

# 非線形格子におけるポテンシャル対称性と熱抵抗消失

鳥取大学学術研究院工学系部門 吉村 和之 (Kazuyuki Yoshimura)<sup>1</sup>

大阪大学大学院工学研究科 土井 祐介 (Yusuke Doi)<sup>2</sup>

鳥取大学大学院持続性社会創生科学研究科 北村 智哉 (Tomoya Kitamura)<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Faculty of Engineering, Tottori University

<sup>2</sup>Graduate School of Engineering, Osaka University

<sup>3</sup>Graduate School of Sustainability Science, Tottori University

## 概要

1次元非線形格子のポテンシャル関数について、ある対称性の概念を導入する。これを $\mathcal{NP}$ 対称性と呼ぶ。周期境界の $\mathcal{NP}$ 対称な格子において、初期条件が正の熱流束を持ち、かつ、一定の条件を満たすとき、 $\varepsilon_0 > 0$ が存在して、任意の時刻 $t$ で全熱流束 $J_H$ について $J_H \geq \varepsilon_0 > 0$ が成り立つことを示す。これは、 $J_H$ の区間長 $T$ での時間平均が $T \rightarrow \infty$ の極限でゼロに収束しない事を意味し、初期条件に対する一定の制限下ではあるが、 $\mathcal{NP}$ 対称格子で熱抵抗が消失することを示す。

## 1 はじめに

熱伝導現象は、巨視的スケールの物質においてはフーリエ則 $J = -\kappa \nabla T$ で良く記述される。ここで、 $J$ と $\nabla T$ はそれぞれ熱流束と温度勾配であり、 $\kappa$ は熱伝導率と呼ばれる物体の長さには依存しない物質定数である。フーリエ則は、長さ $L$ の物体において、両端の温度差が一定のとき、 $L$ の増加に伴い熱流束が $J \propto L^{-1}$ のように減少することを意味する。この熱流束の減少を引き起こす性質が、物質の熱抵抗である。微視的スケールでは、 $J \propto L^{\alpha-1}$ ,  $\alpha \in [0, 1)$ のようになり熱伝導率 $\kappa$ は長さ $L$ に依存し得る[1, 2]が、定性的には $J$ は $L$ の増加に伴い減少するため、熱抵抗は依然として存在する。原子ダイナミクスに基づき熱抵抗の起源を明らかにすることは、物理学における基本的かつ重要な問題の1つである。

固体結晶の最も単純化された微視的力学モデルは、1次元非線形格子モデルであり、このモデルは原子の振動を介した熱伝導の理論・数値的研究に広く用いられてきた[3, 4]。非線形格子においては、フォノン間に相互作用が生じる。このフォノン相互作用が、熱抵抗の発生に関わると考えられている。Peierlsは、フォノン相互作用をnormal過程、および、umklapp過程と呼ばれる2種類の型に分類した。さらに、「格子系にumklapp過程が無くnormal過程のみが存在する場合には熱抵抗が消失する」という仮説が、Peierlsによって提唱され広く受け入れられている[5, 6]。しかしながら、この仮説は、粗い近似理論に基づくものであり、仮説を正当化する厳密な理論は未だ無い。また、固体結晶モデルの分子動力学シミュレーションによる数値的検証さえも、つい最近までなされていなかった。

数値的検証がなされなかった理由としては、適切な非線形格子モデルが無かったことが挙げられる。最近、我々は、umklapp 過程が無く normal 過程のみを持つ特殊な 1 次元非線形格子モデル (Umklapp-free lattice, UFL) を構成した。さらに、UFL を用いて非平衡分子動力学による大規模な熱伝導シミュレーションを行い、弱非線形領域で、umklapp 過程が無い場合に熱抵抗がゼロになることを数値的に示した [7]。ここで構成した UFL は、umklapp 過程が無く normal 過程のみを持つような非線形格子モデルの一例に過ぎないが、少なくとも UFL に関して Peierls 仮説の正当性が数値的に検証された。

本稿では、Peierls 仮説を部分的にはあるが正当化する厳密な結果について述べる。具体的には、周期境界の有限サイズ 1 次元非線形格子において、初期条件で熱流束を与えたとき、熱流束の長時間平均がゼロに緩和しない条件を示す。このために、ポテンシャル関数がある対称性を有するような非線形格子のクラスを導入する。この対称性を、 $\mathcal{NP}$  対称性と呼ぶことにする。本研究では、 $\mathcal{NP}$  対称格子における熱流束の非緩和定理を証明した。この定理は、初期条件が正の熱流束を持ち、かつ、一定の条件を満たすとき、区間長  $T$  での熱流束の時間平均が、 $T \rightarrow \infty$  の極限でゼロに収束しないことを保証する。すなわち、初期条件に対する一定の制限下ではあるが、 $\mathcal{NP}$  対称性が熱抵抗消失の条件となることを示している。なお、 $\mathcal{NP}$  対称格子のクラスは、umklapp 過程が無く normal 過程のみを有する非線形格子を含むため、上記定理は、Peierls 仮説を部分的に正当化するものである。なお、本稿で扱った内容の詳細については、文献 [8] を参照されたい。

## 2 非線形格子と $\mathcal{NP}$ 対称性

### 2.1 非線形格子とフォノンモード座標

次式のハミルトニアンで記述される一般的な 1 次元非線形格子を考える。

$$H = \frac{1}{2} \sum_{n \in \mathcal{N}} p_n^2 + \Phi(q_1, q_2, \dots, q_N) \quad (1)$$

ここで、 $q_n, p_n \in \mathbb{R}$  は  $n$  番目粒子の変位と運動量、 $\mathcal{N} = \{1, 2, \dots, N\}$ 、 $N$  は粒子数、 $\Phi: \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$  はポテンシャル関数である。さらに、粒子数  $N$  は偶数とし、周期境界条件  $q_{N+n} = q_n, p_{N+n} = p_n$  を仮定する。(1) 式のポテンシャル関数  $\Phi$  の定義域を複素領域に拡張して考え、以下の条件 (P1)-(P3) を仮定する。

- (P1)  $\Phi$  は  $(q_1, q_2, \dots, q_N) \in \mathbb{C}^N$  の複素解析関数
- (P2)  $\Phi(\mathbf{0}) = 0$  かつ  $\partial\Phi/\partial q_n(\mathbf{0}) = 0, n \in \mathcal{N}$
- (P3) 巡回置換に対する不変性:  $\Phi(q_2, \dots, q_N, q_1) = \Phi(q_1, q_2, \dots, q_N)$

条件 (P1) と (P2) より、 $\Phi$  は以下の形で表される。

$$\Phi(\mathbf{q}) = \sum_{m=2}^{\infty} \Phi_m(\mathbf{q}) \quad (2)$$

ここで、 $\mathbf{q} = (q_1, \dots, q_N)$  であり、 $\Phi_m$  は  $m$  次の同次関数である。条件 (P3) は、格子系が同種の粒子からなり並進対称であることを示している。格子系 (1) の運動方程式は、 $\dot{q}_n = \partial H / \partial p_n, \dot{p}_n = -\partial H / \partial q_n$  により与えられる。

$\mathcal{K} = \{-N/2 + 1, \dots, N/2\}$  とし, フォノンモード座標  $U_k \in \mathbb{C}$ ,  $k \in \mathcal{K}$  を, 次式のユニタリー変換により定義する.

$$q_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k \in \mathcal{K}} U_k \exp \left[ -i \frac{2\pi k}{N} n \right], \quad n \in \mathcal{N} \quad (3)$$

本稿の以下の記述においては, 実数領域で粒子変位  $q_n$  を扱う. このとき, フォノンモード変数は, 制約条件  $U_{-k} = \bar{U}_k$  を満たす. ただし,  $\bar{U}_k$  は,  $U_k$  の複素共役を表す. また, (3) 式の逆変換は次式で与えられる.

$$U_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n \in \mathcal{N}} q_n \exp \left[ i \frac{2\pi k}{N} n \right], \quad k \in \mathcal{K} \quad (4)$$

(1) 式のハミルトニアンは, 条件 (P1)-(P3) の下で, (3) 式よりフォノンモード座標で以下のよう表される.

$$H = \frac{1}{2} \sum_{k \in \mathcal{K}} |\dot{U}_k|^2 + \Phi(\mathbf{U}) \quad (5)$$

ここで,  $\mathbf{U} = (U_{-N/2+1}, \dots, U_{N/2})$  である. 運動方程式は, ハミルトニアン (5) より次式で与えられる.

$$\ddot{U}_k = -\frac{\partial \Phi(\mathbf{U})}{\partial U_{-k}} \quad \text{for } k \in \mathcal{K} \setminus \{N/2\}, \quad \ddot{U}_{N/2} = -\frac{\partial \Phi(\mathbf{U})}{\partial U_{N/2}} \quad (6)$$

(5) 式のポテンシャル関数  $\Phi(\mathbf{U})$  は, (2) 式より,  $m$  次の部分  $\Phi_m(\mathbf{U})$  の和となる.

$$\Phi(\mathbf{U}) = \sum_{m=2}^{\infty} \Phi_m(\mathbf{U}) \quad (7)$$

式中の各  $\Phi_m(\mathbf{U})$  は次式の形で与えられる.

$$\Phi_m(\mathbf{U}) = \sum_{k_1, \dots, k_m \in \mathcal{K}} a_m(k_1, \dots, k_m) U_{k_1} U_{k_2} \dots U_{k_m} \Delta(k_1 + \dots + k_m) \quad (8)$$

ここで,  $a_m$  は  $(k_1, \dots, k_m)$  に依存する係数であり,  $\Delta(d)$  は次式で定義される関数である.

$$\Delta(d) = \begin{cases} 1 & \text{if } d \in N\mathbb{Z} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (9)$$

$\sigma$  を集合  $\{k_1, k_2, \dots, k_m\}$  上の置換とする. 係数  $a_m$  は, 任意の  $\sigma$ , および, 任意の  $(k_1, \dots, k_m)$  に対して,  $a_m \circ \sigma(k_1, \dots, k_m) = a_m(k_1, \dots, k_m)$  を満たす.

ポテンシャル関数  $\Phi$  の非線形部分, すなわち  $m \geq 3$  に対する  $\Phi_m$  を考える. 各  $\Phi_m$  において, normal 過程と umklapp 過程の分類が定義される. (8) 式は, 一般的な 1 次元非線形格子の  $m$  次部分ポテンシャル  $\Phi_m$  においては, フォノンモード間相互作用が, 波数の条件式  $k_1 + \dots + k_m = lN$  により規定されることを示している. すなわち, 波数  $k_i$ ,  $i = 1, \dots, m$  の組が, ある  $l \in \mathbb{Z}$  に対して  $k_1 + \dots + k_m = lN$  を満たすときに限り, それらのフォノンモードが相互作用することを示している. ここで,  $l = 0$  と  $l \neq 0$  の 2 つの場合が可能となる.  $l = 0$  の相互作用を normal 過程,  $l \neq 0$  の相互作用を umklapp 過程と呼ぶ [5].

## 2.2 $\mathcal{NP}$ 対称性と保存量

本節では、 $\mathcal{NP}$  対称性の定義、および、対称性により生じる保存量について述べる。まず、対称性の定義に必要な写像  $S_\lambda$  をフォノンモード座標を用いて導入する。

**定義 2.1**  $S_\lambda : \mathbb{C}^N \rightarrow \mathbb{C}^N$  を、次式で定義される写像とする。

$$S_\lambda : U_k \mapsto U_k \exp[-ik\lambda] \text{ for } k \in \mathcal{K} \setminus \{N/2\}, \quad U_{N/2} \mapsto U_{N/2} \quad (10)$$

ここで、 $\lambda$  は実数のパラメータである。

写像  $S_\lambda$  を用いて、対称性を以下の様に定義する。

**定義 2.2** 任意の  $\lambda \in \mathbb{R}$  と任意の  $\mathbf{U} \in \mathbb{C}^N$  に対し、ポテンシャル関数  $\Phi$  が写像  $S_\lambda$  の作用で不変、すなわち  $\Phi(S_\lambda \mathbf{U}) = \Phi(\mathbf{U})$  であるとき、非線形格子 (5) は  $\mathcal{NP}$  対称であるという。

ポテンシャル関数に umklapp 過程が無く normal 過程のみ存在する場合には、その非線形格子は  $\mathcal{NP}$  対称となる。すなわち、 $\mathcal{NP}$  対称な非線形格子のクラスは、normal 過程のみを持つ非線形格子のクラスを含むより一般的なものである。

条件 (P1)-(P3) の下で、 $\mathcal{NP}$  対称な非線形格子のポテンシャル関数  $\Phi$  は、以下の関数形を持つ  $m$  次部分ポテンシャル  $\Phi_m$  から成ることが示される。

$$\begin{aligned} \Phi_m(\mathbf{U}) = & \sum_{k_1, \dots, k_m \in \mathcal{K} \setminus \{N/2\}} a_m(k_1, \dots, k_m) U_{k_1} \dots U_{k_m} \Delta_0(k_1 + \dots + k_m) \\ & + \sum_{r=1}^{\lfloor m/2 \rfloor} \left\{ \sum_{k_1, \dots, k_{m-2r} \in \mathcal{K} \setminus \{N/2\}} b_{m,2r}(k_1, \dots, k_{m-2r}) U_{k_1} \dots U_{k_{m-2r}} \Delta_0(k_1 + \dots + k_{m-2r}) \right\} U_{N/2}^{2r} \end{aligned} \quad (11)$$

ここで、 $a_m$  と  $b_{m,2r}$  は係数、 $\lfloor m/2 \rfloor$  は  $m/2$  の整数部分を表し、 $\Delta_0(d)$  は次式で定義される関数である。

$$\Delta_0(d) = \begin{cases} 1 & \text{if } d = 0 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (12)$$

また、非線形格子が  $\mathcal{NP}$  対称性を持つ場合には、Noether の定理により、結晶運動量と呼ばれる以下の保存量  $I$  が存在する。

**命題 2.1** 非線形格子 (5) が  $\mathcal{NP}$  対称性を持つならば、次式で与えられる保存量を持つ。

$$I = \frac{1}{2i} \sum_{k \in \mathcal{K} \setminus \{N/2\}} k \left( \dot{U}_k U_{-k} - U_k \dot{U}_{-k} \right) = \sum_{k \in \mathcal{K} \setminus \{N/2\}} k \operatorname{Im} [\dot{U}_k \bar{U}_k] \quad (13)$$

### 3 熱流束の非緩和定理

本節では、線形ポテンシャルとして標準的な関数形を仮定した以下のハミルトニアンで記述される 1 次元非線形格子を考える。

$$H = \frac{1}{2} \sum_{n \in \mathcal{N}} p_n^2 + \frac{1}{2} \sum_{n \in \mathcal{N}} [\mu_0 q_n^2 + (q_{n+1} - q_n)^2] + \Delta\Phi(\mathbf{q}) \quad (14)$$

ここで、 $\mu_0 \geq 0$  は線形オンサイトポテンシャル係数であり、線形相互作用ポテンシャル係数は 1 としてある。(1) 式と同様に、粒子数  $N$  は偶数とし、周期境界条件  $q_{N+n} = q_n$ ,  $p_{N+n} = p_n$  を仮定する。非線形ポテンシャル  $\Delta\Phi$  としては、以下の形を仮定する。

$$\Delta\Phi(\mathbf{q}) = \sum_{m=4}^{\infty} \Phi_m(\mathbf{q}) \quad (15)$$

(14) 式の線形ポテンシャルは、明らかに条件 (P1)-(P3) を満たしている。(15) 式の各  $\Phi_m$ ,  $m \geq 4$  についても、条件 (P1)-(P3) を満たすことを仮定する。さらに、 $\Phi_m$ ,  $m \geq 4$  に対して、下記の条件 (P4) と (P5) を仮定する。

$$(P4) \quad \mathcal{NP} \text{ 対称性: } \Phi_m(\mathcal{S}_\lambda \mathbf{U}) = \Phi_m(\mathbf{U})$$

$$(P5) \quad \text{半正定値性: 任意の } \mathbf{q} \in \mathbb{R}^N \text{ に対し, } \Delta\Phi(\mathbf{q}) \geq 0$$

条件 (P5) を課すために、(15) 式の和では  $m \geq 4$  とした。 $m = 3$  の項が存在する場合には、条件 (P5) は常に満たされなくなる。

(14) 式のハミルトニアンは、フォノンモード座標では以下のように書かれる。

$$H = \frac{1}{2} \sum_{k \in \mathcal{K}} \left( |\dot{U}_k|^2 + \nu_k^2 |U_k|^2 \right) + \Delta\Phi(\mathbf{U}) \quad (16)$$

ここで、 $\nu_k$  は固有振動数であり、次式で与えられる。

$$\nu_k = \sqrt{\mu_0 + 4 \sin^2(\pi k/N)} \quad (17)$$

(16) 式の線形ポテンシャルは、(11) 式の形をしており  $\mathcal{NP}$  対称性を備えている。また、(P4) より  $\Delta\Phi$  も  $\mathcal{NP}$  対称である。したがって、非線形格子 (14) は  $\mathcal{NP}$  対称な格子である。

#### 3.1 熱流束の表式

非線形格子 (14) において、 $\Delta\Phi$  による粒子間の非線形相互作用が十分弱く、線形相互作用が支配的な状況を想定する。このとき、線形相互作用を介して  $n$  番目と  $n+1$  番目粒子の間を単位時間に異動する熱エネルギーを  $j_n$  で表すと、 $j_n$  は次式で与えられる。

$$j_n = -\frac{1}{2} (p_{n+1} + p_n)(q_{n+1} - q_n) \quad (18)$$

さらに、格子系の全熱流束  $J_H$  を次式で定義する。

$$J_H = \sum_{n \in \mathcal{N}} j_n \quad (19)$$

この  $J_H$  を用いて、格子中を伝わる熱エネルギー量を評価する。フォノンモード座標では、 $J_H$  は次式のように書き換えられる。

$$J_H = \frac{1}{2i} \sum_{k \in \mathcal{K} \setminus \{N/2\}} \omega_k v_k \left( \dot{U}_k U_{-k} - U_k \dot{U}_{-k} \right) = \sum_{k \in \mathcal{K} \setminus \{N/2\}} \omega_k v_k \operatorname{Im} [\dot{U}_k \bar{U}_k] \quad (20)$$

ここで、 $\omega_k$  と  $v_k$  は次式で与えられる。

$$\omega_k = 2 |\sin(\pi k/N)| \quad (21)$$

$$v_k = \operatorname{sgn}(k) \cos(\pi k/N) \quad (22)$$

### 3.2 熱流束の非緩和定理

保存量  $I$  を利用して全熱流束  $J_H$  の時間変動を評価することができる。これにより、定理 3.1 を得ることができる。定理 3.1 は、非線形格子が  $\mathcal{NP}$  対称性を持つとき、あるクラスの初期条件に対しては  $J_H$  の長時間平均がゼロに緩和しないことを保証する。

**定理 3.1** 条件 (P1)-(P5) を仮定する。  $(q(t), p(t)) \in \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N$  を非線形格子 (14) の運動方程式の解とする。定数  $c > 0$  に対し  $\chi_N(c)$  を次式で定義する。

$$\chi_N(c) = \max_{k \in \{1, \dots, N/2-1\}} \left| \frac{v_k \omega_k - ck}{\nu_k} \right| \quad (23)$$

初期条件  $(q(0), p(0))$  に対し、ある値  $c > 0$  が存在して不等式  $cI(0) > \chi_N(c)H(0)$  が成り立つと仮定する。このとき、定数  $\varepsilon_0 > 0$  が存在し、解  $(q(t), p(t))$  に対して不等式  $J_H(t) \geq \varepsilon_0$  が全ての  $t \in [0, \infty)$  で成り立つ。

定理 3.1 では、任意の時刻  $t \geq 0$  について  $J_H(t) \geq \varepsilon_0 > 0$  が保証される。したがって、全熱流束の長時間平均について、 $\lim_{T \rightarrow \infty} T^{-1} \int_0^T J_H(t) dt \geq \varepsilon_0 > 0$  が得られる。このことは、温度勾配が無い状況下で、全調和熱流束の長時間平均がゼロに緩和しないことを保証しており、熱抵抗の消失を示している。なお、定数  $\varepsilon_0$  は、初期条件や格子サイズ  $N$  に依存し得る。

### 3.3 初期条件の例

定理 3.1 の仮定を満たす初期条件の具体例を示す。格子サイズ  $N$  が与えられたとき、 $\eta(s)$  を、 $\chi_N(c)/cN$  の  $c$  に関する最小値として以下の様に定義する。

$$\eta(s) = \min_{c>0} \frac{\chi_N(c)}{cN} \quad (24)$$

ここで、 $s = 1/N$  である。パラメータ  $c$  として上式の最小値を与える  $c$  の値を取ると、定理 3.1 の不等式条件  $cI(0) > \chi_N(c)H(0)$  は以下の様に書ける。

$$\tilde{I}(0) - \eta(s)H(0) > 0 \quad (25)$$

ここで、 $\tilde{I}(0) = I(0)/N$  とした。

(14) 式のハミルトニアン  $H$  において  $\Delta\Phi$  を除いた線形部分を  $H_0$  で表す.  $\tilde{I}(0) > 0$  の場合を仮定し, (25) 式の代わりに次の不等式を考える.

$$1 - \eta(s) \frac{H_0(0)}{\tilde{I}(0)} > 0 \quad (26)$$

以下では, 不等式 (26) を満たすような初期条件の具体例を, 単一フォノンモード励起の形で探す. 波数  $k \in \{1, 2, \dots, N/2 - 1\}$  を任意に固定し, 次式の初期条件を考える.

$$U_j(0) = \begin{cases} A & \text{if } j = \pm k \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}, \quad \dot{U}_j(0) = \begin{cases} i\nu_j A \operatorname{sgn}(j) & \text{if } j = \pm k \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (27)$$

ここで,  $j \in \mathcal{K}$ ,  $A > 0$  はモード振幅を表す定数である. 簡単な計算により次式が得られる.

$$\tilde{I}(0) = 2k\nu_k A^2 N^{-1} \quad (28)$$

$$H_0(0) = 2\nu_k^2 A^2 \quad (29)$$

(26) 式の左辺を  $G$  と書くと, (28) 式と (29) 式を用いて  $G$  は以下の様に得られる.

$$G(\kappa, s) = 1 - \eta(s) \frac{\nu(\kappa)}{\kappa} \quad (30)$$

ただし,  $\kappa = k/N$  および  $\nu(\kappa) = \sqrt{\mu_0 + 4\sin^2(\pi\kappa)}$  と定義した.

$(\kappa, s)$  平面において, 領域  $R = \{(\kappa, s); G(\kappa, s) > 0\}$  を定義する. 図 1 に, 領域  $R$  の例を  $\mu_0 = 0, 0.1, 1$  に対して示す. 曲線は  $G(\kappa, s) = 0$  に対応し, 各曲線の上側の領域が  $R$  に相当する. 領域  $R$  は空でない事が確認できる. 格子サイズ  $N$  と波数  $k$  を  $(\kappa, s) = (k/N, 1/N) \in R$  となるように選び (27) 式の初期条件を取ると, 不等式 (26) が満たされる. さらに, 振幅  $A$  を十分小さく取ると,  $H_0$  に比して  $\Delta\Phi$  を任意に小さくできるので, 不等式条件 (25) も満たされる. このとき, 定理 3.1 により, ある  $\varepsilon_0 > 0$  に対して  $J_H(t) \geq \varepsilon_0 > 0$  が全ての  $t \in [0, \infty)$  で成り立つ. さらに, 初期条件に十分小さな摂動を加えた場合も同様である. すなわち, 上述の単一モード励起初期条件とその摂動は, 全熱流束の非緩和が起こる初期条件の具体例となっている.

## 4 まとめ

本研究では, 1 次元非線形格子における  $\mathcal{NP}$  対称性の概念を導入した.  $\mathcal{NP}$  対称な非線形格子のクラスは, umklapp 過程が無く normal 過程のみを持つような非線形格子のクラスを含む. 周期境界の  $\mathcal{NP}$  対称格子においては, 初期条件が正の熱流束を持ち, かつ, 一定の条件を満たすとき, 定数  $\varepsilon_0 > 0$  が存在して, 任意の時刻  $t$  で全熱流束  $J_H$  が  $J_H \geq \varepsilon_0 > 0$  を満たすことを示した. これは,  $J_H$  の区間長  $T$  での時間平均が  $T \rightarrow \infty$  の極限でゼロに収束しない事を意味する. すなわち, 初期条件に対する一定の制限下ではあるが,  $\mathcal{NP}$  対称格子で熱抵抗が消失することが示された. 本研究の結果は, 熱抵抗に関する Peierls 仮説を部分的に正当化するものである.

## 謝辞

この研究は科学研究費補助金 (No. 22K03451) の助成を受けています.

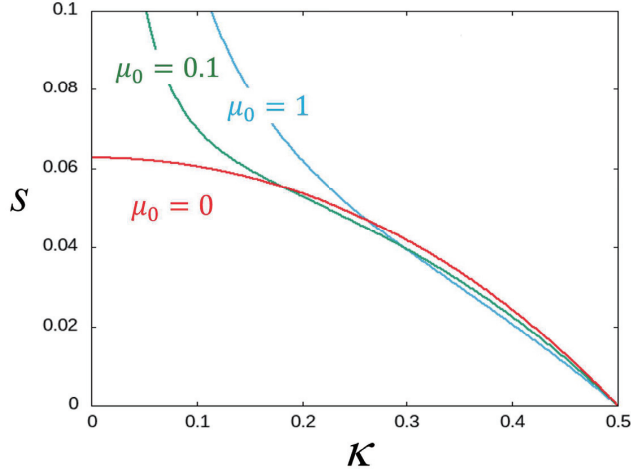


図 1: 初期条件に関する領域  $R$  の例. パラメータ値は  $\mu_0 = 0$  (赤),  $0.1$  (緑),  $1$  (青).

## 参考文献

- [1] C. W. Chang, D. Okawa, H. Garcia, A. Majumdar, and A. Zettl, "Breakdown of Fourier's Law in Nanotube Thermal Conductors," *Phys. Rev. Lett.*, vol.101, 075903, 2008.
- [2] V. Lee, C. H. Wu, Z. X. Lou, W. L. Lee, and C. W. Chang, "Divergent and Ultrahigh Thermal Conductivity in Millimeter-Long Nanotubes," *Phys. Rev. Lett.*, vol.118, 135901, 2017.
- [3] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, Wiley, 2004.
- [4] N. Ashcroft and N. Mermin, *Solid State Physics*, Saunders College Publishing, 1976.
- [5] R. E. Peierls, *Quantum Theory of Solids*, Oxford University Press, London, 1955.
- [6] R. E. Peierls, On the kinetic theory of thermal conduction in crystals, in *Selected Scientific Papers of Sir Rudolf Peierls*, edited by R. H. Dalitz and R. Peierls (World Scientific, Singapore, 1997).
- [7] K. Yoshimura, Y. Doi, and T. Kitamura, "Heat transport in nonlinear lattices free from the umklapp process," *Phys. Rev. E*, vol.105, 024140, 2022.
- [8] K. Yoshimura, G. Kato, and Y. Doi, "Heat transport in nonlinear lattices free from the umklapp process," *Physica D*, vol.446, 133638, 2023.