

Phonon 熱浴に接触した 量子 Harmonic Chain における 熱伝導現象

齊藤 圭司、武末 真二^A、宮下 精二、 阪大 理、京大 総人^A

熱伝導現象の量子効果、熱浴の性質の変化による Energy Profile や Flux への影響を調べる。Fourier 則 などユニバーサルな熱伝導現象は系の強い非線形性が必要である事が分かってきており、それゆえ Normal な熱伝導現象を調べるには非可積分な量子系を使うべきであるが、非可積分系は数値的にも多粒子系を扱う事は難しい。そのためここでは可積分系ではあるが熱伝導に関するたくさんの情報を提供してくれる量子 Harmonic Chain を扱う。Harmonic Chain は古典系においては Rieder, Lebowitz と Lieb によって Langevin 方程式をつかってその非平衡定常状態が調べられている。彼らは温度 Profile が flat になり、各部分の熱流の総和は格子数に比例する事を見出している。特に熱浴との接触点近傍において、高い温度の熱浴の近傍では格子の温度は内部の平均温度より低くなり、温度が低いほうの熱浴近傍の温度は高くなってしまおうという、奇妙な振舞いをする。量子系においても Quantum Langevin 方程式を使った解析があり、flat な温度 profile, 熱浴付近の奇妙な温度振舞いなどが見出されている。

しかしこれらの研究では熱浴が Langevin 方程式でのみ表現されており、熱浴の種類による温度 profile や Energy flux, 両端の効果などは調べられていない。そこで我々は熱浴として Phonon 熱浴を使い、熱浴の Spectral strength が sub-ohmic, ohmic, super-ohmic と変わるときの熱伝導の変化を調べて行く。

格子数 N の Harmonic Chain

$$H = \sum_{n=1}^N \frac{p_n^2}{2m} + \sum_{n=1}^N \frac{m\omega_0}{2} (x_{n+1} - x_n)^2 = \sum_k \epsilon_k \left(a_k^\dagger a_k + \frac{1}{2} \right), \dots \quad \epsilon_k := 2\hbar\omega_0 \sin(k/2).$$

に無限個の調和振動子の集合体で表される、それぞれ逆温度 β_L と β_R を持つ 2 つの熱浴、

$$H_R = \sum_{\alpha_1} \frac{p_{\alpha_1}^2}{2m_{\alpha_1}} + \frac{m_{\alpha_1}\omega_{\alpha_1}^2 x_{\alpha_1}^2}{2} + \sum_{\alpha_2} \frac{p_{\alpha_2}^2}{2m_{\alpha_2}} + \frac{m_{\alpha_2}\omega_{\alpha_2}^2 x_{\alpha_2}^2}{2},$$

が、線形に系に相互作用したときを考える。

$$H_{\text{Int}} = \lambda \left\{ \sum_{\alpha_1} \left(\frac{m_{\alpha_1}\omega_{\alpha_1}}{2} \right)^{1/2} \gamma_{\alpha_1} x_{\alpha_1} x_1 + \sum_{\alpha_2} \left(\frac{m_{\alpha_2}\omega_{\alpha_2}}{2} \right)^{1/2} \gamma_{\alpha_2} x_{\alpha_2} x_N \right\}.$$

このとき定常状態において満たすべき Density Operator の式は λ の 2 次までで、厳密に

$$\frac{1}{i\hbar} [H, \rho(t)] - \frac{\pi\lambda^2}{\hbar} \left\{ [x_1, R_L \rho(t)] + [x_1, R_L \rho(t)]^\dagger \right\} - \frac{\pi\lambda^2}{\hbar} \left\{ [x_N, R_R \rho(t)] + [x_N, R_R \rho(t)]^\dagger \right\} = 0,$$

と表される。ここで Operator R_L は system を対角化する表示で、熱浴の Spectral strength $I(\omega)(:= I_0\omega^\alpha)$ を使うことで、

$$\langle l | R_L | m \rangle = \frac{1}{\lambda^2 \hbar} \langle l | x_1 | m \rangle \frac{I((E_l - E_m)/\hbar) - I(-(E_l - E_m)/\hbar)}{e^{\beta_l(E_l - E_m)} - 1},$$

と求められる。 $\lambda \rightarrow 0$ では解析的に各格子の momentum energy と熱流は

$$\begin{aligned} \langle \epsilon_n \rangle &= \frac{\hbar\omega_0}{\pi} \int_0^\pi dk \sin(k/2) \sin^2(kn) \left(\frac{1}{e^{\beta_L \epsilon_k} - 1} + \frac{1}{e^{\beta_R \epsilon_k} - 1} + 1 \right), \\ J &= \frac{\hbar}{m} \int_0^\pi dk \sin^2 k I(\epsilon_k/\hbar) \left\{ \frac{1}{e^{\beta_L \epsilon_k} - 1} - \frac{1}{e^{\beta_R \epsilon_k} - 1} \right\}. \end{aligned}$$

と計算される。有限の大きさの λ に対しても計算ができ、温度 profile の図は Fig.1, Fig.2 のようになる。Fig.1 は $\alpha = 1.0$ の ohmic のときの図。Fig.2 は $\alpha = 1.5$ の super-ohmic のときの図である。各図の (a),(b),(c) は $T_L = 200.0, T_R = 50.0, T_L = 10.0, T_R = 0.1, T_L = 0.1, T_R = 0.02$ のときの図である。古典極限に相当する (a) の図では 両端の効果が Spectral strength によって異なる事が分かる。量子極限に相当する (c) では 熱浴の種類に影響を受ける事なく量子系固有の profile を示している事がわかる。

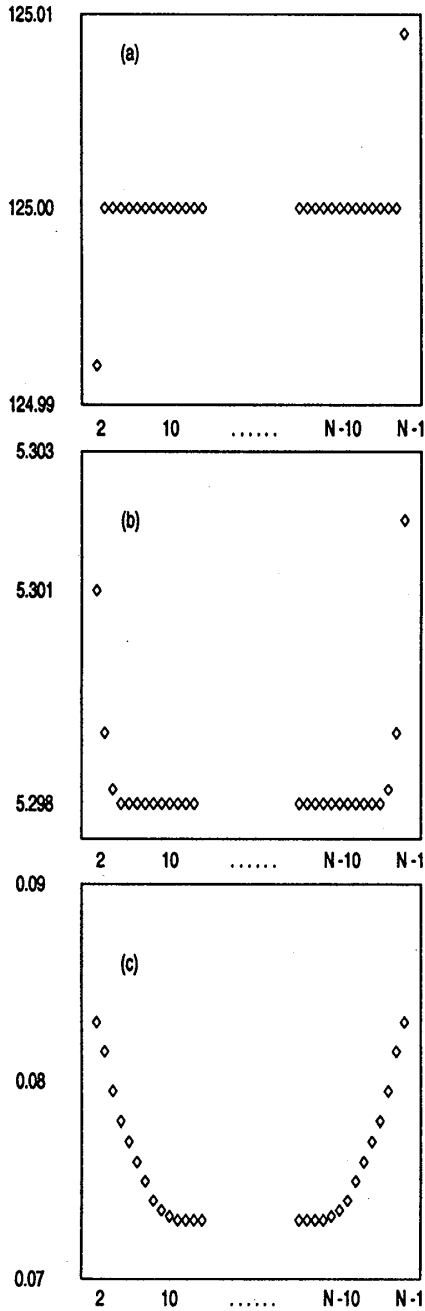


Fig.1

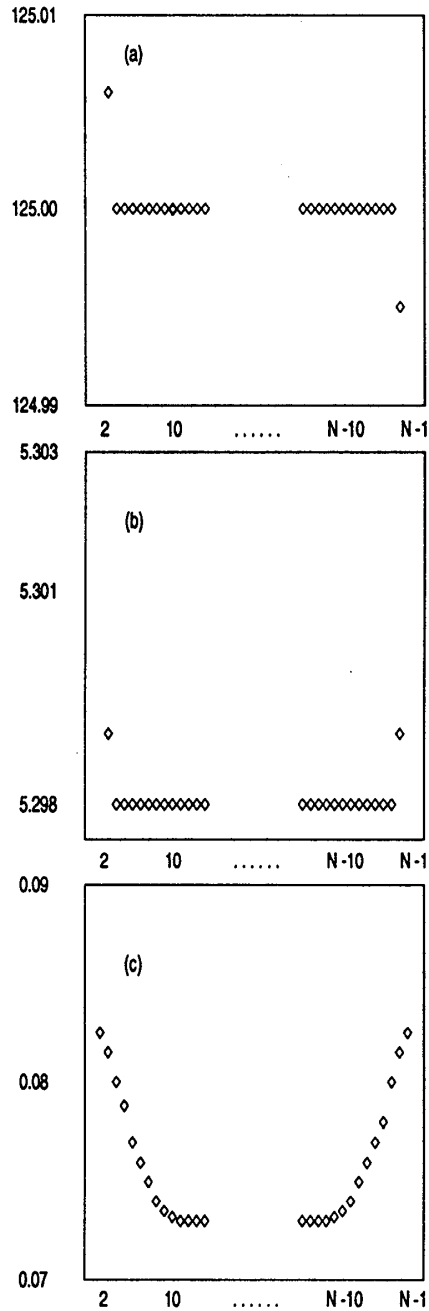


Fig.2