



周期驱动系统的非平衡热输运与热力学几何

王子 任捷

Nonequilibrium thermal transport and thermodynamic geometry in periodically driven systems

Wang Zi Ren Jie

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 70, 230503 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20211723

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20211723>

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

专题: 非平衡量子多体系统

周期驱动系统的非平衡热输运与热力学几何*

王子 任捷†

(同济大学物理科学与工程学院, 声子学与热能科学中心, 上海市特殊人工微结构材料与技术重点实验室, 上海 200092)

(2021年9月15日收到; 2021年10月25日收到修改稿)

随着对微纳尺度系统的深入理解和实验技术的进步, 发生在这些小系统中的热输运和能量转换近期吸引了大量研究. 不同于依赖静态热力学力(如温差、电势差等)的非平衡稳态调控手段, 受时间驱动的非平衡非稳态小系统具有特有的高可调性和普遍性, 其研究同时具有基础价值和应用潜力. 本文从几何这一基本概念出发, 分析了热力学几何相(曲率)和热力学距离这两个关键物理量, 以几何的视角展现和分析近期关于受驱动非平衡量子系统中输运调控和能量转换途径的热力学研究. 热力学几何不仅可以看作是这一大类系统中非平凡输运和耗散的本质起源, 也同样给我们提供了一种理论框架, 给出对于系统输运和能量转换的限制, 同时也可以给出慢驱动条件下量子热机性能的通用优化方式. 这将在未来帮助理解非平衡量子多体系统所发挥的能量输运/转换功能, 也会为发现高性能(高效率、高功率、高可靠性)量子热机提供新的设计思路.

关键词: 非平衡量子系统, 几何相, 热力学距离, 热泵浦, 量子热机**PACS:** 05.70.Ln, 03.65.Vf, 07.20.Pe**DOI:** 10.7498/aps.70.20211723

1 引言

在现实生活中, 宏观的热力学系统, 如热机、制冷机、热泵等发挥着重要作用, 它们可以将一部分馈入的能量转换为人们所需要的输出能量. 在此过程中, 能量的转换方向、转换效率是衡量这些热力学过程的重要参数. 而近些年来, 人们对于热力学系统的研究集中到了非平衡的小系统, 通过纳米制造和精确控制的实验手段, 可以制备出承担着各种热力学任务的微纳系统. 单布朗粒子热机便是这方面的一个重要例子^[1]. 在这样的系统中, 工作介质往往具有较少的自由度和较小的空间尺度, 它与热库进行的能量交换过程充满了大幅的涨落. 如何利用随机热力学^[2]的工具, 来刻画这些涨落过程中能流大小和能量转换效率等物理量就成了一个重要问题. 另外, 量子效应也是研究低温条件下随机能量转换过程所必须考虑的因素. 一方面, 量子热

机是构造功能性量子器件的一个关键目标; 另一方面, 量子制冷机可以被用来在较冷的环境下进一步对所研究的系统进行冷却, 从而凸显其量子效应, 使其可以承担量子信息处理等任务. 研究表明, 量子相干性^[3]和压缩态^[4]可以被当作一种资源, 借以实现超出卡诺效率的热机. 另外, 在量子热机中, 热流的涨落^[5]和最优相干性的寻找^[6]也推动了人们对量子热机的理解.

时间驱动, 正是小系统热力学过程的一个重要调控手段, 例如可以通过时间驱动调控声子系统中的拓扑与非互易性^[7]. 如不依靠时间驱动, 经典的准静态过程虽然一般可以保证能量转换效率最高, 但它的长时间功率却趋向无穷小, 因而很难被实际利用. 静态条件下工作的稳态不可逆热机虽然可以具有可以调节的功率和效率, 但两者间往往存在权衡关系和限制. 因此最大功率下的效率极限^[8-11]受到大量研究. 与这些静态框架相比, 受到时间驱动的小热力学系统具有更大的可调空间, 它们所发

* 国家自然科学基金(批准号: 11935010, 11775159)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: xonics@tongji.edu.cn

挥的功能和品质参数可以通过设计特有的驱动方案得到便捷的调节 [12,13].

然而, 相比稳态系统, 时间驱动的研究难度更大, 一般性结论更少. 特别地, 在试图直接对系统品质参数进行优化时, 往往需要较大的计算量. 尤其是在对多个品质参数进行多目标优化时, 最优驱动方案在不同优化条件间还会出现相变等复杂现象 [14]. 因而关于受驱动小系统的普遍性概念和理论框架就显得十分重要. 几何是物理系统的一种重要内禀性质. 它在小系统热力学性质的研究中也发挥着不可替代的作用. 它可以描述非平凡几何相(曲率)带来的热泵浦现象 [15–18], 也可以描述驱动带来的热-功转换过程 [19,20] 和驱动带来的额外熵的产生 [21,22]. 另外, 借助热力学几何的概念, 人们可以利用热力学度规 [23,24], 对能量转换中的功率、效率和稳定性等品质参数进行优化 [25,26].

本文关注于受周期性驱动的小量子系统中, 时间驱动对于热输运和热-功转换的调节作用. 本文将介绍受驱动热力学系统中, 几何相(曲率)和热力学距离的概念, 它们分别代表了驱动的可逆部分和不可逆部分. 在此框架基础上, 本文分别介绍几何相热泵浦效应, 以及热力学几何在描述热机工作过程的作用. 最后, 本文介绍基于几何方法提出的优化方法和权衡关系. 值得注意的是, 由于各方面的限制, 本文所介绍分析的内容不具备绝对的完整性, 而仅以近期的一些代表性研究工作为例向读者展现这一新颖的研究方向.

2 周期性驱动量子输运中的几何相与距离

在周期驱动热力学系统中, 几何相和热力学距离作为两个重要概念, 为我们提供了一种统一描述经典/量子系统的理论框架. 在几何上, 在一个可以定义任意两点距离的空间中, 可以使用 Riemann 空间中的度规来描述相近两点间的距离. 此无穷小距离沿着曲线的积分就是此路径首尾两点间的距离. 在一个非平坦的空间中, 一个矢量途经一条闭合路径进行平行移动, 其末了矢量与初始矢量间的夹角被称为和乐 (holonomy) 角, 它即是几何相的数学含义. 一个光滑空间中, 此和乐角可以通过路径上几何联络的线积分得到. 从另一个角度, 联络本身定义了曲面上向量平行移动的方式, 它使我们可以把不同位置处切空间内的向量进行比较.

在物理上, 这些数学概念也有对应的意义. 开

放系统内热泵浦、功转换等过程中, 几何相描述了经由一个绝热驱动, 系统分布在回到其初始状态时, 额外累积定向转移热量/功的多少 [15]. 它可以由参数空间内局域的几何联络的积分得到. 描述能量流(功/热)的几何联络可以类比孤立量子系统中的 Berry 联络, 它在驱动路径上的投影给出了在此参数点进行一个微小绝热驱动所引起的额外热流泵浦/功输出. 另外, 若驱动速度较小, 但并非完全绝热, 则热力学距离则描述了驱动过程中引起的耗散大小 [23]. 相近参数点间的热力学距离可以定义出一个参数空间中的度规. 这样的物理图像如图 1 所示. 接下来, 我们给出具体的分析和推导.

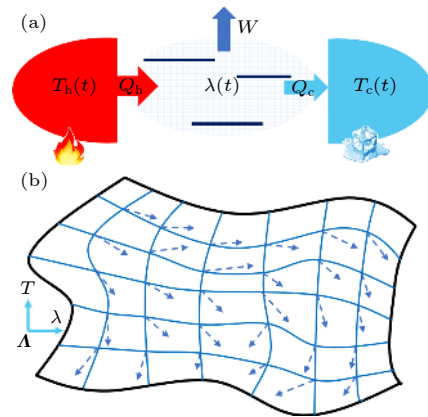


图 1 周期性驱动非平衡量子输运和其中几何性质的示意图 (a) 非平衡量子系统示意图. 量子系统由一个包含多个能级的系统来表示, 它可以与多个热库相连. 热库温度 (T_h 和 T_c) 和系统参数 (λ) 都被含时地驱动. 由此, 可以产生系统与热库间的热量交换 (Q_h 和 Q_c) 以及系统的功输出 (W). (b) 此非平衡量子系统在参数空间 ($\mathbf{A} \equiv (T, \lambda)$) 中的几何性质. 曲线坐标系表现出非均匀的热力学距离, 而各点的箭头表示几何联络. 几何联络在几何上对应平行移动一个微小参数时带来的和乐 (holonomy) 角. 热力学距离定义了一个具有度规的黎曼曲面

Fig. 1. A scheme of periodically driven nonequilibrium quantum transport and its geometry. (a) A diagrammatic nonequilibrium quantum system. The middle quantum system is illustrated by a multi-level system, which is coupled with several thermal reservoirs. The temperature of reservoirs (T_h and T_c) and the mechanical parameter of the system (λ) are simultaneously and periodically modulated. The heat exchange (Q_h and Q_c) and work output (W) are thus generated. (b) The geometry of this nonequilibrium quantum system in the space of parameters ($\mathbf{A} \equiv (T, \lambda)$). The curvilinear coordinate is adopted to show the inhomogeneous thermodynamic distance and the local vectors are for the geometric connection, as derived in the main text. Geometrically, the geometric connection is the holonomy angle during an infinitesimal parallel transport and the thermodynamic distance between neighboring points defines a Riemannian space with endowed metric.

假设作为工作媒质的系统与周边热库之间的耦合较弱, 则根据开放量子系统的理论, 可以在波恩-马尔可夫近似下, 等效地使用量子主方程来描述粗粒化后系统的演化. 若再进一步假设旋转波近似, 则可以将此量子主方程简化为具有全正定且保密度矩阵迹 (completely positive trace preserving, CPTP) 的 Lindblad 形式^[27]:

$$\frac{\partial \hat{\rho}(t)}{\partial t} = \mathcal{L}\hat{\rho}(t) \equiv -i [\hat{H}(t), \hat{\rho}(t)] + D\hat{\rho}(t), \quad (1)$$

其中 $\hat{\rho}(t)$ 是系统的约化密度矩阵; $\hat{H}(t)$ 是它本身瞬时的哈密顿量 (其中包含了热库-系统相互作用带来的能级修正); 耗散子 D 描述了热库带来的耗散和去相干等效效应: $D\hat{\rho} \equiv \sum_i \gamma_i \left(\hat{A}_i \hat{\rho} \hat{A}_i^\dagger - \frac{1}{2} \{ \hat{A}_i^\dagger \hat{A}_i, \hat{\rho} \} \right)$. γ_i 描述热库-系统耦合强度, 反对易子 $\{ \hat{a}, \hat{b} \} \equiv \hat{a}\hat{b} + \hat{b}\hat{a}$. 本节仅介绍基本概念, 这里的描述只涉及 (但不局限于) 系统与单个热库接触的情形. 多个热库的更一般情况在后文中将有所涉及. 在刘维尔空间, 可以把主方程写成:

$$\frac{\partial}{\partial t} |\rho(t)\rangle = \check{\mathbf{L}}(t) |\rho(t)\rangle, \quad (2)$$

其中, 矩阵 $\check{\mathbf{L}}(t)$ 为超算符 \mathcal{L} 在刘维尔空间下的表示. 由于系统仅与单个热库接触, 假设若不进行驱动, 经过足够长时间后, 系统弛豫到唯一的平衡稳态上. 将稳态的左右矢分别记作 $\langle l_0|$ 和 $|r_0\rangle$, 它们将满足本征方程:

$$\check{\mathbf{L}}(t) |r_0(t)\rangle = \langle l_0| \check{\mathbf{L}}(t) = 0. \quad (3)$$

在我们关心的参数范围内, 开放系统一般不处在奇异点 (exceptional point) 处, 此时, 系统的左/右本征态可以选择为一组双正交的基矢, 即: $\langle l_m|r_n\rangle = \delta_{m,n}$. 这里, Kronecker delta 函数在 $m = n$ 时为 1, 否则为 0. 通常, $\langle l_0|$ 不依赖于 $\check{\mathbf{L}}(t)$ 所取的参数, 它仅仅为一个常矢量. 在慢驱动条件下, $|\rho(t)\rangle$ 可以写成瞬时稳态和一个小的修正的叠加:

$$|\rho(t)\rangle = |r_0(t)\rangle + |\delta(t)\rangle. \quad (4)$$

根据绝热响应理论^[28,29], 可以得到一阶修正项 $|\delta(t)\rangle$ 的具体形式为

$$|\delta(t)\rangle = \check{\mathbf{L}}^+(t) \frac{\partial}{\partial t} |r_0(t)\rangle, \quad (5)$$

其中算符 $\check{\mathbf{L}}^+$ 为 $\check{\mathbf{L}}$ 的伪逆. 它的定义式为:

$$\check{\mathbf{L}}^+(t) = \int_0^{+\infty} ds e^{s\check{\mathbf{L}}(t)} (|r_0(t)\rangle \langle l_0| - \mathbf{I}). \quad (6)$$

这里, 矩阵 \mathbf{I} 表示单位矩阵.

假设在驱动过程中, 热库的温度 T 和系统的参数 λ 被驱动, 它们的驱动形式为: $\mathbf{A}(t) = (T(t), \lambda(t))^T$. 这里, 上标 T 表示转置操作. 根据随机热力学^[30], 我们可以给出瞬时系综平均功率 $P(t)$ 和平均热流 $J(t)$ 的定义 (正方向都规定为流入系统的方向):

$$P(t) \equiv \langle l_0| \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} |\rho(t)\rangle \dot{\lambda}, \quad (7)$$

$$J(t) \equiv \langle l_0| \hat{H} \left| \frac{\partial \rho(t)}{\partial \Lambda^\mu} \right\rangle \dot{\Lambda}^\mu. \quad (8)$$

这里, 我们使用了爱因斯坦求和约定. 很容易看到, 它们满足热力学第一定律: $\frac{d}{dt} \langle \hat{H}(t) \rangle = P(t) + J(t)$, 即系统的系综平均能量的瞬时变化等于流入它的功率和热流之和. 若驱动为周期性的, 则系统的演化在经历多个驱动周期后, 也将进入周期性的演化. 此时, 一个周期累积的热 $Q = \int_0^{\tau_p} dt J(t)$ 和功 $W = \int_0^{\tau_p} dt P(t)$ 满足 $Q + W = \int_0^{\tau_p} dt \frac{d}{dt} \langle \hat{H}(t) \rangle = 0$, 这里 τ_p 为驱动周期. 在慢驱动的条件下, $\dot{\lambda}$ 和 $\dot{\Lambda}^\mu$ 都可被视为一阶小量.

在此系统中, 我们关心经历一个周期后的 W . 在慢驱动时, 可以保留功的最低阶贡献为

$$W_{\text{geo}} = \int_0^{\tau_p} dt \left\langle l_0 \left| \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} \right| r_0(t) \right\rangle \dot{\lambda} \equiv \oint_{\partial\Omega} A_\mu d\Lambda^\mu, \quad (9)$$

其中推导可以得出功的几何联络的形式为 $\mathbf{A} = \left(0, \langle l_0| \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} |r_0(\mathbf{A}) \rangle \right)^T$, 回路积分沿着参数空间中的整个驱动路径 $\partial\Omega$. 图 1(b) 用局部的箭头示意了这里推导的几何联络, 它沿着一个回路的积分给出几何相贡献 W_{geo} . 可以看到, 此时的功 W_{geo} 为一个纯几何量, 它不依赖于驱动的速率, 仅仅与驱动在参数空间里驱动路径 $\partial\Omega$ 有关. 值得注意的是, 这里给出的几何联络的形式与文献^[25]中的形式不同, 仅仅源于选择了不同的规范, 它们给出的 W_{geo} 是完全相同的. 根据斯托克斯定理, 可以把 W_{geo} 的表达式写成一个不依赖于所选规范的形式:

$$W_{\text{geo}} = \int_{\Omega} d\mathbf{S} \cdot \mathbf{F}, \quad (10)$$

其中 $\mathbf{F} \equiv \nabla \times \mathbf{A}$ 为参数空间的几何曲率, 积分的范围为驱动路径所围绕的参数范围 Ω , $d\mathbf{S}$ 为面元向量. 可以看出, W_{geo} 的形式与孤立量子系统中的 Berry 相位的形式^[31,32] 具有很强的类比性, 因此被称为几何相 (曲率) 贡献的非平衡功. 几何相 (曲率)

贡献的热也同理可得, 并满足 $Q_{\text{geo}} = -W_{\text{geo}}$. 这里作为示例, 仅推导了平均意义下功的形式, 任意非平衡涨落流的几何相描述和它与 Berry 相位进一步的类比将在下一节中以生成函数的形式给出.

上面所推导的结果为慢驱动下的热-功转换. 若将驱动方向反向, 则这部分的贡献也会反向, 因此它代表了可逆的部分. 若要研究热-功转换中的不可逆性、耗散以及效率, 则需要引入量子随机熵^[29,33]和热力学距离^[23,24]的概念. 下面仍将在此示例系统中进行推导. 在双参数驱动下,

$$|\delta(t)\rangle = \check{\mathbf{L}}^+(t) \frac{\partial}{\partial t} |r_0(t)\rangle = \check{\mathbf{L}}^+(t) \frac{\partial}{\partial A^\mu} |r_0(t)\rangle \dot{A}^\mu. \quad (11)$$

研究工作^[33]已经将经典系统中随机熵的定义^[34]推广到了受驱动量子系统中. 受驱动的过程中, 整体的熵增可以拆分为系统和热库的熵增两部分. 此时, 平均熵产生速率可以写成^[33]:

$$\sigma(t) = -\text{tr} \left\{ \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} \ln \left(\frac{\hat{\rho}(t)}{\hat{\rho}^s(t)} \right) \right\}, \quad (12)$$

其中 tr 表示求迹; $\hat{\rho}^s(t)$ 为瞬时的稳态密度矩阵. 将上面的表达式展开到驱动频率的最低阶, 可以得到:

$$\sigma(t) = \text{tr} \left\{ \dot{\hat{\rho}}^s \ln \left(1 + \frac{\delta \hat{\rho}}{\hat{\rho}^s} \right) \right\} \approx \text{tr} \left\{ \frac{d}{dt} [\ln(\hat{\rho}^s)] \delta \hat{\rho} \right\}, \quad (13)$$

其中 $\delta \hat{\rho}$ 为驱动带来的密度矩阵修正项, 它在刘维尔表象下即为 $|\delta(t)\rangle$.

在刘维尔表象下, 上面熵增速率可以写作:

$$\sigma(t) = \left\langle l_0 \left| \frac{\partial \check{\mathbf{E}}}{\partial A^\mu} \check{\mathbf{L}}^+ \left| \frac{\partial r_0}{\partial A^\nu} \right. \right. \right\rangle \dot{A}^\mu \dot{A}^\nu \equiv R_{\mu\nu} \dot{A}^\mu \dot{A}^\nu. \quad (14)$$

这里, $\check{\mathbf{E}}$ 为 $\ln(\hat{\rho}^s)$ (稳态随机熵) 在刘维尔表象下向量组成的对角矩阵. $R_{\mu\nu} = \left\langle l_0 \left| \frac{\partial \check{\mathbf{E}}}{\partial A^\mu} \check{\mathbf{L}}^+ \left| \frac{\partial r_0}{\partial A^\nu} \right. \right. \right\rangle$ 为热力学几何张量. 可以看到, 不同于与 \dot{A}^μ 成正比的平均功率和平均热流, 熵产生速率是与 \dot{A}^μ 的平方项成正比的. 因此, 一个驱动周期内累积的平均熵产生量是与驱动速度成正比的, 它可以表示为

$$\Sigma \equiv \int_0^{\tau_p} dt \sigma(t) = \oint_{\partial\Omega} dt g_{\mu\nu} \dot{A}^\mu \dot{A}^\nu. \quad (15)$$

由此定义的度规 $g_{\mu\nu} \equiv (R_{\mu\nu} + R_{\nu\mu})/2$ 是 $R_{\mu\nu}$ 的对称部分, 刻画了慢驱动过程中的瞬时平均熵增速率. 从这里容易看出, $R_{\mu\nu}$ 的反对称部分对于熵的产生没有贡献. 图 1(b) 中, 用曲线坐标系定性地表现了 $g_{\mu\nu}$ 描述的参数点间的局域热力学距离. 可以

看到, 若将参数驱动的方向反向, 几何相 (曲率) 的贡献也会反向, 但热力学距离以及熵产生的符号不会改变. 因此, 热力学距离在物理上描述了驱动带来的不可逆性, 而几何相 (曲率) 贡献则代表了可逆的能量转换.

根据 Cauchy-Schwarz 不等式, 可以一般性地给出对于熵产生的限制, 此极限由热力学给出:

$$\Sigma \geq L^2 / \tau_p, \quad (16)$$

这里 $L \equiv \oint_{\partial\Omega} dt \sqrt{g_{\mu\nu} \dot{A}^\mu \dot{A}^\nu}$ 为热力学长度, 它与驱动速率无关, 仅与参数经过的路径有关. 这里得出的结果与经典情况下的结果有直接对应^[23,24]. 在驱动周期 τ_p 固定的情况下, L 限制了系统在驱动过程中所产生的熵增 Σ . 若要使熵增达到其下限 (即不等式的右边), 则需要优化驱动方式, 使其路径的参数化不再由时间 t , 而是由热力学距离给出^[25], 后文会做详细讨论.

与几何相 (曲率) 贡献的平均流类似, 热力学几何也是一个普遍框架. 这里仅举例说明它在最简单系统中的应用. 若采取不同的定义, 可以研究驱动系统中功率-效率的权衡关系^[25], 多个热库的系统中的权衡关系^[20], 以及受驱动量子热机的多目标优化^[26] 等等. 但这些都具有相类似的理解方式. 这正说明了几何方法在受驱动量子系统中, 研究能量转换时所发挥的普适框架性作用. 后文将进一步介绍.

3 几何相: 可逆热泵浦和慢驱动热机

类似于第 2 节的分析, 在慢驱动情况, 时间驱动带来的累积热流和功可以写成一个不依赖驱动频率的几何性表达式. 但是上面的分析没有考虑多个热库的情况, 也没有包含累积流的涨落的性质. 本节将在生成函数的框架下对这两个问题进行讨论.

非热力学的几何泵浦的研究可以追溯到 Thouless^[32] 关于零温孤立且受周期性参数驱动的电子系统的研究, 他发现一个周期内泵浦的电荷量是量子化的, 且它受到拓扑保护, 具有很强的鲁棒性. 此时, 量子化的泵浦量可以写成 Berry 曲率^[31] 在驱动参数和一维布里渊区所组成的二维面上的积分. 这项开创性工作开启了周期性驱动系统中输运性质的研究. 后续, 人们发现, 在开放量子系统中也可以实现类似的现象. 特别地, 即便不存在静态偏压, 也可以周期性驱动产生定向电流. 此电流可

以用散射矩阵表达出来^[35]. 此外, 相互作用量子点系统具有在实验中展现出此类现象的潜力^[36]. 后续 Sinitzyn 和 Nemenman^[37] 的研究说明, 几何泵浦的现象不局限于电子系统, 而具有广泛的应用. 他们使用生成函数的方法, 给出了随机泵浦系统中, 包含泵浦流各阶涨落信息的几何相贡献.

然而, 上面的研究只探讨了粒子流的定向输运, 而没有研究周期驱动过程中热流等能流的输运情况. 基于随机热力学的研究方法^[38], Ren 等^[15] 提出了量子分子结的声子热输运中, 驱动热库温度等参数产生几何相热流的热泵. 随后, 几何相热流也在经典布朗系统^[17], 自旋-玻色系统^[18,39], 量子光力系统^[16] 等大量系统中得到了广泛研究. 特别地, 在自旋-玻色系统中, 研究人员发展运用了极化子变换的方法^[40], 系统性探讨了系统-热库耦合从弱到强的变化对于几何相热流的影响^[18,41].

为了帮助对于这一大类工作的理解, 下面大致梳理了几何相热泵浦^[42] 的基本思想和理论框架.

根据两点测量的方法可以定义从热库流入系统的累积随机热流. 若在时刻 0 和 t 分别测出热库的能量为 m_0 和 m_t , 则流入系统的热流为 $Q = m_0 - m_t$. 将此事件的联合概率密度记作 $P(m_t, t; m_0, 0)$, 它表示热库在 0 时刻总能量为 m_0 , 且在经过酉演化后第二次测量时热库具有总能量 m_t 的联合概率. 在这个过程中流入系统的热流的生成函数为^[2,38]

$$Z(\chi) \equiv \sum P(m_t, t; m_0, 0) e^{\chi(m_0 - m_t)}. \quad (17)$$

χ 是计数参数. 对应地, 热流的累积量 (cumulant) 生成函数为

$$G(\chi) \equiv \ln [Z(\chi)]. \quad (18)$$

通过对它求导, 可以给出热流各阶累积量:

$$\langle Q^n \rangle_c = \left. \frac{\partial^n}{\partial \chi^n} G(\chi) \right|_{\chi \rightarrow 0}, \quad (19)$$

其中前两阶的累积量分别对应平均热和它的涨落: $\langle Q \rangle_c = \langle Q \rangle$, $\langle Q^2 \rangle_c = \langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2$. $\langle Q^n \rangle$ 是随机量 Q^n 的系综平均.

若假设系统-热库的耦合相对于系统和热库各自的能量来说为弱耦合, 则可以用一个带有计数参数 χ 的量子主方程来同时描述系统密度矩阵和流的生成函数的演化^[15,39]:

$$\frac{\partial}{\partial t} |\rho(\chi, t)\rangle = \check{\mathbf{L}}_\chi |\rho(\chi, t)\rangle, \quad (20)$$

其中下标表示对于计数参数 χ 的依赖. 若计数参数 $\chi = 0$, 则此方程对应的是只描述系统密度矩阵演化的主方程. 可以根据 $\check{\mathbf{L}}_\chi$ 得到其稳态下的左右本征矢:

$$\begin{aligned} \check{\mathbf{L}}_\chi |r_0(\chi)\rangle &= E_0(\chi) |r_0(\chi)\rangle, \langle l_0(\chi) | \check{\mathbf{L}}_\chi \\ &= E_0(\chi) \langle l_0(\chi) |, \end{aligned} \quad (21)$$

这里, $E_0(\chi) |_{\chi \rightarrow 0} = 0$. 当系统到达稳态且经历一个完整周期 τ_p 后, $G(\chi)$ 包含动力学相 $G_{\text{dyn}}(\chi)$ 和几何相 $G_{\text{geo}}(\chi)$ 两部分贡献. 它们来自于瞬时的平均效果和来参数空间本身的几何性质:

$$G_{\text{dyn}} = \int_0^{\tau_p} dt E_0(\chi, t), \quad G_{\text{geo}} = \oint_{\partial\Omega} dA \cdot A. \quad (22)$$

A 为驱动的多个参数, $A_\mu = -\left\langle l_0(\chi) \left| \frac{\partial}{\partial A^\mu} r_0(\chi) \right. \right\rangle$ 为几何联络. 可以看到, 动力学贡献 G_{dyn} 与驱动周期成正比, 而几何贡献 G_{geo} 与驱动周期长度无关. 因此, 若保持在慢驱动范围内, 增加驱动频率 (减小驱动周期) 可以增加 G_{geo} 在总热流生成函数 $G(\chi) \equiv G_{\text{geo}}(\chi) + G_{\text{dyn}}(\chi)$ 中所占的比重. 根据计算出的累积量产生函数 $G_{\text{geo}}(\chi)$, 即可计算出几何相部分带来的热流和它任意阶的涨落性质. 同样根据斯托克斯定理, 可以把几何相的贡献写成:

$$G_{\text{geo}} = \int_{\Omega} d\mathbf{S}^{\mu\nu} \mathbf{F}_{\mu\nu}, \quad (23)$$

其中 $d\mathbf{S}^{\mu\nu}$ 为特定方向的面元, 反对称的几何曲率 $\mathbf{F}_{\mu\nu} \equiv \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$ 为参数空间的内禀量, 不依赖于规范的选取. 如果把驱动路径反向, 热的几何相效应也反向. 因此, 在只有纯的几何相效应 (动力学相效应为零) 的情况下, 系统为可逆热泵浦和热机.

近年来, 大量关于受驱动非平衡量子系统中热流泵浦的研究基本都基于以上描述的理论框架. 如图 2(a) 所示, 最初关于几何热泵的研究是关于一个量子分子结的声子热泵^[15]. 通过动态驱动分子结两端热库的温度, 可以产生一个累积的定向热流. 这个热流的一部分累积量生成函数可以和 Berry 相位进行对应, 由一个纯几何量给出, 即几何曲率 (如图 2(b)) 在驱动包裹的参数空间区域内的积分. 几何相热流的存在, 使得静态条件下普适成立的涨落定理被打破. 后续关于此情况下新的形式的涨落定理被推导得出, 此特殊的涨落定理需要考虑几何相热流的贡献^[43].

随后, 除了经典布朗系统中的几何热泵浦现象外^[17], 更多量子系统中的几何相热泵浦也得到了大量关注. 在自旋-玻色系统中, 系统-热库耦合强

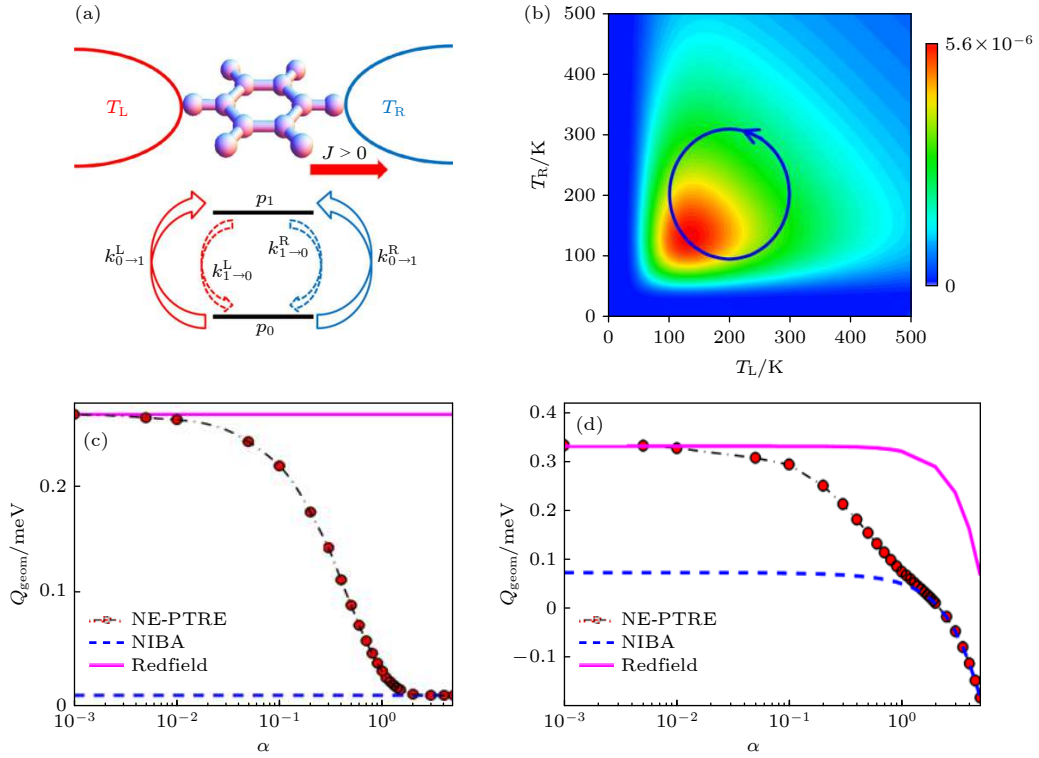


图 2 几何相热泵 (a) 最初研究的量子分子结系统, 工作介质由一个两能级系统描述, p 和 k 分别为各个占据数和跃迁速率^[15]; (b) 驱动两端温度产生的热泵现象, 图中用颜色表示了曲率的大小. 几何泵浦的热量是驱动回路包裹的范围内的几何曲率积分^[15]. (c), (d) 自旋-玻色系统中几何相热流与系统-热库耦合强度 α 的关系^[18]. (c) 为无 Zeeman 劈裂能的情形; (d) 为有 Zeeman 劈裂能的情形^[18]. (a), (b) 改编自文献 [15]; (c), (d) 改编自文献 [18]

Fig. 2. The geometric heat pump effect. (a) The originally studied quantum molecular junction system. The working medium is described by a quantum two-level system, with p and k denoting different populations and transition rates^[15]. (b) The geometric curvature in the two-temperature parameter space. The color denotes the magnitude of the geometric curvature. The pumped heat is the integral of geometric curvature over the encircled area^[15]. (c), (d) The geometrically pumped heat versus the coupling strength between the middle system and reservoirs in a quantum spin-boson system^[18]. (c) is for the setup with no Zeeman splitting while the splitting is present in (d) ^[18]. (a), (b) are adapted from [15], while (c), (d) are adapted from [18].

度对于几何相热流的调控得到了研究^[18]. 如图 2(c) 和图 2(d) 所示, 在没有 Zeeman 劈裂能时, 几何相热流随着耦合强度的增加而单调衰减; 而当有 Zeeman 劈裂时, 几何相热流先随耦合强度的增加而减小, 后经过反向后, 绝对值又继续增大. 这说明几何相热流可以方便地在量子系统中被控制. 另外, 在量子光力系统中, 可以调控的参数更多, 例如失谐, 光驱动的压缩性质等等, 由此在光力系统中引入周期驱动, 也可以实现热流的几何泵浦和非互易传输^[16].

为了使几何相泵浦不再局限于慢驱动附近, 研究人员借鉴了量子控制和非绝热控制^[44]的概念, 在设计驱动方案时, 研究了对几何相泵浦的非绝热控制^[45,46]. 通过引入一个附加的驱动项, 可以把几何相的描述方法拓宽到相对高频的参数条件, 从而极大地增大了几何泵浦的功率, 在单位时间内可以

将更多热量/粒子泵浦到特定热库中去.

除了实现定向泵浦, 几何相的概念也可以被应用在研究慢驱动下热机工作分析. Giri 和 Goswami^[19] 分析了三端口热机中几何相的贡献, 通过驱动高温和低温端热库的温度, 可以向光学腔内单一模式中泵浦光子. 特别地, 他们通过引入两个接近简并的能级, 探究了量子相干性对于泵浦的影响, 相对于动力学相对应的功的行为, 两个近简并能级间的相位差可以更明显地调制几何相部分的功. 几何相的存在, 使得稳态热机在取得最大功率时效率的普适极限被打破.

在上面这些面向实际应用的研究外, 生成函数的几何相也在关于非平衡统计物理的基础理论中发挥了作用. 早期关于稳态统计物理的研究希望能找到一个类似于平衡态 Clausius 不等式的关系, 由此可以给出系统在不同稳态间切换时所要满足

的限制. Hatano 和 Sasa^[47] 指出, 可以将熵产生拆分为瞬时稳态熵 (housekeeping entropy) 和额外熵 (excess entropy), 且根据额外熵满足的涨落定理 (Hatano-Sasa 等式) 可以限制不同稳态间切换的过程. 近期, Sagawa 等^[22] 的工作表明, 几何相正好对应了额外熵的累积量生成函数, 而同时动力学相则对应了瞬时稳态熵的统计性质. 这样的工作说明, 几何相对应的热力学过程不仅具有实际应用的价值, 也对基本非平衡理论的研究具有指导作用.

4 热力学距离: 热机中的不可逆性

第 3 节中描述的几何相贡献没有分析驱动过程中带来的不可逆性和由此带来的热力学效率的减小. 本节将运用热力学距离的概念对此进行讨论. 热力学距离最初源于宏观平衡热力学的研究, 它基于热力学势函数 (内能, 熵等) 在参数空间中的二阶导数, 且其发散性代表了相变的发生^[48,49]. 近年来, 此概念被用来描述单一热库接触的微纳系统的热力学和统计物理性质, 与前面宏观系统的情况不同, 此时的热力学距离基于随机的香农熵 ($S = -\ln p$) 来定义^[23]. 此时的热力学度规与信息几何中的 Fisher 信息矩阵直接相关, 即: 当把 Fisher 信息定义中的概率分布选取为 Gibbs 分布, 则可以得到对应的热力学度规. 根据此度规计算的两点间的热力学距离确定了这两点间态转换的最小耗散, 这与信息几何中 Cramer-Rao 界限具有很强的类比性. 此时的热力学距离是一个实验可直接测量的量^[50], 它可以帮助人们设计进行微纳系统态转换时最优 (耗散最小) 的路径方案, 此方案对应着参数空间中由热力学度规确定的测地线^[24,51].

上面一系列重要的研究仅仅关注了受驱动系统的耗散性质, 而没有研究受到周期驱动的微纳系统中涉及的热机功能以及其能量转换效率. 近期, Brandner 和 Saito^[25] 的研究工作讨论了这个问题. 类似于本文第 2 节中的讨论, 他们用几何联络来描述慢驱动产生的功输出, 用热力学度规来描述驱动带来的耗散. 如图 3(a) 中给出的, 热力学几何限定了有限时间热机工作时的效率-功率权衡关系. 图中的灰色区域为热力学几何给出的不等式所禁止的, 即在一定范围内若要获得更大的效率就要牺牲一部分功率. 而图 3(a) 中黑线为以匀速驱动的结果, 而橙线则代表了经过优化的热机表现, 具体的优化方式将在下一节中进行描述. 另一方面, 与先

前的结果^[6] 不同, 在此研究的具体模型中, 无论驱动的幅度如何, 量子相干性 (由驱动引起) 都只会损害热机的工作性能.

尽管上面的理论适用于大量受到慢驱动的经典/量子系统, 但却要求系统仅与一个热库相连. 随后, Hino 和 Hayakawa^[20] 将此框架推广到了同时与多个热库相接的系统中去, 并以此分析了非平衡自旋-玻色模型中的效率和功率. 此时, 热力学距离的定义不再像单一热库时那样依据 Gibbs 分布, 而是运用了 Hatano-Sasa 等式中的额外熵. 此理论可以用在无驱动时处于稳态的热机中, 但由于稳态分布在较复杂系统时难以直接得到, 因此, 提出另外的计算热力学距离的方法显得尤为重要.

在线性响应区域, 可以把驱动和静态偏置同等地当作一个平衡态附近的微小扰动来处理. 此时, 热力学距离可以直接表示为一个平衡态的关联函数, 但此方法仅局限于驱动幅度和偏置幅度都较小的线性响应区域^[52,53]. 根据平衡态关联函数可计算出热力学张量, 它的对称部分为热力学度规, 反对称部分为几何曲率, 这就把本文第 2 节中介绍的看似分离的两部分内容联系起来^[54]. 特别地, 基于线性响应计算热力学距离的方法可以处理受驱动导体中的相干输运, 给出对于输运系数的热力学限制^[55]. 这将有助于进一步考察更复杂量子系统中的输运现象.

5 基于几何方法的能量转换优化与权衡关系

根据前面的讨论, 热力学耗散和热力学距离之间存在的一般不等式为: $\Sigma \geq L^2/\tau_p$. 其中, Σ 为总耗散, L 为热力学距离, τ_p 为驱动周期. 根据定义, $\Sigma \equiv \int_0^{\tau_p} dt g_{\mu\nu} \dot{\Lambda}^\mu \dot{\Lambda}^\nu$, 且 $L \equiv \int_0^{\tau_p} dt \sqrt{g_{\mu\nu} \dot{\Lambda}^\mu \dot{\Lambda}^\nu}$. 此不等式是可饱和的, 它的等号在特定条件下可以取得. 此条件就给出了最优驱动所要满足的关系. 对于同样的参数位置 $\Lambda(t)$, 假设需要用 $\Lambda(\phi(t))$ 来表示, ϕ 为把路径参数化的另一个变量, 它可以被选在 $[0, 1]$ 的范围内. $\dot{\phi}(t)$ 表示了驱动的速度. 根据 $\Sigma \equiv \int_0^{\tau_p} dt g_{\mu\nu} \dot{\Lambda}^\mu \dot{\Lambda}^\nu$, 改变驱动路径的参数化后, 它变成了 $\int_{\phi(0)}^{\phi(\tau_p)} d\phi g_{\mu\nu} \frac{d\Lambda^\mu}{d\phi} \frac{d\Lambda^\nu}{d\phi} \left(\frac{d\phi}{dt} \right)$. 为了取得不等式中的等号, 需要将此表达式变为不依赖参数选取的形式, 即使得热力学耗散不再依赖于 $\phi(t)$.

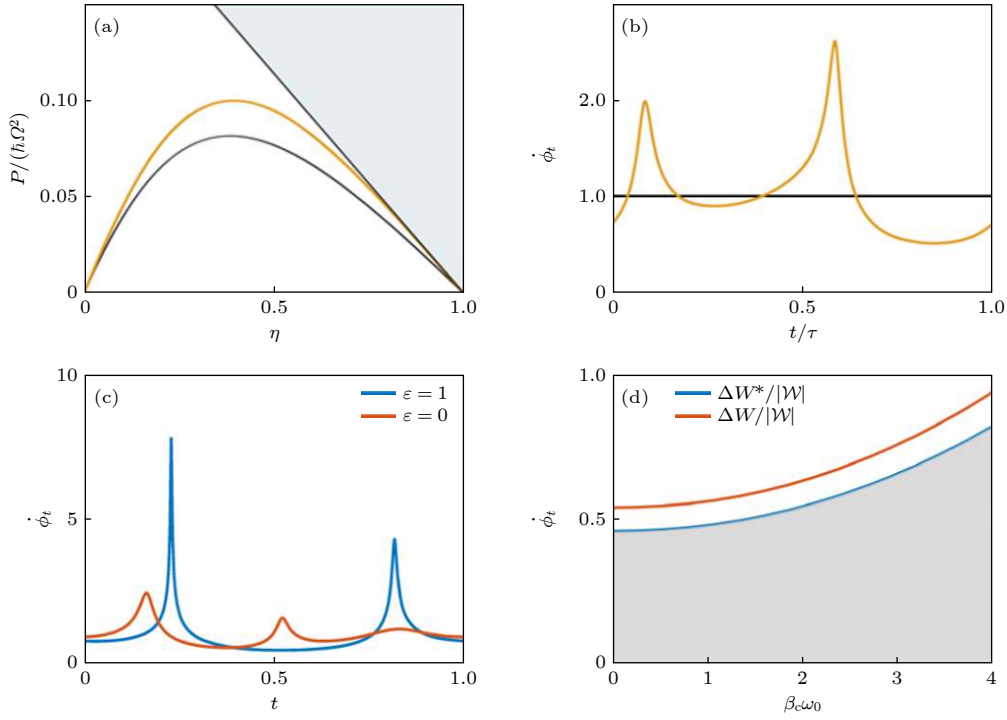


图 3 通过热力学距离对慢驱动热机的限制和优化 (a) 周期驱动量子热机中的功率与效率权衡. 灰色区域是根据热力学几何得出的不可能区域, 黑色线对应等速率驱动方式, 而橙色线对应经过优化的驱动方式 (驱动速度随时间变化), 这两种驱动方式中驱动速度的具体形式由图 (b) 给出^[25]. (c), (d) 对于驱动量子热机 (一个谐振子) 的多目标优化^[26] (c) 不同的优化后的驱动速度; (d) 功的相对涨落与谐振子频率的关系, 此时为效率-功涨落的多目标优化. 红线为匀速率的驱动, 而蓝线对应优化后的驱动, 灰色区域为由热力学几何给出的不可能区域^[26]. (a), (b) 改编自文献^[25]; (c), (d) 改编自文献^[26]

Fig. 3. The constraint on and optimization of slowly driven quantum heat engine using the thermodynamic distance method: (a) The efficiency-power tradeoff in driven quantum heat engine. The gray area is ruled out by the thermodynamic geometry, with the black and orange line corresponding to the constant-speed driving and optimized driving protocols (driving speed is time dependent) respectively. The driving speed in these two protocols is illustrated in Figure (b)^[25]. (c), (d) A multiple target optimization of a driven heat engine composed of a harmonic oscillator: (c) the driving speed of the optimization result with different targets^[26]; (d) the relative work fluctuation versus the oscillator's frequency (system's parameter) with a multiple target optimization. The red line is for the constant speed driving while the blue one is for the optimized protocol. The gray area is prohibited by the thermodynamic geometry^[26]. (a), (b) are adapted from Ref. [25], while (c), (d) are adapted from Ref. [26].

因此, $\phi(t)$ 需要满足的方程为

$$\frac{dt}{d\phi} = C \sqrt{g_{\mu\nu} \frac{d\Lambda^\mu}{d\phi} \frac{d\Lambda^\nu}{d\phi}} = C \frac{ds}{d\phi}, \quad (24)$$

C 为一个待定的常数, s 为沿驱动路径累积的热力学距离. 这时在一个参数点附近停留的时间正比于此处驱动路径的局域热力学距离. 从而求出最优的驱动函数应当为

$$t = C \int_{\phi(0)}^{\phi(t)} d\phi \sqrt{g_{\mu\nu} \frac{d\Lambda^\mu}{d\phi} \frac{d\Lambda^\nu}{d\phi}}, \quad (25)$$

其中给定驱动路径后, $\phi(t)$ 确定了参数空间中的具体位置, 而 t 就表示从初始位置驱动到此处所要花费的时间. 按此方式选择的驱动, 可以使得热力学系统的整体耗散最小. 由于经历完整周期的驱动后, (25) 式变为 $\tau_p = CL$. 因此常数 $C = \tau_p/L$. 可以

看出, 当驱动最优时, 驱动路径 $\Lambda(t)$ 以热力学距离为参数. 此时, 经过相同长度的时间, 参数空间内应走过热力学度规给出的相同的距离.

在对于单一目标 (如效率) 进行优化时, 可以通过计算参数空间中热力学度规, 然后确定出最优的驱动方式^[25]. 不同于一般性的直接优化方式^[14], 此优化过程是不需要大量数值性优化过程的. 另外, 如图 3(c) 和图 3(d) 中的例子, 若优化的目标为多目标优化, 则可以根据 ϵ 这样的参数, 调节优化时的权重, 决定一定程度上牺牲哪一个目标来换取另一个目标的优化. 根据不同 ϵ 计算出的热机表现, 就确定了它在多个衡量标准时的 Pareto 前沿^[26].

6 总结

在近些年来的研究中, 来源于几何的概念——几

何相和热力学距离——给受驱动微纳量子系统中热泵浦和热-功转换现象的研究提供了一种普适的方法和理解的角度. 一般地, 一个随机流的累积量产生函数中包含了驱动带来的几何相贡献. 这部分贡献是可逆的, 平均流的方向会因为驱动方向的转变而翻转. 它可以用一个反对称的张量(几何曲率)来描述. 在慢驱动极限下, 驱动产生的定向热流、功提取、中间系统的额外熵等物理量都可以用一个类似于 Berry 相位(曲率)的几何相(曲率)来表示. 在此范围内, 几何相热流是一个重要的可测量物理量, 它可以帮助人们实现在无静态偏置时的便捷的热流调控. 一系列理论研究已经涵盖了量子分子结、自旋-玻色模型和量子光力系统等实际系统中各系统参数对于几何相热流的调控作用.

另一方面, 源于热力学距离的几何度规则是一个对称张量, 它不会随着驱动反向而反向. 在具体的应用中, 它可以被用来研究周期驱动量子热机中对于功率、效率、涨落的热力学限制, 也可以在慢驱动条件下直接给出最优的驱动方式.

上面这两者, 是非平衡量子系统的参数空间里内禀几何性质的不同体现. 它可以帮助人们用统一的方式去研究大多数受驱动量子系统中的能流和能量转换过程. 未来, 它将指导人们设计出更具实用价值的量子热机^[56,57], 量子热泵和量子制冷机等功能性量子热器件. 本文的讨论局限在弱耦合系统, 若未来能正确考虑系统-热库间一般耦合带来的非马尔可夫效应, 则可以拓宽非平衡系统中几何性质研究的应用场景.

参考文献

- [1] Martínez I A, Roldán É, Dinis L, Petrov D, Parrondo J M, Rica R A 2016 *Nat. Phys.* **12** 67
- [2] Seifert U 2008 *Eur. Phys. J. B* **64** 423
- [3] Scully M O, Zubairy M S, Agarwal G S, Walther H 2003 *Science* **299** 862
- [4] Roßnagel J, Abah O, Schmidt-Kaler F, Singer K, Lutz E 2014 *Phys. Rev. Lett.* **112** 30602
- [5] Rahav S, Harbola U, Mukamel S 2012 *Phys. Rev. A* **86** 43843
- [6] Goswami H P, Harbola U 2013 *Phys. Rev. A* **88** 13842
- [7] Wang Z, Zhang DM, Ren J 2019 *Acta Phys. Sin.* **68** 220302 (in Chinese) [王子, 张丹妹, 任捷 2019 *物理学报* **68** 220302]
- [8] Esposito M, Lindenberg K, Van den Broeck C 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 130602
- [9] Nakpathomkun N, Xu H Q, Linke H 2010 *Phys. Rev. B* **82** 235428
- [10] Tu Z C 2012 *Chin. Phys. B* **21** 020513
- [11] Van den Broeck C 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 190602
- [12] Abiuso P, Perarnau-Llobet M 2020 *Phys. Rev. Lett.* **124** 110606
- [13] Miller H J, Mohammady M H, Perarnau-Llobet M, Guarnieri G 2021 *Phys. Rev. Lett.* **126** 210603
- [14] Solon A P, Horowitz J M 2018 *Phys. Rev. Lett.* **120** 180605
- [15] Ren J, Hänggi P, Li B 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 170601
- [16] Nie W, Li G, Li X, Chen A, Lan Y, Zhu S 2020 *Phys. Rev. A* **102** 43512
- [17] Ren J, Liu S, Li B 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 210603
- [18] Wang C, Ren J, Cao J 2017 *Phys. Rev. A* **95** 23610
- [19] Giri S K, Goswami H P 2017 *Phys. Rev. E* **96** 052129
- [20] Hino Y, Hayakawa H 2021 *Phys. Rev. Res.* **3** 13187
- [21] Yuge T, Sagawa T, Sugita A, Hayakawa H 2013 *J. Stat. Phys.* **153** 412
- [22] Sagawa T, Hayakawa H 2011 *Phys. Rev. E* **84** 51110
- [23] Crooks G E 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 100602
- [24] Sivak D A, Crooks G E 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 190602
- [25] Brandner K, Saito K 2020 *Phys. Rev. Lett.* **124** 40602
- [26] Miller H J, Mehboudi M 2020 *Phys. Rev. Lett.* **125** 260602
- [27] Breuer H, Petruccione F 2002 *The Theory of Open Quantum Systems* (New York: Oxford University Press)
- [28] Kolodrubetz M, Sels D, Mehta P, Polkovnikov A 2017 *Phys. Rep.* **697** 1
- [29] Cavina V, Mari A, Giovannetti V 2017 *Phys. Rev. Lett.* **119** 50601
- [30] Sekimoto K 1997 *J. Phys. Soc. Jpn.* **66** 1234
- [31] Berry M V 1984 *Proc. R. Soc. A* **392** 45
- [32] Thouless D J 1983 *Phys. Rev. B* **27** 6083
- [33] Deffner S, Lutz E 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 140404
- [34] Seifert U 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 40602
- [35] Brouwer P W 1998 *Phys. Rev. B* **58** R10135
- [36] Splettstoesser J, Governale M, König J, Fazio R 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 246803
- [37] Sinitsyn N A, Nemenman I 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 220408
- [38] Esposito M, Harbola U, Mukamel S 2009 *Rev. Mod. Phys.* **81** 1665
- [39] Chen T, Wang X, Ren J 2013 *Phys. Rev. B* **87** 144303
- [40] Xu D, Cao J 2016 *Front. Phys.* **11** 110308
- [41] Wang C, Ren J, Cao J 2015 *Sci. Rep.* **5** 11787
- [42] Wang Z, Wang L, Chen J, Wang C, Ren J 2022 *Front. Phys.* **17** 13201
- [43] Hino Y, Hayakawa H 2020 *Phys. Rev. E* **102** 012115
- [44] Guéry-Odelin D, Ruschhaupt A, Kiely A, Torrontegui E, Martínez-Garaot S, Muga J G 2019 *Rev. Mod. Phys.* **91** 45001
- [45] Takahashi K, Fujii K, Hino Y, Hayakawa H 2020 *Phys. Rev. Lett.* **124** 150602
- [46] Funo K, Lambert N, Nori F, Flindt C 2020 *Phys. Rev. Lett.* **124** 150603
- [47] Hatano T, Sasa S 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 3463
- [48] Weinhold F 1975 *J. Chem. Phys.* **63** 2479
- [49] Ruppeiner G 1995 *Rev. Mod. Phys.* **67** 605
- [50] Feng E H, Crooks G E 2009 *Phys. Rev. E* **79** 012104
- [51] Sivak D A, Crooks G E 2016 *Phys. Rev. E* **94** 052106
- [52] Brandner K, Saito K, Seifert U 2015 *Phys. Rev. X* **5** 031019
- [53] Brandner K, Seifert U 2016 *Phys. Rev. E* **93** 62134
- [54] Bhandari B, Alonso P T, Taddei F, von Oppen F, Fazio R, Arrachea L 2020 *Phys. Rev. B* **102** 155407
- [55] Potanina E, Flindt C, Moskalets M, Brandner K 2021 *Phys. Rev. X* **11** 021013
- [56] Tu Z 2021 *Front. Phys.* **16** 33202
- [57] Quan H, Liu Y, Sun C, Nori F 2007 *Phys. Rev. E* **76** 031105

SPECIAL TOPIC—Non-equilibrium quantum many-body systems

Nonequilibrium thermal transport and thermodynamic geometry in periodically driven systems*

Wang Zi Ren Jie[†]

(Shanghai Key Laboratory of Special Artificial Microstructure Materials and Technology, Center for Phononics and Thermal Energy Science, China-EU Joint Lab on Nanophononics, School of Physics Science and Engineering, Tongji University, Shanghai 200092, China)

(Received 15 September 2021; revised manuscript received 25 October 2021)

Abstract

With the in-depth understanding of nano-/micro-scaled systems and the developing of the corresponding experimental techniques, the heat transport and energy conversion processes in these small systems have attracted much interest recently. In contrast to the static manipulation methods, which hinge on the steady nonequilibrium sources such as temperature bias, chemical potential difference, etc., the temporal driving methods can control small systems in nonequilibrium non-steady states with much more versatility and universality. The research on periodically driven small systems holds both fundamental and pragmatic promises. This review is based on the fundamental concept of geometry. By analyzing the geometric phase and thermodynamic length in the transport process and the energy conversion process, we provide a unified perspective for the recent researches on the thermodynamic properties of driven nonequilibrium quantum systems. Thermodynamic geometry not only is the intrinsic origin of the nontrivial transport and dissipation, but also provides us with an all-applicable theoretical framework. The discussion over the geometry would yield multiple thermodynamic constraints on the transport and energy conversion, and can naturally construct a general optimization method as well. This will conduce to a better understanding of functionality for nonequilibrium quantum many-body systems acting as thermal machines. Also, this will inspire people to design quantum thermal machines with simultaneously more ideal performance, i.e. higher efficiency, higher power and higher constancy.

Keywords: nonequilibrium quantum system, geometric phase, thermodynamic distance, heat pump, quantum heat engine

PACS: 05.70.Ln, 03.65.Vf, 07.20.Pe

DOI: [10.7498/aps.70.20211723](https://doi.org/10.7498/aps.70.20211723)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11935010, 11775159).

[†] Corresponding author. E-mail: xonics@tongji.edu.cn