HOKKAIDO UNIVERSITY

Title	不純物および界面と格子ソリトンの相互作用 ： 計算機実験
Author(s)	吉田, 文夫; 中山, 恒義; 佐久間, 哲郎
Citation	北海道大學工學部研究報告, 78, 131-139
Issue Date	1976-02-16
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/41325
Type	departmental bulletin paper
File Information	78_131-140.pdf

Hokkaido University Collection of Scholarly and Academic Papers : HUSCAP

北海道大学工学部研究報告
第78号（昭和51年）

Bulletin of the Faculty of Engineering,
Hokkaido University, No. 78 (1976)

不純物および界面と格子ソリトンの相互作用

——計算機実験——

吉田文夫* 中山恒義* 佐久間哲郎*

（昭和50年6月30日受理）

Interactions of the Lattice Soliton with Impurity and Interface

—— Computer Experiments ——

Fumio YOSHIDA, Tsuneyoshi NAKAYAMA and Tetsuro SAKUMA

(Received June 30, 1975)

Abstract

The interaction of generalized KdV soliton with impurity and interface in one-dimensional nonlinear lattice is numerically investigated. The numerical calculations were performed starting with a rarefactive one-soliton solution incident in the nonlinear lattice with an impurity or interface.

In the case of the interaction with a heavy impurity at the free end, our results show that the incident soliton disintegrates into a rarefactive and a compressive soliton. When the incident soliton in the heavy mass region propagates into the light region, it disintegrates into a transmitted rarefactive and a reflected compressive soliton which are both stable. In the contrary case of mass regions, initial soliton splits into a stably reflected compressive and an unstably transmitted rarefactive soliton. The results are qualitatively interpreted in terms of the spectral analysis of soliton amplitude.

1. 序　　論

ここ数年，非線形分散系における波動現象がソリトン (soliton) という基本概念によって説明されるようになった。ソリトンとは，非線形分散媒質中を狭い領域にエネルギーを局在しながら固有の速度で安定に伝播するパルス的波動のことである。

1965年，Zabusky と Kruskal[1] は Korteweg-de Vries 方程式（この方程式は浅水重力波を記述する式として古くから得られている。以下 KdV 方程式と略す。）の初期値問題に対する数値解を求め，その結果を説明するために初めてソリトンの概念を導入し，それが媒質中を形を変えずに伝播しまた衝突に対しても安定であって速さや形を不変に保つことを発見した。また彼らは一次元非線形格子の振舞いをソリトンの運動とそれらの相互作用によって説明した。同じ頃，KdV 方程式は無衝突プラズマ中の磁気流体波やイオン音波および非線形結晶中の長波長の波を扱うと

* 工業数学講座
Department of Engineering Science, Hokkaido University, Sapporo, Japan.

きに得られることが発見された[2]。それ以来非線形分散波動におけるソリトン現象に関する研究がプラズマ物理学，固体物理学，非線形光学などの分野において幅広くなされてきている。また実際の媒質中におけるソリトン現象が実験的にも確認されており，ソリトンの存在は明らかな事実となっている。とくに1970年，Narayanamurti と Varma[3] は高純度の NaF 中の熱パルスの伝播が包絡線ソリトンの伝播である事実を実験的に観測した。

このようにソリトンが媒質中において基本的な役割をすると考えられるため，ソリトンの所有する性質，すなわち安定性や相互作用の様子などがその発展方程式とともに数値的に，また解析的に調べられている。とくに逓減摂動法[4]，逆散乱法[5]，Bäcklund 変換[6] の方法などがこのような非線形系を解析する有力な理論的手段として開発され発展させられてきている。

ソリトンが非線形格子において現われるものを格子ソリトンと呼ぶ。唯一の解析解を有する非線形格子として，Toda は特殊な指数形のポテンシャルを持つ格子模型を提出し，解析的なソリトン解を求めた。この非線形格子は Toda Lattice と呼ばれ，Ooyama と Saito[7] はこの格子におけるソリトンの振舞いについて計算機実験を行っている。また非線形 LC 回路を伝播するソリトンの端における反射実験も行われている[8]。この他の非線形格子については長波長連続体近似のもとに解析的ソリトン解が得られている。

ところで実際の物質は完全に一様ではなく，不純物や転位，格子欠陥等を含む場合がほとんどであり，また異なる媒質が界面をつくっているような場合もある。従って不純物や界面を含む媒質中をソリトンが伝播する場合どのような現象が生ずるかを調べることは極めて重要であり，また実験的にも興味深い。解析的に以上のような不均質媒質中を伝播するソリトン解を求めることは現在のところ定性的な結果しか得られていない。本論文においては，非線形項が変位に関して4次までのポテンシャルをもつ自由端を有する一次元非線形格子を考え，自由端に吸着した不純物（これは物質表面に吸着した不純物の一次元模型である。）とソリトンとの相互作用，また2種類の異なる媒質がつくる一次元界面とソリトンとの相互作用の様子を計算機実験によって調べることを目的としている。

2. 一次元非線形格子と格子ソリトン

2.1 1次元非線形格子

同一質量をもつ N 個の粒子が一次元的に並んでいる非線形格子を考える。これは並列に並べられた非線形 LC 回路を考えることと等価である。粒子間ポテンシャルは，線形項および3次と4次の非線形項の和として表わされると仮定する。すなわちポテンシャルは

$$V(r_n)=\frac{\kappa}{2}r_n^2+\frac{\kappa\alpha}{3}r_n^3+\frac{\kappa\beta}{4}r_n^4 \tag{2.1}$$

により与えられる。ここで κ はバネ定数，α と β は非線形項の強さを表わす結合定数である。(2.1) の r_n は粒子間の相対変位であり

$$r_n=y_{n+1}-y_n \tag{2.2}$$

と定義する。ここで y_n は n 番目の粒子の平衡位置からの変位とする。(2.1) と (2.2) から格子中の粒子の運動方程式は

$$m\frac{d^2y_n}{dt^2}=V'(r_n)-V'(r_{n-1}),\qquad V'(r_n)=\frac{dV}{dr_n} \tag{2.3}$$

として与えられる。ここで m は粒子の質量である。

(2.1) において $\alpha=0$，あるいは $\beta=0$ とした格子ではソリトンが存在することが Zabusky[1]

による計算機実験の結果示されている。序論で述べたように，これらの非線形格子に対する解析解はまだ得られていないが，長波長連続体近似によって得られる系の方程式とそのソリトン解は求められている。$\beta=0$ の格子は KdV 方程式により，また $\alpha=0$ の格子は Modified KdV (以下 M. KdV と略記する。) 方程式により記述される系に帰着され，それぞれ KdV ソリトン，M. KdV ソリトンをもつ。ここで扱う格子は一般化の意味を含めて，Generalized KdV (以下 G. KdV と略記する。) 方程式と呼ばれる方程式に従う系へ帰着される。これからの議論のために G. KdV 方程式のソリトン解を導いておこう。

2.2 Generalized KdV 方程式とソリトン解

前節の格子において粒子の座標を

$$x=nh, \qquad (n=0, 1, 2, \cdots, N)$$

とおく。ここで h は格子間隔である。格子中を伝播する波の波長が h に比べて十分長い極限を考えるならば (波数を q とすればこの条件は $qh\ll 1$ と表わされる。)，展開式

$$y_{n\pm1}-y_n=\pm hy_x+\frac{h^2}{2!}y_{xx}\pm\frac{h^3}{3!}y_{xxx}+\frac{h^4}{4!}y_{xxxx}+0(h^5)\Big|_{x=nh} \tag{2.5}$$

を (2.3) に代入することにより，連続体に移行させることができる。h について5次以上の項を無視することにより

$$\frac{d^2y_n}{dt^2}=h^2\left[(1+2\alpha hy_x+3\beta h^2y_x^2)\,y_{xx}+\frac{h^2}{12}y_{xxxx}\right] \tag{2.6}$$

が得られる。ここで y についての添字 x はその偏微分を意味する。簡単のために $\kappa/m=1$ のように規格化する。さらに新しい座標変数

$$\xi=\varepsilon(x-ht) \tag{2.7 a}$$

$$\tau=\varepsilon^3ht \tag{2.7 b}$$

を導入し (2.5) を書き換えると，長波長近似により

$$\phi_\tau+(\lambda\phi+\mu\phi^2)\,\phi_\xi+\delta^2\phi_{\xi\xi\xi}=0 \tag{2.8}$$

を得る。ここで λ, μ, δ, ε についてそれぞれ

$$\lambda=\alpha h, \qquad \mu=\frac{3}{2}\beta h^2, \qquad \delta^2=\frac{h^2}{24}, \qquad \varepsilon=1 \tag{2.9}$$

とおいた。

方程式 (2.8) は Generalized KdV 方程式と呼ばれている。$\mu=0$ または $\lambda=0$ のときに KdV 方程式または M. KdV 方程式が得られることは容易にわかる。Taniuchi と Yajima[4] によって発展させられた逓減摂動法により，(2.8) は非線形シュレーディンガー方程式へ導かれることが知られている。このシュレーディンガー方程式が固体中の熱パルスの伝播を記述することが Tappert と Varma[9] によって示された。

さて (2.8) は解析的特殊解[10] を有し，それは次式で与えられる。

$$\phi(\eta)=\frac{1}{a+\sqrt{a^2+b}\,\cosh(\eta/\Delta)} \tag{2.10}$$

ここで a, b, Δ はそれぞれ次式で与えられる。

$$a=\frac{\lambda}{6c}, \qquad b=\frac{\mu}{6c}, \qquad \Delta=\delta c^{-\frac{1}{2}} \tag{2.11}$$

また変数 η は

$$\eta = \xi - c\tau \tag{2.12}$$

のように変換されている。c は積分定数であり，(ξ, τ) 座標系におけるソリトンの速度である。(2.10) は孤立波を表わす解で G.KdV ソリトンと呼ばれ，極限 $a\to 0$ で M.KdV ソリトン，$b\to 0$ で KdV でソリトン解を与えることは明らかである。なお (2.11) の Δ の大きさに従ってソリトンの広がりも大きくなる。

3. 格子ソリトンと不純物および界面との相互作用

3.1 自由端に不純物を含む非線形格子

ここでは格子中にある不純物とソリトンの衝突問題を扱う。前章における非線形格子においてその自由端に一個の質量の異なる粒子が含まれている場合を考える。この不純物のまわりのポテンシャルは他の粒子のものと同じであると仮定する。このような一次元非線形格子を安定に伝播するソリトンが不純物と衝突するときにどのように散乱されるかを調べるのがこの計算機実験の目的である。

同種粒子からなる一次元非線形格子に対する運動方程式は (2.3) により与えられていた。全粒子数を N とし，格子の端は一方を固定端，他端を自由端とする。従って境界条件は

$$y_0 = \text{constant} \quad : \text{固定端} \tag{3.1}$$

$$y_{N+1} = y_N \quad : \text{自由端} \tag{3.2}$$

と表わされる。また自由端に不純物がある格子に対する運動方程式は

$$m_n \frac{d^2 y_n}{dt^2} = V'(r_n) - V'(r_{n-1}) \quad : n=1, 2, \cdots, N \tag{3.3}$$

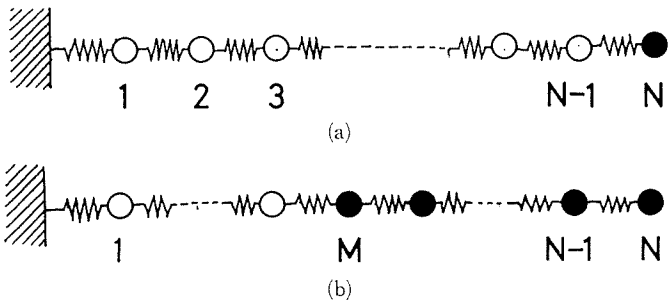
であり，ここで

$$m_n = \begin{cases} m & : \ n=1, 2, \cdots, N-1 \\ m_d & : \ n=N \end{cases} \tag{3.4}$$

となる。m および m_d はそれぞれ正規粒子の質量および不純物粒子の質量である。$m=1$ に規格化しておくと m_d は不純物の正規粒子に対する質量比となる。図1(a)に上述した1次元非線形格子の模型を与える。図1(a)の黒丸粒子は自由端にある不純物である。

つぎにソリトンを格子中に与えるため，(2.10) を最初の空間時間座標変数 $(x=nh, t)$ にもどしておく。このとき (2.10) および (2.11) により

$$\eta = x - (1+c)\, ht \tag{3.5}$$



第1図 (a) 自由端に不純物をもつ一次元格子模型 (黒丸不純物)
(b) 2種類の異なる質量をもつ粒子からなる一次元界面模型

と書かれる。また格子変位は $\phi=\partial y/\partial x$ より

$$y(x,t)=\frac{2\Delta}{\sqrt{b}}\tan^{-1}\frac{1}{\sqrt{b}}(a+\sqrt{a^2+b}\ e^{\pi/\Delta}) \tag{3.6}$$

となる。これが数値計算において用いるソリトンの初期変位である。すでに述べたように Δ は，ソリトンの幅の目安であり，(2.9) および (2.12) と (2.13) の関係から c, a, b の値が一義に定まる。

3.2　不純物と格子ソリトンの衝突の計算機実験

初期値としてのソリトンが不純物に衝突する過程は方程式 (3.3) を数値的にとくことにより，調べることができる。計算機実験の手順をつぎに記すことにする。

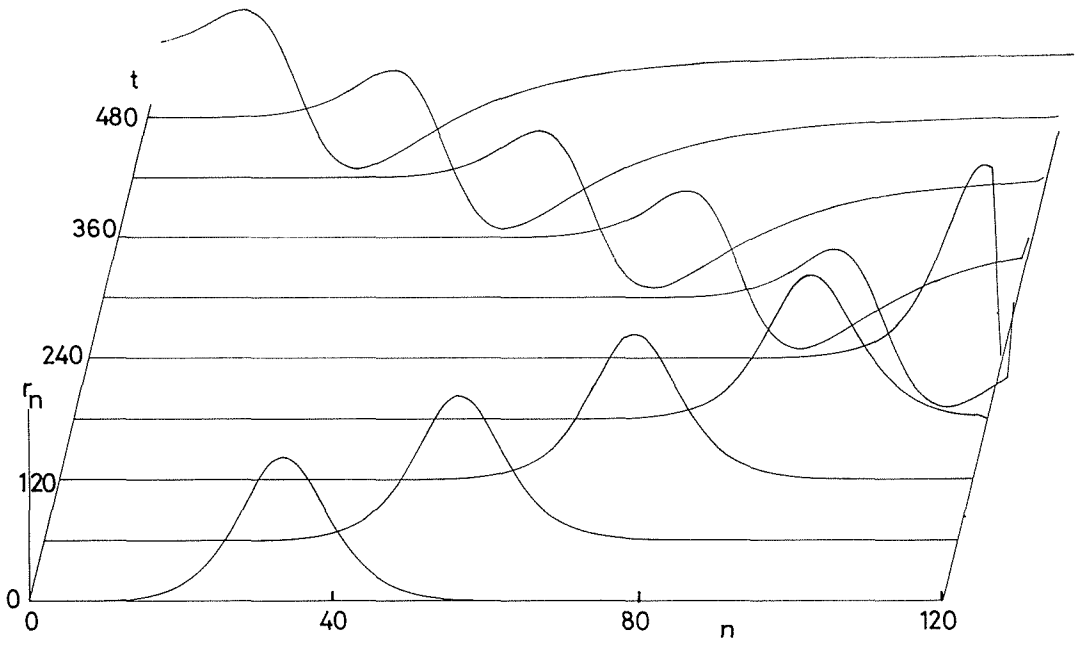
(i)　一次元非調和格子のソリトンは，長波長連続体近似のもとに G. KdV 方程式のソリトン解として求められていた。このソリトン解が正規格子中を安定に伝播するかどうかを数値計算により確かめておく。

(ii)　質量比を数分の 1 から数倍の範囲でいくつかの値をとり，(i) で安定性が確かめられたソリトン解を入力として不純物によるソリトン散乱の数値実験を繰り返す。

以下に手順 (i) および (ii) に従って遂行した数値計算の結果を述べる。最初に上述の (i) について，自由端をもつ正規格子中に初期変位 (2.18) を入れたときのソリトンの安定性を確認する。初期ソリトンについては $\Delta=4h$ をとっている。この実験において粒子数 N, 格子間隔 h, 時間間隔 Δt, 非線形の強さを表わすパラメーター α, β の値をつぎのように与えた。

$$N=120,\quad h=(2N+1)^{-1},\quad \Delta t=1/\sqrt{8},\quad \alpha=1/4,\quad \beta=6.0$$

結果として初期値ソリトンは形と大きさを不変に保ちながら格子中を固有速度で運動し，固定端と自由端で反射をくり返す。このとき固定端においてソリトンの位相は変わらず，自由端において位相が反転してソリトンの反射が起る。数値結果からみるかぎり，初期ソリトンにいくらかゆがみが生じたり，また媒質上にさざ波を生ずるが，その波高はソリトンの振幅の数%以下で



第 2 図　自由端にある不純物と相互作用するソリトンの時間発展 (時間軸の単位は Δt)

あり，時間が経過しても増加の傾向は見られない。このゆがみやさざ波は数値計算自体の誤差，運動方程式を時間差分する場合の近似誤差，G. KdV ソリトンを正規格子ソリトンとして用いたことによる影響などの結果であると考えられる。しかしながら，この G. KdV ソリトン解は初期条件として不純物粒子による衝突過程を調べる上では十分安定な格子ソリトンとして扱うことができる。

つぎに (ii) に対する結果を第2図に示す。図における数値計算の結果は $m_d=15$ の重い粒子が自由端にある場合のものである。横軸に粒子の座標，縦軸に相対変位 η_n，斜軸は時間軸をとっている。初期ソリトンは上向きで右方向に進行し右の自由端に衝突する。不純物がなければ，ソリトンの位相は完全に反転するはずであるが，この場合には位相反転は不完全にしか起らない。反射ソリトンは位相の不変部分（振幅が正の部分）をのこしたまま安定な波を形成する。この波は固定端で同位相で反射され，再び自由端の不純物と衝突し反射されるという過程をくり返す。そして自由端において反射するごとにソリトンの位相の不変部分が増大することが示された。不純物の質量がより大きければこの傾向はより顕著になる。結果として初期ソリトンは不整合な波に変形し，くずれてゆくがしだいに媒質全体に広がりゆるやかな波形を形成する。

不純物の質量を小さくしてゆき，$m_d=5$ 程度になるとソリトンが自由端で反射するときに生ずる位相不変部分は非常に小さくなり，位相反転部分が反射波の大部分をつくる。さらに不純物の質量が正規質量と同程度，あるいはそれより小さくなると，このような位相不変部分はまったく見られなくなり，ソリトンは自由端において完全に位相反転し反射する。

以上の数値計算から，質量比の大きな不純物ほどソリトンとの相互作用を起しやすく，自由端における反射ごとに高いモードへエネルギーが流れていくことが予想される。

3.3 界面と格子ソリトンとの相互作用

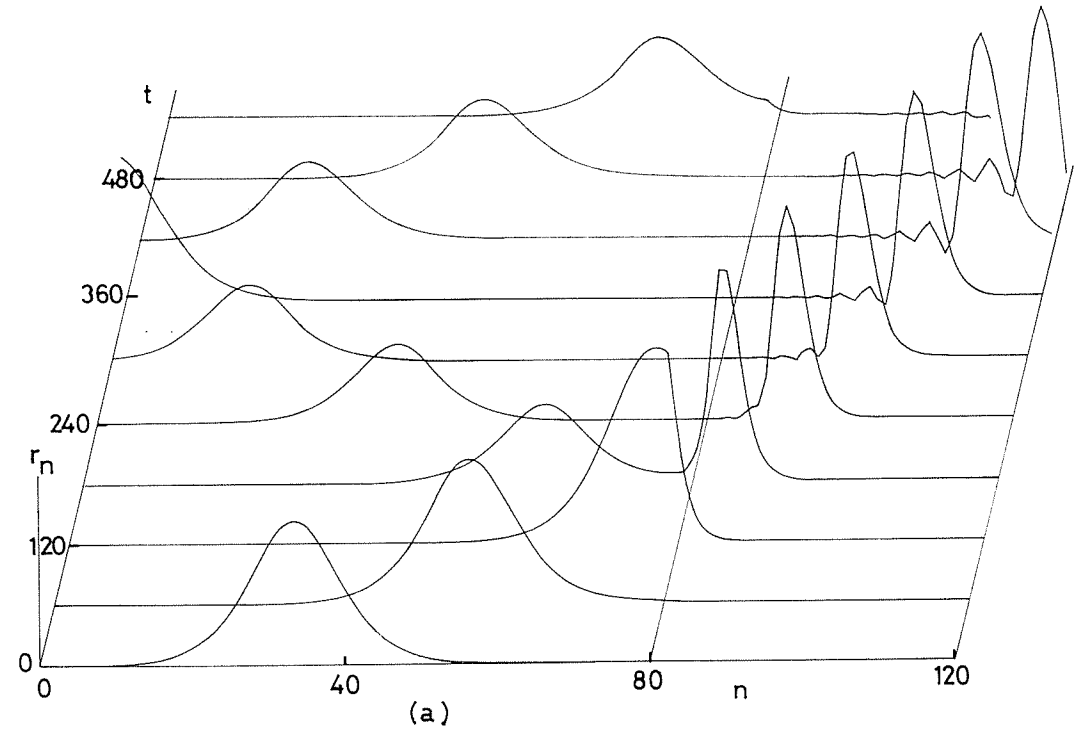
2つの異なる媒質によってつくられている界面を一次元格子模型によって考えよう。この格子模型は前節の不純物を含む格子を修正することによって得られる。質量が異なる2種類の粒子が1つの境界によって接続しているものとしよう。与えられる格子の運動方程式は (2.17) である。しかし (2.18) は

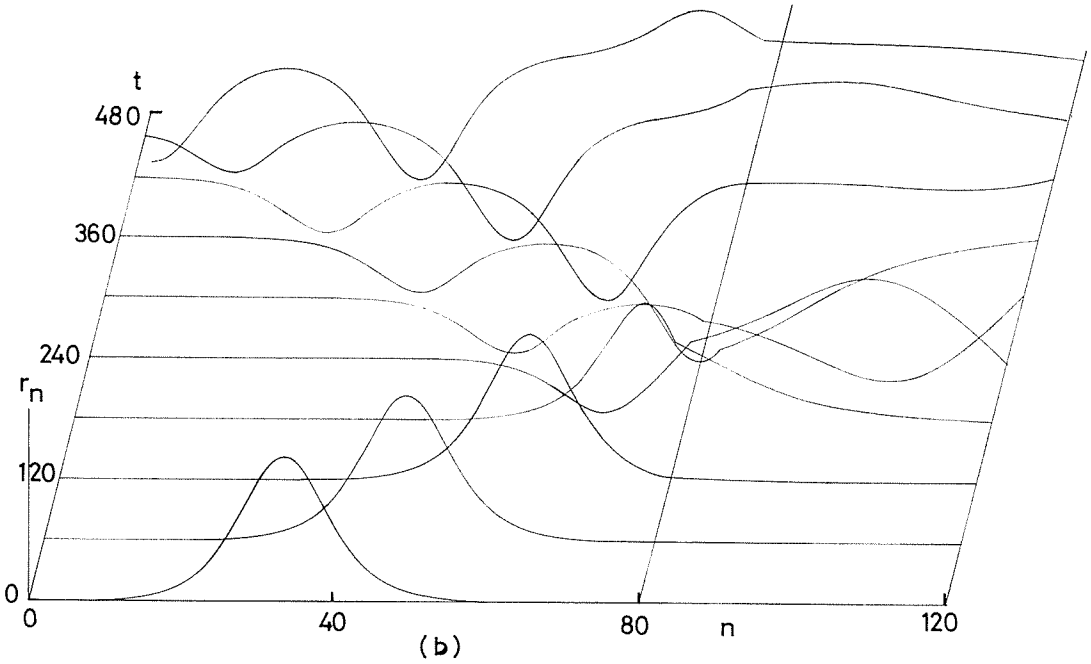
$$m_n=\begin{cases} m & : \ 1\leqq n\leqq M-1 \\ m_d & : \ M\leqq n\leqq N \end{cases} \tag{3.7}$$

のように修正される。ここで m と m_d は2種類の粒子の質量であり，M は界面の位置を表わす。図1(b)に界面の一次元格子を与える。白丸と黒丸はそれぞれ異なる質量 m と m_d を粒子を示している。以下はこの数値実験によって得られた結果である。パラメーターは $\Delta=4h$, $M=80$ とする以外は不純物の場合と同じである。

図3(a)は軽い質量からなる媒質中にある初期ソリトンが重い質量からなる媒質に向って進む場合である。質量比は10倍である。このソリトンは界面に接近するに従い変形していくが結局2つのソリトンに分裂する。その1つは安定な反射ソリトンである。もう1つは透過ソリトンである。透過ソリトンは重い媒質に入ると，以前より遅い速度をもち鋭いパルスになるが後方へさざ波をひきずるようになる。これは透過ソリトンが不安定であることを示している。

図3(b)は上述とは逆の過程を示している。これはソリトンが重い質量をもつ媒質から軽い質量をもつ媒質へ入射する場合を与える。質量比は1/5である。この場合も入射ソリトンは反射ソリトンと透過ソリトンに分裂する。反射ソリトンは安定であり界面において位相は反転している。一方透過ソリトンは大きな速度を持つ振幅のゆるやかなソリトンであり，右端の自由端において位相反転して反射し，再び界面と衝突して小さな反射波と透過波に分裂する。このときの透





第3図 界面と相互作用するソリトンの時間発展 (時間軸の単位は Δt)

(a) 軽い質量をもつ媒質から重い質量をもつ媒質へのソリトンの伝播

(b) 重い質量をもつ媒質から軽い質量をもつ媒質へのソリトンの伝播

過波は安定なソリトンである。

上述した2つの異なる重→軽および軽→重過程についてそれぞれ異なる結果を得たが，この事情は媒質の質量比を変えても本質的に変わらない。以上の結果を総合すると，ソリトンが重い媒質へ入射する場合，またその逆過程の場合のいずれの場合も，界面において入射ソリトンは反射ソリトンと透過ソリトンに分裂する。媒質の質量比が大きいほど反射ソリトンの振幅も大きくなる。ソリトンと界面及び前節の不純物との相互作用はソリトンのスペクトル分布という観点から定性的に説明することができる。これについて次節で述べることにする。

3.4 G. KdV ソリトンのスペクトル分布

第3.2節および第3.3節において得られた結果は，不純物粒子と正規粒子の質量比あるいは界面をつくっている2つの媒質の質量比に依存しているが，ソリトンのもつエネルギーにも関係する。従って実験結果はソリトンのスペクトル分布という観点から議論することができる。(2.10)で与えられたソリトンをフーリェ変換することにより G. KdV ソリトンのスペクトル分布が得られる。G. KdV ソリトンのスペクトル成分を $\hat{\phi}(k)$ とすれば

$$\hat{\phi}(k)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\phi(\eta)\,e^{ik\eta}\,d\eta=A\,\frac{\sinh k\Delta\theta_0}{\sinh k\Delta\pi} \tag{3.8}$$

が得られる。ここで

$$\theta_0=\tan^{-1}\sqrt{b}/a\,,\qquad A=\sqrt{\frac{2\pi}{b}}\,\Delta \tag{3.9}$$

とする。このスペクトル分布は $k=0$ で極大をもち，k の絶対値の大きいところで指数関数的に減少していく。すなわちソリトンのエネルギーは低周波数のところに局在している。また Δ が小さくなるとソリトンはより高い周波数成分を含むようになるが，これはソリトンが鋭いパルスほど大きなエネルギーをもつということと一致している。ところで不純物粒子を考えると，その局在振動数はその不純物の質量に依存する。正規粒子の質量より軽い粒子は高い局在振動数をもち，また重い粒子は共鳴振動数をもつことが知られている。このようにソリトンは重い不純物と相互作用しやすく軽い不純物とは相互作用しにくいが，ソリトンのエネルギーが大きければ軽い不純物とも相互作用することが予想される。界面においてはスペクトル分布が変わるためにソリトンは不安定になると考えられる。

4. 結　　論

ソリトンは非線形格子や非線形分散系を理解する上で基本的な概念であり，実験的にも観測されている。これらの非線形系のうち，1次元非線形格子は長波長連続体近似で G. KdV 方程式によって記述され，その解として G. KdV ソリトンが得られている。

ところで実際の物質は不純物を含んでおり，また異なる媒質が界面をつくっている場合もある。本論文ではこうした不純物や界面とソリトンとの相互作用の問題を1次元非線型格子模型を用いて数値的に調べた。表面に吸着した不純物模型としては自由端に質量の異なる粒子を置いた1次元格子を，また界面模型としては2種類の異なる質量をもつ粒子からなる一次元格子を考えた。以上の仮定にもとづいて得られた結果を要約する。

ソリトンが自由端の不純物と相互作用する場合，散乱によってソリトンの位相不変部分が生ずる。この部分の大きさは不純物粒子の正規粒子に対する質量比が大きいほど大きくなる傾向をもつ。一方ソリトンが界面と相互作用するとき，ソリトンは反射ソリトンと透過ソリトンとに分裂する。ソリトンが軽い媒質から重い媒質に入射する場合，透過ソリトンは不安定であり後方へ

さざ波をひきずる。また反射ソリトンの波高値は2つの媒質の質量比が大きいほど増大する。

このような相互作用は，不純物粒子の正規粒子に対する質量比，また界面をつくる2つの媒質の質量比に明らかに依存する。質量比は不純物においては局在振動数，あるいは共鳴振動数を，また界面においては，2つの媒質の分散関係の差を与える。ソリトンが不安定になるのは，不純物や界面との相互作用の際，ソリトンのもつ固有スペクトルの分布が影響を受けるということに外ならない。このようにソリトンのスペクトル分布によって本論文で得られた実験結果を定性的に説明できる。

文　献

1) N. D. Zabusky and M. D. Kruskal: Phys. Rev. Lett. **15** (1965) 240.
2) N. D. Zabusky: J. Phys. Soc. Japan, Suppl. **26** (1969).
3) V. Narayanamurtt and C. M. Varma: Phys. Rev. Lett. **25** (1970) 1105.
4) T. Taniuchi and C. C. Wei: J. Phys. Soc. Japan **24** (1968) 941.
5) C. S. Gardner, J. M. Greene, M. D. Kruskal and R. M. Miura: Phys. Rev. Lett. **19** (1967) 1095.
6) G. L. Lamb: Phys. Lett. **25 A** (1967) 181.
7) N. Ooyama and N. Saito: Progr. Theor. Phys. Suppl. **45** (1970) 201.
8) 野木，福井：電子通信学会講演予稿集 (1971) p. 51.
9) F. D. Tappert and C. M. Varma: Phys. Rev. Lett. **25** (1970) 11.
10) M. Wadachi: J. Phys. Soc. Japan **38** (1975) 673.