УДК 530

О КВАНТОВОЙ ПРИРОДЕ РОСТА ЭНТРОПИИ ВОЛНОВЫХ ПАКЕТОВ

С. А. Тригер

Зависящее от времени соотношение неопределенности Гейзенберга рассматривается для случая "максимально классических" квантовых состояний (МАКС). Для системы невзаимодействующих между собой частиц МАКС с характерной шириной волновой функции Δ_r необратимо переходит в состояния с большей квантовой неопределенностью. В течение этой эволюции совместная энтропия возрастает с характеристическим временным масштабом $\tau \sim m\Delta_r^2/\hbar$. На этом основании можно предположить, что и в случае взаимодействующих частиц энтропия, определенная в виде соответствующего функционала от точной волновой функции или (для смешанного состояния) от матрицы плотности, будет возрастать, в отличие от энтропии фон Неймана. Квантовая природа частиц играет важную роль в возрастании энтропии, даже для тех параметров системы, при которых частицы обычно рассматриваются как полностью классические. Проявление квантовых свойств (по крайней мере для свободных частиц) нарастает со временем. Принципиальная непредсказуемость будущего может на этом основании рассматриваться как чисто квантовое свойство материи не только для микроскопических, но и для макроскопических физических объектов.

Фундаментальная природа необратимости все еще не полностью понятна и, как представляется, содержит определенные противоречия с обратимым характером основных микроскопических уравнений динамики. По-видимому, проблема необратимости тесно связана с другим принципиальным вопросом о непредсказуемости, что означает принципиальную невозможность предсказать с произвольно высокой точностью поведение физической системы в будущем, даже предположив возможность идеально точных измерений и вычислений. Обе проблемы должны рассматриваться как макроскопические квантовые эффекты.

Необратимое стремление к состоянию равновесия типично для систем, заключенных в конечный объем. В конечном объеме квантовая неопределенность пространственной координаты частицы не может быть произвольно большой. В связи с этим, согласно принципу неопределенности Гейзенберга [1], импульс частицы обладает минимальной неопределенностью как минимум порядка $\hbar/L$, где L является характерным пространственным размером системы. Другими словами, плоские волны являются чрезмерно идеализированным представлением для состояний свободной (невзаимодействующей) частицы в такой системе.

Волновые пакеты и максимально классические состояния. Более реалистическими состояниями свободной частицы в такой системе являются состояния, описываемые волновыми пакетами, которые были введены в квантовую механику Э. Шредингером [2]. Волновые пакеты представляют собой суперпозицию многих стационарных состояний и в простейшем случае одной свбодной частицы могут быть представлены в форме

$$\Psi(\mathbf{r},t)=\int\frac{d^sk}{(2\pi)^s}C(k)\exp[i(\mathbf{kr}-\omega(k)t)], \tag{1}$$

где $\omega(k)\equiv\hbar k^2/2m, s$ – размерность рассматриваемого пространства. Волновой пакет может быть нормализован на единицу, если выполнено следующее условие для формфактора $C(k)$:

$$\int\frac{d^sk}{(2\pi)^s}|C(k)|^2=1. \tag{2}$$

Здесь и далее вместо суммирования по импульсам (более строгого в конечном объеме) используется интегрирование, что не меняет конечные результаты.

Легко показать (см., например, [3]), что левая часть соотношения неопределенности для координаты и импульса частицы

$$(\langle r_i^2\rangle_\Psi-\langle r_i\rangle_\Psi^2)(\langle\hat{p}_i^2\rangle_\Psi-\langle\hat{p}_i\rangle_\Psi^2)\geq\frac{\hbar^2}{4} \tag{3}$$

имеет минимальное значение, равное $\hbar^2/4$ для средних, которые вычислены по функциям волновых пакетов $\Psi(\mathbf{r}, t = 0)$, имеющих при $t = 0$ специфическую форму, а именно, форм-фактор $C(k)$ в уравнении (1) должен быть выбран в Гауссовом виде

$$C(k) = \left[\frac{4\pi}{\Delta_k^2}\right]^{s/4} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}_0) \exp\left[-\frac{(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)^2}{2\Delta_k^2}\right]. \qquad (4)$$

Значение Δ_k является характеристической шириной волнового пакета. Соответствующая зависящая от времени волновая функция $\Psi(\mathbf{r}, t)$ для Гауссова пакета в координатном представлении согласно уравнениям (1), (4) равна

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \left[\frac{1}{\pi R^2(t)}\right]^{s/4} \exp[i(\mathbf{k}_0\mathbf{r} - \omega(k_0)t)] \exp\left[-\frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0 - \mathbf{v}_0 t)^2}{2\Delta_r R(t)}\right], \qquad (5)$$

где $\Delta_r \equiv 1/\Delta_k$ и $R(t) = \Delta_r + i(\hbar t/m\Delta_r)$. Масса частицы обозначена m, а характерный импульс равен $\mathbf{p}_0 \equiv m\mathbf{v}_0 \equiv \hbar\mathbf{k}_0$. Волновые функции $\Psi(\mathbf{r}, t = 0)$, для которых неравенство Гейзенберга превращается в равенство, могут рассматриваться как *максимально классические состояния* (МАКС).

Даже для физических объектов, которые обычно рассматриваются как полностью классические (т.е. с очень большой массой m) МАКС представляют собой предельно достижимый уровень "классичности" при конечном значении постоянной Планка $\hbar$.

Зависящее от времени соотношение неопределенности. Легко вычислить левую сторону соотношения неопределенности (3) для зависящей от времени волновой функции (5), первоначально равной некоторому МАКС с фиксированным значением ширины пакета Δ_r:

$$Var x_\alpha(t) \cdot Var p_\alpha(t) = \frac{\hbar^2}{4}\left[1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2\Delta_r^2}\right]. \qquad (6)$$

В уравнении (6) используется обозначение $Var\xi \equiv \langle\xi^2\rangle - \langle\xi\rangle^2$ для зависящих от времени компонент координаты и импульса частицы, а также следующие равенства:

$$\langle x_\alpha^2(t)\rangle = \frac{|R(t)|^2}{2} + v_{0,\alpha}^2 t^2; \ \langle x_\alpha(t)\rangle = v_{0,\alpha} t, \qquad (7)$$

$$\langle p_\alpha^2(t)\rangle = p_{0,\alpha}^2 + \frac{\hbar^2}{2\Delta_r^2}; \ \langle p_\alpha(t)\rangle = p_{0,\alpha}. \qquad (8)$$

Как следует из уравнения (6), квантовые состояния, в начальный момент времени принадлежащие к классу МАКС, с течением времени перестают принадлежать этому классу состояний. Физической причиной этого является уширение волновых пакетов в соответствии с динамикой, отвечающей уравнению Шредингера. Уширение волновых функций с течением времени является универсальным свойством произвольных нестационарных квантовых состояний, а не только волновых пакетов, принадлежащих классу МАКС.

Квантовое возрастание неопределенности во времени является поэтому универсальным свойством физических объектов, даже в случае, когда их поведение в начальном состоянии предельно близко к классическому. Проявление квантовой природы частиц (в настоящей работе это показано для свободных состояний) возрастает с течением времени. Это свойство частиц можно определить как "quantum trend" ("квантовый дрейф"). В частности это означает, что "почти классический" объект с течением времени демонстрирует возрастание непредсказуемости своего поведения, связанное с его квантовой природой.

Совместная энтропия и необратимость. Чтобы показать исключительно важные последствия зависящего от времени соотношения неопределенности (рассмотренного выше в простейшем случае МАКС свободной частицы) для физических приложений, обратимся к вычислению так называемой совместной энтропии. Л. Бриллюэн [4] обнаружил определенную связь между соотношением неопределенности Гейзенберга и энтропией. Эти идеи были развиты в работе [5], где было показано, что функционал совместной энтропии S_J для координаты и импульса частицы удовлетворяет неравенству

$$S_J = -\int d^s r|\Psi(\mathbf{r})|^2 \ln|\Psi(\mathbf{r})|^2 - \int d^s p|\Phi(\mathbf{p})|^2 \ln|\Phi(\mathbf{p})|^2 - s\ln(2\pi\hbar) \geq s\ln\frac{e}{2}. \qquad (9)$$

Волновая функция в импульсном пространстве $\Phi(\mathbf{p}) \equiv C(p)/(2\pi\hbar)^{s/2}$ соответствует координатной волновой функции $\Psi(\mathbf{r})$. Обе эти волновые функции представляют собой нормализованные на единицу волновые пакеты. Минимальное значение функционала совместной энтропии S_J равно $s\ \ln(e/2)$ и реализуется Гауссовыми волновыми пакетами (МАКС).

Следует отметить, что энтропия фон Неймана для чистых квантовых состояний, какими, в частности, являются МАКС, равна нулю.

Вычислим временную эволюцию функционала совместной энтропии $S_J^{MACS}(t)$ для заданного в начальный момент МАКС. Простое вычисление для одной свободной частицы приводит к выражению

$$S_J^{MACS}(t) = s\ln\left[\frac{e}{2}\sqrt{1+\frac{\hbar^2 t^2}{m^2\Delta_r^4}}\right]. \tag{10}$$

Совместная энтропия заданного в начальный момент времени волнового пакета МАКС возрастает во времени и для больших времен ($t \gg m\Delta_r^2/\hbar$) логарифмически по t стремится к бесконечности. Этот результат легко обобщается на систему невзаимодействующих частиц, описываемых волновыми пакетами, относящимися к классу МАКС.

Приведенное рассмотрение предполагает, что для более сложных и реалистических неравновесных систем взаимодействующих между собой частиц соотношение неопределенности и квантовый дрейф играют существенную роль. Это утверждение подтверждается также невозможностью однозначно определить энтропию для полностью классической системы частиц ($\hbar \to 0$) как в равновесном, так и в неравновесном состоянии. Влияние взаимодействия между частицами на эволюцию совместной энтропии приводит к специфической и сложной картине квантового дрейфа и будет рассмотрено в отдельной работе. По-видимому, столкновения частиц приводят к насыщению совместной энтропии со временем, характерным для перехода системы в состояние равновесия. Иначе говоря, столкновения ограничивают квантовый дрейф.

Чтобы рассмотреть совместную энтропию многочастичной квантовой системы в смешанном состоянии, необходимо принять во внимание статистическое усреднение. Как известно, энтропия фон Неймана, определяемая в общем случае с помощью статистического оператора $\rho(t)$ как

$$S = -Sp\rho\ln\rho, \tag{11}$$

для замкнутой системы не зависит от времени. Статистический оператор в общем случае может быть диагонализован разложением по некоторому специальному полному набору ортогональных векторов чистых состояний в Гильбертовом пространстве $|\Psi_i\rangle$, являющихся его собственными состояниями

$$\rho = \sum_i \gamma_i |\Psi_i(t)\rangle\langle\Psi_i(t)|. \tag{12}$$

Значения γ_i представляют вероятности найти систему в состояниях $|\Psi_i(t)\rangle$. Очевидно, что $\sum_i \gamma_i = 1$. Обычно временная эволюция энтропии и переход к равновесию достигаются переходом от истинного статистического оператора (11) к редуцированному статистическому оператору, усредненному по некоторому набору переменных, относящемуся к подсистеме полной рассматриваемой системы (см., например, [6]). Необходимо отметить, что временная эволюция совместной энтропии не связана с подобного рода редуцированием, как это следует уже из рассмотрения для случая чистых состояний, а является результатом квантового расплывания волновых пакетов, которое заложено в самой природе квантовой динамики.

Следуя приведенному выше определению совместной энтропии для чистого состояния, совместная энтропия смешанного состояния $\tilde{S}$ квантовой статистической системы N частиц ($s = 3$) может быть введена, например, соотношением

$$\tilde{S} = -\int d\mathbf{X}d\mathbf{P}W(\mathbf{X},t)W(\mathbf{P},t)\ln\left[W(\mathbf{X},t)W(\mathbf{P},t)\right] - \ln(2\pi\hbar)^{3N}. \tag{13}$$

Векторы $\mathbf{X}$ и $\mathbf{P}$ определяются равенствами $\mathbf{X} \equiv \{\mathbf{x}_1, ...\mathbf{x}_N\}$ и $\mathbf{P} \equiv \{\mathbf{p}_1, ...\mathbf{p}_N\}$. Функции $W(\mathbf{X}, t)$ и $W(\mathbf{P}, t)$ представляют собой соответственно диагональные матричные элементы статистического оператора в координатном и импульсном представлениях.

Необходимо подчеркнуть, что совместная энтропия, как это следует из определения и полученных свойств, принципиально отличается от энтропии фон Неймана, хотя физически и та и другая характеризуют меру неупорядоченности рассматриваемой системы. Обсуждение различных определений совместной энтропии и энтропии фон Неймана в стационарном случае содержится в недавней работе [7].

Отметим также, что предыстория образования волновых пакетов и, следовательно, зависимость ширины пакета от параметров измерительного прибора или иных внешних условий оказывает существенное влияние на характер временной эволюции частиц. В частности, для специфических экспериментальных ситуаций следует проанализировать возможную зависимость ширины волновых пакетов от постоянной Планка $\hbar$.

Нам представляется, что результаты настоящей работы являются возможной реализацией общей идеи, высказанной Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшицем [8] о возможной связи закона возрастания энтропии (рассматриваемой как меры неупорядоченности физической системы) с существованием некоего (предполагавшегося в [8] неизвестным) неравенства, содержащего постоянную Планка. С позиций настоящей работы таким неравенством является соотношение неопределенности Гейзенберга, а функцией, характеризующей необратимое возрастание неупорядоченности, является совместная энтропия. Для многих замкнутых статистических систем при наличии столкновений между частицами этот необратимый процесс, в основе которого лежат основополагающие свойства квантовой динамики частиц, ведет к термодинамическому равновесию. Естественно, эти утверждения нуждаются в дальнейшем обосновании и развитии.

Автор благодарен М. В. Федорову за полезное обсуждение проблемы волновых пакетов и задач перепутывания в квантовой теории. Я признателен А. М. Игнатову и А. А. Рухадзе за плодотворные дискуссии и интерес к настоящей работе. Рассмотрение данной проблемы было поддержано Российским фондом фундаментальных исследований (проект 04–02–89004 НВО-а) и Нидерландской организацией научных исследований (NWO) в рамках гранта 047.016.020.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Heisenberg W. Z. Phys., **43**, 172 (1927).

[2] Schrödinger E. Naturwissenschaften, **28**, 664 (1926).

[3] Kaempffer F. A. Concepts in Quantum Mechanics, Academic press, N. Y. and London, 1965.

[4] Brillouin L. Science and Information Theory, Academic Press, New York, 1956.

[5] Leipnik R. Information and Control, **2**, 64 (1959).

[6] Anastopoulos C. and Halliwell J. J. Phys. Rev., **51**, 6870 (1995).

[7] Dodonov V. V. J. Opt. B: Quantum Semiclass. Opt., **4**, S98 (2002).

[8] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. Курс теоретической физики, **5**, часть 1, М., Наука, 1976.

Институт общей физики
им. А. М. Прохорова РАН

Поступила в редакцию 8 июля 2004 г.