さて，実際のメゾスコピック系で最初に注目を集めたのがAharanov-Bohm(AB)効果であり，試料の輪の中を磁場が貫く時に試料の物理量が，磁場の大きさ h/e ごとに周期的に変化するような量子効果である．このことは量子力学においては磁場よりもベクトルポテンシャルが本質的であることを示している．また，Al'tschuler-Aronov-Spivak(AAS)効果では磁場の大きさが $h/2e$ ごとに周期的に変化する．筒状の試料では，AB効果は取り得る各path同志で打ち消し合ってしまい，AAS効果だけを見ることが出来る．

こういった変動の振幅を考えるには定量化が必要であり，そこで登場するのがLandauerの公式である．この式は久保公式からも導出可能であり，コンダクタンスが透過確率に比例することを意味する．ここで，完全透過の時にも有限のコンダクタンスが残るといった問題が持ち上がるが，これはreservoirの役割及び四端子法で測定されることを考えることによって解決される．

また，ballistic電気伝導として，狭いチャンネルを通る電子のコンダクタンスの量子化が取り上げられた．この量子化はLandauerの公式で説明を付けることが出来る．また，ゲートの形状を変化させると，量子化の階段の様子も変化を受ける．

走査トンネル顕微鏡と表面原子制御

東京大学 理学部　塚田 捷

本年の夏の学校のポスターには走査トンネル顕微鏡(STM)による世界最小のアインシュタインの似顔絵が載せられていた．7月29日，30日の午前，合わせて6時間そのSTMに関する理論的研究について話された．この装置は表面構造の研究にとって画期的な発明である．しかし，STMの実験法が急速な進歩を遂げているにも関わらず，STMそのものの原理はまだよくわかっていないそうである．

先生はSTMの探針がSTM像にどのように影響を与えるか，計算機実験によって調べたことを紹介し，表面構造の決定には実験と理論の両側面からのアプローチが大切であることを強調されていた．探針先端部についてクラスター模型を作り，それを試料の表面に対して動かしていき，探針と表面の間に流れるトンネル電流を計算し，シミュレーションを行う．STM像は原子配列そのものではなく，電子波の密度分布を表している．その像は探針のクラスターの形やそれが表面とのなす角度，欠陥の有無によって劇的に変化するということだ．したがって，実験で観察されたSTM像から実際の原子配列を決定するには探針の影響も十分に考慮しなければならない．また，STM像とともに試料表面の局所的な電子分布に比例している微分コンダクタンス対バイアス電圧の観測，すなわち走査トンネル分光法(STS)も重要である．

理論シミュレーションの実例としては，グラファイトとシリコンの表面構造について挙げられ，実験によるSTM像写真と比較しながら説明された．特にSiについて，Si(100)の場合，STM像で対称ダイマーに見えていたものが理論計算によると非対称ダイマーではないだろうかと結論されることや，Si(111) $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$-Ag表面のSTM像が蜂の巣状に光って見えることをどう解釈するかなど，丁寧に説明された．

最後に，原子間力顕微鏡(AFM)や単一電子トンネル過程(SET)などSTMに関する興味深い現象について時間の許す限り解説された．

これまでに体系化された固体物理学では，表面効果を無視できるような内部の現象しか扱われていない．固

体物理学の次なるステップは，表面効果が効いてくるメゾスコピック系，クラスター，または，表面そのものの現象に迫る研究であろう．

非平衡熱力学の諸問題

東京工業大学 理学部　北原 和夫

講義の前半では，非平衡熱力学の出発点を概括した．先ず，平衡系の熱力学から出発する．そのとき成り立つ Gibbs-Duhem の関係式を，速度場の中におかれた局所系に適用すると，

$$T\delta s = \delta\varepsilon - \mathbf{v}\cdot\delta(\rho\mathbf{v}) - \sum_{\gamma}\left(\mu_{\gamma} - v^2/2\right)\delta\rho_{\gamma}$$

が導かれる．ここで，ρは密度，s，εはそれぞれ単位体積あたりのエントロピー，全エネルギーである．ここで，扱っている系には，局所平衡を仮定した．この仮定が使えない系は，非平衡熱力学の対象ではない．エントロピーの時間発展は，この式における δ を D/Dt (Lagrange 微分）と解釈し，$\mathbf{c} = (\rho_{\gamma}, \rho\mathbf{v}, \varepsilon)$に対する釣合の式，すなわち，連続の式，ナヴィエ-ストークス方程式，エネルギー保存則を代入して得られる．この際，現れる散逸項は，エントロピー生成と呼ばれる．特に線形の範囲では，エントロピー生成は，

$$\sigma[s] = \sum_{ij} L_{ij} X^i X^j$$

という形に書ける．ここで X^i, L_{ij}は，それぞれ，熱力学的力 $\delta S/\delta c_i$，オンサガー係数である．オンサガー係数は，現象論的方程式を正しく導くように決定される．またこの係数はオンサガーの相反定理を満たしていることも示される．系が安定であるためには，$\sigma[s]$ が正定符号でなければならない．

講義の後半では，特に一成分系に対して，前出の５つの保存量，$\mathbf{c}$ に対する方程式に，揺らぎの効果を入れた場合について論じた．これらの方程式の散逸項は，熱力学的力とオンサガー係数によって結ばれている．これに揺動力を加えれば，確率微分方程式になる．

$$\frac{\partial c_i(\mathbf{r})}{\partial t} = F_i(\mathbf{c}(\mathbf{r})) + \sum_j \int d^3\mathbf{r}' L_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') X^j(\mathbf{r}') + R_i(\mathbf{r})$$

ここで，$F_i(\mathbf{r})$ は可逆な流れを表し，右辺第二項は散逸的流れを表す．揺動力が，ガウシアン白色ノイズであれば，これから，無限自由度の Fokker-Planck 方程式が得られる．

$$\begin{aligned}\frac{\partial P(\mathbf{c}, t)}{\partial t} &= \int d^3\mathbf{r} \sum_i \frac{\delta}{\delta c_i(\mathbf{r})}[F_i(\mathbf{r}, t) P(\mathbf{c}, t)] \\ &+ \int d^3\mathbf{r} \sum_{ij} \frac{\delta}{\delta c_i(\mathbf{r})} \int d^3\mathbf{r}' D_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \left[-\frac{\delta S}{\delta c_j(\mathbf{r}')} + \frac{\delta}{\delta c_j(\mathbf{r}')}\right] P(\mathbf{c}, t)\end{aligned}$$

ここで Sは全エントロピーである．これから，平均 $\langle \mathbf{c} \rangle$ に対する方程式を作ると，流体方程式が再現される．系が無限系であれば，定常解として熱平衡状態 $P_{\mathrm{eq}} \propto \exp(S/k_{\mathrm{B}})$ が得られることが，適当な H関数を導入することによって示される．さらに揺動力の相関は，

$$\langle R_i(\mathbf{r}, t) R_j(\mathbf{r}', t') \rangle = 2D_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\delta(t - t')$$