REVERSAREA TIMPULUI ŞI SIMETRIA ÎN CULORI

Membru corespondent al A.Ş.M.
Ion Geru

Filozofia modernă consideră spaţiul si timpul forma de existenţă a materiei în multiplele ei varietăţi de substanţă şi câmpuri. La rândul său, cercetările în domeniul fizicii au evidenţiat importanţa deosebită a proprietăţilor de simetrie ale spaţiului si timpului. Aceste proprietăţi de simetrie cauzează existenţa unor legi fundamentale ale naturii ce se manifestă pe întreaga scară dimensională a Universului - de la particule elementare, nuclee atomice, atomi, molecule, nano- şi microstructuri până la galaxii si Metagalaxie. Este bine cunoscut, de exemplu, că proprietatea de omogenitate a timpului are drept consecinţă legea conservării energiei, iar proprietatea de omogenitate a spaţiului conduce la legea conservării impulsului, pe când izotropia spaţiului (independenţa proprietăţilor de alegere a direcţiei în spaţiu) cauzează existenţa legii de conservare a momentului cinetic.

Deşi pentru efectuarea oricărei mişcări în spaţiu este necesar un anumit interval de timp, adică drumul parcurs este funcţie de timp, în fizica clasică (newtoniană) spaţiul si timpul sunt considerate ca fiind forme absolute şi independente de existenţă a materiei. Situaţia este cu totul alta în cazul mecanicii relativiste care descrie mişcarea mecanică a particulelor elementare şi a corpurilor[1)] cu viteza aproape de viteza luminii în vid c=300.000 km/h. În acest caz spaţiul nu poate fi separat de timp, are loc formarea aşa numitului "spaţiu-timp" patru dimensional sau spaţiul Minkowsky [4], trei coordonate ale căruia sunt coordonatele spaţiale x,y,z, iar a patra este coordonata temporară imaginară ict ($i=\sqrt{-1}$) .

Conform teoriei restrânse a relativităţii, orice eveniment din lumea înconjurătoare este prezentat printr-un punct în spaţiul Minkowsky, iar orice proces – printr-o linie în acelaşi spaţiu.

În mecanica cuantică nerelativistă la descrierea mişcării microparticulelor cu viteza $\mathcal{V} \leq c$ spaţiul se consideră independent de timp, ca şi în mecanica clasică. Însă, spre deosebire de fizica clasică, în mecanica cuantică nerelativistă există, totuşi, o corelaţie implicită între spaţiu şi timp, corelaţie care rezultă din principiul incertitudinii al lui Heisenberg:

$$\langle(\Delta P_x)^2\rangle\langle(\Delta x)^2\rangle \geq \hbar^2/4\,, \qquad (1)$$

unde Δx si ΔP_x sunt incertitudinile la determinarea coordonatei x si a proiecţiei P_x a impulsului **P** pe axa Ox, iar ħ este constanta Planck ($\hbar=h/2\pi$). Deoarece valoarea medie a impulsului particulei este produsul dintre masa şi viteza acesteia, iar viteza la mişcarea cu acceleraţie depinde de timp, relatia de incertitudine

$$m^2 \langle(\Delta\mathcal{V}_x(t))^2\rangle\langle(\Delta x)^2\rangle \geq \hbar^2/4 \qquad (1a)$$

conţine informaţie despre corelaţia implicită între spaţiu şi timp la mişcarea cu acceleraţie. Mai mult ca atât, indicaţie asupra existenţei corelaţiei implicite între spaţiu şi timp în mecanica cuantică nerelativistă se conţine şi în relaţia de incertitudine dintre alte două mărimi fizice canonic conjugate - energia E şi timpul t:

$$\langle(\Delta E)^2\rangle\langle(\Delta t)^2\rangle \geq \hbar^2/4, \qquad (2)$$

Într-adevăr, E din formula (2) reprezintă energia totală a sistemului cuantic, care este compusă din energia cinetică E_c si energia potenţială E_p ($E=E_c+E_p$). Deoarece energia potenţială este funcţie de coordonate spaţiale, $E_p=E_p(x,y,z)$, energia totală tot va fi dependentă de x,y şi z şi, ca urmare, relaţia de incertitudine (2) dintre energie şi timp poate fi scrisă în forma:

$$\langle(\Delta E(x,y,z))^2\rangle\langle(\Delta t)^2\rangle \geq \hbar^2/4\,, \qquad (2a)$$

una din consecinţele căreia este existenţa corelaţiei implicite între spaţiu şi timp.

De menţionat că mărimea fizică "intervalul de timp" (care, evident, poate fi supusă procedurii de măsurare cu mare exactitate) în mecanica cuantică se deosebeşte în mod radical de oricare altă mărime fizică şi ocupă o poziţie excepţională printre toate mărimile fizice existente. Într-adevăr, conform unuia din postulatele mecanicii cuantice, fiecărei mărimi fizice i se atribuie un operator liniar. Forma explicită a operatorului depinde de reprezentarea utilizată pentru efectuarea calculelor. De exemplu, pentru un sistem unidimensional operatorul coordonatei $\hat{x}$, în reprezentarea coordonativă, coincide cu coordonata clasica x, adica acţiunea operatorului $\hat{x}$ se reduce la "înmulţirea cu x". Însă e destul să se treacă la

1) Necesitatea mişcării corpurilor masive cu viteza $\mathcal{V} \leq c$ apare la rezolvarea practică a problemei zborurilor cosmice interstelare şi, în primul rând, a zborurilor spre exoplanetele de la periferia Sistemului Solar, în vecinătatea planetei Pluton (zona Oort, distanta 1 bilion km), şi a zborurilor cosmice spre exoplanetele celei mai apropiate de Soare stea Prosima Centavra (distanţa 40,5 bilioane km= 4,28 ani lumină) cu ajutorul rachetelor fotonice [1] şi/sau a navelor cosmice ce vor utiliza pentru mişcare cu viteza $\mathcal{V} \leq$ c energia de anihilare a cuplurilor particulă-antiparticulă, sau a rachetelor care vor transforma o parte neînsemnată a energiei vidului în energia unui fascicul puternic de lumină [2,3].

reprezentarea impulsului pentru ca operatorul coordonatei $\hat{x}$ sa obțină forma:

$$\hat{x} = i\hbar \frac{\partial}{\partial P_x} . \qquad (3)$$

Este bine cunoscut că în mecanica cuantică diferite reprezentări ale operatorilor liniari ce corespund mărimilor fizice se utilizează după caz, urmărind scopul de a rezolva problemele concrete pe calea cea mai scurtă. Timpul (sau, mai exact, intervalul de timp) este unica mărime fizică în mecanica cuantică, pentru care nu există operatorul $\hat{t}$ sau $\Delta\hat{t}$ ce o reprezintă. Mai mult ca atât, ecuația de baza a mecanicii cuantice – ecuația Scrödinger – conține operatorul de diferențiere în raport cu timpul, considerat ca o variabilă continuă

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r},\sigma,t)}{\partial t} = \mathbf{H}\Psi(\mathbf{r},\sigma,t), \qquad (4)$$

unde $\mathbf{H}$ este Hamiltonianul (operatorul energiei), iar $\Psi(\mathbf{r},\sigma,t)$ funcția de undă dependentă de coordonata spațială $\mathbf{r}$, coordonata de spin σ şi timpul t. Ecuația Scrödinger (4) este scrisă pentru cel mai simplu caz a unei particule cuantice.

Conform teoriei generalizate a relativității, elaborate de către A. Einstein, prezența materiei în formă de substanță în spațiu duce la schimbarea metricii şi apariția curburii spațiului, efect fizic cu atât mai important cu cât este mai mare masa şi densitatea corpurilor ce creează câmp gravitațional. O altă consecință a prezenței materiei în formă de substanță în spațiu este multiplicitatea propretăților de simetrie în aranjarea spațială a atomilor în molecule, clusteri moleculari şi cristale, care cauzează existența a 32 grupuri punctiforme de simetrie şi 230 grupuri spațiale de simetrie.

Referitor la proprietățile de simetrie ale timpului, e de menționat că, de rând cu omogenitatea axei timpului, din care urmează legea conservării energiei, există simetria în raport cu reversarea sau inversarea timpului. Simetria în raport cu inversia temporară se realizează numai pentru procese reversibile şi nu poate avea loc în cazul proceselor ireversibile, parcurgerea cărora este însoțită de creşterea entropiei. A înțelege esența problemei permite analiza următoarei experiențe imaginate. Fie că moleculele unui gaz ocupă volumul $V_0<V$ a unui vas închis de volum V, considerând camera cu volumul $V_1=V-V_0$ vidată şi separată de camera cu volumul V_0 printr-un perete, la înlăturarea căruia gazul se va dilata şi va ocupa volumul total V. La reversarea timpului va avea loc reversarea direcției mişcării fiecărei molecule a gazului şi peste un interval de timp moleculele gazului vor ocupa volumul inițial V_0 în lipsa peretelui dintre cele două camere cu volumul V_0 şi V_1, respectiv. Pe de altă parte, procesul termodinamic de comprimare a gazului „de la sine ", fără acțiunea forței exterioare, este interzis de legea a doua a termodinamicii. Reversibilitatea dinamică a timpului, pe de o parte, şi ireversibilitatea statistică a timpului, pe de altă parte, sunt cunoscute în istoria fizicii sub denumirea de paradoxul Loschmidt.

În fizica clasică reversibilitatea dinamică a timpului este echivalentă cu invarianța ecuației

$$\sum_{i=1}^{N} m_i \frac{d^2\mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}^{ext} \qquad (5)$$

în raport cu transformarea t→ -t. În formula (5) m_i *şi* $\mathbf{r}_i$ notează masa şi, respectiv, vectorul de poziție a particulei *i*, N este numărul de particule a sistemului mecanic, iar $\mathbf{F}^{ext}$ este rezultanta forțelor exterioare (forțele interne de acțiune şi reacțiune se compensează reciproc). Deoarece ecuația (5) conține derivata de ordinul doi în raport cu timpul, această ecuație, evident, nu-şi schimbă forma (rămâne invariantă) la efectuarea transformării t→ -t.

Această transformare nu are consecințe importante în fizica clasică, în afară doar de simpla confirmare a faptului, că procesele mecanice ce au loc la parcurgerea timpului în direcția "de la trecut prin prezent spre viitor" sunt întocmai echivalente cu procesele mecanice posibile ce ar avea loc la parcurgerea timpului în direcția opusă a axei timpului, „de la viitor prin prezent spre trecut". Folosim aici expresia "ar avea loc" deoarece, pentru ca o anumită transformare să fie considerată transformare de simetrie, este suficient ca această transformare să fie posibilă în principiu. De exemplu, pentru a ne convige că un cristal posedă printre alte elemente de simetrie inversia spațială nu este necesar de a schimba în realitate cu locul atomii echivalenți. Este necesar doar ca această posibilitate să existe în principiu.

Cu totul alta este situația la reversarea timpului în mecanica cuantică. În primul rând, ecuația Shrödinger (4), spre deosebire de ecuația (5) ce reprezintă legea a doua a lui Newton în mecanica clasică, schimbă semnul la efectuarea formală a transformării t→ -t.

Însă invarianța ecuației Shrödinger, în raport cu reversarea timpului, poate fi restabilită prin introducerea operatorului inversiei temporare **K** care comutează cu Hamiltonianul sistemului

$[\mathbf{K}, \mathbf{H}] = 0.$ (6)

Aceasta înseamnă, cu alte cuvinte, că sub acțiunea operatorului **K** Hamiltonianul sistemului **H** rămâne invariant

$$\mathbf{KHK}^{-1} = \mathbf{H}. \tag{6a}$$

Spre deosebire de ceilalți operatori care sunt definiți în spații liniare şi se utilizează pe larg în mecanica cuantică, operatorul inversiei temporare **K** este un operator antiliniar şi unitar, fiind numit operator antiunitar. În cazul sistemului din N particule cu spinul S = 1/2 operatorul **K** poate fi prezentat în forma [5]

$$\mathbf{K} = i^N \sigma_{y1}\sigma_{y2}...\sigma_{yN}\mathbf{K}_0, \tag{7}$$

unde σ_{y1}(m=1,2,…,N) este matricea Pauli imaginară în baza spinorică $\{|1/2,+1/2\rangle, |1/2,-1/2\rangle\}$ pentru particula *m,* iar $\mathbf{K_0}$ este operatorul conjugării complexe. Operatorul $\mathbf{K_0}$ acționează asupra funcției de undă $\Psi(\mathbf{r})$ şi Hamiltonianului **H**, după cum urmează:

$$\mathbf{K}_0\Psi(\mathbf{r}) = \Psi^*, \tag{8}$$

$$\mathbf{KHK}^{-1} = \mathbf{H}^* \tag{9}$$

şi posedă proprietatea $\mathbf{K_0}=\mathbf{K_0}^{-1}$.

În cazurile des întâlnite în practică, când sistemul de particule cu spinul S=1/2, datorită interacțiunilor interne, poate fi considerat ca fiind format din n subsisteme, fiecare cu spinul total S_p (p=1, 2, …, *n*), operatorul inversiei temporare **K** poate fi prezentat în formă de produs dintre *n* operatori unitari $\mathbf{U}_p$ (p = 1, …, n; $\mathbf{U}_p^+\mathbf{U}_p$=1) în baza spinorică $\{|S_p,S_p\rangle,|S_p,S_p-1\rangle,...,|S_p,1-S_p\rangle,|S_p,-S_p\rangle\}$ şi operatorul $\mathbf{K_0}$ [6]:

$$\mathbf{K} = \mathbf{U_1U_2 \ldots U_nK_0}. \tag{10}$$

Toți operatorii $\mathbf{U}_p$ (p = 1, …, n) au aceeaşi structură. Însă dimensionalitatea matricelor care îi reprezintă depinde de tipul interacțiunilor spin-spin şi în caz general este diferită. Matricea operatorului $\mathbf{U}_p$ are toate elementele de matrice egale cu zero, în afară de acelea care sunt situate pe diagonala cu numărul $2S_p$+1 de elemente, înclinată oblic în raport cu diagonala principală. Elementele de matrice de pe această diagonală sunt egale cu +1 sau -1, cu specificul că toate elementele matriciale megieşe au semne diferite:

$$\|U_p\| = \begin{bmatrix} 0 & 0 & ... & 0 & 1 \\ 0 & 0 & ... & -1 & 0 \\ ... & ... & ... & ... & ... \\ 0 & 1 & ... & 0 & 0 \\ -1 & 0 & ... & 0 & 0 \end{bmatrix}. \tag{11}$$

Structura operatorilor $\mathbf{U}_p$ şi, respectiv, a matricelor $\|U_p\|$ (*p* = 1, 2, ..., *n*) este importantă pentru a înțelege comportarea sistemului cuantic format din particule cu spin la reversarea timpului. După cum reiese din (11), operatorul $\mathbf{U}_p$ posedă proprietatea

$$\mathbf{U}_p^2 = +\mathbf{e}^{(S_p)}, \tag{12}$$

dacă numărul elementelor de matrice $(U_p)_{\alpha\beta}$ este impar (spinul S_p este număr întreg) şi, respectiv, proprietatea

$$\mathbf{U}_p^2 = -\mathbf{e}^{(S_p)}, \tag{13}$$

dacă numărul elementelor de matrice $(U_p)_{\alpha\beta}$ este par (spinul S_p este număr semiîntreg). În formulele (12) şi (13) $\mathbf{e}^{(S_p)}$ este operatorul unitate în baza spinorică $\{|S_p,S_p\rangle, |S_p,S_p-1\rangle,..., |S_p,1-S_p\rangle, |S_p,-S_p\rangle\}$.

Cu luare în considerație a formulelor (9)-(13), funcțiile de undă $\Psi^{(S)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2,…, \mathbf{r}_N)$ şi $\mathbf{K}\Psi^{(S)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2,…, \mathbf{r}_N)$ care corespund aceluiaşi nivel energetic, în cazul sistemelor cu spin total S semiîntreg se demonstrează a fi liniar independente, ceea ce duce la degenerare suplimentară a nivelelor energetice cauzată de existența simetriei inversiei temporare. Această afirmare constituie conținutul teoremei Kramers, iar degenerarea suplimentară a nivelelor energetice, care se datoreşte simetriei inversiei temporare, poartă denumirea de degenerare Kramers. În continuare vor fi analizate numai sistemele cu degenerare Kramers a nivelelor energetice, mai concret grupurile de simetrie magnetică a acestor sisteme.

Extinderea a 32 grupuri punctiforme de simetrie spre 58 grupuri punctiforme cunosute de simetrie magnetică în două culori se efectuează tradițional cu ajutorul grupului abelean de simetrie de ordinul doi G_2: {**e**, **K**}, unde **e** este element unitate al grupului G_2 [7]. Grupurile punctiforme de simetrie magnetică caracterizează orientarea momentelor magnetice ale atomilor (ionilor) în clusteri magnetici, pe când poziția spațială a atomilor este determinată de grupul punctiform clasic (unul din 32) de simetrie. E de menționat că în literatură metoda descrisă de obținere a grupurilor punctiforme de simetrie magnetică s-a utilizat timp îndelungat fără a ține cont de specificul sistemelor fizice cu degenerare Kramers a nivelelor energetice. Pentru prima dată necesitatea şi modul de a schimba metoda de obținere a grupurilor de simetrie magnetică pentru sistemele cu degenerare Kramers a nivelelor energetice a fost discutată în [8]. Conform referinței [8], în acest caz grupurile de simetrie magnetică trebuie obținute nu în baza grupului G_2, dar în baza grupului abelean de simetrie de ordinul patru G_4: $\{\mathbf{K}, \mathbf{K}^2, \mathbf{K}^3, \mathbf{K}^4\mathbf{=e}\}$. Pe această cale s-a demonstrat că în cazul sistemelor cu degenerare Kramers a nivelelor energetice există nu 58 grupuri punctiforme de simetrie magnetică în două culori, ci numai patru grupuri şi acestea sunt grupurile punctiforme de simetrie magnetică în patru culori $4^{(4'_z)}$, $\bar{4}^{(4'_z)}$, $\bar{4}^{(4'_z)}/m^{(1)}$ şi $\bar{4}^{(4'_z)}/m^{(2)}$ [8].

O extindere şi mai generală a grupurilor clasice punctiforme de simetrie spre grupurile punctiforme de simetrie magnetică pentru sisteme cu degenerare Kramers a nivelelor energetice se obține pe baza grupului neabelean de simetrie G_8, care conține în calitate de subgrup grupul G_4 ($G_4 \subset G_8$), celelalte patru elemente ale acestui grup fiind prezentate prin operatorii $\pm\sigma_{\mathbf{x}}^{(S)}$ şi $\pm\sigma_{\mathbf{z}}^{(S)}\mathbf{K_0}$. Dimensionalitatea şi structura matricelor operatorilor $\pm\sigma_{\mathbf{x}}^{(S)}$ şi $\pm\sigma_{\mathbf{z}}^{(S)}$ depind de valoarea spinului S (dacă S=1/2, atunci $\sigma_{\mathbf{x}}^{(1/2)}$ şi $\sigma_{\mathbf{z}}^{(1/2)}$ sunt matricele lui Pauli), însă ordinea grupului G_8 este aceeaşi pentru orice valoare a spinului. În acest caz general există tot numai patru grupuri punctiforme de simetrie magnetică în patru culori şi acestea sunt următoarele grupuri [8,9]:

$$4^{(4'_z)}2^{(m'_x)}2^{(m_{xy})},$$

$$4^{(4'_z)}m^{(m'_x)}m^{(m_{xy})}, \; \bar{4}^{(4'_z)}2^{(m'_x)}m^{(m_{xy})},$$

şi $\bar{4}^{(4'_z)}2^{(m_{xy})}m^{(m'_x)}$.

Deşi cu creşterea valorii spinului S se măreşte dimensionalitatea matricelor $\left\|\sigma_{\mathbf{x}}^{(S)}\right\|$ şi $\left\|\sigma_{\mathbf{z}}^{(S)}\right\|$, structura grupurilor de simetrie magnetică în patru culori, obținute atât pe baza grupului abelean de simetrie G_2, cât şi a grupului neabelean de simetrie G_8, rămâne, respectiv, aceeaşi.

Toate opt grupuri noi de simetrie magnetică a sistemelor cu degenerare Kramers a nivelelor energetice se caracterizează prin lipsa mai multor elemente de simetrie, în special, a rotațiilor momentelor magnetice ale ionilor clusterilor magnetici în jurul axelor de simetrie de ordinul trei şi şase. În particular, este interzisă orientarea momentelor magnetice a ionilor paramagnetici sub unghi de 120° în trimeri magnetici homonucleari.

Structura primelor patru grupuri punctiforme de simetrie magnetică, obținute pe baza grupului G_4, este determinată de proprietățile operatorului reversării trimpului **K**, deoarece grupul G_4 este format din elementele $\mathbf{K}$, $\mathbf{K}^2$, $\mathbf{K}^3$ şi $\mathbf{K}^4$. Structura celorlalte grupuri punctiforme de simetrie magnetică, obținute pe baza grupului G_8, este determinată în mare măsură tot de proprietățile operatorului **K**, deoarece G_4 este subgup al grupului G_8, iar din restul patru elemente ale grupului G_8 două conțin operatorul de conjugare complexă $\mathbf{K_0}$. De aici rezultă că existența simetriei în raport cu reversarea timpului cauzează interzicerea anumitor direcții de orientare în spațiu a momentelor magnetice ale ionilor paramagnetici din clusteri magnetici cu degenerare Kramers a nivelelor energetice. Pe de altă parte, această selecție a direcțiilor posibile de orientare în spațiu a momentelor magnetice poate fi considerată ca rezultat al existenței unei corelații dintre proprietățile operatorului de reversare a timpului şi structura grupurilor de simetrie magnetică în patru culori.

Referințe:

1. Е. К. Зенгер. К механике фотонных ракет / Пер. с немецкого. М.: Издательство иностранной литературы, 1958.
2. У. Н. Закиров. Физическая механика межзвёздного полёта. Казань: ФЭН, 2003.
3. H. D. Froning. Interstellar studies their role in Astronautical Progress and the Future of Flight. 40th Congress of IAF, October 1989, Malaga, Spain.
4. В. Паули. Теория относительности. М.: Наука, 1983.
5. Е. Вигнер. Теория групп и её приложение к квантомеханической теории атомных спектров, М.: Издательство иностранной литературы, 1961.
6. И. И. Жеру. Низкочастотные резонансы экситонов и примесных центров, Кишинёв: Штиинца, 1976.
7. М. Хамермеш. Теория групп и ее применение к физическим проблемам, М.: Мир, 1966.
8. И. И. Жеру. Доклады Академии Наук СССР **268**, 1392 (1982) [Sov. Phys. Dokl. **28**, 99 (1983)].
9. И. И. Жеру. ФТТ **44**, 1432 (2002) [Physics of the Solid State **44**, 1496 (2002)].