

УДК 539.19

СПИНОВОЕ СОСТОЯНИЕ МОЛЕКУЛ ОРТО-ПАРАВОДЫ В ЖИДКОСТИ

В. К. Конюхов

Рассматривается состояние ядерных спиновых моментов двух протонов в молекуле воды, когда она подвергается воздействию со стороны окружающей ее жидкости, и по этой причине является открытой квантовой системой. Постулируется вид оператора плотности смешанного состояния для спиновых моментов. Спиновые степени свободы молекулы оказываются сильно защищенными от внешних воздействий и не подвержены действию внешних магнитных полей из-за нулевого ядерного магнитного момента.

Удивительным свойством молекул воды оказалась временная стабильность их спиновых модификаций или спиновых изомеров, или ортоводы и параводы, которая проявляется в жидкой фазе. В парах воды при взаимодействии с адсорбентом изменяются концентрации спиновых изомеров. Вместо равновесного значения концентраций орто:пара=3:1 происходит обогащение паров воды, например, ортомодификацией. Затем пары спин-модифицированной воды переводятся в жидкую фазу или подмешиваются к другой жидкости.

Время спин-конверсии молекул в жидкой фазе (время возвращения к концентрациям орто:пара=3:1) при комнатной температуре оказалось порядка одного часа [1], такое же по порядку величины значение было получено в более поздних опытах [2]. Если неравновесную орто-параводу растворить в глицерине, то время спин-конверсии увеличивается до нескольких недель [3].

В настоящей работе предлагается объяснение эффекта продолжительного существования спин-модифицированной воды в жидком состоянии за счет большой защищенности спиновых степеней свободы молекулы от внешних воздействий. Спиновые степени

свободы обязаны своим существованием двум протонам, которые входят в состав наиболее распространенного изотопа $H_2^{16}O$. Спиновые моменты протонов рассматриваются как открытая квантовая система на основе понятий, методов и моделей квантовой теории информации. После формулирования требований, которым должно удовлетворять состояние спиновых моментов, делается почти безальтернативный выбор среди наиболее обследованных смешанных квантовых состояний двух кубитов и постулируется вид оператора плотности для спиновых моментов молекулы воды в жидкости. Защищенность от воздействий на молекулу со стороны окружающей ее среды является следствием высокой симметрии оператора плотности. Оказывается, что среднее значение ядерного магнитного момента молекулы в этом состоянии равно нулю, по этой причине она защищена от действия внешних магнитных полей.

Перечислим требования, которые предъявляются к состоянию спиновых моментов молекулы спин-модифицированной воды в жидкости.

Должно существовать соответствие между спиновыми степенями свободы молекулы воды в газовой и жидкой фазах. Это соответствие должно переносить в жидкость понятия ортоводы и параводы, которые ранее были установлены для газа. В газовой фазе разделение на ортоводу и параводу относится к спиновым и вращательным степеням свободы молекулы. Связь между ними регулируется принципом Паули антисимметричности полной волновой функции молекулы. В условиях, когда молекула H_2O находится в основном электронном и колебательном состояниях, действующими, активными степенями свободы остаются спиновые моменты протонов и совместное вращение ядер молекулы. В первом приближении можно считать, что двигаются в пространстве именно ядра протонов, тогда как тяжелое ядро атома кислорода остается неподвижным. Так что проблема орто-парамодификаций молекулы воды сводится к описанию движения двух ядер со спиновыми моментами соответственно в спиновом и координатном пространствах.

Будем считать, что при переходе молекулы из газа в жидкость у нее исчезают вращательные и остаются только спиновые степени свободы, т.е. у нее не появляются в конденсированной среде другие квантованные степени свободы, которые можно было бы отнести к индивидуальной молекуле воды.

Спиновые степени свободы должны изменить форму своего существования. Из относительно свободного существования в газовой фазе с описанием чистым вектором состояния или волновой функцией $|\psi\rangle$, спиновые моменты протонов переходят в состояние с сильным воздействием на них со стороны окружающих их молекул. Другими

словами, из замкнутой квантовой системы они становятся открытой квантовой системой с описанием оператором плотности ρ в смешанном состоянии. Оператор ρ должен содержать две части, каждую из которых можно было бы сопоставить параводе и ортоводе. Вероятности p (парамолекула) и $1 - p$ (ортомолекула) должны отражать концентрации спиновых модификаций (изомеров) в жидкой фазе, и параметр p , должно быть можно изменять в пределах $0 \leq p \leq 1$.

Смешанное состояние ρ , в котором находятся спиновые моменты протонов, должно обладать очень большой устойчивостью к воздействиям со стороны окружающей среды, иначе невозможно было бы передать исключительную стабильность существования неравновесной концентрации спиновых изомеров в жидком состоянии.

Перечисленные выше требования к описанию спиновых моментов молекулы воды в жидкости значительно сужают поиск возможных вариантов и конкретизируют возможный вид оператора плотности. В литературе по квантовой теории информации имеются две модели, которые можно использовать применительно к описанию спиновых моментов протонов в жидкой воде.

Первая модель состоит из совокупности базисных векторов $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$ пространства C^4 , обычно она называется вычислительной координатной системой в пространстве двух кубитов. В работе [4] на примере фазового сдвига, который под влиянием окружения испытывает каждый из спинов или независимо, или оба сразу, пространство C^4 разлагается в прямое произведение четырех подпространств. Это означает, что каждый базисный вектор существует в своем подпространстве и не может образовывать суперпозиций с другими базисными векторами, которые не разрушались бы под действием окружения. Эта устойчивая система не вполне пригодна для интерпретации орто-параводы, так как в ней не содержится состояний с целочисленными $\{S = 0, 1\}$ спиновыми моментами.

Следующая модель основывается на тех же базисных векторах, но допускает две сохраняющиеся суперпозиции $\{(|01\rangle - |10\rangle)/\sqrt{2}, |00\rangle, (|01\rangle + |10\rangle)/\sqrt{2}, |11\rangle\}$, и пространство C^4 разлагается в прямую сумму двух подпространств с $S = 0$ и $S = 1$. Такие суперпозиции сохраняются в том случае, когда фазовый сдвиг происходит одновременно у двух спинов. Это означает, что возмущающее поле со стороны окружения, которое провоцирует сдвиг фазы, однородно на размере молекулы. Подобная ситуация носит название симметричной по пространству коллективной декогеренции [5]. Далее это условие будет считаться всегда выполненным не только для фазового сдвига (оператор σ_z), но для переворота спина (оператор σ_x) и их комбинации. В этом случае сохраняется раз-

ложение пространства C^4 в прямую сумму и возникает понятие спиновых изомеров применительно к спиновым степеням свободы молекулы.

После подготовительной работы, которая была проделана выше, можно записать оператор плотности ρ спиновых степеней свободы для молекулы орто-параоводы в жидкости как сумму двух операторов проекции на синглетное подпространство $S = 0$ и на все пространство C^4 :

$$\rho = p|\Psi^-\rangle\langle\Psi^-| + (1-p)\frac{I}{4},$$

$$|\Psi^-\rangle = (|01\rangle - |10\rangle)/\sqrt{2}, \quad I = |00\rangle\langle 00| + |01\rangle\langle 01| + |10\rangle\langle 10| + |11\rangle\langle 11|.$$

Оператор плотности ρ всесторонне обследован, его называют состоянием Вернера, если речь идет об унитарных преобразованиях оператора. При условии $p \leq 1/2$ оператор сепарабелен, т.е. допускает статистически независимое рассмотрение двух его слагаемых [6].

Всякое воздействие со стороны окружения на молекулу для спиновых векторов состояния выражается через операторы Паули для каждого спинового момента или через какую-либо их комбинацию. Так что вопрос о стабильности спинового изомера сводится к нечувствительности векторов состояния к операторам Паули. Состояние $|\Psi^-\rangle\langle\Psi^-|$ является хорошим примером такой инвариантности к одновременному действию операторов σ_z, σ_x на два протона. Подобные состояния называются свободными от декогерентности. Единичный оператор I в операторном пространстве над C^4 , по определению, коммутирует с любым оператором из этого операторного пространства.

Продемонстрируем справедливость утверждений на примере действия оператора проекции спинового момента на ось O_z . Этот оператор сдвигает фазу и используется в ЯМР для описания намагниченности образца. Так как спиновые угловые моменты протонов находятся в связанном состоянии, то действующим оказывается суммарный оператор проекции S_z . Воспользуемся известными матричными представлениями операторов в вычислительной системе координат S_z [7], $|\Psi^-\rangle\langle\Psi^-|$ [8]:

$$S_z = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}, \quad |\Psi^-\rangle\langle\Psi^-| = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}, \quad I = \frac{1}{4} \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}.$$

Среднее значение оператора проекции вычисляется методом взятия следа:

$$\langle S_z \rangle = Tr(S_z \rho) = pTr(S_z |\Psi^-\rangle\langle\Psi^-|) + (1-p)Tr(S_z I) = 0.$$

Обращение в нуль среднего значения оператора S_z означает не только защищенность состояния ρ от сдвига фазы. Но также то, что молекула спин-модифицированной воды, находясь в жидкой среде, утратила ядерный магнитный момент, который является характерным признаком магнитных свойств водной среды.

В заключение следует сказать несколько слов о спиновом состоянии молекулы воды в газовой фазе. Здесь положение дел сложнее, чем в жидкости, по следующим причинам. Если считать, что спиновые степени свободы молекулы полностью изолированы от внешних воздействий, то ядерные спины находятся в чистом состоянии и возможны любые суперпозиции базисных векторов. В частности, в системе координат с целочисленными спиновыми моментами возможно состояние, когда в волновой функции представлены все базисные вектора с одинаковыми численными коэффициентами. В этом случае получается отношение концентрации орто:пара=3:1, что чаще всего встречается в природе.

На самом деле, предположение о полной независимости ядерных моментов от окружения не вполне правильно. Во-первых, потому, что молекулы сталкиваются в газе, и эти столкновения могут повлиять на состояния спинов. Во-вторых, вращательные степени свободы, которые всегда есть у молекулы в газовой фазе, можно рассматривать как внешнюю среду для спиновых моментов, поэтому появляется постоянный, неустрашимый источник возмущения для спиновых моментов в молекуле.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] В. К. Конюхов, В. П. Логвиненко, В.И. Тихонов, Краткие сообщения по физике ФИАН, N 5-6, 83 (1995).
- [2] V. I. Tikhonov and A. A. Volkov, Science **296**, 2363 (2002).
- [3] А. М. Макуренков, В. Г. Артёмов, П. О. Капралов и др., Известия вузов. Радиофизика, L(10-11), 1 (2007).
- [4] D. A. Lidar, D. Bacon, J. Kempe, K. B. Whaley, arXiv:quant-ph/9908064v2
- [5] D. Bacon, J. Kempe, D. A. Lidar, K. B. Whaley, Phys. Rev. Lett. **85**, 1758 (2000).
- [6] R. Horodecki, P. Horodecki, M. Horodecki, K. Horodecki, arXiv:quant-ph/0702225v2
- [7] D. A. Lidar, D. Bacon, K. B. Whaley, arXiv:quant-ph/9809081v2
- [8] К. А. Валиев, А. А. Кокин, *Квантовые компьютеры: надежды и реальность* (Ижевск, РХД, 2001).

Институт общей физики

им. А.М. Прохорова РАН

Поступила в редакцию 24 февраля 2009 г.