# 囚禁离子量子自旋热机

Andr´e R. R. Carvalho、Liam J. McClelland、* Erik W. Streed 和 Joan Vaccaro
*Queensland Quantum and Advanced Technologies Research Institute, Griffith University, Brisbane, Queensland 4111 Australia*（日期：2026年2月4日）

我们提出一种 Vaccaro、Barnett、Wright等人的自旋热机（SHE）的离子阱实现方案；这是一种假想热机，其工作介质是能量储库和自旋热储库，而非两个能量储库。SHE分两步运行：首先，在功提取阶段，热能储库中的热量通过与能量近简并自旋态共振的双光子拉曼跃迁转化为光学功；其次，利用自旋储库进行非能量性信息擦除，使内部自旋态恢复至初始态。后者无需付出能量代价，而是通过自旋浴提供的角动量来完成重置；该自旋浴充当热自旋储库。SHE是迈向展示超越传统范式热机的重要第一步：这类热机不再需要两个热储库，并为通过类似机器利用任意守恒量中的量子相干性铺平道路。

arXiv:2602.03057v1 [quant-ph] 3 Feb 2026

## I. 摘要

热力学热机通过将较高温度热库中所含的热量在其与较低温度热库热化时加以转化，从而产生有用功。在这一转化过程中，所提取的热量只有一部分转化为功，热机效率最终受卡诺定理限制。从纯粹的信息论观点来看，能量在统计力学中不必扮演优先角色，因为最大熵原理并不依赖于所考虑的特定物理量。这一概念促成了利用多个守恒量[1–3]表述广义统计力学。

受Jaynes启发，Vaccaro和Barnett（VB）表明，存储器可以在不消耗能量的情况下被擦除，只要代价由另一种守恒量[4]来支付。这是对Landauer原理的重新诠释：信息擦除过程中耗散的热量现由角动量对应量——自旋热——所取代。这为将麦克斯韦妖思想实验诠释为例如以角动量为代价从单一热储库中提取功的方式开辟了道路。自旋极化原子浴成为该妖的有效存储器，其记忆可用能量以外的资源擦除。Wright等人 [5], 将这一思想应用于量子点（命名为QDSHE），而功与热的自旋对应概念（分别称为自旋功 $\mathcal{L}$ 和自旋热$\mathcal{Q}$ ）则由Toshio等人 [6]应用于离散涨落系统中的信息擦除。

近年来，已有多项有趣研究通过实施 Jaynes 式的广义吉布斯分布 [7–11]。在 XXZ海森堡自旋链的全局量子猝灭背景下，Pozsgay等人[7] 从理论上表明，广义吉布斯系综可以通过量子传输矩阵方法来实现。Halpern等人[8]将交换不对易守恒量的子系统的热态称为“非阿贝尔热态”（NATS）。这种热态具有广义吉布斯形式，通过最大熵原理强化了 Jaynes 将热力学推导推广至任意守恒量的论述。基于三种不同论证（微正则推导、动力学考量和资源理论）对 NATS 的推导，为研究热力学中的量子不对易性提供了工具。Langen等人 [9] 从理论和实验两方面观察到，简并一维玻色气体会弛豫至由广义吉布斯系综描述的状态，并表现出非平凡的守恒量。

Guryanova 等人开展了一项与本文背景密切相关的有趣研究 [10] ，探讨了具有多个守恒量的热力学推广问题，在这种情况下，“能量甚至可能并非讨论的核心”。对于标准热力学情景——由一个热浴、一个相对于热浴处于非平衡态的外部系统以及若干电池构成——可储存在电池中的提取功受系统吉布斯自由能变化的限制。他们没有以广义吉布斯自由能为代价恢复广义热态，而是提出了“自由熵”这一术语——一种相对于一组逆温度定义的无量纲量。对于固定的逆温度，使自由熵最小的状态即为广义热态。他们证明，自由熵的变化限制了可提取的守恒量组合。这些结果对于彼此对易和不对易的可观测量均成立。

这些概念此后被 McClelland [11] 应用于一种假想电池，该电池利用任意守恒量热库之间的熵差来运行，他将其称为熵电池。他从统计力学的视角出发，将本文所得的部分结果推广到每个粒子每个自由度具有任意离散态的系综。他聚焦于低温热能以及

* 联系人：l.mcclelland@griffith.edu.au

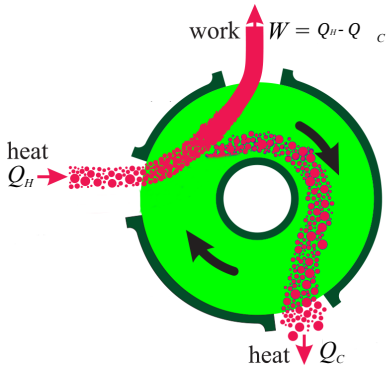
自旋极化储库，以便从热浴中提取能量功。借助 $d \geq 2$ 内部自旋态，且初始温度介于室温与典型发电厂的运行温度之间，此类装置有可能超越标准卡诺效率极限。他采用了在多个守恒量之间绝热运行的幺正热机，例如本文所讨论的那种。

我们利用这些思想表明，有可能在囚禁离子系统中构建一种类似于 Write 等人的 QDSHE 以及 Vaccaro-Barnett 自旋热机（SHE）的热机，该热机在热能与自旋储库之间运行。热机循环涉及热量与功之间以能量形式进行的交换，同时也涉及自旋角动量的等效量（$\mathcal{Q}$ 和 $\mathcal{L}$）。作为该工作机制的结果，从热量中可提取的功在数量上不存在根本限制。

经典卡诺热机在两个温度不同的热库之间工作，如图 1-A 的概念图所示。工作介质从热库吸收热量（$Q_H$），将这部分能量的一部分转化为功，并将剩余能量排入冷储库（$Q_C$）。提取的总功由 $W = Q_H - Q_C$ 给出，效率为 $\epsilon = \frac{T_H - T_C}{T_H}$。

另一方面，Vaccaro-Barnett 自旋热机使用单个热储库（见图 1-B）。通过用自旋储库替代冷的热储库，即可完成一个完整循环。在这种情况下，来自热库的全部热能（$Q$）都会转化为功（$W$）。循环中其余的收支不涉及能量，而是涉及另一种守恒量——自旋角动量。在循环过程中，功的自旋等效量（自旋功 $\mathcal{L}$），即循环期间角动量的变化，会作为热的自旋等效量（自旋热 $\mathcal{Q}$）耗散到自旋储库中。在下一节中，我们将说明如何利用囚禁离子实现这一概念性热机。

(A) 卡诺热机




(B) 自旋热机（SHE）

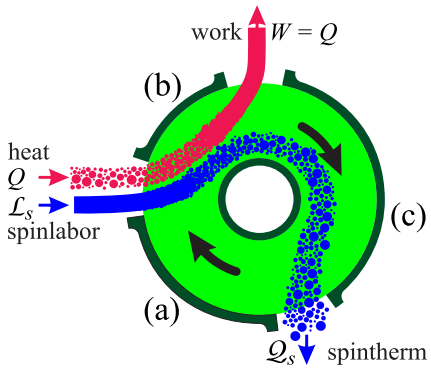



图 1. (A) 传统卡诺热机和 (B) VB自旋热机的概念示意图。在卡诺循环中，能量从高温热库传递到冷储库，并在此过程中产生有用功。在 VB-SHE 中，功从单一高温热库中提取。该循环通过一个重置系统熵的过程完成；在此过程中，外部来源提供的初始自旋（自旋功$\mathcal{L}_s$）以自旋热的形式耗散到自旋储库中，$\mathcal{Q}_s$。后者相当于卡诺循环中耗散到冷储库中的热量。

## II. 离子囚禁自旋热机

图 2 展示了实现 SHE 光学版本的总体方案。工作介质是一个三能级囚禁离子，其两个简并基态仅在自旋上有所不同。离子被囚禁在谐势中，其振动自由度在循环中介导热交换。离子初始化于态 $\rho = |\uparrow\rangle\langle\uparrow| \otimes \rho_\nu(0)$，其中 $\rho_\nu(0)$ 是热振动态，随后被

在功提取阶段接受拉曼脉冲作用，如图 2-b 所示。在此阶段，运动态中的能量（$Q$）以有用功（$W$）的形式传递至光场，同时利用初始自旋分布中的角动量（$\mathcal{L}$），使向不同自旋态的跃迁成为可能。在重置阶段（图 2-c），系统与自旋储库接触，由其移除熵

，使工作介质（$\mathcal{Q}$）恢复至电子态 $|\uparrow\rangle$。随后，系统再次与图 2-a 所示的热库接触，从而恢复热运动态 $\rho_\nu(0)$，完成循环。显然，完整循环中的资源平衡遵循能量与角动量守恒定律，即 $|Q| = |W|$ 和 $|\mathcal{L}| = |\mathcal{Q}|$。此外，能量与角动量通过图 2-b 所示的功提取阶段相互关联。提取的功对应于过程中转换的振动能，其数值等于两束拉曼激光 $\delta$的能量差乘以成功转移的概率，即能级 $|\downarrow\rangle$（$P_\downarrow$）上的末态布居：

$$W = \hbar\delta P_\downarrow. \tag{1}$$

因为如上所述，要发生跃迁，就必须将初始自旋分布中的自旋功

耗散为自旋热，以解释角动量的变化。自旋功就是总角动量的变化，

$$\mathcal{L} = \langle J_z(t)\rangle - \langle J_z(0)\rangle = \frac{\hbar}{2}(P_\uparrow - P_\downarrow) - \frac{\hbar}{2} = -\hbar P_\downarrow, \quad (2)$$

其中， $J_z$ 是角动量的 $z$ 分量。

## III. 功提取

### A. 模型

我们将从图 2-b 所示的拉曼激发方案入手，分析功提取阶段。能级 $|\uparrow\rangle$和 $|\downarrow\rangle$ 是对应不同自旋的简并基态。 $|\uparrow\rangle \leftrightarrow |u\rangle$ 和 $|\downarrow\rangle \leftrightarrow |u\rangle$ 跃迁的频率为 $\omega_0$ ，图中所示的两台激光器分别以频率 $\omega_1 = \omega_0 - \Delta$ 和 $\omega_2 = \omega_0 - \Delta - \delta$远失谐。系统的哈密顿量为

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_I, \quad (3)$$

with

$$\hat{H}_0 = \hbar\nu\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hbar\omega_0 |u\rangle\langle u|, \quad (4)$$

and

$$\begin{aligned}\hat{H}_I =& \hbar\Omega_2 e^{-i(\mathbf{k}_2\cdot\mathbf{x} - \omega_2 t)} |\uparrow\rangle\langle u| \\ &+ \hbar\Omega_1 e^{-i(\mathbf{k}_1\cdot\mathbf{x} - \omega_1 t)} |\downarrow\rangle\langle u| + c.c.\end{aligned} \quad (5)$$

$H_I$ 是描述离子与两台激光器在行波构型下相互作用的哈密顿量。这里， $\mathbf{k}_i$ 是 $i^{\text{th}}$ 激光器的波矢， $\Omega_i$ 是相应的拉比频率，假设其为实数且为正。

若考虑激光器相对于能级 $|u\rangle$远失谐的情况，这个三能级模型便可大幅简化。在这种情况下，能级 $|\uparrow\rangle$与 $|\downarrow\rangle$之间的跃迁发生时，能级 $|u\rangle$上的布居可以忽略，因此可以将其从模型中移除。更具体地说，当 $\Delta \gg \delta$, $\Omega_i$时，我们可以绝热消去能级 $|u\rangle$ ，得到有效的双能级描述，其中 [12]

$$\begin{aligned}\hat{H}_{\text{adia}} =& \hbar\nu\hat{a}^\dagger\hat{a} - \hbar\frac{\Omega_1^2}{\Delta}|\downarrow\rangle\langle\downarrow| - \hbar\frac{\Omega_2^2}{\Delta}|\uparrow\rangle\langle\uparrow| - \hbar\delta|\uparrow\rangle\langle\uparrow| \\ &- \hbar\frac{\Omega_1\Omega_2}{\Delta}\left(e^{-i\eta(\hat{a}+\hat{a}^\dagger)}|\uparrow\rangle\langle\downarrow| + e^{i\eta(\hat{a}+\hat{a}^\dagger)}|\downarrow\rangle\langle\uparrow|\right)\end{aligned} \quad (6)$$

其中我们将 $e^{i\delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} = e^{i\eta(\hat{a}+\hat{a}^\dagger)}$ 表示为，其中 $\delta\mathbf{k} = \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1$, ，而 $\eta = \hbar\sqrt{\delta k/2m}$ 是兰姆-迪克参数。$\hat{a}^\dagger$、$\hat{a}$ 分别是离子量子化运动的产生与湮灭算符。

最后，我们将考虑系统处于边带分辨区，这意味着我们可以通过激光相互作用寻址单个振动态。

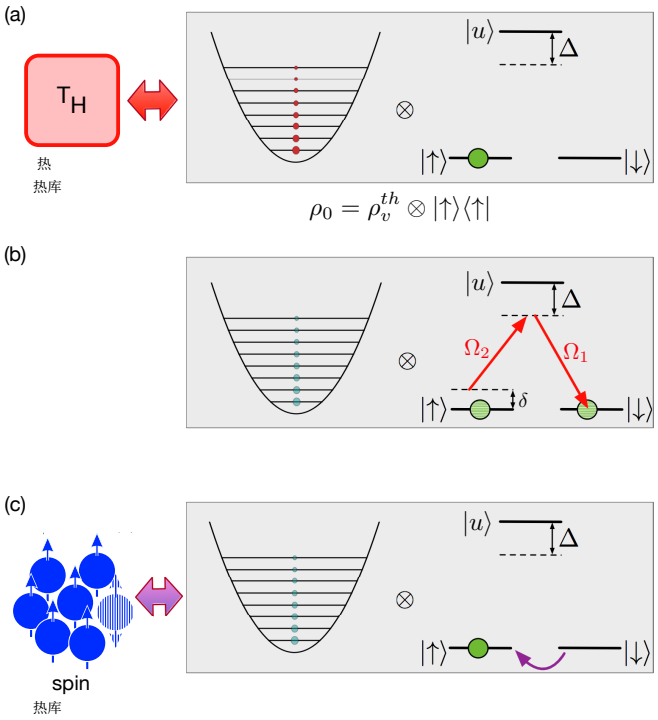



图 2. 光学斯特林发动机（SHE）运行循环示意图。工作介质由一个具有三个电子能级的囚禁离子和一个量子化振动模式组成。后者由谐振子的等间距能级表示，前者则包含两个简并能级 $|\uparrow\rangle$ 和 $|\downarrow\rangle$ ，以及上能态 $|u\rangle$。图 (a) 表示热机循环的第一阶段：工作介质初始化为自旋向上态（绿色实心圆），振动态则因与温度为 $T_H$ 的热库接触而处于热态。图 (b) 表示功提取阶段：来自热储库的能量（源自离子的振动自由度）以相干光（光学功）的形式传递。图 (c) 表示复位阶段，此时系统与自旋储库接触：内部自旋态中的熵随之归零，代价是自旋储库中的熵增加。

如果我们选择 $\delta' = \delta - \frac{\Omega_1^2}{\Delta} + \frac{\Omega_2^2}{\Delta} = \kappa\nu$，其中 $\kappa$ 为整数，那么拉曼耦合会诱导能级 $|\uparrow\rangle$与 $|\downarrow\rangle$之间的跃迁，并恰好交换$\kappa$ 个振动量子。在这种情况下，功提取阶段（在相互作用绘景中）的最终哈密顿量可写为

$$\hat{H} = -\hbar\Omega(\hat{d}^\dagger|\uparrow\rangle\langle\downarrow| + \hat{d}|\downarrow\rangle\langle\uparrow|), \quad (7)$$

其中 $\Omega = \Omega_1\Omega_2/\Delta$,

$$\hat{d} = f_\kappa(\hat{a}^\dagger\hat{a})(i\eta\hat{a})^\kappa, \quad (8)$$

and

$$f_\kappa(\hat{a}^\dagger\hat{a}) = e^{-\eta^2/2}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{(-1)^l\eta^{2l}}{l!(\kappa+l)!}(\hat{a}^\dagger\hat{a})^l. \quad (9)$$

从式 7 出发，并假设离子初始制备于能级 $|\uparrow\rangle$，且振动自由度处于热态 $\rho_\nu^{\mathrm{th}} = \sum_m P(m)\,|m\rangle\langle m|$，那么我们可以明确写出数算符的期望值 $\bar{n}(t) = \langle \hat{a}^\dagger a\rangle$ 的解（见附录 A）：

$$\bar{n}(t) = \sum_m m P(m,t), \tag{10}$$

其中

$$\begin{aligned} P(m,t) = P(m)\cos^2\left(\Omega t \eta^\kappa \sqrt{\frac{m!}{(m-\kappa)!}} f_\kappa^{(m-\kappa)}\right) \\ + P(m+\kappa)\sin^2\left(\Omega t \eta^\kappa \sqrt{\frac{(m+\kappa)!}{m!}} f_\kappa^{(m)}\right) \end{aligned} \tag{11}$$

是振动储库中激发数的概率分布。这里，$P(m) \equiv P(m,\,0) = (1-e^{-\beta\hbar\nu})\,e^{-\beta m\hbar\nu}$ 是初始热分布，其中 $\beta = 1/(k_B T_0)$。或者，也可以利用关系式 $\bar{n}_0 = [e^{\beta\hbar\nu} - 1]^{-1}$，用振动量子平均数来表示该分布。

图 3 展示了这一功提取阶段的动力学，其中 $\eta = 0.05$（左侧面板）和 $\eta = 0.4$（右侧面板）。两种情况下，我们都通过设定 $\kappa = 1$ 来固定失谐，并假设热储库满足 $\bar{n}_0 = 5$。注意，式 (1) 给出的提取的功也可以用平均振动能的变化来表示

$$W = -\hbar\nu[\bar{n} - \bar{n}_0] \tag{12}$$

因此，可以直接从图 3 的上排面板中获得，其中展示了平均数 $\bar{n}(t)$ 随时间的演化。初始热振动能迅速减少，并转化为光学功；我们将阶段持续时间（$t_f$）设为 $\bar{n}(t)$ 首次达到最小值的时刻，因此此时 $W$ 最大。在这一过程中，振动激发的分布 $P(n)$ 冷却下来；当兰姆-迪克参数较小时，分布仍接近较低温度下的热分布，但对于较大的 $\eta$，由于存在非线性效应，分布会显著偏离热分布（见图 3 下排面板）。

### B. 功提取最大化

要优化单次提取循环的效率，我们应使 $\Delta\bar{n} = \bar{n}_{t_f} - \bar{n}_0$ 最大化。这里有三个重要参数：储库的初始温度，它决定了可供转化的能量有多少；激光失谐，它决定跃迁中涉及多少振动量子；以及兰姆-迪克参数，它控制函数 $f_\kappa^{(m)}$ 的非线性程度。

我们首先按照图 3 中的设置 $\kappa = 1$ 固定失谐量，并分析 $\eta$ 的影响

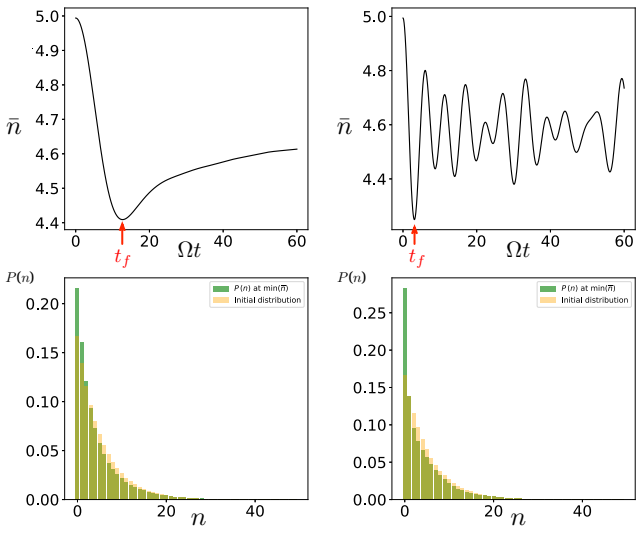



图 3。上图：对于 $\eta = 0.05$（左）和 0.4（右），平均振动量子数随时间的变化。箭头表示该阶段的最终时刻 $t_f$，其选择依据是此时提取的功达到最大值（$\bar{n}$ 达到最小值）。下图：比较该阶段开始（橙色）和结束（绿色）时的概率分布 $P(n)$

以及 $\bar{n}_0$。在图 4 中，我们将循环结束时提取的功（$W_{t_f}$）绘制为不同储库温度下 $\eta$ 的函数。这些结果表明，对于每个储库温度，都存在一个最优的 $\eta_{\mathrm{opt}}$，使得 $W_{\mathrm{opt}}$（由曲线中的峰值给出）；并且对于较大的 $\bar{n}_0$，较小的 $\eta$ 更为有利。图 5 对此进行了总结，其中我们明确将 $\eta_{\mathrm{opt}}$ 绘制为 $\bar{n}_0$ 的函数。

图 4 还表明，$\Delta\bar{n}_{t_f}$ 会随着 $\bar{n}_0$ 增加而趋于饱和。这并不奇怪：尽管增加 $\bar{n}_0$ 能提供更多可转化的能量，但调谐至第一边带的拉曼跃迁限制了可收集的储库能量。解决方法是增大激光失谐，使更多振动量子参与拉曼跃迁。图 6 中的空心符号展示了这一点：图中针对不同的 $\kappa$，绘出了 $W_{\mathrm{opt}}$ 随 $\bar{n}_0$ 的变化。$\bar{n}_0$较小时，涉及多个量子的跃迁受到抑制，因此调谐至较低边带更有效。然而，随着热库初始温度升高，较大的失谐会带来更高的提取功。

### C. 功提取的理论界限

方程 1 表明，所能提取的最大功对应于 $P_\downarrow = 1$ 的最大值；利用方程 12 可得 $\Delta\bar{n}_{\max} = \kappa$。然而，由于初始状态为热振动态，熵会限制我们所能达到的结果。考虑到我们有一个双部系统（自旋 + 振

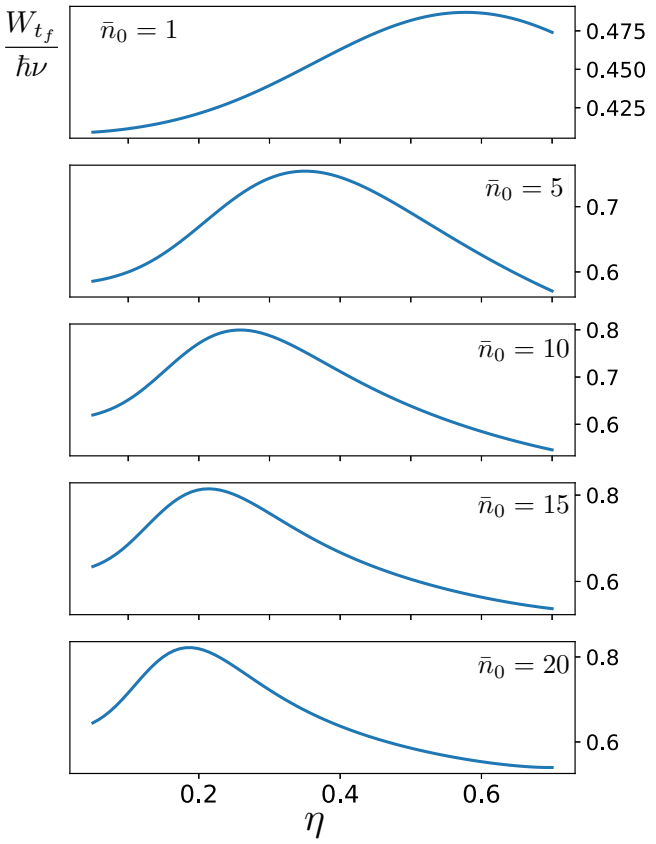



图 4. 一个循环中提取的功（以 $\hbar\nu$ 为单位），针对 $\kappa = 1$。功（$W_{t_f}$）由时间演化计算得出（如图 3），并作为兰姆-迪克参数的函数，针对不同的初始温度值作图。这些曲线表明，存在一个最优的 $\eta$ ($\eta_{\rm opt}$)，可使提取的功最大化。

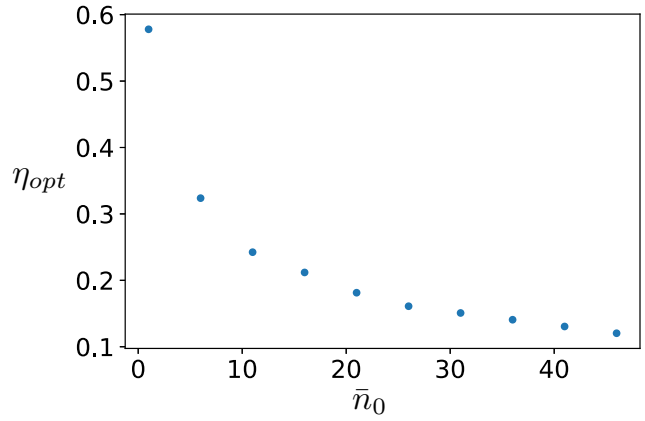



图 5. 最优兰姆-迪克参数（$\eta_{\rm opt}$，定义见图 4）随初始平均运动激发 $\bar{n}_0$ 的变化。曲线表明，初始振动温度越高，$\eta_{\rm opt}$ 的值越小。

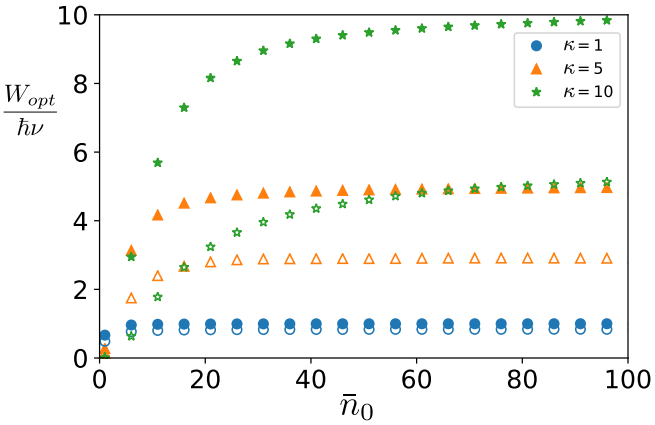



图 6. 不同失谐参数 $\kappa$ 下，最优提取功随 $\bar{n}_0$ 的变化。尽管初始可用振动能随 $\bar{n}_0$ 增加，但提取的有用功受 $\kappa$ 的值限制，所有曲线最终都会趋于其渐近值。对于 $\kappa = 10$，可以看到，当 $\bar{n}_0$ 较低时，循环受到抑制，因为初始能量不足以驱动跃迁。曲线分别对应 $\kappa = 1$（蓝色）、$\kappa = 5$（橙色）和 $\kappa = 10$（绿色）。实心符号表示在最终状态为热态的假设下，不等式 (14) 所允许的最大功。

动），熵的次可加性给出

$$\Delta S_s + \Delta S_v \geq \Delta S_{sv} = 0, \tag{13}$$

其中 $S_i = -\mathrm{Tr}[\rho_i \ln \rho_i]$ 是密度矩阵 $\rho_i$的冯·诺依曼熵。 $\rho_{sv}$ 是系统的总密度矩阵， $\rho_s = \mathrm{Tr}_v[\rho_{sv}]$ 和 $\rho_v = \mathrm{Tr}_s[\rho_{sv}]$ 分别是自旋和振动自由度的约化密度矩阵。最后一个等式中的等号源于总系统在幺正动力学下演化这一事实。

对于我们的初始态 $\rho_{sv}(0) = |\uparrow\rangle\langle\uparrow| \otimes \rho_v^{\rm th}(0)$，我们有$S_s(0) = 0$，并且可以写出

$$-P_\downarrow \ln(P_\downarrow) - (1-P_\downarrow)\ln(1-P_\downarrow) + S_v(t_f) - S_v(\rho_v^{\rm th}(0)) \geq 0. \tag{14}$$

由于 $P_\downarrow$ 和 $\Delta\bar{n}$ 由式 (1) 和式 12 联系起来，因此式 (14) 给出了 $\bar{n}_f$ 的限制，或者说，在初始平均振动量子数为 $\bar{n}_0$ 时， $P_\downarrow$ 可能取值的限制。

为了了解这个界限，我们考虑末态振动态也是热态的情况。正如我们在图 3 中已经看到的，这一般并不成立，但在某些参数范围内是一个不错的近似，并使我们能够解析地计算式（14）中的熵。图 7 展示了式（14）的左侧。

通过计算这些曲线的根，我们可以计算熵不等式（式(14)）所允许的 $P_\downarrow$的最大值，从而得到其所允许的最大功。这由图6中的实心符号表示，并应与我们完整动力学模型所得结果（空心符号）进行比较。

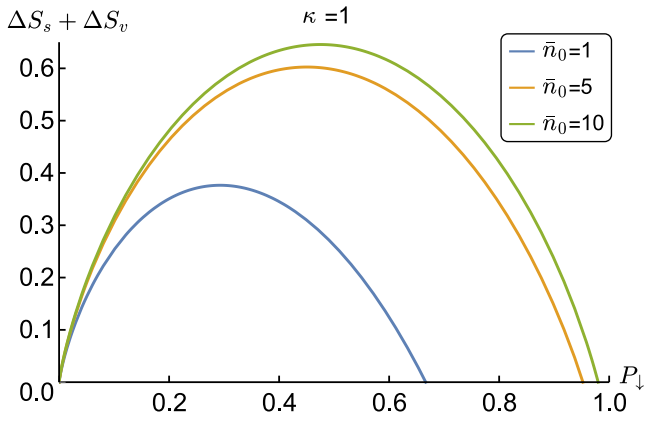



图 7. 约化密度矩阵的冯·诺依曼熵之和随 $P_\downarrow$ 的变化，其中初始振动量子数 $\bar{n}_0$ 和 $\kappa = 1$ 取不同值

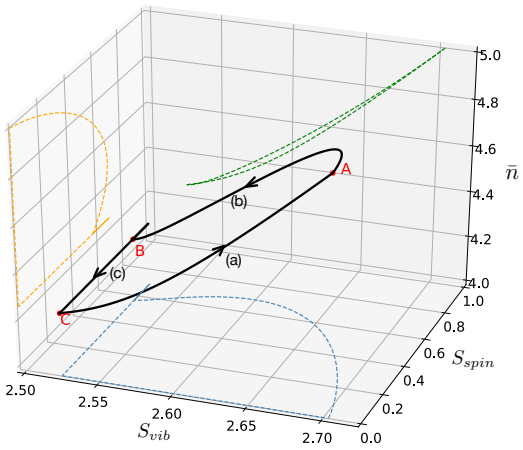



图 8. 用三维 T-S 图表示的 SHE循环。垂直轴对应于 $\bar{n}$ （用于表征温度），其余坐标轴表示自旋 ($S_{\text{spin}}$) 和振动 ($S_{\text{vib}}$) 自由度的熵。功提取、自旋重置和再热化阶段分别表示图 2 中的过程 (b)、(c) 和 (a)。

### IV. 自旋重置阶段：自旋极化储库

在功提取阶段结束时，离子的自旋和振动自由度相互纠缠，自旋变量的约化密度矩阵处于对角混合态，其布居分布在 $|\uparrow\rangle$ 与 $|\downarrow\rangle$态之间。这一点已在图2-b中有所暗示，也可从附录A 2的式A16中明显看出。此时，若要提取更多的功，就需要将系统重置到其初始态，从而闭合循环。我们完成这一重置（或擦除）步骤的策略是被动的：我们考虑离子与一个自旋储库耦合，该储库通过自旋交换碰撞将电子从 $|\downarrow\rangle$转移到 $|\uparrow\rangle$，如图2-c所示。该热库充当熵汇，在把系统带回纯态 $|\uparrow\rangle$ 的同时从系统中移除熵。在数学上，这个完全极化的自旋浴所给出的重置动力学可由如下形式的主方程描述

$$\dot{\rho} = \Gamma_s \mathcal{D}[|\uparrow\rangle\langle\downarrow|]\rho, \tag{15}$$

其中，$\Gamma_s$ 为自旋衰减率，$\mathcal{D}[L]\rho = L\rho L^\dagger - 1/2\ L^\dagger L\rho + \rho L^\dagger L$ 是林德布拉德形式 [13] 下的退相干超算符。在我们的情形中，自旋布居从功提取阶段结束时的数值 ($t = t_f$) 开始，而解 $P_\downarrow = e^{-\Gamma_s t} P_\downarrow(t_f)$ 对应于简单的指数衰减，这会使电子布居在渐近极限下转移回状态 $|\uparrow\rangle$。

这一看似理想化的情形已在另一背景下通过实验实现。在他们的实验中，Ratschbacher等人 [14]用一团自旋极化的超冷 $^{87}$Rb中性原子包围单个囚禁的 $Yb^+$ 离子，并观察原子-离子碰撞对自旋动力学的影响。对于 $^{171}Yb^+$与最初制备在超精细 $|F = 1, m_F = -1\rangle$ 态的Rb原子相互作用时，离子弛豫到自旋基态，时间尺度由 $T_1 \approx 8.7$ ms给出。但请注意，他们的结果并不能直接对应到我们的SHE方案。例如，[14] 中所用的 $^{171}Yb^+$ 能级并非简并，而是 $|F = 1, m_F = 0\rangle$与 $|F = 0, m_F = 0\rangle$ 态。要真正演示无能量代价的SHE，需要选择另一对态，并检验由此产生的自旋交换碰撞是否仍能像 [14]中所示那样有效。此外，在他们的实验中，离子温度受微运动加热限制，量级约为20 mK。这对应于平均热量子数为 $\bar{n} \approx 2700$，远大于我们在第III节中讨论的数值。这似乎并非主要问题，因为我们的计算表明，增大 $\bar{n}_0$ 似乎更有利于功提取（至少在中等 $\bar{n}_0$时如此）。

### V. 再热化阶段

从振动模中提取能量并重置自旋后，最后一步是让离子重新与热库接触，使其重新热化并回到初始热态。如图 2-a 所示，这一阶段将使用运动态的热主方程进行建模：

$$\dot{\rho}_v = \Gamma_H(\bar{n}_0 + 1)\mathcal{D}[\hat{a}]\rho_v + \Gamma_H \bar{n}_0 \mathcal{D}[\hat{a}^\dagger]\rho_v. \tag{16}$$

在该方程下，系统渐近地达到初始热态$\rho_v^{\text{th}}$。

### VI. 完整发动机循环

SHE完整循环的模拟如图8所示，其中我们使用了 $\bar{n}_0$、 $\eta = 0.4$和 $\kappa = 1$。系统从点A开始，离子处于初始态$\rho = |\uparrow\rangle\langle\uparrow| \otimes \rho_v$(0)。随后，它经历第III节所述的功提取阶段(b)，从$A$ 到 $B$ 的曲线由我们在式(10)、(11)、((A16)、(A17))中的解析解给出。从 $B$ 到 $C$，系统经历式(15)所述的自旋重置阶段，我们让系统演化足够长的时间（$t = 10/\Gamma_s$），使其接近其渐近自旋态。请注意，由于 $B$ 处态 $|\downarrow\rangle$ 的布居数大于 $1/2$，系统在达到 $|\uparrow\rangle$ 态并将自旋熵降回零之前，起初会先增加其自旋熵。最后，从$C$ 到 $A$，系统按照式(16)给出的再热化过程演化，其中取 $\bar{n}_0 = 5$ 和 $t = 20/\Gamma_H$。由于该步骤是纯粹的热过程，自旋熵保持不变，但振动熵和温度回到循环开始时的值。不同平面上的投影以虚线标示，用以帮助可视化该过程。请注意， $S_v - \bar{n}$上的投影并不重合，这表明$A \to B$ 与 $C \to A$ 过程之间的差异：后者是与热库的纯粹热化，而前者是由拉曼跃迁诱导的非平衡过程。

### VII. 角动量型功与能量型功的交换

Guryanova 等人提出的自由熵概念 [10]是具有多个守恒量的热力学系统中自由能的熵等价物。正如我们即将证明的，QSHE 遵循自由熵变化不等式

$$\lambda_s \tilde{W}_s + \lambda_v \tilde{W}_v \leq -\Delta\tilde{F}, \tag{17}$$

其中， $\lambda_i$ 和 $W_i$ 分别是热浴 $i$的无量纲逆温度和无量纲功，后者定义为无量纲守恒量 $A_i$的变化，即 $W_i = -\Delta A_i$；$\Delta F = F(\rho) - F(\rho_0)$ 表示系统自由熵的变化。下标 $s$和 $v$分别表示角动量和能量守恒量。自由熵本身定义为

$$\tilde{F} = \sum_i \beta_i \langle A_i \rangle - S(\rho). \tag{18}$$

QSHE 中的系统是离子，而热浴则是用于将离子重置为其初始态的热库和自旋库。由于在幺正演化下 $\Delta S = S(\rho) - S(\rho_0) = 0$，因此式（17）中的不等式达到等号。

本文通篇所采用的初始态 $\rho_0 = |\uparrow\rangle\langle\uparrow| \otimes \rho_{th}$ 意味着 $\lambda_s = \infty$。在热机循环的自旋重置与再热化阶段之后，离子返回其初始态，且自由熵 $\Delta F = 0$。若要使式(17)在有限 $\lambda_v$下仍然成立，则 $W_v = \infty$，这意味着QSHE必须从热能储库中提取无限量的功。该结果基于如下假设：离子在自旋重置和再热化之后被重置回其原来的状态；然而对于有限热浴，这种重置反而是不完美的， $\lambda$保持恒定的假设不再适用。

式(17)是普适的，适用于任意守恒量组合，无论它们是否对易 [10]。在假设系统被重置到其初始的完全自旋极化态的前提下，满足该不等式所需的 $\infty$ 功不仅决定了QSHE能够提取的功量，也决定了最初制备该系统所需的功量。因此，制备完全极化的系统需要无限的资源，而这些资源是 [10]中任意的守恒量。这在实验中十分常见：由于可用资源有限（时间、能量等有限），态制备过程中的纯度从未达到100%。

当逆自旋温度有限时，式(17)更有启发性。将Jaynes 最大熵原理应用于自旋态后，初始自旋分布变为热分布：

$$\rho_s = \frac{1}{1+e^{-\lambda_s}} |\uparrow\rangle\langle\uparrow| + \frac{e^{-\lambda_s}}{1+e^{-\lambda_s}} |\downarrow\rangle\langle\downarrow|. \tag{19}$$

由式(2)给出的无量纲自旋功 $W_s = \mathcal{L}/\hbar$ 现在为$P_\downarrow(0) - P_\downarrow(t)$，而无量纲功 $W_v = W/\kappa h\nu$仍由式(12)定义。我们在附录 A 3中解析地证明，$W_s = W_v$ 对任意初始态成立。特别有启发性的是，若初始热能储库相对于无量纲自旋温度 $\lambda_v^{-1} = \tau_v > \tau_s = \lambda_s^{-1}$而言是“热”的，则 $W_v$，$W_s \leq 0$。在与热浴完成自旋重置和重新热化之后， $\Delta F = 0$。此时功的变化完全体现了热浴中角动量与能量的变化。热能热浴的能量降低，其平均能量比QSHE循环之前更接近0。若从极化的角度解释能量分布，则热能热浴变得更加极化。与此同时，自旋储库发生退极化。因此，QSHE是不同守恒量之间功交换的一个明确例子。

### VIII. 讨论与结论

本文提出的离子阱自旋热机的实现，是展示热机原理的重要第一步。这类热机突破了通常的机器范式，不再需要两个热能储库才能运行。从近期研究[11], 的角度来看，它提供了一种工作机制，使具有

多个守恒量的系综能够实现超越卡诺能效的表现，并实现任意守恒量之间量子相干性的权衡 [10]。

### IX. 致谢

本研究由 ARC 联合资助项目 LP140100797、LP180100096 以及洛克希德·马丁公司资助。我们感谢 N. Allen、L. Uribarri、A. Jacomb-hood、R. Glen、E. Cavalcanti 和 T. Gould 与我们进行的富有帮助的讨论。

### 附录 A：解析解

为了研究更高温度下的情况，我们分析了由式（7）中的哈密顿量所描述的动力学解：

$$\hat{H} = \hbar\Omega(\hat{d}^\dagger \left|\uparrow\right\rangle \left\langle\downarrow\right| + \hat{d} \left|\downarrow\right\rangle \left\langle\uparrow\right|). \tag{A1}$$

将演化算符 $\hat{U} = e^{-i\hat{H}t/\hbar}$ 展开为幂级数

$$\hat{U} = 1 + i\Omega t\mathcal{H} + \frac{(i\Omega t)^2}{2!}\mathcal{H}^2 + \frac{(i\Omega t)^3}{3!}\mathcal{H}^3 + \ldots, \tag{A2}$$

其中，我们定义了 $\mathcal{H} \equiv \hat{d}^\dagger \left|\uparrow\right\rangle \left\langle\downarrow\right| + \hat{d} \left|\downarrow\right\rangle \left\langle\uparrow\right|$，并将该算符的幂写成更简洁的形式

$$\begin{aligned}
i)\mathcal{H} &= \hat{d}^\dagger \left|\uparrow\right\rangle \left\langle\downarrow\right| + \hat{d} \left|\downarrow\right\rangle \left\langle\uparrow\right| && \text{(A3)}\\
ii)\mathcal{H}^2 &= \hat{d}^\dagger\hat{d} \left|\uparrow\right\rangle \left\langle\uparrow\right| + \hat{d}\hat{d}^\dagger \left|\downarrow\right\rangle \left\langle\downarrow\right| && \text{(A4)}\\
iii)\mathcal{H}^3 &= \hat{d}^\dagger\hat{d}\hat{d}^\dagger \left|\uparrow\right\rangle \left\langle\downarrow\right| + \hat{d}\hat{d}^\dagger\hat{d} \left|\downarrow\right\rangle \left\langle\uparrow\right| && \text{(A5)}\\
iv)\mathcal{H}^4 &= \hat{d}^\dagger\hat{d}\hat{d}^\dagger\hat{d} \left|\uparrow\right\rangle \left\langle\uparrow\right| + \hat{d}\hat{d}^\dagger\hat{d}\hat{d}^\dagger \left|\downarrow\right\rangle \left\langle\downarrow\right|, && \text{(A6)}\\
&\vdots
\end{aligned}$$

于是我们可以将演化算符写为

$$\begin{aligned}
\hat{U} = {} & \left|\uparrow\right\rangle \left\langle\uparrow\right| \left(1 + \frac{(i\Omega t)^2}{2!}\hat{d}^\dagger\hat{d} + \frac{(i\Omega t)^4}{4!}(\hat{d}^\dagger\hat{d})^2 + \ldots\right)\\
& + \left|\downarrow\right\rangle \left\langle\downarrow\right| \left(1 + \frac{(i\Omega t)^2}{2!}\hat{d}\hat{d}^\dagger + \frac{(i\Omega t)^4}{4!}(\hat{d}\hat{d}^\dagger)^2 + \ldots\right)\\
& + \left|\uparrow\right\rangle \left\langle\downarrow\right| \left(i\Omega t\hat{d}^\dagger + \frac{(i\Omega t)^3}{3!}\hat{d}^\dagger\hat{d}\hat{d}^\dagger + \ldots\right)\\
& + \left|\downarrow\right\rangle \left\langle\uparrow\right| \left(i\Omega t\hat{d} + \frac{(i\Omega t)^3}{3!}\hat{d}\hat{d}^\dagger\hat{d} + \ldots\right).
\end{aligned} \tag{A7}$$

这可简化为

$$\begin{aligned}
\hat{U} = {} & \left|\uparrow\right\rangle \left\langle\uparrow\right| \cos\left(\Omega t\sqrt{\hat{d}^\dagger\hat{d}}\right) + \left|\downarrow\right\rangle \left\langle\downarrow\right| \cos\left(\Omega t\sqrt{\hat{d}\hat{d}^\dagger}\right)\\
& + i \left|\uparrow\right\rangle \left\langle\downarrow\right| \hat{d}^\dagger \frac{\sin\left(\Omega t\sqrt{\hat{d}\hat{d}^\dagger}\right)}{\sqrt{\hat{d}\hat{d}^\dagger}} + i \left|\downarrow\right\rangle \left\langle\uparrow\right| \hat{d} \frac{\sin\left(\Omega t\sqrt{\hat{d}^\dagger\hat{d}}\right)}{\sqrt{\hat{d}^\dagger\hat{d}}}.
\end{aligned} \tag{A8}$$

假设初始时离子的电子态为 $\left|\uparrow\right\rangle$，且处于热振动态，使得 $\rho_0 = \left|\uparrow\right\rangle \left\langle\uparrow\right| \otimes \rho_{\text{th}}$，那么在时间 $t$，$\rho(t) = \hat{U}\rho_0\hat{U}^\dagger$ 时的状态为：

$$\begin{aligned}
\rho(t) = {} & \left[\left|\uparrow\right\rangle \cos\left(\Omega t\sqrt{\hat{d}^\dagger\hat{d}}\right) + i \left|\downarrow\right\rangle \hat{d} \frac{\sin\left(\Omega t\sqrt{\hat{d}^\dagger\hat{d}}\right)}{\sqrt{\hat{d}^\dagger\hat{d}}}\right] \rho_{\text{th}}\\
& \times \left[\left\langle\uparrow\right| \cos\left(\Omega t\sqrt{\hat{d}^\dagger\hat{d}}\right) - i \left\langle\downarrow\right| \frac{\sin\left(\Omega t\sqrt{\hat{d}^\dagger\hat{d}}\right)}{\sqrt{\hat{d}^\dagger\hat{d}}} \hat{d}^\dagger\right].
\end{aligned} \tag{A9}$$

**1. 平均振动激发**

时刻 $t$ 的平均振动激发为

$$\begin{aligned}
&\bar{n}(t) = \mathrm{Tr}[\hat{n}\rho(t)] \\
&= \sum_m m \left( \langle m| \cos\left(\Omega t\sqrt{\hat{d}^\dagger\hat{d}}\right) \rho_{\mathrm{th}} \cos\left(\Omega t\sqrt{\hat{d}^\dagger\hat{d}}\right) |m\rangle + \langle m| \hat{d} \frac{\sin\left(\Omega t\sqrt{\hat{d}^\dagger\hat{d}}\right)}{\sqrt{\hat{d}^\dagger\hat{d}}} \rho_{\mathrm{th}} \frac{\sin\left(\Omega t\sqrt{\hat{d}^\dagger\hat{d}}\right)}{\sqrt{\hat{d}^\dagger\hat{d}}} \hat{d}^\dagger |m\rangle \right) \\
&= \sum_{m,n} mP(n) \left[ \langle m| \cos\left(\Omega t\sqrt{\hat{d}^\dagger\hat{d}}\right) |n\rangle \langle n| \cos\left(\Omega\sqrt{\hat{d}^\dagger\hat{d}}\right) |m\rangle + \langle m| \hat{d} \frac{\sin\left(\Omega t\sqrt{\hat{d}^\dagger\hat{d}}\right)}{\sqrt{\hat{d}^\dagger\hat{d}}} |n\rangle \langle n| \frac{\sin\left(\Omega t\sqrt{\hat{d}^\dagger\hat{d}}\right)}{\sqrt{\hat{d}^\dagger\hat{d}}} \hat{d}^\dagger |m\rangle \right]
\end{aligned} \tag{A10}$$

现在，我们可以利用 $f_\kappa$ 和 $d^\dagger d$ 在数态基中为对角矩阵这一事实，进一步简化表达式

$$\begin{aligned}
\bar{n}(t) = &\sum_m mP(m) \langle m| \cos^2\left(\Omega t\sqrt{\hat{d}^\dagger\hat{d}}\right) |m\rangle \\
&+ \sum_m (m-\kappa)P(m)\eta^{2\kappa} \frac{m!}{(m-\kappa)!} \left(f_\kappa^{(m-\kappa,m-\kappa)}\right)^2 \\
&\times \langle m| \frac{\sin^2\left(\Omega t\sqrt{\hat{d}^\dagger\hat{d}}\right)}{\hat{d}^\dagger\hat{d}} |m\rangle .
\end{aligned}$$

现在需要计算 $f_\kappa$ 和 $\hat{}_{d^\dagger}\hat{}d$ 的矩阵元。它们可以明确写为

$$\begin{aligned}
\langle m| \hat{d}^\dagger\hat{d} |n\rangle &= \eta^{2\kappa} \langle m| (\hat{a}^\dagger)^\kappa \left(f_\kappa(\hat{a}^\dagger\hat{a})\right)^2 |n\rangle \\
&= \eta^{2\kappa} \sqrt{\frac{m!}{(m-\kappa)!}} \sqrt{\frac{n!}{(n-\kappa)!}} \left(f_\kappa^{(m-\kappa.n-\kappa)}\right)^2 \delta_{m,n} \\
&= \begin{cases} \delta_{m,n}\eta^{2\kappa} \frac{m!}{(m-\kappa)!} \left(f_\kappa^{(m-\kappa,n-\kappa)}\right)^2, & \text{for } m \geq \kappa \\ 0, & \text{for } m < \kappa \end{cases}
\end{aligned} \tag{A11}$$

and

$$\begin{aligned}
f_\kappa^{(m,n)} &= \langle m| f_\kappa |n\rangle = \langle m| e^{-\eta^2/2} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l\eta^{2l}}{l!(\kappa+l)!} (\hat{a}^\dagger\hat{a})^l |n\rangle \\
&= \delta_{m,n} e^{-\eta^2/2} \sum_{l=0}^{n} \frac{(-1)^l\eta^{2l}}{l!(\kappa+l)!} \frac{n!}{(n-l)!} \\
&= \delta_{m,n} e^{-\eta^2/2} \frac{n!}{(n+\kappa)!} L_n^\kappa(\eta^2)
\end{aligned} \tag{A12}$$

其中 $L_n^\kappa(x)$ 是广义拉盖尔多项式

$$L_n^\kappa(x) = \sum_{l=0}^{n} \frac{(-x)^l}{l!} \frac{(n+\kappa)!}{(\kappa+l)!(n-l)!}. \tag{A13}$$

请注意，式 (A11) 中的结果出现在式 (A9) 的正弦项和余弦项的自变量中，因此它们对 $m$ 的所有取值都有明确的定义。

将 (A11) 代入 $\bar{n}(t)$ 的表达式，得到

$$\begin{aligned}
\bar{n}(t) = \sum_m P(m) \Bigg[ &m\cos^2\left(\Omega t\eta^\kappa \sqrt{\frac{m!}{(m-\kappa)!}} f_\kappa^{(m-\kappa)}\right) \\
&+ (m-\kappa)\sin^2\left(\Omega t\eta^\kappa \sqrt{\frac{m!}{(m-\kappa)!}} f_\kappa^{(m-\kappa)}\right)\Bigg] .
\end{aligned} \tag{A14}$$

或者，我们也可以用时刻 t 振动能的概率分布来表示。利用 $\bar{n}(t) = \sum_m mP(m,t)$，可得

$$\begin{aligned}
P(m,t) = &P(m)\cos^2\left(\Omega t\eta^\kappa \sqrt{\frac{m!}{(m-\kappa)!}} f_\kappa^{(m-\kappa)}\right) \\
&+ P(m+\kappa)\sin^2\left(\Omega t\eta^\kappa \sqrt{\frac{(m+\kappa)!}{m!}} f_\kappa^{(m)}\right) .
\end{aligned} \tag{A15}$$

**2. 电子自由度的密度矩阵**

对于所考虑的初始条件，非对角元素将为零（除非 $\kappa = 0$，在这种情况下不会发生热提取），因此我们只需考虑对角项。能级 $|\uparrow\rangle$ ($P_\uparrow$)和$|\downarrow\rangle$ ($P_\downarrow$=$1-P_\uparrow$) 的布居数可直接由式（A9）得到:

$$\begin{aligned}
P_\uparrow &= \mathrm{Tr}\left[|\uparrow\rangle\langle\uparrow| \rho(t)\right] = \mathrm{Tr}\left[\cos^2\left(\Omega t\sqrt{\hat{d}^\dagger\hat{d}}\right)\rho_{\mathrm{th}}\right] \\
&= \sum_m P(m) \langle m| \cos^2\left(\Omega t\sqrt{\hat{d}^\dagger\hat{d}}\right) |m\rangle \\
&= \sum_{m=0}^{\infty} P(m)\cos^2\left(\Omega t\eta^\kappa \sqrt{\frac{m!}{(m-\kappa)!}} f_\kappa^{(m-\kappa)}\right)
\end{aligned} \tag{A16}$$

其中，在最后一行我们使用了式 (A11) 的结果。由布居数可以立即得出冯·

诺依曼熵：

$$S = -\rho \ln \rho = -P_\uparrow \ln P_\uparrow - P_\downarrow \ln P_\downarrow. \tag{A17}$$

**3. QSHE 中 A 型与 B 型功相等**

对于非无穷大的逆自旋温度，自旋子系统和运动子系统的演化遵循

$$\begin{aligned} P_\uparrow(t) = &\sum_{m<\kappa} p_\uparrow P(m) + \sum_{m\geq\kappa} p_\uparrow P(m)\cos^2(\Omega_m t) \\ &+ \sum_m p_\downarrow P(m)\sin^2(\Omega_{m+\kappa} t) \end{aligned} \tag{A18}$$

$$\begin{aligned} P(m,t) = &\, p_\uparrow \left[P(m)\cos^2(\Omega_m t) + P(m+\kappa)\sin^2(\Omega_{m+\kappa} t)\right] \\ &+ p_\downarrow \left[P(m)\cos^2(\Omega_{m+\kappa} t) + P(m-\kappa)\sin^2(\Omega_m t)\right] \end{aligned} \tag{A19}$$

其中 $p_\uparrow = 1/(1+e^{-\lambda_s})$、$\Omega_m = \Omega\eta^\kappa\sqrt{m!/(m-\kappa)!\, f_\kappa^{(m-\kappa)}}$ 和 $p_\downarrow = 1 - p_\uparrow$。

因此，由式 (2) 得到的无量纲自旋功为

$$\begin{aligned} \tilde{W}_s &= (\langle J_z(t)\rangle - \langle J_z(0)\rangle)/\hbar \\ &= \sum_m p_\downarrow P(m)\sin^2(\Omega_{m+\kappa} t) \\ &\quad - \sum_{m\geq\kappa} p_\uparrow P(m)\sin^2(\Omega_m t)\,. \end{aligned} \tag{A20}$$

具有非有限自旋温度时，平均运动量子 $\bar{n}(t) = \sum_m mP(m,\ t)$ 为

$$\begin{aligned} \bar{n} = &\, p_\uparrow \sum_m m\left[P(m)\cos^2(\Omega_m t)\right. \\ &\left. + P(m+\kappa)\sin^2(\Omega_{m+\kappa} t)\right] \\ &+ p_\downarrow \sum_m m\left[P(m)\cos^2(\Omega_{m+\kappa} t)\right. \\ &\left. + P(m-\kappa)\sin^2(\Omega_m t)\right] \end{aligned} \tag{A21}$$

将式（12）中的无量纲功

$$\begin{aligned} \tilde{W}_v &= (\langle \Delta E(t)\rangle - \langle E(0)\rangle)/h\nu\kappa \\ &= \sum_m p_\downarrow P(m)\sin^2(\Omega_{m+\kappa} t) \\ &\quad - \sum_{m\geq\kappa} p_\uparrow P(m)\sin^2(\Omega_m t). \end{aligned} \tag{A22}$$

$\tilde{W}_v$ and $\tilde{W}_s$ are equal.

[1] E. T. Jaynes, 《信息论与统计力学》, Physical Review **106**, 620（1957）。[2] E. T. Jaynes, 《信息论与统计力学》（续）, Physical Review **108**, 171（1957）。[3] E. Jaynes, 《最大熵方法的原理》, Proc. IEEE **70**, 939（1982）。[4] J. A. Vaccaro 和 S. M. Barnett, 《无需能量代价的信息擦除》, Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences **467**, 1770–1778（2011）。[5] J. S. Wright、T. Gould、A. R. Carvalho、S. Bedkihal 和 J. A. Vaccaro, 《在热储库与自旋库之间运行的量子热机》, Physical Review A**97**, 052104（2018）。[6] T. Croucher、S. Bedkihal 和 J. A. Vaccaro, 《无需能量代价的记忆擦除中的离散涨落》, Physical Review Letters **118**, 060602（2017）。[7] B. Pozsgay、E. Vernier 和 M. A. Werner, 《关于具有无限组守恒荷的广义吉布斯系综》, Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment **2017**, 093103（2017）。[8] N. Yunger Halpern、M. E. Beverland 和 A. Kalev, 《量子多体系统中的非对易守恒荷

热化, Phys. Rev. E **101**, 042117 (2020)。[9] T. Langen、T. Gasenzer 和 J. Schmiedmayer, 《近可积量子系统中的预热化与普适动力学》, Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment **2016**, 064009 (2016)。[10] Y. Guryanova、S. Popescu、A. J. Short、R. Silva 和 P. Skrzypczyk, 《具有多个守恒量的量子系统热力学》, Nature Communications **7**, 10.1038/ncomms12049 (2016)。[11] L. J. McClelland, 《超越卡诺极限：通过熵电池提取功》, arXiv 预印本 arXiv:2510.08989 (2025)。[12] T. A. Laine 和 S. Stenholm, 《三能级系统中的绝热过程》, Phys. Rev. A **53**, 2501 (1996)。[13] G. Lindblad, 《论量子动力半群的生成元》, Communications in Mathematical Physics **48**, 119 (1976)。[14] L. Ratschbacher、C. Sias、L. Carcagni、J. Silver、C. Zip-kes 和 M. K¨ohl, 《自旋极化原子浴中单离子量子比特的退相干》, Physical Review Letters **110**, 160402 (2013)。