

非線形格子における局在波動

京都大学大学院工学研究科 川原琢治 (Takuji Kawahara)
Graduate School of Engineering
Kyoto University

1 はじめに

非線形の格子系に格子間隔のスケールで変動する局在モードが存在することが十数年前に示されて以来、様々な分野でこの現象に関連する研究が進められてきた。連続体におけるソリトンは非線形局在構造の典型的な例であるが、離散系である格子における局在構造は、以下の2点で連続体における局在構造と異なっている。

1) 並進不変性の欠如

連続系では空間に関して並進不変性が成立するが、離散系においては格子間隔に関する不変性に限られる。このため、対称性の異なる粒子配置にエネルギー差 (Peierls-Nabarro potential barrier) があると、局在構造は伝播に際して減衰する。すなわち、連続系のソリトンは減衰しないが格子系の局在パルスは、このエネルギー差が0でない限り減衰することになる。

2) 波数にカットオフ：(スペクトルに上限)

連続系では、いくらでも高波数 (短波長) 成分が許されるのに対し、離散系においては、格子間隔に対応する波数以上の高波数は許されない。そのため、非線形性によって高波数へ移ろうとするエネルギーはスペクトルの上限に制約されることになり、両者が釣り合うと格子スケールで変動する非線形局在構造が生じると考えられる。これが、離散ブリーザー (discrete breather; DB) あるいは非線形局在モード (intrinsic localized mode; ILM) と呼ばれている現象である。

また、格子系の数値シミュレーションにおいて高波数の初期条件を与えると、多数の離散ブリーザーが生成され、それらが相互作用して少数あるいは単一の大振幅離散ブリーザーとなり、それが格子中を不規則に伝わり、やがて崩壊して格子全体にエネルギーが拡がった状態になるという現象が観測されている。これは、カオス的ブリーザー (chaotic breather; CB) とも呼ばれており、その生成・崩壊過程の理論的解明が待たれている。

離散系における局在構造の研究は、物理学の様々な分野で盛んに行われており、膨大な数の論文が発表されている。しかしながら、その基本的な性質については、まだよく分っていないと思われる点が存在する。本報では、離散ブリーザーおよびカオス的ブリーザー (以下それぞれDBおよびCBと略記することもある) の基本的な性質、存在条件などについて概要を述べることにする。

2 非線形局在モード (DB, CB) とは

(a) 離散ブリーザー (DB)

離散ブリーザーは、Fermi-Pasta-Ulam- β 格子

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

に対して、最初に見出された。対称性の違いから次の2種のモードが存在する。
Sievers-Takeno モード [1] :

$$u_n^{(ST)} = u_n^{(A)} = A(\dots, \xi_2, -\xi_1, 1, -\xi_1, \xi_2, \dots) \exp(-i\omega t), \quad (2a)$$

Page モード [2] :

$$u_n^{(P)} = u_n^{(B)} = B(\dots, \xi_2, -\xi_1, 1, -1, \xi_1, -\xi_2, \dots) \exp(-i\omega t). \quad (2b)$$

格子の線形分散関係式は $\omega = 2 \sin(k/2)$ で与えられるが、離散ブリーザーの振動数は $k = \pi$ での線形分散関係の最大値 2 より大きい値をとる。非線形性によって線形分散関係の禁止帯に波動が可能となるのである。進行型の離散ブリーザーは上記の2つのモードを交互に繰り返しながら伝わるが、2つのモードにエネルギー差 (Peierls-Nabarro potential barrier) があると、その差に相当するエネルギーを放出しながら伝わるため減衰する。一方、静止型の離散ブリーザーは減衰しない。

離散ブリーザーの2種のモードとエネルギー差については、離散非線形シュレディンガー方程式 (discrete nonlinear Schrödinger (DNLS) 方程式) に基づく Kivshar-Campbell [3] の説明が分かりやすいと思われるので、その結果を引用することにする。
DNLS 方程式 :

$$i \frac{d\phi_n}{dt} + p(\phi_{n+1} - 2\phi_n + \phi_{n-1}) + q|\phi_n|^2 \phi_n = 0, \quad (3)$$

に $\phi_n \propto A \exp[i(kn - \omega t)]$ を用いると、分散関係式 $\omega = 4p \sin^2(k/2) - qA^2$ を得る。これは、低波数 (small k) のとき $\omega \simeq pk^2 - qA^2$ 、最大波数 ($k = \pi$) のとき $\omega = 4p - qA^2$ となる。 $\phi_n(t) = A f_n \exp(-i\omega t)$ を仮定すると

$$\omega f_n + p(f_{n+1} - 2f_n + f_{n-1}) + qA^2 f_n^3 = 0, \quad (4)$$

となるが、ここで

$$\phi_n^{(A)}(t) = A(\dots, \xi_1, 1, \xi_1, \dots) \exp(-i\omega t), \quad (5a)$$

$$\phi_n^{(B)}(t) = B(\dots, \xi_2, 1, 1, \xi_2, \dots) \exp(-i\omega t), \quad (5b)$$

と仮定して、 ξ_1 が小さい近似のもとに (4) 式を満たす ξ_1, ω を求める。たとえば (5a) に対しては $\xi_1 = p/qA^2$ 、 $\omega \simeq -qA^2$ を得る。 $p > 0$ とすると $q > 0$ のとき $\xi_1 > 0$ となるから、これは連続的な局在モードにつながる低周波数モードである。 $q < 0$ なら $\xi_1 < 0$ となり、

周波数は $\omega > 4p$ となり、線形の場合より大きくなる。

$q > 0$ のときには (5b) に対して同様に $\xi_2 > 0$ の値が求まる。従って、 $q > 0$ のときには、各格子が同符号（同位相）で振動する連続体につながる低波数（低周波数）の音響モードが得られる。

$q < 0$ の場合には、隣接格子の振動が異符号（逆位相）となるので

$$\phi_n^{(A)}(t) = A(\dots, -\nu_1, 1, -\nu_1, \dots) \exp(-i\omega t), \quad (6a)$$

$$\phi_n^{(B)}(t) = B(\dots, -\nu_2, 1, -1, \nu_2, \dots) \exp(-i\omega t), \quad (6b)$$

のように置いて ν_1, ν_2 を決めることができる。(6a) が Sievers-Takeno モードの離散ブリーザー (DB) である。(6b) に対しても同様にして Page モードの離散ブリーザーの関係が導ける。

(3) 式の保存量 (conserved quantities) は

$$N = \sum |\phi_n|^2, \quad (7a)$$

$$H = - \sum [p\phi_n^*(\phi_{n+1} + \phi_{n-1}) - 2p|\phi_n|^2 + q|\phi_n|^4/2]. \quad (7b)$$

で与えられる。 N は運動量、 H はハミルトニアンである。(5a)(5b) あるいは (6a)(6b) を保存量 (7a) に用い A モード、B モードに対応する N の値をそれぞれ N_A, N_B とすると、 $N_A = N_B$ より $A^2 = 2B^2$ 、また、同様に (7b) より $H_A - H_B \simeq -q(A^4 - 2B^4)/2 = -qB^4$ を得る。

したがって、低周波数モード ($q > 0$) に対しては $H_A < H_B$ 、高周波数モード ($q < 0$) に対しては $H_A > H_B$ となるので、離散ブリーザーについては、Sievers-Takeno モードのエネルギーが Page モードのエネルギーより大きいことになる。このエネルギー差が Peierls-Nabarro potential である。

(b) Ablowitz-Ladik 方程式

可積分な格子方程式の数少ない例として知られる Ablowitz-Ladik 方程式は複素変数 ϕ_n に対して

$$i \frac{d\phi_n}{dt} + p(\phi_{n+1} - 2\phi_n + \phi_{n-1}) + q|\phi_n|^2(\phi_{n+1} + \phi_{n-1})/2 = 0, \quad (8)$$

で記述される。(8) 式の線形分散関係式は $\omega = 4p \sin^2(k/2) - qA^2 \cos k$ となり、低波数では $\omega \simeq pk^2 + qA^2k^2/2 - qA^2$ 、 $k = \pi$ のときには $\omega = 4p + qA^2$ となる。DNLS 方程式の場合と同様な近似をすると $q > 0$ のとき低周波数モード、 $q < 0$ のとき高周波数モードとなることが言える。高周波数モードの振動数は $\omega = 4p + qA^2 < 4p$ となり、線形の値よりも小さく DB は存在しない。低周波数モードに対して 2 種のモードのエネルギー差： $H_A - H_B = 0$ となる。これは Ablowitz-Ladik 方程式がソリトン解をもつ可積分方程式であることと対応している。

(c) Fermi-Pasta-Ulam 格子

次の格子方程式

$$\frac{d^2 u_n}{dt^2} = u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1} + \alpha[(u_{n+1} - u_n)^2 - (u_n - u_{n-1})^2] + \beta[(u_{n+1} - u_n)^3 - (u_n - u_{n-1})^3], \quad (9)$$

は非線形項が2次の場合はFPU- α 、3次の場合はFPU- β と呼ばれる。Fermi-Pasta-Ulam [4] が低波数、低エネルギーの初期条件に対して回帰現象を発見したのはFPU- α 系であった。また、Zabusky-Kruskal [5] が、この系の連続体近似である Korteweg-de Vries 方程式の初期値問題において準周期的回帰現象を見出し、それがソリトンの発見、可積分系の研究の発展につながったことはよく知られている。

このようにFPU格子の研究はエネルギー分配、エルゴード性、熱化などの観点から、主として低波数の初期条件に対する数値シミュレーションに焦点があてられてきており、高波数の初期条件に対する研究はごく最近になって行われた。Sievers-Takeno によるDBの発見により高周波数モードの研究が盛んとなった時期に、後に Cretegnny ら [6] によりカオス的ブリーザー (chaotic breather) と呼ばれる現象が Burlakov ら [7] によって議論されている。彼らは、FPU- β 格子に、初期条件: $u_n = (-1)^n A_0$ を与え数値計算を行った。その結果、局在モードが生成され、線形最大周波数の約1.5倍あたりに周波数スペクトルをもつこと、鋭い局在モードを生じた後に壊れて低周波数モードが増加し、熱平衡状態の周波数スペクトルが ω^{-1} に比例すること、さらに Toda 格子とFPU- α に対してはDBが存在しないこと、また、2原子格子の場合には完全な熱化は起こらずスペクトルバンドに間隙が存在し、各バンドで熱化すること等が示された。

初期条件 $u_n = (-1)^n A_0$ は格子毎に反対符号をもつジグザグ波形であり、 π -モードと呼ばれる。この初期条件に対し Cretegnny ら [6] は詳しい数値計算を行い 1) 初期条件の変調不安定の結果、多数のDBを生じ、2) それらのDBが相互作用することにより単一の鋭い大振幅DBとなり、一定時間系の中を不規則に移動する、3) このDBは最終的に崩壊し各格子に同程度のエネルギーが分布する等分配状態になる。Cretegnny らは2) の過程で不規則に移動するDBのことをカオス的ブリーザー (CB) と名付けたのである。

3 DB, CB の存在条件

DB, CB は様々な格子系でその存在が示されているが、それらが存在しない格子系も指摘されている。FPU- β 格子ではDB, CB が存在するが、FPU- α 格子には存在しない。それでは、どのような条件のもとに存在するのであろうか。これまでに上げられた格子系に対する結果から以下のような点が条件になり得ると思われる。

(a) 偶奇対称性

DB は格子毎に反対符号で振動する現象であるので、 $u_n = (-1)^n v_n$ のような変換をしたときに、 v_n に対する式が偶奇対称性を持つことが条件になると考えられる。例えば、(9) 式に変換 $u_n = (-1)^n v_n$ をほどこすと

偶数の n に対し

$$\frac{d^2 v_n}{dt^2} = -(v_{n+1} + 2v_n + v_{n-1}) + \alpha[(v_{n+1} + v_n)^2 - (v_n + v_{n-1})^2] - \beta[(v_{n+1} + v_n)^3 + (v_n + v_{n-1})^3], \quad (10a)$$

奇数の n に対し

$$\frac{d^2 v_n}{dt^2} = -(v_{n+1} + 2v_n + v_{n-1}) - \alpha[(v_{n+1} + v_n)^2 - (v_n + v_{n-1})^2] - \beta[(v_{n+1} + v_n)^3 + (v_n + v_{n-1})^3], \quad (10b)$$

となる。 α の項に偶奇対称性はないが、 β の項は変換しても対称性を満たしており、 n の偶奇にかかわらず単一の方程式で記述できる。このことは、FPU- β 格子には DB が許されるが、FPU- α 格子には存在しないことを示唆している。

(b) 非可積分性

数少ない可積分な格子系である Toda 格子

$$\frac{d^2 u_n}{dt^2} = 2 \exp(-u_n) - \exp(-u_{n+1}) - \exp(-u_{n-1}), \quad (11)$$

には DB、CB は存在しない。また、Ablowitz-Ladik 方程式 (8) にも DB、CB は存在しない。例えば Toda 格子に π -モードの初期条件を与えると変調不安定性を示すが DB は現れず非線形の安定な周期解に移行する。しかし、Toda 格子に外力項 (on-site 力) を加えるた方程式

$$\frac{d^2 u_n}{dt^2} = 2 \exp(-u_n) - \exp(-u_{n+1}) - \exp(-u_{n-1}) - \alpha u_n, \quad (12)$$

の場合には DB、CB が存在する [8]。このような事実から可積分な格子には DB が存在しないと考えられ、DB、CB の存在条件の一つとして非可積分性が考えられる。

(c) 格子の自由度の増加 (on-site 力の付加)

Morse-potential

$$\phi = D\{\exp[-2\alpha(r - r_0)] - 2\exp[-\alpha(r - r_0)]\}, \quad (13)$$

を相互作用項とする格子には、DB、CB が存在しないが、on-site 力を加えると DB、CB が存在する。(12) 式のように、Toda 格子に on-site 力を加えた場合にも同様に DB、CB が存在し得る。on-site 力として Morse-potential(13) による力や Lennard-Jones-potential

$$\phi = D[(r_0/r)^{12} - 2(r_0/r)^6], \quad (14)$$

による力を加えた場合にも DB が存在することが示されている [9]。このように適当な強さの外力項 (on-site 力) が付加されると DB、CB が存在するようになる。また、2 原子格子に対しては光学的モードが可能であり、DB、CB を生じ得る。したがって、単純な格子系では、DB、CB が存在しないが、付加的な項 (on-site 力など) を加えた複雑な格子系では存在する可能性がある。

4 様々な格子系とDB、CBの存在

前章で考えた3つの条件：(a) 偶奇対称性 (b) 非可積分性 (c) on-site 力 に基づきDBの存在不存在を整理すると以下ようになる。

FPU- β と DNLS 方程式は (a)(b) を満たし DB 存在。

discrete Klein-Gordon (DKG) 方程式

$$\frac{d^2 u_n}{dt^2} = u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1} - \omega_0^2 u_n + \beta u_n^3, \quad (15)$$

は (a)(b)(c) を満たし DB 存在。

Toda 格子は (a)(b) を満たさず、Ablowitz-Ladik 方程式は (b) を満たさないで DB は存在しない。

FPU- α 、Morse 格子は (a) を満たさないため DB は存在しない。

以上のように、(a) が成立しないと DB は存在しないようである。しかし、(a) が成立しない場合にも on-site 力が加わると DB が存在することがある。

前述したようにCBは次のような現象である ([6] 参照)。初期に与えた π -モードの変調不安定性により生じた多数のDBが相互作用して、より振幅の大きい少数のDBになり、最終的には単一の移動型DBあるいは少数の静止型DBを生じる。単一の移動型DBが不規則に運動することからCBと呼ばれている。CBは最終的に崩壊しエネルギー等分配の状態となる。このようにCBが生じるための前提としてDBの存在が必要となると考えられる。実際、DBの存在する系の殆どについてCBの生成が見られる。また、DBの存在しない格子に on-site 力を加えると、DB、CBを生じる例が知られている。

CBが出現する格子の例として、FPU- β 、DNLS 方程式、梁格子 (beam lattice) [10]、2 原子格子、Toda + on-site 格子、Morse + on-site 格子などがある。DKG 方程式は少数の静止型DB (CB) を生じる例である。

CBの生成のための条件については、Rumpf-Newell [11] の考察がある。彼らはCBの存在条件として

- (1) 低振幅のダイナミックスがNLS型の方程式で記述される、
- (2) 系が非可積分である、
- (3) 2つの運動積分定数が存在する、

をあげている。しかしながら、数値計算の結果CBが観測される格子系に対して、これらの条件が成立するか否かの検討は今後の課題と思われる。

以上の考察から言えそうなことは、DB、CBが存在するための条件として、格子が非可積分であること、そして偶奇対称性をもつことがあげられる。しかし、偶奇対称性がない格子に付加的な外力項 (on-site 力) が加わると、DB、CBが可能になる。これは、1次元格子についての条件であり、2次元、3次元の格子については、不明である。on-site 力を考慮することは一種の2次元的な効果を取り入れることに相当することや、2原子格子のように格子の自由度が増すとDB、CBが存在することなどを考えると、格子の自由度の増大・多次元化によってDB、CBがより一般的に存在し得るとも言える。このことは、現実の物理系におけるDB、CBの役割を明らかにすることの必要性を示唆するものであろう。

2次元格子におけるDBの研究例として、Marínらの研究[12]がある。これは、雲母の結晶中に残されている痕跡がDBの進行により生成されたものであると考え、六方晶系をモデル化した格子方程式を数値的に解き、2次元DBの伝播を確認している。彼らは、相互作用力にはLennard-Jonesポテンシャル、on-site力にMorseポテンシャルを用いている。また、2次元DNLS方程式においても2次元DBが存在することが示されている[13]。しかし、2次元、3次元DBの研究は1次元系ほどには進んでいないようである。

以上はDB、CBの存在条件についての考察である。講演ではCBの具体例について、筆者の研究室で行われた研究の一部を紹介したが、本報告では省略する。

References

- [1] A.J.Sievers, S.Takeno: Phys.Rev.Lett. 61 (1988) 970.
- [2] J.B.Page: Phys.Rev. B 41 (1990) 7835.
- [3] Yu.S.Kivshar, D.K.Campbell: Phys.Rev. E 48 (1993) 3077.
- [4] E.Fermi, J.Pasta, S.Ulam: Los Alamos Report LA-1940 (1955).
- [5] N.Zabusky, M.D.Kruskal: Phys.Rev.Lett. 15 (1965) 240.
- [6] T.Cretegny, T.Dauxois, S.Ruffo, A.Torcini: Physica D 121 (1998) 109.
- [7] V.M.Burlakov, S.A.Kiselev, V.I.Rupasov: Phys.Lett. A 147 (1990) 130;
V.M.Burlakov, S.A.Kiselev: JETP 72 (1991) 854.
- [8] K.Matsuoka, T.Kawahara : Wave Motion 38 (2003) 117.
- [9] A.M.Morgante, M.Johansson, G.Kopidakis, S.Aubry: Physica D 162 (2002) 53.
- [10] T.Nagase, T.Kawahara : Proceedings of APM 2003.
- [11] B.Rumpf, A.C.Newell: Physica D 184 (2003) 162.
- [12] J.L.Marín, J.C.Eilbeck, F.M.Russell: Phys.Lett. A 248 (1998) 225.
- [13] P.G.Kevrekidis, K.Φ.Rasmussen, A.R.Bishop: Int.J.Mod.Phys. B 15 (2001) 2833.