d次元水素用原子ハミルトニアンの自己共役性

浅原 啓輔 北海道大学大学院理学院数学専攻

1 Introduction

水素用原子ハミルトニアン H はクーロンポテンシャル $V_c(x) = -\frac{Ze^2}{|x|}, \quad x \in \mathbb{R}^3$ を用いて

$$H = -\frac{h^2}{2m}\Delta + V_c$$

と表される. ここで $h, m, Z, e > 0$ はそれぞれプランクの定数の 2π 倍, 電子の質量, 原子番号, 電気素量を表す定数であり,Δ は 3 次元の一般化されたラプラシアン,V_c はクーロンポテンシャルによる掛け算作用素を表す. このハミルトニアン H が $\mathrm{L}^2(\mathbb{R}^3)$ 上で自己共役であることは良く知られている [1]. そこで今回は一般の d 次元でも同様に V_c, H を定義し, それが $\mathrm{L}^2(\mathbb{R}^d)$ 上で自己共役になるかを調べる. 即ち $d \in \mathbb{N}$ に対して

$$H = -\frac{h^2}{2m}\Delta + V_c, \quad V_c(x) = -\frac{Ze^2}{|x|}, \quad x \in \mathbb{R}^d$$

とする. ただしここでの Δ は d 次元の一般化されたラプラシアンである. $-\Delta$ は自己共役である [2] ことから摂動論の観点から H の自己共役性を考える. そのため以下 2 節で必要な定義をし、 3 節で自己共役性に関する基本的な定理を紹介し, 4 節で主結果を述べる.

2 Definition

まず摂動論の観点から論じるために必要な定義をする.

2.1 相対的有界性

$\mathcal{H}, \mathcal{K}$ は Banach 空間とし A, B は $\mathcal{H}$ から $\mathcal{K}$ への線形作用素であり. 次の①②を満たすとものとする:

① $\mathrm{D}(A) \subset \mathrm{D}(B)$ ② $\exists a, b \geq 0 \quad \text{s.t.} \quad ||B\psi||_{\mathcal{K}} \leq a||A\psi||_{\mathcal{K}} + b||\psi||_{\mathcal{H}}\ , \quad \forall \psi \in \mathrm{D}(A)$

このとき B は A に関して相対有界であるといい, a を B の A-限界という. ここで $\mathrm{D}(A)$ は A の定義域を表し,$||\cdot||_{\mathcal{H}}, ||\cdot||_{\mathcal{K}}$ はそれぞれ,$\mathcal{H},\mathcal{K}$ のノルムを表す. また B が A に関して相対有界でさらに

②' $\forall \epsilon > 0, \exists b_\epsilon \geq 0 \quad \text{s.t.} \quad ||B\psi||_{\mathcal{K}} \leq \epsilon||A\psi||_{\mathcal{K}} + b_\epsilon||\psi||_{\mathcal{H}}\ , \quad \forall \psi \in \mathrm{D}(A)$

を満たすとき B は A に関して無限小といい $B \ll A$ と表す.

B が A に関して相対有界であることは B の A に対する" 小ささ" を表している. 特に B が A に関して無限小であることは (B の A-限界を" 十分小さく" とれるという意味で)B が A に対して" 十分小さい" ことを意味する.

次に 4 節で用いるある関数空間のクラスを定義する.

2.2 L^p-空間の" 和"

$0 < p, q \leq \infty$, $d \in \mathbb{N}$ に対して $\mathrm{L}^p_{real}(\mathbb{R}^d)$ を $f \in \mathrm{L}^p(\mathbb{R}^d)$ で実数値をとるもの全体とし, $\mathrm{L}^p(\mathbb{R}^d) + \mathrm{L}^q(\mathbb{R}^d)$ を $f = f_1 + f_2$ で $f_1 \in \mathrm{L}^p(\mathbb{R}^d), f_2 \in \mathrm{L}^q(\mathbb{R}^d)$ となるもの全体とする. また $\mathrm{L}^p_{real}(\mathbb{R}^d)$ と $\mathrm{L}^q_{real}(\mathbb{R}^d)$ に対しても同様に空間の " 和 " を定義する.

また以下で $\mathbb{R}^d$ 上の複素数値 Borel-可測関数 V に対して同じ記号 V でその関数による掛け算作用素を意味することとする. このとき特に V が実数値関数ならば掛け算作用素 V は自己共役であることが知られている [3].

3 Theorem

作用素 B が作用素 A に関して相対有界な場合の $A+B$ の自己共役性に関する基本的な定理を紹介する.

3.1 Kato-Rellich の定理 [1]

$\mathcal{H}$:Hilbert 空間, A:$\mathcal{H}$ 上の自己共役作用素, B:$\mathcal{H}$ 上の対称作用素 とする.
B は A に関して相対有界でその A-限界 a を $a<1$ とする. このとき次が成り立つ：
① $A+B$ は自己共役　② A の任意の芯上で $A+B$ は本質的自己共役
③ A は下に有界で $A \geq \gamma$ $(\gamma > -\infty)$ ならば $A+B$ も下に有界で
$A+B \geq \gamma - \max\{\frac{b}{1-a}, a|\gamma|+b\}$.
ここで b は 2.1 ②のものである.

次に主結果を得るために用いた不等式を紹介する.

3.2 Hausdorff-Young の不等式 [4]

$1 \leq p \leq 2$, $1 = \frac{1}{p} + \frac{1}{q}$ とする. このとき $f \in \mathrm{L}^p(\mathbb{R}^d)$ に対して
$||\hat{f}||_q \leq (2\pi)^{d(\frac{1}{2}-\frac{1}{q})}||f||_p$
が成り立つ. ただし $\hat{f}$ は超関数の意味での f の Fourier 変換を意味する.

4 Main Result

まず 4.1 で掛け算作用素の意味で $-\Delta$ に関して無限小となる関数空間のクラスを求め、その具体的な応用としての主結果 4.2 を示す.

4.1　$d \geq 4$ とする.　$V \in \mathrm{L}^p(\mathbb{R}^d)$　$(p > \frac{d}{2})$　ならば　$V \ll -\Delta$.

この 4.1 と　$V_c \in \mathrm{L}^p_{real}(\mathbb{R}^d) + \mathrm{L}^\infty_{real}(\mathbb{R}^d)$　$(0<p<d)$
また $d=3$ のときを合わせて次を得る.

4.2

$d \geq 3$ ならば $V_c \ll -\Delta$ で,　$H = -\dfrac{h^2}{2m}\Delta + V_c$　は自己共役.

更に 4.2 の応用例の一つとして次も成り立つ:

4.3　$d \geq 3, Z \in \mathbb{N}$ として
$V_{C_j}(x) = V_C(x_j)$, $V_{C_{ij}}(x) = V_C(x_i - x_j)$, $x = (x_1, \ldots, x_z) \in (\mathbb{R}^d)^Z$,　$i, j = 1, \ldots, Z$,　$i \neq j$

$$H = -\frac{h^2}{2m}\Delta + \textstyle\sum_{j=1}^{Z} V_{C_j} - \sum_{i<j} \dfrac{1}{Z} V_{C_{ij}}$$

とすると H は自己共役となる. ただしこのときの Δ は dZ 次元の一般化されたラプラシアンである. 特に $d=3$ のときこの H は原子番号 Z の原子系の非相対論的ハミルトニアンである.

5 Research Question

4.3 のように $d=3$ で自己共役性が知られている非相対論的ハミルトニアンで, クーロンポテンシャルを摂動として持つものは $d \geq 4$ の場合に拡張してもその自己共役性が期待できる. 一方 $d=1,2$ のときの H の自己共役性については上述の手法は全く使えない (即ち V_c が $-\Delta$ に関して相対有界とならない) ため別の視点からの考察が必要である.

参考文献

[1] 新井 朝雄, 量子現象の数理, 朝倉書店,2006.

[2] 新井 朝雄・江沢 洋, 量子力学の数学的構造 II, 朝倉書店,1999.

[3] 新井 朝雄・江沢 洋, 量子力学の数学的構造 I, 朝倉書店,1999.

[4] M.Reed and B.Simon, "Methods of Modern Mathematical Physics II:Fourier Analysis,Self-Adjointness",Academic Press,1975.