量子力学の数理

箱（@o_ccah）

2021 年 6 月 27 日

（最終更新日：2022 年 3 月 1 日）

概要

量子力学は，原子や電子などのミクロなスケールでの物理現象を記述する力学です．普段私たちが認識しているマクロなスケールにおける力学（古典力学）との違いから，しばしばその奇妙さが強調されます．

本発表では，von Neumann が与えた量子力学の数学的基礎付けを説明し，いくつかのトピックを通して量子力学に関連する数学を紹介します．時間の都合上，証明をすべて述べることはしませんが，「何をもとに何が定義されるのか」，「数学的に注意すべき点はどこか」などは詳しく説明し，数学を勉強している人にとって聞きやすい発表を目指します．

前提知識：証明よりも枠組みやアイデアを伝えることを主眼とするので，とりあえず内積空間を含む（有限次元の）線型代数がわかっていれば大丈夫です．Lebesgue 積分や Fourier 変換に触れたことがあれば，より理解が深まると思います．

目次

記号と用語

- 自然数，実数，複素数全体の集合を，それぞれ $\mathbb{N}, \mathbb{R}, \mathbb{C}$ と書く．0 は自然数に含める．
- δ_{jk} は Kronecker のデルタを表す．すなわち，$j = k$ ならば $\delta_{jk} = 1$，$j \neq k$ ならば $\delta_{jk} = 0$ である．
- j-方向の単位ベクトルを $1_j \in \mathbb{R}^n$ と書く．
- 恒等作用素を I と書く．

1 イントロダクション

量子力学（quantum mechanics）とは，原子や電子などのミクロなスケール（数値でいえば 10^{-15} m から 10^{-10} m 程度）での物理現象を記述する力学である．これに対して，普段私たちが認識しているマクロなスケールにおける力学は**古典力学**（classical mechanics）と呼ばれる．量子力学は，古典力学との違いから，しばしばその奇妙さが強調される．たとえば，量子力学では物理量の測定値が確率的にしか決まらない，という話は聞いたことがある人も多いのではないだろうか．

歴史的には，量子力学は，Planck による黒体放射の説明におけるエネルギーの量子化（1900），Einstein による光量子仮説（1905）を萌芽とし，Rutherford の原子模型（1911）や Bohr の原子模型（1913）といった原子論の発展を含む 1910 年代から 1920 年代中頃までの大きな進展（前期量子論）を経て，1925 年には Heisenberg–Born–Jordan によって行列力学として，1926 年には Schrödinger によって波動力学としてそれぞれ数学的形式に整理された．さらに 1932 年，von Neumann は，行列力学と波動力学から本質を見抜いて抽象化し，Hilbert 空間を用いて数学的に整然とした基礎付けを与えた．これをまとめた論文・書籍が，有名な *die Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*（『量子力学の数学的基礎』）である（最近，日本語訳の新装版 [5] が出た）．

本稿の目的は，von Neumann が与えた量子力学の数学的基礎付けを説明し，いくつかのトピックを通して量子力学に関連する数学を紹介することである．

2 節，3 節，4 節では，必要な数学を解説しつつ，それぞれ量子力学の系（量子系），量子力学における物理量，量子系の時間発展の数学的定式化を述べる（表 1 に古典力学と量子力学の数学的定式化をまとめた．ただし，本稿では古典力学の解説はしない）．5 節では具体例として量子調和振動子について調べ，6 節では正準交換関係が数学的にどう扱われるのかを見る[*1]．

表 1　古典力学と量子力学の数学的定式化

	古典力学（Hamilton 力学）	量子力学
系を表す対象	シンプレクティック多様体 M	Hilbert 空間 $\mathcal{H}$
物理量	M 上の実数値関数	$\mathcal{H}$ 上の自己随伴作用素
時間発展	ハミルトニアンフロー X_H	一径数ユニタリ群 $e^{-itH/\hbar}$

[*1] 4.3 節，5 節，6 節は，発表時には時間の都合で話せなかった部分である．

2　量子力学の系：Hilbert 空間

以下，線型空間の係数体はすべて $\mathbb{C}$ とする．

定義 2.1（内積空間） 線型空間 V 上の**内積**（inner product）とは，写像

$$V \times V \to \mathbb{C}, \quad (u, v) \mapsto \langle u|v\rangle$$

であって，次の 4 条件を満たすものをいう．

(i) $\langle u|v\rangle$ は u に関して共役線型であり，v に関して線型である．
(ii) 任意の $u, v \in V$ に対して $\langle v|u\rangle = \overline{\langle u|v\rangle}$ である．
(iii) 任意の $u \in V$ に対して $\langle u|u\rangle \geq 0$ である．
(iv) 任意の $u \in V$ に対して，$\langle u|u\rangle = 0$ ならば $u = 0$ である．

線型空間とその上の内積との組を，**内積空間**（inner product space）という．[*2]

以下，特に断らなくても，内積は記号 $\langle u|v\rangle$ で表す．

注意 2.2 V を内積空間とする．通常のベクトル $v \in V$ を $|v\rangle$ と書き，V 上の線型形式 $v \mapsto \langle u|v\rangle$ を $\langle u|$ と書く記法を**ブラ・ケット記法**あるいは **Dirac の記法**といい，物理学では広く用いられている．この記法において，$\langle u|$ をブラベクトル，$|v\rangle$ をケットベクトルという．これらを組み合わせて，たとえば

$$|v\rangle|v\rangle = v \otimes v \in V \otimes V, \qquad |v\rangle\langle u| = (w \mapsto \langle u|w\rangle v) \in \mathrm{End}(V)$$

などと書く．さらに，物理学では，「i 番目のベクトル」という意味で $|i\rangle$ と書いたり，「固有値 λ の固有ベクトル」という意味で $|\lambda\rangle$ と書いたりすることが多い（数学では v_i, v_λ と書くところである）．

内積は，自然にノルムを誘導する．

定義 2.3（内積空間のノルム） V を内積空間とする．$u \in V$ に対して

$$\|u\| = \sqrt{\langle u|u\rangle}$$

と定め（$\langle u|u\rangle \geq 0$ だからこのように定義できる），これを u の**ノルム**（norm）という．

これが実際に V 上のノルムであることは，次の不等式から従う．

命題 2.4（Cauchy–Schwarz の不等式） V を内積空間とすると，任意の $u, v \in V$ に対して

$$|\langle u|v\rangle| \leq \|u\|\|v\|$$

が成り立つ．

[*2] 内積を記号 $\langle u|v\rangle$ で表し，これを u に関して共役線型，v に関して線型とするのは，物理学でよく見られるスタイルである（筆者の好みによりこちらを採用した）．数学では，内積を記号 (u, v) や $\langle u, v\rangle$ で表し，これを u に関して線型，v に関して共役線型とすることが多い．

証明　任意の $t \in \mathbb{R}$ に対して

$$0 \leq \langle u + tv | u + tv \rangle = \langle u|u \rangle + (2\operatorname{Re}\langle u|v \rangle)t + \langle v|v \rangle t^2$$

だから，判別式を見ることで

$$(\operatorname{Re}\langle u|v \rangle)^2 - \langle u|u \rangle \langle v|v \rangle \leq 0$$

を得る．絶対値 1 の複素数 λ を $\operatorname{Re}(\lambda \langle u|v \rangle) = |\langle u|v \rangle|$ となるようにとり，上式で v を λv に置き換えると，

$$|\langle u|v \rangle|^2 - \langle u|u \rangle \langle v|v \rangle \geq 0$$

となる．これは，示すべき式と同値である．　□

系 2.5　V を内積空間とすると，$\|u\| = \sqrt{\langle u|u \rangle}$ は V 上のノルムである．すなわち，次が成り立つ．

(1) 任意の $u,\, v \in V$ に対して $\|u + v\| \leq \|u\| + \|v\|$ である．
(2) 任意の $\lambda \in \mathbb{C}$ と $u \in V$ に対して $\|\lambda u\| = |\lambda| \|u\|$ である．
(3) 任意の $u \in V$ に対して，$\|u\| = 0$ ならば $u = 0$ である．

証明　(2), (3) は内積の定義から明らかである．また，Cauchy–Schwarz の不等式（命題 2.4）より

$$\begin{aligned} \|u + v\|^2 &= \|u\|^2 + 2\operatorname{Re}\langle u|v \rangle + \|v\|^2 \\ &\leq \|u\|^2 + 2\|u\|\|v\| + \|v\|^2 \\ &= (\|u\| + \|v\|)^2 \end{aligned}$$

だから，(1) も成り立つ．　□

以上より，内積空間は自然にノルム空間の構造をもち，したがって距離空間の構造をもつ．すなわち，内積空間 V は距離

$$d_V(u, v) = \|u - v\| \qquad (u,\, v \in V)$$

によって距離空間とみなされる．

さて，V を有限次元内積空間とすると，V は正規直交基底 $(e_1, \ldots, e_n)$ をもち，これを用いて作られる写像 $u \mapsto (\langle e_1|u \rangle, \ldots, \langle e_n|u \rangle)$ は V から $\mathbb{C}^n$（通常の内積によって内積空間とみなす）への内積を保つ線型同型になるのだった．Hilbert 空間とは，標語的にいえば，このような有限次元内積空間の「よい性質」の類似を満たす一般次元の内積空間のことである．数学的には，次のように定義される．

定義 2.6（Hilbert 空間）　距離空間として完備な内積空間を，**Hilbert 空間**という．

例 2.7　J を集合とし，

$$l^2(J) = \left\{ (a_j)_{j \in J} \in \mathbb{C}^J \;\middle|\; \sum_{j \in J} |a_j|^2 < \infty \right\}$$

と定める．$l^2(J)$ の元 $a = (a_j)_{j \in J}$，$b = (b_j)_{j \in J}$ に対して

$$\langle a|b \rangle = \sum_{j \in J} \overline{a_j} b_j$$

と定めると，この和は絶対収束し，これを内積として $l^2(J)$ が Hilbert 空間をなすことが確かめられる．$J = \{1, \ldots, n\}$ のとき，$l^2(J)$ は $\mathbb{C}^n$ に通常の内積を入れて得られる Hilbert 空間に他ならない．

例 2.8　(X, μ) を測度空間とし,

$$L^2(X, \mu) = \left\{ u\colon X \to \mathbb{C} \;\middle|\; u \text{ は可測}, \ \int_X |u|^2 \, d\mu < \infty \right\}$$

と定める．ただし，ほとんどいたるところで一致する関数は $L^2(X, \mu)$ の元として等しいとみなす．u, $v \in L^2(X, \mu)$ に対して

$$\langle u|v \rangle = \int_X \overline{u} v \, d\mu$$

と定めると，この積分は可積分であり，これを内積として $L^2(X, \mu)$ が Hilbert 空間をなすことが確かめられる．$X = J$ として μ を数え上げ測度とすると，この例は例 2.7 そのものになる．

Hilbert 空間の「同型」を，ユニタリ作用素という．

定義 2.9（ユニタリ作用素）　$\mathcal{H}$, $\mathcal{K}$ を Hilbert 空間とする．線型同型写像 $U\colon \mathcal{H} \to \mathcal{K}$ であって，任意の u, $v \in \mathcal{H}$ に対して

$$\langle Uu|Uv \rangle = \langle u|v \rangle$$

を満たすものを，$\mathcal{H}$ から $\mathcal{K}$ への**ユニタリ作用素**（unitary operator）という．

ここでは Hilbert 空間の理論を詳しく述べることはしないが（新井 [11, 第 1 章] を参照のこと），前述の標語に説得力をもたせるために，正規直交基底に関することだけ証明なしで述べておく．

定義 2.10（正規直交基底）　$\mathcal{H}$ を Hilbert 空間とし，$\{e_j\}_{j \in J}$ を $\mathcal{H}$ の元の族とする．

(1) 任意の j, $k \in J$ に対して

$$\langle e_j|e_k \rangle = \begin{cases} 1 & (j = k) \\ 0 & (j \neq k) \end{cases}$$

であるとき，$\{e_j\}_{j \in J}$ を**正規直交系**（orthonormal system）という．

(2) $\{e_j\}_{j \in J}$ が正規直交系であり，かつこれが生成する部分線型空間 $\operatorname{span}\{e_j\}_{j \in J}$ が $\mathcal{H}$ において稠密であるとき，$\{e_j\}_{j \in J}$ を $\mathcal{H}$ の**正規直交基底**（orthonormal basis）という．

Hilbert 空間の正規直交基底は，その Hilbert 空間が有限次元でない限り，代数的な意味での基底にはならない（空間全体を張らない）．しかし，次の定理が成り立つことから，正規直交基底は「基底」と呼ぶにふさわしいものだといえる．

定理 2.11　任意の Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ は正規直交基底をもつ．さらに，$\{e_j\}_{j \in J}$ を $\mathcal{H}$ の正規直交基底とすると，2 つの線型写像

$$\begin{aligned} \varPhi &\colon \mathcal{H} \to l^2(J), \quad u \mapsto (\langle e_j|u \rangle)_{j \in J}, \\ \varPsi &\colon l^2(J) \to \mathcal{H}, \quad (a_j)_{j \in J} \mapsto \sum_{j \in J} a_j e_j \end{aligned}$$

が矛盾なく定義でき，これらは互いに他の逆を与えるユニタリ作用素である．

以上を踏まえて，量子力学の系の数学的定式化を述べる．

量子力学の系

量子力学の系（量子系）は Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ で表され，その系の状態は $\mathcal{H}$ の 0 でない元で表される．ただし，$v = \lambda u$（$\lambda \in \mathbb{C}^\times$）のとき，$u$ と v は同じ状態を表しているとみなす．数学的に正確にいえば，Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ で表される量子系の状態とは，$\mathcal{H} \setminus \{0\}$ を同値関係

$$u \sim v \iff \text{ある } \lambda \in \mathbb{C}^\times \text{ が存在して } v = \lambda u$$

で割って得られる空間

$$\mathbb{P}\mathcal{H} = (\mathcal{H} \setminus \{0\})/\!\sim$$

の元のことである．

以下では $\mathcal{H} \setminus \{0\}$ の元を状態のように扱うが，上述のとおり正式には状態とはその同値類のことだから，量子系の状態に対して何か定義するときは，それが代表元のとり方によらないことを確かめる必要がある．

注意 2.12 $\mathcal{H}$ を Hilbert 空間とする．$\mathbb{P}\mathcal{H}$ の元と $\mathcal{H}$ 上の階数 1 の直交射影とは，$[u] \in \mathbb{P}\mathcal{H}$ に対して $\mathbb{C}u$ の上への直交射影 P_u を対応させることで一対一に対応するから，量子系の状態は階数 1 の直交射影で表される，といってもよい．

より一般に，Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ 上のトレース 1 の正作用素全体（これは，階数 1 の直交射影全体のトレースノルムに関する凸閉包に等しい）を状態として扱うこともあり，このとき階数 1 の直交射影で表される状態を**純粋状態**（pure state）といい，それ以外の状態を**混合状態**（mixed state）という．物理学では，この意味での状態を表すトレース 1 の正作用素を**密度演算子**（density operator）という．

本稿では純粋状態しか扱わないから，これを単に状態と呼んだ．新井・江沢 [9]，新井 [10]，新井 [11]，Hall [3] もこの立場だが，Hall は第 19 章で混合状態にも触れている．Takhtajan [8] ははじめから混合状態を含む状態を扱っている．

3 物理量：自己随伴作用素

3.1 有限次元の場合

定義 3.1（随伴作用素） $\mathcal{H}, \mathcal{K}$ を有限次元 Hilbert 空間とする[*3]．線型写像 $A \colon \mathcal{H} \to \mathcal{K}$ に対して，A の随伴（adjoint）と呼ばれる線型写像 $A^* \colon \mathcal{K} \to \mathcal{H}$ を，任意の $u \in \mathcal{H}$ と $v \in \mathcal{K}$ に対して

$$\langle Au|v\rangle = \langle u|A^*v\rangle$$

を満たすものとして定義する（この条件で一意に定まる）．[*4]

定義 3.2（自己随伴作用素） $\mathcal{H}$ を有限次元 Hilbert 空間とする．線型写像 $A \colon \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ が**自己随伴**（self-adjoint）[*5] であるとは，$A^* = A$ であることをいう．このとき，A は $\mathcal{H}$ 上の**自己随伴作用素**（self-adjoint operator）であるという．

---

*3 「有限次元 Hilbert 空間」は「有限次元内積空間」といっても同じである．
*4 物理学では，A の随伴を $A^\dagger$ と書くことが多い．
*5 「自己随伴」の代わりに「自己共役」ということも多い．英語ではどちらも self-adjoint である．

例 3.3　$\mathbb{C}^n$, $\mathbb{C}^m$ を通常の内積によって有限次元 Hilbert 空間とみなす．$A\colon \mathbb{C}^n \to \mathbb{C}^m$ が $m \times n$ 行列 $(a_{ij})_{1\le i\le m, 1\le j\le n}$ によって表される線型写像ならば，随伴 $A^*\colon \mathbb{C}^m \to \mathbb{C}^n$ は行列 $(\overline{a_{ji}})_{1\le j\le n, 1\le i\le m}$ によって表される．

よく知られているように，自己随伴行列はユニタリ行列によって対角化できる．あるいは同じことだが，有限次元 Hilbert 空間上の自己随伴作用素に対して，それの固有ベクトルからなる正規直交基底が存在する．ここでは，無限次元の場合との比較のため，次のように定理を述べておく．

定理 3.4（スペクトル分解定理）　有限次元 Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ 上の自己随伴作用素 A に対して，$\mathcal{H}$ の恒等作用素 I の分解

$$I = \sum_{\lambda\in\mathbb{R}} E_A(\lambda) \qquad (E_A(\lambda) \text{ は直交射影，像は互いに直交する，有限個を除き } 0)$$

が一意に存在して，A は

$$A = \sum_{\lambda\in\mathbb{R}} \lambda E_A(\lambda)$$

と表される．

有限次元 Hilbert 空間で表される量子系の物理量は，次のように定式化される．

量子力学における物理量（有限次元の場合）

有限次元 Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ で表される量子系の物理量は，$\mathcal{H}$ 上の自己随伴作用素で表される．状態 $u \in \mathcal{H}\setminus\{0\}$ において物理量 A を測定して得られる値は A の固有値のいずれかであり[*6]，A の固有値 λ が得られる確率は，対応する固有空間の上への直交射影 $E_A(\lambda)$ を用いて

$$\frac{\|E_A(\lambda)u\|^2}{\|u\|^2}$$

と表される（これは代表元 u のとり方によらない）．

例 3.5　有限次元 Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ で表される量子系と，$\mathcal{H}$ 上の自己随伴作用素 A で表される物理量を考える．$u \in \mathcal{H}\setminus\{0\}$ が A の固有値 λ の固有ベクトルならば，状態 u において物理量 A を測定すると，確率 1 で値 λ が得られる．

例 3.6　2 次元 Hilbert 空間 $\mathbb{C}^2$（内積は通常のものを考える）で表される量子系（2 準位系）と，自己随伴作用素 $A = \begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & \mu \end{pmatrix}$（$\lambda, \mu \in \mathbb{R}$，$\lambda \neq \mu$）で表される物理量を考える．

- 状態 $(1, 0)$ において物理量 A を測定すると，確率 1 で値 λ が得られる．
- 状態 $(0, 1)$ において物理量 A を測定すると，確率 1 で値 μ が得られる．
- 状態 $(1/\sqrt{2}, 1/\sqrt{2})$ において物理量 A を測定すると，確率 1/2 で値 λ が，確率 1/2 で値 μ が得られる．

[*6] 「状態 $u \in \mathcal{H}\setminus\{0\}$」は「$u \in \mathcal{H}\setminus\{0\}$ で表される状態」，「物理量 A」は「自己随伴作用素 A で表される物理量」というべきところだが，数学的にはこれらは同一視されるので，このようないい方をする．

3.2 無限次元の場合

前小節の定義を無限次元 Hilbert 空間に拡張したいのだが，量子力学では有界とも Hilbert 空間全体で定義されているとも限らない線型写像（非有界作用素）が多く登場することに注意する必要がある．たとえば，$L^2(\mathbb{R})$ 上で「x を掛ける」操作は量子力学で基本的な役割を果たすが（後に例 3.14 で見る），$L^2(\mathbb{R})$ の元に x を掛けた結果は $L^2(\mathbb{R})$ に属するとは限らないから，この操作を $L^2(\mathbb{R})$ 全体から $L^2(\mathbb{R})$ への写像として定義することはできない．

このことを踏まえて，次のように定義する．

定義 3.7（線型作用素） $\mathcal{H}, \mathcal{K}$ を Hilbert 空間とする．$\mathcal{H}$ から $\mathcal{K}$ への**線型作用素**（linear operator）とは，$\mathcal{H}$ のある部分線型空間 $\operatorname{Dom} A$ から $\mathcal{K}$ への線型写像 $A\colon \operatorname{Dom} A \to \mathcal{K}$ のことをいう．$\mathcal{H}$ から $\mathcal{H}$ への線型作用素を，$\mathcal{H}$ 上の線型作用素という．[*7]

$\operatorname{Dom} A = \mathcal{H}$ ならば A は**全域で定義されている**といい，$\operatorname{Dom} A$ が $\mathcal{H}$ において稠密ならば A は**稠密に定義されている**（densely defined）という．

線型作用素 A, B について，$\operatorname{Dom} A = \operatorname{Dom} B$ かつ任意の $u \in \operatorname{Dom} A = \operatorname{Dom} B$ に対して $Au = Bu$ であるとき，A と B は**等しい**といい $A = B$ と書く．また，$\operatorname{Dom} A \subseteq \operatorname{Dom} B$ かつ任意の $u \in \operatorname{Dom} A$ に対して $Au = Bu$ であるとき，B は A の**拡張**であるといい $A \subseteq B$ と書く．

定義 3.8（随伴作用素） $\mathcal{H}, \mathcal{K}$ を Hilbert 空間とする．$\mathcal{H}$ から $\mathcal{K}$ への稠密に定義された線型作用素 A に対して，A の**随伴**（adjoint）と呼ばれる $\mathcal{K}$ から $\mathcal{H}$ への線型作用素を，任意の $u \in \operatorname{Dom} A$ と $v \in \operatorname{Dom} A^*$ に対して

$$\langle Au | v \rangle = \langle u | A^* v \rangle$$

を満たすものの中で定義域 $\operatorname{Dom} A^*$ が最大のものとして定義する（A が稠密に定義されていることから，この条件で一意に定まる）．

Hilbert 空間の間の稠密に定義された線型作用素 A, B について，$A \subseteq B$ ならば $B^* \subseteq A^*$ であることが容易にわかる．

定義 3.9（対称作用素，自己随伴作用素） $\mathcal{H}$ を Hilbert 空間とし，A を $\mathcal{H}$ 上の稠密に定義された線型作用素とする．

(1) A が**対称**（symmetric）であるとは，$A \subseteq A^*$ であることをいう．これは，任意の $u, v \in \operatorname{Dom} A$ に対して $\langle Au | v \rangle = \langle u | Av \rangle$ であることと同値である．

(2) A が**自己随伴**（self-adjoint）であるとは，$A = A^*$ であることをいう．

同じ Hilbert 空間上の自己随伴作用素 A と対称作用素 B が $A \subseteq B$ を満たすとすると，$B \subseteq B^* \subseteq A^* = A \subseteq B$ だから $A = B$ である．すなわち，自己随伴作用素は対称作用素の中で極大である．しかし，この逆は成り立たない（Rudin [7, 13.20] を参照のこと）．

例 3.10 (X, μ) を測度空間とし，$F\colon X \to \mathbb{C}$ を可測関数とする．Hilbert 空間 $L^2(X, \mu)$ 上の線型作用素 M_F

[*7] 物理学では，「作用素」の代わりに「演算子」ということが多い．英語ではどちらも operator である．

を

$$\mathrm{Dom}\, M_F = \{u \in L^2(X,\mu) \mid Fu \in L^2(X,\mu)\}, \qquad M_F u = Fu$$

と定め，これを F による**掛け算作用素**という．M_F が稠密に定義された線型作用素であり，その随伴が $M_{\overline{F}}$ であることを示そう（これより特に，F が実数値ならば M_F は自己随伴である）．

M_F が稠密に定義されていることを示す．各 $n \in \mathbb{N}$ に対して $S_n = \{x \in X \mid |f(x)| \leq n\}$ と定める．$f \in L^2(X,\mu)$ とすると，$\chi_{S_n} f \in \mathrm{Dom}\, M_F$ であり（χ_{S_n} は S_n の特性関数を表す），Lebesgue の収束定理より $n \to \infty$ のときこれは f に L^2 収束する．よって，M_F は稠密に定義されている．

$M_F^* = M_{\overline{F}}$ を示す．まず，$v \in \mathrm{Dom}\, M_{\overline{F}}$ とすると，任意の $u \in \mathrm{Dom}\, M_F$ に対して

$$\langle M_F u | v\rangle = \int_X \overline{Fu} \cdot v \, d\mu = \int_X \overline{u} \cdot \overline{F} v \, d\mu = \langle u | M_{\overline{F}} v\rangle$$

だから，$v \in \mathrm{Dom}\, M_F^*$ かつ $M_F^* v = M_{\overline{F}} v$ である．したがって，$M_{\overline{F}} \subseteq M_F^*$ である．次に，$v \in \mathrm{Dom}\, M_F^*$ とすると，任意の $u \in \mathrm{Dom}\, M_F$ に対して

$$\left| \int_X \overline{Fu} \cdot v \, d\mu \right| = |\langle M_F u | v\rangle| = |\langle u | M_F^* v\rangle| \leq \|u\| \|M_F^* v\|$$

が成り立つ．各 $n \in \mathbb{N}$ に対して，F が S_n 上で有界であることより $\chi_{S_n} \overline{F} v \in \mathrm{Dom}\, M_F$ がわかるから，上式で $u = \chi_{S_n} \overline{F} v$ と置くことができ，

$$\int_{S_n} |\overline{F} v|^2 \, d\mu \leq \|u\| \|M_F^* v\|$$

を得る．$n \to \infty$ とすれば，単調収束定理より

$$\int_X |\overline{F} v|^2 \, d\mu \leq \|u\| \|M_F^* v\| < \infty,$$

すなわち $v \in \mathrm{Dom}\, M_{\overline{F}}$ を得る．したがって，$\mathrm{Dom}\, M_F^* \subseteq \mathrm{Dom}\, M_{\overline{F}}$ である．これで，$M_F^* = M_{\overline{F}}$ が示された．

例 3.11　$\mathbb{R}^n$ を Lebesgue 測度によって測度空間とみなす．可測関数 $F\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{C}$ による掛け算作用素 M_F を，$F(X) = F(X_1, \dots, X_n)$ と書く（F が座標関数 x_j のときは X_j と書く）．例 3.10 より，F が実数値ならば $F(X)$ は $L^2(\mathbb{R}^n)$ 上の自己随伴作用素である．

例 3.12　Fourier 変換 $\mathscr{F}$ と Fourier 逆変換 $\mathscr{F}^{-1}$ は

$$\mathscr{F} u(\xi) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} u(x) e^{-ix\xi} \, dx,$$
$$\mathscr{F}^{-1} u(x) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} u(\xi) e^{ix\xi} \, d\xi$$

と定義され*8，これらは $L^2(\mathbb{R}^n)$ から自身へのユニタリ作用素を与え，名前のとおり互いに他の逆になっている．

これを踏まえて，可測関数 $F\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{C}$ による**一般化された微分作用素** $F(D) = F(D_1, \dots, D_n)$ を，

$$\mathrm{Dom}\, F(D) = \mathscr{F}^{-1}(\mathrm{Dom}\, F(X)), \qquad F(D) = \mathscr{F}^{-1} F(X) \mathscr{F}$$

*8 正確には，この積分で定義されるのは，$u \in L^1(\mathbb{R}^n)$ に対する Fourier 変換・逆変換である．$u \in L^2(\mathbb{R}^n)$ に対する Fourier 変換・逆変換の正確な定義については，新井 [11, 5.1 節] を参照のこと．

と定義する（F が座標関数 x_j のときは D_j と書く）．F が実数値ならば $F(X)$ は $L^2(\mathbb{R}^n)$ 上の自己随伴作用素だったから（例 3.11），Fourier 変換を通してそれに対応する $F(D)$ も $L^2(\mathbb{R}^n)$ 上の自己随伴作用素である．

F が多項式ならば，$F(D)$ は微分作用素 $F((1/i)\partial/\partial x)$ に一致することが知られている．ただし，微分作用素は超関数の範囲で考え，定義域は $u \in L^2(\mathbb{R}^n)$ であって $F((1/i)\partial/\partial x)u \in L^2(\mathbb{R}^n)$ となるもの全体とする．（緩増加超関数に対する Fourier 変換を用いればわかる．詳しくは，新井 [10, 付録 C] を参照のこと．）特に，

$$D_j = \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial x_j}$$

である．

一般の Hilbert 空間上の自己随伴作用素に対して，前小節で述べた有限次元の場合のスペクトル分解定理の一般化が成り立つ．ただし，無限次元の場合，スペクトル分解は「離散的」であるとは限らず，有限次元の場合の「和」の代わりに「積分」を用いる必要がある．ここでは細かい定義は述べず，主張だけを述べる．定理の正確な内容については，新井・江沢 [9, 第 2 章] や Hall [3, 第 7–10 章] を参照のこと（ただし，新井・江沢では，本稿でいう「射影値測度」を「スペクトル測度」と呼んでいる）．

定理 3.13（スペクトル分解定理） Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ 上の自己随伴作用素 A に対して，$\mathbb{R}$ 上の $\mathcal{H}$-射影値測度 E_A が一意に存在して，A はこれに関する積分として

$$A = \int_{\mathbb{R}} \lambda \, dE_A(\lambda)$$

と表される．この E_A を，A の**スペクトル測度**（spectral measure）という．

スペクトル測度を用いることで，無限次元 Hilbert 空間で表される量子系の物理量も定式化できる．

量子力学における物理量（無限次元の場合）

Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ で表される量子系の物理量は，$\mathcal{H}$ 上の自己随伴作用素で表される．状態 $u \in \mathcal{H} \setminus \{0\}$ において物理量 A を測定したとき，得られる値が Borel 集合 $S \subseteq \mathbb{R}$ に含まれる確率は，A のスペクトル測度 E_A を用いて

$$\frac{\|E_A(S)u\|^2}{\|u\|^2}$$

と表される（これは代表元 u のとり方によらない）．

上の状況で，$u \in \operatorname{Dom} A$ ならば，物理量 A の測定値の期待値は

$$\int_{\mathbb{R}} \lambda \frac{d\|E_A(\lambda)u\|^2}{\|u\|^2} = \frac{1}{\|u\|^2}\int_{\mathbb{R}} \lambda \, d\langle u|E_A(\lambda)u\rangle = \frac{\langle u|Au\rangle}{\|u\|^2}$$

である（射影値測度に関する積分の性質を用いた）．

例 3.14 古典力学では，$\mathbb{R}^n$ 内の 1 つの粒子（質点とみなす）からなる系はシンプレクティック多様体 $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$（標準的なシンプレクティック構造を入れる）で表され，その点 $(\xi, x) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ は運動量が ξ で位置が x である状態を表す[*9]．すなわち，$\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ 上の座標関数 ξ_j, x_j は，それぞれ運動量の j-成分と位置の j-成分を表す．

*9 (ξ, x) よりも (p, q) と書くことの方が多いかもしれない．

これに対して，量子力学では，$\mathbb{R}^n$ 内の 1 つの粒子からなる系は Hilbert 空間 $L^2(\mathbb{R}^n)$ で表され[*10]，運動量の j-成分は微分作用素 $\hbar D_j = (\hbar/i)\partial/\partial x_j = (h/2\pi i)\partial/\partial x_j$ で，位置の j-成分は掛け算作用素 X_j で表される（例 3.11 と例 3.12 で見たように，これらは $L^2(\mathbb{R}^n)$ 上の自己随伴作用素である）．ここで，h は **Planck 定数**と呼ばれる物理定数

$$h = 6.62607015 \times 10^{-34}\,\mathrm{J\,s}$$

であり[*11]，$\hbar$ は h を 2π で割った値で**換算 Planck 定数**と呼ばれる．

上記の物理量の定式化より，状態 $u \in L^2(\mathbb{R}^n) \setminus \{0\}$ において，位置の j-成分 X_j の測定値が Borel 集合 $S \subseteq \mathbb{R}$ に含まれる確率は

$$\frac{\|E_{X_j}(S)u\|^2}{\|u\|^2} = \frac{\|\chi_{\widetilde{S}_j} u\|^2}{\|u\|^2} = \frac{1}{\|u\|^2}\int_{\widetilde{S}_j} |u(x)|^2\,dx$$

である．ここで，$\widetilde{S}_j = \{(x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n \mid x_j \in S\}$ であり，$\chi_{\widetilde{S}_j}$ はその特性関数である．これより，状態を表す関数（波動関数と呼ばれる）u の絶対値の 2 乗 $|u|^2$（を正規化したもの）は，粒子の位置の確率分布と解釈できる．

より一般に，古典力学における物理量 $f\colon \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ の量子力学における対応物は，$f(\xi, x) = f(\xi_1, \dots, \xi_n, x_1, \dots, x_n)$ の ξ_j, x_j にそれぞれ $\hbar D_j$, X_j を「代入」することで定義される．たとえば，古典力学におけるハミルトニアン（系のエネルギー）

$$H(\xi, x) = \frac{\xi^2}{2m} + V(x) \qquad (m \text{ は質点の質量，} V \text{ はポテンシャルエネルギー})$$

の量子力学における対応物は，

$$H = \frac{\hbar^2}{2m} D^2 + V(X)$$

である．ここで，

$$D^2 = \sum_{j=1}^n D_j^2 = -\sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial}{\partial x_j}\right)^2$$

であり，$V(X)$ は例 3.11 で定義したとおり V による掛け算作用素である．

注意 3.15 「物理量は自己随伴作用素で表される」という立場からは，例 3.14 のハミルトニアン $H = (\hbar^2/2m)D^2 + V(X)$ は自己随伴であるか，あるいは少なくとも適切な定義域上で本質的自己随伴（新井・江沢 [9] や Hall [3] を参照のこと）であることが期待される．しかし，これは一般には正しくないし（たとえば，$n = 1$，$V(x) = -x^4$ のとき，H は $C_c^\infty(\mathbb{R})$ 上本質的自己随伴でない [3, 9.10 節]），基本的な例であってもそのハミルトニアンの自己随伴性は明らかではないことが多い．

本稿では，5 節で量子調和振動子のハミルトニアンの自己随伴性を示す．また，本稿では触れないが，物理的に重要な別の例として水素原子があり，そのハミルトニアンは定数 $Q > 0$ を用いて

$$H = \frac{\hbar^2}{2m} D^2 + V(X), \qquad V(x) = -\frac{Q}{|x|}$$

[*10] 実際には，量子力学における粒子は「スピン」と呼ばれる内部自由度をもつことが知られており，これを考慮すると，系を表す Hilbert 空間は $L^2(\mathbb{R}^n) \otimes V_s$（Hilbert 空間のテンソル積）となる．ここで，s は粒子の種類によって定まる**スピン量子数**（spin quantum number）と呼ばれる 0 以上の半整数，V_s は Lie 代数 $\mathfrak{so}(3)$ が既約に作用する $2s + 1$ 次元 Hilbert 空間である．詳しくは，Hall [3, 第 17 章] を参照のこと．

[*11] 余談だが，2019 年の SI 基本単位の再定義により，1 kg の定義が「国際キログラム原器の質量」から「単位 $\mathrm{J\,s} = \mathrm{kg\,m^2\,s^{-1}}$ による Planck 定数の値を $6.62607015 \times 10^{-34}$ にするもの」に変更された [14]．したがって，Planck 定数の値は測定値ではなく定義値であり，不確かさをもたない．

と表される（$n = 3$ である）．このハミルトニアンの自己随伴性は，1944 年に加藤敏夫によってはじめて示された（第二次世界大戦のため，論文 [4] の出版は 1951 年に遅れた [9, はじめに]）．今日では，加藤–Rellich の定理として知られている．

自己随伴性の問題については，Reed–Simon [6, II 巻] が詳しい他，新井 [10, 第 2 章] でも解説されている．また，水素原子のハミルトニアンの解析については，新井 [11, 第 8 章] や Hall [3, 第 18 章] を参照のこと．

注意 3.16　例 3.14 で考えたハミルトニアンには $\xi = (\xi_1, \ldots, \xi_n)$ と $x = (x_1, \ldots, x_n)$ が分かれて現れていたため自然に「代入」することができたが，D_j と X_j の非可換性のため，一般には「代入」をどのように定義すべきかは明らかではない．たとえば，関数 $\xi_j x_j$ に $\hbar D_j$ と X_j を「代入」した結果としては $\hbar D_j X_j$, $\hbar X_j D_j$, $\hbar(D_j X_j + X_j D_j)/2$ などが考えられ，これらは異なる線型作用素である．

一般に，古典力学における対象の量子力学における対応物を考えることを**量子化**（quantization）という．上記の「代入」については，Weyl 量子化と呼ばれる方法が比較的よい性質を満たすことが知られている（Weyl 量子化では，関数 $\xi_j x_j$ には $\hbar(D_j X_j + X_j D_j)/2$ が対応する）．詳しくは，Hall [3, 第 13 章] や Folland [1, 第 2 章] を参照のこと．

4　時間発展：一径数ユニタリ群

4.1　Stone の定理

定義 4.1（一径数ユニタリ群）　$\mathcal{H}$ を Hilbert 空間とし，$\mathcal{H}$ 上のユニタリ作用素全体のなす群を $\mathscr{U}(\mathcal{H})$ と書く．$\mathcal{H}$ 上の**一径数ユニタリ群**（one-parameter unitary group）とは，$\mathcal{H}$ 上のユニタリ作用素の族 $\{U(t)\}_{t\in\mathbb{R}}$ であって，次の 2 条件を満たすものをいう．

(i) $\mathbb{R}$ から $\mathscr{U}(\mathcal{H})$ への写像 $t \mapsto U(t)$ は群準同型である．

(ii) $\mathbb{R}$ から $\mathscr{U}(\mathcal{H})$ への写像 $t \mapsto U(t)$ は，$\mathbb{R}$ の通常の位相と $\mathscr{U}(\mathcal{H})$ の $\mathcal{H}$ 上各点収束位相（強作用素位相）に関して連続である（強連続性）．いいかえれば，任意の $u \in \mathcal{H}$ に対して $\mathbb{R}$ から $\mathcal{H}$ への写像 $t \mapsto U(t)u$ は連続である．

定理 4.2（Stone の定理）　$\mathcal{H}$ を Hilbert 空間とする．

(1) $\mathcal{H}$ 上の自己随伴作用素 A に対して，$\mathcal{H}$ 上の一径数ユニタリ群 $\{e^{itA}\}_{t\in\mathbb{R}}$ が定まる[*12]．

(2) $\mathcal{H}$ 上の一径数ユニタリ群 $\{U(t)\}_{t\in\mathbb{R}}$ に対して，$\mathcal{H}$ 上の線型作用素 A を

$$\operatorname{Dom} A = \left\{ u \in \mathcal{H} \;\middle|\; \lim_{t\to 0} \frac{U(t)u - u}{t} \in \mathcal{H} \text{ が存在する} \right\},$$
$$Au = \frac{1}{i} \lim_{t\to 0} \frac{U(t)u - u}{t}$$

と定めると，A は $\mathcal{H}$ 上の自己随伴作用素である．

(3) (1) と (2) の対応は，互いに他の逆であり，$\mathcal{H}$ 上の自己随伴作用素と $\mathcal{H}$ 上の一径数ユニタリ群との間の

[*12] 一般に，Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ 上の自己随伴作用素 A と Borel 可測関数 $f\colon \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ に対して，f に A を「代入」して得られる $\mathcal{H}$ 上の線型作用素 $f(A)$ が定義される．これを，**Borel 可測関数算**（Borel functional calculus）という．定理の主張における e^{itA} は，$f(x) = e^{itx}$ に対する Borel 可測関数算 $f(A)$ を表す．$\mathcal{H}$ が有限次元ならば，これは行列の指数関数として計算した結果に一致する．

一対一対応を与える．

証明については，新井・江沢 [9, II 巻, 3.5.4 節] や Hall [3, 10.2 節] を参照のこと．

例 4.3　$\mathcal{H} = \mathbb{C}^n$ の場合に，Stone の定理（定理 4.2）による対応を見よう．A を $\mathbb{C}^n$ 上の自己随伴作用素とし，ユニタリ作用素 V によって

$$A = V \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n \end{pmatrix} V^{-1}$$

と対角化されるとする．すると，$t \in \mathbb{R}$ に対して

$$e^{itA} = V \begin{pmatrix} e^{it\lambda_1} & & \\ & \ddots & \\ & & e^{it\lambda_n} \end{pmatrix} V^{-1}$$

である．このユニタリ作用素を $U(t)$ と置き，$u \in \mathbb{C}^n$ に対して極限 $(1/i)\lim_{t\to 0}(U(t)u - u)/t$ を計算すると，

$$\begin{aligned} \frac{1}{i}\lim_{t\to 0}\frac{U(t)u-u}{t} &= \frac{1}{i}\lim_{t\to 0} V \begin{pmatrix} (e^{it\lambda_1}-1)/t & & \\ & \ddots & \\ & & (e^{it\lambda_n}-1)/t \end{pmatrix} V^{-1}u \\ &= V \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n \end{pmatrix} V^{-1}u \\ &= Au \end{aligned}$$

となって確かにもとの自己随伴作用素 A に戻る．

例 4.4　Hilbert 空間として $L^2(\mathbb{R}^n)$ を考える．座標関数 x_j による掛け算作用素 X_j に対応する一径数ユニタリ群を構成するユニタリ作用素 e^{itX_j}（$t \in \mathbb{R}$）は，e^{itx_j} による掛け算作用素である（これは認める）．微分作用素 D_j が掛け算作用素 X_j と Fourier 変換を通して対応することに注意すると，D_j に対応する一径数ユニタリ群を構成するユニタリ作用素 e^{itD_j}（$t \in \mathbb{R}$）は平行移動

$$e^{itD_j}u(x) = u(x + t1_j) \qquad (u \in L^2(\mathbb{R}^n))$$

であるとわかる．

4.2　時間発展

古典力学における系の時間発展は，ハミルトニアン（系のエネルギーを表す関数）H から定まるハミルトニアンフロー X_H で表される．これに対して，量子力学における系の時間発展は，ハミルトニアンから定まる一径数ユニタリ群で表される．

量子系の時間発展

Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ で表される量子系において，エネルギーを表す $\mathcal{H}$ 上の自己随伴作用素 H をハミルトニアンという[*13]．量子系の時間発展は，ハミルトニアン H から定まる一径数ユニタリ群 $\{e^{-itH/\hbar}\}_{t\in\mathbb{R}}$ で表される．すなわち，ある時刻における状態が $u \in \mathcal{H} \setminus \{0\}$ ならば，そこから時間 t が経過したときの状態は $e^{-itH/\hbar}u$ である（この対応は代表元のとり方によらずに定まる）．

Stone の定理（定理 4.2）より，$\operatorname{Dom} H$ は一径数ユニタリ群 $\{e^{-itH/\hbar}\}_{t\in\mathbb{R}}$ に関して安定である．このことに注意して，$u \in \operatorname{Dom} H$ に対して $u_t = e^{-itH/\hbar}u$ の両辺を t に関して微分すると，

$$\frac{d}{dt}u_t = \lim_{s\to 0}\frac{u_{t+s}-u_t}{s} = \lim_{s\to 0}\frac{e^{-isH/\hbar}u_t - u_t}{s} = -\frac{i}{\hbar}Hu_t$$

を得る．この微分方程式

$$\frac{d}{dt}u_t = -\frac{i}{\hbar}Hu_t$$

を，**非定常 Schrödinger 方程式**という．

注意 4.5　上のように，量子系の時間発展を状態の変化として捉える見方を，**Schrödinger 描像**（Schrödinger picture）という．Schrödinger 描像では，物理量は時間経過によって不変であると考える．これに対して，量子系の時間発展を物理量の変化として捉える見方を **Heisenberg 描像**（Heisenberg picture）という．Heisenberg 描像では，状態は時間経過によって不変であり，代わりに，時間 t の経過によって物理量 A が $e^{itH/\hbar}Ae^{-itH/\hbar}$ に変化すると考える．

一般に，$\mathcal{H}$ を Hilbert 空間，A を $\mathcal{H}$ 上の自己随伴作用素，U を $\mathcal{H}$ 上のユニタリ作用素とすると，$U^{-1}AU$ のスペクトル測度 $E_{U^{-1}AU}$ は，A のスペクトル測度 E_A を用いて

$$E_{U^{-1}AU}(S) = U^{-1}E_A(S)U \qquad (\text{Borel 集合 } S \subseteq \mathbb{R})$$

と表される．したがって，任意の $u \in \mathcal{H} \setminus \{0\}$ に対して

$$\frac{\|E_{U^{-1}AU}(S)u\|^2}{\|u\|^2} = \frac{\|U^{-1}E_A(S)Uu\|^2}{\|u\|^2} = \frac{\|E_A(S)Uu\|^2}{\|Uu\|^2}$$

が成り立つ．これを前段の状況に当てはめて $U = e^{-itH/\hbar}$ とすると，Schrödinger 描像と Heisenberg 描像のどちらを採用しても，物理量の測定に関して得られる結果は同じであることがわかる．

自己随伴作用素とそれに対応する一径数ユニタリ群の固有ベクトルについて，次が成り立つ．

命題 4.6　$\mathcal{H}$ を Hilbert 空間，A を $\mathcal{H}$ 上の自己随伴作用素とする．$u \in \mathcal{H}$ に対して，次の 2 条件は同値である．

(a) u は A の固有ベクトルである．
(b) 任意の $t \in \mathbb{R}$ に対して，u は e^{itA} の固有ベクトルである．

証明　(a) $\Longrightarrow$ (b)　Borel 可測関数算の性質より，$Au = \lambda u$ ならば $e^{itA}u = e^{it\lambda}u$ である．ここから主張が従う．

[*13] 本稿では，ハミルトニアン H が時刻 t に依存しない場合だけを考える．

(b) $\Longrightarrow$ (a)　$u=0$ の場合は明らかだから，$u \neq 0$ の場合を考える．各 $t \in \mathbb{R}$ に対して $e^{itA}u = f(t)u$（$f(t) \in \mathbb{C}$）であるとする．$\{e^{itA}\}_{t\in\mathbb{R}}$ は一径数ユニタリ群だから，f は $\mathbb{R}$ から絶対値 1 の複素数全体がなす群への連続群準同型である．このような f は，ある $\lambda \in \mathbb{R}$ を用いて

$$f(t) = e^{i\lambda t} \qquad (t \in \mathbb{R})$$

と表せる（Folland [2, 4.6] に証明がある）．したがって，$t \to 0$ のとき

$$\frac{1}{i}\frac{e^{itA}u - u}{t} = \frac{1}{i}\frac{e^{i\lambda t}-1}{t}u \to \lambda u$$

だから，Stone の定理（定理 4.2）より $u \in \operatorname{Dom} A$ かつ $Au = \lambda u$ である．よって，u は A の固有ベクトルである． □

Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ とハミルトニアン H で表される量子系を考える．状態 $u \in \mathcal{H} \setminus \{0\}$ がこの系の定常状態（時間発展で不変な状態）であるとは，上記の時間発展の定式化を踏まえると，任意の $t \in \mathbb{R}$ に対して u が $e^{-itH/\hbar}$ の固有ベクトルであることだといえる．命題 4.6 より，これはさらに u が H の固有ベクトルであることと同値である．よって，この量子系の定常状態を決定する問題は，固有値問題

$$Hu = \lambda u$$

と等価である．この方程式を，**定常 Schrödinger 方程式**という．

4.3　対称性と保存量

命題 4.7　$\mathcal{H}$ を Hilbert 空間とし，A, B を $\mathcal{H}$ 上の自己随伴作用素とする．次の 3 条件は同値である．

(a) 任意の $s, t \in \mathbb{R}$ に対して $e^{isA}e^{itB} = e^{itB}e^{isA}$ である．
(b) 任意の $s \in \mathbb{R}$ に対して $e^{isA}B = Be^{isA}$ である．
(c) 任意の $t \in \mathbb{R}$ に対して $Ae^{itB} = e^{itB}A$ である．

証明　Stone の定理（定理 4.2）によって自己随伴作用素 B と一径数ユニタリ群 $\{e^{itB}\}_{t\in\mathbb{R}}$ とが対応する．$s \in \mathbb{R}$ を固定すると e^{isA} は $\mathcal{H}$ 上のユニタリ作用素だから，Stone の定理によって自己随伴作用素 $e^{isA}Be^{-isA}$ と一径数ユニタリ群 $\{e^{isA}e^{itB}e^{-isA}\}_{t\in\mathbb{R}}$ とが対応する．よって，自己随伴作用素 B と $e^{isA}Be^{-isA}$ が等しいことと，一径数ユニタリ群 $\{e^{itB}\}_{t\in\mathbb{R}}$ と $\{e^{isA}e^{itB}e^{-isA}\}_{t\in\mathbb{R}}$ が等しいこととは同値である．すなわち，(a) $\Longleftrightarrow$ (b) が成り立つ．同様に，(a) $\Longleftrightarrow$ (c) も成り立つ． □

Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ とハミルトニアン H で表される量子系を考える．物理量 A がこの系の不変量（時間発展で不変な物理量）であるとは，前小節で述べた時間発展の定式化と Heisenberg 描像（注意 4.5）を踏まえると，任意の $t \in \mathbb{R}$ に対して $e^{itH/\hbar}Ae^{-itH/\hbar} = A$ であることだといえる．命題 4.7 より，これは任意の $t \in \mathbb{R}$ に対して $e^{itA/\hbar}He^{-itA/\hbar} = H$ であることと同値である．標語的にまとめれば

$$A \text{ が系の不変量} \iff \text{系のハミルトニアンは } A \text{ に関して対称性をもつ}$$

ということであり，これは古典力学における Noether の定理の類似になっている．

特別な場合として，任意の $s, t \in \mathbb{R}$ に対して $e^{isH}e^{itH} = e^{i(s+t)H} = e^{itH}e^{isH}$ だから，命題 4.7 より任意の $t \in \mathbb{R}$ に対して $e^{itA/\hbar}He^{-itA/\hbar} = H$ である．すなわち，ハミルトニアン H は常に系の不変量である．これは，古典力学におけるエネルギー保存則の類似になっている．

5　量子調和振動子

前節までの定式化を踏まえて，本節では，量子系の具体例として，量子力学における**調和振動子**（harmonic oscillator）を考える．

まず，古典力学における調和振動子について確認しておこう．古典力学において，調和振動子とは，$\mathbb{R}^n$ における粒子が原点からの距離に比例する大きさの引力を受けて運動する系を指す．粒子の質量を m，角振動数を ω とすると，ポテンシャルエネルギーは

$$V(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2} \qquad (\text{位置 } x \in \mathbb{R}^n)$$

だから，系のハミルトニアンは

$$H(\xi, x) = \frac{\xi^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \qquad (\text{運動量 } \xi \in \mathbb{R}^n\text{，位置 } x \in \mathbb{R}^n)$$

である．

対応して，量子力学における調和振動子とは，Hilbert 空間 $L^2(\mathbb{R}^n)$ とハミルトニアン

$$H = \frac{\hbar^2}{2m} D^2 + \frac{m\omega^2}{2} X^2$$

で表される系をいう．簡単のため，以下では $n = 1$ とし，D_1, X_1 をそれぞれ単に D, X と書く．また，しばらくの間，H として係数を正規化したもの

$$H = D^2 + X^2 = -\frac{d^2}{dx^2} + X^2$$

を考える．H の定義域は $\operatorname{Dom} H = \operatorname{Dom} D^2 \cap \operatorname{Dom} X^2$ としておく（安直だが，結果的にうまくいく）．なお，H が対称であることは明らかだが，自己随伴であることはこの時点では明らかではない（定理 5.11 で示される）．

線型作用素 H を調べよう．まず，定義域の問題を気にせず議論を進めるため，次の関数空間を導入する．

定義 5.1（急減少関数）　滑らかな関数 $f\colon \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ は，D と X を何回繰り返し施しても有界であるとき，**急減少**（rapidly decreasing）であるという．急減少関数全体のなす空間を，$\mathscr{S}(\mathbb{R})$ と書く．

急減少関数の空間 $\mathscr{S}(\mathbb{R})$ は線型空間であり，コンパクト台をもつ滑らかな関数の空間 $C_{\mathrm{c}}^\infty(\mathbb{R})$ を含み，$L^2(\mathbb{R}^n)$ に含まれる．関数 e^{-1/x^2} やそれに多項式を掛けたものは急減少だが，$1/(1+x^2)$ は X を 3 回施すと有界でなくなるから急減少ではない．明らかに，$\mathscr{S}(\mathbb{R})$ は D と X によって安定である．

次の線型作用素が，H の固有関数（固有ベクトル）を調べる鍵となる．

定義 5.2（昇降作用素）　$L^2(\mathbb{R})$ 上の線型作用素 A_+, A_- を

$$\begin{aligned}
\operatorname{Dom} A_+ &= \operatorname{Dom} A_- = \operatorname{Dom} D \cap \operatorname{Dom} X, \\
A_+ &= -iD + X = -\frac{d}{dx} + X, \\
A_- &= iD + X = \frac{d}{dx} + X
\end{aligned}$$

と定め，これらをそれぞれ**上昇作用素**（raising operator），**下降作用素**（lowering operator）といい，これらをまとめて**昇降作用素**（ladder operator）という．

昇降演算子の定義域は $\mathrm{Dom}\, D \cap \mathrm{Dom}\, X$ としたが，以下では $\mathscr{S}(\mathbb{R})$ 上でしか考えない．

容易に確かめられるように, 昇降作用素は次の関係式を満たす．ここで, 交換子積の記号 $[A, B] = AB - BA$ を用いた．

補題 5.3 $\mathscr{S}(\mathbb{R})$ 上で

$$\begin{aligned} A_+A_- &= H - I, & A_-A_+ &= H + I, \\ [H, A_+] &= 2A_+, & [H, A_-] &= -2A_- \end{aligned}$$

が成り立つ． □

ここから，A_+, A_- と H の固有関数について次のことがわかる（これが昇降作用素という名称の由来である）．

補題 5.4 $u \in \mathscr{S}(\mathbb{R})$ が H の固有値 λ の固有関数ならば，A_+u, A_-u はそれぞれ固有値 $\lambda + 2$, $\lambda - 2$ の固有関数である．

証明 $Hu = \lambda u$ だから，$[H, A_+] = 2A_+$ と $[H, A_-] = -2A_-$（補題 5.3）より

$$\begin{aligned} HA_+u &= (AH_+ + [H, A_+])u = (AH_+ + 2A_+)u = (\lambda + 2)u, \\ HA_-u &= (AH_- - [H, A_-])u = (AH_- - 2A_-)u = (\lambda - 2)u \end{aligned}$$

となる． □

補題 5.5 $u_0 \in \mathscr{S}(\mathbb{R})$，$\|u_0\| = 1$，$A_-u_0 = 0$ であるとして，$\alpha \in \mathbb{N}$ に対して $u_\alpha = A_+^\alpha u_0 \in \mathscr{S}(\mathbb{R})$ と定める．すると，

$$Hu_\alpha = (2\alpha + 1)u_\alpha, \qquad \langle u_\alpha | u_\beta \rangle = \begin{cases} 2^\alpha \alpha! & (\alpha = \beta) \\ 0 & (\alpha \neq \beta) \end{cases}$$

が成り立つ．

証明 $Hu_0 = (A_+A_- + I)u_0 = u_0$ だから，補題 5.4 より $Hu_\alpha = (2\alpha + 1)u_\alpha$ である．

内積 $\langle u_\alpha | u_\beta \rangle$ を求める．前段の結果と H の対称性より

$$(2\alpha + 1)\langle u_\alpha | u_\beta \rangle = \langle Hu_\alpha | u_\beta \rangle = \langle u_\alpha | Hu_\beta \rangle = (2k + 1)\langle u_\alpha | u_\beta \rangle$$

だから，$\alpha \neq \beta$ ならば $\langle u_\alpha | u_\beta \rangle = 0$ である[*14]．また，補題 5.3 より

$$\begin{aligned} \langle u_{\alpha+1} | u_{\alpha+1} \rangle &= \langle A_+u_\alpha | A_+u_\alpha \rangle \\ &= \langle A_-A_+u_\alpha | u_\alpha \rangle \\ &= \langle (H + I)u_\alpha | u_\alpha \rangle \\ &= (2\alpha + 2)\langle u_\alpha | u_\alpha \rangle \end{aligned}$$

だから，$\langle u_0 | u_0 \rangle = \|u_0\|^2 = 1$ と合わせて $\langle u_\alpha | u_\alpha \rangle = 2^\alpha \alpha!$ を得る．これで，主張が示された． □

補題 5.5 の関数列 $(u_\alpha)_{\alpha \in \mathbb{N}}$ を実際に構成しよう．まず，u_0 が満たすべき条件 $A_-u_0 = 0$ は，

$$\frac{d}{dx}u_0(x) + xu_0(x) = 0$$

[*14] 一般に，対称作用素の異なる固有値に対する固有ベクトルは直交する．

という微分方程式である．これは変数分離法で解くことができ，その（滑らかな関数の範囲での）解は

$$u_0(x) = Ce^{-x^2/2} \qquad (\text{定数 } C \in \mathbb{C})$$

となる．これは $\mathscr{S}(\mathbb{R})$ の元であり，$C = 1/\pi^{1/4}$ とすれば $\|u_0\| = 1$ となる．

この $u_0(x) = (1/\pi^{1/4})e^{-x^2/2}$ から定まる $u_\alpha = A_+^\alpha u_0$ は，多項式 H_α を用いて

$$u_\alpha(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}} H_\alpha(x) e^{-x^2/2}$$

と書くことができ，

$$\begin{aligned} u_{\alpha+1}(x) &= A_+ u_\alpha(x) \\ &= \frac{1}{\pi^{1/4}} \left(-\frac{d}{dx} + x \right) (H_\alpha(x) e^{-x^2/2}) \\ &= \frac{1}{\pi^{1/4}} \left(-\frac{d}{dx} H_\alpha(x) + 2x H_\alpha(x) \right) e^{-x^2/2} \end{aligned}$$

だから，多項式 H_α は漸化式

$$H_0(x) = 1, \qquad H_{\alpha+1}(x) = -\frac{d}{dx} H_\alpha(x) + 2x H_\alpha(x)$$

によって定まる．そこで，次のように定義する．

定義 5.6（Hermite 多項式，Hermite 関数） Hermite 多項式 H_α（$\alpha \in \mathbb{N}$）を漸化式

$$H_0(x) = 1, \qquad H_{\alpha+1}(x) = -\frac{d}{dx} H_\alpha(x) + 2x H_\alpha(x)$$

によって定め，Hermite 関数 h_α（$\alpha \in \mathbb{N}$）を

$$h_\alpha(x) = \frac{1}{\sqrt{2^\alpha \alpha!}\, \pi^{1/4}} H_\alpha(x) e^{-x^2/2}$$

と定める．

すなわち，Hermite 関数とは，上記の u_α を正規化したもの

$$h_\alpha = \frac{u_\alpha}{\|u_\alpha\|} = \frac{1}{\sqrt{2^\alpha \alpha!}} u_\alpha$$

である．

例 5.7 $\alpha = 5$ までの Hermite 多項式・Hermite 関数を具体的に書くと，

$$\begin{aligned} H_0(x) &= 1, & h_0(x) &= \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-x^2/2}, \\ H_1(x) &= 2x, & h_1(x) &= \frac{\sqrt{2}}{\pi^{1/4}} x e^{-x^2/2}, \\ H_2(x) &= 4x^2 - 2, & h_2(x) &= \frac{1}{\sqrt{2}\, \pi^{1/4}} (2x^2 - 1) e^{-x^2/2}, \\ H_3(x) &= 8x^3 - 12, & h_3(x) &= \frac{1}{\sqrt{3}\, \pi^{1/4}} (2x^3 - 3) e^{-x^2/2}, \\ H_4(x) &= 16x^4 - 48x^2 + 12, & h_4(x) &= \frac{1}{2\sqrt{6}\, \pi^{1/4}} (4x^4 - 12x^2 + 3) e^{-x^2/2}, \\ H_5(x) &= 32x^4 - 160x^3 + 120x, & h_5(x) &= \frac{1}{2\sqrt{15}\, \pi^{1/4}} (4x^4 - 20x^3 + 15x) e^{-x^2/2} \end{aligned}$$

となる．一般に，H_α はちょうど α 次の多項式である．

定理 5.8 Hermite 関数 h_α は $H = D^2 + X^2$ の固有値 $2\alpha + 1$ の固有関数であり，その全体 $\{h_\alpha\}_{\alpha\in\mathbb{N}}$ は $L^2(\mathbb{R})$ の正規直交基底をなす．

証明 Hermite 関数 h_α が H の固有値 $2\alpha+1$ の固有関数であること，および Hermite 関数の全体が正規直交系であることは，補題 5.5 からわかる．あとは，Hermite 関数の全体が張る部分線型空間の閉包 $V = \overline{\mathrm{span}\{h_\alpha\}_{\alpha\in\mathbb{N}}}$ が $L^2(\mathbb{R})$ 全体であることを示せばよい．

まず，任意の $\lambda \in \mathbb{C}$ に対して，関数 $e^{\lambda x}e^{-x^2/2}$ が V に属することを示す．$e^{\lambda x}$ の Taylor 展開に $e^{-x^2/2}$ を掛けたものを考えると，剰余部分の L^2 ノルムは

$$\int_{\mathbb{R}} \left| \sum_{m=M}^{\infty} \frac{(\lambda x)^m}{m!} e^{-x^2/2} \right|^2 dx \tag{$*$}$$

である．この被積分関数は $M \to \infty$ のとき 0 に各点収束し，m によらず

$$\left| \sum_{m=M}^{\infty} \frac{\lambda^m x^m}{m!} e^{-x^2/2} \right|^2 \leq \left(\sum_{m=0}^{\infty} \frac{|\lambda x|^m}{m!} e^{-x^2/2} \right)^2 = e^{2|\lambda x|}e^{-x^2}$$

と評価できる．したがって，Lebesgue の収束定理より，($*$) は $M \to \infty$ のとき 0 に収束する．すなわち，L^2 収束の意味で

$$\lim_{M\to\infty} \sum_{m=0}^{M-1} \frac{(\lambda x)^m}{m!} e^{-x^2/2} = e^{\lambda x}e^{-x^2/2}$$

が成り立つ．$e^{-x^2/2}$ に多項式を掛けて得られる関数はすべて V に属するから，関数 $e^{\lambda x}e^{-x^2/2}$ も V に属する．

u を V の直交補空間の元とすると，前段の結果より，任意の $\xi \in \mathbb{R}$ に対して

$$0 = \langle e^{ix\xi}e^{-x^2} | u \rangle = \int_{\mathbb{R}} u(x) e^{-x^2} e^{-ix\xi}\, dx$$

である．すなわち，関数 $u(x)e^{-x^2/2}$ の Fourier 変換は 0 である．Fourier 変換の単射性と合わせて，ほとんどすべての $x \in \mathbb{R}$ に対して $u(x)e^{-x^2/2} = 0$ であり，したがって $u(x) = 0$ であることを得る．よって，V の直交補空間は 0 だから，V は $L^2(\mathbb{R})$ 全体である． □

これで，H の固有関数からなる $L^2(\mathbb{R})$ の正規直交基底が得られた．スカラー倍を除いてこれら以外の固有関数が存在しないこと，および H の自己随伴性を示すため，補題を 2 つ用意する．

補題 5.9 $u \in \mathscr{S}(\mathbb{R})$ に対して，

$$\|D^2u\|^2 + \|X^2u\|^2 \leq \|Hu\|^2 + 2\|u\|^2$$

である．

証明 $H = D^2 + X^2$ より

$$\|Hu\|^2 = \|D^2u\|^2 + \|X^2u\|^2 + 2\,\mathrm{Re}\langle D^2u | X^2u \rangle$$

だから，$\mathrm{Re}\langle D^2u|X^2u\rangle \geq -\|u\|^2$ を示せばよい．$\mathscr{S}(\mathbb{R})$ 上で $[D,X]=(1/i)I$，$[D,X^2]=(2/i)X$ であることに注意すると，

$$\begin{aligned}
\mathrm{Re}\langle D^2u|X^2u\rangle &= \mathrm{Re}\langle Du|DX^2u\rangle \\
&= \mathrm{Re}\left(\frac{2}{i}\langle Du|Xu\rangle + \langle Du|X^2Du\rangle\right) \\
&= \mathrm{Re}\left(\frac{2}{i}\langle Du|Xu\rangle + \|XDu\|^2\right) \\
&\geq \mathrm{Re}\left(\frac{2}{i}\langle Du|Xu\rangle\right) \\
&= 2\,\mathrm{Im}\langle Du|Xu\rangle \\
&= \frac{1}{i}(\langle Du|Xu\rangle - \langle Xu|Du\rangle) \\
&= \frac{1}{i}\langle u|(DX-XD)u\rangle \\
&= -\|u\|^2
\end{aligned}$$

を得る．これで，主張が示された． □

Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ から $\mathcal{K}$ への**閉作用素**（closed operator）とは，$\mathcal{H}$ から $\mathcal{K}$ への線型作用素 A であって，そのグラフ

$$\mathrm{gr}(A) = \{(u, Au) \mid u \in \mathrm{Dom}\,A\}$$

が $\mathcal{H}\times\mathcal{K}$ において閉であるものをいう．この条件は，$\mathrm{Dom}\,A$ 上の点列 $(u_m)_{m\in\mathbb{N}}$ と $u\in\mathcal{H}$，$v\in\mathcal{K}$ に対して

$$u_m \to u \text{ かつ } Au_m \to v \quad \text{ならば} \quad u \in \mathrm{Dom}\,A \text{ かつ } Au = v$$

であることと同値である．

補題 5.10　可測関数 $F\colon \mathbb{R}\to\mathbb{C}$ による一般化された微分作用素 $F(D)$ と掛け算作用素 $F(X)$ は，$L^2(\mathbb{R})$ 上の閉作用素である．

証明　$F(D)$ と $F(X)$ は Fourier 変換を通して対応するから，$F(X)$ が $L^2(\mathbb{R})$ 上の閉作用素であることだけ示せば十分である．より一般に，(X,μ) を測度空間とするとき，可測関数 $F\colon X\to\mathbb{C}$ による掛け算作用素 M_F が $L^2(X,\mu)$ 上の閉作用素であることを示す．

$\mathrm{Dom}\,M_F$ 上の点列 $(u_m)_{m\in\mathbb{N}}$ と u，$v\in L^2(X,\mu)$ が $u_m\to u$ かつ $M_Fu_m\to v$ を満たすとする．すると，$(u_m)_{m\in\mathbb{N}}$ の部分列 $(u_{m_k})_{k\in\mathbb{N}}$ を，$(u_{m_k})_{k\in\mathbb{N}}$, $(M_Fu_{m_k})_{k\in\mathbb{N}}$ がそれぞれ u, v に概収束するようにとれる（Lebesgue 積分の一般論）．$(u_{m_k})_{k\in\mathbb{N}}$ が u に概収束することから $(M_Fu_{m_k})_{k\in\mathbb{N}}$ は Fu にも概収束するから，ほとんどいたるところで $v=Fu$ である．したがって，$u\in\mathrm{Dom}\,M_F$ かつ $M_Fu=v$ である．よって，M_F は $L^2(X,\mu)$ 上の閉作用素である． □

定理 5.11　$H=D^2+X^2$ は，

$$\begin{aligned}
\mathrm{Dom}\,\widetilde{H} &= \left\{\sum_{\alpha=0}^{\infty} a_\alpha h_\alpha \,\middle|\, (a_\alpha)_{\alpha\in\mathbb{N}},\ ((2\alpha+1)a_\alpha)_{\alpha\in\mathbb{N}} \in l^2(\mathbb{N})\right\}, \\
\widetilde{H}\left(\sum_{\alpha\in\mathbb{N}} a_\alpha h_\alpha\right) &= \sum_{\alpha=0}^{\infty}(2\alpha+1)a_\alpha h_\alpha
\end{aligned}$$

によって定まる $L^2(\mathbb{N})$ 上の自己随伴作用素 $\widetilde{H}$ に等しい．

証明　$\widetilde{H}$ は，正規直交基底 $\{h_\alpha\}_{\alpha\in\mathbb{N}}$ が定めるユニタリ作用素 $L^2(\mathbb{R}^n) \to l^2(\mathbb{N})$ を通して（定理 5.8，定理 2.11），実数値関数 $\alpha \mapsto 2\alpha+1$ による掛け算作用素に対応するから，自己随伴である（例 3.10）．

$H = \widetilde{H}$ を示す．H は対称で $\widetilde{H}$ は自己随伴だから，自己随伴作用素の極大性より（3.2 節），$\widetilde{H} \subseteq H$ を示せば十分である．$u = \sum_{\alpha=0}^{\infty} a_\alpha h_\alpha \in \operatorname{Dom} \widetilde{H}$ とすると，

$$\widetilde{H}u = \sum_{\alpha=0}^{\infty} (2\alpha+1) a_\alpha h_\alpha$$

である．部分和 $u_m = \sum_{\alpha=0}^{m-1} a_\alpha h_\alpha$ を考えると，$m \to \infty$ のとき

$$u_m \to u, \qquad \widetilde{H}u_m = \sum_{\alpha=0}^{m-1} (2\alpha+1) a_\alpha h_\alpha \to \widetilde{H}u$$

である．特に，$L^2(\mathbb{R})$ 上の点列 $(u_m)_{m\in\mathbb{N}}$, $(Hu_m)_{m\in\mathbb{N}}$ は Cauchy 列である．さらに，補題 5.9 より

$$\|D^2(u_m - u_{m'})\|^2 + \|X^2(u_m - u_{m'})\|^2 \le \|H(u_m - u_{m'})\|^2 + \|u_m - u_{m'}\|^2$$

だから，$(D^2u_m)_{m\in\mathbb{N}}$, $(X^2u_m)_{m\in\mathbb{N}}$ も Cauchy 列であり，したがって収束する．D^2, X^2 は閉作用素だから（補題 5.10），これより

$$u \in \operatorname{Dom} D^2 \quad かつ \quad D^2u = \lim_{m\to\infty} D^2u_m,$$
$$u \in \operatorname{Dom} X^2 \quad かつ \quad X^2u = \lim_{m\to\infty} X^2u_m$$

である．よって，$u \in \operatorname{Dom} D^2 \cap \operatorname{Dom} X^2 = \operatorname{Dom} H$ であり，

$$Hu = D^2u + X^2u = \lim_{m\to\infty}(D^2u_m + X^2u_m) = \lim_{m\to\infty} \widetilde{H}u_m = \widetilde{H}u$$

が成り立つ（第三の等号は，u_m が Hermite 関数の有限線型結合であることに注意して定理 5.8 を用いれば得られる）．これで，主張が示された．□

系 5.12　$H = D^2 + X^2$ の固有値は $\alpha \in \mathbb{N}$ に対する $2\alpha+1$ の全体であり，固有値 $2\alpha+1$ の固有空間は Hermite 関数 h_α のスカラー倍の全体 $\mathbb{C}h_\alpha$ である．□

系 5.12 にスケール変換を施せば，1 次元量子調和振動子のハミルトニアン

$$H = \frac{\hbar^2}{2m}D^2 + \frac{m\omega^2}{2}X^2$$

の固有値は $\alpha \in \mathbb{N}$ に対する $(\alpha+1/2)\hbar\omega$ の全体であり，固有値 $(\alpha+1/2)\hbar\omega$ の固有空間は $\mathbb{C}h'_\alpha$ であるとわかる．ここで，

$$\begin{aligned} h'_\alpha(x) &= \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/4} h_\alpha\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2^\alpha \alpha!}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} H_\alpha\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x\right) e^{-m\omega x^2/2\hbar} \end{aligned}$$

である（$\{h'_\alpha\}_{\alpha\in\mathbb{N}}$ も $L^2(\mathbb{R})$ の正規直交基底である）．これは，

1 次元量子調和振動子の定常状態は，$\alpha \in \mathbb{N}$ に対する h'_α（エネルギー $(\alpha+1/2)\hbar\omega$）の全体である

ことを意味する．

6　正準交換関係

6.1　正準交換関係の表現

5 節と同様に，交換子積の記号 $[A,B]=AB-BA$ を用いる．

定義 6.1（正準交換関係の表現）　n-**正準交換関係の表現**とは，Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ とその上の自己随伴作用素 P_j, Q_j（$1\leq j\leq n$）の組 $(\mathcal{H};P_1,\ldots,P_n;Q_1,\ldots,Q_n)$ であって，ある稠密部分線型空間 $\mathcal{D}\subseteq\mathcal{H}$ が存在して，次の 2 条件を満たすものをいう．

(i) 任意の $1\leq j\leq n$ に対して，$\mathcal{D}\subseteq\operatorname{Dom}P_j$ かつ $P_j(\mathcal{D})\subseteq\mathcal{D}$ であり，$\mathcal{D}\subseteq\operatorname{Dom}Q_j$ かつ $Q_j(\mathcal{D})\subseteq\mathcal{D}$ である．

(ii) 任意の j, $k\in\{1,\ldots,n\}$ に対して，$\mathcal{D}$ 上で

$$[P_j,P_k]=[Q_j,Q_k]=0,\qquad [P_j,Q_k]=\delta_{jk}\frac{\hbar}{i}I$$

である．

n-正準交換関係の表現 $(\mathcal{H};P_1,\ldots,P_n;Q_1,\ldots,Q_n)$ と $(\mathcal{H}';P'_1,\ldots,P'_n;Q'_1,\ldots,Q'_n)$ が**同値**（equivalent）であるとは，ユニタリ作用素 $U\colon\mathcal{H}\to\mathcal{H}'$ であって $UP_jU^{-1}=P'_j$, $UQ_jU^{-1}=Q'_j$（$1\leq j\leq n$）を満たすものが存在することをいう．

例 6.2（Schrödinger の波動力学）　Hilbert 空間 $\mathcal{H}$，その稠密部分線型空間 $\mathcal{D}$，および自己随伴作用素 P_j, Q_j を

$$\mathcal{H}=L^2(\mathbb{R}^n),\qquad \mathcal{D}=\mathscr{S}(\mathbb{R}^n),\qquad P_j=\hbar D_j,\qquad Q_j=X_j$$

と定めると，これらは定義 6.1 の 2 条件を満たす．よって，$(L^2(\mathbb{R}^n);\hbar D_1,\ldots,\hbar D_n;X_1,\ldots,X_n)$ は n-正準交換関係の表現である．

例 6.3（Heisenberg–Born–Jordan の行列力学）　簡単のため，$n=1$ とする．Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ とその稠密部分線型空間 $\mathcal{D}$ を

$$\begin{aligned}&\mathcal{H}=l^2(\mathbb{N}),\\&\mathcal{D}=\mathbb{C}^{\oplus\mathbb{N}}=\{(a_n)_{n\in\mathbb{N}}\in l^2(\mathbb{N})\mid \text{有限個の } n \text{ を除いて } a_n=0\}\end{aligned}$$

と定め，$\mathcal{H}=l^2(\mathbb{N})$ 上の線型作用素 P, Q を行列表示によって

$$P=\frac{\hbar}{\sqrt{2}\,i}\begin{pmatrix}0&1&&&\\-1&0&\sqrt{2}&&\\&-\sqrt{2}&0&\sqrt{3}&\\&&-\sqrt{3}&0&\ddots\\&&&\ddots&\ddots\end{pmatrix},\qquad Q=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&1&&&\\1&0&\sqrt{2}&&\\&\sqrt{2}&0&\sqrt{3}&\\&&\sqrt{3}&0&\ddots\\&&&\ddots&\ddots\end{pmatrix}$$

と定めると（定義域は，行列を施した結果がふたたび $l^2(\mathbb{N})$ に属する元全体とする），これらは定義 6.1 の 2 条件を満たすことがわかる（P, Q の自己随伴性は明らかではないが，ここでは証明は述べない）．よって，$(l^2(\mathbb{R});P;Q)$ は 1-正準交換関係の表現である．

n が一般の場合の形および必要な自己随伴性の証明については，新井・江沢 [9, II 巻, 例 3.4] を参照のこと．

Schrödinger の波動力学と Heisenberg–Born–Jordan の行列力学は，見た目はまったく異なるにもかかわらず，物理的には同一の結果を与える．その背景には，次の命題がある．

命題 6.4 「Schrödinger の波動力学」$(L^2(\mathbb{R}); \hbar D; X)$ と「Heisenberg–Born–Jordan の行列力学」$(l^2(\mathbb{R}); P; Q)$ とは，1-正準交換関係の表現として同値である．

証明 $L^2(\mathbb{R})$ の正規直交基底 $\{h_\alpha\}_{\alpha\in\mathbb{N}}$ が定めるユニタリ作用素 $U\colon L^2(\mathbb{R}) \to l^2(\mathbb{N})$（定理 5.8，定理 2.11）を通して $\hbar D$, X がそれぞれ P, Q と対応すること，すなわち $\hbar D = U^{-1}PU$ かつ $X = U^{-1}QU$ であることを示す．どちらも同様だから，後者のみ示す．

5 節の記号を用いる．Hermite 関数は，$u_0(x) = (1/\pi^{1/4})e^{-x^2/2}$ から定まる $u_\alpha = A_+^\alpha u_0$ を正規化したもの

$$h_\alpha = \frac{u_\alpha}{\|u_\alpha\|} = \frac{1}{\sqrt{2^\alpha \alpha!}} u_\alpha$$

だった．$A_+u_\alpha = u_{\alpha+1}$ かつ $A_-u_\alpha = A_-A_+u_{\alpha-1} = (H+I)u_{\alpha-1} = 2\alpha u_{\alpha-1}$（補題 5.3，補題 5.5）だから

$$Xu_\alpha = \frac{1}{2}(A_+ + A_-)u_\alpha = \frac{1}{2}u_{\alpha+1} + \alpha u_{\alpha-1}$$

であり，したがって

$$Xh_\alpha = \sqrt{\frac{\alpha+1}{2}}\, u_{\alpha+1} + \sqrt{\frac{\alpha}{2}}\, u_{\alpha-1} = U^{-1}QUh_\alpha$$

である（ただし，$\alpha = 0$ のときは第 2 項は無視する）．よって，X と $U^{-1}QU$ は $\operatorname{span}\{h_\alpha\}_{\alpha\in\mathbb{N}}$ 上で一致する．一方で，容易にわかるように Q の $\mathbb{C}^{\oplus\mathbb{N}}$ への制限のグラフは Q のグラフにおいて稠密だから，$U^{-1}QU$ の $U^{-1}(\mathbb{C}^{\oplus\mathbb{N}}) = \operatorname{span}\{h_\alpha\}_{\alpha\in\mathbb{N}}$ への制限のグラフは $U^{-1}QU$ のグラフにおいて稠密である．これらと X が閉作用素であること（補題 5.10）より，$U^{-1}QU \subseteq X$ である．X と $U^{-1}QU$ はともに自己随伴だから，自己随伴作用素の極大性より（3.2 節），$X = U^{-1}QU$ を得る． □

6.2 Weyl 型の正準交換関係の表現

前小節で述べた正準交換関係の表現の定義には非有界作用素が直接現れており，数学的には扱いづらい．そこで，Stone の定理（定理 4.2）を用いて自己随伴作用素の代わりに一径数ユニタリ群を使って正準交換関係を表すことを考えよう．

自己随伴作用素 $P_1, \ldots, P_n, Q_1, \ldots, Q_n$ の正準交換関係

$$[P_j, P_k] = [Q_j, Q_k] = 0, \qquad [P_j, Q_k] = \delta_{jk}\frac{\hbar}{i}I$$

に対応する $e^{itP_1}, \ldots, e^{itP_n}, e^{itQ_1}, \ldots, e^{itQ_n}$（$t \in \mathbb{R}$）の関係式を求めるために，いったん厳密性を気にせずに考えてみる．まず，行列の指数関数からの類推で，関係式 $[P_j, P_k] = [Q_j, Q_k] = 0$ は関係式

$$e^{isP_j}e^{itP_k} = e^{itP_k}e^{isP_j}, \qquad e^{isQ_j}e^{itQ_k} = e^{itQ_k}e^{isQ_j}$$

に対応していると考えられる．次に，関係式 $[P_j, Q_k] = \delta_{jk}(\hbar/i)I$ について考える．定義域の問題を気にしなければ，ここから $[P_j^m, Q_k] = \delta_{jk}(m\hbar/i)P_j^{m-1}$（$m \geq 1$）が得られ，したがって

$$[e^{isP_k}, Q_k] = \delta_{jk}\hbar s e^{isP_j}, \quad \text{すなわち } e^{isP_j}Q_k = (Q_k + \delta_{jk}\hbar sI)e^{isP_j}$$

であると考えられる．ふたたび定義域の問題を気にしなければ，ここから $e^{isP_j}Q_k^m = (Q_k + \delta_{jk}\hbar sI)^m e^{isP_j}$（$m \geq 0$）が得られ，したがって

$$e^{isP_j}e^{itQ_k} = e^{\delta_{jk}i\hbar st}e^{itQ_k}e^{isP_j}$$

であると考えられる．

以上の議論を踏まえて，次のように定義する．

定義 6.5（Weyl 型の正準交換関係の表現） **Weyl 型の n-正準交換関係の表現**とは，Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ とその上の自己随伴作用素 P_j, Q_j（$1 \leq j \leq n$）の組 $(\mathcal{H}; P_1, \dots, P_n; Q_1, \dots, Q_n)$ であって，任意の j, $k \in \{1, \dots, n\}$ と s, $t \in \mathbb{R}$ に対して

$$e^{isP_j}e^{itP_k} = e^{itP_k}e^{isP_j}, \qquad e^{isQ_j}e^{itQ_k} = e^{itQ_k}e^{isQ_j}, \qquad e^{isP_j}e^{itQ_k} = e^{\delta_{jk}i\hbar st}e^{itQ_k}e^{isP_j}$$

を満たすものをいう．

例 6.6 「Schrödinger の波動力学」$(L^2(\mathbb{R}^n); \hbar D_1, \dots, \hbar D_n; X_1, \dots, X_n)$ に対応する一径数ユニタリ群は

$$e^{it\hbar D_j}u(x) = u(x + \hbar t1_j), \qquad e^{itX_j}u(x) = e^{itx_j}u(x)$$

であり（例 4.4），これらは定義 6.5 の関係式を満たす．よって，「Schrödinger の波動力学」は Weyl 型の n-正準交換関係の表現である．また，これと同値な「Heisenberg–Born–Jordan の行列力学」も Weyl 型の n-正準交換関係の表現である．

Weyl 型の正準交換関係の表現については，次の「一意性定理」が成り立つ．

定理 6.7（Stone–von Neumann の定理 I） Weyl 型の n-正準交換関係の表現は，「Schrödinger の波動力学」のいくつか（無限個でもよい）の Hilbert 直和に同値である．

Stone–von Neumann の定理（定理 6.7）は，Heisenberg 群の表現に関する定理として述べることもできる．

定義 6.8（Heisenberg 群） **Heisenberg 群 $\mathbf{H}_n$** を，

$$\begin{aligned}\mathbf{H}_n &= \{(a, b, c) \mid a,\, b \in \mathbb{R}^n,\, c \in \mathbb{R}\}, \\ (a, b, c) \cdot (a', b', c') &= \left(a + a', b + b', c + c' + \frac{1}{2}(ab' - a'b)\right)\end{aligned}$$

と定める．[*15]

上の演算によって $\mathbf{H}_n$ は確かに群となり，単位元は $(0, 0, 0)$ で，逆元は $(a, b, c)^{-1} = (-a, -b, -c)$ で与えられることがわかる．さらに，$\mathbf{H}_n$ は Euclid 位相に関して位相群をなす．

群の表現に関する定義を確認しておく．Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ に対して，$\mathcal{H}$ 上のユニタリ作用素全体のなす群を $\mathscr{U}(\mathcal{H})$ と書く．G を群とするとき，Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ と群準同型 $\pi\colon G \to \mathscr{U}(\mathcal{H})$ との組 $(\pi, \mathcal{H})$ を，G の**ユニタリ表現**（unitary representation）という．さらに，G が位相群であるとき，π が G の位相と $\mathscr{U}(\mathcal{H})$ の $\mathcal{H}$ 上各点収束位相（強作用素位相）に関して連続ならば，π は**連続**（continuous）であるという．

[*15] 演算を $(a, b, c) \cdot (a', b', c') = (a + a', b + b', c + c' + ab')$ としても群となり，これを**偏極付き Heisenberg 群**（polarized Heisenberg group）といい，$\mathbf{H}_n^{\mathrm{pol}}$ と書く（名称と記号は Folland [1, p. 19] に倣った）．写像 $(a, b, c) \mapsto (a, b, c + ab/2)$ は $\mathbf{H}_n$ から $\mathbf{H}_n^{\mathrm{pol}}$ への群同型である．$\mathbf{H}_n^{\mathrm{pol}}$ の方を Heisenberg 群ということもある．

さて，Weyl 型の n-正準交換関係の表現 $(\mathcal{H}; P_1, \ldots, P_n; Q_1, \ldots, Q_n)$ から Heisenberg 群 $\mathbf{H}_n$ のユニタリ連続表現を構成しよう．$\mathbb{R}^n$ の元 $a = (a_1, \ldots, a_n)$，$b = (b_1, \ldots, b_n)$ に対して

$$e^{iaP} = e^{ia_1P_1} \cdots e^{ia_nP_n}, \qquad e^{ibQ} = e^{ib_1Q_1} \cdots e^{ib_nQ_n}$$

と定めると，Weyl 型の正準交換関係の表現の定義から

$$e^{iaP}e^{ia'P} = e^{i(a+a')P}, \qquad e^{ibQ}e^{ib'Q} = e^{i(b+b')Q}, \qquad e^{iaP}e^{ibQ} = e^{i\hbar ab}e^{ibQ}e^{iaP}$$

を得る（$ab = a_1b_1 + \cdots + a_nb_n$ である）．そこで，

$$\pi(a, b, c) = e^{i\hbar(c+ab/2)}e^{ibQ}e^{iaP} \qquad ((a, b, c) \in \mathbf{H}_n)$$

と定めると，(a, b, c), $(a', b', c') \in \mathbf{H}_n$ に対して

$$\begin{aligned}
\pi(a, b, c)\pi(a', b', c') &= e^{i\hbar(c+c'+ab/2+a'b'/2)}e^{ibQ}e^{iaP}e^{ib'Q}e^{ia'P} \\
&= e^{i\hbar(c+c'+ab/2+a'b'/2+ab')}e^{ibQ}e^{ib'Q}e^{iaP}e^{ia'P} \\
&= e^{i\hbar(c+c'+(ab'-a'b)/2+(a+a')(b+b')/2)}e^{i(b+b')Q}e^{i(a+a')P} \\
&= \pi\left(a + a', b + b', c + c' + \frac{1}{2}(ab' - a'b)\right)
\end{aligned}$$

だから，$(\pi, \mathcal{H})$ は $\mathbf{H}_n$ のユニタリ表現である．さらに，$\{e^{itP_j}\}_{t\in\mathbb{R}}$, $\{e^{itQ_j}\}_{t\in\mathbb{R}}$ の強連続性と，有界線型作用素の合成 $(A, B) \mapsto AB$ がノルム有界集合上では強作用素位相に関して連続であることから，このユニタリ表現 $(\pi, \mathcal{H})$ は連続である．よって，$(\pi, \mathcal{H})$ は $\mathbf{H}_n$ のユニタリ連続表現である．特に：

定義 6.9（Schrödinger 表現） Schrödinger の波動力学による Weyl 型の n-正準交換関係の表現

$$(L^2(\mathbb{R}^n); \hbar D_1, \ldots, \hbar D_n; X_1, \ldots, X_n)$$

に対応する $\mathbf{H}_n$ のユニタリ連続表現を，**Schrödinger 表現**といい，$\rho_\hbar$ と書く．明示的に書けば，$(a, b, c) = (a_1, \ldots, a_n, b_1, \ldots, b_n, c) \in \mathbf{H}_n$ に対して

$$\begin{aligned}
\rho_\hbar(a, b, c)f(x) &= e^{i\hbar(c+ab/2)}e^{ibX}e^{ia\hbar D}f(x) \\
&= e^{i\hbar(c+ab/2)}e^{ibx}f(x + \hbar a)
\end{aligned}$$

である．

前段の対応の逆を考えよう．$(\pi, \mathcal{H})$ を Heisenberg 群 $\mathbf{H}_n$ のユニタリ連続表現であって

$$\pi(0, 0, c) = e^{i\hbar c} \qquad (c \in \mathbb{R}) \tag{$*$}$$

を満たすものとする．すると，任意の j, $k \in \{1, \ldots, n\}$ と s, $t \in \mathbb{R}$ に対して

$$\begin{aligned}
&\pi(s1_j, 0, 0)\pi(t1_k, 0, 0) = \pi(s1_j + t1_k, 0, 0) = \pi(t1_k, 0, 0)\pi(s1_j, 0, 0), \\
&\pi(0, s1_j, 0)\pi(0, t1_k, 0) = \pi(0, s1_j + t1_k, 0) = \pi(0, t1_k, 0)\pi(0, s1_j, 0), \\
&\pi(s1_j, 0, 0)\pi(0, t1_k, 0) = \pi\left(s1_j, t1_k, \delta_{jk}\frac{1}{2}st\right) \\
&\qquad = \pi(0, 0, \delta_{jk}st)\pi\left(s1_j, t1_k, -\delta_{jk}\frac{1}{2}st\right) = e^{\delta_{jk}i\hbar st}\pi(0, t1_k, 0)\pi(s1_j, 0, 0)
\end{aligned}$$

であり，$\{\pi(t1_j,0,0)\}_{t\in\mathbb{R}}$, $\{\pi(0,t1_j,0)\}_{t\in\mathbb{R}}$ は $\mathcal{H}$ 上の一径数ユニタリ群である．そこで，これらの一径数ユニタリ群に対応する自己随伴作用素をそれぞれ P_j, Q_j と置くと，$(\mathcal{H};P_1,\dots,P_n;Q_1,\dots,Q_n)$ は Weyl 型の n-正準交換関係の表現である．これは，明らかに前段の対応の逆を与える．

以上により，Weyl 型の n-正準交換関係の表現と，Heisenberg 群 $\mathbf{H}_n$ のユニタリ連続表現であって $(*)$ を満たすものとが一対一に対応する．よって，定理 6.7 は次のように述べ直せる．

定理 6.10（Stone–von Neumann の定理 II） Heisenberg 群 $\mathbf{H}_n$ のユニタリ連続表現 π が $(*)$ を満たすならば，π は Schrödinger 表現 $\rho_\hbar$ のいくつか（無限個でもよい）の Hilbert 直和に同値である．

Stone–von Neumann の定理（定理 6.10）の証明は，Folland [1, (1.50)]（von Neumann によるオリジナルの証明）や Folland [2, 6.50]（誘導表現に関する一般論を用いた証明）にある．新井 [10, 3.5 節] には，定理 6.7 の形で $n=1$ の場合の証明と一般の場合の証明の概略が書かれている．

注意 6.11 Stone–von Neumann の定理（定理 6.7）より「Weyl 型の正準交換関係の表現」（定義 6.5）は「正準交換関係の表現」（定義 6.1）だが，その逆は成り立たず，Weyl 型でない正準交換関係の表現であって物理的にも興味深いものが存在する．詳しくは，新井 [10, 注意 3.8, 3.6 節] を参照のこと．

参考文献

量子力学の数学的側面への入門書として，新井 [11] をおすすめする．この本は，Hilbert 空間の定義から始めて量子力学の数学的定式化を述べ，具体例として本稿で扱った調和振動子の他に水素原子も扱っている．また，Fourier 変換についても簡単にまとめている．自己随伴作用素のスペクトル分解定理は証明していないが，一冊目に読む本としてはその方がよいと思う．新井・江沢 [9] は，I 巻で Hilbert 空間の定義から始めてスペクトル分解定理を証明し，II 巻ではその内容を踏まえて量子力学の基礎が展開している．これの続編にあたる新井 [10] は，より進んだ量子力学のトピックを解説している．

他に量子力学の数学的側面について解説した本として，Hall [3] や Takhtajan [8] がある．Hall [3] は，前半でスペクトル分解定理を証明し，後半で量子力学のさまざまなトピックに触れている．気になった章から覗いてみるのもよいと思う．Takhtajan [8] では，スペクトル分解定理をはじめとする作用素論や表現論の基礎事項は既知として，数学的に高度な話題まで解説している．

スペクトル分解定理は，（筆者が知っている限りでは，）まず有界な場合に定理を示し，次に非有界な場合を有界な場合に帰着する，という流れで証明される．この前半部分である有界な場合のスペクトル分解定理の証明には，新井・江沢 [9, I 巻] のように極分解を用いる方法の他，Gelfand 理論（可換 Banach 代数の理論）を用いる方法もある．Rudin [7, Part III] では，Banach 代数の一般論を述べてから Gelfand 理論を解説し，その応用として有界な場合のスペクトル分解定理を証明し，自己随伴作用素，さらにはより一般に正規作用素に対するスペクトル分解定理まで証明している．

von Neumann [5] は，教科書として読むことはおすすめしないが，理論の創始にあたっての考察が書かれている点で重要な文献である．

量子力学の成立までの歴史的経緯については，湯川など [12] の第 I 部の「はじめに——量子論小史」を参考にした．その他，発表準備中に，物理学科の量子力学の講義ではどんなことを習うのかが気になり，立川 [13] を参照した．

[1] G. B. Folland, *Harmonic Analysis in Phase Space*, Princeton University Press, 1989.
[2] G. B. Folland, *A Course in Abstract Harmonic Analysis*, 2nd edition, CRC Press, 2015.
[3] B. C. Hall, *Quantum Theory for Mathematicians*, Springer, 2013.
[4] T. Kato, "Fundamental properties of Hamiltonian operators of Schrödinger type", *Transactions of the American Mathematical Society* **70**.2 (1951): 195–211.
[5] J. von Neumann（著），井上健，広重徹，恒藤敏彦（訳），『量子力学の数学的基礎』，新装版，みすず書房，2021.
[6] M. Reed, B. Simon, *Methods of Modern Mathematical Physics I–IV*, Academic Press, 1975–1980.
[7] W. Rudin, *Functional Analysis*, 2nd edition, McGrow-Hill, 1991.
[8] L. Takhtajan, *Quantum Mechanics for Mathematicians*, American Mathematical Society, 2008.
[9] 新井朝雄，江沢洋，『量子力学の数学的構造 I・II』，朝倉書店，1999.
[10] 新井朝雄，『量子現象の数理』，朝倉書店，2000.
[11] 新井朝雄，『ヒルベルト空間と量子力学』，共立出版，2014.
[12] 湯川秀樹，並木美喜雄，江沢洋，豊田利幸，高木修二，田中正，位田正邦，『量子力学 I・II』，新装版，岩波書店，2011.
[13] 立川裕二，「量子力学 II (2016)」，2016.
https://member.ipmu.jp/yuji.tachikawa/lectures/2016-qm2/
[14] Wikipedia「SI 基本単位の再定義 (2019 年)」.（2022 年 2 月 28 日アクセス）
https://ja.wikipedia.org/wiki/SI 基本単位の再定義_(2019 年)