

ランダムな質量分布を持つ格子系における非線形局在モード

京大・工 土井 祐介(Yusuke Doi)

Graduate School of Engineering,

Kyoto Univ.

1. はじめに

離散格子系は、ミクロからマクロまで様々なスケールでの物理現象を記述するのに用いることができるモデルである。多くの場合、離散格子系で生じる現象は、長波長近似を適用することによって連続体での現象と関連付けることができる。このとき、離散系を記述する格子方程式は偏微分方程式に帰着される。しかし、格子点数個のオーダーでの現象は、長波長近似による連続体では記述できない。また、不均一性を有する離散格子系においては長波長近似を行うことができない。したがって、このような系での現象には長波長近似によって得られる偏微分方程式系の解として記述できないものがあると予想される。このような現象は離散格子系特有の現象ということができよう。

離散格子系特有の現象としては系に不純物を導入した場合に出現する局在現象がよく知られている。この場合、不純物局在振動の振幅は不純物上で最大となり、不純物から遠ざかるにつれて指数関数的に減少する。一方、系に非線形性を導入した場合、系が均一である完全格子系の場合でも局在現象が起こることが知られている[1]。この現象は非線形局在モードと呼ばれる。非線形局在モードの形態および振動周波数は、不純物局在モードと似ている。その一方で局在が生じるために不純物を必要とせず、系の任意の場所に生じうるという点で不純物局在モードとは異なっている。非線形局在モードによる局在現象は物理の様々な分野で報告されている[2,3,4]。

非線形局在モードはその性質がまだ十分に知られてはいない。また、工学的には、ナノテクノロジーなどの分野において系を連続体として扱えないような場合の現象を考えると、非線形局在モードが重要な役割を果たす可能性がある。

本研究では、1次元系における非線形局在モードと離散格子系のランダム性・不均一性との関係を調べるため、単一不純物を含む離散格子系およびランダムな質量分布を持つ離散格子系での非線形局在モードの振る舞いを数値計算によって解析した。

2. 非線形局在モードとは

非線形性をもつ離散格子系においては非線形再帰現象やソリトン解の存在が示されてきた。さらに1988年にSieversおよびTakenoによって非線形局在モードの存在が示された。非線形局在モードは系の非線形性によって励起される局在モードであり、系の任意の場所に発生する。その

振動の形は隣接した格子点の変位の向きが相異なっている。その意味で光学モード的である。

非線形局在モードには前述の Sievers と Takeno によって発見されたモード(Sievers-Takeno モード、ST モード)および、ST モードとは異なる対称性をもつモード(Page モード)が存在する。非線形局在モードの近似解を求める試みはさまざまになされてきており、近似解および数値解の性質が調べられているが解析解そのものは求められていない。

3. モデル

本研究で用いるモデルを説明する。系は 1 次元離散格子系を考える。各格子点上にはそれぞれ質量 m_i をもつ質点がある。各質点は最近接の質点同士にのみ作用する同一のポテンシャルで結びついている。各質点はそれぞれ格子点上がつりあいの位置であり、つりあいの位置にあるときにはポテンシャルによる外力が働かない。また、境界条件は周期境界条件とする。

最近接格子間に働くポテンシャルは

$$\Phi(r) = \frac{1}{2}k_2 r^2 + \frac{1}{4}k_4 r^4 \quad (1)$$

で与えられる。ここで r は隣接質点間の距離のつりあいの長さからのずれ、 k_2 は線形ばね定数、また k_4 は非線形ばね定数である。

この場合、各質点の運動を記述する運動方程式は

$$m_i \frac{d^2 x_i}{dt^2} = k_2 (x_{i-1} + x_{i+1} - 2x_i) + k_4 (x_{i-1} - x_i)^3 + k_4 (x_{i+1} - x_i)^3 \quad (2)$$

と与えられる。ここで、 x_i は i 番目の質点のつりあいの位置からの変位、 m_i は i 番目の質点の質量である。

次に、系に導入する不均一性を説明する。系には(a)単一不純物、(b)ランダムな質量分布を持つ格子のどちらか一方を導入する。単一不純物の場合、完全格子系の質点の一つを周りとは異なる質量をもつ質点と置き換えることによって系を構成する(図 1a)。一方、ランダムな質量分布を持つ質点の場合、系を構成する質点の質量の統計分布が平均 $\bar{m} = 1.0$ 、分散 σ^2 の正規分布にしたがい、その質点の並び方はランダムであるとする(図 1b)。したがって、平均および分散が同じであっても異なる配列をもつ質点系が無数に存在する。

4. 数値計算

まず、後の数値計算に用いるための非線形局在モードをつくり、系から取り出す。隣接格子間のポテンシャルが(1)で与えられる完全格子系に対して、初期条件

$$x_i = a \left(1 - \cos \left(2\pi \frac{i}{N_w} \right) \right) (-1)^{i-1} \quad \left(\frac{N - N_w}{2} + 1 \leq i \leq \frac{N + N_w}{2} \right) \quad (3)$$

なる擾乱を与えその後の時間変化を調べる。数値計算では $N = 1000$ をとり、(2)式を 6 次のシンプレクティック解法によって解いた。 $N_w = 40$ の場合の結果を図 2 に示す。図 2(a)は線形の場合

であり、非線形局在モードは形成されていないが、図 2(b)のように非線形の場合には、初期条件に応じて非線形局在モードが形成される。形成される非線形局在モードは移動タイプと静止タイプに大別される。ここでは移動タイプを取り出して不均一性を有する系に初期条件として与えることにする。

次に、様々な質量の単一不純物が存在する離散格子系において非線形局在モードがどのように振る舞うかを調べる。特徴的な結果を示す。

反射

不純物の質量が十分に大きい場合、図 3 に示すように非線形局在モードは不純物で反射する。このときのエネルギーは反射前後で変化しない。したがって同じ非線形局在モードのまま進行方向だけが反転している。

他モードへの変化

図 4 に示すように、非線形局在モードが不純物を通過するとき他の非線形局在モードに変化することがある。このとき、非線形局在モードのエネルギーの変化を調べると不純物通過後に非線形局在モードのエネルギーが不連続に減少していることがわかる。したがって非線形局在モードが不純物を通過するためにエネルギーを消費し、その結果として別の非線形局在モードに変化したと考えられる。

捕捉

図 5 に示すように非線形局在モードが不純物に捕捉される場合がある。この場合、捕捉された非線形局在モードは不純物の場所にとどまり、そのエネルギーを失いながら振動する。

分裂

図 6 に示すように非線形局在モードが不純物通過後に、複数の非線形局在モードに分裂することがある。単一の非線形局在モードが透過成分、捕捉成分、そして反射成分に分裂する。それぞれの分裂後の非線形局在モードには分裂前の非線形局在モードのエネルギーが分配される。

以上のように非線形局在モードの振る舞いは不純物の質量に応じて変化していく。ある状態から別の状態への遷移はしきい値を境にして不連続的に起こるのではなく、連続的に変化している。ただ、その状態遷移が始まってから終わるまでの質量の幅は非線形局在モードの種類によって大きな差がある。

最後にランダムな質量分布を持つ質点系における非線形局在モードの振る舞いを調べる。ランダムさの度合いとして分散が $\sigma^2 = 1.0 \times 10^{-6}, 1.0 \times 10^{-5}, 1.0 \times 10^{-4}$ である離散格子系での非線形局在モードの伝播の様子を数値シミュレーションによって調べた。計算はそれぞれの分散に対し 50 通りおこなった。図 7 から図 9 に非線形局在モードの伝播の様子のおよび、50 通りのエネルギーの変化を示す。ランダムな質量分布を持つ離散格子系に進入した非線形局在モードは、系を通過するときにエネルギーを失っていく(図 11)。その減衰の大きさは σ^2 が大きい系、つまりランダムさが大きな系ほど大きくなる。また、 $\sigma^2 = 1.0 \times 10^{-4}$ の系においては、非線形局在モードが不純物によって反射する現象、また、他のモードに変化する現象が見られる。いずれの場合も、非線形局在モードはエネルギーを失っていき、最終的に静止状態に移行する。

5. 考察

以上の結果をもとに、不均一な離散格子系での非線形局在モードの振る舞いについて考察する。図 7 から図 9 にランダムな質量分布を持つ質点で構成された離散格子系を通過する非線形局在モードのエネルギーの減衰の様子を示した。また、比較のため同様の格子系を通過する音響モード的なソリトンのエネルギーの減衰の様子を図 10 に示す。これらの図からランダムな質量分布を持つ系において、非線形局在モードは音響モード的なソリトンに比べ、より大きな影響を受けることが分かる。したがって、非線形局在モードがランダム性という格子スケールのオーダーの特性の影響を大きく受けることが分かる。これは、 σ^2 が大きくなる、つまり、系のランダム性が大きくなることによってエネルギーの減衰が顕著になることから明らかである。したがって、移動型非線形局在モードを物理的に観測する場合、伝播する系の均一性は観測結果に大きな影響を及ぼすと考えられる。

また、ランダムな質量分布を持つ格子系によって、非線形局在モードのエネルギーは減衰していくが、エネルギーがゼロになる、つまり非線形局在モードそのものが消滅するまで減衰するという結果は今回の計算では得られなかった。しかし、そうなる代わりにあるエネルギーに達すると移動型非線形局在モードが静止型非線形局在モードに移行するという結果が得られた。静止状態に移行した非線形局在モードは、ランダムな質量分布を持つ系を移動することによるエネルギーの損失がなくなるため、長時間の計算のあとでも一定のエネルギーを保ったまま存在を続ける。

一方、単一不純物を含む系での非線形局在モードの伝播の解析から、非線形局在モードが 1 つの不純物によって大きな影響を受けることが分かる。具体的な影響としては先に述べた他モードへの変化、反射、捕捉、そして分裂がある。非線形局在モードが受ける影響は不純物の質量に依存する。また、非線形局在モードの種類によっても影響の受け方は異なる。

非線形局在モードがどのようなメカニズムによって影響を受けるかを考える。不純物の質量が大きい場合、不純物の慣性が大きく、非線形局在モードは不純物に十分な運動を引き起こすことができない。その結果、入力側の質点が運動してエネルギーを受け取ることによって非線形局在モードは反射する。一方、不純物の質量が小さい場合、不純物は容易に振動する。非線形局在モードのエネルギーが十分大きければ入力側と反対側の質点が運動し、非線形局在モードは不純物を透過する。しかし、非線形局在モードのエネルギーが不十分な場合、非線形局在モードは不純物上に捕捉される。

今回の数値計算によって非線形局在モードが不純物によって影響を受けることは示されたが、非線形局在モードの種類や不純物質量などのパラメータと非線形局在モードが受ける影響(反射、分裂、etc)との関連づけができていない。この関連づけは今後の課題である。

単一不純物を含む系での非線形局在モードの変化では、非線形局在モードのエネルギーは不連続に減少する。一方、ランダムな質量分布を持つ質点系の場合、ランダムさ(σ^2)が小さいうちは非線形局在モードのエネルギーは不連続には減少せず滑らかに減少していく。しかし、ランダム性が大きくなってくるとエネルギーの不連続な減少が見られるようになる(図 12)。このことから、系を構成する質点の質量のランダム性が大きくなってくると、一部の質点が単一不純物としての

役割を果たすようになると考えられる。

一方で、ランダムな質量分布を持つ質点で構成される離散格子系における連続的なエネルギーの減少は、単一不純物における不連続なエネルギーの減少とは異なるメカニズムの現象であるといえよう。

以上のような考察を踏まえて、ランダムな質量分布を持つ格子系における非線形局在モードの振る舞いを次のように考える。

- A) 非線形局在モードがランダムな質量分布を持つ質点で構成される離散格子系を通過するとき、質点の質量によっては非線形局在モードが分裂する。その結果、分裂した後にそれぞれの非線形局在モードがもつエネルギーの総量は小さくなっていく。
- B) 分裂後のエネルギーによっては、移動型非線形局在モードが静止型非線形局在モードに変化する。
- C) 静止状態となった非線形局在モードは、ランダムな質点系を移動することによるエネルギー減衰が無くなるので、その状態で安定化する。
- D) 移動状態の非線形局在モードは、ランダムな質量分布を持つ格子系を移動することによって徐々にエネルギーを失い、障壁となる質点と質点の間に捕捉され、一定の範囲内を往復する。往復を繰り返す間も格子系がランダム性を有することに起因するメカニズムによってエネルギーを失い、最後には静止状態の非線形局在モードに変化して安定化する。
- E) 非線形局在モードの分裂の際に生じる小さなさざなみはランダムな質量分布を持つ格子系によって破壊され、そのエネルギーは系全体に広がる。
- F) 十分に長い時間が経過したあと、非線形局在モードは静止状態に移行する。その結果、初期に系に与えたエネルギーの多くは系のごく一部に局在したままになる。

6. おわりに

本研究では1次元のランダムな質量分布を持つ質点で構成される離散格子系および単一不純物を持つ離散格子系における非線形局在モードの振る舞いを数値シミュレーションを用いて解析した。その結果、非線形局在モードは、音響モード的なソリトンに比べてきわめて格子系の離散性の影響を受けやすいことが分かった。また、単一の不純物を含む離散格子系においては、非線形局在モードは不純物の質量に応じて捕捉、反射、分裂、他のモードへの変化を起こすことが分かった。さらに、ランダムな質量分布を持つ質点で構成される離散格子系においては、移動型の非線形局在モードがエネルギーを失っていき、最終的には静止型の非線形局在モードへ移行することが示された。このエネルギー減衰の過程においては、単一不純物による不連続なエネルギー減少のみならず、離散格子系の質点のランダムな分布の効果によるエネルギー減少も寄与していると考えられる。

今後はこれらの現象をさらに詳しく解析するとともに、物理的に現象の観測を行い、その結果と数値シミュレーションの結果とを比較することによって非線形局在モードの理解を深めていく必要がある。

参考文献

- [1] A. J. Sievers, and S. Takeno: Phys. Rev. Lett. **61**, (1988) 970.
- [2] H. S. Eisenberg, Y. Silberberg, R. Morandotti, A. R. Boyd, and J. S. Aichison: Phys. Rev. Lett. **81**, (1998) 3383.
- [3] U. T. Schwarz, L. Q. English, and A. J. Sievers: Phys. Rev. Lett. **83**, (1999) 223.
- [4] P. Marquié, J. M. Bilbault, and M. Remoissenet: Phys. Rev. E **51**, (1995) 6127.

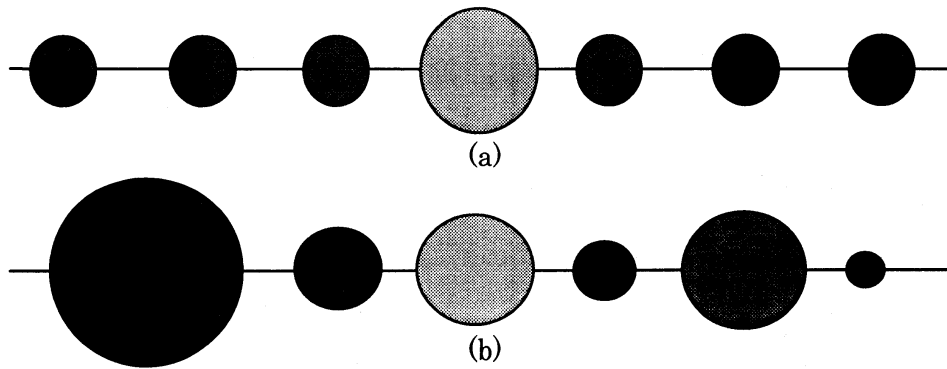


図 1 質点分布の模式図 (a)単一不純物 (b)ランダムな質量分布

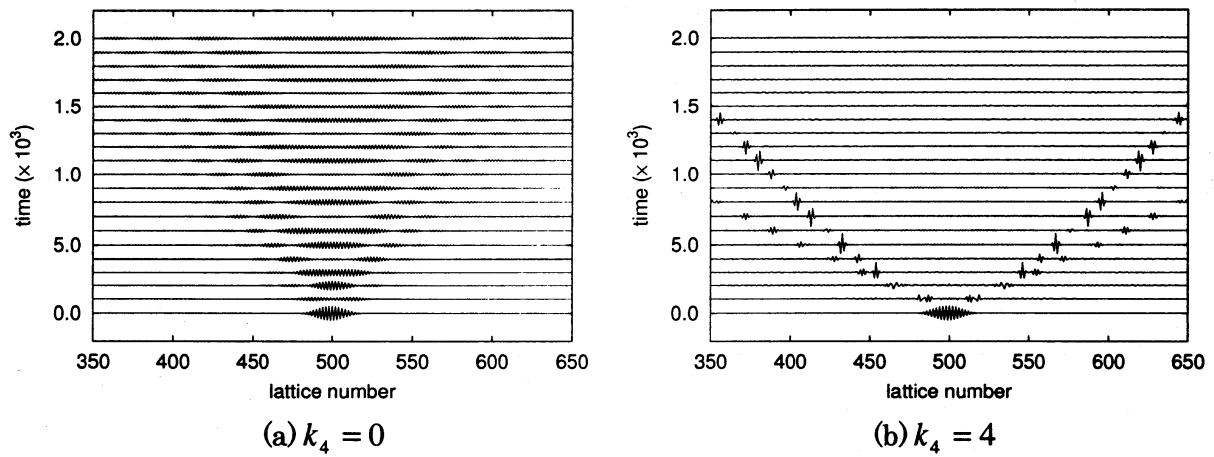


図 2 非線形局在モードの生成($N_w = 40, k_2 = 1$)

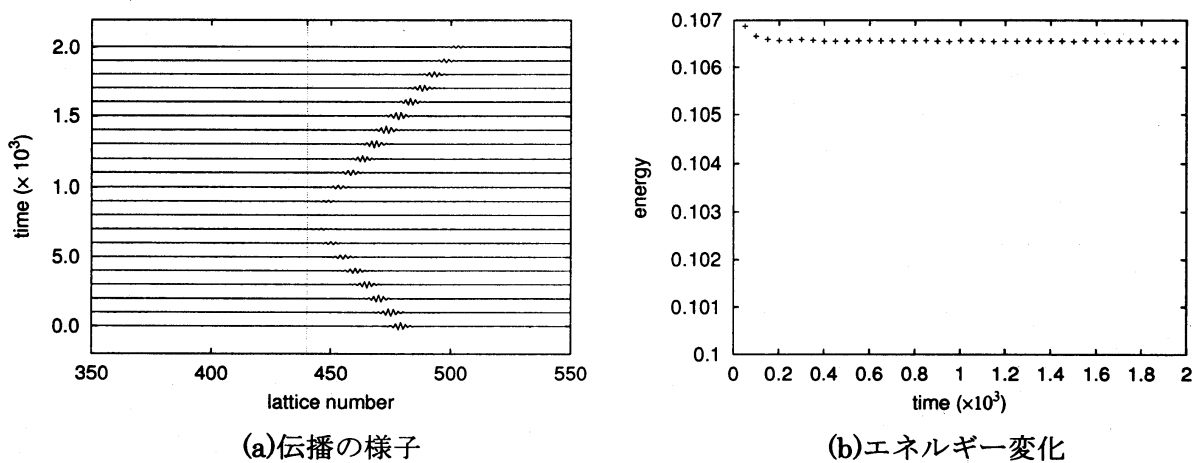
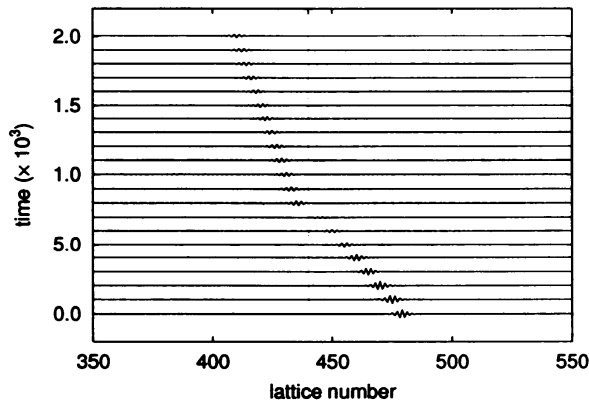
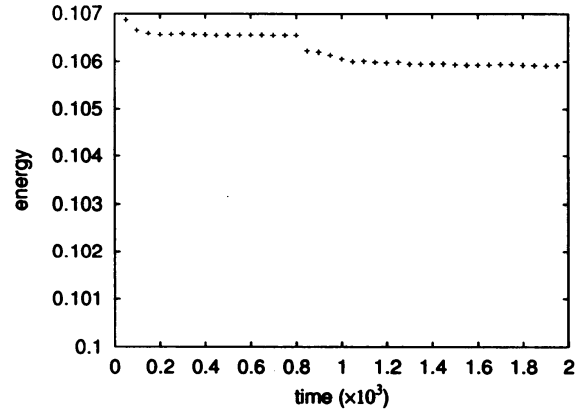


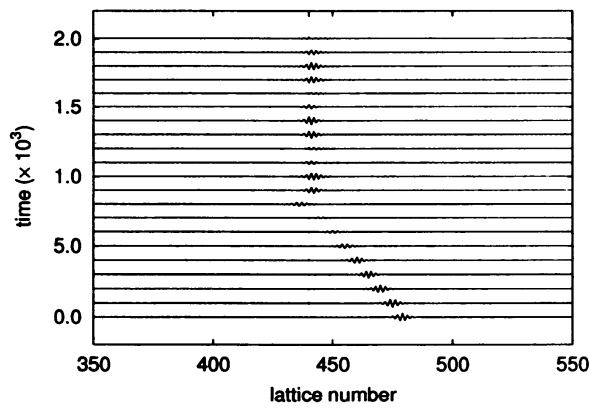
図 3 非線形局在モードと単一不純物の相互作用($k_2 = 1, k_4 = 4, m_{imp} = 1.01$)



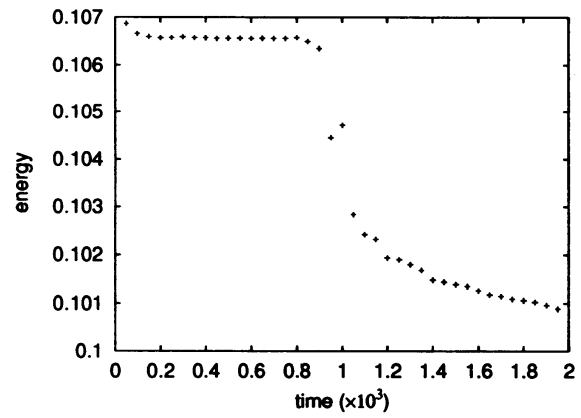
(a)伝播の様子



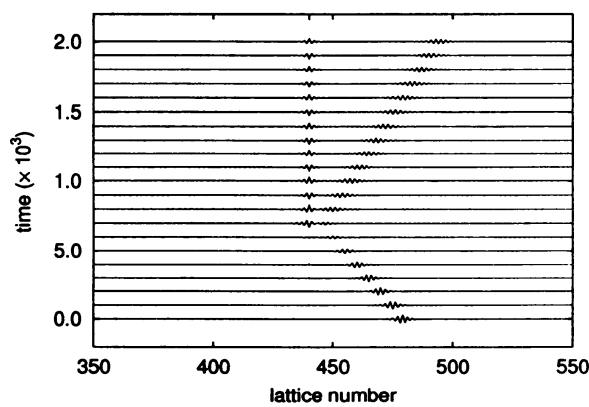
(b)エネルギー変化

図 4 非線形局在モードと単一不純物の相互作用($k_2 = 1, k_4 = 4, m_{imp} = 0.98$)

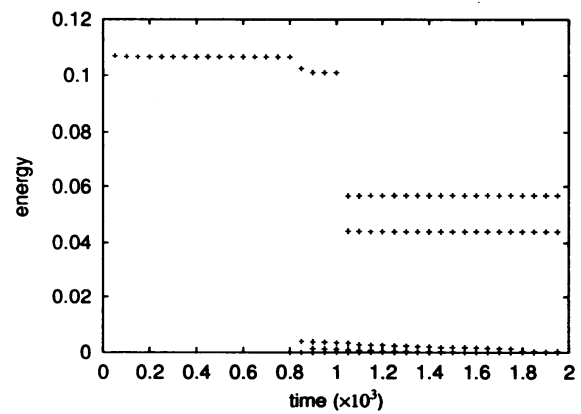
(a)伝播の様子



(b)エネルギー変化

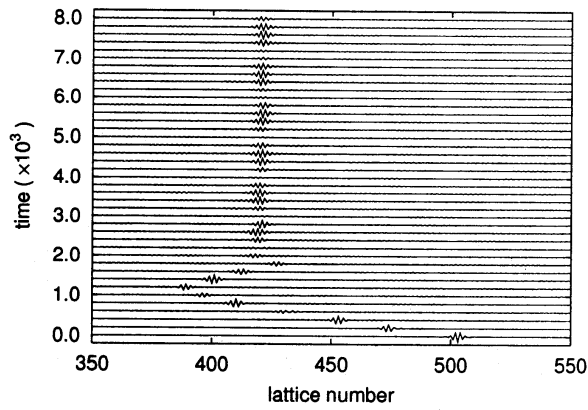
図 5 非線形局在モードと単一不純物の相互作用($k_2 = 1, k_4 = 4, m_{imp} = 0.97$)

(a)伝播の様子

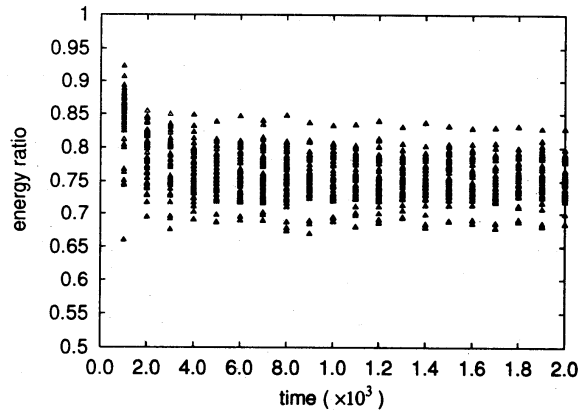


(b)エネルギー変化

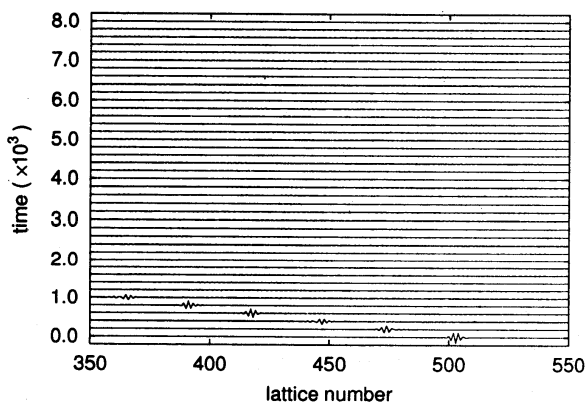
図 6 非線形局在モードと単一不純物の相互作用($k_2 = 1, k_4 = 4, m_{imp} = 0.82$)



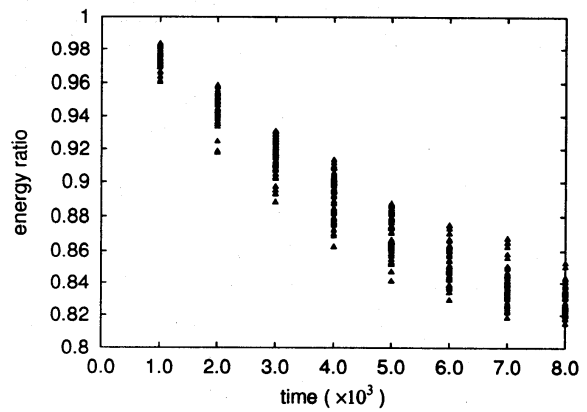
(a)伝播の様子



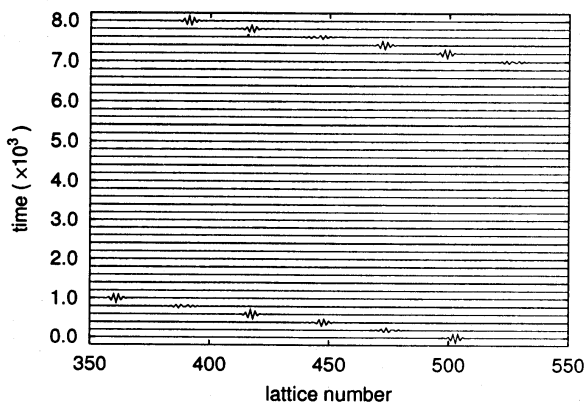
(b)エネルギー変化

図7 ランダムな質量分布を持つ離散格子系を伝播する非線形局在モード($\sigma^2 = 1.0 \times 10^{-4}$)

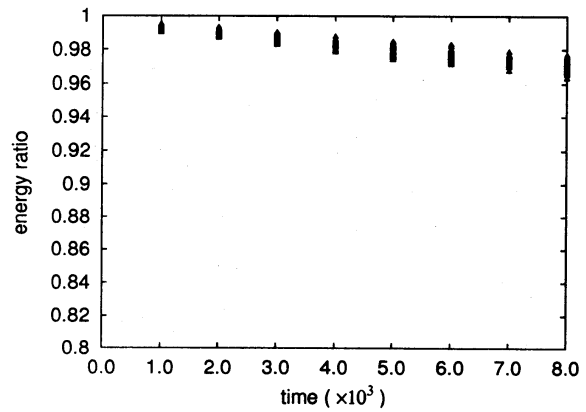
(a)伝播の様子



(b)エネルギー変化

図8 ランダムな質量分布を持つ離散格子系を伝播する非線形局在モード($\sigma^2 = 1.0 \times 10^{-5}$)

(a)伝播の様子



(b)エネルギー変化

図9 ランダムな質量分布を持つ離散格子系を伝播する非線形局在モード($\sigma^2 = 1.0 \times 10^{-6}$)

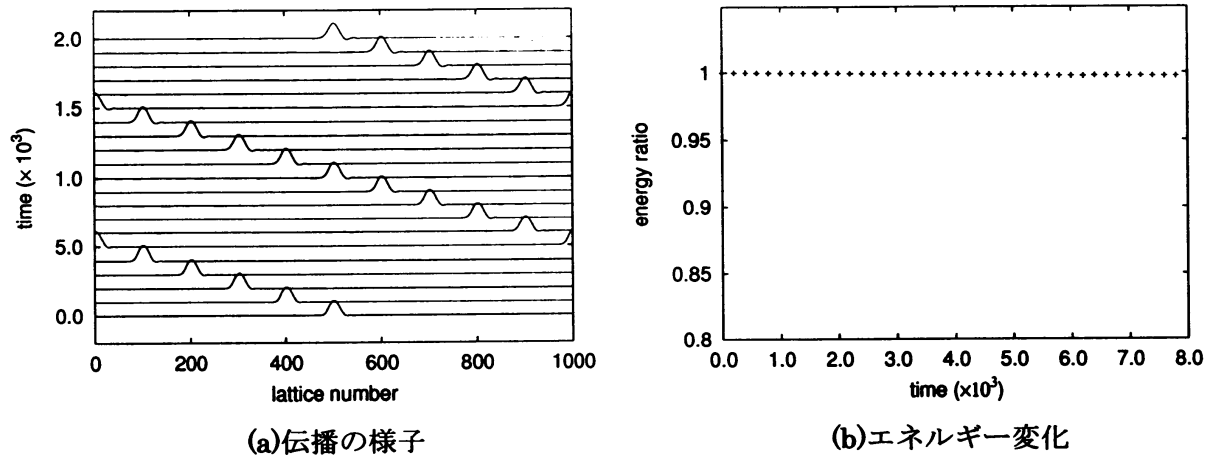


図 10 ランダムな質量分布を持つ離散格子系を伝播する音響モード的ソリトン($\sigma^2 = 1.0 \times 10^{-4}$)

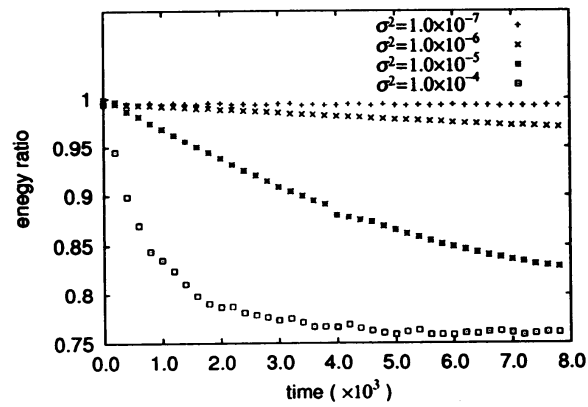


図 11 非線形局在モードのエネルギー減衰率とランダム性の関係

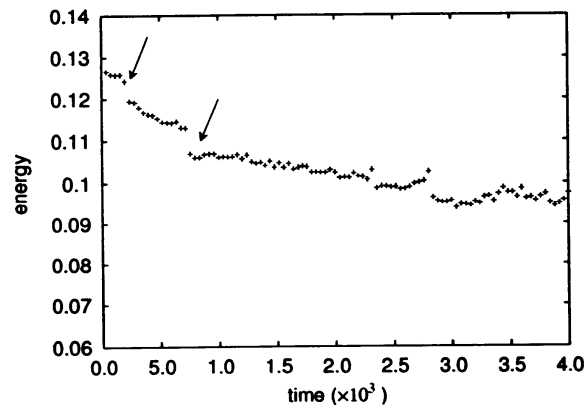


図 12 ランダムな質量分布を持つ系での不連続なエネルギーの減少