論文の内容の要旨

論文題目：**Long-range scattering problem and continuum limit of discrete Schrödinger operators**
(離散シュレディンガー作用素の長距離散乱問題と連続極限)

氏名：只野 之英

1. 導入

d 次元ユークリッド空間 $\mathbb{R}^d$ 上のシュレディンガー方程式

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

は量子力学の基礎方程式であり，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) の挙動は $\mathbb{R}^d$ 上のシュレディンガー作用素

$$(2)\qquad -\Delta_x + V(x) \quad \text{on } L^2(\mathbb{R}^d)$$

のスペクトルの解析によって得られることが知られている．$\mathbb{R}^d$ 上のシュレディンガー作用素の研究は 20 世紀半ばから後半にかけて活発に行われた．その当時の結果については [2], [7] で解説されている．

本論文では，固体中の電子に対するシュレディンガー作用素の強束縛近似によって得られる離散シュレディンガー作用素

$$(3)\qquad H = H_0 + V = -\Delta_{\mathrm{disc}} + V_{\mathrm{disc}}$$

の長距離散乱理論，およびスペクトル理論の観点から見た連続極限を考察する．$V = V_{\mathrm{disc}}$ は格子上の実数値関数とし，$-H_0 = \Delta_x$ はグラフ理論の枠組みでは，最近接点の値の平均値によって離散近似することが多い．考えたい格子の形状（四角形型，三角形型，六角形型など）によって離散シュレディンガー作用素の表現形が変わってくることに注意する．

例 1. (1) 正方格子上の離散シュレディンガー作用素. $u\in\ell^2(\mathbb{Z}^d)$, $x\in\mathbb{Z}^d$ に対し

$$H_{\mathrm{sq}}u(x) = H_{\mathrm{sq},0}u(x) + Vu(x) = -\frac{1}{2d}\sum_{|y-x|=1} u(y) + V(x)u(x).$$

(2) 三角格子上の離散シュレディンガー作用素. $u\in\ell^2(\mathbb{Z}^2)$, $x\in\mathbb{Z}^2$ に対し

$$H_{\mathrm{tr}}u(x) = H_{\mathrm{tr},0}u(x) + Vu(x) = -\frac{1}{6}\sum_{j=1}^{6} u(x+n_j) + V(x)u(x).$$

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.

(3) 六角格子上の離散シュレディンガー作用素. $u = {}^t(u_1,u_2)\in\ell^2(\mathbb{Z}^2;\mathbb{C}^2)$ に対し

$$\begin{aligned} &H_{\mathrm{he}}u(x_1,x_2) = H_{\mathrm{he},0}u(x_1,x_2) + Vu(x_1,x_2) \\ &= -\frac{1}{3}\begin{pmatrix} u_2(x_1,x_2)+u_2(x_1-1,x_2)+u_2(x_1,x_2-1) \\ u_1(x_1,x_2)+u_1(x_1+1,x_2)+u_1(x_1,x_2+1) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} V_1(x)u_1(x) \\ V_2(x)u_2(x) \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

各座標 (x_1,x_2) に対し 2 点（下に示した図 2 にて，座標 (x_1,x_2) が振られた辺の●点が第 1 成分 $u_1(x_1,x_2)$，■点が第 2 成分 $u_2(x_1,x_2)$）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．

上で挙げた例のほかにも，はしご型，ダイヤモンド型，カゴメ格子型など様々な形の格子上で離散シュレディンガー作用素を考察することができ，安藤-磯崎-森岡 [1] で多くの例を見つけることができる．

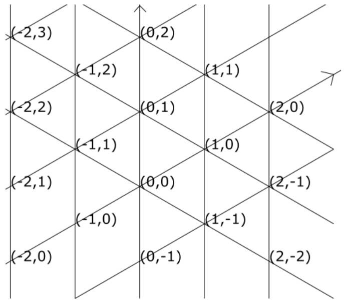

図 1. 三角格子.

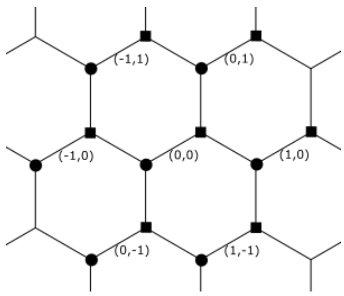

図 2. 六角格子.

2. 研究の背景

2.1. 散乱問題.

・*(2)* に対する既知の結果. $\mathbb{R}^d$ 上のシュレディンガー作用素 (2) において，次の結果が知られている（Dereziński-Gérard[3], Yafaev[10] を参照）.

- $V(x)$ が短距離型（$\exists\rho > 1,\ C > 0$ s.t. $|V(x)| \leq C(1+|x|)^{-\rho}$）のとき，波動作用素 $W^{\pm} := \text{s-}\lim_{t\to\pm\infty} e^{it(-\Delta_x+V(x))}e^{-it(-\Delta_x)}$ が存在し，漸近完全，すなわち $W^{\pm}$ の値域が $-\Delta_x + V(x)$ の絶対連続部分空間 $\mathcal{H}_{\mathrm{ac}}(-\Delta_x + V(x))$ に一致する（$\operatorname{Ran} W^{\pm} = \mathcal{H}_{\mathrm{ac}}(-\Delta_x + V(x))$）.
- $V(x)$ が長距離型（$\exists\rho \in (0,1],\ C > 0$ s.t. $|V(x)| \leq C(1+|x|)^{-\rho}$）のとき，波動作用素 $W^{\pm}$ は存在するとは限らないが,「$V(x)$ に微分の条件をさらに仮定」すれば「修正波動作用素」が存在し,「漸近完全」である.

絶対連続部分空間の元は「散乱状態」と呼ばれるため，波動作用素が存在して漸近完全のとき，$W^{\pm}$ は $-\Delta_x$ の散乱の情報と $-\Delta_x + V(x)$ の散乱の情報の間に 1 対 1 対応を与える．これは，遠方で減衰している外力場 $V(x)$ の中で運動する粒子のうちはるか遠方に飛んでいくものの挙動を等速直線運動で近似することと対応しており，古典力学と量子力学の密接な関係を示唆している.

また，$V(x)$ が長距離型のときの「修正波動作用素」はいくつか知られているが，いずれの構成法でも外力場 $V(x)$ の中での古典力学が関わっている．例えば，磯崎-北田 [4] で提唱された磯崎-北田型の修正波動作用素では次のアイコナール方程式

$$|\nabla_x\varphi(x,\xi)|^2 + V(x) = |\xi|^2, \quad (x,\xi) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \tag{4}$$

の解 φ が用いられる.

・離散シュレディンガー作用素に対する先行研究. シュレディンガー作用素と同様に，V が短距離型（$\exists\rho > 1,\ C > 0$ s.t. $|V(x)| \leq C(1+|x|)^{-\rho}$）のとき，波動作用素 $W^{\pm} := \text{s-}\lim_{t\to\pm\infty} e^{itH}e^{-itH_0}$ が存在し漸近完全 ($\operatorname{Ran} W^{\pm} = \mathcal{H}_{\mathrm{ac}}(H)$) であることが知られている.

一方，V が長距離型（$\exists\rho \in (0,1],\ C > 0$ s.t. $|V(x)| \leq C(1+|x|)^{-\rho}$）のとき，(2) の場合と同様に波動作用素 $W^{\pm}$ の存在は一般には期待できないため修正波動作用素を考える必要がある．先行研究として，中村 [5] による正方格子の場合の結果があり，離散フーリエ変換を介して $H_{\mathrm{sq},0}$ から得られる関数 $h_{\mathrm{sq},0}$（次節を参照）に付随するトーラス $\mathbb{T}^d$ 上のハミルトン力学を解析することで修正波動作用素を構成した.

2.2. 離散シュレディンガー作用素の連続極限.

離散シュレディンガー作用素は，先に述べた導出の他にも，シュレディンガー作用素 (2) のラプラシアン Δ_x および V を離散化したものと解釈することもできる．特に，格子幅が $h > 0$ の正方格子 $h\mathbb{Z}^d = \{hn \mid n \in \mathbb{Z}^d\}$ の上での離散シュレディンガー作用素 H_h を，$u \in \ell^2(h\mathbb{Z}^d)$ に対して

$$H_h u(x) := h^{-2}\sum_{j=1}^{d}\left(2u(x) - u(x+he_j) - u(x-he_j)\right) + V(x)u(x),\ x \in h\mathbb{Z}^d \tag{5}$$

と定義すると，$u(x \pm he_j)$ の h についてのテーラー展開を思い出せば H_h は $h \to 0$ のときシュレディンガー作用素 $H = -\Delta + V(x)$ に近づくと予想できる．

実際にこの描像は当然視されており，物理学においてシュレディンガー方程式 (1) の近似解を数値計算で求めることが頻繁に行われている．また，数値解析の分野おいても時空間で離散化したシュレディンガー方程式の解の挙動が研究されている．しかし，筆者の知る限りでは，離散シュレディンガー作用素がシュレディンガー作用素の近似になっていることをスペクトル理論の観点で考察されている研究は Rabinovich[6] のみであり，より深い解析が必要であると考えた．

3. 主結果 1：長距離散乱問題

3.1. $H_{\mathrm{sq}}, H_{\mathrm{tr}}$ を含むクラスの作用素に対する長距離散乱理論の結果を紹介する．$f : \mathbb{Z}^d \to \mathbb{C}$, $V : \mathbb{Z}^d \to \mathbb{R}$ とし，H_0, H を

$$H_0 u(x) = \sum_{y \in \mathbb{Z}^d} f(y) u(x-y), \quad H = H_0 + V$$

とおく．離散フーリエ変換 $F : \ell^2(\mathbb{Z}^d) \to L^2(\mathbb{T}^d)$ を $Fu(\xi) = (2\pi)^{-\frac{d}{2}} \sum_{x \in \mathbb{Z}^d} e^{-ix\cdot\xi} u(x)$, $\xi \in \mathbb{T}^d = [-\pi, \pi)^d$ とすると，$H_0 u(x) = F^*(h_0(\cdot) Fu(\cdot))(x)$，ただし

$$h_0(\xi) = \sum_{x \in \mathbb{Z}^d} e^{-ix\cdot\xi} f(x),$$

となる．ここで次を仮定する．

仮定 2. (1) $h_0 \in C^\infty(\mathbb{T}^d; \mathbb{R})$ であり，$v(\xi) = \nabla_\xi h_0(\xi)$, $A(\xi) = {}^t\nabla_\xi \nabla_\xi h_0(\xi)$ とおくと $\{\xi \in \mathbb{T}^d \mid v(\xi) = 0 \text{ または } \det A(\xi) = 0\}$ は $\mathbb{T}^d$ 上ルベーグ測度 0 である．

(2) ある $\rho > 0$, $C_\alpha > 0$ と V の拡張 $\tilde{V} \in C^\infty(\mathbb{R}^d)$ が存在して，$|\partial_x^\alpha \tilde{V}(x)| \le C_\alpha (1 + |x|)^{-|\alpha|-\rho}$ が任意の $x \in \mathbb{R}^d$ と多重指数 α で成り立つ．

正方格子，三角格子の場合，それぞれ

$$h_{\mathrm{sq},0}(\xi) = \frac{1}{d} \sum_{j=1}^d \cos \xi_j, \ h_{\mathrm{tr},0}(\xi) = -\frac{1}{3}(\cos \xi_1 + \cos \xi_2 + \cos(\xi_1 - \xi_2))$$

であるから仮定 2 (1) をみたすことが分かる．

定理 3 ([8])**.** $\mathcal{T} = \{h_0(\xi) \mid \xi \in \mathbb{T}^d, v(\xi) = 0\}$ とおく．仮定 2 の下で，次をみたす $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$ 上の作用素 J が存在する：任意の $\Gamma \Subset h_0(\mathbb{T}^d) \backslash \mathcal{T}$ 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，$\mathbb{R}^d \times \mathbb{T}^d$ のある部分領域上の eikonal 方程式

$$h_0(\nabla_x \varphi(x, \xi)) + \tilde{V}(x) = h_0(\xi), \quad (x, \xi) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{T}^d,$$

の解 φ を用いて構成され，離散シュレディンガー作用素でも「古典力学」が重要な役割を果たすことが分かる．

3.2. 六角格子の場合. 考えるヒルベルト空間が $\ell^2(\mathbb{Z}^2; \mathbb{C}^2)$ である点で定理 3 と状況が異なるが，次の定理が示される．

定理 4 ([9])**.** $\mathcal{T}_{\mathrm{he}} = \{0, \pm1, \pm3\}$ とおく．$\mathbb{Z}^2$ 上の実数値関数 V_1, V_2 は $V_1 = V_\ell + V_{s1}$, $V_2 = V_\ell + V_{s2}$ と分解され，V_ℓ は仮定 2 (2) をみたし，V_{sj} は短距離型とする．このとき，任意の $\Gamma \Subset [-3, 3] \backslash \mathcal{T}_{\mathrm{he}}$ に対して作用素 $J = J_\Gamma$ が存在して，修正波動作用素

$$W_J^\pm(\Gamma) = \operatorname*{s-lim}_{t \to \pm\infty} e^{itH_{\mathrm{he}}} J e^{-itH_{\mathrm{he},0}} E_{H_{\mathrm{he},0}}(\Gamma)$$

が存在し，定理 3 と同様の性質 i), ii), iii) が成り立つ．

$\mathcal{F} := F \oplus F$ とおくと，作用素として $\mathcal{F} \circ H_{h0} \circ \mathcal{F}^* = -\begin{pmatrix} 0 & \overline{\alpha(\xi)} \\ \alpha(\xi) & 0 \end{pmatrix}$, $\alpha(\xi) := 1 + e^{i\xi_1} + e^{i\xi_2}$, であり，$\mathcal{T}_{\mathrm{he}}$ は上の行列の固有値 $\pm|\alpha(\xi)|$ の停留点および縮退するエネルギーに対応している．

4. 主結果 2：格子幅を狭めたときの連続極限

(2) は $L^2(\mathbb{R}^d)$，(5) は $\ell^2(h\mathbb{Z}^d)$ 上の作用素のため，2 つのヒルベルト空間 $L^2(\mathbb{R}^d)$, $\ell^2(h\mathbb{Z}^d)$ をつなぐ作用素が必要である．自然な構成法として，$\varphi \in L^2(\mathbb{R}^d)$ を一つ固定し，$P_h : L^2(\mathbb{R}^d) \to \ell^2(h\mathbb{Z}^d)$ を

$$P_h u(z) := h^{-d} \int_{\mathbb{R}^d} \overline{\varphi(h^{-1}(x-z))} u(x) dx, \quad h > 0,\ z \in h\mathbb{Z}^d \tag{6}$$

とするものがある．今回の結果では，φ をうまくとることで H_h が H にノルムレゾルベントの意味で漸近することを証明した．定理の主張の中で共役作用素 P_h^* が現れるが，$\ell^2(h\mathbb{Z}^d)$ のノルムとして $\|u\|_h = h^{\frac{d}{2}} \left(\sum_{x \in h\mathbb{Z}^d} |u(x)|^2\right)^{\frac{1}{2}}$ を取ることに注意する．

定理 5. φ を $\hat{\varphi} \in C_c^\infty\left((-2\pi, 2\pi)^d\right)$ かつ $\sum_{n \in \mathbb{Z}^d} |\hat{\varphi}(\xi + 2\pi n)|^2 = 1$, $\xi \in \mathbb{R}^d$，ただし $\hat{\varphi}(\xi) := \int_{\mathbb{R}^d} e^{-ix\cdot\xi} \varphi(x) dx$，を満たすものを一つ取り，$P_h$ を (6) で定義する．V は下に有界な実数値連続関数で次を満たすと仮定する: $M := \inf_{x \in \mathbb{R}^d} V(x) - 1$ とおくと $(V(x) - M)^{-1}$ は一様連続で，ある $\varepsilon > 0$ と $C_1, C_2 > 0$ に対して

$$C_1(V(x) - M) \le V(y) - M \le C_2(V(x) - M) \quad \text{if} \quad |x - y| < \varepsilon \tag{7}$$

が成り立つ．

このとき，任意の $\mu \in \mathbb{C} \backslash \mathbb{R}$ に対して

$$P_h^*(H_h - \mu)^{-1} P_h - (H - \mu)^{-1} \to 0,\ h \to 0 \tag{8}$$

が作用素ノルムの収束の意味でが成り立つ．

定理 5 の系として，格子幅を狭めることで両者のスペクトルが漸近することが分かる．これは (8) がノルム収束の意味で成り立つことから示せる．

系 6. V が定理 5 の仮定を満たすならば，次が成り立つ：

$$d_{\mathrm{H}}\left(\sigma((H_h - M)^{-1}), \sigma((H - M)^{-1})\right) \to 0, \quad h \to 0. \tag{9}$$

ただし，$d_{\mathrm{H}}(X, Y) = \max\left(\sup_{x \in X} d(x, Y), \sup_{y \in Y} d(y, X)\right)$ はハウスドルフ距離である．

References

[1] K. Ando, H. Isozaki, H. Morioka: Spectral properties of Schrödinger operators on perturbed lattices. Ann. Henri Poincaré **17** (2016), 2103-2171.

[2] H.L.Cycon, R.G.Froese, W.Kirsch, B.Simon, Schrödinger Operators. Springer Verlag (1987)

[3] J. Dereziński, C. Gérard: Scattering Theory of Classical and Quantum N-Particle Systems. Springer Verlag, 1997.

[4] 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.

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

[6] V. Rabinovich: Wiener algebra of operators on the lattice $(\mu\mathbb{Z})^n$ depending on the small parameter $\mu > 0$. Complex Variables and Elliptic Equations **58** (2013), No. 6, 751–766.

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

[8] Y. Tadano: Long-range scattering for discrete Schrödinger operators. To appear in Ann. Henri Poincaré (preprint, arXiv:1605.02466).

[9] Y. Tadano: Long-range scattering theory of discrete Schrödinger operators on the hexagonal lattice. Preprint

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