EESTI NSV TEADUSTE AKADEEMIA TOIMETISED. 26. KÕIDE
FÜÜSIKA * MATEMAATIKA. 1977, NR. 3

ИЗВЕСТИЯ АКАДЕМИИ НАУК ЭСТОНСКОЙ ССР. ТОМ 26
ФИЗИКА * МАТЕМАТИКА. 1977, № 3

https://doi.org/10.3176/phys.math.1977.3.04

УДК 539.28

В. СИНИВЕЭ

ГРУППОВОЙ ПОДХОД В ДИНАМИКЕ МНОГОСПИНОВЫХ СИСТЕМ. IV*

Продолжение методики построения преобразований в виде произведения нескольких более простых составляющих приводит к группам двойного резонанса (три составляющих) и мультирезонанса (составляющих более трех). Завершение темы селективного резонансного возбуждения (п. 7) [3], а также изучение основных видов подгрупп двойного резонанса (п. 8) и являются предметом настоящей статьи.

В данной работе двойной резонанс — понятие более общее, нежели принято обычно. Существует по меньшей мере три вида подгрупп двойного резонанса: 1) совпадающая с группой резонансного возбуждения группа двойного возбуждения, 2) группа модуляционного двойного резонанса, 3) группа «чистого» двойного резонанса.

7.5. Резонансное приближение. Покажем, что динамика унимодулярной группы $\mathbf{u}_d$ резонансного возбуждения (п. 7.1) приближенно описывается набором подгрупп $\mathbf{G}$ селективного возбуждения (п. 7.2), если только возбуждение V не слишком сильное.

Высказанное позволяет: а) физически реализовать динамику группы $\mathbf{G}$ и в том случае, если нет требуемого специфичного вида $H_1(t)$, б) объяснить резонансные свойства в группе $\mathbf{u}_d$.

Начнем со сравнения динамических колец $\mathbf{u}_d^0$ и $\mathbf{G}^0$. Подпространство $\mathbf{H}_A^0$ — общее для $\mathbf{u}_d^0$ и $\mathbf{G}^0$. Поэтому разложение (7.16) по-прежнему верно, но лишь первое равенство (7.17) относится к $\mathbf{u}_d^0$. Взамен (7.18), (7.19) следует принять

$$\Delta=\Delta_S+\Delta_L,\quad \Delta_S=H_S-G_S, \tag{7.59}$$

$$V=V_L+V_K, \tag{7.60}$$

$$F=\Delta_S+F_L+V_K, \tag{7.61}$$

где

$$F_L=\Delta_L+V_L,\quad \Delta_L=H_L-G_L. \tag{7.62}$$

Операторы с индексами S, L, K принадлежат к подпространствам $\mathbf{S}^0$, $\overset{0}{\mathbf{G}}_L$ и $\mathbf{H}_K$ соответственно (см. 7.15). В силу уравнения (7.60) и вследствие инвариантности $\mathbf{H}_K$ относительно $\mathbf{G}$, возбуждение $H_1(t)$ тоже разлагается на компоненты

$$H_1(t)=H_{1L}(t)+H_{1K}(t), \tag{7.63}$$

* Предыдущие статьи этой серии см. [1-3].

где $H_{1L}(t) \in \mathbf{H}_V$, а $H_{1K}(t) \in \mathbf{H}_K$. Покажем, что в условиях резонансного приближения компонента $H_{1K}(t)$ не влияет на движение системы.

Доказательство сводится к изучению решений уравнения

$$Fb_j = f_j b_j, \tag{7.64}$$

где

$$F = F_0 + V_K, \tag{7.65}$$

$$F_0 = \Delta_S + F_L, \tag{7.66}$$

в первом приближении теории возмущения. В качестве возмущения принимаем V_K.

Коммутирующие операторы Δ_S и F_L имеют общие собственные векторы e_j:

$$F_L e_j = \omega_j^{(1)} e_j, \tag{7.67}$$

$$\Delta_S e_j = \Delta\nu_q e_j \quad \text{при} \quad e_j \in {}^{(q)}\mathbf{C}. \tag{7.68}$$

Операторы H_S, G_S, Δ_S имеют вырожденные уровни $\omega_q^{(0)}$, ν_q и $\Delta\nu_q$ соответственно (см. п. 7.2). Под влиянием F_L вырожденный уровень оператора Δ_S расщепляется на $(d_q - 1)$ невырожденных уровней оператора F_0

$$F_0 e_j = (\Delta\nu_q + \omega_j^{(1)}) e_j. \tag{7.69}$$

Уравнение (7.69) выражает нулевое приближение теории возмущения. В первом приближении $b_j = e_j$ и

$$f_j = (\Delta\nu_q + \omega_j^{(1)}) + (V_K e_j, e_k). \tag{7.70}$$

В силу $V_K \in \mathbf{H}_K$ имеем $(V_K e_j, e_j) = (V_K, E_{jj}) = 0$. Поэтому первое приближение совпадает с нулевым. Различие появляется лишь во втором приближении

$$b_j = e_j + \sum_{k \neq j} (V_K e_j, e_k)(\Delta\nu_{qp} + \omega_{jk}^{(1)})^{-1} e_k. \tag{7.71}$$

При $j \in q$ сумма в (7.71) распространяется на все $k \in p \neq q$, если только V_K имеет компоненты в соответствующем подпространстве $\mathbf{H}^{(qp)}$ (см. п. 7.4).

Итак, условием пригодности резонансного приближения является

$$|(V_K e_j, e_k)| \ll |\Delta\nu_{qp} + \omega_{jk}^{(1)}| \tag{7.72}$$

при всех $j \in q$, $k \in p \neq q$. Короче:

$$V_K \ll F_0. \tag{7.73}$$

Собственные значения оператора Δ могут быть представлены формулой

$$\Delta\nu_j = \Delta\nu_q + \Delta\nu_j^{(q)}, \quad j \in q, \tag{7.74}$$

где $\Delta\nu_j^{(q)}$ — собственное значение оператора $\Delta_L^{(q)}$ (см. п. 7.4). Поэтому взамен условия (7.72) имеем

$$|(V_K e_j, e_k)| \ll |\Delta\nu_{jk} + [(\omega_j^{(1)} - \Delta\nu_j^{(q)}) - (\omega_k^{(1)} - \Delta\nu_k^{(p)})]|. \tag{7.75}$$

Оператор $F_L^{(q)} = \Delta_L^{(q)} + V_L^{(q)}$ (см. п. 7.4) имеет собственные значения

$|\omega_j^{(1)}| < |F_L^{(q)}|$. Поэтому для выполнения условия (7.75) достаточно, чтобы

$$|(V_K e_j, e_k)| \ll |\Delta\nu_{jk} + |V_L^{(q)}| - |V_L^{(p)}|| \tag{7.76}$$

при любых $j \in q$, $k \in p \neq q$.

Условия (7.76) позволяют выделить две частные области соблюдения резонансного приближения.

1) Расстройка на невозбуждаемых переходах $j \to k$ достаточно большая:

$$|\Delta\nu_{jk}| \gg |(V_K e_j, e_k)|. \tag{7.77}$$

2) Возбуждение $H_1(t)$ достаточно сильное и специфичное:

$$|V_L^{(q)}| \gg |(V_K e_j, e_k)|, \tag{7.78}$$

$$|V_L^{(q)}| \gg |V_L^{(p)}| \tag{7.79}$$

при $j \in q$, $k \in p \neq q$. В этом случае $H_1(t)$ соответствует в основном лишь одному неприводимому подпространству $\mathbf{G}_L^q$ и, несмотря на то, что настроены ($\Delta\nu_{jk} \approx 0$) обе компоненты ($H_{1L}(t)$ и $H_{1K}(t)$), действует из них только $H_{1L}(t)$.

В пределе абсолютной специфичности ($H_1(t) \in \mathbf{G}_L^0$) условия (7.79) больше не требуются.

Итак, использование резонансных свойств, выражаемых резонансным приближением, позволяет реализовать динамику разных групп $\mathbf{G} \subset \mathfrak{u}_d$ селективного возбуждения.

Если оператор G может быть изменен (экспериментатором) в пределах всего подпространства $\mathbf{H}_A^0$ и нет запрещенных (правилами отбора для V) переходов, то все подгруппы $\mathbf{G} \subset \mathfrak{u}_d$ селективного возбуждения реализуемы. В самом деле, в этом случае условия (7.77) всегда выполнимы при достаточно большой расстройке $\Delta\nu_{jk}$ на невозбуждаемых переходах $j \to k$. Перечень всех $\mathbf{G} \subset \mathfrak{u}_d$ описывает резонансные свойства в группе $\mathfrak{u}_d$. При этом конкретный расчет движений (и сигналов) предполагает знание решений уравнений типа (7.67) для всех необходимых неприводимых подгрупп (п. 7.3).

Если $H_1(t)$ может быть свободно выбрано лишь в пределах некоторой $\mathbf{G}^0 \subset \mathfrak{u}_d^0$, то реализуется динамика группы $\mathbf{G} \subset \mathfrak{u}_d$ и ее подгрупп селективного возбуждения.

В п. 2.3 [1] был показан общий вид (2.21)—(2.23) встречающихся в спектроскопии ЯМР гамильтонианов H_0. Взаимодействие спиновой системы с внешним радиочастотным полем в качестве $H_1(t)$ имеет вид (2.22). Это — лишь элемент подкольца спиновых векторов. Если бы N независимых радиочастотных полей взаимодействовали селективно с ядрами N-спиновой системы, мы имели бы физическую реализацию этого подкольца. На самом деле такой селективности нет. Непосредственно (в резонансном приближении) к группам селективного возбуждения относится лишь монохроматическое возбуждение радиочастотным магнитным полем. Чтобы с таким $H_1(t)$ возбуждать набор переходов $m \to n$ с близкими резонансными частотами $\omega_{mn}^{(0)}$, необходимо соблюдение условий

$$|\omega_{mn}^{(0)} - \omega_{jk}^{(0)}| \gg |V| \tag{7.80}$$

у невозбуждаемых переходов $j \to k$. Поскольку H_0 таков, что условия (7.80) соблюдаются, то методика двойного (и мульти-) резонанса позволяет исчерпывать подкольцо спиновых векторов как операторов возбуждения $H_1(t)$ типа (2.22).

Применение тензорных взаимодействий (2.23) в качестве $H_1(t)$ позволило бы реализовать все необходимые для ЯМР группы селективного возбуждения. Потенциально такая возможность существует в области ядерного акустического резонанса в твердых телах [4]. Звуковые колебания модулируют диполь-дипольное взаимодействие, создавая оператор возбуждения типа (2.23).

8. Двойной резонанс

8.1. Группа двойного резонанса.

Теорема. *Преобразование движения d-уровневой системы*

$$D(t,0)=D_1(t,0)\,D_2(t,0)\,D_3(t,0), \tag{8.1}$$

$$D_1(t,0)=\exp(-itG_1), \tag{8.2}$$

$$D_2(t,0)=\exp(-itG_2), \tag{8.3}$$

$$D_3(t,0)=\exp(-itF_2), \tag{8.4}$$

соответствует гамильтониану

$$H(t)=H_0+H_1(t)+H_2(t), \tag{8.5}$$

где

$$H_1(t)=D_1(t,0)\,V_1D_1(t,0)^{-1}, \tag{8.6}$$

$$H_2(t)=D_1(t,0)\,D_2(t,0)\,V_2D_2(t,0)^{-1}D_1(t,0)^{-1}. \tag{8.7}$$

При этом эффективными гамильтонианами проблемы являются

$$F_1=(H_0-G_1)+V_1=\Delta_1+V_1, \tag{8.8}$$

$$F_2=(F_1-G_2)+V_2=\Delta_2+V_2. \tag{8.9}$$

Подразумевается: G_1, G_2 *таковы, что*

$$[G_1,H_0]=0, \tag{8.10}$$

$$[G_2,F_1]=0, \tag{8.11}$$

а

$$(V_1,G_1)=(V_2,G_2)=0. \tag{8.12}$$

Доказательство. Будем искать преобразование движения, соответствующее гамильтониану (8.5) в виде $D(t,0)=D_1(t,0)D_{23}(t,0)$, где $D_1(t,0)$ задано формулой (8.2). Согласно п. 6.1 $D_{23}(t,0)$ должно удовлетворять уравнению движения (6.4) с эффективным гамильтонианом

$$F(t)=F_1+D_2(t,0)\,V_2D_2(t,0)^{-1}. \tag{8.13}$$

Это — с учетом формул (8.8) и (8.10). Но решение уравнений (6.4) и (8.13) задано в п. 6.2, если только за $H(t)$ принять здесь $F(t)$, за G — оператор G_2, удовлетворяющий выражениям (8.11) и (8.12). Тогда за оператором (6.25) следует оператор F_2 (8.9).

Приведем выражения, объясняющие принятые в тексте обозначения ортонормированных базисов пространства состояний **C** и собственных значений действующих в **C** эрмитовых операторов

$$H_0 a_m = \omega_m^{(0)} a_m, \tag{8.14}$$

$$G_1 a_m = \nu_m^{(1)} a_m, \tag{8.15}$$

$$G_2 e_m^{(1)} = \nu_m^{(2)} e_m^{(1)}, \tag{8.16}$$

$$F_1 e_m^{(1)} = \omega_m^{(1)} e_m^{(1)}, \tag{8.17}$$

$$F_2 e_m^{(2)} = \omega_m^{(2)} e_m^{(2)}. \tag{8.18}$$

Индексы собственных значений $m = 1, 2 \ldots$ по-прежнему пронумерованы сверху вниз, т. е. $\omega_n^{(0)} < \omega_m^{(0)}$ при $n > m$. Базисы a_m, $e_m^{(1)}$, $e_m^{(2)}$ связаны унитарными преобразованиями

$$e_m^{(1)} = T_1 a_m, \tag{8.19}$$

$$e_m^{(2)} = T_2 e_m^{(1)}. \tag{8.20}$$

Исходный базис a_m определяет A-базисы в операторных пространствах **O** и **H** (см. п. 2.2). Базисные операторы A_{mm} выделяют d-мерное подпространство $\mathbf{H}_A$. Операторы H_0, G_1 — элементы $(d-1)$-мерного подпространства $\mathbf{H}_A^0 \subset \mathbf{H}_A$, содержащего лишь операторы с нулевым следом. Если представить пространство всех эрмитовых операторов (с нулевым следом) $\mathfrak{u}_d^0 = \mathbf{H}^0$ в виде прямой суммы

$$\mathbf{H}^0 = \mathbf{H}_A^0 \dotplus \mathbf{H}_\perp, \tag{8.21}$$

то $H_1(t) \in \mathbf{H}_\perp$, а $G_2, H_2(t) \in \mathbf{H}^0$.

Назовем унитарную унимодулярную группу $\mathfrak{u}_d$, над которой заданы преобразования движения типа (8.1)—(8.4), включающие всевозможные G_1, V_1, G_2, V_2, допустимые соотношениями (8.10)—(8.12), группой двойного резонанса $\mathfrak{u}_d$. Над динамическим кольцом $\mathfrak{u}_d^0$ группы двойного резонанса определены гамильтонианы вида (8.5)—(8.7).

Отметим, что

$$F_2 = H_0 - G + V, \tag{8.22}$$

где

$$G = G_1 + G_2, \tag{8.23}$$

$$V = V_1 + V_2. \tag{8.24}$$

В частном случае, когда G_1, $G_2 \in \mathbf{H}_A^0$, группа двойного резонанса сводится к группе резонансного возбуждения (п. 7), если только

$$[G_2, V_1] = 0. \tag{8.25}$$

В спектроскопии ЯМР (и не только ЯМР) монорезонанс означает монохроматическое возбуждение, двойной резонанс — два различных набора частот возбуждения. Принятое в данной работе понимание этих терминов отличается от обычного. При необходимости различения этих двух словоупотреблений будем говорить об обобщенном (моно) резонансе, обобщенном двойном резонансе и т. д.

В пространстве **O** базису $e_m^{(1)}$ соответствует ортонормированный базис $E_{mn}^{(1)}$, базису $e_m^{(2)}$ — базис $E_{mn}^{(2)}$. На базисные операторы $E_{mm}^{(1)}$ натянуто подпространство $\mathbf{H}_{F1}$, на операторы $E_{mm}^{(2)}$ — подпространство $\mathbf{H}_{F2}$. Символны $\mathbf{H}_{F1}^{0'}$, $\mathbf{H}_{F2}^{0}$ обозначают соответствующие $(d-1)$-мерные подпространства, содержащие лишь операторы с нулевым следом. Ясно, что H_0, G_1, $\Delta_1 \in \mathbf{H}_A^0$ и F_1, G_2, $\Delta_2 \in \mathbf{H}_{F1}^0$, а $F_2 \in \mathbf{H}_{F2}^0$. Позже будут изучены подгруппы $\mathbf{G} \subset \mathfrak{u}_d$ группы двойного резонанса, у которых $H_1(t) \in \mathbf{H}_{V1}$ и $\mathfrak{R}_1(t,0)^{-1} H_2(t) \in \mathbf{H}_{V2}$.

Воспользовавшись введенными базисами, получим следующие развернутые выражения операторов возбуждения

$$H_1(t) = \sum_{m,n} (V_1, A_{mn}) \exp(-i\overset{(1)}{\nu}_{mn} t) A_{mn}, \tag{8.26}$$

$$H_2(t) = \sum_{m,n} \sum_{j,k} (V_2, \overset{(1)}{E}_{jk})(\overset{(1)}{E}_{jk}, A_{mn}) \exp(-i(\overset{(1)}{\nu}_{mn} + \overset{(2)}{\nu}_{jk})t) A_{mn}. \tag{8.27}$$

Без ограничения общности принимаем, что V_1 ортогонален с V_2. Тогда частоты $\overset{(1)}{\nu}_{mn}$ содержатся лишь в двойной сумме (8.26), а боковые частоты $\overset{(1)}{\nu}_{mn} \pm \overset{(2)}{\nu}_{jk}$ $(\overset{(2)}{\nu}_{jk} > 0)$ характеризуют возбуждение (8.27). Выбор этих частот, т. е. операторов Δ_1, Δ_2, определяет расположение подпространств $\mathbf{H}_{F1}^0$, $\mathbf{H}_{F2}^0$ в $\mathbf{H}^0$.

Движение оператора плотности $\varrho(t) \in \mathbf{O}$ описывается тремя двойными суммами

$$\varrho(t) = \sum_{m,n} \sum_{j,k} \sum_{r,s} (\varrho(0), \overset{(2)}{E}_{rs})(\overset{(2)}{E}_{rs}, \overset{(1)}{E}_{jk})(\overset{(1)}{E}_{jk}, A_{mn}) \times$$

$$\times \exp(-i(\overset{(1)}{\nu}_{mn} + \overset{(2)}{\nu}_{jk} + \overset{(2)}{\omega}_{rs})t) A_{mn}, \tag{8.28}$$

отвечающими трем составляющим движения — относительно базисов A_{mn}, $\overset{(1)}{E}_{jk}$ и $\overset{(2)}{E}_{rs}$ соответственно. В пространстве $\mathbf{H}$ эти составляющие описываются ортогональными супероператорами $\mathfrak{R}_1(t,0)$, $\mathfrak{R}_2(t,0)$ и $\mathfrak{R}_3(t,0)$ соответственно. Эрмитовые A-базисы (см. п. 2.2) обозначаются через X_{mn}, $\overset{(1)}{X}_{jk}$, $\overset{(2)}{X}_{rs}$.

Подпространство $\mathbf{H}_{F1} \cap \mathbf{H}_{F2}$ содержит начальные состояния $\varrho(0)$, временные изменения которых характеризуются лишь частотами $\overset{(1)}{\nu}_{mn}$. Частоты $\overset{(1)}{\nu}_{mn} \pm \overset{(2)}{\nu}_{jk}$ $(\overset{(2)}{\nu}_{jk} > 0)$ — субмультиплеты первого порядка — характеризуют временные изменения начальных состояний $\varrho(0) \in \mathbf{H}_{F2}$, не принадлежащих к подпространству $\mathbf{H}_{F1} \cap \mathbf{H}_{F2}$. В наиболее широком множестве начальных состояний получаются субмультиплеты второго порядка $\nu_{mn}^{(1)} \pm \nu_{jk}^{(2)} \pm \omega_{rs}^{(2)}$ $(\nu_{jk}^{(2)} > 0,\ \omega_{rs}^{(2)} > 0)$, которые могут содержать до $1 + d(d-1)[1 + d(d-1)]$ частот. Даже в случае $d = 2$ (односпиновая система) число компонент субмультиплета второго порядка достигает семи.

Условиями полной расстройки возбуждений $H_1(t)$, $H_2(t)$ будут:

$$|(V_1 a_m, a_n)| \ll |\overset{(0)}{\omega}_{mn} - \overset{(1)}{\nu}_{mn}|, \quad n \neq m, \tag{8.29}$$

$$|(V_2 \overset{(1)}{e}_m, \overset{(1)}{e}_n)| \ll |\overset{(1)}{\omega}_{mn} - \overset{(2)}{\nu}_{mn}|, \quad n \neq m \tag{8.30}$$

соответственно. В этих условиях система совершает свободное движение (п. 5), отвечающее гамильтониану H_0. При выполнении лишь одного из неравенств (8.29), (8.30) движение описывается группой резонансного возбуждения (п. 7), отвечающей $H_1(t)$ или $H_2(t)$ соответственно. Вблизи же точки (полного) двойного резонанса

$$G_1 = H_0, \tag{8.31}$$

$$G_2 = F_1 = V_1 \tag{8.32}$$

необходимы преобразования движения (8.1)—(8.4).

Условия (8.29), (8.30) распространяются на все переходы. Одновременное выполнение как (8.29), так и (8.30) лишь у части переходов означает близость условий опыта к точке частичного двойного резонанса. Исследование окружности этих точек сводится к рассмотрению подгрупп двойного резонанса.

8.2. Подгруппы двойного резонанса. Пусть группа двойного резонанса определена над некоторой подгруппой $\mathbf{G} \subset \mathbf{u}_d$ унитарной унимодулярной группы $\mathbf{u}_d$. Для составляющих подгрупп $\mathbf{G}_1$, $\mathbf{G}_2 \subset \mathbf{G}$ и их динамических колец принимаем следующие определения:

$$D_1(t,0),\ D_2(t,0),\ T_1 \in \mathbf{G}_1;\quad H_0,\ H_1(t),\ G_2 \in \overset{0}{\mathbf{G}}_1, \tag{8.33}$$

$$D_2(t,0),\ D_3(t,0),\ T_2 \in \mathbf{G}_2;\quad G_2,\ F_1,\ \mathfrak{R}_1(t,0)^{-1}H_2(t) \in \overset{0}{\mathbf{G}}_2. \tag{8.34}$$

Общая часть $\mathbf{G}_1 \cap \mathbf{G}_2$ — тоже подгруппа в $\mathbf{G}$. Очевидно, что $D_2(t,0) \in \mathbf{G}_1 \cap \mathbf{G}_2$, а $\overset{0}{\mathbf{H}}_{F1} = \overset{0}{\mathbf{G}}_1 \cap \overset{0}{\mathbf{G}}_2$. Более подробно:

$$\overset{0}{\mathbf{G}}_1 = \overset{0}{\mathbf{H}}_A \dotplus \mathbf{H}_{V1} = \overset{0}{\mathbf{S}}_1 \dotplus \overset{0}{\mathbf{G}}_{L1}, \tag{8.35}$$

причем $H_0, G_1, \Delta_1 \in \overset{0}{\mathbf{H}}_A$, а $H_1(t) \in \mathbf{H}_{V1}$. Аналогично

$$\overset{0}{\mathbf{G}}_2 = \overset{0}{\mathbf{H}}_{F1} \dotplus \mathbf{H}_{V2}, \tag{8.36}$$

где $F_1, G_2, \Delta_2 \in \overset{0}{\mathbf{H}}_{F1}$, а $\mathfrak{R}_1(t,0)^{-1}H_2(t) \in \mathbf{H}_{V2}$ и $F_2 \in \overset{0}{\mathbf{H}}_{F2} \subset \overset{0}{\mathbf{G}}_2$.

Здесь учитывается, что $\mathbf{G}_1$ — некоторая группа селективного возбуждения (п. 7.2), обладающая подгруппой симметрии $\mathbf{S}_1$. Возникшее подкольцо $\overset{0}{\mathbf{G}}_{L1}$ определяется прямыми суммами

$$\overset{0}{\mathbf{H}}_A = \overset{0}{\mathbf{S}}_1 \dotplus \overset{0}{\mathbf{H}}_{L1}, \tag{8.37}$$

$$\overset{0}{\mathbf{G}}_{L1} = \overset{0}{\mathbf{H}}_{L1} \dotplus \mathbf{H}_{V1}. \tag{8.38}$$

Ортогональное супероператорное представление группы $\mathbf{G}_1$ разлагает пространство $\mathbf{H}^0 = \mathbf{u}_d^0$ на прямую сумму инвариантных подпространств

$$\mathbf{H}^0 = \overset{0}{\mathbf{S}}_1 \dotplus \overset{0}{\mathbf{G}}_{L1} \dotplus \mathbf{H}_{K1}. \tag{8.39}$$

Поскольку $\overset{0}{\mathbf{H}}_{F1} = \overset{0}{\mathbf{G}}_1 \cap \overset{0}{\mathbf{G}}_2$ и $(V_1, V_2) = 0$, то структура самого $\mathbf{G}^0$ зависит от расположения подпространства $\mathbf{H}_{V2} \subset \overset{0}{\mathbf{G}}_2$. В связи с этим выделим следующие три частных вида подгрупп двойного резонанса.

1. Группа модуляционного двойного резонанса. $\mathbf{H}_{V2} \subset \overset{0}{\mathbf{G}}_{L1}$. В данном случае $\mathbf{S}_1$ — общая подгруппа симметрии групп $\mathbf{G}_1$ и $\mathbf{G}_2$. Преобразование T_1 переводит $\overset{0}{\mathbf{H}}_{L1} \subset \overset{0}{\mathbf{H}}_A$ в $\overset{0}{\mathbf{F}}_{L1} \subset \overset{0}{\mathbf{H}}_{F1}$ и $\mathbf{H}_{V1} \subset \overset{0}{\mathbf{G}}_{L1}$ в $\mathbf{H}_{V2} \subset \overset{0}{\mathbf{G}}_{L2}$.

$$\mathbf{H}^0_{F1} = \mathbf{S}^0_1 \dotplus \mathbf{F}^0_{L1}, \tag{8.40}$$

$$\mathbf{G}^0_{L2} = \mathbf{F}^0_{L1} \dotplus \mathbf{H}_{V2}. \tag{8.41}$$

При этом $G_1 \in \mathbf{H}^0_{L1}$, а $G_2 \in \mathbf{F}^0_{L1}$. Группы $\mathbf{G}_1$, $\mathbf{G}_2$ эквивалентны (см. п. 3.1), подпространства $\mathbf{G}^0_1$, $\mathbf{G}^0_2$, $\mathbf{G}^0$ — совпадают. Некая система переходов возбуждается действием $H_1(t)$. На возникшее движение налагается второе (вызванное действием $H_2(t)$), низкочастотное движение, сохраняющее (8.39).

2. Группа чистого двойного резонанса. $\mathbf{H}_{V2} \subset \mathbf{H}_{K1}$. В этом случае $\mathbf{G}_2$ имеет свою подгруппу симметрии $\mathbf{S}_2$. Поэтому

$$\mathbf{H}^0_A = \mathbf{S}^0_2 \dotplus \mathbf{H}^0_{L2}, \tag{8.42}$$

$$\mathbf{G}^0_2 = \mathbf{S}^0_2 \dotplus \mathbf{F}^0_{L2} \dotplus \mathbf{H}_{V2} = \mathbf{S}^0_2 \dotplus \mathbf{G}^0_{L2}. \tag{8.43}$$

Подразумевается, что T_1 переводит $\mathbf{H}^0_{L1}$ в $\mathbf{H}^0_{F1}$, а $\mathbf{H}^0_{L2}$ в $\mathbf{F}^0_{L2}$. Попрежнему $G_1 \in \mathbf{H}^0_{L1}$, а $G_2 \in \mathbf{F}^0_{L2}$.

Подгруппы $\mathbf{G}_1$, $\mathbf{G}_2$ — это две различные (приводимые) группы селективного возбуждения (п. 7.4), соответствующие двум различным системам возбуждаемых переходов. При этом возбуждаемые группой $\mathbf{G}_2$ переходы являются связанными (а не возбуждаемыми) с «точки зрения» группы $\mathbf{G}_1$. Если $j \to k$ есть такой связанный переход, то $Z_{jk} \in \mathbf{H}^0_{L2}$, $Z^{(1)}_{jk} \in \mathbf{F}^0_{L2}$, а $X^{(1)}_{jk} \in \mathbf{H}_{V2} \subset \mathbf{H}_{K1}$. Базисные операторы $X^{(1)}_{jk}$, $Y^{(1)}_{jk}$ могут лежать не только на плоскости X_{jk}, Y_{jk}, но и во всем подпространстве $\mathbf{H}_{K1}$.

3. Группа двойного возбуждения. $\mathbf{H}_{V2} \subset \mathbf{H}_{K1}$, а $\mathbf{S}^0_1 = \mathbf{S}^0_2 = \mathbf{S}^0$. Динамические кольца $\mathbf{G}^0_{L1}$ и $\mathbf{G}^0_{L2}$ — взаимно коммутирующие.

$$\mathbf{H}^0_A = \mathbf{S}^0 \dotplus \mathbf{H}^0_{L1} \dotplus \mathbf{H}^0_{L2}, \tag{8.44}$$

$$\mathbf{G}^0 = \mathbf{S}^0 \dotplus \mathbf{G}^0_{L1} \dotplus \mathbf{G}^0_{L2}, \tag{8.45}$$

где $\mathbf{G}^0_{L1}$ задано формулой (8.38), а $\mathbf{G}^0_{L2} = \mathbf{H}^0_{L2} \dotplus \mathbf{H}_{V2}$. При этом $\mathbf{G}^0_{L1}$ и $\mathbf{G}^0_{L2}$ могут быть как приводимыми, так и неприводимыми. Так как в данном случае

$$H_2(t) = \Re_2(t, 0)\, V_2, \tag{8.46}$$

то оба возбуждения $H_1(t)$, $H_2(t)$ могут изменяться независимо друг от друга. Возбуждаемые ими системы переходов общих возбуждаемых уровней не имеют.

Ясно, что группа двойного возбуждения — лишь иное представление группы селективного возбуждения (п. 7.4).

8.3. Группы мультирезонанса.

Теорема l-кратного резонанса. *Преобразование движения d-уровневой системы*

$$D(t, 0) = D_1(t, 0)\, D_2(t, 0) \ldots D_{l+1}(t, 0), \tag{8.47}$$

где

$$D_k(t, 0) = \exp(-itG_k) \quad \textit{при} \quad k = 1, 2, \ldots, l, \tag{8.48}$$

а

$$D_{l+1}(t, 0) = \exp(-itF_l), \tag{8.49}$$

соответствует гамильтониану

$$H(t) = H_0 + \sum_{k=1}^{l} H_k(t) \tag{8.50}$$

при

$$H_k(t) = \mathfrak{R}_1(t, 0)\,\mathfrak{R}_2(t, 0)\ldots\mathfrak{R}_k(t, 0)\,V_k. \tag{8.51}$$

Эффективными гамильтонианами проблемы будут (8.8) *и*

$$F_k = (F_{k-1} - G_k) + V_k = \Delta_k + V_k \tag{8.52}$$

при $2 \leqslant k \leqslant l$. *Предполагается*: $G_1, G_2, \ldots, G_l$ *таковы, что соблюдаются* (8.10) *и*

$$[G_k, F_{k-1}] = 0 \tag{8.53}$$

при $2 \leqslant k \leqslant l$.

Доказательство соответствует доказательству в п. 8.1.

На группу $\mathfrak{u}_d$ l-кратного резонанса легко перенести (обобщая) рассуждения типа тех, которые применялись в пп. 8.1—8.2. Сделаем лишь два (дополнительных) замечания по этому поводу.

1. Группа селективного возбуждения (п. 7.4), состоящая из неприводимых подгрупп $\mathbf{G}_L^{(q)}$, $(q = 1, 2, \ldots, l)$, может толковаться и как группа l-кратного возбуждения (подгруппа группы l-кратного резонанса, аналог группы двойного возбуждения). При этом оператору $H_k(t)$ (8.51) соответствует компонента $H_L^{(k)}(t)$ в сумме (7.40).

2. Пусть группа l-кратного возбуждения входит в состав группы двойного резонанса (п. 8.2). Применяя, далее, вышеописанный метод построения групп мультирезонанса, продвигаемся либо по «лестнице» групп модуляционного, либо «чистого» типа (см. 8.2). После конечного числа шагов пространство $\mathbf{H}^0$ оказывается «заполненным». Возникает существенный вопрос: могут ли преобразования движения любой группы над $\mathfrak{u}_d$ быть представленными в виде (8.47)?

ЛИТЕРАТУРА

1. Синивеэ В., Изв. АН ЭССР, Физ. Мат., 24, 35 (1975).
2. Синивеэ В., Изв. АН ЭССР, Физ. Мат., 25, 146 (1976).
3. Синивеэ В., Изв. АН ЭССР, Физ. Мат., 26, 161 (1977).
4. Кессель А. Р., Ядерный акустический резонанс, М., 1969.

Институт кибернетики
Академии наук Эстонской ССР

Поступила в редакцию
28/VI 1976

V. SINIVEE

RÜHMADE TEOORIA RAKENDAMISEST MITMESPINNISÜSTEEMIDE DÜNAAMIKA UURIMISEKS. IV

On defineeritud multiresonantsirühmad. Detailsemalt on käsitletud topeltresonantsirühmi.

V. SINIVEE

GROUP APPROACH IN DYNAMICS OF MANY-SPIN SYSTEMS. IV

Multiple resonance groups are included in the framework of the group approach. The double resonance group is studied in greater detail.