*Август 1995 г.* УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК *Том 165, № 8*

МЕТОДИЧЕСКИЕ ЗАМЕТКИ

# Необратимость классическая и квантовая

Б.Б. Кадомцев

*Необратимость физических систем обсуждается на простейшем примере разреженного газа, либо изолированного, либо находящегося в тепловом равновесии со стенками сосуда. Наибольшее внимание уделяется анализу логической схемы теоретического описания необратимости.*

PACS numbers: 05.70.Ln, **89.70.+c**

## Содержание



## 1. Введение

Необратимость является универсальной сущностью Мира, относящейся не только к жизни, но и ко многим простым физическим явлениям природы. Не будет преувеличением сказать, что мы погружены в необратимый поступательно эволюционирующий Мир. Однако классические законы механики являются обратимыми во времени. Обратимыми являются также основные уравнения квантовой механики. Поэтому вопрос о том, как из обратимых уравнений динамики может быть получено описание необратимых процессов, многократно обсуждался и продолжает обсуждаться в физической литературе. Нам не хотелось бы комментировать здесь все высказанные по этому поводу точки зрения. Наша задача будет гораздо проще: взяв в качестве примера одну из простейших физических систем с присущей ей внутренней необратимостью, мы постараемся более тщательно проанализировать логическую схему рассуждений, приводящих к теоретическому описанию необратимости. В качестве такой простейшей системы мы выберем разреженный газ из слабо взаимодействующих атомов. Будем считать, что газ заключен в замкнутый сосуд и может находиться в тепловом равновесии, в том числе с равномерно нагретыми стенками сосуда.

Как известно, поведение такого газа описывается кинетическим уравнением Больцмана для функции распределения частиц $F(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$, где $\mathbf{r}$ — координата (трехмерный вектор), а $\mathbf{v}$ — скорость частицы. Все частицы считаются имеющими одну и ту же функцию распределения, так что $F = nf(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$, где $n$ — плотность частиц, а $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ — одночастичная функция распределения.

Свое кинетическое уравнение Больцман вывел с помощью одного лишь вполне естественного допущения: атомы газа считаются некоррелированными перед их парными соударениями. Больцман назвал это допущение гипотезой о "молекулярном хаосе". Эта гипотеза кажется вполне естественной, хотя она никак не следует из молекулярной динамики.

Как оказалось, одной лишь этой гипотезы вполне достаточно, чтобы явно ввести физическую необратимость: согласно знаменитой $H$-теореме кинетическое уравнение описывает необратимую релаксацию газа к термодинамическому равновесию с монотонным возрастанием энтропии со временем. Возникает вопрос о том, какое же физическое явление стоит за гипотезой о молекулярном хаосе, и как это явление может быть рассмотрено в рамках более строгого логического обоснования. Именно этот вопрос мы и обсудим в данной статье. Сначала мы рассмотрим газ классических частиц, а затем обсудим более точное квантовое описание поведения атомов.

## 2. Классическая необратимость

В приближении классических частиц атомы можно представлять себе как маленькие твердые шарики, упруго сталкивающиеся между собой. Если диаметр шариков составляет величину $d$, то столкновения происходят при величине параметра удара, меньших $d$. Это значит, что поперечное сечение рассеяния равно $\sigma = \pi d^2$, а средняя длина свободного пробега $\lambda = 1/n\sigma$, где $n$ — средняя плотность атомов. Газ считается разреженным, если $\lambda \gg \sqrt{\sigma}$, т.е. $n\sigma^{3/2} \ll 1$.

Допустим сначала, что газ заключен в сосуд объема $V$ с идеально отражающими зеркальными стенками. Полное число атомов в объеме $V$, равное $N = nV$, будем считать очень большим числом: $N \gg 1$. Легко видеть, что такая система упруго взаимодействующих частиц является полностью обратимой во времени. В самом деле, потенциал взаимодействия частиц между собой и со стенками сосуда зависит только от координат, поэтому уравнения Ньютона не меняют своего вида при замене $t$ на $-t$. Это значит, что при любом стартовом состоянии при $t = 0$ система классических упругих частиц

**Б.Б. Кадомцев.** Российский научный центр "Курчатовский институт", Институт ядерного синтеза 123182 Москва, пл. Курчатова 46
Тел. (095) 196-98-14, факс (095) 190-42-44
E-mail: kadomtsev@ufn.msk.su

*Статья поступила 8 июля 1995 г.*

проэволюционирует к моменту времени $t$ к такому состоянию, что при обращении времени система в точности повторит свою эволюцию в обратном порядке. Разумеется, такое "обратное кино" можно реализовать и просто мгновенным преобразованием скоростей $\mathbf{v}_i \to -\mathbf{v}_i$ у каждой $i$-й частицы из полного набора $N$ частиц. Итак, молекулярная механика газа обратима во времени, что явно не согласуется с нашими житейскими представлениями.

Чтобы понять, откуда берется необратимость, нужно более подробно рассмотреть динамику атомов газа. Выберем некоторую пробную частицу $A$ (рис. 1). Такая частица свободно летит некоторое время, затем мгновенно меняет свою скорость из-за столкновения с другим атомом $B$ и снова свободно летит до следующего столкновения. Средняя длина отрезков свободного полета равна $\lambda$, т.е. средней длине свободного пробега. А среднее время между последовательными столкновениями равно $\tau = \lambda/v_{\mathrm{T}}$, где $v_{\mathrm{T}}$ — средняя скорость движения частицы. Траектория движения конкретной пробной частицы очень чувствительна к тому, где именно и с какими именно другими частицами происходят парные столкновения. Поэтому такая траектория является хаотической, а соответствующий процесс принято называть динамическим хаосом. В нашем случае динамический хаос связан с большим числом партнеров, участвующих в столкновениях. Но хорошо известно, что динамический хаос может иметь место и в системах с небольшим числом степеней свободы.

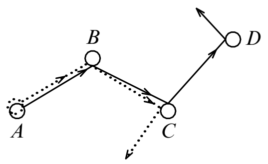


**Рис. 1.** При малом смещении атома $A$ его траектория (пунктирная линия) начинает сильно отличаться от первоначальной траектории (сплошная линия) после первых же нескольких ударов о другие атомы

Динамический хаос сам по себе еще не является основанием для появления необратимости. Какой бы сложной ни была эволюция системы из прошлого в будущее, замкнутая система классических частиц обязательно проходит в обратном порядке по той же самой траектории в фазовом пространстве при замене $t$ на $-t$. Поэтому необратимость не является прямым следствием хаоса, хотя косвенным образом она с этим хаосом может быть связана.

Чтобы продвинуться дальше, нам нужно рассмотреть еще одну особенность хаотических систем, а именно, разбегание траекторий в фазовом пространстве. Для этого опять выберем некоторую пробную частицу (см. рис. 1) и рассмотрим, наряду с ее реальной траекторией, близко расположенную возможную траекторию движения. Например, мы можем предположить, что пробная частица немного сдвигается на очень малую величину $\xi$. Тогда после первого столкновения направление рассеяния изменится на малый угол $\gamma_0 \cong \xi/a$, где $a = \sqrt{\sigma}$ — характерный размер взаимодействия. В результате малого отклонения $\gamma$ параметр удара во втором столкновении изменится на величину $\gamma\lambda$, так что после второго рассеяния направление движения пробной частицы изменится на величину $\gamma_1 \sim (\xi/a)\cdot(\lambda/a)$. А после $q$ рассеяний угол станет равным (приближенно) $\gamma_q = (\xi/a)\cdot(\lambda/a)^q$. Так как $\lambda/a \gg 1$, то величина угла $\gamma_q$ быстро возрастает с номером рассеяния. При $\gamma_q \sim 1$ траектория частицы перескакивает на другой атом, и возмущенная траектория частицы становится совершенно непохожей на исходную. Итак, после $q \cong \ln(a/\xi)/\ln(\lambda/a)$ рассеяний частица перескакивает на совершенно другую траекторию. Другими словами, близкие вначале траектории экспоненциально быстро разбегаются друг от друга. Именно это разбегание траекторий и приводит в конце концов к необратимости. Но следует еще понять, как это происходит.

Как мы установили выше, в замкнутой системе классических частиц никакой необратимости нет. Однако достаточно присутствие ничтожно малых внешних возмущений, чтобы такая необратимость появилась. Как мы видим, достаточно иметь смещение одного из сталкивающихся атомов всего лишь порядка $\xi^2 \sim a/\lambda = \sigma/\lambda$, чтобы уже за один-два удара их траектории стали совершенно не похожими на исходные траектории при $\xi = 0$. Величина $\xi \sim \sigma/\lambda$ ничтожно мала: например, в обычном воздухе при атмосферном давлении $\xi \sim 10^{-7}\ \lambda \sim 10^{-11}$ см. Если мы предположим, что газ находится в более или менее обычном сосуде, т.е. с возможностью теплообмена со стенками из-за неупругих столкновений, то смещения такого масштаба вполне естественны даже далеко от стенок. Вблизи от стенки неупругие столкновения атомов со стенкой могут приводить к смещениям масштаба $\lambda$, а затем возмущения переносятся в глубь газа либо диффузионным образом, либо звуковым шумом, который генерируется вблизи стенок из-за неупругих столкновений. Такие столкновения вносят дополнительное затухание звуковых волн, а стало быть, согласно флуктуационно-диссипационной теореме пристеночные слои газа должны генерировать дополнительный звуковой шум. Этот шум может создавать смещения атомов внутри газа и тем самым перебрасывать их с одних неустойчивых траекторий на другие.

Именно внешние возмущения и создают необратимость. Мы можем рассматривать их как некоторый хаотический шум. Таким образом, молекулярная динамика может рассматриваться как своеобразный "усилитель хаоса" за счет приходящего извне шума. "Усилитель" имеет огромный коэффициент усиления. Число ударов, необходимых для сбоя траекторий, всего лишь логарифмически зависит от величины внешнего шума, поэтому даже очень малое взаимодействие с внешним окружением радикально меняет поведение атомов газа. Все далекие корреляции атомов очень быстро разрушаются: для этого достаточно всего лишь одного-двух характерных времен парных столкновений. Соответственно, поведение атомов с одними и теми же начальными скоростями становятся однотипными: они движутся и сталкиваются с другими атомами по одним и тем же статистическим законам. В результате этого многочастичная функция распределения превращается в произведение одночастичных функций распределения, для которых справедливо уравнение Больцмана.

Итак, строго говоря, молекулярный хаос в газе классических частиц создается внешним окружением. Ясно, что поведение такого газа становится необратимым: мы могли бы обратить скорости молекул внутри рассматриваемого нами объема, но внешнее окружение находится вне нашего контроля. Поэтому обратимость при $t \to -t$ может существовать не более одного или нескольких средних времен столкновений, а затем газ снова забудет о своем начальном состоянии и его эволюция будет в точности такой же, как и при $t > 0$ (но с обратными газодинамическими скоростями).

Как мы видим, для возникновения необратимости нет необходимости в передаче или изъятии энергии из газа. Для хаотизации траекторий достаточно лишь наличия малых смещений атомов, т.е. своего рода "сбоя фаз" в процессах парных столкновений. Необратимость — это явление, не связанное с изменением энергии.

Чтобы лучше понять, что такое классическая необратимость, рассмотрим идеализированный мысленный эксперимент. Пусть газ с плотностью атомов $n$ находится в сферическом сосуде радиуса $R$ с зеркальными стенками. Ясно, что такой газ является идеальной механической системой с полной обратимостью движения во времени. Допустим теперь, что стенки сосуда очень тонкие и что снаружи от сосуда находится точно такой же газ с той же средней скоростью теплового движения атомов и при той же самой плотности $n$. Пусть оба газа в среднем покоятся. Допустим, что внешний газ находится в состоянии теплового равновесия, а его взаимодействие с внешним Миром устроено так, что внутри него устанавливается молекулярный хаос. Будем считать, что длина свободного пробега $\lambda$ гораздо меньше радиуса сосуда $R$.

Пусть в момент времени $t = 0$ оболочка, разделяющая два газа, исчезает. Тогда возникает начальный разрыв, разделяющий два газа: внешний газ, находящийся в тепловом равновесии, и внутреннюю систему атомов, испытывающих сложное, полностью обратимое, движение. Ясно, что тепловое хаотическое движение внешнего газа вместе с акустическим тепловым шумом должны приводить к хаотизации траекторий атомов внутреннего газа. Одного удара хаотизированного газа достаточно для сбоя фазы траектории атома внутреннего газа. Соответственно, внутрь области с обратимым движением атомов начнет распространяться фронт необратимости (рис. 2). Перед фронтом движение газа еще обратимо, а за фронтом — необратимо. Другими словами, внутрь газа распространяется фронт разрушения обратимости.

Как известно, любой перемещающийся слабый разрыв в газе распространяется со скоростью звука $c_s = \sqrt{\gamma T/m}$, где $\gamma$ — показатель адиабаты, $T$ — температура, $m$ — масса атомов. Соответственно, радиус сферы $r_s$ с обратимым движением внутри будет схлопываться по закону $r_s = R - c_s t$. При $t = R/c_s$ область обратимости исчезает. За движущимся фронтом остается равновесный газ с обычной случайностью траекторий атомов и с разрушенными далекими корреляциями между их движением. На самом фронте, шириной масштаба $\lambda$, происходит разрушение корреляций в движении атомов. А перед фронтом имеется классическая механическая система с совершенно определенной и, стало быть, единственной траекторией в фазовом пространстве. Замена $t$ на $-t$ в такой системе меняет просто направление движения системы по траектории. Соответственно, мы должны считать, что никакого неупорядоченного движения внутри сферы радиуса $r_s$ нет. Это значит, что энтропия системы атомов внутри сферы радиуса $r_s$ равна нулю. А сразу же после прохождения фронта у равновесного газа появляется энтропия $S$ (на единицу объема), которая может быть рассчитана по известным расчетам статистической физики.

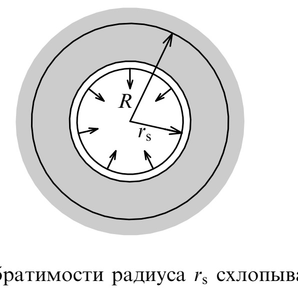


**Рис. 2.** Фронт необратимости радиуса $r_s$ схлопывается к центру со скоростью звука после того, как исчезает оболочка радиуса $R$, разделявшая внутренний обратимый газ от необратимого внешнего окружения

Итак, главный физический процесс, происходящий на движущемся фронте, состоит в рождении энтропии от нуля до величины $S$ на единицу объема. Процесс рождения энтропии необратим, поэтому фронт необратимости может двигаться только в одну сторону — в сторону обратимой механической системы частиц с нулевой энтропией.

Теперь нам осталось понять, как и из чего рождается энтропия. Для этого воспользуемся знаменитой формулой Больцмана:

$$S = k \ln \Gamma . \qquad (1)$$

Здесь $\Gamma$ есть число возможных микроскопических состояний системы при фиксированных макроскопических параметрах, например, плотности и температуры газа. А параметр $k$, получивший название постоянной Больцмана, возник только потому, что температура измеряется в градусах Кельвина, а энергия атомов измеряется в эргах (или джоулях). Если условиться измерять температуру в тех же самых энергетических единицах, что и энергию атомов, то следует положить $k = 1$. Этот выбор единиц нам более удобен, так что в формуле (1) мы будем считать $k = 1$.

Как известно, в классической механике число состояний $\Gamma$ не определено точно. Но если, следуя принципу неопределенности $\Delta x\, \Delta p \approx \hbar$, разбить все фазовое пространство на дискретные ячейки размером $\Delta x$, $\Delta p$, так что $\Delta x\, \Delta p \approx \hbar$, то величина $\Gamma$ становится вполне определенной.

Условимся использовать это же самое дискретное ячеестое пространство и для описания механического движения системы классических частиц. Тогда мы сразу же сталкиваемся с понятием информации. Рассмотрим нашу механическую систему атомов в некоторый фиксированный момент времени. В этот момент ее фазовая точка находится в одной единственной ячейке из $\Gamma$ возможных ячеек. Можно сказать, что вероятность попадания в данную ячейку равна $p = 1/\Gamma$. Если учитывать все возможные ячейки, то систему атомов можно рассматривать как запоминающее устройство с информационной емкостью

$$I = -\ln p = \ln \Gamma . \qquad (2)$$

Именно такую информацию имеет классическая система атомов в любой момент времени. При эволюции во времени фазовая точка движется по очень узкой (шириной в одну ячейку) нити в фазовом пространстве, так что ее информация сохраняется.

В соотношении Шеннона (2) информация измеряется в "натах", а не в битах, так что становится очевидной связь этого выражения с энтропией (1) при $k = 1$. Если информация полностью стирается, то система атомов может попадать в любую из возможных ячеек, число которых равно $\Gamma$. При этом возникает совершенно хаотическое тепловое движение.

Итак, на фронте необратимости происходит полное стирание информации и превращение ее в энтропию. Перед фронтом мы имеем механическую систему с полностью детерминированным поведением во времени, а за фронтом — хаос теплового движения. Подчеркнем еще раз, что хаос теплового движения создается ничтожно малыми шумами из необратимого внешнего окружения. Динамика атомов газа многократно усиливает этот хаос и превращает его в молекулярный хаос теплового движения.

Теперь мы можем обсудить некоторые вопросы, встречающиеся в различного рода учебниках по термодинамике и статистической физике, или просто в популярных статьях по физике. Например, один из часто задаваемых вопросов звучит так: существует ли мгновенная температура? Как это ни парадоксально, но для газа классических частиц, ответ должен быть отрицательным: мгновенной температуры не существует.

В самом деле, любое мгновенное состояние системы классических частиц можно рассматривать как точно заданное, т.е. с нулевой энтропией и полной информацией $I = \ln \Gamma$. Поэтому понятия мгновенной температуры ввести нельзя (можно считать ее равной нулю, но это мало что значит). И только при наличии слабых внешних возмущений, усиливаемых парными столкновениями частиц, по прошествии промежутка времени, порядка среднего времени столкновений, наступает реальный молекулярный хаос с соответствующей температурой, являющейся мерой хаотического теплового движения. При этом любая начальная информация исчезает, а энтропия достигает своего максимального значения $S = \ln \Gamma$. Именно такой процесс появления температуры с одновременным превращением информации в энтропию происходит в узком слое фронта необратимости на рис. 2.

Второй, часто задаваемый вопрос: почему можно пользоваться статистическим подходом к описанию поведения газа классических частиц? Ответы бывают разные. Иногда говорится, что статистическое описание используется из-за незнания точных начальных данных. Встречается также утверждение, что статистика используется из-за невозможности проинтегрировать уравнения движения для огромного числа частиц. Нетрудно видеть, что ни первое, ни второе утверждения нельзя признать вполне правильными.

Начнем со второго. В обычном воздухе при атмосферном давлении в объеме порядка $\lambda^3$ находится $N = 1/\sigma^3 n^2 \sim 10^8$ частиц. Это, разумеется, много, но не слишком много. Энтропия $S = \ln \Gamma$ для $N$ молекул газа при комнатной температуре равна приближенно $S \cong N \times 30 = 3 \times 10^9$. Следовательно, информация начального состояния измеряется гигабайтами, что вполне под силу современному компьютеру. А суперкомпьютер имеет возможность просчитать эволюцию молекул газа в течение некоторого числа парных столкновений. Так что при желании и необходимости можно моделировать динамику газа в приближении укрупненных частиц.

Рассмотрим теперь первое утверждение. Строго говоря, незнание начальных данных не дает еще никаких оснований для использования вероятностного описания. Ведь это описание применяется не ко многим повторяющимся измерениям, а к одной единственной системе. Будучи замкнутой, такая система движется по одной единственной траектории в фазовом пространстве. Замена такой системы на ансамбль систем с несколько различными начальными данными не только не является логически обоснованным, но и приводит к определенным логическим трудностям.

В самом деле, неопределенность начальных данных можно учесть тем, что при $t = 0$ в фазовом пространстве создается "капля" функции распределения. При дальнейшей эволюции замкнутой системы каждая точка такой капли движется по единственной строго определенной траектории. Траектории разбегаются, так что очень скоро в фазовом пространстве образуется "вата" или "паутина", заполненная точками начальной функции распределения. Чтобы упростить описание этой "ваты", обычно предлагается производить "крупнозернистое усреднение". Но эта последняя операция ниоткуда не следует и является искусственной, будучи навязанной извне. Только реальное нарушение траекторий внешним шумом создает условия для такого усреднения.

Итак, мы еще раз можем сделать заключение о том, что необратимость газа классических частиц и возможность его статистического описания определяются очень малым взаимодействием системы с необратимым внешним окружением. Столкновения частиц многократно усиливают возмущения внешнего хаоса и уничтожают далекие корреляции в движении частиц. В результате движение частиц становится однотипным: любая из частиц ведет себя сходным образом, приобретая одночастичную вероятностную функцию распределения. Именно для такой функции и формулируется уравнение Больцмана.

Макроскопические характеристики газа могут вести себя сходным образом как в замкнутой, так и в контактирующей с внешним миром системах. Но чтобы гипотеза о молекулярном хаосе была логически обоснованной, требуется допустить, что у рассматриваемого газа имеется очень малое взаимодействие с необратимым внешним миром. Замкнутые и незамкнутые системы сильно различаются с логической точки зрения.

## 3. Квантовая необратимость

Квантовая необратимость сильно отличается от классической необратимости, но рассуждения предыдущего раздела могут помочь выяснению и этой проблемы.

Допустим опять, что мы имеем замкнутую систему из атомов в сосуде с зеркально отражающимися стенками. Будем считать, что температура газа значительно выше температуры вырождения, так что поведение атомов может быть близким к классическому. Нетрудно видеть, что в замкнутой системе опять имеет место полная обратимость. В самом деле, поведение такой системы описывается уравнением Шрёдингера

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi. \qquad (3)$$

Здесь $\hbar$ — постоянная Планка, $H$ — гамильтониан, а $\psi$ — волновая функция, симметричная по $N$ переменным $\mathbf{r}_1 \ldots r_N$.

Согласно (3) волновая функция $\psi(\mathbf{r}, t)$, где $\mathbf{r}$ — совокупность всех $N$ переменных $\mathbf{r}_i$, может быть найдена по ее начальному значению $\psi(\mathbf{r}, \theta)$ с помощью операции

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \exp\left\{-\frac{\mathrm{i}Ht}{\hbar}\right\}\psi(\mathbf{r}, 0). \tag{4}$$

Матрица $U(t) = \exp\{-\mathrm{i}Ht/\hbar\}$ яляется унитарной, так что $U^{-1}(t) = \exp\{\mathrm{i}Ht/\hbar\}$. Соответственно, имеет место соотношение

$$\psi(\mathbf{r}, 0) = U^{-1}(t)\psi(\mathbf{r}, t) = \exp\left\{\frac{\mathrm{i}Ht}{\hbar}\right\}\psi(\mathbf{r}, t). \tag{5}$$

Другими словами, функция $\psi(\mathbf{r}, 0)$ может быть найдена по заданной $\psi(\mathbf{r}, t)$ с помощью соотношения (4) но с обратным временем: $t \to -t$. Таким образом, соотношения (4), (5) соответствуют утверждению о полной обратимости замкнутой квантовой системы.

Следовательно, необратимость может возникнуть только в результате слабого взаимодействия рассматриваемой системы с необратимым внешним окружением.

Чтобы понять, как возникает необратимость в газе квантовых частиц, удобно начать с рассмотрения некоторого мысленного эксперимента в замкнутой системе. Допустим, что в некоторый начальный момент времени $t = 0$ волновая функция $N$ частиц имеет общий вид $\psi(\mathbf{r}, 0)$, где $\mathbf{r}$ — совокупность $N$ координат вида $\mathbf{r}_i$. Выберем некоторую пробную частицу, например, с координатой $\mathbf{r}_1$. Чтобы избежать усложнений, связанных с тождественностью частиц, допустим, что пробный атом имеет ядро-изомер, т.е. полной тождественности данного атома с другими нет, хотя массы всех атомов одинаковы. Представим теперь функцию $\psi(\mathbf{r}, 0)$ в виде суперпозиции

$$\psi(\mathbf{r}, 0) = \sum_j \psi_j(\mathbf{r}_1)\, C_j. \tag{6}$$

Здесь каждая из функций $\psi_j(\mathbf{r}_1)$ выбрана в виде волнового пакета с некоторым номером $j$, а коэффициенты $C_j$ представляют собой волновые функции всех оставшихся атомов в выбранном нами состоянии с волновой функцией $\psi_j(\mathbf{r}_1)$ у первого атома.

Выберем ширину локализации $\Lambda$ волнового пакета $\psi_j(\mathbf{r}_1)$ таким образом, чтобы пакет не очень сильно уширялся за время $\tau = \lambda/v_{\mathrm{T}}$, где $\lambda$ — длина свободного пробега, а $v_{\mathrm{T}}$ — средняя ("тепловая") скорость атомов. Согласно соотношению неопределенностей

$$\Delta p \Delta x \approx \hbar, \tag{7}$$

неопределенность скорости в пакете шириной $\Delta x \sim \Lambda$ составляет величину $\Delta v \sim \hbar/m\Lambda$, где $m$ — масса атома. Наше условие $\tau \cdot \Delta v \approx \Lambda$ приводит, таким образом, к приближенному соотношению

$$\Lambda^2 \cong \lambda\lambda_{\mathrm{B}}, \tag{8}$$

где через $\lambda_{\mathrm{B}}$ обозначена длина волны де Бройля: $\lambda_{\mathrm{B}} = \hbar/mv_{\mathrm{T}}$.

Рассмотрим теперь, что происходит с волновым пакетом $\psi_j(\mathbf{r}_1, t)$ со временем. В разреженном газе он движется, в основном, свободно, испытывая слабые рассеяния на других атомах. За время $\tau = \lambda/v_{\mathrm{T}}$ начальный пакет практически полностью превратится в рассеянные волны. Эти волны испытывают вторичные рассеяния, затем третичные и т.д. Давайте опять "обернем время", т.е. заменим $t$ на $-t$. Тогда все рассеянные расходящиеся волны превратятся в сходящиеся волны, а вся эволюция волн будет происходить в обратном порядке, пока они не сольются в исходный волновой пакет $\psi_j(\mathbf{r}_1, 0)$. Отсюда следует, что в обратимой системе квантовых частиц должны в равной мере присутствовать и расходящиеся (рассеянные) волны, и сходящиеся волны. Волновая функция такой системы представляет собой очень сложную и очень нежную конструкцию из точно коррелированных сходящихся и расходящихся волн.

Допустим теперь, что рассматриваемый нами газ находится в слабом взаимодействии с необратимым внешним окружением. Первый и главный эффект от такого взаимодействия состоит в разрушении точных фазовых соотношений между сходящимися и расходящимися волнами. Происходит, как говорят, сбой фаз. Ясно, что такое нарушение фаз скажется прежде всего в исчезновении сходящихся волн, как это имеет место при излучении волн в обычной классической электродинамике.

Математически исключение сходящихся волн можно было бы учесть в виде малого затухания рассеянных волн на больших расстояниях от точки рассеяния. В квантовой механике такого рода подход используется в оптической модели ядра, когда при рассеянии нейтрона ядро рассматривается просто как шарик из серого вещества. В основе этого подхода лежит гипотеза о том, что волновая функция "запутавшегося" в ядре нейтрона не способна вступать в суперпозицию с налетающей волновой функцией свободного нейтрона.

В газе квантовых частиц также естественно предположить, что исходная волновая функция $\psi_j(\mathbf{r}_1)$ постепенно исчезает на длине $\sim \lambda$, превращаясь в рассеянные волны. Но этого мало. Квантовая частица не может проявлять себя одновременно во многих областях пространства в условиях, когда когерентность между этими областями полностью разрушена. Поэтому необходимо принять как аксиоматическое утверждение, что по прошествии некоторого промежутка времени порядка нескольких времен рассеяния волновая функция частицы может быть отличной от нуля только в некоторой ограниченной области пространства. На рис. 3 эта область отмечена буквой $D$. Соответствующий эффект можно назвать "коллапсом" волновой функции. Но следует подчеркнуть, что главным здесь является не "стягивание" волновой функции в область $D$, а "уничтожение" волновой функции вне некоторой широкой области $D$.

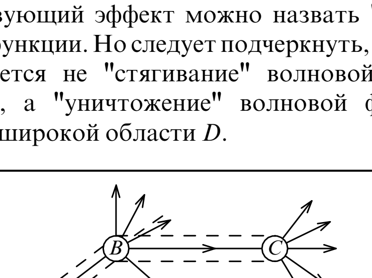


**Рис. 3.** Волновой пакет $A$ рассеивается на втором атоме в области $B$, а затем одна из рассеянных волн рассеивается в области $C$ на третьем атоме. Пусть в области $D$ происходит "широкий коллапс". Тогда, возвращаясь обратно по времени в точку $A$, можно воспроизвести движение волнового пакета с последовательными рассеяниями

В "процессе коллапса" волновая функция частицы искажается, и кажется, что искажается очень сильно: ведь она уничтожается в большей области пространства. Но на самом деле динамическое возмущение системы при этом может быть очень мало. Ведь волновая функция устроена так, что не она сама, а средние с весом $|\psi|^2$ операторы являются физическими величинами. В силу этого волновая функция приобретает скорее информационный, чем динамический характер. Поэтому введение в волновую функцию широкого по пространству формфактора локализации может не очень сильно повлиять на динамические свойства (например, на энергию). Но оно может очень сильно повлиять на информационные характеристики волнового поля.

Итак, допустим, что влияние внешнего окружения сводится к тому, что сходящиеся волны исчезают и что волновой пакет пробной частицы рано или поздно окажется собранным в некоторую область $D$ на рис. 3. Теперь мы может обратным преобразованием по времени вернуться в исходную область $A$. Так как у нас остались только рассеянные волны, то уже в области $C$ предшествующего рассеяния волновая функция сжимается в пакет размером порядка $\Lambda$ и этот пакет прослеживается из точки $C$ в $B$ и из точки $B$ в $A$. В силу эффекта Эйнштейна–Подольского–Розена [1] аналогичный коллапс происходит и у волновых функций атомов, на которых происходило рассеяние. Можно сказать, что любой широкий коллапс в будущем эквивалентен тому, что в настоящем эволюцию волновой функции $\psi_j(\mathbf{r}_1)$ можно рассматривать как результат свободного движения по прямым отрезкам со случайными рассеяниями в областях $B$, $C$ и т.д. У квантовой частицы не только появляются черты классического поведения, но и возникает случайность в каждом акте рассеяния.

Для статистического описания такого квантового объекта естественно ввести матрицу плотности для ансамбля одинаковых систем, т.е. фактически атомов со сходным поведением. При этом диагональные члены одночастичной матрицы плотности, т.е. $|\psi_j(\mathbf{r}_1)|^2$, играют роль функции распределения, а эффект "стирания" недиагональных членов соответствует процессу "пакетизации". При таком подходе все атомы ведут себя однотипным образом, а любая "мгновенная" волновая функция $\psi(\mathbf{r}, t)$ многих атомов может рассматриваться как случайный набор волновых пакетов, вероятностные характеристики которых описываются кинетическим уравнением для функции распределения и дополнительным уравнением для формы и размеров волновых пакетов.

Итак, мы можем сделать вывод о том, что даже слабое воздействие необратимого окружения может сильно изменить волновую функцию системы квантовых частиц. Вместо сложного когерентного состояния, с обратимой эволюцией во времени, мы получаем набор одночастичных волновых пакетов со случайной необратимой эволюцией. Необратимость возникает на временах, больших среднего времени столкновений, а само различие волновых функций замкнутых и открытых систем может иметь гораздо более сложную пространственно-временную структуру.

Чтобы прояснить этот вопрос, вернемся к рис. 2, но в варианте газа квантовых частиц. Как и в классическом случае, соприкосновение чистого состояния с необратимым внешним окружением приводит к возникновению фронта необратимости, схлопывающегося со скоростью звука. Перед фронтом необратимости имеется сложно организованное обратимое чистое состояние. А за фронтом образуется набор случайных одночастичных волновых пакетов. Такое состояние естественно назвать смешанным состоянием, поскольку поведение каждого из пакетов является случайным и происходит по вероятностным законам. Естественно допустить, что ширина фронта необратимости имеет характерный размер порядка средней длины свободного пробега $\lambda$, хотя в общем случае ситуация может быть несколько сложнее, поскольку перед фронтом необратимости могут разрушаться более далекие межатомные квантовые корреляции. Локализация (коллапс) волновой функции любого атома отвечает как бы "измерению" его координаты, и соответственно, волновая функция газа остальных атомов может немедленно прореагировать на это измерение уничтожением части из своих компонент.

Как мы видим, волновые функции замкнутой и открытой систем сильно отличаются друг от друга. В открытой системе волновая функция выглядит как совокупность большого числа волновых пакетов. Такой набор пакетов нельзя считать чистым состоянием общего вида. По этой причине в случае квантовой системы в отличие от классической вполне законно говорить о мгновенной температуре: волновая функция системы в тепловом равновесии заведомо сильно отличается от любого чистого состояния. В любой момент времени ее можно рассматривать как набор волновых пакетов с максвелловским распределением по импульсам.

Точный момент коллапсирования рассеянных волн указать невозможно. Поэтому можно считать, что коллапсирование представляет собой протяженный во времени процесс без фиксации промежуточных состояний. Такой подход отличается от обычной квантовой механики, сформулированной только для обратимых систем.

## 4. Парадокс кота Шрёдингера

Примером своеобразной квантовой необратимости служит знаменитый мысленный эксперимент Шрёдингера [2]. Он получил название "Парадокс кота Шрёдингера". В этой схеме счетчик Гейгера, регистрирующий пролетающие через него $\alpha$-частицы от распада радиоактивных ядер, пристыкован к устройству, которое может разбить ампулу с цианистым калием в случае регистрации частицы. Все устройство вместе с живым котом находится под стеклянным колпаком. Согласно стандартной квантовой механике можно представить себе суперпозицию двух состояний счетчика — с зарегистрированным и незарегистрированным пролетом $\alpha$-частицы. Но тогда должна возникнуть суперпозиция живого и погибшего кота.

Разумеется, без $\alpha$-частицы ни у кого и мысли не могло бы возникнуть о допущении такой странной суперпозиции. Все дело именно в микрочастице, которая по определению должна описываться квантовой механикой. Эта частица вступает во взаимодействие с более сложной системой — счетчиком Гейгера, а через него и с ампулой, и в конце концов, с котом. Естественный подход к описанию всего процесса состоит в расширении системы от $\alpha$-частицы к счетчику и т.д. При этом последовательно увеличивается число динамических переменных и расширяется гильбертово пространство, в котором определена волновая функция. Кажется, что на каждом шаге следует использовать уравнение Шрёдингера. И в результате мы приходим к возможности абсурдной суперпозиции двух необратимых процессов.

Ясно, что основной вывод из этого рассуждения состоит в том, что обратимое уравнение Шрёдингера не годится для описания необратимых процессов (впрочем, это утверждение не является пока общепризнанным). Как мы видели выше, очень малое взаимодействие с необратимым внешним окружением существенно влияет на необратимую эволюцию сложной квантовой системы. Соответственно, и описание такой системы отличается от простого использования уравнения Шрёдингера.

В рассматриваемом здесь случае уравнение Шрёдингера описывает $\alpha$-распад ядра и сферически симметричную волновую функцию вылетающей $\alpha$-частицы. Если радиоактивное ядро находится в воздухе, то уравнение Шрёдингера расширенной системы описывает рассеяние атомов газа на $\alpha$-частице и их возможную ионизацию. Но обратимая эволюция такой системы существует только в течение времени порядка времени свободного пробега атомов газа. Вслед за этим происходит коллапс волновых пакетов атомов газа, который сопровождается коллапсом волновой функции $\alpha$-частицы: из сферически симметричной она превращается в свободно летящий локализованный пакет, сопровождаемый треком рассеянных и ионизованных атомов. Этот явно необратимый процесс можно рассматривать как переброс системы из одного гильбертова пространства в другое с полным исчезновением первоначальной сферически симметричной волновой функции. Если между радиоактивным ядром и счетчиком Гейгера находится вакуум, то описанный процесс коллапса происходит в счетчике Гейгера. Онто и приводит в конце концов к неустранимому печальному исходу.

Итак, в рамках логически обоснованного подхода к описанию необратимых процессов не может быть суперпозиции живого и погибшего кота: процесс развивается только по одному из возможных необратимых сценариев. При этом приходится отказаться от буквального использования обратимого уравнения Шрёдингера и следует ввести коллапсы волновых функций в сценарий их эволюции.

## 5. Заключение

Необратимость процессов в физических системах, будь то классических или квантовых, продолжает быть предметом дискуссий и разных точек зрения вплоть до настоящего времени. Особенно актуален вопрос о необратимости на границе между классическими и квантовыми системами, в частности, при измерении квантовых систем. Общепринятой теории квантовых измерений не существует, и главную трудность в ее построении представляет теория необратимых явлений.

Разреженный газ при не очень низкой температуре представляет собой удобный объект для обсуждения проблем необратимости. Необратимость классического газа рассматривалась со многих точек зрения, начиная с выдающихся работ Больцмана. Необратимость в квантовом газа также является предметом достаточно глубокого теоретического анализа. Необходимость рассмотрения необратимости на микроуровне, т.е. в квантовых процессах, многократно подчеркивалась Пригожиным и его сотрудниками [3–5]. Они обращают особое внимение на то, что классический предел разреженного газа соответствует классическому хаосу с разбегающимися траекториями в фазовом пространстве без интегралов движения. Соответственно, они пытаются развить такой математический аппарат для их описания, который автоматически приводил бы к коллапсам волновых функций.

В настоящей статье мы рассматриваем проблему необратимости на уровне наглядного описания с помощью мысленных экспериментов. Наибольшее внимание уделено логической схеме построения соответствующих рассуждений. Эти рассуждения неотвратимо приводят к выводу, что истоки необратимости лежат за пределами рассматриваемой системы многих атомов. Как мы видели, разреженный газ является очень эффективным усилителем внешних шумов. В газе классических частиц такое "усиление хаоса" возникает из-за неустойчивости траекторий атомов. А в квантовом случае влияние внешнего окружения в виде "затравочного коллапса" в будущем приводит к распадению волновой функции в набор волновых пакетов, похожих на "уширенные" классические частицы. Взаимодействие таких пакетов между собой выглядит как случайный процесс парных столкновений, описываемый с помощью кинетического уравнения для одночастичной функции распределения. Надо полагать, что более точная квантовая теория необратимых процессов будет развита в скором времени.

## Список литературы

1. Einstein A, Podolsky B, Rosen N *Phys. Rev.* **47** 777 (1935)
2. Schrodinger E *Naturwissenschaften* **23** 807 844 (1935)
3. Пригожин И *От существующего к возникающему* (М.: Наука, 1985)
4. Пригожин И, Стенгерс И *Время, хаос, квант* (М.: Прогресс, 1994)
5. Petrosky T, Prigogine I *Physics. Lett.* **A182** 5 (1993)

**CLASSICAL AND QUANTUM IRREVERSIBILITY**

**B.B. Kadomtsev**
*Russian Research Centre Kurchatov Institute, Institute of Nuclear Fusion*
*Moscow, 46, Kurchatov Square, 123182, Moscow, Russia*
*Tel. (095) 196-98 14. Fax (095) 190-42 44. E-mail: kadomtsev@ufnmsk.su*

Irreversibility of physical systems are discussed on the simplest example of rare gas either isolated or being in equilibrium with the walls. The most attention is paid to the analysis of the logical scheme of the theoretical description of the irreversibility.

PACS numbers: 05.70.Ln, **89.70. + c**
Bibliography — 5 references

*Received 8 July 1995*