

Discrete Nonlinear Systemにおけるkinkの運動方程式

京大工 五十嵐 顕人 (Akito Igarashi)

京大工 宗像 豊哲 (Toyonori Munakata)

§ 1. はじめに

kink解を有する非線形系、例えばsine-Gordon系、 Φ^4 系、を考える。系が離散的な場合には、kinkは連続系におけるのとは違った振舞いを示す。[1-6] kinkが系中を進行するとき、離散性の影響で、kinkは格子定数の周期を持つpotentialを感じながら進む。したがって、kinkは系の中をこのpotential (Peierls potentialと呼ぶ) を乗り越えつつ進み、wobbling motionを起こす。またある場合には、Peierls potentialの井戸にtrapされるということも起こる。さらに、離散系でのkinkの形は、連続系での形から変形する。(これをkinkのdressingと呼ぶ。)このようなdiscrete nonlinear systemにおけるkinkの性質を調べるのが本報告の目的である。

kinkに関する力学変数を、系の新しい自由度として取り扱うために、我々は拘束条件を導入しなければならない。その

拘束条件のもとでの kink の位相空間における運動方程式を求め、kink の dynamics を調べる。次に、拘束のある場合を統計力学的に考えて、Peierls potential、kink の dressing を求める。

§ 2. kink の運動方程式

2-1. one kink の場合

我々は、次のような Lagrangian L を持つ格子定数 a の非線形格子を考える。

$$L = \frac{M}{2} \sum_n \left(\frac{du_n}{dt} \right)^2 - V(\{u_n\}), \quad (1)$$

ここで

$$V(\{u_n\}) \equiv \frac{f}{2} \sum_n (u_{n+1} - u_n)^2 + \sum_n V_s(u_n). \quad (2)$$

u_n は n 番目の粒子 (質量 m) の格子点からの変位であり、 f は force constant、 $V_s(u)$ は on-site potential である。我々は、kink 解を持つ系に興味がある。例えば、sine-Gordon (sG) 系、 ϕ^4 系等である。これらの場合 $V_s(u)$ は、それぞれ

$$V_s(u) = \frac{V_0}{2} [1 - \cos(\frac{2\pi u}{a})], \quad (\text{sG}) \quad (3-a)$$

$$V_s(u) = -\frac{A}{2}u^2 + \frac{B}{4}u^4, \quad (\phi^4) \quad (3-b)$$

とあらわされる。

u_n についての運動方程式は、式 (1) より

$$Mu_n'' = f[u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n] - \frac{\partial V_s(u_n)}{\partial u_n}, \quad (4)$$

となる。(4)式の近似的なkink解を $f_n(X)$ とする。ここで、 X はkinkの中心座標である。 $f_n(X)$ を用いて、 u_n を2つの部分に分割する。

$$u_n = f_n(X) + q_n, \quad (5)$$

ここで、 q_n はkinkのまわりのphonon excitationをあらわす。

X を系の新しい自由度として取り扱うために、力学変数の間に拘束条件を導入する。すなわち、Shani & Mazenko[7]やComb & Yip[2,3]と同様に

$$\xi = \sum_n f_n^{(1)}(X) q_n = 0, \quad (6)$$

という条件を課する。ここで、 $f_n^{(j)}(X)$ は $f_n(X)$ の X に関する j 階微分である。(6)式は $\vec{q} = \{\dots, q_n, \dots\}$ がkinkの並進のモード(Goldstone mode)に直交するという条件をあらわしている。

まず、配位空間における運動方程式を導く。導かれた方程式は位相空間での運動方程式を求める際に用いる。さて、(5)式を(1)式に代入すると系のLagrangianは

$$L = \frac{M}{2} \sum_n (f_n^{(1)}(X) \dot{X} + \dot{q}_n)^2 - V(\{f_n(X) + q_n\}), \quad (7)$$

となる。運動方程式は次のHamiltonの原理

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} (L + \lambda \xi) dt = 0, \quad (8)$$

から導かれる。ここで、 λ はLagrangeの未定定数で、拘束条件(6)式に対応して導入された。(8)式より運動方程式

$$-\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{X}}\right) + \frac{\partial L}{\partial X} + \lambda \frac{\partial \xi}{\partial X} = 0, \quad (9)$$

$$-\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_n}\right) + \frac{\partial L}{\partial q_n} + \lambda \frac{\partial \xi}{\partial q_n} = 0, \quad (10)$$

が得られる。

さて、いよいよ位相空間での運動方程式を導出する。最初に、 X , q_n に共役な運動量 P , p_n を次のように定義する。

$$P = \frac{\partial L}{\partial \dot{X}} = M \sum_n (f_n^{(1)}(X) \dot{X} + \dot{q}_n) f_n^{(1)}(X), \quad (11)$$

$$p_n = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_n} = M (f_n^{(1)}(X) \dot{X} + \dot{q}_n). \quad (12)$$

(11), (12)式より、次の関係式が成立することがわかる

$$\zeta = \sum_n f_n^{(1)}(X) p_n - P = 0. \quad (13)$$

この条件が第2の拘束条件となる。

さて、次に定義する $\tilde{H}$ という関数を導入する。

$$\tilde{H} = \sum_n p_n \dot{q}_n + P \dot{X} - L. \quad (14)$$

普通の系では、 $\tilde{H}$ は Hamiltonian となるが、今の場合 (11), (12) 式を逆に解いて $\dot{X}$, $\dot{q}_n$ を P , p_n , X , q_n の関数としてあらわすことはできない。すなわち、我々の系の Lagrangian L は singular Lagrangian とよばれるものであって、 $\tilde{H}$ において、 $\dot{X}$, $\dot{q}_n$ を消去できるかどうかは、わからない。しかし、(11), (12) 式を用いると $\tilde{H}$ は

$$\tilde{H} = \frac{1}{2M} \sum_n p_n^2 + V(\{f_n(X) + q_n\}) \equiv H(\{p_n\}, \{q_n\}, X), \quad (15)$$

と、時間微分された変数を含まない形に書ける。これを、 H と書き表す。また、 H は系の全エネルギーとなっている。(16)

式より $\tilde{H}$ の変分を取ると

$$\delta \tilde{H} = \sum_n \frac{\partial H}{\partial q_n} \delta q_n + \sum_n \frac{\partial H}{\partial p_n} \delta p_n + \frac{\partial H}{\partial X} \delta X. \quad (16)$$

また一方(14)式より

$$\delta \tilde{H} = \sum_n \dot{q}_n \delta p_n + \dot{X} \delta P - \sum_n \frac{\partial L}{\partial q_n} \delta q_n - \frac{\partial L}{\partial X} \delta X. \quad (17)$$

ここで(11),(12)式を用いた。(16),(17)式より

$$\sum_n \left(\frac{\partial H}{\partial q_n} + \frac{\partial L}{\partial q_n} \right) \delta q_n + \sum_n \left(\frac{\partial H}{\partial p_n} - \dot{q}_n \right) \delta p_n + \left(\frac{\partial H}{\partial X} + \frac{\partial L}{\partial X} \right) \delta X - \dot{X} \delta P = 0, \quad (18)$$

なる変分の間の関係式が得られた。しかしながら、2つの拘束条件、(6),(13)式、があるために、 $\{\delta q_n\}$ 、 $\{\delta p_n\}$ 、 δX 、 δP は相互に独立ではない。すなわち

$$\frac{\partial \xi}{\partial X} \delta X + \sum_n \frac{\partial \xi}{\partial q_n} \delta q_n = 0, \quad (19)$$

$$\frac{\partial \zeta}{\partial P} \delta P + \frac{\partial \zeta}{\partial X} \delta X + \sum_n \frac{\partial \zeta}{\partial p_n} \delta p_n = 0, \quad (20)$$

なる関係がある。したがって、2つの Lagrange の未定定数 μ 、 ν を導入して

$$\begin{aligned} & \sum_n \left(\frac{\partial H}{\partial q_n} + \frac{\partial L}{\partial q_n} + \mu \frac{\partial \xi}{\partial q_n} \right) \delta q_n + \sum_n \left(\frac{\partial H}{\partial p_n} - \dot{q}_n + \nu \frac{\partial \xi}{\partial p_n} \right) \delta p_n \\ & + \left(\frac{\partial H}{\partial X} + \frac{\partial L}{\partial X} + \mu \frac{\partial \xi}{\partial X} + \nu \frac{\partial \zeta}{\partial X} \right) \delta X + \left(-\dot{X} + \nu \frac{\partial \zeta}{\partial P} \right) \delta P = 0, \end{aligned} \quad (21)$$

という変分の間の関係が導かれる。これより、

$$\frac{\partial H}{\partial X} + \frac{\partial L}{\partial X} + \mu \frac{\partial \xi}{\partial X} + \nu \frac{\partial \zeta}{\partial X} = 0, \quad (22)$$

$$-\dot{X} + \nu \frac{\partial \zeta}{\partial P} = 0, \quad (23)$$

$$\frac{\partial H}{\partial q_n} + \frac{\partial L}{\partial q_n} + \mu \frac{\partial \xi}{\partial q_n} = 0, \quad (24)$$

$$\frac{\partial H}{\partial p_n} - \dot{q}_n + \nu \frac{\partial \zeta}{\partial p_n} = 0, \quad (25)$$

なる関係式が得られる。(22)-(25)式には、まだ変分原理を用

いてないので、運動方程式を導いたことにはなっていない。そこで、Hamiltonの原理から得られた関係式、(9),(10)式、に(11),(12)式を用いて書き換えた関係式

$$\frac{\partial L}{\partial X} = \dot{p} - \lambda \frac{\partial \xi}{\partial X}, \quad (26)$$

$$\frac{\partial L}{\partial q_n} = \dot{p}_n - \lambda \frac{\partial \xi}{\partial q_n}, \quad (27)$$

を(22)-(25)式へ代入すると、

$$\dot{p} + \frac{\partial V(\{f_n(X)+q_n\})}{\partial X} + (\mu - \lambda) \sum_n f_n^{(2)}(X) q_n + v \sum_n f_n^{(2)}(X) p_n = 0, \quad (28)$$

$$-\dot{X} - v = 0, \quad (29)$$

$$\dot{p}_n + \frac{\partial V(\{f_n(X)+q_n\})}{\partial q_n} + (\mu - \lambda) f_n^{(1)}(X) = 0, \quad (30)$$

$$-\dot{q}_n + \frac{1}{M} p_n + v f_n^{(1)}(X) = 0, \quad (31)$$

を得る。さて、(28)-(31)式には、3つの未定定数 λ, μ, v があり、これらを決定する。未定定数は、3つであるが、運動方程式には $\tilde{\mu} = \mu - \lambda, v$ の形で現れる。したがって、 $\tilde{\mu}, v$ の2つの未定定数を決めればよいことがわかる。 $\tilde{\mu}, v$ は、拘束条件式の時間微分を0とする条件から決定する。すなわち、

$$\frac{d\xi}{dt} = 0, \quad \frac{d\zeta}{dt} = 0. \quad (32)$$

この様な条件より初期に拘束を満足していればそれ以後拘束条件は自動的に満足される。(32)式より $\tilde{\mu}, v$ は、

$$\tilde{\mu} = \mu - \lambda = 0, \quad (33)$$

$$v = - \sum_n f_n^{(1)}(X) p_n / M\Gamma, \quad (34)$$

と決められる。ここで、

$$\Gamma = \sum_n [f_n^{(1)}(X)]^2 - \sum_n f_n^{(2)}(X)q_n. \quad (35)$$

(33), (34)式を(28)-(31)式へ代入して kink の運動方程式

$$\dot{X} = \sum_n f_n^{(1)}(X)p_n/M\Gamma = P/M\Gamma, \quad (36)$$

$$\dot{P} = -\frac{\partial V(\{f_n(X)+q_n\})}{\partial X} + [\sum_n f_n^{(1)}(X)p_n] \cdot [\sum_n f_n^{(2)}(X)p_n]/M\Gamma, \quad (37)$$

$$\dot{q}_n = \frac{1}{M}p_n - f_n^{(1)}(X)\sum_\ell f_\ell^{(1)}(X)p_\ell/M\Gamma, \quad (38)$$

$$\dot{p}_n = -\frac{\partial V(\{f_n(X)+q_n\})}{\partial q_n}, \quad (39)$$

が導かれる。(36)-(39)式は拘束条件を満たしているのでこれらの式だけで kink の運動を記述できる。

2-2. multi kinks の場合

multi kinks の場合を考える。L - kink 解を $f_n(X)$ として、

u_n を

$$u_n = f_n(X) + q_n, \quad (40)$$

と分割する。ただし、 $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_L)$ 。L 個の kink の座

標、 $X_1, \dots, X_L$ を系の新しい自由度として取り扱うため

に、L 個の拘束条件

$$\xi_m \equiv \sum_n \frac{\partial f_n}{\partial X_m} q_n = 0, \quad (41)$$

を導入する。これらの拘束条件は L 個の kink の各々の並進の

モードに $\vec{q}$ が直交するという条件となっている。(40)式を用

いると(1)式の Lagrangian は

$$L = \frac{M}{2} \sum_n \left[\sum_m \frac{\partial f_n}{\partial X_m} \dot{X}_m + \dot{q}_n \right]^2 - V(\{f_n(X) + q_n\}), \quad (42)$$

と書き換えられる。ここで、後で使うために、配位空間での運動方程式を求めておく。multi kinksの場合、Hamiltonの原理は

$$\delta \int_{t_2}^{t_1} (L + \sum_m \lambda_m \xi_m) dt = 0, \quad (43)$$

となる。ここで、 λ_m はLagrangeの未定定数でL個の拘束条件、(41)式、に対応して導入された。これより、Lagrangeの運動方程式

$$-\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{X}_m} \right) + \frac{\partial L}{\partial X_m} + \sum_{\ell} \lambda_{\ell} \frac{\partial \xi_{\ell}}{\partial X_m} = 0, \quad (44)$$

$$-\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_n} \right) + \frac{\partial L}{\partial q_n} + \sum_{\ell} \lambda_{\ell} \frac{\partial \xi_{\ell}}{\partial q_n} = 0, \quad (45)$$

が導かれる。

さて、位相空間での運動を調べるために、 X_m , q_n に共役な運動量 P_m , p_n を定義する。

$$P_m \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{X}_m} = M \sum_n \frac{\partial f_n}{\partial X_m} \left(\sum_{\ell} \frac{\partial f_n}{\partial X_{\ell}} \dot{X}_{\ell} + \dot{q}_n \right), \quad (46)$$

$$p_n \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_n} = M \left(\sum_m \frac{\partial f_n}{\partial X_m} \dot{X}_m + \dot{q}_n \right). \quad (47)$$

(46), (47)式よりL個の関係式

$$\zeta_m \equiv \sum_n p_n \frac{\partial f_n}{\partial X_m} - P_m = 0, \quad (48)$$

が成立することがわかり、拘束条件となる。次に、関数 $\tilde{H}$ を導入する。すなわち、

$$\tilde{H} = \sum_n p_n \dot{q}_n + \sum_m P_m \dot{X}_m - L. \quad (49)$$

one kinkの場合と同様(42)式のLagrangianはsingularである

が、 $\tilde{H}$ は

$$\tilde{H} = (1/2M) \sum_n p_n^2 + V(\{f_n(\mathbf{x}) + q_n\}) \equiv H(\{q_n\}, \{p_n\}, \mathbf{x}), \quad (50)$$

となる。また $\tilde{H}$ は系の全エネルギーをあらわす。one kink の場合と同様 $\tilde{H}$ の変分を取り、 $2L$ 個の拘束条件 (41), (48) を考慮して $2L$ 個の Lagrange の未定定数 $\{\mu_m\}$ 、 $\{\nu_m\}$ を導入して

$$\frac{\partial \tilde{H}}{\partial q_n} + \dot{p}_n + \sum_m (\mu_m - \lambda_m) \frac{\partial \xi_m}{\partial q_n} = 0, \quad (51)$$

$$\frac{\partial \tilde{H}}{\partial p_n} - \dot{q}_n + \sum_m \nu_m \frac{\partial \zeta_m}{\partial p_n} = 0, \quad (52)$$

$$\frac{\partial \tilde{H}}{\partial X_m} + \dot{p}_m + \sum_\ell \{(\mu_\ell - \lambda_\ell) \frac{\partial \xi_\ell}{\partial X_m} + \nu_\ell \frac{\partial \zeta_\ell}{\partial X_m}\} = 0, \quad (53)$$

$$- \dot{X}_m + \sum_\ell \nu_\ell \frac{\partial \zeta_\ell}{\partial P_m} = 0, \quad (54)$$

という関係式が導かれる。ここで (44), (45) 式より得られる、

$$\frac{\partial L}{\partial q_n} = \dot{p}_n - \sum_m \lambda_m \frac{\partial \xi_m}{\partial q_n}, \quad (55)$$

$$\frac{\partial L}{\partial X_m} = \dot{p}_m - \sum_\ell \lambda_\ell \frac{\partial \xi_\ell}{\partial X_m}, \quad (56)$$

という Hamilton の原理から導かれた式を、(51)-(54) 式へ代入

して、運動方程式

$$\dot{p}_m + \frac{\partial V}{\partial X_m} + \sum_\ell \{(\mu_\ell - \lambda_\ell) \sum_i \frac{\partial^2 f_i}{\partial X_m \partial X_\ell} q_i + \nu_\ell \sum_i \frac{\partial^2 f_i}{\partial X_m \partial X_\ell} p_i\} = 0, \quad (57)$$

$$- \dot{X}_m - \nu_m = 0, \quad (58)$$

$$\dot{p}_n + \frac{\partial V}{\partial q_n} + \sum_m (\mu_m - \lambda_m) \frac{\partial f_n}{\partial X_m} = 0, \quad (59)$$

$$- \dot{q}_n + \frac{1}{M} p_n + \sum_m \nu_m \frac{\partial f_n}{\partial X_m} = 0, \quad (60)$$

が得られる。最後に、one kink の場合と同様に、(57)-(60) に

現れる未定定数 $\tilde{\mu}_m = \mu_m - \lambda_m$ 、 ν_m を

$$\frac{d\xi_m}{dt} = 0, \quad \frac{d\zeta_m}{dt} = 0, \quad (61)$$

より決定する。すなわち、

$$\tilde{\mu}_m \equiv \mu_m - \lambda_m = 0, \quad (62)$$

$$\mathbf{v} = -\frac{1}{M} \hat{B}^{-1} \cdot \sum_n \frac{\partial f_n}{\partial \mathbf{X}} \mathbf{p}_n, \quad (63)$$

ただし、 $\mathbf{v} = (v_1, v_2, \dots, v_L)$,

$$(\hat{B})_{lm} = \sum_n \frac{\partial f_n}{\partial X_l} \cdot \frac{\partial f_n}{\partial X_m} - \sum_n q_n \frac{\partial^2 f_n}{\partial X_l \partial X_m}. \quad (64)$$

その結果、 $\mathbf{P} = (P_1, \dots, P_L)$ として

$$\dot{\mathbf{X}} = \hat{B}^{-1} \cdot \frac{\mathbf{P}}{M}, \quad (65)$$

$$\dot{\mathbf{P}} + \frac{\partial V}{\partial \mathbf{X}} - \left(\sum_n p_n \frac{\partial^2 f_n}{\partial \mathbf{X}^2} \right) \cdot \hat{B}^{-1} \cdot \frac{\mathbf{P}}{M} = 0, \quad (66)$$

$$-\dot{q}_n + \frac{1}{M} p_n - \frac{\partial f_n}{\partial \mathbf{X}} \cdot \hat{B}^{-1} \cdot \frac{\mathbf{P}}{M}, \quad (67)$$

$$\dot{p}_n = -\frac{\partial V}{\partial q_n}, \quad (68)$$

という L 個の kink のある場合の運動方程式が得られる。この方程式も one kink の場合と同様に、初期に拘束条件を満たしていれば、それ以後拘束条件は自動的に満たされる。

2-3. 数値計算

ここでは、sine-Gordon系を取り上げて、one kink の場合の運動方程式 (36) - (39) を数値的に解いて kink の振舞いをしらべる。 $f_n(X)$ としては、連続体近似における static な kink 解

$$U_k(n|X) = 2 \frac{a}{\pi} \tan^{-1} \left\{ \exp \left[\frac{\pi(na-X)}{l_0} \right] \right\}, \quad l_0 = a \sqrt{\frac{fa^2}{2V_0}}, \quad (69)$$

を用いる。 l_0 は kink の幅を表すパラメーターである。方程式を解く初期条件としては連続体近似における速度 v の kink 解

図 1 .kinkの中心座標 X , $v / \sqrt{f a^2 / m} = 0.1055$

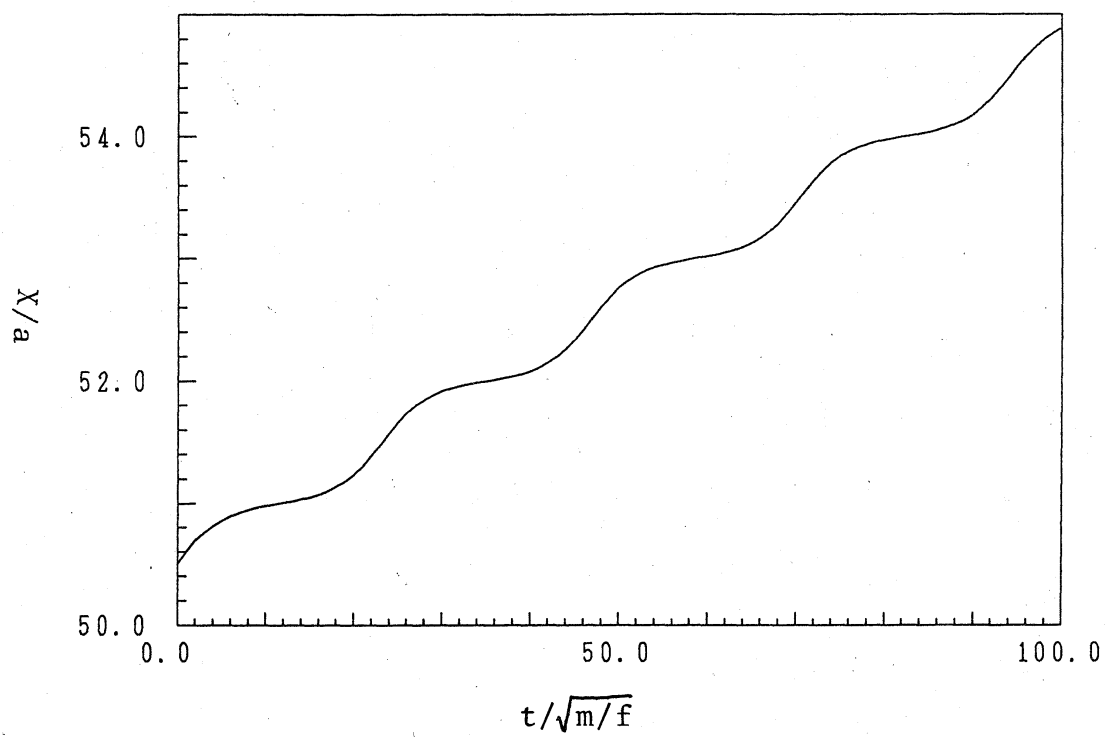
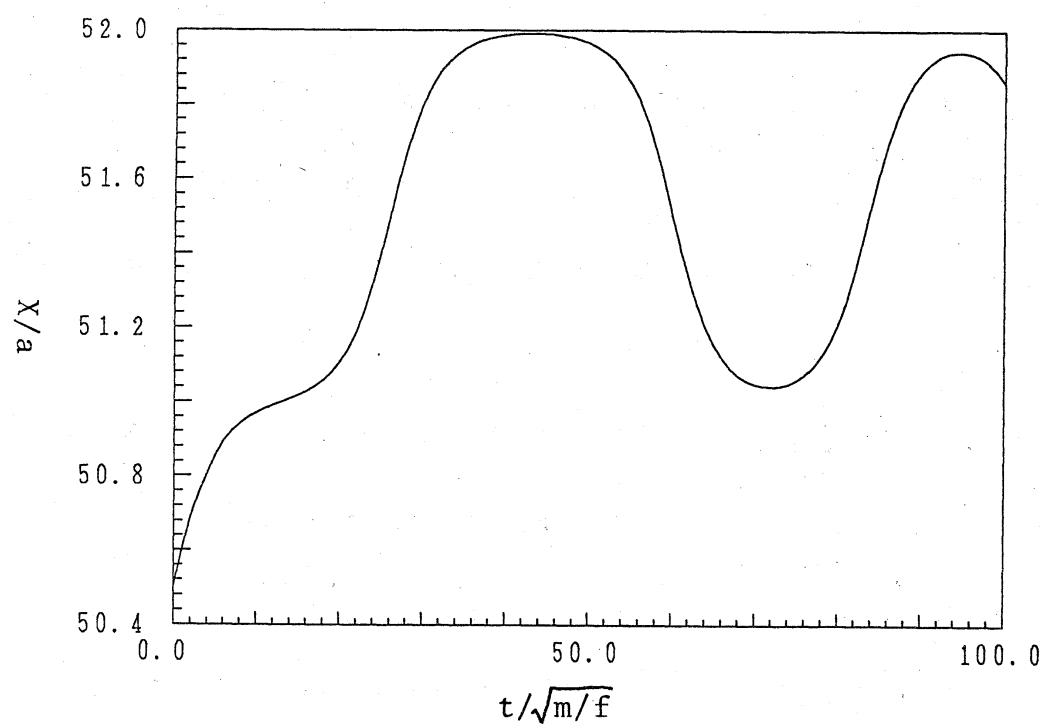


図 2 .kinkの中心座標 X , $v / \sqrt{f a^2 / m} = 0.105$.



$$u_n = 2 \frac{a}{\pi} \tanh^{-1} \left\{ \exp \left[\frac{\pi(na - X_0)}{\ell_0 \sqrt{1 - (Mv/fa^2)^2}} \right] \right\}, \quad (70)$$

及び

$$\dot{u}_n = - \frac{2a}{\ell_0} \cdot \frac{v}{\sqrt{1 - (Mv/fa^2)^2}} \operatorname{sech} \left[\frac{\pi(na - X_0)}{\ell_0 \sqrt{1 - (Mv/fa^2)^2}} \right], \quad (71)$$

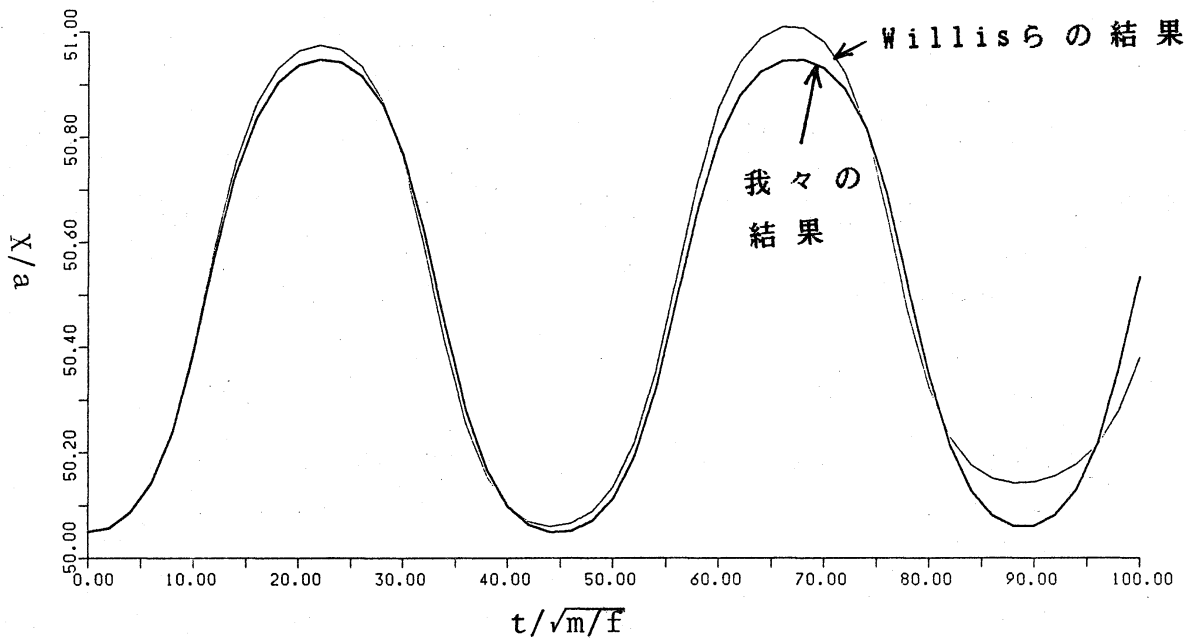
を用いる。図 1、2 に運動方程式を解いた結果の kink の中心座標を時間の関数として示す。図 1、2 とも初期に kink の中心は、Peierls potential の谷底にあるとしている。また、初期の kink の速度はそれぞれ $v / \sqrt{f a^2 / m} = 0.1055, 0.105$ である。図 1 は、kink の wobbling motion すなわち Peierls potential を乗り越えながら進む様子を示している。また、図 2 は kink が potential well に trap される様子を示している。kink の自由度を考慮しない運動方程式 (2) 式をといて、得られた u_n から拘束条件 (4) 式を用いて X を決める naive な方法により得られた X と図 1、2 の結果は完全に一致している。さらに、我々の運動方程式が、初期に拘束条件を満足させておけば、以後拘束条件は自動的に満たされることが数値的にも確かめられた。以上のことは、我々の導いた運動方程式の正しさを示している。

(38)-(39) 式の運動方程式は、Kitahara によっても導かれている。[8] Kitahara は、導出の際変分原理として修正された Hamilton の原理

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} dt \left[\sum_n p_n \dot{q}_n + P \dot{X} - H + \mu \xi + \nu \zeta \right] = 0, \quad (72)$$

を採用している。今の場合、Lagrangianがsingularであるので、(72)式がHamiltonの原理(8)と同等であるかどうかは、明かではない。変分原理としては、(8)式を取るのが正しい。また、Willis[5]らは、違った道筋でkinkの運動方程式を導出した。

図3 .Willisらと我々の結果の比較。



彼らは、 X , q_n に共役な運動量 P , p_n を

$$P = M\dot{X} \cdot \sum_n [f_n^{(1)}(X)]^2, \quad (73)$$

$$p_n = M\dot{q}_n, \quad (74)$$

と定義し、拘束条件(3)式のかわりに

$$\theta \equiv \sum_n f_n^{(1)}(X)p_n, \quad (75)$$

を採用した。(70),(71)式の初期条件において、 $v \neq 0$ のとき

は(75)式の拘束条件を満たさない。(70),(71)式の初期条件は reasonableなものであるから、(75)式は妥当な条件とはいえない。さらに、彼らの結果を調べるために、拘束条件(75)式も満たす初期条件、すなわち(70),(71)式で $v=0$ の場合に彼らの運動方程式を数値的にといてみた。図3に、その結果を示す。時間がたつにつれて我々とWillisらとの結果がずれてくる。さらに、Willisらの方程式では初期に満たされていた拘束条件は、時間とともに満たされなく成っていく。最近Willisらは彼らの方程式の修正版を出した。[9] one kinkの場合には我々の結果と一致しているが、multi kinksの場合には一致しない。

§ 3. kinkの dressingと Peierls potential

3-1. Theory

離散的な系に1つのkinkがある場合のkinkの dressing及びそれが進行するとき感じる Peierls potentialを求める。(1)式の Lagrangianを考える。前と同様、one kink解 $f_n(X)$ を用いて u_n を

$$u_n = f_n(X) + q_n, \quad (76)$$

と分割する。 X は、kinkの中心座標である。ここで $\hat{H}$ という関数を導入する。

$$\tilde{H} = \sum_n p_n \dot{q}_n + P\dot{X} - L. \quad (77)$$

L は、singular Lagrangianであるが前節と同じ様に

$$\tilde{H} = \frac{1}{2M} \sum_n p_n^2 + V(\{f_n(X) + q_n\}) \equiv H(\{p_n\}, \{q_n\}, X), \quad (78)$$

となり、H は系の全エネルギーをあらわす Hamiltonianとなる。ただし、力学変数の間に2つの拘束条件

$$\xi(X, \{q_n\}) \equiv \sum_n f_n^{(1)}(X) q_n = 0, \quad (79)$$

$$\zeta(X, P, \{p_n\}) \equiv \sum_n f_n^{(1)}(X) p_n - P = 0, \quad (80)$$

が課される。

さて、Peierls potentialと dressingを求めるために kink の位置 X の平衡分布 $f_{eq}(X)$ を考える。

$$f_{eq}(X) \propto \int dP \int d\{p_n\} \int d\{q_n\} \delta(\zeta(X, \{q_n\})) \delta(\xi(X, P, \{p_n\})) \exp(-\beta H). \quad (81)$$

ここで、2つの拘束条件(79), (80)を δ 関数で示した。また、

$\beta = (k_B T)^{-1}$ で k_B は Boltzmann 定数、T は温度である。ここで

$$f_{eq}(X) \propto \exp(-\beta V_{RK}(X)), \quad (82)$$

で定義した $V_{RK}(X)$ が Peierls potential となる。また、kink の

dressing は、 $\langle \vec{q} \rangle_X$ 、すなわち X を固定した $\vec{q}$ の ensemble 平均より求める。

$$\langle \vec{q} \rangle_X = \frac{\int dP \int d\{p_n\} \int d\{q_n\} \delta(\zeta(X, \{q_n\})) \delta(\xi(X, P, \{p_n\})) \vec{q} \exp(-\beta H)}{\int dP \int d\{p_n\} \int d\{q_n\} \delta(\zeta(X, \{q_n\})) \delta(\xi(X, P, \{p_n\})) \exp(-\beta H)}. \quad (83)$$

$V_{RK}(X)$ と $\langle \vec{q} \rangle_X$ を具体的に計算するために、H の potential の

部分に近似を行う。 q_n は小さいとして q_n の2次までの項で近

似する。すなわち、

$$\begin{aligned} V(\{f_n(X) + q_n\}) &= V_{BK}(X) + \sum_n v_n(X) q_n + \frac{1}{2} \sum_{nm} v_{nm} q_n q_m \\ &\equiv V_{BK}(X) + \vec{v}(X) \cdot \vec{q} + \frac{1}{2} {}^t \vec{q} \cdot \hat{v}(X) \cdot \vec{q}, \end{aligned} \quad (84)$$

ここで、 $V_{BK}(X)$

$$V_{BK}(X) = V(\{f_n(X)\}), \quad (85)$$

は bare kink の Peirls potential. また、

$$v_n(X) = f[2f_n(X) - f_{n+1}(X) - f_{n-1}(X)] + V'_S(f_n(X)), \quad (86)$$

$$v_{nm}(X) = [2f + V''_S(f_n(X))] \delta_{n,m} - f \delta_{n,m-1} - f \delta_{n,m+1}. \quad (87)$$

計算した結果は、Peierls potentialは

$$V_{RK}(X) = V_{BK}(X) + V_I(X) + V_C(X) + V_T(X). \quad (88)$$

ただし

$$V_I(X) = -\frac{1}{2} {}^t \vec{v}(X) \cdot \hat{v}^{-1}(X) \cdot \vec{v}(X), \quad (89)$$

$$V_C(X) = \frac{[{}^t \vec{f}^{(1)}(X) \cdot \hat{v}^{-1}(X) \cdot \vec{v}(X)]^2}{2 {}^t \vec{f}^{(1)}(X) \cdot \hat{v}^{-1}(X) \cdot \vec{f}^{(1)}(X)}, \quad (90)$$

$$V_T(X) = (1/2\beta) \ln[{}^t \vec{f}^{(1)}(X) \cdot \hat{v}^{-1}(X) \cdot \vec{f}^{(1)}(X) \cdot \det(\hat{v}(X))]. \quad (91)$$

また $\langle \vec{q} \rangle_X$ は

$$\langle \vec{q} \rangle_X = -\hat{v}^{-1}(X) \cdot \vec{v}(X) + \frac{{}^t \vec{f}^{(1)}(X) \cdot \hat{v}^{-1}(X) \cdot \vec{v}(X)}{{}^t \vec{f}^{(1)}(X) \cdot \hat{v}^{-1}(X) \cdot \vec{f}^{(1)}(X)} \hat{v}^{-1}(X) \cdot \vec{f}^{(1)}(X). \quad (92)$$

我々は $V_{RK}(X)$, $\langle \vec{q} \rangle_X$ を、iteration を行って決定する。すなわち、trial 関数 $\vec{f}_0(X) = \{\dots, f_{n0}(X), \dots\}$ を用いて (92) 式より $\langle \vec{q} \rangle_X$ を求める。そこで、 $\vec{f}_0(X) + \langle \vec{q} \rangle_X$ を新たな trial 関数 $\vec{f}_1(X)$ とする。同様の process を繰り返して $\vec{f}(X)$ が収束するまで続ける。

3-2. 数値計算

図4に、s G系 ($l_0 = 3a$) の場合の Peierls potentialを示す。また、 $\vec{f}_0(X)$ を連続体近似でのstaticなkink解としたときの $V_B(X) = V(\{f_{n0}(X)\})$ をあわせて示す。温度 $T = 0$ の Peierls potential $V_{RK}(X) = V_W(X)$ は $V_B(X)$ より steep になる。すなわち、dressingによってより potential は深くなり、self-trapの現象等において phonon dressing の効果は重要であることがわかる。さらに、温度 T が大きくなると、Peierls potential の深さがさらに増す。これは、熱揺動の効果により $V_{RK}(X)$ が増し potential well が深くなることを示している。ただしさらに高温になると、非線形項がきいてきて我々の近似では扱えない。

図4 .Peierls potential/ $4a^2$ (s G系) $V_W(X) = V_{RK}(X) \Big|_{T=0}$
 $k_B T = V_W(X=0) - V_W(X=0.5)$

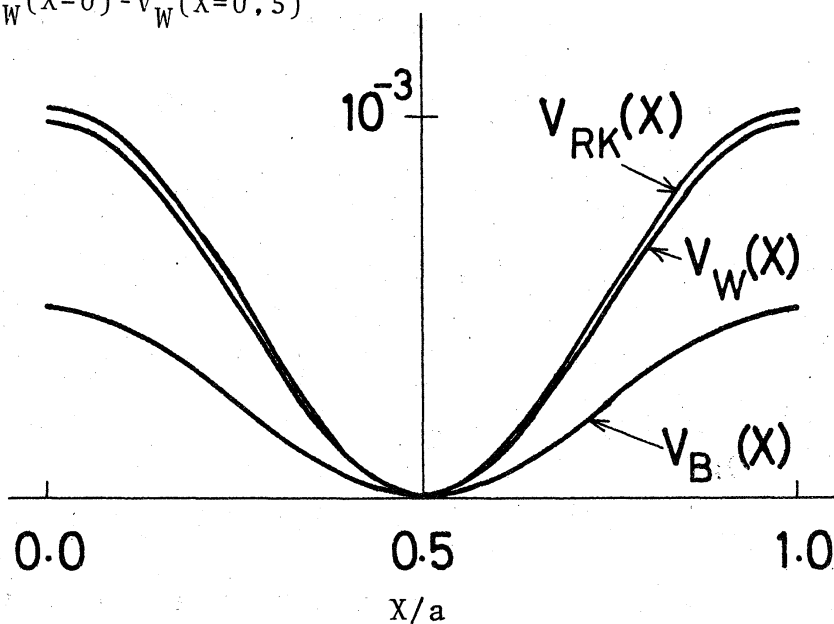


図 5 .Peierls potentialの wellの 深さ

実線 : $(V_{RK}(X=0.0) - V_{RK}(X=0.5)) / \frac{1}{4}a^2$

破線 : $(V_B(X=0.0) - V_B(X=0.5)) / \frac{1}{4}a^2$ ● : simulation

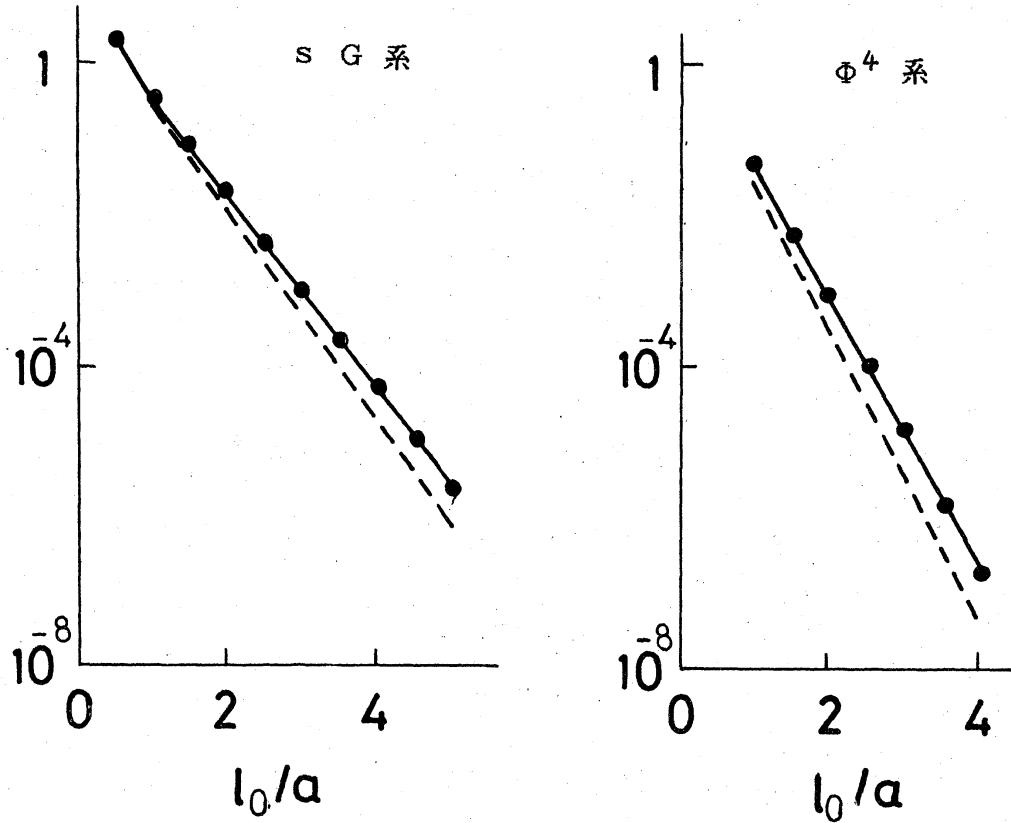


図 5 には、 Φ^4 系、s G 系での Peierls potentialの wellの 深さの $T = 0$ の値を、 l_0 の関数として示している。 l_0 依存性は指数的で simulation の結果をよく再現していることがわかる。図には $V_B(X)$ の potential wellの 深さも示した。dressing の影響で、 $V_B(X)$ に対して $V_{RK}(X)$ の wellの 深さは 2 倍近い。

連続体近似での解からの変化である phonon dressing については、図 6 に $l_0/a = \pi, 1.5$ の場合を示す。 $f_{n,0}(X)$ として連続体近似での static な kink 解を用いた場合 first iteration

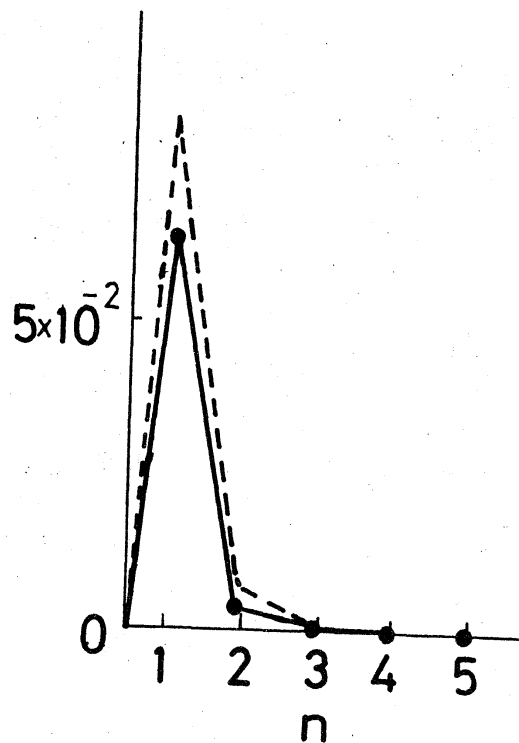
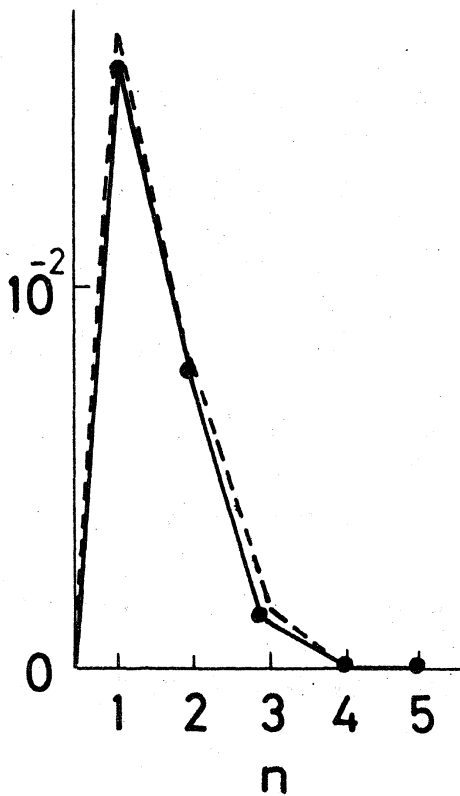
の結果、(92)式、(破線で示す。これはWillis[5]の求めた結果である)は l_0 が大きな時にはsimulationの結果に近いが、 l_0 が小さくなるとsimulationとの差が開いてくる。iterationが収束した段階ではsimulationの結果を、我々の理論で良く再現できる。

図6 .dressing / a

実線：理論。 破線：first iteration。 ●：simulation

s G 系 $l_0 = \pi a$

Φ^4 系 $l_0 = 1.5 a$



§ 4. おわりに

kink解を有する非線形系において、特に系が離散的である

場合に kink の性質を調べた。kink の自由度を系の新しい自由度として取り扱うために、拘束条件を用いなければならない。このような拘束条件のもとで kink の運動方程式を求め、それを数値的に解いて kink の運動を調べた。また、この拘束系を統計力学的に取り扱い Peierls potential と kink の dressing を求めた。

最後に、iteration について comment をして本報告を終わる。iteration が収束した時の kink 解は、 $\langle \vec{q} \rangle_X \rightarrow 0$ で特徴づけられる。このとき、(92) 式より

$$\vec{v}^*(X) = \frac{t_{\vec{f}^*(1)}(X) \cdot \hat{v}^{*-1}(X) \cdot \vec{v}^*(X)}{t_{\vec{f}^*(1)}(X) \cdot \hat{v}^{*-1}(X) \cdot \vec{f}^*(1)(X)} \vec{f}^*(1)(X) \quad (93)$$

が成り立つ。(*の付いた量は収束した時の値を表す。)(93) 式は、 $\vec{f}_n^*(X)$ を self-consistent に決定する式である。この式を解くのに我々は iteration を用いたことになる。さて、(93) 式より $\vec{v}^*(X)$ は $\vec{f}^{*(1)}(X)$ に平行になっており、式(84)の q_n の 1 次の項は iteration が収束した段階では、事実上ないものと同じである。また、 $\hat{v}^*(X)$ の最低の固有値に対応する固有ベクトルは $\vec{f}^*(X)$ に平行であることが数値的に確かめられている。

参考文献

- [1] J.F. Currie, S.E. Trullinger, A.R. Bishop and J.A. Krumhansl, Phys. Rev., B15, 5567 (1977).

- [2] J.A.Combs and S.Yip, Phys.Rev., **B28**, 6873 (1983).
- [3] J.A.Combs and S.Yip, Phys.Rev., **B29**, 438 (1984).
- [4] M.Peyrard and M.D.Kruskal, Physica, **14D**, 88 (1984).
- [5] C.W.Willis, M.El-Batanouny and P.Stancioff, Phys.
Rev., **B33**, 1904 (1986).
- [6] P.Stancioff, C.Willis, M.El-Batanouny and
S.Burdick, Phys.Rev., **B33**, 1912 (1986).
- [7] P.S.Sahni and G.F.Mazenko, Phys.Rev., **B20**, 4674
(1979).
- [8] K.Kitahara, Lecture Note at University of Illinois
in 1987.
- [9] R.Boesch, P.Stancioff and C.R.Willis, Phys.Rev.,
B38, 6713 (1988).