

量子系における熱伝導

齊藤 圭司*, 京大 人環, 武末 真二, 京大 総人, 宮下 精二, 阪大 理

1 はじめに

統計力学の基礎的研究においていまなお本質的な解決をみていないものに、注目する System の左端と右端に異なる温度の熱浴をつけた時に観測される熱伝導の性質とその力学系の性質との関係、とりわけ Fourier law がどのような力学系において現れるかという問題がある [1]。Fourier law 自体は多くの現実的な物質において成立しているがその成立条件はいまだに明らかにされておらず、解析的な導出は唯一 Lorentz gas に対する Boltzmann-grad 極限というのがあるのみである [2]。そのほかは専ら数値的な実験が行なわれてきている。

数値的な研究における力学的対象は、FPU Lattice [3], 戸田 lattice などの振動子系、Reversible Cellular Automata (CA) [7] の仮想力学系、など専ら古典系に限られていた。我々の今回の研究はこれら熱伝導の研究を量子系において行ってみるということである。

今まで量子系においてこの種の研究が行われなかった理由は量子系において熱浴をつけるということが理論的にはわかっていてもそれをコンピューター上で実現することが難しかったからである。量子トンネリング現象をはじめとする多くの分野では、熱浴としての外界の影響を熱平衡にある無数の調和振動子との相互作用ということで表現する Caldeira - Leggett 流の方法が主流である [4]。ところがその方法は熱伝導の問題には適していない。今回の研究では熱伝導の問題に適した方法をまず考え数値的に熱伝導の性質をみていく。

2 古典系での概要 (完全調和格子と FPU 格子)

我々の研究との比較で重要な古典系での研究の概要を述べる。古典系において研究された最も重要なものに 格子間がフックの法則に従うバネでつながれた完全調和格子と、それに 2 次、3 次の非線形項を加えた力で結び付いた非調和格子 (FPU 格子) がある。完全調和格子は解析的にもその熱伝導の振る舞いが調べられている。System の格子数を N , System の左端および右端につけた熱浴の温度をそれぞれ T_L, T_R ($T_L > T_R$) とする。完全調和格子においては各格子における温度は $\frac{T_L + T_R}{2}$ に収束し、熱流は $\frac{T_L - T_R}{N}$ でなく $T_L - T_R$ に比例する [5, 6]。その結果温度分布が平らになり熱伝導率が発散するという異常なことが起こる。

FPU 格子における数値的研究においては以下のような結果が一般に得られている。つまり、温度分布の勾配は形成されるが熱浴と接触している両端において温度のとびが現れる。

*saitoh@phys.h.kyoto-u.ac.jp

その結果温度勾配は熱浴が要請した勾配よりかなり低いものとなる。この温度のとびの原因は未だにわかっていない。また熱伝導の問題において検証されるべき公式に Green-Kubo 公式があるが FPU 格子にたいしてはまったくそれに成功していない。これはまだ System の運動が十分にカオティックになっておらず周期的な軌道が残っているためと考えられる。Green-Kubo 公式は直接的には CA において証明されているのみである [7]。完全調和格子と FPU 格子における温度分布の様子はそれぞれ Fig.2.1, Fig.2.2 のようになる。ここで Fig.2.1 では $T_L > T_R$ 、Fig.2.2 では $T_L < T_R$ の熱浴の場合を考えている。

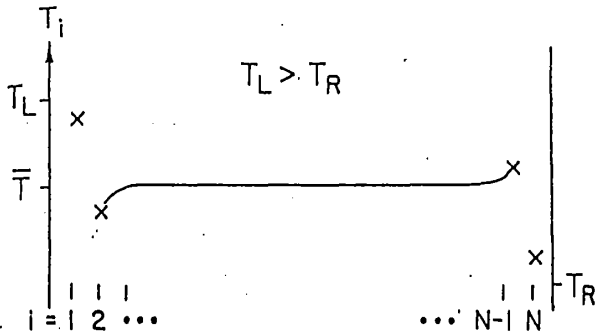


Fig2.1

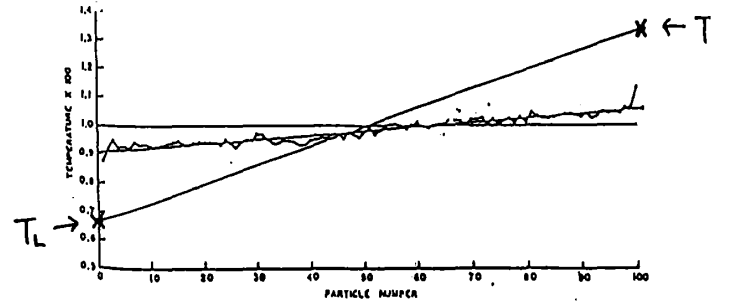


Fig.2.2

3 System と Subsystem

我々は考える System として 1 次元量子スピン系を考える。熱浴をも含めた全体の系の Hamiltonian H_T は System、熱浴、その間の相互作用の Hamiltonian H_S , H_R , H_{Int} で次のように表される。

$$H_T = H_S + H_R + \lambda H_{Int} \quad (1)$$

$$H_S = \alpha \sum_{k=1}^{N-1} \sigma_k^z \sigma_{k+1}^z + \xi \sum_{k=1}^N \sigma_k^z + \gamma \sum_{k=1}^N \sigma_k^z \quad (2)$$

$$H_{Int} = \sigma_1^z \sigma_1^z + \sigma_N^z \sigma_N^z, \quad (3)$$

ここで σ_k^z は k 番目の格子における z 方向の Pauli 行列、 σ_i^z ($i = 1$ or N) は i 番目の System の格子と相互作用する熱浴の演算子である。 H_R の力学系は指定しなかったが熱浴については次の節で説明する。System の Hamiltonian は $\gamma = 0$ の時は Jordan-Wigner 変換によって Free-fermion の形式で新たに書き表せることができる [9]。

$$H_S \rightarrow \sum_k c(k) b_k^\dagger b_k, \quad (4)$$

b_k は波数 k の fermion の下降演算子、 $c(k)$ は定数である。 $\gamma \neq 0$ のときはこのように一般の N に対して解析的に対角化することはできない。 $\gamma = 0, \gamma \neq 0$ の Hamiltonian における Spacing spectrum を $N = 7$ に対して示すとそれぞれ Fig.3.1, Fig.3.2 のようになる。

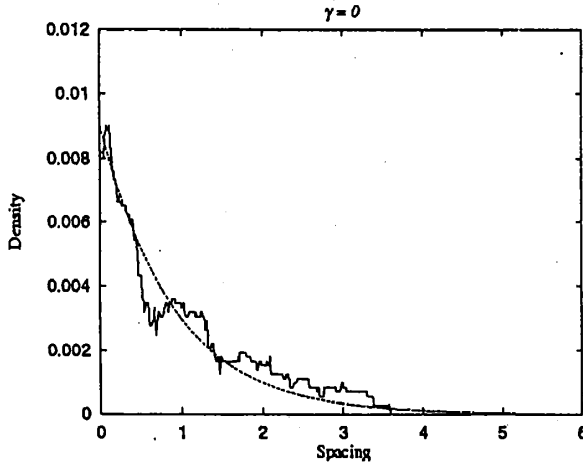


Fig3.1

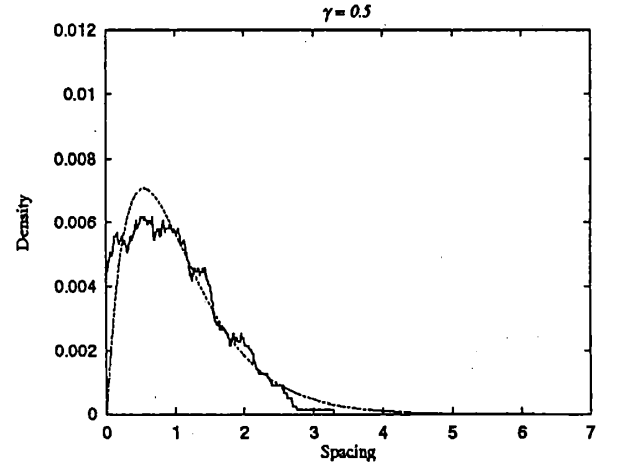


Fig.3.2

前者の分布は Poisson 分布であり、後者では準位反発が起こっていることが理解される[8]。このことから我々は前者を可積分系、後者を非可積分系と呼ぶことにする。

次に、熱伝導の問題では最終状態の系の温度分布を知りたいので Subsystem を定義することにする。まず簡単のために演算子 $\hat{a}$ を以下のように定義しよう。

$$\begin{aligned}\hat{a}(2i-1) &\equiv \xi \sigma_i^x + \gamma \sigma_i^z & \text{for } 1 \leq i \leq N \\ \hat{a}(2i) &\equiv \alpha \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z & \text{for } 1 \leq i \leq N-1\end{aligned}$$

すると i 番目の Subsystem $H_{ss}(i)$ は

$$H_{ss}(i) = \hat{a}(2i-1) + \hat{a}(2i) + \hat{a}(2i+1) \quad (5)$$

のように定義される。ここで i 番目の Subsystem は i および $(i+1)$ 番目のスピンから作られることに注意しなければならない。 i 番目の Subsystem に対して、左側のスピンでの熱流演算子を $\hat{j}_L(i)$ 、右側のスピンでの熱流演算子を $\hat{j}_R(i)$ とすると

$$\hat{j}_L(i) = -i[\hat{a}(2i-1), \hat{a}(2i-2)] \quad (6)$$

$$\hat{j}_R(i) = -i[\hat{a}(2i+2), \hat{a}(2i+1)] \quad (7)$$

と表され、これらは Heisenberg 表示で次の連続の式でつながっている。

$$\frac{\partial H_{ss}(i, t)}{\partial t} = -\hat{j}_L(i) + \hat{j}_R(i). \quad (8)$$

4 熱浴

左端および右端にそれぞれ逆温度 β_1, β_N の熱浴に接している System の密度演算子の時間発展は相互作用の強さ λ に関して展開される。相互作用が小さいという条件($\lambda \ll 1$)のもとでこれは以下のように2次までで表現することができる [10]

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = & -i[H_S, \rho(t)] \\ & -i\lambda \left\{ \langle \sigma_1^z \rangle_1 [\sigma_1^z, \rho(t)] + \langle \sigma_N^z \rangle_N [\sigma_N^z, \rho(t)] \right\} \\ & + \lambda^2 \left\{ \left[\sigma_1^z, f_1(t) - f_1^\dagger(t) \right] + \left[\sigma_N^z, f_N(t) - f_N^\dagger(t) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} f_k(t) &= \int_0^t du h_k(u) e^{-iH_S u} \rho(t-u) \sigma_k^z e^{iH_S u} \\ h_k(u) &= \langle \Delta \sigma_k^z \Delta \sigma_k^z(u) \rangle_k \\ \langle \dots \rangle_k &= \frac{\text{Tr} \{ \dots e^{-\beta_k H_R} \}}{\text{Tr} \{ e^{-\beta_k H_R} \}} \\ \Delta \sigma_k^z &= \sigma_k^z - \langle \sigma_k^z \rangle_k \\ \Delta \sigma_k^z(u) &= e^{iH_R u} \Delta \sigma_k^z e^{-iH_R u}, \quad \text{for } k=1 \text{ and } N \end{aligned}$$

この式は厳密であるが熱浴の情報を含んだ因子, $h_1(u), h_N(u)$ の振る舞いが分からない限りこの方程式は解かれな。我々はこの相関関数 $h_k(u)$ にたいして次のような近似をする。

$$h_k(u) \simeq h_k(0) \cdot \exp \left(-\frac{|u|}{\tau_k} + i\omega_k u \right) \quad (10)$$

実際にこの近似を用いた場合の方程式 (9) は厳密なシミュレーションが可能である。またこの近似関数は大きな Time scale で KMS-condition を満たすことが確かめられている [11]。ここで重要な点は この近似関数の (τ_k, ω_k) が System の k 番目の格子に接触する熱浴の、温度とある程度の力学系の構造を決定するという立場をとるという点である。

この近似による熱浴をつけシミュレーションを行ったときその定常状態におけるエネルギー分布を Fig.4.1 に示す。熱浴は左端にだけつけた。 $N=7$, (τ_1, ω_1) は $(1.0, \pi/0.7)$ にとっており、これは最終状態のエネルギーから温度は約 1.2 にあたる。

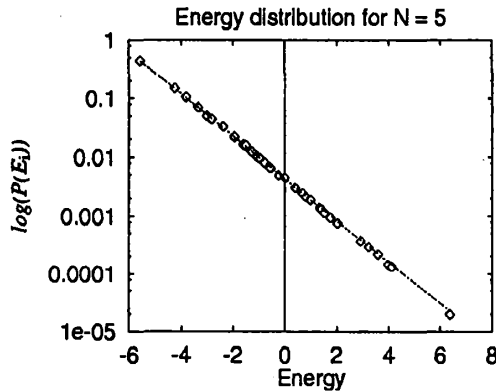


Fig.4.1

定常状態がカノニカル分布であることからこの近似をつかった系の運動が熱浴と接触した系の運動とみなすことができる。こうして我々は τ と ω を適当に選り熱伝導を議論する。

5 Simulation

熱伝導の数値実験を行う。スピン数 N は 7、相互作用の強さ λ は 0.2 にとる。可積分系に対しては $(\tau_1, \omega_1) = (2.0, \pi/1.0)$ (温度 2.0), $(\tau_7, \omega_7) = (1.0, \pi/0.5)$ (温度 0.7) ととる。非可積分系にたいしては $(\tau_1, \omega_1) = (2.0, \pi/1.5)$ (温度 0.6), $(\tau_7, \omega_7) = (1.0, \pi/0.3)$ (温度 4.0) ととる。ここで温度は定常状態のエネルギーから逆算して求めた。温度分布は可積分系、および非可積分系それぞれ Fig.5.1, Fig.5.2 に示される。これから分かるように、可積分系では温度分布が平らになり非可積分系では温度勾配が形成される。また両端の温度は熱浴の温度とかなり異なり古典系同様温度のとびが観測されることが分かる。この意味で、可積分系、非可積分系はそれぞれ古典系における完全調和格子、非調和格子にあたるといえる。しかしながら、可積分系 非可積分系ともに温度領域が低温側にずれている。これは古典系における完全調和格子の各格子が両端の熱浴の中間の温度に収束したことにたいして異なる結果となっている。また両端の温度はほぼ同じ温度に収束している。これは系が少数自由度であるためであろう。2つの力学系で熱流はそれぞれ 0.0015, 0.0011 あった。

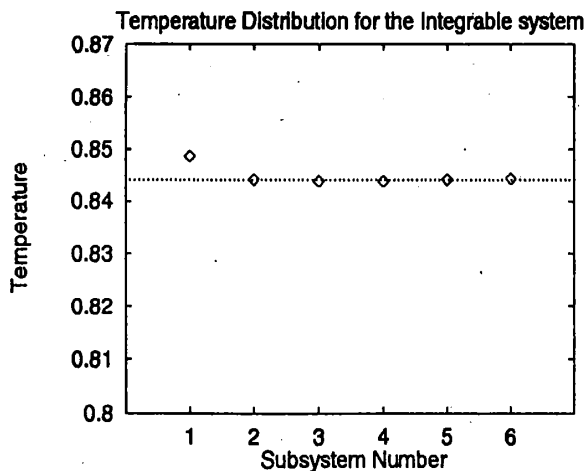


Fig5.1

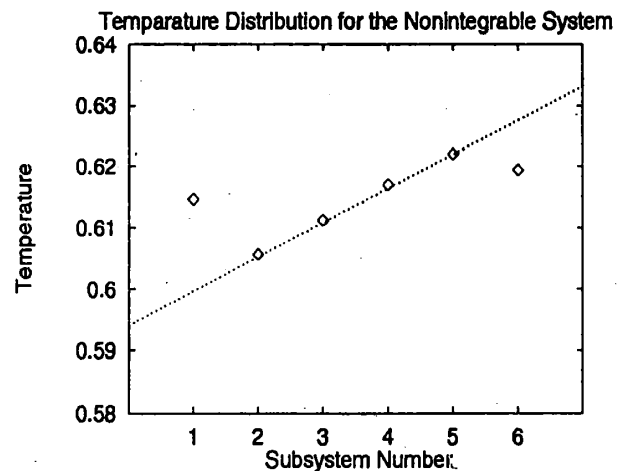


Fig.5.2

6 これからの課題

我々は、2つの量子力学系が異なる熱伝導の振る舞いを示すことを示した。しかしながらこの実験で非可積分系において Fourier law が現れたということは完全に示すことはできていない。なぜなら現れた温度勾配は熱浴が要請した勾配より非常に小さい値であるし更に Fourier law が現れたことを確定するには熱流の N 依存性をみななければならないからだ。

量子系においても古典系同様温度のとびが観測された。CA では両端の温度ギャップは N に反比例して小さくなっていく [12]。量子系においてもそのような N 依存性を調べておく必要があるであろう。それゆえ系のサイズ N を大きくしていく計算法の開発が重要となってくる。

section 3 で説明したように我々がつかった2つの力学系はそのエネルギー・スペクトラムにおいて特徴的な違いを示した。量子系において熱伝導と準位間隔分布には関係があると期待される。それは量子系において古典系の非線形性に相当するものは準位間隔分布に現れてくるからである。それゆえこの関係を系統的に調べることは古典系とは違った量子系における熱伝導の特徴を理解する上で重要となるであろう。

参考文献

- [1] E. A. Jackson, Nonlinearity and Irreversibility in Lattice Dynamics, Rocky Mountain J. Math. 8 127 (1978)
- [2] J. L. Lebowitz and H. Spohn, J. Stat. Phys. 19 633 (1973)
- [3] H. Kaburaki and M. Machida, Phys. Lett. A181 85 (1993)
- [4] A. O. Caldeira and A. J. Leggett, Ann. Phys. (USA) 149 374 (1983)
- [5] Z. Rieder, J. L. Lebowitz, and E. Lieb, J. Math. Phys. 8 1073 (1967)
- [6] K. Ishii and H. Matsuda, Progr. Theor. Phys. Suppl. 45 56 (1970)
- [7] S. Takesue, Phys. Rev. Lett. 64 252 (1990)
- [8] M. L. Mehta, Random matrices and the statistical theory of energy level, Academic Press (1967)
- [9] T. D. Schultz, D. C. Mattis, and E. H. Lieb, Rev. Mod. Phys. 36 856 (1964)
- [10] R. Kubo, M. Toda, and N. Hashitsume, Statistical Physics II, Springer - Verlag, Berlin (1985)
- [11] K. Saito, S. Takesue, and S. Miyashita, in preparation
- [12] S. Takesue, Private Communication