過剰エントロピー：
非平衡におけるエントロピーとは

Satoshi Nakajima, Y. Tokura, J. Stat. Phys. **169**, 902 (2017)
(arXiv:1612.03527)

Satoshi Nakajima, arXiv:1710.05646 (博士論文)

中嶋　慧(なかじま　さとし)

http://physnakajima.html.xdomain.jp

私の研究テーマ

興味：物理学の原理的なこと

(1)非平衡統計（M2～）（D論）

このスライド

・非平衡でのエントロピー

S. Nakajima and Y. Tokura, J. Stat. Phys. **169**, 902 (2017) (arXiv:1612.03527)

・量子（断熱）ポンプ

S. Nakajima, *et al*., PRB **92**, 195420 (2015).

・博士論文

S. Nakajima, arXiv:1710.05646

(2)量子（連続）測定（D1）

測定, 波束の収縮とは何か

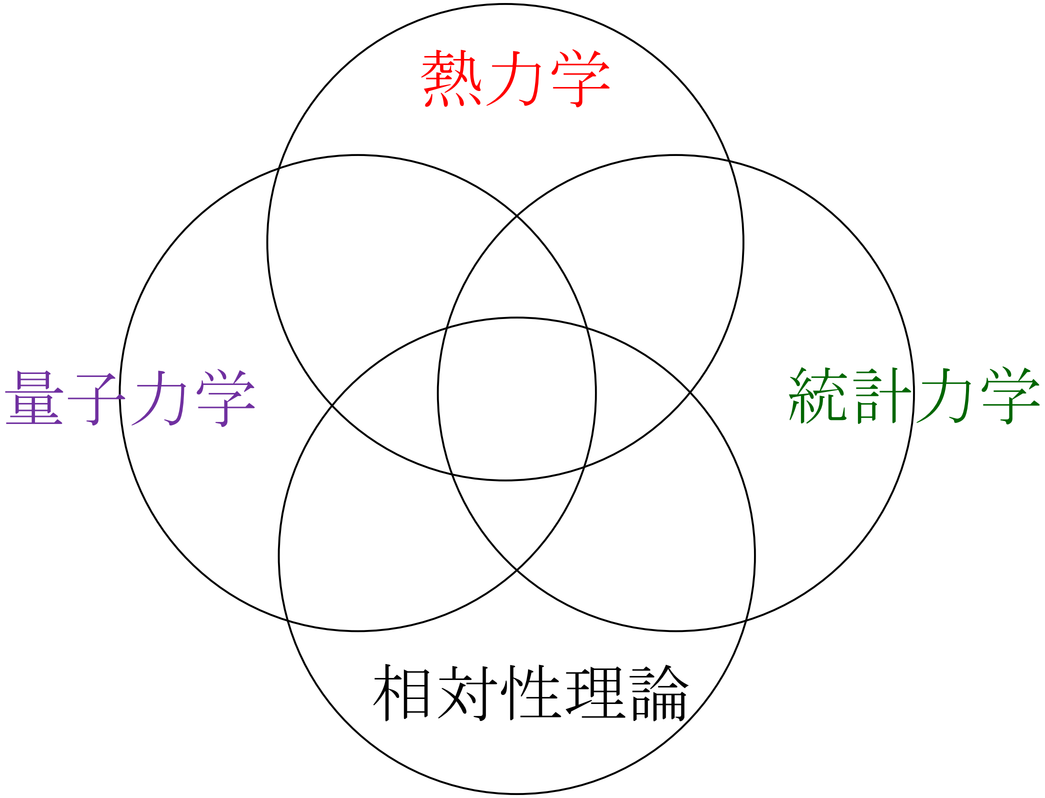
・Mensky制限経路積分の non-Markovへ拡張

(3)共変解析力学（D2～）

時間と空間を平等に扱う解析力学。微分形式が基本変数。

S. Nakajima, EJTP **13**, 95 (2016) (arXiv:1510.09048), arXiv:1602.04849

現代物理と非平衡物理



平衡な系を支配する物理の原理は良く分かっているが、
非平衡な系の原理は、ほとんど分かっていない。

エントロピーは熱力学の中心的な概念である。

熱力学エントロピー

熱平衡な系に対して、エントロピーSという状態関数が存在する。

ある熱平衡状態から別の平衡状態に移ったとき、エントロピーの変化は、途中の情報(経路)に依らない。

特に、準静的(非常にゆっくり)に移る場合は、

クラウジウスの等式 $$\boxed{dS = \frac{d'Q}{T}}$$

熱は状態関数ではない

温度

が成り立つ。

量子力学での「状態」

内積

純粋状態: ヒルベルト空間のベクトル $|\psi\rangle = \sum_i c_i |i\rangle$ $\qquad \langle i|j\rangle = \delta_{ij}$

物理量Aの期待値: $\langle A\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle \equiv \langle\psi|A\psi\rangle$

混合状態: ヒルベルト空間の密度演算子

$$\rho = \sum_\alpha p_\alpha |\psi_\alpha\rangle\langle\psi_\alpha| \qquad \sum_\alpha p_\alpha = 1 \qquad 0 \le p_\alpha \le 1$$

物理量Aの期待値: $\langle A\rangle = \mathrm{Tr}(\rho A) = \sum_\alpha p_\alpha \langle\psi_\alpha|A|\psi_\alpha\rangle$

トレース $\mathrm{Tr}X = \sum_i \langle i|X|i\rangle$

von Neumannエントロピー

熱平衡状態 (カノニカル分布)：

エネルギー固有状態 i の確率が $\dfrac{e^{-\beta E_i}}{Z}$ $\quad Z = \sum_i e^{-\beta E_i} \quad \beta = \dfrac{1}{k_{\mathrm{B}}T}$

$$\rho_{\mathrm{th}} = \sum_i \frac{e^{-\beta E_i}}{Z} |i\rangle\langle i| = \frac{e^{-\beta H}}{Z}$$

$$H|i\rangle = E_i|i\rangle$$

ハミルトニアン

von Neumannエントロピー：$-\mathrm{Tr}(\rho \ln \rho)$

$$\rho = \rho_{\mathrm{th}}$$

統計力学によると熱力学エントロピーと一致

von Neumannエントロピーの時間発展

シュレーディンガー方程式 $\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = -iH|\psi(t)\rangle$　　$\hbar = 1$ とする

ハミルトニアン

$$|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle,\ U(t) = e^{-iHt}$$

$$\langle\psi(t)| = \langle\psi(0)|U^\dagger(t),\ \ U^\dagger(t) = e^{iHt} = U^{-1}(t)$$

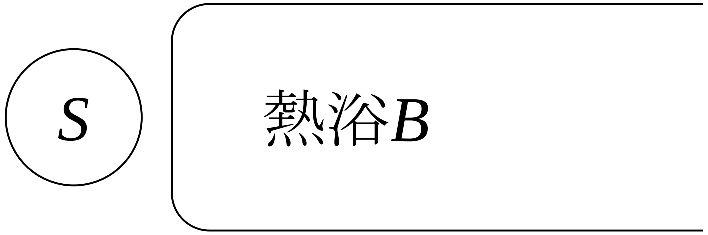
$$\rho(t) = \sum_\alpha p_\alpha|\psi_\alpha(t)\rangle\langle\psi_\alpha(t)| = U(t)\rho(0)U^\dagger(t)$$

von Neumannエントロピー $S_{\mathrm{vN}}(t) = -\mathrm{Tr}(\rho(t)\ln\rho(t)) = S_{\mathrm{vN}}(0)$
は変化しない。

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -i(H\rho(t) - \rho(t)H)$$　von Neumann方程式

部分系の熱平衡状態への緩和

$$H_{\mathrm{tot}} = H_S + H_B + H_{SB}$$



注目系Sの状態 $\rho_S(t) = \mathrm{Tr}_B \rho_{\mathrm{tot}}(t)$

$$\rho_B = \mathrm{Tr}_S \rho_{\mathrm{tot}}(0) = e^{-\beta H_B}/Z_B$$

量子マスター方程式

H_{SB} の 2 次

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = -i(H_S\rho_S(t) - \rho_S(t)H_S) + \underline{\hat{\Pi}(\beta)\rho_S(t)}$$

散逸項(緩和項)

$$\hat{\Pi}(\beta)\bullet = \sum_a c_a(\beta) A_a \bullet B_a$$

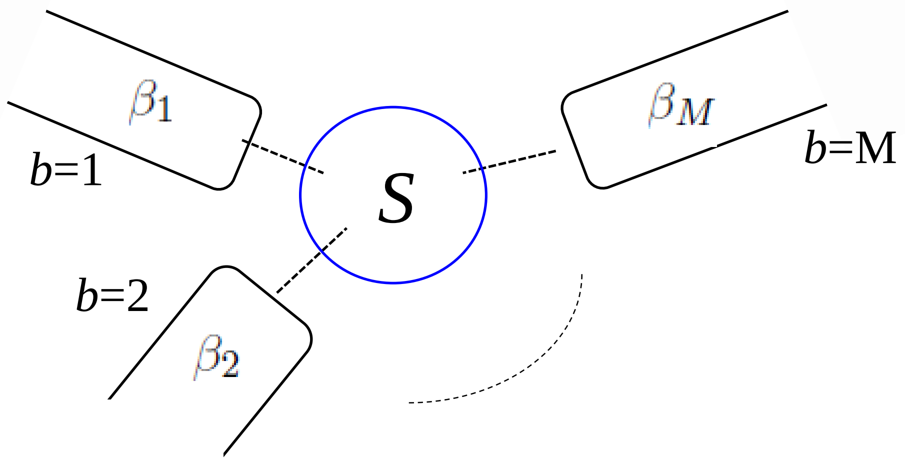
熱平衡状態へ緩和

$$\rho_S(\infty) = \frac{e^{-\beta H_S}}{Z_S} \equiv \rho_0(\beta)$$

部分系の非平衡定常状態への緩和

$$H_{\mathrm{tot}} = H_S(\alpha_S) + \sum_{b=1}^{M} [H_b + H_{Sb}(\alpha_{Sb})]$$

$$\rho_b = e^{-\beta_b H_b}/Z_b$$



$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = -i(H_S \rho_S(t) - \rho_S(t) H_S) + \hat{\Pi}(\alpha)\rho_S(t)$$

$$\hat{\Pi}(\alpha) = \sum_{b=1}^{M} \hat{\Pi}_b(\alpha_S, \alpha_{Sb}, \beta_b)$$

$$\rho_S(\infty) = \rho_0(\alpha)$$

非平衡定常状態へ緩和

$$\alpha = (\alpha_S, \{\alpha_{Sb}\}_{b=1}^{M}, \{\beta_b\}_{b=1}^{M})$$

過剰エントロピー

ある非平衡定常状態から、別の非平衡定常状態へ、準静的に動かしたときのエントロピー生成は、

$$\text{エントロピー生成}\sigma = \int_0^\tau dt\ J_0(\alpha_t) + \text{過剰エントロピー}\sigma_{\mathrm{ex}}$$

$\rho_0(\alpha_t)$ でのエントロピー生成率

平衡状態 $\beta_b(t) = \beta(t)$ では、$J_0(\alpha_t) = 0$ で、$\sigma = \sigma_{\mathrm{ex}} = S_{\mathrm{vN}}(\rho_0(\alpha_\tau)) - S_{\mathrm{vN}}(\rho_0(\alpha_0))$

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = -i\left[H_S(\alpha_S(t))\rho_S(t) - \rho_S(t)H_S(\alpha_S(t))\right] + \hat{\Pi}(\alpha_t)\rho_S(t)$$

過剰エントロピーの性質

過剰エントロピーは、パラメーター空間の線積分となる
(経路にだけ依存。速さに依らない)。

$$\sigma_{\rm ex} = \int_{C(\alpha_0 \to \alpha_\tau)} \sum_n d\alpha^n \ A_n^\sigma(\alpha)$$

先行研究によると、経路*C*にもほとんど依らない
(なので、エントロピーの非平衡への拡張っぽい)：

古典系 $\sigma_{\rm ex} = $ シャノンエントロピーの差 $+ \mathcal{O}(\varepsilon^2 \delta)$

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

対称化von Neumannエントロピー
(次のページ)

$\varepsilon = \max\{|\beta_b - \bar{\beta}|/\bar{\beta}\}$ 非平衡度

$\bar{\beta}$ は基準値で、例えば $\sum_b \beta_b / M$

δはパラメーター変化の大きさ

対称化von Neumannエントロピー

対称化von Neumannエントロピー

$$S_{\mathrm{sym}}(\rho) = -\mathrm{Tr}_S\left(\rho\frac{\ln\rho + \ln\theta\rho\theta^{-1}}{2}\right)$$

θ は時間反転演算子

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

しかし、量子系の先行研究では、ハミルトニアンに時間反転対称性を仮定していた。

私の結果

時間反転対称性を仮定を外した私の結果:

$$\sigma_{\rm ex} = \int_{C(\alpha_0 \to \alpha_\tau)} \sum_n d\alpha^n \ A_n^\sigma(\alpha)$$

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

ラム・シフト項の符号を逆転された場合の非平衡定常状態

(1) H_S に縮退がないときは、

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

(2)時間反転対称性があれば、先行研究と一致：

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

(3)**一般の場合には、過剰エントロピーは、非平衡度の1次でも経路依存性がある。**

まとめ

(1)過剰エントロピーは、熱力学エントロピーの非平衡への拡張として、注目されている。

(2)過剰エントロピーは線積分で表される。
古典系では、
また、時間反転対称性がある量子系では、
過剰エントロピーは、非平衡度の1次では経路依存性がない。

(3)**時間反転対称性が破れ**、かつ注目系のハミルトニアンに縮退がある場合には、過剰エントロピーは、非平衡度の1次でも経路依存性があることを示した。

S. Nakajima, Y. Tokura, J. Stat. Phys. **169**, 902 (2017) (arXiv:1612.03527)

S. Nakajima, arXiv:1710.05646 (博士論文)

ラムシフト項

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = -i\left[H_S(\alpha_S(t))\rho_S(t) - \rho_S(t)H_S(\alpha_S(t))\right] + \hat{\Pi}(\alpha_t)\rho_S(t)$$

$$\hat{\Pi}(\alpha)\bullet = \underbrace{-i[H_{\mathrm{L}}(\alpha)\bullet - \bullet H_{\mathrm{L}}(\alpha)]}_{\text{ラムシフト項}} + \sum_b \mathcal{L}_b(\alpha_S, \alpha_{Sb}, \beta_b)\bullet$$

$$-i\left[(H_S + H_{\mathrm{L}})\rho_0(\alpha) - \rho_0(\alpha)(H_S + H_{\mathrm{L}})\right] + \sum_b \mathcal{L}_b(\alpha_S, \alpha_{Sb}, \beta_b)\rho_0(\alpha) = 0$$

$$-i\left[(H_S - H_{\mathrm{L}})\rho_0^{(-1)}(\alpha) - \rho_0^{(-1)}(\alpha)(H_S - H_{\mathrm{L}})\right] + \sum_b \mathcal{L}_b(\alpha_S, \alpha_{Sb}, \beta_b)\rho_0^{(-1)}(\alpha) = 0$$

エントロピー生成の定義

$$\text{エントロピー生成}\sigma \overset{\text{def}}{=} \int_0^\tau dt\ \dot{\sigma}(t)$$

$$\dot{\sigma}(t) \overset{\text{def}}{=} \sum_b \beta_b(t) \underline{i_b^{\text{Energy}}(t)}$$

熱浴bから注目系Sへの熱流

$$\dot{\sigma}(t) \overset{\text{def}}{=} \sum_b [\beta_b(t) i_b^{\text{Energy}}(t) - \mu_b(t) i_b^{\text{Particle}}(t)]$$

人によってエントロピーの定義は違う。
古典系では、別のもの(ただし近似的に一致)が使われる
T. S. Komatsu, N. Nakagawa, S. Sasa and H. Tasaki, J. Stat. Phys. **159**, 1237 (2015).

また、量子系の先行研究
T. Yuge, T. Sagawa, A. Sugita and H. Hayakawa, J. Stat. Phys. **153**, 412 (2013)
のエントロピー生成はエントロピー生成ではないと私が指摘した。また、
その量の計算方法も間違っていた。