量子系の基底状態の存在とエネルギーに関する不等式

佐々木 格

2011 年 4 月 25 日 “信州数理物理セミナー”

量子系の基底状態の存在とエネルギーに関する不等式

佐々木 格

2011 年 4 月 25 日 “信州数理物理セミナー”

量子系と基底状態

$\mathcal{H}$ をヒルベルト空間，H を $\mathcal{H}$ 上に作用するハミルトニアン (自己共役作用素) とする。$\Psi \in \mathcal{H}$ を初期状態とするとき，状態の時間発展 $\Psi(t)$ は,

$$\Psi(t) = \exp(-itH)\Psi$$

で与えられる。Ψ が H の固有値 E に属する固有状態なら

$$\Psi(t) = e^{-itE}\Psi$$

であり，状態は時間がたっても変化しない。

基底状態エネルギー (最低エネルギー)

$$E_0(H) := \min \sigma(H)$$

$E_0(H)$ が H の固有状態であるときに，H は基底状態を持つ，または系の基底状態は存在するという

例

自由運動

$$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^d),\ H = -\Delta$$

$\sigma(H) = [0, \infty)$ で基底状態は存在しない。

束縛ポテンシャルの系 ($V \in C^0(\mathbb{R})$)

$$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}), \quad H = -\Delta + V(x), \quad V(x) \to \infty (|x| \to \infty)$$

$\sigma(H) = \{e_0, e_1, e_2, \cdots\}$, $e_0 < e_1 < e_2 < \cdots$

有限のエネルギーの範囲，有限の空間領域を運動する粒子は離散的な状態しかとれない。

原子模型

- $+Z$ の電荷を持つ原子核 (原点に固定) の周りを N 個の電子 (電荷 -1) が運動する系
- 状態のヒルベルト空間は反対称関数のなす空間 $\wedge^N(L^2(\mathbb{R}^3)\otimes\mathbb{C}^2)$

$$\Psi(x_1,\cdots,x_N)=\mathrm{sgn}(\sigma)\Psi(x_{\sigma(1)},\cdots,x_{\sigma(N)})$$

- ハミルトニアンと基底状態エネルギー

$$H_{N,Z}=\sum_{j=1}^{N}\left(-\frac{1}{2}\Delta_j-\frac{Z}{|x_j|}\right)+\sum_{1\le i<j\le N}\frac{1}{|x_i-x_j|}$$
$$E(N,Z):=\min\sigma(H_{N,Z})$$

エネルギーと粒子数 N の関係

$E(N,Z)\le E(N-1,Z)$ が成立する

Ψ_j^{N-1} を規格化された $H_{N-1,Z}$ の minimizer とする：

$$\lim_{j\to\infty} \|(H_{N-1,Z} - E(N-1,Z))\Psi_j^{(N-1)}\| = 0$$

$f_j \in C_c^\infty(\mathbb{R}^3)$ は遠方へ飛び去る状態で $\|f_j\| = 1$, $\|\nabla f_j\| \to 0$ となるものとする。反対称化した状態

$$\Phi_j := A_N(\Psi_j^{(N-1)} \otimes f_j)$$

を定義する。

$$\begin{aligned} E(N,Z) &\le \langle \Phi_j, H_{N,Z}\Phi_j\rangle = \left\langle \Phi_j, H_{N,Z}\Psi_j^{(N-1)} \otimes f_j \right\rangle \\ &\le \left\langle \Phi_j, (H_{N-1,Z}\Psi_j^{(N-1)}) \otimes f_j + (\sum_{i=1}^{N-1} \frac{1}{|x_i - x_N|} - \frac{Z}{|x_N|})\Psi_j^{(N-1)} \otimes f_j \right\rangle \\ &\quad + \left\langle \Phi_j, \Psi_j^{(N-1)} \otimes (-\Delta_N f_j) \right\rangle \\ &\to E(N-1,Z) \quad (j \to \infty) \end{aligned}$$

Theorem (HVZ Theorem)

$\sigma_{\mathrm{ess}}(H_{N,Z}) = [E(N-1), \infty)$ が成り立つ。特に $E(N,Z) < E(N-1,Z)$ ならば $H_{N,Z}$ の基底状態は存在する。

- 証明は Hunziker(1966), van Winter(1964), Zhislin(1960) による。
- 基底状態の存在は $E(N,Z)$ に関する不等式に帰着される。
- 逆に $E(N,Z) = E(N-1,Z)$ がある開区間の Z について成り立つなら，そのような Z に対しては基底状態は存在しない。
- $N < Z+1$ ならば $E(N,Z) < E(N-1,Z)$ が成り立つ (Zhislin)。
- H^{--}（陽子と 3 個の電子の束縛状態）は存在しない：$E(1,1) < E(1,2) = E(1,3)$。
- 与えられた核の電荷 Z に対していくつの電子をバインドさせることができるかという問題は (一般には) 未解決である。

最大イオン化については次の事実が成り立つ：

Theorem (Bound on the maximum ionization(Lieb 1984))

$E(N,Z) < E(N-1,Z)$ であるとする。このとき $N < 2Z+1$ が成り立つ。

証明

仮定により $H_{N,Z}$ は基底状態 $\Psi_{N,Z}$ を持つ。これと $|x_N|\Psi_{N,Z}$ との内積をとる。

$$\begin{aligned}
0 =& \langle |x_N|\Psi_{N,Z}, (H_{N,Z} - E(N,Z))\Psi_{N,Z}\rangle \\
=& \langle |x_N|\Psi_{N,Z}, (H_{N-1,Z} - E(N,Z))\Psi_{N,Z}\rangle + \frac{1}{2}\langle |x_N|\Psi_{N,Z}, -\Delta_N\Psi_{N,Z}\rangle \\
&+ \left\langle \Psi_{N,Z}, \left[-Z + \sum_{i=1}^{N-1} \frac{|x_N|}{|x_i - x_N|} \right] \Psi_{N,Z} \right\rangle \qquad (1)
\end{aligned}$$

(1) の第 1 項は正である。なぜなら

$$\begin{aligned}
&\langle |x_N|\Psi_{N,Z}, (H_{N-1,Z} - E(N,Z))\Psi_{N,Z}\rangle \\
&= \int_{\mathbb{R}^3} dx_N |x_N| \int_{\mathbb{R}^{3(N-1)}} dx_1 \dots dx_{N-1} \langle \Psi_{N,Z}(\cdot, x_N), (H_{N-1} - E(N,Z))\Psi_{N,Z}(\cdot, x_N)\rangle \\
&\geq (E(N-1,Z) - E(N,Z)) \langle |x_N|\Psi_{N,Z}, \Psi_{N,Z}\rangle \geq 0.
\end{aligned}$$

第 2 項目が非負であること示すためには次の補題を用いる：

Lemma ($-\Delta$ と subharmonic function)

このとき $H^1(\mathbb{R}^3)$ 上の *form* の意味で次の不等式が成り立つ：

$$\frac{1}{|x|}(-\Delta) + (-\Delta)\frac{1}{|x|} \geq 0 \tag{2}$$

上の補題の不等式の両辺に $|x|$ をかければ $|x|(-\Delta) + (-\Delta)|x| \geq 0$ が導かれる。これによって (1) の第 2 項は非負である。したがって,

$$\left\langle \Psi_{N,Z}, \left[-Z + \sum_{i=1}^{N-1} \frac{|x_N|}{|x_i - x_N|} \right] \Psi_{N,Z} \right\rangle \leq 0$$

$\Psi_{N,Z}$ の反対称性よりこの左辺は

$$\left\langle \Psi_{N,Z}, \left[-Z + \frac{1}{N} \sum_{1 \le i < j \le N} \frac{|x_i| + |x_j|}{|x_i - x_j|} \right] \Psi_{N,Z} \right\rangle \le 0$$

と書き直すことができる。三角不等式より

$$\frac{1}{N(N-1)} \sum_{1 \le i < j \le N} \frac{|x_i| + |x_j|}{|x_i - x_j|} > \frac{1}{2}, \quad \text{a.e.}$$

であるから $-ZN + \frac{N(N-1)}{2} < 0$ を得る。故に $N < 2Z + 1$ でなければならない。■

最近の結果によれば

New bound(Phan Thanh Nam(2010,arXiv))

$E(N,Z) < E(N-1,Z)$ となる N を N_c とすると $N_c < 1.22Z + 3Z^{1/3}$。
特に $C_c/Z < 1.22(Z \to \infty)$

準相対論的 Pauli-Fierz モデル

ハミルトニアン

$$H^V = \sqrt{(\mathbf{p} - e\mathbf{A}(\mathbf{x}))^2 + m^2} - m + V(\mathbf{x}) + H_f$$

- $\mathbf{p} = -i\nabla_{\mathbf{x}}$：電子の運動量作用素
- m ：電子の静止質量 ≥ 0
- e： 素電荷
- $\mathbf{A}$：ベクトルポテンシャル (電子と光との相互作用)。
- $V(\mathbf{x}) \in L^2_{\mathrm{loc}}(\mathbb{R}^3)$ 外力ポテンシャル：例えば

$$V(\mathbf{x}) = -\frac{C}{|\mathbf{x}|}, \quad -\frac{Ce^{-\mu|\mathbf{x}|}}{|\mathbf{x}|}, \quad C|\mathbf{x}|^2$$

系の定義：ヒルベルト空間

- 電子の状態のヒルベルト空間: $\mathcal{H}_p := L^2(\mathbb{R}^3)$
- 光子の状態のヒルベルト空間：

$$\mathcal{H}_{\mathrm{photon}} := \bigoplus_{n=0}^{\infty} \bigotimes_{\mathrm{sym}}^{n} L^2(\mathbb{R}^3 \times \{1,2\})$$

$$\text{ただし } \mathbb{C} := \bigotimes_{\mathrm{sym}}^{0} L^2(\mathbb{R}^3 \times \{1,2\})$$

代数的には $\mathcal{H}_{\mathrm{photon}}$ は，無限個の成分を持つ多項式の空間・ヤング図形の集合。$\Omega := (1,0,0,\cdots) \in \mathcal{H}_{\mathrm{photon}}$ を真空ベクトルという。

系のヒルベルト空間

$$\mathcal{H} := \mathcal{H}_p \otimes \mathcal{H}_{\mathrm{photon}}$$

消滅作用素の構成

$$a(k)\Omega = 0, \quad k \in \mathbb{R}^3 \times \{1,2\}$$

$$a(k)\Psi = \{(a(k)\Psi)^{(n)}\}_{n=0}^{\infty}$$

$$(a(k)\Psi)^{(n)}(k_1, \cdots, k_n) := \sqrt{n+1}\Psi^{(n+1)}(k_1, \cdots, k_n, k)$$

関数 $f \in L^2(\mathbb{R}^3 \times \{1,2\})$ に対して,

$$a(f) := \int \overline{f(k)} a(k) dk, \quad a^*(f) = \int f(k) a^+(k) dk$$

を定義する。$a(f), a^*(f)$ は閉作用素。

正準交換関係

$$[a(k), a^+(k')] = \delta(k - k') \qquad k = (\mathbf{k}, \lambda) \in \mathbb{R}^3 \times \{1,2\}$$

$$[a(k), a(k')] = [a^+(k), a^+(k')] = 0$$

量子化されたベクトルポテンシャル

$$A_j(\mathbf{x}) := \sum_{\lambda=1,2} \int \left(\overline{\Lambda(\mathbf{k})} e_j^{(\lambda)}(\mathbf{k}) a(k) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} + \mathrm{h.c.} \right) \frac{d\mathbf{k}}{\sqrt{|\mathbf{k}|}}, \qquad j = 1, 2, 3$$

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}) := (A_1(\mathbf{x}), A_2(\mathbf{x}), A_3(\mathbf{x}))$$

ここに $\Lambda \in L^2(\mathbb{R}^3)$ は紫外切断。Λ を $|\mathbf{k}|^{-1}\Lambda \in L^2(\mathbb{R}^3)$ となるように選ぶ。

光子の自由ハミルトニアン H_f

$$H_f := \int |\mathbf{k}| a^+(k) a(k) dk$$

H_f は $\mathcal{H}_{\mathrm{photon}}$ 上の非負の自己共役作用素。
$H_f\Omega = 0$: Ω は H_f のただ一つの基底状態。

The semi-relativistic Pauli-Fierz Hamiltonian

$$H^V := \sqrt{(\mathbf{p} - e\mathbf{A}(\mathbf{x}))^2 + m^2} - m + H_f + V(\mathbf{x})$$

$\sqrt{-\Delta + m} - m + V$ は $C_c^\infty(\mathbb{R}^3)$ 上で本質的に自己共役であると仮定する。

Proposition(self-adjointness)

H^V and H^0 は適当な条件の下で自己共役作用素となる。

基底状態エネルギーを $E^V := \inf \sigma(H^V)$, $E^0 := \inf \sigma(H^0)$ と置く。

イオン化エネルギー (束縛エネルギー)

$$E^0 - E^V$$

Theorem

基底状態の存在 *(O. Matte, E. Stockmeyer 2009(CMP))* $E^0 - E^V > 0$ ならば H^V は基底状態を持つ。

Theorem(S. 2010)

$H_p := \sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2} - m + V$ は負エネルギーの基底状態を持つとする：

$$H_p \phi_0 = -e_0 \phi_0, \quad -e_0 = \inf \sigma(H_p) < 0.$$

このとき $E^{\mathrm{ion}} \geq e_0 > 0$。

Remark この結果は $e \in \mathbb{R}$, $m \geq 0$ に対する制限なしに成立する。特に $m = 0$ の場合も含めて成立する。

Proof

M. Griesemer, E. H. Lieb and M. Loss, *Invent. Math.* (2001) によって開発された手法を用いる。簡単のため $e=1$ とおく,

$$\Omega(\mathbf{p}) := \sqrt{(\mathbf{p}-A(\mathbf{x}))^2+m^2}$$

任意の小さい $\epsilon>0$ に対して，規格化されたベクトル $F_0 \in \mathcal{H}$ と $f_0 \in C_0^\infty$ を次のようにとる：

$$\left\langle F_0, H^0 F_0 \right\rangle_{\mathcal{H}} < E^0 + \epsilon,$$
$$\langle f_0, H_{\mathrm{p}} f_0 \rangle_{\mathcal{H}_p} < -e_0 + \epsilon$$

F^0 は十分なめらかな良い関数にとることができる。作用素の対称性から f_0 は実関数としてかまわない。

ベクトル $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^3$ の並進作用素を

$$U_{\mathbf{y}} := e^{-i\mathbf{y}\cdot(-i\nabla_{\mathbf{x}})} \otimes \Gamma(e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{y}})$$

と定義する。試験関数を

$$\Phi_{\mathbf{y}} := f_0(\hat{\mathbf{x}})F_{\mathbf{y}}, \qquad F_{\mathbf{y}} := U_{\mathbf{y}}F$$

とおく。ここに $f_0(\hat{\mathbf{x}})$ は $f_0(\mathbf{x})$ によるかけ算作用素

Lemma 1

$$\begin{aligned}
&\int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{y} \left\langle \Phi_{\mathbf{y}}, H^V \Phi_{\mathbf{y}} \right\rangle \\
&= \|f_0\|^2 \left\langle F_0, H^0 F_0 \right\rangle + \langle f_0, V f_0 \rangle \langle F_0, F_0 \rangle \\
&\quad + \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{k} |\hat{f}_0(\mathbf{k})|^2 \\
&\qquad \times \langle F_0, [\Omega_{\mathbf{A}}(\mathbf{p}+\mathbf{k}) + \Omega_{\mathbf{A}}(\mathbf{p}-\mathbf{k}) - 2\Omega_{\mathbf{A}}(\mathbf{p})] F_0 \rangle \, .
\end{aligned}$$

証明の鍵となるのが次の補題：

Lemma 2

すべての $m \geq 0$ と $\mathbf{k} \in \mathbb{R}^3$ に対して次の作用素不等式が成り立つ：

$$\frac{1}{2}(\Omega_{\mathbf{A}}(\mathbf{p}+\mathbf{k}) + \Omega_{\mathbf{A}}(\mathbf{p}-\mathbf{k}) - 2\Omega_{\mathbf{A}}(\mathbf{p})) \leq \sqrt{\mathbf{k}^2 + m^2} - m$$

証明 $A \geq B \geq 0$ は $A^{1/2} \geq B^{1/2} \geq 0$ を導くので，補題は次の不等式から導かれる：

$$(\Omega_{\mathbf{A}}(\mathbf{p}+\mathbf{k}) + \Omega_{\mathbf{A}}(\mathbf{p}-\mathbf{k}))^2 \leq 4[\sqrt{\mathbf{k}^2 + m^2} - m + \Omega_{\mathbf{A}}(\mathbf{p})]^2.$$

次のように評価する：

$$\begin{aligned}(\Omega_{\mathbf{A}}(\mathbf{p}+\mathbf{k}) + \Omega_{\mathbf{A}}(\mathbf{p}-\mathbf{k}))^2 &\leq 2\Omega_{\mathbf{A}}(\mathbf{p}+\mathbf{k})^2 + 2\Omega_{\mathbf{A}}(\mathbf{p}-\mathbf{k})^2 \\ &= 4|\mathbf{k}|^2 + 4[(\mathbf{p} - \mathbf{A}(\mathbf{x}))^2 + m^2]\end{aligned}$$

一方，右辺は

$$\begin{aligned}4[\sqrt{\mathbf{k}^2 + m^2} - m + \Omega_{\mathbf{A}}(\mathbf{p})]^2 = 4[\mathbf{k}^2 &+ (\mathbf{p} - \mathbf{A}(\mathbf{x}))^2 + m^2 \\ &+ 2(\sqrt{\mathbf{k}^2 + m^2} - m)(\Omega_{\mathbf{A}}(\mathbf{p}) - m)] \quad \blacksquare\end{aligned}$$

証明

$$\begin{aligned}\int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{y} \left\langle \Phi_{\mathbf{y}}, H^V \Phi_{\mathbf{y}} \right\rangle &\le \|f_0\|^2 \left\langle F_0, H^0 F_0 \right\rangle + \langle f_0, V f_0 \rangle \langle F_0, F_0 \rangle \\ &\quad + \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{k} |\hat{f}_0(\mathbf{k})|^2 \left\langle F_0, (\sqrt{\mathbf{k}^2 + m^2} - m) F_0 \right\rangle \\ &\le \left\langle F, H^0 F \right\rangle + \left\langle f_0, (\sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2} - m + V) f_0 \right\rangle \\ &< (E^0 - e_0 + 2\epsilon) \int d\mathbf{y} \langle \Phi_{\mathbf{y}}, \Phi_{\mathbf{y}} \rangle\end{aligned}$$

これから

$$\int d\mathbf{y} \left\langle \Phi_{\mathbf{y}}, (H^V - E^0 - e_0 - 2\epsilon) \Phi_{\mathbf{y}} \right\rangle < 0.$$

故に，あるベクトル $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^d$ が存在して，$\Phi_{\mathbf{y}} \neq 0$ かつ

$$\left\langle \Phi_{\mathbf{y}}, H^V \Phi_{\mathbf{y}} \right\rangle < (E^0 - e_0 + 2\epsilon) \|\Phi_{\mathbf{y}}\|^2.$$

が成り立つ。$\epsilon > 0$ は任意だったので，$E^V \le E^0 - e_0$ となる。

N 体の準相対論的 Pauli-Fierz モデル

N 体 SRPF ハミルトニアン

$$H^V(N) := \sum_{j=1}^{N} \left(\sqrt{(\mathbf{p}_j - e\mathbf{A}(\mathbf{x}_j))^2 + m^2} - m + V(x_j) \right) + \sum_{1 \le i < j \le N} \frac{e^2}{|x_i - x_j|} + H_f$$

この場合に HVZ-theorem と同様に次の定理が成り立つ

Theorem (基底状態の存在と束縛エネルギー)

系が正の束縛エネルギーを持つとする：

$$E^V(N) < \min\{E^V(N-M) - E^0(M) : M = 1, 2, \cdots, N\}$$

このとき H^V の基底状態は存在する。

未解決問題 1

$N \geq 2$ の場合に，束縛条件

$$E^V(N) < \min\{E^V(N-M) - E^0(M) : M = 1, 2, \cdots, N\}$$

を示せ。

未解決問題 2(より簡単な場合)

$N \geq 2$ の場合に，不等式 $E^V(N) < E^0(N)$ を示せ。

準相対論的 Schrödinger 作用素に関する未解決問題

$L^2(\mathbb{R}^9)$ 上に作用する，ハミルトニアン

$$H := \sum_{j=1}^{3}(\sqrt{-\Delta_j + m^2} - m) - \sum_{1\le i<j\le 3} \frac{1}{|x_i - x_j|}$$

を考える。全運動量 $P := \sum_{j=1}^{3}(-i\nabla_{x_j})$ は H と可換なので，H を P のスペクトルごとに分解することができる：

$$H \cong \int_{\mathbb{R}^3}^{\oplus} H(P) d^3P$$

未解決問題 3：全運動量 P とエネルギーの関係

$E_0(H(0)) \le E_0(H(P))$ を示せ

- 2 粒子の場合には上の不等式は簡単に証明できる。
- このタイプの不等式は，原子核が固定されていない系の基底状態の存在証明に，本質的に関わるのだが，上のような最も簡単な場合ですら証明方法が見つかっていない。