

一次元格子での熱伝導

波多野恭弘

東大総合文化研究科 (hatano@jiro.c.u-tokyo.ac.jp)

格子熱伝導の問題は古くから研究されているが、その主な動機は力学系の視点から熱力学的法則の成立条件を明らかにしようとするものであった。ここで、問題にする巨視的法則は以下の Fourier 則

$$\langle j \rangle = -\kappa \nabla T \quad (1)$$

であり、係数 κ は熱伝導率である。

ところが、例えば調和格子などの可積分系においては両端を異なる温度 T_1, T_2 の熱浴に接触させても温度勾配は形成されず、全系は両端を除き一定の温度 $(T_1 + T_2)/2$ になることが知られている。つまり可積分系では式 (1) のような局所的な法則は成立しない。では、非可積分系ではどうかということが、これまで主に計算機実験によって様々な系について調べられてきた。非可積分系では温度勾配がじゅうぶん小さければ、線形の勾配が形成され式 (1) はとりあえず成り立つと思われるのだが、実は熱伝導率 κ が系のシステムサイズ N を増やしていても一定の値に落ち着かず、 N^α のように発散していつてしまう。言葉を変えれば、熱力学的極限で熱伝導率が発散してしまうわけである。そのような例として、調和型の相互作用に 4 次の非線形項を加えた FPU chain が詳しく調べられているが [1]、 κ は $N^{0.38}$ 程度で発散していくことが $N \simeq 5000$ 程度まで確認されている。

一方で Frenkel-Kontorova model など

$$H = \sum_i \left[\frac{p_i^2}{2m} + U(x_{i+1} - x_i) + V(x_i) \right] \quad (2)$$

のように外場のある系では、 $N \simeq 10$ 程度で κ が収束することがいくつかの同様な系で確かめられている [2]。では、外場 $V(x)$ が κ を収束させている原因なのかということそうでもなく、diatomic Toda lattice

$$H = \sum_i \left[\frac{p_i^2}{2m_i} + \exp(x_{i+1} - x_i) \right] \quad (3)$$

においては κ は収束するという研究があり [3]、これらの発散性を統一的に理解する観点はなかった。

ごく最近 Lepri らは、FPU における熱流の相関関数 $\langle J(0)J(t) \rangle$ が $t^{-0.6}$ のようにベキ減衰することを計算機実験で確かめた [4]。実はこの発散性の起源は相関関数の long-time tail に起因するものだったのである。つまり線形領域では κ は Green-Kubo 公式

$$\kappa = \lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N k_B T^2} \int_0^t dt \langle J(0)J(t) \rangle \quad (4)$$

(ただし J は全熱流 $J = \int dx j(x)$) によって与えられるから、 $\langle J(0)J(t) \rangle$ が $t^{-\alpha}$ のように減衰するのなら $\alpha \leq 1$ でこの積分は発散する。(long-time tail に起因する低次元での輸送係数の発散はすでに 70 年代からモード結合理論や繰り込み群などを用いて理論的に理解されていたのだが)。

ただし上述したように一次元系でも伝導率が収束する例はいくつかあって、一次元なら全てが発散するわけではない。それらはハミルトニアン (2) のように粒子が外場にトラップされて自由に動けないような系、そして pair interaction のみの系では diatomic Toda lattice だけである。これらの系を統一的にクラス分けし理解しなくてはならないのだが、そもそも熱流の long-time tail の原因は局所熱流 $j(x, t)$

$$j(x, t) = h(x, t)v(x, t) - \kappa \nabla T(x, t) \quad (5)$$

($h(x, t)$ は局所エンタルピー密度) における第一項 $h(x, t)v(x, t)$ であった。この項がなければモード結合のない単なる一次元拡散となって流れ相関関数は $t^{-d/2-1}$ のように減衰し、積分は発散しない。 $v(x, t)$ は巨視的 (流体力学的) な速度場であるから、ハミルトニアン (2) のような一つ一つの粒子が自由に動けない系

では $v(x, t)$ は恒等的にゼロであるといつてよい。つまりこのような系では熱流 (5) の第一項 $h(x, t)v(x, t)$ の寄与がなく、発散もなくなるわけである。だが、もう一つの収束例である diatomic Toda lattice は pair interaction のみであり、同じ理由では説明できない。ここで E. A. Jackson らの結果 [3] を見直してみると、系のサイズについては $N = 400$ 程度まで調べているが、熱浴との境界部分で温度分布にかなり大きなギャップがみられる。それにも関わらず伝導率を $\kappa = \langle j \rangle N / (T_1 - T_2)$ で定義しており (T_1, T_2 は熱浴の温度)、これは非常に不正確である。(ギャップは系のサイズが大きくなるにつれ小さくなるので、伝導率のサイズ依存性を見る際にはその効果が含まれてしまう)。

熱浴部分のギャップは熱浴の設定方法によるので、熱浴のモデルの選択には注意が必要である。ここでは thermal wall タイプ [5] と Langevin タイプの2種類の熱浴を使用した。いずれの場合も両端で大きなギャップはできず、なめらかな温度分布が見られた (図参照)。曲線になっているのは温度差が大きいため、温度差を小さくすればほぼ直線的な温度分布が得られる。またシステムサイズを変えても曲線の形は変わらない。そこで、diatomic Toda lattice の熱伝導率のシステムサイズ依存性を以下の系について調べてみた。

1. $U(r) = \exp(r)$ 型 (図中◇, $T_1 = 100, T_2 = 10$, thermal wall 型熱浴)
2. $U(r) = \exp(r) + r$ (図中□, $T_1 = 5, T_2 = 4$, Langevin 型熱浴)
3. Hard sphere limit (図中+, $T_1 = 5, T_2 = 4$, thermal wall 型熱浴)

粒子の質量比は全て 0.5 とした。1. は Jackson らが調べた系と熱浴モデル以外同じ設定である。結果は図のように温度によらず全て同じスケールリングで発散していき (およそ $N^{0.35}$)、diatomic Toda lattice も FPU chain の場合と全く同様であることを確認した。

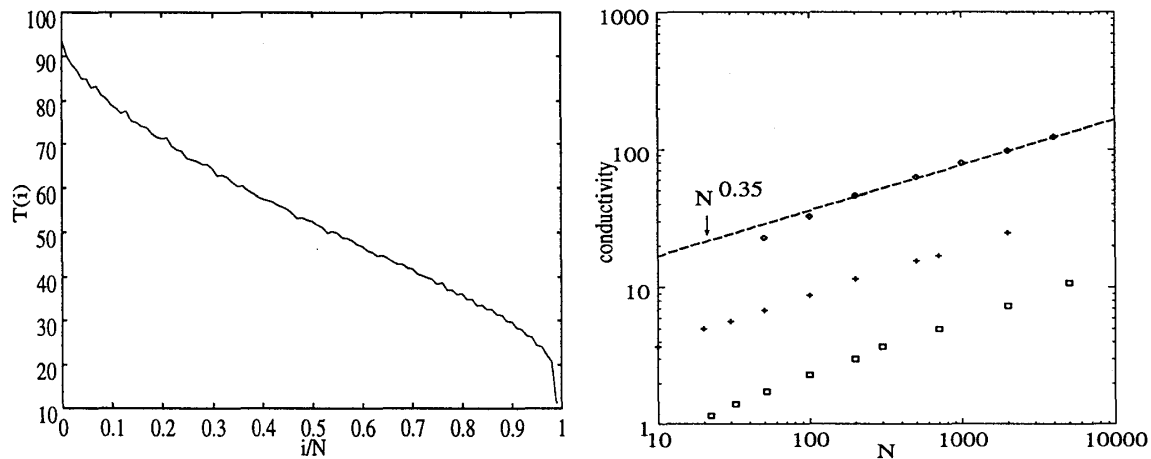


図 1: 左; 温度勾配 右; 熱伝導率のシステムサイズ依存性

参考文献

- [1] H. Kaburaki and M. Machida, Phys. Lett. A **181**, 85 (1993); S. Lepri, R. Livi, and A. Politi, Phys. Rev. Lett. **78**, 1896 (1997); Preprint (cond-mat/9709156).
- [2] G. Casati, J. Ford, F. Vivaldi, and W. M. Visscher, Phys. Rev. Lett. **52** 1861 (1984); T. Prosen and M. Robnik, J. Phys. A. **25**, 3449 (1984); B. Hu, B. Li, and H. Zhao, Phys. Rev. E. **57**, 2992 (1998).
- [3] E. A. Jackson and A. D. Mirlis, J. Phys. Cond. Matt. **1**, 1223 (1989).
- [4] S. Lepri, R. Livi, and A. Politi, Preprint (cond-mat/9806133).
- [5] R. Tehver et al, Phys. Rev. E. **57**, R17 (1998).