

УДК 539.144.3

ТОЧНОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ О МАГНИТНОМ ДИПОЛЬНОМ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ ДВУХ ПРОТОНОВ

В. К. Конюхов

Показано, что энергетический спектр гамильтониана магнитного дипольного взаимодействия двух протонов не зависит от направления вектора, соединяющего точки пространства, где расположены протоны. Определены собственные функции гамильтониана, которые зависят от направления этого вектора. Метод решения задачи можно использовать для случая любой пары одинаковых спинов.

Гамильтониан дипольного взаимодействия двух спиновых моментов широко используется в задачах ядерного магнитного резонанса, где он учитывается как малая добавка к энергии спинов во внешнем магнитном поле [1]. В соответствии с этим из полного выражения оставляют только два члена, А и В по классификации Ван-Флека, которые коммутируют с зеемановским оператором, и вычисляют их значение по теории возмущений. Однако существует большой круг задач молекулярной физики, где магнитное взаимодействие спинов оказывается определяющим, и поэтому требуются сведения об энергетическом спектре полного гамильтониана и его волновых функциях. Такая ситуация реализуется, когда внешнего магнитного поля нет или оно мало по сравнению с внутренним полем, то есть полем, которое создает один магнитный момент в точке, где находится другой магнитный момент. Если результат решения поставленной задачи для энергетического спектра взаимодействующих протонов возможно предсказать, исходя из частного случая ориентации магнитного поля [1], то вид собственных векторов без решения задачи в общем виде предугадать нельзя.

В настоящей работе описывается способ приведения гамильтониана дипольного взаимодействия общего вида к диагональной форме методом вращений в пространствах представления угловых моментов на примере спиновых моментов с $J = 1/2$.

Операторное выражение для гамильтониана H получается из классической формулы для энергии взаимодействия двух магнитных дипольных моментов, если на места, которые занимают проекции векторов магнитных диполей на оси координат, подставить операторы проекций μ_a магнитных моментов и учесть, что операторы магнитных моментов пропорциональны операторам I_a угловых моментов:

$$\mu_a = -\gamma\hbar I_a, \quad a = x, y, z$$

$$H = \frac{\mu_0}{4\pi r^3} (\gamma\hbar)^2 [(I^{<1>}, I^{<2>}) - 3(I^{<1>}, n)(I^{<2>}, n)] \quad (1)$$

$$(I^{<1>}, I^{<2>}) = I_x^{<1>} I_x^{<2>} + I_y^{<1>} I_y^{<2>} + I_z^{<1>} I_z^{<2>}$$

$$(I^{<1>}, n) = I_x^{<1>} n_x + I_y^{<1>} n_y + I_z^{<1>} n_z$$

$$E_d = \frac{\mu_0 \gamma^2 \hbar^2}{4\pi r^3}$$

$$(I^{<2>}, n) = I_x^{<2>} n_x + I_y^{<2>} n_y + I_z^{<2>} n_z$$

$$n = (\sin(\Theta) \cos(\phi) \sin(\Theta) \sin(\phi) \cos(\Theta)).$$

Здесь n – единичный вектор, лежащий на прямой, проведенной из точки, где находится первый диполь, в точку, где расположен второй диполь. Операторы $I_a^{<1>}$ и $I_a^{<2>}$, где $a = x, y, z$ – компоненты углового момента, представлены матрицами Паули в двумерных пространствах S_1 и S_2 , которые имеют независимые базисы

$$(f_p^{<1>} f_m^{<1>}) (f_p^{<2>} f_m^{<2>}), \quad p = \frac{1}{2}, \quad m = -\frac{1}{2}.$$

Величина энергетического множителя E_d в правой части равенства и входящие в него параметры обсуждаются ниже применительно к молекулам воды и водорода. Из базисных векторов двумерных представлений строится базис (j_1, m_1, j_2, m_2) четырехмерного пространства S несвязанного представления двух угловых моментов [2]

$$a = f_p^{<1>} f_p^{<2>}, b = f_p^{<1>} f_m^{<2>}, c = f_m^{<1>} f_p^{<2>}, d = f_m^{<1>} f_m^{<2>}.$$

С помощью матричного представления можно проверить, что гамильтониан коммутирует с оператором I^2 квадрата суммарного углового момента, где

$$I^2 = (I_x^{<1>} + I_x^{<2>})^2 + (I_y^{<1>} + I_y^{<2>})^2 + (I_z^{<1>} + I_z^{<2>})^2.$$

Это означает, что оператор I^2 сохраняется и что гамильтониан действует в пределах каждого из подпространств представления, где оператор I^2 имеет одинаковое собственное значение [3]. Коммутативность гамильтониана H и оператора I^2 позволяет рассматривать действие H независимо в каждом из подпространств, на которые разлагается пространство S при переходе к базису типа (J, M) связанного представления [2]. Это стандартная процедура разложения S на сумму подпространств, в каждом из которых реализовано неприводимое представление группы $SU(2)$ [3]. В данном примере это подпространства размерности 3 и 1. Из сказанного выше следует, что магнитное дипольное взаимодействие спиновых моментов не нарушает закона сохранения суммарного момента количества движения.

Преобразование гамильтониана общего вида (1) к сумме частных гамильтонианов H_k , каждый из которых действует в k -ом пространстве неприводимого представления, и приведение H_k к диагональному виду основано на Q - и R -вращениях в этих пространствах:

$$\frac{H_k}{E_d} = (I^{<1>}, I^{<2>}) - 3[(QR)^{-1} I_z^{<1>} I_z^{<2>} (QR)]. \quad (2)$$

Эти вращения являются унитарными операциями над квантовой системой, они не изменяют собственных значений оператора I^2 и гамильтониана [3]. Выражения для Q и R в форме матриц приводятся ниже. Предполагается, что в формуле (2) все операторы определены в k -ом пространстве представления. Индекс k при операторах не ставится, чтобы не усложнять формулы. Так как далее рассмотрение ведется в каждом из пространств независимо, то это соглашение относительно индекса сохраняется.

Первоначально вращения определены в пространствах S_1 и S_2 , а затем они переносятся в пространства неприводимых представлений:

$$\sin(\Theta) \cos(\phi) I_x^{<1,2>} + \sin(\Theta) \sin(\phi) I_y^{<1,2>} + \cos(\Theta) I_z^{<1,2>} = (QR)^{-1} I_z^{<1,2>} (QR),$$

$$Q = \begin{bmatrix} \cos\left(\frac{\Theta}{2}\right) & \sin\left(\frac{\Theta}{2}\right) \\ -\sin\left(\frac{\Theta}{2}\right) & \cos\left(\frac{\Theta}{2}\right) \end{bmatrix}, \quad R = \begin{bmatrix} \exp\left(i\frac{\phi}{2}\right) & 0 \\ 0 & \exp\left(-i\frac{\phi}{2}\right) \end{bmatrix}.$$

Например, в нашем случае для трехмерного и одномерного подпространств в базисах $[a \frac{1}{2}\sqrt{2}(b+c) d]$, $[\frac{1}{2}\sqrt{2}(b-c)]$ типа (J, M) матрицы вращений записываются следующим образом с помощью D -функций [2]:

$$Q = \begin{bmatrix} \cos^2\left(\frac{1}{2}\Theta\right) & \frac{1}{2}\sqrt{2} \sin(\Theta) & \sin^2\left(\frac{1}{2}\Theta\right) \\ \frac{-1}{2}\sqrt{2} \sin(\Theta) & \cos(\Theta) & \frac{1}{2}\sqrt{2} \sin(\Theta) \\ \sin^2\left(\frac{1}{2}\Theta\right) & \frac{-1}{2}\sqrt{2} \sin(\Theta) & \cos^2\left(\frac{1}{2}\Theta\right) \end{bmatrix}, \quad R = \begin{pmatrix} \exp(-i\phi) & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \exp(i\phi) \end{pmatrix}$$

$$Q = 1$$

$$R = 1$$

Следующий этап преобразования основывается на том, что первый член гамильтонианов H_k в базисе типа (J, M) пропорционален единичной матрице E и поэтому инвариантен относительно вращений:

$$I_x^{<1>} I_x^{<2>} + I_y^{<1>} I_y^{<2>} + I_z^{<1>} I_z^{<2>} = \frac{1}{2} [I^2 - (I^{<1>})^2 - (I^{<2>})^2]$$

$$I^2 = J(J+1)E \quad (I^{<1,2>})^2 = J^{<1,2>}(J^{<1,2>} + 1)E$$

$$(QR)(I^{<1>}, I^{<2>})(QR)^{-1} = (I^{<1>}, I^{<2>}).$$

Здесь операторы I^2, E определены в k -ом пространстве представления. На этом приведение H_k к диагональному виду заканчивается:

$$(QR) \frac{H_k}{E_d} (QR)^{-1} = (I^{<1>}, I^{<2>}) - 3(I_z^{<1>} I_z^{<2>}).$$

Собственные значения H_k находятся сложением двух диагональных матриц, например, в нашем случае для $J = 1$ и $J = 0$ имеем

$$(QR) \frac{H_1}{E_d} (QR)^{-1} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \left(\frac{-3}{4} \right) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$(QR) \frac{H_0}{E_d} (QR)^{-1} = \frac{-3}{4} (1) + \left(\frac{-3}{4} \right) (-1) = 0.$$

Координаты собственных векторов в базисе типа (JM) находятся перемножением Q - и R -матриц. Координаты собственного вектора для первого сверху собственного значения располагаются в первом столбце матрицы.

Энергетический множитель E_d представляет собой энергию одного дипольного момента в магнитном поле, которое создает другой дипольный момент. Множитель E_d в (1) записан в рационализированной системе уравнений Максвелла в системе единиц MKSQ поэтому содержит размерный множитель μ_0 , проницаемость вакуума, и множитель 4π , которые в гауссовой системе единиц отсутствуют. Остальные параметры в (1) – гиромагнитное отношение γ для протонов и расстояние r между точками пространства, где расположены протоны. Последний параметр различается в молекулах воды и водорода; здесь используются расстояния для свободных молекул.

$$\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ кг}\cdot\text{м}/\text{Кл}^2, \quad \gamma = 2,6751 \cdot 10^8 \text{ Кл}/\text{кг},$$

$$r = 1,5139 \cdot 10^{-8} \text{ см}, \quad E_d = 34,61 \text{ кг}\cdot\text{ч} (\text{H}_2\text{O}),$$

$$r = 0,74667 \cdot 10^{-8} \text{ см}, \quad E_d = 288,5 \text{ кг}\cdot\text{ч} (\text{H}_2).$$

Как показано выше, энергетический спектр двух спиновых моментов за счет прямого магнитного дипольного взаимодействия не зависит от направления вектора n в физическом пространстве. Это объясняется тем, что в пространстве нет выделенных направлений, например, внешнего магнитного поля или кристаллографических осей, относительно которых можно было бы определить ориентацию вектора n . Дипольное взаимодействие оставляет уровни энергии вырожденными по магнитному квантовому числу m , как если бы действовало электрическое, а не магнитное поле. Вырождение снимается внешним магнитным полем, индукцию которого следует сравнивать с индукцией поля в системе двух протонов. Оценка этой величины получается, если характерную энергию E_d представить как энергию диполя μ во внешнем поле B_d . Например, для молекулы воды,

$$\mu = 1,4106 \cdot 10^{-24} \text{ м}^2 \cdot \text{Кл/с}, \quad B_d = 16,26 \text{ Гс}.$$

Таким образом, настоящее рассмотрение, которое выполнено без учета внешнего магнитного поля, остается справедливым, если индукция внешнего поля B удовлетворяет условию $B \ll B_d$.

Настоящая работа частично поддержана РФФИ.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] А б р а г а м А. Ядерный магнетизм, М., ИЛ, 1963.
- [2] З а р Р. Теория углового момента, М., Мир, 1993.
- [3] С а д б е р и А. Квантовая механика и физика элементарных частиц, М., Мир, 1989.

Институт общей физики РАН

Поступила в редакцию 9 апреля 1997 г.