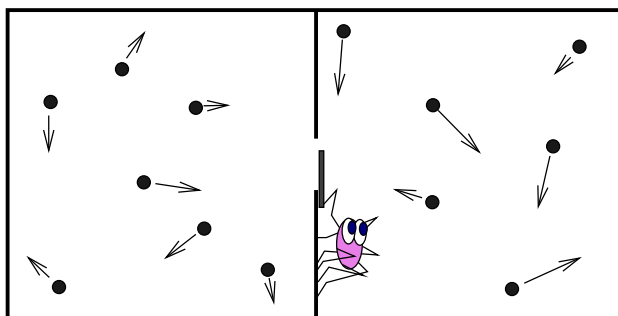


## Kvantová a statistická fyzika 2 (Termodynamika a statistická fyzika)

### 1 Maxwellův démon

Jak je to přesně s platností druhého termodynamického zákona? Víme, že podle něj nesmí celková entropie izolovaného systému klesat. Pokud v systému dojde k poklesu entropie, musí někde v okolí dojít k růstu entropie. Pokud však považujeme entropii za jistou míru neuspořádanosti, nemohli bychom si představit, že pokud nějakým způsobem nepořádek v systému „uklidíme“, entropie tak klesne? Mohli bychom tak narušit platnost druhého termodynamického zákona?

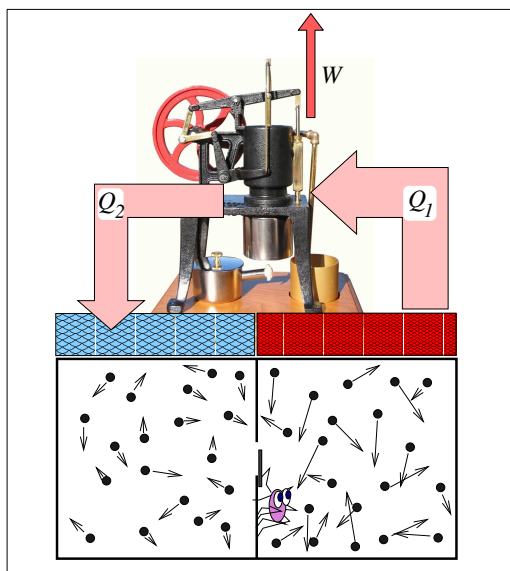
Roku 1871 přišel J. C. Maxwell s následující myšlenkou. Představme si nádobu s plynem o teplotě  $T$ , přičemž nádoba je rozpuštěná přepážkou na dvě části. V přepážce je malý otvor s uzávěrem, obsluhovaný bytůstkou, která je schopná rozeznat rychlost molekul blížících se k otvoru (viz obr. 1). Pokud se z levé části blíží k otvoru molekula s nadprůměrnou rychlostí, tedy větší než  $\sqrt{3k_B T/m}$ , bytůstka otevře otvor a nechá molekulu projít z levé části do pravé. Pokud se z levé části blíží k otvoru pomalejší molekula, bytůstka otvor uzavře. Podobným způsobem jsou sledovány i rychlosti molekul blížících se k otvoru zprava, tentokrát však je pomalým molekulám dovoleno projít a rychlé musí zůstat v pravé části. Celý tento systém je tepelně izolovaný od okolí a bytůstka nespotřebává ke své činnosti v podstatě žádnou energii: k pouhému přemístění uzávěru není nutná žádná mechanická práce. Vnitřní energie systému se tedy bude stále stejná. Ovšem po nějaké době budou v levé části nádoby převažovat pomalé molekuly kdežto v pravé bude více rychlých, což znamená, že vlevo poklesne teplota a vpravo se zvýší. Bytůstka—po svém myšlenkovém otci nazvaná Maxwellovým démonem—přinesla do systému více pořádku, než tam bylo dříve. Entropie systému poklesla, aniž by se zvýšila entropie okolí. To tedy znamená narušení druhého termodynamického zákona se všemi důsledky, které to s sebou nese.



Obrázek 1: Maxwellův démon, třídící molekuly podle rychlosti.

Co by to tedy znamenalo? Například bychom mohli jeho teplejší část použít jako ohřívač a chladnější jako chladič tepelného stroje a přeměnit určité teplo na práci (viz obr. 2). Tím bychom systému odebrali část vnitřní energie, až by se teplota obou částí vyrovnala a ustálila na hodnotě o něco nižší než na počátku. Nyní bychom opět pustili k činnosti démona (třeba mikroskopického robota), nechali jej roztřídit molekuly podle rychlostí a zajistili tak rozdílné teploty v obou částech nádoby. Pak můžeme zapojit tepelný stroj přeměňující teplo na práci a pokračovat tak dále, až všechny molekuly zastavíme a veškerou vnitřní energii plynu přeměníme na práci. Byl by to nejvýhodnější energetický zdroj pro hospodářství—žádné spalování surovin, žádné radioaktivní odpady, jen ochlazování okolí. Mohlo by něco takového fungovat? A když ne tak proč?

V době Maxwellových úvah se dalo operovat velikostí systému: druhý termodynamický zákon platí pro makroskopické veličiny, kdežto na úrovni jednotlivých molekul jsou statistické odchylky přípustné. Ovšem dostat se do mikrosvěta a manipulovat s jednotlivými molekulami pro nás bylo tenkrát nemožné a takoví malí démoni sami v přírodě zřejmě neexistují. Dnes jsme ale o něco dál, naše technologie nám umožňují „vidět“ jednotlivé molekuly i atomy, můžeme měřit jejich rychlosti, můžeme uvažovat použití různých nanomateriálů na výrobu dvířek zavírajících či otvírajících molekulám cestu. Můžeme



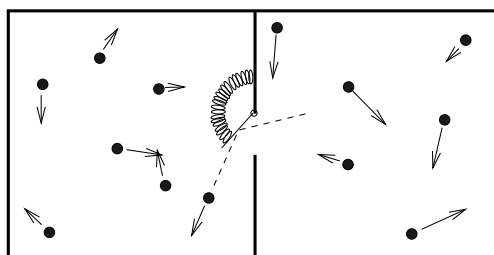
Obrázek 2: Nádoba s plynem, jejichž molekuly Maxwellův démon roztřídil na rychlejší a pomalejší, může sloužit jako teplý a studený rezervoár pro pohon tepelného stroje. Zařízení tak funguje jako perpetuum mobile druhého druhu: systém molekul je ochlazován a jejich energie se přeměňuje na práci, aniž by se muselo odpadní teplo předávat do okolí.

tedy v blízké budoucnosti Maxwellova démona vyrobit? Jsou tím pádem dny platnosti druhého termodynamického zákona sečteny? Diskuse na toto téma probíhaly od Maxwellových dob a v určitých variantách jsou živé až dodnes. Zajímavé je, že překvapivá rozuzlení, související i s teorií informace a výpočetní techniky přišla poměrně velice nedávno—v osmdesátých letech dvacátého století.

## 1.1 Varianty Maxwellova démona

### 1.1.1 Jednosměrná dvířka

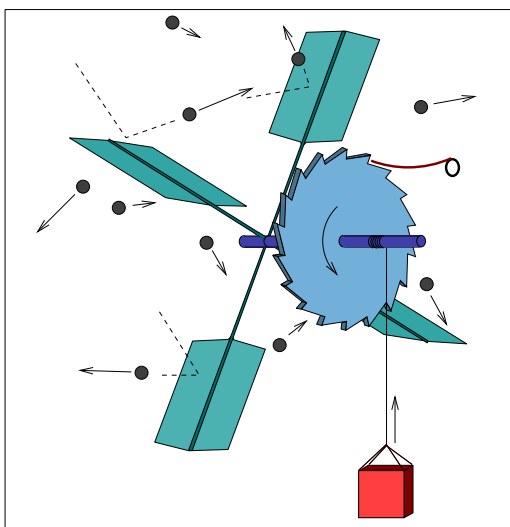
Myšlených zařízení, která by měla odebírat systému energii neuspořádaného pohybu a přeměňovat ji na užitečnou práci, bylo navrženo více. Snad nejjednodušší je varianta démona, který vytváří nikoliv teplotní, ale tlakový rozdíl mezi dvěma nádobami. Uvažujme dvířka, která se mohou vyklápět na jednu stranu, přičemž jemná pružinka je přidržuje uzavřená (viz obr. 3). Když na dvířka narazí molekula zleva, jenom se odrazí a zůstane v levé části nádoby. Když narazí molekula zprava, dvířka se nárazem odklopí a mohou nechat molekulu projít do druhé nádoby. Po nějaké době bude vlevo více molekul než vpravo a výsledný tlakový rozdíl můžeme využít ke konání práce.



Obrázek 3: Dvířka s pružinou propouštějící molekuly pouze jedním směrem.

### 1.1.2 Ozubené kolečko se západkou

Toto schéma diskutoval R.P. Feynman ve svých přednáškách, které se staly klasikou<sup>1</sup>. Uvažujme maličké ozubené kolečko s asymetrickými zoubky (rohatku) jako na obr. 4. Do zoubků přitlačuje jemná pružina západku tak, že kolečko se může otáčet jen jedním směrem. Kolečko je upevněno ke hřídeli, na které je zároveň několik lopatek. Do těch mohou z obou stran narážet molekuly okolního plynu. Někdy se stane, že z jedné strany narazí do lopatky více molekul než do druhé. Pokud výsledný silový moment působí v příznivém směru, může se kolečko pootočit, když je silový moment opačný, západka pootočení zabrání. Takovýmto způsobem se neuspořádaný pohyb molekul přemění na uspořádaný—jednosměrný pohyb kolečka, který může konat práci. Vykonaná práce je ovšem na úkor vnitřní energie molekul: kdykoliv molekula narazí do lopatky, která se pohybuje stejným směrem, molekula se odrazí zpět s menší rychlostí (představte si takový úder s tenisovou raketou). Na hřídel se může navíjet vlákno se závažím a zvyšovat tak jeho potenciální energii, zatímco teplota okolního plynu bude klesat.

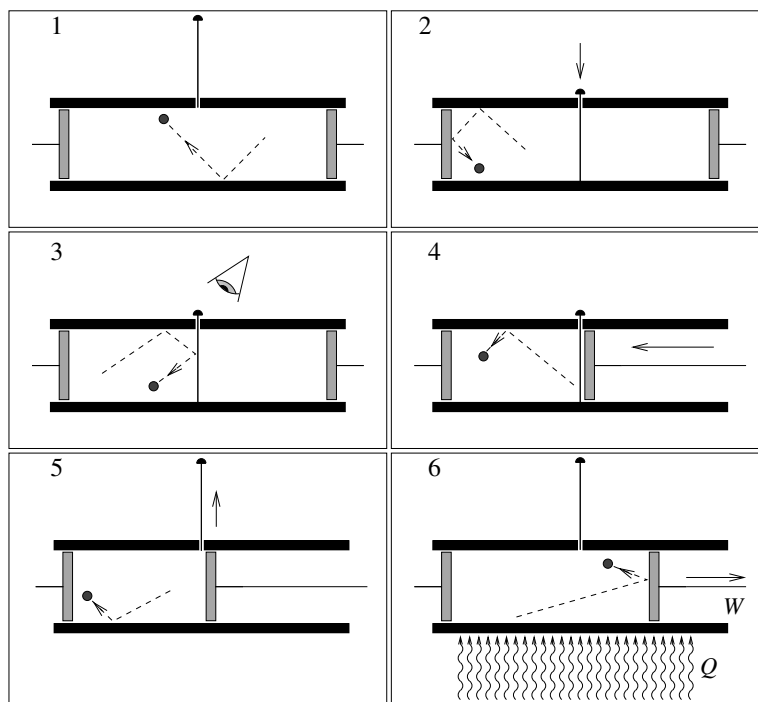


Obrázek 4: Rohatka se západkou k přeměně energie neuspořádaného pohybu molekul na potenciální energii závaží.

### 1.1.3 Szilardův stroj

Leo Szilard roku 1929 analyzoval funkci tepelného stroje, pracujícího s jedinou volnou molekulou ve válci se dvěma pohyblivými písty (viz obr. 5). Do válce lze (bez konání práce) zasunout přepážku, která omezí pohyb molekuly na jednu polovinu objemu válce. Nyní můžeme provést měření—zjistit, ve které polovině válce se molekula nachází. Do druhé, prázdné části válce pak můžeme zasunout píst. To lze opět bez konání práce, protože nám v tom nebrání pohyb molekuly. Přepážku nyní můžeme odstranit, takže molekula bude narážet i do tohoto pístu, kterým začneme pohybovat zpět k okraji válce. Protože molekula předává svůj moment hybnosti ve směru pohybu pístu, koná tak práci. Tím ovšem ztratí část své kinetické energie. Odráží-li se však ode stěn, které jsou v tepelném kontaktu s rezervoárem o teplotě  $T$ , získá od nich molekula ztracenou kinetickou energii tak, že v průměru má neustále kinetickou energii  $\frac{3}{2}k_B T$ . Energie neuspořádaného pohybu částic rezervoáru se tedy přeměňuje na uspořádaný pohyb pístu, konajícího práci. Kolik práce se takto dá získat? Zdvojnásobí-li se objem při izotermickém ději ideálního plynu, vykoná každá molekula práci v průměru  $k_B T \ln 2$ . Tolik by odpovídalo i našemu jednomolekulovému stroji.

<sup>1</sup>Richard P. Feynman dostal Nobelovu cenu roku 1965 za jeho podíl k vybudování kvantové elektrodynamiky, k jeho hlavním přínosům ve fyzice patří např. analýza interakcí částic pomocí tzv. Feynmanových diagramů či formulace kvantové mechaniky pomocí integrálů po trajektoriích. V letech 1961-63 přednášel na Caltechu značně netradičním způsobem úvodní kurz fyziky a tyto přednášky pak byly vydány knižně [v českém překladu R. P. Feynman, R. B. Leighton, M. Sands, Feynmanovy přednášky z fyziky, Fragment, Praha 2002].



Obrázek 5: Szilardova verze Maxwellova démona. Pohyb molekuly je nejprve omezen zasunutím přepážky, měřením pak zjistíme, ve které části válce se molekula nachází (stádium 3) a do druhé části se zasune píst. Po odstranění přepážky molekula naráží do pístu a vykoná tak práci  $W$ , přičemž ztráty její energie jsou kompenzovány přísunem tepla  $Q$  z okolí.

## 1.2 Vymítání démona

Pokud považujeme druhý termodynamický zákon za platný, nemůže ani jedno z uvedených schémat fungovat. Kde se však nachází hlavní nesnáž, která nám v konstrukci jednotlivých zařízení zabrání?

### 1.2.1 Jednosměrná dvířka

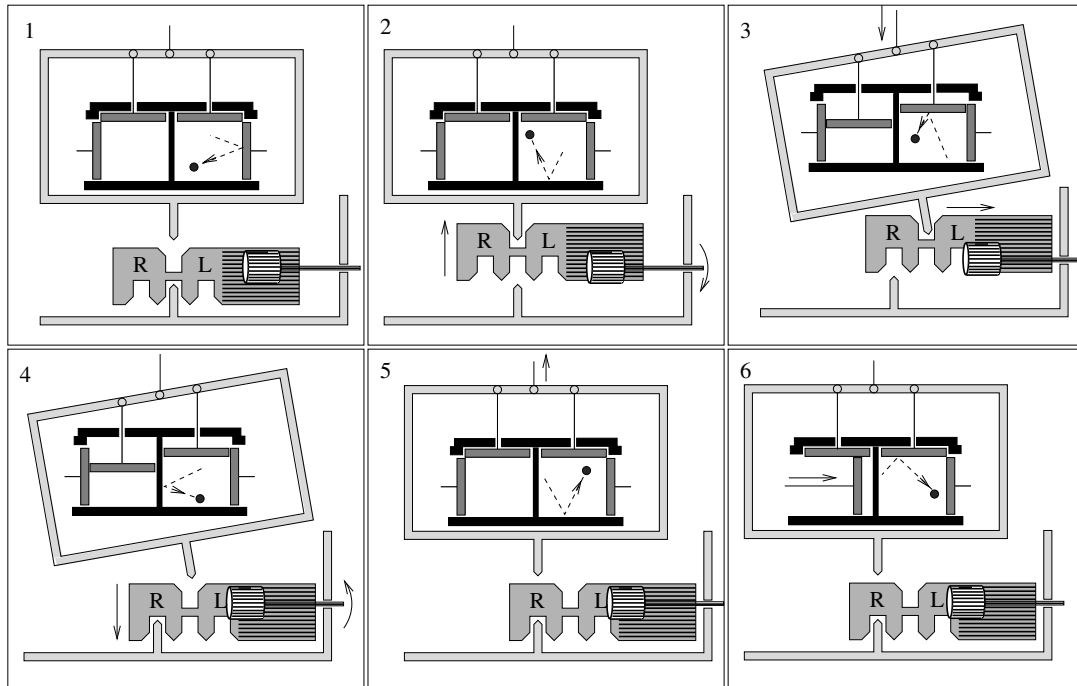
Kritickou součástí tu je pružinka, která přidržuje dvířka zavřená. Pokud má dvířka pootevřít pouhý náraz molekuly, musí na deformaci pružiny stačit energie této molekuly připadající na pohyb ve směru otevírání a to je v průměru  $\frac{1}{2}k_B T$ . Ovšem pružina sama musí být v termodynamické rovnováze se svým okolím a to při teplotě  $T$  znamená, že pružina sama má střední energii  $k_B T$ . Taková energie ale je dostatečná na její deformaci tak, aby dvířka byla každou chvíli pootevřená jen díky tepelnému pohybu pružiny. V konečném důsledku budou molekuly prostupovat z levé nádoby do pravé stejně často jako z pravé do levé.

### 1.2.2 Ozubené kolečko se západkou

Podobný problém nastane i ve Feynmanově schématu. Aby kolečko se západkou fungovalo, musí západku přitlačovat nějaká pružina. Ta musí být dostatečně slabá na to, aby ji mohl nadzvednout zub rohatky. Pokud však bude mít pružina stejnou teplotu jako plyn pohánějící lopatky, bude sama díky svým termálním fluktuacím často vychýlena tak, že umožní podklouznutí rohatky v opačném směru. Co se tedy bude dít, když bude na hřídel navinuto vlákno se závažím? Bude na ni vyvíjen moment síly, který bude mít tendenci otáčet hřídel tak, aby závaží klesalo. Kromě toho budou působit náhodně orientované momenty síly způsobené nárazy molekul do lopatek. Západka bude velmi často vychýlena do otevřené polohy, takže převažující moment síly způsobí otáčení hřídele ve směru umožňujícím pokles závaží. Potenciální energie závaží bude klesat, ovšem nárazy otáčejících se lopatek do molekul způsobí ohřívání plynu. Celkový efekt je tedy přesně opačný, než bylo zamýšleno—užitečná potenciální energie

závaží se mění na odpadní teplo.

Může takové zařízení fungovat tak, aby závaží stoupalo vzhůru? Může, ale je potřeba použít „měkčí“ pružinu a chladit ji na nižší teplotu, než je teplota plynu. To nám zajistí, že západka se nebude otevírat pouhým tepelným pohybem pružiny ale jen tehdy, když tepelný pohyb molekul bude působit správným směrem. Nyní však již máme zařízení pracující se dvěma tepelnými rezervoáry. Z teplejšího (molekul plynu) se odebírá energie a částečně se předává chladnějšímu (chladiči pružiny). Zbývající část energie se pak může přeměnit na užitečnou práci—zvedání závaží. Podrobnější výpočet by nám pak ukázal, že účinnost takového zařízení nebude vyšší než účinnost Carnotova stroje pracujícího ve stejném teplotním rozpětí.



Obrázek 6: Bennettovo reverzibilní měření u Szilardova stroje. Na počátku nevíme, ve které části válce se molekula nachází, a západka je v neutrální poloze. Otáčením ozubeného kolečka se západka přemístí do horní polohy, aby zapadla do zubu pod Szilardovým strojem. Protože tento pohyb může být vykonán libovolně pomalu a západka může být vyvážena stejně hmotným závažím, spotřeba energie při něm může být libovolně malá. Ve stádiu 3 tlačíme rám s bočními písty dolů do Szilardova stroje. Protože molekula v pravé části nádoby naráží na pravý píst a klade mu tak odpor, rám se vychýlí a přesune západku doprava. V této části cyklu musíme konat práci proti pohybu molekuly. V kroku 4 ozubené kolečko přesune západku dolů—opět bez spotřeby energie. Krok 5 představuje vytažení rámce s bočními písty vzhůru. V tomto případě nárazy molekuly působí ve směru pohybu rámce, takže práci spotřebovanou v kroku 3 nyní získáme zpět. Szilardův stroj se tak dostane do výchozího stavu a informace o poloze molekuly je zakódována v poloze západky - a to s libovolně malou spotřebou energie (z hlediska informatiky jsme provedli reverzibilní kopii jednoho bitu, neseného polohou molekuly na bit nesený polohou západky). Stádium 6 představuje první krok Szilardova stroje, kdy využíváme informace o poloze molekuly a zasouváme píst do prázdné části válce.

### 1.2.3 Szilardův stroj

Sám Leo Szilard považoval za hlavní problém měření, tedy zjištění, ve které části válce se molekula nachází. Řekněme, že si na takovou molekulu posvítíme. Použijeme svazek světla, které se na molekule může rozptýlit. Zadetekujeme foton vychýlený ze své dráhy molekulou a z jeho směru určíme, kde se molekula nachází. Tady je ovšem háček: rozptylování fotonů ze směrovaného svazku znamená zvyšování entropie. Abychom rozeznali cokoliv uvnitř válce, musíme pracovat s fotony s energií vyšší, než

odpovídá tepelnému záření vycházejícímu z válce o teplotě  $T$ , tedy s dostatečně vyšší energií než  $k_B T$ . Pokud však takovýto foton vychýlíme z uspořádaného svazku do zcela náhodného směru, je to totéž, jako disipovat odpovídající množství energie a přeměnit ji na tepelný ekvivalent. Ve výsledném účtění tedy budeme opět v červených číslech: sice jsme získali  $k_B T \ln 2$  užitečné mechanické práce, ale ještě větší množství energie jsme museli degradovat na teplo. Szilard uzavřel, že právě proces měření je vždy nevratným dějem, během kterého roste entropie. *Tento závěr se však ukázal jako mylný!*

Charles H. Bennett v osmdesátých letech minulého stletí ukázal, že v měření problém není. Můžeme vratným způsobem zjistit polohu molekuly a zapsat ji do paměti přístroje, aniž bychom museli disipovat nějakou energii. Mechanický model možného Bennetova měření je na obrázku 6. Informace o poloze molekuly je zapsána do paměti, tvořené polohou mechanické západky. Ta byla na počátku v neutrální prostřední poloze, která nenese žádnou informaci. Následné posouvání západky a válce s molekulou vzhůru a dolů (nevyžadující v konečné sumě žádnou energii) přemístí západku do jedné ze dvou poloh, nesoucích informaci: L pokud je molekula vlevo a R pokud je vpravo. Při tom jsme vůbec nezměnili energii molekuly. Tento proces je také zcela vratný—můžeme si představit posloupnost na obrázku 6 od stavu 5 po stav 1, při kterém se válec s molekulou v pravé části a západka v poloze R dostanou do stavu, kdy je západka v neutrální poloze. Tato mechanická informace se nyní může použít k volbě, kterým pístem se bude v Szilardově stroji posouvat. Znamená to tedy, že narušení druhého termodynamického zákona nestojí nic principiálního v cestě?

Překvapivá odpověď, na jejímž nalezení mají zásluhy Rolf Landauer a Charles Bennett, spočívá v tom, že je problém zbavit se informace. Máme-li zaplněnou paměť počítače a chceme ji vynulovat, musíme disipovat energii. Konkrétně, pracuje-li paměť při teplotě  $T$ , musíme na vynulování každého bitu o neznámé hodnotě disipovat energii  $k_B T \ln 2$ . Toto je pozoruhodný výsledek, který vyplynul z úvah o tom, jaké jsou vlastně fyzikální limity práce počítačů. V dnešní době probíhá jejich bouřlivý rozvoj a zdokonalování a zlepšování efektivity přichází každým dnem. Kam až můžeme jít, než nás zastaví přírodní zákony? Naše počítače spotřebovávají energii, je třeba dodávat napětí definující bity a chladit jejich procesory, ale když navrheme procesor chytřeji, může nám ke stejnému výpočtu stačit méně energie. Kolik energie je nejmenší nutné množství a k jakým operacím je vlastně nezbytná? Jako nečekané se ukázalo, že libovolně malé množství energie může stačit na přenášení informace, na její kopírování i na jakoukoliv matematickou operaci, kterou lze provést reverzibilně. Je zajímavé, že tímto způsobem můžeme provést jakékoliv algoritmy, které provádějí dnešní počítače—lze tedy postavit reverzibilní univerzální počítač. Ovšem nulování paměti—tedy převedení každého bitu z neznámé hodnoty 0 či 1 do jediné předem dané hodnoty 0 je ireverzibilní. Podle Landauerova principu musíme znehodnotit alespoň  $k_B T \ln 2$  energie na každý vynulovaný bit<sup>2</sup>. Během jednoho cyklu se Szilardovým strojem jsme přeměnili  $k_B T \ln 2$  tepla na práci. Jestliže ale chceme tento cyklus zopakovat, musíme vynulovat paměť. Na to však musíme disipovat přinejmenším stejné množství energie, kolik činí získaná práce.

Dnešní odpověď na více než stoletý Maxwellův problém tedy zní takto: ano, Maxwellův démon v principu může fungovat, pokud svou činnost začne s čistou pamětí a jen do té doby, než ji zcela zaplní. Pokud má pokračovat dále, musí svou paměť vynulovat. Toto však vyžaduje předat do okolí minimálně stejné množství entropie, o jaké klesla entropie „tříděného“ systému. Druhý termodynamický zákon tedy zůstává neochvějně na svém místě.

---

<sup>2</sup>Není tady spor s tím, co jsme tvrdili v diskusi u obrázku 6? Postup ze stavu 1 do stavu 5 můžeme přece obrátit a z bitu o hodnotě R přejít zpět do neutrální, vynulované prostřední polohy. Ale pozor - západku tak můžeme přenést do neutrální polohy pouze tehdy, když její poloha koresponduje s polohou molekuly. Vratně tak můžeme pouze „odkopírovat“ jednu ze dvou kopií bitu o stejné hodnotě, ne však vynulovat samostatný bit.