数理解析研究所講究録
873巻 1994年 87-92

Propagation of frequency sets for Schrödinger operators

阪大理　横山耕一郎 (Koichiro Yokoyama)

§1

物体の運動は、古典力学においてはHamilton-Jacobi方程式、量子力学においてはSchrödinger方程式によって記述されており、例えば$\mathbb{R}^n$でポテンシャルが$V(x)$ $(x \in \mathbb{R}^n)$で与えられている場における、質量mの質点の運動を表すH-J方程式は

$p(x,\xi) = \frac{1}{2m}|\xi|^2 + V(x)$ $\quad ((x,\xi) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n)$ とおくと

$$
(\text{H-J}) \begin{cases} \frac{d}{dt}\phi_1^t(x,\xi) = (\partial_\xi p)(\phi_1^t(x,\xi), \phi_2^t(x,\xi)) \\ \frac{d}{dt}\phi_2^t(x,\xi) = -(\partial_x p)(\phi_1^t(x,\xi), \phi_2^t(x,\xi)) \\ \phi^0(x,\xi) = \begin{pmatrix} x \\ \xi \end{pmatrix} \end{cases} \qquad \left(\phi^t = \begin{pmatrix} \phi_1^t \\ \phi_2^t \end{pmatrix}\right)
$$

一方、Schrödinger方程式は$\hbar$を(プランク定数)/2πとすると、

$$
(\text{Sch}) \begin{cases} i\hbar\partial_t u(t,x) = p(x,-i\hbar\nabla_x)\, u(t,x) \\ u(0,x) = u_{0,\hbar}(x) \quad (\text{以下 } u_0) \end{cases}
$$

$$
(p(x,-i\hbar\nabla_x) = -\hbar^2\Delta + V(x))
$$

Bohrの対応原理によると,「H-J方程式の解の軌道は,$\hbar$が十分小さいと考えたときのSch.方程式の解の近似」となる。

例えば,$V(x) = |x|^2$ 等,$\mathbb{R}^n$でC^∞かつ,ある性質を(Robert)満たすときについては,

$$\begin{tikzcd}
\boxed{\begin{array}{l} t=0\text{初期状態} \\ u_0(x) \end{array}} \arrow[r, "(\mathrm{Sch})"] \arrow[d, "(\hbar \downarrow 0)"] & \boxed{u_t(x)} \arrow[d, dashed, "(\hbar \downarrow 0)"] \\
\boxed{\begin{array}{l} t=0\text{において対応する} \\ \text{古典粒子}\ (FSu_0) \end{array}} \arrow[r, "(\mathrm{H\text{-}J})"] & \boxed{\Phi^t(FSu_0)}
\end{tikzcd}$$

上図の$\Phi^t(FSu_0)$と$FS[u_t]$が一致する。つまり時刻tにおいて,$\hbar\downarrow 0$とするときに対応する古典粒子の位置と運動量は,u_0において$\hbar \downarrow 0$とする時に対応する粒子をH-J方程式に従って発展させたものと同じ,ということです。

今回の結果は,$V(x)$が$\mathbb{R}^n$全体では,なめらかではない場合はこの関係がどう変わるのかに関することです。

§2.

<u>def 1</u>　$m \in \mathbb{N}$に対して,

$$B^m = \{ u \mid |||u|||^2_{B^m} = \sum_{|\alpha|+|\beta| \leq m} \left[\| x^\alpha \partial_x^\beta u \|^2_{L^2(\mathbb{R}^n)} \right] < \infty \}$$

$$B^{-m} = (B^m)^* \quad (\text{dual space})$$

(C.1) $u_\hbar \in \mathcal{D}'(\mathbb{R}^n)$ は 十分小さい $\hbar_0 > 0$ と, $M, \ell \in \mathbb{N}$, $C > 0$ が存在して, $|||u_\hbar|||_{B^{-M}} \leq C\hbar^{-\ell}$ $(\hbar \in (0, \hbar_0])$ となるものとする。

<u>def 2</u> frequency set

(C.1)を満たす $u_\hbar$ に対し, $(x^0, \xi^0) \in \mathbb{R}^{2n}$ が $u_\hbar$ の frequency set に属さないとは $((x^0, \xi^0) \notin FS[u_\hbar])$

ある $\chi(x, \xi) \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2n})$ が存在して, $\chi(x^0, \xi^0) \neq 0$, かつ

$$\|\chi(x, \hbar D_x) u_\hbar\|_{L^2} = O(\hbar^\infty) \quad (\hbar \downarrow 0) \text{ となるとき。}$$

(但し $(\chi(x, \hbar D_x) u)(x) = (2\pi\hbar)^{-n} \iint e^{i\hbar^{-1}\langle x-y, \xi\rangle} \chi\left(\frac{x+y}{2}, \xi\right) u(y)\, dy\, d\xi$

以降は全てこの Weyl op.を表すものとする)

<u>def 3</u>

$m \in \mathbb{R}$と, $\rho \in [0, 1)$ に対し, $a(x, \xi) \in \Sigma_\rho^m$

$\Longleftrightarrow$ $a(x, \xi) \in C^\infty(\mathbb{R}^{2n})$, 全ての α, β について $C_{\alpha\beta} > 0$ が存在し

$$|\partial_x^\alpha \partial_\xi^\beta a(x, \xi)| \leq C_{\alpha\beta} (1 + |x|^2 + |\xi|^2)^{\frac{1}{2}(m - \rho(|\alpha| + |\beta|))} \quad ((x, \xi) \in \mathbb{R}^{2n})$$

定理に必要な仮定をいくつか行う。

(A.1) i) $A(\hbar) = M(x, \hbar D_x) + V(x)$

$M(x, \xi)$, $V(x)$ は実値, ある $m_0 \in \mathbb{R}$, $\rho_0 \in (0, 1)$ が存在して,

$M(x, \xi) \in \Sigma_{\rho_0}^{m_0}$

ii) ある閉集合 $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ が存在して $V(x) \in C^\infty(\mathbb{R}^n \setminus \Omega)$. 更に、ある $\lambda \in \mathbb{N}$, $C(\varepsilon) > 0$ ($0<\varepsilon<1$ となる ε に依る) が存在して、$C(\varepsilon) = O(\varepsilon^{-\lambda})$ $(\varepsilon \downarrow 0)$, なおかつ ε を固定する度 $\|V(x)u\|_{L^2} \leq \varepsilon \|\Delta u\|_{L^2} + C(\varepsilon)\|u\|_{L^2}$ が全ての $u \in \mathcal{S}$ に対し成立する。

iii) ある $\hbar_0 > 0$ が存在して、$A(\hbar)$ は任意の $\hbar \in (0, \hbar_0]$ に対して本質的に自己共役となる。

(A.2) i) $u_0 \in \mathcal{S}$ で $\|u_0\|_{L^2} = O(1)$ $(\hbar \downarrow 0)$

ii) ある $\chi_0(x,\xi) \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2n})$ が存在し $dis((supp\,\chi_0), \Omega \times \mathbb{R}^n) \geq \delta_0 > 0$ かつ $u_0 = \chi_0(x, \hbar D_x)u_0 + O_{L^2}(\hbar^\infty)$ $(\hbar \downarrow 0)$

iii) $a(x,\xi) = M(x,\xi) + V(x)$, 以後 $\Phi^\tau(x,\xi)$ は a を Hamiltonian とする H-J 方程式の解を表すものとする。

<u>Remark 1</u> (A.2) ii) は FS u_0 が $\Omega \times \mathbb{R}^n$ から距離 δ_0 以上あるために必要な仮定である。(Gérard)

§3

<u>def 4</u> $t > 0$ に対して

$$\mathcal{A}_t^+ = \{ (x,\xi) \in \mathbb{R}^{2n} \; ; \; d(x,\xi) = \inf_{\tau \in [-t,0]} [dis(\Phi^\tau(x,\xi), \Omega \times \mathbb{R}^n)] > 0 \}$$

Theorem

$$(*)\begin{cases} i\hbar\partial_t u(t,x) = A(\hbar)u(t,x) \\ u(0,x) = u_0(x) \end{cases}$$

$(*)$で (A.1), (A.2) が満たされているとする。 このとき、

$\inf_{0\leq t\leq T}[\mathrm{dis}(\Phi^t(FS\,u_0), \Omega\times\mathbb{R}^n)] > 0$ となる T について、

$$FS[u_t]\cap \mathcal{A}_t^{+} = \Phi^t(FS\,u_0) \qquad (0\leq t\leq T)$$

Remark 2

$t<0$ のときも $\mathcal{A}_t^{-} = \{(x,\xi)\in\mathbb{R}^{2n} \mid \inf_{\tau\in[0,-t]}[\mathrm{dis}(\Phi^{\tau}(x,\xi), \Omega\times\mathbb{R}^n)] > 0\}$

とおくと、同様の結果が得られる。 $\mathcal{A}_t^{+}$は 時刻 $-t$ から 0

までに$\Omega\times\mathbb{R}^n$から出て来たものの集合のようなものであり、

$FS[u_t]$のうち 時刻 0 から t までの位置、運動量のはっきり

しているものは、$FS\,u_0$ を H-J に従って発展させたものに

一致する、というのが定理の主張である。

例として、$A_1(\hbar) = -\hbar^2\Delta + \frac{C}{|x|}$ $A_2(\hbar) = (-i\hbar\nabla_x - B_0\times x)^2 + \frac{C}{|x|}$ $(x, B_0\in\mathbb{R}^3)$

は (A.1), (A.2) を満たしており、特に $C>0$ のときは、

$\mathcal{A}_t^{+} = \{0\}\times\mathbb{R}^3$ であるから、 $FS[u_t]\cap\{x\neq 0\} = \Phi^t(FS\,u_0)$

def 5

$A(\hbar)$ が $\hbar$-admissible であるとは、ある $N_0\in\mathbb{N}$ が存在して

$N\geq N_0$ となる全ての N について、 $A(\hbar) = \sum_{j=0}^{N} a_j(x, \hbar D_x) + \hbar^{N+1}R_{N+1}(\hbar)$

$a_j \in \Sigma_{\rho}^{m}$ $({}^{\exists}m\in\mathbb{R},\ \rho\in[0,1])$ $\qquad \sup_{\hbar\in(0,\hbar_0]}\|R_{N+1}(\hbar)\|_{\mathcal{L}(L^2)} < \infty$

特に a_0 を $A(\hbar)$ の主要部(P.S.) と呼ぶ。

証明の方針は $(x^0,\xi^0)\notin FS[u_\hbar] \Longleftrightarrow {}^\exists\hbar$-ad. op. $P(\hbar)$ が存在して

P.S. $\neq 0$ at (x^0,ξ^0) かつ $\|P(\hbar)u_\hbar\|_{L^2}=O(\hbar^\infty)$ (Robert) を用いて,

この $P(\hbar)$ を具体的に構成することによる。

$(x^0,\xi^0)\in \mathcal{A}_t^+ \setminus \Phi^t(FS\,u_0)$ とすると, $\Phi^{-t}(x^0,\xi^0)\notin FS\,u_0$ より, ${}^\exists b(x,\xi)\in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2n})$

が存在して $b(\Phi^{-t}(x^0,\xi^0))\neq 0$, $\|b(x,\hbar D_x)u_0\|_{L^2}=O(\hbar^\infty)$

$U_t(\hbar)=e^{-it\hbar^{-1}A(\hbar)}$, $P(\hbar)=U_t(\hbar)(b(x,\hbar D_x))U_{-t}(\hbar)$ とおくと $P(\hbar)$ は

$\hbar$-ad. かつ P.S. $=b\circ\Phi^{-t}$ $(\neq 0$ at $(x^0,\xi^0))$ となり,

$$\|P(\hbar)u_t\|_{L^2}=\|b(x,\hbar D_x)u_0\|_{L^2}=O(\hbar^\infty)$$

$$(x^0,\xi^0)\in \mathcal{A}_t^+\setminus FS[u_t]$$

$$(\mathcal{A}_t^+)^c\cup FS[u_t]\subset(\mathcal{A}_t^+)^c\cup\Phi^t(FS\,u_0)$$

$$\mathcal{A}_t^+\cap FS[u_t]\subset\mathcal{A}_t^+\cap\Phi^t(FS\,u_0)$$

$$\therefore\ \mathcal{A}_t^+\cap FS[u_t]\subset\Phi^t(FS\,u_0)$$

逆向きもほぼ同様に示される。

References

[1] Gérard, C and Knauf, A. : *Collisions for the Quantum Coulomb Hamiltonian.* Comm. in Mathematical Physics 143 (1991) P17-26

[2] Robert, D : *Autour de l'Approximation semiclassique.* Birkhäuser (1983)