Изв. АН Армянской ССР, Физика, 11, 380—384 (1976)

АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ НЕКОТОРЫХ ЗАДАЧ „ВНЕШНЕЙ" РЕЛАКСАЦИИ

И. В. АЛЕКСАНДРОВ, Р. Г. ГАБРИЕЛЯН

Двухуровневая модель „внешней" релаксации, обусловленной модуляцией взаимодействия диффузионным движением, рассчитана с учетом конечного размера диффундирующих частиц.

1. Учет конечной величины наименьшего сближения частиц в задачах „внешней" релаксации

В работе [1] был предложен математический аппарат, позволяющий для двухуровневой модели анализировать задачу так называемой „внешней" релаксации [2] вне рамок теории возмущений. Пространственная диффузия частиц, которая обуславливает релаксационные переходы ядер, в [1] считается свободной во всем пространстве, однако это не соответствует реальным физическим ситуациям. В настоящей работе рассматривается случай диффузионного движения частиц, имеющих конечный радиус сближения.

Как и в [1], будем рассматривать двухуровневую систему, гамильтониан которой есть

$$H = \frac{1}{2}\,\Omega(t)\,\sigma_z, \quad \Omega(t) = \sum_l \omega(M_l,\ \mathbf{r}_l(t)), \tag{1}$$

где σ_z — матрица Паули, $\omega(M_l,\ \mathbf{r}_l(t))$ в единицах частоты представляет взаимодействие двухуровневой системы с частицей l; $\mathbf{r}_l$ — радиус-вектор, соединяющий рассматриваемую частицу (к которой относится σ_z) с частицей l; M_l — случайный параметр, не меняющийся за время взаимодействия.

В [1] показано (см. также [3]), что рассматривая $\mathbf{r}_l$ как случайный процесс, стохастические свойства которого определяются диффузионным уравнением с коэффициентом диффузии D, асимптотический вид релаксационной функции $\sigma^+(t)$ при больших t, отвечающий гамильтониану (1), можно представить выражением

$$\sigma^+(t) = \exp\left[\, i\Delta\omega \cdot t - \frac{|t|}{T_2} \right], \tag{2}$$

где T_2 отвечает времени релаксационного перехода между состояниями $\sigma_x = 1$ и $\sigma_x = -1$, а $\Delta\omega$ представляет релаксационный сдвиг. Для величин T_2 и $\Delta\omega$ (как раз они представляют интерес в приложениях) в [1] найдены простые аналитические формулы

$$\begin{aligned} \frac{1}{T_2} &= 4\pi CD\,\mathrm{Re}\,(A_{\nu_M}\lambda_M), \\ \Delta\omega &= -4\pi CD\,\mathrm{Im}\,(A_{\nu_M}\lambda_M), \end{aligned} \tag{3}$$

Av_M означает усреднение по случайному параметру M, λ — длина рассеяния [4], отвечающая уравнению шредингеровского типа с мнимым потенциалом

$$R'' + \frac{2}{r} R' + \left(k^2 + i \frac{\omega(M, r)}{D} \right) R = 0, \tag{4}$$

$$\lambda_M = - \lim_{k \to 0} \frac{\partial \delta_M}{\partial k}, \tag{4a}$$

δ_M — фаза рассеянной s-волны.

Приведенные выше результаты получены для „свободной" диффузии частиц. В действительности $D = \mathrm{const}$ всюду, за исключением малой сферы радиуса r_0, где $D = 0$; величина r_0 отвечает наименьшему возможному сближению частиц.

Все выкладки работы [1] и в этом случае могут быть буквально повторены, с той лишь разницей, что вместо условия ограниченности в нуле на решения уравнения (4) должно быть наложено условие

$$\left. \frac{\partial R}{\partial r} \right|_{r=r_0} = 0. \tag{5}$$

Интересно отметить следующее обстоятельство. Если вычислить длину рассеяния λ'_M для обрезанного потенциала

$$q'^2(M, r) = \begin{cases} q^2(M, r) = \dfrac{\omega(M, r)}{D}, & r > r_0 \\ 0, & r < r_0, \end{cases} \tag{6}$$

то эта величина совпадает с длиной рассеяния, полученной с потенциалом $q^2(M, r)$ и граничным условием (5). В самом деле, пользуясь обрезанным потенциалом (6), мы должны при отыскании фазы $\delta_M(k)$ сшивать в точке $r = r_0$ решение радиального уравнения

$$R'' + \frac{2}{r} R' + (k^2 + iq^2) R = 0 \tag{7}$$

при $r > r_0$ с решением уравнения „свободного движения"

$$R'' + \frac{2}{r} R' + k^2 R = 0 \tag{7a}$$

при $r < r_0$. Но ограниченное в нуле решение есть

$$R_k(r) = \mathrm{const} \frac{\sin kr}{r}, \tag{7б}$$

а так как при вычислении λ_M нас интересуют (согласно (4a)) лишь малые значения k, то фактически формула (7б) эквивалентна условию $R = \mathrm{const}$, $\left. \frac{\partial R}{\partial r} \right|_r = 0$, т. е. сшивание решений для малых k эквивалентно граничному условию (5), что и доказывает сделанное выше утверждение.

Итак, чтобы при вычислении времени T_2 и релаксационного сдвига $\Delta\omega$ учесть конечную величину r_0 наименьшего возможного сближения взаимодействующих частиц, достаточно, воспользовавшись формулами (3), принять во внимание при вычислении длины рассеяния λ_M граничное условие (5), накладываемое на уравнение (4), или решить это уравнение с обрезанным потенциалом (6). Некоторые примеры таких расчетов приведены в разделе 2.

2. Примеры

В качестве примеров мы рассмотрим случаи, когда потенциал в уравнении (4) зависит от r экспоненциально или по степенному закону.

Пусть взаимодействие $\omega(M, \mathbf{r})$ в (1) имеет вид

$$\omega(M, \mathbf{r}) = \omega(r) = \omega_{int} \exp\{-\alpha(r - r_0)\}, \tag{8}$$

$\omega_{int} = \omega(r_0)$ — потенциал на сфере радиуса r_0; зависимость взаимодействия ω от случайного параметра M мы игнорируем, чтобы не делать формулы слишком громоздкими.

Общее решение уравнения (4) с потенциалом (8) можно найти, сделав замену переменных

$$R(r) = \frac{u(r)}{r}, \quad \exp\left\{-\frac{\alpha(r - r_0)}{2}\right\} = \xi.$$

Применение граничного условия (5) в точке $r = r_0$ позволяет определить вес каждого из двух линейно независимых решений, а это, в свою очередь, позволяет определить асимптотический вид функции $R(r)$ и, следовательно, фазу $\delta(k)$. Проделав все это, получим

$$\lambda = -\lim \frac{\partial\delta}{\partial k} = \frac{2}{\alpha}\left[\ln\frac{\beta}{2} + c + \frac{\alpha r_0}{2}\right] - \frac{\pi}{\alpha}\,\frac{\beta N_1(\beta) - \frac{2}{\alpha r_0} N_0(\beta)}{\beta J_1(\beta) - \frac{2}{\alpha r_0} J_0(\beta)}, \tag{9}$$

где $\beta = 2\sqrt{i\frac{\omega_{int}}{D\alpha^2}}$, c — постоянная Эйлера, J_n и N_n — соответственно функции Бесселя и Неймана.

Выражение (9) существенно упрощается в случае слабых ($\omega_{int} \ll D\alpha^2$) или сильных ($\omega_{int} \gg D\alpha^2$) взаимодействий. В первом случае находим

$$\begin{aligned}\lambda = \lambda_B = &-i\frac{\omega_{int}}{D\alpha^2}\left[2 + \alpha r_0 + \frac{2}{\alpha r_0}\right] r_0 + \\ &+\left(\frac{\omega_{int}}{D\alpha^2}\right)^2\left[(\alpha r_0)^2 + \frac{5}{2}\alpha r_0 + \frac{5}{2} + \frac{5}{4\alpha r_0}\right] r_0,\end{aligned} \tag{10}$$

что совпадает с борновским приближением в квантовой механике [4] (или с приближением Блоха-Редфильда в теории ЯМР). Величина T_2^{-1} пропорциональна вещественному слагаемому в (10)

$$\frac{1}{T_2} = 4\pi CD\left(\frac{\omega_{int}}{D\alpha^2}\right)^2\left[(\alpha r_0)^2 + \frac{5}{2}\alpha r_0 + \frac{5}{2} + \frac{5}{4\alpha r_0}\right] r_0. \qquad (11)$$

Из (11) видно, что если взаимодействие $\omega(r)$ не зависит от размера частиц и экспоненциально убывает с расстоянием между центрами этих частиц, то T_2^{-1} экспоненциально падает с увеличением линейного размера частиц (т. е. с увеличением r_0).

В случае сильного взаимодействия из (10) и (3) имеем

$$\frac{1}{T_2} = 4\pi CD\,\frac{1}{\alpha}\ln\frac{\omega_{int}}{D\alpha^2}; \qquad (12)$$

при тех же условиях, что и в предыдущем случае ($\omega_{int} = \omega_0 e^{-\alpha r_0}$), величина T_2^{-1} линейно падает с ростом r_0.

Рассмотрим теперь случай степенной зависимости $\omega(r)$

$$\omega(r) = \omega_{int}\left(\frac{r_0}{r}\right)^n, \quad n > 3, \qquad (13)$$

$\omega_{int} = \omega(r_0)$ — потенциал взаимодействия на поверхности барьера.

Обычным образом находим длину рассеяния

$$\lambda = -\frac{J_{\frac{n-3}{n-2}}(\beta)}{J_{-\frac{n-3}{n-2}}(\beta)}\,\frac{\Gamma\left(\frac{n-3}{n-2}\right)}{\Gamma\left(\frac{n-1}{n-2}\right)}\left(\frac{\beta}{2}\right)^{\frac{2}{n-2}} r_0, \qquad (14)$$

где $\beta = \frac{2}{n-2}\sqrt{i\,\frac{\omega_{int}}{\omega_D}}$, $\omega_D = \frac{D}{r_0^2}$ представляет собой частоту диффузионного „столкновения“.

Учитывая (3) и (14), можно найти выражение для скорости релаксации в случае быстрой диффузии $\omega_{int} \ll \omega_D$ (которое имеет место в не очень вязких жидкостях)

$$\frac{1}{T_2} = \frac{8\pi C}{(n-2)(2n-5)}\,D\left(\frac{\omega_{int}}{\omega_D}\right)^2 r_0, \qquad (15)$$

что с точностью до несущественного множителя совпадает с формулой для T_2^{-1} из теории БПП [5].

В случае же слабой диффузии ($\omega_{int} \gg \omega_D$) при $n = 6$ имеем

$$\frac{1}{T_2} \sim 4\pi CD\,\frac{\Gamma(3/4)}{2\,\Gamma(5/4)}\left(\frac{\omega_{int}}{\omega_D}\right)^{1/4} r_0. \qquad (16)$$

Институт химической физики
АН СССР

Поступила 16.XII.1975

ЛИТЕРАТУРА

1. *I. V. Alexandrov, L. G. Karamjan.* Mol. Phys., 24, 1313 (1972).
2. *Н. Н. Корст.* Докторская диссертация, Москва, 1974.
3. *И. В. Александров.* Теория магнитной релаксации, М., 1975.
4. *Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц.* Квантовая механика, М., 1974.
5. *N. Bloembergen, E. Pursell, R. Pound.* Phys. Rev., 73, 679 (1948).

«ԱՐՏԱՔԻՆ» ՌԵԼԱՔՍԱՑԻԱՅԻ ՄԻ ՇԱՐՔ ԽՆԴԻՐՆԵՐԻ ԱՆԱԼԻՏԻԿ ԼՈՒԾՈՒՄԸ

Ի. Վ. ԱԼԵՔՍԱՆԴՐՈՎ, Ռ. Գ. ԳԱԲՐԻԵԼՅԱՆ

Դիտարկված է «արտաքին» ռելաքսացիայի խնդիրը (երկմակարդականի մոդել), որը պայմանավորված է դիֆուզիոն շարժմամբ փոխազդեցության մոդուլյացիայով։ Հաշվի է առնված մասնիկների վերջավոր չափսերը։

ANALYTICAL SOLUTIONS OF SOME „EXTERNAL" RELAXATION PROBLEMS

I. V. ALEKSANDROV, R. G. GABRIELYAN

The two level model of the relaxation process due to the diffusional modulation of the interaction is discussed taking into account the finiteness of particles size.