

オフシエル電磁場系の作用と散逸構造系のエントロピー

坂野 齋

山梨大学工学部 *

(Dated: March 4, 2024)

間接遷移型半導体であるシリコンから三原色のLED作製を可能にするフォトンブリーディング (PB) という手法は、川添、大津を中心に開発されました [1, 2]. 発光波長が半導体のバンドギャップで決まるのではなく、プロセス時に照射する光の波長と同じになるというものです。また、驚くべき事に巨大磁気光学効果や強磁性を伴います。現象の巨大さは大きなコヒーレント長の電子系を、また、磁気現象を伴うことは内在するオフシエルのベクトルポテンシャルの関与を示唆します。この革新的なプロセスの仕組みとそれで作製されたデバイス (PB デバイス) の動作を記述することはオフシエル電磁場が関わる光学の試金石です。

2019年のオフシエル科学フォーラムでは[人間の都合とオフシエル科学](#) [3] と題して、オフシエル電磁場は物質中に遍在・内在しているが操作性・有用性が低いため認識の俎上に載せられなかったこと、オフシエル電磁場が操作性・有用性が低い点において、熱力学のエントロピーを担う自由度に類似していることを述べました。また、2022年のオフシエル科学フォーラムでは以下の2つの記事を書かせていただきました：[ドレスト光子が関わる量子的散逸構造](#) [4] [流れを考慮した最小作用の原理による量子的散逸構造の探索](#) [5] ここでは、非平衡開放熱力学系の散逸構造 [6] のように、流れと非線形性を原因として生じる状態が開放量子電磁力学系に、PB デバイスの発光状態としてあるであろうと推察し、基底状態から遠い、その状態を変分法で探索するアイデアを述べました。

私には、熱力学系の理論の枠組みは、他の系への移転可能性が高い、洗練されたものに見える、上の記事のような考えに至りました。この記事では、開放量子電磁力学系の流れと非線形性について述べたいと思います。

まず、拡散 (流れ) と化学反応 (非線形性) が結合した散逸構造を例として復習します。

1. エントロピー密度 (単位体積あたりのエントロピー) s がギブスエネルギー密度から決まります。
2. 変数は温度, 圧力, 化学ポテンシャルの他, 原料物質と生成物質の密度場 $\{\rho_i(\mathbf{r}, t)\}$ であり, エントロピー密度 s はこれらの密度場に局所的に依存します。

*Electronic address: banno@yamanashi.ac.jp

3. 化学反応の進行は質量作用の法則で決まる平衡からのずれ：

$$\sim \log \left\{ \frac{\prod_i (\rho_i^{(0)})^{\nu_i}}{\prod_i \rho_i(\mathbf{r}, t)^{\nu_i}} \right\} \quad (1)$$

を駆動力とします。但し、 ν_i は化学種*i*の反応次数です。また、平衡では変数の密度場 $\{\rho_i^{(0)}\}$ は時空間座標によらず一定値です；これは平衡でエントロピー最大が実現されるからです。

4. 開放系であり、原料物質の流入と生成物質の流出が拡散により許されます。

この仮定のもと、エントロピー密度の連続の方程式を次のようにかきます：

$$\frac{d}{dt}s + \nabla \cdot \mathbf{j}_s = \sigma_s \quad (2)$$

実際は、ギブスエネルギー密度から求めたエントロピー密度の時間微分 $\frac{d}{dt}s$ を計算し、エントロピー流密度 \mathbf{j}_s とエントロピー生成密度 σ_s を同定します。特に、 σ_s は、化学反応を駆動する「平衡からのずれの因子」(1)を介して変数 $\{\rho_i(\mathbf{r}, t)\}$ の非線形性を運びます。

外的・内的なゆらぎなど何らかの原因で、変数である物質の密度場が平衡の値から微小なずれ $\{\rho_i(\mathbf{r}, t) - \rho_i^{(0)}\}$ が生じ、不均一になったとします。「不均一」ということは、一種の秩序が生じたことであり、この非平衡状態のエントロピーは平衡状態より減少しています。しかし、ずれが微小なので、エントロピー生成密度 σ_s 中の変数依存性(1)は線形近似ができます。非平衡線形熱力学の教えるところは、エントロピー生成密度は正定値 $\sigma_s > 0$ であり、時間とともにエントロピーを生成して平衡に戻ります。

何らかの原因で、変数が平衡の値から大きなずれ $\{\rho_i(\mathbf{r}, t) - \rho_i^{(0)}\}$ が生じた場合、エントロピー生成密度 σ_s に含まれる変数の非線形性の考慮が必須となり、 σ_s の正定値性は失われます。ある場合には、系内の化学反応で負のエントロピーが生成、秩序構造が成長し、同時に、流れによる補償により定常状態が維持されることがあります。これが散逸構造で、変数が平衡の値から大きくずれたところに現れます。

散逸構造が、流れと非線形性が支える定常状態として出現することは汎用性のある考えであり、PBデバイスの発光の理論的記述を目的にした、開放量子電磁力学系にも適用できるのではないかと、というのが、2022年のオフシエル科学フォーラムの記事Ref.[4, 5]でした。

量子電磁力学系の基底状態から遠い定常状態の探索には、摂動法は無効であり、最小作用の原理をに基づく変分法を採用します。つまり、エントロピーの働きを作用に担わせ、エントロピー密度 s の働きをラグランジアン密度 \mathcal{L} に担わせることにします。また、量子電磁力学系は電子の自由度と電磁場（電磁ポテンシャル）の自由度からなりますが、電磁ポテンシャルごとに電子の自由度を予め最適化して、電磁ポテンシャルの自由度のみ変数として残

すようにします；実際，電子の自由度の最適化はハイゼンベルグ描像で線形・非線形感受率を用意することで達成できます．つまり，非平衡開放熱力学系の変数である原料物質・生成物質の密度場の働きを電磁ポテンシャルに担わせることができます．このような対応づけの下で，ラグランジアン密度 \mathcal{L} は変数である電磁ポテンシャルでかかれ，ラグランジアン密度 \mathcal{L} ，ラグランジアン密度流 $\mathbf{j}_{\mathcal{L}}$ ，ラグランジアン生成密度 $\sigma_{\mathcal{L}}$ の間の関係としての連続の方程式は次のようになるでしょう；

$$\frac{d}{dt}\mathcal{L} + \nabla \cdot \mathbf{j}_{\mathcal{L}} = \sigma_{\mathcal{L}} \quad (3)$$

電子の場を量子場，電磁場を古典場とする半古典論では，ラグランジアン生成密度 $\sigma_{\mathcal{L}}$ は，電子系の演算子であり，線形・非線形感受率演算子と電磁ポテンシャルのたたみ込み積分で記述され非線形性を運びます．とくに，オンシエル電磁場は物質との結合があってこそ存在でき，物質内に局在するため $\sigma_{\mathcal{L}}$ の非線形性においてオンシエル電磁場を凌ぎ主役を担うと予想されます．また，ラグランジアン密度流は，オンシエル電磁場の出射を記述するはずで

具体的には，量子電磁力学系において，基底状態から遠い定常状態をマクスウェル方程式の解として変分法で求めます．その際には生成物の発光をもたらす原因である原料物のキャリア電子・正孔注入を表す電子状態を想定して，線形・非線形感受率演算子の期待値を求めます．解が求まったあと，その電子系の状態で $\sigma_{\mathcal{L}}$ の期待値をとり，その符号と大きさが決まり，定常状態 $\frac{d}{dt}\mathcal{L} = 0$ の条件から，発光を表すラグランジアン密度流 $\mathbf{j}_{\mathcal{L}}$ を決めるという計画です．

最後に，一点注意すべきことは，エントロピー密度 s は単位体積あたりのエントロピーですが，ラグランジアン密度 \mathcal{L} は単位時間・単位体積あたりの作用です．動的状態は作用の最適化で決まりますが，静的状態はエネルギーの最適化でも求められます．熱力学はもともと，静的な2状態の差を対象としており，エネルギーベースの理論です．散逸構造の理論はギブスエネルギーをベースに平衡系の理論を上手に非平衡系の記述に拡張しています．もし，(3) によって開放量子電磁力学系が作用ベースで理解可能ということになれば，非平衡熱力学系にも作用ベースの理論があってよいというフィードバックが可能かもしれません．私は散逸構造の理論にはお世話になっているので，そのような恩返しができるれば嬉しく思います．

[1] Minh Anh Tran, Tadashi Kawazoe, and Motoichi Ohtsu. Fabrication of a bulk silicon p-n homojunction-structured light-emitting diode showing visible electroluminescence at room temperature. *Appl. Phys. A*, 115:105–111, 2014. DOI 10.1007/s00339-013-7907-9.

- [2] M. Ohtsu. *Silicon Light-Emitting Diodes and Lasers*. Springer International Publishing, Switzerland, 2016.
- [3] 坂野 齋. 人間の都合とオフシエル科学, 2019. [https://rodrep.or.jp/forum/05\)20190424.html](https://rodrep.or.jp/forum/05)20190424.html).
- [4] 坂野 齋. ドレスト光子が関わる量子的散逸構造, 2022. [https://rodrep.or.jp/forum/36\)20220223.html](https://rodrep.or.jp/forum/36)20220223.html).
- [5] 坂野 齋. 流れを考慮した最小作用の原理による量子的散逸構造の探索, 2022. [https://rodrep.or.jp/forum/43\)20221030.html](https://rodrep.or.jp/forum/43)20221030.html).
- [6] G. ニコリス and I. プリゴジーン. 散逸構造 – 自己秩序形成の物理学的基礎. 岩波書店, 1980.