中国科学: 物理学 力学 天文学 2010 年 第 40 卷 第 6 期: 744 ~ 747
SCIENTIA SINICA Phys, Mech & Astron www.scichina.com phys.scichina.com
《中国科学》杂志社
SCIENCE CHINA PRESS

论 文

宏观可逆绝热过程与微观量子绝热过程的关系

段乾恒, 陈平形*

国防科技大学理学院物理系, 长沙 410073
* 联系人, E-mail: pxchen@nudt.edu.cn

收稿日期: 2009-10-10; 接受日期: 2010-04-12
全国优秀博士论文作者专项基金(编号: 200524)和教育部新世纪人才支持计划资助项目

摘要 从量子绝热过程中粒子在各个能级上分布的概率不变这一特点出发, 通过对比分析大量粒子经历量子绝热过程后在宏观上的表现及宏观系统在可逆绝热过程中其微观表现特点, 证明了对近独立粒子系统, 微观粒子经历量子绝热过程时宏观上表现为可逆绝热过程, 而宏观可逆绝热过程在微观上表现为每个粒子经历量子绝热过程.

关键词 量子绝热过程, 可逆绝热过程, 绝热条件

PACS: 03.65.Ca, 03.65.Ta, 05.30.Jp

量子绝热定理[1,2]是量子理论的重要原理之一, 它主要关注的是含时哈密顿演化足够慢的量子系统的演化特点. 自从 1984 年 Berry [3]发现贝利相位以来, 物理学家重新燃起了对量子绝热的兴趣. 量子绝热定理在物理化学、量子场论[4]中都有了很好的应用. 近年来, 随着绝热量子计算的发展[5], 对量子绝热近似满足的条件展开了积极的研究[6~10], 特别是绝热量子算法的提出[11,12], 量子绝热定理更是得到了新的应用.

19 世纪末期玻尔兹曼统计物理[13]使人们对热力学的认识从宏观进入微观, 从经验科学上升到理论科学. 进入 20 世纪后, 随着量子力学的发展, 人们对热力学的认识又发展到了新的高度. 特别是对于可逆过程的研究, 发现了很多有趣的现象.

尽管量子绝热定理在很多领域有了重要的应用, 但是, 对于宏观可逆绝热过程与微观量子绝热过程的对比研究以及二者之间的关系还未见报道. 本文即从量子绝热定理出发, 研究量子绝热过程与宏观可逆绝热过程之间的关系, 证明了对近独立粒子系统, 微观粒子遵从量子绝热过程时宏观上表现为可逆绝热过程, 而宏观可逆过程在微观上可以看作每个粒子经历量子绝热过程. 这个结论从一个侧面反映了宏观过程与微观过程的联系, 并通过将宏观可逆过程发生的条件和量子绝热过程发生的条件相互对照研究, 能使我们更准确地理解这两个条件的物理本质.

1 大量粒子的量子绝热过程宏观上经历一个可逆绝热过程

量子绝热定理可以追溯到量子力学发展的早期, 它在量子力学中有着重要的应用. 量子绝热定理由 Ehrenfest 于 1916 年第一次提出[14], 并由 Born 和 Fork[15]在 1928 年第一次用现代量子力学方法给出了证明. 简单的说, 量子绝热定理给出了量子系统在哈密顿量缓慢变化时系统态的演化规律, 即: 若系统哈

引用格式: 段乾恒, 陈平形. 宏观可逆绝热过程与微观量子绝热过程的关系. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2010, 40: 744 ~ 747

密顿量 $H(t)$演化的足够慢, 且初始时刻系统处于 $H(0)$的某个本征态上, 则演化结束时系统仍将处于 $H(t)$相应的本征态上[1,2].

我们可以这样理解量子绝热定理: 系统只要满足量子绝热条件, 即系统哈密顿量演化的足够“缓慢”, 则系统态在演化过程中在哈密顿各个本征态的分布概率不变[16]. 对于大量近独立粒子构成的系统, 若每一个粒子都经历量子绝热过程, 即系统中每个能级上分布的粒子数在演化过程中是不变的, 则我们可证明该系统经历的是一个宏观可逆绝热过程. 我们以玻尔兹曼气体粒子为例证明, 对玻色粒子和费米粒子系统也可类似证明.

以 N 表示玻尔兹曼系统的粒子总数, $\varepsilon_l\,(l=1,2,\cdots)$ 表示粒子能级, ω_l 表示能级 ε_l 的简并度, a_l 表示在能级 ε_l 上的粒子数, 则由统计物理[17]可知其微观状态数为

$$\Omega=\frac{N!}{\prod_l a_l!}\prod_l \omega_l^{a_l}. \tag{1}$$

对于单个粒子, 其平均能量为

$$\bar{\varepsilon}=\sum_l p_l\varepsilon_l, \tag{2}$$

其中 p_l 为粒子在能级 ε_l 上的概率. 因此, $a_l=Np_l$, 系统的内能为 $U=N\bar{\varepsilon}$.

对(2)式进行微分可得

$$\mathrm{d}\bar{\varepsilon}=\sum_l p_l\mathrm{d}\varepsilon_l+\sum_l \varepsilon_l\mathrm{d}p_l. \tag{3}$$

在热力学中, 热力学第一定律表述为

$$\mathrm{d}U=\bar{\mathrm{d}}W+\bar{\mathrm{d}}Q \tag{4}$$

其中 $\bar{\mathrm{d}}Q=T\mathrm{d}S+\sum_i y_i\mathrm{d}y_i$, T 和 S 分别是系统的温度和熵, y_i 是广义坐标, Y_i 是对应 y_i 的广义力. 我们可以定义微观过程的热传递和做功[18,19]

$$\bar{\mathrm{d}}Q=\sum_l \varepsilon_l\mathrm{d}p_l, \tag{5}$$

$$\bar{\mathrm{d}}W=\sum_l p_l\mathrm{d}\varepsilon_l. \tag{6}$$

由(6)式定义的做功是粒子分布概率不变时由粒子能级改变而引起的, 即系统外参量的改变, 会引起系统能级的变化.

若每一个粒子都满足量子绝热条件, 则由量子绝热定理可知在演化过程中 p_l 不变, 因此在上述过程中, 系统在各个能级上的粒子数分布不变, 系统与环境的热量交换为

$$\bar{\mathrm{d}}Q=\sum_l \varepsilon_l\mathrm{d}p_l=0. \tag{7}$$

从上式可以看出在上述过程中系统与外界没有发生热量交换, 所以这个过程在宏观上也是绝热过程.

在上述量子绝热过程中, 哈密顿量的形式不变, 因此简并度不变. 例如, 假定该过程是体积变化, 由于简并度是由哈密顿量的对称性决定的, 改变体积并不引起哈密顿对称性的变化, 所以在改变体积的过程中不改变简并度ω_l. 因此有

$$\Omega(0)=\frac{N!}{\prod_l a_l!}\prod_l \omega_l^{a_l}=\Omega(t), \tag{8}$$

即在量子绝热过程前后宏观系统的微观状态数不变, 由玻尔兹曼熵公式

$$S=k\ln\Omega, \tag{9}$$

可知, 过程前后系统的熵也不改变.

上述过程也可以这样理解, 在大量粒子进行的量子绝热过程中, 粒子在各个能级的分布概率与系统的温度有如下关系

$$p_l\propto\exp\left(-\frac{\varepsilon_l}{kT}\right), \tag{10}$$

在量子绝热过程中, 粒子在各个能级的分布概率不变, 因此 $\frac{\varepsilon_l}{kT}$ 是一个常数. 对于理想的近独立粒子系统, 每个粒子在一个体积为V 的容器中运动, 由量子力学或周期性边界条件可知, 粒子的能级与体积之间满足

$$\varepsilon_l=\frac{\hbar^2\chi_l}{2m}V^{-2/3}, \tag{11}$$

其中 V 为系统的体积, m 为粒子质量, χ_l 是只与 l 有关的常数. 由(10)式可知

$$TV^{2/3}=\text{常数}. \tag{12}$$

上式正是近独立粒子构成的理想气体的可逆绝热过程方程.

由上面的分析可知, 大量微观粒子进行的量子绝热过程中系统与环境没有交换热量, 且在过程前后没有改变系统的熵, 故由宏观可逆绝热过程的性质可以判定, 满足量子绝热条件的大量微观粒子进行的过程在宏观上表现为可逆的绝热过程.

2　宏观可逆绝热过程在微观上的表现

在宏观可逆绝热过程中, 系统的熵不变, 由于系统是近独立的全同粒子, 因此每个粒子的熵也不变. 由统计力学可知, 粒子的熵与两个量有关: 一是粒子的可能状态数; 二是粒子在各个可能状态的分布[17]. 由平衡态统计物理可知, 如果粒子的可能状态数不变, 则热平衡系统中粒子在各个可能状态的不同分布对应系统不同的熵. 下面我们说明在宏观可逆过程中, 粒子的可能状态数不变.

在体积为 V、温度为 T 的近独立粒子组成的气体系统中(或理想气体系统), 我们可以将相空间划分为许多体积元 $\Delta\omega = V\Delta p\ \left(\Delta p = \Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z\right)$, 由于粒子的微观状态数由大小为 h^3 的相格确定, 故$\Delta\omega$内粒子的可能状态数为

$$n = \frac{V\Delta p}{h^3}, \tag{13}$$

由海森堡不确定关系可知

$$h = \Delta\alpha \Delta p_\alpha \left(\alpha = x, y, z\right), \tag{14}$$

故

$$n = \frac{V}{\Delta x \Delta y \Delta z}. \tag{15}$$

对于处于温度为 T 的热平衡状态的单个粒子, 其热运动平均能量的数量级为 $E_\alpha = \pi kT$, 相应的动量为 $p_\alpha = \sqrt{2m\pi kT}\ \left(\alpha = x, y, z\right)$. 热运动导致的动量在各个方向的平均不确定度可以分别为

$$\Delta p_x = p_x,$$
$$\Delta p_y = p_y,$$
$$\Delta p_z = p_z.$$

因此由(14)式有

$$\Delta\alpha \equiv \lambda_\alpha = \frac{h}{\sqrt{2m\pi kT}}\left(\alpha = x, y, z\right), \tag{16}$$

这里 λ_α 为在 α 方向热运动的平均波长. 因此粒子的可能状态数为

$$n = \frac{V}{\lambda_x \lambda_y \lambda_z} = \frac{V}{\lambda^3}, \tag{17}$$

其中λ^3 为热运动波包的平均大小.

这样, 我们可以将粒子的可能状态数的物理图像理解为: 在体积 V 中, 每个粒子占据体积的大小为 λ^3, 即波包的体积, 体积 V 中波包的个数也就是粒子的可能状态数.

将(16)式代入(17)式中, 得

$$n = \frac{V\left(2\pi mkT\right)^{3/2}}{h^3} = \frac{\left(2\pi mk\right)^{3/2}\left(VT^{3/2}\right)}{h^3}. \tag{18}$$

对于理想气体, 其可逆绝热过程方程

$$TV^{\gamma-1} = C, \tag{19}$$

其中 C 为一常数, γ表示定压热容量与定容热容量的比值. 上面我们考虑的是系统中的粒子质心运动, 故其自由度为 3, $\gamma = \frac{5}{3}$, 即

$$TV^{2/3} = C, \tag{20}$$

将(20)式代入(18)式中, 得

$$n = \frac{\left(3mk\right)^{3/2} C^{3/2}}{h^3}, \tag{21}$$

即粒子可能状态数为一常数. 因此, 在可逆绝热过程中, 粒子可能的状态数是不变的. 由于在可逆绝热过程中熵不变, 从前面的分析我们可以得出: 粒子在各个可能状态的分布也不变. 由此得出, 在宏观可逆绝热过程中, 粒子处于各个可能状态的概率是不变的. 故由量子绝热过程的特点可知: 理想气体质心运动的宏观可逆绝热过程在微观上粒子经历的过程是量子绝热过程.

3　结论

我们对比分析了宏观可逆绝热过程与量子绝热过程, 得到了以下结论: (ⅰ) 近独立粒子系统中如果每个粒子都经历量子绝热过程, 那么系统在宏观上就表现为可逆的绝热过程; (ⅱ) 如果系统在宏观上进行一个可逆绝热过程, 那么在微观上每一个粒子也都可以看作是经历了量子绝热过程. 最近, 关于量子绝热定理成立的条件有很多的讨论. 我们的结论能够为人们更深理解量子绝热定理的物理本质提供一些新的思路, 同时也从一个侧面看到了微观过程与宏观过程的内在联系.

致谢　感谢李承祖教授和张硕等课题组成员给出的很多有益的建议.

参考文献

1 Messiah A. Quantum Mechanics. 2nd ed. Amsterdam: North-Holland Publishing Company, 1970. 739—759
2 曾谨言. 量子力学(卷Ⅱ). 第四版. 北京: 科学出版社, 2007. 203—210
3 Berry M V. Quantal phase factors accompanying adiabatic changes. Proc R Soc London Ser A, 1984, 392: 45—57
4 Gell-Mann M, Low F. Bound states in quantum field theory. Phys Rev, 1951, 84: 350—354
5 Farhi E, Goldstone J, Gutmann S, et al. A quantum adiabatic evolution algorithm applied to random instances of an NP-complete problem. Science, 2001, 292: 472—475
6 Marzlin K P, Sanders B C. Inconsistency in the application of the adiabatic theorem. Phys Rev Lett, 2004, 93: 160408-1—4
7 Tong D M, Singh K, Kwek L C, et al. Quantitative conditions do not guarantee the validity of the adiabatic approximation. Phys Rev Lett, 2005, 95: 110407-1—4
8 Tong D M, Singh K, Kwek L C, et al. Sufficiency criterion for the validity of the adiabatic approximation. Phys Rev Lett, 2007, 98: 150402-1—4
9 Zhao Y. Reexamination of the quantum adiabatic theorem. Phys Rev A, 2008, 77: 032109-1—8
10 Amin M H S. Consistency of the adiabatic theorem. Phys Rev Lett, 2009, 102: 220401-1—4
11 Siu M S. From quantum circuits to adiabatic algorithms. Phys Rev A, 2005, 71: 062314-1—9
12 Aberg J, Kult D, Sjoqvist E. Robustness of the adiabatic quantum search. Phys Rev A, 2005, 71: 060312-1—4
13 王竹溪. 统计物理学导论. 第二版. 人民教育出版社, 1965.37—46
14 Wu Z Y, Yang H. Validity of the quantum adiabatic theorem. Phys Rev A, 2005, 72:012114-1—5
15 Aguiar Pinto A C, Nemes M C, Thomaz M T, et al. Comment on the adiabatic condition. Am J Phys, 2000, 68: 955—960
16 Tong D M, Yi X X, Fan X J, et al. Examination of the adiabatic approximation in open systems. Phys Lett A, 2008, 372: 2364—2367
17 汪志诚. 热力学·统计物理. 第三版. 北京: 高等教育出版社, 2003. 233—242
18 全海涛. 量子信息启发的量子热力学和量子相变问题. 博士学位论文. 北京: 中国科学院理论物理研究所, 2007. 10—11
19 Quan H T, Zhang P, Sun C P. Quantum heat engine with multilevel quantum systems. Phys Rev E, 2005, 72: 056110-1—10

The relations between macro reversible adiabatic process and quantum adiabatic process

DUAN QianHeng & CHEN PingXing*

Department of Physics, Science College of National University of Defense Technology, Changsh 410073, China

Starting from the trait of the quantum adiabatic process in which the distribution of a particle's probability among different energy levels doesn't change, we analyses the characteristics of quantum adiabatic processes and macroscopic reversible adiabatic process. It is shown that for ideal gas a quantum adiabatic process is equal to a macroscopic reversible adiabatic process.

quantum adiabatic process, reversible adiabatic process, adiabatic condition

PACS: 03.65.Ca, 03.65.Ta, 05.30.Jp