

УДК 539.19

## ПРИМЕНЕНИЕ РАССЛОЕНИЯ ГРУППЫ $SU(2)$ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОБЛЕМ КИНЕТИКИ МНОГОАТОМНЫХ МОЛЕКУЛ

В. К. Конюхов, Е. В. Степанов, С. К. Борисов

*Мы обращаем внимание на разрешенную симметрией область в  $3D$  пространстве, доступную для поступательного движения вращающихся молекул. Эта область принадлежит однопараметрической подгруппе, отмеченной как слой. Ее диапазон  $0-1$  для действительной переменной отложен на прямой линии, направленной главным кватернионом. Основная часть расслоения содержит двумерную сферу, известную как структура симметрии, описывающей вращения твердого тела. В качестве примера многоатомных молекул в этом исследовании мы используем молекулы воды. Когда молекулы воды связаны с типом симметрии расслоения, они должны двигаться в направлении, указанном главным кватернионом, противоположно трем статистически обоснованным взаимно ортогональным направлениям. Движение молекул в одном направлении, которое, однако, может быть произвольно ориентированным в трехмерном пространстве, позволяет объяснить экспериментальные результаты.*

**Ключевые слова:** молекула воды, группа симметрии, поверхность твердого тела.

*Введение.* В данной работе мы изучаем теоретически свободное вращение молекулы воды около поверхности твердого адсорбента в присутствии сил различной природы. Мы ожидаем, что индуцированные поверхностью поля изменяют вращательный спектр и воздействует на поступательное движение молекул. Мы связываем оба эффекта с нарушением пространственной изотропии.

Этот аспект влияния твердой поверхности на молекулы важен, поскольку предположение об изотропном трехмерном пространстве формирует основу математической

---

ИОФ РАН, 119991 Россия, Москва, ул. Вавилова, 38; e-mail: konyukhov16@yandex.ru.

модели квантового вращения молекул. Теория вращения многоатомных молекул была разработана для газовой среды, где предположение об изотропном пространстве в молекулярном диапазоне расстояний вполне справедливо. Такая модель для вращения молекул используется в книгах [1, 2]. Эта модель используется нами в ситуациях, где взаимодействие молекул с поверхностью становится существенным; в этом случае предположение об изотропии пространства неприменимо к потенциалам и силовым полям различной природы, действующим со стороны поверхности.

Цель данной работы – объяснить необычные физические свойства молекулы воды, которая могла бы взаимодействовать с поверхностью керамического корунда. Например, в наших предыдущих экспериментальных исследованиях мы заметили, что такие молекулы могут поддерживать давление пара в три раза ниже, чем давление, поддерживаемое обычными молекулами воды [3].

Квантовое вращение многоатомных молекул есть сложный раздел общей молекулярной теории, поскольку включает в себя ряд математических структур, далёких от наглядности.

В настоящей работе мы решаем проблемы вращательного и поступательного движения молекулы воды в газовой фазе с использованием математических структур, основанных на свойствах  $SU(2)$  группы. Эти проблемы требуют другой математической структуры, основанной на расслоении  $SU(2)$  группы или главного пучка слоев. Эта структура позволяет организовывать два типа движений в трехмерном пространстве. Один из них – движением точки или 2D сферы, которое всегда интерпретируется как вращение; а второй тип – это линейное перемещение в единственном направлении. Квантовое вращение молекул – это известный процесс, тогда как однонаправленное перемещение в связи с ним обычно не рассматривается.

Системы координат в трехмерном пространстве играют очень важную роль в физических применениях расслоения. Одна из них принадлежит к  $SU(2)$  группе главных векторов, определенных как мнимые кватернионы  $\mathbf{i}$ ,  $\mathbf{j}$ ,  $\mathbf{k}$ , со специально выделенным кватернионом  $\mathbf{i}$ . Другие две системы связаны с молекулами воды и твердой поверхностью.

Молекула воды – это полный асимметричный ротатор со своей собственной трехмерной системой координат. Система координат поверхности может быть получена следующим образом. Чисто геометрически часть поверхности с микроскопической точки зрения может быть определена как плоскость, разделяющая пространство на две части. Каждая плоскость в трехмерном пространстве имеет перпендикуляр как обяза-

тельный элемент симметрии. Отметим его как специальный главный вектор в системе координат поверхности.

Мы предполагаем, что система координат  $SU(2)$  играет роль посредника, который может передавать надлежащую информацию между поверхностью и молекулой. Ориентация системы  $SU(2)$  относительно системы поверхности всегда такова, что главные специальные векторы совпадают. Поведение системы  $SU(2)$  относительно молекулярной системы имеет варианты, поскольку главный специальный вектор может быть направлен вдоль любого из трех главных молекулярных векторов. При столкновениях молекулы с поверхностями все условия для описанных выше систем координат выполняются.

Мы построили временную картину с использованием ориентационных членов системы, но физически взаимная ориентация молекулы и поверхности происходит благодаря полям поверхностных сил, когда молекула оказывается в их зоне действия.

*Расслоение  $SU(2)$  группы.* Цель этой главы – показать как  $G = SU(2)$  группа становится источником двух различных типов движений, а именно, вращения и направленного перемещения.

Мы предполагаем, что элементы  $G$  представлены как точки на трехмерной сфере  $S^3$  в 4D пространстве, которое является реальным и евклидовым, с системой координат, основанной на одном реальном и трех мнимых кватернионах, так что любой элемент  $\mathbf{q}$  группы может быть записан как

$$\mathbf{q} = x_0 + x_1\mathbf{i} + x_2\mathbf{j} + x_3\mathbf{k},$$

где  $x_1, x_2, x_3$  – трехмерные пространственные координаты, связанные с кватернионами  $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ .

Здесь мы перейдем к рассмотрению методом Понтрягина [4]. Введение сферических координат в 4D пространство позволяет использовать элементы группы  $G$  и определять действие  $G$  на  $S^2$  сферу:

$$\begin{aligned} x_3 &= \sin(\theta_3) \sin(\theta_2) \sin(\theta_1), & x_2 &= \sin(\theta_3) \sin(\theta_2) \cos(\theta_1), \\ x_1 &= \sin(\theta_3) \cos(\theta_2), & x_0 &= \cos(\theta_3). \end{aligned}$$

Используя простое правило, что три угловые переменные связаны с  $S^3$  и две переменные с  $S^2$ , мы дважды исключаем угловую переменную  $\theta_2$ , приравнявая ее к  $\theta_2 = 0$  и  $\theta_2 = \pi/2$ , и получаем:

$$\begin{aligned} &\cos(\theta_3) + \sin(\theta_3)\mathbf{i}, \\ &\cos(\theta_3) + \sin(\theta_3)(\cos(\theta_1)\mathbf{j} + \sin(\theta_1)\mathbf{k}). \end{aligned}$$

Таким образом, мы имеем два выражения для одного и двух измерений в трехмерном пространстве. Названия выражений – слой или однопараметрическая подгруппа, и базис или левосторонняя фактор-группа, соответственно.

Удобно преобразовать выражение в скобках в единичный кватернион для дальнейшего его использования в качестве оси вращения. Отметим, что каждое вращение в трехмерном пространстве имеет ось, которая есть единичный кватернион. Тогда выражение для элемента фактор-группы выглядит как оператор вращения  $R$ :

$$\mathbf{u} = \cos(\theta_1)\mathbf{j} + \sin(\theta_1)\mathbf{k}, \quad \mathbf{u}^2 = -1, \\ R = \cos(\theta_3) + \sin(\theta_3)\mathbf{u}.$$

Здесь необходимо вернуться к рассмотрению кватерниона  $\mathbf{i}$ , который ранее был исключен. Операция возвращения выполняется поворотом с использованием  $\mathbf{i}$  как оси вращения:

$$R\mathbf{i}R^{-1} = (\cos(\theta_3) + \sin(\theta_3)\mathbf{u})\mathbf{i}(\cos(\theta_3) - \sin(\theta_3)\mathbf{u}) = \\ = (\cos(\theta_3) + \sin(\theta_3)\mathbf{u})(\cos(\theta_3) + \sin(\theta_3)\mathbf{u})\mathbf{i} = (\cos(2\theta_3) + \sin(2\theta_3)\mathbf{u})\mathbf{i} = \\ = \cos(2\theta_3)\mathbf{i} + \sin(2\theta_3)\mathbf{u}\mathbf{i} = \cos(2\theta_3)\mathbf{i} + \sin(2\theta_3)(-\cos(\theta_1)\mathbf{k} + \sin(\theta_1)\mathbf{j}).$$

Определяя новые угловые переменные  $\theta = 2\theta_3$ ,  $\phi = \theta_1 + \pi/2$ , мы получаем стандартную форму координат точки на  $S^2$  сфере,  $\cos(\theta)\mathbf{i} + \sin(\theta)(\cos(\phi)\mathbf{j} + \sin(\phi)\mathbf{k})$ .

Полученные результаты могут интерпретироваться следующим образом. Группа  $G$  выражает пространственную симметрию вращения для классических объектов. В частности,  $S^2$  сфера является одной из областей в трехмерном пространстве, куда может быть помещена массивная классическая частица для представления вращения твердого тела.  $S^2$  сфера не представляет интереса, потому что вращение молекул воды следует квантовому закону, тогда как смещение частицы в интервале 0–1 на прямой линии, направленной кватернионом  $\mathbf{i}$ , по-прежнему описывается классическим законом, а поэтому может представить движение молекулы. Группа  $G$  не описывает временное движение молекул, она показывает только области пространства, разрешенные симметрией.

*Заключение.* Координата  $x_1$  и радиус  $S^2$ , который численно равен единице, оба являются безразмерными объектами, но это ограничение не затрагивает физической картины. Действительно, всегда должна существовать такая единица длины, которая соответствует данной физической ситуации.

Несколько количественно развитых теоретических моделей объясняют поведение молекул, взаимодействующих с поверхностью [5]. Все модели включают нормаль к поверхности, вдоль которой молекула перемещается во время взаимодействия с поверхностью независимо от микроскопической динамики.

Мы надеемся, что однонаправленное движение молекул воды, которое мы наблюдали экспериментально с высокой точностью, является распространенной ситуацией в молекулярной физике. Но соответствующие экспериментальные условия, позволяющие выбрать этот эффект среди прочих имеющих место одновременно, необходимы для обнаружения эффекта однонаправленного движения.

## Л И Т Е Р А Т У Р А

- [1] Ф. Банкер, *Спектроскопия молекул и молекулярная спектроскопия* (М., Мир, 1981).
- [2] Р. Зар, *Теория углового момента. О пространственных эффектах в физике и химии* (М., Мир, 1993).
- [3] V. K. Konyukhov, E. V. Stepanov, and S. K. Borisov, *Laser Physics* **28.5**, 055602 (2018).
- [4] Л. С. Понтрягин, *Непрерывные группы* (М., Наука, 1973).
- [5] Hans Jurgen Kreuzer and Zbigniew Gortel, *Physisorption kinetics*, volume 1 (Springer Science & Business Media, 2012).

Поступила в редакцию 29 июня 2018 г.

После доработки 25 октября 2018 г.

Принята к публикации 18 декабря 2018 г.