

Discrete Nonlinear System における Kink Dynamics

京大工 五十嵐顕人、宗像豊哲

1 モデル

1次元の非線形格子モデルであるフレンケル・コントロローヴァモデルを取り上げる。このモデルでは、各粒子(質量 m)は線形のパネ(バネ定数 f)で結ばれており、更に周期的ポテンシャル(振幅 V_0)による力と一定の外力(大きさ F)が各粒子に働いている。 n 番目($1 \leq n \leq N$)の粒子の変位を u_n 、格子定数を a とすると系のハミルトニアン H は

$$H = K + V_{\text{int}} + V_{\text{site}} \equiv K + V(\{u_n\}), \quad (1)$$

となる。ここで

$$K = \frac{m}{2} \sum_n \dot{u}_n^2, \quad (2)$$

$$V_{\text{int}} = \frac{f}{2} \sum_n (u_{n+1} - u_n)^2, \quad (3)$$

$$V_{\text{site}} = \sum_n \left\{ \frac{V_0}{2} \left[1 - \cos \left(\frac{2\pi u_n}{a} \right) \right] - F u_n \right\} \quad (4)$$

である。連続体の極限においてはこのモデルはサイン・ゴールドン方程式で近似できる。この場合には、N-キंक解が厳密に知られており、格子内をキंकは自由に運動する。たとえば X に静止したキंक解は

$$u_n = \frac{2a}{\pi} \tan^{-1} \exp \left[\frac{\pi(n - X/a)}{\ell_0} \right], \quad (5)$$

とあらわせる。ただし、 $\ell_0 a = a \sqrt{f a^2 / 2 V_0}$ はキंक幅である。しかしキंकの幅が格子定数 a 程度になるときは連続体極限が成り立たず離散的に扱わねばならない。この場合キंकが格子中を動く時には、格子と同じ周期を持つパイエルス力を感じながら動くなどサイン・ゴールドン方程式とは極めて違った性質を示す。このような場合に興味を持ってこの系の計算機シミュレーションを行なった。このモデルは様々な現象のモデルとして研究されてきたが、特に線形のパネで結ばれている粒子の鎖を転位に対応させると固体中の転位の振舞いを示すモデルとなる。

本研究では、一定の応力が加わっている場合の鎖(転位)の動きを調べるために、系の各粒子に一定の外力(大きさ F)を加えたモデルを計算機でシミュレートする。有限温度のもとでは、この鎖にキंक・アンチキंकのペアが次々に生成され、さらにこれらがパイエルスポテンシャルの山を越えて鎖の中を伝搬してゆくことで鎖(転位)が外力の方向へ移動してゆくと考え。計算機シミュレーションは分子動力学法を用いて行うが、そ

の際一定温度 T の状態を調べるために運動方程式にランダム力 $R(t)$ と減衰項 (減衰定数 ζ) をつけ加える。すなわち、ランジュバン方程式

$$m \frac{d^2 u_n}{dt^2} = -m\zeta \frac{du_n}{dt} - \frac{\partial V(\{u_n\})}{\partial u_n} + R(t), \quad (6)$$

を数値的に解く。ただし、揺動散逸定理

$$\langle R(t)R(s) \rangle = 2mk_B T \zeta \delta(t-s), \quad (7)$$

を仮定する。キンク対の生成頻度、キンクの移動速度、鎖 (転位) の移動速度に関して計算機シミュレーションによって得られた結果を、拘束系の統計力学の手法およびトランジションステイト理論を用いて得られた理論結果 [1-4] と比較する。(キンク幅を $2a$ とし、 $\zeta\sqrt{m/f} = 1.0$ とした。また、周期境界条件を用い、時間メッシュは $\sqrt{m/f}/100$ とした。)

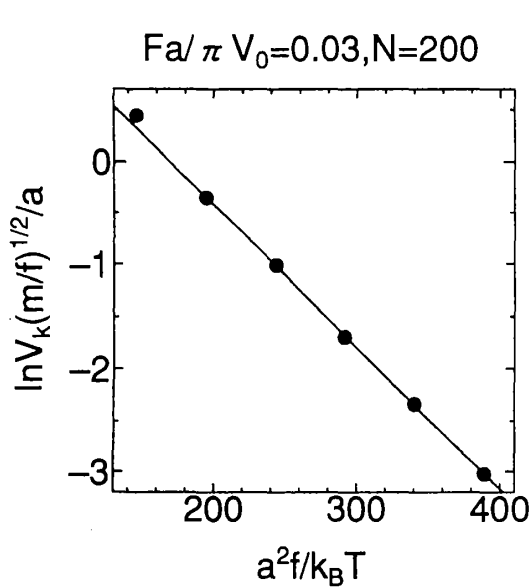


図1 キンクの移動速度 V_k

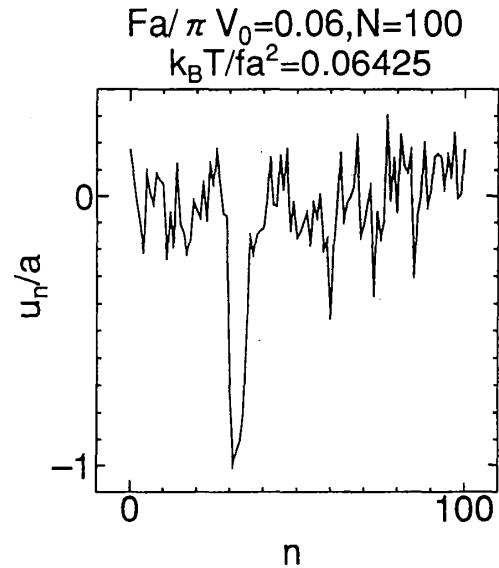


図2 キンク対生成の瞬間の snapshot

2 キンクの移動速度

理論的にはまず、キンクの変位 u_n をキンクをあらわす部分 $f_n(X)$ とそれからのずれ q_n に分解し、 $u_n = f_n(X) + q_n$ とする。キンクの位置 X を、拘束条件 (q_n は、キンクの並進モード (Goldstone モード) とは直交しているという条件)

$$\sum_n q_n \cdot \frac{df_n(X)}{dX} = 0, \quad (8)$$

を課すことで固定する。[1-4] $f_n(X)$ の初期解として (5) 式を採用し、(8) の拘束条件のもとで iteration によって解の改良をおこなっていく。解が収束した段階での解が正確なキ

ンク解となる。各キンクの位置 X に対してキンク解が求まるのでそれを用いてキンクのセルフ・エネルギー $E_k(X; F)$ を X の関数として計算する。これにより、平衡位置 X_{eq} でのセルフ・エネルギーとサドルポイント X_s でのそれとの差としてキンクの1格子間隔の移動に対する活性化エネルギー E_a を計算できる。すなわち

$$E_a \equiv E_k(X_s; F) - E_k(X_{eq}; F). \quad (9)$$

1 格子間隔の移動の頻度はトランジションステイト理論によって得られる。キンクの速度は、この頻度に a を掛けて得られ、シミュレーションでは、キンクが格子定数 a だけ移動する平均時間を求め、それで a を割ってキンクの移動速度を計算している。図1はキンクの移動速度 $V_k(F; T)$ の対数を温度 T の逆数の関数として描いたものである。黒丸がシミュレーションの結果であり、理論的に得られたキンクの移動に関する活性化エネルギー E_a から決まる傾きを持つ直線と比較している。図からわかるように温度の低い領域で両者の傾きは良く一致していることがわかる。

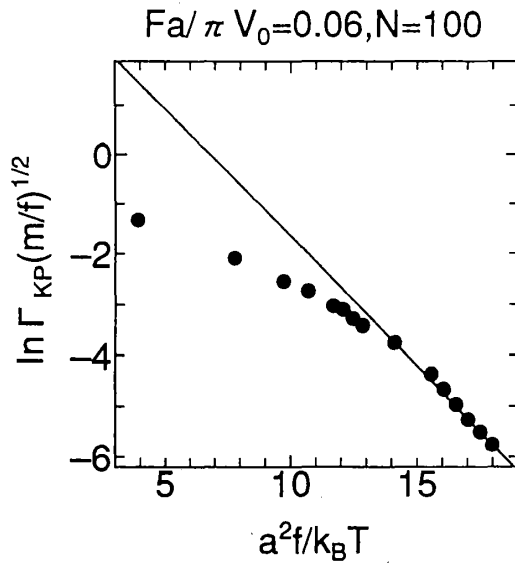


図3 キンク対生成頻度 Γ_{KP}

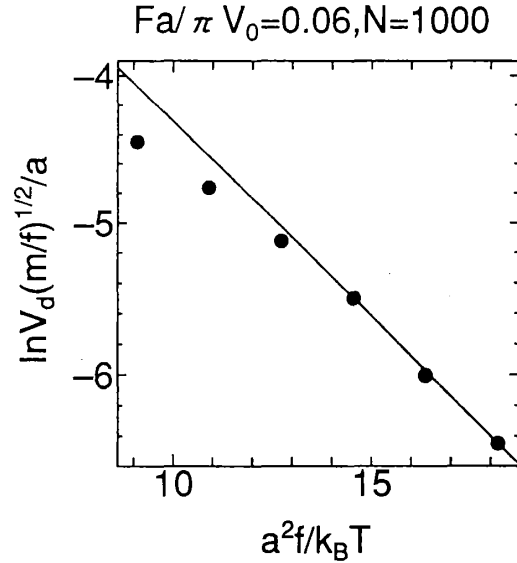


図4 鎖(転位)の移動速度 V_d

3 キンク・アンチキンク対の生成頻度

キンクの位置 X_k とアンチキンクの位置 X_{ak} を2つの拘束条件を課すことによって固定し、2節と同じようにiterationを行なってキンク対の解を求める。これを用いて、任意の X_k, X_{ak} でのキンク対のセルフ・エネルギーを求め、キンク対生成に対するサドルポイントを求めた。その結果、キンクとアンチキンクの対が、格子定数 a の4倍程度離れた時にキンク対の核生成となると理論より予測された。[1] シミュレーションにおいてもそのことが確認されたので、キンク対ができてその距離が $4a$ になった時キンク対が生成されたとした。図2はキンク・アンチキンク対が生成した瞬間の snapshot である。図3はキンク対の生成頻度 $\Gamma_{KP}(F; T)$ の対数を温度の逆数の関数として描いたものである。黒丸がシミュレーションの結果であり、直線は理論的に得られたキンク対生成に関する活性化エネルギー E_{KP} (これは、サドル・ポイントにある時のキンク対のセルフ・エネルギー

とキンク対がない時のエネルギーとの差として計算される。) から決まる傾きを持っている。両者を比較するとわかるように温度の低い領域でシミュレーション結果は理論の結果をよく再現していることがわかる。

4 鎖 (転位) の移動速度

鎖 (転位) は、キンク・アンチキンク対があちこちで出来てキンクとアンチキンクは外力にしたがってお互いに反対方向に移動する。やがて、キンク (アンチキンク) は他のキンク対に由来するアンチキンク (キンク) と出会い対消滅する。この様なプロセスを繰り返して転位は外力の方向に移動していく。このキンク対の生成と消滅がつりあって定常になるとして鎖 (転位) の移動速度 $V_d(F; T)$ を理論的に求めることができる。[5] キンク、アンチキンクの密度を n_k, n_{ak} とする。 $n_k = n_{ak}$ とすれば $V_d(F; T)$ は

$$V_d(F; T) = 2aV_k(F; T)n_k \quad (10)$$

とあらわされる。さて、ある 1 つのキンクが他のある 1 つのアンチキンクに時間 dt の間に出会う確率は $2V_k(F; T)n_k dt$ である。system size が十分大きければキンク対生成と対消滅は釣合って

$$2V_k(F; T)n_k^2 dt = \frac{2}{a}\Gamma_{KP}(F; T)dt \quad (11)$$

となる。すなわち、鎖 (転位) の移動速度 $V_d(F; T)$ は、

$$V_d(F; T) = 2\sqrt{aV_k(F; T)\Gamma_{KP}(F; T)}, \quad (12)$$

キンクの密度 $n_k = n_{ak}$ は、

$$n_k = \sqrt{\frac{\Gamma_{KP}(F; T)}{aV_k(F; T)}}, \quad (13)$$

とあらわされ、転位の移動に対する活性化エネルギーは、キンクの移動に関する活性化エネルギーとキンク対生成に関する活性化エネルギーの和の半分すなわち $(E_a + E_{KP})/2$ となる。図 4 は $V_d(F; T)$ の対数を温度の逆数の関数として描いたものである。黒丸がシミュレーションの結果であり、 $(E_a + E_{KP})/2$ で決まる傾きを持つ直線を描いている。温度の低い領域でシミュレーションと理論結果の傾きは良く一致していることがわかる。

参考文献

- [1] T. Munakata, Phys. Rev. A, **45** (1992) 1230.
- [2] T. Munakata and A. Igarashi, J. Phys. Soc. Jpn. **58** (1989) 4019.
- [3] T. Munakata and A. Igarashi, J. Phys. Soc. Jpn. **59** (1990) 2394.
- [4] A. Igarashi, A. Takahashi and T. Munakata, Computer Aided Inovation of New Materials **2** (1993) 603.
- [5] M. Büttiker R. Landauer, Phys. Rev. A, **23** (1981) 1397.