

# ソニック結晶の非線形波

愛媛大学理学部 飯塚剛 (Takeshi Iizuka)

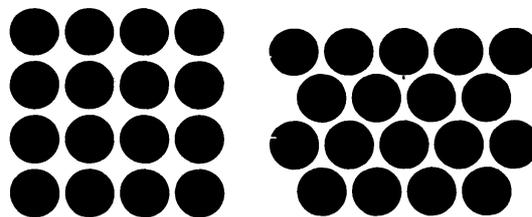
## 1 序

結晶固体中の電子は一体近似としてバンドギャップ構造をもち、金属や半導体の電気伝導等の物性の基礎を与えることはよく知られている。波動論の立場からみるとこれはドゥブローシュレディンガー波が周期ポテンシャルによって多重散乱を受けて、ブラッグ波数に対応する波の共鳴によってストップバンドが形成されるという現象である。

この事実は電子に限らず、様々な古典波動においてみられることは容易に予想できる。最も代表的な例は光の波である。これは、光の媒質に対して何らかの周期構造を入れると実現できる。1次元系に対しては、ファイバグレーティング、超格子などが知られている [1]。電子の場合と違い古典波動は非線形性を有し、特にブラッグ共鳴周波数においてもギャップソリトンと呼ばれる特有の波が存在することが理論的にも [2]、実験的にも [3] 確認されている。

2次元や3次元の周期構造をもつ光物質はフォトニック結晶と呼ばれるが、この場合の光バンドギャップの存在はマイクロ波領域において [4] 発見されて以来、最近では可視光領域においても見出されている。フォトニック結晶における非線形光の研究は著者の知る限りそれほど確立されておらず、結合モード方程式の近似理論 [5] や、ブロッホ波によるアプローチ [6] などに限られている。これは今後の研究の余地のある領域であろう。

光の波以外にも、音波に関しても周期構造とそれに伴うストップバンド構造がある [7]。具体的には、大気中に棒状のロッド (シリンダー) を互いに平衡にかつ周期的において、ロッドに垂直方向に音波を発生させることによって、2次元的な音波を解析するのである。このような構造はソニック結晶と呼ばれる。ソニック結晶の例を図に示す。黒の部分がロッド (剛体) を表しており白の部分が大気 (流体) を示す。



(a) 正方格子

(b) 三角格子

ソニック結晶に至っては、非線形波の解析は皆無である。本稿ではこの点に絞って、特にロッドの半径が結晶定数に比べて十分小さいという仮定をして、結合モード理論が適用

できることを示す。

## 2 基本方程式

大気中の音響波を支配する完全流体の基礎方程式は以下の通りである。

$$\text{運動方程式} \quad \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\frac{\nabla p}{\rho} \quad (1)$$

$$\text{連続の式} \quad \frac{D\rho}{Dt} + \rho \operatorname{div} \mathbf{v} = 0 \quad (2)$$

$$\text{断熱圧縮} \quad \frac{p}{p_0} = \left( \frac{\rho}{\rho_0} \right)^\gamma \quad (3)$$

ただし  $t$  は時間であり、 $\mathbf{x} = (x, y)$  を 2次元座標として、 $p = p(\mathbf{x}, t)$  は圧力場、 $\rho = \rho(\mathbf{x}, t)$  は密度場、 $\mathbf{v} = \mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$  は流体の速度場を示している。定数  $\gamma$  は理想気体の比熱比であり、大気に対しても (3) が成立するものと仮定した。 $p_0, \rho_0$  はそれぞれ静止 (平衡) 状態での大気圧、大気密度である。(1),(2) より  $\mathbf{v}$  の線形部を消去すると

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{1}{\rho} \frac{D\rho}{Dt} \right) - \nabla \cdot ((\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v}) = \nabla \cdot \left( \frac{\nabla p}{\rho} \right) \quad (4)$$

が得られる。次に圧力  $p(\mathbf{x}, t)$  と平衡状態からの揺らぎを考える。

$$p = p_0 + P(\mathbf{x}, t), \quad p_0 \gg P \quad (5)$$

$$\rho = \rho_0 + \Gamma(\mathbf{x}, t), \quad \rho_0 \gg \Gamma \quad (6)$$

(3) より

$$\Gamma = \frac{\rho_0 P}{\gamma p_0} + \frac{\rho_0}{2\gamma} (\gamma^{-1} - 1) \left( \frac{P}{p_0} \right)^2 + \dots \quad (7)$$

$$\frac{1}{\rho} = \frac{1}{\rho_0} \left\{ 1 - \frac{P}{\gamma p_0} + \frac{\gamma + 1}{2\gamma^2} \left( \frac{P}{p_0} \right)^2 + \dots \right\} \quad (8)$$

先ほど得た式 (4) の 2 次の非線形項まで考慮した式を書くと

$$\underbrace{\frac{1}{\gamma p_0} \frac{\partial^2 P}{\partial t^2} - \frac{\nabla^2 P}{\rho_0}}_{\text{線形部}} = \frac{1}{2\gamma p_0^2} \frac{\partial^2 P^2}{\partial t^2} - \frac{1}{\gamma \rho_0 p_0} \nabla \cdot (P \nabla P) - \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\mathbf{v} \cdot \nabla P}{\gamma p_0} \right) + \nabla \cdot ((\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v}) \quad (9)$$

となる。また、 $\mathbf{v}$  については非線形項しかないので、 $\mathbf{v}$  と  $P$  の関係を与える式は (1) を線形化したもの、

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = -\frac{\nabla P}{\rho_0} \quad (10)$$

でよい。(9)と(10)が2次の範囲での完全圧縮性流体の基礎方程式となる。

ソニック結晶を形成するロッドは剛体と仮定して、ロッド面に垂直な流体速度、加速度成分はゼロなので、境界条件として

$$\nabla P \cdot \mathbf{t} = 0 \quad (\mathbf{t} \text{はロッド面の法線ベクトル}) \quad (11)$$

を与える [8]。

### 3 線形理論と有効ポテンシャル

まずは、(9)を線形化した方程式

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 P}{\partial t^2} - \nabla^2 P = 0, \quad c = \sqrt{\frac{\gamma p_0}{\rho_0}} \quad (\text{音速}) \quad (12)$$

を考える。(12)が境界条件(11)を自動的に満たすように書き換える。

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 P}{\partial t^2} - \nabla \cdot (U(\mathbf{x}) \nabla P) = 0 \quad (13)$$

$$U(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & (\text{air}) \\ 0 & (\text{rod}) \end{cases} \quad (14)$$

少なくとも空気中では、(13)と(12)は同等であり、(13)を図のようなロッド面の周りで面積分を実行して、ガウスの定理を用いると流体側で(11)を満たすからである。以下本稿では rod の部分の面積が、大気の占める部分の面積に比べ十分小さいと仮定する。また、流体の運動は rod から十分遠くに離れた、いわゆる遠方場で考えるとする。

この状況で  $U(\mathbf{x})$  をソニック結晶の逆格子ベクトル  $\mathbf{G}_{n,m}$  ( $n, m$  は整数) を用いて、フーリエ展開をする。

$$U(\mathbf{x}) = 1 + (U(\mathbf{x}) - 1) = 1 + \sum_{n,m \in \mathbf{Z}} u_{n,m} \exp(i\mathbf{G}_{n,m} \cdot \mathbf{x}) \quad (15)$$

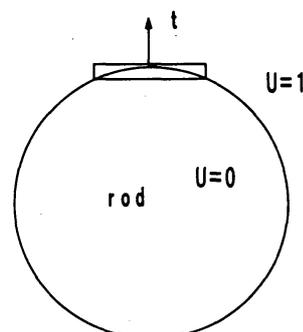
$$\mathbf{G}_{n,m} \equiv \left( \frac{2\pi n}{d_1}, \frac{2\pi m}{d_2} \right) \quad (16)$$

ただしフーリエ成分  $u_{n,m}$  は1周期のセルでの  $U(\mathbf{x}) - 1$  の積分を実行すればよい。特に、ブラベー格子が、

$$\mathbf{d}_1 = (d_1, 0), \quad \mathbf{d}_2 = (0, d_2) \quad (17)$$

と与えられるような長方形の格子を考えると

$$\begin{aligned} u_{n,m} &= \frac{1}{d_1 d_2} \int_{-d_1/2}^{d_1/2} dx \int_{-d_2/2}^{d_2/2} dy (U(x, y) - 1) e^{-i(\frac{2\pi n}{d_1} x + \frac{2\pi m}{d_2} y)} \\ &= -\frac{1}{d_1 d_2} \int \int_{x^2 + y^2 < a^2} dx dy e^{-i(\frac{2\pi n}{d_1} x + \frac{2\pi m}{d_2} y)} \ll 1 \end{aligned} \quad (18)$$



ただし  $a$  は rod の半径を表しておりここでは  $d_1, d_2$  に比べ十分小さいと仮定したので、上記成分は 1 に比べ微小な無次元量である。かくして線形化式 (13) は次のように書き換えられる。

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 P}{\partial t^2} - \nabla \cdot \left( 1 + \sum_{n,m \in \mathbf{Z}} u_{n,m} \exp(i\mathbf{G}_{n,m} \cdot \mathbf{x}) \nabla P \right) = 0 \quad (19)$$

いまの場合遠方場を考えているので、rod の付近構造を表す  $u_{n,m}$  の短波成分はそれほど効いてこないと予想できる。つまり、フーリエ展開の適当なところでカットして  $U(\mathbf{x})$  を近似しても音響波を十分記述できると考えられる。このときの  $U(\mathbf{x})$  をここでは、有効場と呼ぶことにする。

## 4 ブラッグ共鳴と結合モード

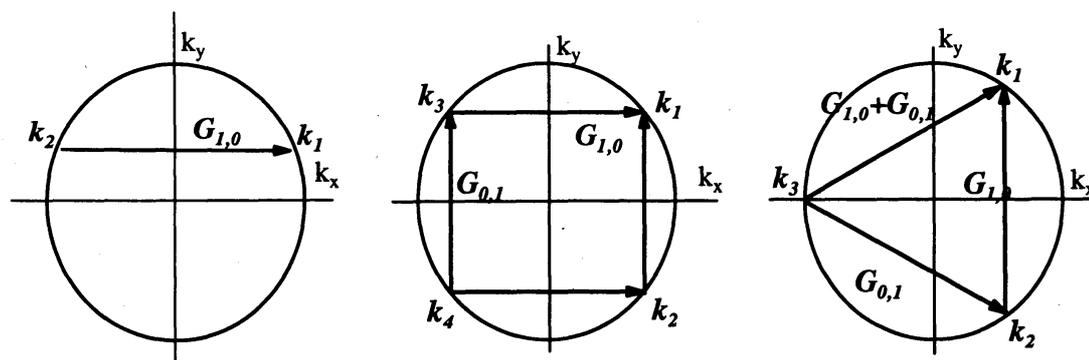
(19) の解のをソニック結晶に入射した平面波とそれに伴う散乱波の線形結合と仮定しよう。

$$P = P_0 e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t)} \underbrace{\left( 1 + \sum_{n,m \in \mathbf{Z}} w_{n,m} \exp(i\mathbf{G}_{n,m} \cdot \mathbf{x}) \right)}_{\text{散乱波成分}} \quad (20)$$

ここで  $u_{n,m}$  やそれに関連する  $w_{n,m}$  は微量なので、摂動論的に解析する。0 次の議論からは  $\omega^2 = (c\mathbf{k})^2$  という、大気音響の分散関係が導かれる。1 次からは

$$w_{l,m} = \frac{(\mathbf{k}^2 + \mathbf{G}_{n,m} \cdot \mathbf{k})}{-\omega^2 c^{-2} + (\mathbf{k} + \mathbf{G}_{n,m})^2} v_{n,m} \quad (21)$$

が得られる。しかし、 $\omega^2 - c^2(\mathbf{k} + \mathbf{G}_{n,m})^2 \simeq 0$  なる逆格子  $\mathbf{G}_{n,m}$  がある場合は上記の摂動論は明らかに破綻する。この状況が「ブラッグ共鳴」であり、 $\mathbf{k} + \mathbf{G}_{n,m}$  の波と  $\mathbf{k}$  の波と振動数が等しいとき  $O(1)$  で励起すると考えられる。



正方格子におけるブラッグ共鳴の例

三角格子におけるブラッグ共鳴の例

上図はブラッグ共鳴が起こる波の組み合わせ例である。ここでは最も簡単な場合である左側の図を考える。つまり、 $|\mathbf{k}_1| = |\mathbf{k}_2|$  で  $\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 = \mathbf{G}_{1,0}$  を満たすと仮定しよう。結合

モードの摂動理論に従うと、有効ポテンシャル  $U(\mathbf{x})$  は最低次の範囲で

$$U(\mathbf{x}) = 1 + \kappa \exp(i\mathbf{G}_{1,0} \cdot \mathbf{x}) + \kappa^* \exp(-i\mathbf{G}_{1,0} \cdot \mathbf{x}) \quad (22)$$

とすれば十分である。ただし  $\kappa \equiv u_{1,0}$ 。また、圧力場  $P$  は  $\mathbf{k}_1$  に対応する進行波と  $\mathbf{k}_2$  に対応する後退波の和とする。

$$P = p_1(\mathbf{x}, t)e^{i(\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{x} - \omega t)} + p_2(\mathbf{x}, t)e^{i(\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{x} - \omega t)} + c.c. \quad (23)$$

ただし、「係数」 $p_1, p_2$  はそれぞれの包絡線を表しており、時空間に対してゆっくりと変化する関数である。これを (19) へ代入して、高次の微分を無視して、 $e^{i(\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{x} - \omega t)}$  ( $i = 1, 2$ ) の係数を比較することによって、包絡線に対する結合モード方程式を得る。

$$i \left( \frac{\omega}{c^2} \frac{\partial p_1}{\partial t} + \mathbf{k}_1 \cdot \nabla p_1 \right) + \frac{\kappa^* \mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{k}_2}{2} p_2 = 0 \quad (24)$$

$$i \left( \frac{\omega}{c^2} \frac{\partial p_2}{\partial t} + \mathbf{k}_2 \cdot \nabla p_2 \right) + \frac{\kappa \mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{k}_2}{2} p_1 = 0 \quad (25)$$

包絡波に対して、平面波解を以下のように仮定して、

$$p_i = P_i e^{i(\mathbf{K} \cdot \mathbf{x} - \Omega t)} \quad (i = 1, 2) \quad (26)$$

定数  $P_1, P_2$  に対する可解条件より  $\Omega$  と  $\mathbf{K}$  の分散式

$$\left( \frac{\omega}{c^2} \Omega - \mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{K} \right) \left( \frac{\omega}{c^2} \Omega - \mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{K} \right) = \frac{|\kappa|^2}{4} (\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{k}_1)^2 \quad (27)$$

を得る。先程のブラッグ共鳴の図より、 $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_\perp + \mathbf{G}_{1,0}/2$ ,  $\mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_\perp - \mathbf{G}_{1,0}/2$  とおけるので、分散関係式は

$$\frac{\omega}{c^2} \Omega = \pm \sqrt{\frac{|\kappa|^2}{4} (\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{k}_1)^2 + \left( \frac{1}{2} \mathbf{G}_{1,0} \cdot \mathbf{K} \right)^2 + \mathbf{k}_\perp \cdot \mathbf{K}} \quad (28)$$

となる。これは丁度正方格子の第一 Brillouin ゾーンの境界にギャップができていていることを示している。

## 5 非線形解析

基礎方程式 (9) を有効ポテンシャル (13) を用いて境界条件を満たすように書き直すと

$$\underbrace{\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 P}{\partial t^2} - \nabla \cdot \left( 1 + \sum_{n,m \in \mathbf{Z}} u_{n,m} \exp(i\mathbf{G}_{n,m} \cdot \mathbf{x}) \nabla P \right)}_{\text{線形部}} = \frac{\rho_0}{2\gamma p_0^2} \frac{\partial^2 P^2}{\partial t^2} - \frac{1}{\gamma p_0} \nabla \cdot (P \nabla P) - \frac{\partial}{\partial t} \left( \rho_0 \frac{\mathbf{v} \cdot \nabla P}{\gamma p_0} \right) + \rho_0 \nabla \cdot ((\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v}) \quad (29)$$

となる。これを摂動論的に解析する。ただし、 $u_{n,m}$  や非線形性、包絡波に対する1回の微分を全て同じ程度の微小量として、最低次の方程式を抽出するという立場をとる。

まず圧力場 (23) を拡張し、次のような非線形補正項を入れた型の展開を導入する。

$$\begin{aligned}
 P = & \left( p_1 e^{i(\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{x} - \omega t)} + p_2 e^{i(\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{x} - \omega t)} \right) + c.c. + \underbrace{p_0(\mathbf{x}, t)}_{\text{長波}} \\
 & + \underbrace{\left( p_{11} e^{2i(\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{x} - \omega t)} + p_{22} e^{2i(\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{x} - \omega t)} + p_{12} e^{i((\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{x} - 2\omega t)} \right)}_{\text{2倍調波}} + c.c. \\
 & + p_{12}^* e^{i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{x}} + p_{12}^* e^{i(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{x}}
 \end{aligned} \quad (30)$$

また (10) より速度場  $\mathbf{v}$  は圧力場の基本成分 ( $p_1, p_2$ ) を用いて explicit に表すことができる。

$$\mathbf{v} = \sum_{j=1}^2 \frac{\mathbf{k}_j}{\rho_0 \omega} p_j e^{i(\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{x} - \omega t)} + c.c. \quad (31)$$

(30) と (31) を (29) に適用し最低次の部分から次のような方程式を得る。

$$i \left( \frac{\omega}{c^2} \frac{\partial p_1}{\partial t} + \mathbf{k}_1 \cdot \nabla p_1 \right) + \frac{\kappa^* \mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{k}_2}{2} p_2 + (A|p_1|^2 + B|p_2|^2 + Cp_0)p_1 = 0 \quad (32)$$

$$i \left( \frac{\omega}{c^2} \frac{\partial p_2}{\partial t} + \mathbf{k}_2 \cdot \nabla p_2 \right) + \frac{\kappa \mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{k}_2}{2} p_1 + (B|p_1|^2 + A|p_2|^2 + Cp_0)p_2 = 0 \quad (33)$$

$$\left( \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \right) p_0 + (D_1 \frac{\partial}{\partial t^2} + D_2 \nabla^2)(|p_1|^2 + |p_2|^2) = 0 \quad (34)$$

係数  $A, B, C, D_1, D_2$  は複雑なのでここでは明記しない。別の機会に示す予定である [9]。この方程式が本稿のメインの結果である結合モードモデルである。 $\mathbf{k}_1 = -\mathbf{k}_2$  なら1次元の問題であるが、ここでは純粋な2次元の問題であることを注意しておく。さらに、DCモード  $p_0$  が最後まで除去できずに方程式に入ってしまった。これは2次の光学物質にも同様のことが起きている [10]。

得られた結合モード方程式の進行波解を求める。まず  $\zeta = x - Wy - Vt$  とおいて、次のような仮定をする。

$$p_1 = \Delta^{-1/2} f(\zeta) \exp i(\theta_1(\zeta) - \Omega t + g/2) \quad (35)$$

$$p_2 = \Delta^{+1/2} f(\zeta) \exp i(\theta_2(\zeta) - \Omega t - g/2) \quad (36)$$

$$p_0 = p_0(\zeta) \quad (37)$$

$$(38)$$

とする。これらを結合モード方程式に代入することにより、

$$\Delta = \sqrt{\frac{\frac{G_{0,1}c^2}{2\omega} - V - \frac{W\mathbf{k}_1c^2}{\omega}}{\frac{G_{0,1}c^2}{2\omega} + V + \frac{W\mathbf{k}_1c^2}{\omega}}} \quad (39)$$

がわかり、また DC モードもこの場合は代数的に

$$p_0 = \frac{V^2 D_1 + (1 + W^2) D_2}{V^2 - (1 + W^2) c^2} (\Delta + \Delta^{-1}) f(\zeta) \quad (40)$$

となる。また、 $f(\zeta)$ ,  $\theta_1(\zeta)$ ,  $\theta_2(\zeta)$  も求まるが手法は文献 [10] と同じなのでここでは割愛する。2次元系におけるギャップソリトン解の厳密型の例が示されことになるが、詳細は別の機会に譲る [9]。

## 6 まとめ

フォトニック結晶にせよ、ソニック結晶にせよ線形の範囲では、物理学的にはバンド理論の焼き直しであり、ブロッホ波やバンド構造を数值的に、あるいは汎関数法などで強引に求めればそれで目的は達成できる。そこには新しい物理があるとは考えにくい。しかし、系に非線形性があるとすれば、問題は一気に難しくなる。もちろん数值的に解析はできるであろうが、非線形性故の新しい現象—例えばギャップソリトンが見受けられた。しかし、これは1次元に限ったことであり2次元以上の高次元は関してほとんど解析が成されていない。

今回はごく簡単な場合の、非線形ソニック結晶を結合モードという手法で解析して、ギャップソリトンを導く手法を提示したわけだが、3波あるいは4波ブラッグ共鳴に対して同じことが成立するか否かはまったくわかっていない。このてんは将来のテーマにしたい。

## 参考文献

- [1] C.M.de Sterke and J.E.Sipe, Phys.Rev.A38,5149(1988).
- [2] A.B.Aceves and S.Wabnitz, Phys.Lett.A141, 37 (1989).
- [3] B.J.Eggleton et al,Phys.Rev.Lett.76,1627(1996).
- [4] E.Yablonovitch, Phys.Rev.Lett.58, 2486(1987).
- [5] Nest Aközбек and Sajeev Jhon, Phys.Rev.E 57 2287(1998).
- [6] N.A.R.Bhat and J.E.Sipe, Phys.Rev.E 64 056604(2001).
- [7] F.Cervera et al, Phys.Rev.Lett.88 023902(2002).
- [8] L.Sanchis et al, J.Acoust.Soc.Am.109(6), (2001).
- [9] in preparation
- [10] T.Iizuka and Y.S.Kivshar, Phys.Rev.E, 59 7148 (1999).