ヒルベルト空間と量子力学
—量子力学の数学的構造—

2005MM049 中野健一
指導教員：宮元忠敏

1　はじめに

1920 年代に端を発した量子力学は，現在では，原子レベルのミクロな力学をほとんど完全に記述するに至っている．そこに改めて数学的裏づけが与えられることで，量子力学の一般性と確かさが，より揺るぎないものになることは言うまでもない．

量子力学を記述するための数学的手法として，フォン・ノイマンはヒルベルト空間とその上で働く自己共役作用素を起用した．これらの概念はもちろん，それ自身としても有用であるが，目的を量子力学の記述に限定した場合にも，非常に合理的な考察結果をもたらす．

そこで本研究では，[2] と [3] を用いて，フォン・ノイマンの研究 [1] の一部分を読み解き，量子力学の数学的構造を明らかにする．

以下，$\mathscr{H}$ を複素ヒルベルト空間とする．

2　正射影作用素

$\mathscr{H}$ 上の有界線形作用素 P で，次の性質 (i)，(ii) を持つものを，**正射影作用素**とよぶ．

(i) $P^2 = P$ (ベキ等性)

(ii) $P = P^*$ (自己共役性)

3　スペクトル測度

$\mathbf{B}^d$ を $\mathbf{R}^d$ のボレル集合体，$\mathcal{P}(\mathscr{H})$ を $\mathscr{H}$ 上の正射影作用素の全体とし，E は $\mathbf{B}^d$ から $\mathcal{P}(\mathscr{H})$ への写像であるとする．この写像は，正射影作用素の族 $\left\{ E(B) \,\middle|\, B \in \mathbf{B}^d \right\}$ を与える．この族が次の条件 (E.1)〜(E.3) を満たすとき，これを d 次元の**スペクトル測度**という．

(E.1) $E(\emptyset) = 0,\ E(\mathbf{R}^d) = I$

(E.2) $B = \bigcup_{n=1}^{\infty} B_n$，$B_n \cap B_m = \emptyset\ (n \neq m)$ $(B_n \in \mathbf{B}^d, n = 1, 2, \cdots)$ ならば，

$$E(B) = \operatorname*{s-lim}_{N\to\infty} \sum_{n=1}^{N} E(B_n) \tag{1}$$

(E.3) 任意の $B_1, B_2 \in \mathbf{B}^d$ に対して，$E(B_1)E(B_2) = E(B_1 \cap B_2)$．

例 3.1　$\Lambda := \{\lambda_n\}_{n=1}^{N}$ $(N \leq \infty)$ を $\mathbf{R}$ の部分集合とし，各 λ_n に対して，$\mathscr{H}$ 上の正射影作用素 P_n が対応しているとする．さらに，$m \neq n$ ならば，$P_n P_m = 0$ であり，$\sum_{n=1}^{N} P_n = I$ を満たすとする．ここで，1 次元ボレル集合 $B \in \mathbf{B}^1$ に対して，$\mathscr{H}$ 上の線形作用素 $E(B)$ を

$$E(B) = \sum_{\lambda_n \in B} P_n$$

によって定義する．ただし，$\Lambda \cap B = \emptyset$ のとき，$E(B) = 0$．このとき，$\left\{ E(B) \,\middle|\, B \in \mathbf{B}^1 \right\}$ は 1 次元のスペクトル測度である．

4　作用素値汎関数

$\mathbf{R}^d$ 上の任意のボレル可測関数 f に対して，

$$\mathscr{D}_f := \left\{ \psi \in \mathscr{H} \,\middle|\, \int_{\mathbf{R}^d} |f(\lambda)|^2 d(\psi, E(\lambda)\psi) < \infty \right\} \tag{2}$$

によって定義される部分集合 $\mathscr{D}_f$ を考える．任意の $\phi \in \mathscr{D}_f$ を固定し，写像 $F_f : \mathscr{H} \to \mathbf{C}$ を

$$F_f(\psi) = \int_{\mathbf{R}^d} f(\lambda)^* d(\phi, E(\lambda)\psi),\ \psi \in \mathscr{H} \tag{3}$$

によって定義する．このとき，$F_f \in \mathscr{H}^*$ であり，

$$\|F_f\| = \left(\int_{\mathbf{R}^d} \left| f(\lambda) \right|^2 d(\phi, E(\lambda)\phi) \right)^{1/2} \tag{4}$$

が成立する．

定理 4.1　$\mathscr{H}$ 上の線形作用素 A_f で，$D(A_f) = \mathscr{D}_f$，

$$(\psi, A_f \phi) = \int_{\mathbf{R}^d} f(\lambda) d(\psi, E(\lambda)\phi),\quad \psi \in \mathscr{H},\ \phi \in \mathscr{D}_f \tag{5}$$

を満たすものがただひとつ存在する．この場合，

$$\|A_f \phi\| = \left(\int_{\mathbf{R}^d} \left| f(\lambda) \right|^2 d(\phi, E(\lambda)\phi) \right)^{1/2},\quad \phi \in \mathscr{D}_f \tag{6}$$

定理 4.1 によって与えられる線形作用素 A_f を記号的に，

$$A_f = \int_{\mathbf{R}^d} f(\lambda) dE(\lambda) \tag{7}$$

と表わす．

$\mathscr{H}$ 上に d 次元のスペクトル測度が与えられると，$\mathbf{R}^d$ 上の任意のボレル可測関数 f に対して，$\mathscr{H}$ 上の線形作用素 A_f がひとつ定まる．これは，$\mathbf{R}^d$ 上のボレル可測関数の空間から $\mathscr{H}$ 上の線形作用素の空間への写像 $\mathbb{A} : f \to A_f$ を定義する ($\mathbb{A}(f) := A_f$)．一般に，定義域が関数空間で，値域が線形作用素の空間のなかにある写像を**作用素値汎関数**という．したがって，写像 $\mathbb{A}$ は作用素値汎関数の一例である．

5　スペクトル定理

定理 5.1　スペクトル定理．T を $\mathscr{H}$ 上の任意の自己共役作用素とする．このとき，

$$T = \int_{\mathbf{R}} \lambda dE(\lambda) \tag{8}$$

を満たす，1次元のスペクトル測度 $\{\, E(B) \,|\, B \in \mathbf{B}^1 \,\}$ がただひとつ存在する．

定理 5.2 T を自己共役作用素，E を T のスペクトル測度とする．このとき，

(i) λ を T の固有値，これに対する T の固有ベクトルを ψ とすれば，

$$E(\mathbf{R}\backslash\{\lambda\})\psi = 0 \tag{9}$$

$$E(\{\lambda\})\psi = \psi \tag{10}$$

さらに，$\mathbf{R}$ 上の任意の点で有限値をとる任意のボレル可測関数 f に対して，$f(T)\psi = f(\lambda)\psi$.

(ii) 逆に，$E(\{\lambda\})\psi = \psi$ を満たす $\psi \neq 0$ があれば，λ は T の固有値であり，ψ は λ に対する T の固有ベクトルである．

(iii) λ が T の固有値であるとき，$E(\{\lambda\})$ はその固有空間への正射影作用素である．

6 状態と物理量

公理 6.1 量子系の状態は，$\mathscr{H}$ の単位ベクトルによって記述される．このベクトルを**状態ベクトル**という．ただし，絶対値が1の任意の複素数 α に対して，状態ベクトル $\psi \in \mathscr{H}$ と $\alpha\psi$ は同一の状態を表わすものとする．

公理 6.2 量子系の物理量は，$\mathscr{H}$ 上の自己共役作用素によって表わされる．物理量を表わす自己共役作用素の任意の固有ベクトルは状態を表わす．

T_ψ を，確率空間 $(\Omega, \mathbf{B}, P)$ 上に定義された確率変数で，状態 $\psi \in \mathscr{H}$ における物理量 T の観測値を表わすものとする．

公理 6.3 (i) T を物理量とする．任意のボレル集合 $B \subset \mathbf{R}$ に対して，$T_\psi \in B$ である確率を $P(T_\psi \in B)$，T_ψ の分布を P^{T_ψ} とすれば，$P(T_\psi \in B) = \|E_T(B)\psi\|^2$，すなわち，

$$P^{T_\psi}(B) = \|E_T(B)\psi\|^2, \quad B \in \mathbf{B}^1 \tag{11}$$

である．ここで，E_T は T のスペクトル測度である．

(ii) 観測によって，物理量 T の固有値 λ が得られたとすれば，観測直後の状態は λ に対する T の固有ベクトルによって記述される．

命題 6.1 任意の状態 $\psi \in D(T)$ に対して，

$$E[T_\psi] = (\psi, T\psi) \tag{12}$$

命題 6.2 任意の状態 ψ, ϕ に対して，状態 ψ が状態 ϕ であるか否かを決定するための観測をしたときに，状態 ϕ を得る確率は，$\left|(\phi,\psi)\right|^2$ によって与えられる．

7 ハイゼンベルクの不確定性関係

$\mathscr{H}$ 上の2つの線形作用素 T, S に対し，線形作用素 $[T, S]$ を

$$D([T,S]) := D(TS) \cap D(ST) \tag{13}$$

$$[T,S]\psi := TS\psi - ST\psi, \quad \psi \in D([T,S]) \tag{14}$$

によって定義し，これを T と S の**交換子**とよぶ．

部分空間 $D \subset D(TS) \cap D(ST)$ があって，任意の $\psi \in D$ に対して，$[T,S]\psi = 0$ が成立するとき，T と S は D 上で**可換**であるという．

確率変数 T_ψ の分散は，(7),(12) 式によれば，

$$V[T_\psi] = \|[T - (\psi, T\psi)]\psi\|^2 \tag{15}$$

である．したがって，T_ψ の標準偏差は，

$$(\Delta T)_\psi := \sqrt{V[T_\psi]} = \|[T - (\psi, T\psi)]\psi\| \tag{16}$$

によって与えられる．これを状態 ψ における T の**不確定さ**として定義する．

定理 7.1 ハイゼンベルクの不確定性関係．T, S を $\mathscr{H}$ 上の対称作用素とし，$\psi \in D([T,S])$ とする．このとき，

$$(\Delta T)_\psi (\Delta S)_\psi \geq \frac{1}{2}\left|(\psi, [T,S]\psi)\right| \tag{17}$$

が成り立つ．とくに，部分空間 $\mathscr{D} \subset D([T,S])$ 上で，

$$[T,S] = c \tag{18}$$

($c \neq 0$ は複素数) が成立するならば，

$$(\Delta T)_\psi (\Delta S)_\psi \geq \frac{1}{2}|c|\|\psi\|^2, \quad \psi \in \mathscr{D} \tag{19}$$

定理 7.1 は，T, S が可換でない場合にのみ，非自明な内容を持つ．こうして，2つの物理量 T, S の観測値は，じゅうぶん小さな精度では同時に確定されえないことが示される．

8 おわりに

ハイゼンベルクの不確定性関係にいう物理量 T, S は，量子力学の文脈においてはそれぞれ，位置と運動量を表わす作用素として登場する．

こうして，量子力学の最も基本的な記述が準備された．これによって，ヒルベルト空間や自己共役作用素の具体例に関する議論へと，ただちに進むことができる．

参考文献

[1] J.von Neumann, Die mathematische Grundlagen der Quantenmechanik, Springer Verlag, Berlin, 1932.
日本語訳：『量子力学の数学的基礎』(井上健ほか訳，みすず書房，東京，1957).

[2] 新井朝雄：『共立講座—21 世紀の数学 16　ヒルベルト空間と量子力学』，共立出版，東京，1997.

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