

## 初态对线型分子体系量子速度极限量度的影响

冯海冉 李鹏 岳现房

### Impact of initial states on the quantum speed limits metric in linear molecules

Feng Hai-Ran Li Peng Yue Xian-Fang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 68, 050201 (2019) DOI: 10.7498/aps.68.20181942

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.68.20181942>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

---

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

Bose–Hubbard模型中系统初态对量子关联的影响

Effects of initial states on the quantum correlation in Bose–Hubbard model

物理学报. 2015, 64(22): 220301 <https://doi.org/10.7498/aps.64.220301>

能够突破标准量子极限的原子双数态的制备研究

Generation of twin–Fock states for precision measurement beyond the standard quantum limit

物理学报. 2018, 67(16): 160303 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20181029>

两端线型双量子点分子Aharonov–Bohm干涉仪电输运

Electron transport through a two–terminal Aharonov–Bohm interferometer coupled with linear di–quantum dot molecules

物理学报. 2015, 64(20): 207304 <https://doi.org/10.7498/aps.64.207304>

在不同初态下Dzyaloshinskii–Moriya相互作用及内禀退相干对海森伯系统的量子纠缠的影响

Effects of Dzyaloshinskii–Moriya interaction and decoherence on entanglement dynamics in Heisenberg spin chain system with different initial states

物理学报. 2016, 65(17): 170301 <https://doi.org/10.7498/aps.65.170301>

基于量子图态的量子秘密共享

Quantum secret sharing with quantum graph states

物理学报. 2016, 65(16): 160301 <https://doi.org/10.7498/aps.65.160301>

从离散Wigner函数的角度探讨量子相干性度量

Investigating quantum coherence from discrete Wigner function

物理学报. 2017, 66(11): 110301 <https://doi.org/10.7498/aps.66.110301>

# 初态对线型分子体系量子速度极限度量的影响\*

冯海冉<sup>†</sup> 李鹏 岳现房

(济宁学院物理与信息工程系, 曲阜 273155)

(2018年10月31日收到; 2018年11月28日收到修改稿)

量子速度极限(QSL)的实用性研究关系到更高效量子技术的实现, 研究不同分子体系中 QSL 问题可为基于分子体系的量子信息技术提供理论支持. 采用代数方法讨论了不同的初始态对 QSL 度量方式的影响, 研究发现初始态和分子参数均会影响 QSL 的度量方式, 对分子体系无论 Fock 态还是相干态, 量子 Fisher 信息度量方式优于 Wigner-Yanase 信息度量方式. 广义几何 QSL 度量更适合描述强相干态下的分子动力学演化.

**关键词:** 李代数, 量子速度极限, 分子**PACS:** 02.20.Sv, 03.67.-a, 33.15.-e**DOI:** 10.7498/aps.68.20181942

## 1 引言

量子系统的最大动力学演化速度是量子计算、量子通信和量子调控等量子物理领域中涉及的一个基本概念. 量子速度极限 (quantum speed limit, QSL) 对应量子系统演化速度的极限值, 是由量子力学本身产生的限制. 虽然 QSL 问题的提出已有数十年的历史, 但其理论发展一直较为缓慢, 直到量子信息科学技术与激光技术的发展使许多动力学演化过程成为超快演化过程, 这引出了 QSL 研究的重要实用价值, 而使其成为近年来国内外的研究热点. QSL 时间作为体系两个态间最短的演化时间是由 Anandan 和 Aharonov<sup>[1]</sup> 于 1990 年首次提出并利用 Fubini-Study 度量给出了其定义式, 随后 Mandelstam-Tamm 和 Margolus-Levitin 公式被分别拓展用于给出封闭系统么正演化下的量子极速值<sup>[2,3]</sup>. 量子极速的实用价值被引出后, 近年来在国内外得到迅猛发展, QSL 限值被拓展到驱动系统<sup>[4-6]</sup> 和混合量子态演化中<sup>[7,8]</sup>. 因为系统不可避免地与环境相互作用, 所以开放系统下的 QSL

也引起了广泛关注<sup>[9-11]</sup>. 目前有关 QSL 的研究大部分集中在对理想模型的探讨, 对实际分子体系涉及较少, 随着超快超强激光脉冲技术的发展, 基于分子振转态以及不同电子态的分子振动态等量子计算问题和实验研究<sup>[12-14]</sup> 虽然有了一定突破, 但其中均涉及到振转态间的量子纠缠和态的量子调控, 也属于超快演化过程, 这些都不可避免地 with QSL 相关. 前述对理想模型的研究中已发现不同特性的物理体系具有不同的 QSL, 而且其限值还依赖于初始态的选择, 不同的 QSL 度量方式得到的结果也不尽相同, 这些发现更加促使了对不同分子体系下 QSL 问题研究的迫切性, 探寻分子振转参数和任意初始态对 QSL 的影响, 可以为基于分子体系的量子信息技术实验的实现提供理论支持. 本文采用代数方法研究三原子分子体系的 QSL 问题, 代数方法可方便地构造分子体系振转自由度的代数哈密顿算符, 并可解析地推导出体系的约化密度矩阵表达式, 便于对 QSL 度量公式的推导. 我们已基于李代数方法成功地研究了小分子在强激光场中的红外多光子过程及其解析控制, 小分子振动纠缠与量子调控<sup>[15-18]</sup>, 将代数方法拓展到 QSL 的

\* 国家自然科学基金 (批准号: 11504135, 11147019) 资助的课题.

<sup>†</sup> 通信作者. E-mail: hrfeng\_jnxy@163.com

研究,也是对代数方法的进一步发展应用. 根据最近的 QSL 度量的理论研究<sup>[19]</sup>, 从初始态  $\rho_0$  到末态  $\rho_\tau$  的演化可以用一种广义几何 QSL 度量方法, 此方法已应用到单量子体系并分析了度量方式的紧致性, 本文将此方法拓展应用到分子这类多维体系, 分析适合描述分子体系的 QSL 度量方式并讨论初态对度量方式的影响.

## 2 理论方法

### 2.1 线性三原子分子代数模型

线性三原子分子的动力学对称性群是两个  $U(2)$  代数群的直积, 可表示为两个耦合的二次型非谐振子代数形式<sup>[20,21]</sup>:

$$\hat{H} = \hbar\omega_{01} \left( \hat{A}_1^+ \hat{A}_1^- + \frac{\hat{I}_{01}}{2} \right) + \hbar\omega_{02} \left( \hat{A}_2^+ \hat{A}_2^- + \frac{\hat{I}_{02}}{2} \right) - \lambda \left( \hat{A}_1^+ \hat{A}_2^- + \hat{A}_2^+ \hat{A}_1^- \right), \quad (1)$$

式中  $\omega_{01}$  和  $\omega_{02}$  分别为分子两个键的振动角频率;  $\hbar = h/(2\pi)$ ,  $h$  为普朗克常数;  $\lambda$  为振子间的耦合系数, 可由实验光谱值确定. 二次型产生消灭算符  $\hat{A}_i^+$ ,  $\hat{A}_i^-$ ,  $\hat{I}_{0i}$  作用于态矢  $|N_i, v_i\rangle$  可得到<sup>[20]</sup>:

$$\begin{aligned} \hat{A}_i^+ |N_i, v_i\rangle &= \sqrt{(1 - x_{0i}v_i)(v_i + 1)} |N_i, v_i + 1\rangle \\ \hat{A}_i^- |N_i, v_i\rangle &= \sqrt{[1 - x_{0i}(v_i - 1)]v_i} |N_i, v_i - 1\rangle \\ \hat{I}_{0i} |N_i, v_i\rangle &= (1 - 2x_{0i}v_i) |N_i, v_i\rangle, \end{aligned} \quad (2)$$

其中  $x_{0i} = 1/N_i$ , ( $i = 1, 2$ ) 为非谐性修正因子<sup>[22,23]</sup>.

### 2.2 量子速度极限量

从初始态  $\rho_0$  到末态  $\rho_\tau$  演化的广义几何 QSL 对封闭的么正体系可简化表达为<sup>[19]</sup>

$$\ell(\rho_0, \rho_\tau) = \int_0^\tau \sqrt{g(t)} dt, \quad (3)$$

式中  $g$  考虑量子 Fisher 信息和 Wigner-Yanase 信息两类度量后的具体形式分别为

$$g^{\text{QF}}(t) = \frac{1}{2\hbar^2} \sum_{j,l} \frac{(p^j - p^l)^2}{p^j + p^l} \langle j | \Delta \hat{H} | l \rangle \langle l | \Delta \hat{H} | j \rangle, \quad (4)$$

$$g^{\text{WY}}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \sum_{j,l} \left( \sqrt{p^j} - \sqrt{p^l} \right)^2 \langle j | \Delta \hat{H} | l \rangle \langle l | \Delta \hat{H} | j \rangle, \quad (5)$$

其中  $\Delta \hat{H} = \hat{H} - \langle \hat{H} \rangle$ ;  $p^k$  和  $|k\rangle$  分别为态密度  $\rho_t$  的本征值和本征态, 即  $\rho = \sum_k p^k |k\rangle \langle k|$  ( $k = j, l$ ). 在量

子态空间这两类度量也是描述从初态  $\rho_0$  到末态  $\rho_\tau$  最短几何距离  $L$  仅有的两种解析度量方式<sup>[24,25]</sup>, 可分别表示为

$$L^{\text{QF}}(\rho_0, \rho_\tau) = \arccos \left( \text{Tr} \left( \sqrt{\sqrt{\rho_0} \rho_\tau \sqrt{\rho_0}} \right) \right), \quad (6)$$

$$L^{\text{WY}}(\rho_0, \rho_\tau) = \arccos (\text{Tr} [\sqrt{\rho_0} \sqrt{\rho_\tau}]). \quad (7)$$

定义两者之间的相对差来检验广义几何 QSL 度量的紧致度:

$$\delta = \frac{\ell(\rho_0, \rho_\tau) - L(\rho_0, \rho_\tau)}{L(\rho_0, \rho_\tau)}, \quad (8)$$

$\delta$  值越小, 说明此几何 QSL 度量越紧致, 越适合描述相应初末态的演化.

由上面的理论公式 (3)—(8) 式可看出, 只要已知体系任意时刻的态密度形式, 即可得到上述的几类 QSL 度量. 对不含时的三原子分子体系代数哈密顿, 在么正演化下, 由初始态矢  $|\psi(0)\rangle$  可以很方便地推导得到任意时刻的含时波函数  $|\psi(t)\rangle = e^{-it\hat{H}} |\psi(0)\rangle$  (这里计算取原子单位, 故  $\hbar = 1$ ), 从而给出相应的态密度. Fock 态和相干态在量子光学和量子信息领域有重要的应用价值, 两类初态在量子纠缠的研究中表现出不同的特性<sup>[15]</sup>, 因此这里分别讨论 Fock 态和相干态两类初态下的 QSL 度量问题. 下面直接给出两类初态下任意时刻的约化态密度表达式<sup>[14,17]</sup>: 初始态为 Fock 态  $|\psi^{\text{F}}(0)\rangle = |N_1, v_1\rangle \otimes |N_2, v_2\rangle \equiv |v_0, v_n - v_0\rangle$  下的约化密度矩阵形式:

$$\begin{aligned} \rho_1^{\text{F}}(t) &= \text{Tr}_2 \rho(t) \\ &= \text{Tr}_2 \{ |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| \} \\ &= \sum_{j=-v_0}^{v_n-v_0} \sum_{j'=-v_0}^{v_n-v_0} Y^j(t) Y^{j'}(t)^* |v_0 + j\rangle \langle v_0 + j'| \delta_{j,j'} \\ &= \sum_{j=-v_0}^{v_n-n_0} |Y^j(t)|^2 |v_0 + j\rangle \langle v_0 + j| \\ &= \sum_{j=-v_0}^{v_n-n_0} p^j(t) |v_0 + j\rangle \langle v_0 + j|, \end{aligned} \quad (9)$$

式中  $Y^j(t) = \sum_{k=j}^\infty \Gamma_k^j(t)$ . 当  $k = 0$  时,  $\Gamma_0^j(t) = \delta_{0,j}$ ; 当  $k = 1, 2, 3, \dots, \infty$  时, 递推式  $\Gamma_k^j(t)$  为

$$\begin{aligned} \Gamma_k^j(t) &= -\frac{it}{k} \cdot \left\{ \gamma_0(v_0 + j, v_n - v_0 - j) \Gamma_{k-1}^j(t) \right. \\ &\quad + \gamma_+(v_0 + j, v_n - v_0 - j) \Gamma_{k-1}^{j+1}(t) \\ &\quad \left. + \gamma_-(v_0 + j, v_n - v_0 - j) \Gamma_{k-1}^{j-1}(t) \right\}. \end{aligned} \quad (10)$$

函数  $\gamma_0, \gamma_+, \gamma_-$  由代数运算推导得

$$\begin{aligned} \gamma_0(v_1, v_2) &= \hbar\omega_{01}(v_1^2 - x_{01}v_1^2) + \hbar\omega_{02}(v_2^2 - x_{02}v_2^2), \\ \gamma_+(v_1, v_2) &= -\lambda\sqrt{(1-x_{01}v_1)(v_1+1)} \\ &\quad \times \sqrt{[1-x_{02}(v_2-1)]v_2}, \\ \gamma_-(v_1, v_2) &= -\lambda\sqrt{[1-x_{01}(v_1-1)]v_1} \\ &\quad \times \sqrt{(1-x_{02}v_2)(v_2+1)}, \end{aligned} \quad (11)$$

式中  $v_1 = v_0 + j, v_2 = v_n - v_0 - j$ .

初始态为相干态下的约化密度矩阵形式为

$$\begin{aligned} \rho_1^C(t) &= \text{Tr}_2 \rho(t) = \text{Tr}_2 \{ |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| \} = \\ &= \sum_{v_n, j} \sum_{v'_n, j'} Y_{v_n, v_n-j}(t) Y_{v'_n, v'_n-j'}^*(t) |j\rangle \langle j'| \delta_{v_n-j, v'_n-j'}. \end{aligned} \quad (12)$$

相干态形式<sup>[14]</sup>为

$$\begin{aligned} |\psi^C(0)\rangle &= e^{-\alpha^2} \sum_{v_n=0}^{\infty} \sum_{v_1, v_2=0}^{v_n} \frac{\alpha^{v_n}}{\sqrt{v_1! v_2!}} |v_1, v_2\rangle \\ &= \sum_{v_n=0}^{\infty} \sum_{v_0=0}^{v_n} \epsilon_{v_0, v_n-v_0} |v_0, v_n-v_0\rangle, \end{aligned} \quad (13)$$

式中

$$\epsilon_{v_0, v_n-v_0} = e^{-\alpha^2} \frac{\alpha^{v_n}}{\sqrt{v_0!(v_n-v_0)!}},$$

其中  $\alpha$  为相干系数. 函数

$$Y_{v_n, v_n-j}(t) = \sum_{k=0}^{\infty} y_k^{(v_j, v_n-v_j)}(t),$$

$y_k^{(v_j, v_n-v_j)}(t)$  仍为递推式:

$$\begin{aligned} y_k^{(v_j, v_n-v_j)}(t) &= -\frac{it}{k} \cdot \left\{ \gamma_0(v_j, v_n-v_j) y_{k-1}^{(v_j, v_n-v_j)}(t) \right. \\ &\quad + \gamma_+(v_j, v_n-v_j) y_{k-1}^{(v_j+1, v_n-v_j-1)}(t) \\ &\quad \left. + \gamma_-(v_j, v_n-v_j) y_{k-1}^{(v_j-1, v_n-v_j+1)}(t) \right\}, \end{aligned} \quad (14)$$

其中  $\gamma_0, \gamma_+, \gamma_-$  的形式同 Fock 态, 只是  $v_1 = v_j, v_2 = v_n - v_j$ . 相干态下的密度矩阵是非对角的, 可求出其对应的本征值.

分别将已知的初始态密度  $\rho_0(t) = |\psi(0)\rangle \langle \psi(0)|$  和推导得到的任意时刻的约化密度矩阵  $\rho_1^F(t), \rho_1^C(t)$  代入方程 (4)–(8) 即可得到相应的 QSL 度量  $\ell(\rho_0, \rho_\tau)$  和  $L(\rho_0, \rho_\tau)$  及两者之间的相对差.

### 3 计算结果与讨论

这里以氰化氢和氰化氘两分子为例进行计算研究. 氰化氢和氰化氘是广泛存在于行星大气中的一类重要的星际分子, 它们均属于线型分子, 其构

型分别为  $\text{H}-\text{C}\equiv\text{N}$  与  $\text{D}-\text{C}\equiv\text{N}$ . 虽然氰化氢对人和其他生物体是有毒的, 但它也是星际化学中最重要分子, 因为它是含有 CN 成分最简单的一类分子, 而 CN 成分是形成氨基酸的先决条件. 另外, 两分子也是光解反应动力学中的典型分子, 因此有关氰化氢分子的研究一直备受科学家的关注<sup>[26,27]</sup>. 我们采用此代数模型已经得到了 HCN 和 DCN 两个分子的伸缩振动能谱, 与实验值符合较好<sup>[28]</sup>, 说明其相应的分子参数能反映分子的真实情况, 两分子也已被成功应用到振动纠缠的研究<sup>[15]</sup>, 为体系演化的 QSL 度量研究奠定了基础. 因此本文以 HCN 和 DCN 两个分子为例, 计算分析其 QSL 度量问题, 这里主要讨论度量方式的紧致性以探寻适合描述分子体系的 QSL 度量方式, 并给出影响度量方式的因素.

对初始态为 Fock 态时, 选择初态分别为  $|0, 3\rangle, |1, 2\rangle, |2, 1\rangle, |3, 0\rangle$  时进行计算. 图 1 和图 2 给出了不同初态下两种 QSL 的相对差, 从两图共同特征可以看出两分子的相对差  $\delta$  值都不大, 说明这种广义几何 QSL 限度量方式在描述分子体系时仍是紧致的, 可以用来描述分子体系动力学演化时的 QSL. 但随着初态的变化即能级的升高, 相对差逐渐变大, 反映出高激发态动力学演化中 QSL 的度量方式需要改进. 两分子在量子 Fisher 信息度量下的相对差比在 Wigner-Yanase 信息度量下要小一些, 说明在这两个分子体系中量子 Fisher 信息度量更紧致. 文献 [19] 给出了在单量子体系中量子 Fisher 信息度量方式优于 Wigner-Yanase 信息度量方式, 但没有涉及多维体系, 这里对 HCN 和 DCN 两分子的研究表明此结论同样适用于高维度

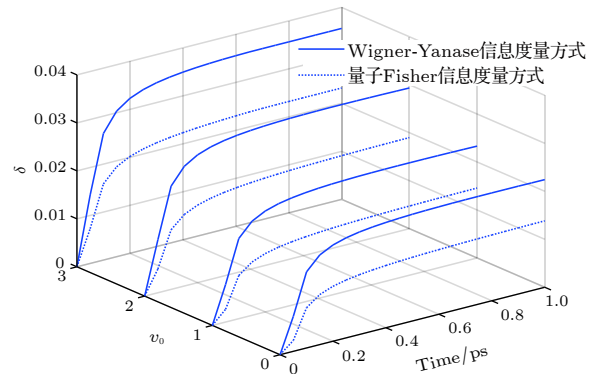


图 1 Fock 态下 HCN 分子 QSL 度量相对差

Fig. 1. Relative differences of QSL metrics for the initial Fock states in HCN.

体系. 为了更清楚直观地观察两分子间的差别, 分别从图 1 和图 2 中取出初态为  $|0, 3\rangle$  时量子 Wigner-Yanase 信息度量下的相对差 (见图 3, 量子 Fisher 信息度量下的结果与之相同, 故图 3 只给出其中一种度量方式, 为了更清楚直观地观察两分子的差别, 图中的时间只取了 0.2 ps 以后的值), 可以发现 DCN 分子的相对差要小于对应的 HCN 分子相对差, 在 HCN 和 DCN 两分子参数中, 前者的振动频率  $\omega_0$  和非谐性系数  $x_0$  均大于后者, 而  $\delta$  值可以反映初末态的几何演化路径偏离最短演化路径的程度, 因此 HCN 分子的  $\delta$  值偏大可能是由其较强的振动非谐性而导致演化过程中产生较大偏离引起的. 这也说明此度量方式更适合描述 DCN 分子, 换句话说, 分子参数的不同也会对 QSL 度量产生影响, 这在别的体系研究中也得到过同样的结论<sup>[8]</sup>. 对初始态为相干态时, 选择相干系数  $\alpha$  分别为 0.4, 1.6, 2.8 和 4.0 时进行计算. 从图 4 和图 5

可以看出, 两分子的相对差值普遍大于 Fock 态的, 对相干度较小的两个初态, Wigner-Yanase 信息度量相对差略小于量子 Fisher 信息度量, 但随着相干系数的增加即初始态相干度的提高, 两种度量方式偏差变小, 反映了 QSL 度量对初态的依赖性. 这种广义几何 QSL 度量方式可以很好地反映强相干初始态的动力学演化的速度极限情况, 相应的工作正在进行中.

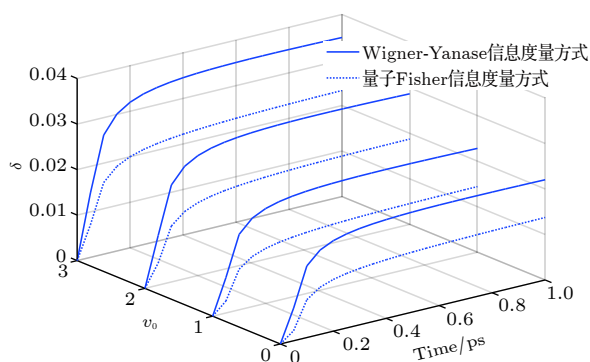


图 2 Fock 态下 DCN 分子 QSL 度量相对差

Fig. 2. Relative differences of QSL metrics for the initial Fock states in DCN.

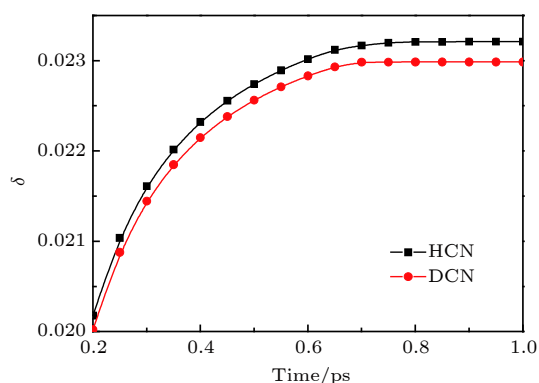


图 3 初态为  $|0, 3\rangle$  时, 两分子采用 Wigner-Yanase 度量方式时对应的 QSL 度量相对差

Fig. 3. Relative differences of Wigner-Yanase information metric for the initial state  $|0, 3\rangle$  in HCN and DCN molecules.

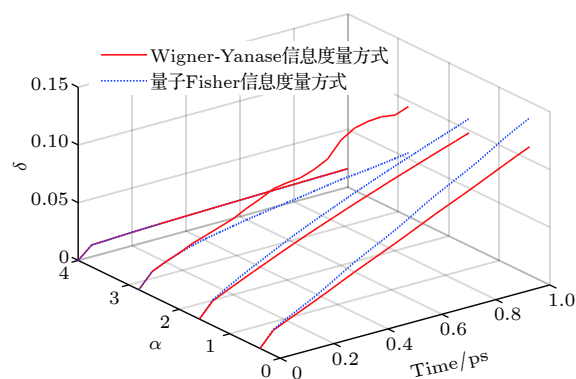


图 4 相干态下 HCN 分子 QSL 度量相对差

Fig. 4. Relative differences of QSL metrics for the coherent states in HCN.

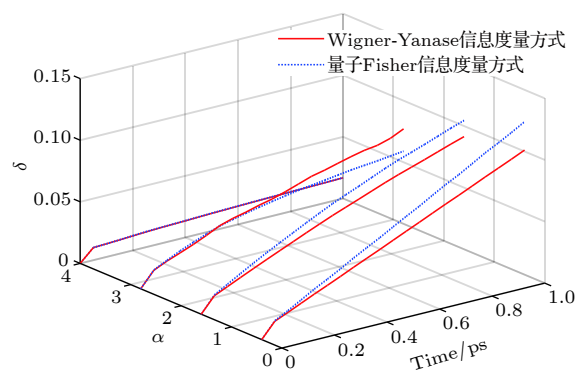


图 5 相干态下 DCN 分子 QSL 度量相对差

Fig. 5. Relative differences of QSL metrics for the coherent states in DCN.

## 4 结 论

本文将代数方法推广应用到分子体系的 QSL 度量方式的探讨中, 研究发现与单量子体系研究结论一致的是量子 Fisher 信息度量方式优于 Wigner-Yanase 信息度量方式, 但是对分子这类高维体系, 随着能级的升高, QSL 度量方式的紧致性降低. 对振动频率和非谐性参数小的分子, 两类几何 QSL 度量方式差异较小, 而高频率且振动非谐

性偏移大的分子对其动力学演化的 QSL 度量方式影响更显著. 初态的不同确实影响到 QSL 度量方式, 通过计算相对差, 可帮助我们寻找更合适于描述分子体系的度量方式. 本文的分子代数模型只考虑了分子振动, 后续工作可加入转动因素, 另外, 确定了适合描述分子动力学演化的度量方式, 可进一步由此度量方式讨论分子动力学演化速度极限时间, 这部分工作正在进行中.

## 参考文献

- [1] Anandan J, Aharonov Y 1990 *Phys. Rev. Lett.* **65** 1697
- [2] Margolus N, Levitin L B 1998 *Physica D* **120** 188
- [3] Jones P J, Kok P 2010 *Phys. Rev. A* **82** 022107
- [4] Hegerfeldt G C 2013 *Phys. Rev. Lett.* **111** 260501
- [5] Poggi P M, Lombardo F C, Wisniacki D A 2013 *EPL* **104** 40005
- [6] Deffner S 2014 *J. Phys. B* **47** 145502
- [7] Andersson O, Heydari H 2014 *J. Phys. A* **47** 215301
- [8] Zhang Y J, Han W, Xia Y J, Cao J P, Fan H 2014 *Sci. Rep.* **4** 4890
- [9] Wu S X, Zhang Y, Yu C S, Song H S 2015 *J. Phys. A* **48** 045301
- [10] Liu C, Xu Z Y, Zhu S 2015 *Phys. Rev. A* **91** 022102
- [11] Cai X J, Zheng Y J 2017 *Phys. Rev. A* **95** 052104
- [12] Shyshlov D, Babikov D 2012 *J. Chem. Phys.* **137** 194318
- [13] Vatasescu M 2013 *Phys. Rev. A* **88** 063415
- [14] Shyshlov D, Berrios E, Gruebele M, Babikov D 2014 *J. Chem. Phys.* **141** 224306
- [15] Feng H R, Li P, Zheng Y J, Ding S L 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 5246 (in Chinese) [冯海冉, 李鹏, 郑雨军, 丁世良 2010 *物理学报* **59** 5246]
- [16] Zheng Y J 2013 *Molecular Structure and Algebraic Methods* (Beijing: Science Press) pp110–140, pp179–225 (in Chinese) [郑雨军 2013 *分子结构及其代数方法* (北京: 科学出版社) 第110–140页, 第179–225页]
- [17] Feng H R, Li P, Zheng Y J 2011 *Mol. Phys.* **109** 2633
- [18] Feng H R, Meng X J, Li Peng, Zheng Y J 2014 *Chin. Phys. B* **23** 040305
- [19] Pires D P, Cianciaruso M, Cleri L C, Adesso G, Soares-Pinto D O 2016 *Phys. Rev. X* **6** 021031
- [20] Levine R D 1983 *Chem. Phys. Lett.* **95** 87
- [21] Feng H R, Liu Y, Zheng Y J, Ding S L, Ren W Y 2007 *Phys. Rev. A* **75** 063417
- [22] Cooper I L, Gupta R K 1997 *Phys. Rev. A* **55** 4112
- [23] Cooper I L 1998 *J. Phys. Chem. A* **102** 9565
- [24] Uhlmann A 1995 *Rep. Math. Phys.* **36** 461
- [25] Gibilisco P, Isola T 2003 *J. Math. Phys.* (N.Y.) **44** 3752
- [26] Theule P, Borget F, Mispelaer F, Danger G, Duvernay F, Guillemin J C, Chiavassa T 2011 *Astronomy Astrophysics* **534** A64
- [27] Xu D, Xie D, Guo H 2002 *J. Chem. Phys.* **116** 10626
- [28] Feng H R, Ding S L 2007 *J. Phys. B* **40** 69

# Impact of initial states on the quantum speed limits metric in linear molecules\*

Feng Hai-Ran<sup>†</sup> Li Peng Yue Xian-Fang

(*Department of Physics and Information Engineering, Jining University, Qufu 273155, China*)

( Received 31 October 2018; revised manuscript received 28 November 2018 )

## Abstract

Quantum speed limit (QSL) in a quantum system originates from the essential principle of the quantum mechanics. It gives a maximum speed of evolution or a minimum evolution time of the quantum system, which has potential applications in the fields of quantum information, quantum communication and quantum control and so on. In the last decades, the QSL bounds have been explored from the isolated quantum systems to the open quantum systems, several different geometric measures have been adopted to investigate the distinguishability between the initial and the evolved state. The QSL bounds in many systems have been discussed, indicating that the tightness of the QSL metric is related to the researched dynamical system. However, the QSL problem for the molecular system has rarely been reported. The study of the quantum speed limits in the different molecular systems is helpful for realizing the quantum information technology based on the molecules. In this paper, the generalized quantum speed limit metric for linear molecular dynamics is studied by the algebraic approach. The quantum Fisher information metric and the Wigner-Yanase information metric are both used to study the QSLs in the dynamical evolution of the two linear molecules. Here the dynamical evolutions begin with the two kinds of vibrational states, Fock initial state and coherent initial state. The results show that the quantum Fisher information metric is more appropriate than the Wigner-Yanase information metric for HCN and DCN molecules. The relative differences between the generalized geometric QSL and the two geodesic QSL metrics become bigger gradually with the increase of the initial vibrational quantum number. However, the relative difference for the DCN molecule is smaller than for the HCN molecule. The relative difference between the strong coherent states is smaller, which indicates that the generalized geometric quantum speed limit is suitable to describing high-coherent case. In conclusion, the different QSL metrics reveal the discrepancy in the evolution of the molecular system, and the relative difference is related to the initial state of the molecules and molecular parameters. More molecular systems need to be investigated in order to obtain the criteria between the QSL metrics and the molecular parameters.

**Keywords:** Lie-algebra, quantum speed limit, molecules

**PACS:** 02.20.Sv, 03.67.-a, 33.15.-e

**DOI:** [10.7498/aps.68.20181942](https://doi.org/10.7498/aps.68.20181942)

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11504135, 11147019).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [hxfeng\\_jnxy@163.com](mailto:hxfeng_jnxy@163.com)