ПРОБЛЕМЫ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ И ИННОВАЦИОННОГО РАЗВИТИЯ ВНУТРЕННИХ ВОДНЫХ ПУТЕЙ В БАССЕЙНАХ ВЕЛИКИХ РЕК
Труды конгресса «Великие реки» 2017
Выпуск 6, 2017 г.
ISBN 978-5-901722-54-1

УДК 512.54; 530.145

Н.В. Лунин, к.ф.-м. н., зав. лаб. кафедры физики ФГБОУ ВО «ВГУВТ»,
603951, г. Нижний Новгород, ул. Нестерова, 5.

О БАЗИСЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЙ РЕШЕНИЙ ВОЛНОВЫХ УРАВНЕНИЙ

Ключевые слова: квантовая механика, теория групп, кватернионы, параметры Стокса.

Проанализирована полнота базиса некоммутативных преобразований решений волновых уравнений и их соответствие построенным из них эрмитовым формам

Уравнения классической физики, например механики или электродинамики, содержат только наблюдаемые величины. Это - независимые переменные – координаты и время, это – параметры, определяющие поведение физической системы типа энергии, импульса, потенциала. Наконец это функции, векторные или скалярные, как правило действительные, которые находятся как решения таких уравнений и которые можно непосредственно сравнить с результатами эксперимента.

Для описания этих величин необходимы координатные системы, обобщение их приводит к понятию системы отсчета. Они, в свою очередь, требуют какого-то базиса, часто это тройка единичных ортогональных векторов **i, j, k** или связанных с ними систем базисных векторов цилиндрических, сферических и т.п. координат.

По-видимому можно считать, что базисы, подобные упомянутым выше, пригодны для описания физических явлений в евклидовом пространстве или его обобщениях для других пространств, обладающих, однако, равной нулю гауссовой кривизной.

Ситуация в отношении базисных векторов систем координат или систем отсчета меняется при переходе к квантовой физике. Хотя нельзя считать, что некоммутативность преобразований решений возникла лишь с появлением последней (она была и раньше в связи с волновыми уравнениями, например в электродинамике), в квантовой механике она проявилась выразительнее, чем в других областях физики, что отразилось, например, в ее именовании как матричной механики. Возникла необходимость преобразований, явно содержащих некоммутативность, простейшие из которых включают матрицы второго порядка. Многие физические явления описываются дифференциальными уравнениями или их системами, требующими явного учета неперестановочности преобразований решений и их композиций, и при этом для значительной и важнейшей их части достаточно матриц второго порядка. Почва для решения математических вопросов, связанных с неперестановочностью преобразований, была подготовлена тем важнейшим обстоятельством, что в 1843 году Гамильтон открыл кватернионы, которые в современной физике проявляют себя в виде матриц Паули вместе с единичной σ_0.

Для физических теорий существенным является выполнение законов сохранения. Теоремы Нетер устанавливают взаимно-однозначное соответствие между группами преобразований и законами сохранения [1], причем, как правило, наиболее важные для физических задач группы оказываются некоммутативными. Поэтому замкнутая физическая теория должна строиться как последовательная математическая теория неабелевых групп Ли, а матричные представления таких групп должны обладать полным базисом, что, в свою очередь, является необходимым условием полноты системы наблюдаемых, без чего немыслимо выполнение законов сохранения.

Рассмотрим стационарное одномерное уравнение Шредингера, записанное в форме

$$\psi''(z)+k^2(z)\psi(z)=0\,. \tag{1}$$

Чтобы определить групповую принадлежность преобразований его решений, перейдем, согласно [2], к системе уравнений первого порядка для функций

$$\Phi_\pm(z)=\frac{k^{1/2}(z)}{\sqrt{2}}\left[\psi(z)\pm\frac{1}{ik(z)}\psi'(z)\right]\,, \tag{2}$$

откуда получаем, используя матричную форму записи и матрицы Паули σ_s вместе с единичной σ_0, систему искомых уравнений в виде

$$\Phi'(z)=\left[ik(z)\sigma_3+\frac{k'(z)}{2k(z)}\sigma_1\right]\Phi(z) \tag{3}$$

для матрицы-столбца

$$\Phi(z)=\begin{Vmatrix}\Phi_+(z)\\ \Phi_-(z)\end{Vmatrix}=\begin{Vmatrix}ae^{i\alpha}\\ be^{i\beta}\end{Vmatrix} \tag{4}$$

с произвольными условиями в начальной точке

$$\Phi_+(z_0)=a_0e^{i\alpha_0}\,,\qquad \Phi_-(z_0)=b_0e^{i\beta_0}\,. \tag{5}$$

Уравнение (3) является спинорным представлением уравнения Шредингера, оно

позволяет использовать матричные представления групп для исследования групповых и трансформационных свойств пропагаторов, пространства их преобразований и, согласно теоремам Нетер, законов сохранения.

Чтобы сравнить результаты расчетов с экспериментальными данными, согласно любой теоретической схеме необходимо из комплексных решений построить действительные величины. В квантовой теории и в классическй электродинамике для этой цели используются плотность вероятности и ее ток – в первой, и параметры Стокса [3] – во второй.

Отметим следующее обстоятельство. Произвольные преобразования спинора, представимого в виде двухкомпонентного столбца, являются матрицами второго порядка,для которых полным базисом являются упомянутые выше четыре матрицы σ_s .Поэтому и пропагатор должен содержать все четыре матрицы полного базиса. Это означает также, что и полная система эрмитовых форм, т.е. полная система наблюдаемых, построенных из решений, должна содержать в той или иной форме все четыре базисных элемента преобразований решений.

Примем эрмитовы формы в виде [4]

$$j_s(z)=\Phi^+(z)\sigma_s\Phi(z), \tag{6}$$

где $s=0,1,2,3,$ которые для спинора (4) приобретают вид

$$\begin{aligned}
j_0&=\Phi_+^*\Phi_++\Phi_-^*\Phi_-=a^2+b^2, & j_1&=\Phi_+^*\Phi_-+\Phi_-^*\Phi_+=2ab\cos(\beta-\alpha),\\
j_3&=\Phi_+^*\Phi_+-\Phi_-^*\Phi_-=a^2-b^2, & j_2&=-i\left(\Phi_+^*\Phi_--\Phi_-^*\Phi_+\right)=2ab\sin(\beta-\alpha).
\end{aligned} \tag{7}$$

Для любых компонент спинора (4) величины j_s удовлетворяют тождеству

$$j_0^2=j_1^2+j_2^2+j_3^2, \tag{8}$$

которое может рассматриваться как условие полноты наблюдаемых.

Те же самые эрмитовы формы могут быть выражены через волновую функцию ее производную в виде

$$\begin{aligned}
j_0&=k\psi\psi^*+(\psi')(\psi^{*}{}')/k, & j_1&=k\psi\psi^*-(\psi')(\psi^{*}{}')/k,\\
j_2&=\psi\psi^{*}{}'+\psi^*\psi', & j_3&=i\left(\psi\psi^{*}{}'-\psi^*\psi'\right)
\end{aligned} \tag{9}$$

с тем же условием полноты (8).

При эволюции физической системы, спинор которой меняется согласно уравнению (3), эрмитовы формы (6) или (9) также меняются. Система уравнений для самих эрмитовых форм, т.е. параметров Стокса, может быть записана в виде [4]

$$\begin{aligned} j_0' &= \frac{k'}{k} j_1, \quad & j_1' &= 2kj_2 + \frac{k'}{k} j_0, \\ j_2' &= -2kj_1, & j_3' &= 0. \end{aligned} \tag{10}$$

Эта система уравнений так же полна, как полна система эрмитовых форм, и она поэтому содержит все законы сохранения.

Теперь, следуя [5], рассмотрим базис пропагатора для спинорного представления уравнения Шредингера (3). Он, т.е. мультипликативный интеграл [6], представим в виде

$$\lim_{\substack{N\to\infty \\ \Delta z\to 0}} \prod_{m=1}^{N} \exp\left[ik_m \Delta z_m \sigma_3 + \left(\Delta k_m / 2k_m\right)\sigma_1\right] \equiv T \exp \int_{z_i}^{z_f} \left[ikdz\sigma_3 + \frac{dk}{2k}\sigma_1\right]. \tag{11}$$

Выражение (11) определяет также групповую принадлежность пропагатора для решений уравнения Шредингера: матрица преобразования спинора , т.е. выражение (11), принадлежит группе SU(1,1) [4].

Обращает на себя внимание следующее обстоятельство. Несмотря на то, что полный базис матричных преобразований спинора представляет собой четыре матрицы σ_s, выражение (11) не содержит явно σ_0, σ_2 .

Первая из них коммутативна со всеми матрицами, разложение экспоненты от которых содержит их след, который пропорционален единичной матрице, поэтому σ_0 уже неявно содержится в выражении пропагатора (11).

Что же касается второй, то следует принять во внимание, что алгебра Ли некоммутативной группы содержит не только сами матрицы, но и их коммутаторы на этой алгебре. Последний разумеется отличается от коммутатора самих элементов некоммутативной группы.

Преобразование спинора на группе является произведением последовательных матричных преобразований. Чтобы найти коммутатор матриц, уже входящих явно в (11), воспользуемся формулой Бэйкера-Кэмпбелла-Хаусдорфа с учетом только одного коммутатора $\exp A \exp B \cong \exp\left(A + B + (1/2)[A, B]\right)$, . Сопоставив матрицам A и B матрицы

$ik\Delta z\sigma_3$ и $(\Delta k / 2k)\sigma_1$ соответственно, получим подинтегральное выражение для мультипликативного интеграла в виде

$$ik_m \Delta z_m \sigma_3 + \left(\Delta k_m / 2k_m\right)\sigma_1 - \left(\Delta k_m \Delta z_m / 2\right)\sigma_2, \tag{12}$$

которое содержит все матрицы Паули явно, а σ_0 уже содержится в (11) неявно, о чем говорилось выше.

Таким образом, все матрицы полного базиса представлены в выражении для пропагатора. Следует попутно отметить, что последнее слагаемое в (12) напоминает соотношение неопределенностей, присутствующее в общепризнанных нетеоретико-групповых схемах квантовой механики, однако оно не связано никак с точностью экспериментальных измерений. Говоря точнее, оно связано с последними точно так же, как и все другие слагаемые, которые с некоммутативностью не связаны.

Современные схемы квантовой теории содержат важные утверждения, кардинально отличающие ее от всех, построенных ранее, физических теорий. Одними из таких утверждений являются концепция вероятности и принцип неопределенностей.

Вероятность. Наблюдаемыми в КМ являются эрмитовы формы, построенныеиз решений уравнения Шредингера и их производных вместе с сопряженными. В современных схемах КМ используются две – плотность вероятности $\rho = \psi\psi^*$ и ее

ток $j = i\left(\psi\psi^{*\prime} - \psi^*\psi'\right)$, они не удовлетворяют никакому алгебраическому условию полноты.

Между тем из тех же величин, ψ, ψ' вместе с сопряженными, могут быть построены четыре эрмитовы формы, удовлетворяющие условию полноты. Эти четыре эрмитовы формы давно и хорошо известны под именем параметров Стокса [3], они используются в классической электродинамике, и последняя вовсе не требует концепции вероятности. В квантовой же теории отсутствие некоторых из эрмитовых форм полной их системы восполнено концепцией вероятности. Поэтому включение в рассмотрение всех четырех эрмитовых форм делает использование концепции вероятности избыточным, как и в классической электродинамике.

Неопределенность. И решения, и эрмитовы формы, из них построенные, для своего описания требуют какого-либо базиса, возможно они разные. Базисы должны быть полны и согласованы, поскольку эрмитовы формы связаны и со спинором, и между собой. Таким полным и общим базисом, как это видно из (6), (11) и (12), являются матрицы Паули вместе с единичной. Четырем матрицам базиса преобразований спинора отвечают четыре эрмитовы формы (параметры Стокса), образующие полную их систему.

Алгебры Ли некоммутативных групп содержат коммутуторы вида [A,B], а также и высших порядков, что, в частности, проявляется в формуле Бэйкера-Кэмпбелла-Хаусдорфа. В работе [5] показано, что в подинтегральном выражении мультипликативного интеграла (11), т.е. пропагатора, не содержащем в явном виде всех матриц полного базиса, при явном учете коммутатора алгебры Ли группы появляется матрица, дополняющая базисные матрицы до полного их набора. Это σ_2 с коэффициентом $\Delta k \Delta z / 2$, отвечающим соотношению непределенностей, но имеющим смысл ортогональной координаты базиса преобразований решений, в отличие от обычной интерпретации как ограничения на точность экспериментальных результатов.

Вклад составляющей по этой координате базиса может разумеется изменяться. Он может быть нулевым, может быть большим, и даже, при специальных условиях, как показано в [5], основным, как, впрочем, и по другим координатам, что не является удивительным в силу равноправности базисных элементов.

Спин. Обращает на себя внимание еще и следующее обстоятельство. Наряду сновыми, отсутствующими в других физических теориях свойствами или явлениями, подобными вероятности и неопределенностям, в квантовой механике возникло также и понятие спина. “Спин является ключевым и до конца еще непонятым свойством материи”[7].

Математическое выражение спина, как это показано в [8], образовано величинами

$$
\begin{aligned}
s_x &= \psi^+ \hat{s}_x \psi = \frac{1}{2}\left(\psi_1^* \psi_2^*\right)\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\left(\psi_1 \psi_2^* + \psi_1^* \psi_2\right), \\
s_y &= \psi^+ \hat{s}_y \psi = \frac{i}{2}\left(\psi_1 \psi_2^* - \psi_1^* \psi_2\right), \\
s_z &= \psi^+ \hat{s}_z \psi = \frac{1}{2}\left(\psi_1 \psi_1^* - \psi_2^* \psi_2\right),
\end{aligned}
\tag{13}
$$

которые построены с помощью трех матриц Паули из двухкомпонентной волновой функции $\psi =$ столбец $\left(\psi_1, \psi_2\right)$. Очевидно, что величины в (13) удовлетворяют тождеству

$s_x^2 + s_y^2 + s_z^2 \equiv s_0^2 = \frac{1}{4}\left(\psi_1 \psi_1^* + \psi_2 \psi_2^*\right)^2$. Поэтому, если дополнить (13) четвертой величиной,

$$
s_0 = \psi^* \hat{s}_0 \psi = \frac{1}{2} \psi^+ \sigma_0 \psi, \tag{14}
$$

то очевидно, что, с точностью до коэффициента величины ψ_1, ψ_2 совпадают с Φ_+, Φ_-,

а s_s совпадают с j_s.

Поэтому, поскольку в [8] прямо не говорится, решением каких уравнений являются ψ_1, ψ_2, следует считать, что под ними понимаются решения уравнения Шредингера в спинорном представлении, т.е. двух уравнений первого порядка. Ибо вряд ли авторы [8] подразумевали, что функции ψ_1, ψ_2, каждая, являются решениями уравнения второго порядка, т.е. уравнения Шредингера, и в рассмотрение тогда должны были бы быть включены четыре комплексные функции, спинор заменен на биспинор, базис σ_s на $\sigma_s \otimes \sigma_t$, а ситуация напоминала бы вывод уравнения Дирака.

Действительные величины можно рассматривать как точки на оси, например вдоль вектора **i ,** его можно считать базисом для геометрической интерпретации этих чисел.

Комплексные числа принято рассматривать в комплексной плоскости, в этом случае базисом для их геометрической интерпретации следует считать ортогональные единичные векторы **i, j,** при этом действительная и мнимая части – это проекции комплексного вектора **r** =x**i** + y**j** с условием полноты $r^2 = x^2 + y^2$, что конечно связано с полнотой тригонометрических функций типа $\sin\varphi, \cos\varphi$. Для пары комплексных чисел или функций, как-то связанных между собой, например для двух комплексных функций, подчиняющихся каким-либо уравнениям, хотя бы даже одномерного уравнения второго порядка, базиса **i, j** уже недостаточно**.** Для них недостаточно даже и базиса **i , j , k .** Две связанных комплексных величины типа (6) или (4) для своего описания требуют матричных преобразований, полный базис которых представим четырьмя матрицами σ_s. Эрмитовы формы, построенные из двух связанных комплексных чисел или функций, состоят из четырех величин (6) или (7), они связаны условием полноты (8) независимо от того, являются ли ψ_1, ψ_2 решением какого-либо уравнения или нет.

Если ψ_1, ψ_2 подчиняются каким-либо уравнениям, описывающим какой-то физический процесс, то система этих двух функций как-то эволюционирует, как и соответствующие эрмитовы формы. В случае уравнений (1) или (3) эти формы одчиняются уравнениям (10), которые, в свою очередь, образуют замкнутую систему, и потому они содержат все необходимые законы сохранения. (Следует, однако, сделать ту оговорку, что в (10) не учитывается коммутатор алгебры Ли группы, который не включен явно в выражение для пропагатора.). Например в среде с $k = const$выполняются законы сохранения $j_0^{'} = 0, j_3^{'} = 0$, а две другие эрмитовы формы, j_1, j_2, меняются. На стенке потенциальной ступеньки $j_2^{'} = 0, j'_3 = 0$, но меняются j_0, j_1. Поэтому исключение из рассмотрения j_0 в системе (13) не позволяет рассматривать все необходимые законы сохранения.

Система (13) не включает единичный элемент базиса преобразований. Это, кроме прочего, приводит к тому, что преобразования спинора, который, в свою очередь, образует спин, определяемый системой (13), не образуют группу, т.к. любая группа содержит единичный элемент. Это, согласно теоремам Нетер, устанавливающим взаимно-однозначное соответствие между группами преобразований и законами сохранения, означает, что для так определенного спина все законы сохранения не могут быть выполнены.

Из сравнения (6) или (7) с (13) очевидно, что величины $s_{x}, _{y}, _{z}$ представляют собой лишь часть полной системы параметров Стокса. Полная система этих параметров, так же, как и полный базис для них – кватернионы, введенные Гамильтоном в 1843г., известны более полутора сотен лет. И только то обстоятельство, что они не нашли применения в квантовой механике в качестве полной системы, привело к возникновению в ней понятия спина. Например в классической электродинамике, содержащей полную систему параметров Стокса, понятие «спин», составляющее только их часть, не вознило вовсе.

Список литературы:

[1] П.Олвер Приложения групп Ли к дифференциальным уравнениям. М.: Мир, 1989.
[2] В.А.Колкунов Проблемы S-матрицы (квазиклассика). Ядерная физика, т.10, 1296 (1969).
[3] М. Борн, Э. Вольф Основы оптики. М.: Наука, 1973.
[4] N.V. Lunin The group theory and non-Euclidean superposition principle in quantum mechanics. In: Theoretical Concepts of Quantum Mechanics, ed. M.R. Pahlavani, InTech, p.263, 2012. (open access: http://www.intechopen.com/books/theoretical-concepts-of- quantum-mechanics/)
[5] N.V. Lunin "Uncertainty relations" in the group-theoretic scheme of quantum mechanics. Physical Science Int. Journ., 2017 (in print)
[6] Ф.Р. Гантмахер Теория матриц. М.: Наука, 1988.
[7] Л.Б. Окунь Физика элементарных частиц. М.: Наука, 1988.
[8] А.И. Базь, Я.Б. Зельдович, А.М. Переломов Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. М.: Наука, 1971.

ON THE BASIS OF SOLUTIONS TRANSFORMATIONS FOR WAVE EQUATIONS

N.V. Lunin

Key words: quantum mechanics, group theory, quaternions, Stokes parameters.

An analysis of basis completeness for non-commutative transformations of solutionsof wave equations and their compatibility with complete set of the Hermitian forms (the Stokes parameters) is carried out.