EESTI NSV TEADUSTE AKADEEMIA TOIMETISED. 26. KÖIDE
FÜÜSIKA * MATEMAATIKA. 1977, NR. 2

ИЗВЕСТИЯ АКАДЕМИИ НАУК ЭСТОНСКОЙ ССР. ТОМ 26
ФИЗИКА * МАТЕМАТИКА. 1977, № 2

https://doi.org/10.3176/phys.math.1977.2.08

УДК 539.28

В. СИНИВЕЭ

ГРУППОВОЙ ПОДХОД В ДИНАМИКЕ МНОГОСПИНОВЫХ СИСТЕМ. III

В порядке приложения группового подхода [1] первыми исследовались преобразования движения, заданные над унимодулярной унитарной группой в виде произведения двух более простых преобразований [2]. Это привело к обобщению понятия резонанса как полного. Данная статья посвящена изучению частичных резонансов. Оказывается, что разные частичные резонансы связаны с динамическими подгруппами унимодулярной группы. Неприводимые подгруппы позволяют обобщить тиклинг-эффект, приводимые описывают обстановку, более близкую к опытам по коллапсу. Точная физическая реализация этих подгрупп требует возбуждения системы с помощью взаимодействий с определенными свойствами симметрии. Однако на основе резонанса возможна приближенная реализация менее специфическими взаимодействиями.

Результаты статьи применимы практически ко всем квантовым системам, обладающим конечным числом уровней, если только пренебрежение релаксацией и радиационным затуханием — основными условиями адиабатических процессов — оправдано.

7. Селективное резонансное возбуждение

7.1. Унимодулярная группа резонансного возбуждения. Исследуем d-уровневую систему с гамильтонианом H_0. Условимся нумеровать уровни $\omega_m^{(0)}$ $(m=1, 2, \ldots, d)$ оператора H_0 (уровни энергии) сверху вниз, т. е. $n>m$, если $\omega_n^{(0)}<\omega_m^{(0)}$.

Унимодулярная динамическая группа $\mathbf{u}_d$ называется группой резонансного возбуждения (d-уровневой системы), если над $\mathbf{u}_d$ определены преобразования движения (6.27) со всевозможными $G, F\in \overset{0}{\mathbf{u}}_d$ (см. п. 6.2). Различные опыты, описываемые этой группой, отличаются выбором возбуждения $H_1(t)$ в гамильтониане (6.14), т. е. выбором пары операторов G, V.

Полезно представить пространство $\mathbf{H}^0=\mathbf{u}_d^0$ всех эрмитовых операторов, имеющих нулевой след, в виде прямой суммы

$$\mathbf{H}^0=\mathbf{H}_A^0+\mathbf{H}_\perp. \tag{7.1}$$

$(d-1)$-мерное подпространство $\mathbf{H}_A^0$ содержит эрмитовые операторы (с нулевым следом), имеющие собственные векторы $a_m (m=1, 2, \ldots, d)\in \in \mathbf{C}$. $d(d-1)$-мерное подпространство $\mathbf{H}_\perp$ натянуто на эрмитовые базисные операторы X_{mn}, Y_{mn} (см. п. 2.2) переходов $m\to n$ $(m, n=1, 2, \ldots, d;\ m<n)$. Согласно п. 6 H_0, $G, \Delta\in\mathbf{H}_A^0$, но $H_1(t)\in\mathbf{H}_\perp$.

Каждой паре операторов Δ, V соответствует оператор $T\in\mathbf{u}_d$ преобразования базисов (6.30), (6.31). В частности, базис A_{mm} пространства $\mathbf{H}_A$ переводится в базис E_{mm} пространства $\mathbf{H}_F$, а $\mathbf{H}^0_A$ переходит в $(d-1)$-мерное подпространство $\mathbf{H}^0_F \subset \mathbf{H}_F$, содержащее оператор F (6.25). Пространство $\mathbf{H}^0$ состоит из непрерывного множества подпространств типа $\mathbf{H}^0_F$, получаемых при разных парах Δ, V. В частности, пределу полной расстройки соответствует $\overset{0}{\mathbf{H}}_F = \overset{0}{\mathbf{H}}_A$, а в точке полного резонанса (6.45) — $V \in \mathbf{H}^0_F \subset \mathbf{H}_\perp$.

В пп. 6.1 и 6.2 движение $\varrho(t)$ представлялось в виде наложения двух движений — переносного (6.10), (6.41) и относительного (6.40). Состояния $\varrho \in \mathbf{H}_A$ не изменяются под влиянием переноса $\mathfrak{R}_1(t,0)$. Состояния же $\varrho \in \mathbf{H}_\perp$ совершают вращения (5.19) с круговыми частотами ν_{mn} (6.36). Наложение относительного движения (6.40) не изменяет абсолютное движение $\varrho(t)$ лишь при начальных состояниях $\varrho(0) \in \mathbf{H}_F$. Перевод системы в такое состояние можно истолковать как обобщение метода «захвата спина» (spin-locking). В частности, в случае быстрого адиабатического прохождения, в приведенном здесь обобщенном смысле, движение начинается с состояния $\varrho(0) \in \mathbf{H}_A$ и заключается в медленной развертке всех ν_{mn} через точку полного резонанса (6.45). В любой момент времени

$$\varrho(t) = \mathfrak{R}_1(t,0)\,\varrho(0), \tag{7.2}$$

а в спектре Q-наблюдаемой (6.44) появляются лишь частоты ν_{mn}.

В случае произвольного начального состояния $\varrho(0)$ движение $\varrho(t) \in \mathbf{H}^0$ описывается формулами

$$\varrho(t) = \varrho_F(t) + \sum_{j<k}\sum |\varrho(0)|_{jk} [\cos(\omega^{(1)}_{jk} t + \varphi_{jk}) X^{(F)}_{jk}(t) + \sin(\omega^{(1)}_{jk} t + \varphi_{jk}) Y^{(F)}_{jk}(t)], \tag{7.3}$$

$$X^{(F)}_{jk}(t) = \mathfrak{R}_1(t,0) X^{(F)}_{jk}, \tag{7.4}$$

$$\varrho_F(t) = \mathfrak{R}_1(t,0)\,\varrho_F(0), \tag{7.5}$$

$$X^{(F)}_{jk} = T X_{jk} T^{-1}. \tag{7.6}$$

Определения $Y^{(F)}_{jk}$, $Y^{(F)}_{jk}(t)$ эквивалентны (7.6), (7.4); $|\varrho(0)|_{jk}$ — амплитуда проекции $\varrho(0)$ на плоскость $X^{(F)}_{jk}$, $Y^{(F)}_{jk}$; $\varrho_F(0)$ — компонента $\varrho(0)$ в пространстве $\mathbf{H}^0_F$.

Формула (7.5) аналогична формуле (7.2). В спектре Q-наблюдаемой компонента $\varrho_F(t)$ обеспечивает центральные частоты ν_{mn} субмультиплетов (см. ниже).

Второе слагаемое выражения (7.3) описывает вращения компонент $\varrho(t)$ на плоскостях $X^{(F)}_{jk}$, $Y^{(F)}_{jk}$, сопровождаемые переносным движением (7.4) этих плоскостей. Проекция таких вращений на любую из плоскостей X_{mn}, Y_{mn} приводит к картине сложного амплитудно-модулированного вращения. В спектре Q-наблюдаемой появляются субмультиплеты. Центральная частота ν_{mn} каждого субмультиплета сопровождается $d(d-1)$ боковыми частотами $\nu_{mn} \pm \omega^{(1)}_{jk}$ $(\omega^{(1)}_{jk} > 0)$, симметрично расположенными по обе ее стороны.

Более конкретное предсказание частот $\varrho(t)$ и сигналов требует расчета частот $\omega^{(1)}_{jk}$ и базиса E_{kk}, $X^{(F)}_{jk}$, $Y^{(F)}_{jk}$ в зависимости от Δ, V. В силу резонансного поведения системы существуют две частные области, описание которых в значительной мере исчерпывает всю проблему: 1) область достаточно слабого возмущения V (резонансное приближение) и 2) область специально выбранных $H_1(t)$, обеспечивающих селективное возбуждение наборов переходов даже при сильном V.

7.2. Группа селективного возбуждения. Это подгруппа $\mathbf{G} \subset \mathbf{u}_d$ группы резонансного возбуждения $\mathbf{u}_d$ с $H_1(t) \in \mathbf{H}_V \subset \mathbf{G}^0$, расположенными лишь в некотором подпространстве $\mathbf{H}_V \subset \mathbf{H}_\perp$.

В отличие от (7.1) динамическое кольцо $\mathbf{G}^0$ группы $\mathbf{G}$ можно представить в виде прямой суммы

$$\mathbf{G}^0 = \mathbf{H}^0_A \dotplus \mathbf{H}_V, \tag{7.7}$$

откуда

$$\mathbf{H}_\perp = \mathbf{H}_V \dotplus \mathbf{H}_K. \tag{7.8}$$

Помимо преобразований движения $D(t, 0)$, к группе $\mathbf{G}$ принадлежат также преобразования базиса T.

Подгруппа симметрии $\mathbf{S} \subset \mathbf{G}$ группы $\mathbf{G}$ селективного возбуждения состоит из элементов $S \in \mathbf{S}$, оставляющих неизменными элементы $\mathbf{G}$ и $\mathbf{G}^0$. Например,

$$SH(t)S^{-1} = H(t). \tag{7.9}$$

Инфинитизимальное кольцо $\mathbf{S}^0 \subset \mathbf{G}^0$ группы симметрии $\mathbf{S}$ состоит из эрмитовых операторов, коммутирующих со всеми элементами $\mathbf{G}^0$ и имеющих нулевой след. $\mathbf{S}^0$ образует подпространство в $\mathbf{H}^0_A$. Поэтому $\dim \mathbf{S}^0 < (d-1)$.

Если $\mathbf{S}^0$ существует, то $\mathbf{H}^0_A$ распадается на прямую сумму

$$\mathbf{H}^0_A = \mathbf{S}^0 \dotplus \mathbf{H}^0_L. \tag{7.10}$$

В этом случае подпространство

$$\mathbf{G}^0_L = \mathbf{H}^0_L \dotplus \mathbf{H}_V \subset \mathbf{G}^0 \tag{7.11}$$

само образует динамическое кольцо, соответствующее некоторой подгруппе $\mathbf{G}_L \subset \mathbf{G}$. Поэтому нахождение возможных $\mathbf{S}^0 \subset \mathbf{H}^0_A$, коммутирующих с некоторым кольцом $\mathbf{G}^0_L$, есть один из способов выделения групп селективного возбуждения.

Для доказательства того, что ортогональное дополнение $\mathbf{G}^0_L$ к $\mathbf{S}^0 \subset \mathbf{G}^0$ образует кольцо, достаточно показать, что $-i[G_1, G_2]$ с любыми $G_1, G_2 \in \mathbf{G}^0_L$ ортогонален с любым $S^0 \in \mathbf{S}^0$. Так как след трех эрмитовых операторов G_1, G_2, S^0 не изменяется при циклической перестановке

$$\operatorname{tr}(G_1 G_2 S^0) = \operatorname{tr}(S^0 G_1 G_2), \tag{7.12}$$

то, в силу коммутирования элементов $\mathbf{S}^0$ и $\mathbf{G}^0_L$, получаем

$$(-i[G_1, G_2], S^0) = (-i[S^0, G_1], G_2) = 0. \tag{7.13}$$

Итак, $\mathbf{G}^0_L$ дополняется до $\mathbf{G}^0$

$$\mathbf{G}^0 = \mathbf{S}^0 \dotplus \mathbf{G}^0_L, \tag{7.14}$$

а пространство $\mathbf{H}^0$ разлагается на прямую сумму подпространств

$$\mathbf{H}^0 = \mathbf{S}^0 \dotplus \mathbf{G}^0_L + \mathbf{H}_K, \tag{7.15}$$

инвариантных относительно супероператорного представления группы $\mathbf{G}$. Подпространства типа $\mathbf{H}^0_F$ имеют $\dim \mathbf{H}^0_F = \dim \mathbf{H}^0_L$ и заполняют подпространство $\mathbf{G}^0_L \subset \mathbf{H}^0$.

Разложению (7.14) соответствует разложение всех операторов $\mathbf{G}^0$ на компоненты, лежащие в $\mathbf{S}^0$ (индекс S) и в $\mathbf{G}^0_L$ (индекс L) соответственно:

$$H_0 = H_S + H_L, \tag{7.16}$$

$$G = G_S + G_L = H_S + G_L, \tag{7.17}$$

$$\Delta = \Delta_L = H_L - G_L, \tag{7.18}$$

$$F = F_L = \Delta_L + V. \tag{7.19}$$

Возбуждение $H_1(t)$ не зависит от выбора G_S и определяется лишь парой G_L, V. Поэтому в (7.17)—(7.19) принято $G_S = H_S$. Выражение же (6.27) следует заменить на

$$D(t, 0) = \exp(-itH_S)\exp(-itG_L)\exp(-itF_L). \tag{7.20}$$

Разложению (7.15) соответствует разложение $\varrho(t)$ на компоненты

$$\varrho(t) = 1/4E + \varrho_S(0) + \varrho_L(t) + \varrho_K(t). \tag{7.21}$$

Компонента $\varrho_S \in \mathbf{S}^0$ вообще не изменяется. Временное изменение компоненты $\varrho_L(t) \in \mathbf{G}^0_L$ описывается супероператорным представлением группы резонансного возбуждения $\mathbf{G}_L \subset \mathbf{u}_d$, имеющей

$$H_L(t) = H_L + H_1(t) \in G^0_L \tag{7.22}$$

в качестве гамильтониана. Изменение же $\varrho_K(t) \in H_K$ определяется полным гамильтонианом $H(t) = H_S + H_L(t)$.

Р-наблюдаемые (см. п. 5.4) типа $\mathrm{P} \in \mathbf{S}^0$ являются интегралами движения — их средние значения (5.37) постоянны во времени. Число боковых частот в субмультиплетах сокращается в соответствии с симметрией группы $\mathbf{G}$ (см. ниже).

Захват спина (см. п. 7.1) возможен лишь в пределах подпространства $\mathbf{G}^0_L$. В частности, при быстром адиабатическом прохождении $\varrho_K(t) = 0$. Лишь в случае $\varrho_K(0) \neq 0$ наблюдаются сигналы, происходящие от $\varrho_K(t)$. В этих сигналах отражено влияние возбуждения $H_1(t)$.

В общем случае точка полного резонанса (6.45) недостижима (в группе $\mathbf{G}$). Возможен лишь частичный резонанс *

$$G_L = H_L. \tag{7.23}$$

Собственные векторы e_m любого оператора F_L группы селективного возбуждения $\mathbf{G}$ (имеющей подгруппу симметрии $\mathbf{S}$) должны одновре-

---

* В изыскании точки полного резонанса (6.45) можно увидеть наиболее прямой спектроскопический метод измерения H_0. Нахождение точки частичного резонанса (7.23) позволяет измерять часть H_L гамильтониана H_0. Свойства симметрии взаимодействий H_L, $H_1(t)$ определяют возможность раздельного измерения H_L этим способом.

менно быть собственными векторами любого $S^0 \in \mathbf{S}^0$. Это возможно лишь в том случае, когда S^0 имеет одно или несколько вырожденных собственных значений.

Пространство состояний $\mathbf{C}$ распадается на прямую сумму подпространств ${}^{(q)}\mathbf{C}$

$$\mathbf{C} = \sum_{q=1}^{l} {}^{(q)}\mathbf{C}, \tag{7.24}$$

инвариантных относительно операторов $\mathbf{G}$ и $\mathbf{G}^0$. В частности, операторы $T \in \mathbf{G}$ переводят часть базиса $a_m, a_n \ldots \in {}^{(q)}\mathbf{C}$ ($q = 1, 2, \ldots, l$) в часть базиса $e_m, e_n, \ldots \in {}^{(q)}\mathbf{C}$. Любой $S^0 \in \mathbf{S}^0$ имеет в качестве подпространства собственных векторов ${}^{(q)}\mathbf{C}$, принадлежащие собственному значению с кратностью вырождения $d_q = \dim {}^{(q)}\mathbf{C}$. Матрицы операторов $\mathbf{G}$ и $\mathbf{G}^0$ (на любом базисе типа e_m) либо квазидиагональны, либо приводимы к таковым путем перестановки рядов и столбцов. Поэтому операторы $D(t, 0) \in \mathbf{G}$ и $H(t) \in \mathbf{G}^0$ разлагаются на прямые суммы (3.4) и (3.5) соответственно. В этом смысле группа $\mathbf{G}$ и кольцо $\mathbf{G}^0$ — приводимые.

Изучение приводимых групп в значительной мере сводится к изучению самых простых групп селективного возбуждения — неприводимых.

7.3. Неприводимые группы селективного возбуждения и адиабатический тиклинг. Выделяем в прямой сумме (7.24) некоторое d_q-мерное подпространство ${}^{(q)}\mathbf{C} = \mathbf{C}(mn\ldots)$, натянутое на базис $a_m, a_n, \ldots \in \mathbf{C}(mn\ldots)$. Уровни $\omega_m^{(0)}, \omega_n^{(0)} \ldots$ и все переходы $m \to n \ldots$ между ними будем называть возбуждаемыми. Два перехода $m \to k$, $k \to n$, имеющие общий уровень k, будем называть связанными и в противном случае — несвязанными. Переход $m \to n$ является замыкающим относительно связанных переходов $m \to k$, $k \to n$. Все переходы между уровнями подпространства ${}^{(q)}\mathbf{C}$ образуют систему взаимосвязанных возбуждаемых переходов (обозначения номера q и перечня $mn\ldots$ номеров возбуждаемых уровней эквивалентны). Графически этой системе соответствует схема уровней энергии, где возбуждаемые переходы (граф возбуждаемых переходов) обозначаются стрелками.

Группа селективного возбуждения $\mathbf{G}_L(mn\ldots)$ считается неприводимой, если над ней определены преобразования движения $D^{(q)}(t, 0)$, действующие как единичные операторы в подпространстве, ортогонально дополняющем ${}^{(q)}\mathbf{C}$ (не смешивать с аналогичным обозначением в п. 3.3). Квазидиагональная матрица $D^{(q)}(t, 0)$ (на базисе a_m) имеет ненулевые недиагональные элементы лишь в блоке, соответствующем ${}^{(q)}\mathbf{C}$.

Динамическое кольцо $\mathbf{G}_L^{(q)} = \mathbf{G}_L^0(mn\ldots)$ неприводимой группы $\mathbf{G}_L(mn\ldots)$ содержит гамильтонианы вида

$$H_L^{(q)}(t) = H_L^{(q)} + H^{(q)}(t), \tag{7.25}$$

действующие в ортогональном дополнении к ${}^{(q)}\mathbf{C}$ как нулевые операторы. В данном случае формула (7.11) принимает вид

$$\mathbf{G}_L^{(q)} = \mathbf{H}_L^{(q)} \dotplus \mathbf{H}_V^{(q)}. \tag{7.26}$$

Имеем: $H_L^{(q)} \in \mathbf{H}_I^{(q)} \subset \mathbf{H}_A^0$, но $H^{(q)}(t) \in \mathbf{H}_V^{(q)} \subset \mathbf{H}_\perp$. Ясно, что

$$\dim \mathbf{H}_L^{(q)} = d_q - 1,$$

$$\dim \mathbf{H}_V^{(q)} = d_q(d_q - 1), \tag{7.27}$$

$$\dim \mathbf{G}_L^{(q)} = d_q^2 - 1.$$

Подпространство $\mathbf{H}_V^{(q)}$ натянуто на базисные операторы X_{mn}, Y_{mn} возбуждаемых переходов $m \to n$. Базисом подпространства $\mathbf{H}_L^{(q)} \subset \mathbf{H}_A^0$ может служить набор линейно независимых операторов Z_{mn} (см. п. 2.2) возбуждаемых переходов $m \to n$, ... Операторы Z_{mn}, Z_{jk} несвязанных переходов ортогональны. Операторы же Z_{mk}, Z_{kn} связанных переходов не ортогональны и, кроме того, не коллинеарны (угол между Z_{mk}, Z_{kn}, равный 120°, делится пополам вектором Z_{mn}). Оператор Z_{mn} перехода $m \to n$, замыкающего переходы $m \to k$, $k \to n$, задан соотношением

$$Z_{mn} = Z_{mk} + Z_{kn}. \tag{7.28}$$

Поэтому, располагая Z_{mk}, Z_{kn} в порядке увеличения индексов $m < k < n < \dots$, получим (неортогональный) базис подпространства $\mathbf{H}_L^{(q)} \subset \mathbf{H}_A^0$.

Преобразования движения (6.27) группы $\mathbf{G}_L(mn\dots)$ следует записать в виде

$$D^{(q)}(t, 0) = \exp(-itG_L^{(q)}) \exp(-itF_L^{(q)}), \tag{7.29}$$

где $G_L^{(q)} \in \mathbf{H}_L^{(q)}$, но

$$F_L^{(q)} = \Delta_L^{(q)} + V^{(q)} \in \mathbf{G}_L^{(q)}. \tag{7.30}$$

Оператор $T \in \mathbf{G}_L(mn\dots)$ изменяет базис a_m лишь в пределах подпространства ${}^{(q)}\mathbf{C}$. Спектр собственных значений операторов кольца $\mathbf{G}_L^{(q)}$ состоит из вырожденного нулевого уровня и из d_q невырожденных уровней, расположенных по обе стороны нулевого. Имеется $1/2 d_q(d_q - 1)$ ненулевых частот $\omega_{jk}^{(1)}$ $(a_j, a_k \in {}^q\mathbf{C})$. Оператор $H_1^{(q)}(t)$ задается суммой (6.21), содержащей только возбужденные переходы.

Группа $\mathbf{G}_L(mn\dots)$ применима лишь в случае $H_0 = H_0^{(q)} \in \mathbf{H}_L^{(q)} \subset \mathbf{H}_A$. Она может быть расширена до группы селективного возбуждения системы взаимосвязанных переходов (группы тиклинга $\mathbf{G}(mn\dots)$) путем дополнения $\mathbf{H}_L^{(q)}$ до $\mathbf{H}_A^0$ прибавлением $\mathbf{S}^0$. В данном случае любой $S^0 \in \mathbf{S}^0$ имеет d_q-кратно вырожденный уровень, соответствующий собственным векторам в ${}^{(q)}\mathbf{C}$. Остальные уровни оператора $\mathbf{S}^0$ ограничены требованием $\operatorname{tr} S^0 = 0$.

Динамическое кольцо $\mathbf{G}^0(mn\dots)$ группы тиклинга: $\mathbf{G}^0(mn\dots) = \mathbf{S}^0 \dot{+} \mathbf{G}_L^0(mn\dots)$. Оно содержит операторы $H_0 = H_S + H_L^{(q)}$, $G = G_L^{(q)}$, $H(t) = H^{(q)}(t)$, $F = F_L^{(q)}$. Согласно (7.20), выражение (7.29) в случае $\mathbf{G}(mn\dots)$ дополняется членом, включающим H_S.

В случае группы тиклинга разложение (7.15) можно уточнить следующим образом:

$$\mathbf{H}^0 = \mathbf{S}^0 \dot{+} \mathbf{G}_L^0(mn\dots) \dot{+} \mathbf{H}_{K1} \dot{+} \mathbf{H}_{K2}. \tag{7.31}$$

Движение компоненты $\varrho_L(t) \in \mathbf{G}_L^0(mn\dots)$ (см. 7.21) совпадает с движением d_q-уровневой системы с гамильтонианом (7.25). В частности, субмультиплеты имеют центральную частоту ν_{mn} $(a_m, a_n \in {}^{(q)}\mathbf{C})$ и

$d_q(d_q-1)$ боковых частот $\nu_{mn} \pm \omega_{jk}^{(l)}$ $(a_j, a_k \in {}^{(q)}\mathbf{C})$. Учет H_S сдвигает частоты ν_m на «правильное» положение, соответствующее гамильтониану H_0. Условие частичного резонанса (7.23) имеет вид

$$G_L^{(q)} = H_L^{(q)}, \tag{7.32}$$

т. е. условие резонанса $\nu_{mn} = \omega_{mn}^{(0)}$ выполнимо одновременно лишь для возбуждаемых переходов $m \to n, \ldots$.

Подпространство $\mathbf{H}_{K1}$ натянуто на базисные операторы X_{mk}, Y_{mk} переходов $m \to k, \ldots$, связанных с возбуждаемыми переходами. Такие переходы имеют лишь один возбуждаемый уровень — либо $a_m \in {}^{(q)}\mathbf{C}$, либо $a_k \in {}^{(q)}\mathbf{C}$. Подпространство $\mathbf{H}_{K2}$ опирается на базисные операторы переходов между невозбуждаемыми уровнями. Операторы подпространств $\mathbf{G}_L^0\,(mn\ldots)$ и $\mathbf{H}_{K2}$ коммутируют не с операторами подпространства $\mathbf{H}_{K1}$, а между собой.

Преобразование (7.6) не затрагивает базиса подпространства $\mathbf{H}_{K2}$. Если компонента $\varrho(0)$ в $\mathbf{H}_{K2}$ существует, то движение в нем совершается частотами свободного движения $\omega_{mn}^{(0)}$ $(a_m, a_n$ — невозбуждаемые$)$.

Характерные особенности динамики группы тиклинга проявляются в движении компоненты $\varrho_K(t)$ в подпространстве $\mathbf{H}_{K1}$-переходов, связанных с возбуждаемыми переходами. Эту динамику можно рассматривать как адиабатический вариант известного стационарного эффекта тиклинга [3, 4]. Простейший случай $d_q = 2$ соответствует условиям двойного резонанса [4], случай $d_q = 3$ — условиям тройного резонанса [5, 6]. (При адиабатическом варианте т. н. измерительное радиочастотное поле не нужно. Но на связанном переходе должно быть предварительно возбуждено свободное движение.)

Воспользуемся выражением

$$D(t, 0) = \exp(-it(H_0 - \Delta_L)) \exp(-itF_L), \tag{7.33}$$

эквивалентным формуле (7.20). В случае группы тиклинга: $\Delta_L = \Delta_L^{(q)}$; $F_L = F_L^{(q)}$. Ортогональное супероператорное представление преобразования (7.33) приводит к формуле типа (7.3) с особенностями, присущими группе тиклинга. Обсудим эти особенности для компоненты l в $\mathbf{H}_{K1}$.

Пусть индексы $m \in q$ и $l \in p$ относятся к возбуждаемому и, соответственно, невозбуждаемому уровням энергии. Рассмотрим плоскость перехода $m \to l$. По (7.33) на этой плоскости круговая частота переносного движения равна $\omega_{ml}^{(0)} - \Delta\nu_{ml} = \omega_{ml}^{(0)} - \Delta\nu_m$ (поскольку $(d-d_q)$-кратно вырожденный уровень $l \in p$ оператора $\Delta_L^{(q)}$ нулевой). Это — частота переноса проекции всех (7.4) на плоскости X_{ml}, Y_{ml}. Но так как $\mathbf{H}_F^0 \subset \mathbf{G}_L^{(q)}$, то сама центральная частота субмультиплета (см. п. 7.1) в сигнале все же отсутствует. В сумме (7.3) — двойная сумма: $j \in q$, $k \in p$. Но $\omega_{jk}^{(1)} = \omega_j^{(1)}$. Поэтому в спектре Q-наблюдаемой переходу $m \to l$ соответствует субмультиплет из d_q боковых частот

$$(\omega_{ml}^{(0)} - \Delta\nu_m + \omega_j^{(l)}); \quad j \in q. \tag{7.34}$$

В формуле (6.30) $e_k = a_k$ при $k \in p$. Поэтому выражение (6.31) упрощается:

$$E_{jk} = \sum_{m \in q} T_{mj} A_{mk}; \quad j \in q, \quad k \in p. \tag{7.35}$$

Обозначая

$$T_{mj} = |T_{mj}| \exp(-i\vartheta_{mj}), \tag{7.36}$$

запишем преобразования (7.6) в $\mathbf{H}_{K1}$ в виде

$$X_{jk}^{(F)} = \sum_{m\in q} |T_{mj}| (\cos\vartheta_{mj} X_{mk} + \sin\vartheta_{mj} Y_{mk}),$$
$$Y_{jk}^{(F)} = \sum_{m\in q} |T_{mj}| (-\sin\vartheta_{mj} X_{mk} + \cos\vartheta_{mj} Y_{mk}). \tag{7.37}$$

В (7.37) и в дальнейшем предполагается, что $m < k$. В противном случае знак перед Y_{mk} следует поменять.

По (7.37) пространство $\mathbf{H}_{K1}$ распадается на прямую сумму $(d - d_q)$-подпространств, инвариантных относительно ортогонального супероператорного представления группы тиклинга. Каждому $k \in p$ соответствует инвариантное подпространство, состоящее из d_q-плоскостей X_{mk}, Y_{mk} переходов $m \to k$, $m \in q$.

Подстановка (7.37) в (7.4) и (7.3) позволяет вычислить проекцию $\varrho(t)_{ml}$ оператора $\varrho(t)$ на плоскость перехода $m \to l$

$$\varrho(t)_{ml} = \sum_{j\in q} |T_{mj}| |\varrho(0)|_{jl} [\cos(\omega_j^{(l)} t + \varphi_{jl} + \vartheta_{mj}) X_{ml}(t) +$$
$$+ \sin(\omega_j^{(l)} t + \varphi_{jl} + \vartheta_{mj}) Y_{ml}(t)]. \tag{7.38}$$

Итак, расчет движения (7.38) (и соответствующих сигналов) предполагает: 1) нахождение собственных значений $\Delta\nu_m$, $\omega_j^{(1)}$ операторов $\Delta_L^{(q)}$ и $F_L^{(q)}$ соответственно и 2) вывод оператора T в виде матрицы на базисе a_m.

Согласно (7.38), проекция $\varrho(t)_{ml}$ совершает на плоскости X_{ml}, Y_{ml} вращение с угловой частотой $(\overset{(0)}{\omega_{ml}} - \Delta\nu_m)$ и амплитудой, осциллирующей с набором частот $\omega_j^{(l)}$. Это приводит к наблюдаемому субмультиплету (7.34). В наиболее простом случае $d_q = 2$ (лишь один возбуждаемый переход) получаем дублет, расщепление которого задается формулой, аналогично той, которая получена в [4] для стационарного тиклинга.

7.4. Приводимые группы селективного возбуждения. Располагая набором l неприводимых групп $\mathbf{G}(mn\ldots)$, можно сконструировать приводимую группу селективного (резонансного) возбуждения (ср. с п. 3.2). В качестве элементов такой группы и ее динамического кольца имеем соответственно

$$D(t,0) = \exp(-itH_S) D^{(1)}(t,0) D^{(2)}(t,0)\ldots, \tag{7.39}$$

$$H(t) = H_S + H_L^{(1)}(t) + H_L^{(2)}(t) + \ldots . \tag{7.40}$$

Динамическое кольцо состоит из прямой суммы взаимно коммутирующих неприводимых подколец

$$\mathbf{G}^0 = \mathbf{S}^0 \dotplus \sum_{q=1}^{l} \mathbf{G}_L^{(q)}, \tag{7.41}$$

каждое из которых имеет структуру типа (7.26). Поэтому

$$\mathbf{H}_A^0 = \mathbf{S}^0 + \sum_{q=1}^{l} \mathbf{H}_L^{(q)}, \tag{7.42}$$

$$\mathbf{H}_V = \sum_{q=1}^{l} \mathbf{H}_V^{(q)}. \tag{7.43}$$

В данном случае подкольцо симметрии $\mathbf{S}^0$ содержит лишь общую часть всех $\mathbf{S}^0$ групп тиклинга, составляющих данную приводимую группу. Любой $S^0 \in \mathbf{S}^0$ имеет вырожденные уровни, соответствующие отдельным слагаемым в прямой сумме (7.24). Матрицы операторов (7.39), (7.40) (на базисе a_m) имеют квазидиагональный вид (3.4) и (3.5). Разложения (7.16) — (7.19) уточняются:

$$H_0 = H_S + \sum_{q=1}^{l} H_L^{(q)}, \tag{7.44}$$

$$G = G_L = \sum_{q=1}^{l} G_L^{(q)}, \tag{7.45}$$

$$\Delta = \Delta_L = \sum_{q=1}^{l} \Delta_L^{(q)}, \tag{7.46}$$

$$F = F_L = \sum_{q=1}^{l} F_L^{(q)}. \tag{7.47}$$

Взамен одного условия резонанса (7.23) можно сформулировать l условий частичного резонанса типа (7.32). Лишь при выполнении всех этих условий (точном или приближенном) относительное движение проявляется во всех подпространствах $\mathbf{G}_L^{(q)}$. Если же некоторая $|\Delta_L^{(q)}|$ слишком велика, то в хорошем приближении движение описывается подгруппой группы $\mathbf{G}$. Переводя в (7.42) $H_L^{(q)}$ в состав $\mathbf{S}^0$, а в (7.43) $H_V^{(q)}$ в состав $\mathbf{H}_K$, получим динамическое кольцо новой подгруппы. Итак, приводимая группа $\mathbf{G}$ содержит иерархию новых приводимых групп в качестве подгрупп $\mathbf{G}$.

Ортогональное супероператорное представление приводимой группы состоит из неприводимых множителей

$$\Re(t, 0) = \Re^{(0)}(t, 0)\, \Re^{(1)}(t, 0)\, \Re^{(2)}(t, 0) \ldots \tag{7.48}$$

В выражении (7.48) $\Re^{(0)}(t, 0)$ соответствует первому множителю в (7.39), $\Re^{(q)}(t, 0)$ при $q = 1, 2, \ldots$ — множителю $D^{(q)}(t, 0)$.

Согласно п. 4.3, разложение $\mathbf{H}^0$ (7.15) на инвариантные подпространства представления (7.48) уточняется следующим образом:

$$\mathbf{H}^0 = \mathbf{S}^0 + \sum_{q=1}^{l} \mathbf{G}_L^{(q)} + \sum_{q<p}\sum \mathbf{H}^{(qp)}. \tag{7.49}$$

Подпространство $\mathbf{H}^{(qp)} \subset \mathbf{H}_K$ натянуто на базисные операторы X_{ml}, Y_{ml} переходов типа $m \to l$, $m \in q$, $l \in p$. Эти переходы связывают возбуждаемые переходы подпространств $\mathbf{G}_L^{(q)}$, $\mathbf{G}_L^{(p)}$. Оба уровня m, l возбуждаемы. Но сам переход — невозбуждаем.

Баланс размерностей дает

$$\dim \mathbf{S}^0 = l - 1,$$

$$\dim \mathbf{H}^{(qp)} = 2 d_q d_p, \tag{7.50}$$

$$\dim \mathbf{H}_K = d^2 - \sum_{q=1}^{l} d_q^2 .$$

Граф возбуждаемых переходов приводимой группы $\mathbf{G}$ состоит из l подсистем взаимосвязанных возбуждаемых переходов. Между отдельными подсистемами нет связывающих возбуждаемых переходов. В обозначенной через $\mathbf{G} = \mathbf{G}(mn, jkl, \ldots)$ приводимой группе запятыми отделяем номера возбуждаемых уровней, принадлежащих к разным подсистемам. Например: $\mathbf{G}^0$ (12, 34) четырехуровневой системы содержит, помимо одномерного $\mathbf{S}^0$, 3-мерные подкольца $\mathbf{G}^0_L$ (12) и $\mathbf{G}^0_L$ (34). Возбуждены переходы $1 \to 2$, $3 \to 4$. $\mathbf{H}_K = \mathbf{H}^{(12)}$ включает переходы $1 \to 3$, $2 \to 4$, $1 \to 4$, $2 \to 3$.

Поясним вопрос о собственных значениях операторов выражений (7.44) — (7.47) и соответствующих им супероператоров.

При $m \in q$ величина ν_m есть собственное значение как оператора G, так и оператора $G_L^{(q)}$. Аналогично, $\Delta\nu_m$ есть (ненулевое) собственное значение операторов $\Delta, \Delta_L^{(q)}$, а $\overset{(l)}{\omega_j}$ — операторов F, $F_L^{(q)} (j \in q)$. Если собственные значения операторов H_S и $H_L^{(q)}$, относящихся к уровню $m \in q$, обозначить временно через $\omega_q^{(0)}$ и $\omega_m^{(q)}$ соответственно, то собственное значение $\omega_m^{(0)}$ оператора H_0 будет равняться

$$\omega_m^{(0)} = \omega_q^{(0)} + \omega_m^{(p)}. \tag{7.51}$$

Поэтому при $m, n \in q$ имеем

$$\omega_{mn}^{(0)} = \omega_{mn}^{(q)}, \tag{7.52}$$

а при $m \in q$, $l \in p$ —

$$\omega_{ml}^{(0)} = \omega_{qp}^{(0)} + (\omega_m^{(q)} - \omega_l^{(p)}). \tag{7.53}$$

В силу (7.20) круговая частота переносного движения (частота центральной линии субмультиплета) для перехода $m \to n$, $m, n \in q$, равняется ν_{mn}, а для перехода $m \to l$, $m \in q$, $l \in p$ соответственно $(\omega_{qp}^{(0)} + \nu_{ml})$.

Возникновение субмультиплетов можно наглядно проследить на графе возбужденных уровней (и переходов) оператора $H_S + G_L = H_0 - \Delta_L$, дополненного системой субуровней. На этом графе любой уровень $\omega_q^{(0)} + \nu_m = \omega_m^{(0)} - \Delta\nu_m$, $m \in q$, расщепляется на d_q субуровней $(\omega_q^{(0)} + \nu_m + \omega_j^{(1)})$, $m, j \in q$. Поэтому у перехода типа $m \to n$, $m, n \in q$, помимо центральной частоты ν_{mn} имеется еще $d_q(d_q - 1)$ боковых частот

$$\nu_{mn} \pm \overset{(1)}{\omega}_{jk} = \overset{(0)}{\omega}_{mn} - \Delta\nu_{mn} \pm \overset{(1)}{\omega}_{jk}, \tag{7.54}$$

где $m, n, j, k \in q$. В случае же перехода подпространства $\mathbf{H}^{(qp)}$ $m \to l$, $m \in q$, $l \in p$, центральной линии нет, а $d_q d_p$ боковых частот субмультиплета вычисляются по

$$\overset{(0)}{\omega}_{qp} + \nu_{ml} + \overset{(1)}{\omega}_{jk} = \overset{(0)}{\omega}_{ml} - \Delta\nu_{ml} + \overset{(1)}{\omega}_{jk}, \tag{7.55}$$

где $m, j \in q$, но $l, k \in p$.

Базис подпространства $\mathbf{H}^0_A$, приспособленный к данной приводимой группе, состоит, во-первых, из базисных операторов B_k $(k = 1, 2, \ldots, l)$ подпространства $\mathbf{S}^0$ и, во-вторых, из линейно независимых операторов Z_{mn} (см. п. 7.3), сгруппированных по подпространствам $\mathbf{H}^{(q)}_L$. Операторы X_{mn}, Y_{mn} по-прежнему удобно использовать в качестве базиса в $\mathbf{H}_\perp$. Их тоже следует сгруппировать по подпространствам $\mathbf{H}^{(q)}_V$ и $\mathbf{H}^{(qp)}$. Аналогично (7.48), преобразование (7.6) этого базиса состоит из неприводимых множителей.

Движение компоненты $\varrho(t)$ в подпространстве $\mathbf{G}^{(q)}_L$ описывается супероператором $\mathfrak{R}^{(q)}(t, 0)$. Это — динамика унимодулярной группы резонансного возбуждения (см. п. 7.1) с размерностью $d_q - 1$.

Движение компоненты $\varrho(t)$ в подпространстве $\mathbf{H}^{(qp)}$ описывается произведением $\mathfrak{R}^{(0)}(t, 0)\mathfrak{R}^{(q)}(t, 0)\mathfrak{R}^{(p)}(t, 0)$.** В частности, переносное движение (7.4)

$$X^{(F)}_{jk}(t) = \mathfrak{R}^{(0)}_1(t, 0)\,\mathfrak{R}^{(q)}_1(t, 0)\,\mathfrak{R}^{(p)}_1(t, 0)\,X^{(F)}_{jk} \tag{7.56}$$

базиса (7.6) с $j \in q$, $k \in p$, происходит с круговой частотой

$$\overset{(0)}{\omega}_{qp} + (\nu_m - \nu_l) = \overset{(0)}{\omega}_{ml} - \Delta\nu_{ml}, \tag{7.57}$$

где

$$\Delta\nu_{ml} = \Delta\nu_m - \Delta\nu_l. \tag{7.58}$$

Действующее на систему возбуждение $H_1(t)$ не имеет в сумме (6.21) частоты ν_{ml}. Поэтому расстройка (7.58) является функцией расстроек частот возбуждения на возбуждаемых переходах подсистем q и p. Эта зависимость получается на основании разложения $\Delta^{(q)}_L$ и $\Delta^{(p)}_L$ по базисным операторам типа Z_{mn}.

Установление базиса (7.6) относительного движения в $\mathbf{H}^{(qp)}$ сводится к двум последовательным преобразованиям типа (7.37). В результате $X^{(F)}_{jk} \in \mathbf{H}^{(qp)}$, $j \in q$, $k \ni p$, приобретает компоненты на всех базисных операторах переходов, совершающихся между уровнями q и p подсистем и сходящихся на уровни j и k. Прилагая затем формулу (7.3), получаем детальную картину всех движений и сигналов.

Итак, описание приводимой группы селективного возбуждения сводится к описанию набора неприводимых групп. В частности, резонансное поведение системы определяется набором частичных резонансов неприводимых групп.

** Существование движения в $\mathbf{H}^{(qp)}$ и отличает динамику d-уровневой системы от динамики смеси l независимых d_q-уровневых систем.

ЛИТЕРАТУРА

1. Синивеэ В., Изв. АН ЭССР, Физ. Матем., 24, 35 (1975).
2. Синивеэ В., Изв. АН ЭССР, Физ. Матем., 25, 146 (1976).
3. Autler, S. H., Townes, C. H., Phys. Rev., 100, 703 (1955).

4. Freeman, R., Anderson, W. A., J. Chem. Phys., 37, 2053 (1962).
5. Синивеэ В., Изв. АН ЭССР, Физ. Матем., 16, 444 (1967).
6. Bystrov, V. F., J. Molec. Spectr., 28, 81 (1968).

Институт кибернетики
Академии наук Эстонской ССР

Поступила в редакцию
2/VI 1976

V. SINIVEE

RÜHMADE TEOORIA RAKENDAMISEST MITMESPINNISÜSTEEMIDE DÜNAAMIKA UURIMISEKS. III

Artiklis käsitletakse mitmespinnisüsteemide selektiivse ergastamise seost dünaamiliste rühmadega.

V. SINIVEE

GROUP APPROACH IN DYNAMICS OF MANY SPIN SYSTEMS. III

The relations between dynamical groups and selective resonance excitation of many-level quantum systems are studied in detail.