

Inverse N -body scattering with the time-dependent Hartree-Fock approximation

渡邊道之 (岡山理科大学)*

2023年11月25日

同種粒子多体系を考える。外力ポテンシャルを V_{ext} とする。相互作用ポテンシャルは2体力 V_{int} からなるものとする。典型的な例は、原子核に陽子数 Z を持つ原子中の N 個の電子である。この場合、外力ポテンシャルは原子核と電子の引力であり、相互作用ポテンシャルは電子と電子の斥力である。多体系の逆散乱問題では、粒子の散乱状態から相互作用ポテンシャル V_{int} と外力ポテンシャル V_{ext} を決定できるか、という問題である。この問題に対する数学的アプローチとして、多体シュレーディンガー方程式に対する逆散乱問題の定式化が、定常的方法や時間に依存する方法を用いてなされており、外力ポテンシャルを含まない場合 (Enss and Weder [1]; Novikov [2]; Wang [3, 4]; Vasy [5]; Uhlmann and Vasy [6, 7, 8]) や、外力ポテンシャルとして、電場が与えられている状況下において (Valencia and Weder [9]; Adachi, Fujiwara and Ishida [10]; Adachi et al. [11]; Adachi and Maehara [12]; Ishida [13]), 相互作用ポテンシャルを推定する研究が行われてきた。

上記の研究とは異なる数理物理的なアプローチに、ハートリー・フォック近似とベイズ統計的方法を用いて多体系の相互作用ポテンシャルを散乱データから決定する逆問題研究もある (Lemm and Uhlig [14])。この論文では、定常ハートリー・フォック方程式の解で定まるデータから、相互作用ポテンシャルを再構成する数値計算可能な方法を与えている。ハートリー・フォック近似は、多体系の波動関数を近似的に求めるだけでなく、相互作用ポテンシャルを再構成する計算にも有効に使われている。

近年の核分光実験の発展により、時間依存のハートリー・フォック理論が1つの有望な理論と考えられており (例えば、市村・坂田・松柳 [15, 6-4 節] を参照), 時間依存ハートリー・フォック方程式の数値計算の研究も進んでいる (Lubich[16])。

このような研究背景のもと、これまで数学的なアプローチによる研究結果の少なかった、外力ポテンシャルと相互作用ポテンシャルの両方を推定する逆散乱問題を、多体系の近似法として注目されている時間依存ハートリー・フォック方程式に対して数学解析を試みた。本講演では、時間依存ハートリー・フォック方程式の散乱作用素を与えられたデータとして、散乱作用素から相互作用ポテンシャルと外力ポテンシャルの両方を決定する逆問題について考える。散乱作用素の高エネルギー極限が、外力ポテンシャルと相互作用ポテンシャルの両方を一意的決定でき、それぞれの再構成公式の導出を可能とすることを紹介する (Watanabe[17])。

* 〒700-005 岡山県岡山市北区理大町 1-1 岡山理科大学

参考文献

- [1] Volker Enss and Ricardo Weder. The geometrical approach to multidimensional inverse scattering. *J. Math. Phys.*, Vol. 36, No. 8, pp. 3902–3921, 1995.
- [2] Roman G. Novikov. On inverse scattering for the N -body Schrödinger equation. *J. Funct. Anal.*, Vol. 159, No. 2, pp. 492–536, 1998.
- [3] Xue Ping Wang. On the uniqueness of inverse scattering for N -body systems. *Inverse Problems*, Vol. 10, No. 3, pp. 765–784, 1994.
- [4] Xue Ping Wang. High energy asymptotics for n -body scattering matrices with arbitrary channels. *Annales de l'IHP Physique théorique*, Vol. 65, No. 1, pp. 81–108, 1996.
- [5] András Vasy. Structure of the resolvent for three-body potentials. *Duke Math. J.*, Vol. 90, No. 2, pp. 379–434, 1997.
- [6] Gunther Uhlmann and András Vasy. Low-energy inverse problems in three-body scattering. *Inverse Problems*, Vol. 18, No. 3, pp. 719–736, 2002.
- [7] Gunther Uhlmann and András Vasy. Inverse problems in three-body scattering. In *Inverse problems: theory and applications (Cortona/Pisa, 2002)*, Vol. 333 of *Contemp. Math.*, pp. 209–215. Amer. Math. Soc., Providence, RI, 2003.
- [8] Gunther Uhlmann and András Vasy. Inverse problems in N -body scattering. In *Inverse problems and spectral theory*, Vol. 348 of *Contemp. Math.*, pp. 135–154. Amer. Math. Soc., Providence, RI, 2004.
- [9] Gerardo Daniel Valencia and Ricardo Weder. High-velocity estimates and inverse scattering for quantum N -body systems with Stark effect. *J. Math. Phys.*, Vol. 53, No. 10, pp. 102105, 30, 2012.
- [10] Tadayoshi Adachi, Yuko Fujiwara, and Atsuhide Ishida. On multidimensional inverse scattering in time-dependent electric fields. *Inverse Problems*, Vol. 29, No. 8, pp. 085012, 24, 2013.
- [11] Tadayoshi Adachi, Tatsuya Kamada, Masayuki Kazuno, and Keisuke Toratani. On multidimensional inverse scattering in an external electric field asymptotically zero in time. *Inverse Problems*, Vol. 27, No. 6, pp. 065006, 17, 2011.
- [12] Tadayoshi Adachi and Katsuhiko Maehara. On multidimensional inverse scattering for Stark Hamiltonians. *J. Math. Phys.*, Vol. 48, No. 4, pp. 042101, 12, 2007.
- [13] Atsuhide Ishida. Inverse scattering in the Stark effect. *Inverse Problems*, Vol. 35, No. 10, pp. 105010, 20, 2019.
- [14] Joerg C. Lemm and J Uhlig. Hartree-fock approximation for inverse many-body problems. *Physical review letters*, Vol. 84, pp. 4517–20, 06 2000.
- [15] Munetake Ichimura, Fumihiko Sakata, and Kenichi Matsuyanagi. *Theory of Atomic Nuclei, Japanese*. Iwanami-Tokyo, 2001.
- [16] Christian Lubich. *From quantum to classical molecular dynamics: reduced models and numerical analysis*. Zurich Lectures in Advanced Mathematics. European Mathematical Society (EMS), Zürich, 2008.
- [17] Michiyuki Watanabe. Inverse N -body scattering with the time-dependent Hartree-Fock approximation. *Inverse Probl. Imaging*, Vol. 15, No. 3, pp. 499–517, 2021.