これまでの研究成果のまとめ （氏名）蘆田　聡平

私の研究テーマは量子力学において重要なシュレーディンガー方程式の多体問題です。すなわち大きい自然数Nに対してN個の粒子が存在するときにそれらの粒子の状態をシュレーディンガー方程式に基づいて決定する問題です。ここで考える場合はNは大きいが有限の値の場合であり、Nが無限大になる極限を考える問題とは異なります。このような問題は量子力学の誕生直後から研究され続けています。私の研究の特色は偏微分方程式であるシュレーディンガー方程式のみに基づいて数学的に厳密な議論により結果を導こうとする点と、解の定性的な振る舞いよりも定量的な数値として解を評価する方法を研究し、その誤差の評価も定量的に求めようとする点です。数学的な手法としてはルベーグ積分に基づいて関数の集合を定義し、微分作用素を関数空間の間の写像ととらえ、写像の性質に基づいて解の評価をする関数解析と呼ばれる手法を主に使っています。特にシュレーディンガー方程式に現れる微分作用素はハミルトニアンと呼ばれます。シュレーディンガー方程式の研究ではハミルトニアンの数学的解析を通して発展してきたスペクトル理論に基づいた解析が強力な研究手段となります。スペクトル理論は行列の固有値問題の自然な発展形とみなせます。行列から関数空間上の作用素に一般化して考えるときに行列の固有値がスペクトルに一般化されます。スペクトルは作用素の固有値を含みますが、連続スペクトルと呼ばれる固有値ではないスペクトルも存在します。関数空間の要素はスペクトルに基づいて分類することができ、固有値に対応するのが定常状態である固有関数で、連続スペクトルに対応するのが散乱状態です。

散乱状態に関する研究で重要な役割を果たすのが過去の状態に未来の状態を対応させる散乱行列と呼ばれる作用素です。私は多体問題における散乱行列の新しい定義を与えました。これは定常的な時間に依存しない解を散乱していく波に見立てて過去と未来の状態を考える方法によるものです。1体問題においてはこのような手法はよく知られていて、この方法により散乱方向の分布である微分断面積が求められます。しかし多体問題においては定常的な定義は難しく、これまでは時間発展に基づく定義しか存在しませんでした。私はさらに、定常的な定義と時間発展に基づく定義は等価であり同じ散乱行列を与えることも証明しました。この結果は分子線の衝突による散乱の実験を記述するものであり、化学反応の研究に役立ちます。

シュレーディンガー方程式で扱う粒子は通常、電子と原子核です。電子の質量は原子核の質量よりはるかに小さいため単位系を適切にとるとシュレーディンガー方程式の中に質量比が小さいパラメーターとして現れます。質量比が０に近づくときの解の漸近挙動を求める方法はボルン・オッペンハイマー近似と呼ばれています。私はボルン・オッペンハイマー近似に基づいたシュレーディンガー方程式の解の解析もこれまで行ってきました。ボルン・オッペンハイマー近似の利点は電子と原子核の運動を分離して扱えることです。原子核の運動に関しては定常磁場中の原子の運動や分子の解離現象の数学的解析を行いました。これらの研究においては、方程式の中のパラメーターが０に近づくときの解の漸近挙動を調べる半古典近似やWKB近似と呼ばれる手法を数学的に厳密に正当化したものを使いました。特に解離する分子の寿命を正確に求めた結果は化学反応の研究などにおいて重要です。

一方で電子状態に関しては固有関数及び固有値を求めるために使われるハートリー・フォック方程式の研究と電子密度の研究をしました。ハートリー・フォック方程式はハートリー・フォック汎関数の臨界点が満たす方程式であり、ハートリー・フォック方程式の研究においてはハートリー・フォック汎関数の臨界値と臨界点の分布を調べることが重要となります。私はハートリー・フォック汎関数の臨界値の分布に関して、ある閾値より小さい臨界値が有限個しか存在しないことを証明しました。また、閾値より小さい臨界値に対応する臨界点の集合は有限個のコンパクト連結実解析空間と呼ばれる集合から構成されていることを示しました。これらの研究の中で汎関数の２階微分のフレドホルム性を示す手法を確立し、この手法を用いてさらにハートリー・フォック方程式の標準的数値解法である Self-Consistent-Field method (SCF法)によって得られる関数列が収束することを証明しました。本結果はSCF法の正当性を理論的に保証する初めての重要な結果です。

電子密度は複数の電子の固有関数の絶対値の２乗を一つの変数を残して積分して得られる関数で、変数の点近傍での電子の個数の期待値を表します。私は分子内の電子のシュレーディンガー方程式の固有関数から得られる電子密度が任意の有界領域上である上界評価を満たすことを示すことにより、電子間の斥力によって電子が特定の領域に集積することが妨げられることを非常に一般的に証明しました。