

[研究論文]

# 周期的ポテンシャルを持つ 一次元シュレーディンガー作用素の 繰り込み群特異摂動論による解析

高橋大介

神奈川工科大学 物理非常勤講師

慶應義塾大学 自然科学研究教育センター ポスドク研究員

## Renormalization-group singular perturbation analysis for the one-dimensional Schrödinger operator with periodic potentials

Daisuke A. TAKAHASHI

### Abstract

The wavefunctions and band structures of the one-dimensional Schrödinger operators possessing periodic potentials, which are written as a sum of the exactly-solvable finite-zone potential and the small integrability-breaking perturbation, are investigated using the renormalization-group/envelope (RG/E) method in the singular perturbation theory. Following the RG/E method, we obtain the fundamental equation which generates the solution free from power-law divergence caused by the secular terms. Using it, we provide the perturbative expansions of the eigenfunctions and the eigenvalues both for the non-resonant points, where the new gap does not open, and for the resonant points, where the wavelength of the square of the wavefunction is commensurate with that of the potential and hence the new gap opens. Furthermore, we propose a “patched” solution, which preserves the same analytic properties as the perturbative expansions for all points up to second order and is free from unphysical divergence for any parameter including a resonant wavenumber. These results are illustrated by several elementary examples.

Keywords: renormalization-group/envelope method, Schrödinger operator, elliptic functions

### 1 序文

タイトルにある特異摂動論の説明から始める。一般にある微分方程式を微小パラメータに関する素朴展開で解くと、永年項と呼ばれる幂発散する非物理的な項が出現する。例えば簡単な例として

$$f'' + (k + \delta)^2 f = 0 \quad (1.1)$$

の解は明らかに  $f = e^{i(k+\delta)x}$  であるが、仮に  $\delta \neq 0$  に対する解を知らなかったとして  $f_0 = e^{ikx}$  から出発し  $f = f_0 + \delta f_1 + \delta^2 f_2 + \dots$  という形で  $\delta$  について高次の項を逐次的に決定していくと  $f = e^{ikx}(1 + i\delta x - \frac{\delta^2 x^2}{2} + \dots)$  なる解を得る。これは本来の解の有界性が失われており、物理的に正しい振舞いを捉えられていない。より一般の（何らかの自然科学的考察から導かれたため解は有界であると期待され、数値解もそれを支持するよう

な）非線形あるいは変数係数の微分方程式に対しても類似の解析を行うとしばしば同じ問題に出くわす。特異摂動論とは大雑把に言って、このような永年項の出現によって破綻する素朴摂動展開に適切な処理や修正を施すことで、物理的にもっともらしい振舞いをする解を構成するための理論的枠組みである。

この分野における 90 年代半ばの発展として、繰り込み群の手法を用いた特異摂動法が提唱され [1,2], 後に包絡線の言葉により再定式化・解釈がなされた [3,4]. ここではこれを Renormalization-group/Envelope (RG/E) の手法と呼ぶことにしよう。RG/E の手法によって得られる結果は、古くより知られている理論、例えば、多重尺度法、境界層の理論、Krilov-Bogoliubov-Mitropolsky の方法、等によって得られる結果を特殊ケースとして含み、かつ同じ展開をより高次まで素早くシステマティッ

クに行うことができる。力学系の言葉による数学的基礎付け等もなされている [5, 6].

続いて話題を変え、本研究の動機と RG/E の手法に着目するに至った背景である物性物理学におけるソリトン格子について述べる。物性物理学のいくつかの問題においては楕円関数で書かれる厳密解が時として非常に強力に系を記述することがある。例えば超伝導体、超流動体、有機導体における FFLO 状態 [7, 8], 磁性体のカイラルソリトン格子とその上を伝播するソリトン [9, 10], 冷却原子気体系におけるボース凝縮体のソリトン列車や超固体の上を通過するソリトン [11, 12] 等である。これらの厳密解の背後には古典可積分系、例えば非線形 Schrödinger 方程式, sine-Gordon 方程式とその高階化 (Novikov 方程式) の階層があり、有限個のギャップしか持たない (有限帯ポテンシャル) という特徴を持つ [13, 14]。ところが実験系から来る制限、有限温度効果、量子多体効果などによって非可積分性が入った場合には通常のポテンシャル同様無限個のギャップが開き、これらを素朴摂動論で扱おうと試みると失敗する。ゆえ、まず現象のゼロ次近似として可積分点から出発し、より現実の問題設定に近づけるために摂動項を加える時に、特異摂動の方法が必要となる。

本論文では、上述のような可積分ポテンシャルに摂動項を加える問題の最も基本的な例として、まずは KdV 階層を生成する微分作用素、すなわち Schrödinger 作用素に対しこの問題を定式化する。最終目標は物理の問題で登場する様々な微分作用素に定式を一般化することであるが、KdV 階層はソリトン理論の中でも特に多くの知見が蓄積しているため、有用な理論が作れるか否か試す対象として好適である。KdV 階層には Lamé ポテンシャル, Darboux-Treibich-Verdier (DTV) ポテンシャルといった楕円関数ポテンシャルの族 [15–19] があり (図 1), 本論文では一般的な特異摂動展開をこれらのポテンシャルにも適用できる形で与える。但し扱う具体例は出発点の非摂動系を自由粒子に選んだ場合に留める。楕円関数ポテンシャルへの応用は今後別論文でより詳しく論じたい。

本論文の残りの構成は以下の通りである。2 節では解きたい問題の定義と RG/E の手法における基礎方程式を与え、その導出の概略を述べる。3 節～5 節では実際に摂動解の構成する。3 節ではギャップが開かない通常点 (非共鳴点) での展開、4 節および 5 節では摂動によって新たなギャップが開く共鳴点での摂動展開を与える。6 節では、共鳴点と非共鳴点の摂動展開を両方再現する、大域的に使用可能な“つぎはぎの解”を発見的に構成する。7 節では具体例を与え、8 節ではまとめと今後の課題・展望を述べる。

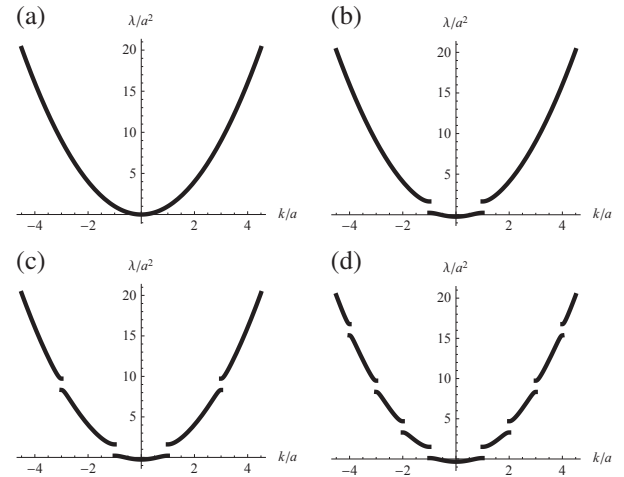


図 1: 周期ポテンシャル中のバンド分散 (概念図であり正確なプロットではない。)  $\pi/a$  はポテンシャルの周期。 (a): 自由粒子。 (b): 1-ギャップ Lamé ポテンシャル  $U_0(x) = 2m \operatorname{sn}^2(x|m)$ 。一般に  $g$ -ギャップ Lamé ポテンシャル  $g(g+1)m \operatorname{sn}^2(x|m)$  は  $k/a = \pm 1, \dots, \pm g$  にギャップを持つ。 (c): DTV ポテンシャルの一例  $U_0(x) = 6m \operatorname{sn}^2(x|m) + 2m \operatorname{cd}^2(x|m)$ 。これは  $k/a = \pm 1, \pm 3$  にギャップを持つが  $\pm 2$  には無い。つまり有限帯ポテンシャルのギャップは必ずしも低エネルギーから順に開くわけではない。 (d): 通常の周期ポテンシャル。全ての  $k/a \in \mathbb{Z}$  がバンド端となる。 (a)～(c) に可積分性をやぶる微小な周期ポテンシャルを加えると (d) のような分散になる。

## 2 基本理論

まず永年項を持たない解を構成する RG/E 理論の基礎方程式を与える。導出の数学的詳細は今後別の論文で報告し、ここでは概略を述べる。

### 2-1 問題の定義

解きたいのは次の一次元 Schrödinger 方程式である：

$$-\psi_{xx} + U^{\text{tot}}(x)\psi = \lambda^{\text{tot}}\psi. \quad (2.1)$$

但し “tot” は total を意味し  $U^{\text{tot}}(x) = U_0(x) + \delta U(x)$  は周期  $\pi/a > 0$  を持つ有界な周期ポテンシャル、 $\lambda^{\text{tot}} = \lambda_0 + \delta\lambda$  はエネルギー固有値である。添字  $x$  は偏微分を表す。 $U_0, \lambda_0$  に対する Bloch 関数解  $f$  は既知とし、その結晶運動量を  $k$  と書く。複素共役  $f^*$  も解で、Wronskian  $W = f f_x^* - f_x f^*$  は  $(f, f^*)$  が線形独立でなくなるバンド端の波動関数でない限り) 非ゼロの純虚数定数である。

我々の目的は微小パラメータ  $\delta$  によってポテンシャルに摂動  $\delta U(x)$  が加わった時の波動関数とエネルギー固有値、特に分散関係あるいはバンド構造を決定することである。固有値の摂動部分  $\delta\lambda$  は解の記述や分類に適した選び方をするが、その方法は後で述べる。

## 2-2 基礎方程式：永年項の無い形式的級数解の構成

以後、 $2 \times 2$  単位行列を  $\mathbf{1}_2$ , Pauli 行列を  $\sigma_i (i = 1, 2, 3)$  と書く. RG/E の手法で構成される永年項が除去された解は以下の形で与えられる:

$$\begin{pmatrix} \psi(x) & \psi(x)^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(x) & f(x)^* \end{pmatrix} \Phi(x) e^{Rx}. \quad (2.2)$$

但し  $\Phi(x)$ ,  $R$  はいずれも  $2 \times 2$  行列で,  $\Phi(x)$  は捻った周期境界条件  $\Phi(x + \pi/a) = e^{-ik\pi/a\sigma_3} \Phi(x) e^{ik\pi/a\sigma_3}$  を満たし有界, また  $R$  は  $x$  によらない (ゆえ  $e^{Rx}$  の計算は容易).  $\psi, \psi^*$  が互いに複素共役であることより  $\Phi(x)^* = \sigma_1 \Phi(x) \sigma_1$ ,  $R^* = \sigma_1 R \sigma_1$  である.  $R$  はトレースレスでその固有値は純虚数.  $R$  の固有値は結晶運動量の摂動による変化を表すが, 3 節~5 節では, この  $R$  の固有値の  $\delta$ -展開が有限次で終わるように  $\lambda$  の摂動展開係数を調整する.

$\Phi(x)$ ,  $R$  の構成方法を述べよう. まずある関数  $h$  (スカラーでも行列でも良い) に対し, 空間平均値  $\langle h \rangle$  と積分  $I[h]$  を以下で定義する:

$$\langle h \rangle := \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} h dx, \quad (2.3)$$

$$I[h] := \lim_{\eta \rightarrow +0} \int_{-\infty}^{\infty} (h - \langle h \rangle) e^{\eta x} dx. \quad (2.4)$$

具体例でこれらの積分を定義通り計算することは少なく,  $h = \sum_{j \in \mathbb{Z}} h_j e^{2ijax} e^{2ikx}$  という Fourier 展開を持つ関数に対し

$$\langle h \rangle = \begin{cases} 0 & (k/a \notin \mathbb{Z}) \\ h_{-k/a} & (k/a \in \mathbb{Z}), \end{cases} \quad (2.5)$$

$$I[h] = \sum_{j \in \mathbb{Z}, j \neq -k/a} \frac{h_j e^{2ijax} e^{2ikx}}{2i(ja + k)}, \quad (2.6)$$

と計算すれば良い.  $I[h]$  は定数項を除いた後に積分する作用素で永年項の除去に関係する. 続いて摂動ポテンシャルを用いて

$$F = (\lambda - U)N, \quad N := \frac{1}{W} \begin{pmatrix} f^* \\ -f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f & f^* \end{pmatrix}, \quad (2.7)$$

と置く. すると  $\Phi(x)$ ,  $R$  は以下の方程式の解である:

$$\Phi = \mathbf{1}_2 + \delta I[F\Phi] - I[\Phi]R, \quad (2.8)$$

$$R = \delta \langle F\Phi \rangle. \quad (2.9)$$

逐次代入を繰り返せば, 欲する次数まで  $\Phi(x)$ ,  $R$  を得られる:

$$\Phi = \mathbf{1}_2 + \delta I[F] + \delta^2 (I[FI[F]] - I^2[F] \langle F \rangle) + \dots, \quad (2.10)$$

$$R = \delta \langle F \rangle + \delta^2 \langle FI[F] \rangle + \delta^3 (\langle FI[FI[F]] \rangle - \langle FI^2[F] \rangle \langle F \rangle) + \dots. \quad (2.11)$$

## 2-3 導出の概略

ここでは 2-2 節に書いた基礎方程式の導出の概略を記す. 主に包絡線による定式化 [3,4] に基づく. まず素朴摂動論により永年項由来の冪発散を持つ解を, ある位置  $x = \tau$  を基点として作る. 0 次の解を  $\phi_0(x, \tau) = \phi_{0,0}(x) = f(x)$  とし, 解の摂動展開を

$$\phi(x, \tau, \delta) = \sum_{n=0}^{\infty} \delta^n \phi_n(x, \tau), \quad (2.12)$$

$$\phi_n(x, \tau) = \sum_{m=0}^n \frac{(x - \tau)^m}{m!} \phi_{n,m}(x), \quad (2.13)$$

という形で作る. 但し  $\phi_{n,m}(x)$  たちは  $\tau$ -依存性を持たずかつ有界な関数であり, それゆえに永年項の発散は全て  $(x - \tau)^m$  の箇所に括り出されている. 部分積分の繰返しにより, いつでもこのような表示に持つていくことができる. 続いてこの形式的級数解を

$$\phi(x, \tau, \delta) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(x - \tau)^m}{m!} \phi^m(x, \delta), \quad (2.14)$$

$$\phi^m(x, \delta) = \sum_{n=m}^{\infty} \delta^n \phi_{n,m}(x), \quad (2.15)$$

と整理し直す. (ここで  $\phi^m$  の  $m$  は添字であり  $m$  乗ではない.) さらに関係式

$$\begin{pmatrix} \phi^m(x, \delta) & \phi^m(x, \delta)^* \\ \partial_x \phi^m(x, \delta) & \partial_x \phi^m(x, \delta)^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(x) & f(x)^* \\ f'(x) & f'(x)^* \end{pmatrix} \Phi_m(x, \delta) \quad (2.16)$$

によって  $\Phi_m(x, \delta)$  を導入する. 幾らかの計算の後,  $\Phi_0$  は以下の微分方程式を満たすことが示される:

$$\partial_x \Phi_0 = -\Phi_1 + \delta F \Phi_0. \quad (2.17)$$

上記のように構成した  $\phi(x, \tau, \delta)$  により Schrödinger 方程式の一般解は  $\psi(x, \tau, \delta) = A\phi(x, \tau, \delta) + B\phi(x, \tau, \delta)^*$  と書ける.  $A, B$  は積分定数. しかしこの摂動解は,  $\frac{(x-\tau)^m}{m!} \phi_{n,m}(x)$  について無限和を実行でき既知で有界な関数に帰着できる稀な例外を除き, 普通はたかだか最初の数項しか具体的に書き下すことができない. しかも当然それらは多項式的に発散しているため, そのままでは使い物にならない. しかし, 展開の基点  $x = \tau$  においてのみ, 全ての永年項が消え解は有界になる. よって気持ちとしては, 「 $x$  を動かすごとに  $\tau$  も動かすことで, 常に永年項が消える点の上だけを “渡り歩きながら” 解を追跡」したくなるだろう. というのも,  $\tau$  は好き勝手に選んだ摂動展開の基点で, 自由に値を変えられるからである. しかし勿論  $\tau$  は  $x$  に依存しない定数なので  $\tau = x$  を代入することは, そのままでは許されない.

RG/E の手法を用いると, 上述の素朴なアイデアに



修正を施した上で実際に Schrödinger 方程式の解となるものが構成できる。まず  $\tau$  は定数なのだから、積分定数  $A, B$  に形式的に  $\tau$ -依存性を持たせるのは構わない。そこで  $A = A(\tau)$ ,  $B = B(\tau)$  としてこれらを繰り込まれた振幅と言う。この繰り込まれた振幅を用いると、先に述べた「永年項が消える点だけを渡り歩く解」の候補として  $\tau = x$  を代入した

$$\begin{aligned}\psi(x, x, \delta) &= A(x)\phi(x, x, \delta) + B(x)\phi(x, x, \delta)^* \\ &= \begin{pmatrix} f(x) & f(x)^* \end{pmatrix} \Phi_0(x, \delta) \begin{pmatrix} A(x) \\ B(x) \end{pmatrix} \quad (2.18)\end{aligned}$$

が考えられる。これが実際にオリジナルの Schrödinger 方程式 (2.1) の解になるよう  $A, B$  を選ぶ。文献 [3, 4] に従い、 $\psi$  とその導関数  $\psi_x = \frac{\partial \psi}{\partial x}$  に対し、次の包絡線方程式の成立を要請する：

$$\left. \frac{d\psi}{d\tau} \right|_{\tau=x} = 0, \quad \left. \frac{d\psi_x}{d\tau} \right|_{\tau=x} = 0. \quad (2.19)$$

これらの条件は繰り込まれた振幅が以下の微分方程式を満たすことに同値である：

$$\begin{pmatrix} A_\tau \\ B_\tau \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \phi & \phi^* \\ \phi_x & \phi_x^* \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \phi_\tau & \phi_\tau^* \\ \phi_{x\tau} & \phi_{x\tau}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}. \quad (2.20)$$

但し、「添字の変数で微分した後に  $\tau = x$  を代入した関数」を引数を略して書いた。例えば  $\phi_{x\tau} = \left. \frac{\partial^2 \phi(x, \tau, \delta)}{\partial x \partial \tau} \right|_{\tau=x}$  等。これが繰り込まれた振幅に対する RG/E 方程式である。式 (2.20) の右辺の係数行列を  $R$  と記すことにすると、若干の計算の後に  $R = \Phi_0^{-1} \Phi_1 = \delta \langle F \Phi_0 \rangle$  と書いて、 $x$  に依存しない行列であることが証明される。 $\Phi_1 = \Phi_0 R$  を式 (2.17) に代入し、 $\Phi_0$  を単に  $\Phi$  と書き、さらにこれを  $\langle \Phi_0 \rangle = \mathbf{1}_2$  という規格化条件のもとで積分方程式に書き換えたものが式 (2.8) である。 $\delta$ -依存性を持つ定数行列  $C$  による別の規格化  $\langle \Phi_0 \rangle = C$  を採用することは摂動展開の高次の項に 0 次の解を加える自由度を使って解を書き換えることに相当し、質的に新しい解を得るわけではない。

これらが成り立つ時、式 (2.18) の  $\psi(x, x, \delta)$  は

$$\frac{d\psi(x, x, \delta)}{dx} = A\phi_x + B\phi_x^*, \quad (2.21)$$

$$\frac{d^2\psi(x, x, \delta)}{dx^2} = A\phi_{xx} + B\phi_{xx}^* \quad (2.22)$$

を満たす。ゆえに  $A(x), B(x)$  は  $x$  の関数であるにもかかわらず、“あたかも微分演算子をすり抜ける定数であるかのように見える”。式 (2.22) より明らかに  $\psi(x, x, \delta)$  は Schrödinger 方程式を満たすので、こうして望む解が作れた。

なお、より一般に RG/E の手法を非線形微分方程式に適用した場合、繰り込まれた振幅に対する RG/E 方程式それ自身も非線形になる。ゆえに RG/E 方程式が定数係数線形微分方程式になるのは今の系の特殊性である。

### 3 非共鳴点

一般論は 2-2 節に書いたもので尽きているが、摂動展開の出発点となる 0 次の波動関数の自乗  $f^2$  の波長がポテンシャルの周期と整合 (commensurate) するか否か、つまり整数  $n \in \mathbb{Z}$  を用いて結晶運動量が  $k = na$  であるか否かであるかで、摂動展開に場合分けが生ずる。(以後、このような  $k$  の値を共鳴点と呼ぶ。) この節ではまず非共鳴点を考える。

非共鳴点においては  $k/a \notin \mathbb{Z}$  であるから、平均値の性質 (2.5) より  $R$  の非対角成分は消え、 $R = R_{11}\sigma_3$  と書ける。そこで  $\lambda = \lambda_1 + \delta\lambda_2 + \delta^2\lambda_3 + \dots$  と展開し  $\lambda_j$  たちを  $R_{11}$  の  $\delta$  に関する展開係数が消えるように順次選んでいけば、結晶運動量  $k$  の値は摂動展開の過程で固定され続け、 $k$  でラベルされたエネルギー固有値と波動関数の  $\delta$ -展開が得られる。(逆に全ての  $j \geq 1$  に対し  $\lambda_j = 0$  とする場合、結晶運動量がエネルギー固有値の関数として得られる。) 結晶運動量は周期ポテンシャル下での波動関数に対する「良い量子数」なので状態のラベルとして固有値そのものより優れている。 $\lambda_j$  たちをこう選ぶ場合  $R = 0$  になるので、基礎方程式 (2.8) は劇的に簡単になり、直ちに次の級数解を得る：

$$\Phi = \sum_{j=0}^{\infty} \delta^j I_F^j[\mathbf{1}_2] = \mathbf{1}_2 + \delta I[F] + \delta^2 I[F I[F]] + \dots \quad (3.1)$$

但し記号  $I_F[X] := I[FX]$  を導入した。式 (2.9) は  $\Phi$  に対し以下の自己無撞着条件を課す：

$$\langle F \rangle + \delta \langle F I[F] \rangle + \delta^2 \langle F I[F I[F]] \rangle + \dots = 0. \quad (3.2)$$

$\lambda_1, \lambda_2, \dots$  はこの方程式を満たすように決めていく。

最初の数項を決定した結果は次のように要約される<sup>1</sup>。固有値は  $\lambda^{\text{tot}} = \lambda_0 + \delta\lambda_1 + \delta^2\lambda_2 + \delta^3\lambda_3 + \dots$  として

$$\lambda_1 = \frac{\langle U | f^2 \rangle}{\langle |f|^2 \rangle}, \quad (3.3)$$

$$\lambda_2 = \frac{-1}{\langle |f|^2 \rangle} \left\langle \frac{I[(U - \lambda_1)f^2] I[(U - \lambda_1)|f|^2]}{f^2} \right\rangle, \quad (3.4)$$

$$\begin{aligned}\lambda_3 = \frac{1}{\langle |f|^2 \rangle} \left\langle (U - \lambda_1) |f|^2 \left| I \left[ \frac{I[(U - \lambda_1)|f^2]}{f^2} \right] \right|^2 \right\rangle \\ + \frac{\lambda_2}{\langle |f|^2 \rangle} \left\langle \left( \frac{I[f^2]}{f^2} + \frac{I[f^{2*}]}{f^{2*}} \right) I[(U - \lambda_1)|f^2] \right\rangle. \quad (3.5)\end{aligned}$$

<sup>1</sup>本文の結果を与えるのに有用な公式を挙げておく。今  $g, h$  は (平面波)  $\times$  (周期関数) という関数、あるいはそのような関数を成分に持つ行列とする。式 (2.3), (2.4) で定義した演算は以下を満たす：

$$\langle h_x \rangle = \langle I[h] \rangle = 0, \quad I[h_x] = I[h]_x = h - \langle h \rangle.$$

これらを用いれば以下の部分積分の公式が証明される：

$$\langle g I[h] \rangle = - \langle I[g] h \rangle,$$

$$\langle gh \rangle = - \langle I[g] h_x \rangle + \langle g \rangle \langle h \rangle = - \langle g_x I[h] \rangle + \langle g \rangle \langle h \rangle,$$

$$\begin{aligned}I[gh] &= I[g]h - \langle I[g]h \rangle - I[I[g]h_x] + \langle g \rangle I[h] \\ &= g I[h] - \langle g I[h] \rangle - I[g_x I[h]] + I[g] \langle h \rangle.\end{aligned}$$

を得る。次の関係式も役立つ： $f, f^*$  を Schrödinger 方程式の Bloch 関数解とすると  $\left(\frac{f}{f}\right)_x = \frac{W}{f^2}$ ,  $\left(\frac{f}{f^*}\right)_x = -\frac{W}{f^{2*}}$  である。但し Wronskian  $W = f f_x^* - f_x f^*$  は  $x$  に依らない定数。

固有関数  $\psi = \psi_0 + \delta\psi_1 + \delta^2\psi_2 + \dots$  は

$$\psi_0 = f, \quad (3.6)$$

$$\psi_1 = f^* I \left[ \frac{I[(U - \lambda_1)|f|^2]}{f^{2*}} \right], \quad (3.7)$$

$$\psi_2 = f^* I \left[ \frac{1}{f^{2*}} I \left[ (U - \lambda_1) f^{2*} I \left[ \frac{I[(U - \lambda_1)|f|^2]}{f^{2*}} \right] - \lambda_2 |f|^2 \right] \right]. \quad (3.8)$$

以上は非摂動ポテンシャル  $U_0(x)$  が一般の可積分な有限帯ポテンシャルであっても正しいが、特に非摂動系が自由粒子の場合 ( $U_0(x) = 0$ ,  $f = e^{ikx}$ ) には以下のようになる。まず摂動ポテンシャルの Fourier 展開を

$$U(x) = \sum_{j \in \mathbb{Z}} u_j e^{2ijax}, \quad u_{-j} = u_j^*, \quad (3.9)$$

と書く。すると

$$\lambda^{\text{tot}} = k^2 + \delta u_0 - \delta^2 \sum_{j \neq 0} \frac{|u_j|^2}{4ja(k + ja)} + \delta^3 \sum_{j \neq 0, l \neq 0, j+l \neq 0} \frac{u_j u_l u_{j+l}^* + u_j^* u_l^* u_{j+l}}{16a^3 j l (j + l)(k + ja)} + O(\delta^4), \quad (3.10)$$

$$\psi = e^{ikx} \left( 1 - \frac{\delta}{4} \sum_{j \neq 0} \frac{u_j e^{2ijax}}{ja(k + ja)} + \frac{\delta^2}{16} \sum_{l \neq 0} \sum_{j \neq 0, l} \frac{u_{l-j} u_j}{ja(k + ja)} \frac{e^{2ilax}}{la(k + la)} + O(\delta^3) \right). \quad (3.11)$$

特に  $k = 0$  は基底状態の固有値と波動関数を与える。

以上の結果は Rayleigh-Schrödinger 摂動論に等価である。よって非共鳴点では、独立パラメータを  $\lambda$  ではなく  $k$  に選び直すことで、RG/E 理論は従来の摂動論と同じ結果を与える。しかし、これらの表式に共鳴波数  $k = na$  を代入すると発散するため、共鳴点では別の扱いが必要になる。

#### 4 共鳴点

続いて共鳴点  $k = na$ ,  $n \in \mathbb{Z}$  を考える。但し、ここで対象になるのは「摂動を加えることで初めて開くギャップ」である。既存のバンド端 (例えば自由粒子  $U_0 = 0$  の場合には  $k = 0$  が、Lamé ポテンシャル  $U_0 = 2m \operatorname{sn}^2(x|m)$  ならば  $k = 0, \pm a$  が該当。図 1 参照。) はその位置がシフトするのみで、シフトの具体的な値は非共鳴点における表式の極限  $k \rightarrow na \pm 0$  より得られる。実のところ、背後に可積分性が無い「普通の」周期ポテンシャルに対するエネルギーバンドは、最初から全ての  $k = na$  に対してギャップが開いている [図 1(d)] ため、ここで行う計算の潜在的な適用対象は (可積分系らしい計算技術は一切登場しないにも関わらず) 可積分な有限帯ポテンシャルに限られる。

共鳴点においては行列  $R$  が非対角成分を持ちうる。また、バンド分散  $\lambda^{\text{tot}}(k)$  を与えるには結晶運動量の式に自由に動かせるパラメータが必要だが、今の場合 0 次解では  $k = na$  に固定されている。そこで最低限の修正として、結晶運動量の  $\delta$ -展開は 1 次までで厳密に打ち切られる、すなわち

$$k = na + \delta k_1 \quad (4.1)$$

とし  $O(\delta^2)$  以上の項は出現しないように  $\lambda_1, \lambda_2, \dots$  を選ぶ。すなわち  $R$  は次のように対角化されるように選ぶ:

$$R = V(i\delta k_1)\sigma_3 V^{-1}, \quad V = \begin{pmatrix} 1 & r^* \\ r & 1 \end{pmatrix}. \quad (4.2)$$

但し対角化行列  $V$  は  $\delta$  について高次の依存性も持つ。さて  $R$  の形をこう仮定すると、 $\Xi := \Phi V$  としてこれが満たす方程式は式 (2.8) から

$$\Xi = V + \delta I[F\Xi] - i\delta k_1 I[\Xi]\sigma_3. \quad (4.3)$$

$\Xi$  をなす列ベクトルに  $\Xi = (\xi_1 \quad \xi_2)$ ,  $\xi_2 = \sigma_1 \xi_1^*$  という記号を与えるとこれらに対する形式的級数解は直ちに得られ、

$$\xi_1 = \sum_{j=0}^{\infty} \delta^j I_{F-ik_1}^j \begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix}, \quad \xi_2 = \sum_{j=0}^{\infty} \delta^j I_{F+ik_1}^j \begin{pmatrix} r^* \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (4.4)$$

そして自己無撞着条件は  $RV = \delta \langle F\Xi \rangle$  すなわち  $\langle (F - ik_1)\xi_1 \rangle = 0$ ,  $\langle (F + ik_1)\xi_2 \rangle = 0$  である。たとえば  $\xi_1$  に関しては係数行列の  $\det$  が消えるべしという条件

$$\det \langle F - ik_1 + \delta(F - ik_1)I[F - ik_1] + \dots \rangle = 0 \quad (4.5)$$

より  $\lambda_1, \lambda_2, \dots$  が決まり、ゼロ固有値に対する固有ベクトルが  $\begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix}$  である。固有方程式は  $\lambda_1$  について二次方程式なので二つ解を得るが、 $\langle Uf^2 \rangle \rightarrow 0$ ,  $\delta \rightarrow 0$  で固有ベクトルが  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  になる方を選べば一意である。2 次までの固有方程式  $\det \langle F - ik_1 + \delta FI[F] \rangle = 0$  を解く<sup>2</sup>ことで、結晶運動量の値  $k = na$  近傍のバンド分散は

$$k = na + \delta k_1, \quad (4.6)$$

$$\lambda^{\text{tot}} = \lambda_0 + \delta \lambda_1 + \delta^2 \lambda_2 + O(\delta^3), \quad (4.7)$$

ここで展開係数  $\lambda_1, \lambda_2$  は

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= \frac{\langle U|f|^2 \rangle}{\langle |f|^2 \rangle} + \frac{iWk_1}{\langle |f|^2 \rangle} \sqrt{1 + \frac{|\langle Uf^2 \rangle|^2}{|W|^2 k_1^2}}, \\ \lambda_2 &= \frac{-1}{\langle |f|^2 \rangle} \operatorname{Re} \left( \left\langle f^{-2} I[(U - \lambda_1)f^2] I[(U - \lambda_1)|f|^2] \right\rangle \right. \\ &\quad + \left\langle (U - \lambda_1)f^2 (\langle (U - \lambda_1)|f|^2 \rangle - |f|^2 \langle Uf^2 \rangle) I[f^{-2}] \right\rangle \\ &\quad \left. + \frac{\langle Uf^2 \rangle \langle f^{-2} I[(\lambda - U)|f|^2]^2 \rangle}{\langle (U - \lambda_1)|f|^2 \rangle} \right). \end{aligned} \quad (4.9)$$

<sup>2</sup>これを解く際には次に注意する。一般に有限帯ポテンシャルに対するある固有値の Bloch 固有関数  $f, f^*$  が線形独立なら、たとえ共鳴波数であっても  $\langle f^2 \rangle = 0$  である。(これは Schrödinger 方程式のパラメータ微分を用いて  $f^2$  の積分を行うと分かる。)

$W$  は純虚数なので  $|W|^2 = -W^2 > 0$  であるが、正の数であることが見やすいよう絶対値記号を用いた。  $\lambda_1, \lambda_2$  いずれも一つ目の項は非共鳴点の式 (3.3), (3.4) と同じ見かけだが、積分作用素  $I$  の性質 (2.6) より  $j = -k/a$  の定数項は除外されている。残りの項は共鳴点に特有である。  $\lambda_1$  を

$$\lambda_1 = \frac{1}{\langle |f|^2 \rangle} \left( \langle U|f|^2 \rangle + \text{sgn}(iWk_1) \sqrt{|W|^2 k_1^2 + |\langle Uf^2 \rangle|^2} \right) \quad (4.10)$$

と書き直すと分散関係が見やすく、  $k_1 \rightarrow \pm 0$  の極限を取るとバンド端のエネルギーが  $\lambda^{\text{tot}} = \lambda_0 + \delta \frac{\langle U|f|^2 \rangle \pm \langle Uf^2 \rangle}{\langle |f|^2 \rangle} + O(\delta^2)$  と分かる。また係数行列の固有ベクトルの成分は

$$r = \frac{\langle Uf^2 \rangle - \delta B}{iWk_1 \left( 1 + \sqrt{1 + \frac{1}{|W|^2 k_1^2} |\langle Uf^2 \rangle - \delta B|^2} \right)}, \quad (4.11)$$

$$B = \langle f^{-2*} I[(U - \lambda_1)|f|^2] \rangle + 2 \langle (U - \lambda_1)|f^2 \rangle \langle (U - \lambda_1)|f^2 I[f^{-2*}] \rangle. \quad (4.12)$$

今固有方程式を 1 次で打ち切っているなのでこの表式を  $\delta$  で展開したものは 1 次まで正しい。波動関数は  $\psi = (f \ f^*) \xi_1 = (f \ f^*) (1 + \delta I[F] + O(\delta^2)) \begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix}$  で与えられ、

$$\begin{aligned} \psi &= (f + rf^*) + \delta f^* \left( I \left[ \frac{I[(U - \lambda)|f|^2]}{f^{2*}} \right] \right. \\ &\quad \left. - \langle (U - \lambda)|f^2 \rangle I^2[f^{-2*}] - \langle (U - \lambda)|f^2 I^2[f^{-2*}] \rangle \right) \\ &\quad + \delta r f \left( I \left[ \frac{I[(U - \lambda)|f|^2]}{f^2} \right] - \langle (U - \lambda)|f^2 \rangle I^2[f^{-2*}] \right. \\ &\quad \left. - \langle (U - \lambda)|f^2 I^2[f^{-2*}] \rangle \right) + O(\delta^2). \end{aligned} \quad (4.13)$$

特に非摂動系が自由粒子で  $\lambda_0 = n^2 a^2$ ,  $f = e^{inax}$  の場合を書く。固有値は

$$\begin{aligned} \lambda^{\text{tot}} &= n^2 a^2 + \delta \left( u_0 + 2nak_1 \sqrt{1 + \frac{|u_n|^2}{4n^2 a^2 k_1^2}} \right) \\ &\quad + \delta^2 \left( k_1^2 - \frac{1}{4a^2} \sum_{j \neq 0, -n} \frac{|u_j|^2}{j(j+n)} \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{8a^2(u_0 - \lambda_1)} \sum_{j \neq 0, -n} \frac{u_n u_j u_{j+n}^* + u_n^* u_j^* u_{j+n}}{j(j+n)} \right) + O(\delta^3). \end{aligned} \quad (4.14)$$

バンド端は  $\lambda^{\text{tot}} = n^2 a^2 + \delta(u_0 \pm |u_n|) + \dots$ 。波動関数は式 (4.13) そのものではなく 0 次の解  $f + rf^*$  を 1 次の項に足して式を簡単にしたものを書く。まず  $r$  は

$$r = \frac{u_n^* - \delta B}{2nak_1 \left( 1 + \sqrt{1 + \frac{|u_n^* - \delta B|^2}{4n^2 a^2 k_1^2}} \right)}, \quad (4.15)$$

$$B = \frac{1}{4a^2} \sum_{j \neq 0, -n} \frac{u_j u_{j+n}^*}{j(j+n)} - \frac{u_n^*(u_0 - \lambda_1)}{2n^2 a^2}, \quad (4.16)$$

であり、これを用いて

$$\begin{aligned} \psi &= e^{i(na + \delta k_1)x} \left[ (1 + re^{-2inax}) + \delta \left( \frac{k_1 r}{na} e^{-2inax} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \sum_{j \neq 0, -n} \frac{(u_j + ru_{j+n}) e^{2ijax}}{4a^2 j(j+n)} \right) \right] + O(\delta^2). \end{aligned} \quad (4.17)$$

$\delta$  のオーダーごとに項を整理するには  $r = r_0 + \delta r_1 + \dots$  と  $r$  も展開せねばならないが省略する。

## 5 共鳴点 (2 次摂動でギャップが開く場合)

前節で  $\langle Uf^2 \rangle = 0$  であれば  $O(\delta^1)$  ではギャップは開かず、更に  $k_1 \rightarrow 0$  で  $\langle (U - \lambda_1)|f^2 \rangle = 0$  となるため、  $\lambda_2$  の表式 (4.9) が発散しギャップが正しく見積もれない。この場合

$$k = na + \delta^2 k_2 \quad (5.1)$$

と置いて同様の展開をする。この時  $\xi_1 = \sum_{j=0}^{\infty} \delta^j I_{F-i\delta k_2}^j \begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix}$  であり、  $\langle (F - i\delta k_2) \xi_1 \rangle = 0$  を満たす。最低次の固有方程式  $\det \langle F - i\delta k_2 + \delta F I[F] \rangle = 0$  の解より

$$\lambda_1 = \frac{\langle U|f|^2 \rangle}{\langle |f|^2 \rangle}, \quad (5.2)$$

$$\begin{aligned} \lambda_2 &= \frac{1}{\langle |f|^2 \rangle} \left( - \left\langle \frac{I[(U - \lambda_1)f^2] I[(U - \lambda_1)|f|^2]}{f^2} \right\rangle \right. \\ &\quad \left. + iWk_2 \sqrt{1 + \frac{1}{|W|^2 k_2^2} \left\langle \frac{I[(U - \lambda_1)|f|^2]^2}{f^2} \right\rangle} \right), \end{aligned} \quad (5.3)$$

を得る。0 次の波動関数は  $f + rf^*$  で与えられ係数  $r$  は

$$r = \frac{- \left\langle \frac{I[(U - \lambda_1)|f|^2]^2}{f^{2*}} \right\rangle}{iWk_2 \left( 1 + \sqrt{1 + \frac{1}{|W|^2 k_2^2} \left\langle \frac{I[(U - \lambda_1)|f|^2]^2}{f^2} \right\rangle} \right)} \quad (5.4)$$

である。特に非摂動系が自由粒子で  $\lambda_0 = n^2 a^2$ ,  $f = e^{inax}$  の場合を書いておく。  $O(\delta^1)$  でギャップが開かない条件は  $u_n = 0$  で、固有値の展開は  $\lambda_1 = u_0$  および

$$\begin{aligned} \lambda_2 &= - \sum_{l \neq 0, -n} \frac{|u_l|^2}{4a^2 l(l+n)} \\ &\quad + 2nak_2 \sqrt{1 + \frac{1}{4n^2 a^2 k_2^2} \left| \sum_{l \neq 0, -n} \frac{u_{-l} u_{l+n}}{4a^2 l(l+n)} \right|^2}. \end{aligned} \quad (5.5)$$

この式で  $k_2 \rightarrow \pm 0$  の極限を取ればバンド端エネルギーを得る。0 次の波動関数は  $\psi = e^{inax} + re^{-inax}$  で  $r$  は

$$r = \frac{- \sum_{j \neq 0, -n} \frac{u_j u_{-n-j}}{4a^2 j(j+n)}}{2nak_2 \left( 1 + \sqrt{1 + \frac{1}{4n^2 a^2 k_2^2} \left| \sum_{j \neq 0, -n} \frac{u_{-j} u_{j+n}}{4a^2 j(j+n)} \right|^2} \right)}. \quad (5.6)$$



より一般に  $j$ -次の摂動までではバンドが分裂しない場合  $k = na + \delta^{j+1}k_{j+1}$  とする. この場合,  $R$  は  $j$  次までは対角的であり,  $\lambda_1, \dots, \lambda_j$  の表式は非共鳴点のそれに一致する.

## 6 つぎはぎだらけの波動関数

### 6-1 動機

前節までの結果を合わせれば, 共鳴点・非共鳴点どちらの場合も含め, どんな初期固有値に対しても摂動展開を与えることができる. もし解析者の目標が, ある与えられた周期ポテンシャルを持つ Schrödinger 作用素の固有関数の振舞いを例外的に振舞う点も含めて全て理解し尽くすことであれば, これで目標は達成できたと言えるかもしれない. ところが, 物理学の問題においてはしばしば「全ての固有状態に関する和」というものが必要になる. 例えば分配関数やグリーン関数の計算, あるいはある種の平均場理論における自己無撞着方程式, 等である. 我々は既に非共鳴点  $k \neq na$  及び共鳴点  $k = na$  近傍の両方に対して波動関数と固有値の展開式を手に入れたが, 全ての  $k$  に関するこれらの和を計算する場合, これらの表式を一体どの点を境に切り替えればよいのか,  $k = (n \pm 0.1)a$  か, それとも  $k = (n \pm 0.01)a$  か, という問題が生ずる.  $\delta$  に関して十分高次の項まで展開すればどこで切り替えるかは問題にならないだろうというのはナイーブな期待である. というのも, 一般に摂動展開は漸近級数 — 項を取りすぎるとかえって悪くなる級数 — を与えるからである. そもそも精度だけを気にするのであれば数値解を求めればよい. 数式で書ける解を使う根本の動機は, 上述の各種物理量の解析的性質の正確な取り扱いにあり, そのためには固有関数および固有値が, 共鳴点と非共鳴点でシームレスに繋がっているようなものが必要となる. 本節では  $U_0(x) = 0$  の場合に話を限定し, そのような解を発見的に作る. その構成は  $U_0(x)$  が他の非自明な可積分ポテンシャルの場合にもヒントになるだろう.

### 6-2 つぎはぎされた解

固有関数  $\phi^{\text{tot}} = \phi_0 + \delta\phi_1(x, \delta) + \delta^2\phi_2(x, \delta) + \dots$  およびその固有値  $\lambda^{\text{tot}} = \lambda_0 + \delta\lambda_1(\delta) + \delta^2\lambda_2(\delta) + \dots$  が以下の条件を満たす時,  $j$ -次の“つぎはぎ”された解と呼ぶ.

- (i) 結晶運動量に共鳴値  $k = na, n \in \mathbb{Z}$  を代入しても解が非物理的な発散を起こさない.
- (ii) 展開係数  $\phi_l(x, \delta)$  や  $\lambda_l(\delta)$  の内部に含まれる  $\delta$  も含め,  $\phi^{\text{tot}}$  や  $\lambda^{\text{tot}}$  の表式中の全ての  $\delta$  に関して式を

展開したものは,  $\phi^{\text{tot}}$  に関しては  $j$ -次まで,  $\lambda^{\text{tot}}$  に関しては  $(j+1)$ -次まで, 非共鳴点  $k \neq na$  での展開 (3 節) を再現する.

- (iii) 結晶運動量に  $k = na + \delta k_1$  を代入後, 上と同様に  $\delta$  で全ての式を展開すると,  $\phi^{\text{tot}}$  については  $(j-1)$ -次まで,  $\lambda^{\text{tot}}$  に関しては  $j$ -次まで共鳴点  $k = na$  での展開 (4 節) を再現する.
- (iv) もし  $k = na$  におけるギャップが  $O(\delta^2)$  で開く場合には, 5 節の展開を  $\phi^{\text{tot}}$  に関しては  $(j-2)$ -次まで,  $\lambda^{\text{tot}}$  に関しては  $j$ -次まで再現する. 同様にギャップが  $O(\delta')$  で開く場合,  $\phi^{\text{tot}}$  に関しては  $(j-l)$ -次まで摂動展開を再現する.

これは微分方程式の持つパラメータに対して“大域的”に適用できる解の構築であり, 特定のパラメータ近傍の特異性を解明する“局所的”解析よりも難しい問題である.

以下では  $U_0(x) = 0$  の場合に 2 次の“つぎはぎ”された解を実際に構成する. まず

$$v_j = \frac{1}{4a^2} \sum_{l \neq 0, -j} \frac{u_l^* u_{j+l}}{l(j+l)} \quad (6.1)$$

と書く. すると“つぎはぎ”されたエネルギー固有値は

$$\lambda^{\text{tot}} = k^2 + \delta u_0 - \delta^2 \sum_{j \neq 0} \frac{|u_j - \delta v_j|^2}{2ja(k+ja) \left(1 + \sqrt{1 + \frac{\delta^2 |u_j - \delta v_j|^2}{4j^2 a^2 (k+ja)^2}}\right)}. \quad (6.2)$$

これだと式 (3.10) のうち  $\lambda_2$  に該当する項までしか書いてないように見えるが,  $|u_j - \delta v_j|^2 = |u_j|^2 - \delta(u_j v_j^* + u_j^* v_j) + O(\delta^2)$  とすると  $\lambda_3$  に該当する項まで現れる. 続いて波動関数  $\psi = \phi^{\text{tot}}$  は

$$\begin{aligned} \psi e^{-ikx} = & 1 - \delta \sum_{j \neq 0} \frac{u_j e^{2ijax}}{2ja(k+ja) \left(1 + \sqrt{1 + \frac{\delta^2 |u_j - \delta v_j|^2}{4j^2 a^2 (k+ja)^2}}\right)} \\ & + \delta^2 \sum_{l \neq 0} \sum_{j \neq 0, l} \frac{u_j u_{l-j}}{2ja(k+ja) \left(1 + \sqrt{1 + \frac{\delta^2 |u_j - \delta v_j|^2}{4j^2 a^2 (k+ja)^2}}\right)} \times \\ & \frac{e^{2ilax}}{2la(k+la) \left(1 + \sqrt{1 + \frac{\delta^2 |u_l - \delta v_l|^2}{4l^2 a^2 (k+la)^2}}\right)}. \end{aligned} \quad (6.3)$$

若干の面倒な計算の後, 式 (6.2), (6.3) は先述の (i)-(iv) を満たす 2 次の“つぎはぎ”された解になっていることが確かめられる.

もし 1 次の“つぎはぎ”された解だけが欲しいならば, 式 (6.2), (6.3) 中の  $u_j - \delta v_j$  を全て  $u_j$  に置き換えて良い. 1 次の“つぎはぎ”された解は非共鳴点の固有値

(3.10) と固有関数 (3.11) に対し ad hoc な置き換え

$$4ja(k+ja) \rightarrow 2ja(k+ja) \left( 1 + \sqrt{1 + \frac{\delta^2 |u_j|^2}{4j^2 a^2 (k+ja)^2}} \right) \quad (6.4)$$

を行うことで作ることができる。この根号関数のヒントは共鳴点の波動関数の  $r$  [式 (4.15)] で  $B=0$  としたものである。この発見的構築を、更にもう一つ高次の項まで適用できる形に改良したのが式 (6.2), (6.3) である。

上記の解は、あたかも共鳴点の波動関数と非共鳴点の波動関数の表式から良いところを都合よく“つぎはぎ”して作ったように見えるためこう呼んでいるものの、性質 (i)-(iv) を満たし各点における解の摂動展開を再現するため、各種応用において望まれる解析的性質は保っている。この解はパラメータ  $\delta$  に関して Taylor 展開でも Padé 近似でもない。(Padé 近似を用いた摂動論に関しては文献 [20] 参照。) これと同等の性質を持つ解を Padé 近似で作ることはできない。というのも関数  $\sqrt{1+X^2}$  の  $|X| \gg 1$ ,  $|X| \ll 1$  両方の振舞いを再現する有理関数は存在しないからである。

一度“つぎはぎ”された解が作れてしまえば、これ一つで全てが済む。これまで3節～5節で作ってきた式を固有値に依じて使い分ける必要はなくなる。

## 7 例

### 7-1 Dirac コーム

最初の例として Dirac コーム

$$U(x) = LV_0 \sum_{n \in \mathbb{Z}} \delta(x - nL) = V_0 \sum_{j \in \mathbb{Z}} e^{2ijax} \quad (7.1)$$

を考える。  $L = \frac{\pi}{a} > 0$  で  $V_0$  は実定数。これは矩形の Kronig-Penney ポテンシャルの特別な極限でもある。Fourier 展開係数は全て同じ  $u_j = V_0$  である。  $\sum_{l \neq 0, -j} \frac{1}{l(j+l)} = \frac{2}{j}$  より  $u_j - \delta v_j = V_0 \left( 1 - \frac{\delta V_0}{2j^2 a^2} \right)$ 。ゆえ固有値 (6.2) は

$$\lambda^{\text{tot}} = k^2 + \delta V_0 - \delta^2 \sum_{j \neq 0} \frac{V_0^2 \left( 1 - \frac{\delta V_0}{2j^2 a^2} \right)^2}{2ja(k+ja) \left( 1 + \sqrt{1 + \frac{\delta^2 V_0^2 (2j^2 a^2 - \delta V_0)^2}{8j^4 a^4 (k+ja)^2}} \right)}. \quad (7.2)$$

ここに  $k = na + \delta k_1$  を代入し  $k_1 \rightarrow \pm 0$  として得るバンド端のエネルギーは

$$\lambda_{\text{edge}, n}^{\text{tot}} = \begin{cases} n^2 a^2 + 2\delta V_0 - \frac{\delta^2 V_0^2}{n^2 a^2} + O(\delta^3), \\ n^2 a^2 + O(\delta^3). \end{cases} \quad (7.3)$$

バンド端の一方はどれだけ高次まで摂動展開を行っても  $n^2 a^2$  のままである。というのも固有関数  $\sin(nax)$  はデルタ関数が課す境界条件を感じないため、上記の分散関係 (7.2) は厳密解

$$k(\lambda) = \pm \frac{1}{L} \arccos \left( \cos[L\sqrt{\lambda}] + \frac{\delta LV_0}{2\sqrt{\lambda}} \sin[L\sqrt{\lambda}] \right) \quad (7.4)$$

とコンシステントであることが確かめられる。

### 7-2 Mathieu 方程式

ポテンシャルとして

$$U(x) = u_1 \cos 2ax, \quad u_1 > 0, a > 0, \quad (7.5)$$

を選ぶ。この方程式の  $n=1$  のギャップは特異摂動の例題として古くから取り上げられている<sup>3</sup>。Fourier 展開係数は  $u_1 = u_{-1} > 0$ ,  $u_{n \neq \pm 1} = 0$  である。  $u_{n \geq 2} = 0$  なので、5節で論じたように  $k = \pm na$ ,  $n \geq 2$  におけるギャップは  $O(\delta^2)$  以上の摂動で初めて開く。少しの計算より  $v_0 = \frac{u_1^2}{2a^2}$ ,  $v_{\pm 2} = \frac{-u_1^2}{4a^2}$ ,  $v_{n \neq 0, \pm 2} = 0$  が分かるので固有値 (6.2) は

$$\lambda^{\text{tot}} = k^2 - \delta^2 \sum_{s=\pm 1} \left[ \frac{u_1^2}{2sa(k+sa) \left( 1 + \sqrt{1 + \frac{\delta^2 u_1^2}{4a^2 (k+sa)^2}} \right)} + \frac{\frac{\delta^2 u_1^4}{16a^4}}{4sa(k+2sa) \left( 1 + \sqrt{1 + \frac{\delta^2 u_1^4}{256a^6 (k+2sa)^2}} \right)} \right]. \quad (7.6)$$

今の公式の精度は非共鳴点では  $O(\delta^3)$  であったから、第二項が正確な役割を果たすのは  $k = \pm 2a$  におけるギャップの幅を求める時だけである。例えば  $k=0$  として得られる基底状態エネルギーは今の精度で

$$\lambda_{\text{g.s.}}^{\text{tot}} = -\frac{\delta^2 u_1^2}{2a^2} + O(\delta^4) \quad (7.7)$$

であって、 $\delta^4$  の係数は求められない。 $k = a + \delta k_1$  を代入し  $k_1 \rightarrow \pm 0$  とすれば一番目のバンド端エネルギーが<sup>3</sup>,  $k = 2a + \delta^2 k_2$  を代入後  $k_2 \rightarrow \pm 0$  とすれば二番目のそれが求まる。結果は

$$\lambda_{\text{edge}, n=1}^{\text{tot}} = a^2 \pm \delta u_1 - \frac{\delta^2 u_1^2}{8a^2} + O(\delta^3), \quad (7.8)$$

$$\lambda_{\text{edge}, n=2}^{\text{tot}} = 4a^2 + \delta^2 \left( \frac{u_1^2}{6a^2} \pm \frac{u_1^2}{4a^2} \right) + O(\delta^3). \quad (7.9)$$

<sup>3</sup>実は、バンド端のエネルギーだけであれば縮退基底に対する従来の Rayleigh-Schrödinger 摂動論で出せる（まず  $N$  を十分大きな自然数としてポテンシャルの周期の  $N$  倍の長さの有限系を考えて教科書通りの摂動展開を行い、その後極限  $N \rightarrow \infty$  を取る。）ので、特異摂動論の有用性を示すにはこの手法でしか得られない情報、例えばバンドの分散関係  $\lambda^{\text{tot}}(k)$  等を導く必要がある。



$n \geq 3$  のギャップは  $O(\delta^2)$  の摂動では開かず、より高次の摂動で開く。但しギャップの存在位置そのものは  $k = na$  を代入すれば求まり、 $\lambda_{\text{gap position}, n \geq 3}^{\text{tot}} = n^2 a^2 + \frac{\delta^2 u_1^2}{2(m^2-1)a^2} + O(\delta^3)$  である。

波動関数は式 (6.3) の和においてノンゼロの項が  $\delta^1$  の項では  $j = \pm 1$ , また  $\delta^2$  の項では  $(j, l) = (1, 2), (-1, -2)$  のみなので、それを書き下せばよい。

### 7-3 $\delta m \operatorname{sn}^2$

三つ目の例として Lamé ポテンシャル

$$U(x) = mb^2 \operatorname{sn}^2(bx|m), \quad b = \frac{2K(m)a}{\pi} > 0, \quad 0 < m < 1, \quad (7.10)$$

を考える。楕円関数や楕円積分の記号については文献 [21] に準拠する。  $g$  を非負整数として  $g(g+1)U(x)$  は  $g$ -ギャップの可積分ポテンシャルになることが知られている (例えば文献 [18]) が、ここでは  $\delta U(x)$ ,  $|\delta| \ll 1$  のケースを考える。解ける値の近傍、つまり  $U(x) = [g(g+1) + \delta]mb^2 \operatorname{sn}^2(bx|m)$  の解析結果を全ての  $g$  に関して繋ぎ合わせることで非可積分な一般係数に対する Lamé ポテンシャルの全容を把握するのは将来の課題として面白い。

紙数の都合より、1 次の“つぎはぎ”された解だけを考えよう。この時は式 (6.2), (6.3) における  $u_j - \delta v_j$  を全て  $u_j$  に置き換えて良い。ポテンシャルの Fourier 展開係数は (例えば文献 [22])

$$u_0 = b^2 \left(1 - \frac{E(m)}{K(m)}\right), \quad u_j = \frac{4ja^2}{q^{-j} - q^j}. \quad (7.11)$$

但し  $q = \exp\left(-\frac{\pi K(1-m)}{K(m)}\right)$  はノーム。よって固有値及び波動関数は

$$\begin{aligned} \lambda^{\text{tot}} &= k^2 + \delta b^2 \left(1 - \frac{E(m)}{K(m)}\right) \\ &\quad - \delta^2 \sum_{j \neq 0} \frac{8ja^3}{(q^{-j} - q^j)^2 (k + ja) \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4\delta^2 a^2}{(q^{-j} - q^j)^2 (k + ja)^2}}\right)}, \end{aligned} \quad (7.12)$$

$$\begin{aligned} \psi &= e^{ikx} \\ &\quad - \delta \sum_{j \neq 0} \frac{2ae^{2ijax} e^{ikx}}{(q^{-j} - q^j)(k + ja) \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4\delta^2 a^2}{(q^{-j} - q^j)^2 (k + ja)^2}}\right)}. \end{aligned} \quad (7.13)$$

このポテンシャルは  $\tilde{U}(x) = U(x) - u_0$  と平均値を除外してから  $\delta = \tilde{\delta} \log q$  において  $\tilde{\delta}, a$  を固定して  $m \rightarrow 1$  とすることで Dirac コームに帰着し、また、 $\delta = \tilde{\delta}/m$  において  $\tilde{\delta}, a$  を固定して  $m \rightarrow 0$  とすることで Mathieu 方程式に帰着することを付記しておく。Mathieu 方程式に帰着させると  $u_2 \rightarrow 0$  になるため 2 番目のギャップ幅

のオーダーが  $O(\delta^1)$  から  $O(\delta^2)$  に変わる [式 (7.9)] が、このような次数の転移も 2 次の“つぎはぎ”された解を書き下せば場合分け無しに記述できる。

最後に小ネタを一つ与える。基底状態の二次摂動固有値は  $\lambda_{2|k=0} = -8a^2 \sum_{j=1}^{\infty} (q^{-j} - q^j)^{-2}$  と書ける。一方式 (3.4) で  $k \rightarrow 0$  とすると  $\lambda_{2|k=0} = -\langle I[U]^2 \rangle = -\langle b^2 Z(bx)^2 \rangle$  である。  $Z$  は Jacobi ゼータ関数。  $Z(x)^2$  の Fourier 展開係数を複素積分から求めれば、以下の  $q$  に関する恒等式を得る：

$$\begin{aligned} &24 \sum_{j=1}^{\infty} (q^{-j} - q^j)^{-2} \\ &= 1 + \frac{\theta_1'''(0)}{\theta_1'(0)} = 1 + \frac{4K(m)^2}{\pi^2} \left(2 - m - \frac{3E(m)}{K(m)}\right). \end{aligned} \quad (7.14)$$

## 8 まとめと今後の展望

本論文では、RG/E の手法を用いて、可積分な有限帯ポテンシャルに可積分性を破る微小な摂動が加わった形をした周期ポテンシャルを持つ Schrödinger 作用素の固有値と固有関数の摂動展開を与えた。特に、独立パラメータが結晶運動量  $k$  になるように固有値の摂動展開係数を選ぶという方法を取ることににより、バンド分散  $\lambda^{\text{tot}}(k)$  と対応する波動関数の摂動パラメータ  $\delta$  による展開を得た。それは非共鳴点では従来の Rayleigh-Schrödinger 摂動論に等価な結果を与える一方で、共鳴点では新しく開くギャップの近傍の波動関数と分散関係を与える。また、共鳴点と非共鳴点の摂動展開結果を“つぎはぎ”することで、どちらの点にも利用でき、かつ解析的性質を維持したまま特異性を除去した波動関数を低次のオーダーで発見的に構成した。このような解を楕円関数ポテンシャルの場合や高次のオーダーへ系統的に拡張する (場当たり的な“つぎはぎ”ではない数学的根拠の伴った操作に置き換える) 方法を確立し、また得られた摂動解の漸近解析や収束の議論を精密化することは今後の課題である。楕円関数ポテンシャルに対する固有値と固有関数は結晶運動量ではなく Riemann 面上の点でパラメトライズするのが最も自然であるから、理論もそのように書き換えられるだろう。

物理の問題への応用の観点からもいくつか展望や課題がある。2 節で扱った基礎方程式の定式化には Schrödinger 作用素に特有の性質はそれほど使わないため、行列係数あるいは高階の微分作用素へと定式化を拡張するのは容易と期待される。例えば、超伝導体中の準粒子固有状態やソリトン励起の記述に用いられる Bogoliubov-de Gennes 方程式 [23] のソリトン理論における対応物は、分散関係を Fermi 面で線形化する近似の枠組みでは非線形 Schrödinger 階層であり多くの仕事がある [24–26] が、二乗分散を維持する場合には

結合 Schrödinger-Boussinesq 階層 [27] であり, これらの系における様々な応用を考えている. また近年, 南部-Goldstone モードの分散関係に基づく分類と数え上げの理論が発展した [28, 29] が, 本論文の 4 節と 5 節で議論したギャップの  $\delta$ -依存性の次数の違いによる摂動項の扱いの変化は, スピン 3 のボース凝縮体を例として論じたこれらのモードの Type-I-Type-II 転移 [30] の計算と数学的には共通である. 特異摂動からこの問題を見直すのは独特の視点かもしれない.

特殊関数論や微分方程式論への貢献の可能性も残されている. 例えば厳密に解けないパラメータを持つ Lamé 及び Heun の微分方程式の解の性質を解けるパラメータから出発し摂動的に調べることができるだろう. また, 7-3 節で例を示したように, 固有値や固有関数の摂動展開を複数の方法で計算することで, 副産物としてノーム  $q$  に関する恒等式を得ることもでき,  $q$ -類似の様々な関数の恒等式を古典的な関数による表示に帰着させる手段として補助的に用いることもできるかもしれない. また, 微分方程式に対する他の強力な解析手法, 例えばリサージェンス, 完全 WKB 解析 [31] と適用範囲を比較し組み合わせることも今後の重要な課題だろう.

本稿に関連する話題について講義して頂いた国場敦夫氏に感謝する. 本研究は私立大学戦略的研究基盤形成支援事業 (S1511006) の支援を受けて行われた.

## 参考文献

- [1] L. Y. Chen, N. Goldenfeld, and Y. Oono, Phys. Rev. Lett., **73**, 1311–1315 (1994).
- [2] L.-Y. Chen, N. Goldenfeld, and Y. Oono, Phys. Rev. E, **54**, 376–394 (1996).
- [3] T. Kunihiro, Prog. Theor. Phys., **94**(4), 503–514 (1995).
- [4] T. Kunihiro, Prog. Theor. Phys., **97**(2), 179–200 (1997).
- [5] H. Chiba, SIAM J. Appl. Dym. Syst., **7**(3), 895–932 (2008).
- [6] H. Chiba, J. Math. Phys., **49**(10), 102703 (2008).
- [7] S. A. Brazovskii, S. A. Gordynin, and N. N. Kirova, JETP Lett., **31**, 456 (1980).
- [8] K. Machida and H. Nakanishi, Phys. Rev. B, **30**, 122–133 (1984).
- [9] Y. Togawa, T. Koyama, K. Takayanagi, S. Mori, Y. Kousaka, J. Akimitsu, S. Nishihara, K. Inoue, A. S. Ovchinnikov, and J. Kishine, Phys. Rev. Lett., **108**, 107202 (2012).
- [10] A. B. Borisov, J. Kishine, I. G. Bostrem, and A. S. Ovchinnikov, Phys. Rev. B, **79**, 134436 (2009).
- [11] D. A. Takahashi, Phys. Rev. E, **93**, 062224 (2016).
- [12] B.-F. Feng, L. Ling, and D. A. Takahashi, Stud. Appl. Math., **144**(1), 46–101 (2020).
- [13] I. M. Krichever, Funct. Anal. Its Appl., **11**(1), 12–26 (1977).
- [14] 田中, 伊達, KdV 方程式, (紀伊國屋書店, 1979).
- [15] I. M. Krichever, Funct. Anal. Its Appl., **14**(4), 282–290 (1980).
- [16] A. O. Smirnov, Acta Appl. Math., **36**(1), 125–166 (1994).
- [17] E. D. Belokolos, A. I. Bobenko, V. Z. Enol'skii, A. R. Its, and V. B. Matveev, *Algebro-Geometric Approach to Non-linear Integrable Equations*, (Springer, Berlin, 1994).
- [18] E. D. Belokolos, J. C. Eilbeck, V. Z. Enolskii, and M. Salerno, J. Phys. A Math. Gen., **34**(5), 943–959 (2001).
- [19] K. Takemura, Math. Z., **263**(1), 149 (2008).
- [20] 江沢, 漸近解析入門, (岩波書店, 2013).
- [21] M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, (Dover, Mineola, New York, 9th edition, 1965).
- [22] 戸田, 楢門関数入門, (日本評論社, 2001).
- [23] P. G. de Gennes, *Superconductivity of metals and alloys*, (Westview Press, Boulder, 1999).
- [24] G. Basar and G. V. Dunne, Phys. Rev. D, **78**, 065022 (2008).
- [25] F. Correa, G. V. Dunne, and M. S. Plyushchay, Ann. Phys., **324**, 2522–2547 (2009).
- [26] D. A. Takahashi, S. Tsuchiya, R. Yoshii, and M. Nitta, Phys. Lett. B, **718**, 632–637 (2012).
- [27] V. Makhankov, Phys. Lett. A, **50**(1), 42–44 (1974).
- [28] H. Watanabe and H. Murayama, Phys. Rev. Lett., **108**, 251602 (2012).
- [29] Y. Hidaka, Phys. Rev. Lett., **110**, 091601 (2013).
- [30] D. A. Takahashi and M. Nitta, Ann. Phys., **354**, 101–156 (2015).
- [31] T. Kawai and Y. Takei, *Algebraic Analysis of Singular Perturbation Theory*, (American Mathematical Society, Providence, Rhode Island, 2005).