УДК 621.384.4: 581.141

ТЕОРЕТИЧНЕ ОБҐРУНТУВАННЯ ДІЇ ЕНЕРГІЇ ОПТИЧНОГО ВИПРОМІНЮВАННЯ НА СТРУКТУРИ БІОЛОГІЧНИХ ОБ'ЄКТІВ

Червінський Л. С., Книжка Т. С., Романенко О. І.

Національний університет біоресурсів і природокористування України (м. Київ)

Проведено теоретичне дослідження взаємодії фотонів оптичного випромінювання з електронами опромінюваних структур на основі законів квантової біофізики.

Постановка проблеми. Результативність застосування електромагнітної енергії, зокрема оптичного випромінювання, при опромінюванні БО залежить від розуміння механізму взаємодії цієї енергії із сприймаючими структурами опромінюваного об'єкту.

Мета досліджень – дослідити механізм дії енергії оптичного випромінювання на біологічні тіла, що опромінюються.

Основні матеріали досліджень. В дослідженні використовуються постулати та закони квантової механіки та теоретичної біофізики. Згідно законів квантової фізики взаємодію енергії електромагнітного поля з структурами (електронами атомів чи молекул опромінюваного тіла) прийнято описувати квантами енергії. Енергія кванта обернено пропорційна довжині хвилі його розповсюдження λ. [1,3]. Хвильовий характер розповсюдження в просторі ЕМ випромінювання, як правило, представляється у вигляді диференціального рівняння суперпозиції плоских хвиль:

$$A = \sqrt{\frac{4\pi c^2}{V}} \sum_{k\lambda} u_{k\lambda}(q_{k\lambda}\, e^{i(k\cdot r-\omega t)} + q^*_{k\lambda} e^{-i(k\cdot r-\omega t)}), \quad (1)$$

де $u_{k\lambda}$ – одиничний вектор поля, об'ємний коефіцієнт світлової хвилі $\sqrt{\frac{4\pi c^2}{V}}$, $q_{k\lambda}$ і $q^*_{k\lambda}$ – амплітуди взаємоперпендикулярних плоских хвиль, а індекс λ відповідає двом станам поперечної поляризації. Вищевикладені положення дозволяють перейти до квантування електромагнітного поля, замінивши класичні амплітуди $q_{k\lambda}$ і $q^*_{k\lambda}$ операторами $q_{k\lambda}$ і $q^{\dagger}_{k\lambda}$, які зручно записати у вигляді: $q_{k\lambda} = C_k b_{k\lambda}$ та $q^{\dagger}_{k\lambda} = C_k b^{\dagger}_{k\lambda}$ (2)
де C_k – дійсні нормувальні множники. Вирази для енергії та імпульса електромагнітного поля оптичного спектру тепер можна записати як:

$$W = \sum_{k\lambda} \omega^2 C_k^2 (b_{k\lambda} b^{\dagger}_{k\lambda} + b^{\dagger}_{k\lambda} b_{k\lambda}),$$
$$P = \sum_{k\lambda} \omega k C_k^2 (b_{k\lambda} b^{\dagger}_{k\lambda} + b^{\dagger}_{k\lambda} b_{k\lambda}). \quad (3)$$

Використовуючи положення статистики Бозе оператори $b_{k\lambda}$ і $b^f_{k\lambda}$ можна узгодити перестановочним співвідношенням: $b_{k\lambda} b^{\dagger}_{k\lambda} - b^{\dagger}_{k\lambda} b_{k\lambda} = \delta_{kk'} \delta_{\lambda\lambda'}$, (4)

При цьому слід зазначити, що всі інші комбінації цих операторів комутативні. В силу приведених перестановочних співвідношень власні значення операторів $b_{k\lambda}$ і $b^f_{k\lambda}$, що позначаються нижче через $N_{k\lambda}$, мають бути цілочисельними: $N_{k\lambda} = 0,1,2,3, \ldots,$ (5)
при цьому власні значення операторів $b_{k\lambda}$ та $b^{\dagger}_{k\lambda}$ будуть рівні $N_{k\lambda}+1$. Якщо врахувати сталу Планка і записати нормувальний множник у вигляді:

$$C_k = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}}, \quad (6)$$

то вирази для енергії та імпульсу електромагнітного поля оптичного діапазону (3) в квантованому вираженні приймуть вигляд:

$$W = \sum_{k\lambda} \frac{\hbar\omega}{2} (b_{k\lambda} b^{\dagger}_{k\lambda} + b^{\dagger}_{k\lambda} b_{k\lambda}),$$
$$P = \sum_{k\lambda} \hbar k (b_{k\lambda} b^{\dagger}_{k\lambda} + b^{\dagger}_{k\lambda} b_{k\lambda}). \quad (7)$$

Або виводячи визначення енергії поля через сумарну кількість квантів можна записати:

$$W = \sum_{k\lambda} \hbar\omega (N_{k\lambda} + 1/2) \text{ та } P = \sum_{k\lambda} \hbar k (N_{k\lambda} + 1/2) \quad (8)$$

За виразом (8) можемо інтерпретувати величину $N_{k\lambda}$, як число квантів в стані з квантовими числами k і λ, (причому в зазначеному стані кожен квант має енергію $\hbar\omega$, а його імпульс, спрямований вздовж вектора $\hbar k$ дорівнює за величиною $\hbar k = {}^{\hbar\omega}/_{c}$). Вище викладене обґрунтування дозволяє нам розглядати ЕМ поле (зокрема його частину – оптичне випромінювання) як потік фотонів (оптичні кванти називають фотонами) відповідної енергії у просторі. Обгрунтуємо взаємодію цих фотонів із сприймаючими структурами, що опромінюються (тобто електронами атомів БО, що знаходяться в просторовому середовищі даного оптичного поля при їх опроміненні). У класичній теорії Максвелла взаємодія речовини (електрона) з випромінюванням описується виразом [1, 3]:

$$H' = \frac{1}{c} \int (A \cdot j) d^3x, \quad (9)$$

де A – векторний потенціал поля випромінювання, а j – щільність електричного струму речовини на яку діє поле. У теорії квантованих полів векторний потенціал, згідно виразів (7) та (8) записується:

$$A = \sum_{k\lambda} \sqrt{\frac{2\pi c\hbar}{kV}}\, u_k^{(\lambda)} (\, b_{k\lambda} e^{ik\cdot r} + b^{\dagger}_{k\lambda} e^{-ik\cdot r}\,) \quad (10)$$

Вираз для щільності електричного струму можна написати, скориставшись результатами квантування електромагнітного поля за Шредінгером:

$$\psi = \sum_n c_n u_n(r), \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 u_n + V u_n = E_n u_n. \quad (11)$$

де ψ – хвильова функція електромагнітного поля в сферичних координатах (r); u_n – одночасткова хвильова функція (характеристика фотона). Підставивши у (9) вирази (10) та (11) після обчислень отримаємо формулу для визначення щільності ел. струму через хвильову функцію Шредінгера:

$$j = -\frac{e\hbar}{2mi} (\psi^{\dagger} \nabla\psi - \nabla\psi^{\dagger} \cdot \psi). \quad (12)$$

Оскільки заряд електрона дорівнює (- e) можемо записати:

$$j = -\frac{e\hbar}{2mi} \sum_n \sum_{n'} (u^*_{n'} \nabla u_n - u_n \nabla u^*_{n'}) c^{\dagger}_{n'} c_n. \quad (13)$$

Тут u_n і $u^*_{n'}$ – одночасткові хвильові функції, явний вид яких можна знайти шляхом вирішення виразу (13). Величини c_n і $c^{\dagger}_{n'}$ є операторами стану, і підкоряються перестановочним співвідношенням Бозе [3, 4]:

$$c_n c^{\dagger}_{n'} + c^{\dagger}_{n'} c_n = \delta_{nn'},\ c_n c_{n'} + c_{n'} c_n = 0. \qquad (14)$$

При цьому постулюється, що поглинання фотона відбувається в процесі переходу електрону з початкового енергетичного стану n_i в кінцевий (збуджений) стан n_f. (В теорії квантованного "шредінгеровського" поля це означає, що електрон, що знаходиться в початковому стані n_i, "знищується", а замість нього "народжується" електрон в кінцевому стані n_f). У той же самий час відбувається народження фотона в стані ($\Bbbk$, λ). Зазначений процес описується тим членом в енергії взаємодії (10), який містить добуток операторів:

$$b^{\dagger}_{\Bbbk\lambda} c^{\dagger}_{n_f} c_{n_i} \qquad (15)$$

Якщо підставити вирази (11) і (13) в енергію взаємодії (10), то легко переконатися, що в ній такий член дійсно є і його можна записати у вигляді:

$$\langle f|H'|i\rangle b^{\dagger}_{\Bbbk\lambda} c^{\dagger}_{n_f} c_{n_i}, \qquad (16)$$

Замінивши оператори та проаналізувавши вирази бачимо звичайний матричний елемент переходу між початковим і кінцевим станами:

$$\langle f|H'|i\rangle \frac{1}{c}\int\sqrt{\frac{2\pi c\hbar}{\Bbbk V}}\,\frac{e\hbar}{2m} i e^{-i\Bbbk\cdot r}\cdot u^{(\lambda)}_{\Bbbk}\left(u^*_{n_f}\nabla u_{n_i} - u_{n_i}\nabla u^*_{n_f}\right) d^3x. \qquad (17)$$

Ймовірність відбування такого переходу підтверджується "золотим правилом" квантованого поля:

$$P = \frac{2\pi}{\hbar}\rho_f |f|H'|i|^2. \qquad (18)$$

В енергетичній шкалі щільність кінцевих станів ρ_f електронів повністю визначається енергією поглинутих ними фотонів:

$$\rho_f = \frac{\Bbbk^2 d\Bbbk d\Omega_{\Bbbk} V}{(2\pi)^3 \hbar c d\Bbbk} = \frac{V}{8\pi^3\hbar c}\Bbbk^2 d\Omega_{\Bbbk}, \qquad (19)$$

де $d\Omega_{\Bbbk}$ – одиничний просторовий тілесний кут, під яким падає фотон; V – об'єм взаємодії фотонів з електронами. Враховуючи те, що молекулами сприймаються лише фотони, енергія яких відповідає енергетичним рівням збудження електрона:

$$E_i - E_f = \hbar\omega, \qquad (20)$$

де E_i, E_f – енергетичні рівні основного і збудженого стану молекули, що опромінюється, то матричний елемент (16) можна записати у вигляді:

$$\langle f|H'|i\rangle = \frac{e}{c} i\sqrt{\frac{2\pi c\hbar}{\Bbbk V}}\,\omega\langle f|u^{(\lambda)}_{\Bbbk}\cdot r|i\rangle, \qquad (21)$$

Відповідно до виразу (11) матрицю можна замінити інтегралом одночасткових хвильових функцій, що характеризують енергію фотонів при їх взаємодії з електронами:

$$\left\langle f\middle|u^{(\lambda)}_{\Bbbk}\cdot r\middle|i\right\rangle = \int u^*_{n_f}\,(u^{(\lambda)}_{\Bbbk}\cdot r)\,u_{n_i} d^3x. \qquad (22)$$

Після підстановки виразів (21) і (22) в формулу (18) отримуємо остаточний вираз для визначення ймовірності збудження молекул опромінюваного тіла фотонами даного електромагнітного поля:

$$P_{\Bbbk,\lambda} = \frac{d\Omega_{\Bbbk}}{2\pi}\frac{e^2}{\hbar c}\frac{\omega^3}{c^2}|\langle f|u^{(\lambda)}_{\Bbbk}\cdot r|i\rangle|^2. \qquad (23)$$

Останній вираз можна представити у більш звичній формі, ввівши замість ω частоту випромінювання $\nu = {}^{\omega}/_{2\pi}$. Тоді вираз (23) запишемо:

$$P_{\Bbbk,\lambda} = \frac{e^2}{\hbar c}\frac{4\pi^2\nu^3}{c^2} d\Omega_{\Bbbk}|\langle f|u^{(\lambda)}_{\Bbbk}\cdot r|i\rangle|^2. \qquad (24)$$

Матричний елемент, що фігурує у виразі можна записати у вигляді добутку:

$$\langle f|u^{(\lambda)}_{\Bbbk}\cdot r|i\rangle = (u^{(\lambda)}_{\Bbbk}\cdot r_{if}), \qquad (25)$$

Висновки. Аналіз виразу (25) показує, що ліва частина рівняння є характеристикою електромагнітного поля і визначає напрямок вильоту і поляризацію випромінюваного фотона, а за правою частина можна визначати внутрішні параметри опромінюваного атома. Тобто дані викладки підтверджують можливість математично обгрунтувати ймовірність протікання фотофізичних реакцій збудження атомів чи молекул опромінюваної речовини оптичним випромінюванням на основі врахування спектрального складу випромінювання та будови молекул опромінюваного тіла.

Список використаних джерел

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Механика и электродинамика / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц – М.: Изд. "Наука", 1969. – 272 с.

2. Леман В. М. Курс светокультуры растений: учеб. пособие для с.-х. вузов. / В. М. Леман. // [2-е изд., перераб. и доп.]. – М.: Высш. шк.,1976. – 271 с.

3. Червінський Л. С. Електричнне освітлення та опромінення: Посібник / Л. С. Червінський, Л. О. Сторожук. – К.: Аграр Медіа Груп, 2011. – 214 с.

Аннотация

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ОБОСНОВАНИЕ ДЕЙСТВИЯ ЭНЕРГИИ ОПТИЧЕСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА СТРУКТУРЫ БИОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ

Червинский Л. С., Книжка Т. С., Романенко А. И.

Проведены теоретические исследования взаимодействия энергии фотонов с електронами облучаемых биологических структур на основании законов квантовой биофизики.

Abstract

THEORETICAL ASPECTS OF OPTICAL RADIATION ENERGY ACTION ON STRUCTURE BIOLOGICALLY OBJECTS

L. Chervynskyy, T. Knizhka, A. Romanenko

A theoretical study of the interaction of photons with electrons optical radiation irradiated structures based on the laws of quantum biophysics.