

حاشا
الرحمن الرحيم



دانشکده فیزیک و مهندسی هسته ای

رشته فیزیک، گرایش ذرات بنیادی و نظریه میدان‌ها

پایان‌نامه کارشناسی ارشد

مطالعه و بررسی ترمودینامیک به‌هم‌ریختگی اطلاعات کوانتومی

نگارنده: محمد سلیمان زاده

استاد راهنما

دکتر مرتضی رفیعی

شهریور ۱۳۹۷

شماره:

تاریخ:

باسمه تعالی



دانشگاه علمی کاربردی

مدیریت تحصیلات تکمیلی

فرم شماره (۳) صورتجلسه نهایی دفاع از پایان نامه دوره کارشناسی ارشد

با نام و یاد خداوند متعال، ارزیابی جلسه دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد خانم / آقای محمد سلیمانزاده با شماره دانشجویی ۹۵۰۸۰۹۴ رشته فیزیک گرایش ذرات بنیادی و نظریه میدان ها تحت عنوان مطالعه و بررسی ترمودینامیک بهم ریختگی اطلاعات کوانتومی که در تاریخ ۹۷/۶/۱۲ با حضور هیأت محترم داوران در دانشگاه صنعتی شاهرود برگزار گردید به شرح ذیل اعلام می گردد:

<input checked="" type="checkbox"/> قبول (با درجه: <u>بسیار خوب</u>) <input type="checkbox"/> مردود			
نوع تحقیق: <input checked="" type="checkbox"/> نظری <input type="checkbox"/> عملی			
عضو هیأت داوران	نام و نام خانوادگی	مرتبۀ علمی	امضاء
۱- استاد راهنمای اول	دکتر مرتضی رفیعی	استادیار	
۲- استاد راهنمای دوم			
۳- استاد مشاور			
۴- نماینده تحصیلات تکمیلی	دکتر احسان ابراهیمی بسابی	استادیار	
۵- استاد ممتحن اول	دکتر مصطفی عنابستانی	استادیار	
۶- استاد ممتحن دوم	دکتر سیدعلی حسینی منصور	استادیار	

نام و نام خانوادگی رئیس دانشکده: دکتر سعید حسامی پیله رود

تاریخ و امضاء و مهر دانشکده:



تبصره: در صورتی که کسی مردود شود حداکثر یکبار دیگر (در مدت مجاز تحصیل) می تواند از پایان نامه خود دفاع نماید (دفاع

مجدد نباید زودتر از ۴ ماه برگزار شود).

تقدیم به:

به پاس عاطفه سرشار و گرمای امید بخش وجودشان که در سردترین روزگار ان بهترین پشتیبان است، به پاس قلب های بزرگشان که بهترین فریادرس است، و به پاس محبت های بی دریغشان که هرگز فروکش نمی کند، این اثر را به خانواده عزیزم تقدیم می کنم.

سپاس‌گزاری...

شکر و سپاس خدا را که بزرگترین امید و یاور در لحظه لحظه زندگیست...
با سپاس‌گذاری و قدردانی خالصانه و خاضعانه از تمامی استادانی که در طول تحصیلم بزرگوارانه آموختند و در انتقال آنچه می‌دانستند، دریغ نکردند. و با تشکر فراوان از استاد بزرگوارم دکتر مرتضی رفیعی که در تمامی مراحل تحصیل و تدوین با دریایی از دانش، راهنما و مشوق من بوده و از هیچ کمکی دریغ نداشتند. ایشان نه تنها معلم مسائل علمی بنده بوده بلکه معلم اخلاق، ایثار، گذشت و تواضع برای من می‌باشند.

محمد سلیمان زاده

شهریور ۱۳۹۷

تعهد نامه

اینجانب محمد سلیمان زاده دانشجوی کارشناسی ارشد رشته فیزیک دانشکده فیزیک و مهندسی هسته ای دانشگاه شاهرود، نویسنده پایان نامه با عنوان مطالعه و بررسی ترمودینامیک بهم ریختگی اطلاعات کوانتومی، تحت راهنمایی مرتضی رفیعی متعهد می شوم:

- تحقیقات در این پایان نامه توسط اینجانب انجام شده است و از صحت و اصالت برخوردار است.
- در استفاده از نتایج پژوهش های دیگر پژوهش گران، به مرجع مورد استفاده استناد شده است.
- مطالب این پایان نامه، تا کنون توسط خود، یا فرد دیگری برای دریافت هیچ نوع مدرک یا امتیازی در هیچ جا ارایه نشده است.
- حقوق معنوی این اثر، به دانشگاه صنعتی شاهرود تعلق دارد، و مقالات مستخرج با نام “ دانشگاه صنعتی شاهرود “ یا “ Shahrood University of Technology “ به چاپ خواهد رسید.
- حقوق معنوی تمام افرادی که در به دست آوردن نتایج اصلی پایان نامه تاثیرگذار بوده اند، در مقالات مستخرج از پایان نامه رعایت می گردد.
- در تمام مراحل انجام این پایان نامه، در مواردی که از موجود زنده (یا بافت های آنها) استفاده شده است، ضوابط و اصول اخلاقی رعایت شده است.
- در تمام مراحل انجام این پایان نامه، در مواردی که به حوزه اطلاعات شخصی افراد دسترسی یافته (یا استفاده شده است)، اصل رازداری و اصول اخلاق انسانی رعایت شده است.

محمد سلیمان زاده

شهریور ۱۳۹۷

مالکیت نتایج و حق نشر

- تمام حقوق معنوی این اثر و محصولات آن (مقالات مستخرج، کتاب، برنامه های رایانه ای، نرم افزارها و تجهیزات ساخته شده) متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می باشد. این مطلب باید به نحو مقتضی، در تولیدات علمی مربوطه ذکر شود.
- استفاده از اطلاعات و نتایج موجود در این پایان نامه بدون ذکر منبع مجاز نمی باشد.

چکیده

در این پژوهش با بهم‌ریختن اطلاعات کوانتومی، همبستگی خارج از زمان ($OTOC$) را محاسبه می‌کنیم. همبستگی خارج از زمان ($OTOC$) به طور معمول به وسیله $C_{V,X(\tau)} = \langle [X_\tau, V]^2 \rangle$ نشان دهنده میانگین گرمایی است. $OTOC$ در ابتدا برای بررسی بی‌ثباتی مسیرهای الکترونی نیمه‌کلاسیک در ابررساناها استفاده شد. اخیراً به عنوان معیاری برای اندازه‌گیری آشوب کوانتومی در نظر گرفته می‌شود. برای اندازه‌گیری $OTOC$ بین دو نقطه، از روشی که به اصطلاح، روش اندازه‌گیری دو نقطه‌ای می‌گویند، استفاده می‌کنیم. طرح اندازه‌گیری دونقطه‌ای کاربرد گسترده‌ای در این زمینه دارد و همچنین یک تفسیر روشنی از بهم‌ریختگی اطلاعات کوانتومی با نوسانات غیرتعدالی کمیت‌های کوانتومی از جمله کار و گرما می‌دهد. محاسبات $OTOC$ را برای یک زنجیره اسپینی ارائه می‌دهیم و رفتار این کمیت را در سامانه‌های انتگرال‌پذیر و غیرانتگرال‌پذیر مقایسه می‌کنیم. در سامانه‌های کوانتومی انتگرال‌پذیر غیرتعدالی، مشاهده‌پذیرها نمی‌توانند به طور معمول در حالت گرمایی به تعادل برسند. در این سامانه‌ها به طور طبیعی مشاهده‌پذیرها بعد از واهلش با یک آنسامبل مکانیک آماری جدید توصیف می‌شوند که به آنسامبل تعمیم یافته گیبس موسوم است. اما مشاهده‌پذیرها در سامانه‌های غیرانتگرال‌پذیر در طولانی مدت به تعادل می‌رسند. در نتیجه مقدار $OTOC$ به صفر میل می‌کند. همچنین مقدار متوسط توزیع کار و مقدار متوسط انحراف معیار و پاشندگی توزیع کار را برای هر دو سامانه بررسی شد. از آنجایی که همبستگی‌ها در مکانیک کوانتومی نقشی اساسی دارند، میانگین تابع همبستگی $\langle \sigma_z^i \sigma_z^{i+1} \rangle$ ($i = L/2$) را برای دو اسپین وسط و همسایه آن برای هر دو سامانه بررسی شده است که نشان می‌دهد برای سامانه‌های غیرانتگرال‌پذیر به مقدار مشخصی همگرا می‌شود. در حالی که برای سامانه‌های انتگرال‌پذیر همچنان رفتار نوسانی دارد. در ادامه محاسبات به اندازه‌گیری فاصله نسبی بین حالت سامانه در هر لحظه با حالت گرمایی اولیه سامانه برای هر دو حالت انتگرال‌پذیر و غیرانتگرال‌پذیر پرداخته شده است. با توجه با نتایج به دست آمده مشاهده می‌شود این کمیت نیز رفتار نمایی برای سامانه‌های غیرانتگرال‌پذیر دارد در صورتی که در سامانه‌های انتگرال‌پذیر شاهد نوسانی بودن این کمیت هستیم.

کلمات کلیدی: ترمودینامیک کوانتومی، همبستگی خارج از زمان، سامانه‌های انتگرال‌پذیر، سامانه‌های غیرانتگرال‌پذیر، گرمایی شدن، فرضیه گرمایی شدن ویژه حالت‌ها.

لیست مقالات مستخرج از پایان نامه

۱. استفاده از همبستگی خارج از زمان (*OTOC*) برای مقایسه سامانه‌های انتگرال‌پذیر و غیرانتگرال‌پذیر، کنفرانس فیزیک ایران، دانشگاه بین‌المللی امام خمینی (ره)، قزوین

فهرست مطالب

ق	فهرست تصاویر
ش	فهرست جداول
۱	۱ مفاهیم اولیه
۲	۱.۱ مفاهیم اولیه کلاسیکی
۲	۱.۱.۱ ترمودینامیک کلاسیک
۲	۲.۱.۱ چشم‌انداز ترمودینامیک
۳	۳.۱.۱ حدود ترمودینامیکی
۶	۴.۱.۱ تعادل ترمودینامیکی
۶	۵.۱.۱ فرایند تعادلی
۷	۶.۱.۱ فرایند غیرتعادلی
۷	۷.۱.۱ فرایند ایستاوار
۷	۸.۱.۱ فرایندهای برگشت‌پذیر و برگشت‌ناپذیر
۸	۹.۱.۱ ترمودینامیک تعادلی
۸	۱۰.۱.۱ ترمودینامیک غیرتعادلی
۸	۱۱.۱.۱ کار
۹	۱۲.۱.۱ گرما
۱۰	۱۳.۱.۱ قانون صفرم ترمودینامیک
۱۰	۱۴.۱.۱ قانون اول ترمودینامیک
۱۱	۱۵.۱.۱ قانون دوم ترمودینامیک
۱۲	۱۶.۱.۱ قانون سوم ترمودینامیک
۱۳	۲.۱ مفاهیم کوانتومی
۱۳	۱.۲.۱ ترمودینامیک کوانتومی
۱۴	۲.۲.۱ نظریه اطلاعات
۱۵	۳.۲.۱ آنتروپی شانون

۱۵	آنتروپی فون نیومن	۴.۲.۱
۱۶	آنتروپی نسبی	۵.۲.۱
۱۷	اصول موضوعه حالت‌های خالص از سامانه کوانتومی منزوی	۶.۲.۱
۱۸	حالت‌های آمیخته	۷.۲.۱
۲۰	دینامیک یک زیرسامانه	۸.۲.۱
۲۰	اندازه‌گیری	۹.۲.۱
۲۱	جابه‌جایی عملگرها	۱۰.۲.۱
۲۳		سامانه‌های انتگرال‌پذیر و شرایط گرمایی شدن	۲
۲۴	مفهوم انتگرال‌پذیری در مکانیک کلاسیک و مکانیک کوانتومی	۱.۲
۲۴	مقدمه	۱.۱.۲
۲۴	شرط بنیادی کوانتوم	۲.۱.۲
۲۵	انتگرال‌پذیری	۳.۱.۲
۲۷	نمونه فیزیکی	۴.۱.۲
۲۷	بررسی گرمایی شدن سامانه‌های کلاسیکی و کوانتومی	۲.۲
۲۷	گرمایی شدن	۱.۲.۲
۲۸	شرایط گرمایی شدن سامانه‌ها	۲.۲.۲
۲۸	فرضیه گرمایی شدن ویژه حالت‌ها	۳.۲.۲
۳۰	چرا مطالعه <i>ETH</i> ؟	۴.۲.۲
۳۱	آیا گرمایی شدن <i>ETH</i> را در بر می‌گیرد؟	۵.۲.۲
۳۱	چند بیان از فرضیه گرمایی شدن ویژه حالت‌ها	۶.۲.۲
۳۳		ترمودینامیک کوانتومی و افت‌وخیزهای کار	۳
۳۴	اطلاعات و ترمودینامیک	۱.۳
۳۴	مقدمه	۱.۱.۳
۳۴	بررسی قانون اول و دوم ترمودینامیک	۲.۱.۳
۳۶	شیطانک ماکسول	۳.۱.۳
۳۷	اصل لانداور	۴.۱.۳
۳۸	پاک کردن با استفاده از اطلاعات کوانتومی	۵.۱.۳
۳۸	فیزیک آماری غیرتعادلی کلاسیک و کوانتومی	۲.۳
۳۸	مفهوم کلاسیکی افت‌وخیز کار و گرما	۱.۲.۳
۴۰	رابطه کلاسیکی افت‌وخیز	۲.۲.۳
۴۱	مفهوم کوانتومی افت‌وخیز کار و گرما	۳.۲.۳
۴۳	روابط افت‌وخیز کوانتومی	۴.۲.۳

۴۳	کار در ترمودینامیک و مکانیسم آماری	۳.۳
۴۳	توصیف ترمودینامیکی	۱.۳.۳
۴۶	فرایند هم‌دما در مکانیک آماری تعادلی	۲.۳.۳
۴۸	کار به عنوان یک متغیر تصادفی	۴.۳
۴۸	برابری جازینسکی	۱.۴.۳
۴۹	دینامیک غیرتعادلی یکانی	۲.۴.۳
۵۰	توزیع کار و تابع مشخصه	۳.۴.۳
۵۳	ترمودینامیک بهم‌ریختگی اطلاعات کوانتومی	۴
۵۴	مقدمه	۱.۴
۵۴	استفاده از همبستگی‌ها در مکانیک کوانتومی	۲.۴
۵۶	بهم‌ریختگی اطلاعات	۳.۴
۵۷	همبستگی خارج از زمان	۴.۴
۵۸	روش اندازه‌گیری دو نقطه‌ای	۵.۴
۶۱	ترمودینامیک بهم‌ریختگی اطلاعات	۶.۴
۶۲	هامیلتونی‌های اسپینی	۷.۴
۶۳	بررسی ترمودینامیک زنجیره اسپینی انتگرال‌پذیر و غیر انتگرال‌پذیر	۸.۴
۶۷	نتیجه‌گیری	۵
۶۸	نتیجه‌گیری	۱.۵
۶۹		مراجع
۷۵		آ
۷۵	Matlab	۱.آ

فهرست تصاویر

۳	نیروی وارد بر سقف کلبه، ناشی از سقوط قطرات باران	۱.۱
۴	نیروی وارد بر سقف با مساحت بزرگ ناشی از قطرات باران	۲.۱
۴	نیروی وارد بر سقف با مساحت بزرگتر ناشی از قطرات باران	۳.۱
۱۰	بیان قانون صفرم ترمودینامیک	۴.۱
۱۱	قانون دوم ترمودینامیک بیان کلوین-پلانک	۵.۱
۱۲	قانون دوم ترمودینامیک بیان کلاسیوس	۶.۱
۳۷	نحوه عملکرد شیطانک ماکسول	۱.۳
۳۹	فضای فاز با مکان و تکانه $x(q, p)$ مشخص می‌شود.	۲.۳
۴۵	نمودار یک فرآیند غیرتعادلی	۳.۳
۵۹	روش اندازه‌گیری دو نقطه‌ای	۱.۴
۶۳	متوسط توزیع کار نسبت به زمان	۲.۴
۶۴	متوسط انحراف معیار و پاشندگی توزیع کار نسبت به زمان	۳.۴
۶۴	بخش حقیقی $OTO C$ $F_{ei u O, X(t)}$ برای $u=1$	۴.۴
۶۵	متوسط تابع همبستگی σz برای اسپین وسط و همسایه آن بر حسب زمان	۵.۴
۶۵	: فاصله بین حالت سامانه و حالت گرمایی اولیه بر حسب زمان	۶.۴

فصل ١

مفاهيم اوليه

۱.۱ مفاهیم اولیه کلاسیکی

۱.۱.۱ ترمودینامیک کلاسیک

ترمودینامیک شاخه‌ای از علوم طبیعی است که به بحث راجع به گرما و نسبت آن با انرژی و کار می‌پردازد، که متغیرهای ماکروسکوپی مانند دما، انرژی داخلی، آنتروپی و فشار را برای توصیف حالت سامانه‌ها تعریف و چگونگی ارتباط آن‌ها و قوانین حاکم بر آن‌ها را بررسی و همچنین رفتار میانگینی از تعداد زیادی از ذرات میکروسکوپی را بیان می‌کند.

میزان تاثیر موتورهای بخار در تبدیل گرما به کار برای نخستین بار در سال ۱۸۲۴ و در فرایند به حرکت درآوردن پیستون و توانایی چرخش یک چرخ، توسط مهندس جوان فرانسوی، سعدی کارنو^۱ بیان شد [۱]. فرمولی که امروزه از آن تحت عنوان بازده فرایند یاد می‌کنند. بر اساس مطالعات کارنو، بالاترین بهره‌وری یک موتور، تنها به اختلاف دمای میان منبع موتور گرمایی و منبع مصرف کننده گرما وابسته است. او همچنین بیان کرد که کار، محصول جانبی گرما است، که به شکل طبیعی از جسم گرم‌تر به جسم سردتر منتقل می‌شود.

قوانین ترمودینامیک مجموعه‌ای از قوانین جهانی هستند که فعل و انفعالات بین دما، گرما، کار، انرژی و آنتروپی را توضیح می‌دهند. قوانین ترمودینامیک نه تنها در مورد موتورهای بخار معتبر است، بلکه در مورد هر مسئله دیگری از جمله خورشید، سیاه‌چاله‌ها، موجودات زنده و حتی کل جهان نیز صدق می‌کنند. این نظریه در عین سادگی، بسیار جامع است، طوری که آلبرت اینشتین^۲ از آن به عنوان نظریه‌ای که هیچ‌گاه منسوخ نمی‌شود، یاد کرد. بر خلاف مدل‌های استاندارد فیزیک ذرات که سعی در اثبات وجود اجسام دارند، قوانین ترمودینامیکی تنها برای بیان توانایی انجام یا عدم انجام یک فرایند، کاربرد دارند [۱].

۲.۱.۱ چشم‌انداز ترمودینامیک

توصیف مشخصات کلی یک سامانه به کمک تعدادی از ویژگی‌های قابل اندازه‌گیری آن، که کم‌وبیش توسط حواس ما قابل درک هستند، یک توصیف از ویژگی‌های ماکروسکوپی است. این توصیف‌ها، نقطه شروع تمام بررسی‌ها در تمام شاخه‌های فیزیک است. در بررسی مکانیک یک جسم صلب دیدگاه ماکروسکوپی اتخاذ می‌کنیم. زیرا فقط جنبه‌های خارجی جسم صلب را در نظر می‌گیریم. مکان و زمان و ترکیبی از آن دو مانند سرعت، بعضی از کمیت‌های ماکروسکوپی متداول در مکانیک را تشکیل می‌دهند و به مختصات مکانیکی مشهور هستند. اما در ترمودینامیک توجه ما به داخل سامانه معطوف می‌شود. دیدگاه ماکروسکوپی را اختیار می‌کنیم و بر آن دسته از کمیت‌های ماکروسکوپی تاکید می‌کنیم که رابطه‌ای با حالت داخلی

¹Nicolas Léonard Sadi Carnot

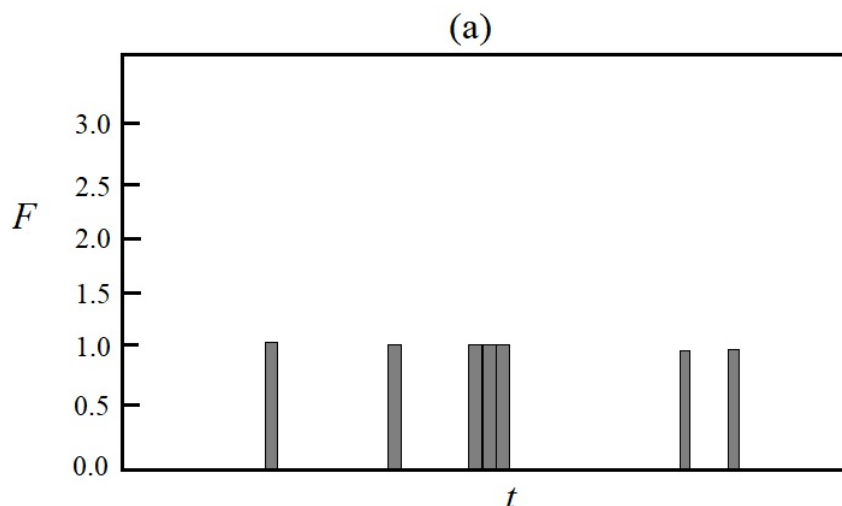
²Albert Einstein

سامانه داشته باشد. تعیین کمیت‌هایی که برای توصیف این حالت داخلی لازم است به عهده آزمایش است. آن کمیت‌های ماکروسکوپی که به حالت سامانه مربوط هستند، مختصات ترمودینامیکی نامیده می‌شوند. این مختصات، برای تعیین انرژی داخلی سامانه به کار می‌رود. هدف ترمودینامیک پیدا کردن روابط کلی بین اجزای این مختصات ترمودینامیکی است، که با قوانین ترمودینامیک سازگار باشند. سامانه‌ای که را که بتوان بر حسب مختصات ترمودینامیکی توصیف کرد، سامانه ترمودینامیکی می‌نامند [۱].

۳.۱.۱ حدود ترمودینامیکی

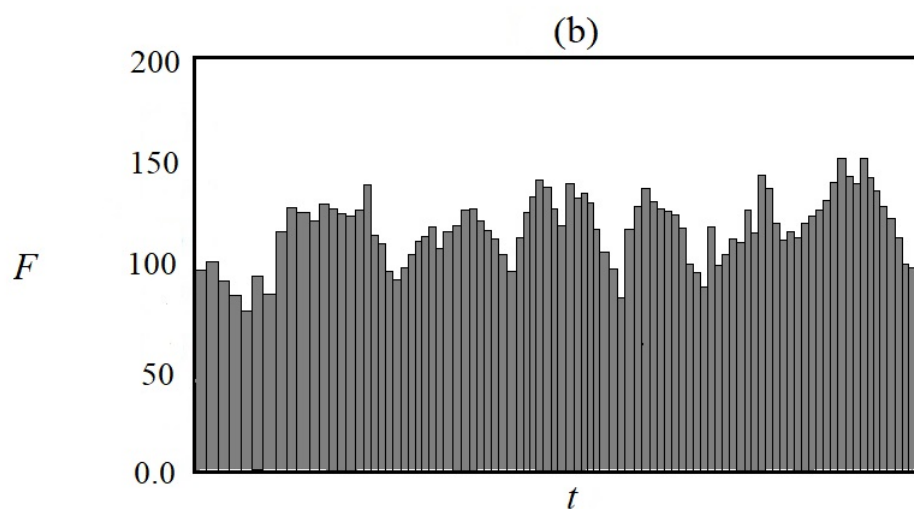
چگونه می‌توان امکان ارتباط بین تعداد زیادی از ذره‌های یک سامانه بس ذره‌ای ترمودینامیکی، با مقادیر متوسط آنها فراهم کرد؟

تصور کنید که در داخل کلبه‌ای کوچک با سقف تخت نشسته‌اید. بیرون در حال باریدن باران است و می‌توانید گاهی صدای باران را بر روی سقف را بشنوید. قطرات باران به صورت تصادفی به سقف برخورد می‌کنند. گاهی اوقات با فاصله نزدیک به هم صدای قطرات را می‌شنوید و اما گاهی اوقات فاصله زیادی بین قطرات باران وجود دارد. هر قطره باران که به پشت‌بام می‌رسد، ضربه‌ای به سقف وارد می‌کند. اگر که جرم و سرعت نهایی یک قطره باران را بدانیم، می‌توان، نیروی را که بر روی سقف کلبه وارد می‌شود، محاسبه کرد [۱۱]. این نیرو تابعی از زمان است که در شکل (۱.۱) نشان داده شده است.



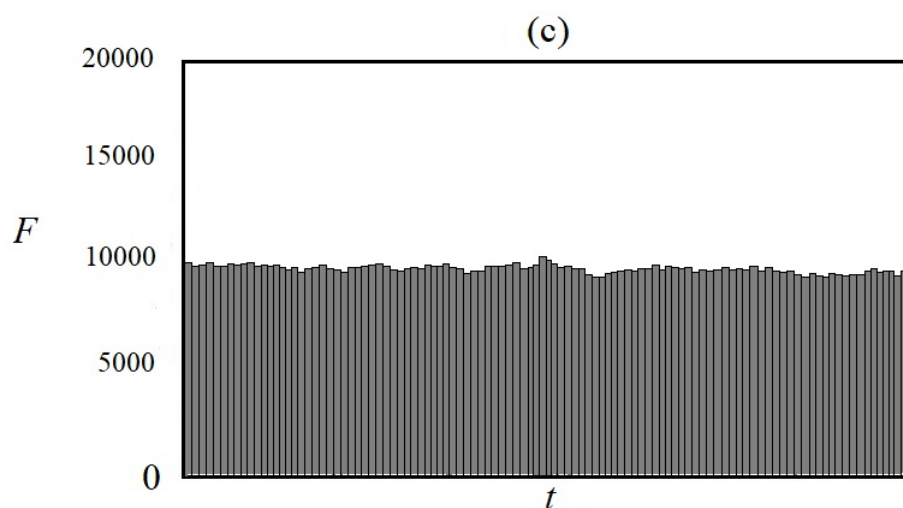
شکل ۱.۱: نیروی وارد بر سقف کلبه، ناشی از سقوط قطرات باران

تصور کنید که شما در داخل یک کلبه بزرگتر با سقف تخت، هزار بار بیشتر از مساحت سقف اول نشسته‌اید، این بار قطره‌های باران بیشتری به سقف با مساحت بزرگتر سقوط خواهند کرد و نیروی بیشتری به سقف وارد می‌شود.



شکل ۲.۱: نیروی وارد بر سقف با مساحت بزرگ ناشی از قطرات باران

دوباره مساحت سقف تخت را با ضریب صد افزایش دهید.



شکل ۳.۱: نیروی وارد بر سقف با مساحت بزرگتر ناشی از قطرات باران

به دو نکته کلیدی در مورد این نمودارها توجه کنید:

۱. نیرو به طور متوسط بزرگتر می‌شود، زیرا مساحت سقف بزرگتر می‌شود و سقف بزرگتر باران بیشتری را جذب می‌کند.
۲. افتوخیز نیروها از بین می‌رود و به نظر می‌رسد که نیرو به مقدار متوسط آن نزدیک‌تر

می‌شود. در حقیقت، افت‌وخیز هنوز بزرگ است، اما همان‌طور که سطح سقف افزایش می‌یابد، آنها به آرامی رشد می‌کنند.

نیرو با مساحت رشد می‌کند بنابراین برای در نظر گرفتن فشار مفید است.

میانگین فشار ناشی از سقوط قطرات باران به دلیل افزایش مساحت سقف تغییر نمی‌کند، اما افت‌وخیز فشار کاهش می‌یابد. در حقیقت، به‌طور کلی می‌توانیم از افت‌وخیز فشار در حدی که سقف به بی‌نهایت رشد می‌کند، کاملاً نادیده بگیریم. این دقیقاً همان معیاری است که ما به عنوان حد ترمودینامیکی اشاره می‌کنیم [۱۱].

مولکول‌های یک گاز که در ظرفی قرار دارند، در هر بار که مولکول‌ها به دیواره‌های ظرف برخورد می‌کنند، ضربه‌ای به آنها وارد می‌شود. اثر خالص ضربات وارد شده بر روی دیواره‌های ظرف، فشار یا نیرو بر واحد سطح است. اگر ظرف بسیار کوچک باشد، ما باید نگرانی بابت افت‌وخیزهای فشار داشته باشیم. با این حال، در اکثر موارد تعداد مولکول‌ها در یک منبع بسیار زیاد هستند، بنابراین این افت‌وخیزها را می‌توان نادیده گرفت. بنابراین فشار گاز کاملاً یکنواخت به نظر می‌رسد. می‌توان گفت توصیف فشار سامانه در محدوده ترمودینامیکی است. تعداد مولکول‌ها را در آن بی‌نهایت فرض می‌کنیم، به طوری که تراکم گاز ثابت باشد.

تصور کنید منبع گازی دارای حجم V ، دمای T ، فشار P و انرژی جنبشی U باشد، منبع را با یک صفحه فرضی از نیمه جدا و فقط توجه خود را بر روی گاز در یک نیمه منبع متمرکز کنید. حجم این نیمه گاز نصف حجم کل منبع $V' = \frac{V}{2}$ است و انرژی جنبشی این نیمه گاز به طور واضح نصف انرژی جنبشی کل $U' = \frac{U}{2}$ است. با این حال فشار P و دما T نیمی از گاز، مشابه فشار $P' = P$ و دمای کل $T' = T$ ظرف هستند. متغیرهایی که به اندازه سامانه، مانند U و V ، وابسته هستند متغیرهای مقداری یا فزونور^۳ نامیده می‌شوند. آن‌هایی که مستقل از اندازه سامانه هستند، مانند P و T ، متغیرهای شدتی یا نافزونور^۴ نامیده می‌شوند.

فیزیک گرمایی در مراحل مختلف، تکامل یافته و با روش‌های مختلفی برای این موضوع روبرو هستیم:

۱. در ترمودینامیک کلاسیک با خواص ماکروسکوپی از جمله فشار، حجم و دما یا به عبارتی با فیزیک بنیادی سر و کار داریم. این به سامانه‌هایی که به اندازه کافی بزرگ هستند اعمال می‌شود که می‌توان افت‌وخیزهای میکروسکوپی را در آن نادیده گرفت [۱۱].

۲. نظریه جنبشی گازها تلاش می‌کند که، خواص گازها را با در نظر گرفتن توزیع‌های احتمالی مرتبط با حرکت انفرادی مولکول‌ها تعیین کند. که در ابتدا تا حدودی بحث برانگیز بود زیرا به وجود اتم‌ها و مولکول‌ها تا اواخر قرن نوزدهم و اوایل قرن بیستم شک داشتند [۱۱].

۳. درک اینکه اتم‌ها و مولکول‌ها وجود دارند، منجر به توسعه مکانیک آماری شد. به جای شروع از توصیف خواص ماکروسکوپی، این رویکرد با تلاش برای توصیف حالت‌های میکروسکوپی سامانه آغاز شد و سپس از روش‌های آماری برای تعیین خواص ماکروسکوپی از

³ Intensive properties

⁴ Extensive properties

آنها استفاده شد [۱۱].

۴.۱.۱ تعادل ترمودینامیکی

فرض کنید که آزمایش‌هایی بر روی یک سامانه ترمودینامیکی انجام شده و مختصات آن که برای توصیف میکروسکوپی سامانه لازم و کافی هستند، معین شده باشد. وقتی که این مختصات به هر طریقی، چه خودبخودی و چه به سبب عوامل خارجی تغییر کند، سامانه تغییر حالت پیدا می‌کند. اگر سامانه‌ای به هیچ وجه تحت تاثیر محیط قرار نگیرد، منزوی نامیده می‌شود. در کاربردهای علمی سامانه‌های منزوی از اهمیت کمی برخوردار هستند. در ترمودینامیک معمولاً با سامانه‌هایی که به نحوی تحت تأثیر محیط قرار دارند، سر و کار داریم. به طور کلی ممکن است از طرف محیط نیروهایی به سامانه وارد شود و یا بین سامانه و جسمی که در دمای معین قرار دارد تماسی حاصل شود. هنگامی که حالت یک سامانه تغییر می‌کند، معمولاً برهم کنش‌هایی بین سامانه و محیط رخ می‌دهد. وقتی که هیچ‌گونه نیروی خنثی نشده‌ای در داخل سامانه و همچنین بین سامانه و محیط آن وجود نداشته باشد، سامانه در تعادل مکانیکی قرار دارد. اگر این شرایط برقرار نباشد، یا سامانه به تنهایی یا سامانه و محیط آن با هم تغییر خواهد داد و این تغییر حالت وقتی متوقف می‌شود که تعادل مکانیکی دوباره برقرار شود.

چنانچه سامانه‌ای که در تعادل مکانیکی قرار دارد تمایلی به تغییر خودبخودی ساختار داخلی از قبیل واکنش‌های شیمیایی و یا انتقال ماده از یک قسمت سامانه به قسمت دیگر، مانند پخش یا حل شدن، حتی به آهستگی، نداشته باشد، آنگاه سامانه در تعادل شیمیایی است و سامانه‌ای که در تعادل شیمیایی نباشد دچار تغییر حالت می‌شود که در بعضی از موارد با کندی فوق‌العاده‌ای صورت می‌گیرد. این تغییر وقتی متوقف می‌شود که تعادل شیمیایی برقرار شود [۱].

اگر سامانه‌ای در تعادل شیمیایی و مکانیکی باشد و از محیط خود توسط دیواره گرمابر جدا شود و هیچ‌گونه تغییر خودبخودی رخ ندهد، تعادل گرمایی وجود خواهد داشت. در تعادل گرمایی تمام قسمت‌های سامانه در یک دما به سر می‌برند که با دمای محیط یکسان است. هنگامی که شرایط برای هر سه نوع تعادل برقرار باشد، سامانه در تعادل ترمودینامیکی است. تحت این شرایط واضح است که هیچ‌گونه تمایلی برای تغییر حالت، نه در سامانه و نه در محیط آن وجود نخواهد داشت. حالت‌های تعادل ترمودینامیکی را می‌توان بر حسب مختصات ماکروسکوپی که تابع زمان نیستند، توصیف کرد [۱].

۵.۱.۱ فرایند تعادلی

یک تحول می‌تواند به روش‌های مختلفی تکامل یابد. اگر تغییری بسیار کوچک در پارامترها ایجاد شود، تغییر بعدی تا رسیدن سامانه به حالت تعادل صورت نمی‌گیرد، یعنی می‌توان تمام

پارامترها در سراسر سامانه، با مقادیر ثابت فرض کرد. بعد از آن مرحله بعدی صورت می‌گیرد و به همین ترتیب ادامه می‌یابد. بنابراین تمامی فرآیندها شامل حالت‌های تعادلی متوالی است. چنین فرایندی، فرآیند تعادلی نامیده می‌شود [۱۲].

۶.۱.۱ فرایند غیر تعادلی

فرض کنید باید به یک حالتی با حجم متفاوت برسیم. واضح است که اگر تحول به آرامی انجام نشود، فشار و دما برای مدت زیادی در این حجم ثابت نخواهد ماند. در حالت کلی، صحبت درباره هر فشار و دمای معینی بی‌معنی خواهد بود، چون آنها در نقاط مختلف متفاوت خواهد بود. به علاوه، توزیع فشار و دما در یک حجم فقط به حالت‌هایی اولیه و نهایی بستگی ندارد، بلکه به نحوه انجام این تحول نیز وابسته است. بنابراین حالت‌های میانی در یک چنین فرایندی، غیر تعادلی هستند. این فرایند را فرایند غیر تعادلی نامیده می‌شود [۱۲].

۷.۱.۱ فرایند ایستاوار

هنگامی که یک سامانه در تعادل ترمودینامیکی باشد و محیط مجاور آن بدون تغییر نگه داشته شود، هیچ حرکتی رخ نمی‌دهد در نتیجه کاری انجام نمی‌شود. ولی اگر حاصل جمع نیروهای خارجی تغییر داده شود به گونه‌ای که یک نیروی محدود خنثی نشده بر سامانه وارد شود دیگر شرایط تعادل مکانیکی برقرار نخواهد بود. یک نیروی خنثی نشده، می‌تواند سامانه را وادار کند تا از حالت‌های ناپایدار عبور کند. اگر بخواهیم در طی یک فرایند تمام حالت‌های یک سامانه را توسط مختصات ترمودینامیکی مربوط به کل سامانه توصیف کنیم، فرایند نباید توسط یک نیروی خنثی نشده ایجاد شود. بنابراین، ما باید وضعیت ایده‌آلی را تصور کنیم که در آن نیروهای خارجی وارد بر سامانه فقط به مقدار اندکی تغییر می‌کنند، به گونه‌ای که نیروهای خنثی نشده بی‌نهایت کوچک است. فرایندی که با این روش ایده‌آل انجام می‌شود، ایستاوار می‌گویند [۱]. در طی یک فرایند ایستاوار سامانه در تمام لحظات خیلی نزدیک به حالت تعادل است و تمام حالت‌هایی که سامانه از آنها عبور می‌کند را می‌توان توسط مختصات ترمودینامیکی مربوط به کل سامانه توصیف کرد. فرایند ایستاوار کمال مطلوبی است که قابل اعمال بر همه سامانه‌های ترمودینامیکی است. شرایط لازم برای چنین فرایندی را هرگز نمی‌توانیم در آزمایشگاه به طور تمام و کمال برقرار کنیم ولی تقریباً می‌توانیم به آنها نزدیک شویم.

۸.۱.۱ فرایندهای برگشت‌پذیر و برگشت‌ناپذیر

فرایندهای برگشت‌پذیر به گونه‌ای انجام می‌شوند که در پایان فرایند، هم سامانه و هم محیط به حالت‌های اولیه خود باز می‌گردند، بدون اینکه هیچ تغییری در بقیه جهان ایجاد کنند.

فرایندی که چنین شرایطی دقیقی را ایجاد نکند، برگشت‌ناپذیر خوانده می‌شوند. واضح است که یک فرایند غیرتعادلی در حالت کلی نمی‌تواند برگشت‌پذیر باشد. از طرف دیگر، یک فرایند تعادلی همواره برگشت‌پذیر است. یکی از نتایج مستقیم قانون دوم ترمودینامیک این است که تمام فرایندهای طبیعی خودبخودی برگشت‌ناپذیر هستند. برای اینکه یک فرایند برگشت‌پذیر باشد باید به طور ایستوار انجام گیرد و با هیچ اثر اتلاف‌کننده‌ای همراه نباشد. از آنجا که غیرممکن است این دو شرط را به طور کامل برقرار کرد، فرایند برگشت‌پذیر یک تصور ایده‌آل است که هر چند برای محاسبات نظری مفید است ولی کاملاً به دور از واقعیت است [۱].

۹.۱.۱ ترمودینامیک تعادلی

ترمودینامیک تعادلی به بررسی فرایندهای ترمودینامیکی در سامانه‌هایی که در آن تعادل ترمودینامیکی برقرار است، می‌پردازد. یک حالت تعادلی با مقادیر پارامترهای ماکروسکوپی T, P, V مشخص می‌شود. ترمودینامیک تعادلی تغییر خواص سامانه را بین دو حالت تعادلی بررسی می‌کند. اما هیچ بحثی در مورد زمان مورد نیاز برای انجام این تغییر، نمی‌کند. در ترمودینامیک تعادلی تنها یک روش تحت عنوان روش آنسامبل گیبس^۵ به کار می‌رود.

۱۰.۱.۱ ترمودینامیک غیرتعادلی

ترمودینامیک غیرتعادلی به بررسی فرایندهای که در آن تعادل برقرار نیست، می‌پردازد. عمده پدیده‌های طبیعی دارای تعادل ترمودینامیکی نیستند. ترمودینامیک غیرتعادلی زمینه بسیار جدید و جالبی از ترمودینامیک است، که می‌تواند در بررسی برخی از سامانه‌ها که ترمودینامیک کلاسیک کفایت لازم را ندارد، مورد استفاده قرار گیرد.

در ترمودینامیک غیرتعادلی زمان به عنوان متغیر کلیدی در مطالعه رفتار غیرتعادلی سامانه‌ها است. در ترمودینامیک غیرتعادلی نیز دو شیوه برای مطالعه سامانه‌ها وجود دارد. روش اول روش‌های ماکروسکوپی، روش دوم روش‌های آماری یا میکروسکوپی است، که رفتار دینامیکی مولکول‌ها و اجزای سازنده سامانه جهت کسب اطلاعات ماکروسکوپی مورد استفاده قرار می‌گیرد.

۱۱.۱.۱ کار

اگر سامانه‌ای در اثر نیروی وارد بر آن تغییر مکان دهد، کار انجام شده است، مقدار کار برابر با حاصل ضرب نیرو و مولفه تغییر مکان به موازات نیرو است. اگر سامانه‌ای نیرویی به محیط مجاور خود وارد کند و تغییر مکانی رخ دهد، کاری که توسط سامانه انجام می‌شود یا بر روی سامانه انجام می‌شود کار خارجی می‌نامند. اما کاری که توسط قسمتی از یک سامانه بر روی

⁵ Gibbs Ensemble

قسمت دیگر آن انجام گیرد کار داخلی نامیده می‌شود. کار داخلی در ترمودینامیک جایی ندارد. فقط کاری که شامل برهم کنش بین یک سامانه و محیط مجاور آن باشد، دارای اهمیت است. هنگامی که یک سامانه کار خارجی انجام دهد، تغییرات حاصله را می‌توان به کمک کمیت‌های ماکروسکوپی که به کل سامانه مربوط هستند توصیف کرد [۱].

۱۲.۱.۱ گرما

آنچه بین سامانه و محیط صرفاً به علت اختلاف دما منتقل می‌شود، گرما است. وقتی یک سامانه، که محیط آن در دمای متفاوتی است و بر روی آن می‌توان کاری انجام داد، دستخوش فرایندی شود، انرژی که از طریق غیرمکانیکی انتقال پیدا می‌کند و برابر تفاضل تغییر انرژی داخلی و کار انجام شده است، گرما نامیده می‌شود [۱].

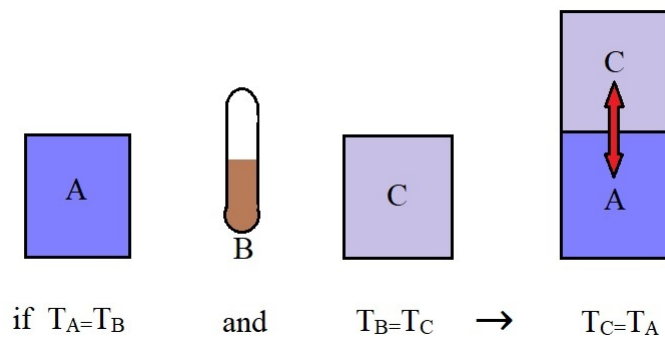
$$Q = U_f - U_i - W \quad (1.1)$$

اگر Q وارد سامانه شود مثبت و زمانی که از آن خارج می‌شود منفی در نظر می‌گیریم. این انرژی از بخشی از یک سامانه به بخش دیگر و یا از یک سامانه به سامانه دیگر، صرفاً به علت اختلاف دما جریان پیدا می‌کند. گرما و دما دو کمیت مرتبط به یکدیگر هستند، اما این به معنای آن نیست که گرما و دما یک کمیت و یک معنا هستند. دمای یک جسم در واقع نشان دهنده سرعت حرکت ذرات تشکیل دهنده آن است. هر چه سرعت حرکت ذرات یک ماده بیشتر باشد دمای آن جسم بالاتر است. به همین دلیل می‌توان گفت که افزایش دمای یک جسم به معنی افزایش انرژی جنبشی ذرات آن جسم است. در طی فرایند، گرما نامعلوم است. کمیت معلوم در خلال فرایند، سرعت جریان گرما \dot{Q} است که تابعی از زمان می‌باشد. تنها زمانی می‌توان آن را تعیین کرد که زمان $\tau_2 - \tau_1$ سپری شده باشد. فقط بعد از پایان یافتن جریان است که می‌توان گرما را به عنوان «انرژی داخلی منتقل شده از یک سامانه با دمای بالاتر به یک سامانه با دمای پایین‌تر» تلقی کرد.

آزمایش‌ها نشان می‌دهند که زمانی که دو جسم در تماس با هم هستند گرما به طور خودبخودی از جسم گرم‌تر به جسم سردتر منتقل می‌شود، ولی در جهت معکوس امکان‌پذیر نیست. با این حال، شرایطی وجود دارد که گرما ممکن است در جهت معکوس حرکت کند. یک نمونه خوب از حرکت گرما در جهت معکوس، یک فریزر آشپزخانه است. غذایی را که در دمای اتاق است، در فریزر قرار می‌دهیم، سپس فریزر گرما را از مواد غذایی می‌گیرد و به نقطه انجماد می‌رساند. گرما از غذای گرم به فریزر سردتر منتقل می‌شود، ظاهراً در جهت معکوس است. اگر یک قطعی برق وجود داشته باشد، گرما به آرامی از آشپزخانه گرم به فریزر منتقل می‌شود و تمام غذای یخ‌زده را ذوب می‌کند. این نشان می‌دهد که معکوس کردن جهت جریان گرما ممکن است، البته فقط با صرف انرژی امکان‌پذیر است. بخش انتقال، بخش بسیار مهمی از تعریف فوق است. با توجه به اینکه می‌توان گرما را به یک شی انتقال داد، اما نمی‌توان گفت که یک جسم شامل چه مقدار از گرما است [۱۱].

۱۳.۱.۱ قانون صفرم ترمودینامیک

دما خاصیتی است که می‌تواند جهت جریان یافتن انرژی گرمایی را تعیین کند. بدین ترتیب که وقتی دو جسم در تماس با هم قرار گیرند، گرما از جسمی که دمای بالاتری دارد به جسم دیگر که دمای پایین‌تری دارد جریان پیدا می‌کند. هرگاه این دو جسم هم‌دما باشند، میان آنها انتقال گرمایی قابل مشاهده‌ای، رخ نمی‌دهد و گفته می‌شود که آن دو جسم با هم به تعادل گرمایی رسیده‌اند. هرگاه دو جسم مانند A و B هر یک جداگانه با جسم سوم C در تعادل گرمایی باشد، تجربه نشان می‌دهد که دو جسم A و B نیز زمانی که با هم تماس پیدا کنند، در تعادل گرمایی هستند [۲]. بنابراین قانون صفرم می‌گوید که اگر دو جسم با جسم سوم در حال تعادل گرمایی باشند، با یکدیگر در تعادل گرمایی هستند. قانون صفرم پایه‌ای برای ساختن وسیله‌ای به نام دماسنج است. در یک دماسنج، یک خاصیت فیزیکی مانند طول یک ستون مایع در یک لوله موئین با تغییر دما، تغییر می‌کند. برای مثال با بالا رفتن دمای مایع در یک لوله، طول آن نیز افزایش می‌یابد. بدین ترتیب، طول ستون مایع در لوله می‌تواند میزانی از دمای مایع را نشان دهد. هرگاه یک لوله موئین که دارای مقداری جیوه است را در تماس با جسمی مانند A قرار دهیم تا میان آنها تعادل گرمایی برقرار شود، ستون جیوه در لوله، طول مشخصی پیدا خواهد کرد. حال اگر همین لوله را در تماس با جسم B قرار دهیم و پس از برقراری تعادل گرمایی میان آن دو، دیده شود که طول ستون جیوه در لوله باز هم مساوی همان مقدار قبلی است، در آن صورت بر پایه قانون صفرم، می‌توان گفت که جسم A و B هم‌دما هستند [۲].



شکل ۴.۱: بیان قانون صفرم ترمودینامیک

۱۴.۱.۱ قانون اول ترمودینامیک

قانون اول ترمودینامیک با معرفی انرژی داخلی به عنوان یک کمیت، تابع حالتی است که بر مبنای آن مجاز بودن یک فرایند تا جایی که که انرژی ثابت بماند، مورد قضاوت قرار می‌دهد. این قانون نشان می‌دهد انرژی در یک سامانه از بین نمی‌رود یعنی خلق یا نابود نمی‌شود، بلکه

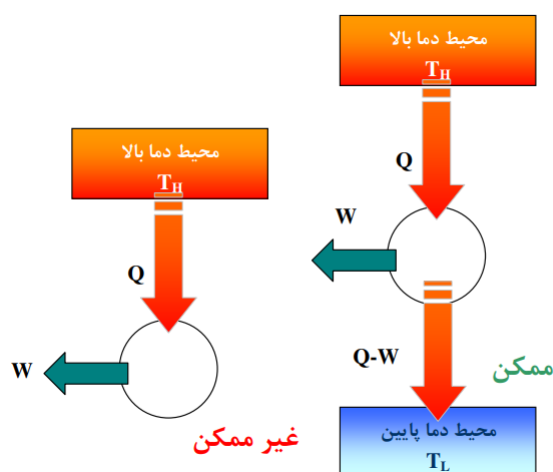
از شکلی به شکل دیگر تبدیل می‌شود. به عبارت دیگر انرژی داخلی سامانه ثابت می‌ماند، مگر اینکه با انجام کار یا انتقال گرما مقدارش تغییر کند. گرما Q و کار W دو شکل متفاوت از انرژی هستند. طبق قانون اول ترمودینامیک، مقدار انرژی مبادله شده در یک فرایند به صورت کار و گرما ثابت است و بستگی به نوع و نحوه تغییر حالت ندارد [۱۱]. در نتیجه مقدار آن برابر است با تغییرات کلی انرژی سامانه که آن را انرژی درونی U می‌نامند.

$$\Delta U = W + Q \quad (2.1)$$

۱۵.۱.۱ قانون دوم ترمودینامیک

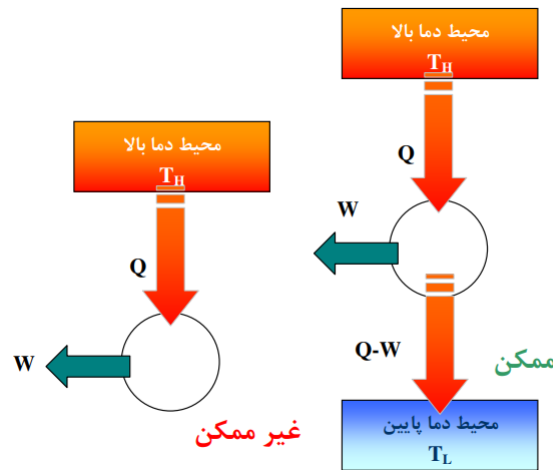
در یک فرایند ترمودینامیکی جمع آنتروپی سامانه‌های شرکت کننده در آن فرایند، همواره با گذشت زمان افزایش می‌یابد. تنها اگر در شرایط ایده‌آل، یا تحت فرایند برگشت‌پذیری قرار داشته باشد، آنتروپی $\Delta S = 0$ ثابت می‌ماند [۱۱]. به بیان دیگر هیچ فرایند ترمودینامیکی وجود ندارد که با گذشت زمان با افزایش آنتروپی همراه نباشد. در نتیجه برای سامانه‌های ترمودینامیکی در صورت تحول از حالتی به حالت دیگر مقدار آنتروپی افزایش $\Delta S > 0$ پیدا می‌کند. آنتروپی کمیتی ترمودینامیکی است که اندازه‌ای برای تعیین بی‌نظمی در هر سامانه است. هر چه بی‌نظمی سامانه‌ای بالاتر باشد، آنتروپی آن بیشتر است. غیر ممکن است بتوان ماشینی ساخت که گرما را که از یک منبع جذب کند و بدون اینکه مقداری از آن را به یک منبع با دمای پایین‌تر پس بدهد، به کار تبدیل کند. قانون دوم به دو صورت زیر بیان شده است.

بیان کلوین-پلانک هیچ فرایندی که تنها نتیجه آن جذب گرما از یک منبع و تبدیل این گرما به کار باشد امکان‌پذیر نیست [۱].



شکل ۵.۱: قانون دوم ترمودینامیک بیان کلوین-پلانک

بیان کلاسیوس هیچ فرایندی که تنها نتیجه آن انتقال گرما از یک جسم سردتر به یک جسم گرم‌تر باشد امکان‌پذیر نیست [۱].



شکل ۶.۱: قانون دوم ترمودینامیک بیان کلاسیوس

در قانون اول چیزی وجود ندارد که مانع تبدیل کامل گرما به کار شود. بنابراین قانون دوم یکی از نتایج قانون اول نیست بلکه خود، قانون طبیعی جداگانه‌ای است که ناظر بر جنبه‌ای از طبیعت است که قانون اول آن را در بر نمی‌گیرد. قانون اول امکان ایجاد و نابودی انرژی را نمی‌کند. قانون دوم، امکان استفاده از یک روش خاص در بهره‌گیری از انرژی را نمی‌کند.

۱۶.۱.۱ قانون سوم ترمودینامیک

قانون سوم ترمودینامیک همانند قانون اول و قانون دوم، حاصل تجربه‌های زیاد انسان درباره طبیعت و رویدادهای آن است. قانون سوم از یک سو قابل دسترس نبودن دمای صفر مطلق را اعلام می‌کند و از سوی دیگر روشی برای تعیین آنتروپی مطلق اجسام را نشان می‌دهد. طبق این قانون همه برهم‌کنش‌ها در دمای صفر مطلق متوقف می‌شوند. در این دما حرکت مولکول‌ها و انرژی جنبشی متوقف می‌شود. پژوهش در رسیدن به دماهای پایین نشان داده است، که دستیابی به دماهای بسیار نزدیک به صفر مطلق امکان‌پذیر است. با وجود این هر چه به دمای صفر مطلق نزدیک‌تر می‌شویم، تفاوت میان آنتروپی دو حالتی مانند A و B که به وسیله یک مسیر برگشت‌پذیر به هم وصل می‌شوند، نیز به صفر نزدیک‌تر می‌شود. با توجه به این، هر چه دما به صفر مطلق نزدیک‌تر شود، کاهشی که ممکن است در دما ایجاد گردد کوچکتر و کوچکتر می‌شود تا اینکه سرانجام به صفر برسد. از آنجا است که دست یافتن به دمای صفر مطلق ناممکن می‌شود [۲].

۲.۱ مفاهیم کوانتومی

۱.۲.۱ ترمودینامیک کوانتومی

در طول تاریخ علم، همواره اصول بنیادین ترمودینامیک و زیرشاخه‌های آن با قوانین علم مکانیک، چه کلاسیک و چه کوانتومی در تضاد و تناقض بوده است. نظریه پردازان فیزیک علاقه‌مند شدند تا قوانین ترمودینامیک را بر اساس مکانیک کوانتومی تعریف نمایند که البته در این زمینه به نتایج قابل توجهی نیز دست یافته‌اند. در این نظریه، گسترش اطلاعات از طریق سامانه‌های کوانتومی توصیف می‌شود، که سعی در بیان مفاهیم ترمودینامیکی با استفاده از نظریه اطلاعات کوانتومی دارد. اگرچه نظریه ترمودینامیک کلاسیک در ابتدا سعی در بهبود کارایی موتورهای بخار داشت، اما ترمودینامیک کوانتومی برای گسترش ماشین‌های کوانتومی، تلاش می‌کند. گروهی از محققان، اخیراً آزمایشی انجام داده‌اند که در آن اولین بار، با استفاده از تکنولوژی کوچک‌سازی، مانند یک موتور تک‌یونی و سه اتم منجمد، موفق به گسترش ترمودینامیک به قلم‌روی کوانتومی شده‌اند، جایی که در آن مفاهیمی مانند دما و کار، معانی معمول خود را از دست داده و قوانین کلاسیک لزوماً صدق نمی‌کنند. نتایج این آزمایش منجر به ارائه نسخه کوانتومی جدیدی از قانون اول ترمودینامیک شده است. بازنویسی اساسی این نظریه باعث شد دانشمندان، ارتباط عمیق و شگفت‌انگیزی بین انرژی و اطلاعات کوانتومی پیدا کنند. ترمودینامیک کوانتومی با هدف گسترش ترمودینامیک استاندارد و فیزیک آماری آنسامبل‌های کوچک ترمودینامیکی در شرایط غیرتعادلی و با گنجاندن اثرات کوانتومی در حال ظهور است. دانشمندان با آزمایش‌های پیشرفته در زمینه‌های مختلف در مقیاس نانو و نظریه اطلاعات کوانتومی و با استفاده از مواد و ابزارها و روش‌هایی که در این زمینه کاربرد دارد، در تلاش هستند. یکی از بزرگترین پازل‌های نظریه اطلاعات کوانتومی این است که نشان دهد چگونه با مطالعه دقیق چند ذره که در نظریه آماری توصیف شده‌اند، می‌توان قوانین جدید ترمودینامیک کوانتومی بدست آورد. ترمودینامیک کوانتومی یکی از نوین‌ترین رشته‌های علم امروز محسوب می‌شود و سعی دارد تا دانش کوانتوم را با علوم گرما آشتی دهد. این علم امروزه مادام در حال گسترش است و جنجال‌هایی نیز بر پا کرده است. بسیاری از فیزیکدانان امیدوار هستند بتوانند با بازسازی علم ترمودینامیک بر اساس قوانین مکانیک کوانتومی به شک و تردیدها و جنجال‌های دیرینه در این خصوص خاتمه دهند. گفتنی است چندین آزمایش عملی در این زمینه نیز صورت گرفته است [۱۳]. دانشمندان از طریق این مطالعات در تلاش هستند، دریابند آیا گرما می‌تواند بر روی عناصر الکترونیکی و یا دستگاه‌هایی که ابعاد اتمی دارند موثر واقع شود. با وجود آنکه تا به امروزه رویکردهای متعددی ارائه شده است، اما این رشته هنوز نو پا قلم‌داد می‌شود و آن‌چنان که باید، جا نیفتاده است. پرسشی که ذهن دانشمندان را به خود مشغول کرده، این است که آیا قوانینی که گرما و انرژی را تحت تأثیر قرار می‌دهند، در مورد سامانه‌های بسیار کوچک در ابعاد نانومتری هم مصداق پیدا می‌کنند

یا اینکه برای آنها باید قوانین جدید دیگری تعریف شود. تلاش برای کشف این موضوع رو به افزایش است. فیزیکدانان به بحث و گفتگو درباره مفهوم سه قانون ترمودینامیک که در قرن نوزده و اوایل قرن بیستم مطرح شده است، پرداخته‌اند. بر اساس این سه قانون انرژی نمی‌تواند به وجود آید و یا از بین برود، در یک سامانه ایزوله آنتروپی نمی‌تواند کاهش یابد و نیز اینکه رساندن دمای اجسام به دمای صفر مطلق غیر ممکن است. در ترمودینامیک نوعی پارادوکس وجود دارد. قانون دوم محدودیت‌هایی در خصوص تبدیل گرما به کار قائل است. که این خود جای بحث دارد. طبق این قانون، ایجاد اختلال، یک فرایند یک طرفه است، اما به عقیده برخی فیزیکدانان این قانون در مقیاس میکروسکوپی با قوانین مکانیک (قانون نیوتن و فیزیک کوانتوم) در تناقض به نظر می‌رسد. از دیدگاه این فیزیکدانان تمامی فرایندها دارای قابلیت برگشت‌پذیری هستند. پژوهشگران راه‌حل‌های متعددی برای حل این معما ارائه داده‌اند. اما هیچ یک نتوانسته است نظر کلیه پژوهشگران را به خود جلب کند. کریستین گوگولین^۶ بر آن شده است تا با استفاده از مکانیک آماری برخی از کمیت‌ها چون دما و گرما را به مکانیک کوانتومی تبدیل کند. برخی از فیزیکدانان بر این باورند که رویکرد آماری-مکانیکی نشان می‌دهد. برخی کمیت‌ها از جمله آنتروپی و یا گرما به میزان اطلاعات بیننده بستگی دارد. این رویکرد در سال‌های اخیر مورد مطالعات بسیاری قرار گرفته و فیزیکدانان از نتیجه این مطالعات دریافته‌اند که اطلاعات چیزی کیفی هستند، اما دارای مفهوم فیزیکی. با این وجود در ده سال اخیر نظریه‌پردازان ثابت نموده‌اند که سامانه‌های کوانتومی گرایشی بسوی رسیدن و حفظ تعادل و یا به اصطلاح گرمایی شدن دارند [۱۴، ۱۵]. اخیراً فیزیکدانان به موفقیت‌هایی در خصوص قانون سوم دست یافته‌اند. پژوهش‌گران اثبات نمودند که قوانین مکانیک کوانتومی سرعتی که به واسطه آن در اجسام گرما ایجاد می‌شود، کاهش می‌دهد و رسیدن به نقطه صفر مطلق نیاز به زمانی نامحدود دارد. از حاصل مطالعات آنها چنین برمی‌آید که قانون سوم از طریق مکانیک کوانتومی قابل اثبات است [۱۶].

۲.۲.۱ نظریه اطلاعات

نظریه اطلاعات کلاسیک به بررسی انتقال اطلاعات از یک نقطه به نقطه دیگر از طریق کانال‌های کلاسیکی می‌پردازد. مسأله اصلی نظریه اطلاعات کوانتومی همانند مسأله اصلی نظریه اطلاعات کلاسیک انتقال پیام از یک نقطه به نقطه دیگر است، با این تفاوت که نحوه انتقال و حتی ماهیت پیام تحت تأثیر آثار کوانتومی قرار دارد. در نتیجه، نظریه کلاسیک نیازمند گسترش می‌باشد. قطعاً قدم اول در این راه تعمیم مفهوم آنتروپی به دنیای کوانتومی است که به آن آنتروپی فون نیومن گفته می‌شود. ممکن است عجیب به نظر برسد اما آنتروپی فون نیومن که تعمیمی از آنتروپی شانون است قبل از آنتروپی شانون معرفی شده است. البته آنتروپی فون نیومن در مباحث مربوط به ترمودینامیک و جهت اندازه‌گیری بی‌نظمی مطرح

⁶ Christian Gogolin

شده بود، و در نگاه فون نیومن معنای اطلاعاتی نداشته است. علی‌رغم مقدم بودن تعریف آنتروپی فون نیومن بر آنتروپی شانون تا قبل از دهه نود میلادی محققین نظریه اطلاعات عموماً توجه چندانی به نظریه کوانتومی اطلاعات نداشته‌اند، و تنها دو دهه است که بررسی نظام‌مند نظریه اطلاعات کوانتومی شروع شده است. اگر چه بسیاری از نتایج دنیای کوانتومی شبیه نتایج کلاسیک هستند، اما مواردی از تفاوت‌های مورد توجه نیز به چشم می‌خورد [۴].

۳.۲.۱ آنتروپی شانون

چگونه می‌توان مفهوم اطلاعات را با توجه به نتایج مکانیک کوانتومی به سامانه‌های کوانتومی گسترش داد؟ در سامانه‌های کلاسیک مقدار اطلاعات با احتمالات ارتباط دارد. در سامانه‌های کوانتومی، این احتمال‌ها توسط ماتریس‌های چگالی جایگزین می‌شوند. ماتریس چگالی برای توصیف وضعیت آماری یک سامانه کوانتومی استفاده می‌شود [۳، ۵]. اولین عملیات پایه‌ای در نظریه اطلاعات کلاسیکی تعیین میزان اطلاعات درون یک پیام است. این مسئله توسط شانون^۷ در سال ۱۹۴۸ حل شد. یک پیام رشته‌ای مانند $A = \{a_1, a_2, \dots, a_k\}$ را در نظر بگیرید به گونه‌ای که حروف درون پیام از لحاظ آماری مستقل باشند. حرف a_i با احتمال p_i دریافت می‌شود که $\sum_i^k p_i = 1$. آنتروپی شانون متناسب با توزیع احتمال $\{p_1, p_2, \dots, p_k\}$ عبارت است از

$$H(p_1, p_2, \dots, p_k) = - \sum_{i=1}^K p_i \log p_i \quad (۳.۱)$$

این آنتروپی میزان اطلاعات هر حرف پیام را تعیین می‌کند.

۴.۲.۱ آنتروپی فون نیومن

نسخه مشابه آنتروپی شانون در نظریه اطلاعات کوانتومی آنتروپی فون نیومن^۸ است. اگر حالت سامانه کوانتومی توسط ماتریس چگالی بیان شود، آنتروپی فون نیومن عبارت است از

$$S(\rho) = -tr(\rho \log \rho) \quad (۴.۱)$$

برای مشاهده شباهت بین آنتروپی شانون و فون نیومن فرض کنید که آلیس یک مجموعه از حروف الفبا $A = \{\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_k\}$ را در اختیار دارد که هر حرف ρ_i که توصیف کننده حالت‌های کوانتومی (خالص یا آمیخته) است با احتمال p_i انتخاب می‌شود. حال آلیس یک حرف (یک حالت کوانتومی) را برای باب می‌فرستد [۴]. باب تنها می‌داند که این حرف از آنسامبل $\{\rho_i, p_i\}$ به دست آمده است. بنابراین باب این سامانه کوانتومی را با استفاده از ماتریس چگالی زیر توصیف

⁷ Shannon

⁸ Von Neumann

می‌کند.

$$\rho = \sum_i p_i \rho_i \quad (5.1)$$

و بنابراین آنتروپی فون نیومن آن عبارت است از

$$S(\rho) = -tr(\rho \log \rho) = -\sum_i \lambda \log \lambda_i = H(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_k) \quad (6.1)$$

که λ_i ها ویژه مقادیر ماتریس چگالی ρ و $H(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_k)$ آنتروپی شانون متناظر با آنسامبل $\{\lambda_i\}$ است.

آنتروپی فون نیومن دارای خواص زیر است.

۱. برای حالت‌های خالص $S(\rho) = 0$. در حالت‌های خالص تنها ویژه مقدار مخالف صفر،

$$S(\rho) = -\sum_i \lambda_i \log \lambda_i = -\lambda_1 \log \lambda_1 = 0$$

۲. آنتروپی تحت تبدیل یکانی پایه‌های فضا تغییر نمی‌کند، یعنی $S(U\rho U^\dagger) = S(\rho)$ در واقع آنتروپی تنها به ویژه مقادیر ماتریس ρ که مستقل از پایه‌ها هستند، وابسته است. به این مفهوم آنتروپی فون نیومن تحت تحول یکانی در زمان ناوردا است.

۳. اگر عملگر چگالی ρ بر روی فضای N بعدی اثر کند، $0 \leq S(\rho) \leq \log N$ به راحتی می‌توان دید که $S(\rho) \geq 0$ از آنجایی که $0 \leq \lambda_i \leq 1$ بنابراین $-\lambda_i \log \lambda_i \leq 0$ برای نشان دادن $S(\rho) \geq \log N$ از رابطه $S(\rho) = H(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_k)$ استفاده می‌نماییم. بیشترین مقدار آنتروپی شانون به ازای $\lambda_1 = \lambda_2 = \dots = \lambda_k = \frac{1}{N}$ است [۵]. بنابراین

$$S_{max}(\rho) = -\frac{1}{N} \sum_i \log \frac{1}{N} = \log N \quad (7.1)$$

۵.۲.۱ آنتروپی نسبی

اگر $p(x_i)$ و $q(x_i)$ دو احتمال متفاوت برای مقدار x_i از متغیر تصادفی X باشند. آنتروپی نسبی این دو تابع توزیع بصورت زیر تعریف می‌شود [۳].

$$H(p \parallel q) = \sum p(x_i) \log \frac{p(x_i)}{q(x_i)} \quad (8.1)$$

آنتروپی نسبی همواره بزرگ‌تر یا مساوی صفر است و مساوی وقتی برقرار است که دو تابع توزیع یکسان باشند. آنتروپی نسبی معیاری از فاصله دو تابع توزیع است، اگر چه باید توجه کرد که آنتروپی نسبی متقارن نیست، یعنی

$$H(p \parallel q) \neq H(q \parallel p) \quad (9.1)$$

۶.۲.۱ اصول موضوعه حالت‌های خالص از سامانه کوانتومی منزوی

در مکانیک کوانتومی اتفاق‌هایی که در حین یک فرایند برای یک سامانه کوانتومی اتفاق می‌افتد، اهمیت چندانی ندارد و تنها حالت‌های اولیه و نهایی سامانه مورد توجه قرار دارد. در آزمایشگاه مجموعه احتمال‌های گذار از حالت‌های اولیه به نهایی تعیین می‌شود. در ادامه به بیان اصول متعارف حالت‌های خالص یک سامانه کوانتومی منزوی^۹ که هیچ برهم‌کنشی با محیط پیرامون خود ندارد می‌پردازیم.

اصل ۱. **حالت خالص**^{۱۰} یک سامانه کوانتومی منزوی توسط بردار حالت آن $|\psi\rangle$ توصیف می‌شود که $|\psi\rangle$ یک بردار بهنجار در فضای هیلبرت H از سامانه است.

اصل ۲. **اندازه‌گیری تصویری، تحول دینامیکی نامعین**

الف) یک اندازه‌گیری تصویری انجام شده بر روی سامانه کوانتومی از یک کمیت کوانتومی (به‌عنوان مثال انرژی، تکانه زاویه‌ای و...) توسط عملگر هرمیتی که می‌تواند وابسته به زمان باشد و بر روی بردارهای فضای هیلبرت اثر می‌کند، توصیف می‌شود.

ب) مقادیر اندازه‌گیری شده که از نتیجه اندازه‌گیری بر روی مشاهده‌پذیر A به دست می‌آیند، ویژه‌مقادیر a_n هستند. با فرض گسسته بودن طیف عملگر برای سادگی در نوشتار داریم:

$$A|u_n\rangle = a|u_n\rangle \quad (10.1)$$

ج) به محض اندازه‌گیری مشاهده‌پذیر A با حالت‌های بهنجار $|\psi\rangle$ حالت نابهنجار $|\psi'_n\rangle$ به دست می‌آید:

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi'_n\rangle = P_n|\psi\rangle \quad (11.1)$$

به همراه عملگر تصویری

$$P_n = \sum_{i=1} |u_n^i\rangle\langle u_n^i| \quad (12.1)$$

ت) تعداد مقادیر به دست آمده a_n از اندازه‌گیری بر روی N سامانه یکسان در حالت $|\psi\rangle$ را با $N(a_n)$ نشان می‌دهیم. احتمال $p(a_n)$ به دست آمده از اندازه‌گیری مقدار a_n در یک زمان مشخص برابر با مقدار چشم‌داشتی عملگر تصویری P_n است.

$$p(a_n) = \langle\psi|P_n|\psi\rangle = \|\psi\|^2 \quad (13.1)$$

از آنجایی که A یک عملگر هرمیتی است، $\sum_n P_n = 1$ و بنابراین

$$\sum_n p(a_n) = \langle\psi|\psi\rangle = 1 \quad (14.1)$$

⁹ isolated quantum system

¹⁰ pure state

اصل ۳. تحول دینامیکی معین

(الف) برای سامانه‌های منزوی، توزیع احتمال $p(a_n)$ در یک مسیر برگشت‌پذیر و معین بین حالت آماده‌شده اولیه و حالت اندازه‌گیری شده، تحول می‌یابد. این تحول زمانی بین زمان‌های t_0 و t توسط عملگر یکانی $U(t, t_0)$ انجام می‌شود و بنابراین:

$$U^\dagger(t, t_0) = U^{-1}(t, t_0) \quad (۱۵.۱)$$

برای این عملگر خواص زیر را نیز داریم:

$$U(t_0, t_0) = 1 \quad (۱۶.۱)$$

$$U(t_2, t_1)U(t_1, t_0) = U(t_2, t_0)$$

معادله دینامیکی $U(t, t_0)$ عبارت است از

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = H(t)U(t, t_0) \quad (۱۷.۱)$$

که در آن $H(t)$ عملگر هامیلتونی و \hbar ثابت پلانک است. (پ) در تصویر شرودینگر تحول زمانی هر حالت به صورت زیر بیان می‌شود [۵،۶].

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0)|\psi(0)\rangle \quad (۱۸.۱)$$

۷.۲.۱ حالت‌های آمیخته

در دنیای واقعی، اطلاعات ما از حالت سامانه بعد از اندازه‌گیری کامل نیست و در ضمن هیچ سامانه‌ای به‌طور کامل از محیط پیرامون خود مستقل نیست. در چنین حالتی تنها می‌توانیم بگوییم کسر p_i از اجزای سامانه (به‌عنوان مثال اتم‌ها) در حالت $|\psi_i\rangle$ قرار دارند و حالت دستگاه به‌جای خالص، آمیخته است. در غیاب هرگونه اطلاعاتی که یک حالت را بر دیگر حالت‌ها ترجیح دهد، می‌توانیم با اطمینان بیان کنیم که توزیع اجزای سامانه بر روی حالت‌های مختلف کاملاً یکنواخت است. برای یک سامانه آمیخته مقدار میانگین مشاهده‌پذیر به‌صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$\langle A \rangle = \sum_i P_i \langle \psi_i | A | \psi_i \rangle = \text{tr}(\rho A) \quad (۱۹.۱)$$

که در آن ρ عبارت است از

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \quad (۲۰.۱)$$

و ماتریس چگالی سامانه نامیده می‌شود. بنابراین حالت چنین سامانه‌ای به جای یک بردار با یک ماتریس چگالی بیان می‌شود. این ماتریس چگالی دربرگیرنده تمامی اطلاعاتی است که ما

می‌توانیم از سامانه کوانتومی کسب کنیم. به راحتی می‌توان تحقیق کرد که ماتریس چگالی دارای خواص زیراست.

$$\begin{aligned} \text{tr}(\rho) &= 1 \\ \rho^\dagger &= \rho \\ \rho &\geq 0 \end{aligned} \quad (21.1)$$

یک حالت، خالص است اگر و فقط اگر $\text{tr}(\rho^2) = 1$. برای به‌دست آوردن حالت یک بخش از سامانه چندبخشی باید بر روی درجه‌های آزادی بخش‌های دیگر ردگیری نماییم. نتیجه این ردگیری جزئی^{۱۱} ماتریس چگالی کاهش یافته^{۱۲} بخش مورد نظر است برای یک فضای هیلبرت H مجموعه تمام حالت‌های کوانتومی را با $S(H)$ نمایش می‌دهند و به آن فضای حالت گفته می‌شود. حال اگر ρ_1 و ρ_2 دو ماتریس چگالی باشند $(\rho_1, \rho_2 \in S(H))$ ماتریس

$$\rho(\lambda) = \lambda\rho_1 + (1 - \lambda)\rho_2, \quad 0 \leq \lambda \leq 1 \quad (22.1)$$

نیز یک ماتریس چگالی در این فضای حالت است این موضوع نشان می‌دهد که مجموعه ماتریس‌های چگالی در فضای حالت یک مجموعه محدب را تشکیل می‌دهند. حال که با مفهوم ماتریس چگالی آشنا شدیم می‌توان اصول موضوعه مربوط به حالت و اندازه‌گیری را بازنویسی نمود.

اصل ۱. **حالت**: حالت یک سامانه کوانتومی در فضای هیلبرت یک ماتریس هرمیتی مثبت با رد واحد است که ماتریس چگالی نامیده می‌شود و معمولاً با ρ نمایش داده می‌شود.

اصل ۲. **اندازه‌گیری تصویری**: هر اندازه‌گیری تصویری روی یک سامانه با مجموعه‌ای از عملگرهای تصویری P_n مشخص می‌شود که در شرایط زیر صدق می‌کنند [۵].

$$\begin{aligned} P_n P_m &= \delta_{n,m} P_n \\ \sum_n P_n &= I \end{aligned} \quad (23.1)$$

که در آن I عملگر واحد روی فضای هیلبرت سامانه است. هرگاه حالت اولیه سامانه را با ρ نمایش دهیم حالت بعد از اندازه‌گیری تنها با احتمال مشخص می‌شود، به این معنا که با احتمال $P(n) = \text{tr}(P_n \rho P_n)$ حالت بعد از اندازه‌گیری عبارت است از

$$\rho' = \frac{P_n \rho P_n}{\text{tr}(P_n \rho P_n)} \quad (24.1)$$

¹¹ partial trace

¹²reduced density matrix

۸.۲.۱ دینامیک یک زیرسامانه

همانطور که در قبل ذکر گردید، حالت یک سامانه کوانتومی که با یک بردار حالت خالص توصیف می‌شود، طبق رابطه $|\psi(t)\rangle = U(t, t_0)|\psi(0)\rangle$ در زمان تحول می‌یابد. ولی وقتی که حالت سامانه خالص نیست و با یک ماتریس چگالی توصیف می‌شود، این ماتریس چگالی بر طبق رابطه زیر در زمان تحول می‌یابد.

$$\rho(t) = U(t, t_0)\rho(0)U^\dagger(t, t_0) \quad (25.1)$$

این تحول زمانی ماتریس چگالی تنها در یک حالت خاص صحیح است که برهم‌کنش سامانه با محیط صفر و یا خیلی ضعیف است. برای توضیح مناسب‌تر فرض می‌کنیم در لحظه صفر، حالت سامانه که آن را با A نشان می‌دهیم و محیط که با B نشان می‌دهیم به صورت زیر است.

$$\rho_{AB}(0) = \rho_A \otimes \rho_B \quad (26.1)$$

حال فرض کنیم هامیلتونی سامانه و محیط به شکل زیر است

$$H_{AB} = H_A \otimes I_B + I_A \otimes H_B \quad (27.1)$$

در این صورت عملگر تحول سامانه – محیط به شکل ساده زیر بیان می‌شود:

$$\begin{aligned} U_{AB}(t, t_0) &= e^{-\frac{i}{\hbar}H_{AB}(t-t_0)} = e^{-\frac{i}{\hbar}(H_A \otimes I_B + I_A \otimes H_B)(t-t_0)} \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar}H_A(t-t_0)} \otimes e^{-\frac{i}{\hbar}H_B(t-t_0)} \\ &= U_A(t, t_0) \otimes U_B(t, t_0) \end{aligned} \quad (28.1)$$

بنابراین خواهیم داشت:

$$\begin{aligned} \rho_{AB}(t) &= U_{AB}(t, t_0)\rho_{AB}U_{AB}^\dagger(t, t_0) \\ &= (U_A(t, t_0) \otimes U_B(t, t_0))\rho_{AB}(U_A^\dagger(t, t_0) \otimes U_B^\dagger(t, t_0)) \\ &= U_A(t, t_0)\rho_A(t_0)U_A^\dagger(t, t_0) \otimes U_B(t, t_0)\rho_B(t_0)U_B^\dagger(t, t_0) \end{aligned} \quad (29.1)$$

در نتیجه ماتریس چگالی سامانه در زمان t عبارت خواهد بود از

$$\rho_A(t) = \text{tr}_B(\rho_{AB}(t)) = U_A(t, t_0)\rho_A(t_0)U_A^\dagger(t, t_0) \quad (30.1)$$

حالت به دست آمده همانی است که در مکانیک آماری با آن مواجه هستیم [۵].

۹.۲.۱ اندازه‌گیری

معمولاً در مکانیک کوانتومی گفته می‌شود که به ازای هر مشاهده‌پذیر مانند A یک عملگر هرمیتی مانند \hat{A} وابسته است که اندازه‌گیری روی یک حالت دلخواه با احتمال معین یکی

از ویژه مقادیر آن عملگر را به دست خواهد داد و سامانه کوانتومی بعد از اندازه گیری با همان احتمال به ویژه زیر فضای مربوط به آن ویژه مقدار اندازه گیری شده تصویر خواهد شد [۵]. مجموعه عملگرهای تصویری $\{P_m, m = 1, \dots, K\}$ یک دستگاه اندازه گیری تصویری را تشکیل می دهند. این عملگرها دارای خاصیت های زیر هستند.

$$\begin{aligned} P_m P_n &= \delta_{m,n} P_m \\ \sum_m P_m &= I \end{aligned} \quad (31.1)$$

هر عملگر P_m به یک نتیجه از آزمایش اندازه گیری مانند نتیجه m وابسته است. اندازه گیری روی حالت ρ با احتمال $P_m = \text{tr}(P_m \rho P_m)$ نتیجه m را به دست می دهد. حالت هایی بعد از اندازه گیری با چگالی احتمال زیر داده می شود.

$$\rho_m = \frac{P_m \rho P_m}{\text{tr}(P_m \rho P_m)} \quad (32.1)$$

حالت های بعد از اندازه گیری برهم عمود هستند و به همین دلیل به آن اندازه گیری متعامد می گویند. بنابراین

$$\rho_m \rho_n = 0, m \neq n \quad (33.1)$$

اگر مشاهده پذیری مانند A مقدار a_m را برای نتیجه m از اندازه گیری بالا داشته باشد، مقدار میانگین آن عبارتند از

$$\langle A \rangle_\rho = \sum_m a_m P(m) = \sum_m a_m \text{tr}(P_m \rho P_m) = \text{tr}(\hat{A} \rho) \quad (34.1)$$

که در آن $\hat{A} = \sum_m a_m P_m$ عملگر هرمیتی است که به A نسبت داده می شود.

۱۰.۲.۱ جابه جایی عملگرها

زمانی که عملگری روی یک حالتی اثر کند، حالت را عوض می کند. وقتی می گوییم جابه جایی دو عملگر برابر صفر است، یعنی این دو عملگر دارای ویژه حالت های یکسان هستند، به صورتی که اگر ویژه حالت ها یا ویژه توابع یک عملگر را به دست آوریم، برای عملگر دیگری که با آن جابه جا می شود را نیز به دست آورده ایم. جابه جایی و پادجابه جایی به صورت زیر تعریف می شوند [۷].

$$\begin{aligned} [A, B] &= AB - BA \\ \{A, B\} &= AB + BA \end{aligned} \quad (35.1)$$

فصل ۲

سامانه‌های انتگرال‌پذیر و شرایط گرمایی شدن

۱.۲ مفهوم انتگرال پذیری در مکانیک کلاسیک و مکانیک کوانتومی

۱.۱.۲ مقدمه

هدف از مطالعه انتگرال پذیری در مکانیک کوانتومی بررسی رفتار حالت‌های منظم و نامنظم سامانه‌های کوانتومی است. مکانیک کوانتومی به عنوان نظریه اساسی برای توصیف پدیده‌های فیزیکی، حداقل باید به طور عمده ویژگی‌های اساسی مکانیک کلاسیک را دارا باشد. به همین علت باید رفتار آشوبناک را که در مکانیک کلاسیک وجود دارد، در زمینه مکانیک کوانتومی درک کنیم. در واقع رویکردهای مختلفی برای این مساله وجود دارد که زمینه آشفتنگی کوانتومی را تشکیل می‌دهد [۱۷، ۱۸].

۲.۱.۲ شرط بنیادی کوانتوم

روابطی که سنگ‌بناهای مکانیک کوانتومی تشکیل می‌دهند و پل آدرین موریس دیراک^۱ آنها را «شرایط بنیادین کوانتوم» نامید، روابط جابجایی زیر هستند [۷].

$$\begin{aligned} [X_i, X_j] &= 0 \\ [P_i, P_j] &= 0 \\ [X_i, P_j] &= i\hbar\delta_{i,j} \end{aligned} \quad (1.2)$$

که غالباً آنها را با نام «روابط جابجایی کانونیک» یا «روابط جابجایی بنیادی» می‌شناسیم که با بررسی خواص انتقال نتیجه شده است. در سال ۱۹۲۵ دیراک دید که روابط مختلف کوانتومی را می‌توان از روابط کلاسیک متناظر آنها با جایگزین کردن گروه‌های پواسون با جابجایی‌ها به صورت زیر به دست آورد.

$$[,]_{classical} \rightarrow \frac{[,] }{i\hbar} \quad (2.2)$$

که گروه‌های پواسون کلاسیکی را برای توابعی از p ها و q ها را به صورت زیر تعریف می‌کند.

$$[A(q, p), B(q, p)]_{classical} = \sum_s \left(\frac{\partial A}{\partial q_s} \frac{\partial B}{\partial p_s} - \frac{\partial A}{\partial p_s} \frac{\partial B}{\partial q_s} \right) \quad (3.2)$$

با تعریف روابط جابجایی بنیادی، دیراک معادله بنیادی حرکت در تصویر هایزنبرگ برای عملگر A به صورت زیر نوشت.

$$\frac{dA}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [A, H]_{classical} \quad (4.2)$$

¹Paul Adrien Maurice Dirac

در مکانیک کلاسیک نشان داده شده است که اگر A تابعی از p ها و q ها باشد، آنگاه

$$\frac{dA}{dt} = [A, H]_{classical} \quad (5.2)$$

با قیاس دو معادله اخیر با معادله (۲.۲) می بینیم که قاعده کوانتش دیراک به معادله صحیح در مکانیک کوانتومی منجر می شود. معادله (۴.۲) توسط دیراک نوشته شده است که با توجه به شخصیت فروتنانه اش آن را معادله حرکت هایزنبرگ نامید. قابل ذکر است که معادله (۴.۲) همواره صادق است حتی اگر A مانشته کلاسیک هم نداشته باشد. مانند عملگر اسپین در بررسی حرکت تقدیمی اسپین. حال اگر A به عنوان یک عملگر به زمان وابسته نباشد آنگاه بنا به معادله هایزنبرگ، این عملگر با هامیلتونی سیستم جابجاپذیر بوده به طوری که خواهیم داشت.

$$[A, H] = 0 \quad (6.2)$$

آنگاه A به عنوان ثابت سیستم می توان معرفی کرده یک مشاهده پذیر سازگار است و کار اصلی در مکانیک کوانتومی یافتن چنین مشاهده پذیری است [۷].

۳.۱.۲ انتگرال پذیری

در مکانیک کوانتومی اگر یک عملگر وابسته به زمان نباشد، آنگاه با توجه به معادلات حرکت در تصویر هایزنبرگ این عملگر با هامیلتونی سامانه جابجاپذیر بوده و ثابت حرکت نامیده می شود. که در مکانیک کوانتومی به آن انتگرال حرکت و در مکانیک کلاسیک به آن ناوردایی حرکت می گویند. اگر برای یک سامانه کلاسیکی یا کوانتومی غیرنسبیتی در N بعد با هامیلتونی H بتوان N ثابت حرکت مستقل (شامل هامیلتونی) تعریف کرد، به طوری که نسبت به زمان دچار تغییر نشوند، یعنی با هامیلتونی سامانه جابجاپذیر باشند آن گاه چنین سامانه های را انتگرال پذیر می گویند [۱۹]. برای سامانه های انتگرال پذیر، لزوماً ثابت های حرکت مستقل از هم هستند. یعنی علاوه بر اینکه با هامیلتونی سامانه جابجا می شوند با هم نیز جابجاپذیر هستند. حال اگر تعداد ثابت های حرکت سامانه از درجه آزادی سامانه بیشتر باشد سامانه را ابرانترال پذیر می گویند، که یک زیر مجموعه از سامانه های انتگرال پذیر هستند. مفهوم انتگرال پذیری در سامانه های کلاسیکی به خوبی قابل تعریف است. انتگرال پذیری در مکانیک کلاسیک بدان معنی است که تعداد درجه آزادی کمتر از تعداد ثابت های حرکت باشد. ثابت های حرکت در سامانه های کلاسیکی با صفر شدن براکت پواسون مشخص می شود.

در مکانیک کلاسیک مفهوم انتگرال پذیری اهمیت زیادی دارد. در سامانه های غیرانتگرال پذیر تحول زمانی مسیرهای مجاور در طولانی مدت کاملاً متفاوت است. در تعریف انتگرال پذیری کوانتومی نسخه دیراک جایگزین براکت پواسون با مجموعه عملگرهای کوانتومی می شود [۱۹].

$$\{, \} \rightarrow \frac{i}{\hbar} [,] \quad (7.2)$$

یک سامانه کوانتومی با عملگر هامیلتونی انتگرال‌پذیر است اگر N ثابت حرکت کوانتومی داشته باشد.

$$[H, I] = 0 \quad (۸.۲)$$

که همه N ثابت حرکت (I) با یکدیگر جابه‌جا می‌شوند.

$$[I_n, I'_n] = 0 \quad (۹.۲)$$

انتگرال‌پذیری اغلب به عنوان یک پیش‌فرض برای گرمایی‌شدن^۲ کوانتومی مورد استفاده قرار می‌گیرد. با این حال یک تعریف پذیرفته شده از انتگرال‌پذیری کوانتومی نیست. بنابراین ممکن است بتوان مجموعه‌ای از ثابت‌های حرکت را پیدا کرد به طوری که هر سامانه کوانتومی انتگرال‌پذیر به نظر برسد [۱۹]. علاوه بر این می‌توان برای هر مجموعه $[I_n]$ ثابت کرد که:

۱. عملگرهای جابجاپذیر I_n وجود دارد به طوری که $\hat{I}_n = F(x)$ باشد [۲۰]. این قضیه می‌گوید که باید تعداد عملگرهای مستقل، مشخص شود.

۲. ثابت‌هایی مرتبط با انتگرال حرکت هستند که می‌توانند با همتای کلاسیکی خود مربوط باشند [۲۱، ۲۲].

۳. حدس بته^۳: یک سامانه کوانتومی می‌تواند انتگرال‌پذیر باشد اگر بتوان آن را با حدس بته حل کرد. تعریفی از حدس بته این نوع نمی‌تواند کلی باشد چون مدل‌های مختلفی وجود دارد که بدون حدس بته قابل حل هستند [۱۹].

به این صورت است که اگر N گلوله هم جرم در یک بعد با تکانه‌های مختلف به صورت

$$e^{iK_1X_1+iK_2X_2+\dots} \quad (۱۰.۲)$$

در حرکت باشند و با هم برخورد کشسان کنند، بتوان تابع موجی به صورت

$$e^{iK_1X_1+iK_2X_2+\dots} + e^{iK_2X_1+iK_1X_2+\dots} + \dots \quad (۱۱.۲)$$

نوشت سامانه انتگرال‌پذیر است زیرا تکانه گلوله‌ها با هامیلتونی جابجاپذیر است. که فرض کامل نمی‌باشد [۲۳].

۴. سطح آماری پواسونی: یک سامانه کوانتومی در صورتی که نمودار انرژی آن پواسونی باشد انتگرال‌پذیر است، که برای هر سامانه عمومیت ندارد [۲۴].

۵. حل‌پذیری: سامانه کوانتومی در صورتی که قابل حل باشد انتگرال‌پذیر است. البته این شرط، توصیف کاملی از انتگرال‌پذیری را ارائه نمی‌دهد [۱۹].

² Thermalization

³ Bethe solution

۴.۱.۲ نمونه فیزیکی

در ادامه مثالی آموزنده از یک مدل انتگرال پذیر ارائه می‌دهیم که در آن انتگرال پذیری به صورت طبیعی حفظ می‌شود. این مدل را زنجیره اسپینی می‌نامند. که فضای فاز Γ به صورت زیر است.

$$\Gamma = S^2 \times S^2 \times S^2 \dots \times S^2 \quad (12.2)$$

برای هر S^2 یک متغیر دینامیکی به نام اسپین است و حاصل ضرب فوق معادل است با N اسپین می‌باشد. ساختار پواسون در Γ به روش موضعی تعریف می‌شود. متغیرهای S_n^i که $n = 1, 2, \dots, N$ و $i = 1, 2, 3$ به صورت

$$(S_n^1)^2 + (S_n^2)^2 + (S_n^3)^2 = S^2 \quad (13.2)$$

است.

$$\{S_n^i, S_m^k\} = \varepsilon_{ijk} S_n^j, \quad n = m \quad (14.2)$$

$$\{S_n^i, S_m^k\} = 0, \quad n \neq m \quad (15.2)$$

واضح است که $dim \Gamma_N = 2N$ بنابراین ما با سامانه‌ای با N درجه آزادی سرو کار داریم [۲۵].

۲.۲ بررسی گرمایی شدن سامانه‌های کلاسیکی و کوانتومی

۱.۲.۲ گرمایی شدن

اگر یک سامانه منزوی در حالت غیرتعادلی قرار گیرد، آیا در نهایت به تعادل می‌رسد یا در حالت غیرتعادلی باقی خواهد ماند؟

برای تشخیص اینکه آیا سامانه در تعادل است یا خیر، باید میانگین زمانی مشاهده پذیرها با میانگین مکانیک آماری تعادلی برابر باشد. لازم به ذکر است که میانگین پیش بینی شده توسط آنسامبل‌های مکانیک کوانتومی در شرایطی که سامانه در یک برهم‌نهی ماکروسکوپی قرار دارد، نادرست هستند، یک نمونه آن توسط گره شرودینگر نشان داده شده است. این استدلال در مورد مدت رسیدن به تعادلی بحث نمی‌کند. زمان لازم برای رسیدن به تعادل می‌تواند بسیار طولانی باشد. اما در عین حال آرام سازی برخی از سامانه‌ها بسیار طولانی است حتی برای

یک سامانه‌های باز که در تماس با یک حمام گرمایی هستند. با توجه به فرضیه گرمایی شدن ویژه‌حالت‌ها^۴ (ETH) می‌توان گفت که تعادل در نهایت به دست خواهد آمد [۲۶].

۲.۲.۲ شرایط گرمایی شدن سامانه‌ها

بسیاری از سامانه‌های بس ذره‌ای کوانتومی غیرتعادلی یا غیرانتگرال‌پذیر در بی‌نهایت به تعادل می‌رسند، که به اصطلاح می‌گویند گرمایی شده است. در سامانه‌های بسته تمام مشاهده‌پذیرها تعادلی نیستند. با این حال به طور کلی انتظار می‌رود که در سامانه‌های بس ذره‌ای کوانتومی حداقل برخی از مقادیر فیزیکی باید به مقدار تعادل برسند. در ادامه تعدادی از شرایط گرمایی شدن را بررسی می‌کنیم، که هر یک جنبه‌ای از گرمایی شدن را به تصویر می‌کشد.

۱. **تعادل:** تمایل یک سامانه به تحول به حالت تعادلی یک فرض کلیدی برای فیزیک آماری کلاسیک است که به عنوان یک شرط لازم برای گرمایی شدن در نظر گرفته می‌شود [۱۹].

شرایط بعدی مشخص می‌کند که حالت تعادل زیر سامانه‌ها باید چه ویژگی‌هایی داشته باشد.
۲. **استقلال حالت اولیه زیر سامانه:** حالت تعادل یک زیر سامانه باید از حالت اولیه زیر سامانه‌های دیگر مستقل باشد. اگر حالت تعادل سامانه به جزئیات حالت اولیه خود بستگی داشته باشد، آن را نباید گرمایی دانست [۲۷، ۲۸، ۲۹].

۳. **استقلال حالت‌ها:** انتظار می‌رود مقدار انتظاری تعادلی مشاهده‌پذیرها در زیرسامانه‌ها باید مستقل از جزئیات حالت اولیه بقیه زیرسامانه‌ها باشد. نه تنها باید به یک ویژگی‌های ماکروسکوپی مانند چگالی انرژی آن وابسته باشد، بلکه باید تأثیری بر دمای سامانه نیز داشته باشد [۲۶].

۴. **شکل قطری حالت تعادلی زیر سامانه:** حالت تعادلی یک زیر سامانه باید قطری باشد و در انرژی خاصی از هامیلتونی تعریف شده باشد. زمانی می‌توان این تقسیم‌بندی را انجام داد که تعامل حمام با حالت زیرسامانه‌ها به صورت قطری باشد [۲۶].

۵. **حالت گیبس:** حالتی که سامانه در آن به تعادل می‌رسد باید به حالت تعادلی گیبس نزدیک باشد [۲۶].

۳.۲.۲ فرضیه گرمایی شدن ویژه‌حالت‌ها

فرضیه گرمایی شدن ویژه‌حالت‌ها (ETH) مجموعه‌ای از ایده‌هایی است که مشخص می‌کند که چه زمانی و چرا یک سامانه کوانتومی مستقل را می‌توان با استفاده از مکانیک آماری توصیف کرد؟ به طور خاص این مساله اختصاص دارد به درک اینکه چگونه سامانه‌های که در ابتدا در وضعیت‌های غیرتعادلی هستند، می‌توانند به حالتی که در تعادل گرمایی است، تحول زمانی پیدا کنند. برای توضیح ایده ETH ابتدا تحول زمانی برخی از حالت‌های $|\psi(t)\rangle$ را بررسی

⁴Eigenstate Thermalization Hypothesis

می‌کنیم [۳۰].

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{\nu} C_{\nu} e^{-iE_{\nu}t/\hbar} |\psi_{\nu}\rangle \quad (16.2)$$

مقدار چشم‌داشتی مشاهده‌پذیرها

$$\langle \hat{A}(t) \rangle = \sum_{\nu} |C_{\nu}|^2 A_{\nu\nu} + \sum_{\nu \neq \mu} C_{\nu}^* C_{\mu} e^{i(E_{\nu} - E_{\mu})t/\hbar} A_{\nu\mu} \quad (17.2)$$

$$A_{\nu\mu} = \langle \psi_{\nu} | A | \psi_{\mu} \rangle \quad (18.2)$$

اگر حالت‌ها تعادلی باشد مقدار انتظاری در طولانی مدت $\langle A \rangle^{Lt}$ باید:

$$\langle A \rangle^{Lt} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \langle A(t) \rangle = \sum |C_{\nu}|^2 A_{\nu\nu} \quad (19.2)$$

این مقدار انتظاری زمانی حاصل می‌شود که حالت‌ها در طولانی مدت بر اساس ویژه‌مقدارها قطری باشند.

$$E = \langle \psi | H | \psi \rangle_{\rho_{Lt}} = \sum_{\nu} |C_{\nu}|^2 \langle \psi_{\nu} | H | \psi_{\nu} \rangle \quad (20.2)$$

برای توزیع میکروکانونیک

$$\rho_{mc} = N(E, \delta)^{-1} \sum_{r \in E\delta} |\psi\rangle \langle \psi| \quad (21.2)$$

δ ویژه مقدار انرژی E و $N(E, \delta)$ تعداد حالت‌های δ است.

$$\langle A \rangle^{mc} = \frac{1}{N(E, \delta)} \sum A_{\gamma\gamma} \quad (22.2)$$

حالتی گرمایی است که

$$\langle A \rangle^{Lt} = \langle A \rangle^{mc} \quad (23.2)$$

ETH می‌گوید برای یک حالت گرمایی A_{aa} در یک فاصله زمانی کم، انرژی به اندازه ΔE تغییر می‌کند. مقدار انتظاری $\langle A \rangle^{Lt}$ تقریباً از توزیع میکروکانونی $\langle A \rangle^{mc}$ به دست می‌آید. ETH نمی‌گوید که یک سامانه گرمایی است یا خیر، بلکه یک ویژگی از سامانه گرمایی است. ETH خواص عناصر ماتریسی مشاهده‌پذیر در انرژی ویژه‌حالت یک سامانه را بررسی می‌کند. مکانیک آماری کوانتومی با هدف درک شرایط استفاده از مکانیک آماری می‌تواند براساس اصول اولیه مکانیک کوانتومی استاندارد توجیه شود. یکی از ارکان آن، فرضیه گرمایی شدن ویژه‌حالت‌ها ETH است. فرضیه‌ای درباره ویژگی‌های انرژی انفرادی سامانه‌های کوانتومی بس‌ذره‌ای است که به وسیله نتایج حاصل شده از نظریه آشفتگی کوانتومی پیشنهاد شده است. ایده اصلی این است که برای سامانه‌های بزرگ و مرکب، انرژی ویژه‌حالت‌ها می‌توانند چنان درهم‌تنیده

شوند که هم‌پوشانی آنها با خصوصیات یک حالت‌های یک مشاهده‌پذیر فیزیکی می‌تواند به طور مؤثر با متغیرهای تصادفی توصیف شود. اگر ETH برآورده شود، گرمایی شدن را برای تمام مشاهده‌پذیرها که به طور متوسط در تعادل هستند تضمین می‌کند. ETH نیز یک معیار ضروری برای گرمایی شدن است [۳۰، ۳۱]. ETH به طور کلی در سامانه‌های غیرانتگرال‌پذیر وجود دارد و تعادل در جهت مقدار انتظاری گرمایی پیش می‌رود که معمولاً در زمان‌بندی‌های معقول رخ می‌دهد [۳۲، ۳۳].

عناصر ماتریسی $A_{m,n} = \langle E_m | A | E_n \rangle$ مشاهده‌پذیر A با توجه به انرژی ویژه‌حالت‌ها $|E_n\rangle$ در بخش عمده‌ای از طیف هامیلتونی یک سامانه با N ذره باید رابطه زیر را ارضاء کند [۳۴].

$$-\ln |A_{m+1,m+1} - A_{m,m}|, \quad -\ln |A_{m,n}| \in o(N) \quad (24.2)$$

در این نوع ETH گاز را به صورت کره‌های سخت در نظر می‌گیرند. در معادله (۲۴.۲) عناصر ماتریس $A_{m,m}$ قطری و $A_{m,n}$ غیرقطری می‌باشد. باید که این جنبه را برجسته کرد، چرا که عناصر قطری ماتریس به شیوه‌ای غیرمستقیم به دینامیک غیرتعادلی مشاهده‌پذیرها می‌رسند. علاوه بر این، بعد از گذشت زمان زیاد و یا اگر افت وخیز خیلی زیاد باشد، مقدار تعادلی می‌تواند از لحاظ فیزیکی بی‌معنی باشد. این همان چیزی است که ارتباط فیزیکی ETH را به طور غیرمستقیم نشان می‌دهد [۳۵-۳۹].

۴.۲.۲ چرا مطالعه ETH ؟

در دهه گذشته مطالعه گرمایی شدن سامانه‌ها رشد سریعی در سطح کوانتومی داشته است. بررسی گرمایی شدن ابتدا با شرودینگر آغاز شد و مدت کوتاهی بعد از آن، فون نیومن موفق به پیشرفت قابل ملاحظه‌ای در این مسئله پیچیده شد. از آن زمان تاکنون رویکردهای زیادی برای درک گرمایی شدن وجود داشته است. با این حال اخیراً پژوهشگران علاقه‌مند به درک گرمایی شدن از دیدگاه میکروسکوپی شده‌اند. ادامه تلاش‌های فیزیک برای توضیح همه پدیده‌ها از معادله شرودینگر شروع شده است. یکی از اصلی‌ترین این پدیده‌ها، فرضیه گرمایی شدن ویژه‌حالت‌ها ETH است.

اما چرا ETH و گرمایی شدن به طور کلی مطالعه می‌شود؟ واقعیت این است که ساختار ماکروسکوپی در نهایت با محیط خود به تعادل می‌رسد، که از تجربه روزمره بسیار واضح است. چرا باید روشی برای تعریف یک حالت ماکروسکوپی تعادلی وجود داشته باشد که جزئیات آن در آماده‌سازی حالت اولیه بستگی ندارد؟ فیزیک می‌گوید که تحول یک حالت به طور کامل به شرایط اولیه آن بستگی دارد. در سطح ماکروسکوپی، رفتار یک سامانه ساده می‌شود. عدم وابستگی به حالت اولیه، آن چیزی است که رفتار سازگار را در مقیاس ماکروسکوپی ایجاد می‌کند. از این رو برگشت‌ناپذیری و قانون دوم ترمودینامیک رابطه نزدیکی با گرمایی شدن دارد. گذشته از درک این که چرا سامانه‌ها گرمایی می‌شوند، ETH بر رفتار سامانه‌ها، از جمله افت‌وخیزها، تأثیر می‌گذارد [۴۰، ۴۱]. جنبه مکانیکی آشفتگی کوانتومی، گرمایی شدن و ETH

با درک عملکرد درونی سامانه‌ها بسیار مرتبط هستند. گرمایی شدن سامانه‌هایی مانند اتم‌های سرد که برای مطالعه تجربی آسان‌تر هستند، واضح است، که بسیاری از جزییات تصور ما از گرمایی شدن کوانتومی را می‌توان مورد آزمایش قرار داد [۲۵].

۵.۲.۲ آیا گرمایی شدن ETH را در بر می‌گیرد؟

با توجه به اینکه ممکن است جایگزینی برای ETH وجود داشته باشد، مشاهده‌پذیرها نشان می‌دهند که تمام سامانه‌های واقعی گرمایی می‌شوند. همچنین مشخص نیست که آیا ETH یک روشی مفید برای درک گرمایی شدن است یا خیر؟ زیرا همانطور که در بالا ذکر شد، حتی مدل‌های انتگرال پذیر، ETH ضعیف را ارضا می‌کنند.

فرض کنید که ما یک سامانه منزوی داریم و آن را به دو بخش تقسیم می‌کنیم، یک بخش مورد علاقه سامانه A و بقیه B در نظر می‌گیریم که می‌توان B را به عنوان یک حمام برای A در نظر گرفت. اکنون سامانه A و B را غیرتعادلی در نظر می‌گیریم. اگر تمام شرایط اولیه باعث گرمایی شدن A شود، این نیاز به حفظ ETH است. اما اگر تمام ویژه‌حالت‌های انرژی گرمایی شوند نیاز به این دارد که ETH قوی باشد. به منظور دستیابی به گرمایی شدن، به همه ویژه‌حالت‌ها نیاز است با این حال، سامانه‌هایی هستند که نسخه قوی ETH ندارند، بلکه نسخه ضعیف هستند، اما هنوز قادر خواهند بود برخی از مجموعه بزرگی از حالت‌های اولیه را گرمایی کنند [۲۵، ۴۲].

۶.۲.۲ چند بیان از فرضیه گرمایی شدن ویژه‌حالت‌ها

بیان اول: یک سامانه منزوی با هامیلتونی انتگرال‌پذیر و با N درجه آزادی را در نظر بگیرید. ویژه‌حالت $|E_i\rangle$ جوابی برای $H|E_i\rangle = E_i|E_i\rangle$ است. جواب‌ها نیز باید با بخش تقارنی از هم جدا شوند [۴۳]. به عنوان مثال، تکانه کل در سامانه‌های همگن با شرایط مرزی حفظ می‌شود. در این بخش فرض می‌کنیم که E_i ، غیرتبهگن است.

فرض ۱. برای یک مجموعه بزرگ از عملگرها، مقادیر انتظاری $O_{ii} \equiv \langle E_i|O|E_i\rangle$ را به عنوان تابعی از i و میانگین میکروکانونی $\langle \hat{O} \rangle_{micro, E_i}$ تعریف شده را در نظر می‌گیریم.

$$O_{ii} = \langle \hat{O} \rangle_{micro, E_i} + \Delta_i \quad (۲۵.۲)$$

Δ_i^2 دارای مقدار از مرتبه

$$\langle \hat{O}^2 \rangle_{micro, E_i} \exp(-S(E)) \propto \langle \hat{O}^2 \rangle_{micro, E_i} \exp(const \times N) \quad (۲۶.۲)$$

به همین دلیل است که O_{ii} در میان حالت‌های مجاور تفاوت چندانی ندارد، به این معنی است که میانگین $\langle O_{ii} \rangle$ در یک بازه کوچک باید به میانگین میکروکانونی برسد.

بنابراین ETH ناچیز بودن افت‌وخیز مقدار انتظاری ویژه‌حالت‌ها را بررسی می‌کند. **بیان دوم:** بیانیه ETH نسبت به رفتار عناصر ماتریس غیرقطری بیشتر گسترش یافته است. این امر برای درک اینکه چگونه میانگین زمانی برابر میانگین آنسامبل است، لازم نیست. با این حال، در بین سامانه‌های دیگر، در درک توابع همبستگی دینامیکی و نزدیک به تعادل مهم است [۴۰، ۴۳، ۴۴، ۴۵] در اینجا ما بیشتر به طور کلی $O_{ij} \equiv \langle E_i | \hat{O} | E_i \rangle$ را در نظر می‌گیریم. برای $(i \neq j)$ فرضیه این است که، $O_{ij} = \Delta_{ij}$ که به نظر می‌رسد تصادفی است. اما در حال حاضر دو انرژی مرتبط به معادله E_i و E_j وجود دارد. بنابراین این عناصر بسیار کوچک هستند. از آنجایی که آمار این مقدار باید به صورت تابعی از E_j و E_i باشد، می‌توانیم این را برای یک سامانه بر روی سطوح انرژی i و j میانگین‌گیری (\dots) کنیم، بنابراین می‌توانیم بنویسیم.

فرض ۲

$$\langle |O_{ij}|^2 \rangle_n = \langle \Delta_{ij}^2 \rangle_n F(E_i E_j) \quad (27.2)$$

F یک تابع یکانی برای $E_i = E_j$ است. $E_{ij} \equiv (E_i + E_j)/2$ ، که می‌توان تقریباً به طور متقارن نوشت.

$$\langle |O_{ij}|^2 \rangle_n = \langle \hat{O} \rangle_{micro, \langle E \rangle_{ij}} f(\bar{E}_{ij}, E_i - E_j) \exp(S(\bar{E})/2) \quad (28.2)$$

در اینجا $f(\bar{E}_{ij}, E_i - E_j) = F(E_i, E_j)$ یک تابع را نشان می‌دهد که وقتی $|E_i - E_j|$ صفر می‌شود بزرگ می‌شود. با این حال O_{ij} نمی‌تواند صفر باشد. به عنوان مثال اگر ما یک اپراتور A را ریشه دوم $O = \hat{A}^2$ در نظر بگیریم یعنی $\hat{O} = \hat{A}^2$ سپس

$$\langle E_i | (A - \hat{A}_{ii})^2 | E_i \rangle = \sum_{i \neq j} |A_{ij}|^2 \quad (29.2)$$

سمت چپ بزرگ و غیر منفی است و سمت راست عبارت‌هایی هستند که در عناصر ماتریس غیرقطری هستند که در این فرضیه ظاهر می‌شوند. این بدان معناست که عناصر ماتریس غیرقطری باید کاملاً به طور مساوی توزیع شوند یا این فرضیه نقض شود [۲۵].

فصل ۳

ترمودینامیک کوانتومی و افت‌وخیزهای کار

۱.۳ اطلاعات و ترمودینامیک

۱.۱.۳ مقدمه

مطالعه ترمودینامیک را مهندسیین قرن نوزدهم آغاز کردند. آنها می‌خواستند بدانند قوانین فیزیک چه محدودیت‌هایی بر عملکرد ماشین‌های بخار و سایر ماشین‌های تولید کننده انرژی مکانیکی تحمیل می‌کنند. ترمودینامیک درباره تبدیل انرژی از شکل به شکلی دیگر، از جمله تبدیل گرما به سایر شکل‌های انرژی بحث می‌کند، که فقط در لحظه ابتدایی و انتهای فرایندهای تعادلی را بررسی می‌کند.

۲.۱.۳ بررسی قانون اول و دوم ترمودینامیک

کار و گرما نتیجه انرژی و تغییر انرژی در فرایندهای ترمودینامیکی هستند. برای یک سامانه کوانتومی در حالت ρ و با هامیلتونی H در یک زمان معین، انرژی داخلی یا میانگین انرژی سامانه به صورت $U(\rho) = \text{tr}[\rho H]$ مشخص می‌شود. هنگامی که یک سامانه نسبت به زمان تغییر می‌کند، به این معنی است که حالت ρ و هامیلتونی H دچار تغییر شده است و در هر لحظه مقدار مشخصی (ρ^t, H^t) در بازه $[0, \tau]$ دارد. در نتیجه تغییر میانگین انرژی یا انرژی داخلی سامانه به صورت زیر است.

$$\Delta U = \text{tr}[\rho^t, H^t] - \text{tr}[\rho^0, H^0] \quad (1.3)$$

ترمودینامیک علاقمند به انرژی و تغییر انرژی است که کار و گرما نتیجه آن می‌باشد. کار قابل کنترل و مفید و گرما غیرقابل کنترل و غیرمفید است [۴۶، ۴۷، ۴۸]. از آنجا که تغییرات هامیلتونی H نسبت به زمان، توسط یک آزمایشگر کنترل می‌شود، تغییرات انرژی مرتبط با این تغییر زمانی هامیلتونی به عنوان کار شناخته می‌شود. تغییر انرژی کنترل نشده مرتبط با تغییر حالت سامانه در واکنش به تغییرات هامیلتونی به عنوان گرما شناخته می‌شود. میانگین گرمای جذب شده توسط سامانه و میانگین کار انجام شده در سامانه به صورت زیر است.

$$\langle Q \rangle = \int_0^\tau \text{tr}[\dot{\rho}^t H^t] dt \quad (2.3)$$

$$\langle W \rangle = \int_0^\tau \text{tr}[\rho^t \dot{H}^t] dt \quad (3.3)$$

اگر سامانه کاری انجام دهد، کار منفی $\langle W_{ext} \rangle = -\langle W \rangle > 0$ و اگر گرمایی در سامانه تلف شود آن گرما را به صورت منفی $\langle Q_{dis} \rangle = -\langle Q \rangle > 0$ در نظر گرفته می‌شود. با توجه تعریف کار و گرما می‌توان قانون اول ترمودینامیک را به صورت زیر بیان کرد.

$$\langle W \rangle + \langle Q \rangle = \int_0^\tau \frac{d}{dt} \text{tr}[\rho^t, H^t] dt = \text{tr}[\rho^\tau, H^\tau] - \text{tr}[\rho^0, H^0] = \Delta U \quad (4.3)$$

انرژی فقط بستگی به حالت اولیه و نهایی دارد. بنابراین کار و گرما بستگی به فرایند دارند. تغییر می‌توان کار و گرما را به وسیله فرایند بینهایت کوچک $\langle \delta W \rangle$ و $\langle \delta Q \rangle$ مشخص کرد. که در آن δ نشان دهنده غیر کامل بودن دیفرانسیل کار و گرما است [۴۹]. در حالی که میانگین انرژی دیفرانسیل کامل است.

با توجه به تجزیه کردن تغییرات انرژی به دو نوع کار و گرما، می‌توان قانون دوم ترمودینامیک را تعیین کرد. قانون دوم ترمودینامیک، یک قانون اساسی فیزیک است که، محدوده کار موتورهای گرمایی را تعیین و مفهوم برگشت‌پذیری را در فیزیک ایجاد می‌کند. کلاسیوس در سال ۱۸۶۵ مشاهده کرد که آنتروپی S_{th} می‌تواند برای مطالعه جریان گرما به سامانه، هنگامی که با حمام گرمایی با دمای T در تماس است، مفید باشد [۵۰]. آنتروپی به وسیله تغییر در یک فرایند برگشت‌پذیر تعریف می‌شود.

$$\Delta S_{th} = \int_{rev} \frac{\langle \delta Q \rangle}{T} \quad (۵.۳)$$

$\langle \delta Q \rangle$ گرمایی است که در طول فرایند جذب می‌شود و T دمایی است که در آن گرما بین سامانه و حمام مبادله می‌شود. بنابراین در هر فرایند بازگشت‌پذیر تغییرات آنتروپی مساوی یا کوچکتر از صفر است $\oint \frac{\langle \delta Q \rangle}{T} \leq 0$. با توجه به برابری کلاسیوس می‌توان برای فرایندهای برگشت‌پذیر، نسخه‌ای از قانون دوم ترمودینامیک را برای تمامی فرایندهای ترمودینامیکی که امروزه به عنوان نابرابری کلاسیوس^۱ شناخته می‌شود، فرمول‌بندی کرد.

$$\int \frac{\langle \delta Q \rangle}{T} \leq \Delta S_{th} \quad \text{for } T = \text{const} \quad \text{becoming } \langle Q \rangle \leq T \Delta S_{th} \quad (۶.۳)$$

در این حالت، تغییرات آنتروپی سامانه برابر یا بزرگتر از میانگین گرمای مبادله شده توسط سامانه در طول فرایند است. در این فرم از نابرابری کلاسیوس وجود حداکثر گرمای مبادله شده توسط سامانه که درستی آن عموماً به پیشرفت روش‌های کوانتومی می‌انجامد، معادل است با تعریف انرژی آزاد سامانه‌ای با هامیلتونی H که با حمام گرمایی با دمای T در تماس است [۴۶].

$$F(\rho) = U(\rho) - TS_{th}(\rho) \quad (۷.۳)$$

با توجه به نابرابری کلاسیوس می‌توان کار را در یک فرایند به صورت زیر نشان داد.

$$\langle W_{ext} \rangle = -\langle W \rangle = -\Delta U + \langle Q \rangle \leq -\Delta U + T \Delta S_{th} = -\Delta F \quad (۸.۳)$$

کار و گرما بستگی به ویژگی فرایند دارد. اصلاح قانون دوم و در نتیجه کار، زمانی رخ می‌دهد که کنترل سامانه به طور فیزیکی، محدود به پروتکل‌های موضعی باشد [۵۱]. برای حالت‌های تعادلی $\rho_{th} = e^{-\beta H} / \text{tr}[e^{-\beta H}]$ و هامیلتونی H در دمای معکوس $\beta = \frac{1}{k_B T}$ آنتروپی، برابر با

^۱Clausius inequality

آنتروپی نظریه اطلاعات $S_{th}(\rho_{th}) = K_B S(\rho_{th})$ می‌باشد که K_B ثابت بولتزمن است. آنتروپی نظریه اطلاعات به عنوان آنتروپی شانون یا فون نیومن شناخته می‌شود. در حالت کلی می‌توان S را به صورت زیر تعریف کرد.

$$S(\rho) = -tr[\rho \ln \rho] \quad (۹.۳)$$

بسیاری از محققان در ترمودینامیک کوانتومی فرض می‌کنند که آنتروپی ترمودینامیکی به طور طبیعی به واسطه آنتروپی نظریه اطلاعات گسترش می‌یابد. به عنوان مثال، این فرض با استفاده از آنتروپی فون نیومن در ارتباط با قانون دوم و تجزیه و تحلیل فرایندهای گرمایی و در محاسبه اثر بخشی ماشین‌های گرمایی کوانتومی ساخته شده است. گسترش آنتروپی نظریه اطلاعات از طریق راه‌های زیادی از جمله کار اصل پاک کردن لانداور^۲ ارائه شده است.

۳.۱.۳ شیطانک ماکسول

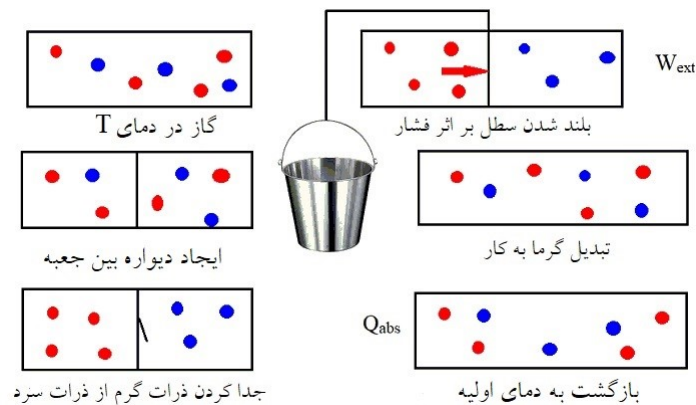
شیطانک ماکسول موجودی است که حرکت یک ذره را مشاهده و اطلاعاتی را از آن بدست می‌آورد و از این اطلاعات برای تبدیل گرما به کار در یک فرایند برگشت‌پذیر، استفاده می‌کند. شیطانک می‌تواند در یک جعبه ذرات گرم‌تر را از ذرات سردتر جدا کند. در نتیجه با افزایش ذرات گرم‌تر در یک طرف جعبه به پیستون فشار وارد می‌کند و در هنگام بازگشت به حالت مخلوط اولیه، کار انجام می‌شود. کاری که شیطانک می‌تواند برای یک ذره در یک فرایند بازگشت‌پذیر انجام دهد به صورت زیر است.

$$\langle W_{ext}^{demon} \rangle = K_B T \ln 2 \quad (۱۰.۳)$$

ماکسول در سال ۱۸۶۷ متوجه شد که چنین موجودی می‌تواند قانون دوم ترمودینامیک، را نقض کند. زیرا در یک فرایند بازگشت‌پذیر گرما به طور کامل به کار تبدیل می‌شود. یعنی $\langle W_{ext}^{demon} \rangle = \langle Q \rangle - \Delta U \not\leq T \Delta S_{th} - \Delta U = 0$. معنی این پارادوکس این است که شیطانک اطلاعاتی از ذرات به دست می‌آورد و از این اطلاعات برای تبدیل کامل گرما به کار مفید، استفاده می‌کند. یکی از راه‌های حل این پارادوکس توسط بنت^۳ ارائه شده است، که از اصل پاک‌شدگی لانداور استفاده می‌کند. پدیده ترمودینامیکی شیطانک ماکسول به طور تجربی بسیار با اهمیت است، به عنوان مثال می‌توان برای خنک کردن گاز از شیطانک ماکسول تقلید کرد [۴۶].

^۲Landauer's erasure principle

^۳Bennett



شکل ۱.۳: نحوه عملکرد شیطانک ماکسول

۴.۱.۳ اصل لانداور

لانداور در یک مقاله علمی انرژی مورد نیاز برای پردازش اطلاعات بررسی کرد. او به این نتیجه رسید که پاک کردن یک کیوبیت اطلاعات نیاز به حداقل گرما به صورت زیر دارد.

$$\langle Q_{dis}^{min} \rangle = K_B T \ln 2 \quad (11.3)$$

سامانه پاک‌شده، با محیط در دمای T در تعادل است. از بین رفتن یک بیت اطلاعات، که با حالت $|0\rangle$ مشخص می‌شود، تغییر سامانه در یکی از دو حالت با احتمال برابر $\frac{1}{2}$ اشاره دارد. مقدار اتلاف انرژی توسط حداقل کاری که باید روی سامانه انجام شود برای رسیدن به پاک‌شدن با انرژی میانگین ثابت $\Delta U = 0$ برابر است با

$$\langle W^{min} \rangle = \Delta U - \langle Q \rangle = \langle Q_{dis}^{min} \rangle \quad (12.3)$$

بنت برای حل پارادوکس شیطانک ماکسول استدلال کرد که حافظه شیطانک جزئی از اطلاعات است که باید پاک شوند تا چرخه ترمودینامیکی را کامل کنند و به شرایط اولیه بازگردد. که باید برای پاک کردن اطلاعات به دست آمده، بدون انجام کار و موافق با قانون دوم باشد. در حالی که اصل لانداور در ابتدا برای پاک شدن یک بیت اطلاعات کلاسیک فرموله شده بود، به طور مستقیم به پاک کردن حالت کوانتومی مخلوط ρ ، که به حالت $|0\rangle$ منتقل می‌شود، گسترش یافته است. حداقل اتلاف گرما مورد نیاز به صورت $\langle Q_{dis}^{min} \rangle = K_B T S(\rho)$ بیان می‌شود. تجزیه و تحلیل اخیر از اصل لانداور با استفاده از پروتکل گرمایی، برای به دست آوردن اصلاحات حد لانداور، استفاده می‌کنند. آنها نشان می‌دهند که گرمای تلف شده عموماً بالاتر از حد لانداور است و فقط برای منابعی با اندازه بی‌نهایت به حد لانداور نزدیک می‌شود. در ساده‌ترین حالت پروتکل پاک کردن، برای رسیدن به حد مجاز لانداور نیاز به یک فرایند شبه استاتیک ایده‌آل دارد که اجرای فرایند مدت زمان زیادی طول می‌کشد [۵۲، ۵۳].

۵.۱.۳ پاک کردن با استفاده از اطلاعات کوانتومی

اتلاف گرما در هنگام پاک کردن سامانه، وقتی که حالت اولیه سامانه یک حالت مخلوط است بی‌اهمیت است. در مکانیک کوانتومی حالت‌های مختلفی را می‌توان به عنوان حالت کاهش یافته حالت‌های کلی، از سامانه و حافظه مشاهده کرد. در طول فرایند، حالت موضعی سامانه پاک می‌شود، در حالی که حالت موضعی حافظه تغییر نمی‌کند. با استفاده از اطلاعات، مانند استفاده از همبستگی بین سامانه و حافظه، می‌توان حداکثر مقدار کار را به دست آورد.

$$\langle W_{max}^{ext} \rangle = -K_B T S(S|M)_{\rho_{MS}} \quad (13.3)$$

$S(S|M)_{\rho_{SM}}$ آنتروپی شرطی فون نیومن بین سامانه و حافظه $S(S|M)_{\rho_{SM}} = S(\rho_{SM}) - S(\rho_M)$ است. به طور کلی، آنتروپی شرطی می‌تواند برای بعضی از حالت‌های همبسته کوانتومی (یک زیر مجموعه از حالت‌های درهم آمیخته) منفی باشد، بنابراین کار خارجی می‌تواند مثبت باشد. این نتیجه به شدت با اصل لاندور موافق و برای هر دو حالت کلاسیک و کوانتومی زمانی که هیچ اطلاعات جانبی در دسترس نباشد، معتبر است. امکان ایجاد کار در حین پاک کردن، یک ویژگی کاملاً کوانتومی است که بر دسترسی به اطلاعات جانبی متکی است. ایده رسیدن به کار مثبت، نیاز به دانستن و دسترسی به حالت درهم‌تنیده اولیه سامانه و حافظه و اجرای فرایند کنترل شده دقیق است [۴۶].

۲.۳ فیزیک آماری غیرتعادلی کلاسیک و کوانتومی

۱.۲.۳ مفهوم کلاسیکی افت‌وخیز کار و گرما

در فیزیک آماری کلاسیک به هر ذره نقطه‌ای مانند $x(q, p)$ در فضای فاز اختصاص داده می‌شود در حالی که مجموعه‌ای از ذرات را می‌توان با یک تابع چگالی احتمال $P(x)$ در فضای فاز توصیف کرد. هامیلتونی ذره با $H(x, \lambda)$ مشخص می‌شود که x نقطه فضای فیزیکی ذره‌ای است که انرژی در آن اندازه‌گیری شده است. λ یک پارامتر نیرو است که می‌تواند نسبت به زمان تغییر کند. هر حالت ذره $x_t = (q_t, p_t)$ به دلیل اعمال نیروهای خارجی و تعامل با محیط در فضای فاز تحول می‌یابد. افت‌وخیز کار (کاری که بر روی سامانه انجام می‌شود) و افت‌وخیز گرما (گرمای جذب شده توسط سامانه) برای یک ذره با مسیر در بازه زمانی $[0, \tau]$ به صورت زیر تعریف می‌شود [۴۶].

$$Q_{\tau, x_t} = \int_0^{\tau} \frac{\partial H(x_t, \lambda_t)}{\partial x_t} \dot{x}_t dt \quad (14.3)$$

$$W_{\tau, x_t} = \int_0^{\tau} \frac{\partial H(x_t, \lambda_t)}{\partial \lambda_t} \dot{\lambda}_t dt \quad (15.3)$$

کار و گرما متغیرهای تصادفی هستند که به مسیر ذره x_t در فضای فاز بستگی دارند.

$$Q_{\tau, x_t} + W_{\tau, x_t} = H(x_\tau, \lambda_\tau) - H(x_0, \lambda_0) \quad (۱۶.۳)$$

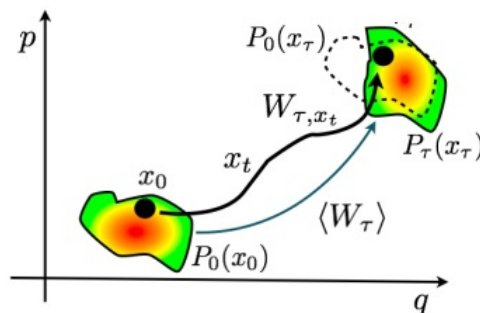
برای یک سامانه بسته مقدار گرمای مبادله شده صفر است و هر گونه تغییر انرژی سامانه مربوط به کار است.

$$Q_{\tau, x_t}^{closed} = \int_0^\tau \left(\frac{\partial H(x_t, \lambda_t)}{\partial q_t} \dot{q}_t + \frac{\partial H(x_t, \lambda_t)}{\partial p_t} \dot{p}_t \right) dt = \int_0^\tau (-\dot{p}_t \dot{q}_t + \dot{q}_t \dot{p}_t) dt = 0 \quad (۱۷.۳)$$

$$W_{\tau, x_t}^{closed} = H(x_\tau, \lambda_\tau) - H(x_0, \lambda_0) \quad (۱۸.۳)$$

با توجه به معادله حرکت هامیلتونی $\frac{\partial H}{\partial p} = \dot{q}$ و $\frac{\partial H}{\partial q} = -\dot{p}$ که به سامانه‌های بسته اعمال می‌شود، یک سامانه بسته دارای تبادل گرما نیست و تغییر انرژی سامانه در طول پروتکل به طور کامل با کار برای هر مسیر مشخص می‌شود. میانگین کار یک سامانه اشاره به تکرار آزمایش حالت اولیه سامانه دارد، که سامانه در تماس با همان محیط و استفاده از یک پروتکل مشابه است. میانگین کار به صورت ریاضی از انتگرال‌گیری تمام مسیرها که توسط سامانه‌ای که مورد بررسی قرار می‌گیرد، به دست می‌آید $\langle W_t \rangle = \int P(x_t) W_{\tau, x_t} dD(x_t)$ که $P(x_t)$ چگالی احتمال مسیر x_t و $dD(x_t)$ فضای فاز انتگرال تمام مسیرها است. برای یک سامانه بسته، مسیرها به وضوح توسط نقطه فضای فاز اولیه خود به صورت یکتا تعیین می‌شوند. هر مسیری که با x_0 شروع می‌شود، به طور قطعی در زمان تحول می‌یابد. بنابراین احتمال این مسیر با احتمال اولیه از نقطه شروع فضای فاز، شروع می‌شود و ژاکوبین دترمینان $\frac{dx_0}{dx_\tau} = 1$ است. می‌توان میانگین کار را به صورت زیر بیان کرد [۴۶].

$$\begin{aligned} \langle W_\tau^{closed} \rangle &= \int P_0(x_0) (H(x_\tau, \lambda_\tau) - H(x_0, \lambda_0)) dx_0 \\ &= \int P_0(x_\tau) (H(x_\tau, \lambda_\tau) \left| \frac{dx_0}{dx_\tau} \right| dx_\tau - \int P_0(x_0) (H(x_0, \lambda_0)) dx_0 \\ &= U_\tau - U_0 \end{aligned} \quad (۱۹.۳)$$



شکل ۲.۳: فضای فاز با مکان و تکانه $x(q, p)$ مشخص می‌شود.

بنابراین میانگین کار برای یک فرایند بسته تفاوت میانگین انرژی در لحظه اولیه و نهایی است. از آنجا که تحول، در فضای فاز بسته است، حجم سامانه را حفظ می‌شود. شکل (۲.۳) که به عنوان قضیه لیوویل شناخته شده است. توزیع نهایی $P_0(x_\tau)$ در واقع همان فرم توزیع احتمال اولیه، $P_0(x_0)$ است که فقط به نقاط نهایی x_τ بستگی دارد. احتمال یافتن x_τ در انتها دقیقاً مشابه احتمال یافتن x_0 در حالت اولیه است. توزیع احتمال سامانه باز با توجه به تعامل غیرخطی سامانه با محیط تغییر خواهد کرد. در معادله فوق میانگین انرژی اولیه سامانه به صورت $U_0 = \int P_0(x)H(x, \lambda_0)dx$ تعریف شده و به طور مشابه U_τ میانگین انرژی در زمان τ است. در آزمایشات آماری فیزیک، میانگین کار به وسیله اندازه‌گیری افت‌وخیز کار W_j برای یک مسیر مشاهده شده در انجام یک آزمایش خاص j است. تکرار N بار آزمایش و با در نظر گرفتن میانگین نتایج محاسبات، میانگین کار به دست می‌آید. در حد $N \rightarrow \infty$ معادل با یک نمودار از نتایج (W_j) و توزیع چگالی احتمال $P(W)$ است و سپس از این تابع برای به دست آوردن میانگین کار استفاده می‌شود.

$$\langle W_\tau \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N W_j = \int P(W)WdW \quad (20.3)$$

۲.۲.۳ رابطه کلاسیکی افت‌وخیز

رابطه افت‌وخیز کاملاً نشان می‌دهد که چگالی احتمال افت‌وخیز تصادفی یک فرایند غیرتعادلی مانند آنتروپی، کار و گرما به خواص تعادلی و مقادیر متناظر با فرایند معکوس زمانی مرتبط است. با انتگرال‌گیری از چگالی احتمال، می‌توان روابط انتگرالی افت‌وخیز مانند رابطه کار جازینسکی^۴ را به دست آورد. رابطه کروکس^۵ یک رابطه مهم افت‌وخیز دیگری می‌باشد، که سامانه در تماس با حمام گرمایی در دمای معکوس $\beta = \frac{1}{K_B T}$ است. این رابطه، توزیع کار $P^F(W)$ را با یک پروتکل روبه‌جلو مرتبط است که پارامتر نیرو از $\lambda(0)$ به $\lambda(\tau)$ تغییر می‌کند. توزیع کار $P^B(-W)$ معکوس زمانی است، که مرتبط با پروتکل روبه‌عقب می‌باشد که پارامتر نیرو به صورت $\lambda(\tau) \rightarrow \lambda(0)$ تغییر می‌کند.

$$P^F(W) = P^B(-W)e^{\beta(W-\Delta F)} \quad (21.3)$$

اختلاف انرژی آزاد

$$\Delta F = F(\tau) - F(0) \quad (22.3)$$

اشاره به دو توزیع گرمایی با هامیلتونی حالت نهایی $H(x, \lambda_\tau)$ و هامیلتونی حالت اولیه $H(x, \lambda_0)$ دارد. انرژی آزاد، می‌تواند به صورت

$$F^{(0)} = \frac{1}{\beta} \ln Z^{(0)} \quad (23.3)$$

⁴Jarzynski's work relation

⁵Crooks relation

در زمان 0 و τ به تابع پارشی کلاسیک $Z^{(0)}$ بیان شود. با انتگرال گیری از هر دو طرف، منجر به یک رابطه افتوخیز انتگرالی، معروف به برابری جازینسکی می شود.

$$\langle e^{-\beta W} \rangle = \int P^F(W) e^{-\beta W} dW = e^{-\beta \Delta F} \quad (24.3)$$

قبل از بیان رابطه کروکس، جازینسکی با در نظر گرفتن یک سامانه بسته که با توزیع گرمایی شروع می شود، برابری خود را برای هامیلتونی $H(x, \lambda(0))$ در دمای معکوس β ثابت کرد

$$P_0(x_0) = \frac{e^{-\beta H(x_0, \lambda(0))}}{Z(0)} \quad (25.3)$$

برای یک سامانه غیرتعادلی هامیلتونی در بازه زمانی $[0, \tau]$ از طریق تغییر پارامتر نیرو λ تغییر پیدا می کند. سپس می توان میانگین ها را بر اساس مسیرهای بسیاری محاسبه کرد که هر کدام از فضای فاز نقطه اولیه که از یک توزیع گرمایی اولیه شروع شده است، محاسبه می شود.

$$\begin{aligned} \langle e^{-\beta W_{\tau}^{cloesd}} \rangle &= \int P_0(x_0) e^{-\beta W_{\tau, x_0}^{cloesd}} dx_0 = \\ &= \int \frac{e^{-\beta H(x_0, \lambda(0))}}{Z(0)} e^{-\beta(H(x_{\tau}, \lambda(\tau)) - H(x_0, \lambda(0)))} dx_0 \\ &= \frac{1}{Z^0} \int e^{-\beta(H(x_{\tau}, \lambda(\tau)))} \left| \frac{dx_0}{dx_{\tau}} \right| dx_{\tau} = \frac{Z(\tau)}{Z(0)} = e^{-\beta \Delta F} \end{aligned} \quad (26.3)$$

نکته قابل توجه برابری فوق این است که برای فرایندهای بسته اما غیرتعادلی، میانگین نمایی کار توسط پارامترهای تعادلی موجود در ΔF تعیین می شود. همانطور که جازینسکی نشان داد برابری نیز می تواند برای سامانه های باز تعمیم یابد. با استفاده از نابرابری جنسین^۶

$$\langle e^{-\beta W} \rangle \geq e^{-\beta \langle W \rangle} \quad (27.3)$$

برابری جازینسکی به قانون دوم ترمودینامیک تبدیل می شود،

$$\langle e^{-\beta W} \rangle \geq \Delta F \quad (28.3)$$

بنابراین رابطه جازینسکی قانون دوم را با کار غیرتعادلی در هر لحظه تقویت می کند [۴۶].

۳.۲.۳ مفهوم کوانتومی افتوخیز کار و گرما

با توجه به ویژگی های فرایندهای ترمودینامیکی مشخص می شود که کار مشاهده پذیر نیست. یعنی هیچ عملگر w نیست، به طوری که $W = tr[wp]$. برای کوانتیزه کردن برابری جازینسکی گام مهم، تعریف کوانتومی افتوخیز کار برای دینامیک بسته به عنوان یک تابع همبستگی دونقطه ای است. انرژی باید در ابتدا و پایان فرایند، اندازه گیری شود، تا در مورد تغییراتی که

^۶Jensen's inequality

در انرژی سامانه ایجاد شده اطلاعاتی به دست آورد. با تکرار این کار می‌توان یک تابع توزیع کار، به عنوان تابع توزیع اندازه‌گیری دو نقطه‌ای کار به دست آورد. بنابراین امکان ایجاد رابطه تاساکی- کروکس^۷ و برابری جازینسکی را به صورت کوانتومی فراهم می‌کند [۴۹، ۵۴].

برای معرفی کوانتومی افت‌وخیز کار و گرما، یک سامانه کوانتومی با حالت اولیه $\rho^{(0)}$ و هامیلتونی اولیه $|e_n^{(0)}\rangle\langle e_n^{(0)}|$ با ویژه‌مقادیر $E_n^{(0)}$ و ویژه‌حالت $|e_n^{(0)}\rangle$ در نظر بگیرید. یک سامانه بسته به علت اینکه همزمان با هامیلتونی تغییر می‌کند، دینامیکی ایجاد می‌کند که باعث یک تبدیل یکانی $V(\tau) = \tau e^{-i \int_0^\tau H^{(\tau)} dt/\hbar}$ می‌شود و حالت نهایی به صورت $\rho^{(\tau)} = V(\tau)\rho^{(0)}V(\tau)^\dagger$ تبدیل می‌شود و هامیلتونی نهایی $|e_m^{(\tau)}\rangle\langle e_m^{(\tau)}|$ با انرژی $E_m^{(\tau)}$ و ویژه‌حالت $|e_m^{(\tau)}\rangle$ است. برای به دست آوردن افت‌وخیز کار، در ابتدای فرایند انرژی $E_n^{(\tau)}$ اندازه‌گیری می‌کنند و سپس در پایان فرایند دوباره انرژی $E_m^{(\tau)}$ اندازه‌گیری می‌شود. تفاوت انرژی‌های اندازه‌گیری شده به صورت افت‌وخیز کار بیان می‌شود.

$$W_{m,n}^{closed} = E_m^{(\tau)} - E_n^{(0)} \quad (29.3)$$

وقتی که دینامیک سامانه بسته است، تحول یکانی و هیچ اتلاف گرما رخ نمی‌دهد. توزیع کار زمانی به نقطه اوج می‌رسد که توزیع متغیر W با $W_{m,n}^\tau$ مساوی باشد.

$$P(W) = \sum_{m,n} p_{m,n}^{(0)} \delta(W - (E_m^{(\tau)} - E_n^{(0)})) \quad (30.3)$$

توزیع احتمال پیدا کردن انرژی اولیه $E_n^{(0)}$ و انرژی نهایی $E_m^{(\tau)}$ است. که می‌توان به صورت احتمال یافتن انرژی اولیه $E_n^{(0)}$ ، $p_n^{(0)} = \langle e_n^{(0)} | \rho^{(0)} | e_n^{(0)} \rangle$ و احتمال شرطی برای انتقال از n در $t=0$ تا m در $t=\tau$ ، $p_{m|n}^{(\tau)} = |\langle e_m^{(\tau)} | V(\tau) | e_n^{(0)} \rangle|^2$ بیان کرد. می‌توان میانگین کار را برای فرایند غیرتعادلی یکانی به صورت میانگین توزیع احتمال کار محاسبه کرد.

$$\begin{aligned} \langle W_\tau^{closed} \rangle &= \int \sum_{m,n} p_{m,n}^{(\tau)} \delta(W - (E_m^{(\tau)} - E_n^{(0)})) W dW \\ &= \sum_{m,n} p_n^{(0)} p_{m|n}^{(\tau)} (E_m^{(\tau)} - E_n^{(0)}) = \sum_m p_m^{(\tau)} E_m^{(\tau)} - \sum_n p_n^{(0)} E_n^{(0)} \end{aligned} \quad (31.3)$$

که

$$p_m^{(\tau)} = \sum_n p_{m,n}^{(\tau)} = \langle e_m^{(\tau)} | \rho^{(\tau)} | e_m^{(\tau)} \rangle \quad (32.3)$$

حالت نهایی توزیع احتمال است، یعنی فقط احتمال اندازه‌گیری انرژی $E_m^{(\tau)}$ در حالت نهایی $\rho^{(\tau)}$ است. بنابراین میانگین کار برای فرایند یکانی تفاوت انرژی درونی است [۴۶].

$$\langle W_\tau^{closed} \rangle = \text{tr}[H^{(\tau)} \rho^{(\tau)}] - \text{tr}[H^{(0)} \rho^{(0)}] = \Delta U \quad (33.3)$$

⁷Tasaki-Crooks relation

۴.۲.۳ روابط افت و خیز کوانتومی

میانگین نمایی کار بر روی سامانه که با حالت اولیه ρ_0 به دست می‌آید، به صورت زیر بیان می‌شود.

$$\langle e^{-\beta W_{\tau}^{closed}} \rangle = \int P(W) e^{-\beta W} dW = \sum_{n,m} p_{n,m}^{\tau} e^{-\beta(E_m^{\tau} - E_n^0)} \quad (34.3)$$

زمانی که حالت اولیه یک حالت گرمایی با هامیلتونی H_0 در دمای معکوس β باشد، به عنوان مثال $\langle e^0 | e^0 \rangle = \sum_n p^0 | e^0 \rangle$ با احتمالات گرمایی $p^0 = \frac{e^{\beta E^0}}{Z^0}$ برابری کوانتومی جازینسکی به صورت زیر به دست می‌آید.

$$\langle e^{-\beta W_{\tau}^{closed}} \rangle = \sum_{n,m} \frac{e^{\beta E^0}}{Z^0} p_{m|n}^{\tau} e^{-\beta(E_m^{\tau} - E_n^0)} = \frac{1}{Z^0} \sum_m e^{-\beta E_m^{\tau}} = \frac{Z^{\tau}}{Z^0} = e^{-\beta \Delta F} \quad (35.3)$$

در اینجا از احتمالات شرطی $\sum_n p_{m|n}^{\tau} = \sum_n |\langle e_m^{\tau} | V^{\tau} | e_n^0 \rangle|^2 = 1$ استفاده شده است. تفاوت انرژی آزاد، مانند کلاسیک $\Delta F = \frac{1}{\beta} \ln \frac{Z^{\tau}}{Z^0}$ است. به طور مشابه رابطه کلاسیکی کورکس نیز می‌تواند برای مکانیک کوانتومی دوباره حاصل شود و به عنوان رابطه تاساکی - کورکس شناخته می‌شود.

$$\frac{P^F(W)}{P^B(-W)} = e^{\beta(W - \Delta F)} \quad (36.3)$$

۳.۳ کار در ترمودینامیک و مکانیسم آماری

۱.۳.۳ توصیف ترمودینامیکی

قانون اول ترمودینامیک بیانی از اصل بقای انرژی است. این قانون بیان می‌دارد که انرژی نه از بین می‌رود نه به وجود می‌آید، بلکه از نوعی به نوع دیگر تبدیل می‌شود. انرژی درونی یک سامانه منزوی ثابت و پایدار است. تغییر انرژی درونی یک سامانه برابر با مجموع گرمای داده شده به سامانه و کار انجام شده بر آن است.

اگر سامانه‌ای با هامیلتونی H در تماس با یک منبع گرمایی باشد، انرژی از طریق گرما بین سامانه و منبع گرمایی جریان پیدا می‌کند. انرژی یک سامانه ممکن است با یک عامل خارجی تغییر کند که به صورت دستی بعضی از پارامترهای هامیلتونی سامانه را تغییر می‌دهد، این تغییرات باعث ایجاد کار می‌شود.

کار و گرما جزء خواص سامانه نیستند. بلکه آن‌ها نتیجه تغییر حالت سامانه می‌باشند. اگر در یک بازه زمانی معین، مقدار Q گرما وارد سامانه شود و مقدار W کار بر روی سامانه انجام پذیرد، انرژی کل پایسته می‌ماند. انرژی درونی U سامانه به مقدار $\Delta U = W + Q$ تغییر می‌کند، که همان قانون اول ترمودینامیک است. اگر بر روی سامانه‌ای توسط یک عامل خارجی کاری

صورت پذیرد مقدار کار مثبت ($W > 0$) است و اگر سامانه بر روی یک عامل خارجی کاری انجام دهد کار به صورت منفی ($W < 0$) می‌باشد.

در فرایندی که بر روی یک سامانه کار انجام شود می‌توان پارامتر میکروسکوپی λ در هامیلتونی توصیف کرد. λ را پارامتر کار می‌نامند. برای توصیف چگونگی کار انجام شده بر روی سامانه از یک پروتکل مشخص استفاده می‌شود. استفاده از پروتکل به این معنی است که تحت چه شرایطی سامانه دچار تغییر می‌شود و این تغییرات $\lambda(t)$ چه زمانی طول می‌کشد؟ فرض می‌کنید که این فرایند از زمان $t = 0$ تا $t = \tau$ طول بکشد، که طی آن، تغییرات $\lambda(t)$ از مقدار اولیه $\lambda_i = \lambda(0)$ به مقدار نهایی $\lambda_f = \lambda(\tau)$ تعریف می‌شود. به طور کلی توصیف یک فرایند بازگشت‌پذیر کاری بس مشکل است. زیرا نیازمند اطلاعات دقیق در مورد دینامیک سامانه و چگونگی تماس با منبع گرمایی است. ترمودینامیک معمولاً در فرایندهای شبه استاتیک متمرکز است که در طول این فرایند λ به صورت خیلی آهسته تغییر می‌کند تا اطمینان حاصل کنیم که سامانه همیشه در تعادل گرمایی بوده است. فرایندهای شبه استاتیک این مزیت را دارا می‌باشند که وابسته به زمان نیستند. در نتیجه ما نیازی به تابع معین $\lambda(t)$ نداریم بلکه صرفاً به مقدار اولیه و نهایی نیاز است. مهمترین نمونه از فرایند شبه استاتیک فرایند هم‌دمای است که در طول فرایند، دمای سامانه ثابت باقی می‌ماند. برای آن که دمای یک سامانه منزوی بدون تغییر باشد، باید با یک منبع گرمایی تماس داده شود تا در دمای ثابت باقی بماند. همچنین توجه داشته باشید که یک فرایند هم‌دمای لزوماً شبه استاتیک است. اگر فرایندی شبه استاتیک نباشد دما به صورت غیریکنواخت پایین می‌آید و ثابت نمی‌ماند. در واقع باید دما و فشار در دمای تعادلی تعریف شوند. بنابراین در هر فرایندی که در آن دمای سامانه مقداری ثابت نگه داشته شود شبه استاتیک است [۵۵].

در مکانیک کلاسیک، وقتی بر روی سامانه کاری انجام شود به صورت انرژی پتانسیل ذخیره می‌شود که می‌توان به منظور انجام کار خارجی از آن استفاده کرد. در سامانه‌های گرمایی که تحت فرایند هم‌دمای هستند به دلیل اینکه این سامانه‌ها همیشه با منبع تبادل گرمایی دارند این موضوع صادق نیست. بخشی از انرژی درونی قابل دسترس برای انجام کار، انرژی آزاد نامیده می‌شود [۵۵].

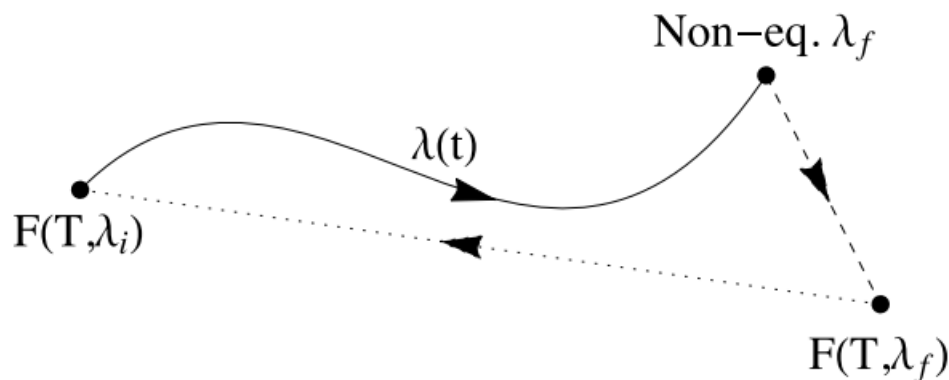
$$W = \Delta F = \Delta U - Q \quad (37.3)$$

حال فرض می‌کنید که همان فرایند را تکرار کنیم اما باید خیلی سریع انجام شود. حالت نهایی بستگی به چگونگی انجام این فرایند دارد. با این وجود به نظر می‌رسد سامانه‌ای که در تماس با منبع گرمایی است، اگر سامانه را از منبع جدا شود سامانه گرما از دست می‌دهد. بنابراین بعد از اجرای پروتکل یک مقدار مشخصی از کار W لازم است که سامانه از $F(\tau, \lambda_i)$ به $F(\tau, \lambda_f)$ برود. اما این کار هم‌ارز با انرژی آزاد ΔF نیست. این هم‌ارزی فقط برای سامانه‌های شبه استاتیک وجود دارد. با توجه به قانون دوم ترمودینامیک کار انجام شده در یک فرایند غیرتعادلی همیشه بزرگتر از انرژی آزاد ΔF است. بنابراین مقدار کار بزرگتر از انرژی آزاد است

[۵۵].

$$W > \Delta F \quad (38.3)$$

این تفاوت $W_{irr} = W - \Delta F \geq 0$ به عنوان کار قابل برگشت پذیر است، در نتیجه با توجه به انتخاب یک پروتکل خاص نشان دهنده کار اضافی است. نابرابری (۳۸.۳) می تواند به عنوان یک نتیجه مستقیم بیان کلین از قانون دوم تفسیر کرد. نتیجه نهایی برای یک سامانه از تبدیل کار به گرمای گرفته شده از منبع، تحول سامانه است. این به این معنی است که برای ایجاد کار از یک منبع گرمایی با دمای ثابت دمای منبع بدون تغییر باقی می ماند. برای مثال گازی که با منبع گرمایی در تماس است، بعد از انجام فرایند کار ایجاد می شود. در پایان این فرایند حالت گاز تغییر می کند. بنابراین ایجاد کار تنها نتیجه این فرایند است [۵۵].



شکل ۳.۳: نمودار یک فرایند غیرتعادلی

آنچه قانون دوم می گوید این است که غیرممکن است برای ایجاد کار از یک منبع با دمای ثابت حالت سامانه ثابت باقی بماند. برای ارتباط با معادله (۳۸.۳) فرایندی در نظر بگیرد که در سه حالت تقسیم شود. در اولین مرحله ما در یک فرایند غیرتعادلی مقدار مشخص W کار انجام می شود. در مرحله بعد کار انجام نمی شود و اجازه می دهیم تا سامانه به آرامش رسیده و به حالت تعادلی $F(\tau, \lambda_f)$ برسد. در حالت سوم فرایند را معکوس می کنیم تا به حالت تعادلی اولیه برگردیم یعنی از $F(\tau, \lambda_f)$ به $F(\tau, \lambda_i)$ برویم. به دلیل اینکه فرض کردیم فرایند شبه استاتیک است مقدار کار مورد نظر برای برگشت برابر با انرژی آزاد است [۵۵].

$$W_{retren} = -\Delta F \quad (39.3)$$

در بازگشت به حالت اولیه کل کار انجام شده در طول فرایند برابر با $W + W_{retren} = W - \Delta F$ است. طبق قانون دوم ترمودینامیک کار کل نمی تواند منفی باشد. به این معنی است که کار انجام شده از یک منبع در دمای ثابت بدون هیچ گونه تغییری در حالت سامانه انجام شده است. در نتیجه $W - \Delta F \geq 0$ که مطابق با معادله (۳۸.۳) است.

طبق پروتکل $\lambda(t)$ که سامانه در حالت اولیه $F = (\tau, \lambda_i)$ به یک حالت نهایی غیرتعادلی با پارامتر λ_f تحول پیدا می‌کند. بعد از انجام فرایند سامانه از حالت غیرتعادلی به حالت تعادلی $F = (\tau, \lambda_f)$ به استراحت خواهد رفت [۵۵].

۲.۳.۳ فرایند هم‌دما در مکانیک آماری تعادلی

در ادامه فرایند هم‌دما را از لحاظ کیفی و کمی تحلیل می‌کنیم. از آنجا که این فرایند شبه استاتیک است می‌توان آنها را به یک سری فرایندهای بی‌نهایت کوچک که در آن λ به مقدار کمی $(\lambda + d\lambda)$ تغییر پیدا می‌کند تقسیم کرد. این فرایند به دلیل کامل بودن به صورت یک سری فرایند کوچک پی‌درپی است. فرض می‌کنید در ابتدا یک سامانه با هامیلتونی $H = H(\lambda)$ در تعادل گرمایی با یک منبع گرمایی با دمای T قرار دارد. مطابق با مکانیک آماری این حالت گرمایی را با چگالی حالت گیبس نشان می‌دهند [۵۵].

$$\rho = \frac{e^{-\beta H}}{Z} \quad (۴۰.۳)$$

که $Z = \text{tr}(e^{-\beta H})$ تابع پارش و $\beta = \frac{1}{T}$ ثابت بولتزمن برابر یک است. همچنین می‌توان این عبارت را با ویژه‌مقدار E_n و ویژه‌بردار $|n\rangle$ نشان داد. احتمال پیدا کردن سامانه در حالت $|n\rangle$ به صورت زیر است.

$$P_n = \langle n | \rho_{th} | n \rangle = \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} \quad (۴۱.۳)$$

علاوه بر این انرژی داخلی سامانه را می‌توان به صورت زیر نوشت.

$$U = \langle H \rangle = \text{tr}(H \rho_{th}) = \sum_n E_n \rho_n \quad (۴۲.۳)$$

زمانی که λ را به $\lambda + d\lambda$ تغییر می‌کند E_n و P_n دچار تغییر می‌شود. در نتیجه U تغییر خواهد کرد.

$$dU = \sum d(E_n P_n) = \sum [(dE_n) P_n + E_n (dP_n)] \quad (۴۳.۳)$$

می‌توان از این جدا شدگی dU یک تفسیر جالب فیزیکی کرد [۵۶]. به دلیل این که تغییرات λ خیلی کوچک و آنی است سامانه پاسخی به آن نمی‌دهد. این وضعیت مربوط به اولین مرحله است. تغییرات غیراختلالی میانگین انرژی dE_n در احتمال P_n و در بخش دوم انرژی ثابت است و احتمال تغییر می‌کند. که سامانه به منظور رسیدن به تعادل به خود را منبع گرمایی وفق می‌دهد. بنابراین هر یک از فرایندهای بی‌نهایت کوچک را می‌توان در دو بخش از هم جدا کرد. بخش اول کار انجام شده است و در بخش دوم گرمای مبادله شده به منظور رسیدن به تعادل است. که به صورت زیر تعریف می‌شوند [۵۵].

$$\delta W = \sum (dE_n) P_n \quad (۴۴.۳)$$

$$\delta Q = \sum_n E_n(dP_n) \quad (۴۵.۳)$$

معادله (۴۳.۳) می‌توان به صورت زیر نوشت.

$$dU = \delta Q + \delta W \quad (۴۶.۳)$$

در ادامه ارتباط کار انجام شده δW با انرژی آزاد سامانه را بررسی می‌کنیم. به این معنی که

$$F = -T \ln Z \quad (۴۷.۳)$$

با توجه به اینکه $dF = -T \frac{dZ}{Z}$ و $Z = \sum_n e^{-E_n/T}$ است. می‌توان نشان داد $dF = \sum_n (dE_n)P_n$ که دقیقاً معادله (۴۴.۳) است.

$$\delta W = dF \quad (۴۸.۳)$$

با معکوس کردن معادله (۴۱.۳) ویژه مقدار انرژی حالت $|n\rangle$ را به صورت زیر تبدیل می‌شود.

$$E_n = -T \ln(ZP_n) \quad (۴۹.۳)$$

می‌توان معادله (۴۵.۳) را به دو بخش تقسیم کرد، یکی $\ln(Z)$ و دیگری $\ln(P_n)$ در بخش $\ln(Z)$ خواهیم داشت

$$-T \sum_n \ln(Z)d(P_n) = -T \ln(Z)d(\sum_n P_n) = 0 \quad (۵۰.۳)$$

با توجه به اینکه مجموع احتمالات برابر با یک $\sum P_n = 1$ است.

$$\delta Q = -T \sum_n (dP_n) \ln P_n \quad (۵۱.۳)$$

توجه داشته باشید که

$$d(\sum_n P_n \ln P_n) = \sum_n (dP_n) \ln P_n + \sum_n \frac{P_n}{P_n} (dP_n) \quad (۵۲.۳)$$

آخرین جمله نیز به دلیلی که در بالا ذکر شد، صفر است.

$$\delta Q = -Td(\sum_n P_n \ln P_n) \quad (۵۳.۳)$$

اگر چه δQ تابعی از حالت نیست، با تغییر کمیتی مرتبط است که تابعی از حالت می‌باشد. می‌توان آنروپی را به صورت زیر تعریف کرد.

$$S = -\sum_n P_n \ln P_n \quad (۵۴.۳)$$

$$\delta Q = TdS \quad (۵۵.۳)$$

این رابطه تنها برای فرآیندهای بسیار کوچک صدق می‌کند. برای فرآیندهای برگشت‌ناپذیر ممکن است تغییرات اضافی در آنروپی وجود داشته باشد. که تعاریف میکروسکوپی به مقادیر ترمودینامیکی مثل گرما و کار امکان‌پذیر است. علاوه بر این، امکان این وجود دارد که آن‌ها را به تابع حالت مرتبط کرد که از ماتریس چگالی اولیه ρ_{th} ساخته شوند. در حالی که این مقادیر ترمودینامیکی را می‌توان به طور مستقل از مکانیک آماری تعریف کرد.

۴.۳ کار به عنوان یک متغیر تصادفی

سال ۱۹۷۷ جازینسکی بینش بزرگی از خواص فرایندهای غیرتعادلی را کشف کرد. جازینسکی کار را به عنوان یک متغیر تصادفی به دست آورد [۵۷،۵۸]. فرایندی را فرض کنید که در آن از یک پیستون متحرک برای فشردن گاز دورن سیلندر استفاده می‌شود. از آنجا که مولکول‌های گاز متحرک هستند به صورت بی‌نظم و آشفته به دیواره‌های پیستون ضربه می‌زنند و در هر لحظه به پیستون فشار وارد می‌کنند. در نتیجه مولکول‌های گاز در هر لحظه نیروی متفاوتی به دیواره‌ها اعمال می‌کنند. این بدان معنی است که با تکرار این آزمون کار مورد نیاز برای فشردن گاز دورن سیلندر تغییر خواهد کرد. البته در اکثر سامانه‌ها این افت‌وخیزهای جزئی وجود دارد. از طرف دیگر، هنگام برخورد با سامانه‌های میکروسکوپی، این افت‌وخیزها قابل توجه می‌شوند. برخی از سامانه‌های میکروسکوپی علاوه بر افت‌وخیزهای گرمایی دارای افت‌وخیزهای کوانتومی می‌باشد. به منظور دستیابی به مقدار کار انجام شده در یک سامانه، باید انرژی را اندازه‌گیری کرد. با اندازه‌گیری انرژی تابع موج واهلش پیدا می‌کند و در هر لحظه یک مقدار به صورت تصادفی به دست می‌آید. در نتیجه دارای افت‌وخیز کار می‌شود. این اندازه‌گیری، سامانه را با احتمال مختلف در حالت‌های مختلف قرار می‌دهد. بنابراین در سامانه کوانتومی باید هم افت‌وخیز گرمایی و هم افت‌وخیز کوانتومی در نظر گرفته شود [۵۵].

۱.۴.۳ برابری جازینسکی

جازینسکی نشان داد با تفسیر مقدار کار W به عنوان یک متغیر تصادفی می‌توان یک برابری به دست آورد. حتی برای انجام فرایندهای خودبخودی غیرتعادلی این موضوع صادق است. در هر تحقیق همیشه سامانه را در حالت اولیه آماده‌سازی و سپس پروتکل را اجرا می‌کنیم و مقدار کار W را به دست می‌آوریم. پس از تکرار این فرایند می‌توان احتمال توزیع کار $P(W)$ به دست آورد. با داشتن احتمال توزیع می‌توان میانگین هر کمیتی را محاسبه کرد. به طور مثال میانگین کار به صورت زیر خواهد بود [۵۷،۵۸].

$$\langle W \rangle = \int P(W) dW \quad (۵۶.۳)$$

هدف اصلی جازینسکی این بود که نشان دهد که متوسط آماری $e^{-\beta W}$ باید برآورد شود.

$$\langle e^{-\beta W} \rangle = e^{-\beta \Delta F} \quad (57.3)$$

این نتیجه برای یک فرایندهای خودبه‌خودی تعادلی حفظ می‌شود و این برابری بسیار قوی‌تر از نابرابری در ترمودینامیک است. که ظاهر شدن $F(T, \lambda_f)$ در معادله (57.3) تعجب برانگیز است. زیرا حالت نهایی این فرایند تعادلی نیست. اگر فرایند شبه استاتیک باشد حالت نهایی این فرایند به صورت (57.3) است. همان‌طور که در شکل (3.3) نشان داده شد حالت نهایی غیر تعادلی است که ممکن است تفاوت قابل ملاحظه‌ای با $F(T, \lambda_f)$ داشته باشد. بنابراین وجود $F(T, \lambda_f)$ نشان دهنده حالتی از سامانه است که می‌خواهد به آن تحول پیدا کند. ولی امکان‌پذیر نیست زیرا فرایند به اندازه کافی آهسته نیست [55]. می‌توان نشان داد که نابرابری $W \geq \Delta F$ در برابری جازینسکی موجود است.

$$\langle W \rangle \geq \Delta F \quad (58.3)$$

به این ترتیب زمانی که کار را به عنوان یک متغیر تصادفی در نظر گرفته می‌شود، نتایج قدیمی از ترمودینامیک برای میانگین کار حاصل می‌شود. در سامانه‌های میکروسکوپی اندازه‌گیری‌های تکی معمولاً بسیار نزدیک به مقدار میانگین است. بنابراین تمایز بین میانگین کار $\langle W \rangle$ و اندازه‌گیری تکی کار وجود ندارد. اما برای سامانه‌های میکروسکوپی معمولاً درست نیست. در واقع اگر چه $\langle W \rangle \geq \Delta F$ است، ممکن است W خیلی کوچکتر از ΔF باشد. این موارد می‌تواند نقص موضعی قانون دوم ترمودینامیک باشد. برای سامانه‌های بزرگ این نقص موضعی بسیار اندک است. اما برای سامانه‌های کوچک می‌توان آن را به صورت تجربی اندازه گرفت. اگر توزیع $P(W)$ را داشته باشیم آنگاه می‌توان نقص موضعی از قانون دوم را به راحتی به دست آورد [55].

$$Prob(W < \Delta F) = \int_{-\infty}^{\Delta F} P(W) dW \quad (59.3)$$

۲.۴.۳ دینامیک غیر تعادلی یکانی

در این بخش جزئیات یک فرایند غیر تعادلی را بررسی خواهیم کرد. همان‌طور که در بالا اشاره شد نیاز به دانش دقیق از دینامیک سامانه و چگونگی ارتباط آن با منبع گرمایی است. فرض کنید اتصال بین سامانه‌ها و منبع گرمایی ارتباط ضعیف باشد. همچنین برای ساده سازی مسئله می‌توان از معادله شرودینگر برای توصیف دینامیک سامانه استفاده کرد. هامیلتونی سامانه‌ای که با منبع گرمایی با دمای T در تعادل گرمایی است را به صورت $H = H(\lambda_i)$ می‌باشد. حالت اولیه سامانه توسط ماتریس چگالی حالت گیبس در معادله (40.3) بیان شده است. در ابتدا، انرژی سامانه را اندازه می‌گیریم. اگر E_n^i ویژه‌مقدار، $|n\rangle$ ویژه‌حالت و H_i هامیلتونی اولیه سامانه باشد، انرژی E_n^i با احتمال $P_n = \frac{e^{-\beta H}}{Z}$ به دست می‌آید. بلافاصله

بعد از اندازه‌گیری انرژی سامانه، پروتکل را اجرا می‌کنیم. پارامتر λ از $\lambda(0) = \lambda_i$ به $\lambda(\tau) = \lambda_f$ تغییر می‌کند. فرض کنید که در طول این فرایند ارتباط با منبع گرمایی بسیار ضعیف است. بنابراین حالت سامانه به صورت $|\psi(t)\rangle = U(t)|n\rangle$ تحول می‌یابد. که عملگر یکانی تحول زمانی خواهد بود. که در موافقت با معادله شرودینگر است ($\hbar = 1$) [۵۵].

$$i\partial_t U = H(t)U, \quad U(0) = 1 \quad (۶۰.۳)$$

در انتهای فرایند دوباره انرژی سامانه را اندازه‌گیری می‌کنیم. هامیلتونی نهایی $H_f = H(\lambda_f)$ است. بنابراین ممکن است که انرژی E_n^f و ویژه‌حالت متفاوتی داشته باشیم. بنابراین احتمال اینکه انرژی E_n^f به دست آوریم به صورت زیر است.

$$|\langle m|\psi(t)\rangle|^2 = |\langle m|U(t)|n\rangle|^2 \quad (۶۱.۳)$$

که می‌توان آن را به عنوان احتمال شرطی تفسیر کرد. به این صورت که اگر سامانه در ابتدا در حالت $|n\rangle$ باشد بعد گذشت زمان τ در حالت $|m\rangle$ یافت می‌شود. از آنجا که سامانه هیچ گرمایی با محیط تبادل نمی‌کند هر تغییر انرژی لزوماً باید به کار انجام شده توسط عامل خارجی نسبت داده شود. انرژی در اولین اندازه‌گیری E_n^i و در اندازه‌گیری دوم E_m^f خواهد بود. پس می‌توان کار انجام شده توسط عامل خارجی را به صورت زیر تعریف کرد.

$$W = E_m^f - E_n^i \quad (۶۲.۳)$$

هر دو ویژه مقدار E_m^f و E_n^i دارای افت‌وخیز هستند که با تکرار فرایند می‌توانند تغییر کنند. به این صورت که ویژه مقدار انرژی در اولین اندازه‌گیری E_n^i با توجه به افت‌وخیز گرما تصادفی است و ویژه مقدار انرژی در دومین اندازه‌گیری E_m^f با توجه به افت‌وخیز کوانتومی تصادفی می‌باشد. بنابراین W یک متغیر تصادفی است که علاوه بر افت‌وخیز گرمایی، افت‌وخیز کوانتومی را در بر می‌گیرد [۵۵].

۳.۴.۳ توزیع کار و تابع مشخصه

با تکرار پروتکل فوق می‌توان عبارتی برای توزیع کار $P(W)$ به دست آورد. این را می‌توان با توجه به تقسیم فرایند به دو بخش به دست آورد. با توجه به نظریه احتمال اگر A و B دو رویداد باشند احتمال اینکه هر دو رویداد رخ دهد به صورت زیر است [۵۵].

$$P(A, B) = P(A|B)P(B) \quad (۶۳.۳)$$

$P(B)$ احتمال این است که رویداد B رخ دهد و $P(A|B)$ را با توجه به معادله (۶۱.۳) به دست آورد. در حقیقت احتمال اولیه است. از این رو احتمال این که هر رویداد رخ داده است.

$$\text{Prob}(E_n^i \rightarrow \text{protocol} \rightarrow E_m^f) = |\langle m|U(\tau)|n\rangle|^2 P_n \quad (۶۴.۳)$$

بنابراین احتمال کار انجام شده به صورت زیر است.

$$P(W) = \sum_{m,n} |\langle m|U(t)|n \rangle|^2 P_n \delta[W - (E_m^f - E_n^i)] \quad (۶۵.۳)$$

[.] تابع دلتای دیراک است. در اکثر سامانه‌ها تعداد زیادی سطوح انرژی مجاز وجود دارد و بنابراین تعداد زیادی تفاوت انرژی $E_m^f - E_n^i$ وجود دارد. کار کردن با تابع مشخصه کار که به عنوان تبدیل فوریه توزیع اصلی تعریف می‌شود مناسب‌تر است.

$$G(r) = \langle e^{irW} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} P(W) e^{irW} dW \quad (۶۶.۳)$$

می‌توان با $G(W)$ تابع توزیع اصلی را از تبدیل معکوس فوریه بازیابی کرد.

$$P(W) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G(r) e^{-irW} dr \quad (۶۷.۳)$$

با توجه به اینکه $G(W)$ و $P(W)$ تبدیل فوریه یکدیگر هستند، حاوی همان اطلاعات می‌باشد. با کمک از معادله (۶۷.۳) می‌توان نوشت.

$$\begin{aligned} G(r) &= \sum_{n,m} |\langle m|U|n \rangle|^2 P_n e^{ir(E_m^f - E_n^i)} \\ &= \sum_{n,m} \langle n|U^\dagger e^{irE_m^f} |m \rangle \langle m|U e^{-irE_n^i} P_n |n \rangle \\ &= \sum_{n,m} \langle n|U^\dagger e^{irH_f} |m \rangle \langle m|U e^{-irH_i} \rho_{th} |n \rangle \\ &= \text{tr}\{U^\dagger(\tau) e^{irH_f} U(\tau) e^{-irH_i} \rho_{th}\} \end{aligned} \quad (۶۸.۳)$$

از این رو نتیجه می‌گیریم

$$G = \text{tr}\{U^\dagger(\tau) e^{irH_f} U(\tau) e^{-irH_i} \rho_{th}\} \quad (۶۹.۳)$$

تابع مشخصه معنای فیزیکی به خصوصی ندارد اما از آن به عنوان رد حاصل ضرب یک عملگر نوشته می‌شود که معمولاً بسیار راحت‌تر از کار با احتمال $P(W)$ است. در ابعاد مختلف نقشی شبیه تابع پارش Z در مکانیک آماری ایفا می‌کند. معمولاً به معنای فیزیکی Z قرار نمی‌گیرد، بلکه از آن به عنوان کمیت مناسبی استفاده می‌شود که می‌توان مشاهده‌پذیرهای مانند انرژی و آنتروپی به دست آورد. از $G(r)$ نیز می‌توان به راحتی گشتاور آماری W را مشخص کرد.

$$G(r) = \langle e^{irW} \rangle = 1 + ir\langle W \rangle - \frac{r^2}{2} \langle W^2 \rangle - i \frac{r^3}{3!} \langle W^3 \rangle + \dots \quad (۷۰.۳)$$

در هر زمان $\langle W^n \rangle$ متناسب با مرتبه r^n است. از سوی دیگر می‌توان فرمول مکانیک کوانتومی را برای معادله (۷۰.۳) به دست آورد. به عنوان مثال با توجه به عملگر A میانگین کار را به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$\langle W \rangle = \langle H_f \rangle_\tau - \langle H_i \rangle_0 \quad (۷۱.۳)$$

$$\langle A \rangle_t = \text{tr}\{U^\dagger(t)AU(t)\rho_{th}\} \quad (۷۲.۳)$$

حالت سامانه در زمان t به صورت $\rho(t) = U(t)\rho_{th}U^\dagger(t)$ در واقع می‌بینیم که $\langle W \rangle$ اختلاف بین میانگین انرژی در زمان 0 و میانگین انرژی در زمان τ است. از تابع مشخصه می‌توان برای نشان دادن برابری جازینسکی براساس (۶۹.۳) استفاده کرد. با توجه به $G(r = i\beta) = \langle e^{-\beta W} \rangle$ و استفاده از معادله (۴۰.۳) و (۵۸.۳) می‌توان نوشت

$$G(i\beta) = \frac{1}{Z_i} \text{tr}(U^\dagger e^{-\beta H_f} U) = \frac{1}{Z_i} \text{tr}(e^{-\beta H_f}) = \frac{Z_f}{Z_i} \quad (۷۳.۳)$$

که $Z = \sum e^{-\beta H_f}$ تابع پارش است.

$$G(i\beta) = \langle e^{-\beta W} \rangle = e^{-\beta \Delta F} \quad (۷۴.۳)$$

توجه داشته باشید که هیچ فرضی به عنوان سرعت فرایند در نظر گرفته نشده است. بنابراین نتیجه می‌گیریم که برابری جازینسکی برای یک فرایند غیرتعادلی برقرار است [۵۵].

فصل ۴

ترمودینامیک بهم ریختگی اطلاعات
کوانتومی

۱.۴ مقدمه

با کشف قانون دوم ترمودینامیک و تلاش برای ابتدای آن بر دینامیک کلاسیک در نیمه دوم قرن نوزدهم میلادی، مسأله یا پارادوکس بازگشت‌پذیری برای اولین بار مطرح شد، زیرا قوانین دینامیک کلاسیک برخلاف قانون دوم ترمودینامیک نسبت به زمان متقارن یا بازگشت‌پذیر بودند. دو رهیافت اصلی در حل این مسأله وجود دارد در اولین دیدگاه بازگشت‌ناپذیری ناشی از ناپایداری‌های دینامیکی دانسته می‌شود و این ویژگی در سطح میکروسکوپی در قالب نوعی بی‌نظمی تعریف می‌شود؛ در حالی که در دیدگاه دیگر بازگشت‌ناپذیری در سطح ماکروسکوپی را ناشی از وجود شرایط اولیه خاصی برای جهان در نظر می‌گیرند و برقراری بازگشت‌پذیری در سطح میکروسکوپی را در تضاد با آن نمی‌دانند. عدم تقارن زمانی فرآیندهای مذکور این انتظار را ایجاد می‌کند که قوانین بنیادی حاکم بر آنها نیز نسبت به زمان نامتقارن باشند. با این حال به نظر نمی‌رسد که هیچ یک از قوانین بنیادی موجود در فیزیک این‌گونه باشند. عدم تقارن زمانی فرآیندهای ماکروسکوپی از یک طرف، و تقارن زمانی قوانین بنیادی حاکم بر آنها در سطح میکروسکوپی از طرف دیگر، مسأله‌ای را ایجاد می‌کند که «پارادوکس بازگشت‌پذیری» نامیده می‌شود. منظور از تقارن یا ناوردای معکوس زمانی بودن قوانین بنیادی فیزیک این است، که اگر این قوانین بر فرایند مشخصی اعمال شوند، به همان اندازه بر معکوس زمانی همان فرایند نیز قابل اعمال خواهند بود. باید توجه کرد که در سطح میکروسکوپی نیز می‌توان گه‌گاه پدیده‌های بازگشت‌ناپذیری را مشاهده کرد. البته در مقایسه با سایر قوانین بنیادی که نسبت به زمان متقارن هستند، این‌ها مواردی استثنایی محسوب می‌شوند. در قرن نوزدهم، قانونی فیزیکی کشف شد. که بیشتر فرآیندهای بازگشت‌ناپذیر مانند پخش شدن گازها و انتقال گرما از جسم گرم‌تر به سردتر را در بر می‌گرفت. این همان قانون دوم ترمودینامیک است که بیان امروزی آن به این صورت است. آنتروپی سامانه فیزیکی منزوی هیچ‌گاه با گذشت زمان کاهش نمی‌یابد، بلکه باید افزایش یابد و یا بدون تغییر باقی بماند. بنابراین، سامانه‌ها همیشه در جهتی تحول می‌یابند که منجر به افزایش آنتروپی در آنها شود. آنتروپی را می‌توان در اینجا مقیاسی از درجه بی‌نظمی در هر سامانه دانست [۸]. به تازگی توجه زیادی به مقیاس دیگری، به نام همبستگی خارج از زمان (*OTOC*)^۱ نیز به خود گرفته است، که میزان آشفتگی و بی‌نظمی سامانه‌های کوانتومی را مشخص می‌کند [۵۹].

۲.۴ استفاده از همبستگی‌ها در مکانیک کوانتومی

یکی از موضوعات مهم در بحث محاسبات و اطلاعات کوانتومی، همبستگی‌های کوانتومی می‌باشند [۵۹]. وجود همبستگی بین اجزای سامانه می‌تواند باعث به وجود آمدن خواص

^۱out-of-time-order correlators

فیزیکی کاملاً جدیدی در سامانه‌های کوانتومی شود که در هر کدام از زیر سامانه‌ها به طور مجزا وجود ندارد. همبستگی‌های کوانتومی با توجه به نقش مهمی که در نظریه اطلاعات و رایانش کوانتومی ایفاء کرده‌اند، در دهه اخیر نظر بسیاری از محققان این حوزه را به خود جلب کرده است. در این زمینه معیارهای متفاوتی برای محاسبه همبستگی‌های کوانتومی و کلاسیکی ارائه شده است. همبستگی بین قسمت‌های مختلف يك سامانه کوانتومی همواره یکی از مباحث مورد توجه در اطلاعات و محاسبات کوانتومی بوده است. این همبستگی‌ها عامل اصلی برتری سامانه‌های کوانتومی نسبت به سامانه‌های کلاسیکی در انجام محاسبات کوانتومی می‌باشند. تعیین ویژگی همبستگی‌های کوانتومی و میزان این همبستگی‌ها هم از نظر تئوری و هم از نظر کاربردی بسیار اهمیت دارد. توابع همبستگی خارج از زمان به عنوان کمیتی برای تعیین دینامیک آشفتگی سامانه‌های بس ذره‌ای کوانتومی به طور گسترده مورد بحث قرار می‌گیرد [۶۰]. در سامانه‌های اسپینی کوانتومی، مشاهده‌پذیرهای موضعی نیز محدود هستند و بنابراین رشد نمایی صرفاً گذرا (فانی) است، که به عنوان یک معیار خوب برای تعیین آشفتگی کوانتومی در چنین سامانه‌هایی استفاده می‌شود. موفقیت اصلی این حوزه، یک طبقه‌بندی نظریه ماتریس تصادفی برای خواص عمومی سامانه‌های کوانتومی بوده است. محدودیت‌های کلاسیکی چنین سامانه‌ای دارای نمای مثبت لیاپانوف^۲ هستند که حساسیت نمایی را به شرایط اولیه نشان می‌دهد که به اصطلاح اثر پروانه می‌گویند [۵۹].

اثر پروانه‌ای نام پدیده‌ای است که به دلیل حساسیت سامانه‌های آشوبناک به شرایط اولیه ایجاد می‌شود. این پدیده به این اشاره می‌کند که تغییری کوچک در یک سامانه آشوبناک (مثلاً بال‌زدن پروانه) می‌تواند باعث تغییرات شدید (وقوع توفان در کشوری دیگر) در آینده شود. اثر پروانه‌ای به این معناست که تغییر جزئی در شرایط اولیه می‌تواند به نتایج وسیع و پیش‌بینی نشده‌ای در سامانه‌ها منجر گردد [۶۱].

مکانیک کوانتومی به وضوح یک نظریه بسیار موفق است. استفاده از معادلات شرودینگر و هایزینبرگ برای حل مشکلات میکروسکوپی منجر به توضیحات و پیش‌بینی‌های بی‌شماری از پدیده‌های فیزیک شده است. با این حال، از یک سو، مکانیک کوانتومی یک نظریه مستقل نیست، زیرا برای فرموله کردن مسائل خود، نیاز به کوانتیزه کردن نسخه کلاسیکی این مسئله است. یکی از ارکان‌های اکتشافی مهم در فرمول‌بندی اولیه مکانیک کوانتومی، اصل تناظر بوهر است، که بیان می‌کند که یک سامانه مکانیکی کوانتومی باید رفتار همتای کلاسیک خود را در حد ناپدید شدن ثابت پلانک در نظر بگیرد. در حال حاضر به خوبی می‌دانیم که این نسخه ساده دارای مشکلاتی است، زیرا در بسیاری از موارد مقادیر مکانیک کوانتومی رفتار غیرتحلیلی را در این حد نشان می‌دهد. با این حال، مشکلات این نسخه در بیشتر مواقع توسط پیشینیان مکانیک کوانتومی مطرح شده است زیرا اغلب آنها سامانه‌ها را، انتگرال‌پذیر کلاسیکی را در نظر گرفته‌اند. در سال‌های اخیر تعداد زیادی از آثار علمی به مطالعه سامانه‌های کلاسیک اختصاص داده شده است، که ادغام کامل معادلات حرکت حتی در اصل امکان‌پذیر

^۲Lyapunov

نیست. اکنون باور بر این است که تعدادی از هامیلتونی‌هایی که انتگرال‌پذیر هستند، در واقع صفر است؛ یعنی بیشتر سامانه‌های هامیلتونی انتگرال‌پذیر نیستند. برای هامیلتونی‌هایی که غیرانتگرال‌پذیر هستند، اگر چه معادلات حرکت نیوتن قطعی هستند، اما حساس بودن آنها به شرایط اولیه را نشان می‌دهد که منجر به مجموعه‌ای از مسیرها می‌شود. اساساً طوری رفتار می‌کنند مثل اینکه آنها تصادفی یا آشفته هستند. در فلسفه بسیاری از مسائل خاص مکانیک کوانتومی، مورد مطالعه قرار گرفته است که در اغلب موارد با دو درجه آزادی شناخته می‌شود. که به طور کلاسیک آشوبناک هستند. در نتیجه، ظهور آشفتگی کوانتومی از آشفتگی کلاسیک پیدا شده است.

۳.۴ بهم‌ریختگی اطلاعات

این که آیا یک سامانه منزوی گرمایی می‌شود یا نه، یک مسئله اساسی در مکانیک آماری است که مربوط به عدم انتگرال‌پذیری هامیلتونی‌ها است. در سامانه‌های کلاسیک، ارگودیک و گرمایی شدن سامانه آشفته مورد بحث قرار می‌گیرد. در سامانه‌های کوانتومی، هم‌ارزی آشفتگی کلاسیکی به‌طور واضح آشکار نیست، زیرا معادله شرودینگر خطی است. با این وجود، مشخص شده است که برخی از ویژگی‌های رفتار آشوبناک در سامانه‌های کوانتومی، مانند آمار سطح هامیلتونی‌ها وجود دارد. اخیراً، فرضیه گرمایی شدن ویژه‌حالت‌ها *ETH* به عنوان یکی دیگر از نشانه‌های آشفتگی کوانتومی در سامانه‌های بس‌ذره‌ای مورد توجه قرار گرفته است. که بیان می‌کند که حتی یک ویژه‌حالت انرژی گرمایی می‌شود. همه ویژگی‌های آشفتگی کوانتومی به طور مستقیم به انتگرال‌پذیری هامیلتونی مربوط می‌شود؛ سامانه‌های کوانتومی غیرانتگرال‌پذیر آشفتگی کوانتومی را نشان می‌دهند. چنین رفتاری آشوبناک در سامانه‌های کوانتومی نیز موضوع پژوهش‌های فعال در آزمایش‌های واقعی با اتم‌های سرد، تله‌های یونی هستند. به منظور بررسی خواص آشفتگی کوانتومی سامانه‌های بس‌ذره‌ای فراتر از مفهوم متعارف آشفتگی کوانتومی، توجه به دینامیک اطلاعات کوانتومی در سامانه‌های بس‌ذره‌ای کوانتومی بسیار مهم است. چگونه اطلاعات کوانتومی بصورت موضعی بر روی کل سامانه توسط دینامیک‌های یکانی گسترش می‌یابد؟ چنین پراکندگی اطلاعات کوانتومی به معنای بهم‌ریختگی اطلاعات است [۶۲]. بررسی بهم‌ریختگی نه تنها برای درک دینامیک آرامش‌یافتن سامانه‌های تجربی مهم است، بلکه از نظر پارادوکس اطلاعات سیاه‌چاله‌ها، که در آن استدلال شده است که سیاه‌چاله‌ها سریع‌ترین بهم‌ریختگی در جهان دارا می‌باشند، مهم است. با این حال، ارتباط اساسی بین بهم‌ریختگی و آشفتگی کوانتومی به طور جامع درک نشده است [۵۹]. در ادامه یک معیار از بهم‌ریختگی، به نام همبستگی خارج از زمان *OToC* را بررسی می‌کنیم.

۴.۴ همبستگی خارج از زمان

همبستگی خارج از زمان به عنوان یک روش جدید برای تعیین آشفتگی کوانتومی مورد توجه قرار گیرد. از آنجا که می‌تواند تخریب سامانه دینامیک کوانتومی را تشخیص دهد، علاقه‌مند به سامانه‌های بس‌ذره‌ای کوانتومی هستیم تا رفتار آشوبناک کوانتومی خود را نشان دهد. $OTOC$ را به صورت زیر معرفی می‌کنیم [۵۹].

$$C_{V,X}(\tau) = \langle [X_\tau, V]^\dagger [X_\tau, V] \rangle \\ \langle V^\dagger X_\tau^\dagger X_\tau V \rangle + \langle X_\tau^\dagger V^\dagger V X_\tau \rangle \\ - 2\text{Re}\langle X_\tau^\dagger V^\dagger X_\tau V \rangle \quad (1.4)$$

اپراتورهای V و X هر دو هرمیتی هستند. با بهم ریختن اطلاعات کوانتومی می‌توان به راحتی $OTOC$ را محاسبه کرد. این مفهوم ابتدا توسط لارکین و اووچینیکوف^۳ برای بررسی بی‌ثباتی مسیرهای الکترونی نیمه‌کلاسیک در ابررساناها مورد استفاده قرار گرفت. در حال حاضر این مفهوم به عنوان ابزاری برای تعیین آشفتگی کوانتومی نیز استفاده می‌شود. $OTOC$ شامل همبستگی زیر است [۵۹].

$$F_{V,X}(t) = \langle X_\tau^\dagger V^\dagger X_\tau V \rangle \quad (2.4)$$

علاقه‌مندی به $OTOC$ در حال احیا شدن است که در زمینه هولوگرافی رو به افزایش می‌باشد. اخیراً تعدادی از طرح‌های تجربی برای اندازه‌گیری $OTOC$ پیشنهاد شده، که فقط اندازه‌گیری اولیه تجربی آن گزارش شده است. سوئینگل^۴ و همکارانش یک طرح تداخل سنجی پیشنهاد کردند. که در آن $OTOC$ به صورت یک حالت کوانتومی در نظر گرفته شده تا در حالت یک اتم سرد اجرا شود. به تازگی آزمایش‌هایی با یک یون مغناطیسی به دام افتاده و AMR انجام شده است [۶۳،۶۴]. که روشی برای اندازه‌گیری دمای نامحدود ارائه می‌دهند ($\rho \propto 1$). به عنوان مثال $OTOC$ به صورت $F_{V,X}(t) = \text{Tr}(X_\tau^\dagger V^\dagger X_\tau V)$ است. در واقع ρ ظاهر نمی‌شود که ساده‌سازی زیادی در اجرای طرح نشان می‌دهد، می‌توان با آماده‌سازی سامانه در حالت کمکی $(\rho \propto V + a1)$ به $F_{V,X}(t)$ رسید و همبستگی سه نقطه‌ای $\text{Tr}(X_\tau^\dagger V^\dagger X_\tau \rho')$ را اندازه‌گیری کرد. در اینجا از روش جایگزینی برای دستیابی به $F_{V,X}(t)$ و $C_{V,X}(t)$ استفاده شده است که نیازی به کارگیری سامانه کمکی و یا یک حالت کمکی ندارد. این روش برای یک مجموعه وسیعی از حالت‌های ρ که شامل حالت‌های گرمایی است مورد استفاده قرار می‌گیرد. طرح اندازه‌گیری دو نقطه‌ای پروتکلی است که مشاهده‌پذیرها در ابتدا و در پایان اختلالی که به سامانه غیرتعادلی وارد می‌شود، اندازه‌گیری می‌کنیم [۶۵،۶۶]. تغییرات مشاهده شده در مقادیر اندازه‌گیری شده اطلاعات مربوط به اختلال را مشخص می‌کند. مشاهده‌پذیر O در ابتدا و پایان فرایند که در

³ Larkin and Ovchinnikov

⁴ Swingle

اطلاعات سامانه اختلال ایجاد شده، اندازه گیری می شود. به دلیل ارتباط آن با اثر پروانه ای که از فیزیک غیرخطی نشأت می گیرد، می توان از پروتکل $Wing - Flap$ استفاده و تغییرات در مقدار مشاهده پذیر را ثبت کرد [۵۹].

در پروتکل $Wing - Flap$ یک سامانه با توجه به پیشرفت های رو به جلو $e^{-i\tau H}$ تحول می یابد و سپس با $e^{i\tau H}$ به عقب بر می گردد. دو تحول $Wing - Flap$ با استفاده از عملگرهای یکانی X قطع می شود که از عقب رفتن سامانه به حالت اولیه جلوگیری می کند [۵۹].

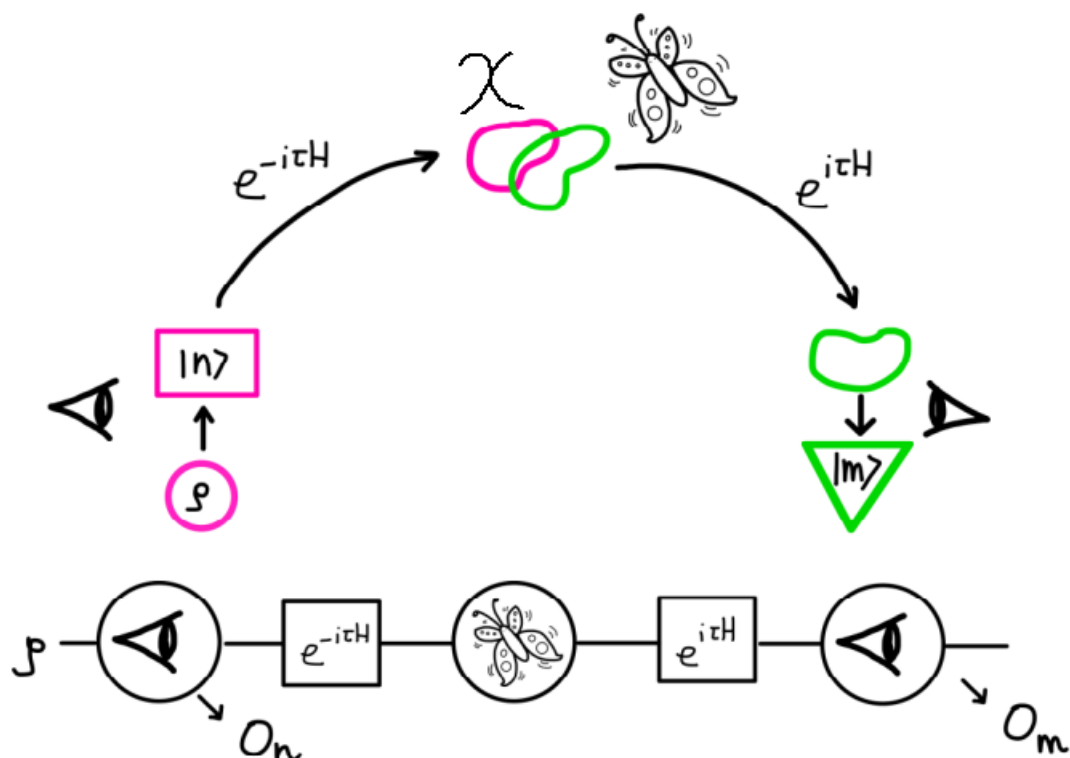
۵.۴ روش اندازه گیری دو نقطه ای

کار در سامانه های کوانتومی بسته معمولاً با اندازه گیری دو نقطه ای تعریف می شود. این تعریف کار با نظریه های افت وخیز کوانتومی سازگار است، اما اساساً با همتای کلاسیکی متفاوت است. در سال های اخیر علاقه مندی به مطالعه ترمودینامیکی سامانه های کوچک کوانتومی غیرتعادلی افزایش پیدا کرده است. بنابراین تعداد مقادیر ترمودینامیکی که در چارچوب کلاسیک تعریف شده بودند، به مکانیک کوانتومی تعمیم یافته است. به طور خاص، تعریف کار کوانتومی بسیار ظریف است. در سامانه های کوانتومی، کار مربوط به تغییر انرژی است. بنابراین کار کوانتومی به طور کلی توسط اندازه گیری دو نقطه انرژی، یکی در ابتدا و دیگری در انتهای فرایند تعریف می شود. سپس کار کوانتومی یک مقدار تصادفی به عنوان تفاوت بین دو نتیجه اندازه گیری انرژی به دست می آید. قابل ذکر است که نسخه کوانتومی روابط کار غیرتعادلی، که در تخمین اختلاف انرژی آزاد برای سامانه های کوچک کلاسیک بسیار مفید است، مستقیماً از این تعریف کار کوانتومی پیروی می کنند. در ادامه روش اندازه گیری دو نقطه ای را برای اندازه گیری OTO مورد بررسی قرار می دهیم.

ابتدا بر روی همبستگی F در مواردی که X و V عملگر یکانی هستند، تمرکز می کنیم. V را به صورت زیر معرفی می کنیم.

$$V = e^{iuO} \quad (۳.۴)$$

- ۱- ابتدا سامانه را در حالت ρ آماده سازی می کنیم. به عنوان مثال سامانه (زنجیره اسپینی) را در جهت x قرار می دهیم.
- ۲- مشاهده پذیر O را قبل از تحول سامانه اندازه می گیریم و مقدار آن را ثبت می کنیم.
- ۳- سامانه را با استفاده از عملگر $e^{-i\tau H}$ برای مدت زمان $t = \tau$ تحول می دهیم.
- ۴- بعد از گذشت زمان $t = \tau$ از تحول سامانه اختلال X را به سامانه وارد می کنیم.
- ۵- بعد از اعمال اختلال X سامانه را با منفی کردن مقدار هامیلتونی H یعنی با عملگر $e^{i\tau H}$ برای مدت زمان $t = \tau$ به طور معکوس تحول می دهیم.
- ۶- بعد از تحول سامانه به طور معکوس، مقدار مشاهده پذیر O را اندازه گیری و ثبت می کنیم.



شکل ۱.۴: روش اندازه‌گیری دو نقطه‌ای

در هر دو اندازه‌گیری مشاهده‌پذیر O فرض می‌شود که ویژه‌مقدار O_n و O_m به ترتیب به حالت $|n\rangle$ و $|m\rangle$ واهلش می‌کند. برای سادگی فرض می‌کنیم که ویژه‌مقدار O غیرتبه‌گن است. تحول را تحت هامیلتونی H را تحول روبه جلو و تحت هامیلتونی $-H$ را تحول روبه عقب می‌نامیم [۵۹]. در غیاب پروتکل *Wing-Flap* یعنی زمانی که X همانی است حالت سامانه در انتهای تحول رو به عقب تغییر نخواهد کرد و دقیقاً همان حالت اولیه $|n\rangle$ تحول رو به جلو است. وقتی که پروتکل *Wing-Flap* وجود دارد $X \neq 1$ در انتهای تحول رو به عقب حالت یک ترکیب خطی از تمام خصوصیات O است و در اندازه‌گیری دوم ویژه‌حالت‌های $|n\rangle$ یا $|m\rangle$ را انتخاب می‌کند، که ممکن است با توجه به، بهم‌ریختگی اطلاعات کوانتومی متفاوت باشد. با تکرار پروتکل، در هر مرتبه ویژه‌مقدار O_n و O_m مشاهده می‌شود که به صورت تصادفی به دست می‌آید. با تکرار زیاد این پروتکل تابع چگالی احتمال $P(\Delta O, \tau)$ ایجاد می‌شود. این تابع از مشاهده تغییرات در مقدار O حاصل می‌شود.

$$\Delta O = O_m - O_n \quad (۴.۴)$$

$P(\Delta O, \tau)$ حاوی اطلاعاتی در مورد *OTOC* است. این ارتباط را می‌توان به صورت زیر ایجاد

کرد.

$$G(k, \tau) = \int P(\Delta O, \tau) e^{-ik\Delta O} d\Delta O \quad (5.4)$$

تابع مشخصه $P(\Delta O, \tau)$ تابع تبدیل فوریه است [۴۹].

$$F_{e^{iuO}, X(t)} = G(u, \tau) \quad (6.4)$$

معادله (۶.۴) ارتباط بین $OTOC$ با عملگرهای e^{iuO} و X را نشان می‌دهد و با تابع مشخصه از متغیر تصادفی O در پروتکل $wing - flap$ برابر است.

$$P(\Delta O, \tau) = \sum_{m,n} \delta[\Delta O - O_m + O_n] P_\tau[m|n] p_n \quad (7.4)$$

برای $p_n = \text{tr} \prod_n \rho$ احتمال مشاهده O_n در اولین اندازه‌گیری و $\delta[\cdot]$ تابع دلتای دیراک است. برای سادگی در ادامه $[\rho, O] = 0$ در نظر گرفته می‌شود. این تنها محدودیتی است که برای O در نظر گرفته می‌شود. نماد $P_\tau[m|n]$ احتمال این است که در دومین اندازه‌گیری O_m را به دست آورد. به شرطی که در اولین اندازه‌گیری O_n حاصل شود.

$$P_\tau[m|n] = |\langle m|U_\tau|n \rangle|^2 \quad (8.4)$$

$$U(\tau) = e^{i\tau H} X e^{-i\tau H} \quad (9.4)$$

توجه داشته باشید که U_τ ، در زمان τ عملگر $X(\tau)$ در نمایش هایزنبرگ است $U_\tau = X_\tau$ با استفاده از (۵.۴)، (۷.۴)، (۹.۴) و تحلیل برابری $\sum_m |m\rangle\langle m| = 1$ و $[\rho, O] = 0$ به دست می‌آوریم. عملگر یکانی U تحول بین دو سامانه را توصیف می‌کند.

$$\begin{aligned} G(u, \tau) &= \sum_{m,n} e^{-iuO_m} e^{iuO_n} P_\tau[m|n] p_n \\ &= \sum_{m,n} \langle n|U^\dagger(\tau)|m\rangle e^{-iuO_m} \langle m|U_\tau|n\rangle e^{iuO_n} p_n \\ &= \sum_n \langle n|U_\tau^\dagger e^{-iuO} U_\tau e^{iuO}|n\rangle p_n \\ &= \text{tr} U_\tau^\dagger e^{-iuO} U_\tau e^{iuO} \rho \\ &= \text{tr} X_\tau^\dagger V^\dagger X_\tau V \rho \end{aligned} \quad (10.4)$$

بنابراین تابع مشخصه $P(\Delta O, \tau)$ تغییرات ΔO بین e^{-iuO} و X در $OTOC$ است. عملاً به این معنا است که می‌توان با اندازه‌گیری دونقطه از O و سپس تبدیل فوریه آن، $F_{iuO, X(\tau)}$ را به دست آورد. به عنوان مثال یک عملگر مکانی (موضعی) اسپین و X ممکن است یک چرخش موضعی در جای مختلف باشد [۶۴].

۶.۴ ترمودینامیک بهم ریختگی اطلاعات

با توجه به این که $OTOC$ می‌تواند به عنوان پروتکل اندازه‌گیری دونقطه‌ای بازنویسی شود، می‌توان به طور مستقیم با ترمودینامیک کوانتومی غیرتعادلی بررسی کرد. زمانی که کمیت O را اندازه‌گیری می‌کنیم، هامیلتونی سامانه کوانتومی را برابر O در نظر گرفته می‌شود. معادله (۶.۴) نشان می‌دهد که $F_{iuO, X(\tau)}$ تابع مشخصه کار $G_{work}(u, \tau)$ یعنی تبدیل فوریه تابع توزیع احتمال کار است.

$$P(w, \tau) = \sum_{n,m} \delta[w - e_m + e_n] P_\tau[m|n] p_n \quad (11.4)$$

تفاوت ویژه مقدار انرژی e_k اندازه‌گیری شده در ابتدا و در انتهای سامانه را به معنای کار کوانتومی X در نظر گرفته می‌شود. در غیاب $Wing - Flap$ یعنی زمانی که هیچ اختلالی به سامانه وارد نشود، هیچ کاری بر روی سامانه انجام نمی‌شود و حالت سامانه دقیقاً همان حالت اولیه است. به دلیل عدم تغییر حالت سامانه با اندازه‌گیری مقدار مشاهده‌پذیر O تفاوت ویژه مقدارها برابر صفر خواهد شد و با تحول سامانه هیچ کاری بر روی سامانه انجام نمی‌شود. زمانی کار بر روی سامانه انجام می‌شود که پروتکل $Wing - Flap$ و عملگر X وجود داشته باشد و حالت سامانه تغییر پیدا کند.

انحراف معیار و پاشندگی یعنی میانگین مربع توزیع کار می‌تواند به صورت زیر باشد.

$$\langle w^2 \rangle = \int dw p(w, \tau) w^2 = \text{tr}(X_\tau^\dagger H_0 X_\tau - H_0)^2 \rho \quad (12.4)$$

در واقع $\langle w^2 \rangle$ میانگین جابجایی بین X و H_0 است.

$$\langle w^2 \rangle = \langle [X_\tau, H_0]^\dagger [X_\tau, H_0] \rangle = C_{H_0, X(\tau)} \quad (13.4)$$

در این مورد از تعادل گرمایی اولیه، $\rho = e^{-\beta H_0} / Z$ که β نشان دهنده دمای معکوس و Z تابع پارش است. میانگین توزیع کار $\langle w \rangle = \text{tr}(X_\tau^\dagger H_0 X_\tau - H_0) \rho$ را می‌توان با توجه به آنتروپی نسبی $S = [\rho_\tau || \rho]$ را بین حالت اولیه ρ حالت تحول یافته ρ_τ است.

$$\langle w \rangle = \beta^{-1} S[\rho_\tau || \rho] = \beta^{-1} \text{tr}(\rho_\tau \ln \rho_\tau - \rho_\tau \ln \rho) \quad (14.4)$$

آنتروپی نسبی کوانتومی یک معیار اندازه‌گیری بین دو حالت ρ و $\rho_\tau = X_\tau \rho X_\tau^\dagger$ است، که غیرمنفی بودن آن نتیجه قانون دوم ترمودینامیک است [۶۷، ۶۸]. به این ترتیب یک مقدار معنی‌دار از بهم‌ریختگی اطلاعات رخ می‌دهد که به عنوان یک نتیجه از پروتکل $wing - flap$ است. عملگر تابع مشخصه کار در $\langle w \rangle$ و $\langle w^2 \rangle$ همه جنبه‌های مختلف بهم‌ریختگی اطلاعات را مشخص می‌کند. هر دوی آن‌ها می‌تواند از تابع کار $P(w, \tau)$ حاصل شوند. با این وجود هر دو نیز بدون اندازه‌گیری $P(w, \tau)$ قابل دسترسی هستند. در حقیقت برای اندازه‌گیری میانگین کار $\langle w^a \rangle$ ، $a = 1, 2$ می‌توان مقدار انتظاری H_0^a در حالت اولیه ρ و مقدار انتظاری

در حالت نهایی ρ_τ اندازه‌گیری کرد و سپس اختلاف گرفت. لازم به ذکر است که اگر بعد از پروتکل $Wing - Flap$ ، سامانه با منبع گرمایی در تماس باشد، برای جبران گرمای اولیه خود مقدار $\beta^{-1}S[\rho_\tau||\rho]$ که برابر با گرمای متوسط (q) است سامانه از منبع آزاد می‌کند. بنابراین بهم‌ریختگی اطلاعات کوانتومی نه تنها از طریق اندازه‌گیری کار بلکه همچنین از طریق اندازه‌گیری گرما قابل دسترسی است [۶۹].

۷.۴ هامیلتونی‌های اسپینی

مطالعه سامانه‌های اسپینی بخش قابل توجهی از نظریه بس‌ذره‌ای را به خود اختصاص داده است در اغلب سامانه‌ها اسپین نقش مهمی را ایفا می‌نماید [۷۰، ۷۱]. مدل‌های برهم‌کنش اسپینی یک نمونه مهم برای توصیف بازه گسترده‌ای از سامانه‌های بس‌ذره‌ای هستند. در ادامه از زنجیره اسپینی برای دیدن نتایج مطالب فوق استفاده می‌کنیم. زنجیره اسپینی زیر شامل L اسپین که در حالت گرمایی $\rho = e^{-\beta H_0}/Z$ آماده سازی شده است.

$$H_0 = g \sum_{i=1}^L \sigma_x^i \quad (15.4)$$

H_0 هامیلتونی اولیه سامانه است. در زمان $t = 0$ هامیلتونی H_i را ایجاد می‌کنیم، به گونه‌ای که سامانه با هامیلتونی $H = H_0 + H_i$ تحول یابد. فرض می‌کنیم سامانه برای تحول نیاز به مدت زمان τ باشد. با رسیدن تحول سامانه در زمان $t = \frac{\tau}{2}$ بلافاصله اختلال $X = e^{-i\theta\sigma_x^k}$ را که یک دوران حول محور x است را با $\theta = \frac{\pi}{2}$ اعمال می‌کنیم. سپس سامانه را با منفی کردن هامیلتونی H تا زمان τ تحول می‌دهیم. هامیلتونی‌های H_i به صورت زیر معرفی می‌کنیم [۵۹].

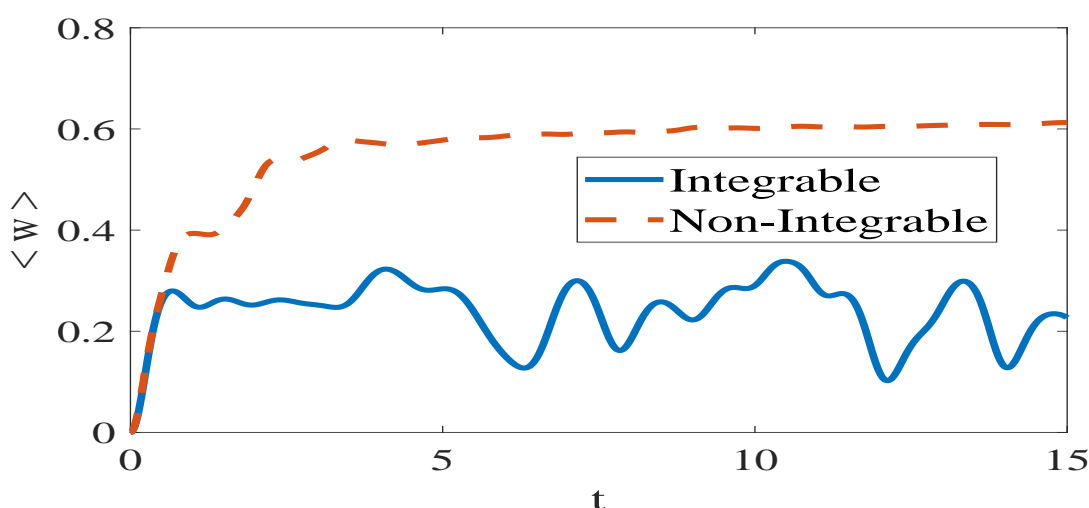
$$H_1 = J \sum_{i=1}^{L-1} \sigma_z^i \sigma_z^{i+1} \quad (16.4)$$

$$H_2 = J \sum_{i=1}^{L-1} \sigma_z^i \sigma_z^{i+1} + h \sum_{i=1}^{L-1} \sigma_z^i + (h - J)(\sigma_z^1 + \sigma_z^L) \quad (17.4)$$

اگر سامانه با هامیلتونی H_1 تحول یابد دینامیک سامانه، انتگرال‌پذیر و اگر با هامیلتونی H_2 تحول یابد غیرانتگرال‌پذیر است. برای اندازه‌گیری میانگین کار می‌توان مقدار انتظاری H_0^a در حالت اولیه ρ و مقدار انتظاری در حالت نهایی ρ_τ اندازه‌گیری کرد و سپس اختلاف گرفت. اختلاف ویژه‌مقدارهای انرژی اندازه‌گیری شده در ابتدا و در انتهای تحول سامانه، به معنای کار w در نظر می‌گیریم. بدین ترتیب میانگین توزیع کار به صورت $\langle w \rangle = tr(X_\tau^\dagger H_0 X_\tau - H_0)\rho$ است.

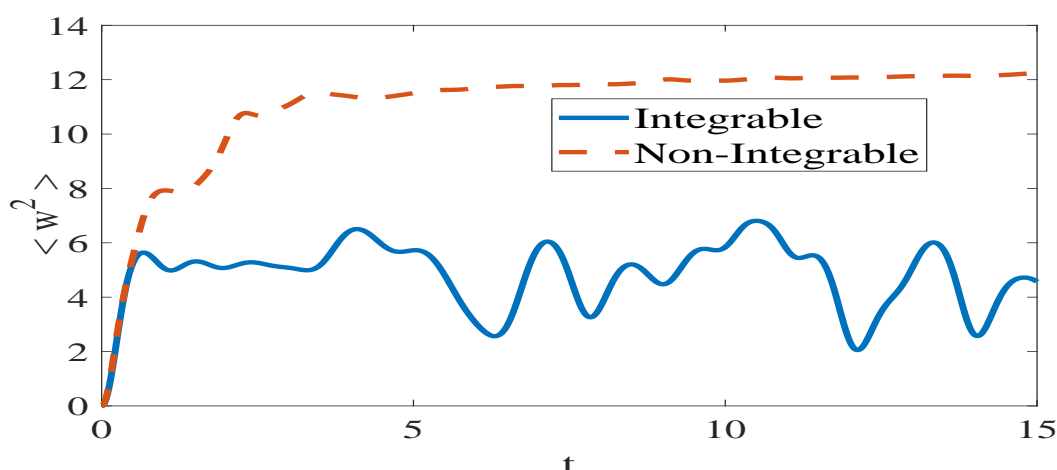
۸.۴ بررسی ترمودینامیک زنجیره اسپینی انتگرال پذیر و غیر انتگرال پذیر

میانگین توزیع کار برای هر دو سامانه انتگرال پذیر (H_1) و غیرانتگرال پذیر (H_2) در شکل (۲.۴) برحسب زمان رسم شده است. پارامترهای J و h و g به ترتیب برابر با 1 ، 0.8090169 ، 0.90450849 می باشند که h قدرت میدان خارجی و J قدرت برهمکنشی اسپینی است [۷۲]. همان طوریکه در شکل مشخص است میانگین توزیع کار برای سامانه های انتگرال پذیر به صورت نوسانی است که نشان دهنده بازگشت پذیری اطلاعات است. ولی در مورد سامانه های غیرانتگرال پذیر به صورت یک حالت نمایی دارد که به مقدار مشخصی میل می کند.



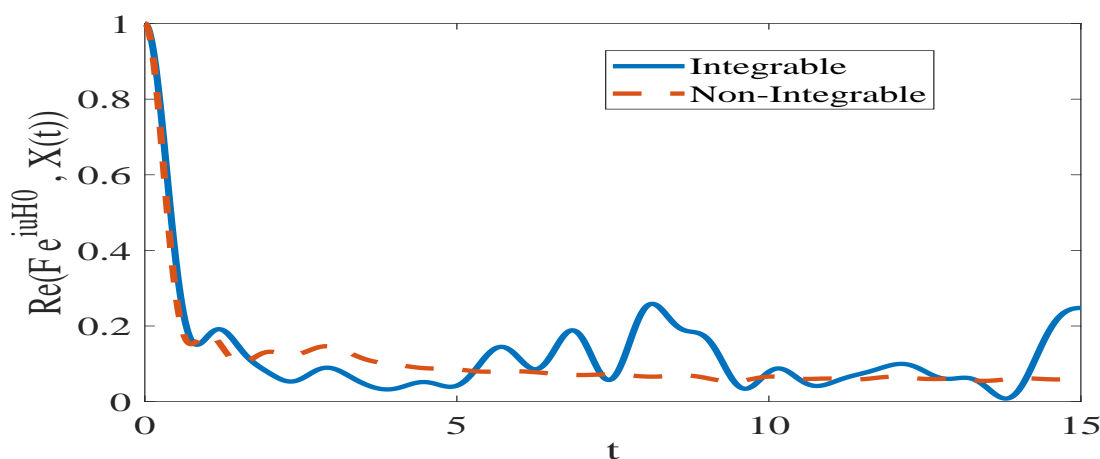
شکل ۲.۴: متوسط توزیع کار نسبت به زمان

همچنین توزیع انحراف و پاشندگی کار یعنی میانگین مربع توزیع کار برای همان زنجیره به صورت $\langle w^2 \rangle = \int dwp(w, \tau) w^2 = \text{tr}(X_\tau^\dagger H_0 X_\tau - H_0)^2 \rho$ می باشد، که برای هر دو سامانه انتگرال پذیر (H_1) و غیرانتگرال پذیر (H_2) در شکل (۳.۴) برحسب زمان رسم شده است. در واقع میانگین جابجایی بین X و H_0 است و در عین حال $\langle w^2 \rangle = \langle [X_\tau, H_0]^\dagger [X_\tau, H_0] \rangle$. با توجه به نتایج به دست آمده، حالت سامانه و کمیت های w و w^2 در سامانه های انتگرال پذیر به صورت نوسانی می باشند، که بازگشت پذیری اطلاعات را نشان می دهد و برای سامانه های غیرانتگرال پذیر به دلیل غیرقابل برگشت بودن اطلاعات به سمت مقدار مشخصی میل می کنند.



شکل ۳.۴: متوسط انحراف معیار و پاشندگی توزیع کار نسبت به زمان

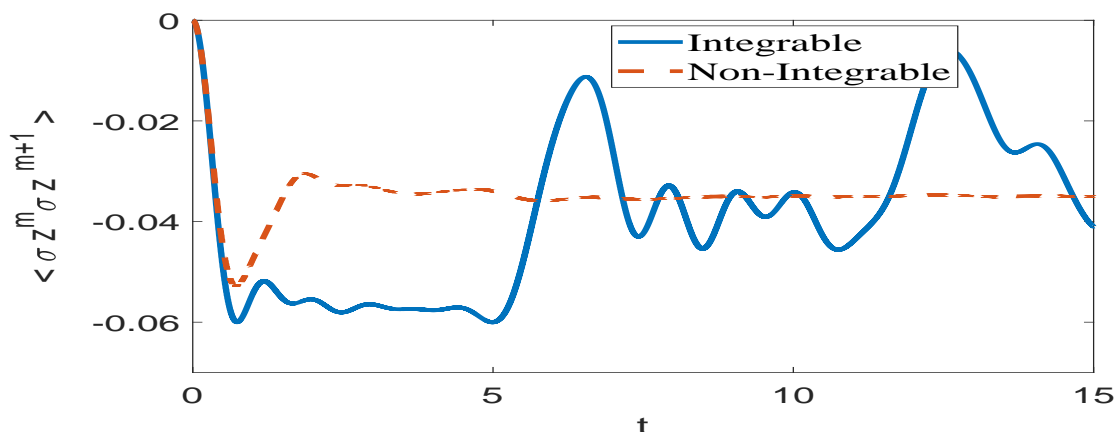
در ادامه محاسبات بخش حقیقی $OTOC$ برای همان زنجیره با ۱۱ اسپین بر حسب زمان برای سامانه انتگرال پذیر و غیرانتگرال پذیر در شکل (۴.۴) رسم شده است. از آنجایی که با یک حالت گرمایی شروع کردیم، در سامانه‌های غیرانتگرال پذیر که حالت سامانه برای زمان‌های طولانی به سمت حالت گرمایی می‌رود $OTOC$ نیز یک رفتار نمایی به سمت مقدار صفر دارد. در عین حال این نتایج نشان دهنده آن است که در سامانه‌های انتگرال پذیر، هیچ رفتار نمایی در وابستگی زمانی $OTOC$ مشاهده نمی‌شود. با توجه شکل (۴.۴) مشخص می‌شود که سامانه‌های غیرانتگرال پذیر در طولانی مدت به سمت یک حالت تعادلی می‌روند.



شکل ۴.۴: بخش حقیقی $OTOC$ $F_{eiuO, X(t)}$ برای $u=1$

از آنجایی که همبستگی‌ها در مکانیک کوانتومی نقشی اساسی دارند، میانگین تابع همبستگی $\langle \sigma_z^m \sigma_z^{m+1} \rangle$ ($m = l/2$) را برای دو اسپین وسط و همسایه آن برای هر دو سامانه در شکل (۵.۴) رسم شده است. که نشان می‌دهد برای سامانه‌های غیرانتگرال پذیر به مقدار مشخصی همگرا می‌شود. در حالی که برای سامانه‌های انتگرال پذیر همچنان رفتار نوسانی دارد. اگرچه

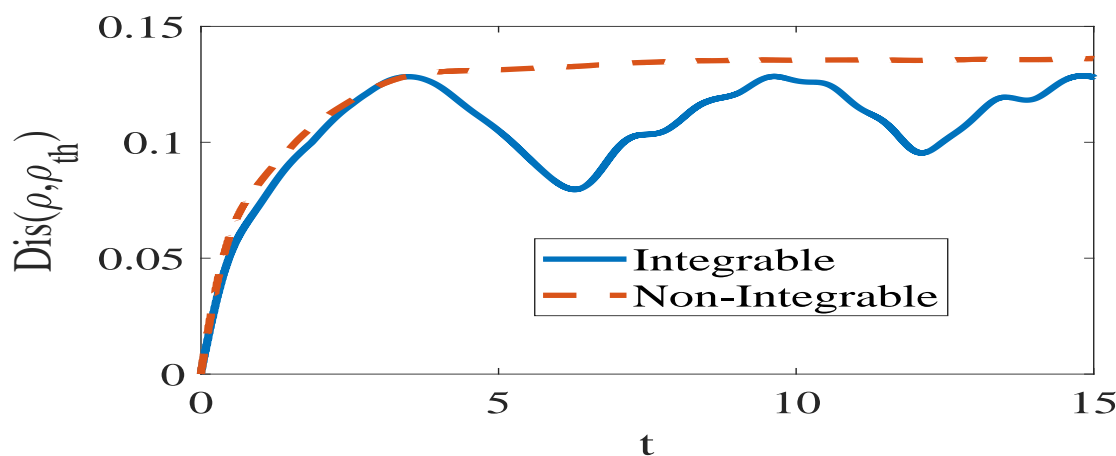
زنجیره اسپینی مورد بررسی یک سامانه کوانتومی بسته در نظر گرفته شده و تحول زمانی آن با یک عملگر هرمیتی داده شده ولی برای اسپین وسط، اسپین‌های دیگر زنجیره تا ابتدا (انتها) زنجیره نقش یک حمام را ایفا می‌نمایند.



شکل ۵.۴: متوسط تابع همبستگی σz برای اسپین وسط و همسایه آن بر حسب زمان فاصله نسبی بین حالت سامانه در هر لحظه با حالت گرمایی اولیه سامانه برای هر دو حالت انتگرال پذیر و غیرانتگرال پذیر در شکل (۶.۴) رسم شده است. این فاصله نسبی از رابطه زیر به دست آمده است.

$$Dis(\rho||\rho_{\tau}) = \frac{1}{2} \|\rho - \rho_{\tau}\| \quad (18.4)$$

که در آن $\|\cdot\|$ به معنای اندازه (نرم) بین دو حالت است. همان گونه که از نتایج مشاهده می‌شود این کمیت نیز رفتار نمایی برای سامانه‌های غیرانتگرال پذیر دارد در صورتی که در سامانه‌های انتگرال پذیر شاهد نوسانی بودن این کمیت هستیم.



شکل ۶.۴: فاصله بین حالت سامانه و حالت گرمایی اولیه بر حسب زمان

فصل ۵

نتیجه گیری

۱.۵ نتیجه گیری

با بهم ریختن اطلاعات کوانتومی، همبستگی خارج از زمان ($OTOC$) را با استفاده از طرح اندازه گیری دو نقطه ای محاسبه کردیم. با محاسبه $OTOC$ میزان آشفتگی سامانه های کوانتومی (یک زنجیره اسپینی با ۱۱ اسپین) را بررسی کردیم. رفتار این کمیت را برای سامانه های انتگرال پذیر به صورت نوسانی است و در سامانه های غیرانتگرال پذیر به صورت نمایی به سمت صفر میل می کند. که نشان دهنده برگشت پذیری اطلاعات در سامانه های انتگرال پذیر و عدم برگشت پذیری در سامانه های غیرانتگرال پذیر است. در سامانه های کوانتومی انتگرال پذیر غیرتعادلی، مشاهده پذیرها نمی توانند به طور معمول در حالت گرمایی به تعادل برسند. در نتیجه مشاهده پذیرها بعد از واهلش با یک آنسامبل مکانیک آماری جدید توصیف می شوند که به آنسامبل تعمیم یافته گیبس موسوم است. اما مشاهده پذیرها در سامانه های غیرانتگرال پذیر در طولانی مدت به تعادل می رسند. در عین حال این نتایج نشان دهنده آن است که در سامانه های انتگرال پذیر، هیچ رفتار نمایی در وابستگی زمانی $OTOC$ مشاهده نمی شود. در بررسی مقدار متوسط توزیع کار و مقدار متوسط انحراف معیار و پاشندگی توزیع کار را برای هر دو سامانه مشاهده کردیم که مقدار این دو کمیت برای سامانه های انتگرال پذیر به صورت نوسانی است و در سامانه های غیر انتگرال پذیر به مقدار مشخصی میل می کند. در ادامه محاسبات میانگین تابع همبستگی $\langle \sigma_z^m \sigma_z^{m+1} \rangle$ ($m = l/2$) برای دو اسپین وسط و همسایه آن برای هر دو سامانه بررسی شد که نشان می دهد برای سامانه های غیرانتگرال پذیر به مقدار مشخصی همگرا می شود. در حالی که برای سامانه های انتگرال پذیر همچنان رفتار نوسانی دارد. با توجه به این که زنجیره اسپینی مورد بررسی یک سامانه کوانتومی بسته در نظر گرفته شد، ولی برای اسپین وسط، اسپین های دیگر زنجیره تا ابتدا (انتها) زنجیره نقش یک حمام را ایفا می نمایند. از نتایج محاسبه فاصله نسبی بین حالت سامانه در هر لحظه با حالت گرمایی اولیه سامانه برای هر دو حالت مشخص شد که این کمیت رفتار نمایی برای سامانه های غیرانتگرال پذیر دارد در حالی که برای سامانه های انتگرال پذیر شاهد نوسانی بودن این کمیت هستیم.

مراجع

- [۱] مارک والدر زیمانسکی، ریچارد دیتمن، توتونچی، شریفیان عطار، هادیزاده، (۱۳۹۳) **“حرارت و ترمودینامیک”** سیزدهم، نشر دانشگاهی، ۵ - ۱۹۸
- [۲] دیوید هالیدی، رابرت رزینک، برل واکر، خوش بین خوش نظر، محمد شیرازی، شمس، (۱۳۹۳) **“مبانی فیزیک مکانیک گرما (شاره‌ها و نوسان)”** اول، نیاز دانش، ۵۶۶
- [۳] استفان بارنت، صوفیانی، ابراهیمی، (۱۳۹۵) **“اطلاعات کوانتومی”** اول، دانشگاه تبریز، ۳۶۵
- [۴] ابوالفتح‌پور بیگی، ورامین‌زاده گوهری، (۱۳۹۱) **“درسنامه نظریه اطلاعات کوانتومی”**
- [۵] رفیعی م، (۱۳۹۱) پایان نامه دکتری: **“پردازش و انتقال اطلاعات کوانتومی به وسیله زنجیره‌های اسپینی متشکل از اسپین‌های حبس‌شده در نقاط کوانتومی”**، دانشکده فیزیک، دانشگاه یزد،
- [۶] محمد رضا سرکرده‌ای، (۱۳۹۲) **“مبانی ریاضی و فیزیکی مکانیک کوانتومی”** اول، دانشگاه صنعتی شاهرود، ۱۹۵
- [۷] جی.جی ساکورایی، علی محمدی، مشفق، (۱۳۹۴) **“مکانیک کوانتومی مدرن”** دهم، دانشگاه تهران ۵۰
- [۸] سید رضا ملیح، زهرا شجاعی، (۱۳۸۹) **“نقد و بررسی دیدگاه‌های اصلی رقیب در مورد مسأله بازگشت‌پذیری”** پژوهش‌های فلسفی، شماره هفدهم، ۹۵-۵۷
- [۹] آدابی ف، (۱۳۹۵) پایان نامه دکتری **“مطالعه همبستگی‌های کوانتومی و معیارهای مختلف آن‌ها”** دانشکده علوم پایه، گروه فیزیک، دانشگاه کردستان
- [۱۰] کریمی‌پور، (۱۳۹۳) **“درس‌نامه رایانش و اطلاعات کوانتومی”** دانشگاه صنعتی شریف

[11] Stephen j. Blundell and Katherine m. Blundell, (2006) **Concepts in Thermal Physics** “University of Oxford”, UK, pp, 4-155

-
- [12] Peter Atkins and Julio de Paula, (2006), “ Physical chemistry ” 8th edition, **W. H. Freeman; U.S.A**
- [13] S. Trotzky, Y.A. Chen, A. Flesch, I.P. McCulloch, U. Schollwöck, J. Eisert, and I. Bloch, (2012), “ Probing the relaxation towards equilibrium in an isolated strongly correlated one-dimensional bose gas ” **Nature Physics** . 8, 325-330
- [14] V. Dunjko and M. Olshanii, (2012), “ Thermalization from the perspective of eigenstate thermalization hypothesis ” **Annual Review of Cold Atoms and Molecules** . 1 , 443
- [15] C. Gogolin and J. Eisert, (2016), “ Equilibration, thermalisation, and the emergence of statistical mechanics in closed quantum systems ” **Reports on Progress in Physics** . 79, 056001
- [16] Sai Vinjanampathy and Janet Anders, (2016), “ Quantum Thermodynamics ” **Contemporary Physics** . 57, 545
- [17] L. D. Faddeev (2007), “ What is complete integrability in quantum mechanics ” **Mathematical Institute, Russian Academy of Sciences**
- [18] Stefan Weigert, (1992) “ The problem of quantum integrability ” **Physica D** . 56, 107-119
- [19] Jonas Larson, (2013) “ Integrability vs Quantum Thermalization ” **J. Phys. B** . 46, 224016
- [20] von Neumann J, (1931), “ Über Funktionen Von Funktionaloperatoren ” **Ann. Math** . 32 191
- [21] Yaffe L G, (1982), “ Large N limits as classical mechanics ” **Rev. Mod. Phys** . 54 407
- [22] Braak D , (2011), “ Integrability of the Rabi Model ” **Phys. Rev. Lett** . 107 100401
- [23] H. Bethe, (1931), “Zur Theorie der Metalle I. Eigenwerte und Eigenfunktionen der linearen Atomkette” **Z. Phys** . 71, 205
- [24] Berry M V and Tabor M, (1977), “ Level clustering in the regular spectrum ” **Proc. R. Soc. A** . 356 375
- [25] L. D. Faddeev, (1995), “ How algebraic Bethe ansatz works for integrable models ” **proceedings of Les Houches School of Physics: Quantum Symmetries, Les Houches**. 149–219
- [26] Joshua M. Deutsch, (2018), “ Eigenstate Thermalization Hypothesis ” **Nature** . 452, 854-858

- [27] Jaynes E T, (1957), “ Information Theory and Statistical Mechanics. I ” **Phys. Rev .** 106 620
- [28] Jaynes E T, (1957), “ Information Theory and Statistical Mechanics. II ” **Phys. Rev .** 108 171
- [29] Rigol M, Dunjko V, Yurovsky V and Olshanii M, (2007), “ Relaxation in a Completely Integrable Many-Body Quantum System: An Ab Initio Study of the Dynamics of the Highly Excited States of 1D Lattice Hard-Core Bosons ” **Phys. Rev. Lett .** 98 50405
- [30] Christian Gogolin, Markus P. Muller, and Jens Eisert, (2011), “ Absence of Thermalization in Nonintegrable Systems ” **Phys. Rev. Lett.** 106, 040401
- [31] G. De Palma, A. Serafini, V. Giovannetti, and M. Cramer, (2015), “ Necessity of Eigenstate Thermalization ” **Phys. Rev. Lett .** 115, 220401
- [32] Th. R. de Oliveira, C. Charalambous, D. Jonathan, M.Lewenstein, and A. Riera, (2018), “Equilibration time scales in closed many-body quantum systems ” **arXiv .** 1704.06646
- [33] A. J. Short and T. C. Farrelly, (2012),“ Quantum equilibration in finite time ” **New J. Phys .** 14, 013063
- [34] Fabio Anza, Christian Gogolin, and Marcus Huber, (2018), “ Eigenstate Thermalization for Degenerate Observables ” **physical review letters .** 120, 150603
- [35] M. Srednicki, (1994),“ Chaos and quantum thermalization ” **Phys.Rev. E .** 50, 888
- [36] J. Eisert, M. Friesdorf, and C. Gogolin, (2015), “ Quantum many-body systems out of equilibrium ” **Nat. Phys .** 11, 124
- [37] N. Linden, D. Popescu, A. Short, and A. Winter, (2009), “ Quantum mechanical evolution towards thermal equilibrium ” **Phys.Rev. E.** 79, 061103
- [38] M. V. Berry, (1977), “ Regular and irregular semiclassical wavefunctions ” **J. Phys. A .** 10, 2083
- [39] R. Mondaini and M. Rigol, (2017), “ Eigenstate thermalization in the two-dimensional transverse field Ising model: II. Off-diagonal matrix elements of observables ” **Phys. Rev. E.** 96, 012157

- [40] L. D'Alessio, Y. Kafri, A. Polkovnikov, and M. Rigol, (2016), " From Quantum Chaos and Eigenstate Thermalization to Statistical Mechanics and Thermodynamics " **Advances in Physics** . 65, 239
- [41] M. Rigol, V. Dunjko, and M. Olshanii, (2008), " Thermalization and its mechanism for generic isolated quantum systems " **Nature** . 452, 854
- [42] L. F. Santos and M. Rigol, (2010), " Onset of quantum chaos in one-dimensional bosonic and fermionic systems and its relation to thermalization " **Phys. Rev. E** . 81, 036206
- [43] T. Mori and N. Shiraishi, (2017), "ransition probability generating function of a transition-less quantum parametric oscillator " **Physical Review E** . 96.022153
- [44] M. Srednicki, (1999), " The approach to thermal equilibrium in quantized chaotic systems " **Journal of Physics A: Mathematical and General** . 32, 1163
- [45] E. Khatami, G. Pupillo, M. Srednicki, and M. Rigol, (2013), " Fluctuation-Dissipation Theorem in an Isolated System of Quantum Dipolar Bosons after a Quench " **Phys. Rev. Lett** . 111, 050403
- [46] J. Gemmer, M. Michel, and G. Mahler, (2004), " Quantum thermodynamics-emergence of thermodynamic behavior within composite quantum systems " **Lecture Notes in Physics 2nd ed**
- [47] J. Anders and V. Giovannetti, (2013), " Thermodynamics of discrete quantum processes " **New Journal of physics** . 15 . 033022
- [48] M.J. Henrich, G. Mahler, and M. Michel, (2007), " Driven spin systems as quantum thermodynamic machines: Fundamental limits " **Physical Review E** . 75. 051118
- [49] P. Talkner, E. Lutz, and P. Hänggi, (2007), " Fluctuation theorems: Work is not an observable " **Physical Review E** 75. 050102
- [50] W. Pusz and S. Woronowicz, (1978), Passive states and kms states for general quantum systems, **Communications in Mathematical Physics**. 58 , pp. 273290.
- [51] H. Wilming, R. Gallego, and J. Eisert, (2016), " Second law of thermodynamics under control restrictions " **Phys.Rev. E** . 93. 042126
- [52] C. Browne, A.J. Garner, O.C. Dahlsten, and V. Vedral, (2014), " Guaranteed energy-efficient bit reset in finite Time " **Physical review letters** . 113 . 100603

- [53] M.H. Mohammady, M. Mohseni, and Y. Omar, (2016), “ Minimising the heat dissipation of quantum information ” **erasure, New Journal of Physics** . 18, 015011
- [54] H. Tasaki, (2000), “ Jarzynski relations for quantum systems and some applications ” **arXiv preprint condmat** . 0009244
- [55] Wellington L. Ribeiro, Gabriel T. Landi, and Fernando L. Semiˆao, (2016), “Quantum thermodynamics and work fluctuations with applications to magnetic Resonance” **Am. J. Phys.** 84, 948-957
- [56] G. E. Crooks, (1998), “ Nonequilibrium Measurements of Free Energy Differences for Microscopically Reversible Markovian Systems ” **J. Stat. Phys** . 90,1481–1487
- [57] C. Jarzynski, (1997), “ Nonequilibrium Equality for Free Energy Differences ” **Phys. Rev. Lett** . 78, 2690–2693
- [58] C. Jarzynski, (1997), “Equilibrium free-energy differences from nonequilibrium measurements: A master-equation approach ” **Phys. Rev. E**. 56, 5018–5035
- [59] Michele Campisi and John Goold, (2017), “ Thermodynamics of quantum information scrambling ” **Phys. Rev E** . 95, 062127
- [60] Ivan Kukuljan, Saˆso Grozdanov, and Tomaˆz Prosen, (2017) ,“ Weak Quantum Chaos ” **Phys. Rev. B** . 96, 060301
- [61] Robert C. Hilborn, (2003),“ Sea gulls, butterflies, and grasshoppers: A brief history of the butterfly effect in nonlinear dynamics ” **American Association of Physics Teachers**. 10.1119/1,1636492
- [62] Brian Swingle and Debanjan Chowdhury, (2017), “ Slow scrambling in disordered quantum systems ” **PhysRevB** . 95.060201
- [63] M. Gärttner, J. G. Bohnet, A. Safavi-Naini, M. L. Wall, J. J. Bollinger, and A. M. Rey, (2017), “ Measuring out-of-time-order correlations and multiple quantum spectra in a trapped-ion quantum magnet ” **arXiv** . 1608.08938
- [64] J. Li, R. Fan, H. Wang, B. Ye, B. Zeng, H. Zhai, X. Peng, and J. Du, (2017), “ Measuring out-of-time-order correlators on a nuclear magnetic resonance quantum simulator ” , **Phys. Rev. X**. 7, 031011
- [65] J. Kurchan, (2001), “ A Quantum Fluctuation Theorem ” **arXiv:cond-mat**. 0007360

-
- [66] P. Hänggi and P. Talkner, (2015), “ The other QFT ” **Nat. Phys .** 11, 108
- [67] R. Kawai, J. M. R. Parrondo, and C. Van den Broeck, (2007), “ Dissipation: The Phase-Space Perspective ” **PRL .** 98, 080602
- [68] S. Deffner and E. Lutz, (2010) , “ Generalized Clausius Inequality for Nonequilibrium Quantum Processes ” **Phys. Rev. Lett .** 105, 170402
- [69] T J G Apollaro, Gianluca Francica, Mauro Paternostro and Michele Campisi, (2015), “ Work statistics, irreversible heat and correlations build-up in joining two spin chains ” **arXiv.** 1406.0648
- [70] J. Kondo, (1964) “ Resistance Minimum in Dilute Magnetic Alloys ” **Prog. Theor .Phys .** 32, 37
- [71] P. W. Anderson, (1961), “ Localized Magnetic States in Metals ” **Phys. Rev A .** 124, 41
- [72] H. Kim and D. A. Huse, (2013), “ Ballistic Spreading of Entanglement in a Diffusive Non-integrable System ” **.Phys. Rev. Lett .** 111, 127205

Appendix I

1.1 Matlab

function work 2

$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1; 1 & 0 \end{bmatrix}$

$\sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0; 0 & -1 \end{bmatrix}$

$s_{z2} = \text{kron}(\sigma_z, \sigma_z)$

$L = 5$

$j = 1$

$h = 0.8090169$

$g = 0.90450849$

$H_x = 0$

$H_z = 0$

$H_0 = 0$

$H_{zz} = 0$

$form = 1 : L - 2$

$H_x = H_x + g \times (\text{kron}(\text{kron}(\text{eye}(2^m), \sigma_x), \text{eye}(2^{(L-m-1)})))$

$H_{xx} = H_x + (\text{kron}(\text{kron}(\text{eye}(2^m), \sigma_x), \text{eye}(2^{(L-m-1)})))$

$H_z = H_z + h \times (\text{kron}(\text{kron}(\text{eye}(2^m), \sigma_z), \text{eye}(2^{(L-m-1)})))$

```

Hzz = Hzz + j × (kron(kron(eye(2m), sz2), eye(2(L-m-2))))
end
H1x = kron(sigmax, eye(2(L-1)))
HLx = kron(eye(2(L-1)), sigmax)
H1z = kron(sigmaz, eye(2(L-1)))
HLz = kron(eye(2(L-1)), sigmaz)
Hz = Hz + (h - j) × (H1z + HLz)
H1zz = kron(sz2, eye(2(L-2)))
H1 = Hzz + H1zz
H2 = H1 + Hz
H0 = Hx + H1x + HLx
sumsigmax = Hxx + H1x + HLx
H1 is Integrable
H2 is Non - Integrable
H = H0 + H1
H = H0 + H2
u = [1; 0]
w = [0; 1]
beta = 0.1
rho = expm(-beta × H0) / (trace(expm(-beta × H0)))
rho0 = expm(-beta × H0) / (trace(expm(-beta × H0)))
sigmaxm = kron(kron(eye(2((L-1)/2)), sigmax), eye(2((L-1)/2)))
sigmazm = kron(kron(eye(2((L-1)/2)), sigmaz), eye(2((L-1)/2)))
sigmaxxm = kron(kron(kron(eye(2((L-1)/2)), sigmax), sigmax), eye(2((L-3)/2)))
sigmazzm = kron(kron(kron(eye(2((L-1)/2)), sigmaz), sigmaz), eye(2((L-3)/2)))
w = expm(-i × pi/2 × sigmaxm)
entropysum = 0
[vt0, et0] = eig(rho0)
et0 = real(diag(et0))
vt0d = vt0'
time = 0 : 0.005 : 15
for numt = 1 : length(time)
numt
rhovt = rho × vt0

```


YY Matlab

```
for num = 1 : length(et0)
    et(num,1) = real(vt0d(num,:) * rhovt(:,num))
end
relent(numt) = (1/beta) * (et' * real(log(et + (et == 0))) - et' * real(log(et0 +
(et0 == 0))))
t = time(numt)
v = expm(1i * t * H)
wt = v * w * v'
rho = w_t' * rho * wt
WW(numt) = trace((((wt' * H0 * wt) - H0)^2) * rho)
WW = real(WW)
W(numt) = trace(((w_t' * H0 * wt) - H0) * rho0)
W = real(W)
G(numt) = trace(w_t' * v' * wt * v * rho)
G = real(G)
asigma_xm(numt) = trace(rho * sigma_xm)
rasigma_xm = real(asigma_xm)
asigma_xxm(numt) = trace(rho * sigma_xxm)
rasigma_xxm = real(asigma_xxm)
asigma_zm(numt) = trace(rho * sigma_zm)
rasigma_zm = real(asigma_zm)
asigma_zzm(numt) = trace(rho * sigma_zzm)
rasigma_zzm = real(asigma_zzm)
sumsigma_xm(numt) = trace(rho * sumsigma_x)
sumsigma_xm = real(sumsigma_xm)
end
save('work_H2.mat','time','relent','W','WW','G','asigma_xm','
'asigma_xxm','asigma_zm','asigma_zzm','sumsigma_xm')
```

Aabstract

In this study, we compute out-of-time order correlations (OTOC) by quantum scrambling. Out-of-time order correlations are typically defined by $C_{V.X(\tau)} = \langle [X_\tau, V]^2 \rangle$. $\langle \cdot \rangle$ indicates the average heat. OTOC was first used to investigate the instability of electron pathways in semiconductors, but has recently been considered as a standard for quantum chaos. To measure OTOC between two points, we use the so-called two-point measurement method. The two-point measurement is widely used in this field, and also gives a clear interpretation of quantum scrambling with non-equilibrium fluctuations of quantum quantities such as work and heat. We provide OTOC calculations for a spin chain and compare the behavior of this quantity in integrable and non-integrable systems. In non-equilibrium integrable quantum systems, observables can not normally balance in a thermal state. After collapsing In these systems, observables are described by a new statistical ensemble, which is called the generalized ensemble of Gibbs. However, observables in non-integrables systems will be balanced in the long run and as a result, the OTOC value goes to zero. We also examined the mean distribution of work and the mean value of standard deviation and distribution of work distribution for both systems. Since correlations play a fundamental role in quantum mechanics, the mean of the correlation function $\langle \sigma_z^m \sigma_z^{m+1} \rangle$ ($m = l/2$) for two spin in The middle and neighboring ones are examined for both systems, which shows that it converges to a certain value for non-integrable system, while still being fluctuating for integrable systems. In the following calculations, we measured the relative distance between the state of the system at any given moment and the initial thermal state of the system for both integrable and non-integrable systems. According to the results obtained, this quantity also has an exponential behavior for non-integrable system, while the quantity has oscillated in integrable systems.

key words: Quantum Thermodynamics, OTOC, Integrable system, Non-Integrable system, ETH, Thermalization,



Shahrood University of Technology

Faculty Of Physics and Nuclear Engineering

MSc Thesis in: Particle Physics

**Study of the Thermodynamics of
Quantum Information Scrambling**

By: Mohammad Soleimanzadeh

Supervisor

Morteza Rafiee

September 2018