様々な格子上の離散シュレディンガー作用素の長距離散乱理論

只野之英 (YUKIHIDE TADANO)

1. 導入

N 次元 Euclid 空間 $\mathbb{R}^N$ 上の Schrödinger 方程式

$$
\begin{cases} i\partial_t u(t,x) = (-\Delta_x + V(t,x))u(t,x), & (t,x) \in \mathbb{R}\times\mathbb{R}^N, \\ u(0,x) = u_0(x), & x \in \mathbb{R}^N \end{cases} \tag{1}
$$

は量子力学の基礎方程式として提唱されて以来，数学において様々な研究がなされている．ポテンシャル $V(t,x)$ が時間依存しない場合，(1) の可解性は Schrödinger 作用素

$$
H = -\Delta_x + V(x) \quad \text{on } L^2(\mathbb{R}^N) \tag{2}
$$

の自己共役性と同値である．(1) の解 $u(t,\cdot) = e^{-itH}u_0$ の挙動は H のスペクトルによって決定されることが知られおり，2 節で詳説する．

本講演では，Schrödinger 作用素 (2) のラプラシアン Δ_x および V を格子上に離散化して得られる**離散 Schrödinger 作用素の散乱理論**を考察する．Δ_x は中心差分近似または最近接点の値の和（の定数倍）によって離散化するが，格子の形状によって作用素の形が変わってくることに注意する．

例 1. (1) 正方格子上の離散 Schrödinger 作用素[1]

$$
H_s u(x) = -\frac{1}{2}\sum_{|y-x|=1} u(y) + V(x)u(x), \quad x \in \mathbb{Z}^N, u \in \ell^2(\mathbb{Z}^N).
$$

(2) 2 次元三角格子上の離散 Schrödinger 作用素

$$
H_t u[x] = -\frac{1}{6}\sum_{j=1}^{6} u(x+n_j) + V(x)u(x), \quad x \in \mathbb{Z}^2,
$$

ただし $n_1 = (1,0)$, $n_2 = (-1,0)$, $n_3 = (0,1)$, $n_4 = (0,-1)$, $n_5 = (1,-1)$, $n_6 = (-1,1)$．座標の取り方は下図参照．

東京大学大学院数理科学研究科 D2 (Graduate School of Mathematical Sciences, the University of Tokyo)
Research Fellow of Japan Society for the Promotion of Science
E-mail: `tadano@ms.u-tokyo.ac.jp`.

[1] 中心差分近似であれば $-\frac{1}{2}\sum_{|y-x|=1}(u(y)-u(x))$ とするべきだが，両者の差は恒等作用素の定数倍なのでスペクトルの性質に影響しない．

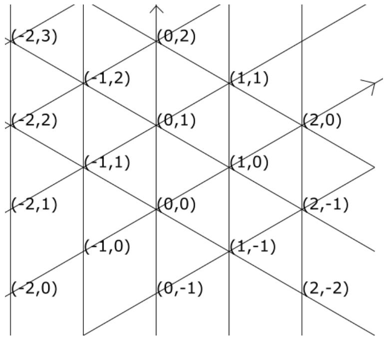

FIGURE 1. 三角格子.

(3) 2次元六角格子上の離散Schrödinger作用素: $u = {}^t(u_1, u_2) \in \ell^2(\mathbb{Z}^2) \oplus \ell^2(\mathbb{Z}^2) = \ell^2(\mathbb{Z}^2; \mathbb{C}^2)$ に対し

$$H_h u(x_1, x_2) = -\frac{1}{3}\begin{pmatrix} u_2(x_1, x_2) + u_2(x_1 - 1, x_2) + u_2(x_1, x_2 - 1) \\ u_1(x_1, x_2) + u_1(x_1 + 1, x_2) + u_1(x_1, x_2 + 1) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} V_1(x)u_1(x) \\ V_2(x)u_2(x) \end{pmatrix}.$$

各座標 (x_1, x_2) に対し 2 点が割り振られているため，先の 2 例より複雑な構造になっている.

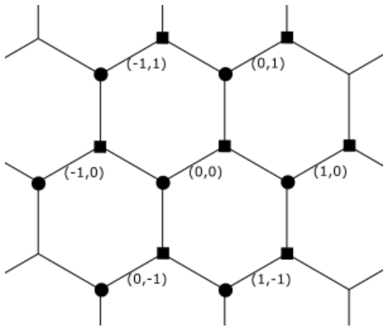

FIGURE 2. 六角格子. 座標 (x_1, x_2) が六角形の左上または右下の辺に付けられ，辺の丸の点が第 1 成分，四角の点が第 2 成分に対応する.

ここで本アブストラクトの流れを述べておこう. 2 節では $\mathbb{R}^N$ 上の Schrödinger 作用素 (2) の散乱理論について知られていることを解説する. 同時に自己共役性の十分条件とスペクトルの一般的な分類を紹介する. 各スペクトルに対応する部分空間が量子力学的な束縛状態と散乱状態とうまく対応していることも説明する. 3 節では離散 Schrödinger 作用素の散乱理論における先行研究を紹介する. 最後の 4 節では主定理を述べる. 4.1 項の定理 6 で，例 1 の H_s, H_t を含むクラスにおける長距離散乱に対する修正波動作用素を構成をし，その存在および漸近完全性について紹介する. H_h の場合は定理 6 を適用できないが，この場合でも同様の結果（定理 7）が示されたことも 4.2 項で報告する.

2. Schrödinger 作用素の既知の結果

2.1. 自己共役性. Schrödinger 作用素の自己共役性は加藤-Rellich の定理によって示されており，具体的には以下のことが知られている．

定理 2 ([6] p.12). $V(x)$ は実数値で

$$N \leq 3 \text{ なら } V \in L^2(\mathbb{R}^N) + L^\infty(\mathbb{R}^N),$$
$$N \geq 4 \text{ なら } V \in L^p(\mathbb{R}^N) + L^\infty(\mathbb{R}^N),\ p > N/2$$

とする．このとき $H = -\Delta + V,\ D(H) = C_c^\infty(\mathbb{R}^N)$ は本質的自己共役であり，$D(\overline{H}) = H^2(\mathbb{R}^N)$ である．

2.2. スペクトルの性質. H をヒルベルト空間 $\mathcal{H}$ 上の自己共役作用素とすると，$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{pp}(H) \oplus \mathcal{H}_{ac}(H) \oplus \mathcal{H}_{sc}(H)$ と分解される．$\mathcal{H}_{pp}(H)$, $\mathcal{H}_{ac}(H)$, $\mathcal{H}_{sc}(H)$ はそれぞれ H の点スペクトル空間，絶対連続部分空間，特異連続部分空間とよばれる：

$$\mathcal{H}_{pp}(H) := \overline{\text{L.h.}\{u \in \mathcal{H} : H \text{ の固有値 }\}},$$
$$\mathcal{H}_{ac}(H) := \{u \in \mathcal{H}; f_u(\cdot)\text{: Lebesgue 測度について絶対連続 }\},$$
$$\mathcal{H}_{sc}(H) := \{u \in \mathcal{H}; f_u(\cdot)\text{: Lebesgue 測度について特異連続 }\}.$$

ここで $f_u(B) := \int_B d(E_H(\lambda)u, u),\ B \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^N)$, $E_H(\lambda)$: H のスペクトル分解である．各スペクトルを以下で定義する．

$$\sigma_{pp}(H) := \{H \text{ の固有値 }\} \quad H \text{ の点スペクトル}$$
$$\sigma_{ac}(H) := \sigma(H|_{\mathcal{H}_{ac}}) \quad H \text{ の絶対連続スペクトル}$$
$$\sigma_{sc}(H) := \sigma(H|_{\mathcal{H}_{sc}}) \quad H \text{ の特異連続スペクトル}$$

$\mathcal{H}_{pp}(H)$ の元は**束縛状態**とも呼ばれ，特に $Hu_0 = \lambda u_0$ であれば (1) の解は $u(t) = e^{-itH}u_0 = e^{-it\lambda}u_0$ である．コペンハーゲン解釈によれば，時間 t において領域 U 内に粒子が存在する確率が $\int_U |u(t,x)|^2 dx/\|u(t)\|^2$ となるので，束縛状態では粒子が時間発展していないことが分かる．

一方，$\mathcal{H}_{ac}(H)$ の元は**散乱状態**と呼ばれ，以下の主張はその解釈を正当化している．定理 2 の条件下の Schrödinger 作用素は定理 3 の仮定をみたす．

定理 3 ([6] p.36). $L^2(\mathbb{R}^N)$ 上の自己共役作用素 H が局所コンパクト性，すなわち任意の $R > 0$ に対して $\chi_{\{|x|<R\}}(H+i)^{-1}$ がコンパクト，を満たすとする．このとき任意の $R > 0$ と $u \in \mathcal{H}_{ac}(H)$ に対して

$$\int_{|x|<R} |e^{-itH}u(x)|^2 dx \to 0,\ t \to \pm\infty.$$

$\mathcal{H}_{ac}(-\Delta) = L^2(\mathbb{R}^N)$, $\sigma(-\Delta) = [0, \infty)$ であるから，ポテンシャルなしの場合は散乱状態のみである．

$\mathcal{H}_{sc}(H) = 0$ である場合しか扱わないため，$\mathcal{H}_{sc}(H)$ には特に触れない．

2.3. **散乱理論．** 散乱理論はSchrödinger 方程式の解の長時間挙動の解析として研究されている．散乱理論の基本的な動機は，V が無限遠で減衰しているとき $u \in \mathcal{H}_{ac}(H)$ なら粒子が無限遠に飛んでいくので，時間が十分たてば $e^{-itH}u$ はポテンシャルが 0 のときのように振舞うだろうという疑問である．言い換えれば，$H_0 = -\Delta$ とするとき，任意の $u \in \mathcal{H}_{ac}(H)$ に対して

$$e^{-itH}u - e^{-itH_0}u_\pm \to 0,\ t \to \pm\infty$$

をみたす $u_\pm \in L^2(\mathbb{R}^N) = \mathcal{H}_{ac}(H_0)$ が一意に存在するかを調べることである．e^{itH} のユニタリ性より $\|e^{-itH}u - e^{-itH_0}u_\pm\| = \|u - e^{itH}e^{-itH_0}u_\pm\|$ なので，さらに次のように定式化される：
i) 波動作用素

$$W^\pm := \operatorname*{s-lim}_{t\to\pm\infty} e^{itH}e^{-itH_0}$$

が存在するか？
ii)$W^\pm$ が存在するとき（$W^\pm$ はユニタリ作用素），$W^\pm$ は漸近完全か？すなわち $\operatorname{Ran} W^\pm = \mathcal{H}_{ac}(H)$ か？

V が短距離型，すなわちある $\rho > 1$ が存在して $V(x) = O(\langle x\rangle^{-\rho})$ $(\langle x\rangle := (1+|x|^2)^{\frac{1}{2}})$ をみたすとき，i),ii) がともに成り立つことが知られている ([5],[10])．

一方，V が短距離型より遅い減衰をするとき，波動作用素 $W^\pm$ が存在するとは限らないことが知られている ([14] p.169) ため，$W^\pm$ を何らかの方法で修正した修正波動作用素を用いて議論する必要がある．修正波動作用素は何種類かあるが，今回は磯崎-北田型の修正波動作用素を紹介する．次のアイコナール方程式

$$|\nabla_x\varphi(x,\xi)|^2 + V(x) = |\xi|^2 \tag{3}$$

を $\{|x| > R = R_\xi, \xi \neq 0, |x\cdot\xi/(|x||\xi|)| > 1-\varepsilon\}$ 上でみたす φ を用いて

$$Ju(x) := (2\pi)^{-N}\int_{\mathbb{R}^N}\int_{\mathbb{R}^N} e^{i(\varphi(x,\xi)-y\cdot\xi)}u(y)dyd\xi \tag{4}$$

とおく．磯崎-北田修正波動作用素は，

$$W_J^\pm(\Gamma) = \operatorname*{s-lim}_{t\to\pm\infty} e^{itH}Je^{-itH_0}E_{H_0}(\Gamma), \quad \Gamma \Subset (0,\infty) \tag{5}$$

で定義される作用素[2]で，漸近完全性は $\operatorname{Ran} W_J^\pm(\Gamma) = E_H(\Gamma)\mathcal{H}_{\mathrm{ac}}(H)$ で置き換えられる．V が長距離型，すなわちある $\rho > 0$ が存在して

$$|\partial_x^\alpha V(x)| \le C_\alpha\langle x\rangle^{-|\alpha|-\rho},\ x \in \mathbb{R}^N, \alpha \in \mathbb{N}_{\ge 0}^N$$

をみたすとき，(5) で定義された修正波動作用素が任意の $\Gamma \Subset (0,\infty)$ で存在し漸近完全であることが磯崎-北田 [7] によって示されている．

---

[2]エネルギー区間を Γ の範囲で制限しているのは，上で定義した作用素 J が有界作用素にならないからである．その原因は φ を $\xi = 0$ の近傍で特異性を持つように構成する必要があることによる．一方，$JE_{H_0}(\Gamma)$ は有界作用素になる．

3. 離散 Schrödinger 作用素の散乱理論に関する先行研究

V が有限台を持つとき，例 1 の 3 つの格子を含むクラスで波動作用素が存在し漸近完全であることが安藤-磯崎-森岡 [2] によって示されている．また，Parra-Richard [13] により V が短距離型の場合に拡張されている．V が長距離型，すなわち後述の仮定 5 をみたすとき，正方格子の場合は中村 [11] によって磯崎-北田型とは異なる修正波動作用素の構成について議論されている．

4. 主定理

4.1. H_s, H_t を含むクラス． f を，$f[-x] = \overline{f[x]}$ をみたす $\mathbb{Z}^N$ 上の急減少関数とし，H_0 を

$$H_0 u[x] = \sum_{y \in \mathbb{Z}^N} f[y] u[x-y]$$

とおく．H_0 は $\ell^2(\mathbb{Z}^N)$ 上の有界自己共役作用素である．離散 Fourier 変換 $F : \ell^2(\mathbb{Z}^N) \to L^2(\mathbb{T}^N)$ を

$$Fu(\xi) = (2\pi)^{-\frac{N}{2}} \sum_{x \in \mathbb{Z}^N} e^{-ix\cdot\xi} u[x], \quad \xi \in \mathbb{T}^N = [-\pi, \pi)^N$$

とすると H_0 は

$$H_0 u[x] = F^*(h_0(\cdot) F u(\cdot))[x],$$
$$h_0(\xi) = \sum_{x \in \mathbb{Z}^N} e^{-ix\cdot\xi} f[x]$$

と表わされ，$h_0 \in C^\infty(\mathbb{T}^N; \mathbb{R})$ である．自由作用素 H_0 に対して次を仮定する．

仮定 4. $v(\xi) = \nabla_\xi h_0(\xi)$, $A(\xi) = {}^t\nabla_\xi \nabla_\xi h_0(\xi)$ とし，

$$\mathcal{T} = \{h_0(\xi) \mid \xi \in \mathbb{T}^N,\ v(\xi) = 0\}$$

とおくと，$\mathcal{T}$ は内点をもたず，

$$\{\xi \in \mathbb{T}^N | v(\xi) \neq 0, \det A(\xi) \neq 0\}$$

は $\mathbb{T}^N$ で稠密である．

正方格子，三角格子の場合，それぞれ $h_s(\xi) = \sum_{j=1}^N \cos \xi_j$, $h_t(\xi) = -\frac{1}{3}(\cos\xi_1 + \cos\xi_2 + \cos(\xi_1 - \xi_2))$ であるから仮定 4 をみたすことが分かる．

V を $\mathbb{Z}^N$ 上の実数値関数とし，

$$H = H_0 + V$$

とおく．V に対して次を仮定する．

仮定 5. ある $\rho > 0$ と V の拡張 $\tilde{V} \in C^\infty(\mathbb{R}^N)$ が存在して，

$$|\partial_x^\alpha \tilde{V}(x)| \le C_\alpha \langle x \rangle^{-|\alpha| - \rho}$$

が任意の $x \in \mathbb{R}^N$ と多重指数 α で成り立つ．

上記の仮定の下で一つ目の主定理を述べる．

定理 6 ([15])．仮定 4，5 の下で，次をみたす $\ell^2(\mathbb{Z}^N)$ 上の作用素 J が存在する：任意の $\Gamma \Subset h_0(\mathbb{T}^N)\backslash\mathcal{T}$ に対して，修正波動作用素

$$W_J^{\pm}(\Gamma) = \operatorname*{s-lim}_{t\to\pm\infty} e^{itH} J e^{-itH_0} E_{H_0}(\Gamma)$$

が存在し，以下が成り立つ：
i)Intertwining property: $HW_J^{\pm}(\Gamma) = W_J^{\pm}(\Gamma)H_0$,
ii) 部分等長性: $\|W_J^{\pm}(\Gamma)u\| = \|E_{H_0}(\Gamma)u\|$,
iii) 漸近完全性: $\operatorname{Ran} W_J^{\pm}(\Gamma) = E_H(\Gamma)\mathcal{H}_{\mathrm{ac}}(H)$.

定理中の J は (3), (4) とほぼ同様にして構成される．φ は x-ξ 空間上のある領域での eikonal 方程式

$$h_0(\nabla_x\varphi(x,\xi)) + \tilde{V}(x) = h_0(\xi)$$

の解として構成し，作用素 J を

$$Ju\,[x] = (2\pi)^{-N}\int_{\mathbb{T}^N}\sum_{y\in\mathbb{Z}^N} e^{i(\varphi(x,\xi)-y\cdot\xi)}u[y]d\xi$$

と定義する．

4.2. **六角格子の場合．** 考えるヒルベルト空間が $\ell^2(\mathbb{Z}^2;\mathbb{C}^2)$ であることが正方格子等の場合と異なり，修正波動作用素の構成のために対角化の議論が必要である．H_{h0} を H_h に $V_1 = V_2 = 0$ を代入した作用素，$\mathcal{F} := F \oplus F$ とおくと

$$\mathcal{F}\circ H_{h0}\circ\mathcal{F}^* = \begin{pmatrix} 0 & \overline{\alpha(\xi)} \\ \alpha(\xi) & 0 \end{pmatrix} \in \mathcal{B}(L^2(\mathbb{T}^2;\mathbb{C}^2)),$$

である．ただし $\alpha(\xi) := 1 + e^{i\xi_1} + e^{i\xi_2}$．ここで

$$p(\xi) = |\alpha(\xi)|,$$
$$U(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & \overline{\alpha(\xi)}/|\alpha(\xi)| \\ -\alpha(\xi)/|\alpha(\xi)| & 1 \end{pmatrix}$$

とおくと，$\alpha(\xi)\neq 0$ ($\Leftrightarrow (\xi_1,\xi_2)\neq(\pm\frac{2\pi}{3},\mp\frac{2\pi}{3})$) ならば

$$\tilde{H}_{h0}(\xi) := U(\xi)\begin{pmatrix} 0 & \overline{\alpha(\xi)} \\ \alpha(\xi) & 0 \end{pmatrix}U(\xi)^* = \begin{pmatrix} p(\xi) & 0 \\ 0 & -p(\xi) \end{pmatrix}$$

$\max_{\xi\in\mathbb{T}^2} p(\xi) = 3$, $\min_{\xi\in\mathbb{T}^2} p(\xi) = 0$ より $\sigma(H_{h0}) = [-3,3]$ で，

$$\{p(\xi) \mid \xi \notin p^{-1}(0),\ \nabla p(\xi) = 0\} = \{1,3\}$$

となる．六角格子の場合の長距離散乱について以下の結果が得られた．
（$H_h = H_{h0} + \begin{pmatrix} V_1 & 0 \\ 0 & V_2 \end{pmatrix}$ に注意.）

定理 7 (T., 2016)**.** $\mathbb{Z}^2$ 上の実数値関数 V_1, V_2 は仮定 5 をみたし，$V_1 - V_2$ は仮定 5 の条件 $\rho > 0$ を $\rho > 1$ に置き換えたものをみたすとする．このとき磯崎-北田型の修正波動作用素が構成できる．すなわち，作用素 J が存在して，任意の $\Gamma \Subset [-3,3]\backslash\{0, \pm 1, \pm 3\}$ に対して修正波動作用素

$$W_J^{\pm}(\Gamma) = \operatorname*{s-lim}_{t \to \pm\infty} e^{itH_h} J e^{-itH_{h0}} E_{H_{h0}}(\Gamma)$$

が存在し，以下が成り立つ：
i)Intertwining property: $H_h W_J^{\pm}(\Gamma) = W_J^{\pm}(\Gamma) H_{h0}$,
ii) 部分等長性: $\|W_J^{\pm}(\Gamma)u\| = \|E_{H_{h0}}(\Gamma)u\|$,
iii) 漸近完全性: $\operatorname{Ran} W_J^{\pm}(\Gamma) = E_{H_h}(\Gamma)\mathcal{H}_{\mathrm{ac}}(H_h)$.

5. 証明の概略

定理 6 の証明は作用素 J の構成を含め，本論文の証明の大部分は磯崎-北田 [7] に沿っている．修正波動作用素の存在は定常位相法で証明し，漸近完全性の証明は量子力学的直観に基づいた Enss の方法による．

六角格子の場合（定理 7）は，$\mathbb{C}^2$ 値関数の解析をするため少々厄介である．非摂動項 H_{h0} の対角化と同時に V_1, V_2 が

$$\mathcal{U} \begin{pmatrix} V_1 & 0 \\ 0 & V_2 \end{pmatrix} \mathcal{U}^*$$

の変形を受けることに注意する．ただし $\mathcal{U} := \mathcal{F}^* \circ U(\cdot) \circ \mathcal{F}$. V_1, V_2 を $\mathbb{T}^2$ 上の擬微分作用素と（modulo smoothing operator で）同一視し，$U(\xi)$ の特異性を無視すれば，擬微分作用素の基本的な計算により上式は

$$\begin{pmatrix} (V_1 + V_2)/2 & 0 \\ 0 & (V_1 + V_2)/2 \end{pmatrix} + (\text{short-range term})$$

となるから，各対角成分で定理 6 と同様の議論に帰着させる．

References

[1] W. Amrein, A. Boutet de Monvel, V. Georgescu: C_0-groups, commutator methods and spectral theory of N-body Hamiltonians. Progress in Mathematics, 135. Birkhäuser Verlag, Basel, 1996.
[2] K. Ando, H. Isozaki, H. Morioka: Spectral properties of Schrödinger operators on perturbed lattices. Ann. Henri Poincaré **17** (2016), 2103-2171.
[3] A. Boutet de Monvel, J. Sahbani: On the spectral properties of discrete Schrödinger operators: (The multi-dimensional case). Rev. Math. Phys. **11** (1999), 1061-1078.
[4] J. Dereziński, C. Gérard: Scattering Theory of Classical and Quantum N-Particle Systems. Springer Verlag, 1997.
[5] M. Hack: On the convergence to the the Møller wave operators. Nouro Cimento **9** (1958), 731-733.
[6] 磯崎洋: 多体シュレーディンガー方程式, シュプリンガー現代数学シリーズ 第 13 巻. 丸善出版, 2012.
[7] H. Isozaki, H. Kitada: Modified wave operators with time-independent modifiers. J. Fac. Sci. Uni. Tokyo Sect. IA Math. **32** (1985), no. 1, 77-104.
[8] H. Isozaki, I. Korotyaev: Inverse Problems, Trace Formulae for Discrete Schorödinger Operators. Ann. Henri Poincaré **13** (2012), 751-788.

[9] H. Kitada: Scattering theory for Schrödinger equations with time-dependent potentials of long-range type. J. Fac. Sci. Univ. Tokyo Sect. IA Math. **29** (1982), 353-369.

[10] S. Kuroda: On the existence and the unitarity property of the scattering operator. Nouro Cimento **12** (1959), 431-454.

[11] S. Nakamura: Modified wave operators for discrete Schrödinger operators with long-range perturbations. J. Math. Phys. **55** (2014), 112101 (8 pages).

[12] S. Nakamura: Microlocal properties of scattering matrices. Comm. Partial Differential Equations 41 (2016), 894-912.

[13] D. Parra, S. Richard: Spectral and scattering theory for Schrödinger operators on perturbed topological crystals. Preprint 2016 July. (https://arxiv.org/abs/1607.03573)

[14] M. Reed, B. Simon: The Methods of Modern Mathematical Physics, Volume III, Scattering Theory. Academic Press, 1979.

[15] Y. Tadano: Long-range scattering for discrete Schrödinger operators. Preprint 2016 May. (https://arxiv.org/abs/1605.02466)

[16] D. R. Yafaev: Mathematical scattering theory. Analytic theory. Mathematical Surveys and Monographs, 158. American Mathematical Society, Providence, RI, 2010.

[17] C. Zworski: Semiclassical Analysis. Graduate Studies in Mathematics, Volume 138. American Mathematical Society, Providence, 2012.