関数解析学と量子物理学

新井朝雄（北海道大学）

千葉大学SLA 2018 記念講演

2018年11月22日

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**

$$\left\{\begin{array}{l}\text{ハイゼンベルク（およびボルン–ヨルダン）}(1925)\\[2ex] \text{シュレーディンガー}(1926)\end{array}\right.$$

▶ **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)

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

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

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

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

$$\mathbf{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \cdots & \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix}$$ (**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**

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

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)

J. von Neumann, Die Eindeutigkeit der Schrödingerschen Operatoren (**シュレディンガー作用素たちの一意性**), Mathematische Annalen **104** (1931), 570–578.

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**

(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： $[A, B] := AB - BA$

<u>自由度1の場合</u>： $[Q, P] = i\hbar I$

（I は恒等元(identity)（$IQ = QI = Q, IP = PI = P$））

自由度 N の場合

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

- CCR を満たす代数的対象 $Q_1, \ldots, Q_N, P_1, \ldots, P_N$ 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 N に対して，自由度 N の CCR は無限に多くの表現をもつ

各自由度 N 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）

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

- 行列力学と波動力学の同等性の厳密な図式

正準交換関係のある表現 $\pi_{\mathrm{S}} \longrightarrow$ 波動力学（シュレーディンガー理論）

正準交換関係のある表現 $\pi_{\mathrm{BHJ}} \longrightarrow$ 行列力学

▶ 実は　π_{S} と π_{BHJ} は同値

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

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

▶ $L^2(\mathbb{R}^d)$ **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**

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

- $\Psi \in \mathscr{H}$ **と**$\Phi \in \mathscr{H}$ **は直交** $\overset{\text{def}}{\Longleftrightarrow}$ $\langle \Psi, \Phi \rangle_{\mathscr{H}} = 0$
- **部分集合**$\mathscr{D} \subset \mathscr{H}$ **の直交補空間**

$$\mathscr{D}^{\perp} = \{\Psi \in \mathscr{H} \,|\, \langle \Psi, \Phi \rangle_{\mathscr{H}} = 0, \ \forall \Phi \in \mathscr{D}\}$$

- $\mathscr{D}$**は閉集合**$\overset{\text{def}}{\Longleftrightarrow}$ $\Psi_n \in \mathscr{D},\ \lim_{n\to\infty} \Psi_n = \Psi$**ならば**$\Psi \in \mathscr{D}$
- $\mathscr{M} \subset \mathscr{H}$ **は閉部分空間**$\overset{\text{def}}{\Longleftrightarrow}$ $\mathscr{M}$ **は部分空間かつ閉集合**

定理 2.6 (正射影定理) $\mathscr{M}$**を閉部分空間とする．このとき，任意の** $\Psi \in \mathscr{H}$ **に対して，**$\Psi_{\mathscr{M}} \in \mathscr{M}$ **と**$\Psi_{\mathscr{M}^{\perp}} \in \mathscr{M}^{\perp}$ **がそれぞれただ一つ存在し**

$$\Psi = \Psi_{\mathscr{M}} + \Psi_{\mathscr{M}^{\perp}} \quad (\textbf{直交分解})$$

と表される．

- $\Psi_{\mathscr{M}}$ を Ψ の $\mathscr{M}$ 上への正射影（直交射影）という．

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 $\|T\Psi\| \leq C\,\|\Psi\|,\ \forall\Psi \in D(T)$

• 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) $T_n T_{n-1} \cdots T_2 T_1$

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

$$(T_n \cdots T_1)(\Psi) := T_n(T_{n-1}(\cdots T_2(T_1(\Psi)) \cdots)) \quad \Psi \in D(T_n \cdots T_1).$$

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**)

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

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

▶ T は対称作用素 $\Longleftrightarrow$ $D(T)$ は稠密かつ $T \subset T^*$

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**

▶ 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，全複素平面 $\mathbb{C}$，閉上半平面 $\{z \in \mathbb{C} | \mathrm{Im}\, z \geq 0\}$，閉下半平面 $\{z \in \mathbb{C} | \mathrm{Im}\, z \leq 0\}$ のいずれか

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**

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

例 2.12 $\mathscr{M}$:$\mathscr{H}$の閉部分空間

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$\mathscr{M}$ **上への正射影作用素**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) $\quad E(\mathbb{R}) = I$

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

▶ **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 2.13 (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**

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

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

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**

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

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

例 2.14 $t \in \mathbb{R}$**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 2.15 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 2.16 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 $\operatorname{supp} f$ **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　定義と注意

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$Q_j \mathscr{D} \subset \mathscr{D}, P_j \mathscr{D} \subset \mathscr{D}$.

(ii) $\mathscr{D}$上で自由度dのCCRを満たす．すなわち，任意の$\Psi \in \mathscr{D}$に対して

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

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，$(\mathscr{H}, \mathscr{D}, \{Q_j, P_j | j = 1, \ldots, d\})$を自由度$d$のCCRの**自己共役表現**という．

注意 4.1

(1) CCRの表現空間は必ず無限次元である.

(2) 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

(3) 諸々の物理量はCCRの自己共役表現$Q_1, \ldots, Q_d, P_1, \ldots, P_d$ から構成される

古典力学における物理量 $f(q_1, \ldots, q_d, p_1, \ldots, p)$

量子力学において対応する物理量 "$f(Q_1, \ldots, Q_d, P_1, \ldots, P_d)$"

作用素の可約性

$\mathscr{M}$を$\mathscr{H}$の閉部分空間

- $\mathscr{H}$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：

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

- $\mathscr{H}$ 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 4.2

(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 4.3 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

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

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

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．

▶ (1) 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 4.4 $\pi_{\mathrm{BHJ}} := (\ell^2(\mathbb{Z}_+), \ell_0(\mathbb{Z}_+), \{q_\mathrm{H}, p_\mathrm{H}\})$ 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．

A: 消滅作用素

A^*: 生成作用素

例 4.5 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

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

によって与えられる．これを A と A^* を用いて表すと

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

他方，直接計算により

$$H_{\rm BHJ}e_n=E_ne_n,\quad n\geq 0$$

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 4.6 $\pi_{\mathrm{S}} := (L^2(\mathbb{R}), C_0^\infty(\mathbb{R}), \{\hat{q}, \hat{p}\})$**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****CCRのシュレーディンガー表現****と呼ぶ．**

注意 4.7 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

$$W\hat{q}W^{-1} = q_{\mathrm{H}}, \quad W\hat{p}W^{-1} = p_{\mathrm{H}} \tag{2}$$

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**(2)**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 4.8 $(\mathscr{H}, \mathscr{D}, \{Q_j, P_j | j = 1, \ldots, d\})$: 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 4.9 $\mathscr{F}_1 : L^2(\mathbb{R}) \to L^2(\mathbb{R})$: 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 4.10 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

- **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**

$\stackrel{\text{def}}{\Longleftrightarrow}$

(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．

▶ 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 5.4 アハラノフ–ボーム効果とよばれる特徴的な現象には，特異なベクトルポテンシャルから定まる CCR の表現でシュレーディンガー表現と非同値なものが付随している

$\longrightarrow$ 新井朝雄『量子現象の数理』（朝倉物理学大系１２，朝倉書店，2006）の３章

6　量子数理物理学と関数解析学の発展

- **自己共役性の問題**

問：古典–量子対応において形式的に定義される物理量は真に自己共役か？
この問題の解析は1940**年代から開始された**
関数解析学と数理物理学の大家故加藤敏夫教授をもってその嚆矢とする

Tosio KatoT, Perturbation Theory for Linear Operators, Springer, 1966, 1976（**第**2**版**）

Reed and B. Simon: Methods of Modern Mathematical Physics II: Fourier Analysis, Self-adjointness, Academic Press, 1975

- **諸々の物理量—特にハミルトニアン—のスペクトル解析**

M. Reed and B. Simon: Methods of Modern Mathematical Physics IV: Analysis of Operators, Academic Press, 1978，

- **量子的粒子の散乱現象を記述する散乱理論**

M. Reed and B. Simon: Methods of Modern Mathematical Physics III: Scattering Theory, Academic Press, 1979

- **量子場の理論の数学的基礎**

$$\left\{\begin{array}{c}\text{構成的場の量子論}\\ \text{公理論的場の量子論}\end{array}\right.$$

この範疇の理論には，関数解析学のみならず，ほとんどすべての数学が陰に陽に関わっている．

1950**年代から始まる量子場の数学的理論は主に関数解析学的手法を中心に展開され，それは今日まで続いている．**

A. Arai, Analysis on Fock Spaces and Mathematical Theory of Quantum Fields, World Scientific, 2018.

- **重要な未解決問題の一つ**

4**次元ミンコフスキー時空上の相対論的量子場のモデルで素粒子の相互作用を記述するものの存在を証明すること**

結語

関数解析学と量子数理物理学の関係は不可分のものであり，両者の発展を通して，量子現象の根底にある数学的構造に関して非常に深い認識がもたらされうる