

以一维谐振子势阱中的单粒子为工质的量子热机性能分析*

王建辉[†] 熊双泉 何济洲 刘江涛

(南昌大学物理系, 南昌 330031)

(2011年7月8日收到; 2011年12月27日收到修改稿)

建立了一维谐振子势阱中的单粒子为工质的量子热机模型. 当势阱壁宽度和粒子的量子态缓慢改变时, 该热机类似于经典卡诺热机对外做功. 假设势阱壁移动速度非常缓慢并且考虑热漏, 推导出量子热机循环的输出功率和效率等重要性能参数的一般表达式. 通过优化分析, 获得了热机循环中各主要性能参数的最佳优化值和优化区间.

关键词: 量子热机, 一维谐振子势阱, 最大输出功率, 性能参数

PACS: 05.70.-a, 03.65.-w

1 引言

自从 Scovil 和 Schulz-Dubois^[1] 引入量子热机概念以来, 量子热机的研究得到了广泛的关注^[2-17]. 量子热机是现代热力学的研究热点之一, 其主要研究对象是各种量子系统为工质的热力学循环的性能. 所用工质一般有量子气体、自旋系统、谐振子系统^[7-10]、二能级或多能级系统^[4,11,12,16,17]、空腔量子系统^[6,13]等. 研究量子热力学循环和研究经典热力学循环的情况类似, 即确定目标函数(输出功或功率、效率、制冷量或制冷率等)并对其进行优化分析, 迄今为止已经取得了大量重要的结论^[11,14,16,17-24].

Bender 等^[4] 在 2000 年提出了以处在一维无限深势阱中单粒子为工质的二能级热机模型. 当势阱壁缓慢移动时, 热机经历两等系统能量(亦称量子“等温”, 简称等温)过程和两量子绝热过程而构成一循环并且对外输出功, 同时得到该热机的效率为卡诺效率, 只是将系统的哈密顿量期望值代替温度而已. 最近, Abe^[14] 得到了该热机模型在最大功率下的效率值 $\eta_{mP} = 0.57398$, 该值和热机的参数(如势阱特征长度的最大值和最小值)无关, 即该

效率值对于该热机模型是普适的.

本文将建立以囚禁于一维谐振子势阱中的单粒子为工质的二能级量子热机循环模型, 该循环模型是由两个等能量(或称等温)过程和两个绝热过程组成. 假设循环过程中势阱壁移动缓慢并且移动速度恒定, 得到了存在热漏情况下量子热机的输出功率、效率等性能参数的表达式, 从而分析了该热机循环性能参数的最佳优化值和优化区间. 最后, 在无热漏情况下求出了该热机循环模型的最大输出功率下的普适效率值 $\eta_{mP} = 0.5507$, 该值和一维无限深势阱中的单粒子为工质的热机对应的效率值不同. 研究表明, 以囚禁在一维势阱中的单粒子为工质的二能级量子热机, 其最大输出功率下的效率值依赖于势阱的具体形式.

2 量子热机模型及其效率表达式

根据量子理论, 可以将体系的状态波函数 ψ 用算符 \hat{F} 的本征函数 ϕ 展开 ($\hat{F}\phi_n = \lambda_n\phi_n, \hat{F}\phi_\lambda = \lambda\phi_\lambda$), 得到波函数的表达式为^[25]

$$\psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \phi_n(x), \quad (1)$$

* 国家自然科学基金(批准号: 11147200, 11065008, 10904059)资助的课题.

[†] E-mail: physwjh@gmail.com

系数 a_n 满足归一化条件

$$\sum_{n=0}^{\infty} |a_n|^2 = 1. \quad (2)$$

囚禁于一维谐振子势阱中的单粒子能谱可表示为

$$\varepsilon_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \quad (n = 0, 1, 2, \dots), \quad (3)$$

其中 ω 为谐振子势阱圆频率. 谐振子势阱的特征长度为^[26] $L = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ (m 为粒子质量), 即圆频率 $\omega = \frac{\hbar}{mL^2}$. 令

$$A \equiv \frac{\hbar^2}{m},$$

可得

$$\varepsilon_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{A}{L^2}. \quad (4)$$

所以, 系统能量 $E(L)$ 可表示为

$$E(L) = \sum_{n=0}^{\infty} |a_n|^2 \left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{A}{L^2}. \quad (5)$$

根据定义, 广义力可表示为

$$Y_n = -\frac{dW}{dy_n},$$

其中 y_n 是广义力 Y_n 对应的广义坐标. 因此, 势阱壁在移动过程中所受的力

$$F = -\frac{\partial E}{\partial L},$$

即

$$F(L) = \sum_{n=0}^{\infty} |a_n|^2 \left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{2A}{L^3}. \quad (6)$$

考虑如下一种简单的情况: 波函数只有两个本征态, 即两状态的量子卡诺循环. 如图 1 所示, 在 $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 4 \rightarrow 1$ 循环中, 1, 2, 3 和 4 分别为循环的各过程之间的分界点, L_1, L_2, L_3 和 L_4 分别为分界点 1, 2, 3 和 4 所对应的势阱特征长度. 整个循环包括 $2 \rightarrow 3, 4 \rightarrow 1$ 两绝热过程和 $1 \rightarrow 2, 3 \rightarrow 4$ 两等温过程. 量子等温过程可以认为系统和外界通过输入或输出能量 (例如利用激光等^[4]) 的方式来实现系统的能量恒定.

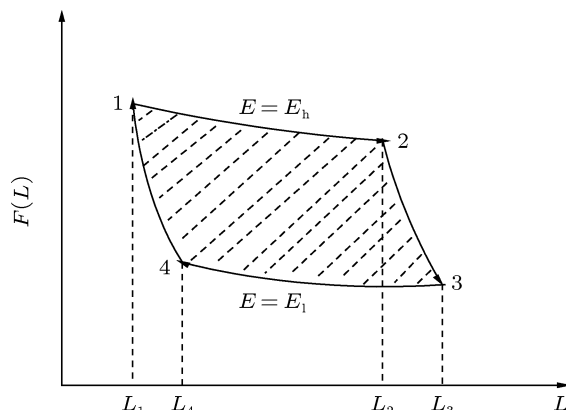


图 1 量子卡诺热机循环过程示意图

在实际情况下, 当热机与“高温热源”和“低温热源”接触时, “热源”足够大且两“热源”内部能量弛豫较强. 因此, 在“高温热源”和“低温热源”中存在热漏 Q_r ^[17]. 下面对热机循环过程作简要叙述.

第1步 我们假定势阱壁等温膨胀, 系统保持哈密顿量期望值不变. 因此, 在等温膨胀过程中, 粒子状态为最低两能量本征状态的线性组合, 即

$$\psi(x) = a_0(L) \phi_0(x) + a_1(L) \phi_1(x). \quad (7)$$

开始时势阱宽为 L_1 且系统处于基态, 并假定势阱宽度移动很慢, 满足绝热定理^[25].

根据 (2) 式可知, $|a_0|^2 + |a_1|^2 = 1$. 由 (5) 式得到此等温过程中系统哈密顿量期望值为

$$\begin{aligned} E_h &= \frac{A}{2L^2} (3 - 2|a_0|^2) \\ &= \frac{A}{2L_1^2}. \end{aligned} \quad (8)$$

因此, 在等温膨胀过程中 $a_1 = 1$ 时 L 达到最大值为 $L_2 = \sqrt{3}L_1$. 同时, 注意到 $L = L_2$ 粒子处于激发态. 在等温膨胀过程中由 (6) 式可得势阱壁所受的力为

$$\begin{aligned} F_1(L) &= |a_0|^2 \frac{A}{L^3} + (1 - |a_0|^2) \frac{3A}{L^3} \\ &= \frac{A}{L_1^2 L}. \end{aligned} \quad (9)$$

第2步 系统从 $L = L_2$ 绝热膨胀到 $L = L_3$. 在绝热膨胀期间, 粒子一直处在激发态. 根据热力学第一定律

$$dE = dW + dQ, \quad (10)$$

绝热过程系统对外界不吸收和释放能量, 即 $dQ = 0$. 因此, 此过程系统对外界做功 W_{23} 等于内能的变化, 即

$$W_{23} = E_h - E_l, \quad (11)$$

其中 E_1 表示第 3 步中系统的哈密顿量期望值.

第3步 系统 $L = L_3$ 等温压缩至 $L = L_4$. 在压缩期间, 必须释放能量, 以便使哈密顿量期望值保持不变. 该过程粒子由激发态回归到基态. 同理可知, $L_4 = \frac{1}{\sqrt{3}}L_3$. 在低温压缩期间哈密顿量期望值 E_1 可表示为

$$E_1 = \frac{3A}{2L_3^2}. \quad (12)$$

类似于第一步, 可求得作用力

$$F_3(L) = \frac{3A}{L_3^2 L}. \quad (13)$$

由 (9) 和 (13) 式可知, 两等温过程中 $LF_1(L)$ 和 $LF_3(L)$ 均为常量. 这正是等温过程下经典状态方程 $PV = C$ 的量子类比.

第4步 势阱壁 $L = L_4$ 绝热压缩至起点 $L = L_1$. 根据热力学第一定律, 此过程系统对外界做功 W_{41} 等于系统内能的变化, 即

$$W_{41} = E_1 - E_h. \quad (14)$$

考虑到热机输出功 $W = W_{12} + W_{23} + W_{34} + W_{41}$, 并根据 (9), (11), (13) 和 (14) 式, 可得热机输出功

$$\begin{aligned} W &= \int_{L_1}^{\sqrt{3}L_1} dLF_1(L) + W_{23} \\ &+ \int_{L_3}^{L_3/\sqrt{3}} dLF_3(L) + W_{41} \\ &= A \left(\frac{1}{L_1^2} - \frac{3}{L_3^2} \right) \ln \sqrt{3}. \end{aligned} \quad (15)$$

在等温膨胀过程中系统吸收的热量

$$\begin{aligned} Q_h &= \int_{L_1}^{\sqrt{3}L_1} dLF_1(L) \\ &= \frac{A}{L_1^2} \ln \sqrt{3}. \end{aligned} \quad (16)$$

为了进一步分析热机的输出功率与效率之间的关系, 令 $v(t)$ 和 τ 分别表示势阱宽度 L 的改变速度和循环周期^[14]. 在每一循环中总移动量 L_{total} 可表示为

$$\begin{aligned} L_{\text{total}} &= (L_2 - L_1) + (L_3 - L_2) \\ &+ (L_3 - L_4) + (L_4 - L_1) \\ &= 2(L_3 - L_1) \\ &= \int_0^\tau dt v(t) \\ &= \bar{v}\tau, \end{aligned} \quad (17)$$

其中 \bar{v} 表示平均速度. 注意到 \bar{v} 应该很小以保证绝热过程有效. 热机循环周期

$$\tau = \frac{2}{\bar{v}}(L_3 - L_1). \quad (18)$$

考虑到热机存在热漏并设热漏的热流 \dot{Q}_r 为一常数, 可以得到在等温膨胀和等温压缩过程中热机实际吸收和释放的热量分别为

$$Q'_h = Q_h + \dot{Q}_r \tau, \quad (19)$$

$$Q'_1 = Q_1 + \dot{Q}_r \tau. \quad (20)$$

实际输出功 $W' = Q'_h - Q'_1 = Q_h - Q_1$, 即 $W' = W$. 因此, 热漏对热机输出功没有影响. 将 (15), (16) 和 (19) 式代入效率公式

$$\eta = \frac{W}{Q'_h},$$

可得

$$\begin{aligned} \eta &= \frac{A \ln \sqrt{3} \left(\frac{1}{L_1^2} - \frac{3}{L_3^2} \right)}{\frac{A \ln \sqrt{3}}{L_1^2} + \dot{Q}_r \tau} \\ &= \frac{A \ln \sqrt{3} \left(\frac{1}{L_1^2} - \frac{3}{L_3^2} \right)}{\frac{A \ln \sqrt{3}}{L_1^2} + \dot{Q}_r \frac{2(L_3 - L_1)}{\bar{v}}}. \end{aligned} \quad (21)$$

因为 $\dot{Q}_r \neq 0$ 的功率 P' ($P' = \frac{W'}{\tau}$) 与理想状态下 $\dot{Q}_r = 0$ 的功率 P ($P = \frac{W}{\tau}$) 相同, 所以无论热机是否存在热漏, 我们均采用 P 表示热机的输出功率. 令

$$r \equiv \frac{L_3}{L_1}, \quad (22)$$

根据 (15), (18) 和 (22) 式, 可得到输出功率

$$P = \frac{\bar{v} A \ln \sqrt{3}}{2L_1^3} \frac{r^2 - 3}{r^2(r-1)}. \quad (23)$$

令无量纲输出功率

$$P^* \equiv \frac{P}{\frac{\bar{v} A \ln \sqrt{3}}{2L_1^2}},$$

同时假设势阱壁的移动平均速度 \bar{v} 和在循环的起始点“1”的势阱壁的特征长度 L_1 已确定^[14], 则 P^* 可表示为

$$P^* = \frac{r^2 - 3}{r^2(r-1)}. \quad (24)$$

对照 P 和 \dot{Q}_r 的量纲分析, 可假设

$$\dot{Q}_r = CA \frac{\bar{v}}{L_1^3}, \quad (25)$$

其中 C 为常量. 将 (22) 和 (25) 式代入 (21) 式可得

$$\eta = \frac{\frac{A \ln \sqrt{3}}{L_1^2} \left(1 - \frac{3}{r^2}\right)}{\frac{A \ln \sqrt{3}}{L_1^2} + CA \frac{\bar{v}}{L_1^3} \frac{2L_1(r-1)}{\bar{v}}} = \frac{\frac{A \ln \sqrt{3}}{L_1^2} \left(1 - \frac{3}{r^2}\right)}{\frac{A \ln \sqrt{3}}{L_1^2} + CA \frac{2(r-1)}{L_1^2}}. \quad (26)$$

明显地, 效率表达式 (26) 可简化为

$$\eta = \frac{1 - \frac{3}{r^2}}{1 + D(r-1)}. \quad (27)$$

其中 D 为常量,

$$D = \frac{2C}{\ln \sqrt{3}}.$$

为确保效率 $\eta \geq 0$, 必须满足 $r \geq \sqrt{3}$.

3 热机循环性能参数优化

根据 (24) 和 (27) 式, 当 D 给定时, 可画出无量纲输出功率 P^* 与效率 η 的关系曲线, 结果如图 2 所示.

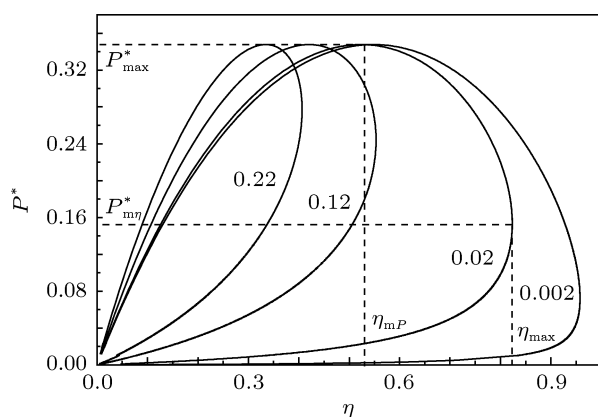


图 2 当 $D = 0.22, 0.12, 0.02, 0.002$ 时, 无量纲输出功率 P^* 与效率 η 的关系曲线

图 2 表明, 当存在热漏 (即 $D \neq 0$) 时, 输出功率与效率的关系曲线为环形. 以 $D = 0.02$ 的曲线为例进行分析. 对于相同的无量纲输出功率 P^* , 效率 η_{mP} (最大输出功率下对应的效率) 的右边区域比其左边区域更优; 对于相同的效率 η , 无量纲输出功率 $P_{m\eta}^*$ (最大效率下对应的无量纲输出功率) 的上方区域更优. 综上可知, 热机循环的优化区间为

$$\eta_{mP} \leq \eta \leq \eta_{\max}, \quad (28)$$

或者表示为

$$P_{m\eta} \leq P \leq P_{\max}. \quad (29)$$

满足 (28) 或 (29) 式时才能使量子热机工作在优化状态. 当热机具有最大输出功率时, 由极值条件

$$\left(\frac{\partial P^*}{\partial r}\right)_{r=r_{mP}} = 0$$

可得

$$r_{mP}^3 - 9r_{mP} + 6 = 0. \quad (30)$$

在满足 $r \geq \sqrt{3}$ 的条件下, (30) 式的数值解为 $r_{mP} = 2.5842$. 需要强调的是, 无量纲输出功率 P^* 与热漏 Q_r 无关, 所以 r_{mP} 与热漏 Q_r 无关.

当热机具有最大效率时, 由极值条件

$$\left(\frac{\partial \eta}{\partial r}\right)_{r=r_{m\eta}} = 0$$

可得

$$D(r_{m\eta}^3 - 9r_{m\eta} + 6) - 6 = 0. \quad (31)$$

满足 (31) 式的数值解依赖于参数 D 的取值, 如表 1 所列. 由 (27) 式可知, η 为 r 的单调递增函数, 结合 (28) 式可知, 势阱宽度的最大值与最小值之比 r 必须满足

$$2.8542 \leq r \leq r_{m\eta}. \quad (32)$$

因此, 在分界点 3 与分界点 1 的势阱特征长度之比 r 满足 (32) 式时热机工作在优化状态. 应当再次强调的是, 表 1 和图 2 表明: 最大无量纲输出功率 r_{mP} 不受热漏 Q_r 的影响, 但热漏 Q_r 对最大效率 η_{\max} 、优化效率 η_{mP} 和最大效率下 $r_{m\eta}$ 的影响非常明显.

表 1 当参数 D 取不同值时, 势阱特征长度之比 r_{mP} , $r_{m\eta}$ 和热机效率 η_{mP} , η_{\max} 的计算值

D	r_{mP}	$r_{m\eta}$	η_{mP}	η_{\max}
0.220	2.5842	3.9812	0.3511	0.4322
0.120	2.5842	4.4879	0.4204	0.5532
0.020	2.5842	7.1418	0.5237	0.8236
0.002	2.5842	14.6305	0.5479	0.9580
0.000	2.5842	∞	0.5507	1.0000

4 理想状态 ($\dot{Q}_r = 0$ 时) 热机最大功率条件下的性能参数优化

当不考虑热漏 ($\dot{Q}_r = 0$) 时, 即参数 $D = 0$, 则

效率表达式 (27) 可简化为

$$\eta = 1 - \frac{3}{r^2}. \quad (33)$$

结合 (8), (12) 和 (22) 式, (33) 式可表示为

$$\eta = 1 - \frac{E_l}{E_h}, \quad (34)$$

其中能量 E_h 和 E_l 相当于经典卡诺循环的效率公式 $\eta = 1 - \frac{T_l}{T_h}$ 中的温度. 因此, (34) 式为经典卡诺热机效率表达式的量子类比. 当 $D = 0$ (即 $\dot{Q}_r = 0$) 时, 根据 (24) 和 (33) 式, 无量纲输出功率 P^* 可表示为效率 η 的函数, 即

$$P^* = \frac{\eta}{\sqrt{\frac{3}{1-\eta} - 1}}. \quad (35)$$

利用 (35) 式我们画出了无量纲输出功率 P^* 与效率 η 的关系曲线, 结果如图 3 所示. 从图 3 可以看出, 存在最大无量纲功率 P_{\max}^* 和对应的效率 η_{mP} . 当 $P < P_{\max}^*$ 时, 对应两个不同的效率值. 在无量纲输出功率 P^* 相同的情况下, 性能参数在 $\eta > \eta_{mP}$ 范围内比在 $\eta < \eta_{mP}$ 范围内更优, 因此效率优化区间 (28) 式可表示为

$$\eta_{mP} \leq \eta < 1, \quad (36)$$

其中 $\eta_{mP} = 0.5507$, 如表 1 所列. 该值与文献 [14] 中 η_{mP} 的值不同. 这表明以囚禁在一维势阱的单粒子为工质的二能级量子热机, 虽然在确定的势阱前提下其最大输出功率时的效率值 η_{mP} 不依赖于该热机模型的参数, 但是 η_{mP} 却依赖于囚禁单粒子势阱的具体形式.

由以上分析可知, 当热机不存在热漏时, 若使热机循环处在 (36) 式所表示的优化区间工作, 势阱宽度最大值与最小值之比 r 必须满足 $r \geq 2.5842$.

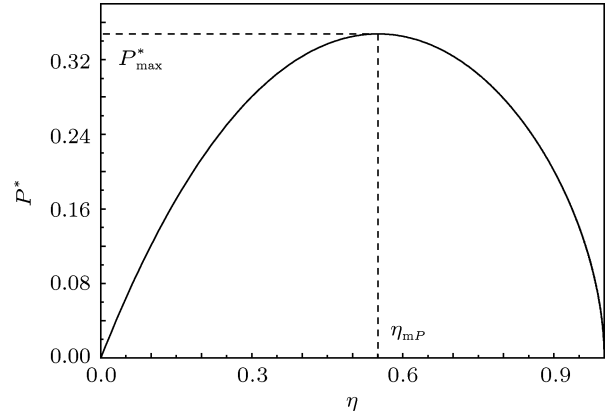


图 3 热机不存在热漏时无量纲输出功率 P^* 与效率 η 的关系曲线

5 结论

本文建立了以囚禁在一维谐振子势阱中的单粒子为工质的量子热机循环模型, 该热机循环包含两等温和两绝热过程, 并且得到了存在热漏情况下的功率和效率表达式. 假设势阱壁移动非常缓慢而且速度有限, 通过优化分析得到了热机效率的优化值和优化区间, 这可以为热机循环的设计提供理论指导. 同时分析了一种理想 (不存在热漏) 的热机循环模型, 发现其效率表达式和以一维无限深势阱中的单粒子为工质的量子热机的效率表达式一致. 通过比较可知, 虽然热机在最大输出功率下的效率值对于确定的势阱是普适的 (即和势阱特征长度之比无关), 但效率优化值以及优化区间依赖于势阱的具体形式. 本文得到的热机性能优化分析结果仅适用于以囚禁在一维谐振子势阱中的单粒子为工质的二能级量子热机模型, 下一步将分析以处在其他形式势阱 [27] (如空腔单模场、四次势阱) 中的单粒子为工质的二能级量子热机的性能.

[1] Scovil H E D, Schulz-Dubois E O 1959 *Phys. Rev. Lett.* **2** 262
 [2] Scully M O 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 220601
 [3] Scully M O 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 050602
 [4] Bender C M, Brody D C, Meister B K 2000 *J. Phys. A* **33** 4427
 [5] Quan H T 2009 *Phys. Rev. E* **79** 041129
 [6] Scully M O, Zubairy M S, Agarwal G S, Walther H 2003 *Science* **299** 862
 [7] He J Z, Chen J C, Hua B 2002 *Phys. Rev. E* **65** 036145
 [8] Wu F, Chen L G, Sun F R, Wu C, Li Q 2006 *Phys. Rev. E* **73** 016103
 [9] Feldmann T, Kosloff R 2000 *Phys. Rev. E* **61** 4774

[10] Wu F, Chen L G, Wu S, Sun F R, Wu C 2006 *J. Chem. Phys.* **124** 214702
 [11] Wang J H, He J Z, Mao Z Y 2007 *Sci. China G* **50** 163
 [12] Quan H T, Liu Y X, Sun C P, Nori F 2007 *Phys. Rev. E* **76** 031105
 [13] Quan H T, Zhang P, Sun C P 2006 *Phys. Rev. E* **73** 036122
 [14] Abe S 2011 *Phys. Rev. E* **83** 041111
 [15] Henrich M J, Mahler G, Michel M 2007 *Phys. Rev. E* **75** 051118
 [16] He J Z, Wang J H, Deng X F 2010 *Int. J. Mod. Phys. B* **24** 4595
 [17] Wu F, Chen L G, Sun F R, Wu C, Guo F Z 2006 *J. Appl. Phys.* **99** 054904
 [18] Wang X M, He J Z, He X, Xiao Y L 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 4460

- (in Chinese) [王秀梅, 何济洲, 何弦, 肖宇玲 2010 物理学报 **59** 4460]
- [19] He J Z, He B X 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 2345 (in Chinese) [何济洲, 贺兵香 2010 物理学报 **59** 2345]
- [20] He J Z, He B X 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 101 (in Chinese) [何济洲, 贺兵香 2010 物理学报 **59** 101]
- [21] Wang X M, He J Z, Wang J H 2008 *Acta Electron. Sin.* **36** 2178 (in Chinese) [王小敏, 何济洲, 王建辉 2008 电子学报 **36** 2178]
- [22] Liu X W, Chen L G, Wu F, Sun F R 2010 *Phys. Scr.* **81** 025003
- [23] Liu X W, Chen L G, Wu F, Sun F R 2009 *Sci. China G* **52** 1976
- [24] Lin B H, Chen J C 2005 *J. Phys. A* **38** 69
- [25] Zeng J Y 2001 *Quantum Mechanics* (Vol. 2) (4th ed) (Beijing: Science Press) pp203—205 (in Chinese) [曾谨言 2001 量子力学 (卷二) (第四版) (北京: 科学出版社) 第 203—205 页]
- [26] Xiong H W, Liu S J, Huang G X, Xu Z X 2002 *Phys. Rev. A* **65** 033609
- [27] Wang J H, He J Z, He X 2011 *Phys. Rev. E* **84** 041127

Performance analysis of a quantum heat engine working with a particle in a one-dimensional harmonic trap*

Wang Jian-Hui[†] Xiong Shuang-Quan He Ji-Zhou Liu Jiang-Tao

(Department of Physics, Nanchang University, Nanchang 330031, China)

(Received 8 July 2011; revised manuscript received 27 December 2011)

Abstract

A heat engine model of a sing particle confined in a one-dimensional harmonic trap is established. The model, as a quantum-mechanical analog of the Carnot engine, does work to outside when both the width of the potential and the quantum state change very slowly. On the assumption that the width of the potential moves at a very slow speed and the heat leakage is included, we derive the general expressions for several performance parameters, such as work, power output, efficiency, etc. We find the optimally operating regions and the optimal values of performance parameters of the heat engine cycle.

Keywords: quantum heat engine, one-dimensional harmonic trap, maximum power output, performance parameters

PACS: 05.70.-a, 03.65.-w

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11147200, 11065008, 10904059).

[†] E-mail: physwjh@gmail.com