量子信息启发的量子统计和热力学若干问题研 究

孙昌璞

中国科学院理论物理研究所 北京,100190

全海涛

中国科学院理论物理研究所 北京,100190

董辉

中国科学院理论物理研究所 北京,100190

摘要

近年来,受量子信息科学发展的启发,量子统计力学/热力学相关的基本物理问题重新引起了人 们的关注,导致了一些新的热点研究方向。本文将首先介绍有关量子热力学的基本概念,如热力学 第一定律和一些基本热力学过程的量子力学表述,以及一些相关的最新进展,如Jarzynski等式。在 此基础上,我们准确阐述量子卡诺(Carnot)热机和量子奥托(Otto)热机中的热力学循环过程,并且比 较它们和经典热机循环的异同。接下来,基于一个比较真实的物理模型详细讨论了量子相干性以及 环境诱导的退相干对量子热机工作效率的影响。最后,我们还利用量子受控逻辑门,给出了一个包 含麦克斯韦(Maxwell)妖的量子热力学循环过程的实现方案,并探讨了在实验上演示麦克斯韦妖工作 过程和信息擦除过程的可能性。

量子信息启发的另一个热点方向是量子统计力学基础方面的问题,如广义正则热化原理和自旋 系统的量子相变问题。过去,人们关注的大多是量子相变与时间无关的性质,比如基态的量子纠缠 在量子临界点的奇异性,而我们则对自旋体系中量子相变发生时的动力学敏感性进行了系统的研 究。我们发现,在横场伊辛(Ising)模型中体系的洛克斯密特(Loschmidt)回波会在量子相变临界点取 极小值,这个结论揭示了量子相变对称性自发坡缺和量子混沌以及量子退相干等领域的一些重要概 念之间的深刻联系。

内容

1、引言 1.1 量子热力学

1.2 从热力学角度看计算的物理极限

1.3 量子计算集成中的多体问题与相变

- 2、量子热力学的基本概念
 - 2.1 热力学第一定律的量子力学描述
 - 2.2 热力学基本过程的量子力学推广
 - 2.3 量子Jarzynski等式
- 3、量子热机的微观模型I-平衡态情形
 - 3.1 量子卡诺热机循环
 - 3.2 量子奥托热机循环
- 4、量子热机的微观模型II-非平衡态情形
 - 4.1 基于理想腔量子电动力学系统的量子热机(光子热机)
 - 4.2 原子退相位 (dephasing) 及光场耗散对量子热机的影响
- 5、麦克斯韦妖,量子热机及热力学第二定律
 - 5.1 麦克斯韦妖佯谬
 - 5.2 有麦克斯韦妖参与的量子热机循环
- 6、从量子纠缠看量子统计热力学和量子相变
 - 6.1 热化过程,量子纠缠与"广义正则热化原理"或"正则典型性"
 - 6.2 自旋系统的量子相变与量子纠缠
 - 6.2 横场伊辛模型的量子相变与洛克斯密特回波(Loschmidt echo)的动力学敏感性
- 7、小结
- 附录: 横场伊辛模型的洛克斯密特回波的计算(Loschmidt echo)

1 引言

1.1 量子热力学

热力学是描述热现象的宏观唯象理论。它主要包括热力学三大定律,具有高度的可靠性和普适性。热力学创建至今已经一百多年了,其应用领域不断扩大,已经成为物理学中的一个重要基石。爱因斯坦曾评论[1]"对于一个理论,其前提越简单,所涉及不同的东西越多,应用范围越大,它就越深刻。因此,经典热力学给了我深刻的印象。我深信,在其基础概念的应用框架里,它是唯一永远不会被推翻的,关于宇宙内容的物理理论"。

热力学对应的微观理论是统计物理学统。它从宏观系统由大量微观粒子组成这一事实出发,认 为宏观性质是大量微观粒子运动的集体表现,宏观物理量是微观量的统计平均值。统计物理学能够 把热力学中三个互相独立的基本规律归结于一个基本的统计物理原理,阐明这三个定律的统计意义, 还可以解释涨落现象[2,3]。从统计物理学的诞生开始,物理学家们,如Boltzmann,Gibbs,Birkhoff, Ehrenfest, von Neumann [4]就在尝试着把唯象的热力学熵和统计熵(经典力学相空间的一定区域的 体积)联系起来,把热力学理论完全简化为多粒子系统的牛顿力学。然而,人们都没能够绕开一些超 出牛顿力学的额外的假设,如"各态历经"假说或者是"等概率"假说。另外,对于如何从更基本的 物理理论推导热力学的有关基本原理,如热力学第二定律,直至今天仍然是一个充满争议的问题。 过去几乎所有推导这些基本原理的方法都是基于牛顿力学,而现在人们意识到,热力学系统本质上 服从的是比牛顿力学更基本的量子力学。

目前,人们开始探讨把热力学建立在量子力学基础上的可能性,把热力学作为量子力学的一个 层展(emergence)现象[5],形成所谓的量子热力学。在这个新兴领域,人们关注的是如何从第一原 理-量子力学,去描述理解热力学现象[4]。最近一个重要思想是用量子纠缠来取代原来热力学中的各 态历经假说(等概率假说)。量子统计力学的系综分布可以自然而然地从量子纠缠中得到,而不需要 额外假设微正则系综分布或等概率)[6,7]。这些工作的成功,会重新改写统计物理学教科书中有关 内容,直接把统计力学完全建立在量子力学基础之上。热力学基础和量子力学的一些基本性问题是 彼此关联的,如光子作为工作物质的光子热与量子相干,量子纠缠与熵与黑洞信息丢失之谜,麦克 斯韦妖,Landauer原理与计算的物理极限的问题。这些研究彼此为对方提供了一个新的视角,将会 彼此互相促进,并导致这些学科新的发展和新的发现。

平衡态量子热力学的研究内容还包括小尺度系统(有限粒子数)上的热力学[8],甚至是纳米尺度范围上的热力学问题[9]。因为通常热力学处理的是热力学极限(粒子数无穷大)下的问题。但是随着纳米技术的发展,人们可以在纳米尺度的范围内研究物理系统的热力学性质。由于系统尺度偏离热力学极限的要求,会得到一些超越以前的热力学的结论。比如文献[8]中就发现当环境不是足够大时,系统被热化到一个"准平衡态"。也就是系统的约化密度矩阵的对角元服从Gibbs分布,但是非对角元的稳态并不趋于零。温度概念在宏观物质世界和原子尺度之间的某一区域失去意义,人们还可以精确地确定这个变化的"临界点"[9]。小尺度上的热力学还涉及纳米机械振子的冷却[10, 11, 12],

3

使得观察到机械振子振动达到标准量子极限成为可能。

量子热力学的另外一个方向是Jarzynski等式[13]。这个等式在非平衡热力学过程的做功量和平 衡过程的自由能的改变量之间建立了等价关系。它在生物学中有广泛的应用。在实验上无法直接测 量一个生物系统的自由能是的改变,只能通过测量准静态过程的做功量来间接得到自由能的改变。 因为准静态过程原则上需要无穷长时间,因而很难做到。但是Jarzynski等式告诉我们,可以通过测 量有限时间(非平衡或者说非准静态)过程的做功,并通过求平均的办法来间接求出自由能。这就为 我们从实验上测量两个状态间的自由能的改变提供了一种可能。

1.2 从热力学角度看计算的物理极限

怎样从微观角度理解热力学第二定律却经常是莫衷一是、众说纷纭,甚至会导致一些违反常识 性真理的永动机设想的产生。其中一个著名的例子是来自于所谓的"麦克斯韦妖"的挑战。1871年, 麦克斯韦(James Clerk Maxwell)在他出版的《热理论》(Theory of Heat)一书的中讨论了热力学 第二定律的局限性。他设想有一个充满气体、温度均匀的容器,容器中间有一个隔板,把容器分 成A和B两个区域,隔板上有一个洞。另外,有一个今天被称为麦克斯韦妖(Maxwell's demon)的想 象中的精灵,它能够区分每个分子的速度,并能够自由的打开和关闭这个洞。所以,它可以让较慢 的分子从A到B,而让较快的分子从B到A,并且不消耗任何能量。经过足够长的时间以后,容器中 的A区温度变高,而B区温度变低。从而,处于A和B之间热机可以对外做功。把麦克斯韦妖和热机集 成为一个整体,表面上形成了一个违反第二定律的永动机-第二类永动机,因为它可以从单一热源吸 热并且把吸收的热全部转化为对外做功。整个循环过程的效果就是使系统加热库的整体熵减小,因 此这个假想实验是违反热力学第二定律的。

麦克斯韦引入这个带有妖怪的假象实验的本意是要说明热力学第二定律是一个统计性的定律, 统计涨落有可能违反它[14, 15]。但是后来人们对这个假想实验的关注逐渐演变为:如果存在这样一 个麦克斯韦妖,它是否可以随意地(而不是由于涨落引起的概率性地)违反热力学第二定律呢?为了 挽救热力学第二定律,Leo Szilard在1929年提出了一个单分子热机模型[16]。他第一次把"信息"作 为一个重要的因素引入到麦克斯韦妖假想实验中来。在他的文章中一个重要的观点是"麦克斯韦妖" 在获取信息的过程中(也就是测量的过程中)要消耗能量,从而导致整体熵增。这些熵增补偿了上面 假想实验中熵的减小。这样就不会出现违背热力学第二定律的第二类永动机了。但是后来的发展表 明,这只是一个暂时性的结论,麦克斯韦妖佯谬的真正解决还依赖于关于信息的物理学基础的进一 步发展。

1961年, Rolf Landauer[17]研究了计算过程的热力学基础,提出了著名的Landauer原理:逻辑 可逆的计算过程(包括读、写以及复制)的能量耗散可以是任意小的、或者是没有耗散。但是,计 算机存储单元的信息擦除却是一个逻辑不可逆的过程。这个逻辑不可逆的过程伴随着一个最小的 熵增。Landauer指出每擦除1比特的信息,至少会有*k*_B ln 2的熵被释放到环境中。1982年, Charles Bennett[18]认识到, Landauer原理可以用来解决麦克斯韦妖佯谬的问题。麦克斯韦妖获取信息,并

4

把信息存储在它的记忆单元中。一个完整的热力学循环必须包括麦克斯韦妖作为做功介质的一部分, 要求其记忆单元也被还原到初始状态。由于擦除麦克斯韦妖的记忆单元带来的环境的熵增,可以抵 消上面的假想实验中熵的减小。因此,麦克斯韦妖的存在,不会违反热力学第二定律。至此,麦克斯 韦妖佯谬问题得到彻底解决[19]。

除了在微观的层面给出麦克斯韦妖佯谬的一个解决方案,Landauer原理的另一个意义就是预言 了计算的物理极限的存在。Landauer原理的直接结果是导致了所谓的摩尔定律的终结。因为计算机 在完成一个有效计算的实际过程中,原理上一个循环必须包含初始化过程。物理上它意味着要对上 一步骤中的存储的信息进行擦除,从而必须消耗一定能量并以热量的形式散发掉。计算的速度越 快,产生的热量就越多。当计算机芯片单位面积上集成的元件数目越多,发热的功率就越大[19]。这 种不可逆计算的耗热机制大大限制了计算机芯片的尺度,给出了其物理极限,从而导致摩尔经验定 律(计算机CPU(中心处理器)的运行速度每十八个月就会增加一倍)的终结。其实,在计算机发展 的过程中,有各种各样"不那么基本"的物理条件制约计算技术本身。例如,逻辑元件是工作在稳态 区域,而达到稳态需要一定的弛豫时间,而Landauer和Bennett的工作主要强调了计算原理上的物理 限制。对于上物理原理带来的传统计算机发展的限制,一个可能的解决这个问题的方案就是当今蓬 勃发展的量子信息科学。量子信息的研究、特别是量子计算的研究可能会为突破上述Landauer原理

1.3 量子计算集成中的多体问题与量子相变

为了实现有实际用途的量子计算机,需要把普适的量子逻辑门相干地地集成起来,并加以操控。随着集成量子比特数目的增多,量子系统与环境的耦合导致的量子退相干(quantum decoherence) 会变得越来越严重[20]。因此,量子信息和计算的发展使得量子退相干的重新成为一个研究热点。为 克服量子退相干,量子计算的实验通常都是在极低温下进行。但是,改变系统参数进行量子操纵,即 使在绝对零温时,也会导致的量子相变[21]。最近,实验上实现的一个量子相变:通过光晶格的深度, 实现其中超冷原子的超流-绝缘体相变[22]。

量子相变和量子信息研究的交叉,衍生出来的一个重要研究方向,是把量子纠缠作为刻画量子 相变的新工具。我们知道,经典相变通常都是在Landau-Ginzuburg-Wilson理论框架下描述的。其中 主要牵涉到的概念是对称性破缺,局域序参量,和关联长度。统计力学和凝聚态物理学的发展都从 这个理论受益良多。然而,与经典相变不同的是有些量子相变(如拓扑量子相变)有可能不伴随着 对称性破缺,从而找不到合适的局域序参量来描述。事实上,对于多组分的、有相互作用的复杂系 统(如微腔阵列中光场-原子耦合系统),很强的Rabi耦合破坏了通常的序参量假定。因此很难找到 一个合适的序参量,寻找新的刻画量子相变的理论工具成为理论物理学中一个重要的挑战。近年来, 人们开始考虑借用量子信息科学的一些观念和方法(如量子纠缠)来研究量子相变。

最近,我们提出了用量子信息有关的两个概念-"退相干"[23,24]和"量子保真度"[24,25,26,27] 来研究量子相变。大家知道,在量子相变点的两边,两个不同的相具有截然不同的性质。系统的性质 的这种急剧变化可以由洛克斯密特回波(Loschmidt echo)或两个态的重叠积分定量描述。不同的相 对与它耦合的量子系统施加完全不同的影响,我们有理由预期环境的相变会对耦合系统的相干性有 很强的破坏[28]。我们让这两个态对应于控制参数稍有不同的系统的基态。在远离临界点时,系统对 微扰不敏感,保真度几乎为1。但是在临界点附近,微扰可能使系统进入另外一个相区。从而它的基 态结构发生了巨大的变化,导致保真度在临界点附近急剧下降。通过这些保真度的行为我们很容易 得到该量子相变系统的相图。而且这种办法可能可以推广到经典相变系统,比如BCS相变和BEC相 变。我们对两个温度稍有不同的系统的热平衡态作内积。我们不需要事先知道任何序参量或对称性 破缺的的信息。这种保真度方法刻画相变的一个重要应用是拓扑量子相变[29],这里没有对称性破 缺,也没有局域序参量的存在,保真度方法的威力就可以显现出来了。

2 量子热力学的基本观念

众所周知,平衡态热力学是建立在经典力学(牛顿力学)基础之上的唯象理论。但是现在我们知 道,其实任何物质都遵守更基本的量子力学。如何把热力学理论建立在量子力学的基础上是一个非 常值得研究的问题。比如说,如何把"做功"和"热传递"推广到量子力学的框架中,如何在量子力 学框架内表述热力学第一定律,另外还有一些与此关联的问题,比如如何描述有限时间内的热力学 过程(也就是非准静态或者说非平衡态过程),以及如何刻画小尺度(非热力学极限)系统的热力学 性质。这些都是长期以来一直被人们忽视,但又十分重要的问题。由此专门发展出来的一门学科分 支叫做量子热力学[4]。下面我们就将经典热力学的一些概念作量子力学的推广,并介绍一些量子热 力学的有关的基本概念和最新进展。首先我们介绍一下量子力学框架下的"功"和"热"。

2.1 热力学第一定律的量子力学描述

考虑一个任意多能级量子系统(见图1)。为了简单起见,我们考虑的系统只包含离散能谱结构,并且只含有有限个本征能级。当然,也可以更一般地考虑具有无穷多个能级的系统。

该系统的哈密尔顿量可以写成

$$H = \sum_{n} E_{n} \left| n \right\rangle \left\langle n \right|, \qquad (2.1)$$

这里|n〉是系统的第n个本征态, *E*_n是它的第n个本征能量。不失一般性, 选取基态|0〉的本征能量为能量零点。这样, 系统的哈密尔顿量(2.1)可以被重新表述成

$$H = \sum_{n} (E_n - E_0) |n\rangle \langle n|.$$
(2.2)

后面将会看到,用哈密尔顿量(2.2)来讨论系统的热力学性质会比用(2.1)式更加方便。对于这个系统,如果已知它在各个能级上的布居数*P_n*,那么它的的内能*U*可以表示为

$$U = \langle H \rangle = \sum_{n} P_{n} E_{n}, \qquad (2.3)$$



Figure 1: 作为量子热机工作物质的多能级量子系统的示意图。 $E_n^h 和 E_n^l$ 是工作物质在两个等容过程中的本征能量(等容过程将会在本章后面介绍,量子热机的循环将会在下一章介绍)。

为了将一些基本的热力学过程进行量子力学的推广,也就是定义量子力学系统的等温过程和量子力学系统的等容过程,我们需要先找到热交换dQ和做功dW的量子力学对应的表述。从方程(2.3)我们可以得到

$$dU = \sum_{n} \left(E_n \, dP_n + P_n \, dE_n \right). \tag{2.4}$$

在经典热力学中, 热力学第一定律被表述为

$$dU = dQ + dW, \tag{2.5}$$

其中dQ = TdS, $dW = \sum_i Y_i dy_i$ [30]; T和S分别是温度和熵; y_i 是广义坐标 Y_i 是与 y_i 共轭的广义 力。考虑到(冯诺依曼)熵S和各个本征能级 E_n 上的布居数 P_i 的关系 $S = -k_B \sum_i P_i \ln P_i$, 我们可以 如下定义量子力学系统的热传递和做功[31, 32, 33]

$$dQ = \sum_{n} E_n \, dP_n, \tag{2.6}$$

$$dW = \sum_{n} P_n \, dE_n. \tag{2.7}$$

方程(2.7)意味着"做功"相应于本征能级*E*_n的改变。这一点与我们知道的另一个常识性的结论 是一致的,那就是做功必然伴随着系统的广义坐标的改变。而在量子力学系统中,广义坐标的改变 又导致了系统的本征能量的改变[32, 34]。因此,有了做功和热传递的量子力学描述(2.6)和(2.7),热 力学第一定律的量子力学描述*dU* = *dQ* + *dW* 就可以从方程(2.4)自然而然的得到。我们还想强调, 经典系统的热传递表达式*dQ* = *TdS*仅仅适用于热平衡过程,与它不同的是,量子力学系统的做功和 热传递的表达式(2.6)和(2.7)既适用于热平衡过程也适用于非平衡过程。

2.2 热力学基本过程的量子力学推广

2.2.1 量子等温过程

下面我们来讨论一些量子力学系统的基本热力学过程。首先我们要研究的是量子力学系统的等 温过程,也就是量子等温过程。在量子等温过程中,作为热机的工作物质的量子力学系统,例如一个 被束缚在势阱中的粒子,始终与一个温度恒定的热库接触。这个粒子从热库吸热,同时对外做功。在 量子等温过程中,工作物质的本征能级和它在各个能级上的布居数时刻都要发生变化,这样才能确 保系统时刻与热库处于热平衡。现在我们以一个二能级系统为例。我们分别用 $|e\rangle$, $|g\rangle$ 和 Δ 来表示这 个二能级系统的激发态,基态和两能级间的能级差。在准静态量子等温过程中,系统在两个能级上 的布居数 P_e 和 P_g 服从玻尔兹曼分布关系 $P_e/P_g = \exp[-\beta\Delta(t)]$ 和归一化条件 $P_e + P_g = 1$ 。对于一个 准静态的量子等温过程, $\Delta(t)$ 随时间t缓慢变化,因此r可以表示成下式

$$r \equiv r(t) = \frac{P_e}{P_g} = e^{-\beta\Delta(t)},$$
(2.8)

其中 $\beta = 1/k_BT$, k_B 是玻尔兹曼常数, T是时间。在一个足够慢的过程中, 系统每一刻都和热库处于热平衡状态。

2.2.2 有效温度

对于一个二能级量子力学系统,我们也可以根据系统在两个能级上的布居数的比例r(t),和两能级间的能级差 $\Delta(t)$,定义一个二能级系统的有效温度。对于一个本征能量分别为 E_e 和 E_g 的二能级系统来说,即使系统并未和热库达到热平衡,我们仍然可以认为系统处于一个"虚拟"的平衡态,而且只要我们知道了能级差 $\Delta(t)$ 和系统在两个能级上的布居数 P_q 和 P_e ,就可以定义这个系统的有效温度

$$T_{\rm eff} = \frac{1}{k_B \beta_{\rm eff}} = \frac{\Delta(t)}{k_B} \left[\ln \frac{P_g}{P_e} \right]^{-1}.$$
(2.9)

当然,方程(2.9)不能直接被推广到多能级系统。例如,对于一个布居数分别为 P_a , P_b 和 P_c 的三能级 系统(三个能级分别是 $|a\rangle$, $|b\rangle$ 和 $|c\rangle$)如果两个能级差 $\Delta_{ab}(t)$ 和 $\Delta_{bc}(t)$ 不满足下面的关系

$$\frac{1}{\Delta_{ab}(t)}\ln\frac{P_a}{P_b} = \frac{1}{\Delta_{bc}(t)}\ln\frac{P_b}{P_c},\tag{2.10}$$

那么,我们就不能定义这个系统的有效温度。因为根据方程(2.9),"子系统"{|a>, |b>}可以定义一个有效温度,同时"子系统"{|b>, |c>}也可以定义另外一个有效温度,但是这两个温度并不相同。我们将会在下一章第一节中仔细讨论这一点。

2.2.3 量子等容过程

量子等容过程有很多与经典等容过程相似的性质。在一个量子等容过程中,工作物质始终和热 库接触。整个过程中,外界不对系统做功,系统也不对外界的做功,但是工作物质和热库有热交换。 因此,在量子等容过程中的功和热的交换情况与经典等容过程中完全相同。在量子等容过程中,系 统在各个能级上的布居数P_n(因而系统的冯诺依曼熵S)一直不断变化,直到工作物质和热库最终达 到热平衡,等容过程完成。在经典等容过程中,系统的压强P和温度T也一直处于变化中。直至系统 和热库达到热平衡,等容过程结束。例如,我们选择一个无限深势阱中的粒子作为工作物质。在量子 等容过程中没有做功,只有吸热或放热,因而各个能级上的布居数会改变。到最后,系统和热库达到 了热平衡,量子等容过程结束了,工作物质在各个能级上的布居数最终达到玻尔兹曼分布。

2.2.4 量子绝热过程

一个经典热力学的绝热过程能够用微观的量子绝热过程来阐述。因为量子绝热过程进行的 如此之慢,以至于一般的量子绝热条件总能够被满足[35],也就是系统在各个能级上的布居数保 持不变*dP_n* = 0[31, 36, 37]。根据前面方程(2.6),量子绝热过程中没有热交换*dQ* = 0,但是根据方 程(2.7)这个过程中的做功并不为零。然而,值得指出的是,经典的绝热过程并不要求系统在各个能 级上的布居数保持不变。例如,当这个过程进行得非常快的时候,量子绝热条件不能被满足,系统内 部能级之间的跃迁就有可能会出现,但是整个过程中系统和外界没有发生热交换。这个过程是经典 的绝热过程,但是它不是量子的绝热过程。因此,基于上述讨论,我们可以说,通过微观的量子力学 绝热过程可以实现宏观的经典绝热过程,但是反之则不成立[33](见图2)。



Figure 2: 经典绝热过程(*a*)和量子绝热过程(*b*)的示意图。在t = 0时刻,活塞位于L(0),经过时间 $t = \tau$ 之后,活塞慢慢移动到了 $L(\tau)$ 。在量子绝热过程中,系统在各个能级上的布居数保持不变。

为了便于比较,我们在表2.1中列出了一些经典热力学过程以及与它们对应的量子热力学过程的 性质。每个空格的第一,二行分别列的是是否有热交换,是否有做功和哪些热力学量变化,那些不 变。 Table 1: 量子热力学过程和经典热力学过程。"变化"和"不变"分别指的是在这些热力学过程中热力学 量发生改变还是不改变。T是系统的温度,P和V分别是经典系统的压强和体积,P_n和E_n分别是量子系统 在各能级上的布居数和本征能级。这里讨论的经典热机都是以理想气体作为工作物质。

	等温过程		等容过程			绝热过程		
经典	:	有						
	热交换;有做功	不	有热交换;	没有做功	不变:	没有热交换;	有做功	不变:
	变: T; 变化: P,	V,	V;变化: P, T, S		S; 变化: P, T, V			
	S							
量子		有						
	热交换;有做功	不	有热交换;	没有做功	不变:	没有热交换;	有做功	不变:
	● 变: T; 变 化: E	\overline{V}_n ,	E_n ; 变化: P_n , T		P_n ; 变化: E_n , T			
	P_n							

2.3 量子Jarzynski等式

Jarzynski等式是由物理学家Christopher Jarzynski[13]在1997年提出来的一个统计物理学中的 等式。这个等式把两个热平衡态的自由能之差与有限时间过程(即非准静态过程或非平衡过程)中 的做功量联系起来了。在一个热力学过程中,初末两平衡态A和B的自由能之差 ΔF 是和在这个过程 中外界对该系统的做功量W之间有如下关系: $\Delta F \leq W$ 。只有在该过程为准静态过程,或者说,只 有当系统从A到B的过程进行地足够慢的时候,上式才能够取等号。这个不等式正好是用"最小功原 理"表述的热力学第二定律[38]。

与上面的情形有所不同,Jarzynski证明了,无论这个过程进行得多么快,等式: $\exp(-\beta\Delta F) = \langle \exp(-\beta W_{irrev}) \rangle_{irrev}$ 总是成立。这里 $\beta = 1/k_BT$,其中 k_B 是玻尔兹曼常数,T是系统在平衡态A时的温度(也就是用来热化系统的热库的温度)。Jarzynski等式的右边的求平均代表对从A到B的过程的求平均,下标"irrev"代表不可逆过程或非平衡过程。在准静态过程中,无论重复多少次实验,每个过程对系统的做功量都相同。因此这时Jarzynski等式就回到了上面的热力学等式 $\Delta F = W$ 。然而在一般情况下(过程在有限时间内完成,并非准静态过程),做功量W依赖于系统的微观初态。也就是每次重复实验,测得的"微观功"不尽相同,而是服从一定分布。这时做功的平均值和自由能的改变量有如下关系 $\Delta F \leq \langle W \rangle_{irrev}$ 。这就是前面提到的用"最小功原理"表述的热力学第二定律。有些人认为上述讨论相当于是热力学第二定律的一种推导方法,不过也有人对此提出质疑[39]。下面我将基于上面定义的量子等温过程,量子绝热过程和量子等容过程把Jarzynski等式作量子力学的推广[40],并进一步讨论它的成立条件和适用范围。

2.3.1 基于二能级量子力学系统的Jarzynski等式

我们以一个二能级的量子力学系统为例,结合上面提到的量子等温过程,量子绝热过程和量子等容过程(示意图见后面的图5)来验证Jarzynski等式。我们以 Δ 表示二能级系统的能级差,以 P_e 表示系统在激发态上的布居数(见图3)。 Δ 和 P_e 满足的函数关系见后面的方程(3.27)。我们考虑的这个过程的初态(A)和末态(B)为两个热平衡态。对于这两个热平衡态,系统的宏观状态,如总粒子数N,总体积V和温度T确定,但是微观状态,如能量E可能不同。在量子等温过程 $A \longrightarrow B$ 中(见图3),外界对系统做的功是唯一确定的[41]。而且这个量由热库的温度 $\beta = 1/k_BT$,以及系统初态和末态的能级差 Δ_h 和 Δ_l 完全决定。

$$W_{\rm rev} = -\int_{\Delta_l}^{\Delta_h} P_e(x) dx = -\int_{\Delta_l}^{\Delta_h} \frac{e^{-\beta x}}{1 + e^{-\beta x}} dx.$$
 (2.11)

作积分参数变换 $e^{-\beta x} = t$,我们就得到

$$W_{\text{rev}} = \int_{\exp(-\beta\Delta_l)}^{\exp(-\beta\Delta_h)} \frac{dt}{(1+t)\beta} = \frac{1}{\beta} \int_{\exp(-\beta\Delta_l)+1}^{\exp(-\beta\Delta_h)+1} \frac{dy}{y} = \frac{1}{\beta} \ln\left(\frac{1+e^{-\beta\Delta_h}}{1+e^{-\beta\Delta_l}}\right)$$
(2.12)

$$= \frac{1}{\beta} \ln \frac{Z_h}{Z_l} = \Delta F. \tag{2.13}$$

其中 $Z_{\lambda} = 1 + e^{-\beta\Delta_{\lambda}}, \lambda = h.l,$ 分别是系统在A和B时刻的配分函数。因此,对于一个(可逆的)量子等温过程 $A \longrightarrow B$,我们有如下关系式

 $e^{-\beta\Delta F} = \frac{1 + e^{-\beta\Delta_l}}{1 + e^{-\beta\Delta_h}}.$



Figure 3: 一个基于二能级量子系统的 $\Delta - P_e$ 图(另见后面的图5A及图7A),这里 Δ 是二能级系统的能级 差, P_e 是系统在激发态上的布居数。*T* 代表热库的温度。 $A \rightarrow B$ 是量子等温过程, $A \rightarrow B'$ 是量子绝热过 程, $B \rightarrow B'$ 是量子等容过程。Jarzynski等式告诉我们A n B两点代表的系统状态的自由能之差(也就是量 子等温过程 $A \rightarrow B$ 中的做功量)可以由非平衡过程 $A \rightarrow B' \rightarrow B$ 的做功量求得。

需要指出的是,在我们所讨论的问题中有三个时间尺度:系统的热化(弛豫)时间 τ ,调节系统(从A到B)的时间(switching time) t_s ,以及保证量子绝热近似条件成立的时间尺度 t_a 。我们假设这三个时间尺度满足关系式 $t_a \ll t_s \ll \tau$ 。相对于量子绝热定理要求的时间 t_a ,调节系统的时间 t_s 足

够长,以至于量子绝热条件能够被满足;但是相对于系统和热库耦合的弛豫时间 τ ,调节系统的时间 t_s 又非常短,以至于系统远未和热库达到热平衡。也就是说在调节系统的过程中,热库的影响完全可以忽略。这个调节系统的过程 $A \rightarrow B'$ (见图3)其实就是前面提到过的量子绝热过程。在量子绝热过程 $A \rightarrow B'$ 中(见图3)。对系统的做功量只有两种可能的取值:0或者是 $\Delta_l - \Delta_h$ 。它们相应的几率分别是 $1 - P_e^l n P_e^l$

$$\begin{array}{c|c|c|c|c|c|c|c|c|}\hline W & 0, & \Delta_l - \Delta_h \\ \hline P(W) & 1 - P_e^l, & P_e^l \end{array}$$
(2.14)

其中

$$P_e^l = \frac{e^{-\beta\Delta_h}}{1 + e^{-\beta\Delta_h}}.$$

知道了每个非平衡过程做功的取值以及这种取值对应的几率,下面我们就可以来计算非平衡过程的 平均值

$$\left\langle e^{-\beta W_{\text{irrev}}} \right\rangle_{\text{irrev}} = (1 - P_e^l) + P_e^l e^{-\beta(\Delta_l - \Delta_h)}$$

$$(2.15)$$

$$= \frac{1}{1+e^{-\beta\Delta_h}} + \frac{e^{-\beta\Delta_h}}{1+e^{-\beta\Delta_h}}e^{-\beta(\Delta_l-\Delta_h)} = \frac{1+e^{-\beta\Delta_l}}{1+e^{-\beta\Delta_h}}$$
(2.16)

$$= e^{-\Delta F}.$$
 (2.17)

因此我们证明了如下结论:如果相对于系统和热库弛豫的时间 τ 相比,调节系统的时间非常 短 $(t_s \rightarrow 0)$ (我们同时假设量子绝热条件也能被满足),我们就可以通过测量非平衡过程的热力学 量(并对之求平均) $\langle e^{-\beta W_{irrev}} \rangle_{irrev}$,得到平衡过程的自由能改变量 ΔF 。需要强调的是,这并非是平庸的结果。如果我们直接对非平衡过程的功求平均,我们会发现非平衡过程做功量的平均值大于系统自由能的改变(平衡过程的做功量)

$$\langle W_{\rm irrev} \rangle_{\rm irrev} = P_e^l(\Delta_l - \Delta_h) > \int_{\Delta_h}^{\Delta_l} P_e(\Delta) d\Delta = W_{\rm rev} = \Delta F.$$
 (2.18)

这正好是最小功原理表述的热力学第二定律[38](要把系统从一个状态改变到另一个状态,只有在整个过程是可逆的时候外界对系统做功量最小)。

从Jarzynski等式被提出以来,它已经在分子生物学的实验和数值模拟[42]中得到验证。还出现了 很多其它的理论推导这个等式的方法。所有这些努力都进一步证明了Jarzynski等式的正确性和普适 性。

3 量子热机的微观模型I - 平衡态情形

最近,受到量子信息发展的带动以及实验技术进步的影响,量子力学和统计物理学的一些基本问题重新受到物理学家的关注。量子热机(Quantum Heat Engine)给人们研究这些问题提供了一个



Figure 4: 一个量子热机的示意图图。从t = 0时刻到 $t=\tau_1$ 时刻,工作物质(量子力学系统)从高温热库吸热。从 $t = \tau_1$ 时刻到 $t=\tau_2$ 时刻,工作物质向外膨胀,推动活塞对外做功。第三步(从 $t = \tau_2$ 时刻到 $t=\tau_3$ 时刻) $t=\tau_3$ 时刻)是工作物质向低温热库释放多余的热量的过程(冷凝过程)。第四步(从 $t = \tau_3$ 时刻到 $t=\tau_4$ 时刻)是外界对工作物质做功,以使它回到第一步开始时的初态。在这里第三步和第四步几乎是第一部和第二步的逆过程,只是热库的温度不同。

很好的平台。顾名思义,量子热机[43,44]是以"量子物质"为工作物质对并外做功的热机(见图4)。 由于工作物质的量子属性,量子热机有很多不一般的性质。量子热机的工作物质的量子性成为一个 备受关注的新的研究热点[45]。人们试图从实验上去验证一些有别于传统热力学理论的新现象,新结 论。在理论研究上上,一些超越人们传统观念的新奇的结论陆续被发现。比如,在一定条件下,量子 热机在每个循环过程中的对外做功量可以超过与它相应的经典热机[31,32],而且量子热机的效率也 可以超越经典热机的效率上限-经典卡诺热极的效率[46]。量子热机不仅有助于研究量子力学和热力 学的关系,而且有助于研究量子退相干问题,另外它还能很好的体现量子和经典热力学系统的差异, 帮助我们理解热力学过程中的量子-经典过渡的问题[47]。

在现有的文献中,关于量子热机(比如量子卡诺热机和量子奥托热机)的定义并不一 致[46,48,49,50,51],有的甚至互相矛盾。因而量子卡诺热机和量子奥托热机的性质也不可能被很 好地阐明。这种现状促使我们去考虑对于各种量子热机循环给出普适的定义。任何一个量子热机的 循环都是由若干基本的量子热力学过程组成的。我们已经在上一章介绍了这些热力学基本过程的量 子力学推广,现在我们来看看这些量子热力学过程构成的平衡态(也就是不考虑工作物质的量子相干 性)量子热机循环的性质,并且将量子热机的性质与经典热机的性质作比较。我们还将讨论用一些物 理系统来实现我们的量子卡诺热机和量子奥托热机。而工作物质的量子相干性对热机的影响将在下 一节讨论。

3.1 量子卡诺热机循环

经典卡诺热机是一种非常典型的热机。它的每个循环的四个冲程的热力学性质都非常清楚,而 且它代表了一类普适的可逆热机的物理机制。现在人们关于量子热机的研究[31, 32, 46, 47, 48, 49, 52, 53, 54, 55, 56, 57] 大多集中在对经典卡诺热机的量子力学推广方面,也就是对量子卡诺热机有 关方面的研究。

在前面一章中,我们定义了量子等温过程。基于这个定义我们将在这一节研究构造量子 卡诺热机循环所需的条件,和它的一些物理性质。量子卡诺热机(一个基于二能级系统的量 子卡诺热机循环的示意图见图5),如同与它对应的经典卡诺热机一样,由两个(量子)等温 过程(*A* → *B*及*C* → *D*)和两个(量子)绝热过程(*B* → *C*及*D* → *A*)构成。在等温膨胀过 程*A* → *B*中,工作物质-被束缚在势阱中的一个粒子-始终与一个温度为*T_h*的热源相接触。工作物质 的能级改变的速度比系统的弛豫速度慢的多,以至于这个粒子一直与热库保持在热平衡状态。在下 面我们将分别考虑工作物质为二能级和多能级两种情形。

3.1.1 量子卡诺循环的可逆性

量子力学系统的可逆性是和量子演化算符的幺正性密切联系的。与量子力学的可逆性不同,热 力学的可逆性与热库的性质,如温度,以及工作物质的有效温度有关。现在我们关注的是热力学意 义上的可逆性。本文后面如果不专门指名,所提到的可逆性都是指热力学可逆性。

我们强调,为了保证量子卡诺热机的循环过程是*可逆的*,关于卡诺循环中的量子绝热过程,有两个条件必须被满足: (1)量子绝热过程($B \rightarrow C$)完成以后,我们可以用一个有效的温度 T_l 来刻画工作物质,也就是经历了量子绝热过程之后工作物质满足玻尔兹曼分布; (2)量子绝热过程完成以后,用来描述工作物质的这个有效温度 T_l 等于接下来的这个等温过程($C \rightarrow D$)的热库的温度 T_l 。当上述两个条件有任何一个不能被满足的时候,量子等温过程($C \rightarrow D$)中就不可避免地出现一个对工作物质的热化[59, 60, 61]过程。在这个热化过程中,工作物质和热库的整体的熵增不等于零。因此,这个热化过程是不可逆的。

可以证明上述的两个条件(1)和(2)等价于下面两个条件: (i)所有的能级差在绝热过程中按同一 比例变化,也就是 $E_n(B) - E_m(B) = \lambda [E_n(C) - E_m(C)] \mathcal{D} E_n(A) - E_m(A) = \lambda [E_n(D) - E_m(D)],$ $(n = 0, 1, 2, \dots);$ 和(ii)绝热过程中 $(B \longrightarrow C\mathcal{D}A \longrightarrow D)$ 能级差的变化比例必须与两个热库的温度之 比相同,也就是 $\lambda = T_h/T_l$ 。

首先,很容易看出上面列出的两个条件(i)和(ii)对于前面最开始提到的两个条件(1)和(2)是 充分的。下面我们将证明条件(i)和(ii)对于条件(1)和(2)来说也是必要的。我们假设在绝热过 程(*B*→→*C*)之前的*B*时刻工作物质和一个温度为*T*_h的热库处于热平衡。这时系统的状态可以用下面 的密度矩阵描述

$$\rho(B) = \frac{1}{Z} \sum_{n} e^{-\beta_h E_n(B)} |n(B)\rangle \langle n(B)|. \qquad (3.1)$$



Figure 5: (A): 一个基于二能级量子系统的量子卡诺热机循环的示意图。 Δ 是二能级系统的能级差, P_e 是 系统在激发态上的布居数。 $A \longrightarrow B(C \longrightarrow D)$ 是等温膨胀(压缩)的过程。在此过程中工作物质和高(低) 温热源保持接触。 $B \longrightarrow C \pi D \longrightarrow A$ 是两个量子绝热过程。(B): 以理想气体作为工作物质的一个经典 卡诺热机循环的温度-体积(PV)图。1 $\longrightarrow 2(3 \longrightarrow 4)$ 是对应于温度为 T_h (T_l)的经典等温膨胀(压缩)过 程。2 $\longrightarrow 3(4 \longrightarrow 1)$ 是经典的绝热膨胀(压缩)过程。 $V_2 \pi V_3$ 是工作物质在2和3时的体积。(C): 基于二 能级的量子卡诺热机循环的温度-熵(PS)图[58]。(D): 基于基于经典理想气体的经典卡诺热机循环的温 度-熵(PS)图[58]。(C)和(D)两个示意图成了沟通量子和经典卡诺循环之间的桥梁。

量子绝热过程完成以后(即图5中的C点),工作物质的本征能级变成了 $E_n(C)$ 。这时工作物质达到了 一个新的有效温度 T_l 。在整个量子绝热过程($B \longrightarrow C$)中,工作物质在各个能级上的布居数 P_n 保持不 变,而且它们始终满足吉布斯正则分布。因此对任意两个本征态 $|n\rangle$ 和 $|m\rangle$ 来说,系统在它们上面的布 居数 P_n 和 P_m 满足如下关系

$$\frac{P_n}{P_m} = \frac{e^{-\beta_h E_n(B)}}{e^{-\beta_h E_m(B)}} = \frac{e^{-\beta_l E_n(C)}}{e^{-\beta_l E_m(C)}}.$$
(3.2)

也就是说,对于任何m,n都有

$$E_n(C) - E_m(C) = \frac{T_l}{T_h} [E_n(B) - E_m(B)].$$
(3.3)

方程(3.3)正好是条件(i)和(ii)的综合。因此我们证明了这两个条件(i)和(ii)对于前面的两个条件(1)和(2)是必要的。

综上所述,我们证明了(i)所有的能级差在绝热过程中按同一比例变化;和(ii)绝热过程中(*B*→ *C*及*A*→ *D*)能级差的变化比例与两个热库的温度之比相同,是量子卡诺循环可逆性的充分必要条件。我们顺便指出,这两个条件(数学上的限制)(i)和(ii)能够被一些实际的物理系统满足。在后面我们将会讨论这样的例子。

3.1.2 量子卡诺热机的性质

现在我们来研究上面引入的量子卡诺热机循环的工作效率 $\eta_{\rm C}$ 。为了简单起见,我们不用公式(2.6),而是用公式dQ = TdS来计算每个量子等温过程中的热交换dQ。因为在量子等温过程中,热库的温度保持不变,所以量子等温膨胀过程中的吸热量 $Q_{\rm in}^{\rm QIT}$ 和量子等温压缩过程中的放热量 $Q_{\rm out}^{\rm QIT}$ 可以通过利用下面的公式得到

$$Q_{\rm in}^{\rm QIT} = T_h[S(B) - S(A)] > 0, \qquad (3.4)$$

$$Q_{\text{out}}^{\text{QIT}} = T_l[S(C) - S(D)] > 0.$$
 (3.5)

这里Th和Tl是不同热库的温度。

$$S(i) = -k_B \sum_{n} \frac{e^{-\beta_i E_n(i)}}{Z(i)} [-\beta_i E_n(i) - \ln Z(i)], \qquad (3.6)$$

是工作物质在不同时刻*i* = *A*, *B*, *C*, *D* (见图5(A))的熵。这里 $\beta_{A,B} = 1/k_B T_h$, $\beta_{C,D} = 1/k_B T_l$ 。为了 得到上述结果,我们利用了热平衡态的正则分布(吉布斯分布),也就是 $\rho = (1/Z) \sum_n \exp(-\beta E_n) |n\rangle \langle n|$, 其中*Z* =*Tr*exp($-\beta H$)是配分函数。当然, $Q_{in}^{QIT} n Q_{out}^{QIT}$ 也能够通过方程(2.6)得到。这些等价的方法 能够用来描述经典卡诺热机的微观机制。现在我们来计算一个卡诺循环中热机对外做功量 W_C 和它 的效率 η_C 。从方程(3.4)和(3.5)及热力学第一定律我们得到了一个量子卡诺循环的净做功量

$$W_{\rm C} = Q_{\rm in}^{\rm QIT} - Q_{\rm out}^{\rm QIT} = (T_h - T_l)[S(B) - S(A)], \qquad (3.7)$$

Table 2: 量子卡诺热机和经典卡诺热机。这里 "CIT" 指的是 "经典等温过程",而 "CA"是 "经典绝热过程"的缩写。"QIT" 和 "QA" 分别指的是 "量子等温过程"和 "量子绝热过程"。 V_2 , V_3 , $E_n(B)$ 和 $E_n(C)$ 的定义见图5; γ 是绝热指数[58]。

	量子热机循环的冲程	对经典绝热和量子绝 热过程的要求	热机效率	正功条件
经典	CIT-CA-CIT-CA	$\frac{T_l}{T_h} = \left[\frac{V_2}{V_3}\right]^{\gamma - 1}$	$\eta = 1 - \frac{T_l}{T_h}$	$T_h > T_l$
量子	QIT-QA-QIT-QA	$\frac{T_l}{T_h} = \frac{E_n(C) - E_m(C)}{E_n(B) - E_m(B)} $ \vec{X}	$\eta = 1 - \frac{T_l}{T_h}$	$T_h > T_l$

在上式中利用了关系式S(B) = S(C)和S(A) = S(D)。这是因为系统的布居数(因而熵)在量子绝热 过程中保持不变。量子卡诺热机的效率 $\eta_{\rm C}$ 是

$$\eta_{\rm C} = \frac{W_{\rm C}}{Q_{\rm in}^{\rm QIT}} = 1 - \frac{T_l}{T_h}.$$
(3.8)

这正好是经典卡诺热机的效率。从方程(3.3)我们可以看出,方程(3.8)中的两个温度的比能够用两个 能级差之比代替

$$\eta_{\rm C} = 1 - \frac{E_n(C) - E_m(C)}{E_n(B) - E_m(B)}.$$
(3.9)

这种用能级差表示的热机效率η_C非常类似于在文献[31, 33]中提到的量子奥托热机的效率(另见 下面的方程(3.22)。然而,我们必须强调,尽管这两者如此相似,他们实际上是不同。方程(3.9)中 的E_n(B) – E_m(B)及E_n(C) – E_m(C)是工作物质在量子绝热过程(B → C)始(B)和末(C)两点的能 级差。然而,对于一个量子奥托热机,它的效率表达式η_O中用到的能级差是工作物质在两个等容过 程中的能级差[31, 33]。因此,量子卡诺热机效率(3.9)和量子奥托热机的效率的表达式虽然看上去相 同,但是本质是不一样的。在后面的第四节中我们还会进一步讨论这一点。

要使量子热机对外做正功,热机的两个热库必须满足一定的条件。方程(3.8)对量子卡诺热机的 两个热库的温度给出了一个限制,*T_h* > *T_l*。这个对量子卡诺热机的限制也就是所谓的量子卡诺热机 的"正功条件"和经典卡诺热机的"正功条件"是一样的。此外,为了说明我们定义的量子卡诺热机 是经典卡诺热机的量子力学推广,我们在图5(C)和(D)中给出了量子和经典卡诺热机循环的温度-熵 循环 (*PS*)图。从这个图上我们可以看到经典和量子的卡诺循环的*PS*图具有完全相同的形式。基于 上述理由,我们相信本文中给出的量子卡诺热机循环是经典卡诺热机循环的量子力学推广。我们比 较了量子卡诺热机和量子奥托热机的一些性质,并把它们列在下面的表3.1中。

经典卡诺循环是由两个经典等温和两个经典绝热过程组成。当工作物质是理想气体时,在经典 等温过程中工作物质的内能保持不变。因为理想气体的内能只与温度有关(与体积,压强都无关)。 这个(基于经典理想气体的)关于经典等温过程的假设对于以其它物理系统为工作物质(非理想气 体)的卡诺循环也可能是成立的。但是在量子力学的意义上,量子等温过程和量子绝热过程应该在 量子力学框架内重新定义。原则上讲,当我们考虑工作物质的量子属性(离散能级)时,可能会得到

3.1.3 可以用来实现量子卡诺热机的一些物理系统

在前面我们已经讨论过,为了构造一个基于多能级(包括二能级)系统的量子卡诺热机,两 个(数学的)条件需要被满足:(1)在量子绝热过程中(工作物质对外做功)工作物质所有的能级按 统一比例变化;(2)量子绝热过程中能级变化的比例等于两个热库的温度之比。这样才能保证整个循 环是热力学可逆的。对于基于二能级系统的量子热机来说,这两个条件总是能够被满足。因为二能 级量子热机只有一个能级差,我们总可以用一个有效温度来描述工作物质。除了二能级系统,谐振 子,和无限深势阱系统是另外的两个可以用来实现我们量子热机的物理系统。因为在这两个系统中, 各个能级都是系统的某参数的函数。当系统的这个参数改变时,所有的能级差都是按同一比例变化。 所以,如同二能级系统一样,我们总可以用一个合适的有效温度来刻画量子绝热过程中的工作物质。 下面我们来计算以这几种物理系统为工作物质的热机在一个量子卡诺循环中的对外做功量。

二能级系统

现在我们来考虑一个基于二能级系统(例如一个处在沿+z方向外磁场的自旋1/2系统)的量子 热机。工作物质的哈密顿量可以表示如下

$$H_{\rm TLS}(i) = -MB(i)(|\uparrow\rangle \langle\uparrow| - |\downarrow\rangle \langle\downarrow|), \qquad (3.10)$$

其中B(i)是在i, (i = A, B, C, D)时刻外场的场强(见图5); $M = e\hbar/2mc$ 是玻尔磁矩; |↓〉和|↑〉分别表 示自旋向下(激发态)和自旋向上(基态)。热平衡态可以用如下的密度矩阵来表示

$$\rho_{\text{TLS}}(i) = \frac{1}{Z(i)} e^{\beta_i M B(i)} \left|\uparrow\right\rangle \left\langle\uparrow\right| + e^{-\beta_i M B(i)} \left|\downarrow\right\rangle \left\langle\downarrow\right|],\tag{3.11}$$

其中 $Z(i) = \exp[\beta_i M B(i)] + \exp[-\beta_i M B(i)]$ 是在i时刻系统的配分函数。利用公式(3.6)我们得到工作物质的熵的表达式

$$S^{\text{TLS}}(i) = k_B \ln[Z(i)] + k_B \beta_i M B(i) \tanh[\beta_i M B(i)].$$
(3.12)

然后从方程(3.4),(3.5)和(3.7)我们得到了一个量子卡诺循环中工作物质对外净做功量

$$W_{\rm C}^{\rm TLS} = (T_h - T_l) \left[S^{\rm TLS}(B) - S^{\rm TLS}(A) \right].$$
 (3.13)

另外一个基于二能级系统的量子热机是光子卡诺热机[46, 47, 54]。经过与上面相似的计算,我们可以得到这个光子卡诺热机的的工作效率,也就是方程(3.8)中1 – *T_l*/*T_h*。由此我们可以进一步得到这个量子热机的正功条件*T_h* > *T_l*。因此,光子卡诺热机事实上就是一个二能级的量子卡诺热机。

谐振子

对于一个基于谐振子的量子热机(谐振子的本征能量为 $E_n(i) = (n+1/2)\hbar\omega(i)$),利用方程(3.6), 我们得到工作物质的熵 $S^{\text{HO}}(i)$ 的表达式

$$S^{\rm HO}(i) = -k_B \ln[1 - e^{-\beta_i \hbar \omega(i)}] + k_B \beta_i \hbar \omega(i) \frac{1}{e^{\beta_i \hbar \omega(i)} - 1}, \qquad (3.14)$$

以及一个量子卡诺循环中工作物质对外做功量

$$W_{\rm C}^{\rm HO} = (T_h - T_l) \left[S^{\rm HO}(B) - S^{\rm HO}(A) \right].$$
(3.15)

无限深势阱系统

对于一个基于无限深势阱系统的量子热机(它的本征能级是 $E_n(i) = \gamma_i n^2$,其中 $\gamma_i = (\pi\hbar)^2/(2mL_i^2)$; $m \, \pi L_i$ 分别是粒子的质量以及i时刻势阱的宽度),工作物质的熵可以通过如下 公式求得(3.6):

$$S^{\rm IS}(i) = \frac{k_B}{2} + k_B \ln\left(\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\beta_i \gamma_i}}\right). \tag{3.16}$$

在求上述方程(3.16)时,我们取了一个近似

$$\sum_{n=1}^{\infty} e^{\gamma_i n^2} \approx \int_0^{\infty} e^{\gamma_i n^2} dn.$$
(3.17)

因此一个量子卡诺循环中工作物质的对外做功量能够表达成(3.7)式

$$W_{\rm C}^{\rm IS} = (T_h - T_l) \left[S^{\rm IS}(B) - S^{\rm IS}(A) \right].$$
(3.18)

我们把这些结果列在了后面的表3.3中。

在结束这一节之前,我们强调一点:本节提到的量子热机模型只能用那些只具有离散能谱结构 的系统(或者说所有的本征态都是束缚态的系统)来实现。除了谐振子和无限深势阱系统,还可以找 到其它一些量子力学系统(比如量子转子[21])也满足离散能谱结构的要求,因此它们也可以用来实 现我们的量子热机。但是我们还不会处理那些具有连续能谱结构的量子系统,比如库仑势或有限深 势阱系统。因为对于这些具有连续谱量子系统,我们还没有办法严格定义量子绝热过程(量子绝热 条件很难被满足)。今后我们将会把现在的研究推广到有连续能谱结构的量子系统。

3.2 量子奥托热机循环

量子奧托热机循环是另一类很重要的量子热机循环。它也引起了很多人的关注[31, 32, 33, 62, 63, 64]。与卡诺循环类似, 经典奥托循环的量子力学对应也有很多研究, 见文献[31, 33, 48, 49, 50]。 实际上, 汽车的内燃机所进行的循环就是经典奥托循环(而非经典卡诺循环)[62]。奥托循环由两个 经典的等容过程和两个经典的绝热过程构成。量子奥托循环由两个量子等容过程和两个量子绝热过 程组成[32, 33, 63, 64](一个基于二能级系统的量子奥托热机的示意图见图6)。



Figure 6: 基于二能级量子系统的量子奥托热机的示意图。 $T_h 和 T_l 分别是两个热库的温度。<math>\Delta_1 Q \Delta_2 分别是$ 两个量子等容过程中二能级系统的能级差。势阱很窄时,系统地能级差很大,而势阱很宽时,系统地能级 差很小。本图取自文献[31]。

3.2.1 量子奥托热机的性质

在量子等容热化的过程中(图7中 $A \longrightarrow B$),工作物质不对外做功,但是它从热源吸收热量。在此过程中工作物质的吸热量 $Q_{\rm in}^{\rm QIC}$ 可以表示成

$$Q_{\rm in}^{\rm QIC} = \sum_{n} \int_{A}^{B} E_n \, dP_n = \sum_{n} E_n^h \left[P_n(B) - P_n(A) \right],\tag{3.19}$$

其中 E_n^h 是量子等容热化过程 ($A \longrightarrow B$)中,工作物质的第n个本征能级的能量。与此类似,我们可以得到它在量子等容冷却过程 ($C \longrightarrow D$)中放出的热量。

$$Q_{\text{out}}^{\text{QIC}} = -\sum_{n} \int_{C}^{D} E_{n} \, dP_{n} = \sum_{n} E_{n}^{l} \left[P_{n}(C) - P_{n}(D) \right], \tag{3.20}$$

其中, E_n^l 是量子等容冷却过程中工作物质的第n个本征能级能量。需要指出的是,在计算 Q_{in}^{QIC} 及 Q_{out}^{QIC} 时, 不能应用公式(3.4)和(3.5)。因为dQ = TdS只适用于热平衡过程,而在量子等容过程中,工作物质和 热库并非总是处于热平衡(其实它们只有在等容过程的最后时刻B点和D点才达到热平衡),即等容 过程不是热力学可逆的(我们还将在后面3.3.2节仔细讨论这一点)。

上面我们提到,为了构造一个量子卡诺热机,在量子绝热过程中所有的能级差必须按同一比例 变化。但是对于一个基于多能级系统的量子奥托热机并没有这样的要求(见[33]),因为量子奥托热 机并不需要保证可逆性。不过,为了便于和前面提到的量子卡诺热机进行比较,我们在这里只考虑 基于多能级系统的量子奥托热机循环的一种特殊情况--在量子绝热过程中所有能级差按统一比例 变化的情形, $E_n^h - E_m^h = \alpha(E_n^l - E_m^l)$, (n = 0, 1, 2, ...)(后面我们还将仔细讨论各个能级差在量子 绝热过程中按不同比例变化的情形)。在量子绝热过程中工作物质在个能级的布居数保持不变,也 就是 $P_n(B) = P_n(C)$ 及 $P_n(A) = P_n(D)$ 。因此量子绝热过程中工作物质的熵保持不变S(B) = S(C)及S(A) = S(D)。这与量子卡诺热机循环完全相同。



Figure 7: (A); 一个基于二能级量子系统的*量子*奧托热机的示意图。点划线和虚线代表量子等温过 程。 $\Delta_h \Delta \Delta_l$ 是二能级系统在两个等容过程($A \longrightarrow B \Delta C \longrightarrow D$)中的能级差。 $P_e^h \Delta P_e^l$ 是系统在激发态 的布居数。 $A \longrightarrow B \cup \Delta C \longrightarrow D$ 是两个量子等容过程, 而 $B \longrightarrow C \cup \Delta D \longrightarrow A$ 是两个量子绝热过 程。T(i), (i = A, B, C, D)是工作物质在i时刻的有效温度,并且 $T(B) = T_h$, $T(D) = T_l$ 。(B): 经典奥托 热机的压强-体积 (PV)图。 $V_h \Delta V_l$ 时工作物质在两个等容过程中的体积。 $1 \longrightarrow 2(3 \longrightarrow 4)$ 是经典等容热 化 (冷却)的过程, 而 $2 \longrightarrow 3(4 \longrightarrow 1)$ 是经典的绝热膨胀 (压缩)过程。工作物质在2和4时刻的温度分别 等于两个热库的温度 $T_h n T_l$ 。(C); 基于二能级量子系统的*量子*奥托循环的温度-熵 (T - S)图[58]。(D); 基于理想气体的经典奥托循环的的温度-熵 (T - S)图[58]。(C)和(D)两个T - S图成为沟通*量子*和经典奥 托循环的桥梁。

基于上述事实和方程(3.19)及(3.20),我们得到了一个量子奥托循环过程中工作物质对外净做功量

$$W_{\rm O} = Q_{\rm in}^{\rm QIC} - Q_{\rm out}^{\rm QIC} = \sum_{n} (E_n^h - E_n^l) \left[P_n(B) - P_n(A) \right].$$
(3.21)

以及量子奥托热机循环的效率

$$\eta_{\rm O} = \frac{W_{\rm O}}{Q_{\rm in}^{\rm QIC}} = 1 - \frac{1}{\alpha}.$$
(3.22)

以上面提到的三个用来实现量子卡诺循环的物理系统(二能级系统,谐振子,无限深势阱系统)为例,我们可以利用公式(3.21)来计算一个量子奥托循环中热机对外净做功量。

$$W_{\mathcal{O}}^{\mathrm{TLS}} = (\Delta_h - \Delta_l) \left(\frac{1}{1 + e^{\beta_h \Delta_h}} - \frac{1}{1 + e^{\beta_l \Delta_l}} \right).$$
(3.23)

$$W_{\rm O}^{\rm HO} = \hbar(\omega_h - \omega_l) \left(\frac{1}{e^{\beta_h \hbar \omega_h} - 1} - \frac{1}{e^{\beta_l \hbar \omega_l} - 1}\right)$$
(3.24)

$$W_{\rm O}^{\rm IS} = \frac{\pi}{8} (\gamma_h - \gamma_l) \left[\frac{1}{(\beta_h \gamma_h)^2} - \frac{1}{(\beta_l \gamma_l)^2} \right].$$
(3.25)

我们很容易算出相应的效率。有关结果见后面的表3.3。

因为*E^h_n* > *E^l_n*,我们很容易看出(3.22)式中 α > 1。上面基于多能级系统的量子奥托热机循环的 一个特殊情形(即所有能级在量子绝热过程中按统一比例变化)是对基于二能级系统的量子奥托热 机循环[31, 33]的一个推广。从方程(3.21)我们知道,这样一个特殊的多能级量子奥托热机循环的正 功条件是

$$T_h > \alpha T_l. \tag{3.26}$$

很显然这个正功条件不同于量子卡诺热机的正功条件T_h > T_l。

我们顺便指出,文献中提到的第一个量子热机模型[43]事实上是一个量子奥托热机模型。因为它的热机效率和正功条件分别是 $\eta = 1 - \nu_1/\nu_p \pi T_1 > (\nu_p/\nu_1)T_0$ 。这里 $\nu_1 \partial \nu_p \partial$ 别是工作物质的两个能级差, $T_1 \pi T_0 \partial$ 别是两个热库的温度。

3.2.2 量子奥托热机与经典奥托热机的等价性

下面我们来证明量子奥托热机的效率 $\eta_O(3.22)$ 等价于经典奥托热机的效率 η_O^{CL} 。为了简单起见,这里我们以基于二能级系统的量子奥托热机为例。对于一个二能级系统(见图6及7)当热源的温度T固定,工作物质(二能级系统)和热库达到热平衡时,它在激发态 $|e\rangle$ 上的布居数 P_e 是两能级的能级差 Δ 的单调递减函数[31, 55, 56]。这个函数的反函数是

$$\Delta_{\theta} = k_B T_{\theta} \ln \left[\frac{1}{P_e^{\theta}} - 1 \right], \quad \theta = h, l.$$
(3.27)

我们上面提到,那样图7中的四边形ABCD代表的量子奥托循环的效率ηο可以表达为

$$\eta_{\rm O} = 1 - \frac{\Delta_l}{\Delta_h}.\tag{3.28}$$

Table 3: 量子奧托热机和经典奧托热机。这里 "CIC"和 "CA"分别指的是 "经典等容过程"和 "经典绝热过 程"; "QIC"和 "QA"分别指的是 "量子等容过程"和 "量子绝热过程"。 $V_h n V_l$ 是两个经典等容过程中工 作物质 (经典理想气体)的体积; γ 是绝热指数。T(i) (i = A, B, C, D)和 T_k (k = 1, 2, 3, 4)的定义见 图7。

	冲程	效率	正功条件
经典	CIC-CA-CIC-CA	$\eta_{O}^{CL} = 1 - \left(\frac{V_{h}}{V_{l}}\right)^{\gamma-1} \\ = 1 - \frac{T(C)}{T(B)} = 1 - \frac{T(D)}{T(A)}$	$T_h > T_l (\frac{V_l}{V_h})^{\gamma - 1}$
量子	QIC-QA-QIC-QA	$\eta_{\rm O} = 1 - \frac{\Delta_l}{\Delta_h}$ $= 1 - \frac{T_3}{T_2} = 1 - \frac{T_4}{T_1}$	$T_h > T_l(\frac{\Delta_h}{\Delta_l})$

从方程(3.27)和(3.28)以及图7我们可以将上述的量子奥托热机的效率ηο重新表述为

$$\eta_{\rm O} = 1 - \frac{T(C)}{T(B)} = 1 - \frac{T(D)}{T(A)}.$$
(3.29)

其中T(i), i = A, B, C, D, 是工作物质在A, B, C和D时刻 (见图7)的有效温度。在上式中我们利用了关系式 $\Delta(C)/\Delta(B) = T(C)/T(B)$ 。这个关系式是缘于量子绝热过程中 $P_e(C) = P_e(B) = P_e^h$ 和方程(3.27)。类似地,我们可以得到关系式 $\Delta(D)/\Delta(A) = T(D)/T(A)$ 。在量子奥托循环中,工作物质在B和D时刻的有效温度T(B)和T(D)分别等于两个热库的温度 $T(B) = T_h$, $T(D) = T_l$ 。经典奥托热机的工作效率 η_{O}^{CL} 是[58]

$$\eta_{\rm O}^{\rm CL} = 1 - \left(\frac{V_h}{V_l}\right)^{\gamma - 1},\tag{3.30}$$

这里 V_l 和 V_h 是工作物质(理想气体)在两个经典等容过程(见图7)中的体积, γ 是经典绝热指数[58]。 由于在经典绝热过程中 $TV^{\gamma-1}$ 是一个常数,我们消去方程(3.30)中的体积,便可以得到

$$\eta_{\rm O}^{\rm CL} = 1 - \frac{T_3}{T_2} = 1 - \frac{T_4}{T_1},\tag{3.31}$$

这里 T_1 , T_2 , T_3 和 T_4 是工作物质在1, 2, 3和4时刻的有效温度。其中工作物质在2和4时刻的有效温度 等于两个热库的温度 $T_2 = T_h$, $T_4 = T_l$ 。从形式上看,这和量子奥托热机的效率(方程(3.29))吻合得 很好。因此我们这里给出的量子奥托热机是经典奥托热机的量子力学推广。有关量子奥托热机和经 典奥托热机的对比列在表3.2中。

4 量子热机的微观模型II - 非平衡态情形

4.1 基于理想腔量子电动力学系统的量子热机(光子热机)

前面一章提到的量子热机其实都只是平衡态情形的(未考虑量子相干性的)热机。作为工作物质的量子力学系统具有离散能级结构(能级差与普朗克常数有关)。我们讨论的热机模型只是



Figure 8: 光子热机的示意图。(A)在这里原子相当于"燃料",而腔中的"光子"相当于"水蒸气"。原子 穿过腔时释放光子,光子推动活塞对外做功。这个过程就相当于燃料燃烧加热水蒸气,水蒸气推动活塞对 外做功。(B)当原子没有量子相干性时,这个光子热机的效率和经典卡诺热机一样。(C)当原子具有一定的 量子相干性时,这种"量子燃料"就会表现出超越经典热机的性质。通俗地说,"量子水蒸气"的温度会超 过"量子燃料"的温度。本图取自文献[46]。

在这一意义上讲是"量子的"。这是关于量子热机的研究的第一步。我们将在上一章工作的基础 上进一步探讨量子相干性对量子热机的影响。其实,研究量子热机的一个重要动机是希望发挥 工作物质的量子相干性这一优势,使量子热机在一个循环中的对外做功量和热机的效率有所提 高[48,49,65,66]。Marlan O. Scully和他的合作者最近设计了一种基于腔量子电动力学系统的量子 热机[46,67,68],也就是光子热机(见图8)[54]。他们设计的热机以微波激射器中的单模光子作为工 作物质。这些单模光子是由带有一定量子相干性的原子在逐个穿过微腔时辐射出来的。在他们的模 型中,腔壁被假设为完全理想的状况,也就是说腔的漏损被忽略掉了。

然而在实际实验装置中,这些腔壁并不能完全反射光子(腔的漏损是不能忽略的),而且原子在 穿过腔时和环境相互耦合,会不可避免地导致它自身的退相干(这里只是指相位消失,也就是退相 位(dephasing)。后面所提到的退相干如果无特殊说明都是指退相位)。一个自然的问题是:光子在 腔中的耗散和原子的退相干会如何影响光子热机的工作效率呢?在本章中,我们修改了Scully和他的 合作者们提出的光子热机的模型[46,67,68]。我们考虑了一个更为实际的腔量子电动力学系统。我 们发现,当腔的品质因子Q减小时(腔的漏损增强时),光子热机的效率降低;当原子发生退相位时, 虽然原子的能量不会损失,光子热机的量子相干性就会消失,从而使量子热机退化成一个"经典热 机"。为了突出重点,我们只是唯象地考虑退相位效果[69]。



Figure 9: 用来构造光子热机的腔量子电动力学系统。当λ型三能级原子穿过腔时,它与腔中的共振光场相 互耦合,并与光场达到稳态。入射三能级原子的两个简并的基态[*g*₁)和[*g*₂)之间有一定的量子相干性。

4.1.1 光场与 \型三能级原子的相互作用

本章考虑的光子热机模型与文献[46, 67, 68]中的光子热机模型类似(示意图见图8和图9)。在这 里用来构造光子热机模型的三能级原子中,基态|g₁〉和|g₂〉是完全简并的。原子和光场的耦合哈密顿 量可以写作[60, 65]

$$H_I = \frac{\hbar\lambda}{\sqrt{2}} |e\rangle \left(\langle g_1| + \langle g_2| \right)\hat{a} + h.c..$$
(4.1)

这里ν是基态和激发态|e)之间的能级差; â是光场的消灭算符; λ是原子和光场的耦合强度。

如果没有光场的耗散(光子漏损)以及原子的退相位, H_I 将完全决定系统随时间的演化。我 们用 $|m\rangle$, $m = 0, 1, 2, \cdots$ 表示光场的Fock态(光子数表象的本征态)。基矢{ $|e\rangle \otimes |m-1\rangle$, $|g_1\rangle \otimes$ $|m\rangle$, $|g_2\rangle \otimes |m\rangle$ }张成 H_I 的一个不变子空间 V_m 。不同的m值对应不同的不变子空间。在 H_I 的每一个不 变子空间中,系统的演化矩阵 $U(\tau) = \exp(-iH_It)$ 可以表示为

$$U_m(\tau) = \begin{bmatrix} C_m(\tau) & \frac{-i}{\sqrt{2}}S_m(\tau) & -\frac{i}{\sqrt{2}}S_m(\tau) \\ \frac{-i}{\sqrt{2}}S_m(\tau) & C_m^2(\frac{\tau}{2}) & -S_m^2(\frac{\tau}{2}) \\ \frac{-i}{\sqrt{2}}S_m(\tau) & -S_m^2(\frac{\tau}{2}) & C_m^2(\frac{\tau}{2}) \end{bmatrix}.$$
 (4.2)

这里 $C_m(\tau) = \cos(\lambda \sqrt{m}\tau)$, $S_m(\tau) = \sin(\lambda \sqrt{m}\tau)$ 。

光场的初态和原子的初态分别用密度矩阵 $\rho_L(t_i)$ 和 $\rho_A(t_i)$ 来描写。每个原子在腔中停留的时间为 τ ,那么一个原子穿过腔后,光场的约化密度矩阵 $\rho_L(t)$ 将会如下演化,

$$M(\tau) \rho_L(t_i) = Tr_A[U(\tau) \rho_L(t_i) \otimes \rho_A(t_i) U^{\dagger}(\tau)], \qquad (4.3)$$

其中 Tr_A 是对原子自由度部分求迹,"超算符" $M(\tau)$ 可以由演化矩阵 $U(\tau)(4.2)$ 完全确定。

如果原子穿过腔的频率是r,那么腔中光场在t时刻的状态可以用下面的密度矩阵来描写

$$\rho^{L}(t) = M(\tau)^{rt} \rho^{L}(0).$$
(4.4)

它满足的运动方程是

$$\frac{d}{dt}\rho^{\scriptscriptstyle L}\left(t\right) = r\left(\ln M\left(\tau\right)\right)\rho^{\scriptscriptstyle L}\left(t\right). \tag{4.5}$$

对于一个很短的时间 τ ,我们有 $M(\tau) \approx 1$ 。因此我们可以取近似ln [$M(\tau)$] $\approx M(\tau) - 1$ (这个近似的可靠性将在后面的参数估计中得到证实 $\tau \sim 10^{-10}$ s)。运动方程也随之变为

$$\frac{d}{dt}\rho^{L}(t) = r(M-1)\rho^{L}(t).$$
(4.6)

再加上腔的漏损项,辐射场的主方程[60,65]可以写成下面的形式

$$\frac{d}{dt}\rho^{L}(t) = r(M-1)\rho^{L}(t) + L\rho^{L}(t), \qquad (4.7)$$

其中

$$L\rho^{L}(t) = \frac{\upsilon}{2Q} \left[2\widehat{a}\rho^{L}(t)\,\widehat{a}^{+} - \widehat{a}^{+}\widehat{a}\rho^{L}(t) - \rho^{L}(t)\,\widehat{a}^{+}\widehat{a} \right]$$
(4.8)

v是腔场模频率,Q是腔的品质因子。

受文献[46]中提出的新概念"phaseonium"的启发,初始时,我们也把原子制备在有一定量子相干性的态上,这个初态用如下的密度矩阵来描写,

$$\rho_A(0) = p_e \left| e \right\rangle \left\langle e \right| + \left| g \right\rangle \left\langle g \right|. \tag{4.9}$$

其中, p_e 是在激发态 $|e\rangle$ 上的布居数; $|g\rangle\langle g|$ 包含了两个简并基态之间的量子相干性

$$|g\rangle \langle g| = |c_1|^2 |g_1\rangle \langle g_1| + |c_2|^2 |g_2\rangle \langle g_2| + c_1 c_2^* |g_1\rangle \langle g_2| + c_1^* c_2 |g_2\rangle \langle g_1|.$$
(4.10)

 $\rho_A(0)$ 是归一化了的密度矩阵,也就是

$$p_e + |c_1|^2 + |c_2|^2 = 1.$$
 (4.11)

众所周知,原子退相位发生比原子能量耗散发生快得多[60,70,71],因此,在短时间内原子退相位 是主要的退相干机制。因此我们只是唯象地考虑原子退相位。我们所说的考虑原子退相干,就是 把ρ_A(0)中的纯态|g> ⟨g|用混态

$$\rho_g = \sum_{k=1,2} |c_k|^2 |g_k\rangle \langle g_k| + \xi c_1 c_2^* |g_1\rangle \langle g_2| + h.c., \qquad (4.12)$$

替换掉。这里 ξ 是退相干因子,它满足 $|\xi| \leq 1$ [69]。完整的量子相干性用 $\xi = 1$ 来标志。而完全的退相 位用 $\xi = 0$ 来标志。有了上面这些考虑,我们可以这样描述原子的退相位,也就是把初态 $\rho_A(0)$ 变为

$$\rho_D = p_e \left| e \right\rangle \left\langle e \right| + \rho_g. \tag{4.13}$$

4.1.2 主方程的稳态解与光场系统的热化

我们考虑一个与文献[67]中类似的量子热机循环。在这个等温膨胀过程中,注入原子被制备在稍 微偏离热平衡态的状态上(也就是有一定量子相干性)。这些注入的原子充当高温热源的作用。然而 在等温压缩的过程中,这些注入原子被制备在热平衡态上。这些原子起着低温热源的作用。对于一 个很短的时间间隔 τ (这个近似的可靠性由后面的参数得到证实 $\sqrt{m\lambda\tau} \sim 10^{-1}$)我们可以取如下近似

$$C_m(\tau) \simeq 1 - \frac{1}{2}m\lambda^2\tau^2, \qquad (4.14)$$

$$S_m(\tau) \simeq \sqrt{m\lambda\tau}.$$
 (4.15)

这样利用方程(4.7)便得到了腔场平均光子数(n(t))的运动方程

$$\frac{d}{dt}\langle n(t)\rangle = \mu[(2p_e - \theta)\langle n(t)\rangle + 2p_e] - \frac{\nu}{Q}\langle n(t)\rangle, \qquad (4.16)$$

其中

$$\mu = \frac{r\lambda^2\tau^2}{2},\tag{4.17}$$

$$\theta = |c_1|^2 + |c_2|^2 + 2Re(\xi c_1 c_2^*), \qquad (4.18)$$

 $\operatorname{Re}(\xi c_1 c_2^*)$ 表示 $\xi c_1 c_2^*$ 的实部。

在热平衡的时候,原子的布居数 p_e , $|c_1|^2 和 |c_2|^2$ 满足

$$\frac{p_e}{|c_1|^2} = \frac{p_e}{|c_2|^2} = \exp(-\frac{\hbar\nu}{kT}),\tag{4.19}$$

这里*k*是玻尔兹曼常数,*T*是被热化的原子的温度。由于辐射场的弛豫时间非常短,在下面的讨论中我们会直接用到平均光子数运动方程(4.16)的稳态解

$$\langle n_E \rangle = \frac{n}{1 + \zeta(T)} \tag{4.20}$$

来取代平均光子数随时间变化的值 $\langle n(t) \rangle$ 。这里的n是没有原子相干性和腔的漏损时的平均光子数的 稳态解

$$n = \frac{2p_e}{|c_1|^2 + |c_2|^2 - 2p_e},\tag{4.21}$$

而

$$\zeta(T) = \frac{n}{p_e} [\operatorname{Re}(\xi c_1 c_2^*) + \frac{\nu}{2\mu Q}]$$
(4.22)

是一个与温度有关的量,它还包含了腔的漏损和原子的退相位等因素。

我们设想光场服从一个有效温度为T'的玻色分布

$$\langle n_E \rangle = \frac{1}{\exp[\hbar\nu/(kT')] - 1}.$$
(4.23)

在高温极限时,我们可以取如下近似(对于微波腔量子电动力学系统和电路量子力学系统,当有效温度*T*/取为室温或更高时,这个近似是可靠的。)

$$\langle n_E \rangle \approx \frac{kT'}{\hbar\nu}, n \approx \frac{kT}{\hbar\nu}.$$
 (4.24)

进一步,T'可以近似地表达为[46]

$$T' = \frac{T}{1 + \zeta(T)}.$$
 (4.25)

不难看出,有效温度T'不同于T是由于原子相干性和腔的漏损导致。很显然,当 $Q \to \infty$ 和 $\text{Re}(\xi c_1 c_2^*) = 0$,有效温度T'就会回到T。也就是说,当入射原子没有量子相干性而且腔是完全理想的情况下,光 子场的有效温度就回到了入射原子的温度。



Figure 10: 一个光子卡诺热机的温度-熵循环示意图。这里我们既没有考虑腔的漏损,也没有考虑原子的 退相位,也就是说在这里我们取了 $\xi = 1, Q \to \infty$ 。此外我们考虑了一个特殊的相角Arg $(c_1c_2^*) = \pi$ 。这样 导致光子的有效温度 T'_h 比 T_h 高出一定量 $\Delta T_h = n_h T_h |c_1^h c_2^{h*}| / P_e^h$ 。

4.1.3 包含量子相干性的光子热机循环

我们的光子卡诺热机循环包括两个量子等温过程和两个量子绝热过程[67] (见图10)。从现在开始我们用下标(或者上标)h和l分别标志量子等温膨胀过程和量子等温压缩过程。例如n_h和n_l分别代表在量子等温膨胀过程和量子等温压缩过程中的n

$$n_i = \frac{2p_e^i}{|c_1^i|^2 + |c_2^i|^2 - 2p_e^i}, i = h, l.$$
(4.26)

在量子等温膨胀过程中,从一个热平衡态1到另一个热平衡态2(见图10),注入的三能级原子的两个 基态带有一定量子相干性 $\rho_A^h(0) \equiv \rho_A(0)$ 。但是在等温压缩过程3 — 4中(见图10),注入的原子被制 备在热平衡态上

$$\rho_A^l(0) = p_e^l |e\rangle \langle e| + |c_1^l|^2 |g_1\rangle \langle g_1| + |c_2^l|^2 |g_2\rangle \langle g_2|.$$
(4.27)

从上面的事实以及方程(4.22)不难发现,在等温膨胀过程1→2中,

$$\zeta_h(T_h) = \frac{n_h}{p_e^h} [Re(\xi c_1^h c_2^{h*}) + \frac{\nu_h}{2\mu Q}], \qquad (4.28)$$

但是在等温压缩过程3 → 4中

$$\zeta_l(T_l) = \frac{\nu_l n_l}{2\mu Q p_e^l}.\tag{4.29}$$

我们用光子场的熵的表达式[46]

$$S_{i} = k \ln \left(\left\langle n_{E}^{i} \right\rangle + 1 \right) + \frac{\hbar \nu_{i} \left\langle n_{E}^{i} \right\rangle}{T_{i}^{\prime}} \left(i = h, l \right)$$

$$(4.30)$$

来计算量子等温过程的热传递。在一个卡诺循环中,辐射场对外做功量 $\Delta W = Q_{in} - Q_{out}$ 。其中

$$Q_{in} = T'_h[S_h(2) - S_h(1)], \qquad (4.31)$$

$$Q_{out} = T'_{l}[S_{l}(3) - S_{l}(4)], \qquad (4.32)$$

分别是在等温膨胀过程1 → 2中吸收到腔场中的热量和等温压缩过程3 → 4中腔场释放出去的热量。

与文献[67]中的光子热机循环类似,在本章讨论的光子热机循环的等温膨胀过程1 → 2中,辐 射场的频率(也就是腔场的共振模式)变化很小

$$\frac{\left[\nu\left(1\right) - \nu\left(2\right)\right]}{\nu\left(1\right)} \ll 1. \tag{4.33}$$

也就是说,我们可以取如下近似

$$\nu(1) \approx \nu_l \approx \nu(2), \qquad (4.34)$$

 $\nu(3) \approx \nu_h \approx \nu(4).$ (4.35)

在量子绝热过程中,平均光子数不发生变化,也就是

$$\langle n_E^h(2) \rangle = \langle n_E^l(3) \rangle, \qquad (4.36)$$

$$\langle n_E^{h}(4) \rangle = \langle n_E^{l}(1) \rangle.$$
(4.37)

从方程(4.24)我们得到

$$\frac{\nu\left(1\right)}{T_{h}'} = \frac{\nu\left(4\right)}{T_{l}'}, \frac{\nu\left(2\right)}{T_{h}'} = \frac{\nu\left(3\right)}{T_{l}'}.$$
(4.38)

从上面这些结论以及方程(4.30)我们有

$$S_{h}(2) - S_{h}(1) = S_{l}(3) - S_{l}(4).$$
(4.39)

因此,在高温极限时,光子热机的效率 $\eta = (Q_{in} - Q_{out})/Q_{in}$ 可以表达为 $\eta = 1 - T'_l/T'_h$ [67] 或者

$$\eta = 1 - \left[\frac{1+\zeta_h(T_h)}{1+\zeta_l(T_l)}\right] \frac{T_l}{T_h}.$$
(4.40)

4.2 原子退相位 (dephasing) 及光场耗散对量子热机的影响

根据上面的结论我们现在可以分别讨论原子退相位和腔场的漏损对于光子热机性质的影响。首 先我们考虑腔的漏损(光子耗散)对光子热机的影响。为了突出重点,我们考虑没有原子退相位的情 况, $\xi = 1$ 。在理想的情况下腔的漏损可以忽略,也就是 $Q \to \infty$,光子热机的效率(4.40)简化为

$$\eta = 1 - \left[1 + \frac{n_h}{p_e^h} Re(c_1^h c_2^{h*})\right] \frac{T_l}{T_h}.$$
(4.41)

上式就是文献[46]中的结论。这个结论似乎告诉我们,从原则上讲,如果我们能够很好的控制相 角 $\theta = \operatorname{Arg}(c_1^h c_2^{h*})$,也就是总是选取 $\theta = \pi$,这个光子热机便可以从单一热源吸热并对外做功。这显示 了"量子热源"的优越性—我们能够从"量子热源"获得比经典热源更多的有效功。然而在腔的漏损非 常严重时,也就是腔的品质因子非常小 $Q \rightarrow 0$,光子热机的效率衰减到零(这一点很容易验证)

$$\eta \to 1 - \frac{\nu_h n_h p_e^l}{\nu_l n_l p_e^h} \frac{T_l}{T_h} \approx 0.$$
(4.42)

这一点也可以从方程(4.25)直观看出来。当腔的品质因子变得非常小,以至于光场达到稳态时几乎没 有光子可以稳定停留在腔内。结果,两个等温过程中光场的有效温度T'_h和T'_l都变得非常低,"工作物 质"也几乎不能对外做功,因而光子热机的效率降到了零。从数学上可以证明:η是Q的单调递增函 数,当Q小到接近零时,光子热机的效率也降低到零。

第二,我们考虑原子的退相位。从文献[20,60,70,71]中我们知道,实际实验装置中退相位的时间比原子和腔的寿命短得多。当原子和环境耦合很短的时间τ以后,原子密度矩阵中与量子相干性有关的这一项Re(ξc^h₁c^h₂*)变得非常小。我们可以作这样假设:在很短的时间τ内,ξ衰减到零。这样光子 热机的效率(4.40)简化为

$$\eta = 1 - \left[\frac{1 + \nu_h n_h (2\mu p_e^h Q)^{-1}}{1 + \nu_l n_l (2\mu p_e^l Q)^{-1}}\right] \frac{T_l}{T_h}.$$
(4.43)

原则上讲,如果腔是完全理想的 $Q \to \infty$,我们可以从光子热机的效率(4.43)重新得到经典卡诺热机的最大效率 $\eta = 1 - T_l/T_h$ 。也就是说,如果没有腔的漏损,原子的完全退相位使光子热机变成了一个理想的(可逆的)经典热机。与此类似,当腔漏损非常严重时 $Q \to 0$,光子热机的效率(4.43)减小为零(4.42)。

最后我们来分析这个光子热机的"正功条件"[31, 32, 33]。正功条件是指在这个条件被满足时,光子热机才能够对外做正功。从方程(4.40)我们知道这个光子热机的正功条件 $\Delta W = Q_{in} - Q_{out} > 0$ 可以表达成

$$T_h > \frac{1 + \zeta_h(T_h)}{1 + \zeta_l(T_l)} T_l, \tag{4.44}$$

其中 $[1 + \zeta_h(T_h)]/[1 + \zeta_l(T_l)]$ 既可能大于1,也可能小于1。如果 $[1 + \zeta_h(T_h)]/[1 + \zeta_l(T_l)]$ 小于1,这个 奇怪的结论似乎与我们的直观理解矛盾(正如同在文献[46]中的情形一样)。这些奇怪的结论根源 于(在热机的等温膨胀过程中)原子的初态并非处在热平衡态上。换句话说,由于原子的初态带有一定的量子相干性,因而它偏离热平衡态,在等温膨胀过程中用来描述原子的"温度" T_h 本质上说不能



Figure 11: 一个光子卡诺热机的温度-熵循环示意图。由于和环境自的耦合,原子的相干性被破 坏掉了,也就是 $\xi \longrightarrow 0$ 。腔的漏损导致光场的有效温度降低。这里 $\Delta T_h = n_h T_h \nu_h / (2 \mu P_e^l Q)$,以 及 $\Delta T_l = n_l T_l \nu_l / (2 \mu P_e^h Q)$.

被理解成为一个真实的热力学的温度。我们还想指出:当

$$\frac{1 + \zeta_h(T_h)}{1 + \zeta_l(T_l)} < 1 \tag{4.45}$$

时,热力学第二定律没有被违反,因为制备入射原子的相干性需要消耗外部的能量[68]。如果全盘考虑,制备原子相干性所需要的消耗的能量将会抵消上述能量"盈余",从而阻止热力学第二定律被违反的情形出现。另外,我们选择相位θ = π本身类似于一个麦克斯韦妖的操作,但是我们并没有把对麦克斯韦妖的信息擦除包括到整个热力学循环中来(我们还将在后面一章仔细探讨这个问题)。后面会看到,如果全盘考虑所有的因素后,热力学第二定律不会被违反。

5 麦克斯韦妖,量子热机及热力学第二定律

5.1 麦克斯韦妖佯谬

麦克斯韦妖是一种能够区分单个气体分子速度的假想物(见图14(i),它能够让一个容器内运动快("热")的分子和运动慢("冷")的分子分别占据不同的区域,从而使容器中不同区域的温度不同[15]。这个结论似乎与热力学第二定律违背:当把高温和低温分子集合当成两个热源,在它们之间放置的热机,能够利用温差对外做功。综合来看,麦克斯韦妖的引进,使得"从单一热源吸热完全转化为对外做功"成为可能,从而出现了违反热力学第二定律的第二类永动机。这个是1873年麦克斯韦对热力学第二定律的质疑,后来物理学家称之为"麦克斯韦妖佯谬"。

在相当长的时间内,物理学家们没有能够对"麦克斯韦妖佯谬"给出一个很满意的解释。这个问题的一个重要的进展是1929年匈牙利物理学家Leo Szilard引入的单分子热机模型[16](见图14(ii))。

在这个简化了的麦克斯韦妖热机模型中,Szilard首次将信息的概念引入到热力学循环中。他直观地 觉得,麦克斯韦妖测量分子处于左边还是右边是一个获取信息的过程,可能会消耗能量,从而导致 整体的熵增加。如果把这个消耗包含到热力学循环中来,热力学第二定律就不会被违反,麦克斯韦 妖佯谬也就迎刃而解了。

可是Szilard的解释并没有被广泛接受,在随后的几十年内,对这个问题的争论一直没有停止。 在1961年,麦克斯韦妖佯谬的研究有了一个革命性的突破出现。在研究计算过程的热力学本质 时,IBM Watson 研究所的物理学家R.Landauer发现了一个著名定理[72]:擦除1比特的信息将会 导致*k_BT* ln 2的热量的耗散[17]。这就是我们今天所说的Landauer原理(它的证明思想如图13所示), 它把信息理论和物理学的基本问题联系起来。这个原理被提出后不久,R. Landauer的同事C. H. Bennett意识到信息擦除与麦克斯韦妖佯谬问题有极其密切的关系。他在1982年[18]利用Landauer原 理从原理上解决了麦克斯韦妖佯谬[15]。

5.2 有麦克斯韦妖参与的量子热机循环

根据前面提到的Szilard单分子热机中麦克斯韦妖的特点:麦克斯韦妖的操作总是一种"条件性" 的操作(如果它发现粒子处于左边他就记录在左边,如果它发现粒子在右边他就记录在右边:如果 它发现自己记录在右边就让粒子向左边做功,如果它发现自己记录在左边就让粒子向右边做功)。这 和量子计算中的一个两比特逻辑门操作-控制非门(CNOT)非常类似。因为控制非门的操作也正好 是一个"条件性"的操作:如果控制比特处在1就翻转目标比特;如果控制比特处在0就不翻转目标比 特。基于上述相似性,我们希望用两比特逻辑门操作来模拟麦克斯韦妖的功能。在这里提出一个新 的集成了量子麦克斯韦妖的量子热机模型(后面我们把"麦克斯韦妖"简称为"妖")。我们将通过这 个模型来演示麦克斯韦妖的两个基本功能:妖对工作物质的状态进行量子测量并记录,以及妖根据 测量的结果对工作物质进行反馈控制,让其对外做功。我们会在量子力学的框架内演示麦克斯韦妖 的作用。我们设计的量子热机循环包含三个基本的步骤(i)一个控制非门的操作,这个操作是麦克斯 韦妖对工作物质的预测量。通过这个步骤, 妖可以提取工作物质的信息。(ii)麦克斯韦妖 (根据已掌 握的信息)对工作物质进行反馈控制,让它对外做功。(iii) 麦克斯韦妖和工作物质退纠缠,并且与各 自的热库耦合,从而达到各自热平衡态。其中对妖的热化过程就是对妖的信息擦除过程。麦克斯韦 妖在前两个步骤中发挥作用。后面我们还将展示: 如果把对麦克斯韦妖的信息擦除包含到热力学循 环中,违反热力学第二定律的永动机就不会出现了,麦克斯韦妖佯谬问题不复存在了。本章的模型 是对C. H. Bennett从原理上对麦克斯韦妖佯谬问题解决的一个新的例证和新的诠释。

5.2.1 未考虑对麦克斯韦妖信息的擦除

让我们来考虑一个新版的西拉德(Leo Szilard)单分子热机[16]。这个量子热机的工作物质是一个 二能级量子力学系统(如自旋1/2系统)。它的基态和激发态分别用|0)和|1>来表示。二能级系统的能级 差是Δ。我们首先让这个二能级系统和一个温度为T的热库耦合。经过足够长的时间之后,这个二能



Figure 12: Maxwell妖和Szilard的一个单分子热机模型:(i)通过判断分子速度的大小,Maxwell妖通开关 阀门、造成容器的不同区域的温度不同。(ii) Szilard提出的单分子热机模型,是一个简化了的麦克斯韦妖 热机模型。其本质把信息的概念引入到了热力学循环中来。如图所示,麦克斯韦妖的作用是:1)确定分子 处在左边还是右边并且记录信息,和2)根据它掌握的信息让单分子推动活塞对外做功:如果它发现分子在 左边就让它向右运动做功,如果它发现分子在右边就让它向左边运动做功。Szilard直观地认为,麦克斯韦 妖测量分子处于左边还是右边的过程会消耗功,从而导致整体熵增。这保证了热力学第二定律不会被违 反。



Figure 13: Landauer原理与擦除信息:通过外力做功的办法擦除信息,记忆单元中的分子都确定地处于在 容器的左边。(a)分子开始以50%的几率处于A或者B区域,信息熵为 $S = k_B \ln 2$ 。($a \rightarrow b$)不管分子在右边 还是在右边,从右边向左推动活塞,等温压缩气体(图b)。当活塞达到中间时(图c),分子最后在确定的 左态,信息完全擦除。在此过程中,外界对系统做功 $W = k_B T \ln 2$,而系统的Shannon信息熵从ln 2 变到0,因此外界的熵就会增加。

级系统和热库达到热平衡状态。这个热平衡态可以用密度矩阵ρ(0)来描述。

$$\rho(0) = p(1)|1\rangle\langle 1| + p(0)|0\rangle\langle 0|, \tag{5.1}$$

其中,二能级系统在各个能级上的布居数p(1)和p(0)完全由热库的温度T以及二能级间的间距 Δ 决定 $p(1) = \exp(-\beta\Delta)/z, p(0) = 1/z, z = 1 + \exp(-\beta\Delta)$ 。第二步,麦克斯韦妖对这个二能级系统作一次测量。如果测量的结果确定系统处于激发态,妖就翻转二能级系统,让它对外做功,这个翻转过程中二能级系统对外做功量是 Δ 。如果测量结果确定系统处于基态,那么就不翻转二能级系统,因而二能级系统也不会对外做功。上述步骤完成后再让这个二能级系统和热库开始耦合,一个新的循环又开始了。这是一个有麦克斯韦妖参与的三步(三冲程)量子热机。(类似的讨论还可以见文献[31])。很容易看出,这个复合量子热机热机的净效果是从单个热库吸热,并把吸收的热量全部转化为对外做功。平均一个周期热机对外做功量是 $P_1\Delta$ 。这里似乎出现了第二类永动机。这里出现的看似对热力学第二定律"违反"的现象,是由于在整个循环中未考虑对麦克斯韦妖信息的擦除。这个模型其实是"麦克斯韦妖佯谬"的量子力学推广。然而,当麦克斯韦妖被包含在热力学循环中来的时候,这个所谓的"佯谬"不复存在了,就不会有对热力学第二定律的违反,这个所谓的"佯谬"也不复存在了。下面我们来看对麦克斯韦妖的信息擦除包含到热力学循环中来的情形。



Figure 14: Bennett的解释: Mexwell妖参加了热力学循环过程,它应当作为循环做功物质或热机不可忽略的一部分。在热力学循环过程中重启时,热机必须恢复初始状态,而作为热机的一部分的Maxwell妖也必须如此。对于要来说,它要做的就是清空自己记忆的信息,这需要额外的能量。这里上部分为热机,下面的部分为Maxwell妖。(a)初始时,单分子热机的分子可以在整个空间里自由运动,Maxwell妖记忆单元中分子位于左边。(b)Maxwell妖在热机的中间加上一个挡板,同时自己也记忆了分子的位置信息,相应地把自己的记忆单元中的分子置于右边。(c,d)这两个过程中热机可以对外做功,单独地从热机考虑,我们就会认为热力学第二定律被违反了。但是这里一个循环并没有完成: Maxwell妖的记忆单元并没有完成 重置。(e,f)这里完成了记忆单元的重置,擦除记忆单元中的信息需要外界做功。对于准静态过程,热机由于Maxwell妖对外做的功和外部清除Maxwell记忆单元的功是相同的,即k_BT ln 2。因此把Maxwell要作为一部分考虑后,热力学第二定律并没有被破坏。



Figure 15: 一个有麦克斯韦妖参与的量子热机循环的示意图。量子比特S是"工作物质",它被麦克斯韦 妖(另一个量子比特)D监视和控制。中间的一个包含有字母"c"的圆圈表示S和D之间的可控的耦合。S 加上D构成了整个量子热机的主要部分。Q_{in}和Q_{out}代表热机的吸热和防热;W代表热机的对外做功。根 据Landauer原理,如果把对妖怪D的信息擦除包含到热力学循环中来,热力学第二定律被违反的情况就不 会出现。

5.2.2 考虑对麦克斯韦妖信息的擦除

图15中的量子热机的主体部分是个两比特组成的复合系统:"工作物质"*S*和"量子麦克斯韦妖"*D*。他们分别与温度为 T_S 和 T_D 的两个热库耦合。利用泡利矩阵 $\sigma_{\alpha}^{(F)}$ ($F = S, D; \alpha = x, y, z$),这两个二能级耦合系统的哈密顿量可以表示为

$$H_{I} = \sum_{F=S,D} \Delta_{F} \sigma_{z}^{(F)} + E_{L} \left(\sigma_{x}^{(S)} \sigma_{x}^{(D)} - \sigma_{y}^{(S)} \sigma_{y}^{(D)} \right),$$
(5.2)

其中Δ_F是量子比特的能级差, *E*_L是*S*和*D*之间可控的耦合强度。利用方两量子比特间可控的*XY*型的相互作用(5.2),我们可以实现各种量子逻辑们操作 [73]。顺便指出,类似的哈密顿量在文献 [74] 中被用来研究量子热机的"摩擦"行为。后面我们将看到,这里讨论的量子热机循环与文献 [32, 31, 33, 56, 63, 74]中讨论的量子奥托循环很类似。现在我们来研究这个量子热机循环的每一个步骤,并且来计算每一步骤中的做功和热交换。

S1:通过调解 $E_L = 0$,使S和D解耦合,并且让他们分别与温度为 T_S 和 T_D 的两个热库耦合。两个量子比特S和D将分别与他们各自的热库达到热平衡。我们来仔细讨论一下两个量子比特与热库的热化问题。两个热库可以用两组处于不同温度,如 T_S 和 T_D ,的多模谐振子来模拟。对于频率为 ω_F (F = S, D)的模式,这两个热库的平均热激发为 $n(T_F, \omega_F) = 1/[\exp(\beta_F \omega_F) - 1]$ 。热化过程完成后,量子比特的两能级上F的布居数之差可以利用下式求得[60]

$$\langle \sigma_z^{(F)}(t) \rangle = \frac{1}{2} \left(\langle \sigma_z^{(F)}(0) \rangle M_F + 1 \right) e^{-2\gamma_F t} - (1/M_F) ,$$
 (5.3)

其中 $M_F = 1 + 2n(T_F, \Delta_F)$ 是不随时间变化的。量子比特F的衰减率 γ_F 依赖于具体的物理系统。 当 $t \gg 1/\gamma_F$ 时,量子比特F将会趋近于它的稳态 $\rho_F(1)$,这个稳态可以用下面的密度矩阵描写

$$\rho_F(1) = p_F(1) |1_F\rangle \langle 1_F| + p_F(0) |0_F\rangle \langle 0_F|, F = S, D.$$
(5.4)

这里 $p_F(1) = \exp(-\beta_F \Delta_F)/z_F \pi p_F(0) = 1/z_F$ 是二能级系统的布居数; $z_F = 1 + \exp(-\beta_F \Delta_F)$ 是 配分函数, $\beta_F = 1/(k_B T_F)$,其中 k_B 是玻尔兹曼常数。从方程(5.3)我们可以看出 $\langle \sigma_z^{(F)}(t \to \infty) \rangle_s = -1/M_F$ 。利用 $p_F(1) \pm p_F(0) = \langle \sigma_z^{(F)}(t) \rangle^{(1\mp1)/2}$,我们可以进一步得到二能级系统稳态布居数 $p_F(1) = (1 - 1/M_F)/2$ 。需要强调的是,方程(5.3)中S的平均值的渐进行为 $\langle \sigma_z^{(F)}(t \to \infty) \rangle_s$ 与系统最初的状态 无关,因为最初的状态被量子耗散擦除了,其衰减率为 γ_F 。无论系统的初态是什么,两个量子比特S 和D最终都会与它们各自的热库的达到热平衡。我们选择了S和D的基态能为能量零点。整个系统被 热化以后的状态 $\rho(1) = \rho_S(1) \otimes \rho_D(1)$ 可以表示为

$$\rho(1) = p_{S,D}^{1,1} |1,1\rangle\langle 1,1| + p_{S,D}^{1,0} |1,0\rangle\langle 1,0| + p_{S,D}^{0,1} |0,1\rangle\langle 0,1| + p_{S,D}^{0,0} |0,0\rangle\langle 0,0|,$$
(5.5)

其中 $F, F' = S, D, q, q' = 0, 1, |q, q'\rangle \equiv |q_S\rangle \otimes |q'_D\rangle, p_{F,F'}^{q,q'} \equiv p_F(q) p_{F'}(q')$ 是联合几率。

S2: 第二步是一个控制非门(CNOT)操作。可以把它理解成麦克斯韦妖对工作物质S的量子预测量[75]。只有当S处在激发态的时候翻转D[76]。在这一步骤中,麦克斯韦妖D获取并记录了有关工作

物质S的信息。这个控制非门[73]可以利用哈密顿量(5.2)来实现。而且这个过程进行得如此之快,以 至于在此过程中S和D与热库的相互作用可以被忽略。在第二步完成以后,描写整个系统的密度矩阵 由ρ(1)变成了

 $\rho(2) = p_{S,D}^{1,1} |1,0\rangle\langle 1,0| + p_{S,D}^{1,0} |1,1\rangle\langle 1,1| + p_{S,D}^{0,1} |0,1\rangle\langle 0,1| + p_{S,D}^{0,0} |0,0\rangle\langle 0,0|.$ (5.6)

 $\rho(2)$ 态的熵与 $\rho(1)$ 态的熵是相等的,也就是说测量不会导致熵增[17, 18, 77, 75]。这一点和Landauer原 理非常吻合。

S3: 在第三步中,麦克斯韦妖D根据它获得的有关工作物质S的信息,控制工作物质对外做功。 在物理上讲,这个步骤是工作物质经历一个条件动力学演化(CEV) U_c 。这个条件动力学演化也可 以利用前面提到的哈密顿量(5.2)实现。也就是 $|q_S\rangle \otimes |q'_D\rangle \rightarrow (U_c)^{q'} |q_S\rangle \otimes |q'_D\rangle$, $U_c |q_S\rangle = |\tilde{q}_S\rangle$ 。其 中 $|\tilde{1}_S\rangle = \cos\theta |1_S\rangle + \sin\theta \exp(i\varphi) |0_S\rangle$, 和 $|\tilde{0}_S\rangle = -\sin\theta |1_S\rangle + \cos\theta \exp(i\varphi) |0_S\rangle$ 是工作物质S经过 条件动力学演化以后达到的状态; θ 和 φ 是实参数。控制非门操作实际上是一种特殊的条件动力学演 化 ($\theta = \pi/2$)。第三步骤完成以后,描写整个系统状态的密度矩阵就由 $\rho(2)$ 演化成

 $\rho(3) = p_{S,D}^{1,1} |1,0\rangle \langle 1,0| + p_{S,D}^{1,0} |\tilde{1},1\rangle \langle \tilde{1},1| + p_{S,D}^{0,1} |\tilde{0},1\rangle \langle \tilde{0},1| + p_{S,D}^{0,0} |0,0\rangle \langle 0,0|.$ (5.7)

在上述的第二步和第三步中,态的改变可以表示为下式

$$\begin{array}{ll} |0,0\rangle & \rightarrow \text{CNOT} & |0,0\rangle & \rightarrow \text{CEV} & |0,0\rangle \\ |0,1\rangle & \rightarrow \text{CNOT} & |0,1\rangle & \rightarrow \text{CEV} & |\tilde{0},1\rangle \\ |1,0\rangle & \rightarrow \text{CNOT} & |1,1\rangle & \rightarrow \text{CEV} & |\tilde{1},1\rangle \\ |1,1\rangle & \rightarrow \text{CNOT} & |1,0\rangle & \rightarrow \text{CEV} & |1,0\rangle \end{array}$$

$$(5.8)$$

最后,通过设置耦合强度*E_L* = 0,让工作物质*S*和麦克斯韦妖*D*完全解耦,并且让他们与各自的 热库重新耦合。这样,一个新的循环开始了。在热化过程中没有做功,但是热库与*S*和*D*之间有热交 换。*D*的热化过程本身是一个"信息擦除"的过程。这种利用低温热库来实现的"零做功"的信息擦 除方法首先是由E. Lubkin在文献[78]中引入的。

对于上面描述的一个热力学循环, 热机的做功量是 $W = -(E''_{S} + E''_{D} - E_{S} - E_{D}) = \Delta_{S}(p^{1,0}_{S,D} - p^{1,0}_{S,D} |\langle \tilde{1} | 1 \rangle|^{2} - p^{0,1}_{S,D} |\langle \tilde{0} | 1 \rangle|^{2}) + \Delta_{D}(p^{1,1}_{S,D} - p^{1,0}_{S,D}),$ 这里的 $E''_{S}(E_{S})$ 和 $E''_{D}(E_{D})$ 分别是工作物质S和 麦克斯韦妖D完成第一步(第三步)以后的内能。工作物质从热源吸收的热量为 $Q_{\text{in}} = E_{S} - E''_{S} = \Delta_{S}(p^{1,0}_{S,D} - p^{1,0}_{S,D} |\langle \tilde{1} | 1 \rangle|^{2} - p^{0,1}_{S,D} |\langle \tilde{0} | 1 \rangle|^{2})$ 。基于上述结论,这个热机的工作效率 η 可以表述为

$$\eta = \frac{W}{Q_{\rm in}} = 1 - \frac{\Delta_D}{\Delta_S} \xi, \tag{5.9}$$

其中

$$\xi = \csc^2 \theta \left(p_{S,D}^{1,1} / p_{S,D}^{1,0} - 1 \right) \left(p_{S,D}^{0,1} / p_{S,D}^{1,0} - 1 \right)^{-1}.$$
(5.10)

方程(5.9)隐含了 $\xi \ge 0$ (以确保工作效率 $\eta < 1$)。方程(5.10)中 ξ 的第一个因子是大于零的,同时,第二 个因子 (可以简化为exp($-\beta_D \Delta_D$) – 1) 是负的。因此,我们得出结论 ξ (5.10)的第三个因子也是负的。



Figure 16: 一个等价于量子奥托热机循环的量子热机循环的示意图。这个量子热机循环包含两个步骤: 1)一个两量子比特间的SWAP操作,如图 (b),和2)一个与它们各自热库的热化过程,如图 (a)。图(c)表示从图 (b) 到图 (a) 的中间过程。这里的SWAP操作取代了量子奥托热机循环的两个量子等容过程 (见图7)。

这导致 $T_S \ge T_D(\Delta_S/\Delta_D)$ 。它和简单量子奥托热机的正功条件(见表3.2及文献[31, 32, 33, 56, 63]) 正好一致。这种一致性是非平庸的。在这里 T_S 和 T_D 是热力学循环中与量子比特S和D耦合的热库的 温度。这与文献[31, 32, 33, 56, 63]中的温度不同,那里的温度是热力学循环的两个等容过程中热库 的温度。这个有麦克斯韦妖参与的量子热机循环很容易让人联想到前面的量子奥托热机,尤其是基 于二能级系统的量子奥托热机。因为它们两者的正功条件的形式完全一样,热机效率也很相似。下 面我们就来看这个复合量子热机是如何等同于一个简单量子奥托热机的。

5.2.3 一个等效的量子奥托热机的循环

我们要探讨的一个等价于量子奥托热机循环的热力学循环,它与文献[76]中提到的量子热机循环以及我们最近在文献[62]中给出的一个量子热机循环很类似。如图16示意的那样,我们用两个二能级系统(两个量子比特)作为工作物质。这两个量子比特分别用S和D来表示。相应的,它们的能级差分别用 Δ_S 和 Δ_D 来表示。两个热源的温度分别是 T_S 和 T_D 。不失一般性,我们作如下的假定: $T_S > T_D$ 以及 $\Delta_S > \Delta_D$.

这个量子热机循环包含两个步骤:1) 让这两个量子比特之间解耦合,并且让它们与各自的热库 耦合。直至它们与各自的热库达到热平衡;2)开启两个量子比特间的耦合并且完成一个SWAP操作。 这两个步骤分别见图16(a)和16(b)。步骤1)完成后,两个量子比特的状态可以用下面的密度矩阵来描写

$$\rho_i(1) = \frac{1}{Z_i} \left[\left| 0 \right\rangle_i \left\langle 0 \right|_i + e^{-\beta_i \Delta_i} \left| 1 \right\rangle_i \left\langle 1 \right|_i \right], \quad (i = S, D), \tag{5.11}$$

其中 $\beta_i = 1/k_B T_i$ 。为了简单起见,我们在这里选取了基态的本征能为能量零点。完成步骤2)以后,描述系统状态的密度矩阵变成了

$$\rho_S(2) = \frac{1}{Z_D} \left[\left| 0 \right\rangle_S \left\langle 0 \right|_S + e^{-\beta_D \Delta_D} \left| 1 \right\rangle_S \left\langle 1 \right|_S \right], \tag{5.12}$$

$$\rho_D(2) = \frac{1}{Z_S} \left[|0\rangle_D \langle 0|_D + e^{-\beta_S \Delta_S} |1\rangle_D \langle 1|_D \right].$$
(5.13)

这两个步骤完成以后,让两个量子比特解耦合,并且重新让它们与各自的热库接触。一个新的热力 学循环又开始了。

现在来计算步骤1中量子比特S的吸热量和量子比特D的放热量了:

$$Q_{\rm in} = \operatorname{Tr}[H\rho_S(1)] - \operatorname{Tr}[H\rho_S(2)] = \Delta_S \left(\frac{1}{Z_S}e^{-\beta_S\Delta_S} - \frac{1}{Z_D}e^{-\beta_D\Delta_D}\right), \quad (5.14)$$

$$Q_{\text{out}} = \text{Tr}[H\rho_D(2)] - \text{Tr}[H\rho_D(1)] = \Delta_D \left(\frac{1}{Z_S} e^{-\beta_S \Delta_S} - \frac{1}{Z_D} e^{-\beta_D \Delta_D}\right).$$
(5.15)

这个量子热机 (循环)的效率η可以直接计算如下

$$\eta = \frac{Q_{\rm in} - Q_{\rm out}}{Q_{\rm in}} = 1 - \frac{\Delta_D}{\Delta_S},\tag{5.16}$$

且它的正功条件是 $T_S > (\Delta_S / \Delta_D) T_D$ 。因此,由这两步骤构成的热力学循环完全等价于一个量子奥托热机的循环。

我们在这里还顺便提一下一个基于两比特SWAP操作的等效量子卡诺循环。这个等效量子卡诺 循环包含三个步骤:1)让这两个量子比特解耦并且让它们与各自的热库耦合,并且经历一个量子等 温过程,2)开启这两个量子比特间的耦合,并且完成一个SWAP操作,以及3)让这两个量子比特解 耦合,并且与它们各自的热库也解耦合,然后经历一个量子绝热过程使它们回到步骤1)的初态。在文 献[76]中,作者研究过一个类似的等效量子奥托热机循环和等效量子卡诺热机循环。在那里SWAP操 作被分解成了三个CNOT (控制非门)操作。

5.2.4 麦克斯韦妖佯谬的解决及热力学第二定律的普适性

了解了上面的这个等价于量子奥托热机循环的量子热机循环之后,我们进一步来理解上述麦克 斯韦妖佯谬问题。

对于有麦克斯韦妖参与的量子热机循环中的条件动力学演化(第三步),当我们选择i)条件动 力学演化为特殊的情形 $\theta = \pi/2$,也就是一个控制非门,以及ii)麦克斯韦妖的热源的温度 T_D 足够低, 以至于exp $(-\beta_D\Delta_D) \ll 1$,也就是麦克斯韦妖几乎被它的热库"擦除"到它的基态 $\rho_D(1) \approx |0_D\rangle \langle 0_D|$ [78],我们的复合量子热机的效率(5.9)变为 $\eta = 1 - (\Delta_D/\Delta_S)$ 。这正是一个简单量子奥托热机循 环(没有麦克斯韦妖参与)[31, 32, 33, 56, 63]的效率,也就是我们上面提到的等价于量子奥托热机循 环的量子热机循环的效率。否则,这个热机的效率(5.9)比一个简单量子奥托热机的效率低。这是因为i)当*T_D*足够低的时候,麦克斯韦妖能够被擦除到一个零熵的"标准态"(standard state)[18,78],这样它可以最有效地获取系统的信息,以及ii)相对于所有的条件动力学的演化来说,控制非门是最有效的对外做功的操作。因此,我们的模型给出了一个非常好的例子,来展示了如何利用Landauer原理解决量子麦克斯韦妖佯谬问题。我们的研究在更广泛的范围内确证了热力学第二定律的正确性和普适性。

这里有麦克斯韦妖参与的量子热机模型可以用一个真实的物理系统:超导量子电路来演示,详 细的实现请参见文献[62]。

6 从量子纠缠看量子统计热力学和量子相变

6.1 热化过程,量子纠缠与"广义正则原理"

6.1.1 微正则系综和正则系综

传统的统计力学的教科书,例如文献[38],都假定系统和无穷大热库构成一个封闭的系统,而且 假设系统和无限大热库间的耦合能相对于系统和热库的能量可以忽略。对于一个封闭的物理系统, 能量在E到E + ΔE之间有大量的微观态。微正则系综假设所有这些微观态出现的概率是相同的。

等几率假设:具有相同的宏观量(能量E)的微观态中每个态出现的几率相等。

作为微正则系综的基本假设,等几率假设不能从任何的基本物理原理建立起来,这仍然是一个 尚未解决的问题。最近量子信息中关于量子纠缠的研究使人们开始从新的角度考虑这个问题。关于 这个问题的讨论将在下面的章节展开。

利用微正则系综的等概率假设,可以直接求出和外界有接触的系统的约化密度矩阵满足吉布斯(正则)分布(非对角元为零)。正则系综中所研究的物理系统和大热源接触达到平衡态。经典的正则系综中,系统的体积和粒子数保持固定,但是与大热源之间存在热交换。大热源提供了一个确定的温度,而系统的能量是一个变量。此时,系统和热源构成一个大的孤立系统。在这里我们假设系统和大热源之间的相互作用能量 E_{SB} 很小,远远小于系统的能量 E_S 和热源的能量 E_B ,可以忽略不计。但是这部分相互作用能量 $E_{SB} \neq 0$,否则二者就成为彼此孤立的系统。实际,在动力学上这种相互作用的大小标志了系统和大热源接触被热化的时间的快慢。在忽略了相互作用以后,我们可以假设系统的总能量

$$E = E_S + E_B \tag{6.1}$$

是一个确定的常数。对于系统和大热源所构成的复合孤立系统,能量是*E*的微观态的都是等几率出现的。假设对于能量为*E*的微观态的总数为 $\Omega(E)$,那么单个微观态出现的几率就是 $P = 1/\Omega(E)$ 。下面我们将从哈密顿量和密度矩阵的角度来讨论如何从微正则系综得到正则系综。整个复合体系的哈密顿量 $H = H_S + H_B + V$,其中V是系统和热库之间的相互总用。对于系统,其本征态记

为 $|n\rangle$: $H_S|n\rangle = E_n|n\rangle$ 。一般的, 热库是有多模的体系构成 $H_B = \sum_j H_j$, 每个模式相应的本征态记 为 n_j : $H_j|n_j\rangle = \varepsilon_i^n|n_j\rangle$ 。对于微正则系综, 复合孤立体系的密度矩阵可以写成如下形式:

$$\rho(E,\delta) = \frac{1}{D_{N+1}(E,\delta)} \sum_{(n,\{n_j\})_{E,\delta}} |n\rangle \langle n| \otimes \prod_j |n_j\rangle \langle n_j|
= \frac{1}{D_{N+1}(E,\delta)} \sum_n \left(|n\rangle \langle n| \otimes \sum_{\{n_j\}_{E-E_n,\delta}} \prod_j |n_j\rangle \langle n_j| \right).$$
(6.2)

这里的求和的限制就是前面公式6.1中总能的限制,在这里具体的就是:

$$E < E_n + \sum_j \varepsilon_j < E + \delta.$$
(6.3)

从微正则系综过渡到正则系综,在这里就是消除大热库B的自由度得到系统S的约化密度矩阵:

$$\rho_{S} = Tr_{B}\rho$$

$$= \sum_{m_{j}} \prod_{j}^{N} \langle m_{j} | \rho(E,\delta) | m_{j} \rangle$$

$$= \frac{1}{D_{N+1}(E,\delta)} \sum_{n} \left(|n\rangle \langle n| \otimes \sum_{\{m_{j}\}} \sum_{\{n_{j}\}_{E-E_{n},\delta}} \prod_{j}^{N} \delta_{m_{j},n_{j}} \right)$$

$$= \frac{1}{D_{N+1}(E,\delta)} \sum_{n} \left(|n\rangle \langle n| \otimes \sum_{\{n_{j}\}_{E-E_{n},\delta}} 1 \right)$$

$$= \frac{1}{D_{N+1}(E,\delta)} \sum_{n} D_{N} (E - E_{n},\delta) |n\rangle \langle n|$$
(6.4)

这里的 $D_N(E - E_n, \delta)$ 表示大热库的能量在E到 $E + \delta$ 之间的微观态的数目。系统的能量为 E_n 的态出 现的几率为 $P_n = D_N(E - E_n, \delta) / D_{N+1}(E, \delta)$ 。对于大热源,其能量 $\sum_j \varepsilon$ 远远大于系统的能量 E_n , 即 $E_n << E$ 。系统的统计熵定义为 $S(E) := \ln D_N(E, \delta)$ 。因此把 E_n 作为小量展开得到

$$S(E - E_n) = S(E) - \frac{dS(E)}{dE}E_n = S(E) - \beta E_n, \qquad (6.5)$$

其中 $\beta = dS(E)/dE$ 定义为大热库的温度。在热力学极限 $N \to \infty$ 下,热库中的状态数 $D_N(E, \delta) \sim D_{N+1}(E, \delta)$ 。此时系统状态出现的概率

$$P_n = \frac{D_{N+1} \left(E - E_n, \delta \right)}{D_N \left(E, \delta \right)} \propto e^{-\beta E_n}.$$
(6.6)

其对应的这正是正则系综的分布。至此我们从哈密顿量的角度重新表述了如何从微正则系综得到正则系综。这种表述为下面讨论广义的正则热化奠定了基础。

6.1.2 动力学热化[79]

在讨论广义正则热化之前,我们先讨论一个量子系统在周围的环境的作用下如何趋向对应的 热态分布的。这里我们将从一个简单的例子入手:一个谐振子环境下的谐振子系统的演化。假设a[†] 和a代表频率为 ω 的谐振子的产生和湮灭算子, a_j^{\dagger} 和 $a_j(j = 1, 2, ..., N)$ 代表频率为 ω_j 的谐振子的产生和湮灭算子。在旋转波近似下,总系统的哈密顿量是

$$H = \omega a^{\dagger} a + \sum_{j} \omega_{j} a_{j}^{\dagger} a_{j} + \sum_{j} \left(\xi_{j} a_{j} a^{\dagger} + \text{h.c.} \right).$$
(6.7)

在此哈密顿量下,算符的Heisenberg方程是

$$\dot{a} = -i\omega a - i\sum_{j}\xi_{j}a_{j}, \qquad (6.8)$$

$$\dot{a}_j = -i\omega_j a_j - i\xi_j^* a. aga{6.9}$$

定义 $a = Ae^{-i\omega t}$,得到关于A的Langevin方程为

$$A = -\sum_{j} |\xi_{j}|^{2} \int_{0}^{t} dt' A(t') e^{-i(\omega_{j} - \omega)(t - t')} + G(t), \qquad (6.10)$$

这里的Browm力 $G(t) = -i \sum_{j} \xi_{j} a_{j}(0) e^{-i(\omega_{j}-\omega)t}$ 只和环境的初值有关。为了求解方程(6.10),我们应用Laplace变换 $\overline{A}(s) = \mathcal{L}(A(t))$ 得到

$$\overline{A}(s) = \frac{a(0) + \overline{G}(s)}{s + \sum_{j=1}^{N} \frac{|\xi_j|^2}{s + i(\omega_j - \omega)}},$$
(6.11)

其中

$$\overline{G}(s) = -i\sum_{j} \frac{\xi_{j} a_{j}(0)}{s + i(\omega_{j} - \omega)}.$$
(6.12)

我们先通过Wigner-Weisskopff(WW)近似求解 $\overline{A}(s)$ 的奇点,即

$$s + \sum_{j=1}^{N} \frac{|\xi_j|^2}{s + i(\omega_j - \omega)} = 0.$$
(6.13)

在耦合系数 $\xi_j = 0$ 时, $s_0 = 0$ 。从而在弱耦合极限下, s_0 可以在0附近小量展开为

$$s_0 = s_0^0 + s_0^{(1)} + s_0^{(2)} + \dots ag{6.14}$$

把上述近似解带入方程(6.13),对比同次项的系数可以得到A(s)的奇点为

$$s_0 = -\frac{\gamma}{2} - i\Delta\omega, \tag{6.15}$$

$$\gamma = 2\pi\rho(\omega) |\xi_j|^2, \qquad (6.16)$$

$$\Delta \omega = -\int \frac{\rho(\omega_j) |\xi_j|^2}{\omega_j - \omega} d\omega_j.$$
(6.17)

在这个近似情况条件下,我们可以求得

$$\overline{A}(s) = \frac{a(0)}{s + \frac{\gamma}{2} + i\Delta\omega} - i\sum_{j=1}^{\infty} \frac{\xi_j a_j(0)}{\left[s + i\left(\omega_j - \omega\right)\right] \left[s + \frac{\gamma}{2} + i\Delta\omega\right]}.$$
(6.18)

因此做反Laplace变换后,我们得到算符的演化关系式

$$a(t) = u(t) a(0) + \sum_{j} v_{j}(t) a_{j}(0), \qquad (6.19)$$

其中

$$u(t) = e^{-\frac{1}{2}\gamma t - i\omega_c t},$$
 (6.20)

$$v_j(t) = -\xi_j e^{-i\omega_j t} \frac{1 - e^{-i(\omega_c - \omega)t - \frac{1}{2}\gamma t}}{\omega_c - \omega_j - i\frac{\gamma}{2}}.$$
(6.21)

这里 $\omega_c = \omega + \Delta \omega$ 表示重整化频率。在温度为T的环境中长时间的演化,谐振子系统会趋向相应的热态。为了说明这点,下面我们研究谐振子的粒子数平均值随时间的改变:

$$a^{\dagger}(t) a(t) = |u(t)|^{2} a^{\dagger}(0) a(0) + \sum v_{j}(t) u^{*}(t) a^{\dagger}(0) a_{j}(0) + \sum_{j} u(t) a(0) v_{j}^{*}(t) a_{j}^{\dagger}(0) + \sum_{j_{1}, j_{2}} a_{j_{1}}^{\dagger}(0) a_{j_{2}}(0) v_{j_{1}}(t) v_{j_{2}}^{*}(t)$$
(6.22)

上式对环境自由度在温度为T的热态做平均得到

$$\left\langle a^{\dagger}\left(t\right)a\left(t\right)\right\rangle = e^{-\gamma t}\left\langle a^{\dagger}\left(0\right)a\left(0\right)\right\rangle + \frac{1 - e^{-\gamma t}}{\exp\left(\frac{\omega}{k_{B}T}\right) - 1}.$$
(6.23)

在得到这个式子的时候我们用到了

$$\left\langle a_{j_{1}}^{\dagger}(0) \, a_{j_{2}}(0) \right\rangle_{T} = \frac{1}{\exp\left(\frac{\omega_{j}}{k_{B}T}\right) - 1} \delta_{j_{1}j_{2}}.$$
 (6.24)

因此在长时间情况下,

$$\left\langle a^{\dagger}\left(t\right)a\left(t\right)\right\rangle = \frac{1}{\exp\left(\frac{\omega}{k_{B}T}\right) - 1}.$$
(6.25)

这正是温度为T时候的Bose分布。因此,在动力学上一个系统在热库环境的作用之下会趋向于相应的热态的分布。对于更一般系统的动力学热化可以通过系统的主方程方法进行研究[80],可以证明Gibbs分布是系统在温度为T的环境中的静态解。

6.1.3 广义正则热化

量子统计物理学的两个基本假设是1)随机相位假设和2)等概率假设[81,82]。综合起来就是微正则系综假设。上述的第一个假设保证了描写微正则系综的密度矩阵的非对角元为零,而第二个假设 保证了对角元(各个态出现的几率)都相等。一般的教科书都从热库加系统构成的微正则系综假设 出发,导出系统的正则系综(吉布斯)分布[81,82]。然而,最近有人[6,7]指出上述的两个基本假设其 实是多余的,甚至有些误导。我们完全可以不引入上述的两个假设而直接利用量子纠缠证明系统的 正则系综(吉布斯)分布。这里为了区别起见,我们把除系统之外的部分统称为环境,以区别与有温 度的热库。其基本思想是:在热力学极限下,在系统加环境的波函数的集合中,绝大多数纯态波函数 关于系统的约化密度矩阵都满足正则分布,(或者表述为:对于宇宙的一个足够小的子系统,几乎当 宇宙处于任意一个纯态时(不必是等概率分布的混态),这个子系统都近似地处于正则分布的热态)。 也就是说对于一个足够小的子系统,宇宙处于任何一个纯态或者处于一个等概率分布时候的状态不 可区分。这种现象被称为"广义正则原理"(general canonical principle)或"正则典型性"(canonical typicality)。这样我们就完全放弃了量子统计力学的两个基本假设,而把量子统计力学完全建立在了 量子力学的基础之上。

这种广义的正则原理把微正则系综中关于系统总能量和总粒子数守恒(封闭系统)推广到更为普遍的限制*R*。而这种广义的限制*R*所导致的系综就不再是正则系综的吉布斯分布,而是由*R*所代表的 守恒量所确定的广义的正则分布。

在广义正则热化过程中,系统和环境之间的纠缠扮演了重要的作用。如果系统和环境之间是简 单的直乘形式的直积态,那么约化后的系统的状态就不会是正则系综的Gibbs分布的状态。因此,满 足广义热化的状态是系统和环境之间的纠缠态。在文献[6,7]中研究的系统和环境之间都是无相互作 用的,但是为了使系统和环境之间产生纠缠,它们之间的相互作用是不可或缺的。孙昌璞和其合作 者基于这点考虑了相互作用对广义热化原理的影响。

这里研究的是一个*M*能级的系统,对应的能级能量为{ ε_n }, n = 1, ..., M。环境是有*N*个模式的谐振子构成,相应的谐振子的频率为{ ω_j }, j = 1, ..., N。系统和环境的自由哈密顿量是

$$H_0 = \sum_{n} \varepsilon_n \left| n \right\rangle \left\langle n \right| + \sum_{j} \omega_j a_j^{\dagger} a_j.$$
(6.26)

这里构造一个精确可解的相互作用

$$H_{I} = \sum_{j,n} \lambda_{n} \left| n \right\rangle \left\langle n \right| \left(g_{j} a_{j}^{\dagger} + \text{h.c.} \right).$$
(6.27)

其中 λ_n 是实数。这里[H_S , H_I] = 0。这种相互作用是典型非破坏量子测量的模型。系统的本征态可以用一组量子数[n, { n_i }], 记为

$$|n, \{n_j\}\rangle = |n\rangle \otimes \prod_{j=1}^N |n_j(n)\rangle.$$
(6.28)

对应的体系的能量 $E(n, \{n_j\}) = \epsilon_n(\kappa) + \sum_j^N n_j \omega_j$ 其中 $\epsilon_n(\kappa) = \epsilon_n - \kappa \lambda_n^2, |n_j(n)\rangle = D(\alpha_{jn}) |n_j\rangle$ 是移动的Fock态,相应的算符 $D(\alpha_{jn}) = \exp(\alpha_{jn}a_j^{\dagger} - h.c.)$ 和移动量 $\alpha_{jn} = -\lambda_n g_j/(2\omega_j)$ 。这里 $\kappa = \sum_j |g_j|^2/(4\omega_j)$ 是系统相互作用的体现。、直观地,系统的能级由于相互作用而发生了修正: $\kappa = \sum_j |g_j|^2/(4\omega_j)$ 。对于系统和环境组成的复合系统,总能量壳的限制在这里具体的表述为

$$E \le \epsilon_n - \kappa \lambda_n^2 + \sum_{j=1}^N n_j \omega_j \le E + \delta.$$
(6.29)

对比无相互作用的情况: $E \leq \epsilon_n + \sum_{j=1}^N n_j \omega_j \leq E + \delta$,我们可以看出相互作用在这里的作用实际上 是改变了能壳的形状。为了形象地说明这中变形,我们考虑一个简单的例子: $\epsilon_n = n\omega$, N = 1,即系 统也是谐振子而环境只有一个模式。



Figure 17: 能壳的变形。这里以谐振子作为系统的例子说明这种变形。图中的红色竖线代表没有相互作用时的能壳。而蓝色横线代表有相互作用时已经变形的能壳。

我们开始研究一个纯态纠缠态

$$|\psi\rangle = \sum' C(n, \{n_j\}) |n, \{n_j\}\rangle.$$
 (6.30)

这里的求和∑′就是在前面总能量壳限制下的,为了求得系统的状态,约化掉环境的自由度

$$\rho_{S} = Tr_{B} \left(\left| \psi \right\rangle \left\langle \psi \right| \right)$$
$$= \sum_{n} P_{n} \left| n \right\rangle \left\langle n \right| + \sum_{n \neq m} F_{nm} \left| n \right\rangle \left\langle m \right|.$$
(6.31)

其中 $P_n \equiv P_n(E,\kappa) = \sum'' |C(n,\{n_j\})|^2$, $F_{nm} = \sum \sum C(n,\{n_j\}) C^*(m,\{m_j\}) D_{m\{m_j\}}^{n\{n_j\}} \circ D_{m\{m_j\}}^{n\{n_j\}}$ 是 具有因子化结构的退相干因子, 其具体的的形式为

$$D_{m\{m_j\}}^{n\{n_j\}} = \prod_{j=1}^N d_{m_j(m)}^{n_j(n)},$$
(6.32)

$$d_{m_j(m)}^{n_j(n)} = \Delta_{\alpha}^{(m_j - n_j)} e^{-\Delta_{\alpha}^2/2} L_{n_j}^{(m_j - n_j)} \left(\Delta_{\alpha}^2\right) \sqrt{\frac{n_j!}{m_j!}}.$$
(6.33)

其中 $L_n^m(x)$ 是拉盖尔多项式并且 $\Delta_{\alpha} = -g_j(n_j - m_j)/(2\omega_j)$ 。对于系统和环境自由度足够大的时候, $F_{nm} \to 0$ 。但是对于有限系统, ρ_S 的非对角元是不会消失的,为了看到系统的广义正则热化到Gibbs分布。首先,在纯态空间, $|C(n, \{n_j\})|^2$ 是完全随机的变量,也就是是独立同分布的。这里不失一般性,我们假设波函数都是归一化的。因此根据归一化条件就有

$$\sum_{j=1}^{\prime} |C(n, \{n_j\})|^2 = 1.$$
(6.34)

根据概率论中的大数定理,我们可以确定 $\sum'' |C(n, \{n_j\})|^2$ 的平均值为

$$E\left[\sum_{j=1}^{n} |C(n, \{n_j\})|^2\right] = \frac{\Omega_N (E - \epsilon_n, \delta, \kappa)}{\mathcal{H}_N (E, \delta, \kappa)}.$$
(6.35)

其中 $\mathcal{H}_N(E,\delta,\kappa)$ 表示系统和环境在能壳中的可能的状态数目,而 $\Omega_N(E-\epsilon_n,\delta,\kappa)$ 表示环境 在 $[E-\epsilon_n, E-\epsilon_n+\delta]$ 之间的状态的数目。这里得到的结果类似于前面经典过程中的公式(6.6)。这 两个维数之间有一个简单的关系

$$\mathcal{H}_{N}(E,\delta,\kappa) = \sum_{n} \Omega_{N} \left(E - \epsilon_{n}, \delta, \kappa \right).$$
(6.36)

对于谐振子的环境的情形,环境的状态数可以计算出来为

$$\Omega_N(n) = \frac{\left[E - \epsilon_n(\kappa)\right]^{N-1} \delta}{(N-1)! \prod_{j=1}^N \omega_j^2}.$$
(6.37)

因此,系统在第n个能级上的占据几率是

$$P_n = \frac{\left[E - \epsilon_n\left(\kappa\right)\right]^{N-1}}{\sum_n \left[E - \epsilon_n\left(\kappa\right)\right]^{N-1}}.$$
(6.38)

在这里我们通过熵依然可以定义温度为

$$\beta = \frac{dS(E)}{dE} = \frac{(N-1)\sum_{n} \left[E - \epsilon_n(\kappa)\right]^{N-2}}{\sum_{n} \left[E - \epsilon_n(\kappa)\right]^{N-1}}.$$
(6.39)

当 $\kappa \to 0$ 时,我们就完全回到没有相互作用的情况,因此可以确定在耦合强度很小的时候,仍 然能得到Gibbs分布。下面将具体考虑前面提到的例子,即系统是谐振子, $\lambda_n = n$,环境是由模式 数N = 50,频率相同 $\omega_j = 10_{-3}$ 的谐振子组成。这里我们限制能量是E = 0.5。对应不同耦合强度 κ 的 约化密度的分布在图18中表示出来。

拟合出来的温度和相互作用的关系在表格4里给出.

Table 4: 温度倒数和相互作用强度的关系

κ	5×10^{-9}	5×10^{-8}	5×10^{-7}
β	98.94	98.85	98.69

至此,我们对这种有相互作用的精确可解的模型得到了正则系综的Gibbs分布。因此系统和环境 之间的相互作用是不会影响系统的正则热化的。

6.2 自旋系统的量子相变与量子纠缠

量子信息和理论凝聚态物理的交叉领域日渐成为一个蓬勃发展的新领域。一方面,量子计算的 方案在固体物理系统的实现面临着多量子比特的集成和量子退相干等量子多体问题。另一方面,近 年来人们也在试图利用量子信息中发展起来的一些新的理论工具和方法,去研究量子多体系统的一 些性质,如用量子纠缠去研究量子相变问题。在这个新交叉领域中物理学家普遍关注的一个问题是 量子多体的相变问题。我们熟悉的相变现象一般都是由于改变系统的温度引起的,如冰熔化的水,



Figure 18: 能级占据几率的对数图。

还有加热一个磁铁使它的磁性消失(铁磁-顺磁相变)。从物理上讲这类相变是由于热涨落引起的,我 们通常称之为"经典相变"。另外还有一类我们不太熟悉的发生在绝对零温时候的相变,这类相变一 般是由系统的哈密顿量的某个参数引起的,比如外磁场强度。研究发现,这类相变是由海森堡不确 定关系引起的量子涨落带来的,因为零温时热涨落完全消失[83]。由于这类相变完全是由量子效应引 起的,因此我们称它为量子相变。由于量子相变发生在极低温时,它对实验技术的要求非常高。要想 从实验上观察到量子相变现象是非常困难的。直到最近物理学家才第一次从实验上[22]观察到了量 子相变现象:光晶格中的冷原子的超流-莫特绝缘体相变[84]。当光晶格势阱的深度不是很深时,冷原 子可以在各个势阱中自由穿梭,这就是超流相;但是当势阱的深度超过某一临界值后,原子就被限 制在光晶格的各个势阱中,不能再在晶格的各个势阱间自由隧穿,这就是绝缘相。物理学家还在探 讨把这种量子相变应用到量子信息处理中的可能性,研究者希望利用量子相变实现对量子比特的复 原[85]。除了光晶格中的冷原子的超流-莫特绝缘体相变外,还有一类常见的量子相变系统,那就是自 旋系统。几个常见的有量子相变行为的自旋模型是XY模型,Dicke模型和LMG模型[86]。下面我们就 以一些具体的例子来了解一下量子相变现象。首先我们介绍一些通常用来判别系统发生量子相变的 方法。

6.2.1 系统基态能级简并与量子相变

判断系统发生量子相变的一个常用标志是基态与第一激发态能级发生交叉或者是简并[21,87]。 或者说,通过寻找能级简并点可以帮助我们确定量子相变点。下面我们来看一个这样的例子。

Lipkin-Meshkov-Glick (LMG)模型最开始是核物理中引入的一个模型[88],它用下面的哈密顿

量描述

$$H_B = -\frac{\lambda}{N} \sum_{i$$

其中 σ_i^{α} , $\alpha = x, y, z$ $(i = 1, 2, \dots N)$ 是第i个原子的泡利算符; λ/N 是任意两个自旋间的耦合强度。这个强度与总自旋数N成反比。这个系统的哈密顿量包含有长程相互作用,因为系统中的任意两个自旋间都有相互作用。在各向同性情况下 $\gamma = 1$,这个哈密顿量在Dicke表象是对角化的。

$$H_B = -\frac{2\lambda}{N} \left[\mathbf{J}_N^2 - (J_N^z)^2 - \frac{N}{2} \right] - 2J_N^z, \tag{6.41}$$

而且 H_B 的基态位于由Dicke态{ $|N/2, M\rangle, M = -N/2, \dots N/2$ }张成的子空间中[89]。这里 $\mathbf{s} = \vec{\sigma}/2,$ $J_N^{\alpha} = 1/2 \sum_{i=1}^N \sigma_i^{\alpha}$ 且

$$\mathbf{J}_{N}^{2} \left| \frac{N}{2}, M \right\rangle = \frac{N}{2} \left(\frac{N}{2} + 1 \right) \left| \frac{N}{2}, M \right\rangle, \qquad (6.42)$$

$$J_N^z \left| \frac{N}{2}, M \right\rangle = M \left| \frac{N}{2}, M \right\rangle.$$
(6.43)

与本征态 $|N/2, M\rangle$ 对应的本征能量是 $2\lambda M^2/N - 2M - \lambda N/2$ 。因此基态 $|G\rangle$ 与 λ 有关[90],

$$|G\rangle = \begin{cases} \left|\frac{N}{2}, \frac{N}{2}\right\rangle, (0 < \lambda < 1), \\ \left|\frac{N}{2}, I(\lambda)\right\rangle, (\lambda > 1) \end{cases}$$
(6.44)

这里 $I(\lambda)$ 是与 $N/2\lambda$ 最接近的整数。方程(6.44)暗含 $\lambda = 1$ 是一个能级简并点,这意味着 $\lambda = 1$ 点也是 一个量子相变点[21]。在 $\lambda > 1$ 和 $\lambda < 1$ 的两个相中,系统地基态的性质非常不同,或者说系统的基态 在 $\lambda = 1$ 两边有完全不同的对称性。这一点也同样是对称性破缺点[90, 91]。当0 < $\lambda < 1$,系统的基态 是唯一的,而且沿着磁场方向完全极化,因而环境系统是处于对称性破缺相;当 $\lambda > 1$,基态无限重 简并,因而环境系统处于对称相。

这个方法在其他一些例子,例如XY模型中[21]也得到了很好的应用。此外文献[92,93]中讨论了 如何利用谐振子平移的办法来求解Dicke 模型的哈密顿量的基态本征能量。并且发现在Dicke模型中 有一能级简并点,这一点正好是该系统的量子相变点。

6.2.2 系统基态的量子纠缠与量子相变

在过去的几年中,物理学家们利用量子信息中的一些概念和方法,对自旋系统的量子相变现 象进行了深入的研究。这些方法的核心思想是:利用量子信息中定义的各种纠缠的度量,如并发 度(concurrence),块纠缠(block entanglement),负值度(negativity),或者是几何相因子(geometric phase)[94,95]来研究量子相变的临界行为。比如,通过纠缠在临界点的对数发散性质寻找量子相变 点,区分量子相变的普适类,验证标度率等。XY模型是最早用来讨论量子纠缠和量子相变问题的 自旋模型[96]。下面我们就来简单地回顾一下如何用并发刻画自旋系统的量子相变现象。当然,对 于XY模型我们仍然可以利用上述的能级简并点的办法来确定量子相变点[21]。 XY模型的哈密顿量可以表示成如下形式

$$H(\gamma,\lambda) = \sum_{i} \left[\frac{1+\gamma}{2} \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \frac{1-\gamma}{2} \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y + \lambda \sigma_i^z \right], \tag{6.45}$$

其中γ决定系统的各向异性, λ代表沿着z轴方向的外磁场。从文献[97], 我们知道XY模型基态的任意 两格点(例如第i个和第i+r个格点)的约化密度矩阵可以表示成如下形式

$$\rho_{i,i+r} = \begin{pmatrix}
u & 0 & 0 & y \\
0 & w & z & 0 \\
0 & z & w & 0 \\
y & 0 & 0 & v
\end{pmatrix},$$
(6.46)

其中

$$u = \frac{1}{4} (1 + 2\langle \sigma^z \rangle + \langle \sigma_0^z \sigma_r^z \rangle), \qquad (6.47)$$

$$y = \frac{1}{4} \left(\langle \sigma_0^x \sigma_r^x \rangle - \langle \sigma_0^y \sigma_r^y \rangle \right), \tag{6.48}$$

$$w = \frac{1}{4} (1 - \langle \sigma_0^z \sigma_r^z \rangle), \tag{6.49}$$

$$z = \frac{1}{4} (\langle \sigma_0^x \sigma_r^x \rangle + \langle \sigma_0^y \sigma_r^y \rangle), \qquad (6.50)$$

$$v = \frac{1}{4} (1 - 2\langle \sigma^z \rangle + \langle \sigma_0^z \sigma_r^z \rangle).$$
(6.51)

这些关联函数的精确表达式可以在文献[98]中找到。我们可以进一步求出XY模型的基态的并发度(concurrence)[99],

$$\tilde{\rho}_{i,i+r} = (\sigma_i^y \otimes \sigma_{i+r}^y) \rho_{i,i+r}^T (\sigma_i^y \otimes \sigma_{i+r}^y) = (\sigma_0^y \otimes \sigma_r^y) \rho_{0,r}^T (\sigma_0^y \otimes \sigma_r^y)$$

$$(6.52)$$

$$(\sigma_i^y \otimes \sigma_{i+r}^y) \rho_{i,i+r}^T (\sigma_i^y \otimes \sigma_{i+r}^y) = (\sigma_i^y \otimes \sigma_r^y) \rho_{0,r}^T (\sigma_i^y \otimes \sigma_r^y)$$

$$= \begin{pmatrix} v & 0 & 0 & y \\ 0 & w & z & 0 \\ 0 & z & w & 0 \\ y & 0 & 0 & u \end{pmatrix}.$$
 (6.53)

以及

$$\rho_{i,i+r}\tilde{\rho}_{i,i+r} = \begin{pmatrix} y^2 + uv & 0 & 0 & 2yu \\ 0 & w^2 + z^2 & 2wz & 0 \\ 0 & 2wz & w^2 + z^2 & 0 \\ 2yv & 0 & 0 & y^2 + uv \end{pmatrix}.$$
(6.54)

矩阵 $\rho_{i,i+r}\tilde{\rho}_{i,i+r}$ 的平方根的最大本征值就是基态的并发。经过研究发现[96],在热力学极限下, $\gamma = 1$ 的XY模型(横场伊辛模型)的基态的紧邻格点的并发度(r=1)对 λ 的导数有如下性质

$$\partial_{\lambda}C(1) = \frac{8}{3\pi^2} \ln|\lambda - \lambda_c| + const.$$
(6.55)

$$\partial_{\lambda} C(1)|_{\lambda_m} = -0.2702 \ln N + const.$$
(6.56)

因此并发度很好地展现了XY模型的量子临界行为和有限尺度的标度性。

6.3 横场伊辛模型的量子相变与洛克斯密特回波(Loschmidt echo)的动力学敏感性

为了研究量子-经典转变,物理学家陆续提出了一些小量子系统和宏观[100,101,102]环境或经 典[69,103,104]环境耦合的精确可解模型。与量子力学中量子-经典转变相关,核磁共振实验中有一 个概念,叫洛克斯密特回波(Loschmidt echo)。它被借用到量子混沌中,用来刻画一个物理系统对 哈密顿量微扰的高度敏感性[105,106]。在本节中,我们将利用一个具体的例子展示这样一个结论: 在一个量子相变系统的量子临界点附近,系统的量子相变行为[21] 会导致它自身的洛克斯密特回 波(Loschmidt echo)急剧地衰减。同时,这意味着与这个量子相变系统耦合的另一个小量子系统 从纯态到混合态的动力学演化的过程。我们还想提到与本节有关的一个工作[107]。他们研究了迪 克(Dicke)模型的量子相变对于系统从准可积到量子混沌过渡的影响。

量子临界现象,或者量子相变,发生在没有热涨落的绝对零度。因此,量子相变根源于由海森 堡(Heisenberg)不确定性关系引起的量子涨落。另外一方面,导致纯态-混态转变的"相位随机性"也 同样根源于海森堡(Heisenberg)不确定性原理[108]。这两者之间的关联促使我们去研究环境的量子 相变和量子系统的纯态-混态转变(这种转变可以用环境的洛克斯密特回波描述)之间的关系。众所 周知,量子相变系统在临界点附近对于控制参数的变换非常敏感[20,70,109]。系统本征态(包括基 态)的性质在临界点发生急剧的变化,或者说系统在临界点经历一次对称性自发破缺。到目前为止, 所有已知量子相变模型都具有这个性质。事实上这种临界敏感性也可以通过量子混沌中的概念,洛 克斯密特回波[106],或者相位随机性的宏观加强[108]来理解。



Figure 19: 推广的Hepp-Coleman量子测量模型的示意图。这些放置在一个环上的自旋链*E*用横场伊辛模型哈密顿量描述。由于处于中心的二能级系统*S*与自旋链*E*的空间波函数的重叠积分具有各向同性,*S*与链上的每个自旋都有相同的耦合强度。

我们这里的讨论是基于Hepp-Coleman模型[100, 101]。这个模型最开始是作为一个量子测量模型提出来的。在我们对这个模型的推广中,那些原本自由(无相互作用)的自旋1/2的集合,也就是测量仪器部分,被一个横场伊辛链[21, 110]取代。二能级的量子系统S(被测量系统)与横场伊辛链(测量仪器)横向耦合。当S处在两个不同的本征态时,E和S间的相互耦合会导致作用在E上的有

效哈密顿量稍有不同。这里至关重要的是:这两个稍有不同的有效哈密顿量在临界点附近可能会有 截然不同的对称性,从而导致洛克斯密特回波的衰减大大加强。

6.3.1 基于横场伊辛模型的量子测量模型与洛克斯密特回波

我们这里讨论的量子测量模型(见图19)非常类似于Hepp-Coleman量子测量模型[100, 101],以 及对它的一些推广[69, 102, 103, 104]。和二能级系统耦合的环境*E*用一个横场伊辛链描写,并且假 设它满足波恩-卡曼条件。这个二能级系统*S*(二能级的基态和激发态分别用|*e*〉和|*g*〉来表示)与环 境*E*横向耦合。二能级系统加上环境的整体哈密顿量可以表示如下:

$$H(\lambda,\delta) = -J\sum_{j} \left(\sigma_{j}^{z}\sigma_{j+1}^{z} + \lambda\sigma_{j}^{x} + \delta \left| e \right\rangle \left\langle e \right| \sigma_{j}^{x}\right), \tag{6.57}$$

其中J和 λ 分别代表伊辛链的自旋之间的耦合强度,以及它们与横向磁场的耦合强度; δ 刻画S与自旋链的耦合强度; σ_i^{α} ($\alpha = x, y, z$)是定义在第i个格点上的泡利算符。

我们假设二能级系统S最开始处于叠加态 $|\phi_s(0)\rangle = c_g |g\rangle + c_e |e\rangle$,其中系数 $c_g n c_e 满 \mathcal{L} |c_g|^2 + |c_e|^2 = 1$,而伊辛链开始处于态 $|\varphi(0)\rangle$ 。系统S和环境E整体波函数随时间的演化可以表达成 $|\psi(t)\rangle = c_g |g\rangle \otimes |\varphi_g(t)\rangle + c_e |e\rangle \otimes |\varphi_e(t)\rangle$ 。其中,伊辛链将会按两条路径演化 $|\varphi_\alpha(t)\rangle = \exp(-iH_\alpha t) |\varphi(0)\rangle$ ($\alpha = e, g$)。这里的两条演化路径 $|\varphi_\alpha(t)\rangle$ 分别受两个有效哈密顿量 $H_g = H(\lambda, 0)$ 和 $H_e = H(\lambda, \delta) = H_g + V_e$ 支配。很显然, $H_g n H_e$ 都是描写横场伊辛模型的哈密顿量,只是横向磁场的强度稍有不同。 当二能级系统处S在两个不同的本征态($|e\rangle$ 或 $|g\rangle$)上时,S和E的耦合会导致对伊辛链的稍有不同的 有效作用,这两个有效作用可以用两个有效势 $V_e = -J\delta \sum_j \sigma_j^x n V_g = 0$ 来表示。后面会看到,正是 由于这两个有效势的微小差异导致了洛克斯密特回波的衰减[106]。洛克斯密特回波定义如下

$$L(\lambda, t) = |\langle \varphi_g(t) | \varphi_e(t) \rangle|^2.$$
(6.58)

我们再来谈谈洛克斯密特回波和退相干之间的关系。为了说明洛克斯密特回波衰减和二能级系统的退相干之间的联系,并且指出它们之间的差异,我们引入一个新的物理量"纯度"[111] $P = Tr_S(\rho_S^2) = Tr_S\{[Tr_E\rho(t)]^2\}$ 来描述量子力学系统的退相干。这里 $\rho(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$,其中 Tr_{α} 指的是对 α ($\alpha = E, S$)的自由度求迹。通过计算我们可以得到横场伊辛链的洛克斯密特回波和二能级系统的纯度之间的关系式 $P = 1 - 2|c_ec_g|^2[1 - L(\lambda, t)]$ 。这个方程显示二能级系统的纯度和二能级系统S及环境E的初态都有关系,但是洛克斯密特回波只与环境E的初态有关。为了简单起见,我们让环境开始处于它的基态。在下面的讨论中,我们关注的是由于二能级系统S与环境E的相互作用导致的环境的洛克斯密特回波的衰减问题。

6.3.2 洛克斯密特回波(退相干因子)的精确解

现在我们来证明,在量子临界点 $\lambda = \lambda_c = 1$ 附近,如果其中一条演化路径上发生量子相变,洛克斯密特回波的衰减将会大大加强。首先,我们将有效哈密顿量对角化[21,110]。 $H_e =$

 $\sum_{k} \varepsilon_{e}^{k} \left(A_{k}^{\dagger} A_{k} - 1/2 \right)$,其中的准粒子算符可以表示为

$$A_{k} = \sum_{l} \frac{e^{-ikal}}{\sqrt{N}} \prod_{s < l} \sigma_{s}^{[x]} \left(u_{e}^{k} \sigma_{l}^{[+]} - i v_{e}^{k} \sigma_{l}^{[-]} \right),$$
(6.59)

而且它满足费米子的正则反对易关系。这里的N是伊辛链上的自旋数(格点数), $\sigma_l^{[\pm]} = (-\sigma_l^z \pm i\sigma_l^y)/2$ 是由泡利算符 $\sigma_l^{\alpha}, \alpha = x, y, z$ 来定义的。系数 $u_e^k = \cos(\theta_e^k/2)v_e^k = \sin(\theta_e^k/2)$ 的定义与角度

$$\theta_e^k = \theta_e^k(\delta) = \arctan\left[\frac{-\sin\left(ka\right)}{\cos\left(ka\right) - (\lambda + \delta)}\right] \tag{6.60}$$

有关; a是晶格常数。与之对应的单个准粒子激发的本征能量 ε_e^k 是

$$\varepsilon_e^k(\delta) = 2J\sqrt{1 + (\lambda + \delta)^2 - 2(\lambda + \delta)\cos(ka)}.$$
(6.61)

顺便指出,在把准粒子消灭算符A_k写成这个紧致表达式(6.59)的时候,我们结合使用了约当-魏格纳(Jordan-Wigner)变换以及傅立叶(Fourier)变换[21,110]。

另一个有效哈密顿量 H_g 可以通过类似的方法完成对角化。 $H_g = \sum_k \varepsilon_g^k (B_k^{\dagger} B_k - 1/2)$ 。这时单个 准粒子激发的能量 $\varepsilon_g^k = \varepsilon_e^k(0)$,与它相应的费米子型的准粒子的消灭算符 B_k 可以通过下面的波戈留 波夫变换得到

$$B_{\pm k} = \cos\left(\alpha_k\right) A_{\pm k} - i\sin\left(\alpha_k\right) \left(A_{\mp k}\right)^{\dagger}.$$
(6.62)

这里 $\alpha_k = [\theta_g^k - \theta_e^k]/2$, 其中, θ_g^k 得定义是 $\theta_g^k = \theta_e^k(0)$.

我们取横场伊辛链的初态为它的基态 $|\varphi(0)\rangle = |G\rangle_g$ 。对任何一个k,我们都有 $B_k |G\rangle_g = 0$ 。从方程(6.62)我们知道,在 H_e 的表象中,基态 $|G\rangle_g$ 可以写成类似于BCS超导体基态的形式:

$$|G\rangle_g = \prod_{k>0} \left[\cos\left(\alpha_k\right) + i\sin\left(\alpha_k\right) A_k^{\dagger} A_{-k}^{\dagger} \right] |G\rangle_e , \qquad (6.63)$$

这里的 $|G\rangle_e$ 是有效哈密顿量 H_e 的基态。有了基态 $|G\rangle_g$ 的明确表达式(6.63),我们就可以来直接求解公式(6.58)中的洛克斯密特回波了。经过计算可以得到它的因子化的表达式

$$L(\lambda, t) = \prod_{k>0} F_k = \prod_{k>0} [1 - \sin^2(2\alpha_k) \sin^2(\varepsilon_e^k t)].$$
(6.64)

6.3.3 量子开系统的量子-经典转变与环境的量子相变

因为公式(6.64)右边的每一个因子*F_k*都小于1,我们可以作以下合理的估计:在一定条件下, 当*N*趋近于无穷大时,*L*(λ,*t*)将会衰减到零。孙昌璞教授[69,104]曾首次发现了退相干因子的这种因 子化结构,并且系统地研究了经典极限及宏观极限下这种因子化结构在量子测量理论中的作用。这 种因子化的结构现在还被用来研究量子计算过程中普遍存在的由于环境导致的退相干问题[108]。下 面我们来仔细研究环境在量子相变点λ_c = 1附近的临界行为,以及它与二能级量子系统的退相干之 间的关系。下面会看到导致洛克斯密特回波衰减被加强的一个新机制。 首先我们来对洛克斯密特回波的特征进行一个简单的解析分析。我们取一个动量空间的截断*K*_e,并且根据这个截断定义一个洛克斯密特回波的部分乘积

$$L_c(\lambda, t) \equiv \prod_{k>0}^{K_c} F_k \ge L(\lambda, t), \qquad (6.65)$$

以及与之相应的部分和 $S(\lambda,t) = \ln L_c \equiv -\sum_{k>0}^{K_c} |\ln F_k|$ 。对于小k我们取如下近似关系 $\varepsilon_e^k \approx 2J|1 - \lambda - \delta|, \sin^2[2\alpha_k] \approx (\delta ka)^2 / (1 - \lambda)^2 (1 - \lambda - \delta)^2$ 。如果这个截断 K_c 取得足够小,那么可以得 到 $S(\lambda,t)$ 的近似表达式

$$S(\lambda,t) \approx -\frac{\delta^2 E(K_c) \sin^2 \left(2Jt \left|1 - \lambda - \delta\right|\right)}{\left(1 - \lambda\right)^2 \left(1 - \lambda - \delta\right)^2}.$$
(6.66)

其中 $E(K_c) = 4\pi^2 N_c (N_c + 1)(2N_c + 1)/(6N^2)$, N_c 是最接近 $NK_c a/2\pi$ 的整数。这里我们利用了布洛 赫波矢k的表达式 $k_n = 2n\pi/Na$ $(n = 1, 2, \dots N/2)$ 。对于一个固定的时间t, 当 $\lambda \to \lambda_c = 1$ 时, 我们可 以得到下面的近似表达式

$$L_c(\lambda, t) \approx \exp\left(-\gamma t^2\right)$$
 (6.67)

其中 $\gamma = 4J^2\delta^2 E(K_c)/(1-\lambda)^2$ 。

注意, $L(\lambda, t)$ 比 $L_c(\lambda, t)$ 小。因此从上面富有启发性的分析我们可以作如下预计,当N非常大, 而且 λ 处于临界点 $\lambda_c = 1$ 附近时,洛克斯密特回波将会随时间的平方指数衰减。另外一方面,我们 看到在取热力学极限 $N \to \infty$ 的过程中,Na是一个常数,而且 $E(K_c) \propto 1/N^2$,因此 γ 在热力学极限 下 $N \to \infty$ 似乎趋于零。由于真实的量子相变只能够发生在热力学极限下,我们很自然地怀疑,在临 界点附近量子相变是否会诱导的洛克斯密特回波衰减。事实上,在量子相变的临界点,由于 γ 的分 母 $(1-\lambda)^2$ 趋于零,即使 γ 的分子趋于零,洛克斯密特回波衰减仍然是可能的。对于一个用来演示量子 相变诱导洛克斯密特回波衰减的真实系统,粒子数N虽然很大,但仍然是有限的,所以 γ 不会消失。

现在我们用数值计算的结果来检验一下上面的解析分析。对于 $N = 50 \sim 250$, $\delta = 0.1$, 根据 $L(\lambda, t)$ 的精确表达式(6.64), 我们用数值的方法得到了在参数 $\lambda \in [0, 2]$, $t \in [0, 27/J]$ 范围内的洛克斯密特回波。结果见图20a和图20b。

在图20a中, 在 $\lambda = \lambda_c - \delta = 0.9$ 的周围有一很深的凹陷区域。 $L(\lambda, t)$ 反映了在环境的量子临界点附近,洛克斯密特回波对外界的微扰非常敏感。在临界点,伴随着洛克斯密特回波的急剧下降,处于中央的二能级量子系统从一个纯态演化为一个混态。图20b的五条曲线清楚地显示了环境的自旋数N对洛克斯密特回波行为的影响。在 $\lambda = \lambda_c - \delta = 0.9$ 点,洛克斯密特回波随时间衰减(这里还有短暂的起伏,其起伏的周期正比于环境中的自旋数)。

环境发生量子相变时,它的洛克斯密特回波衰减加剧。这个现象蕴含的物理机制值得进一步研究。对于量子相变系统而言,哈密顿量 H_e 中的两项代表了两种相互竞争的序:在弱耦合情形 $\lambda \ll 1$,系统的基态是所有自旋向上或者所有自旋向下的状态,而强耦合 $\lambda \gg 1$ 情形,基态是所有自旋都向右的饱和铁磁态。当 λ 取值在1附近时, $\lambda > 1$ 和 $\lambda < 1$ 时的基态的性质分别定性地相似于 $\lambda \gg 1$ 和 $\lambda \ll 1$ 。只有在临界点 $\lambda = 1$,基态有完全不同的性质。



Figure 20: (a) 洛克斯密特回波 $|L(\lambda,t)|^2$ 的三维图, 它是 λ 和t的函数。本图中选取的自旋数N = 200。在临界点 $\lambda_c=1$ 附近的凹陷区域展现了这样一个结论:量子相变增强了洛克斯密特回波的衰减。在 $\lambda = 1$ 点的形状和我们的解析分析吻合得很好。(b)三维图在 $\lambda = \lambda_c - \delta = 0.9$ 点的截面图,这些截面图对应于不同的格点数N = 50,100,150,200,和250。它显示了洛克斯密特回波的准周期结构,并且显示了这个准周期正比于系统格点数。

在临界点 $\lambda = \lambda_c$ 环境的基态对于(中心系统与它耦合带来的)控制参数的微扰的超敏感性反映 了量子相变的奇异行为。这种敏感性体现在洛克斯密特回波的急剧衰减上。我们预期环境的动力学 演化会继承这种敏感性。而动力学演化的敏感性可以与量子混沌联系起来。对于初始时完全相同的 状态,两个稍有差异的耦合会导致两个完全不同的量子演化。从数学上说,最开始等于1的洛克斯密 特回波将会随时间衰减并最终减小为零。在这个意义上,量子相变系统的时间演化对于微扰的敏感 性在洛克斯密特回波的加剧衰减中起到至关重要的作用。由 $|e\rangle$ 和 $|g\rangle$ 导致的两个有效势的微扰,以及 在量子临界点的量子临界行为的奇异性,还有大N极限下相位随机性的宏观加强[108],洛克斯密特 回波有可能衰减到零。

下面我们用数值方法来进一步研究有限N系统的洛克斯密特回波。随着N增加,洛克斯密特回 波在 δ 很小时将会衰减为零。例如,我们取 δ = 0.01, N = 500 ~ 2500,其结果见图21。比较图21中 的数值结果和图20中 δ = 0.1, N = 50 ~ 250的结果,我们可以清楚地看到随着 δ 减少和N增加,凹 槽变得越来越窄。另外一方面,图20和图21展现了洛克斯密特回波在量子临界点 λ_c 附近的两个有趣 的现象:第一,在两个图中,洛克斯密特回波起伏的准周期都正比于环境的自旋数。第二,图20b和 图21b的形状几乎完全一样,数值的结果似乎暗示这里隐含着一个标度行为。也就是说,在临界 点 λ_c ,洛克斯密特回波 $L_c(t,\delta,N)$ 在标度变换 $t \rightarrow t/\alpha, \delta \rightarrow \alpha\delta$,和 $N \rightarrow N/\alpha$ 下是不变的。这个预言 和小Jt近似下的解析分析的结果是一致的。因此,我们的研究表明,有限N系统的洛克斯密特回波 的跳跃 (jump)也可以作为量子相变的见证。而且这一结果已经被最近的实验证实[112]。

另外,值得一提的是F. M. Cucchietti及其合作者在我们上述工作的基础之上提出了"环境的量子相变诱导系统普适的量子退相干"[28]。他们发现,当环境与系统的耦合导致环境发生量子相变



Figure 21: 大N和小 δ 情况下,量子相变导致洛克斯密特回波急剧衰减。除了自旋数N = 2000及 $\delta = 0.01$, 其它的情况与图20完全类似。

时,系统的相干性在短时间内表现出高斯型的衰减。并且这个衰减的包络与系统和环境之间的耦合强度无关。他们基于这个结果提出了一种新的"量子模拟算法"(quantum simulation algorithm)。也就是通过单比特的量子退相干来检测环境的量子相变。

7 小结

在这篇综述文章中,我们比较系统地介绍了量子热力学的一般概念和思想。我们从对热力学量 的量子力学推广开始,介绍了一般热力学过程的量子力学推广。然后我们研究了平衡态量子热力学 循环的性质和量子热机。进一步我们研究了非平衡态量子热机的性质,并对它超越经典热机的性质 作了详细介绍。基于以上研究结果,我们还探讨了量子麦克斯韦妖与热力学第二定律普适性的问题。 最后我们讨论了量子相变诱导的量子力学系统的动力学敏感性。这个工作开辟了用保真度刻画量子 相变的新研究方向。

致谢: 在过去的五年里,我们关于量子热力学和统计的工作得到了国家自然科学基金、中国科 学院知识创新工程以及国家重大基础研究发展规划的资助。特此致谢。

附录: 横场伊辛模型的洛克斯密特回波(Loschmidt echo)

如果环境(横场伊辛链)最开始处于它的基态 $|G\rangle_g$,而且系统和它的耦合在t = 0时刻打开,那么系统的退相干因子可以表达成下面的形式

$$D(t) =_{g} \langle G | e^{iH_{g}t} e^{-iH_{e}t} | G \rangle_{g}, \qquad (A.1)$$

$$H_e = -J \sum_{j} \left[\sigma_j^z \sigma_{j+1}^z + (\lambda + \delta) \sigma_j^x \right], \qquad (A.2)$$

$$H_g = -J \sum_j \left(\sigma_j^z \sigma_{j+1}^z + \lambda \sigma_j^x \right).$$
(A.3)

我们把基态 $|G\rangle_g$ 的本征能量记为 E_g^0 ,也就是说 $H_g |G\rangle_g = E_g^0 |G\rangle_g$ 。那么退相干因子可以被简化成下面的形式

$$D(t) = e^{iE_g^0 t} \langle G | e^{-iH_e t} | G \rangle_g.$$
(A.4)

对角化上面的两个有效哈密顿量He和Hg

$$H_e = \sum_k \varepsilon_e^k \left(A_k^{\dagger} A_k - 1/2 \right), \tag{A.5}$$

其中

$$A_{k} = \cos\left(\frac{\theta_{e}^{k}}{2}\right)c_{k} - i\sin\left(\frac{\theta_{e}^{k}}{2}\right)c_{-k}^{\dagger},\tag{A.6}$$

$$\tan\left(\theta_{e}^{k}\right) = \frac{-\sin\left(ka\right)}{\cos\left(ka\right) - \lambda - \delta},\tag{A.7}$$

$$\varepsilon_e^k = 2J\sqrt{1 - 2\left(\lambda + \delta\right)\cos\left(ka\right) + \left(\lambda + \delta\right)^2},\tag{A.8}$$

以及

$$H_g = \sum_k \varepsilon_g^k \left(B_k^{\dagger} B_k - 1/2 \right), \tag{A.9}$$

其中

$$B_k = \cos\left(\frac{\theta_g^k}{2}\right)c_k - i\sin\left(\frac{\theta_g^k}{2}\right)c_{-k}^{\dagger},\tag{A.10}$$

$$\tan\left(\theta_{g}^{k}\right) = \frac{-\sin\left(ka\right)}{\cos\left(ka\right) - \lambda},\tag{A.11}$$

$$\varepsilon_g^k = 2J\sqrt{1 - 2\lambda\cos\left(ka\right) + \lambda^2}.\tag{A.12}$$

在上面的讨论中我们定义了动量空间的消灭算符

$$c_{k} = \sum_{l} \frac{e^{-ikal}}{\sqrt{N}} \prod_{s < l} \sigma_{s}^{[x]} \sigma_{l}^{[+]}.$$
 (A.13)

我们可以证明无自旋的费米子算符A±k和B±k满足下面的关系

$$B_{\pm k} = \cos\left(\alpha_k\right) A_{\pm k} \mp i \sin\left(\alpha_k\right) \left(A_{\mp k}\right)^{\dagger}, \qquad (A.14)$$

其中

$$\alpha_k = \frac{\theta_g^k - \theta_e^k}{2}.\tag{A.15}$$

基于上面的玻戈留玻夫 (Bogliubov) 变换, 我们可以把 $|G\rangle_g$ 表示成为一个类似于BCS基态的形式:

$$|G\rangle_g \propto \prod_{k>0} B_k B_{-k} |G\rangle_e \tag{A.16}$$

$$\propto \prod_{k>0} \left(\cos\left[\alpha_k\right] A_k - i \sin\left[\alpha_k\right] A_{-k}^{\dagger} \right) \left(\cos\left[\alpha_k\right] A_{-k} + i \sin\left[\alpha_k\right] A_k^{\dagger} \right) \left| 0_k, 0_{-k} \right\rangle_e \quad (A.17)$$

$$\propto \prod_{k>0} \left[i \sin\left[\alpha_k\right] \cos\left[\alpha_k\right] A_k A_k^{\dagger} + \sin^2\left[\alpha_k\right] A_{-k}^{\dagger} A_k^{\dagger} \right] \left| 0_k, 0_{-k} \right\rangle_e \tag{A.18}$$

$$\propto \prod_{k>0} \left[i \sin\left[\alpha_k\right] \cos\left[\alpha_k\right] A_k A_k^{\dagger} + \sin^2\left[\alpha_k\right] A_{-k}^{\dagger} \right] \left| 1_k, 0_{-k} \right\rangle_e \tag{A.19}$$

$$\propto \prod_{k>0} \left[i \sin\left[\alpha_k\right] \cos\left[\alpha_k\right] A_k A_k^{\dagger} + (-1)^1 \sin^2\left[\alpha_k\right] \right] \left| 1_k, 1_{-k} \right\rangle_e \tag{A.20}$$

$$\propto \prod_{k>0} \left[i \sin\left[\alpha_k\right] \cos\left[\alpha_k\right] \left|0_k, 0_{-k}\right\rangle_e - \sin^2\left[\alpha_k\right] \left|1_k, 1_{-k}\right\rangle_e \right]$$
(A.21)

$$= \prod_{k>0} \left[\cos\left(\alpha_k\right) + i \sin\left(\alpha_k\right) A_k^{\dagger} A_{-k}^{\dagger} \right] |G\rangle_e$$
(A.22)

$$= \prod_{k>0} \left[\cos(\alpha_k) |0_k, 0_{-k}\rangle_e + i \sin(\alpha_k) |1_k, 1_{-k}\rangle_e \right],$$
(A.23)

其中 $|G\rangle_e$ 是 H_e 的基态,也就是说任何一个 A_k 作用在 $|G\rangle_e$ 上面都等于零, $A_k |G\rangle_e = 0$.我们回到退相 干因子

$$D(t) = e^{iE_g^0 t} {}_g \langle G | e^{-iH_e t} | G \rangle_g$$
(A.24)

$$= e^{iE_g^0 t} \prod_{k>0} \left[\cos\left(\alpha_k\right)_e \left< 0_k, 0_{-k} \right| - i \sin\left(\alpha_k\right)_e \left< 1_k, 1_{-k} \right| \right] e^{-i\varepsilon_e^k t \left(A_k^{\dagger} A_k + A_{-k}^{\dagger} A_{-k} - 1\right)}$$
(A.25)

$$\left[\cos\left(\alpha_{k}\right)\left|0_{k},0_{-k}\right\rangle_{e}+i\sin\left(\alpha_{k}\right)\left|1_{k},1_{-k}\right\rangle_{e}\right]$$
(A.26)

$$= e^{iE_g^0 t} \prod_{k>0} \left[\sin^2\left(\alpha_k\right) e^{-i\varepsilon_e^k t} + \cos^2\left(\alpha_k\right) e^{i\varepsilon_e^k t} \right]$$
(A.27)

$$= e^{iE_g^0 t} \prod_{k>0} \left[\cos\left(\varepsilon_e^k t\right) + i\cos\left(2\alpha_k\right)\sin\left(\varepsilon_e^k t\right) \right].$$
(A.28)

在我们讨论的这个模型中,系统的退相干因子的模平方正好是环境的洛克斯密特回波(6.64),

$$L(\lambda, t) = |D(t)|^{2} = \prod_{k>0} \left[1 - \sin^{2} (2\alpha_{k}) \sin^{2} \left(\varepsilon_{e}^{k} t\right) \right].$$
(A.29)

其中

$$\sin\left(2\alpha_k\right) = \sin\left(\theta_g^k - \theta_e^k\right) = \sin\left(\theta_g^k\right)\cos\left(\theta_e^k\right) - \cos\left(\theta_g^k\right)\sin\left(\theta_e^k\right).$$
(A.30)

而且在对角化上面的两个有效哈密顿量Hg和He的时候,我们用到了下面的关系式

$$\sin\left(\theta_{g}^{k}\right) = \frac{\sin\left(ka\right)}{\sqrt{1 - 2\lambda\cos\left(ka\right) + \lambda^{2}}},\tag{A.31}$$

$$\cos\left(\theta_{g}^{k}\right) = \frac{-\cos\left(ka\right) + \lambda}{\sqrt{1 - 2\lambda\cos\left(ka\right) + \lambda^{2}}},\tag{A.32}$$

$$\sin\left(\theta_{e}^{k}\right) = \frac{\sin\left(ka\right)}{\sqrt{1 - 2\left(\lambda + \delta\right)\cos\left(ka\right) + \left(\lambda + \delta\right)^{2}}},\tag{A.33}$$

$$\cos\left(\theta_{e}^{k}\right) = \frac{-\cos\left(ka\right) + \lambda + \delta}{\sqrt{1 - 2\left(\lambda + \delta\right)\cos\left(ka\right) + \left(\lambda + \delta\right)^{2}}}.$$
(A.34)

(注意:这里sin(θ_g^k)等其实有两组解,上面列出的是其中一组解。另外一组解是将它们全部取为现 在的相反数,无论取那组解都不影响我们讨论的结果。)因此我们有

$$\sin(2\alpha_k) = \frac{[\sin(ka)][-\cos(ka) + \lambda + \delta] - [-\cos(ka) + \lambda][\sin(ka)]}{\sqrt{1 - 2\lambda\cos(ka) + \lambda^2}\sqrt{1 - 2(\lambda + \delta)\cos(ka) + (\lambda + \delta)^2}}$$
(A.35)

$$\frac{\delta \sin (ka)}{\sqrt{1 - 2\lambda \cos (ka) + \lambda^2} \sqrt{1 - 2(\lambda + \delta) \cos (ka) + (\lambda + \delta)^2}},$$
 (A.36)

以及

$$\sin\left(\varepsilon_{e}^{k}t\right) = \sin\left(2Jt\sqrt{1-2\left(\lambda+\delta\right)\cos\left(ka\right)+\left(\lambda+\delta\right)^{2}}\right).$$
(A.37)

环境的洛克斯密特回波或系统的退相干因子的模平方详细表达式如下

=

$$L(\lambda, t) = |D(t)|^{2} = \prod_{k>0} \left[1 - \sin^{2}(2\alpha_{k})\sin^{2}\left(\varepsilon_{e}^{k}t\right) \right]$$
(A.38)
$$= \prod_{k>0} \left[1 - \frac{\delta^{2}\sin^{2}(ka)\sin^{2}\left[2Jt\sqrt{1 - 2(\lambda + \delta)\cos(ka) + (\lambda + \delta)^{2}}\right]}{\left[1 - 2\lambda\cos(ka) + \lambda^{2}\right]\left[1 - 2(\lambda + \delta)\cos(ka) + (\lambda + \delta)^{2}\right]} \right].$$
(A.39)

References

- [1] E. H. Lieb, and J. Yngvason, Physics Today 53, No. 4, 32, (2000).
- [2] 林宗涵, 热力学与统计物理, 北京大学出版社, 北京, (2007).
- [3] 汪志诚, 热力学统计物理, 高等教育出版社, 北京, (2003).
- [4] J. Gemmer, M. Michel, and G. Mahler, Quantum Thermodynamics, Springer, Berlin, (2004).
- [5] P. W. Anderson, Science, **177**, 393 (1972).
- [6] S. Goldstein, J. L. Lebowitz, R. Tumulka, and N. Zanghi, Phys. Rev. Lett. 96, 050403 (2006).
- [7] S. Popescu, A. J. Short, and A. Winter, Nature Physics 2, 754 (2006).
- [8] H. Dong, S. Yang, X. F. Liu, and C. P. Sun, Phys. Rev. A 76, 044104 (2007),arXive: quantph/0702027.
- [9] M. Hartmann, G. Mahler, and O. Hess, Phys. Rev. Lett. 93, 080402 (2004).
- [10] A. Gaidarzhy, G. Zolfagharkhani, R. L. Badzey and P. Mohanty, Phys. Rev. Lett. 94, 030402 (2005).

- [11] P. Zhang, Y. D. Wang, and C. P. Sun, Phys. Rev. Lett. 95, 097204 (2005).
- [12] A. O. Niskanen, Y. Nakamura, and J. P. Pekola, cond-mat/0704.0845.
- [13] C. Jarzynski, Phys. Rev. Lett. 78, 2690 (1997); Phys. Rev. E 56, 5018 (1997).
- [14] H. S. Leff, and A. f. rex, in Quantum limits to the second law: first international Conference, D.P. Sheehan Ed. American institute of physics, Melville, NY, (2002), pp. 408-419.
- [15] H.S. Leff and A.F. Rex (eds.), Maxwell's Demon 2: Entropy, Classical and Quantum Information, Computing, Bristol, Institute of Physics, (2003).
- [16] L. Szilard, Z. F. Physik 53, 840 (1929).
- [17] R. Landauer, IBM J. Res. Dev. 5, 183 (1961).
- [18] C.H. Bennett, Int. J. Theor. Phys. 21, 905 (1982); Sci. Am. 257, 108 (1987).
- [19] M. A. Nielsen and I. L. Chuang, Quantum Computation and Quantum Information, Cambridge University Press, Cambridge, (2000).
- [20] W.H. Zurek, Phys. Today 44, No. 10, 36(1991).
- [21] S. Sachdev, Quantum Phase Transition, Cambridge University Press, Cambridge, (1999).
- [22] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hansch, I. Bloch, Nature 415, 39 (2002).
- [23] H. T. Quan, Z. Song, X. F. Liu, P. Zanardi, and C. P. Sun, Phys. Rev. Lett. 96, 140604 (2006);
 D. Rossini, ect., quant-ph/0605051.
- [24] P. Zanardi, H. T. Quan, X. G. Wang, and C. P. Sun, Phys. Rev. A 75, 032109 (2007).
- [25] P. Zanardi. M. Cozzini, P. Giorda, quant-ph/0606130; M. Cozzini, P. Giorda, and P. Zanardi quant-ph/0608059 (to be published in Phys. Rev. B).
- [26] P. Zanardi and N. Paunkovic, Phys. Rev. E 74, 031123 (2006).
- [27] M. Cozzini, R. Ionicioiu, P. Zanardi, cond-mat/0611727; P. Buonsante and A. Vezzani, Phys. Rev. Lett., 98, 110601 (2007).
- [28] F. M. Cucchietti, S. Fernandez-Vidal, and J. P. Paz, quant-ph/0604136; D. Rossini, T. Calarco, V. Giovannetti, S. Montangero, and R. Fazio, quant-ph/0605051; F. M. Cucchietti quantph/0609202; X. X. Yi, H. T. Cui, and L. C. Wang, Phys. Rev. A 74, 054102(2006); Y. C. Ou, and H. Fan, quant-ph/0606053.

- [29] X. Y. Feng, G. M. Zhang, and T. Xiang, Phys. Rev. Lett. 98, 087204 (2007).
- [30] H. Callen, Thermodynamics and an Introduction to Themostatistics, 2nd ed. Wiley, New York, (1985).
- [31] T. D. Kieu, Eur. J. Phys. D **39**, 115 (2006).
- [32] T. D. Kieu, Phys. Rev. Lett. 93, 140403 (2004).
- [33] H. T. Quan, P. Zhang, and C. P. Sun, Phys. Rev. E 72, 056110 (2005).
- [34] E. Schrodinger, Statistical Thermodynamcis Dover, New York, (1989); C. Kittle and H. Kroemer, Thermal Physics, 2nd ed. W. H. Freeman, San Francisco, (1980).
- [35] C. P. Sun, J. Phys. A 21, 1595 (1988), Phys. Rev. D 41, 1318 (1990).
- [36] H. Yukawa (Ed), Quantum Mechanics Vol I, 2nd Ed, (in Japanese), Yan-Bo Bookshop, Tokyo, (1978).
- [37] A. Messiah, Quantum Mechanics, Dover, New York, (1999).
- [38] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, Statistical Mechanics, Part I, Pergamon, London, (1958).
- [39] E. G. D. Cohen and D. Maurerall, J. Stat. Mech.: Theor. Exp. P07006 (2004).
- [40] H. T. Quan, et al., in preparation.
- [41] S. Yang, private communication.
- [42] J. Liphardt, S. Dumont, S. B. Smith, I. Tinoco, and C. Bustamante, Science 296, 1832 (2002).
- [43] H. E. D. Scovil and E. O. Schulz-DuBois, Phys. Rev. Lett. 2, 262 (1959).
- [44] J. E. Geusic, E. O. Schulz-DuBois, and H. E. D. Scovil, Phys. Rev. 156, 343 (1967).
- [45] D. P. Sheehan (Ed), Quantum Limits to the Second Law: First International Conference, Melville, New York, (2002).
- [46] M. O. Scully, M. S. Zubairy, G. S. Agarwal, H. Walther, Science 299, 862 (2003).
- [47] H. T. Quan, P. Zhang, and C. P. Sun, Phys. Rev. E 73, 036122 (2006).
- [48] T. Opatrny and M. O. Scully, Fortschr. Physik. 50, 657 (2002).
- [49] Y. V. Rostovtsev, A. B. Matsko, N. Nayak, M. S. Zubairy, and M. O. Scully, Phys. Rev. A 67, 053811 (2003).

- [50] M. O. Scully, Phys. Rev. Lett. 88, 050602 (2002).
- [51] A. E. Allahverdyan, R. S. Gracia, and T. Nieuwenhuizen, Phys. Rev. E 71, 046106 (2005).
- [52] C. M. Bender, D. C. Brody, B. K. Meister, Proc. R. Soc. Lond. A 458, 1519 (2002).
- [53] C. M. Bender, D. C. Brody, and B. K. Meister, J. Phys. A 33, 4427 (2000); K. Bhattacharyya and S. Mukhopadhyay, J. Phys. A 34, 1529 (2001).
- [54] M. H. Lee, Am. J. Phys. **69**, 874 (2001).
- [55] J. Arnaud, L. Chusseau, and F. Philippe, Eur. J. Phys. 23, 489 (2002).
- [56] J. Arnaud, L. Chusseau, and F. Philippe, quant-ph/0211072; unpublished.
- [57] F. Tonner, G. Mahler, Fortschr. Physik. 54, 939 (2006); F. Tonner, G. Mahler, Phys. Rev. E 72, 066118 (2005).
- [58] D. V. Schroeder, Thermal Physics, Addison Wesley Longman, San Francisco, (2000).
- [59] L. H. Yu and C. P. Sun, Phys. Rev. A 49, 592 (1994); C. P. Sun and L. H. Yu, Phys. Rev. A 51, 1845 (1995); C. P. Sun, Y. B. Gao, H. F. Dong, and S. R. Zhao, Phys. Rev. E 57, 3900 (1998).
- [60] M. Orszag, Quantum Optics (Springer, Berlin, 1999); W. H. Louisell, Quantum Statistical Properties of Radiation, Wiley, New York, (1990)
- [61] G. Lindblad, Commun. Math. Phys. 48, 119 (1976); U. Weiss, Quantum Dissipative Systems, 2nd ed. World Scientific, Singapore, (1999).
- [62] H. T. Quan, Y. D. Wang, Yu-xi Liu, C. P. Sun, and F. Nori, Phys. Rev. Lett. 97, 180402 (2006).
- [63] E. Geva and R. Kosloff, J. Chem. Phys. 96, 3054 (1992); E. Geva and R. Kosloff, J. Chem.
 Phys. 97, 4398 (1992); Y. Rezek and R. Kosloff, New J. Phys. 8, 83 (2006).
- [64] T. Feldmann, E. Geva, and R. Kosloff, Am. J. Phys. 64, 485 (1996); T. Feldmann and R. Kosloff, Phys. Rev. E 68, 106101 (2003).
- [65] M. O. Scully and M. S. Zubairy, Quantum Optics Cambridge University Press, (1997).
- [66] M. O. Scully, Phys. Rev. Lett. 87, 220601 (2001).
- [67] M. O. Scully, in *Quantum Limits to the Second Law: First International Conference*, D.P. Sheehan Ed. American institute of physics, Melville, NY, (2002), pp. 83-91.

- [68] M. S. Zubairy, in Quantum Limits to the Second Law: First International Conference, D.P. Sheehan Ed. American institute of physics, Melville, NY, (2002), pp. 92-97.
- [69] C. P. Sun, Phys. Rev. A 48, 898 (1993); Chin. J. Phys. 32, 7 (1994); C. P. Sun, X. X. Yi, and X. J. Liu, Fortschur. Phys. 43, 585 (1995).
- [70] S. Haroche, Phys. Today **51**, 36 (1998).
- [71] E. Joos et al, *Decoherence and the Appearance of a Classical World in Quantum Theory*, second edition, Springer press, Berlin, (2003).
- [72] K. Maruyama, C. Brukner, and V. Vedral , J. Phys. A 38, 7175 (2005); K. Maruyama, F. Morikoshi, and V. Vedral, Phys. Rev. A 71, 012108 (2005).
- [73] N. Schuch, J. Siewert, Phys. Rev. A 67, 032301 (2003).
- [74] T. Feldmann and R. Kosloff, Phys. Rev. E 61, 4774 (2000); 65, 055102(R) (2002); 70, 046110 (2004); 73, 025107(R) (2006).
- [75] W.H. Zurek, arXiv: quant-ph/0301076.
- [76] S. Lloyd, Phys. Rev. A 56, 3374 (1997)
- [77] C. H. Bennett, Studies in History and Philosophy of Modern Physics 34, 501 (2003).
- [78] M.B. Plenio and V. Vitelli, Contemp. Phys. 42, 25 (2001); E. Lubkin, Int. J. Theor. Phys. 26, 523 (1987); V. Vedral, Pro. R. Soc. Lond. A 456, 969 (2000).
- [79] W. L. Louiseil, Quantum Statistical Properties of Radiation(John Wiley & Sons, Inc.), 1990.
- [80] H. P. Breuer and Francesco Petrucci, The Theory of Open Quantum Systems (Oxford University Press), 2002.
- [81] K. Huang, Statistical Mechanics, ohn Wiley, New York, 1987.
- [82] R. K. Pathria, *Statistical Mechanics*, Elsevier, Singapore, (1997).
- [83] 于渌,郝柏林,陈晓松,相变与临界现象,科学出版社,北京,(2003).
- [84] D. Jaksch, C. Bruder, J. I. Cirac, C. W. Gardiner, and P. Zoller, Phys. Rev. Lett. 81, 3108 - 3111 (1998).
- [85] I. Bloch, Physics World, April, 25 (2004).
- [86] C. Emary, N. Lambert, and T. Brandes, Phys. Rev. A 71, 062302 (2005).

- [87] X. F. Qian, T. Shi, Y. Li, Z. Song, and C. P. Sun, Phys. Rev. A 72, 012333 (2005).
- [88] H. J. Lipkin, N. Meshkov, and A. J. Glick, Nucl. Phys. **62**, 188 (1965); N. Meshkov, A. J. Glick, and H. J. Lipkin, Nucl. Phys. **62**, 199 (1965); A. J. Glick, H. J. Lipkin, and N. Meshkov, Nucl. Phys. **62**, 211 (1965).
- [89] J. Vidal, G. Palacios, and R. Mosseri, Phys. Rev. A 69 022107 (2004); R. Somma, G. Ortiz, H. Barnum, E. Knill, and L. Viola, Phys. Rev. A 70 042311 (2004); S. Dusuel and J. Vidal, Phys. Rev. Lett. 93, 237204 (2004).
- [90] S. Dusuel and J. Vidal, Phys. Rev. B 71, 224420(2005); J. I. Latorre, R. Orus, E. Rico, and J. Vidal, Phys. Rev. A 71, 064101 (2005).
- [91] T. Barthel, S. Dusuel, and J. Vidal, Phys. Rev. Lett. 97, 220402 (2006).
- [92] C. Emary and T. Brandes, Phys. Rev. E 67, 066203 (2003)
- [93] Y. Li and Z. D. Wang, and C. P.Sun, Phys. Rev. A 74, 023815 (2006).
- [94] S. L. Zhu, Phys. Rev. Lett. 96, 077206 (2006).
- [95] A. C. M. Carollo and J. K. Pachos, Phys. Rev. Lett. 95, 157203 (2005).
- [96] T. J. Osborne and M. A. Nielsen, Phys. Rev. A 66, 032110 (2002); A. Osterloh, L. Amico, G. Falci, and R. Fazio, Nature 416, 608 (2002).
- [97] Shi-Jian Gu, Chang-Pu Sun, Hai-Qing Lin, quant-ph/0605164; X. Wang, Phys. Lett. A 331, 164 (2004).
- [98] P. Pfeuty, Ann. Phys. 57, 79 (1970).
- [99] W. K. Wootters, Phys. Rev. Lett. 80, 2245 (1998); K. M. O'Connor, W. K. Wootters, Phys. Rev. A 63, 052302 (2001).
- [100] K. Hepp, Hev. Phys. Acta 45, 237 (1972).
- [101] J. S. Bell, Hev. Phys. Acta 48, 93 (1975).
- [102] H. Nakazato and S. Pascazio, Phys. Rev. Lett. 70, 1 (1993)
- [103] M. Cini, Nuovo Cimento B **73**, 27 (1983).
- [104] in Quantum-Classical Correspondence, Ed. by D.H. Feng and B.L. Hu 99-106 (International Press,1994); in Quantum Coherence and Decoherence, Ed. by K. Fujikawa and Y.A. Ono, pp. 331-334, Amsterdam, Elsevier Science Press, (1996).

- [105] A. Peres, Quantum Theory: Concepts and Methods, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, (1995).
- [106] Z. P. Karkuszewski, C. Jarzynski, and W. H. Zurek, Phys. Rev. Lett. 89, 170405 (2002); F.M. Cucchietti, D. A. R. Dalvit, J. P. Paz and W. H. Zurek, ibid. 91, 210403 (2003); R. A. Jalabert and H. M. Pastawski, ibid. 86, 246 (2001).
- [107] C. Emary and T. Brandes, Phys. Rev. Lett. 90, 044101 (2003)
- [108] P. Zhang, X. F. Liu and C. P. Sun, Phys. Rev. A 66, 042104 (2002).
- [109] W.H. Zurek, U. Dorner and P. Zoller, Phys. Rev. Lett. 95, 105701 (2005).
- [110] P. Pfeuty, Phys. Lett. A **72**, 245 (1979).
- [111] F. M. Cucchietti, D. A. R. Dalvit, J. P. Paz, and W. H. Zurek, Phys. Rev. Lett. 91, 210403 (2003); X. S. Ma, A. M. Wang, X. D. Yang, and H. You, J. Phys. A 38, 2761 (2005), and references therein.
- [112] J. Zhang, X. Peng, N. Rajendran, and D. Suter, Phys. Rev. Lett. 100, 100501 (2008).