Kvantum termodinamika

Diósi Lajos

MTA Wigner FK
Budapest

2014. febr. 4.

Miért van 1 qubitnek termodinamikája?

- Termodinamika: végtelen homogén rendszerek egyensúlyban
- Gibbs kanonikus állapot: véges nagy részrendszer
- Miért igaz Gibbs állapot 1 qubitre is?

Gyors válasz: Így csinálják a klasszikus ideális gáz atomjai is!

QuOszcillátor/Qubit: Jelölések

Fock: közös formalizmus

QO: $|0\rangle, |1\rangle, \ldots, |n\rangle, |n+1\rangle, \ldots$ $\quad \hat{a} = \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{n}\, |n\rangle\langle n+1|$ $\quad [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$

QB: $|0\rangle, |1\rangle$ $\quad \hat{a} = |0\rangle\langle 1|$ $\quad \{\hat{a}, \hat{a}^\dagger\} = 1$

Betöltési szám: $\hat{n} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$; Hamilton:

$$\hat{H} = \epsilon \hat{n}; \quad \hat{H}\,|n\rangle = n\epsilon\,|n\rangle\,; \quad n = (0,1), 2, 3, \ldots,$$

Gibbs egyensúlyi állapot sűrűségmátrixa T hőmérsékleten:

$$\hat{\rho}_\beta = \mathcal{N} \mathrm{e}^{-\beta \hat{H}} \qquad \mathcal{N} = 1/\operatorname{tr} \hat{\rho}_\beta \qquad \beta = 1/k_B T$$

Kvantum entrópia, kvantum információs entrópia:

$$S(\hat{\rho}_\beta) = -\operatorname{tr}(\hat{\rho}_\beta \log \hat{\rho}_\beta)$$

Pauli: qubit formalizmus

$$\hat{\sigma}_x = \hat{a} + \hat{a}^\dagger, \quad \hat{\sigma}_y = -i(\hat{a} - \hat{a}^\dagger), \quad \hat{\sigma}_z = 1 - 2\hat{a}^\dagger \hat{a}$$

Termális qubit

Emlékezz: $\hat{n} = \hat{a}^\dagger \hat{a} = |1\rangle\langle 1|$ és $\hat{H} = \epsilon\hat{n} = \epsilon|1\rangle\langle 1|$.
Termalizáció: egyetlen qubitre is!

$$\hat{\rho}_\beta = \mathcal{N}\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}} = (1+\mathrm{e}^{-\beta\epsilon})^{-1}\left(|0\rangle\langle 0| + \mathrm{e}^{-\beta\epsilon}|1\rangle\langle 1|\right) \ .$$

$E = \mathrm{tr}(\hat{H}\hat{\rho}_\beta)$ energia és $S = -\,\mathrm{tr}(\hat{\rho}_\beta \log \hat{\rho}_\beta)$ kvantum entrópia:

$$\begin{aligned} E &= \epsilon(1+\mathrm{e}^{\beta\epsilon})^{-1}\,, \qquad 0 \le E \le \tfrac{1}{2}\epsilon \\ S &= \left(1+\mathrm{e}^{\beta\epsilon}\right)^{-1}\log\left(1+\mathrm{e}^{\beta\epsilon}\right) + \left(1+\mathrm{e}^{-\beta\epsilon}\right)^{-1}\log\left(1+\mathrm{e}^{-\beta\epsilon}\right) \end{aligned}$$

Termodinamikában $S(E)$ hasznos, kifejezzük:

$$S(E) = -\frac{\epsilon - E}{\epsilon}\log\frac{\epsilon - E}{\epsilon} - \frac{E}{\epsilon}\log\frac{E}{\epsilon} \ .$$

Legyen $S_{\mathrm{th}}(E) = (k_B \ln 2)S(E)$, teljesül a termodinamika 1 qubitre:

$$\frac{\mathrm{d}S_{\mathrm{th}}(E)}{\mathrm{d}E} = \frac{1}{T} \ .$$

Információs és termodinamikai entrópia

$$S_{\mathrm{th}}[Cal/K] = (k_B \ln 2) S[bit]$$

Láttuk 1 qubitre, igazolhatjuk N független qubitre, egyensúlyi kvantum rendszerekre ...

- S_{th} objektív termodinamikai mennyiség
- $S(\hat{\rho})$ kvantum adat tömöríthetőség mértéke, látszólag szubjektív

Hogy lehetnek azonosak? Ember tömörít adatot, a természet nem ...
De igen!
Statisztikus fizika: Egy (kvantum)rendszer termikus egyensúlyi állapota egyúttal maximálisan véletlenszerű, maximális entrópiájú.
A $\hat{\rho}_\beta = \mathcal{N} \exp(-\beta \hat{H})$ állapot rögzített $E = \mathrm{tr}(\hat{H}\hat{\rho})$ energia mellett éppen maximalizálja az $S(\hat{\rho}) = -\mathrm{tr}(\hat{\rho} \log \hat{\rho})$ információs entrópiát.
A természet a $\hat{\rho}_\beta$ egyensúlyi állapottal éppen azt az állapotot választja, amely adat veszteség nélkül tovább nem tömöríthető. A természet adattömörít!

Landauer elv

$$S_{\mathrm{th}}[kal/fok] = (k_B \ln 2) S[bit]$$

Vizet felmelegítünk szobahőmérsékleten 1 fokkal. Kb. mekkora az a vízmennyiség, amelyre az információs entrópia növekménye csak 1 terabájt?

Válasz: 1 g-hoz 4.186 J hő kell, így $S_{\mathrm{th}} = 4.186/300 \sim 10^{-2}$ J/K. Mivel $k_B = 1.381 \times 10^{-23}$ J/K, így $S \sim 10^{21}$ bit. Egy terabyte 8×10^{12} bit, tehát kb. 10^{-9} g víz S-e emelkedik 1 terabájttal.

Landauer: Egy qubit információ törlése legkevesebb $k_B T \ln 2$ hőtermeléssel jár.

Érvelés: Kezdetben legyen 1 qubit $\hat{\rho} = \hat{I}/2$ állapotban független a T hőmérsékletű környzettől. Reverzibilis kölcsönhatással töröljük: $\hat{\rho} \to |0\rangle\langle 0|$. A qubit információs entrópia változása -1 bit. A környezeté $+1$ bit kell legyen, ami $k_B \ln 2$ termodinamikai entrópia növekedést jelent. Ehhez $k_B T \ln 2$ hőt kellett kelteni benne. (Irreverzibilis k.h. esetén még többet.)

Kvantum termalizáció dinamikája

$$\hat{\rho} \otimes \hat{\rho}_{\beta\mathrm{HEATBATH}} \longrightarrow \hat{\rho}_\beta \otimes \hat{\rho}_{\beta\mathrm{HEATBATH}}$$

$$\hat{\rho} \longrightarrow \hat{\rho}_\beta$$

Termalizáció mászter egyenlete (Lindblad szerkezet):

$$\frac{\mathrm{d}\hat{\rho}}{\mathrm{d}t} = -\frac{i}{\hbar}\epsilon[\hat{a}^\dagger\hat{a}, \hat{\rho}] + \Gamma\left(\hat{a}\hat{\rho}\hat{a}^\dagger - \tfrac{1}{2}\{\hat{a}^\dagger\hat{a}, \hat{\rho}\}\right) + \mathrm{e}^{-\beta\epsilon}\Gamma\left(\hat{a}^\dagger\hat{\rho}\hat{a} - \tfrac{1}{2}\{\hat{a}\hat{a}^\dagger, \hat{\rho}\}\right)$$

rev. Hamilton + irrev. spontán bomlás + irrev. termikus gerjesztés
Bomlás-gerjesztés versenye $\Rightarrow$ termikus egyensúlyi állapot

$$\hat{\rho}_\beta = \mathcal{N}\mathrm{e}^{-\beta\epsilon\hat{a}^\dagger\hat{a}} = \mathcal{N}\left(|0\rangle\langle 0| + e^{-\beta\epsilon}|1\rangle\langle 1|\right)$$

Helyettesítsd be mászter egyenlet jobboldalán, zérust kapsz!

Fock előnye: Ugyanaz a mászter egyenlet termalizál qubitet és oszcillátort!

Termális qubit külső munkával

Hőcsere qubit és hőtartály közt: épp most tanultuk.
Munka végzés qubiten: most jön!
Kulcselem: időben változtatjuk a Hamiltont: $\hat{H} \to \hat{H}(t)$.
Hő és munka elválik $E(t) = \mathrm{tr}\left(\hat{H}(t)\hat{\rho}(t)\right)$ energiában:

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}t} = \mathrm{tr}\left(\frac{\mathrm{d}\hat{H}}{\mathrm{d}t}\hat{\rho}\right) + \mathrm{tr}\left(\hat{H}\frac{\mathrm{d}\hat{\rho}}{\mathrm{d}t}\right) \equiv \frac{\mathrm{d}W}{\mathrm{d}t} + \frac{\mathrm{d}Q}{\mathrm{d}t}$$

$\dot{W}$: teljesítmény, $\dot{Q}$: hőáram (minkettő 'befelé').
Példa: $\frac{1}{2}$-spin időben változó $\mathcal{H}(t)$ mágneses térben.
$\hat{H}(t) = -\frac{1}{2}\mathcal{H}(t)\hat{\sigma}_z \Longrightarrow \dot{W} = -\frac{1}{2}\dot{\mathcal{H}}\,\mathrm{tr}(\hat{\sigma}_z\hat{\rho}_\beta)$. Mutassuk meg, hogy $\dot{\mathcal{H}}$ okozta $\dot{W}$ equivalens mechanikai munkával !
Érvelés: Legyen $\mathcal{H}$ időben állandó és változzon térben. Mozgassuk a qubitet a z hely szerint, ekkor $E = -\frac{1}{2}\mathcal{H}(z)\,\mathrm{tr}(\hat{\sigma}_z\hat{\rho})$ potenciálban $-\mathrm{d}E/\mathrm{d}z$ erő ellen dolgozunk $\dot{z}\mathrm{d}E/\mathrm{d}z$ teljesítménnyel, ami éppen $\dot{W}$.

Qubit izotermák és adiabaták

Legyen két paramétere az egyensúlyi kvantum állapotnak β és $\mathcal{H}$:

$$\hat{\rho}_{\beta,\mathcal{H}} = \mathcal{N}\exp\left(\tfrac{1}{2}\beta\mathcal{H}\hat{\sigma}_z\right) \qquad (\hat{H} = -\tfrac{1}{2}\mathcal{H}\hat{\sigma}_z)$$

$$E = \mathrm{tr}(\hat{H}\hat{\rho}_{\beta,\mathcal{H}}) = -\tfrac{1}{2}\mathcal{H}\sinh(\tfrac{1}{2}\beta\mathcal{H})$$

Izoterma: $\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}_{\beta,\mathcal{H}(t)}$ (állandó termalizáció, ha $\dot{\mathcal{H}}/\mathcal{H} \ll \Gamma\mathrm{e}^{-\beta\mathcal{H}}$).

$$\dot{W} = -\tfrac{1}{2}\dot{\mathcal{H}}\sinh(\tfrac{1}{2}\beta\mathcal{H}) \qquad \dot{Q} = -\tfrac{1}{4}\beta\mathcal{H}\ \dot{\mathcal{H}}\cosh(\tfrac{1}{2}\beta\mathcal{H})$$

Adiabata: $\hat{\rho}(t) \equiv \hat{\rho}_{\beta,\mathcal{H}(0)}$ (nincs termalizáció csak Hamiltoni dinamika, triviális, mert $[\hat{H},\hat{\rho}_{\beta,\mathcal{H}}] = 0$). Mivel $\hat{\rho}$ állandó, $\dot{Q} = 0$. Csak munkavégzés van:

$$\dot{W} = -\tfrac{1}{2}\dot{\mathcal{H}}\sinh(\tfrac{1}{2}\beta\mathcal{H}(0)).$$

Normális rendszer M mágnesezettsége és E energiája független.
A qubit állapottere degenerált: $\hat{H} = -\mathcal{H}\hat{M}$ ahol $\hat{M} = \tfrac{1}{2}\hat{\sigma}_z$:

$$E = -\mathcal{H}M$$

Egyqubites Carnot gép

Klasszikus Carnot gép: adiabata-izoterma-adiabata-izoterma körfolyamat, mely forró T_h és hideg $T_c \langle T_h$ hőtartály között reverzibilisen visz át Q hőt, eközben L külső munkát végez (hőerőgép) vagy igényel (hűtőgép). Hatásfokuk:

$$\eta = \frac{L}{Q} = 1 - \frac{T_c}{T_h}$$

Egyetlen qubit is alkothat Carnot gépet.
Analógia: $E = -pV \Rightarrow -\mathcal{H}M$

Gyakorlati jelentőség? A természet biztosan nem így hűt/munkál.
Elméleti jelentőség? Konstans információs entrópia mellett dolgozik.

Alternatíva: kétqubites folyamatos, nem-ciklikus hűtőgép/hőerőgép.

Qubit hűtés adiabatikus lemágnesezéssel

- Nuclear $\frac{1}{2}$-spin T hőtartályban, $\mathcal{H}$ mágneses térben:

$$\hat{\rho} = \mathcal{N} \exp\left(-\mathcal{H}/k_B T\right) = \hat{\rho}_{T,\mathcal{H}}$$

- Hirtelen lecsökkentjük a mágneses teret $\mathcal{H}'$-re ($\mathcal{H}' \ll \mathcal{H}$):

$$\hat{\rho} = \mathcal{N} \exp\left(-\mathcal{H}'/k_B T'\right) = \hat{\rho}_{T',\mathcal{H}'}$$

  alakú, de ugyanaz kell legyen, mint előbb.

- Mi történt a spin hőmérsékletével?

$$\hat{\rho}_{T',\mathcal{H}'} \text{ akkor azonos } \hat{\rho}_{T,\mathcal{H}} - \text{val, ha}$$

$$T' = \frac{\mathcal{H}'}{\mathcal{H}} T \ll T.$$

- Spin elkezd hőt felvenni a T hőtartályból.