УДК 539.143.43

ТЕОРИЯ МАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА НА ЯДРАХ ПАРАМАГНИТНЫХ ИОНОВ В ПОЛУМАГНИТНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

М.Н.АЛИЕВ

Бакинский Государственный Университет

mammadaliyev@hotmail.com

Методом аналитических функций Грина была развита теория магнитного резонанса на ядрах парамагнитных примесей в полумагнитных полупроводниках при низких температурах. Были вычислены форма, ширина и сдвиг резонансной Лоренцевой линии при быстрых и медленных флуктуациях локального магнитного поля.

Ключевые слова: ядерный магнитный резонанс, полумагнитные полупроводники, функции Грина, теория возмущения.

Высокотемпературные сверхпроводники и полумагнитные полупроводники (ПМП) являются наиболее важными и интересными соединениями с парамагнитными примесями. Наличие нескольких конкурирующих взаимодействий, в особенности обменное взаимодействие электронов проводимости с локализованными магнитными центрами обуславливают возникновение некоторых необычных эффектов в этих соединениях [1].

При теоретическом рассмотрении ПМП целесообразно рассматривать как сложную систему, состоящую из следующих взаимодействующих подсистем: фононной, электронной (электроны проводимости), спиновой (локализованные ионы), ядерной (система ядерных спинов диамагнитных атомов и парамагнитных ионов).

Хорошо известно, что при подробном теоретическом исследовании динамических эффектов в сложных системах, состоящих из нескольких взаимодействующих подсистем метод двухвременных аналитических функции Грина (МФГ) незаменим [2].

Существенную роль в более глубоком понимании и построении адекватной теоретической модели ПМП может сыграть всестороннее исследование электронного и ядерного магнитного резонанса (ЯМР) в этих соединениях.

В настоящей работе методом ФГ будет рассмотрен ЯМР в магнито-концентрированных ПМП на ядрах парамагнитных ионов при низких температурах.

Известно, что наиболее информативными характеристиками ЯМР являются форма линии (ФЛ), ее сдвиг и ширина [3].

ФЛ ЯМР в ПМП обуславливается взаимодействием ядерных спинов с флуктуирующим локальным магнитным полем создаваемым окружением в месте расположения спинов. В ПМП характер взаимодействия ядерных спинов с локальным магнитным полем будет зависеть в основном от характера флуктуации спиновых переменных локализованных магнитных центров. При низких температурах предполагается, что основными взаимодействиями, влияющими на спиновых переменных локализованных центров являются обменное взаимодействие электронов проводимости с локализованными спинами, спин - спиновые взаимодействия локализованных спинов и сверхтонкое электрон - ядерное взаимодействие.

Нашей конкретной задачей является вычисление ширины, сдвига и ФЛ ЯМР на ядрах парамагнитных ионов в ПМП при низких температурах методом ФГ с учетом выше приведенных взаимодействий.

Согласно формализму МФГ, ФЛ ЯМР отыскивается как мнимая часть соответствующей запаздывающей ядерной спиновой ФГ:

$$f(\omega) = \mathrm{Im} << I^+ \big| I^- >>_{\omega}^{R} \tag{1}$$

Здесь $I^{\pm}$ - повышающие и понижающие ядерные спиновые операторы.

Для отыскания $<< I^+ \big| I^- >>_{\omega}^{R}$ сперва необходимо записать, уравнение движения для антикомутаторной ФГ $<< I_e^+ \big| I_{e'}^- >>$

$$E << I_e^+ \big| I_{e'}^- >> = - < \left[I_e^+ , I_{e'}^- \right]_+ > + << \left[I_e^+ , H \right] I_{e'}^- >> . \tag{2}$$

Здесь H-полный гамильтониан системы, который имеет следующий вид:

$$H = H_0 + H_{\mathrm{int}} \tag{3}$$

$$H_0 = H_I + H_s + H_\sigma + H_l + H_{ph} , \tag{4}$$

где $H_I , H_s , H_\sigma , H_e , H_{ph}$ - гамильтонианы систем невзаимодействующих локализованных ядерных и электронных спинов, спинов свободных электронов, а так же члены описывающие кинетическую энергию свободных электронов и поле фононов, соответственно. Взаимодействия в данной системе представлены в следующих членах

$$H_{\mathrm{int}} = H_{\sigma s} + H_{ss} + H_{s\mathrm{I}} + H_{\sigma\mathrm{I}} \ , \tag{5}$$

здесь $H_{\sigma s}, H_{ss}, H_{sI}, H_{\sigma I}$, соответственно, являются гамильтонианами обменного взаимодействия между свободными и локализованными спинами, спин – спинового взаимодействия парамагнитных ионов, сверхтонкого взаимодействия свободных электронов с ядрами ионов, а так же сверхтонкого контактного взаимодействия парамагнитного центра. Выпишем явный вид H_0 и H_{int}:

$$H_s = -\hbar\omega_s \sum_j S_{zj}\,; \qquad H_I = -\hbar\omega_n \sum_k I_k^z$$

$$H_\sigma = -\hbar\omega_\sigma \sum_i \sigma^z(R_i); \quad H_e = \sum_{k\sigma} \mathrm{E}(k) C_{k\sigma}^z C_{k\sigma} \qquad (6)$$

$$H_{ph} = -\sum_{\text{qæ}}^{\text{i}} \hbar\omega_{\text{qæ}} b_{q\text{æ}}^{+} b_{\text{qæ}}$$

$$H_{\sigma s} = -J\sum_i \left\{ S_1^z \sigma^z(R_i) + \frac{1}{2}\left[S_1^+ \sigma^-(R_i) + S_1^- \sigma^+(R_i) \right] \right\} \qquad (7)$$

$$H_{ss} = -\sum_{ii'} \left[A_{ii'} S_1^z S_1^z + \frac{1}{2} B_{1i'} \left(S_1^+ S_{i'}^- + S_1^- S_{i'} \right) \right] \qquad (8)$$

$$H_{sI} = -\sum_n a S_n^z I_n^z \qquad (9)$$

$$H_{\sigma I} = -G\sum_k I_k^z \sigma^z(R_k) \qquad (10)$$

Вышеприведенных соотношениях $S^z, S^{\pm}; \sigma^z \sigma^{\pm}$ – спиновые операторы локализованных и свободных электронов, соответственно; $I^{\pm}$ – ядерные спиновые операторы, ω_s, ω_n – ларморовы частоты электронов и ядер парамагнитного иона, ω_σ – свободных электронов, $\omega_{\text{qæ}}$ - частота фонона с волновым вектором $\vec{q}$ и поляризацией æ, $\varepsilon(k)$ – кинетическая энергия электрона с волновым вектором $\vec{k}$, $b_{\text{qæ}}^{+}$, $b_{\text{qæ}}$ - операторы рождения и уничтожения фононов, $C_{k\sigma}^{+}$, $C_{k\sigma}$ - известные блоховские операторы, $A_{ii'}$, $B_{ii'}$ - известные спин-спиновые коэффициентами локализованных спинов, J обменная постоянная между парамагнитными ионами и свободными электронами, а и G константы контактного и сверхтонкого взаимодействий.

Уравнение движения (2) с учетом явного вида полного гамильтониана рассматриваемой системы (3)-(10) записывается легко:

$$(E-\omega_n) \ll I_e^+ \big| I_{e'}^1 \gg = -\delta ec' + \frac{\text{a}}{\hbar} \ll S_e^z I_e^+ \big| I_{e'}^- \gg + G/\hbar \ll \sigma^z(R_c) I_e^+ \big| I_{e'}^- \gg \quad (11)$$

Соотношение (11) показывает, что начальная ФГ $\ll I_e^+ \big| I_{e'}^- \gg$ зацепилась за две новые ФГ более высоко порядка $\ll S_e^z I_e^+ \big| I_{e'}^- \gg$ и $\ll \sigma^z(R_c) I_e^+ \big| I_e^- \gg$. Корректность полученных результатов будет определяться корректностью решения - расцепления (11). При грубом расцеплении теряются важные эффекты, тонкое же, расцепление сложных зацепляющихся уравнений движения типа (11) трудно. Наиболее удачным методом расцепления сложных уравнений для ФГ является метод теории возмущения [2]. Учитывая сложность (11) будем применять метод нестандартной теории возмущения для ФГ [4], с этой целью вводим массовый оператор М(E) и переписываем (11) в следующем виде:

$$\left[E-\omega_n-M(E)\right] << \mathrm{I}_{\mathrm{e}}^{+}\left|I_{e'}^{-}\right. >> = -\delta ee', \tag{12}$$

здесь

$$M(E)=M_1(E)+M_2(E) \tag{13}$$

очевидно, что $M(E)$ должен удовлетворять уравнению:

$$\left[M_1(E)+M_2(E)\right] << I_e^{+}\left|I_{e'}^{-}\right. >> = \frac{a}{\hbar} << S_e^z I_e^{+}\left|I_{e'}^{-}\right. >> + \frac{G}{\hbar} << \sigma^z(R_e) I_e^{+}\left|I_{e'}^{-}\right. >>. \tag{14}$$

Очевидно, что задача свелась к отысканию $M_1(E)$ и $M_2(E)$. Соотношения (12), (13) и (14) показывают, что $M_1(E)$ и $M_2(E)$ должны удовлетворять следующим уравнениям:

$$M_1(E) << I_e^{+}\left|I_{e'}^{-}\right. >> = \frac{a}{\hbar} << S_e^z I_e^{+}\left|I_{e'}^{-}\right. >>. \tag{15}$$

$$M_2 << I_e^{+}\left|I_{e'}^{-}\right. >> = \frac{G}{\hbar} << \sigma^z(R_e) I_e^{+}\left|I_{e'}^{-}\right. >>. \tag{16}$$

Для нахождения M_1 и M_2 дифференцируем ФГ стоящие справа в (15), (16) по второму временному аргументу:

$$\begin{aligned} -(E-\omega_n) << S_e^z I_e^{+}\left|I_{e'}^{-}\right. >> &= < S_e^z > \delta ec' - \frac{a}{\hbar} << S_e^z I_e^{+}\left|S_{e'}^z I_{e'}^{-}\right. >> - \\ &-\frac{1}{\hbar} G << S_e^z I_e^{+}\left|\sigma^z(R_{e'}) I_{e'}^{-}\right. >> \end{aligned} \tag{17}$$

$$\begin{aligned} -(E-\omega_n) << \sigma^z(R_e) I_e^{+}\left|I_{e'}^{-}\right. >> &= <\sigma^z(R_c)> \delta ce' - \frac{1}{2\hbar} a << \sigma^z(R_c) I_e^{+}\left|S_e^z I_{e'}^{-}\right. >> - \\ &-\frac{1}{\hbar} G << \sigma^z(R_c) I_e^{+}\left|I_{e'}^{-}\sigma^z(R_{c'})\right. >>. \end{aligned} \tag{18}$$

Для дальнейших вычислений записываем уравнения движения для ФГ стоящих в правой части уравнений (17) и (18) .

$$(E-\omega_n-p) << S_e^z I_e^{+}\left|S_{e'}^z I_{e'}^{-}\right. >> = -< S_e^z S_{e'}^z > \delta ee', \tag{19}$$

где в поляризационный оператор P вносят вклад все взаимодействия $P=P_{\sigma s}+P_{sI}+P_{ss}$ и должны удовлетворять следующим соотношениям:

$$P_{\sigma s} << S_e^z I_e^{+}\left|S_{e'}^z I_{e'}^{-}\right. >> = \frac{J}{2\hbar}\left[<< S_e^{-}\sigma^{+}(R_e) I_e^{+}\left|S_{e'}^z I_{e'}^{-}\right. >> - << S_e^z \sigma^{-}(R_e) I_e^{+}\left|S_{e'}^z I_{e'}^{-}\right. >>\right] \tag{20}$$

$$P_{sI} << S_e^z I_e^+ \left| S_{e'}^z I_{e'}^- \right. >> = \frac{a}{\hbar} << S_e^z S_e^z I_e^+ \left| S_{e'}^z I_{e'}^- \right. >> \qquad (21)$$

$$P_{ss} << S_e^z I_e^+ \left| S_{e'}^z I_{e'}^- \right. >> = \frac{1}{\hbar} \sum_i B_{ie} \left(<< S_i^+ S_e^- I_e^+ \left| S_{e'}^z I_{e'}^- \right. >> - << S_e^+ S_i^- I_e^+ \left| S_{e'}^z I_{e'}^- \right. >> \right) \qquad (22)$$

Явный вид поляризационных операторов представляют самостоятельный интерес и $P_{\sigma s}$; P_{ss} ; P_{sI} найдены с помощью (20), (21), (22)

$$P_{ss}(E) = \frac{2}{\hbar^2} \sum_i B_{1c}^2 \frac{1 - 4 < S_1^z >< S_1^z >}{E - \omega_n - \frac{a}{\hbar} < S_e^z >} \qquad (23)$$

$$P_{sI}(E) = \frac{1}{\hbar} a < S_e^z > + \frac{a^2}{4\hbar^2 (E - \omega_n)} \qquad (24)$$

$$P\sigma s(E) = \frac{J^2}{\hbar^2} \left\{ \frac{\left[\frac{1}{4} - < S^z >< \sigma^z (R_e) > \right] - \left[< S_e^z > - < \sigma^z (R_e) > \right] < I_e^z >}{E - \omega_n - \omega_s - \omega_\sigma + \varepsilon(k+q) - \varepsilon(k)} \right\} +$$
$$+ \frac{\left[1/4 - < S_e^z >< \sigma^z (R_e) > \right] + \left[< S_e^z > - < \sigma^z (R_e) > \right] < I_e^z >}{E - \omega_n - \omega_\sigma - \varepsilon(k) - \varepsilon(k+q)} \qquad (25)$$

Записываем уравнение движения для ФГ $<< S_e^z I_e^+ \left| \sigma^z (R_{e'}) I_{e'}^- \right. >>$ которая входит в (17):

$$(E - \omega_n - P_1) << S_e^z I_e^+ \left| \sigma^z (R_{e'}) I_{e'}^- \right. >> = - < S_e^z >< \sigma^z (R_{e'}) > \delta ee' , \qquad (26)$$

где $P_1 = P_{1sI} + P_{1\sigma I}$, $P_{1sI}, P_{1\sigma I}$ должны удовлетворять следующие уравнения.

$$P_{1sI} << S_e^z I_e^+ \left| \sigma^z (R_{e'}) I_{e'}^- \right. >> = \frac{1}{2\hbar} a \sum_e << S_e^z S_e^z I_e^+ \left| \sigma^z (R_{c'}) I_{e'}^- \right. >> \qquad (27)$$

$$P_{1\sigma I} << S_e^z I_e^+ \left| \sigma^z (R_{e'}) I_{e'}^- \right. >> = \frac{1}{\hbar} G << S_e^z \sigma^z (R_e) I_e^+ \left| \sigma^z (R_{c'}) I_{e'}^- \right. >> . \qquad (28)$$

P_{1sI} и $P_{1\sigma I}$ представляют самостоятельный интерес и будут найдены согласно (27) и (28). Используя соотношения (15), (17), (19) и (26) находим массовый оператор M_1

$$M_1 = \frac{1}{2\hbar} a < S_e^z > + \frac{1}{4\hbar^2} \frac{a^2 < S_e^z S_e^z >}{E - \omega_n - P} + \frac{1}{2\hbar} aG \frac{< S^z >< \sigma^z >}{E - \omega_n - P_1} . \qquad (29)$$

Проведя аналогично вышеприведенным процедуру вычислений находим M_2:

$$M_2 = \frac{1}{\hbar} G < \sigma^z(R_e) > + \frac{1}{2\hbar} aG \frac{< \sigma^z(R_e) >< S_e^z >}{E - \omega_n - P_2} + \frac{1}{\hbar^2} G^2 \frac{< \sigma^z(R_e)\sigma^z(R_{e'}) >}{E - \omega_n - P_3} \ . \quad (30)$$

Поляризационные операторы P_2 и P_3 могут быть найдены составлением уравнений подобным (28) и (29).

Суммарный массовый оператор находим, используя (29) и (30):

$$M(E) = \delta + \frac{a_z^2}{\omega_1 - P_0} + \frac{g_z^2}{\omega_0 - P_3} + b_z^2 \left(\frac{1}{\omega_0 - P_1} + \frac{1}{\omega_0 - P_2} \right) \quad (31)$$

Здесь $\delta = \delta_1 + \delta_2$; $\delta_1 = \frac{1}{2\hbar} a < S_e^z >$; $\delta_2 = \frac{1}{\hbar} G < \sigma^z(R_e) >$

$$a_z^2 = a^2 < S_e^z S_{e'}^z >; \quad \omega_1 = E - \omega_n - \delta; \quad P_0 = P - \delta;$$

$$g_z^2 = \frac{G^2}{\hbar^2} < \sigma^2(R_e)\sigma^2(R_{e'}) >; \quad b_z^2 = \frac{1}{2\hbar^2} aG < \sigma^z(R_e) >< S_e^z .$$

Явный вид массового оператора M(E) позволяет нам найти искомую ФГ используя соотношение (12)

$$G(\omega) = (\omega_1 - P_0)(\omega_0 - P_1)(\omega_0 - P_2)(\omega_0 - P_3)\{a_z^2(\omega_0 - P_1)(\omega_0 - P_2)(\omega_0 - P_3) + g_z^2(\omega_1 - P_0) \times$$
$$\times (\omega_0 - P_1)(\omega_0 - P_2) + g_z^2(\omega_1 - P_0)(\omega_0 - P_3)[(\omega_0 - \mathrm{P}_1) + (\omega_0 - P_2)]\}^{-1}. \quad (32)$$

Из полученных нами выражений (31) и (32) видно, что в общем случае произвольных флуктуаций локального магнитного поля на резонирующих ядерных спинах в массовый оператор и ФГ все взаимодействия вносят свой вклад. Контактные и спин – ядерные сверхтонкие взаимодействия дополнительно вносят свой комбинированный вклад.

Явный вид антикоммутаторной ФГ (32) нам позволяет после простых стандартных вычислений найти ФЛ ЯМР $f(\omega) = \mathrm{Im}\, G^R(\omega)$. Как и ожидалось она оказывается в общем случае довольно сложной и громоздкой и не имеет практический смысл приводить здесь явный вид кривой поглощения. Рассмотрим два интересных для экспериментальных исследований случая быстрых и медленных флюктуациях локального магнитного поля.

В случае быстрых флуктуаций ($\gamma_0 >> a_z$; $\gamma_3 >> g_z$; $\gamma_1 >> b_z$; $\gamma_2 >> b_z$) ФЛ ЯМР $f(\omega)$ имеет нижеприведенный вид:

$$f(\omega) = \frac{\Delta}{\omega_1^2 + \Delta^2} \quad (33)$$

$$\Delta = \frac{a_z^2}{\gamma_0} + \frac{g_z^2}{\gamma_3} + b_z^2 \left(\frac{1}{\gamma_1} + \frac{1}{\gamma_2} \right), \quad (34)$$

где $\omega_1 = \omega - \omega_n - \delta$; $\gamma_0 = \mathrm{Im}\, P_0$; $\gamma_3 = \mathrm{Im}\, P_3$; $\gamma_1 = \mathrm{Im}\, P_1$; $\gamma_2 = \mathrm{Im}\, P_2$.

Здесь необходимо отметить, что γ_0, γ_1, γ_2, γ_3 являются вероятностями перехода электронных спинов обусловленными имеющимися взаимодействиями. Найденные формулы (33) и (34) показывают, что в случае быстрых флуктуаций кривая ЯМР получается лоренцевой линией с полушириной Δ, сдвинутая с резонансной частоты на величину δ. Формула (34) показывает, что в Δ вносят вклад контактные и спин-спиновые взаимодействия аддитивно и комбинированно. Комбинированные вклады $\delta_k = b_z^2\left(\frac{1}{\gamma_1}+\frac{1}{\gamma_2}\right)$, возникающие из-за интерференционных эффектов могут быть важными при сверхнизких температурах. Условием наблюдаемости ЯМР в данном случае является:

$$\omega_n >> \Delta .$$

При быстрых флуктуациях легко оценить по сдвигу резонансной линии $\delta_1 = \frac{1}{2\hbar} a < S_e^z >$; $\delta_2 = G < \sigma^z(R_e) >$ величины a и G контактных и спин ядерных сверхтонких взаимодействий. При медленных флуктуациях локального магнитного поля $(\gamma << az; \gamma_3 << \mathrm{gz}; \gamma_1 << b_z; \gamma_2 << b_z)$ $f(\omega)$ имеет следующий вид:

$$f(\omega) = \frac{\Delta_1}{(\omega_1 - a_z)^2 + \Delta_1^2} . \tag{35}$$

В данном случае получаем Лоренцову линию с полушириной Δ_1, сдвинутой от резонансной частоты на величину δ_3.

Здесь,

$$\Delta_1 = \frac{1}{2}(\gamma_0 + \gamma_1 + \gamma_2 + \gamma_3) \tag{36}$$

$$\delta_3 = \delta + az . \tag{37}$$

Формулы (36) и (37) позволяют, измерив ширину и сдвиг резонансной линии, оценить важные параметры взаимодействий.

В случае медленных флуктуаций локального поля условием наблюдаемости ЯМР является:

$$\omega_n >> \Delta_1 .$$

ЛИТЕРАТУРА

1. Furdyna J.K. Diluted Magnetic Semiconductov J.App.Phys 64(4), 29-64,15, August, 1988
2. Tyablikov S.V. Methods in the Quantum Theory of Magnetism, Plenum Press, New York 1967, 361 p.
3. Abragam A. The Principles ot Nuclear Magnetism, 618 p.
4. Алиев М.Н Изв. Вузов. сер физика 8, 126, 1978

YARIMMAQNİT YARIMKEÇİRİCİLƏRDƏ AŞAĞI TEMPERATURLARDA PARAMAQNİT İONLARIN NÜVƏ MAQNİT REZONANSININ NƏZƏRİYYƏSİ

M.N.ƏLİYEV

XÜLASƏ

Analitik Qrin funksiyası metodu ilə yarımmaqnit yarımkeçiricilərdə aşağı temperaturlarda paramaqnit aşqarların nüvə maqnit rezonansının nəzəriyyəsi inkişaf etdirilmişdir. Rezonans Lorents xəttinin forması, eni və sürüşməsi lokal maqnit sahəsinin sürətli və yavaş fluktuasiyası hallarında hesablanmışdır.

Açar sözlər: nüvə maqnit rezonansı, yarımmaqnit yarımkeçiricilər, Qrin funksiyaları, həyacanlaşma nəzəriyyəsi.

THEORY OF MAGNETIC RESONANCE IN SEMIMAGNETIC SEMICONDUCTORS AT LOW TEMPERATURES ON NUCLEI PARAMAGNETIC IONS

M.N.ALIYEV

SUMMARY

The theory of the magnetic resonance line shape on nuclei of paramagnetic impurities was developed with the help of the analytical Greens function method in semimagnetic semiconductors at low temperatures. The line shape, the linewidth and the line shift of the Lorentzian resonance line at slow and rapid fluctuations of the local magnetic field are calculated.

Key words: nuclear magnetic resonance, semimagnetic semiconductors, Green functions, perturbation theory.

Поступила в редакцию: 01.07.2015 г.
Подписано к печати: 17.11.2015 г.