

非線形格子における動く局在モードの数値計算法

NTT コミュニケーション科学基礎研究所 吉村 和之

NTT Communication Science Laboratories

京大院・工 土井 祐介

Graduate School of Engineering

Kyoto University

1. 緒言

非線形格子系において離散ブリーザー(Discrete Breather)/非線形局在モード(Intrinsic Localized Mode)と呼ばれる局在構造が存在することが知られている[1]。離散ブリーザーは非線形性によって励起される高周波振動が、離散性によって現れるフォノンバンドの上限よりも大きな値をとることにより、定在波として存在できないことから現れる現象である。離散ブリーザーと、同じく非線形系での局在構造であるソリトンとを比較すると、(1)非可積分系での現象である、(2)格子系特有の現象であり連続体近似を行うと記述できないなどの違いがある。

離散ブリーザーは格子にとどまって振動を続ける静止型ブリーザーと、格子間を伝播していく移動型ブリーザーが存在することが知られている。静止型ブリーザーの存在性は広い範囲の系において証明されている。移動型ブリーザーについてはその存在性は証明されていないが、数値シミュレーションにより長時間にわたって安定に存在することが知られている。この移動型ブリーザーの解析はその応用も含め重要な研究課題である。

非可積分系での局在現象である離散ブリーザーの研究は数値シミュレーションによる研究が重要な役割を果たしてきた。そのため、いかに精度のよい数値解を得られることができるかは重要な問題である。静止型ブリーザーについては、運動方程式に *Rotating wave approximation* を施した連立方程式に反復法を用いることによって、数値解を得ることが可能である[2]。しかし、移動型の離散ブリーザーについてはその解の構造が解析的に調べられておらず、反復法によって収束解を得ることは困難である。これは解が収束するための初期値の収束域が極めて狭いためだと考えられる。そのため、移動型ブリーザーに関する多くの研究では、静止型ブリーザーに擾乱を加えることによって移動型ブリーザーを作っている。しかし、この方法では擾乱によって一部のエネルギーがさざ波として拡散し、所望の速度・振幅を持った離散ブリーザーを得るのは極めて難しい。

そこで本報告ではノーマルモード座標での移動型ブリーザーの振る舞いに着目し、その性質を利用して、所望の速度・振幅の移動型ブリーザーを求める数値的に厳密な計算法を提案する。

2. 移動型離散ブリーザー

静止型離散ブリーザーには対称性の異なる2つのモードが存在することが知られている:(a)oddモード、(b)evenモード。oddモード(Sievers-Takeno, STモード)は局在振動のピークが格子点上になり、その波形は $(0, -a_1, a_0, -a_1, 0)$ ($a_0 > a_1 > 0$)と表すことができる。

(b)evenモード(Page, Pモード)は局在のピークが2つの格子点の中間にあり、その波形は $(0, -b_1, b_0, -b_0, b_1, 0)$ ($b_0 > b_1 > 0$)と表すことができる(図1)。これらのモードは振幅に依存する周期 T_b で振動している。一方、移動型ブリーザーのは局在のピークが格子間を伝播していく。移動型ブリーザーはある瞬間にはoddモードの形を取り、またある瞬間にはevenモード、またその中間のモードの形を取りつつ系を伝播していく。

静止型ブリーザーは内部振動数 T_b で振動する週機械であり位相空間で周期軌道をとる。時刻 t にブリーザーの状態が位相空間で $\{q_i(t), p_i(t)\}$ に位置しているとする、 $t+nT_b$ にこの点に戻ってくる軌道をとる。

$$\{q_i(t+nT_b), p_i(t+nT_b)\} = \{q_i(t), p_i(t)\} \quad (1)$$

ここで i は格子番号、 n は自然数である。いま、写像 F を $\{q_i(t), p_i(t)\}$ の T_b 後の状態への変換

$$F: \{q_i(t), p_i(t)\} \mapsto \{q_i(t+nT_b), p_i(t+nT_b)\} \quad (2)$$

とすると、ある初期値 $\{q_i(t), p_i(t)\}$ に対して

$$F(\{q_i(t), p_i(t)\}) = \{q_i(t), p_i(t)\} \quad (3)$$

であるならば、この初期点は静止ブリーザーに対応する周期軌道に属する。したがってこの方程式を反復法で解けば、静止ブリーザー解を得られる。

移動型ブリーザー解の場合も同様に考える。移動型ブリーザーが移動速度 v_b [site/s]で移動しているとする

$$\{q_i(t), p_i(t)\} = \{q_{i-1}(t-1/v_b), p_{i-1}(t-1/v_b)\} \quad (4)$$

となる。いま内部振動 n 周期後に m 格子点移動する有理速度の移動型ブリーザー解を考えると関係式

$$\{q_i(t+nT_b), p_i(t+nT_b)\} = \{q_{i-m}(t), p_{i-m}(t)\} \quad (5)$$

が成り立つ。写像 F を用いると

$$F^n \{q_i(t), p_i(t)\} = \{q_{i-m}(t), p_{i-m}(t)\} \quad (6)$$

となる。方程式(6)を満たす点は移動型ブリーザー解に対応する周期軌道に属する。したがってこの方程式を解くことができれば移動型ブリーザー解を求めることができる。しかしこのような解を反復法で求めるのは解の収束が非常に悪く、困難である。

3. ノーマルモード座標でのDB

ここでは4粒子周期系のFPU格子を考える。系のハミルトニアンは

$$H = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^4 p_n^2 + \sum_{n=1}^4 [V(q_n - q_{n-1})] \quad (7)$$

$$V(r) = \frac{1}{2} \kappa r^2 + \frac{1}{4} \beta r^4 \quad (8)$$

で与えられる。ここで q_n 、 p_n は n 番目の質点の平衡点からの変位および運動量、 κ 、 β は線形および非線形の係数である。この系における運動方程式は

$$\ddot{q}_n + \kappa(q_{n-1} + q_{n+1} - 2q_n) + \beta(q_{n-1} - q_n)^3 + \beta(q_{n+1} - q_n)^3 = 0 \quad (9)$$

となる。

この系をノーマルモード座標に変換する。一般座標 $\{q_n, p_n\}$ とノーマルモード座標 $\{Q_n, P_n\}$ との変換は次の形で与えられる。

$$q_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^N Q_k \left[\sin\left(\frac{2\pi k}{N} n\right) + \cos\left(\frac{2\pi k}{N} n\right) \right] \quad (10)$$

$N=4$ ならばこの変換は

$$\begin{aligned} q_0 &= \frac{1}{2}(Q_0 + Q_1 + Q_2 + Q_3) \\ q_1 &= \frac{1}{2}(Q_0 + Q_1 - Q_2 - Q_3) \\ q_2 &= \frac{1}{2}(Q_0 - Q_1 + Q_2 - Q_3) \\ q_3 &= \frac{1}{2}(Q_0 - Q_1 - Q_2 + Q_3) \end{aligned} \quad (11-14)$$

である。ハミルトニアン、運動方程式は

$$H = \sum_{n=1}^4 P_n^2 + V(Q_2 + Q_3) + V(Q_2 - Q_1) + V(Q_3 - Q_2) + V(Q_2 + Q_1) \quad (15)$$

$$\begin{aligned} \ddot{Q}_1 - V'(Q_2 - Q_1) + V'(Q_2 + Q_1) &= 0 \\ \ddot{Q}_2 + V'(Q_2 + Q_3) + V'(Q_2 - Q_1) - V'(Q_3 - Q_2) + V'(Q_2 + Q_1) &= 0 \\ \ddot{Q}_3 + V'(Q_2 + Q_3) + V'(Q_2 + Q_3) &= 0 \end{aligned} \quad (16-18)$$

と与えられる。ここで並進運動 Q_0 を 0 としたが一般性を失わない。

このような 4 粒子 FPU 系でも離散ブリーザーが存在する[3]。そこで、ノーマルモード空間 $\{Q_n, P_n\}$ での離散ブリーザーの振る舞いをみる。一般座標では静止型ブリーザーは Odd モードの場合 $q_1 = q_3$ または $q_2 = q_4$ が成立する、一方 Even モードの場合、 $q_1 = -q_2$ 、 $q_2 = -q_3$ 、 $q_3 = -q_4$ 、 $q_4 = -q_1$ のいずれかが成立する。この関係をノーマルモード座標で表すと、Odd モードでは $Q_1 = Q_3$ 、 $Q_1 = -Q_3$ 、Even モードでは $Q_1 = 0$ 、 $Q_3 = 0$ となる。このことから不変部分空間 $\{Q_1, Q_2, Q_3\}$ 上において静止型ブリーザーの軌道は Q_3 軸に水平な平面上に拘束されていることが分かる(図 2)。移動型ブリーザーは Even モード、Odd モードの間を遷移し

ながら格子上を移動していくことから、この平面の間を移動する軌道を取る(図 3)。つまり離散ブリーザーの実空間での平行移動はノーマルモード空間での Q_3 軸周りの回転に対応し、その移動速度は Q_3 軸周りの各速度に対応することが分かる。

4. エリートモデル

ここで 4 粒子 FPU 系に第 2 近接格子間の非線形相互作用を付加したモデルを考える。

$$H = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N p_n^2 + \sum_{n=1}^N \left[\frac{\kappa}{2} (q_{n+1} - q_n)^2 + \frac{1}{4} (q_{n+1} - q_n)^4 + \frac{C}{16} (q_{n+2} - q_n)^4 \right] \quad (19)$$

このモデルは移動型ブリーザーの挙動を解析するのに極めてよい性質を有する。簡単のために $\kappa=0$ とする。ハミルトニアンをノーマルモード座標に変換すると

$$H = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^3 P_k^2 + Q_2^4 + 3(Q_1^2 + Q_3^2)Q_2^2 + \left(\frac{1}{2} + \frac{C}{4}\right)Q_1^4 + \frac{3}{2}CQ_1^2Q_3^2 + \left(\frac{1}{2} + \frac{C}{4}\right)Q_3^4 \quad (20)$$

となる。また、運動方程式は

$$\begin{aligned} \ddot{Q}_1 + 6Q_1Q_2^2 + (2+C)Q_1^3 + 3CQ_1Q_3^2 &= 0 \\ \ddot{Q}_2 + 3Q_2^3 + 6(Q_1^2 + Q_3^2)Q_2 &= 0 \\ \ddot{Q}_3 + 6Q_3Q_2^2 + 3CQ_1^2Q_3 + (2+C)Q_3^3 &= 0 \end{aligned} \quad (21-23)$$

と与えられる。

特に $C=1$ は方程式が簡単になる。この場合をエリートモデルと名づける。この場合、ハミルトニアンは

$$H = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^3 P_k^2 + Q_2^4 + 3(Q_1^2 + Q_3^2)Q_2^2 + \frac{3}{4}(Q_1^2 + Q_3^2)^2 \quad (24)$$

となっており、 Q_1, Q_3 に関する項が $Q_1^2 + Q_3^2$ の形でのみ現れていることが分かる。したがってノーマルモード座標の $Q_1 - Q_3$ 平面に対して曲座標 $R - \theta$ を導入し、変数変換、

$$Q_1 = R \cos \theta, \quad Q_2 = Q_2, \quad Q_3 = R \sin \theta \quad (25)$$

$$P_1 = \dot{Q}_1 = \dot{R} \cos \theta - R \dot{\theta} \sin \theta, \quad P_2 = \dot{Q}_2, \quad P_3 = \dot{Q}_3 = \dot{R} \sin \theta + R \dot{\theta} \cos \theta \quad (26)$$

を行うことにより、ハミルトニアンは

$$H = \dot{R}^2 + R^2 \dot{\theta}^2 + \dot{Q}_2^2 + Q_2^4 + 3R^2 Q_2^2 + \frac{3}{4} R^4 \quad (27)$$

と書き換えられる。式(27)からハミルトニアンは変数 θ に依存しないことが分かる。運動方程式は

$$\begin{aligned} \ddot{R} - R \dot{\theta}^2 + 3R^3 + 6RQ_2^2 &= 0 \\ \frac{1}{R} \frac{d}{dt} (R^2 \dot{\theta}) &= 0 \\ \ddot{Q}_2 + 4Q_2^3 + 6R^2 Q_2 &= 0 \end{aligned} \quad (28-30)$$

となり、式(29)より保存量

$$R^2 \dot{\theta} = \varepsilon \quad (31)$$

が存在する。この保存量 ε は Q_3 軸周りの回転の角速度 $\dot{\theta}$ によって決まる。 Q_3 軸周りの回転は実空間での離散ブリーザーの平行移動に対応するので、 ε の大きさはブリーザーの移動速度を特徴付けるパラメータである。

以上より、エリートモデル上でのある速度 v_b の移動型ブリーザーは、対応する ε での連立微分方程式

$$\begin{aligned} \ddot{R} - \varepsilon^2 R^{-3} + 3R^3 + 6RQ_2^2 &= 0 \\ \ddot{Q}_2 + 4Q_2^3 + 6R^2 Q_2 &= 0 \end{aligned} \quad (32-33)$$

の周期解として与えられる。

ここで、 $\varepsilon = 0$ の場合は静止型ブリーザーに対応し、方程式は

$$\begin{aligned} \ddot{R} + 3R^3 + 6RQ_2^2 &= 0 \\ \ddot{Q}_2 + 4Q_2^3 + 6R^2 Q_2 &= 0 \end{aligned} \quad (34-35)$$

となる。変数変換 $R = \frac{\sqrt{3}}{6} Z$, $Q_2 = \frac{\sqrt{2}}{4} Z$ とすることによって

$$\ddot{Z} + Z^3 = 0 \quad (36)$$

が得られる。この方程式の解は楕円関数

$$Z(t) = A \operatorname{cn}\left(\omega t; \frac{1}{2}\right) \quad (37)$$

で与えられる。また、方程式を積分することにより、周期解の周期 T_b とノーマルモード空間上での振幅 A との関係

$$A = 4\sqrt{2} \frac{\sqrt{\pi} \Gamma(5/4)}{\Gamma(3/4)} T_b^{-1} \quad (38)$$

が得られる。したがって静止型ブリーザー ($\varepsilon = 0$) の解析解は

$$\begin{cases} R = \frac{\sqrt{3}}{6} A \operatorname{cn}\left(\omega t; \frac{1}{2}\right) \\ Z = \frac{\sqrt{2}}{4} A \operatorname{cn}\left(\omega t; \frac{1}{2}\right) \end{cases} \quad (39)$$

と与えられる。

以上の議論を用いて内部振動数 T_b 、移動速度 v_b の移動型ブリーザーの数値計算が可能になる。以下に手順を示す。

(a) エリートモデル(34-35)から内部振動数 T_b の静止型ブリーザーに対応する周期解 $X_0^{C=1}$ が(39)で与えられる。

(b) $X_0^{C=1}$ を初期値として $\varepsilon = \varepsilon_1 \ll 1$ の方程式(32-33)に対する周期解 $X_{\varepsilon_1}^{C=1}$ を反復法で求める。

同様に $X_{\varepsilon_{n-1}}^{C=1}$ を初期値として $\Delta\varepsilon_n = \varepsilon_n - \varepsilon_{n-1}$ だけ変化させた方程式の解 $X_{\varepsilon_n}^{C=1}$ を順次反復法で求める。これを所望の速度 v_b に対応する ε に達するまで繰り返す。これによりエリートモデル上での内部振動数 T_b 、移動速度 v_b のブリーザー解 $X_{\varepsilon}^{C=1}$ が得られる。

- (c)手順(b)同様に $C=1$ から $C=0$ まで C を変化させながら反復法で $X_{\varepsilon}^{C=C_n}$ を求める。これによって最終的に一般座標(16-18)での内部振動数 T_b 、移動速度 v_b のブリーザー解 $X_{\varepsilon}^{C=0}$ を得る。
- (d)さらに同様に反復法を繰り返すことにより $\kappa=0$ から任意の κ まで解を延長することができる。以上より4粒子 FPU 格子系での任意の速度の移動型ブリーザーの数値解が得られる。

5. 数値計算例

上記の反復法で得られた移動型ブリーザーの振る舞いを示す。図4は $\kappa=0$ 、 $T_b=5.0$ の場合の各格子点の振動の様子である。4つの図はそれぞれ1.5周期、2.5周期、3.5周期、4.5周期で1格子移動するブリーザーの例である。提案した数値計算法を用いることによって、同一振動数 T_b 、振幅を持ち、所望の速度で安定に移動する離散ブリーザーを構成することが可能であることがわかる。

これまでの研究では数値シミュレーションで励起した移動型の離散ブリーザーの速度は線形格子系での音速 $c \propto \sqrt{\kappa}$ の10%程度であると報告されている[4, 5]。しかし、本報告で提案した数値計算法では、この制限と関係なく所望の速度の離散ブリーザーを構成することが可能である。したがって κ が小さい場合には超音速で伝播する離散ブリーザーの構成も可能である。

図5には同一振動数、同一速度で κ を変化させた場合の振る舞いを示す。図からわかるように κ を大きくしていくにつれて、離散ブリーザーの末端が明確に区別できなくなっていくことが分かる。これは線形性が大きくなることによって局在性が小さくなることを示している。

数値計算によって得られた局在解は、4粒子周期系での解であるから離散ブリーザー列の解であるといえる。そこで $4n$ 粒子周期系でのブリーザー列の安定性を調べた。図6にブリーザー列に微小擾乱を加えた場合の時間発展の様子を示す。ブリーザー列は局在構造の波長よりも大きな波長の変調に対して不安定化し、離散ブリーザーが不規則に移動、衝突を繰り返すカオスのブリーザー[6, 7]のような振る舞いが観測されることが分かった(図7)。

6. 結言

本研究ではノーマルモード座標に着目して移動型の離散ブリーザーの厳密な数値計算法を提案した。この計算法を使うことにより所望の有理数速度で伝播する移動型ブリーザーを求めることができる。この結果は、従来存在しないとされていた超音速離散ブリーザー

の存在を示唆している。

この計算法で得られた厳密な数値解を用いることによって、離散ブリーザーの高速衝突実験、移動型ブリーザーの詳細な安定性解析が可能になり、離散ブリーザーについての研究がさらに進展すると期待される。

参考文献

- [1] A.J. Sievers and S. Takeno: *Phys. Rev. Lett.* **61**, 970 (1988).
- [2] K. Hori and S. Takeno: *J. Phys. Soc. Jpn.* **61**, 2186 (1992).
- [3] 吉村和之: 日本物理学会第 59 回年次大会 **59**, 326 (2004).
- [4] K.W. Sandusky, J.B. Page and K.E. Schmidt: *Phys. Rev. B* **46**, 6161 (1992).
- [5] S.R. Bickham and S.A. Kiselev: *Phys. Rev. B* **47**, 14206 (1993).
- [6] V.M. Burlakov, S.A. Kiselev and V.N. Pyrkov: *Solid State Commun.*, **74**, 327 (1990).
- [7] T. Cretegny, T. Dauxois, S. Ruffo and A. Torcini, *Physica D*, **121**, 109 (1998).

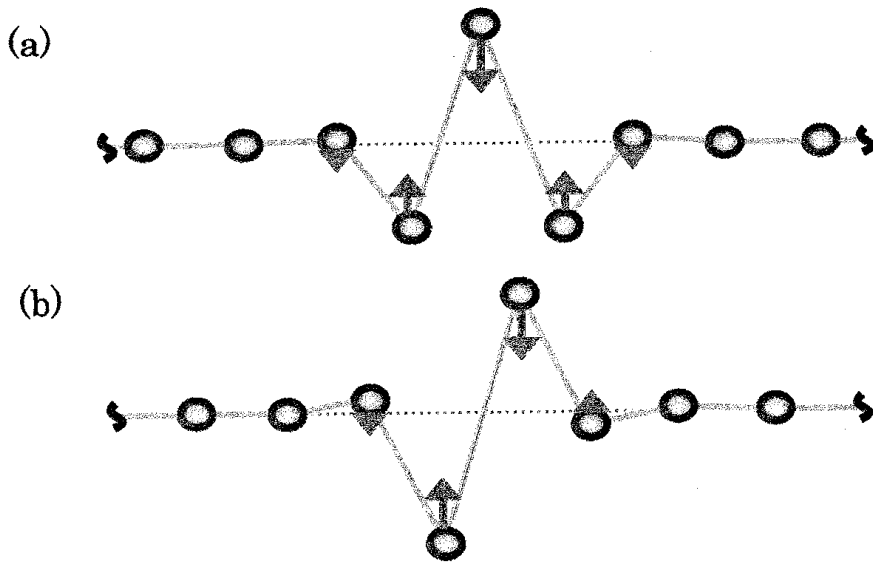


図1 離散ブリーザーの模式図:(a)oddモード、(b)evenモード

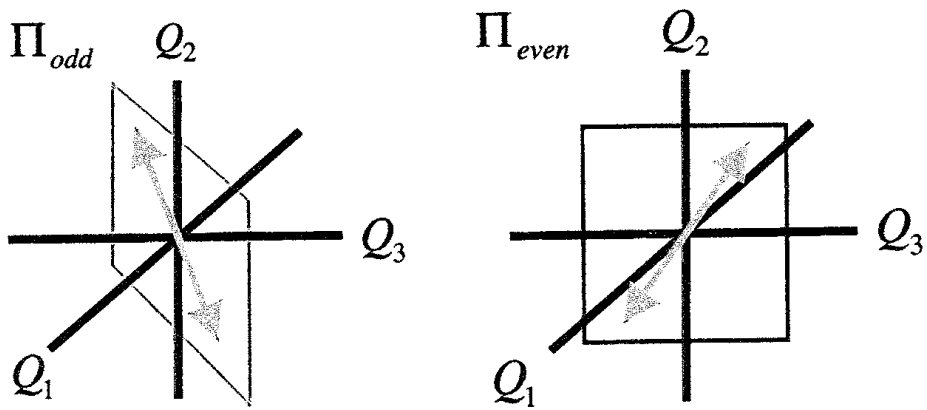


図2 静止型離散ブリーザーの位相空間での振舞い

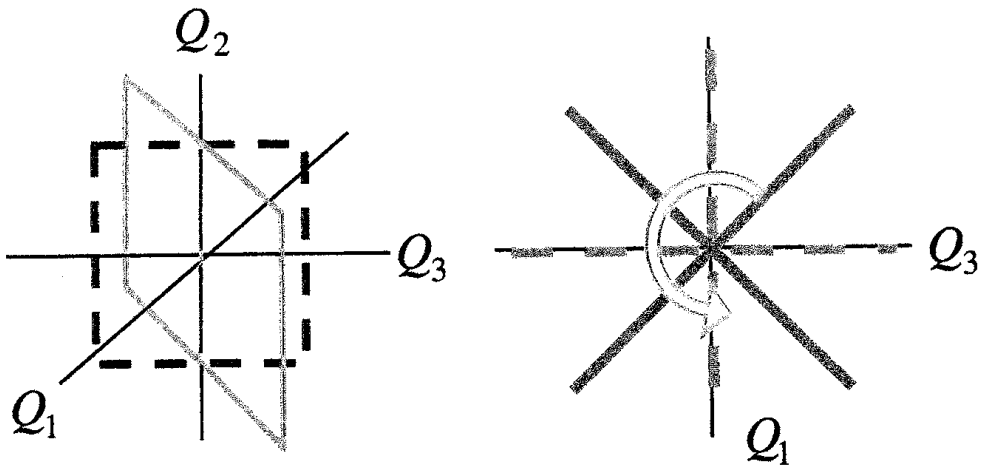


図3 移動型離散ブリーザーの位相空間での振舞い

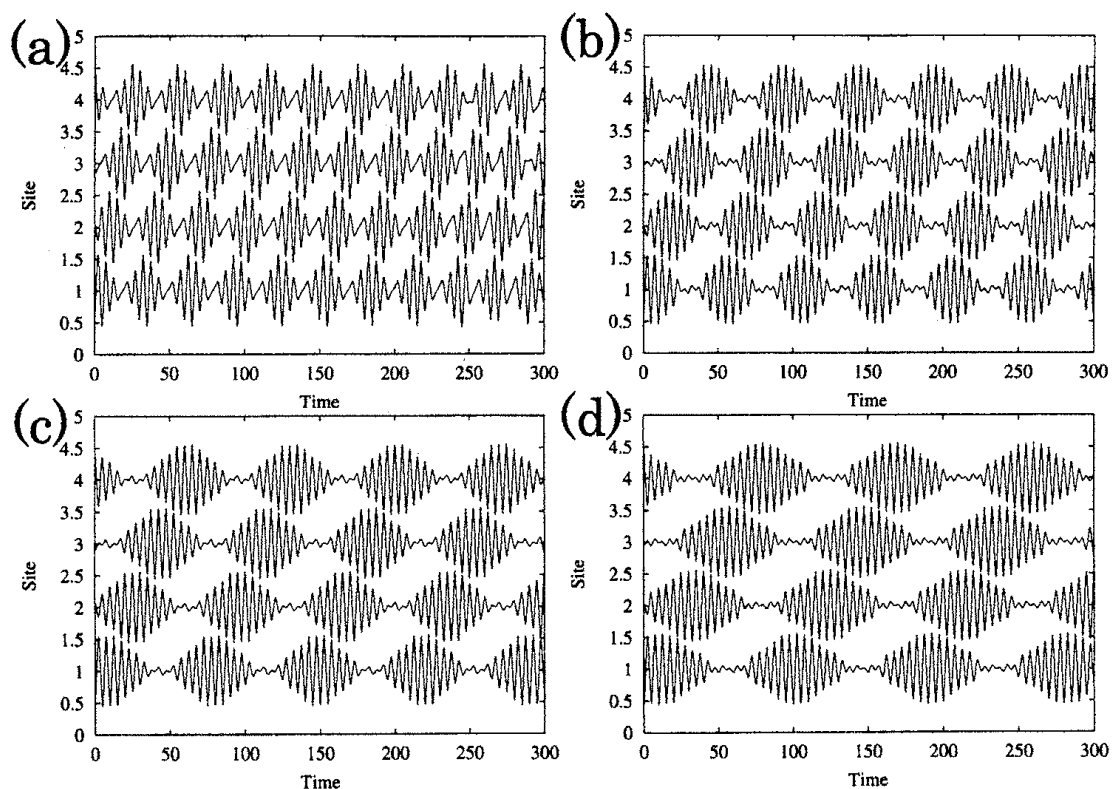


图 4 数值计算例($\kappa = 0$):(a) $v=2/3$, (b) $v=2/5$, (c) $v=2/7$, (d) $v=2/9$ [site/period]

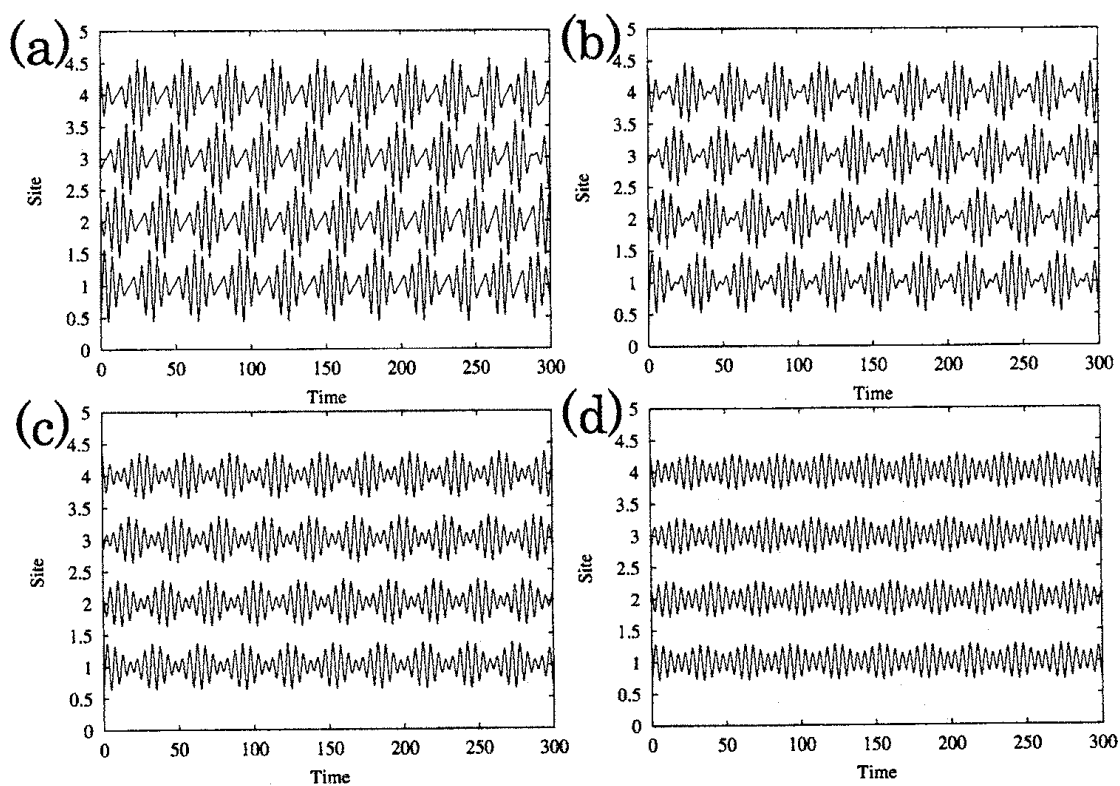


图 5 数值计算例($v = 2/3$ [site/period]):(a) $\kappa=0$, (b) $\kappa=0.1$, (c) $\kappa=0.2$, (d) $\kappa=0.25$

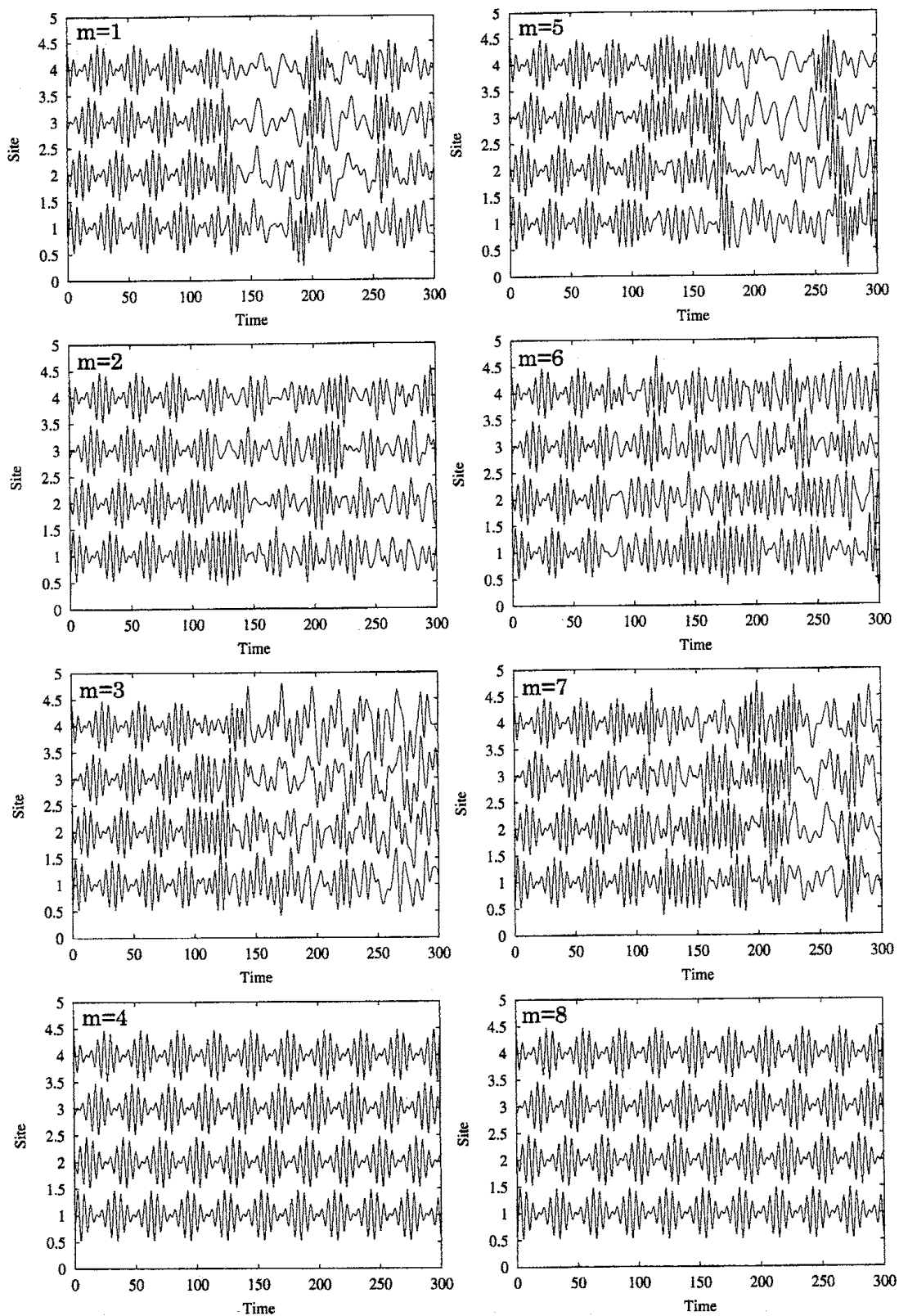


图 6 安定性解析($v = 2/3[\text{site/period}]$):格子数 16, 微小擾乱 $a_0 \sin(2\pi mi / N)$

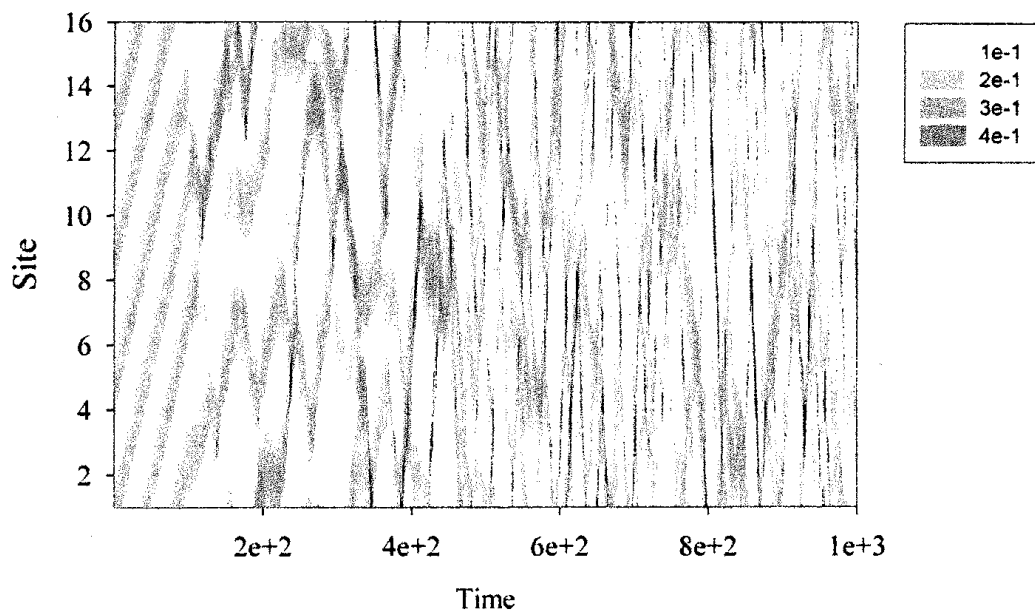


図7 カオス的ブリーザーの形成($\nu = 1/2[\text{site/period}]$, $\kappa = 0.1$)