

幾何学的束縛のある格子における非線形波動 -生体高分子、フォトニック結晶、ガラス物質等-

長崎総合科学大学新技術創成研究所 武野正三 (Shozo Takeno)
Institute for Innovative Science and Technology
Nagasaki Institute for Applied Sciences

I. 研究の動機と目的

自然界の運動、ある種のテクノロジーでは運動の問題において幾何学的な束縛というものを考察することが重要な場合がある。その例は以下の如くである。(1) DNA や蛋白高分子等の生体高分子では1次構造は1次元であるが2次構造では何故直線的形状を取らずらせん的な形状をしているだろうか、また、そのことは生体の機能の発現と何か関係があるだろうか。(2) フォトニック結晶は誘電体に周期構造を導入して光のバンドギャップを作り、それによってフォトンの運動を種々制御して半導体や電子デバイスにおける電子・ホールと同じような役割をフォトンに担わせようとする人工的な結晶である。そのなかで、曲がった光の回路や光導波管を導入すると、フォトンの trapping 等の光の制御が出来る。(3) rigid な unit から成るある種の固体のなかの原子の運動では回転エネルギーが通常の弾性エネルギーより小さく、そのなかでの原子の運動はあたかもある種の幾何学的な束縛を受けたような回転的運動を行う。このような固体は負の Poisson 比等通常の固体に無い特有の性質を示す。(4) ガラス状物質における原子の低エネルギー励起では(3)と類似の状況により原子の運動である種の topological な集団運動が存在すると考えられる。このことがガラス状物質に普遍的に存在する2準位系の identification に繋がるのではないか。(5) この幾何学的な束縛は固体のみならず、流体・音波等連続体の物理の問題にも種々興味ある現象を提供する。

本研究では問題の準備的な研究として結晶格子に幾何学的な束縛が存在する場合のダイナミクスを簡単なモデルシステムを例に取り上げ、その応用について触れることにする。

II. 幾何学的束縛がある場合の格子力学

以下の Lagrangian で記述される l 次元の線形格子を考える。

$$\tilde{L} = \sum_{\vec{n}} \sum_{\alpha=1}^l \frac{m_n}{2} \dot{u}_\alpha(\vec{n})^2 + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{m}} \sum_{\alpha=1}^l K_\alpha(\vec{n}, \vec{m}) u_\alpha(\vec{n}) u_\alpha(\vec{m}), \quad (1)$$

$$K_\alpha(\vec{n}, \vec{m}) > 0 \quad (\vec{n} \neq \vec{m}), \quad \sum_{\vec{m}} K_\alpha(\vec{n}, \vec{m}) = 0. \quad (2)$$

$u_\alpha(\vec{n}), K_\alpha(\vec{n}, \vec{m})$ は、夫々、格子点 \vec{n} における原子の平衡点からの変位 \vec{n} の α 成分、格子点 \vec{n}, \vec{m} における原子の相互作用の定数である。原子の変位に幾何学的な束縛が加えられたことを以下の式で表わす。

$$u_\alpha(\vec{n}) = f_\alpha[s(\vec{n})]. \quad (3)$$

この式を (1) 式に代入すると Lagrangian は

$$\tilde{L} = \sum_{\vec{n}} \sum_{\alpha=1}^{\ell} \frac{m_n}{2} f'_\alpha[s(\vec{n})] \dot{s}(\vec{n})^2 + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{m}} \sum_{\alpha=1}^{\ell} K_\alpha(\vec{n}, \vec{m}) f_\alpha[s(\vec{n})] f_\alpha[s(\vec{m})]. \quad (4)$$

となる。一般に、 $f_\alpha[s(\vec{m})]$ は $s(\vec{m})$ の非線形関数であり、その形に応じて種々の非線形格子が得られる。このことは実験的に非線形性を示す格子のなかにはその非線形性が線形格子に幾何学的な束縛がある結果生じているという結果が得られる。

III. ラセン変換とラセン格子

最も典型的な幾何学的束縛の例の一つとしてラセン的束縛を考察する。

$$f_1[s(\vec{n})] = a(\vec{n}) \cos[c(\vec{n})s(\vec{n})] \equiv a(\vec{n}) \cos[\theta(\vec{n})], \quad f_2[s(\vec{n})] = a(\vec{n}) \sin[c(\vec{n})s(\vec{n})] \equiv a(\vec{n}) \sin[\theta(\vec{n})], \quad (5)$$

$$f_3[s(\vec{n})] = a_3(\vec{n})s(\vec{n}) \equiv b(\vec{n})\theta(\vec{n}), \quad \text{with } K_1(\vec{n}, \vec{m}) = K_2(\vec{n}, \vec{m}), \quad (6)$$

定数 $a(\vec{n})$ は格子点 \vec{n} におけるラセンの半径、 $b(\vec{n})$ は $P(\vec{n}) = 2\pi b(\vec{n})$ の関係を通じてその点におけるラセンのピッチ $P(\vec{n})$ と関係している。また、 $a(\vec{n}), b(\vec{n})$ はラセンの curvature $\kappa(\vec{n})$, torsion $\tau(\vec{n})$ と以下のように関係している。

$$a(\vec{n}) = \frac{\kappa(\vec{n})}{\kappa(\vec{n})^2 + \tau(\vec{n})^2}, \quad b(\vec{n}) = \frac{\tau(\vec{n})}{\kappa(\vec{n})^2 + \tau(\vec{n})^2}. \quad (7)$$

(5), (6) を (1) に代入すると、Lagrangian \tilde{L} は以下の形

$$\begin{aligned} \tilde{L} = & \sum_{\vec{n}} \frac{m_n}{2} [a(\vec{n})^2 + b(\vec{n})^2] \dot{\theta}(\vec{n})^2 \\ & - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{m}} [K_1(\vec{n}, \vec{m}) a(\vec{n}) a(\vec{m}) \{1 - \cos[\theta(\vec{n}) - \theta(\vec{m})]\}] - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{m}} [K_3(\vec{n}, \vec{m}) \{b(\vec{n})\theta(\vec{n}) - b(\vec{m})\theta(\vec{m})\}^2] \end{aligned}$$

で表され、Euler-Lagrange 方程式は

(8)

$$\begin{aligned} \ddot{\theta}(\vec{n}) = & \sum_{\vec{m}} \left[\frac{K_1(\vec{n}, \vec{m})}{m_n} \frac{a(\vec{n})a(\vec{m})}{a(\vec{n})^2 + b(\vec{m})^2} \sin\{\theta(\vec{m}) - \theta(\vec{n})\} \right] \\ & + \sum_{\vec{m}} \left[\frac{K_3(\vec{n}, \vec{m})}{m_n} \frac{b(\vec{n})}{a(\vec{n})^2 + b(\vec{n})^2} \{b(\vec{m})\theta(\vec{m}) - b(\vec{n})\theta(\vec{n})\} \right]. \end{aligned} \quad (9)$$

となる。この式を sine-plus-linear-lattice (SLL) 方程式と呼ぶことにする。

IV. 完全ラセン格子

ラセン格子の定数が site index \vec{n} によらないとき、即ち、以下の場合

$$a(\vec{n}) = a, \quad b(\vec{n}) = b, \quad \kappa(\vec{n}) = \kappa, \quad \tau(\vec{n}) = \tau, \quad m_n = m \text{ for all } \vec{n}; \quad a, b, \kappa, \tau, m : \text{const} \quad (10)$$

$$\ddot{\theta}(\vec{n}) = \sum_{\vec{m}(\neq \vec{n})} L_1(\vec{n}, \vec{m}) \left\{ \frac{\lambda}{1+\lambda} \sin[\theta(\vec{m}) - \theta(\vec{n})] + \frac{\mu}{1+\lambda} [\theta(\vec{m}) - \theta(\vec{n})] \right\}, \quad (11)$$

$$L_\alpha(\vec{n}, \vec{m}) = \frac{K_\alpha(\vec{n}, \vec{m})}{m}, \quad \alpha = 1, 3, \quad \frac{L_3(\vec{n}, \vec{m})}{L_1(\vec{n}, \vec{m})} = \mu, \quad \lambda = \frac{a^2}{b^2} = \frac{\kappa^2}{\tau^2}. \quad (12)$$

が得られる。空間1次元の場合上のSLL方程式は以下のようになる。

$$\ddot{\theta}_n = \frac{L_1}{1+\lambda} \lambda \{ \sin(\theta_{n+1} - \theta_n) - \sin(\theta_n - \theta_{n-1}) \} + \frac{L_1}{1+\lambda} \mu \{ \theta_{n+1} + \theta_{n-1} - 2\theta_n \}. \quad (13)$$

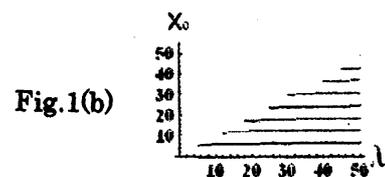
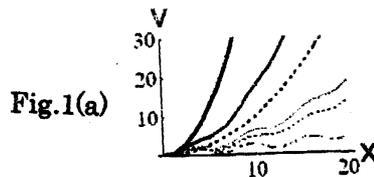
(9), (13) 式で記述されるラセン格子の定性的性質は以下のポテンシャル関数 $v(x, \lambda, \mu)$,

$$v(x, \lambda, \mu) = \frac{\lambda}{1+\lambda} \{ 1 - \cos(x) \} + \frac{\mu}{1+\lambda} \frac{x^2}{2}, \quad (14)$$

を導入することにより得られる。このポテンシャル関数は $\lambda, 1/\mu$ の増加に伴って $v(x, \lambda, \mu)$ は multi-minimum を持ち、その local minima は

$$\lambda \sin(x) + \mu x = 0 \text{ with } \lambda \cos[x_0(\lambda)] + \mu > 0. \quad (15)$$

から決められる。 $x_0(\lambda)$ は $\mu = 1$ の場合の解である。 $\lambda = 0.0$ (thick line), 2.0 (line) 10.0 (thin line) に対する $\mu = 1$ (continuous lines) と $\mu = 0.2$ (dotted lines) の場合のポテンシャル関数 $v(x, \lambda, \mu)$ を図 1 (a), $x_0(\lambda)$ を図 1 (b) に示す。この図、及び方程式の形から、SLL 方程式には (1) local minima の周りの局在モード、(2) 1次元の場合キंकモード、多次元の場合渦モードが存在することが推論される。



V. 局在モードとキंक

(a) 局在モード

(9) 式において、ヘリカル格子の位置 $\vec{n} = \vec{n}_0$ にある原子がポテンシャル関数のある local minimum point n_0 の周りで大振幅の運動をし、その周りの原子は小さな振動的な運動をすると仮定して $\theta(\vec{n})$ を以下の形において置いて (13) 式に代入する。

$$\theta(\vec{n}) = \begin{cases} \theta_0 + \phi(\vec{n}_0), & \text{with } \theta_0 \gg \phi(\vec{n}_0) \text{ for } \vec{n} = \vec{n}_0, \\ \phi(\vec{n}) & \text{with } \theta_0 \gg \phi(\vec{n}) \text{ otherwise,} \end{cases} \quad (16)$$

$\phi(\vec{n})$ s について 1 次の項のみを取り、最近接相互作用近似を用いると

$$\ddot{\phi}(\vec{n}) = \sum_{\vec{e}(\neq \vec{0})} L_1 \frac{\lambda + \mu}{1 + \lambda} [\theta(\vec{n} + \vec{e}) - \theta(\vec{n})] + V[\vec{n}, \phi(\vec{n})], \quad (17)$$

$$V[\vec{n}, \phi(\vec{n})] = \begin{cases} -\sum_{\vec{e}(\neq \vec{0})} L_1 \frac{\lambda}{1 + \lambda} [1 - \cos(\theta_0)] [\phi(\vec{n}_0) - \phi(\vec{n}_0 + \vec{e})] & \text{for } \vec{n} = \vec{n}_0, \\ -L_1 \frac{\lambda}{1 + \lambda} [1 - \cos(\theta_0)] [\phi(\vec{n}_0) - \phi(\vec{n}_0 + \vec{e})] & \text{for } \vec{n} = \vec{n}_0 + \vec{e}, \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (18)$$

が得られる。 \vec{e} は単位ベクトルである。ポテンシャル関数の性質

$$V[\vec{n}, \phi(\vec{n})] \rightarrow 0 \text{ as } \theta_0 \rightarrow 2\pi\ell \text{ with } \mu\theta_0 \ll 1, \ell: \text{整数} \quad (19)$$

から局在モードに関して以下の形の漸近的厳密解が得られる。

$$\theta(\vec{n}) = \begin{cases} \theta_0, & \text{for } \vec{n} = \vec{n}_0, \\ 0 & \text{otherwise,} \end{cases} \quad (20)$$

上記の結果の妥当性を調べるために 100 個 ($0 \leq n \leq 99$) の原子から成る (11) 式で記述される 1 次元格子に対して $L_1 = 1$ と置いて周期境界条件の下に数値計算を行った。B 型の DNA の場合に対応して $\lambda = 1.85$ と取り、 μ の二つの場合：(a) $\mu = 0.01$, (b) $\mu = 0.8$ を選び、初期条件 $\theta_{50}(t=0) = 6.3$, $\theta_n(t=0) = 0$ for $n \neq 50$ and $\theta_n(t=0) = 0$ for all n を設定した。数値計算の結果を図 2 に示す。図 2(a), 2(b) は夫々、厳密解に近い状況、近似解を表している。

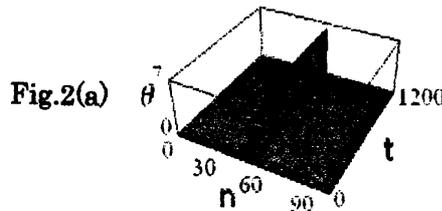


Fig.2(a)

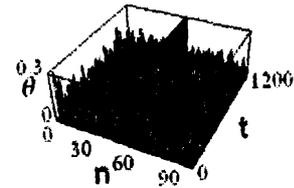


Fig.2(b)

(b) Kink modes

(13) 式のキंक解を以下の形で探し

$$\theta_n = 2 \tan^{-1} \left[\frac{f_n}{g_n} \right] = \frac{1}{i} \ln \left[\frac{z_n}{z_n^*} \right] \quad z_n = g_n + if_n. \quad (21)$$

広田理論の方法を用いると (13) 式は以下の形に reduce される。

$$(z_n^*)^2 \left\{ \frac{2L_1}{1+\lambda} [\lambda P(z_n, z_n^*) + \mu Q(z_n, z_n)] \cosh_1(D_n) - D_t^2 \right\} (z_n \cdot z_n) \quad (22)$$

$$-(z_n)^2 \left\{ \frac{2L_1}{1+\lambda} [\lambda P(z_n, z_n^*) + \mu Q(z_n^*, z_n^*)] \cosh_1(D_n) - D_t^2 \right\} (z_n^* \cdot z_n^*) = 0, \quad (23)$$

$$\cosh_1(D_n) = \cosh(D_n) - 1. \quad (24)$$

$$P(z_n, z_n) = \frac{1 + R(z_n, z_n^*)}{[1 + R(z_n, z_n)][1 + R(z_n^*, z_n^*)]}, \quad Q(z_n, z_n) = \frac{\ln [1 + R(z_n, z_n)]}{R(z_n, z_n)} \quad (25)$$

$$R(z_n, z_n) = \frac{\cosh_1(D_n)(z_n \cdot z_n)}{(z_n)^2} = \frac{z_{n+1}z_{n-1} - z_n^2}{z_n^2}, \quad R(z_n, z_n^*) = \frac{\cosh_1(D_n)(z_n \cdot z_n^*)}{(z_n z_n^*)} \quad (26)$$

$P(z_n, z_n^*), Q(z_n, z_n), Q(z_n^*, z_n^*) \rightarrow 1$ as $R(z_n, z_n), R(z_n^*, z_n^*), R(z_n, z_n^*) \rightarrow 0$ において (13) は以下の式に移行し

$$\left\{ \frac{2L_1}{1+\lambda} [\lambda + \mu] \cosh_1(D_n) - D_t^2 \right\} (f_n \cdot g_n) = 0, \quad (27)$$

$$\left\{ \frac{2L_1}{1+\lambda} [\lambda + \mu] \cosh_1(D_n) - D_t^2 \right\} (f_n \cdot f_n - g_n \cdot g_n) = 0. \quad (28)$$

例えば、以下の 2-kink 解が得られる。

$$\theta_n(t) = 2 \tan^{-1} [\cosh(kn - \omega t)] \equiv q(n, k, t), \quad \omega^2 = \frac{4L_1}{1+\lambda} [\lambda + \mu] \sinh^2(k/2). \quad (29)$$

$$\dot{\theta}_n(t) = 2\omega \sinh(kn - \omega t) / [1 + \cosh(kn - \omega t)^2] \equiv p(n, k, \omega, t) \quad (30)$$

k はパラメーターである。 $\lambda = 1.85, \mu = 0.2$ の場合の (13) 式を初期条件 $\theta_n(t=0) = q(n, 0.6, 0), \dot{\theta}_n(t=0) = p(n, 0.6, \omega, 0)$ for $n = 48, 49, 50, 51, 52$; $\theta_n(t=0) = \dot{\theta}_n(t=0) = 0$ for all $n \neq 48, 49, 50, 51, 52$ の下で解いた数値計算の結果を図 3 に示す。この図はこの解が良い近似解となっていることを示している。

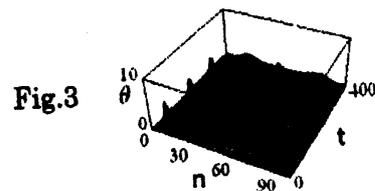


Fig.3

VII. 現実の問題に対する適用

本研究で述べた理論は具体的な問題に対して種々の応用を持っている。以下、そのいくつかを列挙する。

(a) 生体高分子への応用-減衰項と外力がある場合の1次元SLL方程式-

生体高分子:外部環境と接触しているSLL方程式を考察する。

$$\begin{aligned} \ddot{\theta}_n = & -\gamma\dot{\theta}_n + \frac{L_1}{1+\lambda} [\lambda\{\sin(\theta_{n+1} - \theta_n) - \sin(\theta_n - \theta_{n-1})\}] \\ & + \frac{L_1}{1+\lambda} \mu [\theta_{n+1} + \theta_{n-1} - 2\theta_n] + g_n \cos(\omega_n t) \end{aligned} \quad (31)$$

γ, g_n, ω_n は、夫々、抵抗力の係数、ランダムな外力の振幅、振動数である。数値計算を実行するために、(31)式に対して以下のようにパラメーターを設定した。

$$\lambda = 1.85, \quad \mu = 0.2, \quad \gamma = 0.1, \quad \omega = 0.1, \quad g_n = 0.01R, \quad (32)$$

(1) 局在モード解

以下の初期の条件

$$\theta_{50}(t=0) = 6.0, \quad \theta_n(t=0) = 0 \text{ for } n \neq 50, \quad \dot{\theta}_n(t=0) = R_1 \text{ for all } n. \quad (33)$$

の場合を先ず取り上げる。此処に、 R and R_1 は夫々領域 $[0, 1]$ 、 $[-0.5, 0.5]$ にある random number である。数値計算の結果局在モードが存在することを図4に示す。数値計算を更に進めると、上記のように与えられた $\lambda, \mu, \omega, g_n$ に対して局在モードが抵抗力の係数の広範な領域 $0.1 < \gamma < \infty$ で存在することが分かった。このことは、大きな γ の場合 $\dot{\theta}_n \ll \gamma\theta_n$ が成り立ち、(31)式は以下の式

$$\begin{aligned} \gamma\dot{\theta}_n = & \frac{L_1}{1+\lambda} [\lambda\{\sin(\theta_{n+1} - \theta_n) - \sin(\theta_n - \theta_{n-1})\}] \\ & + \frac{L_1}{1+\lambda} \mu [\theta_{n+1} + \theta_{n-1} - 2\theta_n] + g_n \cos(\omega_n t) \end{aligned} \quad (34)$$

に移行し、この場合にも同じ局在モードの解が存在する。

(2) キンク解

(31)式において、図3に見られる(13)式のる伝播するキンクモードの解は抵抗力が極めて小さい場合にのみ存在する。抵抗力が増すと、その大きさの中間の領域で buckling mode 的な非線形モードが存在する。抵抗力が非常に大きくなると、初期条件に相当する非線形モードがそのまま局在モードとして非常に長時間存在することを図5に示す。このときの解は(34)で抵抗力が大きいときの解と一致する。

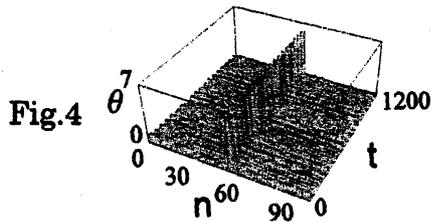


Fig.4

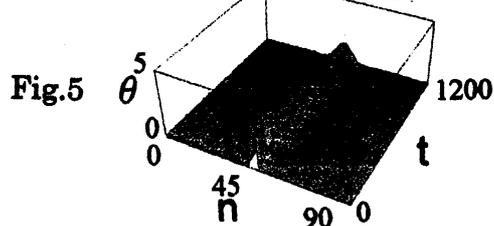


Fig.5

(b) ラセン構造が場所毎に異なっている場合 -生体高分子、photonic crystal等-

現実の生体高分子ではそのまわりの環境に応じラセン構造が局所的に変化している。この場合は(9)式に立ち戻る必要がある。

$$\begin{aligned} \ddot{\theta}(\vec{n}) = & \sum_{\vec{m}} \left[\frac{K_1(\vec{n}, \vec{m})}{m_n} \frac{a(\vec{n})a(\vec{m})}{a(\vec{n})^2 + b(\vec{m})^2} \sin\{\theta(\vec{m}) - \theta(\vec{n})\} \right] \\ & + \sum_{\vec{m}} \left[\frac{K_3(\vec{n}, \vec{m})}{m_n} \frac{b(\vec{n})}{a(\vec{n})^2 + b(\vec{n})^2} \{b(\vec{m})\theta(\vec{m}) - b(\vec{n})\theta(\vec{n})\} \right]. \end{aligned} \quad (35)$$

ラセン性が高い場所では局在モードが発生し易いことが容易に分かる。

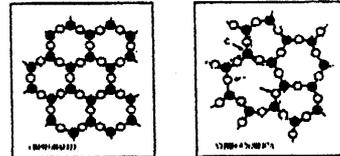
この問題の興味ある他の応用は photonic crystal である。photonic crystal に局所的にラセン構造を取らせることによりそこに photon の trapping を原理上実現させることが出来る。

(c) ガラス状物質

図6に SiO₂-結晶と SiO₂-ガラスの2次元投影を示す。結晶状態にある SiO₂ に対してガラス状態にある SiO₂ で原子間のボンドのいくつかはランダムに配向していることが分かる。この状態は、定性的には、パラメーター $a(\vec{n}), b(\vec{n})$ が場所のランダムな関数であるランダムヘリカル格子方程式(9)で記述されると考えることが出来る。このランダムヘリカル格子には図1で示されるような multi-minimum potential が存在する。極低温状態ではこのランダムな multi-minimum potential において absolute minimum と最初の local minimum 状態のみがその熱的状态に寄与すると見做し、此が2準位モデルに対応すると考えることが出来る。

Fig.6 SiO₂ Silicate の構造

左：結晶状態、右：ガラス状態



(d) Auxetic materials (負の Poisson 比を持つ物質)

負の Poisson 比を持つ物質は引っ張ると横に伸び、押すと縮むという我々の直感に反する性質を持ち、そのことがいろいろな技術上の応用を生んでいる。この auxetic な性質はその物質の幾何学的に特有な内部構造とそれが外部から力を受けたときの変形との密接な相関によることが明らかにされている。このような固体の力学ではその内部の原子があたかも幾何学的な束縛を受けたかのように運動するという問題の典型的な適用例となると考えることができるがこの問題の研究は別の機会に譲ることにする。

VIII. Conclusion

本研究において得られた結果は以下のように要約される。

(1) 線形格子に幾何学的束縛を加えることにより種々の非線形格子が得られる。例

えば、線形格子にヘリカルな変換を施すと sine-plus-linear lattice (SLL) と称されるヘリカル格子になる。その性質は、要約すると、ポテンシャル関数 $V(x, \lambda, \mu) = [\lambda/(1 + \lambda)](1 - \cos(x)) + [\mu/(1 + \lambda)](x^2/2)$ で特徴づけられ、トポロジカルな性質を持ち、それに固有な局在モードとキンクが存在する。

(2) 抵抗力と外力が存在する場合の SLL 方程式においても局在モードは安定に存在し、キンクモードは抵抗力が大きい場合局在モードに移行する。即ち、局在モードは外部環境の揺らぎに対して robust である。この結果は現実の生体高分子等に適用出来、ヘリカル構造はそれ自身がエネルギー貯蔵体等としての役割を果たしているとみなすことが出来る。

(3) 光学的に線形な photonic crystal で局所的にヘリカル構造、bent 等を導入すると photon trapping が得られる。

(4) ガラス状物質の低温での比熱、熱伝導等の熱現象は所謂 2 準位状態が普遍的に存在すると仮定して説明されているが、この 2 準位状態そのものは未だ identify されていないようである。本研究で述べた幾何学的束縛がある場合の固体のなかの原子のダイナミクスによってこの 2 準位状態が説明出来るかも分からない。この点は目下吟味中である。

(5) auxetic materials (負の Poisson 比) を含むある種の固体の常識に反する異常な性質はこの geometrical constraints の概念を固体のダイナミクスに適用して説明出来る可能性がある。

(6) この運動に対する幾何学的束縛の概念は流体にも適用出来る。