数理解析研究所講究録
第 464 巻 1982 年 1-9

Hartree-Fock Theory について

京大 理　　磯崎 洋

1。方程式の導出。

Schrödinger 方程式

$$
(1)\quad \begin{cases} i\dfrac{\partial u}{\partial t} = \hat{H} u \\ \hat{H} = \displaystyle\sum_{j=1}^{N} (-\Delta_{x_j} + Q(x_j)) + \sum_{i<j} V(x_i - x_j) \end{cases}
$$

によって支配されるN個の粒子の運動を考えよう。ここで $x_j = (x_j^1, x_j^2, x_j^3) \in \mathbb{R}^3$, $\Delta_{x_j} = \sum_{l=1}^{3} (\partial/\partial x_j^l)^2$ であり，Q, V は real function で

$$
(2)\quad V(x) = V(-x)
$$

をみたすものとする。粒子は indistinguishable でありFermi-statisticsに従うものとする。このことは方程式(1)を，$L^2(\mathbb{R}^{3N})$ の anti-symmetric な subspace

$$
\mathcal{H}_A = \{ f \in L^2(\mathbb{R}^{3N}) \,;\, f(\cdots, x_i, \cdots, x_j, \cdots) = -f(\cdots, x_j, \cdots, x_i, \cdots) \}
$$

の中で考えることを意味する。$\hat{H}$の固有値は物理において重要な量であるが，Hartree-Fockの方法はその近似値を与える為に考え出された方法であるといってよいであろう。Diracはその方法をtime-dependentな方程式(1)にも使ってみることを提唱している。

$L_t = i\frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}$ とおく。$f_1, \cdots, f_N \in L^2(\mathbb{R}^3)$ に対し

$(f_1 \wedge \cdots \wedge f_N)(x_1, \cdots, x_N) = \det(f_j(x_k))$ とおこう。

$X \equiv \overset{N}{\wedge} L^2(\mathbb{R}^3) \equiv \{f_1 \wedge \cdots \wedge f_N \,;\, f_j \in L^2(\mathbb{R}^3)\}$ とおく。これは$\mathcal{H}_A$の中のconeになっている。Xの中で変分問題を考える。X-valued function $v(t) = u_1(t) \wedge \cdots \wedge u_N(t)$ $(u_j(t) = u_j(x, t),$ $x \in \mathbb{R}^3, t \geq 0)$ が変分問題 $(L_t v(t), v(t))$ の極値を与える為の必要十分条件は

$$\frac{d}{d\varepsilon}(L_t(v(t) + \varepsilon\varphi_1 \wedge \cdots \wedge \varphi_N), v(t) + \varepsilon\varphi_1 \wedge \cdots \wedge \varphi_N)\Big|_{\varepsilon=0} = 0$$
$$\forall \varphi_1, \cdots, \varphi_N \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$$

が成りたつことである。このことから$u_j(t)$のみたすべき方程式が次のように導びかれる。$u(t) = {}^t(u_1(x,t), \cdots, u_N(x,t))$ とおけば

$$(3) \begin{cases} i\frac{\partial u}{\partial t} = Hu(t) + K(u(t)) \\ H = -\Delta + Q(x) \\ K(u(t))(x) = \displaystyle\int_{\mathbb{R}^3} V(x-y)\, U(x,y,t)\, \overline{u(y,t)}\, dy \end{cases}$$

$$\begin{cases} U(x,y,t) = (U_{jk}(x,y,t)) & N \times N \text{ matrix} \\ U_{jk}(x,y,t) = u_j(x,t)\,u_k(y,t) - u_k(x,t)\,u_j(y,t) \end{cases}$$

が成りたつ。(3) が time-dependent Hartree-Fock equation である。

(3) の解 $u(t)$ はいくつかの興味深い性質をもっている。

(I) (unitary invariance) A を任意の $N \times N$ unitary matrix とし、$w(t) = Au(t)$ とおけば $w(t)$ は

$$i\frac{\partial}{\partial t}w(t) = Hw(t) + K(w(t))$$

をみたす。ここで $K(w(t))$ は $K(u(t))$ において $u_j(t)$ を $w_j(t)$ でおきかえたものである。例えば $u_1(t)$ と $u_2(t)$ を入れかえるという操作は unitary 行列で書けるが、それによって方程式が不変であるということは、N 個の粒子が indistinguishable であることを反映していると考えられる。

(II) (conservation of total probabilities)

$$\frac{d}{dt}(u_j(t), u_k(t)) = 0 \qquad \text{for } \forall t,\ \forall j, k$$

が成りたつ。これより特に $\|u_j(t)\|_{L^2} = \|u_j(0)\|_{L^2}$ が成り立つ。

(III) (conservation of energy)

$E(u(t)) = (Hu(t), u(t)) + \frac{1}{2}(K(u(t)), u(t))$ とおけば $\frac{d}{dt}E(u(t)) = 0$ である。

4

2. Existence theorem.

方程式 (1) の解の存在は $\hat{H}$ が self-adjoint であれば保証される。$\hat{H}|C_0^\infty(\mathbb{R}^{3N})$ が essentially self-adjoint である為の十分条件は例えば Q, V が Kato 型 ($Q, V \in L^2 + L^\infty$) であることである。この class に対しては (3) の解の local existence が導びかれる。次のような仮定をおく。

(A.1) $Q(x)$ is real-valued. $Q(x) = Q_1(x) + Q_2(x)$, where $Q_1 \in L^2$, $Q_2 \in L^\infty$.

(A.2) $V(x)$ is real-valued. $V(x) = V_1(x) + V_2(x)$, where $V_1 \in L^2$, $V_2 \in L^\infty$.

$\mathcal{H}^m$ を order m の Sobolev space としよう。

定理 1. (Local existence) (A.1), (A.2) の仮定の下で，任意の Cauchy data $u(0) \in \mathcal{H}^2$ に対して一意的に local solution (in time) が存在する。

global existence の為にはもう一つの仮定を設けるのが便利である。

(A.3). multiplication operator として $V \in B(\mathcal{H}^1; L^2)$.

定理 2. (Global existence) (A.1), (A.2), (A.3) の仮定の下で．任意の Cauchy data $\in \mathcal{H}^2$ に対して global solution が存在する。

(A.3)をみたす V の例をあげよう。

Example) $V = V_1 + V_2 + V_3$。$|V_1(x)| \leq \mathrm{Const}/|x|$, $V_2 \in L^3$, $V_3 \in L^\infty$ ならば V は(A.3)をみたす。

3. Decay property.

(3)の解の挙動は多体Schrödinger方程式(1)の解のそれと類似しているように思われる。解のdecayとenergyの関係について論じよう。

<u>Def.</u> $f \in L^2_\varepsilon + L^\infty_\varepsilon$ とは $\forall \varepsilon > 0$ に対して $f_{1,\varepsilon}, f_{2,\varepsilon}$ が存在して, $f = f_{1,\varepsilon} + f_{2,\varepsilon}$, $f_{1,\varepsilon} \in L^2$, $\|f_{2,\varepsilon}\|_{L^\infty} < \varepsilon$ となることである。

次の仮定を設ける。

(A.4). $Q, V \in L^2_\varepsilon + L^\infty_\varepsilon$.

<u>定理</u>3. (A.1), (A.2), (A.3), (A.4)の仮定の下で, もし $\lim_{t\to\infty} \|u(t)\|_{L^\infty} = 0$ ならば, $E(u(t)) \geq 0$ である。

言い換えれば負のenergyの解は L^∞-normではdecayしない。通常, 解のdecayとはlocalな L^2-normのdecayをさすことが多い. repulsive potentialについて, それを考えよう。

Def. $f \in R_\alpha^+$ とは，$f(x) \geq 0$ かつ $r\frac{\partial}{\partial r}f + \alpha f \leq 0$ ($r = |x|$, α : const.) が成りたつこと。

Q, V が repulsive potential としよう．

(A.5) $Q, V \in R_\alpha^+$, $\alpha \leq 2$.

定理. 4. (A.1), (A.2), (A.3), (A.5) を仮定する．$2 < p < 6$, $a = 3(1/2 - 1/p)$ をみたす a, p をとる。$u(0) \in \mathcal{H}^2$, $r u(0) \in L^2$ とする。このとき

(1) $\alpha < 2$ なら $\|u(t)\|_{L^p} \leq \mathrm{Const.}\left(\frac{t^\alpha}{\log t}\right)^{-\frac{a}{2}}$ $(t > 0)$.

(2) $\alpha = 2$ なら $\|u(t)\|_{L^p} \leq \mathrm{Const.}(t \log t)^{-a}$ $(t > 0)$.

系. 5. 定理4の仮定の下で ${}^\forall R > 0$, $1 < {}^\forall a < 1$ に対し

$$\left(\int_{|x|<R} |u(x,t)|^2 dx\right)^{1/2} \leq C_{R,a} \begin{cases} \left(\frac{t^\alpha}{\log t}\right)^{-\frac{a}{2}} & (\alpha < 2) \\ (t \log t)^{-a} & (\alpha = 2). \end{cases}$$

repulsive potential に対しては (3) の解の local decay が示された。これは repulsive potential をもつ system は single channel であることと深い関係があろう。一般にはこのことは期待できない。起こり得るのは cluster に分かれ

て散乱することであろう。まず cluster 分解を定義する。

<u>Def.</u> $D=\{A_1,\cdots,A_k\}$ が $\{1,\cdots,N\}$ の cluster 分解とは

$\Longleftrightarrow$ (1) A_i は $\{1,\cdots,N\}$ の non-empty subset.

(2) $A_i\cap A_j=\phi$ if $i\neq j$.

(3) $A_1\cup\cdots\cup A_k=\{1,\cdots,N\}$.

<u>Def.</u> $i\sim j\ (D)$ $\Leftrightarrow$ $\exists \ell$ s.t. $i.j\in A_\ell$

$i\not\sim j\ (D)$ $\Leftrightarrow$ otherwise.

$u(t)$ を (3) の解とする。$u(t)\in S_D$ とは $\forall R>0$ に対して

$$\iint_{|x-y|<R} |u_i(x,t)|^2|u_j(y,t)|^2\,dx\,dy \longrightarrow 0 \quad (t\to\infty)$$

if $i\not\sim j\ (D)$ が成りたつこととする。

$\# A_i=n_i$ とし

$$H(A_i)=\sum_{l=1}^{n_i}\left(-\Delta_{x_\ell}+Q(x_\ell)\right)+\sum_{\substack{l<m\\ l,m<n_i}}V(x_\ell-x_m)$$

$$\mathcal{H}_A^{n_i}=\{f\in L^2(\mathbb{R}^{3n_i})\ ;\ f(\cdots,x_\ell,\cdots,x_m,\cdots)=-f(\cdots,x_m,\cdots,x_\ell,\cdots)\}$$

E_{A_i} は $H(A_i)$ を $\mathcal{H}_A^{n_i}$ で考えたときの spectrum の inf.

とする。

<u>定理</u>. 6. (A.1), (A.2), (A.3), (A.4) を仮定する。$u(t)\in S_D$

ならば　$E(u(t)) \geq \sum_{i=1}^{k} E_{A_i}$.

特に $D=\{A_1,\cdots,A_k\}$ において $\# A_i = 1 \quad (2 \leq i \leq k)$ としよう。$u(t) \in S_D$ で $\forall R>0$ に対して

$$\int_{|x|<R} |u_j(x,t)|^2 dx \longrightarrow 0 \quad t \to \infty \quad j \notin A_1$$

と仮定しよう。このとき

<u>定理</u>. 7.　$E(u(t)) \geq E_{A_1}$.

即ち cluster 散乱が起こり得る為には energy が或る程度高くなくてはならない。cluster 散乱をおこすような解が存在し得るかどうかはいわゆる channel wave operator が存在するかという問題である。(い) に対してはそれは示されているが，(3) に対しては筆者はごく限られた場合しか知らない。

4. 参考文献

[1] P.A.M. Dirac, The Principle of Quantum Mechanics, 4 th ed., Oxford University Press, Clarendon, 1958.

[2] A.Bove, G.Da Prato and G.Fano, An existence proof for the Hartree-Fock time-dependent problem with bounded two-body interaction, Comm. Math. Phys. 37, 183-191 (1974).

[3] J.M. Chadam and R.T.Glassey, Global existence of solutions to the Cauchy

problem for time-dependent Hartree equations, J.Math. Phys., 16 1122-1130 (1975).

[4] J.Ginibre and G.Velo, Equation de Schrödinger non linéaire avec interaction non locale, C.R.Acad.Sc.Paris, t. 288, Série A 683-685 (1979).

[5] J.P.Dias and M.Figueria, Décroissance à l'infini de la solution d'une équation non linéaire du type Schrödinger-Hartree, C.R.Acad.Sc.Paris, t. 290, Serie A 889-892 (1980).

[6] J.P.Dias and M.Figueria, Conservation laws and time-decay for the solutions of some nonlinear Schrödinger-Hartree equations and systems, J.Math.Anal. and Appl., 84 486-508 (1981).

[7] H.Isozaki, On the existence of solutions to time-dependent Hartree-Fock equations, (preprint).