

差分演算子のスペクトル理論

北大 理 物理 朝 日 孝

§ 1. 序

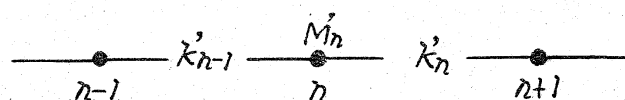
常微分方程式のスペクトル理論については *Titchmarsh* の教科書及びその他の入々々依ってよく調べられているが、差分方程式については必ずしもそうではない様に見受けられる。物理学に於いて屢々問題となる *coupled oscillators* の *system* は正に此の場合に相当するのであるが、物理屋の取扱いは便宜的なものが多くその数学的背景には幾つかの疑問が残されている。

以下、隣り同士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ゐ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、鎖の方向に沿つ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 κ_n とする。

$$M_n \frac{d^2}{dt'^2} u'(n, t') = \kappa_{n-1} \{ u'(n-1, t') - u'(n, t') \} + \kappa_n \{ u'(n+1, t') - u'(n, t') \}$$



次の変数変換を行ふと（ M と κ は後で適当に選ばれる）,

$$M_n = \frac{M_n}{M}, \quad \kappa_n = \frac{\kappa_n}{\kappa}, \quad t = \sqrt{\frac{\kappa}{M}} t', \quad u(n, t) = u'(n, t'),$$

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

$$\text{但し, } \mathcal{L}_n f(n) = \frac{1}{M_n} \left[\kappa_{n-1} \{ f(n-1) - f(n) \} + \kappa_n \{ f(n+1) - f(n) \} \right]$$

更し、初期条件として次が与へられてゐるものとする:

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

ラプラス変換を行つて以上を書換へよう:

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

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

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

此れが解ければ逆変換に依つて初期値問題の解が見出される

$$u(n, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{ic-\infty}^{ic+\infty} u_+(n, \omega) e^{-i\omega t} d\omega + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{ic-\infty}^{ic+\infty} u_-(n, \omega) e^{-i\omega t} d\omega. \\ (c > 0) \qquad \qquad \qquad (c < 0)$$

§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、こゝに半無限鎖について幾分詳しく述べたい。

3.1. 音次方程式

先づ次の音次方程式を問題にしよう：

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

これをみたす解の中、原点での与へられた境界条件をみたしているものを *basic solutions* と呼ぶ：

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

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

これらの一次結合に依つて、 $n = N$ での与へられた境界条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、次の境界条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,
$$m(\lambda; N, \beta) = - \frac{\phi_2(N, \lambda) \cot \beta + \phi_2(N+1, \lambda)}{\phi_1(N, \lambda) \cot \beta + \phi_1(N+1, \lambda)}$$

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

即, $m(\lambda; \beta) \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} m(\lambda; N, \beta)$ が存在し,

$$r(\lambda) \equiv \left| \lambda_0 \left(2 \sum_{n=1}^{\infty} |\phi_1(n, \lambda)|^2 \right)^{-1} \right|; \quad \text{limit circle の半径}$$

故に、 S^2 なる次の函数が存在する：

$$\begin{aligned}\psi(n, \lambda; \beta) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \psi(n, \lambda; N, \beta) \\ &= \phi_2(n, \lambda) + m(\lambda; \beta) \phi_1(n, \lambda)\end{aligned}$$

$$S_{n=1}^{\infty} |\psi(n, \lambda; \beta)|^2 = -\lambda_0 \mathcal{A}m[m(\lambda; \beta)] / \mathcal{A}m[\lambda]$$

但し、 $S_{n=1}^{\infty} \dots = \sum_{n=1}^{\infty} M_n \dots$ ，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* には、その半径が有限なので

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \phi_1(n, \lambda) = 0 \quad \text{が必要となり}$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \lambda_n = \infty \quad \text{が必要となる}$$

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重要でない理由が此処に在る。

(ii) *limit point case* には、

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

$$(iii) \quad |m(\lambda; \beta)| \leq O(v^{-1}), \quad v = \mathcal{A}m[\lambda]$$

以上に掲げた様、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：

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

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

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 に完全な対応が存在してゐる。

前掲の性質 (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。これらの極及び留数を夫々 λ_μ, r_μ ($\mu=1, 2, \dots$) とするならば,

$$S_{n=1}^{\infty} \phi_i(n, \lambda_\mu) \phi_j(n, \lambda_\nu) = \delta_{\mu\nu} \cdot \kappa_0 / r_\mu$$

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

即, $\psi_\mu(n) \equiv \sqrt{\frac{r_\mu}{\kappa_0}} \phi_i(n, \lambda_\mu) \quad , \quad \mu=1, 2, \dots$

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

3.2. 非齊次方程式

適当な条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を形式解を得る為有効) と得る為, 次の非齊次方程式を考へよう:

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

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, $G(n, m; \lambda) \equiv \kappa_0^{-1} \begin{cases} \phi_i(n, \lambda) \psi(m, \lambda) & , n \leq m \\ \psi(n, \lambda) \phi_j(m, \lambda) & , n > m \end{cases}$

一方, $f(n)$ が次の3つの条件をみたしてゐるならば,

$$\begin{cases} f(n), \alpha_n f(n) \in S^2 \\ W_0(f, \phi) = 0 \\ W_N(f, \psi) \rightarrow 0 \quad \text{as } N \rightarrow \infty \end{cases} ,$$

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

以上 2 つの関係式から見られる様に, Green's function G は $(\mathcal{O}_n + \lambda)$ 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たしている. 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 が全て極 (即, 必然的に一次の極) のみの場合を考へよう:

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

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

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

(ii) continuous spectrum case .

$m(\lambda; \beta)$ が実軸上に不連続性のみを示す場合を考へよう:

$$f(n) = \frac{1}{\pi \kappa_0} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(n, u) d\mathcal{F}(u) \quad , \quad n \geq 0 .$$

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

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

$$\kappa(u) = \lim_{v \rightarrow 0^+} \int_{u_0}^u -\operatorname{Im} [m(u+iv)] du$$

$$G(n, m; \lambda) = \frac{1}{\pi \kappa_0} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_1(n, u) \frac{d\kappa(u)}{\lambda - u} \phi_1(m, u)$$

$$\Phi(n, \lambda; f) = \frac{1}{\pi \kappa_0} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_1(n, u) \frac{d\kappa(u)}{\lambda - u} f_u$$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} (f_{u, N} - f_u)^2 d\kappa(u) = 0$$

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

一方、更に次の展開も可能である：

$$f(n) = \frac{1}{\pi \lambda_0} \int_{-\infty}^{\infty} \dot{\phi}(\lambda, u) f_u d\dot{\kappa}(u)$$

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

$\dot{\kappa}(u)$ であって、その意味は次の様にも言われる：

即、 $\dot{\kappa}(u)$ は有限鎖 ($1 \sim N$) に於いての step-function $\dot{\kappa}_N(u)$ の limit function でもある： 但し、 $\dot{\kappa}_N(u)$ としては、

(1) $u = u_0$ に於いて 0

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

(3) $\lambda_{\mu, N}$ 以外の處では一定

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

$\dot{\kappa}(u)$ がもっている此の性質の故に、case (ii) 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た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

$$\langle n | L | n+1 \rangle \equiv \lambda_n / (M_n M_{n+1})^{\frac{1}{2}}$$

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

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

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

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

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：

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

$$\begin{cases} \langle \psi_\mu | \psi_\nu \rangle = \delta_{\mu,\nu} \\ \frac{1}{\pi \kappa_0} \langle \phi; u | \phi; u' \rangle d\kappa(u) = \delta(u-u') du, \end{cases}$$

$$\begin{cases} \sum_\mu |\psi_\mu\rangle \langle \psi_\mu| = 1 \\ \frac{1}{\pi \kappa_0} \int_{-\infty}^{\infty} |\phi; u\rangle d\kappa(u) \langle \phi; u| = 1 \end{cases}$$

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

$$= \begin{cases} \sum_\mu |\psi_\mu\rangle \frac{1}{\lambda - \lambda_\mu} \langle \psi_\mu| \\ \frac{1}{\pi \kappa_0} \int_{-\infty}^{\infty} |\phi; u\rangle \frac{d\kappa(u)}{\lambda - u} \langle \phi; u| \end{cases}$$

但し， $\langle \phi; u | f \rangle = f_u$ ($\phi(n, u)$ は必ずしも S^2 ではなからずとも) と解釋するものと約束する。

§ 5. Scattering formalism.

continuous spectrum と discrete spectrum が存在してゐる時は次の表示を用ゐると物理的見地からは便利である。

$$m(\lambda) = \eta(\lambda) / \vartheta(\lambda), \quad \text{と仮定する}$$

但し、 $\eta(\lambda)$, $\vartheta(\lambda)$ は upper-half λ -plane から continuous spectrum に至る迄 singularities を示さないものとする。多くの例題に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：

$$\text{即, } \phi_s(n, \lambda) = \vartheta(\lambda) \{ \bar{\psi}(n, \lambda) - \psi(n, \lambda) \}$$

$$1 = \frac{1}{\pi \kappa_0} \int_{-\infty}^{\infty} |\phi_s; u\rangle \rho_s(u) du \langle \phi_s; u| + \sum_{\mu} |\psi_{\mu}\rangle \langle \psi_{\mu}|$$

$$G(\lambda) = \frac{1}{\pi \kappa_0} \int_{-\infty}^{\infty} |\phi_s; u\rangle \frac{\rho_s(u) du}{\lambda - u} \langle \phi_s; u| + \sum_{\mu} |\psi_{\mu}\rangle \frac{1}{\lambda - \lambda_{\mu}} \langle \psi_{\mu}|$$

$$\text{但し, } \rho_s(u) = \begin{cases} \frac{1}{2i\pi} \{ \eta(u) \bar{\vartheta}(u) - \bar{\eta}(u) \vartheta(u) \}, & \text{on the continuum} \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

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

$$\text{即, } |\psi_{\mu}\rangle = \sqrt{\frac{\gamma_{\mu}}{\kappa_0}} \frac{-1}{\gamma_{\mu} \vartheta(\lambda_{\mu})} \lim_{v \rightarrow 0^+} i v |\phi_s; \lambda_{\mu} + i v\rangle$$

右辺が存在する全ての λ_{μ} を求めればよい。

§ 6. 結語

以上の如く、半無限鎖の力学に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についても可能である。

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.