

УДК 539 183

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА УСРЕДНЕНИЯ В ПРОБЛЕМЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АТОМОВ С РАДИОЧАСТОТНЫМИ ПОЛЯМИ

В. И. Ахлюстин, Ю. М. Петухов

Для дифференциальных уравнений, описывающих движение широкого класса диссипативных систем, выявлены особенности применения метода усреднения, позволяющие учитывать в решениях вклады от медленно осциллирующих членов. Рассмотрено применение метода усреднения при анализе действия возмущающего циркулярно поляризованного РЧ-поля на атомную систему.

Описание взаимодействия атомной системы с радиочастотными (РЧ) полями может быть проведено методами квантовой теории (концепция «одетого» атома [1]), полуклассически [2] и, наконец, с классических позиций — путем решения уравнений Блоха. Причем, вследствие того, что уравнения Блоха эквивалентны уравнению Шредингера для системы спинов $1/2$ [3], классическое описание допускает возможность анализа и чисто квантовых эффектов, к примеру, многоквантовых резонансов [4] и радиационных сдвигов частоты атомных переходов [5–7]. Несомненным достоинством классического описания является его наглядность и простота физической интерпретации.

Несмотря на различие подходов к описанию взаимодействия атомной системы с полем излучения они имеют общую центральную идею, заключающуюся в выборе такого преобразования гамильтониана системы или уравнений движения, при котором уравнения или их главные члены не содержат явной зависимости от времени. В концепции «одетого» атома эта цель достигается рассмотрением электромагнитных полей как квантовой системы: электромагнитные поля являются тогда операторами, действующими на радиационные состояния. В полуклассической теории выделение главных «квазистатических» членов осуществляется путем соответствующего унитарного преобразования гамильтониана системы, позволяющего перенести явную зависимость от времени на такие члены этого гамильтониана, которыми при дальнейшем рассмотрении можно пренебречь.

При решении уравнений Блоха одним из преобразований, позволяющих устранить явную зависимость от времени из этих уравнений, является метод усреднения [8]. Среди основных результатов, которые получают при применении этого метода к задачам магнитного резонанса, следует выделить наличие радиационных сдвигов резонансной частоты, вызываемых возмущающими РЧ-полями*. Однако при стремлении частоты возмущающего РЧ-поля к частоте поля, индуцирующего резо-

* Следует четко различать характер действия РЧ-полей на атомную систему. При наличии двух взаимодействующих с атомной системой РЧ-полей одно поле рассматривается как возмущающее атом, другое — как индуцирующее переходы между уровнями возмущенной атомной системы.

нанс, сдвиг частоты неограниченно возрастает, что является недостатком метода усреднения в его классической трактовке, позволяющего устранить вибрационные члены из уравнений Блоха лишь в том случае, когда частоты вибраций достаточно велики. Мы покажем, что модификация схемы усреднения, заключающаяся в выборе иной, нежели в [8], стандартной формы уравнений, позволяет получить физически непротиворечивые результаты. Представленная схема усреднения, в которой стандартная форма дифференциальных уравнений явно содержит параметр загухания δ , может быть применена при анализе широкого класса диссипативных систем.

1. СХЕМА УСРЕДНЕНИЯ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ, ОПИСЫВАЮЩИХ ДВИЖЕНИЕ ДИССИПАТИВНЫХ СИСТЕМ

В отличие от [8] стандартную форму уравнений будем брать в виде

$$\frac{dx}{dt} + \delta(x - x_0) = \mu X(x, t), \quad (1)$$

где $X(x, t) = \sum_{\nu} X_{\nu}(x) e^{i\nu t}$, μ — параметр малости, а x_0 — стационарное решение системы (1) при $\mu = 0$. В (1) принята векторная форма записи входящих в нее величин x и X [9]. Согласно идее Н. Н. Боголюбова, под усреднением понимается замена переменных

$$x = \bar{x} + \mu u_1(\bar{x}, t) + \mu^2 u_2(\bar{x}, t) + \dots,$$

позволяющая исключить явную зависимость от времени в уравнениях для \bar{x} с точностью до любой требуемой степени μ . Полагаем, что переменные \bar{x} при этом удовлетворяют уравнению

$$\frac{d\bar{x}}{dt} + \delta(\bar{x} - x_0) = \mu A_1(\bar{x}) + \mu^2 A_2(\bar{x}) + \dots \quad (2)$$

В большинстве случаев наибольший интерес представляют незатухающие решения уравнения (1), определяемые, очевидно, через стационарные решения (2). Поэтому для нахождения стационарных решений перепишем (2) в виде

$$\frac{d\bar{x}}{dt} = 0, \quad \delta(\bar{x} - x_0) = \mu A_1(\bar{x}) + \mu^2 A_2(\bar{x}) + \dots$$

Определение неизвестных функций u_i и A_i производится аналогично [9]. В рассматриваемом случае u_i и A_i находятся из уравнений

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_1}{\partial t} + \delta u_1 &= \sum_{\nu} X_{\nu} e^{i\nu t} - A_1(\bar{x}), \\ \frac{\partial u_2}{\partial t} + \delta u_2 &= \sum_{\nu} u_1 \frac{\partial X_{\nu}}{\partial x} e^{i\nu t} - A_2(\bar{x}), \\ &\dots \end{aligned}$$

т. е. любая функция u_k удовлетворяет соотношению

$$\frac{\partial u_k(\bar{x}, t)}{\partial t} + \delta u_k(\bar{x}, t) = S_k(\bar{x}, t) - A_k(\bar{x}).$$

Поэтому, если принять $A_k(\bar{x}) = S_k(\bar{x}, t)$, где черта над S_k означает усреднение по явно входящему времени, то u_k являются решениями уравнений

$$\frac{\partial u_k}{\partial t} + \delta u_k = S_k - \bar{S}_k. \quad (3)$$

Определяя последовательно $A_k(\bar{x})$ и $u_k(\bar{x}, t)$ для $k = 1, 2, \dots$, можно получить систему n -го приближения для x_n :

$$\delta(\bar{x}_n - x_0) = \mu A_1(\bar{x}_n) + \dots + \mu^n A_n(\bar{x}_n), \quad (4)$$

и незатухающие решения уравнения (1) с точностью до членов $O(\mu^n)$:

$$x_n = \bar{x}_n + \mu u_1(\bar{x}_n, t) + \dots + \mu^{n-1} u_{n-1}(\bar{x}_n, t). \quad (5)$$

Существенным отличием от применяемой в [8] схемы усреднения является вид уравнений (3) для коэффициентов u_k , благодаря чему наличие в них постоянных членов не приводит к появлению секулярных членов, т. е. членов, пропорциональных t^m ($m \geq 1$) в решениях u_k . Это дает возможность исследовать решения (5) уравнения (1) в области малых частот осцилляций, когда одна или несколько частот стремятся к нулю.

Действительно, если рассмотреть уравнение (1), в котором явно выделен вибрационный член $X_\xi e^{i\xi t}$,

$$\frac{dx}{dt} + \delta(x - x_0) = \mu [X_0(x) + X_\xi(x) e^{i\xi t} + \sum_{\nu} X_\nu(x) e^{i\nu t}], \quad (6)$$

то из сравнения решения x'_2 этого уравнения, полученного путем предельного перехода $\xi \rightarrow 0$ в (5), с решением x''_2 , найденным из этого же уравнения, в котором сразу положено $\xi = 0$,

$$\frac{dx}{dt} + \delta(x - x_0) = \mu [X_0(x) + X_\xi(x) + \sum_{\nu} X_\nu(x) e^{i\nu t}], \quad (7)$$

можно показать (см. Приложение), что

$$\delta^2(x'_2 - x''_2) = O(\mu^2).$$

Здесь x'_2 и x''_2 — определенные, согласно выражению (5), решения второго приближения соответственно уравнений (6) и (7). Отсюда следует, что решение x'_2 , отличаясь от x''_2 на величины второго порядка малости, удовлетворяет уравнению (7) с той же точностью, что и x''_2 . Поэтому можно утверждать, что решение (5) будет справедливым и для случая, когда частота одного или нескольких вибрационных членов стремится к нулю. Однако его погрешность, оценка которой производится ниже на примере уравнений Блоха, становится в этом случае максимальной.

Как известно, уравнения Блоха, на которых базируется описание явления магнитного резонанса, являются линейными уравнениями, коэффициентами которых служат расстройка $\Delta\Omega$, характеризующая соответствующий резонанс, а также возмущающие и индуцирующие резонанс РЧ-поля соответственно с амплитудами ω_1 и Ω_1 . Достаточно корректное применение метода усреднения имеет место лишь в предположении малости данных коэффициентов. Возникает вопрос — по сравнению с чем должны быть малы эти коэффициенты, поскольку

параметр малости μ является формальным параметром и в окончательных выражениях он полагается равным единице. В схеме усреднения [8] колебательные члены $X, e^{i\nu t}$ вызывают вибрации x около \bar{x} вида $X, \frac{e^{i\nu t}}{i\nu}$, что приводит к условию

$$\frac{|\Delta\Omega|}{\nu}, \frac{\Omega_1}{\nu}, \frac{\omega_1}{\nu} \ll 1.$$

В рассматриваемой схеме усреднения колебательные члены $X, e^{i\nu t}$ вызывают, согласно (3), вибрации x около \bar{x} вида $X, e^{i\nu t}/(\delta + i\nu)$. Это позволяет ввести новый параметр малости, не связанный с вибрационными частотами ν . Действительно, в силу линейности уравнений Блоха вибрационные колебания не превосходят по величине $\frac{|c||x|}{\delta}$, где роль коэффициентов c играют величины $\Delta\Omega, \Omega_1, \omega_1$. Следовательно, чтобы колебания x около \bar{x} были малы, достаточно выполнения условия

$$\frac{\Delta\Omega}{\delta}, \frac{\Omega_1}{\delta}, \frac{\omega_1}{\delta} \ll 1. \quad (8)$$

При этом на частоты ν никаких ограничений не накладывается. Таким образом; погрешность приближенных решений в окрестности частот $\nu \ll \delta$ определяется параметром малости $\mu = |c|/\delta$. При $\nu \gg \delta$ результаты применения рассматриваемой схемы усреднения совпадают с [8].

Ниже рассматривается применение предложенной схемы усреднения при анализе действия вращающихся магнитных полей на систему спинов.

2. ВЛИЯНИЕ ВОЗМУЩАЮЩЕГО ВРАЩАЮЩЕГОСЯ РЧ-ПОЛЯ НА ХАРАКТЕРИСТИКИ ЛИНИИ ПАРАМАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА

Уравнения Блоха, описывающие движение намагниченности системы спинов, помещенных в магнитное поле

$$\gamma \mathbf{H}(t) = \{\Omega_1 \cos \Omega t + \omega_1 \cos \omega t, -\Omega_1 \sin \Omega t - \omega_1 \sin \omega t, \omega_0\}$$

в системе координат, вращающейся вокруг оси Oz с частотой Ω РЧ-поля, индуцирующего резонанс, имеют вид

$$\dot{m} + \delta m = -i \Delta\Omega_0 m + i(\Omega_1 + \omega_1 e^{i\Delta\omega t})M_z, \quad (9)$$

$$\dot{M}_z + \delta(M_z - M_0) = -\text{Im}[m(\Omega_1 + \omega_1 e^{-i\Delta\omega t})].$$

Здесь $m = m_x + im_y$, $\Delta\Omega_0 = \omega_0 - \Omega$, $\Delta\omega = \Omega - \omega$, δ — скорость релаксации намагниченности (принято, что скорости продольной и поперечной компонент одинаковы), M_0 — стационарная намагниченность, определяемая либо магнитной восприимчивостью системы спинов, либо процессом оптической накачки. При выполнении условия (8) система уравнений (9) представляет собой систему уравнений в стандартной форме (1). Для нахождения стационарных решений уравнений (9), учитывающих влияние возмущающего РЧ-поля, строим систему второго приближения. Используя (3) и (4), получим

$$\begin{aligned} (\delta_2 + i \Delta\Omega_0) \bar{m} - i \Omega_1 \bar{M}_z &= 0, \\ \text{Im}(\Omega_1 \bar{m}) + \delta_1 \bar{M}_z &= \delta M_0, \end{aligned} \quad (10)$$

где

$$\Delta\Omega'_0 = \Delta\Omega_0 + \frac{\omega_1^2 \Delta\omega}{2(\delta^2 + \Delta\omega^2)}, \quad \delta_k = \delta \left[1 + \frac{\omega_1^2}{k(\delta^2 + \Delta\omega^2)} \right] \quad (k = 1, 2). \quad (11)$$

После решения системы (10) можно, принимая во внимание (5), найти решение системы (9). В частности, поперечная составляющая намагниченности приобретает вид

$$m = u + iv = \frac{i\delta M_0 \Omega_1 (\delta - i\Delta\Omega'_0)}{\delta_2 \delta_1^2 + \delta_2 \Delta\Omega_0^2 + \Omega_1^2 \delta_1} \left[1 + \frac{\omega_1 \delta_1 + i\Delta\Omega'_0}{\Omega_1 \delta + i\Delta\omega} e^{i\Delta\omega t} \right].$$

Из этого выражения следует, что присутствие возмущающего РЧ-поля приводит к заметным изменениям в поведении поперечной намагниченности. Зависимость параметров (11) от Ω служит причиной искажения формы сигналов поглощения v и дисперсии u от лоренцевых кривых. Кроме того, принимаемые на частоте Ω сигналы u и v модулированы колебаниями с частотой $\Delta\omega$, причем амплитуды модуляций в области значений $\Delta\omega \leq \delta$ по порядку величины совпадают с постоянными составляющими этих сигналов. Это обстоятельство может послужить серьезной помехой при экспериментальном исследовании проблемы взаимодействия РЧ-полей в магнитном резонансе в случае, когда частота возмущающего РЧ-поля попадает в окрестность полосы пропускания спиновой системы.

Как известно [9], взаимодействие РЧ-полей с атомами приводит к радиационному сдвигу частоты магнитного резонанса. Если определить резонансную частоту ω'_0 из условия максимума постоянной составляющей сигнала поглощения (обозначенной v_c)

$$\left. \frac{dv_c}{d\Omega} \right|_{\Omega=\omega'_0} = 0,$$

то с учетом (8) нетрудно получить следующее выражение для сдвига ε резонансной частоты:

$$\varepsilon = \omega'_0 - \omega_0 = \frac{\omega_1^2}{2} \frac{\Delta\omega_0(3\delta^2 + \Delta\omega_0^2)}{(\delta^2 + \Delta\omega_0^2)^2}, \quad (12)$$

где $\Delta\omega_0 = \omega_0 - \omega$. Отметим, что выражение (12) совпадает с найденными в [10, 11] выражениями для сдвига резонансной частоты, обязанного взаимодействию атомной системы с возмущающим РЧ-полем.

3. ВЛИЯНИЕ ВРАЩАЮЩЕГОСЯ РЧ-ПОЛЯ НА ХАРАКТЕРИСТИКИ ЛИНИЙ ПАРАМЕТРИЧЕСКОГО РЕЗОНАНСА [12]

Пусть на атомную систему, ориентируемую вдоль оси Ox циркулярно-поляризованным лучом света и помещенную в магнитное поле $\gamma H_{\parallel} = k(\omega_0 + \Omega_1 \cos \Omega t)$, действует возмущающее РЧ-поле $\gamma H_{\perp} = i\omega_1 \cos \omega t + j\omega_1 \sin \omega t$. В этом случае движение намагниченности атомной системы описывается уравнениями типа Блоха:

$$\begin{aligned} \dot{M} + \delta(M - M_0) &= -i(\omega_0 + \Omega_1 \cos \Omega t)M + i\omega_1 e^{-i\omega t} M_z, \\ \dot{M}_z + \delta M_z &= -\text{Im}(\omega_1 M e^{i\omega t}), \end{aligned}$$

где $M = M_x + iM_y$, M_0 — стационарная намагниченность, создаваемая в процессе оптической накачки.

Посредством преобразований $M = m e^{-i\Phi}$, $m = m_n e^{i n \Omega t}$, где $\dot{\Phi} = \Omega_1 \cos \Omega t$, эти уравнения приводятся к виду

$$\begin{aligned} \dot{m}_n + \delta(m_n - M_0 J_n) &= -i \Delta \Omega_n m_n + i \omega_1 M_z \sum_q J_{n+q} e^{i(q\Omega - \omega)t}, \\ \dot{M}_z + \delta M_z &= -\text{Im} [\omega_1 m_n \sum_q J_{n+q} e^{-i(q\Omega - \omega)t}], \end{aligned} \quad (13)$$

где $\Delta \Omega_n = \omega_0 + n\Omega$, J_m — функция Бесселя первого рода порядка m с аргументом Ω_1/Ω . Уравнения (13) имеют стандартную форму (1), если, согласно (8), положить $\Delta \Omega_n$, $\omega_1 \ll \delta$.

В соответствии с (4) находим усредненную систему второго приближения:

$$\begin{aligned} [(\delta + \kappa_n) + i(\Delta \Omega_n + \epsilon_n)] \bar{m}_n &= \delta M_0 J_n, \\ (\delta + 2\kappa_n) \bar{M}_z &= 0, \end{aligned}$$

где величины

$$\begin{aligned} \kappa_n &= \frac{\omega_1^2}{2} \sum_q J_{n+q}^2 \frac{\delta}{\delta^2 + (q\Omega - \omega)^2}, \\ \epsilon_n &= \frac{\omega_1^2}{2} \sum_q J_{n+q}^2 \frac{q\Omega - \omega}{\delta^2 + (q\Omega - \omega)^2} \end{aligned} \quad (14)$$

представляют уширение и сдвиг частоты n -го резонанса, обязанные возмущающему РЧ-полю. В отличие от сдвига частоты парамагнитного резонанса (12), который определяется только характеристиками возмущающего РЧ-поля, величины (14) зависят также и от характеристик поля $\Omega_1 \cos \Omega t$, индуцирующего параметрический резонанс.

Наличие сдвига и уширения резонансных линий не единственное следствие взаимодействия атомной системы с возмущающим РЧ-полем. В случае, когда вибрационные частоты сравнимы с характерными для данной системы скоростями изменения, т. е. когда $|\omega - k\Omega| \leq \delta$, где k — целое число, влияние этого взаимодействия уже не может быть сведено лишь к поправкам, даваемым вторым приближением, а сказывается непосредственно на характере поведения данной системы. Учитывая (5), можно показать, что наличие возмущающего РЧ-поля приводит к отличной от нуля компоненте M_z , которая при $\omega = k\Omega$ становится равной

$$M_z = \frac{\Delta \Omega_n \omega_1 J_{n+k}}{\delta^2 + \Delta \Omega_n^2 + \omega_1^2 J_{n+k}^2} M_0 J_n.$$

При этом сигналы поглощения и дисперсии параметрического резонанса испытывают модуляцию на частотах, пропорциональных $(\omega - k\Omega)$, причем амплитуды модуляций по порядку величины сравнимы, как и в случае обычного парамагнитного резонанса, с постоянными составляющими этих сигналов.

Влияние возмущающих РЧ-полей на характеристики линий параметрического резонанса исследовалось нами ранее [7], где при помощи

* Строго говоря, мы должны искать решение в виде суммы $m = \sum_k m_k e^{i k \Omega t}$.

Однако наличие хорошо разрешенной структуры сигналов параметрического резонанса позволяет пренебречь влиянием на m_n остальных членов суммы.

метода последовательных приближений были получены выражения для сдвига и уширения, совпадающие с (14). Экспериментальные результаты, представленные в этой работе, свидетельствуют об удовлетворительном соответствии с теорией.

В заключение еще раз остановимся на основных результатах данной работы.

Мы показали, что переход к стандартной форме уравнений вида (1) позволяет находить стационарные решения этих уравнений в окрестности малых значений вибрационных частот с точностью до параметра малости, не связанного с этими частотами. В результате применения модифицированной схемы усреднения к проблеме взаимодействия атомной системы с РЧ-полями показано, что такое взаимодействие приводит не только к сдвигу и уширению резонансных линий, но в определенных условиях сказывается непосредственно на характере поведения атомной системы.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Ограничиваясь вторым приближением, для решения уравнения (6) имеем следующее выражение:

$$x_2 = \bar{x} + \mu \left(\frac{X_\xi(\bar{x})}{\delta + i\xi} e^{i\xi t} + \sum'_\nu \frac{X_\nu(\bar{x})}{\delta + i\nu} e^{i\nu t} \right),$$

которое при $\xi \rightarrow 0$ становится равным

$$x'_2 = \bar{x} + \mu \left(\frac{1}{\delta} X_\xi(\bar{x}) + \sum'_\nu \frac{X_\nu(\bar{x})}{\delta + i\nu} e^{i\nu t} \right), \quad (\text{П. 1})$$

где \bar{x} является решением уравнения

$$\delta(\bar{x} - x_0) = \mu X_0(\bar{x}) + \mu^2 \sum'_\nu \frac{X_\nu(\bar{x})}{\delta + i\nu} \frac{\partial X_{-\nu}(\bar{x})}{\partial \bar{x}}. \quad (\text{П. 2})$$

Для решения x''_2 уравнения (7) получаем

$$x''_2 = \bar{\bar{x}} + \mu \sum'_\nu \frac{X_\nu(\bar{\bar{x}})}{\delta + i\nu} e^{i\nu t}, \quad (\text{П. 3})$$

где $\bar{\bar{x}}$ находится из уравнения

$$\delta(\bar{\bar{x}} - x_0) = \mu [X_0(\bar{\bar{x}}) + X_\xi(\bar{\bar{x}})] + \mu^2 \sum'_\nu \frac{X_\nu(\bar{\bar{x}})}{\delta + i\nu} \frac{\partial X_{-\nu}(\bar{\bar{x}})}{\partial \bar{\bar{x}}}. \quad (\text{П. 4})$$

Оценим разность решений x'_2 и x''_2 . Вычитая выражение (П. 4) из (П. 1) с учетом (П. 2) и (П. 3), получим

$$\delta(x'_2 - x''_2) = \mu [X_0(\bar{x}) - X_0(\bar{\bar{x}})] + \mu [X_\xi(\bar{x}) - X_\xi(\bar{\bar{x}})] + O_1(\mu^2)$$

или

$$\delta(x'_2 - x''_2) = \mu \left[\frac{\partial X_0}{\partial x} + \frac{\partial X_\xi}{\partial x} \right] (\bar{x} - \bar{\bar{x}}) + O_1(\mu^2),$$

откуда, учитывая вновь (П. 2) и (П. 3), найдем

$$\delta^2(x'_2 - x''_2) = O(\mu^2).$$

ЛИТЕРАТУРА

1. C. Cohen-Tannoudji and S. Haroch, J. Phys., **30**, 125, 133 (1969).
2. D. T. Pegg and G. W. Series, Proc. Roy. Soc., **A332**, 281 (1973).
3. R. P. Feynmann, F. L. Vernon and R. W. Hellwarth, J. Appl. Phys., **28**, 49 (1957).
4. N. Tsukada, T. Yabuzaki and T. Ogawa, J. Phys. Soc. Japan, **35**, 230 (1973).
5. J. Seiden, Compt. Rend., **240**, 2228 (1955).
6. Р. М. Умарходжаев, Вестник МГУ, серия физическая, № 4, стр. 437 (1970).
7. И. Е. Гринько, А. Л. Коткин, А. Н. Кузнецов, Ю. М. Петухов, Р. М. Умарходжаев, И. А. Шушпанов, Изв. вузов — Радиофизика, **19**, № 9, 1346 (1976).
8. Н. Н. Боголюбов, Ю. А. Митропольский, Симптоматические методы в теории нелинейных колебаний, изд. Наука, М., 1974.
9. В. М. Волосов, УМН, **17**, 3 (1962).
10. Б. И. Левит, Ю. М. Петухов, ЖТФ, **45**, 1350 (1975).
11. B. Gurkut, J. Shermann and C. Audoin, Compt. Rend., **272**, 739 (1971).
12. Е. Б. Александров, О. Б. Константинов, В. И. Перель, В. А. Ходовой, ЖЭТФ, **45**, 503 (1963).

Поступила в редакцию
24 января 1977 г.

APPLICATION OF AVERAGING METHOD IN THE PROBLEM OF ATOM
INTERACTION WITH RADIO FREQUENCY FIELDS

V. I. Akhlyustin, Yu. M. Petukhov

For differential equations describing the motion of a wide class of dissipative systems the peculiarities of application of the average method permitting to take into account contributions from slowly oscillating terms in solutions are found out. The application of the averaging method is considered when analysing the influence of disturbing circularly polarized RF field on the atom system.