

非線型の格子振動において
保存される運動

東教育大 物理 戸田盛和

§1. 序

質点が線型のばねで結ばれた体系の振動は基準振動に分けられ、各基準振動は独立である。すなわち、ある基準振動と励起した場合、エネルギーが他の基準振動に移っていくことはない。体系全体としてみれば、調和振動子系は平衡分布に近づくことがあり得ないので、明らかに非エルゴード的である。多くの結晶の格子振動の比熱などが調和振動子模型でよく表わされるにしても、熱平衡への近接の問題にはこの模型で無視されている非線型項の本質的な役割をするところであると多くの人が考えこきたことである。しかし非線型項が入ると計算が本格的に難しくなるので、非線型項は体系のエルゴード性を保証し、熱平衡への近接、エネルギー分配を行わせるものと仮定されてきた。

Fermi, Pasta, Ulam (FPU)¹⁾ は、この予想を計

算機実験により実証し¹⁾とした。しかしこの実験の結果は予想に反し、彼等が調べた1次元の結晶格子では非線型項は体系のエルゴード性を導かないと思われずに終わった。この結果は1955年に報告された²⁾が、1961年以來、さらにFord や Jackson 等により吟味され、1次元の非線型格子は線型格子の性質を驚くべきほどに保持していることが明らかにされた。Toda²⁾は周期条件をつけた場合、時間的に保たれり運動、すなわち基準振動とよんでよい¹⁾な振動があり、これは非線型項を0にした極限では線型格子の基準振動のすべとをつくすことを示した。Saito³⁾は格子の粒子の速度の相関を計算機で調べ、1次元非線型格子が実験の範囲の範囲では熱平衡に近くなることを示している。2次元、3次元でこのように非エルゴード的とみられる現象がどうなるか問題である。しかし、ここでは1次元の場合に限って、非線型の格子振動を調べてみよう。

§2. 非線型格子

質点のばねをつなげた1次元の1次元の格子を考える。 n 番目の質点の位置を Y_n とし、 $r_n = Y_n - Y_{n-1}$ によって離れた相隣り質点間の相互作用のエネルギーを $\phi(r_n)$ とする。質点の質量を m とすると、運動方程式は

“振幅数” ν と “波長” λ とは “分散関係”

$$(2.7) \quad 2\pi\nu = \left\{ \frac{1}{\sin^2 \frac{2\pi}{\lambda}} - 1 + \frac{E}{K} \right\}^{-1/2}$$

と関係が与えられる。楕円関数, 積分の母数 k は λ あるいは ν と関連して振幅を定める。 $x = 2\pi/\lambda$ を一定に $1 \rightarrow \infty$ の極限をとるとパルスの形

$$(2.8) \quad e^{-bx_n} - 1 = \sinh^2 x \cdot \operatorname{sech}^2(xn - \beta t)$$

となる

$$(2.9) \quad \beta = \sinh x$$

を得る。このパルスの形, あるいは孤立波は (格子) ソリトンといつてよいと思われ性質をもっている。すなわち, 2個の孤立波が衝突すると, たがいに中を通り抜けて, はじめの孤立波に戻って離れ去る。独立に存在としての性質をもつ。

実際

$$(2.10) \quad e^{-bx_n} - 1 = \frac{d^2}{dt^2} \log [A \operatorname{cosh}(xn - \beta t) + B \operatorname{cosh}(\mu n - \gamma t)]$$

は $x = \mu$ の場合, 上の孤立波を与えられ, $x \neq \mu$ の場合は一般に2個の孤立波, あるいはその重畳した状態を与える。ただし, β, γ と B/A とは x, μ の関数であり, 2つの場合がある:

$$(i) \quad \beta = 2 \operatorname{sinh} \frac{\mu}{2} \operatorname{cosh} \frac{\kappa}{2}, \quad \gamma = 2 \operatorname{sinh} \frac{\kappa}{2} \operatorname{cosh} \frac{\mu}{2},$$

$$B/A = \operatorname{cosh}(\kappa/2) / \operatorname{cosh}(\mu/2)$$

2の場合、2個のソリトンは互いに逆向きに進む。格子端の反射は、 κ の反射は μ の波の半返しである。

$$(ii) \quad \beta = 2 \operatorname{sinh} \frac{\kappa}{2} \operatorname{cosh} \frac{\mu}{2}, \quad \gamma = 2 \operatorname{sinh} \frac{\mu}{2} \operatorname{cosh} \frac{\kappa}{2},$$

$$B/A = \operatorname{sinh}(\kappa/2) / \operatorname{sinh}(\mu/2)$$

2の場合、2個のソリトンは同じ向きに進む。 κ と μ とが小さいときは後に述べる KdV 方程式の 2個のソリトンを含む解と一致する。

§3. Korteweg-de Vries 方程式

h を格子間の距離 (格子間隔) とし、 $x = nh$ を座標と看做し、連続体近似に移す。 $r(x, t) = r_n(t)$ とし、微分を添字で表わすと連続体近似は、例之は

$$(3.1) \quad r_{tt} - c_0^2 \{ r_{xx} - b(r^2 + r r_{xx}) \} = \underline{x}^2 r_{xxxx}$$

となる。ただし $c_0 = h \sqrt{\frac{ab}{m}}$ は長波長、極限の波の速度、 $\underline{x}^2 = c_0^2 h^2 / 12$ である。

c_0 と同じ座標系 ξ で波を追いかける:

$$(3.2) \quad \begin{cases} \xi = x - c_0 t, \\ \tau = \frac{\pi}{2} \epsilon c_0 (a_y/a_u) t, & (\epsilon = -bh) \\ u = -\frac{h}{\pi} (a_u/a_y) \tau \end{cases}$$

とあると、 $|\epsilon| \ll 1$ の極限で

$$(3.3) \quad u_\tau + u u_\xi + \delta^2 u_{\xi\xi\xi} = 0$$

$$\text{ただし} \quad \delta^2 = (h^2/12\pi\epsilon)(a_u/a_y)$$

を得る。2つの方程式を Korteweg-de Vries (KdV) 方程式⁴⁾と見なす。格子振動の式を KdV 方程式と等しく変換の係数は一意的に決まる。上の変換は $t=0$ にあつた右へ進んだ波

$$y_n|_{t=0} = a_y \sin \pi x$$

を

$$u|_{t=0} = a_u \cos \pi \xi$$

に移すための ξ にとられたものであつた。

KdV 方程式に u の代わりに $U = -u$ と置くと、

$$(3.4) \quad U = -u$$

とある、固有値方程式⁵⁾

$$(3.5) \quad 6\delta^2 \psi_{\xi\xi}^{(2)} - (U - \lambda_\ell) \psi^{(2)} = 0 \quad (U = -u)$$

を与えたと、固有値 λ_ℓ は時間には依存しない。 u は KdV
 にしたときの解として、一般には ξ のハミルトンの分岐 (soliton)
 (2分のみ)。各ソリトンは ξ の

$$(3.6) \quad u_\ell = \underline{u} + A_\ell \operatorname{sech}^2 \left\{ (\xi - \tilde{c}_\ell \tau) / \Gamma_\ell \right\}$$

の形をとる。 \tilde{c} は速度 \tilde{c} と振幅 A_ℓ とは

$$(3.7) \quad \tilde{c} = \underline{u} + A_\ell/3, \quad A_\ell = -2(\lambda_\ell + \underline{u}) > 0$$

で与えられた。

例えば初期条件 ($t=0$) とし

$$(3.8) \quad u|_{t=0} = a_u \cos \pi \xi \quad (0 \leq \xi \leq 2)$$

を与えたとしよう。 λ_ℓ を求めるには U と $(2 - u)|_{t=0}$
 を用いるとよい。 λ_ℓ は Mathieu 方程式の固有値となる。
 周期条件 ($0 \leq \xi \leq 2$) をとるとよい。 $-u|_{t=0}$ は $\xi=0$
 での \min とする。 $\xi=2$ まで展開し

$$(3.9) \quad U = -u|_{t=0} = -a_u + \frac{a_u \pi^2}{2} \xi^2$$

と置く。 δ が小さいときは、固有値 λ_ℓ と近似値

$$(3.10) \quad \lambda_l = -a_u + (l + \frac{1}{2}) \sqrt{12} \delta^2 \sqrt{a_u} \pi^2$$

$$(l = 0, 1, 2, \dots)$$

が得られた。

Zabusky と Kruskal⁽⁶⁾ はこの例の場合の計算機実験を行なった。その結果によると $l = 0, 1, \dots, 8$ のソリトンが ± 2 の z 軸に沿って 2 方向に移動する。2 方向の速度は $\delta = 0.0222$, $a_u = 1$ とした。これはソリトンは右向きに左へ運動し、相互作用と衝突通過の際に行う。衝突の際のソリトンの相互の加速と無視すれば、ソリトンは全く独立な存在として進行することになる。

各ソリトンの速度は上の近似では等差級数になり、その差は一定値

$$(3.11) \quad \Delta \tilde{c} = \frac{1}{3} (l + \frac{1}{2}) \sqrt{12} \delta^2 \sqrt{a_u} \pi^2$$

である。これは周期の長さを 2 の空間で運動するとき、時間

$$(3.12) \quad \tau_R = \frac{2}{\Delta \tilde{c}} = \frac{\sqrt{3}}{2\pi \delta \sqrt{a_u}}$$

の後は相互の関係は、12 の場合と同様に成る。 $\delta = 0.0222$,

$a_u = 1$ とすると再帰時間 τ_R は $\tau_R \approx 40/\pi$ となる。

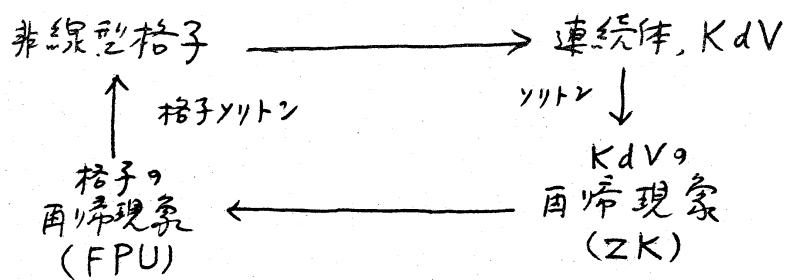
実際に得られた再帰時間は $\tau_R = 30.4/\pi$ である。この不

一致の原因は、ソリトンの衝突通過の際、たがいに加速し合っていることである。

§ 4. 結び

上に示したように格子体系は漸近的に KdV 方程式に変わることになった。KdV 方程式は再帰現象を示すことと計算機実験で示され、これはソリトンの運動として理解できた。

一方で、格子体系もソリトンの独立性を保證している（2個のソリトンの衝突してもはじめの順番に序）ことと § 1. で示され、再帰現象は FPU をもとにした実験で示されている。したがって、格子体系の再帰現象も格子ソリトンの立場から理解できると考えられる。上の推論を図示すると



といふ風になる。

KdV の再帰現象 (Z.K.) は $0 \leq \alpha \leq 2$ の周期的空間で行われた実験である。241 に相当する非線型格子の実験は残念ながらまだない。もし $0 \leq \alpha \leq 2$ の空間で非線

型格子の周期条件の下での実験があったならば、その帰還時間
 間は t と τ との交換式により下の式に求められる:

$$(4.1) \quad t_R = \tau_R / \frac{\pi}{2} \in C_0(a_y/a_n) \\
 = \frac{3}{\pi^{3/2} \sqrt{2} a_y} \frac{N^{1.5}}{\alpha^{0.5}} t_L$$

ただし $t_L = 2/c_0$ は「線型周期」であり、 $\alpha = |b|/2$
 は非線型項の定数であり。2の式は格子ソリトンの衝突、
 際の加速を無視し、初期条件として一方向の進行波を

$$(4.2) \quad y_n \Big|_{t=0} = a_y \sin \pi x$$

の波型をとるときに適用される近似的な帰還時間である。こ
 だし $0 \leq x \leq 2$ の周期条件をとり、

$$(4.3) \quad x = \frac{n}{N}, \quad h = \frac{1}{N} \ll 1, \quad (N \gg 1)$$

とすれば、

FPUの実験は固定端の実験である。すなわち

$$(4.4) \quad y_0 = y_N = 0$$

とし、初期条件は

$$(4.5) \quad y_n \Big|_{t=0} = a \sin \pi x, \quad \dot{y}_n \Big|_{t=0} = 0$$

であつた。FPUは進行波でなく定常波の場合である。

もしも定常波を逆向きの2個の進行波の重ね合わせと解釈すれば、非線型の場合も許さないとすれば、FPUの実験は定常波の振幅が1であり、進行波の振幅は

$$(4.6) \quad a_y = \frac{1}{2}$$

と考へられる。これを上式に入れれば周期時間と(2)

$$(4.7) \quad t_R/t_L \cong 0.6 N^{1.5} / \alpha^{0.5}$$

を得る。一方でZabuskyはFPUの実験などから経験式と(2)

$$(4.8) \quad t_R/t_L = 1.42 N^{1.38} / \alpha^{0.5} \quad (N=16 \sim 64)$$

を得ている。2つの式は t_R の大きさと1.2少し異なるが、程度と傾向とはよく似ている、上の解釈が正しいと考へられることを示している。

上述のこととをまとめると、非線型格子の振動は下記のような異質で、非エルゴード的であるようにみえよう：

その一つは、Todaが示したように形を変えながら進行波、すなわち基底振動としての運動も存在すること。

また、FPUが示したような再帰現象があること。

Fordらの実験を参考にすると、上の基底振動は、少く

らの変形させても、実験は時間あたりに大きくならぬといふ意味で安定であるように思われた。

その再帰現象は、格子ソリトンの運動として解釈できることわかった。しかし同時に、初期の波から発生するソリトンの大きさ、速度、および初期条件によるものであり、したがって再帰現象が起るかどうかは初期条件に依存する筈であるといえる。計算機実験で示すこの再帰現象が着目のもので、そのことは近似的なものか、は尚保留しなくてはならぬ。いつかにしてはソリトンの相互作用をもっと正確に吟味（なくてはならぬ）。

強い揺動はストカステックな運動——格子の乱流運動——を引き起こすといふ話もある。^{?)}しかしこれは含めて、多くの実験は線形、基礎揺動のモデルに於ける分析と求められている。運動はソリトンの運動として記述する方がよいと思われたので、表した波形自身の実験的吟味が重要であろう（文献(1)に図が1枚あるが）。

文献

- (1) E. Fermi, J. Pasta, S. Ulam: *Collected Papers of E. Fermi* Vol. II. p278. Univ. Chicago Press 1965.
- (2) M. Toda: *J. Phys. Soc. Japan* 22 (1967)431, 23 (1967)501.

- (3) N. Saito, H. Hirooka : J. Phys. Soc. Japan
23 (1967) 157, 167
- (4) cf. N. J. Zabusky : A Synergetic Approach
 to Problems of Nonlinear Dispersive Wave
 Propagation and Interaction, Proc. ^{Symp.} Non-
 linear Partial Differential Equations,
 Academic Press (1967).
- (5) R. M. Miura, C. S. Gardner, M. D. Kruskal
 Phys. Rev. Letters 19 (1967) 1095.
- (6) N. J. Zabusky, M. D. Kruskal : Phys. Rev. Letters
15 (1965) 240.
- (7) B. V. Chilikov : Preprint, Institute of Nuclear
 Physics, Novosibirsk (1966). F. M. Izrailev,
 B. V. Chilikov Soviet Phys. Doklady 11 (1966) 30.