数理解析研究所講究録
994巻 1997年 168-183

A solvable model for line interaction

福井高専　島田伸一 (Shin-ichi Shimada)

§0. 問題設定

まず、研究の動機を述べる。それは”電子の粒子と波動の二重性”を示した外村の実験にある。以下、「T」（外村彰著　「量子力学を見る」（岩波））より、著者の了解を得て、実験の概要と結果の図を掲載させていただく。詳しくは、上記著書を見ていただきたい。

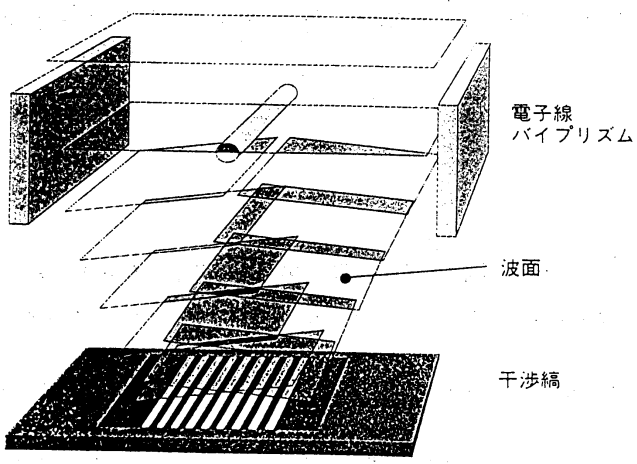


図 19　電子線バイプリズム．細い糸状の中心電極と両側のアース電極から構成されている．糸にプラスの電位を与えると，両側を通る電子は中央に引きつけられて下面で重なり合う．ここに干渉縞が生じる．

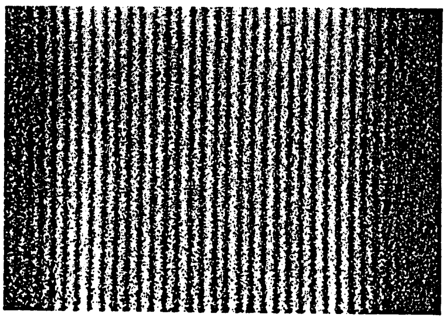


図 20　電子線バイプリズムによる干渉縞の写真

〔T〕 P. 37, 38

この実験から、電場の存在は無視することにして（無視できるかどうかわからないが、類似物として）、電子の直線上にのみサポートを持つポテンシャルによる散乱現象と考えると、その波動関数の絶対値の２乗が干渉縞の様なものを表わすであろうと予想される。そこで次ぎのような問題を考える。

問題：

（１）直線上にのみサポートがあるポテンシャルをもつ*Schrodinger* 作用素を定義せよ。これは、$-\Delta|_{C_0^\infty(\mathbf{R}^3\setminus\{(x,0,0)\})}$の適当な自己共役拡張を定義することである。もっと一般に$-\Delta|_{C_0^\infty(\mathbf{R}^3\setminus\{(x,0,0)\})}$のすべての自己共役作用素を決定せよ。

（２）（１）の作用素のスペクトルの構造を調べよ。$-\infty$に集積する固有値を持つか、正の固有値を持つか等に興味がある。

(3) 散乱作用素の運動量空間での積分核を求めよ。この積分核を波動関数と考えその絶対値の２乗が干渉縞の様になるか調べよ(§２を参照されたい)。

§１. Schrodinger 作用素

考える自己共役作用素を定義する。ポテンシャルといっても通常のものではなくサポートが直線上にあるものなので考える作用素は$-\Delta|_{C_0^\infty(\mathbf{R}^3\setminus\{(x,0,0)\})}$の自己共役拡張となっているはずである。$-\Delta|_{C_0^\infty(\mathbf{R}^3\setminus\{(x,0,0)\})}$のすべての自己共役拡張を求めることもできる（§４）が散乱振幅まで求めたいので、計算が簡単になる次の作用素から出発する。まず仮定を述べる。

仮定：$\psi(x)=q(x_1)\otimes\delta(x_2,x_3)$, $x=(x_1,x_2,x_3)$, δ は２次元ディラックのデルタ関数とする。$q(x_1):\mathbf{R}\to\mathbf{C}$に次の仮定をおく。

１）ある$\varepsilon>1, M>0$があって　$|q(x_1)|\le M\langle x_1\rangle^{-\varepsilon}$,　$\left(\langle x\rangle=\sqrt{1+|x|^2}\right)$が成り立つ。

２）$\hat{q}$（フーリエ変換、Fqとも表わす）はC^1で$\hat{q}(0)\neq 0$とする。

$\psi\in H^{-2}(\mathbf{R}^3)$となっている（§３　参照）。このとき次の作用素$H_{00}$を考える。

定義：$Dom(H_{00})=\{u\in H^2(R^3);(u,\psi)=0\}$,　$H_{00}=-\Delta$.

ここで$H^m(\mathbf{G})$は$\mathbf{G}$上の階数mのソボレフ空間、（、）は$L_2(\mathbf{R}^3)$の内積（H^2とH^{-2}の元とのペアリング）を表す。H_{00}は閉作用素で不足空間は

$$[Ran(H_{00}\pm i)]^{\perp}=L.h.[R_0(\pm i)\psi]$$

とわかる。ここで、

$$H_0 = \left(-\Delta\big|_{C_0^\infty(\mathbf{R}^3)}\right)^- \quad (\text{-は閉包}),\ R_0(z) = (H_0 - z)^{-1} : H^s(\mathbf{R}^3) \to H^{s+2}(\mathbf{R}^3)$$

である。不足指数(1,1)であることがわかるので、ケーリー変換を用いてH_{00}のすべての自己共役拡張は、$\theta \in [0,2\pi)$をパラメータとして次のH_θで尽くされる（§3 参照）。

定理：$Dom(H_\theta) = \left\{v + c\left[R_0(i)\psi - e^{i\theta}R_0(-i)\psi\right]; v \in Dom(H_{00}), c \in C\right\}$,

$$H_\theta\left(v + c\left[R_0(i)\psi - e^{i\theta}R_0(-i)\psi\right]\right) = H_{00}v + ic\left[R_0(i)\psi + e^{i\theta}R_0(-i)\psi\right].$$

ここでH_0は$\theta=0$に対応する。このような自己共役拡張の作り方はPoint interaction の一般化として「GHM」で考えられている。また「KS」はランク１の摂動の一般論を展開している。後者のさらなる展開はこの研究集会のKuroda-Nagataniの講演で与えられている。$supp\ \psi = K$とおくと$|K| = 0$（$\mathbf{R}^3$のルベーグ測度）であり、H_θは$-\Delta\big|_{C_0^\infty(\mathbf{R}^3\setminus K)}$の自己共役拡張にもなっている。§3では$-\Delta\big|_{C_0^\infty(\mathbf{R}^3\setminus K)}$のすべての自己共役拡張を求める。

$H^{-2}(R^3)$ではH_θの作用は$u \in Dom(H_\theta)$に対して

$$H_\theta u = -\Delta u + A_\theta^{-1}(-i)\left((H_\theta + i)u, R_0(i)\psi\right)\psi$$

である。ここで

$$A_\theta(z) = (-i + \lambda_\theta)\|R_0(i)\psi\|^2 + (z+i)\left(R_0(z)\psi, R_0(i)\psi\right),\ \|\cdot\| = (\cdot,\cdot), \quad \lambda_\theta = cot\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

である。またリゾルベントは

$$(H_\theta - z)^{-1} = R_0(z) - A_\theta^{-1}(z)\left(R_0(z)\cdot, \psi\right)R_0(z)\psi$$

と書ける。これより、

定理：$z \in \sigma_p(H_\theta)$ （点スペクトル）$\Leftrightarrow$ $A_\theta(z) = 0.$

がわかる。不足指数(1,1)なので固有値の個数は高々１個である。

§２． 散乱

散乱の一般論をやり、我々の場合波動関数をどうとるか考える。波動作用素、散乱作用素はそれぞれ

$$W_\pm = \lim_{t\to\pm\infty} e^{itH_\theta} e^{-itH_0}, \quad S = W_+^* W_-$$

で定義される。リゾルベントの差がトレースクラスに入っているので

定理： 1）波動作用素が存在して完全、
2）$\sigma_{ac}(H_\theta) = [0,\infty)$ （絶対連続スペクトル）、
3）$\sigma_{sc}(H_\theta) = \phi$ （特異連続スペクトル）。

3）は[P;p.108 Th.8.1] のEnssの方法からわかる。運動量空間での散乱作用素の表示を求めようとすると、リゾルベントの表現式からわかるように$\lim_{\varepsilon\downarrow 0} A_\theta(\lambda \pm i\varepsilon)$の計算が必要である。

補題：$\lambda > 0$とする。このとき、

(1) $$A_\theta(\lambda \pm i0) := \lim_{\varepsilon\downarrow 0} A_\theta(\lambda \pm i\varepsilon) = \frac{1}{4\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\xi_1 \left|\hat{q}(\xi_1)\right|^2 \left\{\lambda_\theta \tan^{-1}\left(\frac{1}{\xi_1^2}\right) + \frac{1}{2}\log\left(\xi_1^4 + 1\right) - \log\left|\xi_1^2 - \lambda\right| \pm i\pi\chi_{\{|\xi_1|\le\sqrt{\lambda}\}}(\xi_1)\right\},$$

(2) $A_\theta(\lambda \pm i\varepsilon)$ は(λ,ε)について$(0,\infty)\times[0,1]$で連続。

ここでχ_AはAの定義関数である。 $Im\, A_\theta(\lambda \pm i0) = \pm\frac{1}{4}\int_{-\sqrt{\lambda}}^{\sqrt{\lambda}} d\xi_1 \left|\hat{q}(\xi_1)\right|^2$ となるので、仮定 $\hat{q}(0) \neq 0$ から $A_\theta(\lambda \pm i0) \neq 0$ がわかる。さて、[K]に従って一般化されたフーリエ変換$F_\pm$を

定義： $F_\pm := FW_\pm^*$

で定義する。このとき、次ぎが得られる。

定理： $$\varphi_\pm(x,\xi) := e^{i\xi\cdot x} - (2\pi)^{\frac{-3}{2}} A_\theta^{-1}\left(|\xi|^2 \mp i0\right)\overline{\hat{\psi}(\xi)}\left[R_0\left(|\xi|^2 \mp i0\right)\psi\right](x)$$

$$= e^{i\xi\cdot x} - \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} A_\theta^{-1}\left(|\xi|^2 \mp i0\right)\overline{\hat{q}(\xi_1)}\int_{-\infty}^{\infty} dy_1 \frac{e^{\mp i|\xi||x-y_1e_1|}}{|x-y_1e_1|} q(y_1), \quad e_1 := (1,0,0)$$

とおくと

(1) $\left(F_\pm u\right)(\xi) = (2\pi)^{\frac{-3}{2}}\int dx\, \overline{\varphi_\pm(x,\xi)}\, u(x) \quad u \in C_0^\infty(R^3),$

(2) $\left(-\Delta_x - |\xi|^2\right)\varphi_\pm(x,\xi) = -(2\pi)^{\frac{-3}{2}} A_\theta^{-1}\left(|\xi|^2 \mp i0\right)\hat{\psi}(\xi)\psi(x) \quad \text{in} \quad D'(R^3).$

が成り立つ。

定理は$\varphi_\pm(x,\xi)$が$F_\pm$の積分核であり、$\xi \neq 0, \quad x \notin supp\, q \times \{(0,0)\}$のとき

$$\left(-\Delta_x - |\xi|^2\right)\varphi_\pm(x,\xi) = 0$$

なので、$\varphi_\pm(x,\xi)$はH_θの$|\xi|^2$に対する一般化された固有関数になっていることをいっている。これで実際上固有関数展開が得られたので、[I2]に沿った計算で次ぎの一連の結果が得られる。

定理：散乱作用素$S = W_+^* W_-$の運動量空間での表示は次のようになる。
$u \in C_0^\infty(\mathbf{R}^3 \setminus \{0\}), \quad r > 0, \omega \in S^2$に対して

$$FSF^* u(r\omega) = u(r\omega) - \pi i r A_\theta^{-1}(r^2 + i0)\hat{\psi}(r\omega)\int_{S^2} d\omega' \overline{\hat{\psi}(r\omega')}u(r\omega').$$

これより散乱振幅は

定義：　$$F(\omega,\omega';r) = \pi A_\theta^{-1}(r^2 + i0)\hat{\psi}(r\omega)\overline{\hat{\psi}(r\omega')}$$

で定義される。$|F(\omega,\omega';r)|^2$はエネルギーr^2でω'方向から入射した粒子がω方向に散乱されていく割合を表わす。$|x| \to \infty$のとき

$$\overline{\varphi_+(x,\xi)} = e^{-\xi \cdot x} - \frac{1}{4\pi^2} F(\omega_\xi, \omega_x; |\xi|)\frac{e^{i|\xi||x|}}{|x|} + O\left(\frac{1}{|x|^2}\right)$$

となることが分かる。散乱行列S_rは

定義：　$r > 0$に対して　$S_r : L_2(S^2) \to L_2(S^2)$,

$$S_r u(\omega) := u(\omega) - ir\int_{S^2} d\omega' F(\omega,\omega';r)u(\omega')$$

で定義される。このとき、

定理：（1）S_rはユニタリ作用素。
（2）$S_r - 1$はランク1、特にトレースクラスの作用素。
（3）$q(x_1)$が実数値関数ならば$F(\omega,\omega';r) = F(-\omega',-\omega;r)$.

（3）はtime reversal invariance を言っている。即ち、ω'方向から入射した粒子がω方向に散乱されていく割合と$-\omega$方向から入射した粒子が$-\omega'$方向に散乱され

ていく割合が等しいということである。散乱全断面積$\sigma_{tot}(r,\omega)$は

定義： $\sigma_{tot}(r,\omega) := \int_{S^2} d\omega' 4\pi^2 \left|F(\omega',\omega;r)\right|^2$

で定義される。これはω方向から入射した粒子が散乱される割合を表わす。散乱行列のユニタリ性から導かれる光学定理を利用して、

定理： $\omega = (\omega_1, \omega_2, \omega_3) \in S^2$として

$$\sigma_{tot}(r,\omega) = \frac{\pi\left|\hat{q}(r\omega_1)\right|^2}{2r\left|A_\theta(r^2+i0)\right|^2} \int_{|\xi_1|\le r} d\xi_1 \left|\hat{q}(\xi_1)\right|^2$$

が得られる。

さて、ここで波動関数の話しに戻る。通常のポテンシャルの場合を思い出そう。標的に平面波$e^{i\xi\cdot x}$を入射したとき、散乱されて出てくる変形された平面波$\varphi_\pm(x,\xi)$はリップマン-シュウィンガー方程式の解で与えられる。Ikebe（［I 1］）は

$H = -\Delta + q(x)$ in $L_2(\mathbf{R}^3)$, $q(x) = O\left(|x|^{-2-\varepsilon}\right)$ $(\varepsilon > 0)$, $|x| \to \infty$ に対して、

1）$\varphi_\pm(x,\xi)$をリップマン-シュウィンガー方程式：

$$\varphi_\pm(x,\xi) = e^{i\xi\cdot x} - \frac{1}{4\pi}\int_{\mathbf{R}^3} \frac{e^{\mp i|\xi||x-y|}}{|x-y|} q(y)\varphi_\pm(y,\xi)dy$$

の

$$\varphi_\pm(x,\xi) - e^{i\xi\cdot x} \in \left\{v \in C(\mathbf{R}^3);\, v(x) \to 0 \quad as \quad |x| \to \infty\right\}$$

という条件の下での一意解として求めた。

2）$\varphi_\pm(x,\xi)$がシュレディンガー作用素の一般化された固有関数であることを示した。

3）　$F_\pm u(\xi) := l.i.m.\, (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \int dy\, \overline{\varphi_\pm(y,\xi)} u(y)$

で一般化されたフーリエ変換を定義し、

4）$F_\pm = FW_\pm^*$を示すことにより波動作用素$W_\pm$の存在と完全性を示した。

さらに、[I2] で $q(x) = O\left(|x|^{-3-\varepsilon}\right)$のとき、

5）散乱作用素の運動量空間での表現：$FSF^* u(\xi) = u(\xi) - i\int_{S^2} d\omega' |\xi| F(\omega,\omega';|\xi|) u(|\xi|\omega')$

を得、$FSF^* - 1$の積分核として定義した散乱振幅$F(\omega, \omega'; r)$が$\varphi_\pm(x,\xi)$の球面波の部分に出てくることを確かめた：

$$\varphi_-(x,\xi) = e^{i\xi\cdot x} - 2\pi F(\omega_x, \omega_\xi; |\xi|)\frac{e^{i|\xi||x|}}{|x|} + o\left(\frac{1}{|x|}\right), \quad |x| \to \infty.$$

物理の定常的理論では、リップマン-シュウィンガー方程式の解を変形された平面波と呼び散乱現象を表わす波動関数と考え、解の球面波に出てくる係数部分を散乱振幅と呼ぶようである。Kuroda [K] は

$$H = -\Delta + q(x) \quad \text{in} \quad L_2(\mathbf{R}^3), \quad q(x) = O\left(|x|^{-2-\varepsilon}\right) \quad (\varepsilon > 0), \quad |x| \to \infty$$ に対して、

1）まず$W_\pm$の存在と完全性をEnss の方法で示した。

2）次ぎに$F_\pm = FW_\pm^*$で一般化されたフーリエ変換$F_\pm$を定義した。

3）$F_\pm$の積分核$\varphi_\pm(x,\xi)$がリップマン-シュウィンガー方程式の$L_2^{-s}(\mathbf{R}^3)$, $\left(s > \frac{3}{2}\right)$での一意解となり、シュレディンガー作用素の一般化された固有関数であることを示した。

これらのことより$\varphi_\pm(x,\xi)$を我々の場合も波動関数と思いたい。

例　　$q(x_1) = \chi_{[-2,2]}(x_1)$を定義関数とする。

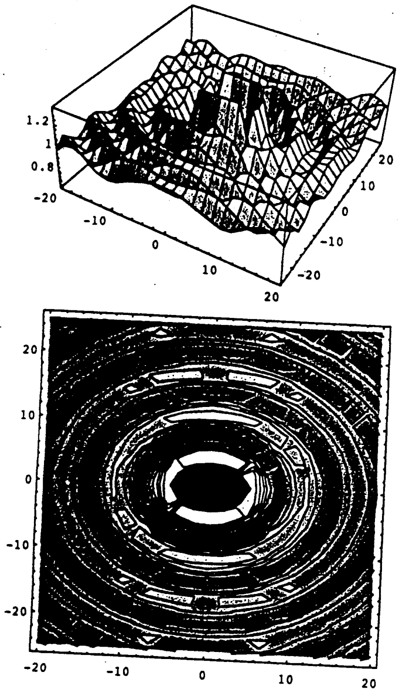
$$\psi(x) = \chi_{[-2,2]}(x_1) \otimes \delta(x_2, x_3), \quad \hat{\psi}(\xi) = 2(2\pi)^{-\frac{3}{2}}\frac{\sin(2\xi_1)}{\xi_1}, \xi = (\xi_1, \xi_2, \xi_3),$$

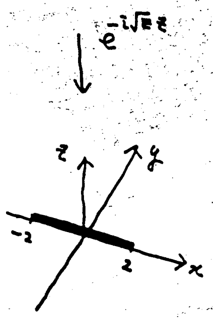
$$A_\theta\left(|\xi|^2 \pm i0\right) = \frac{1}{2\pi^2}\int_{-\infty}^{\infty} d\eta \left\{\frac{\sin(2\eta)}{\eta}\right\}^2 \left\{\lambda_\theta \tan^{-1}\left(\frac{1}{\eta^2}\right) + \frac{1}{2}\log(\eta^4 + 1) - \log\left|\eta^2 - |\xi|^2\right|\right\}$$

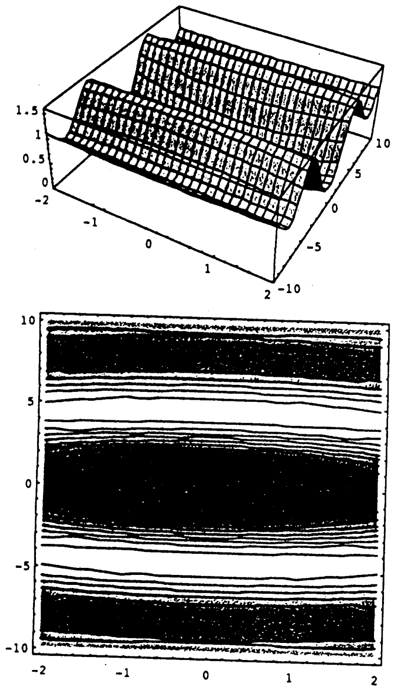
$$\mp \frac{i}{2\pi}\int_{-|\xi|}^{|\xi|} d\eta \left\{\frac{\sin(2\eta)}{\eta}\right\}^2,$$

$$\varphi_+(x,\xi) = e^{i\xi\cdot x} - 2A_\theta^{-1}\left(|\xi|^2 - i0\right)\frac{\sin(2\xi_1)}{\xi_1}\int_{-2}^{2} dy_1 \frac{e^{-i|\xi||x - y_1 e_1|}}{4\pi|x - y_1 e_1|}$$

となる。$\varphi_+(x, -\sqrt{E}e_3)$, $e_3 = (0,0,1)$, $x = (x_1, x_2, x_3)$ に対して$\lambda_\theta, x_3, E, a$ を指定して$|\varphi_+(x, -\sqrt{E}e_3)|^2$をMathematica で描いた２、３の絵を紹介する。

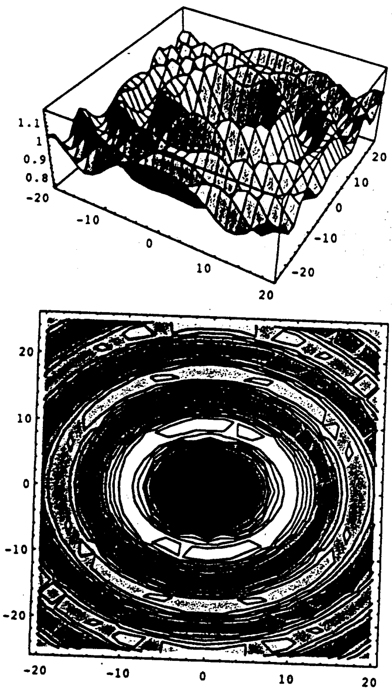


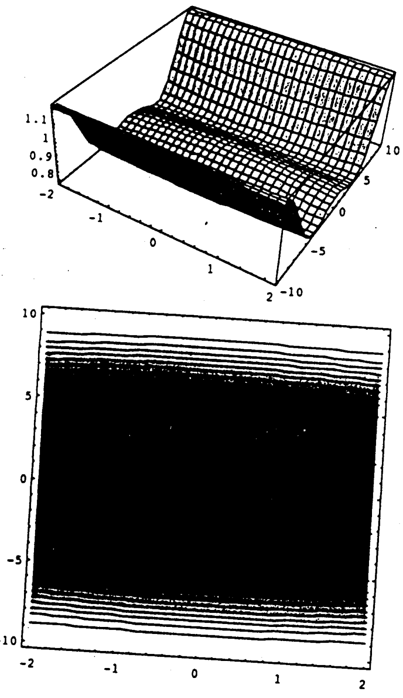




$E = 1$, $\lambda_a = 1$, $z = -1$

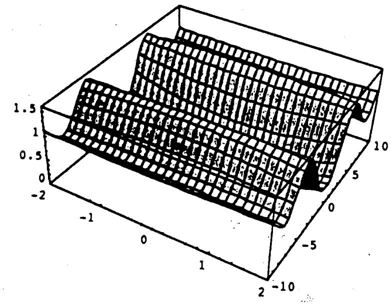
$E = 1$, $\lambda_a = 1$, $z = -1$



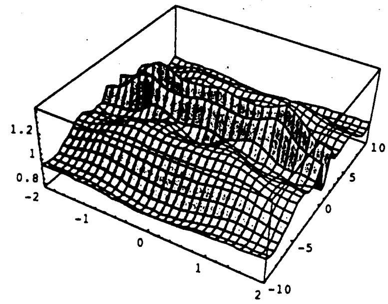


$E = 1$, $\lambda_a = 1$, $z = -10$

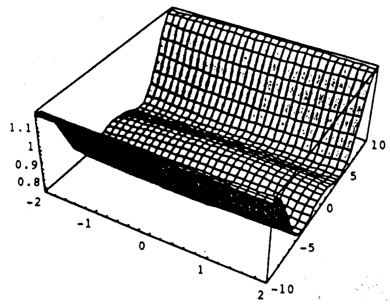
$E = 1$, $\lambda_a = 1$, $z = -10$



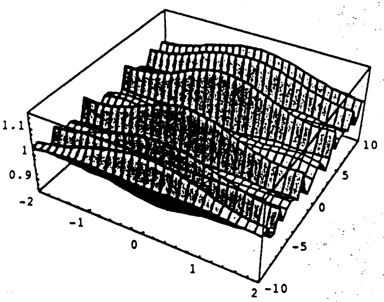
$E = 1$
$\lambda_a = 1$
$z = -1$



$E = 100$
$\lambda_a = 1$
$z = -1$



$E = 1$
$\lambda_a = 1$
$z = -10$



$E = 100$
$\lambda_a = 1$
$z = -10$

§3. $-\Delta|_{C_0^\infty(\mathbf{R}^3\setminus K)}$の自己共役拡張

H_θが$-\Delta|_{C_0^\infty(\mathbf{R}^3\setminus\{(x,0,0)\})}$の自己共役拡張としてどのようにとったものか考える。まず、$-\Delta|_{C_0^\infty(\mathbf{R}^n\setminus K)}$の自己共役性の問題から知られている結果を述べる。

(1) $K=\{0\}$のとき、$-\Delta|_{C_0^\infty(\mathbf{R}^n\setminus K)}$：本質的自己共役 $\Leftrightarrow$ $n\geq 4$.

(2) Kuroda (1996): $K\subset\mathbf{R}^n$；閉集合とする。

$\{u\in H^{-2}(\mathbf{R}^n); \mathrm{supp}\, u\subset K\}=\{0\}\Rightarrow$ $-\Delta|_{C_0^\infty(\mathbf{R}^n\setminus K)}$：本質的自己共役。

(3) Svendsen (1981 [S]): AをC^∞－係数を持つ楕円型線形作用素とし、Kを$\mathrm{co\,dim}K\geq 1$のC^∞－閉多様体とする。さらに、$A|_{C_0^\infty(\mathbf{R}^n)}$が本質的自己共役とする。このとき、

$A|_{C_0^\infty(\mathbf{R}^n\setminus K)}$：本質的自己共役 $\Leftrightarrow$ $\mathrm{co\,dim}K\geq 2\,\mathrm{ord}\,A,$

ここで、$\mathrm{ord}\,A$は微分作用素Aの階数を表わす。この結果より

$-\Delta|_{C_0^\infty(\mathbf{R}^n\setminus K)}$：本質的自己共役 $\Leftrightarrow$ $\mathrm{co\,dim}K\geq 4$

が得られる。

$-\Delta|_{C_0^\infty(\mathbf{R}^n\setminus K)}$のすべての自己共役拡張を求める問題に進む。$K\subset\mathbf{R}^n$;閉集合、$|K|=0$（$\mathbf{R}^n$のルベーグ測度）とする。

定義： $H^{-2}(K):=\{u\in H^{-2}(\mathbf{R}^n); \mathrm{supp}\, u\subset K\}$

と定義する。$H^{-2}(K)\neq\{0\}$の場合を考えていく。$H^{-2}(K)$に内積

$$(u,v)_{-2}:=\int\left(1+|\xi|^4\right)^{-1}\hat{u}(\xi)\overline{\hat{v}(\xi)}\quad\left(=\left(R_0(\pm i)u, R_0(\pm i)v\right)\quad\right)$$

を入れておく。このとき、

補題： $H^{-2}(K)$は$H^{-2}(\mathbf{R}^3)$の閉部分空間かつヒルベルト空間になる。

定義：　$T := -\Delta\big|_{C_0^\infty(\mathbf{R}^n \setminus K)}$

とする。Tの閉包$\overline{T}$の不足空間は次ぎのようになる。

補題：　$\left[Ran\left(\overline{T} \pm i\right)\right]^{\perp} = R_0(\pm i)H^{-2}(K).$

これよりケーリー変換を利用して$\overline{T}$のすべての自己共役拡張が得られる：

（1）$U := \left(\overline{T} - i\right)\left(\overline{T} + i\right)^{-1}$　（$\overline{T}$のケーリー変換）とおく。
(2) $U_1: R_0(i)H^{-2}(K) \to R_0(-i)H^{-2}(K)$,　ユニタリ作用素を定めるごとに
（3）$V := U \oplus U_1: L_2(\mathbf{R}^n) \to L_2(\mathbf{R}^n)$,　ユニタリ作用素が定まり、
（4）$H := i(1+V)(1-V)^{-1}$　で$\overline{T}$のすべての自己共役拡張が定まる。

さて、$K = supp\,\psi$, $\psi = q(x_1) \otimes \delta(x_2, x_3)$のとき、§１の$H_\theta$を与えるユニタリ作用素$V$を決定しよう。

補題：　$\psi_1 = c_0\psi$, $\|\psi_1\|_{-2} = 1$となるようにc_0を定め、ψ_1に$\psi_2, \psi_3, \cdots$を必要なら付け加えて$\{\psi_j\}_j$ を$H^{-2}(K)$の正規直交基底とする。このとき$\{R_0(\pm i)\psi_j\}_j$は$R_0(\pm i)H^{-2}(K)$の正規直交基底となる。

直交性が保たれるように$H^{-2}(K)$に内積$(\cdot,\cdot)_{-2}$を入れたのである。

定理：　H_θをTの自己共役拡張とみるときユニタリ作用素Vは

$Ran\left(\overline{T} + i\right)$上では$\left(\overline{T} + i\right)u \mapsto \left(\overline{T} - i\right)u$,

$\left[Ran\left(\overline{T} + i\right)\right]^{\perp} = R_0(i)H^{-2}(K)$上では、

$R_0(i)\psi_1 \mapsto e^{i\theta} R_0(-i)\psi_1$,　$R_0(i)\psi_j \mapsto R_0(-i)\psi_j$, $(j \ge 2)$

ととったものに対応している。H_{00}との関係を述べておくと、

$$Dom(H_{00}) = \overline{L.h.}\left[u, R_0(i)R_0(-i)\psi_j\,;\, j = 2, 3, \cdots,\ u \in \overline{C_0^\infty(\mathbf{R}^3 \setminus K)}^{H^2(\mathbf{R}^3)}\right],$$

$$Ran(H_{00} \pm i) = Ran\left(\overline{T} \pm i\right) \oplus \overline{L.h.}\left[R_0(\pm i)\psi_j\,;\, j = 2, 3, \cdots\right]$$

となっている。

§ 4． $-\Delta|_{C_0^\infty(\mathbf{R}^3\setminus\{(x_1,0,0)\})}$の自己共役拡張のスペクトル

$\mathbf{R}^3$で$K=\{(x_1,0,0)\}$の場合に$-\Delta|_{C_0^\infty(\mathbf{R}^3\setminus\{(x_1,0,0)\})}$のすべての自己共役拡張をもっと具体的に求め、負の固有値について調べる。この場合$\overline{T}$, $H^{-2}(K)$は次ぎのように特徴付けられる。

補題：（1）　$Dom(\overline{T})=\{u\in H^2(\mathbf{R}^3)\,;\,u(x_1,0,0)=0\}$, $\overline{T}u=-\Delta u,$

（2）　$H^{-2}(K)=\{u_0(x_1)\otimes\delta(x_2,x_3)\,;\,u_0\in H^{-1}(\mathbf{R})\}$

ソボレフの補題より$H^2(\mathbf{R}^3)\subset C(\mathbf{R}^3)$である。(2) より不足空間は

$$\left[Ran(\overline{T}\pm i)\right]^\perp=\{R_0(\pm i)(u_0\otimes\delta)\,;\,u_0\in H^{-1}(\mathbf{R})\}$$

となっている。空間$\hat{H}^{-1}$を

定義：　$\hat{H}^{-1}$は$H^{-1}(\mathbf{R})$に内積

$$(u_0,v_0)_{-1}:=\frac{1}{4\pi}\int_{-\infty}^{\infty}d\eta\,\tan^{-1}\left(\frac{1}{\eta^2}\right)\hat{u}_0(\eta)\overline{\hat{v}_0(\eta)}$$

を入れたものとする。

$|u_0|_{-1}=\sqrt{(u_0,u_0)_{-1}}\sim\|u_0\|_{H^{-1}}=\left(\int d\eta\langle\eta\rangle^{-2}|\hat{u}_0(\eta)|^2\right)^{1/2}$となっている。このとき、

補題：　$U_3:\hat{H}^{-1}\to\hat{H}^{-1}$, ユニタリ作用素を定めると、

$U_2:H^{-2}(K)\to H^{-2}(K);\ u_0\otimes\delta\mapsto(U_3u_0)\otimes\delta,$ はユニタリ作用素となり、

$U_1:R_0(i)H^{-2}(K)\to R_0(-i)H^{-2}(K);\ R_0(i)(u_0\otimes\delta)\mapsto R_0(-i)((U_3u_0)\otimes\delta),$ もユニタリ作用素になる。逆に、ユニタリ作用素U_1から順次ユニタリ作用素U_2, U_3が定まる。

これより、

定理：　$U_3:\hat{H}^{-1}\to\hat{H}^{-1}$, ユニタリ作用素を定めるごとに$T$の自己共役拡張$H$は

$$Dom(H)=\{u+R_0(i)(\varphi\otimes\delta)-R_0(-i)((U_3\varphi)\otimes\delta)\,;\,u\in Dom(\overline{T}),\varphi\in\hat{H}^{-1}\},$$

$$H\left(u + R_0(i)(\varphi \otimes \delta) - R_0(-i)((U_3\varphi) \otimes \delta) \right) = \bar{T}u + i\left[R_0(i)(\varphi \otimes \delta) + R_0(-i)((U_3\varphi) \otimes \delta)\right]$$

で尽くされる。

定理： $f(\eta; z) := log(\eta^2 + i) - log(\eta^2 - z)$, $(log 1 = 0)$とおく。$\lambda > 0$とする。$-\lambda$がHの固有値であるための必要十分条件は、ある$\varphi \in \hat{H}^{-1}, \varphi \neq 0$があって

$$(U_3\varphi)^{\wedge}(\eta) = \frac{\overline{f(\eta; -\lambda)}}{f(\eta; -\lambda)} \hat{\varphi}(\eta)$$

が成り立つことである。このとき、$-\lambda$に対応する固有関数は

$$R_0(-\lambda)\left((1 - U_3)\varphi \otimes \delta \right)$$

で与えられる。

例： 任意の正数列$\{\lambda_n\}_{n=1}^{\infty}$, $(\lambda_n > 0)$を取る。$-\lambda_n$ $(n = 1, 2, \cdots)$を固有値とする自己共役拡張Hが存在することを示そう。ユニタリ作用素U_3の取り方を指定すればよい。

$$\varphi_n(\eta) := F^{-1}\left(c_n \chi_{(n-1,n]}\right)(\eta), \quad n \in \mathbf{Z}, \quad c_n > 0 \text{は} \|\varphi_n\|_{-1} = 1 \text{となるように取る。}$$

$$\psi_n(\eta) := F^{-1}\left(\frac{\overline{f(\cdot; -\lambda_n)}}{f(\cdot; -\lambda_n)} \hat{\varphi} \right)(\eta), \quad (n = 1, 2, \cdots)$$ とおく。$\{\varphi_n\}_{n \in \mathbf{Z}}$, $\{\psi_n\}_{n=1}^{\infty}$は$\hat{H}^{-1}$の正規直交系となる。

$$\left(\overline{L.h}\,[\varphi_n ; n = 1, 2, \cdots]\right)^{\perp} \supset \overline{L.h}\,[\varphi_n ; n = 0, -1, -2, \cdots],$$

$$\left(\overline{L.h}\,[\psi_n ; n = 1, 2, \cdots]\right)^{\perp} \supset \overline{L.h}\,[\varphi_n ; n = 0, -1, -2, \cdots]$$

だから、$\overline{\varphi_l}$ $(l = 1, 2, \cdots)$を付け加えて$\{\varphi_n, \overline{\varphi_l}\}_{n, l=1}^{\infty}$を$\hat{H}^{-1}$の正規直交基底とし、$\overline{\psi_l}$ $(l = 1, 2, \cdots)$を付け加えて$\{\psi_n, \overline{\psi_l}\}_{n, l=1}^{\infty}$を$\hat{H}^{-1}$の正規直交基底とすることができる。このとき、ユニタリ作用素$U_3 : \hat{H}^{-1} \to \hat{H}^{-1}$は

$$U_3\varphi_n := \psi_n, \quad U_3\overline{\varphi_l} := \overline{\psi_l}, \quad (n, l = 1, 2, \cdots)$$

で決めればよい。これより、Tの自己共役拡張の中には、$-\infty$に収束する固有値をもつものや、多重度∞の固有値をもつもの、本質的スペクトルが実軸の負の部分に出てくるものなどがあることがわかる。

§5. 零固有値、正の固有値

§1で考えた作用素を少し一般にして取り扱う。仮定を述べておく。

仮定： $\psi \in H^{-2}(\mathbf{R}^3)$, $\hat{\psi}$がC^1−で $\hat{\psi}, \nabla\hat{\psi}$が有界とする。

この仮定の下で§1と同じように作用素H_{00}を

$$Dom(H_{00}) = \{u \in H^2(R^3) ; (u,\psi) = 0\}, \quad H_{00} = -\Delta.$$

で定義しH_{00}のすべての自己共役拡張を$\theta \in [0,2\pi)$をパラメータとして次のH_θをえる：

$$Dom(H_\theta) = \{v + c[R_0(i)\psi - e^{i\theta} R_0(-i)\psi] ; v \in Dom(H_{00}),\ c \in \mathbf{C}\},$$

$$H_\theta(v + c[R_0(i)\psi - e^{i\theta} R_0(-i)\psi]) = H_{00}v + ic[R_0(i)\psi + e^{i\theta} R_0(-i)\psi].$$

このH_θについて零固有値、正の固有値を持つための条件を考える。

定理： $\theta \in (0,2\pi)$に対して、

（1） $\hat{\psi}(0) \neq 0 \quad \Rightarrow \quad 0 \notin \sigma_p(H_\theta), \forall\, \theta \in (0,2\pi)$

（2） $\hat{\psi}(0) = 0$のとき、

$$0 \in \sigma_p(H_\theta) \quad \Leftrightarrow \quad \lambda_\theta := \cot\left(\frac{\theta}{2}\right) = -\left\| \frac{1}{|\xi|^2 - i}\hat{\psi} \right\|^{-2} \left\| \frac{1}{|\xi|^2 - i}\frac{\hat{\psi}}{|\xi|} \right\|^2.$$

このとき、固有関数は $F^{-1}\left(\dfrac{\hat{\psi}}{|\xi|^2}\right)$.

例： δを3次元のディラックのデルタ関数とし、$a_1, a_2 \in \mathbf{R}^3, a_1 \neq a_2$ をとる。このとき、$\psi = \delta(x - a_1) - \delta(x - a_2)$ とすれば、θをλ_θの条件を満たすようにとれ、このθに対してH_θが零固有値を持つ。固有関数は$\dfrac{1}{|x - a_1|} - \dfrac{1}{|x - a_2|}$である。

正の固有値の存在の判定条件を述べよう。

定理： $\lambda > 0, \theta \in (0,2\pi)$とし、$\alpha := (\lambda - i) - (\lambda + i)e^{i\theta}, \beta := (1 + i\lambda) - (1 - i\lambda)e^{i\theta}$とおく。このとき、

(1) $\exists \xi_0 \in \mathbf{R}^3 \ s.t. \ |\xi_0| = \sqrt{\lambda}, \hat{\psi}(\xi_0) \neq 0 \quad \Rightarrow \quad \lambda \notin \sigma_p(H_\theta)$

（2） $\hat{\psi}(\xi) = 0 \left(|\xi| = \sqrt{\lambda} \right)$とする。このとき、

$$\lambda \in \sigma_p(H_\theta) \quad \Leftrightarrow \quad \int d\xi \frac{\left(\alpha|\xi|^2 + \beta\right)|\hat{\psi}(\xi)|^2}{\left(|\xi|^4 + 1\right)\left(|\xi|^2 - \lambda\right)} = 0.$$

このとき固有関数は

$$F^{-1}\left(\frac{\hat{\psi}(\xi)}{|\xi|^2 - \lambda} \right)(x)$$

である。

(2) の条件は$\psi = q(x_1) \otimes \delta(x_2, x_3)$のとき$A_\theta(\lambda \pm i0) = 0$となる。

例： $L > 0, \chi \in C_0^\infty(\mathbf{R}), \chi \neq 0, supp\,\chi \subset \{|\xi_1| \geq L\}$をとる。$0 < \lambda < L^2$とし、$\psi := \left(F_{\xi_1}^{-1}\chi\right)(x_1) \otimes \delta(x_2, x_3)$とする。このとき$\theta$を定理（2）の条件を満足するように取れ、この$\theta$に対して$H_\theta$が固有値$\lambda$を持つ。これは$-\Delta|_{C_0^\infty(\mathbf{R}^3 \setminus \{(x_1,0,0)\})}$の自己共役拡張で正の固有値を持つ例である。$\psi$のサポートはx軸全体にひろがっている。

例： $\mathbf{R}^3$で$\psi := \delta(|x| - a), \ (a > 0)$の場合を考える。$\delta$は１次元のデルタ関数とする。自然数$l, m$を取り固定する。$a = \sqrt{2}\,\pi m, \lambda = \frac{\pi^2}{a^2} l^2$のとき$\theta$を定理（2）の条件を満足するように取れ、この$\theta$に対して$H_\theta$が固有値$\lambda$を持つ。固有関数は

$$F^{-1}\left(\frac{\hat{\psi}}{|\xi|^2 - \lambda} \right)(x) = \begin{cases} \frac{(-1)^l a^2}{\pi l} sin\left(\frac{\pi l}{a} |x| \right), & (|x| \leq a) \\ 0, & (|x| > a) \end{cases}$$

である。このH_θは正の固有値を持つので、[IS]でフォームから定義した自己共役作用素とは違うものとなっており、正の固有値を１個しか持たないので、$|x| < a$と$|x| > a$のディリクレラプラシアンの直和にもなっていない。

謝辞： 外村先生には著書の掲載を許可してくださった。東京学芸大の廣川先生には有益な御注意をいただいた。学習院大の黒田先生には$H^{-2}(K)$を使うことを御教示いただいた。福井高専の坪川先生にはmathematicaのてほどきをしていただいた。これらの方々に記して感謝いたします。また本研究は科研費課題番号08640248から援助を受けて行われた。

参考文献

[T] 外村彰：量子力学を見る、岩波。

[KS] A. Kiselev and B. Simon : Rank one perturbations with infinitesimal coupling, J. Functional Anal., 130 (1995), 345-356.

[GHM] A. Grossmann, R. Hoegh-Krohn and M. Mebkhout : A class of explicitly soluble, local, many-center Hamiltonians for one-particle quantum mechanics in two and three dimensions. I, J. Math. Phys., 21 (1980), 2376-2385.

[Sv] E. C. Svendsen : The effect of submanifolds upon essential self-adjointness and deficiency indices, J. Math. Anal. Appl., 80 (1981), 551-565.

[I1] T. Ikebe : Eigenfunction expansions associated with the Schreodinger operators and their applications to scattering theory, Arch. Rational Mech. Anal., 5 (1960), 1-34.

[I2] ______ : On the phase-shift formula for the scattering operator, Pacific J. Math., 15 (1965), 511-523.

[K] S. T. Kuroda : スペクトル理論II、岩波.

[P] P. Perry : Scattering Theory by the Enss Method, Harwood Academic, London (1983).

[IS] T. Ikebe, S. Shimada : Spectral and scattering theory for the Schrodinger operators with penetrable wall potentials, J. Math. Kyoto Univ., 31 (1991), 219-258.