

Intrinsic Defects in Pure Anharmonic Crystal Lattices

京工樹大 工芸 武野正三 (Shozo Takeno)

§1. はじめに

ソリトンは通常非線形偏微分方程式の厳密解として現われる。例外として、戸田格子方程式¹⁾、Ablowitz-Ladik²⁾の差分形非線形 Schrödinger 方程式、広田の双一次形式を用いて得られる多数の非線形差分方程式³⁾等がある。ここでは、これらの非線形差分方程式は微分方程式とは全く別個に、非線形格子力学に現われる多くの物理的にも意味のある方程式が、適当な条件下で、非線形局在モードの解を持つことを示した^{4,6)}。ソリトンの場合と同様に、この非線形局在モードは、結晶格子における非線性と波動の分散性の競合により現われるものであるが、それはまた、結晶格子に固有な周期対称性を自発的に破って現われるモードである。ここでは、結晶格子における局在モードは、その中に不純物、すなわち、格子欠陥を導入することにより、周期性を破り、これによって発生し得るものとされた。

ここで述べる非線形局在モードは純結晶・非線形格子固有の性質がある。このような自発的対称性の破れによる局在モードは、格子系の任意の点に於て存在することができ、然も移動可能である。この状態はエネルギーの局在(たまた波動と云)よりは、むしろ粒子的性質を持っており、intrinsic defects あるいは広義の意味におけるソリトとみなすことができる。

§2. simple illustration

このような局在モードが、何故、どの様にして生ずるかを示すためには、次のモデル非線形格子方程式が最も良い例の一つと考えるべき:

$$\frac{d^2 u_n}{dt^2} = J_2(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) + J_4[(u_{n+1} - u_n)^3 - (u_n - u_{n-1})^3] \quad (2.1)$$

ここに、 J_2, J_4 は定数である。 $J_4 > 0$ とする。 $J_4 = 0$ の場合、(2.1) は 1次元等周期格子のよく知られた振動を表すもので、その固有振動数 $\omega \equiv \omega(k)$ は波数 k で特徴づけられる。

$$\omega^2 = 2J_2[1 - \cos(k)] \equiv \omega^2(k) \quad (2.2)$$

と与えられる。ここに、格子定数は簡単のために、単位の長さにとっている。図に示すように、frequency band $\omega(k)$ は N 本のミクロな振動 level から成り立つ。ここに、 N は格子点の総数である。正の4次の非等周期ポテンシャルは、各振動 level を $1/N$ のオーダーだけ振動数

の増す向きに shift させる。このとき、例外的な振舞いをするのは, band の最上端 $\omega = \omega_n$ の振動 level である。gap 領域に有限のオーダーの shift が可能である。最上端のものが有限の shift を行くと, gap 領域に出ると, 群速度振動 level の中で, band の上端に位置するものが非線形性により同じ影響を受けることになる。以下, 同様のことが順次起る可能性が存在する。このような波動の非線形性と共存性は self-consistent な形で表われる。格子点 n における原子の変位 u_n による次の式が成立する:

$$\langle u_n^2 \rangle = \sum_{\lambda} S_n(\lambda) \frac{\hbar}{2\omega(\lambda)} \coth\left(\frac{\hbar\omega(\lambda)}{2k_B T}\right) \quad (2.3)$$

$\langle \dots \rangle$ は熱平均を表わし, k_B, T は, それぞれ, ボルツマン定数, 絶対温度である, $\omega(\lambda)$ は固有状態を表わす index である。 λ_e, λ_j は, それぞれ, 局在状態, in-band 状態を表わす index とする。すると $\lambda_e \approx 1$, $\lambda_j \ll 1/N$ が成立する。つまり, 波動の局在は, 大きな平均振幅を与え, 大きな平均振幅は大きな非線形性を誘起し, この波の局在性を一層助長する----- と云う reasoning である。

以上の物理的考察は, 数学的には以下のように進められる。いま, 簡単なために, 定常局在モード即ち動かない局在モードの場合に話を限定する。 u_n を負の振動数部分と正の振動数部分に次のように

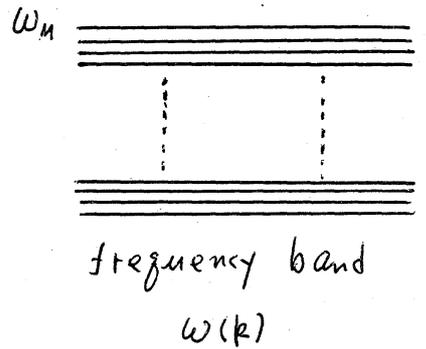


図 1.

分解する:

$$u_n = \alpha (z_n e^{-i\omega t} + z_n^* e^{i\omega t}) \quad (2.4)$$

α, z_n は、それぞれ、振幅、右モードの形状関数であり、 z_n は変数 t により変化する。(2.4) を (2.1) に代入し、右の振動数部が $e^{-i\omega t}$ の因子のみを含むものに着目すると (物理的には、これを回転波近似と呼ぶ)、

$$J[(2z_n - z_{n+1} - z_{n-1}) + \lambda(z_n - z_{n+1})^3 + (z_n - z_{n-1})^3] = \omega^2 z_n \quad (2.5)$$

を得る。非線形固有値問題に還元される。格子グリーン関数

$$G(n, m) = \frac{1}{N} \sum_k \frac{\exp[ik(n-m)]}{\omega^2 - \omega^2(k)} \equiv G(|n-m|) \quad (2.6)$$

を代入すると (2.5) は形式的に次のように解ける。

$$z_n = \sum_m G(n, m) V(z_m) \quad (2.7)$$

$$V(z_n) = J\lambda[(z_n - z_{n+1})^3 + (z_n - z_{n-1})^3] \quad (2.8)$$

$$\lambda = (3J_4/J_2)\alpha^2 \quad (2.9)$$

(2.7) は無限次元の非線形連立方程式である。グリーン関数法の要点は、 $\omega > \omega(k)$ の場合、 $G(n, m)$ は $|n-m|$ による指数関数的に減小する関数であり、振動数バンド $\omega(k)$ の立端から一定程度離れた ω に対しては、事実上極めて少数次元の連立方程式

を取扱)だ4下十分である云) = 云)である。詳細な計算は一切省略(

1. $\omega/\omega_M \gg 1$ の場合, 結果のみを書くと(局在モードの中心は $n=0$)^{5,6)}

$$\omega_M/\omega = 1 / \left(\frac{3}{4} + \frac{27}{16} \lambda \right) \quad (2.10)$$

$$z_n = (-1)^n \left[(\omega_M/\omega)^{2|n-1|} / 4^n \right] [2 + (\lambda/2)] \quad (2.11)$$

$n \geq 2$

$$z_1 \cong -1/2 \quad (2.12)$$

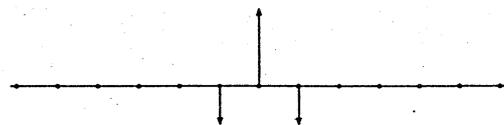
となる。 $\omega/\omega_M \gg 1$ の場合の局在性のありさまを図2に示す。 $\omega/\omega_M \gg 1$

の場合, 中心の位置の原子(振幅

を1に規格化(がある)とその

最近接の原子のみが有限の変位

を行ひ, 他は殆どゼロである。



局在モードの局在性

図2.

此處で得られた非線形局在モードは, 格子空間または差分空間のみにおいて存在し得るものである。何れをよめば, 連続体極限をとると $\omega_M \rightarrow \infty$ となり, localized mode の存在すべき frequency gap 領域が消失するからである。

§3. simple cubic lattice (3次元格子空間) における局在モード

前節の結果を単純立方格子の場合に拡張することは容易である。

(2.7) に対応する式は以下の形をとる:

$$\zeta(\vec{n}) = \sum_{\vec{m}} G(\vec{n}, \vec{m}) V[\zeta(\vec{m})], \quad (3.1)$$

$$G(\vec{n}, \vec{m}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{\exp[i\{k_1(n_1 - m_1) + k_2(n_2 - m_2) + k_3(n_3 - m_3)\}]}{\omega^2 - 2J_2[\zeta - \cos(k_1) - \cos(k_2) - \cos(k_3)]} = G(\vec{n} - \vec{m}) \quad (3.2)$$

$$V(\vec{m}) = J\lambda \sum_{j=1}^3 \{[\zeta(\vec{m}) - \zeta(\vec{m} + \vec{e}_j)]^2 + [\zeta(\vec{m}) - \zeta(\vec{m} - \vec{e}_j)]^2\} \quad (3.3)$$

ここで、 \vec{e}_j は単位立方格子の j -軸の正の向きに取った単位ベクトル
 であり、ベクトル $\vec{n} = (n_1, n_2, n_3)$ は三つの整数の組 n_1, n_2, n_3 によって
 なる。格子定数は単位長さにとりあう。また、非線形寄在モード
 の原点 $\vec{0} = (0, 0, 0)$ にあつておる $\zeta(\vec{0})$ は

$$\zeta(\vec{0}) = 1 \quad (3.4)$$

と規格化される。このとき最も興味深いモードは次の対称性を
 みたすものである:

$$\zeta(1, 0, 0) = \zeta(-1, 0, 0) = \dots = \zeta(0, 0, 1) = \zeta(0, 0, -1) \text{ for n.n. neighbours}$$

$$\zeta(1, 1, 0) = \zeta(1, -1, 0) = \dots = \zeta(0, 1, -1) = \zeta(0, -1, -1) \text{ for next n.n. neighbours}$$

$$\zeta(1, 1, 1) = \zeta(1, -1, 1) = \dots = \zeta(-1, -1, 1) = \zeta(-1, -1, -1) \text{ for 3rd neighbours.}$$

etc. (3.5)

reduced variables

$$\zeta(\vec{n}) = (-1)^{n_1 + n_2 + n_3} \gamma(\vec{n}), \quad G(\vec{n}) = [(-1)^{n_1 + n_2 + n_3} / \omega^2] g(\vec{n}) \quad (3.6)$$

と簡略化の記号を物理量 $X(\vec{n})$ ($X = \gamma, g, \dots$) に対して L.T.F. の如く

$$\begin{aligned}
X_0 &\equiv X(0,0,0), & X_1 &\equiv X(1,0,0), & X_2 &\equiv X(1,1,0), & X_3 &\equiv X(1,1,1), \\
X_4 &\equiv X(2,0,0), & X_5 &\equiv X(2,1,0), & X_6 &\equiv X(2,1,1), & X_7 &\equiv X(2,2,0), \\
X_8 &\equiv X(2,2,1), & X_9 &\equiv X(3,0,0), & X_{10} &\equiv X(2,2,2) \text{ etc.}
\end{aligned} \quad (3.7)$$

同様に、 $G(\vec{m})$ 或いは $f(\vec{m})$ の満たす恒等式を利用して、長い計算の後 1.1 下の結果が得られる。⁶⁾

$$(2/x) - \eta_1 = \lambda(1 + \eta_1)^3, \quad x = \omega_M^2 / \omega^2, \quad \omega_M^2 = 12J_2 \quad (3.8)$$

$$\eta_1 = \frac{g_1}{1 + g_1} g + \frac{\lambda}{6} \frac{g}{(1+g)(1+g_1)} \sum_{m=1}^{\infty} A_{nm} (\eta_m + \eta_{m+1})^3 \quad (3.9)$$

$$\eta_n = (g - \eta_1) g_1 + \frac{\lambda}{6} \frac{1}{1+g} \sum_{m=1}^{\infty} A_{nm} (\eta_m + \eta_{m+1})^3, \quad n \geq 2 \quad (3.10)$$

$$g = (2/x) - 1 \quad (3.11)$$

$$A_{01} = 24(g_1 + g_2), \quad A_{02} = 24(g_2 + g_3), \quad \dots$$

$$A_{21} = 2g_0 + 8g_1 + 8g_2 + 8g_3 + 4g_4 + 8g_5 + 8g_6 + 2g_7, \dots$$

$$A_{22} = 2g_0 + 6g_1 + 8g_2 + 4g_4 + 12g_5 + 8g_6 + 2g_7 + 5g_8, \dots$$

$$A_{31} = 4g_1 + 11g_2 + 12g_5 + 12g_6 + 6g_8$$

$$A_{32} = 3g_0 + 6g_1 + 8g_4 + 12g_5 + 8g_7 + 6g_8 + 3g_{10} + \dots \quad (3.12)$$

この結果を用いると、 $\omega \gg \omega_M$ or $x \ll 1$ の場合

$$x = \frac{2}{1.167 + 1.588\lambda} \quad \lambda \gg 0.542 \quad \text{or} \quad \frac{J_4 \alpha^2}{J_2} > 0.181 \quad (3.13)$$

$$\eta_1 \simeq 1/6, \quad \eta_n \simeq (2/x) g_n \quad n \geq 2 \quad (3.14)$$

が得られる, (3.13), (3.14) は, それぞれ, (2.10) と (2.11) および (2.12) に対応する. η_n は g_n が $n_1 + n_2 + n_3$ とともに指数関数的に減少するので, n とともに急激に減少する. ω が ω_M に近づけば, 数値計算を行えば

$$\lambda = 0.336 \longrightarrow \omega = 1.11 \omega_M \quad (3.15)$$

$$\eta_1 \simeq 0.286, \quad \eta_2 \simeq 0.074, \quad \eta_3 \simeq 0.028 \text{ etc} \quad (3.16)$$

が得られる.

3次元空間における非線形局在モードと1次元空間におけるそれとの基本的相違は, 3次元の場合, 局在モードの発生には λ に Green's 関数により与える critical value が存在すること, モードの空間的局在性が更によくなることである.

§4. 非線形局在モードとソリトン, discrete d-dimensional NLS equation

上の例が示した非線形局在モードは, 振動エネルギーの局在した状態であり, 広い意味でのソリトンとみなすことができる. この関連をみるには, 数例にはむと局在問題を取扱うのが見通しがよい. 動を得る局在モードの場合も比較的簡単に取扱うことができるモデル方程式が少数である(此例の二つの例はこの場合の取扱いが面倒であるのを省略する). このために

d -次元の空間(単純立格子の d -次元版)において定義される次の形の非線形 Schrödinger (NLS) 方程式を考える

$$i \frac{d u(\vec{n})}{dt} = \omega_0 u(\vec{n}) - J \sum_{j=1}^d [u(\vec{n} + \vec{e}_j) + u(\vec{n} - \vec{e}_j)] - g |u(\vec{n})|^2 u(\vec{n}) \quad (4.1)$$

ω_0, J は定数(ある), $\vec{n} = (n_1, n_2, \dots, n_d)$ (n_i は整数, $i=1, 2, \dots, d$), \vec{e}_j は j 軸の正の向きに取られた単位ベクトルである。

$$u(\vec{n}) = \phi_{\vec{k}}(\vec{n}) \exp[-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{n})]; \quad \phi_{\vec{k}}(\vec{n}) \equiv \phi_{\vec{k}}(\vec{n}, t) \quad (4.2)$$

と置き, $\phi_{\vec{k}}(\vec{n})$ は real とする

$$\omega_0 \phi_{\vec{k}}(\vec{n}) - J \sum_{j=1}^d \cos(k_j) [\phi_{\vec{k}}(\vec{n} + \vec{e}_j) + \phi_{\vec{k}}(\vec{n} - \vec{e}_j)] - g \phi_{\vec{k}}(\vec{n})^3 = \omega \phi_{\vec{k}}(\vec{n}) \quad (4.3)$$

$$\frac{d \phi_{\vec{k}}(\vec{n})}{dt} = -J \sum_{j=1}^d \sin(k_j) [\phi_{\vec{k}}(\vec{n} + \vec{e}_j) - \phi_{\vec{k}}(\vec{n} - \vec{e}_j)] \quad (4.4)$$

が得られる, (4.4) は次の形に解ける:

$$\phi_{\vec{k}}(\vec{n}, t) = \sum_{\vec{m}} F_{\vec{k}}(\vec{n}, \vec{m}; t) \phi_{\vec{k}}(\vec{m}, 0) \quad (4.5)$$

$$F_{\vec{k}}(\vec{n}, \vec{m}; t) = \frac{1}{N^d} \sum_{\vec{b}} \exp\{-i[\Omega_{\vec{k}}(\vec{b}) t - \vec{b} \cdot (\vec{n} - \vec{m})]\} \quad (4.6)$$

$$\Omega_{\vec{k}}(\vec{b}) = 2J \sum_{j=1}^d \sin(k_j) \sin(b_j). \quad (4.7)$$

(4.6) γ N 個一つの軸方向の格子点の総数である。(4.3) γ の k_j をゼロとおいたものが前の二つの章で考察した定常局在モードである。前の場合と同様にグリーン関数

$$G_{\vec{k}}(\vec{n}, \vec{m}) = \frac{1}{N^d} \sum_{\vec{b}} \frac{\exp[i\vec{b} \cdot (\vec{n} - \vec{m})]}{\omega_{\vec{k}}(\vec{b}) - \omega} \quad (4.8)$$

$$\omega_{\vec{k}}(\vec{b}) = \omega_0 - 2J \sum_{j=1}^d \cos(k_j) \cos(b_j) \quad (4.9)$$

と λ すると, (2.7), (3.1) に analogous to 式 (1)

$$\phi_{\vec{k}}(\vec{n}) = \alpha z_{\vec{k}}(\vec{n}), \quad z_{\vec{k}}(0) = 1 \quad (4.10)$$

$$z_{\vec{k}}(\vec{n}) = \lambda \sum_{\vec{m}} g_{\vec{k}}(\vec{n}, \vec{m}; \bar{\omega}) z_{\vec{k}}(\vec{m})^3; \quad \lambda = g\alpha^2/2J \quad (4.11)$$

$$g_{\vec{k}}(\vec{n}, \vec{m}; \bar{\omega}) \equiv g_{\vec{k}}(\vec{n}, \vec{m}) \equiv 2J G_{\vec{k}}(\vec{n}, \vec{m}); \quad \bar{\omega} = \frac{\omega_0 - \omega}{2J} \quad (4.12)$$

が得られる。

上の結果を one-localized mode problem に適用 (743.11) すれば, この局在モードが原点 $\vec{0}$ にあるとする。前節の場合と同様に物理的に最も興味あるものは中心対称のモードである。即ち、原点より n 番目の neighbour の振幅 $z_{\vec{k}}(\vec{n}) \equiv z_{\vec{k}n}$ はすべて等しくなるようなモードである。このことが成り立つ最も簡単な例は

$$k_1 = k_2 = \dots = k_d = k \quad (4.13)$$

の場合である。すなわち次の関係が得られる。

$$\omega = \omega_0 - 2Jd\omega(k)z_{k1} - g\alpha^2 \quad (4.14)$$

これは z_{k1} を介して局在モードの分散関係を与える厳密な式である。

変数 z_{k1} を含む式を得るには、始めに局在モードの局在性を仮定して逐次近似を行う必要がある。中心対称のモードが原点 ($z_{k0}=1$) への最近接点 (z_{k1}) のみに有限の z を持つものとして (4.14) を z_{k1} について解いた式を (4.11) に代入して、 z_{k0} , z_{k1} のみを含む式のみを考慮すると

$$g_{\vec{k}}(\vec{\omega}) = \frac{1}{g} \frac{1 + 2(\gamma_{\vec{k}}/d^3)(\bar{\omega}_{\vec{k}} - \gamma_{\vec{k}})^3}{1 + 2(\bar{\omega}_{\vec{k}}/d^3)(\bar{\omega}_{\vec{k}} - \gamma_{\vec{k}})^3} \quad (4.15)$$

$$\bar{\omega}_{\vec{k}} = \frac{\omega_0 - \omega}{2J\omega(k)}, \quad \gamma_{\vec{k}} = \frac{\lambda\alpha^2}{2J\omega(k)} \quad (4.16)$$

が得られる。

上記の計算は逐次近似を行うことに伴って、その改良を行うことができない。逐次近似の収束性と局在モードの空間的局在性は、グリーン関数 $g_{\vec{k}}(\vec{n})$ の $|\vec{n}|$ についての依存性に関連している。 $g_{\vec{k}}(\vec{n}) \equiv g_{\vec{k}}(\vec{n}, \bar{\omega})$ は次のように Bessel 関数の Laplace 変換の形に表わすことができる:

$$g_{\vec{k}}(\vec{n}, \bar{\omega}) = \int_0^{\infty} \exp(-\bar{\omega}\tau) I_{n_1}[\omega(k_1)] I_{n_2}[\omega(k_2)] \cdots I_{n_d}[\omega(k_d)] d\tau \quad (4.17)$$

局在モード発生に必要な $\lambda = g\alpha^2$ の値はグリーン関数の次の性質
 により決まる:

$$\lim_{\omega \rightarrow \omega_{km}} g_{\vec{k}}(\vec{n}, \bar{\omega}) = \begin{cases} \text{finite} & \text{for } d \geq 3 \\ \infty & \text{for } d = 1, 2 \end{cases} \quad (4.18)$$

こゝに、 ω_{km} は (4.9) で与えられる frequency band の minimum ω ; すなわち、
 $\omega_{km} = \omega_0 - 2J \sum_{j=1}^d \cos(k_j)$ で与えられる。大きな $|\vec{n}|$ に対する $g_{\vec{k}}(\vec{n})$ の
 漸近的振舞は次の式で与えられる:

$$g_{\vec{k}}(\vec{n}) = \frac{1}{\pi^{d/2}} \prod_{j=1}^d [\cos(k_j)]^{-1/2} \left(\frac{\bar{\omega}'_k}{2} \right)^{D/2} \frac{K_D[(2\bar{\omega}'_k)^{1/2} |n_k|]}{|n_k|^D} \quad (4.19)$$

$$\bar{\omega}'_k = \bar{\omega} - \sum_j \cos(k_j), \quad |n_k|^2 = \sum_j n_j^2 / \cos(k_j), \quad D = (d/2) - 1 \quad (4.20)$$

こゝに $K_\nu(z)$ は変形 Bessel 関数であり、 ν の大きな値に対する K_ν の漸
 近式 $K_\nu(z) = (\pi/2z)^{1/2} \exp(-z)$ は $g_{\vec{k}}(\vec{n})$ の次の漸近形を示す:

$$g_{\vec{k}}(\vec{n}) \propto |n_k|^{-D'} \exp[-(2\bar{\omega}'_k)^{1/2} |n_k|], \quad D' = \frac{d}{2} - \frac{1}{2}. \quad (4.21)$$

(4.19), (4.20) は、次元数 d の増大とともに、局在モードの局在性が増
 加することを示している。

$d=1$ 即ち空間 1次元の場合、連続体近似あるいは極限の下で、
 非線形局在モードはよく知られた空間 1次元の非線形 Schrödinger
 方程式のソリトン解に移行することを示される。この極限の下でグリー
 ン関数 $G_{\vec{k}}(\vec{n}, \vec{m}; t)$, $G_{\vec{k}}(\vec{n}, \vec{m}; t)$ は

$$F_{\vec{k}}(\vec{n}, \vec{m}; t) = \Delta[n - m - 2Jt \sin(k)] \rightarrow F_k(x, x'; t) = f(x - vt), \quad (4.22)$$

$$g_{\vec{k}}(\vec{n}, \vec{m}; t) \rightarrow g_k(x, x'; t) = [J/\cos(k)]^{1/2} \frac{e^{-\beta_k |x-x'|}}{(\omega(k) - \omega)^{1/2}} \quad (4.23)$$

$$\begin{aligned} \text{すなわち, } v &= 2J \sin(k) \rightarrow 2Jk, & \omega(k) &= \omega_0 - 2J + Jk^2, \\ \beta_k &= \left\{ [\omega(k) - \omega] / J \cos(k) \right\}^{1/2} \end{aligned} \quad (4.24)$$

(4.22), (4.23) をそれぞれ (4.5), (4.11) に代り λ を代入

$$u(x, t) = \alpha \operatorname{sech}[(m\gamma)^{1/2} \alpha(x - vt)] \exp[i(kx - \omega t)] \quad (4.25)$$

$$\omega = \omega_0 - 2J + (k^2/2m) - (\lambda \alpha^2/2), \quad m = 1/2J \quad (4.26)$$

が得られる。(4.25), (4.26) は (4.1) 式の $d=1$ の場合の連続体極限の式

$$i \frac{\partial u}{\partial t} = (\omega_0 - 2J)u - J \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - g|u|^2 u \quad (4.27)$$

の $f < \infty$ のときは one-soliton 解がある。

§5. coupled lattice equations - discrete version of the Zakharov equation^{7), 8)}

$$i \dot{U}_n + \omega_0 U_n - J(U_{n+1} + U_{n-1}) + AU_n(\varphi_{n+1} - \varphi_{n-1}) = 0 \quad (5.1)$$

$$\ddot{\varphi}_n - K(\varphi_{n+1} + \varphi_{n-1} - 2\varphi_n) - (A/2)\{|U_{n+1}|^2 - |U_{n-1}|^2\} = 0 \quad (5.2)$$

上の非線形連立微差分方程式は Zakharov 方程式

$$i(\partial v / \partial t) = -(\partial^2 v / \partial x^2) + A' v \phi \quad (5.3)$$

$$(\partial^2 \phi / \partial t^2) - (\partial^2 \phi / \partial x^2) = A'' (\partial^2 / \partial x^2) |v|^2 \quad (5.4)$$

の差分版とみなすことができる。ここに、 v, ϕ は、それぞれ、複素量の場合、実数の場合を表わし、 A', A'' は定数である。また、(5.1), (5.2)において、 J, A, K も定数である。(5.1), (5.2) は、(5.3), (5.4) に上てて、数学的にも、物理的にも逐次に generic である。計算の詳細は省略し、結果の一部のみを示すと、(5.2) は $\varphi_{n+1} - \varphi_{n-1}$ により、次の形で厳密に u -field と関係づけられる：

$$\begin{aligned} \varphi_{n+1} - \varphi_{n-1} = & -\frac{A}{2K} [2|u_n|^2 + |u_{n+1}|^2 + |u_{n-1}|^2] \\ & + \frac{A}{2K} \sum_m \int_0^t d\tau M_{n-m}(t-\tau) (\partial/\partial \tau) |u_n(\tau)|^2 \\ & + \frac{A}{2K} \sum_m M_{n-m}(t) |u_m(0)|^2 + f_{n+1} - f_{n-1} \end{aligned} \quad (5.5)$$

ここに

$$M_n(t) = 2J_{2n}(\omega_1 t) + J_{2(n+1)}(\omega_1 t) + J_{2(n-1)}(\omega_1 t) \quad (5.6)$$

$$f_n(t) = \sum_m J_{2(n-m)}(\omega_1 t) \varphi_m(0) + \int dt J_{2(n-m)}(\omega_1 t) \dot{\varphi}_m(0) \quad (5.7)$$

$$\omega_1 = 2K^{1/2} \quad (5.8)$$

したがって、 J_{2n} は Bessel 関数である。(5.5) を (5.1) に代入すると、

φ -field 変数を厳密に消去した結果として、次の形の一般化された Langevin 方程式が得られる：

$$\begin{aligned}
& i\dot{U}_n + \omega_0 U_n - J(U_{n+1} + U_{n-1}) - \frac{A^2}{2K} U_n \{2|U_n|^2 + |U_{n+1}|^2 + |U_{n-1}|^2\} \\
& + \frac{A^2}{2K} U_n \sum_m \int_0^t d\tau M_n(t-\tau) (d/d\tau) |U_m(\tau)|^2 \\
& + \frac{A^2}{2K} U_n \sum_m M_{n-m}(t) |U_m(0)|^2 = A U_n (f_{n-1} - f_{n+1}) \quad (5.9)
\end{aligned}$$

(5.9)における第1行の最後の項は, U -fieldと φ -fieldの相互作用により誘起された非線形力であり, 第2行目の項は記憶効果を持つ一般力さゆた抵抗力の項, 第3行, 左辺最後の項は t の経過とともに減小するtransient効果の項を表わす。(5.9)の右辺は φ -fieldの初期条件により生じる揺動力を表わす。尚, 抵抗の項と揺動力の項は, よく知られているように, 揺動散逸定理により結びつけられるが, こゝでは詳細は省略する。

(5.9)で抵抗力の項とそれに対応する揺動力の項を無視し, 元来と同時に, transientな効果を表わす項も無視すると, 次の形の差分形非線形 Schrödinger 方程式が得られる:

$$\begin{aligned}
& i\dot{U}_n + \omega_0 U_n - J(U_{n+1} + U_{n-1}) - \frac{A^2}{2K} U_n \{2|U_n|^2 + |U_{n+1}|^2 + |U_{n-1}|^2\} \\
& = 0 \quad (5.10)
\end{aligned}$$

が得られる。(5.10)は, §4で示した方法により, 非線形系をE-FDと与えることと示すことができる。

結論として, 非線形連立差分方程式(5.1), (5.2)は, (5.5)を

通じて、厳密に(5.9)の形の非線形 Langevin 方程式に還元される。(5.9)の解は、連続体近似の下で得られる Zakharov 方程式 (5.3), (5.4) より、数学的にも物理的にも遙かに豊かな構造を持つ。特に、空間差分の効果は、(5.6) における記憶関数が Bessel 関数で表わされることにより示される。

§6. 結語

ここで論じた非線形格子モードは、非線形性より非調和性により、格子の周期性を自発的に破る生ずる *intrinsic* なモードである。非線形格子には、此種の新しい解が数多く存在すると考えられる。尚、本稿では、非線形力場の変数にのみ奇数次のものに限ったが、偶数次のものについても新たな考察が必要である。

7. References

- 1) M. Toda: J. Phys. Soc. Jpn. 22(1967)431.
- 2) M.J. Ablowitz and J.F. Ladik: Stud. Appl. Math. 55(1976)213.
- 3) R. Hirota: see, for example, in Solitons, ed. R.K. Bullough, and P.J. Caudrey (Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg and New York, 1980)p.157.
- 4) S. Takeno: Prog. Theor. Phys. 75(1986)1.
- 5) A.J. Sievers and S. Takeno: Phys. Rev. Lett. 61(1988)970.
- 6) S. Takeno, K. Kisoda, and A.J. Sievers: Prog. Theor. Phys.

Suppl. No.94(1988)242.

- 7) V.E. Zakharov: Sov. Phys. JETP 72(1972)908.
- 8) See, also, A.S. Davydov: Biology and Quantum Mechanics (Pergamon Press, 1982), Chap. VII and references cited therein.