

УДК 539.19

ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ЭЛЕМЕНТЫ В СТРУКТУРЕ МОЛЕКУЛЫ ВОДОРОДА

В. К. Конюхов

Высказывается предположение, что необычайно высокая стойкость к внешним воздействиям спиновых модификаций молекулы водорода (спиновых изомеров молекулы) обязана существованию зацепления между слоями, которые возникают при отображении Хопфа. В зацеплении участвуют слои, соответствующие спинам протонов и вращательному движению молекулы водорода.

Ортоводород и параводород в жидком и газообразном состояниях известны исследователям с начала прошлого века как вещества с индивидуальными физическими свойствами, имеющими различную теплоемкость, теплопроводность и обладающими различными рамановскими спектрами [1]. Время релаксации к термодинамически равновесной концентрации спиновых изомеров оказывается очень большим по сравнению с характерными временами молекулярных процессов и временами релаксации к равновесному состоянию в газе и жидкости по другим степеням свободы.

Для существования спинового изомера должен выполняться принцип Паули, который устанавливает жесткую связь между полным ядерным спином молекулы и ее вращательным движением так, чтобы полная волновая функция молекулы оказалась антисимметричной по отношению к операциям перестановки спиновых и пространственных координат протонов. Здесь и далее предполагается, что молекула водорода находится в основном электронном и колебательном состояниях, где волновые функции симметричны по отношению к операции перестановки, и по этой причине их можно исключить из рассмотрения, оставив в качестве полной волновой функции произведение спиновой и вращательной функций молекулы. Так как полная функция молекулы должна быть антисимметричной, то для произведения ядерной и вращательной функций реализуются только два варианта, один раз, когда ядерная функция антисимметрична, а

вращательная функция симметрична (параводород, $S = 0, J = 0, 2, 4, \dots$), и второй раз, когда ядерная симметрична, а вращательная антисимметрична (ортоводород, $S = 1, J = 1, 3, 5, \dots$) [2].

В настоящей работе построена топологическая конструкция в трехмерном физическом пространстве из трех окружностей, две из которых принадлежат спиновым моментам протонов и одна – вращению молекулы водорода. Окружности протонов зацепляются с окружностью вращения. Для того, чтобы зацепляющиеся окружности существовали, достаточно учесть пространственную форму молекулы водорода и общий фазовый множитель у спиновых функций протонов. Эта конструкция должна стабилизировать связь между вращением молекулы и спинами, которая существует за счет принципа Паули.

Вращение молекулы. Вращательная функция молекулы водорода строится с учетом пространственной формы молекулы, так как молекула водорода обладает аксиальной симметрией относительно оси, проходящей через центры протонов. В общем случае симметричного и асимметричного волчков вращательные волновые функции молекул определяются на сфере S^3 , они представляют собой линейные суперпозиции D -функций Вигнера $D_{m' m}^j(\alpha, \beta, \gamma)$ с обязательной зависимостью от трех углов Эйлера.

Вращательная функция молекулы водорода определяется на сфере S^2 и представляет собой сферическую функцию $Y_{j m}(\beta, \gamma)$, которая зависит уже от двух углов Эйлера. Угол α , который соответствует вращению относительно оси симметрии молекулы, исключается, поскольку по квантовой механике невозможно вращение тела относительно его аксиальной оси симметрии [3].

Редукцию вращательной функции молекулы водорода следует трактовать как отображение $h : S^3 \mapsto S^2$, которое известно как отображение Хопфа [4]. Все вращения на S^3 (группа $G = SU(2)$) относительно аксиальной оси объединяются в подгруппу H , а сфера S^2 трактуется как совокупность правых классов Hg смежности по подгруппе H . Любая функция на G оказывается определенной на классах смежности, она изменяется при переходе от класса к классу и, следовательно, от точки к точке на S^2 , но остается постоянной на элементах $g \in H$.

Среди всех D -функций с данным значением j общим числом $(2j + 1)^2$ отбираются те $(2j + 1)$ функции, которые имеют индекс $m = 0$ и у которых зависимость от угла α отсутствует [5]:

$$D_{0 m'}^j(\alpha, \beta, \gamma) = \exp(-i 0 \alpha) d_{0 m'}^j(\beta) \exp(-i m' \gamma) = \sqrt{4\pi/(2j + 1)} Y_{j -m'}(\beta, \gamma).$$

В теории вращения молекул индекс m и угловую переменную α обычно связывают с лабораторной системой координат, а индекс m' и переменную γ с молекулярной системой. Здесь для удобства изложения системы координат обменялись своими ролями, что возможно сделать из-за их полной эквивалентности для описания вращательного движения молекул [6].

Таким образом, форма молекулы с ее аксиальной симметрией вызывает расслоение группы G на базовую поверхность S^2 и слой H в виде окружности большого радиуса на S^3 . Так что пространственная форма молекулы водорода и ее вращательное движение делает неизбежным отображение Хопфа.

Спины протонов. Спиновым функциям протонов возможно сопоставить точки на S^2 с помощью следующих операций. Всякая спиновая функция $|\Psi\rangle$ частицы $s = 1/2$ имеет два комплексных числа z_1, z_2 в качестве координат спинора в двумерном пространстве с базисными векторами $|0\rangle, |1\rangle$. Координаты нормированы условием $|z_1|^2 + |z_2|^2 = 1$ [7]:

$$|\Psi\rangle = z_1 |0\rangle + z_2 |1\rangle.$$

Этим же комплексным числам z_1, z_2 приводится в соответствие точка на S^3 и унитарная унимодулярная матрица вращений [8]

$$g = \begin{vmatrix} z_1 & z_2 \\ -\bar{z}_2 & \bar{z}_1 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} X_4 + iX_3 & X_2 + iX_1 \\ -X_2 + iX_1 & X_4 - iX_3 \end{vmatrix} = \\ = \begin{vmatrix} \exp(i\alpha) & 0 \\ 0 & \exp(-i\alpha) \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \cos\beta & \sin\beta \\ -\sin\beta & \cos\beta \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \exp(i\gamma) & 0 \\ 0 & \exp(-i\gamma) \end{vmatrix}. \quad (1)$$

Координаты z_1, z_2 в соответствии с требованиями квантовой механики могут содержать общий фазовый множитель $z_1 = \exp(i\alpha')z'_1, z_2 = \exp(i\alpha')z'_2$ [9]. Обычно этот множитель сокращается при вычислении среднего значения операторов в обкладках спиновых функций, элементов матрицы плотности и скалярного произведения векторов. Здесь же он представлен диагональной унитарной унимодулярной матрицей, на которую следует умножить слева матрицу (1), чтобы от координат z'_1, z'_2 перейти к координатам z_1, z_2 . Исключается общий фазовый множитель тем же приемом перехода к классам смежности, который был употреблен при конструировании вращательной волновой функции молекулы

$$\begin{vmatrix} \exp(i\alpha') & 0 \\ 0 & \exp(-i\alpha') \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \exp(i\alpha) & 0 \\ 0 & \exp(-i\alpha) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \exp(i(\alpha' + \alpha)) & 0 \\ 0 & \exp(-i(\alpha' + \alpha)) \end{vmatrix}$$

Элементы правых классов смежности Hg группы G по подгруппе H параметризуются угловыми переменными β, γ .

Исключение фазового множителя указанным выше способом показывает, что на самом деле спиновой функции частицы сопоставляется не элемент (матрица) группы G , но класс смежности или точка на сфере S^2 . Отображение пространства спиновых функций на сферу в физическом трехмерном пространстве используется в уравнениях Блоха применительно к ядерному магнитному резонансу [10].

Зацепление слоев. Покажем как реализуется зацепление слоев для вращательного движения молекулы и спиновых моментов протонов. В качестве базисных векторов в пространстве R^4 используются кватернионные единицы, произвольная точка \mathbf{q} на S^3 (элемент группы $SU(2)$) записывается через координаты как

$$\mathbf{q} = X_4 \mathbf{1} + X_3 \mathbf{i} + X_2 \mathbf{j} + X_1 \mathbf{k} \quad X_4^2 + X_3^2 + X_2^2 + X_1^2 = 1, \quad (2)$$

где кватернион \mathbf{i} имеет координату X_3 , так как эта координата соответствует оси Oz , она же ось квантования для вращения и спиновых моментов.

При отображении $h : S^3 \mapsto S^2$ каждому \mathbf{q} сопоставляется точка p на S^2 , координаты которой (x_3, x_2, x_1) можно вычислить через координаты кватерниона \mathbf{q} либо определить их с помощью операции, которая используется при отображении группы $SU(2)$ на группу $SO(3)$

$$\mathbf{p} = \mathbf{q}^{-1} \mathbf{i} \mathbf{q}, \quad (3)$$

Величину \mathbf{p} можно интерпретировать несколькими способами. Во-первых, \mathbf{p} есть кватернион, поскольку он равен произведению кватернионов. Из формы записи преобразования (3), как вращения в подпространстве R^3 , следует, что \mathbf{p} есть мнимый кватернион. Во-вторых, p есть точка на S^2 , так как прямая стереографическая проекция $s : S^3 \mapsto R^3$ и обратная $s^{-1} : R^3 \mapsto S^3$ устанавливают взаимно однозначное соответствие между координатами мнимых ($X_4 = 0$) кватернионов на S^3 и координатами точек на сфере S^2 :

$$s : S^3 \mapsto R^3 \quad x_k = \frac{X_k}{1 - X_4} \quad k = 3, 2, 1, \quad \text{если } X_4 = 0, \text{ то } x_k = X_k,$$

$$s^{-1} : R^3 \mapsto S^3 \quad X_4 = \frac{r^2 - 1}{1 + r^2} \quad X_k = \frac{2x_k}{1 + r^2} \quad r^2 = x_3^2 + x_2^2 + x_1^2 \quad k = 3, 2, 1,$$

если $r^2 = 1$, то $X_k = x_k$.

Величину p можно понимать как точку на S^2 , в которую переходит точка $(1, 0, 0)$ при вращении в R^3 с помощью кватерниона (2). Чтобы получить координаты (x_3, x_2, x_1) точки p , следует \mathbf{p} в (3) представить как суперпозицию единичных кватернионов:

$$(x_3, x_2, x_1) = (X_4^2 + X_3^2 - X_2^2 - X_1^2, 2(-X_4X_1 + X_3X_2), 2(X_4X_2 + X_3X_1)).$$

Элементы подгруппы H вращений относительно оси Oz , они же – класс смежности, они же – слой при отображении Хопфа представляются как $He = \cos(t)\mathbf{1} + \sin(t)\mathbf{i}$, где $e \in G$ единица группы, $0 \leq t \leq 2\pi$. Слою He соответствует точка $(1, 0, 0)$ на S^2 .

Вращательному движению молекулы водорода следует сопоставить класс смежности (слой) следующего вида:

$$Hg = (\cos(t)\mathbf{1} + \sin(t)\mathbf{i})(\cos(\theta)\mathbf{j} + \sin(\theta)\mathbf{k}) = \cos(t + \theta)\mathbf{j} + \sin(t + \theta)\mathbf{k},$$

поскольку оси, относительно которых вращается молекула, лежат в плоскости (j, k) , перпендикулярной оси симметрии молекулы. Элементы слоя параметризуются двумя угловыми переменными $0 \leq t, \theta \leq 2\pi$. Этому слою соответствует точка $(-1, 0, 0)$ на S^2 .

Относительно спиновых координат протонов в молекуле водорода сделаем самые общие предположения, считая, что комплексные числа z_1, z_2 , связаны между собой только условием нормировки. В этом случае им соответствует точка p на S^2 общего положения. Такое предположение оправдывается тем, что S^2 есть не что иное как сфера Блоха, движение изображающей точки по которой передает эволюцию спиновых моментов [10]. Класс смежности (слой расслоения группы $SU(2)$), соответствующий произвольной точке $p = (p_3, p_2, p_1)$, приводится в [4]. Элемент слоя \mathbf{q} , который соответствует единичному элементу $t = 0$ в подгруппе H , можно сделать чисто мнимым кватернионом:

$$Hq = (\cos(t)\mathbf{1} + \sin(t)\mathbf{i})\mathbf{q} \quad \mathbf{q} = \frac{1}{\sqrt{2(1 + p_3)}}((1 + p_3)\mathbf{i} + p_2\mathbf{j} + p_3\mathbf{k}).$$

Зацепление слоев Hg, Hq имеет место в том случае, когда окружность $s(Hq)$ пересекает плоскость (j, k) один раз внутри круга $s(Hg)$ в точке с координатой $r_1 < 1$,

$r = \sqrt{x_2^2 + x_1^2}$, а другой раз – за пределами круга в точке с координатой $r_2 > 1$. Точки пересечения определяются тем, что координата x_3 окружности $s(Hq)$ обращается в нуль. Это случается два раза при $t = \pi/2, -\pi/2$:

$$x_3 = \frac{\cos(t)\sqrt{1+p_3}}{\sqrt{2} + \sin(t)\sqrt{1+p_3}} \quad r_1 = \frac{\sqrt{1-p_3}}{\sqrt{2} + \sqrt{1+p_3}} \quad r_2 = \frac{\sqrt{1-p_3}}{\sqrt{2} - \sqrt{1+p_3}}$$

Нетрудно убедиться, что при $p_3 \neq 1$ условия зацепления выполняются. Зацепление между окружностью спинового момента второго протона с окружностью вращательного движения вычисляется аналогичным образом. Комплексные координаты z_1, z_2 и соответственно точка p могут отличаться от этих же величин для первого протона, но доказательство зацепления слоев происходит таким же образом. Можно показать, что существует зацепление между слоями двух спиновых моментов. Доказывается более общее утверждение, что любая пара слоев при отображении Хопфа существуют в зацепленном состоянии [4].

Зацепление или не зацепление замкнутых непересекающихся кривых в R^3 есть очень общее свойство объектов, которое сохраняется при гомотопических преобразованиях R^3 . Эти преобразования могут перемещать молекулу, вращать ее, изменять ее размеры. В настоящей работе делается утверждение, что именно это свойство может быть ответственным за стабильность спиновых модификаций молекулы при всевозможных внешних воздействиях на среду, которая содержит молекулярный водород.

Рассмотрение строится на следующих предположениях. Молекула водорода совершает вращательное движение, пространственная форма молекулы имеет ось симметрии бесконечно высокого порядка. Спиновым координатам протонов можно сопоставить унитарную 2×2 матрицу, координаты протонов имеют общий фазовый множитель.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Ф а р к а с А. Ортоводород, параводород и тяжелый водород, ОНТИ, 1936.
- [2] Ф е р м и Э н р и к о. Молекулы и кристаллы, М., ИНЛИТ, 1947.
- [3] Б о р О., М о т т е л ь с о н Б. Структура атомного ядра, **2**, М., Мир, 1977.
- [4] L y o n s D. W. Mathematics magazine, **76**, No. 2, 87 (2003).
- [5] Б а р у т А., Р о н ч к а Р. Теория представлений групп и ее приложения. М., Мир, 1980.
- [6] К о н ю х о в В. К. Квантовая электроника, **33**, No. 11, 1022 (2003).
- [7] M o s s e r i R. and D a n d o l o f f R. J. Phys. A: Math. Gen. **34**, 10243 (2001).

- [8] Скотт П. Геометрия на трехмерных многообразиях, М., Мир, 1986. Peter Scott. The Bulletin of the London Mathematical Society, **15**, No. 56, 401 (1983).
- [9] Садбери А. Квантовая механика и физика элементарных частиц, М., Мир, 1989.
- [10] Аллен Л., Эберли Дж. Оптический резонанс и двухуровневые атомы, М., Мир, 1978.

Институт общей физики
им. А. М. Прохорова РАН

Поступила в редакцию 30 декабря 2004 г.