

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 5 月 22 日現在

機関番号：14101

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2014～2016

課題番号：26400390

研究課題名(和文)メソスコピック量子導体における非平衡熱電効果と揺らぎの定理

研究課題名(英文)Nonequilibrium thermoelectric effect and fluctuation theorem in mesoscopic quantum conductors

研究代表者

内海 裕洋 (Utsumi, Yasuhiro)

三重大学・工学研究科・准教授

研究者番号：10415094

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,600,000円

研究成果の概要(和文)：量子導体を対象に、熱電効果にまつわる熱・電荷・エントロピーの揺らぎに関する研究を行った。この研究は、揺らぎの分布を取り扱う理論である完全計数統計理論(full-counting statistics)にもとづく。本研究では、1)電極の熱揺らぎを取り扱う理論を構築した。それを拡張し非平衡スピントルクによる磁化反転や、効率の分布を解析した。2)量子状態の事前・事後選択を行ったとき、熱溜めに放出される熱量分布が満足する一般的な関係を調べた。3)量子導体において自己情報量の揺らぎの分布を求めた。これによりエンタングルメント・エントロピーの揺らぎを特徴づけることができる。

研究成果の概要(英文)：We have investigated the fluctuations of heat, charge and entropy, related to the thermoelectric transport through quantum conductors. We adopted the theory of full counting statistics, which enables us to calculate the distribution of the fluctuations. 1) We developed a theoretical description of heat fluctuations in an electrode. We applied this theory to the problem of magnetization reversal caused by nonequilibrium spin torque and to the distribution of efficiency. 2) We investigated the fluctuation theorem of heat fluctuations for a pre- and post-selected quantum states. 3) We obtained the probability distribution of self-information for a quantum conductor. It enables us to characterize the fluctuations of the entanglement entropy.

研究分野：数物系科学

キーワード：非平衡・非線形物理 メソスコピック量子輸送 半導体ナノ構造

1. 研究開始当初の背景

量子系の非平衡物理は基礎的なテーマであり、金属ナノ構造や GaAs/AlGaAs 半導体 2 次元電子系につくられたメソスコピック量子導体の電気伝導を舞台に研究がなされてきた。最近では、非平衡状態で厳密に成り立つ「揺らぎの定理」の研究が新たに行われている。揺らぎの定理は、熱力学の第 2 法則の一般化であり、オンサーガーの相反定理を非線形応答領域へ拡張する。近年、我々はメソスコピック量子導体の電流確率分布を求める理論 (完全計数統計 full-counting statistics) を用いて、揺らぎの定理を量子輸送現象に適用した [K. Saito, Y. Utsumi, Phys. Rev. B 78 (2008) 115429]。また実験グループと共同で、アハロノフ・ボームリング (電子波干渉計) を用いた検証実験を行った [S. Nakamura, et al., Phys. Rev. Lett. 104 (2010) 080602]。

実験によって、電流の平均値の印加電圧に対する 2 次の応答と、平均値の周りの電流揺らぎ 1 の 2 次相関 (電流ノイズ) の印加電圧に対する 1 次の応答の間に、線形相関があることが明らかになった。しかし磁場に関して奇関数の成分については理論と定量的に一致するが、偶関数の成分については、温度が 3~10 倍高いという結果になった。これは実験が低温 (~100mK) で行われるため、外部環境の影響が大きく、さらに環境が非平衡であることにいることが原因だと分かっている。しかし実験を説明する非平衡環境は自明でなく、検討が必要である。

近年、半導体 2 次元電子系に作られた量子ポイントコンタクトの電流ノイズの測定を通じて、ジュール熱の重要性が分かってきた。半導体 2 次元電子系では低温で電子系と格子系の熱伝導が小さくなるため、2 次元電子系が局所的に加熱されて温度が揺らぐ。その温度揺らぎの効果が、電流ノイズの測定において観測された [Y. Nishihara, et. al. Appl. Phys. Lett. 100, 203111 (2012)]。これは、量子揺らぎの定理検証実験と理論のずれの原因が、過去には見落とされてきた熱現象にある可能性を示唆していた。

2. 研究の目的

我々は電子系の過熱が、理論と実験のずれの原因ではないかと考え、熱電効果における量子揺らぎの定理を理解することを目的として研究を開始した。当初は、最終的に実験と理論のずれの原因を解明することを目指したが、研究を進める過程で、熱現象に関連

した興味深い結果を得ることができたので、目的を広くとらえ、電流確率分布の理論 (完全計数統計理論 full-counting statistics) を拡張することで、熱やエントロピーの揺らぎの理解することとした。以下、研究を 3 点説明する。

(1) 熱電効果における揺らぎの定理の構築

電子波干渉計を念頭に、量子導体につながった電極電子の過熱の効果を取り入れ、量子揺らぎの定理を構築することを当初の目的とした。量子導体を通過する電子はエネルギーの移動を伴う。電子波干渉計はバリスティック伝導領域または拡散伝導領域にあり、量子導体内部では緩和は起こらず、電極で電子の緩和がおこると考えられる。つまりドレイン電極においては打ち込まれた電子が緩和するとき、ソース電極においてはドレイン電極に移動した電子が残した正孔が緩和するとき、発熱が起こる。緩和は、まず電子間相互作用によって電子が過熱状態である局所平衡状態に落ち着き、その次に電子フォノン相互作用によって電子系からフォノン系に熱が流れ、最終的に電子と格子が平衡状態に達すると考えられる。これらの緩和過程を考慮したとき、揺らぎの定理がどのような変更を受けるかを明らかにすることを当初の目的とした。

(2) 2 準位系の量子状態の事前選択と事後選択をとりいれた量子系における詳細揺らぎの定理

「(1) 熱電効果における揺らぎの定理の構築」においては、電極電子の過熱による温度の実時間の揺らぎが重要となる。それに関連し、電極の電子温度の揺らぎを実時間で測定する可能性を検討する。現時点で、局所的かつ実時間で温度揺らぎの測定技術は、完全には確立されていない。局所・時間分解温度測定の実験技術は、超伝導体を含む金属メソスコピック量子回路において発展している。実際、局所・時間分解温度計は、超伝導電極を用いて実現されており、これは超伝導量子ビット集積回路に素直に組み込むことができると期待される。そのため将来的には超伝導量子ビットを用いた量子揺らぎの定理の研究にも発展すると期待した。

ここでは、電極の電子過熱による温度揺らぎの実験の提案を目的として、外部から駆動した量子 2 準位系が熱溜めに放出する熱量の分布の研究を行う。熱溜めにエネルギーを放出する過程はエネルギー緩和過程であるため、必然的にデコヒーレンスの原因となり、縦緩和時間を短くする。この制約のもとで量

子性を観測する方法を提案することを目的とした。

(3) 熱力学的エントロピーと情報エントロピーの関係の研究

「4. 研究成果(2) 2準位系の量子状態の事前選択と事後選択をとりいれた量子系における詳細揺らぎの定理」で記述するように、状態の制約は、発熱量の分布に興味深い影響を与える。その結果は、位相空間の制限に伴う熱力学第2法則の修正と捉えることができ、情報熱力学「Sagawa & Ueda, Phys. Rev. Lett. 104 090602 (2019)」とも類似する。そこで情報エントロピーと熱力学エントロピーの役割を理解することを目的に、自己情報量の揺らぎについての完全計数統計理論を研究した。

2端子量子導体において自己情報量の演算子を、以下の手順で導入する。まず左電極と量子導体、および右電極と全系を2つの部分系に分割する。そして右の電極電子の自由度を積分した、縮約密度行列をもとめ、その対数として自己情報量の演算子を定義した。こうして導入した自己情報量の分布の期待値は、エンタングルメント・エントロピーとなる。また自己情報量の分布は、平衡状態においてはエンタングルメント・スペクトラムと等価である。本研究では、バイアス電圧を印加し、2つの部分系に広がる電子・正孔対励起を作ることによって、部分系の間エンタングルメントを生成し、そのエンタングルメントを自己情報量の分布を用いることで定量的に評価することを目的とした。

3. 研究方法

(1) 熱電効果における揺らぎの定理の構築

電極における電子の緩和は、量子導体に滞在する時間よりも十分にゆっくり起こる。このことを用いると、電極の温度ゆらぎに対して、非ガウス分布に従うランジュバン力の元でのランジュバン方程式を構築できる。この時、電極からの電子の放出(電極への電子の吸収)によって引き起こされる電極の熱量の微小変化は、熱力学第一法則により、 $dQ = dU - \mu dN$ となるが、これが温度揺らぎに対するランジュバン力となる。ランジュバン力、つまり dU と dN の同時確率分布は S 行列を用いた多端子量子導体の完全係数統計理論を用いることで構築でき、得られる同時確率分布は一般に非平衡状態で非ガウス分布となる。この理論は過去に我々の先行研究「Y. Utsumi, et al., Phys. Rev. B 89, 205314 (2014)」で、温度プローブの影響を

解析する際に用いており、理論の適用限界などは、この論文で考察している。

(2) 2準位系の量子状態の事前選択と事後選択をとりいれた量子系における詳細揺らぎの定理

本研究ではスピン $1/2$ (量子2準位系)が、熱溜め(揺らぐ xy 磁場を記述するボゾン溜め)と結合した系について、スピン $1/2$ を外部から駆動した場合に、熱溜めに放出する熱量の分布を考えた。量子2準位系のダイナミクスは、量子マスター方程式を用いて解析すると便利であることは確立されている。本研究では、2回測定プロトコルを用い、回転波近似の範囲で、Floquet 状態についての計数場で補正された量子マスター方程式を導く。この近似は、密度行列の非対角要素と対角要素を分離し、通常の揺らぎの定理を満たす。

(3) 熱力学的エントロピーと情報エントロピーの関係の研究

研究方法には、近年開発された多経路ケルディッシュ・グリーン関数法を用いた。まず、自己情報量の分布のフーリエ変換(情報生成関数, information generating function)を求め、それが形式的に Rényi エンタングルメント・エントロピーと関連することを示した。これは Rényi エンタングルメント・エントロピーの意味付けともなっている。次に、正の整数次の Rényi エンタングルメント・エントロピーが、レプリカ法を用いることで、ケルディッシュ分配関数とよばれる量を拡張した形になることを示した。ケルディッシュ分配関数は、多経路ケルディッシュ・グリーン関数による連結クラスター展開を用いて計算できる。さらに、レプリカの指標についての離散フーリエ変換を行うと、多経路ケルディッシュ・グリーン関数が、完全計数統計理論であられる、計数場で補正されたケルディッシュ・グリーン関数と(絶対零度で)等価になることを示した。この事実を使うと、Rényi エンタングルメント・エントロピーを完全計数統計理論の枠組みで計算出来る。

4. 研究成果

(1) 熱電効果における揺らぎの定理の構築

電子溜めの過熱の効果を取り入れ、2端子電子波干渉計に於ける非線形伝導をもとめた。2端子の量子導体の対称性から過熱の効果は、1次の非線形ノイズに対して磁場について偶関数の成分のみに影響を与え、磁場について奇関数の成分には影響を与えないことを示した。また電極における過熱が完全では無いことを仮定すると、奇関数の成分のみ

が揺らぎの定理を満たすことを示した．この結果は実験の傾向と一致する．今後は，偶関数の成分について見られた有効温度の上昇の説明と，不完全な過熱を与えるメカニズムの解明に研究を進展させる．

また研究手法を活用することで，以下の研究を行った．

(1 - 1) 微小強磁性トンネル接合における揺らぐスピントルクによる磁化反転「Y. Utsumi, T. Taniguchi, Phys. Rev. Lett. 114, 186601 (2015)」

強磁性トンネル接合において，揺らぐスピントルクによる磁化反転の研究を行った．スピントルクは，非平衡スピン流により生み出される非保存力であり，非ガウス分布に従って揺らぐ．この影響を受け，自由層の磁化が確率的に反転するが，これは Kramer's escape rate problem において，ガウス揺らぎを非ガウス揺らぎに拡張した問題である．非保存力であるスピントルクの揺らぎは揺動散逸定理では記述できない．本研究では微小強磁性トンネル接合を熱機関ととらえ，微小エンジンの揺らぎの定理を用い，非保存力の揺らぎの分布を決定した．ナノ磁石が強磁性絶縁体の場合でスピントルクの揺らぎの分布を完全係数統計理論を用いて決定した．

(1 - 2) 量子導体の熱電効果における効率の分布の研究「H. Okada, Y. Utsumi, J. Phys. Soc. Jpn. 86, 024007 (2017)」

量子導体においては，出力電流と入力熱流はともに揺らぐ．するとそれらの比である効率も揺らぐため，その分布を考える必要がある．そこでトンネル接合について効率の揺らぎを計算し，効率の期待値が揺らぎのために時間依存性を持つことを示した．本研究結果の意義は，揺らぎの期待値の時間依存性を実際に計算することで，有限時間では効率の期待値が巨視的な効率を上回り得ることを明らかにした点である．

(2) 2準位系の量子状態の事前選択と事後選択をとりいれた量子系における詳細揺らぎの定理「P. Wollfarth, A. Shnirman, Y. Utsumi, Phys. Rev. B 90, 165411 (2014)」

量子2準位系の始状態 i と終状態 f を選択した場合，熱流 q の確率分布が非平衡統計力学の定理である，「詳細揺らぎの定理」

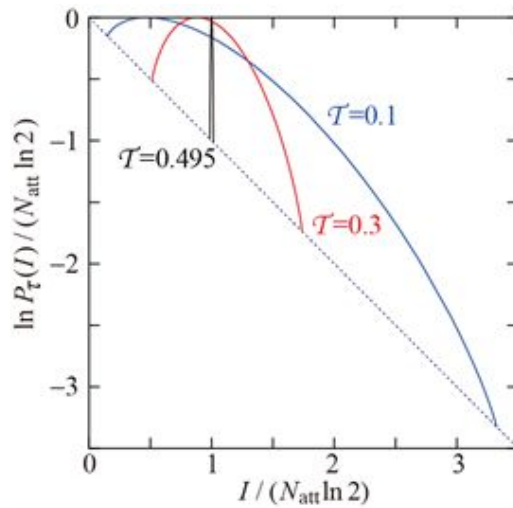
$$\frac{P(q, f | i)}{P(-q, i | f)} = \exp\left(\frac{q}{k_B T}\right)$$

を満たすことを示した．また初状態と過状態を選択した場合，熱流の確率分布には，ディ

フェージング時間より短い時間では時間とともに振動する成分が存在することを見出した．これは振動は事前事後選択を行ったアンサンブルでのみ現れる量子干渉効果といえる．

(3) 熱力学的エントロピーと情報エントロピーの関係の研究「Y. Utsumi, Phys. Rev. B 92, 165312 (2015)」

先行研究「Klich & Levitov, Phys. Rev. Lett. 102, 100502 (2009)」で，電子間相互作用がない場合には，完全計数統計理論で得られる電流揺らぎのキュミュラントと Rényi エンタングルメント・エントロピーの間に一般的な関係があることが示されていた．そこで，まず多経路ケルディシュ・グリーン関数を用いた方法でこの結果を再現することを確認した．



透過率が小さい場合 ($T = 0.1, 0.3, 0.495$) における自己情報量 I の確率分布． $N_{\text{att}} = \tau eV / h$ は観測時間 τ の間に入射する電子数．分布の上限 $I = -(\tau eV / h) \ln T$ はすべての電子が透過するイベントに対応し，下限 $I = -(\tau eV / h) \ln R$ はすべての電子が反射するイベントに対応する．

さらに量子ドット (アンダーソンモデル) について，自己情報量の分布を求めた．そして自己情報量の分布の上限及び下限を明らかにした．上限と下限は透過確率と反射確率の大小関係に依存し，透過が小さい時 ($T < R$)，自己情報量の上限は，観測時間 τ ，印加電圧 V として $I = -(\tau eV / h) \ln T$ で与えられる．これはすべての電子が透過するイベントに対応する．その一方で下限は $I = -(\tau eV / h) \ln R$ で与えられ，これはすべての電子が反射するイベントに対応している．さらにオンサイトクーロン相互作用を

Hartree 近似の範囲で取り入れた。先行研究の方法では、この場合の計算は困難であった。Hartree 近似の範囲では、相互作用の影響は、エンタングルメント・エントロピーの期待値を僅かに変えるだけだが、自己情報量の分布の上限を大きく変えることを明らかにした。

さらに Rényi エンタングルメント・エントロピーについて成立する普遍的な関係式を指摘した。M 次の Rényi エンタングルメントエントロピーについて、 $M \rightarrow 0$ の値が一般的に電子輸送に関するヒルベルト空間の大きさと関係することを示し、このことからエンタングルメント・エントロピーの上限を導くことができることを示した。これは非平衡統計力学の定理である Jarzynski 等式と形式的な類似がある。

本研究で用いた手法は、エンタングルメントエントロピー・情報流・電流・熱流を统一的に扱う枠組みを与えると期待しており、今後も発展させる予定である。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計 12 件)

Hiroki Okada, Yasuhiro Utsumi, "Heat and charge current fluctuations and the time dependent coefficient of performance for a nanoscale refrigerator", J. Phys. Soc. Jpn. 86, 024007 (2017) (査読有)

A. Ueda, Y. Utsumi, Y. Tokura, O. Entin-Wohlman, A. Aharony, "AC transport and full-counting statistics of molecular junctions in the weak electron-vibration coupling regime", J. Chem. Phys. **146**, 092313 (2017) (査読有)

Shlomi Matityahu, Yasuhiro Utsumi, Amnon Aharony, Ora Entin-Wohlman, Carlos A. Balseiro, "Spin-dependent transport through a chiral molecule in the presence of spin-orbit interaction and non-unitary effects", Phys. Rev. B **93**, 075407 (2016) (査読有)

Y. Utsumi, "Full-counting statistics of information content in the presence of Coulomb interaction", Phys. Rev. B **92**, 165312 (2015) [DOI:https://doi.org/10.1103/PhysRevB.92.165312] (査読有)

M. Marthaler, Y. Utsumi, D. S. Golubev,

"Lasing in circuit quantum electrodynamics with strong noise", Phys. Rev. B **91**, 184515 (2015) (査読有)

Yasuhiro Utsumi, Tomohiro Taniguchi, "Fluctuation Theorem for a Small Engine and Magnetization Switching by Spin Torque", Phys. Rev. Lett. **114**, 186601 (2015) (査読有)

Philip Wollfarth, Alexander Shnirman, Yasuhiro Utsumi, "Distribution of energy dissipated by a driven two-level system", Phys. Rev. B **90**, 165411 (2014) (査読有)

[学会発表](計 20 件)

Y. Utsumi, T. Taniguchi, "Fluctuation Theorem for a Small Engine and Magnetization Switching by Spin Torque", Frontiers of Quantum and Mesoscopic Thermodynamics (FQMT2015) (Prague, Czech Republic, July 27-August 1, 2015) (invited)

Y. Utsumi, T. Taniguchi, "Fluctuation Theorem for a Small Engine and Magnetization Switching by Spin Torque", ISSP International Workshop on New Perspectives in Spintronic and Mesoscopic Physics (NPSMP2015) (Institute solid state physics, Univ Tokyo, Kashiwa, Japan, June 1-19, 2015) (invited)

6. 研究組織

(1) 研究代表者

内海裕洋 (UTSUMI, Yasuhiro)

三重大学・大学院工学研究科・准教授

研究者番号: 10415094

(2) 研究分担者 なし

(3) 連携研究者 なし

(4) 研究協力者

Dmitri Golubev (GOLUBEV, Dmitri)

小林研介 (KOBAYASHI, Kensuke)

岡田大輝 (OKADA, Hiroki)

伊藤貴博 (ITO, Takahiro)