Р17-2009-6

В. В. Нестеренко*

О РОЛИ АНСАМБЛЕЙ ГИББСА В СТАТИСТИЧЕСКОЙ ТЕРМОДИНАМИКЕ

Направлено в журнал «Успехи физических наук»

*E-mail: nestr@theor.jinr.ru

Нестеренко В. В. P17-2009-6
О роли ансамблей Гиббса в статистической термодинамике

Анализируются причины, заставившие Гиббса при формулировке статистической термодинамики обратиться к ансамблям, обсуждается понятие ансамбля Гиббса и его связь с понятием вероятности. Анализ современной литературы по данной тематике показывает явную тенденцию к использованию термина «ансамбль Гиббса» только как синонима статистического распределения. Это свидетельствует о том, что исходное понятие ансамбля Гиббса как совокупности большого числа экземпляров (копий) рассматриваемой термодинамической системы, служившее в прошлом веке фактически только для определения понятия вероятности, в настоящее время является лишним при формулировке математического аппарата статистической термодинамики и при изложении ее основ. Его место — в интерпретации этой теории, в полной аналогии с тем, как используются квантовые ансамбли для интерпретации квантовой механики.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики им. Н. Н. Боголюбова ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2009

Перевод авторов

Nesterenko V. V. P17-2009-6
The Role of Gibbs Ensembles in Statistical Thermodynamics

The motives are elucidated that force Gibbs to introduce the notion of ensemble when formulating the statistical thermodynamics. The term «Gibbs ensemble» is analysed in detail and its relation to the notion of probability is revealed. The examination of contemporary literature in pertaining field shows clearly that the term «Gibbs ensemble» is used now only as a synonym of the statistical distribution function and nothing else. This implies, in particular, that the initial notion of the Gibbs ensemble, as the set of a large (more precisely, infinite) number of copies of the thermodynamical system under consideration, becomes now unnecessary in the mathematical tools of the statistical thermodynamics and when presenting its essentials too. Furthermore, in its original meaning the term «Gibbs ensemble» served in the last century only for definition of probability. Now a proper place of this term is presumably in interpretation of the statistical thermodynamics in a complete analogy as the quantum ensembles have been proposed for interpretation of quantum mechanics.

The investigation has been performed at the Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2009

ВВЕДЕНИЕ

Хорошо известны трудности в изложении статистической термодинамики*. Даже существует мнение [4], что «...нет ни одного раздела теоретической физики (кроме, конечно, теории элементарных частиц), в котором существовала бы бо́льшая неясность и разноречивость в интерпретации и обосновании основных положений, чем в статистической физике». Вот что писал по этому поводу в своей книге [5] известный специалист в данной области Риого Кубо: «Физика занимает ведущее место среди точных наук, а статистическая механика является одним из ее главных разделов. Если теперь мы скажем, что в обосновании статистической механики имеется много неясностей, то это может вызвать удивление и недоумение читателя. Работая сам в этой области, автор настоящей книги чувствует некоторую неловкость, но положение действительно таково». В этой связи вопросы формулировки и изложения статистической термодинамики заслуживают внимания и обсуждения. Одному из таких вопросов и посвящена данная заметка.

В широко распространенных изложениях статистической термодинамики, как правило, важное место занимают ансамбли Гиббса. Особенно это касается работ по так называемому обоснованию статистической термодинамики. Без критического анализа этого момента может сложиться впечатление, что ансамбли Гиббса являются непременным атрибутом статистической термодинамики. В данной статье предпринята попытка проанализировать причины, побудившие Гиббса и других ученых обратиться к ансамблям при изложении формализма статистической термодинамики, и будут приведены аргументы, показывающие, что роль ансамблей Гиббса чисто иллюстративная. Более точно, ансамбли Гиббса вовсе не требуются для формулировки математического аппарата статистической термодинамики, их место — в интерпретации этой теории в полной аналогии с тем, как используются квантовые ансамбли при интерпретации квантовой теории.

*Термин «статистическая термодинамика» более точно передает суть этой науки по сравнению с широко используемыми названиями «статистическая физика» и «статистическая механика». Вероятно, этой точки зрения придерживались и авторы книг [1–3].

1. АНСАМБЛИ ГИББСА В СТАТИСТИЧЕСКОЙ ТЕРМОДИНАМИКЕ

1.1. Что заставило Гиббса ввести ансамбли? Как известно, основная задача статистической термодинамики — это расчет термодинамических функций (потенциалов) в рамках микроскопической динамики рассматриваемой макросистемы. В результате построения статистической термодинамики вся термодинамика из феноменологической науки превратилась в предсказательную теорию. В наиболее завершенном виде статистическая теория равновесных состояний термодинамических систем была сформулирована Гиббсом. В своей знаменитой книге [6] он изложил основные принципы статистической механики, имея в виду их приложение к «рациональному обоснованию термодинамики». Центральным моментом в этой формулировке является вероятность того, что рассматриваемая макроскопическая система находится в определенном микросостоянии*. Понимая неестественность введения и использования понятия вероятности на фоне детерминированной микроскопической динамики**, Гиббс сразу же дал наглядную интерпретацию такой вероятности с помощью введенных им ансамблей. На с. 30 своей книги [6] Гиббс пишет: «. . . концепция такого ансамбля может служить для уточнения понятия вероятности.» Здесь имеется в виду ансамбль макросистем. В издании этой книги в серии «Классики науки» [7] это место переведено так: «. . . концепция ансамбля позволяет придать точный смысл понятию вероятности.» Внимательное чтение книги Гиббса показывает, что никакой другой задачи, кроме определения понятия вероятности, ансамбли в изложении Гиббса не выполняют.

Понятие вероятности будет обсуждаться далее в нашей статье.

1.2. Как определяются ансамбли Гиббса. В обширной литературе по статистической термодинамике нет исчерпывающего определения ансамблей Гиббса. Наиболее распространенное определение этого понятия сводится к следующему. Пусть мы имеем некоторую макросистему, находящуюся в заданном термодинамическом состоянии, то есть при фиксированных термодинамических переменных, определяющих это состояние. Возьмем N экземпляров этой системы, которые находятся в том же самом термодинамическом состоянии, но различаются своими микросостояниями. При $N \to \infty$ такая совокупность макросистем образует ансамбль Гиббса.

---

*Вероятностная трактовка отдельных вопросов теории теплоты предлагалась уже Клаузиусом, Максвеллом (распределение молекул газа по скоростям), далее этот подход был существенно развит Больцманом в его кинетической теории газов. В своем определении энтропии Больцман принципиально использовал понятие вероятности. В завершенном виде вероятностное описание равновесных термодинамических систем было дано Гиббсом.

**В духе своего времени Гиббс использовал здесь только классическую механику.

Предписание «Возьмем N экземпляров исходной системы» требует пояснения, каким путем мы получаем или создаем (хотя бы мысленно) копии исходной системы. Без такого пояснения совершенно неясно, что будет гарантировать распределение этих N систем, рассматриваемых в один и тот же момент времени t, по их микросостояниям согласно соответствующей термодинамической функции распределения (например, согласно распределению Гиббса или микроканоническому распределению). Иногда для генерации систем, образующих термодинамический ансамбль (чаще всего здесь имеется в виду микроканонический ансамбль Гиббса), предлагается обратиться к рассмотрению движения во времени исходной системы и брать в качестве отдельных элементов ансамбля исходную систему в различные моменты времени [8].

Здесь возникают следующие трудности. Для ансамбля Гиббса, очевидно, требуются копии исходной системы, которые находятся во всех мыслимых микросостояниях (или, по терминологии Гиббса, фазах), а не только в микросостояниях, допустимых микроскопической динамикой. Дело в том, что термодинамические распределения задаются для всех мыслимых микросостояний. Далее, известные оценки показывают, что для прохождения реальной макросистемой всех допустимых микросостояний требуется время, превышающее время жизни Вселенной.

Конечно, можно просто постулировать, что для построения ансамбля Гиббса мы берем N экземпляров рассматриваемой системы, число которых в каждом микросостоянии распределено согласно соответствующей термодинамической плотности вероятностей. Но в этом случае, очевидно, ни о каком «обосновании» феноменологической термодинамики с помощью статистической механики говорить уже не приходится.

В реальности мы никогда и нигде не имеем дела с ансамблями Гиббса. Это — чисто умозрительные конструкции (см. раздел 1.4).

1.3. Ансамбли и вероятность. Попытаемся проследить, как связаны ансамбли с вероятностью. Здесь прежде всего следует обратиться к самому понятию вероятности. Дать определение вероятности оказалось чрезвычайно сложной задачей. Первое определение этого понятия было предложено Якобом Бернулли (1654–1705) вместе с доказательством закона больших чисел [9]. Я. Бернулли определил вероятность довольно субъективно как «степень уверенности, относящуюся к достоверности как часть к целому». Однако как показывают его рассуждения, он вкладывал в это определение тот смысл, который имеет сейчас понятие *классической вероятности*. Впервые определение классической вероятности сформулировал П. С. Лаплас (1749–1827): «Вероятность события есть отношение числа благоприятствующих случаев к числу всех случаев, причем все случаи предполагаются равнозначными». Важным моментом здесь является требование равнозначности всех случаев (см. его популярное изложение теории вероятностей [10]).

Но если нет возможности теоретически подсчитать шансы, благоприятствующие случайному событию, то, наблюдая за частотой этого события, можно *экспериментально* найти его вероятность. Опять-таки Я. Бернулли был первым, кто рассмотрел и такую возможность. В этом случае вероятность — это предел, к которому стремится частота благоприятных исходов при неограниченном возрастании числа испытаний. В прошлом веке Р. Мизес [11] пытался использовать частотное определение вероятности для строго построения соответствующей математической теории. Частотное определение вероятности привлекательно с физической точки зрения, так как оно близко экспериментальному определению вероятности. Поэтому в физической литературе 30-х гг. прошлого века да и позднее можно найти ссылки именно на это определение вероятности [12, 13].

Однако все эти определения не могли удовлетворить математиков. В случае классического определения вероятности неясно, как можно убедиться в том, что данные события равновероятны. По поводу частотного определения вероятности в книге [14] говорится: «Определение вероятности Мизесом приводит к смешению эмпирических и теоретических элементов, а современные математические теории обычно избегают этого смешения. Указанное определение вероятности можно сравнить, например, с определением геометрической точки как предела пятен мела неограниченно убывающих размеров, а подобного определения современная аксиоматическая школа не вводит». Вот как охарактеризовал подход Мизеса к определению вероятности А. Н. Колмогоров [15]: «Мизес не видит за фактом устойчивости частот появления события A при многократном повторении некоторой совокупности условий S объективной зависимости наступления события A от осуществления условий S. Самую постановку вопроса об объяснении причин устойчивости частот Мизес считает бессмысленной; по мнению Мизеса, можно говорить о вероятности $P(A|S)$ только после того, как устойчивость частот наблюдена. Это мнение противоречит практике научного исследования ...».

Д. Гильберт считал построение строгой аксиоматической теории вероятностей одной из важнейших задач современной ему математики*. Очевидно, для решения этой задачи необходимо дать аксиоматическое определение вероятности, безупречное с математической точки зрения. Э. Борель предложил использовать для этой цели теорию множеств. Окончательно строгая математическая теория вероятностей (аксиоматическая теория) было построена А. Н. Колмогоровым в начале 30-х гг. прошлого века [17]. Разумеется, в

*В этой связи интересно отметить следующее. Несмотря на впечатляющие достижения математиков XIX века в решении отдельных важных проблем теории вероятностей (П. С. Лаплас, П. Л. Чебышев, А. М. Ляпунов, А. А. Марков), эта наука еще не завоевала в то время права называться математической дисциплиной. Примечательно, что Феликс Клейн в своих лекциях о развитии математики в XIX столетии [16] даже не упоминает о теории вероятностей.

этой теории не говорится, как экспериментально измерить вероятность случайного события, а формулируются правила нахождения вероятностей одних случайных величин через вероятности таких же величин, с ними связанных. «В рамках чистой математики теория вероятностей воспринимается как частная глава теории меры или теории булевских алгебр» — писал А. Н. Колмогоров [18].

В учебниках по теории вероятностей [17, 19, 20] эта наука излагается без использования понятия ансамблей. Конечно, можно назвать ансамблем совокупность исходов испытаний, о которых говорится в частотном определении вероятности, но это уже не будет ансамбль Гиббса и это практически ничего не добавляет к определению вероятности и не поясняет это понятие, а только запутывает терминологию.

Следует отметить, что необходимость в коллективе (или последовательности независимых испытаний) возникает только *при экспериментальном определении вероятности*. Теория соответствующих методов разрабатывается *математической статистикой*, которая, строго говоря, не принадлежит собственно теории вероятностей, имеющей дело не с классическим, а с аксиоматическим определением вероятности. Но, конечно, нельзя связывать экспериментальные методы определения вероятности с самой вероятностью и тем самым лишать это понятие статуса объективной характеристики соответствующего физического объекта или явления. Нельзя считать, что вне заданной процедуры экспериментального определения вероятности это понятие не представляет никакого физического смысла. В противном случае получается, что физическое содержание вероятности привносит экспериментатор, решивший заняться ее «измерением».

Таким образом, следует констатировать, что в настоящее время нет такого определения вероятности, которое удовлетворяло бы одновременно и математиков и физиков*. При сопоставлении вероятностной теории с реальным миром необходимо делать предположение (явно или неявно), что «двойником» математической вероятности является частота повторения данного события**. Вот как писал об этом А. Н. Колмогоров [23]: «Познаватель-

*Неудовлетворенность определением вероятности в свое время (1917 г.) побудила С. А. Богуславского отказаться от употребления этого термина в его магистерской диссертации [21], посвященной развитию метода Гиббса. В предисловии к диссертации говорится: «По господствующему в настоящее время в теоретической физике воззрению Больцмана энтропия связывается с «вероятностью» состояния системы. Принцип Больцмана оказался очень продуктивным и позволил решить ряд задач. Но такое истолкование термодинамических функций не представляется мне удовлетворительным, потому что при ближайшем рассмотрении понятие вероятности оказывается в значительной степени произвольным и установление его *a priori* затруднительно. Поэтому в настоящей книге читатель не встретит термина «вероятность».

**Именно так поступают авторы прекрасной по своей строгости и четкости книги [22] при изложении квантовой механики без введения каких-либо ансамблей (см. раздел 2).

ная ценность теории вероятностей обусловлена тем, что массовые случайные явления в своем совокупном действии создают строгие закономерности. Само понятие математической вероятности было бы бесплодно, если бы не находило своего осуществления в идее частоты появления какого-либо результата при многократном повторении однородных условий». Задача математической статистики — разработка надежных методов такого сопоставления (проверки вероятностных предсказаний). Теорию вероятностей можно применять к описанию явлений, которые обнаруживают статистическую устойчивость, и как показывает опыт, таких явлений в окружающем нас мире немало.

Для проверки вероятностных предсказаний требуются массовые явления, коллективы объектов*. Однако это вовсе не означает, что эти предсказания не имеют никакого отношения к отдельному явлению или объекту из рассматриваемой совокупности. Для количественной характеристики этого отношения в прикладных целях широко используются такие вероятностные понятия, как риск, вероятность отказа при одном испытании и т. д. Данные понятия являются базовыми в теориях надежности и массового обслуживания, в оценке всевозможных рисков (например, при оценке влияния неблагоприятных факторов окружающей среды на здоровье человека и т. д.). Основная задача этих теорий — указать наиболее эффективные способы достижения приемлемого риска или достаточной надежности. Можно сказать, что эти понятия количественно характеризуют *потенциальные возможности* данной совокупности условий произвести тот или иной эффект или оказать определенное действие.

Законы, управляющие термодинамическими системами в состоянии равновесия, удается сформулировать на вероятностном языке. В математическом аппарате статистической термодинамики, как и любой другой вероятностной теории, естественно использовать математическое определение вероятности, которое формулируется без ссылок на какие-либо ансамбли.

1.4. Можно ли обойтись без ансамблей Гиббса при формулировке статистической термодинамики? Интересно отметить, что сам Гиббс вовсе не требовал *обязательного* введения ансамблей при формулировке статистической термодинамики, а рассматривал это как удобный для него способ изложения. Вот что он писал по этому поводу в Предисловии к своей книге (см. ссылку [6], с. 12): «Для некоторых целей, однако, *желательно* [курсив мой — Н. В. В.] принять более широкую точку зрения. Мы можем представить себе большое число систем одинаковой природы, но различных по конфигурациям и скоростям, которыми они обладают в данный момент, так, что охватывается каждая мыслимая комбинация координат и скоростей. При

*Р. фон Мизес распространял это условие и на само понятие вероятности. Он писал (см. [11], с. 16): «Сперва должен быть налицо коллектив, тогда только можно говорить о вероятностях».

этом можно поставить себе задачей не прослеживать определенную систему через всю последовательность ее конфигураций, а установить, как будет распределено все число систем между различными возможными конфигурациями и скоростями в любой требуемый момент, если такое распределение было задано для какого-либо момента времени». Таким образом, Гиббс вовсе не запрещал других способов изложения предложенной им теории.

Действительно, дальнейшее развитие науки показало, что математический аппарат статистической термодинамики вовсе не требует введения и использования ансамблей. Для расчета термодинамических функций достаточно трактовать вероятность состояния макроскопической системы как *математическую вероятность* [17].

При формулировке статистической термодинамики (классической и квантовой) на строгом математическом языке [24–28] ансамбли оказываются лишними. Вот мнение автора одной из таких работ [26]: «...проводимое многими авторами систематическое привязывание к каждому из возможных состояний данной системы некоторой особой системы той же структуры (что и создает «ансамбль») совершенно излишне и только обременяет усвоение теории; мы предпочитаем иметь дело с множеством самих возможных состояний (фазовым пространством в классической физике), а не с множеством систем, привязанных к этим состояниям и лишь усложняющих картину явления». Здесь необходимо уточнить: привязываемые системы надо, на самом деле, непрерывно «размазывать» по фазовому пространству так, чтобы локальная плотность их числа в данной точке была пропорциональна значению соответствующей функции распределения в этой точке фазового пространства. При этом коэффициент пропорциональности должен быть одним и тем же по всему фазовому пространству. Трудно предположить, что возникающая здесь громоздкая конструкция может способствовать формированию наглядной картины исследуемой проблемы. Поэтому естественно идти более простым путем [26]: «...вместо того, чтобы размещать в фазовом пространстве целый "ансамбль" однотипных систем и затем следить за эволюцией этого "ансамбля" мы просто говорили о естественном движении самого фазового пространства, полагая, что образ непрерывно преобразующегося в самого себя пространства (связанный, кстати сказать, с простой гидродинамической моделью) в одинаковой мере прост и убедителен как для математика, так и для физика и только теряет в этой своей простоте от не вызываемого никакой необходимостью привешивания к каждой точке фазового пространства некоторой физической системы».

Вместо усреднения по микроканоническому или каноническому ансамблю следует говорить о микроканоническом или каноническом усреднении с использованием соответствующих распределений. Именно распределения занимают центральную роль в современной математической статистической физике [29]. При этом термин «ансамбль» иногда используется, но только как *синоним* соответствующей функции распределения (см., например, с. 16 в книге Р. А. Минлоса [29]). То же самое мы находим и в других руководствах. Дж. Глимм и Ф. Джаффе на с. 47 своей книги [30] пишут: «Равновесное распределение в пространстве состояний изолированной системы называется микроканоническим ансамблем Гиббса. Предположение состоит в том, что априорная вероятность классического состояния с энергией E пропорциональна $\delta(H-E)\,d\mu_N$». В качестве априорной вероятности естественно использовать ее математическое (т. е. аксиоматическое) определение.

1.5. Нужны ли ансамбли Гиббса для сравнения предсказаний статистической термодинамики с экспериментом? Гиббс в своей книге не обсуждает связь развиваемой им теории с экспериментом. Это естественно, так как он поставил задачу, прежде всего, рационального обоснования термодинамики и выполнил ее, показав, что основные термодинамические функции, построенные в предложенном им формализме, имеют те же свойства, что и соответствующие потенциалы в феноменологической термодинамике. А связь термодинамики с экспериментом хорошо известна.

Однако в последующем было выяснено, как устанавливается связь с экспериментом в самой статистической термодинамике. Ситуацию здесь удобно проиллюстрировать следующими символическими уравнениями. Теоретические предсказания рассчитываются по схеме

$$Q_{\text{теор}} = \int Q(q,p)\, f(q,p)\, dq\, dp\,, \tag{1}$$

где $f(q,p)$ — постулируемая функция распределения. Это может быть, например, каноническое распределение Гиббса для системы с гамильтонианом $H(q,p)$ при температуре θ:

$$f(q,p) = \exp\left[-H(q,p)/\theta\right],$$

Экспериментальные значения той же величины Q мы получаем путем усреднения по времени измерений этой величины, выполненных над *одним экземпляром термодинамической системы*

$$Q_{\text{эксп}} = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \int_0^T Q(t)\, dt\,. \tag{2}$$

Иначе мы и не можем поступить, например, мы не можем на эксперименте следовать формуле (1) по той простой причине, что мы не можем построить на эксперименте соответствующий ансамбль для рассматриваемой термодинамической системы (ансамбль Гиббса). Невозможно физически построить даже несколько образцов исходной термодинамической системы, так как для этого надо было бы «заморозить» все значения координат и скоростей атомов в системе. Поэтому делается *предположение*, что образом (двойником) $Q_{\text{теор}}$ в реальном мире и является $Q_{\text{эксп}}$.

Теоретическое доказательство равенства правых частей формул (1) и (2) (в определенном смысле это связано с доказательством эргодической гипотезы) означало бы, что статистическая термодинамика не является фундаментальной теорией, а она выводима из законов микроскопической динамики. Здесь уместно отметить, что предел $T \to \infty$ в правой части формулы (2) является только лишь напоминанием о попытках доказать эргодическую гипотезу и свидетельствует о том, что эта гипотеза не имеет отношения к физике процессов, происходящих в реальных термодинамических системах. В таких системах равновесие всегда устанавливается за *конечное* время (характерное для каждой системы время релаксации). И этого времени, как правило, достаточно для экспериментального определения характеристик термодинамической системы.

Таким образом, на эксперименте мы никогда не имеем дела с ансамблем Гиббса, а работаем с одним экземпляром термодинамической системы.

Несколько иная ситуация имеет место в квантовой механике, что будет рассмотрено в следующем разделе.

2. ИНТЕРПРЕТАЦИЯ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ С ПОМОЩЬЮ КВАНТОВЫХ АНСАМБЛЕЙ

Интересно проследить, как возник интерес к ансамблям Гиббса в квантовой механике, которая дает вероятностное описание физической реальности. Основное уравнение этой теории — уравнение Шредингера — записывается для волновой функции. Квадрат модуля этой функции дает соответствующую плотность вероятности. Создатели квантовой механики уделяли большое внимание интерпретации этой теории (копенгагенская трактовка квантовой теории, развитая в основном Н. Бором на основе принципа дополнительности, предложенного В. Гейзенбергом).

Математическая формулировка основ квантовой механики была предложена в 1932 г. И. фон Нейманом [12]. При анализе связи квантовой теории с экспериментом он обратился к ансамблям Гиббса. В дальнейшем это послужило основой для построения ансамблевой интерпретации квантовой теории.

В нашей стране интерпретация квантовой теории, базирующаяся на понятии квантовых ансамблей, была предложена К. В. Никольским [31] и развивалась Л.И. Мандельштамом [32], и особенно Д. И. Блохинцевым [33–35]. В статье [36] можно найти обсуждение работ американских физиков по данной теме. Квантовые ансамбли строятся в полной аналогии со статистическими ансамблями Гиббса*. Другие подходы к интерпретации квантовой механики рассматриваются, например, в книге М. А. Маркова [37].

Как уже было отмечено выше, именно анализ связи квантовой теории с экспериментом и побудил И. фон Неймана обратиться к ансамблям Гиббса. Вот что он писал на с. 22 своей книги [12]: «Забудем всю квантовую механику и будем держаться только следующих положений. Предположим, что дана система $\boldsymbol{S}$, которая для экспериментатора характеризуется заданием всех эффективно измеримых в ней величин и их взаимных функциональных зависимостей. ...Но исследование физических величин на одном-единственном объекте $\boldsymbol{S}$ не является единственным, что мы можем делать — особенно тогда, когда возникает сомнение относительно одновременной измеримости различных величин. В таких случаях можно рассматривать и большие статистические ансамбли, состоящие из многих систем $\boldsymbol{S}_1, \ldots, \boldsymbol{S}_N$ (т. е. из N экземпляров системы $\boldsymbol{S}$, N велико)». Предлагая забыть всю квантовую теорию перед введением ансамблей, фон Нейман тем самым отделяет математическую часть квантовой теории от ансамблей Гиббса и далее поясняет, почему следует вводить такие ансамбли, при этом он буквально повторяет аргументы Гиббса: «Такие ансамбли, называемые коллективами, вообще необходимы, чтобы можно было обосновать теорию вероятностей как науку о частотностях. Они были введены Р. фон Мизесом, который осознал их значение для теории вероятностей и осуществил их надлежащее построение (ср., например, его книгу: Wahrscheinlichkeit, Statistik und ihre Wahrheit, Berlin, 1928)» [русск. перевод этой книги [11]]. Такая мотивировка вполне естественна для начала 30-х гг. прошлого века**.

Сторонники ансамблевой интерпретации квантовой механики, в отличие от фон Неймана, максимально сосредоточились на том факте, что для сравнения вероятностных предсказаний квантовой теории с реальностью требуются неоднократные постановки эксперимента с *разными* экземплярами исходной квантовой микросистемы, то есть массовые явления, для воспроизведения которых требуются ансамбли исходной микросистемы.

---

*Интересно отметить, что книга Гиббса [6] впервые была переведена на русский язык К. В. Никольским. В издании [6] помещено предисловие переводчика.

**Возвращаясь опять к статистической термодинамике, интересно отметить, что фон Нейман в своей работе 1929 г. «Доказательство эргодической теоремы и H-теоремы в новой механике» [38], перевод которой помещен в качестве дополнения к русскому изданию его книги [12], использует термин «ансамбль» как синоним статистического оператора. На с. 342 книги [12] читаем: «Теперь мы можем определить микроканонический ансамбль, принадлежащий состоянию ψ, т. е. задать его статистический оператор». Здесь фон Нейман рассматривает квантовую статистику, в случае классической статистики это соответствовало бы отождествлению микроканонического ансамбля с микроканоническим распределением. Как было отмечено нами ранее, эта тенденция стала доминирующей в современной математической статистической физике [25, 26, 29].

Вопреки предложению фон Неймана — давайте «забудем всю квантовую механику» перед тем, как обратиться к ансамблям, — сторонники ансамблевой интерпретации ввели фактически квантовые ансамбли в саму математическую схему квантовой теории, заявив, что квантовая теория описывает только такие коллективы, а не отдельные микрообъекты*. Наиболее четко это было сформулировано Д. И. Блохинцевым [39]: «Основным понятием квантовой механики является понятие волновой функции. Основным методом квантовой механики является статистический метод. С помощью волновой функции можно предсказать вероятности результатов различных взаимодействий микрочастиц, находящихся в данном состоянии. ... Применение статистического метода всегда предполагает наличие определенных коллективов явлений — ансамблей. В квантовой механике такой ансамбль образуется совокупностью независимых частиц (или сложных микросистем), находящихся в одинаковых внешних условиях, которые определяются классическими величинами». Эту мотивировку введения квантовых ансамблей и эту формулировку понятия квантового ансамбля Дмитрий Иванович практически не менял в течение последних 25 лет своей жизни. В последней работе по квантовой механике [34] он излагает эти вопросы почти теми же словами (лекция 2 в книге [34]).

Прежде всего следует отметить, что в этих рассуждениях Д. И. Блохинцева отсутствует четкое разделение теоретического вероятностного описания и статистических методов, необходимых для проверки вероятностных предсказаний на эксперименте (то есть нет разделения теории вероятностей и математической статистики, о чем мы говорили в разделе 1.3).* На самом деле, в теоретической части квантовой теории основным методом является теория вероятностей, а при сравнении предсказаний квантовой теории с реальностью используются, как и в любой вероятностной теории, статистические методы.

Но сам по себе ансамбль еще не позволяет связать вероятностное предсказание теории с экспериментом. Поэтому Д. И. Блохинцев делает еще одно предположение [34]: «Предполагается, что в серии независимых измерений возникает вполне определенное продиктованное обстановкой M распределение результатов измерения, которое и предсказывается вероятностью». Как уже отмечалось выше (см. конец раздела 1.3), этого предположения вполне

---

*Здесь позиция последователей ансамблевой интерпретации квантовой механики резко отличается от трактовки любой физической теории, использующей вероятностное описание (например, турбулентности). Мы ведь не утверждаем, что эта теория описывает только ансамбль турбулентных потоков (жидкости или газа) и не имеет отношения к отдельному турбулентному потоку.

*В. А. Фок в последнем прижизненном издании своей книги [40] сделал единственное уточнение в своей интерпретации квантовой теории, а именно, он заменил термин «статистическая интерпретация» термином «вероятностная интерпретация».

достаточно, чтобы связать с экспериментом предсказания любой вероятностной теории, в том числе и квантовой механики, не вводя ансамбли (см. далее формулировку квантовой теории Л. Д. Фаддеевым и О. Ф. Якубовским).

При обращении к ансамблям при интерпретации квантовой механики возникает следующая трудность. До появления наблюдателя, конечно, у нас нет никаких ансамблей, а существует только единственный микрообъект, и естественно возникает вопрос, относятся ли предсказания квантовой механики к этому объекту. Квантовые ансамбли, по крайней мере в чистом виде, когда число микрообъектов стремится к бесконечности, отсутствуют в природе, а их «приготовляет» только экспериментатор.

Таким образом, и в квантовой теории ансамбли приводят к довольно сложной картине изучаемого явления.

Здесь следует напомнить о принципиальном отличии квантовой механики от статистической термодинамики, которое проявляется, в частности, в различных схемах связи с экспериментом этих фундаментальных теорий. Характеристики термодинамической системы извлекаются (как средние по времени) из экспериментов над одной и той же макроскопической системой (схема (2) предыдущего раздела). В квантовой механике это принципиально невозможно, и здесь приходится следовать схеме (1), то есть предполагать, что получаемые на эксперименте данные являются двойником математического понятия вероятности. Четко это предположение формулируется в лекциях Л. Д. Фаддеева и О. Ф. Якубовского [22] по квантовой механике для студентов-математиков. На с. 10 этой книги читаем: «Мы будем считать, что условия эксперимента определяют состояние системы, если при многократном повторении опыта при этих условиях для всех наблюдаемых возникают вероятностные распределения их возможных значений; более точно: состояние системы сопоставляет каждой наблюдаемой меру на вещественной оси».

Без введения квантовых ансамблей излагал квантовую механику и В. А. Фок [40], который считал, что волновая функция относится к исходному микрообъекту и описывает его *потенциальные возможности* иметь то или иное значение физических величин. В. А. Фок фактически дает свое определение вероятности как количественной характеристики потенциальной возможности появления случайного события. Это определение можно отнести к уже обсуждавшемуся нами выше ряду определений вероятности. Оно близко к определению Я. Бернулли.

В определении вероятности, данном Фоком, нет обращения к ансамблю или статистическому коллективу. Но он отмечает (см. книгу [40], с. 95), что для экспериментального определения численного значения вероятности «. . . необходима статистика осуществления этих [потенциальных. — *Н. В. В.*] возможностей, т. е. многократное повторение опыта. Отсюда ясно, что вероятностный характер квантовой теории не исключает того, что она основывается на свойствах отдельного объекта».

При определении вероятности сторонники ансамблевой интерпретации квантовой теории следуют (явно или неявно) за Р. фон Мизесом, который считал, что необходимо сначала предъявить коллектив, к которому относится это понятие, и только после этого говорить о вероятности. Именно разная трактовка понятия вероятности Д. И. Блохинцевым и В. А. Фоком и явилась основной причиной их противостояния в вопросе интерпретации квантовой теории.

Интерпретация новой физической теории — это установление ее связи и связи ее понятий с уже сложившимися физическими представлениями. В процессе интерпретации теории более полно и четко формулируются ее основные понятия, выясняется их физическое содержание. Важным здесь является также и выяснение того, какие вопросы можно ставить в рамках новой теории и получать на них содержательные ответы, а на какие вопросы теория в принципе ответов не дает.

Но, конечно, здесь нельзя забывать и того, что интерпретация той или иной физической теории — это субъективный процесс, в котором явно участвует человек. Поэтому заведомо нельзя ввести объективный критерий правильности интерпретации. Можно только говорить об относительной полезности, простоте, наглядности, эффективности той или иной интерпретации. И не более того.

Необходимо еще раз подчеркнуть, что все эти вопросы лежат за рамками основного математического аппарата квантовой механики и никак не влияют на него и на предсказания, получаемые с его помощью.

3. К ОБОСНОВАНИЮ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ТЕРМОДИНАМИКИ

Большая работа была проведена и проводится по так называемому обоснованию статистической термодинамики (см., например, книгу [41] и цитируемую там обширную литературу). Эти исследования многоплановые, и здесь получен целый ряд хорошо известных важных результатов.

Мы хотим кратко обсудить только один аспект этой деятельности, а именно, попытаемся выяснить, что же следует понимать под обоснованием статистической термодинамики. Дело в том, что термин «обоснование» — нечеткий*. Его ошибочно можно трактовать и как вывод статистической термодинамики из микроскопической классической или квантовой динамики. Разумеется, это заведомо неосуществимо, что следует хотя бы из такого очевидного факта, как невозможность рассчитать постоянную Больцмана в рамках микроскопической динамики. Причем здесь требуется, чтобы эта кон-

*Такая терминология — обоснование — восходит к Гиббсу (см. название его книги [6]).

станта имела одно и то же численное значение для всех физически приемлемых взаимодействий между молекулами и атомами. Этот простой и наглядный довод почему-то не отмечается в работах по обоснованию статистической термодинамики.

Можно констатировать, что общепринятой становится точка зрения, согласно которой функции распределения в статистической термодинамике необходимо постулировать*, так как их математически строгий вывод из микроскопической динамики невозможен**. Именно благодаря этому обстоятельству статистическая термодинамика и является *фундаментальной наукой*, не сводимой к другим теориям.

В книге [42] «обоснование статистики» трактуется как «установление связи физической статистики и механики». Нам кажется, что именно так и надо понимать обоснование статистической физики. И для этой цели, вероятно, полезно использовать ансамбли Гиббса.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, причиной для введения ансамблей Гиббса в статистическую термодинамику является попытка наглядно проинтерпретировать (или определить) понятие вероятности, которое выступает фундаментальным понятием в этой теории. Аналогичная мотивировка имеет место и при интерпретации квантовой теории с помощью квантовых ансамблей. Математический аппарат рассматриваемых теорий и само понятие вероятности не требуют введения каких-либо ансамблей.

Во времена Гиббса (начало прошлого века) теория вероятностей еще не была окончательно сформировавшейся математической дисциплиной. Эта математическая теория как раз в то время и создавалась, и общепризнанной единой точки зрения по этому предмету у математиков и физиков не было. Отношение к ней ученых было неоднозначным (характерный пример здесь — С. А. Богуславский), поэтому естественно стремление Гиббса и его последователей в то время дать физически наглядное определение вероятности. Но в последующем теория вероятностей получила строгую аксиоматическую основу и стала полноправным разделом математики. Поэтому при формулировке той или иной физической дисциплины, использующей вероятностное описание, сейчас совершенно не требуется разъяснять понятие вероятности на элементарном уровне. Как справедливо отмечают математики, это только усложняет

*Это достаточно сделать для одного распределения, например, микроканонического, а остальные распределения можно получить из него путем известных рассуждений.

**Об этом наглядно свидетельствуют, например, исследования по доказательству эргодической гипотезы.

картину физического процесса. Да и сами физики все больше используют термин «ансамбль» только как синоним статистического распределения и не вкладывают в него больше никакого иного содержания. Такова реальная ситуация в этой области науки. Зачем же при обучении затуманивать изложение статистической термодинамики, «привязывая» к каждой точке фазового пространства копии исходной системы?

Весь ход развития теоретической физики убедительно свидетельствует о явной тенденции возрастания роли математики в создании новых физических теорий. Эта тенденция особенно доминирует в настоящее время (дополнительные измерения пространства-времени, суперсимметрия, теория струн, некоммутативная геометрия и т. д.). Основное внимание теоретиков уделяется предсказательной силе теории, а физическая интерпретация новых теорий уходит на второй план. Утверждается мнение, согласно которому понимание физической сущности того или иного объекта или явления сводится к их адекватному математическому описанию.

В такой ситуации естественно стремиться более экономно формулировать новые теории и концентрированно излагать уже сформировавшиеся теории, четко выделяя в них суть, ядро. В отношении статистической термодинамики это, очевидно, означает, что из ее математического аппарата следует убрать понятие ансамблей Гиббса, так как оно просто дублирует здесь четко определенное (физически и математически) понятие «функции распределения».

Этот момент, как нам кажется, важен и с педагогической точки зрения. Дело в том, что до сих пор имеет место довольно большой разброс в подходах к изложению основ статистической физики (см., например, книги [1, 2, 4, 5, 8, 13, 29, 43–45]). Разумеется, это усложняет усвоение и понимание данного предмета теми, кто приступает к его основательному изучению.

В некоторых современных руководствах уже прослеживается тенденция к уменьшению внимания, уделяемого ансамблям Гиббса и эргодической гипотезе при изложении основ статистической термодинамики (ср., например, книги [43] и [29, 44]).

Автор считает своим приятным долгом поблагодарить Б. М. Барбашова, В. Б. Приезжева, А. Б. Пестова и А. Л. Куземского, внимательно прочитавших данную работу и высказавших ряд замечаний и пожеланий.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Шредингер Э.* Статистическая термодинамика. М.: ИЛ, 1948.
2. *Фаулер Р. и Гуггенгейм Э.* Статистическая термодинамика. М.: ИЛ, 1949.
3. *Киттель Ч.* Статистическая термодинамика. М.: Наука, 1977. С. 336.
4. *Ансельм А. И.* Основы статистической физики и термодинамики. СПб.: Лань, 2007.

5. *Кубо Р.* Статистическая механика. М.: Мир, 1967.
6. *Гиббс Дж. В.* Основные принципы статистической механики, излагаемые со специальным применением к рациональному обоснованию термодинамики. М.-Л.: ОГИЗ-Гостехиздат, 1946.
7. *Гиббс Дж. В.* Термодинамика. Статистическая механика. Серия «Классики науки». М.: Наука, 1982. С. 364.
8. *Хилл Т.* Статистическая механика. Принципы и избранные приложения. М.: ИЛ, 1960.
9. *Бернулли Я.* О законе больших чисел. Ред. Ю. В. Прохоров. М.: Наука, 1986.
10. *Лаплас П. С.* Опыт философии теории вероятностей. М. 1908.
11. *Мизес Р.* Вероятность и статистика. Перевод с немецкого. Изд. 3, стереотип. М.: КомКнига, 2007.
12. *фон Нейман И.* Математические основы квантовой механики. Пер. с нем. изд. 1932 г. М.: Наука, 1964.
13. *Леонтович М. А.* Введение в термодинамику. Статистическая физика. М.: Наука, 1983.
14. *Крамер Г.* Математические методы статистики. М.: ИЛ, 1948.
15. *Колмогоров А. Н.* БСЭ-2. 1954. Т. 27. С. 414.
16. *Клейн Ф.* Лекции о развитии математики в XIX столетии. Т. 1. М.: Наука, 1989. Т. 2. С. 453. М.-Ижевск: ИКИ, 2003. С. 240.
17. *Колмогоров А. Н.* Основные понятия теории вероятностей. М.-Л.: ОНТИ, 1936.
18. *Колмогоров А. Н.* Избранные труды. Т. 2. С. 563. М.: Наука, 2005.
19. *Гнеденко Б. В.* Курс теории вероятностей. Серия «Классический университетский учебник». Изд. 8-е. М.: Едиториал УРСС, 2005.
20. *Гнеденко Б. В., Хинчин А. Я.* Элементарное введение в теорию вероятностей. М.: Физматлит, 1970.
21. *Богуславский С. А.* Избранные труды по физике. М.: Физматлит, 1961. С. 146.
22. *Фаддеев Л. Д., Якубовский О. Ф.* Лекции по квантовой механике для студентов математиковю. Л.: Изд-во ЛГУ, 1980.
23. *Колмогоров А. Н.* Доклад на Международном математическом конгрессе в Ницце «Комбинаторные основания теории вероятностей и исчисления вероятностей» (1970 г.) Избранные труды. Т. 2. М.: Наука, 2005. С. 575.
24. *Хинчин А. Я.* Об аналитическом аппарате физической ститистики. М.-Л.: Из-во АН СССР, 1950.
25. *Хинчин А. Я.* Математические основания статистической механики. [репр. изд.] М.-Ижевск: РХД, 2003.
26. *Хинчин А. Я.* Математические основания квантовой статистики. 2-е изд. М.: КомКнига, 2006.
27. *Петрина Д. Я., Герасименко В. И., Малышев П. В.* Математические основы классической статистической механики. Киев: Наук. думка, 1985.
28. *Боголюбов Н. Н.* // Собрание научных трудов: В 12 т. Т. 6: Равновесная статистическая механика. М.: Наука, 2006.

29. *Минлос Р. А.* Введение в математическую статистическую физику. М.: МЦНМО, 2002.
30. *Глимм Дж., Джаффе А.* Математические методы квантовой физики. Подход с использованием функциональных интегралов. Пер. с англ. под ред. Р. А. Минлоса. М.: Мир, 1984.
31. *Никольский К. В.* Квантовые процессы. М.-Л.: Гос. изд-во технико-теорет. лит., 1940.
32. *Мандельштам Л. И.* // Полн. собр. трудов: В 5 т. М.: Изд-во АН СССР, 1948–1950. Т. 5. Под ред. М. А. Леонтовича.
33. *Блохинцев Д. И.* Основы квантовой механики. 7-е изд., стер. СПб.: Лань, 2004.
34. *Блохинцев Д. И.* Квантовая механика: Лекции по избранным вопросам. 2-е изд., доп. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1988.
35. *Блохинцев Д. И.* Принципиальные вопросы квантовой механики. 2-е изд., испр. М.: Наука, 1987.
36. *Печенкин А. А.* Ансамблевые интерпретации квантовой механики в США и СССР // Вестник Московского университета. Серия 7: Философия. 2004. №6. С. 103.
37. *Марков М. А.* О трех интерпретациях квантовой механики. М.: Наука, 1991.
38. *von Neumann J.* // Zs. f. Phys. 1929. Bd. 57. S. 30–70.
39. *Блохинцев Д. И., Драбкина С. И.* Квантовая механика // БСЭ. 2-е изд. 1953. Т. 20. С. 446.
40. *Фок В. А.* Начала квантовой механики. 2-е изд. М.: Наука, 1976.
41. *Кузнецова О. В.* История обоснования статистической механики. М.: Наука, 1988.
42. *Крылов Н. С.* Работы по обоснованию статистической физики. М.: Едиториал УРСС, 2003.
43. *Майер Дж., Гепперт-Майер М.* Статистическая механика. Изд. 2-е. М.: Мир, 1980.
44. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Теоретическая физика. Т. V. Статистическая физика. Ч. 1. Изд. 3-е. М.: Наука, 1976.
45. *Коткин Г. Л.* Лекции по статистической физике. М.-Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Институт компьютерных исследований, 2006.

Получено 22 января 2009 г.

Редактор *М. И. Зарубина*

Подписано в печать 21.04.2009.
Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная.
Усл. печ. л. 1,25. Уч.-изд. л. 1,56. Тираж 305 экз. Заказ № 56572.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований
141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6.
E-mail: publish@jinr.ru
www.jinr.ru/publish/