Spectral theory for repulsive Hamiltonians

板倉 恭平 (Kyohei ITAKURA)*
神戸大学大学院理学研究科 数学専攻 博士課程後期課程 2 年

1 Introduction

$L^2(\mathbb{R}^d)$ 上のシュレディンガー方程式：

$$\left(\frac{1}{2}p^2 + V(x)\right)\psi(x) = E\psi(x); \quad p = -i\nabla = -i(\partial_1, \ldots, \partial_d)$$

の解 ψ は波動関数と呼ばれ，微小な粒子（原子や分子など）の運動を記述することが知られている．ここで，x は空間変数，V はポテンシャル関数（すなわち $-\nabla V$ が電場を表す），E は全エネルギーである．左辺の作用素部分は一般に H と表され，シュレディンガー作用素（またはハミルトニアン）と呼ばれている．

古典力学において空間内を運動する粒子の状態は，大きく次の二つに分類される．

束縛状態： 空間内のある有界な領域に，任意の時刻で粒子が存在している．
散乱状態： どんな有界な領域を選んでも，ある時刻にはその領域外に粒子が存在している．

考えている物理系において粒子が束縛状態をもつか否かは，H に関するハミルトン方程式：

$$\frac{\partial H}{\partial p} = \frac{dx}{dt}(= \dot{x}), \quad \frac{\partial H}{\partial x} = -\frac{dp}{dt}(= -\dot{p})$$

を解き，粒子の古典軌道をみることで調べられる．一方で，束縛状態の存在・非存在は，量子力学においては H の固有値（点スペクトル）の存在・非存在が対応している．また，散乱状態には特異連続スペクトル，絶対連続スペクトルが対応している．(しかし，自然な物理モデルに対応するハミルトニアンにおいては，多くの場合，特異連続スペクトルは現れない.）このように数学的には，作用素 H のスペクトルを調べることで考えている物理系での粒子の大まかな挙動がわかるのである．

このような背景を踏まえ講演者は，次の形のハミルトニアンに対してスペクトルの研究を行った．任意に固定された $\epsilon \in (0, 2]$ に対して

$$H = \frac{1}{2}p^2 - |x|^\epsilon + q.$$

ここで，$-|x|^\epsilon$ は斥力ポテンシャル，q は摂動項である．このハミルトニアンから粒子の古典軌道を計算すると，$-|x|^\epsilon$ という項の影響により,（古典力学的には）粒子は散乱状態しかもたない．これは，$-|x|^\epsilon$ が斥力ポテンシャルと呼ばれる理由の一つである．

*itakura@math.kobe-u.ac.jp

さて，束縛状態がないということは，量子力学的には H は固有値をもたないということが期待される．実際，摂動項に適当な条件を課せば H が固有値をもたないことは以前から知られている (cf. e.g. [BCHM])．しかし後述の Theorem 2.2 のような結果は今までに得られていない．講演では，この定理と関連する結果についてもお話ししたいと考えている．

2 Setting and results

2.1 Classical orbit

さて状況設定に入る前に，ハミルトニアンが斥力ポテンシャルをもつ場合に，粒子の古典軌道がどうなるのかをおおまかに見ておこう．$H = p^2/2 - |x|^\epsilon$ とするとハミルトン方程式は次で与えられる．

$$p = \dot{x}, \quad \epsilon|x|^{\epsilon-2}x = \dot{p}.$$

この連立方程式を解いて $x(t)$ を求めると，$t \to \infty$ で一般に次のような挙動をすることがわかる．

$$x(t) = \begin{cases} \mathcal{O}(t^{2/(2-\epsilon)}) & \text{for } 0 < \epsilon < 2, \\ \mathcal{O}(e^{\sqrt{2}t}) & \text{for } \epsilon = 2. \end{cases}$$

これより，新たな位置関数 $y(t)$ を

$$y(t) = \begin{cases} |x(t)|^{1-\epsilon/2}\,(x(t)/|x(t)|) & \text{for } 0 < \epsilon < 2, \\ \log|x(t)|\,(x(t)/|x(t)|) & \text{for } \epsilon = 2 \end{cases}$$

と定めれば，$|y(t)| = \mathcal{O}(t)$ となる．これは自由運動に相当する．

2.2 Basic setting.

まず，原点近傍で修正された距離関数 $r \in C^\infty(\mathbb{R}^d)$ で，以下が成り立つものを一つ選ぶ．

$$r(x) = \begin{cases} 1 & \text{for } |x| \le 1, \\ |x| & \text{for } |x| \ge 2, \end{cases} \quad r \ge 1.$$

この r とクロネッカーの δ を用いて，なめらかな関数 f と偏微分作用素 ∇^f を次で定める．

$$f(r) = \begin{cases} \left(r^{1-\epsilon/2} - 1\right)/(1-\epsilon/2) + 1 & \text{for } 0 < \epsilon < 2, \\ \log r + 1 & \text{for } \epsilon = 2, \end{cases}$$
$$\nabla^f = (\partial_j f)\delta^{jk}\nabla_k.$$

この f の定め方は，上述の位置関数 y が関係している．このような f を用いることで，斥力ハミルトニアンに対しても，自由ハミルトニアンと同様の議論が展開できることが期待される．

さて，摂動項 q に対し以下の仮定を課そう．

Condition 2.1. q は実数値可測関数であり，次のような実数値関数による分解が存在する：

$$q = q_1 + q_2; \quad q_1 \in C^1(\mathbb{R}^d),\ q_2 \in L^\infty(\mathbb{R}^d)$$

であり，ある $\rho, C > 0$ が存在して，次の評価が $\mathbb{R}^d$ 全体で成り立つ．

$$|q_1| \le \begin{cases} Cr^\epsilon f^{-\rho} & \text{for } 0 < \epsilon < 2, \\ Cr^2 f^{-1-\rho} & \text{for } \epsilon = 2, \end{cases} \quad \nabla^f q_1 \le C f^{-1-\rho}, \quad |q_2| \le C f^{-1-\rho}.$$

次に考える関数空間を設定していく．$s \in \mathbb{R}$ に対して，重み付きヒルベルト空間 $\mathcal{H}_s$ を

$$\mathcal{H}_s = f^{-s}\mathcal{H}$$

と定める．また，$\mathcal{H}_{\mathrm{loc}} = L^2_{\mathrm{loc}}(\mathbb{R}^d)$ とする．$B_R = \{f < R\}$ とし，定義関数：

$$F_\nu = F(B_{R_{\nu+1}} \setminus B_{R_\nu}), \quad R_\nu = 2^\nu,\ \nu \ge 0$$

を考える．ここで $F(\Omega)$ は $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$ の定義関数である．関数空間 $\mathcal{B}$, $\mathcal{B}^*$, $\mathcal{B}^*_0$ をそれぞれ以下で定める．

$$\begin{aligned} \mathcal{B} &= \{\psi \in \mathcal{H}_{\mathrm{loc}} \mid \|\psi\|_{\mathcal{B}} < \infty\}, \qquad \|\psi\|_{\mathcal{B}} = \sum_{\nu \ge 0} R_\nu^{1/2} \|F_\nu \psi\|_{\mathcal{H}}, \\ \mathcal{B}^* &= \{\psi \in \mathcal{H}_{\mathrm{loc}} \mid \|\psi\|_{\mathcal{B}^*} < \infty\}, \qquad \|\psi\|_{\mathcal{B}^*} = \sup_{\nu \ge 0} R_\nu^{-1/2} \|F_\nu \psi\|_{\mathcal{H}}, \\ \mathcal{B}^*_0 &= \{\psi \in \mathcal{B}^* \mid \lim_{\nu \to \infty} R_\nu^{-1/2} \|F_\nu \psi\|_{\mathcal{H}} = 0\}. \end{aligned}$$

ここで任意の実数 $s > 1/2$ に対して，包含関係：

$$\mathcal{H}_s \subsetneq \mathcal{B} \subsetneq \mathcal{H}_{1/2} \subsetneq \mathcal{H} \subsetneq \mathcal{H}_{-1/2} \subsetneq \mathcal{B}^*_0 \subsetneq \mathcal{B}^* \subsetneq \mathcal{H}_{-s} \tag{2.1}$$

が成り立つことに注意しておく．簡単のため，以下の記号を導入する．$I \subseteq \mathbb{R}$ に対して

$$I_\pm = \{z = \lambda \pm i\Gamma \mid \lambda \in I, \Gamma \in (0,1)\}.$$

2.3 Results

次の定理は，今回の主結果の中で基本的かつ，重要な定理である．

Theorem 2.2. *Condition 2.1* を仮定し，$\lambda \in \mathbb{R}$ とする．もし関数 $\phi \in \mathcal{B}^*_0$ が超関数の意味で

$$(H - \lambda)\phi = 0$$

を満たすならば，$\mathbb{R}^d$ 全体で $\phi = 0$ である．

Theorem 2.2 が $\mathcal{B}^*_0$-固有関数の非存在を主張する一方で，Bessel 関数を用いて，$\mathcal{B}^*$-固有関数を構成できることがわかっている．したがって包含関係 (2.1) から，$\mathcal{B}^*$ という空間は一般化固有関数が存在する最小の空間であることがわかる．このように一般化固有関数の存在・非存

在を特徴づける関数空間を決定する定理は，レーリッヒの定理と呼ばれる．レーリッヒの定理は，これまで自由ハミルトニアンに対して研究され，そのほかのハミルトニアンに対しては，講演者が知る限り，研究は行われていない．

さてここからは，H のレゾルベント

$$R(z) = (H - z)^{-1}$$

がもつ性質について見ていこう．まず，$R(z)$ を $\mathcal{B}$ から $\mathcal{B}^*$ への写像とみなしたとき，その作用素ノルムが，局所一様有界となることが次の定理からわかる．

Theorem 2.3. *Condition 2.1* を仮定し，$I \subseteq \mathbb{R}$ を任意の相対コンパクトな開部分集合とする．このとき，ある $C > 0$ が存在して，任意の $\phi = R(z)\psi$, $z \in I_\pm$, $\psi \in \mathcal{B}$ に対して，次の不等式が成り立つ．

$$\|\phi\|_{\mathcal{B}^*} + \|\nabla^f \phi\|_{\mathcal{B}^*} + \langle p_j h^{jk} p_k \rangle_\phi^{1/2} + \|r^{-\epsilon} p_j \delta^{jk} p_k \phi\|_{\mathcal{B}^*} \leq C\|\psi\|_{\mathcal{B}}.$$

ここで，h はある非負なテンソルである．

Theorem 2.2 と Theorem 2.3 から直ちに次が従う．

Corollary 2.4. *Condition 2.1* の下で，H のスペクトルは真に絶対連続である．

H が絶対連続スペクトルしかもたないということは，任意の初期状態に対して，粒子は必ず時刻無限大で空間無限遠方に散乱されることを意味している．これは最初の観察と一致する．そこで問題になるのが，粒子がどういう挙動で遠方に散乱されるのか，というものである．このような散乱状態を量子力学の枠組みで扱ったものを散乱理論と呼ぶ．斥力ハミルトニアンに対する散乱理論は [BCHM] などで研究されている．講演者も今後，レゾルベントがもつ性質を用いて，彼らとは異なるアプローチで斥力ハミルトニアンに対する散乱理論に取り組むつもりである．

さてレゾルベントの解析において，Theorem 2.3 の次に扱うべきは極限吸収原理である．ここで極限吸収原理とは，レゾルベント $R(z)$ の $z \to \lambda \in \mathbb{R}$ における境界値の存在性を主張するものである．しかし，Theorem 2.3 から極限吸収原理は直ちに従わない．そこで，摂動項に対するさらなる仮定とレゾルベントのもう一つのノルム評価を与えよう．まず，テンソル ℓ を導入する．

$$\ell = \delta - \tilde{\eta}(\nabla r) \otimes (\nabla r).$$

ここで δ はクロネッカーのデルタ，$\tilde{\eta}$ は，$\ell \geq 0$ となるように選んだあるカットオフ関数である．さらに conjugate operator A を導入する．

$$A = \mathrm{Re}\, p^f, \quad p^f = -i\nabla^f.$$

Condition 2.5. Condition 2.1 に加えて，ある $\tau, C > 0$ が存在して以下の評価が成り立つ．

$$|\nabla^f q_1| \leq Cf^{-1-\tau}, \quad |\ell^{\bullet k} r^{-\epsilon/2} \nabla_k q_1| \leq Cf^{-1-\tau}.$$

さらに以下，$\beta_c > 0$ は ϵ, ρ, τ にのみ依存する定数とする．

Theorem 2.6. *Condition 2.5* を仮定し，$I \subseteq \mathbb{R}$ を任意の相対コンパクトな開部分集合とする．このときすべての $\beta \in [0, \beta_c)$ に対して，ある $C > 0$ が存在して，任意の $\phi = R(z), \psi \in f^{-\beta}\mathcal{B}, z \in I_\pm$ に対してそれぞれ次が成り立つ．

$$\|f^\beta (A \mp a)\phi\|_{\mathcal{B}^*} + \langle p_i f^{2\beta} h^{ij} p_j \rangle_\phi^{1/2} \leq C \|f^\beta \psi\|_{\mathcal{B}}.$$

ここで a はある有界な関数である．

Theorem 2.6 は $\phi = R(z)\psi$ が空間遠方でどの程度振動しているかをはかる目安となる．

Theorem 2.3 と Theorem 2.6 を用いることで，次の形の極限吸収原理が得られる．

Corollary 2.7. *Condition 2.5* を仮定し，$I \subseteq \mathbb{R}$ を任意の相対コンパクトな開部分集合とする．任意の $s > 1/2$ と $\omega \in (0, \min\{(2s-1)/(2s+1), \beta_c/(\beta_c+1)\})$ に対して，ある $C > 0$ が存在して，任意の $z, z' \in I_+$ または $z, z' \in I_-$ に対して次が成り立つ．

$$\|R(z) - R(z')\|_{\mathcal{B}(\mathcal{H}_s, \mathcal{H}_{-s})} \leq C|z - z'|^\omega,$$
$$\|r^{-\epsilon/2} pR(z) - r^{-\epsilon/2} pR(z')\|_{\mathcal{B}(\mathcal{H}_s, \mathcal{H}_{-s})} \leq C|z - z'|^\omega.$$

特に，$\mathcal{B}(\mathcal{H}_s, \mathcal{H}_{-s})$ でのノルム位相の意味で，これら作用素の $I_\pm \ni z \to \lambda \in I$ についての極限が存在する：

$$R(\lambda \pm i0) := \lim_{I_\pm \ni z \to \lambda} R(z), \quad r^{-\epsilon/2} pR(\lambda \pm i0) := \lim_{I_\pm \ni z \to \lambda} r^{-\epsilon/2} pR(z).$$

さらに，これら作用素の極限は $\mathcal{B}(\mathcal{B}, \mathcal{B}^*)$ に属する．

参考文献

[BCHM] Bony, J. F., Carles, R., Häfner, D., Michel, L.: Scattering theory for the Schrödinger equation with repulsive potential. J. Math. Pures Appl. 84 (2005) 509-579.

[I1] Itakura, K.: Rellich's theorem for spherically symmetric repulsive Hamiltonians. preprint, 2017.

[I2] Itakura, K.: Limiting absorption principle and radiation condition for repulsive Hamiltonians. preprint, 2017.

[IS] Ito, K., Skibsted, E.: Stationary scattering theory on manifolds, I. Preprint, 2016.