非線形 Schrödinger 方程式の散乱の逆問題について

渡辺 道之
東京理科大学 理工学部
watanabe_michiyuki@ma.noda.tus.ac.jp

---

1. Hartree-Fock 方程式について

この講演では Hartree 方程式及び Hartree-Fock 方程式と呼ばれる非線形 Schrödinger 方程式を扱う．これらは量子力学における多体問題を近似的に解くために導出された方程式である．いま，j 番目の粒子と k 番目の粒子とに働く相互作用のポテンシャルを v_{jk} $(1 \le j < k \le N)$ とすれば，全系の（時間を含む）Schrödinger 方程式は

$$i\partial_t \Phi_N = -\sum_{j=1}^{N} \Delta_{x_j} \Phi_N + \sum_{1 \le j < k \le N} v_{jk}(x_j - x_k)\Phi_N \tag{1}$$

と書ける．ここで $\Phi_N = \Phi_N(t, x_1, x_2, \cdots, x_N)$ は N 体系全体の波動関数であり，$x_j \in \mathbf{R}^n$ は j 番目の粒子の位置を表す.

(1) を解くことは非常に難しい. そこで，Φ_N が任意であるとするかわりに，変数分離の形:$\Phi_N = u_1(t, x_1) \cdots u_N(t, x_N)$ をもつと仮定し，変分方を利用して各 u_j が満たす方程式が導出された（Hartree の近似）:

$$i\partial_t u_j = -\Delta u_j + \sum_{k \ne j}^{N} (v_{jk} * |u_k|^2) u_j. \tag{2}$$

ただし，ここでは粒子の**不可弁別性**[1]による多体系全体の波動関数の（反）対称化は考えられていない.

波動関数の対称性を考慮に入れると，別の形で波動関数を求める必要がある．例として，フェルミ粒子と呼ばれる種類のものの場合には，系の波動関数として許されるのは反対称のものだけであるから，Φ_N をスレイター行列式 $\Phi_N(t, x_1, \cdots, x_N) = (N!)^{-1/2} \det(u_j(t, x_k))_{1 \le j,k \le N}$ の形でおく．これを(1) へ代入し，Hartree 近似と同様に変分方を用いて各 u_j が満たす式が導出された（Hartree-Fock の近似）:

$$i\partial_t u_j = -\Delta u_j + \sum_{k \ne j}^{N} (v_{jk} * |u_k|^2) u_j - \sum_{k \ne j}^{N} (v_{jk} * u_j \overline{u}_k) u_k. \tag{3}$$

ここで，u_j は個々の粒子の運動を表す関数で**軌道関数**または単に軌道と呼ばれている.

2. 問題

v_{jk} は遠方で十分早く減衰しているものとする．ここで考える問題は，遠方に散乱された粒子のデータからお互いに働いていた相互作用のポテンシャル v_{jk} が何であるかを同定することである．多体 Schrödinger 方程式(1) に対する散乱の逆問題の取り組みはいくつかある（[17]，[3]，[10]，[15]，[14]）．一方物理でもよく扱われる近似方程式(2), (3) を用いての v_{jk} 同定逆問題については主に講演者が取り組んできた．実は Hartree 方程式(2) に対する v_{jk} 同定問題は，(2) を単純化した式：

$$i\partial_t u = -\Delta u + (v * |u|^2) u$$

---

[1] 量子論では粒子を確率波束としてしか捕らえられないので，各粒子が近づいて互いに力をおよぼしあっているときには，波も重なっており，どちらがどこにいるか区別しようがない．これを同種粒子の不可弁別性という.

に対して v を，この方程式に対応する散乱データから求める手続き（再構成手続き）を与えることとほとんど同じである．しかし，Hartree-Fock 方程式(3) に対して v_{jk} を同定する問題を考えると，Hartree 方程式(2) とは違った，本質的な難しさがあるように思う．Hartree-Fock の近似では，波動関数をスレイター行列式で表した．従って軌道関数 u_j の中に同じものが 1 つでもあると（一次従属であると）波動関数は 0 となり，物理的に意味のない解となる．このことが Hartree-Fock 方程式の v_{jk} 同定逆問題を考える際，問題となってくる．

3. 結果

非常に制限された状況下ではあるが，Hartree-Fock 方程式(3) に対する散乱データから相互作用のポテンシャル v_{jk} を求める公式を作ることができた．

粒子が 3 つの場合（$N=3$）かつ相互作用のポテンシャルが簡単な形である場合について考える．

$$v_{jk}(x)=v_{kj}(x)=\lambda_{jk}|x|^{-\sigma_{jk}},\qquad 1\le j,k\le 3.$$

ここで $\lambda_{jk}\in\mathbf{R}$ と σ_{jk} は定数で以下の条件を満たすものとする．

$$2\le\sigma_{jk}\le 4 \text{ かつ } \sigma_{jk}<n. \tag{4}$$

この条件の下では Hartree-Fock 方程式に対する散乱作用素 S_j, $j=1,2,3$ が適当な意味で定義される（例えば [4]，[5]，[8]，[16] など）．$([S_j-I_j](\boldsymbol{\phi}),\phi_j)_{L^2}$ を散乱データと呼ぶことにする．ここで $\boldsymbol{\phi}=(\phi_1,\phi_2,\phi_3)$, $I_j(\boldsymbol{\phi})=\phi_j$ であり，$(\cdot,\cdot)_{L^2}$ は $L^2(\mathbf{R}^n)$ 内積を表す．この散乱データだけから相互作用のポテンシャルの大きさ λ_{jk} を決定できるというのが結果である．

定理を述べるためにいくつか記号を導入する．$\mathcal{T}_j[\boldsymbol{\phi}]:=\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{i}{\varepsilon^3}([S_j-I_j](\boldsymbol{\phi}),\phi_j)_{L^2}$ とおく．Υ を Fourier 変換 $\hat{f}$ が $C_0^\infty(\mathbf{R}^n)$ となるような急減少関数の集合とする．$U_j^{(\pm)}(t,x)$ を

$$i\partial_t U_j^{(\pm)}=-\Delta U_j^{(\pm)},\quad U_j^{(\pm)}(0,x)=\phi_j^{(\pm)}(x)$$

の解とする．また簡単のため，λ_{jk} と σ_{jk} をそれぞれ λ_j，σ_j $(j=1,2,3)$ と書くことにする．

定理 1. 次の公式が成り立つような

$$\boldsymbol{\phi}\in\mathcal{B}:=\{\boldsymbol{\phi}=(\phi_1,\phi_2,\phi_3),\,\phi_j\in\Upsilon\,;\,\phi_j\neq c\phi_k,\,1\le j,k\le 3,\,c\in\mathbf{R}\}$$

が存在する．

$$\lambda_1=\frac{1}{2(a_1-b_1)}(\mathcal{T}_1[\boldsymbol{\phi}]+\mathcal{T}_2[\boldsymbol{\phi}]-\mathcal{T}_3[\boldsymbol{\phi}]),\quad \lambda_2=\frac{1}{2(a_2-b_2)}(\mathcal{T}_2[\boldsymbol{\phi}]+\mathcal{T}_3[\boldsymbol{\phi}]-\mathcal{T}_1[\boldsymbol{\phi}]),$$
$$\lambda_3=\frac{1}{2(a_3-b_3)}(\mathcal{T}_3[\boldsymbol{\phi}]+\mathcal{T}_1[\boldsymbol{\phi}]-\mathcal{T}_2[\boldsymbol{\phi}]).$$

ここで

$$a_1=\int_{\mathbf{R}}\int_{\mathbf{R}^n}(|x|^{-\sigma_1}*|U_1(t,\cdot)|^2)(x)|U_2(t,x)|^2dxdt,$$
$$a_2=\int_{\mathbf{R}}\int_{\mathbf{R}^n}(|x|^{-\sigma_2}*|U_2(t,\cdot)|^2)(x)|U_3(t,x)|^2dxdt,$$
$$a_3=\int_{\mathbf{R}}\int_{\mathbf{R}^n}(|x|^{-\sigma_3}*|U_3(t,\cdot)|^2)(x)|U_1(t,x)|^2dxdt,$$
$$b_1=\int_{\mathbf{R}}\int_{\mathbf{R}^n}(|x|^{-\sigma_1}*U_1(t,\cdot)\overline{U_2}(t,\cdot))(x)\overline{U_1}(t,x)U_2(t,x)dxdt,$$
$$b_2=\int_{\mathbf{R}}\int_{\mathbf{R}^n}(|x|^{-\sigma_2}*U_2(t,\cdot)\overline{U_3}(t,\cdot))(x)\overline{U_2}(t,x)U_3(t,x)dxdt,$$
$$b_3=\int_{\mathbf{R}}\int_{\mathbf{R}^n}(|x|^{-\sigma_3}*U_1(t,\cdot)\overline{U_3}(t,\cdot))(x)\overline{U_1}(t,x)U_3(t,x)dxdt$$

である．さらに σ_j は

$$\sigma_1 = 2n + 2 + \log_R \left(\frac{\mathcal{T}_1[\phi_R] + \mathcal{T}_2[\phi_R] - \mathcal{T}_3[\phi_R]}{\mathcal{T}_1[\phi] + \mathcal{T}_2[\phi] - \mathcal{T}_3[\phi]} \right), \quad \sigma_2 = 2n + 2 + \log_R \left(\frac{\mathcal{T}_2[\phi_R] + \mathcal{T}_3[\phi_R] - \mathcal{T}_1[\phi_R]}{\mathcal{T}_2[\phi] + \mathcal{T}_3[\phi] - \mathcal{T}_1[\phi]} \right),$$

$$\sigma_3 = 2n + 2 + \log_R \left(\frac{\mathcal{T}_3[\phi_R] + \mathcal{T}_1[\phi_R] - \mathcal{T}_2[\phi_R]}{\mathcal{T}_3[\phi] + \mathcal{T}_1[\phi] - \mathcal{T}_2[\phi]} \right)$$

で与えられる．ここで $\phi_R(x) = \phi(Rx)$ であり，R は 1 以外の任意の実数である．

参考文献

[1] T. Aktosun, V. G. Papanicolaou and V. Zisis, Inverse scattering on the line for a generalized nonlinear Schrödinger equation, *Inverse Problems* **20** (2004), 1267–1280.

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

[3] V. Enss and R. Weder, The geometrical approach to multidimensional inverse scattering, *J. Math. Phys.* **36** (1995), 3902-3921.

[4] N. Hayashi and T. Ozawa, Time decay of solutions to the Cauchy problem for time-dependent Schrödinger-Hartree equations, *Comm. Math. Phys.* **110** (1987), 467-478.

[5] H. Isozaki, On the existence of solutions to time dependent Hartree-Fock equations, *Publ. RIMS, Kyoto Univ.* **19** (1983), 107-115.

[6] E. Jalade, Inverse problem for a nonlinear Helmholtz equation, *Ann. Inst. H. Poincaré Anal. Non Linéaire* **21** (2004), 517–531.

[7] P. Kramer and M. Saraceno, Geometry of the time-dependent variational principle in quantum mechanics, *Lecture Notes in Phys.* **140** (Springer, 1981).

[8] K. Mochizuki, On small data scattering with cubic convolution nonlinearity, *J. Math. Soc. Japan.* **41** (1989), 143–160.

[9] C. S. Morawetz and W. A. Strauss, On a nonlinear scattering operator, *Comm. Pure Appl. Math.* **26** (1973), 47-54.

[10] R. G. Novikov, On inverse scattering for the N-body Schrödinger equation, *J. Funct. Anal.* **159** (1998), 492-536.

[11] H. Sasaki, The inverse scattering problem for Schrödinger and Klein-Gordon equations with a nonlocal nonlinearity, *Nonlinear Anal.: Theory, Methods & Applications* **66** (2007), 1770-1781.

[12] H. Sasaki and M. Watanabe, Uniqueness on identification of cubic convolution nonlinearity, *J. Math. Anal. Appl.* **309** (2005), 294-306.

[13] W. A. Strauss, Non linear scattering theory, in "Scattering Theory in Mathematical Physics", pp. 53–78. J. A. Lavita and J.-P. Marchand, editors, D. Reidel, Dordrecht-Holland / Boston 1974.

[14] G. Uhlmann and A. Vasy, Low-energy inverse problems in three-body scattering, *Inverse Problems* **18** (2002), 719-736.

[15] A. Vasy, Structure of the resolvent for three-body potentials, *Duke Math. J.* **90** (1997), 379-434.

[16] T. Wada, Scattering theory for time-dependent Hartree-Fock type equation, *Osaka J. Math* **36** (1999), 905-918.

[17] X. P. Wang, On the uniqueness of inverse scattering for N-body systems, *Inverse Problems* **10** (1994), 765-784.

[18] M. Watanabe, Inverse scattering for the nonlinear Schrödinger equation with cubic convolution nonlinearity, *Tokyo J. Math* **24** (2001), 59-67.

[19] M. Watanabe, Uniqueness in the inverse scattering problem for the Hartree type equation *Proc. Japan Acad. Ser A.* **77** (2001), 143–146.

[20] M. Watanabe, Reconstruction of the Hartree-type nonlinearity, *Inverse Problems* **18** (2002), 1477-1481.

[21] R. Weder, Inverse scattering for the nonlinear Schrödinger equation, *Comm. Partial Differential Equations* **22** (1997), 2089-2103.

[22] R. Weder, $L^p - L^{\acute{p}}$ estimates for the Schrödinger equation on the line and inverse scattering for the nonlinear Schrödinger equation with a potential, *J. Func. Anal.* **170** (2000), 37-68.

[23] R. Weder, Inverse scattering on the line for the nonlinear Klein-Gordon equation with a potential, *J. Math. Anal. Appl.* **252** (2000), 102-123.

[24] R. Weder, Inverse Scattering for the Nonlinear Schrödinger Equation II. Reconstruction of the Potential and the Nonlinearity in the multidimensional case, *Proc. Amer. Math. Soc.* **129** (2001), 3637–3645.

[25] R. Weder, Inverse scattering for the non-linear Schrödinger equation: reconstruction of the potential and the non-linearity, *Math. Meth. Appl. Sci.* **24** (2001), 245-254.

[26] R. Weder, Multidimensional inverse scattering for the nonlinear Klein-Gordon equation with a potential, *J. Differential Equations* **184** (2002), 62-77.

[27] R. Weder, Scattering for the forced non-linear Schrödinger equation with a potential on the half-line, *Math. Methods Appl. Sci* **28** (2005), 1219-1236.

[28] R. Weder, The forced non-linear Schrödinger equation with a potential on the half-line, *Math. Methods Appl. Sci* **28** (2005), 1237-1255.