УДК 539.143.43:539.199

ФАЗЫ ДЕЙСТВИЯ И ПЕРЕХОДЫ МЕЖДУ НИМИ[1]

Карнаух Г.Е.

Институт проблем химической физики РАН,

Московская обл., Черноголовка, пр. Семёнова, 1

karnaukh@icp.ac.ru

Выявляются и исследуются эффекты, возникающие при действии импульсных последовательностей. Определяется их природа.

ВВЕДЕНИЕ

В 1985 году Карнаух Г.Е. и Сосиков А.И. опубликовали статью [1], в которой теоретически был указан и экспериментально наблюдался в монокристалле кизерита ($MgSO_4$. H_2O) новый эффект. В предлагаемой работе рассмотрены и исследованы, имеющие физический смысл, примеры, что позволило обнаружить физическую суть этого эффекта. В работе использован аппарат спинов $\frac{1}{2}$.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Эффективные взаимодействия (ЭВ) на двухуровневой системе и их особенности

Пусть дана двухуровневая система с гамильтонианом взаимодействия

$$\hat{H} = \hbar\omega\hat{S}^z \;(\omega > 0) \qquad (1)$$

где частота задаётся исследуемой системой (веществом).

Для анализа рассмотрим две импульсные последовательности и рассчитаем их операторы действия, эффективный спин (ЭС). То есть угол поворота эффективным полем, направление этого поля и их особенности.

[1] Работа выполнена по теме государственного задания ФАНО, № 0089-2014-0021.

$$\hat{U} = \exp\left[i\gamma\hat{S}\right] = \cos\frac{\gamma}{2} + 2i\sin\frac{\gamma}{2}\hat{S} \quad (2)$$

Пусть $0 < \varphi < \pi$. Тогда $\operatorname{sgn}\sin\frac{\gamma}{2} = \operatorname{sgn}\sin\frac{\omega t}{2}$. $\hat{S}$ это эффективный спин.

Пример 1

Последовательность:

$$\left(\varphi_x, \hat{S}^x\right) - \left(\omega t, \hat{S}^z\right) \quad (3)$$

Соответствует случаю, когда вначале некоторое время действует магнитное поле, направленное вдоль оси X, а затем всё время действует магнитное поле направленное вдоль оси Z.

Оператор эволюции

$$\hat{U}_1 = \exp\left[i\varphi\hat{S}^x\right]\exp\left[i\omega t\hat{S}^z\right] \quad (4)$$

Откуда

$$\cos\frac{\gamma_1}{2} = \cos\frac{\varphi}{2}\cos\frac{\omega t}{2} \qquad (5)$$

и

$$\hat{S}_1(t) = \frac{\cos\frac{\omega t}{2}\sin\frac{\varphi}{2}\hat{S}^x + \sin\frac{\omega t}{2}\sin\frac{\varphi}{2}\hat{S}^y + \sin\frac{\omega t}{2}\cos\frac{\varphi}{2}\hat{S}^z}{\operatorname{sgn}\sin\frac{\gamma_1}{2}\sqrt{1 - \cos^2\frac{\omega t}{2}\cos^2\frac{\varphi}{2}}} \qquad (6)$$

Изменение ЭС $\hat{S}_1(t)$: при $\frac{\omega t}{2} = 0 + \varepsilon; \frac{\pi}{2}; \pi - \varepsilon; \pi + \varepsilon$, где $0 < \varepsilon \ll 1$

$$\hat{S}_1(t): \hat{S}^x \to \sin\frac{\varphi}{2}\hat{S}^y + \cos\frac{\varphi}{2}\hat{S}^z \to -\hat{S}^x \uparrow \hat{S}^x \qquad (7)$$

Частота изменения ЭС $\hat{S}_1$ есть ω, $\hat{S}_1(\omega t) = \hat{S}_1(\omega t + 2\pi)$

В особых точках $\frac{\omega t}{2} = k\pi$ $\hat{S}_1(t)$ не определён и с ростом времени переворачивается вверх: $-\hat{S}^x \to \hat{S}^x$, поворачиваясь вокруг оси $\sin\frac{\varphi}{2}Z - \cos\frac{\varphi}{2}Y$ против часовой стрелки. В случае, когда $\varphi = \pi$ $\cos\frac{\gamma_1}{2} \equiv 0$. Откуда по непрерывности при $k\pi \le \frac{\omega t}{2} \le (k+1)\pi$ $\hat{S}_1 = \cos\left(\frac{\omega t}{2} - k\pi\right)\hat{S}^x + \sin\left(\frac{\omega t}{2} - k\pi\right)\hat{S}^y \to -\hat{S}^x \uparrow \hat{S}^x$

Частота изменения $\hat{S}_1$ есть ω, $\hat{S}_1(\omega t) = \hat{S}_1(\omega t + 2\pi)$

Пример 2

Последовательность:

$$\left(\frac{\omega t}{4}, \hat{S}^z\right) - \left(-\varphi, \hat{S}^x\right) - \left(\frac{\omega t}{2}, \hat{S}^z\right) - \left(\varphi, \hat{S}^x\right) - \left(\frac{\omega t}{4}, \hat{S}^z\right) \qquad (8)$$

$$\hat{U}_2 = \exp\left[i\frac{\omega t}{4}\hat{S}^z\right]\left(\exp\left[-i\varphi\hat{S}^x\right]\exp\left[i\frac{\omega t}{2}\hat{S}^z\right]\exp\left[i\varphi\hat{S}^x\right]\right)\exp\left[i\frac{\omega t}{4}\hat{S}^z\right]$$

Откуда

$$\cos\frac{\gamma_2}{2} = 1 - 2\sin^2\frac{\omega t}{4}\cos^2\frac{\varphi}{2} \qquad (9)$$

$$\hat{S}_2(t) = \frac{\sin\frac{\omega t}{2}\cos^2\frac{\varphi}{2}\hat{S}^z - \sin\frac{\omega t}{4}\sin\varphi\hat{S}^y}{\sin\frac{\gamma_2}{2}} = \\ = \frac{\operatorname{sgn}\cos\frac{\varphi}{2}\left(\cos\frac{\omega t}{4}\cos\frac{\varphi}{2}\hat{S}^z - \sin\frac{\varphi}{2}\hat{S}^y\right)}{\operatorname{sgn}\cos\frac{\omega t}{4}\sqrt{1 - \sin^2\frac{\omega t}{4}\cos^2\frac{\varphi}{2}}} \qquad (10)$$

Расчёт зависимости $\hat{S}_2$ от $\frac{\omega t}{2}$ с шагом π на отрезке $[\pi, 5\pi]$

$$\frac{\omega t}{2} = \pi + \varepsilon, 2\pi - \varepsilon, 2\pi + \varepsilon, 3\pi - \varepsilon, 3\pi + \varepsilon, 4\pi - \varepsilon, 4\pi + \varepsilon, 5\pi - \varepsilon, 5\pi + \varepsilon .$$

В этих точках $\operatorname{sgn}\cos\frac{\omega t}{4} = -1, -1, -1, -1, 1, 1, 1, 1$

$$\hat{S}_2(t) = \hat{S}^y \to \sin\frac{\varphi}{2}\hat{S}^y + \cos\frac{\varphi}{2}\hat{S}^z \to \sin\frac{\varphi}{2}\hat{S}^y + \cos\frac{\varphi}{2}\hat{S}^z \to \hat{S}^y \downarrow -\hat{S}^y \to$$

$$\to -\sin\frac{\varphi}{2}\hat{S}^y + \cos\frac{\varphi}{2}\hat{S}^z \to -\sin\frac{\varphi}{2}\hat{S}^y + \cos\frac{\varphi}{2}\hat{S}^z \to -\hat{S}^y \uparrow \hat{S}^y \to \ldots$$

Эффективный спин вращается вокруг оси X, в особых точках, $\left(\frac{\omega t}{2} = 2k\pi \Rightarrow \cos\frac{\gamma_2}{2} = 1\right)$ меняя направление вращения: в точках $\frac{\omega t}{2} = 2(2k+1)\pi$ с против на по часовой стрелке, а в точках $\frac{\omega t}{2} = 4k\pi$ с по на против часовой стрелке. В этих точках собственный базис неопределён и вместе с направлением ЭС поддерживается по непрерывности соседями. В точках же $\frac{\omega t}{2}=(2k+1)\pi$ ЭС переворачивается, поворачиваясь вокруг оси X по вышеуказанным направлениям.

В случае, когда $\varphi=\pi$ $\cos\frac{\gamma_2}{2}\equiv 1$. При $(2k+1)\pi\le\frac{\omega t}{2}\le(2k+3)\pi$. $\hat{S}_2$ всюду неопределён, разрывы в точках $\frac{\omega t}{2}=(2l+1)\pi$ равны 2π.

Частота изменения ЭС $\hat{S}_2$ есть $\frac{\omega}{4}$, $\hat{S}_2(\omega t)=\hat{S}_2(\omega t+8\pi)$.

Фазовые переходы между фазами действия – источник особенностей ЭВ

Углы поворота γ, или действие $\hbar\gamma$ определяются, как в работе [1], по принципу непрерывности: при $\varphi=0$ $\frac{\gamma}{2}=\frac{\omega t}{2}$ и $\lim\limits_{\varphi_x\to 0}\frac{\gamma}{2}=\frac{\omega t}{2}$.

В первом примере для $\frac{\gamma_1}{2}$ получаем разрывную возрастающую функцию, которая при $\frac{\omega t}{2}\in[2k\pi,(2k+1)\pi]$есть $2k\pi+\arccos\left(\cos\frac{\omega t}{2}\cos\frac{\varphi}{2}\right)$и растёт от $2k\pi+\frac{\varphi}{2}$ до $(2k+1)\pi-\frac{\varphi}{2}$, а при $\frac{\omega t}{2}\in[(2k+1)\pi,2(k+1)\pi]$ есть $2(k+1)\pi-\arccos\left(\cos\frac{\omega t}{2}\cos\frac{\varphi}{2}\right)$ растущая от $(2k+1)\pi+\frac{\varphi}{2}$ до $2(k+1)\pi-\frac{\varphi}{2}$.

Эти кривые одинаковы и следуют с частотой ω. Во всех точках $\frac{\omega t}{2}=k\pi$ все ненулевые производные меняют знак и имеется разрыв равный φ. При $\varphi=\pi$ $\cos\frac{\gamma_1}{2}\equiv 0$ и при $\frac{\omega t}{2}\in[k\pi,(k+1)\pi]$ $\frac{\gamma_1}{2}=k\pi+\frac{\pi}{2}$.

Во втором примере получаем разрывную возрастающую функцию, которая при $\frac{\omega t}{2}\in[(2k-1)\pi,2k\pi]$ есть $2k\pi-\arccos\left(1-2\sin^2\frac{\omega t}{4}\cos^2\frac{\varphi}{2}\right)$ и растёт от $(2k-1)\pi+\varphi$ до $2k\pi$, при $\frac{\omega t}{2}\in[2k\pi,(2k+1)\pi]$есть $2k\pi+\arccos\left(1-2\sin^2\frac{\omega t}{4}\cos^2\frac{\varphi}{2}\right)$ и растёт от $2k\pi$ до $(2k+1)\pi-\varphi$. Все эти пары кривых одинаковы и следуют с частотой $\frac{\omega}{2}$. Во всех точках $\frac{\omega t}{2}=k\pi$ все ненулевые производные меняют знак, а в точках $\frac{\omega t}{2}=(2k+1)\pi$ имеется разрыв равный 2φ.

Докажем, что в момент перехода через точку разрыва ЭС переворачивается. В точке разрыва левый предел значения полуфазы действия есть $k\pi-\Delta$, а правый $k\pi+\Delta$, где $0<\Delta<\pi$. В силу непрерывности оператора действия [2], его левый и правый пределы в точках разрыва фаз действия должны совпадать. Откуда получаем следующее уравнение $\cos^2\Delta-\cos\psi\sin^2\Delta=1$, где ψ есть угол между левым и правым предельными направлениями ЭС. Это уравнение при $0<\Delta<\pi$ имеет единственное решение $\cos\psi=-1$. Следовательно, ЭС переворачивается.

Полученные особенности прямо указывают на то, что существуют две различные многолистные фазы действия $kh+\hbar arc\cos(...)$ и $kh-\hbar arc\cos(...)$. Ветви фаз образуют упорядоченные по k множества. Вышеописанные особенности являются фазовыми переходами между этими фазами. Эти фазовые переходы, по своей сути, являются поочерёдной сменой ветвей в фазах действия.

Фазовые переходы происходят в точках $\frac{\omega t}{2}=n\pi$. В этих точках фазы действия поочередно, получая один планковский квант действия h от другой фазы, набранный ею во время эволюции, меняют свою ветвь.

$$\begin{array}{ccccccc} kh+\hbar arc & & (k+1)h-\hbar arc & & (k+1)h+\hbar arc & & \\ & \nearrow & & \nearrow & & \nearrow & \ldots \\ kh-\hbar arc & & kh+\hbar arc & & (k+1)h-\hbar arc & & \end{array}$$

Следовательно, при эволюции эти фазовые переходы образуют регулярный периодический процесс с частотой $\frac{\omega}{2}$. Следует отметить, что, как в первом примере, фазы действия могут быть неразличимыми. Тогда наблюдаемая частота будет равна ω.

При $\varphi = 0$ операторы эволюции в точках смены фаз действия $\frac{\omega t}{2} = k\pi$ равны $(-1)^k$. Значит, в этих точках собственный базис неопределён и таких (особых) точек есть два типа, что и было видно во втором примере. При прохождении всех описанных в обоих примерах особых точек собственный базис поддерживается различными способами. В точках с разрывом фазы это переворот ЭС, а в других точках это обращение угловой скорости поворота ЭС.

Гамильтониан эффективного взаимодействия $\exp\left[i\hat{H}t\right] = \hat{U}$ равен $\hat{H}(t) = \hbar\frac{\gamma}{t}\hat{S}(t)$.

Рассмотрим его поведение в точках разрыва фазы действия.

В первом примере точки разрыва $\frac{\omega t}{2} = k\pi$. Времена разрыва $\frac{2k\pi}{\omega}$. Разрыв фазы действия $\hbar\gamma_{1l} = \hbar(2k\pi - \varphi) \to \hbar\gamma_{1r} = \hbar(2k\pi + \varphi)$.

Значит $\hat{H}_{1l} = \hbar\left(\omega - \frac{\varphi\omega}{2k\pi}\right)\left(-\hat{S}^x\right) = \hbar\left(-\omega + \frac{\varphi\omega}{2k\pi}\right)\hat{S}^x$ и $\hat{H}_{1r} = \hbar\left(\omega + \frac{\varphi\omega}{2k\pi}\right)\hat{S}^x$

Во втором примере есть два случая. Точки разрыва $(1+4k)\pi$. Времена разрыва $\frac{2(1+4k)\pi}{\omega}$. Разрыв фазы действия: $\hbar\gamma_{11l} = \hbar((1+4k)\pi - 2\varphi) \to \hbar\gamma_{11r} = \hbar((1+4k)\pi + 2\varphi)$.

Значит $\hat{H}_{11l} = \hbar\left(\omega - \frac{\varphi\omega}{(1+4k)\pi}\right)\left(-\hat{S}^y\right) = \hbar\left(-\omega + \frac{\varphi\omega}{(1+4k)\pi}\right)\hat{S}^y$ и $\hat{H}_{11r} = \hbar\left(\omega + \frac{\varphi\omega}{(1+4k)\pi}\right)\hat{S}^y$.

Аналогично для точек разрыва $\frac{\omega t}{2} = (3+4k)\pi$ получаем $\hat{H}_{12l} = \hbar\left(\omega - \frac{\varphi\omega}{(3+4k)\pi}\right)\hat{S}^y$ и $\hat{H}_{12r} = \hbar\left(-\omega - \frac{\varphi\omega}{(3+4k)\pi}\right)\hat{S}^y$.

В этих случаях порядок собственных состояний меняется. Значит, точки разрыва фаз действия приводят к фазовым переходам эффективных гамильтонианов: $\hat{H}_l \to \hat{H}_r$. Что наблюдалось в работе [1]. Эти переходы происходят периодически с частотами ω как в примере 1 и $\frac{\omega}{2}$ как в примере 2.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Доказано, что действие состоит из двух различных, но не всегда различимых фаз (Arc(…) и –Arc(…)). Переходы между ними являются фазовыми переходами. Их механизм это поочередная смена ветвей фаз действия с помощью получения одного кванта действия h одной фазы от другой, полученного ею при эволюции. Во время эволюции эти фазовые переходы следуют с частотой $\frac{\omega}{2}$, образуя периодический процесс. Тем самым, определяя место особенностей эффективных гамильтонианов взаимодействия. В частности фазовые переходы эффективных гамильтонианов, которые происходят с частотой ω [1] или $\frac{\omega}{2}$, и изменения направления поворота ЭС во времени, проходящие с частотой $\frac{\omega}{2}$.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Карнаух Г.Е., Сосиков А.И.* // сб. Радиоспектроскопия. Пермь. 1985. С.25-30.
2. *Peano G.* // Math. Ann. 1888. V.32. P.450-452.