JÓZEF SZUDY (UNIWERSYTET MIKOŁAJA KOPERNIKA W TORUNIU, INSTYTUT FIZYKI)

PRZYRZĄD KAZIMIERZA ANTONOWICZA DO CAŁKOWANIA RÓWNANIA SCHRÖDINGERA

W tym roku mija 100 lat od sformułowania przez Erwina Schrödingera słynnego równania, będącego podstawą mechaniki falowej. Jak wiadomo, ścisłe analityczne rozwiązanie tego równania jest możliwe jedynie w nielicznych przypadkach i dlatego we współczesnych badaniach kluczową rolę odgrywają rozwiązania numeryczne wykorzystujące nowoczesne techniki obliczeniowe. Mając świadomość, jak wielki postęp dokonał się dzięki superkomputerom w fizyce, astrofizyce i chemii kwantowej, warto może (z pewną nutą nostalgii) cofnąć się w czasie i przypomnieć sobie, jak z problemem numerycznego rozwiązywania równania Schrödingera radzono sobie dawno temu. Dysponując współczesną wiedzą, można się oczywiście trochę uśmiechać na myśl o tym, jak naiwne były to metody, ale pamiętajmy, że postęp w nauce odbywa się zwykle małymi krokami i to, co wiemy obecnie, to wynik pracy wielu minionych pokoleń.

W roku jubileuszu stulecia równania Schrödingera warto przypomnieć o ciekawym – dziś praktycznie zapomnianym – dokonaniu Kazimierza Antonowicza, fizyka z Uniwersytetu Mikołaja Kopernika (UMK), który w 1953 roku zbudował mechaniczno-elektryczny przyrząd do całkowania jednowymiarowego, niezależnego od czasu równania Schrödingera. Antonowicz wykorzystał analogię pomiędzy tym jednowymiarowym równaniem a równaniem różniczkowym opisującym ruch igły magnetycznej w polu magnetycznym. W rezultacie powstał jedyny w swoim rodzaju instrument należący do typu analogowych maszyn matematycznych.

OD MECHANICZNYCH KALKULATORÓW DO ANALIZATORA RÓŻNICZKOWEGO

Należy jednak nadmienić, że poszukiwania możliwości rozwiązywania równań różniczkowych przy użyciu przyrządów mechanicznych były podejmowane co najmniej dziewięć dekad przed powstaniem mechaniki kwantowej, poczynając od pracy francuskiego fizyka i matematyka Gasparda-Gustava Coriolisa, który w 1836 r. zaprojektował przyrząd do całkowania równań różniczkowych pierwszego rzędu. Czterdzieści lat później William Thomson (Lord Kelvin) przedstawił najpierw projekt maszyny do rozwiązywania równań różniczkowych drugiego rzędu, a następnie dowolnego rzędu. Jednak ówczesny stan techniki nie pozwalał na zrealizowanie jego pomysłu.

W 1925 roku do idei Thomsona nawiązał Vannevar Bush, który wraz ze swoim zespołem w Department of Electrical Engineering, Massachusetts Institute of Technology (MIT) rozpoczął prace nad konstrukcją maszyny, którą nazwał *differential analyzer* (analizator różniczkowy). Najpierw wspólnie ze swoim magistrantem Herbertem R. Stewartem skonstruował przyrząd do całkowania równań różniczkowych pierwszego rzędu i później wspólnie z innym studentem Haroldem Hazenem – w 1927 roku – stworzył instrument do rozwiązywania równań różniczkowych drugiego rzędu. W przeciwieństwie do wcześniejszych projektów Coriolisa i Thomsona, które zakładały użycie wyłącznie części mechanicznych, analizator różniczkowy Busha z MIT zawierał zarówno elementy mechaniczne, jak i elektryczne [1].

W 1936 roku Albert S. Coolidge, Hubert M. James i Richard D. Preston zastosowali analizator różniczkowy Busha do wyznaczenia funkcji własnych dla stanów $1s\sigma 2s\sigma\Sigma_g^3$ oraz $1s\sigma 2p\sigma\Sigma_u^3$ cząsteczki wodoru H_2 i na tej podstawie wyznaczyli prawdopodobieństwa przejść z poziomów oscylacyjnych związanych z tymi stanami, co umożliwiło im obliczenie rozkładu natężeń w widmie ciągłym wodoru [2]. Zbadali oni również stosowalność zasady Francka-Condona do analizy widm molekularnych.

1 Ze względu na stosowanie analizatora różniczkowego z MIT do celów o znaczeniu militarnym, jego dane techniczne zostały ogłoszone dopiero w 1945 roku w pracy: V. Bush, S. Caldwell, A new type of differential analyzer, Journal of the Franklin Institute, 240, 255 (October 1945)

2 A.S. Coolidge, H.M. James, R.D. Preston, A study of the Franck-Condon principle, J. Chem. Phys., 4, 193 (1936)

Laboratorium K. Antonowicza: od prawej L. Wolniewicz, K. Antonowicz, S. Dembiński (początek lat 60. XX wieku). Zdjęcie koloryzowane.

Ich praca zrobiła wielkie wrażenie na Aleksandrze Jabłońskim, który w tym czasie, pracując na Uniwersytecie Warszawskim, rozwijał swą kwantowomechaniczną teorię kształtu ciśnieniowo rozszerzonych linii widmowych. Ostateczną wersję tej teorii Jabłoński przedstawił w pracy opublikowanej w 1945 roku, gdy pod koniec wojny znalazł się na Uniwersytecie w Edynburgu [3]. W jego teorii problem obliczenia kształtu linii widmowej sprowadza się do obliczenia odpowiednich czynników Francka-Condona, podobnych do tych badanych w pracy Coolidge'a, Jamesa i Prestona. Te względy spowodowały, że po wojnie Jabłoński zasugerował swemu współpracownikowi Kazimierzowi Antonowiczowi, aby spróbował zbudować przyrząd do całkowania równania Schrödingera. O dostępie do doskonałego, ale bardzo drogiego, analizatora różniczkowego z MIT lub próbie zbudowania identycznego w warunkach panującej wówczas zimnej wojny nie było mowy. Stąd Antonowicz zdecydował się zbudować przyrząd mniej doskonały, ale prosty i tani.

POMYSŁ ANTONOWICZA: RÓWNANIE SCHRÖDINGERA I IGŁA MAGNETYCZNA

Stosując jako zasadę analogię równania ruchu igły magnetycznej w polu magnetycznym z równaniem Schrödingera, Antonowicz w swoim przyrządzie zawiesił igłę magnetyczną na nici kokonowej w jednorodnej części pola magnetycznego układu cewek Helmholtza. Z igłą było sztywnie związane lusterko, od którego odbijał się promień światła wysyłany przez odpowiednio dobraną żarówkę. Odbity promień padał na papier fotograficzny, nawinięty na bęben obracający się ze stałą prędkością. Bęben był poruszany przez silnik elektryczny, zaś na osi bębna była umieszczona tarcza obracająca się przed szczeliną, która albo częściowo, albo całkowicie zasłania szczelinę. Brzeg tarczy był tak wycięty, że długość odsłoniętej części szczeliny jest w każdej chwili proporcjonalna do rzędnej krzywej potencjalnej występującej w równaniu Schrödingera dla rozpatrywanego problemu fizycznego. Punktowe źródło światła dawało za pomocą soczewki równoległą wiązkę światła padającą na szczelinę. Inna soczewka zbierała na fotokomórce światło przepuszczone przez szczelinę. Prąd fotokomórki wzmacniany przez wzmacniacz prądu stałego zasilał jedno z uzwojeń cewki Helmholtza. Prąd ten wytwarzał pole magnetyczne odtwarzające wartość krzywej potencjalnej w równaniu Schrödingera i w ten sposób wpływał na odchylenie igły magnetycznej. W celu uzyskania wiarygodnych rozwiązań Antonowicz przeprowadził wnikliwe testy zmierzające do właściwego doboru prądów za pomocą potencjometrów oraz zapewniające stabilizację prędkości obrotów silnika. W jego przyrządzie stolik, na którym umieszczone były cewki Helmholtza oraz umocowana była podstawa do zawieszenia nici kokonowej, pozwalał za pomocą śruby mikrometrycznej obracać oś cewek tak, aby eliminować wpływ ziemskiego pola magnetycznego.

Pierwszą wersję swojego przyrządu Antonowicz opisał w pracy opublikowanej w 1953 roku [4]. Jest w niej krótka wzmianka o pracy Edwarda C. Bullarda i Philipa B. Moona z 1931 roku, w której opisali oni przyrząd do rozwiązywania równań różniczkowych drugiego rzędu typu:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + G(x) \cdot \Psi = 0 \qquad (1)$$

Zasada działania tego przyrządu jest bliska koncepcji Antonowicza, jednak sposób jej realizacji znacznie się różni [5]. Istotna zmiana polega na tym, że zamiast igły magnetycznej, w przyrządzie Bullarda i Moona użyta została mała cewka, przez którą przepuszczano prąd elektryczny wytwarzający jej moment magnetyczny. Chociaż w pracy Bullarda i Moona nie było żadnych odniesień do równania Schrödingera, po jej lekturze Antonowicz dokonał pewnych ulepszeń w pierwotnej wersji swego przyrządu. Ostateczną postać przyrządu Antonowicz opisał w broszurze wydanej w 1955 roku przez Towarzystwo Naukowe w Toruniu [6]. W tej broszurze, która została uznana za jego rozprawę doktorską, Antonowicz w rozdziale drugim szczegółowo opisał przyrząd Bullarda i Moona i na tym tle przedstawił zasadę konstrukcji ostatecznej wersji swojego przyrządu wraz z podaniem jego schematu blokowego i schematów użytych wzmacniaczy. Ponadto szczegółowo opisał rozkład pola magnetycznego wytwarzanego przez układ cewek Helmholtza oraz przedstawił uzyskane za pomocą jego przyrządu wykresy funkcji własnych dla przypadku oscylatora harmonicznego [7].

Zasada działania tego przyrządu sprowadza się do obserwacji wychyleń igły magnetycznej o momencie magnetycznym μ i momencie bezwładności I, umieszczonej w polu magnetycznym. Równanie ruchu takiej igły ma postać:

$$I\frac{d^2\alpha}{dt^2} + \mu B(t) \cdot \alpha = 0 \qquad (2)$$

gdzie α jest kątem między kierunkiem pola, a kierunkiem momentu magnetycznego. Ściśle rzecz biorąc równanie to dotyczy granicy małych wychyleń i w przyjęciu tego równania już kryje się pewne przybliżenie. Odpowiedni dobór prądów za pomocą potencjometrów pozwala ukształtować zależność pola magnetycznego od czasu tak, aby odtworzyć zależność funkcji G(x) w równaniu (1) od współrzędnej przestrzennej. Natomiast funkcja falowa jest proporcjonalna do α.

Przyrząd Antonowicza wywołał w owym czasie znaczne zainteresowanie, a także później zrobił pewne wrażenie w środowisku fizyków, będąc np. odnotowanym w podręczniku *Teoria kwantów – Mechanika falowa* Iwona Białynickiego-Biruli, Marka Cieplaka i Jerzego Kamińskiego [8].

3 A. Jabłoński, General theory of pressure broadening of spectral lines, Phys. Rev., 68, 78 (1945)

4 K. Antonowicz, An integrating apparatus for the Schrödinger equation, Acta Phys. Polon., 12, 163 (1953).

5 E.C. Bullard, P.B. Moon, A mechanical method for the solution of second-order linear differential equation, Proceedings of the Cambridge Philosophical Society, 27, 546 (1931)

6 K. Antonowicz, Przyrząd do całkowania równania Schrödingera, Studia Societatis Torunensis, Sectio A (Mathematica-Physica), Vol. IV, nr 1, Toruń 1955

7 W zakończeniu tej pracy znajduje się następujące stwierdzenie: *In the literature available to him, the author has found no report on the construction of an integrating apparatus for Schrödinger's equation based on a similar idea, except a short remark in Kamke's well-known textbook (M. Kamke, Differentialgleichungen. Lösungsmethoden und Lösungen (1943) that Bullard and Moon (1931) had put forward an idea of a magnetic device for the solution of the equation $d^2y/dx^2 = f(x)y$.*

8 I. Białynicki-Birula, M. Cieplak, J. Kamiński, Teoria kwantów – Mechanika falowa, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 2001, s. 292

OD ANALOGOWEGO PRZYRZĄDU DO ERY KOMPUTERÓW CYFROWYCH

W środowisku toruńskim pod kierunkiem Antonowicza wykonano kilka prac magisterskich, w których dokonano dalszych ulepszeń i modyfikacji przyrządu [9] oraz skonstruowano przyrząd do całkowania iloczynów funkcji falowych, czyli do obliczania czynników Francka-Condona [10]. Podjęto też próby wykorzystania tego przyrządu do analizy konkretnych zagadnień z fizyki molekularnej [11]. Szybki rozwój cyfrowych maszyn liczących, skutkujący pojawieniem się potężnych komputerów, spowodował jednak, że zbudowany przez Antonowicza przyrząd ma obecnie znaczenie jedynie historyczne jako ciekawy przykład opracowania oryginalnego analogowego instrumentu naukowego. Już na początku ery cyfrowej komputery odegrały istotną rolę w rozwoju fizyki molekularnej, w czym aktywny udział miał Lutosław Wolniewicz z ośrodka toruńskiego, który wraz z Włodzimierzem Kołosem, promotorem jego pracy doktorskiej przeprowadził przy użyciu komputera IBM 7090 na Uniwersytecie w Chicago niezwykle dokładne obliczenia struktury energetycznej cząsteczki wodoru [12].

9 E. Walentynowicz, Zastosowanie wzmacniacza prądu zmiennego w przyrządzie do całkowania równania Schrödingera, praca magisterska, Katedra Fizyki Doświadczalnej UMK, Toruń 1958

10 H. Łożykowski, Przyrząd do obliczania całek condonowskich – Wzmacniacze prądu stałego, praca magisterska, Katedra Fizyki Doświadczalnej UMK, Toruń 1955

11 A. Bączyński, W. Berdowski, S. Łegowski, Solution of the Schrödinger equation for the van der Waals potential, Bull. Acad. Polon. Sci., Sér. Sci. Math. Astron. Phys., 6, 119 (1958)

12 W. Kołos, L. Wolniewicz, Nonadiabatic theory of diatomic molecules and its application to the hydrogen molecule, Revs. Mod. Phys., 35, 473 (1963)

AUTOR

Prof. dr hab. **Józef Szudy** (ORCID: 0000-0001-7048-5435) jest emerytowanym profesorem w Instytucie Fizyki Uniwersytetu Mikołaja Kopernika w Toruniu, członkiem rzeczywistym PAN oraz członkiem honorowym Polskiego Towarzystwa Fizycznego. Był dyrektorem Instytutu Fizyki UMK oraz dziekanem Wydziału Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej UMK. Jego zainteresowania naukowe obejmują fizykę atomowo-molekularną, optykę, ciśnieniowe rozszerzanie linii widmowych oraz historię fizyki.

Zdjęcie tytułowe: Profesor Aleksander Jabłoński (po prawej) i dr Kazimierz Antonowicz przy aparaturze pomiarowej w Katedrze Fizyki Doświadczalnej UMK w Toruniu. Lata 50. XX w. Fotografia dokumentuje okres intensywnego rozwoju toruńskiego ośrodka fizyki doświadczalnej i pionierskich prac konstrukcyjnych dr. Antonowicza. Zdjęcie koloryzowane.

ROZWIĄZANIE RÓWNANIA SCHRÖDINGERA

Przez rozwiązanie stacjonarnego (niezależnego od czasu) równania Schrödingera rozumiemy znalezienie funkcji falowej Ψ oraz odpowiadającej jej energii E, które spełniają zależność $\widehat{H}\Psi = E\Psi$, gdzie $\widehat{H}$ jest operatorem Hamiltona opisującym całkowitą energię układu. W przypadku jednowymiarowym operator ten ma postać:

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x),$$

gdzie $V(x)$ jest potencjałem oddziałującym na cząstkę. Po podstawieniu Hamiltonianu do równania Schrödingera otrzymujemy liniowe równanie różniczkowe drugiego rzędu:

$$\frac{\mathrm{d}^2\Psi(x)}{\mathrm{d}x^2} = -\frac{2\mathrm{m}}{\hbar^2}(\mathrm{E} - V(x))\Psi(x).$$

Problem jest zdefiniowany przez potencjał V(x) oraz warunki brzegowe. Na przykład w przypadku stanów związanych funkcja falowa powinna pozostawać skończona i zanikać w odpowiednio dużej odległości od obszaru, w którym cząstka jest związana.

Dla kilku prostych modeli, takich jak atom wodoru, rozwiązanie można znaleźć analitycznie. W zdecydowanej większości rzeczywistych problemów rozwiązanie ścisłe niezależnego od czasu równania Schrödingera nie jest jednak znane i konieczne jest zastosowanie metod numerycznych. Jedną z najczęściej stosowanych metod jest metoda strzału (ang. shooting method) opisana m.in. w rozdziale 26 podręcznika I. Białynickiego-Biruli, M. Cieplaka i J. Kamińskiego Teoria kwantów (PWN 1991). Polega ona na wybraniu próbnej wartości energii E, przyjęciu wartości funkcji falowej i jej pochodnej w jednym z końców badanego obszaru zgodnych z warunkiem brzegowym oraz numerycznym całkowaniu równania do drugiego końca obszaru. Otrzymane rozwiązanie sprawdza się pod kątem spełnienia warunków brzegowych. Jeżeli warunki te nie są spełnione, wartość energii jest korygowana i proces całkowania powtarzany. W ten sposób wyznacza się dyskretne wartości energii oraz odpowiadające im funkcje falowe.

Na długo przed pojawieniem się komputerów cyfrowych całkowanie równań różniczkowych wykonywano również przy użyciu urządzeń analogowych. Najbardziej zaawansowanym z nich był analizator różniczkowy – mechaniczny komputer zbudowany z wałów, przekładni, tarcz oraz mechanicznych całkowników. Kluczowym elementem analizatora był właśnie mechaniczny całkownik realizujący operację matematycznego całkowania. Odpowiednio łącząc kilka takich elementów oraz dobierając przełożenia przekładni, można było skonfigurować urządzenie tak, aby odwzorowywało strukturę rozwiązywanego równania różniczkowego. W przypadku jednowymiarowego stacjonarnego równania Schrödingera dwa mechaniczne całkowniki odpowiadały dwóm kolejnym całkowaniom prowadzącym od drugiej pochodnej do funkcji falowej, natomiast układ przekładni realizował współczynniki występujące w równaniu, zależne od potencjału $V(x)$ oraz przyjętej wartości energii E.

Podczas pracy analizatora zmienną niezależną była współrzędna przestrzenna x. Obrót głównego wału odpowiadał kolejnym wartościom tej współrzędnej, natomiast ruch pozostałych elementów był rejestrowany za pomocą odpowiedniego wskaźnika, licznika lub rejestratora graficznego i wyznaczał przebieg funkcji falowej $\Psi(x)$. Zmieniając wartość parametru odpowiadającego energii E i obserwując, czy otrzymane rozwiązanie spełnia warunki brzegowe, można było wyznaczać wartości własne Hamiltonianu w sposób całkowicie mechaniczny.

Dokładność takich urządzeń była ograniczona przez tarcie, luzy mechaniczne oraz niedokładność wykonania elementów. Z tego względu analizatory mechaniczne zostały zastąpione przez komputery wykorzystujące układy elektroniczne. Niezależnie jednak od zastosowanej technologii cel obliczeń pozostaje ten sam – wyznaczenie funkcji falowych i odpowiadających im wartości energii spełniających stacjonarne równanie Schrödingera oraz zadane warunki brzegowe.

/prof. Adam Pikul/