

氏名	中嶋 慧
学位の種類	博士（理学）
学位記番号	博甲第 8030 号
学位授与年月日	平成 29 年 3 月 24 日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当
審査研究科	数理物質科学研究科
学位論文題目	Theoretical studies on quantum pump and excess entropy production: Quantum master equation approach (量子ポンプと過剰エントロピー生成に関する理論的研究: 量子マスター方程式によるアプローチ)
主査	筑波大学教授 博士(学術) 都倉康弘
副査	筑波大学教授 博士(理学) 岡田 晋
副査	筑波大学准教授 博士(工学) 谷口伸彦
副査	筑波大学准教授 博士(理学) 野村晋太郎

論 文 の 要 旨

本論文は「Theoretical studies on quantum pump and excess entropy production: Quantum master equation approach (量子ポンプと過剰エントロピー生成に関する理論的研究: 量子マスター方程式によるアプローチ)」と題し、全九章から成る。本論文は、熱浴と結合した量子系において、系の制御変数が時間に依存して変化する場合に期待される量子ポンプ現象と過剰エントロピー生成に関して、量子マスター方程式(QME)の手法を用いて理論的に解析を行ったもので、動的で開いた非平衡状態の物理に関して新たな知見をもたらすものである。

第一章は序論であり、これまでの時間依存する量子系に関する研究や、非平衡定常状態の概念、それに過剰エントロピーの概念がまとめられ、本論文の目的が述べられている。

第二章は本論文の主な研究手法である量子マスター方程式の形式論が説明されている。まず、熱浴間の粒子の変化に関する統計的物理量を議論する場合に有効な概念である完全計数統計(FCS)を導入し、それを従来の量子マスター方程式に適用した完全計数統計-量子マスター方程式(FCS-QME)の詳細な導出が説明されている。QME は、注目する量子系と熱浴とのトンネル結合、あるいは熱的結合の2次摂動までの近似であり、特に本論文ではマルコフ近似と呼ばれる熱浴の量子緩和時間が非常に短い極限で議論を行っている。さらに、時間依存性がある問題で、物理的に正しい議論を行うために有効な手法である粗視化近似を導入し、その特殊な極限である回転波近似が説明される。

第三章では、第二章で導入した FCS-QME を用いて量子ポンプの一般論が展開されている。制御

変数としては、熱浴の温度や化学ポテンシャルの様な熱力学的なもの、注目系や熱浴系それぞれのハミルトニアンや注目系と熱浴系の相互作用ハミルトニアンに含まれる力学的なものについて考察が加えられている。まずこれらの制御変数を変化させた時の、熱浴の物理量についてのカレントが解析されている。QME の表式に現れる擬逆超演算子が導入され、これを用いてカレントを制御変数の変調周波数について無限次まで展開した表式が導かれた。特に、カレントには指数関数的に減衰する成分があることを見出し、これは注目系が定常状態に緩和していく過程を表している。この減衰する成分以外の部分は、瞬間定常流と呼ばれる自明な断熱極限の寄与と、制御変数からなる位相空間での Berry-Sinitsyn-Nemenman (BSN)ベクトルと呼ばれる量の線積分からなる項で表されることが示された。後者は変調周波数の一次のオーダーであるが、さらに変調周波数の高次の寄与についても系統的に議論された。一方、この擬逆超演算子は一意に決まらないという性質があるが、本研究で得られた結果自体は物理的に一意に決定される。この章の最後には、FCS-QME とは別に提案されたアプローチ(一般化 QME)の手法を検討し、これら二つの結果が等価であることが初めて明らかにされている。

第四章は、第三章で展開された一般論のうち量子断熱ポンプの結果を具体的な物理モデルに適用した結果が議論されている。具体的には二つ熱浴と、電子間の相互作用がない量子ドット、また有限の相互作用がある量子ドットが結合した系についてそれぞれ考察を加えた。制御変数は力学的変数を選び、電流及びスピン流に関する新しい知見が示されている。

第五章は、スピンを無視した単一準位量子ドットが二つの熱浴と結合した系に対して、変調周波数の高次の寄与である非断熱量子ポンプの特徴が明らかにされ、数値計算の結果が示されている。

第六章は、量子系のエントロピー生成に関する従来研究の問題点を明らかにした上で、物理的に適切なエントロピー生成の新しい表式を提案し、この表式を導くための QME が議論されている。

第七章では、第六章で導いた QME を用い、過剰エントロピー生成の一般的な表式の導出が議論されている。まず平衡系での性質を整理したあと、わずかに非平衡状態にある条件では、エントロピーが瞬間定常エントロピー生成率による寄与と、BSN ベクトルの線積分で表される項からなる事を導き、後者が過剰エントロピー生成を表していることが示された。この一般的な結果は、過剰エントロピーが特定の制御変数でのみ与えられるある状態量の差では与えられず、制御変数の変化のさせ方(経路)に依存するという事を初めて示している。これは古典系における従来研究では過剰エントロピーが特定の制御変数で決まる状態量の差だけで表される、という結果とは明らかに異なる、新しい結果である。しかしながら、もし系に時間反転対称性がある場合には、BSN ベクトルは対称化フォンノイマンエントロピーの全微分となり、古典系で得られた結果と同様に過剰エントロピーが状態量のみで表されることが明らかにされた。

第八章では、本研究で導かれた結果と古典的なマルコフジャンプ過程と呼ばれるダイナミクスに従う系での過剰エントロピーを比較している。これら二つのアプローチは一般には異なる結果を与えることが明らかにされたが、非平衡度が小さい条件では一致することが示された。

第九章では本論文の総括と今後の展望について述べられている。

審 査 の 要 旨

〔批評〕

本学位論文では、量子マスター方程式(QME)を用いて、量子系が熱浴と結合した系で、系の様々な制御変数が時間とともに変化する場合の量子ポンプ現象、および過剰エントロピー生成に関する一般的な性質を導き、具体的な物理モデルでの解析や系の時間反転対称性に対する性質、及び異なる手法による先行研究の結果との関係をあきらかにしている。

量子ポンプの研究では、完全計数統計を導入した QME(FCS-QME)を注意深く解析し、従来研究では議論されて来なかった、時間とともに指数関数的に減衰する項を初めて見出し、これが任意の初期状態から定常状態への緩和の過渡現象であることを明らかにしている。また制御変数の変調周波数の任意の次数まで有効な表式を導き、同時期に提案された別のアプローチである一般化 QME による結果と FCS-QME による結果が等価であることを初めて確認した。また、得られた一般論を具体的な物理系である二つの熱浴と結合した量子ドット系に適用し、量子断熱ポンプ、および量子非断熱ポンプの性質を議論し、その有効性を明らかにしている。

一方過剰エントロピー生成の研究は、従来の熱平衡系でのみ議論されて来た状態量であるエントロピーを非平衡系に拡張する方向として最近活発に議論されている。特に古典系の研究では、非平衡度の小さい場合には過剰エントロピーは特定の時刻の制御変数でのみ決まる状態量の差で表される。しかしながら量子系での研究は始まったばかりである。本論文では、量子系に対する従来研究の問題点を指摘し、物理的に適切と考えられる仮定から出発し新しいエントロピー生成の表式を初めて提案した。さらに、QME の手法を用いてこの表式を非常に一般的な仮定のもと解析した結果、過剰エントロピーは一般的には制御変数を変化させる経路に依存して必ずしも状態量とは言えないことを初めて指摘している。しかしながら、もし系に時間反転対称性がある場合には、古典系の結果と同様に過剰エントロピーはフォンノイマンエントロピーとして知られる状態量で表されることを明らかにしている。

以上のように、中嶋氏の研究成果は独創性が高く、また関連研究分野に大きな波及効果を与える可能性を持つ。また具体的な物理系に対する議論を行い、先行関連研究との関連を明らかにするなど、多面的な取り組みを行った。以上の点から、本論文は博士(理学)に相当するものである。

〔最終試験結果〕

平成29年2月14日、数理物質科学研究科学学位論文審査委員会において審査委員の全員出席のもと、著者に論文について説明を求め、関連事項につき質疑応答を行った。その結果、審査委員全員によって、合格と判定された。

〔結論〕

上記の論文審査ならびに最終試験の結果に基づき、著者は博士(理学)の学位を受けるに十分な資格を有するものと認める。