博士論文(2017)解説

Theoretical studies on quantum pump and excess entropy production: Quantum master equation approach

筑波大学大学院 数理物質科学研究科 都倉研出身

中嶋 慧

本発表の構成

(1)背景

(2)動機と目的

(3)量子ポンプの研究成果(簡単に)

(4)過剰エントロピーの研究成果

(5)結論

背景

これまで、静的で閉じた量子系の平衡状態の性質は詳しく研究されてきた。これを発展させた、より一般的な系に関する研究は重要であるが、未完成であり、近年活発に議論されている。

これを発展させる方向として、本研究では次の3つの観点に着目した。

(1)時間依存

Berry位相(純量子力学的効果)。

M. V. Berry, Proc. R Soc. A **392**, 45 (1984).

(2)量子開放系

外部の系と結合しながら、量子コヒーレンスが保たれた系。
例えば、量子ドットがリードと結合した系などがある。
研究手法の1つに量子マスター方程式。

H. P. Breuer and F. Petruccione, *The Theory of Open Quantum Systems* (Oxford University Press, Oxford, 2002).

(3) 非平衡系

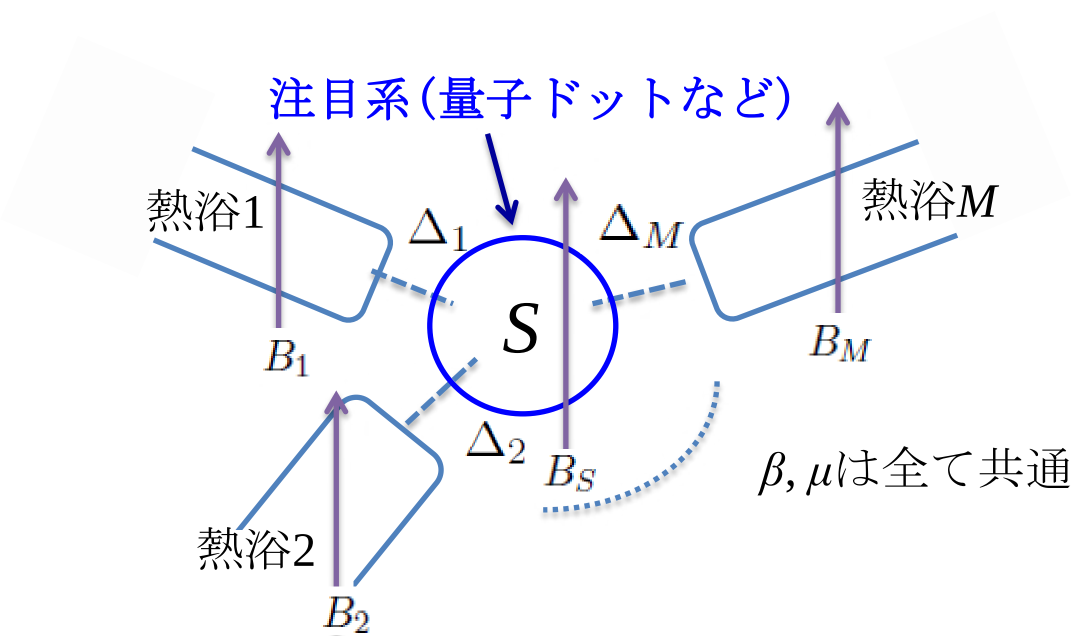
古典的な非平衡定常状態のエントロピーに関しては
研究が進んでいる：

T. S. Komatsu, N. Nakagawa, S. Sasa and H. Tasaki, J. Stat. Phys. **159**, 1237 (2015).

基本的な概念1:量子ポンプ

　量子ドットの様な量子コヒーレンスが保たれた系が、いくつかの熱浴と結合した状況を考える。熱浴間に化学ポテンシャル差や温度差のようなバイアスが無い場合でも、系を制御する様々なパラメーター（制御変数）を動かしたとき、それに誘導されて電流やスピン流が生じる。これを**量子ポンプ**という。特に、制御変数の変化が十分遅い場合を**量子断熱ポンプ**という。

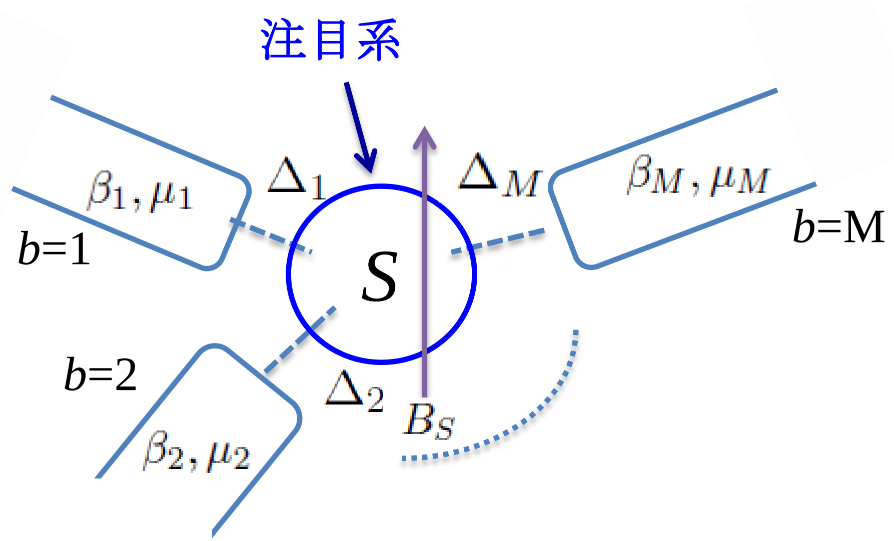
　量子断熱ポンプによりポンプされる電荷やスピンは制御変数空間の線積分で与えられる。



基本的な概念2: 過剰エントロピー

　いくつかの熱浴と結合した注目系を考える。熱浴の温度と化学ポテンシャルは制御可能とする。一般に熱浴の間に温度差や化学ポテンシャル差がある場合を考えると、一定時間の後、系は非平衡定常状態になる。ある非平衡定常状態から別のそれへとゆっくり変化させる間に生じるエントロピー生成を考える。エントロピー生成のうち、幾何学的表式で表される部分を過剰エントロピーという。

$$\textbf{エントロピー生成} = \int_0^\tau dt\ J^\sigma_{\rm ss}(\alpha_t) + \boxed{\int_C d\alpha^n\ A^\sigma_n(\alpha)}$$



過剰エントロピーの経路依存性

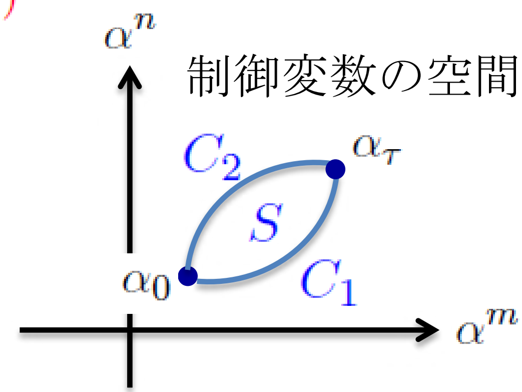
$$\text{エントロピー生成} = \int_0^\tau dt\ J^\sigma_{\rm ss}(\alpha_t) + \underline{\int_C d\alpha^n\ A^\sigma_n(\alpha)}$$

$= \sigma_{\rm ex}(C)$

$$\sigma_{\rm ex}(C_1) - \sigma_{\rm ex}(C_2) = \int_S d\alpha^m \wedge d\alpha^n\ \frac{1}{2} F^\sigma_{mn}(\alpha)$$

Stokesの定理

$$F^\sigma_{mn}(\alpha) = \frac{\partial A^\sigma_n}{\partial \alpha^m} - \frac{\partial A^\sigma_m}{\partial \alpha^n}$$



$$F^\sigma_{mn}(\alpha) = \mathcal{O}(\varepsilon^2) \Longleftrightarrow A^\sigma_n(\alpha) = \frac{\partial \mathcal{S}(\alpha)}{\partial \alpha^n} + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$$

ε：非平衡度

$$\sigma_{\rm ex} = \mathcal{S}(\alpha_\tau) - \mathcal{S}(\alpha_0) + \underline{\mathcal{O}(\varepsilon^2\delta)}$$

δ: 制御変数の変化の大きさ

経路依存性

$F^\sigma_{mn}(\alpha) = \mathcal{O}(\varepsilon) \Longleftrightarrow \mathcal{S}$ は存在しない　　経路依存性が $\mathcal{O}(\varepsilon\delta)$.

古典系では $\mathcal{S}$ が存在する。

先行研究

(1) N. A. Sinitsyn and I. Nemenman, Europhys. Lett. **77**, 58001 (2007)
Berry-Sinitsyn-Nemenman(BSN)位相の発見。

(2) T. Sagawa and H. Hayakawa, Phys. Rev. E **84**, 051110 (2011).
マスター方程式からBSN位相を得る。過剰エントロピーへ応用(古典系)。
$\mathcal{S}$ は対称化Shannonエントロピー。

(3) T. Yuge, T. Sagawa, A. Sugita and H. Hayakawa, Phys. Rev. B **86**, 235308 (2012)
量子マスター方程式からBSN位相を得る。量子断熱ポンプに応用。
ただし、spinlessで、制御変数は温度, 化学ポテンシャルのみ。

(4) H. L. Calvo, *et al.*, Phys. Rev. B **86**, 245308 (2012).
一般化マスター方程式を用いた量子ポンプの研究。
BSN位相を使わず、(3)と同様の結果を得る。

(5) T. Yuge, T. Sagawa, A. Sugita and H. Hayakawa, J. Stat. Phys. **153**, 412 (2013).
量子マスター方程式から得られるBSN位相を過剰エントロピーへ応用(量子系)。
$\mathcal{S}$ は対称化von Neumannエントロピー(時間反転対称性を仮定)。
ただし、不備がある。

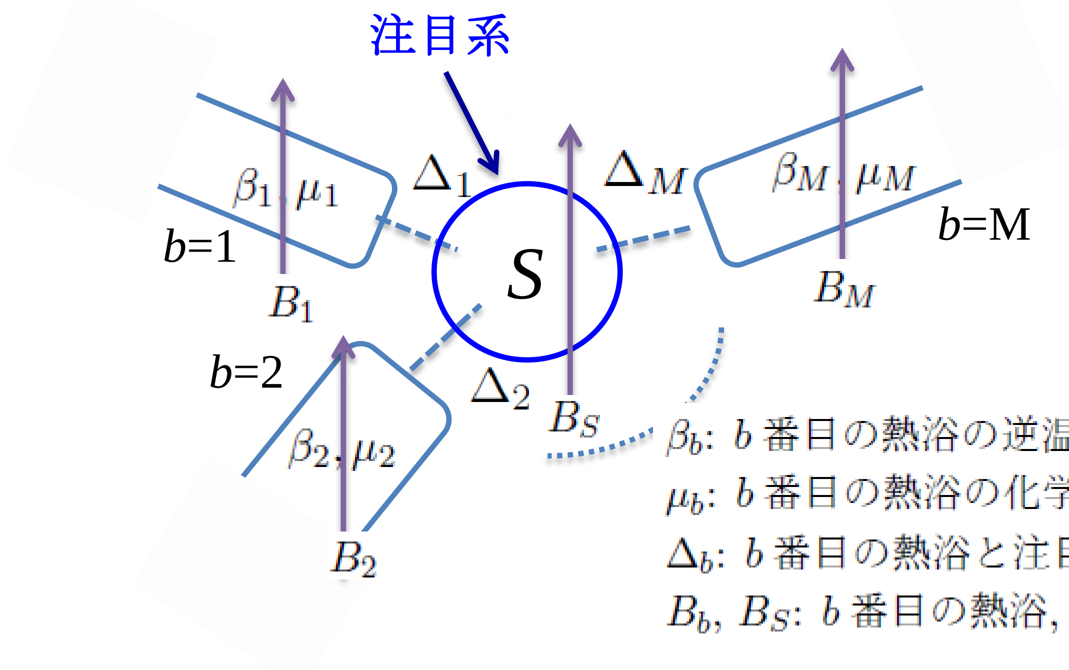
研究の目的

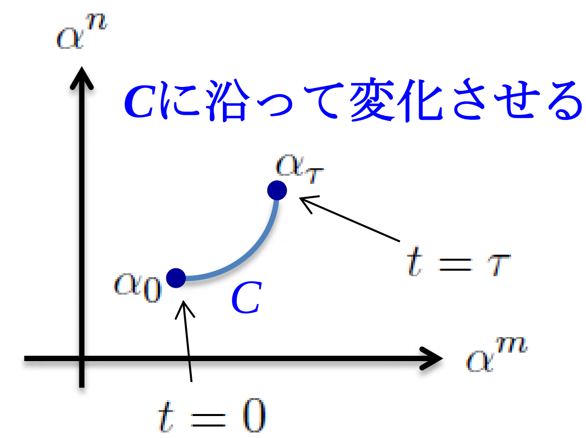
(1)現在様々な量子ポンプの理論的アプローチが提案されているが、それらの間の関係が明確とはなっていない。本論文の第1の目的はそれらの間の関係を明らかにする事である。

　また、量子ポンプの先行研究では主に電荷ポンプが調べられて来たが、spintronics や量子情報処理の観点から電子のスピン自由度に関しても検討を加える必要がある。そのため、量子ポンプにスピンの自由度を導入して、スピンポンプの可能性を探る。

(2)古典系の過剰エントロピーの研究は近年良く整備されて来たが、量子系のそれについてはまだ不完全な所があると考えられる。そこで、第2の目標は、この量子系の過剰エントロピーについて議論を深め、古典系のそれとの比較を行う事である。

本論文での物理モデル





β_b: b 番目の熱浴の逆温度

μ_b: b 番目の熱浴の化学ポテンシャル

Δ_b: b 番目の熱浴と注目系との結合の強さ

B_b, B_S: b 番目の熱浴, 注目系に加えられる磁場

$$H_{\mathrm{tot}}(\underline{\alpha'(t)}) = H_S(\alpha_S(t)) + \sum_{b=1}^{M}[\Delta_b(t)H_{Sb} + H_b(B_b(t))]$$

制御変数の組

$$\begin{aligned}\alpha &= \{\alpha^n\} = \underline{\alpha'} + \underline{\alpha''} \\ &= \underbrace{\alpha_S + \{B_b\} + \{\Delta_b\}}_{\text{力学変数}} + \underbrace{\{\beta_b, \mu_b\}}_{\text{熱力学変数}}\end{aligned}$$

完全計数統計(FCS)

時刻t=0 とt=τ に熱浴の、時間に依らない物理量Oを射影測定する。

$$[O, H_b] = 0,\ \ [O, N_b] = 0$$

出力

$$\Delta o = o(\tau) - o(0)$$

完全計数統計(FCS)とは、Δoの確率分布関数$P_\tau(\Delta o)$を計数場を用いてフーリエ変換して得られる母関数を(何らかの近似を用いて)求める手法である。

母関数 $$Z_\tau(\chi) \stackrel{\text{def}}{=} \int d\Delta o\ P_\tau(\Delta o) e^{\underline{i\chi}\Delta o}$$ 計数場

この母関数の対数で定義されるキュムラント母関数を計数場で微分することにより、物理量Oの変化分Δoの任意のキュムラントを求めることができるため、近年活発に研究されている。

FCS量子マスター方程式

　特に、母関数を求める方法としてFCS量子マスター方程式の方法があり、本研究ではこの方法を採用する。

$$Z_\tau(\chi) \stackrel{\text{def}}{=} \int d\Delta o \; P_\tau(\Delta o) e^{i\underline{\chi}\Delta o}$$

計数場

$$= \mathrm{Tr}_{\mathrm{tot}}[\rho_{\mathrm{tot}}(\chi, t=\tau)]$$

$$= \mathrm{Tr}_S[\rho_S(\chi, t=\tau)] \qquad \rho_S(\chi,t) \stackrel{\text{def}}{=} \mathrm{Tr}_B[\rho_{\mathrm{tot}}(\chi,t)]$$

M. Esposito, *et al.*, Rev. Mod. Phys. **81**, 1665 (2009).

FCS量子マスター方程式 (FCS-QME):

Dissipator, $\mathcal{O}(H_{Sb})^2$

(Born近似)

$$\frac{d\rho_S(\chi,t)}{dt} = -i[H_S(t), \rho_S(\chi,t)] + \hat{\Pi}(\underline{\chi}, \underline{\alpha_t})\rho_S(\chi,t)$$

時刻*t*での制御変数の組の値 **(Markov近似)**.

Liouville space

FCS-QME $\frac{d}{dt}\rho_S(\chi,t) = \underline{\hat{K}(\chi,\alpha_t)}\rho_S(\chi,t)$ **χ=0で普通の量子マスター方程式.**

Liouvillian

量子マスター方程式の議論を簡便に行うため、Liouville space の表記を導入する。ここでは、状態や演算子は(超)ベクトルとなり、状態に対する操作は Liouvillian の様な(超)演算子で表される。

Liouville space

対応

$$
\begin{aligned}
|n\rangle\langle m| \quad &\longleftrightarrow \quad |nm\rangle\rangle, \\
\mathrm{Tr}(A^\dagger B) \quad &\longleftrightarrow \quad \langle\langle A|B\rangle\rangle, \\
\mathrm{Tr}(\bullet) \quad &\longleftrightarrow \quad \langle\langle 1|\bullet\rangle\rangle.
\end{aligned}
$$

Liouville spaceでのFCS-QME

$$\frac{d}{dt}|\rho_S(\chi,t)\rangle\rangle = \hat{K}(\chi,\alpha_t)|\rho_S(\chi,t)\rangle\rangle$$

Liouvillianの固有ベクトル

$$\frac{d}{dt}|\rho_S(\chi,t)\rangle\rangle = \hat{K}(\chi,\alpha_t)|\rho_S(\chi,t)\rangle\rangle$$

左右の固有ベクトル

複素数

$$\hat{K}(\chi,\alpha)|\rho_n^\chi(\alpha)\rangle\rangle = \underline{\lambda_n^\chi(\alpha)}|\rho_n^\chi(\alpha)\rangle\rangle$$

$$\langle\langle l_n^\chi(\alpha)|\hat{K}(\chi,\alpha) = \lambda_n^\chi(\alpha)\langle\langle l_n^\chi(\alpha)|$$

$$\langle\langle l_m^\chi|\rho_n^\chi\rangle\rangle = \delta_{mn}$$

確率保存 (χ=0)

$$0 = \frac{d}{dt}\langle\langle 1|\rho_S(t)\rangle\rangle = \langle\langle 1|\hat{K}(0,\alpha_t)|\rho_S(t)\rangle\rangle$$

$$\boxed{\begin{gathered}\langle\langle 1|\hat{K}(0,\alpha) = 0 \\ \lambda_0^0(\alpha) = 0\,, \quad \langle\langle l_0^0(\alpha)| = \langle\langle 1|\end{gathered}}$$

n=0モード

BSN位相

FCS-QMEの初期状態: $|\rho_S(\chi,0)\rangle\rangle = |\rho_S(0)\rangle\rangle$　　χに依らない

FCS-QMEの形式解：

$$|\rho_S(\chi,t)\rangle\rangle = \sum_n \underline{c_n^\chi(t)}\, e^{\int_0^t ds\ \lambda_n^\chi(\alpha_s)} |\rho_n^\chi(\alpha_t)\rangle\rangle$$

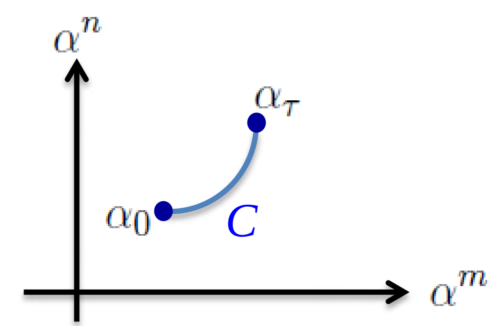
ゆっくりと変化

系の緩和時間

もし制御変数の変化が十分遅い ($\tau \gg \tau_S$) なら、

$$|\rho_S(\chi,t)\rangle\rangle \approx \langle\langle l_0^\chi(\alpha_0)|\rho_S(0)\rangle\rangle e^{\underline{-\int_0^\tau dt\ \langle\langle l_0^\chi(\alpha_t)|\frac{d}{dt}|\rho_0^\chi(\alpha_t)\rangle\rangle}} e^{\int_0^\tau dt\ \lambda_0^\chi(\alpha_t)} |\rho_0^\chi(\alpha_t)\rangle\rangle$$

BSN位相



キュムラント母関数:

$$S_\tau(\chi) \stackrel{\mathrm{def}}{=} \ln Z_\tau(\chi) = \ln\langle\langle 1|\rho_S(\chi,\tau)\rangle\rangle$$

$$\approx \int_0^\tau dt\ \lambda_0^\chi(\alpha_t) \underline{- \int_C d\alpha^n\ \langle\langle l_0^\chi(\alpha)|\frac{\partial}{\partial \alpha^n}|\rho_0^\chi(\alpha)\rangle\rangle} + \ln\langle\langle l_0^\chi(\alpha_0)|\rho_S(\alpha_0)\rangle\rangle + \ln\langle\langle 1|\rho_0^\chi(\alpha_\tau)\rangle\rangle$$

幾何学的(経路Cのみに依存)

期待値

$$\langle \Delta o \rangle_\tau = \frac{\partial S_\tau(\chi)}{\partial (i\chi)}\Big|_{\chi=0}$$

$$= \int_0^\tau dt\ \underbrace{\lambda_0^O(\alpha_t)}_{\text{瞬間定常流}} + \int_C d\alpha^n\ \underline{A_n^O(\alpha)} + \underbrace{\langle\langle l_0^O(\alpha_0)|\rho_S(0)\rangle\rangle + \langle\langle 1|\rho_0^O(\alpha_0)\rangle\rangle}_{=0 \text{ if } \rho_S(0)=\rho_0(\alpha_0)}$$

瞬間定常状態

BSN vector $A_n^O(\alpha) = -\langle\langle l_0^O(\alpha)|\frac{\partial}{\partial\alpha^n}|\rho_0(\alpha)\rangle\rangle$ $\boxed{\hat{K}(\alpha)|\rho_0(\alpha)\rangle\rangle = 0}$

T. Yuge, T. Sagawa, A. Sugita and H. Hayakawa, PRB **86**, 235308 (2012).

以下では、$X^O = \frac{\partial X}{\partial (i\chi)}\Big|_{\chi=0}$ $X(\alpha) = X^\chi(\alpha)\big|_{\chi=0}$ $X = \lambda_0, l_0, \rho_0, \hat{K}, \cdots$

FCS-QMEの方法は、非断熱ポンプにも応用できる。

K. Watanabe and H. Hayakawa, Prog. Theor. Exp. Phys. 2014, 113A01.

一般化マスター方程式の方法

別のアプローチとして、**一般化マスター方程式**

$$\frac{d}{dt}p_\kappa(t) = \sum_\eta \int_{-\infty}^{t} dt'\ W_{\kappa\eta}(t,t')p_\eta(t') \qquad p_\kappa(t) = \langle\kappa|\rho_S(t)|\kappa\rangle$$

を使う方法がある。

H. L. Calvo, *et al.*, Phys. Rev. B **86**, 245308 (2012).

BSN位相を使わず、独立に弓削らと同様の結果を得た。

しかし、FCS-QMEの方法との関係は調べられていなかった。

量子ポンプの研究成果(1)

(1) Calvoらの一般化マスター方程式の方法と、弓削らのFCS-QME方法とが**等価であることを示した**。
　さらに、量子マスター方程式のLiouvillianのpseudo-inverseを用いて、ポンプ周波数ωの高次の効果を表す式を初めて求めた。これは非断熱ポンプに応用できる。
ωのn次によるポンプ電流・スピン流は、線幅(リードとの結合の強さ)Γを用いて、
$(\frac{\omega}{\Gamma})^n$のオーダーであることを示した。

(2)また、量子マスター方程式に使われるMarkov近似による誤差の大きさを評価し、ポンプ周波数ωによる展開が何次まで妥当か評価した。

S. Nakajima, M. Taguchi, T. Kubo and Y. Tokura, Phys. Rev. B **92**, 195420 (2015).

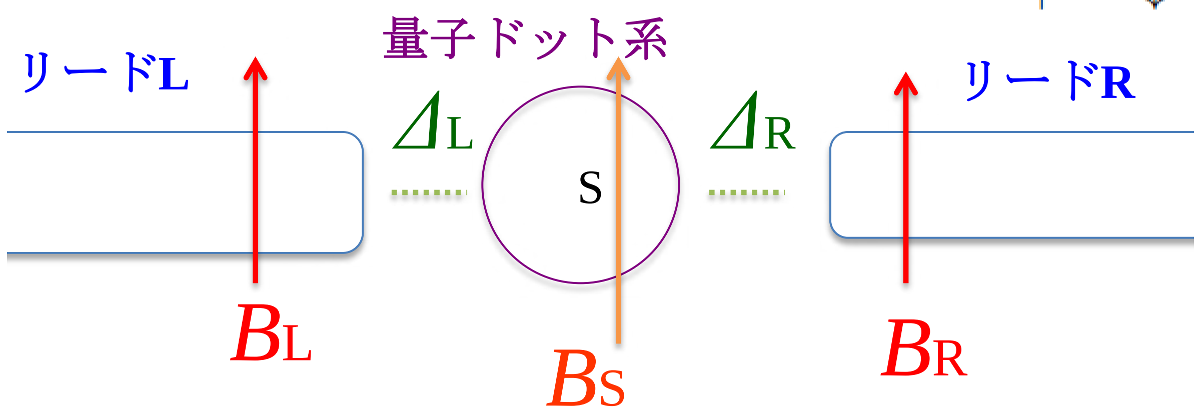
(3)上述の表式を用いて、spinless 1準位の量子ドット系で、ポンプ電荷をωの6次まで定量的に評価した。

量子ポンプの研究成果(2)

(4)温度か化学ポテンシャルを動かす場合には、瞬間定常流を積分しても有限に残るため、ポンプされる電荷(スピン)は周期と共に線形に増大してしまう。制御変数の変化の速度等に依らない幾何学的な項のみを取り出すためには、熱力学量をゼロバイアスに固定しておくべきである事を指摘した。

(5)スピンの自由度を導入し、スピンの効果が表れる現象を見るために、注目系とリードに磁場をかけ、それを制御変数とした。2端子系を考えた。
ドットとリードの結合の強さも制御変数とし、$(B_\mathrm{S}, B_\mathrm{L})$, $(B_\mathrm{S}, \mathit{\Delta}_\mathrm{L})$, $(B_\mathrm{L}, B_\mathrm{R})$, $(\mathit{\Delta}_\mathrm{L}, \mathit{\Delta}_\mathrm{R})$によるポンプ電荷・スピンを調べた。$(B_\mathrm{L}, B_\mathrm{R})$, $(\mathit{\Delta}_\mathrm{L}, \mathit{\Delta}_\mathrm{R})$のように注目系の制御変数を動かさない場合、ポンプが起きない事を示した。
$(B_\mathrm{S}, B_\mathrm{L})$では**純電流ポンプ**, $(B_\mathrm{S}, \mathit{\Delta}_\mathrm{L})$では**純スピンポンプ**を実現可能だと分かった。

スピン流: $I_\uparrow - I_\downarrow$　電流: $I_\uparrow + I_\downarrow$



過剰エントロピー

瞬間定常エントロピー流

$$\text{エントロピー生成} = \underbrace{\int_0^\tau dt\ J_{\rm ss}^\sigma(\alpha_t)}_{\propto\ \tau} + \boxed{\int_C d\alpha^n\ A_n^\sigma(\alpha)}$$

過剰エントロピー

$= \mathcal{S}(\alpha_\tau) - \mathcal{S}(\alpha_0) + \underline{\text{誤差}}$

∝(非平衡度)^2

古典系では経路依存性がほぼない

沙川・早川[1](古典マスター方程式系)において、$A_n^\sigma(\alpha)$と完全計数統計, BSN位相との関係が指摘された。

$\mathcal{S}$は対称化Shannonエントロピーだった。

古典マスター方程式系の最近の研究[2]では、$\mathcal{S}$ はShannonエントロピーであることが知られている。

[1] (古典)T. Sagawa and H. Hayakawa, Phys. Rev. E 84, 051110 (2011).

[2] (古典)T. S. Komatsu, N. Nakagawa, S. Sasa and H. Tasaki, J. Stat. Phys. **159**, 1237 (2015).

弓削らの議論の問題点の指摘

弓削らは、T. Yuge, T. Sagawa, A. Sugita and H. Hayakawa, J. Stat. Phys. **153**, 412 (2013)で、従来研究を量子系の過剰エントロピーに拡張しようとした。

注目系におけるエントロピー生成:

$$\sigma' \stackrel{\text{def}}{=} \langle \underline{S(\tau)} - \underline{S(0)} \rangle$$

$$s(t) \stackrel{\text{def}}{=} -\sum_b \beta_b(t)[H_b - \mu_b(t) N_b]$$ の測定値

これをFCS-QMEを用いて解析。

⟶ *s*(*t*)は時間に陽に依存するので、FCS-QMEは使えない事を指摘。

そもそも、*σ*'はエントロピー生成ではない事を見出した。

$$\sigma' = -\int_0^\tau dt\, \frac{d}{dt} \sum_b [\beta_b(t)\langle H_b\rangle_t - \beta_b(t)\mu_b(t)\langle N_b\rangle_t]$$

$$= \underbrace{-\int_0^\tau dt \sum_b \left[\frac{d\beta_b(t)}{dt}\langle H_b\rangle_t - \frac{\beta_b(t)\mu_b(t)}{dt}\langle N_b\rangle_t\right]}_{?} \underbrace{-\int_0^\tau dt \sum_b \left[\beta_b(t)\frac{d\langle H_b\rangle_t}{dt} - \beta_b(t)\mu_b(t)\frac{d\langle N_b\rangle_t}{dt}\right]}_{\text{エントロピー生成}}$$

エントロピー生成の新しい定義の提案

熱力学(熱浴1つ)では、準静的過程で、

$$dS = \beta d'Q \ (d'Q = dU - \mu dN)$$

Clausiusの等式

熱浴が複数の場合：

注目系における平均エントロピー生成率:

$$J^\sigma(t) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_b \beta_b(t)[\underline{-i^{H_b}(t)} - \mu_b(t)\{-i^{N_b}(t)\}]$$

熱浴*b*から注目系へのエネルギー流

***O*のcurrent:** $i^O(t) = \lambda_0^O(\alpha_t) - \langle\langle l_0^O(\alpha_t)|\frac{d}{dt}|\rho_0(\alpha_t)\rangle\rangle$ FCS-QMEから得られた式

J^σ は計算しやすい。

エントロピー生成

注目系における平均エントロピー生成:

$$\sigma \stackrel{\text{def}}{=} \int_0^\tau dt\ J^\sigma(t)$$
$$= \int_0^\tau dt\ \underbrace{J^\sigma_{\text{ss}}(\alpha_t)}_{\text{瞬間定常エントロピー流}} + \int_C d\alpha^n\ \underbrace{A^\sigma_n(\alpha)}_{\text{BSN vector}}$$

$$J^\sigma_{\text{ss}}(\alpha_t) = \sum_b \beta_b(t)[-\lambda_0^{H_b}(\alpha_t) - \mu_b(t)\{-\lambda_0^{N_b}(\alpha_t)\}]$$
$$A^\sigma_n(\alpha) = \sum_b \beta_b[-A_n^{H_b}(\alpha) - \mu_b\{-A_n^{N_b}(\alpha)\}]$$

過剰エントロピーの理論解析に関する考察

$$\sigma \overset{\text{def}}{=} \int_0^\tau dt\ J^\sigma(t), \quad J^\sigma(t) \overset{\text{def}}{=} \sum_b \beta_b(t)[-i^{H_b}(t) - \mu_b(t)\{-i^{N_b}(t)\}]$$

Currentから考察し直した。

FCS-QMEから得られた式を代入

$$\sigma \neq \langle \underline{S'(\tau)} - \underline{S'(0)} \rangle$$

熱浴系のある演算子*s'*(*t*)の測定値の差

2点測定の完全計数統計とは関係ない。

ある種の一般化された量子マスター方程式

$$\frac{d}{dt}\rho^\lambda(t) = \hat{\mathcal{K}}^\lambda(\alpha_t)\rho^\lambda(t)$$

の、初期条件 $\rho^\lambda(0) = \rho(0)$ の解が、

$$\frac{\partial}{\partial(i\lambda)}\mathrm{Tr}_S[\rho^\lambda(t=\tau)]\Big|_{\lambda=0} = \sigma$$

を満たすような $\hat{\mathcal{K}}^\lambda(\alpha)$ は無数に存在する。

高次モーメントはこの手法では分からず、今後の課題である。

過剰エントロピーの研究成果(1)

$$\sigma = \int_0^\tau dt\ J^\sigma_{\rm ss}(\alpha_t) + \underbrace{\int_C d\alpha^n\ A^\sigma_n(\alpha)}_{=\sigma_{\rm ex}}$$

系に対して時間反転対称性を**仮定せずに**以下を示した。

$$\boxed{A^\sigma_n(\alpha) = -{\rm Tr}_S\left[\ln \rho_0^{(-1)}(\alpha)\frac{\partial \rho_0(\alpha)}{\partial \alpha^n}\right] + \mathcal{O}(\varepsilon^2)}$$

$$\hat{K}_\kappa(\alpha)\underbrace{\rho_0^{(\kappa)}(\alpha)}_{\text{「瞬間定常状態」}} = 0 \qquad \hat{K}_\kappa(\alpha)\bullet \overset{\rm def}{=} -i[H_S(\alpha_S) + \kappa H_{\rm L}(\alpha), \bullet] + \sum_b \Pi_b(\alpha)\bullet$$

$$\rho_0 = \rho_0^{(1)}$$

$H_{\rm L}$: Lambシフト・ハミルトニアン

非平衡度 $\varepsilon \overset{\rm def}{=} \max_b \left\{\frac{|\beta_b - \overline{\beta}|}{\overline{\beta}}, \frac{|\beta_b\mu_b - \overline{\beta\mu}|}{|\overline{\beta\mu}|}\right\}$ $\overline{\beta}, \overline{\beta\mu}$ は参照値。

H_S に縮退がないときや、$H_{\rm L}$ が無視できる場合は、

$$\boxed{\sigma_{\rm ex} = S_{\rm vN}(\rho_0(\alpha_\tau)) - S_{\rm vN}(\rho_0(\alpha_0)) + \mathcal{O}(\varepsilon^2\delta)}$$

$$S_{\rm vN}(\rho) \overset{\rm def}{=} -{\rm Tr}_S[\rho \ln \rho]$$

von Neumannエントロピー

δ: 制御変数の変化の大きさ

過剰エントロピーの研究成果(2)

系に対して時間反転対称性を仮定しないなら、H_S に縮退があるとき、

$$A_n^\sigma(\alpha) = \frac{\partial \mathcal{S}(\alpha)}{\partial \alpha^n} + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$$

となる $\mathcal{S}(\alpha)$ は存在しない。

系に対して時間反転対称性を仮定すると、

$\tilde{\bullet}$ は $\bullet$ の時間反転

$$\mathcal{S}(\alpha) = \underline{S_{\mathrm{sym}}(\rho_0(\alpha)) = -\mathrm{Tr}_S\left[\rho_0(\alpha)\frac{1}{2}(\ln\rho_0(\alpha) + \ln\tilde{\rho}_0(\alpha))\right]}$$

であることを示した。

対称化von Neumannエントロピー

Cf. K. Saito and H.Tasaki, J. Stat. Phys. **145**, 1275 (2011)と整合

$$\sigma_{\mathrm{ex}} = S_{\mathrm{sym}}(\rho_0(\alpha_\tau)) - S_{\mathrm{sym}}(\rho_0(\alpha_0)) + \mathcal{O}(\varepsilon^2\delta)$$

過剰エントロピーの研究成果(3)

量子マスター方程式がマスター方程式

瞬間定常状態：$p_n^{\mathrm{ss}}(\alpha)$

$$\frac{dp_n(t)}{dt} = \sum_{m=1}^{\mathcal{N}} K_{nm}(\alpha_t)p_m(t) \qquad p_n(t) = \langle n|\rho_S(t)|n\rangle$$

に帰着する場合を考える。Lambシフトの影響がない場合である。この場合、

$$\sigma = \int_0^\tau dt \sum_{n,m} \sigma_{nm}(\alpha_t)p_m(t).$$

状態を*n*に見つける確率 $p_n(t)$ が上のマスター方程式に従うMarkov jump過程を考える。[2]で定義された平均エントロピー生成は、

$$\sigma^{\mathrm{C}} = \int_0^\tau dt \sum_{n,m} \sigma^{\mathrm{C}}_{nm}(\alpha_t)p_m(t).$$

$\boxed{\sigma^{\mathrm{C}}_{nm}(\alpha) = \sigma_{nm}(\alpha) + \mathcal{O}(\varepsilon^2)}$ を示した。これは、$\boxed{\sigma^{\mathrm{C}}_{\mathrm{ex}} = \sigma_{\mathrm{ex}} + \mathcal{O}(\varepsilon^2\delta)}$を導く。

[2]の結果 $\boxed{\sigma^{\mathrm{C}}_{\mathrm{ex}} = S_{\mathrm{Sh}}[p^{\mathrm{ss}}(\alpha_\tau)] - S_{\mathrm{Sh}}[p^{\mathrm{ss}}(\alpha_0)] + \mathcal{O}(\varepsilon^2\delta)}$ は本研究の結果と整合する。

$S_{\mathrm{Sh}}[p] \stackrel{\mathrm{def}}{=} -\sum_n p_n \ln p_n$ Shannon entropy

[2] T. S. Komatsu, N. Nakagawa, S. Sasa and H. Tasaki, J. Stat. Phys. **159**, 1237 (2015).

過剰エントロピー研究のまとめ

T. Yuge, T. Sagawa, A. Sugita and H. Hayakawa, J. Stat. Phys. **153**, 412 (2013)
における考え方の不備を指摘し、量子マスター方程式に従う系において、
エントロピー生成率の考察から正しく考え直した。

系に対して時間反転対称性を**仮定せずに**、BSN vectorの一般的な表式を求めた。
時間反転対称性のある系では、BSN vectorは対称化von Neumann entropyの全微分と
非平衡度の自乗の誤差で一致することを示した。

Markov jump過程で記述されるシステムにおける、先行研究でのエントロピー
生成の定義が、本研究のものと異なる事を指摘し、非平衡度が小さいときには一致
することを示した。

H_S に縮退があり、時間反転対称性が破れている場合、過剰エントロピー $\sigma_{\mathrm{ex}} = \int_C d\alpha^n\ A_n^\sigma(\alpha)$
の経路依存性は、非平衡度の1次に比例する(それ以外の場合は2次に比例)。

S. Nakajima and Y. Tokura, arXiv:1612.03527 (J. Stat. Phys.に投稿中).

結論

(1) 量子ポンプの2つの研究手法(FCS-QMEと一般化マスター方程式)の等価性を示した。
　また、スピンの自由度が関係する量子ポンプについて研究した。

(2) 熱力学エントロピーの非平衡への拡張概念として注目されている過剰エントロピー生成を量子系において研究した。先行研究の不備を指摘し、理論の整備を行った。
　非平衡度の1次までの過剰エントロピー生成の一般的な表式を求めた。量子系および古典系での先行研究との整合性を確認した。

S. Nakajima, M. Taguchi, T. Kubo and Y. Tokura, Phys. Rev. B **92**, 195420 (2015).
S. Nakajima and Y. Tokura, arXiv:1612.03527 (J. Stat. Phys.に投稿中).

展望

(1)時間反転対称性の破れの効果を、具体的な系で調べる。
例えば、多準位の量子ドット系に磁場をかけた場合。

(2) H_S に縮退があり、時間反転対称性が破れている場合、過剰エントロピー $\sigma_{\rm ex} = \int_C d\alpha^n\ A_n^\sigma(\alpha)$
は経路に依存するので、それを最小にする経路*C*を調べる。

(3)過剰エントロピーの実験による測定。

博士論文の章立て

1. **Introduction**
2. **Full counting statistics and quantum master equation**
3. **FCS-QME and quantum pump**
4. **Quantum adiabatic pump**
5. **Quantum diabatic pump**
6. **Generalized quantum master equation for entropy production**
7. **Geometrical expression of excess entropy production**
8. **Comparison of two definitions of entropy production**
9. **Conclusions**
10. **Acknowledgements**
11. **Appendix A,B, …**