量子力学のスペクトル・散乱理論における数学的手法

第２回ＧＣＯＥセミナー「社会に拡がる数学について」2010年３月30日

中村周（東京大学・数理科学研究科)

1．ニュートン方程式とシュレディンガー方程式

▷ ポテンシャル場中の粒子の古典軌道のニュートン方程式は、

$$m\ddot{x}(t) = -\nabla V(x(t)),\ x(0) = x_0,\ \dot{x}(0) = p_0.$$

ここで、$x(\cdot)$ は $\mathbb{R}^n$ に値を持つ $\mathbb{R}$ 上の関数（粒子の点の座標）。
$V(x)$ はポテンシャル関数で、$m > 0$ は粒子の質量。

▷ 対応する量子力学の方程式、シュレディンガー方程式は、

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}u(t,x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{j=1}^{n}\frac{\partial^2 u}{\partial x_j^2}(t,x) + V(x)u(x),\ u(0,x) = u_0(x)$$

ただし、$u(t,x)$ は粒子の波動関数。$\hbar > 0$ はプランク定数。
シュレディンガー方程式は、複素数値の線形偏微分方程式。

2．シュレディンガー方程式を考える枠組み

▷ ヒルベルト空間：$X = L^2(\mathbb{R}^n) = \left\{ u(x) \,\middle|\, \int |u(x)|^2 dx < \infty \right\}$
を**「状態の空間」**と考え、その上の線形作用素：

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} + V(x)$$

をシュレディンガー作用素（ハミルトン作用素）と呼ぶ。方程式は、

$$i\hbar \frac{d}{dt} u(t, \cdot) = H u(t, \cdot),\ u(0) = u_0 \in X$$

という、X 上の常微分方程式と考える。形式的に、この解は

$$u(t) = \exp(-i(t/\hbar)H)u_0, \quad t \in \mathbb{R},$$

と書ける（「ストーンの定理」）。$u(t, x)$ または H が研究の対象。

3. 大まかな歴史の流れ

▷ 1930年頃：量子力学の確立（Heisenberg, Schrödinger, Dirac, etc.）
▷ 1932年：フォン・ノイマン「量子力学の数学的基礎」
▷ 1940年代：加藤敏夫によるクーロン系の自己共役性の証明
→ 関数解析的な量子力学の数学理論の展開
▷ 1960年頃〜:散乱理論の発展 (加藤、池辺、Birman, 黒田, Agmon, Hörmander, 北田, Enss, Mourre, Sigal, Soffer, etc.）
▷ (1960年代後半〜：Lax-Phillipsの散乱理論 → Melroseの幾何学的散乱理論）
▷ 1970年代〜（？）：ランダム・シュレディンガー作用素の理論の発展（Pastur, 小谷, Simon, Frölich, Spencer, Klein, Aizenman, Bourgain, etc.)
▷ 1970年代後半〜:「物質の安定性」(多体クーロン系の固有値）(Lieb, Thirring, Siedentop, etc.)
▷ 1980年代〜：半古典極限、量子力学的共鳴の理論の発展（Combes, Simon, Hellffer, Sjöstrand, etc.）（→ Witten理論）
▷ 1990年代〜：シュレディンガー発展作用素の実解析的評価（Sogge, 谷島, Schlag, Burq, Gerard, Tzvetkov, Tataru, etc.)

4．今回のテーマ

シュレディンガー方程式の理論で開発された道具を、いくつか紹介する。

(1) 散乱理論 ＝ 解の長時間の挙動の追跡 ＝ 連続スペクトルの構造の解析

(2) 半古典極限：解の漸近挙動と古典力学の関係 ＝ 拡張された超局所解析、トンネル効果の解析 ＝ 複素領域での解の評価と接続（Paley-Wiener 理論の精密化）

▷ 手法の一般性、他の分野への応用の可能性？

5．シュレディンガー作用素のスペクトルの分割

H は自己共役作用素なので、（対称行列と同様に）「対角化」（スペクトル分解）ができて、固有値（スペクトル）はすべて実数である。つまり、

$$\sigma(H) = \{z \in \mathbb{C} \mid (H - z)\text{が可逆でない}\} \subset \mathbb{R}$$

である。さらに、V が滑らかで $|x| \to \infty$ で 0 に収束するならば、スペクトルは

$$\sigma(H) = \{E_1, E_2, \ldots\} \cup [0, \infty)$$

が成り立つ。ただし $E_j < 0$ で、これらは 0 以外に集積しない。$\{E_j\}$ は固有値の集合で、$[0, \infty)$ は、多くの場合「連続スペクトル」である。
ψ_j が固有関数：$H\psi_j = E_j\psi_j$ ならば、これらを初期値とする解は

$$\exp(-itH)\psi_j = e^{-itE_j}\psi_j$$

であり、簡単に記述できる。それ以外の初期値が問題になる。

6．シンプルな散乱理論

▷ $V(x)$ はコンパクトな台を持つ滑らかな関数とする。古典粒子の軌道（ニュートン方程式の解）は、ポテンシャルに束縛されないとすると、ある時刻以降は自由運動をする。つまり、

$$\exists T,\ \forall t \geq T,\ x(t) = x_\infty + t \cdot v_\infty$$

が成り立つ。類似の結果が、量子力学でも成り立つ。

▷ $V = 0$ のシュレディンガー作用素を H_0 とする。もし、

$$u_0 \in X_c = \{u \in X \mid \text{すべての } j \text{ について } u_0 \perp \psi_j\}$$

ならば、$u_\infty \in X$ が存在して、

$$\left\| \exp(-itH)u_0 - \exp(-itH_0)u_\infty \right\| \to 0 \quad (t \to +\infty).$$

▷ 「波動作用素」$W_\pm$ を

$$W_\pm u = \lim_{t\to\infty} \exp(itH)\exp(-itH_0)u$$

で定義すると、$u_0 = W_+ u_\infty$ と書ける。

▷ これらより、解の長時間での挙動は、$t \to \pm\infty$ のとき

$$u(t) \sim \sum_{j=1}^{\infty} e^{-itE_j}\langle\psi_j, u_0\rangle\psi_j + \exp(-itH_0)(W_\pm^* u_0)$$

と、完全に記述できることが分かる。ここで、$\langle\cdot,\cdot\rangle$ は内積：

$$\langle u, v\rangle = \int \overline{u(x)}\cdot v(x)dx.$$

7．波動作用素とスペクトルの関係

▷ H_0 のスペクトルは簡単に分かる。フーリエ変換 $\mathcal{F}$ を用いると、

$$(\mathcal{F}H_0\mathcal{F}^{-1}u)(\xi) = \frac{\hbar^2}{2m}|\xi|^2 u(\xi) \quad (u \in X)$$

したがって $\sigma(H_0) = [0, \infty)$ で、スペクトルは絶対連続（$|x|^2$ のかけ算作用素とユニタリー同値）。時間発展は、

$$\exp(-itH_0)u = \mathcal{F}^{-1}[\exp\{-i(h/2m)t|\xi|^2\}(\mathcal{F}u)]$$

▷ 波動作用素は等長作用素であり、定義から、

$$HW_\pm = W_\pm H_0 \quad \text{(intertwining property)}$$

が成り立つ。つまり、「$W_\pm$ の像の上で、H は H_0 とユニタリー同値」である。「$W_\pm$ の像」＝「H の正のエネルギーの部分空間」であり、これは正のエネルギーの部分での H の作用素としての構造を完全に記述している。

8．散乱理論の意味すること、ひろがり

▷ コンパクトな作用素、あるいはコンパクトな空間上の楕円型作用素の構造は、固有関数の展開により記述できる。（固有関数の性質、固有関数の性質は、決して簡単ではないが。例えば量子カオス）

▷ 連続スペクトル部分の記述には、散乱理論が有効である。連続スペクトルは、時間が大きくなるとき無限遠方に飛んでいく（＝散乱）粒子に対応している。散乱理論により、一見複雑な作用素（H）の連続スペクトル部分が、簡単な作用素（H_0）と同じ構造を持っていることが分かる。

▷ 作用素論的な一般化は可能であり、加藤・黒田の抽象定常散乱理論 (abstract stationary scattering theory) が代表的である。

▷ 「一般化固有展開」から出発する理論もある。最終的には同値である。

▷ 「自由な作用素」は、 $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2}$ でも良い。（ $\rightarrow$ 多様体の散乱理論）

9．半古典極限 (近似) とは？

▷ ニュートン力学は、量子力学の巨視的なスケールで見たときの近似であると考えられる。それは、プランク定数の０の極限：$\hbar \to 0$ のはずである。しかし、シュレディンガー方程式とニュートン方程式は全く違う方程式。関係は？

▷ 古典力学と量子力学は、以下の**「対応」**(正準量子化) がある。

$$\text{座標：} x_j \longleftrightarrow \text{かけ算作用素：} x_j \cdot,$$

$$\text{運動量：} p_j \longleftrightarrow \text{微分作用素：} -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_j},$$

$$\text{エネルギー：} \frac{1}{2m}|p|^2 + V(x) \longleftrightarrow \text{ハミルトン作用素：} H$$

これらは、解の性質やスペクトルにどう反映するか？解やスペクトルの性質について、古典力学の性質から何が言えるか？また、古典力学的に不可能な運動（トンネル効果）は、どのように記述できるか？

10. $\hbar$-擬微分作用素

▷ **擬微分作用素**(pseudodifferential operator)とは、フーリエ変換を用いた微分作用素の拡張で、$a(x,\xi)$ を $2n$ 変数の関数とするとき、(形式的には)

$$a(x,D_x)u(x) = (2\pi)^{-n}\iint e^{i(x-y)\cdot\xi}a(x,\xi)u(y)dyd\xi$$

で定義される。微分作用素 $D_x = -i\partial_x$ の部分を、$P = \hbar D_x$ で置き換えると、

$$a(x,\hbar D_x)u(x) = (2\pi\hbar)^{-n}\iint e^{i(x-y)\cdot\xi/\hbar}a(x,\xi)u(y)dyd\xi$$

となる。これが、$\hbar$-擬微分作用素である。(これはMaslovにより導入されたが、歴史的には Kohn-Nirenbergによる擬微分作用素の導入より前である。)

▷ 古典力学と量子力学の対応によれば、

xとpの関数:$a(x,p)$ $\longleftrightarrow$ $\hbar$-擬微分作用素:$a(x,\hbar D_x)$

である。これは、どのような意味で成り立つだろうか?

11．エネルギーの関数の半古典極限

▷ f を$\mathbb{R}$上の滑らかな関数として、$f(H)$ を考える。これは「スペクトル関数」であり、ハミルトン作用素 H の性質を調べる上で、とても有用である。適当な条件の下で、

$$f(H) = (f \circ h)(x, \hbar D_x) + O(\hbar)$$

が成り立つ。ここで、h はエネルギー：$h(x,\xi) = \frac{1}{2m}|\xi|^2 + V(x)$ である。

▷ f として適当なカットオフ関数を選び、$\mathrm{Tr}(f(H))$ をこの公式で計算すると、半古典的なワイル公式：$\hbar \to 0$ のとき

$$\#\{j \,|\, E_j < E\} = (2\pi\hbar)^{-n}(\mathrm{Vol}\{(x,\xi) \,|\, h(x,\xi) < E\} + O(\hbar))$$

が得られる。（これは、「ボーアの量子化規則」の正当化と考えられる。）スペクトルシフト関数に関する、「非有界領域でのワイル公式」も、同様の議論で証明できる。

12．ハイゼンベルク方程式とポアッソン方程式

▷ 古典力学と量子力学の対応原理のひとつは、ハイゼンベルク方程式とポアッソン方程式の対応である：

$$\frac{\partial}{\partial t}a(t,x,p) = -\{a,h\}(t,x,p), \quad a(0,x,p) = a_0(x,p),$$

ここで、$\{\cdot,\cdot\}$ はポアッソン括弧：$\{a,b\} = \sum_{j=1}^{n}\left(\frac{\partial a}{\partial p}\cdot\frac{\partial b}{\partial x} - \frac{\partial a}{\partial x}\cdot\frac{\partial b}{\partial p}\right)$ であり、この方程式はhのハミルトン流（相空間での古典力学の時間発展）を用いて解ける。

$$\frac{d}{dt}A(t) = -i\hbar[A(t),H], \quad A(0) = A_0, \quad (\text{ハイゼンベルク方程式})$$

ここで、$A(t)$，A_0 はX上の作用素、$[A,B] = AB - BA$ は交換子。この解は $A(t) = \exp(itH/\hbar)A_0\exp(-itH/\hbar)$ で与えられる。(ハイゼンベルク方程式を解くことは、シュレディンガー方程式を解くことに、ほぼ対応している。)

▷ $a(t,x,\xi)$ をポアッソン方程式の解、$A_0 = a_0(x, \hbar D_x)$ とすると、

$$A(t) = a(t,x,\hbar D_x) + O(\hbar)$$

であることが分かる。さらに、$A(t)$ は（輸送方程式を逐次的に解くことにより）$\hbar$ に関して漸近展開を持ち、$\hbar$-擬微分作用素としての表現ができる。$a(t,x,\hbar D_x)$ は古典力学の対応する「観測量」に対応し、剰余項も古典軌道を用いて展開できることになる。これは、量子力学的な「観測量」と、古典力学的「観測量」の $\hbar \to 0$ での対応を与えている。

▷ これは、波動方程式の「エゴロフ定理」の類似であり、波動方程式の「幾何光学 $\leftrightarrow$ 波動光学」の対応原理の量子力学版である。実は、（もっと一般的な）「半古典的エゴロフ定理」から普通のエゴロフ定理を導くことは可能であるが、逆は正しくない。Sjöstrand の言葉を借りると、

「（特異性に関する）超局所解析は、半古典解析の特別な場合」

なのである。

13．トンネル効果の解析

▷ 以上の議論から導かれる解は、古典力学的な軌道のない領域では0になる。例えば、固有値 E_j の固有関数 ψ_j を近似しようとすると、近似解の台は

$$\Omega(E_j) = \{x \,|\, V(x) \le E_j\}$$

に含まれることになる。しかし、シュレディンガー方程式は一意接続性をもつので、固有関数の台はユークリッド空間全体である。$\Omega(E_j)$ の外で固有関数が消えないのは、古典力学的でない**「トンネル効果」**(tunneling effect) のためであると、物理的には解釈される。

アグモン距離： エネルギー E に対して、$ds^2 = \mathrm{max}(V(x) - E, 0)\, dx^2$ によって定まる擬距離 $\mathbf{d}_E(\cdot,\cdot)$ を、アグモン距離と呼ぶ。大まかに言って、

$$\psi_j(x) = O(\exp(-\mathbf{d}_{E_j}(\Omega(E_j), x)/\hbar)) \quad (\hbar \to 0)$$

が $x \notin \Omega(E_j)$ で成り立つ。（半古典的アグモン評価）

アグモン評価のアイデア： $\rho(x)$ を適当な重み関数として、$e^{\rho(x)/\hbar}\psi_j(x)$ がみたす微分不等式を考え、それが上から評価できるような $\rho(x)$ をうまく選ぶ。

▷ 実際にやっている事は、$h(x,\hbar D_x + i\nabla\rho(x))$ が（適当な領域で）楕円型であるように $\rho(x)$ を選ぶことである。

▷ $h(x,\xi)$ の ξ に関する解析接続を用いているので、実際には、固有関数の ξ-空間での複素解析性を調べているのと同じ。どこまで正則に拡張できるかを調べるのが、指数減衰に対応している（Paley-Wiener型の評価）。

▷ $h(x,\hbar D_x + i\nabla\rho(x))$ が楕円性を失うような $\rho(x)$ を取った時に「（半古典的）特異性の伝播」が生じる。これが「トンネル効果」を産む。

14．相空間でのトンネル効果

▷ 「普通の」トンネル効果は、古典軌道の入れない点の集合での評価である。しかし、相空間 $\{(x,\xi)\in\mathbb{R}^{2n}\}$ で考えると、古典軌道の入れる集合は、もっとずっと小さい。つまり、エネルギー面：

$$S(E)=\{(x,\xi)\in\mathbb{R}^{2n}\,|\,h(x,\xi)=E\}$$

にしか古典粒子の軌道は入れない。では、「相空間において古典粒子の入れない」領域での波動関数の評価はできるだろうか？

▷ 普通の $\hbar$-擬微分作用素を用いては、そのような指数的評価はできない。C^∞-関数による張り合わせは解析性を壊すので、解析性に依存するトンネル効果の評価はできない。

▷ FBI変換(Bargman変換)を用いて、相空間でのトンネル効果の評価（指数的評価）を実行する事ができる。このとき、$h(x,\xi)$ は、x, ξ の両方について、解析的でなければならない。

相空間でのトンネル効果の例：

▷ $n=1$, $V(x)$ は有界で滑らか、遠方で十分早く減衰すると仮定する。$E>\sup V$ であれば、古典力学の粒子は、ポテンシャル障壁よりエネルギーが大きいので、反射は生じない。したがって、反射に対応する「散乱振幅」（反射係数）$r(E)$ は0であるはずである。実際、$\hbar\to 0$ のとき、$r(E)=O(\hbar^N)$ $(\forall N)$ は簡単に示される。しかし、0になるとは限らない。

▷ 相空間で見ると、右向きの軌道と、左向きの軌道は、切り離されている。これらの間のトンネル効果で、反射は生じているはずである。

▷ もし V が**解析的であれば、**$r(E)=O(\exp(-c/\hbar))$, $c>0$, が証明される。（例えば、$V(x)=(1+x^2)^{-1}$、$E>1$）

▷ $V(x)$ が滑らかでも**解析的でなければ、**$r(E)$ は指数的減衰をしない例がある。解析的特異性による反射が起こっていると考えられる。(M. Berry)

15．半古典極限のまとめ

▷ 量子力学的観測量 (observable) の $\hbar$ の漸近展開は、$\hbar$-擬微分作用素を代表とする、半古典解析で解析できる。(時間発展に関しては、$\hbar$-フーリエ積分作用素や、WKB 解と呼ばれる漸近解もあり、その仲間である。)

▷ 超局所解析では x と ∂_x の非可換性が基本的困難であり、その取り扱いが本質的である。半古典解析においては、ハイゼンベルクの不確定性原理：$[x, \hbar D_x] = i\hbar$ がそれに対応する。

▷ 半古典解析における小さなパラメーター $\hbar$ はプランク定数とは限らない。ボルン・オッペンハイマー近似においては、$\hbar$ は重い粒子の質量の逆数である。エネルギーの逆数にすれば、特異性の解析となる。

▷ トンネル効果の評価とは、共役な変数に関する解の複素領域での解析性の評価である。相空間でのトンネル効果の評価は、解析的な超局所的特異性の解析に密接に関係する。