

ВЛИЯНИЕ ПЛОТНОСТИ КЛАСТЕРОВ ДИНАМИЧЕСКИ КОРРЕЛИРОВАННЫХ СПИНОВ НА СКОРОСТИ РЕЛАКСАЦИИ КОМПОНЕНТ МНОГОКВАНТОВОГО СПЕКТРА ЯМР

В. Е. Зобов^{a}, А. А. Лундин^{b**}*

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

*^b Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семенова
Российской академии наук
117977, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 23 января 2025 г.,
после переработки 19 февраля 2025 г.
Принята к публикации 19 февраля 2025 г.

Рассмотрена релаксация компонент многоквантового (МК) спектра ЯМР твердого тела в зависимости от длительностей периодов приготовления и эволюции. Предложена и реализована простая физическая модель, посредством которой учтено распределение кластеров динамически коррелированных спинов, образовавшихся на подготовительном периоде, как по числу спинов в каждом кластере, так и по его периметру (числу спинов, находящихся в области активного роста кластера). Описание деградации кластеров выполнено в адиабатическом приближении Андерсона. Функция, описывающая деградацию кластера, представлена в виде произведения двух функций, соответствующих прецессии спинов в двухкомпонентном локальном поле, имеющем коррелированную и некоррелированную составляющие. Относительный вклад этих составляющих зависит от размера кластера и его плотности. Полученные результаты объясняют известные экспериментальные данные, в том числе «выполаживание» зависимости скорости релаксации от порядка когерентности на крыльях МК-спектра и различие во влиянии среднего числа коррелированных спинов, оказываемом на эту скорость в разных частях МК-спектра.

DOI: 10.31857/S0044451025060112

1. ВВЕДЕНИЕ

Процессы возникновения и разрастания динамических корреляций между частицами и их релаксации, вызываемой различными механизмами деградации, играют фундаментальную роль в физике многих тел. В качестве примера приведем проблемы термализации состояний и хаоса, при решении которых важную роль играет динамика роста со временем числа операторов, входящих в произведение в гейзенберговском представлении для состояния системы, развивающегося со временем (operator size growth) [1, 2]. В настоящее время изучение указанных процессов стало необходимым и для чисто ути-

литарных приложений, включая практическую реализацию квантовых приборов и технологий [3–6]. В частности, например, при создании и применении так называемых NISQ-компьютеров [6, 7] (noisy intermediate-scale quantum computers), размер регистра которых ограничен процессами декогерентности. Так, в работе [8] NISQ-компьютер реализован на динамически коррелированных спинах ядер ^1H в поликристаллическом адамантане. Управление спиновой системой осуществлялось методами ЯМР с помощью последовательности когерентных радиочастотных (РЧ) импульсов. В условиях эксперимента достигнутый размер регистра составлял 25 спинов.

Уникальным методом изучения многочастичных динамических корреляций является многоквантовая (МК) ЯМР-спектроскопия твердых тел [9, 10]. С помощью этого метода экспериментатор имеет возможность наблюдать за очень большими

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

** E-mail: ya-andylun2012@yandex.ru

кластерами, содержащими до нескольких тысяч спинов [11]: изучать их рост и деградацию, характеризующую их энтропию [12–14] и т. п. В МК-экспериментах посредством облучения спиновой системы последовательностью когерентных РЧ-импульсов исследователи преобразуют гамильтониан межъядерных спин-спиновых взаимодействий (как правило, диполь-дипольных взаимодействий, ДДВ) в некоторый «запланированный» заранее межъядерный спин-спиновый гамильтониан, называемый эффективным. При традиционной схеме эксперимента [9, 15–17] на начальном, подготовительном, периоде воздействие эффективного гамильтониана вызывает развитие многоспиновых корреляций и тем самым формирование кластеров коррелированных спинов. Затем на последующем периоде эволюции под действием исходного гамильтониана происходит деградация корреляций. Наконец, на периоде смешивания образовавшиеся многоспиновые корреляции преобразуются под влиянием эффективного гамильтониана в односпиновые, доступные наблюдению. Разумеется, прямому наблюдению доступны не сами кластеры динамически коррелированных спинов, а проявление их основных характеристик через влияние последних на МК-спектры. Указанное влияние реализуется благодаря зависимости МК-спектра от длительности подготовительного периода и периода эволюции. Так, от длительности подготовительного периода зависит ширина МК-спектра [9–11, 16–18], а промежуток времени, затрачиваемый на эволюцию, определяет скорость релаксации спектральных компонент [15, 16, 19].

На подготовительном периоде образуются спиновые кластеры разного размера и формы: цепочки, деревья, петли, плотные образования (капли) и т. п. Каждый из кластеров содержит K односпиновых операторов, которые формируют произведение, связывающее различающиеся на M единиц зеemannовские состояния (M — порядок когерентности). Эти операторы расположены на множестве $\{i\}$ узлов кристаллической решетки с некоторой фиксированной топологией. Скорости релаксации различных кластеров должны зависеть от перечисленных факторов и, следовательно, различаться. Поскольку учет всех этих факторов — чрезвычайно сложная (а возможно, и практически неразрешимая) задача, в работах по экспериментальному исследованию МК-спектров (например [15]) было предложено характеризовать процесс релаксации через размер среднего кластера, который определялся через дисперсию МК-спектра (второй момент) в предположении

гауссовой формы МК-спектра. С помощью указанного выше приема в работе [15] была измерена релаксация компонент спектра поликристаллического адамантана при увеличении длительности интервала эволюции под влиянием ДДВ. Найдена зависимость скорости декогерентизации от порядка когерентности и от размера среднего кластера.

Первый теоретический анализ этих результатов в приближении среднего кластера был дан в работе [20]. Авторы предложили поле, возникающее вследствие ДДВ на спинах кластера, делить на коррелированную и некоррелированную части (на некоторую часть спинов действует только коррелированное поле, а на оставшуюся часть — некоррелированное). По этой причине сигнал от компоненты МК-спектра был ими представлен в виде суммы двух слагаемых от двух видов спинов, динамику которых определяет или коррелированное поле, или некоррелированное поле соответственно.

В подобном же приближении «среднего кластера» и мы [21] интерпретировали экспериментальные результаты, полученные в работе [15]. Однако, в отличие от статьи [20], в работе [21] предполагалось, что локальное поле состоит из двух частей на каждом из спинов, а не на разных спинах. Выдвинутое принципиально новое предположение (двухкомпонентное поле на каждом из спинов) представлялось более естественным, поскольку ранее оно, в частности, весьма успешно использовалось при описании различных аспектов динамики ядерной спиновой системы твердого тела (см., например, [22]). В работе [21] нами была получена функция, описывающая деградацию кластера, в виде произведения двух сомножителей от двух вкладов в локальное поле:

$$\Gamma_{KM}(t_1) = \exp(-KB^2 t_1^2/2) \exp(-A^2 M^2 t_1^2), \quad (1)$$

где t_1 — длительность интервала эволюции, K — число спинов в кластере, а M — порядок когерентности. Параметр B^2 характеризует некоррелированный вклад в локальное поле на каждом из спинов кластера, не зависящий от локального поля на других спинах. Преимущественно этот вклад возникает вследствие диполь-дипольных взаимодействий со своими собственными ближайшими соседями. Параметр же A^2 характеризует среднее по кластеру поле, коррелированно действующее на все спины кластера (для плотных кластеров ее, например, создают спины, расстояние до которых велико по сравнению с размерами кластера). Порядок величины параметров B^2 и A^2 определялся нами, исходя из величины второго момента спектра автокорреляци-

онной функции одного спина m_2 . Точный же их расчет практически невозможен. Вследствие этого мы полагали константы некоторыми феноменологическими параметрами, определяемыми из экспериментальных данных.

Представляя сигнал от компоненты МК-спектра в виде суммы двух слагаемых от двух видов спинов, как предложено в работе [20], для функции релаксации получаем

$$\Gamma_{KM}(t_1) = p \exp(-A^2 M^2 t_1^2) + (1-p) \exp(-KB^2 t_1^2/2). \quad (2)$$

В формуле (2) использованы те же обозначения, что и в формуле (1), и введен параметр степени коррелированности p , который определяется соотношением амплитуд двух слагаемых.

В изложенных выше взглядах (приближениях) и приведенных формулах зависимость скорости деградации кластера от порядка когерентности M есть только у вклада от коррелированного поля, тогда как вклад от некоррелированных полей на спинах кластера не зависит от M , а зависит только от числа спинов в кластере. Причина этого обстоятельства кроется в принятых приближениях: в упомянутых теориях деградация под действием ДДВ на периоде эволюции рассматривается для кластера коррелированных спинов только среднего размера \bar{K} , образовавшегося на подготовительном периоде. На самом же деле в конце подготовительного периода матрица плотности является суммой кластеров разного размера K , каждый из которых будет деградировать со своей скоростью на периоде эволюции. Поэтому в дальнейшем [23] было учтено распределение кластеров по числу K коррелированных спинов. Это позволило несколько улучшить согласие теории с экспериментом [15]. При сопоставлении полученных результатов с экспериментальными оказалось, что одного лишь распределения кластеров по числу коррелированных спинов K недостаточно для корректного описания экспериментальных зависимостей скорости релаксации от M , по крайней мере, на крыле МК-спектра. Для учета зависимости скорости деградации кластера, спины которого расположены на множестве $\{i\}$ узлов кристаллической решетки с фиксированной геометрией, от расположения спинов целесообразно функцию релаксации выбрать в следующем виде [21]:

$$\Gamma_{\{i\}M}(t) = \exp\left\{-\frac{t^2}{2}K(1-P_{\{i\}})B_{\{i\}}^2 - \frac{t^2}{2}M^2P_{\{i\}}B_{\{i\}}^2\right\}, \quad (3)$$

где коэффициент

$$B_{\{i\}}^2 = \frac{1}{K} \sum_j \sum_{i=1}^K b_{ij}^2$$

определяет среднюю величину локального поля на спине кластера, тогда как параметр

$$P_{\{i\}} = \frac{1}{B_{\{i\}}^2} \sum_j \left(\frac{1}{K} \sum_{i=1}^K b_{ij}\right)^2 \quad (4)$$

определяет среднюю величину коррелированной части локального поля. b_{ij} — константа ДДВ между спинами i и j . Индекс i нумерует спины кластера, а индекс j — все остальные спины. Отметим, что в работе [20] авторы используют совершенно другое, нежели в выражении (4), суммирование вкладов, вытекающее из предложенной ими интерпретации. Приведенное выражение (3) получено нами в работе [21] в приближении большого числа соседей при использовании модели Андерсона [24, 25] (адиабатического приближения), в соответствии с которой предполагалось, что у операторной компоненты матрицы плотности кластера меняется только фаза. Изменение фазы во времени обусловлено локальным дипольным полем и описывается гауссовым случайным процессом. Зависимость выражения (3) от формы кластера, от соотношения радиуса взаимодействия r и объема V_K , занимаемого кластером из K спинов, определяется преимущественно величиной параметра $P_{\{i\}}$. Как будет показано далее, параметр $P_{\{i\}}$ уменьшается при снижении плотности кластера K/V_K . Ниже, плотность кластера будет связана с его периметром (числом спинов, находящихся в области активного роста), а необходимое для расчетов распределение кластеров по периметру [26] будет получено на базе модели роста Идена [27, 28].

Статья имеет следующую структуру. В разд. 2 приведены общие формулы для МК-спектров в виде суммы вкладов от кластеров с разным числом и расположением спинов, в которых учтены процессы деградации кластеров. В разд. 2 также найдены МК-спектры для двух простых примеров функции релаксации, допускающих аналитическое решение. В разд. 3 рассмотрена простая модель, позволившая учесть зависимость функции релаксации от плотности кластера. В разд. 4 приведены результаты численных расчетов и их обсуждение. В разд. 5 приведено краткое заключение. Наконец, в Приложении рассмотрено распределение решеточных деревьев по периметру в модели роста Идена.

2. ЗАВИСИМОСТЬ МК-СПЕКТРА ОТ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ КЛАСТЕРОВ ПО РАЗМЕРУ И ОТ РАСПОЛОЖЕНИЯ СПИНОВ

Представим наблюдаемый МК-спектр $G_M(T, t_1)$ в виде суммы МК-спектров g_{KM} кластеров разного размера K , образовавшихся на подготовительном периоде длительностью T и деградировавших затем на периоде эволюции длительности t_1 :

$$G_M(T, t_1) = \sum_{K=|M|}^{\infty} g_{KM} \Gamma_{KM}(t_1) F(K, T), \quad (5)$$

где $F(K, T)$ представляет собой распределение по числу кластеров, содержащих K спинов, а $\Gamma_{KM}(t_1)$ — функция деградации (релаксации), которую с учетом сказанного выше представим в виде суммы функций релаксации для кластеров с разным расположением спинов кластера $\{i\}$:

$$\Gamma_{KM}(t_1) = \sum_{\{i\}} C_{K\{i\}} \Gamma_{KM\{i\}}(t_1) \quad (6)$$

при условиях

$$\Gamma_{KM\{i\}}(0) = 1, \quad \sum_{\{i\}} C_{K\{i\}} = 1.$$

Следуя комбинаторной теории [9], для МК-спектра отдельного кластера используем функцию Гаусса

$$g_{KM} = \frac{1}{\sqrt{\pi K}} \exp\left(-\frac{M^2}{K}\right). \quad (7)$$

В качестве функции распределения кластеров по размерам примем полученное ранее в [23, 29] выражение

$$\begin{aligned} F(K, T) &= K \left(\frac{2}{\bar{K}_0 + 1}\right)^2 \left(\frac{\bar{K}_0 - 1}{\bar{K}_0 + 1}\right)^{K-1} \approx \\ &\approx K \left(\frac{2}{\bar{K}_0 + 1}\right)^2 \exp\left(-2\frac{K-1}{\bar{K}_0 + 1}\right) \sim \\ &\sim K \left(\frac{2}{\bar{K}_0}\right)^2 \exp\left(-\frac{2K}{\bar{K}_0}\right), \quad (8) \end{aligned}$$

приводящее для среднего размера кластера к соотношению

$$\bar{K}_0(T) = \sum_{K=1}^{\infty} KF(K, T) = 1 + 2 \operatorname{sh}^2(T/\sqrt{2}). \quad (9)$$

Выражение (9) обеспечивает экспоненциальный рост среднего размера кластера:

$$\bar{K}_0(T) \sim \exp(\sqrt{2}T)/2, \quad T \gg 1,$$

характерный для плотных спиновых систем, таких, например, как адамантан или флюорит [30, 31]. (Здесь и ниже время выражено в единицах обратного второго момента $(1/\sqrt{m_2})$ автокорреляционной функции.)

Подставим соотношения (6)–(8) в (5). Заменяя суммирование интегрированием с равным нулю нижним пределом, что справедливо, по крайней мере, для больших кластеров, получим для МК-спектра следующее выражение:

$$\begin{aligned} G_M(T, t_1) &= \left(\frac{2}{\bar{K}_0}\right)^2 \int_0^{\infty} \sum_{\{i\}} C_{K\{i\}} \Gamma_{KM\{i\}}(t_1) \times \\ &\times \exp\left\{-K\frac{2}{\bar{K}_0} - \frac{M^2}{K}\right\} \sqrt{K/\pi} dK. \quad (10) \end{aligned}$$

В дальнейшем выражение (10) будет рассматриваться и исследоваться преимущественно в разд. 4, однако на этом периоде целесообразно исследовать функцию релаксации для двух интересных случаев, допускающих простое аналитическое решение. В первом случае мы введем усредненную функцию релаксации (1) для кластера, содержащего K спинов, имеющего порядок когерентности M . Во втором же случае разобьем множество кластеров на две группы: плотные, на которые воздействует только коррелированный вклад в локальное поле, и рыхлые, на которых присутствует только вклад от независимых полей (этот случай рассматривался и в работе [20]).

В первом случае [21] подставим функцию релаксации (1) в соотношение (10) и вынесем вклад от коррелированного поля за знак интеграла. Получаем интеграл, который можно вычислить [32]:

$$\begin{aligned} G_M(T, t_1) &= \exp(-A^2 M^2 t_1^2) \left(\frac{2}{\bar{K}_0}\right)^2 \times \\ &\times \int_0^{\infty} \exp\left\{-K\frac{2}{\bar{K}_0} (1 + \bar{K}_0 B^2 t_1^2/4) - \frac{M^2}{K}\right\} \sqrt{K/\pi} dK = \\ &= \frac{1}{2q^{(3/2)}} \left(\frac{2}{\bar{K}_0}\right)^2 (1 + 2|M|\sqrt{q}) \times \\ &\times \exp(-2|M|\sqrt{q}) \exp(-A^2 M^2 t_1^2), \quad (11) \end{aligned}$$

где $q = (2/\bar{K}_0)(1 + \bar{K}_0 B^2 t_1^2/4)$. Этот случай подробно изучен нами в работе [23].

Обратим внимание, что итоговая форма МК-спектра (11), полученная как сумма (10) функций Гаусса (7) для каждого отдельного кластера, демонстрирует зависимость от M , описываемую простой экспонентой при

$$A^2 M^2 t_1^2 \ll 2|M|\sqrt{q} \approx \sqrt{2B^2 M^2 t_1^2}.$$

Именно такая зависимость наблюдалась в экспериментах [11, 17]. Детальное обсуждение формы МК-спектра выполнено нами в работе [33].¹⁾

Во втором случае, подставив функцию релаксации (2) в соотношение (10), находим

$$\begin{aligned}
 G_M(T, t_1) &= p \exp(-A^2 M^2 t_1^2) \left(\frac{2}{\bar{K}_0}\right)^2 \times \\
 &\times \int_0^\infty \exp\left\{-\frac{2K}{\bar{K}_0} - \frac{M^2}{K}\right\} \sqrt{\frac{K}{\pi}} dK + \\
 &+ (1-p) \left(\frac{2}{\bar{K}_0}\right)^2 \times \\
 &\times \int_0^\infty \exp\left\{-\frac{2K}{\bar{K}_0} \left(1 + \frac{\bar{K}_0 B^2 t_1^2}{4}\right) - \frac{M^2}{K}\right\} \sqrt{\frac{K}{\pi}} dK = \\
 &= \frac{p}{2} \sqrt{q_0} (1 + 2|M|\sqrt{q_0}) \times \\
 &\times \exp(-2|M|\sqrt{q_0}) \exp(-A^2 M^2 t_1^2) + \\
 &+ \frac{1-p}{2q^{(3/2)}} q_0^2 (1 + 2|M|\sqrt{q}) \exp(-2|M|\sqrt{q}), \quad (12)
 \end{aligned}$$

где $q = (2/\bar{K}_0)(1 + \bar{K}_0 B^2 t_1^2/4)$, $q_0 = 2/\bar{K}_0$.

В масштабированных переменных, введенных в работе [23],

$$m^2 = q_0 M^2 = 2M^2/\bar{K}_0,$$

$$R^2 = 1/(\bar{K}_0 B^2 t_1^2),$$

получим

$$\begin{aligned}
 G_M(T, t_1) &= \\
 &= \frac{p}{2} \sqrt{q_0} (1 + 2|m|) \exp(-2|m|) \exp\left(-\frac{\alpha m^2}{2R^2}\right) + \\
 &+ \frac{1-p}{2} \sqrt{q_0} \left[1 + \frac{1}{4R^2}\right]^{-3/2} \left(1 + 2|m|\sqrt{1 + \frac{1}{4R^2}}\right) \times \\
 &\times \exp\left(-2|m|\sqrt{1 + \frac{1}{4R^2}}\right), \quad (13)
 \end{aligned}$$

где $\alpha = A^2/B^2$.

Отсюда для определения скорости релаксации компоненты МК-спектра, соответствующей порядку когерентности M , получаем уравнение

¹⁾ В статьях [23] и [33] допущены опечатки в формулах: правые (итоговые) части формул (7) в [23] и (23) в [33] следует умножить на $(2/\bar{K}_0)^2$.

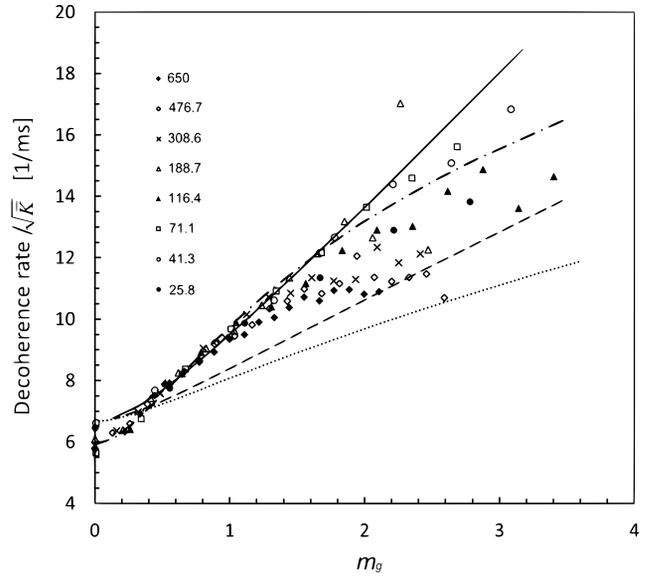


Рис. 1. Экспериментальные скорости релаксации (декогерентизации) [15], деленные на \sqrt{K} , как функции порядка когерентности M , взятого в виде $m_g = \sqrt{2M^2/K}$. Результаты, полученные при разных средних размерах кластеров $\bar{K} = \bar{K}_{0g}$ (колонка цифр на рисунке), показаны разными символами. Теоретические результаты, найденные численным решением уравнения $G_M(T, 0)/G_M(T, t_1) = e$ для МК-спектра (11), показаны линиями в виде функций $13R(0.7134 m_g)/\text{мс}$ при $B = 9.27$ (1/мс) и трех значениях параметра α : $\alpha = 0$ (пунктирная линия), $\alpha = 0.1$ (штриховая линия) и $\alpha = 0.5$ (сплошная линия). Теоретические результаты, найденные численным решением уравнения (14), показаны штрихпунктирной линией в виде функций $16R(0.7134 m_g)/\text{мс}$ при $p = 0.2$, $B = 11.4$ (1/мс), $\alpha = 0.5$

$$\begin{aligned}
 \frac{G_M(T, t_1)}{G_M(T, 0)} &= \frac{1}{e} = \\
 &= p \exp\left(-\frac{\alpha m^2}{2R^2}\right) + (1-p) \frac{1 + 2|m|\sqrt{1 + \frac{1}{4R^2}}}{(1 + 2|m|) \left[1 + \frac{1}{4R^2}\right]^{3/2}} \times \\
 &\times \exp\left\{-2|m|\left(\sqrt{1 + \frac{1}{4R^2}} - 1\right)\right\}. \quad (14)
 \end{aligned}$$

Численное решение этого уравнения было выполнено при разных значениях параметров. Результат, полученный при $p = 0.2$, $B = 11.4$ (1/мс), $\alpha = 0.5$, показан на рис. 1 в дополнение к трем кривым, приведенным в статье [23], которые были рассчитаны по формуле

$$\frac{G_M(T, 0)}{G_M(T, t_1)} = e$$

для МК-спектра (11) при другом значении $B = 9.27$ (1/мс) и трех значениях $\alpha = A^2/B^2$.

В завершение данного раздела отметим, что в отсутствие релаксации, т. е. при $t_1 = 0$, выполняется закон сохранения суммы МК-когерентностей в полученных формулах (10)–(13): интегралы по M от полученных выражений равны 1. При увеличении t_1 происходит уменьшение суммы МК-когерентностей. В общем случае для описания релаксации необходимы весьма сложные интегралы. Простой результат получаем лишь при $A = 0$. Так, для случая (12) находим

$$\int_{-\infty}^{\infty} G_M(T, t_1) dM = p + \frac{1-p}{(1 + K_0 B^2 t_1^2 / 4)^2} = p + \frac{1-p}{(1 + 1/(4R^2))^2}.$$

Для случая (11) в этом выражении надо положить $p = 0$. Поскольку

$$\exp(-A^2 M^2 t_1^2) = \exp\left(-\frac{\alpha m^2}{2R^2}\right),$$

то и в общем случае, и в частном сохраняется зависимость скорости релаксации R (или времени релаксации t_1) от $\sqrt{K_0}$ как от масштаба. Такая зависимость как раз и наблюдалась в эксперименте [15].

3. ФУНКЦИЯ РЕЛАКСАЦИИ И ЕЕ ЗАВИСИМОСТЬ ОТ РАЗМЕРА И ПЛОТНОСТИ КЛАСТЕРА

В выражении общего вида для функции релаксации (3) величина параметра $P_{\{i\}}$ (4) зависит от формы кластера, от соотношения радиуса взаимодействия r и объема V_K , занимаемого кластером из K спинов. Для оценки параметра рассмотрим простую модель. Заменяем в формуле (4) суммирование интегрированием. Будем представлять кластер сферой радиуса l . Взаимодействие определим посредством функции $\theta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$, равной 1 при $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| \leq r$ и 0 при $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| > r$. Искомые решеточные суммы тогда трансформируются в два интеграла:

$$I_1 = \int_0^\infty d^3 \mathbf{r}_j \int_{V_i} d^3 \mathbf{r}_i \theta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) = \frac{4\pi l^3}{3} \frac{4\pi r^3}{3}, \quad (15)$$

$$I_2 = \int_0^\infty d^3 \mathbf{r}_j \left[\int_{V_i} d^3 \mathbf{r}_i \theta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \right]^2, \quad (16)$$

где внутренний интеграл берется по объему V_i сферы радиуса l .

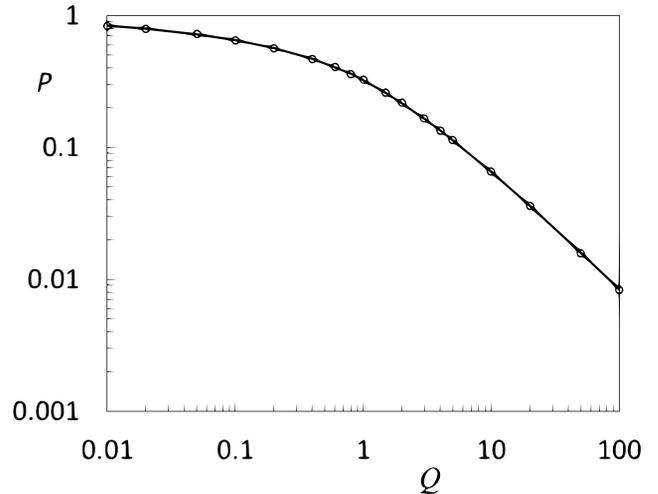


Рис. 2. Зависимость коэффициента корреляции $P = P_{\{i\}} = P(Q)$ от параметра $Q = l^3/r^3$

K спинов кластера занимают объем $4\pi l^3/3$ с плотностью $3K/4\pi l^3$. Z ближайших соседей занимают объем $4\pi r^3/3$ с плотностью $3Z/4\pi r^3$. Отсюда для оценки среднего значения параметра $P_{\{i\}}$ получаем

$$P_{\{i\}} = \frac{I_2 \frac{3Z}{4\pi r^3} \left(\frac{3K}{4\pi l^3}\right)^2 \frac{1}{K^2}}{I_1 \frac{3Z}{4\pi r^3} \frac{3K}{4\pi l^3} \frac{1}{K}} = \frac{3I_2}{4\pi l^3 I_1}. \quad (17)$$

Вычислив интегралы, получаем

$$P_{\{i\}} = P(Q) = \begin{cases} \frac{1}{Q} - \frac{27}{35Q^{4/3}} + \frac{2}{21Q^2}, & Q > 1, \\ 1 - \frac{27}{35}Q^{1/3} + \frac{2}{21}Q, & Q < 1, \end{cases} \quad (18)$$

где $Q = l^3/r^3$. Зависимость коэффициента корреляции $P_{\{i\}} = P(Q)$ от отношения объема кластера к объему взаимодействия $Q = l^3/r^3$, характеризующего плотность кластера, приведена на рис. 2. В пределе $l^3 \ll r^3$ получаем $Q \rightarrow 0$, $P \rightarrow 1$, тогда как в пределе $l^3 \gg r^3$ имеем $Q \rightarrow \infty$, $P \sim 1/Q \rightarrow 0$.

Для расчетов суммарного (результатирующего) МК-спектра (10) осталось найти $C_{K\{i\}}$, представляющую теперь распределение кластеров из K спинов в зависимости от занимаемого ими объема $V_K = 4\pi l^3/3$. Для этого надо понимать топологию растущих кластеров, отношение их поверхности (периметра) к объему. Указанный предмет довольно обстоятельно изучается (и изучался) в статистической физике полимеров и макромолекул [34]. Так, в работах [25, 35, 36] на примере кластеров в модели роста Идена исследовалось множество разнообразных графов, образованных различными связями на

решетке. Для кластеров в форме деревьев в приложении получена функция распределения кластеров по периметру. Установим связь кластеров в модели Идена с кластерами, рассмотренными в настоящем разделе. Введем объем элементарного кубика на решетке r_{min}^3 . Тогда за объем, приходящийся на дерево из K связей с периметром S , примем

$$V_K(S) = r_{min}^3 \{Z + (Z - 2)S + K\}. \quad (19)$$

В Приложении используются обозначения n для числа связей и m для периметра. Чтобы избежать путаницы, в основном тексте мы поменяли эти обозначения на K и S соответственно.

В рассмотренной выше континуальной модели величине (19) соответствует интеграл I_1 (15), деленный на r_{min}^3 , в котором следует учесть, что

$$\frac{4\pi r^3}{3r_{min}^3} = Z.$$

Отсюда для объема кластера получаем оценку

$$\frac{4\pi l^3}{3r_{min}^3} = 1 + \frac{Z - 2}{Z}S + \frac{K}{Z}, \quad (20)$$

позволяющую выразить параметр корреляции $P_{\{i\}}$ через S и K . Искомое выражение для $P_{\{i\}}(K, S)$ получается после подстановки в выражение (18) степеней отношения

$$Q(K, S) = \frac{l^3}{r^3} = \frac{Z + S(Z - 2) + K}{Z^2}. \quad (21)$$

4. ПРОЦЕССЫ РЕЛАКСАЦИИ В МК-СПЕКТРЕ

Подставляя выражение (3) с найденным благодаря формулам (18) и (21) коэффициентом корреляции в выражение (10), мы получим искомый результат для МК-спектра. Заменим в выражении (10) суммирование по $\{i\}$ на интегрирование по S . Получим

$$G_M(T, t_1) = \left(\frac{2}{\bar{K}_0}\right)^2 \times \int_0^\infty dK \int_0^\infty dS \exp\left\{-K\frac{2}{\bar{K}_0} - \frac{M^2}{K} - \lambda(S - \bar{S})^2\right\} \times \exp\left\{-\frac{t_1^2}{2}K(1 - P_{\{i\}}(K, S))B_{\{i\}}^2 - \frac{t_1^2}{2}M^2P_{\{i\}}(K, S)B_{\{i\}}^2\right\} \frac{\sqrt{K/\pi}}{V}. \quad (22)$$

Используемые в этой формуле для «задания» функции распределения величины λ, \bar{S} и V определены в Приложении.

Перейдем к масштабированным переменным, добавив к уже введенным в [23] и в (13) переменным новые:

$$\begin{aligned} k &= \frac{K}{\bar{K}_0}, & \Lambda &= \lambda\bar{K}_0 = \frac{1}{2s_2}, \\ s_2 &= M_{c2}/\bar{K}_0, & s_1 &= M_1/\bar{K}_0, \\ s &= S/\bar{K}_0, & \bar{V} &= V/\bar{K}_0, \\ Q &= \frac{l^3}{r^3} = \frac{Z + s\bar{K}_0(Z - 2) + k\bar{K}_0}{Z^2}. \end{aligned} \quad (23)$$

Запишем интеграл (22) в этих переменных:

$$G_m(T, t_1) = \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dk \int_0^\infty ds \times \exp\left\{-2k - \frac{m^2}{2k} - \Lambda\bar{K}_0(s - s_1)^2\right\} \times \exp\left\{-\frac{k}{2R^2(m)}(1 - P_{\{i\}}(k, s)) - \frac{m^2}{4R^2(m)}P_{\{i\}}(k, s)\right\} \frac{\sqrt{k}}{V}. \quad (24)$$

Для расчетов положим следующее.

В случае простой кубической (ПК) решетки $\Lambda = 1/0.33k, s_2 = 0.164k, s_1 = 0.59k,$

$$\bar{V} = \frac{\sqrt{k}}{\sqrt{\bar{K}_0}}, \quad Q = \frac{6 + 4s\bar{K}_0 + k\bar{K}_0}{36}.$$

В случае гранецентрированной (ГЦК) решетки $\Lambda = 1/0.32k, s_2 = 0.16k, s_1 = 0.56k,$

$$\bar{V} = \frac{\sqrt{k}}{\sqrt{\bar{K}_0}}, \quad Q = \frac{12 + 10s\bar{K}_0 + k\bar{K}_0}{144}.$$

Наконец, для получения скоростей релаксации спектральных компонент следует найти решение уравнения

$$G_M(T, 0)/G_M(T, t_1) = e$$

относительно времени t_1 , или решение относительно релаксационного параметра

$$R^2(m) = \frac{1}{\bar{K}_0 B_{\{i\}}^2 t_1^2}$$

уравнения

$$G_m(R = \infty)/G_m(R(m)) = e. \quad (25)$$

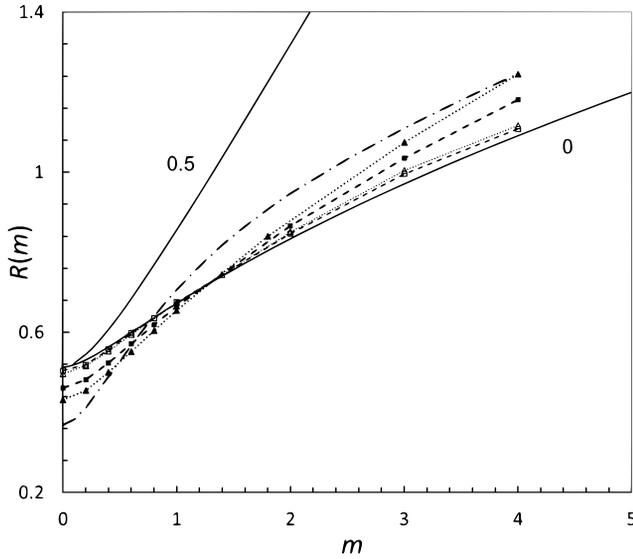


Рис. 3. Масштабированная скорость релаксации (декогерентизации) компоненты МК-спектра $R(m) = (\sqrt{K_0} B t_1)^{-1}$ как функция масштабированного порядка когерентности $m = \sqrt{2M^2/K_0}$. Сплошными линиями показаны результаты, найденные численным решением уравнения $G_M(T, 0)/G_M(T, t_1) = e$ для МК-спектра (11), при двух значениях, 0 и 0.5, параметра $\alpha = A^2/B^2$ (цифры у кривых). Штрихпунктирная линия — результаты, найденные численным решением уравнения (14) при $p = 0.2$, $\alpha = 0.5$. Маркеры — результаты численного решения уравнения (25): для ПК-решетки ($\bar{K}_0 = 50$ — залитые квадраты, соединенные штриховой линией, $\bar{K}_0 = 500$ — пустые квадраты, соединенные штриховой линией) и для ГЦК-решетки ($\bar{K}_0 = 50$ — залитые треугольники, соединенные пунктиром, $\bar{K}_0 = 500$ — пустые треугольники, соединенные пунктиром)

Результаты расчета для $\bar{K}_0 \sim 50$ и 500 приведены на рис. 3.

Как демонстрируется кривыми, приведенными на рис. 3, в масштабированных переменных сохранилась зависимость $R(m)$ от среднего размера кластеров \bar{K}_0 , величина которого определяется временем приготовления T . При возрастании \bar{K}_0 кривая зависимости от m приближается к предельной кривой без корреляции. Причем при $m \sim 1.3$ зависимость от \bar{K}_0 исчезает, а при $m < 1.3$ или $m > 1.3$ кривые отклоняются в разные стороны: вверх или вниз. Для ГЦК-решетки амплитуда отклонения больше, чем для ПК-решетки.

Для качественного объяснения эффекта заменим в формуле (22) узкое гауссово распределение по периметру S на δ -функцию со средним значением \bar{K} : $\bar{S} = \mu\bar{K}$ (ПК-решетка: $\mu = 0.58$ при $d = 2$, $\mu = 0.59$ при $d = 3$, $\mu = 0.82$ при $d = 10$; ГЦК-решетка:

$\mu = 0.56$ при $d = 3$, решетка Бете: $\mu = 1$). При больших значениях \bar{K} имеем

$$Q(\bar{K}) = \frac{1}{Z} \left(1 + \bar{K} \frac{\mu(Z-2)+1}{Z} \right) \approx c\bar{K}, \quad (26)$$

где

$$c = \frac{\mu(Z-2)+1}{Z^2} = \begin{cases} 1/10.7 & \text{для ПК,} \\ 1/21.8 & \text{для ГЦК,} \end{cases} \quad (27)$$

а $P(\bar{K})$ определим формулой (18) при $Q \gg 1$:

$$P(\bar{K}) = P_{\{i\}}(\bar{K}, \mu\bar{K}) \approx 1/Q(\bar{K}) \approx 1/c\bar{K}. \quad (28)$$

Оценим величину интеграла, полученного из (22), при $m = 0$ и $m \gg 1$. При $m = 0$ заменим \bar{K} на \bar{K}_0 в коэффициенте корреляции $P_{\{i\}}(\bar{K}_0, \mu\bar{K}_0) = P(\bar{K}_0)$. После чего находим оценку

$$R(0) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1 - P(\bar{K}_0)}{e^{2/3} - 1}} \approx 0.5136 \left(1 - \frac{1}{2c\bar{K}_0} \right). \quad (29)$$

При $m \gg 1$ в качестве оценки величины интеграла возьмем подынтегральное выражение при $K_M = \sqrt{M^2\bar{K}_0/2}$ — в перевальной точке без релаксации. Его затухание определяется затуханием релаксационной функции

$$\exp \left\{ -\frac{t_1^2}{2} K_M [1 - P_{\{i\}}(K_M, \mu K_M)] B_{\{i\}}^2 - \frac{t_1^2}{2} M^2 P_{\{i\}}(K_M, \mu K_M) B_{\{i\}}^2 \right\} = \frac{1}{e},$$

поскольку часть подынтегрального выражения, не зависящая от времени, в (25) сократится. Отсюда для нахождения релаксации получаем уравнение в переменных $k_m = K_M/\bar{K}_0 = m/2$ в следующем виде:

$$\frac{m}{4R^2(m)} (1 - P_{\{i\}}(k_m, \mu k_m)) + \frac{m^2}{4R^2(m)} P_{\{i\}}(k_m, \mu k_m) = 1.$$

Отсюда при $m \gg 1$ находим

$$R^2(m) = \frac{m}{4} [1 - P(m\bar{K}_0/2)] + \frac{m^2}{4} P(m\bar{K}_0/2) \sim \frac{m}{4} \left(1 - 2\frac{1}{cm\bar{K}_0} + 2\frac{1}{c\bar{K}_0} \right). \quad (30)$$

В соответствие с формулой (30) при $m = 1$ скорость релаксации действительно перестает зависеть от величины \bar{K}_0 , а при $m > 1$ зависимость от величины \bar{K}_0 становится противоположной ситуации

$m = 0$ в формуле (29). При этом увеличение амплитуды отклонения в ГЦК-решетке по сравнению с ПК-решеткой передается зависимостью (27) константы c от числа ближайших соседей Z . Таким образом, сделанные оценки объясняют найденную посредством численного расчета зависимость скорости релаксации от величины \bar{K}_0 , представленную на рис. 3. Сохранившаяся в масштабированных переменных зависимость $R(m)$ от среднего размера кластеров \bar{K}_0 обусловлена зависимостью от \bar{K}_0 коэффициента корреляции $P(\bar{K})$.

Экспериментальные данные для $R(m)$ из работы [15], пересчитанные нами в работе [23] в масштабированных координатах и показанные на рис. 1, демонстрируют похожую зависимость от среднего размера кластеров \bar{K} , полученного из МК-спектра. При $m_g \sim 0.7$ результаты для разных \bar{K} близки, тогда как при $m_g = 0$ и при $m_g > 1$ наблюдается разброс результатов для разных \bar{K} . По сравнению с теорией, приведенной на рис. 3, в эксперименте наблюдается более сильная и немонотонная зависимость от величины \bar{K} . Различия могут быть обусловлены свойствами пластического кристалла адамантана, в котором быстро вращающиеся молекулы, содержащие по 16 атомов водорода, образуют ГЦК-решетку. Поэтому каждый спин имеет $16 \times 12 = 192$ близких соседа. При этом взаимодействие 16 спинов внутри молекулы усредняется быстрым вращением до нуля.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Как следует из изложенного, предложенная в настоящей работе физическая модель позволила учесть влияние на скорость релаксации компонент МК-спектра распределения кластеров динамически коррелированных спинов не только по числу спинов, но и по периметру кластеров. В частности, дано объяснение замедлению скорости релаксации компонент на крыльях МК-спектра, наблюдавшееся в эксперименте [15], а также разной зависимости скорости релаксации от длительности подготовительного периода в разных частях МК-спектра. От периметра кластера зависит его плотность, от которой, в свою очередь, зависит соотношение вкладов в деградацию кластера от коррелированной и некоррелированной частей локального поля. Предложенная теория, в частности, продемонстрировала проявление зависимости деградации кластеров от структуры решетки в МК-спектрах. Тем самым сопоставление теории с экспериментом открывает дополнительные возможности извлекать новую информа-

цию о неравновесных процессах в спиновой динамике изучаемых систем.

Финансирование. Работа выполнена в рамках научной тематики ФИЦ химической физики им. Н. Н. Семенова РАН (в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема №122040500060-4)) и в рамках научной тематики ИФ СО РАН.

ПРИЛОЖЕНИЕ. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ РЕШЕТОЧНЫХ ДЕРЕВЬЕВ ПО ПЕРИМЕТРУ В МОДЕЛИ РОСТА ИДЕНА

В модели Идена рост кластера на решетке происходит путем последовательного присоединения узлов (связей) на границе кластера [27, 28]. Свободные узлы, ближайшие к узлам, занятым кластером, образуют периметр. Случайно с равной вероятностью выбирается один из узлов периметра и присоединяется к кластеру. Поскольку запрещено повторное присоединение уже занятых узлов, то не происходит пересечения связей, и полученный кластер является деревом. Ранее с помощью компьютерного моделирования методом Монте-Карло было рассчитано увеличение полного числа деревьев в ансамбле при увеличении числа связей n в дереве для простой [35] и гранецентрированной [36] гиперкубических решеток различной размерности d ($d = 2, 3, 4, 6, 8$ и 10). В пределе $n \rightarrow \infty$ для числа деревьев имеем простое асимптотическое выражение

$$T_n \sim An!(Z_c)^n n^p,$$

Для трехмерных решеток найдено:

$$\text{ПК: } Z = 6, Z/Z_c = 1.945, p = 2.7$$

$$\text{ГЦК: } Z = 12, Z/Z_c = 1.67, p = 2.46,$$

Z — число ближайших соседей.

Для объяснения численного эксперимента предложено [26] периметр растущего дерева разбить на три части:

$$\nu + m\nu_1 + m\nu_2,$$

где ν — начальный периметр ($\nu = Z$), ν_1 — часть периметра, приводящая к росту скелета (внешний периметр или периметр роста), ν_2 — часть периметра, приводящая к росту мертвых концов (внутренний периметр или мертвый периметр). На основании предложенной модели роста для производящей функции деревьев

$$F(x, y) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^n x^n y^m N_n(m)/n! \quad (\text{A.1})$$

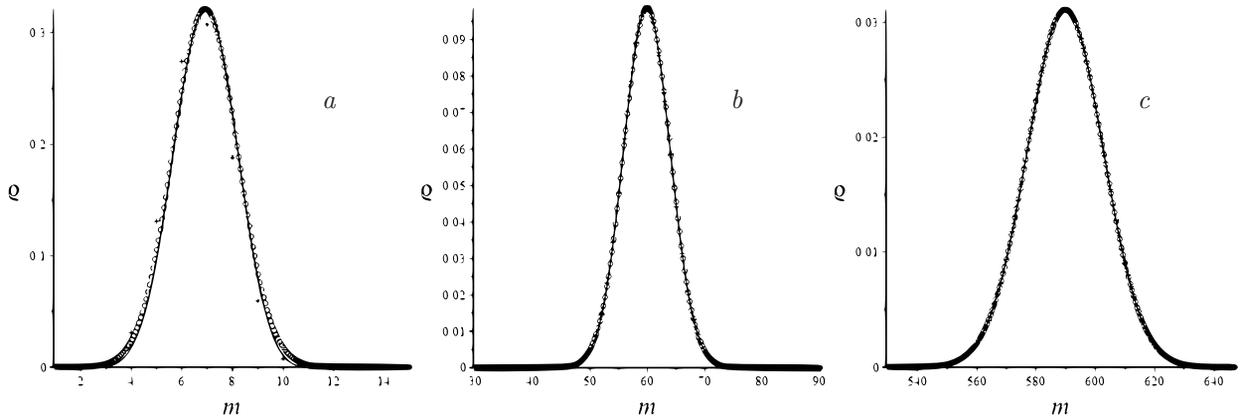


Рис. 4. Плотность распределения решеточных деревьев по периметру $\rho = N_n(m)/N_n$ в модели Идена для кластеров с разным числом связей: $n = 10$ (а), $n = 100$ (б) и $n = 1000$ (в). Линии — функция Гаусса: $(1/V) \exp(-\lambda(m - M_1)^2)$. Кружки — $(1/V) \exp(-\lambda(m - M_1)^2) (1 - \mu(m - M_1)^4 - \eta(m - M_1)^3 - \chi(m - M_1))$, крестики — численный расчет по точным формулам (А.3) и (А.4)

выведено уравнение и найдено решение

$$F(x, y) = \left[1 - y \frac{\nu_1}{\nu_2} (e^{\nu_2 x} - 1) \right]^{-\nu/\nu_1}. \quad (A.2)$$

Согласно (А.1) параметр x определяет число деревьев, а параметр y их распределение по периметру. Как функция от x производящая функция (А.2) имеет особую точку при $x = x_c$:

$$x_c = \frac{1}{\nu_2} \ln \left(1 + \frac{\nu_2}{y\nu_1} \right).$$

Показатель степени особенности

$$1 + p = \nu/\nu_1.$$

Для параметра роста $Z_c = 1/x_c$ (при $y=1$) получаем

$$\frac{Z}{Z_c} = \frac{1+p}{b} \ln(1+b), \quad b = \frac{\nu_2}{\nu_1}.$$

Тогда из результатов численного эксперимента получаем

ПК: $v = Z = 6, \quad Z/Z_c = 1.945,$
 $b = 2.23, \quad p = 2.7, \quad a = v/\nu_1 = 3.7;$
 ГЦК: $v = Z = 12, \quad Z/Z_c = 1.67,$
 $b = 2.72, \quad p = 2.46, \quad a = v/\nu_1 = 3.46.$

Разлагая производящую функцию (А.2) в ряд (А.1) находим число деревьев с заданными параметрами n и m :

$$N_n(m) = \frac{\nu_2^n \Gamma(n+a)}{b^m \Gamma(a)} \sum_{f=0}^m C_f^m f^n (-1)^{m-f}, \quad (A.3)$$

$$N_n = \sum_{m=1}^n N_n(m) = \sum_{m=1}^n \frac{\nu_2^n \Gamma(n+a)}{b^m \Gamma(a)} \sum_{f=0}^m C_f^m f^n (-1)^{m-f}, \quad (A.4)$$

где $\Gamma(a)$ — гамма-функция, C_f^m — биномиальные коэффициенты. Отсюда можно получить искомую функцию распределения кластеров с n связями по периметру m : $N_n(m)/N_n$. Эти функции для трех значений n были рассчитаны и приведены на рис. 4.

На основании (А.1) и (А.2) для больших деревьев можно приближенно принять

$$N_n(y) = \sum_{m=1}^n y^m N_n(m) \approx [x_c(y)]^{-n} [x_c(y) \nu_1(y+b)]^{-a} \Gamma(n+a)/\Gamma(a), \quad (A.5)$$

где

$$x_c(y) = \frac{1}{\nu_2} \ln \left(1 + \frac{b}{y} \right), \quad a = \frac{\nu}{\nu_1}, \quad b = \frac{\nu_2}{\nu_1}.$$

Отсюда можно найти значения моментов распределения:

$$M_1 = \overline{m} = \lim_{y=1} \frac{d}{dy} \ln N_n(y),$$

$$M_2 = \overline{m^2} = \lim_{y=1} \left\{ \frac{d^2}{dy^2} \ln N_n(y) + \overline{m} + \overline{m^2} \right\}, \quad (A.6)$$

$$M_3 = \overline{m^3} = \lim_{y=1} \left\{ \frac{1}{N_n(y)} \frac{d}{dy} y \frac{d}{dy} y \frac{d}{dy} N_n(y) \right\}$$

и центральных моментов:

$$M_{C2} = \overline{(m - \overline{m})^2} = M_2 - M_1^2,$$

$$M_{C3} = \overline{(m - \overline{m})^3} = M_3 - 3M_2M_1 + 2M_1^3. \quad (A.7)$$

Нами получены следующие общие выражения:

$$\begin{aligned}
 M_1 = \bar{m} &= \frac{n+a}{(1+1/b)\ln(1+b)} - \frac{a}{1+b}, \\
 M_2 = \overline{m^2} &= \frac{n+a}{(1+1/b)^2 \ln^2(1+b)} \times \\
 &\times \left\{ 1 - \frac{1}{b} \ln(1+b) \right\} - \frac{ab}{(1+b)^2} + \\
 &+ \left[\frac{n+a}{(1+1/b)\ln(1+b)} - \frac{a}{1+b} \right]^2, \quad (A.8) \\
 M_{C2} = \overline{(m-\bar{m})^2} &= M_2 - M_1^2 = \\
 &= \frac{n+a}{(1+1/b)^2 \ln^2(1+b)} \left\{ 1 - \frac{1}{b} \ln(1+b) \right\} - \frac{ab}{(1+b)^2}, \\
 M_{C3} = \overline{(m-\bar{m})^3} &= \frac{n+a}{(1+1/b)^3 \ln^3(1+b)} \times \\
 &\times \left\{ 2 - \frac{3}{b} \ln(1+b) \right\} + \frac{ab(1-b)(1+\ln(1+b))}{(1+b)^3 \ln(1+b)}.
 \end{aligned}$$

В частности, для ПК-решетки получаем

$$M_1 \approx 0.5888n + 1.03,$$

$$M_{C2} \approx 0.1644n - 0.183.$$

Для ГЦК-решетки получаем

$$M_1 \approx 0.556573n + 0.995634,$$

$$M_{C2} \approx 0.160157n - 0.125936.$$

По этим формулам были рассчитаны значения моментов, которые мы сравнили со значениями моментов, рассчитанными для точного распределения. Результаты приведены в таблице для ПК-решетки.

Сравнение полученных результатов показало, что асимптотическое выражение (A.5) для числа деревьев близко к точному, а форма найденного распределения близка к гауссовой. Как известно, для функции Гаусса отношение четвертого момента к квадрату второго равно трем. Из проведенного же нами исследования видно, что при $n = 1000$ для моментов, рассчитанных численно,

$$M_{CN4}/M_{CN2}^2 = 2.973718434,$$

а для моментов, рассчитанных по формулам (A.5)–(A.8),

$$M_{CN4}/M_{CN2}^2 = 2.998166565.$$

Таблица. Средний периметр и центральные моменты для ПК-решетки, вычисленные по формулам (A.8) (обозначены индексами C...), и полученные с помощью обсчета численных спектров, приведенных на рис. 4 (обозначены индексами C...N)

n	10	50	100	1000
M_{1N}	6.69031	30.41255	59.88424	588.6904
M_1	6.92157	30.47511	59.91703	589.8300
M_{C2N}	1.51322	8.05666	16.26999	163.9168
M_{C2}	1.46180	8.03891	16.26029	164.2452
M_{C3N}	-0.027543	0.61374	1.4534	17.1
M_{C3}	-0.069992	0.604965	1.44866	16.63519
M_{C4N}	6.40394	192.2881	789.08	79900
M_{C4}	5.95580	191.4373	788.2816	80880.046

На этом основании распределение по параметру m выберем в форме, соответствующей рецепту, приведенному в работе [37]:

$$\begin{aligned}
 \frac{N_n(m)}{N_n} &\approx W(\omega) = \\
 &= \frac{1}{V} \exp \{ -\lambda\omega^2 - \mu\omega^4 - \eta\omega^3 - \chi\omega \},
 \end{aligned}$$

где $\omega = m - \bar{m}$. В линейном по малым величинам приближении получим

$$W(\omega)_1 = \frac{1}{V} \exp \{ -\lambda\omega^2 \} (1 - \mu\omega^4 - \eta\omega^3 - \chi\omega). \quad (A.9)$$

Вычислив центральные моменты для этой функции, получаем систему уравнений для параметров распределения (A.9), решение которой

$$\begin{aligned}
 \lambda &= \frac{1}{2M_{C2}}(1 - \varepsilon/2), \quad \mu = \varepsilon \frac{1}{24M_{C2}^2}, \\
 \chi &= \frac{M_{C3}}{2M_{C2}^2}(1 - 1.125\varepsilon),
 \end{aligned}$$

$$\eta = -\frac{M_{C3}}{6M_{C2}^3}(1 - 1.625\varepsilon), \quad v = \sqrt{2\pi M_{C2}}(1 + \varepsilon/8),$$

где $\varepsilon = 3 - M_{C4}/M_{C2}^2$.

После подстановки найденных значений моментов, убеждаемся в хорошем соответствии приближенных распределений точным (см. рис. 4). При $n = 10$ замечен небольшой сдвиг распределений, отражающий неточность приближения (A.5) (см. таблицу).

ЛИТЕРАТУРА

1. D. E. Parker, X. Cao, A. Avdoshkin, T. Scaffidi, and E. Altman, *Phys. Rev. X* **9**, 041017 (2019).
2. P. Zhang and Z. Yu, *Phys. Rev. Lett.* **130**, 250401 (2023).
3. Д. Прескилл, *Квантовая информация и квантовые вычисления*, Т. 1. НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Москва–Ижевск, (2008).
4. D. Suter and G. A. Alvarez, *Rev. Mod. Phys.* **88**, 041001 (2016).
5. L. Pezze, A. Smerzi, M. K. Oberthaler, R. Schmied, and P. Treutlein, *Rev. Mod. Phys.* **90**, 035005 (2018).
6. J. Preskill, *Quantum* **2**, 79 (2018).
7. Bin Cheng, Xiu-Hao Deng, Xiu Gu et al., *Front. Phys.* **18**, 21308 (2023).
8. T. Kusumoto, K. Mitarai, K. Fujii, M. Kitagawa, and M. Negoro, *npj Quantum Inf.* **7**, 94 (2021).
9. J. Baum, M. Munovitz, A. N. Garroway, and A. Pines, *J. Chem. Phys.* **83**, 2015 (1985).
10. Р. Эрнст, Дж. Боденхаузен, А. Вокаун, *ЯМР в одном и двух измерениях*, Мир, Москва (1990).
11. G. A. Alvarez and D. Suter, *Phys. Rev. A* **84**, 012320 (2011).
12. M. Gattner, Ph. Hauke, and A. M. Rey, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 040402 (2018).
13. S. I. Doronin, E. B. Fel'dman, and I. D. Lazarev, *Phys. Rev. A* **100**, 022330 (2019).
14. S. I. Doronin, E. B. Fel'dman, and I. D. Lazarev, *Phys. Lett. A* **406**, 127458 (2021).
15. H. G. Krojanski and D. Suter, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 090501 (2004).
16. G. Cho, P. Cappelaro, D. G. Cory, and C. Ramanathan, *Phys. Rev. B* **74**, 224434 (2006).
17. S. Lacelle, S. Hwang, and B. Gerstein, *J. Chem. Phys.* **99**, 8407 (1993).
18. D. Levy and K. Gleason, *J. Phys. Chem.* **96**, 8125 (1992).
19. G. A. Bochkin, E. B. Fel'dman, S. G. Vasil'ev, and V. I. Volkov, *Appl. Magn. Reson.* **49**, 25 (2018).
20. A. Fedorov and L. Fedichkin, *J. Phys.: Condens. Matter* **18**, 3217 (2006).
21. В. Е. Зобов, А. А. Лундин, *ЖЭТФ* **139**, 519 (2011).
22. А. А. Лундин, Б. Н. Провоторов, *ЖЭТФ* **70**, 1047 (1976).
23. В. Е. Зобов, А. А. Лундин, *Письма в ЖЭТФ* **117**, 929 (2023).
24. P. W. Anderson and P. R. Weiss, *Rev. Mod. Phys.* **25**, 269 (1953).
25. J. R. Klauder and P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **125**, 912 (1962).
26. В. Е. Зобов, *ТМФ* **165**, 242 (2010).
27. G. Parisi and Y. C. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 1791 (1984).
28. J. Vannimenus, B. Nickel, and V. Hakim, *Phys. Rev. B* **30**, 391 (1984).
29. А. А. Лундин, В. Е. Зобов, *ЖЭТФ* **147**, 885 (2015).
30. В. Е. Зобов, А. А. Лундин, *ЖЭТФ* **130**, 1047 (2006).
31. В. Е. Зобов, А. А. Лундин, *Хим. физика* **27**, 18 (2008).
32. А. П. Прудников, Ю. А. Брычков, О. И. Маричев, *Интегралы и ряды*, разд. 2.3.16(2), Наука, Москва (1981).
33. В. Е. Зобов, А. А. Лундин, *Хим. физика* **43**, 3 (2024).
34. А. Ю. Гросберг, А. Р. Хохлов, *Статистическая физика макромолекул*, Наука, Москва (1989).
35. В. Е. Зобов, М. А. Попов, *ТМФ* **126**, 325 (2001).
36. В. Е. Зобов, М. А. Попов, *ТМФ* **144**, 564 (2005).
37. J. G. Powles and B. Carazza, in: *Magnetic Resonance*, Plenum, New York (1973), p. 133.