EESTI NSV TEADUSTE AKADEEMIA TOIMETISED. 25. KÕIDE
FÜÜSIKA * MATEMAATIKA. 1976, NR. 2

ИЗВЕСТИЯ АКАДЕМИИ НАУК ЭСТОНСКОЙ ССР. ТОМ 25
ФИЗИКА * МАТЕМАТИКА. 1976, № 2

УДК 539.28

В. СИНИВЕЭ

ГРУППОВОЙ ПОДХОД В ДИНАМИКЕ МНОГОСПИНОВЫХ СИСТЕМ. II

Описание динамики многоспиновых систем посредством групп преобразований движения возможно с двух сторон. Группово-алгебраическая сторона сужает множество преобразований, соответствующее данному типу взаимодействий. Временно-топологическая сторона устанавливает временную последовательность и скорости движений [1]. Предлагаемая часть работы посвящена временной стороне проблемы.

Изложение будет конструктивным. В п. 5 настоящей статьи рассматриваются движения, соответствующие гамильтонианам с постоянными собственными векторами. Это многоспиновой аналог движения единичного спина в магнитном поле, сохраняющем постоянное направление. П. 5 служит иллюстрацией для введенных в [1] понятий и отправным моментом для следующего шага конструкции в п. 6. Произведение двух таких преобразований движения, соответствующих гамильтонианам с различными собственными векторами, дает динамику возбуждения спин-системы с зависящим от времени взаимодействием. Это обобщение действия вращающегося магнитного поля приводит к обобщению понятия резонанса.

5. Свободное движение

5.1. Пусть в d-мерном пространстве квантовых состояний **C** задан ортонормированный базис a_m $(m = 1, 2, \ldots, d)$, а в операторном пространстве **O** соответствующий A-базис (см. п. 2.2). Унитарные операторы

$$D(\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_d) = \exp[-i\Phi(\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_d)] \tag{5.1}$$

с эрмитовыми фазовыми операторами Φ, определяемыми по

$$\Phi(\alpha_1, \alpha_2, \ldots) a_m = \alpha_m a_m, \tag{5.2}$$

$$0 \leqslant \alpha_m \leqslant 2\pi, \tag{5.3}$$

образуют коммутативную группу свободного движения. Динамическое кольцо группы состоит из всех эрмитовых операторов, имеющих собственные векторы a_m. Базисными операторами (1.20) служат операторы A-базиса A_{mm}. Фазовые углы (5.3) сами по себе образуют группу с операцией сложения углов, а группа свободного движения — ее представление в **C**. Мы используем α_m для параметризации группы — в окрестности E они составляют карту.

Для введения динамики определим двухвременные функции $\alpha_m(t_2, t_1)$ (см. п. 1.1). В частности, по (1.12)

$$\alpha_m(t+\Delta t, t) = \omega_m(t)\Delta t. \tag{5.4}$$

В силу аддитивности алгебры углов

$$\alpha_m(t+\Delta t, 0) = \alpha_m(t, 0) + \alpha_m(t+\Delta t, t), \tag{5.5}$$

откуда

$$\frac{d\alpha_m(t, 0)}{dt} = \omega_m(t). \tag{5.6}$$

Используя в (5.1) результат решения (5.6), имеем

$$D(t, 0) = \sum_{m=1}^{d} \exp(-i\alpha_m(t, 0)) A_{mm} \tag{5.7}$$

в качестве элементов нашей динамической группы, а эрмитовые операторы

$$H(t) = \frac{d\Phi(t, 0)}{dt} = \sum_m \omega_m(t) A_{mm} \tag{5.8}$$

в качестве элементов (1.19) динамического кольца.

Свободное движение в узком смысле описывается независящим от времени гамильтонианом (5.8), а

$$D(t, 0) = \sum_m \exp(-i\omega_m t) A_{mm}. \tag{5.9}$$

Назовем более общее движение (5.7) модуляционным. Существенно, чтобы собственные векторы a_m оператора (5.8) были постоянными.

Унитарные супероператорные представления наших динамического кольца и динамической группы описываются выражениями

$$\mathfrak{H}(t) A_{mn} = \omega_{mn}(t) A_{mn} \tag{5.10}$$

и

$$\mathfrak{D}(t, 0) A_{mn} = \exp[-i\alpha_{mn}(t, 0)] A_{mn} \tag{5.11}$$

соответственно. При этом

$$\omega_{mn}(t) = \omega_m(t) - \omega_n(t), \tag{5.12}$$

$$\alpha_{mn}(t, 0) = \alpha_m(t, 0) - \alpha_n(t, 0). \tag{5.13}$$

Движение оператора плотности (2.4) в пространстве **O** имеет вид

$$\varrho(t) = \sum_m \sum_n \varrho_{mn}(0) \exp[-i\alpha_{mn}(t, 0)] A_{mn}. \tag{5.14}$$

Ортогональное супероператорное представление (см. п. 4.2) удобно описать на сопряженном с A-базисом эрмитовом базисе A_{mm}, X_{mn}, Y_{mn} (см. п. 2.2):

$$\mathfrak{R}(t, 0) A_{mm} = A_{mm}, \tag{5.15}$$

$$\begin{aligned} \mathfrak{R}(t, 0) X_{mn} &= \cos\alpha_{mn}(t, 0) X_{mn} + \sin\alpha_{mn}(t, 0) Y_{mn}, \\ \mathfrak{R}(t, 0) Y_{mn} &= -\sin\alpha_{mn}(t, 0) X_{mn} + \cos\alpha_{mn}(t, 0) Y_{mn}. \end{aligned} \tag{5.16}$$

Динамическое кольцо описывается формулами:

$$\begin{aligned} \mathfrak{K}(t) A_{mm} &= 0, \\ \mathfrak{K}(t) X_{mn} &= \omega_{mn}(t) Y_{mn}, \\ \mathfrak{K}(t) Y_{mn} &= -\omega_{mn}(t) X_{mn}. \end{aligned} \tag{5.17}$$

Пусть начальное состояние спинового ансамбля $\varrho(0)$ задано матричными элементами

$$\varrho_{mn}(0) = |\varrho_{mn}(0)| \exp(-i\psi_{mn}). \tag{5.18}$$

Тогда свободное движение (5.9) оператора плотности в пространстве **H** примет вид

$$\varrho(t) = \Re(t,0)\varrho(0) = \sum_m \varrho_{mm}(0) A_{mm} +$$

$$+ \sum_{m>n}\sum 2|\varrho_{mn}(0)|[\cos(\omega_{mn}t + \psi_{mn}) X_{mn} + \sin(\omega_{mn}t + \psi_{mn}) Y_{mn}]. \quad (5.19)$$

Как фазовые разницы (5.13), так и частоты переходов (5.12) связаны комбинационными соотношениями Ритца типа

$$\omega_{mk}(t) + \omega_{kn}(t) = \omega_{mn}(t), \quad (5.20)$$

что обусловлено одинаковой размерностью d супероператорного представления.

Пространство **O** распадается на одномерные неприводимые подпространства, натянутые на операторы A-базиса. Пространство же **H** состоит из одномерных (базис A_{mm}) и двумерных (базис X_{mn}, Y_{mn}) неприводимых подпространств.

5.2. Гамильтонианам с исчезающим следом (2.18) соответствует d — 1-мерная унимодулярная унитарная группа свободного движения. В силу того, что фазовые углы (5.3) и частоты $\omega_m(t)$ связаны соотношениями

$$\sum_m \alpha_m(t,0) = 0, \quad (5.21)$$

$$\sum_m \omega_m(t) = 0, \quad (5.22)$$

суммы углов (5.13) и частот (5.12) исчезают.

Любой унитарный оператор может быть представлен в виде произведения фазового множителя на унимодулярный оператор типа (5.1). Ограничиваясь лишь последними, мы получаем однозначное соответствие динамической группы со своим супероператорным представлением. Поясним это подробнее.

Векторы (в том числе и базисные) пространства **C** рассматриваем как наборы комплексных чисел, упорядоченных по значениям индексов. Действующие в **C** операторы задаем их матрицами относительно базиса a_m. В частности, гамильтонианы определяем по упорядоченному набору собственных значений ω_m. Согласовав упорядочение базисных операторов A_{mn}, выражаем супероператоры по их суперматрицам. Так, супергамильтониан задаем упорядоченным набором частот перехода (5.12). Если набор частот (5.12) принят без индексации, то в силу (5.20) и (5.12) ему будут соответствовать только два гамильтониана с противоположно упорядоченными наборами собственных частот. Поскольку индексация рядов в супергамильтониане согласована, следовательно, соответствие **H** и $\mathfrak{H}$ однозначно.

Однозначное соответствие $D(t,0)$ и $\mathfrak{D}(t,0)$ выводится аналогично, однако при этом следует отметить, что хотя парам α_m, α_n и $(\alpha_m + 2\pi/d)$, $(\alpha_n + 2\pi/d)$ и отвечает одинаковое α_{mn} при выполнении условий Ритца и (5.21), начальному условию $\alpha_m(0,0) = 0$ удовлетворяет лишь первая пара.

5.3. В коммутативной группе свободного движения можно выделить коммутативные подгруппы любой размерности $r \leqslant d$. Пусть в данном случае наша динамическая группа **G** — некоторая такая подгруппа.

Введем независимые параметры группы **G** — действительные числа β_k $(k = 1, 2, \ldots, r)$. В **G** входят такие операторы $D(\beta_1, \beta_2, \ldots)$ типа (5.1), которые заданы непрерывными дифференцируемыми функциями $\alpha_m(\beta_1, \beta_2, \ldots)$. Выбираем β_k так, чтобы $\alpha_m(0, 0, \ldots) = 0$. Если динамика над независимыми параметрами задана функциями $\beta_k(t,0)$, то ими же заданы $\alpha_m(t, 0)$ и $D(t, 0) \in \mathbf{G}$. Требуя, чтобы в окрестности E параметры образовали карту, имеем в этой окрестности

$$\alpha_m(t, 0) = \sum_{k=1}^{r} \lambda_{mk} \beta_k(t, 0), \tag{5.23}$$

где

$$\lambda_{mk} = \left(\frac{\partial \alpha_m}{\partial \beta_k} \right)_0. \tag{5.24}$$

Индекс «0» по-прежнему означает производную в точке $\beta_j = 0$ ($j = 1, 2, \ldots, r$). Наложим на величины (5.24) условия ортонормированности

$$\sum_{m=1}^{d} \lambda_{mj} \lambda_{mk} = \delta_{jk}. \tag{5.25}$$

Тогда независимым параметрам будет соответствовать новый базис динамического кольца

$$B_k = i \left(\frac{\partial D}{\partial \beta_k} \right)_0 = \sum_{m=1}^{d} \lambda_{mk} A_{mm}, \tag{5.26}$$

который в силу (5.25) оказывается ортонормированным. Матрицы базисных операторов (5.26) диагональны: $(B_k)_{mm} = \lambda_{mk}$. Динамическое кольцо группы свободного движения образует d-мерное подпространство в $\mathbf{H}$ с базисом A_{mm}. Динамическое кольцо $\mathbf{G}^0$ здесь же образует r-мерное подпространство с базисом B_k. Элементы $\mathbf{G}^0$ (гамильтонианы) заданы r независимыми функциями $\varepsilon_k(t)$ согласно

$$H(t) = \sum_{k=1}^{r} \varepsilon_k(t) B_k. \tag{5.27}$$

Вследствие справедливости и (5.8), собственные значения $\omega_m(t)$ элементов $\mathbf{G}^0$ связаны линейными соотношениями

$$\omega_m(t) = \sum_{k=1}^{r} \lambda_{mk} \varepsilon_k(t). \tag{5.28}$$

В силу (5.28) на частоты переходов (5.12) супероператорного представления $\mathbf{G}^0$ налагаются более сильные ограничения, чем ограничения (5.20) — они определяются теми же функциями $\varepsilon_k(t)$ по

$$\omega_{mn}(t) = \sum_{k=1}^{r} (\lambda_{mk} - \lambda_{nk}) \varepsilon_k(t). \tag{5.29}$$

Выражение (5.28) может быть согласовано с (5.6) лишь в том случае, если

$$\frac{d\beta_k(t, 0)}{dt} = \varepsilon_k(t) \tag{5.30}$$

и

$$\frac{\partial \alpha_m}{\partial \beta_k} = \lambda_{mk}. \tag{5.31}$$

Итак, линейная зависимость (5.23) распространяется на всю группу $\mathbf{G}$, а параметры β_k оказываются каноническими, т. е.

$$\alpha_m(\ldots \beta'_k \ldots) + \alpha_m(\ldots \beta''_k \ldots) = \alpha_m(\ldots \beta'_k + \beta''_k \ldots). \tag{5.32}$$

Природа β_k должна быть такой, чтобы (5.23) давали значения α_m в пределах (5.3).

Динамическая группа G составлена из преобразований движения

$$D(t,0)=\exp[-i\Phi(t,0)], \tag{5.33}$$

где фазовые операторы (5.2) заданы по

$$\Phi(t,0)=\sum_{k=1}^{r}\beta_k(t,0)B_k=\sum_{m=1}^{d}\alpha_m(t,0)A_{mm}. \tag{5.34}$$

В супероператорных представлениях группы G углы (5.13) определены по

$$\alpha_{mn}(t,0)=\sum_{k=1}^{r}(\lambda_{mk}-\lambda_{nk})\beta_k(t,0). \tag{5.35}$$

Итак, подведем итоги. Подгруппа G соответствует гамильтонианам, собственные значения которых связаны согласно (5.28). Частоты переходов связаны согласно (5.29), а вращения на плоскостях переходов (5.16) синхронизованы согласно (5.35).

Если G унимодулярная, то (5.21) и (5.22) удовлетворяются при

$$\sum_{m=1}^{d}\lambda_{mk}=0. \tag{5.36}$$

5.4. Наблюдаемые. Различаем два типа наблюдаемых. Наблюдаемые Р-типа (оператор P) коммутируют со всеми A_{mm}, наблюдаемые Q-типа (оператор Q) ортогональны со всеми A_{mm}. В частности, z-компонента суммарного спина системы относится к Р-типу, x, y компоненты — к Q-типу.

В случае свободного движения (5.14)

$$\langle P\rangle=(\varrho(t),P)=(\varrho(0),P), \tag{5.37}$$

$$\langle Q\rangle=\sum_{m\neq n}\sum\varrho_{mn}(0)\,Q_{nm}\exp[-i\alpha_{mn}(t,0)] \tag{5.38}$$

лишь наблюдаемые Q-типа зависят от времени. Временные функции (5.38) имеют вид (частотно-модулированных) колебаний. Частотный спектр колебаний содержит частоту (5.12), если $Q_{nm}\neq 0$.

Если динамическая группа G — лишь подгруппа унитарной группы, то колебания в (5.38) синхронизованы согласно (5.35) и (5.29).

6. Вынужденное движение

6.1. Умножение движений.

Теорема. *Если преобразование движения $D(t,0)$, соответствующее гамильтониану $H(t)$, может быть представлено в виде произведения двух преобразований*

$$D(t,0)=D_1(t,0)\,D_2(t,0), \tag{6.1}$$

удовлетворяющих начальным условиям

$$D_1(0,0)=D_2(0,0)=E \tag{6.2}$$

и уравнению

$$i\frac{dD_1(t,0)}{dt}=G(t)\,D_1(t,0), \tag{6.3}$$

то $D_2(t,0)$ задается уравнением движения

$$i\frac{dD_2(t,0)}{dt}=F(t)\,D_2(t,0), \tag{6.4}$$

где
$$F(t)=D_1(t,0)^{-1}(H(t)-G(t))D_1(t,0). \tag{6.5}$$

Доказательство получается путем непосредственной дифференциации выражения (6.1).

Теорема об умножении движений является обобщением метода вращающего репера в теории элементарного магнитного резонанса (см., напр. [2]). Аналогом подвижного репера является подвижный базис пространства **C**
$$a_m(t)=D_1(t,0)a_m. \tag{6.6}$$

Произведение
$$D(t,0)=U(t,0)D_1(t,0), \tag{6.7}$$

где
$$U(t,0)=D_1(t,0)D_2(t,0)D_1(t,0)^{-1}, \tag{6.8}$$

интерпретируется следующим образом. $D_1(t,0)$ описывает переносное движение вектора состояния совместно с подвижным базисом (6.6), $U(t,0)$ — движение относительно этого же базиса. То же движение, но относительно неподвижного базиса a_m, описывает $D_2(t,0)$. Гамильтониан относительного движения (6.5) соответствует эффективному магнитному полю в теории элементарного магнитного резонанса.

В силу гомоморфизма приведенная теорема распространяется и на супероператорные представления. Имеем
$$D(t,0)\to\mathfrak{D}(t,0)=\mathfrak{D}_1(t,0)\mathfrak{D}_2(t,0), \tag{6.9}$$

где унитарные супероператоры $\mathfrak{D}_1$, $\mathfrak{D}_2$ относятся к D_1 и D_2 соответственно. Аналогичное разложение получается для ортогонального супероператорного представления.

В пространстве **O** подвижному базису (6.6) соответствует подвижный A-базис
$$A_{mn}(t)=D_1(t,0)A_{mn}D_1(t,0)^{-1}. \tag{6.10}$$

На языке неподвижного базиса относительное движение спинового ансамбля описывается оператором
$$\sigma(t)=\mathfrak{D}_2(t,0)\varrho(0)=\sum_m\sum_n\sigma_{mn}(t)A_{mn}. \tag{6.11}$$

Имеет место уравнение движения
$$i\frac{d\sigma}{dt}=[F(t),\sigma]. \tag{6.12}$$

Абсолютное движение оператора плотности получается как переносное движение оператора (6.11)
$$\varrho(t)=\mathfrak{D}_1(t,0)\sigma(t)=\sum_m\sum_n\sigma_{mn}(t)A_{mn}(t). \tag{6.13}$$

6.2. Умножение свободных движений. Рассмотрим приложение теоремы об умножении движений к частному случаю, определяемому гамильтонианом
$$H(t)=H_0+H_1(t). \tag{6.14}$$

Независящая от времени часть гамильтониана
$$H_0=\sum_m\omega_m^{(0)}A_{mm} \tag{6.15}$$

предполагается коммутирующей с оператором
$$G=\sum_m\nu_mA_{mm}. \tag{6.16}$$

Зависящая от времени часть гамильтониана (возбуждение) определяется по

$$H_1(t)=D_1(t,0)\,VD_1(t,0)^{-1}, \tag{6.17}$$

где эрмитовый оператор V ограничен дополнительным условием ортогональности

$$(V,A_{mm})=0. \tag{6.18}$$

Подразумевается, что следы операторов H_0, G, V — нули.

Так как G не зависит от времени, то согласно п. 5.1

$$D_1(t,0)=\sum_m \exp(-i\nu_m t)\,A_{mm}. \tag{6.19}$$

В силу (6.17), (6.19) и (6.10) имеем

$$H_1(t)=\sum_{m\neq n}\sum V_{mn}A_{mn}(t). \tag{6.20}$$

Воспользовавшись эрмитовым базисом, сопряженным с A-базисом, имеем также

$$H_1(t)=\sum_{m>n}\sum 2/V_{mn}/[\cos(\nu_{mn}t+\psi_{mn})X_{mn}+\sin(\nu_{mn}t+\psi_{mn})Y_{mn}], \tag{6.21}$$

где начальные фазы ψ_{mn} определяются по

$$V_{mn}=/V_{mn}/e^{-i\psi_{mn}}. \tag{6.22}$$

Поставленная задача типична для ЯМР спектроскопии. H_0 выражает взаимодействие спинов с постоянным внешним полем и усредненные внутримолекулярные взаимодействия, $H_1(t)$ — действие вращающегося радиочастотного поля. Однако в качестве H_0 и $H_1(t)$ мы допускаем взаимодействия в некотором смысле более общие, чем встречающиеся в эксперименте ЯМР. С другой стороны, не следует думать, что (6.21) включает все эксперименты, которые можно осуществить на основе вращающихся магнитных полей. Например, выпадают эксперименты с сильным многочастотным возбуждением.

Так как G считается известным, то задача сводится к определению относительного движения. Если $V=0$, то движение (6.1) — свободное движение (5.9), соответствующее гамильтониану H_0. В этом случае гамильтониан относительного движения F совпадает с оператором расстройки

$$\Delta=H_0-G, \tag{6.23}$$

имеющим собственные значения

$$\Delta\nu_m=\omega_m^{(0)}-\nu_m. \tag{6.24}$$

В случае же присутствия возбуждения (6.20) имеем

$$F=\Delta+V. \tag{6.25}$$

Так как (6.25) не зависит от времени, то относительное движение

$$D_2(t,0)=\exp(-itF) \tag{6.26}$$

тоже некоторое «свободное» движение, но относящееся к гамильтониану (6.25) с отличным от a_m базисом собственных векторов. Абсолютное движение получается в виде произведения

$$D(t,0)=\exp(-itG)\exp(-itF). \tag{6.27}$$

Чтобы по известным характеристикам возбуждения — спектру расстройки (6.24) и оператору возмущения (6.22) — определить относительное движение к базису a_m, следует решить систему алгебраических уравнений

$$Fe_k = \omega^{(1)}_k e_k, \quad (k=1,\ 2,\ \ldots,\ d) \tag{6.28}$$

с дополнительными условиями

$$\sum_k \omega^{(1)}_k = 0. \tag{6.29}$$

«Ориентацию» нового ортонормированного базиса e_k относительно базиса a_m можно выразить унитарным оператором T

$$e_k = Ta_k = \sum_m \mathrm{T}_{mk} a_m. \tag{6.30}$$

Примыкающий к базису e_k (в пространстве **O**) базис A-типа (E-базис) задается по

$$E_{jk} = TA_{jk}T^{-1} = \sum_m \sum_n \mathrm{T}_{mj} \mathrm{T}^*_{nk} A_{mn}. \tag{6.31}$$

Преобразование относительного движения (6.26) выражается просто на Е-базисе

$$D_2(t,0) = \sum_k \exp(-i\omega^{(1)}_k t) E_{kk}. \tag{6.32}$$

Переводя (6.32) на A-базис и учитывая (6.19), получаем матрицу абсолютного движения (6.27) с элементами

$$\mathrm{D}_{mn}(t,0) = \sum_k \mathrm{T}_{mk} \mathrm{T}^*_{nk} \exp[-i(\nu_m + \omega^{(1)}_k)t]. \tag{6.33}$$

Движение вектора состояния $x(t)$ (в пространстве **C**) описывается амплитудами вероятности (компонентами на а-базисе)

$$\mathrm{x}_m(t) = \sum_n \sum_k \mathrm{T}_{mk} \mathrm{T}^*_{nk} \mathrm{x}_n(0) \exp[-i(\nu_m + \omega^{(1)}_k)t]. \tag{6.34}$$

Унитарному супероператорному представлению можно придать вид, сходный с видом (6.27)

$$\mathfrak{D}(t,0) = \exp(-it\mathfrak{G}) \exp(-it\mathfrak{F}). \tag{6.35}$$

Супероператоры в (6.35) определяются по

$$\mathfrak{G} A_{mn} = \nu_{mn} A_{mn}, \tag{6.36}$$

$$\mathfrak{F} E_{jk} = \omega^{(1)}_{jk} E_{jk}, \tag{6.37}$$

где

$$\nu_{mn} = \nu_m - \nu_n, \tag{6.38}$$

$$\omega^{(1)}_{jk} = \omega^{(1)}_j - \omega^{(1)}_k. \tag{6.39}$$

Относительное движение (6.11) удобно выписать на Е-базисе

$$\sigma(t) = \sum_j \sum_k (\varrho(0), E_{jk}) \exp(-i\omega^{(1)}_{jk} t) E_{jk}. \tag{6.40}$$

Тогда абсолютное движение (6.13) принимает вид

$$A_{mn}(t) = \exp(-i\nu_{mn} t) A_{mn}, \tag{6.41}$$

$$\sigma_{mn}(t) = \sum_j \sum_k (\varrho(0), E_{jk}) \mathrm{T}_{mj} \mathrm{T}^*_{nk} \exp(-i\omega^{(1)}_{jk} t). \tag{6.42}$$

Определенная в п. 5.4 наблюдаемая P-типа больше не является постоянной, а колеблется с частотами $\omega_{jk}^{(1)}$

$$\langle P\rangle=(\sigma(t), P)=\sum_{m}\sigma_{mm}(t)\,\mathrm{P}_{mm}. \tag{6.43}$$

Как явствует из формулы

$$\langle Q\rangle=\sum_{m\neq n}\sum\sigma_{mn}(t)\,\mathrm{Q}_{nm}\exp(-i\nu_{mn}t), \tag{6.44}$$

те же частоты относительного движения расщепляют спектр возбуждения (6.38) на симметрические мультиплеты.

Удобно представить частотный спектр движений (6.33) и (6.34) в виде терм-схемы, состоящей из основных уровней ν_m, одинаково расщепленных на d подуровней $\nu_m+\omega_k^{(1)}$ ($k=1, 2, \ldots, d$). Тогда частотный спектр сигналов (6.44) получится в виде частот переходов на основе комбинационного принципа Ритца.

6.3. Резонанс. Действие возбуждения типа (6.21) сводится к наложению дополнительного движения, соответствующего возмущению V, на свободное движение (5.9), определяемое гамильтонианом H_0. Однако оба движения (как переносное, так и относительное) совершаются независимо лишь в точке полного резонанса

$$G=H_0, \tag{6.45}$$

т. е. в точке полной настройки

$$\Delta\nu_m=0, \quad (m=1, 2, \ldots, d). \tag{6.46}$$

В этой точке разложение (6.1) совпадает с т. н. представлением взаимодействия. В точке полного резонанса малое возмущение, сила которого

$$|V|=\sqrt{(V, V)}=\sqrt{\sum_{m\neq n}\sum|\mathrm{V}_{mn}|^2} \tag{6.47}$$

много меньше аналогичной силы $|H_0|$, вызывает в течение достаточного времени такие же вращения (5.19) в относительном движении, как и сильное H_0 в течение короткого времени в переносном движении. Оба движения ортогональны в смысле (6.18).

Вне точки полного резонанса относительное движение уже зависит не только от возмущения V, но и от расстройки (6.23). Формула (6.25) выражает вектор F в виде суммы двух векторов Δ, V. Длины этих векторов: (6.47) и

$$|\Delta|=\sqrt{(\Delta, \Delta)}=\sqrt{\sum_{m}(\Delta\nu_m)^2}, \tag{6.48}$$

$$|F|=\sqrt{(F, F)}=\sqrt{\sum_{m}(\omega_k^{(1)})^2}, \tag{6.49}$$

вместе с параметром относительной расстройки

$$\delta=|\Delta|/|V| \tag{6.50}$$

позволяют определить в некоторой степени долю участия V в величине второго момента спектра частот $\omega_k^{(1)}$

$$|V|/|F|=\frac{1}{\sqrt{1+\delta^2}}. \tag{6.51}$$

По (6.28) предел полной расстройки достигается при

$$|\Delta\nu_m| \gg |V|. \tag{6.52}$$

В этом пределе $F \to \Delta$ и $T \to E$, т. е. система не чувствует влияния возбуждения. Если же отношения $|\Delta\nu_m|/|\Delta\nu_n|$ сохранить постоянными и устремить $\delta \to 0$, то при $\delta \approx 1$ она попадает в область значительного влияния возбуждения с максимумом в точке полного резонанса $\delta = 0$.

В реальных условиях спектроскопии ЯМР сила возмущения $\|V|$ для значительного числа переходов бывает ограничена, поскольку, как правило, $|V| \ll |\omega^{(0)}_{mn}|$. Возможны только различные частичные резонансы, когда возбуждаются лишь отдельные переходы или группы переходов (селективное возбуждение). При этом групповая принадлежность H_0, G и V оказывается весьма существенной.

ЛИТЕРАТУРА

1. Синивеэ В., Изв. АН ЭССР, Физ. Мат., 24, 35 (1975).
2. Синивеэ В., Изв. АН ЭССР, Физ. Мат., 23, 220 (1974).

Институт кибернетики
Академии наук Эстонской ССР

Поступила в редакцию
20/VI 1975

V. SINIVEE

RÜHMADE TEOORIA RAKENDAMISEST MITMESPINNISÜSTEEMIDE DÜNAAMIKA UURIMISEKS. II

Käsitletakse liikumisteisenduste ajalise sõltuvuse probleeme. Esitatakse resonantsi mõiste üldistus.

V. SINIVEE

GROUP APPROACH IN DYNAMICS OF MANY-SPIN SYSTEMS. II

The group approach, developed in the first part of this series, is extended to time-dependent problems. This results in a generalization of the resonance concept.