УДК 539.143.43:539.199.

К ТЕОРИИ СПИНОВОГО ОБМЕНА В СИСТЕМЕ ТРЁХ СПИНОВ $\frac{1}{2}$

Карнаух Г.Е.

Институт Проблем Химической Физики РАН, Черноголовка, Моск.обл., Россия,
karnaukh@icp.ac.ru

Исследован спиновый обмен (СО) в системах трёх и двух спинов $\frac{1}{2}$. Работа опирается на дух книги К.И. Замараева, Ю.Н. Молина и К.М. Салихова «Спиновый обмен» [1], указывающий, что СО является наблюдаемым примером важного общефизического процесса.

На трёхспиновой системе показано, что СО это обмен спинами с сохранением своего состояния, а на двухспиновой – как это происходит. Тем самым показано, что спины являются тождественными квантовыми объектами. Поэтому на каждом ядре во всё время процесса СО будет находиться спин, испытывающий воздействие продольного или поперечного, обменного, по происхождению, магнитного поля.

В рамках законов сохранения энергии и магнитного момента при СО в основу положена неизменность гамильтониана спин-спинового взаимодействия (ГССВ), то есть множества его собственных термов $a_k\left(\lambda_k, \Psi_k\right)$. Терм – это пара: собственные число и волновая функция собственного состояния (ВФСС). В силу того, что дважды применённый СО одной пары спинов есть тождественное преобразование, возможны два и только два случая: термы сохраняются $a_k \to a_k$ или попарно обмениваются $a_k \leftrightarrow a_l$. Рассмотрены следующие гамильтонианы спин-спинового взаимодействия (ГССВ): секулярная часть диполь-дипольного взаимодействия, обменный (Гейзенберга) и zz-взаимодействия.

$$\hat{H}_d^z = b_{12}\left(3\hat{S}_1^z\hat{S}_2^z - \vec{S}_1\vec{S}_2\right) + b_{23}\left(3\hat{S}_2^z\hat{S}_3^z - \vec{S}_2\vec{S}_3\right) + b_{31}\left(3\hat{S}_3^z\hat{S}_1^z - \vec{S}_3\vec{S}_1\right)$$

$$\hat{H}_{ex} = J_{12}\hat{E}x_{12} + J_{23}\hat{E}x_{23} + J_{31}\hat{E}x_{31},\ J_{jk}\hat{E}x_{jk} = \frac{J_{jk}}{2}\left(\hat{P}_{jk}^t - \hat{P}_{jk}^s\right)$$

$$\hat{H}_{zz} = c_{12}\hat{S}_1^z\hat{S}_2^z + c_{23}\hat{S}_2^z\hat{S}_3^z + c_{31}\hat{S}_3^z\hat{S}_1^z$$

где $\hat{P}_{jk}^{t}$ и $\hat{P}_{jk}^{s}$ проекторы на триплет и синглет пары спинов (j,k).

Далее были получены и исследованы их собственные термы при СО.

Термы $\hat{H}_d^z : a_{11} = \left(\frac{\sigma_1}{2}, \uparrow\uparrow\uparrow\right); \quad a_{81} = \left(\frac{\sigma_1}{2}, \downarrow\downarrow\downarrow\right)$

$$a_{21} = \left(\frac{-\sigma_1 - \chi}{4}, \frac{\left(3(\sigma_1 - 2b_{23}) + \chi\right)\downarrow\uparrow\uparrow + \left(3(\sigma_1 - 2b_{31}) + \chi\right)\uparrow\downarrow\uparrow + \left(3(\sigma_1 - 2b_{12}) + \chi\right)\uparrow\uparrow\downarrow}{\sqrt{6\chi(\chi + \sigma_{1.})}}\right)$$

$$a_{71} = \left(\frac{-\sigma_1 - \chi}{4}, \frac{\left(3(\sigma_1 - 2b_{23}) + \chi\right)\uparrow\downarrow\downarrow + \left(3(\sigma_1 - 2b_{31}) + \chi\right)\downarrow\uparrow\downarrow + \left(3(\sigma_1 - 2b_{12}) + \chi\right)\downarrow\downarrow\uparrow}{\sqrt{6\chi(\chi + \sigma_{1.})}}\right)$$

$$a_{31} = \left(\frac{-\sigma_1 + \chi}{4}, \frac{\left(3(\sigma_1 - 2b_{23}) - \chi\right)\downarrow\uparrow\uparrow + \left(3(\sigma_1 - 2b_{31}) - \chi\right)\uparrow\downarrow\uparrow + \left(3(\sigma_1 - 2b_{12}) - \chi\right)\uparrow\uparrow\downarrow}{\sqrt{6\chi(\chi - \sigma_{1.})}}\right)$$

$$a_{61} = \left(\frac{-\sigma_1 + \chi}{4}, \frac{\left(3(\sigma_1 - 2b_{23}) - \chi\right)\uparrow\downarrow\downarrow + \left(3(\sigma_1 - 2b_{31}) - \chi\right)\downarrow\uparrow\downarrow + \left(3(\sigma_1 - 2b_{12}) - \chi\right)\downarrow\downarrow\uparrow}{\sqrt{6\chi(\chi - \sigma_{1.})}}\right)$$

$$a_{41} = \left(0, \frac{b_{23}\uparrow_1 s(2,3) + b_{31}\uparrow_2 s(3,1) + b_{12}\uparrow_3 s(1,2)}{\sqrt{\sigma_1^2 - 3\sigma_2}}\right) \quad \sigma_1 = b_{12} + b_{23} + b_{31}; \chi = \sqrt{9\sigma_1^2 - 24\sigma_2}$$

$$a_{51} = \left(0, \frac{b_{23}\downarrow_1 s(2,3) + b_{31}\downarrow_2 s(3,1) + b_{12}\downarrow_3 s(1,2)}{\sqrt{\sigma_1^2 - 3\sigma_2}}\right) \quad \sigma_2 = b_{12}b_{23} + b_{23}b_{31} + b_{31}b_{12};$$

$$s(j,k) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\uparrow_j\downarrow_k - \downarrow_j\uparrow_k\right)$$

Термы $\hat{H}_{ex} : a_{12} = \left(\frac{\sigma_1}{2}, \uparrow\uparrow\uparrow\right); \quad a_{82} = \left(\frac{\sigma_1}{2}, \downarrow\downarrow\downarrow\right)$

$$a_{22} = \left(\frac{\sigma_1}{2}, \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\downarrow\uparrow\uparrow + \uparrow\downarrow\uparrow + \uparrow\uparrow\downarrow\right)\right); \quad a_{72} = \left(\frac{\sigma_1}{2}, \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\uparrow\downarrow\downarrow + \downarrow\uparrow\downarrow + \downarrow\downarrow\uparrow\right)\right)$$

$$a_{32} = \left(\frac{\eta}{2}, \frac{\nu_{23}\uparrow_1 s(2,3) + \nu_{31}\uparrow_2 s(3,1) + \nu_{12}\uparrow_3 s(1,2)}{\sqrt{\sigma_1^2 - 3\sigma_2}}\right)$$

$$a_{62} = \left(\frac{\eta}{2}, \frac{\nu_{23}\downarrow_1 s(2,3) + \nu_{31}\downarrow_2 s(3,1) + \nu_{12}\downarrow_3 s(1,2)}{\sqrt{\sigma_1^2 - 3\sigma_2}}\right)$$

$$a_{42} = \left(-\frac{\eta}{2}, \frac{u_{23}\uparrow_1 s(2,3) + u_{31}\uparrow_2 s_{31}(3,1) + u_{12}\uparrow_3 s(1,2)}{\sqrt{\sigma_1^2 - 3\sigma_2}}\right)$$

$$a_{52} = \left(-\frac{\eta}{2}, \frac{u_{23}\downarrow_1 s(2,3) + u_{31}\downarrow_2 s(3,1) + u_{12}\downarrow_3 s(1,2)}{\sqrt{\sigma_1^2 - 3\sigma_2}}\right)$$

где $l_{31}=\sqrt{2\eta(2\eta+\sigma_1-3J_{23})};l_{41}=\sqrt{2\eta(2\eta-\sigma_1+3J_{23})}$

$$l_{32}=\sqrt{2\eta(2\eta+\sigma_1-3J_{31})};l_{42}=\sqrt{2\eta(2\eta-\sigma_1+3J_{31})}$$

$$l_{33}=\sqrt{2\eta(2\eta+\sigma_1-3J_{12})};l_{43}=\sqrt{2\eta(2\eta-\sigma_1+3J_{12})}$$

$$v_{23}=\frac{1}{3}\left(\frac{J_{23}-\eta}{l_{31}}+\frac{J_{12}}{l_{32}}+\frac{J_{31}}{l_{33}}\right);u_{23}=\frac{1}{3}\left(\frac{J_{23}+\eta}{l_{41}}+\frac{J_{12}}{l_{42}}+\frac{J_{31}}{l_{43}}\right)\quad \sigma_1=J_{12}+J_{23}+J_{31};$$

$$v_{31}=\frac{1}{3}\left(\frac{J_{12}}{l_{31}}+\frac{J_{31}-\eta}{l_{32}}+\frac{J_{23}}{l_{33}}\right);u_{31}=\frac{1}{3}\left(\frac{J_{12}}{l_{41}}+\frac{J_{31}+\eta}{l_{42}}+\frac{J_{23}}{l_{43}}\right)\quad \sigma_2=J_{12}J_{23}+J_{23}J_{31}+J_{31}J_{12};$$

$$v_{12}=\frac{1}{3}\left(\frac{J_{31}}{l_{31}}+\frac{J_{23}}{l_{32}}+\frac{J_{12}-\eta}{l_{33}}\right);u_{12}=\frac{1}{3}\left(\frac{J_{31}}{l_{41}}+\frac{J_{23}}{l_{42}}+\frac{J_{12}+\eta}{l_{43}}\right)\quad \eta=\sqrt{\sigma_1^2-3\sigma_2}$$

Термы $\hat{H}_{zz}$ $a_{13}=\left(\frac{\sigma_1}{4},\uparrow\uparrow\uparrow\right),a_{83}=\left(\frac{\sigma_1}{4},\downarrow\downarrow\downarrow\right)\qquad \sigma_1=c_{12}+c_{23}+c_{31}$

$$a_{23}=\left(\frac{1}{4}(2c_{23}-\sigma_1,\downarrow\uparrow\uparrow)\right),a_{73}=\left(\frac{1}{4}(2c_{23}-\sigma_1,\uparrow\downarrow\downarrow)\right),a_{33}=\left(\frac{1}{4}(2c_{31}-\sigma_1,\uparrow\downarrow\uparrow)\right),$$

$$a_{63}=\left(\frac{1}{4}(2c_{31}-\sigma_1,\downarrow\uparrow\downarrow)\right),a_{43}=\left(\frac{1}{4}(2c_{12}-\sigma_1,\uparrow\uparrow\downarrow)\right),a_{53}=\left(\frac{1}{4}(2c_{12}-\sigma_1,\downarrow\downarrow\uparrow)\right)$$

Для анализа действия СО на собственные термы ГССВ будем считать, что все константы, входящие в ГССВ, попарно различны, и рассмотрим СО между спинами первого и второго ядра. Для СО *a priori* существуют три возможности: 1) обмениваются только сами спины (это эквивалентно тому, что $b_{31}\leftrightarrow b_{23}, J_{31}\leftrightarrow J_{23}, c_{31}\leftrightarrow c_{23}$); 2) спины обмениваются поляризациями (flip-flop); 3) спины обмениваются местами, сохраняя свои поляризации. Собственные числа первых двух ГССВ в силу того, что они зависят только от симметрических функций своих констант, при СО не меняются. Для $\hat{H}_{zz}$ действие СО на собственные числа следует учитывать.

Рассмотрим действие СО на ВФСС гамильтониана $\hat{H}_d^z$:

$$\Psi_{41}=\frac{b_{23}\uparrow_1 s(2,3)+b_{31}\uparrow_2 s(3,1)+b_{12}\uparrow_3 s(1,2)}{\sqrt{\sigma_1^2-3\sigma_2}}.$$

В случае 1) получаем $\Psi_{41}\to\Psi=\dfrac{b_{31}\uparrow_1 s(2,3)+b_{23}\uparrow_2 s(3,1)+b_{12}\uparrow_3 s(1,2)}{\sqrt{\sigma_1^2-3\sigma_2}}$.

В случае 2), учитывая, что $\uparrow_1 s(2,3)\leftrightarrow-\uparrow_2 s(3,1)$, и $\downarrow_3 s(1,2)\to-\downarrow_3 s(1,2)$, получаем $\psi_{41}\to-\Psi$. Однако Ψ_{41} и Ψ, а с ними и их термы, различны и являются для всех ГССВ термами другого ГССВ. Таким образом, показано, что первые две возможности СО меняют все три ГССВ. А именно:

$$b_{12}\left(3\hat{S}_1^z\hat{S}_2^z-\vec{S}_1\vec{S}_2\right)+b_{23}\left(3\hat{S}_2^z\hat{S}_3^z-\vec{S}_2\vec{S}_3\right)+b_{31}\left(3\hat{S}_3^z\hat{S}_1^z-\vec{S}_3\vec{S}_1\right)\to$$

$$\to b_{12}\left(3\hat{S}_1^z\hat{S}_2^z-\vec{S}_1\vec{S}_2\right)+b_{31}\left(3\hat{S}_2^z\hat{S}_3^z-\vec{S}_2\vec{S}_3\right)+b_{23}\left(3\hat{S}_3^z\hat{S}_1^z-\vec{S}_3\vec{S}_1\right)$$

$$J_{12}\hat{E}x_{12}+J_{23}\hat{E}x_{23}+J_{31}\hat{E}x_{31}\to J_{12}\hat{E}x_{12}+J_{31}\hat{E}x_{23}+J_{23}\hat{E}x_{31}$$

$$c_{12}\hat{S}_1^z\hat{S}_2^z+c_{23}\hat{S}_2^z\hat{S}_3^z+c_{31}\hat{S}_3^z\hat{S}_1^z\to c_{12}\hat{S}_1^z\hat{S}_2^z+c_{31}\hat{S}_2^z\hat{S}_3^z+c_{23}\hat{S}_3^z\hat{S}_1^z$$

Такое изменение ГССВ при СО есть, вообще говоря, изменение структуры, что ведёт к несохранению энергии. Однако такого не может быть [1].

Третья же возможность СО у всех трёх ГССВ сохраняет или попарно обменивает все собственные термы $\left(\Psi_{41}\to-\Psi_{41}\right)$. Значит именно она и определяет СО. Для необязательной проверки полученного результата для $\hat{H}_d^z$ и $\hat{H}_{ex}$ воспользуемся представлением их ВФСС через перманенты (per) (симметричные ВФСС) и определители (det) (антисимметричные ВФСС) матриц. Например:

$$\psi_{21}=\frac{1}{\sqrt{6\mu\left(\chi+\sigma_1\right)}}\left(\frac{1}{2}(3\sigma_1+\chi)\,per\begin{pmatrix}\downarrow_1 & \uparrow_1 & \uparrow_1\\ \downarrow_2 & \uparrow_2 & \uparrow_2\\ \downarrow_3 & \uparrow_3 & \uparrow_3\end{pmatrix}-3per\begin{pmatrix}b_{23}\downarrow_1 & \uparrow_1 & \uparrow_1\\ b_{31}\downarrow_2 & \uparrow_2 & \uparrow_2\\ b_{12}\downarrow_3 & \uparrow_3 & \uparrow_3\end{pmatrix}\right)$$

$$\psi_{41}=\frac{1}{\sqrt{2\left(\sigma_1^2-3\sigma_2\right)}}\det\begin{pmatrix}b_{23}\uparrow_1 & \uparrow_1 & \downarrow_1\\ b_{31}\uparrow_2 & \uparrow_2 & \downarrow_2\\ b_{12}\uparrow_3 & \uparrow_3 & \downarrow_3\end{pmatrix}$$

Для ГССВ $\hat{H}_{zz}$ собственные числа и ВФСС записываются раздельно через определители главных диагоналей (dmd) своих матриц. Например:

$$\lambda_{23}=dmd\begin{pmatrix}2c_{23}-\sigma_1 & 1 & 1\\ 2c_{31}-\sigma_1 & 1 & 1\\ 2c_{12}-\sigma_1 & 1 & 1\end{pmatrix};\quad \Psi_{23}=dmd\begin{pmatrix}\downarrow_1 & \uparrow_1 & \uparrow_1\\ \downarrow_2 & \uparrow_2 & \uparrow_2\\ \downarrow_2 & \uparrow_2 & \uparrow_2\end{pmatrix}$$

Строка в матрице задаёт спин, нижний индекс – ядро, на котором он находится. Обмен первых двух строк есть СО спинов первого и второго ядер. Механизм СО полностью совпадает с описанным выше. Для матричного представления ВФСС выписан обменный оператор, который задаёт обмен k-ой и l-ой строк матриц, соответствующий СО k-того и l-того ядер

$$\sqrt{2}\,\mathrm{Re}\exp\left[i\left(\frac{\pi}{4}-\omega_{kl}\hat{\sigma}_{kl}^{x}t\right)\right] \tag{1}$$

У матрицы оператора $\hat{\sigma}_{kl}$ kl-ый и lk-ый элементы равны 1, а остальные нули. Распишем (1) в нашем случае

$$\sqrt{2}\,\mathrm{Re}\exp\left[i\left(\frac{\pi}{4}-\omega_{12}\hat{\sigma}_{12}^{x}t\right)\right]=\begin{pmatrix}\cos\omega_{12}t & \sin\omega_{12}t & 0\\ \sin\omega_{12} & \cos\omega_{12}t & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix};\omega_{12}t=\frac{\pi}{2}\rightarrow\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&1\end{pmatrix}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2\left(\sigma_1^2-3\sigma_2\right)}}\det\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}b_{23}\uparrow_1 & \uparrow_1 & \downarrow_1\\ b_{31}\uparrow_2 & \uparrow_2 & \downarrow_2\\ b_{12}\uparrow_3 & \uparrow_3 & \downarrow_3\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2\left(\sigma_1^2-3\sigma_2\right)}}\det\begin{pmatrix}b_{31}\uparrow_2 & \uparrow_2 & \downarrow_2\\ b_{23}\uparrow_1 & \uparrow_1 & \downarrow_1\\ b_{12}\uparrow_3 & \uparrow_3 & \downarrow_3\end{pmatrix}=-\psi_{41}$$

Так были проанализированы собственные термы всех ГССВ. И были получены следующие результаты. У $\hat{H}_d^z$ при СО все термы сохраняются, ВФСС спина $\frac{1}{2}$ Ψ_{41} и Ψ_{51} антисимметричны, а остальные – симметричны относительно СО любой пары спинов. Проекторы на пространства ВФСС – симметричных и анти-симметричных – есть:

$$\hat{P}_{123}^{t}=\frac{\left(b_{12}-b_{23}\right)\left(b_{12}-b_{31}\right)\hat{P}_{12}^{t}+\left(b_{23}-b_{31}\right)\left(b_{23}-b_{12}\right)\hat{P}_{23}^{t}+\left(b_{31}-b_{12}\right)\left(b_{31}-b_{23}\right)\hat{P}_{31}^{t}}{\sigma_1^2-3\sigma_2}$$

$$\hat{P}_{123}^{s}=\frac{\left(b_{12}-b_{23}\right)\left(b_{12}-b_{31}\right)\hat{P}_{12}^{s}+\left(b_{23}-b_{31}\right)\left(b_{23}-b_{12}\right)\hat{P}_{23}^{s}+\left(b_{31}-b_{12}\right)\left(b_{31}-b_{23}\right)\hat{P}_{31}^{s}}{\sigma_1^2-3\sigma_2}$$

У ГССВ $\hat{H}_{ex}$ при СО все термы сохраняются. ВФСС $\Psi_{12},\Psi_{22},\Psi_{32},\Psi_{42}$ спина $\frac{3}{2}$ симметричны и ВФСС двух спинов $\frac{1}{2}$ $\left(\Psi_{32},\Psi_{62}\right)$ и $\left(\Psi_{42},\Psi_{52}\right)$ анти-симметричны относительно СО. Проекторы на пространства ВФСС есть:

$$\hat{P}_{123}^{t}=\frac{2}{3}\left(\hat{P}_{12}^{t}+\hat{P}_{23}^{t}+\hat{P}_{31}^{t}\right)-1 \text{ и } \hat{P}_{123}^{s}=\frac{2}{3}\left(\hat{P}_{12}^{s}+\hat{P}_{23}^{s}+\hat{P}_{31}^{s}\right)$$

У ГССВ $\hat{H}_{zz}$ термы a_{13} и a_{83} при всех СО сохраняются, а ВФСС симметричны. Остальные термы для каждого случая СО ведут себя по-своему. Так, при обмене спинов ядер (1,2) $a_{43} \to a_{43}; a_{53} \to a_{53}; a_{23} \leftrightarrow a_{33}; a_{73} \leftrightarrow a_{63}$

Исследуем СО в системе двух спинов $\frac{1}{2}$. Следуя [1], запишем обменный оператор

$$\hat{V}_{12} = \frac{J_{12}}{2}\left(\hat{P}_{12}^{t} - \hat{P}_{12}^{s}\right) \qquad (2)$$

где J_{12} - обменный интеграл. Сам обменный оператор (2) определён на пространстве $R = \left\{\uparrow_1\uparrow_2; \uparrow_1\downarrow_2; \downarrow_1\uparrow_2; \downarrow_1\downarrow_1\right\}$

Тогда

$$\exp\left[-i\hat{V}t\right]\uparrow_1 = \begin{pmatrix} \exp\left[-i\frac{J_{12}t}{2}\right] & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\frac{J_{12}t}{2} & -i\sin\frac{J_{12}t}{2} & 0 \\ 0 & -i\sin\frac{J_{12}t}{2} & \cos\frac{J_{12}t}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \exp\left[\frac{J_{112}t}{2}\right] \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} =$$

$$= \cos\frac{J_{12}t}{2}\begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} - i\sin\frac{J_{12}t}{2}\begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ 0 \\ \frac{1}{2} \\ 0 \end{pmatrix} = \cos\frac{J_{12}t}{2}\uparrow_1^1 - i\sin\frac{J_{12}t}{2}\uparrow_2^1 \qquad (3)$$

где верхний индекс указывает, откуда взялась данная поляризация.

Аналогично получается эволюция остальных ВФСС и, тем самым, подтверждается полученный на трёхспиновой системе перенос спинов с сохранением их поляризации. Из анализа (3) следует, что базовыми для СО являются обоюдные переносы спинов. Пример: при начальном условии $\left(\uparrow_1, \downarrow_2\right)$ это переносы $\uparrow_1 \to \uparrow_2$ и $\downarrow_2 \to \downarrow_1$. Таким образом, при начальных поляризациях $\uparrow_1\uparrow_1$ и $\uparrow_1\downarrow_2$ на первом ядре образуются следующие ВФСС:

$$\cos\frac{J_{12}t}{2}\uparrow_1^1 - i\sin\frac{J_{12}t}{2}\uparrow_1^2,\ \cos\frac{J_{12}t}{2}\uparrow_1^1 - i\sin\frac{J_{12}t}{2}\downarrow_1^2 \qquad (4)$$

Спин является неотъемлемой «частью» ядра. Следовательно, формулы (4) являются формальной записью непрерывной во времени тождественности спинов. С другой стороны, (4) есть запись того, что изменения ВФСС приводят к появлению обменных продольных и поперечных магнитных полей. Покажем это.

Проекторы на ВФСС второй формулы из (4) есть

$$\begin{pmatrix} \cos^2\frac{J_{12}t}{2} & i\cos\frac{J_{12}t}{2}\sin\frac{J_{12}t}{2} \\ -i\cos\frac{J_{12}t}{2}\sin\frac{J_{12}t}{2} & \sin^2\frac{J_{12}t}{2} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} + \left(\cos\left(J_{12}t\right)\hat{S}_1^z - \sin\left(J_{12}t\right)\hat{S}_1^y\right) =$$

$$= \frac{1}{2} + \exp\left[-iJ_{12}\hat{S}_{ex1}^x t\right]\hat{S}_1^z \exp\left[iJ_{12}\hat{S}_{ex1}^x t\right]$$

Такой же результат получается и для ВФСС на втором ядре. Следовательно,

$$\exp\left[-i\hat{V}t\right]\left(\uparrow_1 + \downarrow_2\right) = \exp\left[-iJ_{12}\hat{S}_{ex}^x t\right]\left(\uparrow_1 + \downarrow_2\right) \text{ и}$$

$$\exp\left[-i\hat{V}t\right]\left(\downarrow_1 + \uparrow_2\right) = \exp\left[-iJ_{12}\hat{S}_{ex}^x t\right]\left(\downarrow_1 + \uparrow_2\right)$$

Для действия поперечного магнитного поля есть две равноправные составляющие: само поле и ВФСС, которые изменяются во время поворота. Обычно под действием поля видим меняющиеся ВФСС. Но в данном случае, наоборот: под действием СО меняются ВФСС, и поэтому возникает поперечное (обменное) магнитное поле $J_{12}\hat{S}_{ex}^x = J_{12}\left(\hat{S}_{ex1}^x + \hat{S}_{ex2}^x\right)$.

Рассмотрим два случая СО, когда вначале спины поляризованы параллельно.

$$\exp\left[-i\hat{V}_{12}t\right]\left(\uparrow_1 + \uparrow_2\right) = \left(\cos\frac{J_{12}t}{2}\uparrow_1^1 - i\sin\frac{J_{12}t}{2}\uparrow_1^2\right) + \left(\cos\frac{J_{12}t}{2}\uparrow_2^2 - i\sin\frac{J_{12}t}{2}\uparrow_2^1\right) =$$
$$= \exp\left[-iJ_{12}\hat{S}_{ex}^z\right]\left(\uparrow_1 + \uparrow_2\right)$$

$$\exp\left[-i\hat{V}_{12}t\right]\left(\downarrow_1+\downarrow_2\right)=\left(\cos\frac{J_{12}t}{2}\downarrow_1^1-i\sin\frac{J_{12}t}{2}\downarrow_1^2\right)+\left(\cos\frac{J_{12}t}{2}\downarrow_2^2-i\sin\frac{J_{12}t}{2}\downarrow_2^1\right)=$$
$$=\exp\left[iJ_{12}\hat{S}_{ex}^z\right]\left(\downarrow_1+\downarrow_2\right)$$

В обоих случаях видно, что при СО возникает продольное магнитное поле, направленное по начальной поляризации спинов.

Таким образом, доказано, что СО является наблюдаемым примером обмена местами тождественных квантовых объектов (спинов), что является частным случаем обмена местами тождественных частиц [2]. При этом достаточно подробно выяснен механизм такого обмена. Для этого достаточно для пары любых тождественных квантовых частиц с конечным числом состояний получить обменный оператор и описать процедуру самого обмена.

Пусть заданы две тождественные квантовые частицы, находящиеся в различных местах, обозначаемых буквами a и b. Их операторы есть $\hat{A}=\sum_1^n\lambda_k\hat{P}_{kk}^a$ и $\hat{B}=\sum_1^n\lambda_k\hat{P}_{kk}^b$. Пространства собственных волновых функций есть $R^a=\{a_k\}$ и $R^b=\{b_k\}$. Обменный оператор $\hat{V}_{ab}$ действует на прямом произведении этих пространств $R^{ab}=R^a\otimes R^b=R^{ab}{}_+\oplus R^{ab}{}_-=\hat{P}_+^{ab}R^{ab}\oplus\hat{P}_-^{ab}R^{ab}$ и равен $\hat{V}_{ab}=\frac{J_{ab}}{2}\left(\hat{P}_+^{ab}-\hat{P}_-^{ab}\right)$, где

$$\hat{P}_+^{ab}=\sum_k\hat{P}_{kk}^a\hat{P}_{kk}^b+\frac{1}{2}\sum_{k<l}\left(\hat{P}_{kk}^a\hat{P}_{ll}^b+\hat{P}_{ll}^a\hat{P}_{kk}^b+\hat{P}_{kl}^a\hat{P}_{lk}^b+\hat{P}_{lk}^a\hat{P}_{kl}^b\right)$$

$$\hat{P}_-^{ab}=\frac{1}{2}\sum_{k<l}\left(\hat{P}_{kk}^a\hat{P}_{ll}^b+\hat{P}_{ll}^a\hat{P}_{kk}^b-\hat{P}_{kl}^a\hat{P}_{lk}^b-\hat{P}_{lk}^a\hat{P}_{kl}^b\right)$$

- проекторы на подпространства чётных и нечётных, относительно обмена, состояний пространства R^{ab}.

Отсюда: $$\hat{V}_{ab}=\frac{J_{ab}}{2}\left(\sum_k\hat{P}_{kk}^a\hat{P}_{kk}^b+\sum_{j<k}\left(\hat{P}_{jk}^a\hat{P}_{kj}^b+\hat{P}_{kj}^a\hat{P}_{jk}^b\right)\right)$$

Далее, так же, как и в двухспиновом случае, получаем для переносов тождественных частиц:

$$\exp\left[-i\hat{V}t\right]a_k = \cos\frac{J_{ab}t}{2}a_k^a - i\sin\frac{J_{ab}t}{2}b_k^a$$

Аналогично (4) получаем на обменных волновых функциях запись непрерывного во времени процесса обмена тождественности частиц при начальном условии (a_k, b_l):

$$\cos\frac{J_{ab}t}{2}a_k^a - i\sin\frac{J_{ab}t}{2}a_l^b \text{ и } \cos\frac{J_{ab}t}{2}b_l^b - i\sin\frac{J_{ab}t}{2}b_k^a$$

Обменные продольные поля при начальных условиях (a_k, b_k) есть $\frac{J_{ab}}{2\lambda_k}\left(\hat{A}+\hat{B}\right)$ с их рабочей частью $\frac{J_{ab}}{2}\left(\hat{P}_{kk}^a + \hat{P}_{kk}^b\right)$

Обменные поперечные поля при начальных условиях $(a_k, b_l), k \neq l$ есть

$$J_{ab}\left(\hat{S}_{kl}^a + \hat{S}_{kl}^b\right) = J_{ab}\left(\frac{1}{2}\left(\hat{P}_{kl}^a + \hat{P}_{lk}^a\right) + \frac{1}{2}\left(\hat{P}_{kl}^b + \hat{P}_{lk}^b\right)\right)$$

Выводы:

1) спиновый обмен есть наблюдаемый пример обмена тождественных квантовых объектов, куда входит и обмен тождественных частиц;
2) при обмене собственные термы гамильтонианов сохраняются или попарно обмениваются;
3) описано происхождение продольных и поперечных обменных полей;
4) получен общий вид обменного оператора.

В заключение автор считает своим долгом поблагодарить доктора физ.-мат. наук Кулагину Т.П. и кандидата физ.-мат. наук Иванову А.В. за внимание к работе и обсуждение результатов.

Литература

1. К.И. Замараев, Ю.Н. Молин, К.М. Салихов. Спиновый обмен, «Наука», Сибирское отделение, Новосибирск, 1977г., 320 стр.
2. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Квантовая механика, 1989, Москва, Наука, 768 стр.