EESTI NSV TEADUSTE AKADEEMIA TOIMETISED. 25. KÖIDE
FÜÜSIKA * MATEMAATIKA. 1976, NR. 3

ИЗВЕСТИЯ АКАДЕМИИ НАУК ЭСТОНСКОЙ ССР. ТОМ 25
ФИЗИКА * МАТЕМАТИКА. 1976, № 3

УДК 539.28

В. СИНИВЕЭ

ГРУППОВЫЕ АСПЕКТЫ УРАВНЕНИЯ БЛОКА

Феноменологическое уравнение Блока [1] во многом сходно с квантовокинетическим уравнением Редфильда [2]. Поэтому ряд вопросов теории ядерного магнитного резонанса жидкостей удается разрешить именно на базе относительно простого и наглядного уравнения Блока. В данной работе это уравнение исследуется с точки зрения применимости группового подхода [3, 4] к процессам, включающим релаксацию спиновой системы.

В п. 1 на групповом языке описывается переходный процесс достижения стационарного состояния движения. Применение группового подхода к стационарным процессам демонстрируется в п. 2. Выясняется роль двух качественно различных динамических подгрупп — группы обратимого процесса [3] и полугруппы «чистой релаксации» (п. 1.2). Устанавливается «уравновешивание» релаксации с частью обратимого движения в стационарном процессе.

1. Переходный процесс

1.1. Стационарный и переходный процесс. Движение вектора ядерной намагниченности $\vec{M}(t)$ исследуемой жидкости подчиняется уравнению Блока

$$\frac{d\vec{M}}{dt}=V(t)\vec{M}-\Gamma\vec{M}^0, \tag{1}$$

где $\vec{M}^0$ — равновесная намагниченность в постоянном внешнем магнитном поле $\vec{B}_0 \parallel \vec{M}^0$, а аффинор

$$V(t)=H(t)+\Gamma. \tag{2}$$

Мы воспользовались операторной формой уравнения Блока. Кососимметрический аффинор $H(t)$ описывает взаимодействие ядерного магнитного момента с внешним магнитным полем (постоянным и переменным) [3]. Оператор скорости релаксации Γ является симметрическим аффинором, имеющим уравнение собственных значений

$$\Gamma\vec{a}_j=\delta_j\vec{a}_j, \qquad (j=x,y,z). \tag{3}$$

Выбирая $\vec{a}_j$ в качестве ортонормированного лабораторного репера ($\vec{a}_z$ направлено по $\vec{B}_0$), имеем

$$\delta_x=\delta_y=-1/T_2, \quad \delta_z=-1/T_1, \tag{4}$$

где T_1 и T_2 — времена продольной и поперечной релаксации соответственно.

Общее решение неоднородного линейного уравнения (1) можно представить в виде суммы

$$\vec{M}(t)=\vec{m}(t)+\vec{s}(t), \tag{5}$$

где $\vec{s}(t)$ — частное решение уравнения (1), а $\vec{m}(t)$ — общее решение однородного уравнения

$$\frac{d\vec{m}}{dt}=V(t)\vec{m}. \tag{6}$$

Согласно (4) все

$$\delta_j<0. \tag{7}$$

В силу этого функции $\vec{m}(t)$ обладают свойством

$$\vec{m}(t)\to 0 \quad \text{при} \quad t\to\infty. \tag{8}$$

На самом деле, по (6), (2) и (7)

$$\frac{d}{dt}(\vec{m},\vec{m})=2(\Gamma\vec{m},\vec{m})\leqslant 0, \tag{9}$$

что приводит всегда к монотонному уменьшению скалярного произведения $(\vec{m}(t), \vec{m}(t))$, за исключением случая, когда $\vec{m}(0)=0$ (знак равенства в (9)).

В силу (8) разложение (5) однозначно. Каждому набору $H(t), \Gamma$ (условиям опыта) соответствуют:

1) определенная траектория $\vec{s}(t)$ в 3-мерном эвклидовом векторном пространстве $\mathbf{L}$ — стационарный процесс;

2) непрерывное семейство траекторий $\vec{m}(t)\in\mathbf{L}$ — переходный процесс (описанный относительно $\vec{s}(t)$).

Развитый ранее групповый подход [4] непосредственно приложим именно к переходному процессу. Теорию же стационарного процесса следует построить отдельно.

1.2. Полугруппа релаксации. Частный случай уравнения (6), соответствующий обратимому процессу $\Gamma=0$, был рассмотрен в [3]. Обсудим здесь другой предельный случай $H(t)=0$ — процесс релаксации.

Покажем, что преобразования движений, описывающие процесс релаксации, принадлежат к группе $\mathbf{S}$ коммутирующих симметрических аффиноров S, имеющих лабораторный репер $\vec{a}_j$ в качестве общих собственных векторов

$$S\vec{a}_j=\sigma_j\vec{a}_j. \tag{10}$$

Следуя [4], поставим в соответствие определенным условиям опыта

$\Gamma(t)$ двухвременные функции $S(t_2, t_1)$. В частности, семейство траекторий $\vec{m}(t) \in \mathbf{L}$ описывается преобразованием

$$\vec{m}(t) = S(t, 0)\vec{m}(0). \tag{11}$$

Инфинитезимальное кольцо $\mathbf{S}^0$ группы $\mathbf{S}$ состоит из симметрических аффиноров Γ, коммутирующих с операторами S. Для общности допустим, что собственные значения $\delta_j(t)$ операторов $\Gamma(t)$ могут зависеть от времени.

Воспользовавшись инфинитезимальным преобразованием движения

$$S(t+\Delta t, t) = E + \Delta t \Gamma(t) \tag{12}$$

и начальными условиями

$$S(0,0) = E, \tag{13}$$

выведем, аналогично [4], уравнения движения

$$\frac{dS(t,0)}{dt} = \Gamma(t) S(t,0), \tag{14}$$

$$\frac{d\vec{m}}{dt} = \Gamma(t)\vec{m}. \tag{15}$$

При $H(t) = 0$ уравнение (6) действительно является частным случаем уравнения (15). В качестве характерных особенностей (6) отметим: а) условие (7); б) постоянство δ_j; в) соотношения (4). Покажем, что а) необходимо, чтобы релаксационный процесс обладал свойством (8). Условия же б) и в) связаны постоянством и аксиальной симметрией среды, в которой происходит процесс релаксации.

Преобразования движения $S(t, 0)$ должны образовывать непрерывные траектории над $\mathbf{S}$ начиная с единичного оператора E. В силу этого в динамическую группу $\mathbf{G} \subset \mathbf{S}$ входят операторы, удовлетворяющие неравенству

$$\det S > 0. \tag{16}$$

На самом деле, детерминанты операторов E и $S(t+\Delta t, t)$ положительны. Получая $S(t, 0)$ в виде бесконечной цепи произведений с преобразованием (12), мы никогда не сможем нарушить (16). Величина $\det S$ может стремиться к нулю, но не равняться ему. В силу диагональности матриц $S(t, 0)$ те же соображения применимы к их собственным значениям $\sigma_j(t, 0)$. Поэтому

$$\sigma_j > 0 \quad (j = x,\ y,\ z). \tag{17}$$

Выбираем в группе $\mathbf{G}$ в качестве параметров α_j величины

$$\alpha_j(t, 0) = \ln \sigma_j(t, 0). \tag{18}$$

Числа σ_j образуют мультипликативную группу, а числа α_j — изоморфную аддитивную группу. Поэтому динамика параметров (18) следует уравнению движения

$$\frac{d\alpha_j(t,0)}{dt} = \delta_j(t), \tag{19}$$

а

$$\sigma_j(t, 0) = \exp \int_0^t \delta_j(t')\,dt'. \tag{20}$$

Итак, динамическая группа $\mathbf{G} \subset \mathbf{S}$ состоит из экспоненциальных операторов

$$S(t,0) = \exp A(t,0), \tag{21}$$

$$A(t,0)\vec{a}_j = \alpha_j(t,0)\vec{a}_j. \tag{22}$$

Динамическое кольцо $\mathbf{G}^0$ состоит из симметрических аффиноров $\Gamma(t)$, определяемых по (19) и

$$\Gamma(t)\vec{a}_j = \delta_j(t)\vec{a}_j. \tag{23}$$

Однако условия (17) еще не обеспечивают свойство (8). Если мы хотим определить $\mathbf{G}^0$ как непрерывное множество, над которым могут быть заданы различные функции $\delta_j(t)$, в том числе и постоянные, нам следует еще потребовать выполнения условия (7). Поэтому на $\mathbf{G}$ накладывается дополнительное условие

$$0 < \sigma_j \leqslant 1. \tag{24}$$

Стало быть, функции $S(t_2, t_1)$ при $t_2 > t_1$ определены над непрерывным дифференцируемым подмножеством группы $\mathbf{G}$ — над полугруппой релаксации, описываемой условием (24). Над полугруппой релаксации допустимы только такие функции

$$\sigma_j(t_2, t_1) = \exp \int_{t_1}^{t_2} \delta_j(t')\,dt', \tag{25}$$

в которых $\delta_j(t')$ удовлетворяет неравенству (7). К полугруппе релаксации не принадлежат обратные элементы $S(t_2, t_1)^{-1} = S(t_1, t_2)$, описывающие обращенный по времени процесс. Определенные над полугруппой релаксации преобразования движения $S(t, 0)$ производят непрерывное, монотонное сжатие пространства $\mathbf{L}$ к точке 0. Этим обеспечивается спад (8).

Для математического удобства будем и далее группу $\mathbf{G}$ считать динамической группой процесса релаксации и соблюдать дополнительные условия выделения полугруппы.

1.3. Переходный процесс во внешнем магнитном поле. Зададимся целью установить динамическую группу $\mathbf{G}$, соответствующую уравнениям (2) и (6). По-прежнему допускаем, что собственные значения $\delta_j(t)$ операторов $\Gamma(t)$ могут зависеть от времени.

Наиболее общей группой линейных операторов пространства $\mathbf{L}$ является группа обратимых аффиноров U. Определяя над этой группой функции $U(t_2, t_1)$ [4], имеем в качестве уравнения движения

$$\frac{dU(t,0)}{dt} = V(t)\,U(t,0), \tag{26}$$

откуда следует уравнение (6). Динамическое кольцо $\mathbf{G}^0$ состоит из всех аффиноров V, причем $\dim \mathbf{G}^0 = 9$.

Соображения, примененные к условию (16), справедливы и в данном случае. В качестве $U \in \mathbf{G}$ допустимы только те, которые подчиняются условию

$$\det U > 0. \tag{27}$$

Все элементы $\mathbf{G}$ должны соединяться с единичным элементом E непрерывной кривой. Это требование налагает на $\mathbf{G}$ ограничения более строгие, чем условие (27).

Любой аффинор U может быть представлен в виде произведения версора Ω и симметрического аффинора (тензора) $\tilde{S}$. Поэтому

$$U(t_2, t_1) = \Omega(t_2, t_1)\bar{S}(t_2, t_1). \tag{28}$$

Закон произведения аффиноров

$$U(t_2, 0) = U(t_2, t_1)U(t_1, 0) = \Omega(t_2, 0)\bar{S}(t_2, 0) \tag{29}$$

гласит:

$$\Omega(t_2, 0) = \Omega(t_2, t_1)\Omega(t_1, 0), \tag{30}$$

$$\bar{S}(t_2, 0) = S(t_2, t_1)\bar{S}(t_1, 0), \tag{31}$$

где симметрический аффинор

$$S(t_2, t_1) = \Omega(t_1, 0)^{-1}\bar{S}(t_2, t_1)\Omega(t_1, 0) \tag{32}$$

имеет те же собственные значения $\sigma_j(t_2, t_1)$, что и $\bar{S}(t_2, t_1)$.

По (30) верзорные составляющие сами образуют группу в связной окрестности единицы E. Это — подгруппа вращения ($\det\Omega = +1$), описывающая обратимый процесс [3]

$$\frac{d\Omega(t, 0)}{dt} = H(t)\Omega(t, 0). \tag{33}$$

Кососимметрический $H(t)$ входит в 3-мерное подкольцо нашего $\mathbf{G}^0$.

Множество тензоров, замкнутое относительно сложения, не замкнуто относительно умножения. Однако не все тензоры допустимы в качестве составляющих наших $U \in \mathbf{G}$. Соотношение между тензорами (31) соблюдается лишь в том случае, если

$$[S(t_2, t_1),\ \bar{S}(t_1 0)] = 0. \tag{34}$$

В п. 1.2 указывалось, что связная окрестность единицы группы коммутирующих тензоров определяется не столько условием (16), сколько более строгими условиями (17). В силу (34) те же ограничения оставим в силе относительно тензорных составляющих наших $U \in \mathbf{G}$.

Составляя выражение (31) с участием инфинитезимальных операторов

$$\bar{S}(t + \Delta t, 0) = S(t + \Delta t, t)\bar{S}(t, 0), \tag{35}$$

$$S(t + \Delta t, t) = E + \Delta t\tilde{\Gamma}(t), \tag{36}$$

$$\tilde{\Gamma}(t) = \Omega(t, 0)^{-1}\Gamma(t)\Omega(t, 0), \tag{37}$$

имеем в пределе $\Delta t \to 0$

$$\frac{d\bar{S}(t, 0)}{dt} = \tilde{\Gamma}(t)\bar{S}(t, 0). \tag{38}$$

Решения уравнений движения (33), (38), соответствующие начальным условиям

$$U(0, 0) = \Omega(0, 0) = \bar{S}(0, 0) = E, \tag{39}$$

определяют преобразование движения

$$U(t, 0) = \Omega(t, 0)\bar{S}(t, 0). \tag{40}$$

В силу (34), (36) и (38)

$$[\tilde{\Gamma}(t), \bar{S}(t, 0)] = \left[\frac{d\bar{S}(t, 0)}{dt}, \bar{S}(t, 0)\right] = 0. \tag{41}$$

Входящие в (41) операторы имеют общие собственные векторы

$$\tilde{\Gamma}(t)\vec{b}_j(t)=\delta_j(t)\vec{b}_j(t), \tag{42}$$

$$\tilde{S}(t,0)\vec{b}_j(t)=\sigma_j(t,0)\vec{b}_j(t).$$

Принимая определение (23), получаем

$$\vec{b}_j(t)=\Omega(t,0)^{-1}\vec{a}_j. \tag{43}$$

Подстановка (41) и (42) в (38) приводит к уравнению

$$\frac{d\sigma_j(t,0)}{dt}=\delta_j(t)\sigma_j(t,0), \tag{44}$$

имеющему решение (20).

Стало быть,

$$\tilde{S}(t,0)=\Omega(t,0)^{-1}S(t,0)\Omega(t,0), \tag{45}$$

где $S(t,0)$ сохраняет экспоненциальный вид (21). Более явный вид выражения (40):

$$U(t,0)=\Omega(t,0)\exp\int_0^t\tilde{\Gamma}(t')dt'. \tag{46}$$

В силу (17) функции $U(t,0)\in \mathbf{G}$ описывают монотонное уменьшение $|\vec{m}(t)|$. Чтобы обеспечить свойство необратимости (8), из **G** выделяем полугруппу, определенную условием (7).

Выражение (40) эквивалентно выражению

$$U(t,0)=S(t,0)\Omega(t,0). \tag{47}$$

По (47) в пространстве **L** последовательно завершаются вращение $\Omega(t,0)$ и сжатие $S(t,0)$ вдоль главных осей $\vec{a}_i$.

Подведем итоги. Динамическая группа **G** уравнения (6) составлена из обратимых аффиноров, верзорные и тензорные компоненты которых являются вращениями и тензорами с положительными собственными значениями соответственно. Необратимый процесс (8) описывается полугруппой в **G**, соответствующей условиям (7). Знание обратимой динамики над группой вращения и необратимой динамики полугруппы релаксации достаточно для описания необратимого переходного процесса.

2. Стационарный процесс

В случае переходного процесса система преобразований движения $U(t_2,t_1)$ соответствует множеству экспериментов с одинаковыми $H(t)$ и Г, но различными начальными состояниями $\vec{M}(0)$. К этому множеству относится и стационарный процесс $\vec{s}(t)$ с определенным $\vec{s}(0)$. Составляя семейство траекторий $\vec{s}(t)$, описываемое одной системой линейных преобразований движения, приходим к динамической группе, характеризующей временное изменение $\vec{s}(t)$ в зависимости от условий опыта $H(t)$.

Поясним эту мысль на примере типичного монорезонансного опыта. Выразим внешнее магнитное поле $\vec{B}(t)$, действующее на образец, с помощью лармопового вектора

$$\vec{\omega}(t) = -\gamma\vec{B}(t). \tag{48}$$

В опыте монорезонанса

$$\vec{\omega}(t) = \Omega_1(t, 0)\,\vec{\omega}(0), \tag{49}$$

где

$$\vec{\omega}(0) = \vec{\omega}_0 + \vec{\omega}_1, \tag{50}$$

$\vec{\omega}_0$ — лармовый вектор постоянного магнитного поля, B_1 — амплитуда радиочастотного поля,

$$\vec{\omega}_1 = -\omega_1\vec{a}_x, \tag{51}$$

$$\omega_1 = \gamma B_1, \tag{52}$$

$\Omega_1(t, 0) = \Omega_1(-\vec{a}_z, \nu_1 t)$ описывает вращение $\vec{\omega}(t)$ вокруг $-\vec{a}_z$ с угловой частотой ν_1. Преобразования движения $\Omega(t, 0)$ определены над подгруппой вращений вокруг $\vec{a}_z$. Имеет силу уравнение движения

$$\frac{d\Omega_1(t, 0)}{dt} = G_1\Omega_1(t, 0), \tag{53}$$

где кососимметрический аффинор G_1 соответствует [3] вектору

$$\vec{\nu}_1 = -\nu_1\vec{a}_z. \tag{54}$$

На операторном языке [3] формулам (49), (50) соответствуют

$$H(t) = \Omega_1(t, 0)\,H(0)\,\Omega_1(t, 0)^{-1}, \tag{55}$$

$$H(0) = H_0 + H_1. \tag{56}$$

Существенно, что

$$[G_1, H_0] = [G_1, \Gamma] = 0, \tag{57}$$

$$G_1\vec{M}^0 = \vec{0}. \tag{58}$$

Следуя Ф. Блоку [1], ищем стационарное решение $\vec{s}(t)$ уравнения (1) в виде

$$\vec{s}(t) = \Omega_1(t, 0)\,\vec{r}(t). \tag{59}$$

Подставляя (59) в (1) и учитывая (53), (57) и (58), имеем

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = (F_1 + \Gamma)\,\vec{r} - \Gamma\vec{M}^0. \tag{60}$$

Здесь кососимметрический аффинор

$$F_1 = (H_0 - G_1) + H_1 \tag{61}$$

соответствует ларморовому вектору т. н. эффективного магнитного поля

$$\vec{f}_1 = \Delta\nu_1\vec{a}_z + \omega_1\vec{a}_x, \tag{62}$$

где

$$\Delta\nu_1 = \omega_0 - \nu_1. \tag{63}$$

Стационарное решение $\vec{s}(t)$ задается условием

$$\frac{d\vec{r}}{dt}=0. \tag{64}$$

Стало быть,

$$\vec{s}(t)=\Omega_1(t,0)\vec{s}(0). \tag{65}$$

Вектор $\vec{s}(0)$ получается в виде решения алгебраического уравнения

$$(F_1+\Gamma)\vec{s}(0)=\Gamma\vec{M}^0. \tag{66}$$

Динамическая группа стационарного процесса конструируется на основе вышеотмеченной подгруппы вращений. Каждый $\Omega(t,0)$ описывает семейство траекторий $\vec{s}(t)$ с одинаковыми частотами ν_1, но различными условиями опыта $\vec{\omega}(0)$.

Отметим связь этой группы с динамической группой монорезонанса в условиях отсутствия релаксации. В этом случае преобразования движения принимают вид произведения вращений

$$\Omega(t,0)=\Omega_1(t,0)\Omega_2(t,0), \tag{67}$$

$\Omega_1(t,0)$ сохраняет прежний смысл, а $\Omega_2(t,0)$ задается уравнением движения

$$\frac{d\Omega_2(t,0)}{dt}=F_1\Omega_2(t,0). \tag{68}$$

Верзорная составляющая переходного процесса (40) монорезонанса тоже совпадает с (67). В случае стационарного процесса нутационное движение $\Omega_2(t,0)$ заменяется условием типа «равновесия» (66).

С динамической группой стационарного процесса сопряжено множество обратимых аффиноров

$$L=E+\Gamma^{-1}F_1, \tag{69}$$

для которых

$$\det L=1+(\Delta\nu_1 T_2)^2+\omega_1^2 T_1 T_2. \tag{70}$$

Аффиноры L описывают соответствие $\vec{\omega}(0)\to\vec{s}(0)$: уравнение (66) имеет решение

$$\vec{s}(0)=L^{-1}\vec{M}^0. \tag{71}$$

Компоненты $s_x(0)$, $s_y(0)$ выражают спектр медленной развертки дисперсионного или абсорбционного типа соответственно.

ЛИТЕРАТУРА

1. Bloch F., Phys. Rev., 70, 460 (1946).
2. Redfield A. G., Adv. Magn. Reson., 1, 1 (1965).
3. Синивеэ В., Изв. АН ЭССР, Физ. Матем., 23, 220 (1974).
4. Синивеэ В., Изв. АН ЭССР, Физ. Матем., 24, 35 (1975).

Институт кибернетики
Академии наук Эстонской ССР

Поступила в редакцию
31/XII 1975

V. SINIVEE

BLOCHI VÕRRANDI RÜHMAASPEKTE

Käsitletakse pidevate rühmade teooria rakendamise võimalusi vedelike tuumamagnetresonantsinähtustes, mille puhul on tähtis relaksatsiooni olemasolu.

V. SINIVEE

GROUP ASPECTS OF BLOCH EQUATIONS

The application of the Group Approach to experiments including nuclear spin relaxation is studied on the basis of phenomenological Bloch equations.