

非線形格子における局在モード

—非線形性と空間不連続性および空間の次元について—

群馬大工 武野正三 (Shozo Takeno)

§ 1. はじめに

ソリトンの理論は、周知のように、流体力学、格子力学、プラズマ物理学等物理学の問題に端を発しているが、近年それはその数学的側面において著しい発展を遂げ、佐藤理論等はその頂点の一つを形成している。¹⁾ ソリトンを非線形微分方程式、あるいは差分方程式として記述し、その解を求めようとするとき、いくつかの特徴的なことが通常行われる。それらよりいくつか列挙すると①問題は大抵1次元に対して、あるいは還元して考察される。②場の変化はゆっくとしたものに制限される。③②とも関連するが、多くの場合空間連続系が取扱われる。④非線形の問題を線形の問題に転換して理論の展開が行われる(逆散乱法)等々である。これらの手法は、通常非線形可積分系に対する方法となっている。

ソリトンの問題は、数理物理学および数学の発展に大きな寄

をなしたが、それと並行して重要なことは、その基礎的概念が、物理学においては、素粒子論、場の理論、相対性理論より、流体、固体物理、プラズマ、非線形光学、生物物理に至る分野に横断的に適用され、また色んな工学上の問題にも現われてくるという学際的な面を持つてくることである。これらの物理学、工学の問題においては、采固有のモード（ここでは非線形モード）が存在し得ることに興味あり、重要なことであって、采その自身数学的な意味での可積分性を持つた否々ということは余り問題とはされないことが多い。勿論、可積分性不存在すれば（それはするに可証明でなければ）それに越したことはないが、そのことに拘泥しては、これらの分野においては問題の理解の発展につながり難い場合が多い。

本論では上記のことと関連して、最近筆者が行っている主要な研究の一つとして、空間不連続系^{3,4)}または格子系における非線形固有モードについて述べることにする。取扱う系は一般に非可積分系であり、この非線形空間不連続系に、固有なモードとして、固有モードという非線形モードが普遍的に存在し得ることを述べ、1次元系の場合、それが通常のリリトニの性質を持つてくることを示すことにする。采の非可積分性と筆者の数学的力不足により、内容はいくつかの近似解析計算、数値計算の援用を含んでくることを始めにお断りしておく。ここでは、

数半時的厳密性より概念的普遍性を問題としらる。

§2. 任意次元離散型非線形シュレディンガー方程式の局在モード解とその連続体近似版

d 次元立方格子における格子点 $\vec{n} = (n_1, n_2, \dots, n_d)$ (n_i : 整数) におけるスカラー場 $u \equiv u(\vec{n}, t) \equiv u(\vec{n})$ の次の離散型非線形シュレディンガー方程式

$$i \frac{d u(\vec{n})}{dt} = \epsilon u(\vec{n}) - J \sum_{j=1}^d [u(\vec{n} + \vec{e}_j) + u(\vec{n} - \vec{e}_j)] - J' |u(\vec{n})|^2 u(\vec{n}) \quad (1)$$

を考える。 $\epsilon > 0$, $J > 0$, $J' > 0$ は定数である。 (1) 式の与える定常モード解は $u(\vec{n}) = \phi(\vec{n}) e^{-i\omega t}$ とおき, $\phi(\vec{n})$ は t によらないとして, (1) を次の形の非線形固有値問題に変え, その解を求めることにしよう。

$$\epsilon \phi(\vec{n}) - J \sum_{j=1}^d [\phi(\vec{n} + \vec{e}_j) + \phi(\vec{n} - \vec{e}_j)] - J' \phi(\vec{n})^3 = \omega \phi(\vec{n}) \quad (2)$$

一方, (1), (2) に対し, 連続体近似も適用すると

$$i \frac{\partial u}{\partial t} = (\epsilon - 2J) u - J a^2 \Delta u - J' |u|^2 u, \quad (3)$$

$$(\epsilon - 2J) \phi - J a^2 \Delta \phi - J' \phi^3 = \omega \phi \quad (4)$$

となる。 a は格子定数である。 $d=1$ のとき, (3), (4) は通常

の非線形シュレディンガー方程式となり、その包絡リリトに解はリリトに理論に於て既知のこゝである。一方向の場合、(3)、(4)のリリトには安定な形は存在しない(collapse)に比べて、⁵⁻⁷⁾うズ又物理学、非線形光学等に於てよく知られており、こゝにある。⁵⁻⁷⁾こゝから、元の式(2)に於ては、包絡リリトに対して安定なモードという安定な解が存在し得る。

固体物理学の観点からみると、(2)式は次式で表わされる線形格子

$$\epsilon \phi(\vec{r}) - J \sum_{i=1}^d [\phi(\vec{r} + \vec{e}_i) + \phi(\vec{r} - \vec{e}_i)] = \omega \phi(\vec{r}) \quad (5)$$

の線形のエネルギー帯

$$\omega_0(\vec{\delta}) = \epsilon - 2J \sum_{i=1}^d \cos(\delta_i a), \quad \vec{\delta} = (\delta_1, \delta_2, \dots, \delta_d) \quad (6)$$

の下止端 $\omega_m = \epsilon - 2dJ$ より低いエネルギー領域 ($\omega < \omega_m$)、即ち禁止帯に、系固有の非線形性 $J' \phi(\vec{r})^3$ によって誘起される安定モードが発生し得るということが分かる。このことは、線形格子の格子グリーン関数

$$g(\vec{r}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{\delta}} \frac{e^{i\vec{\delta} \cdot \vec{r}a}}{\omega_0(\vec{\delta}) - \omega} = \frac{1}{2J} \int_0^\infty \exp\left(-\frac{\epsilon - \omega}{2J} \tau\right) \prod_{i=1}^d I_{n_i}(\tau) d\tau \quad (7)$$

$(\epsilon - \omega)/2J > d$, I : Bessel 関数

を代入して(4)を

$$\phi(\vec{m}) = J' \sum_{\vec{m}} g(\vec{m} - \vec{m}) \phi(\vec{m})^3 \quad (8)$$

の形に reduce するべくより示すことが出来る。即ち、いま、この
局在モードが、その中心を格子点 $\vec{m}=0$ に持つとし、その振幅を A
とすると、 $\phi(\vec{m}) = A z(\vec{m})$, $z(0) = 1$ と (7)

$$1 = J' A^2 \sum_{\vec{m}} g(\vec{m}) z(\vec{m})^3, \quad z(\vec{m}) = \frac{\sum_{\vec{m}} g(\vec{m} - \vec{m}) z(\vec{m})^3}{\sum_{\vec{m}} g(\vec{m}) z(\vec{m})^3} \quad (9)$$

が得られる。(9)の第二式の解を第一式の $z(\vec{m})$ に代入すること
により、 $\omega < \omega_c = -2dJ$ の領域に現われる局在モードの振動数
固有値 ω が得られ、形状関数 $z(\vec{m})$ は原点 $\vec{m}=0$ のまわりで急激
に (指数関数的に) 減小することを示すことが出来る。⁴⁾

尚、上の結果を (1) の一般形

$$i \frac{d u(\vec{m})}{dt} = \epsilon u(\vec{m}) - J \sum_{\vec{c}=1}^d [u(\vec{m} + \vec{e}_j) + u(\vec{m} - \vec{e}_j)] - F(|u(\vec{m})|) u(\vec{m}) \quad (10)$$

($F(x)$ は x の任意関数) に拡張することは容易である。

この節で得られた結果は、① 空間 2 次元以上では、不連続系に
おける非線形モードとそれを含む連続体近似によって得られる
連続系の非線形モードには本質的な相違があること、② (10)
の形の非線形格子方程式には、上に得られた定常局在モードは
普遍的に存在 (解る) あり、③ このより一般的な結果が
系の非可積分性にも関係する得られたのは、非線形項の

影響を考慮するに当り、我々は線形系のエネルギー帯 $\omega(\vec{q}) = \epsilon - 2J \sum_{i=1}^d \cos(q_i - q)$ の外領域、即ち禁止帯のみに着目したからである。

このような局在モードは、リリトニ理論の場合と同様に、分散性と非線形性との balance により生ずるが、ここは分散性を特徴づけるのは格好グリーン関数で、それは以下のような空間の次元数による相違を持つ。713:

(a) 解析性

$$g(\vec{m}) = \frac{e^{-m|z|}}{2J \sinh(|z|)}, \quad z = \cosh^{-1} \left(\frac{\epsilon - \omega}{2J} \right) \quad \text{for } d=1 \quad (11)$$

$g(\vec{m})$ for $d \geq 2$: $d=2$ の特別な場合を除き解析的に表わせない。
(12)

(b) 発散性

$$\lim_{\omega \rightarrow \omega_m} g(\vec{m}) = \begin{cases} \infty & d=1 \\ \text{logarithmic divergence,} & d=2 \\ \text{finite} & d=3 \end{cases} \quad (13)$$

(11) は、 $d=1$ のとき、局在モードが存在（得る）は、その固有振動数は、系の何れの非線形性に対しても

$$\omega = \omega_0(k), \quad K = K(A) \quad (14)$$

の如く、線形の振動数帯のエネルギー $\omega_0(\vec{l})$ も $\omega_0(\vec{l} + i\vec{k})$ の形であるの帯止帯領域に共振したものに変わってしまうことを示し、これは普遍的結果である。(13)は、 $d=1, 2$ の場合、僅かな非線形性によって二モードが交差し得るが、 $d \geq 3$ の場合、非線形性の強さにはしきり値(threshold)が存在することを示している。

5.3. 量子系における非線形二モード

(1)式と類似の式をもつて現実の場合に対応するモデルに片側二モードの例として、量子系を取上げる。系のハミルトニアンは

$$H = \epsilon \sum_{\vec{n}} S^z(\vec{n}) - (J/2) \sum_{\vec{n}, \vec{m}} J(\vec{n}, \vec{m}) [S^+(\vec{n}) S^-(\vec{m}) + S^-(\vec{n}) S^+(\vec{m})] \quad (15)$$

で与えられる場合と考察する。ここには、 $S(\vec{n}) \equiv (S^x(\vec{n}), S^y(\vec{n}), S^z(\vec{n}))$ は格子点 $\vec{n}$ に associate したスピニ演算子で、 $S^\pm(\vec{n}) = S^x(\vec{n}) \pm iS^y(\vec{n})$ となる。また、 $J(\vec{n}, \vec{m})$ は定数である。スピニ演算子 $S(\vec{n})$ の大きさは S であり、 $S=1/2$ の場合、(15)式は励起エネルギー ϵ 、交換相互作用 $J(\vec{n}, \vec{m})$ の励起子のハミルトニアンを表わす。一個のスピニ $S(\vec{n})$ の固有状態は $|S, M\rangle$ ($M = -S, -S+1, \dots, S-1, S$) で記述される。但し M は $S^z(\vec{n})$ の固有値である。このスピニ系の真空状態 $|0\rangle$ は

$$|0\rangle_{\vec{n}} = |S, -S\rangle \quad (16)$$

で定義される。すなわち、この系のエネルギー固有状態 $|\mu(\vec{n})\rangle$ は

$$|\mu(\vec{n})\rangle = \frac{1}{(1+|\mu(\vec{n})|^2)^S} \exp[\mu(\vec{n}) \cdot S^+(\vec{n})] |0\rangle_{\vec{n}} \quad (17)$$

で表わされる⁸⁾。 $\mu(\vec{n})$ は格子点 $\vec{n}$ に associate (たいてい素数) である。次の形の $\mu(\vec{n})$ の完全性

$$\frac{2S+1}{\pi} \int \frac{d\text{Re}[\mu(\vec{n})] d\text{Im}[\mu(\vec{n})]}{(1+|\mu(\vec{n})|^2)^2} |\mu(\vec{n})\rangle \langle \mu(\vec{n})| = 1, \quad (18)$$

$S^{\pm}(\vec{n})$ のエネルギー固有表示

$$\begin{aligned} \langle \mu(\vec{n}) | S^+(\vec{n}) | \mu(\vec{n}) \rangle &= 2S \frac{\mu(\vec{n})^{\dagger}}{1+|\mu(\vec{n})|^2}, \quad \langle \mu(\vec{n}) | S^-(\vec{n}) | \mu(\vec{n}) \rangle = 2S \frac{\mu(\vec{n})}{1+|\mu(\vec{n})|^2} \\ \langle \mu(\vec{n}) | S^z(\vec{n}) | \mu(\vec{n}) \rangle &= -S \frac{1-|\mu(\vec{n})|^2}{1+|\mu(\vec{n})|^2} \end{aligned} \quad (19)$$

を用いると time-evolution 演算子のエネルギー固有表示

$$\langle \prod_{\vec{n}} \mu(\vec{n}) | \exp[-i \frac{H}{\hbar} (t_f - t_i)] | \prod_{\vec{n}} \mu(\vec{n}) \rangle = \int \mathcal{D}(\mu) \exp \left(\frac{S}{\hbar} \right) \quad (20)$$

$$S = \int_{t_i}^{t_f} L dt \quad (t_i: \text{initial time}; t_f: \text{final time}) \quad (21)$$

の汎関数積分表示を得られる。ここに、 L はこの系のラグランジアン

$$L = \sum_{\vec{n}} \frac{S}{1+|\mu(\vec{n})|^2} \left[\mu(\vec{n})^{\dagger} i\hbar \frac{d\mu(\vec{n})}{dt} - \mu(\vec{n}) i\hbar \frac{d\mu(\vec{n})^{\dagger}}{dt} \right] - \langle \prod_{\vec{n}} \mu(\vec{n}) | H | \prod_{\vec{n}} \mu(\vec{n}) \rangle \quad (22)$$

の形を持つ。(22)の右辺第二項は、系のハミルトニアンの1ク-
レニ状態を表すものがある。

以上は形式に厳密な式である。(20)の右辺に於いて停留値
条件 $\delta S = 0$ を用いると(ポントリヤagin)次のLagrange方程式

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\mu}(\vec{m})} \right) - \frac{\partial L}{\partial \mu(\vec{m})} = 0 \quad (23)$$

より

$$i\hbar \frac{d\mu(\vec{m})}{dt} = \frac{(1+|\mu(\vec{m})|^2)^2}{2S} \frac{\partial \langle \prod_{\vec{m}} \mu(\vec{m}) | H | \prod_{\vec{m}} \mu(\vec{m}) \rangle}{\partial \mu(\vec{m})} \quad (24)$$

が得られる。Hamiltonianは(15)より与えられるとき、(24)式
の具体的な形は

$$i\hbar \frac{d\mu(\vec{m})}{dt} = \epsilon \mu(\vec{m}) - S \sum_{\vec{m}'} J(\vec{n}, \vec{m}') \frac{\mu(\vec{m}')}{1+|\mu(\vec{m}')|^2} \quad (25)$$

となる。(25)は(1)より高次の非線形項を含むが、それは通常
の自由フェルミオン系と等価な場合と同様である。

この場合、 $\mu(\vec{m}) = \phi(\vec{m}) e^{-i\omega t}$ とおくと、(2)と類似の式

$$\epsilon \phi(\vec{m}) - S \sum_{\vec{m}'} J(\vec{n}, \vec{m}') \phi(\vec{m}') - S \sum_{\vec{m}'} \frac{J(\vec{n}, \vec{m}') \phi(\vec{m}')^3}{1+\phi(\vec{m}')^2} = \omega \phi(\vec{n}) \quad (26)$$

が得られる。格点グリーン関数 ($E = i\hbar\omega$, $\vec{\Delta} = \vec{R}(\vec{m}) - \vec{R}(\vec{n})$)

$$g(\vec{n}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{\delta}} \frac{e^{i\vec{\delta} \cdot \vec{R}(\vec{n})}}{E_0(\vec{\delta}) - E} \equiv \frac{1}{N} \sum_{\vec{\delta}} \frac{e^{i\vec{\delta} \cdot \vec{R}(\vec{n})}}{\epsilon - S \sum_{\vec{\Delta}} e^{i\vec{\delta} \cdot \vec{\Delta}} J(\vec{\Delta})} \quad (27)$$

を用いる。(26) 以下の形を取る。

$$\phi(\vec{m}) = S \sum_{\vec{m}'} J(\vec{m}, \vec{m}') g(\vec{m} - \vec{m}') \frac{\phi(\vec{m}')^3}{1 + \phi(\vec{m}')^3} \quad (28)$$

(1) 式の場合と同様, エネルギーバンド $E_0(\vec{k}) = \epsilon - S \sum_{\vec{k}'} J(\vec{k}) e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{a}}$ の下端より分離して生ずるようなモードの存在を示すことが出来る。尚, 量子系におけるこのようなモードは準正則近似 $\hbar \rightarrow 0$ の下で得られるものであることも附記した。

§ 4. おわりに

以上, 空間不連続系における固有な非線形モードについて, 存在モードが存在することも簡単に述べて来た。ここでは, 空間不連続系と連続系の場合の非線形モードの本質的相違に先ずふれ, その相違は空間の次元数に於いてどのように異なる様相を持つかと云う点も述べた。また, 量子系においてはこのような非線形固有モードはどのようになるかと云う点にもふれて来た。もっと議論したり点は数多くあるが, ここではおこにせにやる。

本論は空間不連続・非線形系の物理学, 数理物理学を取扱ったものであるが, 此處の数理物理学, 物理学は, 多くの場合, その対極として, 連続・線形系の場合を取扱って来たものである。

この研究会に参加する機会を与えて頂いた同志社大学工学部重典系梶原健司氏に謝意を表（たく存じます）。

文 献

- 1) 広田良吾: リリトニの数理 (岩波, 1992)
- 2) Reference for physicists; Y. Ohta, J. Satsuma, D. Takahashi and T. Tokihiro: Prog. Theor. Phys. Suppl. No. 94 (1988) 210.
- 3) A. J. Sievers and S. Takeno: Phys. Rev. Lett. 61 (1988) 970.
- 4) S. Takeno, K. Kisoda and A. J. Sievers: Prog. Theor. Phys. Suppl. No. 94 (1988) 242.
- 5) G. H. Derrick: J. Math. Phys. 5 (1964) 1252.
- 6) V. E. Zakharov: in Solitons, S. E. Trullinger, V. E. Zakharov and V. I. Pokrovsky, eds. (North Holland, 1986) p 503.
- 7) V. E. Zakharov, Collapse and Self-Focusing of Langmuir Waves, M. Rosenbluth and R. Z. Sagdeev, Handbook of Plasma Physics (Elsevier, Amsterdam, 1984) p 81.
- 8) S. Takeno and K. Kawasaki: J. Phys. Soc. Jpn. 61 (1992) 4547.