DOI: 10.3901/JME.2014.04.150

量子斯特林热机的输出功和热效率*

吴 锋^{1,2} 汪 拓¹ 陈林根² 刘晓威²

(1. 武汉工程大学理学院 武汉 430073;

2. 海军工程大学船舶与动力工程学院 武汉 430033)

摘要: 量子斯特林热机工质为一维势阱中的粒子, 其循环由两个等内能过程和两个等势宽过程组成, 分别对应经典斯特林热机的两个等温过程和两个等容回热过程。建立二能级系统量子斯特林热机的量子力学模型, 研究工质系统量子态的演化规律。通过求解 Schrödinger 方程, 分析量子斯特林热机循环的量子力学机理。考虑热漏的影响, 得到热机的最大输出功和最大热效率。数值计算表明输出功与热效率之间的关系曲线是回原点的柳叶形, 与经典斯特林热机循环输出功和效率之间的关系曲线形状相同。在最大输出功和最大热效率之间的曲线, 是量子斯特林热机的最佳运行区段。研究结果有助于了解量子斯特林热机的最优热力性能, 为量子斯特林热机的最优设计和模型评估提供依据。

关键词: 量子热机; 斯特林循环; 输出功; 热效率

中图分类号: TK121

Work Output and Efficiency of Quantum Stirling Engine

WU Feng^{1,2} WANG Tuo¹ CHEN Lingen² LIU Xiaowei²

(1. School of Science, Wuhan Institute of Technology, Wuhan 430073;

2. Shipping and Power Engineering School, Naval University of Engineering, Wuhan 430033)

Abstract: A quantum Stirling cycle with a single quantum mechanical particle confined in a one-dimensional box trap is made of two isoenergetic branches corresponding to isothermal processes and two constant-well widen branches corresponding to isovolumic regenerating processes. The quantum thermodynamic model of a quantum Stirling engine with two-energy-level is established. The evolution of quantum states is investigated. The quantum characteristics of the cycle are analyzed by solving the Schrödinger equation. Based on the assumption that there exists a heat leakage between two energy baths, the expressions of the maximum work output W^* and the maximum efficiency η for the two-eigenstate system are derived. The relationship between the work output W^* versus the efficiency η is obtained by numerical calculation. It is a willow-shaped curve in harmony with that of a classical Stirling cycle. The region between the maximum work and the maximum efficiency is the optimization criteria of a quantum Stirling engine. The analysis will be helpful to further understand the optimal thermodynamic performance of a quantum Stirling engine. The results obtained here provides a new theoretical basis for the model evaluation and the optimal design of a quantum Stirling engine.

Key words: quantum engine; Stirling cycle; work output; efficiency

0 前言

所谓量子热机, 是指其工质的动力学行为受量子力学支配的热机^[1-2]。随着现代科学技术的迅猛发展, 在航天、军事、医疗、红外、低温物理、低温生物学、人工智能等领域, 都迫切需要特殊的动力装置, 如量子辐射放大器、用于医疗及各种微型机械装置的动力系统、激光制冷器、激光推进器、电子热机、布朗热机、分子制冷器、磁制冷机、各种

低温制冷系统、光电转换系统、热电系统等。这些特殊的动力系统的热力特性和经典理论有着很大程度的偏离^[3-4]。另一方面, 即使是对于经典的热力循环, 当工质的密度较大或温度很低时, 工质的性质将偏离理想气体状态方程。这时, 必须用量子理论来描述工质的量子性质。由此可见, 对热力循环量子性能的研究不仅仅可以提高计算的精确度, 而且有助于加深理解量子循环和经典循环之间的联系与区别, 同时也提出了一种新的更精确的热力计算方法。

自 20 世纪 80 年代以来, 有限时间热力学对热力装置性能的研究范围, 就从经典热机(制冷机、热

* 国家自然科学基金资助项目(51176143)。20130313 收到初稿, 20130725 收到修改稿

泵)扩展到量子热机(制冷机、热泵)^[5]。许多学者研究了以无相互作用的玻色系统、费米系统为工质的量子热机^[6-11]、制冷机^[12-13]、热泵^[14-16]的优化性能。还有一些学者研究了激光制冷系统^[17]、三能级系统量子热机^[18]的热力学性能。量子热力循环性能特性的研究方法主要有半群逼近理论^[5]、求解量子主方程^[7]、理想玻色系统和费米系统的量子统计理论^[19]以及求解 Schrödinger 方程^[20-21]等。

斯特林循环是一种理想效率可以达到卡诺效率的热力循环方式^[1]。通过求解量子主方程^[9]和采用量子统计理论分析的方法^[22], 一些学者对量子斯特林循环进行了研究, 得到了许多有意义的结果^[1, 4, 7-8, 22]。本文建立了二能级系统量子斯特林热机的量子力学模型, 通过求解 Schrödinger 方程, 得到了最大输出功以及输出功和热效率之间的优化关系。研究结果有助于了解量子斯特林热机的最优热力性能。

1 量子斯特林热机循环的理论模型

考虑的系统工质是位于一维无限深势阱中的粒子, 势阱宽度 L 的最小值和最大值分别为 L_1 和 L_2 。如图 1 所示, 工质的热力循环由两个等温过程(过程 2-3 和 4-1)和两个等容回热过程(过程 1-2 和 3-4)构成。两个等温过程是系统与外部的能量通道, 两个等容过程是系统的内部回热通道。由于理想量子气体的内能仅是温度的函数, 因此在等温过程中, 粒子的内能不变。等容过程对应于势阱壁的宽度 L 不变。

图 1 量子斯特林热机循环

对于一个两能级系统, 图 2 给出了量子斯特林循环中粒子跃迁的能级模型。假设粒子在态 1 位于基态, 从态 1 到态 2, 是内部回热过程, 粒子从热机蓄热材料吸热激发, 粒子以不同的概率处于基态能级和激发态能级(对于工质气体, 是部分粒子处于基态能级, 另一部分粒子处于激发态能级)。从态 2 到态 3, 粒子经能量通道从外部热源等温吸热, 跃

迁到激发态能级, 但内能不变。从态 3 到态 4, 是内部回热过程, 粒子向热机蓄热材料放热, 粒子以不同的概率处于基态能级和激发态能级(对于工质气体, 是部分粒子处于基态能级, 另一部分粒子处于激发态能级)。从态 4 到态 1, 粒子经能量通道向外部热源等温放热, 保持内能不变跃迁回基态能级, 完成一个循环。计算表明, 粒子在回热过程 1-2 中的吸热量等于在回热过程 3-4 中的放热量, 因此, 量子斯特林热机可以实现理想回热。

图 2 粒子跃迁的能级模型

2 系统的量子力学分析

势阱中粒子的定态 Schrödinger 方程可写为^[23]

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (1)$$

式中, $\hat{H}$ 是系统的哈密顿算子, ψ 是含时波函数, E 对应于系统的能量。对于一维无限深势阱, 哈密顿算子

$$\hat{H} = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{d^2}{dx^2} + U(x)$$

在 $0 < x < L$ 处, $U(x) = 0$, 而在 $x \geq L$ 或 $x \leq 0$ 处, $U(x) = \infty$ 。故式(1)可以写为

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0 \quad (2)$$

式中, $\psi(x)$ 满足边界条件 $\psi(0) = 0$ 和 $\psi(L) = 0$ 。二阶常微分方程式(2)的解为

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \varphi_n(x) \quad (3)$$

式中, $\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$ 是归一化的本征态, 其系数 a_n 满足归一化条件

$$\sum_{n=1}^{\infty} |a_n|^2 = \sum_{n=1}^{\infty} p_n = 1 \quad (4)$$

式中, $|a_n|^2 = p_n$ ($n = 1, 2, \dots, \infty$) 是粒子对应的占有概

率。将式(3)代入式(2), 可得对应于本征态 $\varphi_n(x)$ 的本征值 E_n 的表达式

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

粒子的能量为

$$E = \sum_{n=1}^{\infty} |a_n|^2 E_n = \sum_{n=1}^{\infty} P_n E_n \quad (5)$$

对于二能级系统($n=1,2$), 式(4)代入式(5), 可得

$$E_i = \sum_{n=1}^2 |a_{in}|^2 E_n = \sum_{n=1}^2 P_{in} E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL_i^2} (4 - 3P_{i1})$$

式中, $i=1, 2, 3, 4$ 分别对应图 1 中的态 1, 2, 3 和 4。注意到在态 1, 粒子位于基态, 故有 $P_{11}=1, P_{12}=0$, 在态 3, 粒子处于激发态, 故有 $P_{31}=0, P_{32}=1$, 因此粒子在 4 个瞬态的能级分别为

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL_1^2} \quad E_2 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL_1^2} (4 - 3P_{21})$$

$$E_3 = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{mL_2^2} \quad E_4 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL_2^2} (4 - 3P_{41})$$

设 P_{h1} 是在过程 2-3 中 L 处粒子位于 $n=1$ 基态的占有几率, 则系统在过程 2-3 中的能量为

$$E_{23} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (4 - 3P_{h1}) \quad (6)$$

等温过程内能不变, $E_2 = E_3 = E_{23} = E_h$, 故有

$$\frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL_1^2} (4 - 3P_{21}) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (4 - 3P_{h1}) = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{mL_2^2} \quad (7)$$

设 P_{c1} 是在过程 4-1 中 L 处粒子位于 $n=1$ 基态的占有概率, 则系统在过程 4-1 中的能量为

$$E_{41} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (4 - 3P_{c1}) \quad (8)$$

由 $E_4 = E_1 = E_{41} = E_c$, 可得

$$\frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL_2^2} (4 - 3P_{41}) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (4 - 3P_{c1}) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL_1^2} \quad (9)$$

3 热机的输出功与效率

根据式(5)的微分形式 $dE = \sum_{n=1}^{\infty} E_n dP_n + \sum_{n=1}^{\infty} P_n dE_n$

和热力学第一定律, 系统吸收的热量、功可以分别表示为 $dQ = \sum_{n=1}^{\infty} E_n dP_n$, $dW = -\sum_{n=1}^{\infty} P_n dE_n$ 。由此, 得到粒子作用于势阱壁的力的表达式为

$$F = -\frac{dW}{dL} = \sum_{n=1}^{\infty} P_n \frac{dE_n}{dL} \quad (10)$$

分别将式(6)和式(8)代入式(10), 得到在过程 2-3 和 4-1 中的力分别为

$$F_{23} = -\frac{\pi^2 \hbar^2}{mL^3} (4 - 3P_{h1}) \quad (11)$$

$$F_{41} = -\frac{\pi^2 \hbar^2}{mL^3} (4 - 3P_{c1}) \quad (12)$$

将式(7)代入式(11), 式(9)代入式(12), 可将式(11)、(12)改写为

$$F_{23} = -\frac{\pi^2 \hbar^2}{mL_1^2 L} (4 - 3P_{21}) \quad F_{41} = -\frac{\pi^2 \hbar^2}{mL_2^2 L} (4 - 3P_{41})$$

系统在等温过程 2-3 中从外部热源吸收的热量 Q_{23} 等于该过程系统做的功 W_{23}

$$Q_{23} = W_{23} = -\int_{L_1}^{L_2} F_{23} dL = \frac{\pi^2 \hbar^2}{mL_1^2} (4 - 3P_{21}) \ln \frac{L_2}{L_1} \quad (13)$$

同理, 系统在等温过程 4-1 中向外部热源放出的热量大小

$$Q_{41} = \left| -\int_{L_1}^{L_2} F_{41} dL \right| = \frac{\pi^2 \hbar^2}{mL_2^2} (4 - 3P_{41}) \ln \frac{L_2}{L_1} \quad (14)$$

考虑高低温热源间存在热漏 Q_r , 为方便起见, 设

$$Q_r = \alpha \frac{\pi^2 \hbar^2}{mL_2^2} \quad (15)$$

式中, 常数 α 为比例系数。由于热漏的存在, 高温热源实际的热交换量 Q_h 和低温热源实际的热交换量 Q_c 分别为

$$Q_h = Q_{23} + Q_r = \frac{\pi^2 \hbar^2}{mL_1^2} (4 - 3P_{21}) \ln \frac{L_2}{L_1} + Q_r \quad (16)$$

$$Q_c = Q_{41} + Q_r = \frac{\pi^2 \hbar^2}{mL_2^2} (4 - 3P_{41}) \ln \frac{L_2}{L_1} + Q_r \quad (17)$$

在两个回热过程中, 有

$$Q_{12} = E_2 - E_1 \quad Q_{34} = E_4 - E_3$$

由于 $E_2 = E_3, E_4 = E_1$, 显然可得 $Q_{12} = |Q_{34}|$, 即量子斯特林热机可以实现理想回热。

由式(7)和式(9)可得

$$P_{21} = \frac{4}{3} \left(1 - \frac{L_1^2}{L_2^2} \right) \quad (18)$$

$$P_{41} = \frac{1}{3} \left(4 - \frac{L_2^2}{L_1^2} \right) \quad (19)$$

联立式(13)~(16), 可得量子斯特林热机每一循

环的输出功 $W = Q_h - Q_c$ 为

$$W = \frac{\pi^2 \hbar^2}{m L_1^2} \left(\frac{4 L_1^2}{L_2^2} - 1 \right) \ln \frac{L_2}{L_1} \quad (20)$$

给定 L_1 , 并令 $x = L_2/L_1$, 可将量纲一输出功

$$W^* = W / \frac{\pi^2 \hbar^2}{m L_1^2} \text{ 写为}$$

$$W^* = \left(\frac{4}{x^2} - 1 \right) \ln x \quad (21)$$

由式(16)、(18)~(20), 热机的循环热效率可以写为

$$\eta = \frac{W}{Q_h} = \frac{4 - x^2}{4 + \alpha / \ln x} \quad (22)$$

很明显, 式(21)、(22)是量纲一输出功 W^* 关于热效率 η 的以 x 为参数的参数方程, 它们决定了无量纲输出功 W^* 与热效率 η 之间的关系。从式(21)、(22)可以看出, 只有当 $x = L_2/L_1 < 2$ 时, 输出功和热效率才不为零。

4 讨论

4.1 最大输出功

根据式(21), 令 $\frac{\partial W^*}{\partial x} = 0$, 可以得到热机每循环的最大量纲一输出功为

$$W_m^* = \frac{1}{8} \left(\frac{4}{x_w} - x_w \right)^2$$

与最大量纲一输出功对应的热效率为

$$\eta_w = \frac{8 \ln x_w}{4 + \alpha / \ln x_w}$$

式中, x_w 满足关系式 $8 \ln x_w = 4 - x_w^2$ 。

4.2 最大热效率

根据式(22), 令 $\frac{\partial \eta}{\partial x} = 0$, 可以得到热机的最大循环效率为

$$\eta_m = \frac{4 - x_\eta^2}{4 + \alpha / \ln x_\eta}$$

与最大热效率对应的量纲一输出功为

$$W_\eta^* = \left(\frac{4}{x_\eta^2} - 1 \right) \ln x_\eta$$

这里 x_η 满足关系式

$$8x_\eta^2 \ln^2 x_\eta + 2\alpha x_\eta^2 \ln x_\eta + \alpha x_\eta^2 - 4\alpha = 0$$

4.3 热漏系数的影响

图 3 给出了量子斯特林热机循环量纲一输出功

和热效率之间的关系曲线。曲线是回原点的柳叶型, 这与经典斯特林热机的性能关系曲线一致^[24]。对应于最大的输出功 W_m^* , 有一最佳热效率 η_w ; 对应于最大的热效率 η_m , 有一最佳的输出功 W_η^* 。在最大的输出功点和最大热效率点之间的曲线, 是热机的最佳运行区段。

从图 3 可以看出, 热漏对循环输出功无影响, 但对热效率的影响较大。实际上, 循环热效率是热漏系数 α 的单调减小函数。

图 3 量纲一输出功和热效率之间的关系曲线

5 结论

本文所研究的量子斯特林热机的工质是一维无限深势阱中的粒子, 其量子态的演化服从 Schrödinger 方程。

(1) 建立了二能级系统量子斯特林热机循环模型, 循环中的两个等势阱宽度之比 L_2/L_1 应小于 2, 才能使输出功和热效率不等于 0。

(2) 二能级量子斯特林热机循环存在最大输出功和最大的热效率。

(3) 输出功与热效率之间的关系曲线为回原点的柳叶形, 在最大的输出功点和最大热效率点之间的曲线, 是热机的最佳运行区段。

(4) 热漏对循环热效率有较大影响, 但对循环输出功无影响。

参 考 文 献

- [1] 吴锋, 陈林根, 孙丰瑞, 等. 斯特林机的有限时间热力学优化[M]. 北京: 化学工业出版社, 2008.
WU Feng, CHEN Lingen, SUN Fengrui, et al. Optimization of finite-time thermodynamics on Stirling machines[M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2008.
- [2] GEVA E. Finite time thermodynamics for quantum heat

- engine and heat pump[D]. Israel: The Hebrew University, 1995.
- [3] SISMAN A, SAYGIN H. On the power cycles working with ideal quantum gases: I. The Erriction cycle[J]. Journal of Physics D: Applied Physics, 1999, 32(3): 664-680.
- [4] SISMAN A, SAYGIN H. Efficiency analysis of a Stirling power cycle under quantum degeneracy conditions[J]. Physica Scripta, 2001, 63(3): 263-267.
- [5] KOSLOFF R. A quantum mechanical open system as a model of a heat engine[J]. The Journal of Chemical Physics, 1984, 80(4): 1625-1631.
- [6] GEVA E, KOSLOFF R. On the classical limit of quantum thermodynamics in finite time[J]. The Journal of Chemical Physics, 1992, 97(6): 4398-4412.
- [7] WU F, CHEN L, SUN F, et al. Finite-time exergoeconomic performance bound for a quantum Stirling engine[J]. International Journal of Engineering Science, 2000, 38(2): 239-247.
- [8] WU F, CHEN L, SUN F, et al. Optimization criteria for an irreversible quantum Brayton engine with an ideal Bose gas[J]. Journal of Applied Physics, 2006, 99(5): 054904.
- [9] WU F, CHEN L, SUN F, et al. Performance and optimization criteria for forward and reverse quantum Stirling cycles[J]. Energy Conversion and Management, 1998, 39(8): 733-739.
- [10] WANG J, HE J, HE X. Performance analysis of a two-state quantum heat engine working with a single-mode radiation field in a cavity[J]. Physical Review E, 2011, 84: 041127.
- [11] WU F, CHEN L, WU S, et al. Performance of an irreversible quantum Carnot engine with spin-1/2[J]. The Journal of Chemical Physics, 2006, 124(21): 214702.
- [12] WU F, CHEN L, SUN F, et al. Optimal performance of an irreversible quantum Brayton refrigerator with ideal Bose gases[J]. Physica Scripta, 2006, 73(5): 452-457.
- [13] ARMEN E A, KAREN V H, DOMINIK J, et al. Thermodynamic limits of dynamic cooling[J]. Physical Review E, 2011, 84: 041109.
- [14] LIN B, CHEN J. General performance characteristics of a quantum heat pump cycle using harmonic oscillators as the working substance[J]. Physica Scripta, 2005, 71(1): 12-19.
- [15] WU F, CHEN L, SUN F, et al. Optimum performance parameters for a quantum Carnot heat pump with spin-1/2[J]. Energy Conversion and Management, 1998, 39(11): 1161-1167.
- [16] LIN B, CHEN J. Performance analysis of a quantum heat-pump using spin systems as the working substance[J]. Applied Energy, 2004, 78(1): 75-93.
- [17] WU F, CHEN L, WU S, et al. Thermodynamic performance of a laser cryocooler[J]. The Journal of Chemical Physics, 2007, 126(20): 204502.
- [18] GEVA E, KOSLOFF R. Three-level quantum amplifier as a heat engine: A study in finite-time thermodynamics[J]. Physical Review E, 1994, 49(5): 3903-3918.
- [19] WU F, CHEN L, WU S, et al. Ecological optimization performance of an irreversible quantum Otto cycle working with an ideal Fermi gas[J]. Open System and Information Dynamics, 2006, 13: 55-66.
- [20] WU F, YANG Z, CHEN L. Work output and efficiency of a reversible quantum Otto cycle[J]. Thermal Science, 2010, 14(4): 879-886.
- [21] WANG J, HE J. Optimization on a three-level heat engine working with two noninteracting fermions in a one-dimensional box trap[J]. Journal of Applied Physics, 2012, 111: 043505.
- [22] SISMAN A, SAYGIN H. Efficiency analysis of a Stirling power cycle under quantum degeneracy conditions[J]. Physica Scripta, 2001, 63: 263-267.
- [23] MESSIAH A. Quantum mechanics[M]. New York: Dover Publications, 1999.
- [24] WU F, CHEN L, WU S, et al. Optimum performance of irreversible Stirling engine with imperfect regeneration[J]. Energy Conversion and Management, 1998, 39(8): 727-732.

作者简介: 吴锋(通信作者), 男, 1955 年出生, 博士, 教授, 博士研究生导师。主要研究方向为新型热能动力装置优化。

E-mail: wufeng@mail.wit.edu.cn