

松 山 大 学 論 集
第 25 卷 第 3 号 抜 刷
2 0 1 3 年 8 月 発 行

数理的アプローチによる量子複雑系の解析

檀 裕 也

数理的アプローチによる量子複雑系の解析

檀 裕 也

Abstract : This article is composed of the historical and recent results in stability of quantum complex systems using mathematical approaches. It is important to treat the problem rigorously and compute the accurate values we estimate mathematically. We mainly consider Schrödinger operators and the pseudo-relativistic operators with electric and magnetic interaction in Euclidean spaces with various inequalities in spectral theory, in order to estimate the ground state energy of quantum complex systems. According to the concept of the second kind of stability, we can prove the stability in almost all realistic settings we always consider. It is also discussed that Pauli and Dirac operators are useful in the model of quantum systems with spin, the magnetic fields and relativistic effects. Then, we overview the stability statement of the second kind for quantum complex systems with Coulomb interaction for fermionic matter. After all, it is suggested that mathematical analysis for quantum complex systems is effective in physical problems.

Keywords : mathematical analysis, Lieb-Thirring inequalities, stability of matter, large Coulomb systems, spectrum of hydrogenic atoms

1 はじめに

私たちの身の回りにある物質は、なぜ存在しているのでしょうか？

物質とは、分子や原子など元素が集まってできたものである。原子の中では、原子核と電子が存在し、原子核は陽子と中性子から成り立っている。現代の素粒子物理学によると、陽子や中性子などのハドロンを構成するクォーク、

電子を含めミュー粒子やタウ粒子といったレプトン，相互作用を媒介する場の量子化として登場するボソン，そして最近になって実験的にも存在が確認されたヒッグス粒子 [2, 9] といった素粒子が宇宙に存在する物質の最小単位であると信じられている。

この宇宙に存在する素粒子は，質量による重力や電荷による電磁気力といった相互作用に加えて，クォークの色荷に作用する「強い力」とベータ崩壊を引き起こす「弱い力」による相互作用を受け，その状態を変えることができる。

重力による相互作用では，太陽系の運動といったスケールの大きな物理系が典型的な例である。1687年にニュートン [51] が万有引力の法則を発見して以来，多くの科学者たちがケプラー問題と呼ばれる重力系の解析に取り組んできた。しかし，3つ以上の天体では解析的なアプローチに限界があることがポアンカレによって判明したため，現在でも解決されていない課題が多く残されている。特に，質点の多い重力複雑系では，計算量の問題から，コンピュータを用いた数値的なアプローチを試みても本質的な解決までは至っていない。例えば，惑星や衛星の軌道に関するボーデの法則 [18, 19, 48] は，重力複雑系の安定性について示唆するところがあるものの，現代物理学では単なる経験則に過ぎないと思われている。

一方，電磁力による相互作用では，原子や分子の結合といったスケールの小さな物理系が典型的な例である。1897年にトムソン [65] が電子を発見して以来，原子の内部構造について探求 [66, 49, 57, 58] が進められた。金箔を用いたアルファ線の散乱実験によってラザフォード [57, 58] が得た現実的な原子模型でさえ，マックスウェルの電磁気学に従うと，電子は制動輻射によってエネルギーを失いながら瞬間に原子核に落ち込むといった深刻な矛盾を引き起こすことが判明した。その時代は，1900年にプランクが黒体輻射の公式を発見し，1905年にアインシュタインが光電効果を量子論に基づき説明するなど量子力学の黎明期でもあった。ボーア [5, 6, 7] は量子化の条件を提示して，ラザフォード模型における「すべての電子は原子核に落ち込む」という

矛盾を解決した。ド・ブロイ [8] による物質波という概念に影響を受けたシュレーディンガー [59] は、1926年に量子の状態を記述する方程式を提示し、ボーアの得た結論が基礎方程式から自然な形で導かれることを証明した。すなわち、原子核と電子から構成される水素原子について、その基底状態のエネルギーが無限大に発散することなく有限値に落ち着くことが理論的に証明されたのである。

シュレーディンガーの方程式は、同時期に発表されたハイゼンベルクの行列力学とともに、量子力学における大成功を収めた。しかし、その方程式はエネルギーが低い水素原子のような量子系に対してはほぼ正確な近似値が求まる一方で、クーロン相互作用による結合エネルギーの高いウラン原子のような量子系では相対論的効果によって思うような精度で計算することができないという不満があった。そこで、ディラックによって相対性理論に基づく方程式が提案されると、水素原子のスペクトルについて驚くべき精度で計算できるだけでなく、自然な形でスピンの登場し、反粒子の存在を理論的に予測するなど相対論的量子力学は完成したかのように見えた。ちなみに、ディラックはシュレーディンガーの方程式とハイゼンベルクの行列力学の同値性を示した科学者としても有名である。

次に、議論の対象となるのは、多数の量子が互いに相互作用するような量子複雑系であった。もちろん、水素原子の問題は単純で、原子核と電子の間には一つのクーロン相互作用を考えればよい。実際、特殊関数を使うことで水素原子のスペクトル問題は簡単に解決する。ところが、ウラン原子のような量子系になると、原子核と92個の電子それぞれとの相互作用のほかにも、92個の電子同士の相互作用を考慮しなければならない。しかも、磁場があれば、スピンと相互作用する。さらに、このような原子が多数集まった量子複雑系では、原子核同士の相互作用も増える。こうなってくると、解析的な波動関数を求めることは絶望的であり、量子複雑系のスペクトルを数理的なアプローチによって評価することに望みをつなげるほかなくなってしまう。

1933年に発行されたフォン・ノイマンの著作からしばらくは、量子複雑系のスペクトル評価を模索する時期が続いたが、戦争による社会的な影響によって科学研究は中断を余儀なくされる。そして、量子複雑系の状態を記述するハミルトン作用素は、たとえクーロン相互作用のような特異点があったとしても自己共役という性質を満たし、そのエネルギーの総量は有限であるとして問題を解決したのは日本の加藤敏夫 [33] である。現在では、第一種の安定性と呼ばれている。その成果が発表されたのは1951年だったが、すでに着想は1944年にあっただろう。

しかし、第一種の安定性だけでは不十分である。なぜならば、量子複雑系の合併や分割によって、エネルギーの出し入れができるようになってしまうからである。量子複雑系の規模を大きくすれば、いくらでもエネルギーを取り出したり、吸収させたりすることが可能になり、やはり現実における物質の安定性とは相容れない。そこで、量子複雑系の基底状態のエネルギーは、その系を構成する粒子数に比例するという第二種の安定性と呼ばれる概念が登場する。フィッシャーとルエル [25] によって最初に定式化された第二種の安定性に関する問題は、パウリの排他原理に従うフェルミ粒子について考察したダイソンとレナード [22] によって一定の解決を見る。その後、ボーズ粒子についても同様に考察を進めたダイソン [23] は、ボーズ粒子によって構成される量子複雑系は第二種の安定性を満たさないことを示した。これは1995年に実験的に確認されたボーズ・アインシュタイン凝縮などの興味深い物理現象につながる理論的な探究である。

さらに、リーブとターリング [40] は物質の安定性に関する問題に取り組む中で、ある不等式を提案してダイソンとレナードの結果を改良したり、現在でも未解決の予想を提示したりして数理論理学の分野を活気づけた。現在までの数理論理学の展開は、いくつかの概説論文 [36, 3, 32, 43, 44] に詳しく述べられている。

本研究は、なぜ物質は安定的に存在できるのかという素朴な疑問に動機づけ

られている。そして、本稿において、数理的なアプローチによって課題の抽出と謎の解明を試みる。第2節では、量子の状態を記述する方程式と作用素として、シュレーディンガーやディラックのものについて述べる。第3節では、シュレーディンガー作用素を取り上げ、その性質について数理的アプローチによって示す。第4節では、量子複雑系に対する安定性について、シュレーディンガー作用素と擬相対論的作用素を用いた議論および結果について述べる。最後に、まとめとして本研究の展望と今後の課題について指摘する。

なお、本稿は、松山大学国外研究制度を利用し、2012年9月～2013年8月の間にミュンヘン大学 (Ludwig-Maximilians-Universität München) において取り組んだ研究の成果 [13, 14, 15, 16, 17] を一般の研究者向けにまとめたものである。一般的な事項については、よく知られているテキスト [4, 12, 26, 27, 29, 34, 39, 53, 63, 64] が参考になる。また、数学の知識としては、学部生向けに執筆されたテキスト [38] の内容程度を前提とする。

2 量子状態を記述する方程式と作用素

量子系の状態は、ヒルベルト空間 \mathcal{H} に属する波動関数 ψ によって記述される。すべての(可分な)ヒルベルト空間は、自乗可積分のルベグ可測空間と同相である。したがって、 d を空間次元とすると、波動関数 ψ は $\psi \in L^2(\mathbb{R}^d)$ と考えることができる。その場合、

$$\int_{\mathbb{R}^d} |\psi(x)|^2 dx < \infty \tag{1}$$

という性質を満たす。通常、 ψ は複素数に値を取る関数で、正規化条件

$$\int_{\mathbb{R}^d} |\psi(x)|^2 dx = 1 \tag{2}$$

を付加するとき、 $|\psi(x)|^2$ は量子が位置 x に存在する確率密度を与えると考えられている。

時刻 t とともに状態が変化する場合、波動関数 ψ は t の関数 $\psi : t \rightarrow \psi \in \mathcal{H}$

として表現される。エネルギーに関するハミルトン作用素を H と置くと、量子系の時間発展は、方程式

$$i \frac{d}{dt} \psi(t) = H\psi(t) \quad (3)$$

に支配される。ただし、 $i = \sqrt{-1}$ は虚数単位である。

初期値に関する条件

$$\psi(0) = \psi_0 \quad \text{in } L^2(\mathbb{R}^d) \quad (4)$$

を与えると、方程式(3)を解いて任意の時刻 t に対する波動関数 $\psi: \mathbb{R} \rightarrow L^2(\mathbb{R}^d)$ を求めることが可能である。実際、ハミルトン作用素を H が自己共役であるときには、あるユニタリ作用素 $U(t)$ を使って

$$\psi(t) = U(t)\psi_0 \quad (5)$$

と表すことができる。便宜的に

$$U(t) = e^{-iHt} \quad (6)$$

と書くことも多く見られる。

以上のことから、量子系の物理を記述するには、ハミルトン作用素 H を与えて方程式(3)を満たす波動関数 ψ を求めればよいということが分かった。

1926年にシュレーディンガー [59] が提示したシュレーディンガー作用素は、スピンのない非相対論的な量子の状態を記述するものとして最初に登場した。しかし、スピンおよび相対論的効果を取り入れたハミルトン作用の探求は困難を極める。実際、クライン・ゴールドン方程式はシュレーディンガーの成果を相対論的に一般化することを試みたが、2階の時間微分作用素が現れるため、シュレーディンガー作用素と同様の取り扱いができないばかりか、単純な水素原子のスペクトルを説明することができなかった。また、擬相対論的作用素は、シュレーディンガー作用素と同様に取り扱いが簡単であるが、微分作用

素の平方根という形式によって定義されていることから、物理系を記述する作用素として重要な局所性を満たさないため、本質的なハミルトン作用素とはいえない。そのため、おもちゃ模型 (toy model) と揶揄して呼ばれることもあるほどである。

シュレーディンガー作用素をはじめ、1920年代後半に提案されたハミルトン作用素の多くは電子のスピンによる電磁場との相互作用を記述することができなかった。その問題を克服するため、パウリ作用素が提案されたが、擬相対論的作用素と併用して相対論的效果を取り入れようとしても、やはり作用素としての局所性を満たさないために失敗に終わる。

1928年になって最終的に登場したものがディラック作用素である。

以下、典型的なハミルトン作用素 H として、シュレーディンガー作用素、擬相対論的作用素、パウリ作用素およびディラック作用素について詳しく述べる。

2.1 シュレーディンガー作用素

電磁場 (V, A) の中を運動する量子 (たとえば電子など) の状態について考察しよう。ここで、 V はクーロン相互作用に基づくスカラーポテンシャルであって、

$$V(x) = -\frac{Z}{|x|} \quad (7)$$

の形式で表現することができる。原点に置かれた原子核の電荷を $Z > 0$ と仮定する。原子核の電荷は整数に値を取らなくても、以下の議論で差し支えるということはない。他方、電子は $x \in \mathbb{R}^d$ に位置し、ポテンシャルの影響を受けて運動するものとする。

また、 A は磁場を記述するベクトルポテンシャル

$$A \in L_{\text{loc}}^2(\mathbb{R}^d; \mathbb{R}^d) \quad (8)$$

であり, 磁場 B に対して

$$\nabla \times A = B \quad (9)$$

の関係が成り立っている。磁場に対して A の一意性を保証するため, クーロン・ゲージ

$$\nabla \cdot A = 0 \quad (10)$$

を仮定することが一般的である。

すると, 電磁場を含むシュレーディンガー作用素は

$$H = T + aV(x) \quad (11)$$

と書くことができる。ただし, $a > 0$ はゾンマーフェルトの微細構造定数, T は質量 m の量子に関する運動エネルギーに対応する作用素で

$$H = \frac{1}{2m} (-i\nabla + \sqrt{a}A(x))^2 \quad (12)$$

である。ここで, ∇ は量子の波動関数に作用するナブラ作用素

$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial}{\partial x_d} \right) \quad (13)$$

を表す。

シュレーディンガー作用素は, エネルギーの低い量子系, すなわち相対論的効果を見捨てる量子系に対して有効である。エネルギーの高い量子系を記述する場合, 相対性理論に基づくハミルトン作用素について考えなければならない。

2.2 擬相対論的作用素

相対性理論に基づく質量 $m \geq 0$ とエネルギー $E \geq 0$ の関係

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4 \quad (14)$$

から出発することにしよう。ただし、 p は量子の運動量である。

量子の運動量に対応する作用素 $p - i\hbar\nabla$ を用いて量子化

$$T = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} - mc^2 \quad (15)$$

すると、 T は運動エネルギーに対応する作用素になる。もちろん、 $p \ll 1$ すなわち $\hbar \rightarrow 0$ の準古典近似において

$$T = \frac{p^2}{2m} \quad (16)$$

を得ることができる。これは、シュレーディンガー作用素における運動エネルギーに対応する。したがって、擬相対論的作用素は

$$H = \sqrt{\hbar^2 c^2 \Delta + m^2 c^4} - mc^2 + \alpha V(x) \quad (17)$$

と書くことができる。微分作用素の平方根を定義するには、フーリエ変換によって座標空間から運動量空間への写像を考え、運動量空間における作用素の積および平方根として与えればよい。

磁場のある場合は

$$H = \sqrt{(-i\hbar\nabla + \sqrt{\alpha}A(x))^2 c^2 + m^2 c^4} - mc^2 + \alpha V(x) \quad (18)$$

と表現することができる。これが擬相対論的なハミルトン作用素である。

2.3 パウリ作用素

量子には、スピンと呼ばれる内部自由度が存在し、電磁場と相互作用する。例えば、電子はスピン $S = 1/2$ の量子である。一般に、スピン S の量子の状態は、ヒルベルト空間

$$L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^{2S+1}) := L^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^{2S+1} \quad (19)$$

の中で記述する必要がある。なお、 \otimes はヒルベルト空間の直積を表す集合の記法である。以下の議論で明らかのように、パウリ作用素では空間次元が3次元に限定される。

スピン $S = 1/2$ の電子の場合、その状態を表現するには

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \quad (20)$$

という形式のスピンル表現を用いると便利である。このとき、正規化の条件は

$$\int_{\mathbb{R}^d} (|\psi_1(x)|^2 + |\psi_2(x)|^2) dx = 1 \quad (21)$$

となる。

ここで、パウリ行列 $\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ を導入しよう。具体的な成分を列挙すると、

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (22)$$

である。パウリ行列のほかにも、いくつか同様の行列の取りかたは存在するが、重要な性質として次の関係がある：

任意の j と k (ただし $j \neq k$) に対して

$$\sigma_j \sigma_k + \sigma_k \sigma_j = 0 \quad (23)$$

および、1, 2, 3の循環置換 j, k, l に対して

$$\sigma_j \sigma_k = i \sigma_l \quad (24)$$

が成り立つことである。

パウリ行列を用いると、電子のスピンに対応する角運動量作用素は

$$S = \frac{\hbar}{2}\sigma \quad (25)$$

と書ける。

したがって、スピンを考慮に入れた非相対論的なハミルトン作用素は

$$H = \frac{1}{2m} [\sigma \cdot (-i\nabla + \sqrt{a}A(x))]^2 + aV(x) \quad (26)$$

すなわち

$$H = \frac{1}{2m} (-i\nabla + \sqrt{a}A(x))^2 + \mu_0\sigma \cdot B(x) + aV(x) \quad (27)$$

と表現できる。ただし、 μ_0 はボーア磁子

$$\mu_0 = \frac{\hbar e}{2mc} \quad (28)$$

である。

すると、スピンの効果を取り入れた相対論的なハミルトン作用素は

$$H = (\sqrt{[\sigma \cdot (p + \sqrt{a}A(x))]^2 c^2 + m^2 c^4} - mc^2) + aV(x) \quad (29)$$

と書けそうである。しかし、作用素としての局所性を満たさないため、物理系を記述するには不適切であると考えられる。

2.4 ディラック作用素

パウリ作用素と同様に、空間次元を3次元に限定して考察する。

スピン $S = 1/2$ の電子の状態をディラック作用素で表現するには

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} \quad (30)$$

という形式のスピンル表現を用いる。

まず、パウリ行列を使って、 4×4 のディラック行列 $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ および β を定義しよう。いま、

$$\alpha_j = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_j \\ \sigma_j & 0 \end{pmatrix}, \beta = \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & I_2 \end{pmatrix} \quad (31)$$

と定義すると、これらのディラック行列は反交換関係

$$\alpha_j \alpha_k + \alpha_k \alpha_j = 2\delta_{jk} I_4, \alpha_j \beta + \beta \alpha_j = 0, \beta^2 = I_4 \quad (32)$$

を満たす。ただし、 I_n は n 次正方行列 $M(n, \mathbb{C})$ の単位行列、 δ_{jk} はクロネッカーの記法である。

すると、電磁場を含むディラック作用素は

$$H = \alpha \cdot (-i\nabla + \sqrt{a}A(x)) + \beta m + \alpha V(x) I_4 \quad (33)$$

と書くことができる。

3 シュレーディンガー作用素の性質

3.1 反磁性不等式

一般に、ハミルトン作用素に対するスペクトルを評価するとき、磁場の効果を計算に入れる必要がある。しかし、反磁性不等式を用いることによって、基底状態エネルギーの下限値を評価する場合は、磁場のない場合について考えれば十分であることが示される。

まずは Kato [35] の不等式から始めよう。

補題 1 (Kato の不等式). $u(x) \neq 0$ のとき $s(u) = \bar{u}/|u|$, $u(x) = 0$ のとき $s(u) = 0$ と定義する。 $A \in C^1(\mathbb{R}^d; \mathbb{R}^d)$, $u \in C^2(\mathbb{R}^d)$ および $|u| \in C^2(\mathbb{R}^d)$ s. t. $(-i\nabla + A(x))^2 u \in L_{loc}^2$ を仮定する。そのとき、不等式

$$-\Delta|u| \leq \Re[s(u)(-i\nabla + A(x))^2 u] \quad (34)$$

が成立する。ただし、 $\Re z$ は複素数 $z \in \mathbb{C}$ の実数部分を表すものとする。

Proof. ナブラ作用素 ∇ を恒等式 $|u|^2 = \bar{u}u$ の両辺に作用させることによって、 $\nabla|u|^2 = 2|u|\nabla|u|$ および $\nabla(\bar{u}u) = (\nabla\bar{u})u + \bar{u}(\nabla u) = 2\Re(\nabla\bar{u})u$ の関係式を得る。

ベクトルポテンシャル A は実数値関数なので、 $\Re[iA(x)u] = 0$ から

$$|u|\nabla|u| = \Re[\bar{u}(\nabla + iA(x))u] \quad (35)$$

という等式を導くことができる。両辺の発散を取ると、 $\nabla \cdot (|u|\nabla|u|) = (\nabla|u|)(\nabla|u|) + |u|\nabla \cdot \nabla|u| = |\nabla|u||^2 + |u|\Delta|u|$ および $\nabla \cdot \Re[\bar{u}(\nabla + iA(x))u] = \Re[\nabla \cdot \bar{u}(\nabla + iA(x))u] + \Re[\bar{u}\nabla \cdot (\nabla + iA(x))u] = \Re[(\nabla - iA(x)) \cdot \bar{u}(\nabla + iA(x))u] + \Re[\bar{u}(\nabla + iA(x)) \cdot (\nabla + iA(x))u]$ となる。したがって

$$|\nabla|u||^2 + |u|\Delta|u| = |(\nabla + iA(x))u|^2 + \Re\bar{u}(\nabla + iA(x))^2 u \quad (36)$$

の関係式が成り立つ。 $|(\nabla + iA(x))u|^2 = ((\nabla - iA(x))\bar{u})((\nabla + iA(x))u) = |\nabla|u||^2 + |A(x)u|^2 \geq |\nabla|u||^2$ だから、

$$|u|\Delta|u| \geq \Re\bar{u}(\nabla + iA(x))^2 u \quad (37)$$

という不等式を得る。 $u(x) \neq 0$ のとき、両辺を $-|u(x)|$ で割ることで

$$-\Delta|u| \leq \Re(\bar{u}/|u|)(-i\nabla + A(x))^2 u \quad (38)$$

という結論に達した。

Kato の不等式を使って、サイモン [60, 61] は反磁性不等式を証明した。

定理 1 (反磁性不等式). 任意のベクトルポテンシャル $A \in C^1(\mathbb{R}^d; \mathbb{R}^d)$ に対して, 不等式

$$\inf_{\|\phi\|=1} (\phi, -\Delta\phi) \leq \inf_{\|\phi\|=1} (\phi, (-i\nabla + A(x))^2\phi) \quad (39)$$

が成り立つ。

Proof. 変分原理から

$$\inf_{\|\phi\|=1} (\phi, -\Delta\phi) \leq \inf_{\|\phi\|=1} (|\phi|, -\Delta|\phi|) \quad (40)$$

となることが分かる。上の補題 1 を適用すると,

$$\inf_{\|\phi\|=1} (|\phi|, -\Delta|\phi|) \leq \inf_{\|\phi\|=1} (\phi, (-i\nabla + A(x))^2\phi) \quad (41)$$

を得る。

反磁性不等式は, 量子系に磁場がかけられることによってエネルギーが上昇することを示している。ゆえに, 基底状態エネルギーの下限値を評価する場合は, 磁場のない場合について考えれば十分であることが分かる。

3.2 フーリエ変換とガウス型の波動関数

波動関数 $\phi \in L^2(\mathbb{R}^d)$ に対して, 次のようにフーリエ変換 $\hat{\phi}$ を定義する:

$$\hat{\phi}(p) = (2\pi)^{-d/2} \int_{\mathbb{R}^d} e^{-ix \cdot p} \phi(x) dx \quad (42)$$

このフーリエ変換によって, 波動関数は空間変数 $x \in \mathbb{R}^d$ から運動量 $p \in \mathbb{R}^d$ に写される。写像

$$\mathcal{F}: L^2(\mathbb{R}^d) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^d) \quad (43)$$

には, 逆変換 \mathcal{F}^{-1} が存在し, 任意の $\phi \in L^2(\mathbb{R}^d)$ に対して

$$\mathcal{F}^{-1}\phi(x) = (2\pi)^{-d/2} \int_{\mathbb{R}^d} e^{ix \cdot p} \phi(p) dp \quad (44)$$

と書くことができる。

フーリエ変換を導入すると、シュレーディンガー作用の解析が容易になる。

例えば、電磁場による相互作用を含まない場合、ガウス型の初期値 $\phi_0(x) = e^{-\frac{1}{2}|x|^2}$ に対して、散乱状態の解

$$\phi(t, x) = (1+it)^{-\frac{d}{2}} e^{-\frac{|x|^2}{2(1+it)}} \quad (45)$$

が得られる。

実際、ガウス型の波動関数 $\phi_0(x) = e^{-\frac{1}{2}|x|^2}$ のフーリエ変換について

$$\mathcal{F}: e^{-\frac{1}{2}|x|^2} \mapsto e^{-\frac{1}{2}|p|^2} \quad (46)$$

が成り立つことを念頭に置くと、シュレーディンガー方程式全体をフーリエ変換して得られた運動量における方程式

$$i \frac{d}{dt} \hat{\phi}(t, p) = |p|^2 \hat{\phi}(t, p) \quad (47)$$

は、初期値 $\hat{\phi}(x) = e^{-\frac{1}{2}|p|^2}$ が与えられた常微分方程式として解け、運動量空間における波動関数 $\hat{\phi}$ を求めることができる。 $\hat{\phi} \in L^2(\mathbb{R}^d)$ となることから、逆フーリエ変換を施すと

$$\mathcal{F}^{-1}: \hat{\phi} \mapsto (1+it)^{-\frac{d}{2}} e^{-\frac{|x|^2}{2(1+it)}} \quad (48)$$

のように計算することができ、座標空間における波動関数として先述の解が得られる。

この例は、解析的なアプローチが可能な典型例である。

3.3 水素型原子のスペクトル

空間 \mathbb{R}^3 において、原点に静止した原子核によるクーロン相互作用を受けて

運動する電子の量子状態について考察する。原子核は電子に比べて重いので、ここでは動かないとする。そのような量子系を記述するハミルトン作用素は、クーロンポテンシャル

$$V(x) = -\frac{\gamma}{|x|} \quad (49)$$

を用いて

$$H = -\Delta + V(x) \quad (50)$$

と書くことができる。ただし、 $\gamma = \alpha^2 = e^2/(4\pi\epsilon_0)$ である。

V が球対称であることに注意すると、水素型原子のハミルトニアンは極座標に変換することが有効である。実際、 $r \in [0, \infty)$, $\theta \in [0, \pi]$ および $\varphi \in (-\pi, \pi]$ について、直交座標 $x = (x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3$ から3次元極座標 (r, θ, φ) への変数変換

$$x_1 = r \sin \theta \cos \varphi, \quad x_2 = r \sin \theta \sin \varphi, \quad x_3 = r \cos \theta \quad (51)$$

を実行すると、ユニタリ変換

$$L^2(\mathbb{R}^3) \rightarrow L^2([0, \infty), r^2 dr) \otimes L^2([0, \pi], \sin \theta d\theta) \otimes L^2((-\pi, \pi], d\varphi) \quad (52)$$

によって波動関数の正規性は保存する。さらに、

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (53)$$

という作用素の変換形式を得る。ここで、

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi) \quad (54)$$

という分離仮説を採ると、動径方向に関する微分方程式

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - (V(r) - E) = l(l+1) \quad (55)$$

および極方向に関する微分方程式

$$\frac{1}{Y} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) - \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} = -l(l+1) \quad (56)$$

を得る。両方程式に現れる定数 l は、この段階では一般に複素数であるが、このような形を与えておくことによって、あとから整数になることが判明する。

ルジャンドル多項式を用いた詳しい議論は、著者による成果 [13] に譲ることにして、その結果を証明なしで述べる。

まず、 $l = 0, 1, 2, \dots$ および $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$ と置くと、極方向に関する微分方程式の解はともに整数の l および m を量子数として定まる球面調和関数

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \varepsilon \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} e^{im\varphi} P_l^m(\cos \theta) \quad (57)$$

である。ここで、 P_l^m はルジャンドル多項式である。また、 ε は、 $m \geq 0$ のとき $\varepsilon = (-1)^m$ 、 $m < 0$ のとき $\varepsilon = 1$ を満たす定数である。

定理 2. 球面調和関数

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \varepsilon \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} e^{im\varphi} P_l^m(\cos \theta), \quad |m| \leq l \quad (58)$$

は正規直交系である。さらに、

$$L^2 Y_l^m = l(l+1) Y_l^m \quad (59)$$

および

$$L_3 Y_l^m = m Y_l^m \quad (60)$$

が成り立つ。ただし、 $L = (L_1, L_2, L_3) = x \wedge p$ は角運動量作用素である。
角運動量作用素に関して

$$L^2 = -\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) - \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}, \quad (61)$$

の恒等式が成り立っている。特に、第三方向については

$$L_3 = \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (62)$$

という極形式に書ける。

同形方向に関する微分方程式は、いったんクンマーの方程式に変換してからラゲール多項式を用いて議論すると、非常に見通しが良い。著者[13]のほか、いくつかの研究成果 [47, 21, 52] にはラゲール多項式に関する有用な情報がある。結果のみ述べると、ともに整数の n および l を量子数として定まる動径方向の波動関数

$$R_{n,l}(r) = \sqrt{\frac{\gamma^3 (n-l)!}{2(n+1)^4 (n+l+1)!}} \left(\frac{\gamma r}{n+1} \right) e^{-\frac{\gamma r}{2(n+1)}} L_{n-l}^{(2l+1)} \left(\frac{\gamma r}{n+1} \right) \quad (63)$$

が正規直交系を与えることになる。ここで、 $L_{n-l}^{(2l+1)}$ はラゲール多項式である。

特に、水素型原子のハミルトン作用素については、動径方向の微分方程式における議論からエネルギースペクトルを導くことができる。

定理 3. H のエネルギー固有値は

$$E_n = \frac{\gamma^2}{4(n+1)^2}, \quad n \in \mathbb{N} \quad (64)$$

によって与えられる。いずれも整数の n , l および m を量子数として定まる波動関数

$$\psi_{n, l, m}(x) = R_{n, l}(r) Y_l^m(x), \quad |m| \leq l \leq n \quad (65)$$

は、束縛状態にある水素型原子の波動関数を表現し、正規直交系の関係を満たす。

なお、基底状態のエネルギーは

$$E_0 = -\frac{\gamma^2}{4} \quad (66)$$

であり、そのとき対応する波動関数

$$\psi_{000}(x) = \sqrt{\frac{\gamma^3}{2}} e^{-\gamma|x|/2} \quad (67)$$

は正の値を取る実数値関数である。

もちろん、水素原子に対する基底状態エネルギー $E_0 = -13.6$ eV は実験的にも証明されている精度の高い近似値である。

基底状態の波動関数の正値性は、すべての量子系について成り立つ普遍的な性質である。数理的アプローチによって証明されている正値性とは異なり、基底状態の波動関数の一意性については調和関数など多くの場合には成り立つものの、まだ数理的アプローチによる証明はない。この点が量子複雑系の安定性に関する研究で問題を難解なものにしている。

3.4 リーブ・ターリング不等式

磁場を含まないシュレーディンガー作用素

$$H = -\Delta + V(x) \quad (68)$$

について $L^2(\mathbb{R}^d)$ 上で考察する。数理解物理学の分野で重要なリーブ・ターリング不等式は、以下の定理によって与えられる。

定理 4 (リープ・ターリング不等式). $\gamma \geq 0$ とする。ポテンシャル項の負の部分 $V_-(x) = \max\{-V(x), 0\}$ は、条件 $V_- \in L^{\gamma+d/2}(\mathbb{R}^d)$ を満たすと仮定する。また H の負のエネルギー固有値を $\{E_j\}$ で表すものとする。そのとき、定数 $L_{\gamma, d} > 0$ が存在して、不等式

$$\sum_j |E_j|^\gamma \leq L_{\gamma, d} \int_{\mathbb{R}^d} V_-(x)^{\gamma+d/2} dx \quad (69)$$

が成立する。なお、不等式が成立する γ の値は次の通りである：

$$\begin{cases} \gamma \geq 1/2 & (d = 1) \\ \gamma > 0 & (d = 2) \\ \gamma \geq 0 & (d \geq 3) \end{cases} \quad (70)$$

さもなければ、ある V が存在して、どのように定数 $L_{\gamma, d}$ を取ったとしても、不等式が破れる。

H は有限個または無限個の負のエネルギー固有値を持つ。上記不等式における左辺の和について、 $\gamma = 0$ のとき負のエネルギー固有値の総数を表し、 $\gamma = 1$ のとき負のエネルギー固有値の総和を表すものである。1次元および2次元の場合は、負のエネルギー固有値の総数は有限であるとは限らない。しかし、ポテンシャル V が滑らかかつ遠方で十分に減衰している場合には、負のエネルギー固有値の総数が有限に留まる。もちろん、3次元以上の場合には、負のエネルギー固有値の総数は有限である。

リープとターリング [40] は、フェルミ粒子系から構成される物質の第二種の意味における安定性を証明するために、リープ・ターリング不等式を導いた。リープ・ターリング不等式は、ダイソンとレナード [22] が取り組んだ物質の安定性に関する問題について、より前進した結果を与えた。

$\gamma = 1/2 (d = 1)$ および $\gamma = 0 (d \geq 3)$ の例外を除き、ほぼすべての場合について、リープとターリング [41] は不等式が成立することを示した。境界値である $\gamma = 0 (d \geq 3)$ の場合は、ツイッケル [11]、リープ [42] およびローゼン

ブリューム [55] の三者がそれぞれ独立に証明を与えた。今日では CLR の上限とも呼ばれている。その他、リーとヤン [45], フェファーマン [24], コロン [10] なども定理の一般化や証明の簡素化に取り組んでいる。残る $\gamma = 1/2 (d = 1)$ の場合は、ワイドル [67] によって証明が完了した。

以上の経緯を経て定理が成立したが、不等式に現れる係数 $L_{\gamma, d} > 0$ の最善値を求めることが次の課題となった。特に、準古典近似によって得られる定数

$$L_{\gamma, d}^{\text{cl}} = (2\pi)^d \int_{|p| \leq 1} (1 - |p|^2)^\gamma dp = \frac{\Gamma(\gamma + 1)}{(4\pi)^{d/2} \Gamma(\gamma + 1 + d/2)} \quad (71)$$

との比較が興味の対象である。ここで Γ は、 $\theta > 0$ に対して定義されるガンマ関数

$$\Gamma(\theta) = \int_0^\infty \tau^{\theta-1} e^{-\tau} d\tau \quad (72)$$

である。

また、 $\gamma = 1$ の場合は、 \mathbb{R}^d における単位球の表面積 $|S^{d-1}|$ を用いて、簡単に

$$L_{1, d}^{\text{cl}} = \frac{2(2\pi)^{-d} |S^{d-1}|}{d(d+2)} \quad (73)$$

と表現することができる。

準古典近似によって得られる定数との大小関係を比較するため、

$$R_{\gamma, d} = L_{\gamma, d} / L_{\gamma, d}^{\text{cl}} \quad (74)$$

と置く。すると、漸的に $L_{\gamma, d}^{\text{cl}}$ で置き換えられるという性質から、可能な γ および d の組み合わせについて $R_{\gamma, d} \geq 1$ が成り立つ。アイゼンマンとリーブ [1] は 1978 年、関数 $R_{\gamma, d}$ は変数 γ に対して非増加であることを示した。そして、ヘルファーとロバート [28] は 1990 年、 $\gamma < 1$ ならば $R_{\gamma, d} > 1$ となることを示した。すなわち、リーブ・ターリング不等式を準古典近似によって得ら

れる定数で置き換えることはできないという量子系に特有の性質である。1998年、フンダートマルク、リーブおよびトーマス [31] は、 $\gamma = 1/2 (d=1)$ のときの $L_{\gamma, d}$ の最善値を得たことで、具体的に $R_{1/2, 1} = 2 > 1$ となることが知られるようになった。

さらに、フンダートマルク、ラプテフおよびワイドル [30] は2000年、 $\gamma \geq 3/2$ のときは $R_{\gamma, 1} = 1$ 、すなわち、不等式の係数が準古典近似によって得られたものと一致することを見出した。それだけでなく、ラプテフとワイドル [37] は、持ち上げ論法と呼ばれている技巧的なアイデアを導入することによって、 $\gamma \geq 3/2$ ならば $R_{\gamma, d} = 1$ となることを証明した。

最近の成果としては、ドルビュール、ラプテフおよびロス [20] によって、任意の空間次元 d に対して、現在知られている中で $R_{1, d} \leq \pi/\sqrt{3} = 1.81\dots$ とする最善値が得られている。この評価の証明にも、持ち上げ論法が使われているが、1次元空間における導出過程からすると、 $d=1$ の場合はまさに最善値であり、高次元では改良の余地があるのではないかと信じられている。

その一方、2011年になって、ルーミン [56] は全く新しい概念とともにルベグ測度の性質を用いた高度な抽象化によって、

$$R_{1, d} \leq \left(\frac{d+4}{d} \right)^{d/2} \quad (75)$$

という評価を得た。この斬新なアイデアに刺激を受けたソロベイ [62] は、より具体的な計算方法に基づき、エレガントな証明で同様の評価が得られることを示した。さらに、分数統計量の性質を持つアニオン (anyon) に対する成果 [46] に彼の結果が応用されている。もちろん、この評価は現在知られている最善値よりも大きい。しかし、著者 [16] は、いくつかの仮定を置くことで、彼らの結果を改良する方法を示唆している。

物質の安定性に関する物理学的な関心は、 $R_{1, 3} = 1$ と主張するリーブとターリング [41] の予想に注意が向けられている。すなわち、3次元(したがって、

3次元以上の任意の空間次元) の場合, 基底状態エネルギーの総和に関するリープ・ターリング不等式の係数は, 準古典近似によって得られる値に一致するという予想である。この予想は, まだ証明されていない。この分野の研究については, 最近出版されたいくつかの概説 [36, 3], および, その中で引用されている文献の中で詳しく述べられている。

4 量子複雑系に対するハミルトン作用素

4.1 シュレーディンガー作用素

電磁場 (V, A) の中を運動する M 個の原子核と N 個の電子から構成される量子系について考察しよう。ここで, V はクーロン相互作用に基づくスカラーポテンシャルであって,

$$V(X, R) = \sum_{j=1}^N \sum_{k=j+1}^N \frac{1}{|x_j - x_k|} - \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^M \frac{Z_k}{|x_j - R_k|} + \sum_{j=1}^M \sum_{k=j+1}^M \frac{Z_j Z_k}{|R_j - R_k|} \quad (76)$$

の形式で表現することができる。ここで, $R = (R_1, \dots, R_M) \in \mathbb{R}^d \times \dots \times \mathbb{R}^d$ は静止した原子核の位置を表し, それぞれの原子核の電荷を $Z = (Z_1, \dots, Z_M) \in \mathbb{R}_+ \times \dots \times \mathbb{R}_+$ と仮定する。原子核の電荷は整数に値を取らなくても, 以下の議論で差し支えるということはない。他方, 電子は $X = (x_1, \dots, x_N) \in \mathbb{R}^d \times \dots \times \mathbb{R}^d$ に位置し, ポテンシャルの影響を受けて運動するものとする。簡単のため, 電子の電荷は -1 であるとし, $\hbar = -1$, $c = 1$ および $e = 1$ を満たす自然単位系を採用することがある。

また, A は磁場を記述するベクトルポテンシャル

$$A \in L_{\text{loc}}^2(\mathbb{R}^d; \mathbb{R}^d) \quad (77)$$

であり, 磁場 B に対して

$$\nabla \times A = B \quad (78)$$

の関係が成り立っている。磁場に対して A の一意性を保証するため、クーロ
ンゲージ

$$\nabla \cdot A = 0 \quad (79)$$

を仮定することが一般的である。

すると、電磁場を含むシュレーディンガー作用素は、電子 j に対する運動量
の作用素

$$T_j = \frac{1}{2m} (-i\nabla - (j) + \sqrt{\alpha}A(x_j))^2 \quad (80)$$

を用いて

$$H = \sum_{j=1}^N T_j + \alpha V(X, R) \quad (81)$$

と書くことができる。ただし、 $\alpha > 0$ はゾンマーフェルトの微細構造定数、
 $\nabla^{(j)}$ は電子 j の位置座標 $x^{(j)} = (x_1^{(j)}, \dots, x_d^{(j)}) \in \mathbb{R}^d$ に作用するナブラ作用素

$$\nabla^{(j)} = \left(\frac{\partial}{\partial x_1^{(j)}}, \dots, \frac{\partial}{\partial x_d^{(j)}} \right) \quad (82)$$

である。

4.2 擬相対論的作用素

シュレーディンガー作用素は、エネルギーの低い量子系、すなわち相対論的
効果を見捨てる量子系に対して有効である。エネルギーの高い量子系を記述
する場合、相対性理論に基づくハミルトン作用素について考えなければなら
ない。

電子 j に対応する運動量的作用素 $p_j = -i\hbar\nabla^{(j)}$ を用いると、シュレーディン
ガー作用素は

$$H = \frac{\hbar}{2m} \sum_{j=1}^N (p_j + \sqrt{\alpha}A(x_j))^2 + \alpha V(X, R) \quad (83)$$

と表すことができる。特に、磁場のない場合 ($A = 0$) は

$$H = \frac{1}{2m} \sum_{j=1}^N p_j^2 + \alpha V(X, R) \quad (84)$$

と書くことができ、ハミルトン作用素は電子の運動エネルギーとポテンシャルエネルギーの和の形をしていることが分かる。相対論的な運動エネルギーは、全エネルギーから質量エネルギーを差し引いた

$$\sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} - mc^2 \quad (85)$$

であるから、

$$H = \sum_{j=1}^N (\sqrt{p_j^2 c^2 + m^2 c^4} - mc^2) + \alpha V(X, R) \quad (86)$$

と考えると良さそうである。一般に、磁場のある場合は

$$H = \sum_{j=1}^N (\sqrt{(p_j^2 + \sqrt{\alpha} A(x_j))^2 c^2 + m^2 c^4} - mc^2) + \alpha V(X, R) \quad (87)$$

と表現することができる。これが擬相対論的作用素のハミルトニアンである。

4.3 物質の安定性

シュレーディンガー作用素に基づく量子複雑系の基底状態エネルギーについて、次の定理を得る。

定理 5. $Z_{max} = \max_j \{Z_j\}$ とする。反対称の波動関数 ψ に q 個のスピン状態を含めると、

$$(\psi, H\psi) \geq -0.747 \alpha^2 N q^{2/3} (1 + 2.56 Z_{max} (M/N)^{1/3})^2 \quad (88)$$

という不等式が成り立つ。

よく知られている水素原子の場合、すなわち $Z = 1$, $M = N$ および $q = 2$ ならば、1 核子あたりの基底状態エネルギーは 15.03 リュードベリとなる。この

値は、実験値と比べると依然として高いが、リーブ・ターリング不等式の係数を改良することで、より現実に近いエネルギー値を導出できるようになる。

一方、相対論的物質の安定性について考察する場合、任意の質量 $m > 0$ に対して、関係式

$$|p| - m \leq \sqrt{|p|^2 + m^2} \leq |p| + m \quad (89)$$

が成り立つことを踏まえると、質量のない量子 ($m = 0$) についての安定性が得られれば十分であることが分かる。すると、シュレーディンガー作用素の場合と同様に基底状態エネルギーを評価することができて、磁場を含まない擬相対論的作用素 H に対して次の定理が得られる。

定理 6. $Z\alpha \leq 2/\pi$ のとき、

$$(\psi, H\psi) \geq 0 \quad (90)$$

という評価が成り立つ。他方、 $Z\alpha \geq 2/\pi$ のとき、 $(\psi, H\psi)$ は下に有界でない。

およそ $\alpha = 1/137$ であるから、上記定理における Z の臨界点は、だいたい $Z_c = 87.2$ くらいである。

なお、相対論的物質の安定性が成立すると、自然に非相対論的物質の安定性が成り立つ。実際、任意の正定数 $a > 0$ に対して、不等式

$$\frac{1}{2}|p|^2 \geq a|p| - \frac{a^2}{2} \quad (91)$$

が言えるため、非相対論的物質に対する基底状態エネルギーを計算するとき、下限値として相対論的物質に対する基底状態エネルギーが保証されるためである。

5 ま と め

本稿では、量子状態を記述する偏微分方程式としてシュレーディンガー方程式、擬相対論的方程式、パウリ方程式およびディラック方程式を紹介した上で、量子複雑系の最新の研究成果に基づき、物質の安定性を示す不等式の概略を述べた。特に、量子状態の時間発展を記述するには、それぞれのエネルギー表現に対応したハミルトン作用素が存在し、スペクトル理論に基づく数理的なアプローチによって解析できることを示した。

現実の物理系では、電子が原子核の極めて近くにまで落ち込むことができるとき、クーロンポテンシャルから獲得する大きな運動エネルギーによって相対論的効果を見捨てることができなくなる。そのため、たとえ近似的な方法であっても、相対論的効果を補正する必要に迫られる。また、電子のスピンと電磁場の相互作用を含めて考えなければ、正しくエネルギーを評価することは不可能であろう。

本文でも述べた通り、そのような問題を克服すると考えられているのがディラック作用素である。実際、水素原子のスペクトルを計算してみると、驚くべき精度で相対論的補正ができることが明らかになった。その一方で、ディラック作用素から物質の安定性を証明しようとするには、いくつかの技巧的なトリックが必要になる。すなわち、ディラック方程式に従うすべての自由量子は、シュレーディンガー方程式の場合とは異なり、正の無限大および負の無限大のエネルギーを取ることができる。すべてのディラック粒子は、ディラックの海に落ち込んで溺れてしまうのである。ディラック粒子の負のエネルギーは、空間を充填しているフェルミ粒子と考えれば、フェルミ粒子2個分のエネルギーを添加することで少なくとも1個分のエネルギーを持った粒子が飛び出し、そこにホールができる。そのホールこそ、ディラックが予言した反粒子であって、実験的にも、その存在が確認されている。

したがって、ディラックの海に量子が落ち込まないという設定が必要とさ

れ、ブラウンとラーベンホールによって正のスペクトル部分空間への射影という作用素が導入された。もちろん、この操作によってディラック粒子から構成される量子複雑系の安定性は当然に保証される。しかし、そのような技巧的なトリックが本当に必要なのかという疑問は、厳密な計算と論理を優先する立場の数理物理学の分野から提起されている。これまで公理として設定する必要のなかったパウリの排他原理が再び持ち込まれようとしているからである。

では、このディラックの海にまつわる問題は、いったいどのように解決したら良いのだろうか？ 引き続き、ディラック作用素の性質について考察を深めたい。

謝 辞

本稿で述べた研究を遂行するにあたり、ミュンヘン大学 (Ludwig-Maximilians-Universität München) 数学研究所のシーデントップ (H. Siedentop) 教授をはじめ、解析グループの同僚および大学院生には、研究内容に関する議論とともに、有益な助言や示唆をいただき、たいへんお世話になりました。末尾になりますが、ここで感謝の気持ちを述べさせていただきます。

参 考 文 献

- [1] M. Aizenman and E. H. Lieb, "On semiclassical bounds for eigenvalues of Schrödinger operators," *Phys. Lett. A*, Vol. 66, no. 6, 427-429. (1978)
- [2] The ATLAS Collaboration, "Observation of a new particle in the search for the Standard Model Higgs boson with the ATLAS detector at the LHC," Vol. 716, no. 1, pp. 1-29. (2012)
- [3] R. D. Benguria, "Stability of matter," *Operator Theory: Advances and Applications*, Vol. 224, pp. 25-54. (2012)
- [4] M. L. Boas, *Mathematical Methods in the Physical Sciences* second edition, John Wiley & Sons. (1983)
- [5] N. Bohr, "On the constitution of atoms and molecules," *Philosophical Magazine and Journal of Science*, Vol. 26, pp. 1-25. (1913)
- [6] N. Bohr, "On the constitution of atoms and molecules. Part II. Systems Containing only a Single Nucleus," *Philosophical Magazine and Journal of Science*, Vol. 26, pp. 476-501. (1913)
- [7] N. Bohr, "On the constitution of atoms and molecules. Part III. Systems Containing

- Several Nuclei," *Philosophical Magazine and Journal of Science*, Vol. 26, pp. 857-875. (1913)
- [8] L. de Broglie, "Recherches sur la théorie des quanta," Thesis, Paris. (1924) ; See also *Ann. Phys. (Paris)*, Vol. 3, no. 22. (1925)
- [9] CMS Collaboration, "Combined results of searches for the standard model Higgs boson in pp collisions at $\sqrt{s} = 7\text{TeV}$," Vol. 710, no. 1, pp. 26-48. (2012)
- [10] J. G. Conlon, "A new proof of the Cwikel-Lieb-Rosenbljum bound," *Rocky Mountain J. Math.*, Vol. 15, no. 1, pp. 117-122. (1985)
- [11] M. Cwikel ; "Weak Type Estimates for Singular Values and the Number of Bound States of Schrödinger Operators," *Ann. of Math., Second Series*, Vol. 106, pp. 93-100. (1977)
- [12] B. Dacorogna, *Introduction to the Calculus of Variations*, second edition, Imperial College Press. (2009)
- [13] Y. Dan, "Energy spectrum of hydrogenic atoms," preprint.
- [14] Y. Dan, "Functional analytic inequalities for stability of the hydrogenic atom," preprint.
- [15] Y. Dan, "The isoperimetric inequality," preprint.
- [16] Y. Dan, "The Lieb-Thirring conjecture for Schrödinger operators," preprint.
- [17] Y. Dan, "Stability in quantum complex systems," preprint.
- [18] S. F. Dermott, "On the origin of commensurabilities in the solar system-II : the orbital period relation," *Mon. Not. RAS*, Vol. 141, pp. 363-376. (1968)
- [19] S. F. Dermott, "On the origin of commensurabilities in the solar system-III : the resonant structure of the solar system," *Mon. Not. RAS*, Vol. 142, pp. 143-149. (1969)
- [20] J. Dolbeault, A. Laptev and M. Loss ; "Lieb-Thirring inequalities with improved constants," *J. Eur. Math. Soc.*, Vol. 10, pp. 1121-1126. (2008)
- [21] C. F. Dunkl, "A Laguerre polynomial orthogonality and the hydrogen atom," *Anal. Appl.*, Vol. 01, 177. (2003)
- [22] F. J. Dyson and A. Lenard, "Stability of Matter. I," *J. Math. Phys.*, Vol. 8, no. 3, pp. 423-434 (1967) ; A. Lenard and F. J. Dyson, "Stability of Matter. II," *J. Math. Phys.*, Vol. 9, no. 5, pp. 698-711. (1968)
- [23] F. J. Dyson, "Ground-state energy of a finite system of charged particles," *J. Math. Phys.*, Vol. 8, no. 8, pp. 1538-1545. (1967)
- [24] C. L. Fefferman, "The uncertainty principle," *Bull. Amer. Math. Soc. (N. S.)*, Vol. 9, no. 2, pp. 129-206. (1983)
- [25] M. E. Fisher and D. Ruelle, "The stability of many-particle systems," *J. Math. Phys.*, Vol. 7, no. 2, pp. 260-270. (1966)
- [26] D. J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics*, second edition, Pearson Education. (2005)
- [27] S. J. Gustafson and I. M. Sigal, *Mathematical Concepts of Quantum Mechanics*, second

edition, Springer. (2011)

- [28] B. Helffer and D. Robert, "Riesz means of bound states and semiclassical limit connected with a Lieb-Thirring's conjecture," *Asymptotic Anal.*, Vol. 3, no. 2, pp. 91-103. (1990) ;
"Riesz means of bounded states and semi-classical limit connected with a Lieb-Thirring conjecture. II," *Ann. Inst. H. Poincaré Phys. Théor.*, Vol. 53, no. 2, pp. 139-147. (1990)
- [29] P. D. Hislop and I. M. Sigal, *Introduction to Spectral Theory: with applications to Schrödinger operators*, Springer. (1996)
- [30] D. Hundertmark, A. Laptev and T. Weidl, "New bounds on the Lieb-Thirring constants," *Invent. Math.*, Vol. 140, no. 3, pp. 693-704. (2000)
- [31] D. Hundertmark, E. H. Lieb and L. E. Thomas, "A sharp bound for an eigenvalue moment of the one-dimensional Schrödinger operator," *Adv. Theor. Math. Phys.*, Vol. 2, no. 4, pp. 719-731. (1998)
- [32] W. Hunziker and I. M. Sigal, "The quantum N-body problem," *J. Math. Phys.*, Vol. 41. no. 6, pp. 3448-3510. (2000)
- [33] T. Kato, "Fundamental Properties of Hamiltonian Operators of Schrödinger Type," *Transactions of the American Mathematical Society*, Vol. 70, no. 2, pp. 195-211. (1951)
- [34] T. Kato, *Perturbation theory for linear operators*, Springer. (1966)
- [35] T. Kato, "Schrödinger operators with singular potentials," *Israel J. Math.*, 13, pp. 135-148. (1973)
- [36] A. Laptev, "Spectral inequalities for partial differential equations and their applications," *AMS/IP Stud. Adv. Math.*, Vol. 51, pp. 629-643. (2012)
- [37] A. Laptev and T. Weidl, "Sharp Lieb-Thirring inequalities in high dimensions," *Acta Math.*, Vol. 184, no. 1, pp. 87-111. (2000)
- [38] E. H. Lieb and M. Loss, *Analysis*, second edition, American Mathematical Society. (2001)
- [39] E. H. Lieb and R. Seiringer, *The Stability of Matter in Quantum Mechanics*, Cambridge University Press. (2010)
- [40] E. H. Lieb and W. E. Thirring, "Bound for the Kinetic Energy of Fermions which Proves the Stability of Matter," *Phys. Rev. Lett.*, 35, 687-689. (1975) ; Errata *ibid.*, 1116. (1975)
- [41] E. H. Lieb and W. E. Thirring, "Inequalities for the Moments of the Eigenvalues of the Schrödinger Hamiltonian and their Relation to Sobolev Inequalities," in *Studies in Mathematical Physics*, edited by E. Lieb, B. Simon and A. Wightman Princeton University Press, Princeton, NJ, pp. 269-303. (1976)
- [42] E. H. Lieb, "The number of bound states of one-body Schrödinger operators and the Weyl problem," *Proc. Amer. Math. Soc. Symposia in Pure Math.*, Vol. 36, pp. 241-252. (1980)
- [43] E. H. Lieb, "Thomas-Fermi and related theories of atoms and molecules," *Rev. Mod. Phys.*, Vol. 53, pp. 603-641. (1981)

- [44] E. H. Lieb and S. Oxford, "Improved Lower Bound on the Indirect Coulomb Energy," *Int. J. Quantum Chem.*, Vol. 19, pp. 427-439. (1981)
- [45] P. Li and S. T. Yau, "On the Schrödinger equation and the eigenvalue problem," *Comm. Math. Phys.* Vol. 88, no. 3, 309-318. (1983)
- [46] D. Lundholm and J. P. Solovej, "Hardy and Lieb-Thirring inequalities for anyons," *Commun. Math. Phys.* Vol. 322, no. 3, pp. 883-908. (2013)
- [47] J. Mawhin and A. Ronveaux, "Schrödinger and Dirac equations for the hydrogen atom, and Laguerre polynomials," *Archive for History of Exact Sciences*, Vol. 64, Issue 4, pp. 429-460. (2010)
- [48] C. D. Murray and S. F. Dermott, *Solar system dynamics*, Cambridge University Press, Cambridge. (1999)
- [49] H. Nagaoka, "Kinetics of a System of Particles illustrating the Line and the Band Spectrum and the Phenomena of Radioactivity," *Philosophical Magazine*, Vol. 7, pp. 445-455. (1904)
- [50] Y. V. Nazarov and J. Danon, *Advanced Quantum Mechanics*, Cambridge University Press. (2013)
- [51] I. Newton, *Philosophiae Naturalis Principia Mathematica*, London. (1687)
- [52] A. W. Niukkanen, "Clebsch-Gordan-type linearisation relations for the products of Laguerre polynomials and hydrogen-like functions," *J. Phys. A : Math. Gen.* 18, 1399. (1985)
- [53] J. Rauch, *Partial Differential Equations*, Springer. (1991)
- [54] M. Reed and B. Simon, *Methods of Modern Mathematical Physics*, Vol. 1-4, Academic Press. (1978)
- [55] G. V. Rozenbljum, "Distribution of the discrete spectrum of singular differential operators," (Russian) *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, Vol. 202, pp. 1012-1015. (1972) ; *Izv. VUZov, Matematika*, Vol. 1, pp. 75-86. (1976)
- [56] M. Rumin, "Balanced distribution-energy inequalities and related entropy bounds," *Duke Math. J.*, Vol. 160, no. 3, pp. 567-597. (2011)
- [57] E. Rutherford, "The Scattering of Alpha and Beta Particles by Matter and the Structure of the Atom," *Philosophical Magazine*, Vol. 21, pp. 669-688. (1911)
- [58] E. Rutherford, "The Structure of the Atom," *Philosophical Magazine*, Vol. 27, pp. 488-498. (1914)
- [59] E. Schrödinger, "Quantisierung als Eigenwertproblem," *Annalen der Physik*, Vol. 384, no. 4, pp. 361-376 ; *ibid.* Vol. 384, no. 6, pp. 489-527 ; *ibid.* Vol. 385, no. 13, pp. 437-490 ; *ibid.* Vol. 386, no. 18, pp. 109-139. (1926)
- [60] B. Simon, "Universal Diamagnetism of Spinless Bose Systems," *Phys. Rev. Lett.*, 36, pp. 1083-1084. (1976)
- [61] B. Simon, "Kato's inequality and the comparison of semigroups," *J. Funct. Anal.*, Vol. 32,

no. 1, pp. 97-101. (1979)

- [62] J. P. Solovej, "The Lieb-Thirring inequality," <http://www.ucl.ac.uk/~ucahipe/solovej-lt.pdf>. (2011)
- [63] G. Teschl, *Mathematical methods in quantum mechanics : with applications to Schrödinger operators*, American Mathematical Society. (2009)
- [64] W. Thirring, *Quantum Mechanics of Large Systems, A Course in Mathematical Physics 4*, Springer. (1983)
- [65] J. J. Thomson, "Cathode rays," *Philosophical Magazine*, Vol. 44, pp. 293. (1897)
- [66] J. J. Thomson, "On the Structure of the Atom : an Investigation of the Stability and Periods of Oscillation of a number of Corpuscles arranged at equal intervals around the Circumference of a Circle ; with Application of the Results to the Theory of Atomic Structure," *Philosophical Magazine*, Vol. 7, pp. 237-265. (1904)
- [67] T. Weidl, "On the Lieb-Thirring constants $L_{\gamma, 1}$ for $\gamma \geq 1/2$," *Comm. Math. Phys.* Vol. 178, no. 1, pp. 135-146. (1996)

なお、本研究は2012年度国外研究の成果として公開するものです。