

УДК 539.17

## КВАНТОВОМЕХАНИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ НЕРАВНОВЕСНОЙ СЕЛЕКТИРУЮЩЕЙ СИСТЕМЫ

В. А. АВETИCOB, С. А. АНИКИН

НИИ по биологическим испытаниям химических соединений,  
Старая Купавна Московской обл.

(Поступила в редакцию 20 декабря 1983 г.)

Построена квантовомеханическая модель, в которой при выполнении критических условий происходит процесс спонтанной селекции вещества.

### 1. Введение

В настоящей работе обсуждается возможность организации селективного процесса, способного эффективно разделять вещества, физические свойства которых почти тождественны. Традиционное решение этой проблемы связано, как правило, с поиском специфичного селективного агента, позволяющего усиливать малые различия разделяемых веществ до величин, допускающих их эффективную дифференциацию [1].

В отличие от такого подхода ниже рассматривается модель процесса, в котором осуществляется самопроизвольная дифференциация двух энергетически вырожденных изомерных форм вещества. Типичным примером таких изомерных форм могут служить зеркальные изомеры. Предполагается, что процесс дифференциации происходит в реакторе, представляющем собой неравновесную молекулярную систему проточного типа. Допускается, что поступающее в реактор вещество находится в возбужденном состоянии, в котором физическая неэквивалентность его зеркально-сопряженных форм полностью исчезает. В активной зоне реактора вещество переходит из возбужденного состояния в собственно изомерные состояния и затем образующаяся в результате смесь выводится из реактора. Считается, что все взаимодействия, происходящие как непосредственно в активной зоне, так и вне ее — зеркально симметричны. Селективность выражается в том, что стационарная смесь образующихся в реакторе веществ содержит преимущественно лишь одну изомерную форму.

Задачи такого типа рассматривались в ряде работ [2, 3], в которых модели неравновесных систем строились на основе феноменологических схем столкновительных превращений зеркальных изомеров. В отличие от этого рассматриваемая ниже модель основана на квантовом взаимодействии вещества с электромагнитным полем.

### 2. Модель

Для построения квантовомеханической модели описанного выше реактора введем механизм взаимодействия, ответственный за превращения ве-

ществ в активной зоне. Примем, что превращения осуществляются в однофотонных процессах с вынужденным излучением или поглощением фотонов. В этом случае простейшей квантовой системой, пригодной для описания взаимодействия вещества с электромагнитным полем, является двухуровневая система с возбужденным и основным уровнями. Будем считать, что возбужденный уровень соответствует симметричному состоянию вещества. В этом состоянии операция пространственного отражения переводит вещество само в себя. Примем также, что основной уровень соответствует собственно зеркально-изомерному состоянию. Поскольку пространственное отражение зеркальных изомеров переводит их друг в друга, основные уровни изомеров энергетически вырождены и различаются лишь четностью [4].

Для описания модели воспользуемся представлением чисел заполнения. Введем набор операторов рождения и уничтожения: возбужденного состояния —  $\hat{S}^+$ ,  $\hat{S}$ ; основных состояний —  $\hat{b}_\pm^+$ ,  $\hat{b}_\pm$ ; право- и лево-циркулярно поляризованных фотонов —  $\hat{a}_\pm^+$ ,  $\hat{a}_\pm$ . Коммутационные соотношения для операторов  $\hat{S}$  и  $\hat{b}$  такие же, как и для  $\hat{a}$ .

Введем также вспомогательные операторы

$$\hat{A}_\pm = \alpha \hat{a}_\pm + \beta \hat{a}_\mp, \quad \hat{B}_\pm = \alpha \hat{b}_\pm + \beta \hat{b}_\mp,$$

где  $\alpha$  и  $\beta$  — действительные числа, нормированные условием  $\alpha^2 + \beta^2 = 1$ .

Полный гамильтониан системы представим в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{int}} + \hat{H}_{\text{ext}},$$

где  $\hat{H}_0$  — свободный гамильтониан —

$$\hat{H}_0 = \hbar\omega (\hat{a}_+^+ \hat{a}_+ + \hat{a}_-^+ \hat{a}_-) + \hbar\varepsilon (\hat{b}_+^+ \hat{b}_+ + \hat{b}_-^+ \hat{b}_-) + \hbar(\omega + \varepsilon) \hat{S}^+ \hat{S},$$

$\hat{H}_{\text{int}}$  — гамильтониан взаимодействия с электромагнитным полем —

$$\hat{H}_{\text{int}} = \lambda \hat{S} [\hat{A}_+^+ \hat{B}_-^+ + \hat{A}_-^+ \hat{B}_+^+] + \text{э. с.}$$

( $\lambda$  — константа взаимодействия). Это взаимодействие можно интерпретировать как испускание и поглощение эллиптически поляризованного фотона при переходе между возбужденным и основными состояниями.

$\hat{H}_{\text{ext}}$  — гамильтониан взаимодействия с внешней средой. Ниже будут сделаны некоторые предположения о вкладе этого взаимодействия в уравнения движения.

Заметим, что  $\hat{H}_0$  и  $\hat{H}_{\text{int}}$  инвариантны относительно калибровочных преобразований

$$\hat{a}_\pm \rightarrow \hat{a}_\pm e^{-i\varphi}, \quad \hat{S} \rightarrow \hat{S} e^{i\theta}, \quad \hat{b}_\pm \rightarrow \hat{b}_\pm e^{i(\varphi+\theta)}, \quad \text{Im } \varphi = \text{Im } \theta = 0.$$

Поскольку в рассматриваемой модели количества образующихся в реакторе изомеров связаны с числами заполнения основных состояний, гамильтонианы уравнения движения записываются в терминах следующего набора операторов (с общим обозначением  $\hat{q}$ )

$$\hat{n}_{\pm} = \hat{b}_{\pm}^{\dagger} \hat{b}_{\pm}, \hat{m}_{\pm} = \hat{S}^{\pm} \hat{b}_{\pm}, \hat{l}_{\pm} = \hat{b}_{\pm}^{\dagger} \hat{b}_{\mp}, \hat{z}_{\pm} = \hat{a}_{\pm} + 2\alpha\beta\hat{a}_{\mp}$$

в виде

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{q} = [\hat{q}, \hat{H}].$$

Исключая вклад  $\hat{H}_0$  с помощью замен

$$\hat{a}_{\pm} \rightarrow \hat{a}_{\pm} e^{-i\omega t}, \hat{m}_{\pm} \rightarrow \hat{m}_{\pm} e^{i\omega t},$$

получаем систему уравнений

$$\begin{aligned} i\hbar \lambda^{-1} \frac{d}{dt} \hat{n}_{\pm} &= -\hat{m}_{\pm} \hat{z}_{\mp} + \hat{m}_{\pm}^{\dagger} \hat{z}_{\mp}^{\dagger} + \lambda^{-1} [\hat{n}_{\pm}, \hat{H}_{\text{ext}}], \\ i\hbar \lambda^{-1} \frac{d}{dt} \hat{m}_{\pm} &= -\hat{l}_{\mp} \hat{z}_{\pm}^{\dagger} + (\hat{N} - \hat{n}_{\pm}) \hat{z}_{\mp}^{\dagger} + \lambda^{-1} [\hat{m}_{\pm}, \hat{H}_{\text{ext}}], \\ i\hbar \lambda^{-1} \frac{d}{dt} \hat{l}_{\pm} &= -\hat{m}_{\mp} \hat{z}_{\mp}^{\dagger} + \hat{m}_{\pm}^{\dagger} \hat{z}_{\mp}^{\dagger} + \lambda^{-1} [\hat{l}_{\pm}, \hat{H}_{\text{ext}}], \\ i\hbar \lambda^{-1} \frac{d}{dt} \hat{z}_{\pm} &= (1 + 4\alpha^2\beta^2) \hat{m}_{\mp}^{\dagger} + 4\alpha\beta \hat{m}_{\pm}^{\dagger} + \lambda^{-1} [\hat{z}_{\pm}, \hat{H}_{\text{ext}}], \end{aligned} \quad (1)$$

где  $\hat{N} = \hat{S}^{\dagger} \hat{S}$ .

Усредним (1) по макроскопической системе и введем взаимодействие с внешней средой. Примем, что это взаимодействие сводится к двум процессам.

Во-первых, к релаксации всех средних  $\langle \hat{q} \rangle \equiv q$  к своим равновесным значениям, которые, для простоты, положим равными нулю:

$$\langle [\hat{q}, \hat{H}_{\text{ext}}] \rangle = -i\gamma_q \cdot q, \text{Im } \gamma_q = 0, \gamma_q > 0. \quad (2)$$

Поскольку внешняя среда взаимодействует с системой неселективно, необходимо потребовать также, чтобы

$$\gamma_{n_{\pm}} = \gamma_n, \gamma_{m_{\pm}} = \gamma_m, \gamma_{l_{\pm}} = \gamma_l, \gamma_{z_{\pm}} = \gamma.$$

Во-вторых, к «накачке» — заполнению возбужденного уровня. При этом будем считать, что процесс «накачки» поддерживает постоянным среднее число заполнения  $N = \langle \hat{S}^{\dagger} \hat{S} \rangle$ , которое рассматривается как свободный параметр модели.

Полученная с учетом (2) система уравнений для средних незамкнута. Ее замыкание можно провести, приняв предположение о самосогласованности электромагнитного поля, позволяющее факторизовать средние:  $\langle \hat{q} \hat{a}_{\pm} \rangle = q \cdot \hat{a}_{\pm}$  для всех введенных  $\hat{q}$  и  $\langle \hat{N} \hat{a}_{\pm} \rangle = N \cdot \hat{a}_{\pm}$ . В результате будем иметь

$$\begin{aligned} i\lambda^{-1} \left( \gamma_n + \hbar \frac{d}{dt} \right) n_{\pm} &= -m_{\pm} z_{\mp} + \bar{m}_{\pm} \bar{z}_{\mp}, \\ i\lambda^{-1} \left( \gamma_m + \hbar \frac{d}{dt} \right) m_{\pm} &= -l_{\mp} \bar{z}_{\pm} + (N - n_{\mp}) \bar{z}_{\mp}, \end{aligned} \quad (3)$$

$$i\lambda^{-1} \left( \gamma_l + \hbar \frac{d}{dt} \right) l_{\pm} = -m_{\mp} z_{\mp} + \bar{m}_{\pm} \bar{z}_{\pm},$$

$$i\lambda^{-1} \left( \gamma + \hbar \frac{d}{dt} \right) z_{\pm} = (1 + 4\alpha^2\beta^2) \bar{m}_{\mp} + 4\alpha\beta \bar{m}_{\pm},$$

где  $\bar{q}$  комплексно сопряжено  $q$  и  $\langle \hat{q}^+ \rangle = \bar{q}$ . Эта система уравнений является основой для дальнейшего анализа.

### 3. Стационарные решения

Выводы о селективных свойствах модели можно сделать на основе анализа ее стационарных состояний. Такие состояния описываются решениями системы алгебраических уравнений, получаемых из (3) приравниванием всех производных нулю. Эта система имеет следующие решения.

Во-первых, тривиальное решение

$$1) \quad n_{\pm} = m_{\pm} = l_{\pm} = z_{\pm} = 0. \quad (4)$$

Во-вторых, нетривиальные решения, которые удобно описывать в переменных

$$n^{\pm} = n_{+} \pm n_{-}, \quad m^{\pm} = m_{+} \pm m_{-}, \quad l^{\pm} = l_{+} \pm l_{-}, \quad z^{\pm} = z_{+} \pm z_{-}.$$

К ним относятся неселективные решения ( $n_{+} = n_{-}$ ):

$$\text{Па) } n^{-} = 0, \quad \gamma\gamma_n n^{+} = \gamma\gamma_l l^{+} = \lambda^2 (1 + 4\alpha^2\beta^2) (1 + \xi) |m^{+}|^2, \\ l^{-} = z^{-} = m^{-} = 0, \quad z^{+} = -i\lambda (1 + 4\alpha^2\beta^2) \gamma^{-1} (1 + \xi) \bar{m}^{+}, \quad (5)$$

$$|m^{+}|^2 = \left[ \frac{\lambda^4 (1 + 4\alpha^2\beta^2)}{2\gamma_n \gamma_m \gamma^2} (1 + \xi) (1 + x) \right]^{-1} \left( \delta - \frac{1}{1 + \xi} \right);$$

$$\text{Пб) } n^{-} = 0, \quad \gamma\gamma_n n^{+} = -\gamma\gamma_l l^{+} = \lambda^2 (1 + 4\alpha^2\beta^2) (1 - \xi) |m^{-}|^2, \\ l^{-} = z^{+} = m^{+} = 0, \quad z^{-} = i\lambda (1 + 4\alpha^2\beta^2) \gamma^{-1} (1 - \xi) \bar{m}^{-}, \quad (6)$$

$$|m^{-}|^2 = \left[ \frac{\lambda^4 (1 + 4\alpha^2\beta^2)}{2\gamma_n \gamma_m \gamma^2} (1 - \xi) (1 + x) \right]^{-1} \left( \delta - \frac{1}{1 - \xi} \right)$$

и селективное решение ( $n_{+} \neq n_{-}$ ):

$$\text{III) } n^{-} = \pm \frac{2\lambda^2 (1 + 4\alpha^2\beta^2)}{\gamma\gamma_n} \sqrt{\frac{\Delta_{+}\Delta_{-}}{\Delta^2}},$$

$$n^{+} = \frac{\lambda^2 (1 + 4\alpha^2\beta^2)}{\gamma\gamma_n} \left[ (1 + \xi) \frac{\Delta_{+}}{\Delta} + (1 - \xi) \frac{\Delta_{-}}{\Delta} \right],$$

$$|m^{\pm}|^2 = \frac{\Delta_{\pm}}{\Delta}, \quad l^{-} = 0,$$

$$l^{+} = \frac{\lambda^2 (1 + 4\alpha^2\beta^2)}{\gamma\gamma_l} \left[ (1 + \xi) \frac{\Delta_{+}}{\Delta} - (1 - \xi) \frac{\Delta_{-}}{\Delta} \right], \quad (7)$$

$$z^{\pm} = \mp i\lambda (1 + 4\alpha^2\beta^2) \gamma^{-1} (1 \pm \xi) \bar{m}^{\pm},$$

$$\text{Im}(m^{-} \bar{m}^{+}) = 0.$$

Последнее равенство в (7) фиксирует разность фаз  $m^+$  и  $m^-$ . В формулах (5)—(7) используются обозначения:

$$\xi = \frac{4\alpha\beta}{1 + 4\alpha^2\beta^2}, \quad \delta = N \frac{\lambda^2(1 + 4\alpha^2\beta^2)}{\gamma\gamma_m}, \quad x = \frac{\gamma_m}{\gamma},$$

$$\Delta_{\pm} = (1 \mp \xi) \{ (1 \pm \xi) - x - \delta(1 \mp \xi)[1 - x(1 \pm \xi)] \},$$

$$\Delta = (1 - \xi^2) [(2 - \xi^2)x - 2].$$

Отметим, что полученные решения не определяют абсолютное значение фазы величин  $m^{\pm}$  и  $z^{\pm}$ , что связано с калибровочной инвариантностью выбранного гамильтониана.

#### 4. Анализ стационарных решений

Для наших целей основной интерес представляет определение областей существования физических стационарных решений и анализ их устойчивости. Результаты этого довольно громоздкого анализа выглядят следующим образом.

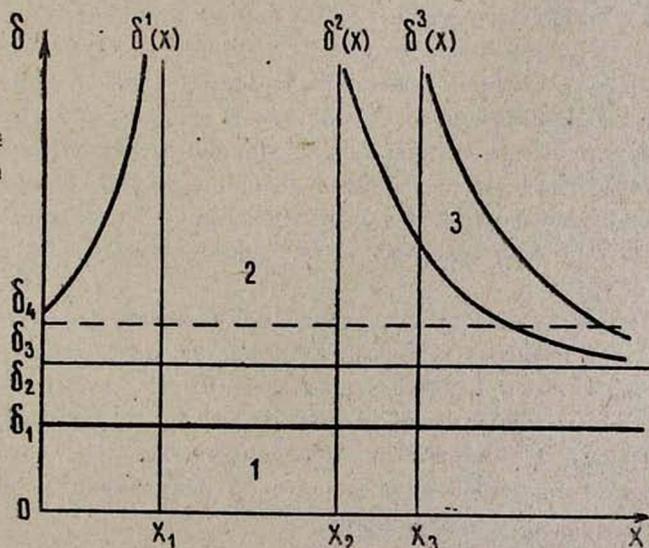
Решение I существует во всей физической области значений параметров  $\delta > 0$ ,  $x > 0$ . Решение IIa существует в области  $\delta > \delta_1$ ,  $x > 0$ ; решение IIб — в области  $\delta > \delta_3$ ,  $x > 0$ . Какое из них существует в области  $\delta_1 < \delta < \delta_3$  — зависит от знака  $\xi$ . Решение III существует в двух несвязанных областях плоскости  $(\delta, x)$ :

$$x < x_1, \delta > \delta^1(x); \quad \delta^1(x) = \frac{1}{1 - |\xi|} \frac{(1 + |\xi|) - x}{1 - (1 + |\xi|)x} \quad (8)$$

и

$$x > x_2, \delta^3(x) \geq \delta > \delta^2(x); \quad \delta^2(x) = \frac{1}{1 + |\xi|} \frac{(1 - |\xi|) - x}{1 - (1 - |\xi|)x} \quad (9)$$

Области существования стационарных решений приведены на рисунке.



где

$$x_{1,2} = \frac{1}{1 \pm |\xi|}, \quad x_3 = \frac{2}{1 - \xi^2}, \quad \delta_{1,3} = \frac{1}{1 \pm |\xi|},$$
$$\delta_2 = \frac{1}{1 - \xi^2}, \quad \delta_4 = \frac{1 + |\xi|}{1 - |\xi|}, \quad \delta^3(x) = \frac{x}{(1 - \xi^2)x - 2}.$$

Анализ устойчивости решений I—III выявил три характерные области параметров. Область 1 —  $0 < \delta < \delta_1$ ,  $x > 0$ , в которой устойчиво тривиальное решение. Область 2 —  $\delta_1 < \delta < \delta^2(x)$ ,  $x > 0$ ; здесь устойчиво неселективное решение, а тривиальное и селективное решения в ней неустойчивы. Наконец, область 3 —  $\delta^3(x) \geq \delta > \delta^2(x)$ ,  $x > x_2$ , в которой устойчиво только селективное решение; неселективное и тривиальное решения в этой области неустойчивы.

### 5. Заключение

Полученные результаты позволяют делать выводы о некоторых свойствах построенной выше модели. Для их обсуждения в качестве управляющих параметров модели будем рассматривать величины  $\delta$  и  $x$ , которые связаны соответственно с «накачкой»  $\delta \sim N$  и выводом вещества из активной зоны, считая остальные параметры фиксированными. При значениях  $\delta$  и  $x$ , обеспечивающих поведение модели в области 1, начальные значения динамических переменных релаксируют к своим равновесным значениям. Увеличение «накачки» до величин, превышающих  $\delta_1$  при тех же  $x$ , переводит модель в режим, при котором количества образующихся в активной зоне веществ превышают равновесные значения. В этом смысле величина  $\delta_1$  является критическим параметром неравновесной модели [5] и определяет порог «генерации» вещества в реакторе. При  $x < x_2$  дальнейшее увеличение «накачки» не приводит к изменению режима работы. В этих условиях реализуются лишь неселективные стационарные состояния  $n_+ = n_-$ . Иная ситуация имеет место при  $x > x_2$ . Для таких  $x$  существует второе критическое значение «накачки»  $\delta$ , лежащее на границе областей 2 и 3 по  $\delta^2(x)$ . Прохождение этой границы в направлении увеличения  $\delta$  приводит к тому, что неселективное стационарное состояние теряет устойчивость и устанавливается селективное стационарное состояние, при котором в активной зоне образуется преимущественно лишь один из изомеров. В этом случае можно говорить о режиме селективной «генерации» вещества.

Следует отметить, что существование критических параметров, определяющих границы режимов «генерации» вещества, накладывает основные ограничения на физическую реализацию модели. Для решения этого вопроса необходимо учесть влияние реальных спектральных характеристик вещества на поведение динамических переменных. Анализ этого вопроса, а также обсуждение возможности физической реализации модели будут приведены в последующих публикациях.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Идзуми И., Таи А. Стереодифференцирующие реакции, Изд. Мир, М., 1979, с. 376.
2. Morozov L. L. Origins of Life, 9, 187 (1979).
3. Morozov L. L., Kuz'min V. V., Goldanskii V. I. Origins of Life, 13, 363 (1983).
4. Морозов Л. Л., Федин Э. И., Кабачник М. И. ЖФХ, 47, 9 (1973).
5. Хаген Г. Синергетика, Изд. Мир, М., 1980, с. 404.

### ԱՆՀԱՎԱՍԱՐԱԿՇԻՌ ՍԵԼԵԿՑՈՂ ՀԱՄԱԿԱՐԳԻ ՔՎԱՆՏԱ- ՄԵԽԱՆԻԿԱԿԱՆ ՄՈՒԴԵԼԸ

Վ. Ա. ԱՎԵՏԻՍՈՎ, Ֆ. Ա. ԱՆԻԿԻՆ

*Կառուցված է քվանտա-մեխանիկական մոդել, որտեղ կրիտիկական պայմանների կատարման դեպքում տեղի է ունենում նյութի ինքնաբերական սեփականի պրոցես:*

### QUANTUM-MECHANICAL MODEL OF NON-BALANCED SELECTING SYSTEM

V. A. AVETISOV, F. A. ANIKIN

A quantum-mechanical model is constructed in which the process of spontaneous selection takes part when some critical conditions are fulfilled.

