

Stability and instability of moving atoms and ions in nonrelativistic QED

岡山大学大学院自然科学研究科 宮尾 忠宏 (Tadahiro Miyao)

Graduate School of Natural Science and Technology,
Okayama University

1 はじめに

原子またはイオンは、1 個の原子核とその周りを巡る、いくつかの電子から構成されている。通常、原子核は電子と比べて非常に大きな質量を持つので、第一近似として原子核を固定する（或いは原子核は無限の大きさの質量を持つ）という仮定を置くことがあるが、ここで議論する原子またはイオンの原子核は有限の質量を持つとしよう。従って、我々の原子またはイオンは空間を自由に動き回ることが出来る。原子またはイオンの存在は、実験により確認されている。この我々の世界に存在する（と考えられている）原子またはイオンの多くはエネルギー的に最も低い状態、即ち基底状態にあると考えられている。このような描像は量子力学の枠内では、次の章で述べるように、数学的に厳密な形で定式化されている。しかしながら、量子力学による定式化は孤立した原子またはイオンの存在を示唆しているだけである。現実の世界に在る原子またはイオンは様々な外的摂動により絶えず揺さぶられており、それにもかかわらず原子やイオンが安定に存在しているとい実験事実は驚くべき事であると言えるだろう。本稿ではこれら様々な外的摂動の中で、光による影響を議論する。原子やイオンは現実的には必ずといって良いほど、光の中にある。一方で「光」は場の量子論の枠組みでは、量子電磁場と呼ばれる対象により記述される。原子やイオンの構成要素である電子や原子核はこの量子電磁場と相互作用している。従って、我々の興味は次の問いに集約されるだろう：「光、即ち量子電磁場と相互作用している原子またはイオンの安定性（または不安定性）を数学的に記述できるか？」現実の原子やイオンが光の中でもある程度安定に存在している事実を鑑みると、この問いには肯定的な結論が期待される。

本稿では、M. Loss 氏及び H. Spohn 氏との共同研究を通じて得られた、上述の問いに対する部分的な回答を概説する。

2 孤立した原子またはイオンの安定性

2.1 全運動量を固定されたハミルトニアン

1個の原子核と N 個の電子からなる多粒子系を考えよう。原子核は電荷 Ze ($Z > 0, e > 0$)、質量 m_n を持ち、各電子は電荷 $-e$ 、質量 m_e を持つとする。 $N = Z$ のとき、この系は原子を記述し、また、 $N \neq Z$ のときにはイオンを記述する。量子力学の枠組みでは、このような系のハミルトニアンは次の形で与えられる：

$$h_N = -\frac{\Delta_0}{2m_n} - \sum_{j=1}^N \frac{\Delta_j}{2m_e} + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \frac{e^2}{4\pi|x_i - x_j|} - \sum_{j=1}^N \frac{Ze^2}{4\pi|x_j - x_0|}.$$

ここで、 $x_0, x_j, j = 1, \dots, N$ はそれぞれ原子核、及び電子の座標を意味する。右辺第1, 2項はそれぞれ原子核及び電子の運動エネルギーを記述しており、第3, 4項はそれぞれ電子間クーロン斥力及び電子-原子核間クーロン引力を表している。任意の N, Z 及び e に対して、 h_N は、ヒルベルト空間 $L^2(\mathbb{R}^{3(N+1)})$ 上に作用する、下に有界な自己共役作用素である。(ここでは、簡単の為に電子の統計性は考えないことにしよう。)

この系の全運動量は保存されることに注意しよう。数学的には、この事実は「 h_N は全運動量作用素 $P_{\text{tot}} = \sum_{j=0}^N (-i\nabla_j)$ と強可換である」と言い表すことが出来る。(ここで、強可換とは $\exp\{ia \cdot P_{\text{tot}}\} \exp\{ith_N\} = \exp\{ith_N\} \exp\{ia \cdot P_{\text{tot}}\}$ が任意の $a \in \mathbb{R}^3$ 及び $t \in \mathbb{R}$ に対して成立していることを言う。)

この系を調べる際には、原子座標系を導入すると何かと都合が良い。原子座標は以下で定義される質量中心座標 R と相対座標 $y_j, j = 1, \dots, N$ から成る：

$$R = \frac{1}{M} \left(m_n x_0 + \sum_{j=1}^N m_e x_j \right), \quad M = m_n + Nm_e \text{ (全質量)},$$

$$y_j = x_j - x_0, \quad j = 1, \dots, N.$$

原子座標 $(R, \{y_j\})$ の下では、 h_N は次のように表される：

$$h_N = -\frac{\Delta_R}{2M} - \sum_{j=1}^N \frac{\Delta_{y_j}}{2\mu} + \frac{1}{m_n} \sum_{1 \leq i < j \leq N} \nabla_{y_i} \cdot \nabla_{y_j} + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \frac{e^2}{4\pi|y_i - y_j|} - \sum_{j=1}^N \frac{Ze^2}{4\pi|y_j|}.$$

ここで、慣性質量 μ は、 $\mu^{-1} = m_n^{-1} + m_e^{-1}$ で定義されている。また、原子座標では全運動量作用素は

$$P_{\text{tot}} = -i\nabla_R.$$

という、単純な形で表現されることに注意しよう。

次に、質量中心座標 R に関するフーリエ変換を $\mathcal{F}_R$ としよう。これはヒルベルト空間 $L^2(\mathbb{R}^{3(N+1)})$ 上のユニタリー作用素であり、自然な同型 $L^2(\mathbb{R}^{3(N+1)}) \simeq \int_{\mathbb{R}^3}^{\oplus} L^2(\mathbb{R}^{3N}) dP$ を引き起こす。この同型の元で、全運動量作用素は

$$\mathcal{F}_R P_{\text{tot}} \mathcal{F}_R^* = \int_{\mathbb{R}^3}^{\oplus} P dP \quad (1)$$

という定数ファイバー直積分作用素で表される。つまり、 $\mathcal{F}_R$ は全運動量作用素のスペクトル表示を与えるわけである。物理的には (1) に現れる P は、全運動量の値であると解釈される。先に注意したように、 h_N は P_{tot} と強可換であった。従って、当然 h_N も分解可能であり、

$$\mathcal{F}_R h_N \mathcal{F}_R^* = \int_{\mathbb{R}^3}^{\oplus} h(P) dP$$

とファイバー分解される。ここで、 h_N の各ファイバー $h(P)$ は

$$h(P) = \frac{P^2}{2M} - \sum_{j=1}^N \frac{\Delta_{y_j}}{2\mu} + \frac{1}{m_n} \sum_{1 \leq i < j \leq N} \nabla_{y_i} \cdot \nabla_{y_j} + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \frac{e^2}{4\pi|y_i - y_j|} - \sum_{j=1}^N \frac{Ze^2}{4\pi|y_j|}$$

で与えられる。この $h(P)$ は、「全運動量の値が P を持つ原子またはイオンのハミルトニアン」と解釈される。 $P \neq 0$ の場合は、 $h(P)$ は運動量 P で動いている原子またはイオンを記述しているわけである。

2.2 束縛エネルギー

まず、 n 個の電子のみから成る系のハミルトニアンを導入しよう：

$$h_{\text{el},n} = - \sum_{j=1}^n \frac{\Delta_j}{2m_e} + \sum_{1 \leq i < j \leq n} \frac{e^2}{4\pi|x_i - x_j|}.$$

次に、後に頻繁に使用する記号を導入しよう。 A をあるヒルベルト空間上の下に有界な自己共役作用素とする。このとき、 A のスペクトルの下限を $E(A)$ で表すことにする：

$$E(A) = \inf \text{spec}(A).$$

これらの記号の元で、系の束縛エネルギー E_{bin} は、

$$E_{\text{bin}} = \min \left\{ E(h_{N-n}) + E(h_{\text{el},n}) \mid n = 1, \dots, N \right\} - E(h_N). \quad (2)$$

で定義される。(容易に分かるように、 $E_{\text{bin}} = E(h_{N-1}) - E(h_N)$ である。しかし、ここでは後の議論のために上述の定義を採用しておく。) この量の物理的な意味を説明するために、

$N = Z$ の場合、つまり原子を例に考えてみよう。この場合には、 $E(h_{N-n}) + E(h_{el,n}) - E(h_N)$ とは、原子を2つのクラスター(1つは原子核と $N - n$ 個の電子から成り、もうひとつのクラスターは n 個の電子のみから成る)に分解するために必要なエネルギーを意味する。従って、原子の場合には E_{bin} とは、原子をイオン化するために必要な最小のエネルギーを意味する。

$E_{\text{bin}} > 0$ のときには、原子核と電子が一緒になっている状態即ち、原子またはイオンの状態の方が2つのクラスターに分離している状態よりもエネルギー的に低いことを意味しており、従って、この場合には原子またはイオンは安定であると予想される。

2.3 安定性

まず、基底状態の定義を明らかにしておこう。

定義 2.1 A を、あるヒルベルト空間上の下に有界な自己共役作用素とする。このとき $E(A)$ が A の固有値であるならば A は基底状態を持つという。 $E(A)$ の固有ベクトルを基底状態と呼ぶ。

HVZ 定理により、次の事実が導かれる。

命題 2.2 $E_{\text{bin}} > 0$ と仮定する。このとき、 $h(P)$ は、任意の $P \in \mathbb{R}^3$ に対して基底状態を持つ。

条件 $E_{\text{bin}} > 0$ を束縛条件と呼ぶ。上述の命題の意味は次のように解釈できる：「束縛条件の下では、考察下の多粒子系はどんなに速く動いていても基底状態を持つ、つまり、安定である。」

残る問題は、束縛条件を実際に示すことである。次の事実は Zhislin により最初に発見された。

命題 2.3 [10] 原子核の質量 m_n は、十分に大きいとする。このとき、 $N < Z + 1$ ならば、束縛条件 $E_{\text{bin}} > 0$ が成立する。

このことから、原子または正イオンは、どんなに速く動いていても安定であることが示せたわけである。我々が考えているハミルトニアン h_N は、非相対論的な対象であり、光速を超えて粒子が動くことが出来ても(数学的には)何ら問題は無い。しかしながら、現実の荷電粒子は光速に近づくとチェレンコフ (Cherenkov) 光を放射する、言い換えれば、安定ではないことが実験的に確認されており、この意味で h_N は現実的な多粒子系を記述していない。

3 量子電磁場中の原子またはイオンの安定性及び不安定性

3.1 準備

この章では、光、即ち量子電磁場中の原子やイオンについて議論する。量子電磁場を数学的に厳密に記述するためには少々準備が必要である。尚、ここで導入する諸々の概念の詳しい解説は、[1, 9] で与えられている。

フォトン・フォック空間とは

$$\mathfrak{F} = \bigoplus_{n=0}^{\infty} \otimes_n^s [\oplus^2 L^2(\mathbb{R}^3)]$$

で定義される。ここで、 $\otimes_n^s$ は、 n 重対称テンソル積であり、また、簡単のため $\otimes_0^s [\oplus^2 L^2(\mathbb{R}^3)] = \mathbb{C}$ という記号を用いている。後に明らかになるように、量子電磁場に付随する様々な対象は、このヒルベルト空間に作用する。

フォトン・フォック空間上の線形作用素で、後々必要となるいくつかのものを定義しておこう。まず、生成・消滅作用素を導入しよう。生成作用素 $a(f)^*$ ($f \in \oplus^2 L^2(\mathbb{R}^3)$) は、

$$a(f)^* \varphi = \bigoplus_{n=0}^{\infty} \sqrt{n+1} S_{n+1} f \otimes \varphi_n$$

で定義される。ここで、ベクトル φ は、以下に定義される $a(f)^*$ の定義域 $\text{dom}(a(f)^*)$ から取っている：

$$\text{dom}(a(f)^*) = \left\{ \psi = \bigoplus_{n=0}^{\infty} \psi_n \in \mathfrak{F} \mid \sum_{n=0}^{\infty} (n+1) \|S_{n+1} f \otimes \psi_n\|^2 < \infty \right\}.$$

また、 S_{n+1} は $n+1$ 次の対称化作用素である。消滅作用素 $a(f)$ ($f \in \oplus^2 L^2(\mathbb{R}^3)$) は $a(f)^*$ の共役作用素で定義される。次に、 $h \in L^2(\mathbb{R}^3)$ に対して、

$$a_1(h)^{\#} = a(h \oplus 0)^{\#}, \quad a_2(h)^{\#} = a(0 \oplus h)^{\#}.$$

と定義しよう。(ここで、 $A^{\#}$ は、 A または A^* を意味する。) 作用素の族 $\{a_{\lambda}(f), a(f)_{\lambda}^* \mid f \in L^2(\mathbb{R}^3), \lambda = 1, 2\}$ は次の正準交換関係 (CCRs) を満たすことが知られている：

$$[a_{\lambda}(f), a_{\mu}(g)^*] = \langle f, g \rangle \delta_{\lambda\mu}, \quad [a_{\lambda}(f), a_{\mu}(g)] = 0 = [a_{\lambda}(f)^*, a_{\mu}(g)^*].$$

ここで、 $\langle \cdot, \cdot \rangle$ はヒルベルト空間 $L^2(\mathbb{R}^3)$ における内積を表し、 $\delta_{\lambda\mu}$ はクロネッカーのデルタである。記号的に $a_{\lambda}(f)^{\#}$ を次のような積分表示で書くことにする：

$$a_{\lambda}(f) = \int_{\mathbb{R}^3} dk \bar{f}(k) a_{\lambda}(k), \quad a_{\lambda}(f)^* = \int_{\mathbb{R}^3} dk f(k) a_{\lambda}^*(k).$$

(これらは、あくまで便宜的な記号に過ぎないことを注意しておく。この記号を使うと、いくつかの量子電磁場に関する作用素が簡単に記述できるという利点がある。)

第二量子化作用素を導入しよう。 b を可測関数 $b(k)$ による $L^2(\mathbb{R}^3)$ 上の掛け算作用素としよう。このとき、 b の第二量子化 $d\Gamma(b)$ とは、

$$d\Gamma(b) \upharpoonright \otimes_s^n [\oplus^2 L^2(\mathbb{R}^3)] = \sum_{j=1}^n \mathbf{1} \otimes \cdots \otimes (b \oplus b) \otimes \cdots \otimes \mathbf{1}_{j\text{th}}$$

で定義される。(ここで、 $d\Gamma(b) \upharpoonright \otimes_s^0 [\oplus^2 L^2(\mathbb{R}^3)] = 0$ と約束しておく。) $d\Gamma(b)$ は可閉作用素であることが容易に分かる。そこで、この作用素の閉包を $d\Gamma(b)$ と改めて定義にすることにする。関数 $b(k)$ が実数値関数ならば、 $d\Gamma(b)$ は $\mathfrak{F}$ 上の自己共役作用素であることを注意しておく。

3.2 Pauli-Fierz ハミルトニアン

光の中にある原子またはイオンを考えよう。前の章と同様に、原子またはイオンは1個の原子核(電荷 Ze 、質量 m_n)と N 個の電子(電荷 $-e$ 、質量 m_e)からなる。光は波動的側面と粒子的側面を状況に応じて現出させることが、実験により知られている。(尚、光の波動的側面が具現している場合を電磁波、粒子的側面を注目する際にはフォトンという呼び方をする。)この2面性を内包する概念が量子電磁場である。こうして、光の中に在る各々の電子及び原子核は、量子電磁場と相互作用することになる。このような各荷電粒子と量子電磁場の間の相互作用までも考慮に入れたハミルトニアンの1つで Pauli-Fierz ハミルトニアンと呼ばれるものを我々の議論の出発点とする。Pauli-Fierz ハミルトニアンは次の形を持つ：

$$H_N = \frac{1}{2m_n} (-i\nabla_0 - ZeA(x_0))^2 + \sum_{j=1}^N \frac{1}{2m_e} (-i\nabla_j + eA(x_j))^2 \\ + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \frac{e^2}{4\pi|x_i - x_j|} - \sum_{j=1}^N \frac{Ze^2}{4\pi|x_j - x_0|} + H_f.$$

ここで、 $A(x)$ は量子化されたベクトル・ポテンシャルであり、 H_f は自由な量子電磁場のハミルトニアンである。これらの正確な定義は後に与える。この線形作用素はヒルベルト空間 $\mathcal{H}_{N+1} = L^2(\mathbb{R}^{3(N+1)}) \otimes \mathfrak{F}$ に作用している。荷電粒子達は $\mathcal{H}_{N+1}$ の中の $L^2(\mathbb{R}^{3(N+1)})$ の部分に、また、量子電磁場は $\mathfrak{F}$ の部分に住んでいる。右辺第1, 2項は量子電磁波中の原子核及び N 電子の運動エネルギーを表しており、各荷電粒子は量子化されたベクトル・ポテンシャル $A(x)$ を通じて量子電磁場と相互作用している。

量子化されたベクトル・ポテンシャル $A(x) = (A_1(x), A_2(x), A_3(x))$ は次のように定義される：

$$A_j(x) = \sum_{r=1,2} \int_{\sigma \leq |k| \leq \kappa} dk \frac{e_j^r(k)}{\sqrt{2(2\pi)^3|k|}} \left\{ a_r(k) e^{ik \cdot x} + a_r(k)^* e^{-ik \cdot x} \right\}.$$

ここで、 $e^r = (e_1^r, e_2^r, e_3^r)$, $r = 1, 2$, は偏角ベクトルと呼ばれるものであり、本稿では簡単のために、

$$e^1(k) = \frac{(k_1, -k_1, 0)}{\sqrt{k_1^2 + k_2^2}}, \quad e^2(k) = \frac{k}{|k|} \wedge e^1(k).$$

と選ぶことにする。切断パラメータ $(0 \leq) \sigma$ を赤外切断、 $\kappa (< \infty)$ を紫外切断と呼ぶ。

自由な量子電磁場のハミルトニアンは掛け算作用素 $|k|$ の第二量子化で与えられる：

$$H_f = d\Gamma(|k|).$$

H_N の自己共役性の問題は廣島氏により完全に解かれている：

命題 3.1 [6] 任意の e, Z, N, σ 及び κ に対して、 H_N は下に有界であり、 $\cap_{j=0}^N \text{dom}(\Delta_j) \cap \text{dom}(H_f)$ 上で自己共役である。

注意 3.2 上述の命題に関して、一言付け加えておこう。通常の Kato-Rellich の定理に基づく摂動論的な議論では必ずパラメータに何らかの制限が付いてくる。従って、命題 3.1 は非自明なものである。

3.3 全運動量を固定されたハミルトニアン II

まず、全運動量を導入しよう。量子電磁場中の多粒子系の全運動量 P_{tot} は、

$$P_{\text{tot}} = \sum_{j=0}^N (-i\nabla_j) + P_f.$$

で定義される。右辺第 1 項は荷電粒子の全運動量、右辺第 2 項は量子電磁場の運動量であり、

$$P_f = d\Gamma(k) = (d\Gamma(k_1), d\Gamma(k_2), d\Gamma(k_3))$$

で定義される。容易に確認できるように、ハミルトニアン H_N と全運動量 P_{tot} は強可換である、言い換えれば、系の全運動量は保存される。

$\mathcal{F}_0$ を x_0 に関するフーリエ変換としよう。この $\mathcal{F}_0$ はヒルベルト空間 $\mathcal{H}_{N+1}$ 上のユニタリー作用素と見做すことが出来る。このとき、 $\mathcal{H}_{N+1}$ 上のユニタリー作用素 U を、

$$U = \mathcal{F}_0 \exp \left\{ ix_0 \cdot (P_{\text{tot}} + i\nabla_0) \right\}$$

で定義しよう。このユニタリー作用素 U は自然な同一視 $\mathcal{H}_{N+1} \simeq L^2(\mathbb{R}_P^3) \otimes \mathcal{H}_N \simeq \int_{\mathbb{R}^3}^{\oplus} \mathcal{H}_N dP$ を誘導する。この自然な同一視の下で、全運動量作用素は定数ファイバー直積分作用素で表すことができる：

$$U P_{\text{tot}} U^* = \int_{\mathbb{R}^3}^{\oplus} P dP.$$

つまり、ユニタリー作用素 U は全運動量のスペクトル表現を与える訳である。ハミルトニアン H_N は、全運動量作用素 P_{tot} と強可換であるので、 H_N も分解可能であり、

$$U H_N U^* = \int_{\mathbb{R}^3}^{\oplus} H(P) dP$$

と表現することが出来る。各ファイバー $H(P)$ は、次の表示を持つ：

$$\begin{aligned} H(P) = & \frac{1}{2m_n} \left(P + i \sum_{j=1}^N \nabla_j - P_f - ZeA(0) \right)^2 + \sum_{j=1}^N \frac{1}{2m_e} \left(-i\nabla_j + eA(x_j) \right)^2 \\ & + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \frac{e^2}{4\pi|x_i - x_j|} - \sum_{j=1}^N \frac{Ze^2}{4\pi|x_j|} + H_f. \end{aligned}$$

この $H(P)$ は、全運動量 P で動く量子電磁場中の原子又はイオンを記述している。

注意 3.3 ここで、ユニタリー作用素 U の意味について一言付け加えておこう。形式的に 全運動量作用素 P_{tot} を定数ベクトル P と等しいと書いてみる： $P_{\text{tot}} = P$ 。この形式的な式を $-i\nabla_0$ について解くと、 $-i\nabla_0 = P + \sum_{j=1}^N i\nabla_j - P_f$ を得る。これを元の H_N に代入して $x_0 = 0$ とすると $H(P)$ を得る。上で定義したユニタリー作用素 U は、この形式的な議論を数学的に厳密に実現してくれるものということが出来る。

この作用素 $H(P)$ の自己共役性については、我々は次の結果を得た：

命題 3.4 [8] 任意の e, Z, N, σ, κ 及び P に対して、 $H(P)$ は下に有界であり、 $\cap_{j=1}^N \text{dom}(\Delta_j) \cap \text{dom}(P_f^2) \cap \text{dom}(H_f)$ 上で自己共役である。

この命題についても、パラメータに関する制限が付かないことを強調しておこう。

我々の問題は、 $H(P)$ がどのような条件の下で基底状態を持つかを明らかにすることである。物理的には、この基底状態は（もし存在すれば）、フォトンの雲を纏った安定な原子又はイオンで、かつ、運動量 P で動いているもの を記述している。

3.4 束縛エネルギー II

量子電磁場中の多粒子系に関する束縛エネルギーも、孤立した原子又はイオンに対するそれと同様に定義される。そのため、ここでは定義を述べるだけに留め、物理的な意味については述べない。（読者は孤立した原子又はイオンに対する束縛エネルギーに関する、物理的な議論から、ここで定義される束縛エネルギーの物理的な意味も容易に推測できるであろう。）

量子電磁場中の n 個の電子のハミルトニアンは、

$$H_{\text{el},n} = \sum_{j=1}^n \frac{1}{2m_e} \left(-i\nabla_j - eA(x_j) \right)^2 + \sum_{1 \leq i < j \leq n} \frac{e^2}{4\pi|x_i - x_j|} + H_f$$

で定義される。量子電磁場の影響も含んだ束縛エネルギーも、やはり2つのクラスターからなる系の最低エネルギーと原子（又はイオン）の最低エネルギーの差で定義される：

$$E_{\text{bin}}^{\text{QED}} = \min \left\{ E(H_{N-n}) + E(H_{\text{el},n}) \mid n = 1, \dots, N \right\} - E(H_N).$$

後に見るように、量子電磁場中の原子の安定性も、この束縛エネルギー $E_{\text{bin}}^{\text{QED}}$ により記述できる。

3.5 量子電磁場中の原子の安定性

量子電磁場中の原子については、次に述べる安定性定理が成立する：

定理 3.5 [8] 量子電磁場中の原子を考える：

$$N = Z.$$

また、赤外切断は除いておく：

$$\sigma = 0.$$

束縛条件を仮定しよう：

$$E_{\text{bin}}^{\text{QED}} > 0.$$

このとき、 $H(P)$ は、

$$|P| < \min \left\{ m_n, \sqrt{2m_n E_{\text{bin}}^{\text{QED}}} \right\}$$

に対して基底状態を持つ。

注意 3.6 (i) 赤外切断がある場合、つまり、任意の $\sigma > 0$ に対しても上の定理は成立する。この定理の重要な点の1つは、赤外切断が取り除くことが出来るという点である。

(ii) [3]において、原子核の質量が無限大の場合には、基底状態の存在が束縛条件の下で示されている。これは、上述の定理では $P = 0$ の場合に相当する。

孤立した原子の安定性のときに述べたが、実際の原子は光速近くまで加速すると、チェレンコフ光を放出して、不安定になることが知られている。（直感的には、「原子が光速よりも速い速度で動くと、纏っていたフォトン置いてきぼりにしてしまう」と述べる事が出来るだろう。）我々が考察しているハミルトニアンは、（孤立した原子のときとは違って）光の効果まで考慮したものである。従って、我々のハミルトニアンは、チェレンコフ放射を記述できると期待することが出来るであろう。この意味で P に関する制限が付いてくることは自然であると言えよう。しかしながら、チェレンコフ光による不安定性を真に理解するためには、 $|P|$ が m_n より大きいときには基底状態が 存在しない ことを証明しなければならない。（この問題は、未解決である。）

3.6 量子電磁場中のイオンの不安定性

量子電磁場中のイオンについては、状況が少々複雑である。まずは、赤外切断を入れた場合、つまり、 $\sigma > 0$ の場合には安定性定理が依然として成立することを述べておこう。

定理 3.7 [8] 量子電磁場中のイオンを考える：

$$N \neq Z.$$

この場合、赤外切断を入れておく：

$$\sigma > 0.$$

束縛条件を仮定しよう：

$$E_{\text{bin}}^{\text{QED}} > 0.$$

このとき、 $H(P)$ は、

$$|P| < \min \left\{ m_n, \sqrt{2m_n E_{\text{bin}}^{\text{QED}}} \right\}$$

に対して基底状態を持つ。

こうして赤外切断がある場合には、量子電磁場中のイオンは依然として安定であることが分かった。しかしながら、赤外切断の仮定は現実的ではない。従って、次の問題は「赤外切断を除くとイオンの安定性はどのようになるのであろうか？」ということになる。この問いに対しては、Hasler-Herbst による次の不安定性定理がある。

定理 3.8 [4] 量子電磁場中のイオンを考える：

$$N \neq Z.$$

赤外切断は除いておく：

$$\sigma = 0.$$

もし、 $E(H(P))$ が P_0 で微分可能であり、かつ、

$$\nabla_P E(H(P))|_{P=P_0} \neq 0$$

ならば、 $H(P_0)$ は基底状態を持たない。

$\nabla_P E(H(P))|_{P=P_0} = 0$ なる点 P_0 では、 $H(P_0)$ は基底状態を持ち得ることを注意しておく。我々は次の予想をしている。

予想：量子電磁場中の動いているイオンの不安定性

$P \neq 0$ の場合には、 $\nabla_P E(H(P)) \neq 0$ 、従って、 $H(P)$ は $P \neq 0$ の場合には基底状態を持たない。一方で、 $\nabla_P E(H(P))|_{P=0} = 0$ であり、さらに、 $H(0)$ は基底状態を持つ。つまり、量子電磁場中では、静止している ($P = 0$) イオンのみが安定である。

この予想は、T. Chen による仕事 [2] が基になっていることを注意しておく。

3.7 束縛エネルギーに関する考察

量子電磁場中の原子やイオンの安定性定理（定理 3.5, 3.7）では、束縛条件 $E_{\text{bin}}^{\text{QED}} > 0$ を仮定していた。ここでは、束縛条件がある条件の下では実際に成立することを述べておこう。

● 原子核が重い場合

命題 3.9 [8] 赤外切断 $\sigma \geq 0$ を任意に固定する。また、 $N < Z + 1$ とする。このとき、原子核の質量 m_n が十分に大きいならば、束縛条件 $E_{\text{bin}}^{\text{QED}} > 0$ が成立する。

現実的な原子やイオンでは、原子核の質量は電子のそれよりも非常に大きいことが知られており、この命題の仮定は自然であると言えるだろう。また、原子核の質量が無限大の場合には、Lieb-Loss [7] により束縛条件が成立することが示されている。

● 孤立した原子又はイオンとの関連

命題 3.10 [8] E_{bin} を、孤立した原子又はイオンの束縛エネルギーとする ((2) を見よ)。このとき、

$$E_{\text{bin}}^{\text{QED}} \geq E_{\text{bin}} - \alpha(\kappa^2 - \sigma^2) \quad (3)$$

が成立する。ここで、

$$\alpha = \frac{e^2}{16\pi^2} \left(\frac{Z^2}{m_n} + \frac{N}{m_e} \right).$$

従って、もし孤立した原子又はイオンに対する束縛条件 $E_{\text{bin}} > 0$ が成立すれば、パラメータ σ, κ , 及び e を適当に選ぶことにより $E_{\text{bin}}^{\text{QED}} > 0$ が成立する。

注意 3.11 E_{bin} は、 σ, κ には依存しないが、 e には依存する。このことから、(e を固定したときには) $E_{\text{bin}} > 0$ ならば、 σ, κ が小さければ $E_{\text{bin}}^{\text{QED}} > 0$ が成立する。尚、不等式 (3) を e について解くことは一般には難しいが、単純な場合には実際に解くことが出来る（下記の Example を参照。）

Example: 水素原子

水素原子を考えよう： $N = Z = 1$ 。また赤外切断も除いておこう： $\sigma = 0$ 。孤立した水素原子の束縛エネルギーは容易に計算出来て、

$$E_{\text{bin}} = \frac{\mu e^4}{32\pi^2}$$

で与えられる。ここで、 μ は還元質量であり、 $\mu^{-1} = m_e^{-1} + m_n^{-1}$ で定義される。これを、(3)に代入することにより、不等式

$$\frac{\mu e^4}{32\pi^2} - \frac{e^2 \kappa^2}{16\pi^2 \mu} > 0 \quad (4)$$

を得る。つまり、不等式(4)が満たされれば、量子電磁場中の水素原子の束縛条件 $E_{\text{bin}}^{\text{QED}} > 0$ が成立するわけである。次の2つの場合を考えてみよう。

(A) 自然界に存在する水素原子： 実験によると、 $\frac{e^2}{4\pi} \simeq \frac{1}{137}$ である。この値を(4)に代入すると、

$$\kappa < \sqrt{\frac{2\pi}{137}} \mu$$

を得る。

(B) e を相互作用パラメータと見た場合：

$$\frac{\sqrt{2}}{\mu} \kappa < e.$$

この式から次の興味深い事実が分かる：結合定数 e を大きく選べば、紫外切断 κ も大きく選ぶことが出来る。

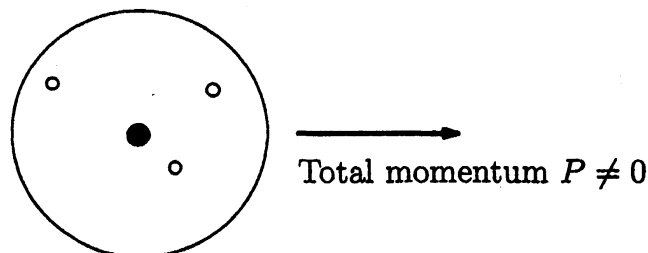
3.8 量子電磁場中の原子の安定性とイオンの不安定性に関する考察

量子電磁場中では、原子はある程度動いても安定であるが、動いているイオンは不安定になる傾向があることを概説してきた。ここでは、この違いがどこから来るのかを考察してみよう。

3.8.1 量子電磁場中の原子

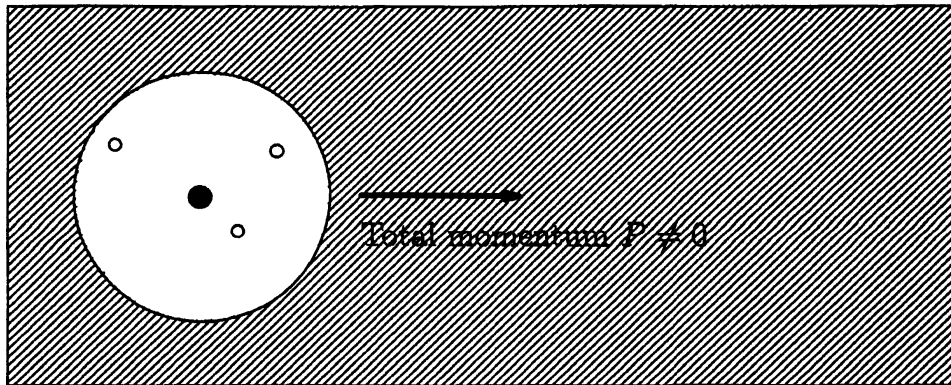
量子電磁場中の原子を考えよう。簡単の為に、 $N = Z = 3$ の場合を例に考えてみよう。我々は、前章で孤立した原子は任意の運動量で動いても安定であることを見た。下図はこの状況を直感的に表したものである。

Ex. $N = 3$



Schrödinger atom ($N = Z = 3$)

この動いている原子からなる系に量子電磁場を加えてみよう。(下図において、斜線部は量子電磁場を視覚的に表したものである。) 原子全体を1つの粒子と考えよう。下図において、大きな円を1つの粒子と見做すわけである。このとき、系は条件 $N = Z$ により、電荷的に中性である。従って、量子電磁場は電荷を感じないことになる。こうして、原子は量子電磁場中を自由に動けるわけである。



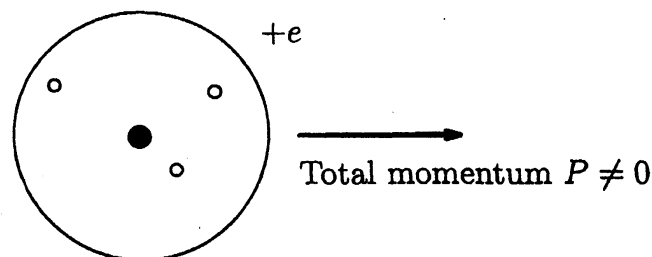
Moving atom in QED

実際には、個々の構成粒子(電子、原子核)は各々量子電磁場と相互作用しているので、状況はもっと複雑である。上の図で言うならば、大きな円の内部では量子電磁場は各荷電粒子と局所的に相互作用している。この辺の事情が、チェレンコフ光等に関連してくると考えられる。

3.8.2 量子電磁場中のイオン

我々は、孤立した動いている正イオンが安定であることを前章で見た。下図は $N = 3, Z = 4$ の場合を表している。従って、イオンは全体で $+e$ の電荷を持つ。

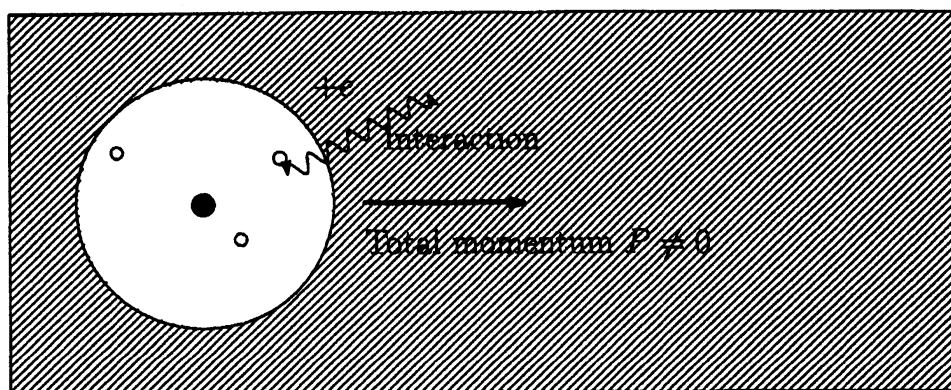
Ex. $N = 3, Z = 4$



Schrödinger positive ion

この動いているイオンに量子電磁場を加えてみよう。原子の場合と同様に、イオンを全体で1つの粒子と考えよう。下図の大きな円を1つの粒子と見るわけである。この大きな粒子は $+e$ の電荷を持つために、量子電磁場を感じることになる、つまり、量子電磁場と相互作用するわけである。ところで、量子電磁場中を運動する1つの荷電粒子は、その周りに無限個の低エネルギー・フォトン(ソフト・フォトン)を纏うことにより不安定に

なことが知られている。(この現象を赤外発散, van Hove 現象などと呼ぶ。この現象については、[2] に繰り込み群を用いた議論がある。分かり易い解説として、[5] を挙げておく。) 今の場合には、この大きな粒子に対して、van Hove 現象が生じると考えられるので、動いているイオンは不安定であると予想される。なお、定理 3.7 において、動いている量子電磁場中のイオンの安定性定理が成立したのは、赤外切断を入れることにより、ソフト・フォトンの効果を排除したことによる。



Moving ion in QED

参考文献

- [1] A. Arai, Fock spaces and quantum fields, Nippon-Hyounsha, Tokyo, 2000 (in Japanese).
- [2] V. Bach, T. Chen, J. Fröhlich, I. M. Sigal, The renormalized electron mass in non-relativistic quantum electrodynamics, J. Funct. Anal. 243 (2007) 426-535.
- [3] M. Griesemer, E. H. Lieb, M. Loss, Ground states in non-relativistic quantum electrodynamics, Invent. Math. 145 (2001) 557-595.
- [4] D. Hasler, I. Herbst, Absence of ground states for a class of translation invariant models of non-relativistic QED, preprint arXiv:math-ph/0702096.
- [5] M. Hirokawa, A mathematical mechanism of infrared catastrophe, preprint, arXiv:math-ph/0403008.
- [6] F. Hiroshima, Self-adjointness of the Pauli-Fierz Hamiltonian for arbitrary values of coupling constants, Ann. Henri Poincaré 3 (2002) 171-201.
- [7] E. H. Lieb and M. Loss, Existence of atoms and molecules in non-relativistic quantum electrodynamics, Adv. Theor. Math. Phys. 7 (2003) 667-710.

- [8] M. Loss, T. Miyao, H. Spohn, Lowest energy states in nonrelativistic QED: atoms and ions in motion, *J. Funct. Anal.* 243 (2007) 353-393.
- [9] M. Reed and B. Simon, *Methods of Modern Mathematical Physics Vol. II*, Academic Press, New York, 1975.
- [10] G. Zhislin, A study of the spectrum of the Schrödinger operator for a system of several particles, *Trudy Moscov Mat. Obsc.* 9 (1960) 81-120.