

2次元FPU格子系での Intrinsic Localized Modeの構造の解析

阪大・工 土井 祐介 (Yusuke Doi),
阪大・工 中谷 彰宏 (Akihiro Nakatani)
Graduate School of Engineering, Osaka University

概要

2次元非線形格子系における Intrinsic Localized Mode(ILM)の局在構造を数値的に解析する。ILMの振動数が大きくなるにつれて、ILMの振幅が大きくなるだけではなく、対称性の異なる構造への分岐が出現することを示す。

1 はじめに

非線形局在モード (Intrinsic Localized Mode, ILM) は非線形格子系に出現する空間的に局在した構造をもつ周期振動である [1]。近年では数値シミュレーションによる解析だけでなく [2]、様々な実験 [3-7] においても観測されており、種々の興味深い性質が報告されている。

非線形格子系とは空間上の格子点が互いに非線形相互作用で結ばれた系であり、大規模周期構造物から結晶中の原子・分子構造まで様々なスケールで出現する離散構造のダイナミクスをモデル化していると見ることができる。そのような格子系の中で Fermi-Pasta-Ulam (FPU) β 格子系は最もよく研究されてきたモデルの一つである [8]。FPU- β 格子系は格子点が隣接する格子点と非線形ばねでつながれた系であり、その Hamiltonian は次のように与えられる。

$$H = \sum_i \left[\frac{1}{2} \dot{u}_i^2 + \frac{1}{2} (u_{i+1} - u_i)^2 + \frac{\beta}{4} (u_{i+1} - u_i)^4 \right]. \quad (1)$$

ここで、 u_i は i 番目の格子点の釣り合いの位置からの変位である。ILM は FPU- β モデルにおいて報告されて以降 [1]、非線形 Klein-Gordon, Born-Mayer-Coulomb ポテンシャルによる格子系 [10] など様々な 1次元非線形格子系で発見されてきた。1次元格子系においては対称性の異なる 2種類の静止型 ILM (odd-type [1], odd-type [11]) が存在することが知られている。また、静止型 ILM は相互作用ポテンシャルの非対称性によってその形状がゆがみ、最終的に存在しなくなると考えられている [12]。一方、厳密解としては示されていないものの、数値シミュレーションにおいては強い局在構造を保ったまま格子を伝播していく移動型 ILM の存在も示されている。この移動型 ILM は even-mode 的な形状と odd-mode 的な形状を遷移しながら移動していくことから、even-mode と odd-mode のエネルギー差として Peierls-Nabarro ポテンシャルを定義してその大きさと ILM の移動性との関連性を考慮する議論もある [13]。一方で、4つの格子点からなる非線形格子系におい

てポテンシャルの対称性を考慮することによって、任意の移動速度を有する ILM を構成可能であることも示されている [14]. このように ILM は 1 次元格子系においても、相互作用ポテンシャルの形状などによって、多様なダイナミクスを示す。

ILM の励起のメカニズムについては系の変調不安定性との関係による議論がなされている。ILM は系の最大固有振動数をもつ固有モードの変調不安定から励起される。この場合、固有モードの包絡線の不安定化によって生じた多数の ILM はお互いに衝突を繰り返しながらエネルギーを交換し、少数の大きなエネルギーを持つ ILM が生き残るという過程が観測される。この時の ILM のカオス的な動きから、この現象はカオス的ブリーザー (Chaotic Breather, CB) と呼ばれる [15].

一方、ILM の存在性は系の次元数に依存せず、2 次元、3 次元格子系においても出現する [16]. このことから、高次元格子系の ILM についても解析が行われてきている。しかし、これらの解析は多くが特定の初期条件からの時間発展による ILM の生成を追跡したものであり、高次元系における ILM の構造に着目した研究はあまり見られない。そのような中、Ikeda らは相互作用ポテンシャルが Morse ポテンシャルある 2 次元格子系において、初期条件に応じて、準 1 次元型および 2 次元型の 2 つのタイプの ILM が励起されることを示した [17]. これらの局在構造は、3 角形格子および 4 角形格子系でともに出現し、格子の構造に依存しないと考えられる。

本稿では、2 次元 FPU 格子系における、この 2 つのタイプの ILM を数値計算によって計算し、その構造を解析する。

2 解析モデル

本稿では、2 次元正方格子型の FPU- β モデルを考える。それぞれの格子点は、 $x-y$ 平面内において、 x 方向、 y 方向にそれぞれ距離 d ごとに周期的に配列している (図 1). 各格子点は x, y 方向の 2 自由度の変位成分を持つものとする。また、各格子点は釣り合いの位置における最近接および第 2 近接格子と相互作用するものとする。この場合、系の Hamiltonian は、

$$H = \sum_{i,j} \left[\frac{1}{2} \dot{\mathbf{u}}_{i,j}^2 + V(|\mathbf{u}_{i+1,j} - \mathbf{u}_{i,j}| - d) + V(|\mathbf{u}_{i,j+1} - \mathbf{u}_{i,j}| - d) + V(|\mathbf{u}_{i+1,j+1} - \mathbf{u}_{i,j}| - d) + V(|\mathbf{u}_{i-1,j+1} - \mathbf{u}_{i,j}| - d) \right], \quad (2)$$

で与えられる。ここで、 $\mathbf{u}_{i,j} = (u_{i,j}, v_{i,j})$ は (i, j) 番目の格子点の位置ベクトル、 d は格子間相互作用の平衡長である。 $V(r)$ は格子間相互作用ポテンシャルであり、

$$V(r) = \frac{1}{2} r^2 + \frac{\beta}{4} r^4, \quad (3)$$

で与えられる。 β は非線形パラメータである。

以上より, (i, j) 番目の格子点の運動方程式は,

$$\ddot{\mathbf{u}}_{i,j} = -\frac{\partial V(|\mathbf{u}_{i+1,j} - \mathbf{u}_{i,j}| - d)}{\partial \mathbf{u}_{i,j}} - \frac{\partial V(|\mathbf{u}_{i,j-1} - \mathbf{u}_{i,j}| - d)}{\partial \mathbf{u}_{i,j}} - \frac{\partial V(|\mathbf{u}_{i+1,j+1} - \mathbf{u}_{i,j}| - d)}{\partial \mathbf{u}_{i,j}} - \frac{\partial V(|\mathbf{u}_{i+1,j-1} - \mathbf{u}_{i,j}| - d)}{\partial \mathbf{u}_{i,j}} \quad (4)$$

と与えられる.

上記の2次元FPU- β 格子系に出現するILMを数値的に計算する. 本稿では計算の対象を静止型ILMに限定する. この場合, 内部振動数 ω_{ILM} で振動するILMは位相空間中を周期 $2\pi/\omega$ で周回する周期軌道に対応する. 今, N^2 個の格子点の構成される $4N^2$ 次元の位相空間 $\{\mathbf{q}_{i,j}, \mathbf{p}_{i,j}\}$ を考える. 運動方程式(4)はこの位相空間上での軌道の時間発展を記述する. 時刻 t_0 で点 $\mathbf{P}(t_0)$ の状態にある点から, $\mathbf{P}(t)$ が時刻 $t_0 + \Delta t$ に移動する点 $\mathbf{P}(t_0 + \Delta t)$ への写像を $f_{\Delta t}$ と定義する.

$$\mathbf{P}(t_0 + \Delta t) = f_{\Delta t}(\mathbf{P}(t_0)). \quad (5)$$

今, 点 $\mathbf{P}_0$ が周期 $2\pi/\omega_{\text{ILM}}$ の周期軌道上にあるならば,

$$\mathbf{P}(t_0 + 2\pi/\omega_{\text{ILM}}) = f_{2\pi/\omega_{\text{ILM}}}(\mathbf{P}(t_0)) = \mathbf{P}(t_0). \quad (6)$$

が成立する.

したがって, ILMに対応する周期軌道を探すことは,

$$f_{2\pi/\omega_{\text{ILM}}}(\mathbf{P}_0) - \mathbf{P}_0 = \mathbf{0}, \quad (7)$$

を満たす $\mathbf{P}_0$ を探すことと等価である. 数値計算においてはNewton法を用いて,

$$|f_{2\pi/\omega_{\text{ILM}}}(\mathbf{P}_0) - \mathbf{P}_0| = 0, \quad (8)$$

を満たす $\mathbf{P}_0$ を探索する. ただし, 写像 $f_{2\pi/\omega_{\text{ILM}}}$ は陽には与えられず, 運動方程式(4)による $\mathbf{P}_0$ の時間発展によって決定される. したがって, 数値積分による時間発展の計算が必要である. 本研究では6次のシンプレクティック数値積分法を用いて計算を行った.

さらに, ある ω_{ILM} に対して, 周期軌道が見つかった場合, その近傍 $\omega_{\text{ILM}} + \Delta\omega$ での周期軌道は ω_{ILM} での解をニュートン法の初期試行の解として用いて計算するより, 効率よく解を探索することが可能である.

3 解析結果

数値計算によって得られたILMの構造を示す. Hamiltonian (2)で示される系は, 固有モード解析により, 分散曲線が存在しない領域は最大固有角振動数 ω_{max} より大きな値

の領域のみであることが分かる。したがって、系 (2) に出現する ILM の内部振動数 ω_{ILM} は常に $\omega_{\text{ILM}} > \omega_{\text{max}}$ となる。また、局在構造の形状は最大固有各振動数のモード (Zone Boundary Mode, ZBM) の構造に由来して、局在構造の付近では隣接格子点の変位が逆位相であるジグザグ型の構造をとる。計算の結果、準 1 次元型および、2 次元型の 2 つのタイプの局在構造が得られた。

3.1 準 1 次元 ILM

準 1 次元 ILM は局在構造が 1 次元的にある格子列のみ出現する構造である。局在構造の出現する方向すなわち波数ベクトル $\mathbf{k}$ と、振幅ベクトル $\mathbf{u}$ の方向は平行であり、縦波的な内部振動をする (図 2)。構造としては、1 次元 FPU 格子系 (1) に出現する ILM と類似しており、2 次元格子系による影響は、隣接する格子列との相互作用を通じて現れる。

局在構造の対称性も 1 次元格子系における ILM の対称性と同様になっている。すなわち、局在のピークの位置に応じて、even-mode および odd-mode が出現する。

2 次元格子構造による影響として、第 2 近接格子間の相互作用が考えられる。第 2 近接相互作用を導入することによって、準 1 次元 ILM は格子列方向に関して局在の中心軸における左右対称性が失われる。これは、第 2 近接相互作用の格子列に沿った成分が、引っ張りと圧縮で非対称になるためである [18]。

図 3 に even モードの準 1 次元 ILM の内部振動数と振幅の関係を示す。縦線はそれぞれのパラメータでの最大固有各振動数である。ILM は最大固有各振動数付近から励起し、内部振動数の増大に伴って振幅も増大する。一方、関係は 1 つの曲線で表されており、分岐は見られない。

3.2 2 次元 ILM

2 次元 ILM は図 4 に示すように局在構造が 2 次元の拡がりをもっている構造である。正方格子をなす 4 つの格子点が格子の対角線方向に沿って振動をする。縦波と横波の変位成分が同じオーダで含まれる。縦波変位は隣接格子点で逆位相、横波成分は同位相で振動している。

局在構造の対称性を考えると、縦波成分の変位は、1 次元格子モデルにおける even-mode 的な構造をしている。その為、局在構造のピークの点は、正方格子の中心点になる。一方、odd-mode 的な構造は現在までのところ見つかっていない。

図 5 に 2 次元 ILM の内部振動数と振幅の関係を示す。準 1 次元 ILM と同様、系の最大固有振動数付近から励起し、内部振動の増大に伴い、振幅も増大していく。ただし、局在構造の対称性の異なるモードが見つからなかったことから、even-mode 的なモードに対する曲線のみとなっている点が異なる。しかし、2 次元 ILM ではモードの分岐が発生し、同一振動数で異なるタイプの局在構造が出現することが明らかになった。図 5 では $\omega = 4.357$

および $\omega = 4.409$ で分岐が発生していることがわかる。

図 4 に分岐点 $\omega = 4.357$ で分岐した 2 つの ILM の構造を示す。モード 1 は中央の振幅、モード 2a, 2b は大きな振幅、小さな振幅のモードを示す。モード 1 は局在のピークが存在する正方格子を構成する 4 つの格子点の x 方向、 y 方向の変位の絶対値が等しい。

$$\begin{aligned}(\tilde{u}_{m,n}, \tilde{v}_{m,n}) &= (d, d), \\(\tilde{u}_{m+1,n}, \tilde{v}_{m,n}) &= (-d, d), \\(\tilde{u}_{m,n+1}, \tilde{v}_{m,n}) &= (d, -d), \\(\tilde{u}_{m+1,n+1}, \tilde{v}_{m,n}) &= (-d, -d).\end{aligned}\tag{9}$$

ここで、 $\tilde{u}_{i,j}$ は (i,j) 番目の格子点のつりあいの位置からの変位である。したがって、このモードは x 方向、 y 方向の構造が対称であるので、正方格子の 2 つの対角線に沿った変位が対称になっていることが分かる。この場合、振動中も 4 つの格子点は正方形の形状を保っており、正形状の格子が時間的に伸縮する様子が観測される。この対称性の構造は分岐前の 2 次元 ILM の構造と同じである。

モード 2 の場合、正方格子を構成する 4 点のうち、隣接する 2 点の変位の絶対値が異なる一方、対角線上に位置する 2 点のつりあいの位置からの変位の絶対値が等しくなる。

$$\begin{aligned}(\tilde{u}_{m,n}, \tilde{v}_{m,n}) &= (d+a, d+a), \\(\tilde{u}_{m+1,n}, \tilde{v}_{m,n}) &= (-d+a, d-a), \\(\tilde{u}_{m,n+1}, \tilde{v}_{m,n}) &= (d-a, -d+a), \\(\tilde{u}_{m+1,n+1}, \tilde{v}_{m,n}) &= (-d-a, -d-a).\end{aligned}\tag{10}$$

この場合、格子の対角線に沿って、大きな振幅となる方向と、小さな振幅となる方向があるので、正方格子はひし形形状に変形して振動する。ただし、4 つの格子点はモード 1 と同じく対角線に沿って振動する。したがって、1 つの格子点に着目すると、2 つの対角線のどちらが大きな振幅となるかによって、内部振動数および構造が同じで方向の異なる 2 つのモードが現れる。これがモード 2a およびモード 2b への分岐である。これらの性質から、モード 2a を正方格子の中心点を回転軸として $\pi/2$ 回転させるとモード 2b となることは容易に分かる。

図 6 はモード 1、モード 2a およびモード 2b の x 方向変位および y 方向変位をプロットしたものである。モード 1 は 1 次元格子系における even-mode タイプの形をしていることが分かるが、モード 2 の場合は、局在ピークを軸とした左右対称性が失われていることが分かる。これは、準 1 次元モードにおいて第 2 近接相互作用が大きくなってきた場合に出現する、局在構造のゆがみと同じ形態と考えることができる。このことから、2 次元 ILM の振幅が大きくなるにつれて、格子点の振動方向と平行でない成分の相互作用の影響が無視できなくなり、それらの相互作用の圧縮方向と伸び方向の非対称性に由来して局在構造にゆがみが生じるというメカニズムが考えられる。

モード2はさらに $\omega = 4.409$ において分岐をしている。これによって、モードはモード2の対称性を保持したモードおよび、新しい構造を持つモードに分岐している。モードの振幅は、内部振動数の増加に伴い、分岐を生じながらもその振幅が増大していく。ただし、今回は2次元格子系の面内における振動を解析しているため、その振幅は隣接格子点と場所を入れ替える大きさになることはない。このことから ILM の最大振幅に対応する内部角振動数 $\omega_{\max 2}$ が存在し、ILM の存在範囲の上限を定める。

$$\omega_{\max} < \omega_{\text{ILM}} < \omega_{\max 2}. \quad (11)$$

4 おわりに

本研究では2次元FPU- β 格子モデルにおける、ILMの構造をNewton法を用いて解析した。その結果、準1次元型および2次元型の2つのタイプの局在構造が存在することがわかった。2次元性の影響として第2近接格子点の影響を考慮した場合、準1次元ILMの場合、局在構造の対称性が敗れることが明らかになった。一方、2次元型ILMにおいては、この対称性の破れに由来し、正方格子型とひし形の変位パターンを有する2つのタイプの局在構造に分岐することが明らかになった。

参考文献

- [1] A.J. Scivers and S. Takeno, "Intrinsic localized modes in anharmonic crystals", Phys. Rev. Lett., 61 (1988), pp. 970-973.
- [2] S. Flach and C.R. Willis, "Discrete Breathers", Phys. Rep., 295 (1998), pp. 181-264.
- [3] M. Sato, B.E. Hubbard, A.J. Sievers, B. Ilic, D.A. Czaplewski and H.G. Craighead, "Observation of locked intrinsic localized vibrational modes in a micromechanical oscillator array", Phys. Rev. Lett., 90 (2003), 044102.
- [4] H.S. Eisenberg, Y. Silberberg, R. Morandotti, A.R. Boyd and J.S. Aitchison, "Discrete spatial optical solitons in waveguide arrays", Phys. Rev. Lett., 81 (1998), pp. 3383-3386.
- [5] A.A. Sukorukov, Yu.S. Kivshar, H.S. Eigenberg and Y. Silberberg, "Spatial optical solitons in waveguide arrays", IEEE J. Quantum Electron, 39 (2003), pp. 31-50.
- [6] E. Trias, J.J. Mazo and T.P. Orlando, "Discrete breathers in nonlinear lattices: Experimental detection in a Josephson array", Phys. Rev. Lett., 84 (2000), pp. 741-744.

- [7] P. Binber, D. Abraimov, A.V. Ustinov, S. Flach and Y. Zolotaryuk, "Observation of breathers in Josephson ladders", *Phys. Rev. Lett.*, 84 (2000), pp. 745-748.
- [8] E. Fermi, J. Pasta and S. Ulam, "Studies of nonlinear problems", *Los Alamos Scientific Laboratory Report LA-1940* (1955).
- [9] O. Bang and M. Peyrad, "Generation of high-energy localized vibrational modes in nonlinear Klein-Gordon lattices", *Phys. Rev. E*, 53 (1996), pp.4143-4152.
- [10] S.A. Kiselev, S.R. Bickham and A.J. Sievers, "Anharmonic gap mode in a one-dimensional diatomic lattice with nearest-neighbor Born-Mayer-Coulomb potentials and its interaction with a mass-defect impurity", *Phys. Rev. B*, 50 (1994), pp. 9135-9152.
- [11] J.B. Page, "Asymptotic solutions for localized vibrational modes in strongly anharmonic periodic systems", *Phys. Rev. B*, 41 (1990), pp. 7835-7838.
- [12] S.R. Bickham, S.A. Kiselev and A.J. Sievers, "Stationary and moving intrinsic localized modes in one-dimensional monatomic lattices with cubic and quartic anharmonicity", *Phys. Rev. B*, 47 (1993), pp. 14206-14211.
- [13] Yu.S. Kivshar and D.K. Campbell, "Peierls-Nabarro potential barrier for highly localized nonlinear modes", *Phys. Rev. E*, 48 (1993), pp. 3077-3081.
- [14] 吉村和之, 土井祐介, 非線形格子における動く局在モード解の数値計算法, 京都大学数理解析研究所講究録, 1430 (2005), pp.187-197.
- [15] T. Cretegny, T. Dauxois, S. Ruffo and A. Torcini, "Localization and equipartition of energy in the β -FPU chain: Chaotic breathers", *Physica D*, 121 (1998), pp. 109-126.
- [16] S. Flach, K. Kladko and R.S. MacKay, "Energy thresholds for discrete breathers in one-, two-, and three-dimensional lattices", *Phys. Rev. Lett.* 78 (1997), pp. 1207-1210.
- [17] K. Ikeda, Y. Doi, B.-F. Feng and T. Kawahara, "Two types of chaotic breathers in two-dimensional Morse lattice with on-site harmonic potential", *Physica D*, 225 (2007), pp. 184-196.
- [18] Y. Doi and A. Nakatani, "Structures of discrete breathers in two dimensional Fermi-Pasta-Ulam lattices", *Theor. Appl. Mech. Japan*, 55 (2006), pp.103-110.

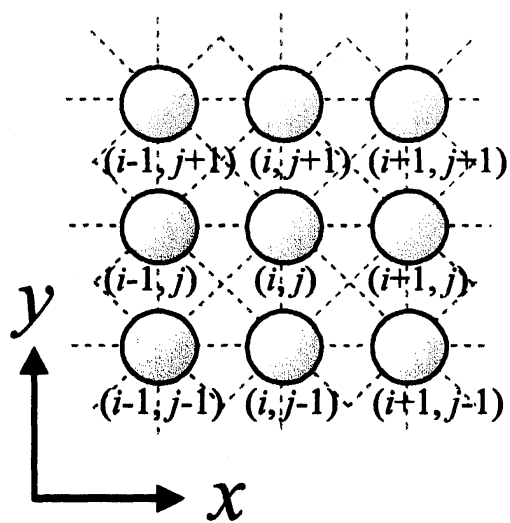


図 1: 2次元格子モデルの模式図

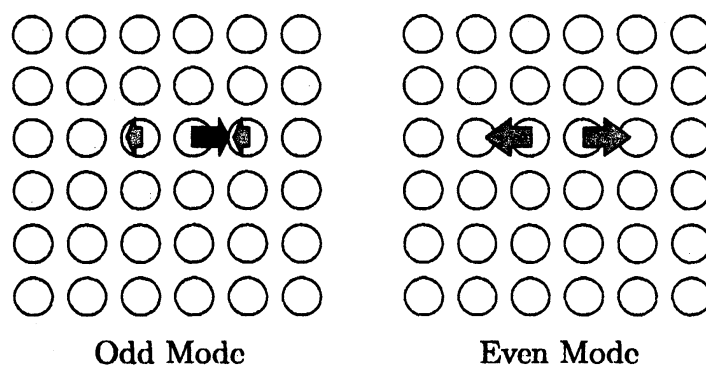


図 2: 準1次元 ILM のの模式図

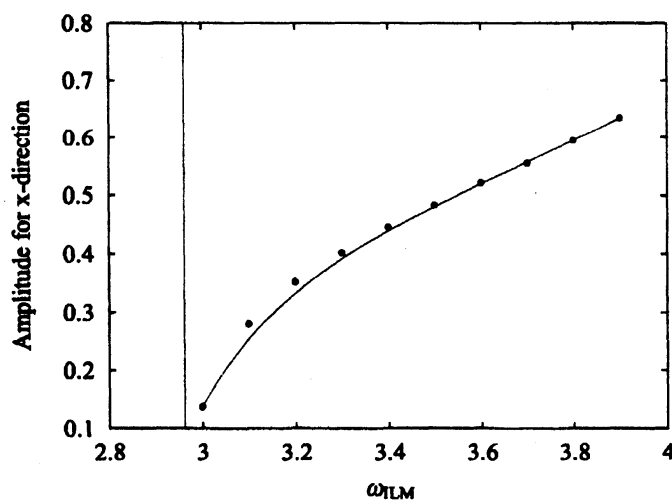


図 3: 準1次元 ILM の内部各振動数-振幅関係

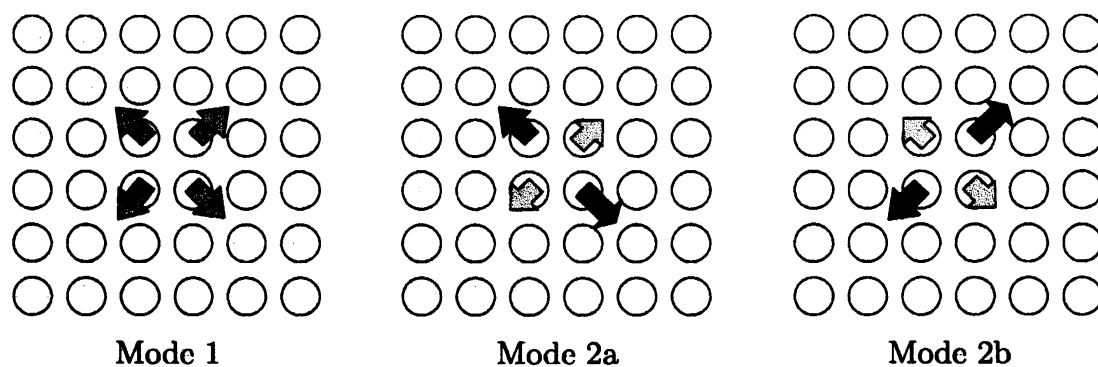


図 4: 2次元 ILM のの模式図

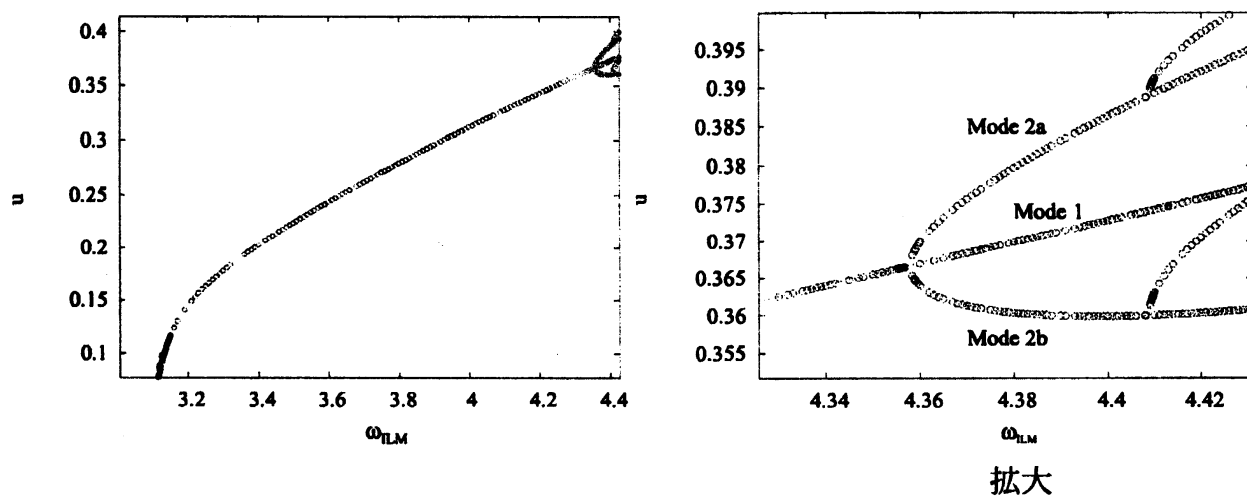


図 5: 2次元 ILM の内部各振動数-振幅関係

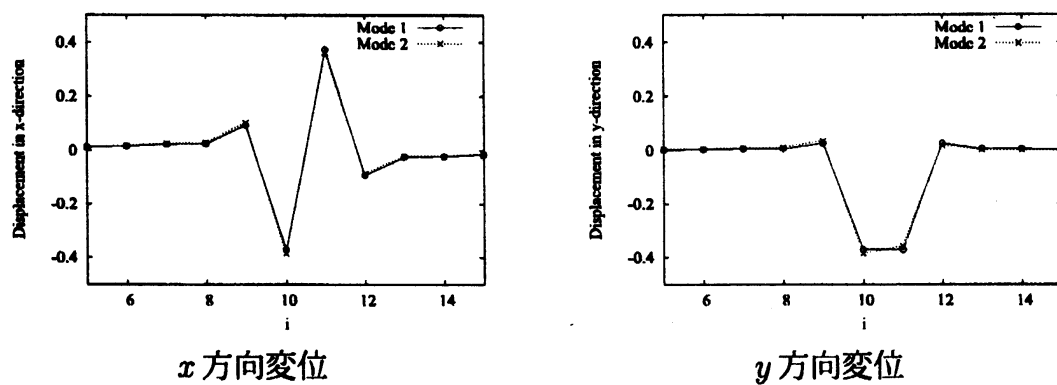


図 6: 2次元 ILM の変位