

УМЕНЬШЕНИЕ ЭНТРОПИИ В РЕЗУЛЬТАТЕ ИЗМЕРЕНИЯ ВРЕМЕНИ ВЫХОДА ИЗ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЫ

О. А. Чичигина*

Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
119899, Москва, Россия

Поступила в редакцию 28 марта 2002 г.

Исследован эффект уменьшения энтропии при переходе от равновесной термодинамической системы к слабо неравновесной. С помощью квазиравновесного распределения Больцмана доказано сохранение свободной энергии при таком переходе. Результаты получены для броуновской частицы в потенциальной яме с малой вероятностью выхода из нее. Этот выход интерпретируется как измерение. Показано, что сам факт измерения приводит к тому, что функция распределения оказывается более узкой по сравнению с функцией, соответствующей системе, не возмущенной измерением, т. е. равновесной. При этом разность энтропий равновесной и возмущенной измерением систем оказывается равной внесенной в систему информации.

PACS: 05.70.-a

1. ВВЕДЕНИЕ

Броуновское движение является одним из фундаментальных понятий статистической физики и термодинамики. Флуктуационные изменения термодинамических параметров можно представлять как движение броуновских частиц в сложных потенциалах. Особенно важным оказывается описание этих флуктуаций в теории фазовых переходов, где изменение параметра порядка соответствует смещению броуновской частицы, а свободная энергия играет роль потенциала, в котором происходит ее движение. Тогда сам фазовый переход будет соответствовать выходу частицы из потенциальной ямы.

Кроме того, броуновская частица является простейшей, но при этом достаточно полной моделью открытой системы, обменивающейся с внешними телами не только энергией, но и информацией. На ее примере удобно прояснить многие фундаментальные вопросы, в том числе второй закон термодинамики в обобщенной формулировке.

Рассмотрим броуновское движение одной частицы в потенциальной яме $U(\mathbf{r}) \leq 0$ под действием внешних шумов, характеризуемых температурой T . Скорость ее движения подчиняется распределению

Максвелла. Причем частица может выйти из этой ямы, преодолев потенциальный барьер (вдоль которого $U = 0$), но вероятность этого события мала. Такой процесс является равновесным по скоростям, но неравновесным по координатам, в связи с тем что время корреляции скорости много меньше времени τ_c корреляции координаты.

В работах [1–4] получена формула для нахождения константы выхода a (т. е. величины, обратной среднему времени жизни τ) квазиравновесной системы. Постоянная a имеет смысл вероятности выхода в единицу времени.

Также в этих работах было показано, что ввиду малости константы a процесс выхода является экспоненциальным, напоминая тем самым спонтанный распад. А именно, вероятность того, что частица, находившаяся в начальный момент в яме, будет там обнаружена в момент времени t , определяется выражением

$$P(t) = \exp(-at). \quad (1)$$

Причем a , согласно [5, 6], зависит от средней энергии частицы в яме следующим образом:

$$a = C \exp\left(\frac{\langle U \rangle}{kT}\right) = \frac{1}{\tau}, \quad (2)$$

где C — некоторая функция, зависящая только от T и не зависящая от U . С другой стороны, эта констан-

*E-mail: chichigina@sqeez.phys.msu.ru

та распада связана с распределением вероятностей по координатам вблизи границы ямы S_0 , что накладывает определенные условия на вид этого распределения вероятностей $w(\mathbf{r})$. Например, для двумерного движения имеем

$$a = \sqrt{\frac{kT}{2m\pi}} L w(S_0) = \frac{1}{\tau},$$

где L — длина границы, через которую происходит выход. Если частица может с течением времени выйти из потенциальной ямы, то процесс движения в яме является неравновесным и, строго говоря, не описывается стационарным распределением вероятностей.

Однако в работах [5, 6] получено стационарное распределение вероятностей по координатам для частицы в потенциальной яме с возможностью выхода из этой ямы. Очевидно, что использование такого распределения возможно только при условии, что время жизни системы велико по сравнению со временем корреляции, $\tau \gg \tau_c$. Это квазиравновесное распределение Больцмана задается выражением

$$w(\mathbf{r}) = \frac{1}{\Omega} \exp\left(\frac{\langle U \rangle - U(\mathbf{r})\alpha}{kT}\right), \quad (3)$$

где Ω — объем ямы. Константа α характеризует неравновесность системы. При $\alpha = 1$ получается просто распределение Больцмана. Для определения α и $\langle U \rangle$ имеем систему уравнений

$$\begin{aligned} \int \exp\left(\frac{-U\alpha}{kT}\right) d\mathbf{r} &= \Omega \exp\left(\frac{-\langle U \rangle}{kT}\right), \\ \int U \exp\left(\frac{-U\alpha}{kT}\right) d\mathbf{r} &= \langle U \rangle \Omega \exp\left(\frac{-\langle U \rangle}{kT}\right). \end{aligned} \quad (4)$$

Первое из этих уравнений получается из условия нормировки, а второе — из того факта, что $\langle U \rangle$ является математическим ожиданием величины U . Легко убедиться, что (3) удовлетворяет всем указанным выше условиям, которые связывают вероятность выхода со средней энергией и с распределением вероятностей по координатам.

Если проводить сравнение формулы (3) с нестационарным распределением, являющимся решением уравнения Фоккера–Планка [7–9], то наше квазиравновесное распределение соответствует условному распределению внутри потенциальной ямы при условии, что выхода еще не произошло.

Также в [5, 6] показано, что $\alpha \geq 1$ при любых T и $U(\mathbf{r})$. Это означает, что распределение вероятностей для неравновесного процесса будет уже, чем для

равновесного, происходящего в яме с тем же потенциальным рельефом, но со стенкой на вершине потенциального барьера, препятствующей выходу частицы. Такая равновесная система будет описываться распределением Больцмана, и все связанные с ней величины мы будем помечать индексом « B ». В соответствии с этим средняя энергия частицы в яме с возможностью выхода меньше, чем в равновесной системе и, согласно (2), среднее время выхода из ямы τ больше, чем среднее время между столкновениями со стенкой в замкнутой области τ_B . Этот результат подтверждается компьютерными экспериментами в [6].

Представим себе эксперимент, в котором мы ловим вышедшую из ямы частицу, запускаем обратно в яму со скоростью, соответствующей упругому удару о стенку, и ждем следующего выхода частицы. Тогда наша система отличается от равновесной системы со стенкой только фактом измерения моментов времени выхода (или столкновения со стенкой). То, что измерение приводит к сужению функции распределения, напоминает проблему квантовых измерений и может служить классическим аналогом частичного коллапса волновой функции.

В классическом случае разница средних времен жизни может быть объяснена тем фактом, что наша модель неравновесного процесса исключает быстрые выходы из потенциальной ямы, т. е. выходы за время меньшее времени корреляции.

Иначе, сужение распределения вероятностей можно интерпретировать как уменьшение эффективной температуры, аналогичное остыванию жидкости в процессе испарения. Только жидкость уменьшает температуру после (в результате) вылета молекулы, а в нашем случае сама возможность выхода (ненулевая вероятность такого события) приводит к уменьшению температуры как коэффициента, определяющего распределение вероятностей.

Можно предположить, что уменьшение энтропии в системе в результате измерения будет равно количеству информации о моменте выхода:

$$S_B - S = I, \quad (5)$$

где S_B — энтропия равновесной системы, описываемой больцмановским распределением, S — энтропия квазиравновесной системы, I — количество информации о времени выхода. Эта связь энтропии и информации для термодинамически изолированной системы обсуждается в работах [10, 11] в связи с рассмотрением так называемого демона Максвелла

ла. Подтверждению и интерпретации результата (5) и посвящена данная работа.

2. ИЗМЕНЕНИЕ ЭНТРОПИИ

Энтропия равновесного состояния без учета аддитивной константы

$$S_B = -k \langle \ln w_B(\mathbf{r}) \rangle = k \frac{\langle U \rangle}{kT} + k \ln \int_{\Omega} \exp\left(\frac{-U}{kT}\right) d\mathbf{r}. \quad (6)$$

Интеграл во втором слагаемом можно преобразовать следующим образом:

$$J = \int \exp\left(\frac{-U}{kT}\right) d\mathbf{r} = \exp\left(\frac{-U^*}{kT}\right) \times \int \exp\left(\frac{(U^* - U)\alpha - (\alpha - 1)(U^* - U)}{kT}\right) d\mathbf{r},$$

U^* подбираем так, чтобы функцию $\exp(-(\alpha - 1)(U^* - U)/kT)$ можно было разложить в ряд, оставив только линейное слагаемое, и ошибка при этом оказалась бы минимальной; тогда получим

$$J = \exp\left(\frac{-U^*}{kT}\right) \int \exp\left(\frac{(U^* - U)\alpha}{kT}\right) \times \left(1 - \frac{(\alpha - 1)(U^* - U)}{kT}\right) d\mathbf{r}.$$

Учитывая систему (4), получаем

$$J = \exp\left(\frac{U^*(\alpha - 1) - \langle U \rangle}{kT}\right) \times \Omega \left(1 - \frac{(\alpha - 1)(U^* - \langle U \rangle)}{kT}\right). \quad (7)$$

Выясним теперь, при каком U^* ошибка разложения в ряд экспоненты окажется минимальной. Введем функцию

$$f(U^*) = \int \exp\left(\frac{-U\alpha}{kT}\right) \times \left\{ \exp\left(\frac{-(\alpha - 1)(U^* - U)}{kT}\right) - \left(1 - \frac{(\alpha - 1)(U^* - U)}{kT}\right) \right\} d\mathbf{r},$$

описывающую эту ошибку, и найдем значение U^* , соответствующее ее минимуму. Получаем

$$\exp\left(\frac{-(\alpha - 1)U^*}{kT}\right) \int \exp\left(\frac{-U}{kT}\right) d\mathbf{r} - \int \exp\left(\frac{-U\alpha}{kT}\right) d\mathbf{r} = 0.$$

Подставляя в первое слагаемое интеграл из (7), а во второе из (4), получаем

$$U^* = \langle U \rangle.$$

Учитывая это, можно упростить формулу (7) и получить выражение

$$J = \exp\left(\frac{-\langle U \rangle(2 - \alpha)}{kT}\right) \Omega. \quad (8)$$

Энтропия квазиравновесного состояния с учетом (3) записывается в виде

$$S = k \frac{\langle U \rangle}{kT} (\alpha - 1) + k \ln \Omega. \quad (9)$$

Изменение энтропии, входящее в (5), с учетом (6), (8) и (9) можно представить в виде

$$S_B - S = \frac{\langle U \rangle_B - \langle U \rangle}{T}. \quad (10)$$

Отсюда также следует, что свободная энергия одинакова для равновесного и квазиравновесного состояний. Для обоих случаев она определяется выражением

$$F = \langle U \rangle + jkT/2 - ST,$$

где j — число степеней свободы частицы, а второе слагаемое является ее средней кинетической энергией.

3. ИНФОРМАЦИЯ О МОМЕНТАХ ВЫХОДА ИЗ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЫ

Квазиравновесная система отличается от равновесной наличием в ней информации о моментах выхода частицы (или, что то же самое, удара о стенку).

Для определения количества информации необходимо дискретизировать время, т. е. задать характерный интервал времени. Таковым является среднее время τ_B между ударами о стенку в равновесном случае. Вероятность выхода на протяжении i -го интервала не зависит от i и равна

$$p = a\tau_B = \tau_B/\tau.$$

Информация, получаемая при указании номера i одного из равновероятных интервалов, во время которого произошел выход частицы, в соответствии с формулой Шеннона (см., например, [7]) равна

$$I = -k \ln p.$$

Учитывая зависимость τ_B от средней энергии (2) и считая, что для равновесной системы она такая же, получаем

$$I = \frac{\langle U \rangle_B - \langle U \rangle}{T},$$

что совпадает с выражением для разности энтропий (10) и подтверждает формулу (5). Итак, мы получили, что убывание энтропии в системе равно количеству введенной в нее информации. Основным интерес представляет возможность моделирования в классической системе эффектов, которые считаются чисто квантовыми. Но все полученные результаты применимы и к квантовым системам.

4. КВАНТОВОЕ КВАЗИРАВНОВЕСНОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ВЕРОЯТНОСТЕЙ

Формула (3) при квантовом описании распределения по i -м состояниям с энергией E_i имеет вид

$$w_i = \exp\left(\frac{\langle E \rangle - E_i \alpha}{kT}\right)$$

и является квазиравновесным распределением Гиббса. При этом в системе (4) интегралы заменяются на суммы:

$$\begin{aligned} \sum \exp\left(\frac{-E_i \alpha}{kT}\right) &= \exp\left(\frac{-\langle E \rangle}{kT}\right), \\ \sum E_i \exp\left(\frac{-E_i \alpha}{kT}\right) &= \langle E \rangle \exp\left(\frac{-\langle E \rangle}{kT}\right). \end{aligned} \quad (11)$$

Аналогичным образом получается соотношение (5) и для квантовой системы.

5. ПРИМЕРЫ ЗАВИСИМОСТИ ИЗМЕНЕНИЯ ЭНТРОПИИ ОТ ГЛУБИНЫ И ФОРМЫ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЫ

Для сокращения записи введем безразмерные переменные

$$\beta = \frac{U_{min}}{kT} < 0, \quad 0 < \gamma = \frac{\langle U \rangle}{U_{min}} < 1,$$

$$0 < u = \frac{U}{U_{min}} < 1, \quad s = \frac{S}{k}.$$

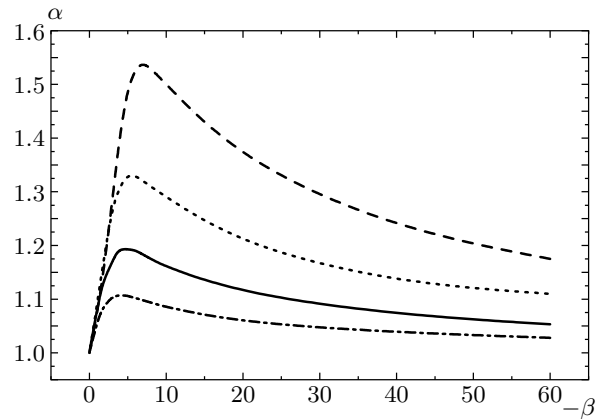


Рис. 1. Зависимость параметра неравновесности α от глубины потенциальной ямы β для параболической (сплошная линия), конусообразной (пунктирная линия) и корневой (штриховая линия) потенциальных ям, а также для ямы вида $U = U_{min}(1 - (r/R)^4)$ (штрих-пунктирная линия)

Рассмотрим параболическую потенциальную яму

$$U = U_{min}(1 - r^2/R^2).$$

Для такой ямы система (11) запишется в виде

$$\begin{aligned} e^{-\beta \alpha} - 1 &= -\alpha \beta e^{-\gamma \beta}, \\ \left(\gamma \beta - \beta - \frac{1}{\alpha}\right) \alpha e^{-\gamma \beta} &= -1. \end{aligned}$$

Для конусообразной ямы

$$U = U_{min}(1 - r/R)$$

получаются уравнения

$$\begin{aligned} \beta \alpha - 1 + e^{-\beta \alpha} &= \frac{1}{2}(\alpha \beta)^2 e^{-\gamma \beta}, \\ \left(\gamma \beta - \beta - \frac{2}{\alpha}\right) \frac{\alpha}{2} e^{-\gamma \beta} &= -1. \end{aligned}$$

Для ямы вида

$$U = U_{min}\left(1 - \sqrt{r/R}\right)$$

система принимает вид

$$\begin{aligned} (6e^{-\beta \alpha} + (\beta \alpha)^3 - 3(\beta \alpha)^2 + 6\beta \alpha - 6) \frac{1}{4}(\beta \alpha)^4 &= e^{-\gamma \beta}, \\ \left(\gamma \beta - \beta - \frac{4}{\alpha}\right) \frac{\alpha}{4} e^{-\gamma \beta} &= -1. \end{aligned}$$

На рис. 1 представлены результаты вычислений зависимости α от β для параболической (сплошная

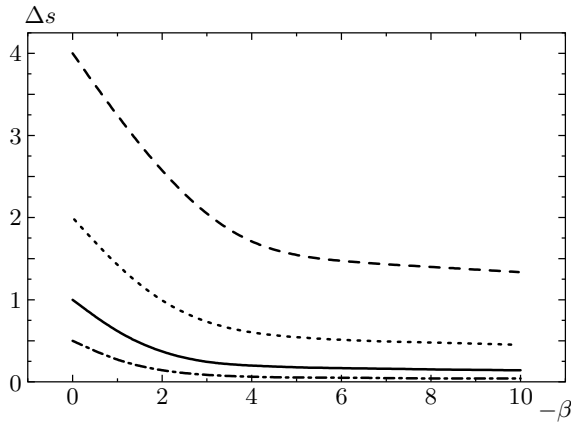


Рис. 2. Зависимость изменения энтропии Δs от глубины потенциальной ямы β для параболической (сплошная линия), конусообразной (пунктирная линия) и корневой (штриховая линия) потенциальных ям, а также для ямы вида $U = U_{min}(1 - (r/R)^4)$ (штрих-пунктирная линия)

линия), конусообразной (пунктирная линия) и корневой (штриховая линия) потенциальных ям, а также для ямы вида

$$U = U_{min}(1 - (r/R)^4)$$

(штрих-пунктирная линия).

Сравнение этих графиков позволяет сделать вывод, что изменение распределения, связанное с неравновесностью процесса, больше всего проявляется при $|\beta| \sim 4$. Причем это изменение тем меньше, чем ближе к прямоугольному оказывается вид потенциальной энергии. Ту же зависимость от формы сосудов можно проследить и в упомянутом выше эффекте остывания жидкости в результате ее испарения.

На рис. 2 представлена зависимость от β изменения энтропии при переходе от равновесной системы к системе с измерениями для тех же случаев, что и на рис. 1. Мы видим медленное убывание разности энтропий с ростом глубины ямы и, соответственно, с уменьшением вероятности выхода из нее.

6. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Мы получили, что влияние измерения моментов выхода из потенциальной ямы сводится к уменьшению эффективной температуры, т. е. к сужению распределения по координатам. Это приводит к уменьшению энтропии на величину, равную количеству полученной информации. Такое измерение можно

сравнить с действием так называемого демона Максвелла и объяснить выполнением второго закона термодинамики в обобщенной формулировке.

В данной работе не обсуждаются технические возможности регистрации вышедших из потенциальной ямы частиц. Но если бы возникающие при этом трудности были преодолены, уменьшение энтропии (или, согласно другой интерпретации, эффективной температуры) в системе можно было бы использовать для создания бозе-конденсата.

Вообще говоря, вычисление времени выхода системы из квазиравновесного состояния под действием флуктуаций является задачей, объединяющей различные разделы современной науки. Такая задача возникает, например, в теориях фазовых переходов [12] и химических реакций, при исследовании динамики сложных биомолекул [13], при вычислении коэффициента поверхностной диффузии в полупроводниках [14], при анализе срыва слежения радиотехнических и оптических систем автосопровождения [15].

Квантовое квазиравновесное распределение Гиббса может быть использовано для учета малой ионизации атомов в газовом лазере и вычисления соответствующих поправок в коэффициентах Эйнштейна. Под малой ионизацией понимается наличие такой концентрации ионов, которая не приводит к лавинным процессам ионизации и переходу к плазме, но влияет на оптические свойства газа.

В заключение автор выражает глубокую благодарность А. В. Нетребко, компьютерные эксперименты которого помогли уточнить и подтвердили результаты вычислений, Б. А. Гришанину, ценные советы которого позволили существенно улучшить статью и понимание ее автором, а также Ю. М. Романовскому, обсуждение с которым результатов подтвердило их применимость в биофизике.

Работа выполнена при финансовой поддержке INTAS (грант 02-0450), РФФИ (грант 01-03-33163а), программы «Научные школы России» (грант 00-15-97788843) и Междисциплинарного научного проекта МГУ.

ЛИТЕРАТУРА

1. Р. Л. Стратонович, *Избранные вопросы теории флуктуаций в радиотехнике*, Сов. радио, Москва (1961).
2. Р. Л. Стратонович, *ЖЭТФ* **81**, 729 (1995).

3. Р. Л. Стратонович, О. А. Чичигина, ЖЭТФ **110**, 1284 (1996).
4. О. А. Чичигина, Вестник Московского Университета, серия 3, «Физика, Астрономия», № 5, 6 (1997).
5. О. А. Чичигина, *Сб. памяти А. Н. Малахова*, под ред. А. И. Саичева, ТАЛАМ, Н. Новгород (2000), с. 98.
6. А. В. Нетребко, О. А. Чичигина, Изв. ВУЗов, прикладная нелинейная динамика **9**, 85 (2001).
7. А. Понтрягин, А. Андронов, А. Витт, ЖЭТФ **3**, 165 (1933).
8. Н. Я. Кramers, Physica **7**, 284 (1940).
9. В. И. Тихонов, М. А. Миронов, *Марковские процессы*, Сов. радио, Москва (1977).
10. Р. Л. Стратонович, *Теория информации*, Сов. радио, Москва (1975).
11. О. А. Чичигина, ЖЭТФ **116**, 57 (1999).
12. Ю. Л. Климонтович, *Статистическая физика*, Наука, Москва (1982).
13. Ю. М. Романовский, А. В. Нетребко, Изв. ВУЗов, Прикладная нелинейная динамика **6**, 31 (1998).
14. Б. И. Болтакс, *Диффузия в полупроводниках*, Физматгиз, Москва (1961).
15. Г. В. Обрезков, В. Д. Разевиг, *Методы анализа срыва слежения*, Сов. радио, Москва (1977).