

УДК 530.145.61; 577.3

Наталья ТИТОВА, д.т.н., професор,
Наталья МАНЧЕВА, к.т.н., доцент,
Ігор ШАПОВАЛОВ, к.ф.-м.н., доцент,
Валерія СЕРБІНА, студент

Національний університет «Одеська політехніка», м. Одеса, Україна, e-mail: tnv.titova@gmail.com,
vmanichev@ukr.net, shapovalov@onu.edu.ua, perchik010102@gmail.com

АНАЛІЗ ВИКОРИСТАННЯ РІВНЯННЯ ШРЕДІНГЕРА У МЕДИЧНІЙ ФІЗИЦІ

Анотація. Предметом вивчення буде квантування станів, яке є універсальним ефектом і спостерігається завжди, коли мікрочастинка може рухатися тільки в обмеженій області простору. Одним із проявів цього ефекту є дискретність станів електронів в атомах, які утримуються в околі ядра кулонівською силою.

Ключові слова: рівняння Шредінгера, рух вільної частинки, потенційний ящик, ефект квантування, хвильові властивості, нейромережа.

Оскільки мікрочастинки мають хвильові властивості, принципово неможливо використати класичну механіку для опису їхнього стану. У зв'язку з цим виникла необхідність створення механіки мікрочастинок, яка врахувала б їх хвильові властивості. Нова механіка, яку назвали хвильовою, або квантовою, була розроблена австрійським фізиком Е. Шредінгером (1887 – 1961), німецьким фізиком В. Гейзенбергом, англійським фізиком П. Діраком (1902 р.) та іншими вченими.

Рівняння Шредінгера використовується для знаходження дозволених енергетичних рівнів квантово-механічних систем (таких як атоми або транзистори). Асоційована хвильова функція дає ймовірність знаходження частинки в певному положенні. Пов'язана хвильова функція дає ймовірність знаходження частинки в певному положенні. Рішенням цього рівняння є хвиля, яка описує квантові аспекти системи.

Це рівняння навчилася вивчати нейромережа PauliNet квантовими способами Монте-Карло. Вони мають на увазі рішення рівнянь Шредінгера для великої кількості частинок. Основна складність у виконанні таких завдань – необхідність великих обчислювальних потужностей визначення багаточастинної хвильової функції. Зазвичай використовують простіші методи, наприклад Теорію функціоналу щільності (DFT) або пов'язані кластери (CC).

Нейромережа PauliNet створила власну методику обчислення хвильових функцій. Цей алгоритм за цілком розумні терміни здатний обчислювати рівняння Шредінгера практично будь-яких з'єднань.

У своїх прикладах автори штучного інтелекту визначали характеристики низки з'єднань за лічені десятки годин роботи стандартних графічних карт персональних комп'ютерів. Таким чином, вчені знайшли новий і надзвичайно ефективний спосіб обчислення основного стану довільних молекул.

Також рівняння Шредінгера активно використовується в квантово-хвильовій медицині, наприклад, у квантовій когеренції та декогеренції, квантових структурно-динамічних ефектах. Явище когерентності у живих системах співвідноситься з хвильовими функціями, що мають подібну морфологію форми та характеризується довжинами когерентності. Декогеренція є взаємодія квантової системи з навколишнім середовищем, у якому квантовий стан системи змінюється і відбувається обмін квантової інформацією системи з навколишнім середовищем.

Ці фундаментальні процеси в живому організмі можуть бути представлені в термінах інформаційної ентропії та математичних розрахунків тонкої структури частотного розподілу квантових процесів.

Квантово-хвильова медицина ґрунтується на розумінні, що квантові структури індивідуального організму та біологічного виду в цілому, здатні реагувати на умови зовнішнього середовища та формувати модифікації програм та відгуків. На рівні квантових структур і відповідних хвильових функцій ця інформація у вигляді зсуву певної фази квантового процесу надходить на рівні квантових кореляцій, виявляючи свій вплив надалі на самоузгоджені польові процеси електромагнітної природи і проявляється на клітинному та молекулярному рівні.

Квантові структурно-динамічні ефекти взаємодії біологічних молекул із зовнішніми полями, що мають природу скіріміонів і виявляються в умовах виражених градієнтів електромагнітного потенціалу зовнішнього поля, що може застосовуватися, в першу чергу, в лікуванні онкологічних захворювань, а також поясненні значної кількості біофізичних явищ, ніколи раніше не досліджених наукою під цим кутом.

Квантові ефекти, створювані зв'язковими групами клітин, які необхідні процесів міжклітинної комунікації, взаємодії з коливальними частотами безлічі ферментів, присутніх у клітинах. Можливість фундаментального впливу на процеси мітозу та гомеостазу цілісним та інтегративним чином, а також застосування квантово-хвильової медицини у випадках численних запальних станів, у тому числі аутоімунних захворювань.

Рішення рівняння Шредінгера використовуються у повсякденному житті (мобільний зв'язок, радіотехніка, мікрохвильові печі), у медицині (рентгенівські апарати), у промисловості та науці (електромагнітні системи управління, лазери і навіть гамма-телескопи).

Розвиваючи ідеї де Бройля про хвильові властивості мікрочастинок, Е. Шредінгер отримав у 1926 р. своє знамените рівняння. Він співставив руху мікрочастинки комплексну функцію координат і часу, яку назвав хвильовою функцією і позначив її грецькою буквою «пси» (Ψ). Називають її пси-функцією [1].

Пси-функція характеризує стан мікрочастинки. Вигляд цієї функції (певне рівняння) знаходять рішенням рівняння Шредінгера:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + U \Psi = i \hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}.$$

Результат дії цього оператора на певну функцію являє собою суму других часткових похідних цієї функції за координатами:

$$\Delta \Psi = \nabla^2 \Psi = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2}.$$

Це рівняння називають рівнянням Шредінгера у загальному вигляді.

Із рівняння випливає, що вигляд пси-функції визначається функцією U , тобто характером сил, що діють на частинку.

Рівняння Шредінгера є основним рівнянням нерелятивістської квантової механіки. В цій області воно відіграє таку ж роль, як рівняння руху Ньютона в класичній механіці. Воно не може бути виведено з інших співвідношень. Його варто розглядати як основне передбачення, справедливості якого підтверджується тим, що всі випливаючі з нього наслідки самим точним чином узгоджуються з дослідними результатами [2].

Пси-функція вводиться як деякий допоміжний символ і не відноситься до безпосередньо спостережуваних величин. Проте її знання дає можливість статистично завбачити значення величин, які одержують експериментально, і які мають реальний фізичний зміст.

Оскільки в рівнянні функція U залежить від координат і часу, то очевидно, що пси-функція теж є функцією координат і часу, тобто

$$\Psi = \Psi(x, y, z).$$

Якщо силове поле, в якому рухається частинка, *стаціонарне*, то потенціал не залежить від часу і функція U має смисл потенціальної енергії. У *стаціонарних станах* усі спостережувані фізичні параметри не змінюються з часом. Сама функція Ψ до таких параметрів

не належить. Не повинні змінюватися з часом тільки фізично спостережувані величини, які можуть бути утворені з Ψ за правилами квантової механіки.

Хвильову функцію будь-якого стаціонарного стану однієї частинки можна представити у вигляді двох співмножників, один з яких залежить тільки від координат, другий – тільки від часу:

$$\Psi = \Psi(x, y, z)e^{-i\left(\frac{E}{\hbar}\right)t}.$$

Рівні енергії електрона в потенційному ящику. Уявімо маленьку пружну кульку, котра рухається без тертя всередині ящика у вигляді прямого паралелепіпеда з абсолютно жорсткими непроникними стінками, що лежить на горизонтальній площині. За таких умов усередині ящика кулька рухається, як вільна частинка, і зіткнення зі стінками відбуваються пружно, без зміни величини імпульсу та кінетичної енергії. Задля спрощення викладок будемо вважати, що рух відбувається вздовж одного з ребер ящика довжини l . При пружному зіткненні із непроникною стінкою ящика кінетична енергія кульки, якою б вона не була, повністю переходить у потенціальну енергію пружної деформації, а потім на стадії відскоку відновлюється до вихідної величини. Але при необмеженій жорсткості стінок деформації є гранично малими, тому перетворення енергії відбуваються в одній точці – точці дотику кульки до стінки ящика [3]. В такому разі можна вважати, що потенціальна енергія кульки $U(x)$ скрізь всередині ящика дорівнює нулю, а на стінках стрибком зростає і може бути якою завгодно, як показано на рис. 1. Отже, можна говорити, що частинка в ящику рухається в такому силовому полі, де її потенціальна енергія $U=0$ в області шириною l і $U \rightarrow \infty$ за її межами. Фраза досить громіздка. Тому для характеристики типових силових полів використовують відповідні жаргонні терміни. Зокрема, описане поле називають потенціальним ящиком або потенціальною ямою з нескінченно високими вертикальними стінками (рис.1).

Характеристики руху кульки в ящику – енергія та імпульс – ніяк не залежать від її маси та розмірів ящика. Вони задаються із зовні при приведенні кульки в рух. Це стосується й мікрочастинки за умов, коли вона не виявляє квантових властивостей. Приміром, енергія молекул газу в посудині визначається не розмірами посудини чи масами молекул, а температурою газу. Але поведінка мікрочастинки, що заперта в мікроскопічному “ящику”, не є очевидною. Вона підпорядкована законам не класичної, а квантової механіки, і її треба розглядати на основі рівняння Шредінгера. Складемо його, спрямувавши координатну вісь Ox уздовж напрямку руху частинки. В такому разі хвильова функція є функцією тільки однієї змінної [3].

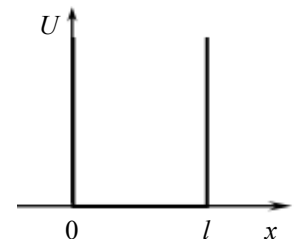


Рис. 1. Потенційний ящик

$$\Psi(x) i \nabla^2 \Psi = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}.$$

Через непроникність стінок частинка не може опинитися за межами ящика ні за яких умов. Отже, хвильова функція існує тільки в області $x \in [0; l]$, де $U(x)=0$. Тому рівняння має вигляд:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + k^2 \Psi = 0.$$

де $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$. При цьому з вимоги неперервності хвильової функції випливає, що вона дорівнює нулю не тільки за межами ящика, а й на його стінках: $\Psi(0)=\Psi(l)=0$.

Хвильові функції. Квантові стани. З математики відомо, що розв’язками рівняння є гармонічні функції, тож можна записати:

$\Psi(0) = A \sin(kx + \alpha)$, де A та α – довільні константи (сталі інтегрування). Але з усієї множини розв’язків хвильовими функціями частинки є лише ті, що задовольняють вимоги

однозначності, неперервності та обмеженості. Усі функції є однозначними та обмеженими, але неперервними з них є лише ті, що задовольняють умови . При цьому з умови $\Psi(0) = 0$ випливає $A \sin \alpha = 0 \rightarrow \alpha = 0$, отже $\Psi(x) = A \sin kx$. З другої умови $\Psi(l) = 0$, маємо: $\sin kl = 0 \rightarrow kl = \pm \pi n$, $n = 1, 2, \dots$, і зі всієї множини розв'язків хвильовими функціями частинки є лише окремі (дискретні) функції [4]

$$\Psi_n = \pm A \sin\left(\frac{\pi x}{l} n\right), \quad n = 1, 2, \dots$$

Відмітимо, що у множині чисел n відсутнє значення $n = 0$, хоча формально воно задовольняє вимозі $\Psi(l) = 0$. Це й зрозуміло, адже при $n=0$ хвильова функція $\Psi_0(x) = 0$ при будь-якому значенні x , що означає відсутність частинки. Амплітуди A хвильових функцій визначаються з умови нормування

$$A^2 \int_0^l \sin^2\left(\frac{\pi x n}{l}\right) dx = 1 \rightarrow \frac{A^2 l}{2} = 1 \rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{l}}.$$

Таким чином, хвильові функції частинки в ящику утворюють дискретний набір:

$$\Psi_n(x) = \pm \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{\pi x}{l} n\right), \quad n = 1, 2, \dots$$

Хвильова функція повністю визначає стан мікрочастинки. Тому дискретність функцій означає, що для частинки в ящику можливі не будь-які, а лише в окремі дозволені стани. Це явище називається квантуванням, а самі дозволені стани – квантовими станами. Енергетичний спектр. Кожна хвильова функція і кожен квантовий стан частинки в ящику визначається відповідним значенням параметра n , який пов'язаний із енергією частинки формулою. Тому, врахувавши вираз, отримаємо:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} n^2, \quad n = 1, 2, \dots$$

Отже, енергія частинки в ящику теж є квантованою: в кожному дозволеному стані вона може мати тільки відповідне значення з набору, який називається енергетичним спектром частинки. Кожне дозволене значення енергії E утворює відповідний енергетичний рівень, а число n називається квантовим числом цього рівня. Наочно енергетичні рівні зображують горизонтальними відрізками на енергетичній діаграмі (рис. 2, а). Іншою особливістю енергетичного спектра є те,

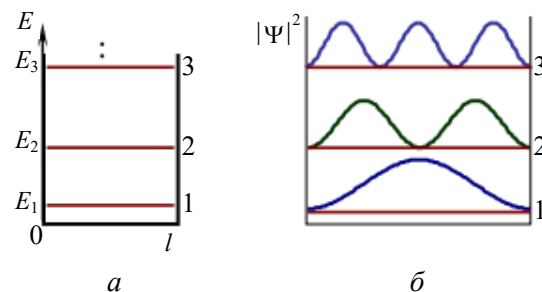


Рис. 2. Енергетична діаграма

що найнижчий енергетичний рівень не дорівнює нулю:

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2}.$$

Оскільки енергія частинки в ящику є чисто кінетичною, це означає, що частинка ні за яких умов не може перебувати у стані спокою. Такий висновок є дуже дивним для класичної механіки, але він повністю узгоджується із принципом невизначеності. Справді, якщо частинка нерухома, то її імпульс відомий точно: $p = 0$, і невизначеність імпульсу $\Delta p = 0$. Але це суперечить співвідношенням Гайзенберга: оскільки невизначеність координати частинки в ящику $\Delta x \leq l$, то повинно бути $\Delta p \geq \frac{\hbar}{l}$. Якщо прийняти мінімальний імпульс частинки

$p = \frac{\hbar}{l_{\min}}$ то для мінімальної енергії частинки отримаємо $E = \frac{\hbar^2}{2ml_{\min}^2}$, що за порядком величини узгоджується з виразом.

Розглянуті особливості поведінки частинок не спостерігаються в класичній механіці, навіть якщо йдеться про рух мікроскопічних частинок, наприклад, молекул газу в посудині. Для з'ясування причин цього оцінимо найменшу можливу кінетичну енергію E_1 та швидкість руху v електрона ($m \approx 10^{-30}$ кг) в ящику ширини $l = 10^{-10}$ м і молекули кисню O_2 в посудині розміром $l = 10$ см.

Для електрона маємо:

$$E_1 = \frac{mV^2}{2} = 6 \cdot 10^{-18} \text{ Дж та } V = 3,6 \cdot 10^6 \text{ м/с.}$$

Це дуже багато. Наприклад, величина E_1 більш ніж у 100 разів перевищує енергію теплового руху частинок при кімнатній температурі. Натомість аналогічні розрахунки для молекули кисню в посудині дають недоступні для спостереження величини

$$E_1 \approx 10^{-40} \text{ Дж та } V = 6 \cdot 10^{-8} \text{ м/с.}$$

Сказане стосується й дискретності енергетичного спектра. Для переведення електрона в ящику ширини $l = 10^{-10}$ м – з першого на другий рівень необхідно надати йому енергію ~ 100 еВ. Ця величина відповідає енергії фотонів жорсткого ультрафіолетового випромінювання і в 10^{-4} разів перевищує середню енергію, якою обмінюються частинки внаслідок теплового руху. А для молекули O_2 в посудині розміром $l = 10$ см треба всього 10^{-21} еВ, тобто, ні про яку дискретність рівнів говорити не доводиться. Зауважимо також, що фактична відсутність квантових властивостей у молекули газу зумовлена макроскопічними розмірами ящика (посудини), в якому знаходиться молекула.

Рух частинки в ящику. Частинка в ящику рухається між стінками із сталою швидкістю. Тому класична частинка (кулька) в усіх точках, окрім стінок, буває однаково часто, тобто з однаковою імовірністю. Біля стінок ця імовірність більша, оскільки під час зіткнення частинка витрачає певний час на гальмування та наступний розгін при відскоку. А от квантова частинка і в цьому відношенні поводить інакше. Густина ймовірності перебування частинки в заданій точці ящика визначається функцією:

$$|\Psi(x)|^2 = \frac{2}{l} \sin^2\left(\frac{\pi nx}{l}\right).$$

Із цього виразу випливає, що для квантової частинки в ящику існують точки, в яких $|\Psi|^2 = 0$. Положення таких точок визначається умовою, $\frac{\pi nx_i}{l} = i\pi \rightarrow x_i = \frac{il}{n}$, $i = 1, 2, \dots, n$. Наявність таких точок ілюструє рис. 2, б, на якому зображено графік $|\Psi(x)|^2$ для трьох перших квантових станів частинки в ящику. Таким чином для всіх станів, окрім першого, всередині ящика є точки, в яких частинку не можна виявити ні за яких умов. Така поведінка частинки є несумісною з поняттям руху по заданій траєкторії. Енергія частинки в ящику є чисто кінетичною $k = \pm \frac{2\pi}{\lambda}$, де λ – дебройлівська довжина хвилі частинки. Це означає, що параметр k в рівнянні є хвильовим числом дебройлівських хвиль, які разом із частинкою поширюються в ящику і відбиваються від його стінок. Але теорія хвиль говорить, що між двома відбиваючими стінками можуть існувати лише хвилі із дискретними довжинами λ_n , при накладанні яких утворюються стаціонарні стоячі хвилі [5]. При цьому на відстані між стінками має укладатися ціла кількість півхвиль:

$$\lambda_n = \frac{2l}{n}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

І якщо підставити сюди співвідношення де-Бройля, то для імпульсу частинки вийде $p_n = \frac{\pi \hbar}{l} n$ а для енергії – $E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} n^2$.

Висновок. Отже, ефект квантування станів можна трактувати як наслідок утворення стоячих дебройлівських хвиль при відбиванні частинки від стінок ящика. При цьому точки, в яких $|\Psi|^2 = 0$, є вузлами вказаних стоячих хвиль. На завершення зазначимо, що хвильове поле на кшталт асоційованих із частинкою стоячих хвиль із дискретним набором довжин хвилі утворюється не лише при вільному русі частинки між перпендикулярними до напрямку руху «стінками», а й у більш складних силових полях, які утримують частинку в обмеженій області простору.

Відповідно, стани частинки теж квантуються, але хвильові функції та правила квантування є складнішими. Отже, квантування станів є універсальним ефектом і спостерігається завжди, коли мікрочастинка може рухатися тільки в обмеженій області простору. Одним із проявів цього ефекту є дискретність станів електронів в атомах, які утримуються в околі ядра кулонівською силою.

Таким чином, у квантовій механіці існування дискретних дозволених станів електронів у атомах не постулюється, як в теорії Бора, а природньо випливає з основного рівняння квантової механіки.

У наш час рівняння Шредінгера можна обчислити за лічені десятки годин роботи звичайним персональним комп'ютером. Це допомогло скоротити час обчислення рівняння Шредінгера практично будь-яких молекул.

Використання рівняння Шредінгера дуже широке в медичній фізиці: у квантово-хвильовій медицині, у квантовій когеренції та декогеренції, у квантових структурно-динамічних ефектах. Рішення рівняння Шредінгера використовуються для знаходження дозволених енергетичних рівнів квантово-механічних систем.

Література

1. Сибіль М. Г. Теплове випромінювання: лекція з навчальної дисципліни “Медична та біологічна фізика” / Сибіль М. Г. – Львів, 2018. – 11 с.
2. Васюк С. О. Оптичні методи аналізу / С.О. Васюк, А. С. Коржова, Н. О. Нагорна, Ю. М. Жук. – Запоріжжя, 2017. – 77 с.
3. Вилков Л.В., Пентин Ю.А. Физические методы исследования в химии. Структурные методы и оптическая спектроскопия. М.: Высш.шк., 1987. – 367 с.
4. Мураєва О. О. Конспект лекцій з дисципліни «Фізико-хімічні методи аналізу води» (для студентів 2 – 3 курсів денної та заочної форм навчання напряму підготовки 6.060103 – Гідротехніка (водні ресурси)) / О. О. Мураєва; Харків. нац. ун-т міськ. госп-ва ім. О. М. Бекетова. – Харків: ХНУМГ ім. О. М. Бекетова, 2015. – 64 с.
5. Клочко А. В. Абсорбційна (поглинальна) спектроскопія // Фармацевтична енциклопедія / голова ред. ради та автор передмови В. П. Черних; Нац. фармац. ун-т України. – 2-ге вид., переробл. і доповн. – Київ: МОРІОН, 2010. – 1632 с.