

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、明ら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は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が無視されている非線型項の本質的な役割を占めるであろうと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扱われてきた。

Fermi, Pasta, Ulam (FPU)<sup>1)</sup> は、この予想を計

算機実験により実証し<sup>1)</sup>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は  
 体系のエルゴード性を導かないと思われ<sup>2)</sup>に到った。この結  
 果は1955年に報告された<sup>3)</sup>が、1961年以來、さらにJ.  
 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。Toda<sup>2)</sup>は周期条件をつけた場合、時間的に保  
 たれ<sup>4)</sup>る運動、すなわち基準振動とよんでよい<sup>5)</sup>る振動があ  
 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<sup>6)</sup>とをつくすことを示した。Saito<sup>3)</sup>は格子の粒子の速  
 度の相関を計算機で調べ、1次元非線型格子が実験の範囲  
 の範囲では熱平衡に近くなることを示している。2次元、  
 3次元でこの<sup>7)</sup>る非エルゴード的とみられる現象がどうい  
 うか問題である。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<sup>8)</sup>がばねをつなばれた1次元の1様な格子を考える。n  
 番目の質点の位置を  $Y_n$  とし、 $r_n = Y_n - Y_{n-1}$  ばね  
 した相隣の質点間の相互作用のエネルギー  $\varepsilon \phi(r_n)$  とする。  
 質点の質量を  $m$  とすると、運動方程式は

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

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

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

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

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

となる。これは FPU の論へたもつである。

Toda は

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

が極端に都合よいことを見出した。  $ab > 0$  とする。運動方程式は  $\sqrt{ab/m} \tau \rightarrow \tau$  と書きかえれば、例えは

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

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

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

がある。ここに  $K$  および  $E$  はそれぞれ異なる種類の完全楕円積分、 $\operatorname{dn}$  は Jacobi の楕円関数である。

“振動数”  $\nu$  と “波長”  $\lambda$  とは “分散関係”

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

と関係が与えられる。楕円関数、積分の母数は  $\lambda$  あるいは  $\nu$  と関連して振幅を定める。  $x = 2\pi/\lambda$  を一定に  $1 \rightarrow \infty$  の極限をとるとパルスの形は

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

となる

$$(2.9) \quad \beta = \operatorname{cosh} x$$

を得る。このパルスの形は、あるいは孤立波は (格子) ソリトンといつてよいと思われ性質をもっている。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

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

は  $x = \mu$  の場合、上の孤立波を与えられ、 $x \neq \mu$  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、 $\beta, \gamma$  と  $B/A$  とは  $x, \mu$  の関数であり、2つの場合がある:

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

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

2の場合、2個のソリトンは互いに逆向きに進む。格子端の面では、 $\kappa$ の反射は $\mu$ の $\delta$ ； $\mu$ の $\delta$ は $\kappa$ の $\delta$ と見做す。

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

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

2の場合、2個のソリトンは同じ向きに進む。 $\kappa$ と $\mu$ 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、 $x = nh$  を座標と見做し、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、例之は

$$(3.1) \quad r_{tt} - c_0^2 \{ r_{xx} - b(r^2 + r r_{xx}) \} = \frac{\kappa^2}{12} r_{xxxx}$$

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

$c_0$  と高 (座標系  $x$ ) の波を比べる。

$$(3.2) \quad \begin{cases} \xi = x - C_0 t, \\ \tau = \frac{\pi}{2} \epsilon C_0 (a_y/a_u) t, \quad (\epsilon = -bh) \\ u = -\frac{h}{\pi} (a_u/a_y) \tau \end{cases}$$

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<sup>4)</sup> といい、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決まる。上の変換は  $t=0$  にあつた右へ進んだ波

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

を

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

に移されたようにとりかたもつて可なり。

KdV 方程式にこのこと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<sup>5)</sup>

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

を与えたと、固有値  $\lambda_\ell$  は時間には依存しない。  $u$  は KdV  
 にしたときの解として、一般に多くの場合、孤立波 (soliton)  
 (2分波) の形をとり、各ソリトンは

$$(3.6) \quad u_\ell = \underline{u} + A_\ell \operatorname{sech}^2 \left\{ (\xi - \tilde{c}_\ell \tau) / \Gamma_\ell \right\}$$

の形をとる。  $2c$  は速度  $\tilde{c}$  と振幅  $A_\ell$  である

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

で与えられる。

例えば初期条件 ( $t=0$ ) として

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

を与えたとする。  $\lambda_\ell$  を求めるには  $U$  と  $(2 - u)|_{t=0}$   
 を用いる。  $\lambda_\ell$  は Mathieu 方程式の固有値となる。  
 周期条件 ( $0 \leq \xi \leq 2$ ) によって  $2 - u$  とする。  $-u|_{t=0}$  は  $2 - u$   
 の  $\rightarrow \rightarrow \min$  である。  $\xi = 2 - \xi$  により展開し

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

とある。  $\delta$  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 Kruskal<sup>(6)</sup> 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  $u(x, t) = 2$  の場合が得られた。この実験では  $\delta = 0.0222$ ,  $a_u = 1$  とした。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後に進行。衝突の際のソリトン相互の加速と無視すれば、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、その差は一定値

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

である。これは周期の長さを2の空間で運動するとき、時間

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

の後には相互の関係は、12の値と同じ状況になる。  $\delta = 0.0222$ ,

$a_u = 1$  とおくと再帰時間  $\tau_R$  は  $\tau_R \approx 40/\pi \approx 12.7$ 。

実際に得られた再帰時間は  $\tau_R = 30.4/\pi \approx 9.7$  であり、この不

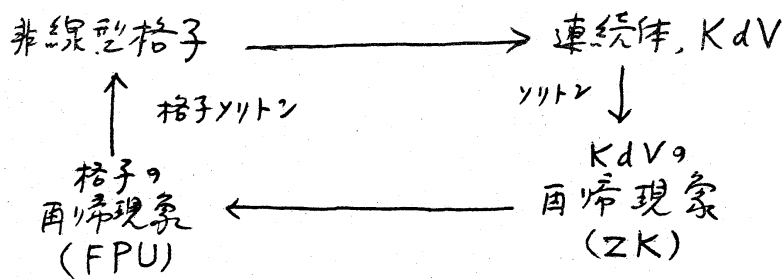


一致の原因は、ソリトンの衝突通過の際、たがいに加速し合ふことである。

#### § 4. 結び

上に示したように格子体系は漸近的に KdV 方程式に表わすこととできる。KdV 方程式は再帰現象を示すことと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る。

一方で、格子体系もソリトンの独立性を保証している（2個のソリトンの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、格子体系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  $0 \leq x \leq 2$  の空間で非線

型格子の周期条件の下での実験を考えたならば、その周期時間  
は  $t$  と  $\tau$  との交換式により下の  $f$  に求めしめよう：

$$(4.1) \quad t_R = \tau_R / \frac{\pi}{2} \in C_0(a_y/a_n)$$

$$= \frac{3}{\pi^{3/2} \sqrt{2} a_y} \frac{N^{1.5}}{\alpha^{0.5}} t_L$$

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り。2の式は格子ソリトンの衝突、  
際の加速を無視し、初期条件として一方向の進行波を

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

の1次元型をもととくに適用し、近似的な周期時間である。な  
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。

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

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

であつた。FPUは進行波でなく定常波の場合である。

もしも定常波を逆向きの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期時間と(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。これら2式は $t_R$ の大きさとして少し異なるが、程度と傾向とはよく似ている、上の解釈が正しいとされてい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質で、非エルゴード的であるようにみえ子:

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しての運動も存在すること。

また、FPUが示したような再帰現象があること。

Fordの経験と参考になると、上の基底振動は、少く

らの変形させても、実験は時間あたりに大きくならぬといふ意味で安定であるように思われた。

その再帰現象は、格子ソリトンの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た再帰現象が着目となり、その近似値のものか、は尚保留しなくてはならぬ。いつかにしてはソリトンの相互作用をもっと正確に吟味（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——を引き起こすといふ話もある。<sup>7)</sup>しかしこれを含めて、多くの実験は線型、基礎揺動のモデルに於ける分析と求められた。運動はソリトンの運動として記述する方がよいと思われたので、むしろ波形自身の実験的吟味が重要であろう（文献(1)に図が1枚あるが）。

#### 文献

- (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. <sup>Symp.</sup> 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.