

学位論文の要約

題目 Analysis of the Quantum Heat Transport under Non-Perturbative and Non-Markovian Conditions: The Hierarchical Equations of Motion Approach
(非摂動・非マルコフ環境下における量子熱輸送の解析：階層型運動方程式によるアプローチ)

氏名 加藤 彰人

序論

近年、熱力学を量子力学に基づいて構築しようとする試みが量子熱力学と呼ばれる分野において活発に研究されている。例えば、量子纏れ・相関・コヒーレンスのような量子論特有の効果が熱力学にどのように現れるかといった問題が関心を集めている。この問題は、古典論の限界を超える効率を持つ量子熱機関の作成といった応用的側面をも含んでいる。古典熱力学においてカルノーが現在カルノー効率と呼ばれている、熱機関の効率を原理上上回ることができないことを証明したように、量子熱力学においても量子熱機関の動作限界を調べる研究が重要な課題として調べられており、特にリソース理論を用いて幾つかの重要な結果が得られている。これに加えて、簡単なモデルを用いて量子熱機関の動力学をミクロな視点から得ることも重要である。これにより新たな熱機関装置の提案や動作効率の上昇といったことも可能になると考えられる。このような研究においては現実の状況の本質部分を抽出したモデルを考え、このモデルと熱機関動力学の対応付けを行う。従来のアプローチでは、2次摂動量子マスター方程式を用いてそのような解析が行われてきた。しかしながら、この方法は系と環境の相互作用が弱い状況でしか用いることができず、また系・環境間の相関も過小評価している。系のコヒーレントな動力学と環境ゆらぎによる相互作用が励起子移動を最適化するように、量子熱機関においても従来のアプローチでは取り扱うことが出来ない領域に拡張しようとすることは重要である。

本学位論文においてはこのような試みの一つとして、階層型運動方程式によるアプローチを用いて量子熱機関のような熱輸送過程を数値的に厳密に取り扱うことのできる方法を構築した。

量子開放系

量子熱機関等の温度の異なる複数の熱浴と相互作用し、エネルギーや情報のやり取りをしている系は量子開放系とみなすことが出来る。ここでは、系の縮約動力学を記

述する方法として、従来の2次摂動量子マスター方程式及び非摂動・非マルコフ環境下においても適用可能な階層型運動方程式の導出を行った。

量子熱力学

従来用いられてきた二つの熱流の定義に対して、それぞれの定義と一貫した熱力学第一及び第二法則を導出した。また、この二つの定義は定常状態において等価であるとみなされてきたが、系・熱浴間の相互作用が強い場合、この二つに違いが生じそれにより片方の定義が、熱力学第二法則を満たさない可能性があることを指摘した。

非摂動・非マルコフ環境下における量子熱流

前章の二つの定義による熱流に対して、各々の熱流を系の縮約動力学から原理上計算可能な量を用いた表現として近似を用いない厳密な形で導出した。また、この表現を階層型運動方程式を用いて数値的に厳密に計算する方法を構築した。

不純物モデルの量子熱輸送動力学

二つの温度が異なる熱浴に挟まれた系を不純物モデルとし、前章で展開した方法を用いてその熱コンダクタンスの解析を行った。二準位モデルの解析により、高温から低温へと温度を下げることで逐次遷移を通した輸送過程から、コトンネリングを通した輸送過程へと移行することをスペクトルを用いて明らかにした。また、三準位モデルの解析から、主となる熱輸送経路がある経路から別の経路へと移行する様子を同様にスペクトル解析を用いて明らかにした。

二つの熱流の定義の違い

非平衡スピン・ボゾンモデルに対して二つの定義の熱流に対してその計算を行った。その結果、片方の定義は第二法則を満たすが、もう片方は第二法則を破ることが分かった。また、三準位熱エンジンモデルの熱機関効率の計算を行い、同様に片方の定義のみ定性的に正しい散逸強度依存性を示すことを明らかにした。

熱輸送最適化における系・熱浴及びキュービット・キュービットコヒーレンスの相互作用の役割

二つのキュービットにおける熱流を計算した。その際、系・熱浴間を摂動として取り扱うレッドフィールド方程式、及びキュービット間を摂動として取り扱うフェルミ則表現の結果との比較を行った。その結果、散逸強度に対する熱流の最大化は散逸強度とキュービット間結合強度が同程度の領域で生ずることを明らかにした。また、摂動を用いたいずれの方法でもこの最大化を正しく再現できないことが分かった。