北京師範大學

本科生毕业论文（设计）

毕业论文（设计）题目：

等温捷径与绝热捷径构成的类卡诺热机的功率与效率

部　院　系：物理学系

专　　　业：物理学

姓　　　名：龚政楠

指 导 教 师：涂展春教授

校内指导教师：涂展春教授

2021 年 3 月 18 日

北京师范大学本科毕业论文（设计）诚信承诺书

本人郑重声明：所呈交的学位论文，是本人在导师指导下，独立进行研究工作所取得的成果。尽我所知，除文中已经注明引用的内容外，本学位论文的研究成果不包含任何他人享有著作权的内容。对本论文所涉及的研究工作做出贡献的其他个人和集体，均已在文中以明确方式标明。

本人签名：　　　　　　　　　　　　年　　月　日

北京师范大学本科毕业论文（设计）使用授权书

本人完全了解北京师范大学有关收集、保留和使用毕业论文（设计）的规定，即：本科生毕业论文（设计）工作的知识产权单位属北京师范大学。学校有权保留并向国家有关部门或机构送交论文的复印件和电子版，允许毕业论文（设计）被查阅和借阅；学校可以公布毕业论文（设计）的全部或部分内容，可以采用影印、缩印或扫描等复制手段保存、汇编毕业论文（设计）。保密的毕业论文（设计）在解密后遵守此规定。

本论文（是、否）保密论文。

保密论文在　　　　年　　月解密后适用本授权书。

本人签名：　　　　　　　　　　　　年　　月　日

导师签名：　　　　　　　　　　　　年　　月　日

等温捷径与绝热捷径构成的类卡诺热机的功率与效率

摘　要

论文的摘要是对论文研究内容和成果的高度概括。摘要应对论文所研究的问题及其研究目的进行描述，对研究方法和过程进行简单介绍，对研究成果和所得结论进行概括。摘要应具有独立性和自明性，其内容应包含与论文全文同等量的主要信息。使读者即使不阅读全文，通过摘要就能了解论文的总体内容和主要成果。

论文摘要的书写应力求精确、简明。切忌写成对论文书写内容进行提要的形式，尤其要避免“第 1 章……；第 2 章……；……”这种或类似的陈述方式。

本文介绍清华大学论文模板 bnuThesis 的使用方法。本模板符合学校的本科、硕士、博士论文格式要求。

本文的创新点主要有：

- 用例子来解释模板的使用方法；
- 用废话来填充无关紧要的部分；
- 一边学习摸索一边编写新代码。

关键词是为了文献标引工作、用以表示全文主要内容信息的单词或术语。关键词不超过 5 个，每个关键词中间用分号分隔。（模板作者注：关键词分隔符不用考虑，模板会自动处理。英文关键词同理。）

关键词：有限时间热力学；等温捷径；绝热捷径；类卡洛热机

Finite Time Thermodynamics

ABSTRACT

An abstract of a dissertation is a summary and extraction of research work and contributions. Included in an abstract should be description of research topic and research objective, brief introduction to methodology and research process, and summarization of conclusion and contributions of the research. An abstract should be characterized by independence and clarity and carry identical information with the dissertation. It should be such that the general idea and major contributions of the dissertation are conveyed without reading the dissertation.

An abstract should be concise and to the point. It is a misunderstanding to make an abstract an outline of the dissertation and words "the first chapter", "the second chapter" and the like should be avoided in the abstract.

Key words are terms used in a dissertation for indexing, reflecting core information of the dissertation. An abstract may contain a maximum of 5 key words, with semi-colons used in between to separate one another.

KEY WORDS: TeX; LaTeX; CJK; template; thesis

目　录

主要符号对照表

E	能量
m	质量。本篇文章只涉及一种粒子，为简单令 $m \equiv 1$
c	光速
h	普朗克常量，$6.62607015 \times 10^{-34}$ J · s
$\hbar$	约化普朗克常量，$\hbar \equiv \frac{h}{2\pi}$
k_{B}	玻尔兹曼常数，1.380649×10^{23} J/K。为了方便，令 $k_{\mathrm{B}} \equiv 1$
$\frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}}$	直角坐标中定义为 $\sum_i \frac{\partial f}{\partial r_i}\hat{r}_i$，其实就是 ∇f
$\dot{f}$	函数 f 对时间的导数
f'	函数 f 对空间位置的导数（针对一维情况）

第 1 章　绪论：从经典热力学到随机热力学

热机的发明和使用对人类的生产生活产生了重大的影响，第一次工业革命和第二次工业革命都和热机的发展有紧密的关系. 一直以来，特别是近些年来，由于能源短缺的问题愈发突出，研究热机的效率问题也一直吸引着一大批研究者。

1.1　引言：热机的最大功率与效率问题

早在 1824，卡诺就指出（基于热质说）[1]：工作在相同高温热源和相同低温热源的所有热机中，以可逆热机的效率最高，而且这些可逆热机的效率都相同. 为 $\eta_{\mathrm{C}} = 1 - \frac{T_1}{T_2}$ 。这个问题似乎就这么解决了，然而必须注意的是可逆热机的要求相当于要求工作物质是准静态的. 也就是说，要想严格意义上达到卡诺热机的效率，热机一个循环的工作时间应当是无限长，这样的热机功率是 0.

我们当然不可能接受功率为 0 的热机，所以得到热机保持在某一功率下（特别是最大功率）的最大效率成了摆在我们面前的问题，而这个问题促进了有限时间热力学的诞生.

1975 年，Curzon 和 Ahlborn 研究了内可逆热机[2]，该热机可在有限时间内完成一个循环. 利用 Newton 热运输规律，得到了该热机在最大功率下的效率为 $\eta_{CA} = 1 - \sqrt{T_c/T_h} = 1 - \sqrt{1 - \eta_C}$ ，其中 η_{C} 为卡诺效率。

2008 年，T. Schmiedl 和 U. Seifert 提出了布朗随机热机模型[3]，该热机模型利用谐振子势场驱动布朗粒子做功，并得到了其在最大功率下的效率.

同年，涂展春推导出费曼棘轮热机[4] 在最大功率下的效率 $\eta_{\mathrm{F}} = \frac{\eta_{\mathrm{C}}^2}{\eta_{\mathrm{C}} - (1-\eta_{\mathrm{C}}) \ln(1-\eta_{\mathrm{C}})}$.[5]

……

同时涂展春[4] 在小温差条件下，即 $\eta_{\mathrm{C}} \to 0$. 将上述热机的效率按照展开. 发现这些效率到二阶项都相同的，它们都普遍地满足 $\eta_{\mathrm{U}} = \frac{\eta_{\mathrm{C}}}{2} + \frac{\eta_{\mathrm{C}}^2}{8} + O\left(\eta_{\mathrm{C}}^3\right)$. 这个规律在其他热机中也得到了验证，但也有一些热机不满足这个关系. 这引发了研究者对相关问题的思考，涂展春在紧耦合热机的范畴内对其中的原因进行了解释.[5]

在这些形形色色的有限时间热机中，由 Seifert 等人提出的随机热机[3] 占据一席之地. 随机热机通常是利用外势驱动与热源接触的布朗粒子做功. 其中的具体的实现过程可以有很大的不同，对应着不同的随机热机. 在这些不同的随机热机中，Campo 等人利用绝热捷径构建的奥托热机[6] 引人注目. 而后，Deng 等人发现绝热捷径能够提高奥托热机的效率，不论是经典的还是量子的.[7] 涂展春在 Schmiedl 和 Seifert 工作[3] 的基础上，考虑了他们在过阻尼情况下忽略的惯性的影响，构建了一种类卡洛热机[8]. 惊讶地发现这种随机热机的效率等于 Curzon 和 Ahlborn 构建的内可逆热机[2] 的效率. 在涂展春构建的热机中[8]，布朗粒子在与时间相关的谐振子 $U = \lambda^2(t)\, x^2/2$ 的控制下，经历了类卡诺循环. 其中与卡诺循环中绝热过程对应的就是前面提到的绝热捷径，但与卡诺循环中等温过程对应的“等温过

程”，却只是粒子与恒温热源接触，而非系统保持等温.

这促使笔者思考是否有与卡诺循环中等温过程更加对应的过程，以实现类卡诺循环. 等温捷径[9] 的提出为实现这个目标提供了契机，李耿等人给一个系统引入了辅助势，这个系统的演化本来是被一个含时哈密顿量所决定的，这个精心选择的辅助势可以使得系统在当前的哈密顿量下的状态，仿佛处于原哈密顿量的瞬时平衡态中一样，从而实现了“等温过程”，我们称之为等温捷径.

综上，笔者欲构造由绝热捷径和等温捷径构成的类卡诺循环，根据随机热力学和非平衡热力学中的典型方法，研究该热机工作过程中的功、熵、能量损失等参数，并考察它的效率与功率. 并与其他类型的热机，特别是涂展春构建的类卡洛热机[8]，Campo 等人构建的奥托热机[6] 进行比较. 考虑到 Deng 等人发现绝热捷径能够提高奥托热机的效率[7]，我们也期望等温捷径的引入能进一步提高热机的效率

1.2 经典热力学

经典热力学是从宏观的角度研究物质的。它所用的概念，如温度、密度、压强等，都是物质的宏观属性。这些都是不以物质的原子结构为基础就可以定义的概念。再根据宏观的观察和分析得到关于这些概念的经验性的规律和关系，经典热力学就是这样得以发展的。这些经验性的规律和关系被延伸为四个个基本定律，即所谓的热力学第零定律，第一定律，第二定律，第三定律，以这些定律为基础就构成了所谓的经典热力学。热力学原理 (即其基本定律) 具有相当的普遍性，即它们不依赖于任何有关物质结构的特殊假设，因为它们根本不以物质的原子特性为基础。由于这种普遍性，热力学的应用范围非常广泛。以至于爱因斯坦说道[10]：“（热力学）这是唯一普遍适用的物理理论，我确信，在这个理论基本概念适用的范围内，它绝不会被推翻。” (It is the only physical theory of universal content, which I am convinced, that within the framework of applicability of its basic concepts will never be overthrown.)

经典热力学是利用宏观的、可测量的特性来描述热力学系统在近平衡状态下的状态。它是根据热力学定律来模拟能量、功和热的交换。经典这个限定词反映了它代表了 19 世纪发展起来的对这一学科的第一层理解，它用宏观的经验性（大尺度的、可测量的）参数来描述系统的变化。后来统计力学的发展对这些概念进行了微观的解释。

热力学作为一门科学的历史，一般是从 Otto von Guericke 开始的，他在 1650 年建造和设计了世界上第一台真空泵，并利用他的马格德堡半球演示了真空。Guericke 之所以要制造真空，是为了推翻亚里士多德长期以来的假设，即" 大自然厌恶真空"。在圭里克之后不久，英裔爱尔兰物理学家和化学家罗伯特-波义耳（Robert Boyle）得知了圭里克的设计，并在 1656 年与英国科学家罗伯特-胡克（Robert Hooke）合作，制造了一个气泵。利用这个气泵，波义耳和胡克注意到压力、温度和体积之间的相关性。随着时间的推移，波义耳定律被制定出来，该定律指出压力和体积成反比。然后，在 1679 年，基于这些概念，波义

耳的一个同事 Denis Papin 建造了一个蒸汽消化器，这是一个封闭的容器，有一个紧贴的盖子，将蒸汽封闭，直到产生高压。

后来的设计实现了一个蒸汽释放阀，以防止机器爆炸。通过观察阀门有节奏地上下移动，帕宾构思出活塞和汽缸发动机的想法。然而，他并没有贯彻他的设计。尽管如此，1697 年，工程师托马斯-萨维里根据帕宾的设计，制造出了第一台发动机，随后，托马斯-纽科门于 1712 年制造出了第一台发动机。虽然这些早期的发动机粗制滥造，效率低下，但却引起了当时顶尖科学家的关注。

热容量和潜热的基本概念是热力学发展所必需的，是由格拉斯哥大学的约瑟夫-布莱克教授提出的，而詹姆斯-瓦特则在该校担任仪器制造者。布莱克和瓦特一起进行了实验，但正是瓦特提出了外置冷凝器的设想，使蒸汽机的效率有了很大的提高 [18] 吸取了以前所有的工作成果，使" 热力学之父" 萨迪-卡诺发表了《关于火的动力的思考》（1824），这是一本关于热、功率、能量和发动机效率的论述。该书概述了卡诺发动机、卡诺循环和动力之间的基本能量关系。它标志着热力学作为一门现代科学的开始。

第一本热力学教科书是 1859 年由 William Rankine 编写的，他原是一名物理学家，在格拉斯哥大学担任土木和机械工程教授，[19] 热力学第一定律和第二定律在 19 世纪 50 年代同时出现，主要出自 William Rankine、Rudolf Clausius 和 William Thomson（开尔文勋爵）的著作。统计热力学的基础是由 James Clerk Maxwell、Ludwig Boltzmann、Max Planck、Rudolf Clausius 和 J.Willard Gibbs 等物理学家提出的。

1873-76 年间，美国数学物理学家约西亚-威拉德-吉布斯发表了一系列的三篇论文，最著名的是《论异质物质的平衡》[3]，他在论文中说明了包括化学反应在内的热力学过程是如何被图形化分析的，通过研究热力学系统的能量、熵、体积、温度和压力这样的方式，可以确定一个过程是否会自发发生。20] 另外，19 世纪的皮埃尔-杜赫姆（Pierre Duhem）也写了关于化学热力学的文章 [4]。20 世纪初，吉尔伯特-N-刘易斯（Gilbert N. Lewis）、梅尔-兰德尔（Merle Randall）[5] 和 E-A-古根海姆（E. A. Guggenheim）[6][7] 等化学家将吉布斯的数学方法应用到化学过程的分析中。

热力学中的一个重要概念是热力学系统，它是所研究的宇宙中一个精确定义的区域。宇宙中除了系统以外的一切都被称为周围环境。一个系统被一个边界与宇宙的其余部分隔开，这个边界可能是物理的或名义的，但作用是将系统限制在一个有限的体积内。边界的部分通常被描述为墙，它们有各自定义的" 渗透性"。根据各自的渗透性，能量作为功、热或物质在系统和周围环境之间的传递，通过墙壁进行。

跨越边界的物质或能量需要在能量平衡方程中进行计算，以影响系统内部能量的变化。墙体所包含的体积可以是单个原子共振能量周围的区域，如马克斯-普朗克在 1900 年定义的；可以是蒸汽机中的蒸汽或空气体，如萨迪-卡诺在 1824 年定义的。系统也可以只是一个核素（即夸克的系统），如量子热力学中的假设。当采用较宽松的观点，放弃热力学平衡的要求时，系统可以是热带气旋的主体，如 1986 年 Kerry Emanuel 在大气热力学领域的理论，也可以是黑洞的事件视界。

边界有四种类型：固定的、可动的、实的和虚的。例如，在发动机中，固定边界意味着活塞被锁定在其位置上，在此范围内可能会发生一个恒定的体积过程。如果允许活塞移动，该边界是可动的，而气缸和气缸盖的边界是固定的。对于封闭系统来说，边界是实的，而对于开放系统来说，边界往往是虚的。在喷气式发动机的情况下，在发动机的进气口处可能会假设一个固定的虚边界，沿壳体表面有固定的边界，在排气口处有第二个固定的虚边界。

一般来说，热力学区分了三类系统，以允许什么东西越过它们的边界来定义。

热力学系统的相互作用系统类型质量流量工作量热量开启绿色刻度线绿色刻度线绿色刻度线关闭红色 X 绿色勾绿色勾热隔离红色 X 绿色 tick 红色 X 机械隔离红色 X 红色 X 绿色剔号隔离的红 X 红 X 红 X 随着时间的推移，在一个孤立的系统中，压力、密度和温度的内部差异趋于平衡。在一个系统中，所有的平衡过程都已完成，可以说是处于热力学平衡状态。

一旦处于热力学平衡状态，根据定义，一个系统的特性在时间上是不变的。处于平衡状态的系统比不处于平衡状态的系统简单得多，也容易理解。在分析一个动态热力学过程时，往往简化假设过程中的每一个中间状态都处于平衡状态，产生的热力学过程发展缓慢，以至于每一个中间步骤都是平衡状态，被称为可逆过程。

当一个系统在给定条件下处于平衡状态时，称其处于确定的热力学状态。系统的状态可以用一些不依赖于系统到达其状态的过程的状态量来描述。根据系统大小变化时的变化情况，它们被称为密集变量或广泛变量。系统的特性可以用一个状态方程来描述，它规定了这些变量之间的关系。状态可以认为是在设定的变量数量保持不变的情况下对系统的瞬时定量描述。

热力学过程可以定义为一个热力学系统从初始状态到最终状态的能量演化过程。它可以用过程量来描述。通常，每个热力学过程在能量特性上与其他过程的区别在于哪些参数，如温度、压力或体积等是固定不变的；此外，将这些过程分成若干对，其中每个保持不变的变量都是共轭对中的一个成员。

几个常用的研究的热力学过程是

绝热过程：发生时没有热能的损失或增加。等焓过程：在恒定的焓值下发生。等熵过程：一个可逆的绝热过程，在一个恒定的熵下发生。等压过程：在恒定压力下发生。等容过程：在恒定体积下发生（也称为等容/等体积）。等温过程：在恒温下进行。稳态过程：发生时内能不发生变化。

1.3 随机热力学

第 2 章　随机热机

2.1　随机热机模型

2.2　绝热捷径

在有限时间热力学中，一个非常重要的议题是如何实现不同平衡态的相互转换。因为**有限时间**的限制使得我们不能够使用准静态的方法，而绝热捷径[11] 提供了这样一种可以在有限时间内实现平衡态转化的策略。这个策略是由 Demirplak and Rice[12] 和 Berry[13] 独立发展出来的。在这个策略提出以后的很长一段时间里，它引起了一大批研究者的关注。下面我们回顾一下绝热捷径是怎么实现的。

2.2.1　绝热捷径的实现

考虑量子力学中的绝热定理[14]：如果一个系统的哈密顿量 $H_0(t)$ 随时间变化很缓慢，即 $\tau_\mathrm{e} \gg \tau_\mathrm{i}$，其中 $\tau_\mathrm{e}, \tau_\mathrm{i}$ 分别表示环境的特征时间和系统的内部特征时间。那么如果系统在时间 $t = 0$ 处于 $H_0(0)$ 的本征态, 即系统的初态 $|\psi(0)\rangle = |n(0)\rangle$，绝热定理告诉我们系统在 t 时刻会处于 $H_0(t)$ 的对应于瞬时本征态 $|n(0)\rangle$，并且

$$|\psi(t)\rangle = |n(t)\rangle e^{i\theta_n(t)} e^{i\gamma_n(t)} \tag{2-1}$$

其中 $\theta_n(t) = -\frac{1}{\hbar}\int_0^t E_n(t')\mathrm{d}t', \gamma_n(t) = i\int_0^t \langle n(t')|\partial_{t'} n(t')\rangle \mathrm{d}t'$

不难注意到，绝热定理实现了 $H_0(t)$ 的对应的本征态之间的转化 $|n(0)\rangle \rightarrow |n(t)\rangle$。现在我们考虑取消 $\tau_\mathrm{e} \gg \tau_\mathrm{i}$ 的要求。

假设存在一个哈密顿量 $H(t)$，它使得系统的态的演化严格为 $|\psi(t)\rangle = |n(t)\rangle e^{i\theta_n(t)} e^{i\gamma_n(t)}$，则根据薛定谔方程有

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = H(t)|\psi(t)\rangle \tag{2-2}$$

将 (2-1) 代入 (2-2)，整理得 $E_n + i\hbar\left(|\partial_t n\rangle - \langle n|\partial_t n\rangle\right)|n\rangle = H|n\rangle$，于是可得

$$\begin{aligned} H(t) &= H_0(t) + i\hbar \sum_m \left(|\partial_t m\rangle \langle m| - \langle m \mid \partial_t m\rangle | m\rangle \langle m|\right) \\ &\equiv H_0 + H_1 \end{aligned} \tag{2-3}$$

于是一个以 $H(t)$ 作为哈密顿量的系统，若其初态为 $H_0(t)$ 的本征态 $|n(0)\rangle$，那么不论 $H(t)$ 随时间的变化快慢与否，在 t 时刻，系统的状态依然是 $H_0(t)$ 的本征态，只是两者有一个相位差。于是我们实现了在有限时间内的本征态之间的转化。这其中的关键在于我们引进

了一个**反绝热哈密顿量** $H_1(t)$，根据 (2-3)，我们已经在形式上得到了 $H_1(t)$。现在我们考虑对于具体的 $H_0(t)$，如何得到 $H_1(t)$ 的具体表达式。[15]

让 H_0 通过一系列参数 $\boldsymbol{\lambda}(t) = (\lambda_1(t), \lambda_1(t), \lambda_1(t), \cdot, \lambda_N(t))$ 依赖于时间 t。同时，$H_0(\boldsymbol{\lambda})$ 的本征值、本征态为 $E_n(\boldsymbol{\lambda}), |n(\boldsymbol{\lambda})\rangle$，根据复合函数的微分法则，式 (2-5) 可以写为

$$H_1(t) = \dot{\boldsymbol{\lambda}} \cdot \boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{\lambda}(t)) \tag{2-4}$$

其中

$$\boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{\lambda}) = i\hbar \sum_m (|\boldsymbol{\nabla} m\rangle\langle m| - \langle m \mid \boldsymbol{\nabla} m\rangle |m\rangle\langle m|) \tag{2-5}$$

同时 $|\nabla m\rangle \equiv \partial_\lambda |m(\boldsymbol{\lambda})\rangle, \dot{\boldsymbol{\lambda}} \equiv \mathrm{d}\lambda/\mathrm{d}t$

把 $\boldsymbol{\xi}$ 看做参数空间的无穷小平移 $\boldsymbol{\lambda} \rightarrow \boldsymbol{\lambda} + \delta\boldsymbol{\lambda}$ 的生成元。这个无穷小平移与希尔伯特空间中态的变换 $|\psi\rangle \rightarrow |\psi\rangle + |\delta\psi\rangle$ 相联系，通过以下方式

$$i\hbar|\delta\psi\rangle = \delta\boldsymbol{\lambda} \cdot \boldsymbol{\xi}|\psi\rangle \tag{2-6}$$

这样，在一阶近似下，$H_0(\boldsymbol{\lambda})$ 的本征态 $|n(\boldsymbol{\lambda})\rangle$ 的变换为

$$|n(\boldsymbol{\lambda})\rangle \rightarrow \left(1 + \frac{1}{i\hbar}\delta\boldsymbol{\lambda} \cdot \hat{\boldsymbol{\xi}}\right)|n(\boldsymbol{\lambda})\rangle = e^{i\delta\boldsymbol{\lambda}\cdot\boldsymbol{A}_n}|n(\boldsymbol{\lambda} + \delta\boldsymbol{\lambda})\rangle \tag{2-7}$$

其中 $\boldsymbol{A}_n(\boldsymbol{\lambda}) = i\langle n|\boldsymbol{\nabla} n\rangle$. 这意味着，沿着参数空间的曲线 $\boldsymbol{\lambda}$ 利用式 (2-7)，可以将系统的态逐步从 $|n(\lambda_0)\rangle$ 变换成 $\mathrm{e}^{i\int_{\boldsymbol{\lambda}_0}^{\boldsymbol{\lambda}_s} i\langle n|\boldsymbol{\nabla} n\rangle \mathrm{d}\boldsymbol{\lambda}}|n(\boldsymbol{\lambda}_s)\rangle$. 这正是们所希望得到的形式。

现在看看系统态的时间演化，先考虑系统经过一个无穷小时间 δt，则态 $|\psi\rangle$ 将演化为

$$\left(1 + \frac{1}{i\hbar}H\delta t\right)|\psi\rangle = |\psi\rangle + \frac{1}{i\hbar}\delta t H_0|\psi\rangle + \frac{1}{i\hbar}\delta\boldsymbol{\lambda} \cdot \boldsymbol{\xi}|\psi\rangle \tag{2-8}$$

如果考虑态 $|\psi\rangle = |n(\boldsymbol{\lambda})\rangle$，那么 (2-8) 的物理意义是明显的。$H_0$ 产生了我们熟悉的动力学相位，而 $\boldsymbol{\xi}$ 产生了几何相因子。

由 (2-5) 定义的 $\boldsymbol{\xi}$，也可由下式 (2-9) 定义，（二者的等价性可由 $\langle m \mid \boldsymbol{\nabla} n\rangle = \left\langle m \left| \boldsymbol{\nabla}\hat{H}_0 \right| n\right\rangle / (E_n - E_m)$[13] 加以证明）

$$[\boldsymbol{\xi}, H_0] = i\hbar\left(\boldsymbol{\nabla} H_0 - \operatorname{diag}\left(\boldsymbol{\nabla} H_0\right)\right) \tag{2-9a}$$

$$\langle n|\boldsymbol{\xi}|n\rangle = 0 \tag{2-9b}$$

其中 $\operatorname{diag}(\boldsymbol{\nabla} H_0) = \sum_m |m\rangle\langle m|\boldsymbol{\nabla} H_0| m\rangle\langle m|$. 对 (2-9a) 两端同时进行操作 $\langle m|\cdots|n\rangle$，得到 $\langle m|\boldsymbol{\xi}|n\rangle(E_n - E_m) = \langle m|i\hbar\left(\boldsymbol{\nabla} H_0 - \operatorname{diag}(\boldsymbol{\nabla} H_0)\right)|n\rangle$. 可见，(2-9a) 决定了 $\boldsymbol{\xi}$ 的非对角元，(2-9b) 决定了其非对角元。

式 (2-9) 提供了一种在经典力学中找到**反绝热哈密顿量**的对应方法。因为我可以利用量子与经典的对应 $[A, B]/i\hbar \rightarrow \{A, B\}$ 将 (2-9) 转换为经典的，进而可以在经典力学中找到

对应的**反绝热哈密顿量**。现在考虑一个经典系统，其自由度为 1，哈密顿量为 $H_0(\boldsymbol{\eta};\boldsymbol{\lambda})$. 其中 $\boldsymbol{\lambda}$ 依然为依赖于时间的一系列参数，$\boldsymbol{\eta}=(q,p)$ 为广义坐标和广义动量，确定了相空间的一个点。对于确定的能量 $E=H_0(\boldsymbol{\eta};\boldsymbol{\lambda})$，这将相点约束在相空间的一个能壳上，积分

$$I(E,\boldsymbol{\lambda})\equiv\int \mathrm{d}\boldsymbol{\eta}\theta\left[E-H_0(z;\boldsymbol{\lambda})\right] \tag{2-10}$$

表示的是能壳所围成的体积，阶跃函数 $\theta\left[E-H_0(z;\boldsymbol{\lambda})\right]$ 可以使得积分区域为整个相空间。经典的绝热定理告诉我们 $I(E,\boldsymbol{\lambda})$ 是一个**绝热不变量**[16]。也就是说如果 H_0 随时间 t 变化的足够缓慢，那么能壳所围成的体积将保持不变。定义任意可观测量 A 的**微正则分布平均**

$$\langle A\rangle_{E,\lambda}\equiv\frac{1}{\partial_E I}\int \mathrm{d}\boldsymbol{\eta}\delta\left(E-H_0\right)A \tag{2-11}$$

利用函数 $I(E,\boldsymbol{\lambda})$ 去定义函数 $E(I,\boldsymbol{\lambda})$，则有

$$\boldsymbol{\nabla}E(I,\boldsymbol{\lambda})=-\frac{\boldsymbol{\nabla}I(E,\boldsymbol{\lambda})}{\partial_E I(E,\boldsymbol{\lambda})}=\langle\boldsymbol{\nabla}H_0\rangle_{E,\lambda} \tag{2-12}$$

其中第一个等式利用循环函数的偏导数的性质，第二个等式利用了式 (2-10) 和式 (2-11)。

式 (2-9) 的经典对应为[17]

$$\{\boldsymbol{\xi},H_0\}=\boldsymbol{\nabla}H_0-\langle\boldsymbol{\nabla}H_0\rangle_{E,\lambda}\equiv\boldsymbol{\nabla}\tilde{H}_0 \tag{2-13a}$$

$$\langle\boldsymbol{\xi}\rangle_{E,\lambda}=0 \tag{2-13b}$$

其中 $\{\cdots\}$ 是经典力学中的泊松括号 $\{A,B\}=(\partial A/\partial q)(\partial B/\partial p)-(\partial A/\partial p)(\partial B/\partial q)$。利用式 (2-12) 和泊松括号的定义，式 (2-13a) 可改写为不懂，出自[15] page2 (13)

$$\{\boldsymbol{\xi},i\}=\boldsymbol{\nabla}i \tag{2-14}$$

其中关于 $\boldsymbol{\eta}$ 和 $\boldsymbol{\lambda}$ 的函数 i 的定义为：$i(\boldsymbol{\eta};\boldsymbol{\lambda})\equiv I\left(H_0\left(\boldsymbol{\eta};\boldsymbol{\lambda}\right);\boldsymbol{\lambda}\right)$。类似于量子的情形的，将 $\boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{\eta};\boldsymbol{\lambda})$ 看做和参数空间的无穷小平移 $\boldsymbol{\lambda}\to\boldsymbol{\lambda}+\delta\boldsymbol{\lambda}$ 相联系的相空间的平移 $\boldsymbol{\eta}\to\boldsymbol{\eta}+\delta\boldsymbol{\eta}$ 的生成元，有[18]

$$\delta\boldsymbol{\eta}=\delta\boldsymbol{\lambda}\cdot\{\boldsymbol{\eta},\boldsymbol{\xi}\} \tag{2-15}$$

于是，由式 (2-14) 和 (2-15) 可得

$$\begin{aligned}&i(\boldsymbol{\eta}+\delta\boldsymbol{\eta};\boldsymbol{\lambda}+\delta\boldsymbol{\lambda})-i(\boldsymbol{\eta};\boldsymbol{\lambda})\\=&\frac{\partial i}{\partial\boldsymbol{\eta}}\delta\boldsymbol{\eta}+\boldsymbol{\nabla}i\cdot\delta\boldsymbol{\lambda}\\=&(\{i,\boldsymbol{\xi}\}+\nabla i)\cdot\delta\boldsymbol{\lambda}\\=&0\end{aligned} \tag{2-16}$$

这说明，变换 $\boldsymbol{\eta}\to\boldsymbol{\eta}+\delta\boldsymbol{\lambda}\cdot\{\boldsymbol{\eta},\boldsymbol{\xi}\}$ 将能壳 $H_0(\boldsymbol{\eta};\boldsymbol{\lambda})$ 上的一个相点映射到能壳 $H_0(\boldsymbol{\eta}+\delta\boldsymbol{\eta};\boldsymbol{\lambda})$ 上的一个点，而二者包围着相同的相体积。

可见，类似于量子中的情形，只要给经典的系统施加一个反绝热的哈密顿量 $\dot{\boldsymbol{\lambda}}\cdot\boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{\eta},\boldsymbol{\lambda}(t))$。那么此系统的 $I(E,\boldsymbol{\lambda}) \equiv \int \mathrm{d}\boldsymbol{\eta}\theta\,[E - H_0(z;\boldsymbol{\lambda})]$ 将严格保持不变，不论 H_0 随时间的变化快慢与否。这个新的哈密顿量为（文献[15] page eq16 直接计算了 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}i(\boldsymbol{\eta};\boldsymbol{\lambda})$，但其中的推理过程未能理解）

$$H(\boldsymbol{\eta},t) = H_0(\boldsymbol{\eta};\boldsymbol{\lambda}(t)) + \dot{\boldsymbol{\lambda}}\cdot\boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{\eta},\boldsymbol{\lambda}(t)) \tag{2-17}$$

*从系综的角度来考虑这个过程：想象一下从 H0 的能壳 E0 中取样的初始条件的集合。在任何后来的时间 t>0，从这些初始条件演化出来的轨迹，在 Hamiltonian H(z; t) 下，将填充一个 H0(z;(t)) 的单一能壳 E(t)，具体来说是绝热能壳，它与初始能壳的相空间体积相同。如果我们把绝热能壳想象成一个随着参数随时间变化而变形的闭合循环，那么在式 16 中，H0 围绕这个循环产生运动，调整每个轨迹，使其保持在壳上。*可不要，出自[15] page eq16

2.2.2 经典和量子偶次幂势场中生成元的构造

现在，鉴于变换 $\boldsymbol{\eta} \to \boldsymbol{\eta}+\delta\boldsymbol{\lambda}\cdot\{\boldsymbol{\eta},\boldsymbol{\xi}\}$ 将能壳 $H_0(\boldsymbol{\eta};\boldsymbol{\lambda})$ 上的相点映射到了能壳 $H_0(\boldsymbol{\eta}+\delta\boldsymbol{\eta};\boldsymbol{\lambda})$ 上，我们可以此为根据构造经典力学中的 $\boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{\eta},\boldsymbol{\lambda})$，下面我们用例子进行说明

考虑一个一维的粒子，处在两堵刚性墙之间，刚性墙的位置为 $q = 0,\lambda$，这个例子这对应于量子力学中的一维无限深势阱。其相空间的能壳如图 (2.1) 所示。

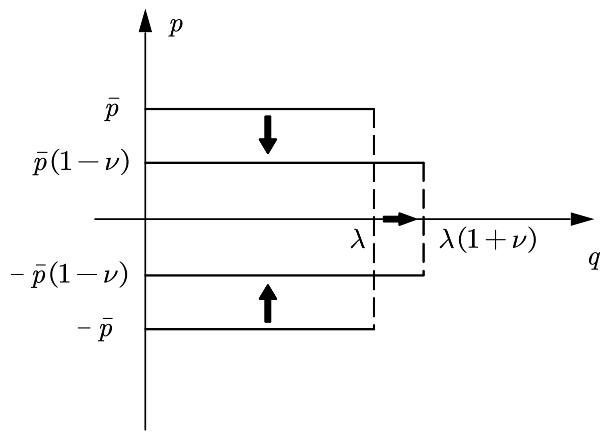

图 2.1　在一维盒子中的粒子的能壳。该粒子的能壳是一个矩形，当盒子的长度发生极小的改变时，矩形能壳也发生相应的改变。但矩形的体积不变

系统的哈密顿量为

$$H_0(\boldsymbol{\eta};\lambda) = \frac{p^2}{2m} + V_{\mathrm{box}}(q;\lambda) \tag{2-18}$$

其中 $V_{\mathrm{box}}(q;\lambda)$ 代表一维盒子的势场 $V_{\mathrm{box}}(q;\lambda) = \begin{cases} 0, q < \lambda \\ \infty, q \leq 0 \text{ or } q \geq \lambda \end{cases}$ 在经典中这个粒子的运动是平凡的——以相同的速度在两堵墙之间做往返运动。

哈密顿量的参数 λ 随时间 t 变化，现在我们构造这个系统的**反绝热哈密顿量**。不难得出，矩形能壳的面积为 $I = 2\bar{p}\lambda$，由于矩形能壳的长的变化为 $\lambda \to \lambda(1+\nu)$，为了维持矩形能壳的面积，在一阶精度下，可令其宽的微小改变为 $2\bar{p} \to 2\bar{p}(1-\nu)$，其中 $\nu \equiv \delta\lambda/\lambda$。于是，这两个能壳被一个线性的尺度变换所联系

$$q \to q(1+\nu) \quad , \quad p \to p(1-\nu) \tag{2-19}$$

现在我们可以通过 $(\nu q, -\nu p) = \delta\lambda\{(q,p),\xi\}$（式 (2-15)）逆向解出生成元的表达式，于是我们可得一对这样的方程 $\begin{cases} q/\lambda = \partial\xi/\partial p \\ p/\lambda = \partial\xi/\partial q \end{cases}$。结合限制条件 (2-13b)，于是可令 $\xi = qp/\lambda$。再根据式 (2-19)，我们最终得到

$$H(\boldsymbol{\eta},t) = H_0(\boldsymbol{\eta};\lambda) + \frac{\dot{\lambda}}{\lambda}qp \quad , \quad \lambda = \lambda(t) \tag{2-20}$$

在这个时间依赖的哈密顿量之下，绝热不变量 $i(q,p;\,\lambda) = 2|p|\lambda$ 是严格守恒的，不论函数 $\lambda(t)$ 的形式是怎样的。现在我们对于这个具体的例子，实实在在的构造出了**反绝热哈密顿量**，这说明其并不只是存在于形式化理论中，而是可以在实际中加以利用的。

在构造出了经典的**反绝热哈密顿量**之后，我们也可以通过 ξ 的经典表达式来猜想量子力学中的**反绝热哈密顿量**，因为算符 p,q 是不对易的，一个自然的猜想是

$$\xi(\lambda) = \frac{qp+pq}{2\lambda} \tag{2-21}$$

于是，再联系到已知的量子力学中**一维无限深势阱**的本征解，非常幸运的，我们发现选择的这个 ξ 满足式 (2-7)

$$\left(1+\frac{1}{i\hbar}\delta\lambda\xi\right)\sqrt{\frac{2}{\lambda}}\sin\left(\frac{n\pi q}{\lambda}\right) = \sqrt{\frac{2}{\lambda+\delta\lambda}}\sin\left(\frac{n\pi q}{\lambda+\delta\lambda}\right) \tag{2-22}$$

这一点可以通过计算 $\frac{\partial}{\partial\lambda}\sqrt{\frac{2}{\lambda}}\sin\left(\frac{n\pi q}{\lambda}\right)\delta\lambda = \frac{1}{i\hbar}\delta\lambda\xi\sqrt{\frac{2}{\lambda}}\sin\left(\frac{n\pi q}{\lambda}\right)$ 得到验证。(2-22) 中的相位由于 $A_n(\lambda) = i\langle n|\partial_\lambda n\rangle = 0$ 而消失。于是可以立刻得到

$$H(t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial q^2} + V_{\text{box}}(q;\lambda) + \frac{\dot{\lambda}}{2\lambda}\frac{\hbar}{i}\left(q\frac{\partial}{\partial q}+\frac{\partial}{\partial q}q\right) \tag{2-23}$$

这样，波函数

$$\psi(q,t) = \sqrt{\frac{2}{\lambda}}\sin\left(\frac{n\pi q}{\lambda}\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_0^t \mathrm{d}t'\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2m\lambda^2}\right) \tag{2-24}$$

将成为这个系统的精确解（初态为 $\psi(q,0) = \sqrt{\frac{2}{\lambda}}\sin\left(\frac{n\pi q}{\lambda}\right)$），不论 $\lambda(t)$ 的函数形式如何。

式 (2-23) 也可以更一般的写成

$$\left(1+\frac{1}{i\hbar}\delta\lambda\hat{\xi}\right)\psi(q) = \sqrt{\frac{1}{s}}\psi\left(\frac{q}{s}\right) \quad , \quad s = \frac{\lambda+\delta\lambda}{\lambda} \tag{2-25}$$

换句话说，算符 $\exp(\delta\lambda\xi/i\hbar)$ 对波函数 $\psi(q)$ 进行了线性放大。（系数 $\sqrt{\frac{1}{s}}$ 保证了波函数的归一化）自此我们也成功的通过构造的**经典反绝热哈密顿量**构造出了**量子反绝热哈密顿量**

不难发现，我们的构造能够成功，很大程度上得益于能壳和本征态之间的**尺度变换**关系能够成立。相似的办法也能够应用于**偶次幂势场**，则经典哈密顿量为

$$H_0(\boldsymbol{\eta};\lambda)=\frac{p^2}{2m}+\epsilon\left(\frac{q}{\lambda}\right)^b \tag{2-26}$$

可以证明，对于相应的量子的情形，也是可以按照类似的方式构造其**量子反绝热哈密顿量**的。其中 $\epsilon>0$ 调节了能量尺度，而 b 是正偶数。同样的，我们先在经典中加以考虑，再推广到量子中。上述系统的**绝热不变量**为

$$\begin{aligned} i(\boldsymbol{\eta};\ \lambda)&=4\int_0^{\lambda(H_0/\epsilon)^{1/b}}\sqrt{2m\left[H_0-\epsilon\left(q/\lambda\right)^b\right]}\,\mathrm{d}q\\ &=\sqrt{8\pi m}\epsilon^{-1/b}\frac{\Gamma\left(1+\frac{1}{b}\right)}{\Gamma\left(\frac{3}{2}+\frac{1}{b}\right)}\lambda H_0^{\frac{1}{2\mu}}\\ &=c\lambda H_0^{\frac{1}{2\mu}} \end{aligned} \tag{2-27}$$

其中，$\mu\equiv\frac{b}{b+2}, c\equiv\sqrt{8\pi m}\epsilon^{-1/b}\frac{\Gamma\left(1+\frac{1}{b}\right)}{\Gamma\left(\frac{3}{2}+\frac{1}{b}\right)}$ 同样的，含时参数 $\lambda\to\lambda+\delta\lambda$ 的变化，通过一个线性变换引起了能壳的变化。为了看到这一点，我们考虑 $i(q,p;\ \lambda)$ 的变化 $\delta i(q,p;\ \lambda)=\frac{\partial i}{\partial q}\delta q+\frac{\partial i}{\partial p}\delta p+\frac{\partial i}{\partial\lambda}\delta\lambda\equiv0$，为了使恒等式成立，可以假设 $\delta q=xq\frac{\delta\lambda}{\lambda},\delta p=-yp\frac{\delta\lambda}{\lambda}$，可以得到

$$\frac{c}{2\mu H_0}\left[(\mu-y)\frac{p^2}{m}+(2\mu-b+bx)\epsilon\left(\frac{q}{\lambda}\right)^b\right]\delta\lambda\equiv0 \tag{2-28}$$

要使上式成立，必须有 $x=y=\mu$，可见，能壳的变换依然可以由式 (2-19) 进行描述，只不过现在 $\nu=\mu\delta\lambda/\lambda$，同理我们可以得到新的哈密顿量

$$H(\boldsymbol{\eta},t)=H_0(\boldsymbol{\eta};\lambda)+\mu\frac{\dot{\lambda}}{\lambda}qp \tag{2-29}$$

在这个哈密顿量下，$i(\boldsymbol{\eta};\ \lambda)=c\lambda H_0^{\frac{1}{2\mu}}$ 将成为一个严格的守恒量。在量子力学中，本征态将满足（不甚理解）

$$\phi_n(q;\lambda)=\sqrt{\frac{1}{\lambda^\mu}}\phi_n\left(\frac{q}{\lambda^\mu};1\right) \tag{2-30}$$

在新的哈密顿量

$$H(t)=H_0(\lambda)+\frac{b}{b+2}\frac{\dot{\lambda}}{2\lambda}\frac{\hbar}{i}\left(q\frac{\partial}{\partial q}+\frac{\partial}{\partial q}q\right) \tag{2-31}$$

之下。这结果对任意 $b\in\{2,4,6,\cdots\}$ 都是成立对的。特别的，$b=2$ 和 $b\to\infty$ 对应于**一维谐振子**和**一维无限深势阱**的情况。不过，对于**一维谐振子**的情况，Muga 等人使用升降算子 $a,a^\dagger$ 结合式 (2-3) 的办法更为简单地得到了相同的结果。[19]

对于一般的一维势场，生成元应该满足

$$\boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{\eta}_b;\boldsymbol{\lambda})-\boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{\eta}_a;\boldsymbol{\lambda})=\int_a^b \mathrm{d}t\nabla\tilde{H}_0(\boldsymbol{\eta}(t);\boldsymbol{\lambda}) \tag{2-32}$$

其中相点 $\boldsymbol{\eta}_a,\boldsymbol{\eta}_b$ 在同一能壳上，$\boldsymbol{\eta}(t)$ 是相点从 $\boldsymbol{\eta}_a$ 演化到 $\boldsymbol{\eta}_b$ 的相轨迹。式 (2-32) 可以结合式 (2-13a) 和 $(\mathrm{d}/\mathrm{d}t)\boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{\eta}(t);\boldsymbol{\lambda})=\{\boldsymbol{\xi},H_0\}$ 而得到。

如果我们考虑相空间中复杂一点的能壳，它们不是简单闭合的环。比如如果势 $V(q;\boldsymbol{\lambda})$ 是双阱势，而参数 $\boldsymbol{\lambda}$ 的变化可以改变能壳的拓扑结构——从单环变成双环或相反。这时 i 的绝热不变性将被破坏。[20-22]

对于自由度 $f\geq 2$ 的经典系统，如果 H_0 是**完全可积的**[16]，我们就有可能能够重复式 (2-10)-(2-17) 对**作用量-角度变量**的分析，每一个生成 ξ_i 元对应一对**作用量-角度变量**。（可加一脚注）另一个情形下，如果 H_0 是各态历经的，那么式 (2-13a) 的解的存在将意味着能壳 $H_0(\boldsymbol{\eta};\ \boldsymbol{\lambda})$ 可以被**正则变换**到 $H_0(\boldsymbol{\eta};\ \boldsymbol{\lambda}+\delta\boldsymbol{\lambda})$。[17] 虽然对于 $f\geq 2$ 的系统，这一条件通常并不能满足，但一旦满足，$\boldsymbol{\xi}$ 就简单的是这个变换的生成元，无耗散的驱动就可以由 $H_0+\dot{\boldsymbol{\lambda}}\cdot\boldsymbol{\xi}$ 实现。

上述的方法除了可以应用在量子和经典动力学之外，相似的方法也可以应用于统计力学，用于估算自由能的变化。其中反绝热的**度规缩放**[23] 或者**场流**[24] 被构造出来，用于减少或者消除对有限时间过程中数字模拟的不可逆性。

2.2.3 利用绝热捷径实现平衡态的转化

接下来，我们举例说明绝热捷径如何实现平衡态的转化。[8] 考虑一个被时间依赖的谐振子势场驱动的布朗粒子，只需使式 (2-26) 中的 $b=2$，再联系到式 (2-30)，就可以直接得到它被施加反绝热哈密顿量之后的哈密顿量

$$\begin{aligned}H(t)=&H_0(t)+\frac{\dot{\lambda}}{2\lambda(t)}qp\\=&\frac{p^2}{2m}+\epsilon\left(\frac{q}{\lambda}\right)^2+\frac{\dot{\lambda}}{2\lambda(t)}qp\end{aligned} \tag{2-33}$$

在时间 $t_i<t\leq t_f$ 内，参数由 $\lambda_i\equiv\lambda(t_i)$ 变为 $\lambda_f\equiv\lambda(t_f)$。我们要求

$$\dot{\lambda}(t_i)=\dot{\lambda}(t_f)=0, \tag{2-34}$$

这样才有 $H(t_f)=H_0(t_f),H(t_f)=H_0(t_f)$，除此之外，$\lambda(t)$ 依赖于时间 t 的形式有很大的任意性。运动方程为

$$\begin{cases}\dot{q}=\dfrac{\partial H}{\partial p}=\dfrac{p}{m}+\dfrac{\lambda(t)}{2\lambda(t)}q\\ \dot{p}=-\dfrac{\partial H}{\partial q}=-2\epsilon\dfrac{q}{\lambda^2(t)}-\dfrac{\dot{\lambda}(t)}{2\lambda(t)}p\end{cases} \tag{2-35}$$

接下来我们将说明**绝热捷径**如何联系两个不同**有效温度**的**正则态**。[8] 假设系统初始处在有效温度为 $(k_{\mathrm{B}}\beta_i)^{-1}$ 的正则态中，那么初始时系统的分布函数可以表达为

$$\rho_i = \frac{\beta_i}{2\pi\lambda_i}\exp\left[-\beta_i H_0\left(t_i\right)\right] \tag{2-36}$$

其中 (q_i, p_i) 代表初始时的相点，根据**刘维尔定理**，当系统不和外界任何热浴接触时，分布函数沿着相轨应当是不变的。所以，末态的分布函数应当为

$$\rho_f = \rho_i = \frac{\beta_i}{2\pi\lambda_i}\exp\left[-\beta_i H\left(t_i\right)\right] \tag{2-37}$$

接着我们寻找末态的有效温度，使得末态的分布函数 (2-37) 可以被表达成正则分布的样子

$$\rho_f = \frac{\beta_f}{2\pi\lambda_f}\exp\left[-\beta_f H\left(t_f\right)\right] \tag{2-38}$$

其中 (q_f, p_f) 是末态的相点。计算 $H_0(t)$ 对时间的导数得

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}H_0(t)}{\mathrm{d}t} &= \frac{p}{m}\dot{p} + 2\epsilon\frac{q}{\lambda^2}\dot{q} - 2\epsilon\frac{q^2}{\lambda^2}\dot{\lambda} \\ &= -H(t)\frac{\mathrm{d}\ln\lambda(t)}{\mathrm{d}t}\end{aligned} \tag{2-39}$$

第二个等式用到了运动方程 (2-38) 于是可得 $H\left(t_f\right) = H\left(t_i\right)\lambda_i/\lambda_f$，将这个式子代入式 (2-38)，得到

$$\rho_f = \frac{\beta_f}{2\pi\lambda_f}\exp\left[-\frac{\beta_f\lambda_i}{\lambda_f}H\left(t_f\right)\right] \tag{2-40}$$

将这个式子和式 (2-37) 比较可得

$$\frac{\beta_f}{\lambda_f} = \frac{\beta_i}{\lambda_i} \tag{2-41}$$

这说明，如果系统的初态等效温度为 $(k_{\mathrm{B}}\beta_i)^{-1}$ 的正则态，那么在系统经历绝热捷径之后，我们可以把系统的末态视为等效温度为 $\left(k_{\mathrm{B}}\beta_f\right)^{-1}$ 的正则态。而且，初态和末态的等效温度满足 (2-41)。

这样，通过绝热捷径，在有限时间时间 $t_i \sim t_f$ 内，我们实现了微观正则态之间的转换。

2.3 等温捷径

上一节我们介绍了绝热捷径，它可以在有限时间内实现**正则平衡态**之间的转化。又由于这个过程中，系统和外界没有热交换故而称之为**绝热捷径**。那么类比于经典中的绝热过程和等温过程，我自然难免思考是否会存在对应的**等温捷径**。类似的，我们希望它可以在有限时间内实现两个等温平衡态间的转化。如果可以成功，我们还可以进一步思考由**绝热捷径**和**等温捷径**构成的有限时间类卡诺循环的功率与效率等问题。

Martínez[25] 针对谐振子场中的布朗粒子，通过对劲度系数进行调节，是系统比自然驰豫过程快一百倍达到了平衡态。Le Cunuder 等人[26] 实现了微观谐振子平衡态的快速转化。不过这些方法都只能限制于布朗粒子系统，我们需要在一般情况也能适用的办法。于是，李耿等人[9] 发展出了等温捷径的概念。很类似于绝热捷径，李耿等人为一个初始处于平衡态的系统施加了一个辅助势场（类似于绝热捷径中的反绝热哈密顿量），它使得这个和恒温热浴接触的系统的演化处于原哈密顿量的瞬时平衡态。通过对辅助势场的调节，可以使得系统的初末状态都是原哈密顿量的平衡态，就此实现了等温情况下平衡态间的转化。

2.3.1 等温捷径的实现

考虑一个和温度为 T 的热浴接触的系统，如果系统的哈密段量 $H_0(\boldsymbol{\eta}, \lambda(t))$ 依赖于时间。分布函数 $\rho(\boldsymbol{\eta}, t)$ 的时间演化由下式决定

$$\frac{\partial \rho(\boldsymbol{\eta}, t)}{\partial t} = L_0(\boldsymbol{\eta}, \lambda(t))\rho(\boldsymbol{\eta}, t) \tag{2-42}$$

其中 $L_0(\boldsymbol{\eta}, \lambda(t))$ 是演化算符，我们将讨论的框架限制在这样一种情况下：对于固定的参数 λ，系统处于这样一种平衡态之中，它的分布函数满足 $\rho_{\mathrm{eq}} \propto e^{-\beta H_0(\eta,\lambda)}$，其中 $\beta = \frac{1}{k_{\mathrm{B}}T}$。现在给系统引入一个辅助势 $U_1(\boldsymbol{\eta}, t)$，哈密顿量成为 $H(\boldsymbol{\eta}, t) = H_0(\boldsymbol{\eta}, \lambda(t)) + U_1(\boldsymbol{\eta}, t)$，演化方程 (2-42) 成为

$$\frac{\partial \rho(\boldsymbol{\eta}, t)}{\partial t} = L_0(\boldsymbol{\eta}, \lambda(t))\rho(\boldsymbol{\eta}, t) + L_1(\boldsymbol{\eta}, t)\rho(\boldsymbol{\eta}, t) \tag{2-43}$$

其中 $L_1(\boldsymbol{\eta}, t)$ 代表与辅助势对应的算符。我们要求辅助势可以使得系统在任何时候都处于原哈密段量的瞬时平衡态中，则分布函数为

$$\rho(\boldsymbol{\eta}, t) = \rho_{\mathrm{ieq}}(\boldsymbol{\eta}, \lambda(t)) \equiv e^{\beta[F(\lambda(t)) - H_0(\eta,\lambda(t))]} \tag{2-44}$$

其中，$F(\lambda) \equiv -\beta^{-1}\ln\left[\int e^{-\beta H_0(\eta,\lambda)}\mathrm{d}\boldsymbol{\eta}\right]$ 是原系统在给定参数 λ 时，在平衡态下的自由能。(2-44) 的积分是对整个相空间的。如果我们限制辅助势 $U_1(\boldsymbol{\eta}, t)$ 在驱动过程的初末时刻都为零，即分布函数在初末时刻都对应于哈密顿量 $H(\boldsymbol{\eta}\, t)$，那么我们就实现了有限时间内的等温平衡态的转化。

上面的这种方法看上去很类似于 Vaikuntanathan 和 Jarzynski 提出的出的**护送自由能模拟 (escorted free-energy simulations)**。[24] 通过在系统中引入恰当的人工场流和巧妙的功的定义，这个方法可以生成相轨迹，沿着这些相轨迹做的功等于系统自由能的改变。而等温捷径的方法致力于为等温情况下有限时间内平衡态的转化提供统一的理论框架。也不用额外引入功的定义，可以依旧采用随机热力学中轨道功的定义。[27-28]

2.3.2 等温捷径应用于过阻尼布朗粒子

考虑在势场 $U_0(q,\lambda(t))$ 中的一维布朗粒子，在过阻尼的情形下忽略其惯性的影响。为系统引入一个辅助势 $U_1(q,t)$，那么现在粒子的势场为

$$U(q,t) = U_0(q,\lambda(t)) + U_1(q,t) \tag{2-45}$$

布朗粒子的分布函数 $\rho(q,t)$ 的演化由**福克-普朗克-克拉马斯方程 (Fokker-Planck-Kramers equation)**[29] 决定

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial J}{\partial q} = 0, \tag{2-46}$$

$$J = -\frac{1}{\gamma}\left(\frac{\partial U}{\partial q}\rho + \frac{1}{\beta}\frac{\partial\rho}{\partial q}\right) \tag{2-47}$$

其中 γ 是粒子与液体间的黏滞系数。鉴于我们的假设——系统时刻处在 $H_0(\boldsymbol{\eta},\lambda(t))$ 瞬时平衡态下，则系统的分布函数为

$$\rho(q,t) = \rho_{\text{ieq}}(q,\lambda(t)) \equiv \mathrm{e}^{\beta[F(\lambda(t))-U_0(q,\lambda(t))]} \tag{2-48}$$

其中，$F(\lambda) \equiv -\beta^{-1}\ln\left[\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta U_0(q,\lambda)}\mathrm{d}q\right]$ 将式 (2-48) 代入福克-普朗克方程 (2-46)，可以得到 $U_1(q,t)$ 需要满足的方程：

$$\frac{1}{\gamma\beta}\frac{\partial^2 U_1}{\partial q^2} - \frac{1}{\gamma}\frac{\partial U_0}{\partial q}\frac{\partial U_1}{\partial q} = \left(\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}\lambda} - \frac{\partial U_0}{\partial\lambda}\right)\dot{\lambda} \tag{2-49}$$

可以令 $U_1(q,t)$ 取如下形式

$$U_1(q,t) = \dot{\lambda}(t) f(q,\lambda(t)) \tag{2-50}$$

将上式 (2-50) 代入式 (2-49) 可得

$$\frac{1}{\gamma\beta}\frac{\partial^2 f}{\partial q^2} - \frac{1}{\gamma}\frac{\partial U_0}{\partial q}\frac{\partial f}{\partial q} = \frac{dF}{d\lambda} - \frac{\partial U_0}{\partial\lambda} \tag{2-51}$$

非常有趣的是式 (2-48) 是方程 (2-51) 的积分因子，于是不难求得方程 (2-51) 的形式解。再结合假设 (2-50)，得到

$$U_1(q,t) = \gamma\beta\dot{\lambda}(t)\int \mathrm{d}q\frac{\int \mathrm{d}q h(q,\lambda(t))}{\rho_{\text{ieq}}(q,\lambda(t))} \tag{2-52}$$

其中 $h(q,\lambda) \equiv \left[\frac{\mathrm{d}F(\lambda)}{\mathrm{d}\lambda} - \frac{\partial U_0(q,\lambda)}{\partial\lambda}\right]\rho_{\text{ieq}}(q,\lambda)$。注意到，从分布函数的演化得到势能的想法，Martínez 等人在**快速平衡 (engineered swift equilibration)** 的研究[25] 中已经被应用过。不过，我们是从给定的势能 $U_0(q,\lambda(t))$ 得到辅助势，Martínez 等人是从给定的分布函数得到辅助势。而且，Martínez 等人的方法不能同时确定哈密顿量和自由能。

考虑到我们对辅助势的 $U(q,t)$ 限制条件——在驱动过程的初末时刻 t_i, t_f 要使得 $U(q,t) = U_0(q,t)$，于是我们引入限制条件

$$\dot{\lambda}(t_i) = \dot{\lambda}(t_f) = 0 \tag{2-53}$$

结合辅助势 (2-52) 和上式 (2-53) 的边界条件，我们就在过阻尼的情况下实现了等温捷径。

现在来让我们考虑两个简单的例子，第一个例子是在谐振子中受时间依赖的力的布朗粒子。相应的势能为

$$U_0(q,\lambda(t)) = \frac{1}{2}kq^2 - \lambda(t)q \tag{2-54}$$

其中 k 代表了谐振子势的强度，$\lambda(t)$ 是外力。将上式 (2-54) 代入式 (2-52) 就得到了辅助势的形式

$$U_1(q,t) = -\frac{\gamma\dot{\lambda}(t)}{k}q \tag{2-55}$$

再来看一个例子：依赖于时间的谐振子势场中的布朗粒子，势场为

$$U_0(q,\lambda(t)) = \frac{q^2}{2\lambda(t)^2} \tag{2-56}$$

同样的，根据式 (2-52) 可得辅助势为

$$U_1(q,t) = -\frac{\gamma\dot{\lambda}(t)}{2\lambda(t)}q^2 \tag{2-57}$$

式 (2-57) 和 Martínez 等人得到的结果[25] 是等价的。并且，他们的结果意味着对于势场 $U_0(q,\lambda(t)) = q^n/2\lambda(t)^n \quad (n = 2,4,6\cdots)$ 都可以找到辅助势的解析解 $U_1(q,t) = -\gamma\dot{\lambda}q^2/(2\lambda)$。除此之外，也可以找到另一类势场 $U_0(q,\lambda(t)) = u(q-\lambda(t))$ 的辅助势[9]，这是一个随时间平移的势场，相应的辅助势为 $U_1(q,t) = -\gamma\dot{\lambda}q$。

2.3.3 等温捷径应用于欠阻尼布朗粒子

在欠阻尼情况下，布朗粒子的惯性的影响不能忽略，我们假设辅助势 U_1 是粒子的坐标 q 和动能 p 的函数①。则总哈密顿量为

$$H(q,p,t) = H_0(q,p,\lambda(t)) + U_1(q,p,t) \tag{2-58}$$

其中 $H_0(q,p,\lambda(t)) = p^2/2 + U_0(q,\lambda(t))$。②但是通常的福克-普朗克-克拉马斯方程只能描述势场不依赖于动量 p 时分布函数 $\rho(q,p,t)$ 的时间演化。通过刘维尔方程，李耿[9] 得到了势能含有动量 p 的福克-普朗克-克拉马斯方程如下

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla\cdot\boldsymbol{J} = 0 \tag{2-59}$$

① 严格说来，这个时候 $U_1(q,p)$ 应该叫做辅助哈密顿量。

② 为了简便，令 $m=1$，或者做变换 $p = \frac{p}{\sqrt{m}}$

其中

$$\boldsymbol{J} \equiv \rho\left(p+\frac{\partial U}{\partial p}\right)\hat{\boldsymbol{q}}-\rho\left(\gamma p+\frac{\partial U}{\partial q}+\frac{\partial U}{\partial p}+\frac{\gamma}{\rho\beta}\frac{\partial \rho}{\partial p}\right)\hat{\boldsymbol{p}} \tag{2-60}$$

注意到，我们令 $U \equiv U_0 + U_1$，算符 $\nabla \equiv \hat{\boldsymbol{q}}\partial/\partial x + \hat{\boldsymbol{p}}\partial/\partial p$，其中 $\hat{\boldsymbol{q}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{p}}$ 是单位方向向量。原系统瞬时平衡态的分布函数为

$$\rho(x,p,t)=\rho_{\mathrm{ieq}}(x,p,\lambda(t)) \equiv \mathrm{e}^{\beta[F(\lambda(t))-H_0(x,p,\lambda(t))]} \tag{2-61}$$

其中 $F(\lambda) \equiv -\beta^{-1}\ln\left[\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}q\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}p e^{-\beta H_0(q,p,\lambda)}\right]$ 同理，将上式 (2-61) 代入方程 (2-59)，得到

$$\frac{\gamma}{\beta}\frac{\partial^2 U_1}{\partial p^2}-\gamma p\frac{\partial U_1}{\partial p}+\frac{\partial U_0}{\partial q}\frac{\partial U_1}{\partial p}-p\frac{\partial U_1}{\partial q}=\left(\frac{dF}{d\lambda}-\frac{\partial U_0}{\partial \lambda}\right)\dot{\lambda} \tag{2-62}$$

假设 $U_1(q,p,t)=\dot{\lambda}(t)f(q,p,\lambda(t))$，可以得到关于 f 的偏微分方程

$$\frac{\gamma}{\beta}\frac{\partial^2 f}{\partial p^2}-\gamma p\frac{\partial f}{\partial p}+\frac{\partial U_0}{\partial q}\frac{\partial f}{\partial p}-p\frac{\partial f}{\partial q}=\frac{dF}{d\lambda}-\frac{\partial U_0}{\partial \lambda} \tag{2-63}$$

不同于欠阻尼的情况，除了一些特殊情况，我们无法为上面这个方程 (2-63) 找到解析解。

和欠阻尼的情况一样，依然考虑两个特殊的势场 (2-54) 和 (2-56)。可以求得相应的辅助势为

$$U_1(q,p,t)=\frac{\dot{\lambda}(t)}{k}(p-\gamma q) \tag{2-64}$$

和

$$U_1(q,p,t)=-\frac{\dot{\lambda}(t)}{2\gamma\lambda(t)}\left[(p-\gamma q)^2+q^2/\lambda(t)^2\right] \tag{2-65}$$

类似于过阻尼的情形，在欠阻尼的情形下我们也可以为两类势场的辅助势找到解析解[9]，势场 $U_0(q,\lambda(t)) = q^n/2\lambda(t)^n \quad (n=2,4,6\cdots)$，$U_0(q,\lambda(t))=u(q-\lambda(t))$ 的辅助势分别为 $U_1(q,p,t)=-\dot{\lambda}\left[(p-\gamma q)^2+q^n/\lambda(t)^n\right]/2\gamma\lambda,\ U_1(q,p,t)=\dot{\lambda}(p-\gamma q)$。

由 Le Cunuder 和他的合作者[26] 所做的实验说明了辅助势 (2-64) 是能够在实验上实现的, 而辅助势 (2-65) 里的交叉项 qp 很类似于绝热捷径中的反绝热哈密顿量[15,30-31]。对于一大类由绝热捷径控制的量子多体系统，del Campo 提出了一种可能的实验方案来实现交叉项[31]。这种方案不需要知道微观系统的详细信息，通过适当的**正则变换**，他得到了在另一个表象，在这个表象下没有交叉项。这个办法为我们实现辅助势 (2-65) 提供了思路。

第 3 章　绝热捷径与等温捷径构成的类卡诺循环热机

3.1　布朗粒子的能量学

在正式开始讨论我们构建的热机之前，为了方便讨论热机的效率、熵变等问题，让我们先花一点时间讨论布朗粒子的能量学。

3.1.1　过阻尼布朗粒子的能量学

李耿博士毕业论文，第一章随机能量学可作为参考

考虑一个和温度为 T 的热浴接触的一维布朗粒子。它被施加一个依赖于时间的外势 $U(q,p,t)=U_0(q,\lambda(t))+U_1(q,t)$，其中考虑到了在绝热捷径和等温捷径中我们施加的辅助势 U_1。在过阻尼情况下，粒子的惯性的影响可以忽略，哈密顿量为

$$H=U_0(q,\lambda(t))+U_1(q,p,t) \tag{3-1}$$

哈密顿量的全微分为

$$\mathrm{d}H=\left(\dot{q}\frac{\partial U_0}{\partial q}+\dot{q}\frac{\partial U_1}{\partial q}\right)\mathrm{d}t+\left(\dot{\lambda}\frac{\partial U_0}{\partial \lambda}+\frac{\partial U_1}{\partial t}\right)\mathrm{d}t \tag{3-2}$$

这提示我们定义沿着相轨迹 $(q(t),p(t))$ 的能量差[8]

$$\Delta e\equiv H\left(t_f\right)-H\left(t_i\right), \tag{3-3}$$

输入功

$$w\equiv\int_{t_i}^{t_f}\mathrm{d}t\left(\dot{\lambda}\frac{\partial U_0}{\partial \lambda}+\frac{\partial U_1}{\partial t}\right) \tag{3-4}$$

这也与传统的随机热力学对轨道功的定义相符合。[28,32-33]。还有吸收的热量

$$q\equiv\int_{t_i}^{t_f}\mathrm{d}t\dot{q}\frac{\partial U}{\partial q}. \tag{3-5}$$

相轨连接了初时刻 t_i 对应的相点 (q_i,p_i) 和末时刻 t_f 对应的相点 (q_f,p_f)。显然，对于每条相轨有

$$\Delta e=w+q \tag{3-6}$$

而系统的分布函数 $\rho(q,p,t)$ 由的福克-普朗克-克拉马斯方程 (2-46) 决定, 在知道了 $\rho(q,p,t)$ 之后就可以计算以上式子 (3-4)-(3-6) 的系综平均，这和文献[34-36] 的步骤是类似

的。得到能量差和输入功的系综平均为

$$\Delta E \equiv \langle \Delta e \rangle = \int \mathrm{d}q (H\rho) \Big|_{t_i}^{t_f}, \tag{3-7}$$

和

$$W \equiv \langle w \rangle = \int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t \int \mathrm{d}q \left[\rho \left(\dot{\lambda} \frac{\partial U_0}{\partial \lambda} + \frac{\partial U_1}{\partial t} \right) \right]. \tag{3-8}$$

对于吸收的热的系综平均，由于存在 $\dot{q}$, 我们不好直接积分，需要做进一步的推导。系综平均为

$$Q = \int_{t_i}^{t_f} \left\langle \dot{q} \frac{\partial U}{\partial q} \right\rangle \mathrm{d}t \tag{3-9}$$

现在分两步对上式 (3-9) 进行平均。

第一步，对系综中在 t 时刻经过 q 的轨道进行平均（不懂至以下），得到

$$\langle \dot{x} \mid x, p, t \rangle = \frac{J}{\rho} \tag{3-10}$$

其中 J 是式 (2-47) 所定义的流。

第二步，利用分布函数 $\rho(q, p, t)$ 对所有的 q 和 p 进行系综平均。于是，系统与热浴的热交换为

$$\begin{aligned} Q &= \int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t \int \mathrm{d}q \left(J \frac{\partial U}{\partial q} \right) \\ &= \int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t \int \mathrm{d}q \left[-\frac{1}{\gamma} \frac{\partial U}{\partial q} \left(\frac{\partial U}{\partial q} \rho + \frac{1}{\beta} \frac{\partial \rho}{\partial q} \right) \right] \end{aligned} \tag{3-11}$$

3.1.2 欠阻尼布朗粒子的能量学

考虑一个和温度为 T 的热浴接触的一维布朗粒子。它被施加一个依赖于时间的外势 $U(q, p, t) = U_0(q, \lambda(t)) + U_1(q, p, t)$，其中考虑到了在绝热捷径和等温捷径中我们施加的辅助势包含动量 p。在欠阻尼情况下，粒子的惯性的影响不能忽略，哈密顿量为

$$H = \frac{p^2}{2} + U_0(q, \lambda(t)) + U_1(q, p, t) \tag{3-12}$$

哈密顿量的全微分为

$$\mathrm{d}H = \left(\dot{p} p + \dot{q} \frac{\partial U_0}{\partial q} + \dot{p} \frac{\partial U_1}{\partial p} + \dot{q} \frac{\partial U_1}{\partial q} \right) \mathrm{d}t + \left(\dot{\lambda} \frac{\partial U_0}{\partial \lambda} + \frac{\partial U_1}{\partial t} \right) \mathrm{d}t \tag{3-13}$$

这提示我们定义沿着相轨迹 $(q(t), p(t))$ 的能量差[8]

$$\Delta e \equiv H\left(t_f\right) - H\left(t_i\right), \tag{3-14}$$

输入功

$$w \equiv \int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t \left(\dot{\lambda}\frac{\partial U_0}{\partial \lambda} + \frac{\partial U_1}{\partial t}\right) \tag{3-15}$$

这也与传统的随机热力学对轨道功的定义相符合。[28,32-33]。还有吸收的热量

$$q \equiv \int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t \left(\dot{p}p + \dot{q}\frac{\partial U}{\partial q} + \dot{p}\frac{\partial U}{\partial p}\right). \tag{3-16}$$

相轨连接了初时刻 t_i 对应的相点 (q_i, p_i) 和末时刻 t_f 对应的相点 (q_f, p_f)。显然，对于每条相轨有

$$\Delta e = w + q \tag{3-17}$$

而系统的分布函数 $\rho(q,p,t)$ 由推广的福克-普朗克-克拉马斯方程 (2-59) 决定。在知道了 $\rho(q,p,t)$ 之后就可以计算以上式子 (3-15)-(3-17) 的系综平均，这和文献[34-36] 的步骤是类似的。得到能量差和输入功的系综平均为

$$\Delta E \equiv \langle \Delta e \rangle = \int \mathrm{d}q \int \mathrm{d}p (H\rho)\Big|_{t_i}^{t_f}, \tag{3-18}$$

和

$$W \equiv \langle w \rangle = \int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t \int \mathrm{d}q \int \mathrm{d}p \left[\rho\left(\dot{\lambda}\frac{\partial U_0}{\partial \lambda} + \frac{\partial U_1}{\partial t}\right)\right]. \tag{3-19}$$

对于吸收的热的系综平均，由于存在 $\dot{q}$ 和 $\dot{p}$ 我们不好直接积分，需要做进一步的推导。系综平均为

$$Q = \int_{t_i}^{t_f} \langle (\dot{x}\hat{\mathbf{x}} + \dot{p}\hat{\mathbf{p}}) \cdot \nabla H \rangle \mathrm{d}t \tag{3-20}$$

为了方便，上式 (3-22) 我们用了 $(\dot{x}\hat{\mathbf{x}} + \dot{p}\hat{\mathbf{p}}) \cdot \nabla H = \dot{p}p + \dot{q}\frac{\partial U}{\partial q} + \dot{p}\frac{\partial U}{\partial p}$。现在分两步对上式 (3-20) 进行平均。

第一步，对系综中在 t 时刻经过 x 且动量为 p 的轨道进行平均（不懂至以下），得到

$$\langle \dot{x} \mid x, p, t \rangle = \frac{J_x}{\rho}, \quad \langle \dot{p} \mid x, p, t \rangle = \frac{J_p}{\rho} \tag{3-21}$$

其中 J_x，J_P 代表式 (2-59) 所定义的流矢量 J 的 q 分量和 p 分量。

第二步，利用分布函数 $\rho(q,p,t)$ 对所有的 q 和 p 进行系综平均。于是，系统与热浴的热交换为

$$Q = \int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t \int \mathrm{d}q \int \mathrm{d}p (\boldsymbol{J} \cdot \nabla H) \tag{3-22}$$

再将流矢量 J 的定义代入上式 (3-22)，不难得到

$$Q = -\int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t \int \mathrm{d}q \int \mathrm{d}p \left[\gamma\rho\left(p + \frac{\partial U}{\partial p}\right)\left(p + \frac{\partial U}{\partial p} + \frac{1}{\beta\rho}\frac{\partial \rho}{\partial p}\right)\right] \tag{3-23}$$

3.2 类卡诺循环热机模型

考虑一个由绝热捷径与等温捷径构成的类卡诺循环热机，它通过由一个依赖于时间的谐振子势 $U_0(q,\lambda(t)) = q^2/2\lambda(t)^2$，来驱动布朗粒子对外做功。

在绝热捷径中，由于系统不与任何热浴接触，故没有热交换，$Q=0$, $\Delta E = W$。也没有过阻尼的情况，即惯性的影响不能忽略。由于在绝热捷径中，系统的初末状态依然是正则平衡态。初末的分布函数分别为式 (2-36) 和式 (2-38)，所以，我们依然可以用式 (3-18) 来计算能量差，于是

$$\begin{aligned} W &= \Delta E \\ &= \int \mathrm{d}q \int \mathrm{d}p \left(\frac{1}{2}p^2 + \frac{1}{2\lambda^2}q^2\right)\rho\bigg|_{t_i}^{t_f} \\ &= \beta_{t_f}^{-1} - \beta_{t_i}^{-1} \end{aligned} \tag{3-24}$$

在等温捷径中，由于系统与热浴接触，可以分过阻尼和欠阻尼两种情况进行讨论。

3.2.1 过阻尼布朗粒子构成的类卡诺循环热机

利用式 (3-7)， (3-8)， (3-11) 可以计算过阻尼布朗粒子的在等温捷径过程中的能量差 ΔE、输入功 W、吸收热 Q。注意到根据式 (2-57)，$U = U_0 + U_1 = q^2/2\lambda(t)^2 - \gamma\dot{\lambda}(t)q^2/2\lambda(t)$，又根据 (2-48) 的假设，$\rho(q,t) = \mathrm{e}^{\beta\left[F(\lambda(t)) - q^2/2\lambda(t)^2\right]}$, $F(\lambda) \equiv -\beta^{-1}\ln\left[\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-\beta q^2/2\lambda(t)^2}\mathrm{d}q\right]$。于是不难得到，能量差（似乎可以根据辅助势满足的微风方程直接计算，省去中间步骤，可以考虑）

$$\begin{aligned} \Delta E &= \int \mathrm{d}q \left[\rho\left(\frac{1}{2\lambda^2}q^2 - \frac{\gamma\dot{\lambda}}{2\lambda}q^2\right)\right]\bigg|_{t_i}^{t_f} \\ &= \left(\frac{1}{2\lambda^2} - \frac{\gamma\dot{\lambda}}{2\lambda}\right)\int \rho q^2 \mathrm{d}q\bigg|_{t_i}^{t_f} \\ &= \left(\frac{1}{2\lambda^2} - \frac{\gamma\dot{\lambda}}{2\lambda}\right)\sqrt{\frac{\beta}{2\pi}}\frac{1}{\lambda}\int \mathrm{e}^{-\frac{\beta}{2\lambda^2}q^2}q^2\mathrm{d}q\bigg|_{t_i}^{t_f} \\ &= \left(\frac{1}{2\lambda^2} - \frac{\gamma\dot{\lambda}}{2\lambda}\right)\sqrt{\frac{\beta}{2\pi}}\frac{1}{\lambda}\frac{\sqrt{\pi}}{2}\left(\sqrt{\frac{\beta}{2}}\frac{1}{\lambda}\right)^{-3}\bigg|_{t_i}^{t_f} \\ &= \left(\frac{1}{2\lambda^2} - \frac{\gamma\dot{\lambda}}{2\lambda}\right)\frac{\lambda^2}{\beta}\bigg|_{t_i}^{t_f} \\ &= 0 \end{aligned} \tag{3-25}$$

其中最后一步用到了对 $\lambda(t)$ 的限制条件 (2-53)。注意到，和经典中理想气体的等温过程相似，粒子的能量没有变化。接下来计算输入功

$$
\begin{aligned}
W &= \int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t \int \mathrm{d}q \left[\rho\left(-\frac{\dot{\lambda}}{\lambda^3}q^2 - \frac{\gamma\dot{\lambda}}{2\lambda}q^2 + \frac{\gamma\dot{\lambda}^2}{2\lambda^2}q^2\right)\right] \\
&= \int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t \left(-\frac{\dot{\lambda}}{\lambda^3} - \frac{\gamma\dot{\lambda}}{2\lambda} + \frac{\gamma\dot{\lambda}^2}{2\lambda^2}\right) \int \rho q^2 \mathrm{d}q \\
&= \int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t \left(-\frac{\dot{\lambda}}{\lambda^3} - \frac{\gamma\dot{\lambda}}{2\lambda} + \frac{\gamma\dot{\lambda}^2}{2\lambda^2}\right) \frac{\lambda^2}{\beta} \\
&= \beta^{-1} \int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t \left(-\frac{\dot{\lambda}}{\lambda} - \frac{\gamma\dot{\lambda}\lambda}{2} + \frac{\gamma\dot{\lambda}^2}{2}\right)
\end{aligned}
\tag{3-26}
$$

再来看看吸收的热量

$$
\begin{aligned}
Q &= \int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t \int \mathrm{d}q \left[-\frac{1}{\gamma}\left(\frac{1}{\lambda^2}q - \frac{\gamma\dot{\lambda}}{\lambda}q\right)\left(\left(\frac{1}{\lambda^2}q - \frac{\gamma\dot{\lambda}}{\lambda}q\right)\rho - \frac{1}{\lambda^2}q\rho\right)\right] \\
&= \int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t \frac{1}{\gamma}\left(\frac{1}{\lambda^2} - \frac{\gamma\dot{\lambda}}{\lambda}\right)\frac{\gamma\dot{\lambda}}{\lambda} \int \rho q^2 \mathrm{d}q \\
&= \int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t \frac{1}{\gamma}\left(\frac{1}{\lambda^2} - \frac{\gamma\dot{\lambda}}{\lambda}\right)\frac{\gamma\dot{\lambda}}{\lambda}\frac{\lambda^2}{\beta} \\
&= \beta^{-1} \int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t \left(\frac{\dot{\lambda}}{\lambda} - \gamma\dot{\lambda}^2\right) \\
&= \beta^{-1} \ln\frac{\lambda_f}{\lambda_i} - \beta^{-1}\gamma \int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t\dot{\lambda}^2
\end{aligned}
\tag{3-27}
$$

不难验证有热平衡关系 $\Delta E = W + Q$，接下来我们分析过阻尼布朗粒子构成的类卡诺热机的各个过程。

如图3.1所示，这个循环由如下四个过程组成。点 1, 2, 3, 4 代表了系统的四个状态，这

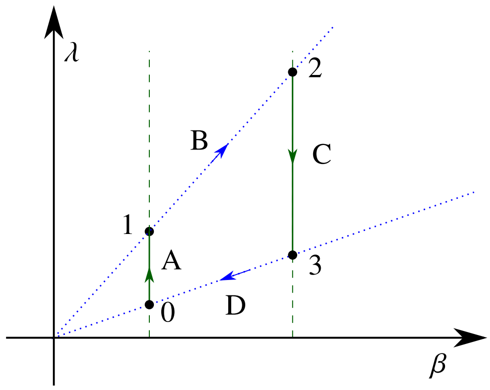

图 3.1　热力学循环过程。点线对应于式 (2-41)，竖直虚线对应于等温。0, 1, 2, 3 代表循环中的四个状态，A, B, C, D 代表四个过程。各个过程所用的时间分别为 t_1，t_2，t_3，t_4

四个状态对应的参数如下表3.1所示。

A. 等温膨胀

表 3.1　循环过程中各个状态所对应的参数

状态	时间 t	（等效）温度 β^{-1}	势能参数 λ
0	$0(t_1+t_2+t_3+t_4)$	β_{h}^{-1}	λ_0
1	t_1	β_{h}^{-1}	λ_1
2	t_1+t_2	β_{c}^{-1}	λ_2
3	$t_1+t_2+t_3$	β_{c}^{-1}	λ_3

在上图3.1中，由实线连接的 $0\to1$ 代表了由等温捷径实现的“等温膨胀”过程。正如在第2章第2.2.2节所阐释的，参数 λ 表征了系统的空间尺度，而该过程中参数 λ 变大了，故把 A 过程称为等温膨胀过程。在 A 过程中，系统与高温热源 β_{h}^{-1} 接触。可以由式 (3-27) 计算 A 过程系统吸收的能量，又鉴于在这个过程中由式 (3-25) 知有 $\Delta E_{\mathrm{A}}=W_{\mathrm{A}}+Q_{\mathrm{A}}=0$，所以

$$\Delta E_{\mathrm{A}}=0,\ -W_{\mathrm{A}}=Q_{\mathrm{A}}=\beta_{\mathrm{h}}^{-1}\ln\frac{\lambda_1}{\lambda_0}-\beta_{\mathrm{h}}^{-1}C_{\mathrm{h}}[\lambda(\tau)\lambda_h]\frac{1}{t_1} \tag{3-28}$$

其中 $C_{\mathrm{h}}[\lambda_{\mathrm{h}}(\tau)]\equiv\gamma\int_0^1\mathrm{d}\tau\left(\frac{\mathrm{d}\lambda_h}{\mathrm{d}\tau}\right)^2$，$\lambda_h(\tau)\equiv\lambda(t_1\tau)$

B. 绝热膨胀

图3.1中由虚线连接的 $1\to2$ 就是由绝热捷径所联系的“绝热膨胀”过程，膨胀一词也同样基于参数 λ 的增长。需要注意的是，在这个过程中我们只知道初末状态 1, 2 的等效温度 β_1,β_2，中间过程的等效温度我们并不清楚，这也是我们用虚线作图的原因。好在，中间的过程的等效温度的知道与否并不影响我们接下来的讨论。根据绝热捷径过程中的关系式 (2-41)，有

$$\frac{\lambda_2}{\beta_{\mathrm{c}}}=\frac{\lambda_1}{\beta_{\mathrm{h}}} \tag{3-29}$$

绝热捷径 B 过程中的能量差 ΔE_{B} 吸收热 Q_{B}，输入功 W_{B} 正如本章开始所讨论的那样，

$$W_{\mathrm{B}}=\Delta E_{\mathrm{B}}=(\beta_{\mathrm{c}}^{-1}-\beta_{\mathrm{h}}^{-1}),\ Q_{\mathrm{B}}=0 \tag{3-30}$$

C. 等温压缩

在上图3.1中，由实线连接的 $2\to3$ 代表了由等温捷径实现的“等温压缩”过程。在 A 过程中，系统与低温热源 β_{c}^{-1} 接触。和 A 过程的讨论类似，不难得到

$$\Delta E_{\mathrm{C}}=0,\ -W_{\mathrm{C}}=Q_{\mathrm{C}}=\beta_{\mathrm{c}}^{-1}\ln\frac{\lambda_3}{\lambda_2}-\beta_{\mathrm{c}}^{-1}C_{\mathrm{c}}[\lambda_{\mathrm{c}}(\tau)]\frac{1}{t_3} \tag{3-31}$$

其中 $C_{\mathrm{c}}[\lambda_{\mathrm{c}}(\tau)]\equiv\gamma\int_0^1\mathrm{d}\tau\left(\frac{\mathrm{d}\lambda_{\mathrm{c}}}{\mathrm{d}\tau}\right)^2$，$\lambda_{\mathrm{c}}(\tau)\equiv\lambda(t_3\tau+t_2+t_1)$

D. 绝热压缩

图3.1中由虚线连接的 $3 \to 0$ 就是由绝热捷径所联系的“绝热压缩”过程。同样，根据(2-41)，有

$$\frac{\lambda_3}{\beta_c} = \frac{\lambda_0}{\beta_h} \tag{3-32}$$

而且和 B 过程类似，不难得到

$$W_D = \Delta E_D = (\beta_h^{-1} - \beta_c^{-1}),\ Q_D = 0 \tag{3-33}$$

我们将各个过程的能量变化、输入功和吸收热总结如下表3.2

表 3.2　循环过程中的能量变化

过程	能量差	输入功	吸收热
A	0	$-\beta_h^{-1}\ln\frac{\lambda_1}{\lambda_0} + \beta_h^{-1}C_h\frac{1}{t_1}$	$\beta_h^{-1}\ln\frac{\lambda_1}{\lambda_0} - \beta_h^{-1}C_h\frac{1}{t_1}$
B	$(\beta_c^{-1} - \beta_h^{-1})$	$(\beta_c^{-1} - \beta_h^{-1})$	0
C	0	$-\beta_c^{-1}\ln\frac{\lambda_3}{\lambda_2} + \beta_c^{-1}C_c\frac{1}{t_3}$	$\beta_c^{-1}\ln\frac{\lambda_3}{\lambda_2} - \beta_c^{-1}C_c\frac{1}{t_3}$
D	$(\beta_h^{-1} - \beta_c^{-1})$	$(\beta_h^{-1} - \beta_c^{-1})$	0

在分析完了整个循环的各个过程之后，来分析这个类卡诺循环热机的效率与功率。先看效率 η，整个循环只有在 A 过程中从高温热源吸热 Q_A，而在 C 过程中发热 Q_C 给低温热源。于是效率为

$$\begin{aligned}\eta &= \frac{Q_A + Q_C}{Q_A} \\ &= 1 - \frac{\beta_c^{-1}\ln\frac{\lambda_1}{\lambda_0} + \beta_c^{-1}C_c\frac{1}{t_3}}{\beta_h^{-1}\ln\frac{\lambda_1}{\lambda_0} - \beta_h^{-1}C_h\frac{1}{t_1}}\end{aligned} \tag{3-34}$$

其中考虑到由式 (3-29) 和式 (3-32) 得 $\ln\frac{\lambda_3}{\lambda_2} = -\ln\frac{\lambda_1}{\lambda_0}$ 现在考虑功率 P，由于一个循环的做功和绝热过程无关，但功率却与绝热过程的时间成反比。好在我们对绝热过程的时间并没有限制，原则上这个时间可以任意短。所以以下的讨论中只考虑 $t_2 + t_4 \ll t_1 + t_3$ 时的情况，有

$$\begin{aligned}P &= -\frac{W}{t_1 + t_3} \\ &= \frac{Q_A + Q_C}{t_1 + t_3} \\ &= \frac{\left(\beta_h^{-1} - \beta_c^{-1}\right)\ln\frac{\lambda_1}{\lambda_0} - \left(\beta_h^{-1}C_h\frac{1}{t_1} + \beta_c^{-1}C_c\frac{1}{t_3}\right)}{t_1 + t_3}\end{aligned} \tag{3-35}$$

现在考虑使得功率 P 最大时的效率 η，可以通过优化 t_1，t_3 使得 P 最大，只需使

$\frac{\partial P}{\partial t_1} = \frac{\partial P}{\partial t_3} = 0$ 即可，解得

$$\begin{cases} \dfrac{1}{t_1} = \dfrac{\left(\beta_{\mathrm{h}}^{-1} - \beta_{\mathrm{c}}^{-1}\right) \ln \frac{\lambda_1}{\lambda_0}}{2\left(\beta_{\mathrm{h}}^{-1} C_{\mathrm{h}} + \sqrt{\beta_{\mathrm{c}}^{-1}\beta_{\mathrm{h}}^{-1} C_{\mathrm{c}} C_{\mathrm{h}}}\right)} \\ \dfrac{1}{t_3} = \dfrac{\left(\beta_{\mathrm{h}}^{-1} - \beta_{\mathrm{c}}^{-1}\right) \ln \frac{\lambda_1}{\lambda_0}}{2\left(\beta_{\mathrm{c}}^{-1} C_{\mathrm{c}} + \sqrt{\beta_{\mathrm{c}}^{-1}\beta_{\mathrm{h}}^{-1} C_{\mathrm{c}} C_{\mathrm{h}}}\right)} \end{cases} \tag{3-36}$$

于是，效率可以写为

$$\begin{aligned} \eta &= 1 - \frac{\beta_{\mathrm{c}}^{-1} \ln \frac{\lambda_1}{\lambda_0} + \beta_{\mathrm{c}}^{-1} C_{\mathrm{c}} \frac{\left(\beta_{\mathrm{h}}^{-1} - \beta_{\mathrm{c}}^{-1}\right) \ln \frac{\lambda_1}{\lambda_0}}{2\left(\beta_{\mathrm{c}}^{-1} C_{\mathrm{c}} + \sqrt{\beta_{\mathrm{c}}^{-1}\beta_{\mathrm{h}}^{-1} C_{\mathrm{c}} C_{\mathrm{h}}}\right)}}{\beta_{\mathrm{h}}^{-1} \ln \frac{\lambda_1}{\lambda_0} - \beta_{\mathrm{h}}^{-1} C_{\mathrm{h}} \frac{\left(\beta_{\mathrm{h}}^{-1} - \beta_{\mathrm{c}}^{-1}\right) \ln \frac{\lambda_1}{\lambda_0}}{2\left(\beta_{\mathrm{h}}^{-1} C_{\mathrm{h}} + \sqrt{\beta_{\mathrm{c}}^{-1}\beta_{\mathrm{h}}^{-1} C_{\mathrm{c}} C_{\mathrm{h}}}\right)}} \\ &= 1 - \frac{\beta_{\mathrm{c}}^{-1} + \beta_{\mathrm{c}}^{-1} C_{\mathrm{c}} \frac{\left(\beta_{\mathrm{h}}^{-1} - \beta_{\mathrm{c}}^{-1}\right)}{2\left(\beta_{\mathrm{c}}^{-1} C_{\mathrm{c}} + \sqrt{\beta_{\mathrm{c}}^{-1}\beta_{\mathrm{h}}^{-1} C_{\mathrm{c}} C_{\mathrm{h}}}\right)}}{\beta_{\mathrm{h}}^{-1} - \beta_{\mathrm{h}}^{-1} C_{\mathrm{h}} \frac{\left(\beta_{\mathrm{h}}^{-1} - \beta_{\mathrm{c}}^{-1}\right)}{2\left(\beta_{\mathrm{h}}^{-1} C_{\mathrm{h}} + \sqrt{\beta_{\mathrm{c}}^{-1}\beta_{\mathrm{h}}^{-1} C_{\mathrm{c}} C_{\mathrm{h}}}\right)}} \\ &= \frac{\eta_{\mathrm{c}}\left[\sqrt{\chi(1-\eta_{\mathrm{c}})} + 1\right]}{2 - \eta_{\mathrm{c}} + 2\sqrt{\chi\,(1-\eta_{\mathrm{c}})}} \end{aligned} \tag{3-37}$$

其中 $\eta_{\mathrm{c}} \equiv 1 - \frac{\beta_{\mathrm{c}}^{-1}}{\beta_{\mathrm{h}}^{-1}}$ 是卡诺效率，而 $\chi \equiv \frac{C_{\mathrm{c}}[\lambda_{\mathrm{c}}(\tau)]}{C_{\mathrm{h}}[\lambda_{\mathrm{h}}(\tau)]}$。

现在唯一的问题就是如何把 χ 用 η_{c} 表示出来，这一点可以这么考虑。对于上式 (3-35) 分子的第二项，除去一个负号外始终是大于零的。既然我们关心功率最大时的效率，就应当考虑选取适当的 $\lambda_{\mathrm{c}}(\tau)$, $\lambda_{\mathrm{h}}(\tau)$ 的形式，使得关于它们的泛函 $C_{\mathrm{c}}[\lambda_{\mathrm{c}}(\tau)]$, $C_{\mathrm{h}}[\lambda_{\mathrm{h}}(\tau)]$ 都取最小值。这一点可以使用变分的方法求得，分别得到

$$\frac{\mathrm{d}\lambda_c}{\mathrm{d}\tau} = 0, \quad \frac{\mathrm{d}\lambda_h}{\mathrm{d}\tau} = 0 \tag{3-38}$$

可见函数 $\lambda_{\mathrm{c}}(\tau)$, $\lambda_{\mathrm{h}}(\tau)$ 是线性函数，于是容易知道

$$\begin{aligned} \chi &= \frac{(\lambda_3 - \lambda_2)^2}{(\lambda_1 - \lambda_0)^2} \\ &= (1 - \eta_{\mathrm{c}})^{-2} \end{aligned} \tag{3-39}$$

只需将上式 (3-39) 带入到式 (3-37)，我们最终得到了过阻尼类卡诺热机在最大功率时的效率

$$\eta = \frac{\eta_{\mathrm{c}}\left(1 + \sqrt{1-\eta_{\mathrm{c}}}\right)}{(2-\eta_{\mathrm{c}})\sqrt{1-\eta_{\mathrm{c}}} + 2} \tag{3-40}$$

在 $\eta_{\mathrm{c}} \to 0$ 的情况下，可以将 $\eta(\eta_{\mathrm{c}})$ 按 η_{c} 展开，得到

$$\eta = \frac{\eta_{\mathrm{c}}}{2} + \frac{\eta_{\mathrm{c}}^2}{8} - \frac{3\eta_{\mathrm{c}}^4}{128} + O\left(\eta_{\mathrm{c}}^5\right) \tag{3-41}$$

可以看到，这符合热机最大功率时效率的二阶普适性。但这个热机的效率比起 Curzon 和 Ahlborn 构建的内可逆热机[2] 的效率 $\eta_{\mathrm{CA}} = 1 - \sqrt{1-\eta_{\mathrm{c}}} = \frac{\eta_{\mathrm{c}}}{2} + \frac{\eta_{\mathrm{c}}^2}{8} + \frac{6\eta_{\mathrm{c}}^3}{96} + O\left(\eta_{\mathrm{c}}^4\right)$ 要低。

3.2.2 欠阻尼布朗粒子构成的类卡诺循环热机

同样地，利用式 (3-18)，(3-19)，(3-22) 可以计算欠阻尼布朗粒子的在等温捷径过程中的能量差 ΔE、输入功 W、吸收热 Q。注意到根据式 (2-57)，

$$\begin{aligned} U &= U_0 + U_1 \\ &= \frac{q^2}{2\lambda(t)^2} - \frac{\dot{\lambda}(t)}{2\gamma\lambda(t)}\left[(p-\gamma q)^2 + q^2/\lambda(t)^2\right] \end{aligned} \tag{3-42}$$

又根据 (2-61) 的假设，$\rho(q,t) = \mathrm{e}^{\beta\left(F - \frac{p^2}{2} - \frac{q^2}{2\lambda^2}\right)}$ 其中，$F(\lambda) \equiv -\beta^{-1}\ln\int \mathrm{d}q \int \mathrm{d}p \mathrm{e}^{\beta\left(-\frac{p^2}{2} - \frac{q^2}{2\lambda^2}\right)}$ 。于是可以计算得到，能量差（似乎可以根据辅助势满足的微风方程直接计算，省去中间步骤，可以考虑）

$$\begin{aligned} \Delta E &= \int \mathrm{d}q \int \mathrm{d}p\rho\left(\frac{p^2}{2} + \frac{q^2}{2\lambda(t)^2} - \frac{\dot{\lambda}(t)}{2\gamma\lambda(t)}\left[(p-\gamma q)^2 + q^2/\lambda(t)^2\right]\right)\Bigg|_{t_i}^{t_f} \\ &= \left[1 - \frac{\dot{\lambda}}{2\gamma\lambda}\left(2+\gamma^2\lambda^2\right)\right]\beta^{-1}\Bigg|_{t_i}^{t_f} \\ &= 0 \end{aligned} \tag{3-43}$$

这个结果和过阻尼的情况下没有区别，为简单计，由于已知 $Q + W = \Delta E = 0$，不再计算输入功，直接计算吸收热

$$\begin{aligned} Q &= -\int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t \int \mathrm{d}q \int \mathrm{d}p \left[\gamma\rho\left(p + \frac{\partial U}{\partial p}\right)\left(p + \frac{\partial U}{\partial p} + \frac{1}{\beta\rho}\frac{\partial\rho}{\partial p}\right)\right] \\ &= \beta^{-1}\int_{t_i}^{t_f}\left(\frac{\dot{\lambda}}{\lambda} - \frac{1}{\gamma}\frac{\dot{\lambda}^2}{\lambda^2} - \gamma\dot{\lambda}^2\right) \end{aligned} \tag{3-44}$$

接下来的处理和上节3.2.1过阻尼情况类似，不再赘述。热机在最大功率时的效率 η 为

$$\eta = \frac{\eta_{\mathrm{c}}\left[\sqrt{\chi(1-\eta_{\mathrm{c}})} + 1\right]}{2 - \eta_{\mathrm{c}} + 2\sqrt{\chi\left(1-\eta_{\mathrm{c}}\right)}} \tag{3-45}$$

其中 $\eta_{\mathrm{c}} \equiv 1 - \frac{\beta_{\mathrm{c}}^{-1}}{\beta_{\mathrm{h}}^{-1}}$ 是卡诺效率，而 $\chi \equiv \frac{C_{\mathrm{c}}[\lambda_{\mathrm{c}}(\tau)]}{C_{\mathrm{h}}[\lambda_{\mathrm{h}}(\tau)]}$。这个形式和过阻尼的情形没有区别，因为二者的吸收热的表达式 (3-27) 和式 (3-44) 里积分式的第二项都含有 $\dot{\lambda}^2$ 项。对于欠阻尼情形而言，不同于过阻尼情形的是

$$C_{\mathrm{h}}[\lambda_{\mathrm{h}}(\tau)] \equiv \int_0^1 \mathrm{d}\tau\left[\frac{1}{\gamma\lambda_{\mathrm{h}}^2}\left(\frac{\mathrm{d}\lambda_{\mathrm{h}}}{\mathrm{d}\tau}\right)^2 + \gamma\left(\frac{\mathrm{d}\lambda_{\mathrm{h}}}{\mathrm{d}\tau}\right)^2\right], \ \lambda_{\mathrm{h}}(\tau) \equiv \lambda(t_1\tau) \tag{3-46}$$

$$C_{\mathrm{c}}[\lambda_{\mathrm{c}}(\tau)] \equiv \int_0^1 \mathrm{d}\tau\left[\frac{1}{\gamma\lambda_{\mathrm{c}}^2}\left(\frac{\mathrm{d}\lambda_{\mathrm{c}}}{\mathrm{d}\tau}\right)^2 + \gamma\left(\frac{\mathrm{d}\lambda_{\mathrm{c}}}{\mathrm{d}\tau}\right)^2\right], \ \lambda_{\mathrm{c}}(\tau) \equiv \lambda(t_3\tau + t_2 + t_1) \tag{3-47}$$

为了求出 χ 我们依然可以使用变分的方法，$\lambda_{\mathrm{h}}(\tau)$ 和 $\lambda_{\mathrm{h}}(\tau)$ 满足的微分方程都是一样的，以 $\lambda_{\mathrm{h}}(\tau)$ 为例，考虑到 $C_{\mathrm{h}}[\lambda_{\mathrm{h}}(\tau)]$ 的积分表达式里面不显含 τ，我们可以直接得到对应的**欧拉-拉格朗日方程**的首次积分[37]，即

$$\left(\frac{1}{\gamma\lambda_{\mathrm{h}}^{2}}+\gamma\right)\left(\frac{\mathrm{d}\lambda_{\mathrm{h}}}{\mathrm{d}\tau}\right)^{2}=C_{\mathrm{h}0} \tag{3-48}$$

其中 $C_{\mathrm{h}0}$ 是不依赖于 τ 的常数。非常有意思的是我们发现，上式 (3-48) 的左边恰好是式 (3-46) 里的积分项。那也就意味着

$$C_{\mathrm{h}}[\lambda_{\mathrm{h}}(\tau)]=C_{\mathrm{h}0} \tag{3-49}$$

现在考虑如何求 $C_{\mathrm{h}0}$，注意到由式 (3-48) 可得

$$\Rightarrow\quad \sqrt{\frac{1}{\gamma\lambda_{\mathrm{h}}^{2}}+\gamma}\,\mathrm{d}\lambda_{\mathrm{h}}=\sqrt{C_{\mathrm{h}0}}\,\mathrm{d}\tau \tag{3-50}$$

$$\Rightarrow\quad \int_{\lambda_0}^{\lambda_1}\mathrm{d}\lambda_{\mathrm{h}}\sqrt{\frac{1}{\gamma\lambda_{\mathrm{h}}^{2}}+\gamma}=\int_0^1\mathrm{d}\tau\sqrt{C_{\mathrm{h}0}} \tag{3-51}$$

$$\Rightarrow\quad C_{\mathrm{h}0}=\frac{1}{\gamma}\left[\left(\sqrt{\gamma^2\lambda_1^2+1}-\sqrt{\gamma^2\lambda_0^2+1}\right)-\ln\frac{\lambda_0\left(1+\sqrt{\gamma^2\lambda_1^2+1}\right)}{\lambda_1\left(1+\sqrt{\gamma^2\lambda_0^2+1}\right)}\right]^2 \tag{3-52}$$

考虑 $\gamma\lambda\ll 1$ 的特殊情况，忽略二阶小量，可以得到

$$C_{\mathrm{h}0}=\frac{1}{\gamma}\left(\ln\frac{\lambda_1}{\lambda_0}\right)^2 \tag{3-53}$$

同理可求得 $C_{\mathrm{c}0}$，于是不难得到

$$\begin{aligned}\chi&=\frac{C_{\mathrm{c}}[\lambda_{\mathrm{h}}(\tau)]}{C_{\mathrm{h}}[\lambda_{\mathrm{h}}(\tau)]}\\&=\frac{C_{\mathrm{c}0}}{C_{\mathrm{h}0}}\\&=1\end{aligned} \tag{3-54}$$

于是将上式 (3-54) 代入最大功率对应的效率的表达式 (3-45)，就得到了欠阻尼情形下，并且满足 $\gamma\lambda\ll 1$ 时，最大功率对应的效率

$$\eta=1-\sqrt{1-\eta_{\mathrm{c}}} \tag{3-55}$$

这正是 Curzon 和 Ahlborn 构建的内可逆热机[2] 的效率 η_{CA}

3.2.3 本章小结

3.3 类卡诺循环热机的功、熵、能量损失

3.4 与其他热机的比较

插图索引

表格索引

公式索引

参考文献

[1] 赵凯华, 罗蔚茵. 新概念物理教程：热学[M]. 北京: 高等教育出版社, 2005

[2] Curzon F L, Ahlborn B. Efficiency of a Carnot engine at maximum power output[J]. American Journal of Physics, 1975.

[3] Schmiedl T, Seifert U. Efficiency at maximum power: An analytically solvable model for stochastic heat engines[J]. EPL, 2008.

[4] Tu Z C. Efficiency at maximum power of Feynman's ratchet as a heat engine[J]. Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, 2008.

[5] Tu Z C. Abstract models for heat engines[J]. Frontiers of Physics, 2020, 16(3): 33202.

[6] Del Campo A, Goold J, Paternostro M. More bang for your buck: Super-adiabatic quantum engines[J]. Scientific Reports, 2014, 4: 1-6.

[7] Deng J, Wang Q H, Liu Z, et al. Boosting work characteristics and overall heat-engine performance via shortcuts to adiabaticity: Quantum and classical systems[J]. Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics, 2013, 88(6): 1-8.

[8] Tu Z C. Stochastic heat engine with the consideration of inertial effects and shortcuts to adiabaticity[J]. Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics, 2014, 89(5): 1-9.

[9] Li G, Quan H T, Tu Z C. Shortcuts to isothermality and nonequilibrium work relations[J]. Physical Review E, 2017, 96(1): 1-11.

[10] Schilpp P A. Albert einstein, autobiographical notes: a centennial edition.[J]. Albert Einstein, 1979: 31.

[11] Chen X, Ruschhaupt A, Schmidt S, et al. Fast optimal frictionless atom cooling in harmonic traps: Shortcut to adiabaticity[J]. Physical Review Letters, 2010, 104(6): 1-4.

[12] Demirplak M, Rice S A. Adiabatic population transfer with control fields[J]. Journal of Physical Chemistry A, 2003, 107(46): 9937-9945.

[13] Berry M V. Transitionless quantum driving[J]. Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, 2009, 42(36): 1-9.

[14] Griffiths D J, Schroeter D F. Introduction to Quantum Mechanics[M]. Cambridge University Press, 2018: 546-550

[15] Jarzynski C. Generating shortcuts to adiabaticity in quantum and classical dynamics[J]. Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics, 2013, 88(4): 1-5.

[16] 刘川. 理论力学[M]. 北京: 北京大学出版社, 2019

[17] Jarzynski C. Geometric phases and anholonomy for a class of chaotic classical systems[J]. Physical Review Letters, 1995, 74(10): 1732-1735.

[18] H. 戈德斯坦. 经典力学[M]. 第二版. 北京: 科学出版社, 1986: 480-483

[19] Muga J G, Chen X, Ibáez S, et al. Transitionless quantum drivings for the harmonic oscillator[J]. Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, 2010, 43(8).

[20] Tennyson J L, Cary J R, Escande D F. Change of the adiabatic invariant due to separatrix crossing[J]. Physical Review Letters, 1986, 56(20): 2117-2120.

[21] Cary J R, Escande D F, Tennyson J L. Adiabatic-invariant change due to separatrix crossing[J]. Physical Review A, 1986, 34(5): 4256-4275.

[22] Hannay J H. Accuracy loss of action invariance in adiabatic change of a one-freedom hamiltonian[J]. Journal of Physics A: Mathematical and General, 1986, 19(17): L1067-L1072.

[23] Miller M A, Reinhardt W P. Efficient free energy calculations by variationally optimized metric scaling: Concepts and applications to the volume dependence of cluster free energies and to solid-solid phase transitions[J]. Journal of Chemical Physics, 2000, 113(17): 7035-7046.

[24] Vaikuntanathan S, Jarzynski C. Escorted free energy simulations: Improving convergence by reducing dissipation[J]. Physical Review Letters, 2008, 100(19): 8-11.

[25] Martínez I A, Petrosyan A, Guéry-Odelin D, et al. Engineered swift equilibration of a Brownian particle [J]. Nature Physics, 2016, 12(9): 843-846.

[26] Le Cunuder A, Martínez I A, Petrosyan A, et al. Fast equilibrium switch of a micro mechanical oscillator [J/OL]. Applied Physics Letters, 2016, 109(11). http://dx.doi.org/10.1063/1.4962825.

[27] Seifert U. Stochastic thermodynamics, fluctuation theorems and molecular machines[J]. Reports on Progress in Physics, 2012, 75(12).

[28] Sekimoto K. Stochastic energetics: volume 799[M]. Berlin Heidelberg: Springer, 2010

[29] Gardiner C W. Handbook of Stochastic Methods for Physics, Chemistry and the Natural Sciences[M]. Third ed. Berlin Heidelberg: Springer, 2004

[30] Deffner S, Jarzynski C, del Campo A. Classical and quantum shortcuts to adiabaticity for scale-invariant driving[J]. Physical Review X, 2014, 4(2): 1-19.

[31] Del Campo A. Shortcuts to adiabaticity by counterdiabatic driving[J]. Physical Review Letters, 2013, 111 (10): 1-5.

[32] Jarzynski C. Nonequilibrium equality for free energy differences[J]. Physical Review Letters, 1997, 78 (14): 2690-2693.

[33] Sekimoto K. Kinetic characterization of heat bath and the energetics of thermal ratchet models[J/OL]. Journal of the Physical Society of Japan, 1997, 66(5): 1234-1237. https://doi.org/10.1143%2Fjpsj.66.1234.

[34] Seifert U. Entropy production along a stochastic trajectory and an integral fluctuation theorem[J]. Physical Review Letters, 2005, 95(4).

[35] Shizume K. Heat generation required by information erasure[J/OL]. Phys. Rev. E, 1995, 52: 3495-3499. https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.52.3495.

[36] Bizarro P S, Report B. Boltzmann ’ s H theorem for systems with frictional dissipation: volume 032102 [Z]. 2011: 1-4.

[37] 吴崇试. 数学物理方法[M]. 第二版. 北京: 北京大学出版社, 2003: 328-332

致　谢

衷心感谢导师 xxx 教授和物理系 xxx 副教授对本人的精心指导。他们的言传身教将使我终生受益。

在美国麻省理工学院化学系进行九个月的合作研究期间，承蒙 xxx 教授热心指导与帮助，不胜感激。感谢 xx 实验室主任 xx 教授，以及实验室全体老师和同学们的热情帮助和支持！本课题承蒙国家自然科学基金资助，特此致谢。

感谢 LaTeX 和 bnuThesis[?]，帮我节省了不少时间。

综合论文训练记录表

<table>
<tr><td>学生姓名</td><td></td><td>学号</td><td></td><td>班级</td><td></td></tr>
<tr><td>论文题目</td><td colspan="5"></td></tr>
<tr><td>主要内容以及进度安排</td><td colspan="5">指导教师签字：
考核组组长签字：
年 月 日</td></tr>
<tr><td>中期考核意见</td><td colspan="5">考核组组长签字：
年 月 日</td></tr>
</table>

指导教师评语	指导教师签字：__________ 年　　月　　日
评阅教师评语	评阅教师签字：__________ 年　　月　　日
答辩小组评语	答辩小组组长签字：__________ 年　　月　　日

总成绩：__________

教学负责人签字：__________

年　　月　　日