

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

我々は注目する量子系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を観察していく。特に Fourier law がどのような力学系において現れるかを考察する。Fourier law は現実の物質においては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いない。そのため様々なモデルに対して Fourier law が現れるか否かをチェックし、帰納法的にその成立条件を解明する試みがなされてきている。Fourier law の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。そのほかはすべて数値的な実験によって、Ding-a-ling モデル、Ding-Dong モデル、Cellular Automata (CA) のモデルにおいて Fourier law が成立していることが確認されている。

しかしながら熱伝導の研究における力学的対象は専ら古典系に限られてきた。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熱伝導の実質的な研究が行われてこなかった理由は、数値的に熱浴をつけるということが非常に難しかったからである。熱浴の効果を入れたマスター方程式は古くから知られている。しかしそれを多体系に適用し数値的に解くことは、コンピューターのメモリー的にも計算能力的にも困難が付きまとう。今回の研究ではこのような状況の中でまず数値的に熱浴をいかに付けるかを考える。そして熱浴が十分にうまくついた事を確認したうえで、熱伝導の実験に取り組んでいく。

この研究会報告書は以下のように構成される。まず Section 2 では熱伝導の研究でこれまで古典系に対して得られてきた結果を、完全調和格子と FPU 格子を例にあげて概観する。Section 3 では我々が使う力学モデルを導入し、Section 4 では熱浴を数値的に接続する方法を説明する。Section 5 では熱伝導の実験をし、最後に Section 6 で今回のまとめをする。

2 古典系に対する熱伝導の概要 (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

研究会報告

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 [2, 3]。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。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 格子にたいしてはそれに成功していない。Green-Kubo 公式の直接的な証明は CA に対しなされているのみである [4]。

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。

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

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

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

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 番目のスピン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 Jordan-Wigner 変換によって Free-fermion の形式で新たに書き表すことができる [7]。

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

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 $N = 9$ に対して示すとそれぞれ Fig.3.1, Fig.3.2 のようになる。

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 [6]。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 を定義する必要がある。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。

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

このとき i 番目の Subsystem $H_{ss}(i)$ を

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

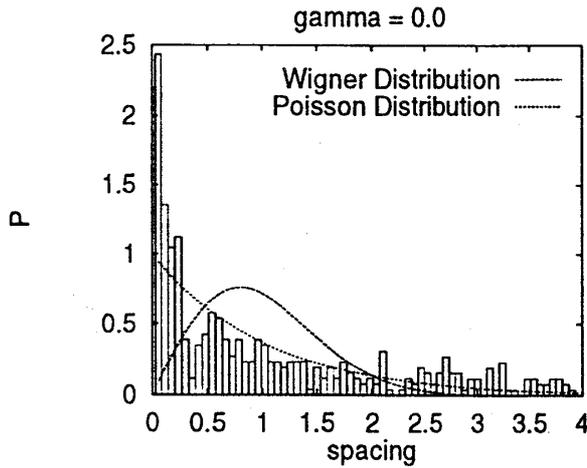


Fig3.1

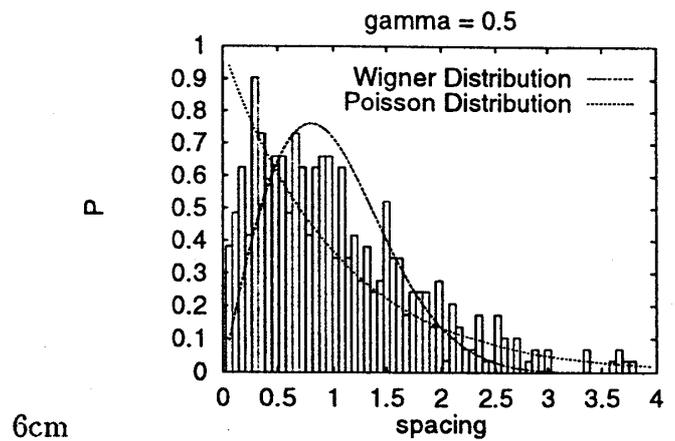


Fig.3.2

と定義する。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、これらはエネルギーに対する連続の式

$$\frac{\partial H_{ss}(i, t)}{\partial t} = -\hat{j}_L(i) + \hat{j}_R(i), \quad (6)$$

から

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

$$\hat{j}_R(i) = -i[\hat{a}(2i+2), \hat{a}(2i+1)] \quad (8)$$

と表される。

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 ($\lambda \ll 1$) の下では、これは以下のように 2 次までで表現することができる [8]

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

研究会報告

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

この式は厳密であるが熱浴の情報を含んだ2点間数, $h_1(u), h_N(u)$ の振る舞いが分からない限りこの方程式は解かれない。さらに方程式中の記憶項 f_k ($k = 1, N$) の存在のために一般には数値計算は困難である。そこで、我々はこの2点関数 $h_k(u)$ にたいして次のような関数を導入する。

$$h_k(u) \simeq h_k(0) \cdot \exp\left(-\frac{|u|}{\tau_k} + i\omega_k u\right) \quad k = 1, N \quad (10)$$

この関数は, $h_k(u)$ が平衡状態の関数であるために必要な条件 (KMS 条件), $h_k(-u) = h_k(u + i\beta)$ を厳密には満たさない。その意味で近似関数である。しかしながら、大きな Time scale では KMS 条件を満たしているために、系を平衡状態に導くことができる (詳しくは [9])。この近似関数を導入する大きな利点は、方程式 (9) が厳密にシミュレーション可能になることである [9]。 τ_k と ω_k の組と逆温度 β_k との間には近似的に次のような関係がある。

$$\beta_k = \frac{4\omega_k}{\left(\frac{1}{\tau_k}\right)^2 + \omega_k^2} \quad k = 1, N \quad (11)$$

この近似によって熱浴をつけ、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。シミュレーションは5個からなるスピン系(非可積分系)に対し左側にのみ1個の熱浴をつけて行なった。熱浴の変数としては τ_1, ω_1 をそれぞれ 1.0, $\pi/0.7$ にとった。このパラメータは温度約 1.2 に相当する。

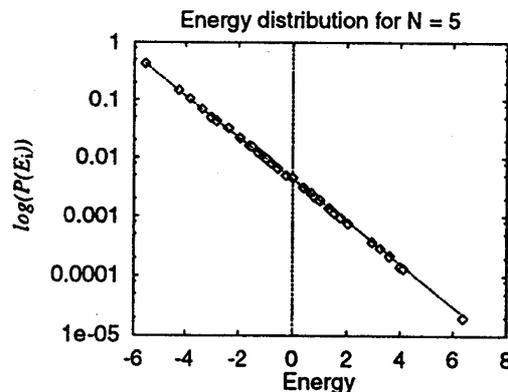


Fig.4.1

さらに両側に熱浴を付けた時も同じ図になることを我々は確かめた。定常状態がガノニカル分布であることからこの近似によって熱浴が表現できたとみなすことができる。

次に関係式 (11) がほぼ正しい表式であることは、ある ω と τ に対し熱浴の温度を、シミュレーションによって得られる最終状態のエネルギーから逆算して求める方法と理論式 (11) から求める方法とで2つ求め、それらの値を比較することから確かめる事ができる。4個から成るスピン系の左側に熱浴を付けこの実験を試みよう。結果は Fig.4.2 のようになる。横軸は τ 、縦軸は逆温度 β である。各々の曲線は一定の ω に対して τ を変えていった時の理論式 (11) から求めた逆温度の曲線であり、点はシミュレーションによって得られるエネルギーから逆算して求めた逆温度である。これから分かるように近似的に關係式 (11) は正しい。この關係式が妥当な τ と ω の領域など、詳しい内容は現在準備中である [9]。

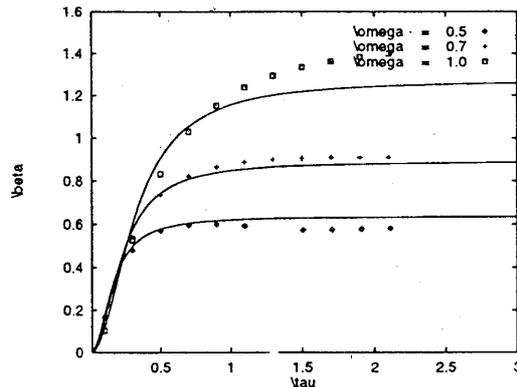


Fig.4.2

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。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ってお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。2つの力学系で熱流はそれぞれ 0.0015, 0.0011 あった。

研究会報告

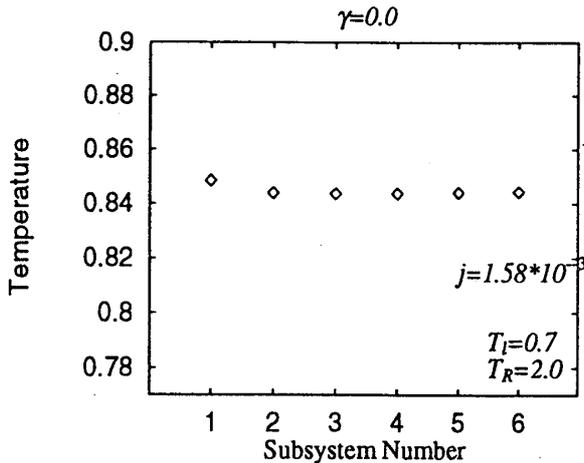


Fig5.1

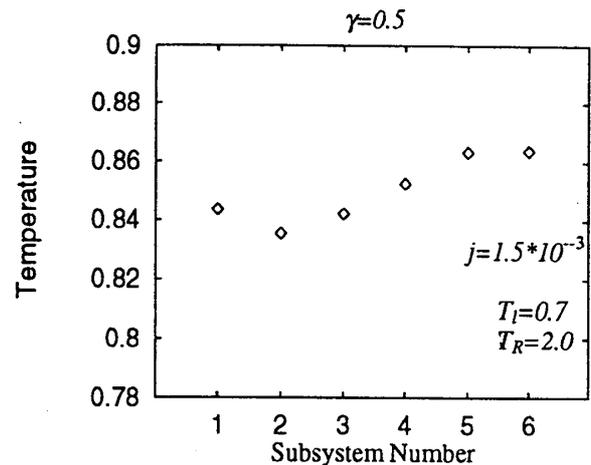


Fig.5.2

6 まとめと議論

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。つまり非可積分系で温度勾配は、Fourier law が成り立っているための必要条件である有限な線形勾配が得られ、可積分系では flat になってしまった。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 Fourier law は N 無限大に成立する法則であるため、それが成立していることを言うには熱伝導度の N 依存性を調べていき、収束していく事を示さなければならないからである。

前節の図を見ると、古典系の様々な数値実験と同様両端に温度のとびが観測された。Fourier の法則が満たされる CA のモデルでは、この温度のとびはサイズが大きくなるとサイズの逆数に比例して減少する傾向を持つ [5]。量子系においてもとびの N 依存性は興味のあるところであり、それゆえ系のサイズ N を大きくしていく計算法（熱浴の接続法）の開発がこれからの大きな課題になる。

また、この研究で得られた系の温度領域が全体的に低温側にずれている理由の解明も今後の課題である。この結果は一部には、我々が用いた熱浴が、KMS 条件を満たした正しい熱浴ではないということに起因することかもしれない。古典系の完全調和格子においては内部温度は両端で接続された熱浴の温度のちょうど中間になる。したがってこの点は、古典的な連成振動子系の結果と違うところである。しかしながら、CA に対しては内部温度が熱浴の温度の中間にならない例も発見されている。したがって、熱浴の表現のまずさ以外にも原因が存在する可能性は十分にある。この点に関しては、我々が行った量子スピン系に相当する古典系に対して同じような熱伝導の実験をして、その時内部温度が低温側にずれるかどうかを調べるところから始めるべきであろう。

Section 3 で説明したように我々が導入した2つの力学系のエネルギースペクトラムは特徴的な違いがあった。つまり、可積分系におけるスペクトラムは Poisson 分布に近く、非可積分系におけるそれは Wigner 分布に近かった。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] H. Kaburaki and M. Machida, Phys. Lett. A181 85 (1993)
- [2] Z.Rieder, J. L. Lebowitz, and E. Lieb, J. Math. Phys. 8 1073 (1967)
- [3] K. Ishii and H. Matsuda, Progr. Theor. Phys. Suppl. 45 56 (1970)
- [4] S. Takesue, Phys. Rev. Lett. 64 252 (1990)
- [5] S. Takesue, in preparation
- [6] M. L. Mehta, Random matrices and the statistical theory of energy level, Academic Press (1967)
- [7] T. D. Schultz, D. C. Mattis, and E. H. Lieb, Rev. Mod. Phys. 36 856 (1964)
- [8] R.Kubo, M. Toda, and N. Hashitsume, Statistical Physics II, Spriger - Verlag, Berlin (1985)
- [9] K. Saito, S. Miyashita, and S. Takesue, in preparation