数理解析研究所講究録
第 1658 巻 2009 年 78-83

時間作用素と正準交換関係について

松澤 泰道
北海道大学大学院 理学院

概要

本稿では、量子力学に現れる時間作用素について考察する。時間作用素とは、系の Hamiltonian と正準交換関係を満たす対称作用素のことである。特に Hamiltonian が離散的な spectrum を持つような場合について、その数学的側面を詳細に叙述する。対応する時間作用素を具体的に構成し、その性質を調べたい。その系として、自己共軛な時間作用素が存在することを示す。

1 時間作用素と正準交換関係

先ずは時間作用素の数学的な定義を与える。H を Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ 上の自己共軛作用素とする。このとき、$\mathcal{H}$ 上の対称作用素 T が H の時間作用素であるとは、正準交換関係

$$[T, H] := TH - HT = i$$

が $\mathcal{H}$ の適当な稠密部分空間 $\mathcal{D}$ 上で成り立つときをいう。量子力学の文脈では、$\mathcal{H}$ は系の状態空間であり、H はその spectrum が系の energy を表す作用素で Hamiltonian と呼ばれる。

物理的には時間作用素は長い間存在しないと云われてきた。その理由は主に次の von Neumann の一意性定理の誤用によるものである：

定理 $\mathcal{K}$ を可分な Hilbert 空間、Q と P を $\mathcal{K}$ 上の自己共軛作用素とし、Weyl 関係式

$$e^{isQ}e^{itP} = e^{-ist}e^{itP}e^{isQ}, \qquad s, t \in \mathbb{R}$$

を満たすとする。このとき、unitary 同値の意味で

$$\mathcal{K} = \bigoplus_n L^2(\mathbb{R})$$

$$Q = \bigoplus_n x$$

$$P = \bigoplus_n \left(-i\frac{d}{dx}\right)$$

が成り立つ。

Weyl 関係式を満たせば、$\mathrm{dom}(QP) \cap \mathrm{dom}(PQ)$ 上で正準交換関係を満たす。しかし、逆は一般には成り立たない。この点は物理の文献ではしばしば見過ごされているので、ここで注意しておく。Weyl 関係式を満たさない正準交換関係で、物理的に意味のある例は沢山存在する。

例 Hilbert 空間 $L^2(\mathbb{R}_+)$ 上で二つの作用素

$$q_+ := x, \qquad p_+ := \overline{p_{+,0}}$$

を考える。但し、

$$\begin{aligned} &\mathrm{dom}(p_{+,0}) := C_c^\infty(\mathbb{R}_+) \\ &(p_{+,0}f)(x) := -i\frac{df}{dx}(x), \qquad f \in \mathrm{dom}(p_{+,0}) \end{aligned}$$

である。このとき、$-p_+$ と q_+ は $C_c^\infty(\mathbb{R}_+)$ 上で正準交換関係を満たす。しかし、Weyl 関係式は満たさない。実際、満たすとすると、von Neumann の一意性定理から、q_+ の spectrum は実数全体に一致するが、それは矛盾である。

上の例は単に半直線上の量子力学というだけではなく、水素原子模型を解く際にも動径方向への分解として現れる自然な対象である。主題から少々脱線するが、p_+ が自己共軛でないことにも注目されたい。量子力学の数学的公理から、可観測量は自己共軛作用素で表される。従って、運動量作用素 p_+ は可観測量ではない（のだろうか)。こういった問題は、(水素原子模型を解く際にも現れるにも関わらず）あまり議論されていないように思う。

さて、主題に戻り、時間作用素が存在しないと云われてきた所以について述べよう。時間作用素と Hamiltonian の組が Weyl 関係式を満たすとすると、von Neumann の一意性定理により、Hamiltonian の spectrum は実数全体と一致する。しかし、系の energy = spectrum は一般に下に有界なので、これは矛盾である。故に時間作用素は存在しない。

時間作用素の存在に関する多くの反論はこの議論と概ね同じである。しかし、既に述べたように、正準交換関係を満たすからといって、Weyl 関係式を満たすとは限らない。予め Weyl 関係式を仮定している点が誤りである。形式的な議論では正準交換関係から Weyl 関係式が導けるように見えるのだが、時間作用素はそのような形式的な議論では扱えないということである。数学的に厳密に扱う意義がここにある。

今までに良く研究された時間作用素は大きく分けて二種類ある。一つは弱 Weyl 関係式を満たすものであり、宮本 [3] によって導入された。もう一つは Galapon[2] によって提出されたものである。本稿では前者には触れず、後者のみを扱う。

2 Galapon時間作用素

Galaponは Hamiltonian の spectrum が離散的な場合に、時間作用素が構成できることを形式的に示した。以下の議論は Galapon の議論を数学的に厳密化したものである [1]。

改めて $\mathcal{H}$ を無限次元複素 Hilbert 空間、H を $\mathcal{H}$ 上の自己共軛作用素とし、次の条件 (H.1) 及び (H.2) を満たすものとする：

(H.1) H は純粋に離散的な spectrum $\sigma(H) = \{E_n\}_{n=1}^{\infty}$ を持ち、各固有値 E_n は単純で、$0 < E_n < E_{n+1}$ を満たす。

(H.2) $\displaystyle\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{{E_n}^2} < \infty$

条件 (H.1) から、$\mathcal{H}$ の完全正規直交系 $\{e_n\}_{n=1}^{\infty}$ で、各 $n \in \mathbb{N}$ に対し、$He_n = E_n e_n$ を満たすものが存在する。以下ではこのような完全正規直交系を任意に一つ固定する。このとき、各 $n \in \mathbb{N}$ と各 $\psi \in \mathcal{H}$ に対し、

$$\sum_{\substack{m=1 \\ m\neq n}}^{\infty} \left| \frac{\langle e_m, \psi\rangle}{E_n - E_m} \right| < \infty$$

が成り立つことが判る。従って、次の作用素 $T_{\max}$ が定義できる：

$$\mathrm{dom}(T_{\max}) := \left\{ \psi \in \mathcal{H} : \sum_{n=1}^{\infty} \left| \sum_{\substack{m=1 \\ m\neq n}}^{\infty} \frac{\langle e_m, \psi\rangle}{E_n - E_m} \right|^2 < \infty \right\}$$

$$T_{\max}\psi := i \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{\substack{m=1 \\ m\neq n}}^{\infty} \frac{\langle e_m, \psi\rangle}{E_n - E_m} e_n, \qquad \psi \in \mathrm{dom}(\mathrm{T}_{\max})$$

$\{e_n\}_{n=1}^{\infty} \subset \mathrm{dom}(T_{\max})$ により、$T_{\max}$ は稠密に定義されているので、その共軛作用素が存在する。そこで、作用素 T を $T := {T_{\max}}^*$ で定義し、これを Galapon 時間作用素と呼ぶ。T は閉対称作用素となる。Galapon 時間作用素 T が H と正準交換関係を満たすことを述べる前に、部分空間

$$\mathcal{D}_{\mathrm{c}} := \mathrm{l.i.h.}\{e_n - e_m : n, m \in \mathbb{N}\}$$

が $\mathcal{H}$ で稠密であることを注意しておく。

定理 包含関係

$$\mathcal{D}_{\mathrm{c}} \subset \mathrm{dom}(TH) \cap \mathrm{dom}(HT)$$

と正準交換関係

$$(TH - HT)\psi = i\psi, \qquad \psi \in \mathcal{D}_{\mathrm{c}}$$

が成り立つ。

従って、T は H の時間作用素であり、Galapon 時間作用素という呼称とも共立的である。上の定理では部分空間 $\mathcal{D}_c$ の選び方が絶妙である。実際、全ての自然数 $n \in \mathbb{N}$ に対して

$$(TH - HT)e_n \neq ie_n$$

となることは、左辺を計算すれば直ぐに判る。

以下では T の満たす性質について述べる。先ず spectrum に関しては次の命題が成り立つ。

命題 T が自己共役であれば、T の spectrum は原点に関して対称な $\mathbb{R}$ の閉部分集合である。T が自己共役でなければ、T の spectrum は $\mathbb{C}$ 全体である。

証明 共役子 J を

$$J\psi := \sum_{n=1}^{\infty} \langle \psi, e_n \rangle e_n, \qquad \psi \in \mathcal{H}$$

と定めると、任意の $z \in \mathbb{C}$ に対して、

$$J(T - z)J = -(T + z^*)$$

が成り立つ。よって、$z \in \sigma(T)$ である為の必要十分条件は、$-z^* \in \sigma(T)$ である。これと、自己共軛でない閉対称作用素の spectrum は $\{z \in \mathbb{C} : \mathrm{Im}(z) \geq 0\}$、$\{z \in \mathbb{C} : \mathrm{Im}(z) \leq 0\}$、$\mathbb{C}$ のいずれかに限ることを用いれば題意が従う。■

弱 Weyl 関係式を満たす時間作用素は、自己共軛にならないことが宮本によって示されている [3]。それとは異なり、Galapon 時間作用素は自己共軛にもなり得る。しかし、直接自己共軛性を示すのは難しく、有界性を示すことで間接的に示されることが多い。

定理 ある定数 $\alpha > 1$、$C > 0$、$a > 0$ が存在し、

$$E_n - E_m \geq C(n^\alpha - m^\alpha), \qquad n > m > a$$

を満たすとする。このとき、T は有界である。

上の定理で $\alpha = 1$ まで伸びない理由は、Riemann ζ 函数 $\zeta(s)$ が $s = 1$ で極を持つことによる。では別の形で $\alpha = 1$ に相当する定理があるだろうか。この問に対しては肯定的に答えることができる。

定理 ある定数 $\lambda > 0$、$\mu \in \mathbb{R}$、$a > 0$ が存在し、

$$E_n = \lambda n + \mu, \qquad n > a$$

を満たすとする。このとき、T は有界である。

よって、定理の条件を満たせば T は自己共軛となる。即ち、自己共軛な時間作用素が存在することが判った。

例 量子調和振動子を考えよう。即ち、Hilbert 空間 $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$ 上で Hamiltonian $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2$ を考える。ただし、p は運動量作用素で、$m > 0$ と $\omega > 0$ は定数である。このとき、H は自己共軛であり、$\sigma(H) = \sigma_p(H) = \{(n + \frac{1}{2})\omega\}_{n=0}^{\infty}$ かつ、各固有値は単純であることが知られている。また、$\displaystyle\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(n+\frac{1}{2})^2} < \infty$ だから、H に対する Galapon 時間作用素 T を考えることができる。定理から T は有界なので、

$$T\psi = \frac{i}{\omega} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\substack{m=0 \\ m\neq n}}^{\infty} \frac{\langle e_m, \psi \rangle}{n-m} e_n, \qquad \psi \in \mathcal{H}$$

となる。よって、T は純粋に絶対連続であり、$\sigma(T) = [-\frac{\pi}{\omega}, \frac{\pi}{\omega}]$ となる。実際、ωT は Hardy 空間 $H^2(\mathbb{T})$ 上の、函数 $\mathbb{T} \ni e^{i\theta} \longmapsto \theta \in [-\pi, \pi]$ に関する Toeplitz 作用素と自然に unitary 同値になる。ここで、個数作用素 $\hat{N} := \frac{1}{\omega}H - \frac{1}{2}$ と作用素 $\hat{\theta} := \omega T$ を考える。$\hat{\theta}$ は $\hat{N}$ に対する Galapon 時間作用素になっていることに注意しよう。故に、正準交換関係を満たす：

$$\hat{\theta}\hat{N}\psi - \hat{N}\hat{\theta}x = i\psi, \qquad \psi \in \mathcal{D}_c$$

また、$\hat{\theta}$ は純粋に絶対連続で、$\sigma(\hat{\theta}) = [-\pi, \pi]$ となることも判る。$\hat{\theta}$ は位相作用素と呼ばれている対象であり、その spectrum が角度に対応していることが判る。

Galapon 時間作用素はより強く、完全連続にもなり得る。

命題 ある定数 $\alpha > \frac{3}{2}$、$C > 0$、$a > 0$ が存在し、

$$E_n - E_m \geq C(n^\alpha - m^\alpha), \qquad n > m > a$$

を満たすとする。このとき、T は Hilbert-Schmidt 類である。

この結果から、T も H も離散的な spectrum を持つような正準共役な組が存在することが判る。この場合、T の spectrum は原点にのみ集積し、H のそれは無限に発散する。これは何らかの双対性の表れではないだろうか。

参考文献

[1] A. Arai and Y. Matsuzawa, Time Operators of a Hamiltonian with Purely Discrete Spectrum, *Rev. Math. Phys.* **20** (2008), 951-978

[2] E. A. Galapon, Self-adjoint time operator is the rule for discrete semi-bounded Hamiltonians, *Proc. R. Soc. Lond. A* **458** (2002), 2671–2689.

[3] M. Miyamoto, A generalized Weyl relation approach to the time operator and its connection to the survival probability, *J. Math. Phys.* **42** (2001), 1038–1052.