面向能源应用的量子工程

Florian Metzler[1], Jorge Sandoval[1], Nicola Galvanetto[1,2]

[1]M马萨诸塞州剑桥市马萨诸塞州理工学院，邮编02139，美国 .

[2]苏黎世大学，温特图尔大街190号，8057 苏黎世，瑞士。

量子工程旨在通过利用量子叠加等鲜明的非经典行为来创造新型技术。目前探索的应用绝大多数属于量子信息科学领域，其中最受瞩目的子领域是量子计算。然而，量子工程的其他应用也正迅速涌现。本文回顾量子工程原理在太阳能、电池和核能领域的应用。我们发现，这些看似迥异的领域在量子工程方法上存在共通之处，并将其与量子信息科学直接进行比较。我们发现，一个共同的知识基础正在形成，实际上这对应着一个新领域，我们称之为"量子能源科学"。量子能源科学有望显著提升有机太阳能电池、量子电池和核聚变等能源技术的性能。认识到这一新兴领域的存在，对于关注能源创新的各方可能具有重要意义。提高该领域的知名度并推动资源投入和机构支持，也可能使活跃于该领域的研究人员受益。

1. 引言

提升能源技术的性能是许多持续开展的创新工作的关键目标。然而，普遍采用的能源技术往往会受到物理极限的制约。一个例子是原子和分子的电离能，其上限约为 15 eV。这一数值为普遍采用的储能技术所能实现的能量密度设定了一个严格的理论上限。在技术的实际应用中，实际极限通常要低得多。例如，电化学电池基于电子氧化还原反应和离子迁移，这使得可实现的能量密度最高约为 1 千瓦时/千克。类似的物理约束也适用于电池的充电和放电速率，以及太阳能电池的最低材料需求。

通过更彻底地重新审视所寻求的能源技术背后的物理原理，可以克服这些限制。在此，我们阐述量子工程如何为太阳能、电池和核工程提供新颖思路，有望突破数十年来阻碍能源技术发展的某些物理限制。这些机遇或将吸引能源领域寻求颠覆式创新的人士，他们希望在关键指标上实现十倍乃至更大的提升。本文介绍的方法包括：材料需求大幅降低、低于 10 g/m^2 （与当前水平相比减少 >30 倍）的高效有机太阳能电池；通过超吸收实现充电性能增强（加速 >100 倍）的量子电池；以及利用原子核作为能量储库、容量提高 >1000 倍的高容量核电池。支持性计算请参阅补充说明 S1。

尽管不同领域的具体实现可能各不相同，基于量子工程的能源技术却有一个共同点：在每种情况下，能量都会被有意地移入和移出量子系统的能态，而量子系统可由分子、原子和原子核构成。通过选择性地激活或抑制这些量子系统之间的耦合，可以控制这一过程。借助这种有意的控制，可以获得新的基础构件，用于能源技术；同时还可以利用集体量子效应，大幅加快所需的动力学过程。所采用的理论和实践工具与其他量子工程领域密切相关，为知识和人力资源的交流应用创造了充足机会。

量子计算以及量子模拟、量子传感和量子通信，是如今量子工程最为显著的应用。世界各地正在制定大型计划，以系统性地支持和推动新兴的量子生态系统（参见相关文献）。然而，能源应用通常不在此类计划之列。我们认为，量子工程在能源应用方面的巨大潜力值得对这一领域给予更多关注，并建议将其纳入重大的量子倡议。

在本文的其余部分，我们将概述面向能源应用的量子工程。我们将介绍关键原理，阐述研究人员设想的可能性，并总结截至目前已经取得的成果。

2. 背景与关键原理

我们大多数材料的性质和行为都受量子原理支配。这些见解最早于 20th 世纪初得到认识，并引发了第一次量子革命；第一次量子革命围绕电子能带结构等量子原理的集体现象展开。20世纪70年代，第二次量子革命兴起，如今正全面展开。与之相伴的新一波量子工程——有时被称为量子2.0——专注于对量子性质进行精确控制，并利用叠加和纠缠等明显非经典行为（Pritchard and Till 2014；Awschalom et al. 2017；Rapp & Schneider 2021）。量子计算或许是量子2.0最显著的表现。在量子计算中，具有离散能态的量子系统（例如原子和小型超导电路）会被有意激发，随后任其以概率上可预测的方式随时间演化。

信息的存储与操控意味着能量的存储与操控——这一原理同样适用于经典物理学和量子物理学（Szilard 1929）。设想一枚存储芯片，其中二进制位的信息内容由少量电荷表示。对于信息应用，工程师力求尽量减少所需电荷量，同时最大限度地提高信息读取的保真度。 而能源应用的优先事项则有所不同：设想一组电容器，它们可以是空的（0），也可以是带电的（1）。在这种情况下，工程师更关注系统的容量，而非保真度。量子科学也适用同样的视角转变。二能级量子系统通常称为量子比特或量子比特，可以处于较高或较低的能量状态——从信息视角来看，分别可解释为 |1> 和 |0> ；从能量视角来看，则可解释为“带电”和“不带电”（Hübler 和 Osuagwu, 2010年）。针对能量存储、传输和转换而非信息存储、传输和转换进行优化的量子系统，被称为工作量子比特（Binder 等，2015）。

信息视角和能量视角的共同点在于，量子系统可通过暂时增强彼此之间的相互作用来加以操控（Majer 等，2007）。这使能量得以重新分布，能态也随之改变。由于相互作用增强，量子

系统之间如今产生了耦合，因而不再能被视为彼此独立的实体。就像多道小波汇成一道更大的波，能量会在短时间内由一个更大的整体系统共同承载，不再能够被定位。这种集体状态称为相干叠加态（Vewinger 等，2003；Sillanpää 等，2007）。最终，叠加态会消失——通常在纳秒内——这是环境扰动所致。此后，能量可能会相对于系统的初始状态重新分布。这种重新分布实质上代表了一次能量传递或能量转换事件。同一过程也可以解释为一次信息传递或信息转换事件，例如量子比特之间的量子态传输（图 1a）。图 1b 展示了两个耦合的量子比特，图 1c 展示了六个耦合的量子比特。在这两种情况下，都可以通过外部激励调节量子比特之间的相互作用，从而借由叠加态引发能量传递，加快或减缓它们的激发与退激发（Wu 等，2018；Bernien 等，2017）。

这里有几个重要特征。首先，这种能量再分配的量子模式——也称为量子能量转移或量子输运——速度可能极快（Jones 和 Bradshaw，2019）。因此，量子能量转移能够避免发生竞争性事件，例如激发分子的自发衰变。快速动力学部分由称为 Dicke 增强的集体量子效应驱动（也称超辐射、超吸收和超转移——参见 Dicke，1956；Lloyd 和 Mohseni，2010；Higgins 等，2014）。其次，能量传递的速率取决于耦合系统中共振的程度（Andrews，2009）。通过设计匹配或在原位调节来提供共振受体，便可加速所需的跃迁。最后，原则上，这种能量再分配模式不会造成能量损失，这与其他会耗散能量的能量传递模式（如电子移动）不同。

为了更好地理解在纳米尺度操控能量的这些独特特性，研究人员建立了模型，用以描述量子系统及其相互作用的相关方面。随后，可以让这些模型随时间演化，以研究其动态行为。表示这类模型的一种常见方式是使用哈密顿量——它们是记录系统能量储库和能量传递路径，以及影响这些因素的各种因素的方程（Eisberg 和 Resnick，1985）。如图 1 所示并在补充说明 S2 中进一步阐述的那样，本文讨论的不同情形——太阳能、电池和核能——其模型及支配这些模型的量子原理都极为相似。

在接下来的章节中，我们将介绍各个领域中量子工程新兴应用的实例，并探讨这些应用在改进现有能源技术或创造新型能源技术方面的潜力。

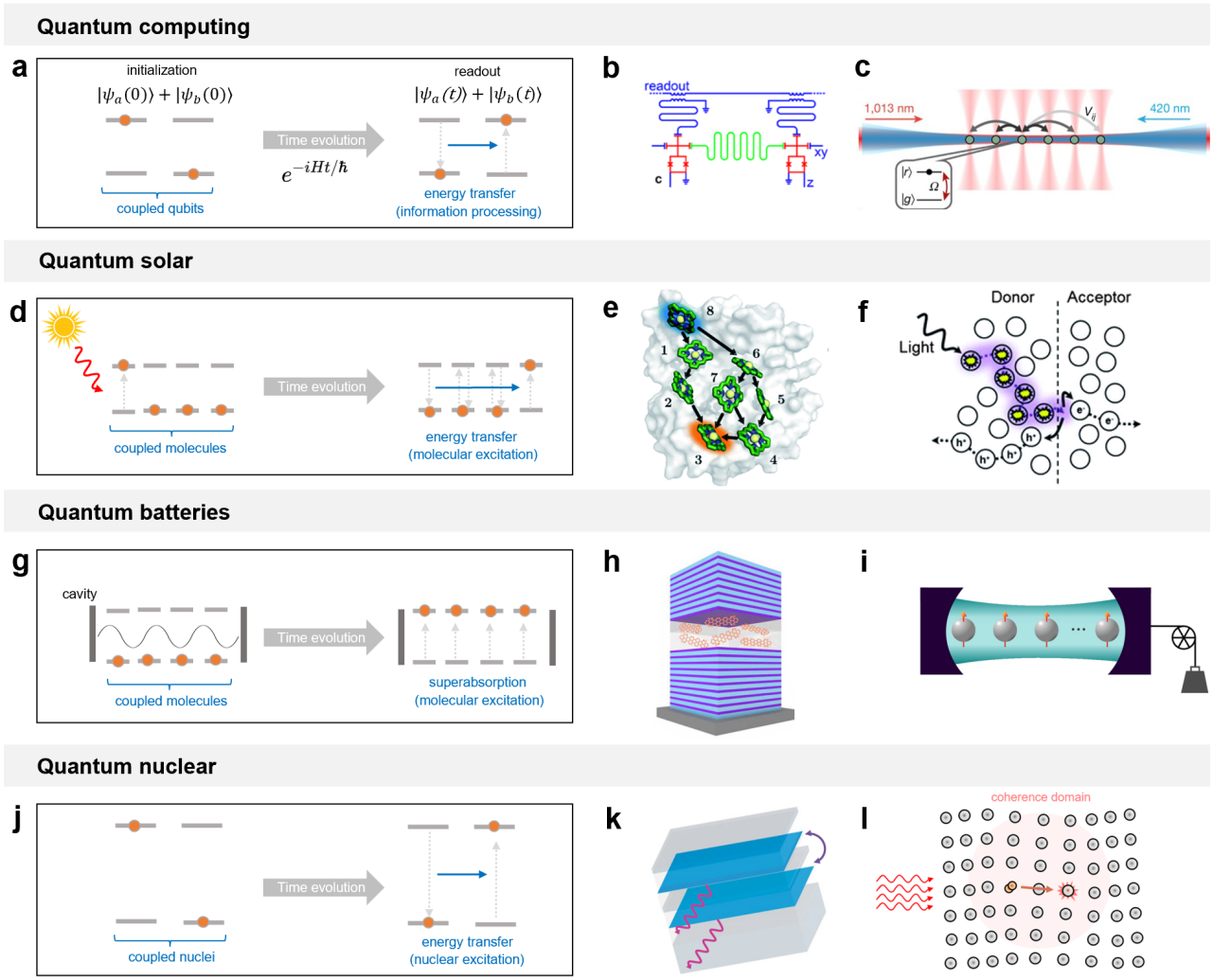

图 *1*：***a*** 量子态传输过程中两个量子比特时间演化的示意图。通过外部激励增强量子比特之间的耦合，从而形成叠加态。***b*** 如 *Wu* 等，*2018* 所示，通过超导电路（红色）和共享振荡器（绿色）实现耦合量子比特。***c***如 *Bernien* 等，*2017* 所示，通过光镊（垂直光束）囚禁里德堡原子实现耦合量子比特，并通过共享光子模式（水平光束）调节相互作用。***d*** 分子激子转移的示意图。分子之间的偶极-偶极耦合形成叠加态。***e***如 *Häse* 等，*2020* 所示，在光合系统（芬纳-马修斯-奥尔森复合物）中实现分子激子转移。***f*** 如 *Menke* 和 *Holmes*，*2014* 所示，在有机太阳能电池中实现分子激子转移：激发从吸收层中的供体系统传输至电荷分离势垒处的受体系统。***g*** 通过超吸收为量子电池充电的示意图，该电池由多个工作量子比特组成。通过外部激励增强工作量子比特之间的耦合，从而形成叠加态。***h*** 如 *Quach* 等人，*2022*年所示，通过腔驱动有机分子（*Lumogen-F orange*）实现量子电池。***i*** 如 *Binder* 等，*2015* 所示，量子电池可实现为由腔驱动的工作量子比特阵列。***j*** 两个核工作量子比特时间演化并实现量子态传输的示意图。通过外部激励增强工作量子比特之间的耦合，从而形成叠加态。***k*** 如 *Haber* 等，*2017* 所示，通过充当共振腔的薄膜 ^{57}Fe 层实现耦合核工作量子比特。***l*** *Hagelstein* 和 *Chaudhary*，*2015* 提出的一种耦合核工作量子比特实现方案，其中氘核对作为供体系统，高 *Z* 晶格原子核作为共振受体系统。

3. 量子能源科学的子领域 3.1. 量子太阳能

如今，量子工程被用于将从光合作用中汲取的经验应用于太阳能电池设计，以最大限度地提高光捕获效率。其目标是将自然界利用所吸收光子的高效率，与人工材料吸收更多光子的能力结合起来（通过利用比生物系统更宽的光谱范围；Brédas 等，2017）。

几十年来，光合作用利用所吸收光子的超高效率一直令科学家惊叹不已（Cao 等，2020）。光合系统吸收的几乎每个光子都会用于形成化学键，而不会重新发射后流失。实现接近 100% 的光子利用率并非易事，因为光子吸收后产生的激发分子级量子系统——即激子——寿命极短（Dursun 和 Guzelturk，2021）。如果激子所携带的能量未能在几皮秒内转移到发生糖生成的反应中心分子，那么激子就会衰变，激发能也会以光子的形式重新发射。如果植物采用经典传递机制，例如将待传递的能量赋予一个粒子，使其像电池中离子的迁移那样在环境中实际移动，那么由于这一过程速度缓慢，大部分最初吸收的能量都会损失。实际上，移动的并不是高能粒子，而只是激发能本身；它通过耦合分子的暂时叠加与离域，以振子介导的非辐射传递过程进行传递（Andrews 等，2020；见图 1d 和 1e）。最后，由于光合复合体中的边界条件，当相干叠加态被打破时，系统中的能量更有可能到达复合体的反应中心，也就是它应当到达的位置。这种高效的路径搜寻过程称为量子漫步，有人将其比作植物进行某种形式的量子计算（Biello，2007；Mohseni 等，2008）。从这一角度来看，激子可被视为受激的工作量子比特，能够暂时储存能量；随后，随着激子扩散，这些能量会传递给其他工作量子比特。

关于这一能量传递过程的理论模型表明，它之所以如此有效，是因为周围环境的参数恰到好处，确保了最高效率。显然，自然界已经演化出能够在噪声环境中维持暂态叠加态的方法，而噪声环境甚至可能有助于稳定此类状态（Plenio 和 Huelga，2008）。此类模型带来的见解随后可应用于技术设计（Mattioni 等，2021）。具体而言，太阳能电池面临着与光合系统相似的挑战：如果能量未能足够迅速地从激子产生位置（太阳能电池吸收光子的顶层）传递到激子产生电荷载流子的位置（太阳能电池的底层），能量就会通过再发射而损失（Menke 和 Holmes，2014；另见图 1f）。在实践中，这意味着电池顶层的厚度受限于激子扩散长度，即激子在其短暂使用寿命内能够移动的距离。然而，顶层较薄（例如厚度仅为几纳米）意味着大量入射光无法得到利用，因为许多光子需要穿透超过 100 纳米的深度才能被吸收（Sajjad 等，2020）。

这对有机太阳能电池尤为重要；有机太阳能电池是最具前景的新兴太阳能技术之一。有机太阳能电池有时也称为塑料太阳能电池，由聚合物材料制成，因此制造和安装成本较低（Chiechi 等人，2013年）。其他优势包括材料需求少（<10 g/sqm）、环保处置、可弯曲性，以及制造半透明电池的可能性——所有这些因素都有助于实现多样而广泛的应用。迄今为止，其主要缺点是有机太阳能电池的效率相对较低，通常低于

10%，尤其是在考虑大规模生产和寿命等实际因素时。效率低下源于有机材料中激子的寿命较短，因而扩散长度也较短（Riede 等人，2021年）。使用较厚的吸收层 >10 纳米时，许多激子会在到达结之前复合，并将能量释放到周围环境中；在结处，激发能会转化为电荷。在某些原型电池中，人们通过构建特殊结构解决了这一问题：具有电荷分离势垒的结遍布吸收层，这种结构称为体异质结 （Rand和Richter，2014年）。然而，与简单得多的平面异质结相比，这类设计的可扩展性和稳健性较差；平面异质结本质上是薄膜平面层。为了兼顾高效率、高可制造性和稳健性，研究人员致力于开发具有长激子扩散长度、且吸收层较深的平面异质结。理想情况下，有机太阳能电池的吸收层和 相应的扩散长度均超过100纳米。

通过测试不同的材料构型，人们已实现在有机材料中增加激子扩散长度，但尚未完全理解为何某些构型比其他构型效果更好（Cnops等，2014年；Long等，2016年；Sneyd 等，2021年）。例如，Sneyd 等，2021年报告称，在低聚聚芴纳米纤维薄膜中，基于泵浦-探测测量估算出的激子扩散长度为 300 纳米 +/- 50 纳米。然而，要真正优化各种材料中的激子扩散，研究人员正试图基于上述非辐射传输过程的模型和模拟，确定理想的材料构型和形貌，从而预测最佳参数（Ruseckas和Samuel，2021年；Mattioni 等，2021）。

总而言之，人们已开发出量子模型，用以解释光合作用中能量传递效率为何高得惊人。这些模型表明，其中存在与量子计算所用相同的耦合诱导的叠加态。若将激发分子视为工作量子比特，这种类比便尤为明显。这些工作量子比特之间的相互作用，使激发态能够在其间快速传输。在量子太阳能工程中，所述模型为新型太阳能电池材料的设计提供最佳参数，以实现同样高效的能量传递性能。植物的内部效率接近 100%——这意味着几乎所有吸收的光子都得到了利用。然而，由于植物仅利用光谱中的一小部分，其总体效率只有约 1%——也就是说，大多数可用光子并未被吸收。若能兼顾两者之长，即吸收更大范围的光谱，同时通过快速激子扩散实现高内部效率，便有望研发出坚固耐用、可规模化且成本低廉的有机太阳能电池，使总体效率超过 20%。Riede 等人，2021年估计，20% 是有机太阳能电池实现大规模应用的门槛。研究人员用于模拟迪克增强的激子扩散的一个典型哈密顿量（Lloyd 和 Mohseni，2010；Abasto等，2012年）的讨论见补充说明 S3。

3.2. 量子电池

能量与信息的等价性促使研究人员思考，二能级量子系统，即量子比特，能否针对能量的存储与提取而非信息的存储与提取进行优化。在这种情况下，设计要求会有所变化：无需单独寻址各个量子比特；但每个量子比特所储存的能量应当较高，且量子比特总数应当较多。

在一种拟议的量子电池设计中，能量储存在染料分子（Lumogen-F Orange）的激发态中，这些分子被包裹在薄膜聚合物基质中（图 1h；Quach 等人，2022年）。一种此类实验配置的数据表明，成功使用了 1.6×10^{11} 个分子作为工作量子比特，每个量子比特的能量跃迁为 0.108 eV（使电池原型的总容量达到 2.768×10^{-9} J）。通过相干激光激发工作量子比特即可进行充电，不过该研究的作者指出，未来也可能使用非相干阳光。另

一种方案由 Cruz 等人，2021年提出，该方案使用一种称为金属羧酸盐的分子作为工作量子比特。这些作者报告称，每摩尔 $Cu_2(HCOO)_4(HCOOH)_2(C_4H_{10}N_2)$ 分子可储存 0.85 mJ 的能量。上述数值仍远低于常见电池的能量密度（常见电池的能量密度在数百 Wh/kg 范围内，而 Cruz 等人的数值约为 1 μWh/kg，Quach 等人的数值约为 4 Wh/kg）。不过，这些早期实验配置已展现出预期量子电池的一些关键优势。Quach 等人的实验报告了显著的功率密度——即充电和放电速率——例如 67 kW/kg。这一数值已远超现有锂离子电池的功率密度，后者仍低于 900 W/kg（见补充说明 S1 ）。即使是最先进的超级电容器，其功率密度也不超过 10 kW/kg。

尽管对于这类早期实验报告仍需谨慎看待，但它们已展现出量子电池设计的一项关键原理：当能量通过叠加态传入和传出工作量子比特时，这一过程可以非常迅速。具体而言，Dicke 增强（超辐射及其逆向机制——超吸收）所带来的量子加速有利于动力学过程。这意味着，具体配置不同，充电和放电时间可分别按 $\sqrt{N}$、N 或 N^2，的倍数缩放，其中 N 是参与中间叠加态的工作量子比特数量（Higgins 等，2014；Campaioli 等人，2018年；Ferraro 等人，2018年；Gumberidze 等人，2019年）。换言之，电池越大（以及其中能够形成的相干态越大），充电和放电就越快。因此，量子电池设计者致力于优化此类配置，以实现高功率密度和高能量密度。采用跃迁能量更高、分子量更小的量子系统，有望实现高于迄今展示水平的能量密度。

与量子太阳能工程一样，系统设计以基于哈密顿量的模型为依据，这些模型描述此类系统中的主要组件及其耦合关系（见补充说明 S4）。随后，通过在设计空间内评估预测的系统性能，可以确定所用材料的最佳组成和结构。因此，充电速率、能量保持和放电速率等关键指标均可得到优化。

经过充分调校后，此类电池的充电和放电速率可以几乎瞬时实现（Alicki 与 Fannes，2013年）。由此产生的技术有望克服现有电池技术的一项主要局限：其充电和放电受到严重的速率限制。这一约束迄今阻碍了电池在车辆和飞机等大众市场应用，以及高端激光器和脉冲磁场等专业应用中的部署。

3.3. 量子核

到目前为止，我们一直将原子尺度上与分子和原子等相关的二能级系统——即作为工作量子比特的量子系统——视为研究对象。原子核同样能够吸收和发射离散的能量量子，因此也满足量子比特或工作量子比特的基本条件（Boyles 2014）。这促使一些研究人员考虑将原子核用作量子电池的工作量子比特——这类电池随后可称为核量子电池（Liao 2014）。

核量子电池的潜在优势在于能量密度大幅提高，远超目前任何储能技术，甚至高出数个数量级。这是因为核激发态通常能够容纳的能量超过原子和分子激发态的 100,000 倍（补充说明 S1）。然而，在原子尺度上能够轻易产生叠加态和替代性能量传递路径的相互作用，在核尺度上要弱得多。尽管如此，研究人员已通过实验成功制备出核叠加态，并提高和降低了

此类核激发态的衰变速率（Chumakov 等人，2018；Heeg 等人，2021）——这是迈向原子核相干控制的重要步骤。例如，Chumakov 等人，2018通过实验展示了将 14 千电子伏 $|^{57}Fe^*>$ → $|^{57}Fe>$ 核退激发速率提高 15 倍。与光合作用和分子量子电池类似，在核尺度上，通常缓慢的动力学也可通过 Dicke 增强而加速（Terhune 和 Baldwin，1965；Hannon &Trammell 1999）。激发和退激发加速，对应于量子电池中的充电和放电过程；而延迟退激发则对应于保留储存能量。

其他研究表明，通过外部激励（例如施加外部场），可以增强振子与原子核之间以及原子核与原子核之间的相关相互作用（Haber 等，2017；Bocklage 等人，2021）。图 1j 展示了一种实验配置：核激发能通过外部激光激励，在两个集体核激发态之间传递（也称为核激子——请注意，这一命名与太阳能工程中使用的分子激子相似）。此外，改变此类外部激励的参数，还可使系统进入或脱离共振，从而进一步加快或减缓所需的动力学过程。这些考量和早期成果推动了量子核工程这一新兴领域的发展。

考虑到量子核工程可能对核反应产生的影响，其潜在应用范围将更加广阔。一些研究人员提出，用于原子核的相干控制的原理不仅适用于核态跃迁，也适用于核反应（Schwinger，1990；[1] Preparata，1995；Hagelstein 和 Chaudhary，2015）。按照这一观点，如果核反应发生在一个能够形成多个原子核临时叠加态的环境中——例如由外部激励所致——那么耦合系统内由此产生的能量再分配就会影响核反应参数。举例来说，如果某一核反应释放的能量能够被同一耦合系统中的对应反应轻易吸收——换言之，如果这两个互补反应处于共振状态——那么，与孤立情形相比，这些反应的发生速率预计会有所提高（Hagelstein 等人，2009；Hagelstein 和 Chaudhary，2015）。

具体而言，Schwinger（1994）提出，将一对氘核 D_2 视为处于激发态的四核子量子系统，即等同于处于状态 $|1>$ 的工作量子比特。随后跃迁至更紧凑、能量更低的四核子构型（例如稳定的 ^4He 原子核），便对应一个退激发步骤——类似于诱导量子比特从 $|1>$ 翻转至 $|0>$（图 1a）。研究人员提出，可以通过激发氘核对与相匹配的重核之间的相互作用来加速这一动态过程；这些重核具有与 23.8 兆电子伏 $|D_2>$ → $|^4He>$ 退激发过程共振的激发态（图 1k）。这种机制类似于加速激子扩散（图 1f），也类似于加速量子电池工作量子比特的充电和放电（图 1h）。这将使核反应的速率超越通常预期的水平。研究人员设想，利用此类技术加速核废料的衰变，并使理想的聚变反应更易实现（Dumé，2021；Metzler 等人，2022）。

如上文所示的示例，所提出的系统和过程——从核量子电池到加速核反应——均可通过基于哈密顿量的模型进行建模，以捕捉相关量子系统及其相互作用的特征（见补充说明 S5 和 S6）。随后，这些模型的时间演化可确定主要的能量传递路径及其速率。这类动力学对几何等环境参数的依赖

[1] 从这个角度来看，核反应是核态跃迁的一个子集。广义而言，核态跃迁是指核子的重新构型，这一过程受到势垒阻碍，而核子有一定概率克服势垒（类似于原子态跃迁是电子的重新构型）。因此，原子核从激发态弛豫到较低能量态，对应于原子核内部核子的重新构型；而聚变反应等核反应，则对应于不同原子核之间核子的重新构型。

以及对刺激特性的依赖，有助于指导材料设计，并为相应技术的理性工程设计带来希望。

表 *1*：所介绍的量子工程领域概览

领域	**工作量子比特的选择** **量子比特**	**迄今为止的实验结果**	**前景**
量子太阳能	分子和分子激子（电子-空穴对）	分子激子扩散长度 >300 纳米；退激发加速（通过超转移）达>100倍已得到验证。参见 Sneyd 等，2021年；Mattioni 等，2021。	低成本且稳健有机太阳能电池与效率；利用更宽范围的光的范围谱
量子电池	分子和原子	激发和分子退激发的加速（通过超吸收和超辐射）已证明可提升 >1000 倍。充电速率高达 854 kW/kg 据报道（充电容量为约 4 Wh/kg）。参见 Quach 等人 2021年；Cruz 等人，2021年。	电池与准瞬时充电和放电；无损通过“暗态”储存
量子核	原子核与核激子（集体核激发）	有意诱导的核退激 ^{57}Fe 中核态的；加速核退激（通过超辐射）提升了 15 倍；核态的相位对齐通过外部手段在多个原子核之间射频刺激已得到验证。参见 Haber 等，2017；Chumakov 等人，2018；Bocklage 等等，2021年 .	核量子高性能储能容量；核核废料处理，通过加速核衰变、紧凑型聚变技术，通过加速核反应

4. 结论

我们阐述了量子科学和量子工程原理在能源技术中的应用，涵盖太阳能技术、电池技术和核技术等领域。表 1 概述了相关内容。在这些领域中，本文介绍的基于量子的方法迄今大多被视为小众领域。然而，这些方法所依托的知识库彼此之间往往比它们与各自应用领域的传统知识库更为相似。

我们已经看到，所介绍的案例有一个共同点，即通过适当的哈密顿量对不同类型的量子系统进行建模，然后研究时间演化以及能量再分配如何随相应物理构型的关键参数而变化。进而，这

为新系统的设计——或对现有系统进行有意改造——提供依据，并使相关参数得以优化。

人们提出了不同名称来描述这类建模与工程过程：“能量转移编辑”（Qin 等，2019）、“相干性工程”（Huynh 等，2012）和“跃迁速率工程”（Higgins 等，2014）只是其中几个例子。更宽泛的术语包括“调控化学反应”（Tan 等，2017）和“调控核反应”（Metzler 等人，2022）。

我们认为，量子工程在不同能源应用领域所共享的知识基础，足以使其被视为量子科学的一个独立分支，可称为“量子能源科学”，与“量子信息科学”相对应。

对传统能源技术的研究以及对量子信息科学的研究都受到公众的高度关注，并获得了大量投资。认识到量子能源科学是一个在这两个重要领域交汇处形成的独立领域，有助于提升人们对其潜在社会影响的认识，并以人力和资金资源的形式获得更多支持。

致谢：

谨此致谢人类世研究所提供的支持。

参考文献：

Alicki, R., & Fannes, M. (2013). 量子电池集合可提取功的纠缠提升。《物理评论*E*》,*87*(4), 042123. Andrews, D. L. (2009). 共振能量转移：理论基础与不断发展的应用. SPIE出版社：华盛顿。Andrews, D. L., Bradshaw, D. S., Forbes, K. A., & Salam, A. (2020). 现代光学与光子学中的量子电动力学。*J. Opt. Soc. Am*. Awschalom, D., Christen, H., Clerk, A., Denes, P., Flatté, M., Freedman, D., Galli, G., Jesse, S., Kasevich, M., & Monroe, C. (2017). 基础能源科学圆桌会议：下一代量子系统基础研究的机遇. 美国能源部科学办公室（SC）（美国）。Bernien, H., Schwartz, S., Keesling, A., Levine, H., Omran, A., Pichler, H., Choi, S., Zibrov, A. S., E ndres, M., Greiner, M., Vuletić, V., & Lukin, M. D. (2017). 探测51原子量子模拟器中的多体动力学。《自然》,*551*(7682), 579–584. Biello, D. (2007). 说到光合作用，植物会进行量子计算。《科学美国人》四月刊,*13*. Binder, F. C., Vinjanampathy, S., Modi, K., & Goold, J. (2015). Quantacell：量子电池的高效充电。《新物理学杂志》, *17*(7), 075015. Bocklage, L., Gollwitzer, J., Strohm, C., Adolff, C. F., Schlage, K., Sergeev, I., Leupold, O., Wille, H.-C., Meier, G., & Röhlsberger, R. (2021). 通过瞬态磁振子相干控制集体核量子态。《科学进展》, *7*(5), eabc3991. Boyles, A. (2014, March 20). 伽马射线整形或将推动“核”量子计算机的发展。《物理世界》。

t

t

ps://p

hysicsworld.com/a/gamma-ray-shaping-could-lead-to-nuclear-quantum-computers/

Brédas, J.-L., Sargent, E. H., & Scholes, G. D. (2017). 受光合系统中相干效应启发的光伏概念。《自然·材料》, *16*(1), 35–44. Campaioli, F., Pollock, F. A., & Vinjanampathy, S. (2018). 量子电池。载于《量子领域中的热力学》(pp. 207–225). 施普林格。Cao, J., Cogdell, R. J., Coker, D. F., Duan, H.-G., Hauer, J., Kleinekathöfer, U., Jansen, T. L. C., Mančal, T., Miller, R. J. D., Ogilvie, J. P., Prokhorenko, V. I., Renger, T., Tan, H.-S., Tempelaar, R., Thorwart, M., Thyrhaug, E., Westenhoff, S., & Zigmantas, D. (2020). 重访量子生物学。《科学进展》,*6*(14), eaaz4888. Chiechi, R. C., Havenith, R. W., Hummelen, J. C., Koster, L. J. A., & Loi, M. A. (2013). 现代塑料太阳能电池：材料、机制与建模。《今日材料》, *16*(7–8), 281–289. Chumakov, A. I., Baron, A. Q. R., Sergueev, I., Strohm, C., Leupold, O., Shvyd’ko, Y., Smirnov, G. V., Rüffer, R., Inubushi, Y., Yabashi, M., Tono, K., Kudo, T., & Ishikawa, T. (2018). 一个超辐射的

n

由自由电子激光激发的原子核系综。自然物理，*14*(3), 261–264.

Cnops, K., Rand, B. P., Cheyns, D., Verreet, B., Empl, M. A., & Heremans, P. (2014). 利用长程激子能量转移实现效率为 8.4% 的无富勒烯有机太阳能电池。《自然·通讯》，5(1), 3406. Cruz, C., Anka, M. F., Reis, M. S., Bachelard, R., & Santos, A. C. (2021). 基于室温量子 discord 的量子电池。arXiv:2104.*00083 [*Quant-Ph*]*. http://arxiv.org/abs/2104.00083 Dicke, R. H. (1954). 超辐射理论。《物理评论》，93(1), 99–110. Dumé, I. (2021, March 4). 原子核进军量子领域。《物理世界》。https://physicsworld.com/atomic-nuclei-go-for-a-quantum-swing/ Dursun, I., & Guzelturk, B. (2021). 激子扩散距离超过 1 μm：激子，快跑！《光：科学与应用》，10(1), 39. Eisberg, R., & Resnick, R. (1985). 原子、分子、固体、原子核和粒子的量子物理学。Ferraro, D., Campisi, M., Andolina, G. M., Pellegrini, V., & Polini, M. (2018). 固态量子电池的高功率集体充电。《物理评论快报》，120(11), 117702. Gumberidze, M., Kolář, M., & Filip, R. (2019). 测量诱导的相干量子电池合成。Scientific Reports, 9(1), 1–12. Haber, J., Kong, X., Strohm, C., Willing, S., Gollwitzer, J., Bocklage, L., Rüffer, R., Pálffy, A., & Röhlsberger, R. (2017). 两个原子核系综间的X射线辐射拉比振荡。《自然·光子学》，11(11), 720–725. Hagelstein, P. L., & Chaudhary, I. U. (2015). 凝聚态核科学异常现象的声子模型。《当代科学》，507–513. Hagelstein, P. L., Chaudhary, I. U., McKubre, M. C. H., & Tanzella, F. (2009). 金属氘化物过剩热理论的研究进展。《美国物理联合会会议论文集》，1154(1), 257–271. Hannon, J. P., & Trammell, G. T. (1999). 相干γ射线光学。《超精细相互作用》，123(1), 127–274. Häse, F., Roch, L. M., Friederich, P., & Aspuru-Guzik, A. (2020). 利用机器学习设计和理解光捕获器件。《自然·通讯》，11, 4587. Heeg, K. P., Kaldun, A., Strohm, C., Ott, C., Subramanian, R., Lentrodt, D., Haber, J., Wille, H.-C., Goerttler, S., Rüffer, R., Keitel, C. H., Röhlsberger, R., Pfeifer, T., & Evers, J. (2021). 原子核激子的相干X射线–光学控制。《自然》，590(7846), 401–404. Higgins, K. D. B., Benjamin, S. C., Stace, T. M., Milburn, G. J., Lovett, B. W., & Gauger, E. M. (2014). 通过量子工程实现光的超吸收。《自然·通讯》，5(1), 4705. Hübler, A. W., & Osuagwu, O. (2010). 数字量子电池：纳米真空管阵列中的能量与信息存储。Complexity, 15(5), 48–55. Huynh, P.-A., Portier, F., le Sueur, H., Faini, G., Gennser, U., Mailly, D., Pierre, F., Wegscheider, W., & Roche, P. (2012). 整数型量子霍尔区间中的量子相干工程。《物理评论快报》，108(25), 256802. Jones, G., & Bradshaw, D. (2019). 共振能量转移：从基础理论到近期应用。《物理学前沿》，7. Liao, W.-T. (2014). 原子核与X射线的相干控制。施普林格科学与商业媒体。

Lloyd, S., & Mohseni, M. (2010年). 离域量子态的对称性增强的超转移. 《新物理学杂志》, 12(7), 075020. Long, G., Wu, B., Solanki, A., Yang, X., Kan, B., Liu, X., Wu, D., Xu, Z., Wu, W.-R., & Jeng, U.-S. (2016年). 小分子有机太阳能电池中形态、激发态动力学与器件性能之间关联的新见解. 《先进能源材料》, 6(22), 1600961. Majer, J., Chow, J. M., Gambetta, J. M., Koch, J., Johnson, B. R., Schreier, J. A., Frunzio, L., Schuster, D. I., Houck, A. A., Wallraff, A., Blais, A., Devoret, M. H., Girvin, S. M., & Schoelkopf, R. J. (2007). 通过腔总线耦合超导量子比特. 《自然》, 449(7161), 443–447. Mattioni, A., Caycedo-Soler, F., Huelga, S. F., & Plenio, M. B. (2021年). 室温长程能量传递的设计原则. Physical Review X, 11(4), 041003. Menke, S. M., & Holmes, R. J. (2014). 有机光伏电池中的激子扩散. 能源与环境科学, 7(2), 499–512. Metzler, F., Hunt, C., & Galvanetto, N. (2022年). 固态中已知的提高核聚变速率的机制（arXiv:2208.07245）. arXiv. https://doi.org/10.48550/arXiv.2208.07245 Mohseni, M., Rebentrost, P., Lloyd, S., & Aspuru-Guzik, A. (2008). 光合作用能量传递中的环境辅助量子行走. 化学物理学杂志, 129(17), 174106. Plenio, M. B., & Huelga, S. F. (2008). 退相干辅助输运：量子网络与生物分子. 《新物理学杂志》, 10(11), 113019. Preparata, G. (1995). 物质中的量子电动力学相干性. 世界科学出版社. Pritchard, J., & Till, S. (2014). 英国量子技术概况 2014 （国防科学技术实验室, DSTL/PUB75620）. Quach, J. Q., McGhee, K. E., Ganzer, L., Rouse, D. M., Lovett, B. W., Gauger, E. M., Keeling, J., Cerullo, G., Lidzey, D. G., & Virgili, T. (2022年). 有机微腔中的超吸收：迈向量子电池. 《科学进展》, 8(2), eabk3160. Rand, B. P., & Richter, H. (2014). 有机太阳能电池：基础原理、器件与规模化. CRC出版社. Rapp, H. P., & Schneider, S. (2021年). 量子2.{*0* [}德意志银行研究报告{]}带来的经济技术革命. Riede, M., Spoltore, D., & Leo, K. (2021年). 有机太阳能电池——通往商业成功之路. 《先进能源材料》, 11(1), 2002653. Ruseckas, A., & Samuel, I. D. (2021年). 构建激子高速通道. 焦耳, 5(11), 2762–2764. Sajjad, M. T., Ruseckas, A., & Samuel, I. D. (2020年). 延长激子扩散长度为有机光伏带来新机遇. Matter, 3(2), 341–354. Schwinger, J. (1990). 原子晶格中的核能. 物理学杂志D：原子、分子与团簇, 15(3), 221–225. Schwinger, J. (1994). 冷聚变理论——我的简史. 聚变技术, 26(4), XIII. Sillanpää, M. A., Park, J. I., & Simmonds, R. W. (2007). 通过谐振腔在两个相位量子比特之间存储和传输相干量子态. 《自然》, 449(7161), 438–442. Sneyd, A. J., Fukui, T., Palecek, D., Prodhan, S., Wagner, I., Zhang, Y., Sung, J., Collins, S. M., Slater, T. J. A., Andaji-Garmaroudi, Z., MacFarlane, L. R., Garcia-Hernandez, J. D., Wang, L., Whittell, G. R.,

Hodgkiss, J. M., Chen, K., Beljonne, D., Manners, I., Friend, R. H., & Rao, A. (n.d.). 瞬态激子离域介导的有机半导体高效能量传输. 《科学进展》, 7(32), eabh4232. Szilard, L. (1929). 关于智能生物干预下热力学系统中的熵减. 物理学杂志, *53*(11), 840–856. Tan, S., Xia, T., Shi, Y., Pfaendtner, J., Zhao, S., & He, Y. (2017). 外部电场增强甲苯氧化：一项反应分子动力学研究. Scientific Reports, 7(1), 1710

Terhune, J. H., & Baldwin, G. C.（1965）。固体中的核超辐射。《物理评论快报》，*14*(15), 589–591。Vewinger, F., Heinz, M., Garcia Fernandez, R., Vitanov, N. V., & Bergmann, K.（2003）。量子态相干叠加的产生与测量。《物理评论快报》，*91*(21)，213001。Wu, Y., Yang, L.-P., Gong, M., Zheng, Y., Deng, H., Yan, Z., Zhao, Y., Huang, K., Castellano, A. D., Munro, W. J., Nemoto, K., Zheng, D.-N., Sun, C. P., Liu, Y., Zhu, X., & Lu, L.（2018）。一种用于量子电路的高效紧凑型开关。*Npj* 量子信息，*4*(1)，1–8。Qin, X., Xu, J., Wu, Y., & Liu, X.（2019）。镧系元素激活的上转换纳米晶中的能量传递调控：新兴应用的工具箱。ACS Central Science，5(1)，29–42。

补充说明 S1

太阳能电池中的材料用量

截至2022年，晶体硅（c-Si）技术占全球太阳能电池生产和部署量的90%以上。除硅之外，银和铝等其他材料也用于电极接触和导电栅格。根据美国国家可再生能源实验室发布的《光伏（PV）组件技术报告》（Smith 等人，2021年），预计主流晶体硅技术将采用所谓的M6组件尺寸，厚度为160 μm。利用硅密度（2328 kg/m³），我们可以估算单位面积材料用量：

单位面积材料用量（晶体硅技术）$= 160 \times 10^{-6} m \times \frac{2328 \times 10^{3}\, g}{m^{3}} = 372.48\, g/m^{2}$

有机半导体技术已实现每平方米材料用量为 1 g²（Riede 等人，2021年），即使采用保守估算，这一数值也提高了 200 倍以上。

另一个用于估算材料用量的相关单位，是峰值性能下每瓦功率所需的克数（g/Wp）；就能源利用而言，这一单位更具参考价值。晶体硅技术的进步已将发电效率提升至约 3 g/Wp（Philipps & Warmuth 2022年）；而商业有机太阳能电池目前的能量效率为 5% 至 10%，其每克材料的能量输出远高于硅（Si）。根据德国公司 Heliatek 公布的数据，其产品 HeliaSol 436-2000 的面积为（0.436 x 2 m²），可将 50 至 55 W 的太阳能转化为电力（Le Séguillon，2019年）。

单位功率输出材料用量（有机半导体技术）$= \frac{1\, g}{m^{2}} \times \frac{0.872\, m^{2}}{50\, W} = 0.017\, g/Wp$

在实践中，评估不同太阳能电池的性能时，需要考虑许多指标，包括成本、衰减、使用寿命及其他因素。然而，单位面积材料用量和单位功率输出材料用量是与经济使用相关的关键技术性能指标——定义见 Magee 等人，2016年——因此值得特别关注。

电池中的功率密度

研究表明，专用锂离子电池的功率密度最高可达 900 W/kg（Dechent 等人，2021年）。对于功率密度更高的应用，通常使用超级电容器。然而，超级电容器的能量密度非常低（通常低于 10 Wh/kg）。量子电池有望兼具高能量密度和高功率密度。Quach 等人，2022年所述的首个量子电池原型，功率密度约为 67 kW/kg，能量密度约为 4 Wh/kg。示例换算如下：

能量密度 $= E_{max}\,[eV] \times 4.45e\text{-}23 / (A_{MM} \times 1.661e\text{-}27) = 4.07\ Wh/kg$

功率密度 $= P_{max}\,[eV/ps] \times 1.602e\text{-}7 /$ 约质量 $[kg] / 1000 = 67.09\ kW/kg$

与最大功率密度约为 900 W/kg 的电化学电池相比，上述报告的数值提升了 74 倍。

核电池中的能量密度

在原子尺度储存能量时，电离能构成了一个硬性上限；所有非气态元素的电离能都低于 15 eV。换言之，如果在原子尺度上向固体或液体系统传递的能量超过每个原子 15 eV，那么接收结构预计会立即瓦解。实际上，不同原子尺度储能技术的能量密度上限往往要低得多，例如氢燃料每个分子的上限为 1.2 eV（见表 S1）。

相比之下，核激发态能够存储高出几个数量级的能量。以 $^{180}_{m}$Ta 核同质异能态为例，它在自然界中以亚稳激发态存在，能量约高于核基态 75 keV（使用寿命： ~10^{15} 年）。这相当于约 11 MWh/kg 的能量密度。将这一能量密度与氢燃料的理论极限 33 kWh/kg 相比较。其他核同位素也具有兆电子伏特范围内的亚稳激发态，其能量密度将比 ^{180m}Ta 高出几个数量级（Chiara 等人，2018；Rzadkiewicz 等人，2019）。

若要将原子核用作储能库，就需要设计放电机制，理想情况下还要设计充电机制。尽管人们已成功展示了亚稳 ^{180m}Ta 同位素以及其他同质异能态的诱导退激，但迄今采用的过程在能量利用方面效率低下，例如激发至接近 1 MeV 的不稳定激发态（Belic 等人，2002）。本文第 3.3 节所述文献介绍了其他（相干）机制，有望触发核退激以及定向激发。

表 *S1.* 不同原子尺度和核尺度能量存储机制的物理能量密度比较。

	能量密度（千瓦时/千克）	**能量密度（电子伏特/原子）**
氢燃料电池（理论极限）	33	1.2411
柴油（理论极限）	12.64	4.9386
锂离子（理论极限）	0.56	N/A
^{180m}Ta 同质异能态	11104.45	75000

Co表 S1 两列之间的换算基于以下关系：

$$\text{能量密度 [电子伏特/原子]} = \text{能量密度 [千瓦时/千克]} \times \frac{1000\ W\text{小时}}{1kW\text{小时}} \times \frac{3600\ J}{1\ W\quad\text{小时}} \times \frac{6。242E18\ eV}{1\ J} \times \frac{molar\ mass\ [kg]\ 。}{6\,022E23\ atoms}$$

对于柴油，采用了由 86% C 和 14% H 组成的成分作为摩尔质量。锂离子电池技术未在电子伏特/原子层级进行计算，因为它们依赖于电芯层级的电化学反应，而这些反应除涉及锂离子物种外，还涉及电解质。

补充说明 S2

能态的量子化特性是量子系统的一大标志。换言之，量子系统只能吸收和释放特定离散值的能量，这些值通常是系统本身所特有的。虽然大多数量子系统具有多个能级，但在仅关注特定感兴趣能级时，模型通常也能得出令人满意的结果。最简化的量子系统模型是二能级系统（TLS），由一个激发态和一个基态组成。

该装置产生一种可能的跃迁：当初态为激发态时，跃迁表现为退激发；当初态为基态时，则表现为激发。若退激发并非由外部诱导，则称为“自发”退激发。自发发射遵循指数概率分布（Loudon 2000），其平均值表示平均衰减速率，也称为半衰期。

当激发态离域于多个量子系统中，且这些系统通过共享振荡器（场）与共振或近共振接收系统耦合时，会产生不同的跃迁速率。在前一种情况下，集体激发态是参与系统的激发态叠加而成的。此时，激发和退激发动力学会受到所谓的 Dicke 增强因子（Dicke 1954）的影响。在后一种情况下，占据概率可在耦合系统之间来回做正弦振荡（拉比振荡）。

上述对激发和退激发动力学所作的修改，均自然源自对所谓 Dicke 模型的分析。虽然存在不同变体的 Dicke 模型，但它们遵循相同的结构，包含描述一个或多个二能级系统中的能量、一个或多个振荡器模态中的能量，以及二能级系统与振荡器模态之间相互作用的项：

$$H = \sum_j H_{tls} + H_{osc} + \sum_j H_{interaction}$$

补充表 S2 概述了不同的 Dicke模型变体。

表 *S2*：单个二能级系统（*TLS*）的模型

Name	**TLS 数量**	**反旋转项**	**哈密顿量**
Rabi	N=1	Y	$H = \overbrace{\hbar\omega_0\sigma_z}^{tls} + \overbrace{\hbar\omega a^\dagger a}^{osc} + \overbrace{\hbar g\left(a^\dagger + a\right)\sigma_x}^{interaction}$
Jaynes-Cummings	N=1	N	$H = \hbar\omega_0\sigma_z + \hbar\omega a^\dagger a + \hbar g(\sigma_+ a + \sigma_- a^\dagger)$

表 *S3*：多个二能级系统（*TLS*）的模型

Name	**TLS 数量**	**反旋转项**	**哈密顿量**
Dicke	N>1	Y	$H = \hbar\omega_0 \sum_{j=1}^{N} \sigma_z^j + \hbar\omega a^\dagger a + \hbar g \sum_j \sigma_x^j (a + a^\dagger)$
Tavis-Cummings	N>1	N	$H = \hbar\omega_0 \sum_{j=1}^{N} \sigma_z^j + \hbar\omega a^\dagger a + \hbar g \sum_j (\sigma_+^j a + \sigma_-^j a^\dagger)$

补充说明 S3

在 Lloyd 和 Mohseni 2010年中，公式（1）给出了一个 Dicke模型：

$$H = \hbar\omega a^\dagger a - \hbar\frac{\omega}{2}\sum_{j=1}^{N}\sigma_z^j + \hbar\gamma\sum_{j=1}^{N}\sigma_x^j(a + a^\dagger)$$

随后对该模型进行具体化，以估算集体激发在N个受体位点（A 位点）与M个受体位点（B 位点）之间的激发转移率：

$$H = -\hbar\frac{\omega_A}{2}\sum_{j=1}^{N}\sigma_z^j - \hbar\frac{\omega_B}{2}\sum_{k=1}^{M}\sigma_z^k + \hbar\gamma\sum_{j=1,k=1}^{N,M}(\sigma_+^j\sigma_-^k + \sigma_-^j\sigma_+^k)$$

以物理系统为例，考虑一个由发色团分子构成的网络，例如光合作用中的情形。随后，激发转移率会随着参与分子数量的增加而提高。正如作者所述：

> “在一定对称性条件下，紧密排列的 N 个分子组成的群体能够集体接受或提供激发，其速率几乎是每个单独分子的 N 倍。”

换言之，跃迁速率不仅由耦合g（此处表示为 γ）决定，也取决于参与系统的数量N。作者将这种激发转移率的增强效应称为超转移。

在 Abasto等，2012年 中，给出了一个等效的哈密顿量，所用符号略有不同：

$$H = -\frac{\epsilon_A}{2}\sum_{i=1}^{n_A}\sigma_z^i - \frac{\epsilon_B}{2}\sum_{j=1}^{n_B}\sigma_z^j + \gamma\sum_{i=1,j=1}^{n_A,n_B}\sigma_+^i\sigma_-^j + \sigma_-^i\sigma_+^j$$

这里，作者也以类似于上述内容的方式进行了阐述：

> “在一组 n 个分子的对称化相互作用下，激发变得高度离域，从而产生与整个分子组相关的较大（有效）偶极矩。由此增强的振子强度可促成超转移，前提是存在具有相近有效偶极矩、能够充当受体的类似分子组装体。

在这种条件下，应根据这些有效的大偶极–偶极相互作用来计算激子动力学速率，以描述此类分子聚集体之间的相干给体与受体过程；即使在远场，其速率也可达到单分子间转移速率的 n^2 倍。”

此外，非辐射激发转移中的叠加阶段不仅可用于传递能量，还可用于转换能量。具体而言，如果入射光子的能量高于吸收材料的带隙——例如在紫外区域——那么多余的能量就会损失。然而，如果将较大的激子能量传递到两个而非一个用于电荷生成的位点，那么就能更充分地利用可用的光子能量。这种基于量子的能量转换技术称为激子裂变（Rao 与 Friend，2017年；Einzinger 等，2019年）。

补充说明 S4

在 Quach 等人，2022年的研究中，式（3）给出了一个 Dicke 模型：

$$H = \frac{\hbar(\omega-\omega_L)}{2}\sum_{j=1}^{N}\sigma_j^z + \hbar(\omega-\omega_L)a^\dagger a + g\sum_{j=1}^{N}(a^\dagger\sigma_j^- + a\sigma_j^+) + i\hbar\eta(t)(a^\dagger - a)$$

其中，Δ表示失谐，ω表示激光器的高斯脉冲包络：$\eta(t)$

$$\eta(t) = \frac{\eta_0}{\sigma\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{1}{2}(\frac{t-t_0}{\sigma})^2}$$

这里采用有机 Lumogen-F Orange 分子作为二能级系统。N 表示耦合在一起的此类系统的数量。当 = 0 时，激光器处于共振状态。$\Delta\omega - \omega_L$

作者在补充材料中指出，此类系统中的激发时间和退激发时间可以随 的变化而增长。

$$g\sqrt{N}$$

补充说明 S5

在 Haber 等，2017 中，公式（1）给出了一个 Dicke模型：

$$\begin{aligned} H &= \Delta_1 a_1^\dagger a_1 + \Delta_2 a_2^\dagger a_2 + J(a_1^\dagger a_2 + a_2^\dagger a_1) \\ &- \Delta(|E_1\rangle\langle E_1| + |E_2\rangle\langle E_2|) \\ &+ g_1\sqrt{N_1}(a_1|E_1\rangle\langle G| + a_1^\dagger|G\rangle\langle E_1|) \\ &+ g_2\sqrt{N_2}(a_2|E_2\rangle\langle G| + a_2^\dagger|G\rangle\langle E_2|) \end{aligned}$$

其中，*G*和*E* 分别表示核基态和激发态。

在所建模的系统中，存在两个腔（由算符 a_1 和a_2描述），每个腔都与一组 ^{57}Fe 原子核耦合（其激发态为E_1 和E_2），其中g_1 和g_2 分别表示每个腔与其对应原子核集合之间的耦合强度。请注意，实际上g_1 和g_2 随每组原子核的数量（N_1 和N_2）的平方根变化。

Δ 是 X射线与核共振能量之间的失谐。

由上可推导出一个描述由E_1和E_2表示的两个原子核系综之间相互作用的耦合项。Haber 等，2017 将其表示为：

$$g_{12} = -\frac{g_1 g_2 N}{2}\left(\frac{\Delta_+}{\kappa_+^2 + \Delta_+^2)} - \frac{\kappa_-}{\Delta_-^2 + \Delta_-^2}\right)$$

其中表示 X 射线驱动强度。

补充说明 S6

在 Ha gelstein & Chaudhary 2015b 和 Metzler 等人，2022 中，Dicke 模型表示为式（1 ）：

$$H = \overbrace{\sum_j M_j c^2}^{nuclei} + \overbrace{\hbar\omega a^\dagger a}^{osc} + \overbrace{\sum_j (-\mu_j \cdot B)_+ + (-\mu_j \cdot B)_-}^{magn.interaction}$$

其中 M_J包含两个核态：

$$M_j = \begin{bmatrix} M_1 c^2 & 0 \\ 0 & M_2 c^2 \end{bmatrix}$$

在 Metzler 等人，2022 中，给出了供体由一组 D_2 原子核构成、受体由一组 ^{4}He 原子核构成时的激发转移率估算值。

激发转移率因此表示为（式 S17）：

$$\Gamma = \frac{\frac{[ge^{-G}\sqrt{\frac{vol_{nuc}}{vol_{mol}}}]g}{\Delta E}\sqrt{N_{D_2}}\sqrt{N_{He}}}{\hbar}$$

其中包含一个体积因子

$$\frac{vol_{nuc}}{vol_{mol}} = \frac{\frac{4}{3}\pi r_{nuc}^3}{2\pi^2 R_0 \Delta R^2} = 6.26 \times 10^{-12}$$

that 表示跃迁过程中体积的变化，而 Gamow 因子

$$e^{-G}$$

则表示库仑斥力对跃迁的阻碍。

此外，表示 Dicke 增强因子，它是参与的原子核数量的函数。$\sqrt{N_{D_2}}\sqrt{N_{He}}$

最后，$g = -\mu \cdot B$ 其中 $\mu = 3。15 \times 10^{-8}\ eV\ T^{-1}$ 是核磁子，而B是影响晶格中原子核的内部磁场。对于B 约为 3 T 的情况，可得g 约为 10^{-7} eV。

这导致估计的 $|D_2> \rightarrow |^4He>$ 跃迁增强约 30 个数量级（见 Metzler 等人，2022 中的公式 S18），相比之下，10^{-64}/s 的非相干跃迁率为：

$$\Gamma = \frac{10^{-7}eV10^{-33}10^{-6}10^{-7}eV}{24 \times 10^{6}eV} 1 \sqrt{10^{12}} \sqrt{10^{6}} \frac{1}{\hbar} = 10^{-34}s^{-1}$$

类似于量子太阳能工程中采用的激子裂变原理（见补充说明 S3），人们也提出，基于叠加态的能量转换可应用于量子核工程。例如，Hagelstein 和 Chaudhary，2015a 提出，单个高能核态跃迁（如聚变反应）可能会共振触发多个低能核态跃迁，例如多个耦合受体原子核中的激发。

参考文献补充说明：

Abasto, D. F., Mohseni, M., Lloyd, S., & Zanardi, P. (2012). 复杂量子系统中的激子扩散长度：无序和环境涨落对对称性增强的超转移的影响。英国皇家学会哲学汇刊 *A* 辑：数学、物理与工程科学,*370*(1972), 3750–3770. Belic, D., Arlandini, C., Besserer, J., Boer, J., Carroll, J., Enders, J., Hartmann, T., Kaeppeler, F., Kaiser, H., Kneissl, U., Kolbe, E., Langanke, K., Loewe, M., Maier, H., Maser, H., Mohr, P., Von Neumann-Cosel, P., Nord, A., Pitz, H., & Zilges, A. (2002). 通过低能中间态光诱导耗减^{180} Ta^{m}同核异能态：结构及天体物理学意义。《物理评论 *C*》, *65*. Chiara, C. J., Carroll, J. J., Carpenter, M. P., Greene, J. P., Hartley, D. J., Janssens, R. V. F., Lane, G. J., Marsh, J. C., Matters, D. A., Polasik, M., Rzadkiewicz, J., Seweryniak, D., Zhu, S., Bottoni, S., Hayes, A. B., & Karamian, S. A. (2018). 同核异能态耗减作为电子俘获核激发的实验证据。《自然》, *554*(7691), Article 7691. Dechent, P., Epp, A., Jost, D., Preger, Y., Attia, P. M., Li, W., & Sauer, D. U. (2021). ENPOLITE：比较锂离子电池在能量、功率、使用寿命和温度方面的表现。《*ACS* 能源快报》, *6*(6), 2351–2355. Dicke, R. H. (1954). 超辐射理论。《物理评论》, 93(1), 99–110. Einzinger, M., Wu, T., Kompalla, J. F., Smith, H. L., Perkinson, C. F., Nienhaus, L., Wieghold, S., Congreve, D. N., Kahn, A., Bawendi, M. G., & Baldo, M. A. (2019). 并四苯中单线态激子裂变对硅的敏化。《自然》, *571*(7763), Article 7763. Haber, J., Kong, X., Strohm, C., Willing, S., Gollwitzer, J., Bocklage, L., Rüffer, R., Pálffy, A., & Röhlsberger, R. (2017). 两个原子核系综之间 X 射线辐射的拉比振荡。《自然 · 光子学》, *11*(11), Article 11. Hagelstein, P. L., & Chaudhary, I. U. (2015a). 断裂实验中的异常，以及振动与原子核之间的能量交换。《力学》, *50*(5), 1189–1203. Hagelstein, P. L., & Chaudhary, I. U. (2015b). 凝聚态核科学中异常现象的声子模型。《当代科学》(00113891), 108(4), 507–513. Le Séguillon, T. (2019). Heliatek：光伏薄膜，从实验室到工厂。《巴黎管理学院杂志》,*138*(4), 30–36. Lloyd, S., & Mohseni, M. (2010). 离域量子态的对称性增强超转移。《新物理学杂志》, *12*(7), 075020. Loudon, R. (2000). 光的量子理论。牛津大学出版社。 Magee, C. L., Basnet, S., Funk, J. L., & Benson, C. L. (2016). 技术性能的定量经验趋势。《技术预测与社会变迁》, *104*, 237–246. Metzler, F., Hunt, C., & Galvanetto, N. (2022). 已知的固态核聚变速率增强机制（arXiv:2208.07245）。*arXiv*。https://doi.org/10.48550/arXiv.2208.07245 Philipps, S., & Warmuth, W. (2022). 光伏报告 弗劳恩霍夫太阳能系统研究所。弗劳恩霍夫太阳能系统研究所 ISE，德国弗赖堡。

Quach, J. Q., McGhee, K. E., Ganzer, L., Rouse, D. M., Lovett, B. W., Gauger, E. M., Keeling, J., Cerullo, G., Lidzey, D. G., & Virgili, T. (2022年). 有机微腔中的超吸收：迈向量子电池。《科学进展》, *8*(2), eabk3160. Rao, A., & Friend, R. H. (2017). 利用单线态激子裂变突破肖克利–奎伊瑟极限。《自然评论：材料》, *2*(11), 文章 11。Riede, M., Spoltore, D., & Leo, K. (2021年). 有机太阳能电池——通往商业成功之路。《先进能源材料》,*11*(1), 2002653. Rzadkiewicz, J., Polasik, M., Słabkowska, K., Syrocki, Ł., Węder, E., Carroll, J. J., & Chiara, C. J. (2019). 通过电子俘获核激发耗减 $^{242m}\mathrm{Am}$ 同核异能态的束流方案。《物理评论*C*》,*99*(4), 044309. Smith, B. L., Woodhouse, M., Horowitz, K. A. W., Silverman, T. J., Zuboy, J., & Margolis, R. M. (2021年).光伏（*PV*）组件技术：*2020*年基准成本与技术演进框架成果 (NREL/TP-7A40-78173). 美国国家可再生能源实验室（NREL），美国科罗拉多州戈尔登。