

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ СИСТЕМЫ НЕСКОЛЬКИХ СПИНОВ ВО ВНЕШНЕМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

А. Ю. Любимова

Пермский государственный национальный исследовательский университет,
614990, Пермь, Букирева, 15

Изучается формирование тонкой структуры энергетического спектра одномерной цепочки квантовых магнитных моментов, расположенных во внешнем магнитном поле и связанных диполь-дипольным взаимодействием. Выполнены расчеты уширения спектральных линий, оценен вклад взаимодействий с соседями порядков выше первого.

Ключевые слова: дипольное взаимодействие; спиновая цепочка; тонкая структура спектра.

MODELING OF THE DYNAMICS OF THE SYSTEM OF SEVERAL SPINS IN THE EXTERNAL MAGNETIC FIELD

A. Yu. Lyubimova

Perm State University, Bukireva St. 15, 614990, Perm

The paper described a study of energy spectrum fine structure of a quantum magnetic moments one-dimensional chain under the external magnetic field. The dipole-dipole interaction of moments is accounted. The spectrum line broadening is calculated. The estimates of high-order neighbours in system are given.

Keywords: dipole interaction; spin chain; fine structure of the spectrum.

Исследование дипольного взаимодействия в модельных двумерных и одномерных системах взаимодействующих магнитных моментов представляет большой фундаментальный и прикладной интерес, т.к. позволяет детализировать описание процессов в реальных кристаллических решетках. Дипольное взаимодействие существенно влияет на спектры и форму линий магнитных резонансов [1, 2].

Описание кристаллических решеток, содержащих большое число магнитных моментов, обычно требует применения специальных теоретических подходов либо выполнения ресурсоемких вычислений. Напротив, простые задачи о свойствах и поведении малых групп спинов могут быть изучены на основе стандартного формализма и базовых методов квантовой механики. Таким образом, существует возможность получения сведений об особенностях спиновых систем с дипольной связью из первых принципов [3].

Модель одномерной цепочки применима для изучения магнитных свойств химических соединений, в молекулах которых существуют линейные цепочки атомов с ненулевыми магнитными моментами, например – в молекулах пентана, гексана, гептана и др. подобных линейных углеводородах, а также в молекулах различных полимеров.

В данной работе изучается одномерная цепочка магнитных моментов, расположенных на прямой линии во внешнем магнитном поле и связанных диполь-дипольным взаимодействием. Магнитные моменты могут свободно ориентироваться в любом направлении. Ранее аналитически были получены матрицы гамильтонианов для систем двух и трёх связанных спинов, однако даже в таких случаях аналитическое построение энергетического спектра оказывается затруднительным. В связи с этим, выполнено численное исследование энергетических уровней цепочки. Спектр рассчитан на примере системы пяти спинов величиной $1/2$. Рассмотрено возникновение уширения зеемановских спектральных линий под влиянием дипольного взаимодействия, и выполнены оценки точности приближения ближайших соседей в зависимости от параметра взаимодействия.

В квантовом представлении система спинов с дипольным взаимодействием описывается с помощью гамильтониана

$$\hat{H} = \hat{H}_Z + \hat{H}_{dd}. \quad (1)$$

Его можно разбить на две части. Зеемановская часть гамильтониана, отвечающая взаимодействию спинов с внешним полем, выглядит следующим образом

$$\hat{H}_Z = -\sum_k \hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \mathbf{H} = -\hbar \sum_k \gamma_k H^\alpha \hat{S}_k^\alpha,$$

где \hat{S}_k^α – оператор спина на узле с номером $k = 1 \dots N$, индекс $\alpha = x, y, z$ нумерует компоненты векторов; здесь и далее по повторяющимся греческим индексам подразумевается суммирование. Операторы спина задаются в виде матриц размерности $2^N \times 2^N$ [4, 5].

Гамильтониан дипольного взаимодействия имеет следующий вид [1–3]:

$$\hat{H}_{dd} = \frac{\hbar^2}{2} \sum_k \gamma_l \gamma_k D_{lk}^{\alpha\beta} \hat{S}_l^\alpha \hat{S}_k^\beta,$$

где введен тензор дипольного взаимодействия

$$D_{lk}^{\alpha\beta} = \frac{1}{r_{lk}^3} \delta^{\alpha\beta} - \frac{3}{r_{lk}^5} r_{lk}^\alpha r_{lk}^\beta,$$

\mathbf{r}_{lk} – вектор расстояния между отдельными магнитными моментами.

Определим также ларморовскую частоту для внешнего постоянного поля \mathbf{H}_0 и характерную частоту, связанную с дипольными взаимодействиями:

$$\omega_0 = |\gamma| H_0, \quad \omega_d = |\gamma| H_d, \quad p_d = \frac{\omega_d}{\omega_0}.$$

Основным управляющим параметром исследуемой задачи является отношение этих частот p_d – параметр взаимодействия.

Для проведения расчетов в цепочке с произвольным числом спинов была написана программа в пакете Wolfram Mathematica для вычисления гамильтониана взаимодействия (1) в матричной форме в представлении Гейзенберга, и нахождения собственных значений полученной матрицы, которые и являются уровнями энергии цепочки.

При описании процессов в спиновых системах часто пренебрегают полными взаимодействиями, и учитывают только взаимодействие ближайших соседей в решетке. Данный вопрос был исследован при решении поставленной задачи. Были проведены вычисления для обоих случаев – с учетом полных взаимодействий и только ближайших соседей.

Также на систему оказывает влияние угол между внешним полем и цепочкой спинов. Расчет выполнен для трех наиболее интересных с точки зрения экспериментов значений угла: 0 (поле вдоль цепочки), $\pi/2$ (поле перпендикулярно цепочке), а также значении $\vartheta = \arccos(1/\sqrt{3}) \approx 54.73^\circ$.

Последнее значение выделено тем, что при такой ориентации магнитного поля секулярное слагаемое в гамильтониане становится равным нулю, и свойства системы определяются несекулярным членом, которым обычно пренебрегают [1, 2].

На рис. 1 представлена типичная структура энергетического спектра системы и тонкая структура одного из энергетических уровней вблизи значения $E = 0.5$ (спектр нормирован на ларморовскую энергию $\hbar\omega_0$).

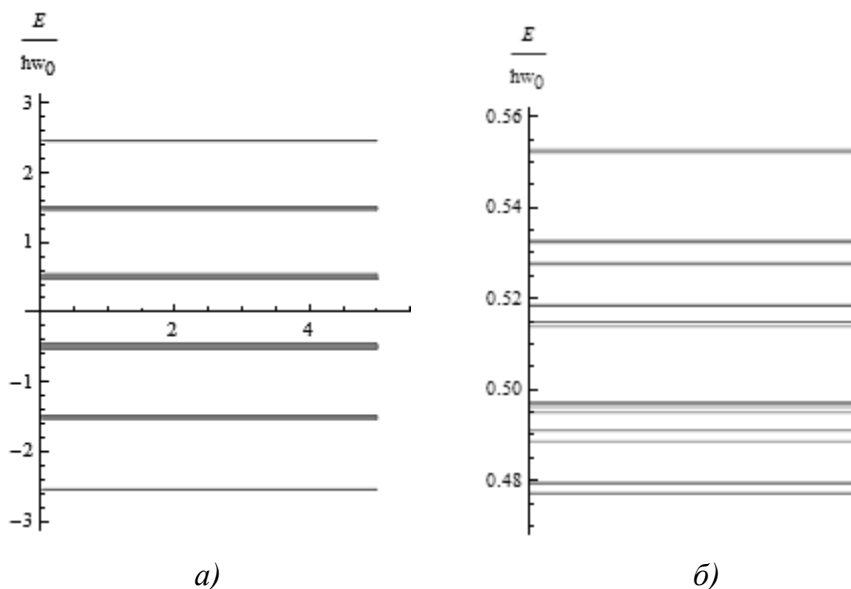


Рис. 1. Спектр уровней энергии при $p_d = 0.01$, $\vartheta = 0$: а) полный спектр; б) тонкая структура уровня $E = 0.5$ (темные линии – с учетом полных взаимодействий, светлые – с учетом только ближайших соседей)

В нулевом приближении энергетический спектр цепочки N спинов является зеемановским, и в нем существует только $N+1$ уровень энергии, кратный ларморовской частоте. Полное число возможных состояний цепочки равно 2^N , что говорит о высокой кратности вырождения уровней.

Расчеты показывают, что включение дипольного взаимодействия в системе приводит к полному снятию вырождения энергетических уровней. При этом происходит уширение основных спектральных линий и образуется тонкая структура спектра с характерным расщеплением линий порядка p_d .

Различие уровней энергии, вычисленных при учете взаимодействий всех частиц в цепочке, и с учетом только ближайших соседей, является величиной порядка p_d^2 . Таким образом, в слабых полях влияние соседей второго и более высоких порядков может играть существенную роль, несмотря на быстрое убывание интенсивности взаимодействия.

Список литературы

1. *Abragam A.* Principles of Nuclear Magnetism // Oxford: Clarendon Press, 1961. 599 p.
2. *Сликтер Ч.* Основы теории магнитного резонанса. 2-е изд. // М.: «Мир», 1981. 448 с.
3. *Henner V. K., Klots A., Belozerova T.* Simulation of Pake doublet with classical spins and correspondence between the quantum and classical approaches // European Physical Journal B. 2016. Vol. 89. 264.
4. *Savostyanov D. V., Dolgov S. V., Werner J. M., Kuprov I.* Exact NMR simulation of protein-size spin systems using tensor train formalism // Physical Review B. 2014. Vol. 90. 085139.
5. *Edwards L. J., Kuprov I.* Parallel density matrix propagation in spin dynamics simulations // Journal of Chemical Physics. 2012. Vol. 136 (4). 044108.