

松 山 大 学 論 集
第 22 卷 第 1 号 抜 刷
2 0 1 0 年 4 月 発 行

シュレーディンガー方程式の数理構造

檀 裕 也

シュレーディンガー方程式の数理構造

檀 裕 也

概 要

量子力学におけるシュレーディンガー方程式の位置づけを明らかにし、その数理構造について本研究で得られた最新の成果を述べる。

情報技術 (IT) を支える半導体産業は、従来から存在する電磁気学や電気・電子工学だけでなく、現在では量子力学を基盤に発展しつつある。ナノテクノロジーが可能となった現代において、理論と実験の両面から量子力学が必要とされ、ミクロな世界における奇妙な性質を説明するためにシュレーディンガー方程式が注目されている。本稿では、その背景となる時代的要請を概観するとともに、シュレーディンガー方程式の数理構造を研究することの位置づけを与える。そのために、本質的な意味で複素数が導入された波動関数とシュレーディンガー方程式に関する性質を明らかにする。数理学の観点から、波動方程式や拡散方程式とともに発展方式として興味深い性質が見られる。特に、空間の構造を多様体としてとらえ、二階微分項とポテンシャル項の関係から得られる成果を明らかにした。これは、ポテンシャル項のあるシュレーディンガー方程式を二階微分項の係数だけで表現するという提案である。

数理学の分野における偏微分方程式の研究には、数学的観点からの理論研究、工学的観点からの数値計算 (シミュレーションを含む)、物理学的観点からの理論および実験に関する研究が幅広く行われている。本研究は、数学的観点からの理論研究に軸足を置くものであるが、初期値問題をはじめとする従来

の研究成果を踏まえ、最近になって明らかになった量子現象について新しい知見を求めるものである。

本稿の構成は次の通りである。第1章で現代社会を支える技術について概観し、最先端の分野では量子力学が使われるようになった背景を述べる。第2章では、シュレーディンガー方程式の数理解造を理解するために必要となる数学を準備し、量子力学の基礎とともに、複素数の性質からフーリエ解析を使ったシュレーディンガー方程式の典型的な解法を導く。第3章は、シュレーディンガー方程式における場の表現を導入する。最後に、本研究の成果を第4章にまとめ、定理の形で提示する。

なお、本稿は2008年度に交付を受けた松山大学特別研究助成による研究成果の一部である。

1 はじめに

インターネットの爆発的な普及によって、私たちの社会生活は大きく変化した。その背景には、Webやメール、IP電話などのサービスが社会生活の中で不可欠な道具として認識されるようになっただけでなく、コンピュータ製品の飛躍的な性能向上とともに、技術革新（イノベーション）による価格破壊が一般社会への普及を後押ししたことが挙げられる。現在では、インターネットを使って単に文字や画像、動画や音声といった情報を交換するだけでなく、意見の集約やライフログの集積といったコミュニケーションツールとともに、残高照会や振込などの銀行取引やクレジットカードによる決済など電子商取引にもコンピュータが利用されている。コンピュータ同士の通信は、インターネット回線を使うことで実現される。インターネット回線は、有線と無線とを問わず、やり取りされるパケットを第三者に盗み見される危険があるが、伝送データを暗号化することによって個人情報や機密情報を取り扱うことが可能である。

コンピュータは、デスクトップ型のパソコンに限らず、携帯電話やスマートフォン、携帯情報端末（PDA）などがインターネットの端末として普及してい

るほか、家電製品にもマイクロチップが搭載され、エンベデッドシステム¹⁾として身近な存在になっている。このように、情報技術 (IT) は社会生活に浸透し、その存在を意識する必要がないほどにユビキタス化が進んでいる。

現在のコンピュータは、記憶部にある命令とデータを取り出して制御・演算部で情報を処理するという形態のノイマン型アーキテクチャーに基づき、制御、演算、記憶、入力および出力に関する装置によって構成されている。そのため、コンピュータの処理能力は、中央演算処理装置 (CPU) の性能によって大きく左右される。CPU の性能は、コアの集積回路 (IC) を構成するトランジスタの組み合わせによって決まるため、その集積密度が大きいことは、より複雑な回路設計に対応できることを意味し、コンピュータの処理能力の向上につながる。ムーアの法則²⁾によると、IC におけるトランジスタの集積密度は 18~24 か月で 2 倍に向上する。もともと、ムーアが 1970 年代までのロードマップを示したときに経験的に得られた法則を提唱したに過ぎないが、驚くことに現在に至るまでムーアの法則が成り立っている。

もちろん、半導体産業の技術革新 (イノベーション) は、不断の努力によって支えられている。ナノテクノロジーの進歩を受けて、それまでに実現できなかった微細加工技術が生まれ、最新の CPU 製品は 45 ナノメートルのプロセスルールによって製造されている。

今後、電子の流れる導線が細くなることで、IC の集積密度を上げることができ一方、電子の通り道が原子スケールに近づくことで発生するトンネル効果などの量子的効果が問題となる。電子の制御と電氣的雑音 (ノイズ) の除去を両立しなければならず、単純にクロック周波数を上げることで CPU の性能を向上させることは難しい段階に直面している。そこで、米インテル社や米 AMD³⁾ 社などの CPU メーカーは、クロック周波数を上げるのではなく、主に

1) embedded systems. 組み込みシステム

2) Moore's law. 米インテル社の創業者であるゴードン・ムーアが 1965 年に提唱したことで知られる。

3) Advanced Micro Devices. 米インテル社の互換 CPU を主力商品として市場に投入している。

プロセスルールの縮小と複数のコアを搭載するマルチコア技術によって CPU の性能向上を図っている。

この局面を打開する技術として、ファインマン型の量子コンピュータが期待されている。電圧や電流の有無によって情報を表現するビットの代わりに、量子状態を使って情報を表現する量子ビットが実用化されると、量子状態の重ね合わせの原理に基づく情報の表現が可能になる。量子コンピュータは、ノイマン型アーキテクチャーとは異なる原理で動作することになるが、1985年からドイッチュ⁴⁾やショア⁵⁾などの研究者によって、素因数分解などの具体的な量子アルゴリズムが提案されている。ショアの素因数分解に関する量子アルゴリズムを適用すると、インターネットでクレジットカードの番号や個人情報などを暗号化して伝送する RSA 暗号を容易に破ることが可能になる。そもそも、RSA 暗号は、ノイマン型コンピュータの構造では、現実的な時間内に大きな整数を素因数に分解することは不可能という事実に基づき設計されている。そのため、量子コンピュータが実現すると、現在のインターネットを利用した電子商取引は大きく見直しを迫られることにつながる。

現在は、まだ研究段階で、ハードウェアの実装では 15 の素因数分解 (3×5) が成功したに過ぎない。ファインマン型量子コンピュータの実用化は数十年先だと見られている。しかし、これまで理論主導で展開されてきていた量子力学が、最近では微細加工技術による具体的な実験まで実現可能になってきた。理論的に予測されていた現象が実験によって検証できるようになったのである。

非相対論的な量子力学における粒子の挙動は、シュレーディンガー方程式を解くことによって得られる波動関数によって記述されている。古典物理学では、物理系の状態を記述するために実数を使うことが通例である。電磁気学や流体力学などで複素数を使う場面があったとしても、便宜上の導入によって議

4) David Deutsch. 英オックスフォード大学の物理学者 [3]

5) Peter Shor. 米マサチューセッツ工科大学 (MIT) の数学者 [13]

論の見通しを良くするという目的に過ぎず、基本的には実数体 \mathbb{R} における閉じた世界観で十分だった。

一方、波動関数は本質的に複素数を含み、素粒子、原子および物性分野の物理学だけでなく、数学の分野でも興味深い研究対象となっている。そもそも、波動関数そのものを物理的に観測または測定することはできない。ある物理量を観測または測定しようとして、波動関数で記述された量子系の状態を操作することしかできない。そのようにして得られた物理量は、観測または測定の一つの答えにはなるが、あくまでも確率的なものに過ぎない。ひょっとすると、次の観測または測定によって得られる物理量は、先のものとは異なっているかもしれない。このような奇妙な性質は、量子力学が対象とする物理系のスケールが小さく、観測または測定によって状態に影響を与えることが理由である。

これまでの研究の成果として、波動関数を記述するシュレーディンガー方程式について、主に時間発展の観点から数理構造が明らかにされてきた。最もシンプルなシュレーディンガー方程式は、量子間の相互作用を考慮しない自由場における量子系である。その中に存在する量子系は、相互作用のない中で束縛されることなく、空間全体に広がっていくと考えられる。この場合、波動関数は空間次元による一定の減衰度でゼロに収束することが知られている。

電磁力などの相互作用がある場合は、自由場のシュレーディンガー方程式にポテンシャル項を付け加えて考えればよい。ポテンシャル項の形状によって、波動関数は多彩な性質を示すことになる。物理的に意味のある波動関数を考えるには、ポテンシャル項に対し、波動関数の存在と一意性が数学的に証明されなければならない。

また、ある種の波動関数には、これまでの枠組みを超えた関数空間に属するものがあり、より一般化されたシュレーディンガー方程式の初期値問題における波動関数の一意性の問題が解決されている。[1]

他方、質量の分布による重力などの相互作用の代わりに空間構造に着目してシュレーディンガー方程式を論じることもできる。この場合は、通常のユーク

リッド空間を一般化したリーマン空間における多様体を使って微分方程式を表現する。

上記ポテンシャル項を空間構造に置き換え、場の表現によって同値のシュレーディンガー方程式を導くことが本稿の主要なテーマである。

2 量子力学の基礎

17世紀に発見されたニュートン⁶⁾の運動方程式は、惑星や衛星など太陽系の天体の運動を記述するだけでなく、地上における物体の運動に関する法則を定式化した。また、電磁気学におけるマックスウェル⁷⁾の方程式は、電気的および磁氣的現象について、電場と磁場の作用という観点から統合的な説明を与えただけでなく、光の正体は電磁波であることを明らかにした。さらに、熱的現象を解析する熱力学や分子の統計的性質を解析する統計力学、固体の運動を記述する剛体力学、気体や液体の運動を記述する流体力学など、古典力学は日常的なスケールにおける自然現象を説明することに成功した。

現代物理学は、古典物理学だけでは説明できない自然現象を視野に入れ、さらに相対性理論と量子力学によって再構築されている。相対性理論は、アインシュタイン⁸⁾によって提唱された特殊相対性理論と一般相対性理論に分けて考えることができる。1905年に発表された特殊相対性理論は、ガリレイの相対性原理と光速不変の原理の二本柱に基づき、重力の作用がない慣性系において光の速度に近い高エネルギー状態の物体の運動を記述する。さらに、1917年に発表された一般相対性理論は、特殊相対性理論の自然な拡張として、質量の存在によって発生する重力場を表現する。相対性理論は、真空中の光速 $c \rightarrow \infty$ の極限において、すなわち、光が瞬時に届くと仮定した場合、ニュートンの力

6) Sir Isaac Newton. 英国の物理学者。運動の法則など物理学の分野だけでなく、微分積分学など数学の分野にも貢献した。

7) James Clerk Maxwell. 英国の物理学者。

8) Albert Einstein. ドイツの物理学者。相対性理論の発見のほか、光量子仮説やブラウン運動に関する業績がある。

学に収束する。

一方、量子力学は、マイクロなスケールにおける粒子の状態や運動を記述する。対象となるのは、電子や陽子、中性子など原子を構成する物体だけでなく、ミュー粒子やニュートリノなどのレプトン、クォークといった基本粒子⁹⁾などである。このようなマイクロな粒子には、マクロな意味での粒子という性質があるばかりか、波動としての性質を合わせ持っている。光の干渉という波動的な性質を証明したヤング¹⁰⁾の実験と同様に、1924年にドゥ・ブロイ¹¹⁾が理論的に粒子の干渉を予言した通り、光の代わりに電子を使っても同様の干渉現象を示すことが知られている。一方、1900年以降、プランク¹²⁾が解決した黒体輻射の問題やアインシュタインが解決した光電効果やコンプトン散乱など、従来の古典物理学による粒子や波動の性質だけでは説明できない現象が存在していた。これらの現象は、マイクロなスケールにおける物体の状態や運動を記述するには粒子と波動という二項対立的な描像を取り上げるのではなく、双方の性質を兼ね備えた量子という概念に止揚すべきことを示唆している。この点は、ニュートン以降、光は粒子か波動かといった問題に対して本質的な解答を示すだけでなく、新しい物理学としてマイクロなスケールでの素粒子の奇妙な振る舞いを記述する量子力学の地位を確固たるものとした。

このように、相対性理論と量子力学は、対象とする物理系が大きく異なるために互いに理論として独立しているように見える。実際、天体の運動など高エネルギーの物理系に対しては相対性理論が有効である一方、原子レベルの物理系に対しては量子力学が有効であり、そのようなマイクロなスケールには相対性理論を適用することは必要ではないと考えられていた時期もあった。しかし、

9) 素粒子物理学の標準模型によると、6種類のクォーク、3種類のレプトン、3種類のニュートリノなどのフェルミ粒子のほか、相互作用を媒介するボース粒子が仮定されている。

10) Thomas Young. 英国の物理学者。光の波動説を主張した。

11) Louis de-Broglie. フランスの物理学者。粒子の波動性を示す仮説を提唱した。

12) Max Karl Ernst Ludwig Planck. ドイツの物理学者。

素粒子物理学の分野では粒子加速器を使って電子や陽子などの粒子を加速し、高エネルギー状態にすることができる。限りなく光速で運動する高エネルギー粒子は、その質量が増大したり、時間の遅れが発生した結果として寿命（崩壊時間）が延びるという相対性理論で理解される現象が起こっている。

そこで、相対性理論と量子力学の統一を目指して、1926年にディラック¹³⁾が相対論的量子力学を提案した。シュレーディンガー方程式は、相対論的効果を考慮すると、ディラック方程式に拡張される。

本章では、量子力学の数理構造を記述するために本質的な役割を果たす複素数を導入し、シュレーディンガー方程式に関する数学的理解に不可欠なヒルベルト空間やフーリエ解析について触れる。また、波動関数の物理学的な解釈を述べた上で、ある初期値に対し解析的な取り扱いが可能な波動関数の例を計算し、初期値問題の実際に迫る。さらに、シュレーディンガー方程式はニュートンの運動方程式と矛盾するものではなく、ある極限においてニュートン力学に帰着されることを示し、シュレーディンガー方程式がニュートンの運動方程式の自然な拡張の一つであることを述べる。

2.1 複素数

実数体 \mathbb{R} は、実数の集合に二項演算として加法および乗法を導入した代数体である。加法のゼロ元に対する逆演算として減法、乗法の単位元に対する逆演算として除算が存在する。実数体 \mathbb{R} は、コーシー列の概念を使って有理数体 \mathbb{Q} の完備化によって構成することができる。実際、有理数のコーシー列の同値類の全体として実数体を定義¹⁴⁾すればよい。したがって、実数体 \mathbb{R} には完備性があり、有理数体 \mathbb{Q} には完備性がない結果として、ルベーグ測度はゼロに等しい。幾何学的に、実数体 \mathbb{R} は数直線として理解されている。

z に関する2次方程式

13) Paul Adrien Maurice Dirac. 英国の物理学者。相対論的量子力学など斬新な理論を発表した。

14) $\sqrt{2}$ に収束する有理数の列を構成することができる点に注意する。

$$z^2 + 1 = 0 \quad (1)$$

を満たす解は実数体 \mathbb{R} に求めることができない。しかし、形式不易の原理によって、2次方程式 (1) の解を i とし、虚数を導入する。 i は2乗すると -1 になる“数”であることから、 i を象徴的に $\sqrt{-1}$ の記号で書くこともある。実数体 \mathbb{R} に i を付加すると、代数学における自然な拡張として拡大代数体を定義することができる。このようにして構成された代数体を複素数体といい、記号 \mathbb{C} で表す。

複素数体 \mathbb{C} の要素 z は、2つの実数 $(x, y) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}$ を使って、

$$z = x + iy \quad (2)$$

と表現することができる。 z を複素数と呼び、 x および y をそれぞれ実部および虚部という。

代数学の基本定理によると、実数を係数とする z に関する n 次方程式

$$a_0 + a_1 z + \cdots + a_n z^n = 0, \quad a_j \in \mathbb{R} \quad (j = 0, 1, \dots, n-1), \quad a_n \in \mathbb{R} - \{0\} \quad (3)$$

は、解の空間を複素数体 \mathbb{C} で考えた場合、ちょうど n 個の解が存在する。したがって、2次方程式 (1) は2つの複素数を解に持つことが分かる。すると i の選び方は2通りあることになるが、一方を $\sqrt{-1}$ とすると、他方は $-\sqrt{-1}$ と表すことができる。複素数体の構成上、虚数 i の取り方には任意性が残るため、本質的に $\sqrt{-1}$ と $-\sqrt{-1}$ を区別することはできない。このような関係にある2つの複素数のことを複素共役という。特に、実数を係数とする z に関する2次方程式における2つの解は複素共役の関係にある。さらに、複素数 $z = x + iy$ の共役複素数 \bar{z} は

$$\bar{z} = x - iy \quad (4)$$

によって与えられる。 x と y の値を座標値 (x, y) とする複素平面上で見る

と、複素共役の関係にある2つの複素数は x 軸に関して対称な位置関係となる。

複素数 z の絶対値 $|z|$ は、複素平面における原点 O から複素数 z までの距離によって与えられる。したがって、実部と虚部を使って表すと、

$$|z| = \sqrt{x^2 + y^2} \quad (5)$$

であり、複素共役と絶対値の間には

$$|z|^2 = \bar{z}z \quad (6)$$

の関係がある。

また、複素数 z を極形式で表現するとき、2つの実数 $(r, \theta) \in \mathbb{R}_+ \times [0, 2\pi)$ を使って、

$$z = re^{i\theta} \quad (7)$$

と書くことができる。ここで、 r は複素数 z の絶対値を表し、 $\mathbb{R}_+ = [0, \infty)$ である。また、 θ は偏角または位相といい、複素平面における複素数 z の方角を示す。極形式を使って複素数 z を表現するとき、 z の共役複素数 \bar{z} は

$$\bar{z} = re^{-i\theta} \quad (8)$$

となる。

なお、複素数の2つの表現形式は、オイラーの公式

$$e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta \quad (9)$$

によって結び付けられている。ここで、 θ は複素平面における原点まわりの回転を表現する角度という意味がある。一次変換として平面上の回転を表す 2×2 行列

$$R(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (10)$$

は,

$$R(\theta) = \cos \theta \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \sin \theta \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (11)$$

と分解することができる。このとき,

$$\begin{aligned} R(-\theta) &= \cos \theta \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - \sin \theta \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \cos \theta \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \sin \theta \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (12)$$

が成り立つ。 $R(-\theta)$ は $R(\theta)$ の逆方向に、同じ θ の角度だけ回転することを示している。また、オイラーの公式 (9) と見比べると、行列

$$I = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (13)$$

は、虚数単位 i に相当することが分かる。ちなみに、 I と $-I$ は複素共役の関係に相当する。実際、この行列は 2 乗すると単位行列の -1 倍になるという性質がある。

2.2 ヒルベルト空間

ベクトル空間 H について考察する。ベクトル空間 H の要素 u および v に対し、次のような写像として内積 (u, v) を定義する：

$$(u, v) \in H \times H \rightarrow \mathbb{C} \quad (14)$$

ただし、内積の公理 (正値性, 対称性および線形性) を満たすように写像を定

義するものとする。ここで、 u のノルムを

$$\|u\| = \sqrt{(u, u)} \quad (15)$$

によって与えたとき、 H はノルム空間としての性質を備える。 H がノルムに関して完備な性質を持つとき、ベクトル空間 H をヒルベルト空間¹⁵⁾ という。

ユークリッド空間 \mathbb{R}^n を定義域とする複素数値関数 $f(x)$

$$f : x \in \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C} \quad (16)$$

を考える。 f がルベーグ可測¹⁶⁾ であるとき、ルベーグ積分

$$\int_{\mathbb{R}^n} \overline{f(x)} f(x) dx \quad (17)$$

が有限確定値として定まる関数の集合を \mathcal{H} で表す。ここで \mathcal{H} の要素 f および g に対し、内積を

$$(f, g) = \int_{\mathbb{R}^n} \overline{f(x)} g(x) dx \quad (18)$$

によって定義すると、 \mathcal{H} はヒルベルト空間である。

2.3 波動関数

量子系は、観測前に物理量を決定することはできないという性質がある。このような量子系の状態は、物理量の確率分布が与えられているに過ぎない。波動関数¹⁷⁾ とは、量子系の状態を複素数によって記述する数学的な表現である。量子系の状態は、時刻の推移とともに空間的な広がりを変化するため、波動関数は時刻と位置座標の関数として表すことができる。

n 次元のユークリッド空間 \mathbb{R}^n において、波動関数を定義する。 $n=3$ のと

15) Hilbert space. 通常は無限次元のベクトル空間である。

16) Lebesgue measurable. リーマン積分の自然な拡張としてルベーグ積分が定義される。

17) wavefunction. 量子系の状態を記述する。

きは, $(x, y, z) \in \mathbb{R}^3$ によって与えられる通常のユークリッド空間となる。時刻を $t \in \mathbb{R}$ とすると, 写像

$$\psi : t \in \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{H} \quad (19)$$

によって, 時刻 t ごとに変化する量子系の状態を表現する。ヒルベルト空間 \mathcal{H} の要素は $x \in \mathbb{R}^n$ の関数として表現できることから,

$$\psi : (t, x) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C} \quad (20)$$

と読み替えてもよい。その場合, 量子系の状態を複素数し, 時刻 $t \in \mathbb{R}$ および空間座標 $x \in \mathbb{R}^n$ に対し, ひとつの複素数を対応させる。その複素数を $\psi(t, x)$ と書く。

波動関数は, 時刻 $t \in \mathbb{R}$ および空間座標 $x \in \mathbb{R}^n$ における量子確率密度をひとつの複素数によって与える。複素数 $a \in \mathbb{C} - \{0\}$ に対し, $\psi(t, x)$ と $a\psi(t, x)$ は, 同じ量子系の状態を記述する。したがって, 一般に正規化された波動関数が用いられる:

$$\frac{\psi(t, x)}{|\psi(t, x)|} \quad (21)$$

ただし,

$$|\psi(t, x)| = \sqrt{\overline{\psi(t, x)}\psi(t, x)} \quad (22)$$

である。

波動関数 $\psi(t, x)$ が正規化されていると, 領域 $\Omega \in \mathbb{R}^n$ に対し, 積分

$$\int_{\Omega} \overline{\psi(t, x)}\psi(t, x) dx \quad (23)$$

は, 波動関数 $\psi(t, x)$ によって記述されている量子系において, 領域 Ω において観測すると, その中に粒子として存在する確率を示している。なお, 他の量子系に変わることはあっても, 保存則から粒子が消滅することはないので,

$$\int_{\mathbb{R}^n} \overline{\psi(t, x)} \psi(t, x) dx = 1 \quad (24)$$

である。量子系の状態は複素数で記述されているが、物理量の観測は実数で求めることができる。これら一連の議論の中で、波動関数 $\psi(t, x)$ と、その共役な波動関数 $\overline{\psi(t, x)}$ は異なる量子系を表現しているが、観測の結果得られる物理量は同じになる。

2.4 フーリエ変換

ヒルベルト空間 \mathcal{H} の要素 $\psi(x)$ に対し、フーリエ変換 $\hat{\psi}(\xi)$ を定義する：

$$\hat{\psi}(\xi) = (2\pi)^{-\frac{n}{2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-ix \cdot \xi} \psi(x) dx \quad (25)$$

ただし、 $\xi \in \mathbb{R}^n$ である。時間変数を含む波動関数 $\psi(t, x)$ の場合には、フーリエ変換を求めるときに t をパラメータと考えて計算すればよい。

位置座標 x と運動量 ξ は正準共役の関係にあることから、 $\hat{\psi}(\xi)$ は、位置座標 x ではなく運動量 ξ によって記述された波動関数と考えることができる。 $\hat{\psi}$ を $\mathcal{F}\psi$ と書くことがある。

また、プランシュレル¹⁸⁾ の公式

$$\|\psi\| = \|\hat{\psi}\| \quad (26)$$

が成り立つ。

さらに、ヒルベルト空間 \mathcal{H} の要素 $\phi(\xi)$ に対し、逆フーリエ変換 $\check{\phi}(x)$ を定義する：

$$\check{\phi}(x) = (2\pi)^{-\frac{n}{2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{ix \cdot \xi} \phi(\xi) d\xi \quad (27)$$

$\check{\phi}$ を $\mathcal{F}^{-1}\phi$ と書くことがある。

18) Michel Plancherel. 調和解析の分野で貢献したスイスの数学者 [9]

なお、係数 $(2\pi)^{-\frac{n}{2}}$ はフーリエの反転公式

$$\mathcal{F}^{-1}\mathcal{F}\psi = \psi, \quad \mathcal{F}\mathcal{F}^{-1}\phi = \phi \quad (28)$$

の表現を簡単にするために付加したものである。

2.5 シュレーディンガー方程式

波動関数 ψ はシュレーディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(t, x) = H\psi(t, x) \quad (29)$$

を満たす。ただし、 \hbar はプランク定数、 H はハミルトン作用素¹⁹⁾ であって、質量 m の量子がポテンシャル $V(t, x)$ の中にあるとき

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(t, x) \quad (30)$$

となる。ここで、ラプラス作用素 Δ は

$$\Delta = \sum_{j=1}^n \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} \quad (31)$$

によって定義される²⁰⁾ また、 $V(t, x)$ は時間と空間に依存するポテンシャル項で、量子系に作用する電磁力などの相互作用を表す。

以下、簡単のため、シュレーディンガー方程式として次のものを考察の対象とする：

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi(t, x) = \left(-\frac{1}{2}\Delta + V(t, x)\right)\psi(t, x) \quad (32)$$

シュレーディンガー方程式 (32) は、時間 t に関する発展型の偏微分方程式と見ることができるため、時刻 $t=0$ における波動関数 $\psi(t, x)$ の初期値が決まると、任意の時刻 t における波動関数 $\psi(t, x)$ の挙動を求めることができる。

19) Hamiltonian. エネルギーを量子化して得られる作用素。

20) Laplacian. 二階微分作用素としてラプラス方程式などで見られる。

実際、 $V(t, x)$ に適切な条件を付加したとき、初期値としてヒルベルト空間 \mathcal{H} の要素 ψ_0 を与えると、

$$\psi(0, x) = \psi_0(x) \quad (33)$$

を初期条件として、シュレーディンガー方程式(32)の解は一意的に存在する。ここで、任意の $t \in \mathbb{R}$ に対して、エネルギー評価式

$$\|\psi(t, \bullet)\| \leq C\|\psi_0\| \quad (34)$$

が成り立つことに注意しておく。ただし、 $C > 0$ である。さらに、 $V=0$ のときは、 $C=1$ で不等号は等号に置き換わる。

核子など安定な物質から構成されている量子系の静的な状態は、波動関数

$$\psi(t, x) = e^{-iEt}\psi_0(x) \quad (35)$$

によって表現することができる。 E はエネルギーを表す物理量で、シュレーディンガー方程式から得られるハミルトン作用素の固有値問題

$$H\psi(t, x) = E\psi(t, x) \quad (36)$$

を解くことによって得られる。水素原子の数理構造のように電子の化学的なエネルギー準位を決定する問題では、時間に依存しないシュレーディンガー方程式として有用である。

一方、放射性原子核の崩壊のように動的な量子力学的現象を記述するには、時間に依存するシュレーディンガー方程式を解かなければならない。この場合、波動関数の果たす役割は本質的で、不安定な量子系の状態を表現する。特に、量子の崩壊や散乱といった物理学的な現象は、時間とともに、常に量子系の状態を変えている。そこで、波動関数の二乗を生存確率²¹⁾ ということがあ

21) survival probability. 波動関数の時間減衰を求める問題に現れる。

る。

シュレーディンガー方程式を数学的に解くには、フーリエ変換が本質的な役割を果たす。ヒルベルト空間の要素 ψ に対し、部分積分を適用することによって

$$\begin{aligned} \mathcal{F}\left[\frac{\partial}{\partial x_j}\psi\right](t, \xi) &= (2\pi)^{-\frac{n}{2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-ix \cdot \xi} \frac{\partial}{\partial x_j} \psi(x) dx \\ &= -(2\pi)^{-\frac{n}{2}} \int_{\mathbb{R}^n} \frac{\partial}{\partial x_j} (e^{-ix \cdot \xi}) \psi(x) dx \\ &= i\xi_j (2\pi)^{-\frac{n}{2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-ix \cdot \xi} \psi(x) dx \\ &= i\xi_j \hat{\psi}(\xi) \end{aligned} \quad (37)$$

となる。すなわち、位置座標に関する微分演算子はフーリエ変換によって運動量に置き換わることが分かる。波動関数を位置座標の変数で微分することは、運動量空間で考えると、運動量をかけるという演算に対応する。さらに、

$$-\Delta e^{ix \cdot \xi} = -\sum_{j=1}^n \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} e^{ix \cdot \xi} = \sum_{j=1}^n \xi_j^2 e^{ix \cdot \xi} = |\xi|^2 e^{ix \cdot \xi} \quad (38)$$

だから、関数 $e^{ix \cdot \xi}$ は、作用素 $-\Delta$ の固有値 $|\xi|^2$ に対応する固有関数と見ることが出来る。よって、フーリエの反転公式

$$\psi(t, x) = (2\pi)^{-\frac{n}{2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{ix \cdot \xi} \hat{\psi}(t, \xi) d\xi \quad (39)$$

は作用素 $-\Delta$ の固有関数 $e^{ix \cdot \xi}$ による展開を表している [17] と考えることができる。そこで、 $V=0$ の自由場を記述するシュレーディンガー方程式

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, x) = -\frac{1}{2} \Delta \psi(t, x) \quad (40)$$

の両辺についてフーリエ変換すると

$$i \frac{\partial}{\partial t} \hat{\psi}(t, \xi) = \frac{1}{2} |\xi|^2 \hat{\psi}(t, \xi) \quad (41)$$

を得る。この方程式は、 ξ をパラメータと考えて t に関する常微分方程式と見

ると、初期値問題に対して

$$\hat{\psi}(t, \xi) = e^{-i\frac{|\xi|^2}{2}t} \hat{\psi}_0(\xi) \quad (42)$$

と解くことができる。 $\hat{\psi}$ は運動量空間 \mathbb{R}^n における波動関数の表示であるから、フーリエの反転公式を使うことによって位置座標の空間における波動関数の表示

$$\psi(t, x) = (2\pi)^{-\frac{n}{2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{ix \cdot \xi} e^{-i\frac{|\xi|^2}{2}t} \hat{\psi}_0(\xi) d\xi \quad (43)$$

を得る。また、関係式(42)とプランシュレルの公式から、自由場における波動関数のエネルギー評価

$$\|\psi(t, \bullet)\| = \|\hat{\psi}(t, \bullet)\| = \|\hat{\psi}_0\| = \|\psi_0\| \quad (44)$$

を導くことができる。

例えば、自由場における初期値として、ガウス分布

$$\psi_0(x) = e^{-\frac{1}{2}|x|^2} \quad (45)$$

を取ると、フーリエ変換の定義から

$$\hat{\psi}_0(\xi) = e^{-\frac{1}{2}|\xi|^2} \quad (46)$$

と計算できるので、シュレーディンガー方程式(40)を満たす波動関数は

$$\psi(t, x) = \{2\pi(1+it)\}^{-\frac{n}{2}} e^{-\frac{|x|^2}{2(1+it)}} \quad (47)$$

と解ける。ポテンシャルのない自由場では、時間の経過とともに、確率分布は空間に広がっていくと考えられる。そこで、確率分布の減衰を評価すると、

$$\overline{\psi(t, x)}\psi(t, x) = \{4\pi^2(1+t^2)\}^{-\frac{n}{2}} e^{-\frac{|x|^2}{1+t^2}} \leq (2\pi)^{-n} t^{-n} \quad (48)$$

だから、波動関数の減衰における各点評価として、任意の $t \in \mathbb{R}$ および $x \in \mathbb{R}^n$

に対し

$$|\psi(t, x)| \leq (2\pi)^{-n/2} t^{-n/2} \quad (49)$$

を得る。これは、自由場における時間減衰に関する評価のひとつである。波動関数または生存確率の時間減衰に関する結果として、[7] や [10] などが知られている。いずれの論文も初期値やポテンシャル項に対して条件を課しているが、初期値のフーリエ変換における原点近傍の運動量分布が減衰度に本質的な影響を与えていることが示唆されている。その様子の具体例を計算した研究として、最近では [2] がある。

3 場 の 表 現

シュレーディンガー方程式

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, x) = -\frac{1}{2} \Delta \psi(t, x) + V(t, x) \psi(t, x) \quad (50)$$

は、ポテンシャル $V(t, x)$ の中に存在する量子の状態を記述する。そもそも、ハミルトン作用素に与えるのはエネルギーの表現であるため、空間成分の微分演算子で運動量を表現する量子力学ではラプラス演算子が現れる。また、ポテンシャル項は、重力や電磁力などの相互作用を基本とし、クーロンポテンシャルや井戸型ポテンシャルなど工学における実用的なエネルギーを表現することができる。量子系は、ミクロな空間スケールで考察することが多く、その場合、重力の存在は一定の精度の範囲内で無視できるため、ポテンシャルの効果は電磁相互作用に基づくものに限られる。

一方、アインシュタインの相対性理論では、質量の存在が空間に歪みを生み出し、その結果、光や粒子が運動するときに空間の歪みの影響を受けるという場の理論に立脚している。もっとも、アインシュタインの重力場の方程式は、空間の曲率などを使って“曲がった空間”の幾何学的な表現を重力と結びつけたものである。ユークリッド空間を一般化することで得られるリーマン幾何学

では、多様体で局所的に定義できる座標系を使って、微分や積分などの解析手法を一般化することに成功した。

ユークリッド空間 \mathbb{R}^n の拡張として、新しい多様体の座標系を定義するために計量 $g_{jk}(j, k = 1, \dots, n)$ を導入する。計量 g_{jk} は、時間と位置座標の実数値関数として $g_{jk} = g_{jk}(t, x)$ と考えると、空間の様子が時刻とともに変化する計量を表現することができる。

場の計量を使って微分作用素を表現すると、シュレーディンガー方程式は

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, x) = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n \frac{\partial}{\partial x_j} \left(g_{jk}(t, x) \frac{\partial}{\partial x_k} \psi(t, x) \right) \quad (51)$$

と書ける。この形式の偏微分方程式をシュレーディンガー型方程式と呼び、もとの偏微分方程式とは区別して考えることがある。計量 g_{jk} の値によって任意の多様体構造を表現することができるが、シュレーディンガー型方程式の初期値問題における解の存在と一意性、安定性などの性質を加味すると、いくつかの制約を与えることが必要になる。

まず、関数 g_{jk} は実数値を取る。すなわち、写像で

$$g_{jk} : (t, x) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R} \quad (52)$$

と書ける。次に、対称性を仮定する。すなわち、

$$g_{kj} = g_{jk} \quad (53)$$

である。これら2つの条件を合わせて実対称性という。

さらに、楕円性を仮定する。すなわち、正定数 $C > 0$ が存在して、任意の $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_n) \in \mathbb{R}^n$ に対し、

$$\sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n g_{jk}(t, x) \xi_j \xi_k \geq C |\xi|^2 \quad (54)$$

が成立する。

以上の仮定に加え，問題によっては正則性や滑らかさ（微分可能性）を課す場合 [1] もある。

3.1 波動関数の存在と一意性

シュレーディンガー型方程式

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, x) = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n \frac{\partial}{\partial x_j} \left(g_{jk}(t, x) \frac{\partial}{\partial x_k} \psi(t, x) \right) \quad (55)$$

に対し，波動関数の初期条件 $\psi(0, x) = \psi_0(x)$ を満たす解 $\psi(t, x)$ について考察する。まず，解の存在と一意性を示すため，エネルギーを評価する。複素数 $z \in \mathbb{C}$ に対し，その実部および虚部をそれぞれ $\Re z$ および $\Im z$ と表すことにすると，

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \|\psi(t, \bullet)\|^2 &= \frac{d}{dt} (\psi(t, \bullet), \psi(t, \bullet)) \\ &= \left(\frac{d}{dt} \psi(t, \bullet), \psi(t, \bullet) \right) + \left(\psi(t, \bullet), \frac{d}{dt} \psi(t, \bullet) \right) \\ &= \left(\frac{d}{dt} \psi(t, \bullet), \psi(t, \bullet) \right) + \left(\frac{d}{dt} \psi(t, \bullet), \psi(t, \bullet) \right) \\ &= 2\Re \left(\frac{d}{dt} \psi(t, \bullet), \psi(t, \bullet) \right) \\ &= 2\Re \left(-\frac{1}{2i} \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n \frac{\partial}{\partial x_j} \left(g_{jk}(t, x) \frac{\partial}{\partial x_k} \psi(t, \bullet) \right), \psi(t, \bullet) \right) \\ &= -\Im \left(\sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n \frac{\partial}{\partial x_j} \left(g_{jk}(t, x) \frac{\partial}{\partial x_k} \psi(t, \bullet) \right), \psi(t, \bullet) \right) \\ &= \Im \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n \left(g_{jk}(t, x) \frac{\partial}{\partial x_k} \psi(t, \bullet), \frac{\partial}{\partial x_j} \psi(t, \bullet) \right) \end{aligned} \quad (56)$$

と式を変形し， g_{jk} の実数値性と対称性から

$$\begin{aligned}
& \overline{\sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n \left(g_{jk}(t, x) \frac{\partial}{\partial x_k} \psi(t, \bullet), \frac{\partial}{\partial x_j} \psi(t, \bullet) \right)} \\
&= \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n \left(\frac{\partial}{\partial x_j} \psi(t, \bullet), g_{jk}(t, x) \frac{\partial}{\partial x_k} \psi(t, \bullet) \right) \\
&= \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n \left(g_{jk}(t, x) \frac{\partial}{\partial x_j} \psi(t, \bullet), \frac{\partial}{\partial x_k} \psi(t, \bullet) \right) \quad (57) \\
&= \sum_{k=1}^n \sum_{j=1}^n \left(g_{kj}(t, x) \frac{\partial}{\partial x_k} \psi(t, \bullet), \frac{\partial}{\partial x_j} \psi(t, \bullet) \right) \\
&= \sum_{k=1}^n \sum_{j=1}^n \left(g_{jk}(t, x) \frac{\partial}{\partial x_k} \psi(t, \bullet), \frac{\partial}{\partial x_j} \psi(t, \bullet) \right)
\end{aligned}$$

が分かる。恒等式 $z - \bar{z} = 2\Im z$ を踏まえると、複素数体における加算は可換であるから、以上の計算結果を合わせて

$$\frac{d}{dt} \|\psi(t, \bullet)\|^2 = 0 \quad (58)$$

すなわち、

$$\|\psi(t, \bullet)\| = \|\psi_0\| \quad (59)$$

を得る。このエネルギー評価式から、初期値 ψ_0 をヒルベルト空間 \mathcal{H} から取ったとき、任意の時間における波動関数 $\psi(t, \bullet)$ は \mathcal{H} の要素として一意的に存在することが分かる。ゆえに、シュレーディンガー型方程式の初期値問題は適切である。

3.2 方程式の行列表現

シュレーディンガー型方程式の表現に行列を使うため、いくつかの準備をする。まず、微分作用素のベクトル表現としてナブラ演算子

$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial}{\partial x_n} \right) \quad (60)$$

を定義する。ナブラ演算子を使うと、ラプラス作用素は $\Delta = \nabla \cdot \nabla$ と書くことができる。

計量 g_{jk} の行列表現として、

$$A(t, x) = \begin{pmatrix} g_{11}(t, x) & g_{12}(t, x) & \cdots & g_{1n}(t, x) \\ g_{21}(t, x) & & \ddots & \vdots \\ \vdots & & & \vdots \\ g_{n1}(t, x) & \cdots & \cdots & g_{nn}(t, x) \end{pmatrix} \quad (61)$$

を使うことにする。すると、シュレーディンガー型方程式は

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, x) = -\frac{1}{2} \nabla A(t, x) \nabla^T \psi(t, x) \quad (62)$$

と行列で表現することができる。ただし、 ∇^T はナブラ演算子 ∇ の転置ベクトルである。 $A(t, x) = E$ (単位行列) のとき、ナブラ演算子はラプラス作用素に一致することから、単位行列 E はポテンシャル項のない自由場の空間構造を表現する行列であることが理解される。

3.3 計量によるポテンシャルの表現

シュレーディンガー型方程式とポテンシャル項のあるシュレーディンガー方程式が同値であるためには、

$$-\frac{1}{2} \nabla A(t, x) \nabla^T \psi(t, x) = -\frac{1}{2} \Delta \psi(t, x) + V(t, x) \psi(t, x) \quad (63)$$

が成り立たなければならない。ここで、 $\Delta = \nabla E \nabla^T$ であることに注意すると、

$$V(t, x) = \frac{1}{2} \nabla (E - A(t, x)) \nabla^T \quad (64)$$

となる。左辺のポテンシャル項 $V(t, x)$ を掛け算作用素²²⁾ と見ると、 V は計量を含む右辺の作用素によって表現されていることが理解できる。これは、与え

22) multiplier. ヒルベルト空間の要素に“関数”を掛けるという演算である。

られた空間構造をポテンシャル項に落とし込むことが可能であることを示し、空間に内在する相互作用をポテンシャルとして表現できることが分かる。

もちろん、 $A(t, x) = E$ のときは $V(t, x) = 0$ となるから、相互作用のない自由場としてのユークリッド空間は、ポテンシャル項がないものとして記述できる。

3.4 ポテンシャル項による計量行列の表現

前節の議論とは逆に、ポテンシャル項を使って計量行列を表現したい。計量行列 A の要素は $n \times n$ 個あるから、ポテンシャル項による計量行列の表現方法は唯一ではない。任意の個数だけ可能な解が存在するが、そのうち、シュレーディンガー型方程式の2階微分係数が自然な形で与えられるようなものを求めたい。

$n = 1$ のとき、シュレーディンガー型方程式とポテンシャル項のあるシュレーディンガー方程式が同値であるための必要かつ十分な条件は

$$-\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left(a(t, x) \frac{\partial}{\partial x} \psi(t, x) \right) = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(t, x) + V(t, x) \psi(t, x) \quad (65)$$

である。

ある点 $x_0 \in \mathbb{R}$ を取って x について積分すると、

$$\begin{aligned} & a(t, x) \frac{\partial}{\partial x} \psi(t, x) - a(t, x_0) \frac{\partial}{\partial x} \psi(t, x_0) \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \psi(t, x) - \frac{\partial}{\partial x} \psi(t, x_0) - 2 \int_{x_0}^x V(t, y) \psi(t, y) dy \end{aligned} \quad (66)$$

を得る。ここで、 $x_0 \rightarrow \infty$ のとき、 $u(t, x_0) \rightarrow 0$ となることに注意すると、

$$a(t, x) \frac{\partial}{\partial x} \psi(t, x) = \frac{\partial}{\partial x} \psi(t, x) - 2 \int_{\infty}^x V(t, y) \psi(t, y) dy \quad (67)$$

が成り立つ。この恒等式から直接 $a(t, x)$ を求めようとする、

$$a(t, x) = 1 - 2 \left(\frac{\partial}{\partial x} \psi(t, x) \right)^{-1} \int_{-\infty}^x V(t, y) \psi(t, y) dy \quad (68)$$

となるが、未知関数である ψ が介在するため、ポテンシャル項を使って計量行列の表現ができたとは言えない。

そこで、擬微分作用素を導入して、作用素の関係を導くことにする。いま、行列 $Q(t, x) = [q(t, x)]$ を使って

$$Q(t, x) = \frac{1}{2}(E - A(t, x)) \quad (69)$$

と置くと、方程式 (65) は

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} q(t, x) \frac{\partial}{\partial x} \psi(t, x) &= V(t, x) \psi(t, x) \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^{-1} V(t, x) \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^{-1} \frac{\partial}{\partial x} \psi(t, x) \end{aligned} \quad (70)$$

と変形することができる。ポテンシャル項による計量行列の表現をするには、条件として

$$q(t, x) = \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^{-1} V(t, x) \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^{-1} \quad (71)$$

の関係が成り立つことが求められる。ただし、積分定数 $q(t, x_0)$ は 0 と仮定した。よって、 $n = 1$ のとき、

$$A(t, x) = E - 2Q(t, x) = 1 - 2 \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^{-1} V(t, x) \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^{-1} \quad (72)$$

であることが分かった。

以上の議論において、

$$\xi^{-1}\hat{f}(\xi) \in \mathcal{H} \quad (73)$$

を満たす f に対し,

$$\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^{-1} f(x) = (2\pi)^{-\frac{n}{2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{ix \cdot \xi} \xi^{-1} \hat{f}(\xi) d\xi \quad (74)$$

を使った。これは、フーリエ変換を使って微分の逆作用素を定義したものである。ただし、上のルベグ積分が定義できるためには、フーリエ変換される前の関数がヒルベルト空間 \mathcal{H} に属していなければならない。

一般に、微分作用素は、多項式

$$p(\xi) = \sum_{j=0}^N c_j \xi^j = c_0 + c_1 \xi + \cdots + c_N \xi^N \quad (75)$$

を使って,

$$p(D)f(x) = (2\pi)^{-\frac{n}{2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{ix \cdot \xi} p(\xi) \hat{f}(\xi) d\xi, \quad n = 1 \quad (76)$$

と表現することができる。ここで、 f は N 回微分可能で、

$$D = -i \frac{\partial}{\partial x} \quad (77)$$

は微分作用素である。フーリエ変換を使った微分作用素の表現から、 N 回微分可能であることは $\xi^N \hat{f}$ がヒルベルト空間 \mathcal{H} に属することと同値であることが分かる。また、フーリエ変換を使った微分作用素の表現によれば、関数 p は ξ の関数として多項式である必要はなく、フーリエ変換が定義できる領域において任意の関数に拡張可能である。この場合における微分作用素 $p(D)$ は、通常の微分作用素のフーリエ変換を使った自然な拡張として擬微分作用素²³⁾ と呼

23) pseudo-differential operator. 数理解析の分野における一般理論の構築において強力な解析手法となっている。

ばれている。

4 ま と め

本研究では、これまでの研究成果をベースに、近年の微細加工技術の実現によって明らかになってきた量子力学的な現象について調査するとともに、未だ明らかになっていないシュレーディンガー方程式の数理構造の解明を目指した。数学的な立場からシュレーディンガー方程式の初期値問題を解析するという点に重心を置き、波動関数の時間減衰など具体的な物理現象を含む形で、理論を構築することができた。その際、一般の n 次元ユークリッド空間におけるシュレーディンガー方程式の初期値問題について、波動関数の存在と一意性に関する議論を整理し、ポテンシャル項を付加した初期値問題だけでなく、場の表現によるシュレーディンガー型方程式であってもエネルギー評価が容易に導けることを指摘した。

一般に、波動関数のエネルギーを評価するとき、ポテンシャル項の計算で困難が発生することが多い。そのため、ポテンシャル項のあるシュレーディンガー方程式を解析するには、ポテンシャル項に対し一定の制約をつけなければならない。一方、自由場を記述するシュレーディンガー方程式のラプラス演算子を変係数の二階微分項に置き換えると、計量行列の実対称性を仮定するだけで、波動関数のエネルギーを評価できる。すなわち、ポテンシャル項を計量行列に変換し、初期値問題について議論できるようになる。

本研究は、量子コンピュータをはじめとする新しい量子技術に理論的基盤を与えるなど、数理科学の分野における学術的な研究として重要な意義があると考えられる。特に、ポテンシャル項を付け加えたシュレーディンガー方程式と場の表現によるシュレーディンガー型方程式が同値となるための必要かつ十分な条件を示した点はオリジナルである。

場の表現によるシュレーディンガー方程式からポテンシャル項を導くことには成功した。しかし、ポテンシャル項を空間構造に置き換え、場の表現によ

同値のシュレーディンガー方程式を導くことは、 $n = 1$ の場合について証明しただけであり、 $n \geq 2$ の場合は未解決である。通常のユークリッド空間を一般化したリーマン空間における多様体を使って微分方程式を表現できると、方程式を変換して初期値問題などの議論を進めることができるため、今後の課題として取り組みたい。

最後に、本研究で得られたシュレーディンガー方程式の数理構造に関する成果を定理の形で述べる。

定理 1

シュレーディンガー型方程式

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, x) = -\frac{1}{2} \nabla A(t, x) \nabla^T \psi(t, x) \quad (78)$$

は、

$$V(t, x) = \frac{1}{2} \nabla (E - A(t, x)) \nabla^T \quad (79)$$

とポテンシャル項を構成することによって

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, x) = \left(-\frac{1}{2} \Delta + V(t, x) \right) \psi(t, x) \quad (80)$$

と同値になる。

定理 2

$n = 1$ のとき、シュレーディンガー方程式

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, x) = \left(-\frac{1}{2} \Delta + V(t, x) \right) \psi(t, x) \quad (81)$$

について、

$$a(t, x) = 1 - 2 \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^{-1} V(t, x) \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^{-1} \quad (82)$$

と置くと、シュレーディンガー型方程式

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, x) = -\frac{1}{2} \nabla a(t, x) \nabla^T \psi(t, x) \quad (83)$$

と同値になる。

参 考 文 献

- [1] Y. Dan ; "Uniqueness theorem in weighted Sobolev spaces of the Cauchy problem for Schrödinger type equations with variable coefficients," *Advances in Differential Equations*, Vol. 13, No. 5-6, pp. 489-507. (2008)
- [2] Y. Dan ; "Decay of scattering solutions to one-dimensional free Schrödinger equation," <http://arxiv.org/abs/1003.3381> (preprint)
- [3] D. Deutsch ; "Quantum theory, the Church-Turing Principle and the universal quantum computer," *Proc. R. Soc. Lond. A*, pp. 400-497. (1985)
- [4] H. O. Fattorini ; *The Cauchy Problem*, Cambridge University Press. (2008)
- [5] H. Grosse, A. Martin ; *Particle Physics and the Schrödinger Equation*, Cambridge University Press. (1997)
- [6] J. Hadamard ; *Lectures on Cauchy's Problem in Linear Partial Differential Equations*, Dover. (1952)
- [7] M. Miyamoto ; "The various power decays of the survival probability at long times for a free quantum particle," *J. Phys. A : Math. Gen.* 35, pp. 7159-7171. (2002)
- [8] S. Mizohata ; "On the Cauchy Problem," *Notes and Reports in Math.*, 3, Academic Press. (1985)
- [9] M. Plancherel ; "Contribution à l'étude de la représentation d'une fonction arbitraire par les intégrales définies," *Rendiconti del Circolo Matematico di Palermo* 30, pp. 289-335. (1910)
- [10] J. Rauch ; "Local decay of scattering solutions to Schrödinger's equation," *Commun. math. Phys.*, 61, pp. 149-168. (1978)
- [11] J. Rauch ; *Partial Differential Equations*, Springer-Verlag. (1991)
- [12] C. D. Sogge, *Fourier Integrals in Classical Analysis*, Cambridge University Press. (1993)
- [13] P. W. Shor, "Algorithms for quantum computation : discrete logarithms and factoring," In *Proceedings of 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science*, IEEE Press, Los Alamitos, CA. (1994)

- [14] 新井朝雄「ヒルベルト空間と量子力学」共立出版（1997）
- [15] 新井朝雄，江沢洋「量子力学の数学的構造」I, II 朝倉書店（2005）
- [16] 新井朝雄「量子現象の数理」共立出版（2006）
- [17] 磯崎洋「多体シュレーディンガー方程式」シュプリンガー（2004）
- [18] 広中平祐「現代数理科学事典」丸善（2009）