ISBN 978-5-901722-67-1

УДК 530.145: 530.13: 530:530.145.6

Лунин Николай Витальевич, зав. лаб. кафедры физики.
Волжский государственный университет водного транспорта
603951, г. Нижний Новгород, ул. Нестерова, 5.

ВОЛНЫ КАКОЙ СУБСТАНЦИИ ОПИСЫВАЕТ ВОЛНОВАЯ ФУНКЦИЯ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ?

Аннотация. Свойства двух множеств, используемых в современных формах квантовой теории, анализируются с точки зрения совместимости в каждом из них концепции вероятности с выполнением точных законов сохранения. Показано, что одна волновая функция, будучи комплексной величиной, не может содержать всех, представляющих собой для волнового уравнения Шредингера полную систему, наблюдаемых, состоящую из четырёх параметров Стокса.

Ключевые слова: квантовая механика, законы сохранения, волновая функция, вероятностная интерпретация.

Можно считать, что основной целью той части теоретической физики, которая связана с установлением и согласованием основ физических теорий, является построение таких их схем, которые, исходя из небольшого числа исходных принципов, достигли бы создания замкнутой, не содержащей внутренних противоречий теории, согласованной со всеми имеющимися экспериментальными данными. Достижимость этой цели часто вызывает сомнения, в частности в квантовой механике [1], и не случайно, что связанные с этим вопросы остаются нерешёнными на протяжении десятилетий, а трудности таковы, что сообщество учёных, с ними связанных, разделяется на «индифферентное» большинство и «озабоченное» меньшинство [2].

Если принять эту цель, то построение физической теории должно быть математически последовательным, строго говоря – аксиоматическим, и первым шагом на этом пути должен стать выбор того (математического) множества, в рамках аксиом которого такое построение возможно. Реальными претендентами могут быть множества, подобные тем, которые именуются полем, кольцом, полугруппой, группой, линейной алгеброй, может быть ещё какие-то, к числу которых следует в первую очередь отнести гильбертово пространство, играющее особенно важную роль в современных схемах квантовой механики.

Разные множества имеют особенности, отличающие их между собой и существенные при построении физической теории. Они отличаются элементами, которые их образуют, а также числом операций, которые заданы на этих множествах и которые определяют отношения между парами их элементов. Некоторые множества имеют один тип элементов, например, представимых только векторами, или только матрицами, другие, наряду с ними включают также, например, и числа, вещественные или комплексные [3].

Простейшими по числу операций являются моноиды – множества с единственной бинарной операцией, обычно называемой умножением, хотя под этим названием могут подразумеваться или умножение – для мультипликативных групп, или сложение – для аддитивных, которые коммутативны, или абелевы. Группы являются моноидами [4], они играют важную роль во многих физических теориях, например в кристаллографии, специальной теории относительности, квантовой механике.

В физических теориях находят применение множества и с б*О*льшим числом бинарных операций. Например, линейные векторные пространства [5] и, особенно в квантовой теории, гильбертово пространство [6]. В нём, помимо операции – умножения, определено сложение, а также умножение на число. Поэтому гильбертово пространство содержит не только мультипликативные преобразования, но и аддитивные. Последние применяются для композиций альтернативных решений или преобразований, образуя принцип суперпозиции.

Одной из нерешённых задач физики остаётся вопрос о полноте квантовой механики и вероятностной интерпретации волновой функции [7]. Значимость этого, имеющего почти столетнюю историю, вопроса сравнима, по-видимому, с ролью выбора того множества, которое было положено в основу математической схемы квантовой теории. Почти сразу с возникновением последней возникло два подхода к вопросу о пригодном для этой цели множестве. В 1928 г. вышла книга Г. Вейля «Теория групп и квантовая механика» [8], а в 1932 г. – «Математические основы квантовой механики» И. фон Неймана [6]. Несмотря на единство целей, подходы их авторов существенно различаются.

Обращаясь к вопросу в названии статьи и цели теоретической физики, обозначенной в её начале, рассмотрим обоснованность концепции вероятности в квантовой механике, а также возможность её реализации на основе используемых в ней математических множеств и математических моделей. При этом, как и в любой физической теории, следует принять во внимание также и необходимость выполнения в ней установленных точных законов сохранения, таких как сохранение энергии, импульса, момента импульса. Ограничиваясь двумя множествами, именуемыми гильбертовым пространством и группами, как наиболее важными для квантовой механики, рассмотрим некоторые из аксиом, их определяющих, с точки зрения сочетания их с концепцией вероятности, ибо, хотя единственность вероятностной интерпретации в квантовой механике и не доказана [9], последняя имеет устойчивый статус общепризнанной в ней концепции.

Рассматривая аксиомы любого из перечисленных выше множества, в том числе двух наиболее важных для квантовой теории, можно видеть, что они не содержат никаких признаков неоднозначности операций, которые могли бы привести к вероятностному характеру их результата. Напротив, операции и в группах, и в гильбертовом пространстве *вполне определены* и их результат однозначен [10,5]. Поэтому ни гильбертово пространство, ни группы не могут рассматриваться как математическая основа и источник вероятностной интерпретации в квантовой теории.

Эту роль могло бы играть какое-либо множество, образующее математическую основу вероятностных моделей и случайных процессов [5]. Поскольку вероятностные модели содержат и умножение, и сложение вероятностей, это, в отношении числа операций, сближает их с гильбертовым пространством, но не позволяет рассматривать их моноидом, каковым являются группы.

Ни один эксперимент не даёт абсолютно точного значения наблюдаемых величин, любая величина измеряется с погрешностью. Но и ни одна теоретическая модель физических явлений, за исключением квантовой теории, не содержит концепции вероятности в качестве основополагающего неотъемлемого принципа. Наоборот, любая теоретическая модель физических явлений содержит, или должна содержать, точные законы сохранения, которые наблюдаются в экспериментах, с погрешностями, разумеется. Исключительная роль точных законов сохранения и даже само их существование в физических теориях связаны, по-видимому, с полной определённостью, однозначностью операций над элементами тех математических множеств, которые образуют математическую основу физических теорий. Не случайно, что ни одно из множеств, используемых в теории вероятностей, не было положено в основу квантовой теории даже после того, как концепция вероятности вошла в её схему, хотя совместимость вероятностной интерпретации в ней с выполнением точных законов сохранения и не получила должного анализа. Неясно, например, как совместить операцию инверсии или перестановок с концепцией вероятности. Являются ли несовместимыми вероятностная интерпретация и «вечный двигатель»? Probability probably hides perpetuum mobile, isn`t it?

Несовместимость законов сохранения с последним доказана теоремами Нётер на множестве с единственной и однозначной бинарной операцией, это множество называется группой [10,11]. Можно ли доказать совместимость вероятностной интерпретации с законами сохранения на других множествах? Можно ли доказать, наоборот, их несовместимость? Если, конечно, их аксиоматика не признается для этого достаточной. Доказательство последнего утверждения явно согласовало бы общепризнанные вероятностные законы квантовой механики с выполнением точных законов сохранения.

Существует ли вообще в квантовой механике какое-либо утверждение, несовместимое с вероятностной интерпретацией?

Таким образом, то обстоятельство, что множества, составляющие математическую основу и аксиоматику теории вероятности не используются в качестве основы построения квантовой механики несмотря на вероятностную интерпретацию волновой функции говорит о том, что выполнение точных законов сохранения в ней было бы невозможно.

Два множества, образующее гильбертово пространство, и образующее группы, отличаются друг от друга, а частности числом заданных в них бинарных операций, но при этом операции вполне определены и однозначны. Это обстоятельство не позволяет ожидать, что оба они могут стать основой для вероятностной интерпретации в квантовой механике. В то же время в отношении выполнения законов сохранения для множества, образующего группы, существуют теоремы Нётер, устанавливающие не только существование, но и взаимно-однозначное соответствие между законами сохранения и симметриями, содержащимися в группах. Утверждение, подобное теоремам Нётер для гильбертова пространства неизвестно, в противном случае одно из них было бы излишним.

Изложенное выше, особенно необходимость выполнения законов сохранения, приводит к необходимости искать ответ на вопрос о волнах, описываемых волновой функцией в квантовой механике, в теоретико-групповой схеме последней.

Чтобы внести ясность в вопрос в названии статьи, обратимся к тому обстоятельству, что физическая теория обязана включать выполнение всех точных законов сохранения, которые наблюдаются в экспериментах и математическим выражением которых являются теоремы Нётер. Эти теоремы устанавливают взаимно-однозначное соответствие между законами сохранения и симметриями в физических законах, средством реализации которых в теории является теория групп [11]. Поэтому квантовая теория с математической точки зрения должна быть представима как последовательная теория групп.

Для ответа, ограничиваясь рассмотрением стационарного одномерного уравнения Шредингера и следуя [12,13], перейдём от уравнения

$$\psi''(z) + k^2(z)\psi(z) = 0 \qquad (1)$$

к двум уравнениям первого порядка для функций $\Phi_\pm$, связанных с волновой функцией и ее производной равенствами

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

Эта пара уравнений может быть записана в матричной форме

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

(σ_1 и σ_3 - матрицы Паули) для столбца

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

с условиями в начальной точке z_0

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

Уравнение (3) является спинорным представлением уравнения Шредингера, оно позволяет использовать матричные представления групп для исследования трансформационных свойств пропагаторов решений, а также, согласно теоремам Нетер, при условии их теоретико-группового построения, законов сохранения [11].

Чтобы сравнить выводы теории с данными эксперимента, необходимо сконструировать измеримые величины, построенные из комплексных решений уравнения Шредингера.

Простая комбинаторика показывает, что на основе комплексных волновой функции и ее производной возможно построить только четыре действительные величины, в том числе и в начальной точке. Это - билинейные эрмитовы формы, определяемые либо двумя компонентами спинора, либо волновой функцией и ее производной вместе с им сопряженными. Здесь мы примем их в виде

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

где $\sigma_s(s=0,1,2,3)$ - матрицы Паули с единичной σ_0 включительно, они представляют собой базис любых матричных преобразований спинора. Используя спинор $\Phi(z)$ из (4) и эрмитово сопряженный $\Phi^+=\left\|\Phi_+^*,\Phi_-^*\right\|$, получим явный вид эрмитовых форм:

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

очевидно, что эрмитовы формы (7) удовлетворяют тождеству

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

содержащему все четыре величины j_s, оно выполняется везде и при любых условиях, и потому может рассматриваться как условие полноты системы эрмитовых форм (6) или (7). Эти эрмитовы формы могут быть также построены из волновой функции и её производной. Принимая во внимание соотношения (2), они выражаются в виде

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

совпадают с выражениями (7) и удовлетворяют тождеству (8).

Из уравнения Шредингера (1) или его спинорного представления (3) для эрмитовых форм j_s (9) или (7) следуют уравнения для изменений Δj_s (см. [12,13]), которые содержат все законы сохранения для j_s или их линейных комбинаций, отвечающие уравнению Шредингера в тех или иных процессах или состояниях . В свою очередь, тождество (8) устанавливает связь также и между этими изменениями наблюдаемых.

Для более полного представления о полноте наблюдаемых и её роли в квантовой механике рассмотрим тот же вопрос с другой стороны. Уравнение (1) является уравнением второго порядка на комплексных функциях, и потому требует задания в начальной точке двух независимых комплексных величин ψ и ψ', т.е. четырёх действительных. Из ψ и ψ' вместе с сопряжёнными могут быть построены четыре эрмитовы формы

$$\psi\psi^*,\ i\left(\psi\psi^{*'} - \psi'\psi^*\right),\ \psi'\psi^{*'} \text{ и } i\,(\psi\psi^{*'} + \psi'\psi^*).$$

Они являются линейными комбинациями величин j_s и могут играть роль наблюдаемых, удовлетворяющих условию полноты . Первые две из них используются в квантовой теории как плотность вероятности и её ток. Вторые две не рассматриваются, а потому в современных схемах квантовой теории отсутствует полная система наблюдаемых, это приводит к проблеме «скрытых параметров».

Между тем величины $j_{0,1,2,3}$ представляют собой давно известные параметры Стокса, удовлетворяющие тому же условию полноты (8). Классическая электродинамика включает их полную систему и не требует привлечения концепции вероятности.

Вполне очевидно, что недостающие наблюдаемые как-то себя проявляют в эксперименте и разумеется требуют теоретического объяснения. Но, поскольку система наблюдаемых неполна, то она требует какого-то своего восполнения. Роль такого восполняющего фактора возложена на вероятностную интерпретацию, очень удобную тем, что не содержит ни строгих предписаний, ни строгих запретов.

Интересно отметить ещё и следующее обстоятельство. Величины $\psi\psi^* = (j_0 + j_1)/(2k)$, $i(\psi\psi^{*'} - \psi'\psi^*) = j_3$ представляют собой две эрмитовы формы. Три величины j_1, j_2, j_3 образуют спин [14]. Поскольку полная система наблюдаемых состоит из четырёх параметров Стокса, то в обоих случаях требуется какое-то восполнение исключённых эрмитовых форм. В одном случае это приводит к вероятностной интерпретации, в другом – к спину («до конца ещё не понятому» [15]).

Для уяснения роли волновой функции в квантовой механике – решения уравнения Шредингера, рассмотрим роль её и её производной, или двух компонент спинора, являющихся линейной комбинацией предыдущих. Очевидно, что для уравнения второго порядка они равноправны. Например, в начальной точке должны быть заданы и ψ, и ψ', или Φ_+, Φ_-.

Выразим ψ и ψ' через параметры компонент спинора a, b, α, β.

$$\psi = \frac{k^{-1/2}}{\sqrt{2}}\left[ae^{-i\frac{\beta-\alpha}{2}} + be^{i\frac{\beta-\alpha}{2}}\right] = \\ = \frac{k^{-1/2}}{\sqrt{2}}\sqrt{b^2 + a^2 + 2ab\cos(\beta-\alpha)}\,e^{i\arctan\left[\frac{b-a}{b+a}\tan\frac{\beta-\alpha}{2}\right]}, \tag{10}$$

$$\psi' = i\frac{k^{1/2}}{\sqrt{2}}\left[ae^{-i\frac{\beta-\alpha}{2}} - be^{i\frac{\beta-\alpha}{2}}\right] = \\ = \frac{k^{1/2}}{\sqrt{2}}\sqrt{b^2 + a^2 - 2ab\cos(\beta-\alpha)}\,e^{i\left\{\arctan\left[\frac{b+a}{b-a}\tan\frac{\beta-\alpha}{2}\right] + \frac{\pi}{2}\right\}}. \tag{11}$$

Они зависят от трёх действительных параметров $a, b, (\beta - \alpha)$ в соответствии с тем, что спинор определён с точностью до фазового множителя, а также с тем, что группа преобразований решений спинорного представления уравнения Шредингера (3), являющаяся псевдоунитарной группой SU(1,1), – трёхпараметрическая. Выражения для ψ и ψ' необходимы оба, ни одно из них, по отдельности, не содержит полного набора всех наблюдаемых ни в начальной точке, ни в любой произвольной. Полная информация о решении содержится в ψ, ψ' или в Φ_+, Φ_-.

Приведённое рассмотрение вопроса о волновой функции приводит к выводу о том, что она одна не содержит замкнутого смысла, заключённого в ψ и ψ' вместе. Точнее, ψ вместе с ψ' обладают той же степенью полноты, которая содержится в начальных условиях задачи. При известной функции $k(z)$, разумеется.

Комплексные величины не являются наблюдаемыми, последние представимы действительными величинами, т.е. эрмитовыми формами. В [16] показано, что эрмитовы формы j_s, т.е. параметры Стокса, описывают пространственное поведение локализованного объекта. При этом кривизна и кручение, которыми задаётся произвольная линия в пространстве, выражаются через j_s, j_s', j_s'', на ней выполняются все законы сохранения, обусловленные уравнением Шредингера и потому она является траекторией частицы. Например, для свободной частицы с $k=const$ она представляет собой винтовую линию, радиус и шаг которой зависят от длины волны де Бройля. Волновые свойства частицы обусловлены винтообразным характером её траектории. Поэтому вопрос о субстанции, её волновом движении и его вероятностном характере отпадает благодаря включению в рассмотрение *полной* системы параметров Стокса.

Одна волновая функция содержит только часть информации о локальном объекте и его эволюции, она не может рассматриваться как объект, требующий какой-либо интерпретации. Содержа только некоторую часть информации об объекте, волновая функция нуждается в восполнении утраченной части, и эту роль выполняет вероятностная интерпретация волновой функции. «Волн вероятности» не существует, это понятие обусловлено исключением некоторых параметров Стокса из полной их системы в современных схемах квантовой теории.

Автор благодарен Е.Н. Мясникову за постоянный интерес к кругу изложенных вопросов и их обсуждение.

Список литературы:

1. Einstein A., Podolsky B., Rozen N. Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete?, Phys. Rev., v.47, p.777 (1935)
2. Mermin N.D. Hidden parameters and the two theorems of John Bell, Rev. Mod, Phys., v.65, p.803 (1993)
3. Хамермеш М. Теория групп, М., Мир (1966)
4. Желобенко Д.П., Штерн А.И. Представления групп Ли, М., Наука (1983)
5. Корн Г., Корн К. Справочник по математике, М., Наука (1968)
6. фон Нейман И. Математические основы квантовой механики, М., Мир (1965)
7. Гинзбург В.Л. Какие проблемы физики и астрофизики представляются сейчас особенно важными и интересными (тридцать лет спустя, причём уже на пороге XXI века)?, т. 169, с.419 (1999)
8. Вейль Г. Теория групп и квантовая механика, М., Наука (1986)
9. Фейнман Р., Хибс А. Квантовая механика и интегралы по траекториям, М., Мир (1968)
10. Холл М. Теория групп, М., ИИЛ (1962)
11. Олвер П. Приложения групп Ли к дифференциальным уравнениям, М., Мир (1989)
12. Лунин Н.В. «Квантовую механику не понимает никто». Почему? Инженерная физика, №8, с.45 (2015)
13. Nicolay V. Lunin The Stokes parameters in the group-theoretic scheme of quantum mechanics, In: Theory and Applications of Physical Science, vol.4, p.1-24 (2019)
14. Базь А.И., Зельдович Я.Б., Переломов А.М. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике, М., Наука (1971)

15. Окунь Л.Б. Физика элементарных частиц, М., Наука (1988)
16. Lunin N.V. Completeness of observables and particle trajectories in quantum mechanics, J. Rus. Laser Research, v.29, n.5, p.441 (2008)

WAVES OF WHAT SUBSTANCE DOES A WAVE FUNCTIONDESCRIBE IN QUANTUM MECHANICS?

Nicolay V. Lunin

Abstract. Properties of two sets used in a contemporary forms of quantum theory are analyzed from view point of probability concept and fulfillment of conservation laws compatibility in each of them. It is shown that single wave function, being a complex variable, can not contain all observable, consisting of four Stokes parameters for the Schroedinger equation.

Keywords: quantum mechanics, conservation laws, wave function, probability interpretation.