Linear Schrödinger evolution equations with moving Coulomb singularities*

吉井 健太郎 (東京理科大学大学院 理学研究科 研究生)

1. Introduction

次のような時間に依存するポテンシャルをもつ Schrödinger 方程式の初期値問題を考える:

$$\text{(SE)}\qquad \begin{cases} i\dfrac{\partial u}{\partial t} = -\Delta u + \displaystyle\sum_{j=1}^{m} \frac{c_j u}{|x - q_j(t)|} + V_1(t,x)u, \quad (t,x) \in [0,T] \times \mathbb{R}^N, \\ u(0,\cdot) = u_0(\cdot). \end{cases}$$

ここで $N \geq 3$ で, u は複素数値の未知関数 $u : [0,T] \times \mathbb{R}^N \to \mathbb{C}$ とする. m 個のベクトル値関数 $q_j : [0,T] \to \mathbb{R}^N$ $(j = 1,2,\ldots,m)$, 実ポテンシャル $V_1 : [0,T] \times \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}$ は以下の仮定を満たすものとする:

$$\text{(q1)}\qquad q_j \in W^{2,1}(0,T;\mathbb{R}^N) \quad (j = 1,2,\ldots,m),$$

$$\text{(q2)}\qquad |q_j(t) - q_k(t)| > 0 \quad (j \neq k),$$

$$\text{(V1)}\qquad (1 + |x|^2)^{-1} V_1 \in W^{1,1}(0,T;L^\infty(\mathbb{R}^N)),$$

$$\text{(V2)}\qquad (1 + |x|^2)^{-3/2} \nabla V_1 \in L^1(0,T;L^\infty(\mathbb{R}^N))^N.$$

ここで X は Banach 空間とし, X 値関数の Lebesgue 空間, Sobolev 空間は次のように定める:

$$L^p(I;X) := \left\{u : I \to X; \|u\|_{L^p(I;X)} := \left\|\|u(\cdot)\|_X\right\|_{L^p(I)} < \infty\right\},$$

$$W^{m,p}(I;X) := \left\{u \in L^p(I,X); \frac{\partial^j u}{\partial t^j} \in L^p(I;X), 0 \leq j \leq m\right\}.$$

本講演の目的は (SE) を $L^2(\mathbb{R}^N)$ の発展方程式とみなし, 初期値 u_0 が $Y := H^2(\mathbb{R}^N) \cap H_2(\mathbb{R}^N)$ に属するときの古典解の一意存在を議論することである. ここで

$$H_2(\mathbb{R}^N) := \{u \in L^2(\mathbb{R}^N); |x|^2 u \in L^2(\mathbb{R}^N)\}$$

は $H^2(\mathbb{R}^N) := W^{2,2}(\mathbb{R}^N)$ の Fourier 像である. このとき, 古典解とは

$$(1)\qquad u \in C^1\big([0,T];L^2(\mathbb{R}^N)\big) \cap C\big([0,T];Y\big)$$

をみたすものである. ただし, $C^k(I;X)$ は X 値 C^k 級関数全体からなる空間を表す (特に $C(I;X) := C^0(I;X)$). 同様に $C_{\mathrm{w}}(I;X)$ は X 値弱連続関数全体からなる空間を表す.

注意. 正確には (1) を満たす解は Y 値解 (Y-valued solution) と呼ばれる. (cf. Tanabe [**5**, Section 7.4]).

---

*本講演は岡沢登 (東京理科大学・理) との共同研究に基づくものである.

応用上, (SE) は m 個の原子核と外力場が存在する空間における電子の運動を記述していると見なせる．このとき, 未知関数 u は電子の波動関数を表し, $c_j|x-q_j(t)|^{-1}$ は中心の座標 $q_j(t)$ が時間と共に移動していく原子核の Coulomb ポテンシャルである．V_1 は電場に対応する (空間無限遠方で $|x|^2$ 以下の増大を許容する) ポテンシャルである.

主定理 ([**4**])**.** 条件 (q1), (q2), (V1), (V2) の下で (SE) は (1) に属する一意解をもつ.

中心が動く Coulomb ポテンシャルを伴った線形 Schrödinger 方程式の解の存在についての先行研究をいくつか紹介する.

まず $m=1$ の場合については, [**3, 7**] において条件 (q1), (V1),

$$(1+|x|^2)^{-1}\nabla V_1 \in L^1(0,T;L^\infty(\mathbb{R}^N))^N \tag{V2$'$}$$

の下で (1) と同様の解の一意存在が示されている．(V2)$'$ は (V2) よりも強い条件である.

また, $m>1$ の場合でも Wüller [**6**] によって解の一意存在が示されているが, [**6**] では q_j に対して強い仮定を課し, V_1 の空間無限遠方での増大も許容されていない. 証明のアイディアを見ると, [**6**] で扱われている方程式は, 時間に依存する相似変換により, 時間に依存しない Coulomb ポテンシャルをもつ Schrödinger 方程式に変換されるようなものに限られている．従って, 変換後は加藤 [**1**] の抽象定理が有効で, 逆変換することにより元の問題の解を得ている.

一方, 加藤・谷島 [**2**] では Liénard-Wiechert ポテンシャルをもつ Dirac 方程式について**局所擬 Lorentz 変換** (Local pseudo-Lorentz transformation) と呼ばれる変換を用いてポテンシャルの特異点を固定し, 加藤 [**1**] を用いて解の存在を示している.

今回, 主定理の証明においても加藤・谷島 [**2**] のアイディアを元に, **局所擬 Galilei 変換**とでも呼ぶべき変換を構成し, この変換を用いて Coulomb ポテンシャルの特異点の動きを固定することで [**4**] の抽象定理を適用できる新たな Schrödinger 方程式を構成する．なお, 今回は局所擬 Galilei 変換の有効性と逆変換により (SE) の解が得られることの確認だけに留め, 抽象定理については扱わないこととする.

2. Local pseudo-Galilean transformation

まず, $\varepsilon_0>0$ と T_* で次を満たすものをとる:

$$|q_j(t)-q_k(t)| \ge 4\varepsilon_0 \quad (j\ne k), \quad T_0 := \min\Big\{T, \frac{\varepsilon_0}{2\|q'\|_{L^\infty(0,T)}}\Big\}.$$

(SE) が区間 $[0,T_0]$ で解ければ, $[T_0,2T_0]$, $[2T_0,3T_0]$, ... においても同様の議論を繰り返すことで $[0,T]$ 上の解を構成できる．ゆえに, 特に $T=T_0$ となる場合を考えれば十分である.

定義 (局所擬 Galilei 変換)**.** $\varphi\in C([0,T]\times\mathbb{R}^N;\mathbb{R}^N)$ を t を固定するごとに $\mathbb{R}^N$ についての微分同相写像となるものとし, $\varphi(t,\cdot)$ のヤコビアンは $J\varphi := \det(\mathrm{Jac}\,\varphi)>0$ となるものとする．ここで $\mathrm{Jac}\,\varphi=(\partial\varphi_j/\partial y_k)_{jk}$. φ を用いて $L^2(\mathbb{R}^N)$ 上の時間依存ユニタリ変換 $\Phi(t)\in B(L^2(\mathbb{R}^N))$ を次のように定義する:

$$\Phi(t)f := J\varphi(t,\cdot)^{1/2}(f\circ\varphi)(t,\cdot) \quad (f\in L^2(\mathbb{R}^N)).$$

特に, Φ が次の φ によって与えられるとき, Φ を局所擬 Galilei 変換と呼ぶこととする:

$$\varphi(t,y) := y + \sum_{j=1}^{m} \eta\Big(\frac{|y-q_j(0)|}{\varepsilon_0}\Big)\big(q_j(t)-q_j(0)\big). \tag{2}$$

ここで $\eta \in C^\infty([0,\infty);[0,1])$ は $\eta(r) = 1$ $(r \le 1)$, $\eta(r) = 0$ $(r \ge 2)$ かつ $|\eta'(r)| \le 3/2$ となる単調関数とする.

新しい未知関数

$$v(t,y) := (\Phi(t)u)(t,y) = (J\varphi(t,y))^{1/2} u(t,\varphi(t,y)) \tag{3}$$

を導入する. このとき, 局所擬 Galilei 変換に限らず φ が十分滑らかならば (SE) は次のような v についての Schrödinger 型方程式に変換される:

$$\begin{cases} i\dfrac{\partial v}{\partial t} + Da(t,y)Dv + Q(t,y)v = g(t,y), \\ v(\cdot,0) = v_0 := \Phi(0)u_0. \end{cases} \tag{SE-v}$$

ここで $D := i^{-1}\nabla - b(t,y)$, $D_j := i^{-1}\partial/\partial y_j - b_j(t,y)$ かつ

$$\begin{aligned} a(t,y) &:= (\operatorname{Jac}\varphi(t,y))^{-1}\,{}^t(\operatorname{Jac}\varphi(t,y))^{-1}, \\ b(t,y) &:= \frac{1}{2}{}^t(\operatorname{Jac}\varphi(t,y))\frac{\partial \varphi}{\partial t}(t,y), \\ Q(t,y) &:= \sum_{j=1}^m \frac{c_j}{|\varphi(t,y) - q_j(t)|} + V_1(t,\varphi(t,y)) - \frac{1}{4}\Big|\frac{\partial\varphi}{\partial t}(t,y)\Big|^2 \\ &\qquad + J\varphi(t,y)^{1/2}\big[\Delta(J\psi(t,x))^{1/2}\big|_{x=\varphi}\big]. \end{aligned}$$

ただし, $\psi(t,\cdot)$ は t を固定するごとに定まる $\varphi(t,\cdot)$ の逆関数.

特に φ を (2) ととるとき, 即ち変換として局所擬 Galilei 変換を用いるとき, 複数の Coulomb ポテンシャルの特異点の動きが固定され, [**4**] の定理が適用でき, (SE-v) が古典解 v を持つことが示される. (SE-v) が古典解 v を持つとき, $\Phi(t)$ とその逆変換 $\Phi(t)^{-1}$ は関数のクラスを不変に保つことが確かめられるので

$$u(t,x) := (\Phi(t)^{-1}v)(t,x) = (J\psi(t,x))^{1/2} v(t,\psi(t,x))$$

が (SE) の古典解であることが確かめられる.

References

[1] T. Kato, *Linear evolution equations of "hyperbolic" type*, J. Fac. Sci. Univ. Tokyo, Sec. I. **17** (1970), 241–258.

[2] T. Kato and K. Yajima, *Dirac equations with moving nuclei*, Ann. Inst. H. Poincaré Phys. Théor. **54** (1991), 209–221.

[3] N. Okazawa, T. Yokota and K. Yoshii, *Remarks on linear Schrödinger evolution equations with Coulomb potential with moving center*, SUT J. Math. **46** (2010), 155–176.

[4] N. Okazawa and K. Yoshii, *Abstract approach to linear Schrödinger evolution equations with moving Coulomb singularities*, in preparation.

[5] H. Tanabe, "Functional Analytic Methods for Partial Differential Equations", Pure and Applied Mathematics **204**, Marcel Dekker, New York, 1997.

[6] U. Wüller, *Existence of the time evolution for Schrödinger operators with time dependent singular potentials*, Ann. Inst. H. Poincaré Phys. Théor. **44** (1986), 155–171.

[7] K. Yoshii, *Classical solutions to a linear Schrödinger evolution equation involving a Coulomb potential with a moving center of mass*, Funkcial. Ekvac., **54** (2011), in press.