

3次元結晶固体の格子振動による異常熱輸送¹

東京大学大学院 工学系研究科 物理工学専攻 芝 隼人*

目次

1	イントロダクション	418
1.1	輸送現象と Green-Kubo 公式	418
1.2	長時間テイル	418
1.3	1次元非線形格子系の熱伝導	419
1.4	熱伝導における次元性	422
2	次元拡張された非線形格子系	423
2.1	モデル	423
2.2	分子動力学シミュレーション	424
2.3	3次元単純立方 FPU 格子系の熱伝導度	426
2.4	長時間テイル	431
2.5	擬1次元系とした場合	432
2.6	自然長の問題	434
2.7	熱浴について	435
2.8	2次元非線形格子系再訪	437
3	ディスオーダーのある3次元非線形格子系	438
3.1	ディスオーダーのある古典格子系	438
3.2	質量にディスオーダーの導入された3次元非線形格子系	439
3.3	固定されたサイトを持つ場合	440

¹本記事は 2007 年 2 月に東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻に提出した修士論文を、物性研究誌向けに切り詰めて日本語に書き直したものである。特に導入と結論について大きく稿を改めた。

*現在の所属: 京都大学大学院 理学研究科 物理学・宇宙物理学専攻 物理学第一教室 相転移動力学グループ D1

〒 606-8502 京都市左京区北白川追分町

E-mail: hshiba@scphys.kyoto-u.ac.jp

4 結論	441
4.1 結果の要約	441
4.2 展望	442

1 イントロダクション

本論文の内容は次のように要約できる：我々は、非線形相互作用を持つ格子振動の古典模型において、3次元系においても熱伝導度が発散する振舞いを発見した。このことは、3次元の絶縁体において異常な輸送が見える可能性を示唆する。以上は、分子動力学法を用い、ハミルトンダイナミクスから直接示された結果である。

最初に我々が輸送現象について通常持っている理解を簡単にまとめておきたい。

1.1 輸送現象と Green-Kubo 公式

1950年代に多くの人々によって手がけられた揺動散逸定理のより一般的な形への拡張への努力は、線形応答理論に結実した。現象論的に局所平衡分布の範囲内では不可逆流 $\mathbf{J}_i$ は示強変数の空間勾配に比例し、

$$\mathbf{J}_i = \sum_j L_{ij} \nabla X_j \quad (1)$$

である。種々の輸送係数 L_{ij} はそれに対応した流れ相関関数の熱平衡平均の積分として次のように与えられる。

$$L_{ij} = \frac{1}{k_B V} \int_0^\infty dt \langle \mathbf{J}_i(t) \cdot \mathbf{J}_j(0) \rangle \quad (2)$$

(2) 式は、電気伝導のように力学的外場によって駆動される輸送 [1, 2] と、熱伝導や粘性のように熱的分布の勾配によって駆動される輸送 [3, 4] とで導出が異なり、またその基礎にも微妙な点を残しているが、ともかく線形輸送現象についての統一的な表式を与えていると考えられる。例えば熱伝導度 κ に対しては次のようになる。

$$\kappa = \frac{1}{k_B T^2 V} \int_0^\infty dt \langle \mathbf{J}(t) \cdot \mathbf{J}(0) \rangle \quad (3)$$

ここに $\mathbf{J}(t)$ は全熱流である。

1.2 長時間テイル

これで諸々の輸送係数を求めるという問題が解決したかのように見えたが、実際には積分核の時間相関関数 $\langle \mathbf{J}(t) \cdot \mathbf{J}(0) \rangle$ の具体的な計算が難しい。不可逆流の輸送

係数を可逆力学から導出できた、ということの裏には、ミクロとマクロの時間空間スケールの分離が画然とできていることが前提に置かれている上、すくなくとも(2)の積分自体が収束するように流れの自己相関関数が速やかにゼロに収斂してゆくことが必要である。

しかし、これには現に反例がある。1967年に剛体球流体の速度相関関数がAlderとWainwrightによって数値的に計算され、 $C_D(t) \sim \langle v_{ix}(t)v_{ix}(0) \rangle$ が指数的な減衰でなく、 $\sim t^{-d/2}$ とべき的に緩やかな減衰を示すことが発見された[5]。このべき的な減衰(長時間テイル)は、特に $d=1,2$ において、拡散係数を与えるグリーン-久保公式の発散を直接引き起こす。つまり流体方程式自身が成立しなくなってしまうことになり、公式そのものの妥当性もあやしくなる。長時間テイルは、現象論的には流体方程式を線形化したときに運動量方程式の拡散項に由来する部分から現れる長波長効果である[6]。すなわち、運動量保存則に起因する。

また重要なことであるが、剪断粘性係数や熱伝導係数の久保公式の積分核にあたるストレステンソルや熱流の自己相関関数も同様に $\sim t^{-d/2}$ の振る舞いを示すことが導出される。従ってこれら流体モードと結びついた輸送係数全般が同様の問題の対象となる。これらの振る舞いの解析については今述べた流体力学的現象論のほか、よりミクロな運動論的扱いによって一応の解決を見ている[7, 8]。ただし $d=2$ の場合には、有限の拡散係数から発散する輸送係数を導くという自己撞着があるので、 $C(t) \sim (t\sqrt{\ln t})^{-1}$ とするのがより正確との指摘がある[9]。

1.3 1次元非線形格子系の熱伝導

上述のような液体における異常性についての認識は40年近く前からあったものの、格子振動においても同種の問題があるという認識は大幅に遅れてしまっていた。しかし、ここ数十年になってようやく、異常な振舞いがどのような場合に見られるのかが正しく認識されるようになってきた。

1.3.1 完全可積分系の輸送について

完全可積分系は温度勾配をみずから維持することができず、熱化を引き起こすこともないので、あらゆるスケールのエネルギーを音速でそのまま伝えてしまう。例えば理想気体のハミルトニアンとリウビュ演算子を書き下せば

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m}, \quad \mathcal{L} = -i \frac{p_i}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial x_i} \quad (4)$$

である。リウビュ演算子の固有関数は $e^{ik_i x_i}$ であり、この系の巨視的性質はすべてヒルベルト空間内にある固有関数の線形重ね合わせで書けることになり、可逆な振舞いしか見えない。

1次元の連成調和振動子系も完全可積分系である。このハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \left[\frac{p_i^2}{2m} + \frac{k}{2} (r_{i+1} - r_i)^2 \right] = \frac{mN}{2} \sum_k \left[|\dot{q}_k|^2 + \frac{2(1 - \cos ka)}{m} |q_k|^2 \right] \quad (5)$$

で与えられる。ただしここに基準モード分解 $\sum_k q_k e^{ikna}$ を用いて表し、 $q_k^* = q_{-k}$ を要請した。作用変数 J_k と角変数 α_k を導入すると、このハミルトニアンとリウビュ演算子は

$$\mathcal{H} = \sum_{k=1}^N \omega_k J_k, \quad \mathcal{L} = i \sum_k \omega_k \frac{\partial}{\partial \alpha_k} \quad (6)$$

となり、やはりこのリウビュ演算子の固有関数はヒルベルト空間内の線形重ね合わせとして表現され、可逆な振舞いしか見えないことになる。戸田格子のような特別な例を除けば、完全可積分な系は以上に限られる。

完全可積分系は何らの拡散的挙動を示さないため、温度勾配を自ら作り出すことができない。従ってこれらの系に温度差をつけても自然な温度分布は形成されず、エネルギー分布も空間依存性のないフラットなものとなる。調和振動子系に確率熱浴を設置した場合については1960年代末の時期ころ Lebowitz らをはじめ [10]、多くの研究者がその挙動を調べ注目すべき結果を得ている。

不可逆性はこの可積分性を破った帰結として現れる。従って理想気体では相互作用項が入った場合に、格子振動系では非調和項が入った場合に熱化がもたらされることになる。

1.3.2 低次元系の熱伝導について

非線形格子系の最初の研究は Fermi-Pasta-Ulam の非線形格子系の数値実験に遡る。彼らは格子振動における不可逆性は相互作用の非線形性によると考え、後に FPU 鎖と呼ばれるようになった最も簡単な非可積分非線形鎖の時間発展を Los Alamos の MANIAC1 を用いて調べたところ、同一のモードが一定時間の後に返ってくる再帰現象を見つけ、さらに不可逆性についての謎を深めた [11]。しかし、彼らが調べたのは最大64粒子数の、しかも弱い非線形性の寄与しかないところである。雑な言い方をすれば、それよりも自由度が大きい場合や非線形性が強い場合に、どうなるかについての知識が我々には殆どない。

非可積分な非線形格子系の振舞いは数値シミュレーションによって初めて分かってきたものであり、ようやく10年位以前になってその理解にまつわる混乱も收拾されてきたように思われる。一連の研究によって、系の運動量保存則が重要であることが明らかになった。その研究の概略についてのレビューが2003年に Lepri らによって書かれている [12]。以下に大まかな概略を示す。

運動量保存のある非線形格子系 運動量保存を満たす低次元系においては熱伝導度が発散すると理解されている。非線形格子系においては次の通りである。1997年に、一番基本的な非線形格子である FPU- β 鎖において、システムサイズ N に対して $\kappa(N) \sim N^{0.37}$ くらいの強さで発散することが示されている [13]。また FPU- α 模型では $\kappa(N) \sim N^{0.44}$ くらいの発散となることも指摘されている [14]。

戸田格子の可積分性を破る方法としてもっとも単純なのは、質量が異なる粒子を交互に配置するものである。この Diatomic Toda Lattice と呼ばれる非線形鎖でも、本質的には熱伝導度が発散していることが1999年に指摘されている [15]。また、このモデルのポテンシャル中のファクターを変えた極限は1次元の剛体球流体となることが知られているが、この場合も同じ発散傾向を示す [15, 16]。従ってこのべき指数 0.4 前後の発散は運動量保存のある1次元系に広く見られる「普遍的」な振舞いであるとするのが、多くの研究者の見解であると思われる。

これに呼応して、いくつかの理論的な提案がなされている。Lepri らによって低次元系の補正を入れた計算が提案されたほか [17]、最近の考察で注目されるのは1次元の線形流体方程式をベースにゆらぎの効果を取り込んだ繰り込み群の Narayan らによる計算である [18]。これらに共通しているのは、非線形格子系でも輸送係数の発散は流体モードの効果による低次元系特有の効果であるという前提に立ち、流体力学的な描像があくまで念頭に置かれていることである。

このクラスの反例として、相互作用ポテンシャルを谷型でなく周期的関数にした coupled rotator 格子系では、伝導度が有限になることも知られている [19]。詳細についてはここでは略すが、この場合絶縁体の模型ということからは一歩離れている。

運動量保存を破る非線形格子系 低次元の非線形格子系であっても、全運動量の保存を破る設定にすれば熱伝導度が収束することが分かっている。最初は Casati らによって調和ポテンシャル中にある次の Ding-a-ling モデルと呼ばれるハミルトン系

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{p_i^2}{2m} + \frac{k_i}{2} q_i^2 \right) + [\text{hard-point core}] \quad (7)$$

で有限の熱伝導度を得られることが分かっている。ただし、 k_i は i が偶数のときのみ有限の値で、それ以外ではゼロである。他にも ϕ^4 モデルと呼ばれる4次の on-site ポテンシャルを持つ模型や [20]、転位の運動などの模型として標準的に用いられる Frenkel-Kontrova (FK) モデルと呼ばれる次の模型

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \left[\frac{p_i^2}{2m} + \frac{\gamma}{2} (x_i - x_{i-1} - a)^2 - \frac{A}{(2\pi)^2} \cos(2\pi x_i) \right] \quad (8)$$

でも [21] 熱伝導度は収束することが指摘された。

本節を要約すれば、全運動量の保存が満たされている低次元系の多くの模型で、熱伝導度の発散の問題に遭遇するということである。

1.4 熱伝導における次元性

熱伝導度の描像がある程度確立している流体系を取り上げ、次元性の役割を考える。先に 1.2 節で述べたように流体系における熱流の自己相関関数は、

$$\langle \mathbf{J}(t) \cdot \mathbf{J}(0) \rangle \sim t^{-d/2} \quad (9)$$

型の緩和を示す (d は系の次元)。従って $d = 1, 2$ において長時間にわたる相関関数の寄与を取り入れた場合、これは熱伝導度を記述するグリーン久保公式 (3) の発散を招く。系の大きさで決定される典型的な時間スケール t_s による、積分の上限のカットオフが付くことで、熱伝導度がサイズに依存すると考えるのが簡単な議論であろう。ここでは典型的な時間スケールを $t_s = L/v_s$ で定める。大胆な簡単化であり、定量的には正しい値を与えないと思われるが、音波が消えない程度の小さい系では、その定性的な変化をある程度捉えている。これにより、系のサイズに依存した熱伝導度が

$$\kappa(L) \sim \int_0^{t_s} dt \langle \mathbf{J}_Q(t) \cdot \mathbf{J}_Q(0) \rangle \sim \begin{cases} \ln L & (d=2) \\ b - \frac{a}{\sqrt{L}} \rightarrow \text{const.} & (d=3) \end{cases} \quad (10)$$

と与えられる。

非平衡シミュレーションの手法が発展したので、これらの振舞いは直接確認することができるようになった。剛体球系の MD シミュレーションでこの依存性がかなりよく成り立っている場合があることが確認されている [22, 23]。また超臨界相のレナード-ジョーンズ 6/12 系でもそれらしい振舞いがある [24]。これらにおいては、熱流方向だけにサイズを延ばし、それに垂直な方向のサイズは固定された上で調べられている。

ナীবにはこれらは絶縁体モデルなどの系においても成り立つように推察される。自明な推察とも言えないが、固体においても流体力学に類似した基礎方程式が用いられていることを考えれば、それほど不自然な推察でもない。前節で見たように運動量保存のある 1 次元系ではモデルの詳細に依存せず熱伝導度の発散が頑健に現れていることが分かった経緯から、多くの研究者が次のように考えているようである [12]：非線形格子系についても近似的には $t^{-d/2}$ 型の長時間テイルが成り立つが、 $d = 1$ については低次元特有の補正によりややずれた値が現れる。すなわち簡単な表にまとめれば、大体的な見解として

$$\begin{cases} \langle \mathbf{J}_Q(t) \cdot \mathbf{J}_Q(0) \rangle \sim t^{-0.6}, & \kappa \sim L^{0.4} & (d=1) \\ \langle \mathbf{J}_Q(t) \cdot \mathbf{J}_Q(0) \rangle \sim t^{-1}, & \kappa \sim \ln L & (d=2) \\ \langle \mathbf{J}_Q(t) \cdot \mathbf{J}_Q(0) \rangle \sim t^{-3/2}, & \kappa \sim \text{const.} & (d=3) \end{cases} \quad (11)$$

とされてきた。

2 次元拡張された非線形格子系

本章では本論文の主題である3次元の絶縁体のモデルを調べていく。前章までから推察されるのとはずいぶん異なった振舞いが見いだされることを述べる。

2.1 モデル

採用するモデルを記す。2次元の場合の図式を図1に示す。我々のシミュレーションの目的は、非平衡分子動力学を遂行することにより、熱輸送の様子を捉えることにある。従って、両端上にある粒子に熱浴を設置して、バルク部分に温度勾配が生じエネルギーの移動が起きるようにする。以降、熱流の向きを z 軸とする。

境界条件は図1に図式的に示されている通りである。熱流方向に固定境界としており、熱浴が付けられた端に存在する粒子は固定壁と相互作用する形となっている。熱流と直交する x, y 方向には、有限サイズであることの効果が効きにくい、周期境界条件を採用する。

このもとで、以下のハミルトニアンで表現される Fermi-Pasta-Ulam β (FPU- β) 非線形格子系を3次元に最も単純に拡張したモデルを主に調べる。

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \sum_{\langle i,j \rangle} \left[\frac{k}{2} |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^2 + \frac{g}{4} |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^4 \right] \quad (12)$$

これは既に Lippi らによって調べられている2次元のモデルを同じ形で3次元に拡張したものになっている [27]。ここに $\mathbf{r}_i$ と $\mathbf{p}_i$ は、全部で $N = N_x \times N_y \times N_z$ 個ある粒子のうち $i = (i_x, i_y, i_z)$ 番目のものの変位と運動量である。変位 $\mathbf{r}_i$ は粒子 i の力学的平衡位置 $\mathbf{q}_i^0$ からのずれを表し、その座標を $\mathbf{q}_i$ として

$$\mathbf{r}_i = \mathbf{q}_i - \mathbf{q}_i^0 \quad (13)$$

である。 $\mathbf{q}_i^0$ は単純立方格子点上にあることを要請する。従って、結晶秩序が完全に成り立った絶縁体のモデルを考えていると言ってよいであろう。 $\langle i, j \rangle$ は最近接相互作用のみを考えることを意味する。各粒子の質量は全て均一としたので、線形近似の言葉で言うと、音響フォノンの励起しか考えていないことに相当する。

このモデルは縦波音響モードと二つの横波音響モードが等価に扱われてしまっているという欠点を持つ。通常の固体ではこれらの分散関係が等しいということはない。また、相互作用ポテンシャルが $\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j = 0$ を中心に対称な形となっているために、熱膨張もしない。しかし、その点を除けば、このモデルは非線形相互作用を持った3次元絶縁体結晶の性質を普通に表現したものであると言ってよいであろう。

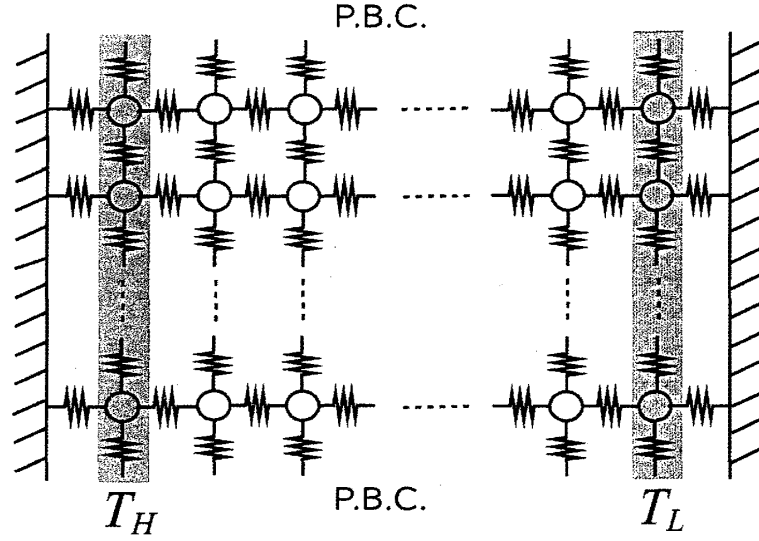


図 1: 本論文が対象とする非線形格子系を 2 次元にした図式。非線形相互作用を持ったバネで最近接の粒子同士のみがつながれている。これを 3 次元に単純に拡張したものが本論文で扱うモデルである。

2.2 分子動力学シミュレーション

上述のモデルのハミルトン動力学から熱力学的諸量を、ミクロマクロ間の階層を越えて直接抽出することが可能な、分子動力学シミュレーションを遂行する。

調べたいのはバルク部分の熱伝導度である。バルク部分は変数 $(\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i)$ は次の通常のハミルトン動力学に従う設定とする。

$$\dot{\mathbf{r}}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{p}_i}, \quad \dot{\mathbf{p}}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{r}_i} \quad (14)$$

熱伝導度を調べるためには、端点に熱浴を設置して、温度勾配の形成された「筋の良い」非平衡定常状態を実現する必要がある。本論文では能勢-フーバー熱浴を用いる（他の熱浴については 2.7 節に後述）。この熱浴は、熱浴の設置された粒子についてのみ運動方程式を以下のように非正準な形に変更することで実現される [25]。

$$\dot{\mathbf{r}}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{p}_i}, \quad \dot{\mathbf{p}}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{r}_i} - \zeta_i \mathbf{p}_i \cdot (\delta_{i_z,1} + \delta_{i_z,N_z}), \quad \dot{\zeta}_i = \frac{1}{Q} \left(\frac{\mathbf{p}_i^2}{3mk_B T} - 1 \right) \quad (15)$$

本論文を通じて、熱浴の特性緩和時間は $Q = 1.0$ に設定する。また差分法には

Störmer-Verlet 陰解法

$$\begin{aligned}
p_i^{n+1/2} &= p_i^n - \frac{\Delta t}{2} \left[\frac{\partial}{\partial q_i} V(\{q^n\}) + \xi_i^n p_i^{n+1/2} \right] \\
q_i^{n+1} &= q_i^n + \Delta t \frac{p_i^{n+1/2}}{m_i} \\
\xi_i^{n+1} &= \xi_i^n + \frac{\Delta t}{Q} \left[\sum_i \frac{(p_i^{n+1/2})^2}{3m_i k_B T} - 1 \right] \\
p_i^{n+1} &= p_i^{n+1/2} - \frac{\Delta t}{2} \left[\frac{\partial}{\partial q_i} V(\{q^{n+1}\}) + \xi_i^{n+1} p_i^{n+1/2} \right].
\end{aligned}$$

を用いる（添字 n は時間ステップ）。これは差分刻み $dt = 0.02$ について2次の収束精度を持ち、熱浴のないバルクの部分では蛙飛び差分法に帰着するためシンプレクティックなものとなる。そのためこの解法はバルクでエネルギーを安定的に保存し高精度の解法となっているが、熱浴部分ではシンプレクティックな性質を一切失っているため、精度が落ちていないかどうか注意して実行する必要がある。本論文の大半の結果についてはルンゲクッタ法のような4次の差分法を用いても変わらなかったことは確認した。

初期条件は適当で良いが、ここでは全粒子について $r_i = 0$ 、また p_i は目標とする定常状態における線形な温度分布に対応する運動エネルギー分布となる乱数を与える形で取りシミュレーションを開始し、数値的に時間発展を追った。十分な時間待つと、定常状態に至ることが確認される。このもとでは温度分布は z 方向にほぼ線形となる。この論文の全ての結果について $t \sim 100000$ くらいの時間を待ってから、定常状態の熱流や温度分布の測定を行っている。

定常状態が達成されてから各熱力学量が数値的に得られる。ここでは局所平衡が達成されていると見て、巨視変数 A の長時間平均 $\overline{A}$ とアンサンブル平均 $\langle A \rangle$ を同一視して $\overline{A} = \langle A \rangle$ とする。

温度 一粒子の局所温度 $T(i) = T(i_x, i_y, i_z)$ をその粒子の運動エネルギーの長時間平均として定義する。

$$k_B T(i) = \overline{K_d(i)}, \quad K_d(i) = \frac{p_i^2}{2m} \quad (16)$$

違った書き換えをすれば

$$\overline{\frac{p_i^2}{2m}} = \frac{d}{2} k_B T(i) \quad (17)$$

であり、エネルギー等分配則の典型的な表現である。精度を上げるために、これをさらに同じ断面上にある $N_x \times N_y$ 個の粒子で平均し、

$$k_B T(i_z) = \frac{1}{N_x N_y} \sum_{i_x, i_y} T(i_x, i_y, i_z) = \frac{1}{N_x N_y} \overline{\sum_{i_x, i_y} \frac{p_i^2}{2m}} \quad (18)$$

を測る。

熱流 分子動力学法においては、エネルギー流を直接抽出できるのが利点である。今回我々は、後に示す異常なエネルギー流の振舞いが現実の絶縁体でも見える不可逆流を表しているのではないかという期待を込め、あえて「熱流」と呼んでおく。我々が測りたいのは z 方向の熱流である。

粒子 i の持っている（粒子 i に「局在」している）エネルギーを $e_i(t)$ と書き、次のように定める。

$$e_i = \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} V_{ij} \quad (V_{ij} = V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)) \quad (19)$$

ここに V は粒子間相互作用エネルギーであり、この前に位置する $1/2$ のプリファクターは、2体力のエネルギーが、その相互作用に関わる両粒子に等分されていると見なしていることを意味する。このエネルギーの時間変化はリウビユ方程式により得られ

$$\frac{de_i}{dt} = -\{\mathcal{H}, e_i\} = -\sum_{k \neq i} \{e_k, e_i\} \quad (20)$$

である。この方程式において $\{e_k, e_i\}$ は粒子 i から最近接粒子 k へと移動するエネルギー流の微視的表現 $j_{i \rightarrow k}$ である。具体的に計算すればただちに

$$j_{i \rightarrow k} = \{e_k, e_i\} = \frac{\mathbf{p}_i}{2m} \cdot \frac{1}{2} \frac{\partial V_{ik}}{\partial \mathbf{r}_i} - \frac{\mathbf{p}_k}{2m} \cdot \frac{1}{2} \frac{\partial V_{ik}}{\partial \mathbf{r}_k} = \frac{1}{2} \left(\frac{\mathbf{p}_i}{m} + \frac{\mathbf{p}_k}{m} \right) \cdot \frac{\partial V_{ik}}{\partial \mathbf{r}_i} \quad (21)$$

これらの微視的エネルギー流のうち z 方向のものについてのみ足し合わせることで、マクロな全熱流が得られる：

$$J_z = \sum_i \frac{j_{i \rightarrow i+e_z}}{N} \quad (22)$$

以上、相互作用が2体力の場合の熱流の表式を導出した。より注意深い導出と多体力の場合への一般化の一例が伊藤と中村により示されている[26]。

我々の系では熱流は保存量であるので、端点にある熱浴が系に対してした仕事を測定することによっても熱流を得ることができる。これは容易に次のように与えることができる。

$$J_z = \frac{1}{N_x N_y} \sum_{i \in \text{left baths}} \zeta_i \mathbf{p}_i \cdot \frac{\mathbf{p}_i}{m} = -\frac{1}{N_x N_y} \sum_{i \in \text{right baths}} \zeta_i \mathbf{p}_i \cdot \frac{\mathbf{p}_i}{m} \quad (23)$$

本論文では状況次第で以上の2つを使い分ける。この2つの方法の与える熱流の値は、本論文の結果に対して少なくとも有効数字2桁の精度で一致する。

2.3 3次元単純立方FPU格子系の熱伝導度

上述の処方箋に従って、まずはハミルトニアンが(12)で与えられる単純立方格子のFPU- β 非線形格子系をシミュレートし、熱伝導度のシステムサイズ依存性 $\kappa(N_z)$ を調べることにする。

本節では系の各辺のサイズの比が $N_x : N_y : N_z = 1 : 1 : 2$ となるように固定する。特にこの比にしなくてはならない a priori な理由は何もないのだが、等方的にこの比を広げて熱力学極限へと向かっていかななくてはいけないため、少なくともこの比を（細すぎない程度の値で）固定する必要がある。各パラメータは

$$T_L = 20.0, \quad T_R = 10.0, \quad k = 1.0, \quad g = 0.1 \quad (24)$$

に定めて、定常状態を調べる。

非線形性の強さについて言及しておく。高温であるほど (12) 中の非線形項は線形項に対して大きな寄与をする。ひとことで言うと、今調べているケースは非常に高温である。大雑把にこれら線形項と非線形項の寄与の長時間平均はそれぞれ

$$\overline{\frac{k}{2}|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^2} \sim 50, \quad \overline{\frac{g}{4}|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^4} \sim 50 \quad (25)$$

と同程度の寄与をしている。従って非常に強い格子振動モード結合下にあると言え、あきらかに Fermi-Pasta-Ulam が最初に調べた、非線形項があまり寄与しない状態とは異なっている [11]。我々のようなケースでは熱化は強く促進されており、このような極限状況下ですら我々の以下に述べる異常輸送がロバストに見られることを強調しておく。

2.3.1 温度分布

定常状態における温度分布として図 2 を得る。 $N_z = 48, 96, 192$ の場合に対するデータが図示されている。横軸は伝導方向のサイズ N_z で規格化された z 方向に見た位置 i_z を表す。このグラフから、線形の温度分布が成り立っていることが分かる。また、保存則の成り立つ完全時間可逆な基礎方程式に従うモデルの時間発展においても、熱化が起き不可逆熱流が実現していると言える。

しかし温度分布の形は 1、2 次元の同種の模型におけるシミュレーションでも見られたものでもあり [13, 27]、それだけでは驚くに及ばない。

温度勾配 dT/di_z を図 2 に示された温度分布のバルク域に対するフィッティングから求める。フィッティング域は十分にまっすぐと思われる範囲から求めることとするが、今の場合はフィッティング域の取り方が結果に大きな影響を与えることはなく、端点の制御温度の差をシステムサイズで割った値を用いても、次節で議論する熱伝導度のべき指数はほとんど変わらない。

2.3.2 熱伝導度

全熱流 J_z を前節で得た温度勾配で割ることによって、熱伝導度のシステムサイズ依存性 $\kappa(N_z)$ が得られる。図 3 に結果を示す。システムサイズ増大につれて、熱伝

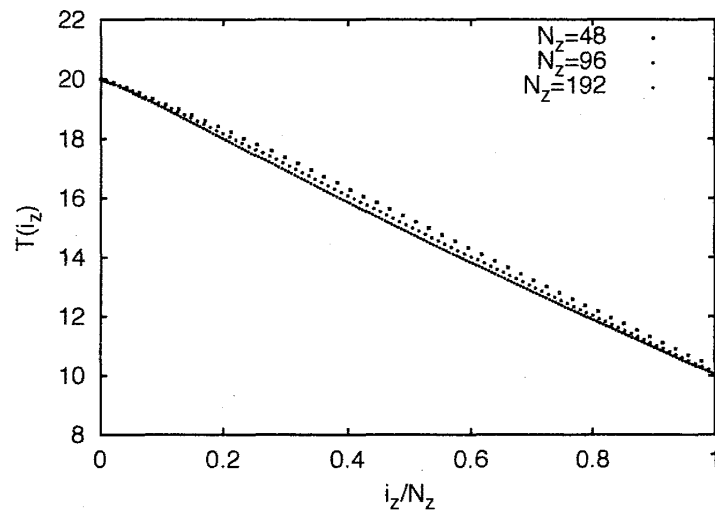


図 2: 3次元FPU- β 格子系の温度分布。 $N_z = 48, 96, 192$ の3つの場合が示されており、各辺の比は $N_x : N_y : N_z = 1 : 1 : 2$ である。横軸がシステムサイズで規格化された位置、縦軸は同じ断面上で平均された局所温度である。 3σ の誤差は、グラフの各点に収まる範囲内である。

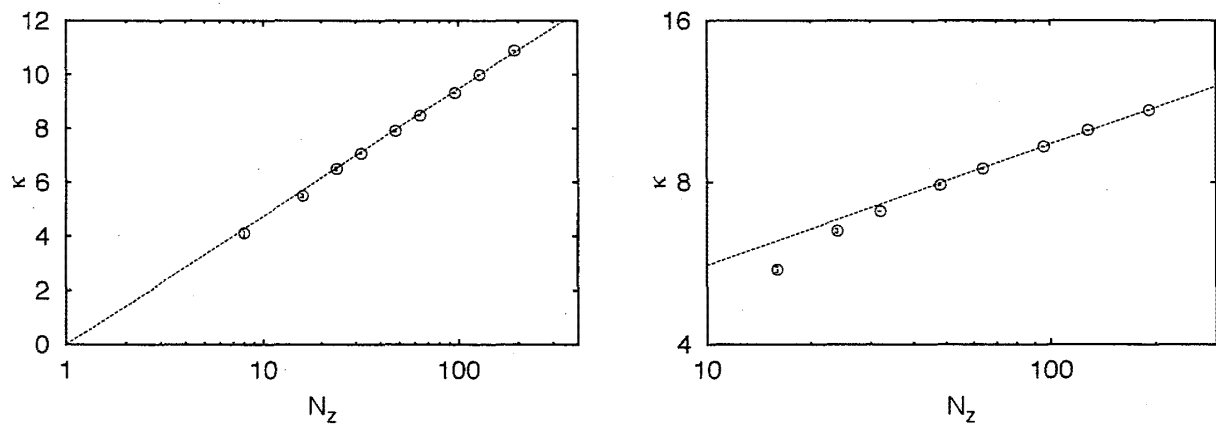


図 3: 左: 単純立方FPU- β 格子系の熱伝導度のシステムサイズ依存性。系の各辺の長さの比を $N_x : N_y : N_z = 1 : 1 : 2$ に保ってサイズを変えていっている。縦軸は有限サイズ熱伝導度 $\kappa(N_z)$ であり、横軸は対数スケールで表示された系のサイズ(N_z)である。点線は対数フィットで $(2.056 \pm 0.005) \ln N_z$ である。右: 同一のデータの面対数プロット。点線が $N_z \geq 64$ でのべき関数によるフィッティングで、 $\kappa \sim N_z^{0.226(5)}$ である。

導度が $\kappa(N_z) \rightarrow \infty$ に向かって徐々に発散していく様が明瞭に捉えられており、(11)の期待内容とは矛盾した非自明な結果となっている。

図3の左側を見たかぎりでは、対数発散に見えなくもない。左図中に示された点線は $\kappa(N_z) = (2.056 \pm 0.005) \ln L$ を表している。しかし、系のサイズが大きくなるにつれて精度が増していることに加えて、 $N_z \sim 100$ 程度になると有限サイズ補正が良く排除されたデータとなっている。その上で左図をもう一度良く見ると、実は $N_z = 192$ のデータは点線より若干上向いている。

図3右に示された図は、同一のデータを両対数グラフにプロットし直したものである²。 $N_z \geq 64$ の領域では、 $\kappa(N_z) \sim N_z^\alpha$ のべき振舞いが非常に良くあっており、そのフィッティング結果は $\alpha = 0.255 \pm 0.005$ である。 N_z がより小さい領域では、有限サイズ効果は熱伝導度を小さくする方に働く。今回の結果よりもさらに大きい系で同じべき発散の指数 α が得られるとは限らないが、少なくとも熱伝導度の発散の様子はべき発散であると言ってよい。

2.3.3 温度が異なる場合

本章の最初で述べた通り、温度が高温に設定されているほど非線形項部分の寄与が大きくなる。当然、より高温であればどうなるであろうかという疑問が浮かぶであろう。我々は温度を変えた場合についてもどうなるかを調べた。調べた温度の場

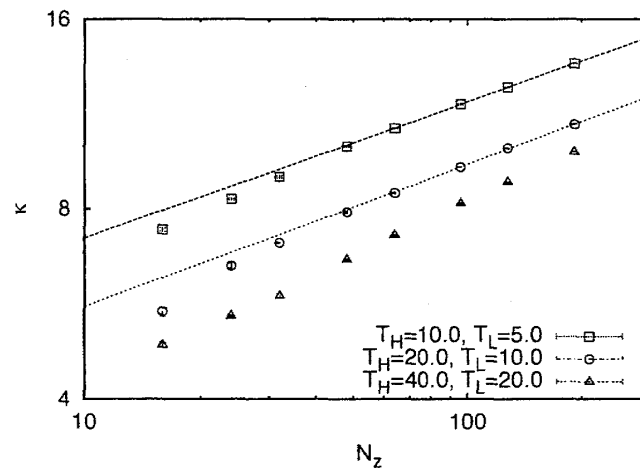


図 4: 3次元単純立方非線形格子系の熱伝導度のシステムサイズ依存性。温度設定は上から順に $(T_L, T_R) = (40.0, 20.0), (20.0, 10.0), (10.0, 5.0)$ 。上の2つについては発散のべき指数も同程度になっていると考えられる。各点線が $N_z \geq 64$ でのべき関数によるフィッティングで、それぞれ $\kappa \sim N_z^{0.216(1)}, N_z^{0.226(5)}$ である。

²筆者は既に $N_z \leq 128$ の範囲でこのデータを [28] に記しており、対数発散が見られると明記した。本論文では $N_z = 192$ のデータが追加され、初めてべき発散の可能性が明らかになった。さらにべき発散であることを確かとするため $N_z = 256$ のデータを取っている最中で、近日に論文として公表する予定である。

表 1: それぞれの温度について線形項と非線形項の寄与の大きさの大雑把な見積もり。

	$\langle \frac{k}{2} \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j ^2 \rangle$	$\langle \frac{g}{4} \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j ^4 \rangle$
(a) $T_L = 10.0, T_R = 5.0$	~ 20	~ 10
(b) $T_L = 20.0, T_R = 10.0$	~ 50	~ 50
(c) $T_L = 40.0, T_R = 20.0$	~ 100	~ 200

表 2: 図 4 のデータに対するフィッティング領域を変えたときに得られる、熱伝導度の発散の強さのべき指数の一覧。

Temperatures	$N_z \geq 48$	$N_z \geq 64$	$N_z \geq 96$	$N_z \geq 128$
$T_H = 10.0, T_L = 5.0$	0.217(1)	0.216(1)	0.215(1)	0.215
$T_H = 20.0, T_L = 10.0$	0.227(4)	0.226(5)	0.222(8)	0.213
$T_H = 40.0, T_L = 20.0$	0.279(3)	0.275(3)	0.270(1)	0.269

合における線形項と非線形項の部分の寄与がどれくらいか、大体の目安を表 1 に記してある。それぞれの場合に対して、いままでと同じ方法で熱伝導度を測った。

熱伝導度を図 4 に示す。全ての温度の組合わせについて熱伝導度がべき発散する様子が分かる。図 4 のそれぞれの系列は表 1 の (a), (b), (c) に対応している。特に (a), (b) の場合についてはべきの指数が 0.22 程度とはつきりと見積もることができ、比較的べき発散のクラスを正しく表しているのではないかと思われる。さらに高温の (c) では単一のべきに乗らないようにも見えるが、温度勾配が大きすぎるか非線形性が強すぎるのが原因である可能性がある。

表 2 には、フィッティング領域を変えていったときのべき発散指数の違いを示している。このデータからも (a), (b) についてはある程度信頼できる指数がとりあえず得られていると言ってよいと考える。

2.3.4 システムサイズの幅に対する依存性

本論文のほぼ全ての結果において、ありうる全ての次元クロスオーバーの効果を排除した系を調べるために、各辺のサイズの比を $N_x : N_y : N_z = 1 : 1 : 2$ と固定している。しかし、熱伝導度 $\kappa(N_z)$ が系の幅 N_x, N_y への依存性を殆ど持たないことを確認しておく。図 5 にはシステムサイズを $N_x = N_y$ のもとで色々変え、長さを保った熱伝導度 $\kappa(N_z = 128)$ をプロットしている。図から容易に分かるように、 $N_x \geq 5$ 程度の領域において、熱伝導度はほぼ一定となっている。

しかし、この結果は全く同様の傾向がより長いサイズの N_z についても成立つこ

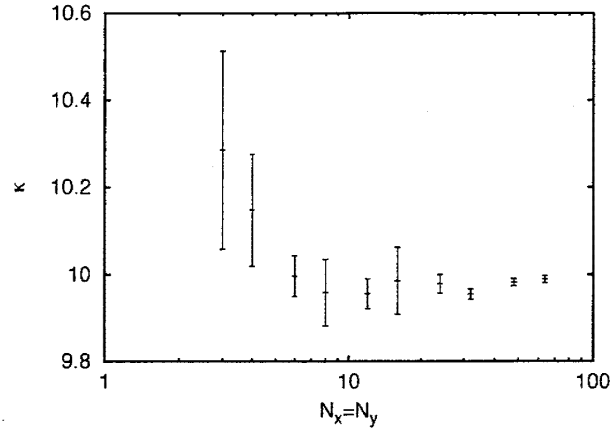


図 5: $N_z = 128$ の場合についての熱伝導度の断面積依存性。 $N_x : N_y = 1 : 1$ の比に保った上で、様々な断面積についての熱伝導度が記されている。

とを保証してくれないことには注意しておく。実際後に 2.5 節に記す結果は、より長い $N_z \sim 1000$ 程度のサイズの場合（特に $N_x \sim 3, 4$ 程度と非常に細い場合）に、幅に対する依存性が本節に示しものよりも強いことを示している。

2.3.5 計算負荷

シミュレーションに要した計算時間に言及する。適当な初期条件から計算を始め、定常状態に緩和するまでに十分な時間を慎重に見定め、計算した。そのために、本論文で最大の $96 \times 96 \times 192$ のサイズの系（約 2×10^6 の粒子数を保有する）に対して典型的には $t \sim 120000$ 程度の計算を行っている。前に述べたように時間刻みを $dt = 0.02$ としているので、全シミュレーションステップは 10^{12} のオーダーとなっている。

我々は 2.2GHz の Opteron プロセッサを用いて計算を行った。最大サイズ 1 サンプルのシミュレーションに約 40 日を要する計算であった。なお筆者は現在、京大基礎物理研究所の大規模計算機サーバ SX8 を用いて、さらに一回り上の $128 \times 128 \times 256$ のサイズの系の包括的な計算に取り組んでいる最中である。

2.4 長時間テイル

以上の異常な熱伝導は非従来の長時間テイルに起因しているだろうと思われる。1.4 節で記したように、(定量的に妥当かどうかは定かではないが) とりあえずの簡単で近似的な議論として、Green-Kubo 公式の時間積分の上限を、系のサイズを典型的音速で打ち切るという近似を用い、サイズ L の系の熱伝導度を

$$\kappa(L) \sim \frac{1}{k_B T^2 V} \int_0^{t_s} dt \langle \mathbf{J}(t) \cdot \mathbf{J}(0) \rangle \quad (26)$$

とする。我々の系は等方的であり、自己相関関数 $C(t) = \langle \mathbf{J}(t) \cdot \mathbf{J}(0) \rangle$ を z 方向の熱流密度の相関 $C_z(t) = \langle J_z(t) J_z(0) \rangle$ としてもべき減衰の指数は同じであるので、今回はこれを測る。

$32 \times 32 \times 64$ のサイズの系を用意し、 x, y, z 全ての方向について周期境界条件を採用する。半数のサイトに $T = 15.0$ の能勢-フーバー熱浴が設置して、しばらく時間発展させて平衡状態に達したのを確認した後、熱浴を切り離してミクロカノニカル的な時間発展に切り替える。その後 $\Delta t \sim 50000$ の時間にわたり熱流の時間相関を長時間にわたって蓄積する。5 サンプルの平均を取り、 $C_z(t)$ を見積もる。結果は図6に示されている。自己相関関数の長時間的な減衰は $C(t) \sim t^{-0.98 \pm 0.25}$ と見積もられる。これは熱伝導度に関するいままで記した漸近振舞い、すなわち対数発散 $\kappa \sim \ln N_z$ と $\kappa \sim N_z^{0.255(5)}$ の両者に矛盾しない値である。

データの精度が少し粗いと感じられると思う。この精度を向上させるのはそれほど容易ではない。熱伝導度が対数発散かべき発散かを見分けるのが現在のシステムサイズでは容易ではないのと同じように、自己相関関数の平衡平均についても現在の有限なシステムサイズではこれ以上誤差を除くことはなかなかできない。またあまり注意されない傾向があるが、1次元の場合で言うと有限サイズ効果そのものによってテイルの評価が系統的に大きくずれることがある。またテイルが緩やかであるためサンプル固有の履歴の影響を非常に大きく受けるために評価そのものが難しいこともある。いずれにしても、この評価を正しく行うことは将来の大きな課題と言える。

2.5 擬1次元系とした場合

2.3節では、各辺の比を $N_x : N_y : N_z = 1 : 1 : 2$ に保ち等方的に系のサイズを大きくしていった場合の振舞いを調べた。擬1次元的に系のサイズを変えていった場合にはどうなるかという疑問が浮かぶ。低次元であれば熱伝導度の発散はより強くなるであろうと想像される。

この予想は正しいと思われる。 N_x, N_y が 3, 4, 8 の場合の熱伝導度のシステムサイズ依存性 $\kappa(N_z)$ を N_z について 8 から 1024 までの範囲で調べ、図7を得た。緩和に要する時間は長くなり、 $N_z = 1024$ については慎重を期して $t = 200000$ までシミュレーションを実行した。 $N_z \sim 256$ 程度まではどの熱伝導度も $N_x : N_y : N_z = 1 : 1 : 2$ の場合とほぼ同じと見受けられる。それよりも大きい N_z については、それぞれが異なった値を持って発散しており、細い系ほど強い熱伝導度の発散が見られることが分かる。 $N_x, N_y \sim 3, 4$ という細い場合については、少なくとも次元クロスオーバーが見えているとあって良いのではないかと考える。

流体系でははつきりと次元クロスオーバーが予期されることに注意しておく。西野は擬1次元、擬2次元の流体についてそれぞれ $L^{1/3}, \sqrt{\ln L}$ を導いている [29]。

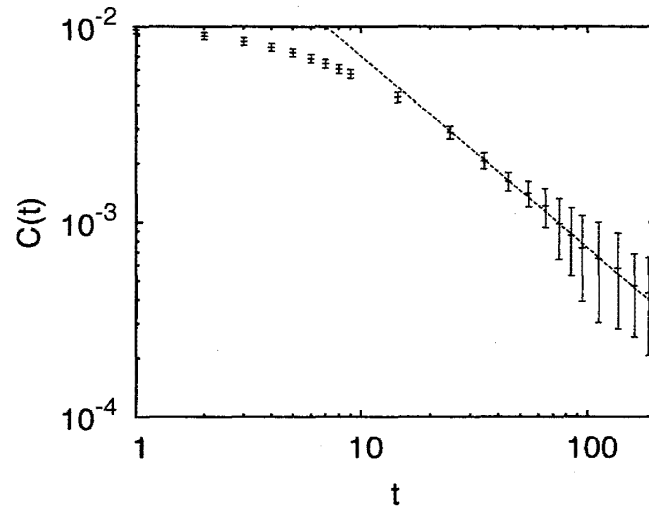


図 6: $32 \times 32 \times 64$ のシステムサイズを持った 3 次元 FPU- β 非線形格子系の熱流自己相関関数 $C_z(t) = \langle J_z(t) J_z(0) \rangle$ 。温度が $T = 15.0$ 、全ての方向について周期境界条件が採用された孤立系についての結果であり長時間のテイルの漸近振舞いが $C_z(t) \sim t^{-0.98 \pm 0.25}$ と見積もられている（点線のフィッティング）。

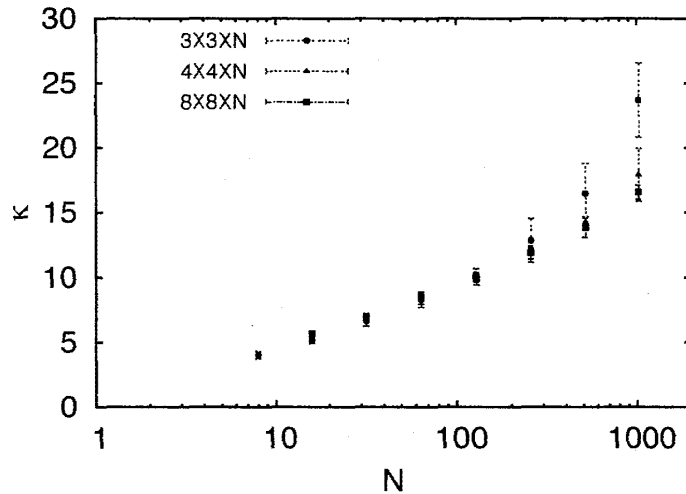


図 7: 擬 1 次元 FPU- β 格子系の熱伝導度のシステムサイズ依存性。丸、三角、四角の記号がそれぞれ $3 \times 3 \times N_z$, $4 \times 4 \times N_z$, $8 \times 8 \times N_z$ のシステムサイズに対する熱伝導度を示す。

2.6 自然長の問題

我々の絶縁体模型において熱伝導度の発散が頑健に見られることを示してきた。しかしハミルトニアン (12) には、その系の長さスケールを特徴づける格子定数が出現せず、実質的にスケールレスとなっている。また、現実の絶縁体ではその複雑な構造から、音響モードだけ取っても多様な分散関係が出現するがそれも込められていない。

縦波横波の違いを最低限でも取り入れる出発点として、最近接相互作用に自然長を取り入れることを考える。島田らは次のハミルトニアン

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{\langle i,j \rangle} \left[\frac{k}{2} (dq_{ij})^2 + \frac{g}{4} (dq_{ij})^4 \right], \quad dq_{ij} = |\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j| - l_0 \quad (27)$$

から出発した「単純立方模型」のシミュレーションを行い、 $t^{-d/2}$ 型の長時間テイルと熱伝導が得られる、とした [23]。これは本論文の結果と一貫していないように見えるが、彼らは実は格子模型のシミュレーションを行っていない。論文 [23] では熱流方向に固定境界ではなく自由境界を採用していた。しかし、単純立方格子では横モードがソフト化してしまっており、彼らが調べた系では、図 8 に示すように結晶構造が崩壊してしまっている。

相互作用における自然長を含めたまま以上に述べた欠点を解消する方法として最も簡単なのは次の二つであろう。

- (最近接相互作用のみ取り入れた) 面心立方格子 (FCC 格子) を採用する。
- 第 2 最近接相互作用を含める。

分散関係の多様さを生む要素としては 2 番目の方が大きいと思われるが、ここではシミュレーションが容易だった 1 番目についてのみ結果を示す。

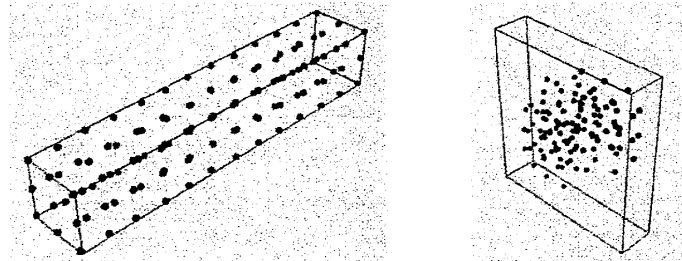


図 8: [23] のシミュレーションの再現の 3 次元図。左図は初期の各粒子の配置を示す。ここから非平衡シミュレーションを始め定常状態に至るにつれ、右図のようにつぶれた形になってしまう。

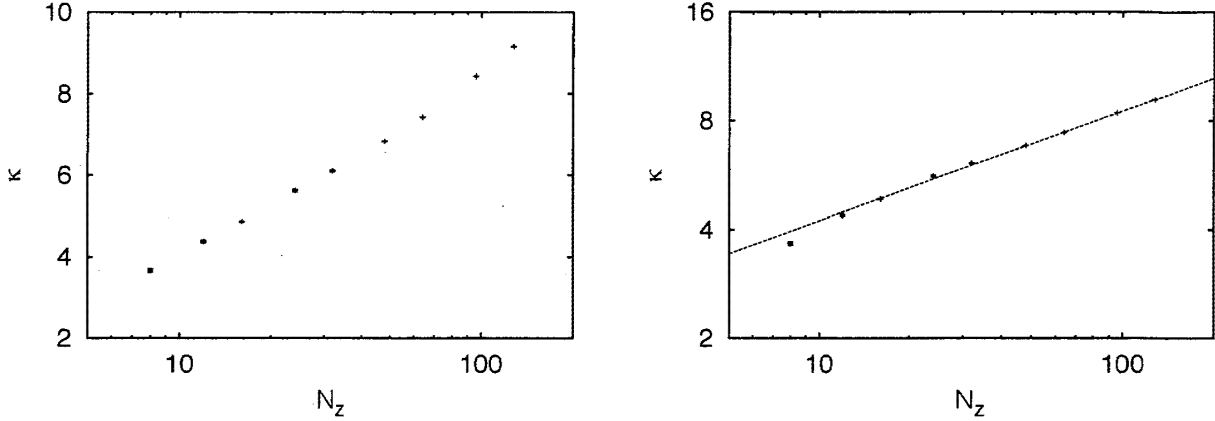


図 9: 左: ハミルトニアンが (27) で与えられる FCC 結晶格子のモデルにおいて熱伝導度を測った結果。熱流は面心方向に流れており、各辺の大きさの比は $N_x : N_y : N_z = 1 : 1 : 1$ に固定されている。 右: 同一のデータを両対数でプロットしたもの。フィッティングは $N_z \geq 48$ で施されており、 $\kappa(N_z) \sim N^{0.303(4)}$ のべきを与える。

ハミルトニアンを (27) とし、格子構造を組み直した上で 2.3 節と同様のシミュレーションを

$$k = 1.0, \quad g = 0.1, \quad T_L = 20.0, \quad T_R = 10.0, \quad l_0 = 50.0 \times \sqrt{2} \quad (28)$$

に設定して行った。各辺の長さの比は $N_x : N_y : N_z = 1 : 1 : 1$ としている。面心方向の 1 つが熱流方向と平行になるように面心立方格子を組んだので、格子定数は 100.0 である。熱流方向に見て両端にある粒子には熱浴が設置されており、もう一つ外側にある固定壁と同じ形の相互作用をしている。このもとで熱伝導度を見積もった結果が図 9 である。弱いべき発散の振舞いが再び得られる。

2.7 熱浴について

本論文の全ての非平衡シミュレーションについて能勢-フーバー熱浴を採用している。一般に熱浴の選択は、こと今回のようにある程度小さいサイズの非平衡系ではそれ自体デリケートで難しい問題となる。

ここでは典型的なもう一つの熱浴としてランジュバン熱浴との比較を行う。ランジュバン熱浴はランダムな外力を粒子に与えることで温度を制御するものであり、時間発展方程式 (15) は次に変更される。

$$\dot{\mathbf{r}}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{p}_i}, \quad \dot{\mathbf{p}}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{r}_i} - [\gamma \mathbf{p}_i + \mathbf{R}_i(t)] \cdot (\delta_{i_z,1} + \delta_{i_z,N_z}) \quad (29)$$

ここではランダムな外力 $\mathbf{R}(t)$ が次のガウシアン白色雑音になっている場合を考える。

$$\langle \mathbf{R}_i(t) \rangle = 0, \quad \langle R_{i\alpha}(t) R_{i\beta}(t') \rangle = 2k_B T \delta_{\alpha\beta} \delta(t - t') \quad (30)$$

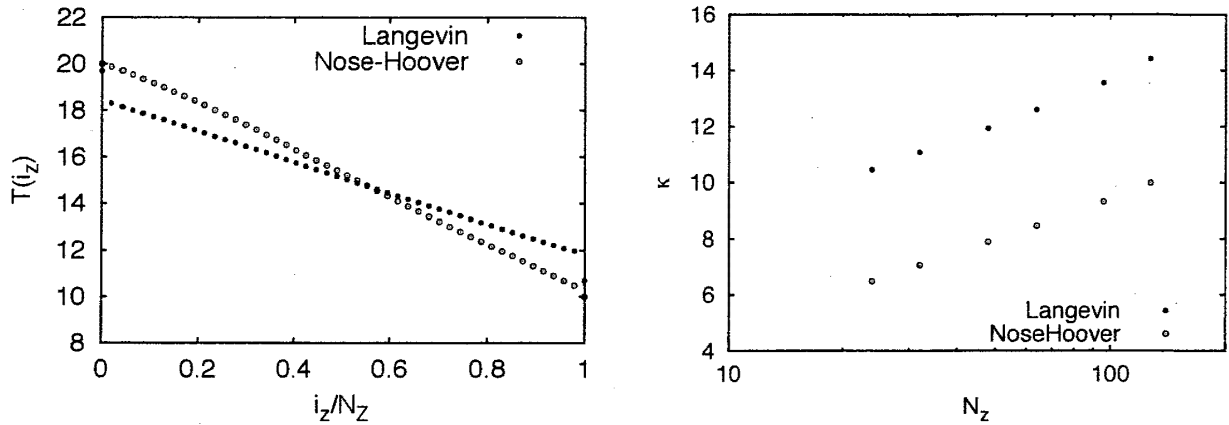


図 10: 左：熱浴を変えたときの温度分布の違い。黒丸はランジュバン熱浴、白丸が図 2 と同じデータで能勢-フーバー熱浴を用いた場合である。共に系のサイズが $24 \times 24 \times 48$ の場合を示している。ランジュバン熱浴の場合には両端に温度ギャップが形成されている。右：熱浴を変えたときの熱伝導度の比較。系のサイズの各辺の比は $N_x : N_y : N_z = 1 : 1 : 2$ に固定されている。黒丸で示されたランジュバン熱浴の場合の熱伝導度が白丸の能勢-フーバー熱浴の場合よりも高くなっているのは、温度勾配が前者で低く評価されていることが理由である。

(29) 中で $-\gamma p_i$ は粘性減衰項である。緩和時間を $\gamma = 1$ に設定する。

温度分布と熱伝導度の比較を図 10 に示す。温度分布の端点におけるギャップがランジュバン熱浴の場合に大きく見える。このことはランジュバン熱浴の場合にバリスティックな輸送がより強く現れていることを示唆する。温度勾配をバルク部分で評価したために熱伝導度には差があるような書き方になっているが、流れているエネルギー流量に両者の間の差はそれほどない。

この温度分布の違いは、定性的に自然である。白色ノイズを採用したランジュバン熱浴においては、長短全てのスケールの波が万遍なく放出されている。一方バルク部分は（一般に気体についても言えるように）長波長の波を減衰させず通しやすく、これらは短波長の波のようには容易に減衰しない。対して能勢-フーバー熱浴はカノニカル熱平衡分布を基準にバルクの状態を定めるために、不自然なほど長波長の波は最初から抑制されてしまう。その点では、特に少数系に対して能勢-フーバー熱浴の方が「自然な」結果を与えていると考える。

とりわけ少数自由度の小さい系では、非平衡状態は境界の設定に依存する場合が多い。当然今回の場合もバルク部分のシステムサイズが大きいほど端点のギャップは小さくなり、両熱浴の生み出す振舞いもお互いに似通う。

2.8 2次元非線形格子系再訪

3次元において熱伝導度が弱いべき発散となることを見てきた。ただちに2次元ではどうか、という疑問が浮かぶ。ここでハミルトニアンが(12)で与えられる2次元における同様の模型を少し調べてみることにする。シミュレーションの設定は3次元の場合と同じく図1に示された通りとし、熱流と直交方向には周期境界条件を採用する。熱流方向に端にある粒子は能勢-フーバー熱浴によって温度を制御し、固定壁につながっている設定とする。以後本節では熱流方向を y 軸とする。

現時点では2次元のこのモデルを研究した例は2.2節で言及した2つしかない。Lippiらは $N_z \leq 128$ の範囲で熱伝導度が対数発散すると指摘した[27]。その後Grassbergerらに対数発散ではなく $\kappa \sim N^{0.22(3)}$ 程度の弱いべき発散であると報告したが[30]、彼らはアスペクト比を一定でないデータを一緒に載せているため実態が判然としない。

ここではアスペクト比を $N_x : N_y = 1 : 2$ に固定したケースに絞り $N_y = 768$ のサイズまで調べた結果を示す。図11の左には温度分布を示している。3次元の場合には見えなかったが、今の場合にはシステムサイズが大きいの、温度分布が曲がっている有様がはっきり見える。またシステムサイズが大きいほど相対曲率が大きくなっている。曖昧さを避けるため、温度勾配の定義は両端の温度差をシステムサイズで割った値を単純に取る。温度分布に対するフィッティングをかけた評価と比較すると、今回の場合はやや異なった値を与え、熱伝導度の発散は若干弱めに評価されることに注意しておく。

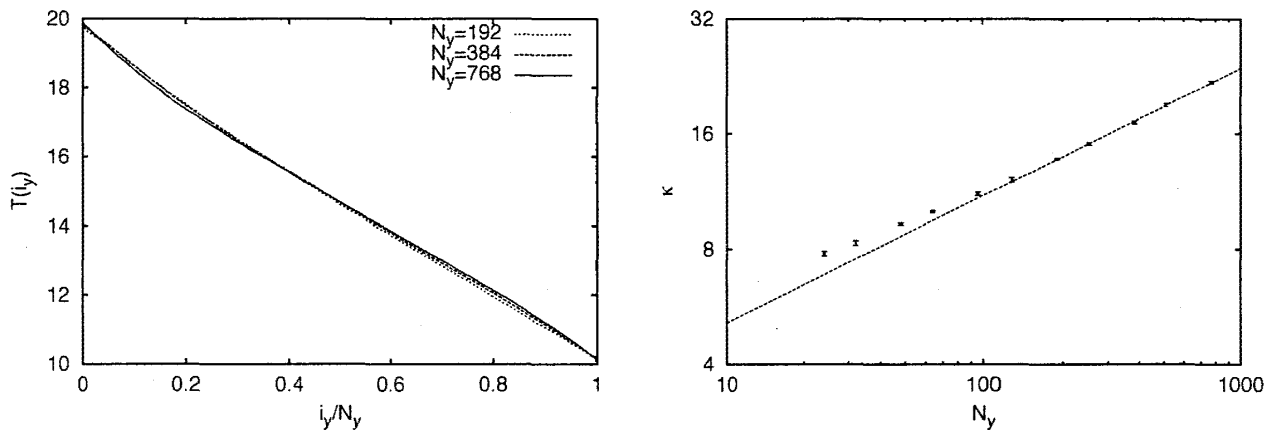


図 11: 左: 2次元FPU- β 格子系における温度分布。アスペクト比は $N_x : N_y = 1 : 2$ としており、 $N_y = 192, 384, 768$ の3つの場合を図示している。両端の温度はそれぞれ $(T_L, T_R) = (20.0, 10.0)$ としている。横軸は系のサイズ N_y で規格化された位置を示し、縦軸が x 方向同じ線上の粒子にわたって平均された粒子の局所温度をしめしている。右: 2次元FPU- β 格子系の熱伝導度のシステムサイズ依存性の両対数プロット。点線は $N_y \geq 128$ の範囲のべきのフィッティングであり、 $\kappa(N_y) \sim N_y^{0.268(3)}$ となっている。

図 11 の右には熱伝導度のシステムサイズ依存性の両対数プロットを記している。発散の強さは $\kappa \sim N_y^{0.268(3)}$ と評価される。発散はあきらかに従来の対数発散と言われていたものよりも強い発散である。

3 ディスオーダーのある 3 次元非線形格子系

本論文では、絶縁体のモデルの熱伝導性質を調べることを目標としている。熱伝導現象には次の要素が本質的にかかわっているであろう、というのが長年の物理学者の信念であった。

1. 相互作用の非線形性を入れること
2. 次元を拡張すること
3. 不純物や乱雑さなどを入れること

1 章の後半部分では 1. のみを取り入れた 1 次元のモデルについての先行研究について述べた。2 章では主に 3 次元のモデルを調べた。ここで分かったのは 1. と 2. のみでは熱伝導度が有限となる正常熱伝導に至ることがない、ということである。従って次に調べるべきは 3. を取り入れたモデルということになる。本章では乱雑さを導入したモデルについて少々述べる。

3.1 ディスオーダーのある古典格子系

ディスオーダーのある系と、そこでの局在現象の役割については、Anderson 以来 [31] 多くの研究がある。電子系では、乱雑なポテンシャルがある場合に電子が空間的に局在し、金属絶縁体転移をもたらすことがある。こういったことから局在効果は量子系特有の効果であると誤解される向きがあるが、実際には音響フォノンをはじめ、古典的波動現象においても見られる現象である [32]。

最近にいたるまで、ディスオーダーのある連成調和振動子系については多くの研究がある。輸送現象についてもまず一連の研究が 1970 年頃になされており、 $\kappa \sim \sqrt{N}$ の形の発散が見られるとされている [33, 34]。しかし調和系の宿痾として、系の性質が境界条件や熱浴の性質に非常に強く左右され、系の熱伝導度はシステムサイズが増えるに従ってゼロに向かう場合すらあることも指摘されている [35]。また 2 次元の調和格子において生じるエネルギーカレントは、熱浴のスペクトルに強く依存してしまうことも示されている [36]。これらの結果から、ディスオーダーのある連成調和振動子系に共通の熱的性質を引き出すことは容易ではない。

従ってこれらディスオーダーのある格子系に非線形性を導入することを考える。この観点の研究も数は少ないものの、歴史が古い。例として初期のころには、非線形

性の強い方が線形格子の場合よりもエネルギー伝達の効率が良いように見える、という驚くべき指摘がされた [37]。これはソリトンのような局在化された励起が不純物を乗り越えているためと思われるが、当時はその事実に気づかれることがなかった。その後、いたるまでの歴史を見ても、非線形性とディスオーダー、両者の果たす効果に焦点を当てた研究は少ないと思われ、ほとんど理解が進んでいない。

3.2 質量にディスオーダーの導入された3次元非線形格子系

Liらは1次元のディスオーダーのある FPU- β 格子系の熱伝導振舞いを研究した [38]。この論文には1つ不適切な点があり、低温（非線形性が強く効かない温度）領域で能勢-フーバー熱浴を使用している。一般に能勢-フーバー熱浴は、「熱的」な性質をミクロカノニカルな状況下で自ら保証できるような非可積分系に対してのみ使用ができる。[38]中の低温におけるシミュレーションについての言及は誤っていることになる。しかし高温領域におけるシミュレーションについては誤りはなく、この状況下、各質点の質量をランダムに設定した熱伝導度が $\kappa(N) \sim N^{0.43(1)}$ のべき発散を示すことを彼らは報告している。我々は同様の設定で3次元への拡張を行ったとき熱伝導度がどうなるかを調べた。

ここで調べるハミルトニアンも2.2節におけるの(12)と同様の形だが、質量がランダムに配置されているもので

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_i} + \sum_{\langle i,j \rangle} \left[\frac{k}{2} |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^2 + \frac{g}{4} |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^4 \right] \quad (31)$$

とする。ここに各点の質量 m_i は

$$m_i = 1.0 + \lambda(R_i - 0.5) \quad (32)$$

のように一様分布を与える (R_i は $[0, 1)$ の範囲の一様乱数)。この設定は [38] における1次元系の設定の3次元への単純な拡張であり、全質量の平均値が1.0となっていることに注目されたい。

この系の熱伝導度は図12の通りである。5通りの独立なサンプルの間で統計平均と誤差を取った。ディスオーダーの強さ λ は0.2と0.4に設定してある。ディスオーダーがあるにもかかわらず、熱伝導度は弱いべき発散をしている。ディスオーダーが強ければより伝導が抑制されていることには変わりないが、少なくともディスオーダーがある3次元非線形格子系においてもサイズに依存した熱伝導度の発散が頑健に出ることを示唆する結果である。

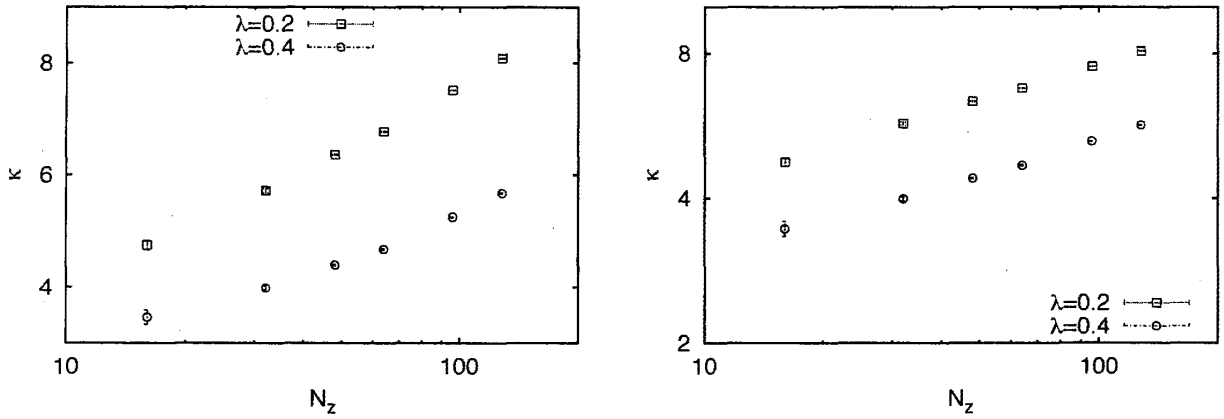


図 12: 左：質量にディスオーダーを導入した単純立方格子の FPU- β 鎖の熱伝導度。系の各辺の大きさの比は $N_x : N_y : N_z = 1 : 1 : 2$ にしている。ディスオーダーの強さを表すパラメタ λ はそれぞれ 0.2 と 0.4 に取っている。右：同一のデータの両対数プロット。

3.3 固定されたサイトを持つ場合

ディスオーダーを導入したことの意味は系の並進対称性を破ることで非局在的に広がった自由運動の描像から質的に異なる状態を得ることにあつた。前節ではそのような結果は得られなかったが、我々の持っている計算機の実力の範囲でなんとかそのような状態を実現してみたい、という動機のもと、質量無限大の不純物を一定の割合で入れる、という極端な設定のシミュレーションを行った。このような不純物は熱流に対する大変なバリエードとなり、長時間相関を切断する効果を持つであろう。改めてハミルトニアンを記せば

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m_i} + \sum_{\langle i,j \rangle} \left[\frac{k}{2} |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^2 + \frac{g}{4} |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^4 \right], \quad m_i = 1 \text{ or } \infty \quad (33)$$

となる。全粒子のうちのある割合の粒子の質量を無限大とした。言い換えれば、それらの粒子の位置をその平衡位置 $\mathbf{r}_i = 0$ に固定した。これら固定された粒子は、熱浴にかかっていない全粒子のうちから 10%あるいは 20%、ランダムに選択した。この割合であれば全ての熱流のブロックが起きてしまう確率はほぼゼロである。本モデル中では並進対称性が破れてしまっていることに注意。

結果を図 13 に示す。特に 20% の場合については熱伝導度が収束していると言ってよいように思われる。熱伝導度の値は今まで見てきたケースよりも一桁程度小さい。図 13 の右側の図から、収束に向かっていく $\kappa(N_z)$ の値のわずかな増加が見えられる。

極端なモデル設定ではあるが、図 13 が示したこの結果は、結晶中で欠陥などの格子の乱れがあれば有限の熱伝導度を与える可能性の示唆を与えると思われる。

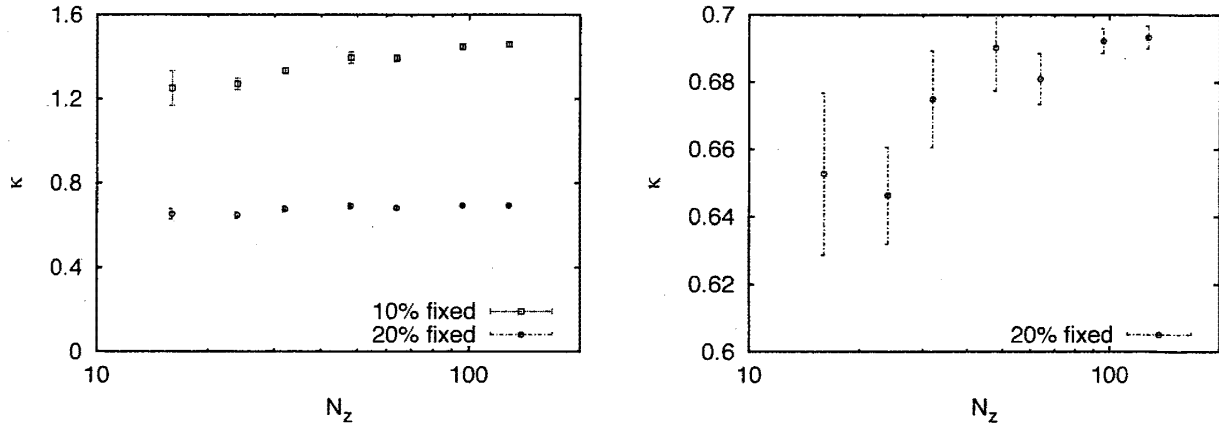


図 13: 左：固定された粒子を持つモデルの熱伝導度のシステムサイズ依存性。固定されたサイトの割合は、四角のプロットが10%、丸のプロット点が20%固定サイトがある場合を示す。有限の熱伝導度への収束らしい振舞いが見えることが分かる。

右：20%の場合の拡大図。熱伝導度が収束値に向かってわずかに増大している様子が見られる。

4 結論

4.1 結果の要約

これまで3次元の絶縁体モデルにおける熱輸送を調べてきた。その際我々は (i) 非線形性、(ii) 系の次元、(iii) 不純物やディスオーダー、という3つの巨視系の動的振舞いに重要な影響を与えると思われる要素を考慮した。また全エネルギーと全運動量を保存する系の設定とした。絶縁体として非物理的な点は熱膨張などの熱的性質を再現しないことと縦波横波が同一の分散関係に従うことである。

第2章では、(i) と (ii) を取り入れた3次元の絶縁体モデルを調べた。システムサイズの増大につれ熱伝導度が発散していく様子が明確に捉えられた。この異常性は規準モード間の結合が非常に強くなり熱化が促進されるような高温下でも見られる。従って熱伝導度の発散が非常に頑健で普遍的な性質であることが結論される。

この熱伝導度の発散は熱流の時間相関関数の平衡平均の遅い緩和と矛盾しない。この緩和は従来の長時間テールとして知られる $t^{-d/2}$ 型のものとは明らかに異なる、より遅い緩和である。このことは、非線形格子系において流体描像がナイーブに適用されてはならないことをはっきり示している。従って、最近の流体モードのモード結合や繰り込み理論に基づいた低次元非線形格子についての最近の理論 [12, 18] の妥当性についても、その出発点から再考慮の必要がある。

第3章では (iii) の要素も取り入れ、質量にディスオーダーのある場合を考慮した。一般の物理系でも同位体などが存在するため、このような場合も考慮される必要が

ある。ディスオーダーがある場合には規準モードの散乱や局在のために、ゼロや有限の伝導度が期待されるケースが多い。ここでは我々は非平衡シミュレーションにより、強いディスオーダーを含む場合も熱伝導度が発散することを示した。

4.2 展望

我々は頑健な熱伝導度の発散を、まだ未解明の現象であるという示唆を込めて「異常熱輸送」と呼んだ。非常に多くの問題が提起されると考えているので、少し言及する。

第一の問題は、非線形性の弱い範囲ですら我々は非平衡輸送現象についての健全な理論を持っていないことである。1.4節において述べたように局所平衡の流体については完結する理論があり、問題は部分的に解決されている [8]。非線形格子系を議論する際に難しく思われるのは、流体力学のような確立した巨視的理論を格子振動について我々が持っていないことである。実際の絶縁体中でも非線形性はわずかであると思われるので、本当の非平衡振舞いは小さいシステムサイズスケールでは見えてこないと思われる。ここにシミュレーションの限界があり、狭い意味での流体描像にかわる新しい連続体理論とそれを基礎づける運動論が必要とされると思われる。

本研究によって、通常の絶縁体で熱伝導度がなぜ有限になるのか、という謎をさらに深めることになるであろう。実験で低次元の固体における異常性を見る試みはなされ続けてきたが、熱流を測ることの困難に加えて境界や周囲の非常に散逸的な状況にさらされるために容易ではなかった。当然3次元の絶縁体の方が輸送係数の測定は容易であり、ダイヤモンドのように無欠陥に近く非常に硬い結晶であれば、マクロな系であっても同様の効果が期待されてよいのではないかと考えている。転位や他の欠陥の密度などへの依存性も興味深いと考える。

追記

- 本研究で提示した3次元における異常輸送はロバストではあるといいつつも、やっていること自体は古典系の大自由度力学系いじりである、という捉え方がされても仕方がない側面はある。また熱膨張率もゼロであり、結晶の巨視的な流れや変形の一切が無視されている。実際のフォノン熱伝導系で見える異常性かどうかについては今後の発展を俟たなければならない。

- いずれにしても、3次元系の非可積分系で異常性が見えた初めての例であり、そこにはミクロマクロ階層分離の不可能と考えられる領域が広がっている。直観的にはアコースティックに非局在化した伝搬特有の捉えがたい性質であるというのがふさわしい。この格子振動のエネルギー流において熱と仕事とは何か？といったいまだ明らかにされてきていない魅力的な問題が山積している。
- 長時間テイルの振舞いについては数値的に筆者の及ぶ力の限りを尽くして精密計算に努めているが、最近には伝導度発散のべき指数とやや一致しないテイルを示唆する結果も得られ、不可解な様相を呈しているように見える。巨大な系にするほど平衡揺らぎとしての熱流は相対的に抑制され正しい計算が困難な上、有限サイズ効果もあるであろうから直ちに結論はつかないが、今後実態が明らかになるように筆者は努めるつもりである。
- この異常性を説明する理論が得られないままに約1年が過ぎてしまって自らの非力さに痛み入るが、萌芽的な本研究を出発点に新たな理解が筆者の想像を超えた方向へと広がっていくことを願いつつ筆を措きたい。

謝辞

最初にこの研究の出発点を提示してくださった齋藤圭司氏に感謝します。彼の提案がなければ本研究はなされませんでした。指導教員の伊藤伸泰氏と湯川諭氏には自由な研究環境と辛抱強い指導や手助けをいただいたことに、また北原和夫先生には寮の世話や講義などを通じて直接間接に多くの影響を与えてくださったことに、感謝します。

山越富夫ペトロスキー、杉山勝、礒部雅晴、清水明、早川尚男、西野貴博、島田尚、上田彰、桂法称の各氏からは特に議論のための長い時間や機会、様々なコメントをいただきました。また、ここに名前を記さない多くの学生や先生方のコメント、また研究室を同じくした院生、周囲の研究室の方々との議論や生活、そして彼らによる援助から、多く有形無形の影響と恩恵を受け現在に至っていることを記しておきます。

参考文献

- [1] H. Nakano, Prog. Theor. Phys. **15**, 77 (1956)
- [2] R. Kubo, J. Phys. Soc. Jpn. **12**, 570 (1957)
- [3] R. Kubo, M. Yokota, and S. Nakajima, J. Phys. Soc. Jpn. **12**, 1203 (1957)

- [4] H. Mori, Phys. Rev. **112**, 1829 (1958); *ibid* **115**, 298 (1959)
- [5] B.J. Alder and T.E. Wainwright, Phys. Rev. A **1**, 18 (1970)
- [6] M. H. Ernst, E. H. Hauge, and J. M. J. van Leeuwen, Phys. Rev. A **4**, 2055 (1971)
- [7] Y. Pomeau and P. Résibois, Phys. Rep. **19**, 64 (1975)
- [8] P. Résibois and M. de Leener, *Classical Kinetic Theory of Fluids*, John Wiley & Sons (1977)
- [9] K. Kawasaki, Phys. Lett. A **34A**, 12 (1971)
- [10] Z. Rieder, J. L. Lebowitz, and E. Lieb, J. Math. Phys. **8**, 1073 (1967)
- [11] E. Fermi, J.R. Pasta, S.M. Ulam, Los Alamos Report No. LA-1940 (1955), later published in *E. Fermi, Collected Papers* (Univ. Chicago Press, 1965)
- [12] S. Lepri, R. Livi, and A. Politi, Phys. Rep. **377**, 1 (2003)
- [13] S. Lepri, R. Livi, and A. Politi, Phys. Rev. Lett. **78**, 1896 (1997)
- [14] S. Lepri, Eur. Phys. J. B **18**, 441 (2000)
- [15] T. Hatano, Phys. Rev. E **59**, R1 (1999)
- [16] A. Dhar, Phys. Rev. Lett. **86**, 3554 (2001)
- [17] S. Lepri, Phys. Rev. E **58**, 7165 (1998)
- [18] O. Narayan and S. Ramaswamy, Phys. Rev. Lett. **89**, 061202 (2003)
- [19] C. Giardiná, R. Livi, A. Politi, and M. Vassalli, Phys. Rev. Lett. **84**, 2144 (2000); O. V. Gendelman and A. V. Savin, Phys. Rev. Lett. **84**, 2381 (2000)
- [20] K. Aoki and D. Kusnezov, Phys. Lett. A **265**, 250 (2000); B. Hu, B. Li, and H. Zhao, Phys. Rev. E **61**, 3828 (1999)
- [21] B. Hu, B. Li, and H. Zhao, Phys. Rev. E **61**, 3828 (2000)
- [22] T. Murakami, T. Shimada, S. Yukawa, and N. Ito, J. Phys. Soc. Jpn. **72**, 1049 (2003)
- [23] T. Shimada, T. Murakami, S. Yukawa, K. Saito, and N. Ito, J. Phys. Soc. Jpn. **69**, 3150 (2000)

- [24] F. Ogushi, S. Yukawa, and N. Ito, J. Phys. Soc. Jpn. **74**, 827 (2005)
- [25] S. Nose, Prog. Theor. Phys. Suppl. **103**, 1 (1999)
- [26] A. Ito and H. Nakamura, preprint arXiv:cond-mat/0608182 (2006)
- [27] A. Lippi and R. Livi, J. Stat. Phys. **100**, 1147 (2000)
- [28] H. Shiba, S. Yukawa, and N. Ito, J. Phys. Soc. Jpn. **75**, 103001 (2006)
- [29] T.-H. Nishino, preprint arXiv: cond-mat/0609059 (2006)
- [30] P. Grassberger and L. Yang, e-print arXiv:cond-mat/0204247 (2002)
- [31] P. W. Anderson, Phys. Rev. **109**, 1492 (1958)
- [32] T. R. Kirkpatrick, Phys. Rev. B **31**, 5746 (1985)
- [33] A. Casher and J. L. Lebowitz, J. Math. Phys. **8**, 1071 (1971); A. J. O'Conner and J. L. Lebowitz, J. Math. Phys. **15**, 692
- [34] H. Matsuda and K. Ishii, Suppl. Prog. Theor. Phys. **45**, 56 (1970)
- [35] A. Dhar, Phys. Rev. Lett. **86**, 5882 (2001)
- [36] L. W. Lee and A. Dhar, Phys. Rev. Lett. **95**, 094302 (2005)
- [37] D. N. Payton, M. Rich, and W. M. Visscher, Phys. Rev. **160**, 706 (1967)
- [38] B. Li, H. Zhao, and B. Hu, Phys. Rev. Lett. **86**, 63 (2001)