

氏名	石川 順一
学位の種類	博士(理学)
学位記番号	甲博理工第499号
学位授与年月日	平成27年3月24日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当
学位論文題目	Application of the Generalized Work Relation for an N-level Quantum System (一般化された最大仕事公式N準位量子系への適用)
審査会	主査 長谷川 博 委員 堀内利郎 委員 下村勝孝 委員 藤間昌一

## 論文内容の要旨

We generalized the maximum work formulation of the second law for a nonequilibrium initial state. This generalization allows us to find the maximum work that can be gained from a nonequilibrium initial state. We are able to consider isolated systems as well as those coupled to heat reservoirs, undergoing both adiabatic and isothermal transitions.

The derivation is based on the information geometry. The maximum work formulation is generalized as a relation between the work and a relative entropy with an effective temperature. The relative entropy, also known as the Kullback–Leibler divergence, is always positive and gives a “distance” between the nonequilibrium initial distribution and the canonical distribution.

For a finite Hamiltonian system without a heat reservoir, the effective temperature is determined by an isentropic condition. The maximum work is realized in two successive processes: an instantaneous stabilization of the nonequilibrium initial distribution and an isentropic process. When the system is coupled to a large heat reservoir, the effective temperature is the temperature of the heat reservoir. From the generalized second law, the maximum work is realized in two successive processes: an instantaneous stabilization and a quasi-static isothermal process.

In this thesis, we explicitly show how the maximum work is realized in the limit of instantaneous stabilization in a finite quantum system. Instantaneous stabilization does not appear in traditional thermodynamics. We introduced this process in order to extract the maximum work from the nonequilibrium initial state. It prevents spontaneous relaxation such as free expansion in a gas system. Since it is an ideal instantaneous process, its realizability is a crucial problem we must consider.

We consider a finite quantum system with a Hamiltonian that has a time dependence associated with an external cyclic operation. The first step in extracting work from a nonequilibrium initial state is to stop its time evolution. This may be accomplished by changing the initial Hamiltonian to an effective Hamiltonian for which the nonequilibrium initial state is a stable canonical distribution. After the stabilization, we performed an isentropic process which changes the effective Hamiltonian to the final Hamiltonian. We show how the maximum work is realized in the limit of instantaneous stabilization in an exactly solvable two-level system.

We confirm that the generalized work relation is consistent with known re-

sults. Several authors showed the validity of the second law for a passive initial state in an  $N$ -level system. Hatsopoulos—Gyftopoulos and Allahverdyan—Balian—Nieuwenhuizen obtained the maximum work from a non-passive initial state. Our result is completely consistent with their results.

We show how to extract the maximum work for a process that includes a crossing of adiabatic energy levels. Work extracted from a thermally isolated equilibrium system is maximized for quasi-static realization of a given process. Allahverdyan and Nieuwenhuizen rigorously showed that this principle can be violated for crossings of adiabatic energy levels. Therefore, we give a non-quasi-static process that maximizes work extraction when there is a level crossing.

Finally we propose an efficient quantum feedback control in a symmetric Two—level quantum system connected to an energy source. For the symmetric two—level quantum system we may skip the restoration process. After re-excitation by the energy source, we repeat the instantaneous stabilization. Since a real stabilization is an almost instantaneous process, we can control the system even though it is coupled to an energy source. The minimum period is determined by a re-excitation time, such as the relaxation time. Since our argument is not restricted within thermodynamics, we can choose any energy source, such as the light from sun, to make the re-excitation time much shorter. We expect our efficient quantum process plays an important role in a quantum dot solar cell.

## 論文審査の結果の要旨

本論文は、非平衡状態間の遷移過程を対象に一般化された、最大仕事公式（熱力学第2法則）を  $N$  準位量子系に適用した結果について報告したものである。通常第2法則は、安定な平衡状態間の遷移過程を対象とする。外部操作で得られる仕事の上限を規定し、第2種の永久機関が実現不可能であることを示す。近年、非平衡状態にあるナノ系やナノ・バイオ系に適用できるようにするため、第2法則が非平衡状態間の遷移過程を対象とするように一般化された。

一般化された最大仕事公式は、ハミルトニアン力学と情報幾何の基本的な性質のみから導かれる、普遍的な法則である。この公式は、熱的に孤立した系についての断熱過程に対して導かれる。そのとき初期状態と終状態のエントロピーの保存関係から有効温度が決まる。熱的に孤立した全系を系と熱浴に分け、熱浴の自由度無限の極限を取ることで、等温過程における公式も導かれる。このとき有効温度は熱浴の温度と一致する。一般化された最大仕事公式は、平衡状態へ到達しない可積分系にも適用可能で、熱力学第1法則（エネルギー保存）と同等に普遍的な法則である。

一般化された最大仕事公式は、非平衡初期状態にある系から得られる仕事の上限を与える。しかし実際に非平衡初期状態にある系から、無駄なく仕事を得るためには、緩和時間より圧倒的に短い時間で、まず系の自発緩和を止める操作を行わなければならない。この瞬間的な安定化を実現させることができれば、後は通常熱力学と同様に、準静過程を用いて系を初期状態へ復元させることで、周期操作によって最大仕事を得ることができる。

本論文では、一般化された最大仕事公式を適用して、非平衡初期状態にある  $N$  準位量子系から、最大仕事を取り出す効率的な周期操作について論議している。以下、要点を述べる。

1.  $N$  準位量子系における先行研究との比較： $N$  準位量子系における熱力学第2法則の研究は、 $N$ 次元のベクトル空間における majorization を基礎としている。majorization は、縮退のない離散スペクトルの系での特有な性質である。熱力学系のような連続スペクトルの系には適用できないものの、独特の発展を遂げた。（近年の発表された一般化された熱力学第2法則は、情報幾何を基礎としているので、連続スペクトル系にも適用可能である。）Lenard, Pusz--Woronowicz, Tasaki らは、 $N$  準位量子系における初期 passive 状態に対する第2法則を厳密に証明した。更に Hatsopoulos--Gyftopoulos, Allahverdyan--Balian--Nieuwenhuizen らによって、 $N$  準位量子系における第2法則の非平衡初期状態への一般化は成し遂げられた。本論文の最大仕事についての結果は、これからの先行研究と完全に一致している。
2. 準位交差のある系での、最大仕事の原理の破れについて：Allahverdyan--Nieuwenhuizen は、 $N$  準位量子系に準位交差のある場合を研究し、準静過程だけでは最大仕事を取り出すことができないことを厳密に示した。本論文では、準位交差のある場合でも、瞬間安定化過程を導入すれば、準静復元過程によって、最大仕事を取り出せることを厳密に示した。
3. 最大仕事を取り出す効率的な周期操作：本論文では、エネルギー源に結合している  $N$  準位量子系から、最大仕事を取り出す非常に効率的な周期操作を提案された。エネルギー源による再励起時間が、効率的周期操作のボトルネックであることが明らかにされている。このことは、熱浴等による再励起よりも、光源からの光による直接的な再励起が、より効率的と判断される。今後、太陽電池等への応用が期待される。

学位論文の判定理由：本論文の内容は極めてオリジナルなもので、既にジャーナル誌に

掲載されている。一般化された最大仕事公式を  $N$  準位量子系に適用して、高効率周期操作を得ているが、ナノ系やナノ・バイオ系への更なる応用が期待される。以上の理由から、茨城大学大学院博士後期課程における学位論文としてふさわしいものと判断した。