

シュレーディンガー作用素の負の固有値の個数の評価について

中野史彦 (東北大学理学研究科)

Fumihiko Nakano (Mathematical Institute, Tohoku University)

概要

シュレーディンガー作用素の負の固有値の個数の評価について、知られている結果を復習し [3, 4, 5]、2次元の場合の最近の結果 [6] の紹介を行う。

次のシュレーディンガー作用素を考える。

$$H = -\Delta + V \quad \text{on } L^2(\mathbf{R}^d).$$

区間 $I \subset \mathbf{R}$ に対して I に対応する H のスペクトル射影作用素を $P_I(H)$ とする。

$$N_I(H) = \dim \text{Ran } P_I(H)$$

とおいて、 H の負の固有値の個数を $N_{(-\infty, 0)}(H)$ と表す。本講演の目的は、 $N_{(-\infty, 0)}(H)$ について知られている主な結果を復習するとともに、2次元の場合についての最近の結果を紹介することである。Birman, Schwinger による次の評価はよく知られている。

Theorem 1 (Birman-Schwinger bound) $d = 3$ のとき、

$$N_{(-\infty, 0)}(H) \leq \frac{1}{(4\pi)^2} \|V\|_R^2, \quad \|V\|_R^2 := \int_{\mathbf{R}^3} \int_{\mathbf{R}^3} \frac{|V(x)||V(y)|}{|x-y|^2} dx dy. \quad (1)$$

式 (1) は、 $\|V\|_R < \infty$ のときのみ意味を持つものと解釈する。 $\|V\|_R < \infty$ のとき、 $-\Delta + V$ は2次形式を用いることにより、適当な定義域上において自己共役作用素として定義され、 $\sigma_{\text{ess}}(-\Delta + V) = [0, \infty)$ である。

Proof. min-max principle により、 $V = -W \leq 0$ としてよい。また、 $V \in C_0(\mathbf{R}^3)$ としてよい。実際、 $V \in C_0(\mathbf{R}^3)$ のときに (1) が証明されたとすると、 $\|V\|_R^2 < \infty$ なる V に対しては $\{V_n\} \subset C_0(\mathbf{R}^3)$ で $\|V - V_n\|_R \rightarrow 0$ となるようなものをとると、強レゾルベント収束の意味で $-\Delta + V_n \rightarrow -\Delta + V$ となることから、任意の $E < 0$ に対して

$$N_{(-\infty, E]}(-\Delta + V) \leq \limsup_{n \rightarrow \infty} N_{(-\infty, E]}(-\Delta + V_n).$$

よって $\|V\|_R < \infty$ となるような V に対しても (1) が示される。

次に $H_\lambda := -\Delta - \lambda W$, $\lambda > 0$ とおくと、 H_λ の負の固有値 $E(\lambda)$ は λ について連続かつ狭義単調減少であるから、 $E < 0$ を任意にとると、

$$N_{(-\infty, E]}(-\Delta + V) = \#\{\lambda \in (0, 1] : E \text{ is an eigenvalue of } H_\lambda\}. \quad (2)$$

H_λ が E を固有値に持つとする。このとき、対応する固有関数を φ とすると、 $\psi = \sqrt{W}\varphi$ は $K_E = \sqrt{W}(-\Delta - E)^{-1}\sqrt{W}$ の固有値 $\frac{1}{\lambda}$ の固有関数である。逆に ψ が K_E の固有値 $\frac{1}{\lambda}$ の固有関数であるとする、 $\varphi = \lambda(-\Delta - E)^{-1}\sqrt{W}\psi$ は H_λ の固有値 E に対応する固有関数である。よって (2) と合わせると、Birman-Schwinger principle と呼ばれる次の等式を得る。

$$N_{(-\infty, E]}(H) = N_{[1, \infty)}(K_E). \quad (3)$$

K_E のヒルベルト・シュミットノルムをとって $E \uparrow 0$ とすることにより、式 (1) を得る。□

$d \neq 3$ のときは、この手法は直接適用できない。実際、 $d \leq 2$ のときは、 $E \uparrow 0$ とすると、 K_E の積分核が発散し、 $d \geq 4$ のときは、多くの場合に $\|V\|_R = \infty$ となってしまう。しかし、(1) の証明方法を用いることにより、Lieb-Thirring inequality と呼ばれる固有値のべき乗の和の評価が得られる。

$$\sum_j |e_j|^\gamma \leq L_{\gamma, d} \int_{\mathbf{R}^d} |V_-(x)|^{\frac{d}{2} + \gamma} dx. \quad (4)$$

ここで、 $\{e_j\}_j$ は $-\Delta + V$ の負の固有値、 $\gamma \geq \frac{1}{2}$ ($d = 1$), $\gamma > 0$ ($d = 2$), $\gamma \geq 0$ ($d = 3$) である。不等式 (4) の最良定数 $L_{\gamma, d}$ と準古典近似により phase space volume を計算して得られる値 $L_{\gamma, d}^d$ との関係調べることは重要である。いくつかの場合においては、これが等しいことが知られている¹。

式 (1) の右辺 $\|V\|_R^2$ は、 $|V|$ が大きいときには $|V|^2$ のオーダーであるから、 $V \in C_0(\mathbf{R}^d)$ について成立つ Weyl 評価²

$$N_{(-\infty, 0)}(-\Delta + \lambda V) = \frac{\tau_d}{(2\pi)^d} \int_{\mathbf{R}^d} V_-(x)^{\frac{d}{2}} dx (1 + o(1)), \quad \text{as } \lambda \rightarrow \infty \quad (5)$$

との比較により、 $|V|$ が大きいときにはよい評価ではないだろうと推測される。これは、絶対値のより大きな固有値は、(3) により K_E のより大きな固有値に対応することからもわかる。しかし、 $d \geq 3$ のときには次の結果がある。

¹詳しくは [2, Theorem 12.44] 及びその参考文献を参照のこと

²[3, Theorem VIII.79]. τ_d は d 次元単位球の体積

Theorem 2 (Cwikel-Lieb-Rosenbljum bound) $d \geq 3$ のとき、ある定数 $c_d < \infty$ に対して次が成立つ。

$$N_{(-\infty, 0)}(H) \leq c_d \int_{\mathbf{R}^d} |V_-(x)|^{\frac{d}{2}} dx. \quad (6)$$

いくつかの証明が知られているが、1つの証明の方針は BS-principle (3) により、

$$N_{(-\infty, E]}(-\Delta - W) \leq 2\text{Tr} \left(W((-\Delta - E)^{-1} - (-\Delta + W - E)^{-1}) \right)$$

と評価し、右辺に現れるレゾルベントをラプラス変換により heat-semigroup を用いて書き表わす。更に、それを Brownian bridge を用いて表現し評価することにより (6) が導かれる。 $d \leq 2$ で証明が成立たない理由は、熱核の評価に現れる $(4\pi t)^{-\frac{d}{2}}$ の $t \gg 1$ における減衰が十分で無いことに起因する([3, Theorem XII.12])。

さて、(6) を用いることにより、 $d \geq 3$ のときは $V_- \in L^{\frac{d}{2}}(\mathbf{R}^d)$ であるような V についても Wely 評価 (5) が証明できる[3, Theorem VIII.80]。一方、 $d = 1, 2$ のときは、(6) のような評価は存在しないことが次の定理からわかる [3, Theorem VII.11]。

Theorem 3 $d = 1, 2$, $V \in C_0(\mathbf{R}^d)$, $V \leq 0$ とする。このとき、任意の $\lambda > 0$ に対し $N_{(-\infty, 0)}(-\Delta + \lambda V) \geq 1$ 。

証明は、(3) を用いて Birman-Schwinger kernel (K_E の積分核) の評価の問題に帰着し、 $\lim_{E \uparrow 0} \|K_E\|_{op} = \infty$ を示すことにより行われる。

Proof. (3) により、任意の $\lambda > 0$ に対しある $E < 0$ がとれて $N_{[\frac{1}{\lambda}, \infty)}(K_E) \geq 1$ であることを示せば良い。 K_E は positive かつ compact であるから、任意の $\lambda > 0$ に対しある $E < 0$ がとれて、 $\|K_E\|_{op} \geq \frac{1}{\lambda}$ であることを示せば良い。そのためには、 $\lim_{E \uparrow 0} \|K_E\|_{op} = \infty$ を示せば十分である。 $\eta \in C_0(\mathbf{R}^d)$ を $\sqrt{W}\eta \neq 0$, $\sqrt{W}\eta \geq 0$ となるようにとる。そのフーリエ変換 $\widehat{\sqrt{W}\eta}(p)$ は連続で $p = 0$ の近傍で 0 ではないから、

$$\langle \eta, K_E \eta \rangle = \langle \sqrt{W}\eta, (-\Delta - E)^{-1} \sqrt{W}\eta \rangle = \int_{\mathbf{R}^d} \frac{|(\widehat{\sqrt{W}\eta})(p)|^2}{p^2 - E} dp \xrightarrow{E \uparrow 0} \infty$$

ゆえに、 $\lim_{E \uparrow 0} \|K_E\|_{op} = \infty$. \square

つまり、 $d = 1, 2$ の場合の特徴は $E \rightarrow 0$ としたときに Birman-Schwinger kernel が発散することにあるのだが、 $d = 2$ のときは、Stoiciu [6] による次の結果がある。

Theorem 4 $d = 2$ のとき,

$$N_{(-\infty, 0)}(H) \leq 1 + \int_{\mathbf{R}^2} \int_{\mathbf{R}^2} |V(x)||V(y)| \left| C_1 \log|x-y| + C_2 \right|^2 dx dy. \quad (7)$$

ここで, $C_1 = -\frac{1}{2\pi}$, $C_2 = \frac{\log 2 - \gamma}{2\pi}$, γ はオイラー定数である。

(1) のときと同様、不等式 (7) の右辺が有限であるような V に対しては、 $-\Delta + V$ は 2 次形式により、適当な定義域上において自己共役作用素として定義され、かつ $\sigma_{ess}(-\Delta + V) = [0, \infty)$ である。(7) の証明は (3) を用いて $N_{(-\infty, 0)}(H)$ を書き表わし、Birman-Schwinger kernel の中から $\log \sqrt{-E}$ のついた項を分離すると、これがランク 1 の作用素に対応していることを用いることにより行われる。

Proof. (1) の証明と同様、 $V = -W \leq 0$, $W \in C_0(\mathbf{R}^2)$ と仮定して証明すれば十分である。 $E < 0$ を任意にとる。 $(-\Delta - E)^{-1}$ の積分核は、第 2 種変形ベッセル関数 K_0 を用いて次のように表される。

$$(-\Delta - E)^{-1}(x, y) = \frac{1}{2\pi} K_0(\sqrt{-E}|x-y|).$$

K_0 は原点において $\log x$ の特異性を持つが、それを次のように分離する。

$$K_0(x) = -I_0(x) \log x + h(x).$$

ここで、 $I_0(x)$ は第 1 種変形ベッセル関数、 h は適当な実解析的関数であり、 $I_0(0) = 1$, $h(0) = \log 2 - \gamma$ 。ここで、 $\varphi \in C_0^\infty(\mathbf{R}^2)$ を $\varphi(x) = 1(|x| \leq 1)$, $= 0(|x| \geq 2)$, $0 \leq \varphi(x) \leq 1$ となるようにとる。

$$f(x) = -\frac{1}{2\pi} I_0(x) \varphi(x), \quad g(x) = K_0(x) - f(x) \log x$$

とおくと、 f, g はともに滑らかな関数で $f(0) = -\frac{1}{2\pi} = C_1$, $g(0) = \frac{\log 2 - \gamma}{2\pi} = C_2$ 。ここで、 K_E の積分核を次のように 2 つに分ける。

$$K_E(x, y) = A_E(x, y) + B_E(x, y)$$

$$A_E(x, y) = \sqrt{W(x)} \left\{ \left(f(\sqrt{-E}|x-y|) - C_1 \right) \log(\sqrt{-E}|x-y|) + C_1 \log|x-y| \right. \\ \left. + g(\sqrt{-E}|x-y|) \right\} \sqrt{W(y)}$$

$$B_E(x, y) = \sqrt{W(x)} \left(C_1 \log \sqrt{-E} \right) \sqrt{W(y)}.$$

ここで、 B_E はランク 1 であることに注意すると、

$$\begin{aligned} N_{(-\infty, E]}(-\Delta - W) &= N_{[1, \infty)}(A_E + B_E) \leq 1 + \|A_E\|_{HS}^2 \\ &= 1 + \int_{\mathbf{R}^2} \int_{\mathbf{R}^2} W(x) \left\{ \left(f(\sqrt{-E}|x-y|) - C_1 \right) \log \sqrt{-E}|x-y| \right. \\ &\quad \left. + C_1 \log|x-y| + g(\sqrt{-E}|x-y|) \right\}^2 W(y) dx dy. \end{aligned}$$

f, g は滑らかであること、 W のサポートはコンパクトであることに注意して $E \uparrow 0$ とすることにより、(7) を得る。□

(7) は、より広いクラスのポテンシャルに対して (5) を証明するのには、十分ではない。Khuri, Martin, Wu [1] によると、次のような予想がある。

$$\begin{aligned} N_{(-\infty, 0)}(-\Delta + V) &\leq 1 + C_1 \int_{\mathbf{R}^2} |V|^*(x) \left(\log \frac{|x_0|}{|x|} \right)_+ dx \\ &\quad + C_2 \int_{\mathbf{R}^2} V_-(x) \left(\log \frac{|x_0|}{|x|} \right)_+ dx + C_3 \int_{\mathbf{R}^2} |V_-(x)| dx. \end{aligned}$$

ここで、 $x_0 \neq 0$, $|V|^*$ は V の symmetric decreasing rearrangement である。この予想を証明するのは困難であろうと推測される。一方、不等式 (6) の証明方法を用いることにより、次の評価は比較的容易に得られる。

Theorem 5 $V \in L^2(\mathbf{R}^2)$ かつ $V_-(1 + (\log V_-)1_{\{V_-(x) \geq 1\}}) \in L^1(\mathbf{R}^2)$ とすると、 $E < 0$ に対し

$$N_{(-\infty, E]}(-\Delta + V) \leq \frac{1}{4\pi} \int_{\mathbf{R}^2} dx W(x) \left\{ \frac{C_1}{|E|} + C_2 (\log W(x) 1_{\{W(x) \geq 1\}} + 1) \right\}.$$

ただし、 $W = V_-$, $C_1 = 1$, $C_2 = 1 + e^{-2}$ である。

Proof. (1) の証明と同様にして、 $V \leq 0$, $V \in C_0(\mathbf{R}^2)$ の場合に証明すれば十分である。[3, Theorem XIII.12] の証明と同様に議論することにより、

$$\begin{aligned} N_{(-\infty, E]}(-\Delta + V) &\leq \frac{1}{4\pi} \int_{\mathbf{R}^2} dx \int_0^\infty dt \frac{e^{Et}}{t^2} \varphi(tW(x)) \\ &= \frac{1}{4\pi} \int_{\mathbf{R}^2} dx F(x), \tag{8} \\ F(x) &= \int_0^\infty dt \frac{e^{Et}}{t^2} \varphi(tW(x)). \end{aligned}$$

ここで、 $G(u) = u - ue^{-u}$ であり、

$$\varphi(u) = \begin{cases} u(1 - e^{-u}) & (0 < u \leq 2) \\ G(2) + (u - 2)G'(s) & (2 \leq u) \end{cases}$$

$W(x) = 0$ のとき $F(x) = 0$ であるから、 $W(x) > 0$ であるような x について考える。 $s = tW(x)$ と変数変換すると

$$\begin{aligned} F(x) &= W(x) \int_0^\infty ds \frac{1}{s^2} e^{\frac{E}{W(x)}s} \varphi(s) = W(x)G(x), \\ G(x) &= \int_0^\infty ds \frac{1}{s^2} e^{\frac{E}{W(x)}s} \varphi(s). \end{aligned} \quad (9)$$

以下、 $G(x)$ の評価を行う。 $A > 0$ を任意にとり、積分を2つに分ける。

$$G(x) = \int_0^A ds \frac{\varphi(s)}{s^2} e^{\frac{E}{W(x)}s} + \int_A^\infty ds \frac{\varphi(s)}{s^2} e^{\frac{E}{W(x)}s} = I + II. \quad (10)$$

すると、

$$\varphi(u) \sim \begin{cases} u^2 & (u \rightarrow 0) \\ u & (u \rightarrow \infty) \end{cases}$$

であることから、

$$C_1 = \sup_{u \in (0, \infty)} \frac{\varphi(u)}{u^2} < \infty, \quad C_2 = \sup_{u \in (0, \infty)} \frac{\varphi(u)}{u} < \infty$$

であることがわかる。実際、 $C_1 = 1$, $C_2 = 1 + e^{-2}$. $E < 0$ であるから、

$$I \leq C_1 A \quad (11)$$

と評価できる。II については、 $u = \frac{|E|}{W(x)}s$ と変換して、

$$II = \int_A^\infty ds \frac{\varphi(s)}{s^2} e^{\frac{E}{W(x)}s} \leq C_2 \int_A^\infty \frac{ds}{s} e^{\frac{E}{W(x)}s} = C_2 \int_{\frac{|E|}{W(x)}A}^\infty \frac{du}{u} e^{-u}.$$

部分積分により、

$$\begin{aligned} \int_{\frac{|E|}{W(x)}A}^\infty \frac{du}{u} e^{-u} &= [\log u e^{-u}]_{\frac{|E|}{W(x)}A}^\infty + \int_{\frac{|E|}{W(x)}A}^\infty \log u e^{-u} du \\ &= -\log \frac{|E|A}{W(x)} e^{-\frac{|E|}{W(x)}A} + \int_{\frac{|E|}{W(x)}A}^\infty \log u e^{-u} du. \end{aligned}$$

ここで、第2項は $\int_{\frac{|E|}{W(x)}A}^{\infty} \log u e^{-u} du \leq \int_1^{\infty} \log u e^{-u} du \leq 1$ と押さえられるから、

$$\int_{\frac{|E|}{W(x)}A}^{\infty} \frac{du}{u} e^{-u} \leq -\log \frac{|E|A}{W(x)} e^{-\frac{|E|}{W(x)}A} + 1. \quad (12)$$

(11), (12) を (10) に代入すると

$$G(x) \leq C_1 A + C_2 \left(-\log \frac{|E|A}{W(x)} e^{-\frac{|E|}{W(x)}A} + 1 \right).$$

(9), (8) と合わせて

$$N_{(-\infty, E]}(-\Delta + V) \leq \frac{1}{4\pi} \int_{\mathbf{R}^2} W(x) \left\{ C_1 A + C_2 \left(-\log \frac{|E|A}{W(x)} e^{-\frac{|E|}{W(x)}A} + 1 \right) \right\}.$$

$A = |E|^{-1}$ とおいて $\log W(x) e^{-\frac{1}{W(x)}} \leq \log W(x) 1_{\{W(x) \geq 1\}}$ を用いることにより、定理の主張を得る。□

参考文献

- [1] Khuri, N.N., Martin, A., and Wu, T.T., Bound states in n dimensions, Few-Body Systems **31**, 83-89 (2002).
- [2] Lieb, E. H. and Loss, M. : Analysis, Graduate studies in Mathematics, AMS 2000.
- [3] Reed, M., Simon, B.: Methods of Modern Mathematical Physics IV, Analysis of Operators, Academic Press, 1978.
- [4] Simon, B. : On the number of bound states of two body Schrödinger operators-a review, Studies in Mathematical Physics, Essays in Honor of V. Bargmann, Lieb, Simon, Wightman eds.
- [5] Simon, B. : Quantum Mechanics for Hamiltonians Defined as Quadratic Forms, Princeton series in physics.
- [6] Stoiciu, M. : An estimate for the number of bound states of the Schrödinger operator in two dimensions, Proc. Amer. Math. Soc. **132**(2004), no.4, 1143-1151.