

“Adiabatic” 的含义： 从参数“浸渐”的量子演化到热力学的绝热过程

孙昌璞[†]

(中国科学院理论物理研究所 北京 100190)

最近,赵凯华先生在《物理》上发表了一篇行文优美的文章^[1],对“Adiabatic”一词在物理学中的用法和含义,进行了历史性阐述,厘清了它是如何从热力学中的“绝热”演变为量子理论中“无限缓慢(浸渐)”的.赵凯华先生是在经典力学和旧量子论的框架中阐释“浸渐”的含义,引用的文献大多是上一世纪20年代以前的文献,有人也会误以为这只是故纸堆里的旧故事.但事实并非如此.赵凯华先生的分析可以在现代量子力学框架中更加明晰地重新阐述^[2,3],对当前量子热力学前沿问题的研究有现实意义^[4-6].

为了说明量子力学中的量子绝热(浸渐)过程如何对应热力学中的“绝热”过程^[2,3],我们先介绍量子绝热定理:给定一个量子系统,其哈密顿量 $H = H[R(t)]$ 依赖于一个缓慢变化的参数 $R(t)$. 它的一个典型例子是自旋为 $1/2$ 的粒子在缓变的磁场中进动. 如果体系参数变化足够缓慢,不足以激发不同的瞬时本征态间的跃迁. 初始时刻处于第 n 个瞬时态 $|n(t=0)\rangle$ 上, t 时刻将保持在具有相同序号缓变瞬时态 $|n(t)\rangle$ 上,能级序号 n 是一个绝热不变量. 以谐振子势阱中粒子运动为例,量子绝热(浸渐)定理可以用图 1(a) 形象说明.

接下来,考虑多个无相互作用粒子处在谐振子势阱中,阱宽变化导致一个量子绝热(浸渐)过程. 让几个粒子分布在谐振子的不同能级上,也不必是热平衡态. 例如,基态上有 2 个粒子,第一激发态上有 2 个粒子,第二激发态上有 1 个粒子,等等. 因为谐振子势阱的浸渐改变不引起瞬时态之间的跃迁,从而不会改变粒子在不同态之间的布居[见图 1(b)],因此,冯·诺依曼(von Neumann)熵为

$$S = -k \sum p_n(t) \ln p_n(t).$$

在量子绝热(浸渐)过程中,冯·诺依曼熵不依赖于时间,是一个动力学不变量. 其中 p_n 代表不同能级上粒子布居的几率, k 是玻尔兹曼常数. 对于热平衡态,要求粒子在各能级上的分布满足正则性的要求,即是

一个玻尔兹曼分布,信息熵就是热力学熵. 因此微观的量子浸渐过程必然导致热力学熵不变. 在统计热力学的意义下,这就是一个热力学的可逆绝热过程.

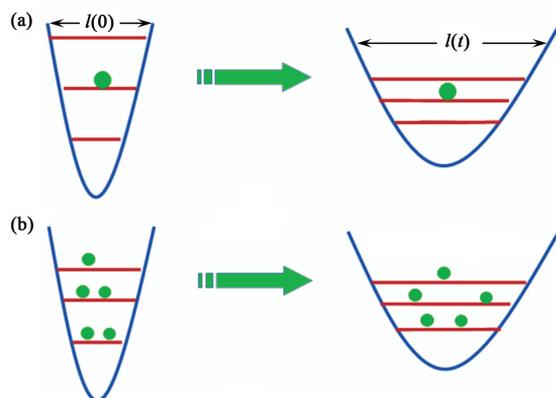


图 1 (a) 处在宽度缓慢变化(特征宽度由 $l(0)$ 变到 $l(t)$) 的谐振子势阱 $V(x) = x^2/l(t)^2$ 中,在第一激发态能级的单粒子将继续保持在这个能级上;(b) 处在宽度缓慢变化的谐振子势阱中的多粒子系统,粒子在各个能级分布的布居数保持不变

上述分析的一个直观宏观热力学图像如图 2(a) 所示. 在由活塞封闭的容器中,充满处在热平衡的气体,当我们足够缓慢地拉动活塞,使得容器体积变化的每一个时刻气体都处在瞬时热平衡态上(准静态过程),体系的熵是不变的. 这个过程与外界没有热量交换,是绝热的. 这种宏观热力学的绝热过程完全对应于无限深势阱宽度缓慢变化的量子力学浸渐过程,如图 2(b) 所示.

为了更加定量地讨论量子力学浸渐过程和热力学绝热过程的对应,我们粗略地介绍一下量子热力学的基本思想. 根据浸渐变化的哈密顿量 $H = H[R(t)]$ 瞬时本征态对应的本征值 $E_n(t)$, 体系瞬态内能 $E(t) = \sum E_n(t) P_n(t)$, 其中 $P_n(t)$ 是第 n 态上粒子布居的几率. 因而体系内能的改变^[5] $dE(t) = dQ + dW$ 可以分为热产生(或热交换)

$$dQ = \sum (dp_n) E_n(t)$$

2010-03-23 收到

[†] Email: suncp@itp.ac.cn

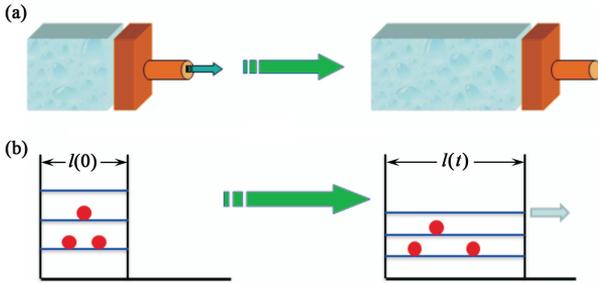


图2 处在封闭容器中热平衡气体的准静态过程(a), 可以和无限深势阱宽度缓慢变化的量子力学浸渐过程(b)对应

和对外做功

$$dW = \sum p_n dE_n(t).$$

前者是由于参数改变引起的内部能级跃迁, 产生了热交换; 而后者是由于参数改变(如拉动活塞改变势阱宽度导致能级改变), 导致对外做功. 对于量子力学的“浸渐”过程, $dp_n = 0$, 没有能级跃迁, 粒子布居数不变, 从而分布几率不变, 没有热交换($dQ=0$), 自然对应于热力学的绝热过程. 按照上述功与热的量子力学划分, 我们可以严格定义各种“量子化”的热力学循环过程, 建立量子热力学的基本框架, 这对理解有限系统、有限时间多粒子统计热力学过程是有裨益的^[5].

最后需要指出, 并非所有的热力学绝热过程都可以由微观的量子浸渐的微观过程来实现. 可以存在这样一个过程, 系统变化得非常快, 量子“绝热(浸渐)条件”不成立, 产生内部激发. 但是, 让做功物质与环境完全隔离, 没有热交换, 这样一个宏观上的热力学绝热过程, 微观上并不是量子浸渐过程. 可以猜测, 由量子浸渐过程实现的热力学绝热过程通常是可逆的, 否则是不可逆的. 因为从微观角度看, 内部

非“绝热”激发不可能是一个可逆过程. 特别是, 如果系统的初态不是热平衡态, 当初态具有量子相干叠加, 系统的“热力学”表现出非常奇异的行为^[6]. 研究做功物质的量子行为如何影响物理体系的热力学, 是目前物理学发展的一个前沿研究领域——量子热力学, 其中最重要的一步, 就是厘清热力学中的“绝热”与量子“浸渐”的关系.

以上的讨论主要是对赵凯华先生的精彩论述加以补充, 但愿不是狗尾续貂、并多少能激发读者对量子热力学前沿研究的兴趣.

参考文献

- [1] 赵凯华. 物理, 2010, 39:54 [Zhao K H. Wuli(Physics), 2010, 39:54(in Chinese)]
- [2] 汤川秀树(主编). 量子力学(I), 北京: 科学出版社, 1991. 366—371 [Yukawa H. Quantum Mechanics (1). Iwanami Shoten, Publishers (岩波书店), 1972. 356—364 (in Japanese)]
- [3] 孙昌璞, 张芑. 量子绝热近似理论与 Berry 相因子. 见: 量子力学新进展(第二辑). 北京: 北京大学出版社, 2001. 21—86 [Sun C P, Zhang P. Quantum Adiabatic Approximation and Berry's Phases. In: New Progress in Quantum Mechanics. Beijing: Peking University Press, 2001. 21—86(in Chinese)]
- [4] Gemmer J, Michel M, Mahler G. Quantum Thermodynamics. Berlin: Springer, 2010 2nd Edition
- [5] Quan H T, Zhang P, Sun C P. Phys. Rev. E, 2005, 72: 056110; Quan H T, Liu Y X, Sun C P *et al.* Phys. Rev. E, 2007, 76: 031105
- [6] Scully M O, Zubairy M S, Agarwal G S *et al.* Science, 2003, 299:862; Quan H T, Zhang P, Sun C P. Phys. Rev. E, 2006, 73: 036122; Quan H T, Wang Y D, Liu Y *et al.* Phys. Rev. Lett., 2006, 97:180402

• 读者和编者 •

《中国大百科全书·物理学》(第二版)邮购信息

《中国大百科全书·物理学》(第二版)收条约 1700 条, 图表 1400 多幅, 200 多万字, 精装 16 开, 638 页, 全彩印刷, 订价 185 元. 为方便《物理》的读者订阅该书, 经与出版社协商, 《物理》编辑部获得该书的代理发行权, 并以 150 元/本的优惠价(8 折, 含邮费)发行, 欢迎各位读者向编辑部订阅. 订购款汇款方式:

1、邮局汇款

地址: 北京 603 信箱, 邮编 100190

收件人: 《物理》编辑部

附言: 大百科全书

2、银行汇款

户名: 中国科学院物理研究所

帐号: 30948821—250101040005699

开户行: 农行北京科院南路支行

又: 汇款时请注明“《物理》大百科全书”

请您汇款后及时发邮件到: physics@iphy.ac.cn, 告知收件人详细地址、发票抬头等详细订购信息, 以便书籍及时、准确的寄到您手里.

咨询电话: 010—82649029, 82649266