様式Ｃ－１９

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成２５年 ３月３１日現在

機関番号：13101
研究種目：基盤研究（ｃ）
研究期間：２０１０年度 ～ ２０１２年度
課題番号：２２５４０３８５
研究課題名（和文）新しい特異格子系における長波長音響フォノンの局在の研究

研究課題名（英文）Localization of long-wavelength acoustic phonons in a new anomalous lattice

研究代表者
合田 正毅（GODA MASAKI）
新潟大学・自然科学系・名誉教授
研究者番号：60018835

研究成果の概要（和文）：放物型分散曲線を持つ特異格子系に少しの乱れが入った時に極めて局在しにくいはずの長波長音響フォノンが強く局在するであろうことを定量的に明らかにするために、充分長い１次元特異格子系と帯状および角柱状の擬１次元系の波動の減衰率を高性能 PC と高効率プログラムにより計算した。その結果、全ての場合について、長波長音響フォノンが特異的に局在することを減衰率の振動数依存性から明らかにした。しかし、帯状および角柱状の擬１次元系の帯の幅および角柱の幅の∞極限である、２次元および３次元極限での長波長音響フォノンの減衰率は格子定数の逆数を単位として 10^-5 以下（局在長は、格子定数を１nm として、0.1mm 以上）であり、数値計算の精度が一桁以下であったために、その値を定量的に確定するに至らなかった。

研究成果の概要（英文）：We numerically calculated the damping rate γ of acoustic phonons in an anomalous solid with parabolic phonon dispersion relation, in the cases of one-dimensional string (of length L), quasi-one-dimensional strip (of width W and length L), and quasi-one-dimensional rod (of cross section W×W and length L). In all cases, we got anomalous peaky structure in the frequency (ω) dependence of the damping rate γ in the low frequency region, which proves a strong localization character of the long-wavelength acoustic phonons. However, we could not determine the numerical value of γ(ω,W→∞,L) in the limiting cases of two- and three-dimensions, because the peak values are of the order of 10^-5 or less in the unit of the inverse of the lattice constant. That means the localization length of the long-wavelength acoustic phonons in the anomalous disordered system is of the order of 0.1mm or more, in the cases of two- and three-dimensions, assuming that the lattice constant is 1nm.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合 計
平成２２年度	1,000,000	300,000	1,300,000
平成２３年度	800,000	240,000	1,040,000
平成２４年度	800,000	240,000	1,040,000
年度			
年度			
総 計	2,600,000	780,000	3,380,000

研究分野：数物系科学
科研費の分科・細目：物理学・　数理物理・物性基礎
キーワード：特異格子、音響フォノン、音波、局在、音響絶縁体

１．研究開始当初の背景

ランダム格子系の長波長音響フォノンは、１,２次元では局在するが局在長が極めて長く、現実の試料の大きさでは極めて良く伝わり、また３次元の長波長音響フォノンは極めて局在しにくい。しかし、申請者等は波束の群速度がゼロであるフラットバンド系では、３次元でも無限小のランダム摂動で強い局在が起きることを提唱して来た。この強い局在は一般性のあるものであり、電子系に限らずにフォノン系についても成立する。波数の２乗に比例する放物型の振動数-波数分散曲線を持つバルクの音響フォノン系の波束の群速度は波数に比例し長波長極限（Γ点近傍）でゼロに漸近する。従って、この放物型特異格子系の長波長の音響フォノンは常識に反して強く局在するのではないか？　これが申請者の本研究への問題意識である。

２．研究の目的

本研究は、通常のランダム一様固体中を一般に極めて良く伝わる長波長（低振動数）領域の音響フォノン（音波、超音波）が、申請者らがミクロな立場から新たに提唱している特異格子系でいかに伝導性を失い絶縁性を獲得してゆくか、を波動の減衰率の数値計算により明らかにして行こうとするものである。

３．研究の方法

特異格子系の長波長音響フォノンの局在傾向は、波動関数の広がりの体系サイズ依存性と波動伝播の計算機シミュレーションで定性的に確認出来ている。本研究では、充分長い１次元特異格子系と帯状および角柱状の擬１次元系の波動の減衰率を、波動の伝達行列の積の QR 分解により、数値計算して、減衰率の逆数である局在長を定量的に求める方法を採用した。

具体的には、１次元系では、格子点上の原子質量Ｍが１で長さが格子定数のＬ倍の、原子間最近接相互作用 K1（平均値は k1），第２近接相互作用 K2（平均値は k2）の調和格子系の波動の（４×４の）シンプレクチック対称性を持つ伝達行列のＬ個の積の固有値の log の中から正の最少固有値γを、行列の績の QR 分解により求める。波動の振動数をωとして、最近接相互作用は k1 の周りに±0.5D1，第２近接相互作用は k2 の周りに±0.5D2，独立一様分布でランダムに揺らぐものとする。独立なサンプルをＮ個用意し、波動の減衰率を表す
γ（ω, K＝{k1,D1,k2,D2｝, N, L）は、
波動の減衰率γの精度を、
σγ/γ≡（△γ）/（√N×γ）　として、
精度が 10^-4 を保証するように系の長さＬを（L=10^5～2×10^7 の範囲で）定めた。相互作用に揺らぎの無い規則正常格子系は K={4,0,1,0} とし、同様に規則特異格子系は K={4,0,-1,0} とした。

2次元は正方格子系とし、計算の簡単のため、相互作用（ばね定数）が方向に依らないローゼンストックモデルを考えた。K1 は最近接原子間の相互作用であるが、K2 は、正方格子の第2近接である正方ユニットセルの対角方向の原子との相互作用ではなく、最近接原子の延長線上の2倍の距離にある原子との相互作用とした。この格子は明らかに構造不安定であるが、2次元系の格子振動の本質は変わらないであろうことを期待して、この簡単なモデルを採用した。1次元系の場合と同様に、原子質量 M=1、ばね定数 K＝{k1,D1,k2,D2}とし、規則正常格子を K={4,0,1,0} とし、規則特異格子は K={4,0,−1,0} とした。波動の伝達行列の大きさは（4W×4W）であり、帯の幅Ｗの増大に伴ってＷに比例して大きくなる。

3次元格子系は立方格子とし、やはり簡単のため、相互作用（ばね定数）が方向に依らないローゼンストックモデルを考えている。2次元の場合と同様に、K1 は最近接原子間の相互作用であるが、K2 は、立方格子の第2近接である立方ユニットセルの対角方向の原子やセルの正方面の対角方向の原子との相互作用ではなく、最近接原子の延長線上の2倍の距離にある原子との相互作用とした。この格子も明らかに構造不安定であるが、3次元系の格子振動の本質は変わらないであろうことを期待して、この簡単なモデルを採用した。1次元系の場合と同様に、原子質量 M=1、ばね定数 K＝{k1,D1,k2,D2}とし、規則正常格子を K={16,0,4,0} とし、規則特異格子は K={16,0,−4,0} とした。固有振動数ωは（K/M）の平方根でスケール出来るので、この二つの3次元格子系も、スケール後はそれぞれ、

K={4,0,1,0}、K={4,0,−1,0}，系と等価であり、振動数 ω は2倍になるが、対応する ω での減衰率 γ は同じ値になる。波動の伝達行列の大きさは (4W^2×4W^2) であり、角柱の幅 W の増大に伴って、W^2 に比例して、急速に大きくなる。

４． 研究成果

放物型分散関係を持つ、充分長い１次元特異格子系と帯状の擬１次元系および角柱状の擬１次元系の全ての場合について、長波長音響フォノンが特異的に局在することを減衰率の振動数依存性から明らかにした。しかし、帯状の擬１次元系の２次元極限（帯の幅→∞）および角柱状の擬１次元系の３次元極限（角柱の幅→∞）での長波長音響フォノンの減衰率は格子定数の逆数を単位として 10^-5 以下（局在長は、格子定数を１nm として、0.1mm 以上）であることが分かり、値の数値計算の精度が一桁以下であるために、その値を定量的に確定するに至らなかった。以下のその詳細を記す。

1次元格子系

１次元ランダム正常格子、K={4,D,1,D/4}，D=4,2,1，についての、波動の減衰率 γ を計算精度 10^−4 で数値計算し、γ(ω) を求め lnγ(lnω) を Fig.1に示した。

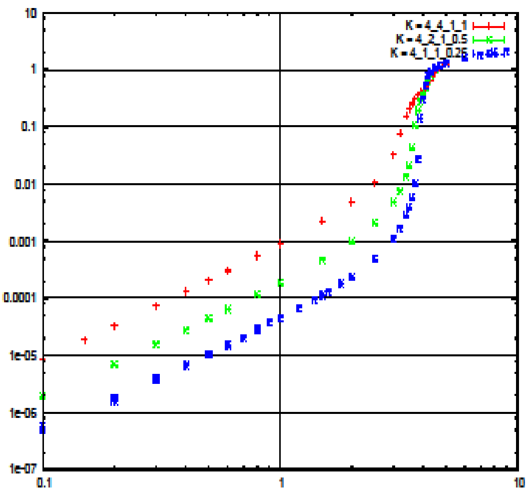

Fig.1

1D ランダム正常格子の lnγ(lnω)の全体図.
K={4,4,1,1}, {4,2,1,0.5}, {4,1,1,0.25}.

この系は音響フォノンのみの体系であり、の D=0 の規則系のバンド端は4(×(1/√M))である。不規則性 D を入れると、ばね定数の乱れにより、バンド端は4より少し大きくなる。Fig.1に見られるように、バンドの中では、振動数 ω が小さくなるに従って γ は ω の冪関数で小さくなり、ゼロに漸近していることが分かる。この γ(ω) の冪構造を、比較的低い振動数領域 ω＝0〜1.0 の範囲で顕著である。ω＝0〜1.0 の範囲で lnγ(lnω)の数値データーを直線による最少2乗法で解析すれば、誤差1%以内(精度 10^−2)で冪指数2が得られる。つまり、

$$\gamma \propto \omega^2 \quad \text{あるいは} \quad \gamma = a0 \times \omega^2. \quad (1)$$

となった。ここに、係数 a0 は D に依存する。

１次元ランダム特異格子、K={4,D,−1,D/4} D=4,2,1,0.5，についての γ(ω) の全体像を Fig.2 に示した。

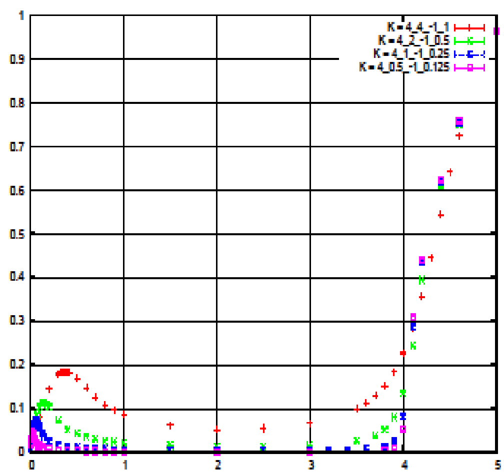

Fig.2

1D ランダム特異格子の γ(ω) の全体図.
K={4,4,-1,1}, {4,2,-1,0.5}, {4,1,-1,0.25}, {4,0.5,-1,0.125}.

ω→0 で γ∝ω^2 である正常格子の場合と異なり、特異格子系では、低振動数領域で振動数 ω が減少するに従い減衰率 γ が増大して、コブを作っていることが分かる。この図の詳細から、減衰率 γ のピーク値を γp(D)，そのピーク値を取る ω の値を ωp(D) とすると、D を陰パラメーターとして、γp(ωp) はやはり冪関数になり、冪は誤差数%で (1/2) となった。つまり、

$$\gamma p \propto \omega p^{(1/2)} \quad \text{or} \quad \gamma p = b0 \times \omega^{(1/2)}. \quad (2)$$

となった。ここに、係数 b0 はおよそ 0.3 である。また、

$$\gamma p(D) = 0.0722 \times D^{(2/3)}, \quad (3)$$

$$\omega_p(D)=0.0589\times D^{(4/3)}, \qquad (4)$$

が確かめられている。(3), (4) から D を消去すれば、(2) が得られる。

関係式(1)と(2)の冪指数の違いは、画期的な結論を与える。すなわち、不規則性の強さ D を小さくして行き、ωp(D) が 10^2Hz～10^4Hz の音波領域に入る状況を想定すれば、関係式(1)と(2)の冪指数の違いから、この充分小さなωp(D)に対応するγp(D)は充分ゆっくり小さくなる。この特異格子系で数値を確かめれば、格子定数を 1nm、デバイ振動数を 10^{13}Hz と仮定して、(2)式から音波領域の波動の局在長は 10μm 程度となる。

2次元格子系

2次元正方格子系の波動の減衰率を調べるために、先ず、幅 W(周期的境界条件)で充分長い(長さ L の)帯状(境界条件を考えれば円筒状)の準1次元系を考察して、次に得られた γ(ω,K,1/W)の W→∞ ((1/W)→0) 極限を、

$$\gamma(\omega,K,1/W)=\gamma(\omega,K,1/W\to 0)+d(\omega,K)\times(1/W)^{\alpha(\omega,K)}, \quad (5)$$

なる関数形を想定して求める。帯の幅は W=20 ～140 とし、γの計算精度は、L=10^5～2×10^7 として二桁の精度を保つように数値計算を実行した。K={4,8,2,2}のランダム正常格子系の W=20～140 の場合の lnγ(lnω)を1次元格子系の場合と同様に調べた。2次元系では、D=0 での2次元の波数空間での分散関係はバンド端で波数空間のブリリュアンゾーン境界からくる構造を持つために、バンド端(ω＝4√2 ≅ 5.65685 (×(1/√M)))近くでは1次元の場合とやや異なるが、低振動数領域ではやはり振動数の冪となっていることが予想され、lnγ(lnω)図からはそのことが伺われる。しかし2次元系の場合には、低振動数領域でのγ値が小さくなるためにγ値の精度が確保されず、冪指数を決めるには至らなかった。

K={4,8,-1,0}のランダム特異格子系の W=20 ～140 の場合のω＝0～5 の範囲でのγ(ω)の外観を Fig.3 に示した。1次元系の場合と同様に、低振動数領域にコブが出来ており、その領域の図の詳細からは、W の増大に連れてのγの単調な減少傾向が伺える。 そこでγ-(1/W)プロットを作成したところ、γは(1/W)にほとんど比例して(α＝～1で) (1/W)→0 の極限に向かっていることが分かった。

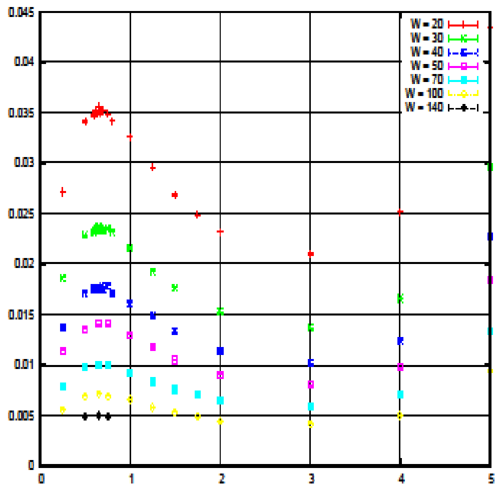

Fig.3

2D ランダム特異格子の γ(ω) のバンド内図.
K={4, 8,-1,0}, W=20, 30,40,50,70,100,140 .

そこで、式(5)を採用して最少二乗フィッティングにより2次元系の波動の減衰率であるγの W→∞極限であるγ(ω,K,1/W→0)を求めた。その結果、αに関しては二桁の精度が出るが、低振動数領域のγのピーク(Fig.3参照)の W→∞極限であるγ(ω,K,1/W→0)については、値が 10^{-5} のオーダー以下となり、数値計算の精度は1(つまりゼロ桁)のオーダーとなり、たいへん残念ながら、値を決めるに至らなかった。この極限値γ(ω,K,1/W→0)が決まって初めて1次元のようなγp-ωp の関係を2次元系で調べることが出来るので、本研究のアプローチはこの時点で行き詰まることとなった。3年間の本研究の期間の内、後半の1年以上はこの計算精度を上げることに費やされたが、困難は本質的なものであり、通常の PC の数十倍～数百倍の計算スピードを持つ高性能 PC5台以上を用いても、この困難は克服できなかった。バンド端付近の振動数領域(規則系のバンド端は ω≃ 5.66 なので、不規則系のそれはもう少し大きい)では、γ(ω,K,1/W→0) は確かな精度で求められる。

10^{-5} のオーダーぎりぎりのγの数値計算の精度を二桁上げるには、現行の 10^4 倍の計算量が必要であり、現状ではスパコンを用いても精度を二桁上げるのは困難と思われる。計算機の性能が画期的に向上する時期を待つか、計算量が飛躍的に増大するのを防ぐ新たな方策を考案するか、が残された道である。

3次元格子系

3次元系でも、γ(ω,K,1/W) W=7,8,9,10 を典型例 K={16,D,-4,D/4} D=16 について数値

計算し、式(5)により、γ(ω,K,1/W→0)を求めることを試みた。Fig.4 にγ(ω)のω＝0～5 の範囲での全体像を示した。

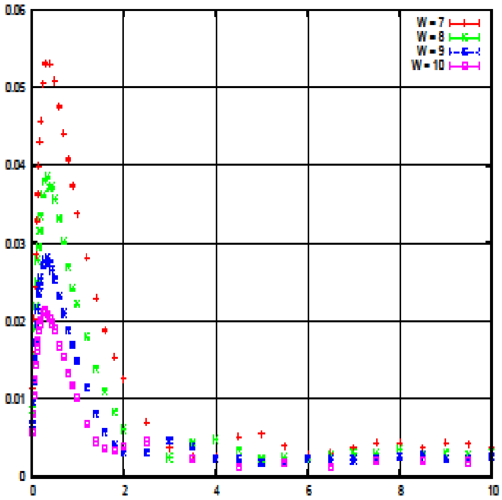

*Fig.*4

３D ランダム特異格子の γ(ω) のバンド内図.
K={16,16,-4,4} , W=7,8,9,10 .

D=0 の規則系のバンド端は 2×2√3 ≅ 13.856 である。W が有限の擬1次元系では、2次元の場合と同様に、やはり低振動数領域にγのコブが出来、コブの値γp とコブの位置ωp は W の増加とともに単調に小さくなってゆくことが、読みとれる。

そこで、γ−(1/W)プロットを見てみると、2次元の場合はα＝～1であったが、3次元ではα＞2であり、α＝2.3～2.5 であった。2次元の場合と同様に3次元でもγ(ω,K,1/W→0) は、やはり値が小さすぎて、計算精度が一桁以下になり、数値計算をこれ以上進めるに至らなかった。

5. 課題

フラットバンド局在に起因する特異ランダ格子系の低振動数音響フォノン(音波)の局在は、1次元では明確に確認出来たが、2次元と3次元系については、対応する擬1次元系の場合の低振動数音響フォノン(音波)の局在が確認できただけで、真の２次元特異ランダム系と3次元特異ランダム系の低振動数音響フォノン(音波)の局在は確認できなかった。この原因は、数値計算の精度不足によるものであり、現時点では 2･3 次元ランダム特異格子系の低振動数音響フォノンの局在の有無を論じるに至っていないことを意味する。

本研究は、線形な特異格子系の研究であるが、純粋な線形特異格子系(本報告書の例では、K={4,0,−1,0} 等の系)は熱力学的に不安定であることには注意が必要である。適切な不規則性 D があることにより、長波長の連続体極限での振動数(ω)−波数(k)分散関係はΓ点近傍で放物型でなく線型になり(ω∝波数)、Γ点近傍から来るフォノンのスペクトル次元は正常なものとなり、原子の平均二乗振幅に寄与する赤外発散は無くなり、熱力学不安定性は無くなることに留意する必要がある。さらに、純粋な線形特異格子系でも、歪モードのような非線形項による安定化のメカニズムを検討することが、課題として残っている。

５．主な発表論文等

（研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線）

〔雑誌論文〕（計１件）

(1) M. Goda, H. Hozojima, K. Oshita, M. Okamura, and S. Nishino, Damping of Long-Wavelength Acoustic Phonons in a Disordered Anomalous Solid with Parabolic Phonon Dispersion. Chinese Journal of Physics, 査読あり Vo.47, No.1, pp480~489 (2011).

〔学会発表〕（計２件）

(1) M. Goda, H. Hozojima, K. Oshita, M. Okamura, and S. Nishino, Damping of Long-Wavelength Acoustic Phonons in a Disordered Anomalous Solid with Parabolic Phonon Dispersion. Int.Conf. PHONONS2010 (2010, Taipei). 2010年4月21日

(2) 合田正毅、門奈孝明, ランダム特異格子系における音響フォノンの伝導III. 日本物理学会2011年秋季大会 (2011,富山大) 2011年 9月23日

６．研究組織

(1)研究代表者

合田 正毅 (GODA MASAKI)

新潟大学・自然科学系・名誉教授

研究者番号：60018835