正準交換関係の表現としての量子力学

新井朝雄（北海道大学名誉教授，数学部門）

2019年度大学院共通授業科目

「トポロジー理工学特別講義」(トポロジー理工学の進展)

2020年 1月31日

目次

参考書

[1] 新井朝雄『量子現象の数理』，朝倉物理学大系12，朝倉書店，2006．

[2] 新井朝雄・江沢洋『量子力学の数学的構造I，II』，朝倉物理学大系7，8，朝倉書店，1999

1　序—量子力学の二つの形式

- 量子力学の最初の歴史的形態—二つの形式

$$\begin{cases} \text{ハイゼンベルク（およびボルン–ヨルダン）}(1925) \\ \text{シュレーディンガー}(1926) \end{cases}$$

▶ これら二つの形式は外見上異なるが最終的な物理的結果は一致

- ハイゼンベルク–ボルン–ヨルダン: 代数的形式（“行列力学”）

基本原理： ハイゼンベルクの交換関係(自由度1の場合)

$$\boxed{Q_{\mathrm{H}}P_{\mathrm{H}} - P_{\mathrm{H}}Q_{\mathrm{H}} = i\hbar\mathbf{1}}$$

$\hbar := \dfrac{h}{2\pi}$ (h はプランク定数)，i は虚数単位

$Q_{\mathrm{H}}, P_{\mathrm{H}}, \mathbf{1}$ は次の型の無限行列：

$$
Q_{\mathsf{H}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0\cdots & \\ 1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix},
$$

$$
P_{\mathsf{H}} = i\sqrt{\frac{\hbar}{2}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0\cdots & \\ 1 & 0 & -\sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{3} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix},
$$

$$
\mathbf{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0\cdots & \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \quad \text{(\textbf{無限次の単位行列})}
$$

- シュレーディンガー：解析的形式（“波動力学”）

シュレーディンガー方程式

1 自由度の場合

- 時間に依存しないシュレーディンガー方程式

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)+V(x)\psi(x)=E\psi(x)} \qquad x\in\mathbb{R}$$

$m>0$：量子的粒子の質量，$V(x)$: ポテンシャル，ψ: 波動関数

E: エネルギー固有値

- 時間に依存するシュレーディンガー方程式

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\psi(t,x)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(t,x)+V(x)\psi(t,x)} \qquad t,x\in\mathbb{R}$$

• **行列力学と波動力学の形式的同等性**

変換理論（シュレーディンガー，ディラック，ヨルダン）

$\exists\{\varphi_n\}_{n=1}^{\infty}$ **完全正規直交系**

$$\left(\begin{array}{c} \langle\varphi_m,\varphi_n\rangle=\delta_{mn}, \quad \psi(x)=\sum_{n=1}^{\infty}\langle\varphi_n,\psi\rangle\,\varphi_n(x) \\ \\ \langle f,g\rangle:=\int_{\mathbb{R}} f(x)^* g(x)dx \quad (L^2\text{内積}) \end{array} \right)$$

such that

$$(Q_{\mathsf{H}})_{mn}=\langle\varphi_m,x\varphi_n\rangle\,, \quad (P_{\mathsf{H}})_{mn}=\left\langle\varphi_m,-i\hbar\frac{d}{dx}\varphi_n\right\rangle.$$

• <u>**完全に厳密な同等性の証明**</u>

J. **フォン・ノイマン** (1931)

記念碑的著作

J. **フォン・ノイマン『量子力学の数学的基礎』，** Springer, 1932

（邦訳：みすず書房， 1954**）**

(1) **抽象ヒルベルト空間論の構築** (1927〜1931)

$\longrightarrow$ **量子力学の数学的基礎，関数解析学** (functional analysis) **の発展**

J. **フォン・ノイマン『数理物理学の方法』（伊東恵一 編訳，筑摩書房，** 2013**）の「量子力学の数学的基礎づけ」**(1927 **年**) **も参照．**

(2) **量子力学を正準交換関係のヒルベルト空間表現として捉える**

$\longrightarrow$ **量子現象の統一的認識**

• **正準交換関係** (canonical commutation relations; CCR)

— **純代数的関係式**

交換子：$[A, B] := AB - BA$

自由度1の場合のCCR：

$$\boxed{[Q, P] = i\hbar I} \qquad (I\text{は単位元})$$

自由度dの場合のCCR

$$\boxed{\begin{aligned} &[Q_j, P_k] = i\hbar\delta_{jk} I, \\ &[Q_j, Q_k] = 0, \quad [P_j, P_k] = 0 \end{aligned}}$$

$j, k = 1, \ldots, d$，δ_{jk} はクロネッカーのデルタ

- CCRを満たす代数的対象$Q_1, \ldots, Q_d, P_1, \ldots, P_d$をヒルベルト空間で作用する線形作用素として実現することを**CCRの表現**という．

▶ **各自由度dに対して，自由度dのCCRは無限に多くの表現をもつ**

例 1.1 任意の実数$\lambda \neq 0$に対して

$$Q_j(\lambda) := \lambda Q_j, \quad P_j(\lambda) = \frac{1}{\lambda} P_j$$

▶ $\{Q_j(\lambda),\, P_j(\lambda) | j = 1, \ldots .d\}$**も自由度$d$の**CCR**を満たす**

▶ **各自由度dに対して**CCR**は一つ**

▶ **しかし，その表現は無限に存在** $\longrightarrow$ **量子現象の多様性（描像の多重性）**

$\mathrm{CCR}(d)$: **自由度dの**CCR**の表現の全体**

$$\mathrm{CCR}(d) \begin{cases} \text{同値なもの} & \text{— 物理的にも同値} \\ \text{非同値なもの} & \text{— 物理的に本質的に異なる} \end{cases}$$

● **行列力学と波動力学の同等性の厳密な図式**

CCR**のある表現** $\pi_{\mathrm{S}} \longrightarrow$ **波動力学（シュレーディンガー理論）**

CCR**のある表現** $\pi_{\mathrm{BHJ}} \longrightarrow$ **行列力学**

▶ **実は** π_{S} **と** π_{BHJ} **は同値**

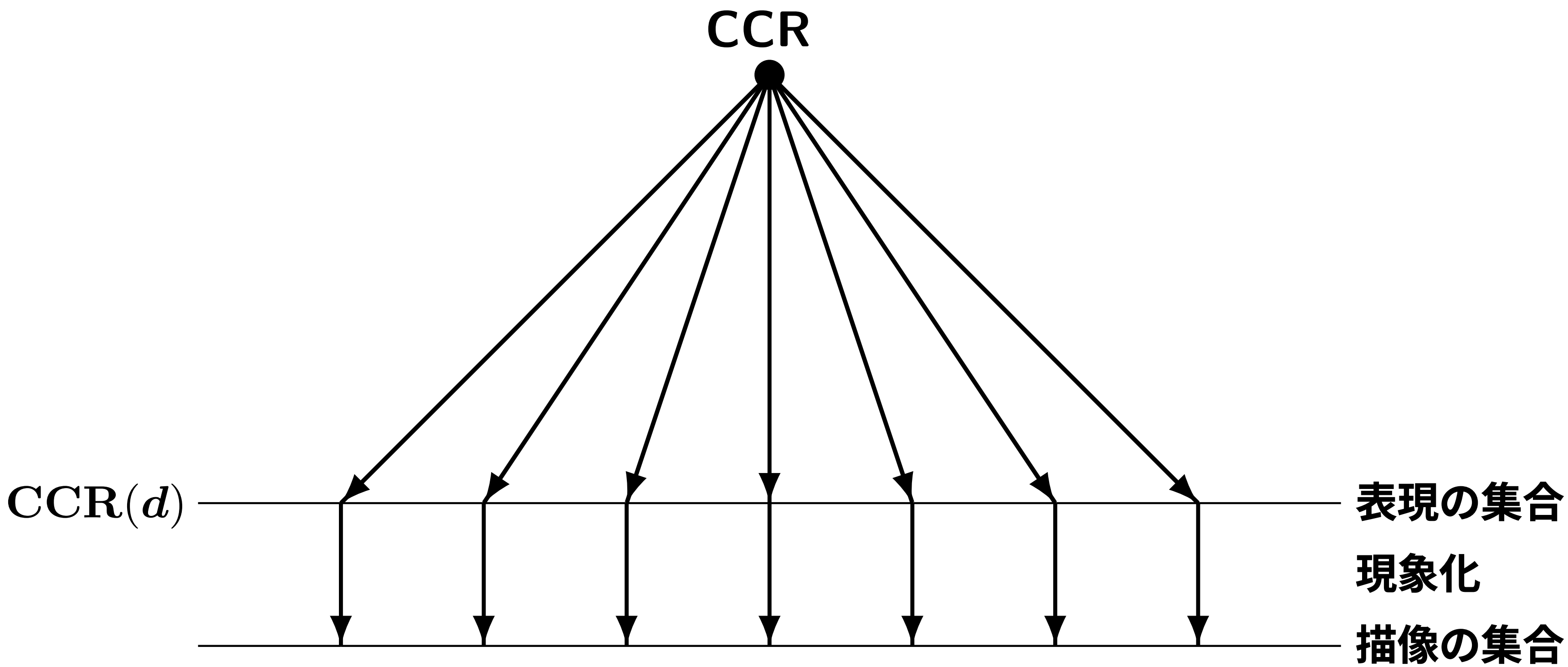

図1　量子力学の基本的構図（象徴図）

2　ヒルベルト空間論における基本的事実

2.1　ヒルベルト空間

定義 2.1 $\mathscr{H}$ **：複素ベクトル空間**

$\mathscr{H}$ **の任意の二つのベクトル** Ψ, Φ **に対して，複素数** $\langle \Psi, \Phi \rangle_{\mathscr{H}}$ **がただ一つ定まり，次の**(H.1)〜(H.4)**を満たすとき，対応：**
$\langle\ ,\ \rangle_{\mathscr{H}} : (\Psi, \Phi) \mapsto \langle \Psi, \Phi \rangle_{\mathscr{H}}$ **を** $\mathscr{H}$ **の内積とよぶ：**

(H.1)　**（正値性）** $\langle \Psi, \Psi \rangle_{\mathscr{H}} \geq 0,\ \forall \Psi \in \mathscr{H}$**.**

(H.2)　**（正定値性）** $\langle \Psi, \Psi \rangle_{\mathscr{H}} = 0$ **ならば** $\Psi = 0$**.**

(H.3)　**（線形性）**

$\langle \Psi, \alpha_1 \Phi_1 + \alpha_2 \Phi_2 \rangle_{\mathscr{H}} = \alpha_1 \langle \Psi, \Phi_1 \rangle_{\mathscr{H}} + \alpha_2 \langle \Psi, \Phi_2 \rangle_{\mathscr{H}}$**,**

$\Psi, \Phi_1, \Phi_2 \in \mathscr{H},\ \alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{C}$**.**

(H.4)　**（エルミート性）** $\langle \Psi, \Phi \rangle^*_{\mathscr{H}} = \langle \Phi, \Psi \rangle_{\mathscr{H}}$**,** $\Psi, \Phi \in \mathscr{H}$**.**

$(\mathscr{H}, \langle\ ,\ \rangle_{\mathscr{H}})$ **を複素内積空間という．**

- **内積空間のノルム**

$$\|\Psi\|_{\mathscr{H}} := \sqrt{\langle \Psi, \Psi \rangle_{\mathscr{H}}}, \quad \Psi \in \mathscr{H}.$$

• 内積空間の収束列

$\mathscr{H}$ の点列$\{\Psi_n\}_{n=1}^{\infty}$（$\Psi_n \in \mathscr{H}$）に対して．あるベクトル$\Psi \in \mathscr{H}$ が存在して，

$$\lim_{n\to\infty} \|\Psi_n - \Psi\| = 0$$

が成り立つとき，点列$\{\Psi_n\}_{n=1}^{\infty}$ はΨ に収束するという．この場合，Ψ を$\{\Psi_n\}_{n=1}^{\infty}$ の極限といい，

$$\Psi = \lim_{n\to\infty} \Psi_n$$

と記す．

• $\mathscr{H}$ の点列$\{\Psi_n\}_{n=1}^{\infty}$ はコーシー列または基本列

$$\overset{\text{def}}{\Longleftrightarrow}$$

任意の$\varepsilon > 0$ に対して，番号n_0 があって，

$n, m \geq n_0 \Longrightarrow \|\Psi_n - \Psi_m\| < \varepsilon$

▶ 収束列はコーシー列．しかし，コーシー列は収束列とは限らない．

• 内積空間は完備(complete) $\overset{\text{def}}{\Longleftrightarrow}$ どのコーシー列も収束列

定義 2.2 完備な内積空間をヒルベルト空間という．

例 2.3 有限次元内積空間はすべてヒルベルト空間

例：n**次元エルミート空間**$\mathbb{C}^n$

例 2.4 $\mathbb{Z}_+ := \{0, 1, 2, \ldots\}$

$$\ell^2(\mathbb{Z}_+) := \left\{ z = \{z_n\}_{n=0}^{\infty} | z_n \in \mathbb{C},\ n \geq 0, \sum_{n=0}^{\infty} |z_n|^2 < \infty \right\}$$

内積: $\langle z, w \rangle_{\ell^2(\mathbb{Z}_+)} := \sum_{n=0}^{\infty} z_n^* w_n, \quad z, w \in \ell^2(\mathbb{Z}_+)$

► $\ell^2(\mathbb{Z}_+)$ **は無限次元ヒルベルト空間.**

例 2.5 $\mathbb{R}^d := \{\boldsymbol{x} = (x_1, \ldots, x_d) | x_i \in \mathbb{R}, i = 1, \ldots, d\}$

$$L^2(\mathbb{R}^d) := \left\{ f : \mathbb{R}^d \to \mathbb{C} \cup \{\pm\infty\}, \text{ ボレル可測} \middle| \int_{\mathbb{R}^d} |f(\boldsymbol{x})|^2 d\boldsymbol{x} < \infty \right\}$$

相等の定義：$f = g \overset{\text{def}}{\Longleftrightarrow} f(\boldsymbol{x}) = g(\boldsymbol{x})$, almost everywhere (a.e.)$\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^d$

内積： $\langle f, g \rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)} := \int_{\mathbb{R}^d} f(\boldsymbol{x})^* g(\boldsymbol{x}) d\boldsymbol{x}, \ \ f, g \in L^2(\mathbb{R}^d)$

► $L^2(\mathbb{R}^d)$ **は無限次元ヒルベルト空間**

• **ヒルベルト空間** $\mathscr{H}$ **の部分集合** $\mathscr{D}$ **は** $\mathscr{H}$ **で稠密** (dense)

$$\overset{\text{def}}{\Longleftrightarrow}$$

任意の $\Psi \in \mathscr{H}$ **に対して，** $\mathscr{D}$ **の点列** $\{\Psi_n\}_{n=1}^{\infty}$ $(\Psi_n \in \mathscr{D})$ **があって** $\lim_{n\to\infty} \Psi_n = \Psi$ **が成り立つ．**

• $\mathscr{D} \subset \mathscr{H}$ **は部分空間** $\overset{\text{def}}{\Longleftrightarrow}$ **任意の** $\Psi, \Phi \in \mathscr{D}, \alpha, \beta \in \mathbb{C}$ **に対して**

$$\alpha\Psi + \beta\Phi \in \mathscr{D}$$

• **ベクトル** Ψ **と** Φ **は直交** $\overset{\textbf{def}}{\Longleftrightarrow}$ $\langle \Psi, \Phi \rangle = 0$

• **集合** $\{\Psi_n\}_{n=1}^{N}$ **（**$N < \infty$ **または** $N = \infty$**）は正規直交系** (orthonormal system; ONS **と略**)

$$\overset{\textbf{def}}{\Longleftrightarrow}$$

$\langle \Psi_n, \Psi_m \rangle = \delta_{nm}$，$n, m = 1, \ldots, N$

- 集合$\{\Psi_n\}_{n=1}^{N}$（$N<\infty$または$N=\infty$）は**完全正規直交系**(complete orthonormal system; CONS と略)

$$\overset{\mathbf{def}}{\Longleftrightarrow}$$

$\{\Psi_n\}_{n=1}^{N}$はONSかつ任意の$\Psi \in \mathscr{H}$が

$$\Psi = \sum_{n=1}^{N} \langle \Psi_n, \Psi \rangle \, \Psi_n$$

と展開される．右辺で$N=\infty$の場合は

$$\Psi = \lim_{N\to\infty} \sum_{n=1}^{N} \langle \Psi_n, \Psi \rangle \, \Psi_n$$

と読む（すなわち，$\lim_{N\to\infty} \|\Psi - \sum_{n=1}^{N} \langle \Psi_n, \Psi \rangle \, \Psi_n\| = 0$）．

• ONSがCONSかどうかの判定条件（理論上も応用上も重要）

定理 2.6 $\{\Psi_n\}_{n=1}^{\infty}$ **をONSとする．このとき，次の**(i)〜(iv)**は同値．**

(i) $\{\Psi_n\}_{n=1}^{\infty}$ **は**CONS.

(ii) **（パーセヴァルの等式）** $\|\Psi\|^2 = \sum_{n=1}^{\infty} | \langle \Psi_n, \Psi \rangle |^2, \ \forall \Psi \in \mathscr{H}$.

(iii) $\langle \Psi, \Phi \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \langle \Psi, \Psi_n \rangle \langle \Psi_n, \Phi \rangle, \ \forall \Psi, \Phi \in \mathscr{H}$.

(iv) $\langle \Psi_n, \Psi \rangle = 0, \forall n \in \mathbb{N}$ **ならば** $\Psi = 0$**.**

▶ **具体的な例で，**ONS**が**CONS**であることを示すためによく使われるのは条件**(iv)**（これは—もちろん，場合にもよるが—比較的，チェックしやすい）.**

2.2 線形作用素

$\mathscr{H},\mathscr{K}$: ヒルベルト空間

$\mathscr{D}\subset\mathscr{H}$: 部分空間

• 写像 $T:\mathscr{D}\to\mathscr{K}$ が**線形** $\overset{\text{def}}{\Longleftrightarrow}$ $T(\alpha\Psi+\beta\Phi)=\alpha T(\Psi)+\beta T(\Phi)$

$$\Psi,\Phi\in\mathscr{D},\alpha,\beta\in\mathbb{C}$$

$\mathscr{D}$: T の**定義域** (domain)　$D(T):=\mathscr{D}$，$T(\Psi)=T\Psi$ と記す

• T を $\mathscr{H}$ から $\mathscr{K}$ への**線形作用素** (linear operator) または**線形演算子**という（$D(T)$ は $\mathscr{H}$ に等しいとは限らない）.

注： $\mathscr{K}=\mathscr{H}$ かつ $D(T)\neq\mathscr{H}$ の場合でも，便宜的上，T を $\mathscr{H}$ 上の線形作用素という.

• **T の値域**：$\mathrm{Ran}(T):=\{T\Psi|\Psi\in D(T)\}$

• 作用素の**相等**

T,S を $\mathscr{H}$ から $\mathscr{K}$ への線形作用素とする

$T=S\overset{\text{def}}{\Longleftrightarrow}D(T)=D(S)$ かつ $T\Psi=S\Psi,\ \forall\Psi\in D(T)$

• 作用素の**拡大**

$T\subset S\overset{\text{def}}{\Longleftrightarrow}D(T)\subset D(S)$ かつ $T\Psi=S\Psi,\ \forall\Psi\in D(T)$

この場合，**S を T の拡大**または **T は S の制限**であるという.

▶ $T = S \iff T \subset S$ かつ $S \subset T$

• T は**有界** $\overset{\text{def}}{\iff}$ ある定数 C があって $\|T\Psi\| \le C\ \|\Psi\|$, $\forall\Psi \in D(T)$

• T の**作用素ノルム** $\|T\| := \sup_{\Psi\in D(T),\Psi\neq 0}(\|T\Psi\|/\|\Psi\|)$

$$\text{線形作用素}\begin{cases}\text{有界}\\ \text{非有界}\end{cases}$$

注意 2.7 有限次元ヒルベルト空間上の線形作用素はすべて有界.

注意 2.8 非有界作用素については定義域が極めて重要

作用の外見上の形は同じでも定義域が異なれば性質はまったく異なる場合がある.

• 線形作用素 T が**単射**（1 対 1） $\overset{\text{def}}{\iff}$ （$T\Psi = T\Phi \Longrightarrow \Psi = \Phi$）

T が単射ならば，**逆作用素** $T^{-1} : \mathrm{Ran}(T) \to D(T)$ が存在：

$$T^{-1}(\Phi) := \Psi, \quad \Phi \in D(T^{-1}) = \mathrm{Ran}(T)$$

ただし，Ψ は $D(T)$ の元で $T\Psi = \Phi$ を満たすもの.

- **線形作用素の和**

(i) $T+S$

$$D(T+S) := D(T) \cap D(S),$$
$$(T+S)(\Psi) := T\Psi + S\Psi, \quad \Psi \in D(T+S).$$

(ii) $\sum_{i=1}^{n} T_i$

$$D\left(\sum_{i=1}^{n} T_i\right) := \cap_{i=1}^{n} D(T_i),$$
$$\left(\sum_{i=1}^{n} T_i\right)(\Psi) := \sum_{i=1}^{n} T_i\Psi, \quad \Psi \in D\left(\sum_{i=1}^{n} T_i\right).$$

- **線形作用素の積**

(i) TS

$$D(TS) := \{\Psi \in D(S) | S\Psi \in D(T)\},$$
$$(TS)(\Psi) := T(S\Psi), \quad \Psi \in D(TS).$$

(ii) $T_nT_{n-1}\cdots T_2T_1$

$$D(T_n\cdots T_1) := \{\Psi \in D(T_1)|T_{j-1}\cdots T_1\Psi \in D(T_j),\, j=2,\ldots,n\},$$
$$(T_n\cdots T_1)(\Psi) := T_n(T_{n-1}(\cdots T_2(T_1(\Psi))\cdots)) \quad \Psi \in D(T_n\cdots T_1).$$

- **ヒルベルト空間**$\mathscr{H}$**上の線形作用素**A, B**に対して，部分空間**$\mathscr{D} \subset D(A)\cap D(B)$**があって**

$$A\Psi = B\Psi, \quad \forall\Psi \in \mathscr{D}$$

が成り立つとき，「$\mathscr{D}$**上で**$A = B$**が成り立つ」という．**

- $\mathscr{D} \subset D(A)$**のとき，**$A\mathscr{D} := \{A\Psi|\Psi \in \mathscr{D}\}$
- **ヒルベルト空間**$\mathscr{H}$**上の線形作用素**A**に対して，部分空間**$\mathscr{D} \subset D(A)$**があって，**$A\mathscr{D} \subset \mathscr{D}$ **（**i.e. **任意の**$\Psi \in \mathscr{D}$**に対して，**$A\Psi \in \mathscr{D}$**）が成り立つとき，「**A**は**$\mathscr{D}$**を不変にする」という．**

2.3　線形作用素のスペクトルとレゾルヴェント集合

T：$\mathscr{H}$ 上の線形作用素，$\lambda \in \mathbb{C}$

考え方：$T-\lambda := T-\lambda I$ の写像特性に応じて λ を分類

(i) λ は T の固有値 $\overset{\text{def}}{\Longleftrightarrow}$ $T\Psi = \lambda\Psi$ を満たすベクトル $\Psi \in D(T), \Psi \neq 0$ が存在

$\Longleftrightarrow$ $T-\lambda$ は単射でない

- T の点スペクトル：　$\sigma_{\mathrm{p}}(T) \overset{\text{def}}{=} \{\lambda \in \mathbb{C} | \lambda$ は T の固有値$\}$

(ii) $\lambda \in \rho(T)$ $\overset{\text{def}}{\Longleftrightarrow}$ $T-\lambda$ は単射かつ $\mathrm{Ran}(T-\lambda)$ は稠密かつ $(T-\lambda)^{-1}$ は有界

$\rho(T)$：T のレゾルヴェント集合

(iii) $\lambda \in \sigma_{\mathrm{c}}(T)$ $\overset{\text{def}}{\Longleftrightarrow}$ $T-\lambda$ は単射かつ $\mathrm{Ran}(T-\lambda)$ は稠密かつ $(T-\lambda)^{-1}$ は非有界

$\sigma_{\mathrm{c}}(T)$：T の連続スペクトル

(iv) $\lambda \in \sigma_{\mathrm{r}}(T)$ $\overset{\text{def}}{\Longleftrightarrow}$ $T-\lambda$ は単射かつ $\mathrm{Ran}(T-\lambda)$ は非稠密

$\sigma_{\mathrm{r}}(T)$：T の剰余スペクトル

▶ $\mathbb{C} = \sigma_{\mathrm{c}}(T) \cup \sigma_{\mathrm{r}}(T) \cup \sigma_{\mathrm{p}}(T) \cup \rho(T)$

- T のスペクトル：$\sigma(T) := \mathbb{C} \setminus \rho(T)$ $(= \sigma_{\mathrm{c}}(T) \cup \sigma_{\mathrm{r}}(T) \cup \sigma_{\mathrm{p}}(T))$

▶ $\mathbb{C} = \sigma(T) \cup \rho(T)$

2.4　線形作用素の基本的クラス

- $U : \mathscr{H} \to \mathscr{K}$ は**ユニタリ作用素** $\overset{\text{def}}{\Longleftrightarrow}$ $\mathrm{Ran}(U) = \mathscr{K}$ **（全射性）かつ**
  $\langle U\Psi, U\Phi\rangle_{\mathscr{K}} = \langle \Psi, \Phi\rangle_{\mathscr{H}}$ **（内積保存性）**

- **ヒルベルト空間** $\mathscr{H}$ **と** $\mathscr{K}$ **は同型** $\overset{\text{def}}{\Longleftrightarrow}$ $\exists U : \mathscr{H} \to \mathscr{K}$ **ユニタリ作用素**

この場合， $\mathscr{H} \overset{U}{\cong} \mathscr{K}$ **と記す**

例 2.9 $\exists \mathscr{F}_d : L^2(\mathbb{R}^d) \to L^2(\mathbb{R}^d)$ ユニタリ　such that

$$(\mathscr{F}_d\psi)(\boldsymbol{k}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^d}} \int_{\mathbb{R}^d} e^{-i\boldsymbol{k}\boldsymbol{x}}\psi(\boldsymbol{x})d\boldsymbol{x}, \quad \boldsymbol{k} \in \mathbb{R}^d,\ \psi \in L^2(\mathbb{R}^d) \cap L^1(\mathbb{R}^d).$$

ただし，

$L^1(\mathbb{R}^d) := \{f : \mathbb{R}^d \to \mathbb{C} \cup \{\pm\infty\}$, ボレル可測 $| \int_{\mathbb{R}^d} |f(\boldsymbol{x})| d\boldsymbol{x} < \infty\}$.

- $\mathscr{F}_d$ **を** $L^2(\mathbb{R}^d)$ **上のフーリエ変換という．**

▶ **逆フーリエ変換**

$$(\mathscr{F}_d^{-1}\phi)(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^d}}\int_{\mathbb{R}^d} e^{i\boldsymbol{x}\boldsymbol{k}}\phi(\boldsymbol{k})d\boldsymbol{k}, \quad \boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^d,\ \phi\in L^2(\mathbb{R}^d)\cap L^1(\mathbb{R}^d).$$

• $\mathscr{H}$ **上の線形作用素** T **とユニタリ作用素** $U:\mathscr{H}\to\mathscr{K}$ **に対して**

$$T_U := UTU^{-1}$$

を T **の** U **によるユニタリ変換という．**

▶ (**スペクトルとレゾルヴェント集合のユニタリ不変性**)

$\sigma_\#(T_U)=\sigma_\#(T)$，$\rho(T_U)=\rho(T)$ $\quad$ **(**$\# = \mathrm{c,\ r,\ p}$**)**

• $\mathscr{H}$ **上の線形作用素** T **と** $\mathscr{K}$ **上の線形作用素** S **はユニタリ同値**

$\overset{\text{def}}{\Longleftrightarrow}$

$\exists U:\mathscr{H}\to\mathscr{K}$ **ユニタリ作用素** such that $UTU^{-1}=S$

• **線形作用素Tは閉作用素**

$$\overset{\text{def}}{\Longleftrightarrow}$$

$D(T)$**の点列**$\{\Psi_n\}_{n=1}^{\infty}$**（**$\Psi_n \in D(T)$**）について，**$\lim_{n\to\infty} \Psi_n = \Psi \in \mathscr{H}$ **かつ**$\lim_{n\to\infty} T\Psi_n = \Phi \in \mathscr{K}$ **ならば，つねに**$\Psi \in D(T)$**かつ**$T\Psi = \Phi$

注: (1) **定義域が$\mathscr{H}$全体の有界作用素は閉作用素**

(2) **閉作用素の概念が実質的な意義をもつのは，定義域が$\mathscr{H}$全体でない非有界作用素の場合**

▶ **閉作用素のスペクトルは$\mathbb{C}$の閉集合**

• T **は可閉** $\overset{\text{def}}{\Longleftrightarrow}$ $\exists S$**：閉作用素** such that $T \subset S$

（Tは閉作用素の拡大をもつ）

▶ **各可閉作用素Tに対して，次のように定義される閉作用素$\overline{T}$が同伴している：**

$$D(\overline{T}) = \{\Psi \in \mathscr{H} | \exists \{\Psi_n\}_{n=1}^{\infty} \, (\Psi_n \in D(T)) \text{ such that } \lim_{n\to\infty} \Psi_n = \Psi, \\ \exists \lim_{n\to\infty} T\Psi_n\},$$

$$\overline{T}\Psi = \lim_{n\to\infty} T\Psi_n, \quad \Psi \in D(\overline{T}).$$

$\overline{T}$ を T の閉包 (closure) と呼ぶ．

▶ T が閉ならば，$\overline{T} = T$

• 共役作用素

$T : \mathscr{H} \supset D(T) \to \mathscr{K}$，$D(T)$ は稠密

このとき，次の性質 (i)，(ii) をもつ，$\mathscr{K}$ から $\mathscr{H}$ への線形作用素 T^* がただ一つ存在する：

$$D(T^*) = \{\eta \in \mathscr{K} \,|\, \text{ベクトル}\,\Phi_\eta \in \mathscr{H}\,\text{が存在して}\\ \langle \Phi_\eta, \Psi \rangle_{\mathscr{H}} = \langle \eta, T\Psi \rangle_{\mathscr{K}}\,,\ \Psi \in D(T)\}$$

$T^*\eta = \Phi_\eta,\ \eta \in D(T^*)$．

線形作用素 T^* を T の共役作用素と呼ぶ．

▶ T^* は閉作用素

▶ 線形作用素 $T : \mathscr{H} \to \mathscr{K}$ が有界 $\Longrightarrow$ $T^* : \mathscr{K} \to \mathscr{H}$ は有界かつ $(T^*)^* = T$

▶ $U : \mathscr{H} \to \mathscr{K}$ はユニタリ $\Longleftrightarrow$ $U^*U = I,\ UU^* = I$

- **有限次のエルミート行列による線形写像の無限次元版：３種類ある**

T を $\mathscr{H}$ 上の線形作用素とする

(i) T は**エルミート** $\overset{\mathrm{def}}{\Longleftrightarrow} \langle\Psi, T\Phi\rangle_{\mathscr{H}} = \langle T\Psi, \Phi\rangle_{\mathscr{H}}, \quad \Psi, \Phi \in D(T)$
(ii) T は**対称**(symmetric) $\overset{\mathrm{def}}{\Longleftrightarrow}$ T はエルミートかつ $D(T)$ は稠密
(iii) T は**自己共役**(self-adjoint) $\overset{\mathrm{def}}{\Longleftrightarrow}$ $D(T)$ は稠密かつ $T^* = T$

▶ T は対称作用素 $\Longleftrightarrow$ $D(T)$ は稠密かつ $T \subset T^*$
▶ 対称作用素 T は可閉であり，$\overline{T}$ は閉対称作用素

注意 2.10 自己共役作用素は閉対称作用素であるが，閉対称作用素は自己共役であるとは限らない

$$\{\text{自己共役作用素}\} \subset \{\text{対称作用素}\} \subset \{\text{エルミート作用素}\}$$

▶ 閉対称作用素 T が自己共役 $\Longleftrightarrow$ $\sigma(T)$ は $\mathbb{R}$ の閉部分集合

▶ **自己共役でない閉対称性作用素のスペクトルは次のいずれか**

(i) **全複素平面** $\mathbb{C}$

(ii) **閉上半平面** $\{z \in \mathbb{C} | \operatorname{Im} z \geq 0\}$

(iii) **閉下半平面** $\{z \in \mathbb{C} | \operatorname{Im} z \leq 0\}$

注意 2.11　エルミート行列が対角化可能であるという性質の無限次元版を有するのは（上述の３種の作用素のうち）自己共役作用素のみ．

$\longrightarrow$ **スペクトル定理**

• **線形作用素** A **の核：** $\ker A := \{\Psi \in D(A) | A\Psi = 0\}$

▶ **自己共役性の判定条件**

定理 2.12 T **をヒルベルト空間** $\mathscr{H}$ **上の対称作用素とする．このとき，次の** (i)〜(iii) **は同値．**

(i) T **は自己共役．**

(ii) T **は閉かつ** $\ker(T^* \pm i) = \{0\}$.

(iii) $\operatorname{Ran}(T \pm i) = \mathscr{H}$.

定義 2.13 T を $\mathscr{H}$ 上の対称作用素とする．

(i) T は**本質的に自己共役** $\overset{\mathbf{def}}{\Longleftrightarrow}$ $\overline{T}$ が自己共役

(ii) $D \subset D(T)$ は稠密な部分空間とし，T の定義域を D に制限して得られる作用素を $T \upharpoonright D$ と記す（これは対称作用素になる）．

T は D **上で本質的に自己共役** $\overset{\mathbf{def}}{\Longleftrightarrow}$ $\overline{T \upharpoonright D}$ が自己共役

► **本質的自己共役性の判定条件**

定理 2.14 T をヒルベルト空間 $\mathscr{H}$ 上の対称作用素とする．このとき，次の (i)〜(iii) は同値．

(i) T は本質的に自己共役．

(ii) $\ker(T^* \pm i) = \{0\}$.

(iii) $\mathrm{Ran}(T \pm i)$ は $\mathscr{H}$ で稠密.

- P が**正射影作用素** $\overset{\mathrm{def}}{\Longleftrightarrow}$ $P^* = P$ かつ $P^2 = P$

例 2.15 $\mathscr{M}$:$\mathscr{H}$ の閉部分空間

- **$\mathscr{M}$ の直交補空間**

$$\mathscr{M}^{\perp} := \{\Phi \in \mathscr{H} \,|\, \langle \Phi, \Psi \rangle = 0, \forall \Psi \in \mathscr{M}\}$$

任意の $\Psi \in \mathscr{H}$ は

$$\Psi = \Psi_{\mathscr{M}} + \Psi_{\mathscr{M}^{\perp}}$$

と一意的に直交分解される(正射影定理).ただし,

$\Psi_{\mathscr{M}} \in \mathscr{M}$, $\Psi_{\mathscr{M}^{\perp}} \in \mathscr{M}^{\perp}$**.**

写像 $P_{\mathscr{M}} : \mathscr{H} \to \mathscr{H}$ を

$$P_{\mathscr{M}}\Psi := \Psi_{\mathscr{M}}.$$

► $P_{\mathscr{M}}$ **は正射影作用素で** $\mathrm{Ran}(P_{\mathscr{M}}) = \mathscr{M}$

- $P_{\mathscr{M}}$ **を $\mathscr{M}$ 上の正射影作用素という.**

• 1次元ボレル集合体 B^1：$\mathbb{R}$ のすべての開集合を含む最小の σ 加法族
($\mathbb{R} \in \boldsymbol{B}^1$，$B \in \boldsymbol{B}^1 \Longrightarrow B^c \in \boldsymbol{B}^1$，$B_n \in \boldsymbol{B}^1 \Longrightarrow \cup_{n=1}^{\infty} B_n \in \boldsymbol{B}^1$)

• 正射影作用素の族 $\{E(B) | B \in \boldsymbol{B}^1\}$（各 $E(B)$ は正射影作用素）は1次元スペクトル測度または単位の分解

$\overset{\text{def}}{\Longleftrightarrow}$

(i) $E(\mathbb{R}) = I$

(ii) $B_n \in \boldsymbol{B}^1, n \in \mathbb{N} = \{1, 2, 3, \ldots\}, B_n \cap B_m = \emptyset, n \neq m \Longrightarrow$
$E(\cup_{n=1}^{\infty} B_n)\Psi = \lim_{N\to\infty} \sum_{n=1}^{N} E(B_n)\Psi, \forall \Psi \in \mathscr{H}$

▶ 各 $\Psi \in \mathscr{H}$ に対して，対応：$\boldsymbol{B}^1 \ni B \mapsto \mu_\Psi(B) := \langle \Psi, E(B)\Psi \rangle$ は $(\mathbb{R}, \boldsymbol{B}^1)$ 上の有界測度

$\int_{\mathbb{R}} f(\lambda) d\mu_\Psi(\lambda)$ を $\int_{\mathbb{R}} f(\lambda) d\lambda \langle \Psi, E(\lambda)\Psi \rangle$ と記す．

▶ 各 $\Psi, \Phi \in \mathscr{H}$ に対して，対応：$\boldsymbol{B}^1 \ni B \mapsto \mu_{\Psi,\Phi}(B) := \langle \Psi, E(B)\Phi \rangle$ は $(\mathbb{R}, \boldsymbol{B}^1)$ 上の加法的集合関数

ルベーグ–スティルチェス積分 $\int_{\mathbb{R}} f(\lambda) d\mu_{\Psi,\Phi}(\lambda)$ を
$\int_{\mathbb{R}} f(\lambda) d\lambda \langle \Psi, E(\lambda)\Phi \rangle$ と記す．

定理 2.16 (スペクトル定理) T **を自己共役作用素とする．このとき，ただ一つの** 1 **次元スペクトル測度** $\{E_T(B)|B \in \boldsymbol{B}^1\}$ **が存在して**

$$D(T) = \left\{\Psi \in \mathscr{H} | \int_{\mathbb{R}} \lambda^2 d\left\langle \Psi, E_T(\lambda)\Psi \right\rangle < \infty\right\},$$

$$\left\langle \Phi, T\Psi \right\rangle = \int_{\mathbb{R}} \lambda d\left\langle \Phi, E_T(\lambda)\Psi \right\rangle, \quad \Phi \in \mathscr{H}, \Psi \in D(T)$$

が成立する．

- $E_T(\cdot)$ **を** T **のスペクトル測度という．**

これを用いると次の仕方で T **の "関数"（作用素）が定義できる：**

$f : \mathbb{R} \to \mathbb{C} \cup \{\pm\infty\}$**，ボレル可測**

$$D(f(T)) = \left\{\Psi \in \mathscr{H} | \int_{\mathbb{R}} |f(\lambda)|^2 d\left\langle \Psi, E_T(\lambda)\Psi \right\rangle < \infty\right\},$$

$$\left\langle \Phi, f(T)\Psi \right\rangle = \int_{\mathbb{R}} f(\lambda) d\left\langle \Phi, E_T(\lambda)\Psi \right\rangle, \quad \Phi \in \mathscr{H}, \Psi \in D(f(T)).$$

例 2.17 $t \in \mathbb{R}$ **をパラメータとして，**$f_t(\lambda) = e^{-it\lambda}, \lambda \in \mathbb{R}$ **を考える．このとき，**$f_t(T)$ **はユニタリ作用素．**

$f_t(T)$ **を** e^{-itT} **と記す．**

例 2.18 ヒルベルト空間 $L^2(\mathbb{R})$ **上の位置作用素（演算子）**$\hat{q}$ **は次のように定義される：**

$$D(\hat{q}) := \left\{ \psi \in L^2(\mathbb{R}) | \int_{\mathbb{R}} |x\psi(x)|^2 dx < \infty \right\},$$

$$(\hat{q}\psi)(x) = x\psi(x), \quad \text{a.e.} x \in \mathbb{R}, \psi \in D(\hat{q}).$$

- ▶ $\hat{q}$ **は自己共役かつ** $\sigma(\hat{q}) = \sigma_{\mathrm{c}}(\hat{q}) = \mathbb{R}$**，**$\sigma_{\mathrm{p}}(\hat{q}) = \emptyset$**．**
- ▶ $\hat{q}$ **のスペクトル測度** $E_{\hat{q}}$ **は次で与えられる：**

$$(E_{\hat{q}}(B)\psi)(x) = \chi_B(x)\psi(x), \quad \text{a.e.} x \in \mathbb{R}, \ B \in \boldsymbol{B}^1.$$

ただし，χ_B **は** B **の定義関数：**

$x \in B \Longrightarrow \chi_B(x) = 1$; $x \notin B \Longrightarrow \chi_B(x) = 0$

例 2.19 ヒルベルト空間 $L^2(\mathbb{R})$ 上の微分作用素 d_x を次のように定義する：

$$D(d_x) := C_0^\infty(\mathbb{R}) := \{f \in C^\infty(\mathbb{R}) | \exists R > 0 \text{ such that } |x| \geq R \Longrightarrow f(x) = 0\},$$

（台 $\mathrm{supp}\, f$ が有界な C^∞ 関数の全体）

$$d_x f := f', \quad f \in D(d_x).$$

▶ $D(d_x)$ **は稠密かつ** d_x **は可閉**

- **一般化された微分作用素（超関数的な意味での微分作用素）**

$$D_x := \overline{d_x} \quad (d_x \text{ の閉包})$$

▶ $\langle D_x\psi, f\rangle_{L^2(\mathbb{R})} = -\langle \psi, f'\rangle_{L^2(\mathbb{R})}$, $\psi \in D(D_x)$, $f \in C_0^\infty(\mathbb{R})$

- **運動量作用素（演算子）**

$$\hat{p} := -i\hbar D_x.$$

▶ $\hat{p}$ **は自己共役かつ** $\sigma(\hat{p}) = \sigma_{\mathrm{c}}(\hat{p}) = \mathbb{R}$**，** $\sigma_{\mathrm{p}}(\hat{p}) = \emptyset$**.**

▶ **(双対性)**

$$\mathscr{F}_1 \hat{q} \mathscr{F}_1^{-1} = iD_k, \quad \mathscr{F}_1 \hat{p} \mathscr{F}_1^{-1} = \hbar\hat{k}.$$

3　量子力学の公理系

量子力学の公理（フォン・ノイマン）

[公理1] 各量子系Sに対して，ヒルベルト空間$\mathscr{H}_{\mathrm{S}}$が付随し，系の状態は$\mathscr{H}_{\mathrm{S}}$の零でないベクトル—状態ベクトルという—によって表される．ただし，ベクトル$\Psi \in \mathscr{H}_{\mathrm{S}}$と$\Phi \in \mathscr{H}_{\mathrm{S}}$によって表される状態が同一であるのは，ある定数$\gamma \neq 0$があって$\Psi = \gamma\Phi$となるとき，かつこのときに限る（状態の相等原理）．

$\mathscr{H}_{\mathrm{S}}$を状態のヒルベルト空間という．

[公理2] 量子系Sの物理量は，$\mathscr{H}_{\mathrm{S}}$の自己共役作用素によって表される．

[公理3]（時間発展）系Sの全エネルギーを表す自己共役作用素Hをハミルトニアン（時刻に依らないとする）という．時刻t_0の状態が$\Psi_0 \in \mathscr{H}_{\mathrm{S}}$であるとき，時刻$t \in \mathbb{R}$での状態ベクトル$\Psi(t) \in \mathscr{H}_{\mathrm{S}}$は，この間に観測が行われない限り，$\Psi(t) = e^{-itH/\hbar}\Psi_0$であたえられる．

- **物理量が自己共役であることの意味**

(1) **物理量の観測（測定）値を物理量を表す作用素Tのスペクトル点と解釈する．この場合，スペクトル点は実数でなければならない．したがって，Tは自己共役でなければならない．（単にTが対称またはエルミートというだけでは，スペクトルの実数性は保証されない）**

(2) (**確率解釈**) **物理量Tのスペクトル測度をE_Tとする．単位ベクトル$\Psi \in \mathscr{H}_{\mathrm{S}}$に対して，対応：$\boldsymbol{B}^1 \ni B \mapsto \mu_\Psi(B) := \|E_T(B)\Psi\|^2$は$(\mathbb{R}, \boldsymbol{B}^1)$上の確率測度である．したがって，次の公理的定式化が可能：**

[**公理**4]　T**を状態**Ψ**で観測（測定）したとき，その測定値がボレル集合**$B \subset \mathbb{R}$**の中に見出される確率は**$\|E_T(B)\Psi\|^2$**．**

要点：この定式化は，Tが固有値をもたず連続スペクトルをもつ場合でも有効な普遍的な定式化をあたえる．

- **問：状態のヒルベルト空間$\mathscr{H}_{\mathrm{S}}$はどのような原理にしたがって決まるのか？**

答：$\mathscr{H}_{\mathrm{S}}$は[正準交換関係(CCR)+内的代数]の表現空間である．

4 CCRの表現

4.1 定義

定義 4.1 dを自然数とする．ヒルベルト空間$\mathscr{H}$と$\mathscr{H}$の稠密な部分空間$\mathscr{D}$および$\mathscr{H}$上の閉対称作用素Q_j, P_j　（$j=1,\ldots,d$）からなる三つ組み$(\mathscr{H},\mathscr{D},\{Q_j,P_j|j=1,\ldots,d\})$は，次の(i)，(ii)を満たすとき，**自由度$d$のCCRの表現**と呼ばれる：

(i) $\mathscr{D}\subset D(Q_j)\cap D(P_j)$ $(j=1,\ldots,d)$ かつ$Q_j\mathscr{D}\subset\mathscr{D}, P_j\mathscr{D}\subset\mathscr{D}$（i.e. Q_j,P_jは$\mathscr{D}$を不変にする）．

(ii) $\mathscr{D}$上で自由度dのCCRを満たす．すなわち，$\mathscr{D}$上次の交換関係が成り立：

$$[Q_j,Q_k]=0,\quad [P_j,P_k]=0$$
$$[Q_j,P_k]=i\hbar\delta_{jk},\quad (j,k=1,\ldots,d).$$

この場合，$\mathscr{H}$を**CCRの表現空間**という．

すべての$j=1,\ldots,d$に対して，Q_j,P_jが自己共役であるとき，表現$(\mathscr{H},\mathscr{D},\{Q_j,P_j|j=1,\ldots,d\})$は**自己共役である**という．

命題 4.2 CCRの表現空間は必ず無限次元である．

証明． 仮に $\dim \mathscr{H} = n < \infty$ とすると，$\mathscr{D} = \mathscr{H}$．したがって，$[Q_j, P_j] = i\hbar$．両辺のトレースをとると

$$\mathrm{Tr}\,[Q_j, P_j] = \mathrm{Tr}\,(Q_j P_j) - \mathrm{Tr}\,(P_j Q_j) = 0.$$

一方，$\mathrm{Tr}\,(i\hbar) = i\hbar n$．したがって，$0 = i\hbar n$ となり矛盾． ∎

補題 4.3 A, B, C を $\mathscr{H}$ 上の線形作用素とし，部分空間 $\mathscr{D} \subset D(A) \cap D(B) \cap D(C)$ があって，A, B, C は $\mathscr{D}$ を不変にするとする．このとき，$\mathscr{D}$ 上で次の式が成立する：

$$[A, BC] = [A, B]C + B[A, C].$$

証明． 次の変形による：

$$\begin{aligned}
[A, BC] &= ABC - BCA \\
&= (AB - BA)C + BAC - BCA \\
&= [A, B]C + B(AC - CA) = [A, B]C + B[A, C].
\end{aligned}$$ ∎

補題 4.4 **各**$j=1,\ldots,d$**に対して，**$\mathscr{D}$**上で次の交換関係が成り立つ：**

$$[Q_j, P_j^n] = in\hbar P_j^{n-1}, \quad n \in \mathbb{N} = \{1,2,3,\ldots\}. \tag{1}$$

証明．n**に関する帰納法による．**$n=1$**のときは明らか．**(1)**が成立するとする．このとき**

$$\begin{aligned}[Q_j, P_j^{n+1}] &= [Q_j, P_jP_j^n] \\ &= [Q_j, P_j]P_j^n + P_j[Q_j, P_j^n] \quad (\textbf{補題}4.3\textbf{による}) \\ &= i\hbar P_j^n + P_j(i\hbar n)P_j^{n-1} \quad (\textbf{帰納法の仮定による}) \\ &= i(n+1)\hbar P_j^n.\end{aligned}$$

したがって，(1)**で**n**を**$n+1$**に置き換えた式も成立する．** ∎

補題 4.5 A, B**を**$\mathscr{H}$**上の有界線形作用素とする（**$A, B \in \mathfrak{B}(\mathscr{H})$**）．**

(0) $\|A\| = 0$**ならば**$A=0$**．**

(i) **（３角不等式）**$\|A+B\| \le \|A| + \|B\|$**．**

(ii) $\|AB\| \le \|A\|\,\|B\|$.

(iii) $\|A^n\| \le \|A\|^n,\ n \in \mathbb{N}$**．**

命題 4.6 各 j ごとに Q_j と P_j のうち少なくとも一つは非有界作用素である

証明． $Q = Q_j, P = P_j$ とし，仮に Q, P はともに有界であるとする．このとき，Q, P の閉性により，Q, P は $\mathscr{H}$ 全体で定義された有界作用素になる．したがって，(1) は作用素の等式

$$i\hbar n P^{n-1} = QP^n - P^n Q \tag{2}$$

をあたえる．ゆえに

$$\begin{aligned}\hbar n \|P^{n-1}\| &\leq \|QP^n\| + \|P^n Q\| \leq \|Q\|\,\|P^n\| + \|P^n\|\,\|Q\| \\ &\leq 2\|Q\|\,\|P\|\,\|P^{n-1}\|.\end{aligned}$$

もし，ある $n \geq 2$ に対して，$\|P^{n-1}\| = 0$ であるとすると，$P^{n-1} = 0$．すると，(2) によって，$P^{n-2} = 0$．以下，同様にして，$P = 0$ が導かれる．だが，これは矛盾である．したがって，すべての $n \geq 2$ に対して，$\|P^{n-1}\| > 0$．ゆえに

$$\hbar n \leq 2\|Q\|\,\|P\|, \quad n \geq 2$$

となる．だが，右辺は定数であるので，これは矛盾である． ∎

作用素の可約性

$\mathscr{M}$ を $\mathscr{H}$ の閉部分空間とする

- $\mathscr{H}$ 上の作用素 A は $\mathscr{M}$ によって**約される**

$$\overset{\text{def}}{\Longleftrightarrow}$$

$\Psi \in D(A)$ ならば，$P_{\mathscr{M}}\Psi \in D(A)$ かつ $AP_{\mathscr{M}}\Psi = P_{\mathscr{M}}A\Psi$

この場合，$\mathscr{M}$ 上の作用素 $A_{\mathscr{M}}$ を次のように定義できる：

$$D(A_{\mathscr{M}}) := D(A) \cap \mathscr{M},$$
$$A_{\mathscr{M}}\Psi := A\Psi, \quad \Psi \in D(A_{\mathscr{M}}).$$

$A_{\mathscr{M}}$ を A の $\mathscr{M}$ **における簡約部分**という．

- $\mathscr{H}$ 上の（有界とは限らない）作用素の集合 $\mathfrak{A}$ は $\mathscr{M}$ によって**約される**

$$\overset{\text{def}}{\Longleftrightarrow}$$

各 $A \in \mathfrak{A}$ は $\mathscr{M}$ によって約される

$\mathscr{H}$ の自明な閉部分空間：$\{0\}$，$\mathscr{H}$

定義 4.7

(1) $\mathfrak{A}$ は**可約** $\overset{\text{def}}{\Longleftrightarrow}$ $\mathfrak{A}$ を約する非自明な閉部分空間が存在

(2) $\mathfrak{A}$ は**既約** $\overset{\text{def}}{\Longleftrightarrow}$ $\mathfrak{A}$ は可約でない

定義 4.8 CCRの表現 $(\mathscr{H}, \mathscr{D}, \{Q_1, \ldots, Q_d, P_1, \ldots, P_d\})$ は**既約** $\overset{\text{def}}{\Longleftrightarrow}$ $\{Q_1, \ldots, Q_d, P_1, \ldots, P_d\}$ が既約

▶ 諸々の物理量はCCRの既約な自己共役表現 $Q_1, \ldots, Q_d, P_1, \ldots, P_d$ から構成される．

- 古典力学における物理量 $f(q_1, \ldots, q_d, p_1, \ldots, p_d)$
  $(q_1, \ldots, q_d, p_1, \ldots, p_d)$ は正準変数
  $\downarrow$ （形式的対応）
- 量子力学において対応する物理量 "$f(Q_1, \ldots, Q_d, P_1, \ldots, P_d)$"
  ▶ しかし，Q_j, P_j は可換でないので（$[Q_j, P_j] = i\hbar \neq 0$），この作用素をどのように定義するかは一般には難しい問題

4.2 “行列力学” を実現するCCRの表現

ヒルベルト空間：

$$\ell^2(\mathbb{Z}_+) = \left\{ z = \{z_n\}_{n=0}^{\infty} | z_n \in \mathbb{C},\ n \geq 0, \sum_{n=0}^{\infty} |z_n|^2 < \infty \right\}$$

- CCR**の表現を構成するための作用素** A

$$D(A) := \left\{ z \in \ell^2(\mathbb{Z}_+) | \sum_{n=1}^{\infty} |\sqrt{n}\, z_n|^2 < \infty \right\},$$

$$(Az)_n := \sqrt{n+1}\, z_{n+1}, \quad z \in D(A),\, n \geq 0.$$

▶ A **は稠密に定義された閉作用素であり，その共役作用素** A^* **は次のように与えられる：**

$$D(A^*) = \left\{ z \in \ell^2(\mathbb{Z}_+) | \sum_{n=1}^{\infty} |\sqrt{n} z_{n-1}|^2 < \infty \right\},$$

$$(A^* z)_0 = 0,$$

$$(A^* z)_n = \sqrt{n}\, z_{n-1}, \quad z \in D(A),\, n \geq 1.$$

- 番号が十分大きい項はすべて 0 であるような複素数列の集合

$$\ell_0(\mathbb{Z}_+) := \{z = \{z_n\}_{n=0}^{\infty} | \text{ある番号} n_{\geq} 0 \text{があって} \\ n \geq n_0 \text{ならば} z_n = 0\}$$

は $\ell^2(\mathbb{Z}_+)$ の稠密な部分空間である．

▶ $\ell_0(\mathbb{Z}_+) \subset D(A) \cap D(A^*)$ かつ $A\ell_0(\mathbb{Z}_+) \subset \ell_0(\mathbb{Z}_+)$，$A^*\ell_0(\mathbb{Z}_+)$

▶ $\ell_0(\mathbb{Z}_+)$ 上で交換関係

$$[A, A^*] = 1 \tag{3}$$

が成立．

作用素 A, A^* から，対称作用素

$$q_0 := \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(A + A^*),$$

$$p_0 := i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(A^* - A)$$

が定義される．ただし，$m > 0,\ \omega > 0$ は定数である．

▶ (3) によって，$\ell_0(\mathbb{Z}_+)$ 上で

$$[q_0, p_0] = i\hbar$$

が成り立つ

- q_0, p_0 **の閉包をそれぞれ，** $q_{\mathrm{H}}, p_{\mathrm{H}}$ **とする．**

▶ $q_{\mathrm{H}}, p_{\mathrm{H}}$ **は自己共役である**

定理 4.9 $\pi_{\mathrm{BHJ}} := (\ell^2(\mathbb{Z}_+), \ell_0(\mathbb{Z}_+), \{q_{\mathrm{H}}, p_{\mathrm{H}}\})$ **は自由度** 1 **の** CCR **の既約な自己共役表現である**

CCR **の表現** π_{BHJ} **をボルン–ハイゼンベルク–ヨルダン (BHJ) 表現と呼ぶ．**

▶ **数学的に厳密な観点からは，この表現こそ “行列力学” の真の姿なのである．**

例 4.10 量子力学的物理量の例

古典力学の調和振動子のハミルトニアン（全エネルギー）

$$\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} q^2$$

（$m > 0$ は振動子の質量，ω は角振動数）に対応する物理量—1 次元量子調和振動子のハミルトニアン— は BHJ 表現では

$$H_{\mathrm{BHJ}} := \frac{1}{2m} p_{\mathrm{H}}^2 + \frac{m\omega^2}{2} q_{\mathrm{H}}^2$$

によって与えられる．これを A と A^* を用いて表すと

$$H_{\mathrm{BHJ}} = \hbar\omega \left(A^* A + \frac{1}{2} \right)$$

他方，直接計算により

$$H_{\mathrm{BHJ}} e_n = E_n e_n, \quad n \geq 0$$

がわかる．ただし，$e_n \in \ell^2(\mathbb{Z}_+)$ は $(e_n)_k = \delta_{nk},\, n, k \in \mathbb{Z}_+$ によって定義されるベクトル，

$$E_n := \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

したがって，H_{BHJ} は固有値 E_n をもち，e_n はこれに属する固有ベクトルの一つであることがわかる．集合 $\{e_n\}_{n=0}^{\infty}$ は完全正規直交系であるので，

$$\sigma(H_{\mathrm{BHJ}}) = \sigma_{\mathrm{p}}(H_{\mathrm{BHJ}}) = \{E_n | n \in \mathbb{Z}_+\}$$

であることが結論される.

▶ CCR の BHJ 表現を使用すれば，1 次元量子調和振動子のハミルトニアンの固有値問題は簡単に解ける

4.3 "波動力学" を実現するCCRの表現

ヒルベルト空間：$L^2(\mathbb{R})$

▶ **位置作用素**$\hat{q}$**と運動量作用素**$\hat{p}$**は次の性質を有する：**

(i) $C_0^\infty(\mathbb{R}) \subset D(\hat{q}) \cap D(\hat{p})$ **かつ**

$\hat{q}C_0^\infty(\mathbb{R}) \subset C_0^\infty(\mathbb{R})$, $\hat{p}C_0^\infty(\mathbb{R}) \subset C_0^\infty(\mathbb{R})$

(ii) $C_0^\infty(\mathbb{R})$**上で**

$$[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar$$

を満たす．

定理 4.11 $\pi_{\mathrm{S}} := (L^2(\mathbb{R}), C_0^\infty(\mathbb{R}), \{\hat{q}, \hat{p}\})$ **は自由度**1**の**CCR**の既約な自己共役表現である**.

▶ 1**次元空間**$\mathbb{R}$**上の "波動力学" は**CCR**の表現**π_{S}**から構成される理論**

● π_{S} **を自由度**1**の<u>CCRのシュレーディンガー表現</u>と呼ぶ．**

注意 4.12 シュレーディンガー表現は物理の文献では，q**表示または座標表示と呼ばれる．**

● 1次元量子調和振動子のハミルトニアンのシュレーディンガー表現での形：

$$H_{\mathrm{S}} := \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{m\omega^2}{2}\hat{q}^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}D_x^2 + \frac{m\omega^2}{2}\hat{q}^2$$

▶ H_{S} の固有値問題 $H_{\mathrm{S}}\psi = E\psi$ $(\psi \in D(H_{\mathrm{S}})$，$E$ は定数) を解くことは，シュレーディンガー方程式

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}D_x^2 + \frac{m\omega^2}{2}x^2\right)\psi(x) = E\psi(x)$$

を $D(H_{\mathrm{S}})$ の中で解く問題と等価

▶ H_{S} の固有値問題は，BHJ表現でのハミルトニアン H_{BHJ} のそれとまったく同じ結果を与えることが示される．

▶ この背後には，実は，次の事実が存在する：$L^2(\mathbb{R})$ から $\ell^2(\mathbb{Z}_+)$ へのユニタリ変換 W で

$$W\hat{q}W^{-1} = q_{\mathrm{H}}, \quad W\hat{p}W^{-1} = p_{\mathrm{H}} \tag{4}$$

を満たすものが存在する．これから，特に

$$WH_{\mathrm{S}}W^{-1} = H_{\mathrm{BHJ}}$$

► 関係式(4)**の存在こそ，"行列力学" と "波動力学" が物理的には同一の結果を与えることに対する真の理由なのである．**

4.4　CCRの表現の同値性と非同値性

- **二つの**CCR**の表現**$(\mathscr{H}, \mathscr{D}, \{Q_j, P_j | j=1,\ldots,d\})$**，**
$(\mathscr{H}', \mathscr{D}', \{Q'_j, P'_j | j=1,\ldots,d\})$ **が同値**

$$\overset{\text{def}}{\Longleftrightarrow}$$

$\exists$**ユニタリ変換** $U : \mathscr{H} \to \mathscr{K}$ such that

$$UQ_jU^{-1} = Q'_j, \quad UP_jU^{-1} = P'_j, \quad j=1,\ldots,d$$

例 4.13 $(\mathscr{H}, \mathscr{D}, \{Q_j, P_j | j=1,\ldots,d\})$: CCR**の表現**
任意のヒルベルト空間$\mathscr{K}$ **と任意のユニタリ変換**$X : \mathscr{H} \to \mathscr{K}$ **に対して，**$Q_j^X := XQ_jX^{-1}$, $P_j^X = XP_jX^{-1}$ **とおく**

▶ $(\mathscr{K}, X\mathscr{D}, \{Q_j^X, P_j^X | j=1,\ldots,d\})$ **は**$(\mathscr{H}, \mathscr{D}, \{Q_j, P_j | j=1,\ldots,d\})$ **と同値な表現**

したがって，任意のCCR**の表現に対して，これと同値な**CCR**の表現は無数に存在する．**

例 4.14 $\mathscr{F}_1 : L^2(\mathbb{R}) \to L^2(\mathbb{R})$: 1次元フーリエ変換

$$\hat{q}' := \mathscr{F}_1 \hat{q} \mathscr{F}_1^{-1} = iD_k, \quad \hat{p}' := \mathscr{F}_1 \hat{p} \mathscr{F}_1^{-1} = \hbar \hat{k}.$$

▶ $\pi'_{\mathrm{S}} := (L^2(\mathbb{R}), \mathscr{F} C_0^\infty(\mathbb{R}), \{\hat{q}', \hat{p}'\})$ はシュレーディンガー表現 π_{S} と同値なCCRの表現

注意 4.15 π'_{S} は物理の文献では運動量表示または p 表示とよばれる．

▶ 多くの物理の教科書で採用されているシュレーディンガー流の量子力学における計算を座標表示で行っても運動量表示で行ってもよい真の根拠は，いま言及したCCRの表現の同値性にあるのである．

● 違い：観測の枠組みを定める基本的描像の違い

— π_{S} は量子的粒子の位置を観測する枠組みに対応

— π'_{S} は量子的粒子の運動量を観測する枠組みに対応

注意：不確定性原理により，量子的粒子の位置と運動量を同時に正確に観測する枠組みは存在し得ない

- **自由度dのCCRのシュレーディンガー表現**

ヒルベルト空間：$L^2(\mathbb{R}^d)$

位置作用素$\hat{q}_j$

$$D(\hat{q}_j) := \left\{ \psi \in L^2(\mathbb{R}^d) | \int_{\mathbb{R}^d} |x_j \psi(\boldsymbol{x})|^2 d\boldsymbol{x} < \infty \right\}$$

$$(\hat{q}_j \psi)(\boldsymbol{x}) := x_j \psi(\boldsymbol{x}), \quad \text{a.e.}\boldsymbol{x}, \ \psi \in D(\hat{q}_j), \ j = 1, \ldots, d.$$

運動量作用素$\hat{p}_j$

$$\hat{p}_j := -i\hbar D_{x_j}.$$

$$\pi_{\mathrm{S}}^{(d)} := (L^2(\mathbb{R}^d), C_0^\infty(\mathbb{R}^d), \{\hat{q}_1, \ldots, \hat{q}_d, \hat{p}_1, \ldots, \hat{p}_d\})$$

を自由度dのCCRのシュレーディンガー表現という．

5　フォン・ノイマンの一意性定理

- $(\mathscr{H}, \{Q_1, \ldots, Q_d, P_1, \ldots, P_d\})$ は**自由度 d の CCR のヴァイル表現**

$\overset{\text{def}}{\Longleftrightarrow}$

(i) 各 Q_j, P_j は自己共役

(ii) ユニタリ作用素は次の関係式（**ヴァイル関係式**）を満たす：

$$e^{itQ_j} e^{isP_k} = e^{-i\delta_{jk}ts} e^{isP_k} e^{itQ_j}$$

$$e^{itQ_j} e^{isQ_k} = e^{isQ_k} e^{itQ_j}, \quad e^{itP_j} e^{isP_k} = e^{isP_k} e^{itP_j}, \quad j, k = 1, \ldots, d,\ s, t \in \mathbb{R}.$$

▶ $\exists \mathscr{D}$ （稠密な部分空間）such that $(\mathscr{H}, \mathscr{D}, \{Q_1, \ldots, Q_d, P_1, \ldots, P_d\})$ は CCR の自己共役表現

例 5.1 $\pi_{\mathrm{S}}^{(d)}$ は既約なヴァイル表現である．

- ヒルベルト空間 $\mathscr{H}$ は可分 $\overset{def}{\Longleftrightarrow}$ $\mathscr{H}$ で稠密な可算部分集合 $\mathscr{D}$ が存在

定理 5.2 (フォン・ノイマンの一意性定理) 可分なヒルベルト空間上の自由度 d の CCR のヴァイル表現は自由度 d のシュレーディンガー表現 $\pi_{\mathrm{S}}^{(d)}$ の直和に同値である．

注意 5.3 ヴァイル表現ではない CCR の表現はシュレーディンガー表現に同値とは限らない．

- $\mathrm{CCR}(d)$: 自由度 d の CCR の表現の全体

$$\mathrm{CCR}(d)\begin{cases}\text{同値なもの} & \longrightarrow \text{同値類}\\ \text{非同値なもの} & \end{cases}$$

各同値類：ひとつの量子系の記述の本質的枠組みを与える

▶ 各量子系 $\longleftrightarrow$ CCR の表現の同値類

▶ 一つの同値類に対応する量子系は，この同値類に属する CCR の表現に応じて異なる外見をもつが，どの表現においても同一の物理的結果が得られる．

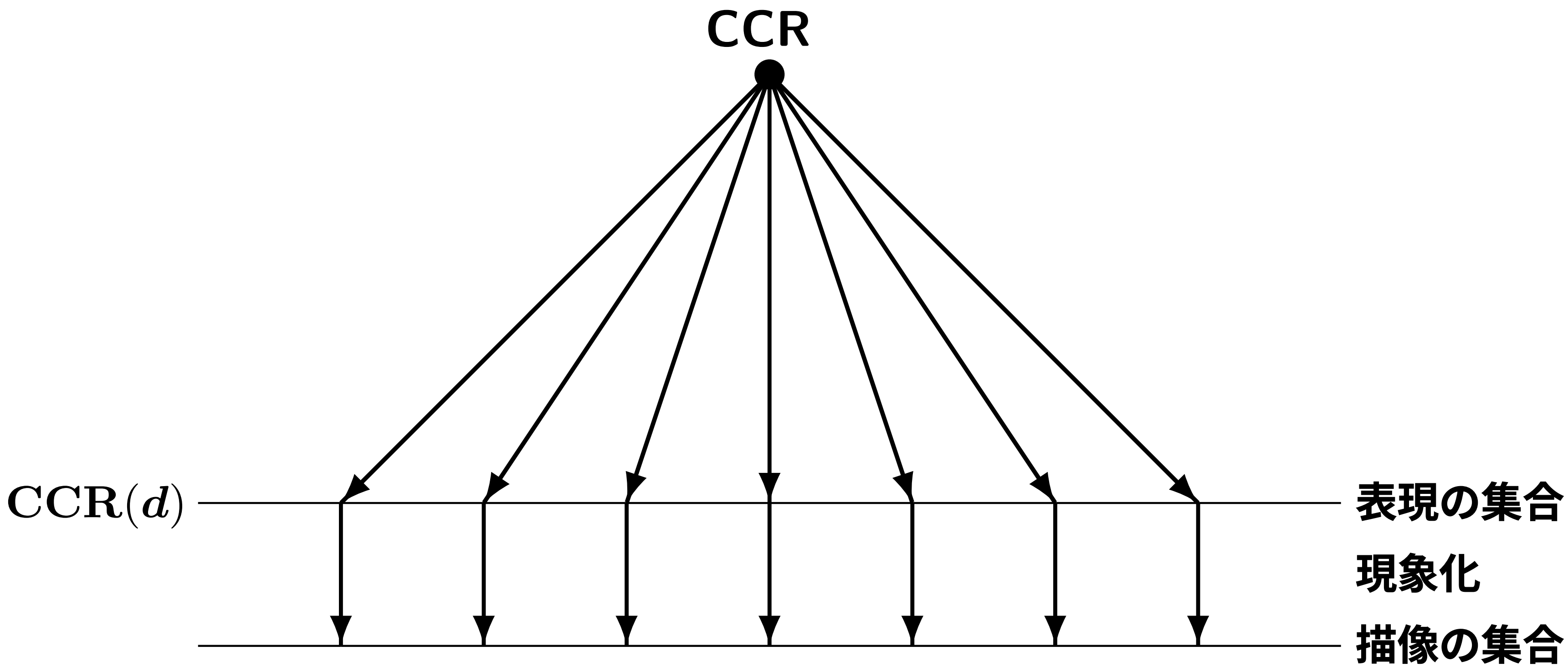

図2　量子力学の基本的構図（象徴図）

► **CCRの（非自明な）非同値表現は，特徴的な物理現象と深く関わっている**

例：次の節で述べるアハラノフ–ボーム効果

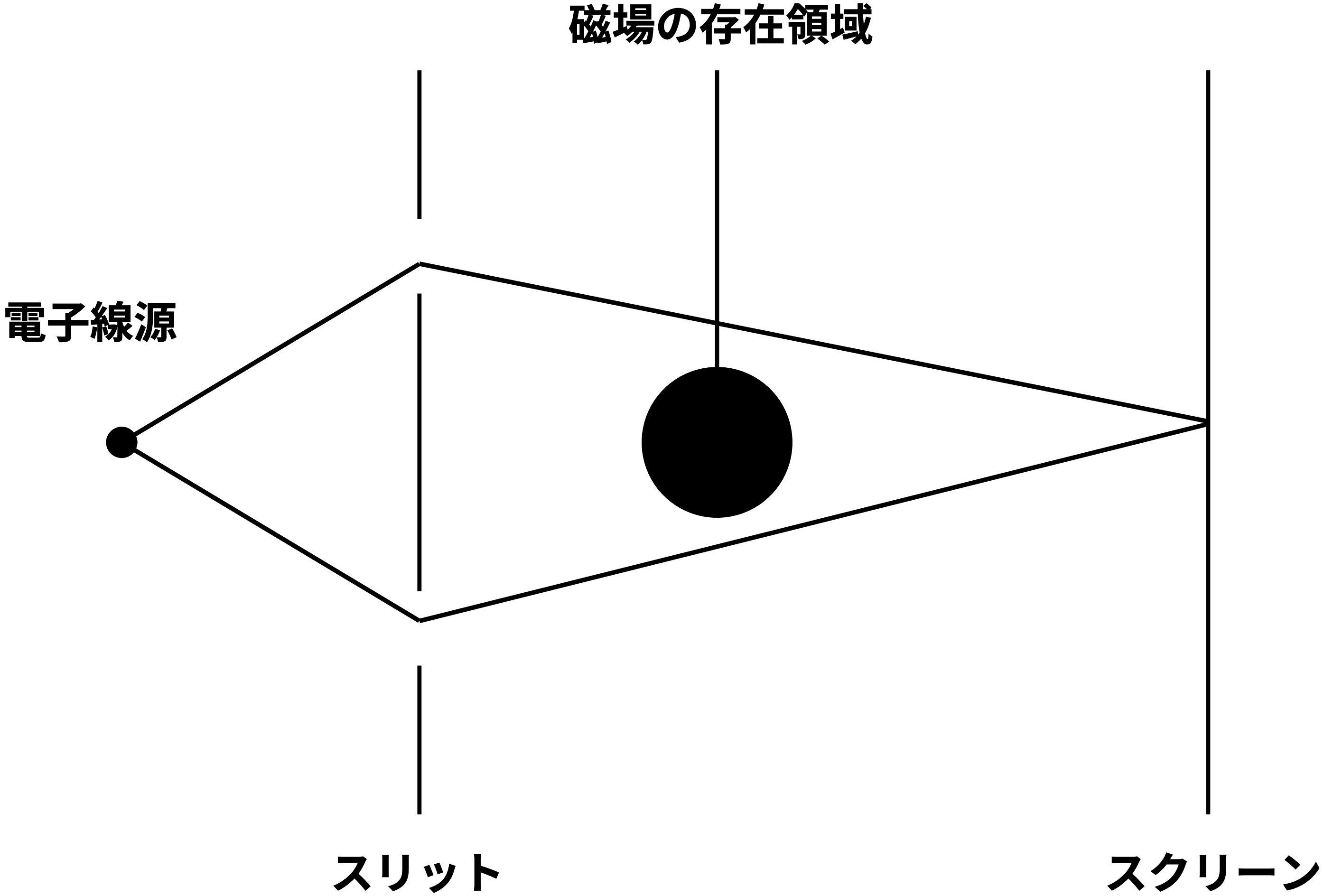

図3　アハラノフ–ボーム（AB）効果の模式図（磁場の方向は紙面に垂直）

6　量子力学とトポロジー — アハラノフ–ボーム効果とCCRの非同値表現

6.1　アハラノフ–ボーム効果

- **アハラノフ–ボーム(AB)効果**
  図3のような実験装置において，磁場を変動させるとスクリーン上の干渉縞のパターンが変化する現象

▶ 古典電磁気学的には不可解な現象

▶ 量子力学で説明可能

▶ トポロジー的側面

▶ 重要な点：磁場を除いた領域は非単連結 ⟶ トポロジカルな効果

6.2 特異な磁場をもつ２次元量子系におけるCCRの表現

磁場が平面の原点に集中している理想化された状況を考える

- **非単連結領域**

$$M := \mathbb{R}^2 \setminus \{\mathbf{0}\} = \{\boldsymbol{x} = (x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2 | \boldsymbol{x} \neq \mathbf{0}\} \tag{5}$$

- **磁場 B，磁束 Φ_0**

$$B(\boldsymbol{x}) = \Phi_0 \delta(\boldsymbol{x}) \tag{6}$$

$\delta(\boldsymbol{x})$ **は** $x = 0$ **に台をもつデルタ超関数**

- **ベクトルポテンシャル**

$$A_1(\boldsymbol{x}) := -\frac{1}{2\pi}\frac{x_2}{|\boldsymbol{x}|^2}\Phi_0, \quad A_2(\boldsymbol{x}) := \frac{1}{2\pi}\frac{x_1}{|\boldsymbol{x}|^2}\Phi_0 \tag{7}$$

▶ **超関数の意味で**

$$B = D_1 A_2 - D_2 A_1$$

▶ M **上では**

$$D_1 A_2 - D_2 A_1 = 0.$$

- **量子系の状態のヒルベルト空間：**$L^2(M) \cong L^2(\mathbb{R}^2)$
- $q \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ **：荷電粒子の電荷**
- $\hat{p}_j := -i\hbar D_j$ **：運動量作用素**
- **荷電粒子の物理的運動量** $\boldsymbol{P} = (P_1, P_2)$ **：**

$$P_j := \overline{\hat{p}_j - qA_j} \quad (\hat{p}_j - qA_j \text{ の閉包}) \quad j = 1, 2 \tag{8}$$

▶ P_j **は** $L^2(\mathbb{R}^2)$ **上の閉対称作用素**

- **関数** $f : M \to \mathbb{C}$ **の台** $(\mathrm{supp}\, f)$

$$\mathrm{supp}\, f := \overline{\{\boldsymbol{x} \in M | f(\boldsymbol{x}) \neq 0\}}$$

- $C_0^\infty(M) := \{f \in C^\infty(M) | \mathrm{supp}\, f \subset M,\ \mathrm{supp}\, f \text{ は有界}\}$

補題 6.1 $C_0^\infty(M)$ **は** $L^2(\mathbb{R}^2)$ **で稠密な部分空間である．**

定理 6.2 $\hat{p}_j - qA_j$ **は** $C_0^\infty(M)$ **上で本質的に自己共役である．したがって，**P_j **は自己共役**.

- $\hat{q}_j := M_{x_j}$ **（変数** x_j **によるかけ算作用素）**

補題 6.3 $C_0^\infty(M)$ **上で次の交換関係が成り立つ**:

$$[\hat{q}_j, P_k] = i\hbar\delta_{jk}, \quad [\hat{q}_j, \hat{q}_k] = 0, \quad [P_j, P_k] = 0 \quad (j, k = 1, 2) \qquad (9)$$

定理 6.4

$$\pi_{\boldsymbol{A}} := (L^2(\mathbb{R}^2), C_0^\infty(M), \{\hat{q}_j, P_j\}_{j=1}^2)$$

は自由度２のCCR**の既約な自己共役表現である．**

▶ **証明については**

新井朝雄『量子現象の数理』，朝倉物理学大系12**，朝倉書店**

の3.6**節を参照．**

6.3　CCRの非同値表現とAB効果

- Mの中の任意の閉曲線Cを貫く磁束

$$\Phi(C) := \int_C [A_1(\boldsymbol{x})dx_1 + A_2(\boldsymbol{x})dx_2] = \int_C \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}) \cdot d\boldsymbol{x} \tag{10}$$

- $C(\boldsymbol{x}; s, t)$（$s, t \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$）：次のような長方形の閉曲線（原点は通らない）

$$\boldsymbol{x} \to (x_1 + \hbar s, x_2) \to (x_1 + \hbar s, x_2 + \hbar t) \to (x_1, x_2 + \hbar t) \to \boldsymbol{x}$$

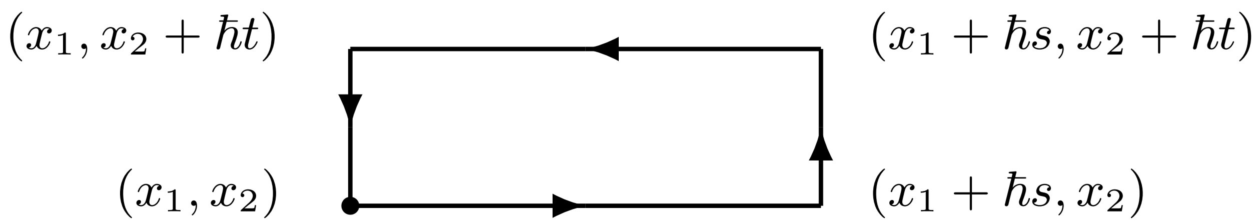

図4　曲線 $C(\boldsymbol{x}; s, t)$ ($s, t > 0$の場合)

定理 6.5 **すべての** $\psi \in L^2(\mathbb{R}^2)$, $s, t \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ **に対して**

$$\left(e^{isP_1} e^{itP_2} \psi\right)(\boldsymbol{x}) = e^{-q\Phi(C(x;s,t))i/\hbar} \left(e^{itP_2} e^{isP_1} \psi\right)(\boldsymbol{x}) \tag{11}$$

が（ルベーグ測度に関して）ほんとんどいたるところの点 x **について成り立つ．**

補題 6.6 $D(\boldsymbol{x};s,t)$ を $C(\boldsymbol{x};s,t)$ の内部領域とすれば

$$\Phi(C(\boldsymbol{x};s,t)) = \begin{cases} \varepsilon(st)\Phi_0 & (0 \in D(\boldsymbol{x};s,t)\text{ のとき}) \\ 0 & (0 \notin D(\boldsymbol{x};s,t)\text{ のとき}) \end{cases}$$

ただし，$\varepsilon(t) := t/|t|,\ t \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$．

系 6.7 $q\Phi_0/\hbar$ が 2π の整数倍 (i.e. $q\Phi_0/\hbar \in 2\pi\mathbb{Z}$)

$$\Longleftrightarrow$$

$e^{isP_1}e^{itP_2} = e^{itP_2}e^{isP_1},\ s,t \in \mathbb{R}$

定理 6.8 $\pi_{\boldsymbol{A}}$ がシュレーディンガー表現

$$\pi_{\mathrm{S}}^{(2)} := (L^2(\mathbb{R}^2), C_0^\infty(M), \{\hat{q}_j, \hat{p}_j | j = 1,2\})$$

に同値であるための必要十分条件は $q\Phi_0/\hbar$ が 2π の整数倍であることである．

定義 6.9 $\Phi_0 \in \frac{2\pi\hbar}{q}\mathbb{Z}$ であるとき，磁束 Φ_0 は量子化されているという．

系 6.10 $\pi_{\boldsymbol{A}}$ が $\pi_{\mathrm{S}}^{(2)}$ に非同値 $\Longleftrightarrow$ 磁束は量子化されていない

- (11) 式の物理的な意味

  磁場が存在する場合の状態関数の平行移動による位相のずれが

$$-q\Phi(C(\boldsymbol{x};s,t))/\hbar = -q\Phi_0\varepsilon(st)/\hbar \quad (0 \in D(\boldsymbol{x};s,t)\text{のとき})$$

▶ 磁束の非量子化 $\longleftrightarrow$ 非自明な位相のずれ $\longleftrightarrow$ AB 効果の生起

▶ CCR の表現 $\pi_{\boldsymbol{A}}$ の非同値表現 $\longleftrightarrow$ AB 効果の生起

6.4　トポロジー的構造との照応

- $\pi_1(M)$：M の基本群
  - ▶ M は非単連結であるので $\pi_1(M)$ は非自明
  - ▶ $\pi_1(M) \cong \mathbb{Z}$（加法群としての $\mathbb{Z}$）
- 写像 $\rho : \pi_1(M) \to U(1)$（1次元ユニタリ群）

$$\rho([C]) := e^{-iq\Phi(C)/\hbar}, \quad [C] \in \pi_1(M)$$

  - ▶ ρ は $\pi_1(M)$ のユニタリ表現
- $\rho([C(\boldsymbol{x}; s, t)]) = e^{-iq\Phi_0 \varepsilon(st)/\hbar} \quad (0 \in D(\boldsymbol{x}; s, t)$ のとき)
  - ▶ 磁束が量子化 $\Longleftrightarrow \rho([C(\boldsymbol{x}; s, t)]) = I$

命題 6.11 ユニタリ表現 ρ は自明 $\Longleftrightarrow$ 磁束は量子化

系 6.12 ユニタリ表現 ρ は非自明 $\Longleftrightarrow$ $\pi_{\boldsymbol{A}}$ は $\pi_{\mathrm{S}}^{(2)}$ に非同値