

量子相干在量子热力学中演化规律的研究

丁峰, 丁玉强, 韩森, 胡雪元*

山东大学信息科学与工程学院, 山东 青岛 266237

摘要 在量子热力学的研究中,量子相干扮演着重要的角色。基于本课题组的研究结果,分别从热力学操作与增强热力学操作间的相干鸿沟猜想及关联催化相干放大猜想两个角度,讨论了能级之间的量子相干在热力学中的奇特行为。首先,通过研究单模热力学操作,进一步发掘了相干转化在划分量子热力学操作中的作用。其次,通过研究关联催化协变操作,发现关联催化在含有相干的量子热力学中存在尚未发掘的作用。研究结果对进一步完善量子热力学第二定律具有重要意义。

关键词 量子光学; 量子信息理论; 量子热力学; 能级之间的量子相干; 热力学操作; 非对称性; 催化

中图分类号 O436

文献标志码 A

doi: 10.3788/CJL202148.1212003

1 引言

量子热力学是为了将经典热力学结果拓展到量子领域而产生的新兴学科,主要研究内容是基于量子力学的基本假定,借助量子信息研究领域的新工具,在微观视角下重新审视和解读热力学三大定律^[1]。其中,关于量子热力学第二定律的研究成果最为丰富^[2-4],研究者解释并量化了很多情形下经典量子态在热力学操作下的态转化能力。但是该领域仍然存在一些难以解决的开放问题,比如量子相干在热力学中的作用。量子相干是基于量子叠加的性质,是量子信息与量子计算领域不可或缺的资源。在热力学中,相干是基于热力学操作的协变性,因此具有一些独特的性质。本文首先简单介绍了热力学操作与量子相干,之后主要依照本课题组先前的结果^[5-6],从两个方面揭示了量子相干在热力学演化中的特殊行为。

热力学操作^[1]是在保持热库与主系统能量守恒的前提下对主系统的量子操作。近年来,研究者在不同设定下获得了许多基于热力学操作的对称态量子热力学第二定律的重要研究成果,例如无催化的情形^[4]、无关联催化的情形^[2]和关联催化的情形^[7]。尽管热力学操作在物理上有明确含义,但理论分析

难度较大。Ćwikliński 等^[3]以满足更弱条件的增强热力学操作来简化数学分析。增强热力学操作是在布居数演化上等价于通常定义的热力学操作,但是在高维系统中,增强热力学操作与热力学操作在相干转化能力上的差异较大。本课题组提出了热力学操作的一个严格子集——单模热力学操作^[5]。首先,对于单量子比特系统,我们证明了单模热力学操作与增强热力学操作具有相同的相干转化能力,但对于高维系统,例如三能级系统,单模热力学操作与增强热力学操作在相干转化能力上的差异较大。单模热力学操作与热力学操作的相干鸿沟是证明增强热力学操作与热力学操作间相干鸿沟猜想的关键。其次,我们对相干合并任务进行了讨论,推导出了增强热力学操作下相干合并可达到的上界,同时证明了单模热力学操作也可到达该上界。研究结果有助于探索热力学操作的能力。

催化是量子资源理论中的一个概念^[7-15],即通过添加有资源的量子态来增强量子操作但不改变所添加量子态的行为。在非对称性或量子相干的资源理论中,存在一个相干不可传播定理^[15-16],即非相干态不能通过关联催化协变操作来获得相干资源。热力学操作是一种特殊的协变操作(也称为平移不变操作或对称操作)。本课题组证明了当催化系统是

收稿日期: 2021-02-24; 修回日期: 2021-04-08; 录用日期: 2021-05-06

基金项目: 国家自然科学基金(11774205)、山东大学青年学者未来计划

*E-mail: xyhu@sdu.edu.cn

纯态时,任意维度的不可传播定理依旧成立。同时,本课题组研究发现,对于量子比特系统,若主系统存在少量的相干态,这些相干态可以被关联催化对称操作放大,进而推导出了关联催化对称操作在量子态转化能力方面近似等价于整个量子比特操作集合。我们还发展了一套关于关联催化相干研究的数值方法^[6]。在前人的研究中,催化的热力学操作较少聚焦于相干行为,本课题组的研究结果对于研究关联催化下量子热力学第二定律有着重要意义。

2 量子热力学与量子相干概述

热力学操作^[1,4,17] (TO)是基于主系统与热库(处于热平衡的 Gibbs 态)能量守恒对主系统的有效操作。主系统的能级结构在本文取于有限维的 Hilbert 空间。热库的能级结构不受限制,一般可以将其设置为无限的离散维度的 Hilbert 空间。

下面介绍量子热力学在量子资源理论下的一些设定。首先作为量子资源理论中的自由态,热库的 Gibbs 态(即热平衡态)是热力学操作中的不动点,可表示为

$$\gamma = \exp(-\beta H_B) / \text{Tr}[\exp(-\beta H_B)], \quad (1)$$

式中: $\gamma \stackrel{\text{def}}{=} 1/(\kappa_B T)$ 为逆温度,其中 κ_B 为 Boltzmann 常数, T 为热库的温度; Tr 为求迹运算; H_B 为热库的哈密顿量。量子力学中封闭系统的演化满足么正性,而热力学操作一般是针对开放系统且能量守恒,因此热力学操作在物理上可被描述为基于主系统与热库能量守恒的局域有效操作,可表示为

$$\epsilon_{\text{TO}}(\rho_S) = \text{Tr}_B[U(\rho_S \otimes \gamma_B)U^\dagger], \quad (2)$$

式中: $[U, H_S + H_B] = 0$, U 为整体系统的么正算符, H_S 为主系统的哈密顿量; ϵ_{TO} 为热力学操作; Tr_B 为对 B 系统取偏迹; \otimes 为张量积运算; U^\dagger 为对么正算符取共轭转置; ρ_S 为主系统的初态; γ_B 为热库的 Gibbs 态; E 表示热库; S 表示主系统。主系统与热库的能量守恒体现在么正操作 U 与整体哈密顿量的对易上。容易验证,热力学操作保持 Gibbs 态不变。在更广义的开放系统演化中,可以得到增强热力学操作^[18] (EnTO)。不同于 TO,EnTO 除了保持 Gibbs 态不变外,还满足时间演化不变,即

$$\begin{cases} \epsilon_{\text{EnTO}}(\gamma_S) = \gamma_S, \forall t \in \mathbb{R} \\ \epsilon_{\text{EnTO}}^\circ U_t = U_t \epsilon_{\text{EnTO}}, \forall t \in \mathbb{R} \end{cases}, \quad (3)$$

式中: ϵ_{EnTO} 为增强热力学操作; γ_S 为系统的 Gibbs 态; $^\circ$ 表示量子操作的级联; t 为时间; $U_t(\cdot) := \exp(-iHt) \cdot \exp(iHt)$ 表示系统在其自身哈密尔

顿量下的自由演化,其中 H 为主系统的哈密顿量。容易证明,TO 亦满足(3)式^[2-3],因此时间演化不变条件相对于能量守恒条件更弱。这是由于时间演化不变性仅在封闭系统演化(即么正演化)下等价于能量守恒性。此外,时间演化不变性在数学上被描述为量子信道的边界条件,因此 EnTO 的性质较 TO 更容易表征。

为了研究并比较不同热力学操作,研究者提出了操作锥(operation cone)的概念^[19]。对于一个给定的量子态,TO 锥 $C^{\text{TO}}(\rho)$ 被定义为量子态 ρ 经过 TO 后可能得到的所有态的集合。其他热力学操作的锥也有类似的定义。

对于处于量子态 ρ 的系统,当占据能级 E_k 的概率 $p_k = \langle k | \rho | k \rangle$ 组成的向量为 \mathbf{p} 时(k 为能级编号),增强热力学操作 ϵ_{EnTO} 引发的布居数演化过程可以被表示为

$$\rho = \epsilon_{\text{EnTO}}(\rho_0) \Rightarrow \mathbf{p} = \mathbf{G}\mathbf{p}_0, \quad (4)$$

式中: ρ_0 为初态; \mathbf{p}_0 为初始布居数分布; \mathbf{G} 为从能级 E_k 到 $E_{k'}$ 的转移概率的矩阵,其矩阵元 $G_{k'k} = \langle k' | \epsilon_{\text{EnTO}}(|k\rangle\langle k|) | k' \rangle$ 。 \mathbf{G} 被称为 Gibbs 随机矩阵(Gibbs-stochastic matrices),并且所有 Gibbs 矩阵均可被 TO 实现^[3]。因此当仅考虑布居数演化时,EnTO 等价于 TO。

在经典物理中,Noether 定理建立了守恒量 and 对称性之间的联系,即每种对称性都对应守恒量(在对称性所对应的群作用下,系统某个特定的指标守恒)。在量子力学中,若系统封闭(么正演化),则结论依旧成立,但开放系统中的情形相对复杂,多数情况下得不到这种守恒量。为了消除这种分离现象,得到更广义的 Noether 定理,我们一般采用更为自然的协变操作(covariant operation)来描述对称性^[18,20-26]。如 TO 关于时间演化对称,是一种协变操作,对应的对称群是 $u(1)$,生成元是 $-iH$ 。

量子相干^[27]是基于量子叠加的性质。在有限维空间中,对于纯态(pure state),量子相干可以理解为确定正交基的线性叠加;对于混态(mixed state),量子相干可以简单理解为密度矩阵在确定表象下的非对角性(非对角元严格非 0)。

在对称性所对应群作用下保持不变的量子态为对称态。非对称态(asymmetric states)是在群作用下不能保持不变的量子态。进一步,如果群作用么正表示的不变子空间非平凡,则对称态的密度矩阵可描述为块对角矩阵,这意味着非对称态的密度矩阵在除对角块之外的位置上存在非零元素。实际上

非对称性就是一种更广义的“相干”，因此文献[26]称这种基于非对称性定义的相干为不可描述(unspeakable)相干。

3 热力学操作下的相干演化

在对称态演化方面,EnTO 与 TO 是等价的,具有相同的态转化能力^[18]。然而,如果非对称性参与其中且主系统的维度大于等于 3,则这种等价性就不存在。虽然 TO 有着更自然的物理定义,然而在数学上相比 EnTO 更难以处理。因此,为了系统地发掘 TO 态转化能力的界限,在有关热力学资源理论的研究中,研究者建立了一套层级结构(hierarchy structure),包含基础热力学操作^[19](EITO)和单模热力学操作^[1](STO),前者是一次仅涉及两个能级的 TO,后者弱于 TO 但更容易处理。EnTO 与 TO 之间的界限究竟是怎样的? 两者是否存在鸿沟? 因此,我们在此讨论 STO 的态转化能力,并将其与 EITO、TO 和 EnTO 进行了比较。

文献[18]已经对 EnTO 的相干演化界限进行了讨论并推导出了上界,发现能级间的相干演化过程同时依赖于初始的相干态与转移概率。具体地,对于一个量子态 $\rho = \sum_{i,j} \rho_{ij} |i\rangle\langle j|$, 其相干模式(mode of coherence)可以被定义为 $\rho^{(\omega)} = \sum_{i,j,E_i-E_j=\hbar\omega} \rho_{ij} |i\rangle\langle j|$, 通过 EnTO 后,其输出相干项被限定为

$$|\rho_{ij}| \leq \sum_{c,d,E_c-E_d=E_i-E_j} |\rho_{0,cd}| \sqrt{p_{ic}p_{jd}}, \quad (5)$$

式中: ρ_{ij} 为密度矩阵的矩阵元; i,j,c,d 为能级的标号; ω 为角频率; E_i,E_j,E_c,E_d 分别为对应能级的能量; \hbar 为普朗克常数; p_{ic} 为能级 c 到能级 i 的转移概率; p_{jd} 为能级 d 到能级 j 的转移概率。研究者还发现,TO 与 EnTO 在相干转化能力方面存在鸿沟。因此 TO 的相干转化能力仍待探索。

尽管 TO 在物理上有明确的意义,但因为热库很大,变量很多,所以其相干转化能力的理论分析与实验操作都非常难。我们提出了 TO 的一个严格子集 STO^[1]。STO 是仅涉及单模玻色热库的热力学操作。在数学上,STO 与 TO 具有相同的表示形式,只是热库的哈密顿量为 $H_B = \sum_{n=0}^{\infty} n\hbar\omega |n\rangle\langle n|$, 定义 $q = \exp(-\beta\hbar\omega)$, 其中 n 为能级标记, q 为确定热库的一个常数。根据定义,STO 仅仅是 TO 的一个子集且结构简单,但我们发现,当主系统维度较小(维度等于 3)时,STO 锥占据了 TO 锥的大部分,且相干转化能力不错。这些结果有助于 EnTO 与 TO

之间相干鸿沟的探索,且与一般的热库比较,单模玻色热库对于实验与理论分析更加友好。

首先,当我们仅考虑单量子比特系统时,对于布居数演化,TO 与 EnTO 是等价的^[3]。研究表明,对于任意的单量子比特态 ρ ,STO 与 EnTO 一样,也可以实现任意的态转换^[1]。又因为 STO 是 TO 的严格子集,所以对于单量子比特情况,TO 与 EnTO 的等价性不仅仅局限于布居数演化,在相干转化过程中也有相同的能力。

但对于高维系统,单量子比特系统情况下的不同操作之间的等价性不再存在。例如仅考虑布居数演化时,EITO 锥、STO 锥与 TO 锥之间存在差异;考虑相干演化时,EnTO 可以实现的态转化不能被 TO 实现。首先我们仅考虑布居数演化。考虑哈密顿量为 $H_S = \sum_{m=0}^2 m\hbar\omega |m\rangle\langle m|$ 的三能级系统,若选择布居数满足 $p_0 > p_1/q > p_2/q^2$ 的对角态作为输入态,我们可以计算得到 $p_{0\min}^{\text{STO}} > p_{0\min}^{\text{EITO}} > p_{0\min}^{\text{TO}}$, 其中 $p_{0\min}^{\text{STO}}$ 、 $p_{0\min}^{\text{EITO}}$ 、 $p_{0\min}^{\text{TO}}$ 分别为 STO、EITO、TO 操作下基态的最低概率。因此 STO 锥是 EITO 锥的严格子集,而 EITO 锥则是 TO 锥的严格子集,如图 1 所示。但根据图 1,我们可以知道,STO 锥已经占据 TO 锥的很大一部分,这表明即使 STO 的结构简单,但其在布居数演化过程中仍表现较好。

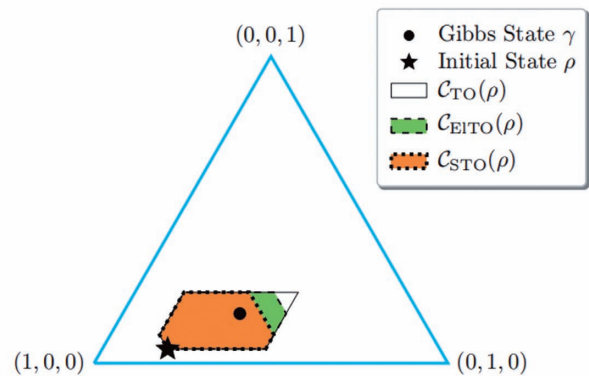


图 1 一个三能级系统的 TO 锥、EITO 锥和 STO 锥之间的比较^[1]

Fig. 1 Comparison among TO, EITO, and STO cones for qutrit state^[1]

对于高维系统的相干演化过程,文献[4]提出了一类 EnTO 可以实现的态转化,因为 TO 不能达到(5)式中的上界,其不能被 TO 实现,且未给出两者具体的相干鸿沟以及鸿沟大小。为了观察 EnTO 与 STO 之间不可忽略的最大相干鸿沟,我们以哈密顿量为 $H_S = \sum_{m=0}^2 m\hbar\omega |m\rangle\langle m|$ 的三能级系统为例,但大多数的讨论可以被拓展到更高维的情况。

增强热力学操作引发的布居数演化过程可表示为

$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} 1 - q^2 & 0 & 1 \\ q^2 & 1 - q & 0 \\ 0 & q & 0 \end{bmatrix}, \quad (6)$$

式中:转移概率矩阵 \mathbf{G} 表示布居数演化,从主系统的能级 E_k 到 $E_{k'}$ 的转移概率满足 $G_{k'k} = \langle k' | \epsilon (|k\rangle\langle k|) | k' \rangle$ 。该布居数演化过程也可以被 STO 实现。根据(5)式和简单的计算,我们可以观察到,在 EnTO 最大输出相干 $|\rho_{10}^{\text{EnTO}}|$ 与 STO 最大输出相干 $|\rho_{10}^{\text{STO}}|$ 之间,存在一个不可忽略的鸿沟,即

$$\Delta_{10} = |\rho_{10}^{\text{EnTO}}| - |\rho_{10}^{\text{STO}}| = (1 - q)(\sqrt{1 + q} - 1) |\rho_{10}|, \quad (7)$$

式中: $|\rho_{10}|$ 表征初态的相干。

该结果表明,STO 与 EnTO 在高维系统情况下不再具有相同的相干转化能力。如果考虑的是 TO,即需要考虑一般的热库,热态的混度很大,这是因为能级是高度简并的。较大的混度不利于相干增加,(7)式中不可忽略的相干鸿沟同样存在于 TO 与 EnTO 之间。但 TO 是否可近似地取到最大相干 $|\rho_{10}^{\text{EnTO}}|$? 这仍需要进一步的研究。

除了探讨各种热力学操作的相干转化能力,我们也对相干合并(coherence merging)的问题进行了研究。在量子比特系统中,相干项不能通过 TO 增加。但根据(5)式,在高维系统中,可以通过减少其他相干项的相干来增加相同模式中某个相干项的相干。而相干合并就是将其他相同模式中相干项的相干合并到某一个相干项中。

对于一个四能级系统,其哈密顿量为 $H_S = \sum_{j=0}^3 E_j |j\rangle\langle j|$,其中 $E_0 = 0, E_3 = E_1 + E_2$ 且 $E_1 > 0, E_2 > 0$ 。这个哈密顿量是非简并的但有简并能级差 $E_1 - E_0 = E_3 - E_2$,所以该系统具有非重叠能级(non-overlapping levels)。很容易发现,量子态 ρ 的相干模式 $\rho^{(\omega_1)}$ 由两项组成 $\rho^{(\omega_1)} = \rho_{10} |1\rangle\langle 0| + \rho_{32} |3\rangle\langle 2|$ 。在相干合并任务中,为了将这两项的相干合并到末态的 ρ'_{10} (或 ρ'_{32}) 中,最大化 $|\rho'_{10}|$ (或 $|\rho'_{32}|$)。我们推导出了该主系统通过 EnTO 后相干合并的最大上界,即

$$|\rho'_{10}| \leq \max \{ |\rho_{10}|, [1 - \exp(-\beta E_2)] |\rho_{10}| + |\rho_{32}| \}, \quad (8)$$

$$|\rho'_{32}| \leq \max [|\rho_{10}| \exp(-\beta E_2), |\rho_{32}|]。 \quad (9)$$

上界(8)、(9)式可以被单位算子或量子操作 β

实现,该量子操作 β 可表示为

$$\begin{cases} \mathbf{K}_0 = \sqrt{1 - \exp(-\beta E_2)} (|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|) \\ \mathbf{K}_1 = |0\rangle\langle 2| + |1\rangle\langle 3| \\ \mathbf{K}_2 = \sqrt{\exp(-\beta E_2)} (|2\rangle\langle 0| + |3\rangle\langle 1|) \end{cases}。 \quad (10)$$

显然该量子操作 β 保持 Gibbs 态不变并满足时间演化不变性,因此属于 EnTO,从而上界(8)、(9)式对于 EnTO 来说是可以达到的。同时,我们找到了特定的热库哈密顿量 H_B 与联合酉操作 U ,使得 STO 可以实现量子操作 β ,从而也可以达到上界(8)、(9)式。这表明 STO 与 EnTO 在非重叠能级相干合并任务中具有相同的能力。

最有趣的是,我们可以将这样的四能级系统看作是两个量子比特系统。根据相干合并的上界,我们发现,不可能通过 TO 甚至 EnTO 实现 ρ_{AB} 到 $\rho_A \otimes \rho_B$ 的转化,其中 ρ_{AB} 为一个两体态, ρ_A 与 ρ_B 均为局域态。这表明在量子热力学中,消除关联需要消耗一定的资源。然而,该量子态存在的关联是量子失谐关联^[28],消除的关联种类是否会对非热性资源消耗产生影响还是开放问题。

4 关联催化下的相干演化

在量子热力学中,关于热力学第二定理的研究成果已经相当丰富。在对称态转换的条件下,先前研究已经得到了如下结论。1)若不允许催化,只允许单纯的热力学操作,热优化的单调性决定是否可能进行态转化^[1,4]。2)若允许催化,但无关联的热力学操作,即催化的热力学操作^[2](CTO), α -自由能决定态转化。3)若允许催化,且具有关联的热力学操作, Helmholtz-自由能决定态转化^[7]。特别是最后一条 3),表明实际上经典热力学对于对称态依旧适用,尽管 TO 中的量子性没有发挥其完全的作用,这是 $u(1)$ -协变(或平移不变)的复杂性导致的。实际上,我们没有完全理解单纯协变操作的态转化,更何况存在关联催化的情形。先前的研究^[15-16]通过互补信道和 Imoto-Koashi 定理,证明了严格的对称态无法在有限维关联催化的条件下通过协变操作转化到非对称态,从而打破了热力学第二定律直接推广到量子情形的设想^[7]。

虽然先前研究已经指出,在关联催化下对称态无法通过协变操作转化到非对称态,然而量子涨落是客观存在的,严格对称态在实际的物理系统中难以出现。因此我们在与热力学兼容的平移不变操

作^[15] (TIO) 下, 研究了催化对非对称性的放大作用。首先, 我们证明了纯态催化下的 TIO 对任何初始态的转化能力等同于单纯的 TIO, 这体现了关联的重要性。其次, 对初始态构造特定催化系统后, 二能级系统中任意两个非对称混态能通过 TIO 相互转化。最后, 我们建立了数值搜索催化系统的理论基础, 为相关结论拓展到高维系统中打下了基础。这些结论可能会导致在渐进情况下, 热力学第二定律依旧在量子领域成立。

首先我们给出了关联催化的定义。对于主系统 S 和催化系统 C, 通过添加催化辅助系统 ρ_C 的关联催化 TIO, ρ_S 转化到 ρ'_S , 可表示为

$$\epsilon_{\text{TIO}}(\rho_S \otimes \rho_C) = \rho'_{SC} = \rho'_S | \rho_C, \quad (11)$$

式中: ρ'_{SC} 为主系统和催化系统的整体量子末态; $\rho'_S | \rho_C$ 意味着 $\text{Tr}_S(\rho'_{SC}) = \rho_C$ 且 $\text{Tr}_C(\rho'_{SC}) = \rho'_S$, 即催化系统保持局域不变。催化意为在保证自身无变化的前提下参与作用。关联催化意为只保证催化系统局域不发生变化, 不保证主系统和催化系统的末态之间无关联。

虽然由 Fisher 信息的可加性可知, 无关联催化的 TIO 并不能增加局域的非对称性, 然而这并不意味着问题得到了完全的解决。我们需要确定无关联情形下催化系统不能使 TIO 的态转化能力增强。我们设法证明了纯态催化 TIO 的态转化能力等价于单纯的 TIO。证明利用了 TIO 的 Stinespring 分解定理与群操作演化不变操作的无催化效应定理。需要说明的是, 该结论不限定主系统和催化系统的维度, 因此有普适性。

关联催化的 TIO (CCTIO) 有一些良好的性质便于讨论。其一就是在不限制催化系统维度的前提下, 构成一个凸集 (convex set), 即对于任意 $\epsilon_0, \epsilon_1 \in \mathcal{O}_{\text{CCTIO}}$, 有

$$(1-p)\epsilon_0 + p\epsilon_1 \in \mathcal{O}_{\text{CCTIO}}, \quad (12)$$

式中: $\mathcal{O}_{\text{CCTIO}}$ 为关联催化 TIO 的整体集合; $p \in [0, 1]$ 。这个性质的导出是基于低维信道与高维信道的线性组合且信道的协变性与催化系统不变。进而我们可以利用 Brouwer 不动点定理, 在构造一系列低维催化的 CCTIO 的基础上, 合成高维的 CCTIO。简单来说, 如果我们找到了一个有效的 TIO 保证催化系统局域不变, 就一定存在一个对应的有效 CCTIO。这样就可以将我们的任务简化为考察低维催化的 CCTIO (固定维度为 d 的 d -CCTIO)。然而, 即便是寻找简单的 2-CCTIO, 解析上并没有现成的研究成果可以利用, 更直接的方

式是借助数值手段。

在固定催化态后, 在最大化相干鲁棒性测度^[21] 下, 优化 TIO 信道容易被转化为半正定规划问题, 因此可以在多项式时间内解决。在二维系统中, 不同相干测度给出的序是一致的, 所以对于主体维度为 2 的情况, 只考虑鲁棒性测度是充分的。实际上, 催化态的选取具有不可控性。原因有两点。1) 如果限定催化系统的维度为 d , d -CCTIO 构成的集合非凸。2) 催化态选取的优化是一个嵌套双层规划问题, 难以在多项式时间内快速找到全局最优解, 只能寄希望于全局搜索 (暴力搜索或者分支定界法) 找寻最优解, 或是梯度下降法找寻局部最优解。为了给出 2-CCTIO 与 3-CCTIO 之间的区别, 我们利用全局搜索与 Lipschitz 连续性, 给出了 2-CCTIO 演化的上界, 用梯度下降与生成元分解^[29] 的方法求解了 3-CCTIO 的下界, 从而给出了两者之间清晰的界限, 数值上验证了催化系统的维度增长意味着 CCTIO 的态转化能力增强。同时, 通过对数值结果进行分析, 我们发现, 在固定二维催化态后, 最优 TIO 的 Choi-Jamiołkowski 矩阵的秩一般为 2, 这为我们构造通用的 2-CCTIO 奠定了基础。

对于主系统和催化系统能级结构相同的二能级系统, 我们找到了一个符合要求的 TIO 信道 ϵ_0 , 其 Kraus 算符为

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{K}_0^0 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/4 & \sqrt{3}/4 & 0 \\ 0 & \sqrt{3}/4 & 3/4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \\ \mathbf{K}_1^0 = \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \end{array} \right. \quad (13)$$

对于 $0 < |\sigma_x| < \sqrt{1 - |\sigma_z|^2}$ 的初态 ρ_S , 能找到一个催化系统, 使得末态 ρ'_S 相对于初态有严格的非对称性增长, 其中 σ_x, σ_z 为 Pauli 矩阵。同时, 我们可以通过二能级上 Bloch 球的对称性, 继续构造 $\epsilon_1 = \epsilon_0^0 \sigma_x \otimes \sigma_x$, 满足保持催化系统量子态不变的性质。利用 CCTIO 的凸性, 我们可以在 4 维催化系统上构造严格非对称性增长, 同时保持初态的 σ_z 不变。因此, 利用 Brouwer 不动点定理和 TIO 的协变不变性, 我们发现, 任意二能级非对称混态之间都可以通过有限维的 CCTIO 相互转化。

然而, 关联催化下的量子热力学还有诸多未解

决问题。1) $u(1)$ -协变性与保持 Gibbs 态不是 TO 的充分条件,因此关于关联催化 TO 的研究需要其他方法。2) 非对称态的非对角元之间无法完全自由转化,即存在独立的相干模式^[25],不同相干模式之间无法相互转化,因此高维 TIO 相对来说更难研究。然而我们可以推测,高维主系统的相干同样可以通过 CCTIO 进行放大。3) 保持 Gibbs 态不变和 $u(1)$ -协变性这两种迥异的性质在关联催化下的研究结论能在多大程度上相容目前尚无定论,但 Helmholtz-自由能的态转化表征实际上是基于保持 Gibbs 态不变,因而我们的研究给出了“关联催化下 EnTO 的态转化表征也遵循 Helmholtz-自由能单调性”这样一种可能性。

5 结 论

对于单量子比特系统,STO 无论是在布居数演化过程中还是在相干演化过程中,都与 EnTO 具有相同的态转化能力。但在高维系统中,STO 与 EnTO 在相干演化过程中存在不可忽略的鸿沟,这个鸿沟同样存在于 TO 与 EnTO 之间,该研究结果有助于探索 TO 与 EnTO 之间的相关鸿沟能否被近似关闭的问题。在相干合并任务中推导了 EnTO 可以达到的上界,并将其应用到一个两量子比特系统,发现不可能通过热力学操作将一个两体的关联态转化为其局域态的张量积。因此,在量子热力学中,消除关联是消耗非热性资源的操作。

此外研究了 CCTIO 放大相干的能力。尽管处于纯态的催化系统不能放大相干,但对于单量子比特系统,只要主系统存在少量相干态,便可以 CCTIO 放大,即 CCTIO 在态转化能力方面近似等价于全部的量子操作。该研究结果对于任意维度主系统都是成立的。由于热力学操作的协变性,研究结果对于研究关联催化下量子热力学第二定律的完全表述有重要意义。

参 考 文 献

- [1] Brandão F G, Horodecki M, Oppenheim J, et al. Resource theory of quantum states out of thermal equilibrium[J]. *Physical Review Letters*, 2013, 111(25): 250404.
- [2] Brandão F, Horodecki M, Ng N, et al. The second laws of quantum thermodynamics[J]. *PNAS*, 2015, 112(11): 3275-3279.
- [3] Ćwikliński P, Studziński M, Horodecki M, et al. Limitations on the evolution of quantum coherences: towards fully quantum second laws of thermodynamics[J]. *Physical Review Letters*, 2015, 115(21): 210403.
- [4] Horodecki M, Oppenheim J. Fundamental limitations for quantum and nanoscale thermodynamics[J]. *Nature Communications*, 2013, 4: 2059.
- [5] Hu X Y, Ding F. Thermal operations involving a single-mode bosonic bath[J]. *Physical Review A*, 2019, 99: 012104.
- [6] Ding F, Hu X Y, Fan H. Amplifying asymmetry with correlating catalysts[J]. *Physical Review A*, 2021, 103(2): 022403.
- [7] Müller M P. Correlating thermal machines and the second law at the nanoscale[J]. *Physical Review X*, 2018, 8(4): 041051.
- [8] Jonathan D, Plenio M B. Entanglement-assisted local manipulation of pure quantum states[J]. *Physical Review Letters*, 1999, 83(17): 3566-3569.
- [9] Turgut S. Catalytic transformations for bipartite pure states[J]. *Journal of Physics A Mathematical and Theoretical*, 2007, 40(40): 12185-12212.
- [10] Åberg J. Catalytic coherence[J]. *Physical Review Letters*, 2014, 113(15): 150402.
- [11] Bu K F, Singh U, Wu J D. Catalytic coherence transformations[J]. *Physical Review A*, 2016, 93(4): 042326.
- [12] Anshu A, Hsieh M H, Jain R. Quantifying resources in general resource theory with catalysts[J]. *Physical Review Letters*, 2018, 121(19): 190504.
- [13] Chen S R, Zhang X J, Zhou Y, et al. One-shot coherence distillation with catalysts[J]. *Physical Review A*, 2019, 100(4): 042323.
- [14] Boes P, Eisert J, Gallego R, et al. Von Neumann entropy from unitarity[J]. *Physical Review Letters*, 2019, 122(21): 210402.
- [15] Lostaglio M, Müller M P. Coherence and asymmetry cannot be broadcast[J]. *Physical Review Letters*, 2019, 123(2): 020403.
- [16] Marvian I, Spekkens R W. No-broadcasting theorem for quantum asymmetry and coherence and a trade-off relation for approximate broadcasting[J]. *Physical Review Letters*, 2019, 123(2): 020404.
- [17] Lostaglio M. An introductory review of the resource theory approach to thermodynamics[J]. *Reports on Progress in Physics. Physical Society*, 2019, 82(11): 114001.
- [18] Lostaglio M, Jennings D, Rudolph T. Description of quantum coherence in thermodynamic processes requires constraints beyond free energy[J]. *Nature Communications*, 2015, 6: 6383.
- [19] Lostaglio M, Alhambra Á M, Perry C. Elementary

- thermal operations[J]. *Quantum*, 2018, 2: 52.
- [20] Bartlett S D, Rudolph T, Spekkens R W. Reference frames, superselection rules, and quantum information[J]. *Reviews of Modern Physics*, 2007, 79(2): 555-609.
- [21] Piani M, Cianciaruso M, Bromley T R, et al. Robustness of asymmetry and coherence of quantum states [J]. *Physical Review A*, 2016, 93 (4): 042107.
- [22] Bužek V, Derka R, Massar S. Optimal quantum clocks[J]. *Physical Review Letters*, 1999, 82(10): 2207-2210.
- [23] Marvian I, Spekkens R W. The theory of manipulations of pure state asymmetry: I. basic tools, equivalence classes and single copy transformations[J]. *New Journal of Physics*, 2013, 15(3): 033001.
- [24] Marvian I, Spekkens R W. Extending Noether's theorem by quantifying the asymmetry of quantum states[J]. *Nature Communications*, 2014, 5: 3821.
- [25] Marvian I, Spekkens R W. Modes of asymmetry: the application of harmonic analysis to symmetric quantum dynamics and quantum reference frames[J]. *Physical Review A*, 2014, 90(6): 062110.
- [26] Marvian I, Spekkens R W. How to quantify coherence: distinguishing speakable and unspeakable notions [J]. *Physical Review A*, 2016, 94 (5): 052324.
- [27] Streltsov A, Adesso G, Plenio M B. Colloquium: quantum coherence as a resource [J]. *Reviews of Modern Physics*, 2017, 89(4): 041003.
- [28] Hu X Y, Fan H, Zhou D L, et al. Necessary and sufficient conditions for local creation of quantum correlation [J]. *Physical Review A*, 2012, 85 (3): 032102.
- [29] Gell-Mann M. Symmetries of baryons and mesons [J]. *Physical Review*, 1962, 125(3): 1067-1084.

Coherence Evolution in Quantum Thermodynamics

Ding Feng, Ding Yuqiang, Han Sen, Hu Xueyuan*

School of Information Science and Engineering, Shandong University, Qingdao, Shandong 266237, China

Abstract

Objective Quantum thermodynamics is an emerging field that extends the results of classical thermodynamics to the quantum world. The main research topic is based on the axioms of quantum mechanics, and reinterprets the three laws of thermodynamics from the microscopic perspective, with the help of new tools originated from the research of quantum information science. One of the most important results of quantum thermodynamics is the re-characterization of the second law of thermodynamics, which explains and quantifies the state-transformation ability of classical states under the so-called thermodynamic operation (a type of free quantum operations defined in the resource theory of quantum thermodynamics). But there are still some open problems in this field that are hard to solve, such as what role quantum coherence plays in thermodynamics. Coherence, which originates from the phenomenon of quantum superposition, is an indispensable resource in the field of quantum information and computing, and is also one of the essential sources of the difference between the microscopic world and the macroscopic world. In quantum thermodynamics, the coherence is characterized based on the covariance of thermodynamic operations (TOs) and thus has some unique properties. In this review, we reveal some special behaviors of unspeakable coherence in quantum thermodynamics from two aspects according to our previous results.

Methods Thermal operations refer to the quantum operations for the target system after maintaining the energy conservation of the composite system of heat reservoir and main system. Although it has a clear meaning in physics, it is hard to analyze mathematically. Therefore, the previous studies have proposed enhanced thermodynamic operations (EnTOs) satisfying weaker conditions to simplify the mathematical analysis. It is found that the population dynamics of the enhanced thermodynamic operations is equivalent to that of the original thermodynamic operations in any finite dimension of the target system, but the coherence dynamics of the high dimensional system (of which dimension is larger than 3) is actually difficult to examine. It is discovered that there are state conversions under EnTO which cannot be realized exactly by TO. However, it remains an open problem whether this gap can be closed approximately. In order to investigate this problem, in our study, we first proposed a strict subset of thermodynamic operations, single-mode thermodynamic operations, which have the experimental-friendly and equally gapped single-

mode bosonic heat reservoir, and then developed a series of results corresponding to its coherence dynamics.

Catalysis is a concept of resource theory, which is described as applying a composite free operation on the target system and the resourceful auxiliary quantum system, and enhancing the power of free operations without disturbing the auxiliary quantum system. In the resource theory of asymmetry or unspeakable coherence, there exists a no-broadcasting theorem, that is, incoherent states cannot obtain coherence resources through catalytic covariant operations, even allows the existence of correlation between target system and catalytic system. Thermodynamic operation is a special type of covariant operation (in different contexts, it also refers to as translational invariant operation or symmetric operation), thus the previous study on no-broadcasting theorem disproved the simple generalization from the incoherent second law of quantum thermodynamics to a full version of the second law. But through a series of constructive protocol, we find that the no-broadcasting theorem is actually unstable, i. e., even the smallest amount of asymmetry in the catalytic system can still strictly enhance the power of a covariant operation.

Results and Discussions In the part of our research on a single-mode thermodynamic operation, first, we show that for single-qubit target systems, the single-mode thermodynamic operation has the same coherence transformation ability as the enhanced thermodynamic operation. But for higher-dimensional systems, such as three-level systems, there is a non-negligible gap in the coherence transformation ability between the single-mode thermodynamic operation and the enhanced thermodynamic operation. This result is a key step in solving the gap conjecture between enhanced thermodynamic operation and thermodynamic operation. At the same time, we also compare the population dynamics of three types of thermodynamic operations (Fig. 1). Second, we discuss the coherence merging task and derive the reachable upper bound for coherence merging under the enhanced thermodynamic operation. Interestingly, we also prove that the upper bound can also be reached by the single-mode thermodynamic operation. Finally, by using this bound, we derive an example that erasing the correlation in quantum thermodynamics does cost a thermal resource.

In part of amplification of asymmetry with correlated catalyst, we first prove that, when the catalytic system is in a pure state, the no-catalyst theorem of asymmetry in any finite dimension is still valid, no matter whether the target system initially has asymmetric resource or not. Second, for the qubit system, we prove that if there is a small amount of coherence in the target system, it can be amplified by the symmetric operation with a correlated catalyst. Furthermore, it follows that the set of symmetric operations with correlated catalyst is almost equivalent to the whole set of quantum operations for qubit under approximate conditions. Finally, we develop a set of numerical methods for the research on correlated catalytic symmetric operations, which can also be generalized to the research on enhanced thermodynamic operations.

Conclusions We reveal the peculiar behaviors of unspeakable coherence in quantum thermodynamics from two aspects. In the first part, our research on coherence dynamics of single-mode thermodynamic operations provides new methods on exploring the gap between thermodynamic operations and enhanced thermodynamic operations, and the fact that erasing correlation is resource-consuming may attract more research interest in the quantum correlation behaviors of thermodynamics. In the second part, since the previous studies on the thermodynamic operations of catalysis have focused less on the coherence behaviors, the results here are of great significance for studying the full version of the second law of quantum thermodynamics under the correlated catalysis condition.

Key words quantum optics; quantum information theory; quantum thermodynamics; quantum coherence between energy levels; thermodynamic operations; asymmetry; catalysis

OCIS codes 270.5585; 020.1670