

Intrinsic localized modes in nonlinear lattices

長崎総合科学大学新技術創成研究所 武野正三 (Shozo Takeno)
(Institute for Innovative Science and Technology, Nagasaki Institute of Applied Science)

I. Introduction

結晶格子に欠陥(不純物)等が存在する場合、結晶格子の周期性が破れて電子やフォノン状態が欠陥の周りに局在することは半導体の”donor, acceptor 準位”や固体フォノンの”不純物モード”として物性物理学で周知の事実である。intrinsic localized modes (ILM) とは不純物や欠陥が存在しない完全(周期)格子においても格子自身に内在する非線形性と空間構造の離散性(lattice discreteness)により空間的に局在したモードがある場所に誘起されることを意味する。ILMはその固有振動数が線形格子の振動数帯の外、即ち禁止帯にある通常のILMとそれが線形の acoustic phonon band 中の振動数ゼロに近い領域に現われる非線形共鳴モード(Intrinsic Resonant Modes)(IRM)に大別される。不純物モードと異なり、ILM,IRMは完全格子の任意の場所に局在状態として任意個数存在することが出来、適当な状況の下では動く(mobile)ことも出来る。このことはソリトンを連想させるが、ILM、あるいはIRMは以下の点でソリトンと基本的に異なっている：(1) 非可積分格子系固有の性質、(2) 概念、存在の普遍性：その存在は一般に格子の次元数によらない、(3) 連続体近似等を用いるとその本質は見失われることが多い、(4) 理工学のいろいろな分野で存在する：格子力学、スピン系、結合 Josephson 系、光学格子系、生体高分子系、Bose-Einstein 格子系、種々のマクロな力学系、電気振動系等等。ILM,IRMの基本概念は当初著者により日本物理学会で発表され[1]、その後共同研究者 A.J. Sievers 達と共著の形で Phys. Rev. Lett.[2], Prog. Theor. Phys.[3], および Solid State Commun.[4]において公表された。現在ではヨーロッパが数の上では最大の研究者の community を形成し、そこではILMは Discrete Breather (DB) と呼ばれている。

完全格子の場合に何故局在モードが存在するかということに対する直感的・定性的な理解は以下のようであれば良いであろう。いま、hard nonlinearityを持つ非線形格子を考える。この正の非線形性は線形のフォノンの振動帯を形成している各振動レベルを振動数が増大する方向にシフトさせる効果を齎す。格子の構造離散性のため振動帯の上の端は有限であり非線形性がなければその上の振動数領域は禁止帯となっている。正の非線形のためにこの最高位の振動数レベルは禁止帯の領域にシフトするが、その領域は元々波が伝わらない領域であるからこのような振動のモードは空間的に局在せざるをえない。ILMは格子のなかで非線形性の大きなところ、即ち振動の振幅の大きなところに spontaneous に発生するという特徴を持つ。従って、状況に応じて振動レベルが振動帯の上端から次から次へと分離して禁止帯の領域に存在するようになる。これが multi-ILM である。

II. Illustration of intrinsic localized modes

(1) 1次元非線形(周期)格子

最も簡単な場合からはなしを始める。最近接相互作用を持つ1次元非線形完全格子を考える。原子間ポテンシャルは2次の調和項と正の4次の非線形項で記述されるものとする。結晶内の n 番目の原子の平衡の位置からの変位を u_n 、原子の質量を m 、線形のパネ定数を K_2 、4次の非線形項のパネ定数を $K_4(>0)$ とする。 $K_2/m = J_2$ 、 $K_4/m = J_4$ とおくと以下の運動方程式が成り立つ。

$$\frac{d^2 u_n}{dt^2} = J_2[(u_{n+1} - u_n) - (u_n - u_{n-1})] + J_4[(u_{n+1} - u_n)^3 - (u_n - u_{n-1})^3] \quad (1)$$

新しい従属変数

$$v_n = u_{n+1} - u_n \quad (2)$$

を導入すると (1) 式は

$$\frac{d^2 v_n}{dt^2} = J_2(v_{n+1} + v_{n-1} - 2u_n) + J_4(v_{n+1}^3 + v_{n-1}^3 - 2u_n^3) \quad (3)$$

となる。上の式の定常モード解を求める。(1) 式の場合それは

$$u_n = \phi_n \cos(\omega t), \quad (4)$$

とおき、envelope function ϕ_n は時間 t によぬとし、 ω は定数となるような解を求めることに相当する。(4) を (1) に代入すると $\cos(\omega t)^3$ の項が現われる。公式 $\cos(x)^3 = \frac{3}{4} \cos(x) + \frac{1}{4} \cos(3x)$ より当初仮定した基本振動数 ω の振動モードの外に 3ω の振動数を持つ項が現われて来ることが分かる。この操作を繰り返すと振動数 ω の外に $3\omega, 5\omega, \dots$ の振動数項が次々に現われて来るといふ非線形振動特有の状況に遭遇する。この問題を一般に厳密に解くことが出来ないが、このとき総ての高振動数 $3\omega, 5\omega, \dots$ 項を“エイヤー”と落す近似を rotating-wave approximation (回転波近似, RWA) という。尚一般に、このような heuristic な近似法は、多体問題における平均場近似の場合と同様に、問題の解の可成良い近似となっていることは物理の多くの問題で周知の事実である。この RWA を用いると (4) 式は

$$J_2(2\phi_n - \phi_{n+1} - \phi_{n-1}) + \frac{3}{4} J_4[(\phi_n - \phi_{n+1})^3 + (\phi_n - \phi_{n-1})^3] = \omega^2 \phi_n \quad (5)$$

となる。線形格子を reference system とみなして格子 Green 関数

$$g(n, \omega) = \frac{1}{N} \sum_q \frac{\exp(iqn)}{\omega^2 - \omega(q)^2}; \quad \omega(q)^2 = 2J_2[1 - \cos(q)] \quad (6)$$

を導入すると (5) 式は

$$\phi_n = \frac{3}{4} J_4 \sum_m g(n-m, \omega) [(\phi_m - \phi_{m+1})^3 + (\phi_m - \phi_{m-1})^3] \quad (7)$$

となる。ここに、 N は格子点の総数である。(6) 式において線形振動の振動帯の上端 $4J_2 = \omega_M^2$ より上の禁止帯 $\omega^2 > \omega_M^2$ にある固有値 ω^2 が定常 ILM の固有振動数に対応する。このとき $N \rightarrow \infty$ の極限をとると格子グリーン関数 $g(n, \omega)$ は

$$g(n, \omega) = \frac{(-1)^n \exp(-z|n|)}{2J_2 \sinh(z)} \quad z = \cosh^{-1} \left(\frac{\omega^2 - 2J_2}{2J_2} \right) \quad (8)$$

となる。

問題の illustration のために、先ず one-ILM problem を考察する。ILM が原点 $m=0$ に存在したとすると、strong localization limit にはなしを限って ILM の存在により直接に影響をうける格子点は $m=0, \pm 1$ とする。(7) 式は

$$\phi_n = \frac{3}{4} J_4 [g(n, \omega) [(\phi_0 - \phi_1)^3 + (\phi_0 - \phi_{-1})^3] + g(n-1, \omega) (\phi_1 - \phi_0)^3 + g(n+1, \omega) (\phi_{-1} - \phi_0)^3] \quad (9)$$

となる。ここで物理的に興味ある解は次の対称性

$$\phi_n = \phi_{-n} \quad (10)$$

を満たす解 (s-like mode) である。この s-like mode に対して (9) 式は

$$\phi_n = \frac{3}{4} J_4 [2g(n, \omega) - g(n-1, \omega) - g(n+1, \omega)] (\phi_0 - \phi_1)^3 \quad (11)$$

となる。格子グリーン関数の満たす恒等式

$$(\omega^2 - 2J_2)g(n, \omega) + 2J_2[g(n+1, \omega) + g(n-1, \omega)] = \Delta(n) \quad (12)$$

を用いると(11)式は

$$\phi_n = \frac{3J_4}{4J_2} [\omega^2 g(n, \omega) - \Delta(n)] (\phi_0 - \phi_1)^3 \quad (13)$$

となる。(4.12)より ϕ_0 と ϕ_n の関係式が以下のように求められる。

$$\frac{\phi_n}{\phi_0} = \frac{\omega^2 g(n, \omega)}{\omega^2 g(0, \omega) - 1}, \quad n \neq 0. \quad (14)$$

ϕ_n の n 依存性は格子グリーン関数 $g(n, \omega)$ により決められ、それは $e^{-c|n|}$ (n : constant)の形をしていることが分かる。(14)式において $n=1$ とおき(12)を用い ϕ_1 を ϕ_0 と $g(0, \omega)$ のみで表すと

$$\phi_1 = \frac{\frac{\omega^2}{2J_2} - (\frac{\omega^2}{2J_2} - 1)\omega^2 g(0, \omega)}{\omega^2 g(0, \omega) - 1} \phi_0, \quad (15)$$

が得られ、(13)式は以下の形に書くことが出来る。

$$\phi_n = \frac{3J_4}{4J_2} \alpha(\omega) [\omega^2 g(n, \omega) - \Delta(n)] \phi_0^3, \quad \alpha(\omega) = \left[\frac{-1 - \frac{\omega^2}{6J_2} + \frac{\omega^2}{6J_2} \omega^2 g(0; \omega)}{\omega^2 g(0; \omega) - 1} \right]^3. \quad (16)$$

ILMの典型的な性質として直感的にも理解しやすいstrong localization limitにおけるその局在性を考察する。格子グリーン関数 $g(0, \omega)$ に対する $\omega^2 \gg \omega_M^2 \equiv 4J_2$ の場合の漸近式

$$\omega^2 g(0, \omega) = 1 + \frac{2J_2}{\omega^2} + \frac{4J_2^2(1 + \frac{1}{2})}{\omega^4} + \dots, \quad (17)$$

を用いると以下の関係式が得られる

$$\frac{\phi_1}{\phi_0} = -\frac{1}{2} \frac{1}{1+\delta} + \frac{\delta}{1+\delta} \rightarrow -\frac{1}{2} \quad \text{for } \omega^2 \gg \omega_M^2 \equiv 4J_2, \quad \delta = \frac{2J_2}{\omega^2} \left(1 + \frac{1}{2}\right), \quad (18)$$

ILMの固有振動数は(13)で $n=0$ として得られる式

$$1 = \frac{\left[-1 - \frac{\omega^2}{2J_2} + \frac{\omega^4}{2J_2} g(0, \omega)\right]^3}{[\omega^2 g(0, \omega) - 1]^2} \phi_0^2 \quad (19)$$

よりILMの振幅 ϕ_0 をパラメーターとして得られる。 $\phi_1 = -(1/2)\phi_0$ という結果は第一近似を用いたにもかかわらず多くの数値実験の結果と良く一致していることが示されている。

(7), (8)式は任意の数のILMに対しても適用できる。いまILMが $\ell = (\ell_1, \ell_2, \dots)$ の位置に存在するとし、それらの間に直接的な重なり合いがないとすると以下の非線形固有値方程式が得られる。

$$\phi_n = \frac{3}{4} J_4 \sum_{\ell} \times [g(n - \ell, \omega) [(\phi_{\ell} - \phi_{\ell+1})^3 + (\phi_0 - \phi_{\ell-1})^3] + g(n - \ell - 1, \omega) (\phi_{\ell+1} - \phi_{\ell})^3 + g(n - \ell + 1, \omega) (\phi_{\ell-1} - \phi_{\ell})^3] \quad (20)$$

この式を解くことは省略する。元の one-localized mode の問題に戻り、(3) 式に対して同じ方法で定常 ILM を求めるには

$$v_n = \varphi_n \cos(\omega t), \quad (21)$$

とおき、envelope function φ_n は時間 t に依存しないとする。RWA を用いると

$$J_2(2\varphi_n - \varphi_{n+1} - \varphi_{n-1}) + \frac{3}{4}J_4[2\varphi_n^3 - \varphi_{n+1}^3 - \varphi_{n-1}^3] = \omega^2 \varphi_n \quad (22)$$

が得られる。Green 関数 $g(n, \omega)$ を用いると

$$\varphi_n = \frac{3}{4}J_4 \sum_m g(n-m, \omega) J_4 [2\varphi_m^3 - \varphi_{m+1}^3 - \varphi_{m-1}^3] \quad (23)$$

が得られる。グリーン関数の恒等式(12)を用いると(26)式は

$$\varphi_n = \frac{3}{4}J_4 \sum_m \tilde{g}(n-m, \omega) \varphi_m^3 \quad \tilde{g}(n, \omega) = \frac{1}{N} \sum_q \frac{\omega(q)^2 \exp(iqn)}{\omega^2 - \omega(q)^2} = \omega^2 g(n, \omega) - \Delta. \quad (24)$$

となる。(23)は(16)と同形である。従って strong localization limit として以下の対称性を持った解が存在する。

$$\varphi_0 = 1, \quad \varphi_1 = \varphi_{-1} = -\frac{1}{2} \quad (25)$$

この関係式を元の変位で表すと

$$\phi_{n+1} = -\phi_{-n} \quad (26)$$

となり、この対称性を持つ ILM を p-like mode と呼ぶことにする。結局 1 次元非線形格子では s 型と p 型の二つの ILM モードが存在することが分かる。strong localization limit における s-like mode と p-like mode のプロファイルを図 1 に示す。

(2) 1 次元非線形表面モード

1 次元の半無限格子を考え、端の原子より順次 $n = 0, 1, 2, \dots$ という番号を付ける。この 1 次元半無限格子の格子グリーン関数を $g_s(n, m; \omega)$ とすると、それは周期境界条件を付けた 1 次元格子の格子グリーン関数 $g(n, \omega)$ と以下の関係で結ばれている、

$$g_s(n, m; \omega) = g(n-m; \omega) - J_2 \frac{[g(n; \omega) - g(n+1; \omega)][g(m; \omega) - g(m+1; \omega)]}{\omega^2 g(0, \omega)} \quad (27)$$

(7) 式に対応する非線形固有値方程式は

$$\phi_n = \frac{3J_4}{4} g_s(n, 0; \omega) (\phi_0 - \phi_1)^3 + \frac{3J_4}{4} \sum_{r=1}^{\infty} g_s(n, m; \omega) [(\phi_m - \phi_{m+1})^3 + (\phi_m - \phi_{m-1})^3] \quad (28)$$

となる。この式を数値的に解くと図 2 に示すような結果が得られ、線形の場合の Rayleigh 表面モードと異なった振る舞いを示すことが分かる。

III. Intrinsic localized mode の一般理論

(1) Formal theory

任意次元の任意の非線形格子を考察する。格子点 $\vec{n}$ における原子 n の平衡の位置 $\vec{R}_n$ からの変位 $\vec{u}(\vec{n})$ の α -成分を $u_\alpha(\vec{n}) \equiv u(x); x = (\vec{n}, \alpha)$ とし、それにはたらく力を $F(\{u(x)\}, \{u(x')\})$ とすると

$$\ddot{u}(x) = - \sum_{x'} F(\{u(x)\}, \{u(x')\}) \equiv - \sum_{x'} J_2(x, x') u(x') - \sum_{x'} F_a(\{u(x)\}, \{u(x')\}) \quad (29)$$

が得られる。 $J_2(x, x')$, $F_a(\{u(x)\}, \{u(x')\})$ は、それぞれ、線形のスプリング定数、非線形力である。この式の定常モードILM解は

$$u(x) \equiv u(x, t) = \phi_0(x, t) + \sum_{r=1}^{\infty} \phi_r(x) \cos(r\omega t) \quad (30)$$

とおき、 $\phi_r(x) (r \geq 1)$ は時間に依らないとしてそれを上の運動方程式に代入し両辺の $\cos(\omega t)$ の等しい次数を比較することにより得られる。形式的に力を

$$F(\{u(x)\}, \{u(x')\}) \equiv F(\{u(x, t)\}, \{u(x', t)\}) = f_0(\{\phi(x)\}, \{\phi(x')\}) + \sum_{r=1}^{\infty} f_r(\{\phi(x)\}, \{\phi(x')\}) \cos(r\omega t) \quad (31)$$

の形に展開し、右辺第2項で線形力に対応する部分 $\sum_{x'} J_2(x, x') \phi(x')$ を抜き出して取り扱ふと以下の式が得られる。

$$\ddot{\phi}_0(x) = -f_0(\{\phi(x)\}, \{\phi(x')\}), \quad (32)$$

$$\sum_{x_1} J_2(x, x_1) \phi_r(x_1) - f_r(\{\phi(x)\}, \{\phi(x')\}) = (r\omega)^2 \phi_r(x), \quad r = 1, 2, 3, \dots \quad (33)$$

線形格子を reference system とみなし、その場合の固有値方程式

$$\sum_{x_1} J_2(x, x_1) \varphi_\mu(x_1) = \omega(\mu)^2 \varphi_\mu(x), \quad \sum_{\mu} \varphi_\mu(x) \varphi_\mu(x')^* = \Delta(x, x') \quad \sum_x \varphi_\mu(x) \varphi_\nu(x)^* = \Delta(\mu, \nu) \quad (34)$$

より格子グリーン関数

$$g(x, x'; \omega) = \sum_{\mu} \frac{\varphi_\mu(x) \varphi_\mu(x')^*}{\omega^2 - \omega(\mu)^2}, \quad (35)$$

を導入すると (32) は以下の形に表される。

$$\phi_r(x) = \sum g(x, x'; \omega) f_r(\{\phi(x')\}), \quad r = 1, 2, 3, \dots \quad (36)$$

ここで示した一般論を具体的な問題に対して実行するには数多くの解析的な計算が必要である。紙面の都合上ここでは最低次の計算の結果を示す。その結果は以下の式で示される。

$$\phi_1(x) = \frac{3}{4} \sum g(x, x'; \omega) J_4(x', x_1, x_2, x_3) \phi_1(x_1) \phi_1(x_2) \phi_1(x_3) \quad (37)$$

$$\phi_2(x) = \frac{1}{2} \sum_g g(x, x'; 2\omega) J_3(x', x_1, x_2) \phi_1(x_1) \phi_1(x_2) \quad (38)$$

$$\phi_3(x) = \frac{1}{4} \sum g(x, x'; 3\omega) J_4(x', x_1, x_2, x_3) \phi_1(x_1) \phi_1(x_2) \phi_1(x_3) \quad (39)$$

(2) d -次元単純立方格子

高次元の問題の illustration として単純立方格子の d 次元版を取り上げる。この場合も (7) 式と全く同じ形の式が成り立つ。envelope function を $\phi(\vec{n})$ と書くと

$$\phi(\vec{n}) = \frac{3}{4} \sum_{\vec{m}} \sum_{j=0}^d g(\vec{n} - \vec{m}; \omega) J_{4j} [(\phi(\vec{m}) - \phi(\vec{m} + \vec{e}_j))^3 + (\phi(\vec{m}) - \phi(\vec{m} - \vec{e}_j))^3] \quad (40)$$

となる。格子グリーン関数は

$$g(\vec{n}; \omega) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \frac{\exp(i\vec{q} \cdot \vec{n})}{\omega^2 - 2d + 2 \sum_j J_{2j} \cos(q_j n_j)} \quad (41)$$

の形をとり、それに対して 1 次元の場合と同様恒等式

$$(\omega^2 - 2dJ_2)g(n, \omega) + 2J_2 \sum_{j=0}^d [g(n + \vec{e}_j; \omega) + g(n - \vec{e}_j; \omega)] = \Delta(n) \quad (42)$$

が成り立つ。このとき、s-like mode は

$$\phi(\vec{e}_j) = \phi(-\vec{e}_j) \quad \text{for all } j \quad (43)$$

で定義され 1 次元の (13) 式の場合と同様にグリーン関数の恒等式を用いると

$$\phi(\vec{n}) = \frac{3J_4}{4J_2} [\omega^2 g(\vec{n}, \omega) - \Delta(\vec{n})] (\phi(\vec{0}) - \phi(\vec{e}_j)^3) \quad (44)$$

となる。これらの結果を用いると、1 次元の場合と同様にして、strong localization limit の極限でグリーン関数の漸近式を用いると以下の結果が得られる。

$$\frac{\phi(\vec{e}_j)}{\phi(\vec{0})} \approx -\frac{1}{d} \quad \text{for s-like mode} \quad (45)$$

(3) 高次元の場合の ILM に関する remark: ソリトンの場合との相違、ソリトンの collapse、Derrick の定理等

ILM の問題においては、解析、数値計算の両面において、殆ど総ての場合空間 1 次元の場合に対して研究が行なわれている。この場合連続体近似を用いると従属・独立を適当に選ぶことにより元の非線形格子方程式は nonlinear Klein-Gordon 方程式、非線形 Schrodinger 方程式 (NLS) に移行することが多い。従って ILM, IRM はソリトン方程式である非線形 Schrodinger 方程式の一種に過ぎないという議論がある。然し、ILM はソリトンと基本的に異なるものである。そのことを示す典型的な例は 1 次元の場合 NLS に移行する非線形格子方程式の 2 次元版、或いは 3 次元版である。このことを最も簡単に示すために例として、(3) 式と類似の形の式

$$\frac{d^2 v_n}{dt^2} = J_2(v_{n+1} + v_{n-1} - 2v_n) + \lambda v_n^3 \quad (46)$$

を考察する。 λ は定数である。この式の 2 次元版の式は

$$\frac{d^2 v(n_1, n_2)}{dt^2} = J_2[v(n_1 + 1, n_2) + v(n_1 - 1, n_2) + v(n_1, n_2 + 1) + v(n_1, n_2 - 1) - 4v(n_1, n_2)] + \lambda v_n^3 \quad (47)$$

$$v(n_1, n_2) = \phi(n_1, n_2)e^{-i\omega t} \quad \omega \dot{\phi}(n_1, n_2) \gg \ddot{\phi}(n_1, n_2) \quad (48)$$

とおきRWAを用いると上の式は

$$i \frac{d\phi(n_1, n_2)}{dt} = -\omega^2 \phi(n_1, n_2) + \frac{J_2}{2\omega} [\phi(n_1+1, n_2) + \phi(n_1-1, n_2) + \phi(n_1, n_2+1)\phi(n_1, n_2-1) - 4\phi(n_1, n_2)] \\ + \frac{\lambda}{2\omega} |\phi(n_1, n_2)|^2 \phi(n_1, n_2) \quad (49)$$

連続体近似の下で元の式は2次元のNLS方程式に従い、そこでは1次元の場合に対応するソリトンは存在しないことはプラズマ物理等における"collaps"として良く知られている。このことの他の典型的な例として場の理論におけるDerrickの定理がある。離散空間では系固有の非線形性により空間あらゆる方向に局在する状態が(1次元の場合と同様)存在することができる。還元すれば、ILMとソリトンとの相違は高次元の世界になって初めて顕著に表れ、1次元空間と多次元空間にはこのような意味で本質的な相違がある。筆者のILMにたいする発想はこのことに端を発しており、このことは1986の物理学会で発表された。

IV. acモード、dcモード、moving ILM

(1) moving ILM -3次 (soft), 4次 (hard) の非線形性を持つ1次元格子-

此迄の議論では、簡単のため、定常、即ち動かないILMについてのみ論じて来た。また格子の非線形性はformal theory の場合を除き、すべて4次のhardな非線形性の場合にはなしを限って来た。固体物理との関連においてより具体的に興味ある場合はMorse potential やLennard-Jones potentialに見られるようにsoftな非線形性を持つ格子の問題である。このことを念頭において系のHamiltonian H が以下の形で表される1次元非線形格子を考える。

$$H = \sum_n \left[\frac{m}{2} \dot{u}_n^2 + \frac{K_2}{2} (u_{n+1} - u_n)^2 + \frac{K_3}{3} (u_{n+1} - u_n)^3 + \frac{K_4}{4} (u_{n+1} - u_n)^4 \right], \quad K_2, K_4 > 0, \quad K_3 < 0 \quad (50)$$

従属変数 $v_n = u_{n+1} - u_n$ に対して運動方程式

$$\frac{d^2 v_n}{dt^2} = J_2(v_{n+1} + v_{n-1} - 2v_n) + J_2(v_{n+1}^2 + v_{n-1}^2 - 2v_n^2) + J_2(v_{n+1}^3 + v_{n-1}^3 - 2v_n^3) \quad (51)$$

が成り立つ。

この式の"moving ILM mode"解を以下の形に求める。

$$v_n \equiv v_n(t) = \phi_n^{(0)} + 2 \sum_{r=1}^{\infty} \phi_n^{(r)}(t) \cos[r(kn - \omega t)] \quad (52)$$

定常モードの場合と対比してenvelope function $\phi_n^{(0)}(t)$, $\phi_n^{(r)}(t)$ は時間座標 t に依存する。この式を(47)式に代入して両辺の $\cos[r(kn - \omega t)]$ 、及び $\sin[r(kn - \omega t)]$ ($r = 0, 1, 2, \dots$) の係数比較するとenvelope function にたいして一連の式が得られる。演算子

$$L_k(y_n) = 2y_n - \cos(k)(y_{n+1} + y_{n-1}), \quad M_k(y_n) = \sin(k)(y_{n+1} - y_{n-1}), \quad (53)$$

を導入すると、それらの式は以下の形に要約される。

$$J_2 L_0[\phi_n^{(0)}] + J_3 L_0[\{\phi_n^{(\alpha)}\}] + J_4 L_0[\{\phi_n^{(\beta)}\}] = -\ddot{\phi}_n^{(0)}, \quad (54)$$

$$J_2 L_0[\phi_n^{(r)}] + J_3 L_{rk}[\{\phi_n^{(\alpha)}\}] + J_4 L_{rk}[\{\phi_n^{(\beta)}\}] = (r\omega)^2 \phi_n^{(r)}, \quad (55)$$

$$J_2 L_{rk}[\phi_n^{(r)}] + J_3 L_{rk}[\{\phi_n^{(\alpha)}\}] + J_4 L_{rk}[\{\phi_n^{(\beta)}\}] = (r\omega)^2 \phi_n^{(r)}, \quad (56)$$

$$J_2 M_{rk}[\phi_n^{(r)}] + J_3 M_{rk}[\{\phi_n^{(\alpha)}\}] + J_4 M_{rk}[\{\phi_n^{(\beta)}\}] + 2(r\omega)^2 \phi_n^{(r)} = 0, \quad r, \alpha, \beta, \dots = 1, 2, 3, \dots \quad (57)$$

ここに、 $L_{rk}[\{\phi_n^{(\beta)}\}]$, $M_{rk}[\{\phi_n^{(\beta)}\}]$ 等は $\phi_n^{(\beta)}$ の組の関数である。この方法を実行した結果を要約すると、定常モードでは図3に示すようにdc-modeとac-modeの二つのモードに大出来ることが示される。moving ILMの計算結果の1例を図4に示す。

V. Nonlinear rotating modes (NRM)

(1) 1次元sine 格子 (SL)

1次元の非線形微分方程式

$$J \left[\sin(u_{n+1} - u_n) - \sin(u_n - u_{n-1}) - \frac{d^2 u_n}{dt^2} \right] = \lambda \sin(u_n) \quad (58)$$

は当初DNA生体高分子のなかの塩基の非線形ダイナミクスのモデル方程式として導入されたものでsine 格子 (SL) と称されている。それは離散SG (dSG) 方程式

$$J \left[(u_{n+1} - u_n) - (u_n - u_{n-1}) - \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \right] = \lambda \sin(u_n) \quad (59)$$

と同様従属変数 $u \equiv u(x, t)$ が小さい場合場合、ともに、変数が適当にスケールされたsine-Gordon (SG) 方程式

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \lambda_0 \sin(u_n) \quad (60)$$

に移行するが、 u が大きな値をとる場合SLはdSGと本質的に異なった性質を持つ。このことはSL系とdSG系のポテンシャルエネルギー U を比較することにより分かる、

$$U = J \sum_n [1 - \cos(u_{n+1} - u_n)] \quad (\text{SL}) \leftrightarrow U = \frac{J}{2} \sum_n [(u_{n+1} - u_n)^2] \quad (\text{dSG}) \quad (61)$$

即ち、SL系のポテンシャルエネルギーは u のsinusoidal関数であるがdSG系ポテンシャルエネルギーは2次関数であり u の増大とともに限りなく大きくなるが、SL系の場合のポテンシャルエネルギーは三角関数型の周期的振る舞いをし有限の値に止まっている。SL系にはある一つの格子点にある振子が回転運動をし、その周りの振子はbreather的な振動運動をするというnonlinear rotating modeが存在する。要約すると、SL系は動かないILM, 動くILM(breather)のほかに新たにnonlinear rotating mode (NRM)をあたえる。その模様を図5に示す。

(2) 高温超伝導体におけるintrinsic Josephson 素子系のNRM

図3に示すように、セラミクス高温超伝導体においてはc軸に垂直な CuO_2 超伝導層が絶縁体によりc軸方向に垂直にある間隔をもって隔てられそれ自身がJosephson 素子系を形成している。このJosephson 系はゲージ不変な超伝導波動関数 ψ_n について以下のKoyama-Tachiki 方程式で記述される。

$$\frac{d^2 \varphi_n}{d\tau^2} + \beta \frac{d\varphi_n}{d\tau} + (1 + 2\alpha) \sin(\varphi_n) - \alpha [\sin(\varphi_{n+1}) + \sin(\varphi_{n-1})] = I, \quad (62)$$

$$\frac{\hbar}{2e} \frac{d\varphi_n}{d\tau} = -\alpha [V_{n+1} + V_{n-1} - 2V_n] + V_n, \quad (63)$$

ここに β, α, I 及び V_n は、それぞれ、抵抗係数、素子間の結合定数、外電流、および電圧である。無次元の変数 τ は $\tau = \omega_p t$ で定義される。 ω_p はプラズマ振動数である。格子グリーン関数

$$g_c(n) = \frac{1}{N} \sum_q \frac{e^{iqn}}{1 + 2\alpha - 2\alpha \cos(q)} \quad (64)$$

を導入すると (50) 式は以下の形に表すことが出来る。

$$V_n = \frac{\hbar\omega_p}{2e} \sum_m g_c(n-m) \frac{\varphi_m}{d\tau} \quad (65)$$

reduced voltage $\bar{v}_n = \overline{v_n(t)} = \frac{eV_n}{\hbar\omega_p}$ で定義するとこのジョゼフソン素子系の reduced voltage $\bar{v}$ は

$$\bar{v} = \lim_{T \rightarrow \infty} \int_0^T dt \sum_{n=1}^N \frac{eV_n}{\hbar\omega_p} \equiv \sum_{n=1}^N v_n(t) > T = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \sum_r g(n-r) < \frac{d\varphi_r}{d\tau} > T \quad (66)$$

電流 I の関数としての (49) 式の $\varphi_n \equiv \varphi_n(I)$ を (53) 式に代入すればジョゼフソン素子系の $I-V$ 特性が得られる。この概要の 1 例を図 6 に示す。上の結果により高温超伝導体におけるジョゼフソン効果における $I-V$ 特性を理解することができる。尚、この章に相当することの内容のより詳細な研究は町田氏外によりなされている。

VI. Base flipping state in enzyme-catalized DNA

DNA 生体高分子において塩基配列による遺伝情報がメッセンジャー RNA に読み取られるためにはその 2 重螺旋構造において local open state が存在することが必要である。DNA のなかの塩基のダイナミクスにおいてその large-amplitude collective mode の存在がその前駆状態となるという考えがいくつか提案されている。local opening の前駆となる非線形ダイナミクスとして base pair の伸縮振動と base の twisting 運動が此迄提案されている。ここでは後者の立場に立って ILM がここではどのようなものであるかということを考察する。モデルとして図 7 のように螺旋軸を Z 方向に選びそれに垂直な面上における塩基対の平面回転を考察する。いま対をなす strand S と S' において S に属する n 番目の塩基対の平衡位置からの回転角を θ_n , S' のそれを θ'_n とし、モデル Hamiltonian を以下の形に取る。

$$H = \sum_n \left[\frac{I_n}{2} \dot{\theta}_n^2 + \frac{I'_n}{2} \dot{\theta}'_n{}^2 + K_n [1 - \cos(\theta_{n+1} - \theta_n)] + K'_n [1 - \cos(\theta'_{n+1} - \theta'_n)] \right] + V_h(\theta_n, \theta'_n) + V_o(\theta_n, \theta'_n), \quad (67)$$

where

$$V_h(\theta_n, \theta'_n) = h_n [1 - \cos(\theta_n - \theta'_n)] + d_n [1 - \cos(\theta_n) \cos(\theta'_n) g_n [1 - \cos(\theta_n)]]. \quad (68)$$

$$\begin{aligned} V_o(\theta_n, \theta'_n) &= \lambda_{1n} [1 - \cos(\theta_n)] + \lambda_{2n} [1 - \cos(2\theta_n)] + \mu_n [\cosh(\beta\theta_n) - 1] \\ &\quad + \lambda'_{1n} [1 - \cos(\theta'_n)] + \lambda'_{2n} [1 - \cos(2\theta'_n)] + \mu'_n [\cosh(\beta'\theta'_n) - 1] \\ &\equiv V_o(\theta) + V_o(\theta'). \end{aligned} \quad (69)$$

I_n 等は定数である。以下簡単のために、すべての係数が塩基の位置 n, n' に依存しない場合を考察する。運動方程式は以下の形をとる。

$$\begin{aligned} I\ddot{\theta}_n &= -\gamma\dot{\theta}_n + K \sin(\theta_{n+1} - \theta_n) - K \sin(\theta_n - \theta_{n-1}) - h \sin(\theta_n - \theta'_n) - \lambda_1 \sin(\theta_n) \\ &\quad - \lambda_2 \sin(2\theta_n) - \mu \sinh(\beta\theta_n) - d \sin(\theta_n) \cos(\theta'_n), \end{aligned} \quad (70)$$

$$\begin{aligned} I'\ddot{\theta}'_n &= -\gamma'\dot{\theta}'_n + K' \sin(\theta'_{n+1} - \theta'_n) - K' \sin(\theta'_n - \theta'_{n-1}) - h \sin(\theta'_n - \theta_n) - \lambda'_1 \sin(\theta'_n) \\ &\quad - \lambda'_2 \sin(2\theta'_n) - \mu' \sinh(\beta'\theta'_n) - d \sin(\theta'_n) \cos(\theta_n). \end{aligned} \quad (71)$$

このモデル方程式は定常 ILM, 動く ILM, NRM のほかに、on-site ポテンシャル $V_o(\theta_n)(V_o(\theta'_n))$ が図 8 に示されるような形にパラメーターを選びぶと図 9 に示されるように 2 重螺旋構造のなかで 1 対の塩基

対のみが外向きに配列した base flipping mode がえられる。選ばれたパラメーターの値は $I = I' = 1$ としたことに対応して以下の如くである。

$$\gamma = 0.01, K = K' = 0.2, h = 5.0, \lambda_1 = \lambda'_1 = 0.06, \lambda_2 = \lambda'_2 = 0.8, \mu = \mu' = 0.176, d = 2.0 \quad (72)$$

VII. その他

(1) 多次元 sine 格子

多次元 sine 格子のモデル方程式は以下であたえられる。

$$m \frac{d^2 u(\vec{n})}{dt^2} = -\lambda \sin[u(\vec{n})] + \sum_j K_j [\sin[u(\vec{u} + \vec{e}_j)] + \sin[u(\vec{u} - \vec{e}_j)] - 2 \sin[u(\vec{n})]] \quad (73)$$

この式はスピン系や固体物理に現われ、そのなかで最も興味深い ILM は渦状態である。

(2) photonic crystal

ILM が存在し工学的な応用も期待される最も有望な分野の一つは photonic crystal である。ここでは原理上いろいろな実験手段によって ILM を比較的容易に制御できる。

(3) 相転移、相変態

固体のなかで ILM が存在する場所では局所的に原子が大きな振幅で振動乃至変位をし非線形性が大きな場所である。この考えに沿って、Lindemann の考えに対応して固体の 1 次相転移の問題に対する ILM の役割を考えて行くことが今後の課題の一つである。ILM はそこでは前駆状態となっているのではないかという考えがある。また、渦的励起に関連して広い意味での ILM はある種の固体における Martensite 相変態に対して重要な役割をはたしているのではないかという考えがある。

(4) discretized hydrodynamics, acoustics

ILM の本質は系の非線形性とその構造の離散性にある。この考えを拡張すると流体の場や音波の場のなかに周期場を作れば、それ自身の非線形性により ILM を発生させる可能性があり、今後検討すべき課題の一つである。

(5) Anderson 局在との関連

Anderson 局在は線形系固有の性質である。系に非線形性があれば、適当な状況の下ではソリトン的な動く ILM は局在せず伝播することができる。

(6) 化学の問題との関連 : local mode in chemistry

化学の問題では normal mode と対比して local mode という概念があり古い研究の歴史を持っている。ここでの local mode の概念は ILM の概念と密接な関連を持っているが、研究面での相互の対話・討論は殆どないと思われる。今後の研究の課題としたい。

VIII. 結論

intrinsic localized mode の研究は (ソリトンの問題と同様) 殆ど数理的な研究や数値実験的研究の側面から行なわれている。ILM の問題を現実の物理や工学の問題と関連させて研究することが更に必要と思われる。

6. 文献

- (1) 武野正三、木曾田賢治、非線形完全格子における局在モード - Derrick の定理の破れ、日本物理学会講演、関西学院大学、1986.
- (2) A.J. Sievers and S. Takeno, Phys. Rev. Lett. **61**(1988), 970-973.
- (3) S. Takeno, K. Kisoda and A.J. Sievers, Prog. Theor. Phys. Suppl. No. **94** (1988), 242-269.
- (4) S. Takeno and A.J. Sievers, Solid State Commun. **67** (1988), 1023-1026.
- (5) M. Machida, T. Koyama and M. Tachiki, Phys. Rev. Lett. **83**(1999), 4618-4621.

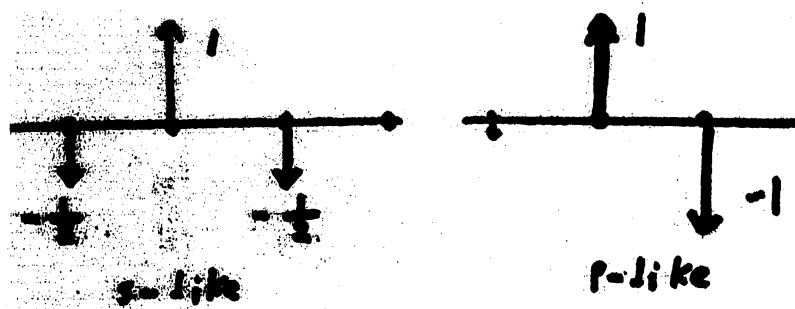


Fig.1 Two types of ILM

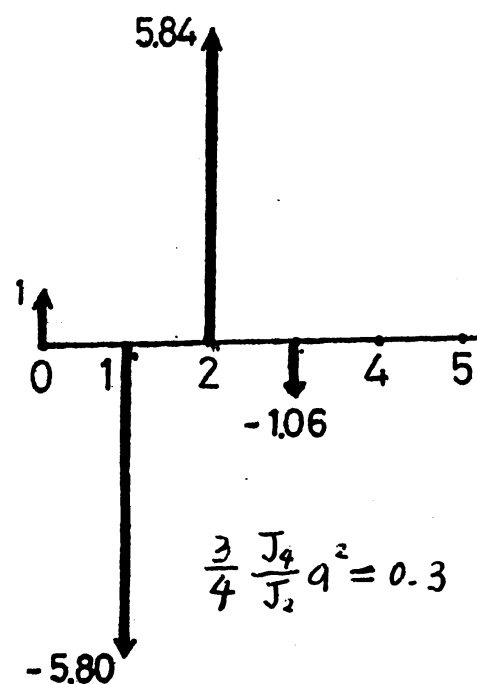


Fig.2 1次元非線形表面モード

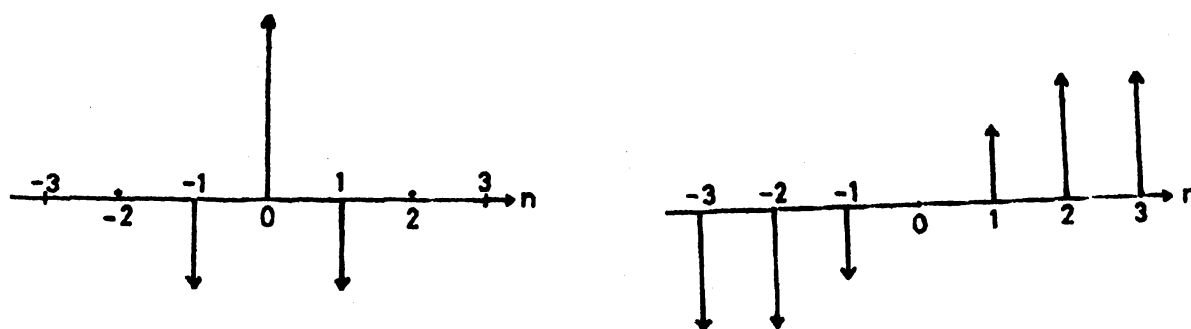


Fig.3 非対称ポテンシャルの場合の定常 s-like ILM

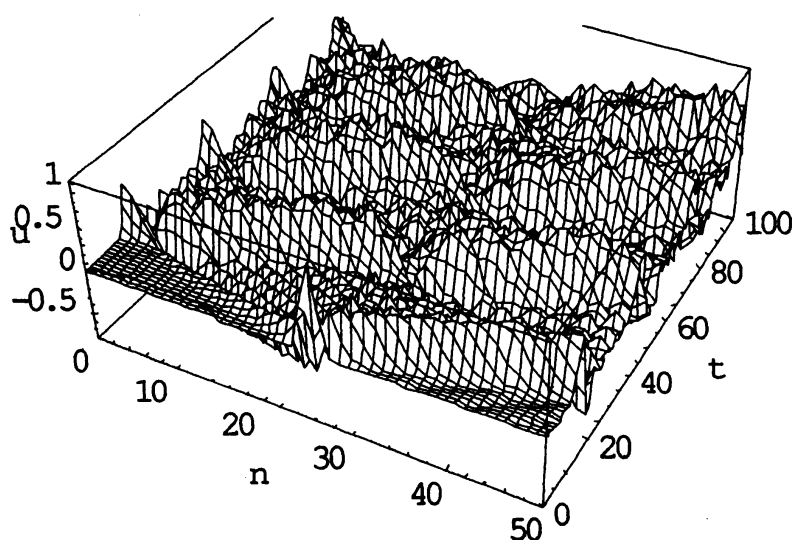


Fig.4 非対称ポテンシャルの場合の moving ILM

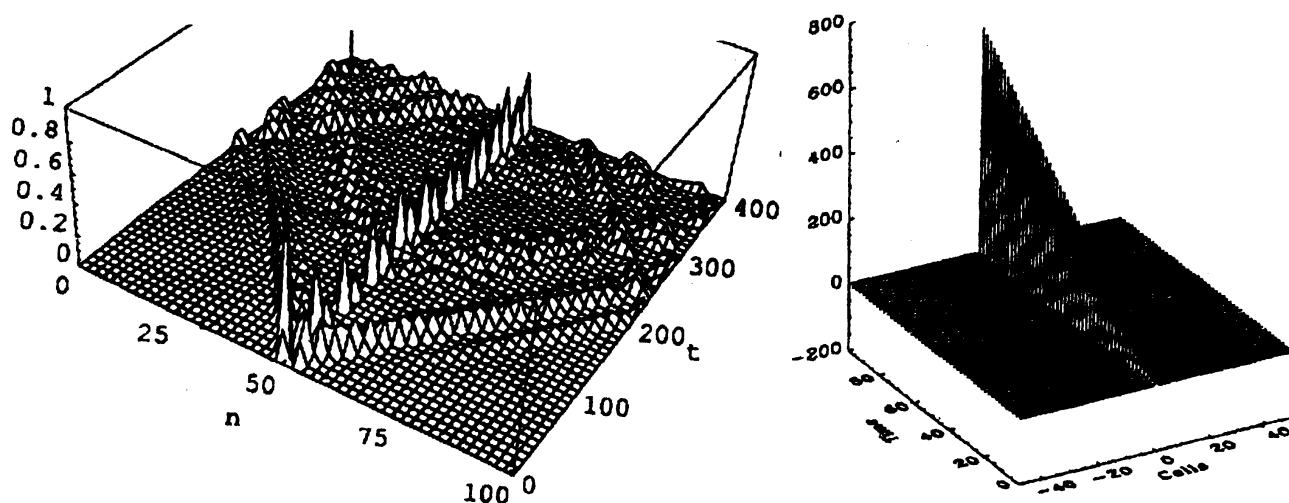


Fig.5 sine 格子における定常 ILM,動く ILM と NRM

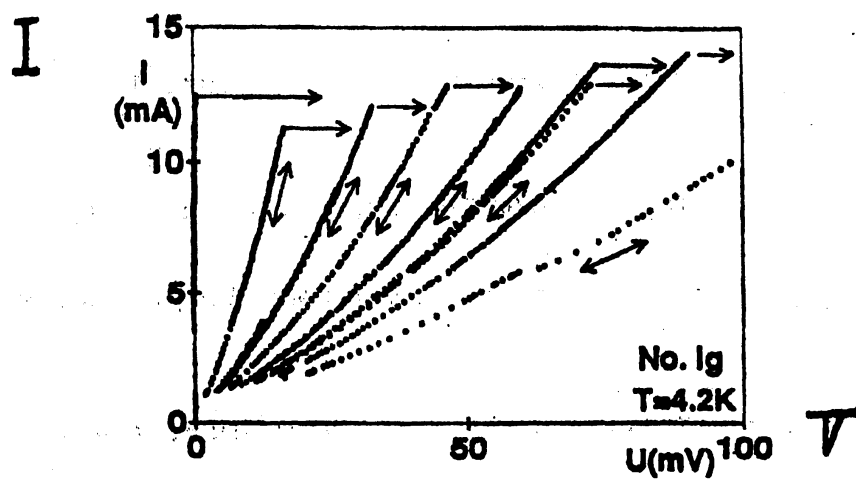


Fig.6 高温超電導体のジョゼフソン効果における I-V 特性

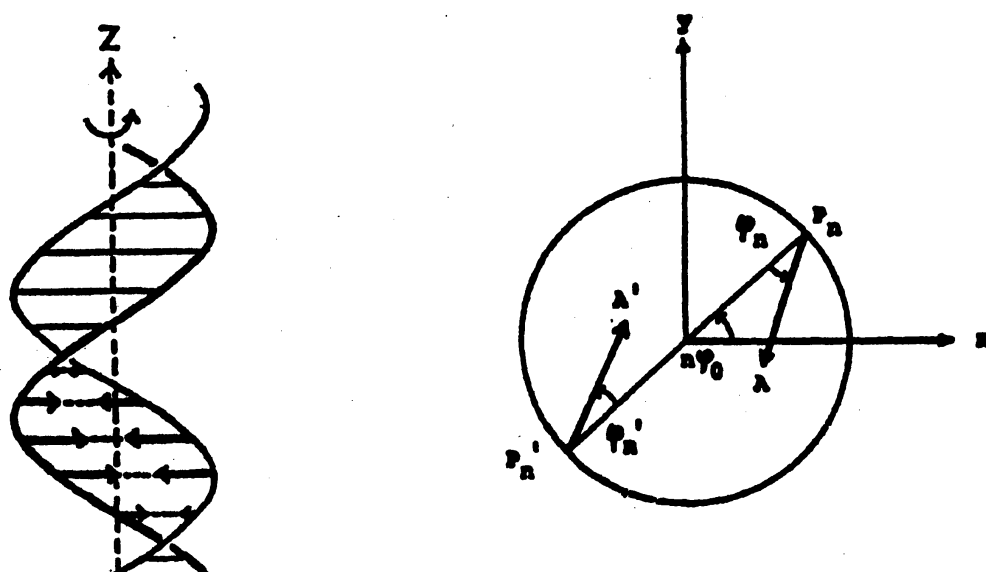


Fig.7. DNA における塩基配列と塩基対の平面回転体モデル

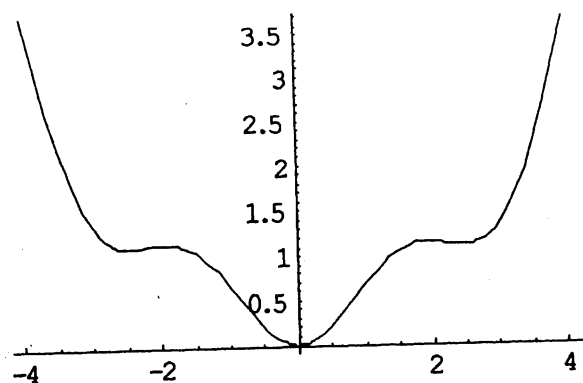


Fig.8 base-flipping の on-site ポテンシャル

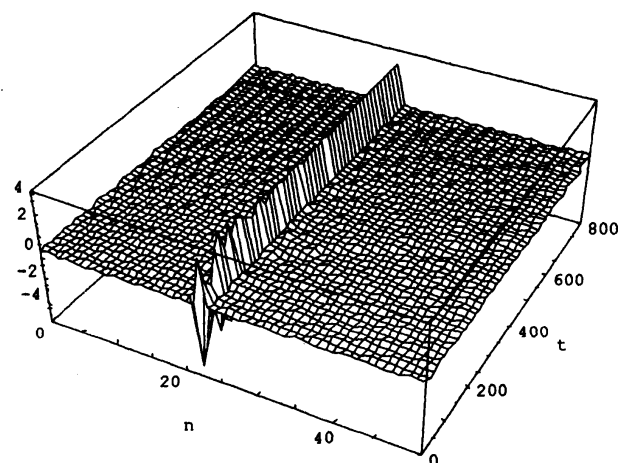
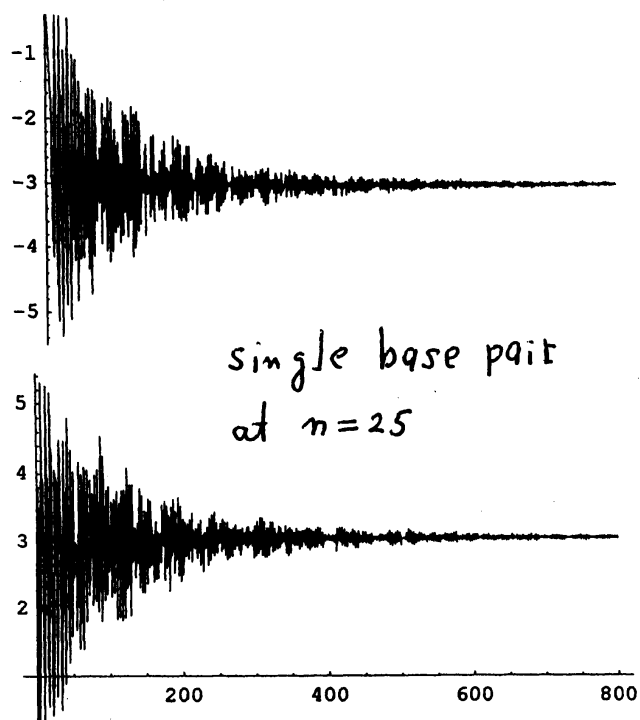


Fig.9 Base flipping state in DNA