端に不規則外力を加えた場合の格子振動

鯖　田　秀　樹（京大理）

§　序

ここ数年来、一次元格子の振動の問題は解析的に追求できるためか、いろいろな角度から精力的に研究され、着々と成果が上つている。
ここでは、所謂"深刻な話"から少し深刻さを取り除いた話を述べよう。

格子運動の時間を含む問題の中で、運動方程式の解析的厳密解が得られている場合はあまり多くはない。ここで述べる完全格子の特定の粒子にブラウン運動の理論で周知の不規則力が働くときの振動の問題は厳密に追求できる。しかし統計力学的現象を完全に力学的に追求する立場からは、不規則力を力学的に計算できるものに置換えなければならない。この報告ではまだ話をそこまで深刻にしていない事をことわつておく。

この結果はブラウン運動の systematic force $-\beta v$ の力学的基礎づけと関連した興味ある模型となつている。又、harmonic chain の heat flow の問題とも関連している。

§ 1

ブラウン運動で周知の Langevin 方程式[1)]

$$\frac{dv}{dt} = -\beta v + f(t) \tag{1}$$

における f(t) と同じ性質をもつ ramdom force を考える。すなわち、

$$\overline{f(t_1)\, f(t_2)}^{v_0} = \phi(t_1 - t_2) \tag{2}$$

上式で平均は $t=0$ で、$v=v_0$ で出発した粒子の ensemble を考えて、それについてとる。$\phi(t_1-t_2)$ は t_1-t_2 のみの関数である事を示している。

扱う問題は、半無限の一次元調和完全格子で端に f(t) を働かしたもので

ある。

まず、一般に考えて、有限格子から出発する。運動方程式は、n番目の原子の平衡位置からのずれを u_n と書けば、

$$\ddot{u}_n = \alpha^2 (u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) + \delta_{n,1} f(t) \tag{3}$$

である。$\alpha^2 = K/m$ で、mは原子の質量、Kはフツク・バネの常数である。境界条件としては話を簡単にするために自由端を考える。そのため次の量を定義しておけば、(3)は端の粒子についても成立つ。

$$u_0 = u_1 , \quad u_{N+1} = u_N \tag{4}$$

初期条件としては、全粒子が平衡位置に静止している場合をとる。

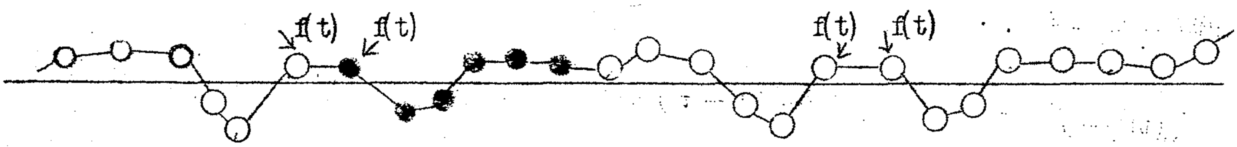
この問題を elegant に解くために、P.C. Hemmer[2] の方法に倣つて上の有限格子に仮想的な粒子を付加して両無限の格子の問題を持つていく。そうすると図から symmetry により、付加した粒子が元からある 1,…,N の粒子の運動を disturb しないためには

$$f_{1+2rN}(t) = f_1(t) \equiv f(t) , \quad f_{2rN+2N} = f_1(t) \equiv f(t) \tag{5}$$

$$(r = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots\cdots)$$

なる random force を各 1 + 2rN 番目，2rN + 2N 番目の粒子に加えておく必要がある。

f_n が u_n ，$\dot{u}_n$ の関数であるときにはこんな考えの許されない事を注意しておく。



そうすると(3)の方程式は、

$$\ddot{u}_n = \alpha^2 (u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) + \sum_{r=-\infty}^{\infty} (\delta_{n,1+2rN} + \delta_{n,2rN+2N}) f(t) \tag{6}$$

$$n = -\infty, \cdots\cdots -1, 0, 1 \cdots +\infty$$

になる。

(6)を解くための母函数

$$F(z,t)=\sum_{n=-\infty}^{\infty} z^n u_n(t) \tag{7}$$

を導入する。[3] (6)の両辺に z^n をかけ、n について和をとると、

$$\frac{d^2}{dt^2}F(z,t)=\left\{\alpha\left(\sqrt{z}-\frac{1}{\sqrt{z}}\right)\right\}^2F(z,t)+\sum_{r=-\infty}^{\infty}\left\{z^{2rN+1}f(t)+z^{2rN+2N}f(t)\right\} \tag{8}$$

初期条件 $u_n(0)=\dot{u}_n(0)=0$ は $F(z,0)=\dot{F}(z,0)=0$ を意味するから、二階の非斉次微分方程式の解き方に従つて、

$$\begin{aligned}F(z,t)&=\sum_{r=-\infty}^{\infty}\left(z^{2rN+1}+z^{2(r+1)N}\right)\int_0^t d\tau\int_0^{t-\tau}dt'\cosh\left\{\alpha\left(\sqrt{z}-\frac{1}{\sqrt{z}}\right)t'\right\}f(\tau)\\&=\sum_{r=-\infty}^{\infty}\left(z^{2rN+1}+z^{2(r+1)N}\right)\int_0^t d\tau\int_0^{t-\tau}dt'\sum_{n=-\infty}^{\infty}J_{2n}(2\alpha t')\,z^n f(\tau)\end{aligned} \tag{9}$$

$N\to\infty$ の時、すなわち半無限格子の場合には、0番目，1番目だけに $f(t)$ が加わつた両無限格子を考えることになるから、

$$F(z,t)=\int_0^t d\tau\int_0^{t-\tau}dt'\sum_{n=-\infty}^{\infty}\left[J_{2(n-1)}(2\alpha t')+J_{2n}(2\alpha t')\right]z^n f(\tau) \tag{10}$$

z^n の係数を比較して、

$$u_n(t)=\int_0^t d\tau\int_0^{t-\tau}dt'\left[J_{2(n-1)}(2\alpha t')+J_{2n}(2\alpha t')\right]f(\tau) \tag{11}$$

時間微分をとれば、

$$\dot{u}_n(t)=\int_0^t f(\tau)\left[J_{2(n-1)}\{2\alpha(t-\tau)\}+J_{2n}\{2\alpha(t-\tau)\}\right]d\tau \tag{12}$$

(12)を平方して平均をとり、$f(\tau)$ に関する仮定、$\overline{f(\tau)\,f(\tau')}^0=\phi(\tau-\tau')$ を使うと、

$$\overline{\dot{u}_n^2(t)}^0=\int_0^t\int_0^t\phi(\tau-\tau')\left[J_{2(n-1)}\{2\alpha(t-\tau)\}+J_{2n}\{2\alpha(t-\tau)\}\right]\left[J_{2(n-1)}\{2\alpha(t-\tau')\}+J_{2n}\{2\alpha(t-\tau')\}\right]d\tau d\tau' \tag{13}$$

§ 2

次に(13)の積分にうつるが、二度変数変換し、 $t\to\infty$ の場合を求める。
$\tau+\tau'=\xi$, $\tau-\tau'=\eta$ に変数変換し、 $J_{2n}\{2\alpha(t-\tau)\}$ 等を η について展開し、２次の項まで考える。

$$\overline{\dot{u}_n^2}^0=\frac{1}{2\alpha}\int_0^\infty dx\int_{-\infty}^\infty d\eta\,\phi(\eta)\left[\{J_{2n}+J_{2(n-1)}\}^2+\alpha^2\zeta^2\{J_{2n}+J_{2(n-1)}\}(J''_{2n}+J''_{2(n-1)})-(J'_{2n}+J'_{2(n-1)})^2\}\right] \quad (14)$$

ダツシユは $x=2\alpha(t-\frac{\xi}{2})$ についての微分である。
モーメントを $q_0=\int_{-\infty}^\infty\phi(\eta)\,d\eta$, $q_2=\int_{-\infty}^\infty\eta^2\phi(\eta)\,d\eta$. と書き、部分積分により、

$$\overline{\dot{u}_n^2}^0=\frac{q_0}{2\alpha}\int_0^\infty\{J_{2n}+J_{2(n-1)}\}^2dx-\alpha q_2\int_0^\infty\{J'_{2n}+J'_{2(n-1)}\}^2dx \quad (15)$$

(15)の各分積は漸化式を使つて計算できて、（Struve の積分）

$$\int_0^\infty\{J_{2n}(x)+J_{2(n-1)}(x)\}^2dx=\frac{4(2n-1)^2}{\pi(2n-\frac{1}{2})(2n-\frac{3}{2})} \quad (16)$$

$$\int_0^\infty\{J'_{2n}+J'_{2(n+1)}\}^2dx=\frac{2}{\sqrt{\pi}}\left[\frac{n^2}{(2n+\frac{1}{2})(2n-\frac{1}{2})}+\frac{(n-1)^2}{(2n-\frac{3}{2})(2n-\frac{5}{2})}-\frac{4n(n-1)}{3\sqrt{\pi}(2n-\frac{1}{2})(2n-\frac{3}{2})}\right] \quad (17)$$

特に $\phi(\eta)=q_0\,\delta(\eta)=q_0\,\delta(\tau-\tau')$ のときには２次のモーメントは考えなくてもよいから

$$\overline{\dot{u}_n^2}^0=\frac{2}{\pi}\frac{q_0}{\alpha}\frac{(2n-1)^2}{(2n-\frac{1}{2})(2n-\frac{3}{2})} \quad (18)$$

と簡単な答が得られる。

§ 3

(18)で $t\to\infty$ での各粒子の平均エネルギーが求まつたわけだが、nについてどう変化するかを調べてみる。特に、$n=1$ の近傍と $n\to\infty$ の場合を考えると

$$\overline{\dot{u}_1^2}^0=\frac{8}{3\pi}\frac{q_0}{\alpha},\quad \overline{\dot{u}_2^2}^0=\frac{36}{35}\cdot\frac{2}{\pi}\frac{q_0}{\alpha},\quad \overline{\dot{u}_3^2}^0=\frac{100}{99}\cdot\frac{2}{\pi}\frac{q_0}{\alpha} \quad (19)$$

鯖田秀樹

$$\lim_{n\to\infty} \overline{\dot{u}_n^2}^0 = \frac{2}{\pi}\frac{q_0}{\alpha} \tag{20}$$

となり、microscopic local temperature が n＝1の近くでだけ高くなつていて、少し離れると殆んど皆等しくなつている事がわかる。これは f(t)の中には band の外の振動数の振動に対応する力が混つていて、これは格子の中を伝わらなくて、n＝1の近くに localize しているためと考えられる。

ブラウン運動の場合[1]には

$$\lim_{t\to\infty} \overline{\dot{u}^2}^{\dot{u}_0} = \frac{q_0}{2\beta} = \frac{kT}{m} \tag{21}$$

なる性質があつた。

f(t)の働く n＝1の粒子の運動をブラウン運動と等価視してβを求めてみると、

$$\frac{q_0}{2\beta} = \frac{8}{3\pi}\frac{q_0}{\alpha} = \frac{kT}{m} \quad \text{から} \quad \beta = \frac{3\pi}{16}\alpha \tag{22}$$

これから、harmonic force によつて右側の格子へエネルギが移つていくのは、$-\beta\dot{u}_1 = -\frac{3\pi}{16}\alpha\dot{u}_1$ なる粘性力が n＝1の粒子に働いている 状態と同じであるという解釈ができる。

つぎに、energy flow の計算結果を述べる。（２次まで） これも上と同じく $t\to\infty$ の場合には、

$$\overline{-K\dot{u}_n(u_n - u_{n-1})}^0 = K\left(\frac{q_0}{2\alpha^2} - \frac{q_2}{4}\right) \tag{23}$$

ただし、n＞1のときのみ計算可能。

この結果を吟味してみると、$t\to\infty$ では n によらない定常流が流れていて、数値的にも、柏村－寺本[4]の Heat flow の問題と類似した結果が得られている。

この事と関連して、f を熱槽と考えられないかという意図で原子数を１，……，Nにして、１とNに f，f′ 各各加えた時の振動を調べた。

結果は否定的で $\overline{\dot{u}_n^2}^0$ (n＝1，……，N）は $t\to\infty$ で発散する事が示される。

それで、 f(t) と $(-\beta\dot{u})$ を同時に加えると発散は防げるが、計算は大変面倒になる。

§ 結 論

ブラウン運動における f(t)を半無限調和格子の一端に働かす。粘性力として現われる systematic force $(-\beta v)$ はブラウン運動の理論では力学的基礎づけはない。

§ 3で述べた解釈に従うと、この systematic force は各原子間に働く調和力の全体である。

それに対応するβが求められた。ブラウン運動での dissipative part が半無限の振動子系で表現され得ることがわかつた。

終りに常に御指導をいただき、この論文を書くことをおすすめ下さつた寺本 英先生に感謝いたします。

文 献

1) G.E. Uhlenbeck and L.S. Ornstein, Phys. Rev. 36 (1930), 823.
2) P.C. Hemmer, "Dynamic and Stochastic Types of Motion in the Linear Chain" (1959), thesis.
3) 寺本 英. 物性論研究 2集 8巻 5号 (1960), 385.
4) S. Kashiwamura and E. Teramoto, Prog. Theor. Phys. Suppl. No.23 (1962), 207.