

щего множителя вблизи момента формирования эха и от соотношения времени поперечной обратимой релаксации  $T_2^*$  и  $T$  ( $\tau_2$ ). Период модуляции  $T$  ( $\tau_2$ ) имеет определенное значение для различных сигналов эха, что также существенно в определении формы откликов системы. Например, для  $I=5 \text{ Co}^{60}$  при  $\tau_2^3=7\tau_{1/2}$ ,  $9\tau_{1/2}$  период модуляции квадрупольными взаимодействиями имеет значение  $\pi/2a$ , а при  $\tau_2^3=\tau_1 - 2\pi/a$ , при  $\tau_2^3=\tau_1/8$ ,  $3\tau_1/8$ ,  $5\tau_1/8$ ,  $7\tau_1/8$ ,  $9\tau_1/8$  —  $\pi/8a$ , при  $\tau_2^3=7\tau_{1/4}$ ,  $\tau_{1/4}$ ,  $\pi/4a$  и т. д. В результате форма сигналов эха в принципе в различные моменты времени отличается. Что касается эха при  $\tau_1/10$ ,  $3\tau_1/10$ ,  $7\tau_1/10$ ,  $9\tau_1/10$ , то они не модулированы вообще.

Наблюдение эха в УРГИ является информативным в исследованиях электрических квадрупольных взаимодействий в ферромагнетиках. Эффект модуляции амплитуды эха с изменением  $\tau_1$ , а также определенная зависимость ее от соотношения  $\omega_1$  и  $a$ , чувствительность к знаку  $a$ , наконец, форма сигнала эха в принципе позволяют получить богатую информацию о величинах  $a$  и  $\omega_1$ . Изменение ориентации монокристалла изменяет угол  $\theta$  и, следовательно, влияет на эффект модуляции.

#### Л и т е р а т у р а

- [1] Callaghan P. T., Johnston P. D., Stone N. J. J. Phys. C.: Sol. St. Phys., 1974, vol. 7, p. 3161—3181.
- [2] Wilson G. V. H., Chaplin D. H. Hyp. Int., 1981, vol. 10, p. 1081—1100.
- [3] Шахмурамова Л. Н. Изв. АН СССР, 1986, т. 50, № 12, с. 2296—2303.
- [4] Back P. J., Chaplin D. H., Foster H. R., Stewart G. A., Wilson G. V. H. Hyp. Int., 1985, vol. 22, p. 193—198.
- [5] Foster H. R., Cooke P., Chaplin D. H., Lynam P., Wilson G. V. H. Phys. Rev. Lett. 1977, vol. 38, N 26, p. 1546—1549.
- [6] Abe H., Yasuoka H., Hirai A. J. Phys. Soc. Jap., 1966, vol. 21, N 1, p. 77—89.

Казанский государственный  
педагогический институт  
Казань

Поступило в Редакцию  
25 января 1988 г.

## ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СПЕКТРАЛЬНОЙ ДИФФУЗИИ В СТЕКЛАХ: НЕЛИНЕЙНОЕ РЕЗОНАНСНОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ И ВЫЖЖЕННАЯ ДЫРА

Д. А. Паршин, В. Н. Соловьев

Известно, что многие свойства стекол при низких температурах обусловлены существованием в них так называемых двухуровневых систем (ДУС) [1]. В настоящей работе проведены численные расчеты нелинейного резонансного поглощения и выжженной дыры. Этим вопросам посвящено много работ [2—4], однако количественная теория при больших интенсивностях развита недостаточно. Связано это с тем, что рассматриваемые эффекты осложнены явлением спектральной диффузии — случайного изменения во времени энергии резонансной ДУС  $e$  за счет взаимодействия с тепловыми ДУС (расстояние между уровнями, энергии которых  $E \leq T$ , где  $T$  — температура) [2—4]. Взаимодействие переменного поля частоты  $\omega$  с резонансной ДУС характеризуются матричным элементом  $\hbar F/2$  для перехода между уровнями, где  $F$  есть не что иное как частота Раби для резонансной ДУС (частота когерентных осцилляций заселенности ДУС под действием резонансного возмущения). Другим параметром теории является

ширина  $\gamma$  уровней резонансной ДУС, обусловленная испусканием и поглощением фононов с энергией  $e$ . Взаимодействие с тепловыми ДУС имеет характерную величину  $1/\tau_d = D^2 P T / \hbar \rho v^2$ , где  $P$  — плотность состояний ДУС,  $\rho$  — плотность стекла,  $v$  — средняя скорость звука,  $D$  — некоторое среднее значение деформационного потенциала. Наконец, важна частота скачков тепловых ДУС  $\Gamma_0$ , равная  $\Gamma_0 \simeq D^2 T^3 / \rho \hbar^4 v^5$ . В типичной для эксперимента ситуации имеем  $\gamma \ll \Gamma_0 \ll \sqrt{\Gamma_0 / \tau_d}$ . Для нее и будут проведены все расчеты.

Рассмотрим систему из  $N$  равновероятно распределенных в объеме  $V$  тепловых ДУС. Радиус-вектор  $r_i$   $i$ -й тепловой ДУС определяется тройкой чисел:  $(x_i, y_i, z_i)$ , задаваемой генератором случайных чисел (ГСЧ). В начало системы координат поместим резонансную ДУС. Среднее расстояние между тепловыми ДУС  $r_0 = (3V/4\pi N)^{1/3}$ . Изменение собственной частоты резонансной ДУС, обусловленное взаимодействием с тепловыми соседями, равно

$$\Delta\omega(t) = \sum_{i=1}^N J_0 \left( \frac{r_0}{r_i} \right)^3 \tilde{\xi}_i(t). \quad (1)$$

Здесь  $\tilde{\xi}_i$  — случайная функция времени, описываемая телеграфным процессом. Она попеременно принимает значения  $+1$  и  $-1$  в случайные моменты времени. Средняя частота скачков равна  $\Gamma_0$ . Заметим, что  $1/\tau_d \simeq J_0$ .

Времена жизни соответственно резонансной и тепловой ДУС равны  $1/\gamma$  и  $1/\Gamma_0 \ll 1/\gamma$ . В течение временного интервала  $\Delta t = 1/\Gamma_0 N$  случайно выбранная ГСЧ тепловая ДУС совершает скачок. На следующем шаге переворачивается какая-нибудь другая (или та же самая) тепловая ДУС и т. д. На каждом  $i$ -м шаге для данного  $z$  решается система уравнений для диагональной  $n$  и недиагональной  $f$  компонент матрицы плотности резонансной ДУС [4]

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial t} &= -\gamma(n - n_0) - F \operatorname{Re} f, \\ \frac{\partial \operatorname{Re} f}{\partial t} &= F \left( n - \frac{1}{2} \right) + s \operatorname{Im} f - \frac{\gamma}{2} \operatorname{Re} f, \\ \frac{\partial \operatorname{Im} f}{\partial t} &= -s \operatorname{Re} f - \frac{\gamma}{2} \operatorname{Im} f. \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

Здесь  $n_0 = [\exp(e/T + 1)]^{-1}$  — равновесная заселенность верхнего уровня резонансной ДУС;  $z = \omega - e/\hbar$  — величина отстройки резонансной ДУС;  $s = z - \Delta\omega(t)$ .

Для численного решения системы (2) использована неявная схема интегрирования. Для уравнения  $du/dt + \psi(u, t) = 0$  она имеет вид  $u^{i+1} = u^i + \frac{\Delta t}{2} (\psi^i + \psi^{i+1})$  [5].

В моменты времени  $t = k/\gamma$  ( $k=1, 2, \dots$ ) находятся средние

$$\operatorname{Re} \langle f \rangle_k = \frac{\Delta t}{k/\gamma} \sum_{i=1}^{k/\gamma} \operatorname{Re} f^i, \quad (3)$$

$$\langle n - n_0 \rangle_k = \frac{\Delta t}{k/\gamma} \sum_{i=1}^{k/\gamma} (n^i - n_0). \quad (4)$$

Проверяется также неравенство, имеющее место в стационарном случае

$$\operatorname{Re} \langle f \rangle_k = -\frac{\gamma}{F} \langle n - n_0 \rangle \quad (5)$$

и вытекающее из первого уравнения системы (2). Если средние (3) и (4) на  $k$ -м и  $(k+1)$ -м отрезках времени равны в пределах заданной точности, а также с той же степенью точности выполняется равенство (5), опреде-

ляется «стационарный» коэффициент поглощения для резонансной ДУС с фиксированной расстройкой  $z$

$$\alpha(z) = -\frac{2}{F} \operatorname{Re} \langle f \rangle. \quad (6)$$

Далее расчет производится для другого  $\alpha(z)$ , и суммарный коэффициент поглощения  $\alpha(F)$  для заданной конфигурации тепловых ДУС находится интегрированием  $\alpha(z)$  по всем  $z$  (дающим существенный вклад). Затем расчет повторяется для новой случайной конфигурации и полученные результаты усредняются.

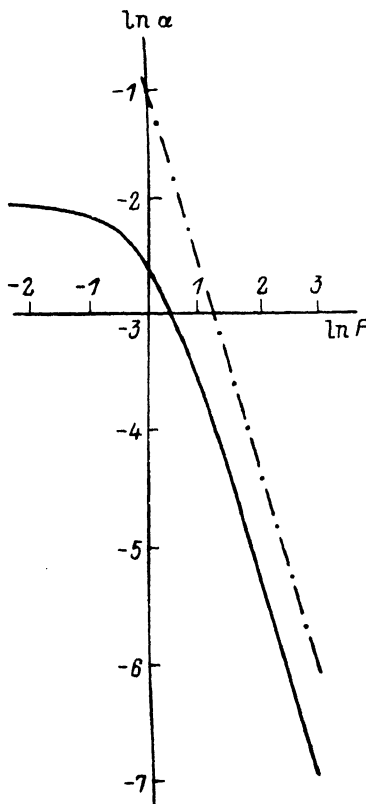


Рис. 1. Зависимость нелинейного коэффициента поглощения в стационарном случае.

Штрихпунктирной прямой проведена зависимость  $\alpha \sim F^{-2}$ .

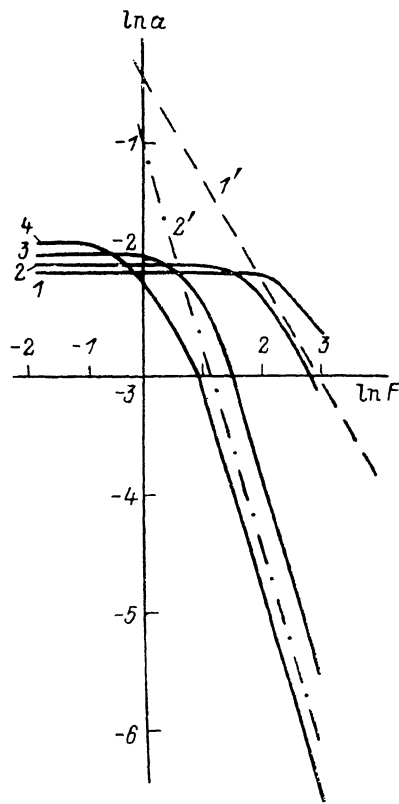


Рис. 2. Нестационарный случай.

Кривая 1 соответствует длительности импульса  $t = \Gamma_0^{-1}/10$ , 2 —  $t = \Gamma_0^{-1}/5$ , 3 —  $t = \Gamma_0^{-1}$ , 4 —  $t = 4\Gamma_0^{-1}$ . Штриховая линия отвечает зависимости  $\alpha \sim F^{-1}$ , штрихпунктирная — зависимости  $\alpha \sim F^{-2}$ .

В нестационарном режиме усреднение (3) и расчет коэффициента поглощения производились для текущего значения времени  $t = (1, 2, \dots) \Delta t$ .

Для формы выжженной дыры имеем [4]

$$\Delta Q = \left\langle \int de \Delta n_{\omega-e; \hbar} (t) \delta(\omega_1 - e/\hbar - \Delta\omega(t)) \right\rangle_t = \langle \Delta n_{\omega-\omega_1+\Delta\omega}(t) \rangle_t \equiv \Delta Q(\omega - \omega_1), \quad (7)$$

где  $\omega_1$  — частота пробного импульса малой интенсивности, а  $\Delta n_z(t) = n - n_0$  в момент времени  $t$  для резонансной ДУС с отстройкой, равной  $z$ . Из (7) следует алгоритм расчета. Действительно, найдем  $\Delta n(t)$  для всех возможных значений отстройки  $z$ . Тогда, согласно (7), для каждого момента времени следует выбрать такое  $\Delta n$ , для которого имеет место равенство  $\omega - \omega_1 + \Delta\omega(t) = z$ . Интеграл по всем  $t$  для выбранных таким образом  $\Delta n$  и определяет форму выжженной дыры.

Расчеты проводились для следующего набора данных: число тепловых ДУС  $N=50$ ,  $\Gamma_0=1$ ,  $\gamma=0.1$ ,  $J_0=10$ , шаг при интегрировании по отстройке

$dz=0.3$ , число конфигураций, по которым проводилось усреднение 10, точность расчета  $\approx 5\%$ .

Результаты расчета приведены на рис. 1—3. Из рис. 1 видно, что, начиная с критического значения поля  $F_c \approx \sqrt{\gamma/\tau_1}$  [4], коэффициент поглощения  $\alpha$  убывает с ростом интенсивности  $\sim F^{-2}$ , т. е. обратно пропорционально интенсивности. В ряде опытов наблюдалась зависимость  $F^{-1}$  [2]. Дело, видимо, заключается в том, что в выполненных экспериментах дли-

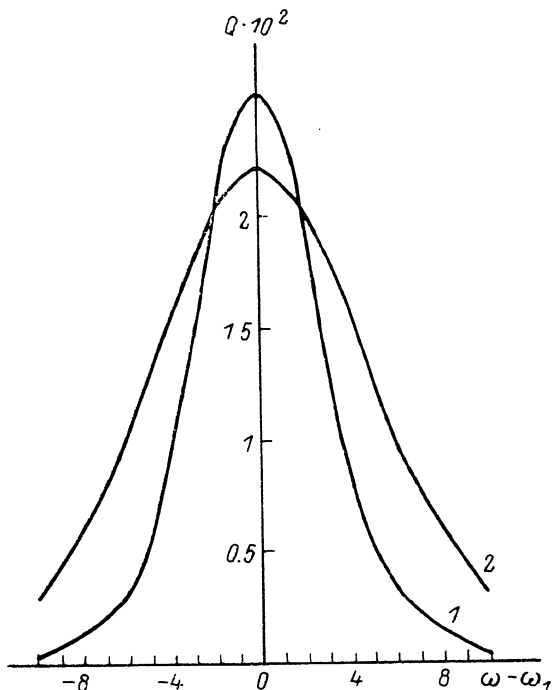


Рис. 3. Форма выжженной дыры в стационарном случае.

1 — при  $F=0.2 < F_c$ , 2 — при  $F=3 > F_c$ .

тельность импульса была достаточно малой, так что не устанавливалось настоящего стационарного режима. Об этом свидетельствуют данные нестационарного поглощения. Из рис. 2 следует, что на малых временах (длительностях импульса)  $t < 1/\gamma$ ,  $1/\Gamma_0$ , для коэффициента поглощения имеет место зависимость  $\alpha \sim F^{-1}$ , тогда как начиная с времен  $t > 1/\Gamma_0$  зависимость коэффициента поглощения стремится к виду  $\alpha \sim F^{-2}$ .

Форма выжженной дыры (рис. 3) не является лоренцевой, что следовало бы из решения обычных уравнений Блоха. Видно, что с ростом интенсивности ширина дыры возрастает и при  $F > F_c$  ее значение равно  $\Delta \approx 1/\tau_d$ , что хорошо согласуется с оценками [4].

Авторы выражают благодарность Ю. М. Гальперину, В. Л. Гуревичу, В. И. Козубу за полезное обсуждение результатов работы.

#### Л и т е р а т у р а

- [1] Amorphous solids: Low-temperature properties. Ed. by W. A. Phillips. Berlin—Heidelberg—New York: Springer-Verlag, 1981. p. 165.
- [2] Hunklinger S., Arnold W. Ultrasonic Properties of Glasses at Low Temperatures—Physical Acoustics, 1976, vol. 12, p. 155—215.
- [3] Black J. L., Halperin V. I. Phys. Rev. B, 1977, vol. 16, N 7, p. 2879—2893.
- [4] Гуревич В. Л., Гальперин Ю. М., Паршин Д. А. ЖЭТФ, 1984, т. 87, № 6, с. 2178—2192; Письма ЖЭТФ, 1987, т. 45, № 2, с. 85—88.
- [5] Поттер Д. Вычислительные методы в физике. М.: Мир, 1975. 392 с.

Криворожский государственный  
педагогический институт  
Кривой Рог

Поступило в Редакцию  
28 января 1988 г.