振動と同期学の研究会
JSSR (Japanese Society for oscillations and Synchrology Research)
全国大会Society Meeting

非線形格子における波動伝播と熱伝導

吉村 和之 [1]

[1] 鳥取大学学術研究院工学系部門　〒 680–8552 鳥取県鳥取市湖山町南 4–101

あらまし　熱振動状態にある 1 次元 FPUT-β 格子におけるソリトンの伝播特性と，その特性に基づき構築した異常熱伝導の理論について述べる．さらに，固体における熱抵抗起源に関する Peierls の仮説に対して数値的な検証を行った結果を述べる．
キーワード 非線形格子，熱伝導，ソリトン，Peierls 仮説

Wave propagation and thermal conduction in nonlinear lattice

Kazuyuki YOSHIMURA[1]

[1] Faculty of Engineering, Tottori University, 4-101 Koyama-Minami, Tottori 680-8552, Japan

Abstract We describe the propagation properties of soliton in the one-dimensional FPUT-β lattice with thermal vibrations and a theory of the anomalous heat conduction constructed based on the properties. Furthermore, we present the results of numerical verification of Peierls' hypothesis regarding the origin of thermal resistance in solids.
Key words Nonlinear lattice, thermal conduction, soliton, Peierls's hypothesis

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．J と ∇T はそれぞれ熱流束と温度勾配であり，κ は対象物のサイズに依存しない物質定数で熱伝導率と呼ばれる．一方，微視的スケールでの熱伝導法則や熱伝導機構は，未だ十分に解明されていない．固体結晶を構成する原子の波動ダイナミクスに基づき，それらを理解することは，物理学における重要な課題である．

微視的スケールの物質ではフーリエ則は必ずしも成立せず，対象物のサイズと共に κ が増大する異常熱伝導が起き得るが，その発生機構は未解明である．また，全ての物質には，熱エネルギーの移動を妨げる性質である熱抵抗が存在する．熱抵抗の起源について，原子ダイナミクスに基づく微視的視点からの理解も十分ではない．本稿では，固体結晶を単純化した 1 次元非線形格子モデルにおける異常熱伝導と熱抵抗起源に関する研究結果を紹介する．

2.　ソリトン伝播と異常熱伝導

次式のハミルトニアンで記述される 1 次元 Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou β (FPUT-β) 格子を考える．

$$H = \sum_n \frac{p_n^2}{2} + \sum_n \left[\frac{1}{2}(q_{n+1} - q_n)^2 + \frac{1}{4}(q_{n+1} - q_n)^4\right]$$

ここで，q_n, p_n は n 番目粒子の変位と運動量である．

FPUT-β 格子の両端に異なる温度 T_H, T_L ($T_H > T_L$) の熱浴を付けて，熱伝導の数値計算を行うことが出来る．熱伝導率 κ は，次式で定義される．

$$\kappa = \frac{J}{(T_H - T_L)/N} \tag{1}$$

ここで，N は格子の粒子数であり，J は単位時間に伝わるエネルギー量で熱流束と呼ばれる．$N \gg 1$ のとき，冪乗則 $\kappa \propto N^\alpha$, $0 < \alpha < 1$ に従い，熱伝導率 κ が発散する現象が数値的に観測されている [1–3]．この現象は，異常熱伝導と呼ばれる．指数 α については，我々の大規模非平衡 MD 計算により $\alpha \simeq 0.3987$ が得られている [4]．

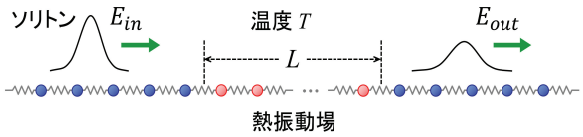

図 1: ソリトン伝播特性の数値実験の説明図.

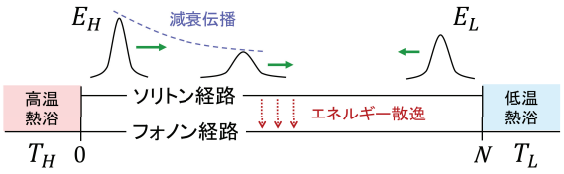

図 2: 減衰ソリトンとフォノンによる熱伝導の説明図.

異常熱伝導は，FPUT-β 以外の格子モデルでも数値的に観測されており，格子モデルの詳細には依らない普遍的現象である．さらに，長さが数 μm 程度のカーボンナノチューブと窒化ホウ素ナノチューブの実験でも観測されている [5]．上述の格子モデルと実験による事実は，1 次元的形状の微小な固体物質において，異常熱伝導が普遍的に起こることを示唆している．しかしながら，その発生機構に関しては，いくつかの理論が提唱されているが未だ確定的な結論には至っていない．本講演では，熱エネルギー搬送波としてソリトンの可能性に着目し，異常熱伝導メカニズムの説明を試みた研究 [6,7] を紹介する．

熱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変化を数値的に調べた（図 1 参照）．区間の長さを L，温度を T で表す．E_{in} と E_{out} を，それぞれ，熱振動場の入射前および透過後のソリトンのエネルギーとする．数値実験では，T, L, E_{in} を固定した上で，Langevin 熱浴によりランダムに生成した熱振動場の異なる実現状態に対して，試行を多数回繰り返した．個々の試行では，熱振動場の透過によるソリトンのエネルギー変化は，増加と減少のいずれの場合も起こる．ただし，平均としては，ソリトンのエネルギーは減少する．エネルギー減衰率 R を，次式で定義しておく．

$$R = \frac{E_{in} - \bar{E}_{out}}{E_{in}} \tag{2}$$

ここで，$\bar{E}_{out}$ は，熱振動場の異なる実現状態に関する E_{out} の平均値を表す．我々は，エネルギー減衰率 R について，以下の冪乗則を見出した．

$$R \propto E_{in}^{c}, \quad c \simeq 1.65 \tag{3}$$

この冪乗則は，熱振動状態の格子において，ソリトンは減衰しながら伝播する事を示している．熱エネルギーが減衰伝播ソリトンとフォノンによる 2 つの経路で格子を伝わると仮定し，異常熱伝導メカニズムを説明するための理論を構築した（図 2 参照）．フォノン経路はフーリエ則に従うと仮定しておく．当該理論からは，以下の冪乗則が得られる．

$$\kappa \propto N^{1-1/c}. \tag{4}$$

上式は，当該理論に基づけば，異常熱伝導の特徴である冪乗則 $\kappa \propto N^{\alpha}$ を導出可能である事を示している．さらに，指数は $\alpha = 1 - 1/c$ で与えられ，数値実験による値 $c \simeq 1.65$ を用いると $\alpha \simeq 0.394$ が得られる．この値は，非平衡熱伝導 MD 計算 [4] による値 $\alpha \simeq 0.3987$ と非常に良く一致している．この一致は，本研究で提唱する減衰ソリトンによる熱エネルギー輸送が，異常熱伝導のメカニズムである可能性を強く示唆している．

3. 熱抵抗に関する Peierls 仮説と数値的検証

あらゆる物質には，熱の移動を妨げる性質である熱抵抗が備わっている．固体結晶を単純化した非線形格子モデルにおいては，フォノン間に相互作用が生じる．このフォノン相互作用が，熱抵抗の発生に関わると考えられている．Peierls は，フォノン相互作用を normal 過程，および，umklapp 過程と呼ばれる 2 種類の型に分類した．さらに，「格子系に umklapp 過程が無く normal 過程のみが存在する場合には熱抵抗が消失する」，換言すれば「熱抵抗の原因となり得るのは umklapp 過程のみ」という仮説が，Peierls によって提唱され広く受け入れられている [8]．しかしながら，この仮説を正当化する厳密な理論は無い．また，非線形格子の MD 計算による数値的検証さえも，つい最近までなされていなかった．数値的検証がなされなかった理由としては，適切な非線形格子モデルが無かったことが挙げられる．

我々は，umklapp 過程が無く normal 過程のみを持つ特殊な 1 次元非線形格子モデル（Umklapp-free lattice, UFL）を構成した [9]．UFL は，長距離相互

作用を有する 1 次元非線形格子であり，次式のハミルトニアンで記述される．

$$H = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} p_n^2 + \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[\frac{\mu_0}{2} q_n^2 + \frac{\mu_1}{2} (q_{n+1} - q_n)^2 \right] + \beta \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{r=1}^{\infty} \frac{1}{4r^2} \{q_{n+r} - (-1)^r q_n\}^4 \quad (5)$$

ここで，q_n, $p_n \in \mathbb{R}$ は n 番目粒子の変位と運動量，μ_0, μ_1, β は非負のパラメータである．運動方程式は，$\dot{q}_n = \partial H/\partial p_n$, $\dot{p}_n = -\partial H/\partial q_n$ より得られる．

離散 Fourier 変換によりフォノンモード座標 $\{U(k)\}_{k\in\mathbb{T}}$ を導入する．

$$U(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} q_n e^{-ikn} \quad (6)$$

ただし，$\mathbb{T} = (-\pi, \pi]$ である．フォノンモード座標での運動方程式は，次式の形で得られる．

$$\ddot{U}(k) + \nu_k^2 U(k) = \frac{4\beta}{\pi} \int_{\mathbb{T}^3} dk_1 dk_2 dk_3 \phi_0(k_1, k_2, k_3, k) \times U(k_1) U(k_2) U(k_3) \delta(k_1 + k_2 + k_3 - k) \quad (7)$$

ここで，$\nu_k^2 = \mu_0 + 4\mu_1 \sin^2(k/2)$，$\phi_0$ は (k_1, k_2, k_3, k) に依存する係数，δ は Dirac のデルタ関数，$U(k)$ は時間 t の関数である．4 次ポテンシャルを持つ一般の非線形格子では，波数条件 $k_1 + k_2 + k_3 - k = 0$（normal 過程），および，$\pm 2\pi$（umklapp 過程）を満たすモード間相互作用が現れる．一方，(7) 式のデルタ関数部分は，格子系 (5) には normal 過程のみ現れることを示している．これが，UFL が有する特別な性質である．

UFL の両端に高温と低温の熱浴を付して非平衡 MD 計算による熱伝導シミュレーションを行った．粒子数を変化させて $N = 2^{20} = 1048567$ までの範囲で計算を行い，熱伝導率 κ を粒子数 N の関数として求めた．スケーリング則 $\kappa \propto N$ が確認された．関係式 $\kappa \propto N$ を満たすような熱伝導は，弾道的熱伝導と呼ばれ，熱抵抗が消失した状態に相当する．ここで構成した UFL は，umklapp 過程が無く normal 過程のみを持つような非線形格子モデルの一例に過ぎないが，少なくとも当該 UFL に関して Peierls 仮説の正当性が数値的に検証されたことになる．

謝辞　本研究の一部は，科研費基盤研究（C）（22K03451）の助成を受けました．

参考文献

[1] S. Lepri, R. Livi, and A. Politi: Heat Conduction in Chains of Nonlinear Oscillators, *Phys. Rev. Lett.*, **78**, (1997), pp. 1896–1899.

[2] L. Wang, and T. Wang: Power-law divergent heat conductivity in one-dimensional momentum-conserving nonlinear lattices, *Europhys. Lett.*, **93**, (2011), 54002.

[3] G. Dematteis *et al.*: Coexistence of Ballistic and Fourier Regimes in the β Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou Lattice, *Phys. Rev. Lett.*, **125**, (2020), 024101.

[4] M. Takatsu, T. Kitamura, and K. Yoshimura: A Large Scale Non-equilibrium Simulation of Heat Transport in One-dimensional Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou Lattice, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **93**, (2024), 053001.

[5] C. W. Chang, D. Okawa, H. Garcia, A. Majumdar, and A. Zettl: Breakdown of Fourier's Law in Nanotube Thermal Conductors, *Phys. Rev. Lett.*, **101**, (2008) 075903.

[6] 高津昌希, 吉村和之：FPUT 格子における異常熱伝導とソリトン減衰, 数理解析研究所講究録, **2286**, (2024), pp. 89–100.

[7] K. Yoshimura, M. Takatsu, and T. Kitamura: Thermal attenuation of soliton and anomalous heat transport in the FPUT-β lattice, *Proc. of the 2025 International Symposium on Nonlinear Theory and Its Applications*, (2025), pp. 687–690.

[8] R. E. Peierls: *Quantum Theory of Solids*, Oxford University Press, (1955).

[9] K. Yoshimura, Y. Doi, and T. Kitamura: Heat transport in nonlinear lattices free from the umklapp process, *Phys. Rev. E*, **105**, (2022), 024140.