

古典系および量子系における非線形局在モードとソリトン

京都工芸繊維大学工学部 武野正三 (Shozo Takeno)

§1. はじめに

不連続空間（物理的には格子空間）に固有な非線形モードとして、非線形局在モードと云う概念が古典系・量子系にわたり広く成り立つことを示すのがこの小論の目的である。

よく知られているように、ソリトンの問題は物理に端を発しているが、逆散乱理論、戸田格子理論、応田の方法等数学あるいは数理解析の分野で著しい発展が行われ、佐藤理論および関連分野において大きな数学的理論が形成されるに至っている。

ここでは、ソリトン的な非線形モードを非線形系に固有な空間的・時間的局在状態、または局在モードとして理解しようとする物理的アプローチについて述べる。一般に、格子空間において定義された線形系は、エネルギー領域について有限の幅のスペクトルあるいは、エネルギー帯を持つ。系の非線形性は、このスペクトルの領域の外部に新たな固有状態を發

生させるにヒゲイキ、この状態は空間的、または、時空的に局在してゐる。多くのソリトンはこの局在モードに対応するが、非線形局在モードは、準可積分系に近し非可積分系にも適用できる、空間の次元数によらなり、もっと広き概念と普遍性を持つてゐる。しかし、それは、数学的厳密性・美しさも欠く場合が多い。

以下、与ふるべき問題を純粹にして、古典系量子系における非線形局在モードの概念について述べることにする。

§2. d -次元格子空間における定常非線形局在モード(古典系)

d -次元の直交座標軸上で定義される d -次元格子空間における格子点 $\vec{n} = (n_1, n_2, \dots, n_d)$ における場の変数を $u(\vec{n})$ とする。

n_j ($j=1, 2, \dots, d$) は整数であり、直交軸上の最近接格子点間の距離(格子定数)を a とする。 $u(\vec{n})$ は次の形の微差分方程式

$$\frac{d^2 u(\vec{n})}{dt^2} = \sum_{j=1}^d \left[J_2 [u(\vec{n} + \vec{e}_j) + u(\vec{n} - \vec{e}_j) - 2u(\vec{n})] + J_4 \{ [u(\vec{n} + \vec{e}_j) - u(\vec{n})]^3 - [u(\vec{n}) - u(\vec{n} - \vec{e}_j)]^3 \} \right] \quad (1)$$

($u(\vec{n})$: 実数の変数 $\vec{e}_j$: d 軸の正の方向の単位ベクトル)

を満すものとする。 $J_2 > 0$, $J_4 > 0$ は定数である。 $J_4 = 0$ のとき、即ち線形の場合、(1) は次の形の解を持つてゐる。

$$u(\vec{n}) \rightarrow u^{(0)}(\vec{n}) = \psi^{(0)}(\vec{n}) + \psi^{(0)*}(\vec{n}), \\ \psi^{(0)}(\vec{n}) \equiv \psi_{\vec{k}}^{(0)}(\vec{n}) = N^{-1/2} \exp[i(\vec{k} \cdot \vec{n} a - \omega t)] \quad (2)$$

$\vec{k} = (k_1, k_2, \dots, k_d), -\pi/q \leq k_j \leq \pi/q, N: \text{格子点の総数}$

$$\omega^2 \rightarrow \omega^{(0)2} \equiv \omega(k)^2 = 2J_2 \sum_{j=1}^d [1 - \cos(k_j q)] \quad (3)$$

$\omega(k)^2$ はエネルギー ω^2 について, $0 \leq \omega^2 \leq 4dJ_2$ の領域において, $N \rightarrow \infty$ の場合, 連続な固有状態, あるいはスペクトルを形成している。III 式の非線形項は, 適当な条件のもとで, この連続スペクトルの領域外に定常固有モードと云はれる新たな非線形系固有の固有状態を発生させる。この状態は, III 式の解を

$$u(\vec{m}) = 2 \sum_{\ell=1}^{\infty} \phi_{2\ell-1}(\vec{m}) \cos[(2\ell-1)\omega t]; \quad (\phi_{2\ell-1}(\vec{m}) = \pm 1 \text{ による}) \quad (4)$$

の形で採り, 固有関数 $\phi_{2\ell-1}(\vec{m})$ と固有値 ω^2 を求めることに対応する。(4) を II) に代入すると, $\phi_1(\vec{m}), \phi_3(\vec{m}), \dots$ によって無限次元の連立非線形差分方程式が得られる。線形格子に関しただけならば格子グリーン関数

$$G(\vec{m}, \omega) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{\exp(i\vec{k} \cdot \vec{m} q)}{\omega^2 - \omega(k)^2} \quad (5)$$

を導入すると, $\phi_1(\vec{m}), \phi_3(\vec{m})$ 等に関し以下の式が得られる:

$$\phi_1(\vec{m}) = J_4 \sum_{\vec{m}} \sum_{j=1}^d G(\vec{m} - \vec{m}, \omega) \left[3 \left\{ [\phi_1(\vec{m}) - \phi_1(\vec{m} + \vec{e}_j)]^3 + [\phi_1(\vec{m}) - \phi_1(\vec{m} - \vec{e}_j)]^3 \right\} + \dots \right],$$

$$\phi_3(\vec{m}) = J_4 \sum_{\vec{m}} \sum_{j=1}^d G(\vec{m} - \vec{m}, 3\omega) \left\{ [\phi_1(\vec{m}) - \phi_1(\vec{m} + \vec{e}_j)]^3 + [\phi_1(\vec{m}) - \phi_1(\vec{m} - \vec{e}_j)]^3 + \dots \right\}$$

etc. (6)

$\omega(k)^2$ の領域の外部, 即ち $\omega^2 > 4dJ_2$ において, $G(\vec{n}, \omega)$ は, n および, ω^2 に関して, 速激に (指数関数的に) 減少するという特性を持つている。このことを用いると, $\omega^2/4dJ_2 \gg 1$ の場合の (6) の漸近解として, $\vec{n}=0$ の点に中心を持つ定常局在モード, 即ち動かない (非線形振動の) 局在モードについて, 次の漸近解が得られる。

$$\omega^2 \cong 4dJ_2 \left[\frac{2d+1}{4d} + \frac{\lambda}{2} \left(\frac{2d+1}{2d} \right)^3 \right], \quad \lambda = 3 \frac{J_4}{J_2} \alpha^2$$

$$\phi_1(\vec{0}) = \alpha, \quad \phi_1(\pm \vec{e}_j) \cong -\frac{1}{2d} \alpha, \quad \text{for all } j,$$

$$\phi_3(\vec{n}) / \phi_1(\vec{n}) \cong \frac{1}{3} \frac{G(\vec{n}, \omega)}{G(\vec{n}, 3\omega)} \ll 1. \quad (7)$$

$d=1, 2$ の場合, 上の結果は, 数値実験により確かめられている。また, 上の結果は, 特列の形の格子について得られたが, 任意の形の格子についても, 同様の結果を得ることにできる。

ここに得られた定常局在モードは, 次のような特性を持つている:

- (i) 非線形定常局在モードは, 任意次元の, 任意の形の非線形格子について, 適当な条件下で存在する。
- (ii) 非線形局在モードは任意の格子点に現われる。
- (iii) Sine-Gordon 方程式等の breather mode は, この非線形局在モードの一種とみなすことができる。

(iv) 連続スベクトル $\omega(k)^2$ の外部の領域 $\omega^2 > \omega(k)^2$ に現われるこの非線形局在モードは、連続体の場合には存在しない。

(v) 場の理論におよぶ所謂 Derrick の定理は、不連続空間または格子空間において成り立たない。

(vi) 線形の場の (2), (3) で記述される状態が波動としての性質を持つもののに対し、非線形局在モードは、格子の性質を持つもの。 etc.

§3 d-次元空間におよぶ動的な非線形局在モードの厳密に解けるモデル (古典系)

前節で求めた非線形局在モードは、任意の格子点に存在し得ることを分ったが、適当な条件の下で、それは数多く存在するものと予想される。この場合、問題は物理的にも、数学的にも、定常モードの場合と比べると状況は豊かになるが、それと同時に、もっと難しくなる。この場合の厳密に解ける d-次元空間非線形格子のモデルとして、次の式がある。

$$i \frac{d\psi(\vec{n})}{dt} = \epsilon \psi(\vec{n}) - \sum_{j=1}^d J_j [1 \pm \lambda |\psi(\vec{n})|^2] [\psi(\vec{n} + \vec{e}_j) + \psi(\vec{n} - \vec{e}_j)] \quad (18)$$

($\psi(\vec{n})$: 複素数の変数, $\epsilon, J_j, \lambda > 0$: 定数)

$$\psi(\vec{n}) = \lambda^{-1/2} \phi(\vec{n}) \exp[i(\vec{k} \cdot \vec{n} a - \omega t)], \quad \phi(\vec{n}) \equiv \phi(\vec{n}, t) \quad (19)$$

とおく、 $\phi(\vec{n})$ が実数の変数の場合、次の式の対応が得られる:

$$-\frac{d\phi(\vec{n})/dt}{1 \pm \phi(\vec{n})^2} = \sum_{j=1}^d J_j \sin(k_j a) [\phi(\vec{n} + \vec{e}_j) - \phi(\vec{n} - \vec{e}_j)], \quad (10a)$$

$$\frac{(\epsilon - \omega) \phi(\vec{n})}{1 \pm \phi(\vec{n})^2} = \sum_{j=1}^d J_j \cos(k_j a) [\phi(\vec{n} + \vec{e}_j) + \phi(\vec{n} - \vec{e}_j)] \quad (10b)$$

(9)式と(4)式との本質的な相違は、前者に於ては(4)式の $\rho \geq 2$ の場合に対応する高調波成分が存在しないことである。(9)の局在モードは、非線形項 $\pm(\epsilon - \omega)\phi(\vec{n})/[1 \pm \phi(\vec{n})^2]$ により、線形エネルギースペクトル

$$\omega \equiv \omega_k(\delta) = \epsilon - 2 \sum_{j=1}^d J_j \cos(k_j a) \cos(\delta_j a) \quad (11)$$

の外側の領域、即ち、 $\omega < \epsilon - 2 \sum_j J_j \cos(k_j a)$ 、または、 $\omega > \epsilon + 2 \sum_j J_j \cos(k_j a)$ の領域に現われる非線形モードとみなすことができる。§2の場合との本質的な相違は、非線形局在モードの運動量に対応するベクトル $\vec{k}$ がパラメータとして含まれていないことである。(10a),(10b)は、ともに、次の形と同じ厳密解を与える:

$$\phi(\vec{n}) = (\pm 1)^{|\vec{n}|} \sinh(Ka) \begin{cases} \operatorname{sech}(\vec{K} \cdot \vec{n} a - \omega t) & \text{for } 1 + \phi(\vec{n})^2 \\ \operatorname{cosech}(\vec{K} \cdot \vec{n} a - \omega t) & \text{for } 1 - \phi(\vec{n})^2 \end{cases} \quad (12a)$$

$$\vec{K} = (\pm K, \pm K, \dots, \pm K), \quad \vec{n} = \sum_j n_j \vec{e}_j \quad (12b)$$

$$\Omega = \pm 2 \sum_{j=1}^d J_j \sinh(ka) \sinh(k_j a)$$

$$\omega = \epsilon \mp 2 \sum_{j=1}^d J_j \cosh(ka) \cosh(k_j a) \quad (13)$$

(12a), (13) 式において, upper sign, lower sign は, $\pm$ かつ $\mp$ かつ
 (8) 式において, 特殊形の场合, 即ち

$$\omega(k) = \omega_k(0) = \epsilon - 2 \sum_{j=1}^d J_j \cosh(k_j a) \quad (14)$$

の下, 即ち $\omega < \omega_k(0)$, 上, 即ち $\omega > \omega_k(\pm \pi/a)$ の領域に
 現れる動くことができる局在モードに対応する。(9), (12a) - (13) は,
 包絡格子リリトニ解の形を(7)より, 上記の観点に立つ概
 念は, もっと広い適用性を持つ。

尚, (8) で記述される系は, d-次元格子空間における厳密な one
 lattice soliton 解を与える点において興味深い。
 それは, 物理的にみて, 次の二つの難点を持つ。

(a): (8) で記述される系は Hamiltonian 系と見做すことが
 ない。即ち, 力学系(8)は物理系ではない。

(b) 格子リリトニの group velocity に対応する $\vec{K}$ は, (12b)
 の特別な形をとり。

(b) に比べて, (a) は問題の本質にかかわるものである。

(8) 式は物理的にみて現実性を欠いているが, 非線形物理系に

おける非線形局在モードの概念と性質について、重要な示唆を含んでいる。それは、以下のように要約することによってできる。

「非線形格子系に現われる動力学局在モードは、波数ベクトル k (あるいは運動量) が特徴づけられる、対応する線形格子系のエネルギースペクトル、あるいはエネルギー帯の外の領域に現われる時空的局在状態である」

上の結論は、(11) 式と (12), (13) 式と比較することにより得られる。

物理的に見た場合、問題の要点は、現実の物理系において、平衡点あるいは基底状態からの小さなずれにおける線形運動のエネルギースペクトルの外領域に、非線形性による動力学局在モードが存在し得る点、それは、多くの場合、有限の寿命を持つものであることである。

§ 4. 格子力学系における動的非線形局在モード

格子力学は現代物理学の中でも古い歴史を持ち、その研究の過程は今日に至るまで最もよく知られた道の一つとなっている。リリトニの物理学、あるいは数理科に於ても、Fermi-Pasta-Ulam の問題、戸田格子はこの分野における milestones 的役割を果たしたことは周知の通りであるが、特に後者は幾多のリリトニの数理科において、殊甚なものとして永く歴史に残るものと思われる。

ここでは、所謂格子力学の問題においても、周知の一次元格子におけるパルス型 (あるいは sech^2 -型, sech -型) リリトン入

外に、包絡リット二時性質を持つ動的局在モードが存在し、空間の次元数によらず、現実の格子系、分子系において、多くの場合、永く寿命を持つて存在し得る可能性を指摘しておきたい。

前節末尾の部分で得られた一般化(理論を含む)性質によれば、(1)式で記述される d -次元の非線形格子系中、(3)式で表わされるエネルギースペクトルの外領域に、ある条件の下で、動的局在モードを持つ得るのと同じであるといふことが予測できる。一般化にいつて、局在状態は、エネルギースペクトルの幅が小さくなる程発生し易くなる。(3)式において、この幅は $J_2 \cos(k_j a)$ ($j=1, 2, \dots, d$) で表わされ、 $k_j a \rightarrow \pm(\pi/2)$ での幅はゼロとなる。そこで(1)式の解を(4)の代りに

$$u(\vec{m}) = \psi(\vec{m}) + \psi(\vec{m})^*, \quad \psi(\vec{m}) = \phi(\vec{m}, t) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{m} a - \omega t)} \quad (15)$$

の形を求め、 $u(\vec{m})^3$ の項では $3|\psi(\vec{m})|^2 \psi(\vec{m})$ のみをとるといふ高調波を無視する近似を用いる。(15)を(1)に代入し、

$$k_j a = \pm \pi/a \quad j=1, 2, \dots, d \quad (16)$$

の項のみをとると、 $\phi(\vec{m}, t) \equiv \phi(\vec{m})$ として

$$\begin{aligned} \frac{d\phi(\vec{m})}{dt} = & -\frac{J_2}{2\omega} \sum_j [\phi(\vec{m} + \vec{e}_j) + \phi(\vec{m} - \vec{e}_j)] \left[1 + 3 \frac{J_4}{J_2} \left\{ \phi(\vec{m})^2 + \phi(\vec{m} + \vec{e}_j)^2 \right. \right. \\ & \left. \left. + \phi(\vec{m} + \vec{e}_j) \phi(\vec{m} - \vec{e}_j) + \phi(\vec{m} - \vec{e}_j)^2 \right\} \right] = 0 \end{aligned} \quad (17)$$

$$\sum_i \left[2J_2 \phi(\vec{m}) + 3J_4 \left\{ 2\phi(\vec{m})^3 + [\phi(\vec{m} + \vec{e}_j)^2 + \phi(\vec{m} - \vec{e}_j)^2] \phi(\vec{m}) \right\} \right] = \omega^2 \phi(\vec{m}) - \frac{d^2 \phi(\vec{m})}{dt^2} \quad (18)$$

の形の対の式が得られる。前面の都合上、詳細は一時省略するが、 $\phi(\vec{m})$ が $\vec{m}$ についてゆるやかに変る場合、換言すれば、群速度が小さい場合、(17)、(18) は $\text{sech}(\vec{k} \cdot \vec{m} - \omega t)$ の型の動的時間局在モードを与える、(16) で与えられる包絡型格子ソリトンは非分散包絡格子ソリトンと呼んでもよいかも知れない。このように、特別の包絡格子ソリトンは、高次元空間に於いても存在し得るものと予測されるが、その結果は、数値実験（現実では大変面倒）の結果を待つ外はないかも知れない。

尚、(16) 以外の一般の場合についても、ある条件の下では動的時間局在モードが、特に、 $d=1$ の場合、存在し得ることを示すことができるが、詳細は省略する。

5. 量子系における非線形局在モード

量子力学系においては、古典力学系で存在し得る定常、あるいは動的非線形局在モードは、どのような概念の下で存在し得るものであろうか？ 量子の世界に於ては、必ず量子力学的ゆらぎが存在し、粒子的性質を持つソリトン、あるいは局在モードは、このようなゆらぎが小さい量子状態のものと意味のあるものとして存在するものと思われ。このような量子状態は何であらう

か?。それに対する回答の candidate として, coherent state と云うものが考えられる。以下, 典型的な量子格子モデルとして次のハミルトニアルで記述されるスピノ系を考える。

$$H = - \sum_{nm} J(n, m) \left[(\eta/2) (S_n^+ S_m^- + S_n^- S_m^+) + S_n^z S_m^z \right], \quad 0 < \eta < 1, \quad (19)$$

S_n^α ($\alpha = x, y, z$; $S_n^\pm = S_n^x \pm i S_n^y$) は格子点 n に局在したスピノ演算子 $\vec{S}_n$ の α 成分である。各 $\vec{S}$ の固有状態は $|S, M\rangle$ ($M = -S, -S+1, \dots, S-1, S$) で与えられる。 S は $\vec{S}$ の大きさである。真空状態 $|0\rangle$ は $|S, -S\rangle$ で与えられる。 $SU(2)$ (Lie 演算子) の Coherent state $|\mu_n\rangle$ は各 $\vec{S}_n$ に対し

$$|\mu_n\rangle = (1 + |\mu_n|^2)^{-S} \exp(\mu_n S_n^+) |0\rangle_n \quad (20)$$

で定義される。 $|0\rangle_n$ は $\vec{S}_n$ に対するスピノの真空状態である。 μ_n は複素数である。 $\vec{S}_n$ の set $\{\vec{S}_n\}$ によるこのスピノ系全体の coherent state $|\Lambda\rangle$ は

$$|\Lambda\rangle = \prod_n |\mu_n\rangle \quad (21)$$

で与えられる。量子力学系の時間発展演算子 $\exp(-iHt/\hbar)$ の $|\Lambda\rangle$ に関する行列要素の閉関数表示は,

$$\langle \Lambda_f | e^{-iH(t_f - t_i)/\hbar} | \Lambda_i \rangle = \int \mathcal{D}(\Lambda) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} L(\Lambda, \Lambda') dt \right] \quad (22)$$

$$L = \sum_n \frac{S}{1+|\mu_n|^2} \left[\mu_n^* i\hbar \frac{d\mu_n}{dt} - \mu_n i\hbar \frac{d\mu_n^*}{dt} - \langle 1|H|1 \rangle \right] \quad (23)$$

$$\langle 1|H|1 \rangle = -S^2 \sum_{n,m} J(n,m) \frac{2\gamma(\mu_n^* \mu_m + \mu_n \mu_m^*) + (1-|\mu_n|^2)(1-|\mu_m|^2)}{(1+|\mu_n|^2)(1+|\mu_m|^2)} \quad (24)$$

の形に書ける。上式において, subscript. i, t, H , μ_n, μ_n^* , initial state, final state に対応し, (20)式の記号 $\rho(1)$ は状態 $|1_i\rangle$ の状態 $|1_f\rangle$ に至るあらゆる経路について積分する意味を意味する。

上記の一般論は, (22)の指数関数の中が停留値をとる点のみに着目した場合に, 現実の計算が比較的容易に行われ,

$$\delta \int L(1, 1^*) dt = 0 \quad (25)$$

$$\text{即ち,} \quad \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\mu}_n} \right) - \frac{\partial L}{\partial \mu_n} = 0 \quad \text{and c.c} \quad (26)$$

より次の形の準古典的・非線形微分方程式が得られる。

$$i\hbar \frac{d\mu_n}{dt} = \frac{2S}{(1+|\mu_n|^2)^2} \frac{\partial \langle 1|H|1 \rangle}{\partial \mu_n^*} \quad \text{and c.c} \quad (27)$$

すなわち

$$i\hbar \frac{d\mu_n}{dt} = S \sum_m J(n,m) \frac{\mu_n - \gamma \mu_m + \gamma \mu_m^2 \mu_n^* - \mu_n |\mu_m|^2}{1+|\mu_m|^2} \quad (28)$$

各スピンの最近接格子点にあるスピンのみ相互作用するとし、§2で考察した1次元格子の格子点にスピンスピンを配列してとりとすれば、(28)は(18)式と類似したものの、然しなほもっと複雑な非線形性を持つ、非線形微差分方程式となる。(28)式に対し(7, 3) < 1の場合通常非線形局在モードの存在を示すことが出来る。また、少くとも $d=1$ の場合、動的局在モード、また、空間2次元系の場合、トポロジカル非線形モードと(7, 3) 渦糸の局在モードが存在する。このような非線形モードは、力学的には、スピンの大振幅運動、量子力学的には、多くの *quanta* が励起されつゝここに相当する局所的スピニ液体の存在を示すものである。非線形性の強いこのような局所的励起状態は、量子力学的には、通常の“数表示”よりは、(20)で定義されるコヒーレント状態によく記述される。詳細は一切省略する。

古典力学、量子力学を問わず系の非線形性が本質的役割を果たす状態は、平衡状態、基底状態、あるいは真空状態より大きくはずれた状態である。少数粒子および多粒子系成る系のこのような量子状態は必ずしもよく理解されつゝいるものには云々難しい。ここで述べた、コヒーレント状態を base とする Feynman の経路積分法は、この此の問題を取扱う有力な方法の一つであるが、そこで量子力学は古典的性格を持つ理か、量子力学的リットン、カス等の概念が用いられるであろう。