

# 論文の内容の要旨

## 論文題目 非平衡定常状態における フォン・ノイマンエントロピーの体積依存性

氏名 箱嶋 秀昭

### 【研究の背景・問題意識】

非平衡定常状態 (Nonequilibrium Steady States、以降 NESS と略記する) は、非平衡統計力学の基礎研究としてこれまでに様々な研究がなされてきた。NESS とは、例えば、電源 (電池) に繋いだ抵抗に定常電流が流れ続けているような状態のような、有限の流れが存在する状態のことである。この例のように、NESS は日常的に見られる現象であり、応用上でも重要であるため、非平衡の研究の中でも長い歴史があり、非常に多くの研究がなされてきた。しかし、完成された理論が存在する平衡状態とは違って、NESS の一般論は現時点では存在しない。

### 【研究の目的】

本研究の目標は、メゾスコピック伝導体における NESS のモデルを用いて、NESS が実現している部分系のフォン・ノイマンエントロピーを調べることである。メゾスコピック系の研究範囲は幅広いが、その中でも本研究における NESS の研究対象となるのは、量子細線 (Quantum Wire、以下 QWR と略記する) が2つの粒子溜に接合されていて、2つの粒子溜の化学ポテンシャル差  $\Delta\mu$  により QWR 内部に定常電流が生じるような伝導体である。解析する系は、図 1(a) のように QWR 内部にのみ不純物が存在しており、2つの粒子溜には不純物は存在しないような無限に長い1次元系である。メゾスコピック伝導体の標準モデルに従い、全系の量子状態を次のように定める。左右の粒子溜は1粒子状態がフェルミ分布関数に従う電子で満たされていて、右向き (左向き) の一粒子散乱状

態が左側（右側）のフェルミ分布関数に従うような量子状態とする。粒子溜が絶対零度の場合、フェルミ分布関数の絶対零度極限が階段関数となることから、左右のフェルミ面まで1粒子散乱状態が詰まった量子状態とする。 $\Delta\mu = 0$ であれば平衡状態であり、 $\Delta\mu \neq 0$ であればQWRでNESSが実現する。

NESSの先行研究は膨大であり、様々なNESSが調べられているが、メゾスコピック伝導体のNESSには以下のような利点がある。

- 確率過程モデルより基本的な力学である、量子力学で記述するモデルが確立している
- 様々な物理量が実験と整合するような良い理論的枠組みが確立している
- 定義が曖昧な「熱流」のある系のNESSとは異なり、mass flow（電流）のあるNESSである
- 不純物散乱により空間並進対称性のない系になっており、非自明なNESSが実現する
- 平衡から遠く離れた非線形非平衡領域まで調べることができる

これらの長所を全て備えていて、NESSの量子状態があらわに知られているのは、メゾスコピック伝導体のみである。

粒子溜も含めた全系の量子状態を用いて、NESSが実現しているQWR内部の部分系Aのフォン・ノイマンエントロピーを調べる。部分系Aは、図1(b)のようにQWR内部の領域であり、その長さは $L$ である。

部分系Aの縮約密度演算子 $\hat{\rho}_L$ を用いて、そのフォン・ノイマンエントロピー $S_L$ は、

$$S_L := -\text{Tr}[\hat{\rho}_L \ln \hat{\rho}_L] \quad (1)$$

のように定義される。フォン・ノイマンエントロピーは、一般に縮約密度演算子が部分系Aにおけるヒルベルト空間内で、実質的に利用している基底の個数（の対数）を意味する。着目領域の長さ $L$ を変化させることで、フォン・ノイマンエントロピー（つまり、状態数）の $L$ 依存性を調べることができる。

粒子溜が絶対零度の場合、粒子溜も含めた全系が量子純粋状態となるので、着目系のフォン・ノイマンエントロピーはエンタングルメントエントロピーに一致する。一般にエンタングルメントエントロピーとは、着目領域とそれ以外との間のエンタングルメントを

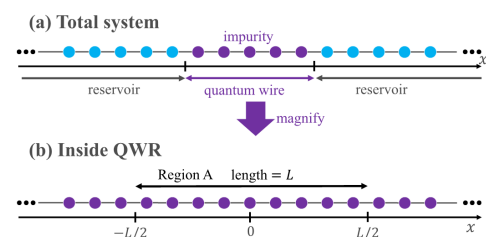


図1 (a) 2つの粒子溜とQWRを含む全系の図。(b)QWR内部の部分系Aを表す図。

測る尺度であり、近年様々な分野で研究されている。NESS のエンタングルメントエントロピー（フォン・ノイマンエントロピーも含めて）を調べた先行研究は存在するが、これらはすべて空間並進対称性のある系の NESS である。そのために、これらの NESS は実質的に平衡状態を並進運動させたものに過ぎなかった。

それに対して本研究の NESS は、不純物による多重散乱により系の並進対称性が破れているために、平衡状態を並進運動させた状態とは大きく異なっている。このような NESS のことを、本研究では非自明な **NESS** と呼んでいる。また、非平衡度の大小については、共鳴トンネリングに着目する。多重散乱のために、電子の波動関数には QWR をほぼ確率 1 で透過するような共鳴状態が非常に多く現れる。このような共鳴状態を多数含むぐらゐに  $|\Delta\mu|$  を大きくしたときの NESS を本研究では平衡から遠く離れた **NESS** と呼んでいる。平衡から遠く離れた非自明な **NESS** でフォン・ノイマンエントロピーを計算することが、本研究の目的である。

#### 【本研究の結果】

##### 粒子溜が絶対零度の場合の結果（論文第 2 章）

粒子溜が絶対零度の場合、平衡状態 ( $\Delta\mu = 0$ ) では、 $S_L^{\text{eq}} = O(\ln L)$  となる。それに対して、平衡から遠く離れた非自明な NESS では、図 2 のように  $S_L$  は  $O(\ln L)$  のようには振る舞わず、次のように振る舞うことを示した [1]。

$$S_L = \eta(L)L|\Delta k_F| + O(\ln L) \quad (2)$$

ただし、 $\Delta k_F$  は電子溜のフェルミ波数の差であり、 $\eta(L)$  は  $L$  が増加するにつれて徐々に減少する関数で、 $a \leq \eta(L) \lesssim 2a$  を満たす。ここで、 $a$  は  $L$  と  $\Delta k_F$  に依存しない正の定数である。この結果より、

$$S_L \geq aL|\Delta k_F| + O(\ln L) \quad (3)$$

であるので、本研究では式 (2) を準体積則 (**Quasi volume law**) と呼んでいる。平衡状態の場合の結果  $S_L^{\text{eq}} = O(\ln L)$  と比べると、 $S_L > O(\sum_{\nu} S_L^{\text{eq}})$  となっていることが分かる ( $\nu$  は粒子溜のラベルであり、 $\sum_{\nu}$  はそのすべてについての和を意味する)。先行研究の NESS は完全な並進対称性を持つために、平衡状態と本質的に同じであり、 $S_L = O(\sum_{\nu} S_L^{\text{eq}})$  という結果が得られていたが、本研究の結果はこれらの先行研究とは定性的にも異なっていることが分かる。このような結果が得られた先行研究はこれまでに無く、本研究がはじめて発見した結果である。

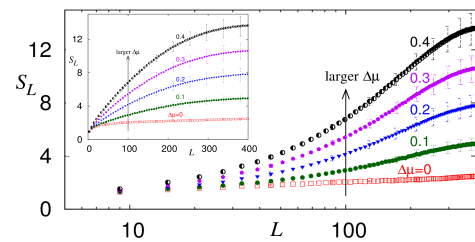


図 2 絶対零度の場合の  $S_L$  の  $L$  依存性を表すグラフ。

さらに、平衡から遠く離れた非自明な NESS では、電子密度相関などの局所物理量の長距離相関が異常に発達することも分かった。

### 粒子溜が有限温度の場合の結果（論文第3章）

粒子溜が有限温度の場合、平衡状態 ( $\Delta\mu = 0$ ) では、 $S_L^{\text{eq}} = O(L)$  のように熱力学に整合的な結果が得られる。それに対して、平衡状態から遠く離れた非自明な NESS では、 $S_L$  は次のように振る舞うことを示した（図3）。

$$S_L = \eta(L)L \int_{-\pi}^{\pi} f_{\beta}(\varepsilon_k - \mu^+) [1 - f_{\beta}(\varepsilon_k - \mu^-)] dk + O(L) \quad (4)$$

ただし、 $\eta(L)$  は絶対零度の結果に出てくるものと同じものである。 $f_{\beta}(\varepsilon_k - \mu^{\pm})$  は、それぞれ左右の粒子溜のフェルミ分布関数である。絶対零度の場合とは違って有限温度の場合は、全系の状態が混合状態であるために、フォン・ノイマンエントロピー  $S_L$  はエンタングルメントエントロピーではなくなるが、部分系 A で利用されているマイクロ状態の個数という意味は変わらず持っている。有限温度の平衡状態では、 $S_L = O(L)$ （示量的）であることと比較すると、 $\eta(L)$  の項は  $S_L$  に対する補正項を与える。

絶対零度の場合と同様に、平衡から遠く離れた非自明な NESS の場合は、局所物理量の長距離相関が異常に発達していることが分かった。この長距離相関の振る舞いは、式(4)と整合的であることも示した。さらに、長距離相関の距離に対する振る舞いが絶対零度と有限温度の場合で同様であることが分かった。これは  $\eta(L)$  が絶対零度と有限温度の場合とで共通であることを整合的であることも示した。

以上の結果は、メゾスコピック伝導系という特定の系での結果ではあるものの、その物理的な由来は、空間並進対称性を破る不純物による多重散乱と、平衡から遠く離れたことの2つの相乗効果であった。そのことから、この系の NESS に限らず、不純物や壁により空間並進対称性を破る多重散乱が起こる系の、平衡から遠く離れた NESS であれば、同様な結果になることもありうると期待される。

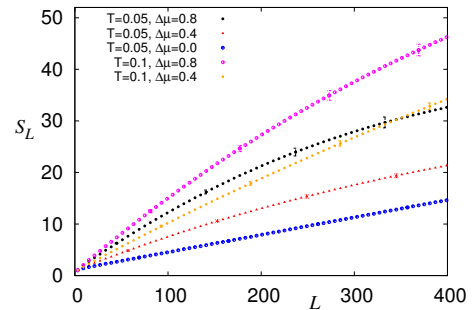


図3 有限温度の場合の  $S_L$  の  $L$  依存性を表すグラフ。

[1] H. Hakoshima and A. Shimizu, Journal of the Physical Society of Japan (Letter), Vol.88 (2019), in press.