MEGJEGYZÉSEK A GIBBS-PARADOXON KVANTUMMECHANIKAI ÉRTELMEZÉSÉHEZ

Írta: FÁY GYULA

A kvantumelmélet NEUMANN által kidolgozott deduktív felépítése alapján, valamint a kvantumelméleti ítéletkalkulus segítségével kimutatjuk, hogy bármely fizikai tulajdonság entrópiája növekszik, ha a tulajdonságot egy logikai értelemben gyengébbel helyettesítjük.

1. §. Bevezetés

A *Gibbs*-paradoxon feloldására a termodinamikában az a felismerés vezetett, hogy az entrópia információelméleti fogalom, más szóval, hogy értéke függ azoktól a feltételektől, amelyek közt az adott termodinamikai rendszert vizsgáljuk[1] [1]. Pontosabban szólva: fel lehet egy termodinamikai rendszert olyan tulajdonságokkal ruházni, amelyek bár e rendszer makroszkopikus viselkedése szempontjából lényegtelenek, mégis az entrópia értékébe belejátszhatnak. L. SZILÁRD [2] vizsgálta meg elsőnek kvantitatíve, hogy a termodinamikai rendszerbe való beavatkozás, mely a rendszer bizonyos mikroszkopikus tulajdonságainak ismeretén alapszik, mekkora értékkel változtatja meg a rendszer entrópiáját.

Mielőtt e dolgozat célkitűzését ismertetnénk, fogalmazzuk meg általánosan a *Gibbs*-paradoxont.

Tekintsünk két gázt, amelyek egymástól egy fallal vannak elválasztva. Határozza meg mindkét gáz állapotát nyomása (p_1, p_2), térfogata $(V_1 = V_2 = V)$ és molekuláinak száma (N_1); (N_2). Ha az $1+2$ rendszer termikusan homogén, akkor van entrópája, s ez

$$S = S_1 + S_2.$$

Távolítsuk el mármost a válaszfalat, s tekintsük az így létrejövő termodinamikai rendszert. Entrópiáját jelölje S_{12}. Ekkor a termodinamika alapján kiadódik, hogy

$$\Delta S \equiv S_{12} - (S_1 + S_2) > 0.$$

Ez a ΔS entrópiaváltozás akkor sem válik zérussá, ha az 1 és 2 rendszerek „teljesen azonosak" értve ezen azt, hogy termodinamikailag ekvivalensek, vagyis hogy állapothatározóik (P, V, N) és állapotegyenleteik is megegyeznek. Ez utóbbi ideális gázok esetében azt jelenti, hogy molekulasúlyaik egyeznek meg. Minthogy a fallal

[1] FÉNYES [1] dolgozatában a *Gibbs*-paradoxon problémáját teljesen tisztázta. Jelen dolgozat nem a tulajdonképpeni termodinamikai *Gibbs*-paradoxonnal foglalkozik, hanem az entrópiának egy, a *Gibbs*-paradoxon vizsgálata során megismert tulajdonságának általánosabb keretű diszkussziójával.

gondolatban is elválaszthattuk volna az $1+2$ rendszert, azért paradoxonként tűnik az, hogy a fal *gondolatbani* odahelyezése az entrópiát megváltoztathatja[2].

A fallal való gondolatbeli elválasztás azonban azt jelenti, hogy míg a falnélküli $1+2$ rendszer bármely molekuláját azzal a tulajdonsággal ruháztuk fel, hogy lehetséges térfogata $2V$ volt, addig a fallal elválasztott $1+2$ rendszer bármely molekulájának lehetséges térfogata csupán V[3]. A fal *eltávolítása* tehát azt jelenti, hogy a „V tulajdonságú" molekulát egy gyengébb tulajdonsággal ruháztuk fel, ti. a „$2V$ tulajdonság"-gal. A $2V$ tulajdonság azért gyengébb V-nél, mert abból, hogy egy molekula egy V térfogatban tartózkodik, következik, hogy benne van a (V-t körülvevő) $2V$ térfogatban. Ezt úgy is kifejezhetjük, hogy a fal gondolatbeli eltávolítása ekvivalens azzal, hogy a gázt (termodinamikai rendszert) alkotó molekulák (részrendszerek[4]) valamely tulajdonságát annak egy következményével pótoljuk. A tulajdonságoknak következményükkel való pótlását röviden *helyettesítésnek* nevezve azt mondhatjuk, hogy helyettesítés során az entrópia növekszik.

Egy termodinamikai rendszert alkotó molekulák (ill. általánosabban: részrendszerek) fenti „V", „$2V$" típusú tulajdonságairól és azok helyettesítésének hatásáról természetesen a *fenomenologikus* termodinamika nem tud kijelentéseket tenni, minthogy a molekulák általános értelemben vett „tulajdonságai" közül explicite csak számuk, N szerepel[5].

Kézenfekvőnek látszik ezért a kérdést egy olyan diszciplina keretében megvizsgálni, amely kifejezetten foglalkozik egy fizikai rendszer részrendszereinek tulajdonságaival. — A cél nyilván az, hogy kimutassuk: *Valahányszor egy fizikai rendszer valamely tulajdonságát egy* (nála gyengébb) *következményével pótoljuk, mindannyiszor a fizikai rendszer entrópiája növekszik.* Az alkalmas diszciplina, amelyben ezen vizsgálatok elvégzésére mód nyílhat, mint ismeretes, a *kvantumelmélet*[6].

E cél érdekében mindenekelőtt ismertetjük a tárgykör főbb kvantumelméleti vonatkozásait és a továbbiakban felhasználásra kerülő alapvető kvantummechanikai fogalmakat[7].

2. §. A felhasznált kvantummechanikai fogalmak

A *fizikai rendszereket* kvantummechanikailag az absztrakt *Hilbert*-tér elemeivel és opreátoraival jellemezhetjük: [3].

a) A fizikai rendszer *állapotainak* halmazához kölcsönösen egyértelműen hozzá van rendelve az absztrakt *Hilbert*-tér elemeinek halmaza.

[2] Természetesen csak abban a felfogásban, hogy a rendszer állapotát nyomása p, és térfogata, $2V$ egyértelműen meghatározza. Ilyen esetben a gondolatbeli fal odahelyezése a rendszert nem változtatja meg, mert a gáz molekulákból való felépítettségéről nem veszünk tudomást. A paradoxon az, hogy a fal eltávolításával a keveredést is tekintetbe vesszük, vagyis azt, hogy az eredeti $(p, V)+(p, V)$ rendszer átalakult a $(p, 2V)+(p, 2V)$ rendszerré, akkor ennek összentrópiája már különbözni fog a $(p, V)+(p, V)$ rendszer összentrópiájától.

[3] Itt tehát már eltérünk a fenomenologikus szemléletmódtól.

[4] Ezek már nem termodinamikai rendszerek.

[5] Vagy bizonyos szűkebb tárgyalásmódban még ez sem. (Vö. [2]).

[6] A fizikai rendszerek tulajdonságainak kvantitatív vizsgálatával NEUMANN foglalkozott részletesen. ([3], III. fej. 5. és IV. fej. 3.)

[7] Lényegében NEUMANN [3] könyve alapján. (18, 130—135. oldalak.)

b) A fizikai rendszeren értelmezett *fizikai mennyiségek* halmazához egyértelműen hozzá van rendelve[8] az absztrakt *Hilbert*-tér hipermaximális hermitikus operátorainak halmaza.

c) A fizikai rendszer *tulajdonságainak* halmazához kölcsönösen egyértelműen hozzá van rendelve az absztrakt *Hilbert*-tér idempotens hermitikus (=projekciós) operátorainak halmaza[9].

Itt az *állapot* alapfogalom; implicit értelmezése éppen a Hilbert-tér *Neumann*-féle öt axiómájával történik.

Ugyancsak alapfogalom a *fizikai mennyiség* fogalma is; implicit értelmezése pl. a *Carnap*-féle öt követelménnyel történhetik[10] [4].

A *tulajdonság* származtatott fogalom; értelmezése NEUMANN szerint: fizikai mennyiségekre vonatkozó ítélet[11].

Így a tulajdonságokon logikai műveletek végezhetők, úgymint: negáció, konjunkció, implikáció stb.[12]

Az ítéletkalkulus és a projekciós operátorok algebrájának izomorfizmusa a következő:

Legyen $\mathscr{E}$ és $\mathscr{F}$ két tulajdonság. A hozzájuk tartozó projekciós operátorok legyenek E és F. Ekkor:

$\bar{\mathscr{E}}$-hez („nem $\mathscr{E}$")-	tartozik az $1+E$ projekciós operátor,
$\mathscr{E}\,\&\,\mathscr{F}$-hez („$\mathscr{E}$ és $\mathscr{F}$")	tartozik az $E\cdot F$. projekciós operátor,
$\mathscr{E}\vee\mathscr{F}$-hez („$\mathscr{E}$ vagy $\mathscr{F}$")	tartozik az $E+F-E\cdot F$ projekciós operátor,
$\mathscr{E}\forall\mathscr{F}$-hez („vagy $\mathscr{E}$ vagy $\mathscr{F}$")	tartozik az $E+F$ projekciós operátor,
$\mathscr{E}\rightarrow\mathscr{F}$-hez („ha $\mathscr{E}$ akkor $\mathscr{F}$")	tartozik az $1-E+E\cdot F$ projekciós operátor.

Ha $\mathscr{F}$ következménye $\mathscr{E}$-nek, akkor az $\mathscr{E}\rightarrow\mathscr{F}$ formula azonosan igaz, $(\mathscr{E}\rightarrow\mathscr{F}\equiv\mathfrak{t})$, ami a megfelelő operátorokra azt jelenti, hogy

$$E = E\cdot F. \tag{1}$$

[8] Hogy ez a leképezés miért nem *kölcsönösen* egyértelmű, meg van indokolva E. P. WIGNER: Die Messung Quantenmechanischer Operatoren, *Z. Phys.*, **133** (1952), 101–109 dolgozatában.

[9] A felhasznált operátorelméleti fogalmak definíciójára nézve l. [3], II. fej. és [8].

[10] Ez az öt követelmény a következő:

a) a fizikai mennyiség értékei közti egyenlőség-reláció, és
b) sorrend-reláció értelmezése,
c) a fizikai mennyiség 0-pontjának,
d) egységének, és
e) skálaformájának lerögzítése.

Nem állítjuk azonban, hogy ezen 5 *Carnap*-féle követelmény a fizikai mennyiség fogalmának jellemzésére feltétlenül szükséges vagy elegendő lenne. E követelmények egy kritikáját l. pl. H. NIEHRS: Analyse der Begriffe Temperatur und Wärmemenge, *Nachr. d. Akad. d. Wiss. Gött.*, 1951. évf. 3. oldal.

[11] Vö. [3], 130–135. old. NEUMANN a tulajdonságokhoz fizikai mennyiségeket rendel oly módon, hogy valahányszor egy méréssel egy tulajdonság megléte eldőlt, mindannyiszor a hozzá tartozó fizikai mennyiség értéke meg van mérve, éspedig 0-val egyenlő, ha a tulajdonság nincs meg, és 1-gyel, ha a tulajdonság meg van. Ez egyébként a fizikai rendszeren értelmezett tulajdonságok halmazához tartozó valószínűségi változó karakterisztikus változója.

[12] A logikai műveletek értelmezésére l. pl. HILBERT–BERNAYS [5] könyvét.

Sokaságoknak nevezzük a fizikai rendszerek halmazait, s ezeket a következőképpen jellemezzük:[13]

a) Álljon az S sokaság N számú elemből (fizikai rendszerből), jelük legyen $S_1, S_2, S_3, \ldots, S_N = S$. Lehetséges állapotaik jele legyen rendre: $\varphi_1, \varphi_2, \ldots, \varphi_N \equiv \Phi$.

b) Jelölje továbbá w_i annak valószínűségét, hogy az S sokaságból találomra kiválasztva egy elemet, annak állapota éppen φ_i.[14]

A sokaságnak ezen (*a)*-ban és *b)*-ben adott) jellemzését fogalmilag összefoglalhatjuk oly módon, hogy megadunk egy U (ún. statisztikus) operátort az

$$U = \sum_{i=1}^{N} w_i P_{[\mathfrak{M}_i]} \tag{2}$$

definícióval. Ahol is $P_{[\mathfrak{M}_i]}$ jelenti az $\mathfrak{M}_i$ zárt lineáris sokaságra proiciáló projekciós operátort; $\mathfrak{M}_i$ pedig U-nak a w_i-khez tartozó sajátelemei által kifeszített zárt lineáris sokaságot. $\mathfrak{M}_i$ dimenziószáma w_i multiplicitásával egyenlő[15]. Ezzel az U statisztikus operátorral, mely tehát a kvantummechanikai sokaságok állapotjellemzőjének tekinthető[16], ki lehet fejezni annak e_i valószínűségét, hogy a sokaságban az $\mathscr{E}_i$ tulajdonság megvan. Erre nézve, mint ismeretes,[17]

$$e_i = \text{Spur } UE_i. \tag{3}$$

Mármost NEUMANN értelmezte a sokaság kvantummechanikai és makroszkopikus entrópiáját a fentebb említett fogalmak segítségével;[18] mi ennek nyomán, kissé általánosabban az S sokaság *makroszkopikus* entrópiáján az S bizonyos E_i makroszkopikus tulajdonságainak e_i valószínűség-eloszlásához tartozó matematikai entrópiáját fogjuk érteni[19]. — A következő §-ban az ezen értelmezéshez vezető gondolatmenetet fogjuk ismertetni.

3. §. Kvantummechanikai sokaságok makroentrópiája

Tekintsünk egy U statisztikus operátorú kvantummechanikai sokaságot. Nézzük meg, hogy egy makroszkopikus megfigyelő milyen módon tudja ezt jellemezni. Eljárása minden esetben a következő: Tekint valamilyen $\mathscr{E}_1$ tulajdonságot és megméri, hogy az milyen valószínűséggel van meg a sokaságban. Vagyis méri a 2. §-beli e_1-et. Emellett azonban szükségképpen mérnie kell az ellentétes $\overline{\mathscr{E}}_1$ tulajdonságot

[13] A kvantummechanikai sokaságok használatának indokolására nézve l. [3] 159. old.

[14] Ezen w_i-k mérése elvileg keresztülvihető. Vö. [3], IV. fej. 3.

[15] L. a 9. lábjegyzetet.

[16] Ki lehet mutatni, hogy ezen U független azon fizikai mennyiségek operátoraitól, R-től, amelynek várható értékét az Erw R = Spur UR összefüggés szolgáltatja. Speciálisan, ha R sajátértékei karakterisztikus változó értékei, akkor a várható érték a megfelelő valószínűséggel egyenlő. Ez történik akkor, ha R egy tulajdonsághoz tartozó projekciós operátor. Egyúttal az is látszik, hogy U független a sokaság makroszkopikus tulajdonságaihoz tartozó projekciós operátoroktól (az E_i-ktől; vö. a 18. lábjegyzetet) is.

[17] L. [3], IV. 3.

[18] L. [3], V. 4. A makroszkopikus tulajdonságok részletes diszkussziója ugyanitt megtalálható.

[19] A matematikai entrópia fogalmának legfontosabb sajátságaira vonatkozólag l. pl. BALATONI—RÉNYI [6] dolgozatát, valamint BRILLOUIN [7] könyvét.

is, mert azzal a megállapítással, hogy az $\mathscr{E}_1$ tulajdonság nincs meg egy találomra kiválasztott rendszeren, egyben megtudta az $\overline{\mathscr{E}}_1$ („nem $\mathscr{E}_1$") tulajdonság meglétét. $\overline{\mathscr{E}}_1$-t $\mathscr{E}_2$-vel jelölve az egyetlen tulajdonság iránt érdeklődő makroszkopikus megfigyelő mérési módját jellemezhetjük az E_1, E_2 operátorokkal, melyek az $\mathscr{E}_1$, $\mathscr{E}_2$ tulajdonságokhoz tartoznak, s amelyekre tehát:

$$E_1 + E_2 = 1$$

$$E_1 \cdot E_2 = 0.$$

Tegyük fel mármost, hogy a megfigyelő az $\mathscr{E}_1, \mathscr{E}_2, \mathscr{E}_3, \ldots, \mathscr{E}_N$ tulajdonságokról kíván információt szerezni. Az előbb mondottak értelmében szükségképpen most is

$$(1) \qquad \sum_{i=1}^{N} E_i = 1.$$ [20]

Megmutatjuk azonban, hogy az

$$(2) \qquad E_i E_k = 0 \qquad (i \neq k)$$

„ortogonalitási" feltétel is mindig kielégíthető abban az értelemben, hogy: ha az $E_1, E_2, E_3, \ldots, E_N = \{E_i\}$ rendszer nem ortogonális, azonban „teljes", vagyis (1)-et kielégíti, akkor egyértelműen hozzá lehet rendelni $\{E_i\}$-hez ($i = 1, 2, 3, \ldots, N$) egy $\{F_n\}$ rendszert ($n = 1, 2, 3, \ldots, M = 2^N$), melyre már a (2)-vel analóg

$$(2') \qquad F_i F_k = 0 \qquad (i \neq k)$$

ortogonalitás fennáll.

Ezt az $\{F_n\}$ rendszert a következőképpen lehet megkonstruálni: Az E_i operátort alakítsuk át annak felhasználásával, hogy minden k-ra ($k = 1, 2, 3, \ldots, N$)

$$E_k E_k = E_k$$

és

$$1 = E_k + 1 - E_k.$$

Ezekkel:[21]

$$(3) \quad E_i = 1 \cdot 1 \cdot 1, \ldots, 1 \cdot E_i \cdot 1, \ldots, 1 = [E_1 + (1 - E_1)][E_2 + (1 - E_2)][E_3 + (1 - E_3)].$$
$$[E_{i\pm 1}(1 - E_{i-1})] E_i \cdot E_i \ldots [E_N + (1 - E_N)].$$

Az áttekinthetőség kedvéért vezessük be a következő jelöléseket[22]

$$E_k = E_k^+, \quad 1 - E_k = E_k^- \qquad (k = 1, 2, 3, \ldots, N).$$

[20] Az E_i-khez tartozó ítéletek kalkulusában a (3) az E_i rendszerben történő kitüntetett kizáró diszjunktív normálformára hozás első lépésének, míg (4) magának a normálformának felel meg. (Vö. a 12. lábjegyzettel.)

[21] Voltaképpen az összegezést 1-től $N+1$-ig kellene végezni, ahol $E_{N+1} = 1 - \sum_{i=1}^{N} E$; de az egyszerűség kedvéért ezt az írásmódot alkalmazzuk.

[22] E jelölések NEUMANNtól erednek [3], 217—218. oldal.

A +, – jeleket foglaljuk össze az s_k jellel. $s_k = +$ vagy $s_k = -$ és ezek a jelek a k-adik tényezőben állhatnak a következő, (3) alapján nyerhető felbontásban. (3)-ban elvégezve a kiejlölt műveleteket, azt kapjuk, hogy

$$E_i = \sum_{s_1, s_2, \ldots, s_{i-1}\, s_{i+1} \ldots, s_N = \pm} E_1^{s_1} E_2^{s_2} \ldots E_{i-1}^{s_{i-1}} E_i E_{i+1}^{s_{i+1}} \ldots E_N^{s_N}. \tag{4}$$

Az összegezés a + és – jelek minden variációjára kiterjesztendő úgy, hogy $s_i = \pm$. Az összes i-re felírt jobb oldali összegekben az egyes összeadandókat jelöljük F_n-el; ezek száma nyilván annyi, ahányféleképpen a + és a – jel az N tényezőre elosztható, ami 2^N-el egyenlő. Természetesen az F_n-ek közt 0-ok is lehetnek. Mármost ezen F_n-ekről könnyű belátni, hogy a (2′) ortogonalitási relációkat kielégítik. Hiszen ha $i \neq k$, akkor F_i az F_k-tól csak annyiban különbözhet, hogy van oly m index, hogy míg F_i m-edik tényezőjében E_m, ill. E_m^- áll, addig F_k m-edik tényezőjében E_m^-, ill. E_m áll. Márpedig

$$E_m E_m^- = E_m^- E_m = 0.$$

Vagyis (3) alapján a (2′) valóban kielégíthető. Itt felhasználtuk, hogy az E_i-k felcserélhetők, ami azt jelenti, hogy az $\mathscr{E}_i$ makroszkopikus tulajdonságok egyidejűleg eldönthetők, ami éppen a tulajdonságok *makroszkopikus* voltának folyománya[23]. Természetesen (1)-ből következik az, hogy

$$\sum_{n=1}^{2^N} F_n = \sum_{i=1}^{N} E_i = 1. \tag{5}$$

Ezek után azt mondhatjuk, hogy a makroszkopikus megfigyelő mérési módját egy az (1) és (2) feltételeket kielégítő $\{E_i\}$ operátor-rendszerrel lehet jellemezni. Az ilyen rendszereket a továbbiakban nevezzük *normalizált*aknak. A normalizált $\{E_i\}$ rendszer tehát teljesen meghatározza az e_i valószínűségeloszlást az U statisztikus operátorú keverékben:

$$e_i = \text{Spur}\, U E_i. \tag{6}$$

Melyre nézve (1) szerint

$$\sum_{i=1}^{N} e_i = 1. \tag{7}$$

Lényegében véve tehát a makroszkopikus megfigyelő szempontjait ez a diszkrét valószínűségeloszlás karakterizálja. Az e_i valószínűségi változójának értékében levő bizonytalanság mértékéül, mely tehát a megfigyelő módszereinek sajátja, célszerű az e_i eloszlás matematikai entrópiáját tekinteni [6]:

$$\text{Entr}(S) = -K \cdot \sum_{i=1}^{N} e_i \log e_i, \qquad (K > 0, \text{ állandó}). \tag{8}$$

Ezek után az a kérdés marad hátra, hogy miként mérhető össze az $\{E_i\}$ rendszerhez tartozó (8)-beli entrópia annak az $\{E_i\}'$ rendszernek az entrópiájával, mely

[23] L. 18. lábjegyzetet.

$\{E_i\}$-ből úgy jön létre, hogy a j-edik tulajdonságot annak egy E_j' projekciós operátorú következményével pótoljuk, azaz E_j helyébe oly E_j'-t helyettesítünk, amelyre ((1.1) szerint)

$$E_j E_j' = E_j. \tag{9}$$

Ezt vizsgáljuk meg a következő §-ban.

4. §. A makroszkopikus tulajdonság helyettesítése

Az előző §-ban ismertetett terminológiát használva mármost fogalmazzuk meg kvantitatíve, hogy miben áll, s hogyan értendő a bevezetésben említett helyettesítés.

Legyen adva egy U statisztikus operátorú kvantummechanikai sokaság. Egy makroszkopikus megfigyelő mérési módja azzal karakterizálható, hogy megadunk egy *normalizált* $\{E_i\}$ projekciós operátor-rendszert. Ez a $\{E_i\}$ rendszer tehát azt a megfigyelési módot reprezentálja, amelyben a megfigyelő a sokság $\mathscr{E}_1, \mathscr{E}_2, \mathscr{E}_3, \ldots, \mathscr{E}_N$ tulajdonságait akarja vizsgálni.

Tekintsük mármost azt az esetet, amikor a makroszkopikus megfigyelő más típusú információkat kíván szerezni az U statisztikus operátorú sokaságról[24], mégpedig oly módon, hogy a j-edik $\mathscr{E}_j$ tulajdonság helyett az annál gyengébb $\mathscr{E}_j'$ $(\mathscr{E}_j' \to \mathscr{E}_j \equiv \uparrow)$ tulajdonságot vizsgálja. Ezt a megfigyelési módot $\{\mathscr{E}_i\}$ helyett egy $\{\mathscr{E}_i\}'$ rendszerrel reprezentálhatjuk, s itt $\{\mathscr{E}_i\}'$ abban különbözik $\{\mathscr{E}_i\}$-től, hogy $\{\mathscr{E}_i\}$-ben a j-edik tulajdonságot, $\mathscr{E}_j$-t, annak egy következményével, $\mathscr{E}_j'$-vel pótoljuk. Természetesen az $\{\mathscr{E}_i\}$-hez tartozó $\{E_i\}'$ projekciós operátor-rendszer már nem fog a (3. 1), (3. 2) tulajdonságokkal rendelkezni: nem lesz normalizált[25]. Így az entrópiafogalom ugyan formálisan értelmezhető a megfelelő $\{e_i\}'$ valószínűség-rendszeren, de $\{e_i\}'$ már nem valószínűség-eloszlás, ezért a formálisan nyert

$$-K\sum_{i=1}^{N} e_i \log e_i = -K(e_1 \log e_1 + e_2 \log e_2 + \ldots + e_j + \ldots + e_N \log e_N) e_j' = \operatorname{Supr} UE_j'$$

kifejezés már nem tekinthető entrópiának és így az eredeti

$$-K\sum_{i=1}^{N} e_i \log e_i$$

kifejezéssel való összehasonlításra sincsen alap.

Ezért tehát az $\{E_i\}'$ rendszert ortogonalizálni kell és teljessé kell tenni, azaz a 3 §-ban követett eljáráshoz hasonlóan egyértelműen hozzárendelni egy $\{F_n\}$ rend-

[24] Ez természetesen lehetséges, hiszen U nem függ az E_i-ktől. (Vö. 16.)

[25] A triviális $E_j'=E_j$ esettől eltekintve. Valóban: $\sum E_i=1$-ből $E_j = 1-\sum_{i\neq j} E_i'$, azaz $E_j'E_j= =E_j = E_j\big(1-\sum_{i\neq j} E_i\big) = E_j'-E_j'\big(\sum_{i\neq j} E_i\big)$, azaz $E_j'-E_j = E_j'\sum_{i\neq j} E_i$, így E_j' akkor és csakis akkor lehet minden E_i-re $(i\neq j)$ ortogonális, ha $E_j'=E_j$. Az, hogy $\{E_i\}$ nem teljes, hasonlóan látható be, l. (4.10).

szert, amelyre már

$$F_n = 1, \qquad (M = 2^N)^{26}$$

$$F_i F_k = 0, \qquad (i \neq k).$$

Az entrópia csak ezen normalizált $\{F_n\}$ rendszerre vonatkozóan képezhető az

$$\text{Entr'}\,(S) = -K \sum_{n=1}^{2^N} f_n \log f_n$$

definícióval, ahol

$$f_n = \text{Spur}\; UF_n.$$

Lényegében ez lesz az az entrópia[27], amely Entr(S)-el összehasonlítható, s melyről ki fogjuk mutatni, hogy

$$\text{Entr}'(S) > \text{Entr}(S).$$

Ennek keresztülvitelére végezzük el az $\{E_i\}'$ rendszer normalizálását. Kezdjük az ortogonalizálással. Legyen tehát:

$$E_i = \sum_{s_1, s_2, \ldots, s_{i-1}\, s_{i+1}, \ldots, s_N = \pm} E_1^{s_1} E_2^{s_2} \ldots E_i \ldots E_N^{s_N}, \qquad i \neq j$$

míg az $i = j$ esetre:

$$E_j' = \sum_{s_1, \ldots, s_{j-1}, s_{j+1}, \ldots, s_N = \pm} E_1^{s_1} \ldots E_j' \ldots E_N^{s_N}$$

Az egyes összeadandókat F_n-el jelölve ($n = 1, 2, 3, \ldots, M = 2^N$) megkaptuk az $\{F_n\}$ rendszert, mint az $\{E_i\}'$ rendszer ortogonalizálását. Ez az $\{F_n\}$ azonban egyszerűsödik, ha tekintetbe vesszük az $\{E_i\}$ normalizáltságát. Az F_n-ek áttekintése céljából vezessük be a következő jelöléseket:

$$F(s_h, s_j) = E_1^- E_2^- \ldots E_{h-1}^- \ldots E_h^{s_n} E_{h+1}^- \ldots E_{j-1}^- E_j'^{s_j} E_{j+1}^- \ldots E_{N-1}^- E_N^-$$

$$F(s_h, s_j, s_i) = E^- E^- \ldots E_{i-1}^- E_i^{s_i} E_{i+1}^- \ldots E_{h-1}^- E_h^{s_h} E_{h+1}^- \ldots E_{j-1}^- E_j^{s_j} E_{j+1} \ldots E_{N-1}^- E_N^-,$$

$$i \neq j, \quad h \neq j.$$

Belátható, hogy a többi típusú F_n-ek mind zérusak, mivel ha a j-edik helyen kívül legalább két helyen áll $+$ jel, akkor az $\{E_i\}$ rendszer ortogonális volta miatt az operátorszorzat értéke zérus lesz[28]. Tehát ha $s_h = +$, $s_i = -$, $i \neq j$, $h \neq j$, akkor a megfelelő

(5) $$F(+, s_j, +) = 0.$$

[26] Voltaképpen $M = 2^N + 1$ értendő, ahol $F_M = 1 - \sum_{n=1}^{2^N} F_n$, de mint látni fogjuk, ez nem jelent lényeges különbséget.

[27] Azzal a különbséggel, hogy az összegezés 1-től $2^N + 1$-ig értendő, ahol $f_M = 1 - \sum_{n=1}^{2^N} f_n$, viszont az erre vonatkozó állítás már következik (2′)-ből ($M = 2^N + 1$).

[28] Felhasználva az E_i-k egymás közti és E_j'-vel való felcserélhetőségét. Mivel, ha E_i az E_j-vel, és E_j az E_j'-vel felcserélhető, azért a felcserélhetőség tranzitivitása alapján (vö. [3], 92. old.) az E_i-k E_j'-vel is felcserélhetők. Az, hogy E_j' az E_j-vel felcserélhető, abból következik, hogy $E_j' E_j = E_j$ hermitikus operátor. (Vö. [3], 51. old.)

Az $\{F_n\}$-nek ezt az egyszerűsödését még így is kifejezhetjük:

(6) $$E_i = \sum_{\substack{h\neq i\\ h\neq j}}\sum (F(-,+,+)+F(-,-,+)) \qquad (i\neq j)$$

Szükségünk lesz még az $i=j$ esetnek megfelelő

(7) $$E_j = F(-,+)$$

összefüggésre is[29]. Ennek bizonyítása a következőképpen történhetik:[30] A definíció szerint:

$$F(-,+) = E_1^- \dots E_h^- \dots E_j' \dots E_N^- = E_j' \cdot \prod_{i\neq j}(E_i^-) = E_j' \prod_{i\neq j}(1-E_i),$$

ahol is felhasználtuk, hogy E_j az E_i-kel felcserélhető.[31] Elég annyit kimutatni, hogy

(7′) $$\prod_{i\neq j}(1-E_i) = E_j,$$

mert akkor ebből $E_j'E_j = E_jE_j' = E_j$ miatt az állított (7) adódik. (7′) egy magától értetődő tényt fejez ki, ha azt az $\{E_i\}$ normalizált rendszerhez tartozó $\{\mathscr{E}_i\}$ ítéletrendszerre fogalmazzuk át. Az $\{\mathscr{E}_i\}$-kre vonatkozó megfelelő állítás:

(7″) $$\mathscr{E}_j = \bar{\mathscr{E}}_1 \& \bar{\mathscr{E}}_2 \& \dots \& \bar{\mathscr{E}}_{j-1} \& \bar{\mathscr{E}}_{j+1} \& \dots \bar{\mathscr{E}}_N .$$

Ez azonban csakugyan így van, hiszen az $\mathscr{E}_i$ tulajdonságok bármelyike, pl. $\mathscr{E}_j$ azt jelenti, hogy sem $\mathscr{E}_1$, sem $\mathscr{E}_2$, sem bármely $\mathscr{E}_3$-től különböző $\mathscr{E}_i$ nincs meg, mivel $\mathscr{E}_i$-k közül valamelyik feltétlenül megvan.

Szükségünk lesz végül a következő összefüggésre is: ha $x_i > 0$, $(i=1,2,\dots,n)$ és $\sum_{i=1}^{n} x_i < 1$, akkor:

(8) $$\left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)\cdot \log \sum_{i=1}^{n} x_i > \sum_{i=1}^{n} x_i \log x_i .$$

Bizonyításul alakítsuk át az állítást a következő módon:

$$(\sum x_i)^{\Sigma x_i} > \prod x_i^{x_i}.$$

Használjuk fel, hogy az x^y függvény mind x-nek, mind pedig y-nak monoton növekvő függvénye. Ezért mivel az x_i-kre tett feltevéseinkből folyólag: $\Sigma x_i > x_i$, $\Pi x_i^{x_i} < x_i^{x_i}$,

$$(\sum x_i)^{\Sigma x_i} > (\sum x_i)^{x_i} > x_i^{x_i}.$$

Így azt kapjuk, hogy

$$(\Sigma x_i)^{\Sigma x_i} > x_i^{x_i},$$

viszont:

$$\Pi x_i^{x_i} < x_i^{x_i}.$$

[29] Ez természetesen h-tól nem függ, hiszen a j-edik tényezőn kívül *minden* tényezőben a $-$ je áll $F(-,+)$-ban.
[30] E számítás egyszerűsítéséért TŐRÖS RÓBERT kollégámnak mondok köszönetet.
[31] L. 28. at.

E két egyenlőtlenséget összekapcsolva:

$$(\Sigma x_i)^{\Sigma x_i} > x_i^{x_i} > \Pi x_i^{x_i},$$

tehát

$$(\Sigma x_i)^{\Sigma x_i} > \Pi x_i^{x_i},$$

amint állítottuk.

Az entrópia növekedésének bizonyítása előtt még az $\{F_m\}$ rendszer teljességével kell foglalkoznunk. Az látható, hogy a (4. 3) rendszerből nyert F_n-ek már ortogonális rendszert alkotnak, vagyis (4. 2) teljesül, amennyiben

$$F_i F_k = 0, \qquad (i \neq k;\ i, k = 1, 2, \ldots, 2^N).$$

A teljesség azonban nem áll, mivel

$$(10) \quad \sum_{n=1}^{2^N} F_n = E_1 + \ldots + E_j' + \ldots + E_N = \sum_{i=1}^{N} E_i - E_j + E_j' = 1 - (E_j - E_j') \neq 1,$$

hacsak $\mathcal{E}_j'$ nem triviális következménye $\mathcal{E}_j$-nek, vagyis $E_j' \neq E_j$. A 3. §-ban megindokoltuk, hogy egy makroszkopikus megfigyelő mérési módját reprezentáló projekciós operátor-rendszernek teljesnek kell lennie. Ezért $\{F_n\}$ is bővítendő az $F_{2^N+1} = 1 - \sum_{n=1}^{2^N} F_n$ tag hozzáfűzésével, amelyre természetesen, mint az könnyen igazolható,

$$F_n F_{2^N+1} = F_{2^N+1} F_n = 0 \qquad (n = 1, 2, \ldots, 2^N).$$

Mármost ezen módosított rendszer az, amelyre vonatkozó[32]

$$-K \sum_{n=1}^{2^N+1} f_n \log f_n,$$

$$f_n = \mathrm{Spur}\, U F_n$$

kifejezés entrópiának tekintendő a 3. § értelmezése szerint, s ez az, amit az eredeti

$$-K \sum_{i=1}^{n} e_i \log e_i$$

kifejezéssel össze kell mérnünk. Ezt végezzük el a következő paragrafusban.

5. §. Az entrópia növekedése

Ezek után a bebizonyított (4. 6), (4. 7), (4. 8) összefüggéseket felhasználva könnyen megmutathatjuk, hogy

$$(1) \quad -K \sum_{n=1}^{2^N+1} f_n \log f_n > -K \sum_{i=1}^{N} e_i \log e_i.$$

Mivel $-K < 0$, azért elég annyit kimutatni, hogy

$$\sum_{n=1}^{2^N+1} f_n \log f_n < \sum_{i=1}^{N} e_i \log e_i.$$

[32] Lásd a 28. és 20. lábjegyzeteket.

Vagy ami ugyanaz, az $f_{2^N+1} = 1-\sum_{n=1}^{2N} f_n = 1-f$ jelölést használva,

$$\sum_{n=1}^{2N} f_n \log f_n + (1-f)\log(1-f) < \sum_{i=1}^{N} e_i \log e_i.$$

Ehelyett pedig az ennél erősebb

$$\sum_{n=1}^{2N} f_n \log f_n < \sum_{i=1}^{N} e_i \log e_i \tag{2}$$

egyenlőtlenséget bizonyítjuk be, ami $(1-f)\log(1-f)<0$ miatt az állított (1)-et maga után vonja.

(2) belátására fejezzük ki az e_i-ket (4.6) alapján f_n-ekkel: Bevezetve a

$$F_{ni} \equiv F(-,+,+)+F(-,-,+)$$

jelölést, (4. 6) így írható:

$$E_i = \sum_{h\neq i} F_{ni} \qquad (i\neq j) \quad h\neq j \tag{3}$$

(3)-at (4.7) figyelembevételével kiterjeszthetjük az $i=j$ esetre is az

$$F(-,+) = \sum_{h\neq j} F_{nj} = E_j$$

megállapodással.

Így általánosan:

$$E_i = \sum_{h\neq i} F_{ni} \qquad (i=1,2,\dots,N).$$

Képezve a Spur $UE_i = e_i$-t és a Spur $UF_{hi} = f_{hi}$ jelöléssel

$$e_i = \sum_{n\neq i} f_{ni}$$

Ezt a (2) összefüggésbe helyettesítve, a

$$\sum_{n=1}^{2N} f_n \log f_n < \sum_{i=1}^{N} \Big(\sum_{h\neq i} f_{ni}\Big) \log \Big(\sum_{h\neq i} f_{ni}\Big) \tag{4}$$

egyenlőtlenséget kapjuk, ahol

$$\sum_{h\neq i} f_{nj} = f_j f(-,+) = \text{Spur}\, UF(-,+).$$

Most vegyük figyelembe, hogy az f_n-ek közül csak az $f_{hi}(+)$ és az $f_{hi}(-)$-ok különbözhetnek zérustól, tehát

$$f_{n_i}(+) = \text{Spur}\, UF_{n_i}(+) = \text{Spur}\, UF(-,+,+), \quad f_{n_i}(-) = \text{Spur}\, UF(-,-,+).$$

A (4) egyenlőtlenség bal oldala tehát két részre bontható:

$$\sum_{n=1}^{2N} f_n \log f_n = \sum_{i=1}^{N} \sum_{h\neq 1}^{N} f_{n_i}^{(+)} \log f_{n_i}^{(+)} + \sum_{i=1}^{N} \sum_{n\neq i} f_{n_i}^{(-)} \log f_{n_i}^{(-)}, \tag{5}$$

ahol

$$\sum_{h\neq j} f_{n_j}^{(+)} \log f_{n_j}^{(+)} \equiv f_{n_j}^{(+)} \log f_{n_j}^{(+)} \quad \text{és} \quad \sum_{h\neq j} f_{n_j}^{(-)} \log f_{n_j}^{(-)} \equiv 0.$$

Ezt felhasználva elég csupán annyit megmutatni, hogy

$$0 > \sum_{i=1}^{N} \left\{ \left[\sum_{n \neq i} f_{n_i}^{(+)} \log f_{n_i}^{(+)} + f_{n_i}^{(-)} \log f_{n_i}^{(-)} \right] - \left[\left(\sum_{h \neq i} f_{n_i}^{(+)} + f_{n_i}^{(-)} \right) \log \sum_{h \neq i} \left(f_{n_i}^{(+)} + f_{n_i}^{(-)} \right) \right] \right\},$$

vagy ami ugyanaz, azt, hogy

$$0 > \sum_{i=1}^{N} \left\{ \left[\sum_{h \neq i} \left(f_{n_i}^{(+)} \log f_{n_i}^{(+)} \right) - \sum_{h \neq i} f_{n_i}^{(+)} \log f_{n_i}^{(+)} \right] + \right.$$
$$\left. + \left[\sum_{n \neq i} f_{n_i}^{(-)} \log f_{n_i}^{(-)} - \sum_{h \neq i} f_{n_i}^{(-)} \log \sum_{h \neq i} f_{n_i}^{(-)} \right] \right\}.$$

Ez azonban (4. 8) alapján triviális.[33]

Ezzel kitűzött célunkat elértük.

Megjegyezzük, hogy az $f_{1i}^{(+)}, f_{2i}^{(+)}, \ldots, f_{1i}^{(-)}, \ldots$ valószínűségek az $\{E_i\}'$ rendszer *korrelációját* fejezik ki, azaz azt, hogy az $\mathscr{E}'_j$, ill. $\overline{\mathscr{E}'_j}$ tulajdonságnak valamelyik $\overline{\mathscr{E}_i}$-sal való együttes előfordulásának mekkora a valószínűsége.

Befejezésül köszönetet mondok FÉNYES IMRE egyetemi tanárnak, akivel való beszélgetésem során a dolgozat problémái tisztázódtak előttem.

IRODALOM

[1] FÉNYES I.: A Gibbs-paradoxon. (Még nem publikált kézirat.)
[2] L. SZILÁRD: Über die Entropieverminderung in einem thermodinamischen System bei Eingriffen intelligenter Wesen, *Z. Phys.*, **53** (1929) 840—856.
[3] J. v. NEUMANN: *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*, Berlin, Springer, 1932.
[4] R. CARNAP: *Physikalische Begriffsbildung*, Karlsruhe, 1926.
[5] D. HILBERT—P. BERNAYS: *Grundlagen der Mathematik*, I., Berlin, Springer, 1934, 53—60. oldal.
[6] BALATONI J.—RÉNYI A.: Az entrópia fogalmáról, *M. T. A. Mat. Kut. Int. Közl.* **1** (1956) 9—40.
[7] L. BRILLOUIN: *Science and Information Theory*, New York, Academic Press., 1956, 115., 122., 152., 153., 170. oldal.
[8] N. I. ACHIESER—I. M. GLASSMANN: *Theorie der linearen Operatoren im Hilbert-Raum*, Berlin, Akademie-Verl., 1954.,

(Beérkezett: 1964. X. 9.)

[33] A j-edik tag kivételével minden tag negatív járulékot ad a $\sum_{h \neq i}$ összegekben. A j-edik tag esetében pedig: vö. (5)

$$\sum_{h \neq j} f_{n_j}^{(\pm)} \log \sum_{h \neq j} f_{n_j}^{(\pm)} - \sum_{h \neq j} f_{n_j}^{(\pm)} \log f_{n_j}^{(\pm)} = f_{n_j}^{(\pm)} \log f_{n_j}^{(\pm)} - f_{n_j}^{(\pm)} \log f_{n_j}^{(\pm)} = 0.$$

Természetesen a $\sum_{h \neq i}$ összegekben a $h=j$ érték kimarad.