研究会報告

不規則格子の振動スペクトル II

広　田

一次元格子場内に於ける一電子波動函数を、Volterra 及び Fredholm 積分方程式の iteration method に依つて求めた。δ 函数型の週期場に於いては良く知られた Kronig Penny の relation を得、更に格子間隔の異なる非週期場に於いてはその間隔についての分布函数を用いて平均化された波動函数を求めた。

平均操作の改良及び境界条件を吟味して energy spectrum との関係を調べる事が残されている様に思われる。

岡　田・(松　田)

松田によつて発展させられてきた Transfer Matrix Method を有限の長さをもつ zigzag chains の skeletal bending vibration に適用し、maximum frequency 近傍において撰ばれた一個の parameter を用いるだけで色々の脂肪酸についての実験結果と可成り良い一致をみた。

簡単な model に基づく理論と実験との対比が直接的に見られる数少ない case として今後の発展が望まれる。

非線型の問題 I

昨年10月の研究会の結論として今後振動子系の問題における非線型効果についていろいろな考察をすることが必要であるという事になり、今回の研究会でこの問題について調べてくることになつていた。戸田，斉藤の報告は、いずれもこのような非線型現象に関する報告であつた。

戸田は、相対論的力学が、運動エネルギーに関しては非線型の形になつていて、Canonical 変換をやれば、座標に於ける非線型の問題になるという立場

から、この問題を論じた。相対論的力学では、調和振動子の運動方程式は

$$\frac{d}{dt}\frac{m\dot{x}}{\sqrt{1-\frac{\dot{x}^2}{c^2}}} = -\gamma x$$

という形になる。この方程式の解は、楕円積分、$E(\varphi, k)$,$F(\varphi, k)$ を用いると

$$\frac{1}{\sqrt{1-k^2}}\{E(\varphi, k) - \frac{1-k^2}{2}F(\varphi, k)\} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\gamma}{m}}(t-t_0)$$

$$k = \sqrt{\frac{E}{E+2mc^2}}$$

$$x = \sin(\sqrt{\frac{\gamma/2}{E}}\varphi)$$

という形で与えられる。

一方、ここで $x \to p$, $p \to -x$ という canonical transformation を行うと、Hamiltonian は

$$H = \frac{\gamma}{2}p^2 + \sqrt{m^2c^4 + c^2x^2}$$

になり、これはバネの強さに相当する γ の逆数 $1/\gamma$ という質量で、$\sqrt{m^2c^4 + c^2x^4} - mc^2$ という非線型ポテンシャルを受けている非相対論的粒子の Hamiltonian である。このようにして、相対論的力学と、通常の力学のある種の非線型運動とは互に相支的な関係にある事に注目する。

これを chain の問題に適用して、非線型の問題を取扱うことが考えられるが、relativistic な波の存在というのはむつかしい。運動エネルギーが非線型で、ポテンシャルが線型な場合

$$\frac{d}{dt}\frac{m\dot{x}_n}{\sqrt{1-\frac{\dot{x}^2}{c^2}}} = -\gamma(2x_n - x_{n-1} - x_{n+1})$$

を考えて、quasi-relativistic な波が存在するかどうかということも考えられるが、これもうまくいかない。

ここで Hamiltonian が

$$H=K+U\ ,\quad K=\frac{m}{2}\sum_j \dot{x}_j^2\ ,\quad U=\sum_{i<j}\phi(x_i-x_j)$$

で与えられる問題を考える。ここで

$$x_1=r_1\ ,\ x_2-x_1=r_2\ \cdots\cdots,\quad x_N-x_{N-1}=r_N$$

で与えられる二粒子間の距離 $r_1, r_2, \cdots r_N$ を変数にとり、これらに conjugate な運動量を $s_1, s_2\cdots s_N$ とする。ここで、$r_j\to -s_j$, $s_j\to r_j$ という変換を行うと

$$\dot{r}_n=\frac{1}{m}(2s_n-s_{n-1}-s_{n+1})$$

になり、$\dot{s}_n=-\phi'(r_n)$ の逆を $r_n=\psi(\dot{s}_n)$ と書くと、

$$\frac{d}{dt}\psi\left(\frac{ds_n}{dt}\right)=\frac{1}{m}(2s_n-s_{n-1}-s_{n+1})$$

となり、1/m をバネの強さとする運動になる。特に最初の Chain のバネが harmonic で、強さ r_j が異つているという場合には、上の変換した後の式は質量は m_j が $1/r_j$ で、バネの強さが総て $1/m$ であるような運動になる。この場合固定端の条件が自由端の条件に変わる。

斉藤は、前回に問題になつた Chain の外力に対する response について、Chain の間に anharmonic な力が作用する場合を論じた。まず質量 m の n 個の粒子が、強さ k のバネで結ばれ、その n 個目のものは固定した壁にむすばれ 1 番目の粒子に、

$$f(t)=\begin{cases}0 & t<0\\ 1 & t\geq 0\end{cases}$$

で与えられる力が作用したとき、この力による仕事によるエネルギーの増加がどのように粒子間に配分されるかという問題を取扱つた。

運動方程式は

$$\frac{d^2\vec{x}}{dt^2}+\frac{Ke}{m}A\vec{x}=\frac{f(t)}{m}$$

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \cdots\cdots & 0 \\ -1 & 2 & -1 \cdots\cdots & 0 \\ 0 & -1 & 2 \cdots\cdots & 0 \\ 0 & 0 & -1 \cdots\cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \\ \cdots & \cdots & \cdots & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

で、この解の $t\to\infty$, $n\to\infty$ にした極限の behaviour をしらべる。harmonic な場合のk番目の粒子の座標は

$$x_k = \sqrt{\frac{2}{m}} \sum_{j=1} \frac{1}{\omega_j^2} \sin\frac{j\pi}{n+1}(1-\cos\omega_j t)\sin\frac{jk\pi}{n+1}$$

$$\omega_j^2 = \frac{4K}{m}\sin^2\frac{j\pi}{2(n+1)}$$

である。k番目の粒子の運動エネルギーは $t\to\infty$ にして、$n\to\infty$ にすると

$$\overline{\frac{m}{2}\dot{x}_k} \to \frac{1}{K\pi^2}\left(\frac{4k}{4k^2-1}\right)$$

になる。

anharmonicity を入れるため、解を

$$x_n = \sum_k \{a_k(t)\cos(\omega_k t - \frac{2\pi k}{N}n) + b_k(t)\sin(\omega_k(t) - \frac{2\pi k}{N}n)$$

とおき、$a_k(t)$, $b_k(t)$ に関する一階微分方程式を導きこれから、$a_k(t)$, $b_k(t)$ を定める。しかし、これを一般に解くことは困難であるので、$(u_{n+1}+u_{n-1}-2u_n)$ を含む非線型項で、これにかかる項が、nによらないとして、$g(t)$ とおくと、解は

$$x_k = \mathcal{K}\sum_k (a_k(0) - i b_k(0)) \{ e^{i\{\omega_k\sqrt{\frac{1+\gamma}{\gamma}}\int_0^t g(t)dt - \frac{2\pi k}{N}n\}} \}$$

という形になり、これから asymptotic な behaviour を調べる事が出来る。上のnに関係しないという仮定は力が random であるという事になると考えら

れる。

次に小暮が、accomodation coefficient の問題について報告した。この問題も前回の研究会で論ぜられたことであるが、今回は小暮が一次元の chain の場合について具体的な計算をされたので、その結果の報告があつた。

accomodation coefficient というのは、分子が固体表面に衝突した時の衝突後のエネルギーと衝突前のエネルギーの比で、物理的には、気体分子を固体表面にぶつつけた時にどの程度吸着されるかという問題に関連する。この問題は前に Lennard-Jones が one-phonon process として取扱つたが実験とは factor 2 くらい合わない。実際には Ag − gas を Cu にふきつけると、９０%位吸着される。実験からは six phonon process とする必要がある様である。

小暮が取り扱つたのは、強さKのバネでつながれている一次元の chain を考える。chain の中の各粒子の質量は一端のものを除いては総てmとし、端のものだけが異つた質量M′を持つているものとする。これに質量Mの粒子が衝突する。問題は総て一次元で取扱う。衝突する粒子の座標をR_0，その他の chain の中の粒子の座標をR_1，$R_2 \cdots$とすると、運動方程式は

$$M\ddot{R}_0 = F(R_0 - R_1)$$

$$M'\ddot{R}_1 = -F(R_0 - R_1) - K(R_1 - R_2)$$

$$m\ddot{R}_2 = K(R_3 + R_1 - 2R_2)$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots$$

になる。Fは衝突する分子との間の力でここで問題は非線型になる。ここで Schrödinger 座標を用いて問題を解く：

$$2R_j(\tau) = 2x_{2j}(\tau)\ ;\quad R_j - R_{j+1} = x_{2j+1}(\tau)$$

$$\tau = 2(K/m)^{1/2}\, t$$

母函数として $G(z, \tau) = \sum_{i=1}^{\infty} x_n(\tau)\, z^n$ を用いる。Bessel 函数，Hankel 函数を用いる。

この解は Bessel 函数を用いると

$$x_3 = 2(1-\frac{1}{\mu'})\int_0^\tau \frac{J_2(s)}{s} x_3(\tau-s)\,ds - \frac{1}{\mu'}\int_0^\tau \frac{1}{s} J_2(s) F(x_1(\tau-s))\,ds$$

という形に書かれる。$\mu' = M'/m$ である。$\mu' = 1$ とおくと、結果は簡単になり、x_1 は Bessel，Hankel 函数を用いて、x_1 を表わし、数値計算を行うことかできる。

$$x_1(\tau) = f(\mu, \tau)$$

$\mu = M/m$ である。これから衝突前後の速度 $r_0(0)$，$r_0(\tau_C)$ を計算すると

$$\left|\frac{r_0(\tau_C)}{r_0(0)}\right| = \frac{\tau_C - 8\mu f(\tau_C)}{\tau_C + 8\mu f(\tau_C)}$$

になり、当然のことながら μ が小さい程弾性衝突に近くなる。

小暮は μ によつて、この様な衝突した分子がどういう behaviour をするかという事を調べるため $\mu = 0.5$，1.0 の場合について、$r_0(\tau_C)$ を $r_0(0)$の函数として計算した。また $f(\mu, \tau)$ を $\mu = 0.5$，1.0，2.0 の場合について τ の函数として計算した。この計算を図に示すと、$\mu = 2.0$ の場合には、$f(\mu, \tau)$ は 0 から出発して正になつて再び 0 に近くなり、衝突した分子と二度衝突する事を示す様である。

柏村は、格子系が統計力学における bath との相互作用、系の中での dissipation という一般的な問題に関するモデルとしての意義について、種々の立場から意見をのべた。しかし、lattice system は gas と違つた irreversibility，ergodicity に関するモデルと十分なり得るというのが多くの人の意見であつた。　（小　野）