

# 境界誘起型非平衡量子系での流れとエントロピーの関係

鈴木 秀則<sup>1,2</sup>, 橋爪 洋一郎<sup>3</sup>

## Relation between current and entropy in nonequilibrium boundary-driven quantum systems

Hidenori Suzuki<sup>1,2</sup>, Yoichiro Hashizume<sup>3</sup>

### Abstract

Nonequilibrium boundary-driven quantum systems, where the dissipation terms in the Lindblad equation are represented by operators located at the boundaries of the system, are one of the open quantum systems that have recently attracted significant interest. In this paper, we investigate the relation between spin current and entropy production rate in the steady state of a boundary-driven quantum spin system by numerical and analytical approaches. Using numerical calculations on the finite-size  $XXZ$  model, we observe that the anisotropy parameter dependence of both spin current and entropy production rate exhibits similar behavior. This fact is further confirmed analytically on the basis of the repeated interactions scheme, and an expression for the entropy production rate in terms of steady-state spin currents is obtained. This relation can be intuitively understood, as the spin current between the system and the reservoirs directly corresponds to the entropy flow, given that the spin degree of freedom is the fundamental unit of information within the system.

**Key words** : nonequilibrium boundary-driven quantum system, repeated interactions scheme, spin current, entropy production rate

### 1. 序論

境界誘起型の非平衡量子系とは、系の両端に接触した外界により系の内部に流れが生じている量子系で、系の密度行列の時間発展を記述する Lindblad 方程式における散逸項が系の端に位置する自由度に対応した演算子のみで表される系のことを言う。通常は、図 1 のような状況で系と外界が相互作用しているとき、外界を含めた全体に対する密度行列が満たす von Neumann 方程式において外界の自由度を消去すると、系の内側も含めた全ての自由度に対応する演算子により散逸項が記述されることになるため、単に外界が系の端に接しているだけでは境界誘起

<sup>1</sup> 日本大学歯学部 基礎自然科学分野 (物理学)

<sup>2</sup> 日本大学歯学部総合歯学研究所 機能形態部門  
〒101-8310 東京都千代田区神田駿河台 1-8-13

<sup>3</sup> 東京理科大学教養教育研究院 北海道・長万部キャンパス  
教養部

〒049-3514 北海道山越郡長万部町富野102-1

(受理: 2024年9月26日)

<sup>1</sup> Department of Physics, Nihon University School of Dentistry

<sup>2</sup> Division of Functional Morphology, Dental Research Center,  
Nihon University School of Dentistry

1-8-13 Kanda-Surugadai, Chiyoda-ku, Tokyo 101-8310, Japan

<sup>3</sup> Institute of Arts and Sciences, Oshamambe Division,  
Tokyo University of Science

102-1 Tomino, Oshamambe, Yamakoshi, Hokkaido 049-3514,  
Japan

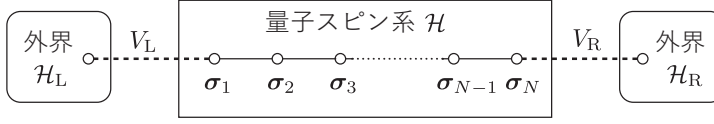


図 1: 端で外界と接触する量子スピンス系

型とはならない。境界誘起型非平衡量子系を基礎付ける考え方としては、繰り返し相互作用の方法 (repeated interactions scheme; RIS) が最もよく知られている<sup>1-5)</sup>。RIS では、非常に短い一定の間隔で系と外界との相互作用のオン・オフが繰り返され、これにより外界と接触している系の端においてのみ散逸項を持つ形式での Lindblad 方程式が導出される。

このように、境界誘起型量子系は特殊な状況で達成される系ではあるが、実現の可能性が指摘されている<sup>2)</sup> ことに加え、理論的な観点からは、スピнкаレントや熱流における整流作用の発現<sup>5-11)</sup>、定常状態における行列積密度演算子による厳密な解析<sup>12-16)</sup> などの報告がなされ、多くの研究者から注目されている。そこで、本研究では量子スピンス系を対象として、境界誘起型非平衡状態でのスピнкаレントとエントロピー生成率の関係性について数値的および RIS に基づいた解析的な手法を用いて調べた。次節では RIS による境界誘起型の Lindblad 方程式の導出の概要を示し、第 3 節で有限サイズ  $XXZ$  模型での定常状態に対する数値計算により、スピнкаレントとエントロピー生成率の異方性パラメータ依存性が等しいことを示す。第 4 節で系と外界の間を流れるスピнкаレントの表式の RIS に基づいた導出から系のスピнкаレントとエントロピー生成率の関係性を明らかにし、第 5 節にまとめを示す。

## 2. RIS による Lindblad 方程式の導出

本節では、Landi ら<sup>5)</sup> に従って RIS による境界誘起型非平衡量子系を記述する Lindblad 方程式の導出を示し、流れとエントロピーの関係性を導くために必要な概念を準備する。

$N$  個のスピンスからなる量子スピンス系を想定し、そのハミルトニアンを  $\mathcal{H}$  とする。この系に流れを誘起する外界も含めた全体のハミルトニアン  $\mathcal{H}_T$  として

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_T &= \mathcal{H} + \mathcal{H}_L + \mathcal{H}_R + V_L + V_R \\ &= \mathcal{H} - H_L \sigma_L^z - H_R \sigma_R^z + \alpha_L (\sigma_L^x \sigma_1^x + \sigma_L^y \sigma_1^y) + \alpha_R (\sigma_N^x \sigma_R^x + \sigma_N^y \sigma_R^y) \end{aligned} \quad (2.1)$$

を考える。ただし、 $\sigma_n^{x,y,z}$  はサイト  $n$  におけるスピンスを表すパウリ行列である。量子スピンス系は図 1 のように 1 次元的である必要はなく任意のスピンス系としてよいが、左端のスピンスを  $\sigma_1$ 、右端のスピンスを  $\sigma_N$  として固定し、これらの端のスピンスだけが外界と相互作用しているとする。(2.1) で外界のハミルトニアン  $\mathcal{H}_{L,R}$  を 1 個のスピンスで表しているが、これは、本来は大きな自由度を持つ外界において系の端のスピンスと相互作用しているスピンス  $\sigma_{L,R}$  以外の自由度を平均場として  $H_{L,R}$  に取り入れた形になっている。また、系と外界の相互作用  $V_{L,R}$  はスピンス間の  $XY$  相互作用  $\alpha_{L,R}$  のみを考えることにする。スピンス間相互作用の  $Z$  成分は、系の端のスピンス  $\sigma_{1,N}^z$  にかかる磁場にくり込まれ、スピнкаレントの誘起への直接の寄与はないため、ここでは考慮

しない。

RIS に基づいた系の時間発展では、時間間隔  $\tau$  ごとに系と外界との接続が切れて左右の外界は逆温度  $\beta_{L,R}$  の熱平衡に瞬間的に戻ることになる。したがって、時刻  $t = m\tau$  ( $m$ =整数) としたとき、外界を含めた全体の密度行列  $\rho_T$  は、

$$\rho_T(t) = \rho_L \rho(t) \rho_R \quad (2.2)$$

と、独立した外界の熱平衡状態における密度行列

$$\rho_{L,R} = \frac{e^{-\beta_{L,R} \mathcal{H}_{L,R}}}{\text{Tr} e^{-\beta_{L,R} \mathcal{H}_{L,R}}} = \frac{e^{\beta_{L,R} H_{L,R} \sigma_{L,R}^z}}{2 \cosh(\beta_{L,R} H_{L,R})} \quad (2.3)$$

を用いて表される。さらに、時刻  $t = m\tau$  から  $\Delta t$  ( $0 \leq \Delta t < \tau$ ) だけ時間が経過したときの密度行列  $\rho_T$  は、ユニタリ行列

$$U(\Delta t) = e^{-i\mathcal{H}_T \Delta t / \hbar} \quad (2.4)$$

を用いて

$$\rho_T(t + \Delta t) = U(\Delta t) \rho_T(t) U^\dagger(\Delta t) \quad (2.5)$$

と書ける。着目する量子スピン系の密度行列  $\rho$  は (2.5) での外界の自由度に対する部分トレース

$$\rho(t + \Delta t) = \text{Tr}_{L,R} (U(\Delta t) \rho_T(t) U^\dagger(\Delta t)) = \text{Tr}_{L,R} \left( e^{-i\mathcal{H}_T \Delta t / \hbar} \rho_T(t) e^{i\mathcal{H}_T \Delta t / \hbar} \right) \quad (2.6)$$

により得られる。ここで、(2.6) 左辺の  $\rho(t)$  が  $t = m\tau$  では微分不可能であるから  $\Delta t$  による Taylor 展開が出来ないことに注意すると、 $\rho(t)$  の時間発展方程式は間隔  $\tau$  の差分方程式から  $\tau \rightarrow 0$  の極限をとることで導出されることになる。

まず、(2.6) 右辺に Baker-Campbell-Hausdorff (BCH) の公式を適用して、交換関係  $[A, B] \equiv AB - BA$  を用いて、

$$\rho(t + \tau) = \text{Tr}_{L,R} \left\{ \rho_T(t) - \frac{i\tau}{\hbar} [\mathcal{H}_T, \rho_T(t)] - \frac{\tau^2}{2\hbar^2} [\mathcal{H}_T, [\mathcal{H}_T, \rho_T(t)]] \right\} + O(\tau^3) \quad (2.7)$$

と展開する。(2.1), (2.2) を (2.7) に代入して  $t = m\tau$  に注意すると、右辺の括弧内の第 1 項は  $\text{Tr}_{L,R}(\rho_L \rho(t) \rho_R) = \rho(t)$ 、第 2 項は  $\text{Tr}_{L,R}[\mathcal{H}_T, \rho_L \rho(t) \rho_R] = [\mathcal{H}, \rho(t)]$  となることが分かるから、 $\tau$  の高次の項を無視して、 $\rho(t)$  に対する間隔  $\tau$  の差分方程式

$$\frac{\rho(t + \tau) - \rho(t)}{\tau} = \frac{1}{i\hbar} [\mathcal{H}, \rho(t)] - \frac{\tau}{2\hbar^2} \left\{ \text{Tr}_L [V_L, [V_L, \rho_L \rho(t)]] + \text{Tr}_R [V_R, [V_R, \rho(t) \rho_R]] \right\} \quad (2.8)$$

が得られる。ここで単純に  $\tau \rightarrow 0$  とすると右辺第 2 項は消えてしまい、散逸のない von Neumann 方程式になってしまう。そこで、第 2 項から有限の大きさの寄与を残すために、外界との相互作用定数  $\alpha_{L,R}$  を

$$\alpha_{L,R} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\hbar \gamma_{L,R}}{\tau}} \quad (2.9)$$

とする。これは、Brown 運動を記述する Langevin 方程式においてランダム力を  $\delta$  関数で記述することと同様に、無限小の時間で無限大の大きさの力が加わることで系に対して有限の大きさの寄与をすることを表している。(2.9) を考慮して (2.8) で  $\tau \rightarrow 0$  の極限をとると、系の密度行列  $\rho(t)$  の時間発展を表す方程式が

$$\frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [\mathcal{H}, \rho(t)] + \mathcal{D}_L^+(\rho(t)) + \mathcal{D}_L^-(\rho(t)) + \mathcal{D}_R^+(\rho(t)) + \mathcal{D}_R^-(\rho(t)) \quad (2.10)$$

と導かれる。ただし、

$$\mathcal{D}_{L,R}^+(\rho(t)) + \mathcal{D}_{L,R}^-(\rho(t)) \equiv -\frac{\tau}{2\hbar^2} \text{Tr}_{L,R} [V_{L,R}, [V_{L,R}, \rho(t)\rho_{L,R}]] \quad (2.11)$$

であり、部分トレースを実際に計算すると、反交換関係の記号  $\{A, B\} \equiv AB + BA$  を用いて、

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_L^\pm(\rho(t)) &= \frac{\gamma_L}{2\hbar} (1 \pm f_L) \left( \sigma_1^\pm \rho(t) \sigma_1^\mp - \frac{1}{2} \{ \sigma_1^\mp \sigma_1^\pm, \rho(t) \} \right) \\ \mathcal{D}_R^\pm(\rho(t)) &= \frac{\gamma_R}{2\hbar} (1 \pm f_R) \left( \sigma_N^\pm \rho(t) \sigma_N^\mp - \frac{1}{2} \{ \sigma_N^\mp \sigma_N^\pm, \rho(t) \} \right) \end{aligned} \quad (2.12)$$

と表される。ここで、 $f_{L,R}$  は外界スピンの熱平衡での期待値

$$f_{L,R} = \text{Tr}_{L,R} \sigma_{L,R}^z \rho_{L,R} = \langle \sigma_{L,R}^z \rangle_{L,R} = \tanh \beta_{L,R} H_{L,R} \quad (2.13)$$

であり、 $-1 \leq f_{L,R} \leq 1$  の範囲の値をとる。

以上より、系の密度行列  $\rho(t)$  の時間発展を表す Lindblad 方程式 (2.10) の散逸項 (2.12) が系の端に位置するスピン  $\sigma_{1,N}$  によって記述され、境界誘起型非平衡量子系の基本方程式が RIS により導出される。

### 3. 境界誘起型非平衡量子スピン系

#### 3.1 XXZ 模型の定常状態

境界誘起型非平衡量子系におけるスピнкаレントとエントロピー生成について具体的な計算例を示すために、本節では、典型的な量子系のひとつである 1 次元 XXZ 模型

$$\mathcal{H} = \sum_{n=1}^{N-1} \left( J_{xy} (\sigma_n^x \sigma_{n+1}^x + \sigma_n^y \sigma_{n+1}^y) + J_z \sigma_n^z \sigma_{n+1}^z \right) - \sum_{n=1}^N H_n \sigma_n^z \quad (3.1)$$

をとりあげる。最近接スピン間の相互作用は一様で、XY 成分を  $J_{xy}$ 、Z 成分を  $J_z$  とし、サイトに依存した磁場が印加されているものとする。この系が Lindblad 方程式 (2.10), (2.12) に従って時間発展して定常状態に至ったときの密度行列  $\rho_{ss}$  は、

$$0 = \frac{1}{i\hbar} [\mathcal{H}, \rho_{ss}] + \mathcal{D}_L^+(\rho_{ss}) + \mathcal{D}_L^-(\rho_{ss}) + \mathcal{D}_R^+(\rho_{ss}) + \mathcal{D}_R^-(\rho_{ss}) \quad (3.2)$$

をみताす。

### 3.2 スピнкаレント

サイト  $n$  から  $n+1$  へのスピнкаレントを表す演算子は、 $\sigma_n^z$  のみならず Heisenberg 方程式  $\dot{\sigma}_n^z = [\sigma_n^z, \mathcal{H}] / i\hbar$  および連続の方程式  $\dot{\sigma}_n^z = \mathcal{J}_{n-1} - \mathcal{J}_n$  に基づいて、

$$\mathcal{J}_n = \frac{2J_{xy}}{\hbar} (\sigma_n^x \sigma_{n+1}^y - \sigma_n^y \sigma_{n+1}^x) \quad (3.3)$$

によって与えられる。(3.2) で記述される定常状態では、系の一方の端から他方の端へと流れるスピнкаレントが途中で散逸することなく流れるため、スピнкаレントの期待値  $\langle \mathcal{J}_n \rangle_{ss} \equiv \text{Tr } \mathcal{J}_n \rho_{ss}$  は、

$$\langle \mathcal{J}_1 \rangle_{ss} = \langle \mathcal{J}_2 \rangle_{ss} = \cdots = \langle \mathcal{J}_{N-1} \rangle_{ss} \equiv \langle \mathcal{J} \rangle_{ss} \quad (3.4)$$

と保存される。

$f_L = -f_R$  で、磁場が  $H_1/J_{xy} = h$  から  $H_N/J_{xy} = -h$  へと線形に変化する場合について、定常状態でのスピнкаレント  $\langle \mathcal{J}_{ss} \rangle$  の  $J_z$  依存性を図 2 に示す。これは系の流れに整流作用が現れる例<sup>5-11)</sup> のひとつ<sup>5)</sup> で、整流作用の発現を反映し非対称な  $J_z$  依存性が見られる。

### 3.3 エントロピー生成率

一般に、エントロピー生成率  $\Pi(t)$  は、von Nuemann エントロピー  $S(t) = -k_B \text{Tr } \rho(t) \log \rho(t)$  の時間変化 ( $k_B$  は Boltzmann 定数) と系から外界へのエントロピーの流出  $\Phi(t)$  の和で、

$$\Pi(t) = \frac{dS(t)}{dt} + \Phi(t) \quad (3.5)$$

と表される。<sup>17)</sup> また、散逸項が一般に演算子  $L_k$  により

$$\sum_k \left( L_k \rho(t) L_k^\dagger - \frac{1}{2} \{ L_k^\dagger L_k, \rho(t) \} \right) \quad (3.6)$$

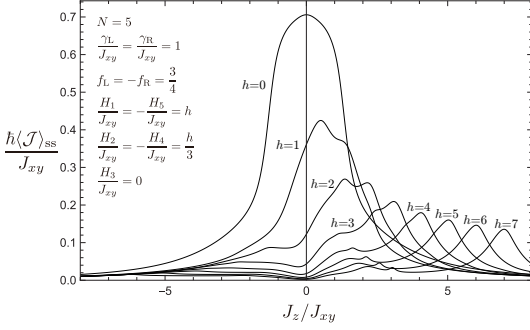
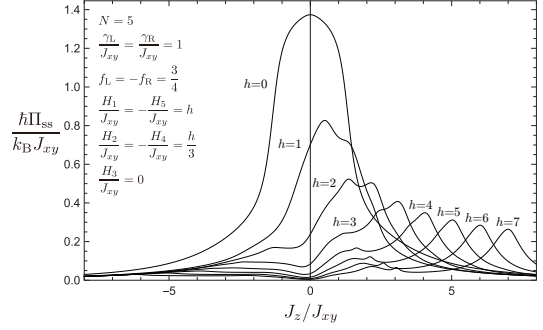
で表される Lindblad 方程式で記述される量子開放系におけるエントロピー流出  $\Phi(t)$  は

$$\Phi(t) = \sum_k \left( \text{Tr } L_k^\dagger L_k \rho(t) \right) \Delta s_k \quad (3.7)$$

で与えられることが知られている<sup>18)</sup>。ここで、 $\Delta s_k$  は演算子  $L_k$  による状態遷移  $k$  によるエントロピーの変化で、遷移  $k$  の逆遷移  $\tilde{k}$  に対して  $\Delta s_{\tilde{k}} = -\Delta s_k$ 、 $L_k = L_{\tilde{k}}^\dagger e^{\Delta s_k / 2k_B}$  をみताす。

今の場合は散逸項が(2.12)で与えられるから、例えば  $L_k = \sqrt{\Gamma_L^+} \sigma_1^+$  に対して逆遷移の演算子は  $L_{\tilde{k}} = \sqrt{\Gamma_L^-} \sigma_1^-$  であり、 $L_k = L_{\tilde{k}}^\dagger e^{\Delta s_k / 2k_B}$  より  $\Delta s_k = k_B \log(\Gamma_L^+ / \Gamma_L^-)$ 、 $\Delta s_{\tilde{k}} = k_B \log(\Gamma_L^- / \Gamma_L^+)$  となり、これは  $\Delta s_{\tilde{k}} = -\Delta s_k$  をみたすことがわかる。ただし

$$\Gamma_{L,R}^\pm = \frac{\gamma_{L,R}}{2\hbar} (1 \pm f_{L,R}) \quad (3.8)$$


 図 2: スピンカレントの  $J_z$  依存性

 図 3: エントロピー生成率の  $J_z$  依存性

である．他の遷移に対しても同様であるから，エントロピー流出  $\Phi(t)$  は，

$$\begin{aligned} \Phi(t) = k_B & \left( \Gamma_L^+ (\text{Tr } \sigma_1^- \sigma_1^+ \rho(t)) \log \frac{\Gamma_L^+}{\Gamma_L^-} + \Gamma_L^- (\text{Tr } \sigma_1^+ \sigma_1^- \rho(t)) \log \frac{\Gamma_L^-}{\Gamma_L^+} \right. \\ & \left. + \Gamma_R^+ (\text{Tr } \sigma_N^- \sigma_N^+ \rho(t)) \log \frac{\Gamma_R^+}{\Gamma_R^-} + \Gamma_R^- (\text{Tr } \sigma_N^+ \sigma_N^- \rho(t)) \log \frac{\Gamma_R^-}{\Gamma_R^+} \right) \quad (3.9) \end{aligned}$$

となる．定常状態では von Nuemann エントロピーは時間変化しないので，エントロピー生成率の期待値  $\Pi_{ss}$  はエントロピー流出の期待値  $\Phi_{ss}$  と等しくなり，

$$\begin{aligned} \Pi_{ss} &= \Phi_{ss} \\ &= \text{Tr } k_B \left( \left( \Gamma_L^+ \sigma_1^- \sigma_1^+ - \Gamma_L^- \sigma_1^+ \sigma_1^- \right) \log \frac{\Gamma_L^+}{\Gamma_L^-} + \left( \Gamma_R^+ \sigma_N^- \sigma_N^+ - \Gamma_R^- \sigma_N^+ \sigma_N^- \right) \log \frac{\Gamma_R^+}{\Gamma_R^-} \right) \rho_{ss} \quad (3.10) \end{aligned}$$

と表される．

図 3 にエントロピー生成率の期待値  $\Pi_{ss}$  の  $J_z$  依存性を，系に整流作用の発現する図 2 と同じパラメータの場合について示す．図 2 と図 3 を比べると，ふたつの異なる物理量が全く同じ  $J_z$  依存性を示していることが分かる．このようなスピンカレントとエントロピー生成率の関係が  $XXY$  模型 (3.1) に特有なものではなく一般に成り立つ関係であることを，次節において RIS に基づいた計算から明らかにする．

#### 4. スピンカレントとエントロピー生成率の関係

RIS における外界を含めた全ハミルトニアン (2.1) の下で外界スピン  $\sigma_{L,R}^z$  がみたす Heisenberg 方程式および連続の方程式から，左の外界から系に流入するスピンカレント  $\mathcal{J}_L$  および系から右の外界へ流出するスピンカレント  $\mathcal{J}_R$  はそれぞれ，

$$\mathcal{J}_L = \frac{2\alpha_L}{\hbar} (\sigma_L^x \sigma_1^y - \sigma_L^y \sigma_1^x), \quad \mathcal{J}_R = \frac{2\alpha_R}{\hbar} (\sigma_N^x \sigma_R^y - \sigma_N^y \sigma_R^x) \quad (4.1)$$

により定義される．エントロピー生成率とスピンカレントとの関係性を明らかにするために，これらのスピンカレントの期待値について系内部の演算子による表式を RIS に基づいて求める．

まず,  $t = m\tau$ ,  $0 \leq \Delta t < \tau$  として,  $\rho_T(t + \Delta t)$  を BCH の公式を用いて展開して,

$$\mathrm{Tr}_{L,R} \mathcal{J}_L \rho_T(t + \Delta t) = \mathrm{Tr}_{L,R} \mathcal{J}_L \left( \rho_T(t) - \frac{i\Delta t}{\hbar} [\mathcal{H}_T, \rho_T(t)] + O(\Delta t^2) \right) \quad (4.2)$$

を考える.  $\mathrm{Tr}_L \sigma_L^x \rho_L = \mathrm{Tr}_L \sigma_L^y \rho_L = 0$  より  $\Delta t$  の 0 次の項からの寄与は 0 となる. また, (2.9) より  $\alpha_{L,R} \sim \tau^{-1/2}$  であることから,  $\Delta t$  の 2 次の項からの寄与は  $O(\Delta t^2/\tau^{2/3})$  となり,  $\tau \rightarrow 0$  の極限で消えるので考慮しない. したがって,  $\tau \rightarrow 0$  の極限での時刻  $t$  における  $\mathcal{J}_L$  の期待値は  $\Delta t$  の 1 次の項からの寄与のみで,  $\Delta t$  について  $0 \sim \tau$  の間の平均として,

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{J}_L \rangle_t &= \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \mathrm{Tr} \mathrm{Tr}_{L,R} \mathcal{J}_L \left( -\frac{i\Delta t}{\hbar} [\mathcal{H}_T, \rho_T(t)] \right) d(\Delta t) \\ &= -\frac{i\tau}{2\hbar} \mathrm{Tr} \mathrm{Tr}_{L,R} \mathcal{J}_L [\mathcal{H}_T, \rho_T(t)] \end{aligned} \quad (4.3)$$

により求められる. ここで, 密度行列を展開する際に第 2 節での Lindblad 方程式の導出のときとは異なり  $\Delta t$  で展開しなければならないことに注意する必要がある. もし  $\tau$  で展開すると (4.2) で  $\Delta t$  を  $\tau$  で置換えた形になり, 時間  $t \sim t + \tau$  の間は一定のスピンカレントが流れ続けているとみなされてしまい, スピンカレントの期待値は (4.3) の 2 倍となってしまう. RIS において, Lindblad 方程式の導出での展開と物理量を求めるための展開は区別することが必要で, 誤った表式で系と外界とのスピンカレントを示している文献<sup>5)</sup> も見られる.

(4.3) に (2.1), (2.9), (4.1) を代入して部分トレース  $\mathrm{Tr}_{L,R}$  を実行すると, 単純な計算の後に

$$\langle \mathcal{J}_L \rangle_t = \mathrm{Tr} \left( \frac{2\gamma_L}{\hbar} (\mathrm{Tr}_L \sigma_L^+ \sigma_L^- \rho_L) \sigma_1^- \sigma_1^+ - \frac{2\gamma_L}{\hbar} (\mathrm{Tr}_L \sigma_L^- \sigma_L^+ \rho_L) \sigma_1^+ \sigma_1^- \right) \rho(t) \quad (4.4)$$

を得る. 左の外界スピンに関する部分トレースをとり, (3.8) を用いると, 左の外界から流入するスピンカレントの期待値は系の内部の自由度のみを用いて

$$\langle \mathcal{J}_L \rangle_t = \mathrm{Tr} 2 (\Gamma_L^+ \sigma_1^- \sigma_1^+ - \Gamma_L^- \sigma_1^+ \sigma_1^-) \rho(t) \quad (4.5)$$

と書ける. 同様の計算により系から右の外界へ流出するスピンカレントの期待値は,

$$\langle \mathcal{J}_R \rangle_t = \mathrm{Tr} 2 (-\Gamma_R^+ \sigma_N^- \sigma_N^+ + \Gamma_R^- \sigma_N^+ \sigma_N^-) \rho(t) \quad (4.6)$$

となる.

得られたスピンカレント (4.5), (4.6) を用いると, 系のエントロピー流出 (3.9) は

$$\Phi(t) = \frac{k_B \langle \mathcal{J}_L \rangle_t}{2} \log \frac{\Gamma_L^+}{\Gamma_L^-} - \frac{k_B \langle \mathcal{J}_R \rangle_t}{2} \log \frac{\Gamma_R^+}{\Gamma_R^-} \quad (4.7)$$

となり, 系と外界との間のスピンカレントを用いて表されることが示される.  $XXZ$  模型における定常状態でのスピンカレントの保存 (3.4) は外界からの流出入も含めて成り立ち,

$$\langle \mathcal{J}_L \rangle_{ss} = \langle \mathcal{J}_R \rangle_{ss} = \langle \mathcal{J} \rangle_{ss} \quad (4.8)$$

であるから, (3.10), (4.7) および (4.8) より,

$$\Pi_{ss} = \Phi_{ss} = \frac{k_B \langle \mathcal{J} \rangle_{ss}}{2} \log \frac{\Gamma_L^+ \Gamma_R^-}{\Gamma_L^- \Gamma_R^+} \quad (4.9)$$

が導かれる. 以上より, 定常状態でのエントロピー生成率とスピнкаレントは因子  $\frac{k_B}{2} \log \frac{\Gamma_L^+ \Gamma_R^-}{\Gamma_L^- \Gamma_R^+}$  だけの違いで表されることが示される. この因子は散逸項のパラメータのみで表されており, 系のスピン間相互作用の大きさとは無関係であることから, 図2と図3における同じ  $J_z$  依存性が説明できる.

## 5. まとめ

本論文では, 境界誘起型非平衡量子スピン系における定常状態において, スピнкаレントとエントロピー生成率が定数倍を除いて全く同じ式で表されることを示した. (4.9) は1次元  $XXZ$  模型に限らず, 左端のスピンを  $\sigma_1$ , 右端のスピンを  $\sigma_N$  として固定し, 端のスピンだけが外界と相互作用している系であれば成り立つ式である. 例えば図4のように格子点が任意のネットワークと形成するような場合でも, 系のある部分を横切るカレントの和として全スピнкаレント演算子  $\mathcal{J}$  を定義すると, スピнкаレントの保存 (4.8) が成り立ち, 定常状態において (4.9) が成立する. スピнкаレントとエントロピーは全く別の物理量であるが, スピン自由度が系の自由度の最小単位であることから, 系と外界の間でのスピнкаレントの出入りが系のエントロピーの流出に対応していることが理解できる. また, (4.7) において,  $\mathcal{J}_L$  は外界から系へのスピнкаレントの流入なので  $\Gamma_L^+ > \Gamma_L^-$  のとき  $\langle \mathcal{J}_L \rangle_t > 0$ ,  $\mathcal{J}_R$  は系から外界へのスピнкаレントの流出なので  $\Gamma_R^+ < \Gamma_R^-$  のとき  $\langle \mathcal{J}_R \rangle_t > 0$  であるから, スピнкаレントの流入・流出いずれの場合でもエントロピーの流出  $\Phi(t)$  は常に正であることが確かめられる.

RIS によって制御される系の実現に向けて, 系と外界の間でのカレントの流出入を正確に評価する必要は当然生じるであろう. その際に Lindblad 方程式の導出過程とは異なり, 物理量を求める際には系と外界との相互作用の切断間隔  $\tau$  で密度行列を展開してはならず,  $0 \sim \tau$  の間の平均として評価しなければならないことも, 本研究で得られた重要な知見のひとつといえる.

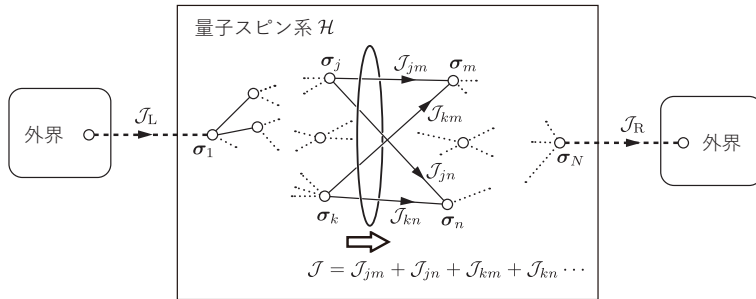


図 4: 一般の場合のスピнкаレント  $\mathcal{J}$  の定義

## 謝辞

本論文に記載した研究は令和4年度日本大学歯学部佐藤研究費（研究）の援助を受けた。

### 【参考文献】

- 1) Barra F (2015) The thermodynamic cost of driving quantum systems by their boundaries. *Sci Rep* 5, 14873.
- 2) Strasberg P, Schaller G, Brandes T, Esposito M (2017) Quantum and information thermodynamics: A unifying framework based on repeated interactions. *Phys Rev X* 7, 021003.
- 3) Pereira E (2018) Heat, work, and energy currents in the boundary-driven *XXZ* spin chain. *Phys Rev E* 97, 022115.
- 4) Reis LH, Silva SHS, Pereira E (2020) Beyond the Lindblad master equation: Heat, work, and energy currents in boundary-driven spin chains. *Phys Rev E* 101, 062107.
- 5) Landi GT, Novais E, de Oliveira MJ, Karevski D (2014) Flux rectification in the quantum *XXZ* chain. *Phys Rev E* 90, 042142.
- 6) Schuab L, Pereira E, Landi GT (2016) Energy rectification in quantum graded spin chains: Analysis of the *XXZ* model. *Phys Rev E* 94, 042122.
- 7) Balachandran V, Benenti G, Pereira E, Casati G, Poletti D (2018) Perfect diode in quantum spin chains. *Phys Rev Lett* 120, 200603.
- 8) de Paula Jr AL, Pereira E, Drumond RC, Aguiar MCO (2020) Energy current manipulation and reversal of rectification in graded *XXZ* spin chains. *J Phys: Condens Matter* 32, 175403.
- 9) Lee KH, Balachandran V, Tan R, Guo C, Poletti D (2020) Giant spin current rectification due to the interplay of negative differential conductance and a non-uniform magnetic field. *Entropy* 22, 1311.
- 10) Oliveira D, Pereira E, Lemos HCF (2020) Transport in boundary-driven quantum spin systems: one-way street for the energy current. *J Phys A: Math Theor* 53, 375007.
- 11) Chioquetta A, Pereira E, Landi GT, Drumond RC (2021) Rectification induced by geometry in two-dimensional quantum spin lattices. *Phys Rev E* 103, 032108.
- 12) Žnidarič M (2010) A matrix product solution for a nonequilibrium steady state of an *XX* chain. *J Phys A: Math Theor* 43, 415004.
- 13) Prosen T (2011) Open *XXZ* spin chain: nonequilibrium steady state and a strict bound on ballistic transport. *Phys Rev Lett* 106, 217206.
- 14) Prosen T (2011) Exact nonequilibrium steady state of a strongly driven open *XXZ* chain. *Phys Rev Lett* 107, 137201.
- 15) Buča B, Prosen T (2014) Exactly solvable counting statistics in open weakly coupled interacting spin systems. *Phys Rev Lett* 112, 067201.
- 16) Prosen T (2015) Matrix product solutions of boundary driven quantum chains. *J Phys A:*

Math Theor 48, 373001.

- 17) Spohn H (1978) Entropy production for quantum dynamical semigroups. J Math Phys 19, 1227-1230.
- 18) Trushechkin AS (2019) On the general denition of the production of entropy in open Marcov quantum systems. J Math Sci 241, 191-209.