数理解析研究所講究録
30巻 1967年 91-100

差分演算子のスペクトル理論

北大 理 物理　朝日 孝

§1. 序

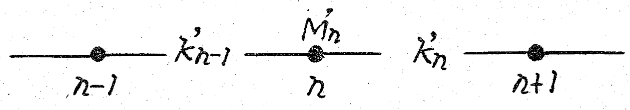
常微分方程式のスペクトル理論については *Titchmarsh* の教科書及びその他の人々に依ってよく調べられているが、差分方程式については必ずしもそうではない様に見受けられる。物理学に於いて屡々問題となる *coupled oscillators* の *system* は正に此の場合に相当するのであるが、物理屋の取扱には便宜的なものが多くその数学的背影には幾つかの疑問が残されている。

以下、隣り同志の質点がバネに依って結ばれている一次元鎖の運動を追求し、差分方程式に於いてもそのスペクトルが常微分方程式に於けると全く同じ様に扱はれ得るものであることを示したい。

§2. 初期値問題

バネに依って結ばれている質点から成る一次元鎖を考へ，その質点の平衡位置からのズレ（例へば，鎖の方向に沿ってのみ変位するものとする）に対する運動方程式を書下してみよう．但し，n番目の質点の質量をM'_n，ズレを$u'(n,t')$，及びn番目の質点と$n+1$番目の質点を結ぶバネの強さをk'_nとする．

$$M'_n \frac{d^2}{dt'^2}u'(n,t') = k'_{n-1}\{u'(n-1,t')-u'(n,t')\} + k'_n\{u'(n+1,t')-u'(n,t')\}$$



次の変数変換を行ふと（MとKは後に適当に撰ばれる），

$$M_n=\frac{M'_n}{M},\quad k_n=\frac{k'_n}{K},\quad t=\sqrt{\frac{K}{M}}\,t',\quad u(n,t)=u'(n,t'),$$

$$\frac{d^2}{dt^2}u(n,t)=\mathcal{L}_n u(n,t)$$

但し，$\mathcal{L}_n f(n) \equiv \frac{1}{M_n}\left[k_{n-1}\{f(n-1)-f(n)\}+k_n\{f(n+1)-f(n)\}\right]$

更に，初期条件として次が与へられているものとする：

$$u(n,0)=u(n),\quad v(n,0)=v(n)\quad \left(v(n,t)\equiv\frac{d}{dt}u(n,t)\right).$$

ラプラス変換を行って以上を書換へよう：

$$u_+(n,\omega)\equiv\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_0^{\infty}u(n,t)\,e^{i\omega t}\,dt \qquad \text{for } \mathrm{Im}(\omega)>0,$$

$$u_-(n,\omega)\equiv\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{0}u(n,t)\,e^{i\omega t}\,dt \qquad \text{for } \mathrm{Im}(\omega)<0.$$

$$(\mathcal{L}_n+\omega^2)\,u_\pm(n,\omega)=\pm\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\{i\omega u(n)-v(n)\} \qquad \text{for } \mathrm{Im}(\omega)\gtrless 0.$$

此れが解ければ逆変換に依って初期値問題の解が見出される

$$u(n,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{\substack{ic-\infty \\ (c>0)}}^{ic+\infty}u_+(n,\omega)\,e^{-i\omega t}\,d\omega+\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{\substack{ic'-\infty \\ (c'<0)}}^{ic'+\infty}u_-(n,\omega)\,e^{-i\omega t}\,d\omega.$$

§3. 半無限鎖

一次元鎖としては色々のものが考へられるが，こくに半無限鎖について幾分詳しく述べたい。

3.1. 斉次方程式

先づ次の斉次方程式を問題にしよう：

$$(\mathcal{L}_n+\lambda)\phi(n,\lambda)=0 \quad , \quad n\geq 1 \quad , \quad \text{non-real } \lambda .$$

此れをみたす解の中，原点での与へられた境界條件をみたしているものを *basic solutions* と呼ぶ：

即，

$$\phi_1 ; \quad \phi_1(0,\lambda)=\sin\alpha \quad , \quad \phi_1(1,\lambda)=-\cos\alpha$$

$$\phi_2 ; \quad \phi_2(0,\lambda)=\cos\alpha \quad , \quad \phi_2(1,\lambda)=\sin\alpha$$

此れらの一次結合に依って，$n=N$ での与へられた境界條件をみたしている解を求めよう：

$$\psi(n,\lambda;N,\beta)=\phi_2(n,\lambda)+m(\lambda;N,\beta)\phi_1(n,\lambda)$$

但し，次の境界條件をみたしているものとする．

$$\psi(N,\lambda;N,\beta)\cos\beta+\psi(N+1,\lambda;N,\beta)\sin\beta=0$$

故に，

$$m(\lambda;N,\beta)=-\frac{\phi_2(N,\lambda)\cot\beta+\phi_2(N+1,\lambda)}{\phi_1(N,\lambda)\cot\beta+\phi_1(N+1,\lambda)}$$

$N\to\infty$ の時の $m(\lambda;N,\beta)$ の振舞としては，*limit circle case* と *limit point case* が出現する：

即，

$$m(\lambda;\beta)\equiv\lim_{N\to\infty}m(\lambda;N,\beta) \qquad \text{が存在し，}$$

$$r(\lambda)\equiv\left|\,\mathcal{R}_0\left(2\,\mathrm{Im}[\lambda]\sum_{n=1}^{\infty}|\phi_1(n,\lambda)|^2\right)^{-1}\right| \quad ; \quad \textit{limit circle}\text{の半径}$$

故に，S^2なる次の函数が必在する：

$$\psi(n,\lambda;\beta) \equiv \lim_{N\to\infty} \psi(n,\lambda;N,\beta)$$
$$= \phi_2(n,\lambda) + m(\lambda;\beta)\phi_1(n,\lambda)$$
$$S_{n=1}^{\infty} |\psi(n,\lambda;\beta)|^2 = -k_0 \, \mathrm{Im}[m(\lambda;\beta)] / \mathrm{Im}[\lambda] .$$

但し，$S_{n=1}^{\infty} \cdots \equiv \sum_{n=1}^{\infty} M_n \cdots$ ，此の sum が存在する函数をS^2と云ふ。

上で得られた$m(\lambda;\beta)$の性質を調べると，

(i) limit circle case にては，その半径が有限なので

$$\lim_{n\to\infty} \phi_1(n,\lambda) = 0 \qquad \text{が必要となり}$$
$$\lim_{n\to\infty} k_n = \infty \qquad \text{が必要となる．}$$

故に通常物理にて問題となる系は此の場合ではなくて，次に述べる limit point case に相当する．無限遠での境界条件が物理的には重要でない理由が此処に在る．

(ii) limit point case にては，

$$m(\lambda;\beta) = -\lim_{N\to\infty} \frac{\phi_2(N,\lambda)}{\phi_1(N,\lambda)} \quad ; \ \beta \text{ independent} .$$

(iii) $|m(\lambda;\beta)| \le O(v^{-1})$ ，$v \equiv \mathrm{Im}[\lambda]$ ．

以上に挙げた様に，微分方程式に於けると類似の結果に至るのは次に示される如き Wronskian の存在に依る：

即，$W_n(F,G) \equiv k_n \{ F(n)G(n+1) - G(n)F(n+1) \}$

$$S_{n=N'}^{N''} \{ F(n)\mathcal{L}_n G(n) - G(n)\mathcal{L}_n F(n) \} = W_{N''}(F,G) - W_{N'-1}(F,G) .$$

此の Wronskian の詞で語られる限り，微分方程式と差分方程式とに於ける formulations に完全な対應が存在している．

前揭の性質(iii)の故に，$m(\lambda;\beta)$ が有し得る極は実軸上の一次の極のみである。 此れらの極及び留数を夫々 λ_μ, r_μ ($\mu=1,2,\cdots$) とするならば，

$$S_{n=1}^{\infty}\phi_1(n,\lambda_\mu)\phi_1(n,\lambda_\nu) = \delta_{\mu\nu}\cdot k_0/r_\mu$$

故に，次の如き orthonormalized eigenfunctions の set が帰結する：

即，　$\psi_\mu(n) \equiv \sqrt{\frac{r_\mu}{k_0}}\,\phi_1(n,\lambda_\mu)$ ，　$\mu=1,2,\cdots$

但し，　$S_{n=1}^{\infty}\psi_\mu(n)\psi_\nu(n) = \delta_{\mu,\nu}$.

3.2. 非斉次方程式

適当な條件をみたす函数の固有函数に依る展開（故に又，初期値問題に対しての一般的な形式解を得る為に有効）を得る為に，次の非斉次方程式を考へよう：

$$(\mathcal{L}_n+\lambda)\Phi(n,\lambda;f) = f(n) \quad \text{for } n\geq 1,\ f(n)\in S^2$$

此の方程式の解としては，

$$\Phi(n,\lambda;f) = S_{m=1}^{\infty}G(n,m;\lambda)f(m)$$

但し，

$$G(n,m;\lambda) \equiv k_0^{-1}\begin{cases}\phi_1(n,\lambda)\psi(m,\lambda) & ,\ n\leq m\\ \psi(n,\lambda)\phi_1(m,\lambda) & ,\ n>m\end{cases}$$

一方，$f(n)$ が次の3つの條件をみたしているならば，

$$\begin{cases} f(n),\ \mathcal{L}_n f(n)\in S^2\\ W_0(f,\phi_1) = 0\\ W_N(f,\psi)\longrightarrow 0 \quad \text{as } N\longrightarrow\infty\end{cases},$$

$$f(n) = S_{m=1}^{\infty} G(n,m;\lambda)(\mathcal{L}_m+\lambda)f(m) \quad , n\geq 0 .$$

以上２つの関係式から見られる様に，Green's function G は $(\mathcal{L}_n+\lambda)$ に対して n については右逆元 m については左逆元の役割を果している．　此れらの性質を利用して，以下に述べる様な固有函数に依る展開を得る：

(i)　discrete spectrum case .

$m(\lambda;\beta)$ が実軸上に有している singularities が総て極（即，必然的に一次の極）のみの場合を考へよう：

$$f(n) = \sum_{\mu} \psi_{\mu}(n) f_{\mu} \quad , \quad f_{\mu} \equiv S_{n=1}^{\infty} \psi_{\mu}(n) f(n)$$

$$G(n,m;\lambda) = \sum_{\mu} \frac{\psi_{\mu}(n)\psi_{\mu}(m)}{\lambda-\lambda_{\mu}}$$

$$\Phi(n,\lambda;f) = \sum_{\mu} \frac{\psi_{\mu}(n) f_{\mu}}{\lambda-\lambda_{\mu}}$$

(ii)　continuous spectrum case .

$m(\lambda;\beta)$ が実軸上にて不連続性をのみ示す場合を考へよう：

$$f(n) = \frac{1}{\pi k_0}\int_{-\infty}^{\infty} \phi_1(n,u)\, d\mathcal{F}(u) \quad , n\geq 0 .$$

$$\mathcal{F}(u) = S_{n=1}^{\infty} \chi(n,u) f(n)$$

$$\chi(n,u) = \int_{u_0}^{u} \phi_1(n,u)\, dk(u)$$

$$k(u) = \lim_{v\to 0^+}\int_{u_0}^{u} -\mathrm{Im}[m(u+iv)]\, du$$

$$G(n,m;\lambda) = \frac{1}{\pi k_0}\int_{-\infty}^{\infty} \phi_1(n,u)\frac{dk(u)}{\lambda-u}\phi_1(m,u)$$

$$\Phi(n,\lambda;f) = \frac{1}{\pi k_0}\int_{-\infty}^{\infty} \phi_1(n,u)\frac{dk(u)}{\lambda-u} f_u$$

$$\lim_{N\to\infty}\int_{-\infty}^{\infty} (f_{u,N}-f_u)^2\, dk(u) = 0$$

$$f_{u,N} \equiv S_{n=1}^{N} \phi_1(n,u) f(n)$$

一方，更に次の展開も可能である：

$$f(n)=\frac{1}{\pi k_0}\int_{-\infty}^{\infty}\xi(n,u)f_u\,dk(u)$$

以上の色々の展開に於いて基本的な役割を果しているのは $k(u)$ であって，その意味は次の様にも云われる：

即，$k(u)$ は有限鎖（$1\sim N$）についての step-function $k_N(u)$ の limit function でもある：但し，$k_N(u)$ としては，

(1) $u=u_0$ に於いて 0．

(2) $\lambda_{\mu,N}$ を通る時，$\pi r_{\mu,N}$ だけ増大する

(3) $\lambda_{\mu,N}$ 以外の点では一定．

(4) $\lambda_{\mu,N}$ に於いては，$\frac{1}{2}\{k_N(\lambda_{\mu,N}-0)+k_N(\lambda_{\mu,N}+0)\}$

$k(u)$ がもっている此の性質の故に，case (iii) に於ける展開式はそのまゝの形で discrete spectrum をも含む場合に有効である．

§4. Bra-ket vector formalism

今迄に得られた結果を演算子を用いての形に書換へてみよう：

vector

$$\langle n|f\rangle \equiv M_n^{\frac{1}{2}}f(n)\equiv\overline{\langle f|n\rangle}$$

difference operator

$$\langle n|L|n+1\rangle = k_n/(M_nM_{n+1})^{\frac{1}{2}}$$

$$\langle n|L|n\rangle = -(k_n + k_{n-1})/M_n$$

$$\langle n|L|n-1\rangle = k_{n-1}/(M_n M_{n-1})^{\frac{1}{2}}$$

此れら以外は総て 0 とする．

Green's operator

$$\langle n|G(\lambda)|m\rangle = M_n^{\frac{1}{2}} G(n,m;\lambda)\, M_m^{\frac{1}{2}}$$

scalar product

$$\langle g|f\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \langle g|n\rangle\langle n|f\rangle = \overline{\langle f|g\rangle} \quad , \quad f, g \in S^2 .$$

此れら新たに定義された量を用いて，§3 に於ける結果を次の形にまとめる事が出来る：

$$\sum_{n=1}^{\infty} |n\rangle\langle n| = 1 \quad , \qquad \langle n|m\rangle = \delta_{n,m}$$

$$\begin{cases} \langle \psi_\mu|\psi_\nu\rangle = \delta_{\mu,\nu} \\ \frac{1}{\pi k_0}\langle \phi;u|\phi;u'\rangle\, dk(u) = \delta(u-u')\,du \end{cases} ,$$

$$\begin{cases} \sum_\mu |\psi_\mu\rangle\langle\psi_\mu| = 1 \\ \frac{1}{\pi k_0}\int_{-\infty}^{\infty} |\phi;u\rangle\, dk(u)\langle\phi;u| = 1 \end{cases}$$

$$G(\lambda) = (L+\lambda)^{-1}$$

$$= \begin{cases} \sum_\mu |\psi_\mu\rangle \frac{1}{\lambda-\lambda_\mu}\langle\psi_\mu| \\ \frac{1}{\pi k_0}\int_{-\infty}^{\infty} |\phi;u\rangle \frac{dk(u)}{\lambda-u}\langle\phi;u| \end{cases}$$

但し，$\langle\phi;u|f\rangle = f_u$ （$\phi(n,u)$ は必ずしも S^2 ではない）と解釈するものと約束する．

§ 5. Scattering formalism.

continuous spectrum と discrete spectrum が存在している時ル は次の表示を用いると物理的見地からは便利である．

$$m(\lambda)=\mathcal{N}(\lambda)/\mathcal{D}(\lambda)\,,$$ と仮定する

但し，$\mathcal{N}(\lambda),\mathcal{D}(\lambda)$ は upper-half λ-plane から continuous spectrum ル至る迄 singularities を示さないものとする．多くの例題ル於いて斯様な函数を見出す事が可能である．

次の新しい函数を定義して，§ 4 の結果を書換へ得る：

即，
$$\phi_S(n,\lambda)\equiv\bar{\mathcal{D}}(\lambda)\{\bar{\psi}(n,\lambda)-\psi(n,\lambda)\}$$
$$1=\frac{1}{\pi k_0}\int_{-\infty}^{\infty}|\phi_S;u\rangle\rho_S(u)\,du\,\langle\phi_S;u|+\sum_{\mu}|\psi_\mu\rangle\langle\psi_\mu|$$
$$G(\lambda)=\frac{1}{\pi k_0}\int_{-\infty}^{\infty}|\phi_S;u\rangle\frac{\rho_S(u)\,du}{\lambda-u}\langle\phi_S;u|+\sum_{\mu}|\psi_\mu\rangle\frac{1}{\lambda-\lambda_\mu}\langle\psi_\mu|$$

但し，
$$\rho_S(u)\equiv\begin{cases}\dfrac{1}{2i\{\mathcal{N}(u)\bar{\mathcal{D}}(u)-\bar{\mathcal{N}}(u)\mathcal{D}(u)\}}\,, & \text{on the continuum}\\ 0\,, & \text{otherwise}\end{cases}$$

此処ル大切なのは，continuum の上で求められた $\phi_S(n,\lambda)$ の知識からそれを upper half plane へ解析接続して discrete spectrum の知識を知り得る事である：

即，
$$|\psi_\mu\rangle=\sqrt{\frac{\gamma_\mu}{k_0}}\,\frac{-1}{\gamma_\mu\,\bar{\mathcal{D}}(\lambda_\mu)}\lim_{v\to 0^+}iv\,|\phi_S;\lambda_\mu+iv\rangle$$

右辺が存在する総ての λ_μ を求めればよい．

§ 6. 結語

以上ル於いて，半無限鎖の力学ルついてスペクトルの意味を議論した．　同様の議論は両無限鎖ルついても可能であ

って，詳しくは次の論文を参照していただきたいと思います．2，3の例題も含まれています。

Prog. Theor. Phys. Suppl. No. 36 (1966) 55.