

С. Н. Д о б р я к о в, В. В. П р и в е з е н ц е в (Москва, ИХФ РАН, ФТИАН). **Независимые параметры полуэмпирического оператора релаксации в квантовом уравнении Лиувилля при компьютерном моделировании спектров магнитного резонанса двухспиновых систем.**

Теоретические компьютерные спектры магнитного резонанса двухспиновых систем вычисляются путем решения системы из 16 уравнений: а) дифференциальных — для случаев временной развертки и б) алгебраических — для случая непрерывного поглощения электромагнитного излучения. В матричной форме эта система уравнений соответствует квантовому уравнению Лиувилля [1]

$$\dot{M}_{mn} = \sum_k iH_{mk}M_{kn} - iM_{mj}H_{kn} + \sum_{j,k} (\nu_{mj}p_{kn} + p_{mj}\nu_{kn})(M_{jk} - M_{mn}) - R_{mn}^0 M_{mn}, \quad (1)$$

с введенным полуэмпирическим оператором релаксации (четырёхиндексной релаксационной матрицей) $R_{mjkn} = \nu_{mj}p_{kn} + p_{mj}\nu_{kn}$ (обозначения те же, что в [1]). Здесь ν_{mn} — эмпирические релаксационные частоты спиновых переходов между зеемановскими состояниями m и n , которые неограниченно убывают ($\nu_{mn} \rightarrow 0$) при уменьшении локальной концентрации центров окружающей спиновой среды. Величины p_{mn} — эмпирические функции перекрытия, которые являются результатом стохастического взаимодействия между двухспиновой системой и окружающей спиновой средой и определяются концентрацией последней при условии [2]: $p_{mn} < 1$ при $n = m$, $p_{mn} > 0$, при $n \neq m$. Величина R_{mn}^0 соответствует собственной ширине линии спиновых переходов.

Для вычисления R_{mjkn} запишем приведенное выше условие ортогональности в параметрической форме через одноэлектронные зеемановские спин-функции:

$$\begin{aligned} \langle \alpha(1)|\alpha(1) \rangle = \langle \beta(1)|\beta(1) \rangle &= 1 - p', & \langle \alpha(2)|\alpha(2) \rangle = \langle \beta(2)|\beta(2) \rangle &= 1 - p'', \\ \langle \alpha(1)|\beta(1) \rangle = \langle \beta(1)|\alpha(1) \rangle &= p', & \langle \alpha(2)|\beta(2) \rangle = \langle \beta(2)|\alpha(2) \rangle &= p'', \end{aligned} \quad (2)$$

где p' — параметр, описывающий взаимодействие первого спина двухспиновой системы с окружающей спиновой средой, а p'' — параметр такого же взаимодействия второго спина той же системы с этой же средой.

Так, если взаимодействие осуществляется в окружении первого спина, то благодаря стохастическому взаимодействию между ним и окружающей спиновой средой его функция ортогональности нарушается ($p' \neq 0$). Если при этом отсутствует взаимодействие второго спина двухспиновой системы с окружающей спиновой средой, то его функция ортогональности сохраняется ($p'' = 0$). При взаимодействии второго спина с окружающей спиновой средой для него записывается самостоятельная таблица интеграла ортогональности. Поэтому полная таблица вероятностей совпадения уровней базиса может быть записана следующим образом:

	$\alpha(1)\alpha(2)$	$\alpha(1)\beta(2)$	$\beta(1)\alpha(2)$	$\beta(1)\beta(2)$
$\alpha(1)\alpha(2)$	$(1 - p')(1 - p'')$	$(1 - p')p''$	$p'(1 - p'')$	$p'p''$
$\alpha(1)\beta(2)$	$(1 - p')p''$	$(1 - p')(1 - p'')$	$p'p''$	$p'(1 - p'')$
$\beta(1)\alpha(2)$	$p'(1 - p'')$	$p'p''$	$(1 - p')(1 - p'')$	$(1 - p')p''$
$\beta(1)\beta(2)$	$p'p''$	$p'(1 - p'')$	$(1 - p')p''$	$(1 - p')(1 - p'')$

Используя матрицу перекрытия из приведенной выше таблицы и частоты релаксационных переходов, можно вычислить все элементы R_{mjkn} . Переход $m \rightarrow j$ происходит с частотой ν_{mj} и вероятностью совпадений уровня базиса $p_{kn} \neq 0$, а переход $n \rightarrow k$ — с частотой ν_{nk} и вероятностью совпадений уровня базиса $p_{mj} \neq 0$. При компьютерном моделировании спектров магнитного резонанса двухспиновых систем необходимо наличие следующих 12 независимых параметров: 1) диагональные

элементы ν_{nn} , $n = 1, 2, 3, 4$ (всего 4 элемента); 2) недиагональные элементы ν_{mn} , $m, n = 1, 2, 3, 4$ при $m \neq n$ (всего 6 элементов); 3) одноэлектронные вероятности p' и p'' (всего 2 элемента).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Добряков С. Н., Корнилов Б. В., Привезенцев В. В. Компьютерное моделирование спектров магнитного резонанса цинк-фосфорной двухспиновой системы в кремнии. — Обозрение прикл. и промышл. матем., 2005, т. 12, в. 3, с. 350.
2. Добряков С. Н., Привезенцев В. В. Особенности полуэмпирического оператора релаксации в квантовом уравнении Лиувилля при компьютерном моделировании спектров магнитного резонанса цинк-фосфорной двухспиновой системы в кремнии. — Обозрение прикл. и промышл. матем., 2005, т. 12, в. 4, с. 947.