

非線型の格子振動において 保存される運動

東教育大 物理 戸田盛和

§1. 序

質点が線型のばねで結ばれた体系の振動は基準振動に分けられ、各基準振動は独立である。すなわち、ある基準振動と励起した場合、エネルギーが他の基準振動に移っていくことはない。体系全体としてみれば、調和振動子系は平衡分布に近づくことがあり得ないので、明かに非エルゴード的である。多くの結晶の格子振動の比熱などが調和振動子模型でよく表わされるにしても、熱平衡への近接の問題にはこの模型で無視されている非線型項が本質的な役割をするところであるといは多くの人が考えしてきたことである。しかし非線型項が入ると計算が極めて難しくなるので、非線型項は体系のエルゴード性を保証し、熱平衡への近接、エネルギー分配を行わせるものと仮定されてきた。

Fermi, Pasta, Ulam (FPU)¹⁾ は、この予想を計

算機実験により実証し¹⁾とした。しかしこの実験の結果は
 予想に反し、彼等が調べた1次元の結晶格子では非線型項の
 体系のエルゴード性を導かないと思われずに終わった。この結
 果は1955年に報告されているが、1961年以来、さらに
 Ford や Jackson 等により吟味され、1次元の非線型格子
 は線型格子の性質を驚くべきほどに保持していることが明か
 にされた。Toda²⁾は、周期条件をつけた場合、時間的に保
 たれる運動、すなわち基準振動とよんでよい¹⁾な振動があ
 り、これは非線型項を0にした極限では線型格子の基準振動
 のすべてをつくすことを示した。Saito³⁾は格子の粒子の連
 なる相関と計算機で調べて、1次元非線型格子が実験の時間
 の範囲では熱平衡に近づかないことを示している。2次元、
 3次元でこのような非エルゴード的とみられる現象がどうな
 るか問題である。しかし、ここでは1次元の場合に限って、
 非線型の格子振動を調べてみよう。

§2. 非線型格子

質点をばねにつなげた1次元の一様な格子を考える。 n
 番目の質点の位置を x_n とし、 $r_n = x_n - x_{n-1}$ によら
 れた相隣り質点間の相互作用のエネルギーを $\phi(r_n)$ とする。
 質点の質量を m とすると、運動方程式は

$$(2.1) \quad m \frac{d^2 y_n}{dt^2} = -\phi'(r_n) + \phi'(r_{n+1})$$

である。 $\phi' = d\phi/dr$ とする。 $t \rightarrow \tau$

$$(2.2) \quad \phi(r) = K(r + \alpha r^2)$$

とすれば、 $\sqrt{K/m} \tau \rightarrow \tau$ と書きかえよとす

$$(2.3) \quad \ddot{y}_n = (y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1})[1 + \alpha(y_{n+1} - y_{n-1})]$$

となる。これは FPU の調へたものがある。

Toda は

$$(2.4) \quad \phi(r) = \frac{a}{b} e^{-br} + ar$$

が極めて都合よいことを見出した。 $ab > 0$ とする。運動方程式は $\sqrt{ab/m} \tau \rightarrow \tau$ と書きかえよとす、例えは

$$(2.5) \quad \ddot{r}_n = \frac{1}{b} (2e^{-br_n} - e^{-br_{n+1}} - e^{-br_{n-1}})$$

となる。この方程式の特解として進行波 (母数 $k \ll 1$ では正弦波)

$$(2.6) \quad e^{-br_n} - 1 = (2K\nu)^2 \left[\operatorname{dn}^2 \left\{ 2K(\nu\tau - \frac{n}{\lambda}) \right\} - \frac{E}{K} \right]$$

がある。ここに K および E はそれぞれ 1 種および 2 種の完全楕円積分、 dn は Jacobi の楕円関数である。

“振動数” ν と “波長” λ とは “分散関係”

$$(2.7) \quad 2\pi\nu = \left\{ \frac{1}{\sin^2 \frac{2\pi}{\lambda}} - 1 + \frac{E}{K} \right\}^{-1/2}$$

で関係づけられる。楕円関数, 積分の母数 k は λ あるいは ν と関連して振幅を定める。 $K = 2\pi/\lambda$ を一定に $1 \rightarrow \infty$ の極限をとるとパルス的な形

$$(2.8) \quad e^{-br_n} - 1 = \sinh^2 x \cdot \operatorname{sech}^2(xn - \beta t)$$

ただし

$$(2.9) \quad \beta = \sinh x$$

を得る。このパルス的な形, あるいは孤立波は (格子) ソリトンというように思われる性質をもっている。すなわち, 2個の孤立波が衝突すると, たがいに中を通り抜けて, はじめの孤立波に戻って離れ去る。独立に存在としての性質をもつ。

実際

$$(2.10) \quad e^{-br_n} - 1 = \frac{d^2}{dt^2} \log [A \cosh(xn - \beta t) + B \cosh(\mu n - \gamma t)]$$

は $x = \mu$ の場合, 上の孤立波を与えるが, $x \neq \mu$ の場合は一般に2個の孤立波, あるいはその重畳した状態を与える。ただし, β, γ と B/A とは x, μ の関数であり, 2つの場合がある:

$$(i) \quad \beta = 2 \sinh \frac{\mu}{2} \cosh \frac{\kappa}{2}, \quad \gamma = 2 \sinh \frac{\kappa}{2} \cosh \frac{\mu}{2},$$

$$B/A = \cosh(\kappa/2) / \cosh(\mu/2)$$

2の場合、2個のソリトンはたがいに逆向きに進む。格子端があるとき、この反射はこの反対の波で与えられる。

$$(ii) \quad \beta = 2 \sinh \frac{\kappa}{2} \cosh \frac{\mu}{2}, \quad \gamma = 2 \sinh \frac{\mu}{2} \cosh \frac{\kappa}{2},$$

$$B/A = \sinh(\kappa/2) / \sinh(\mu/2)$$

2の場合、2個のソリトンは同じ向きに進む。 κ と μ とが小さいときは後に述べる KdV 方程式の2個のソリトンを含む解と一致する。

§3. Korteweg-de Vries 方程式

h を粒子間の距離 (格子間隔) とし, $x = nh$ を座標とすると, 連続体近似に移す。 $r(x, t) = r_n(t)$ とし, 微分を添字で表わすと連続体近似は, 例えて

$$(3.1) \quad r_{tt} - c_0^2 \{ r_{xx} - b(r_x^2 + r r_{xx}) \} = \kappa^2 r_{xxxx}$$

となる。ただし $c_0 = h \sqrt{\frac{ab}{m}}$ は長波長、極限の波の速度, $\kappa^2 = c_0^2 h^2 / 12$ である。

c_0 を動く座標系 ξ で波を追いかける:

$$(3.2) \quad \begin{cases} \xi = x - c_0 t, \\ \tau = \frac{\pi}{2} \epsilon c_0 (a_y/a_u) t, & (\epsilon = -bh) \\ u = -\frac{h}{\pi} (a_u/a_y) r \end{cases}$$

とあると, $|\epsilon| \ll 1$ の極限で

$$(3.3) \quad u_\tau + u u_\xi + \delta^2 u_{\xi\xi\xi} = 0$$

$$\text{ただし} \quad \delta^2 = (h^2/12\pi\epsilon)(a_u/a_y)$$

を得る。2つの方程式を Korteweg-de Vries (KdV) 方程式⁴⁾という。格子振動の式を KdV 方程式と等しく変換の係数は一意的にはない。上の変換は $t=0$ にあつて右へ進む波

$$y_n|_{t=0} = a_y \sin \pi x$$

を

$$u|_{t=0} = a_u \cos \pi \xi$$

に移されるようにとらえたものである。

KdV 方程式については次の著しい性質がある。

$$(3.4) \quad U = -u$$

とある, 固有値方程式⁵⁾

$$(3.5) \quad 6\delta^2 \psi_{\xi\xi}^{(l)} - (U - \lambda_l) \psi^{(l)} = 0 \quad (U = -u)$$

を与える。固有値 λ_l は時間によらずな。 u は KdV にしたときと等価し、一般に多くのハミルトンの波 (soliton) に分解される。各ソリトンは⁴⁾

$$(3.6) \quad u_l = \underline{u} + A_l \operatorname{sech}^2 \{ (\xi - \tilde{c}_l \tau) / \Gamma_l \}$$

の形をもつ。 $\tilde{c}$ は速度 $\tilde{c}$ と振幅 A_l には

$$(3.7) \quad \tilde{c} = \underline{u} + A_l/3, \quad A_l = -2(\lambda_l + \underline{u}) > 0$$

で与えられる。

例えば初期条件 ($t=0$) とし

$$(3.8) \quad u|_{t=0} = a_u \cos \pi \xi \quad (0 \leq \xi \leq 2)$$

を与えたとしよう。 λ_l を求めるには U と $(-u)|_{t=0}$ を用いてもよい。 λ_l は Mathieu 方程式の固有値となる。周期条件 ($0 \leq \xi \leq 2$) をとる。 $-u|_{t=0}$ は 2π の $\min$ をもつ。 $\xi = 2 - \xi$ につき展開し

$$(3.9) \quad U = -u|_{t=0} = -a_u + \frac{a_u \pi^2}{2} \xi^2$$

と書く。 δ が小さいときは、固有値として近似値

$$(3.10) \quad \lambda_l = -a_u + (l + \frac{1}{2}) \sqrt{12} \delta^2 \sqrt{a_u} \pi^2$$

$$(l = 0, 1, 2, \dots)$$

が得られた。

Zabusky と Kruskal⁶⁾ はこの例の場合の計算機実験を行なった。その結果によると $l = 0, 1, \dots, 8$ のソリトンが $u(2) = 2$ の場合みられた。2つの実験では $\delta = 0.0222$, $a_u = 1$ としている。これはソリトンは右向きに左へ運動し、相互作用と衝突通過の順に行う。衝突の際のソリトン相互の加速を無視すれば、ソリトンは全く独立な存在として進行することになる。

各ソリトンの速度は上の近似では等差級数になり、その差は一定

$$(3.11) \quad \Delta \tilde{c} = \frac{1}{3} (l + \frac{1}{2}) \sqrt{12} \delta^2 \sqrt{a_u} \pi^2$$

である。これから周期を長く2つの空間で運動するとき、時間

$$(3.12) \quad \tau_R = \frac{2}{\Delta \tilde{c}} = \frac{\sqrt{3}}{2\pi \delta \sqrt{a_u}}$$

の後は2つの相互の関係は、12.5.4と10.5.4に同じになる。 $\delta = 0.0222$,

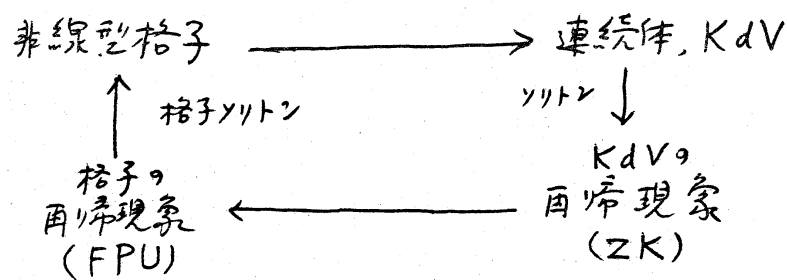
$a_u = 1$ とおくと 再帰時間 τ_R は $\tau_R \cong 40/\pi$ となる。実際に求めた再帰時間は $\tau_R = 30.4/\pi$ である。この不

一致の原因は、ソリトンが衝突通過の際、たがいに加速し合うことである。

§ 4. 結び

上に示したように格子振動は漸近的に KdV 方程式に替わることになる。KdV 方程式は再帰現象を示すことが計算機実験で示され、これはソリトンの運動として理解できた。

一方で、格子振動もソリトンの独立性を保証している（2個のソリトンが衝突してもはじめる状態に戻る）ことと §1. で示され、再帰現象は FPU などによって実験で示されている。したがって、格子振動の再帰現象も格子ソリトンの立場から理解できると考えられる。上の推論を図示すると



といふ風になる。

KdV の再帰現象 (Z.K.) は $0 \leq x \leq 2$ の周期的空間で行われた実験である。241 に相当する非線型格子の実験は残念ながらまだない。もしも $0 \leq x \leq 2$ の空間で非線

型格子の周期条件の下での実験があったならば、その帰還時間は t と τ との交換式により下の式に求められる:

$$(4.1) \quad t_R = \tau_R / \frac{\pi}{2} \in C_0(a_y/a_n) \\ = \frac{3}{\pi^{3/2} \sqrt{2} a_y} \frac{N^{1.5}}{\alpha^{0.5}} t_L$$

ただし $t_L = 2/C_0$ は「線型周期」であり、 $\alpha = |b|/2$ は非線型項の定数である。2の式は格子ソリトンの衝突の際の加速を無視し、初期条件として一方向きの進行波を

$$(4.2) \quad y_n|_{t=0} = a_y \sin \pi x$$

の波型をもつときに適用される近似的な帰還時間である。ただし $0 \leq x \leq 2$ の周期条件をとり、

$$(4.3) \quad x = \frac{n}{N}, \quad h = \frac{1}{N} \ll 1, \quad (N \gg 1)$$

とすれば、

FPUの実験は固定端の実験である。すなわち

$$(4.4) \quad y_0 = y_N = 0$$

とし、初期条件は

$$(4.5) \quad y_n|_{t=0} = a \sin \pi x, \quad \dot{y}_n|_{t=0} = 0$$

であつた。FPUは進行波でなく定常波の場合である。

もしも定常波と逆向きの2個の進行波の重ね合わせと解釈するときは、非線型の場合も許さないとすれば、FPUの実験は定常波の振幅が1であり、進行波の振幅は

$$(4.6) \quad a_y = \frac{1}{2}$$

と考えられる。これを上式に入れれば周帰時間と(2

$$(4.7) \quad t_R/t_L \cong 0.6 N^{1.5} / \alpha^{0.5}$$

を得る。一方でZabuskyはFPUの実験などから経験式と(2

$$(4.8) \quad t_R/t_L = 1.42 N^{1.38} / \alpha^{0.5} \quad (N=16 \sim 64)$$

を得ている。これは2式は t_R の大きさと1と少し異なるが、程度と傾向とはよく似ている、上の解釈が正しいものがあることを示している。

上述のこととまとめると、非線型格子の振動は下記のような異で、非エルゴード的であるようにみえる：

その一つは、Todaが示したように形を変えながら進行波、すなわち基底振動といつてもよい運動が存在すること。

お2に、FPUが示したような周帰現象があること。

Fordらの実験を参考にすると、上の基底振動は、少しづつ

うの变形させても、系統は時間的につも大きくならぬといふ意味で安定であるように思われる。

この再帰現象は、格子ソリトン運動として解釈できることわかった。しかし同時に、初期の波から発生するソリトンの大きさ、速度、および初期条件によるものであり、したがって再帰現象が起こるかどうかは初期条件に依存する筈であるといえる。計算機実験で示される再帰現象が厳密なものか、あるいは近似のものか、は尚保留しなくてはならぬ。いつかにしてもソリトン相互作用をもう少し正確に吟味しなくてはならぬ。

強い揺動はストカステック運動——格子の乱流運動——を引き起こすという話もある。⁷⁾しかしこれを含めて、多くの実験は線型、非線型運動のモデルに対する分析を求めた。運動はソリトン運動として記述する方がよいと思われる。むしろ、むしろ波形自身の実験的吟味が重要であろう(文献(1)に図表1枚あるが)。

文南大

- (1) E. Fermi, J. Pasta, S. Ulam: *Collected Papers of E. Fermi* Vol. II. p278. Univ. Chicago Press 1965.
- (2) M. Toda: *J. Phys. Soc. Japan* 22 (1967) 431, 23 (1967) 501.

- (3) N. Saito, H. Hirooka : J. Phys. Soc. Japan
23 (1967) 157, 167
- (4) cf. N. J. Zabusky : A Synergetic Approach
to Problems of Nonlinear Dispersive Wave
Propagation and Interaction, Proc. ^{Symp.} Non-
linear Partial Differential Equations,
Academic Press (1967).
- (5) R. M. Miura, C. S. Gardner, M. D. Kruskal
Phys. Rev. Letters 19 (1967) 1095.
- (6) N. J. Zabusky, M. D. Kruskal : Phys. Rev. Letters
15 (1965) 240.
- (7) B. V. Chilikov : Preprint, Institute of Nuclear
Physics, Novosibirsk (1966). F. M. Izrailev,
B. V. Chilikov Soviet Phys. Doklady 11 (1966) 30.