объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

Р6-93-244

В.М.Дубовик, И.В.Лунегов*, М.А.Марценюк*

ТОРОИДНЫЙ ОТКЛИК В МАГНИТНОМ РЕЗОНАНСЕ

Направлено в «Journal of Magnetism and Magnetic Materials»

*Пермский государственный университет

1993

В явлении магнитного резонанса наблюдаемой величиной обычно является магнитный момент $\vec{M}$ некоторой выделенной системы спинов [1], который является средним от полного суммарного оператора спина $\hat{\vec{S}} = \sum_a \hat{\vec{S}}_a$: $\vec{M} =< \hat{\vec{S}} >$, где угловые скобки обозначают усреднение, как по квантовому состоянию, так и по "ансамблю" спиновых систем. Однако очевидно, что система спинов, распределенных в пространстве, каковой в действительности является ядерная подсистема (для определенности далее обсуждается система ядерных спинов), может описываться в дополнении к дипольному моменту $\vec{M}$ и другими мультиполями – квадрупольным, октупольным и т.д., которые более чувствительны к деталям пространственного распределения спинов. Тем не менее в ядерном резонансе поля высших мультиполей обычно не рассматриваются. Дело в том, что магнитное поле H_l мультиполя l - ранга зависит от координат как $1/r^{2+l}$. Рассматривая макроскопический образец размера L и суммируя поля, создаваемые каждым мультиполем, мы видим, что в дипольном случае (соответствующем $l = 1$) полный дипольный момент растет как ML^3 (здесь M - плотность дипольного момента), а его поле H_1 на границе образца, которое обычно наблюдается в эксперименте, меняется как ML^3/L^3, то есть оно оказывается пропорциональным намагниченности M. В то же время поле H_l мультиполя более высокого ранга $l > 1$, имеющего объемную плотность Q_l, на границе образца убывает как $H_l \sim Q_l/L^{l-1}$, что и позволяет пренебрегать этим полем.

Однако существует один важный случай, когда поле мультиполя, описывающего систему ядерных спинов, ведет себя подобно полю магнитного диполя. Мы имеем в виду поле тороидного момента, который был введен и подробно исследован в работах [2-4]. Будем рассматривать ядерные спины как совокупность классических магнитных диполей $\vec{m}_a =< \hat{\vec{S}}_a >$ (здесь подразумевается то же самое усреднение, что и при введениии суммарного магнитного момента), расположенных в точках пространства $\vec{r}_a$. Для упрощения рассуждений далее предположим, что начало координат, от которого отсчитываются векторы $\vec{r}_a$, выбрано в геометрическом центре рассматриваемой системы спинов, то есть предполагается, что

$$\sum_a \vec{r}_a = 0. \tag{1.1}$$

Тороидный момент системы определяется как сумма произведений вида

$$\vec{T} = \frac{1}{2}\sum_a [\vec{r}_a \vec{m}_a]. \tag{1.2}$$

Как показано в работах [2-4] статический (то есть не меняющийся со временем) тороидный момент не создает электрического или магнитного полей, а только лишь поле векторного потенциала, которое имеет вид

$$\vec{A} = \frac{3\vec{r}(\vec{T}\vec{r}) - \vec{T}r^2}{r^5}. \tag{1.3}$$

Это выражение может быть получено путем суммирования потенциалов $\vec{A}_a$, которые создаются отдельными магнитными диполями $\vec{m}_a$, и последующим использованием обычного мультипольного разложения по степеням отношения размера системы к расстоянию до точки наблюдения. Один из вкладов в это разложение определяется тороидным моментом (1.2) и имеет вид (1.3). В ядерном магнитном резонансе средние значения спинов $\vec{m}_a$ являются функциями времени и вместе с ними будет зависеть от времени и тороидный момент $\vec{T}(t)$, а также и создаваемое им поле векторного потенциала (1.3). Но, как известно, производная векторного потенциала по времени пропорциональна электрическому полю

$$\vec{E} = -\frac{1}{c}\dot{\vec{A}} = \frac{\dot{\vec{T}}r^2 - 3\vec{r}(\dot{\vec{T}}\vec{r})}{cr^5}. \tag{1.4}$$

Это поле формально эквивалентно полю электрического диполя $\vec{P}$, имеющего величину $\vec{P} = -\dot{\vec{T}}/c$, и может обнаруживать свое "тороидное происхождение" только в интерференционных опытах при изучении спектральных характеристик (см. [2], приложение 3). Как и для магнитодипольного случая, поле образца макроскопических размеров L не будет зависеть от L и целиком определяется плотностью электрического дипольного момента $\vec{P}$. Оценивая производную по времени в (1.4) как величину, пропорциональную частоте магнитного резонанса ω, можно видеть, что электрическая составляющая поля отличается от магнитной на множитель, равный безразмерному параметру $a\omega/c$, где a - размер спиновой системы, или, если учесть, что $\lambda = c/\omega$, на множитель a/λ. Частоты ЯМР обычно лежат в диапазоне $\omega \sim 10^6 \ldots 10^9$ Гц, что соответствует длинам волн $\lambda \sim 10 \ldots 10^4$ см. При размерах $a \sim 1$см электрическое поле оказывается на несколько порядков меньше магнитного, но оно линейно растет с увеличением частоты резонаса.

Проведенные рассуждения ясно показывают, что следующим после магнитного момента $\vec{M}$ "претендентом" для наблюдения в ЯМР является тороидный момент спиновой системы $\vec{T}$, причем он определяет электрическую составляющую электромагнитного поля, индуцируемого магнитодипольной системой в окружающем пространстве (мы здесь говорим о том, что поля именно индуцируются, а не излучаются, так как всюду рассматривается поле в "ближней зоне", которое обычно и измеряется в магнитном резонасе). Экспериментальная методика прецизионных измерений электрического поля в магнитном резонасе была недавно разработана и использована для измерения величины обратного влияния квадрупольного поля ядер на электронную подсистему Ханом с сотр. [5].

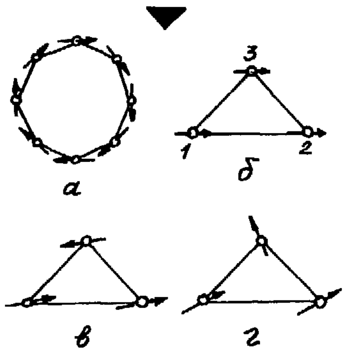
Целью настоящей работы является последовательный учет в ЯМР тороидного момента системы ядерных спинов. Как можно видеть из (1.2), тороидный момент описывает вихревую составляющую неоднородного распределения спинов в пространстве. Ориентация спинов, при которой тороидный момент максимален (а магнитный момент отсутствует) схематически показана на рис. 1(а).

Такого рода динамическая составляющая периодически возникает в системе диполыно взаимодействующих ядерных спинов во время так называемого спада сигнала свободной индукции, который наступает после импульсного воздействия на систему переменным (однородным по пространству) полем резонасной частоты. Отметим, что задача о возбуждении ядерной системы вихревым полем в условиях "медленного прохождения" интервала частот и в эхо-экспериментах рассмотрена в работах авторов [6,7]. Во второй части работы сигнал свободной индукции тороидного момента вычислен в рамках приближенного подхода, когда взаимодействие между спинами учитывается по теории возмущений. При этом в качестве модельной задачи рассматривается система трех ядерных спинов. Как оказалось, тороидный момент этой системы изменяется в противофазе с магнитным моментом. В рамках этого подхода, а также с помощью численного моделирования простых систем с помощью расчетов на ЭВМ удается детально проследить за динамикой каждого спина в процессе спада свободной индукции. При использовании теории возмущений, сводящейся к пренебрежению несекулярными членами диполь-дипольного взаимодействия спинов, все спины прецессируют вокруг постоянного магнитного поля, оставаясь параллельными или антипараллельными друг другу. При этом конфигурация, которая показана на рис. 1(б), возникающая сразу после импульса, с течением времени переходит в конфигурацию, показанную на рис. 1(в), которая описывается тороидным моментом. Эти изменения спиновой конфигурации как раз и отражают возможность появления тороидного эха в ядерном резонасе. При моделировании на ЭВМ диполь-дипольное взаимодействие учитывалось точно (то есть принималась во внимание также и его несекулярная часть). Как выяснилось, в процессе свободной индукции, спины не только меняют свои абсолютные величины, но также и взаимную ориентацию (рис.1(г)). В третьей части работы рассматривается приближенный подход, применимый к произвольной спиновой системе, который учитывает тороидную поляризацию образца. Суть этого подхода состоит в пренебрежении полями всех мультиполей, кроме выделенных. В отличие от теории обычного ЯМР, в основе которого лежат преобразования группы SU(2), в рассматриваемом случае такую же роль играет более широкая группа SO(4), которая более детально описывает динамику спиновой системы. По всей видимости этот подход, учитывающий и магнитную и электрическую составляющие поля системы, может оказаться полезным и при исследовании отклика спиновой системы в обычном случае. В заключении работы обсуждаются некоторые условия наблюдения тороидного отклика в ядерном магнитном резонансе.

2. Тороидный отклик спиновой системы (на примере системы трех спинов)

Рассмотрим систему взаимодействующих спинов , находящихся в постоянном $\vec{H}_0$ и переменном $\vec{h}(t)$ магнитных полях. В этом случае полный спиновый гамильтониан системы можно представить в виде суммы двух частей : невозму-

Рис.1. *Схематическое изображение распределения магнитных диполей по пространству, обладающее тороидным моментом (а). Ориентации средних значений ядерных спинов после воздействия на систему импульсного переменного поля : (б) - сразу после импульса, (в) - спустя некоторое время после импульса - в приближенной картине (секулярное приближение) ; (г) - в точной картине, учитывающей все члены гамильтониана.*



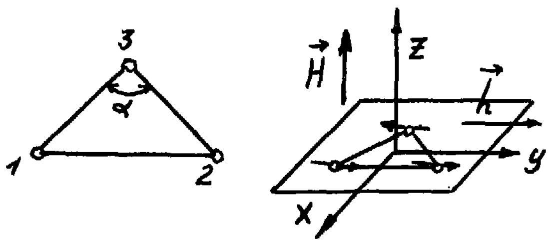


Рис.2. *Геометрия модельной задачи.*

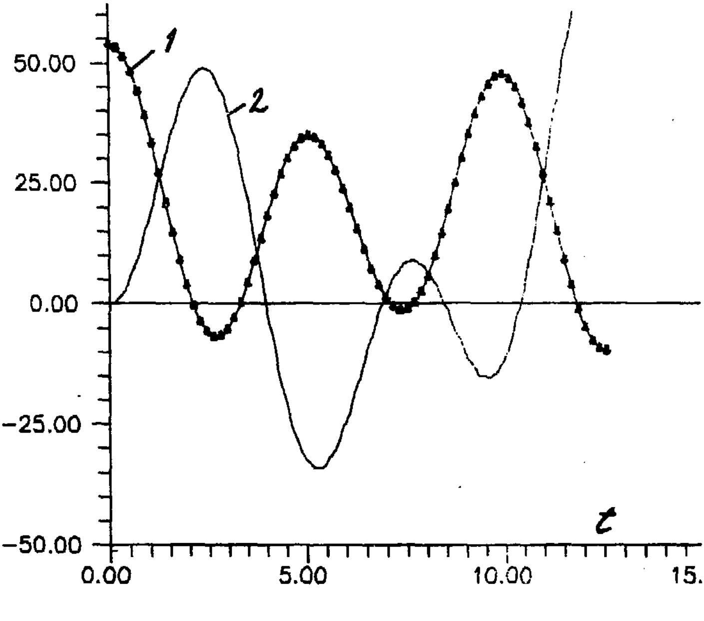


Рис.3. *Огибающие спада свободной прецессии магнитного (1) и тороидного (2) моментов после действия импульса. Для наглядности масштаб кривой 2 увеличен по вертикали в 5 раз.*

щенного гамильтониана $\hat{\mathcal{H}}_0$ и возмущения $\hat{\mathcal{V}}(t)$

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{V}}(t); \qquad \hat{\mathcal{V}}(t) = \hat{\mathcal{H}}_1(t) + \hat{\mathcal{H}}_{dd}, \tag{2.1}$$

где $\hat{\mathcal{H}}_0, \hat{\mathcal{H}}_1(t)$ - операторы, описывающие зеемановское взаимодействия спинов с постоянным и переменным магнитным полем, $\hat{\mathcal{H}}_{dd}$ - оператор диполь-дипольного взаимодействия

$$\hat{\mathcal{H}}_{dd} = -\gamma^2\hbar^2 \sum_{a<b} A_{ij}(\vec{r}_{ab})\hat{S}_{ai}\hat{S}_{bj}; \qquad A_{ij}(\vec{r}) = \frac{r^2\delta_{ij} - 3x_i x_j}{r^5}. \tag{2.2}$$

Выберем ось Z системы координат вдоль направления постоянного поля и предположим, что переменное магнитное поле действует вдоль оси Y (рис. 2). Тогда операторы $\hat{\mathcal{H}}_0$ и $\hat{\mathcal{H}}_1(t)$ будут иметь вид :

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = -\gamma\hbar H_z \hat{S}_z; \qquad \hat{\mathcal{H}}_1(t) = -\gamma\hbar h(t)\hat{S}_y, \tag{2.3}$$

где $\hat{S}_i = \sum_a \hat{S}_{ai}$ - компоненты оператора полного спина. В дальнейшем, для упрощения записи, выберем систему единиц, в которой гиромагнитное отношение γ и постоянная Планка $\hbar$ равны единице ($\gamma = 1, \hbar = 1$).

Будем искать отклик спиновой системы на импульсное воздействие однородного по пространству переменного (РЧ) поля. Эволюция системы со временем определяется матрицей плотности $\hat{\rho}(t)$, которая описывает состояние системы в произвольный момент времени. Как известно [1], $\hat{\rho}(t)$ удовлетворяет уравнению Лиувилля

$$\frac{d}{dt}\hat{\rho}(t) = i[\hat{\rho}(t), \hat{\mathcal{H}}], \tag{2.4}$$

решение которого может быть записано в виде :

$$\hat{\rho}(t) = \hat{\mathcal{U}}(t,0)\hat{\rho}(0)\hat{\mathcal{U}}^+(t,0), \tag{2.5}$$

где $\hat{\mathcal{U}}(t,0)$ - оператор эволюции, $\hat{\rho}(0)$ - равновесная матрица плотности в начальный момент времени, которая в пренебрежении малой разностью населенностей уровней энергии, обусловленных диполь-дипольным взаимодействием, может быть записана в виде :

$$\hat{\rho}(0) = \frac{1}{Z}e^{-\hat{\mathcal{H}}_0\beta}; \quad Z = Sp\{e^{-\hat{\mathcal{H}}_0\beta}\}; \quad 1/\beta = k_B T^o. \tag{2.6}$$

На временной оси событий можно выделить два интервала $(0, t_p)$ и (t_p, t). Первый из них соответствует периоду приготовления системы, а второй - периоду отклика или спаду свободной прецессии. На стадии приготовления спиновая система подвергается воздействию импульса РЧ-поля. Предположим, как это обычно делается, что интенсивность импульса настолько велика, что выполняется неравенство $\|\hat{\mathcal{H}}_1\| \gg \|\hat{\mathcal{H}}_{dd}\|$, а длительность импульса t_p мала, так что эффекты, связанные с присутствием взаимодействия, не успеют проявиться на интервале $(0, t_p)$, и диполь-дипольным взаимодействием на первой стадии можно пренебречь. На интервале (t_p, t) взаимодействием пренебрегать нельзя, несмотря на большую величину постоянного магнитного поля. Действуя в течение многих периодов прецессии спинов, это взаимодействие проявляется в их расфазировке.

Оператор $\hat{\mathcal{H}}_1(t)$ содержит зависимость от времени, от которой можно избавиться, если перейти во вращающуюся систему координат (ВСК), считая, что частота переменного поля ω совпадает с частотой $\omega_0 = H_0$ ("частота резонанса"), определяющей расстояния между уровнями энергии невозмущенного гамильтониана

$$\hat{\mathcal{H}}'_1 = \hat{Q}_z^+(t)\hat{\mathcal{H}}_1(t)\hat{Q}_z(t); \qquad \hat{Q}_z(t) = e^{i\omega_0 \hat{S}_z t}. \tag{2.7}$$

Переход в ВСК здесь обозначен штрихом над оператором $\hat{\mathcal{H}}_1$. Используя (2.3) и предполагая, что $h(t) = hexp\{i\omega t\}$, получаем, что в ВСК на интервале $(0, t_p)$ будет действовать оператор $\hat{\mathcal{H}}'_1 = h\hat{S}_y$.

Так как операторы $\hat{\mathcal{H}}'_1$ и $\hat{\mathcal{H}}_{dd}$ действуют в разные периоды эволюции системы, то оператор $\hat{\mathcal{U}}(t,0)$ может быть записан в виде произведения двух операторов эволюции $\hat{\mathcal{U}}(t_p,0)$ и $\hat{\mathcal{U}}(t,t_p)$, действующих на интервалах $(0,t_p)$ и (t_p,t) соответственно

$$\hat{\mathcal{U}}(t,0) = \hat{\mathcal{U}}(t,t_p)\hat{Q}_z(t_p)\hat{\mathcal{U}}(t_p,0), \tag{2.8}$$

где $\hat{\mathcal{U}}(t_p,0) \equiv \hat{\mathcal{U}}(t_p)$ и $\hat{\mathcal{U}}(t,t_p) = \hat{\mathcal{U}}(t-t_p) \equiv \hat{\mathcal{U}}(\tau)$ имеют вид :

$$\begin{gathered} \hat{\mathcal{U}}(t_p) = exp\{-ih\hat{S}_y t_p\}; \qquad \hat{\mathcal{U}}(\tau) = exp\{-i\hat{\mathcal{H}}_f \tau\}; \\ \hat{\mathcal{H}}_f = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}_{dd}; \qquad \tau = t - t_p. \end{gathered} \tag{2.9}$$

Подставив явный вид оператора $\hat{\mathcal{U}}(t,0)$ в выражение (2.5), получим

$$\hat{\rho}(t) = \hat{\mathcal{U}}(\tau)\hat{Q}_z(t_p)\hat{\mathcal{U}}(t_p)\hat{\rho}(0)\hat{\mathcal{U}}^+(t_p)\hat{Q}_z^+(t_p)\hat{\mathcal{U}}^+(\tau). \tag{2.10}$$

Используя высокотемпературное приближение $\omega_0\beta \ll 1$ (которое обычно удовлетворяется для системы ядерных спинов), матрицу плотности $\hat{\rho}(0)$ в (2.6) можно представить в виде ряда, оставляя только первые члены разложения

$$\hat{\rho}(0) = \frac{1}{Sp\{\hat{1}\}}\{\hat{1} - \hat{\mathcal{H}}_0\beta\}. \tag{2.11}$$

где $\hat{\mathcal{H}}_0$ определяется формулой (2.3). В этом случае действие операторов эволюции $\hat{\mathcal{U}}(t_p)$ и $\hat{\mathcal{U}}^+(t_p)$ на матрицу плотности (2.11) сводится к преобразованию поворота вокруг РЧ-поля на угол $\varphi = ht_p$. Если длительность импульса t_p подобрана таким образом, что $\varphi = \pi/2$, то по окончании действия импульса матрица плотности $\hat{\rho}(t_p)$ во вращающейся системе координат (что мы отмечаем штрихом) будет иметь вид :

$$\hat{\rho}'(t_p) = \frac{1}{Sp\{\hat{1}\}}\{\hat{1} - \hat{S}_x\beta\}; \qquad \hat{\rho}(t_p) = \hat{Q}_z(t_p)\hat{\rho}'(t_p)\hat{Q}_z^+(t_p). \tag{2.12}$$

В соответствии с полученными формулами, среднее значение оператора тороидного момента $\hat{\hat{T}}$ на стадии свободной прецессии будет определяться выражением

$$T_i = Sp\Big\{\hat{\rho}(t)\hat{T}_i\Big\} = -\Re e\ e^{i\omega_0 t_p} Sp\Big(e^{i\hat{\mathcal{H}}_f t}\hat{S}_+ e^{-i\hat{\mathcal{H}}_f t}\hat{T}_i\Big), \tag{2.13}$$

где введен оператор $\hat{S}_+ = \hat{S}_x + i\hat{S}_y$ и изменено начало отсчета времени (за нуль выбран момент $t = t_p$). Таким образом, задача сводится к исследованию эволюции системы, описываемой гамильонианом $\hat{\mathcal{H}}_f$ (2.9). В представлении собственных состояний гамильтониана $\hat{\mathcal{H}}_f$ оператор $exp\{i\hat{\mathcal{H}}_f t\}$ имеет диагональный вид, при чем элементы, стоящие на главной диагонали,равны $e^{iE_n t}$, где E_n - собственное значение $\hat{\mathcal{H}}_f$. Обозначая условно эту матрицу символом $[e^{iE_n t}]$, получим :

$$e^{i\hat{\mathcal{H}}_f t} = \mathcal{V}[e^{iE_n t}]\mathcal{V}^{-1}. \tag{2.14}$$

где $\mathcal{V}$ - унитарная матрица преобразования к энергетическому представлению. Собственные значения оператора $\hat{\mathcal{H}}_f$, могут быть определены приближенно с помощью теории возмущений [8], причем возмущением считается диполь-дипольное взаимодействие. Однако сложность заключается в том, что энергетический спектр невозмущенного гамильтониана $\hat{\mathcal{H}}_0$ вырожден,и поэтому обычная теория возмущений (для невырожденного спектра) здесь не применима. Состояния системы трех спинов ($S_a = 1/2$), которые мы далее будем обсуждать, можно классифицировать по величине полного момента $S = 1/2, 3/2$, его проекции на направление поля $S_z = M$, где $M = -S, -S+1, \ldots, S$ и дополнительного квантового числа $j = 1, 0$. При этом уровни энергии $E_n^{(0)} = -\omega_0 M$ зависят только от M. Таким образом,из восьми возможных стационарных состояний системы два не вырождены ($S = 3/2, M = \pm 3/2, j = 1$), а остальные шесть состояний разбиваются на две группы трехкратно вырожденных состояний, причем в одной группе $M = 1/2$, а в другой $M = -1/2$.Это вырождение снимается диполь-дипольным взаимодействием. Представим собственные значения E_n оператора $\hat{\mathcal{H}}_f$ в первом приближении теории возмущений в виде суммы двух слагаемых

$$E_n = E^{(0)} + E_n^{(1)}, \tag{2.15}$$

где $E^{(0)}$ - вырожденное собственное значение для данной группы трех состояний невозмущенного гамильтониана $\hat{\mathcal{H}}_0$, $E_n^{(1)}$ - поправки первого порядка к вырожденным уровням энергии, вносимые возмущением $\hat{\mathcal{H}}_{dd}$. Здесь и далее верхний индекс в скобках указывает порядок теории возмущений. "Правильные" собственные функции Ψ_n невозмущенного гамильтониана в нулевом приближении теории возмущений будем искать в виде линейной комбинации собственных функций $\Psi_n^{(0)}$, относящихся к одному и тому же собственному значению энергии $E^{(0)}$

$$\Psi = \sum_n c_n^{(0)}\Psi_n^{(0)}. \tag{2.16}$$

Подставив (2.15) и (2.16) в уравнение Шредингера $\hat{\mathcal{H}}_f\Psi = E\Psi$, получим уравнение для коэффициентов $c_n^{(0)}$ и поправок к энергии $E^{(1)}$

$$\sum_{n'}(V_{nn'} - E^{(1)}\delta_{nn'})c_{n'}^{(0)} = 0, \tag{2.17}$$

где $V_{nn'}$ - матричные элементы оператора возмущения $\hat{\mathcal{H}}_{dd}$, определенного выражением (2.2). Как было установлено, в матричные элементы $V_{nn'}$, связывающие вырожденные уровни энергии невозмущенного гамильтониана $\hat{\mathcal{H}}_0$, дает вклад только секулярная часть диполь-дипольного взаимодействия (2.2) (ср. [1]). Из условия равенства нулю определителя системы (2.17) получаем поправки к энергии первого порядка, одинаковые для обоих вырожденных уровней с $M = \pm 1/2$

$$E_1^{(1)} = 0; \quad E_{2,3}^{(1)} = -\frac{1}{2}(A_{12} + A_{13} + A_{23}) \pm$$

$$\pm \frac{\sqrt{3}}{2}\sqrt{(A_{12} - A_{13} - A_{23})^2 + (-A_{12} + A_{13} - A_{23})^2 + (-A_{12} - A_{13} + A_{23})^2}, \qquad (2.18)$$

где обозначено $A_{ab} \equiv A_{zz}(r_{ab})$ (здесь тензор $A_{ik}(r_{ab})$ определен соотношением (2.2)); индексы нумеруют взаимодействующие частицы. Таким образом, наличие диполь-дипольного взаимодействия полностью снимает вырождение уровней энергии невозмущенного гамильтониана, за исключением одного случая, когда все спины расположены в вершинах правильного треугольника. В этом случае $A_{ab} = A$ и значения $E_1^{(1)} = E_2^{(1)} = 0$, а $E_3^{(1)} = -3A$.

Для собственных векторов при произвольной конфигурации спинов получаются громоздкие выражения, но они существенно упрощаются, если предположить, что все спины расположены в вершинах равнобедренного треугольника с углом α при вершине (рис. 2). В этом случае компоненты тензора $A_{zz}(r_{ab})$ будут иметь вид :

$$A_{ab} = A_{zz}(r_{ab}) = \frac{(1 - 3cos^2\theta_{ab})}{r_{ab}^3}, \qquad (2.19)$$

причем в силу симметрии треугольника $A_{13} = A_{23}$. Далее для краткости мы обозначим $A_{12} \equiv a$ и $A_{13} \equiv b$, что позволяет записать (2.18) в виде :

$$E_1^{(1)} = 0; \qquad E_{2,3}^{(1)} = -\frac{1}{2}(a + 2b) \pm \sqrt{(\frac{3}{2}a - b)^2 + 2b^2}. \qquad (2.20)$$

Тогда правильные волновые функции оператора $\hat{\mathcal{H}}_f$, соответствующие собственным значениям $E_n^{(1)}$, в базисе состояний невзаимодействующих спинов будут иметь вид :

$$\begin{aligned} \Psi_1 &= (0; -1/\sqrt{2}; 1/\sqrt{2}); \\ \Psi_2 &= (cos\theta; 1/\sqrt{2}sin\theta; 1/\sqrt{2}sin\theta); \\ \Psi_3 &= (-sin\theta; 1/\sqrt{2}cos\theta; 1/\sqrt{2}cos\theta), \end{aligned} \qquad (2.21)$$

где угол θ определяется соотношениями

$$cos2\theta = \frac{3/2a - b}{\Delta\omega}; \quad sin2\theta = \frac{\sqrt{2}b}{\Delta\omega}; \quad \Delta\omega = \sqrt{(\frac{3}{2}a - b)^2 + 2b^2}. \qquad (2.22)$$

Так как для обоих вырожденных собственных значений оператора $\hat{\mathcal{H}}_0$ получаются аналогичные собственные векторы и собственные значения, матрица перехода к энергетическому представлению ($\mathcal{V}$), может быть представлена в виде произведения некоторых матриц, каждая из которых имеет блок-диагональный вид. Данное преобразование позволяет привести выражение (2.13) к виду :

$$T_i(t) = -\Re e\, e^{i\omega_0 t_p} Sp\Big\{(\mathcal{S}_+)_{nn'}(\mathcal{T}_i)_{nn'} e^{i(E_{n'}-E_n)t}\Big\}, \tag{2.23}$$

где $(\mathcal{S}_+)_{nn'}$ и $(\mathcal{T}_i)_{nn'}$ - матрицы операторов $\hat{\mathcal{S}}_+$ и $\hat{\mathcal{T}}_i$ в энергетическом представлении.

Из этого выражения следует, что величину тороидного отклика можно оценить по величине шпура $Sp\Big\{\hat{\mathcal{S}}_+\hat{\mathcal{T}}_i\Big\}$. Этот шпур будет отличен от нуля при совпадении хотя бы некоторых матричных элементов операторов $\hat{\mathcal{S}}_x, \hat{\mathcal{S}}_y$ и $\hat{\mathcal{T}}_i$. В работе [6] были подробно изучены свойства операторов $\hat{\vec{\mathcal{S}}}$ и $\hat{\vec{\mathcal{T}}}$ и вычислены их приведенные матричные элементы. В результате было установлено, что операторы $\hat{\vec{\mathcal{S}}}$ и $\hat{\vec{\mathcal{T}}}$ имеют общие матричные элементы для значения полного спина $S = 1/2$, которые удовлетворяют правилам отбора

$$\Delta S = 0; \qquad \Delta M = \pm 1. \tag{2.24}$$

При этом приведенные матричные элементы оператора $\hat{\mathcal{T}}_i$ для этих двух значений S равны $< 1/2 \mid \hat{\mathcal{T}}_i \mid 1/2 >= \pm\sqrt{6} r_{3i}$. Таким образом, средний тороидный момент $\vec{T}$ в выражении (2.23) будет отличен от нуля и пропорционален координатам одного из спинов.

Выделив в явном виде быструю и медленную зависимости от времени, приведем окончательные выражения для всех трех компонент тороидного момента, которые следуют из (2.23)

$$T_x(t) = sin(\omega_0 t) r_{3\|} F_T(t); \quad T_y(t) = cos(\omega_0 t) r_{3\|} F_T(t);$$

$$T_z(t) = sin(\omega_0 t + \xi_3) r_{3\perp} F_T(t), \tag{2.25}$$

где $r_{3\|}, r_{3\perp}$ - параллельная и перпендикулярная внешнему магнитному полю составляющие радиус-вектора $\vec{r}_3$ третьего спина (см. рис. 2), ξ_3 угол между осью X и радиусом-вектором $\vec{r}_3$(напомним,что компоненты всех векторов $\vec{r}_a$ берутся относительно геометрического центра и связаны соотношением (1.1)). Функция $F_T(t)$ в выражении (2.25) определяет медленную зависимость от времени или спад свободной прецессии тороидного момента $\vec{T}$

$$F_T(t) = 4\tau_1(cos(3\lambda - \Delta\omega)t - cos(3\lambda + \Delta\omega)t) + 2\tau_2(1 - cos(2\Delta\omega)t), \tag{2.26}$$

где $\lambda = (a + 2b)/2$, а коэффициенты τ_i имеют вид :

$$\tau_1 = cos2\theta - \frac{1}{2\sqrt{2}} sin2\theta \ ; \ \tau_2 = 2cos^2 2\theta - \frac{1}{2} sin^2 2\theta + \frac{1}{\sqrt{2}} sin2\theta cos2\theta. \tag{2.27}$$

Для сравнения, в том же приближении была вычислена зависимость магнитного момента от времени, которая также представлена в виде произведения быстро и медленно осциллирующих функций

$$M_j(t) = cos(\omega_0 t + \zeta_j) F_M(t);$$

$$F_M(t) = \mu_1 cos(3\lambda - \Delta\omega)t + \mu_2 cos(3\lambda + \Delta\omega)t \ + \mu_3 + \mu_4 cos(2\Delta\omega)t. \qquad (2.28)$$

где коэффициенты μ_i имеют вид

$$\mu_1 = 4(cos\theta - \sqrt{2}sin\theta)^2; \quad \mu_3 = 4(2 + 2\sqrt{2}sin2\theta(\frac{7\sqrt{2}}{8}sin2\theta + cos2\theta));$$

$$\mu_2 = 4(sin\theta + \sqrt{2}cos\theta)^2; \quad \mu_4 = 4(2 - \sqrt{2}sin2\theta(\frac{7\sqrt{2}}{8}sin2\theta + cos2\theta)), \qquad (2.29)$$

здесь фаза ζ_j зависит от компоненты магнитного момента : $\zeta_x = 0$ для $M_x(t)$ и $\zeta_y = -\pi/2$ для $M_y(t)$. Таким образом, суммарный магнитный момент прецессирует с большой частотой в плоскости, перпендикулярной постоянному магнитному полю, одновременно изменяясь по абсолютной величине. Функции $F_M(t)$ и $F_T(t)$ описывают спад свободной индукции тороидного и магнитного моментов системы трех спинов. Эти функция показаны на рис.3 для системы спинов, расположенных в вершинах равнобедренного треугольника с углом $\alpha = \pi/2$, ориентированного перпендикулярно постоянному магнитному полю (рис. 2).

Переходя к описанию тороидного отклика, заметим, что функция $F_T(t)$,определяющая медленную зависимость от времени выражения (2.26), удовлетворяет следующим условиям : во-первых, по окончании действия импульса, в момент времени $t = t_p$, функция $F_T(t)$ обращается в нуль. Это свойство объясняется тем, что по окончании действия импульса все магнитные моменты, имея одинаковую длину, направлены вдоль оси X. Во-вторых, значение функции $F_T(t)$ зависит от коэффициентов τ_i, которые обращаются в нуль при $\alpha = \pi/3$. Графики зависимости коэффициентов τ_i от угла α приведены на рис.4а. На рис.4б, для сравнения, приведены графики зависимости коэффициентов μ_i от угла α. Если разложить функции $T_i(t)$ и $M_i(t)$ в ряд Фурье, то коэффициенты τ_i и μ_i будут являться амплитудами фурье - гармоник. На рис.5а и рис.5б приведены спектры, полученные после фурье - преобразования спада свободной прецессии магнитного и тороидного моментов для угла $\alpha = \pi/2$.

Как уже было сказано во введении, наблюдаемой величиной в эксперименте является не тороидный момент системы, а индуцируемое им электрическое поле (1.4), которое пропорционально производной тороидного момента по времени. Взяв производные от функций T_i получим

$$\dot{T}_x(t) = \omega_0 cos(\omega_0 t) r_{3||} F_T(t) + sin(\omega_0 t) r_{3||} \dot{F}_T(t);$$

$$\dot{T}_y(t) = -\omega_0 sin(\omega_0 t) r_{3||} F_T(t) + cos(\omega_0 t) r_{3||} \dot{F}_T(t); \qquad (2.30)$$

$$\dot{T}_z(t) = \omega_0 cos(\omega_0 t + \xi_3) r_{3\perp} F_T(t) + sin(\omega_0 t + \xi_3) r_{3\perp} \dot{F}_T(t),$$

где производная от функции $F_T(t)$ имеет вид :

$$\dot{F}_T(t) = 4\tau_1(-(3\lambda - \Delta\omega)sin(3\lambda - \Delta\omega)t +$$

$$+(3\lambda + \Delta\omega)sin(3\lambda + \Delta\omega)t) + 2\tau_2(1 + (2\Delta\omega)sin(2\Delta\omega)t). \qquad (2.31)$$

Из выражения (2.30) видно, что производная от тороидного момента по времени содержит два вида слагаемых, пропорциональных ω_0 и $\Delta\omega$ соответственно. Так

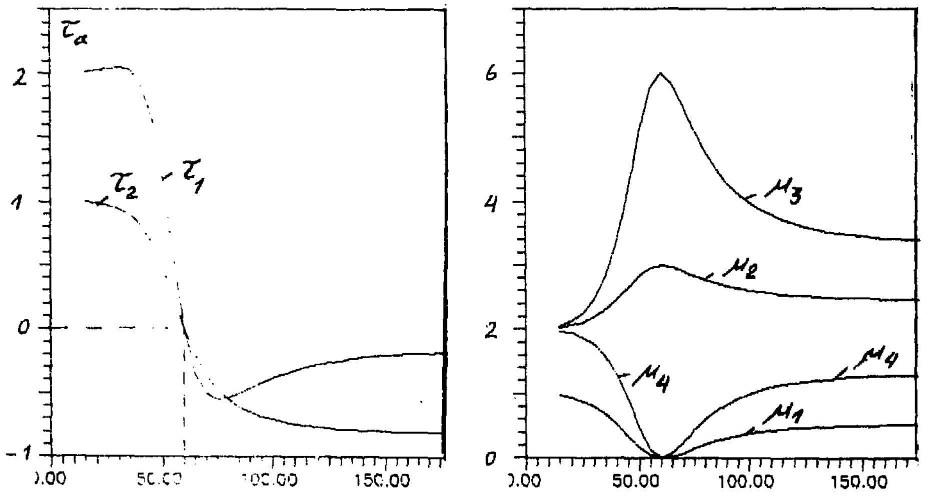


Рис.4. *Зависимости коэффициентов τ_i (а) и μ_i (б) от угла α равнобедренного треугольника соответственно для тороидного и магнитного откликов.*

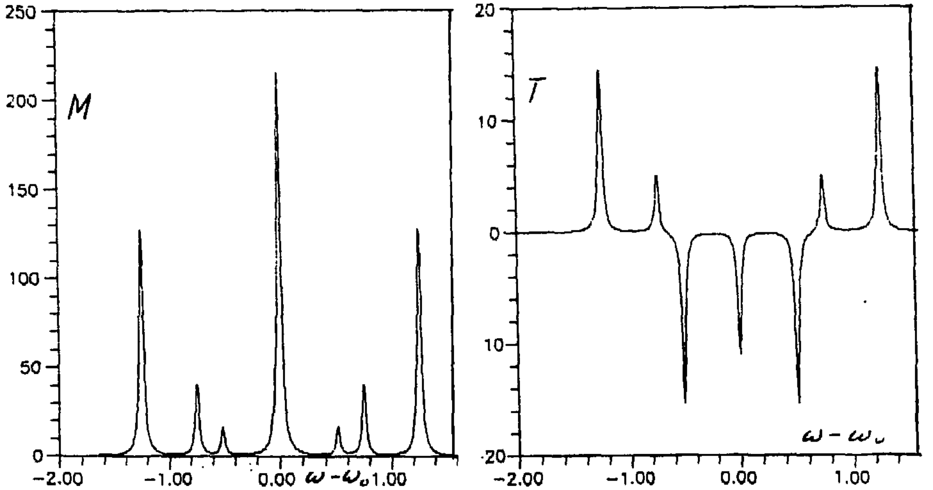


Рис.5. *Спектральные линии,полученные после фурье-преобразования сигналов свободной прецессии магнитного (а) и тороидного (б) моментов. Для наглядности в спектры искусственно введена ширина линии.*

как $\omega_0 \gg \Delta\omega$ (при наличии постоянного магнитного поля это неравенство всегда справедливо), то основной вклад в электрическое поле, индуцируемое осциллирующим тороидным моментом, будут вносить слагаемые, содержащие ω_0. В этом случае индуцируемое электрическое поле $\vec{E}(t)$ будет пропорционально выражению

$$\vec{E}(t) \approx \vec{C} f(t) F_T(t), \tag{2.38}$$

где $\vec{C}$ - векторная величина, описывающая пространственные характеристики спиновой системы и условия наблюдения отклика, $f(t)$ - быстроосциллирующая функция времени, которая определяется линейной комбинацией $sin\omega_0 t$ и $cos\omega_0 t$, функция $F_T(t)$ имеет вид (2.26). На основании вышеизложенного весь последующий анализ, касающийся поведения индуцированного электрического поля можно проводить на языке тороидного момента (а не его производной $d\vec{T}/dt$), так как $\vec{E}(t)$ и $\vec{T}(t)$ изменяются со временем по одинаковому закону.

Как видно из выражения (2.30), на стадии свободной прецесии тороидный момент вращается в некоторой плоскости, ориентация которой определяется параметрами пространственного расположения спинов. Если спины находятся в плоскости, перпендикулярной постоянному магнитному полю, тороидный момент может иметь только z-компоненту, независимо от ориентации спинов в этой плоскости. Если же ориентация треугольника выбрана таким образом, что радиус-вектор $\vec{r}_3$ третьего спина имеет только z-компоненту, тогда тороидный момент будет вращаться в плоскости, перпендикулярной постоянному магнитному полю. Так как в общем случае тороидный момент имеет все три компоненты, он может применяться при исследовании диффузионных процессов в ядерных спиновых системах. Медленная зависимость z-компоненты тороидного момента от времени для системы спинов, находящихся в вершинах равнобедренного треугольника с углом при вершине $\pi/2$, изображен на рис.3 (на этом же рисунке для сравнения приведен спад свободной прецессии ядерной намагниченности).

Спад свободной прецессии магнитного и тороидного моментов может быть объяснен с точки зрения движения магнитных моментов отдельных ядер. В секулярном приближении было установлено, что на стадии свободной прецессии магнитные моменты вращаются с одинаковой частотой, оставаясь все время параллельными друг другу (учет несекулярных членов приводит к нарушению параллельной структуры), изменению подвергается только длина магнитных моментов. Изменение длины магнитных моментов происходит, вообще говоря, с разной скоростью, именно по этой причине происходит формирование тороидного момента, поведение которого описано выше.

На основе приведенных выше рассуждений, можно провести качественный анализ поведения суммарных магнитного и тороидного моментов спиновой системы на стадии свободной прецессии, изобразив на конкретном примере ориентации магнитных моментов в различные моменты времени в ВСК. Рассмотрим систему спинов, находящихся в вершинах равнобедренного треугольника с $\alpha = \pi/2$ при вершине, плоскость треугольника расположена перпендикулярно постоянному магнитному полю. В начальный момент времени $t = t_p$ длины всех магнитных моментов одинаковы и имеют максимальное значение , в этом случае $|\vec{M}| = max$, а $|\vec{T}| = 0$, в некоторый последующий момент времени $t = t_1$, магнитный момент $\vec{m}_3$ будет направлен в сторону, противоположную двум другим, а его длина будет равна $|\vec{m}_3| = (|\vec{m}_1| + |\vec{m}_2|)$, при этом $|\vec{M}| = 0$, а $|\vec{T}| \neq 0$. Далее, в момент времени $t = t_2$ сохраняется прежняя относительная ориентация магнитных моментов, а их длины удовлетворяют неравенству $|\vec{m}_3| > (|\vec{m}_1| + |\vec{m}_2|)$, при этом оба момента - тороидный и магнитный - отличны от нуля ($|\vec{M}| \neq 0$ и $|\vec{T}| \neq 0$). Тороидный момент $|\vec{T}|$ достигает своего максимального значения в некоторый момент времени ($t_3 > t_2$).

Кроме аналитических расчетов, основанных на теории возмущений, было проведено также численное моделирование динамики системы на ЭВМ. Было установлено, что учет несекулярных членов диполь-дипольного взаимодействия проявляется в виде нарушения параллельной структуры магнитных моментов, которое, в рассмотренном модельном случае, не сказывается существенно на изменении со временем наблюдаемых величин.

3. SO(4)-динамика спиновой системы

В предыдущем разделе тороидный отклик спиновой системы был рассмотрен на конкретном примере системы из трех спинов путем прямого решения уравнения Шредингера. В этом разделе мы используем приближенный подход, в котором вводится описание системы с помощью небольшого числа наблюдаемых величин (компонент магнитного и тороидного моментов), что дает возможность рассмотреть произвольную систему спинов с учетом их взаимодействия. Основанием для такого приближенного подхода, в котором, грубо говоря, не рассматриваются высшие мультиполи, служит тот факт, что поля этих мультиполей быстро спадают с расстоянием, как это обсуждалось во Введении. Наша задача заключается в том, чтобы получить наглядную картину спиновой динамики с учетом тороидного момента, которая является обобщением известной картины прецессии спинов вокруг направления магнитного поля [1].

На первом шаге построения приближенного описания введем вместо спиновых операторов ядер $\hat{\vec{S}}_a$ $(a = 1, 2, \ldots, n)$ операторы мультипольных моментов системы в соответствии с определением (см. также [9]).

$$\hat{T}_{i_1 i_2 \ldots i_k j} = \sum_a x_{ai_1} x_{ai_2} \ldots x_{ai_k} \hat{S}_{aj}. \tag{3.1}$$

Это выражение можно рассматривать как некоторое линейное преобразование (вообще говоря, не ортогональное и не унитарное) от $3n$ переменных $\hat{S}_{aj}$ к другим $3n$ переменным $\hat{T}_{LM}$. Для удобства рассуждений вместо декартовых компонент мультипольных моментов, использованных в (3.1), здесь введены их сферические компоненты; как обычно считается, что индекс L может принимать целые положительные значения, а индекс M пробегает значения от $-L$ до L (см. подробнее [9]). Так как имеется конечное число операторов $\hat{S}_{aj}$, то и число независимых операторов $\hat{T}_{LM}$ также конечно. Если выбрать некоторую конечную совокупность $3n$ компонент $\hat{T}_{LM}$, которые выражаются через $\hat{S}_{aj}$ с помощью невырожденного линейного преобразования вида

$$\hat{T}_{LM} = \sum_{aj} U_{LMaj} \hat{S}_{aj}, \tag{3.2}$$

то обращая это соотношение, то есть выражая $\hat{S}_{aj}$ через $\hat{T}_{LM}$, получим

$$\hat{S}_{aj} = \sum U^{-1}_{ajLM} \hat{T}_{LM} \cdot \tag{3.3}$$

Мы можем с помощью (3.1) выразить все остальные моменты только через "отобранные" $\hat{T}_{LM}$.

Подчеркнем, что переход к новым операторам является точным, так как в этих преобразованиях не использовалось каких бы то ни было приближений. Так, например, для системы, состоящей из четырех спинов, не лежащих в одной плоскости, вместо 12 операторов $\hat{S}_{ai}$ $(a = 1,2,3,4; i = 1,2,3)$ мы можем ввести следующие 12 операторов моментов

$$\hat{\vec{S}} = \sum_a \hat{\vec{S}}_a; \qquad \hat{\vec{T}} = \frac{1}{2} \sum_a [\vec{r}_a \hat{\vec{S}}_a]; \tag{3.4}$$

$$\hat{q} = \sum_a (\vec{r}_a \hat{\vec{S}}_a); \quad \hat{Q}_{ik} = \sum_a (x_{ai} \hat{S}_{ak} + x_{ak} \hat{S}_{ai}) - \frac{2}{3} \hat{q} \delta_{ik},$$

где $\hat{\vec{S}}$, $\hat{\vec{T}}$, $\hat{Q}_{ik}$ и $\hat{q}$ – соответственно полный спин, тороидный и квадрупольный моменты и магнитный "заряд". Все остальные мультиполи ситемы могут быть линейно выражены через эти операторы с помощью формулы (3.1) после обращения этих выражений.

Предполагая, что переход к "отобранным" мультиполям уже выполнен и что найдено обратное преобразование (3.3), мы можем выразить оператор Гамильтона рассматриваемой системы через операторы мультипольных моментов в виде

$$\hat{\mathcal{H}} = -\sum_{LM} h_{LM} \hat{T}_{LM} + \sum_{LML'M'} a_{LML'M'} \hat{T}_{L'M'} \hat{T}_{LM}, \tag{3.5}$$

где матрица $a_{LML'M'}$ целиком определяется пространственным расположением спинов, а h_{LM} пропорционально внешнему полю.

Будем считать, что операторы полного спина системы $\hat{\vec{S}}$ и тороидного момента $\hat{\vec{T}}$ включены в число отобранных операторов $\hat{T}_{LM}$. Учитывая малость полей, создаваемых высшими мультиполями, в простейшем приближении мы можем не учитывать их вклад в гамильтониан (3.5), что позволяет записать его в виде

$$\hat{\mathcal{H}} = -\vec{H}_0 \hat{\vec{S}} + a_{ik} \hat{S}_i \hat{S}_k + b_{ik} \hat{S}_i \hat{T}_k + c_{ik} \hat{T}_i \hat{T}_k, \tag{3.6}$$

где по сравнению с (3.5) отброшены слагаемые, включающие взаимодействие $\hat{\vec{S}}$ и $\hat{\vec{T}}$ с мультиполями высших порядков, а также взаимодействие этих мультиполей между собой. Отметим, что тензоры a_{ik}, b_{ik} и c_{ik} в выражении (3.6) определяются геометрией системы, при этом a_{ik} и b_{ik} - это полярные (истинные) тензоры, а c_{ik} - псевдотензор, это следует из того, что операторы $\hat{\vec{S}}$ и $\hat{\vec{T}}$ имеют разную пространственную четность. Очевидно, что смешанный член будет присутствовать в гамильтониане, когда расположение спинов является киральным.

Динамика спиновой системы на стадии свободной индукции целиком определяется гамильтонианом (3.6) и соотношениями коммутации между операторами моментов $\hat{S}_i$ и $\hat{T}_k$. Для получения этих соотношений будем исходить из того, что коммутаторы операторов отдельных спинов имеют вид

$$[\hat{S}_{ai}, \hat{S}_{aj}] = i\delta_{ab}e_{ijk}\hat{S}_{ak}. \tag{3.7}$$

Используя связь между операторами $\hat{S}_{aj}$ и операторами $\hat{S}_i$ и $\hat{T}_k$, с помощью (3.7) получаем

$$[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = ie_{ijk}\hat{S}_k; \quad [\hat{S}_i, \hat{T}_k] = \frac{1}{2}i\sum_a (x_{ai}\hat{S}_{aj} - \delta_{ij}x_{ak}\hat{S}_{ak});$$

$$[\hat{T}_i, \hat{T}_j] = \frac{1}{4}ie_{ijk}\sum_a x_{ak}x_{al}\hat{S}_{al}. \tag{3.8}$$

Таким образом, эти соотношения оказываются не замкнутыми относительно операторов $\hat{S}_i$ и $\hat{T}_k$ и включают мультиполи высших порядков. Если, как и при получении гамильтониана (3.6), в правых частях соотношений (3.6) отбросить операторы всех мультиполей, кроме $\hat{S}_i$ и $\hat{T}_k$, то эти соотношения можно переписать в виде

$$[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = ie_{ijk}\hat{S}_k; \quad [\hat{S}_i, \hat{T}_j] = \frac{1}{4}ie_{ijk}\hat{T}_k; \quad [\hat{T}_i, \hat{T}_j] = 0. \tag{3.9}$$

Из этих соотношений следует, что операторы $\hat{S}_i$ и $\hat{T}_j$ образуют алгебру Ли, изоморфную алгебре группы движений 3-мерного пространства M(3).

Полученное таким образом приближенное описание системы спинов, включающее гамильтониан (3.6) и коммутационные соотношения (3.9), неудобно для дальнейшей интерпретации, так как неприводимые представления некомпактной группы M(3) бесконечномерны. Поэтому далее мы будем использовать более точное приближение, позволяющее с вариационной точностью учесть и отброшенные высшие мультиполи. Это позволяет, как мы увидим, компактифицировать группу симметрии, на которой разыгрывается динамика спиновой системы. Чтобы найти приближенную связь между операторами спинов частиц и моментами $\hat{S}_i$ и $\hat{T}_j$, заменяющую точное соотношение (3.3), запишем приближенное соотношение

$$\hat{\vec{S}}_a = \hat{\vec{\mu}} + [\hat{\vec{\tau}}\vec{r}_a], \tag{3.10}$$

где $\hat{\vec{\mu}}$ и $\hat{\vec{\tau}}$ - некоторые вспомогательные операторы, которые подлежат определению (см. также [9]). Если бы мы включили в (3.10) и другие степени векторов $\vec{r}_a$, то соотношение (3.10) было бы точным. Чтобы найти вид операторов $\hat{\vec{\mu}}$ и $\hat{\vec{\tau}}$, будем решать систему $3n$ линейных уравнений (3.10) методом наименьших квадратов. С этой целью сначала вычислим сумму уравнений (3.10) по индексу a, что позволяет получить связь между операторами $\hat{\vec{\mu}}$ и $\hat{\vec{S}}$, а затем умножим каждое уравнение векторно на $\vec{r}_a$ и снова найдем их сумму, что с учетом соотношения (1.1) дает возможность найти связь между $\hat{\vec{r}}$ и $\hat{\vec{T}}$. Таким образом, получаем

$$\hat{S}_i = n\hat{\mu}_i; \quad \hat{T}_i = \frac{1}{2}I_{ik}\hat{\tau}_k; \quad I_{ik} = \frac{1}{n}\sum_a (r_a^2\delta_{ik} - x_{ai}x_{ak}), \tag{3.11}$$

где введен тензор 2-ранга I_{ik}, формально совпадающий с тензором инерции n частиц,находящихся в точках расположения ядерных спинов $\vec{r}_a$ и имеющих одинаковые массы $1/n$. Отметим, что тензор I_{ik} симметричен и имеет положительные и не равные нулю главные значения (то есть матрица I_{ik} симметрична и невырожденна).

Выразим в точном гамильтониане спиновой системы и в точных коммутационных соотношениях операторов $\hat{S}_i$ и $\hat{T}_k$ (3.8) операторы $\hat{S}_{ai}$ через операторы $\hat{S}_i$ и $\hat{T}_k$, пользуясь соотношениями (3.10), (3.11). В результате гамильтониан примет прежний вид (3.6) с переопределенными тензорными коэффициентами a_{ik}, b_{ik} и c_{ik}, а коммутационные соотношения преобразуются к виду

$$[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = ie_{ijk}\hat{S}_k; \quad [\hat{S}_i, \hat{T}_j] = iK_{il}e_{jlm}I^{-1}_{mk}\hat{T}_k; \quad [\hat{T}_i, \hat{T}_j] = \frac{1}{4}ie_{ijl}K_{lk}\hat{S}_k, \tag{3.12}$$

где введена матрица I^{-1}_{ij} - обратная к I_{ij}, а также тензор K_{ij}, имеющий вид

$$K_{ij} = \frac{1}{n}\sum_a x_{ai}x_{aj}. \tag{3.13}$$

Как можно видеть из сравнения этого выражения с определением тензора I_{ij} (3.11), тензоры I_{ij} и K_{ij} имеют общие главные оси, однако в отличие от I_{ij}, главные значения K_{ij} могут обращаться в нуль для некоторых вырожденных случаев - например, для системы спинов,лежащих в одной плоскости или на одной прямой. В дальнейшем удобно считать, что у тензора K_{ij} хотя бы два главных значения отличны от нуля. Этого всегда можно достигнуть, если искусственно произвести слабую деформацию пространственной конфигурации спиновой системы, а в окончательных результатах устремить параметр деформации к нулю.

Как можно видеть из соотношений (3.12),операторы $\hat{S}_i$ и $\hat{T}_j$ образуют некоторую алгебру Ли. Чтобы установить структуру этой алгебры, следует найти соответствующую ей форму Киллинга-Картана (см., например, [10]), которая определяется следующим образом. Обозначим образующие алгебры Ли (роль которых в нашем случае играют операторы $\hat{S}_i$ и $\hat{T}_j$) собирательным символом $\hat{e}_I$, $(I = 1, 2, \ldots, 6)$. Коммутационные соотношения между образующими можно записать с помощью структурных констант C^J_{IK} : $[\hat{e}_I, \hat{e}_K] = C^J_{IK}\hat{e}_J$. Тогда форма Киллинга-Картана g_{IK} определяется как свертка произведения структурных констант вида

$$g_{IK} = C^J_{IL}C^L_{KJ}. \tag{3.14}$$

Если направить оси декартовой системы координат по главным осям тензоров I_{ik} и K_{ik} и обозначить их главные значения символами I_i и K_i $(i = 1, 2, 3)$, то, как можно найти с помощью соотношений коммутации (3.12), шестимерная матрица

g_{IK} будет иметь в этой системе диагональный вид, причем ее диагональные элементы выражаются через величины I_i и K_i следующим образом:

$$diag(g_{IK}) = \left\{2\left(1+\frac{K_1^2}{I_2I_3}\right); 2\left(1+\frac{K_2^2}{I_1I_3}\right); 2\left(1+\frac{K_3^2}{I_1I_2}\right);\right.$$
$$\left.\frac{1}{4}\left(\frac{K_2^2}{I_3^2}+\frac{K_3^2}{I_2^2}\right); \frac{1}{4}\left(\frac{K_2^2}{I_3^2}+\frac{K_3^2}{I_2^2}\right); \frac{1}{4}\left(\frac{K_2^2}{I_3^2}+\frac{K_3^2}{I_2^2}\right)\right\}. \quad (3.15)$$

Таким образом, форма Киллинга-Картана оказывается положительно определенной, что означает компактность соответствующей алгебры Ли. Как можно убедиться, шесть операторов $\hat{S}_i$, $\hat{T}_k$ образуют алгебру, изоморфную алгебре ортогональных вращений 4-мерного пространства so(4).

Форма Киллинга-Картана позволяет построить оператор Казимира $\hat{C}$ рассматриваемой алгебры : $\hat{C} = g_{IK}\hat{e}_I\hat{e}_K$, коммутирующий со всеми образующими алгебры, который в нашем случае может быть представлен в виде

$$\hat{C} = g_{ik}^{(1)}\hat{S}_i\hat{S}_k + g_{ik}^{(2)}\hat{T}_i\hat{T}_k, \quad (3.16)$$

где тензоры $g_{ik}^{(a)}(a = 1,2)$ имеют главные оси, совпадающие с главными осями тензора I_{ik}, а их главные значения совпадают соответственно с первой и второй тройками диагональных элементов формы g_{IK}, которые указаны в (3.15). Полученное соотношение показывает, что в системе взаимодействующих спинов длины векторов $\hat{S}_i$ и $\hat{T}_i$ по отдельности не являются сохраняющимися величинами. Поэтому наглядный образ движения магнитного момента по поверхности сферы в 3-мерном пространстве должен быть заменен некоторой более общей картиной.

Для дальнейших рассуждений удобно ввести операторы $\hat{\Gamma}_I$ $(I = 1,\ldots,6)$

$$\hat{\Gamma}_i = [g^{(1)}]_{ik}^{\frac{1}{2}}\hat{S}_k; \qquad \hat{\Gamma}_{i+3} = [g^{(2)}]_{ik}^{\frac{1}{2}}\hat{T}_k; \qquad (i = 1,2,3), \quad (3.17)$$

где матрицы $[g^{(a)}]^{\frac{1}{2}}$ при возведении в квадрат превращаются в $g^{(a)}$. С помощью этих операторов гамильтониан системы (3.6) и оператор Казимира (3.16) могут быть записаны в виде

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_I f_I\hat{\Gamma}_I + \sum_{IK} h_{IK}\hat{\Gamma}_I\hat{\Gamma}_K; \qquad \hat{C} = \sum_I \hat{\Gamma}_I^2, \quad (3.18)$$

где 6-вектор f_I пропорционален магнитному полю, а тензор h_{IK} определяется взаимодействием между спинами. Эти соотношения могут быть использованы для получения наглядной картины динамики системы. С этой целью заменим операторы $\hat{\vec{S}}$ и $\hat{\vec{T}}$ классическими векторами $\vec{S}$ и $\vec{T}$, а соотношения коммутации - скобками Пуассона. Сохранение оператора Казимира означает, что классический 6-вектор Γ_I может двигаться только по поверхности сферы в 6-мерном пространстве. С другой стороны, из закона сохранения энергии (выражение для классической энергии следует первого равенства в (3.18)) можно видеть, что вектор Γ_I должен двигаться по поверхности второго порядка (для определенности будем считать эту поверхность эллипсоидом), центр которой сдвинут относительно центра сферы на величину, пропорциональную вектору магнитного поля (точнее, 6-вектору f_I). При отсутствии взаимодействия между спинами эта поверхность вырождается в плоскость $E = f_I\Gamma_I$. При слабом взаимодействии можно считать, что эта плоскость слегка деформируется, так как ее радиус кривизны обратно пропорционален малому параметру взаимодействия. Линия пересечения двух поверхностей - сферы и эллипсоида - опеределяет траекторию в 6-пространстве, по которой будет двигаться конец вектора Γ_I. Доказательство того, что эти поверхности пересекаются, аналогично доказательству пересечения поверхностей энергии и сохраняющегося момента для асимметрического волчка, рассмотренному в [11]. В дальнейшем мы будем называть 6- пространство фазовым пространством нашей системы, а координаты конца вектора Γ_I - фазовой точкой.

Рассмотрим в рамках полученной геометрической интерпретации возникновение тороидного отклика. Процесс приготовления начального состояния с хорошей степенью точности может быть рассмотрен на языке части введенного 6-мерного фазового пространства - его 3-мерного подпространства, натянутого на компоненты вектора полного спина $\vec{S}$. Если пренебречь взаимодействием между спинами и если в начальный момент времени тороидный момент отсутствовал, то он не появится и в дальнейшие моменты времени. Поэтому в данном случае оператор Казимира вырождается и становится равным $\hat{C} = \hat{\vec{S}}^2$, что на классическом языке означает движение фазовой точки по поверхности сферы в 3-мерном пространстве. Оператор Гамильтона также принимает простой вид, так что классическая энергия равна $E = -(\vec{S}\vec{H})$. Таким образом, в этом случае траектория системы представляет собой линию пересечениями плоскости - $(\vec{S}\vec{H}) = -E$ и сферы $S^2 = C$ (рис. 6, а). Величина энергии E определяет расстояние от центра сферы до плоскости. До воздействия импульса переменного поля система находится в основном состоянии. При этом плоскость касается сферы в "северном" полюсе (точка А на рис. 6, а). Под действием импульса переменного поля система увеличивает свою энергию Е. При этом плоскость постоянной энергии опускается из положения 1 в положение 2 и если импульс поля девяностоградусный, то она будет проходить через центр сферы и фазовая точка будет двигаться по окружности большого круга, лежащей на пересечении плоскости и сферы, как это показано на рис. 6а.

Чтобы получить представление о динамике спиновой системы в процессе свободной индукции (то есть после выключения импульса поля), необходимо учитывать спин-спиновое взаимодействие и рассматривать полный гамильтониан (3.18). Мы рассмотрим сравнительно простой случай, когда для описания системы достаточно всего лишь трех компонент 6-вектора Γ_I, которые соответствуют компонентам S_x, S_y и T_z; при этом считается, что все остальные компоненты $(S_z; T_x; T_y)$ были равны нулю при $t = 0$ и не появляются в последующие моменты времени. Такая ситуация возникает при определенном выборе ориентации постоянного магнитного поля относительно системы спинов - например, если система плоская, то поле должно быть направлено перпендикулярно этой плоскости. В рассматриваемом случае, в силу сохранения оператора Казимира, фазовая точка будет двигаться по поверхности эллипсоида в 3-пространстве, натянутом на компоненты $(S_x; S_y; T_z)$. Если бы взаимодествие между спинами отсутствало и в начальный момент времени, фазовая точка лежала бы в плоскости $(S_x; S_y)$, то она продолжала бы оставаться в этой плоскости и дальше. Однако, за счет взаимодействия, поверхность постоянной энергии не совпадает с плоскостью, и поэтому фазовая траектория выходит из плоскости $(S_x; S_y)$, то есть у системы появится отличная от нуля компонента тороидного момента (рис.6,б). Таким образом, в этой картине становится понятным, что в процессе свободной индукции вектор полного спина может изменять свою длину, а магнитный момент "перекачивается" в тороидный и наоборот, что качественно описывает возникновение тороидного отклика спиновой системы.

Перейдем теперь к более детальному рассмотрению динамики спиновой системы в рамках введенного здесь приближенного описания. Как известно, группа SO(4) распадается на прямое произведение групп SO(3). Практически это означает, что с помощью линейного преобразования вместо операторов $\hat{\vec{S}}$ и $\hat{\vec{T}}$ можно ввести операторы $\hat{\vec{\mathcal{J}}}_1$ и $\hat{\vec{\mathcal{J}}}_2$:

$$\hat{S}_i = p_{ik}\hat{\mathcal{J}}_{1k} + q_{ik}\hat{\mathcal{J}}_{2k}; \quad \hat{T}_i = u_{ik}\hat{\mathcal{J}}_{1k} + v_{ik}\hat{\mathcal{J}}_{2k}, \tag{3.19}$$

которые удовлетворяют соотношениям коммутации

$$[\hat{\mathcal{J}}_{1i}, \hat{\mathcal{J}}_{1j}] = ie_{ijk}\hat{\mathcal{J}}_{1k}; \quad [\hat{\mathcal{J}}_{2i}, \hat{\mathcal{J}}_{2j}] = ie_{ijk}\hat{\mathcal{J}}_{2k}; \quad [\hat{\mathcal{J}}_{1i}, \hat{\mathcal{J}}_{2j}] = 0. \tag{3.20}$$

С помощью этих операторов гамильтониан (3.6) может быть представлен в виде

$$\hat{\mathcal{H}} = -\sum_a N_{ak}\hat{\mathcal{J}}_{ai} + \sum_{a,b} A_{aibk}\hat{\mathcal{J}}_{ai}\hat{\mathcal{J}}_{bi}; \qquad (a, b = 1, 2), \tag{3.21}$$

где тензоры A_{aibk}, выражаются через введенные в (3.6) и (3.19) тензоры a_{ik}, b_{ik}, c_{ik}, p_{ik}, q_{ik}, u_{ik} и v_{ik}, а векторы N_{ak} - пропорциональны величине однородного поля H_0. Полученный гамильтониан формально эквивалентен гамильтониану системы двух (электрических) ядерных квадруполей, взаимодействующих с сильными магнитными полями N_{1k} и N_{2k} и с градиентами электрического поля A_{aiak} соответственно, а спины ядер $\hat{\mathcal{J}}_{1i}$ и $\hat{\mathcal{J}}_{2k}$ также взаимодействуют между собой. Будем рассматривать последнее слагаемое в гамильтониане (3.21) как возмущение. Без учета взаимодействия собственные состояния гамильтониана $| \Psi^{(0)} >$ можно классифицировать по величинам моментов J_1 и J_2 и их проекций на направления полей $\vec{N}_1$ и $\vec{N}_2$. Таким образом, имеем

$$| \Psi^{(0)} > = | \mathcal{J}_1\mathcal{J}_2 m_1 m_2 >; \qquad E^{(0)}_{m_1 m_2} = -m_1 N_1 - m_2 N_2. \tag{3.22}$$

Мы ограничимся случаем, когда величины полей N_1, N_2 не совпадают между собой и спектр энергии невозмущенного гамильтониана не вырожден. Тогда поправки к энергии равны диагональным матричным элементам оператора возмущения

$$\Delta E_{m_1 m_2} = A'_{1z1z} m_1^2 + A'_{2z2z} m_2^2 + A_{1z2z} m_1 m_2 + A_1 \mathcal{J}_1(\mathcal{J}_1 + 1) + A_2 \mathcal{J}_2(\mathcal{J}_2 + 1). \tag{3.23}$$

Эти величины определяют сдвиги частот резонанса, обусловленные взаимодействиями в системе. Более подробно спиновая динамика в рамках этого описания будет рассмотрена в последующей публикации, где также будут учтены релаксационные процессы.

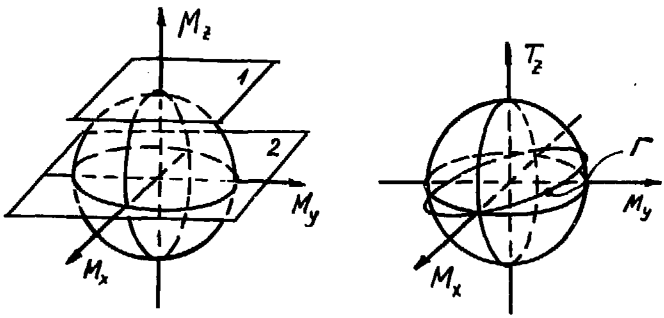


Рис.6. *Фазовая поверхность спиновой системы для случая системы невзаимодействующих спинов (а) и с учетом взаимодействия в "тороидном" приближении (б).*

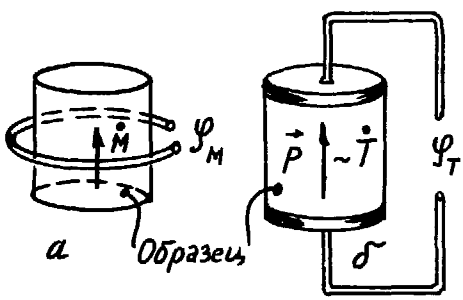


Рис.7. *Принципиальная схема устройства для наблюдения магнитного (а) и тороидного (б) откликов ядерной системы.*

4. Заключение

Проведенное в работе детальное рассмотрение показывает, что в процессе свободной индукции возможно наблюдать не только сигнал от прецессирующего магнитного момента образца, но также и сигнал от его тороидного момента.

Магнитный момент наблюдается стандартными методами ЯМР, в основе которых лежит измерение ЭДС, индуцируемой в приемной катушке (рис.7,а). Как было показано во Введении, величина магнитного поля в этом случае пропорциональна намагниченности образца : $H \sim M$, а ЭДС в катушке φ_M - скорости изменения магнитного потока, то есть

$$\varphi_M \approx \frac{\omega}{c} M L^2, \tag{4.1}$$

где L^2 - площадь поперечного сечения катушки, которую мы считаем по порядку величины равной квадрату размера образца L. Вследствие переменной тороидной поляризации образца возникает электрическая составляющая поля, как это было рассмотрено во Введении. Нетрудно показать, что разность потенциалов на обкладках конденсатора (рис. 7, б) по порядку величины составит

$$\varphi_T \approx 4\pi P L \approx 4\pi T L \frac{\omega}{c}. \tag{4.2}$$

С помощью полученных формул может быть оценено отношение магнитного и тороидного сигналов :

$$\frac{\varphi_T}{\varphi_M} = \frac{4\pi \frac{\omega}{c} T L}{\frac{\omega}{c} M L^2} \sim \frac{a}{L}, \tag{4.3}$$

где было принято для оценки, что $T \sim Ma$, где a - размер спиновой системы. Величина размера a определяется радиусом пространственной корреляции системы спинов. Если спины не коррелированы, то величина тороидного сигнала усредняется до нуля. Если же a возрастает (например, при возрастании пространственных флуктуаций взаимодействующих частиц в процессе фазового перехода жидкость - твердое тело), то, соответственно, будет возрастать и величина сигнала тороидного отклика.

Таким образом, проведенное рассмотрение показывает что наблюдение тороидного отклика дает новую возможность исследования пространственных корреляций в спиновой системе и тем самым расширяет сферу применения ЯМР.

Литература

1. Сликтер Ч. *Основы теории магнитного резонанса.* Изд. 2-ое. М.:Мир - 1981. 448с.

2. Дубовик В. М., Чешков А. А. . *Мультипольные разложения в классической и в квантовой теории поля и излучение* // Физ. элем. частиц и ат. ядра (ЭЧАЯ), 1974, 5, в.3, с.791-837.

Dubovik V. M. , Shabanov S. V. . *The gauge invariance, radiation and toroid order parameters in electromagnetic theory* // In spetial issue "Essays on the formal aspects of electromagnetic theory". Ed. A. Lakhtakia, Singapore: WS, 1992, p.21-79.

3. Дубовик В. М., Тосунян Л. А.. *Тороидные моменты в физике электромагнитных и слабых взаимодействий* // Физ. элем. частиц и ат. ядра (ЭЧАЯ), 1983, 14, в.5, с.1193-1228.
4. Dubovik V. M., Tugushev V. V.. *Toroid moments in electrodynamics and solid-state physics*// Phys. Reports, 1990, 187, n.4, p.145-202.
5. Sleator T., Hahn E. L., Heaney M. B., Hilbert C., Clarke J. *Nuclear-quadrupole induction of atomic polarisation*. Phys.Rev. 1988, V.38B, n. 13, p. 8609-8624.
6.Дубовик В. М., Лунегов И. В., Марценюк М. А. *Тороидное возбуждение ядерного. Препринт ОИЯИ Р14-92-321* Дубна: Из-во ОИЯИ, 1992. 16с.
Dubovik V. M., Lunegov I. V., Martsenuyk M. A. *Toroidal excitation of nuclear magnetic resonance*. Extended abstracts of XXVI Congress AMPERE (Athens, september 1992). Athens, 1992. P. 587 - 588.
7. Дубовик В. М., Лунегов И. В., Марценюк М. А. *Отклик ядерной спиновой системы на импульсное воздействие вихревым магнитным полем* // Сб. "Радиоспектроскопия", ред. проф. И.Г.Шапошников. Пермь : Из-во Перм. универс.- 1993. с.38-50.
8. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*. Изд. 4-е. М. : Наука, 1989. 768с.
9. Дубовик В. М., Марценюк М. А., Марценюк Н. М. *Тороидная поляризуемость агрегированных магнитных суспензий и композитов магнитных частиц*. Физ. элем. частиц и ат. ядра. 1993. В.4.
10. Желобенко Д. П., Штерн А. И.*Представления групп Ли*.– М.:Наука, 1983.
11. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. *Механика*.– М.:Наука, 1988. С.150.

Рукопись поступила в издательский отдел

30 июня 1993 года.