

# Принцип Дополнительности и Проективность Познания

Юрий Магаршак  
MathTech, Inc. (New York, USA)

Лев Грибов  
Институт Геохимии РАН (Москва, Россия)

## ABSTRACT

Со времени споров между Эйнштейном и Бором на сольвеевских конгрессах, проходивших три четверти века назад, считается, что неправ был Эйнштейн а квантовая механика является “окончательным объяснением атомной структуры”. Однако новые результаты, в частности: невозможность предсказания на основе уравнения Шредингера брутто формул и геометрических структур молекул несмотря на мощный прогресс вычислительной техники; многочисленные структуры и симметрии как в атомах и молекулах, так и возникающие на более высоких уровнях взаимодействия атомов, которые *ab initio* предсказать также не удастся; вынужденное чрезмерное упрощение представлений о функционировании биомолекул, которые в свою очередь диктуются необходимостью использования модельных подходов при попытке решения задач молекулярной биологии – и другие вновь сделали актуальным вопрос о том, не является ли квантовая механика частью более общей теории, и не требует ли Шерингеровская модель атома уточнения.

\*\*\*

Начнём с напоминания некоторых высказываний:

1. “Я не считаю метод квантовой механики в принципе удовлетворительным. Однако в то же время я хочу заметить, что никоим образом не собираюсь отрицать того, что эта теория представляет выдающийся, в известном смысле даже окончательный, шаг в физическом познании. Мне представляется, что эта теория будет содержаться в более поздней примерно так, как геометрическая оптика в волновой оптике: связи останутся, но основа будет развита и, соответственно, заменена более широкой.

Albert Einstein 1948г. [1]

2. Своеобразие современной ситуации в квантовой механике состоит, по моему, в том, что сомнениям подвергается не математический аппарат теории, а физическая интерпретация ее утверждений.

Albert Einstein 1953г. [2]

Со времени создания Ньютоновой Механики, а затем теории относительности и квантовой механики, концептуально фундаментальная картина мира, управляемого иерархией законов природы таким образом, что происходящее на более высоких уровнях организации вещества определяется законами, существующими на более низких уровнях, не вызывает сомнений. Валентность, проявляющаяся при взаимодействии атомов, определяется теорией атома; формулы химических соединений и изомеры определяются теорией валентности; комплементарность генов и функционирование ферментов определяется химическими свойствами веществ и так далее по иерархии вплоть до живой клетки, физиологии человека и функционирования мозга. На практике, однако, “глядя” из состояния современной науки на сегодняшний день – не той или иной науки: физики, химии, биологии, а Науки в целом – ситуация совершенно иная. Вместо цельной картины мира имеются “острова знаний”, “глядя” из которых представления о том, каким образом устроен мир, разнятся разительно.

**ГЛЯДЯ ИЗ ФИЗИКИ** не вызывает сомнений, что мир управляется законами квантовой механики и теорией атома. Уравнение Шрёдингера [3]

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}, t) - E_p(\vec{r}) \Psi(\vec{r}, t) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) \quad (1)$$

связывающее энергию частицы с пространственным распределением амплитуды вероятности, было, которое выведено в 1925 году “в качестве **окончательного объяснения атомной структуры** с помощью представлений о волновой функции, играет в квантовой механике такую же важную роль, как уравнение второго закона Ньютона в классической механике”<sup>1</sup>. Развитые в 30-ых годах 20 века Полингом на основе квантовой теории атома представления о валентности [4] постулируют природу валентной связи как способность атомов отдавать или присоединять электроны – или (если пользоваться квантовомеханической терминологией) «смешивать» АО волновые функции, которые им соответствуют. В ионных связях валентность атомов определяется числом присоединенных или отданных электронов (волновых функций, практически полностью отданных одним атомом другому). В соединениях с ковалентными связями валентность атомов определяется числом образовавшихся «общих» электронных пар (волновых функций, практически принадлежащих обоим атомам). Эти два процесса – согласно модели Полинга – ответственны за образование всех химических веществ, включая ферменты и другие биологически активные вещества. За прошедшие со времени создания теории валентности три четверти века теория валентности была пополнена такими представлениями, как степень окисления и координационное число, но в целом, концептуально осталась без изменения.

“Глядя из физики” тот факт, что на сегодняшний день исходя из уравнения Шрёдингера общего «электронно-ядерного» вида предсказать уже для 30-40 атомной системы брутто-формулу молекулы, которые образуются в результате химических реакций, а по уже имеющейся брутто-формуле структуру конкретного изомера молекулы не удастся почти никогда. Тем не менее, эти и другие трудности считаются временными. Рано или поздно, когда мощность компьютеров увеличится на десять – или сто десять – порядков все будет рассчитано и показано – таково доминирующее мнение. Фундаментальность вселенной *глядя из физики* не вызывает ни малейших сомнений.

Чтобы в дальнейшем не было непонимания нашей точки зрения, будем исходить из определения Науки как такой совокупности знаний и умений, которая позволяет сделать логически прогноз развития события, исходя из некоторых, по возможности, немногих исходных посылок.

**ГЛЯДЯ ИЗ ХИМИИ** картина мира совершенно иная.

1. Известно, что любой молекулярный объект с заданной структурной формулой может существовать в форме громадного числа структурных изомеров. Так, соединение  $C_6H_6$  существует в форме бензола, призмана, бициклопропена и ещё нескольких десятков конфигураций. Для 30-40 атомных объектов число реально возможных стабильных структур может составлять сотни тысяч и миллионы. В гамильтониане, однако этот факт отражения не находит. Задание уравнения Шрёдингера  $\hat{H}_{эя} \psi_{эя} = E_{эя} \psi_{эя}$  не фиксирует проблему и не делает постановку задачи определённой. Просматривается аналогия с некорректно поставленными задачами, математическая определённость которых достигается лишь при наложении дополнительных условий таких, например, как близость к некоторому наперед заданному состоянию [5].

2. Объектом молекулярной физики являются электроны, движущиеся в поле движущихся атомных ядер. Возможность разделения переменных в этой задаче соответствует адиабатическому приближению, которое является модельным подходом, область применения которого весьма

<sup>1</sup> Уравнение Шрёдингера. Википедия\_Свободная Энциклопедия. 2007 год.

ограничена. Тот факт, что адиабатическое приближение, позволяющее применять уравнение Шредингера, используется повсеместно, связан с невозможностью на практике решать электронно-ядерную задачу без разделения переменных на ядерные и электронные, а вовсе не с тем, что такое решение является адекватным проблеме или вообще применимо [6].

3. Хотя решение чисто электронной задачи на основе фундаментальных взаимодействий возможно при любом относительном расположении ядер в пределах наложенных ограничений, при этом, однако, каждому фиксированному относительному расположению ядер (например, соответствующему молекуле бензола) отвечает своё уравнение Шредингера. Варьируя расположения ядер можно построить по точкам электронные термы. Однако отсутствует уравнение Шредингера с стационарным оператором  $\hat{H}_{эя}$  для электронно-ядерной задачи с неразделенными переменными, решение которого привело бы к тому же результату, что и в случае разделения переменных [5,6].

4. Рассмотрим теперь, в какой связи в химии и молекулярной физике находится подход *ab initio*, основанный на уравнении Шредингера (с базисами STO-3G, 3-21G, 6-21G, 4-31G и др.), и матричные полуэмпирические подходы (MNDO, INDO, AM1 и т.д.). Гайзенберговский (матричный) и Шредингеровский (операторный) подходы по умолчанию и в физике, и в химии, и в биологии, и в *material science* считаются эквивалентными, а их эквивалентность доказанной. Однако указанная эквивалентность имеет место только там, где возможен переход от операторного уравнения и матричному. Обратное верно далеко не всегда. Запись гамильтониана требует задания потенциальной функции. Например, при построении энергетической матрицы методом Ритца можно вычислить все необходимые матричные элементы. Но, если изначально ставить задачу, формулируя на основе тех или иных соображений энергетическую матрицу (так и поступают в квантовой химии при использовании так называемых полуэмпирических методов, а также в молекулярной биологии, энзимологии, при создании методов расчета биомолекул с помощью молекулярной динамики и многих других областях), то перейти от такой матрицы к гамильтониону уже невозможно: потенциал «скрыт» в матричном элементе и выделить его, зная только величину матричного элемента, нельзя. Сказанное можно записать в терминах логических операций  $\hat{H} \rightarrow H$ , но  $H \not\rightarrow \hat{H}$ . Здесь стрелкой обозначена операция импликации: из *A* следует *B*. Более подробно проблема моделирования в химии *ab initio* (основанного на операторном подходе Шредингера) и методами, называемыми полуэмпирическими, рассмотрена в работе [6]. Однако даже из кратких соображений, приведенных в этом параграфе, ясно, что **при решении практических задач квантовой химии матричный и операторный формализмы не эквивалентны в смысле постановки задачи**. Вселенная “глядя из химии” является нефундаментальной, поскольку химические реакции и структуры химических веществ определяются фундаментальными законами физики лишь отчасти: эмпирика и полуэмпирика, из законов физики не вытекающая, также играют в ней “фундаментальную” роль.

**« ГЛЯДЯ » ИЗ ХИМИИ НА БИОЛОГИЮ.** « Глядя » из химии на физику, « сверху вниз » по иерархии структур материи, полуэмпирическая картина мира не вызывает сомнений: физики могут говорить все, что угодно, но они не могут привести никаких доказательств того, что мир молекул и взаимодействий между молекулами фундаментально устроен. Однако такая полуэмпирическая картина представляется совершенно абсурдной при “взгляде из химии” вверх по иерархии организации материи – на биологические структуры.

Предположение, что биологические структуры, образуются сами собой, в результате удачного подбора эмпирических параметров, что живые организмы, образованные из биомолекул, функционируют благодаря условиям среды, локально возникающим при синтезе каждой из множества биомолекул, одновременно синтезируемых в любом живом организме – представляется абсолютно абсурдным любому ученому независимо от области его экспертизы. В приложении к системам *in vivo* – от функционирования ДНК до живых организмов – эмпиризм представляется примитивным и абсолютно бесперспективным. Если фундаментальное представление о вселенной

в принципе дает надежду на возможность объяснения структурирования материи *in vivo*, поддержания этого структурирования вдали от состояния равновесия и рост этого структурирования в развивающихся организмах, то эмпирическая вселенная “глядя из химии” объяснить функционирование биологических структур – от ферментов до человека – не может даже гипотетически.

Возникающее таким образом противоречие при « *взгляде* » из химии « *вниз* » на физику и « *взгляде* » из химии « *вверх* » на биологические структуры, кажущееся неразрешимым, требует объяснения.

**ГЛЯДЯ ИЗ БИОЛОГИИ.** Биологические структуры настолько разнообразны и их функционирование регулируется настолько эффективно и многоуровнево, что утверждение, будто это функционирование происходит в результате удачно сложившегося набора внешних условий (как в химии) представляется нелепым. Предположение что жесткие законы, управляющие биохимическими и молекулярно биологическими системами (комплементарность ДНК, аминокислотный состав белков, липидный состав мембран, и множество других) возникли на основе отсутствия закономерностей на нижних уровнях организации, также представляется нонсенсом. В большинстве случаев функционирование биологически активных молекул описывается с помощью метода молекулярной динамики, основанного на эргодической гипотезе, согласно которой усреднение по статистическому ансамблю и среднее по времени равны. В качестве обоснования справедливости такого свехупрощения в применении к биологии часто ссылаются на высказывание Ричарда Фейнмана "everything that living things do can be understood in terms of the jiggling and wiggling of atoms [7]. С “индугльгенцией” Фейнмана на использование для описания явлений, происходящих в живой природе, классических механистических представлений и с “символом веры” в универсальность эргодической гипотезы для всех или почти всех биологических процессов, Molecular Dynamics крайне ограничивают возможные объяснения процессов *in vivo*. Например, в случае ферментов такой механистический подход (помимо стерического соответствия называемого ключ-замок) сводятся к электростатике и второму закону Ньютона, “jiggling and wiggling of atoms”, не более. При этом по умолчанию предполагается, что получающиеся таким образом матрицы являются матрицами Гайзенберга, выведенными из некоего операторного уравнения Шредингера, которое в принципе может быть написано и решено. Однако подобное квантово-механическое обоснование механистического эмпиризма в применении к фундаментальным биологическим процессам, таким, как активность ферментов и функционирование макромолекулярных комплексов, не только безосновательно и бездоказательно, но и неверно: как было показано в [6] и отмечено выше, уравнение Шредингера, соответствующее Гайзенберговским матрицам (к которым, также по умолчанию, относят матрицы эмпирически подобранных потенциалов межатомных взаимодействий), можно написать далеко не всегда. Предположение о том, что в основной функционирования таких заведомо неадиабатических и неэргодичных систем, как живая клетка и человек, являются адиабатически функционирующие биологические молекулы, представляется наивным и странным. Кроме того, к неадиабатическим задачам биологии подход *ab initio* (если можно так выразиться) еще менее применим, чем к неадиабатическим задачам химии <sup>2</sup>. Не вызывает сомнения, что трактовка “индугльгенций” Фейнмана в применении к биомолекулам оказалась чрезмерно широко понятой.

---

<sup>2</sup> В связи с вышесказанным полезно обратить внимание на термин: неадиабатический. На первый взгляд неадиабатическим является процесс, в котором не соблюдаются условия адиабатичности. На самом же деле, в термине *неадиабатический* содержится двойное отрицание. Исходным термином являлся *диабатический* процесс, то есть такой, в котором система обменивается энергией с окружающей средой.

Микроскопического равновесия, являющегося основой классической термодинамики, в этом случае как правило не наблюдается, *A*-диабатический процесс (где *a* – отрицание), стало быть, не обменивается энергией с окружающей средой, *не-а*-диабатический снова обменивается. Почему неадиабатический процесс на незван *диабатическим*? Очевидно для того, чтобы подчеркнуть, что наиболее распространенными в природе являются *a*-диабатические процессы, в то время как *не-а*-диабатичность всего лишь экзотика. В

**НЕОБХОДИМОСТЬ ОБЪЯСНЕНИЯ ВОЗНИКНОВЕНИЯ СИММЕТРИЙ В ХИМИИ, БИОЛОГИИ И ФИЗИКЕ ТВЕРДОГО ТЕЛА.** В *дискуссиях между Эйнштейном и Бором* (в которых на самом деле с Эйнштейном дискутировал не только Бор, а многие участники Сольвеевских Конгрессов [8] ) спор шел (говоря обобщенно) вокруг таких фундаментальных вопросов, как физическая реальность и ее интерпретация [9,10]. Как представляется, сегодня, три четверти века спустя, сомнения (а) в полноте и (б) в “окончателности” квантовой механики, о которых писал Эйнштейн, должны быть дополнены (с) необходимостью объяснить возникновение многочисленных симметрий и структур в химии, биологии и физике твердого тела. Симметризирующие механизмы, порождаемые уравнением Шредингера и представлениями о валентности, восходящими к Полингу, явно недостаточны для объяснения симметрий и структур, образующих и неорганические молекулы, и кристаллы, и процессы *in vivo*. Неудача многочисленных попыток их объяснения не случайна.

**ВОЗМОЖНЫЕ ПУТИ РАЗРЕШЕНИЯ ПРОТИВОРЕЧИЯ В ПРЕДСТАВЛЕНИИ О ВСЕЛЕННОЙ, ВОЗНИКАЮЩЕГО « ГЛЯДЯ ИЗ ХИМИИ НА ФИЗИКУ » И « ГЛЯДЯ ИЗ ХИМИИ НА БИОЛОГИЮ ».** Рассуждая логически, их три.

- I. Существуют неизвестные в настоящее время законы природы, которые проявляются при взаимодействии атомов, то есть в масштабах ангстремов<sup>3</sup>.
- II. Существует “витальное поле” (или “витальные силы”), которые не влияют на химические реакции, а действуют *in vivo* и только *in vivo*.
- III. Теория атома в ее нынешнем виде требует уточнения.

С точки зрения современной науки, интерес представляют первая и третья возможности. В спорах с Бором – и до конца своей жизни – Эйнштейн придерживался точки зрения, что на смену квантовой механике должна прийти более общая теория, в основе которой лежит квантовая теория поля. “Разумная общая релятивистская теория поля, возможно, могла бы дать ключ к более совершенной квантовой теории. Это – скромная надежда, но никак не убеждение. Имеются веские аргументы против мнения, что описание реальности, основанное на дифференциальных уравнениях (теория поля) может, вообще говоря, согласоваться с атомистическим характером реальности. Однако эти соображения, насколько я могу судить, не являются обязательными, и у нас до сих пор вообще нет никакого другого пути для формулировки общерелятивистских законов” [10]. В настоящее время есть смысл вернуться к постановке проблемы в той форме, в какой она была сформулирована Эйнштейном. Однако до создания теории, которая *ab initio* объясняла бы возникновение симметрий и структур в химии, физике твердого тела и биологии, а при определенных условиях переходила бы в квантовую механику подобно тому, как квантовая механика переходит в классическую, повидимому, еще далеко.

---

действительности, однако, это несомненно не так. И если в химии адиабатичность процессов является во многих случаях разумным приближением к требуемому решению, то в биологии, где все системы находятся в состоянии, далеко от равновесия, предположение об адиабатичности (равно как и о микроскопическом равновесии) равно как и методы математического анализа биологических процессов, в которых постулирована адиабатичность, должны быть обоснованы в каждом конкретном случае. Как правило, этого не происходит.

<sup>3</sup> Само по себе существование поля, которое действует не во всех масштабах, а в том или ином диапазоне расстояний между частицами, не противоречит физическим представлениям. Напомним, что, например, поле сильных взаимодействий оказывается эффективным при расстоянии между элементарными частицами порядка размеров атомного ядра.

### Литература.

1. Albert Einstein, *Quanten-Mechanik und Wirklichkeit*, Dialectica, II, 320-323 (1948)
2. Albert Einstein, *Elementare Überlegungen zur Interpretation der Grundlagen der Quanten-Mechanik*, В сб. "Scientific Papers, presented to Max Born", Edinburgh: Oliver & Boyd, 33-40 (1953)
3. E. Schrödinger, *Annalen der Physik*. Leipzig **79**, 361 (1926)
4. I. L. Pauling, *The Nature of the Chemical Bond and the Structure of Molecules and Crystals: An Introduction to Modern Structural Chemistry* (Cornell Univ. Press, Ithaca, 1939)
5. Gribov L.A. *Russian J. of Phys. Chem.*, 2005, v.79, N4, pp. 688-692.
6. L.A.Gribov Y.B..Magarshak *To the Problem of Formulation of Basic Principles in the Theory of the Molecular Structure and Dynamics* J.New and Old Ideas in Physics, to appear
7. Richard Feynman, "Lectures on Physics" 1: 3-6 (1963).
8. Бор Н. Избранные научные труды, т.2, М. Наука, 1971.
9. A.Einstein, B. Podolsky and N. Rosen: *Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality be considered complete?*, *Phys.Rev.* 47, 777-780 (1935)].
10. Albert Einstein, *Einleitende Bemerkungen über Grundbegriffe*. В сборнике «Louis de Broglie, physicien et penseur» Paris 4-14 (1953)