

专题: 热传导及其相关交叉领域研究

基于离子阱中离子晶体的热传导的研究进展*

李冀¹⁾ 陈亮^{2)†} 冯芒^{1)2)‡}

1) (广州工业技术研究院, 广州 511458)

2) (中国科学院精密测量科学与技术创新研究院, 武汉 430071)

(2023年10月28日收到; 2023年11月23日收到修改稿)

热传导现象是物理学中最重要的研究课题之一, 特别是近年来, 随着对单分子器件研究的不断深入, 人们越来越关注低维(一维和二维)微观系统的热传导问题. 离子阱中的离子晶体处于真空环境中, 没有与外部环境进行能量交换, 其晶体结构和温度可以通过电场和光场精确操控, 为研究低维晶体在经典或量子状态下的热传导提供了理想的实验平台. 本文综述了近年来离子晶体中热传导的理论研究, 包括一维、二维和三维模型中温度分布和稳态热流的计算方法, 以及在不同维度离子晶体构型下热流与温度分布的特性. 此外, 还讨论了无序度对离子晶体热导性的影响.

关键词: 离子阱, 离子晶体, 热传导, 结构相变

PACS: 37.10.Ty, 05.60.-k, 05.70.Fh

DOI: 10.7498/aps.73.20231719

1 引言

热传导是物理学中的一个基本现象, 它描述了当物质受到加热或冷却时, 热量在物质内部以及物质之间传递的机制. 对热传导的研究有助于深入了解宏观现象和微观动力学之间的联系. 例如, 一维模型中的热传导作为一个典型的研究对象, 可以帮助我们理解热量传输过程中的非线性和混沌等复杂现象^[1]. 对热传导的深入研究可以揭示热量传输的内在机理和数学模型, 为实际应用提供理论依据和指导.

在经典系统中, 热传导遵循傅里叶定律, 该定律阐述了热流密度与空间中温度场之间的相互关系. 假设在三维空间中存在一个宏观系统, 在某一特定时刻 t , 系统空间的温度分布可用 $T(\mathbf{q}, t)$ 来描述. 其中, 向量 $\mathbf{q}(x, y, z)$ 表示系统内的某个空间位

置, x , y 和 z 分别表示三维坐标轴上的坐标. 根据傅里叶定律, 在此情况下, 热流密度 $\mathbf{J}(\mathbf{q}, t)$ 可以表示为^[2]

$$\mathbf{J}(\mathbf{q}, t) = -\kappa \nabla T(\mathbf{q}, t), \quad (1)$$

其中 κ 为系统的导热系数. 为了理解温度场在时间维度上的变化规律, 这里定义系统在三维空间内的能量分布为 $u(\mathbf{q}, t)$. 将方程 (1) 代入连续性方程 $\partial u / \partial t + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0$ ^[3] 得

$$\frac{\partial T(\mathbf{q}, t)}{\partial t} = \frac{\nabla \cdot [\kappa \nabla T(\mathbf{q}, t)]}{c}, \quad (2)$$

其中 $c = \partial u / \partial T$ 是系统的比热容. 方程 (2) 也被称为热扩散方程, 它描述了宏观系统中能量转移的规律. 傅里叶定律是从大量宏观系统实验中总结出的经验定律, 其基本假设是系统中的粒子在进行热量交换时主要依靠的输运过程是扩散. 也就是说, 粒子通过与周围粒子的随机碰撞来进行能量的交换. 从声子的角度来看, 这可以理解为数量多的声子向

* 国家自然科学基金 (批准号: U21A20434)、广州市重点实验室 (批准号: 202201000010) 和广州市科技计划 (批准号: 20220101011727) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: liangchen@wipm.ac.cn

‡ 通信作者. E-mail: mangfeng@wipm.ac.cn

数量少的声子的方向扩散. 然而, 当系统的尺寸和维度减小到一定程度后, 粒子之间的热交换过程可能不再符合扩散输运的规律. 例如, 热交换过程可能会变为弹道输运^[4], 此时粒子在进行能量交换时没有发生碰撞, 并且可以忽略声子之间的相互作用. 在这种情况下, 热传导不再符合傅里叶定律.

为了深入了解低维系统中热传导的特性, 科学家们针对两种简单模型进行了研究. 其中一种模型是谐波晶体, 另一种则是 FPU (Fermi-Pasta-Ulam) 晶体. 在这两种模型中, 假定晶体包含有限颗粒, 并且晶体两端与两个不同温度且温度恒定的热库相接触. 这些粒子在空间中以固定点为中心进行简谐振动, 同时它们仅仅与相邻的粒子进行相互作用. 当两个粒子之间的相互作用势表示为 $U(\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_l) = \frac{1}{2}(\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_l)^2 + \frac{\beta}{4}(\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_l)^4$ 时, 其为 FPU 晶体, 其中 β 为非谐参数; i, l 表示两个粒子的编号; $\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_l$ 表示粒子在空间上的位置. 而当 $U(\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_l) = \frac{1}{2}(\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_l)^2$ 时, 称为谐波晶体. 综述文献^[3,5] 详尽地介绍了相关研究, 展示了当前的研究现状和未来的发展趋势. 人们通常以系统的稳态热流 $J \sim N^a$ 作为评判热传导特性的重要标准. 其中, N 代表模型中的粒子数, 而 a 是一个常数. 在傅里叶定律的适用范围内, 系统的热流应满足 $a = -1$ ^[6,7]. 对于这两种晶体, 当系统处于三维状态时, 其稳态热流遵循傅里叶定律. 然而, 当系统维度降低至二维或一维时, 参数 a 不再等于 1, 这表明热传导特性发生了变化. 对于一维谐波晶体, 当系统处于有序状态, 即所有粒子的质量或粒子之间相互作用力等参数均相同时, 其稳态热流与系统大小 N 无关, 此时 $a = 0$ ^[4,8]. 给系统中的粒子的质量引入无序因素后, 例如系统中粒子质量并不全相等, a 的值可能为 $-3/2$ ^[9,10] 或者为 $-1/2$ ^[11,12]. 针对 FPU 晶体, 人们发现了一个有趣的特性: 当 FPU 晶体的温度低于某个阈值时, 其热传导特性会与谐波晶体极为相似^[13].

离子晶体是由囚禁在离子阱中的多个离子组成的晶体, 本综述主要探讨离子晶体中的热传导特性. 这类晶体因其独特的性质而备受关注: 在真空环境中, 囚禁的离子晶体与外部环境没有能量交换, 其晶体结构和温度可以通过电场和光场进行精确操控^[14-16]. 这为研究低维晶体在经典或量子状态下的热传导提供了理想的实验平台. 在离子晶体

中, 离子之间的距离相对于其他晶体材料要大得多, 这使得离子间的相互作用主要是库仑力. 这种情况下, 离子会与晶体中所有其他离子进行能量交换. 通过调节系统的参数, 可以使离子晶体呈现出不同维度的构型, 例如直线构型 (一维)、之字构型 (二维) 或螺旋构型 (三维)^[17], 这些不同维度构型的离子晶体为研究热传导提供了丰富的模型.

本综述的结构安排如下: 第 2 节详细阐述热传导研究中常用的一些基本原理和方法; 第 3 节分别采用一维、二维和三维模型来计算离子晶体中的热传导, 并展示离子晶体的结构相变与温度分布以及与热流的关系; 第 4 节在三维离子晶体热传导模型中加入无序度的情况下, 探讨离子晶体中热传导的特殊表现和规律; 第 5 节介绍一些离子晶体中与热传导相关的实验, 并总结目前在离子晶体中对热传导研究的主要成果.

2 离子晶体热传导模型

本文的研究对象是两端与不同温度的热库接触的离子晶体模型, 期望获得该系统在稳态情况下的热流密度以及温度分布. 离子晶体中的热传导研究通常借助郎之万方程来描述系统中每个离子的运动. 此方程原用于描述布朗运动, 其中摩擦力和随机噪声项在热传导情境中可对应于热库对离子的作用, 可以证明, 此系统的稳态是唯一的^[18]. 通过对稳态下离子晶体的深入分析, 可以得到热流密度、温度分布等关键信息.

该模型涉及两类离子, 其中一类离子与热库接触, 而另一类离子则不与热库接触. 为了计算模型的稳态, 有两种常用的方法可供选择: RLL (Rieder Lebowitz Lieb) 法和 LEGF (Langevin equations and Green's function) 法. RLL 法是由 Rieder, Lebowitz 和 Lieb 三人首次提出的^[4], LEGF 法是由 Ford, Kac 和 Mazur 三人首次提出^[19], 并且在后续工作^[2,20-23] 中得到了发展. 这两种方法的主要区别在于如何处理这两类离子. LEGF 法通过哈密顿量进行区分, 将总哈密顿量分别按照这两类离子写出各自独立的哈密顿量. 相对而言, RLL 法是在运动方程的层面对两者进行区分, 即根据不同的离子采用不同的运动方程.

下面基于 RLL 方法介绍一些基本原理. 首先定义模型中离子的数量为 N , 离子的质量为 m , 那

么离子晶体的哈密顿量可以写为

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \sum_{i=1}^N V(\mathbf{q}_i) + \sum_{i=1}^N \sum_{l \neq i}^N U(\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_l), \quad (3)$$

其中 \mathbf{p}_i 表示第 i 个离子的动量, $V(\mathbf{q}_i)$ 表示离子在阱势场中的势能, 而 $U(\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_l)$ 则表示离子 i 与离子 l 之间的相互作用势能. 此时, 可以将离子受到的来自阱势场和其他离子的力表示为 $\mathbf{f}_i = -\partial H / \partial \mathbf{q}_i$. 假设第 1 个离子与高温热库 L 接触, 第 N 个离子与低温热库 R 相接触. 那么系统的运动方程为

$$\frac{\partial \mathbf{p}_i}{\partial t} = \begin{cases} \mathbf{f}_i - \frac{\gamma_L \mathbf{p}_i}{m} + \boldsymbol{\eta}_L(t), & i = 1, \\ \mathbf{f}_i, & i = 2, 3, \dots, N-1, \\ \mathbf{f}_i - \frac{\gamma_R \mathbf{p}_i}{m} + \boldsymbol{\eta}_R(t), & i = N, \end{cases} \quad (4)$$

其中, $\gamma_{L,R}$ 表示热库 L 或 R 对离子的摩擦系数, $\boldsymbol{\eta}_{L,R}(t)$ 表示热库 L 或 R 对离子的随机力. 接下来, 需要用离散形式定义热流, 首先定义由第 i 个离子流向第 l 个离子的瞬态的热流密度为 $j_{i \rightarrow l}$, 其内涵是第 i 个离子向第 l 个离子做功的功率, 即:

$$j_{i \rightarrow l} = \frac{\partial U(\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_l)}{\partial \mathbf{q}_i} \frac{\mathbf{p}_i + \mathbf{p}_l}{2m}. \quad (5)$$

定义热库 L, R 对第 1, N 个离子的作用力为 $\mathbf{f}_L, \mathbf{f}_R$, 那么热库流向离子的热流可以表示为

$$j_L = \mathbf{f}_L \frac{\mathbf{p}_1}{m}, \quad j_R = \mathbf{f}_R \frac{\mathbf{p}_N}{m},$$

为了利用连续性方程, 定义第 i 个离子上的能量密度为 [3,24]

$$\varepsilon(\mathbf{q}_i) = \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + V(\mathbf{q}_i) + \frac{1}{2} \sum_{l \neq i}^N U(\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_l), \quad (6)$$

于是, 连续性方程的离散形式可以表示为 [3,24]

$$\frac{\partial \varepsilon(\mathbf{q}_i)}{\partial t} = \begin{cases} \sum_{l \neq i}^N j_{i \rightarrow l} + j_L, & i = 1, \\ \sum_{l \neq i}^N j_{i \rightarrow l}, & i = 2, 3, \dots, N-1, \\ \sum_{l \neq i}^N j_{i \rightarrow l} + j_R, & i = N. \end{cases} \quad (7)$$

当处于稳态的时候离子晶体的热流不再变化, 即 $\partial \varepsilon(\mathbf{q}_i) / \partial t = 0$, 使用 $\langle \dots \rangle$ 表示物理量的平均值, 可得

$$\begin{cases} \sum_{l \neq i}^N \langle j_{i \rightarrow l} \rangle + \langle j_L \rangle = 0, & i = 1, \\ \sum_{l \neq i}^N \langle j_{i \rightarrow l} \rangle = 0, & i = 2, 3, \dots, N-1, \\ \sum_{l \neq i}^N \langle j_{i \rightarrow l} \rangle + \langle j_R \rangle = 0, & i = N. \end{cases} \quad (8)$$

此时的总热流就是离子晶体与热库之间的热流, 使用 $\langle \mathbf{J} \rangle$ 代表系统稳态下的总热流, 可得

$$\langle \mathbf{J} \rangle = \langle j_L \rangle = -\langle j_R \rangle = \sum_{l \neq 1}^N \langle j_{1 \rightarrow l} \rangle = -\sum_{l \neq N}^N \langle j_{N \rightarrow l} \rangle. \quad (9)$$

根据温度与能量的关系 $E = \frac{3}{2} k_B T$, 稳态下离子晶体的温度分布的离散形式可以表示为

$$T_i = \frac{1}{2mk_B} \langle \mathbf{p}_i^2 \rangle. \quad (10)$$

3 离子晶体中的热传导

离子阱系统中, 产生与离子晶体接触的热库有两种方式. 离子晶体被离子阱势场囚禁在真空中, 其与外界交换能量的方式通常有两种: 离子阱势场的作用和激光的作用. 在与离子阱势场的作用中, 通过调整阱势场的频率、幅度以及离子在势场中的位置, 可以对离子晶体产生不同程度的加热作用. 在与激光的相互作用中, 通过调整激光的功率和频率, 可以对离子晶体产生不同程度的加热和冷却效果. 因此, 在实验中可以通过这两种方式在离子晶体的两边产生不同温度的热库: 1) 改变离子晶体两端最边缘的若干个离子所处的囚禁势场, 这样会使这两类离子受到来自阱的不同的加热作用, 此时的囚禁势场相当于两个不同温度的热库; 2) 让两端最边缘的若干个离子分别受到两束不同参数的激光照射, 此时激光就能被视作一个等效的热库. 因为使用激光产生热库的方案更容易实现, 在接下来的章节中, 讨论的模型都以激光作为热库. 本节将详细介绍并探讨文献 [25-28] 针对不同维度模型中的离子晶体热流的研究成果.

3.1 一维模型

考虑一维模型, N 个离子沿 x 轴线性排列, 由于离子阱势场的限制, 每个离子均以固定位置为

中心做简谐振动, 用 ω_x 表示离子的宏运动频率. 设 x_i^0 表示第 i 个离子简谐振动的中心坐标, 而 x_i 和 p_i 表示其相对于运动中心 x_i^0 的相对位移和动量. 根据海森伯-郎之万方程 (Heisenberg-Langevin equation)^[29,30], 系统的运动方程为

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{x}_i}{\partial t} = \mathbf{p}_i, \\ \frac{\partial \mathbf{p}_i}{\partial t} = -\sum_{l=1}^N \mathbf{A}_{il} \mathbf{x}_l - \rho_i \mathbf{p}_i + \sqrt{2\rho_i} \zeta_i(t), \end{cases} \quad (11)$$

其中 ρ_i 表示热库对离子的摩擦系数, $\zeta_i(t)$ 表示热库对离子的随机力. \mathbf{A}_{il} 表示离子之间相互作用力的耦合矩阵, 其表达式为^[25]

$$A_{ii} = \omega_x^2 - \sum_{l \neq i}^N \frac{1}{|x_l^0 - x_i^0|^3}, \quad A_{il} = \frac{1}{|x_l^0 - x_i^0|^3}, \quad l \neq i.$$

假设离子晶体两端的热库为 Markovian 型热库, 那么 $\zeta_i(t)$ 满足以下条件 ($\hbar = 1$):

$$\begin{cases} \zeta_i(t) = -i\sqrt{\frac{\omega_x}{2}}(b_i(t) - b_i^\dagger(t)), \\ \langle b_i^\dagger(t_1) b_l(t_2) \rangle = T_i^B \delta_{il} \delta(t_1 - t_2), \end{cases} \quad (12)$$

其中 δ 表示德尔塔函数, 并且假设所有离子的振动频率都为 ω_x ; T_i^B 表示热库的平均声子数; b_i 表示玻色场算子. 将 $\langle b_i^\dagger(t_1) b_l^\dagger(t_2) \rangle = 0$ 和 $\langle b_i(t_1) b_l(t_2) \rangle = 0$ 代入 (12) 式, 可得^[25]

$$\langle \zeta_i(t_1) \zeta_l(t_2) \rangle = \omega_x \left(T_i^B + \frac{1}{2} \right) \delta_{il} \delta(t_1 - t_2). \quad (13)$$

通过对角化, 方程 (11) 的解具有以下矩阵形式:

$$\mathbf{q}(t) = e^{-\Omega t} \mathbf{q}(0) + \int_0^t d\tau e^{\Omega(\tau-t)} \boldsymbol{\eta}(\tau), \quad (14)$$

其中,

$$\mathbf{q}(t) = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1(t) \\ \mathbf{x}_2(t) \\ \vdots \\ \mathbf{x}_N(t) \\ \mathbf{p}_1(t) \\ \mathbf{p}_2(t) \\ \vdots \\ \mathbf{p}_N(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \{\mathbf{x}_i(t)\} \\ \{\mathbf{p}_i(t)\} \end{bmatrix},$$

$$\boldsymbol{\eta}(t) = \begin{bmatrix} \{0\} \\ \{\sqrt{2\rho_i} \zeta_i(t)\} \end{bmatrix},$$

$$\Omega = \begin{bmatrix} \{0\} & -I \\ \{\mathbf{A}_{il}\} & \{\rho_i \delta_{il}\} \end{bmatrix},$$

$\mathbf{x}_i(t)$ 和 $\mathbf{p}_i(t)$ 为第 i 个离子在 t 时刻的位移和动量, I 为单位矩阵, Ω 为一个大小为 $2N \times 2N$ 的矩阵.

在时刻 t , 第 i 个离子的温度可以表示为 $T_i(t) = \frac{1}{2}(\omega_x \langle \mathbf{x}_i^2(t) \rangle + \langle \mathbf{p}_i^2(t) \rangle / \omega_x - 1)$, 当时间 $t \rightarrow \infty$ 时, 可以得到离子的稳态温度 $T_i^s = T_i(t \rightarrow \infty)$.

在文献 [25] 中, 采用了上述方法对包含 100 个离子的模型在不同 ρ 的取值下的温度分布进行了计算. 当两个热库位于离子晶体边缘时, 离子晶体中的温度分布如图 1 所示. 显然, 图中的温度分布不符合傅里叶定律. 对于符合傅里叶定律的系统, 其温度分布应该呈现从高温点逐渐下降到低温点的线性分布, 然而在图 1 的分布中, 与热库接触的离子和未与热库接触的离子间的温度存在显著的跃阶现象, 且所有未与热库接触的离子的温度分布几乎完全一致. 这种温度分布的出现, 可以归因于热库将热量传递到离子晶体的速率远低于离子晶体内部热传导的速度.

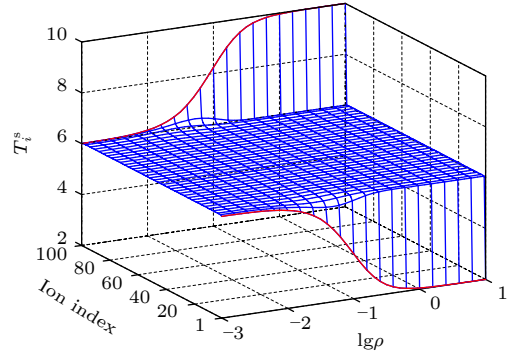


图 1 ρ 值不同时, 由 100 个离子组成的离子晶体在稳态下的温度分布^[25], 其中离子的温度 T_i^s 由平均声子数来表示. 第 1 个离子和第 100 个离子与热库相接触, 由图中的红线表示, 其他的离子由蓝线表示

Fig. 1. Temperature distribution of an ion crystal composed of 100 ions under different ρ in stable state, where temperature distribution T_i^s measured by the mean thermal phonon number. The 1st and the 100th ions are in contact with the thermal bath, indicated by the red line in the figure, while other ions are indicated by the blue line. The figure is taken from Ref. [25].

在另一种情况下, 如图 2 所示, 将高温热库移到离子晶体的中央, 此时的温度分布将会分为两部分. 位于两个热库之间的部分将维持在一个相对较低的温度, 而位于高温热库另一侧的部分则展现出较高的温度. 值得注意的是, 这两个温度之间的

差距会随着热导率的降低而逐渐减小并最终趋于一致. 从上述计算结果可以看出, 相较于符合傅里叶分布的宏观系统, 一维离子晶体的温度稳态分布具有多种不同寻常的模式.

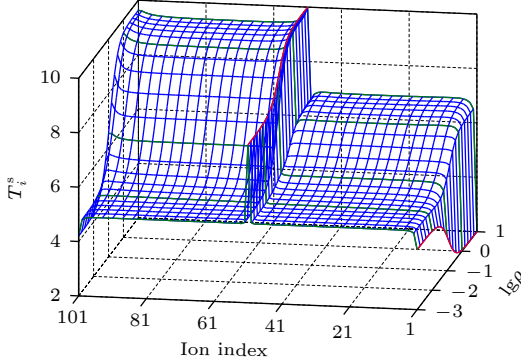


图 2 由 101 个离子组成的离子晶体在稳态下的温度分布^[25], 其中离子的温度 T_i^s 由平均声子数来表示. 第 1 个离子和第 51 个离子与热库相接触. 与热库相接触的离子由图中的红线表示, 其他的离子由蓝线表示

Fig. 2. Temperature distribution of an ion crystal composed of 101 ions under different ρ in stable state, where temperature distribution T_i^s measured by the mean thermal phonon number. The first ion and the 51st ion are in contact with the thermal bath. Ions in contact with the thermal bath are indicated by the red line in the figure, while other ions are indicated by the blue line. The figure is taken from Ref. [25].

3.2 二维模型

接下来, 我们将探讨更为复杂的二维模型. 在二维模型中, 离子晶体能够发生结构相变, 从一维的直线构型转变为二维的之字构型. 将模型的两个维度分别定义为 x 轴和 y 轴, 离子在这两个轴向上的宏运动频率分别为 ω_x 和 ω_y . 定义该模型中的离子数量为 N , 离子的质量为 m , 所带电荷为 Q . 另外定义 \mathbf{q}_i 和 \mathbf{p}_i 为离子相对坐标零点的位移和动量, $q_{x,i}$, $q_{y,i}$ 和 $p_{x,i}$, $p_{y,i}$ 分别为它们在两个坐标轴上的投影. 于是系统的哈密顿量可以写为^[26]

$$H = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^N (p_{x,i}^2 + p_{y,i}^2) + \mathcal{V}, \quad (15)$$

$$\mathcal{V} = \frac{m}{2} \sum_{i=1}^N (\omega_x^2 q_{x,i}^2 + \omega_y^2 q_{y,i}^2) + \frac{Q^2}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^N \sum_{l \neq i}^N \frac{1}{|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_l|}. \quad (16)$$

可以看出, 该模型中的离子振动中心位置并不固定, 因此当选取不同的离子阱参数时, 离子晶体

将呈现出不同的构型. 在二维模型中, 离子的运动方程可以写为^[26]

$$\begin{cases} \frac{dq_{\mu,i}}{dt} = \frac{p_{\mu,i}}{m}, \\ \frac{dp_{\mu,i}}{dt} = - \left(\frac{\partial \mathcal{V}}{\partial q_{\mu,i}} + \frac{\eta_{\mu,i}}{m} p_{\mu,i} \right) + \sqrt{2D_{\mu,i}} \frac{dW_{\mu,i}}{dt}, \end{cases} \quad (17)$$

其中 μ 表示 x 或 y ; $\eta_{\mu,i}$ 和 $D_{\mu,i}$ 表示来自热库的摩擦系数和扩散系数; $W_{\mu,i}$ 与热库对离子的随机力 $\varepsilon_{\mu,i}(t)$ 有关, 并且随机力满足条件 $\langle \varepsilon_{\mu,i}(t) \rangle = 0$ 和 $\langle \varepsilon_{\mu,i}(t) \varepsilon_{\mu,i}(t') \rangle = 2D_{\mu,i} \delta(t - t')$. 热库是由激光对离子的作用产生的, 在弱光强的条件下可得^[26]

$$\begin{cases} \eta_{\mu,i} = -4\hbar k_{\mu,i}^2 I_{\mu,i} \frac{(2\Delta_{\mu,i}/\Gamma)}{(1 + 4\Delta_{\mu,i}^2/\Gamma^2)^2}, \\ D_{\mu,i} = \hbar^2 k_{\mu,i}^2 I_{\mu,i} \frac{\Gamma}{(1 + 4\Delta_{\mu,i}^2/\Gamma^2)}, \end{cases} \quad (18)$$

式中 $I_{\mu,i}$ 是个无量纲的量, 它表示作用在第 i 个离子上的相对光强; $k_{\mu,i}$ 表示激光的波数; $\Delta_{\mu,i} = \omega_{\mu,i}^{\text{laser}} - \omega_0^{\text{laser}}$ 表示激光的失谐, 其中激光的频率为 $\omega_{\mu,i}^{\text{laser}}$, 激光对应离子的两个能级 (基态和激发态) 之间的跃迁频率为 ω_0^{laser} ; Γ 为这两个能级中的激发态的自然线宽.

假设激光只与 x 轴上投影坐标最大和最小的几个离子相互作用, 分别产生两个不同温度的热库, 而其他离子则不与激光发生相互作用. 用 $U(|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_l|)$ 代表离子之间的相互作用势, $V(\mathbf{q}_i)$ 代表离子阱的势场, 离子的能量密度可以表示为^[3,24]

$$\varepsilon_i = \frac{1}{2m} (p_{x,i}^2 + p_{y,i}^2) + V(\mathbf{q}_i) + \frac{1}{2} \sum_{l \neq i}^N U(|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_l|), \quad (19)$$

$$V(\mathbf{q}_i) = \frac{m}{2} (\omega_x^2 q_{x,i}^2 + \omega_y^2 q_{y,i}^2), \quad (20)$$

$$U(|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_l|) = \frac{Q^2}{8\pi\epsilon_0 (|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_l|)}. \quad (21)$$

定义从第 i 个离子流向第 l 个离子的热流密度为

$$j_{i \rightarrow l} = \frac{1}{2m} \sum_{\mu=\{x,y\}} \frac{\partial U(|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_l|)}{\partial q_{\mu,i}} (p_{\mu,i} + p_{\mu,l}). \quad (22)$$

激光与第 i 个离子作用, 使这个离子与热库产生了接触, 热库流向第 i 个离子的热流密度为

$$j_{B \rightarrow i} = \sum_{\mu=\{x,y\}} \frac{p_{\mu,i}}{m} \left(-\frac{\eta_{\mu,i}}{m} p_{\mu,i} + \varepsilon_{\mu,i} \right). \quad (23)$$

定义热流的方向是由编号较小的离子流向编号较

大的离子. 对于单个离子来说, 其自身的能量变化等于流向离子的能量密度减去流出离子的能量密度. 因此, 第 i 个离子的连续性方程的离散形式可以写成:

$$\frac{d\varepsilon_i}{dt} = \sum_{l<i} j_{l \rightarrow i} - \sum_{l>i} j_{i \rightarrow l} + j_{B \rightarrow i}. \quad (24)$$

在稳态情况下, 流入离子的能量与流出离子的能量相等, 因此由 (24) 式, 稳态下的连续性方程可以改写成:

$$\sum_{l<i} \langle j_{l \rightarrow i} \rangle + \langle j_{B \rightarrow i} \rangle = \sum_{l>i} \langle j_{i \rightarrow l} \rangle, \quad (25)$$

式中的 $\langle j_{B \rightarrow i} \rangle$ 可以由 Novikov 定律^[31] 得到

$$\langle j_{B \rightarrow i} \rangle = \frac{1}{m^2} \sum_{\mu=\{x,y\}} (-\eta_{\mu,i} \langle p_{\mu,i}^2 \rangle + m D_{\mu,i}). \quad (26)$$

为了得到通过离子晶体的总热流 $\mathbf{J}(t)$, 需要把单个离子的连续性方程扩展成整个离子晶体的连续性方程^[3,24]:

$$\frac{\partial \varepsilon(\mathbf{q}, t)}{\partial t} + \nabla \mathbf{j}(\mathbf{q}, t) = \sum_{i=1}^N j_{B \rightarrow i}(t) \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}_i), \quad (27)$$

$$\varepsilon(\mathbf{q}, t) = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i(t) \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}_i),$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{q}, t) = \sum_{i=1}^N \mathbf{j}_i(t) \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}_i), \quad (28)$$

其中 $\varepsilon(\mathbf{q}, t)$ 代表离子晶体的能量密度; $\mathbf{j}(\mathbf{q}, t)$ 代表离子晶体的热流密度; $\mathbf{j}_i(t)$ 代表经过第 i 个离子的热流密度, 其表达式可以通过傅里叶分析得到^[26]

$$\mathbf{j}_i(t) = \mathbf{q}_i \left(\frac{d\varepsilon_i}{dt} - j_{B \rightarrow i} \right) + \varepsilon_i \frac{d\mathbf{q}_i}{dt}. \quad (29)$$

将热流密度 $\mathbf{j}(\mathbf{q}, t)$ 在整个离子晶体范围内进行积分, 得到通过离子晶体的总热流 $\mathbf{J}(t)$:

$$\mathbf{J}(t) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^N \varepsilon_i \mathbf{p}_i + \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{l=1}^i (\mathbf{q}_{i+1} - \mathbf{q}_l) j_{l \rightarrow i+1}. \quad (30)$$

利用 Novikov 定理写出稳态下离子晶体总热流的表达式^[31]:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{J} \rangle &= - \sum_{i=1}^N \langle \mathbf{q}_i j_{B \rightarrow i} \rangle \\ &= \frac{1}{m^2} \sum_{i=1}^N \sum_{\mu=\{x,y\}} (\eta_{\mu,i} \langle p_{\mu,i}^2 \mathbf{q}_i \rangle - m D_{\mu,i} \langle \mathbf{q}_i \rangle). \end{aligned} \quad (31)$$

稳态时离子晶体中的温度分布可以表示为

$$T_i = \frac{1}{2mk_B} \sum_{\mu=\{x,y\}} \langle p_{\mu,i}^2 \rangle. \quad (32)$$

文献 [26] 采用数值模拟方法计算了包含 $N = 30$ 个离子的离子晶体在不同构型下的稳态热流和温度分布, 其中编号为 $i = 1, 2, 3$ 和 $i = N - 2, N - 1, N$ 的离子分别受到相同功率不同失谐量的两束激光照射, 而其他离子不与激光相互作用. 离子晶体的结构相变过程用序参量 α 来表示, 其定义见文献 [26]. 在文献 [26] 采用的数值模拟条件下, $\alpha = 13$ 时, 离子晶体为直线构型, 随着 α 逐渐减小, 离子晶体相变为之字构型. 在离子晶体为直线构型时, 离子沿着 x 轴排列. 在直线构型到之字构型的结构相变过程中, 离子晶体的温度分布如图 3 所示, 其中温度分布梯度逐渐增大. 在直线构型中, 离子晶体温度分布规律与一维模型计算结果一致, 数值模拟结果显示离子晶体中间部分的温度为两个热库的平均值. 在之字构型中, 离子晶体温度分布更接近符合傅里叶定律的宏观系统.

在二维模型中, 离子的振动模式从一维 (x 方向) 拓展到了二维 (x 和 y 方向). 这两个方向的宏运动频率越接近, 离子晶体的构型就越接近之字构型, 反之, 则更接近直线构型. 图 4 给出了离子晶体在两种构型之间的相变过程中热流的变化趋势. 随着 α 值的不断增大, 离子晶体从之字构型相变到直线构型. 在这个过程中, 热流逐渐增加. 当 $\alpha = 13$ 时, 离子晶体完成了从之字构型到直线构型的完全转变, 热流达到最大值. 然而, 随着 α 值的继续增大, 热流量开始逐渐下降, 但是下降速度较为缓慢. 这种现象出现的原因在于离子晶体从之字构型向直线构型相变的过程中, 离子之间的距离减小, 导致离子之间的相互作用力增强, 这使得离子晶体中的热流增大. 另外, 在相变点附近, 离子热运动产生的噪声增大, 这种噪声能够减小离子晶体中的非平衡性影响^[32], 也使得热流增强.

3.3 三维模型

在三维模型中, 将研究对象扩展到螺旋构型, 为此, 需要首先计算出在三维情况下离子晶体内的稳态热流和温度分布的表达式. 定义离子晶体中一共有 N 个离子, 且质量都为 m , 则系统的哈密顿量可以写为

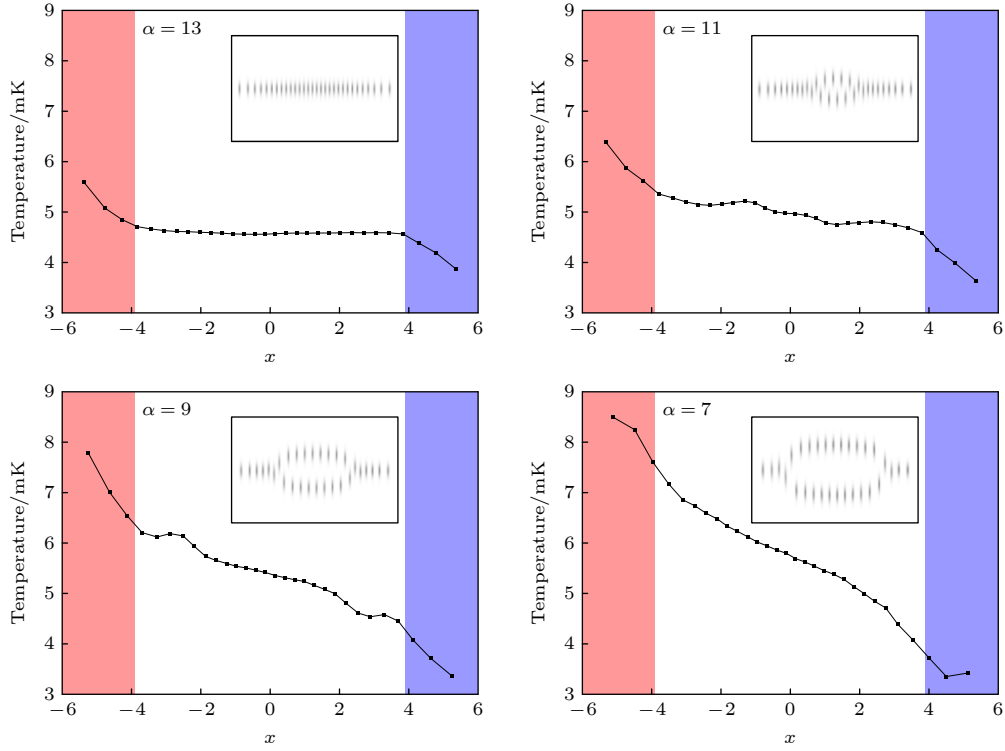


图 3 处于不同构型下的离子晶体在 x 方向上的温度分布 [26], 其中 α 表示结构相变的序参量. 两个颜色不同的区域中的离子和不同参数的激光相互作用. 插图表示离子晶体的构型

Fig. 3. Temperature distribution of ion crystals vs. the distance x in different configurations, where α represents the order parameter of structural phase transition, and the two regions with different colors represent ions interacting with the laser. The insets show the configurations of ion crystals. The figure is taken from Ref. [26].

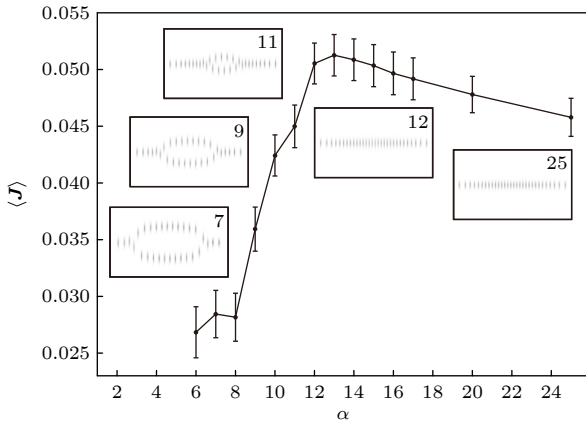


图 4 处于不同构型下的离子晶体的稳态热流 [26], 其中 α 表示结构相变的序参量. 插图表示离子晶体的构型

Fig. 4. Heat flux of ion crystals in different configurations, where α represents the order parameter of structural phase transition. The insets show the configurations of ion crystals. The figure is taken from Ref. [26].

$$H = \sum_{i=1}^N \left[\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{l \neq i}^N U(|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_l|) + V(\mathbf{q}_i) \right], \quad (33)$$

其中 $\mathbf{q} = (q_{x,i}, q_{y,i}, q_{z,i})$ 是三维空间中的坐标, $\mathbf{p} = (p_{x,i}, p_{y,i}, p_{z,i})$ 是三维空间中的动量. 定义 $\mu = (x,$

$y, z)$ 代表坐标轴上的 3 个方向. 两束激光分别与离子晶体两端的离子相互作用, 使离子晶体与两个温度不同的热库 L 和 R 相接触. 定义离子晶体中的第 1 个到第 N_L 个离子与热库 L 相接触, 第 N_R 个到第 N 个离子与热库 R 相接触, 其他的离子不与热库接触. 此时, 离子的运动方程可以写为

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{q}_{\mu,i}}{dt} = \frac{d\mathbf{p}_{\mu,i}}{m}, & i = 1, \dots, N, \\ \frac{d\mathbf{p}_{\mu,i}}{dt} = A_L + \sqrt{2D_{\mu,i}^L} \frac{dW_{\mu,i}^L}{dt}, & i = 1, \dots, N_L, \\ \frac{d\mathbf{p}_{\mu,i}}{dt} = g_{\mu,i} + \sum_{l \neq i}^N f_{\mu}^{il}, & i = N_L + 1, \dots, N_R - 1, \\ \frac{d\mathbf{p}_{\mu,i}}{dt} = A_R + \sqrt{2D_{\mu,i}^R} \frac{dW_{\mu,i}^R}{dt}, & i = N_R, \dots, N, \end{cases} \quad (34)$$

$$A_L = g_{\mu,i} + \sum_{l \neq i}^N f_{\mu}^{il} - \frac{\eta_{\mu,i}^L}{m} p_{\mu,i}, \quad (35)$$

$$A_R = g_{\mu,i} + \sum_{l \neq i}^N f_{\mu}^{il} - \frac{\eta_{\mu,i}^R}{m} p_{\mu,i}, \quad (36)$$

其中, $g_{\mu,i} = -\partial V(\mathbf{q}_i)/\partial q_{\mu,i}$ 表示离子受到 μ 方向的囚禁势场力, $f_{\mu}^{il} = -f_{\mu}^{li} = -\partial U(|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_l|)/\partial q_{\mu,i}$ 表示第 l 个离子施加在第 i 个离子上的力在 μ 方向上的投影, $\eta_{\mu,i}^{L,R}$ 表示热库 L, R 的摩擦系数, $D_{\mu,i}^{L,R}$ 表示热库的扩散系数. 假设热库的随机力 $\varepsilon_{\mu,i}^{L,R}$ 满足高斯噪声, 即 $\langle \varepsilon_{\mu,i}^{L,R}(t) \rangle = 0$, 那么 $D_{\mu,i}^{L,R}$ 与 $\varepsilon_{\mu,i}^{L,R}$ 的关系可以写为

$$\langle \varepsilon_{\mu,i}^{L,R}(t) \varepsilon_{\beta,l}^{L,R}(t') \rangle = 2D_{\mu,i}^{L,R} \delta_{\mu,\beta} \delta_{i,l} \delta(t-t'). \quad (37)$$

利用涨落耗散定理 [33], $D_{\mu,i}^{L,R}$ 与 $\eta_{\mu,i}^{L,R}$ 的关系可以写为

$$\eta_{\mu,i}^{L,R} = \frac{1}{2k_B T^{L,R}} \int_{-\infty}^{\infty} \langle \varepsilon_{\mu,i}^{L,R}(t) \varepsilon_{\mu,i}^{L,R}(t+\tau) \rangle d\tau = \frac{D_{\mu,i}^{L,R}}{k_B T^{L,R}}. \quad (38)$$

$$j_{B \rightarrow i} = \begin{cases} \sum_{\mu} \frac{p_{\mu,i}}{m} \left(-\frac{\eta_{\mu,i}^L}{m} p_{\mu,i} + \varepsilon_{\mu,i}^L(t) \right), & i = 1, \dots, N_L, \\ 0, & i = N_L + 1, \dots, N_R - 1, \\ \sum_{\mu} \frac{p_{\mu,i}}{m} \left(-\frac{\eta_{\mu,i}^R}{m} p_{\mu,i} + \varepsilon_{\mu,i}^R(t) \right), & i = N_R, \dots, N, \end{cases} \quad (42)$$

其中 $G(\lambda)$ 为满足以下条件的任意函数 [34]:

$$\delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}_l) - \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}_i) = \nabla \int_0^1 \frac{dG(\lambda)}{d\lambda} \delta[\mathbf{q} - G(\lambda)] d\lambda,$$

$$G(1) = \mathbf{q}_i, \quad G(0) = \mathbf{q}_l.$$

利用 (39) 式、(41) 式和 (42) 式, 可以写出连续性方程:

$$\frac{\partial \varepsilon(\mathbf{q}, t)}{\partial t} + \nabla j(\mathbf{q}, t) = \sum_{i=1}^N j_{B \rightarrow i}(t) \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}_i). \quad (43)$$

通过对 $j(\mathbf{q}, t)$ 积分, 可得系统的热流:

$$\mathbf{J}(t) = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i}{m} \varepsilon_i + \frac{1}{4} \sum_{i=1}^N \sum_{l \neq i}^N \frac{1}{m} (\mathbf{p}_i + \mathbf{p}_l) \mathbf{f}^{il}(\mathbf{q}_i + \mathbf{q}_l). \quad (44)$$

在稳态下, 系统的平均热流与热库流向系统的热流相等, 于是稳态热流可以写为

$$\langle \mathbf{J} \rangle = - \sum_{i=1}^N \langle \mathbf{q}_i j_{B \rightarrow i} \rangle = \frac{1}{m^2} \sum_k \sum_{\mu} \eta_{\mu,k}^{B_k} \langle \mathbf{q}_k p_{\mu,k}^2 \rangle - \frac{1}{m} \sum_k \sum_{\mu} \langle \mathbf{q} p_{\mu,k} \varepsilon_{\mu,k}^{B_k}(t) \rangle, \quad (45)$$

其中 k 代表所有与热库接触的离子的编号, B_k 代

接下来计算系统的稳态热流, 首先定义系统的能量密度为

$$\varepsilon(\mathbf{q}, t) = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i(t) \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}_i), \quad (39)$$

$$\varepsilon_i = \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + V(\mathbf{q}_i) + \frac{1}{2} \sum_{l \neq i}^N U(|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_l|). \quad (40)$$

根据 (34) 式和 (39) 式, 可以推出系统的热流密度 $j(\mathbf{q}, t)$ 和热库流向离子的热流密度 $j_{B \rightarrow i}$ 分别为 [28]

$$j(\mathbf{q}, t) = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i}{m} \varepsilon_i \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}_i) + \frac{1}{4} \sum_{i=1}^N \sum_{l \neq i}^N \frac{1}{m} (\mathbf{p}_i + \mathbf{p}_l) \mathbf{f}^{il} \times \int_0^1 d\lambda \frac{dG(\lambda)}{d\lambda} \delta[\mathbf{q} - G(\lambda)], \quad (41)$$

表与编号为 k 的离子接触的热库. 考虑 Novikov 定律 [31], 利用 (34) 式和 (37) 式, 稳态热流的表达式可化为

$$\langle \mathbf{J} \rangle = \frac{1}{m^2} \sum_k \sum_{\mu} \left[\eta_{\mu,k}^{B_k} \langle \mathbf{q}_i p_{\mu,k}^2 \rangle - m D_{\mu,k}^{B_k} \langle \mathbf{q}_k \rangle \right]. \quad (46)$$

文献 [28] 用上述方法计算了不同构型下离子晶体的热流. 在三维模型中, 由于运动模式增加了一维, 离子晶体的构型需要用另一种方式表达. 假设离子晶体处于直线构型时沿着 x 方向, 用 $\omega_{x,y,z}$ 表示离子在 3 个方向的宏运动频率, 并定义 $\omega_y = n_y \omega_x$, $\omega_z = n_z \omega_x$, 那么可以用 (n_y, n_z) 表示离子的构型. 图 5 显示了在文献 [28] 的计算参数下, n_y 和 n_z 取值不同时离子晶体结构相变的相图.

离子晶体在不同构型下的温度分布如图 6(a) 所示, 其中直线构型和之字构型的温度分布规律与二维模型的计算结果相似. 螺旋构型的温度分布相比之字构型更接近宏观状态下符合傅里叶定律的温度分布. 从图 6(b) 可以看出, 螺旋构型的离子晶体中温度梯度基本保持不变, 而不像之字构型中的温度梯度不断变化.

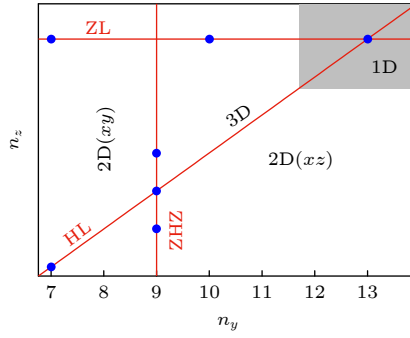


图 5 在不同 n_y 和 n_z 的取值下, 离子晶体结构相变的相图^[28]. 用 L (linear), Z (zigzag) 和 H (helical) 这三个字母代表离子晶体的直线构型、之字构型和螺旋构型. 沿 HL 线, (n_y, n_z) 值的变化会产生直线构型和螺旋构型之间的结构相变. 沿 ZL 线, (n_y, n_z) 值的变化会产生直线构型与之字构型之间的结构相变. 沿 ZHZ 线, (n_y, n_z) 值的变化会产生从之字构型到螺旋构型再到之字构型的结构相变. 图中的灰色区域代表直线构型. 在灰色区域之外, HL 线之上的区域代表处于 $x-y$ 平面上的之字构型, 在 HL 线之下的区域代表处于 $x-z$ 平面上的之字构型, HL 线上为螺旋构型

Fig. 5. Phase diagram of ion crystal structural phase transitions under different values of n_y and n_z . L (linear), Z (zigzag), and H (helical) represent the linear, zigzag, and helical configurations of ion crystal. ZL line, HL line and ZHZ line represent the zigzag-linear transition, helical-linear transition and zigzag-helical-zigzag transition. The gray region in the figure represents the linear configuration. Outside of the gray region, the region above the HL line represents the zigzag configuration lying in the $x-y$ plane, while the region below the HL line represents the zigzag configuration lying in the $x-z$ plane. The region on the HL line represents the helical configuration. The figure is taken from Ref. [28].

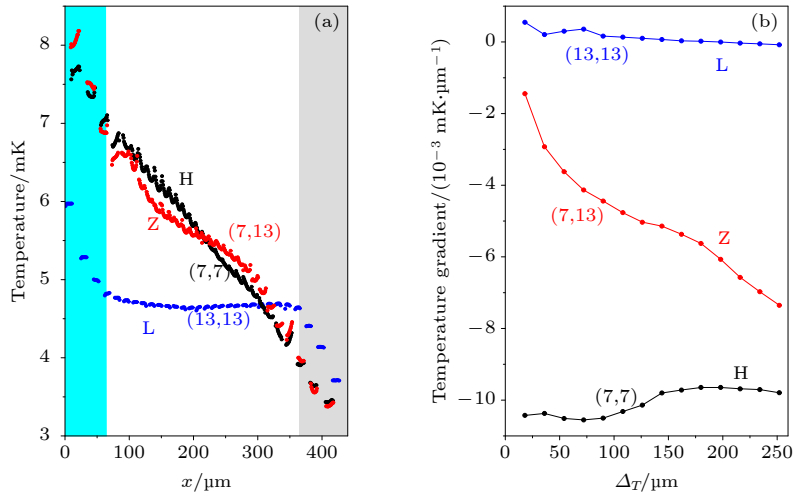


图 6 在离子数 $N = 30$ 的离子晶体中, 不同构型的离子晶体的稳态温度分布^[28], 图中 L 代表直线构型、Z 代表之字构型、H 代表螺旋构型, 图中的参数为 (n_y, n_z) : (a) 3 种不同构型的离子晶体在稳态下的温度分布, 两个颜色不同的区域中的离子和不同参数的激光相互作用; (b) 在稳态下, 3 种不同构型的离子晶体不与激光接触的部分的温度梯度分布, 其中 Δr 代表与系统中心的距离

Fig. 6. Temperature distribution of ion crystals with 30 ions with different configurations in stable state, where L represents linear configuration, Z represents zigzag configuration, and H represents helical configuration. The labels indicate the values of (n_y, n_z) : (a) Temperature distribution of three different configurations of ion crystals in stable state, where two different colors represent ions interacting with the laser; (b) distribution of temperature gradients in the parts of ion crystals with three different configurations that are not in contact with the laser in stable state, where Δr represents the distance from the center of the system. The figure is taken from Ref. [28].

在保持 $n_y = n_z$ 的前提下, 离子晶体可以直接从直线构型相变到螺旋构型, 而这两个构型之间的相变过程中的温度分布和热流与直线构型与之字构型之间的相变相似. 图 7 给出了当 (n_y, n_z) 的值沿着图 5 中的 ZHZ 线变化时离子晶体的温度分布和热流的变化情况. 从图 7 可以看出, 离子晶体无

论是处于 $x-z$ 平面的之字构型还是处于 $x-y$ 平面的之字构型, 其热流均小于处于螺旋构型时的热流. 此外, 还发现 n_y 和 n_z 的差值越大, 热流越小. 这是由于 y 和 z 两个维度之间的不平衡导致的非线性效应阻碍了热流的传导^[28].

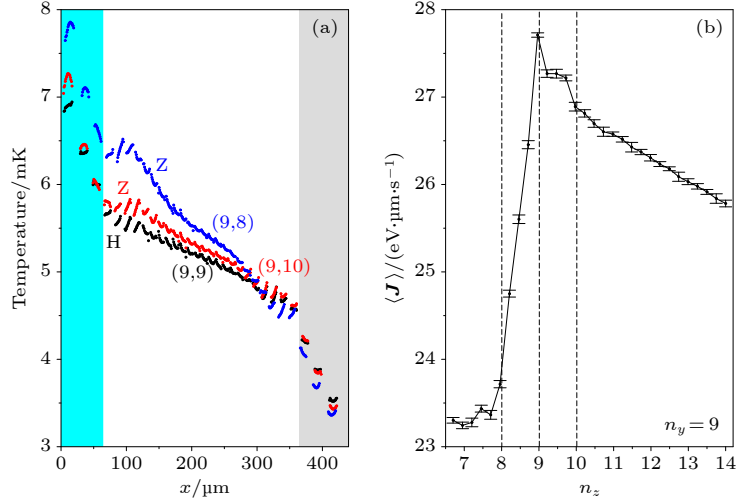


图 7 在离子数 $N = 30$ 的离子晶体中, 离子晶体从处于 xz 平面的之字构型相变到螺旋构型再相变到处于 xy 平面的之字构型的过程中的温度分布和热流变化^[28] (a) 离子晶体在结构相变过程中的 3 种典型的温度分布, 两个颜色不同的区域中的离子和不同参数的激光相互作用, 图中 Z 代表之字构型, H 代表螺旋构型, 图中的参数为 (n_y, n_z) ; (b) 在 n_y 保存不变时, n_z 不断增大的过程中的热流变化

Fig. 7. Temperature distribution and heat flux changes in an ion crystal with 30 ions during the process of zigzag-helical-zigzag transition where Z represents zigzag configuration and H represents helical configuration: (a) Three typical temperature distributions of the ion crystal during the structural phase transition process, where two different colors represent ions interacting with the laser; the labels indicate the values of (n_y, n_z) ; (b) changes in heat flux during the process of increasing n_z while keeping n_y constant. The figure is taken from Ref. [28].

4 热流与无序度之间的关系

在研究谐波晶体的热流中, 无序度是一个重要的因素, 通常无序度的变化会导致热流的变化. 本节将讨论一种能够解析计算离子晶体稳态热流的方法, 并使用该方法在离子晶体中引入无序度. 同时, 分析无序度对离子晶体中热流的影响.

首先, 需要写出系统的哈密顿量 H , 其表达式为 $H = H_S + H_E + H_{\text{int}}$, 由 3 个部分组成. 其中, 结构哈密顿量 H_S 和环境哈密顿量 H_E 分别表示不与热库接触和与热库接触的两类离子的哈密顿量, 相互作用哈密顿量 H_{int} 表示前面这两类离子之间相互作用的哈密顿量^[27,35]. 定义系统中有 N 个不与热库接触的离子, $\mathbf{X} = (q_1, \dots, q_{3N})^T$ 表示这些离子在 x, y, z 这 3 个方向上的坐标, 其中 T 表示矩阵转置. $\mathbf{P} = (p_1, \dots, p_{3N})^T$ 表示离子在 3 个方向的动量, 用 \mathbf{V} 表示离子之间的耦合矩阵. 于是系统的结构哈密顿量可以写为

$$H_S = \frac{1}{2m} \mathbf{P}^T \mathbf{P} + \frac{1}{2} \mathbf{X}^T \mathbf{V} \mathbf{X}. \quad (47)$$

另一方面, 用 (e) 表示与离子接触的热库, 每个热库与 $N^{(e)}$ 个离子接触. 假设离子晶体的两边

分别与热库 L 和 R 接触, 那么 $(e) = (L)$ 或 (R) . 于是系统的环境哈密顿量可以写为

$$H_E = \sum_e H_E^{(e)}, \quad (48)$$

$$H_E^{(e)} = \sum_{k=1}^{N^{(e)}} \left(\frac{p_k^{(e)2}}{2m_k^{(e)}} + \frac{m_k^{(e)} \omega_k^{(e)2} q_k^{(e)2}}{2} \right), \quad (49)$$

其中下标 k 表示受到热库影响的离子, $q_k^{(e)}$ 和 $p_k^{(e)}$ 表示在热库 (e) 的影响下离子的坐标和动量, $m_k^{(e)}$ 和 $\omega_k^{(e)}$ 表示离子的质量和振动频率. 用 $C_{ik}^{(e)}$ 表示与热库 (e) 接触的离子和未接触热库的离子之间的耦合系数, 于是系统的相互作用哈密顿量可以写为

$$H_{\text{int}} = \sum_e \sum_{i,k} C_{ik}^{(e)} q_i q_k. \quad (50)$$

根据文献 [35], 热库的性质由 ξ 和 ν 决定, 表达式分别为

$$\xi(\tau) = \int_0^\infty \sum_e \frac{I^{(e)}(\omega) \cos(\omega\tau)}{\omega} d\omega, \quad (51)$$

$$\nu(\tau) = \hbar \int_0^\infty \sum_e I^{(e)}(\omega) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T^{(e)}}\right) \cos(\omega\tau) d\omega. \quad (52)$$

假设热库的类型为 Ohmic 热库, 此时

$$I^{(e)}(\omega) = \frac{2}{\pi} \xi_0 P^{(e)} \frac{\omega \Lambda^2}{\Lambda^2 + \omega^2}, \quad (53)$$

其中 Λ 表示高频截止频率, ξ_0 表示弛豫率, $P^{(e)}$ 表示与热库 (e) 接触的离子在坐标轴上的投影. $\hat{G}(s)$ 是系统格林函数 (Green's function) 的拉普拉斯变换 (Laplace transform), 其表达式为

$$\hat{G}(s) = \frac{1}{s^2 m \mathbf{I} + V_R + 2s \hat{\xi}(s)},$$

$$\hat{\xi}(s) = \frac{\xi_0 (P^{(L)} + P^{(R)}) A}{s + \Lambda}, \quad V_R = V - 2\xi(0),$$

其中 \mathbf{I} 是单位矩阵. 系统稳态下的各种物理量都可通过 $\hat{G}(s)$ 来表示, 令 $\sigma^{(0,0)} = \langle \mathbf{X} \mathbf{X}^T \rangle$, $\sigma^{(1,1)} = \langle \mathbf{P} \mathbf{P}^T \rangle$, $\sigma^{(0,1)} = \text{Re} [\langle \mathbf{X} \mathbf{P}^T \rangle]$, 均可以表示为 [6,35]

$$\sigma^{n,l} = \int_0^\infty i^{l-n} (m\omega)^{n+l} \hat{G}(i\omega) \hat{\nu}(\omega) \hat{G}(-i\omega) d\omega, \quad (54)$$

其中 $\hat{\nu}(\omega)$ 是 $\nu(\omega)$ 的傅里叶变换, m 表示离子质量, 由 (54) 式可以推导出稳态热流的表达式 [35]:

$$\langle \mathbf{J} \rangle = \pi \int_0^\infty d\omega \text{tr} \left(\mathbf{I}^{(L)}(\omega) \hat{G}(i\omega) \mathbf{I}^{(R)}(\omega) \hat{G}(-i\omega) \right) \times \hbar \omega \left[\coth \left(\frac{\hbar \omega}{k_B T^{(L)}} \right) - \coth \left(\frac{\hbar \omega}{k_B T^{(R)}} \right) \right]. \quad (55)$$

通过对 (54) 式和 (55) 式进行积分, 就可以得到稳态下的热流等物理量. 文献 [27,36,37] 提供了一种方法, 能够解析地计算积分. 首先计算 $\hat{G}(s)$ 的 $6N$ 个特征值 $\{s_\varphi\}$ 和对应的特征向量 $\{r_\varphi\}$. 根据文献 [38], $\hat{G}(s)$ 可以被写成:

$$\hat{G}(s) = \sum_{\varphi=1}^{6N} \frac{s_\varphi}{s - s_\varphi} r_\varphi r_\varphi^T, \quad (56)$$

并且满足以下条件:

$$\hat{G}^{-1}(s_\varphi) r_\varphi = 0. \quad (57)$$

于是 (54) 式的积分可以被写为 [27]

$$\sigma^{n,l} = 2\xi_0 \text{Re} \left[\frac{m^{n+l}}{i^{l-n+1}} \sum_{\varphi,\beta=1}^{6N} \omega_\varphi^{n+l+1} \omega_\beta \frac{r_\varphi^T A \xi_\beta}{\omega_\varphi + \omega_\beta} r_\varphi r_\beta^T \right], \quad (58)$$

其中 $A = 2k_B (T^{(L)} P^{(L)} + T^{(R)} P^{(R)})$, 并且 $\omega_\varphi = -is_\varphi$.

(55) 式的积分可以被写为 [27]

$$\langle \mathbf{J} \rangle = 4\xi_0^2 \Delta \sum_{\varphi,\beta=1}^{6N} \frac{\omega_\varphi^3 \omega_\beta}{\omega_\varphi + \omega_\beta} \times \left(r_\varphi^T P^{(L)} \xi_\beta \right) \left(r_\beta^T P^{(R)} \xi_\varphi \right), \quad (59)$$

其中 $\Delta = -2ik_B (T^{(L)} - T^{(R)})$.

文献 [27] 采用上述方法计算了离子晶体在不同构型下的热导率 κ_L 与无序度间的关系, 其中 κ_L 的定义为 $\langle \mathbf{J} \rangle = \kappa_L (T^{(L)} - T^{(R)})/L$, L 为离子晶体的长度. 上述模型虽然是三维, 但是也能计算出一维 (直线构型) 和二维 (之字构型) 情况下离子晶体受到无序度的影响. 研究者在耦合矩阵 \mathbf{V} 中引入无序度, 具体操作如下: 随机选取离子晶体中的一半离子, 将其耦合矩阵对应值进行改变 $V_{ii} \rightarrow (1 \pm d)V_{ii}$, 其中 d 为表示无序度的参数. 在文献 [27] 中, 根据数值计算得到了以下结论: 无序度和离子晶体的长度均会对离子晶体的热导率产生影响. 对于一维情况 (直线构型), 当无序度 $d = 0.005$ 且离子晶体长度较小时, 热导率基本不受无序度的影响. 然而, 当晶体长度继续增加, 热导率出现了明显的下降. 对于无序度 $d = 0.02$ 的情况, 热导率受到无序度影响的离子晶体的长度的阈值相对于 $d = 0.005$ 减小了约一半, 并且当晶体长度足够大时, 热导率下降到了接近 0. 对于二维情况 (之字构型), 当 $d = 0.001$ 时, 热导率就明显受到了无序度的影响, 随着离子晶体长度的增加, 热导率会下降到接近 0. 当 d 的值提高到 0.02 时, 热导率会在更小的晶体长度处下降到接近 0. 对于三维情况 (螺旋构型), 热导率受到无序度的影响也很明显, 但是热导率没有出现下降到 0 的趋势.

除了离子晶体, 研究者也在其他低维系统对无序度进行了研究. 文献 [39] 在一维 FPU 晶体中探讨了无序度与热流之间的关系, 他们通过给晶体中的粒子引入不同质量来产生无序度. 数值模拟结果显示, 在高温或大尺寸的 FPU 晶体中, 无序度对热流的影响较弱. 只有在晶体尺寸较小且温度较低的情况下, 无序度才会对热流产生显著影响, 此时无序度越高, 热流越小. 文献 [6] 在二维和三维的谐波晶体中考察了无序度与热流的关系, 他们同样通过给粒子赋予不同的质量来产生无序度. 对于二维谐波晶体, 热流受到无序度和晶体尺寸的共同影响. 无序度或晶体尺寸越大, 热流越小. 当无序度和晶体尺寸达到一定值时, 热流会降低至接近零. 然而, 对于三维谐波晶体, 热流受无序度和晶体尺寸的影响较小. 尽管无序度和晶体尺寸的增加会使热流减小, 但热流并未呈现出趋于零的趋势.

5 总结

本文简要介绍了离子晶体中热传导的研究进

展,包括一维、二维和三维模型中温度分布和稳态热流的计算方法,以及在不同维度的离子晶体构型下热流与温度分布的特性.此外,还介绍了无序度对离子晶体热导性的影响.在没有引入无序的情况下,直线构型的离子晶体具有最高的导热性,其次是螺旋构型,最后是之字构型.产生这一现象的原因是:在离子晶体中运动模式不平衡导致的非线性效应会阻碍热流的传导.直线构型具有最少的运动模式(仅为一维),因此其导热性最佳.之字构型和螺旋构型都包含3个运动模式,它们之间的区别在于之字构型的3个运动模式均不相等,而螺旋构型中有两个维度的运动模式是相等的.因此,之字构型的导热性要小于螺旋构型.

在引入无序的情况下,无序会导致离子晶体的热导性下降,其中之字构型受到的影响最大.当离子晶体中的离子数量较少时(25个以下),直线构型受到影响最小;而当离子数量较多时(120个以上),螺旋构型受到的影响最小.如果将离子晶体中轴向运动的不平衡也视为一种无序,那么这也能够解释离子晶体中之字构型的导热率最低.

实验上已经成功构造出了离子晶体的多种构型,比如直线构型、之字构型^[40]、螺旋构型^[41]和带拓扑结的之字构型^[42].实验上也实现了离子晶体在不同构型之间的结构相变^[43],而且观察到温度对离子晶体构型的影响^[44,45].但是到目前为止,还没有实验对上述理论描述的稳态下离子晶体的热传导进行直接验证,主要原因在于:目前在离子阱系统中,用于测量离子温度的方法(扫描离子荧光线条型或测量离子边带谱线等)都不适用于稳态下的离子晶体.比如,在使用扫描离子荧光线条型的方法时,需要使用一束不断改变失谐的激光持续照射离子,这相当于离子晶体与一个额外的热库相接触并且破坏了稳态.而扫描离子边带谱线的方法虽然不会破坏稳态,但是只能准确测量运动能量低于20个声子数的离子体系,相对来说,稳态下离子体系至少会有几百个声子数.目前最有希望对稳态进行无破坏测量的技术是通过使用CCD拍摄离子照片来识别离子的温度^[46].在离子阱系统中已经有研究者在热传导方向进行了相关的实验,比如在文献^[47,48]中,用脉冲激光加热离子晶体中的一个离子,然后测量了热量在离子晶体中的传播(扩散、反射等)规律.

目前对有关低维系统热传导的理论已经在实验

室中有所应用,比如在离子阱中的协同冷却技术,这种技术能够在只对离子晶体中的一个离子进行冷却的情况下,降低离子晶体中所有离子的温度^[49,50].对于离子晶体,存在两种非常有效的冷却方法,分别是EIT (electromagnetically-induced-transparency) 冷却^[51]和偏振梯度冷却^[52].对离子晶体热传导的深入研究有助于更好地理解这几种冷却方法的冷却过程以及所能达到的极限冷却温度.在离子晶体以外的低维系统中,为了测量热流,研究者们发展出了多种实验技术.文献^[53]新发展出一种加工技术,能够制造尺寸小于100 nm的独立三维结构,通过应用这个技术,制造了绝缘热导体和热传感器,并测量了纳米线的热导率.文献^[54]发明了一种悬挂装置,这种装置能够用于探测无基底接触的纳米管中的热流.

在宏观系统中,根据变换热力学的理论,科学家们已经成功研发出能够控制热量流动方向的超构材料,例如热二极管.同样地,在低维系统中也能够制造出类似功能的微观热二极管.文献^[55]在实验中成功使用纳米管制造出了微米级别的热二极管,整流参数约为7%.而文献^[56]在理论上模拟了由15个离子构成的离子晶体组成的热二极管,他们让离子晶体处于直线构型,并调整每个离子所在的势阱,使势阱的频率依次递增.将处于此状态的离子晶体的左右两端与热库接触,理论计算结果显示,当左边的热库温度高于右边的热库时的热流与左边的热库温度低于右边热库时的热流存在明显的差异.理论上,这种热二极管的整流参数最高可达80%.

参考文献

- [1] Li B, Wang L, Hu B 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 223901
- [2] Dhar A, Roy D 2006 *J. Stat. Phys.* **125** 801
- [3] Dhar A 2008 *Adv. Phys.* **57** 457
- [4] Rieder Z, Lebowitz J L, Lieb E 1967 *J. Math. Phys.* **8** 1073
- [5] Dhar A, Dandekar R 2015 *Physica A* **418** 49
- [6] Chaudhuri A, Kundu A, Roy D, Dhar A, Lebowitz J L, Spohn H 2010 *Phys. Rev. B* **81** 064301
- [7] Saito K, Dhar A 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 040601
- [8] Dhar A 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 5882
- [9] Casher A, Lebowitz J L 1971 *J. Math. Phys.* **12** 1701
- [10] Rich M, Visscher W M 1975 *Phys. Rev. B* **11** 2164
- [11] Rubin R J, Greer W L 1971 *J. Math. Phys.* **12** 1686
- [12] Verheggen T 1979 *Commun. Math. Phys.* **68** 69
- [13] Hu B, Li B, Zhao H 2000 *Phys. Rev. E* **61** 3828
- [14] Wang P, Luan C Y, Qiao M, Um M, Zhang J, Wang Y, Yuan X, Gu M, Zhang J, Kim K 2021 *Nat. Commun.* **12** 233

- [15] Kielpinski D, Monroe C, Wineland D J 2002 *Nature* **417** 709
- [16] Leibfried D, Blatt R, Monroe C, Wineland D 2003 *Rev. Mod. Phys.* **75** 281
- [17] Schiffer J P 1993 *Phys. Rev. Lett.* **70** 818
- [18] Eckmann J P, Pillet C A, Rey-Bellet L 1999 *Commun. Math. Phys.* **201** 657
- [19] Ford G W, Kac M, Mazur P 1965 *J. Math. Phys.* **6** 504
- [20] Zürcher U, Talkner P 1990 *Phys. Rev. A* **42** 3278
- [21] Saito K, Takesue S, Miyashita S 2000 *Phys. Rev. E* **61** 2397
- [22] Dhar A, Shastry B S 2003 *Phys. Rev. B* **67** 195405
- [23] Segal D, Nitzan A, Hänggi P 2003 *J. Chem. Phys.* **119** 6840
- [24] Lepri S, Livi R, Politi A 2003 *Phys. Rep.* **377** 1
- [25] Lin G D, Duan L M 2011 *New J. Phys.* **13** 075015
- [26] Ruiz A, Alonso D, Plenio M B, del Campo A 2014 *Phys. Rev. B* **89** 214305
- [27] Freitas N, Martinez E A, Paz J P 2016 *Phys. Scr.* **91** 013007
- [28] Ruiz-García A, Fernández J J, Alonso D 2019 *Phys. Rev. E* **99** 062105
- [29] Gardiner C, Zoller P 2010 *Quantum Noise: A Handbook and Non-Markovian Quantum Stochastic Methods with Applications to Quantum Optics* (3rd Ed.) (Berlin: Springer) pp42–89
- [30] Walls D F, Milburn G J 2010 *Quantum Optics* (2nd Ed.) (Berlin: Springer) pp112–117
- [31] Novikov E A 1965 *Sov. Phys. JETP* **20** 1290
- [32] Plenio M B, Huelga S F 2008 *New J. Phys.* **10** 113019
- [33] Kubo R 1966 *Rep. Prog. Phys.* **29** 255
- [34] Piccirelli R A 1968 *Phys. Rev.* **175** 77
- [35] Martinez E A, Paz J P 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 130406
- [36] Freitas N, Paz J P 2014 *Phys. Rev. E* **90** 042128
- [37] Freitas N, Paz J P 2014 *Phys. Rev. E* **90** 069903
- [38] Tisseur F, Meerbergen K 2001 *SIAM Rev.* **43** 235
- [39] Li B, Zhao H, Hu B 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 63
- [40] Birkel G, Kassner S, Walther H 1992 *Nature* **357** 310
- [41] Dubin D H E, O’Neil T M 1999 *Rev. Mod. Phys.* **71** 87
- [42] Pyka K, Keller J, Partner H L, Nigmatullin R, Burgermeister T, Meier D M, Kuhlmann K, Retzker A, Plenio M B, Zurek W H, del Campo A, Mehlstäubler T E 2013 *Nat. Commun.* **4** 2291
- [43] Yan L L, Wan W, Chen L, Zhou F, Gong S J, Tong X, Feng M 2016 *Sci. Rep.* **6** 21547
- [44] Li J, Yan L L, Chen L, Liu Z C, Zhou F, Zhang J Q, Yang W L, Feng M 2019 *Phys. Rev. A* **99** 063402
- [45] Liu Z C, Chen L, Li J, Zhang H, Li C B, Zhou F, Su S L, Yan L L, Feng M 2020 *Phys. Rev. A* **102** 033116
- [46] Srivathsan B, Fischer M, Alber L, Weber M, Sondermann M, Leuchs G 2019 *New J. Phys.* **21** 113014
- [47] Ramm M, Pruttivarasin T, Häffner H 2014 *New J. Phys.* **16** 063062
- [48] Mao Z C, Xu Y Z, Mei Q X, Zhao W D, Jiang Y, Cheng Z J, Chang X Y, He L, Yao L, Zhou Z C, Wu Y K, Duan L M 2022 *Phys. Rev. A* **105** 033107
- [49] Zuo Y N, Han J Z, Zhang J W, Wang L J 2019 *Appl. Phys. Lett.* **115** 061103
- [50] Li M, Zhang Y, Zhang Q Y, Bai W L, He S G, Peng W C, Tong X 2023 *Chin. Phys. B* **32** 036402
- [51] Qiao M, Wang Y, Cai Z, Du B, Wang P, Luan C, Chen W, Noh H R, Kim K 2021 *Phys. Rev. Lett.* **126** 023604
- [52] Joshi M K, Fabre A, Maier C, Brydges T, Kiesenhofer D, Hainzer H, Blatt R, Roos C F 2020 *New J. Phys.* **22** 103013
- [53] Tighe T S, Worlock J M, Roukes M L 1997 *Appl. Phys. Lett.* **70** 2687
- [54] Kim P, Shi L, Majumdar A, McEuen P L 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 215502
- [55] Chang C W, Okawa D, Majumdar A, Zettl A 2006 *Science* **314** 1121
- [56] Simón M A, Martínez-Garaot S, Pons M, Muga J G 2019 *Phys. Rev. E* **100** 032109

SPECIAL TOPIC—Heat conduction and its related interdisciplinary areas

Research progress of heat transport in trapped-ion crystals*Li Ji¹⁾ Chen Liang^{2)†} Feng Mang^{1)2)‡}1) (*Guangzhou Institute of Industrial Technology, Guangzhou 511458, China*)2) (*Innovation Academy for Precision Measurement Science and Technology, CAS, Wuhan 430071, China*)

(Received 28 October 2023; revised manuscript received 23 November 2023)

Abstract

Heat transport is one of the most important research topics in physics. Especially in recent years, with the in depth study on single-molecule devices, heat transport in low-dimensional (i.e. one- and two-dimensional) microsystems has received more and more attention. In the research of Fermi-Pasta-Ulam crystals and harmonic crystals, it is widely accepted that heat conduction in low-dimensional system does not follow Fourier's law. Due to the lack of the equipment that can directly measure heat current, it has been proven to be a challenging task to carry out relevant experiments. Ion crystal in ion trap is located in vacuum and does not exchange energy with the external environment. The crystal structure and temperature can be accurately controlled by electric field and optical field, providing an ideal experimental platform for studying thermal conduction in low-dimensional crystals in classical state or quantum state. Herein we summarize the recent theoretical research on thermal conduction in ion crystals, including the methods of calculating temperature distribution and steady-state heat current in one-dimensional, two-dimensional, and three-dimensional models, as well as the characteristics of heat current and temperature distribution under different ion crystal configurations. Because the nonlinear effect caused by the imbalance among three dimensions hinders the heat transport, the heat current in ion crystal is largest in the linear configuration while smallest in the zig-zag configuration. In addition, we also introduce the influence of disorder on the thermal conductivity of ion crystal, including the influence on the heat current across various ion crystal configurations such as the linear, the zig-zag and the helical configuration. Notably, the susceptibility of ion crystal to disorder increases with crystal size increasing. Specifically, the zig-zag ion crystal configuration exhibits the largest susceptibility to disorder, whereas the linear configuration is least affected. Finally, we provide a concise overview of experimental studies of the heat conduction in low-dimensional systems. Examination of the heat conduction in ion crystal offers a valuable insight into various cooling techniques employed in ion trap systems, including sympathetic cooling, electromagnetically induced transparency cooling, and polarization gradient cooling. Just like macroscopic thermal diodes made by thermal metamaterials, it is possible that the microscopic thermal diodes can also be made in low-dimensional systems.

Keywords: ion trap, ion crystals, heat transport, structural phase transition**PACS:** 37.10.Ty, 05.60.-k, 05.70.Fh**DOI:** [10.7498/aps.73.20231719](https://doi.org/10.7498/aps.73.20231719)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. U21A20434), the Key Laboratory of Guangzhou, China (Grant No. 202201000010), and the Science and Technology Project of Guangzhou, China (Grant No. 202201011727).

† Corresponding author. E-mail: liangchen@wipm.ac.cn

‡ Corresponding author. E-mail: mangfeng@wipm.ac.cn



基于离子阱中离子晶体的热传导的研究进展

李冀 陈亮 冯芒

Research progress of heat transport in trapped-ion crystals

Li Ji Chen Liang Feng Mang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 73, 033701 (2024) DOI: 10.7498/aps.73.20231719

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231719>

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

两量子比特系统中相互作用对高阶奇异点的影响

High-order exceptional point in a quantum system of two qubits with interaction

物理学报. 2022, 71(13): 130303 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20220716>

量子计算与量子模拟中离子阱结构研究进展

Advances in the study of ion trap structures in quantum computation and simulation

物理学报. 2022, 71(13): 133701 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220224>

氟化镁高压萤石结构稳定性及热物性的数值模拟

Numerical prediction of structural stability and thermodynamic properties for MgF_2 with fluorite-type structure under high pressure

物理学报. 2020, 69(15): 156202 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200289>

方镁石高压结构预测和高温结构稳定性研究

High-pressure structure prediction and high-temperature structural stability of periclase

物理学报. 2019, 68(12): 126201 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190204>

二维材料热传导研究进展

Recent progresses of thermal conduction in two-dimensional materials

物理学报. 2020, 69(19): 196602 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200709>

毫秒时间分辨同步辐射X射线衍射和高压快速加载装置及应用

Millisecond time-resolved synchrotron radiation X-ray diffraction and high-pressure rapid compression device and its application

物理学报. 2022, 71(10): 100702 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212360>