

FPUT 格子における異常熱伝導とソリトン減衰

鳥取大学大学院持続性社会創生科学研究科工学専攻 高津 昌希 (Masaki Takatsu)[†]

鳥取大学学術研究院工学系部門 吉村 和之 (Kazuyuki Yoshimura)[‡]

[†]Graduate School of Sustainability Science, Tottori University

[‡]Faculty of Engineering, Tottori University

概要

1 次元 Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou (FPUT) 格子において、熱的振動状態にある格子区間をソリトンが伝播するときのエネルギー減衰過程について調べた。数値実験により、ソリトンのエネルギー減衰率について、冪乗則 $\Delta E/E_{in} \propto E_{in}^c$ を見出した。ここで、 E_{in} は熱振動区間に入射するソリトンのエネルギー、 ΔE は区間前後のエネルギー変化量、 $c \simeq 1.62$ は定数である。さらに、この冪乗則に基づき、ソリトン減衰過程を記述する理論を構築した。また、1 次元 FPUT 格子は異常熱伝導を示し、熱伝導率 κ と格子サイズ N の間に冪乗則 $\kappa \propto N^\alpha$ 、 $\alpha \simeq 0.4$ が成り立つことが知られている。上述のソリトン減衰理論より、異常熱伝導の冪乗測 $\kappa \propto N^\alpha$ 、および、指数の値 $\alpha \simeq 0.4$ を導けることを示す。

1 はじめに

巨視的スケールの物質における熱伝導は、フーリエ則 $J = -\kappa \nabla T$ で良く記述される。ここで、 J と ∇T はそれぞれ熱流束と温度勾配であり、 κ は熱伝導率と呼ばれる対象物の長さには依存しない物質定数である。一方、ミクロスケールの物質では、フーリエ則が必ずしも成立しないことが知られている。実際に、熱伝導率 κ が長さに依存するという非フーリエ熱伝導が、長さ 1mm 以上のカーボンナノチューブを用いた実験で観測されている [1, 2]。

固体結晶の単純化された微視的力学モデルとして、1 次元非線形格子がある。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。これまでの研究により、熱伝導率 κ が格子サイズ N のべき乗則 $\kappa \propto N^\alpha$ に従い、熱伝導のタイプは、 $\alpha = 0$, $0 < \alpha < 1$, $\alpha = 1$ の 3 つに分類できる事が知られている。正常熱伝導 $\alpha = 0$ はフーリエ則に対応し、 κ の値は N に依存しない定数となる。正常熱輸送は、Ding-a-ling [3, 4], Ding-dong [5], Frenkel-Kontrova [6], ϕ^4 chain [7, 8] などのオンサイトポテンシャルを有する非線形格子で観測されている。一方で、 $\alpha > 0$ のときは N の増加とともに κ が発散する。異常熱伝導 $0 < \alpha < 1$ は、1997 年の Lepri らによる論文 [12] によって発見され、FPUT- β 格子 [12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19], FPUT- α 格子 [20], Diatomic Toda 格子 [21] などの運動量が保存されるような非線形格子で観測されている。また、弾道的熱伝導 $\alpha = 1$ は、熱抵抗が消滅するという極めて異常な場合に相当する。このタイプの熱伝導は例外的であり、特殊な性質をもつ格子でのみ観測される。例えば、完全可積分系である戸田格子 [9] や、NP 対称性 [10] と名づけられたポテンシャル関数の対称性によって追加の第一積分を 1 つ有する Umklapp-free 格子 [11] で観測される。

異常熱伝導における研究対象は、熱伝導指数 α である。特に、正確な α 値の決定、および、その値の背後に潜む異常熱伝導メカニズムの解明が主要な問題である。これまでに、FPUT- β 格子を含む様々な 1 次元非線形格子に対して、 α は 0.3 から 0.4 程度の値を共通して取ることが数値計算によって観測されている [12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21]。格子モデルの詳細によらず共通した α の値が現れる事実は、その背後に共通した異常熱伝導を引き起こすメカニズムが存在していること、すなわち、ユニバーサリティクラスの存在を示唆している。また、いくつかの理論的研究もユニバーサリティクラスの存在を示唆している。モードカップリング理論 [13] や Peierls-Boltzmann 方程式に基づく理論 [22] では $\alpha = 2/5$ 、一方、1 次元非線形揺らぎあり流体力学理論 [23] では、非対称相互作用ポテンシャル格子に対して $\alpha = 1/3$ 、FPUT- β のような対称相互作用ポテンシャル格子に対して $\alpha = 1/2$ が示唆されている。ただし、現時点では、異常熱伝導のメカニズムに関して、上述のいずれかの理論が正しいのか、または、それらとは異なるメカニズムであるのか、確定的な結論は得られていない。

本研究では、1 次元 FPUT- β 格子について、異常熱伝導を引き起こすメカニズムについて論じる。非線形格子中の熱エネルギー輸送を担う波動モードの候補としては、フォノンと呼ばれる平面波、および、ソリトンと呼ばれる局在波が考えられている。ただし、これらの波動モードのいずれか一方が熱エネルギー輸送に支配的寄与するのか、それとも両者が同程度に寄与するのか、または、これら以外の何らかの波動モードが重要なのかは、現時点では明らかではない。実際、これまでに、フォノンの寄与 [24, 25]、および、ソリトンの寄与 [26]、それぞれの主張がなされている。ここでは、ソリトンに着目して異常熱伝導メカニズムの理論構築を試みる。まず、熱的な乱雑振動が生じている FPUT- β 格子中をソリトンが減衰しながら伝播するときの性質を、数値計算により詳細に調査する。その結果、ソリトンのエネルギー減衰率について、冪乗則 $\Delta E/E_{in} \propto E_{in}^c$ が成立することを示す。ここで、 E_{in} は入射ソリトンのエネルギー、 ΔE は伝播によるエネルギー変化量、 $c \simeq 1.62$ は定数である。この冪乗則に基づき、ソリトンの減衰伝播過程を記述する理論も構築する。さらに、ソリトンの減衰伝播過程に基づき、異常熱伝導メカニズムを説明する理論を提案する。特に、指数 α の値について理論的予測値を計算し、それが近年の大規模非平衡シミュレーションによる値 $\alpha \simeq 0.4$ [17, 18, 19] と良く一致することを示す。

2 FPUT 格子モデル

本研究では、次のハミルトニアンで定義される 1 次元 FPUT- β 格子モデルを扱う。

$$H = \frac{1}{2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} p_n^2 + \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} (q_{n+1} - q_n)^2 + \frac{\beta}{4} \sum_{n=-\infty}^{\infty} (q_{n+1} - q_n)^4 \quad (1)$$

ここで、 p_n と q_n は、それぞれ、 n 番目粒子の運動量と変位を表す変数であり、 $\beta \geq 0$ は非線形性の強さを表す定数である。(1) 式は直線上に並んだ単位質量粒子が、最隣接粒子と非線形相互作用する力学系を表している。なお、FPUT 格子においては、オンサイトポテンシャルは無い。(1) 式には、粒子が無限個の格子のハミルトニアンを示したが、数値シミュレーションでは有限格子を用いる。

FPUT 格子モデルの運動方程式は、 $\dot{q}_n = \partial H / \partial p_n$, $\dot{p}_n = -\partial H / \partial q_n$ より以下のように与えられる。

$$\ddot{q}_n = q_{n+1} - 2q_n + q_{n-1} + \beta \left\{ (q_{n+1} - q_n)^3 - (q_n - q_{n-1})^3 \right\}, \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (2)$$

3 FPUT 格子中のソリトン

先行研究 [18] によって, FPUT 格子における異常熱伝導の原因が低波数の波であるということが分かっている. 本研究では, この低波数の波がソリトンであり, ソリトンが異常熱伝導の主たる原因であるという仮説を立てて調査を行う. 本節では, ソリトンに関する数値実験の準備として, FPUT 格子におけるソリトン解の導出を文献 [27] に従って述べる.

3.1 FPUT 格子中のソリトンの初期解の導出

3.1.1 絶対座標から相対座標への変換

絶対座標 q_n で書かれた FPUT 格子のハミルトニアンは (1) 式で与えられる. この FPUT 格子の運動方程式 (2) において, 相対座標を $r_n = q_n - q_{n-1}$ と定義すると, 相対変位で書いた格子の運動方程式は次式で与えられる.

$$\frac{d^2 r_n}{dt^2} = \phi'(r_{n+1}) + \phi'(r_{n-1}) - 2\phi'(r_n) \quad (3)$$

ここで, 粒子間ポテンシャル ϕ は

$$\phi(r) = \frac{1}{2}r^2 + \frac{\beta}{4}r^4 \quad (4)$$

で定義される. (4) 式の非線形ポテンシャルの関数形を用いると

$$\frac{d^2 r_n}{dt^2} = r_{n+1} + r_{n-1} - 2r_n + \beta(r_{n+1}^3 + r_{n-1}^3 - 2r_n^3) \quad (5)$$

を得る. これは, 線形項 $r_n, r_{n\pm 1}$ に加えて, 非線形項 $r_n^3, r_{n\pm 1}^3$ を含む非線形微差分方程式である.

3.1.2 運動方程式の連続体近似と 1 ソリトン解

(5) 式の差分を微分に置き換えるため, $r_{n\pm 1}$ を r_n の周りに展開し連続体近似を行う. この近似は, 格子間隔に比べ波長が長い波を仮定し, $r_{n\pm 1}$ を r_n の周りに展開して得られる. 格子間隔が長さの基準であるから, $x = n$ において, 以下のように表記する.

$$r_n(t) = r(n, t) = r(x, t)$$

$r(x, t)$ を連続変数 x に依存する関数とみなして Taylor 展開すると, $r_{n\pm 1}$ は

$$\begin{aligned} r_{n\pm 1} &= r(x \pm 1, t) \\ &\simeq r \pm \frac{\partial r}{\partial x} + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 r}{\partial x^2} \pm \frac{1}{3!} \frac{\partial^3 r}{\partial x^3} + \frac{1}{4!} \frac{\partial^4 r}{\partial x^4} \pm \dots \end{aligned}$$

と展開できる. 非線形項は

$$(r_{n\pm 1})^3 \simeq r^3 \pm 3r^2 \frac{\partial r}{\partial x} + \frac{3}{2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial r}{\partial x} \right)$$

と計算でき

$$r_{n+1}^3 + r_{n-1}^3 - 2r_n^3 \simeq 3 \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial r}{\partial x} \right)$$

と近似することができる。したがって、運動方程式 (5) を非線形偏微分方程式

$$\frac{\partial^2 r}{\partial t^2} - c_0^2 \frac{\partial^2 r}{\partial x^2} - \frac{c_0^2}{12} \frac{\partial^4 r}{\partial x^4} - \beta c_0^2 \frac{\partial^2 r^3}{\partial x^2} = 0 \quad (6)$$

に近似的に書き換えることができる。ただし、 $c_0^2 = 1$ であり、 c_0 は長波長極限での線形波の速度を表わす。

進行波解 $r = f(x - ct)$ を仮定して解くと、(6) 式の 1 ソリトン解が次式のように得られる。

$$r = \sqrt{A} \operatorname{sech} \left(\sqrt{6\beta A} (x - ct) \right) \quad (7)$$

ここで、 A は定数であり、(7) 式において $\sqrt{A}$ はソリトン解の振幅を表わしていることがわかる。波の速度 c は A を用いて

$$c^2 = c_0^2 \left(1 + \frac{1}{2} \beta A \right) \quad (8)$$

と書ける。(7) 式の解について、相対変位座標系から絶対座標系への変換を行う。粒子変位 q_n と相対変位 r_n は、関係式 $r_n = q_n - q_{n-1}$ を考慮すると、FPUT 格子における絶対座標系でのソリトン近似解が次式のように得られる。

$$q_n \simeq \frac{1}{\sqrt{6\beta}} \tan^{-1} \left(\sinh \sqrt{6\beta A} (n - ct - x_0) \right) - \frac{\pi}{2\sqrt{6\beta}} \quad (9)$$

ここで、 $n \rightarrow +\infty$ で変位が 0 となるように右辺第 2 項の定数を選び、さらに時刻 $t = 0$ におけるソリトンの中心の位置を示す x_0 を加えた。この (9) 式を、本研究の数値実験で用いる FPUT 格子のソリトン初期解とする。

4 熱伝導とソリトンの関係

熱伝導状態の FPUT 格子におけるソリトンの有無を調査する。長さ L の FPUT 格子を準備し、その全粒子に温度 T の Langevin 熱浴をつける。それを時間発展させ熱平衡状態を生成する。その温度 T の FPUT 格子の右側に温度 0 の十分長い FPUT 格子を準備する。ただし、この状態での図 6 の矢印の部分の結合は切り離している (図 6a)。次に、図の矢印の部分の結合を接続し時間発展させる (図 b,c 参照)。その後十分時間が経った後、熱場から波が伝播し、その先頭に釣り鐘型の孤立波が出現・分離していくことが観測できる (図 6d,e)。これらの孤立波は、ソリトンと考えられる。以下の図 6 は、各パラメータ値を $\beta = 10.0$, $T = 0.02$, $L = 1000$ に設定して上記手順にしたがって数値計算を実行し、各時間ごとに、縦軸を相対座標、横軸を粒子番号として図示したものである。図 1 の f は、e のグラフでの先頭 400 粒子を拡大した図である。

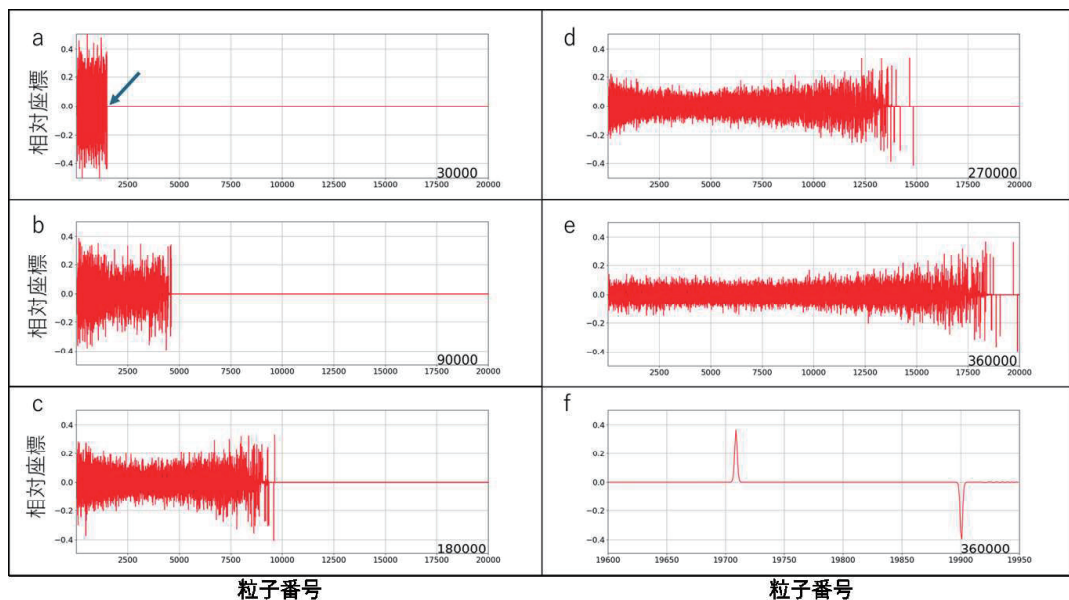


図 1: 熱的振動状態からソリトンが生成・分離していく様子. 縦軸は相対座標, 横軸は粒子番号, 各グラフの右下の数字は計算 step 数を表わす. f は e のグラフでの先頭部分を拡大したものである.

5 ソリトン減衰

5.1 数値実験の設定

4 節では, 熱的に励起された FPUT 格子にソリトンが存在することを確認した. 本節では, ソリトンが格子の熱的振動部分 (熱場と呼ぶ) を伝播するときの特性について数値的に調査を行う. 数値実験の手順は以下の通りである. 図 2 は手順を図説したものである.

1. 十分長い粒子数 N の温度 0 の 1 次元 FPUT 格子を用意する.
2. 温度 T の Langevin 熱浴を付けた長さ L の区間 (熱場) を設定し, 熱平衡状態を生成する. その後 Langevin 熱浴をオフにする. このとき, 熱場中のエネルギーが外部に伝播しないよう熱場の両端の結合を切り離しておく.
3. (9) 式を用いて, 熱場の左側部分に振幅 $\sqrt{A}$ のソリトンを生成する.
4. 生成したソリトンを伝播させ熱場に到達する直前に, 熱場の左端の結合を接続する.
5. ソリトンが熱場を通り, 熱場の右端に到達する直前に熱場の右端の結合を接続する.
6. ソリトンが熱場を透過後, ソリトンと熱場から放出されるフォノンが分離するまで待つ. 分離後に, 透過ソリトンのエネルギーを計測する

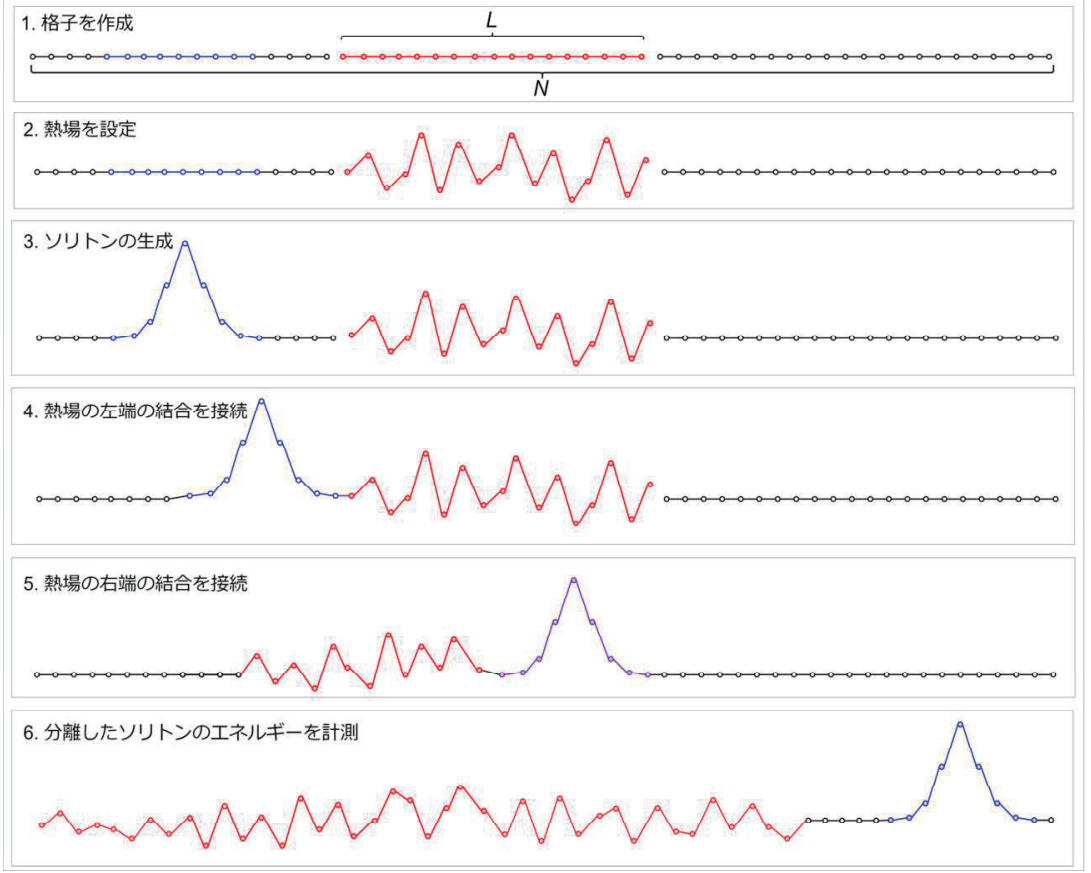


図 2: ソリトン減衰実験の手順の説明図

5.2 エネルギーの測定方法

手順 6 におけるソリトンのエネルギーの測定方法を述べる． n 番目と $n+1$ 番目の粒子の間を単位時間に流れるエネルギー J_n は，以下の (10) 式で与えられる．この定義式の導出は，文献 [28] に記述されている．

$$J_n = \dot{q}_{n+1} \times F(q_{n+1} - q_n), \quad F(x) = -x - \beta x^3 \quad (10)$$

粒子番号 n と $n+1$ を固定し，ソリトンがそれらの粒子間を通過した際の J_n の積分値をソリトンのエネルギー E とする． E は以下の式で与えられる．

$$E = \int_{t_s}^{t_e} J_n(t) dt$$

ここで， t_s はソリトンの先端が粒子 n に到達した時刻． t_e はソリトンの終端が粒子 n を通過した時刻である．

熱場を通過する直前のソリトンのエネルギー（入射エネルギー）を E_{in} 、熱場を通過した後に計測したソリトンのエネルギー（透過エネルギー）を E_{out} とする。ソリトンの透過率 r_T と減衰率 R_A を次式で定義する。

$$r_T = \frac{E_{out}}{E_{in}}, \quad R_A = 1 - r_T \quad (11)$$

定義により、減衰率 R_A は、 $R_A = \Delta E / E_{in}$ とも書ける。ただし、 $\Delta E = E_{in} - E_{out}$ である。

5.3 数値実験結果

5.4 数値実験 1

数値実験 1 では、ソリトンの入射エネルギー E_{in} に対する減衰率 R_A の依存性を調べる。熱場の長さ L を固定し、入射エネルギー E_{in} のみを変化させて E_{out} を測定する数値実験を行う。各パラメータの設定は表 1 の通りである。また、実験は熱場生成に用いる Langevin 熱浴の乱数を変えて 1000 回行った平均を E_{out} とした。

表 1: 実験 1 の設定

非線形項の強さ β	1.0
粒子数 N	ソリトンが分離する十分な大きさ
熱場の温度 T	0.02
熱場の長さ L	3000
E_{in}	13 通り

図 3 に、ソリトンの入射エネルギー E_{in} と減衰率 R_A の関係に関する数値実験結果を示す。この結果より、 R_A は E_{in} に依存して変化し、 E_{in} の減少に伴い減衰率 R_A も減少することが分かる。特に、概ね E_{in} が 2.8 ～ 12.0 の範囲の低エネルギー領域で、データ点が直線的依存性を示していることが見い出される。このことは、減衰率 R_A と入射エネルギー E_{in} の間に、以下の冪乗則が成り立つことを示している。

$$R_A \propto E_{in}^c \quad (12)$$

ここで、 c は定数である。また、データ点が直線となっている $E_{in} = 2.8 \sim 12.0$ の範囲の 8 点について、直線の傾き c を最小二乗法を用いて計算したところ、 $c \simeq 1.62$ が得られた。また、異なるパラメータ条件でも数値実験を行い、指数 c は、熱場の長さ L と熱場の温度 T に依存しない定数となることも確認した。

5.5 数値実験 2

数値実験 2 では、熱場の長さ L に対する透過率 r_T の依存性を調べる。入射エネルギー E_{in} を固定し、熱場の長さ L のみを変化させて E_{out} を測定する数値実験を行う。各パラメータの設定は表 2 の通りである。また、実験は熱場生成に用いる Langevin 熱浴の乱数を変えて 500 回行った平均を E_{out} とした。

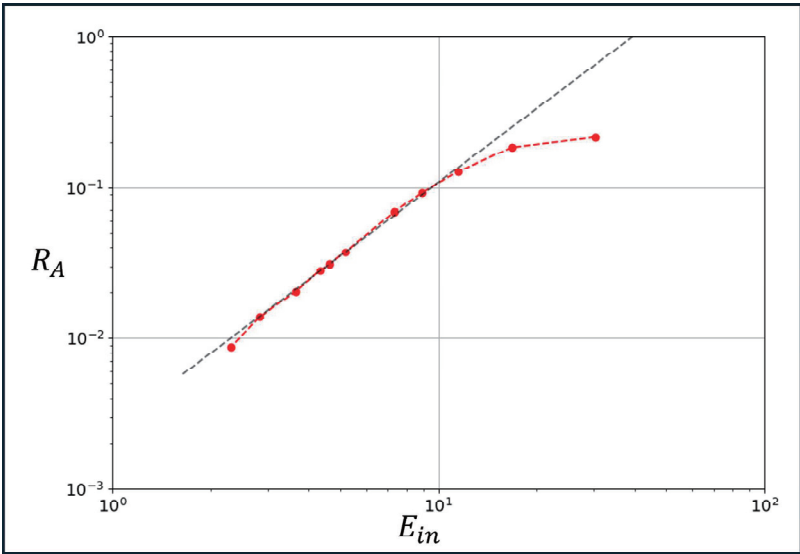


図 3: ソリトンの減衰率 R_A と入射エネルギー E_{in} の関係.

数値実験の結果, ソリトンが熱場を通る際の透過率 r_T は熱場の長さ L に依存し, L の増加にともない減少することがわかった. また, L が十分大きい領域では, 冪乗則 $r_T \propto L^{c'}$ (c' は定数) が成り立つことが確認できた.

表 2: 数値実験 2 の設定	
非線形項の強さ β	1.0
粒子数 N	ソリトンが分離する十分な大きさ
熱場の温度 T	0.02
熱場の長さ L	2000 ~ 80000 の 19 通り
E_{in}	11.531

6 熱場中のソリトン減衰伝播理論

熱場の長さを L とし, 熱場の始まる位置を $x = 0$ とする. 位置 $x = 0$ で $E(0)$ のエネルギーを持つソリトンに対して, 熱場のある位置 x でのエネルギーを $E(x)$ と表す. このとき, $E(0) = E_{in}$, $E(L) = E_{out}$ であることに注意すれば, 数値実験 1 で得られた冪乗則 (12) より

$$\frac{E(L)}{E(0)} = 1 - a' \cdot E^c(0)$$

(13)

と書くことができる．ここで、 a' と c は定数である．(13) の両辺に $E(0)/L$ をかけて整理すると

$$\frac{E(L) - E(0)}{L} = -\frac{a'}{L} \cdot E^{c+1}(0) \quad (14)$$

(14) 式の左辺の差分を微分で近似する．つまり

$$\frac{E(L) - E(0)}{L} \simeq \frac{dE}{dx} \quad (15)$$

とすると、(14) 式より以下の微分方程式が得られる．

$$\frac{dE}{dx} = -a \cdot E^{c+1}, \quad a = \frac{a'}{L} \quad (16)$$

(16) 式を解くと、次式の解が得られる．

$$E(x) = \frac{1}{(acx + b)^{1/c}} \quad (17)$$

ここで、 b は任意定数であり、初期条件 $E(0)$ と $b = (1/E(0))^c$ の関係がある．この (17) 式は、熱場を距離 x だけ伝播したソリトンのエネルギーを表わす式となっている．また、 x が十分大きい場合には、(17) 式の解は次式で近似される．

$$E(x) \propto x^{-1/c} \quad (18)$$

数値実験 2 の結果との比較による理論式 (17) の検証を行った．(17) 式において、パラメータ a と c の値は数値実験 1 の結果より定めることができ、 $a \simeq 8.967 \times 10^{-7}$ と $c \simeq 1.62$ が得られた．パラメータ b については、表 2 の値 $E_{in} = 11.531$ を用いて $b = (1/E_{in})^c$ と定める．このようにパラメータ値を定めた (17) 式と、数値実験 2 の結果を比較したところ、概ね良い一致が確認できた．特に、 L が大きな領域において、数値実験データは冪乗則 (18) に良く一致していることが確認できた．上述の一致は、6 節の理論の妥当性を示すものと思われる．

7 ソリトン減衰伝播に基づく異常熱伝導指数 α の説明

7.1 ソリトン減衰と異常熱伝導の理論

4 節では熱伝導状態の FPUT 格子にはソリトンが存在することを観測した．4 節の結果より、両端に温度差のある熱浴をつけて実験を行う熱伝導シミュレーションにおいては高温側・低温側の両方の熱浴からそれぞれソリトンが生成され、反対側の熱浴に向かってソリトンが減衰しながら伝播していると考えることができる．ここでは、異常熱伝導においてソリトンによるエネルギー輸送が主要部分であると仮定して理論を構築する．

熱浴で生成されるソリトンの平均的なエネルギーは、熱浴の温度 T に依存すると考えられる．温度 T の熱浴から生成されるソリトン 1 つのエネルギーを $E_0(T)$ と書く．高温側で生成されるソリトン 1 つのエネルギーは、 $T = T_H$ より $E_0(T_H)$ と表わされる．高温側の熱浴で生成されたソリトン 1 つが距離 x を進んだときのエネルギーを $E_H(x)$ で表わす．定義より、 $E_H(0) = E_0(T_H)$ である．このとき (17) 式より次式が従う．

$$E_H(x) = \frac{1}{(acx + b)^{1/c}} \quad (19)$$

ただし, (19) 式において, a は熱場の平均温度 $T_{ave} = (T_H + T_L)/2$ に依存すると考えられる定数なので $a = a(T_{ave})$ ((16) 式参照). なお, 以下の記述では T_{ave} は省略する. b は, 高温熱浴で生成された時点でのソリトンのエネルギーによって決定される定数と考えられるので, $b = (E_H(0))^{-c} = (E_0(T_H))^{-c}$. これは熱浴の温度 T_H に依存する関数なので, $b = b(T_H)$ と書ける. (19) 式においてパラメータ温度依存性を考慮すると, 平均温度 T , 粒子数 N の FPUT 格子における温度 T_H の熱浴から生成された 1 つのソリトンが反対側の熱浴に到達した時点でのエネルギーは次式で表わされる.

$$E_H(N) = \frac{1}{(acN + b(T_H))^{1/c}} \quad (20)$$

ここまで考えてきたのは, 熱浴から生成された一つのソリトンが反対側の熱浴に到達した際のエネルギーについてであった. しかしながら, 熱浴から生成されるソリトンはたった一つだけでは無く, 定常熱伝導状態にある間は一定のレートで常に生成され続けられると考えられる. 単位時間あたりに高温側の熱浴から生成されるソリトンの平均の数を $\sigma(T_H)$ とすると, 高温側から低温側へソリトンにより輸送されるエネルギー J_H は次式で表わされる.

$$J_H = \sigma(T_H) \times E_H(N) \quad (21)$$

ここで, $N \gg 1$ とすると (20) 式より, J_H は次式のように近似される.

$$J_H \simeq \sigma(T_H) \times (acN)^{-1/c} \quad (22)$$

同様に低温側から高温側へ輸送されるエネルギー J_L は次式で表わされる.

$$J_L \simeq \sigma(T_L) \times (acN)^{-1/c} \quad (23)$$

(22) 式と (23) 式より, 粒子数 N の FPUT 格子中を高温側から低温側へ流れる正味のエネルギー J は次式で表わされる.

$$\begin{aligned} J &= J_H - J_L \\ &= \{\sigma(T_H) - \sigma(T_L)\} (acN)^{-1/c} \end{aligned}$$

よって, 次式が得られる.

$$J \propto N^{-1/c} \quad (24)$$

(24) 式は, ソリトン減衰伝播理論によって導き出された熱流束と格子サイズの冪乗則である.

7.2 実験結果による理論の検証

熱伝導率とは, 熱流束 J を単位長さあたりの温度差で割った値である. したがって, 格子モデルの熱伝導率 κ は熱流束 J を用いて次式で定義される.

$$\kappa = \frac{J}{(T_H - T_L)/N} \quad (25)$$

(25) 式は、熱伝導率 κ が次式のような熱流束 J と格子サイズ N の積に比例することを示している.

$$\kappa \propto J \times N \quad (26)$$

(24) 式と (26) 式より、熱伝導率 κ に対するソリトン減衰伝播理論による表式として次式を得る.

$$\kappa \propto N^{1-1/c} \quad (27)$$

(27) 式に数値実験によって得た値 $c \simeq 1.62$ を代入すると次式が得られる.

$$\kappa \propto N^{0.383} \quad (28)$$

(28) 式は、ソリトン減衰伝播理論とソリトン減衰の数値実験で求めた c 値に基づいて導出された熱伝導率と格子サイズの冪乗則である. 理論から求めた指数 $\alpha = 0.383$ は、近年の熱伝導の大規模非平衡 MD によって得られた値 $\alpha \simeq 0.4$ [17, 18, 19] とほぼ一致する. この良い一致は、FPUT 格子における異常熱伝導の原因がソリトンの減衰伝播によるものであるという仮説を支持している.

8 結論

ソリトン減衰に関する数値実験によって、FPUT- β 格子における熱場を伝播するソリトンの減衰特性を明らかにした. 特に、減衰率 R_A について冪乗則 $R_A \propto E_{in}^c$ を発見した. さらに、ソリトン減衰伝播理論を構築し、それによって FPUT- β 格子の熱伝導率指数の数値的結果である $\alpha \simeq 0.4$ を説明可能であることを示した. これは、FPUT- β 格子の異常熱伝導の原因がソリトンによるものであるという仮説の正しさを支持する結果である.

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.

参考文献

- [1] C. W. Chang, D. Okawa, H. Garcia, A. Majumdar, and A. Zettl, Phys. Rev. Lett. **101**, 075903 (2008).
- [2] V. Lee, C. H. Wu, Z. X. Lou, W. L. Lee, and C. W. Chang, Phys. Rev. Lett. **118**, 135908 (2017).
- [3] G. Casati, J. Ford and F. Vivaldi, Phys. Rev. Lett. **52**, 1861 (1984).
- [4] D. J. R. Mimmagh and L. E. Ballentine, Phys. Rev. E **56**, 5332 (1997).
- [5] T. Prosen and M. Robnik, J. Phys. A **25**, 3449 (1992).
- [6] B. Hu, B. Li and H. Zhao, Phys. Rev. E **57**, 2992 (1998).

- [7] B. Hu, B. Li, H. Zhao, Phys. Rev. E **61**, 3828 (2000).
- [8] K. Aoki and D. Kusnezov, Phys. Lett. A **265**, 250 (2000).
- [9] M. Toda, Physica Scripta **20**, 424 (1979).
- [10] K. Yoshimura, G. Kato, and Y. Doi, Physica D **446**, 133638 (2023).
- [11] K. Yoshimura, Y. Doi, and T. Kitamura, Phys. Rev. E **105**, 024140 (2022).
- [12] S. Lepri, R. Livi, and A. Politi, Phys. Rev. Lett. **78**, 1896 (1997).
- [13] S. Lepri, R. Livi, and A. Politi, Europhys. Lett. **43**, 271 (1998).
- [14] T. Mai, A. Dhar, O. Narayan, Phys. Rev. Lett. **98**, 184301 (2007).
- [15] L. Delfini, S. Lepri, R. Livi, and A. Politi, Phys. Rev. Lett. **100**, 199401 (2008).
- [16] A. Dhar and O. Narayan, Phys. Rev. Lett. **100**, 199402 (2008).
- [17] L. Wang and T. Wang, Europhys. Lett. **93**, 54002 (2011)
- [18] G. Dematteis, L. Rondoni, D. Proment, F. De Vita, and M. Onorato, Phys. Rev. Lett. **125**, 024101 (2020).
- [19] M. Takatsu, T. Kitamura, and K. Yoshimura (submitted).
- [20] S. Lepri, European Physical Journal B **18**, 441 (2000).
- [21] T. Hatano, Phys. Rev. E **59**, R1 (1999).
- [22] A. Pereverzev, Phys. Rev. E **68**, 056124 (2003).
- [23] H. Spohn, J. Stat. Phys. **154**, 1191 (2014).
- [24] N. Li, B. Li, and S. Flach, Phys. Rev. Lett. **105**, 054102 (2010).
- [25] N. Li and B. Li, AIP Advances **2**, 041408 (2012).
- [26] H. Zhao, Phys. Rev. Lett. **96**, 140602 (2006).
- [27] 渡辺慎介. ソリトン物理入門. 培風館. (1985).
- [28] S. Lepri, R. Livi, and A. Politi, Phys. Rep. **377** 1 (2003).