

基于二维耦合谐振子的量子热机效率研究

武建安¹ 方爱平¹ 赵宇亮¹ 高 畅¹ 蒋臣威¹ 冯 俊¹ 张修兴² 王小力¹

(¹ 西安交通大学物理学院, 陕西 西安 710049; ² 渭南师范学院物理与电气工程学院, 陕西 渭南 714099)

摘 要 本文介绍了量子热机与量子热力学中的基本概念, 研究了二维耦合谐振子这一具体的量子系统作为工质时的量子热机的相关性质。笔者以经典热力学中的有关概念进行类比, 运用量子热力学相关研究, 引入波戈留波夫(Bogoliubov)变换这一方法解决了二维耦合谐振子的势能项难以对角化的问题。此外, 笔者以二维耦合谐振子为工质设计奥托循环热机, 通过理论推导和数值计算获得了奥托热机的效率, 并得出量子热机中各物理量与经典热机中对应量之间存在着统一的联系的结论。

关键词 量子热机; 谐振子; 奥托热机; 波戈留波夫变换; 量子热力学

ON THE EFFICIENCY OF QUANTUM HEAT ENGINE: AN EXAMPLE BASED ON COUPLED HARMONIC OSCILLATORS

WU Jian'an¹ FANG Aiping¹ ZHAO Yuliang¹ GAO Chang¹ JIANG Chenwei¹ FENG Jun¹
ZHANG Xiuxing² WANG Xiaoli¹

(¹ School of Physics, Xi'an Jiaotong University, Xi'an, Shaanxi 710049;

² School of Physics and Electrical Engineering, Weinan Normal University, Weinan, Shaanxi 714099)

Abstract This paper gives an introduction on the basic concepts of quantum heat engine and quantum thermodynamics while exploring relevant properties of the quantum heat engine system based on coupled harmonic oscillators. The authors drew references from classical thermodynamics and introduces Bogoliubov transformation so as to diagonalize the potential term in coupled quantum harmonic oscillators. The authors also based the quantum heat engine system on said oscillators and gives a detailed demonstration of acquiring the efficiency of Otto cycle utilized by this system, arriving at the conclusion that there is a unifying and cohesive factor that interconnects certain corresponding values between classical and quantum heat engines.

Key words quantum heat engine; harmonic oscillator; Otto cycle; Bogoliubov transformation; quantum thermodynamics

从第一次工业革命到第二次工业革命, 热机的效率一直是物理学家与工程师关注的问题。自

20 世纪初以来, 量子力学的蓬勃发展又将热机研究带领到了更加微观的范畴。物理学家以经典热

收稿日期: 2024-02-20; 网络首发日期: 2024-05-07

基金项目: 西安交通大学 2023 年基层教师教学发展组织建设项目(2302JF-01); 2023 年基层教学组织教学改革研究专项(基础课程); 渭南师范学院教育科学研究项目(2020JYKX021)。

通信作者: 蒋臣威, 西安交通大学物理学院副教授, jiangcw@mail.xjtu.edu.cn。

引文格式: 武建安, 方爱平, 赵宇亮, 等. 基于二维耦合谐振子的量子热机效率研究[J]. 物理与工程, 2024, 34(3): 109-116.

Cite this article: WU J A, FANG A P, ZHAO Y L, et al. On the efficiency of quantum heat engine: An example based on coupled harmonic oscillators[J]. Physics and Engineering, 2024, 34(3): 109-116. (in Chinese)

机为模型,对各类量子系统进行深入研究,探索量子与经典世界的异同,并将相关物理量进行对比与类比,试图探究运用经典热力学来诠释量子现象的可能性。在此过程中,物理学的一个新分支——量子热力学便应运而生。谐振子作为量子力学研究中的基础模型,以其为工质的量子热机的效率必然是一值得探究的问题。本文选取二维耦合谐振子作为主要研究对象,探究这一工质下量子热机的有关性质。

1 量子热机的最初模型——三能级模型

1.1 最初提出及来源

1959年,第一个量子热机模型由 Scovil 和 Schulz-DuBois 提出^[1]。两人在研究激微波(Maser,即受激辐射微波放大,是激光的前身)时发现,激微波三能级模型的最大效率可以与卡诺热机的效率相联系。图1为三能级模型的最初形式。

激微波与传统热机的本质区别在于激微波涉及的是粒子能量的离散能级,而传统热机研究的是连续的能量谱以及工作物质与外界的作用。

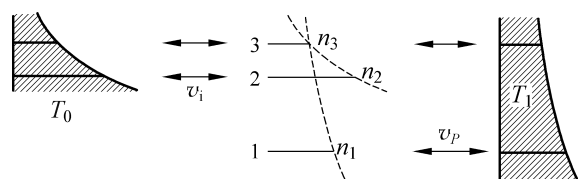


图1 三能级模型的最初形式^[1]

当时,两人引入热机这一模型来解释三能级激微波效率仅仅是因为把激微波问题与卡诺热机进行类比,从而能够在概念与理解方面获得良好的简化。例如,通过泵浦源向激微波供能可以看作热机从高温热源吸取能量,而激微波向外释放能量则可看作热机对外做功,并且两人证明了二者的最大效率均有 $(1 - T_1/T_2)$ 的形式^[1]。

1.2 工作原理

三能级模型通过利用高温热源和低温热源来维持粒子数反转以此来实现受激辐射放大。如图2所示,设产生激微波的三个能级为 E_1, E_2, E_3 ($E_1 < E_2 < E_3$)。由关系式 $\Delta E = \hbar\omega$ 可以确定任意两能级之间所对应的频率。1、3能级对应频率 ω_h 为泵频,代表泵浦源对激微波供能,类比卡诺热机从高温热源吸热,我们称 ω_h 与高温热源 T_h 耦合。

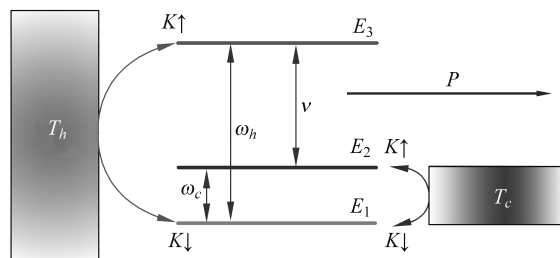


图2 三能级模型工作示意图^[1]

同理,1、2能级对应频率 ω_c 为闲频,即向低温热源放热, ω_c 与低温热源 T_c 耦合。2、3能级对应频率 ν 为信号频率,代表激微波对外输出,即对外做功。

激微波工作时,每从泵浦源得到能量 $\hbar\omega_h$,就对外辐射能量 $\hbar\nu$,并且释放一部分不对外输出的能量 $\hbar\omega_c$,并且能量守恒 $\omega_h = \nu + \omega_c$ 。如同在一个热机循环中,工质从高温热源吸热,得到的能量一部分对外做功,一部分再传递给低温热源。这样一来,便实现了三能级模型与传统热机的初步类比。

需要说明的是,为了实现上述量子热机的持续工作,高温热源和低温热源都是必不可少的。高温热源将系统从 E_1 能级持续泵浦到 E_3 能级,低温热源则使系统从 E_2 能级退回到 E_1 能级。高温热源在实验上可以通过单频光源实现;低温热源可以通过模式与 E_2 和 E_1 能级差共振的谐振腔实现,也可以通过其他类型的单频率玻色子库实现。

1.3 最大效率

如上所述,Scovil 和 Schulz-DuBois 提出量子热机模型的初衷是注意到了激微波三能级模型的最大效率可以与卡诺热机的效率相联系。类比热机效率的定义,此激微波的效率为

$$\eta = \frac{\hbar\nu}{\hbar\omega_h} = 1 - \frac{\omega_c}{\omega_h} \quad (1)$$

又根据玻尔兹曼分布,得到各能级间粒子数关系为

$$\frac{N_3}{N_1} = \exp\left(-\frac{\hbar\omega_h}{kT_h}\right) \quad (2)$$

$$\frac{N_2}{N_1} = \exp\left(-\frac{\hbar\omega_c}{kT_c}\right) \quad (3)$$

而受激辐射放大可以发生的条件是高低能级粒子数反转,高能级粒子数必须大于等于低能级

粒子数, 即 $N_3 > N_2$, 故

$$\hbar\omega_c/kT_c \geq \hbar\omega_h/kT_h \quad (4)$$

将此不等关系带入效率的表达式(1), 得

$$\eta = 1 - \frac{\omega_c}{\omega_h} \leq 1 - \frac{T_c}{T_h} = \eta_c \quad (5)$$

即此三能级激微波的最大效率为在同样高低温热源下工作的卡诺热机的效率。

2 量子热力学

2.1 量子热力学中的热力学第一定律^[2]

经典热力学中的定律在量子领域会有不同的表示形式。对于热机问题及其效率, 能够计算热机循环中的热量、做功与内能十分重要, 因而在此给出量子热力学中的热力学第一定律。

量子力学中, 一个多能级系统的哈密顿量为

$$H = \sum_n (E_n - E_0) |n\rangle\langle n| \quad (6)$$

则内能可由哈密顿量的平均值求得, 为

$$U = \langle H \rangle = \sum_n P_n E_n \quad (7)$$

其中 P_n 、 E_n 分别为处于态 $|n\rangle$ 的概率和态 $|n\rangle$ 的能量。

由上式两边同时求全微分得

$$dU = \sum_n (E_n dP_n + P_n dE_n) \quad (8)$$

将其与传统热力学中的热力学第一定律类比

$$dU = dQ + dW \quad (9)$$

并且知道

$$dQ = T dS \quad (10)$$

$$S = -k \sum_i P_i \ln P_i \quad (11)$$

通过量纲分析可以得出, dQ 对应式(8)中的第1项, 而 dW 对应第2项, 即

$$dQ = \sum_n E_n dP_n \quad (12)$$

$$dW = \sum_n P_n dE_n \quad (13)$$

式(13)表明做功对应能量本征值的改变。这与经典力学所认知的事实相符, 即做功是改变广义坐标的过程, 广义坐标的改变进而带来本征能量的改变。

2.2 一维谐振子系统下的微元功与微元热量

在讨论二维耦合谐振子系统前, 先给出一维谐振子的元功与元热量表达式。对于谐振子系统, 哈密顿算符可表示为

$$\hat{H} = \hbar\omega\hat{N} \text{ (忽略零点能)} \quad (14)$$

其中 $\hat{N}$ 为粒子数算符, 则系统内能为

$$E = \langle \hat{H} \rangle = \hbar\omega n \quad (15)$$

其中 n 为平均粒子数, 再对 E 求全微分得

$$dE = \hbar n d\omega + \hbar\omega dn \quad (16)$$

与 2.1 节中一样, 类比经典热力学, 得到^[3]

$$dW = \hbar n d\omega \quad (17)$$

$$dQ = \hbar\omega dn \quad (18)$$

即为一维谐振子系统下的微元功与微元热量表达式。式(17)与式(18)表明系统的能级改变导致功的产生, 而系统与外界交换的热量等于粒子在各能级重新分布所改变的内能。

2.3 一维谐振子系统下的热力学过程

由上述 2.2 节的讨论可知, 一维谐振子作为工质的量子热机中微元功的表达式为 $dW = \hbar n d\omega$, 与经典热机中微元功的表达式 $dW = P dV$ 类比, 可以利用类似于经典热机 p - V 图的形式画出 n - ω 图, 并用来描述量子热机中的热力学过程。需要强调的是, 上述类比并不是将粒子占据数 n 看作压强 p , 将谐振子的本征频率 ω 看作体积 V , 而是说类似于经典热机对外做功与压强 p 和体积 V 两个参量有关, 对于以一维谐振子为工质的量子热机, 其对外做功则与粒子占据数 n 和谐振子的本征频率 ω 有关。

另外需要说明的是, 对于一维谐振子作为工质的量子热机, 当谐振子的势阱壁缓慢移动时, 谐振子的本征频率 ω 随之发生改变。也就是说, 我们可以通过移动谐振子的势阱壁改变谐振子的频率。

图 3~图 5 展示了一维谐振子量子热机系统中的绝热、等频率和等温过程对应的 n - ω 图。我们还讨论了上述几种典型过程的实验实现方法。

一维谐振子量子热机中微元热量的表达式为 $dQ = \hbar\omega dn$, 而绝热过程要求 $dQ = 0$, 因此 n 为常数, 反应在 n - ω 图中即为一水平线, 如图 3 所示。实验上对应的过程如下: 针对一维谐振子系统, 缓慢改变谐振子的势阱形状(如移动谐振子势阱

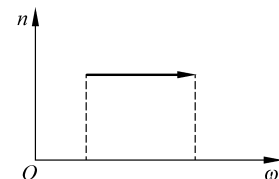


图 3 一维谐振子系统下的绝热过程

壁),将改变谐振子的频率 ω ,但系统的粒子占据数 n 保持不变,于是就实现了绝热过程(绝热膨胀或绝热压缩过程)。

在以一维谐振子为工质的量子热机系统中,只要保持谐振子势阱的形状不变,谐振子的频率 ω 就保持不变,此后进行的过程即为等频率过程,如图4所示。例如,若此时工质与高温或低温热源接触,将发生热量传递过程,从而引起谐振子系统中粒子占据数 n 的变化。

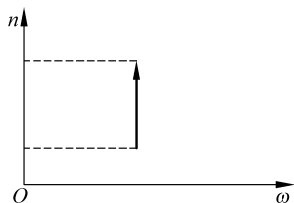


图4 一维谐振子系统中的等频率过程

在以一维谐振子为工质的量子热机中,若谐振子始终与一个温度恒定的热源接触,在谐振子频率 ω 和粒子占据数 n 变化的过程中,谐振子不仅从热源吸收热量,也对外做功,但整个过程谐振子系统总能量保持不变,上述过程称为等温过程,也称为等能量过程。其 n - ω 关系在图5中展示。

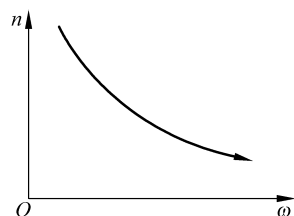


图5 一维谐振子系统下的等温过程

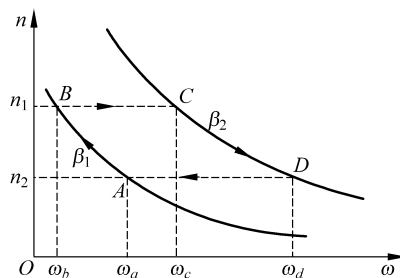
2.4 一维谐振子系统下卡诺热机的效率

根据量子统计理论,谐振子系统粒子数分布满足玻色-爱因斯坦分布 $n = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega\beta}{kT}} - 1}$,其中 $\beta = \frac{1}{kT}$, k 为玻尔兹曼常数^[3]。为方便推导,以下将 $\hbar$ 设为1, β 记为通常意义下的“温度”。

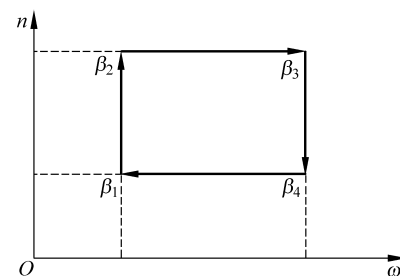
图6(a)展示了一个在温度分别为 β_1, β_2 的两个热库之间工作,包含两个等温过程和两个绝热过程的一维谐振子量子卡诺热机。

等温过程 A-B:

$$W_{AB} = \int_A^B n d\omega = \frac{1}{\beta_1} \ln \frac{e^{\beta_1 \omega_b - 1}}{e^{\beta_1 \omega_a - 1}} - (\omega_b - \omega_a) \quad (19)$$



(a)



(b)

图6 一维谐振子系统下的两种典型循环

(a) 卡诺循环; (b) 奥托循环

$$Q_{AB} = \frac{1}{\beta_1} \left(n_2 \ln \frac{n_2 + 1}{n_2} - n_1 \ln \frac{n_1 + 1}{n_1} + \ln \frac{n_2 + 1}{n_1 + 1} \right) \quad (20)$$

绝热过程 B-C:

$$W_{BC} = \int_B^C n d\omega = n_1 (\omega_c - \omega_b) \quad (21)$$

$$Q_{BC} = 0 \quad (22)$$

类似地,可以求得该量子卡诺热机对外做的总功和吸收的总热量,就此可以算出该热机效率 $\eta = 1 - \frac{\beta_2}{\beta_1}$,与经典卡诺热机效率类似^[4]。

同理,对于一个在四个温度分别为 $\beta_1, \beta_2, \beta_3, \beta_4$ 的热库之间工作,包含两个绝热过程和两个等频率过程的一维谐振子量子奥托热机(参见图6(b)),其效率易算得为 $\eta = 1 - \frac{\beta_4 - \beta_1}{\beta_3 - \beta_2}$,与经典奥托热机效率同样类似^[4]。

3 波戈留波夫变换处理二维耦合谐振子

考虑一个存在相互作用的谐振子系统,为处理简单,我们关注一个坐标耦合的二维耦合谐振子系统。波戈留波夫为研究一个具有两体弱排斥势的非理想玻色气体模型,引入了以他的名字命名的一种变化方法,来处理哈密顿量中的非对角

化项^[5]。由于谐振子可以视为玻色子,而我们研究的二维耦合谐振子正是有相互作用的情况,因此我们采用了这种方法。坐标耦合的二维谐振子系统,其哈密顿量可写为:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(p_1^2 + p_2^2) + \frac{1}{2}m\omega^2(x_1^2 + x_2^2) + \lambda x_1 x_2 \quad (23)$$

其中 $\hat{x}_i = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}_i^+ + \hat{a}_i)$, $\hat{p}_i = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(\hat{a}_i^+ - \hat{a}_i)$ ($i=1,2$), $\hat{a}_i$ 、 $\hat{a}_i^+$ 分别为粒子的湮灭算符和产生算符,满足玻色对易关系 $[\hat{a}_i, \hat{a}_j^+] = \delta_{ij}$, $[\hat{a}_i, \hat{a}_j] = [\hat{a}_i^+, \hat{a}_j^+] = 0$, ($i, j=1,2$), λ 为耦合项系数,表示两个谐振子间的耦合强度。

代入化简可得^[6]

$$H = \hbar\omega(a_1^+ a_1 + a_2^+ a_2 + 1) + \frac{\lambda\hbar}{2m\omega}(a_1^+ a_2^+ + a_1 a_2 + a_1^+ a_2 + a_1 a_2^+) \quad (24)$$

此时,动能项已经对角化,接下来为使势能项实现对角化,选取如下波戈留波夫变换

$$\left. \begin{aligned} a_1 &= u_{11}c_1 + u_{12}c_2 + u_{13}c_1^+ + u_{14}c_2^+ + \xi_1, \\ a_2 &= u_{21}c_1 + u_{22}c_2 + u_{23}c_1^+ + u_{24}c_2^+ + \xi_2, \\ a_1^+ &= u_{31}c_1 + u_{32}c_2 + u_{33}c_1^+ + u_{34}c_2^+ + \xi_3, \\ a_2^+ &= u_{41}c_1 + u_{42}c_2 + u_{43}c_1^+ + u_{44}c_2^+ + \xi_4 \end{aligned} \right\} \quad (25)$$

其中 u_{ij} 和 ξ_i ($i, j=1,2,3,4$) 均为常数,要求 c_i 和 c_i^+ 同样满足玻色对易关系 $[c_i, c_j^+] = \delta_{ij}$, $[c_i, c_j] = [c_i^+, c_j^+] = 0$, ($i, j=1,2$)。

解得

$$\left. \begin{aligned} a_1 &= \frac{1}{2\sqrt{2}}(\alpha_1 c_1 + \alpha_2 c_2 + \alpha_1^- c_1^+ + \alpha_2^- c_2^+), \\ a_2 &= \frac{1}{2\sqrt{2}}(\alpha_1 c_1 - \alpha_2 c_2 + \alpha_1^- c_1^+ - \alpha_2^- c_2^+), \\ a_1^+ &= \frac{1}{2\sqrt{2}}(\alpha_1^- c_1 + \alpha_2^- c_2 + \alpha_1 c_1^+ + \alpha_2 c_2^+), \\ a_2^+ &= \frac{1}{2\sqrt{2}}(\alpha_1^- c_1 - \alpha_2^- c_2 + \alpha_1 c_1^+ - \alpha_2 c_2^+). \end{aligned} \right\} \quad (26)$$

其中

$$\alpha_1 = \sqrt{\frac{\omega}{\omega_1}} + \sqrt{\frac{\omega_1}{\omega}} \quad (27)$$

$$\alpha_2 = \sqrt{\frac{\omega}{\omega_2}} + \sqrt{\frac{\omega_2}{\omega}} \quad (28)$$

$$\alpha_1^- = \sqrt{\frac{\omega}{\omega_1}} - \sqrt{\frac{\omega_1}{\omega}} \quad (29)$$

$$\alpha_2^- = \sqrt{\frac{\omega}{\omega_2}} - \sqrt{\frac{\omega_2}{\omega}} \quad (30)$$

$$\omega_1^2 = \omega^2 + \frac{\lambda}{m} \quad (31)$$

$$\omega_2^2 = \omega^2 - \frac{\lambda}{m} \quad (32)$$

得到

$$H = \hbar\omega_1\left(c_1^+ c_1 + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_2\left(c_2^+ c_2 + \frac{1}{2}\right) \quad (33)$$

此时,哈密顿量已经完全实现了对角化。需要说明的是,对于式(23)中的哈密顿量,类似于韦伯福斯摆,对坐标和动量同时做一个对角化也可以得到式(33),波戈留波夫变换并非从式(23)得到式(33)的唯一方法。

令 $n_1 = c_1^+ c_1$, $n_2 = c_2^+ c_2$, 可以将其视为假想粒子的粒子数算符,称为准粒子,由于要求其产生算符和湮灭算符满足玻色对易关系,因此它们是玻色型准粒子,即各自独立地满足对应的玻色-爱因斯坦分布^[7]。故体系内能 $E = \left(n_1 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_1 + \left(n_2 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_2$, 其中 $\omega_1^2 = \omega^2 + \frac{\lambda}{m}$, $\omega_2^2 = \omega^2 - \frac{\lambda}{m}$ 。

4 二维耦合谐振子奥托热机效率

回顾先前已知条件:

(1) 单谐振子中 $dW = n d\omega$, $dQ = \omega dn$;

(2) 坐标耦合谐振子能量本征值去除零点能,并令普朗克常数等于 1 后的形式为: $E = n_1 \omega_1 + n_2 \omega_2$;

(3) $\omega_1^2 = \omega^2 + \frac{\lambda}{m}$, $\omega_2^2 = \omega^2 - \frac{\lambda}{m}$;

(4) 二维坐标耦合谐振子变换后: $n_1 = \frac{1}{e^{\beta\omega_1} - 1}$, $n_2 = \frac{1}{e^{\beta\omega_2} - 1}$, 依据谐振子性质得出两个谐振子的分布;

(5) 奥托热机包含两个绝热过程和两个等体过程。

4.1 二维耦合谐振子奥托循环过程

图 7 给出了二维耦合谐振子奥托循环过程示意图,其中每个状态对应 6 个物理量:两谐振子各自的频率、粒子数,以及系统的温度和能量。

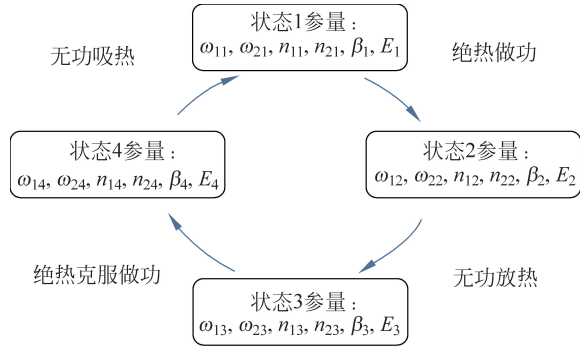


图7 二维耦合谐振子奥托循环过程

图中带两个下标的量:第一个下标分别代表两个谐振子,第二个下标表示状态;带一个下标的量:此下标表示状态。

4.2 二维耦合谐振子奥托热机效率的理论推导

利用无功过程和绝热过程的特点,用能量差表示做功和热效应后得到效率表达式

$$\eta = \frac{A}{Q_{\text{吸}}} \times 100\% = \left(1 - \frac{E_2 - E_3}{E_1 - E_4}\right) \times 100\% \quad (34)$$

为得到 $E-\beta$ 表达式,对 E 求全微分

$$\begin{aligned} dE &= n_1 d\omega_1 + \omega_1 dn_1 + n_2 d\omega_2 + \omega_2 dn_2 \\ &= dW + dQ \end{aligned} \quad (35)$$

根据对单谐振子的分析,两耦合谐振子的功和热为各谐振子的直接加和^[3]

$$dW = n_1 d\omega_1 + n_2 d\omega_2 \quad (36)$$

$$dQ = \omega_1 dn_1 + \omega_2 dn_2 \quad (37)$$

考虑无功过程,将 $dW=0, \omega_1^2 = \omega^2 + \frac{\lambda}{m}, \omega_2^2 =$

$$\omega^2 - \frac{\lambda}{m}, n_1 = \frac{1}{e^{\beta\omega_1} - 1}, n_2 = \frac{1}{e^{\beta\omega_2} - 1} \text{ 联立得}$$

$$dW = \frac{d\omega_1}{e^{\beta\omega_1} - 1} + \frac{d\omega_2}{e^{\beta\omega_2} - 1} = 0 \quad (38)$$

$$\frac{\omega d\omega}{\sqrt{\omega^2 + \frac{\lambda}{m}} (e^{\beta\omega_1} - 1)} + \frac{\omega d\omega}{\sqrt{\omega^2 - \frac{\lambda}{m}} (e^{\beta\omega_1} - 1)} = 0 \quad (39)$$

无功过程成立,需满足

$$\frac{1}{\sqrt{\omega^2 + \frac{\lambda}{m}} (e^{\beta\omega_1} - 1)} + \frac{1}{\sqrt{\omega^2 - \frac{\lambda}{m}} (e^{\beta\omega_1} - 1)} = 0 \quad (40)$$

或

$$\omega = C \quad (41)$$

讨论 $\omega=C$ 的情况,若 $\omega=C$,则有

$$\omega_{12} = \omega_{13} \quad (42)$$

$$\omega_{22} = \omega_{23} \quad (43)$$

$$\omega_{11} = \omega_{14} \quad (44)$$

$$\omega_{21} = \omega_{24} \quad (45)$$

所以, η 可化为

$$\eta = \left(1 - \frac{E_2 - E_3}{E_1 - E_4}\right) = 1 - \frac{V}{W} \quad (46)$$

其中

$$\begin{aligned} V &= \omega_{12} \left(\frac{1}{e^{\frac{\omega_{22}\beta_3}{\omega_{22}\beta_3} - 1}} - \frac{1}{e^{\frac{\omega_{22}\beta_2}{\omega_{22}\beta_2} - 1}} \right) + \\ &\omega_{22} \left(\frac{1}{e^{\frac{\omega_{22}\beta_3}{\omega_{22}\beta_3} - 1}} - \frac{1}{e^{\frac{\omega_{22}\beta_2}{\omega_{22}\beta_2} - 1}} \right) \end{aligned} \quad (47)$$

$$\begin{aligned} W &= \omega_{11} \left(\frac{1}{e^{\frac{\omega_{11}\beta_1}{\omega_{11}\beta_1} - 1}} - \frac{1}{e^{\frac{\omega_{11}\beta_4}{\omega_{11}\beta_4} - 1}} \right) + \\ &\omega_{21} \left(\frac{1}{e^{\frac{\omega_{21}\beta_1}{\omega_{21}\beta_1} - 1}} - \frac{1}{e^{\frac{\omega_{21}\beta_4}{\omega_{21}\beta_4} - 1}} \right) \end{aligned} \quad (48)$$

考虑从状态 1 到状态 2 的绝热过程,有

$$\begin{aligned} dQ &= \omega_1 dn_1 + \omega_2 dn_2 \\ &= \frac{\omega_1 e^{\beta\omega_1} (\beta d\omega_1 + \omega_1 d\beta)}{(e^{\beta\omega_1} - 1)^2} + \\ &\frac{\omega_2 e^{\beta\omega_2} (\beta d\omega_2 + \omega_2 d\beta)}{(e^{\beta\omega_2} - 1)^2} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (49)$$

令 $m_1 = \beta\omega_1, m_2 = \beta\omega_2$, 有

$$\frac{m_1 e^{m_1} dm_1}{(e^{m_1} - 1)^2} = - \frac{m_2 e^{m_2} dm_2}{(e^{m_2} - 1)^2} \quad (50)$$

两边积分得并带入初始条件得

$$\begin{aligned} &\frac{e^{\beta_2\omega_{12}} \ln(e^{\beta_2\omega_{12}} - 1) - \beta_2\omega_{12} e^{\beta_2\omega_{12}}}{e^{\beta_2\omega_{12}} - 1} + \\ &\frac{e^{\beta_2\omega_{22}} \ln(e^{\beta_2\omega_{22}} - 1) - \beta_2\omega_{22} e^{\beta_2\omega_{22}}}{e^{\beta_2\omega_{22}} - 1} = C \end{aligned} \quad (51)$$

其中

$$\begin{aligned} C &= \frac{e^{\beta_1\omega_{11}} \ln(e^{\beta_1\omega_{11}} - 1) - \beta_1\omega_{11} e^{\beta_1\omega_{11}}}{e^{\beta_1\omega_{11}} - 1} + \\ &\frac{e^{\beta_1\omega_{12}} \ln(e^{\beta_1\omega_{12}} - 1) - \beta_1\omega_{12} e^{\beta_1\omega_{12}}}{e^{\beta_1\omega_{12}} - 1} \end{aligned}$$

而由状态 3 到状态 4 的绝热过程有类似关系。

因此,最终的效率可由式(46)与式(51)联立求出。不难看出,与一维量子谐振子奥托热机^[8]不同,以二维耦合谐振子为工质的量子热机效率除了由热源温度决定外,其参数 $\frac{\lambda}{m}$ 也会产生影响。

由于出现超越方程,难以给出解析解,在这里只针对特定情况做数值计算。

选取 $\beta_1=0.01, \beta_2=0.02, \beta_3=0.06, \beta_4=0.03$, $\omega=100$; 则可得如下结果:

当 $\frac{\lambda}{m}=0$ 时,该热机为一维谐振子奥托热机,效率 $\eta=1-\frac{\beta_4-\beta_1}{\beta_3-\beta_2}=50\%$ 。

当 $\frac{\lambda}{m}=1$ 时,该热机为一种二维耦合谐振子奥托热机,其效率计算得 $\eta=36\%$,此效率小于一维谐振子奥托热机的效率。

对于参数为其他情况的二维耦合谐振子奥托热机,可以按照上述方法进行数值求解,从而获得热机的效率。

5 总结

在本文中,笔者回顾了量子热机的概念诞生,并进行了具体的量子热机效率计算。在充分讨论了量子热力学中的基本理论与一维量子谐振子的基础上,笔者以二维耦合谐振子作为具体实例分析在量子领域中热机的效率问题,并以经典热力学的分析方法进行理论计算,运用波戈留波夫变换处理耦合谐振子中哈密顿量的势能项,大大简化了后续计算的复杂度,为求解复杂系统的热机效率增加了可行性。回顾前文,读者不难发现,经典热机问题中蕴含着巨大的知识价值,以至于当经典热机问题中的分析方法被运用到量子领域时,在量子热力学中均找到了其对应表述或诠释。需要强调的是,本文仅以量子系统本身的哈密顿量进行处理,并无考虑外界环境与系统作用时的相关哈密顿量,此点可值得后续关注与研究。

参考文献

- [1] SCOVIL H E D, SCHULZ-DUBOIS E O. Three-level masers as heat engines[J]. Physical Review Letters, 1959, 2(6): 262-263.
- [2] QUAN H T, LIU Y, SUN C P, et al. Quantum thermodynamic cycles and quantum heat engines[J]. Physical Review E, 2007, 76(3): 031105.
- [3] 王建辉, 何济洲, 毛之远. 谐振子系统量子热机循环性能[J]. 中国科学 G 辑 物理学 力学 天文学, 2006, 36(6): 591-605.
- [4] 秦允豪. 普通物理学教程热学[M]. 4 版. 北京: 高等教育出版社, 2018: 212-216.
- [5] 张先蔚. 量子统计力学[M]. 2 版. 北京: 科学出版社, 2008: 151-153.

- [6] 张新明, 周焕强. 耦合谐振子的代数解法——波戈留波夫变换法[J]. 四川师范大学学报(自然科学版), 1995, 18(3): 35-38.
- [7] 杨展如. 量子统计物理学[M]. 1 版. 北京: 高等教育出版社, 2007: 134-137.
- [8] 黎才昌, 何济洲, 何弦等. 热纠缠奥托量子热机[J]. 低温物理学报, 2013, 35(2): 138-144.

附: 审稿意见和修改说明摘录

审稿意见(一):

论文第一部分讨论的三能级系统与热机的类比,为什么必须有高温热源和低温热源,为什么不直接从高能级跃迁到最低能级? 不是通过谐振腔就可以实现吗? 我没有看出来低温热源的必要性。论文中应该有所说明。

回复意见(一):

非常感谢审稿人的问题,使我们有将文章表述得更加清晰。

本文第一部分回顾了 Scovil 和 Schulz-DuBois 提出的量子热机模型,在量子力学中,该模型中的高温热源可以由单频光源完成,而低温热源确实可以通过模式与 E_2 和 E_1 能级差共振的谐振腔实现。此时,谐振腔扮演的作用就是热机中的低温热源。

修改情况(一):

我们在论文第 2 页“1.2 工作原理”的最后增加了如下段落,用来说明低温热源和高温热源问题。(略——编辑注)

审稿意见(二):

第二部分作者似乎是把谐振子量子数 n 看作是压强,频率看作是体积,所以有类似的等温过程、等容过程等。为什么? 为什么绝热过程是一个水平线? 谐振子的频率是可以任意改变的么?

那这个和上面的三能级系统有什么关系? 黑体谱的是由电磁谐振子最概然分布得到的。这里跟黑体谱的谐振子是一样的么? 那和前面的三能级系统有什么关系?

回复意见(二):

非常感谢审稿人的问题,使我们有将文章表述得更加清晰。

关于“作者似乎是把谐振子量子数 n 看作是压强,频率看作是体积。所以有类似的等温过程、等容过程等。为什么?”的回答:

由上述 2.2 节的讨论可知,一维谐振子作为工质的量子热机中微元功的表达式为 $dW=\hbar n d\omega$,与经典热机中微元功的表达式 $dW=PdV$ 类比,可以利用类似于经典热机 P - V 图的形式画出 n - ω 图,并用来描述量子热机中的热力学过程。需要强调的是,上述类比并不是将粒子占据数 n 看作压强 P ,将谐振子的本征频率 ω 看作体积 V ,而是说类似于经典热机对外做功与压强 P 和体积 V 两个参量有关,对于以一维谐振子为工质的量子热机,其对外做功则与粒子占据数 n 和谐振子的本征频率 ω 有关。

此外,我们在正文中针对一维谐振子作为工质的量子

热机系统,详细阐述了该系统中的绝热过程、等容过程(已经改称等频率过程,这样更加准确)和等温过程的意义,以及实验上的实现方法。

关于“为什么绝热过程是一个水平线?”问题的回答:

一维谐振子量子热机中微元热量的表达式为 $dQ = \hbar\omega dn$,而绝热过程要求 $dQ=0$,因此 n 为常数,反应在 $n-\omega$ 图中即为一水平线,如图 3 所示。实验上对应的过程如下:针对一维谐振子系统,缓慢改变谐振子的势阱形状(如移动谐振子势阱壁),将改变谐振子的频率 ω ,但系统的粒子占据数 n 保持不变,于是就实现了绝热过程(绝热膨胀或绝热压缩过程)。

关于“谐振子的频率是可以任意改变的吗?”问题的回答:

另外需要说明的是,对于一维谐振子作为工质的量子热机,当谐振子的势阱壁缓慢移动时,谐振子的本征频率 ω 随之发生改变。也就是说,我们可以通过移动谐振子的势阱壁改变谐振子的频率。

关于“那这个和上面的三能级系统有什么关系?黑体谱的是由电磁谐振子最概然分布得到的。这里跟黑体谱的谐振子是一样的么?那和前面的三能级系统有什么关系?”等问题的回答:

论文第一部分的三能级系统量子热机是作为量子热机研究背景给出,是我们回顾最早提出的量子热机的一种原型,与第二部分的一维谐振子作为工质的量子热机相比,二者是两种不同类型的量子热机模型。

此外,我们认为文中的一维谐振子与黑体谱的谐振子关系不大。

修改情况(二):

为了回答审稿人的上述问题,同时将文章表述更加清晰,我们重写了文章“2.3 一维谐振子系统下的热力学过程”部分,详细讨论了一维谐振子作为工质的量子热机中的热力学过程,包括绝热过程、等频率过程和等温过程,并给出了上述过程的实验实现方法。具体如下:(略——编辑注)。

审稿意见(三):

如果量子热机中的频率就是黑体谱一样的,那 ω 就是能量,也是可以变化的,对三维黑体也是成立的,那第三部分耦合的 ω_1, ω_2 是怎么回事?本身就是能量,也没有方向,怎么区分 1 和 2? 是两种物质分子吧?

回复意见(三):

第三部分我们考虑的耦合谐振子其实是为了描述有相互作用的谐振子系统,这也是本文的创新点所在。为处理简单,我们考虑的是二维坐标耦合情况下的谐振子系统,通过波戈留波夫变换得到了两种准粒子,它们的频率分别为 ω_1, ω_2 ($\omega_1^2 = \omega^2 + \frac{\lambda}{m}, \omega_2^2 = \omega^2 - \frac{\lambda}{m}$, 其中 ω 为没有耦合时谐振子的本征频率),且满足玻色爱因斯坦分布。相关处理也可以拓展到 n 维坐标与坐标,坐标与动量,动量与动量耦合的情况。在我们的理解中,这与黑体谱的关系并不大。

审稿意见(四):

我看公式(21)很简单,坐标和动量同时做一个简单的对角化就可以了,类似于韦伯福斯摆,为什么要用波戈留波夫变换?

回复意见(四):

非常感谢审稿人的上述问题和建议。

研究工作开展时,我们没有留意到对坐标和动量同时做一个简单的对角化就能实现,而是留意到采用波戈留波夫曾研究过一个具有两体弱排斥势的非理想玻色气体模型,与本文的二维耦合谐振子系统比较类似。由于谐振子可以视为玻色子,而我们研究的二维耦合谐振子正是有相互作用的情况,因此我们采用了这种方法。这种做法的主要好处是:有耦合的谐振子不再满足玻色爱因斯坦分布,而通过波戈留波夫变换可以引入两种准粒子,使其重新满足玻色爱因斯坦分布,便于计算量子热机做功和热量交换。

我们已在论文中加入说明,提醒读者可以不用波戈留波夫变换也能实现式(23)的对角化。再次感谢审稿人的建议!

修改情况(四):

我们在论文第 5 页结尾处加入了如下段落,强调波戈留波夫变换并非从式(23)得到式(33)的唯一方法。(略——编辑注)

同时在论文第 5 页“3 波戈留波夫变换(Bogoliubov)变换处理二维耦合谐振子”部分的开始处加入如下段落,说明我们采用波戈留波夫变换的初衷。

(略——编辑注)

再次感谢编辑和审稿人的辛苦工作!