

Morse potential を持つ格子系における非線形局在モードの生成

京大院・工 池田 公輔 (Kousuke Ikeda)
Graduate School of Engineering,
Kyoto University

1 緒言

非線形格子に特有の非線形局在モードである離散ブリーザー (discrete breather) やカオス的ブリーザー (chaotic breather) は, Fermi-Pasta-Ulam(FPU)- β 格子や離散クラインゴルドン格子など理想化された格子モデルに対しては, 様々な観点から詳細な研究が行われている [1].

しかし, より現実に近い格子モデルでの非線形局在モードの研究は, まだそれほど進展していない上, 非線形局在モードの存在条件も明確にはされていない. 非線形局在モードが現実の固体や格子系でどのような役割を果たすかを知るためには, より現実に近い格子系を取り上げ, 非線形局在モードの存在条件や性質を明らかにする必要がある.

本研究では Morse potential で記述される一次元および二次元非線形格子を取り上げ, 変調不安定性を数値シミュレーションによって調べた結果 (とくに非線形局在モードの生成) について報告する.

2 非線形局在モードとエネルギーの局在について

均一な質点が

$$\Phi(r) = \frac{1}{2}r^2 + \frac{\alpha}{3}r^3 + \frac{\beta}{4}r^4 \quad (2.1)$$

で表されるポテンシャルをもつバネによって繋がれているモデル (FPU モデル) を考える. FPU モデルの運動方程式は次の式で表される.

$$m\ddot{q}_n = \Phi'(q_{n+1} - q_n) - \Phi'(q_n - q_{n-1}) \quad (2.2)$$

このモデルにおいて $\alpha = 0$ の場合は, FPU- β と呼ばれるモデルであり非線形局在モード (離散ブリーザー) が存在する. そのため, 初期条件として波数最大の波 π モードと微小擾乱を与えると変調不安定が起こり, 複数の非線形局在モードが現れる. その非線形局在モードが衝突を繰り返すことにより, 一つの大きな非線形局在モードが現れ, エネルギーの局在が起こる. また, 局在が一つになった後は格子中を不規則に移動するカオス的ブリーザーと呼ばれる状態を経て減衰し, 格子一つ一つが不規則に振動する熱平衡状態に移ることが示されている [2-5].

$\alpha \neq 0$ の場合はポテンシャルの対称性が破れるため, α の値が小さいときは非線形局在モードが存在するが, α の値が大きくなると非線形局在モードが存在しなくなる [6].

今回用いる Morse potential は圧縮に強く, 引っ張りに弱い非対称性の強いポテンシャルであるため, 均一な質点が Morse potential によるバネで繋がれたモデルでは非線形局在モードは存在しないと考えられている [7]. そこで線形の on-site potential を加えたモデルを取り上げ, 非線形局在モードの振る舞いについて調べる.

3 基礎方程式

3.1 Morse potential

本報では格子間ポテンシャルを表す式として Morse potential(図 1) を用いる。隣接する格子間の距離を r とすると、Morse potential $\Phi(r)$ は次のようになる。

$$\Phi(r) = D[e^{-2\alpha(r-d)} - 2e^{-\alpha(r-d)}] \quad (3.1)$$

ここで d は格子間のポテンシャルより生ずる相互干渉が 0 になるような距離、 D はポテンシャルを表す関数の最小値、 α はポテンシャルパラメータである。これを原子間の関係を示すものとする、 d は平衡状態における原子間の距離、 D は解離エネルギーに相当する。Morse potential は図 1 からわかるように、格子間隔が狭くなる方向には非常に強い斥力が働き、広がる方向にはある値を越えると弱い引力となる形をしており、金属結合の状態などを表現するのに適している。

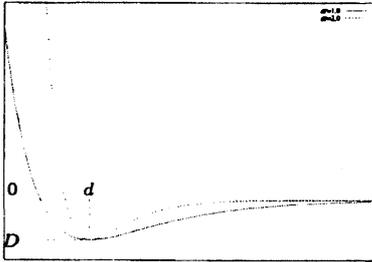


図 1: Morse potential

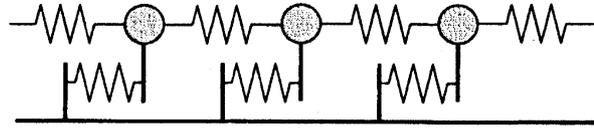


図 2: 一次元モデル

3.2 一次元モデル

図 2 に示すように格子間の相互作用として Morse potential による力、各格子点に外から線形の復元力が働く一次元格子モデルを考える。

格子点 n の位置を q_n 、運動量を p_n とすると、運動方程式は次のようになる。

$$m\ddot{q}_n = -f_n^{(r)} + f_{n-1}^{(r)} + f_n^{(q)} \quad (3.2)$$

ここで $f_n^{(r)}$ は n 番目と $n+1$ 番目の格子間に作用する力、 $f_n^{(q)}$ は n 番目の格子の変位に対して働く力で以下の式で与えられる。

$$f_n^{(r)} = 2D\alpha[e^{-2\alpha(r_n-d)} - e^{-\alpha(r_n-d)}] \quad (3.3)$$

$$f_n^{(q)} = -k(q_n - q_{n0}) \quad (3.4)$$

$$r_n = q_{n+1} - q_n \quad (3.5)$$

次に無次元化を行う。以下に示す無次元量を導入する。

$$\hat{q}_n = \frac{q_n}{d}, \quad \hat{r}_n = \frac{r_n}{d}, \quad \hat{f}_n^{(r)} = \frac{1}{2D\alpha} f_n^{(r)}, \quad \hat{f}_n^{(q)} = \frac{1}{2D\alpha} f_n^{(q)},$$

$$\hat{\alpha} = d\alpha, \quad \hat{k} = \frac{d}{2D\alpha} k, \quad \hat{t} = \sqrt{\frac{2D\alpha}{md}} t$$

結果、無次元化された一次元の運動方程式を以下に示す。

$$\ddot{\hat{q}}_n = -\hat{f}_n^{(r)} + \hat{f}_{n-1}^{(r)} + \hat{f}_n^{(q)} \quad (3.6)$$

ただし

$$\hat{f}_n^{(r)} = e^{-2\hat{\alpha}(\hat{r}_n-1)} - e^{-\hat{\alpha}(\hat{r}_n-1)} \quad (3.7)$$

$$\hat{f}_n^{(q)} = -\hat{k}(\hat{q}_n - \hat{q}_{n0}) \quad (3.8)$$

$$\hat{r}_n = \hat{q}_{n+1} - \hat{q}_n \quad (3.9)$$

である。今後用いる変数はすべて無次元量としは省略する。

3.3 二次元モデル

図3, 図4に示すような正三角形格子モデルと正方格子モデルの二種類のモデルを考える。

正三角形格子モデルは格子間の相互作用として第一近接格子間のみ Morse potential が働き、各格子点に外から線形の復元力が働くモデルである。一方、正方格子モデルは格子間の相互作用として第一近接格子間と第二近接格子間に Morse potential が働き、各格子点に外から線形の復元力が働くモデルである。

(m, n) 番目にある格子点 P の絶対変位を $\mathbf{q}(m, n)(= \mathbf{q})$ 、運動量を $\mathbf{p}(m, n)(= \mathbf{p})$ 、 j 番目の隣接する格子点の P に対する相対距離を $\mathbf{r}_j(m, n)(= \mathbf{r}_j)$ とすると、格子点 P の運動方程式は以下の式で与えられる。

$$\ddot{\mathbf{q}} = \sum_{j=1}^l \mathbf{f}_j^{(r)} + \mathbf{f}^{(q)} \quad (3.10)$$

ただし

$$\mathbf{f}_j^{(r)} = (e^{-2\alpha(r_j-1)} - e^{-\alpha(r_j-1)}) \frac{\mathbf{r}_j}{r_j} \quad (3.11)$$

$$\mathbf{f}^{(q)} = -k(\mathbf{q} - \mathbf{q}_0) \quad (3.12)$$

$$r_j = |\mathbf{r}_j| \quad (3.13)$$

である。ここで l は相互作用を考える格子点の個数であり、正三角形格子モデルでは $l = 6$ 、正方格子モデルでは $l = 8$ である。

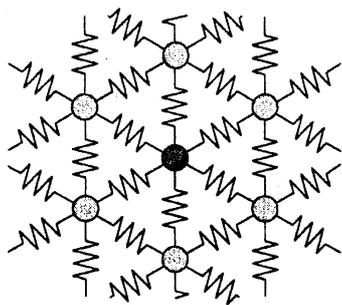


図3: 正三角形格子モデル

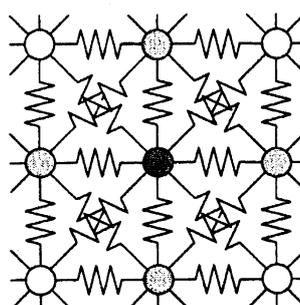


図4: 正方格子モデル

4 一次元格子モデルにおけるエネルギーの局在現象

4.1 数値計算

格子数 N 、数値積分には6次のシンプレクティック数値積分を用いた。

4.1.1 境界条件

以下に示す周期境界条件を用いた.

$$q_0 = q_N, \quad \dot{q}_0 = \dot{q}_N \quad (4.1)$$

4.1.2 初期条件

初期変位として π モード, 初期運動量として 10^{-14} のオーダーの擾乱を一様乱数を用いて与えた.

$$q_n = A_0(-1)^n \quad (4.2)$$

$$\dot{q}_n = O(10^{-14}) \quad (4.3)$$

4.2 エネルギーの定義

格子点のエネルギーを次の式で定義する.

$$E_n = \frac{1}{2}\dot{q}_n^2 + \frac{1}{2}(\Phi(r_n) + \Phi(r_{n-1})) + \Psi(q_n - q_{n0}) \quad (4.4)$$

ただし

$$\Phi(r) = \frac{1}{2\alpha}(e^{-2\alpha(r-1)} - e^{-\alpha(r-1)}) \quad (4.5)$$

$$\Psi(q) = \frac{1}{2}kq \quad (4.6)$$

である.

4.3 計算結果

格子数 $N = 128$, 初期振幅 $A_0 = 0.1$, パラメータ $\alpha = 1.0, k = 1.0$ で計算した結果を図 5-8 に示す. 図 5 には比較のため $\alpha = 1.0, k = 0.0$ の場合も示した. 図 5 は最大のエネルギーを持つ格子点のエネルギーが系全体のエネルギーに占める割合を示したものである. $k = 0.0$ のときはエネルギーの局在が起こらず π モードのまま振動しているが, $k = 1.0$ のときはエネルギーの局在が起きていて, ピーク時で全エネルギーの約 22% が一点に集中していることがわかる. また図 6-8 はそれぞれ $t = 1000, 20000, 90000$ のときの各格子点の振幅とエネルギーの様子を示したものである. 初期状態では π モードで振動しているが, 変調不安定の後, 複数の非線形局在モードが現れ (図 6), それらが衝突を繰り返し, 一つの大きな非線形局在モードに変わり (図 7), 最終的に局在が壊れ熱平衡状態に移っている (図 8) ことがわかる. 結果, この一次元モデルでは on-site potential を導入することによって非線形局在モードを生じ, カオスのブリーザーに発展する現象が存在することが確認できた.

5 二次元モデルにおけるエネルギーの局在現象

5.1 数値計算

格子数 $M \times N$, 数値積分には 6 次のシンプレクティック数値積分を用いた.

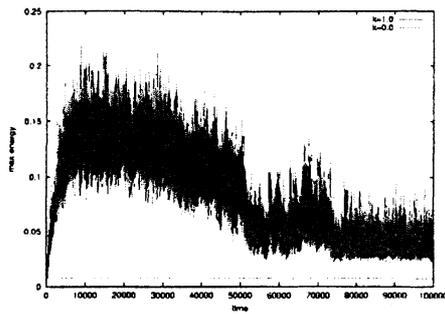
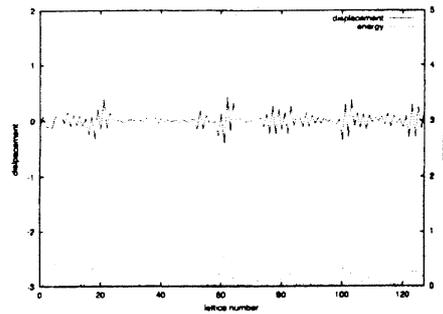
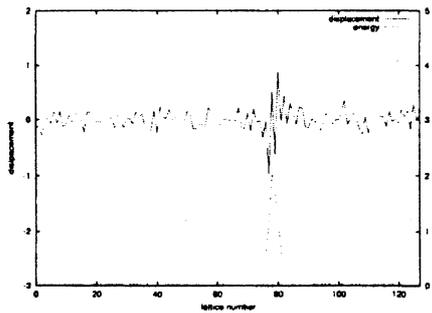
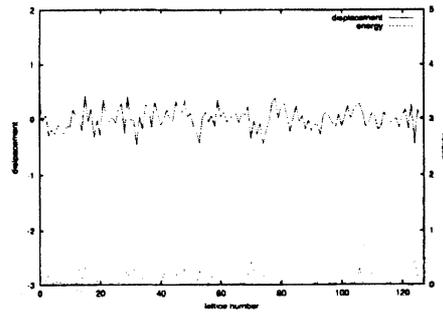


図 5: 最大エネルギーの時間履歴

図 6: $t = 1000$ における振幅とエネルギー分布図 7: $t = 20000$ における振幅とエネルギー分布図 8: $t = 90000$ における振幅とエネルギー分布

5.1.1 境界条件

以下に示す周期境界条件を用いた。

$$q_{0,n} = q_{M,n}, \quad q_{m,0} = q_{m,N}, \quad \dot{q}_{0,n} = \dot{q}_{M,n}, \quad \dot{q}_{m,0} = \dot{q}_{m,N} \quad (5.1)$$

5.1.2 初期条件

初期変位として波数最大の波を二次元的に加えるために図 9, 図 10 に示すような変位を振幅 A_0 で与えた。初期運動量として 10^{-14} のオーダーの擾乱を一様乱数を用いて与えた。

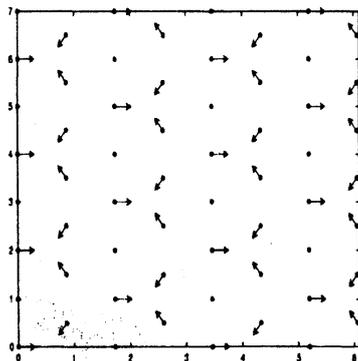


図 9: 正三角形格子

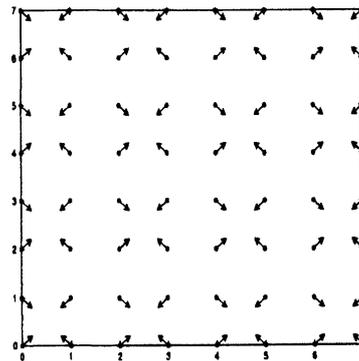


図 10: 正方格子

5.2 エネルギーの定義

格子点 (m, n) のエネルギーを次の式で定義する.

$$E = \frac{1}{2}|\dot{q}|^2 + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^l \Phi(|r_j|) + \Psi(|q - q_0|) \quad (5.2)$$

ただし

$$\Phi(r) = \frac{1}{2\alpha} (e^{-2\alpha(r-1)} - e^{-\alpha(r-1)}) \quad (5.3)$$

$$\Psi(q) = \frac{1}{2}kq \quad (5.4)$$

である.

5.3 計算結果

図1より Morse potential は振幅, もしくはパラメータ α を大きくすると非線形性が強くなることがわかる. 非線形性が小さいと初期条件のままの振動モードで振動し, 非線形性が大きくなると熱平衡状態に早く移ってしまうため初期振幅 A_0 は αA_0 を固定してパラメータを動かすこととした. 格子数 32×32 , 初期振幅 $\alpha A_0 = 0.05$, Morse potential パラメータ $\alpha = 0.5 \sim 4.0$, on-site potential パラメータ $k = 0.0 \sim 8.0$ で計算し, 局在が出るか出ないかを調べた結果を図11に示す. 正三角形格子モデル, 正方格子モデルともに同じ傾向が得られたことから図は一つとした. この図から相互作用ポテンシャルを強くするとそれに合わせて on-site potential も強くしなければエネルギーの局在は起きないということがわかる.

図11: 各パラメータにおける局在 (正三角形格子・正方格子)

	$k = 0.0$	$k = 0.5$	$k = 1.0$	$k = 2.0$	$k = 4.0$	$k = 8.0$
$\alpha = 0.5$	×	○	○	○	○	○
$\alpha = 1.0$	×	×	○	○	○	○
$\alpha = 2.0$	×	×	×	○	○	○

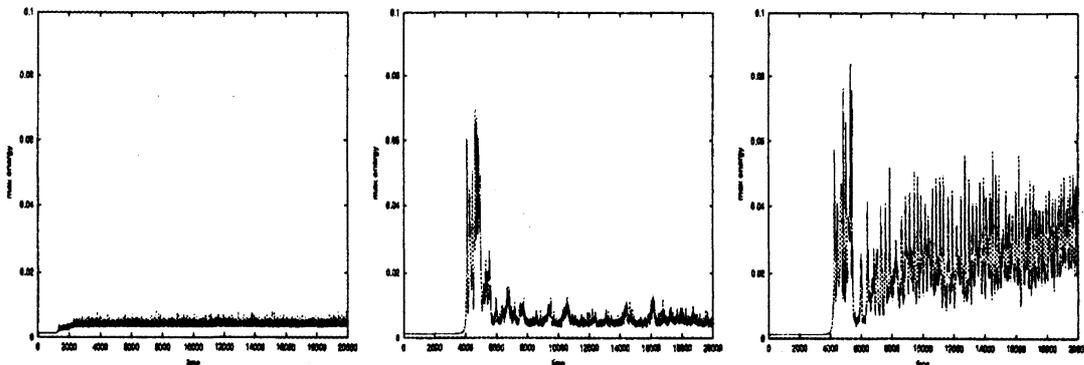


図12: 正三角形格子・最大エネルギーの時間履歴・ $\alpha = 1.0$ (左から $k = 0.5, 1.0, 2.0$)

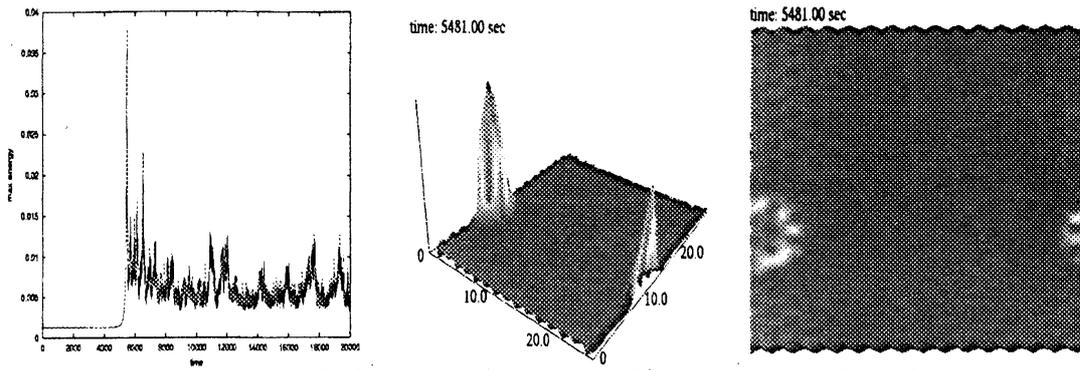


図 13: 正三角形格子・二次元的な局在現象の例・ $\alpha = 0.5, k = 1.0$

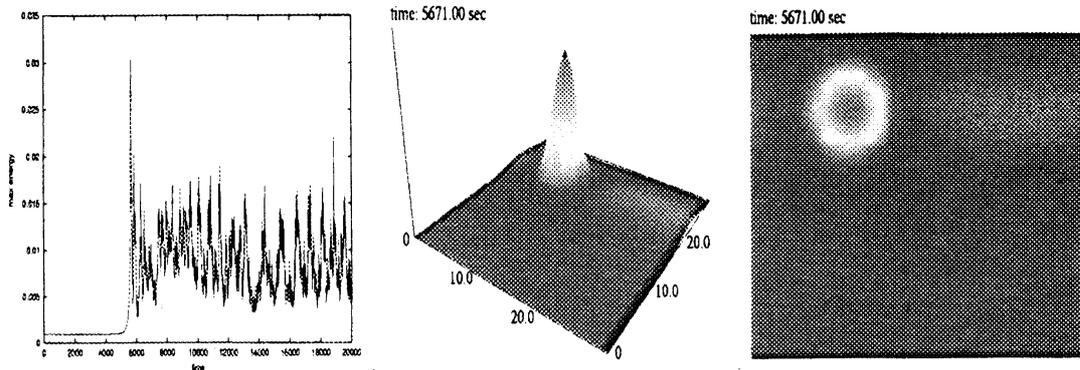


図 14: 正方格子・二次元的な局在現象の例・ $\alpha = 0.5, k = 1.0$

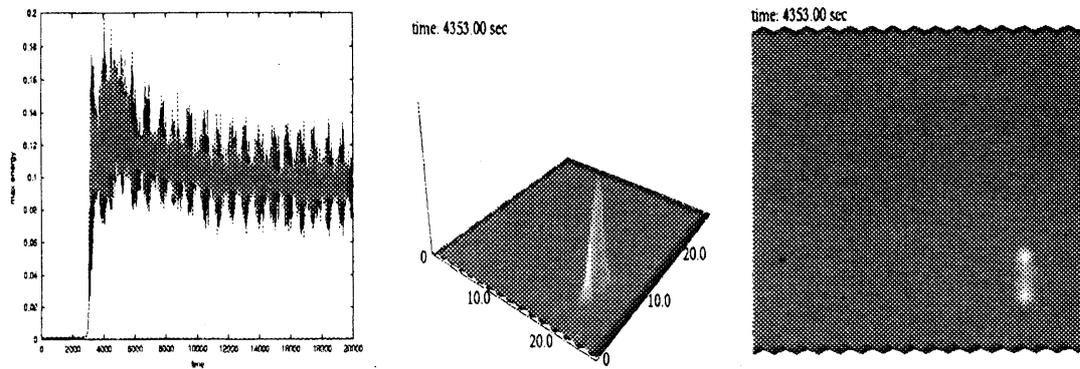


図 15: 正三角形格子・一次元的な局在現象の例・ $\alpha = 2.0, k = 4.0$

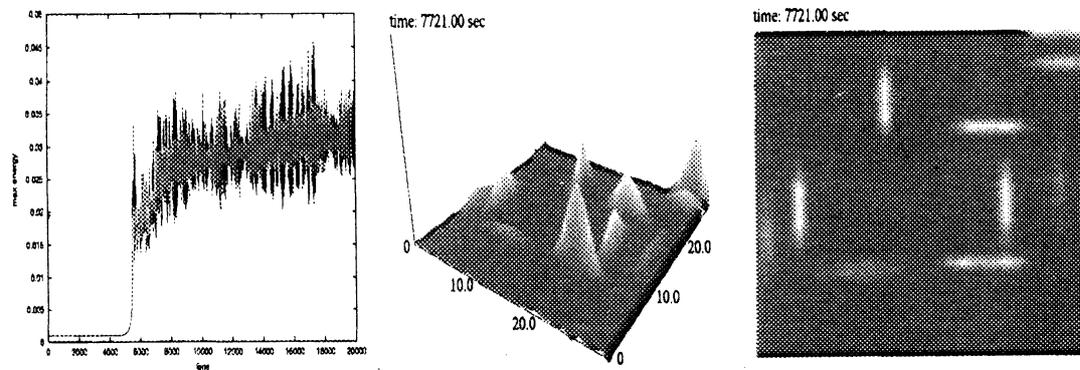


図 16: 正方格子・一次元的な局在現象の例・ $\alpha = 2.0, k = 4.0$

次に、 $\alpha = 1.0$, $k = 0.5, 1.0, 2.0$ の場合の最大エネルギーの時間履歴を図 12 に示す。この図より、局在が起きる・起きないで現象がどう違うかを見ることができる。縦軸は図 5 と同様に系全体に占めるエネルギーの割合を示している。 $k = 0.5$ のときは局在が起らず熱平衡状態に移行しているのに対し、 $k = 1.0$ のときは局在が起きた後、熱平衡状態に移行していることがわかる。また、 $k = 2.0$ を見ると k の値が大きい方が局在が減衰しにくく、長く続いていることが確認出来る。

最後に、正三角形格子と正方格子に出現する一次元的な局在及び二次元的な局在の様子を図 13-16 に示す。図 13, 図 14 は二次元的なエネルギー局在の例で、共に初期条件の振動モードで局在の中心の振幅が大きく、中心から離れるに従って振幅が小さくなるような振動をしている。また、図 15, 図 16 は一次元的なエネルギー局在の例で、局在している列のみを取り出すと、一次元モデルで得られているように、振幅が互いに $+$ $-$ となっていて、局在の中心の振幅が大きく、中心から離れるに従って振幅が小さくなるような振動をしている。

以上のように、両モデルともに α の値が小さい場合は二次元的な局在が現れ、 α の値が大きくなると一次元的な局在が現れるようになるという傾向があることが確認できた。

6 結言

Morse potential で記述される一次元および二次元非線形格子の変調不安定性を数値シミュレーションによって調べた。その結果、Morse potential で記述される系において非線形局在モードが存在するためには on-site potential が必要であると考えられる。二次元モデルでは初期条件として π モードの代わりに図 9, 図 10 のような初期条件を用いたが、一次元的に x 方向のみに π モードを与えた場合でも、正三角形格子においては α が小さい場合は二次元的な局在、 α が大きい場合は一次元的な局在が現れ、正方格子においては α が大きい場合のみ一次元的な局在が現れることを確認しているが、本報では省略した。Morse potential で記述される二次元非線形格子モデルにおいて非線形局在モードの存在が確認されたことから、現実の固体や格子系においても非線形局在モードが存在することが期待出来る。今後は、on-site potential の非線形局在モードに対する役割や、二次元における非線形局在モードの生成のメカニズム、そしてこの非線形局在モードが現実の固体や格子系に与える影響等について解析を進めたい。

参考文献

- [1] S.Flach, C.R.Willis, Phys. Rev. Rep. 295, 181(1998).
- [2] V.M.Burlakov, S.A.Kiselev, and V.I.Rupasov, Phys. Lett. A 147, 130(1990).
- [3] V.M.Burlakov and S.A.Kiselev, Sov. Phys. JETP 72, 854(1991).
- [4] T.Cretegny, T.Dauxois, S.Ruffo, and A.Torcini, Physica D 121, 109(1998).
- [5] K.Ullmann, A.J.Lichtenberg, and G.Corse, Phys. Rev. E 61, 2471(2000).
- [6] S.R.Bickham, S.A.Kiselev, and A.J.Sievers, Phys. Rev. B 47, 14206(1993).
- [7] K.W.Sandusky and J.B.Page, Phys. Rev. B 50, 866(1994).