シュレーディンガー・ニュートン方程式

量子力学と重力を合わせた方程式であるシュレーディンガー・ニュートン方程式についてフワフワとした話をします。
最初に一般相対性理論が出てきますが、アインシュタイン方程式の雰囲気だけを知っていれば大丈夫だと思います。

1 粒子のシュレーディンガー方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla^2 - V\right)\psi(\boldsymbol{x},t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{x},t)$$

このようになっており、V はポテンシャルです。この V を重力の効果として与えることを考えます。そのために、アインシュタイン方程式

$$G_{\mu\nu} = \frac{8\pi\kappa}{c^4}T_{\mu\nu}$$

を持ち出します (持ち出さなくてもどうにかなりますが話の流れとしてここから行います)。$G_{\mu\nu}$ はアインシュタインテンソル、$T_{\mu\nu}$ はエネルギー・運動量テンソル、c は光速、κ は重力定数です。エネルギー・運動量テンソルは完全流体とし、エネルギー密度の次元を持たせています。添え字の μ と ν は時空の成分を表し、$\mu,\nu = 0,1,2,3$ です。細かいことは一般相対性理論の「エネルギー・運動量テンソル」と「アインシュタイン方程式」を見てください。アインシュタイン方程式とニュートンの重力理論との対応を簡単に見ておきます。
まず、時空の計量テンソル $g_{\mu\nu}$ を

$$g_{\mu\nu} = \eta_{\mu\nu} + h_{\mu\nu}$$

と分解します。$\eta_{\mu\nu}$ はミンコフスキー空間 (平坦な時空) の計量テンソル、$h_{\mu\nu}$ はそれに対する微小な寄与です。そして、速度が光速に比べて十分小さいと要求します。そうすると、エネルギー・運動量テンソルは質量による寄与以外は近似的に無視できます。$T_{\mu\nu}$ の成分で言えば

$$|T_{00}| \gg |T_{0i}| \gg |T_{ij}|$$

ということです。これらの近似はニュートンの重力理論への極限 (非相対論的極限) なので、アインシュタイン方程式は一般相対性理論の「アインシュタイン方程式」で行っているように、ポアソン方程式

$$\nabla^2\phi = 4\pi\kappa\rho$$

になります。ϕ は重力ポテンシャル、ρ は質量分布 (質量密度) です。この ϕ をシュレーディンガー方程式の V に入れても量子論的な領域で粒子が重力と絡んでいません。なので、もう一段ひねります。
やることは単純で、アインシュタイン方程式の左辺の時空の幾何学を表すアインシュタインテンソルは放置して、エネルギー・運動量部分に手を加えます。量子論では物理量は期待値でしか観測されないことから、エネルギー・運動量テンソルを演算子として状態 $|\psi\rangle$ で挟んで

$$G_{\mu\nu} = \frac{8\pi\kappa}{c^2}\langle\psi|\hat{T}_{\mu\nu}|\psi\rangle \tag{1}$$

この形を準古典的 (semi-classical) アインシュタイン方程式と言ったりもします。これを直接扱うのも難しいので、これに対して非相対論的極限を取ります。そうすると、質量分布 ρ が波動関数 $\psi(\boldsymbol{x},t)$ による確率分布に従うことになるので、その波動関数に従う粒子の質量を m としてポアソン方程式は

$$\nabla^2\phi = 4\pi\kappa m|\psi(\boldsymbol{x},t)|^2$$

となります。方程式の構造自体は力学で出てくるものと同じなので、解けば

$$\phi(\boldsymbol{x},t)=-\kappa m\int d^3x'\frac{|\psi(\boldsymbol{x}',t)|^2}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}$$

一応表記上の注意ですが $(\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,x_3),\ \boldsymbol{y}=(y_1,y_2,y_3))$

$$|\psi(\boldsymbol{x},t)|^2=\psi^*(\boldsymbol{x},t)\psi(\boldsymbol{x},t)$$
$$|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|=\sqrt{(x_1-y_1)^2+(x_2-y_2)^2+(x_3-y_3)^2}$$

となっています。

　これをシュレディンガー方程式に組み込みます。波動関数はどちらも同じものとして、単純にシュレーディンガー方程式の V に入れることで

$$\begin{aligned}i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{x},t)&=(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+m\phi(\boldsymbol{x},t))\psi(\boldsymbol{x},t)\\&=\Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2-\kappa m^2\int d^3y\frac{|\psi(\boldsymbol{y},t)|^2}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}\Big)\psi(\boldsymbol{x},t)\end{aligned}$$

ポテンシャル V は $m\phi$ です。この方程式をシュレーディンガー・ニュートン方程式と言います。重力ポテンシャルが粒子自身の質量によるものなので、自己相互作用している粒子に対する非線形方程式となっています。一般相対性理論の段階からでなく、質量分布が波動関数に従っている場合とすることでも出てきます。

　シュレーディンガー・ニュートン方程式もシュレーディンガー方程式と同じように

$$\psi(\boldsymbol{x},t)=\Psi(\boldsymbol{x})e^{-iEt/\hbar}$$

と置き換えることで時間に依存しない形として

$$E\Psi(\boldsymbol{x})=(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2-\kappa m^2\int d^3y\frac{|\Psi(\boldsymbol{y})|^2}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|})\Psi(\boldsymbol{x})$$

となります。

　シュレーディンガー・ニュートン方程式のラグランジアンは

$$L=\int d^3x[\frac{i\hbar}{2}(\psi^*\frac{d\psi}{dt}-\psi\frac{d\psi^*}{dt})-\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla^*\psi)\cdot(\nabla\psi)]+\frac{\kappa m^2}{2}\int d^3xd^3y\frac{|\psi(\boldsymbol{x},t)|^2|\psi(\boldsymbol{y},t)|^2}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}$$

と与えられます。第一項は通常のシュレディンガー方程式の部分で、第二項が重力ポテンシャルによる部分です。これをオイラー・ラグランジュ方程式に入れれば、シュレーディンガー・ニュートン方程式が出てきます。例えば、ポテンシャル部分は $\psi^*(\boldsymbol{x}',t)$ で微分すると

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial\psi^*}\int d^3xd^3y\frac{|\psi(\boldsymbol{x},t)|^2|\psi(\boldsymbol{y},t)|^2}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}&=\int d^3y\frac{\psi(\boldsymbol{x}',t)|\psi(\boldsymbol{y},t)|^2}{|\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{y}|}+\int d^3x\frac{|\psi(\boldsymbol{x},t)|^2\psi(\boldsymbol{x}',t)}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}\\&=2\int d^3x\frac{|\psi(\boldsymbol{x},t)|^2}{|\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x}|}\psi(\boldsymbol{x}',t)\end{aligned}$$

となります。

この方程式の特徴として、確率密度 $\psi^*\psi$ に対するカレントの式と期待値による運動方程式に重力ポテンシャルが入らないというのがあります。これらは簡単に見れます。カレントは、V が実数なのでポテンシャルありでのシュレーディンガー方程式と同じ手続きで

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi)+\frac{\hbar}{2im}\nabla\cdot(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*)=0$$

となります。これには重力ポテンシャルの寄与は入ってきません。

期待値に対する運動方程式もポテンシャルありでのエーレンフェストの定理を出すときと同じようになっています。位置 $\boldsymbol{x}_i$ の期待値を時間微分すると

$$\frac{\partial}{\partial t}<x_i>=\frac{\partial}{\partial t}\int d^3x\psi^*x_i\psi=\int d^3x(\frac{\partial\psi^*}{\partial t}x_i\psi+\psi^*x_i\frac{\partial\psi}{\partial t})$$

$i=1,2,3$ は 3 次元成分をあらわしています ($\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,x_3)$)。これにシュレーディンガー・ニュートン方程式を入れると、波動関数は表面積分で消えるとして部分積分で変形していくと

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}<x_i>=&\int d^3x\big[-\frac{1}{i\hbar}(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi^*}{\partial\boldsymbol{x}^2}-m\phi\psi^*)x_i\psi+\frac{1}{i\hbar}\psi^*x_i(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial\boldsymbol{x}^2}-m\phi)\psi\big]\\
=&\frac{\hbar}{2im}\int d^3x\big[(\frac{\partial^2\psi^*}{\partial\boldsymbol{x}^2})x_i\psi-\psi^*x_i\frac{\partial^2\psi}{\partial\boldsymbol{x}^2}\big]\\
=&\frac{\hbar}{2im}\int d^3x\big[-\frac{\partial\psi^*}{\partial\boldsymbol{x}}\cdot\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{x}}(x_i\psi)-\psi^*x_i\frac{\partial^2\psi}{\partial\boldsymbol{x}^2}\big]\\
=&\frac{\hbar}{2im}\int d^3x\big[\psi^*(\frac{\partial^2}{\partial\boldsymbol{x}^2}x_i\psi)-\psi^*x_i\frac{\partial^2\psi}{\partial\boldsymbol{x}^2}\big]\\
=&\frac{\hbar}{2im}\int d^3x\big[\psi^*((\frac{\partial}{\partial x_i}\psi+\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{x}}\cdot(x_i\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{x}}\psi))-\psi^*x_i\frac{\partial^2\psi}{\partial\boldsymbol{x}^2}\big]\\
=&\frac{\hbar}{2im}\int d^3x\big[\psi^*(2\frac{\partial}{\partial x_i}\psi+x_i\frac{\partial^2\psi}{\partial\boldsymbol{x}^2})-\psi^*x_i\frac{\partial^2\psi}{\partial\boldsymbol{x}^2}\big]\\
=&\frac{\hbar}{im}\int d^3x\psi^*\frac{\partial}{\partial x_i}\psi
\end{aligned}$$

よって、重力ポテンシャルは入ってません。同じように運動量の期待値の時間微分も出せて

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}<p_i>=&\frac{\partial}{\partial t}\int d^3x\psi^*(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x_i})\psi\\
=&-\int d^3x\psi^*m\frac{\partial\phi}{\partial x_i}\psi\\
=&\kappa m^2\int d^3xd^3y\psi^*(\boldsymbol{x},t)(\frac{\partial}{\partial x_i}\frac{|\psi(\boldsymbol{y},t)|^2}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|})\psi(\boldsymbol{x},t)
\end{aligned}$$

$m\phi=V$ としてポテンシャルありでのシュレーディンガー方程式と同じようにすればいいので途中を省いています。積分部分は、$\boldsymbol{x}$ と $\boldsymbol{y}$ の積分がいるために $\boldsymbol{x}$ と $\boldsymbol{y}$ の入れ替えで式は変わらないので

$$\int d^3xd^3y\psi^*(\boldsymbol{x},t)(\frac{\partial}{\partial x_i}\frac{|\psi(\boldsymbol{y},t)|^2}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|})\psi(\boldsymbol{x},t)=\int d^3xd^3y\psi^*(\boldsymbol{y},t)(\frac{\partial}{\partial y_i}\frac{|\psi(\boldsymbol{x},t)|^2}{|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}|})\psi(\boldsymbol{y},t)$$

しかし、微分が分母の絶対値にかかるために $\boldsymbol{x}$ と $\boldsymbol{y}$ の大小関係から符号が反転します。なので、この項は0にならなければいけなく、ポテンシャルとして別の U をシュレーディンガー方程式に組み込んだとき

$$\frac{\partial}{\partial t} < p_i > = -\int d^3x\psi^*\frac{\partial U}{\partial \boldsymbol{x}_i}\psi$$

となります。よって、期待値による運動方程式に重力ポテンシャルは入ってきません。

シュレーディンガー・ニュートン方程式の特殊な不変性についても見ておきます。シュレーディンガー・ニュートン方程式を

$$\boldsymbol{x} \ \Rightarrow \ \boldsymbol{x}' = \alpha\boldsymbol{x} \ , \ t \ \Rightarrow \ t' = \beta t \ , \ m \ \Rightarrow \ m' = \lambda m$$

と変換したとき (α, β, λ は実数)、波動関数も $\psi'(\boldsymbol{x}', t')$ となるとして

$$\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial}{\partial t'}\psi'(\boldsymbol{x}', t') &= -\frac{\hbar^2}{2m'}(\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}'}\cdot\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}'})\psi'(\boldsymbol{x}', t') - \kappa m'^2\int d^3y\frac{|\psi'(\boldsymbol{y}, t')|^2}{|\boldsymbol{x}' - \boldsymbol{y}|}\psi'(\boldsymbol{x}', t') \\
i\hbar\frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial t}\psi'(\boldsymbol{x}', t') &= -\frac{1}{\alpha^2\lambda}\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}}\cdot\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}})\psi'(\boldsymbol{x}', t') - \frac{\lambda^2}{\alpha}\kappa m^2\int d^3y\frac{|\psi'(\boldsymbol{y}, t')|^2}{|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}/\alpha|}\psi(\boldsymbol{x}', t') \\
&= -\frac{1}{\alpha^2\lambda}\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}}\cdot\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}})\psi'(\boldsymbol{x}', t') - \alpha^2\lambda^2\kappa m^2\int d^3y\frac{|\psi'(\alpha\boldsymbol{y}, \beta t)|^2}{|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}|}\psi(\boldsymbol{x}', t')
\end{aligned}$$

最後に積分を $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{y}/\alpha$ で置き換えています。このとき

$$\lambda = \mu \ , \ \alpha = \mu^{-3} \ , \ \beta = \mu^{-5} \ , \ \psi'(\boldsymbol{x}', t') = \mu^{9/2}\psi(\boldsymbol{x}, t)$$

とすると

$$\begin{aligned}
i\hbar\mu^5\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{x}', t') &= -\mu^5\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\boldsymbol{x}', t') - \mu^{-4}\kappa m^2\int d^3y'\frac{|\psi'(\boldsymbol{y}', t')|^2}{|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}'|}\psi'(\boldsymbol{x}', t') \\
i\hbar\mu^{19/2}\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{x}, t) &= -\mu^{19/2}\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\boldsymbol{x}, t) - \mu^{-4}\mu^{27/2}\kappa m^2\int d^3y\frac{|\psi(\boldsymbol{y}, t)|^2}{|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}|}\psi(\boldsymbol{x}, t) \\
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{x}, t) &= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\boldsymbol{x}, t) - \kappa m^2\int d^3y\frac{|\psi(\boldsymbol{y}, t)|^2}{|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}|}\psi(\boldsymbol{x}, t)
\end{aligned}$$

となって、元の方程式になります。よって、シュレーディンガー・ニュートン方程式はスケール変換

$$\boldsymbol{x} \ \Rightarrow \ \boldsymbol{x}' = \mu^{-3}\boldsymbol{x} \ , \ t \ \Rightarrow \ t' = \mu^{-5}t \ , \ m \ \Rightarrow \ m' = \mu m \ , \ \psi'(\boldsymbol{x}', t') = \mu^{9/2}\psi(\boldsymbol{x}, t)$$

に対して不変になっています。

シュレーディンガー・ニュートン方程式を無次元化することができます。そのために、長さの次元を持った l を導入し

$$\tau = \frac{2ml^2}{\hbar}$$

というのを作ります。プランク定数の次元は、長さの次元を L、質量を M、時間を T とすれば $[L^2MT^{-1}]$ なので、τ は時間の次元です。波動関数の次元は全空間積分で $|\psi|^2$ が1になるように規格化されていることから、$L^{-3/2}$ です。これらから、無次元の量 $\overline{\boldsymbol{x}}, \bar{t}, \overline{\psi}$ を

$$\boldsymbol{x}=l\overline{\boldsymbol{x}}\ ,\ t=\tau\bar{t}\ ,\ \psi=l^{-3/2}\overline{\psi}$$

と定義できます。これをシュレーディンガー・ニュートン方程式に入れると

$$\begin{aligned}
i\hbar\frac{1}{\tau}l^{-3/2}\frac{\partial}{\partial\bar{t}}\overline{\psi}(\overline{\boldsymbol{x}},\bar{t})&=\Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{l^2}\overline{\nabla}^2-\kappa m^2l^{-1}\int d^3\overline{y}\frac{|\overline{\psi}(\overline{\boldsymbol{y}},\bar{t})|^2}{|\overline{\boldsymbol{x}}-\overline{\boldsymbol{y}}|}\Big)l^{-3/2}\overline{\psi}(\overline{\boldsymbol{x}},\bar{t})\\
i\frac{\partial}{\partial\bar{t}}\overline{\psi}(\overline{\boldsymbol{x}},\bar{t})&=\frac{\tau}{\hbar}l^{3/2}\Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{l^2}\overline{\nabla}^2-\kappa m^2l^{-1}\int d^3\overline{y}\frac{|\overline{\psi}(\overline{\boldsymbol{y}},\bar{t})|^2}{|\overline{\boldsymbol{x}}-\overline{\boldsymbol{y}}|}\Big)l^{-3/2}\overline{\psi}(\overline{\boldsymbol{x}},\bar{t})\\
&=\Big(-\frac{\hbar}{2m}\frac{\tau}{l^2}\overline{\nabla}^2-\kappa m^2l^{-1}\frac{\tau}{\hbar}\int d^3\overline{y}\frac{|\overline{\psi}(\overline{\boldsymbol{y}},\bar{t})|^2}{|\overline{\boldsymbol{x}}-\overline{\boldsymbol{y}}|}\Big)\overline{\psi}(\overline{\boldsymbol{x}},\bar{t})\\
&=\Big(-\overline{\nabla}^2-\kappa\frac{2m^3l}{\hbar^2}\int d^3\overline{y}\frac{|\overline{\psi}(\overline{\boldsymbol{y}},\bar{t})|^2}{|\overline{\boldsymbol{x}}-\overline{\boldsymbol{y}}|}\Big)\overline{\psi}(\overline{\boldsymbol{x}},\bar{t})
\end{aligned}$$

重力定数の次元は $L^3M^{-1}T^{-2}$ なので κm^3l と $\hbar^2$ の次元は同じです。というわけで、無次元のシュレーディンガー・ニュートン方程式は無次元の結合定数

$$K=\frac{2\kappa m^3l}{\hbar^2}$$

を持っている形として

$$i\frac{\partial}{\partial\bar{t}}\overline{\psi}(\overline{\boldsymbol{x}},\bar{t})=(-\overline{\nabla}^2-K\int d^3\overline{y}\frac{|\overline{\psi}(\overline{\boldsymbol{y}},\bar{t})|^2}{|\overline{\boldsymbol{x}}-\overline{\boldsymbol{y}}|})\overline{\psi}(\overline{\boldsymbol{x}},\bar{t})$$

と書けます。長さのパラメータ l は任意で入れているために、見ている状況によって変化します。例えば、原子を考えるなら典型的な長さであるボーア半径 10^{-10}m を使って、K は (m は電子質量)

$$\begin{aligned}
K&=2\kappa m^3l\hbar^{-2}\\
&\simeq 2\times(6\times10^{-11})(9\times10^{-31})^3\times10^{-10}\times(10^{-34})^{-2}\\
&\simeq 10^{-43}
\end{aligned}$$

大体のオーダが出てくればいい程度でやっています。この結果から原子の領域を考えるとき重力ポテンシャルの効果は十分無視できることが分かります。

方程式から分かる性質を見てきましたが、具体的なことは解かないと分かりません。しかし、非線形方程式を厳密に解く方法がないので、数値計算を使うことになります (時間独立な場合はある程度解くことができるようですが)。最近のものとしては例えば、「Gravitationally induced inhibitions of dispersion according to the Schrodinger-Newton Equation」(arXiv:1105.1921) なんかを見てください。

最後にシュレーディンガー・ニュートン方程式を考える理由に触れておきます。理由は大まかには 2 つあります。1 つは単純に量子論と一般相対性理論を組み合わせるというものです。この組み合わせを一般相対性理論の段階で考えたものが準古典的アインシュタイン方程式 (1) です。準古典的アインシュタイン方程式の段階でも扱いが難しいので、さらに非相対論的極限に持っていき調べるのがシュレーディンガー・ニュートン方程式です。なので、シュレーディンガー・ニュートン方程式は名前の通り、量子力学での量子的な粒子と古典的な重力 (ニュートン的な) が相互作用しているのを表すと解釈されます。もう 1 つの理由が、量子論の有名なよく分からない話の 1 つである波動関数の収縮 (状態の収縮) です。この問題は重力と絡んでいるとも考えられてもおり、シュレーディンガー・ニュートン方程式によって記述できるとペンローズとかが提案しています。提案なので確定された話ではないですし、その証拠らしきものも求められていません。ペンローズの主張は「Quantum computation, entanglement and state reduction」(Phil.Trans.R.Soc.Lond.A.356 (1998),1927) に書いてあります。doi:10.1098/rsta.1998.0256 で検索すれば出てきます (Full Text(PDF) で見れるはずです)。

ちなみに、シュレーディンガー・ニュートン方程式は、「The Schrodinger-Newton equation as non-relativistic limit of self-gravitating Klein-Gordon and Dirac fields」(arXiv:1206.4250) で、球対称時空におけるクライン・ゴルドン方程式とディラック方程式 (これらは相対論的量子力学の方程式) の非相対論的極限によって導かれています。波動関数を

$$\psi(\boldsymbol{x},t)=\exp[ic^2S(\boldsymbol{x},t)/\hbar]\sum_{n=0}^{\infty}(\frac{\sqrt{\hbar}}{c})^n a_n(\boldsymbol{x},t)$$

と展開できると仮定して、$\hbar$ と $1/c$ のオーダを調べることで出しています。これは準古典近似と非相対論的極限を混ぜた展開になっています。面倒なだけなので地道にやれば出てきます (ディラック方程式ではスピノールなのでかなり面倒)。非相対論的極限を取ったとき、クライン・ゴルドン方程式とディラック方程式はシュレーディンガー方程式に、球対称時空 (ようはシュバルツシルト時空) はニュートン的な重力ポテンシャルになる、というように作られているので予想通りと言えば予想通りです。