自主量子系统的热力学分析

Tiago F. F. Santos[1], * 和 Camille Latune[1]
[1] *Université Bourgogne Europe, CNRS, Laboratoire Interdisciplinaire Carnot de Bourgogne ICB UMR 6303, F-21000 Dijon, France*（日期：2026年1月6日）

传统量子热力学框架将外部控制所引发的幺正变换导致的能量交换视为功，将热浴相互作用导致的能量交换视为热。最近，有人提出了一种框架，旨在将热力学形式体系拓展至真正的量子情形，这种情形也称为自主量子系统：系统不受外部控制，只有量子系统彼此相互作用。本文将这一热力学框架应用于常见的相互作用量子系统实验情形。在传统框架只识别出热交换的情形下，近期提出的自主热力学框架指出存在基于两种机制的功交换：布居反转以及相干性的生成／消耗。文献早已指出，这些机制与功的消耗和提取有关，尤其是与功率相关，这凸显了自主框架的重要性以及传统框架的局限性。此外，自主框架还识别出一种与非热性相关的真正非幺正功交换机制。最后，在半经典极限下，自主框架将所有能量交换都识别为纯功，但会区分局域功和相互作用能。我们的结果表明，自主框架能够对量子领域中的功交换机制进行更精细的分析，并为分析现实量子器件中的热力学过程提供了一种一致的方法。

arXiv:2601.01272v1 [quant-ph] 3 Jan 2026

I. 引言

量子热力学是一门融合量子力学、热力学和量子信息理论的研究领域，旨在将经典热力学的概念拓展至量子领域。除了在理论上探究量子层面能量交换的机制——叠加、纠缠和量子涨落等现象在其中发挥着基础性作用——量子热力学还直接关系到量子技术的发展 [1–12], ，也有助于分析并改善量子技术的能耗足迹 [13–17]。

尽管过去十年取得了显著进展，量子热力学仍缺乏统一的表述。人们已提出多种理论框架，分别基于热力学资源理论、量子信息理论和开放量子系统。然而，在某些情形下，尤其是在非平衡或强耦合区间中，这些方法往往会得出相互冲突的结果或解释 [18–26]。在许多情况下，这种差异源于各框架所依据的假设存在根本差异。此外，其中一些方法是针对特定类别的问题或特定的系统配置而设计的。

在文献 [25] 中，作者提出了一种形式体系，将热力学定律扩展到自主量子系统——即不受外部作用者作用的系统。这种方法超越了其他形式体系中常用的纯热源和纯功源的传统定义，将每个子系统置于同等地位，视为兼具热与功的混合源。在这种情形下，他们提出了前后一致的热与功定义，并给出了热力学第二定律的一个表达式；这些定义和表达式对于任意耦合强度及任意数量的相互作用量子系统均成立。

在这项工作中，我们将[25] 中发展的形式主义应用于一些常见的实验情形，在这些情形下，传统框架并不适用或存在一些局限：与单个玻色模相互作用的二能级原子、由两个相互作用的量子比特组成的系统，以及与热浴相互作用的量子比特。

在半经典极限下，我们表明，该形式主义再现了量子热力学中所使用的标准定义 [18, 19] ，并且与其他近期提出的和已确立的框架 [22, 26], 一致，同时区分了局域功与能量相互作用。在非幺正区间，即量子关联发挥重要作用的情形（因此下文将其称为量子区间）中，我们表明会出现两种幺正的功交换机制：一种与布居反转有关，另一种与相干性的产生/消耗有关。最后，我们还指出了一种非幺正功交换机制，在该机制中，量子系统的维数似乎是一种决定性资源。

本文组织如下：第二节简要回顾参考文献 [25]中提出的理论框架。第三节将给出一系列具有解析解和数值解的示例，涵盖半经典区间和量子区间，以展示这一形式体系的一些关键特征及其影响。最后，第四节总结主要结论，并探讨所引入框架的潜在应用及其更广泛的意义

* t.santos0990@gmail.com

见参考文献 [25]。

II. 理论框架

在展示结果之前，我们将简要回顾参考文献 [25]中提出的理论框架。为此，考虑两个任意的量子系统， A 和 B，它们彼此相互作用，其中系统 A可能受到外部驱动。复合系统的总哈密顿量 $H(t)$ 表示为$H(t) = H_A(t) + V_{AB}(t) + H_B$，其中 $V_{AB}(t)$ 表示 A 和 B 之间的相互作用，而 $H_A(t)$ 则包含作用于系统 A的外部驱动。

假设在 $t = 0$时，系统 A 和 B 处于可分态 $\rho(0) = \rho_A(t) \otimes \rho_B^{th}$ $\rho_B^{th} = e^{-\beta_B H_B}/Z_B$，其中 是具有逆温度 β_B的热平衡态，而 $Z_B = \mathrm{Tr}\, e^{-\beta_B H_B}$ 为配分函数。

在这些假设下，参考文献 [20] 中的作者推导出了系统 A 在任意时间 $t \geq 0$的熵产生表达式

$$\begin{aligned}\sigma_A &= \Delta S_A + \beta_B \Delta U_B \\ &= I_{AB} + D[\rho_B(t)||\rho_B^{th}] \geq 0,\end{aligned} \tag{1}$$

其中， S_A 是系统 A 的冯·诺依曼熵，$S_{A(B)} = -\mathrm{Tr}[\rho_{A(B)}(t) \ln \rho_{A(B)}(t)]$， U_B是系统 B 的内能， $U_{B(A)} = \mathrm{Tr}[\rho_{B(A)}(t) H_{B(A)}(t)]$， $I_{AB} = D[\rho(t)||\rho_A(t) \otimes \rho_B(t)]$ 是 A 和 B 之间的互信息，该互信息在二者的联合演化过程中建立（$t > 0$），而 $D[\rho_1(t)||\rho_2(t)] = \mathrm{Tr}\{\rho_1(t)[\ln \rho_1(t) - \ln \rho_2(t)]\}$ 是状态 $\rho_1(t)$ 与$\rho_2(t)$之间的相对量子熵。

方程（1）始终为正，因为 I_{AB} 和$D[\rho_B(t)\|\rho_B^{\mathrm{th}}]$ 均为非负量。因此，方程（1）被视为开放量子系统热力学第二定律。我们在此强调这一结果，因为它与文献 [25], 的核心结果直接相关，我们很快就会讨论这一结果。

尽管我们接下来给出的表达式适用于形式为$H(t) = H_A(t)+V_{AB}(t)+H_B$的含时哈密顿量，但从现在起，我们假设全局哈密顿量 $H(t)$ 不随时间变化。这一假设是后续所有讨论和结果的基础，因为我们关注的是自治量子系统——即不受外部作用者作用而演化的系统。

现在，让我们回顾一下 [25] 中引入的热与功的定义。设量子系统 A 和 B 初始处于任意无关联态$\rho(0) = \rho_A(0) \otimes \rho_B(0)$，其中每个系统都可以同时作为热和功的来源。整体系统的哈密顿量为 $H = H_A + V_{AB} + H_B$，其中 V_{AB} 表示 A 和 B 之间的相互作用。为了将系统 A 和 B 之间的能量交换分解为热与功的贡献，作者引入了这一量 [25, 28, 29]

$$U_j^{th}(t) = \mathrm{Tr}[\rho_j^{th}(t) H_j], \quad j = A, B \tag{2}$$

这称为系统 j的热能，其中 $\rho_j^{th}(t) = e^{-\beta_j(t) H_j}/Z_j$ 表示系统 j 的热态，其构造使其具有与实际状态 $\rho_j(t)$ 相同的冯·诺依曼熵，即，

$$S[\rho_j^{th}(t)] = S[\rho_j(t)]. \tag{3}$$

$\beta_j(t)$ 是由式（3）定义的有效逆温度。注意，式（3）始终有唯一解，因此热态 $\rho_j^{th}(t)$也由此唯一确定（简并基态的系统除外，见 [30]）。将热定义为

$$Q_j = -\Delta U^{th} j(t), \tag{4}$$

并使用式（1）， [25] 中的作者得出了他们的核心结果：

$$\begin{aligned}\sigma_j &= \Delta S_j - \beta_{i \neq j}(0) Q_{i \neq j} \\ &= I_{AB}(t) + D[\rho_j^{th}(t)||\rho_j^{th}(0)] \geq 0\end{aligned} \tag{5}$$

值得注意的是，式（1）与式（5）的主要区别在于，式（5）允许系统 B 初始处于任意状态。这意味着两个系统可以同时作为热和功的来源。

在这种情况下，式（5）代表量子系统 A 和 B 的热力学第二定律。由于它取决于初始有效逆温度$\beta_j(0)$，式（5）对热流施加了某些约束。还值得注意的是，由于热被定义为热能的变化，因此它与熵变直接相关。事实上，很容易证明

$$\dot{S}_j = -\beta_j(t) \dot{Q}_j. \tag{6}$$

我们可以根据热力学第一定律定义功：

$$W_j(t) = -\Delta U_j - Q_j(t), \tag{7}$$

其中， $U_j = \mathrm{Tr}[\rho_j(t) H_j]$ 是系统j的平均能量。这里值得一提的是，由于符号约定的选择， $Q > 0 (Q < 0)$对应系统提供（吸收）的热，而 $W > 0 (W < 0)$对应系统提供（接收）的功。我们可以将式（7）改写为

$$W_j(t) = -\mathrm{Tr}\,[\rho_j(t) - \rho_j^{th}(t)] H_j + \mathrm{Tr}\,[\rho_j(0) - \rho_j^{th}(0)] H_j, \tag{8}$$

并定义 $\Xi_j(t) := \mathrm{Tr}\{[\rho_j(t) - \rho_j^{th}(t)] H_j\}$。于是，

$$W_j(t) = -\Xi_j(t) + \Xi_j(0) = -\Delta \Xi. \tag{9}$$

现在，让我们定义一个与 $\rho_j(t)$ 具有相同谱的被动态$\pi_j(t) = \sum_i r_i(t) |E_i\rangle \langle E_i|$，其中

$|E_i\rangle$ 是系统 j 的能量本征基。注意，由于它与 $\rho_j(t)$ 具有相同的谱，$\pi_j(t)$ 也具有相同的熵，即 $S[\rho_j(t)] = S[\pi_j(t)]$。我们可以使用与该被动态相关的内能，即$U_P(t) = \mathrm{Tr}[H_j\pi_j(t)]$, ，将 $\Xi_j(t)$ 重写为（详情请参见附录 A）

$$\begin{aligned}\Xi_j(t) &= \mathrm{Tr}\{[\rho_j(t) - \pi(t)]H_j\} + \mathrm{Tr}\{[\pi(t) - \rho_j^{th}(t)]H_j\} \\ &= \mathcal{E}_j(t) + \frac{1}{\beta_j(t)} D[\pi_j(t)||\rho_j^{th}(t)] \geq 0, \end{aligned} \tag{10}$$

其中，式（10）右侧的第一项是功率，$\mathcal{E}_j(t)$，对应于可通过幺正操作提取的最大功 [31]。

请注意，式（10）始终为正，因为功率和相对量子熵都是正量。该表达式还表明，$\Xi(t)$始终大于功率。我们将 $\Xi(t)$称为烳 [32, 33]„ 并且可以证明（见 [25]），它对应于在逆温度为 $\beta_j(t)$的热浴中可提取的能量。将式（10）代入式（8），得到

$$W_j = -\Delta\mathcal{E}_j(t) - \Delta\left\{\frac{1}{\beta_j(t)} D[\pi_j(t)||\rho_j^{th}(t)]\right\}. \tag{11}$$

至关重要的是，式（11）指出，功可以通过两种不同机制产生：与功率相关的幺正机制，以及与相对熵相关的非幺正机制。因此，只要系统处于不同于热态的被动态，它仍然可以提供功，正如 [33]中所指出的那样。

III. 结果

本节将介绍上述框架在半经典区间和量子区间的一些结果与特点。在半经典区间，我们将上一节所述的形式体系与我们称为标准框架的形式体系进行比较，并说明二者之间存在差异。我们还将说明，能够把 [25] 中构建的框架与半经典区间内其他近期方法联系起来。在量子区间，我们将通过具体示例突出新出现的鲜明特征。

A. 半经典区间

考虑两个系统 A 和 B 相互作用，且与任何其他外部系统隔离。全局系统的完整哈密顿量为 $H = H_A + V_{AB} + H_B = H_A + gV_{AB} + H_B$，其中 $V_{AB} = gV_{AB}$表示 A 和 B 之间的相互作用，g 是耦合强度。现在，假设可以忽略相互作用项 V_{AB} 所产生的关联，因此系统的联合态始终是可分态，$\rho(t) \approx \rho_A(t) \otimes \rho_B(t)$。这就是我们所说的半经典极限（或状态）。例如，当时间尺度远短于 g^{-1} 时，或者当 B 或 A 成为“经典系统”时，就可能出现这种情况；比如，在弱耦合极限 [34–36] 下处于大相干态的谐振子。在这种情形下，局域动力学变得

$$\dot{\rho}_A(t) = -\frac{i}{\hbar}[H_A^{eff}(t), \rho_A(t)], \tag{12}$$

$$\dot{\rho}_B(t) = -\frac{i}{\hbar}[H_B^{eff}(t), \rho_B(t)], \tag{13}$$

其中 $H_A^{eff}(t)$ 和 $H_B^{eff}(t)$ 是有效哈密顿量

$$H_A^{eff}(t) = H_A + \mathrm{Tr}_B[\rho_B(t)V_{AB}] \tag{14}$$

$$H_B^{eff}(t) = H_B + \mathrm{Tr}_A[\rho_A(t)V_{AB}]. \tag{15}$$

从现在起，我们将把系统 B 视为经典系统，并将系统 A 视为研究对象。

由式（4）可知，不存在热交换，$Q_A(t) = 0$，因为 S_A 不随时间变化。于是，由式（7）可得

$$W_A(t) = -\Delta U_A(t) = -\mathrm{Tr}\{H_A[\rho(t) - \rho(0)]\}. \tag{16}$$

注意，在半经典区间中，A 被视为由半经典系统 B 驱动，而 A 的局域哈密顿量就是驱动哈密顿量 $H_A^{eff}(t)$。将标准定义 [18, 19]应用于有效动力学方程（12），可得:

$$\dot{W}_A^{st} = \mathrm{Tr}\left[\rho_A(t)\dot{H}_A^{eff}(t)\right] \tag{17}$$

$$\dot{Q}_A^{st} = \mathrm{Tr}\left[\dot{\rho}_A(t)H_A^{eff}(t)\right] \tag{18}$$

$$U_A^{st}(t) = \mathrm{Tr}\left[\rho_A(t)H_A^{eff}(t)\right] = Q_A^{st} + W_A^{st}. \tag{19}$$

注意，在半经典区间中不存在热交换，$\dot{Q}_A^{st} = 0$。这可直接由方程（12）和（18）结合得出。

现在，利用方程（14）计算 A的内能，可得:

$$U^{st}(t) = U_A + E_{int}, \tag{20}$$

其中，$E_{int} = \mathrm{Tr}\,[\rho(t)V_{AB}]$ 为相互作用能。于是，

$$\dot{W}^{st} = \dot{W}_A + \dot{E}_{int}. \tag{21}$$

这意味着，如果相互作用能是常数，$E_{int} = 0$，那么功的标准定义与 W_A自治形式体系中的定义[25]一致。一个简单的例子是 Jaynes-Cummings 模型：系统 B 是处于大相干态的谐振子，系统 A 则是一个双能级系统。在这种情况下，如果两个系统共振 $E_{int} = 0$，那么 $\dot{W}^{st} = \dot{W}_A \Rightarrow W^{st} = W_A$。

值得一提的是，式 (21) 强化了这样一种观点：相互作用能发挥着（非局域）功源的作用。这也与以下观察一致：开启和关闭相互作用需要付出代价，其大小等于相互作用能的变化量， $W_{on}+W_{off}=\Delta E_{int}$。在这种情形下，我们看到，参考文献 [25] 中提出的完整量子框架似乎更为精确，因为它区分了纯局域功与相互作用能所带来的贡献。

此处所示的框架也可以与半经典区间中的其他近期框架联系起来。例如，在“MCA”框架中（以作者姓名命名）， [22], 作者考虑了两个相互作用的量子系统 A 和 B，并将它们的能量变化 $U_j(t)$拆分为两部分，分别称为功流和相干能量通量。

系统 j 的能量流为

$$\begin{aligned}\dot{U}_j(t) = &-i\,\mathrm{Tr}_j\left\{[H_j,\mathcal{H}_j(t)]\rho_j(t)\right\}\\ &-i\,\mathrm{Tr}_{l\neq j}\left\{H_j\left[V_{AB}(t),\chi(t)\right]\right\},\end{aligned}\tag{22}$$

其中，与前文一样， $U_j(t)=\mathrm{Tr}[H_j\rho_j(t)]$， H_j 是系统 j的自由哈密顿量， $\mathcal{H}_j(t)=\mathrm{Tr}_{l\neq j}[V_{AB}(t)\rho_l(t)]$是一个有效驱动项， $\rho_j(t)$是系统 $j=A,\ B$的密度矩阵， $V_{AB}(t)$是 A 与 B 之间的相互作用哈密顿量，而 $\chi(t)=\rho(t)-\rho_A(t)\otimes\rho_B(t)$是关联矩阵（$\rho(t)$是 AB 的联合态）。根据式（22），他们将功率定义为

$$\dot{W}_j^{MCA}(t) = -i\,\mathrm{Tr}_j\left\{[H_j,\mathcal{H}_j(t)]\rho_j(t)\right\}\tag{23}$$

以及关联能流

$$\dot{Q}_j^{MCA}(t) = -i\,\mathrm{Tr}_{l\neq j}\left\{H_j\left[V_{AB}(t),\chi(t)\right]\right\}.\tag{24}$$

在半经典区间 $\rho(t)\approx\rho^A(t)\otimes\rho^B(t)$，这意味着$\chi(t)=0$， $\dot{Q}^j=0$，且动力学由方程（12）给出。然后，利用方程（23）和（12），我们得到

$$\dot{W}_j^{MCA}=\mathrm{Tr}\left[H_A\dot{\rho}_A(t)\right]=\dot{U}^j(t),\tag{25}$$

这正是半经典区间中所预期的结果。将上述表达式与功的标准定义（方程（17））进行比较，可得

$$\dot{W}^{st}=\dot{W}_j^{MCA}+\dot{E}_{int},\tag{26}$$

这意味着，在半经典区间， [25]和 [22]中的功定义相一致。

另一个有趣的案例是 [26] 中提出的框架。在这项工作中，作者为自主系统定义了热和功，并建立了这些定义与功和热的标准定义之间的联系（详情请参见 [26] 中的第四至第七节）。他们以功的标准定义 $\dot{W}^{st}$ 表示，得到了自主情形下功的产生的一般表达式 $\dot{W}_a^A$，

$$\dot{W}_a^A=\dot{W}^{st}+\mathcal{F}(t),\tag{27}$$

其中， $\mathcal{F}(t)$ 是一个取决于 A 与 B 之间关联的函数。在半经典区间内，我们有 $\mathcal{F}(t)=0$。因此，自主功的产生定义不同于公式（21）和（26）中幺正区域内的功的产生。这意味着，在他们的定义下，与文献 [22, 25] 中的框架不同，在幺正区域内无法区分纯局域功贡献与相互作用能。

在下一节中，我们将研究量子区间。为此，我们考虑一些来自实验情形的例子，例如二能级原子与电磁模式相互作用、量子比特相互作用以及自发辐射现象。

B. 非幺正区间

1. *Qubit-Harmonic oscillator interaction*

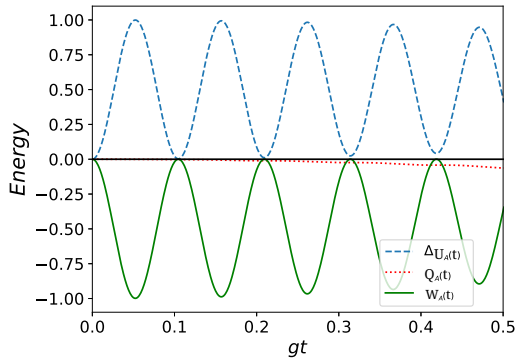
考虑一个典型的实验情形 [34, 37, 38]：二能级系统 A 通过 Jaynes-Cummings模型与一个由量子谐振子（QHO）表示的电磁模式系统 B 相互作用。复合系统的完整哈密顿量为

$$H=\frac{\hbar\omega_A}{2}\sigma_z+\hbar\omega_B a^\dagger a+g\left(\sigma_+ a+\sigma_- a^\dagger\right),\tag{28}$$

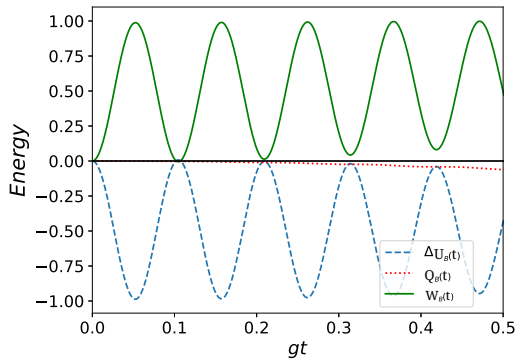
其中 σ_z 是泡利矩阵，量子比特的能级为$|g\rangle$ 和 $|e\rangle$，其中 $E_e>E_g=0$、 $\sigma_-=\sigma_+^\dagger=|g\rangle\langle e|$ 和$a^\dagger$ （a）分别是通常的产生（湮灭）算符。假设两个子系统处于共振状态（$\omega_A=\omega_B$）。这里，我们将分析系统在四种不同情况下的热力学性质：第一种情况下，量子比特初始处于基态 $|g\rangle$，而 QHO 初始处于含有大量光子的相干态（$\bar{n}\gg1$）。在后续所有情况下，假设 QHO 初始处于真空态 $|0\rangle$；第二种情况下，量子比特初始处于激发态；第三种情况下，量子比特初始处于叠加态$|\psi_A(0)\rangle=\frac{|g\rangle+|e\rangle}{\sqrt{2}}$；最后，在第四种情况下，量子比特初始处于吉布斯态。

在图 1 中，我们展示了上述第一种情形对应的热力学量。在该情形下，量子谐振子初始处于相干态$|\psi_{HO}(0)\rangle=|\alpha\rangle$，其中 $\bar{n}=|\alpha|^2=900$ ($\alpha=30$) 再现了由激光相干驱动的二能级系统的实验情形；这种系统常用于许多实验平台，以控制和操纵量子比特 [34, 37, 38]。

从图 1a 和 1b 可以看出，在初始阶段，也就是无量纲时间区间 $gt=0$ 至 $gt=0.1$ 内，两个系统之间大致没有热交换。这是因为在这一时间尺度内，量子谐振子表现得像一个经典系统，因此量子比特的动力学由方程 (12) 支配。这对应于实验中用于相干驱动的著名半经典区间



(a) 量子比特（系统 A）。



(b) 量子谐振子（系统 B）。

图 1：量子比特（A）和量子谐振子（B）的内能、热和功随无量纲时间 gt 变化的曲线图。所有热力学量均以 $\hbar\omega$ 为单位表示；这一约定适用于后续所有图。量子比特初始处于基态，量子谐振子初始处于相干态 $|\psi_{HO}\rangle(0) = |\alpha\rangle$。参数：$\omega_A = \omega_B$、$\alpha = 30$ 和 $g = 0.01\omega_A$。

。然而，当 $gt > 0.1$ 时，我们开始观察到两个系统之间发生热交换，这意味着半经典近似开始失效，量子比特的动力学也不再是幺正的，正如 [36] 中所指出的。有趣的是，在量子比特和量子谐振子中，热流不像功流那样振荡，而是随着耗散逐渐显现而缓慢、持续地增加。还请注意，对于 $gt > 0.1$，我们观察到所产生的功存在阻尼效应。

总之，热力学分析再现了日常经验以及许多实验平台中所预期的现象：量子比特从激光中获得功。然而，经过多次拉比振荡后，当 gt 不再远小于 1 时，相干驱动窗口的崩溃会反映在功传递上：功传递开始减弱，同时出现热流。

接下来，我们将分析深入量子区间的典型情形，此时量子谐振子最初处于真空态。首先考虑量子比特最初处于激发态时，联合态的时间演化形式为

$$|\psi(t)\rangle = c_1(t)\,|e,0\rangle + c_2(t)\,|g,1\rangle\,, \tag{29}$$

其中 $c_1(0) = 1$ 和 $c_2(0) = 0$。对量子谐振子、系统 B 取迹后，我们得到量子比特（系统 A）的约化态，

$$\rho_A(t) = p_e(t)\,|e\rangle\langle e| + p_g(t)\,|g\rangle\langle g|\,, \tag{30}$$

$p_e(t) = |c_1(t)|^2 = \cos^2(gt)$ 和 $p_g(t) = |c_2(t)|^2 = \sin^2(gt)$（详情见 [34] ）。类似地，对量子比特取迹后，可得量子谐振子的约化态，

$$\rho_B(t) = p_1(t)\,|1\rangle\langle 1| + p_0(t)\,|0\rangle\langle 0|\,, \tag{31}$$

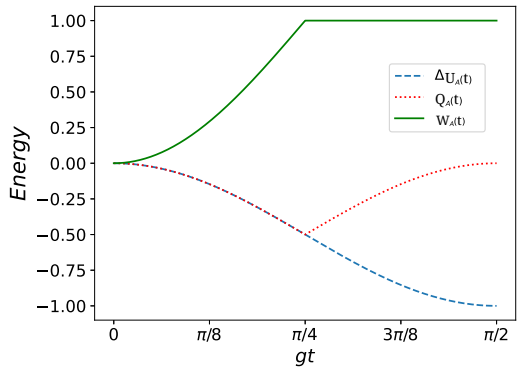
其中 $p_1(t) = p_g(t)$ 和 $p_0(t) = p_e(t)$。

总体而言，仅考察量子比特的能量变化（见图 2、3 和 4），会发现其行为与前一种情形相似，因为两条能量曲线均对应平方正弦函数（只是振荡的时间尺度不同）。然而，热与功交换的分解则大不相同。这是由于关联的产生所致。这也说明了一个众所周知的观点：热和功强烈依赖于路径。此外，前一种情形（图 1）中观察到的量子比特与量子谐振子热力学量之间的对称性如今已被打破，这也体现了上述两点。接下来，我们将更详细地描述图 2、3 和 4 中的曲线。

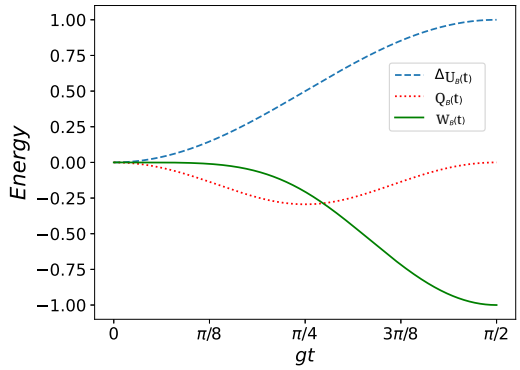
在图（2）中，我们展示了量子比特和量子谐振子的相关热力学量。由于动力学以及随之发生的能量交换具有周期性，我们将分析限制在时间区间 $0 \le t \le \tau = \pi/2g$ 内（详情请见附录B）。在图 2a 中，我们观察到，在区间 $0 \le t \le \pi/4g$ 内，当$p_e(t) \ge p_g(t)$时，量子比特提供功 $W_A(t)$，同时吸收热，这表明量子比特与量子谐振子之间逐渐形成的关联降低了量子比特的纯度。

对于 $\pi/4g < t \le \pi/2g$，由于 $p_g(t)$ 大于 $p_e(t)$，量子比特不再产生功。在此时间区间内，量子比特处于热态，因此没有可用于产生功的资源。此外，系统从最大混合态演化至基态 $|g\rangle$ 的过程中，开始向浴释放热。

在图（2b）中，热流 Q_B 与量子比特的热流 Q_A 的主要差异出现在 $gt = \pi/4$处的最大谷值附近。具体而言，Q_B 中没有出现明显的转变，这是因为不存在布居反转机制。关于量子谐振子中的功，我们发现，尽管对于 $t \le \pi/4g$，$p_0(t) \ge p_1(t)$，量子谐振子仍在受到做功。这是因为在这一时间区间内，系统处于被动态而非热态，这与量子比特不同。这直接源于两个系统的希尔伯特空间维数不同。量子谐振子获得这样的功，正是方程（10）第二项的体现，这意味着可以通过纯粹的非幺正机制获得功。



(a) 量子比特（系统 A）。

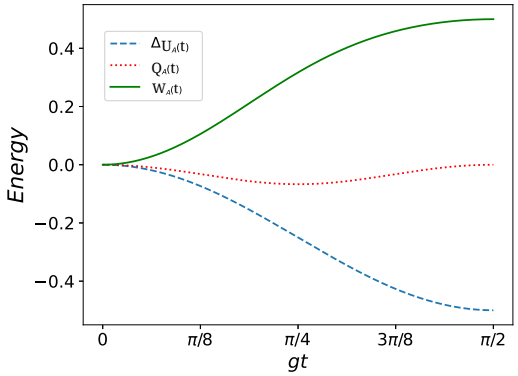


(b) 量子谐振子（系统 B）。

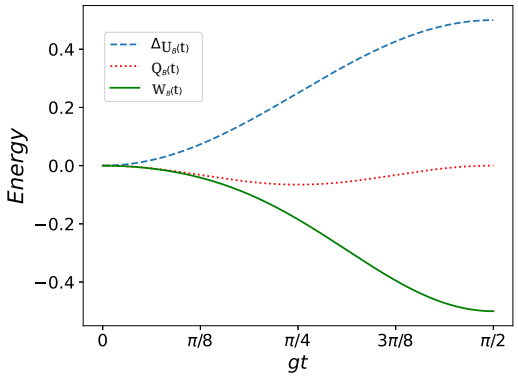
图 2：量子比特（A）和量子谐振子（B）的热力学量随时间的变化曲线。参数： $\omega_A = \omega_B$ 和 $g = 0.01\omega_A$。

作为第三个例子，为了研究系统中相干性的影响，我们考虑量子比特（系统 A）初始制备为叠加态 $|\psi_A(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|e\rangle \pm |g\rangle)$，而量子谐振子仍初始处于真空态。

在图 3 中，我们展示了两个系统的热力学量。首先，可以注意到量子比特和量子谐振子的流动呈现对称／反对称关系。此外，我们可以看到，两个系统从局域纯态演化为局域混态时会吸收热，这一过程发生在 $t = \pi/4g$；随后，它们在被纯化、即朝着 $t = \pi/2g$ 处的局域纯态演化时释放热。关于功，我们看到，在整个演化过程中，功持续从量子比特中提取，并在 $t = \pi/2g$ 达到最大值；与此同时，功持续输入量子谐振子，并在同一时间达到最大值。这种行为的原因是，量子比特中最初包含的相干性在时间区间$0 \leq t \leq \pi/2g$内完全转移到了量子谐振子。这幅图说明，相干性确实可以作为功生成的资源：生成相干性意味着向系统输入功，而消耗相干性则能够实现功的提取从系统中提取功。



(a) 量子比特（系统 A）。



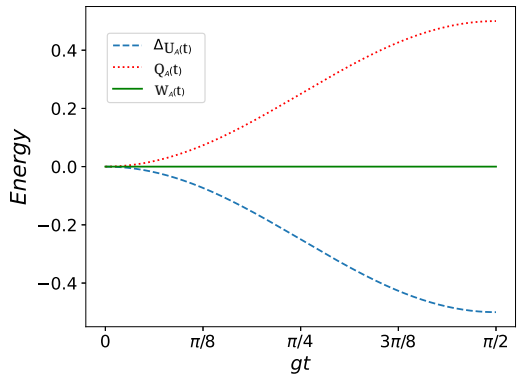
(b) 量子谐振子（系统 B）。

图 3：量子比特和量子谐振子的内能、热和功随时间变化的曲线。量子比特初始处于状态 $|\psi_A(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|e\rangle + |g\rangle)$。参数： $\omega_A = \omega_B$ 和 $g = 0.01\overline{\omega_A}$。

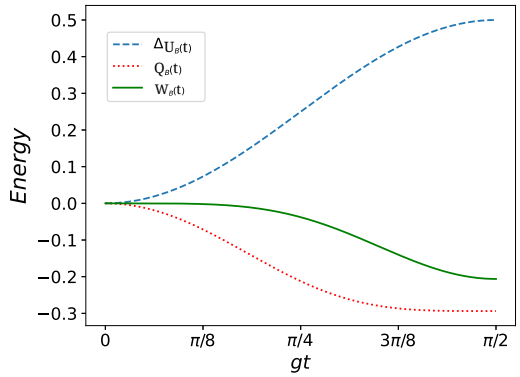
值得指出的是，第三个例子与第二个例子的主要区别在于功的产生机制。在第二个例子中，布居反转和系统维数是功生成的机制；而在第三个例子中，相干性则是功生成的机制。

作为第四个也是最后一个例子，我们考虑量子比特初始处于最大混合态（即无限温度下的热态），而量子谐振子初始处于真空态的情形。图 4 显示，在这种情况下，量子比特仅向量子谐振子提供热，而量子谐振子不仅吸收热，还获得功。产生这种功的机制与第二个例子相同：两个系统维数的差异。这再次表明，如式 (10) 第二项所示，功可以通过纯粹的非幺正机制进行交换。

此外，值得一提的是，如果量子谐振子最初处于



(a) 量子比特（系统 A）。



(b) 量子谐振子（系统 B）。

图 4：量子比特和量子谐振子的热力学量随时间的变化曲线。量子比特初始处于热态 $\rho_A(0) = \frac{1}{2}($ $|g\rangle\langle g| + |e\rangle\langle e|)$。参数： $\omega_A = \omega_B$ 和 $\bar{} g = 0.01\omega_A$。

非零温度下的热态，仍会产生一些功，但其幅度较小，因为在这种情况下，总能量交换会减少。然而，当两个系统的希尔伯特空间维数相同，且最初都处于温度不同的热态时，观察到的只有热交换。这一结果再次印证了我们此前的观察，并表明量子系统希尔伯特空间之间的维数差异本身可能就是功产生的一种资源，即使系统最初处于热态也是如此。

在下一个例子中，我们用量子比特替代量子谐振子，并分析系统在与上文相同的时间区间内的热力学行为。

2. *Qubit-Qubit interaction*

现在，我们来考虑两个量子比特 A 和 B，它们的能级分别为 $|g\rangle$ 和 $|e\rangle$，对应的能量为 $E_e > E_g = 0$。该复合系统的总哈密顿量表示为

$$H = \hbar\omega_A\sigma_{ee}^{(A)} + \hbar\omega_B\sigma_{ee}^{(B)} + \hbar g\left(\sigma_+^{(A)}\sigma_-^{(B)} + \sigma_-^{(A)}\sigma_+^{(B)}\right), \tag{32}$$

其中，假设 $\sigma_{ee} = |e\rangle\langle e|$、 $\sigma_- = \sigma_+^\dagger = |g\rangle\langle e|$ 和量子比特处于共振状态（$\omega_A = \omega_B$）。

在第一个例子中，我们设量子比特 A 初始处于激发态 $|e\rangle$，而量子比特 B 初始处于基态 $|g\rangle$。在这种情况下，每个量子比特的约化态为

$$\rho_A(t) = p_e^A(t)\,|e\rangle\langle e| + p_g^A(t)\,|g\rangle\langle g| \tag{33}$$

and

$$\rho_B(t) = p_g^B(t)\,|e\rangle\langle e| + p_e^B(t)\,|g\rangle\langle g|\,, \tag{34}$$

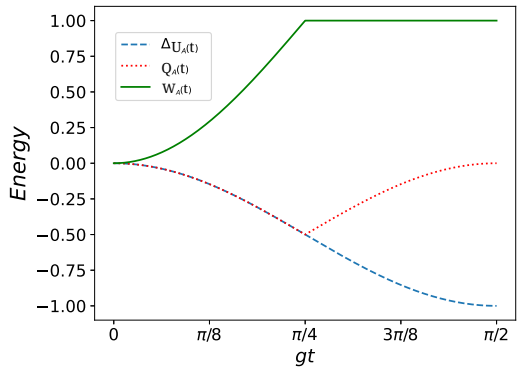
其中 $p_e^A(t) = p_g^B(t)$，而 $p_g^A(t) = p_e^B(t)$。注意，两个量子比特始终处于对角态，因此，如果 $p_e(t) \geq p_g(t)$，系统中就会出现布居反转。

与量子比特–量子谐振子情形中的做法类似，我们将分析限制在时间区间 $0 \leq t \leq \tau = \pi/2g$内，因为在这种情形下，动力学以及由此产生的能量交换同样具有周期性。首先，图 5a 中量子比特 A 的热力学流与图 (2a) 中的相一致。这是因为两种情形下量子比特 A 的动力学完全相同。另一方面，我们观察到，与量子谐振子相关的热力学量不同，量子比特 B 的热力学量与图 2b 中量子谐振子的结果有所差异。首先，量子比特 B 吸收或释放的热量大于量子谐振子，且其热交换在 $t = \pi/4g$ 处呈现出急剧转变。这些差异源于两种情形下系统 B 的希尔伯特空间维数不同。

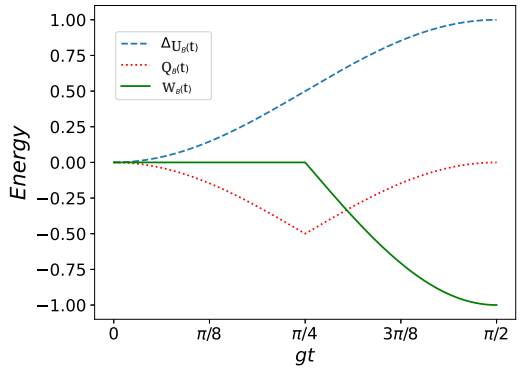
关于功的产生，对于 $t \leq \pi/4g$ ，系统 B 不会获得功，因为在此时间区间内，量子比特 B 保持热态，与量子谐振子不同。然而，对于$\pi/4g \leq t \leq \tau = \pi/2g$，确实有功作用于量子比特 B。这是因为在此时间区间内产生了布居反转，这表明它需要功，并非免费资源。

仍以这个例子（图 5）为例，我们可以说，A 最初提供的功转化为 A 与 B 之间的关联（见图 6），这会降低 A 和 B 的纯度，导致二者吸收热。随后，A 和 B 提供的热转化为 B 获得的功，同时 A 与 B 之间的关联被消耗。这种功—信息转换造成了一种延迟效应：A 提供功的时刻与 B 获得功的时刻并不相同。

作为第二个例子，我们考虑最初制备为叠加态的量子比特 A， $|\psi_A(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|e\rangle + |g\rangle)$，而量子比特 B 最初仍处于基态。在图 7 中，我们观察到，两个系统的热力学量呈现出与图 3 所示相同的行为，这表明希尔伯特空间的维数在此并不起作用。这是因为在这种情况下，功产生的主要机制源自



（a）量子比特（系统 A）。



（b）量子比特（系统 B）。

图 5：两个量子比特的内能、热和功随时间的变化图。量子比特 A 初始处于激发态，$|e\rangle$量子比特 B 初始处于基态，$|g\rangle$。参数：$\omega_A = \omega_B$ 和$g = 0.01\omega_A$

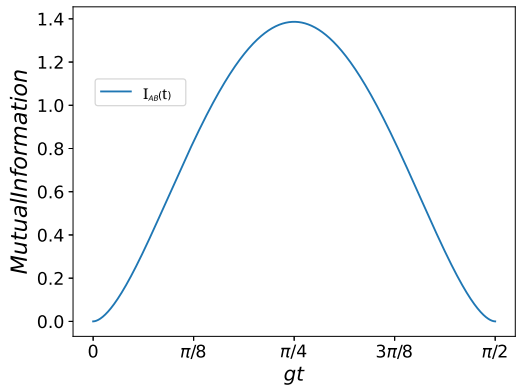
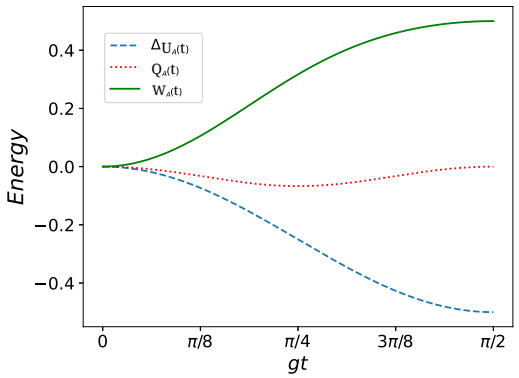
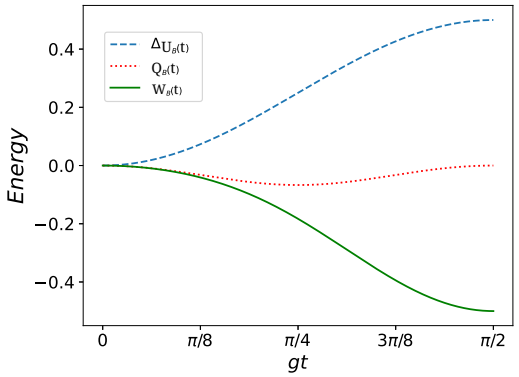


图 6：系统 A 和 B 之间的互信息随时间的变化图。参数：$\omega_A = \omega_B$ 和 $g = 0.01\omega_A$。



（a）量子比特（系统 A）。



（b）量子比特（系统 B）。

图 7：两个量子比特的内能、热和功随时间的变化图。量子比特 A 初始处于叠加态 $|\psi_A(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|e\rangle + |g\rangle)$，而量子比特 B 再次初始处于基态 $|g\rangle$。参数：$\omega_A = \omega_B$ 和 $g = 0.01\omega_A$。

量子比特 A 中最初存在的相干性。因此，在量子谐振子的子空间 $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ 以及量子比特的子空间 $\{|g\rangle, |e\rangle\}$ 中产生的相干性，对功的产生起着关键作用。

值得注意的是，对于二能级系统，式（10）右侧的第二项始终为零。这是因为对于二能级系统，任何被动态必然都是热态。因此，对于量子比特，系统所做的功或系统获得的功始终等于系统的功率。在这些量子比特-量子比特示例中，我们再次看到了两种产生功的幺正机制、希尔伯特空间维数对于布居反转机制所起的作用（以及其对于基于相干性的机制不起作用），以及由功-关联转换实现的延迟机制。

在下一个示例中，我们将以零温热浴替代量子系统 B，并分析自发辐射现象的热力学。

3. Spontaneous emission

现在，让我们来考虑自发辐射现象。一个初始制备在激发态 $|e\rangle$ 的量子比特与零温热库接触，并将渐近弛豫至基态 $|g\rangle$。在这种情形下，系统只与热浴交换能量，其动力学可由林德布拉德形式的主方程描述，参见文献 [39],

$$\dot{\rho}_q(t) = -\frac{i}{\hbar}[H_q, \rho_q(t)] + \Gamma(\sigma_- \rho_q(t)\sigma_+ - \frac{1}{2}\{\sigma_+\sigma_-, \rho_q(t)\}), \tag{35}$$

其中 $H_q = \frac{\hbar\omega}{2}\sigma_z$ 是量子比特哈密顿量，$\sigma_- = |g\rangle\langle e|$，$\sigma_+ = \sigma_-^\dagger$，$\rho_S(t)$是量子比特的密度矩阵，而$\Gamma$ 是由与热浴的耦合所诱导的跃迁率。求解系统的动力学后，我们得到

$$P_e(t) = e^{-\Gamma t} \tag{36}$$

$$P_g(t) = 1 - e^{-\Gamma t}, \tag{37}$$

其中 $P_e(t)$是激发态的布居，$P_g(t)$是基态的布居。值得注意的是，在这个例子中，系统在所有时刻都保持对角形式，$\rho_q(t) = P_e(t)\,|e\rangle\langle e| + P_g(t)\,|g\rangle\langle g|$。

根据量子热力学中功和热的标准定义，即式（17）和（18），我们看到没有功的产生（即 $\dot{W}_q^{st} = 0$），因为H_q 与时间无关。因此，系统与热浴之间只有热交换，其表达式为

$$Q_q^{st}(t) = \omega\left[P_e(t) - 1\right]. \tag{38}$$

这表明，根据标准框架，系统总是向热浴提供热。使用框架 [20] 也能得出相同的结论。

相比之下，使用自主框架 [25], , 我们看到，对于 $0 \le t \le \tau$, 其中 τ 是 $P_e(\tau) = P_g(\tau) = 1/2$ 的时刻，我们有 $P_e(t) \ge P_g(t)$，根据方程（3 $\rho_q^{th} = P_e\ t\ |g\rangle\langle g| +)$，这意味着 $P_g\ t\ |e\rangle\langle e|$ ( ) ( )。在这种情形下，由方程和（11）可得 (4)

$$Q_q(t) = -\omega P_g(t) = -\omega[1 - P_e(t)] \tag{39}$$

$$W_q(t) = 2\omega[1 - P_e(t)], \tag{40}$$

以及 $\Delta U_q(t) = \omega[P_e(t) - 1]$。按照我们的符号约定，系统从浴中吸收热量，并向浴提供功。

于是，对于 $t > \tau$，我们有 $P_e(t) \le P_g(t)$，因此由式 (3) 可得 $\rho_q^{th} = P_g(t)\,|g\rangle\langle g| + P_e(t)\,|e\rangle\langle e|$。在这种情况下，不会产生功，系统与热浴之间的热交换为

$$Q_q(t) = \omega\left[P_e(t) - 1\right], \tag{41}$$

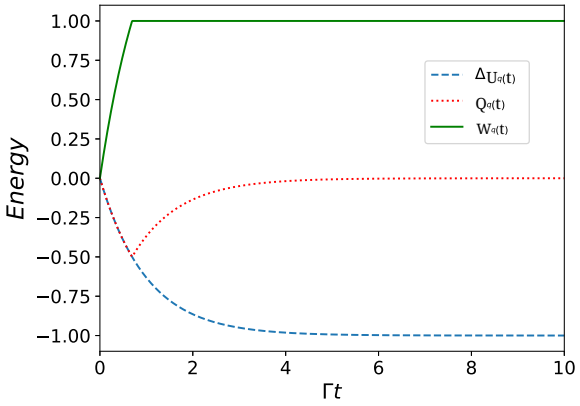


图8：量子比特自发辐射过程中热力学量随时间变化的曲线。量子比特初始处于激发态 $|e\rangle$。参数：$\Gamma = 0.01\omega$。

并且它与式 (38) 中的标准热定义一致。 W_q 和 Q_q 绘于图8中。

这些结果凸显了第 II 节所述标准框架与自主框架在热力学分析中的明显区别。在前者中，系统始终仅与热浴进行热交换；而在后者中，对于$0 \le t \le \tau$，系统通过布居反转机制做功。

还值得注意的是，在区间 $0 \le t \le \tau$内，由于系统-热浴关联的建立，系统从热浴中吸收热量，而不是像标准形式体系中那样释放热量。因此，在标准框架中被解释为纯粹热交换的过程，在这里对应于系统对热浴所做的功与系统吸收的热量的组合。

最后请注意，图8所示的热力学行为与图 5所示的类似。区别在于，图 5中热力学量呈周期性，而在这里它们达到渐近值，这是由于量子比特与热浴发生了热化。

接下来，为了获得浴的热力学性质，并处理强系统–浴耦合，我们采用反应坐标（RC）方法 [40–45]。在这种方法中，与量子比特耦合最强的浴自由度会被映射为一个显式的量子化模——反应坐标，并将其作为扩展系统的一部分进行处理（更多详情请参见附录 C）。

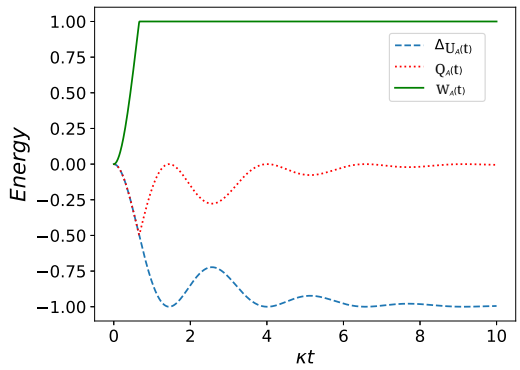
因此，我们现在考虑一个与量子化模相互作用的量子比特，而该量子化模又与零温马尔可夫热浴相互作用。在这种情形下，总

动力学由主方程 [43–46] 支配

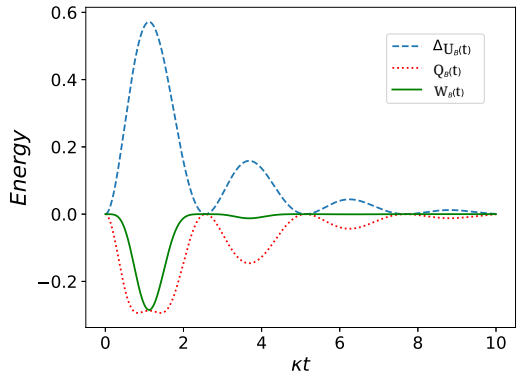
$$\dot{\rho}(t) = -\frac{i}{\hbar}[H_{Q,RC}, \rho(t)] + \frac{\kappa}{2}(2a\rho(t)a^\dagger - \{a^\dagger a, \rho(t)\}), \tag{42}$$

其中 $H_{Q,\ RC} = \frac{\hbar\omega}{2}\sigma_z + \hbar\omega_{RC}a^\dagger a + \hbar\lambda(\sigma_+ a + \sigma_- a^\dagger)$，$\{A, B\} = AB + BA$ 和 $\rho(t)$ 是系统的联合态。下文中，我们假设量子比特与反应坐标共振，$\omega = \omega_{\mathrm{RC}}$。

接下来，为了研究自发辐射过程中浴的热力学，我们采用反应坐标（RC）映射，其中 RC 代表浴中可访问的部分，并使我们能够提取其热力学信息。在以下讨论的所有情形中，RC 初始时均处于真空态 $|0\rangle$，而量子比特初始时处于激发态 $|e\rangle$。



(a) 量子比特（系统 A）。



(b) 反应坐标（系统 B）。

图9：量子比特和反应坐标的热力学量随时间变化的曲线。参数：$\omega = \omega_{RC}$、$\kappa = 0.8\lambda$ 和 $\lambda = 0.01\omega$。

在图 9 中，我们展示了量子比特和反应坐标的热力学量。量子比特初始制备在激发态，而量子化模式初始处于真空态 $|0\rangle$，对应于与热浴其余部分（也称为剩余浴）达到平衡。我们关注反应坐标与剩余浴之间的中等耦合强度

，其中 $\kappa = 0.8\lambda$。

在图9a中，我们观察到量子比特提供的功与图8中的相同。然而，由于处于中等耦合强度范围，提供的热流以及量子比特的能量在衰减之前会发生振荡，这是耦合不为零和非马尔可夫性的典型表现 [43, 44, 47]。

在图 9b 中，我们观察到反应坐标确实接收了量子比特提供的部分功，这再次与将所有能量交换都视为热的标准热力学框架形成对比。不过，反应坐标也与量子比特和剩余浴发生了一些热交换，但这些仅占交换能量的一小部分。长时间后，反应坐标接收的功和热都会在浴的其余部分中耗散。

总之，这个例子表明，浴确实接收了量子比特提供的部分功，但这部分能量会迅速通过整个浴的模式耗散。自然，改变反应坐标与浴之间的耦合强度，会影响传递给浴的功的大小以及耗散所需的时间尺度（更多示例见附录 C）。

IV. 结论与讨论 N

在这项工作中，我们应用了一种热力学形式体系 [25]，该体系专为自主量子系统设计，用于研究半经典和量子区间内相互作用量子系统的热力学。

在半经典区间，我们证明，当两个系统相互作用而其中一个表现出经典行为时，能量交换完全表现为功的产生。将 [25] 的框架与[18, 19]标准定义[18, 19]及其他近期方法 [22, 26], 进行比较后，我们发现，该形式体系 [25] 识别出局域功的贡献，同时将相互作用能单独处理。对于相互作用能不可忽略的系统而言，这一区分尤其值得关注，例如，开启和关闭相互作用所需的代价不可忽略时。我们通过对一个由量子谐振子驱动的二能级系统进行热力学分析来说明这一点；该谐振子初始处于大振幅相干态，从而再现了激光驱动量子比特的实验情形。我们表明，量子比特与激光（谐振子）之间交换的能量确实是功，直到半经典近似开始失效，关联随之出现，并导致流入热流缓慢增加。

在量子区间，我们的结果揭示了多种功的产生机制。我们确定了两种幺正机制：一种基于布居反转，另一种基于量子相干性。在许多论文中，这两种幺正机制都与功成本相关，

包括将其作为主要的厄格ᴑᵭropy 产生机制 [48–51] [31, 52, 53], ，但奇怪的是，其他热力学框架（包括标准框架）却检测不到这些机制。除此之外，我们的结果还揭示了一种额外的功产生机制，它是非幺正的，发生在不同维数的系统相互作用时。这表明，希尔伯特空间维数可以作为自主量子系统中功生成的一种内禀资源。最后，我们还表明，即使存在无限热浴，这两种幺正功产生机制也可能发生，尽管热浴获得的功最终会在长时间后耗散到所有热浴模态中。

我们认为，我们的结果展示了自主框架的灵活性，并有助于理解量子领域中的功与热交换机制，尤其是在自主环境下的相关机制。这对于利用量子层面的不同形式能量至关重要，旨在控制量子器件和量子技术的能耗。

致谢

作者感谢法国国家研究署（ANR）通过资助项目 ANR-23-CPJ1-0030-01 提供的经费支持。

[1] O. Abah, J. Roßnagel, G. Jacob, S. Deffner, F. Schmidt-Kaler, K. Singer, and E. Lutz, 《最大功率下的单离子热机》, Phys. Rev. Lett. **109**, 203006 (2012). [2] J. P. Pekola, 《迈向电子电路中的量子热力学》, Nat. Phys. **11**, 118 (2015). [3] F. Binder, L. A. Correa, C. Gogolin, J. Anders, and G. Adesso, *Thermodynamics in the Quantum Regime: Fundamental Aspects and New Directions* 2018 , (Springer,). [4] J. Goold, M. Huber, A. Riera, L. del Rio, and P. Skrzypczyk, 《量子信息在热力学中的作用——专题综述》, J. Phys. A: Math. Theor. **49**, 143001 (2016). [5] P. P. Hofer, J. B. Brask, M. Perarnau-Llobet, and N. Brunner, 《量子热机作为温度计》, Phys. Rev. Lett. **119**, 090603 (2017). [6] D. Xie, F.-X. Sun, and C. Xu, 《基于腔量子电动力学装置的量子测温》, Phys. Rev. A **101**, 063844 (2020). [7] G. T. Landi, A. L. Fonseca de Oliveira, and E. Buksman, 《量子纠错引擎的热力学分析》, Phys. Rev. A **101**, 042106 (2020). [8] A. Danageozian, M. M. Wilde, and F. Buscemi, 《量子信息增益与纠错的热力学约束：三重权衡》, PRX Quantum **3**, 020318 2022( ). [9] F. Cavaliere, M. Carrega, G. De Filippis, V. Cataudella, G. Benenti, and M. Sassetti, 《具有非马尔可夫储库的动力学热机》, Phys. Rev. Research **4**, 033233 2022( ). [10] T-J. Zhou, Y-H. Ma, and C. P. Sun, 《量子西拉德热机的有限时间优化》, Phys. Rev. Research **6**, 043001 (2024). [11] G. Zambon, and G. Adesso, 《量子过程作为热力学资源：非马尔可夫性的作用》, Phys. Rev. Lett. **134**, 200401 (2025). [12] A. de Oliveira Junior, J. B. Brask, and P. Lipka-Bartosik, 《热作为量子性质的见证》, Phys. Rev. Lett. **134**, 050401 (2025). [13] J. Monsel, M. Fellous-Asiani, B. Huard and A. Auff`eves, 《功提取的能量成本》, Phys. Rev. Lett. **124**, 130601 (2020). [14] M. H. Mohammady, A. Auff`eves, and J. Anders, 《量子区间中不可逆性的能量印记》, Communications Physics volume **3**, 89 (2020).

[15] M. Fellous-Asiani、J. H. Chai、R. S. Whitney、A. Auff`eves 和 H. Khoon Ng, 《资源约束对量子计算的限制》, PRX Quantum **2**，040335（2021年）。[16]N. Piccione、M. Maffei、X. Linpeng、A. N. Jordan、K. W. Murch 和 A. Auff`eves, 《基于色散型量子比特—光相互作用的自主测量中能量交换的基本机制》, Phys. Rev. A **109**，063707 2024( )。[17] I. M. de Buy Wenniger、S.E. Thomas、M. Maffei、S.C. Wein、M. Pont、N. Belabas、S. Prasad、A. Harouri、A. Lemaˆıtre 等, 《量子发射体与光场之间能量传递的实验分析》, Phys. Rev. Lett. **131**，260401（2023年）。[18] H. Spohn, 《量子动力半群的熵产生》, J. Math. Phys. **19**, 1227（1978年）。[19] R. Alicki, 《作为热机模型的量子开放系统》, J. Phys. A **12**，L103（1979年）。[20] M. Esposito、K. Lindenberg 和 C. Van den Broeck, 《作为系统与储库间关联的熵产生》, New J. Phys. **12**，013013（2010年）。[21] J. Monsel、M. Fellous-Asiani、B. Huard 和 A. Auff`eves, 《功提取的能量成本》, Phys. Rev. Lett. **124**，130601（2020年）。[22] M. Maffei、P. A. Camati 和 A. Auff`eves, 《利用能量见证量探测波导量子电动力学中的非经典光场》, Phys. Rev. Research **3**，L032073（2021年）。[23] Philipp Strasberg 和 Andreas Winter, 《量子热力学第一定律与第二定律：基于熵的微观定义的一致推导》, PRX Quantum **2**, 030202（2021年）。[24] A. Colla 和 H-P. Breuer, 《任意耦合下非平衡量子热力学的开放系统方法》, Phys. Rev. A **105**, 052216（2022年）。[25] C. Elouard 和 C. L. Latune, 《将热力学定律扩展至任意自主量子系统》, PRX Quantum **4**, 020309（2023年）。[26] R. Dann 和 R. Kosloff, 《量子热力学第一定律的统一》, New J. Phys. **25** 043019（2023年）。[27] W. Pusz 和 S. L. Woronowicz, 《一般量子系统的被动态与KMS态》, Commun. Math. Phys. **58**，273（1978年）。

[28] M. N. Bera、A. Riera、M. Lewenstein、Z. B. Khanian 和 A. Winter，《热力学是信息守恒的结果》，Quantum **3**，121（2019年）。[29] C. Macchiavello、A. Riccardi 和 M. F. Sacchi，《两个玻色系统的量子热力学》，Phys. Rev. A **101**，062326（2020年）。[30] C. Elouard 和 C. L. Latune，《对"关于〈将热力学定律扩展至任意自主量子系统〉的评论"的回复》，arXiv:2309.08243（2023年）。[31] A. E. Allahverdyan、R. Balian 和 Th. M. Nieuwenhuizen，《有限量子系统的最大功提取》，Europhys. Lett. **67**，565（2004年）。[32] I. Dincer、Y. A. Cengel，《能量、熵与㶲概念及其在热工程中的作用》，《Entropy》**3(3)**，116-149（2001年）。[33] F. H. Kamin、S. Salimi 和 A. C. Santos，《被动态的㶲：提取功率后的废能》，Phys. Rev. E **104**，034134（2021年）。[34] C. C. Gerry 和 P. L. Knight，*Introductory quantum optics* 2004（剑桥大学出版社，）。[35] G. Grynberg、A. Aspect 和 C. Fabre，*Introduction to Quantum Optics: From the Semi-classical Approach to Quantized Light* 2010（剑桥大学出版社，）。[36] Y. Jha、D. Karevski、C. Elouard，《作为自主麦克斯韦妖的 Jaynes-Cummings 模型》，arXiv:2502.10344（2025年）。[37] J. I. Cirac 和 P. Zoller，《利用冷阱离子进行量子计算》，Phys. Rev. Lett. **74**，4091（1995年）。[38] M. Brune、F. Schmidt-Kaler、A. Maali、J. Dreyer、E. Hagley、J. M. Raimond 和 S. Haroche，《量子Rabi振荡：腔中场量子化的直接检验》，Phys. Rev. Lett. **76**，1800（1996年）。[39] H. P. Breuer 和 F. Petruccione，*The theory of open quantum systems* 2002（牛津大学出版社，）。[40] A. Garg、J. N. Onuchic 和 V. Ambegaokar，《摩擦对生物分子中电子转移的影响》，J. Chem. Phys. 83，4491（1985年）。[41]] P. Strasberg、G. Schaller、T. L. Schmidt 和 M. Esposito，《费米子反应坐标及其在强耦合区域自主麦克斯韦妖中的应用》，Phys. Rev. B 97，205405（2018年）。[42] M. Perarnau-Llobet、H. Wilming、A. Riera、R. Gallego 和 J. Eisert，《量子热力学中的强耦合修正》，Phys. Rev. Lett. 120，120602（2018年）。[43] J. Iles-Smith、N. Lambert 和 A. Nazir，《开放量子系统中的环境动力学、关联与非正则平衡态的涌现》，Phys. Rev. A 90，032114（2014年）。[44] J. Iles-Smith、A. G. Dijkstra、N. Lambert 和 A. Nazir，《结构化与非结构化环境中的能量传递：超越Born-Markov近似的主方程》，J. Chem. Phys. 144，044110（2016年）。[45] C. L. Latune：《强系统—热浴耦合区域中的稳态：反应坐标与微扰展开》。Phys. Rev. E 105，024126（2022年）。[46] H-P. Breuer、B. Kappler 和 F. Petruccione，《非马尔可夫量子主方程的随机波函数方法》，Phys. Rev. A **59**，1633（1999年）。[47] C. L. Latune、G. Pleasance、F. Petruccione：《强热浴耦合增强的循环量子热机》。Phys. Rev. Appl. **20**，024038（2023年）。[48] A. Misra、U. Singh、S. Bhattacharya、A. K. Pati：《产生量子相干的能量成本》。Phys. Rev. A 93，052335 2016( )。[49] S. Kallush、A. Aroch、R. Kosloff、S. Kallush、A. Aroch、R. Kosloff：热量子系统中相干性的幺正生成量化。《Entropy》21，8（2019年）[50] I. Marvian：在量子热力学中，相干蒸馏机是不可能的。《Nat. Commun.》11，25（2020年）。[51] M. Hadipour、S. Haseli：非平衡环境中的量子相干功提取。《Sci. Rep.》14，24876（2024年）。[52] Z. Niu、Y. Wu、Y. Wang、X. Rong、J. Du：单自旋系统中相干火用的实验研究。《Phys. Rev. Lett.》133，180401（2024年）。[53] E. Lutz：量子相干性提升量子功。《Physics》17（2024年）。

附录 A：㶲

在正文中，我们定义了 $\Xi_j(t) = \mathrm{Tr}\{[\rho_j(t) - \rho_j^{th}\ t\ ]H_j\}$ _ $U_P\ t\ = ( )$。将与被动态 $\pi_j(t) = \sum_i r_i(t)\,|E_i\rangle\langle E_i|$相关的被动能 $( )\ \mathrm{Tr}[\pi_j(t)H_j]$ 加到其中，可得

$$\Xi_j(t) = \mathrm{Tr}\{[\rho_j(t) - \pi_j(t)]H_j\} + \mathrm{Tr}\{[\pi_j(t) - \rho_j^{th}(t)]H_j\}. \tag{A1}$$

上式右端的第一项是功率，因此我们可以将上式改写为

$$\Xi_j(t) = \mathcal{E}_j(t) + \mathrm{Tr}\,[\pi(t) - \rho_j^{th}(t)]H_j. \tag{A2}$$

现在，将 $H_j = -\frac{1}{\beta_j\ t\ ()}\ln[\rho_j^{th}(t)Z_j(t)]$ 代入式 (A2)，并在其右端加上 $\frac{S[\pi_{(t)}]-S[\pi\ t\ ]\ ()()}{\beta_j\ t}$，经过一些代数运算后可得，

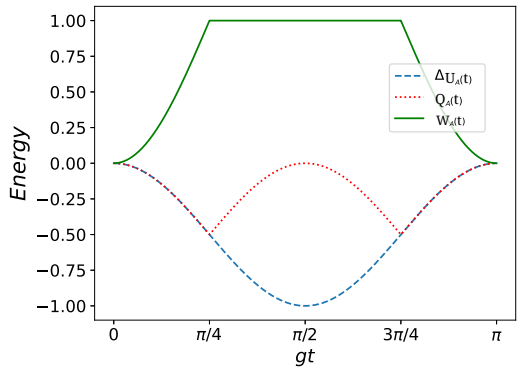
$$\Xi_j(t) = \mathcal{E}_j(t) + \frac{1}{\beta_j(t)}D[\pi_j(t)||\rho_j^{th}(t)], \tag{A3}$$

其中，右端的第二项是相对量子熵。我们将该量称为㶲 [32，33]，；由于功率 $\mathcal{E}_j(t)$ 和相对量子熵 $D[\pi_j(t)||\rho_j^{th}(t)$] 始终为正，因此㶲始终为正，$\Xi_j(t) \geq 0$

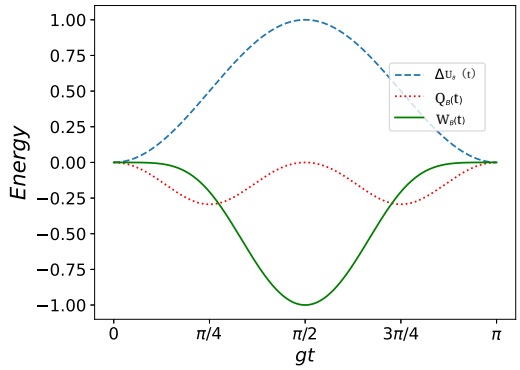
式（A3）表明，㶲 $\Xi_j(t)$ 始终大于或等于功率 $\mathcal{E}_j(t)$，并揭示了两种不同的功生成机制：与功率的产生或提取相关的幺正机制，以及与热背景（由逆有效温度 $\beta_j(t)$))表征）和被动态 $\pi_j(t)$ 与热态 $\rho_j^{th}(t)$ 之间的距离相关的非幺正机制。

附录B：量子比特-QHO 补充说明

在正文中，我们分析了量子比特-量子谐振子和量子比特-量子比特系统在时间区间 $0 \leq t \leq \pi/2g$ 内的热力学，但量子谐振子初始制备为

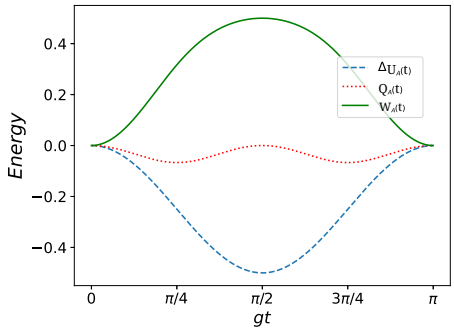


(a) 量子比特（系统 A）。

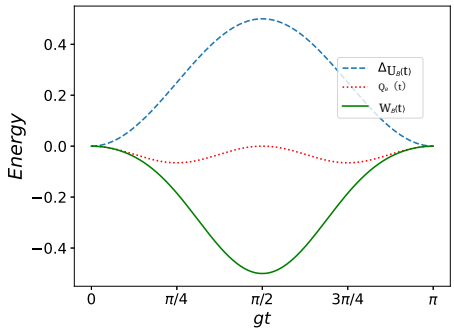


(b) 量子谐振子（系统 B）。

图 10：这里，我们绘制了量子比特（A）和量子谐振子（B）的热力学量随时间的变化。量子比特最初处于激发态 $|e\rangle$，量子谐振子最初处于真空态 $|0\rangle$。参数：$\omega_A = \omega_B$ 和 $g = 0.01\omega_A$。



(a) 量子比特（系统 A）。



(b) 量子比特 B。

图 11：这里，我们绘制了两个系统的内能、热和功随时间的变化。量子比特（A）最初处于叠加态 $|\psi_A(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|e\rangle \pm |g\rangle)$，量子谐振子（B）最初处于真空态 $|0\rangle$。参数：$\omega_A = \omega_B$ 和 $g = 0.01\omega_A$。

相干态 $|\alpha = 30\rangle$ 的情况除外。这一限制的依据是动力学具有周期性，因此热力学行为也具有周期性。然而，区间 $0 \le t \le \pi/2g$ 仅对应完整周期 $0 \le t \le \pi/g$ 的一半。对于互补区间 $\pi/2g \le t \le \pi/g$，其动力学相当于将 $0 \le t \le \pi/2g$ 中的演化沿 $t = \pi/2g$ 处的竖直线反射。由此，如果一个系统在区间 $0 \le t \le \pi/2g$ 内提供（接收）功或热，那么它将在区间 $\pi/2g \le t \le \pi/g$ 内接收（提供）等量的功或热。这种行为源于在 $t = \pi/2g$ 时，系统交换了各自的状态和角色，随后在区间 $\pi/2g \le t \le \pi/g$ 内演化回各自的初始状态。

在图 10 中（对应于图 2 的全周期图），我们观察到，对于 $\pi/2g \le t \le \pi/g$，热力学量的变化仿佛系统沿着相对于区间 $0 \le t \le \pi/2g$ 的反向路径演化，从 $t = \pi/2g$ 返回到 $t = 0$。例如，在量子比特的情形下，从 $t = \pi/2g$ 到 $t = 3\pi/4g$ 没有功的产生，这与区间 $t = \pi/4g$ 到 $t = \pi/2g$类似；而从 $t = 3\pi/4g$ 到 $t = \pi/g$，量子比特获得的功与它在早期时刻从 $t = 0$ 到 $t = \pi/4g$所提供的功相同。

对于热交换，我们观察到相应时间区间之间存在对称性：在两种情况下，热最初都由量子比特吸收，随后释放。这是因为，在这两个区间内，量子比特都从纯态开始，演化为最大混合态——在时间区间 $\Delta t = \pi/4g$ 内需要吸热——最后再次演化为纯态，从而导致放热。

在图 11 中，该图对应于图 3 的全周期图。我们观察到，对于 $\pi/2g \le t \le \pi/g$，热力学量呈现出其在区间 $0 \le t \le \pi/2g$ 内行为的镜像，即关于位于 $t = \pi/2g$ 处的竖直线发生反射。以量子比特（A）为例，在区间 $0 \le t \le \pi/2g$ 内系统获得功，而在区间 $\pi/2g \le t \le \pi/g$ 内，它获得的功与第一半周期中提供的功相同。对于量子谐振子，我们观察到相反的行为：它在区间 $0 \le t \le \pi/2g$ 内获得功，并在区间 $\pi/2g \le t \le \pi/g$ 内提供功。两个系统的热交换

均遵循前一段中针对图 10 所讨论的相同行为。

附录 C：反应坐标：附加信息

考虑一个量子比特（Q）与零温浴（E）相互作用，其哈密顿量如下（以下 $\hbar = 1$）

$$H_{QE} = \frac{\omega}{2}\sigma_z + \sum_k \omega_k a_k^\dagger a_k + \sum_k \Omega_k(\sigma_+ a_k + \sigma_- a_k^\dagger). \quad \text{(C1)}$$

我们可以将上述哈密顿量改写为

$$H_{QE} = \frac{\omega}{2}\sigma_z + \sigma_+ E + \sigma_- E^\dagger + \sum_k \omega_k a_k^\dagger a_k \quad \text{(C2)}$$

其中 $E := \sum_k \Omega_k a_k$。为简单起见，我们假设 Ω_k 为实数。引入相互作用绘景算符$E^\dagger(t) := e^{iH_E t/\hbar} E^\dagger e^{-iH_E t/\hbar}$，其中 $H_E = \sum_k \omega_k a_k^\dagger a_k$，浴关联函数为

$$c(t) := \mathrm{Tr}[\rho_B E^\dagger(t) E] = \sum_k \Omega_k^2 e^{i\omega_k t} n_k \quad \text{(C3)}$$

其中 $n_k := \mathrm{Tr}[\rho_B b_k^\dagger b_k]$。通常，通过引入谱密度 $D(\omega)$并переход到模的连续谱来计算关联函数

$$\sum_k \Omega_k^2 \to \int_0^\infty d\omega \frac{\Lambda^2}{2\pi} D(\omega) \quad \text{(C4)}$$

使得 $\int_0^\infty d\omega D(\omega) = 2\pi$，因此 Λ 表示与浴的耦合强度。

采用洛伦兹谱密度（有时也称为欠阻尼谱密度），

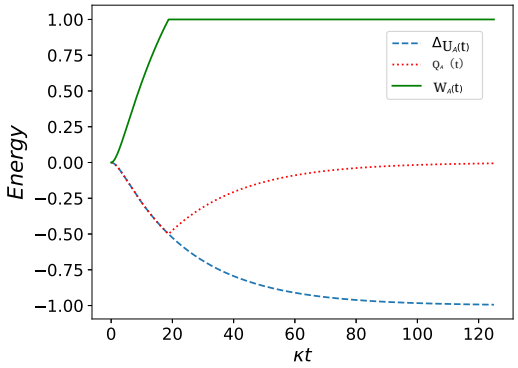
$$D(\omega) = \omega \frac{2}{\pi} \frac{\gamma \lambda^2 \omega_c^2}{(\omega^2 - \omega_c^2)^2 + (\omega\gamma\omega_c)^2} \quad \text{(C5)}$$

其中 ω_c 对应洛伦兹型谱密度的峰值，γ 描述其宽度，λ 表示浴的耦合强度。上述问题可以精确映射为 [40–45]我们的系统 Q，并增加一个称为反应坐标 RC 的虚构玻色模；该玻色模本身与零温下的剩余马尔可夫浴相互作用。在与剩余浴弱耦合的极限下（这对应于窄谱密度的情形），Q 与 RC 的动力学由下式给出

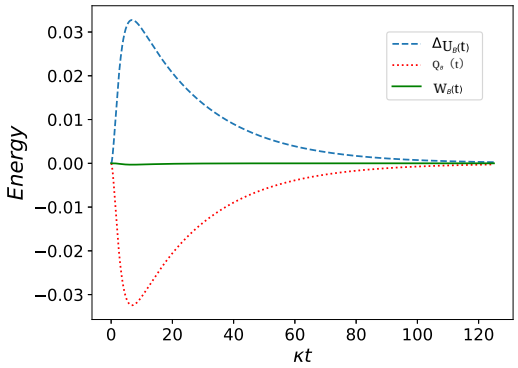
$$\dot{\rho}(t) = -i[H_{Q,RC}, \rho(t)] + \frac{\kappa}{2}(2a\rho(t)a^\dagger - \{a^\dagger a, \rho(t)\}), \quad \text{(C6)}$$

其中 $\{A, B\} = AB + BA$, $H_{Q,\ RC} = \frac{\omega}{2}\sigma_z + \omega_{RC} a^\dagger a + \lambda(\sigma_+ a + \sigma_- a^\dagger)$，其中 a, $a^\dagger$ 分别为反应坐标的湮灭算符和产生算符，以及 $\omega_{RC} = \omega_c$。注意，阻尼率 κ 由 γ 决定，即浴谱密度的宽度。在下文中，我们假设量子比特与反应坐标共振（$\omega = \omega_c$）。

为了研究自发辐射过程中浴的热力学性质，我们采用反应坐标（RC）映射，其中 RC 代表浴中可访问的部分，使我们能够提取有关其热力学的信息。在下文考虑的所有情形中，RC 初始处于真空态 $|0\rangle$，而量子比特初始处于激发态 $|e\rangle$。



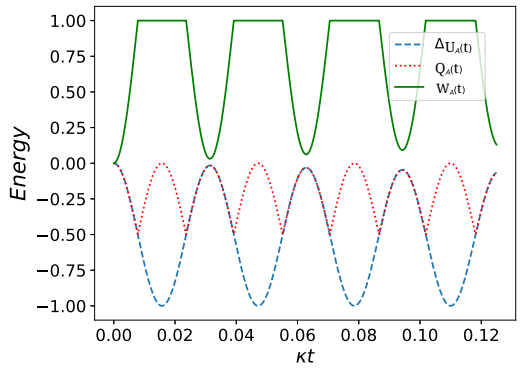
(a) 量子比特（系统 A）。



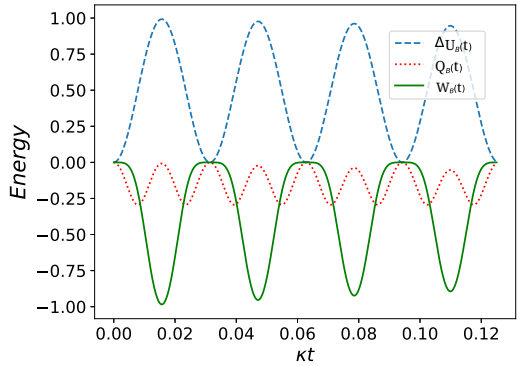
(b) 反应坐标（系统 B）。

图 12：量子比特和量子化模（反应坐标）的热力学量随时间的变化。参数：$\omega = \omega_{RC}$、$\kappa = 10\lambda$ 和 $\lambda = 0.01\omega_c$。

图12a展示了反应坐标与剩余浴处于强耦合状态时，量子比特和反应坐标的热力学量。如图12a所示，量子比特的热力学行为与图8中的结果非常相似，这符合预期。对于反应坐标，我们观察到，它在早期的短时间区间内获得了极少量的功，并与量子比特和浴都交换了少量的热。在长时间后，如预期的那样，所有热力学量都耗散到剩余浴中。在这种情况下，反应坐标交换的能量小于图9所示的中等耦合情形，这是因为能量耗散随{v1}增大而增强。



(a) 量子比特（系统 A）。



(b) 反应坐标（系统 B）。

图 13：量子比特和量子化模（反应坐标）的热力学量随时间的变化。参数： $\omega = \omega_{RC}$、 $\kappa = 0.01\lambda$ 和 $\lambda = 0.01\omega$。

变化增大。还要注意，对于$\kappa \gg \Omega$，动力学实际上相当于量子比特直接耦合到零温浴，因此可以在描述中消去腔。

现在，我们考虑反应坐标与浴之间的弱耦合极限。在这一状态下，图 13 显示热力学量变为周期性变化。然而，对于量子比特（图 13a），每个周期结束时功的最小值会随时间增加。内能也呈现类似行为，但表现为最大值增加。对于反应坐标（图 13b），我们观察到相关趋势：功的最小值逐周期增加，而内能的最大值则逐周期降低。这种行为源于浴的影响：尽管浴与反应坐标的耦合较弱，但仍会影响量子比特与反应坐标之间的能量交换。在极长时间尺度下，这种振荡行为趋于消失，与先前的情况相同。不过，当耗散率 κ 足够小时，系统的动力学会趋近于与浴有效解耦时的状态，量子比特则表现出完全周期性的热力学行为。