数理解析研究所講究録
第 730 巻 1990 年 84-95

Schrödinger 方程式の解の漸近挙動

東大・教養　北田 均
(Hitoshi Kitada)

我々の問題は N-体 Schrödinger 方程式

(1) $$\frac{1}{i}\frac{du}{dt} + Hu = 0, \quad u(0) = f \quad \text{in } \mathcal{H} = L^2(R^n),$$
$(n = (N-1)\nu,\ \nu \geqq 3)$

の解 $e^{-itH}f$ の $t \to \pm\infty$ での漸近挙動を調べることである。

ここで H は N-体 Hamiltonian で

(2) $$H = H_0 + V = H_0 + \sum_\alpha V_\alpha(x_\alpha)$$
(H_0 は free Hamiltonian)

の形をしている。$\alpha = (i, j)$, $1 \le i < j \le N$ は pair で, V_α は pair potential と呼ばれる:

(3) $$V_\alpha(x_\alpha) = V_\alpha(r_i - r_j) \qquad (r_i, r_j \in R^\nu)$$

r_i は i 番目の粒子の位置 vector である。i 番目の粒子の質量を $m_i > 0$ と書く。

$a = \{C_1, \cdots, C_k\}$ が $\{1, \cdots, N\}$ の cluster 分解とは,

(4) $\bigcup_{\ell=1}^{k} C_\ell = \{1, \cdots, N\}$, $C_i \cap C_j = \phi\ (i \neq j)$, $C_i \neq \phi$

なること。R^n の Jacobi 座標系 $x = (x_1, \cdots, x_{N-1})$ は

(5) $$x_{j+1} = r_{j+1} - \left(\sum_{i \leq j} m_i\right)^{-1} \left(\sum_{i \leq j} m_i r_i\right) \quad (j = 1, \cdots, N-1)$$

と定義される。

cluster 分解 a に対応する Jacobi 座標 $x = (y_a, x^a)$ は、まず各 cluster C_ℓ 内の Jacobi 座標 $x^{(C_\ell)} = (x_1^{(C_\ell)}, \cdots, x_{|C_\ell|-1}^{(C_\ell)})$ ($|C_\ell|$ は set C_ℓ の元の個数) をとり、$x^a = (x^{(C_1)}, \cdots, x^{(C_{|a|})})$ とする。次に各 cluster C_ℓ の重心を一点とみなし、この重心間の Jacobi 座標をとり、それを $y_a = (y_1, \cdots, y_{|a|-1})$ として得られる。この時 H_0 は

(6) $$H_0 = -\frac{1}{2}\left(\sum_{\ell=1}^{|a|-1} \frac{1}{M_\ell} \Delta_{y_\ell} + \sum_{\ell=1}^{|a|} \sum_{i=1}^{|C_\ell|-1} \frac{1}{\mu_i} \Delta_{x_i^{(C_\ell)}}\right)$$

と表わされる。但し、M_ℓ, μ_i は reduced mass.

$R^n = R^{\nu(|a|-1)}_{y_a} \times R^{\nu(N-|a|)}_{x^a}$ の内積として、

(7) $$\langle (y_a, x^a), (\tilde{y}_a, \tilde{x}^a) \rangle = \sum_{\ell=1}^{|a|-1} M_\ell y_\ell \cdot \tilde{y}_\ell + \sum_{\ell=1}^{|a|} \sum_{i=1}^{|C_\ell|-1} \mu_i x_i^{(C_\ell)} \cdot \tilde{x}_i^{(C_\ell)}$$

をとる。$x = (y_a, x^a)$ に conjugate な運動量を

(8) $$q = (q_a, p^a)$$
$$\begin{cases} q_a = (M_1^{-1} D_{y_1}, \cdots, M_{|a|-1}^{-1} D_{y_{|a|-1}}) \\ p^a = (\mu_1^{-1} D_{x_1^{(C_1)}}, \cdots, \mu_{|C_{|a|}|-1}^{-1} D_{x_{|C_{|a|}|-1}^{(C_{|a|})}}) \end{cases}$$

と定義すると、H_0 は次のようになる：

(9) $$H_0 = -\frac{1}{2} \langle (q_a, p^a), (q_a, p^a) \rangle.$$

cluster 分解 a に対し、

(10) $$A^a = \frac{1}{2}(\langle x^a, p^a\rangle + \langle p^a, x^a\rangle) = \frac{1}{2}(x^a \cdot D^a + D^a \cdot x^a)$$

とおく。$|a|=1$ のとき、A^a を A と書く。A^a は $\mathcal{H}^a \equiv L^2(R^{(N-|a|)\nu}_{x^a})$ の selfadjoint operator で、$i[H_0, A] = 2H_0$ をみたす。

cluster 分解 a の各 cluster C_l, C_m の重心を結ぶ vectors を z_k, $k=1, \cdots, k_a$, ($k_a = \binom{k}{2}$, $k=|a|$) と表わす。

全 Hamiltonian H は

(11) $$H = H_0 + V = H_0 + \sum_\alpha V_\alpha = H^a + T_a + I_a$$
$$\equiv \Big(H_0^a + \sum_{\alpha \le a} V_\alpha\Big) + T_a + I_a, \quad I_a = \sum_{\sim(\alpha\le a)} V_\alpha$$

と分解される。但し、$\alpha \le a$ は pair $\alpha = (i,j)$ の i,j が a の同一の cluster に属することを表し、$\sim(\alpha \le a)$ はその否定とする。T_a は cluster 間の free energy, H_0^a は cluster 内の free energy である。

P_a を H^a の eigenprojection とする。$|a|=N$ のときは、$P_a = I$ とする。

Lemma. $0 < \Lambda_0 < \infty$ とする。$\Lambda_0 \gg \theta_2 \gg \theta_3 \gg \cdots \gg \theta_{N-1} > 0$ なる θ_j に対し、

(12) $$\tilde{j}_a(x) = \phi(|x^a|^2 < 2\theta_{|a|})^{1/2} \quad (|a|=2)$$
$$= \Big\{\phi(|x^a|^2 < 2\theta_{|a|}) \prod_{l=2}^{|a|-1}\Big(1 - \sum_{|c|=l,\, a\le c} \phi(|x^c|^2 < 2\theta_{|c|})\Big)\Big\}^{1/2} \quad (3 \le |a| \le N)$$

とおくと、

(13) $$\sum_{2\le|a|\le N} \tilde{j}_a(x)^2 = 1 \quad \text{on } \{x \in R^n \mid |x|^2 > \Lambda_0\}.$$

従って，$r_0 >> \rho_2 >> \sigma_2 >> \rho_3 >> \sigma_3 >> \cdots >> \sigma_{N-1} >> \rho_N > 0$

なる ρ_j に対し，$|x|^2 > r_0$ の時

$$(14) \quad \sum_{2\le|a|\le N} \tilde{j}_a(x)^2 \prod_{k=1}^{k_a} \phi(|y_k|^2 > \rho_{|a|}) \overset{\text{def.}}{\equiv} \sum_{2\le|a|\le N} j_a(x)^2 = 1.$$

但し，$\phi(\lambda > \rho)$ は $\{\lambda \mid \lambda > \rho\}$ の滑らかな特性関数。

これは Sigal-Soffer [2] の Sect. 5 の phase space での 1 の分解を configuration space でやったものに過ぎない。

結果を述べるために仮定をおく：

仮定 I．$V_\alpha(x_\alpha) \in C^1(R^\nu)$ で，

$$|V_\alpha(x_\alpha)| + |x_\alpha \cdot \nabla_{x_\alpha} V_\alpha(x_\alpha)| \to 0 \quad (|x_\alpha| \to \infty).$$

仮定 II．i) $1 \le |a| \le N-1$ に対し，$P_a = \sum_{i=1}^{L_a} P_a^i$，$P_a^i f = (f, \varphi_a^i)\varphi_a^i$

$$(0 \le L_a < \infty) \qquad \|\varphi_a^i\| = 1$$

ii) $\| |x^a| P_a \| < \infty$，$2 \le |a| \le N-1$.

<u>定理.</u> $f \in \mathcal{D}(\langle x \rangle) \cap \mathcal{D}(H)$ に対し，$\exists t_n \to \pm\infty$ なる列があって，

$$\lim_{\substack{\rho_j/\sigma_j \to \infty \\ \rho_N \to \infty}} \limsup_{n\to\infty} \sum_{2\le|a|\le N} \left\| \left(\frac{y_a}{t_n} - q_a\right) j_a(x) e^{-it_nH} f \right\|^2 = 0.$$

この定理は 状態 $j_a e^{-it_nH} f$ 上では 運動量と座標が古典力学的な関係を漸近的に満たすことを示す。これは Enss [1] の結果の一変形であり，筆者が 1984 年に予想していたものである。

以下定理の証明： $t_n \to +\infty$ の時のみ考える。

$$(1) = \sum_{2 \le |a| \le N} \| (\tfrac{y_a}{t} - q_a) j'_a(x) e^{-itH} f \|^2$$

とおく。このとき $\exists T_n \to \infty$, $\exists s_n \to \infty$ なる列に対し、

$$\frac{1}{T_n} \int_{s_n}^{s_n+T_n} (1)\, dt \longrightarrow 0 \quad (n \to \infty)$$

を言えば十分。この式は $s, T > 0$ に対して、

$$\frac{1}{T} \int_s^{s+T} (1)\, dt$$

$$= \sum_{2 \le |a| \le N} \frac{1}{T} \int_s^{s+T} (e^{itH} j'_a \left(\frac{y_a^2}{t^2} - \frac{1}{t} (\langle y_a, q_a \rangle + \langle q_a, y_a \rangle) + 2T_a \right) j'_a$$

$$\times e^{-itH} f, f)\, dt$$

となる。$y_a^2 + (x^a)^2 = x^2$, $\frac{1}{2}(\langle y_a, q_a \rangle + \langle q_a, y_a \rangle) + A^a = A$ に注意して、j'_a の support の性質より、

$$\frac{1}{T} \int_s^{s+T} (1)\, dt = \sum_{2 \le |a| \le N} \left\{ \frac{1}{T} \int_s^{s+T} \left(e^{itH} j'_a \left(\frac{x^2}{t^2} - \frac{2A}{t} + 2T_a \right) j'_a e^{-itH} f, f \right) dt \right.$$

$$\left. + O\left(\frac{\theta_{|a|}}{s} \right) \right\}$$

$$\equiv (2) + ①, \quad ① = \sum_{2 \le |a| \le N} O\left(\frac{\theta_{|a|}}{s} \right)$$

となる。$[j'_a, \frac{A}{t}] = O\left(\frac{1}{t\theta_{|a|}} \right)$, $[j'_a, T_a] = O\left(\frac{1}{\theta_{|a|}} \right)$ ゆえ、

$$(2) = \sum \left\{ \frac{1}{T} \int_s^{s+T} \left(e^{itH} \left(\frac{x^2}{t^2} - \frac{2A}{t} + 2T_a \right) j'^2_a e^{-itH} f, f \right) dt \right.$$

$$\left. + O\left(\frac{1}{\theta_{|a|}} \right) \right\}$$

$$= \sum \left\{ \frac{1}{T} \int_s^{s+T} \left(e^{itH} \left(\frac{x^2}{t^2} - \frac{2A}{t} + i[H, A] \right) j'^2_a e^{-itH} f, f \right) dt \right.$$

$$\left. + O\left(\frac{1}{\theta_{|a|}} \right) + \frac{1}{T} \int_s^{s+T} \left(e^{itH} (i[H^a, A^a] + i[I_a, A]) e^{-itH} f, f \right) dt \right\}$$

ここで $\| i[I_a, A] j_a^2 (H+i)^{-1} \| = o_{\theta(a)}(1)$ ($\to 0$ as $\theta(a)\to\infty$) ゆえ,

$\sum_{2\le |a| \le N} j_a^2 = 1$と合わせて,

$$(2) = \frac{1}{T}\int_s^{s+T} (e^{itH} J(t) e^{-itH} f, f)\, dt$$

$$+ \sum_{2\le|a|\le N} \Big\{ \frac{1}{T}\int_s^{s+T} (e^{itH} i[H^a, A^a] j_a^2 e^{-itH} f, f)\, dt + o_{\theta(a)}(1) \Big\}$$

$$\equiv (4) + (5) + \sum o_{\theta(a)}(1).$$

まず(4)を考える: $G(t) = e^{itH} i[H,A] e^{-itH} = \frac{d}{dt} e^{itH} A e^{-itH}$

(これは$\mathcal{D}(H)$上 tに付き一様有界) とおき,

$$H(t) = \frac{1}{t^2}\int_0^t \tau G(\tau)\, d\tau \quad (これも\mathcal{D}(H)上一様有界)$$

とする。このとき, 部分積分より,

$$tH'(t) = G(t) - \frac{2}{t^2}\int_0^t \tau G(\tau)\, d\tau$$

$$= G(t) - \frac{2}{t^2}\Big\{ \Big[\tau \int^\tau G(\sigma)\, d\sigma\Big]_0^t - \int_0^t \int^\tau G(\sigma)\, d\sigma\, d\tau \Big\}$$

$$= G(t) - \frac{2}{t}\{ e^{itH} A e^{-itH} - A\} + \frac{2}{t^2}\int_0^t e^{i\tau H} A e^{-i\tau H}\, d\tau$$

$$= G(t) - e^{itH}\frac{2A}{t} e^{-itH} + \frac{2A}{t} + \frac{1}{t^2}(e^{itH} x^2 e^{-itH} - x^2)$$

$$= e^{itH} J(t) e^{-itH} + \Big(\frac{2A}{t} - \frac{x^2}{t^2}\Big).$$

よって,

$$e^{itH} J(t) e^{-itH} = tH'(t) + \Big(\frac{x^2}{t^2} - \frac{2A}{t}\Big).$$

ゆえに,

$$(4) = \frac{1}{T}\int_s^{s+T} t(H'(t) f, f)\, dt + \frac{1}{T}\int_s^{s+T} \Big(\Big(\frac{x^2}{t^2} - \frac{2A}{t}\Big) f, f\Big)\, dt$$

$$= (4)' + O\Big(\frac{1}{s}\Big).$$

ここで Enss [ ] による Lemma が成り立つ;

Lemma. $h(t) \in C^1([0,\infty))$, bounded, $\lim_{t\to\infty} |h'(t)| = 0$

$\Rightarrow \forall T > 0, \exists s_n \to \infty$ s.t.

$$\lim_{n\to\infty} \frac{1}{T}\int_{s_n}^{s_n+T} t\,h'(t)\,dt = 0.$$

これより, $\exists T_n \to \infty, \exists s_n \to \infty$ s.t.

$$④ \equiv (4)\Big|_{T=T_n,\, s=s_n} \longrightarrow 0 \quad (n\to\infty)$$

がいえる。

次に (5) を考える;

$$(5) = \sum_{2\le|a|\le N} \frac{1}{T}\int_{s}^{s+T} (e^{itH} i[H^a, A^a] J_a'^2 e^{-itH} f, f)\,dt,$$

$S > 0$; given に対し, $s(t) = t - mS$ for $mS + s \le t < (m+1)S + s$ $(m = 0, 1, 2, \cdots)$ とおく。すると, $m_0 = [T/S]$ (Gauss 記号) とおくとき,

$$\frac{1}{T}\int_{s}^{s+T} (e^{itH} i[H^a, A^a] J_a'^2 e^{-itH} f, f)\,dt$$

$$= \frac{1}{T}\left\{ \int_{s}^{S+s} + \int_{m_0S}^{s+T} + \sum_{m=1}^{m_0-1} \int_{mS+s}^{(m+1)S+s} \right\} (e^{is(t)H} i[H^a, A^a] J_a'^2 e^{-is(t)H}$$

$$\times e^{-imSH} f, e^{-imSH} f)\,dt$$

$$= O\left(\frac{S}{T}\right) + \frac{1}{m_0}\sum_{m=1}^{m_0-1} \frac{1}{S}\int_{s}^{s+S} (e^{isH} i[H^a, A^a] J_a'^2 e^{-isH} f_m, f_m)\,d$$

となる。但し, $f_m = e^{-imSH} f$. これを

$$\equiv ⑤ + \frac{1}{m_0}\sum_{m=1}^{m_0-1} (6)$$

と書く。

(6)は

$$(6) = \frac{1}{S}\int_{s}^{s+S} \left(e^{is'H} i[H^a, A^a] j_a'^2 e^{-is'H} f_m, f_m\right) ds'$$

であるが、固定したSに対し、$s \le s' \le s+S$ なる s' について一様に、

$$e^{is'H} = e^{is'H_a} + O^S_{\rho|a|}(1)$$

但し $O^S_\rho(1) \to 0$ (as $\rho \to \infty$ for each fixed $S>0$)

がいえるので、

$$(6) = \frac{1}{S}\int_{s}^{s+S} \left(e^{is'H_a} i[H^a, A^a] j_a'^2 e^{-is'H_a} f_m, f_m\right) ds' + O^S_{\rho|a|}(1)$$

$$\equiv (7) + ⑥.$$

ここで次が成りたつ：

Lemma. $B(s)$ を s について norm 連続、一様有界 operator とする。

i) $\left\| \frac{1}{S}\int_0^S B(s)\,\phi(|x^a|<\theta)\,(I-P_a)\,e^{isH^a}(H^a+i)^{-1} ds \right\| \to 0$ (as $S\to\infty$)

(RAGE-theorem)

ii) 仮定II-ii) より、$\|\phi(|x^a|>\theta) P_a\| \to 0$ (as $\theta\to\infty$).

iii) i), ii) より、$\forall s>0$ について一様に

$$\left\| \frac{1}{S}\int_{s}^{s+S} B(s')\left(\phi(|x^a|<\theta) - P_a\right) e^{is'H^a}(H^a+i)^{-1} ds' \right\|$$

$$= O_\theta(1) + O^\theta_S(1).$$

よって

$$(7) = \left(\frac{1}{s} \int_{\sigma}^{\sigma+s} e^{i\sigma' H_a} i[H^a, A^a] J_a^2 e^{-i\sigma' H_a} (H^a+i)^{-1} d\sigma' \times \right.$$

$$\left. \times (H^a+i) f_m, f_m \right).$$

ここで $3 \le |a| \le N$ のときの $J_a(x)$ の定義式の第2の因子と, $H_a = H^a + T_a$ の中の T_a の commutator $\times (T_a+i)^{-1}$ の operator norm の order は $O_{\rho_{|a|}}(1)$ なので, fixed $s>0$ に対し,

$$e^{i\sigma' T_a} \{J_a(x)\text{の第2因子}\} e^{-i\sigma' T_a} = I + O^{s}_{\rho_{|a|}}(1) \quad (\sigma \le \sigma' \le \sigma+s)$$

となる。J_a の第1因子は T_a と可換に注意すれば, 上のLemmaの前より,

$$(7) = \left(\frac{1}{s} \int_{\sigma}^{\sigma+s} e^{i\sigma H^a} i[H^a, A^a] \{J_a^2\text{の第1因子}\} e^{-i\sigma H^a} (H^a+i)^{-1} d\sigma' \right.$$

$$\left. \times (H^a+i) f_m, f_m \right)$$

$$+ O^{s}_{\rho_{|a|}}(1) \ (\equiv ⑦ \text{とおく})$$

$$= \left(\frac{1}{s} \int_{\sigma}^{\sigma+s} e^{i\sigma' H^a} i[H^a, A^a] P_a e^{-i\sigma' H^a} (H^a+i)^{-1} d\sigma' \right.$$

$$\left. \times (H^a+i) f_m, f_m \right)$$

$$+ \underbrace{O_{\theta_{|a|}}(1)}_{\equiv ⑧} + \underbrace{O_{s}^{\theta_{|a|}}(1)}_{\equiv ⑨ \text{とおく}} + ⑦.$$

ところが, $H^a P_a^i = \lambda_a^i P_a^i$ とすれば,

$$\frac{1}{s} \int_{\sigma}^{\sigma+s} e^{i\sigma' H^a} i[H^a, A^a] P_a^i e^{-i\sigma' H^a} (H^a+i)^{-1} d\sigma'$$

$$= \frac{1}{s} \int_{\sigma}^{\sigma+s} e^{i\sigma'(H^a - \lambda_a^i)} i(H^a - \lambda_a^i) A^a P_a^i \times (H^a+i)^{-1} d\sigma'$$

$$= \frac{1}{s} \left(e^{i(\sigma+s)(H^a-\lambda_a^i)} - e^{i\sigma(H^a-\lambda_a^i)} \right) A^a P_a^i (H^a+i)^{-1}.$$

$A^a p_a^{i} (H^a + i)^{-1}$ は 仮定 II-ii) より bounded operator なので, これは $S \to \infty$ のとき, operator norm で $\to 0$。よって

$$(7) = o\left(\frac{1}{S}\right) + ⑦ + ⑧ + ⑨ \equiv ⑩ + ⑦ + ⑧ + ⑨.$$

以上まとめると,

$$\frac{1}{T_n} \int_{s_n}^{s_n + T_n} (1)\, dt$$

$$= \sum_{2 \le |a| \le N} \Big\{ \overset{①}{O\left(\frac{\theta_{|a|}}{s_n}\right)} + \overset{③}{o_{\theta_{|a|}}(1)} + \overset{④}{o_n(1)}$$

$$+ \overset{⑤}{O\left(\frac{S}{T_n}\right)} + \overset{⑥}{o^S_{\rho_{|a|}}(1)} + \overset{⑦}{o^S_{\rho_{|a|}}(1)}$$

$$+ \overset{⑧}{o_{\theta_{|a|}}(1)} + \overset{⑨}{o_S^{\theta_{|a|}}(1)} + \overset{⑩}{O\left(\frac{1}{S}\right)} \Big\}.$$

$\forall \varepsilon > 0$ given とする。このとき,

1° $\exists \theta^0_{|a|} > 1, \ \forall \theta_{|a|} > \theta^0_{|a|}$: ③ + ⑧ $< \varepsilon$.

2° $\forall \theta_{|a|} > \theta^0_{|a|}, \ \exists S > 1$: ⑨ + ⑩ $< \varepsilon$.

3° $\exists \rho^0_{|a|} > \theta_{|a|}, \ \forall \rho_{|a|} > \rho^0_{|a|}$: ⑥ + ⑦ $< \varepsilon$.

4° $\exists n_0 > 1, \ \forall n > n_0$: ① + ④ + ⑤ $< \varepsilon$.

とできるので, 定理が示された。 □

以上の結果，または，Enss[1] の結果を使うと下の仮定Ⅲを付け加えたとき，N-体波動作用素

$$W_a^{\pm} = \underset{t\to\pm\infty}{\text{s-}\lim} e^{itH} e^{-itH_a} P_a$$

の完全性：

$$\bigoplus_{2\le|a|\le N} \mathcal{R}(W_a^{\pm}) = \mathcal{H}^c(H) = \mathcal{H}^{ac}(H)$$

がいえる。但し，$\mathcal{H}^c(H)$，$\mathcal{H}^{ac}(H)$ は H の連続，及び，絶対連続部分空間．

仮定Ⅲ． $V_\alpha(x_\alpha)$ は $C^2(R^\nu)$-関数で，$\exists\varepsilon>0$，$\exists C_0>0$ に対し，

$$|V_\alpha(x_\alpha)| \le C_0(1+|x_\alpha|)^{-1-\varepsilon}, \quad |(x_\alpha\cdot D_{x_\alpha})^2 V_\alpha(x_\alpha)| \le C_0,$$

$$(\text{※}) \quad x_\alpha\cdot D_{x_\alpha} V_\alpha(x_\alpha) + 2V_\alpha(x_\alpha) \ge 0.$$

この研究をした初期の段階では(※)はなしで完全性が成り立つことを証明できたと思ったが，W. Hunziker の学生 Gian Graf，及び，中村周氏より，その時の key Lemma は成り立たないのではないかとの疑問がよせられた。現段階で確実にいえるのは，(※)の条件をつければ完全性は成り立つということである。

文 献

[1] V. Enss, Introduction to asymptotic observables for multi-particle quantum scattering, In Schrödinger Operators, Aarhus 1985, ed. E. Balslev, Lect. Notes in Math., 1218, Springer-Verlag, 1986, pp. 61-92.

[2] I. M. Sigal, A. Soffer, The N-particle scattering problem: Asymptotic completeness for short-range systems, Ann. Math., 126 (1987), 35-108.