**Об ориентационной поляризации спиновых систем**

Валерий Эткин

**Введение**

В одной из наших предыдущих статей, посвященных термодинамике спиновых систем, была выявлена несостоятельность попыток свести к теплообмену процессы установления единой ориентации противоположно направленных ядерных спинов [1]. Несколько позднее было показано, что процессы упорядочивания взаимной ориентации имеют место и в макромире, свидетельствуя о зависимости потенциальной энергии от взаимной ориентации вращающихся тел и тел с несферической симметрией [2]. Затем было показано, что существование ориентационных процессов непосредственно вытекает из развернутой формулировки основного закона термодинамики пространственно неоднородных сред [3]. Представляет интерес показать, что учет «ориентационной» степени свободы при термодинамическом описании спин-спинового взаимодействия приводит к результатам, согласующимся с экспериментом.

**Основное уравнение термодинамики спиновых систем**

Известно, что потенциальная энергия взаимодействия между частицами зависят от взаимной ориентации их спинов. Энергетическая выгодность состояния с определенной взаимной ориентацией спинов предопределяет характер ряда химических превращений (в частности, образование орто- или параводорода), объясняет ферромагнетизм и антиферромагнетизм [4]. Так, в молекулах с ковалентной химической связью (например, в молекулах водорода) энергетически выгоднее состояние, в котором спины валентных электронов соединяющихся атомов антипараллельны. Напротив, в ферромагнетике более низкой энергией обладает состояние, в котором спины электронов в незаполненных оболочках соседних атомов (и их магнитные моменты) параллельны, благодаря чему возникает спонтанная намагниченность. Поэтому при описании ряда макрофизических свойств веществ необходимо учитывать протекающие в них процессы ориентации (переориентации) спинов ядерных частиц. С термодинамической точки зрения это означает учет в ее уравнениях еще одной степени свободы, связанной с суммарным собственным моментом количества движения ядер исследуемых веществ J. Эта величина зависит как от общего количества нуклонов в ядрах конденсированных веществ, так и от взаимной ориентации спинов протонов и нейтронов. Известно, что ядерные частицы при своем вращении испытывают прецессию, т.е. движение, при котором оси их вращения образуют с вектором H пространственно ориентированный угол φ. Кроме того, проекция спинов Ii i-х элементарных частиц на выбранное направление в пространстве (например, на направление внешнего магнитного поля H) изменяется в зависимости от угла φ=|φ| между ними от –Ii до +Ii (что соответствует φ=180° и φ=0°). Следовательно, суммарный момент J может быть выражен через спины Ii соотношением:

J = ΣħIi·cos φi, (1)

где ħ – постоянная Планка.

Наряду с этим, как известно, ядра, атомы и молекулы конденсированных веществ обладают некоторым магнитным моментом M, обусловленным главным образом орбитальным движением электронов вокруг ядра и их спинами. Таким образом, внутренняя энергия U конденсированных веществ зависит в общем случае не только от их температуры (или энтропии S), напряженного состояния (тензора деформаций D) и от их магнитного момента M, но и от суммарного момента количества движения ядер исследуемых веществ J(φ), зависящего от взаимной ориентации спинов. Экстенсивные параметры S, D, M и J являются в принципе независимыми, поскольку ядерный спин J может отсутствовать, несмотря на отличные от нуля значения параметров S, D и M. Это означает, что внутренняя энергия U конденсированных веществ как функция их состояния имеет вид U=U(S, D, M, J), а ее полный дифференциал выражается соотношением:

dU ≡ TdS – ПdD + НdM + РdJ, (2)

где T ≡ (∂U/∂S) – абсолютная температура системы; П≡(∂U/∂D) – тензор давлений; Н≡(∂U/∂M) – напряженность внешнего магнитного поля; Р≡(∂U/∂J).

В этом выражении член РdJ характеризует работу, связанную с ориентационной поляризацией системы ядерных спинов (подобно тому, как член НdM определяет работу, связанную с намагничиванием системы). Хотя векторная величина Р имеет размерность угловой скорости, она далека по физическому содержанию от этого понятия, поскольку говорить об угловой скорости вращения ядра или атома подобно твердому телу не имеет смысла. Поэтому мы будем называть величину Р вектором ориентационной поляризации спиновой системы.

Из практических соображений потенциальную энергию системы во внешнем магнитном поле НM целесообразно исключить из понятия внутренней энергии, вводя так называемую «собственную внутреннюю энергию» U\*=U–НM [5]. Тогда, используя преобразование Лежандра НdM=d(НM)–MdН, выражение (2) можно переписать в виде:

dU\* = TdS – ПdD – MdН + РdJ. (3)

Отсюда на основании свойств полного дифференциала следуют дополнительные дифференциальные соотношения вида

(∂M/∂J)Н = (∂Р/∂Н)J (4)

Согласно этому соотношению, ориентационная поляризация системы ядерных спинов Р изменяется под влиянием внешнего магнитного поля Н в той же мере, что и намагниченность системы – вследствие переориентации спиновой системы (изменения момент количества движения J). Поскольку же в условиях постоянства магнитного поля Н изменение M может быть обусловлено лишь изменением ядерной намагниченности (дипольного магнитного момента ядер) MЯ, который связан с суммарный момент количества движения J так называемым гиромагнитным отношением γ [4]

MЯ = γ·J, (5)

то вместо (4) можно написать

(∂Р/∂Н)J = γ (6)

Таким образом, ориентационная поляризация системы ядерных спинов под влиянием внешнего магнитного поля действительно имеет место и выражается тем же гиромагнитным отношением γ. Отличие от нуля левой и правой частей соотношения (4) подтверждает обоснованность учета дополнительной степени свободы, связанной с ориентацией спиновых систем.

Термодинамика позволяет также установить условия равновесия двух спиновых систем. С этой целью применим критерий равновесия Гиббса dUS≥0 к рассмотренной в [1] совокупности двух спиновых подсистем кристалла LiF. Будучи экранированной от воздействия внешнего магнитного поля (Н=0), эта система в целом образует в целом недеформируемую (dD=0) теплоизолированную систему (dS=0), Разбивая систему на две части и обозначая их параметры вслед за Гиббсом соответственно одним и двумя штрихами, имеем для нее

dU = dU' + dU" = Р'dJ' + Р"dJ" ≥ 0 (7)

Рассмотрим это соотношение совместно с уравнениями наложенных связей, которые вытекают из закона сохранения момента количества движения:

dJ = dJ' + dJ" = 0. (8)

Рассматривая (7) совместно с (8), находим, что условию спин – спинового равновесия двух систем отвечает равенство векторов их ориентационной поляризации:

Р' = Р". (9)

Это выражение показывает, что даже в отсутствие внешнего магнитного поля спин – спиновое взаимодействие приводит к установлению единой ориентации двух спиновых систем. Это явление и было обнаружено с опытах по смешению двух спиновых систем с противоположной ориентацией спинов [1]. Таким образом, признание факта существования ориентационных процессов и связанной с ней дополнительной степени свободы конденсированных веществ приводит к результатам, согласующимся с опытом.

**Обсуждение результатов**

Предложенное термодинамическое описание процессов спин-спинового взаимодействия свободно от противоречий, связанных с попытками приписать системе ядерных спинов определенную (положительную или отрицательную) абсолютную температуру и тем самым свести процесс установления единой ориентации двух спиновых подсистем к процессу выравнивания их температур [5]. Этот пример еще раз подтверждает справедливость вывода [6] о том, что основные методологические ошибки при применении термодинамики обусловлены нарушением довольно очевидного положения, согласно которому число независимых переменных, определяющих состояние какой-либо системы, равно числу независимых процессов, протекающих в ней.

С другой стороны, предложенный подход подтверждает обоснованность рассмотрения спин-спинового взаимодействия как особого, качественно отличимого и несводимого к другим процесса, связанного с упорядочиванием ориентации спинов разнородных нуклонов, атомов и веществ в целом. Выделение и изучение специфики подобных ориентационных процессов может пролить новый свет на многие явления, проявляющиеся в том числе и на макроуровне. В качестве примера сошлемся на обнаруженное недавно группой ученых Массачусетского технологического института непостоянство гравитационной постоянной (точнее, зависимость ее от ориентации тел относительно звезд). Если (как это имело место в рассмотренном случае) внутренняя энергия системы зависит от взаимной ориентации ее компонентов или субкомпонентов (в данном случае – от взаимной ориентации гравитирующих тел), то сила их взаимного притяжения F, определяемая как производная от U(r, φ) по радиус-вектору r, также будет зависеть от φ:

F = –∂U(r, φ)/ ∂r = F(r, φ). (10)

Поскольку же в соответствии с законом Ньютона

U(r) = –Gm1m2/r12 (11)

потенциальная энергия взаимодействия двух тел массой m1 и m2 при неизменном расстоянии между ними r12 зависит только от гравитационной постоянной G, остается признать последнюю также зависящей от ориентации тел, т.е. G=G(φ).

**Список литературы**

Эткин В.А. О специфике спин-спиновых взаимодействий. НиТ, 2002.

Эткин В.А. Об ориентационном взаимодействии спиновых систем. НиТ, 2002.

Эткин В.А. К математическому моделированию торсионных и ориентационных взаимодействий. // Электронный журнал «SciTec», 20.04.03.

Физический энциклопедический словарь. – М.: Советская энциклопедия, 1984.

Базаров И.П. Термодинамика. Изд. 4-е. М.: Высшая школа, 1991.

Эткин В.А. Термодинамика неравновесных процессов переноса и преобразования энергии. Саратов: СГУ, 1991.