数理解析研究所講究録
第822巻 1993年 43-55

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芸学部　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，広田の方法等数学あるいは数理物理学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壮大な数学的理論が形成されるに至っている。

ここでは，ソリトン的非線形モードを非線形系に固有な空間的あるいは時空的局在状態，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，エネルギー帯を持っている。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发

生させることができ、この状態は空間的または時空的に局在している。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、準可積分系に近い非可積分系にも適用できる、空間の次元数によらない、もっと広い概念と普遍性を持っている。しかし、それは、数学的厳密性・美しさを欠く場合が多い。

以下、できるだけ問題を純粋にして、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ているd-次元格子空間における格子点 $\vec{n}=(n_1, n_2, \cdots, n_d)$ における場の変数を $u(\vec{n})$ とする。n_j $(j=1,2,\cdots,d)$ 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

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

（$u(\vec{n})$：実数の変数　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) は次の形の解を持っている。

$$u(\vec{n}) \longrightarrow u^{(0)}(\vec{n}) = \psi^{(0)}(\vec{n}) + \psi^{(0)}(\vec{n})^*,$$
$$\psi^{(0)}(\vec{n}) \equiv \psi^{(0)}_{\vec{k}}(\vec{n}) = N^{-1/2}\exp\left[i(\vec{k}\cdot\vec{n}a-\omega t)\right] \qquad (2)$$

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

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

$\omega(k)^2$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。(1)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局在モードと云われる新たなる非線形系固有の局在状態を発生させる。この状態は，(1)式の解を

$$u(\vec{n}) = 2\sum_{l=1}^{\infty} \phi_{2l-1}(\vec{n}) \cos[(2l-1)\omega t]; \quad (\phi_{2l-1}(\vec{n}): t\text{によらない}) \qquad (4)$$

の形で探し，固有関数$\phi_{2l-1}(\vec{n})$と固有値ω^2を求めることに対応する。(4)を(1)に代入すると，$\phi_1(\vec{n})$, $\phi_3(\vec{n})$, ... についての無限次元の連立非線形差分方程式が得られる。線形格子に関して定義される格子グリーン関数

$$G(\vec{n}, \omega) = \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}} \frac{\exp(i\vec{k}\cdot\vec{n}a)}{\omega^2 - \omega(k)^2} \qquad (5)$$

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

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

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

etc. (6)

$\omega(k)^2$ の領域の外部、即ち $\omega^2 \geq 4dJ_2$ において、$G(\vec{n},\omega)$ は、n、および、ω^2に関して、急激に(指数関数的に)減少するという特性を持っている。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。

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

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

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

$d=1,2$ の場合、上の結果は、数値実験により確められている。また、上の結果は、特別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ができる。

ここで得られた定常局在モードは、次のような特性を持っている：

(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、適当な条件の下で存在する。

(ii) 非線形局在モードは任意の格子点に現われ得る。

(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) 連続スペクトル $\omega(k)^2$ 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) 場の理論における所謂 Derrick の定理は、不連続空間または格子空間においては成り立たない。

(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っているのに対して、非線形局在モードは、粒子的性質を持っている。 etc.

§3 d-次元空間における動的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が分ったが、適当な条件の下で、それは動くことができ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。

$$i\frac{d\psi(\vec{n})}{dt} = \epsilon\psi(\vec{n}) - \sum_{j=1}^{d} J_j\left[1 \pm \lambda|\psi(\vec{n})|^2\right]\left[\psi(\vec{n}+\vec{e}_j) + \psi(\vec{n}-\vec{e}_j)\right] \qquad (8)$$

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

$$\psi(\vec{n}) = \lambda^{-1/2}\phi(\vec{n})\exp[i(\vec{k}\cdot\vec{n}a - \omega t)], \quad \phi(\vec{n}) \equiv \phi(\vec{n}, t) \qquad (9)$$

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

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

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

(9)式と(4)式との本質的な相違は，前者に於ては(4)式の$\ell\geq 2$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 $\pm(\epsilon-\omega)\phi(\vec{n})^3/[1+\phi(\vec{n})]^3$ により，線形のエネルギースペクトル

$$\omega\equiv\omega_k(q)=\epsilon-2\sum_{j=1}^{d}J_j\cos(k_j a)\cos(q_j a) \qquad (11)$$

の外部の領域，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$\vec{k}$がパラメーターとして含まれていることである。(10a)，(10b)は，ともに，次の形の同じ厳密解を与える：

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

$$\vec{K}=(\pm K,\pm K,\ldots,\pm K),\qquad \bar{n}=\sum_j n_j \qquad (12b)$$

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

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

(12a), (13) 式において, upper sign, lower sign は, それぞれ, (8) 式において, 線形の場合, 即ち

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

の 下, 即ち $\omega < \omega_k(\vec{0})$, 上, 即ち $\omega > \omega_k(\pm \vec{\pi}/a)$ の領域に現われる動くことのできる局在モードに対応する。(9), (12a)−(13) は, 包括格子ソリトン解の形をしているが, 上記の観点に立つ概念は, もっと広い適用性を持っている。

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 解を与えるという点において興味深いが, それは, 物理的にみて, 次の二つの難点を持っている：

(a)：(8) で記述される系は Hamiltonian から導くことはできない; 即ち, 力学系 (8) は物理系ではない.

(b) 格子ソリトンの group velocity に対応する $\vec{K}$ は, (12b) の特別な形をとる.

(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, 非線形物理学に

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ができる。

「非線形格子系に現われる動的局在モードは,波数ベクトル $\vec{k}$ (あるいは運動量)で特徴づけられる,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。物理的にみた場合,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たる線形運動のエネルギースペクトルの外領域に,非線形性による動的局在モードが存在し得るが,それは,多くの場合,有限の寿命を持っているであろうと云うことである。

§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は古い歴史を持ち,その研究の過程は今日に至るまで最もよく踏みならされた道の一つとなっている。ソリトンの物理学,あるいは数理科学に於ても,Fermi-Pasta-Ulamの問題,戸田格子はこの分野における milstones 的役割を果したことは周知の通りであるが,特に後者は幾多のソリトンの数理科学において,疎去的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)ソリトン以、

外に、包絡ソリトン的性質を持つ動的局在モードが、必ずしも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、永い寿命を持って広く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的(推論を含む)性質によれば、(1)式で記述される d-次元の非線形格子系は、(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ち得るのではないかと云うことが予測できる。一般的にいって、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、$k_j a \longrightarrow \pm(\pi/2)$ でこの幅はゼロとなる。そこで(1)式の解を(4)の代りに

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

の形で求め、$u(n)^3$ の項では $3|\psi(\vec{n})|^2\psi(\vec{n})$ のみをとると云う高調波を無視する近似を用いる。(15)を(1)に代入し、

$$k_j a = \pm\, \pi/a \qquad j=1,2,\dots,d \tag{16}$$

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

$$\frac{d\phi(\vec{n})}{dt} = -\frac{J_2}{2\omega}\sum_j \left[\phi(\vec{n}+\vec{e}_j) + \phi(\vec{n}-\vec{e}_j)\right]\Big[1 + 3\frac{J_4}{J_2}\big\{\phi(\vec{n})^2 + \phi(\vec{n}+\vec{e}_j)^2$$
$$+ \phi(\vec{n}+\vec{e}_j)\phi(\vec{n}-\vec{e}_j) + \phi(\vec{n}-\vec{e}_j)^2\big\}\Big] = 0 \tag{17}$$

$$\sum_j \left[2J_2\,\phi(\vec{n}) + 3J_4 \left\{ 2\phi(\vec{n})^3 + \left[\phi(\vec{n}+\vec{e}_j)^2 + \phi(\vec{n}-\vec{e}_j)^2 \right] \phi(\vec{n}) \right\} \right] = \omega^2 \phi(\vec{n}) - \frac{d^2\phi(\vec{n})}{dt^2} \tag{18}$$

の形の式が得られる。紙面の都合上，詳細は一切省略するが，$\phi(\vec{n})$が$\vec{n}$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 $\mathrm{sech}(\vec{k}\cdot\vec{n}a-\omega t)$ の型の動的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よいかも知れない。このような特別の包絡格子ソリトンは，高次元空間に於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分からない。

尚，(16)以外の一般的場合についても，ある条件の下では動的局在モードが，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とで意味のあるものとして存在するものと思われる。このような量子状態は何であろう

がこ。それに対する回答の candidate として，coherent state とい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ン系を考える。

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

S_n^α $(\alpha=x,y,z;\ S_n^\pm = S_n^x \pm i S_n^y)$ は格子点 n に局在したスピン演算子 $\vec{S}_n$ の α 成分である。各 $\vec{S}$ の固有状態は $|S,M\rangle$ $(M=-S,-S+1,\cdots,S-1,S)$ 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 $\vec{S}_n$ に対して

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

で定義される。$|0\rangle_n$ は $\vec{S}_n$ に対応するスピンの真空状態である。μ_n は複素数である。$\vec{S}_n$ の set $\{\vec{S}_n\}$ よりなるこのスピン系全体の coherent state $|\Lambda\rangle$ は

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

で与えられ，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汎関数表示は，

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

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

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

の形に書ける。上式において, subscript. i, f は, それぞれ, initial state, final state に対応し, (20)式の記号 $D(\Lambda)$ は状態 $|\Lambda_i\rangle$ より状態 $|\Lambda_f\rangle$ に至るあらゆる経路について積分することを意味する。

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,

$$\delta\int L(\Lambda,\Lambda^*)\,dt=0 \tag{25}$$

即ち,

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

より次の形の半古典的非線形微分方程式が得られる。

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

または

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

各スピンが最近接格子点にあるスピンとのみ相互作用するとし、§2で考察したd−次元格子の格子点にスピンが配列しているとすれば、(28)は(18)式と類似の、然しながら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)式に対して、$\gamma<1$の場合定常非線形局在モードの存在を示すことができる。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して、渦状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が励起されていることに相当する局所的スピン波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高励起状態は、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でよく記述される。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す状態は、平衡状態、基底状態、あるいは真空状態から大きくはずれた状態である。少数粒子および多粒子より成る系のこのような量子状態は必ずしもよく理解されているものとは云い難い。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、この種の問題を取扱う有力な方法の一つであるが、そこでは、量子力学は古典的性格を持って現われ、量子力学的ソリトン、カオス等の概念が用いられるであろう。