ЛЕКЦІЯ № 13

Адіабатичні інваріанти.

> Значення адіабатичної гіпотези в квантовій теорії винятково велике, оскільки вона веде до роз'яснення та розвитку формальних принципів визначення стаціонарних станів.
>
> Н.Бор

Лекція починається з цієї фрази Н.Бора, оскільки адіабатичні інваріанти відіграли важливу роль у розвитку квантової механіки. У попередніх лекціях у деяких місцях вказувався зв'язок класичної та квантової механік, яка особливо проявляється у гамільтоновому підході (гамільтонові рівняння, дужки Пуассона взагалі та фундаментальні дужки Пуассона). Адіабатичні інваріанти дають ще один такий зв'язок, хоча саме поняття адіабатичних інваріантів виникло в теорії термодинамічних систем. В 1866 г. Людвіг Больцман, намагаючись співвіднести закони термодинаміки та механіки, показав, що при періодичному русі системи з частотою ω відношення середньої кінетичної енергії до частоти $\langle K \rangle / \omega$ залишається приблизно постійним при повільній зміні з часом параметрів, що входять до системи. Це співвідношення, яке можна записати в інтегральному вигляді:

$$I = \frac{1}{2\pi}\int_0^T 2K dt, \qquad (13.1)$$

де $T = 2\pi / \omega$ - період періодичного процесу, було названо Полем Еренфестом ***адіабатичним інваріантом***, оскільки, згідно з Больцманом, ця величина залишається постійною, якщо зміна параметрів не супроводжується поглинанням чи виділенням тепла, тобто. відбувається адіабатично.

Для газу частинок, що не взаємодіють, вираз (13.1) можна переписати у вигляді

$$I = \frac{1}{2\pi}\int_0^T 2K dt = \frac{1}{2\pi}\int_0^T m_{ik}\dot{q}_i\dot{q}_k dt = \frac{1}{2\pi}\int_0^T p_i \frac{dq_i}{dt} dt = \frac{1}{2\pi}\oint p_i dq_i . \qquad (2\ 5.2\ )$$

У простому випадку одного ступеня вільності адіабатичний інваріант має вигляд

$$I = \frac{1}{2\pi}\oint pdq = \frac{1}{2\pi}\int_s dpdq\,, \qquad (2\ 5.3\ )$$

де інтегрування проводиться за площею у фазовому просторі, обмеженою замкненою фазовою траєкторією. Збереження цієї величини при повільній зміні параметрів системи можна довести для будь-яких механічних *гамільтонових систем* .

Еренфест сформулював ***адіабатичну гіпотезу***, згідно з якою при переході від класичного до квантового розгляду адіабатичні інваріанти повинні набувати дискретних значень, що відповідають правилам квантування квантової механіки («квантуються адіабатичні інваріанти»).

Перед доказом збереження адіабатичних інваріантів, розглянемо простий приклад гармонійного осцилятора та два сценарії зміни його параметра – частоти. У першому випадку на момент часу $t = 0$ частота стрибком змінюється від значення ω_- до значення ω_+, тоді як у другому – повільно змінюється за великий час, набагато більший періоду осциляцій.

У першому випадку при $t < 0$ енергія та рішення виглядають так:

$$E_- = p^2 / 2m + m\omega_-^2 x^2 / 2\,, \quad x = a_- \cos\left(\omega_- t + \alpha\right) = \sqrt{2E_- / m\omega_-^2}\cos\left(\omega_- t + \alpha\right). \qquad (13.4)$$

Траєкторію руху на фазовій площині зображено червоною лінією на Рис.13.1а. Розміри еліпсу траєкторії дорівнюють $p_{\max} = \sqrt{2mE_-}$ і $x_{\max} = \sqrt{2E_- / m\omega_-^2}$. Тому, обчислений за формулою (13.3) адіабатичний інваріант, який є площа фазового простору всередині еліпсу, дорівнює

$$I_- = \frac{1}{2\pi}\oint pdx = \frac{1}{2}p_{\max}x_{\max} = \frac{E_-}{\omega_-}. \qquad (13.5)$$

Траєкторія після зміни частоти залежить від фази осциляцій до цього моменту. Для визначеності покладемо $\alpha = 0$. При цьому, в момент часу $t = 0$ маємо: $x = \sqrt{2E_- / m\omega_-^2}$ і $p = 0$. Тому при $t > 0$ енергія та рішення мають вигляд

$$E_+ = p^2 / 2m + m\omega_+^2 x^2 / 2\,, \qquad x = a_+ \cos\left(\omega_+ t\right) = \sqrt{2E_- / m\omega_-^2}\cos\left(\omega_+ t\right). \qquad (13.6)$$

З умови безперервності зміщення в момент зміни частоти знаходимо: $p_{\max} = \sqrt{2mE_-}\left(\omega_+ / \omega_-\right)$ та $x_{\max} = \sqrt{2E_- / m\omega_-^2}$ (синій еліпс на Рис.13.1а). Для визначенності вважаємо, що $\omega_+ > \omega_-$. При цьому енергія змінюється $E_+ / E_- = \left(\omega_+ / \omega_-\right)^2$ і адіабатичний інваріант не зберігається:

$$I_+ == \frac{E_+}{\omega_+} = I_- \frac{\omega_+}{\omega_-}. \tag{13.7}$$

У разі повільної (адіабатичної) зміни частоти від ω_- при $t = -\infty$ до ω_+ при $t = +\infty$, згідно з теореми Больцмана -Еренфеста, адіабатичний інваріант зберігається: $I_+ = I_-$. Оскільки рішення при $t > 0$ набуває вигляду $x = b\cos\left(\omega_+ t\right)$, то з параметрів орбіти знаходимо, що $I_+ = E_+ / \omega_+ = E_- / \omega_-$. Таким чином, параметри орбіти такі: $x_{\max}^+ = x_{\max}^- \sqrt{\omega_- / \omega_+}$ і $p_{\max}^+ = p_{\max}^- \sqrt{\omega_+ / \omega_-}$. Ці орбіти зображені на Рис.13.1б.

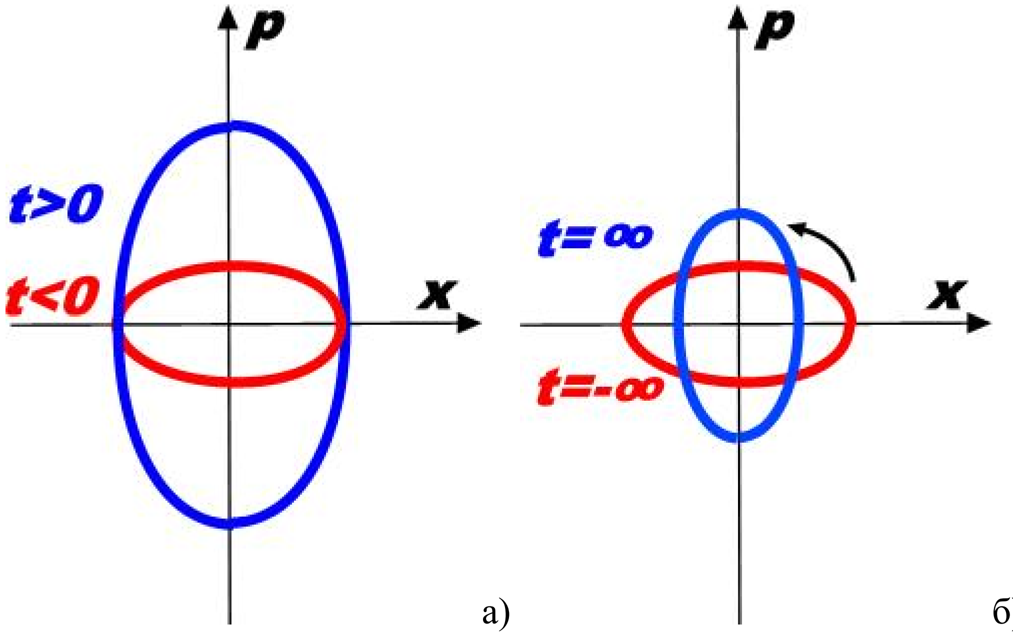


Рис.13.1. Зміна фазового об'єму при швидкій зміні частоти гармонійного осцилятора (а) та при її адіабатичній зміні (б).

У цьому прикладі бачимо, що якщо параметр системи $\omega = \omega(t)$ повільно залежить від часу, то й енергія теж повільно залежить від часу $E = E(t)$, але їхня комбінація може від часу не залежити. Вона і є адіабатичний інваріант. Доведемо його інваріантність при повільній зміні параметра.

Доказ збереження адіабатичного інваріанту.

Розглянемо ***гамільтонову*** систему, що допускає періодичний рух з періодом $T = 2\pi / \omega$ і з параметром $\lambda(t)$, що повільно залежить від часу. Тобто. зміна параметра за період T значно менша самої величини параметра: $d\lambda / dt << \lambda / T$. При цьому енергія системи E також стає функцією часу. Оскільки зміна гамільтоніану визначається лише явною залежністю від часу (не через координати та імпульси, а через параметр λ), то

$$\frac{dH}{dt} = \frac{dE}{dt} = \frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial \lambda}\frac{d\lambda}{dt}. \tag{13.8}$$

Зосередимо цю рівність за періодом руху T. Тут робиться головне наближення: ми беремо час між моментами, у яких фаза руху однакова, але за цей час частота (і період) злегка змінюються. Тобто. залежності $q(t)$та $p(t)$беруться при фіксованому значенні λ. У цьому наближенні $\dot{\lambda}$ виноситься з операції усереднення:

$$\left\langle \frac{dE}{dt} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial H}{\partial \lambda}\frac{d\lambda}{dt} \right\rangle \approx \frac{d\lambda}{dt}\left\langle \frac{\partial H}{\partial \lambda} \right\rangle. \tag{13.9}$$

Тут операція усереднення означає $\langle A \rangle = (1/T)\int_0^T A dt$. Тобто

$$\left\langle \frac{dE}{dt} \right\rangle \approx \frac{d\lambda}{dt}\frac{1}{T}\int_0^T \frac{\partial H}{\partial \lambda} dt. \tag{13.10}$$

Оскільки з рівняння Гамільтона $dq / dt = \partial H / \partial p$ витікає, що $dt = dq / (\partial H / \partial p)$, то (13.10) можна переписати в формі

$$\left\langle \frac{dE}{dt} \right\rangle \approx \frac{d\lambda}{dt}\frac{\oint \frac{(\partial H / \partial \lambda)}{(\partial H / \partial p)} dq}{\oint \frac{1}{(\partial H / \partial p)} dq}. \tag{13.11}$$

(Ми врахували, що $T = \int_0^T dt = \oint dq / (\partial H / \partial p)$ і інтеграл за періодом замінюється інтегралом по координаті по замкнутому контуру, що відповідає постійному значенню λ). Далі скористаємося співвідношенням

$$\frac{(\partial H / \partial \lambda)}{(\partial H / \partial p)} = -\frac{\partial p}{\partial \lambda}, \tag{13.12}$$

яке на перший погляд виглядає дивно через знак у правій частині. Справа в тому, що при русі по траєкторії енергія E зберігається, і імпульс можна розглядати як функцію координати, енергії і параметра λ: $p = p(q, E, \lambda)$. Тому гамільтоніан цієї траєкторії залежить від параметра безпосередньо і через імпульс: $H\left(p(q, E, \lambda), q, \lambda\right) = E$. Диференціюючи цю рівність по λ, отримуємо співвідношення (13.12). Розглянемо для прикладу гармонійний осцилятор з гамільтоніаном $H = p^2/2 + \lambda^2 q^2/2$. Для нього виконуються співвідношення $\partial H/\partial p = p$, $\partial H/\partial \lambda = \lambda q^2$ і $(\partial H/\partial \lambda)/(\partial H/\partial p) = \lambda q^2/p$. З іншого боку, із співвідношення $E = p^2/2 + \lambda^2 q^2/2$ випливає, що $p = \sqrt{2E - \lambda^2 q^2}$. Звідси $\partial p/\partial \lambda = -\lambda q^2/p$, що відповідає (13.12).

Підставляючи (13.12) в (13.11), отримуємо

$$\left\langle \frac{dE}{dt} \right\rangle \approx -\frac{d\lambda}{dt} \frac{\oint (\partial p/\partial \lambda) dq}{\oint \frac{1}{(\partial H/\partial p)} dq}, \tag{13.13}$$

або

$$\frac{1}{2\pi} \oint \left(\frac{\partial p}{\partial E} \left\langle \frac{\partial E}{\partial t} \right\rangle + \frac{\partial p}{\partial \lambda} \frac{d\lambda}{dt} \right) dq = 0. \tag{13.14}$$

Цю рівність можна остаточно переписати у вигляді

$$\left\langle \frac{dI}{dt} \right\rangle = 0, \tag{13.15}$$

де адіабатичний інваріант I визначається виразом (13.3). Таким чином, адіабатичний інтеграл дійсно є наближеним інтегралом руху.

Про ступінь збереження адіабатичного інваріанту можна судити з розглянутої в лекції №10 задачі про рух гармонічного осцилятора під дією зовнішньої сили, що повільно включається і потім так само адіабатично вимикається. У цьому разі параметром системи є амплітуда зовнішньої сили. У розглянутому завданні сила вибиралася як $F = F_0 / \left(1 + (t/\tau)^2\right)$ і адіабатичність її зміни визначалася малим параметром $1/(\omega_0 \tau) << 1$. Як було показано, асимптотично амплітуда коливань прагнула до величини

$\sim \exp\left(-\omega_0\tau / 2\pi\right)$. Таким чином, зміна адіабатичного інваріанту має експоненційно малу величину $\Delta I \sim \exp\left(-\omega_0\tau / \pi\right)$.

Відзначимо важливу властивість адіабатичного інтегралу. Оскільки він є функцією енергії $I = I\left(E,\lambda\right)$, то знайдемо похідну від нього за енергією:

$$\frac{\partial I}{\partial E} = \frac{1}{2\pi}\oint\frac{\partial p}{\partial E}dq = \frac{1}{2\pi}\oint\frac{dq}{\partial H / \partial p} = \frac{1}{2\pi}\oint\frac{dq}{dq / dt} = \frac{1}{2\pi}\oint dt = \frac{T}{2\pi} = \frac{1}{\omega}. \qquad (13.16)$$

Цьому співвідношенню за сталості параметрів можна надати і інший вид:

$$\omega = \frac{dE}{dI}. \qquad (13.17)$$

Зв'язок цього виразу квантовою теорією видно, якщо домножити цю формулу на константу Планка (з розмірністю дії) і ввести безрозмірну величину $N = I / \hbar$. Тоді формула (13.17) набуває форми:

$$\hbar\omega = \frac{dE}{dN}, \qquad (13.18)$$

де N має значення числа квантових збуджень з енергіями, меншими E, а $\hbar\omega$ - енергії одного кванта збудження. При цьому (13.18) описує зміну енергії системи при додаванні одного кванту.

Хоча величину (13.3) адіабатичного інваріанту I ми ввели у зв'язку з розглядом параметрів, що повільно змінюються, але він має сенс і в задачах з постійними параметрами, в яких ця величина є точним інтегралом руху.

Співвідношення (13.17) важливо і в іншому прикладенні, пов'язаному з так званими *змінними «дія-кут».*

Змінні «дія-кут» .

Розглянемо ще одне подання адіабатичного інваріанту. У лекції №21 було показано, що імпульс, що входить у вираз для нього, може бути представлений у вигляді $p = \partial S / \partial q$. У консервативній системі з енергією, що зберігається, дія має вигляд $S\left(q,t\right) = -Et + S_0\left(q,E\right)$, де S_0- укорочена дія. Отже, в консервативних системах $p = \partial S_0\left(q,E\right) / \partial q$ і адіабатичний інваріант набуває форми $I = \left(1 / 2\pi\right)\oint\left(\partial S_0 / \partial q\right)dq$, тобто він дорівнює зміні укороченої дії при обході замкнутої фазової траєкторії. Оскільки в консервативній системі є однозначна відповідність між енергією E та адіабатичним інваріантом I, то укорочену дію можна подати у вигляді $S_0 = S_0(q, I)$. Виявилося зручним перейти в системі з періодичним рухом від гамільтонових змінних (p, q) до нових змінних, у яких роль нового імпульсу гратиме адіабатичний інваріант, а як твірну функцію вибрати укорочену дію, що залежить від старих координат і нових імпульсів $\Phi(q, P) = S_0(q, I)$. Вона грає роль твірної функції Φ у лекції №22 (див. (22.20)). Тоді ці формули, що пов'язують нові та старі змінні, виглядатимуть так:

$$p = \frac{\partial S_0(q, I)}{\partial q}, \quad \phi = \frac{\partial S_0(q, I)}{\partial I}, \quad H' = H(I) = E(I), \tag{13.19}$$

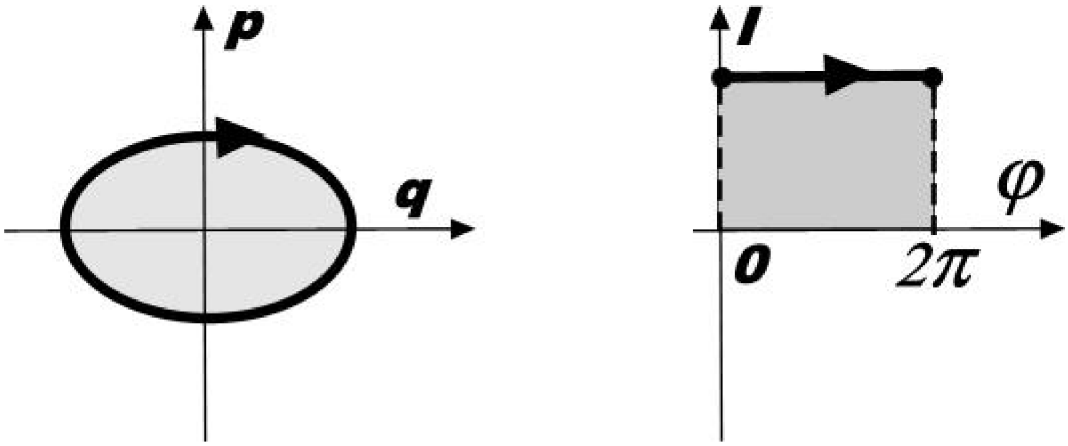
де ϕ- нова узагальнена координата. Зауважимо, що новий гамільтоніан у нових змінних залежить тільки від нового імпульсу, але не від нової координати. Нові канонічні змінні (I, ϕ) називаються « *змінними дія-кут».* (Для уникнення непорозуміння відзначимо, що термін «змінна дія», що устоявся, не відрізняється від істинної дії, яка обговорювалася в попередніх лекціях). Оскільки ми зробили канонічне перетворення, то нова система є гамільтоновою, і виконуються рівняння Гамільтона:

$$\dot{I} = -\frac{\partial E}{\partial \phi} = 0, \quad \dot{\phi} = \frac{\partial E}{\partial I}. \tag{13.20}$$

Враховуючи співвідношення (13.16), друге рівняння зводиться до простого рішення:

$$\phi = \omega t. \tag{13.21}$$

Таким чином, траєкторія руху зображувальної точки в новому фазовому просторі набуває абсолютно простого вигляду (див. Рис.13.2b). При цьому вона рухається вздовж осі ϕ із постійною швидкістю.



a) b)

Рис. 13.2. Фазова траєкторія зображуючої точки на фазовій площині канонічно спряжених змінних (p,q) (a) і на фазової площини канонічно спряжених змінних (I,ϕ) (b).

Рис. 13.3 зображено рух зображуючої точки на фазовій площині вихідних канонічних змінних (p,q). У циліндричних координатах на цій площині її положення характеризується полярним кутом $\psi(t) = arctg(p(t)/q(t))$, залежність якого від часу, взагалі кажучи, нелінійна (див. мал. 13.3 b). На Рис.13.3c зображено відповідну тимчасову еволюцію ведичини «кут» у змінних «кут-дія».

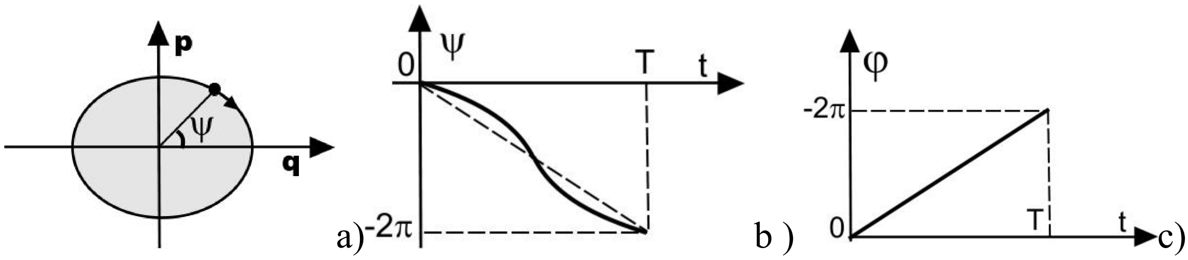


Рис. 13.3. Рух зображувальної точки вздовж фазової траєкторії в консервативній системі (a) та тимчасова зміна полярної координати зображувальної точки з часом (b). На Рис.(c) наведено тимчасову еволюцію змінної «кут».

Як приклад розглянемо випадок гармонійного осцилятора з гамільтоніаном $H = p^2/2m + kq^2/2$. В консервативному випадку його енергія $E = p^2/2m + kq^2/2$ зберігається і повна дія має вигляд $S(q,t) = -Et + S_0(q)$, де вираз для укороченої дії було отримано в лекції №9 :

$$S_0 = \sqrt{\frac{m}{2}} q \sqrt{E - \frac{kq^2}{2}} + \sqrt{\frac{m}{k}} E\, arcsin \frac{q\sqrt{k}}{\sqrt{2E}}. . \qquad (13.22)$$

Адіабатичний інваріант осцилятора дорівнює $I = E/\omega_0$. Тому зазначена вище твірна функція має вигляд

$$\Phi(q,P) = S_0(q,I) = \sqrt{\frac{m}{2}}q\sqrt{\omega_0 I - \frac{kq^2}{2}} + I\, arcsin\frac{q\sqrt{k}}{\sqrt{2\omega_0 I}}. \qquad (13.23)$$

З її допомогою знаходиться зв'язок "старих" канонічних змінних (p,q) з "новими" змінними "дія-кут" (φ, I):

$$p = \partial S_0/\partial q = \sqrt{2m}\sqrt{\omega_0 I - kq^2/2}, \qquad \varphi = \partial S_0/\partial I = arcsin\left(q\sqrt{k}/\sqrt{2\omega_0 I}\right)$$

або

$$q = \sqrt{2\omega_0 I} sin\varphi/\sqrt{k}, \qquad p = \sqrt{2\omega_0 I} cos\varphi\,\sqrt{m}. \qquad (13.24)$$

При цьому $H = p^2/2m + kq^2/2$ і $H' = \omega_0 I = E$. Звідси і з гамільтоновості нової системи випливає, що $\dot{\varphi} = \omega_0$ і $\varphi = \omega_0 t$.

Якщо ж у вираз $\psi(t) = arctg(p(t)/q(t))$ підставити рішення для вихідної системи $q = a\,cos\omega_0 t$, то вийде результат

$$\psi(t) = -arctg\left(\sqrt{km}\,tq\omega_0 t\right), \qquad (13.25)$$

зображений на Рис.13.3b .