет решение

$$X(t) = \frac{1}{\text{ch}^2\left(t\sqrt{(\Delta_z^2 + \Delta_y^2)/2}\right)} = \frac{1}{\cos^2\left(it\sqrt{(\Delta_z^2 + \Delta_y^2)/2}\right)}. \quad (15)$$

С другой стороны, для получения функции $Z(t)$ с гарантированно меньшими коэффициентами следует взять решение уравнения

$$\frac{d}{dt} Z(t) = -(\Delta_x^2 + \Delta_y^2) \int_0^t Z^2(t-t_1)Z(t_1) dt_1. \quad (16)$$

Решения уравнений (14) и (16) имеют особые точки на оси мнимого времени [29–32], в окрестности которых АКФ имеет вид

$$\Gamma_\alpha(t) \approx \frac{A_\alpha}{(it \pm \tau_0)^2}. \quad (17)$$

Для уравнения (14) это следует из его решения (15), тогда как для уравнений (16) и (7) в этом можно убедиться после подстановки в них главной части решений (17) (см. Приложение).

Координата ближайшей к началу координат особой точки определяет радиус сходимости рядов (9). Поэтому эта координата может быть найдена через отношение моментов высокого порядка как предел при $n \rightarrow \infty$ величины

$$\tau_{0n}^2 = \frac{2n(2n+1)M_{2(n-1)}}{M_{2n}}. \quad (18)$$

Эта формула аналогична формуле Даламбера для радиуса сходимости ряда, в которой мы заменили коэффициент $2n(2n-1)$ на $2n(2n+1)$, поскольку нам известен показатель сингулярности в (17) равный двум.

Соотношение между коэффициентами рядов (9) для решений уравнений (7) и (14), положительных на оси мнимого времени, приводит к соотношению между самими этими функциями и, следовательно, между координатами ближайших особых точек

$$\tau_0 > \tau_c = \pi/\sqrt{2(\Delta_z^2 + \Delta_y^2)}. \quad (19)$$

3. НЕОДНОРОДНОЕ МАГНИТНОЕ ПОЛЕ

Самосогласованное флуктуирующее во времени поле, рассмотренное выше, создается спин-спиновым взаимодействием между спинами с одинаковыми ларморовыми частотами. Исследуем влияние

случайного разброса ларморовых частот спинов на динамику. Предположим, что такой разброс произошел из-за неоднородного локального магнитного поля, направленного вдоль оси z и заданного гауссовым распределением с плотностью

$$P(\omega_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi W^2}} \exp\left(-\frac{(\omega_i - \omega_0)^2}{2W^2}\right), \quad (20)$$

где ω_0 — средняя частота, W^2 — дисперсия.

Причин разброса резонансных частот может быть много. В частности, это может произойти вследствие взаимодействия с системой спинов другого сорта в гетероядерных кристаллах. Такой случай был рассмотрен нами в работе [35] на примере кристалла LiF. Полученные там общие формулы позволяют вывести выражения для первых пяти коэффициентов ряда (моментов) (9) в аксиально-симметричном случае $\Delta_x^2 = \Delta_y^2 = \Delta_X^2$. Положив в формулах¹⁾ работы [35] $\Delta_{FL}^2 = W^2$, $\Delta_{LL}^2 = \Delta_{XL}^2 = 0$, находим в нашем случае

$$M_{2X} = W^2 + \Delta_z^2 + \Delta_X^2, \quad (21)$$

$$\begin{aligned} M_{4X} &= 3W^4 + 3\Delta_z^4 + (4\Delta_X^2 + 6\Delta_z^2)W^2 + \\ &\quad + 5\Delta_X^4 + 6\Delta_z^2\Delta_X^2, \\ M_{6X} &= 15W^6 + 15\Delta_z^6 + (21\Delta_X^2 + 45\Delta_z^2)W^4 + \\ &\quad + 51\Delta_X^6 + 73\Delta_z^2\Delta_X^4 + 55\Delta_z^4\Delta_X^2 + \\ &\quad + (45\Delta_X^4 + 45\Delta_z^4 + 76\Delta_z^2\Delta_X^2)W^2, \\ M_{8X} &= 105W^8 + (144\Delta_X^2 + 420\Delta_z^2)W^6 + \\ &\quad + (448\Delta_X^4 + 630\Delta_z^4 + 988\Delta_z^2\Delta_X^2)W^4 + \\ &\quad + \{1678\Delta_z^2\Delta_X^4 + 1544\Delta_z^4\Delta_X^2 + 420\Delta_z^6 + \\ &\quad + 914\Delta_X^6\} W^2 + 1470\Delta_z^2\Delta_X^6 + 861\Delta_X^8 + \\ &\quad + 105\Delta_z^8 + 1378\Delta_z^4\Delta_X^4 + 700\Delta_z^6\Delta_X^2, \quad (22) \\ M_{10X} &= 945W^{10} + (1245\Delta_X^2 + 4725\Delta_z^2)W^8 + \\ &\quad + (5856\Delta_X^4 + 9450\Delta_z^4 + 15120\Delta_z^2\Delta_X^2)W^6 + \\ &\quad + \{36858\Delta_z^2\Delta_X^4 + 37890\Delta_z^4\Delta_X^2 + \\ &\quad + 9450\Delta_z^6 + 16676\Delta_X^6\} W^4 + \\ &\quad + \{27643\Delta_X^8 + 57858\Delta_z^6\Delta_X^2 + \\ &\quad + 64744\Delta_z^4\Delta_X^4 + 35400\Delta_z^2\Delta_X^6 + \\ &\quad + 4725\Delta_z^8\} W^2 + 43989\Delta_z^2\Delta_X^8 + \\ &\quad + 21847\Delta_X^{10} + 945\Delta_z^{10} + 48498\Delta_z^4\Delta_X^6 + \\ &\quad + 33742\Delta_z^6\Delta_X^4 + 11385\Delta_z^8\Delta_X^2. \end{aligned}$$

¹⁾ В формуле (A.1) [35] для $M_{8X}^{(F)}$ есть опечатка: правильное четвертое слагаемое в фигурных скобках $420\Delta_{FF}^6$, а не $420\Delta_{XL}^6$.

Выразим моменты в единицах второго момента, взяв для определенности, как для ДДВ, $\Delta_z^2 = 4\Delta_x^2$. Введем обозначения

$$M_2 = M_{2X} = B^2 + W^2, \quad B^2 = \Delta_z^2 + \Delta_x^2, \\ w^2 = \frac{W^2}{M_2}, \quad b^2 = \frac{B^2}{M_2}, \\ \frac{\Delta_z^2}{M_2} = \frac{4b^2}{5}, \quad \frac{\Delta_x^2}{M_2} = \frac{b^2}{5}. \tag{23}$$

Находим

$$\frac{M_{4X}}{M_2^2} = 3 + \frac{2b^4}{5^2} - \frac{2b^2w^2}{5}, \\ \frac{M_{6X}}{M_2^3} = 15 - \frac{24b^2}{5}w^4 - \frac{56b^4w^2}{5^2} + \frac{308b^6}{5^3}, \\ \frac{M_{8X}}{M_2^4} = 160.7504b^8 + 473.68b^6w^2 + 579.2b^4w^4 + \\ + 364.8b^2w^6 + 105w^8, \tag{24}$$

$$\frac{M_{10X}}{M_2^5} = 2244.96b^{10} + 7632.286b^8w^2 + \\ + 11001.18b^6w^4 + 8701.44b^4w^6 + \\ + 4029b^2w^8 + 945w^{10}.$$

По полученным формулам (23), (24) мы рассчитали M_{8X} и M_{10X} при разных значениях W^2 и по их отношению оценили радиус сходимости ряда по степеням времени по формуле (18). Результат показан на рис. 1. Величина τ_0^2 растет с ростом W^2 при малых W^2 . При больших значениях W^2 рост прекращается, поскольку в этом пределе величина моментов малого порядка определяется неоднородным полем. Для гауссовой функции $M_{10}/M_8 = 9M_2$, поэтому мы наблюдаем предельное значение $110/9 = 12.22$. Если увеличить порядки моментов в формуле (18), то для гауссовой функции величина оценки радиуса сходимости росла бы пропорционально порядку, тогда как при учете ДДВ рост остановится. Таким образом, если в спиновых системах без неоднородного поля [29–35] радиус сходимости удалось оценить по десятому моменту с точностью в несколько процентов, то при большом неоднородном поле нужны моменты более высокого порядка. К сожалению, нам они не известны, поскольку их вычисление очень сложная задача, не решенная на сегодняшний день. А поскольку для полного уравнения (7) мы не можем рассчитать моменты высокого порядка, обратимся к приближенным уравнениям, описанным в предыдущем разделе.

В кумулянтном приближении повороты в разных полях учитываются как независимые, поэтому в уравнении (14) просто добавим новое слагаемое от

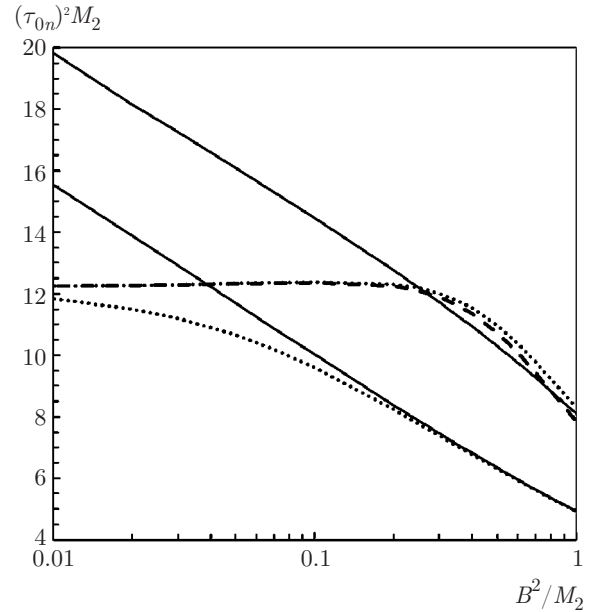


Рис. 1. Зависимости от отношения B^2/M_2 координат особых точек, рассчитанных по формуле (18). Верхняя сплошная линия — результаты расчета для уравнения (31) при $n = 70$. Нижняя сплошная линия — результаты расчета для уравнения (25) при $n = 70$. Верхняя и нижняя пунктирные линии рассчитаны для тех же уравнений, но при $n = 5$. Штриховая линия рассчитана по отношению полных моментов M_{8X}/M_{10X} (24)

неоднородного магнитного поля и получим уравнение

$$D(t) = \exp \left\{ -B^2 \int_0^t \int_0^{t'} D(t'') dt' dt'' - W^2 t^2 / 2 \right\}. \tag{25}$$

При $W^2 \neq 0$ мы не знаем решения этого уравнения, однако можем рассчитать координату особой точки τ_{c0} через радиус сходимости ряда по степеням времени:

$$D(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} D_n t^{2n}, \tag{26}$$

для коэффициентов которого из (25) получаем рекуррентное уравнение

$$D_{n+1} = B^2 \sum_{k=0}^n \binom{2n+1}{2k} D_{n-k} D_k + (2n+1)W^2 D_n.$$

Результаты расчета τ_{c0}^2 по формуле (18) показаны на рис. 1. Эта зависимость хорошо аппроксимируется (см. рис. 2) функцией

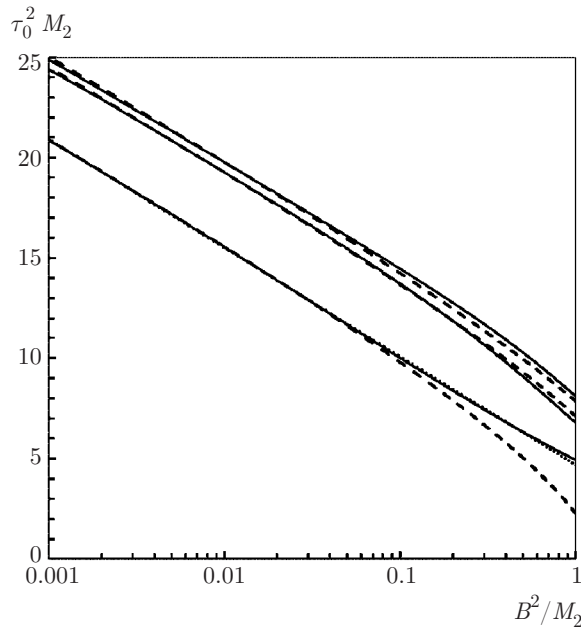


Рис. 2. Зависимости от отношения B^2/M_2 координат особых точек решений уравнения (31) с (32), упрощенного варианта (35) и уравнения (25), соответственно сверху вниз. Сплошные линии — результаты расчетов по формуле (A.11). Штриховые линии — результаты расчетов соответственно по формулам (34), (A.12) и (A.14). Пунктирная линия проведена по формуле (27)

$$\tau_{c0}^2 M_2 = 2.35 \ln \left\{ \frac{2M_2}{B^2} \right\} + 3.05. \quad (27)$$

τ_{c0}^2 дает нижнюю границу для показателя τ_0^2 :

$$\tau_0^2 > \tau_{c0}^2. \quad (28)$$

Граница (27) математически строгая, но довольно грубая, поскольку она не учитывает анизотропию вращения в системах с ДДВ, связанную с выделенностью вращения вокруг одной из осей — оси z . Для секулярной части ДДВ в сильном магнитном поле $\Delta_x^2 = \Delta_y^2$ и $\Delta_z^2 = 4\Delta_x^2$. В этом случае для повышения точности приближения на первом этапе предложено учитывать только вращение вокруг оси z [32]. Поскольку повороты вокруг локальных z -полей от ДДВ и от неоднородного магнитного z -поля складываются, мы получаем пропагатор

$$G_0(t) = \exp \left\{ -\Delta_z^2 \int_0^t \int_0^{t'} \Gamma_z(t'') dt'' - \frac{W^2 t^2}{2} \right\}. \quad (29)$$

Корреляционная функция z -поля в самосогласованном приближении определяется уравнением

$$\frac{d}{dt} \Gamma_z(t) = -aB^2 \int_0^t \Gamma_x^2(t_1) \Gamma_z(t-t_1) dt_1 \quad (30)$$

через АКФ x -компоненты спина, для которой, следуя [32], записываем уравнение

$$\Gamma_x(t) = G_0(t) - \varepsilon \int_0^t G_0(t-t_1) \times \int_0^{t_1} \Gamma_z(t_1-t_2) \Gamma_x(t_1-t_2) \Gamma_x(t_2) dt_1 dt_2. \quad (31)$$

Уравнения (30) и (31) получены в приближении, которое состоит в том, что взаимодействия с полями x и y делят интервал эволюции на участки, между которыми нет корреляции полей (спаривания). Константы в уравнениях определяются величинами поперечных полей:

$$\varepsilon = \frac{B^2}{5} = \Delta_y^2, \quad aB^2 = \frac{2B^2}{5} = \Delta_y^2 + \Delta_x^2, \quad (32)$$

$$\Delta_z^2 = \frac{4B^2}{5}.$$

Для расчета коэффициентов временных рядов из (29)–(31) получаем систему рекуррентных уравнений

$$G_{n+1} = \frac{4}{5} B^2 \sum_{k=0}^n \binom{2n+1}{2k} G_k Z_{n-k} + (2n+1)W^2 G_n,$$

$$Z_{n+1} = aB^2 \sum_{k=0}^n Z_{n-k} \sum_{m=0}^k X_{k-m} X_m, \quad (33)$$

$$X_{n+1} = G_{n+1} + \varepsilon \sum_{k=0}^n G_{n-k} \sum_{m=0}^k X_{k-m} \times \sum_{p=0}^m \binom{2m}{2p} Z_{m-p} X_p,$$

где G_n , Z_n и X_n — коэффициенты рядов вида (26) соответственно для функций $G_0(t)$, $\Gamma_z(t)$ и $\Gamma_x(t)$. Рассчитанные по этим коэффициентам координаты особых точек приведены на рис. 1. Зависимость τ_0^2 от B^2/M_2 хорошо описывается (см. Приложение) функцией

$$\tau_0^2 M_2 = 2 \ln \left\{ \frac{10M_2}{B^2} \ln \left(\frac{5M_2}{B^2} \right) \right\} + 2.3. \quad (34)$$

Помимо результата, полученного по коэффициентам с $n = 70$, на рис. 1 для сравнения приведен результат для $n = 5$. Видно, что результат для уравнения (31) действительно близок к результату по моментам M_{10} полного уравнения (7). Ранее в работе

[38] мы исследовали упрощенный вариант уравнения, получающийся из уравнения (31) при

$$\varepsilon = 0, \quad a = 1/2, \quad B^2 = \Delta_z^2. \quad (35)$$

Соответствующая зависимость (А.7) проходит несколько ниже (34) (см. рис. 2).

4. ОБСУЖДЕНИЕ

Вид АКФ в окрестности ближайших к началу координат особых точек (17) определяет вид высокочастотных асимптотик АКФ при $\tau_0|\omega| \gg 1$:

$$g_x(\omega) \approx A_x|\omega| \exp(-\tau_0|\omega|). \quad (36)$$

Из соотношения между координатами особых точек (28) следует соотношение между крыльями спектров

$$g_x(\omega) \approx A_x|\omega| \exp(-\tau_0|\omega|) < A_{cx}|\omega| \exp(-\tau_{c0}|\omega|) \cong g_{cx}(\omega). \quad (37)$$

Тем самым крыло спектра функции кумулянтного приближения $g_{cx}(\omega)$ служит верхней границей для крыла спектра АКФ (3).

Другие временные корреляционные функции рассматриваемой спиновой системы будут иметь особенности в тех же точках оси мнимого времени. Поэтому крылья их спектров будут иметь одинаковый экспоненциальный сомножитель и будут различаться только предэкспоненциальными коэффициентами. Для всех таких функций крыло функции $g_{cx}(\omega)$ будет служить верхней границей, в том числе, для спектра поглощения ЯМР и для скорости нагрева системы высокими гармониками при периодическом управлении. И в том, и в другом случаях скорости процессов поглощения энергии выражаются через образ Фурье от корреляционной функции полного спина системы, умноженный на квадрат амплитуды радиочастотного поля [40] или квадрат амплитуды соответствующей гармоники периодического воздействия [16, 20, 21].

Формула (36) показывает, что поглощение энергии на крыле имеет экспоненциальную малость, т. е. затухает по экспоненциальному закону с ростом частоты. Полученные в настоящей работе результаты позволяют исследовать зависимость скорости процесса от величины неоднородного уширения W . Согласно (27) и (34), коэффициент τ_0 перед частотой в показателе экспоненты в (36) уменьшается с ростом W , вследствие роста $\sqrt{M_2}$ (23). Если же измерять

частоту в единицах $\sqrt{M_2}$, то поглощение падает, поскольку $\tau_0^2 M_2$ растет логарифмически. Сам же масштаб $\sqrt{M_2}$ растет пропорционально W . Причина в том, что большие частоты на крыле спектра АКФ образуются вследствие модуляции локального поля от окружающих спинов, осциллирующих в поперечном поле (флип-флоп-поворотов). С ростом W амплитуда таких осцилляций падает, но частота растет. Логарифмический сомножитель в τ_0 отражает это уменьшение амплитуды. Вместе с тем он выражает очевидное свойство системы, что без ДДВ не будет экспоненциального крыла. В этой связи заметим, что в оценочной формуле для показателя экспоненты, полученной в работе [16], отсутствует таковой логарифмический сомножитель. Это говорит о том, что предложенная в [16] оценка границы хотя и верная, но грубая, полученная с большим запасом.

Примененное выше приближение гауссовского СФП не учитывает корреляции между вкладами в поле от разных спинов окружения, приводящей к образованию петель из связей на решетке и многократных связей. В случае взаимодействия ближайших соседей показана малость корреляционного вклада для решеток большой размерности пространства [33]. Оценки показывают их малость и в трехмерных решетках с ДДВ [16, 34]. И в том, и в другом случаях корреляционные эффекты ослабляют действие полей и приводят к увеличению τ_0 . Следовательно, функция кумулянтного приближения $g_{cx}(\omega)$ (37) останется строгой границей для скорости нагревания в реальных спиновых системах.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Исследуем поведение АКФ в окрестности ближайших особых точек на оси мнимого времени. Вид (17) для АКФ в окрестности особенности следует из вида нелинейных уравнений для них. В этом можно убедиться методом, аналогичным методу Пенлеве для анализа подвижных особенностей нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений [41]. Возьмем АКФ вблизи особенности в виде

$$\Gamma_\alpha(t) \approx -A_\alpha(t - i\tau_0)^{-p} \quad (A.1)$$

и подставим в уравнение (8) при условии (12). Вычислив наиболее расходящуюся часть интеграла в правой части уравнения (8) и выполнив дифференцирование в его левой части, находим

$$\frac{A_x p}{(t - i\tau_0)^{p+1}} \approx \frac{A_z A_y (\Delta_z^2 + \Delta_y^2)}{(2p - 1)(t - i\tau_0)^{2p-1}}. \quad (A.2)$$

Для выполнения равенства в (A.2) показатели степеней и коэффициенты должны совпадать:

$$p+1 = 2p-1, \quad A_x p(2p-1) = A_z A_y (\Delta_z^2 + \Delta_y^2). \quad (A.3)$$

Из первого уравнения в (A.3) следует $p = 2$. Нелинейные уравнения того же приближения, что и (8), для АКФ двух других спиновых компонент дают еще два равенства:

$$6A_y = A_z A_x M_{2y}, \quad 6A_z = A_y A_x M_{2z}, \quad (A.4)$$

где $M_{2x} = (\Delta_z^2 + \Delta_y^2)$, $M_{2y} = (\Delta_z^2 + \Delta_x^2)$, $M_{2z} = (\Delta_x^2 + \Delta_y^2)$. Из системы трех уравнений для амплитуд (A.3), (A.4) находим

$$A_\alpha = 6\sqrt{M_{2\alpha}/(M_{2x}M_{2y}M_{2z})}. \quad (A.5)$$

Перейдем к нелинейному уравнению для АКФ общего вида (7). В ряду для функции памяти $G_\alpha(t)$ при переходе от члена с m парами к члену с $m+1$ парой добавляется сомножитель $g_\beta(t_k - t_q) = \Delta_\beta^2 \Gamma_\beta(t_k - t_q)$ и одновременно интегрирование по переменным t_k и t_q . Следовательно, вид (17) особенности (A.1) с $p = 2$ сохранится и при включении остальных членов ряда для функции памяти, хотя при этом изменятся сами величины A_α и τ_0 .

Исследуем теперь поведение АКФ в окрестности ближайших особых точек на оси мнимого времени при наличии неоднородного магнитного поля на примере решения нелинейных уравнений (29)–(31). Подставим сингулярные части в виде (17) соответствующих функций в уравнения (29)–(31). Решив уравнения для коэффициентов при сингулярных частях, находим

$$\Gamma_z(t) \approx \frac{2/\Delta_z^2}{(it \pm \tau_0)^2}, \quad \Gamma_x(t) \approx \frac{\sqrt{12/aB^2\Delta_z^2}}{(it \pm \tau_0)^2}, \quad (A.6)$$

$$G_0(t) \approx \left(1 - \frac{\varepsilon}{3\Delta_z^2}\right) \frac{\sqrt{12/aB^2\Delta_z^2}}{(it \pm \tau_0)^2}.$$

Найдем оценку для величины τ_0^2 при $W^2/B^2 \gg \gg 1$. Рассмотрим на оси мнимого времени $t = i\tau$ линейаризованный вариант системы уравнений (29)–(31):

$$\Gamma_z(i\tau) = 1 + aB^2 \int_0^\tau \int_0^{\tau_1} \Gamma_x^2(i\tau_2) d\tau_1 d\tau_2 \approx \approx \frac{aB^2}{4M_2^2\tau^2} \exp(M_2\tau^2), \quad (A.7)$$

$$G_0(i\tau) = \exp\left\{\frac{(M_2 - \varepsilon)\tau^2}{2}\right\}, \quad (A.8)$$

$$\Gamma_x(i\tau) = \exp\left(\frac{M_2\tau^2}{2}\right),$$

где $M_2 = B^2 + W^2$, а для интеграла от функции ошибок мнимого аргумента взято асимптотическое значение. Функции (A.7) и (A.8) не имеют особых точек на конечном расстоянии от начала координат. Появление таких особенностей обусловлено нелинейностью уравнений (29)–(31). Нелинейность проявится при тех значениях мнимого времени, при которых в показателе экспоненты для $G_0(i\tau)$ (29) нелинейный вклад от $\Gamma_z(t)$ превзойдет линейный (A.8). Отсюда получаем условие

$$\frac{aB^2\Delta_z^2}{16M_2^3\tau^2} \exp(M_2\tau^2) \geq \frac{(M_2 - \varepsilon)\tau^2}{2},$$

которое после подстановки значений параметров (32) приводит к уравнению для оценки τ_0

$$M_2\tau_0^2 = 2 \ln\left(\frac{5M_2}{B^2} M_2\tau_0^2\right) + \ln\left(1 - \frac{B^2}{5M_2}\right). \quad (A.9)$$

Из (A.9) находим искомую оценку

$$\tau_0^2 M_2 = 2 \ln\left\{\frac{10M_2}{B^2} \ln\left(\frac{5M_2}{B^2}\right)\right\} + c_1. \quad (A.10)$$

Соответствующая зависимость при $c_1 = 2.3$ (34) приведена на рис. 2 и хорошо описывает результаты численного расчета τ_0 , который проводился по формуле

$$\tau_{0n}^2 = n(2n+1)\{X_{n-1}/X_n + Z_{n-1}/Z_n\} \quad (A.11)$$

при $n = 85$. Эта формула позволила сгладить осцилляции τ_{0n} при $B^2/M_2 < 0.01$, обусловленные анизотропией ДДВ.

Для упрощенного варианта уравнения (31) с параметрами (35) мы в работе²⁾ [38] нашли зависимость координаты особой точки

$$\tau_0^2 M_2 = 2 \ln\left\{\frac{8M_2}{B^2} \ln\left(\frac{4M_2}{B^2}\right)\right\} + 2.3, \quad (A.12)$$

которая, как видно на рис. 2, проходит несколько ниже (A.10).

Подобным образом для уравнения (25) находим

$$D(t) \approx \frac{2/B^2}{(it \pm \tau_{c0})^2}, \quad (A.13)$$

а для τ_{c0}^2 при $W^2/B^2 \gg 1$ получаем оценку

²⁾ В уравнении (20) [38] есть опечатка: правильно $X_k Z_{n-k}$, а не $X_{n-k} Z_k$.

$$\tau_0^2 M_2 = 2 \ln \left\{ \frac{2M_2}{B^2} \ln \left(\frac{2M_2}{B^2} \right) \right\} + c_2, \quad (\text{A.14})$$

которая приведена на рис. 2 и хорошо согласуется с результатами численного расчета при $c_2 = 1.62$ на интервале $B^2/W^2 < 0.1$. Там же показана аппроксимирующая функция (27), которая лучше передает поведение τ_{c0} при малых неоднородных полях.

ЛИТЕРАТУРА

1. R. P. Feynman, *Int. J. Theor. Phys.* **21**, 467 (1982).
2. I. Georgescu, S. Ashhab, and F. Nori, *Rev. Mod. Phys.* **86**, 153 (2014).
3. J. Preskill, *Quantum* **2**, 79 (2018); arXiv:1801.00862.
4. И. И. Рябцев, И. И. Бегеров, Д. Б. Третьяков, В. М. Энгин, Е. А. Якшина, *УФН* **186**, 206 (2016).
5. S. Choi, J. Choi, R. Landig, G. Kucsko, H. Zhou, J. Isoya, F. Jelezko, S. Onoda, H. Sumiya, V. Khemani, C. Keyserlingk, N. Y. Yao, E. Demler, and M. D. Lukin, *Nature* **543**, 221 (2017).
6. S. Choi, N. Y. Yao, and M. D. Lukin, *Phys. Rev. Lett.* **119**, 183603 (2017).
7. P. I. Bunyk, E. M. Hoskinson, M. W. Johnson, E. Tolkacheva, F. Altomare, A. J. Berkley, R. Harris, J. P. Hilton, T. Lanting, A. J. Przybysz, and J. Whitaker, *IEEE Trans. App. Supercond.* **24**, 1700110 (2014); arXiv:1401.5504.
8. M. Bukov, L. D'Alessio, and A. Polkovnikov, *Adv. Phys.* **64**, 139 (2015).
9. A. Eckardt and E. Anisimovas, *New J. Phys.* **17**, 093039 (2015).
10. Е. И. Кузнецова, Э. Б. Фельдман, Д. Э. Фельдман, *УФН* **186**, 647 (2016).
11. A. Eckardt, *Rev. Mod. Phys.* **89**, 011004 (2017).
12. D. A. Abanin, W. De Roeck, and F. Huveneers, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 256803 (2015).
13. T. Mori, T. Kuwahara, and K. Saito, *Phys. Rev. Lett.* **116**, 120401 (2016).
14. T. Kuwahara, *New J. Phys.* **18**, 053034 (2016).
15. D. A. Abanin, W. De Roeck, W. W. Ho, and F. Huveneers, *Phys. Rev. B* **95**, 014112 (2017).
16. W. W. Ho, I. Protopopov, and D. A. Abanin, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 200601 (2018).
17. F. Machado, G. D. Meyer, D. V. Else, C. Nayak, and N. Y. Yao, arXiv:1708.01620.
18. U. Haeblerlen and J. S. Waugh, *Phys. Rev.* **175**, 453 (1968).
19. Р. Эрнст, Дж. Боденхаузен, А. Вокаун, *ЯМР в одном и двух измерениях*, Мир, Москва (1990).
20. Ю. Н. Иванов, Б. Н. Провоторов, Э. Б. Фельдман, *ЖЭТФ* **75**, 1847 (1978).
21. Б. Н. Провоторов, Э. Б. Фельдман, *ЖЭТФ* **79**, 2206 (1980).
22. P. W. Anderson and P. R. Weiss, *Rev. Mod. Phys.* **25**, 269 (1953).
23. R. Kubo and T. Toyabe, *Magnetic Resonance and Relaxation*, ed. by R. Blinc, North-Holland, Amsterdam (1967), p. 810.
24. Г. Е. Карнаух, А. А. Лундин, Б. Н. Провоторов, К. Т. Сумманен, *ЖЭТФ* **91**, 2229 (1986).
25. М. И. Булгаков, А. Д. Гулько, Ф. С. Джепаров, С. В. Степанов, С. С. Тростин, *Письма в ЖЭТФ* **58**, 614 (1993).
26. F. S. Dzheparov and D. V. Lvov, *Appl. Magn. Res.* **48**, 989 (2017).
27. P. Borckmans and D. Walgraef, *Physica* **35**, 80 (1967); *Phys. Rev.* **167**, 282 (1968).
28. M. Blume and J. Hubbard, *Phys. Rev. B* **1**, 3815 (1970).
29. V. E. Zobov, *Phys. Lett. A* **119**, 315 (1986).
30. В. Е. Зобов, *ТМФ* **77**, 426 (1988).
31. В. Е. Зобов, *ТМФ* **84**, 111 (1990).
32. А. А. Лундин, А. В. Макаренко, and В. Е. Зобов, *J. Phys.: Condens. Matter* **2**, 10131 (1990).
33. В. Е. Зобов, М. А. Попов, *ТМФ* **136**, 463 (2003).
34. В. Е. Зобов, М. А. Попов, *ЖЭТФ* **124**, 89 (2003).
35. В. Е. Зобов, М. А. Попов, *ЖЭТФ* **127**, 877 (2005).
36. В. Е. Зобов, М. М. Кучеров, *Письма в ЖЭТФ* **103**, 780 (2016).
37. В. Е. Зобов, М. М. Кучеров, *ЖЭТФ* **151**, 174 (2017).
38. В. Е. Зобов, М. М. Кучеров, *Письма в ЖЭТФ* **107**, 578 (2018).
39. D. A. Abanin and Z. Papić, *Ann. Phys. (Berlin)* **529**, 1700169 (2017).
40. А. Абрагам, *Ядерный магнетизм*, Изд-во иностр. лит., Москва (1963).
41. В. В. Голубев, *Лекции по аналитической теории дифференциальных уравнений*, Гостехиздат, Москва (1950).