Очерк
о генетической связи уравнения Гамильтона-Якоби классической механики и уравнений квантовой механики
и о содержательном толковании волновой функции частиц

Новосадов Б. К.
ГЕОХИ РАН, г. Москва

Введение

С зарождением в физике квантовой теории неоднократно и на протяжении почти 100 лет предпринимались попытки понять смысл введенной Э. Шрёдингером в 1926 г. волновой функции. Блестящее подтверждение спектроскопических закономерностей с помощью неизвестно откуда появившегося на свет волнового уравнения обусловило всеобщее признание новой квантовой теории, пришедшей на смену первоначальной теории Н. Бора, 1913 г., однако, этот триумф сопровождался мучительным непониманием физического смысла введенной Шрёдингером ψ-функции. Именно оставленный без ответа вопрос об этом Н. Бора к Шрёдингеру заставил основателей квантовой механики В. Гейзенберга, В. Паули и всей Копенгагенской научной школы с недоверием относиться к теории Шрёдингера и задаться вопросом, что же означает и какую физику содержит волновая функция. Счастливая мысль М. Борна о статистической интерпретации волновой функции Шрёдингера умиротворила боевой копенгагенский дух молодых рыцарей квантовой революции и оттеснила борцов за причинность физических законов (А. Эйнштейна, Л. Де Бройля, М. Планка, самого Шрёдингера и ряда других ученых) с поля научных споров о природе квантовых законов. Тем не менее, приверженцы классической причинности в физике впоследствии не раз поднимали острую дискуссию об истинной природе и волнового уравнения, и подчиняющейся ему функции (Д. Бом, Де Бройль, В. А. Фок, Д. И. Блохинцев). Копенгагенское мировое соглашение о статистической природе законов квантовой механики признано физическим сообществом единственно приемлемым в современной физике и утверждено Нобелевским комитетом премией М. Борну за это философское достижение. Тлеющая лучина далекого научного спора была отнесена в уединенные кабинеты философов, где продолжает светить едва вспыхивающим светом неясной научной истины. Как и в далеком античном прошлом, наступило время схоластики и полного доверия большинства созданному в муках учению о квантах.

«Eppur si muove!» - воскликнул Г. Галилей после инквизиторского суда над планетарной моделью Н. Коперника. Квантовая механика обрела вековую традицию статистического толкования, и все-таки не сделать ли еще одну попытку и разобраться в истоках квантовой модели, чтобы понять, так что же такое это волновое уравнение Шрёдингера и каков физический смысл ψ-функции. Именно об этом идет речь в данном очерке.

1. Играет ли Бог в кости? (Эйнштейн)

Рожденная во время чумы 1662-1664 гг. физика И. Ньютона, соединила известные опытные факты (добытые прежде всего Гюйгенсом, Галилеем) и теории (Коперник, Кеплер) в уравнения механики, в которых изменение импульса тела во времени сопоставлено действию силы, о природе которой Ньютон предпочитает не гадать. То, что, к примеру, сила тяготения порождает поле тяготения, а не просто некую контактную, узко направленную силу, Ньютон не указывает специально, но в его открытии этой всемирной силы предзнаменуется введение в обиход физической науки понятия поля, как фундаментального образа Природы. Следом за Ньютоном силовая механика преобразована трудами Лапласа, Лагранжа, Гамильтона и др. в аналитическую механику, в которой из скалярных функций Лагранжа и Гамильтона дифференцированием получаются векторные образы механики Ньютона.

Наиважнейшим понятием явилась функция действия S Гамильтона и Якоби, частные производные от которой по координатам и времени дают импульс и энергию частицы. Оптико-механическая аналогия Гамильтона настолько близко подошла к будущей волновой теории частиц, что, кажется, росчерком пера могла быть впрок заготовлена волновая теория частиц, опережая драматический век будущих невероятных открытий теории электромагнитного поля, теории относительности и атомной физики. По существу, тем самым было введено «поле импульсов» [1, 2], и это еще до работ М. Фарадея и Дж. Максвелла, введших в обиход теории электричества понятие поля, как материальной сущности. Иными словами, волновая механика, появившись на свет, еще не заявила о себе высоким голосом рождения. Физики-механики держались на благоговейно-почтительном расстоянии от уравнений Гамильтона — Якоби, пока в 1923 г. Де Бройль, а в 1926 г. Шрёдингер в своих поисках волновой природы микрочастиц не обратили внимание на оптико-механическую аналогию, возбуждающую творческую интуицию в этом красном уголке теоретической механики. Эстетика этих уравнений заключается в том, что они являются уравнениями в частных производных, нетипичными для механики частиц, основанной Ньютоном на обыкновенных дифференциальных уравнениях. Вот эта полевая формулировка уравнений механики и привлекла Шрёдингера, который искал для своей квантовой механики уравнения с оператором Лапласа — главным оператором в задачах на собственные значения в теории сплошной среды. Примерами служат объемные музыкальные инструменты, звуки которых суть собственные значения частот колебаний натянутых струн, мембран барабанов и заключенных в трубах объемов воздуха. Шрёдингер хорошо знал математическую физику этих резонансных систем, поэтому и поставил своей целью найти аналогичное уравнение, описывающее волновые движения частиц в атоме. С точки зрения математики другого адекватного аппарата не должно было быть, и спектры частот колебаний механических макросистем и атомных микросистем получаются при решении краевых задач похожих уравнений. Введение понятия импульса электромагнитного поля и связи его с длиной волны побудило Де Бройля предположить аналогичное волновое соотношение для микрочастицы: $p = \frac{h}{\lambda}$. Дэвиссон и Джермер в опытах по рассеянию электронов в кристаллах экспериментально подтвердили соотношение Де Бройля. Зоркий Эйнштейн своей короткой заметкой обратил внимание Шрёдингера на диссертацию Де Бройля. Началась погоня за неуловимой сущностью при сопровождающем скепсисе и отрицании волн гетингенской группы под руководством М. Борна: В. Гейзенберга, П. Иордана и критически настроенного В. Паули. В 1925 г. была оформлена матричная парадигма квантовой механики, в которой были введены матричные элементы дипольных моментов переходов между квантовыми состояниями. Было открыто перестановочное соотношение между координатой и импульсом частицы. М. Борн после сокрушался, что группа не догадалась записать аналогичное соотношение для энергии и времени, тогда они первыми сообразили бы записать дифференциальное уравнение на собственные значения энергии атомных систем. Но руководящий принцип был в руках австрийца Э. Шрёдингера, и несколько высокомерное отношение гетингенцев к волновым представлениям в теории микромира не дало им в руки главный самородок золотой лихорадки квантового прииска.

Однако, метод поиска Шрёдингера сопровождался привлечением ряда гипотез и скорее напоминал священнодействие, чем безупречную логическую нить рассуждений. В данном очерке мы попытаемся соединить теорию Гамильтона — Якоби с утвердившей себя в физике логикой квантово-полевых представлений. В итоге статистическая интерпретация волновой функции уступит естественному физическому смыслу шрёдингеровской характеристической функции, а трактовка Борна останется удобной сопровождающей аналогией с вероятностным описанием местонахождения элементарных частиц в атоме. Тем самым, сарказм Эйнштейна «играет ли Бог в кости» в явлениях микромира, получит удовлетворительную логику причинного поведения атомных систем.

2. От классических траекторий частиц к полю импульсов и волновой механике частиц

Классическая электродинамика Максвелла — Лоренца изучает свойства электромагнитных полей с помощью волнового уравнения, в котором координаты и время являются независимыми переменными для векторов напряженности электрического поля **E** и магнитной индукции **D**. Вид волнового уравнения электродинамики относится к гиперболическому типу согласно классификации типов дифференциальных уравнений в частных производных 2-го порядка. В конце XIX в. физиками был поставлен вопрос об инвариантности волнового уравнения по отношению к равномерно движущейся системе координат. Фогтом (1887 г.) и далее Лоренцом, Пуанкаре и Эйнштейном (1905-06 гг.) были заложены основы специальной теории относительности, в которой установлены преобразования координат и времени (!), не нарушающие вида волнового уравнения. По следам этих исследований Минковский в 1908 г. ввел 4-мерную геометрию мира в пространстве трех координат и времени. В результате инвариантность уравнений Максвелла — Лоренца была отнесена к вращению в 4-мерном пространстве-времени Минковского. Энергия и импульс частицы в релятивистской механике также оказались связанными 4-мерным представлением и было получено фундаментальное соотношение

$$\frac{E^2}{c^2} = p^2 + m^2c^2, \tag{1}$$

где E и $\mathbf{p}$ — энергия и импульс частицы, m — масса покоя частицы. То, что это релятивистское соотношение — не выдумка теоретиков, получило убедительное доказательство на практике: испытано атомное оружие, работают атомные электростанции и ускорители элементарных частиц. Именно соотношение (1) первоначально использовал Шрёдингер для создания своего волнового уравнения, но был разочарован численным несовпадением вычисленных мультиплетов спектра атома водорода с экспериментальными спектральными линиями. Тогда Шрёдингер обратился к нерелятивистскому соотношению энергии и импульса электрона и придумал дифференциальное уравнение в частных производных, решения которого дали спектр, прекрасно согласующийся с серией Бальмера.

На самом деле, была создана квантовая теория в другом масштабе энергий, существенно меньшем, чем энергия покоя частицы. Этот масштаб вводится простым соотношением

$$E = mc^2 + \varepsilon, \tag{2}$$

где $|\varepsilon| \ll mc^2$. Подставляя это соотношение в (1), получим выражение кинетической энергии свободной частицы в нерелятивистском приближении

$$\varepsilon = \frac{p^2}{2m}. \tag{3}$$

В таком виде это соотношение было получено Гамильтоном и использовано для перехода к полевому представлению классической механики материальных точек (частиц). Гамильтон ввел конфигурационное пространство координат и импульсов частиц, в котором определил свою характеристическую функцию H

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(r). \tag{4}$$

Впоследствии эту функцию стали называть гамильтонианом. Уравнения Ньютона получаются дифференцированием гамильтониана по координатам и по импульсу. Импульс является векторной величиной и при всевозможных начальных условиях движения частицы импульс заполняет целое пространство — поле импульсов, потенциал которого в виде некоторой скалярной функции, названной Гамильтоном действием S, определяет поле импульсов как градиент функции действия

$$\vec{p} = \nabla S, \tag{5}$$

соответственно энергия определяется как частная производная по времени

$$E = \frac{\partial S}{\partial t}. \tag{6}$$

Подстановкой этих производных в функцию Гамильтона Якоби получил по существу полевое уравнение характеристик, которое носит название уравнения Гамильтона — Якоби

$$\frac{\partial S}{\partial t} = H(\nabla S, r, t). \tag{7}$$

Уравнения Гамильтона — Якоби для частицы, скорость которой близка к скорости света, записываются на основе соотношения (1)

$$\left(\frac{\partial S}{c\partial t}\right)^2 = (\nabla S)^2 + m^2c^2. \tag{8}$$

В чем сказалась неудача Шрёдингера при формировании волнового уравнения на основе релятивистского уравнения Гамильтона — Якоби (8)? В соотношении (1) не учтен опыт Штерна — Герлаха по расщеплению пучка одновалентных атомов в неоднородном магнитном поле, который показал, что у электрона имеется дополнительная внутренняя степень свободы, приводящая к существованию двух вырожденных по энергии дискретных состояний свободного электрона. В то же время уравнение (1) относительно энергии имеет всего один положительный корень, и никакого вырождения состояний электрона не описывает. Стало быть, адекватная математическая модель получается, если возвести в квадрат соотношение (1), тогда в качестве исходного соотношения для электрона может быть использовано следующее

$$\left(\frac{E^2}{c^2} - p^2 - m^2c^2\right)^2 = 0. \qquad (9)$$

Данное уравнение имеет два вырожденных положительных корня для энергии электрона, а также два лишних отрицательных корня, которые не имеют физического смысла, а исполняют алгебраическую функцию сопряженных корней в записи соотношения между энергий и импульсом частицы в виде рационального выражения. Уравнение Гамильтона - Якоби на основе соотношения (9) оказывается дифференциальным уравнением первого порядка 4-ой степени производных по координатам и времени пространства Минковского. Оно описывает характеристики некоторой системы линейных уравнений по первым производным. В случае свободной частицы, когда импульс сохраняется и является просто числом, соотношение (9) может рассматриваться как определитель матрицы однородной части системы линейных уравнений. Порядок системы равен четырем. Можно поставить задачу так: мы ищем матрицу системы уравнений с определителем (9). Поскольку импульс является векторной величиной, то в искомой матрице элементами будут декартовы проекции импульса, которые можно компактно выразить в виде субматриц Паули второго порядка, которые геометрически выражают клиффордовы проекции импульса на винтовые декартовы оси координат. Имеем

$$\vec{\sigma}\vec{p} = \begin{pmatrix} p_z & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & -p_z \end{pmatrix}. \qquad (10)$$

Искомая матрица 4-го порядка с определителем (9) может быть задана с помощью субматриц Паули в следующем виде

$$D = \begin{pmatrix} mcI_2 - \frac{E}{c}I_2 & \vec{\sigma}\vec{p} \\ \vec{\sigma}\vec{p} & -mcI_2 - \frac{E}{c}I_2 \end{pmatrix}, \qquad (11)$$

где I_2- единичная матрица 2-го порядка.

Однородная система уравнений 4-го порядка относительно вектора с 4-мя компонентами запишется в виде

$$Dc = 0. \qquad (12)$$

Собственно говоря, пока в уравнении представлена кинематическая часть, а магнитный момент электрона должен проявиться во взаимодействии с электромагнитным полем. Но как видно из матрицы уравнения, магнитный момент может войти только в выражение для потенциальной энергии частицы.

Удивительным свойством матрицы Дирака является появление как бы ниоткуда магнитного момента электрона, хотя при выводе уравнения этот момент в него не закладывался, а проявился в процессе решения уравнения Дирака для атома водорода. Отметим, что модель электрона в квантовой механике остается материальной точкой, оснащенной зарядом. Загадка интерпретации спина как носителя магнитных свойств частиц связана с особенностями кинематики микрочастиц, поскольку вне проекции импульса частицы на клиффордовы оси координат и вне движения частицы это свойство физически себя не проявляет. С другой стороны, наличие нескольких спиновых проекций создает впечатление, что следует ввести несколько функций действия, как будто одновременно у электрона измеряется несколько импульсов, что вряд ли можно принять в качестве адекватной математической модели, поэтому мы полагаем действие скалярной функцией, тогда импульс частицы определяется классическим градиентом функции действия.

Итак, кроме скалярного уравнения (9) существует матричная форма классических уравнений Гамильтона — Якоби, в которых обнаруживается клиффордова проекция импульсов на винтовые оси координат, орты которых задаются матрицей Паули $\vec{\sigma}$.

Система линейных уравнений первого порядка по производным (12) преобразуется к однородной системе дифференциальных уравнений с помощью введения характеристической функции Шрёдингера —ψ-функции:

$$S = a ln\psi. \tag{13}$$

Смысл ψ-функции состоит в том, что она описывает характеристическое распределение функции действия частицы в пространстве-времени

$$\psi = e^{\frac{S}{a}}. \tag{14}$$

С ее помощью получим операторное представление импульса и энергии свободной частицы

$$\vec{p} = \nabla S = a\frac{\nabla\psi}{\psi},\ \ E = \frac{\partial S}{\partial t} = a\frac{\partial\psi}{\psi\partial t}. \tag{15}$$

Однородная система 4-го порядка имеет вид:

$$\begin{pmatrix} mc\psi I_2 - a\frac{\partial\psi}{c\partial t}I_2 & \vec{\sigma}\nabla\psi \\ a\vec{\sigma}\nabla\psi & -mc\psi I_2 - a\frac{\partial\psi}{c\partial t}I_2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = 0. \tag{16}$$

Мы получили классические уравнения Гамильтона — Якоби для характеристики действия (14) в релятивистской матричной форме, которая переходит в релятивистскую систему уравнений Дирака, если ввести спинорные функции (двухкомпонентные столбцы)

$$\psi_1 = \psi c_1,\ \ \psi_2 = \psi c_2. \tag{17}$$

Нормируемость функции ψвозможна при условии

$$Real\frac{S}{a} \leqslant 0 \text{ или } \frac{S}{a} = Im.$$

Поскольку знак вещественной функции действия нельзя с определенностью установить, то и знак константы в первом условии неопределенен, второе условие приводит к мнимому значению константы, которая может быть выбрана после сравнения спектра уравнения с экспериментальным спектром для атома водорода в виде постоянной Планка, умноженной на мнимую единицу: $a = i\hbar$.

В результате установлена генетическая связь уравнения Гамильтона — Якоби и волнового уравнения Дирака. Компоненты спинора Дирака отвечают спинорному представлению характеристики функции действия и ее распределению в пространстве-времени.

Поскольку при формулировании уравнения Дирака мы не использовали понятий и определений теории вероятностей, то есть не подсчитывали число событий определенного вида и не постулировали знакоположительности спинорных функций-компонент, то физический смысл спинорной функции связан с функцией действия частицы и ее распределением в пространстве-времени. Наиболее значимые по величине области этой функции отвечают за наиболее вероятное обнаружение частицы в объеме квантовой системы. Именно с этой аналогией следует увязать представление М. Борна о статистической интерпретации ψ-функции. Из нашего рассмотрения очевидна условность вероятностной трактовки распределения характеристической функции действия. Волновая функция не есть вероятность по своему происхождению и определению, а является, еще раз подчеркнем, характеристической функцией действия, позволяющей представить исходное уравнение Гамильтона — Якоби в виде системы однородных уравнений для компонент спинора.

Переход к нерелятивистскому масштабу энергии (2) приводит к оригинальному нерелятивистскому волновому уравнению Шрёдингера с интерпретацией волновой функции как распределения характеристической функции действия с двукратным вырождением по энергии.

Характеристическое распределение нормируется к 1, если спектр $\varepsilon < 0$, или к δ-функции Дирака, если $\varepsilon > 0$.

Источником дуализма «волна-частица» является переменчивый характер распределения: если оно δ-образно, то мы получаем характерные для частиц траектории; при функциональном распределении действия в пространстве квантовой системы мы обнаруживаем волновой характер поведения микрочастиц. Наконец, укажем на характер наблюдений за механикой частиц [3]. Классический тип наблюдений состоит в освещении объекта и фиксации его перемещений, при этом используется вся совокупность собственных частот объекта, тогда мы получаем классическую функцию действия. При резонансном типе эксперимента функция (14) с классической функцией действия в экспоненте разлагается в ряд Фурье по собственными квантовым частотам и наблюдаются резонансные переходы между существующими квантовыми состояниями.

Литература

1. Аржаных И. С. Поле импульсов. Ташкент: Наука. 1965. 231 с.

2. Гольденблат И. И., Ульянов С. В. Введение в теорию относительности и ее приложения к новой технике. М.: Наука. Гл. Ред. Физматлит. 1979. 272 с.

3. Новосадов Б. К. Методы математической физики молекулярных систем. М.: ЛИБРОКОМ. 2018. 384 с.