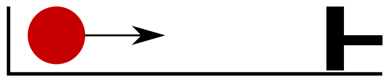
Tomáš Tyc, Brno 22.2.2018

Adiabatické jevy

1 Adiabatický děj

Uvažujme částici v nádobě šířky a uzavřené pístem, která se může pohybovat v jedné dimenzi:



Pokud má částice nenulovou energii, bude běhat sem a tam a pravidelně narážet na píst. Zajímavá otázka zní, jak se bude měnit energie částice, jestliže pístem budeme velmi pomalu (adiabaticky) pohybovat?

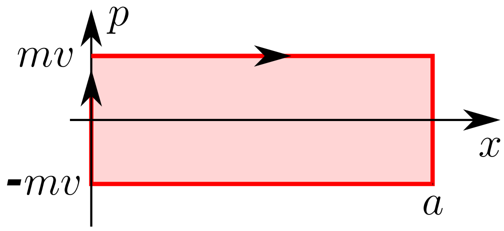
1. Úvaha s pomocí srážek: Označme a šířku nádoby. Je-li rychlost částice před nárazem na píst v a rychlost pístu $\dot{a} = \mathrm{d}a/\mathrm{d}t$, blíží se částice ke pístu rychlostí $v-\dot{a}$. Stejnou relativní rychlostí se od něj odrazí, po srážce bude mít proto rychlost o velikosti $v' = v - 2\dot{a}$ a energii $E' = \frac{1}{2}m(v-2\dot{a})^2$. Změna energie je pak
$$\Delta E = E' - E = \frac{1}{2}m(v-2\dot{a})^2 - \frac{1}{2}mv^2 \approx -2mv\dot{a}, \tag{1}$$
přičemž jsme zanedbali malou veličinu druhého řádu v $\dot{a}$. Tato změna energie nastane za dobu mezi dvěma nárazy na píst, tedy za dobu $2a/v$, za kterou se stěna vzdálí o $\Delta a = 2a\dot{a}/v$. Rychlost změny energie dělená rychlostí změny a je pak
$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}a} \approx \frac{\Delta E}{\Delta a} = -\frac{mv^2}{a} = -\frac{2E}{a} \tag{2}$$
Je důležité, že rychlost pístu se vykrátila, takže nezáleží na tom, jak rychle jím pohybujeme – jen když je to dost pomalu.

2. Úvaha s pomocí síly: Průměrná síla od částice na píst je rovna hybnosti předané během srážky dělená dobou T mezi dvěma srážkami:
$$F = \frac{2mv}{T} = \frac{2mv}{2a/v} = \frac{mv^2}{a} = \frac{2E}{a} \tag{3}$$
Změna energie při zvětšení jámy o $\mathrm{d}a$ je rovna záporně vzaté vykonané práci této síly, tedy $\mathrm{d}E = -F\,\mathrm{d}a$ a proto $\mathrm{d}E/\mathrm{d}a = -2E/a$, což je stejná rovnice jako (2).

Aby byla tato odvození správná, musí platit, že než se píst výrazně posune, dojde k mnoha nárazům částice na píst. Také nesmí být posouvání pístu synchronizováno s pohybem částice: pokud bychom např. s pístem popojeli vždy zrovna ve chvíli, kdy je částice na opačné straně nádoby, její energie by se vůbec neměnila. Tato pomalost a nesynchronizovanost jsou právě podmínkami adiabatičnosti.

Řešením rovnice (2) separací proměnných dostaneme
$$Ea^2 = C, \tag{4}$$
kde C je integrační konstanta. Jde o tzv. *adiabatický invariant* problému.

Všimněte si, že tento adiabatický invariant lze vyjádřit pomocí plochy opsané fázovou trajektorií během jedné periody pohybu ve fázovém prostoru.



Tato plocha je $S = 2mva = \sqrt{8mC}$. Je tedy vidět, že pokud se zachovává C, zachovává se i S. Jak uvidíme, právě plocha ve fázovém prostoru je vždy adiabatickým invariantem.

Všimněte si rovněž, že energie je nepřímo úměrná a^2, což je stejná závislost, jakou má v kvantové mechanice kvantovaná energie částice v nekonečně hluboké jámě (tam je $E_n = \pi^2\hbar^2 n^2/(2ma^2)$).

1.1 Souvislost s adiabatickým dějem pro ideální plyn

Srovnejme naši nádobu s běžnou nádobou s plynem. V jednorozměrné situaci hraje roli tlaku síla a roli objemu šířka. Víme, že v 3D platí $pV^\kappa = \text{const.}$ Šel by i zde odvodit podobný zákon? Ano, z rovnic (3) a (4) plyne, že

$$Fa^3 = 2C, \tag{5}$$

což je zákon pro adiabatický děj s Poissonovou konstantou $\kappa = 3$.

Je to náhodná podobnost? Není. Zkusme si představit, že nádoba je trojrozměrná a částice se v ní může pohybovat různými směry. Uvažujme, že nádoba nemá přesně tvar kvádru, aby částice během dosti dlouhé doby vystřídala nejrůznější směry pohybu[1]. Je-li píst kolmý na osu x, pak z podobné úvahy jako dříve je vidět, že $\mathrm{d}E/\mathrm{d}V = -mv_x^2/V$. Tyto rovnici musíme vystředovat přes všechny směry rychlosti částice, tedy

$$\left\langle \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}V} \right\rangle_{\text{směry}} = -\frac{m}{V}\,\langle v_x^2 \rangle_{\text{směry}} = -\frac{mv^2}{3V} = -\frac{2E}{3V}\,, \tag{6}$$

kde jsme využili toho, že se částice pohybuje se stejnou pravděpodobností všemi směry a platí $v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2$. Odtud odvodíme, že $EV^{2/3} = C$ a pro tlak $p = -\mathrm{d}E/\mathrm{d}V$ pak dostaneme

$$pV^{5/3} = \text{konst.}\,, \tag{7}$$

což je zákon pro adiabatický děj s Poissonovou konstantou $\kappa = 5/3$ – tedy její známou hodnotou pro jednoatomový plyn.

1.2 Je adiabatický děj rychlý nebo pomalý?

V termodynamice je požadavek na adiabatický děj většinou takový, aby byl děj rychlý, protože pak se nestihne předat teplo. My jsme naopak uvažovali pomalý děj, aby se systém stihl přizpůsobovat novým podmínkám. Tento zdánlivý rozpor zmizí, jestliže si uvědomíme, že ani v termodynamickém kontextu by děj nebyl adiabatický, pokud bychom jej vykonali příliš rychle – např. nadzvukovou rychlostí zvětšili objem nádoby s pístem, takže plyn by přitom nevykonal téměř žádnou práci. A v našich úvahách jsme naopak neuvažovali předávání tepla.

[1] Jedná se o tzv. **ergodickou dutinu**, v níž částice během dost dlouhé doby proběhne libovolně blízko kterémukoli bodu fázového prostoru; v takové dutině je středování přes čas ekvivalentní středování přes fázový prostor.

2 Obecné odvození adiabatických invariantů (dle Landaua a Lifšice)

Uvažujme systém popsaný hamiltoniánem $H(q,p,\lambda)$, který závisí na parametru λ. Předpokládejme, že pohyb soustavy je periodický. Rychlost změny energie je

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial \lambda}\frac{\mathrm{d}\lambda}{\mathrm{d}t} \tag{8}$$

Derivace $\frac{\partial H}{\partial \lambda}$ závisí na rychle se měnících p, q. Nás zajímá derivace vystředovaná přes periodu pohybu:

$$\left\langle \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}t} \right\rangle_{\text{perioda}} = \frac{\mathrm{d}\lambda}{\mathrm{d}t} \left\langle \frac{\partial H}{\partial \lambda} \right\rangle_{\text{perioda}} \tag{9}$$

přičemž ve středované funkci $\partial H/\partial \lambda$ se mění veličiny q, p, ale ne λ, tedy středujeme přes periodu takového pohybu, který by odpovídal konstantnímu λ. Středování dá

$$\left\langle \frac{\partial H}{\partial \lambda} \right\rangle_{\text{perioda}} = \frac{1}{T}\int_0^T \frac{\partial H}{\partial \lambda}\,\mathrm{d}t, \tag{10}$$

kde T je perioda pohybu. Z Hamiltonovy rovnice máme

$$\mathrm{d}t = \frac{\mathrm{d}q}{\partial H/\partial p}. \tag{11}$$

Pomocí této rovnice převedeme integrování z času na souřadnici, vyjádříme periodu T jako integrál z $\mathrm{d}T$ a vše dosadíme do rovnice (9):

$$\left\langle \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}t} \right\rangle_{\text{perioda}} = \frac{\mathrm{d}\lambda}{\mathrm{d}t} \frac{\oint \frac{\partial H/\partial \lambda}{\partial H/\partial p}\,\mathrm{d}q}{\oint \frac{\mathrm{d}q}{\partial H/\partial p}} \tag{12}$$

Integrály teď probíhají podél uzavřené trajektorie ve fázovém prostoru odpovídající dané hodnotě λ a q se mění „vpřed“ a „vzad“. Hamiltonova funkce je podél takové trajektorie konstantní a hybnost je danou funkcí měnící se souřadnice q a dvou konstantních veličin E, λ. Chápejme nyní hybnost jako právě takovou funkci a derivujme rovnici $H[q, p(q,E,\lambda), \lambda] = E$ podle parametru λ:

$$\frac{\partial H}{\partial \lambda} + \frac{\partial H}{\partial p}\frac{\partial p}{\partial \lambda} = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \frac{\partial H/\partial \lambda}{\partial H/\partial p} = -\frac{\partial p}{\partial \lambda}. \tag{13}$$

Toto je vlastně jinak napsaná identita používaná často v termodynamice:

$$\left(\frac{\partial A}{\partial B}\right)_C \left(\frac{\partial B}{\partial C}\right)_A \left(\frac{\partial C}{\partial A}\right)_B = -1$$

Toto nyní dosadíme do integrálu v rovnici (12), přičemž ve spodním integrálu nahradíme $1/(\partial H/\partial p)$ výrazem $\partial p/\partial E$:

$$\left\langle \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}t} \right\rangle_{\text{perioda}} = -\frac{\mathrm{d}\lambda}{\mathrm{d}t} \frac{\oint \left(\frac{\partial p}{\partial \lambda}\right)_{q,E} \mathrm{d}q}{\oint \left(\frac{\partial p}{\partial E}\right)_{q,\lambda} \mathrm{d}q} \tag{14}$$

neboli

$$\oint \left[\left(\frac{\partial p}{\partial E}\right)_{q,\lambda} \left\langle \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}t} \right\rangle + \left(\frac{\partial p}{\partial \lambda}\right)_{q,E} \frac{\mathrm{d}\lambda}{\mathrm{d}t} \right] \mathrm{d}q = 0, \tag{15}$$

což lze konečně přepsat jako

$$\frac{\mathrm{d}I}{\mathrm{d}t} = 0, \tag{16}$$

kde

$$I = \frac{1}{2\pi} \oint p \,\mathrm{d}q. \tag{17}$$

Vidíme tedy, že I je adiabatickým invariantem. Jaký je jeho význam? Není těžké se přesvědčit, že integrál v rovnici (17) je vlastně plochou S opsanou trajektorií ve fázovém prostoru:

$$\oint p \,\mathrm{d}q = \int \mathrm{d}p \,\mathrm{d}q. \tag{18}$$

Při adiabatické změně parametrů hamiltoniánu se tedy zachovává plocha ve fázovém prostoru opsaná během jedné periody pohybu.

Veličina I je funkcí energie a parametru λ. Její parciální derivace podle energie určuje periodu pohybu, protože

$$T = \oint \frac{\partial p}{\partial E} \,\mathrm{d}q = 2\pi \frac{\partial I}{\partial E}, \tag{19}$$

což lze napsat jako

$$\omega = \frac{\partial E}{\partial I}, \tag{20}$$

Příklady:

1. Harmonický oscilátor s hamiltoniánem

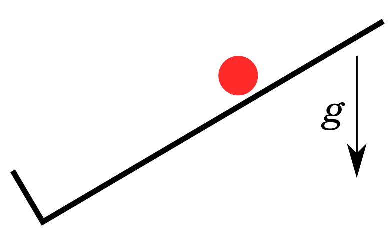
$$H(q, p, \omega) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 q^2 \tag{21}$$

(zde frekvence ω hraje roli parametru λ). Fázové trajektorie jsou dány zákonem zachování energie. Jsou jimi elipsy o poloosách $\sqrt{2mE}$ a $\sqrt{2E/m\omega^2}$ a proto

$$I = \frac{1}{2\pi} \pi \sqrt{2mE} \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} = \frac{E}{\omega} \tag{22}$$

Při adiabatickém pohybu harmonického oscilátoru je tedy energie přímo úměrná frekvenci. Praktickou situací zde může být kyvadlo, jehož délku pomalu měníme (i když kyvadlo není zcela přesně harmonický oscilátor).

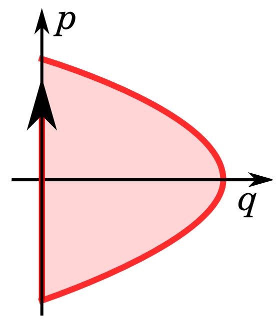
2. Částice odrážející se od zarážky na nakloněné rovině, přičemž lze měnit hodnotu složky gravitace podél roviny jejím nakláněním.



Hamiltonián je $H = p^2/2m + m\lambda q$, kde $\lambda = g \sin\alpha$. Zákon zachování energie ukazuje, že fázové trajektorie jsou parabolické úseče, přičemž amplituda na ose q je $E/m\lambda$ a na ose p je $\sqrt{2mE}$. Adiabatický invariant pak je

$$I = \frac{1}{2\pi} 2 \frac{2}{3} \sqrt{2mE} \frac{E}{m\lambda} = \frac{2}{3\pi} \frac{\sqrt{2m}\, E^{3/2}}{\lambda} \tag{23}$$

a energie se tedy mění přímo úměrně $\lambda^{2/3}$. Při zvětšování α konáme práci, takže se energie bude zvětšovat. Pokud nakloněnou rovinu pomalu položíme ($\lambda \to 0$), částice se zastaví.



3 Souřadnice akce – úhel

Uvažujme nyní, že parametr λ se nemění, je zafixován. Provedeme kanonickou transformaci k novým proměnným, přičemž roli nové hybnosti bude hrát I. Jako vytvořující funkci vezmeme zkrácenou akci S_0 jako funkci q, E, λ. Tuto akci totiž počítáme jako

$$S_0(q, E, \lambda) = \int p(q, E, \lambda)\, \mathrm{d}q \tag{24}$$

při pevné hodnotě energie. Ale protože I závisí na energii, lze S_0 vyjádřit i jako funkci $S_0(q, I, \lambda)$. Pak máme

$$p = \frac{\partial S_0(q, E, \lambda)}{\partial q} = \frac{\partial S_0(q, I, \lambda)}{\partial q}, \tag{25}$$

což je současně první z rovnic pro kanonickou transformaci[2]. Druhá rovnice pak určuje novou souřadnici, kterou označíme jako w:

$$w = \frac{\partial S_0(q, I, \lambda)}{\partial I}. \tag{26}$$

Nové proměnné I, w se nazývají *kanonické*, přičemž I je proměnnou akce a w je úhlovou proměnnou.

Protože vytvořující funkce S_0 nezávisí explicitně na čase, je nová Hamiltonova funkce rovna staré, je ovšem vyjádřena v nových proměnných. Je to tedy energie vyjádřená jako funkce I: $H' = E(I)$. Hamiltonovy rovnice proto jsou

$$\dot{I} = 0, \qquad \dot{w} = \frac{\mathrm{d}E(I)}{\mathrm{d}I}. \tag{27}$$

První rovnice dá $I = \text{const.}$ a druhá

$$w = \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}I}\, t + \text{const.} = \omega(I) t + \text{const.} \tag{28}$$

a určuje tak fázi kmitů.

Po uplynutí jedné periody kmitů vzroste zkrácená akce o

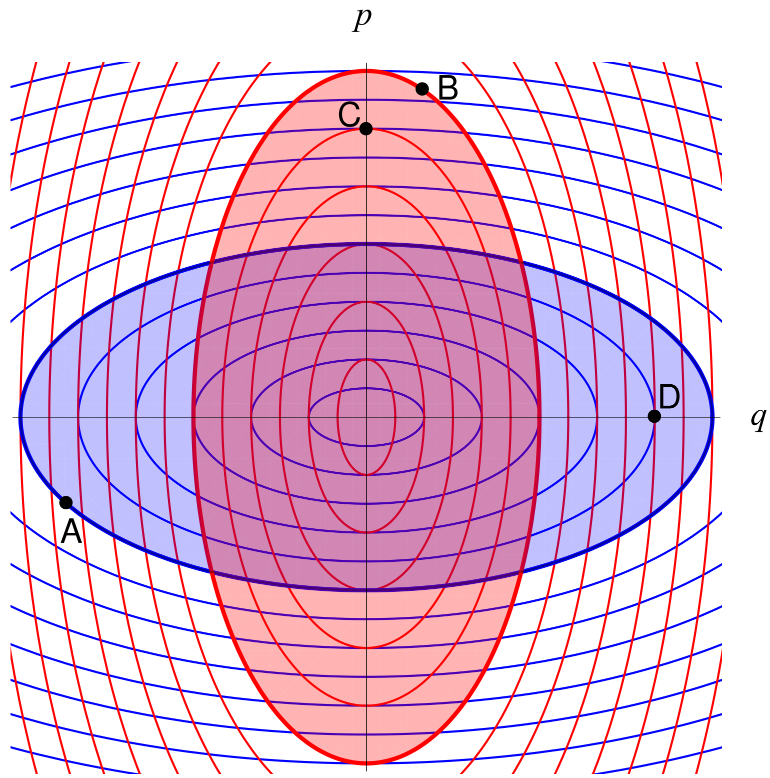
$$\Delta S_0 = \oint p(q, E, \lambda)\, \mathrm{d}q = 2\pi I. \tag{29}$$

Za stejnou dobu vzroste w o 2π, což je vidět z rovnic (19) a (28). Systém se tím navrátí do původního stavu, takže libovolná funkce souřadnice a hybnosti je periodickou funkcí w. Lze ji proto rozložit ve Fourierovu řadu, což může být velice užitečné.

[2]Máme tím na mysli rovnice $p = \partial\Phi/\partial q$, $Q = \partial\Phi/\partial P$, $H' = H + \partial\Phi/\partial t$

4 Adiabatický teorém a Liouvillova věta

Adiabatický teorém můžeme dostat zajímavým způsobem i z Liouvillovy věty. Představme si pro konkrétnost harmonický oscilátor s hamiltoniánem (21), jehož frekvenci pomalu změníme z hodnoty ω_1 (v čase $t = 0$) na hodnotu $\omega_2 > \omega_1$ (v čase $t = T$). Na obrázku níže odpovídají jsou fázové trajektorie při frekvenci ω_1 nakresleny modře, při frekvenci ω_2 červeně.



Každý fázový bod při pevném ω obíhá po odpovídající fázové trajektorii (v našem případě po elipse), která ohraničuje určitou plochu fázového prostoru. Pro pevný hamiltonián (pevnou frekvenci) můžeme zavést na množině fázových bodů uspořádání – bod X „je větší“ než bod Y, jestliže plocha opsaná bodem X během jedné periody je větší než plocha opsaná bodem Y. Je zřejmé, že při neadiabatické změně hamiltoniánu se toto uspořádání nemusí zachovávat, například při frekvenci ω_1 je bod C větší než bod D, zatímco při frekvenci ω_2 je tomu naopak. Jestliže ale frekvenci měníme velmi pomalu a rovnoměrně, nemůže ke změně uspořádání dojít, protože systém vykoná mnoho oscilací, než se hamiltonián výrazněji změní, a ve fázovém prostoru nemůže dojít k „překřížení“ trajektorií.

Vezmeme-li nyní fázový bod A v čase $t = 0$, všechny body uvnitř silnější modré elipsy jsou menší než on. Tyto body reprezentují různé počáteční podmínky (v čase $t = 0$) ansámblu nekonečně mnoha identických systémů. Při časovém vývoji těchto systémů se příslušné body budou po fázovém prostoru pohybovat, plocha tvořená jimi však bude podle Liouvillovy věty stále stejná. To platí i pro čas $t = T$, kdy se frekvence již adiabaticky změnila na hodnotu ω_2. Vzhledem k zachování uspořádání bodů při adiabatickém ději je ale jasné, že všechny tyto body jsou nyní stále menší než bod B, do kterého se systém dostal z původního bodu A. Z toho je vidět, že fázový bod našeho systému opisuje stále stejně velkou plochu (v čase $t = T$ je to plocha vyznačená červeně), a tedy že plocha opsaná fázovou trajektorií během jedné periody se nemění – je adiabatickým invariantem.

5 Adiabatický teorém v kvantové fyzice

Nechť se hamiltonián pomalu mění s časem, $\hat{H} = \hat{H}(t)$, a $|n(t)\rangle$ jsou jeho vlastní stavy s vlastními hodnotami $E_n(t)$, tj.

$$\hat{H}(t)|n(t)\rangle = E_n(t)|n(t)\rangle \tag{30}$$

Rozložme stav $|\psi\rangle$, o jehož časový vývoj se zajímáme, do báze okamžitých vlastních stavů $|n(t)\rangle$ hamiltoniánu:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)|n(t)\rangle \tag{31}$$

Protože se stavy $|n(t)\rangle$ mění s časem, je časová změna $|\psi(t)\rangle$ obsažena jak ve změně koeficientů c_n, tak ve změně bázových stavů.

Dosazením do Schrödingerovy rovnice $\mathrm{i}\hbar|\dot{\psi}\rangle = \hat{H}(t)|\psi\rangle$ dostaneme

$$\mathrm{i}\hbar\sum_n \dot{c}_n|n\rangle + \mathrm{i}\hbar\sum_n c_n|\dot{n}\rangle = \sum_n c_n E_n|n\rangle, \tag{32}$$

přičemž už nepíšeme explicitně časovou závislost jednotlivých veličin. Skalární součin této rovnice s okamžitým bázovým stavem $\langle m|$ pak dá

$$\mathrm{i}\hbar\dot{c}_m + \mathrm{i}\hbar\sum_n c_n\langle m|\dot{n}\rangle = c_m E_m \tag{33}$$

Pravé strany rovnice se lze snadno zbavit tím, že provedeme substituci

$$c_m(t) = u_m(t)\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t E_m(t')\mathrm{d}t'\right) \tag{34}$$

Pokud by se hamiltonián neměnil, zůstávaly by koeficienty u_m v čase konstantní. Přepsáním rovnice (33) pomocí u dostaneme

$$\dot{u}_m = -\sum_n u_n \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t [E_m(t') - E_n(t')]\mathrm{d}t'\right)\langle m|\dot{n}\rangle \tag{35}$$

Uvažujme nyní, že systém je na začátku v některém vlastním stavu hamiltoniánu, např. $|k\rangle$. Pak všechna $u_n(0)$ jsou nulová kromě u_k, které je rovno jedné, tj. $u_n(0) = \delta_{nk}$. Pro $m \neq k$ pak v čase $t = 0$ dostáváme

$$\dot{u}_m = -\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t [E_m(t') - E_k(t')]\mathrm{d}t'\right)\langle m|\dot{k}\rangle \tag{36}$$

Jestliže se hamiltonián mění pomalu, bude se pomalu měnit i součin $\langle m|\dot{k}\rangle$. Díky rychlým oscilacím exponenciálního členu se vyruší jakýkoli příspěvek k u_m během jedné periody kmitů, takže koeficienty u_m pro $m \neq k$ budou i nadále zůstávat nulové. Systém tedy pod vlivem pomalých změn hamiltoniánu nebude přecházet na jiné hladiny, ale bude zůstávat na své původní (jejíž energie i vlnová funkce se však budou měnit). To je obsahem adiabatického teorému. Dá se tedy říci, že adiabatickým invariantem je index energiové hladiny.

Pokud nyní využijeme tohoto poznatku (tj. že $u_m(t) = 0$ pro $m \neq k$) a napíšeme rovnici (35) pro $m = k$, dostaneme rovnici

$$\dot{u}_k = -u_k\langle k|\dot{k}\rangle, \tag{37}$$

jejímž řešením je

$$u_k(t) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t \langle k(t')|\dot{k}(t')\rangle \mathrm{d}t'} \tag{38}$$

Celkově se pak stav systému v čase t dá napsat jako

$$|\psi(t)\rangle = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t E_k(t')\mathrm{d}t'} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma}|k(t)\rangle, \tag{39}$$

kde $\gamma = \mathrm{i}\int_0^t \langle k(t')|\dot{k(t')}\rangle \mathrm{d}t'$ je tzv. geometrická fáze.

Všimněte si, že argumentaci nelze použít, pokud se dvě hladiny k sobě velice přiblíží. Pak totiž exponenciální člen v rovnici (36) neosciluje dost rychle a systém na jiné hladiny může přecházet. Přiblížení hladin ovšem současně znamená, že frekvence oscilací ω je kolem příslušné energie malá, protože v kvaziklasické aproximaci platí

$$\Delta E \approx \hbar\omega\,. \tag{40}$$

Systém tedy pak kmitá velmi pomalu a je proto obtížnější docílit adiabatických změn hamiltoniánu.

Literatura pro další čtení: K.-P. Marzlin a B. C. Sanders, arXiv quant-ph/0404022