

УДК 530.1

ПРОБЛЕМА НЕОБРАТИМОСТИ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

О. Д. Чернавская, Д. С. Чернавский

Рассматривается проблема необратимости и роста энтропии в квантовой механике на основе анализа параметрической (структурной) неустойчивости. В классической механике причиной необратимости является глобальная неустойчивость систем типа бильярда Больцмана–Синяя. В квантовой механике, согласно теореме Вигнера, решения динамически устойчивы. В данной работе показано, что в структурно-неустойчивых квантовых системах энтропия возрастает за счет исчезновения недиагональных членов матрицы плотности.

Квантовая механика основана на двух постулатах. Первым постулатом является уравнение Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi, \quad (1)$$

где \hbar – постоянная Планка и \hat{H} – оператор Гамильтона, Ψ – волновая функция системы.

Второй постулат представляет собой плотность вероятности обнаружить частицу в заданной точке x :

$$\tilde{\Psi}(x) \Psi(x) = \rho(x); \quad (2)$$

здесь тильда означает комплексное сопряжение.

Известно, что эти постулаты в рамках современной квантовой механики несовместимы [1]. Дело в том, что при фиксации частицы волновая функция стягивается в точку, то есть плотность вероятности $\rho(x)$ превращается в δ -функцию:

$$|\Psi^{(2)}(x)| = \rho(x) \longrightarrow \delta(x). \quad (3)$$

Этот процесс называется *редукцией пакета*.

Известно, что редукция пакета не может быть описана в рамках уравнения Шредингера (1), даже если в гамильтониан включить всю систему вместе с измерительным прибором ([2]). Эта проблема известна как "парадокс измерения". Суть дела в том, что редукция пакета – процесс, необратимый во времени; энтропия в течение этого процесса возрастает. В то же время уравнение Шредингера является гамильтоновой системой и, следовательно, описывает только обратимые во времени процессы.

При изложении основ квантовой механики обычно говорят, что измерительный прибор – система классическая и квантовой механикой не описывается. Встает вопрос: при каких условиях и почему квантово-механическое описание теряет силу и должно быть заменено классическим. Одним из главных элементов проблемы является вопрос о росте энтропии в гамильтоновых квантово-механических системах.

В классической физике причиной необратимости является глобальная неустойчивость динамических процессов, то есть возникновение динамического хаоса [3, 4, 5]. Аналогичный подход в квантовой механике натолкнулся на трудности. Выяснилось, что замкнутые квантово-механические системы динамически устойчивы. Это значит, что при малом изменении начальных условий девиации со временем не нарастают. Интегральная мера начальных отклонений остается постоянной, и энтропия не увеличивается со временем. Это утверждение известно под названием теоремы Вигнера [1].

Численные методы исследования хаотизации некоторых квантово-механических систем [6] не дали определенного ответа, и вопрос остается открытым.

В предлагаемом сообщении проведен анализ параметрической устойчивости квантово-механических систем. Мы покажем, что при определенных условиях квантово-механическая система становится параметрически неустойчивой, что приводит к возрастанию наблюдаемой энтропии. Систему, удовлетворяющую этим условиям, можно назвать классическим прибором.

Динамическая и параметрическая устойчивость квантово-механических систем. Рассмотрим конечную систему. Оператор Гамильтона обозначим $\hat{H}^{(\nu)}$, где индекс ν соответствует определенному набору параметров. Далее будем считать, что при изменении индекса ν параметры меняются мало, так, что параметры гамильтониана близки друг к другу при всех значениях параметра ν (меру близости мы обсудим позже).

Собственные функции $\Psi_i^{(\nu)}(x)$ удовлетворяют уравнению

$$\hat{H}^{(\nu)}\Psi_i^{(\nu)}(x) = E_i^{(\nu)}\Psi_i^{(\nu)}(x); \quad (4)$$

здесь и далее индекс i нумерует состояния в порядке возрастания энергии.

Развитие во времени любого состояния $\Psi(x, t)$, не являющегося собственным, описывается уравнением

$$\Psi(x, t) = \sum_i C_i^{(\nu)}\Psi_i^{(\nu)}(x) e^{-iE_i^{(\nu)}t}, \quad \text{где } C_i^{(\nu)} \equiv \int \tilde{\Psi}(x, 0) \Psi_i^{(\nu)}(x) d^3x; \quad (5)$$

здесь и далее полагается $\hbar = 1$.

Матрица плотности в энергетическом представлении $\rho_{i,j}^{(\nu)}(t)$ равна произведению амплитуд плотностей вероятности $p_i^{(\nu)}$ заставить систему в i -ом состоянии:

$$p_i^{(\nu)}(t) \equiv \int \Psi^{(\nu)}(x, t) \Psi_i^{(\nu)}(x) d^3x = \sum_j C_j^{(\nu)} \Psi_j^{(\nu)} e^{-iE_j^{(\nu)}t} \Psi_i^{(\nu)}(x) d^3x = C_i^{(\nu)} e^{-iE_i^{(\nu)}t}. \quad (6)$$

Отсюда

$$\rho_{i,j}^{(\nu)}(t) = \tilde{C}_i^{(\nu)} C_j^{(\nu)} e^{-i(E_i^{(\nu)} - E_j^{(\nu)})t}. \quad (7)$$

Диагональные элементы матрицы плотности $\rho_{ii} = \tilde{C}_i C_i$ представляют собой вероятность заставить систему в состоянии с энергией E_i , то есть связаны с энергетическим спектром нестационарного состояния $\Psi(x, t)$. Последний характеризуется средней энергией \bar{E} и полушириной (или дисперсией) ΔE .

В структурно-неустойчивых системах энергетический спектр сильно изрезан (при изменении индекса i на единицу величина $\rho_{i,j}^{(\nu)} = \tilde{C}_i^{(\nu)} C_i^{(\nu)}$ меняется в меру самой себя), но, будучи усреднен по индексу ν , становится плавным. Величины \bar{E} и ΔE , усредненные по i , от индекса ν не зависят. В этом представлении энтропия S равна

$$S^{(\nu)} = k Sp(\rho \ln \rho) = k \sum_{i,j} \rho_{i,j}^{(\nu)} \left(\ln \rho \right)_{i,j}^{(\nu)}, \quad (8)$$

где k – постоянная Больцмана. Это выражение является обобщением классического представления энтропии

$$S = k \sum_i w_i \ln w_i, \quad (9)$$

где w_i – априорная вероятность застать систему в i -ом микроскопическом состоянии.

Выражение (8) переходит в (9), если сумма недиагональных членов равна нулю. Поэтому задача сводится к исследованию поведения недиагональных элементов матрицы плотности во времени.

Рассмотрим специальный класс систем, удовлетворяющих следующим условиям:

(1) Энергетический спектр системы достаточно плотен, то есть расстояния между соседними уравнениями малы:

$$\delta E_{ij}^{(\nu)} \equiv |E_i^{(\nu)} - E_j^{(\nu)}| \ll E_i^{(\nu)}, E_j^{(\nu)}; \quad (10)$$

величины масштаба $\epsilon_0 \equiv \delta E_{ij}/E_{i,j} \ll 1$ будем считать малыми.

(2) При изменении параметров энергетические уровни сдвигаются мало, то есть

$$|E_i^{(\nu+1)} - E_i^{(\nu)}| \ll E_i^{(\nu)}, \quad (11)$$

причем величины масштаба $\epsilon_1 \equiv |E_i^{(\nu)} - E_j^{(\nu)}|/E_i^{(\nu)} \ll 1$ того же порядка, что и ϵ_0 . Это означает, что в ансамбле похожих, но не тождественных систем, отличающихся параметрами, сами параметры различны лишь в меру ϵ_1 . Отсюда следует, что и энергетическое воздействие на систему, связанное с изменением параметров, мало в той же мере.

(3) Собственные функции $\Psi_i^{(\nu)}$ при изменении параметров изменяются сильно, так, что

$$\left| \int \tilde{\Psi}_i^{(\nu)} \Psi_i^{(\nu+1)} d^3x \right| - 1 \sim 1; \quad (12)$$

при этом и коэффициенты разложения любой функции $\Psi(x, 0)$ по собственным функциям ν -го и $(\nu + 1)$ -го гамильтониана также отличаются сильно:

$$|C_i^{(\nu)} - C_j^{(\nu+1)}| \sim |C_i^{(\nu)}|. \quad (13)$$

Отсюда следует, что близкие по значению коэффициенты $C_i^{(\nu)}$ и $C_j^{(\mu)}$, такие, что

$$|C_i^{(\nu)} - C_j^{(\mu)}| \ll 1,$$

соответствуют разным значениям энергии, таким, что

$$|E_i^{(\nu)} - E_j^{(\mu)}| \sim E_i^{(\nu)}, E_j^{(\mu)}.$$

Системы, удовлетворяющие перечисленным свойствам, будем называть **параметрически (или структурно) неустойчивыми**. Термин оправдан тем, что при малом (в меру ϵ) и случайном изменении параметров коэффициенты разложения меняются тоже случайно, но сильно.

Примером таких систем может служить спиновое стекло. Оно состоит из n атомов, каждый из которых может находиться в двух состояниях ("спин вверх" и "спин вниз"). Число возможных различных состояний $N = 2^n$, таково же число уровней системы. Взаимодействие между атомами снимает вырождение, и образуется зона ширины Δ . Далее будем считать, что $\Delta \geq \Delta E$, т.е. нестационарная функция $\Psi(x, t)$ может быть разложена по собственным функциям гамильтониана спинового стекла. Расстояние между уровнями в зоне

$$\delta E = \frac{\Delta}{2^n} \sim \frac{\Delta E}{2^n}, \quad \Rightarrow \quad \epsilon_0 \approx \delta E / \Delta E = 2^{-n}. \quad (14)$$

При $n > 1000$ величина ϵ_0 настолько мала, что ее мы будем считать аналогом бесконечно малой величины в классической физике (т.е. величиной типа "обратный гугол"; гугол — число порядка или больше 10^{100}). То же можно сказать и о возмущениях масштаба $\epsilon_1 > \epsilon_0$.

Обсудим вопрос о динамической устойчивости.

Рассмотрим ансамбль тождественных систем, параметры которых одинаковы. При этом индекс ν можно опустить. Сравним развитие во времени двух нестационарных функций, которые вначале отличаются слабо, так, что

$$\int |\delta\Psi(x)|^2 d^3x \equiv \epsilon \ll 1, \quad \text{где } \delta\Psi(x) = \Psi_1(x, 0) - \Psi_2(x, 0). \quad (15)$$

Изменение функций $\Psi_1(x, t)$ и $\Psi_2(x, t)$ во времени описывается выражениями (5), где коэффициенты $C_i^{(1)}$ и $C_i^{(2)}$ различны. Из (15) и (5) следует, что разности коэффициентов $\delta C_i = C_i^{(1)} - C_i^{(2)}$ подчиняются условию

$$\sum_1^N |\delta C_i|^2 = \epsilon, \quad |\delta C_i|^2 \sim \frac{\epsilon}{N} \approx \epsilon^2; \quad |C_i| \sim \epsilon; \quad (16)$$

здесь N — эффективное число уровней: $N \sim 1/\epsilon$.

Интегральная мера девиации в момент времени t равна

$$\int |\delta\Psi(x)|^2 d^3x = \int d^3x \sum_{i,j} \delta\tilde{C}_i \delta C_j \tilde{\Psi}_i(x) \Psi_j(x) e^{-i(E_i - E_j)t} = \sum_i |\delta C_i| \sim \epsilon; \quad (17)$$

она не зависит от времени и всегда мала.

Таким образом, по интегральным критериям квантово-механические системы динамически устойчивы. Это можно рассматривать как иллюстрацию теоремы Вигнера [1]. Причина устойчивости в том, что фазовое пространство квантово-механических систем разделено на слои, соответствующие энергетическим уровням. При развитии системы во времени эти слои не перемешиваются.

Рассмотрим теперь ансамбль сходных, но не тождественных систем, параметры которых отличаются в меру $\epsilon_1 \sim \epsilon_0$ так, что энергетические уровни в них перемешиваются. Сравним, как развиваются во времени изначально одинаковые волновые функции $\Psi(x, 0)$ в двух системах ($\nu = 1, 2$):

$$\Psi^{(1)}(x, t) = \sum_i C_i^{(1)} e^{-iE_i t} \Psi_i^{(1)}(x); \quad \Psi^{(2)}(x, t) = \sum_j C_j^{(2)} e^{-iE_j t} \Psi_j^{(2)}(x); \quad (18)$$

их разность, то есть девиация функции в момент времени t , равна

$$\delta\Psi(x, t) \equiv \Psi^{(1)}(x, t) - \Psi^{(2)}(x, t) = \sum_i |C_i^{(1)} \Psi_i^{(1)}(x) - C_i^{(2)} \Psi_i^{(2)}(x)| e^{-iE_i t}. \quad (19)$$

Здесь мы учли, что, согласно свойству (2), собственные значения E_i в системах (1) и (2) различны лишь в меру ϵ (в то время, как коэффициенты C_i отличаются сильно). Малым различием собственных энергий мы пренебрегаем.

При $t = 0$: $\Psi^{(1)} = \Psi^{(2)} = \Psi(x, t = 0)$, и $\delta\Psi(x, t = 0) = 0$. Отсюда

$$\sum_i \left(C_i^{(1)} \Psi_i^{(1)}(x) - C_i^{(2)} \Psi_i^{(2)}(x) \right) = 0, \quad (20)$$

хотя сами функции и коэффициенты $C_i^{(\nu)}$, согласно условию (3), отличаются сильно.

Интегральная мера девиации равна

$$\begin{aligned} \int d^3x |\delta\Psi(x, t)|^2 &= \\ &= \sum_{i,j} \int d^3x \left[\tilde{C}_i^{(1)} C_i^{(1)}(x) + \tilde{C}_i^{(2)} C_i^{(2)}(x) \right] - \left[\tilde{C}_i^{(1)} C_j^{(1)}(x) \phi_{i,j}^{1,2} - C_j^{(2)} \Psi_j^{(2)}(x) \right] e^{-i(E_i - E_j)t} \\ &= \sum_{i \neq j} \tilde{C}_i^{(1)} C_j^{(2)}(x) \left[1 - e^{-i(E_i - E_j)t} + c.c. \right]. \end{aligned} \quad (21)$$

Здесь обозначено

$$\phi_{ij}^{1,2} \equiv \int d^3x \tilde{\Psi}_i^{(1)} \Psi_j^{(2)},$$

и учтено, что при $t = 0$, согласно (20),

$$\sum_i \left[\tilde{C}_i^{(1)} C_i^{(1)}(x) + \tilde{C}_i^{(2)} C_i^{(2)}(x) \right] = 2 = \sum_{i \neq j} \tilde{C}_i^{(1)} C_j^{(2)}(x) \phi_{ij}^{1,2}. \quad (22)$$

Из (20) и (22) следует, что при $t \sim (\Delta E)^{-1}$ каждый член суммы (21) не мал. Компенсация членов в сумме также невозможна, поскольку временной фактор не зависит от индекса ν ($=1,2$), а остальные величины зависят от параметров гамильтониана и меняются при их изменении, согласно условию (3), достаточно сильно.

Таким образом, интегральная девиация растет со временем и за конечное время (порядка обратной полуширины спектра исходного состояния ΔE) достигает значения порядка единицы. Полуширину спектра ΔE можно считать аналогом числа Ляпунова.

Важно, что здесь, как и в классической физике, характер развития системы во времени, равно как и сам факт неустойчивости, определяются внутренними свойствами системы, а не внешним воздействием.

Наблюдаемые величины в структурно-неустойчивых квантово-механических системах. Обычно под наблюдаемым значением оператора \hat{O} понимают его среднее по ансамблю

$$\langle \hat{O} \rangle = \int \tilde{\Psi}(x, t) \hat{O} \Psi(x, t) d^3x; \quad (23)$$

при этом не оговаривают, в какой мере системы ансамбля одинаковы. В случае структурно-устойчивых систем этот вопрос и не встает: системы можно считать тождественными. Однако, если системы структурно-неустойчивы, т.е. отвечают условиям (1)-(3), необходимо дополнить эту процедуру усреднением по ансамблю близких по характеристикам, но нетождественных систем (или, что то же, по индексу ν). Тогда наблюдаемое значение оператора \hat{O} следует представить в виде

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{1}{N} \sum_i^N \langle \hat{O}^{(\nu)} \rangle; \quad (24)$$

такая процедура уже предлагалась и обсуждалась ранее в [7].

Если оператор не зависит от времени явно, его наблюдаемое значение будет зависеть от времени за счет эволюции нестационарной функции $\Psi(x, t)$. Тогда

$$\langle \hat{O} \rangle = \sum_{i,j} \tilde{C}_i^{(\nu)} C_j^{(\nu)} \hat{O}_{ij}^{(\nu)} e^{-i(E_i - E_j)t}, \quad \text{где } \hat{O}_{ij}^{(\nu)} \equiv \int d^3x \tilde{\Psi}_i^{(\nu)} \Psi_j^{(\nu)}. \quad (25)$$

Представим (25) в виде

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\nu} \left\{ \sum_i \tilde{C}_i^{(\nu)} C_j^{(\nu)} \hat{O}_{ii}^{(\nu)} + \sum_{i \neq j} \tilde{C}_i^{(\nu)} C_j^{(\nu)} \hat{O}_{ij}^{(\nu)} e^{-i(E_i - E_j)t} \right\}. \quad (26)$$

Здесь первый член – сумма диагональных элементов, она не зависит от времени. Второй член – сумма недиагональных элементов, которая содержит зависящий от времени множитель $\exp(-i(E_i - E_j)t)$. Рассмотрим оба члена отдельно в случае, когда система структурно-неустойчива.

В первом члене $\tilde{C}_i^{(\nu)} C_i^{(\nu)} = W(E_i)$ – энергетический спектр системы; $O_{ii}^{(\nu)}$ – величина оператора в состоянии с энергией E_i . Обе величины – сильно изрезанные функции как индекса ν , так и индекса i . Однако после усреднения по ν (см. (24)) они становятся гладкими функциями индекса i . Примем, что при усреднении по ν эти величины статистически независимы. Роль и смысл этого (как будет показано, важного) положения мы обсудим позже. Тогда

$$\frac{1}{N} \sum_{\nu} \tilde{C}_i^{(\nu)} C_i^{(\nu)} O_{ii}^{(\nu)} = W(E_i) O_{ii}, \quad (27)$$

где $|\tilde{C}_i|^2$ и $O_{ii} \equiv (1/N) \sum_{\nu} \hat{O}_{ii}^{(\nu)} = O(E_i)$ – усредненные по ν , т.е. уже гладкие, функции индекса i .

Первый член в (27) можно представить в виде

$$\int dE \frac{di}{dE} |\tilde{C}_i|^2 O(E) = \int dE W(E) O(E), \quad (28)$$

где $W(E)$ – энергетический спектр системы; $O(E)$ – наблюдаемое значение оператора \hat{O} в состоянии с энергией E . Этот интеграл представляет собой вклад диагональных членов в наблюдаемую величину, который мы обозначим $\langle O_{diag} \rangle$; от времени он не зависит.

Аналогично, представим второй член (27) в виде

$$\sum_{i \neq j} (\tilde{C}_i C_j) \hat{O}_{ij} e^{-i(E_i - E_j)t} = \int dE_i \int dE_j W(E_i, E_j) O(E_i, E_j) e^{-i(E_i - E_j)t}; \quad (29)$$

здесь $(\tilde{C}_i C_j)$ и $\hat{O}_{i,j}$ – усредненные по ν значения недиагональных членов; спектральная функция $\bar{W}(E_i, E_j)$ определяется выражением

$$\bar{W}(E_i, E_j) = \left\{ \tilde{C}(E_i)C(E_j) - |C(E_i)|^2 \right\} \frac{di}{dE_i} \frac{dj}{dE_j}. \quad (30)$$

Этот интеграл представляет вклад недиагональных членов, который мы обозначим $\langle O_{non}(t) \rangle$. Этот вклад имеет следующие свойства:

(i) $\langle O_{non}(t) \rangle$ убывает со временем, причем характерное время убывания $\Delta t \sim (\Delta E)^{-1}$: подынтегральная функция $W(E_i, E_j)O(E_i, E_j)$ – плавная функция энергий E_i и E_j , которая велика в интервале $\Delta E_i \sim \Delta E_j \sim \Delta E$ и мала вне его; экспоненциальный фактор при $t \geq (\Delta E)^{-1}$ становится сильно изрезанным.

(ii) $\langle O_{non}(t) \rangle$ исчезает при $\Delta E \rightarrow 0$ (если $\Delta E = 0$, то исходное состояние является собственным и недиагональные члены отсутствуют).

(iii) В том случае, когда коэффициенты $C(E)$ имеют полюсной характер, т.е.

$$C(E_i) \propto \frac{1}{(E_i - \bar{E}) - i\Delta E}, \quad (31)$$

$\langle O_{non}(t) \rangle$ убывает со временем экспоненциально:

$$\langle O_{non}(t) \rangle = \langle O_{non}(t=0) \rangle e^{-\Delta E t}. \quad (32)$$

Таким образом, полное наблюдаемое значение произвольного оператора \hat{O} равно

$$\langle \hat{O}(t) \rangle = \langle O_{diag} \rangle + \langle O_{non}(t) \rangle, \quad (33)$$

где последний член убывает со временем. В частном, но распространенном случае (31) наблюдаемое значение оператора представляется в виде

$$\langle \hat{O}(t) \rangle = \langle O_{diag} \rangle + \langle O_{non}(t=0) \rangle e^{-\Delta E t}. \quad (34)$$

Эти общие соображения применимы, в частности, и для конкретного оператора энтропии (8):

$$\hat{O} \equiv S = -k\{\ln \rho\}_{i,j}.$$

Согласно (34), энтропия может быть представлена в виде

$$S(t) = S_{diag} + S_{non}(t), \quad (35)$$

а в случае (31):

$$S(t) = S_{diag} + S_{non}(t=0)e^{-\Delta Et}. \quad (36)$$

Поскольку при $t = 0$ энтропия отсутствует (исходное состояние является чистым), т.е. диагональный и недиагональный вклады гасят друг друга,

$$S_{diag} = -S_{non}(t=0), \quad (37)$$

(36) окончательно принимает вид

$$S(t) = S_{diag} (1 - e^{-\Delta Et}). \quad (38)$$

Аналогичный результат был получен (для некоторого специального класса систем) в [7].

Сделаем ряд замечаний.

1. Первый член в (38) представляет собой классическое выражение для энтропии в термодинамически равновесном состоянии:

$$S_{diag} = -k \sum_i \tilde{C}_i C_i \{ \ln | \tilde{C}_i C_i | \}_{i,i}.$$

Он соответствует реальным наблюдениям и используется в реальных расчетах. Второй член соответствует сумме недиагональных членов, причем по знаку он противоположен первому. Таким образом, (38) описывает процесс *возрастания наблюдаемой энтропии при развитии исходно чистого состояния*.

2. Согласно теореме фон Неймана [2], в квантово-механических системах энтропия не может изменяться со временем. Если исходное состояние чистое, то энтропия системы всегда равна нулю: при любом конкретном наборе параметров (т. е. при заданном значении ν) второй член в (35) всегда компенсирует первый. Это значит, что если при вычислении энтропии сперва провести суммирование по индексам i и j , то, согласно теореме фон Неймана, мы должны получить нуль; последующее усреднение по ν не должно изменить этого результата. Отсюда следует, что предположение о статистической независимости элементов $\tilde{C}_i^{(\nu)} C_j^{(\nu)}$ и $O_{ij}^{(\nu)}$ в (27) формально некорректно.

Напомним, что в структурно-неустойчивых системах величины $\tilde{C}_i^{(\nu)} C_i^{(\nu)}$ и $O_{ij}^{(\nu)}$ представляют собой весьма нерегулярные функции дискретных индексов. Эти функции случайны, поскольку случайны изменения параметров при сдвиге ν на единицу. При

усреднении по ν (в предположении о статистической независимости) эти функции не только сглаживаются, но и исчезают дальние корреляции между ними.

Отметим, что можно использовать другой метод сглаживания: разобьем все величины, имеющие индексы i или j , на группы по n членов, причем n выберем большим по сравнению с единицей, но много меньше полного числа членов в сумме:

$$1 \ll n \ll N \sim \frac{1}{\epsilon}.$$

Будем считать, что *внутри группы* энергии меняются слабо, и проведем усреднение, т.е. представим (27) в виде

$$\frac{1}{n} \sum_{i=I}^{I+n} (\tilde{C}_i C_i) \hat{O}_{ii} = (\tilde{C}_I C_I) \hat{O}_{II}. \quad (39)$$

Здесь I нумерует группы; их число меньше, чем число индексов i , но того же порядка, что гугол. В пределах группы корреляции отсутствуют, поскольку появляются на более высоком порядке (значительно большем, чем гугол).

Процедура такого усреднения приводит к тому же результату, что и (27), т.е. к выражению (38).

3. Эта ситуация аналогична той, которая имеется в классической физике. Там энтропия равна логарифму *фазового объема* динамической системы Ω :

$$S = k \ln \left(\frac{\Omega}{\Omega_0} \right),$$

где Ω_0 – объем элементарной ячейки. Согласно теореме Лиувилля, в динамическом процессе фазовый объем сохраняется. Если начальные условия заданы точно (т.е. в пределах Ω_0), энтропия всегда равна нулю. Это равносильно заданию чистого начального состояния в квантовой механике.

Теорема Лиувилля формально сохраняет силу и в глобально неустойчивых (т.е. *хаотических*) динамических процессах. Однако при этом фазовое пространство, занимаемое динамической системой, сильно и хаотично изрезано. Объем, занимаемый этой рыхлой структурой, существенно больше объема, вычисленного в соответствии с теоремой Лиувилля. По предложению Синая (см. [5]) можно ввести понятие *объема внутри всюду выпуклой гиперповерхности, натянутой на рыхлое фазовое пространство, занимаемое хаотической динамической системой* ("объем Синая" $\Omega_s(t)$). Можно принять, что фазовое пространство внутри объема заполнено равномерно, то есть плотность распределения регулярна. Тогда энтропия определяется как

$$S_s = k \ln \left(\frac{\Omega_s}{\Omega_0} \right), \quad (40)$$

Энтропия S_s в (40) называется *энтропией Синая*; она совпадает с наблюдаемой физической энтропией в реальных процессах. Возрастание этой энтропии связано с разбуханием объема Ω_s и продолжается вплоть до того, как этот объем займет все доступное фазовое пространство. В этом пределе энтропия максимальна, что соответствует термодинамическому равновесию.

В квантовой механике аналогом теоремы Лиувилля является теорема фон Неймана. Нерегулярная зависимость элементов $\tilde{C}_i^{(\nu)} C_j^{(\nu)}$ и $O_{ij}^{(\nu)}$ от индексов является аналогом изрезанности лиувиллевского фазового пространства классических глобально неустойчивых динамических систем.

Усреднение по параметрам в предположении статистической независимости сомножителей эквивалентно введению синаевского объема. Эта процедура столь же "некорректна" и столь же "правильна", как и процедура Синая: в обоих случаях речь идет о пренебрежении корреляциями очень высокого порядка ($\sim 2^{1000}$).

4. В простейших квантово-механических системах (атомы, простые молекулы и т.д.) разность уровней *не мала*. При этом малые изменения параметров не ведут к перемешиванию уровней, и свойства (1)-(3) не имеют места – иными словами, они *структурно устойчивы*. Операция усреднения по ν в этом случае не дает никакого эффекта. Энергетический спектр $W(E)$ остается дискретным, и корреляции между элементами $\tilde{C}_i^{(\nu)} C_j^{(\nu)}$ и $O_{ij}^{(\nu)}$ необходимо учитывать. Энтропия в этом случае не растет, что соответствует действительности.

То же относится и к коллективным регулярным системам (например, кристаллам), в которых энергетический спектр плотный, но условия (1)-(3) *не выполняются*. Однако и в этих случаях часто используют термодинамический подход. При этом считают, что образец помещен в "термостат". О последнем, по умолчанию, предполагают, что он "классический", то есть в нем соблюдены условия, необходимые и достаточные для роста энтропии.

5. В практических приложениях часто используется предположение о том, что недиагональные элементы матрицы плотности исчезают со временем порядка времени расплывания пакета τ ($\tau \sim 1/\Delta E$). Из изложенного выше следует, что такое предположение оправдано *лишь при соблюдении условий (1)-(3)*; их и следует рассматривать как условия применимости термодинамического подхода к квантово-механическим системам.

Заключение. Как было показано, физической причиной возрастания энтропии и необратимости процессов во времени как в классических, так и в квантово-механических системах, является структурная неустойчивость этих систем. Однако, для корректного математического описания неустойчивых процессов необходимо дополнить математическую аксиоматику следующим утверждением:

Корреляции высокого порядка между случайными величинами (порядка 10^{100} , т.е. "гугол", и выше) должны быть признаны пренебрежимо малыми, даже если они возникают в расчетах.

Основанием для этого можно считать следующее:

Во-первых, такие корреляции физически нереализуемы, т.е. их в принципе невозможно ни наблюдать, ни проверить.

Во-вторых, в этом и только в этом случае расчеты ведут к правильным (т.е., *наблюдаемым*) результатам.

В-третьих, это правило уже давно используется на интуитивном уровне при решении конкретных задач. Исключения из этого правила возможны лишь в случаях, когда такие корреляции возникают в связи с фундаментальными законами (сохранения энергии, импульса, заряда, барионного числа, и т.п.).

Отметим кроме того, что возрастание энтропии – одна из проблем парадокса измерения. Другая проблема заключается в описании редукции пакета, то есть автолокализации волновой функции частицы в малой пространственной области. Для этого регистрирующий прибор должен обладать дополнительными свойствами: энергия локализованного состояния должна быть ниже энергии исходного, а процесс автолокализации – сопровождаться выделением продуктов, уносящих избыток энергии: фотонов, фононов и т. п. Для регистрации необходимо, чтобы эти продукты рассеялись в приборе и не возвращались обратно. Именно на этом этапе важен вопрос о возрастании энтропии.

Сам процесс автолокализации требует специального рассмотрения.

Авторы благодарны В. А. Намиоту за весьма полезные обсуждения и И. В. Мелик-Гайказян за стимуляцию работы.

Работа выполнена в рамках гранта РФФИ N 96-02-19572.

Л И Т Е Р А Т У Р А

[1] В и г н е р Е. Этюды о симметрии. М., Мир, 1971, с. 318.

- [2] Ф о н Н е й м а н В. Математические основы квантовой механики. М., Мир, 1964.
- [3] К р ы л о в Н. С. Работы по обоснованию статистической физики. М., Наука, 1948.
- [4] З а с л а в с к и й Г. М. Статистическая необратимость в нелинейных системах. С и н а й Я. Г. Несколько точных результатов об убывании корреляций. М., Наука, 1970, с. 143.
- [5] Странные аттракторы. М., Наука, 1981.
- [6] З а с л а в с к и й Г. М., Ч и р и к о в Б. А., УФН, **105**, 1 (1971).
- [7] С h e r n a v s k a y a O. D., С h e r n a v s k i i D. S. "The problem of entropy production and stability of motion in Quantum Mechanics", preprint of P.N.Lebedev Insitute N 74, Moscow, 1980.

Поступила в редакцию 25 декабря 1998 г.