EESTI NSV TEADUSTE AKADEEMIA TOIMETISED. 27. KÖIDE
FÜÜSIKA * MATEMAATIKA. 1978, NR. 3

ИЗВЕСТИЯ АКАДЕМИИ НАУК ЭСТОНСКОЙ ССР. ТОМ 27
ФИЗИКА * МАТЕМАТИКА. 1978, № 3

УДК 539.28

В. СИНИВЕЭ

ГРУППОВОЙ ПОДХОД В ДИНАМИКЕ МНОГОСПИНОВЫХ СИСТЕМ. V

Система, состоящая из одного спина 1/2, — простейшая двухуровневая квантовая система. В данной статье на ее примере выясняются детали группового подхода в квантовой динамике. Представления исследуемой динамической группы $SU(2)$ имеют множество приложений и в динамике многоспиновых систем.

До сих пор динамика системы изучалась применительно к некоторым встречающимся в практике видам временной зависимости внешнего магнитного поля. В данной статье рассматривается общий случай произвольно изменяющегося поля. Устанавливается связь между временным изменением состояний системы (либо ансамбля систем), с одной стороны, и управляющим этим движением магнитным полем (или гамильтонианом) — с другой. Специально обсуждаются пути обобщения понятия резонанса.

Статья автономна. Для ее понимания требуется, помимо общих положений теории непрерывных групп [1–3], знакомство с вводной статьей этой серии [4].

9. Динамика двухуровневой системы

9.1. Группа $\mathfrak{u}_2$ и ее суперoператорное представление. Пространство **C** (чистых) квантовых состояний, по определению, 2-мерно. Если a_m-базис пространства **C** [4] составлен из координатных строк $a_1 = [1, 0]$ и $a_2 = [0, 1]$, то любой (нормированный) вектор состояния $x \in \mathbf{C}$ может быть представлен в виде суперпозиции

$$x(\Phi, \varphi_1, \varphi_2) = \cos\Phi\, e^{-i\varphi_1} a_1 + \sin\Phi\, e^{-i\varphi_2} a_2. \tag{9.1}$$

Угловые параметры $(\Phi, \varphi_1, \varphi_2)$ векторов состояний имеют следующие пределы изменения

$$0 \leqslant \Phi \leqslant \pi/2; \quad -\pi \leqslant \varphi_1,\ \varphi_2 \leqslant \pi. \tag{9.2}$$

Однако формулы (9.2) требуют некоторых разъяснений, чтобы понять особенность топологии множества векторов (9.1).

Рассмотрим подмножество векторов (9.1) с постоянным Φ и переменными φ_1 и φ_2. Существуют три различных типа таких подмножеств:

а) $0 < \Phi < \pi/2$ — поверхность тора,

б) $\Phi = 0$ — круг (только переменная φ_1),

в) $\Phi = \pi/2$ — круг (только переменная φ_2).

Итак, в случаях б) и в) лишь один из параметров φ_1, φ_2 имеет смысл, второй считаем нулем.

Если система содержит независящий от времени гамильтониан H_0 с собственными векторами a_m $(m = 1, 2)$, то состояния б) и в) называются стационарными, а состояния а) — нестационарными. Однако с математической точки зрения базис a_m не является особым. Аналогичное «расслоение» на множества квантовых состояний дает любой базис пространства **C**.

Углы (9.2) могут быть использованы для параметризации действующих в $\mathfrak{u}_2$* унитарных унимодулярных операторов $T(\Phi, \varphi_1, \varphi_2)$. Матрица любого такого оператора (на a_m-базисе) имеет вид

$$T(\Phi, \varphi_1, \varphi_2) = \begin{bmatrix} \cos\Phi\, e^{-i\varphi_1} & -\sin\Phi\, e^{i\varphi_2} \\ \sin\Phi\, e^{-i\varphi_2} & \cos\Phi\, e^{i\varphi_1} \end{bmatrix}. \tag{9.3}$$

Между векторами (9.1) и операторами (9.3) существует взаимно однозначное соответствие

$$x(\Phi, \varphi_1, \varphi_2) = T(\Phi, \varphi_1, \varphi_2)\, a_1, \tag{9.4}$$

указывающее на совпадение топологии группы $\mathfrak{u}_2$ и множества векторов (9.1). Значит, квантовые состояния двухуровневой системы можно выразить с помощью операторов состояний (9.3), т. е. всю динамику $\mathfrak{u}_2$ описывать на групповом языке. Более того, за представителя квантовых состояний можно принимать риманово пространство точек $(\Phi, \varphi_1, \varphi_2)$.

Различие этих трех способов описания квантовых состояний состоит в применяемой алгебре. В случае векторов (9.1) — это линейная алгебра над комплексным пространством **C**. В случае операторов (9.3) — матричная алгебра. Углы же $(\Phi, \varphi_1, \varphi_2)$ подчиняются более сложной алгебре. Для описания перемещения системы применима только групповая операция (умножение) матриц (9.3). Линейные операции этих матриц хотя и полезны при установлении связи с динамическим кольцом [4], но не обязательны [1]. Можно себе представить более общие динамики, описываемые группами Ли. Но если эти группы компактны (пространственно локализованные системы?), то они неминуемо имеют унитарное представление [1].

Пространство всех линейных операторов **O** 4-мерно. Поставим в соответствие a_m-базису пространства **C** A-базис пространства **O** [4]. Образуем эрмитовый A-базис A_{11}, A_{22}, X_{12}, Y_{12}, что и даст основу 4-мерного пространства **H** эрмитовых операторов. В целях выделения 3-мерного подпространства $\mathbf{H}^0 \subset \mathbf{H}$ операторов с нулевым следом видоизменим эрмитовый A-базис следующим образом:

$$I_0 = 1/2\,(A_{11} + A_{22}); \tag{9.5}$$

$$\begin{aligned} I_z &= Z_{12} = 1/2\,(A_{11} - A_{22}), \\ I_x &= X_{12} = 1/2\,(I_+ + I_-), \\ I_y &= Y_{12} = -i/2\,(I_+ - I_-), \end{aligned} \tag{9.6}$$

где $I_+ = A_{12}$ и $I_- = A_{21}$. Стало быть,

$$I_z a_m = \mu_m a_m, \tag{9.7}$$

где $\mu_1 = +1/2$ и $\mu_2 = -1/2$. В данном случае I-базис [4] динамического кольца $\mathfrak{u}_2^0$ совпадает с (видоизмененным) эрмитовым A-базисом.

---

* Вместо более распространенного в физике обозначения $SU(2)$ [1] мы заимствуем обозначения из [2].

Базисные операторы (9.6) подчиняются алгебре Ли $\mathbf{u}_2{}^0$. Метрика в 3-мерном евклидовом пространстве $\mathbf{H}^0$ определяется скалярными произведениями

$$(I_j, I_k) = 1/2\delta_{jk} \qquad (j, k = z, x, y). \tag{9.8}$$

Любой оператор вида

$$I_n = \sum_j n_j I_j \in \mathbf{H}^0, \qquad \sum_j n_j^2 = 1 \tag{9.9}$$

называется спиновым оператором. Все они имеют одинаковые собственные значения μ_m, но различные собственные векторы. Любой эрмитовый оператор $H \subset \mathbf{H}^0$ может быть представлен в виде

$$H = \omega_{12} I_n = \sum_j \omega_j I_j, \tag{9.10}$$

где $\omega_j = n_j \omega_{12}$. Оператор (9.10) имеет собственные значения $\omega_m = \mu_m \omega_{12}$. Символ $\omega_{12} = \omega_1 - \omega_2$ обозначает (угловую) частоту единственного перехода $1 \to 2$.

Ортонормированный репер $\vec{a}_j$ $(j = z, x, y)$, связанный с измерительной аппаратурой (лабораторный репер), выделяет 3-мерное (действительное) векторное пространство $\mathbf{V}$. Векторная алгебра $\mathbf{V}$ изоморфна алгебре $\mathbf{u}_2{}^0$. Взаимно однозначное соответствие линейных операций в $\mathbf{V}$ и $\mathbf{u}_2{}^0$ вытекает из сопоставления единичного вектора направления

$$\vec{n} = \sum_j n_j \vec{a}_j \in \mathbf{V} \tag{9.11}$$

и спинового оператора (9.9). Векторному произведению $[\vec{H}_1, \vec{H}_2]$ соответствует коммутатор $-i[H_1, H_2]$, а скалярные произведения связаны соотношением

$$(\vec{H}_1, \vec{H}_2) = 2(H_1, H_2). \tag{9.12}$$

Появляется возможность говорить о пространственном направлении операторов (9.9) и (9.10). Какой физический смысл вкладывается в операторы (9.9), зависит от природы двухуровневой системы. Она может быть, например, изоспином или же т. н. энергетическим спином [5].

Принимая двухуровневую систему за ядерный спин 1/2, приписываем ей (как источнику магнитного поля) оператор ядерного магнитного момента

$$M_m = \gamma \hbar I_m \tag{9.13}$$

в направлении $\vec{m}$. Вещество, содержащее в единице объема N спинов и трактуемое как больцмановский ансамбль спинов, будет обладать ядерной намагниченностью

$$\vec{M} = N(\varrho, M_m)\vec{m} \in \mathbf{V}, \tag{9.14}$$

если состояние ансамбля задано оператором плотности $\varrho \in \mathbf{H}$.

С другой стороны, ядерный спин взаимодействует с внешним магнитным полем $\vec{B} = B\vec{n} \in \mathbf{V}$ согласно гамильтониану зеемановского взаимодействия (9.10). При этом

$$\omega_{12} = -\gamma B \tag{9.15}$$

— ларморовая частота, а γ — гиромагнитное отношение ядерного спина.

Состояния ансамбля спинов 1/2 описываются оператором плотности

$$\varrho = I_0 + \pi_{12} I_m \in \mathbf{H}. \tag{9.16}$$

Эрмитовый оператор (9.16) имеет собственные векторы $s_m \in \mathbf{C}$ и собственные значения (естественные популяции) $0 \leqslant \pi_m \leqslant 1$:

$$\varrho s_m = \pi_m s_m. \tag{9.17}$$

Разница $\pi_{12} = \pi_1 - \pi_2$ именуется поляризацией.

В необратимых процессах типа спиновой релаксации, химической и динамической поляризации π_{12} может изменяться во времени. В рассматриваемых нами обратимых процессах поляризация сохраняется. Поэтому состояния ансамбля достаточно описывать спиновыми операторами $I_m \in \mathbf{H}^0$, образующими сферу направлений $\vec{m}$. Тогда ядерная намагниченность вычисляется по формуле

$$\vec{M} = (1/2)\gamma\hbar N \pi_{12} \vec{m}. \tag{9.18}$$

Унитарное супероператорное представление [4] операторов (9.3) в пространстве $\mathbf{O}$ получается путем составления 4×4 матриц супероператоров на A-базисе. Преобразование этих матриц на I-базис приводит к ортогональному супероператорному представлению [4] группы $\mathfrak{u}_2$ в пространстве $\mathbf{H}$

$$T(\Phi, \varphi_1, \varphi_2) \rightarrow \mathfrak{T}(\Phi, \varphi_1, \varphi_2) \tag{9.19}$$

в виде 4×4 ортогональных матриц с $\det \mathfrak{T} = 1$. Как одномерное подпространство, натянутое на I_0, так и 3-мерное подпространство $\mathbf{H}^0$ являются инвариантными относительно представления (9.19).

9.2. Эйлерова параметризация. В целях разложения операторов (9.3) на составляющие, зависящие только от одного параметра, заменим углы (9.2) (первичные параметры) новыми (эйлеровыми) параметрами (φ_{12}, Φ, σ_{12}). В новой параметризации Φ сохраняет прежний смысл, но

$$\varphi_{12} = \varphi_1 - \varphi_2, \tag{9.20}$$

$$\sigma_{12} = \varphi_1 + \varphi_2. \tag{9.21}$$

В дальнейшем углы (9.20) и (9.21) будут иметь различный смысл в зависимости от того, являются ли они параметрами группы $\mathfrak{u}_2$ или ее супероператорного представления. В первом случае они могут изменяться в пределах

$$-2\pi \leqslant \varphi_{12}, \quad \sigma_{12} \leqslant 2\pi. \tag{9.22}$$

Допускаются лишь такие пары, которые имеют образ φ_1, φ_2.

Во втором случае пределы изменения углов φ_{12} и σ_{12} обычные, т. е. $0 \leqslant \varphi_{12}, \quad \sigma_{12} \leqslant 2\pi$.

В [3] применена несколько иная параметризация унитарных групп. Наш выбор обусловлен желанием сохранить непрерывность параметров при их независимом изменении.

Любой оператор $T(\varphi_{12}, \Phi, \sigma_{12}) \in \mathfrak{u}_2$ типа (9.3) может быть представлен в виде произведения трех экспонент

$$T(\varphi_{12}, \Phi, \sigma_{12}) = T_1(\varphi_{12})\, T_2(\Phi)\, T_3(\sigma_{12}), \tag{9.23}$$

где

$$T_1(\varphi_{12}) = \exp(-i\varphi_{12}I_z), \tag{9.24}$$

$$T_2(\Phi) = \exp(-i2\Phi I_y), \tag{9.25}$$

$$T_3(\sigma_{12}) = \exp(-i\sigma_{12}I_z). \tag{9.26}$$

Применение оператора (9.23) в формуле (9.4) приводит к эйлеровой параметризации векторов состояния $x(\varphi_{12}, \Phi, \sigma_{12})$.

Аналогично (9.23) разлагаются супероператоры $\mathfrak{T}(\varphi_{12}, \Phi, \sigma_{12})$ представления (9.19):

$$\mathfrak{T}(\varphi_{12}, \Phi, \sigma_{12}) = \mathfrak{T}_1(\varphi_{12})\mathfrak{T}_2(\Phi)\mathfrak{T}_3(\sigma_{12}), \tag{9.27}$$

где

$$\mathfrak{T}_1(\varphi_{12}) = \mathfrak{R}(I_z, \varphi_{12}), \tag{9.28}$$

$$\mathfrak{T}_2(\Phi) = \mathfrak{R}(I_y, 2\Phi), \tag{9.29}$$

$$\mathfrak{T}_3(\sigma_{12}) = \mathfrak{R}(I_z, \sigma_{12}). \tag{9.30}$$

В формулах (9.28) — (9.30) содержится укороченная символика ортогональных супероператоров, которую отныне будем использовать. Например, супероператор (9.29) совершает правое вращение вокруг оси I_y на угол 2Φ, оставляя I_0 неизменным.

Эйлерова параметризация спиновых операторов $I_m(\varphi_{12}, \Phi)$ состояний ансамбля (9.16) получается по формуле

$$I_m(\varphi_{12}, \Phi) = \mathfrak{T}(\varphi_{12}, \Phi, \sigma_{12}) I_z = \mathfrak{T}_1(\varphi_{12})\mathfrak{T}_2(\Phi) I_z. \tag{9.31}$$

Состояния ансамбля зависят только от эйлеровых параметров φ_{12} и 2Φ — двух сферических координат направления $\vec{m}(\varphi_{12}, 2\Phi) \in \mathbf{V}$.

Становится явной неизоморфность представления (9.19). Левое вращение, описываемое отрицательными углами φ_{12}, всегда эквивалентно некоторому правому вращению. Более того, σ_{12} выпадает из (9.31).

Группа операторов (9.27) представляет собой приводимое представление группы вращений $\mathbf{d}_3$ (т. е. $SO(3)$). Преобразование

$$\mathfrak{T}(\varphi_{12}, \Phi, \sigma_{12}) I_j \quad (j = z, x, y), \tag{9.32}$$

совершаемое операторами (9.27), является эйлеровым вращением лабораторного репера (9.6). Углы φ_{12}, 2Φ и σ_{12} — это углы прецессии, нутации и собственного вращения соответственно. Обратное к (9.19) соответствие будет многозначным представлением группы $\mathbf{d}_3$.

Согласно (9.16) и (9.17) операторы $\varrho(\varphi_{12}, \Phi)$ и $I_m(\varphi_{12}, \Phi)$ имеют общую систему собственных векторов $s_m(\varphi_{12}, \Phi, \sigma_{12})$ $(m = 1, 2)$. В силу (9.31) и (9.19) верно

$$s_m(\varphi_{12}, \Phi, \sigma_{12}) = T(\varphi_{12}, \Phi, \sigma_{12}) a_m. \tag{9.33}$$

Согласно (9.4), вектор $s_1(\varphi_{12}, \Phi, \sigma_{12})$ — представитель произвольного $x(\varphi_{12}, \Phi, \sigma_{12}) \in \mathbf{C}$.

Каждому состоянию ансамбля $I_m(\varphi_{12}, \Phi)$ соответствует подмножество состояний $s_1(\varphi_{12}, \Phi, \sigma_{12})$, обладающее следующим свойством: намагниченности, вычисленные по формуле квантового среднего

$$\vec{M} = N\langle M_m\rangle \vec{m} \tag{9.34}$$

и по формуле (9.14), совпадают, если только $\pi_{12} = 1$ (все спины в состояниях $s_1(\varphi_{12}, \Phi, \sigma_{12})$, σ_{12} — переменная).

9.3. Динамика $\mathfrak{u}_2$. Квантовая динамика ядерного спина построена по следующей общей схеме

$$\vec{B}(t) \to \boxed{H(t) \to x(t) \to \varrho(t)} \to \vec{M}(t). \qquad (9.35)$$

Классическое (внешнее) магнитное поле $\vec{B}(t)$ выступает здесь в роли входного (управляющего) сигнала, намагниченность $\vec{M}(t)$ — в роли выходного (классического наблюдаемого). В раме — «черный ящик квантового формализма».

Переход от $x(t)$ к $\varrho(t)$ предусматривает введение статистики ансамбля. Вышеотмеченная неизоморфность представления (9.19) является (дополнительной) «квантовой частью» возникающей убыли информации о состоянии системы. Теряются «квантовые корреляции» спина и магнитного поля (классическое поле взамен квантованного).

Исследователь, интересующийся только измерением $\vec{M}(t)$, может обойти стадию вычисления $x(t)$ (прямой метод в теории магнитного резонанса).

Под прямой задачей динамики (задачей управления спином) подразумеваем следующее: дано $x(t)$ (либо только $I_m(t)$), требуется найти возможные $\vec{B}(t)$, управляющие этим движением. Решением этой задачи является сформулированное ниже понятие подсемейства траекторий.

Обратная задача динамики гласит: даны $x(0)$ (либо только $I_m(0)$) и $\vec{B}(t)$, требуется найти $x(t)$ и сигнал $\vec{M}(t)$. Компактным решением этой задачи служит семейство траекторий, управляемое одним и тем же $\vec{B}(t)$ [4].

При групповом подходе [4] «черный ящик» из (9.35) заменяется системой соотношений

$$H(t) \leftrightarrow D(t,0) \to \mathfrak{R}(t,0). \qquad (9.36)$$

Преобразование движения $D(t,0) \in \mathfrak{u}_2$ описывает семейство траекторий

$$x(t) = D(t,0)\,x(0) \in \mathbf{C}, \qquad (9.37)$$

управляемое гамильтонианом $H(t)$, а ортогональное супероператорное представление $\mathfrak{R}(t,0)$ оператора $D(t,0)$ — соответствующее суженное семейство

$$I_m(t) = \mathfrak{R}(t,0)\,I_m(0) \in \mathbf{H}^0. \qquad (9.38)$$

Установление входящих в (9.36) матриц — один из возможных способов описания семейства [4]. При этом о векторах x, I_m поставляют данные их компоненты на базисе a_m или I_j соответственно. Второй способ описания семейства — составление списка входящих в семейство подсемейств. При этом способе траектории даются своими эйлеровыми параметрами. Ниже рассматриваются оба способа в их взаимосвязи.

Введение временной зависимости в эйлеровы параметры

$$(\varphi_{12}(t),\ \Phi(t),\ \sigma_{12}(t)) \qquad (9.39)$$

определяет траектории системы

$$x(t) = T(t)\,a_1 \qquad (9.40)$$

и соответствующие им траектории ансамбля

$$I_m(t) = \mathfrak{T}(t)\,I_z. \qquad (9.41)$$

Подстановка (9.39) в формулы (9.23)—(9.26) и (9.27)—(9.30) позволяет записать явные выражения $T(t)$ и $\mathfrak{T}(t)$ в виде разложений

$$T(t)=T_1(t)T_2(t)T_3(t), \tag{9.42}$$

$$\mathfrak{T}(t)=\mathfrak{T}_1(t)\mathfrak{T}_2(t)\mathfrak{T}_3(t). \tag{9.43}$$

Траектории (9.39) различаются начальными состояниями $(\varphi_{12}(0),\ \Phi(0),\ \sigma_{12}(0))$ и дифференциальными частотными характеристиками

$$\nu_1(t)=d\varphi_{12}/dt=d\alpha_1/dt, \tag{9.44}$$

$$\nu_2(t)=2d\Phi/dt=2d\alpha_2/dt, \tag{9.45}$$

$$\nu_3(t)=d\sigma_{12}/dt=d\alpha_3/dt, \tag{9.46}$$

(учитываем пока только первые части этих равенств).

Эквивалентные траекториям (9.40) траектории (9.42) тоже подчиняются уравнению Шредингера

$$i\frac{dT}{dt}=H(t)T \tag{9.47}$$

с тем же гамильтонианом $H(t)$, что и $x(t)$. Дифференцированием (9.42) получим

$$H(t)=\nu_1(t)I_z+\nu_2(t)I_y(t)+\nu_3(t)I_m(t), \tag{9.48}$$

где

$$I_j(t)=\mathfrak{T}_1(t)I_j \quad (j=x,y), \tag{9.49}$$

$$I_m(t)=\mathfrak{T}_1(t)\mathfrak{T}_2(t)I_z. \tag{9.50}$$

Объединим в одно подсемейство те траектории $x(t)$, у которых одинаковые частоты (9.44)—(9.46) и начальные состояния которых соответствуют одной и той же $I_m(0)$. Все траектории подсемейства (и только они) обеспечивают один и тот же сигнал $\overleftrightarrow{M}(t)$ в смысле (9.34). Траектории подсемейства управляются одним и тем же гамильтонианом (9.48).

В силу отмеченного в п. 9.2 двоякого смысла углов (9.20) подсемейство распадается на две непрерывные половины. Начальные параметры $\varphi_{12}(0)$ этих половин отличаются на 2π. Значения $\varphi_{12}(0)$, $\Phi(0)$ являются общими для одной половины подсемейства. Параметр $\sigma_{12}(0)$ — переменная подсемейства.

Вместе с $I_m(t)$ к подсемейству примыкают их собственные векторы (9.33). Угол $\sigma_{12}(t)$ — разница их фаз. Подсемейство состоит из векторов $x(t)=s_1(t)$.

Траектории подсемейства управляются определенным гамильтонианом (9.48). Однако соответствующая подсемейству траектория $I_m(t)$ управляется множеством гамильтонианов (9.48), могущих отличаться частотой $\nu_3(t)$. Относительно вращающегося репера (9.49) гамильтониан (9.48) имеет вид

$$H(t)=\omega_z(t)I_z+\omega_x(t)I_x(t)+\omega_y(t)I_y(t), \tag{9.51}$$

где

$$\omega_z(t)=\nu_1(t)+\nu_3(t)\cos 2\Phi(t), \tag{9.52}$$

$$\omega_x(t)=\nu_3(t)\sin 2\Phi(t), \tag{9.53}$$

$$\omega_y(t)=\nu_2(t). \tag{9.54}$$

Относительно лабораторного репера гамильтониан (9.51) может быть представлен в виде суммы продольной (относительно I_z) и вращающейся поперечной составляющих

$$H(t)=H_z(t)+H_\perp(t), \tag{9.55}$$

где

$$H_z(t)=\omega_z(t)I_z, \tag{9.56}$$

$$H_\perp(t)=\omega_\perp(t)\Re(I_z,\psi(t))I_x. \tag{9.57}$$

Тогда

$$\omega_x(t)=\omega_\perp(t)\cos(\psi(t)-\varphi_{12}(t)), \tag{9.58}$$

$$\omega_y(t)=\omega_\perp(t)\sin(\psi(t)-\varphi_{12}(t)). \tag{9.59}$$

В типичном эксперименте (по магнитному резонансу) $H_z(t)$ обязан своим происхождением сильному магнитному полю, а $H_\perp(t)$ — слабому полю возбуждения, т. е.

$$|\omega_\perp(t)|\ll|\omega_z(t)|. \tag{9.60}$$

В силу (9.44)—(9.46) уравнения (9.52)—(9.54) — дифференциальные. Их решения, при всех возможных начальных состояниях, и определяют список подсемейств, образующих семейство с гамильтонианом (9.55)—(9.57).

Практически проблема сводится к решению нелинейных интегральных дифференциальных уравнений

$$d\varphi_{12}/dt=\omega_z(t)-\omega_x(t)\cot 2\Phi(t), \tag{9.61}$$

$$\Phi(t)=\Phi(0)+\int_0^t\omega_y(t')\,dt', \tag{9.62}$$

где $\omega_x(t)$, $\omega_y(t)$ берутся из (9.58), (9.59). Заданными считаются: $\omega_z(t)$, $\omega_\perp(t)$ и $\psi(t)$.

Вышеописанный способ разложения унитарных операторов (и ортогональных супероператоров) на три составляющих, каждая из которых зависит только от одного параметра, применим к входящим в (9.37), (9.38) преобразованиям движения семейства.

Назовем траекторию с начальным состоянием $\varphi_{12}(0)=\Phi(0)=\sigma_{12}(0)$ центральной. Эйлеровы параметры (9.39) этой траектории обозначим через

$$(\alpha_1(t,0),\ \alpha_2(t,0),\ \alpha_3(t,0)). \tag{9.63}$$

Стало быть, $\alpha_k(0,0)=0$ $(k=1,2,3)$.

Примем (9.63) за параметры преобразования движения семейства [4]. Заменим ими эйлеровы параметры в формулах (9.23)—(9.26). Вместо (9.42) запишем

$$D(t,0)=D_1(t,0)D_2(t,0)D_3(t,0), \tag{9.64}$$

а вместо (9.48) —

$$H(t)=\nu_1(t)I_z+\nu_2(t)I'_y(t)+\nu_3(t)I''_z(t). \tag{9.65}$$

Аналогично, взамен (9.43) имеем супероператорное представление оператора (9.64)

$$\Re(t,0)=\Re_1(t,0)\Re_2(t,0)\Re_3(t,0), \tag{9.66}$$

где

$$\mathfrak{R}_1(t,0)=\mathfrak{R}(I_z, \alpha_1(t,0)), \tag{9.67}$$

$$\mathfrak{R}_2(t,0)=\mathfrak{R}(I_y, 2\alpha_2(t,0)), \tag{9.68}$$

$$\mathfrak{R}_3(t,0)=\mathfrak{R}(I_z, \alpha_3(t,0)). \tag{9.69}$$

Тогда входящие в (9.65) спиновые операторы $I_y'(t)$, $I_z''(t)$ определяются формулами

$$I'_y(t)=\mathfrak{R}_1(t,0)I_y, \tag{9.70}$$

$$I''_z(t)=\mathfrak{R}_1(t,0)\mathfrak{R}_2(t,0)I_z. \tag{9.71}$$

В случае центрального подсемейства $D(t,0)$ — не только оператор состояния, но и преобразование движения. Вместе с тем (9.64) и (9.66) — преобразования движения целого семейства, обладающего гамильтонианом (9.65).

Мультипликативные разложения (9.64), (9.66) и аддитивное разложение (9.65) приспособлены к центральному подмножеству. Можно выписать аналогичные разложения, пригодные к любым другим подсемействам данного семейства. В таком случае гамильтониан будет иметь приспособленный к подсемейству вид (9.48), но с иными частотами (9.44)—(9.46), чем те, которые входят в (9.65). Каждый параметр (9.39) траектории выбранного подсемейства аддитивно слагается из значения начального состояния и значения соответствующего параметра преобразования движения (9.63) данного подсемейства. Последние соответствуют вторым частям равенств (9.44)—(9.46).

Как геометрическая форма разных траекторий данного семейства, так и способ их временной параметризации, вообще говоря, различны.

Множество всех центральных траекторий $I_z''(t)$ всевозможных семейств содержит все пространственно-временные формы динамики. Остальные траектории получаются из них путем смещения начального состояния $I_m(0)$.

Типичная центральная траектория $(\alpha_1(t,0), 2\alpha_2(t,0))$ — это некоторая винтовая линия на поверхности сферы $\alpha_2 = f(\alpha_1)$. Уклон этой линии относительно «широтной» α_1-линии характеризуется величиной

$$2d\alpha_2/d\alpha_1=\nu_2(t)/\nu_1(t). \tag{9.72}$$

В условиях (9.60) этот уклон очень мал, и линия плотно наматывает сферу (полностью или частично), образуя замкнутую или незамкнутую кривую.

Замкнутая кривая получается тогда, когда моменты времени 0, t_1, t_2, ... разделяют временную шкалу на такие интервалы, что отношения типа

$$\int_{t_1}^{t_2}\nu_2(t')\,dt'\Big/\int_{t_1}^{t_2}\nu_1(t')\,dt' \tag{9.73}$$

будут рациональными числами. В противном случае имеем бесконечную «иррациональную обмотку сферы».

Выше предполагалось, что ν_1, ν_2 сохраняют знак и интегралы в (9.73) кратны 2π. В этом случае замкнутая винтовая линия начинается с I_z, доходит до $-I_z$ и возвращается к концу интервала к I_z.

В случае знакопеременного $\nu_2(t)$ возможны более сложные (но легко представляемые) формы траекторий.

9.4. Резонанс. Если взаимодействие (9.56) сильно в смысле (9.60), то действие возбуждения (9.57) на движение заметно лишь в том случае, когда частота возбуждения близка к частоте резонанса

$$\nu(t)=\omega_z(t), \tag{9.74}$$

где

$$\nu(t)=d\psi/dt. \tag{9.75}$$

Расстройка

$$\Delta\nu(t)=\omega_z(t)-\nu(t) \tag{9.76}$$

частоты возбуждения (9.75) порядка $|\omega_\perp(t)|$ (область резонанса).

Поясним сказанное путем последовательного рассмотрения некоторых специальных случаев.

Свободная прецессия. Возбуждение (9.57) отсутствует. По (9.52)—(9.54) имеем

$$\nu_1(t)=\omega_0(t);\quad \nu_2(t)=\nu_3(t)=0. \tag{9.77}$$

Сигнал

$$M_x(t)=M_x(0)\cos\int_0^t\omega_z(t')\,dt' \tag{9.78}$$

может быть частотно модулированным. Движение происходит по φ_{12}-линиям.

Обобщенный резонанс. Возбуждение присутствует. Расстройка (9.76) произвольна, но амплитуда возбуждения $\omega_\perp(t)$ подчиняется закону

$$\omega_\perp(t)=\Delta\nu(t)\tan\Theta, \tag{9.79}$$

причем угол Θ лежит в пределах

$$0\leqslant\Theta\leqslant\pi. \tag{9.80}$$

В этих условиях гамильтониан принимает вид

$$H(t)=\nu(t)I_z+\omega_2(t)I_2(t), \tag{9.81}$$

где

$$\omega_2(t)=\sqrt{\Delta\nu(t)^2+\omega_\perp(t)^2}. \tag{9.82}$$

В данном случае спиновый оператор $I_y'(t)$ вращается вокруг I_z с частотой $\nu(t)$. Спиновый оператор $I_2(t)$ лежит в плоскости I_z, $I_y'(t)$, сохраняя угол Θ с оператором I_z. Это и обеспечивается условием (9.79).

Движение $I_m(t)$ состоит из прецессии вокруг I_z и вращения вокруг $I_2(t)$ с частотами $\nu(t)$ и $\omega_2(t)$ соответственно.

$$\Re(t,0)=\Re_1(I_z,\alpha_1(t,0))\,\Re_2(I_2(0),\beta_2(t,0)), \tag{9.83}$$

где в данном случае

$$\alpha_1(t,0)=\int_0^t\nu(t')\,dt', \tag{9.84}$$

$$\beta_2(t,0)=\int_0^t\omega_2(t')\,dt'. \tag{9.85}$$

Траектория $I_2(t)$ чисто прецессионная. Ей соответствует сигнал

$$M_x(t)\sim-\sin\Theta\sin\alpha_1(t,0). \tag{9.86}$$

В случае траекторий, исходящих из начальных состояний $I_m(0) \perp \perp I_2(0)$, «несущая» (9.84) модулируется движением (9.85). Например,

$$I_3(t) = \sin\Theta\cos\beta_2(t,0)\, I_z + \sin\beta_2(t,0)\, I'_x(t) - \cos\Theta\cos\beta_2(t,0)\, I'_y(t). \quad (9.87)$$

Этой траектории соответствует сигнал

$$M_x(t) \sim 1/2\,(1+\cos\Theta)\sin(\alpha_1(t,0)+\beta_2(t,0)) - \\ - 1/2\,(1-\cos\Theta)\sin(\alpha_1(t,0)-\beta_2(t,0)). \quad (9.88)$$

В случае произвольного угла между $I_m(0)$ и $I_2(0)$ сигнал является некоторой суперпозицией сигналов типа (9.86) и (9.88).

Если частоты ω_z, ν, $\omega_\perp$ постоянны (обыкновенный монорезонанс), то частотный спектр сигнала $M_x(t)$ представляет собой триплет. Компонента (9.86) обусловливает центральную частоту ν, боковые частоты $\nu \pm \omega_2$ происходят от компоненты (9.88).

Амплитуда сигнала с частотой ν пропорциональна величине

$$\sin\Theta = \omega_\perp / \sqrt{\Delta\nu^2 + \omega_\perp^2}. \quad (9.89)$$

Зависимость этой величины от $\Delta\nu$ имеет форму типичной спектральной линии с максимумом в точке резонанса и с шириной порядка $\omega_\perp$. Формы боковых линий:

$$1/2\,(1 \pm \Delta\nu / \sqrt{\Delta\nu^2 + \omega_\perp^2}). \quad (9.90)$$

В случае зависящих от времени частот $\omega_z(t)$, $\nu(t)$, $\omega_\perp(t)$ основное резонансное поведение все еще сохраняется. Влияние возбуждения заметно только тогда, когда отношение $\Delta\nu(t)/\omega_\perp(t)$ не слишком велико. Однако центр $\omega_z(t)$ области резонанса движется по шкале частот. В точке резонанса (9.74) $I_2(t) = I_y'(t)$, а $\beta_2(t,0) = 2\alpha_2(t,0)$ описывает нутацию.

Общий случай. Все частотные характеристики гамильтониана (9.55)—(9.57) $\omega_z(t)$, $\nu(t)$, $\omega_\perp(t)$ произвольно зависят от времени. Для определенности рассмотрим только центральную траекторию, предполагая, что гамильтониан приведен к виду (9.65).

Движение по-прежнему состоит из прецессии и нутации. Однако частоты $\nu_1(t)$, $\nu_2(t)$ этих вращений отличаются от частот $\nu(t)$ и $\omega_\perp(t)$ соответственно. Ось нутации $I_y'(t)$ непрерывно смещается относительно направления $H_\perp(t)$.

Тем не менее в условиях (9.60) резонансные свойства возбуждаемости движения сохраняются. Поскольку

$$|\nu_2(t)|,\ |\nu_3(t)| \lessapprox |\omega_\perp(t)|, \quad (9.91)$$

то, согласно (9.52), различие частот

$$\Delta\nu_1(t) = \omega_z(t) - \nu_1(t) \quad (9.92)$$

имеет тот же порядок величины. Поэтому частота прецессии $\nu_1(t)$ всегда лежит в области резонанса.

Нутация

$$2\alpha_2(t,0) = \int_0^t \omega_\perp(t')\sin(\psi(t') - \alpha_1(t',0))\,dt' \quad (9.93)$$

заметна только тогда, когда частота возбуждения $\nu(t)$ тоже лежит в области резонанса. В противном случае интеграл (9.93) исчезает в результате действия быстро осциллирующего множителя.

9.5. Замечание. В области квантовой электроники первые работы о приложении группового подхода принадлежат У. Х. Копвиллему. В его программном докладе [6] говорится о связи квантовых динамик с типом их алгебр Ли гамильтонианов, а также (в наших терминах) о представлениях простых динамик в сложных системах. В ряде последующих его работ, сделанных самостоятельно и вместе с сотрудниками, эти идеи прилагаются к разным (существующим и предполагаемым) областям спектроскопии.

ЛИТЕРАТУРА

1. Желобенко Д. П. Компактные группы Ли и их представления. М., 1970.
2. Boerner, H. Representations of groups. Amsterdam, 1963.
3. Murnaghan, F. D. The unitary and rotation groups. Washington D. C., 1962.
4. Синивеэ В. Групповой подход в динамике многоспиновых систем. I. — Изв. АН ЭССР, Физ. Матем., 1975, т. 24, № 1, с. 35—48.
5. Файн В. М., Ханин Я. И. Квантовая радиофизика. М., 1965.
6. Копвиллем У. Х. Роль открытия Е. К. Завойским ЭПР в развитии физики. — В кн.: Парамагнитный резонанс 1944—1969. (Всесоюз. юбил. конф., Казань, 24—29 июня 1969 г.). М., 1971, с. 218.

Институт кибернетики
Академии наук Эстонской ССР

Поступила в редакцию
14/X 1977

V. SINIVEE

RÜHMADE TEOORIA RAKENDAMISEST MITMESPINNISÜSTEEMIDE DÜNAAMIKA UURIMISEKS. V

Artiklis on käsitletud kahe nivooga kvantsüsteemi dünaamikat ning jätkatud resonantsi mõiste üldistamist.

V. SINIVEE

GROUP APPROACH IN DYNAMICS OF MANY-SPIN SYSTEMS. V

The dynamics of a two-level quantum system (of a spin 1/2 system) is studied in detail. A further generalization of the resonance concept is given.