

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 27 年 6 月 24 日現在

機関番号：34315

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2012～2014

課題番号：24540196

研究課題名(和文)シュレディンガー方程式の準古典解析

研究課題名(英文)Semi-classical analysis of Schroedinger equations

研究代表者

藤家 雪朗 (FUJIE, Setsuro)

立命館大学・理工学部・教授

研究者番号：00238536

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,900,000円

研究成果の概要(和文)：第1に、古典ハミルトニアンのあるエネルギー超曲面上の捕捉された集合が、一つの双曲型不動点とそれに付随する一つないしは複数のホモクリニック軌道からなる場合、そのエネルギーの近傍でのレゾナンスの量子化条件を書き下し、レゾナンスの漸近分布が明らかにした。

第2に、シュタルクポテンシャルをもつシュレディンガー作用素およびその摂動から定義されるスペクトルシフト関数が、非捕捉的なエネルギーの近傍では完全な漸近展開を持つことが示せた。

第3に、ある連立のシュレディンガー作用素について、交差エネルギーの近傍でのレゾナンスの量子化条件を書き下し、レゾナンスの漸近分布が明らかにした。

研究成果の概要(英文)：First, I wrote down the quantization condition of resonances and clarified the asymptotic distribution of these resonances for the Schroedinger operator near an energy at which the corresponding classical mechanics has a non-degenerate hyperbolic fixed point and associated homoclinic or heteroclinic orbits as trapped set.

Second, I proved that the spectral shift function for the Stark hamiltonians has a complete asymptotic expansion at non-trapping energies.

Finally, I wrote down the quantization condition of resonances and clarified the asymptotic distribution of these resonances near a crossing level of two potentials of a system of Schroedinger operators.

研究分野：偏微分方程式論

キーワード：準古典解析 シュレディンガー作用素 超局所解析 WKB解析 レゾナンス スペクトルシフト関数

### 1. 研究開始当初の背景

シュレディンガー方程式に含まれるプランク定数 ( $\hbar$  で表す) を小さなパラメータとみなし、方程式の解や固有値、レゾナンスなどの  $\hbar$  に関する漸近挙動、分布を調べる研究を準古典解析 (Semiclassical Analysis) と呼ぶ。準古典極限において、量子力学と古典力学との関係が明らかになることが期待される (ボーアの対応原理)。また、数学的にも、特異摂動の理論、超局所解析の理論の一つとして、大変興味深い。

レゾナンス (共鳴極) は、シュレディンガー作用素のレゾルベントの極であり、一種の複素固有値である。特に実軸に近いレゾナンスは、寿命の長い半束縛状態に対応している物理的に重要であるばかりでなく、対応する古典力学系の「捕捉された軌道」の幾何学的な構造を反映すると考えられている。これは、ラプラス作用素の固有値の漸近分布が領域の形状と関係しているのと類似している。

レゾナンスの存在、非存在は、実エネルギーの関数であるスペクトルシフト関数の挙動にも大きく関係する。非捕捉エネルギーの近傍では、スペクトルシフト関数が完全な漸近展開をもつことが知られている (Robert-Tamura)。これはレゾナンスの非存在と関係している。しかしこの興味深い結果は、作用素がシュタルクポテンシャルを持つ場合や、連立の場合にはまだ証明されていない。時間に依存するシュレディンガー作用素の時間大域解の構成が容易でないからである。

連立のシュレディンガー作用素は、原子核と電子の運動を Born-Oppenheimer 近似により分離することによって自然に現れる。そのレゾナンスの分布は、量子化学において極めて重要であるが、数学的に厳密に知られている結果はまだ極めて少ないと言える。ポテンシャルが交差しない場合の研究が若干あるが、交差する場合については皆無である。連立の作用素に対する WKB 解析の理論、超局所解析の理論の発展が待たれるところである。

### 2. 研究の目的

この科研費補助期間における目的は、大きく分けて3つある。

まず第1は、あるエネルギー超曲面上の捕捉された軌道が、双曲型不動点およびそれに付随するホモクリニックあるいはヘテロクリニック軌道から成る場合に、そのエネルギーの近傍でのレゾナンスの漸近分布を明らかにすることである。双曲型不動点が複数ある場合や、ホモクリニック軌道が複数ある場合、それらが無数にあって多様体を形成する場合など、いろいろな場合が考えられる。量子化条件を求め、そこからレゾナンスの実部、虚部の位置を正確に求められれば理想的であるが、難しい場合はレゾナンスの虚部の (下からの) 評価だけでも出せばよい。

第2は、シュタルクポテンシャルをもつシュレディンガー作用素およびその摂動から定義されるスペクトルシフト関数の微分が、非捕捉的なエネルギーの近傍で完全な漸近展開を持つことを示すことである。弱い意味、すなわち超関数としての漸近展開が得られることがまず第一に証明すべきことであるが、そこから強い意味、すなわち各エネルギーを固定する毎に完全な漸近展開を持つことを示す部分が本質的である。これが以下に述べるような時間に依存しない方法でできれば、連立のシュレディンガー作用素についても同様の問題を考えたい。

第3は、連立のシュレディンガー作用素のポテンシャルが交差する場合、交差するエネルギーの近傍でのレゾナンスの漸近分布を調べることである。次元は1とし、2元連立のシュレディンガー方程式を考える。一方のポテンシャルは井戸型で、もう一方は単調な関数とし、これら2つのポテンシャルは原点で一次の交差をすると仮定する。相互作用は  $\hbar$  のオーダーで小さいとする。このとき、井戸型のポテンシャルが生成する固有値は、相互作用のために消失して連続スペクトルのみとなるが、その代わり固有値の近くにレゾナンスが現れると予想される。交差レベルより小さいエネルギーの近くでは、レゾナンスの虚部は指数的に小さいことが予想される (それを裏付ける先行結果もある) が、交差レベル、あるいはそれより大きいレベルでは、相互作用が強く、レゾナンスの虚部は大きいと予想される。この研究の目的は、交差レベルの近傍でレゾナンスの虚部の漸近的な振る舞いを明らかにすることである。

### 3. 研究の方法

まず第1の研究について述べる。以前の同研究課題の研究において、双曲型不動点の近傍での接続問題、すなわち安定多様体上に超局所台をもつ解 (内向波解) が不安定多様体上に超局所台をもつ解 (外向波解) にどのような法則で接続されるかを明らかにした。この結果を用いることにより、上記レゾナンスの漸近分布の問題を超局所的な方法によって解くことが可能になった。例えば捕捉された軌道が一つの不動点と一つのホモクリニック軌道からなる場合、ホモクリニック軌道の上の一点の近傍で定義された超局所解から出発して、ホモクリニック軌道上、および不動点上を接続して1周し、元の超局所解と一致するという条件から量子化条件を売ることが出来る。ホモクリニック軌道上では、よく知られたマスロフの WKB 解析の理論を用い、不動点上を接続するとき上記の我々の先行結果を使う。

次に第2の研究に用いた方法について述べる。Robert-Tamura では、時間に依存するシュレディンガー方程式の時間大域解を構成する方法を取っているが、ここでは時間に依存しない方法を用いることによって、シュ

タルクポテンシャルに起因する難しさを避けることに成功した。作用素の関数をレゾルベントで書き表す Helffer-Sjostrand の公式を用い、非捕捉条件によってレゾルベントのトレースが上半平面から下半平面まで実軸を超えて解析接続できることを使うと、時間発展において時間 0 の近傍以外からの寄与が  $h$  に関して無限のオーダーで小さいことが証明できる。

最後に第 3 の研究に用いた方法について述べる。考える作用素は 2 元連立の 2 階の作用素である。このような作用素に対して、標準的な複素 WKB 法の理論は適用が難しい。この理論においては、4 つの相関数のそれぞれに対して、他の 3 つ相関数との差の実部が増大する方向が存在しなければならないが、そうはなっていない。ここでは 2 つの単独のシュレディンガー作用素の特別な基本解を (Yafaev の方法に倣って) 構成し、それを第 1 近似として、連立の方程式の解を逐次近似で解く。こうすることによって、単独の方程式の解の漸近的性質についての既知の情報を最大限に生かすことができる。こうして構成した、遠方の一方で減衰する解、もう一方で外向きの振動解を 2 つずつ構成し、これら 4 つの解のロンスキアンを計算することによってレゾナンスの量子化条件を得る。

#### 4. 研究成果

第 1 の研究については、以下が明らかになった。捕捉集合が、一つの双曲型不動点とそれに付随する一つないしは複数のホモクリニック軌道からなる場合、レゾナンスの量子化条件を書き下すことができた。さらに量子化条件を満たす複素数 (近似レゾナンス) と真のレゾナンスの集合の間の「距離」が小さいこと、すなわち各近似レゾナンスの「近く」に真のレゾナンスが存在し、逆に各真のレゾナンスの近くに近似レゾナンスが存在すること、を厳密に証明することができた。証明の方法がシンプルになった一方、真のレゾナンスと近似レゾナンスの間の 1 対 1 対応までは証明できていない。この結果は、不動点の数が複数あって、不動点とそれに付随するホモクリニックおよびヘテロクリニック軌道が一つのグラフをなす場合にまで一般化することができることもわかった。

第 2 の研究については、シュタルクポテンシャルをもつシュレディンガー作用素およびその摂動から定義されるスペクトルシフト関数についても、Robert-Tamura と同様の結果、すなわち非捕捉的なエネルギーの近傍では完全な漸近展開を持つことが示せた。

第 3 の研究については、交差エネルギーの近傍でのレゾナンスの量子化条件を書き下すことができた。これにより、レゾナンスの実部および虚部の漸近的な振る舞いが明らかになった。実部は、井戸型のポテンシャルが生成する固有値に近く、虚部は  $h$  の  $5/3$  乗のオーダーである。虚部の主要項の係数はエ

アリ関数を用いて書くことができ、特に交差が対称である場合 (すなわち交差点における 2 つのポテンシャルの微分係数が正負を除いて一致する場合)、主要項の係数は単独のエアリ関数で書け、したがってその零点で消える。この零点は交差エネルギーより高いエネルギーに対応しており、これらのエネルギーの近くのレゾナンスは、虚部が  $h$  の 2 乗のオーダーであることが分かる。

#### 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計 9 件)

Mouez DIMASSI, Setsuro FUJIE: A time-independent approach for the study of the spectral shift function and application to Stark Hamiltonians, Communications in Partial Differential Equations, 印刷中(2015) 査読有

Hubert KALF, Takashi OKAJI, Osanobu YAMADA: The Dirac operator with mass  $m_0 = 0$ ; Non-existence of zero modes and of threshold eigenvalues, Documenta Mathematica 20 (2015) p. 37-64 査読有

Jean-Francois BONY, Setsuro FUJIE, Thierry RAMOND, Maher ZERZERI: Width of resonances created by homoclinic orbits - isotropic fixed point case: RIMS Kokyuroku Bessatsu B45, p.31-43 (2014) 査読有

Jean-Francois BONY, Setsuro FUJIE, Thierry RAMOND, Maher ZERZERI: WKB solutions near an unstable equilibrium and applications: Nonlinear Physical Systems: Spectral Analysis, Stability and Bifurcations p.15-40(2014) Wiley DOI:10.1002/978118577608.ch2 査読有

Jean-Francois BONY, Setsuro FUJIE, Thierry RAMOND, Maher ZERZERI: Resonances generated by a homoclinic curve, RIMS Kokyuroku 1914, p.121-138 (2014) 査読無

Karl Michael SCHMIDT, Tomio UMEDA: Spectral properties of massless Dirac operators with real-valued potentials, RIMS Kokyuroku Bessatsu B45 p.25-30 (2014) 査読有

Osanobu YAMADA: A remark on the limiting absorption principle of Schroedinger operators with expoding

potentials, 立命館大学理工学研究所紀要 72 p. 1-7 (2014) 査読有

Setsuro FUJIE, Amina LAHMAR-BENBERNOUS, Andre MARTINEZ: Semiclassical complex interactions at a non-analytic turning point: RIMS Kokyuroku Bessatsu B37, p.31-47 (2013) 査読有

Yoshimi SAITO, Tomio UMEDA: A sequence of zero modes of Weyl-Dirac operators and an associated sequence of solvable polynomials, Operator Theory: Advances and Applications 219 p.197-209 (2012) 査読有

[学会発表](計 10 件)

Osanobu YAMADA: Uniform resolvent estimate of Dirac operators, 第 21 回超局所解析と古典解析, 2014/12/06 松藤プラザ「えきまえ」いきいき広場(長崎県)

Osanobu YAMADA: Uniform resolvent estimate of Dirac operators, 夏の作用素論シンポジウム, 2014/09/07 勤労福祉会館「臨湖」(滋賀県)

Setsuro FUJIE: Stationary approach to the spectral shift function - application to the Stark Hamiltonians, International conference "Inverse problems and related topics" 2014/08/19, Euler International Mathematical Institute, Saint Petersburg, RUSSIA

Setsuro FUJIE: A time-independent approach to the study of spectral shift functions, 南大阪応用数学セミナー, 2014/05/31, 大阪市立大学(大阪府)

Setsuro FUJIE: Semiclassical distribution of resonances created by homoclinic trajectories, Analysis and PDE seminar, 2014/04/02, Stanford University, USA

Setsuro FUJIE: Resonances and homoclinic curves I, II, III, Summer school "nonselfadjoint operators, semiclassical analysis and evolution operators, 2013/07/10-12, Iles de Berder FRANCE

Setsuro FUJIE: Asymptotic distribution of resonances created by a homoclinic orbit, RIMS 研究集会「保

存則をもつ偏微分方程式に対する解の正則性、特異性の研究」, 2013/06/05 京都大学数理解析研究所(京都府)

Setsuro FUJIE: A time-independent approach for the study of the spectral shift function and application to the Stark Hamiltonians: Himeji Conference on Partial Differential Equations, 2013/02/23, イーグレ姫路(兵庫県)

Setsuro FUJIE: Stationary approach to the spectral shift functions for Stark Hamiltonians, TAIWAN-JAPAN Joint Conference on PDE and Analysis, 2012/12/27, Taipei, TAIWAN

Setsuro FUJIE: Semi-classical resonances associated with unstable equilibria, Spectral Analysis, Stability and Bifurcation in Modern Nonlinear Physical Systems, 2012/11/05, Banff CANADA

[図書](計 1 件)

Ovidiu CALIN, Der-Chen CHANG, Kenro FURUTANI, Chisato IWASAKI: Heat kernels for elliptic and sub-elliptic operators, Method and Techniques, Birkhauser 433p (2011)

[その他]

補助金による研究集会の開催:

(1) Himeji Conference on Partial Differential Equations:

イーグレ姫路

2015年3月5日~7日

2014年2月20日~21日

2013年2月22日~23日

[http://www.math.ritsumei.ac.jp/takuwata\\_nabe/CHPDE/CPDE.html](http://www.math.ritsumei.ac.jp/takuwata_nabe/CHPDE/CPDE.html)

(2) Lectures on Semi-Classical Analysis:

立命館大学

2014年7月3日~5日

2012年10月26日~28日

[http://www.math.ritsumei.ac.jp/takuwata\\_nabe/LSCA/LSCA2014.html](http://www.math.ritsumei.ac.jp/takuwata_nabe/LSCA/LSCA2014.html)

6. 研究組織

(1) 研究代表者

藤家 雪朗 (FUJIE SETSURO)

立命館大学・理工学部・教授

研究者番号: 00238536

(2) 研究分担者

( )

研究者番号:

(3) 連携研究者

岩崎 千里 (IWASAKI CHISATO)

兵庫県立大学・大学院・物質理学研究科・  
教授

研究者番号： 30028261

榎田 登美男 (UMEDA TOMIO)

兵庫県立大学・大学院・物質理学研究科・  
教授

研究者番号：20160319

山田 修宣 (YAMADA OSANOBU)

立命館大学・理工学部・教授

研究者番号： 70066744

渡部 拓也 (WATANABE TAKUYA)

立命館大学・理工学部・准教授

研究者番号： 80458009