УДК 539.19

СМЕШАННОЕ СОСТОЯНИЕ СПИНОВЫХ МОМЕНТОВ ДВУХ ПРОТОНОВ В МОЛЕКУЛЕ ВОДЫ И УСТОЙЧИВОСТЬ ЕЕ СПИНОВЫХ ИЗОМЕРОВ

В. К. Конюхов

В работе показано, что наиболее распространенное в природе соотношение параводы и ортоводы оказывается наиболее устойчивой к внешним воздействиям формой существования молекул воды. Обсуждаются допущения, которые неявно делаются, когда независимо рассматриваются синглетное и триплетное состояния квантовой системы из двух спиновых моментов.

Ключевые слова: вода, спины протонов.

Традиционно спиновые степени свободы молекулы воды рассматриваются с помощью волновых функций, что пригодно для случая изолированной молекулы в разреженном газе. Если же молекула взаимодействует с другими молекулами или в общем случае с окружающей ее средой, то спиновая подсистема молекулы описывается оператором и матрицей плотности. Происходит полностью или частично замена чистых спиновых состояний на смешанные. Одновременно возникает проблема устойчивости состояний по отношению к действию на них окружающей среды. Такой подход соответствует случаю конденсированной среды. Спиновая ядерная подсистема молекулы относительно слабо взаимодействует с окружением в плотных газах и жидкости, поэтому ее можно выделить в самостоятельную квантовую систему, что следует из опытов по наблюдению протонного ЯМР в воде.

В настоящей работе показано, что естественная смесь $1/4$ синглетного и $3/4$ триплетного состояний является не только устойчивой к внешним возмущениям, но максимально устойчивой. Синглетное состояние в этом смешанном состоянии остается чистым состоянием, триплетное состояние становится смешанным. Устойчивость объясняется тем, что это смешанное состояние, если представить операторы плотности синглетной

Учреждение Российской академии наук Институт общей физики им. А. М. Прохорова РАН, 119991, Москва, ул. Вавилова, 38. E-mail: Collie@kapalla.gpi.ru

и триплетной частей матрицами, пропорционально единичной матрице, которая коммутирует с любым возмущающим оператором в пространстве спиновой системы.

Исходное матричное равенство записывается в пространстве $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$ двух спиновых моментов $j = 1/2$, где вводится базис в виде прямого произведения базисов каждого из спинов

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \tag{1}$$

Каждая из трех матриц в равенстве (1) эрмитова, так что выполняется первое требование, которое предъявляется к матрицам плотности. Второе условие состоит в нормировке матрицы, ее след должен равняться единице. Первая слева матрица нормирована и соответствует синглентному состоянию [1]. Вторая матрица будет соответствовать триплетному состоянию, если ввести нормировку и дополнительный множитель, чтобы матричное равенство не нарушалось. Такое же замечание относится и к последней матрице равенства (1)

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} + 3\left(\frac{1}{3}\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}\right) = 4\left(\frac{1}{4}\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}\right). \tag{2}$$

Полностью деполяризованное триплетное состояние обычно записывается в виде единичной матрицы в трехмерном пространстве, но это состояние можно записать и в четырехмерном пространстве, где крайние единицы на диагонали соответствуют состояниям $m = \pm 1$, а центральная часть матрицы – состоянию $m = 0$. Множитель $1/3$ перед матрицей указывает, что все три составляющие входят с равной вероятностью.

Далее матричное равенство (2) можно записать в форме операторного равенства, что является главным результатом настоящей работы

$$\frac{1}{4}\rho_{\text{singlet}} + \frac{3}{4}\rho_{\text{triplet}} = \rho_{\text{depolarized}}.$$

Единичную матрицу в (2) можно, в свою очередь, представить как прямое произведение двух деполяризованных спиновых состояний

$$\frac{1}{4}\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \bigotimes \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Так как никакой корреляции между состояниями спиновых моментов нет (прямое произведение отражает это утверждение) и, кроме того, состояния спинов в своих подпространствах также максимально симметричны, воздействовать на спиновую систему каким-либо образом невозможно, оставаясь в пределах четырехмерного пространства. Внести возмущение в эту систему можно, если присоединить к ней еще один спиновый момент, и допустить, что имеется взаимодействие и совместная эволюция его с исходной системой. Но для это требуется расширение спинового пространства.

Условия, при которых можно разделить синглетную и триплетную части спиновой волновой функции молекулы воды, обычно не обсуждаются. Предполагается, что интерференции между этими частями волновой функции нет, что недиагональные элементы в приведенной блочно-диагональной 4×4 матрице малы, либо они быстро затухают, так что квантовые числа $S = 0$ (синглет) и $S = 1$ (триплет) являются "хорошими" квантовыми числами, и они сохраняются во времени. Здесь введением смешанного состояния с самого начала устанавливается возможность оперировать с синглетным и триплетным операторами плотности по отдельности, и произвольно устанавливать вероятности, с которыми они входят в оператор плотности спиновой системы. Это открывает возможность описывать любые концентрации спиновых изомеров молекулы воды.

Предположения, которые здесь делаются относительно смешанного триплетного состояния, где с равной вероятностью $1/3$ входят три составляющих, так что матрица плотности в представлении полного момента $S = 1$ диагональна, основаны на физических предположениях, которые обычно выполняются и, как правило, не обсуждаются. Такое состояние называется полностью деполяризованным и используется в [2]. Действительно, внешнее магнитное поле напряженностью 1 Тесла при комнатной температуре вызовет поляризацию состояний на 10^{-6} часть от единицы. Переменные магнитные поля дают еще меньший вклад в недиагональные матричные элементы в силу малой амплитуды переменного магнитного поля.

Известен способ, который позволяет получить полностью деполяризованное состояние из произвольного начального состояния двухспиновой системы [3]. Он основан на действии операторов σ_z, σ_x на один из спинов. Первый оператор $\mathrm{I} \otimes \sigma_z$ стирает фазовые множители, и матрица становится диагональной. Второй оператор $\mathrm{I} \otimes \sigma_x$ стирает остальную информацию, которая принадлежала одновременно двум спинам. Оказывается, что есть еще один способ деполяризации состояния, который демонстрируется в настоящей работе. В синглете и триплете спиновые моменты находятся частично или полностью в запутанном состоянии и кроме того, существует “классическая” корреляция, которая не сводится к запутанности. Для исключения всякой связи между спинами достаточно сложить эти два состояния в пропорции 1:3.

ЛИТЕРАТУРА

[1] К. А. Валиев, А. А. Кокин, *Квантовые компьютеры: надежды и реальность* (Ижевск, РХД, 2001).

[2] S. D. Bartlett, T. Rudolph, and R. W. Spekkens, Rev. Mod. Phys. **79**, 555 (2007).

[3] B. Groisman, S. Popescu, and A. Winter, Phys. Rev. **A 72**, 032317 (2005).

Поступила в редакцию 22 марта 2010 г.