時間作用素の存在について

北海道大学理学部　　寺西　功哲
Noriaki Teranishi
Department of Mathematics, Hokkaido University
e-mail: teranishi@math.sci.hokudai.ac.jp

1　序文

当研究の一部は信州大学の佐々木格 氏，信州大学の鈴木章斗 氏，信州大学の松澤泰通 氏，北海学園大学の船川大樹 氏との共同研究に基づくものである．

本稿では，以下で定義される時間作用素の存在と性質について述べるものである．時間作用素には従来研究されてきた自己共役作用素に対する時間作用素と，新たに定義したユニタリ作用素に対する時間作用素がある．先ずは，時間作用素の定義を確認しておきたい．

定義 1.1. $\mathcal{H}$ をヒルベルト空間，H を $\mathcal{H}$ 上の自己共役作用素，U を $\mathcal{H}$ 上のユニタリ作用素，T を $\mathcal{H}$ 上の対称作用素とする．このとき，

(1) T が自己共役作用素 H に対する時間作用素であるとは，非自明な部分空間 $D \subseteq \mathcal{H}$ が存在して

$$[T, H] = i \quad \text{on } D \tag{1}$$

が成立することである．ここで，$[T, H] \coloneqq TH - HT$ とする．

(2) T が自己共役作用素 H に対する強時間作用素であるとは，任意の実数 $t \in \mathbb{R}$ に対して

$$e^{itH} T e^{-itH} = T + t$$

が成立することである．

(3) T がユニタリ作用素 U に対する時間作用素であるとは，非自明な部分空間 $D \subseteq \mathcal{H}$ が

存在して

$$[T, U] = U \quad \text{on } D$$

が成立することである．

(4) T がユニタリ作用素 U に対する強時間作用素であるとは，作用素等式として

$$[T, U] = U$$

が成立することである．

ユニタリ作用素に対する時間作用素を新たに定義したが，これは離散時間で発展する量子ウォークを念頭に定義している．離散な量子ウォークの時間発展はユニタリ作用素 U で記述されるが，このユニタリ作用素には 1 変数強連続ユニタリ群のような生成子として自然な自己共役作用素が定義されない．そこで，強時間作用素の定義中の e^{itH} をユニタリ作用素 U に，$t = 1$ としたものを定義とした．以下，時間作用素の存在と性質を見ていきたい．

2　自己共役作用素に対する時間作用素

正準交換関係 (1) が成立する領域 D に稠密性を要請する場合は Galapon の時間作用素なる，非常に性質の良い時間作用素の構成方法が知られている．Galapon による時間作用素の構成方法は割愛するが，時間作用素の一般論等については [AM08, AH17] 及びその参考文献に詳しい．ここでは，先ず，領域 D が稠密である必要がないことを利用して，時間作用素が存在することを述べる．

正準交換関係に関しては，次の古典的な定理が知られている．([新江 99] を参照のこと．)

定理 2.1. A, B をヒルベルト空間 $\mathcal{H}$ 上の作用素で，稠密な部分空間 $D \subseteq \mathrm{D}(AB) \cap \mathrm{D}(BA)$ が存在して，D 上で交換関係

$$[A, B] = \lambda$$

を満たすとする．但し，$\lambda \in \mathbb{C} \backslash \{0\}$ である．このとき，A, B の少なくとも一方は非有界作用素である．

これにより，稠密な部分空間上で正準交換関係を満たす有界作用素の組 (T, H) は存在しない．従って非有界作用素を取り扱う必要が出てくる．しかし，正準交換関係を満たしながら非有界作用素を構成することは大変難しい．そこで，時間作用素が正準交換関係を満たす領域 D が稠密である必要がないことを利用して時間作用素を構成することにする．

命題 2.2. ヒルベルト空間 $\mathcal{H}$ 上の非自明な自己共役作用素 H が異なる 2 つ以上の固有値を持つとき，H に対する (有界な) 時間作用素 T が存在する．（ここで，自明な作用素とは定数作用素を指す．）

この命題は先の定理 2.1 に矛盾するように見えるが，領域 D が不変部分空間ではないので矛盾しない．非常に簡単なので証明を見てみる．

（命題 *2.2* の証明）．仮定から，H は異なる固有値 a と b をもつ．ξ と η をそれらに対するノルム 1 の固有ベクトルとする．$\{e_\lambda\}_{\lambda\in\Lambda}$ を完全正規直交系で $e_{\lambda_0} := \xi$ かつ $e_{\lambda_1} := \eta$ を満たすものとして取る．このとき，有界作用素 T を次のようにして定める．$\mathrm{D}(T) := \mathcal{H}$,

$$Te_\lambda := \begin{cases} (b-a)^{-1}e_{\lambda_1} & (\lambda = \lambda_0) \\ (b-a)^{-1}e_{\lambda_0} & (\lambda = \lambda_1) \\ 0 & (\lambda \neq \lambda_0, \lambda_1). \end{cases}$$

明らかに，T は有界な対称作用素である．$D \subseteq \mathcal{H}$ としてベクトル $\xi + i\eta$ により生成される一次元部分空間とする．このとき，

$$\begin{aligned}[T,H](\xi+i\eta) &= (TH-HT)(\xi+i\eta) \\ &= T(a\xi+ib\eta) - (b-a)^{-1}H(i\xi+\eta) \\ &= (b-a)^{-1}(ib\xi+a\eta) - (b-a)^{-1}(ia\xi+b\eta) \\ &= i\xi - \eta \\ &= i(\xi+i\eta).\end{aligned}$$

である．これは T が H に対する時間作用素となることに他ならない． ■

上記の命題は固有値がある事が強力に効いている為に時間作用素が構成できているように見えるが，実は固有値がなくても殆ど同じようにして時間作用素を構成することができる．要は，正準交換関係が成立する部分空間 D 上では不変部分空間にならないようにした上で，上手く調整する．調整に必要になった箇所を D の外側に押し付ければよいのである．これにより次の命題が得られる．

命題 2.3. ヒルベルト空間 $\mathcal{H}$ 上の非自明な自己共役作用素 H に対して，(有界な) 時間作用素 T が存在する．

この命題も実は一次元部分空間上でしか正準交換関係を保証しないが，一次元で構成できれば十分なのである．なぜならば，正準交換関係を成立させるために使う部分空間の次元は高々有限次元なのである．従って，必要になった部分空間の直交補空間上で同じ議論

をすれば，そこでまた時間作用素が作れることが分かる．可算無限回の操作を繰り返して，正準交換関係が成立する一次元部分空間と時間作用素を可算無限個取って直和をすることで無限次元部分空間上で正準交換関係が成立するものが取れる．以上により，次の定理が得られることが了解される．

定理 2.4. ヒルベルト空間 $\mathcal{H}$ 上の自己共役作用素 H を $|\sigma(H)| \geqslant \aleph_0$ となるものとする．このとき，無限次元部分空間 $D \subseteq \mathcal{H}$ と対象作用素 T が存在して

$$[T, H] = i \ \text{ on } D$$

となるものが存在する．

これにより，一応，時間作用素が存在することはわかった．しかしながら，ここで示された時間作用素はあまり良い性質を持っていない可能性が高い．何故ならば，この構成法で時間作用素を非可算無限個作ることが可能だが，それら全てが良い性質を持っているとは考え難いからである．また，正準交換関係が満たされる領域 D が稠密でないという事もある．D に稠密性を課す場合，現状では本質的に Galapon の構成法が必要である．但し，Galapon の証明には不備があるので [AM08] から引用しておく．

定理 2.5. H をヒルベルト空間 $\mathcal{H}$ 上の非負な自己共役作用素で，次を満たすとする．

(1) H のスペクトル $\sigma(H)$ は離散固有値のみからなる．従って，$\sigma(H) = \{E_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ と表せる．
(2) 各 $n \in \mathbb{N}$ に対して，固有空間の次元は 1 である：$\dim\ker(H - E_n) = 1$.
(3) $\sum E_n^{-2} < \infty$.

このとき，稠密な部分空間 D と対象作用素 T が存在して

$$[T, H] = i \quad \text{on } D$$

を満たすものが存在する．

この定理の条件は非常に強いが，次の定理まで仮定を弱めることが可能である．

定理 2.6. H をヒルベルト空間 $\mathcal{H}$ 上の非有界な自己共役作用素で，そのスペクトルは重複度を込めても高々加算個の固有値からなるとする．このとき，稠密な部分空間 D と対象作用素 T が存在して

$$[T, H] = i \quad \text{on } D$$

を満たすものが存在する．

［証明］．スペクトル $\sigma(H)$ は上に非有界としても一般性を失わない．定理 2.5 が使える状況にヒルベルト空間とハミルトニアンを分解して，直和を取ればよいのである． H 固有値からなる集合を $\sigma_{\mathrm{p}}(H)$ と書くとする．今，仮定から $|\sigma_{\mathrm{p}}(H)| = \aleph_0$ である．従って，全射 $f : \mathbb{N} \to \sigma_{\mathrm{p}}(H)$ で任意の自然数 $n \in \mathbb{N}$ に対して，

$$|\{m \in \mathbb{N} \mid f(m) = f(n)\}| = \dim \ker \big(H - f(n)\big)$$

を満たすものが存在する．

ここから部分集合 $N_j \subseteq \mathbb{N}$ を帰納的に構成していく．$\sigma_{\mathrm{p}}(H)$ は非有界なので，$M \subseteq \mathbb{N}$ で，次を満たすものが見つけられる．

(i) 任意の異なる 2 つの元 $a, b \in M$ に対して $|f(a) - f(b)| > 1$，

(ii) $f(M)$ は下に有界かつ上に非有界，

(iii) $|\sigma_{\mathrm{p}}(H) \backslash f(M)| = \aleph_0$.

となるものが見つけられる．更に，この M を非有界性を保ったまま可算無限個に分解する．即ち，互いに素な集合族 $\{M_k\}$ で各 $k \in \mathbb{N}$ に対して $f(M_k)$ は非有界かつ $M = \bigcup M_k$ となるものがある．そこで $N_0 := \{\inf(f^{-1}(\sigma_{\mathrm{p}}(H) \backslash f(M_0)))\} \cup M_0)$ とし，以下，帰納的に $N_j := \{\inf(f^{-1}(\sigma_{\mathrm{p}}(H) \backslash f(M_j)) \backslash \bigcup_{k=0}^{j-1} N_k)\} \cup M_j$ と定める．

正規直交基底 $\{e_j\}_{j \in \mathbb{N}}$ を $He_j = f(j)e_j$ となるように順番を付け，$\mathcal{H}_j := \overline{\langle \{e_k\}_{k \in N_j} \rangle}$ とする．この部分空間 $\mathcal{H}_j$ に H を制限した作用素 $H_j := H|_{\mathcal{H}_j}$ を考えると，H_j は $\mathcal{H}_j$ 上の自己共役作用素であり， 定理 2.5 の仮定 (1) と (2) を満たすことが分かる．また，M の (i) の性質から定理 2.5 の仮定 (3) も満たすことが分かる．従って，$\mathcal{H}_j$ 上の対称作用素 T_j と稠密な部分空間 $D_j \subseteq \mathcal{H}_j$ が存在して

$$[T_j, H_j] = i \quad \text{on } D_j$$

を満たすものが存在する．$T := \bigoplus_{j \in \mathbb{N}} T_j$ とすれば，T は稠密な部分空間 $\bigoplus_{j \in \mathbb{N}} D_j$ 上で H と正準交換関係を満たす対称作用素となる． ■

時間作用素が直接に時間的な意味合いを持っているか現在のところ不明である．しかし，[Ara05] により強時間作用素は減衰時間と関わりがあることが知られている．

定理 2.7. H をヒルベルト空間 $\mathcal{H}$ 上の自己共役作用素，T を H に対する強時間作用素とする．このとき，任意の $\phi, \psi \in \mathrm{D}(T^n)$ と任意の $t \in \mathbb{R} \backslash \{0\}$ に対し，t と独立な正の定数 $C_n(\phi, \psi)$ が存在して

$$|\langle \phi, e^{-itH}\psi \rangle| \leqslant \frac{C_n(\phi, \psi)}{|t|^n}$$

が成立する．

3　ユニタリ作用素に対する時間作用素

ユニタリ作用素に対する時間作用素も，先ずは存在するかが気になるところである．自己共役作用素に対する強時間作用素が存在するためには，強い条件がつく事が知られている．しかしながら，ユニタリ作用素に対する時間作用素の定義は非常に弱いので，殆どの場合存在を保証できる．

定理 3.1. 非自明なユニタリ作用素 U は時間作用素 T を持つ．

証明の概略. U をケーリー変換を通じて一度自己共役作用素 H に変換する：

$$U = e^{-i\theta}(H-i)(H+i)^{-1}.$$

定理 2.3 により H は時間作用素 T' をもつ．このとき

$$T := -\frac{1}{2}(H-i)T'(H+i)$$

とすると，適切な領域上で

$$\begin{aligned}
[T,U]\psi &= e^{-i\theta}[T,(H-i)(H+i)^{-1}]\psi \\
&= \frac{-e^{-i\theta}}{2}\Big((H-i)T'(H+i)(H-i)(H+i)^{-1} \\
&\qquad\qquad - (H-i)(H+i)^{-1}(H-i)T'(H+i)\Big)\psi \\
&= \frac{-e^{-i\theta}}{2}\Big((H-i)T'(H-i) - (H-i)(H+i)^{-1}(H-i)T'(H+i)\Big)\psi \\
&= \frac{-e^{-i\theta}}{2}(H-i)(H+i)^{-1}\Big((H+i)T'(H-i) - (H-i)T'(H+i)\Big)\psi \\
&= \frac{-e^{-i\theta}}{2}(H-i)(H+i)^{-1}(-2iHT' + 2iT'H)\psi \\
&= -ie^{-i\theta}(H-i)(H+i)^{-1}[T',H]\psi \\
&= e^{-i\theta}(H-i)(H+i)^{-1}\psi \\
&= U\psi.
\end{aligned}$$

となる．従って，T が U に対する時間作用素となる． ■

また，定理 2.7 の類似がユニタリ作用素の場合にも成立する．

定理 3.2. U をヒルベルト空間 $\mathcal{H}$ 上のユニタリ作用素，T を U に対する強時間作用素とする．このとき，任意の $\phi, \psi \in \mathrm{D}(T^n)$ と任意の $t \in \mathbb{Z}\backslash\{0\}$ に対し，t と独立な正の定数 $C_n(\phi, \psi)$ が存在して

$$|\langle \phi, U^t\psi\rangle| \leqslant \frac{C_n(\phi,\psi)}{|t|^n}$$

が成立する．

ここからは，（1 次元）量子ウォークの時間発展を記述するユニタリ作用素に話を限ることにする．ヒルベルト空間 $\mathcal{H} = \ell^2(\mathbb{Z};\mathbb{C}^2) \cong \ell^2(\mathbb{Z}) \bigoplus \ell^2(\mathbb{Z})$，$L : \ell^2(\mathbb{Z}) \to \ell^2(\mathbb{Z})$ を

$$(L\psi)(n) \coloneqq \psi(n+1) \quad (\psi \in \ell^2(\mathbb{Z}),\ n \in \mathbb{Z})$$

としたとき，

$$S \coloneqq \begin{pmatrix} L & 0 \\ 0 & L^* \end{pmatrix}, \quad C \coloneqq \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \in \mathcal{U}(\mathcal{H}) \tag{2}$$

に対して $U \coloneqq SC$ により定まるユニタリ作用素を考える．このユニタリ作用素に対して良い性質を持っていそうな時間作用素を探す事にする．先ず，フーリエ変換 $\mathscr{F}_0 : \ell^2(\mathbb{Z}) \to L^2([0,2\pi], dk/2\pi)$,

$$(\mathscr{F}_d\psi)(k) := \sum_{x\in\mathbb{Z}} \psi(x)e^{-ixk}, \qquad k \in [0,2\pi]$$

により $\mathcal{H}$ 上に誘導されるユニタリ変換 $\mathscr{F}$ を考える．このとき，U は $\mathscr{F}$ により次の掛け算作用素 $\hat{U}(k)$ に変換される：

$$\hat{U}(k) := \begin{pmatrix} e^{ik} & 0 \\ 0 & e^{-ik} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ik}a & e^{ik}b \\ e^{-ik}c & e^{-ik}d \end{pmatrix}, \qquad k \in [0,2\pi].$$

各 $k \in [0,2\pi]$ に対して，$\hat{U}(k)$ は適当な行列 $W(k)$ により対角化可能である．$\hat{U}(k)$ の固有値を $\lambda_1(k)$ と $\lambda_2(k)$ とすれば，

$$W(k)^{-1}\hat{U}(k)W(k) = \begin{pmatrix} \lambda_1(k) & 0 \\ 0 & \lambda_2(k) \end{pmatrix}, \qquad k \in [0,2\pi].$$

と表すことができる．従って，若しもユニタリな掛け算作用素 $\lambda_i(k)$ に対する良い時間作用素 $\hat{T}_i$ が存在すれば，

$$\hat{T} \coloneqq \begin{pmatrix} \hat{T}_1 & 0 \\ 0 & \hat{T}_2 \end{pmatrix}$$

の引き戻し $T \coloneqq \mathscr{F}^{-1}W\hat{T}W^{-1}\mathscr{F}$ が求めるものである．ユニタリな掛け算作用素 $\lambda(k)$ は次の定理により，適当な条件下で強時間作用素を持つ．

定理 3.3. $\lambda : \mathbb{R} \to \mathbb{T}$ を 2 回連続微分可能な周期 2π の周期関数で，導関数 λ' の零点は $[0, 2\pi)$ の中に高々有限個とする．このとき，

$$T = \frac{i}{2}\left(\frac{\lambda(k)}{\lambda'(k)}P + P\frac{\lambda(k)}{\lambda'(k)}\right).$$

ユニタリ作用素 $\lambda(k)$ に対する強時間作用素となる． 但し，P は $L^2([0, 2\pi], dk/2\pi)$ 上の自己共役作用素で，定義域を

$$D(P) := \left\{f \in AC[0, 2\pi] \mid f' \in L^2([0, 2\pi], dk/2\pi),\ f(0) = f(2\pi)\right\}.$$

もち，作用が $Pf := -if'$ となる作用素である．

次に，定理 3.3 の強時間作用素 T のスペクトルと不足指数を求めてみる．作用素 T の不足指数 $d_{\pm}(T)$ とは $\dim\ker(T^* \mp i)$ の事であり，自己共役拡大の有無の判定に使われる重要な指数である．掛け算作用素 $\lambda(k)$ はユニタリなので，適当な関数 $g : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ により $\lambda(k) = e^{ig(k)}$ と表現できる．更に，$\lambda(k)$ の回転数を m とおく．この設定のもとで，次の定理によりスペクトルを求めることが可能である．詳しくは [FMSST] を参照していただきたい．

定理 3.4. $\lambda : \mathbb{R} \to \mathbb{T}$ を 2 回連続微分可能な周期 2π の周期関数で，導関数 λ' の零点は $[0, 2\pi)$ の中に高々有限個とする．更に，m を λ の回転数 T を定理 3.3 で述べられている強時間作用素, g を $\lambda(k) = e^{ig(k)}$ となるものとする.

(1) λ' が零点を持たないならば，$m \neq 0$ かつ T は自己共役作用素である．更に，ユニタリ作用素 $V : L^2([0, 2\pi], dk/2\pi) \to \bigoplus_{j=0}^{|m|-1} L^2([0, 2\pi], dk/2\pi)$ が存在して

$$VTV^{-1} = \bigoplus_{j=0}^{|m|-1}\left(P + \frac{j}{|m|}\right), \qquad V\lambda(k)V^{-1} = \bigoplus_{j=0}^{|m|-1} e^{ik}$$

が成立する．

(2) λ' が零点を持つならば，ユニタリ作用素 $V : L^2([0, 2\pi], dk/2\pi) \to \bigoplus_{j=1}^{n} L^2\left(g(\bar{I}_j), dE\right)$ で

$$V\bar{T}V^{-1} = \bigoplus_{j=1}^{n} P_j, \qquad V\lambda(k)V^{-1} = \bigoplus_{j=1}^{n} e^{iE},$$

となるものが存在する．ここで，$0 \leqslant a_1 < a_2 < \cdots < a_n < 2\pi$ は λ' の $[0, 2\pi)$ における零点，$a_{n+1} := 2\pi + a_1$，各 $j = 1, \cdots, n$ に対して，$I_j := (a_j, a_{j+1})$，P_j は

$L^2(g(\bar{I}_j), dE)$ 上の作用素で

$$\mathrm{D}(P_j) := \{f \in AC(g(\bar{I}_j)) \mid f' \in L^2(g(\bar{I}_j), dE),\ f(g(a_j)) = f(g(a_{j+1})) = 0\},$$
$$P_I f := -if' \quad (f \in \mathrm{D}(P_j)).$$

となるものである．

(3) 強時間作用素 T の不足指数は λ' の $[0, 2\pi)$ 中の零点の個数に等しい．従って，T は自己共役拡大を持つ．

最後に，この定理を用いた量子ウォークのユニタリ作用素 U に対する時間作用素の性質を述べておく．

定理 3.5. $U = SC$ を式 (2) により定まるユニタリ作用素，T を定理 3.3 を用いて構成される U に対する強時間作用素とする．このとき，

(1) $0 < |a| < 1$ ならば，強時間作用素 T の不足指数は $d_\pm(T) = 4$ でありスペクトルは $\sigma(T) = \mathbb{C}$ となる．特に，T は自己共役拡大を持つ．更に，T の自己共役拡大は U に対する時間作用素であるが，U に対する強時間作用素とはならない．

(2) $|a| = 1$ のときは, T は自己共役な強時間作用素で，スペクトルは $\sigma(T) = \mathbb{Z}$ となる．

参考文献

[AH17] A. Arai and F. Hiroshima. Ultra-weak time operators of Schrödinger operators. Ann. Henri Poincaré **18** (2017), no. 9. 2995–3033.

[AM08] A. Arai and Y. Matsuzawa. Time operators of a Hamiltonian with purely discrete spectrum. Rev. Math. Phys. **20** (2008), no. 8. 951–978.

[Ara05] A. Arai. Generalized weak Weyl relation and decay of quantum dynamics. Rev. Math. Phys. **17** (2005), no. 9. 1071–1109.

[新江 99] 新井朝雄・江沢洋, 量子力学の数学的構造 II, 朝倉書店, 1999.

[FMSST] D. Funakawa, Y. Matsuzawa, A. Suzuki, I. Sasaki, and N. Teranishi. Time operators for continuous-time and discrete-time quantum walks. arXiv e-prints:1901.10665 .