シュレディンガー方程式と経路積分

廣島文生[*] [†]

目 次

[*]九州大学大学院数理学研究院
[†]e-mail: hiroshima@ math.kyushu-u.ac.jp

1　長さ・面積の概念の拡張

1.1　面積ってなに？

長さについて考えてみよう. $\mathbb{R}$ は実数全体をあらわし, 数直線と同一視する.

図 1: 数直線

集合 $A \subset \mathbb{R}$ の長さを測る物差しを m とする. m はどのような性質をもつだろうか? 考えてみよう. 区間 $[a, b]$ の長さは

$$m([a, b]) = b - a,$$

1点の長さは

$$m(\{a\}) = 0$$

となるだろう. また, 交わりのない集合 A, B, $A \cap B = \emptyset$, に対しては

$$m(A \cup B) = m(A) + m(B) \tag{1.1}$$

となるはずだ. (1.1) から有限個の点の集合 $A = \{a_1, ..., a_n\}$ の長さが $m(A) = 0$ となることもわかる. ここまではいい. さて, 有理数 $\mathbb{Q}$ の長さ $m(\mathbb{Q})$ はどうだろうか? 有理数 $\mathbb{Q}$ は $\mathbb{Q} = \{a_1, a_2, ...\}$ と番号付けできるので,

$$m(\mathbb{Q}) = \sum_{j=1}^{\infty} m(\{a\}) = 0$$

とすればいいのだろうか? しかし, $[0, 1]$ 区間内の無理数 $\mathcal{I} = ([0, 1] \setminus \mathbb{Q})$ の長さ $m(\mathcal{I})$ はどうだろうか? $\mathcal{I}$ はもはや番号付けできないから困ってしまう. 長さというものををまじめに考えるとすぐに破綻してしまう.

1901年, H. ルベーグは学位論文で長さ・面積の概念の拡張について論じた. 今日の測度論の始まりである. 当時, 曲線で囲まれた図形の面積を求める方法はニュートン以来のリーマン積分（高等学校で習う定積分のこと）によるものであった.
つまり関数 $y = f(x)$ と 2 直線 $x = 0$, $x = 1$ そして x 軸で囲まれた図形の面積 D は

$$\lim_{n \to \infty} \sum_{j=1}^{n} \frac{1}{n} f(x_j^*), \quad x_j \in [\frac{j-1}{n}, \frac{j}{n}]$$

の極限として

$$D = \int_0^1 f(x) dx \tag{1.2}$$

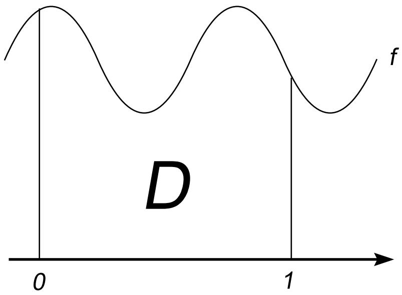

図 2: リーマン積分

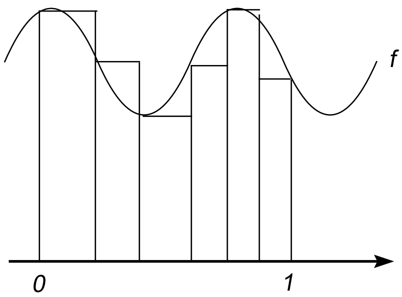

図 3: 区分求積法

を求めることに他ならなかった. これは 関数 f が区分的に連続であれば何も問題はない. しかし, 絵を描くのが難しいが至るところで非連続な関数に対しては, (1.2) の積分が定義できない. さらに困ったことに, 至るところ連続でない関数のほうが区分的に連続な関数よりもはるかに多い. リーマン積分が不可能な関数の例として

$$\xi(x) = \begin{cases} 1, & x \in \mathbb{Q} \\ 0, & x \notin \mathbb{Q} \end{cases}$$

がある. $\int_0^1 \xi(s)ds$ を定義に従って計算しようとしてもできない. 実際

$$\int_0^1 \xi(s)ds = \lim_{n\to\infty} \sum_{j=1}^n \frac{1}{n}\xi(x_j^*), \quad x_j^* \in [\frac{j-1}{n}, \frac{j}{n}]$$

は x_j^* の取り方によって値が異なる. これは困った. 連続関数ばかり見ている我々はこのことをいつも気をつけなければならない. というわけで, 面積・長さという概念を考え直す必要があった.

1.2 測度論

ここから, 測度論の話をはじめよう. 測度論では可測集合という概念を導入する. これは長さを測ることが可能な集合である. 測るためには測る物差しが必要であり, それを測度という. つまり測度論には可測集合の族 $\mathcal{F}$ と測度 μ が定義される. $\mathcal{F} \ni A$ に対してはいつでも μ でその長さ $\mu(A)$ が計測可能なのだ. 前の例では, $[a,b]$ や $\{a_1,...,a_n\}$ は可測集合に入りそうだ. $\mathbb{Q}$ や $\mathcal{I}$ は可測集合なのだろうか?

モヤモヤした書き方をしてしまったので, ここでもう少し厳密に説明してみよう. 集合の形によって可測集合か可測集合でないかを判断するのは止めて, 立派な数学者がやるように発想を転換する. Ω を集合とする. $\mathcal{F}$ を Ω の部分集合の族で次を満たすものとする.

1. $\Omega \in \mathcal{F}$
2. $A \in \mathcal{F} \Longrightarrow A^c \in \mathcal{F}$
3. $A_n \in \mathcal{F}, n = 1,2,3,... \Longrightarrow \bigcup_{n=1}^{\infty} A_n \in \mathcal{F}$

上の 1., 2., 3. をみたす集合族 $\mathcal{F}$ を σ 加法族とよび, $A \in \mathcal{F}$ を可測集合と呼ぶことにする. 例えば $\mathcal{F} = 2^{\Omega}$, $\mathcal{F} = \{\emptyset, \Omega\}$ など[1] が自明な σ 加法族である. $\mathcal{F}$ は代数的な関係式を満たす集合族として定義された. 集合の形については何も言っていない. 可測集合族を代数的な関係式から定義するという発想は実に奥が深いようにじられる. 次に物差し μ を定義しよう. $\mathcal{F}$ の元 A の長さを測る物差し μ とは $\mathbb{R}$ に値をとる $\mathcal{F}$ 上の関数 $\mu : \mathcal{F} \to \mathbb{R}$ で

$$\begin{aligned}
&\mu(\emptyset) = 0 \\
&\mu\left(\bigcup_{n=1}^{\infty} A_n\right) = \sum_{n=1}^{\infty} \mu(A_n), \quad A_j \cap A_j = \emptyset.
\end{aligned}$$

を満たすものと定める. 前者のように空集合の長さがゼロでなければ矛盾がおきそうなことは直感的にわかるだろう. 後者は $A \cap B = \emptyset$ であれば

$$\mu(A \cup B) = \mu(A) + \mu(B)$$

なのだから, $\mu(A)$ が A の長さだと思えば自然な仮定であろう. ここではそれが極限操作においても保たれることを仮定している. ただし, $\mu(\{a\}) = 0$ とは仮定していない.

[1] 2^{Ω} とは Ω の全ての部分集合の集合である.

これで物差し μ と μ で長さが測れる部分集合族 $\mathcal{F}$ が定まった．重要なことは長さ測定可能な集合族 $\mathcal{F}$ を特定したことである．これで 3 つ組み

$$(\Omega, \mathcal{F}, \mu) = (\text{集合}, \sigma\text{加法族}, \text{測度})$$

が出来た．これを測度空間と呼ぶ.

いよいよ $\int_\Omega f(x)\mu(dx)$ を定義しよう．とはいっても $f : \Omega \to \mathbb{R}$ はなんでも言い訳ではない．適当なことをやるとはじめに言ったようにどこかで破綻する．そのためには関数 f の可測性という概念を導入しなければならない．はじめに階段関数[2]

$$\chi(x) = \sum_{j=1}^{n} \alpha_j \chi_{A_j}(x), \quad A_j \in \mathcal{F}, \tag{1.3}$$

に対して

$$\int_\Omega \chi(x)\mu(dx) = \sum_{j=1}^{n} \alpha_j \mu(A_j)$$

と定義する．これはもちろん意味がある．なぜなら $A_j \in \mathcal{F}$ なので $\mu(A_j)$ はちゃんと定義されているからだ．繰り返すが μ は $\mathcal{F}$ の元の長さしか測れない．一般の実数値関数 f (ただし, $f \geq 0$) について考えてみよう．任意の $a \in \mathbb{R}$ に対して

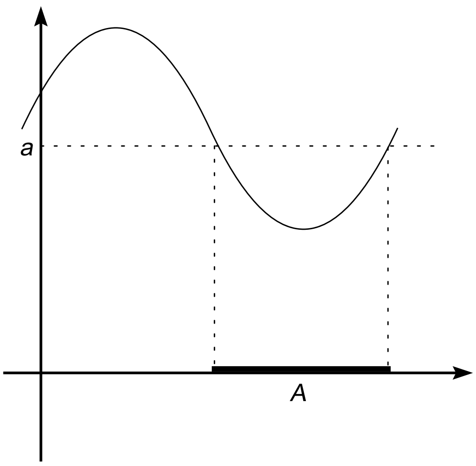

図 4: 可測関数, $A \in \mathcal{F}$

$$A = \{x \in \Omega | f(x) < a\} \in \mathcal{F} \tag{1.4}$$

[2] $\chi_A(x) = \begin{cases} 1, & x \in A, \\ 0, & x \notin A. \end{cases}$

となれば f は単調増加な (1.3) のような階段関数 f_n で各点で近似できることがわかる. 実際

$$f_n(x) = \begin{cases} \frac{k}{2^n}, & \frac{(k-1)n}{2^n} < f(x) \le \frac{kn}{2^n}, \quad k = 1, ..., 2^n, \\ n, & f(x) > n \end{cases}$$

とすればいい. (1.4) により f_n が (1.3) のような可測集合上の階段関数になっているこ

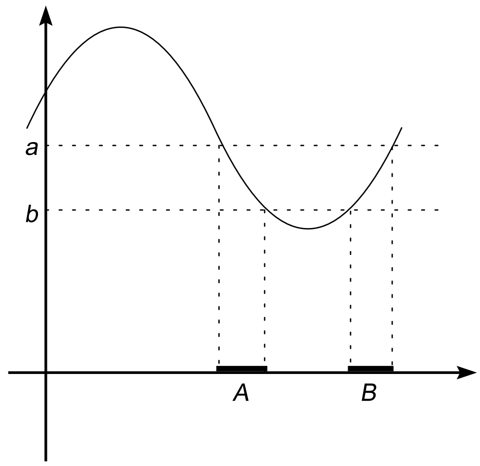

図 5: $a = kn/2^n$, $b = (k-1)n/2^n$, $A, B \in \mathcal{F}$

とがわかるだろう. (1.4) をみたす関数を可測関数という. 可測関数 f に対して

$$\int_\Omega f(x)\mu(dx) = \lim_{n\to\infty} \int_\Omega f_n(x)\mu(dx) \tag{1.5}$$

と定義する. もちろん, この値が無限大になることもある. 一般の $\mathbb{R}$ 値関数に対しては $f = f_+ - f_-$ $(f_\pm \ge 0)$ とおいて，$f_\pm$ が可測関数のとき

$$\int_\Omega f(x)\mu(dx) = \int_\Omega f_+(x)\mu(dx) - \int_\Omega f_-(x)\mu(dx) \tag{1.6}$$

で定義し μ 積分可能であるという. ここで $\int_\Omega f_\pm(x)\mu(dx)$ のどちらか一方は少なくとも有限であると仮定する. どちらも無限大のときは定義しない.

1.3 いろいろな測度

測度論の一般論を説明したので, 大切な測度の例をあげておこう.

(ルベーグ測度) $\mathbb{R}$ 上のルベーグ測度を定義しよう． $\Omega=\mathbb{R}$ として全ての半開区間 $[a,b)\subset\mathbb{R}$ を含む最小の σ 加法族を $\mathcal{B}$ とする[3]. $[a,b)\subset\mathbb{R}$ に対して,

$$\mu((a,b])=b-a$$

と定義する．これはもちろんリーマン積分 $\int_a^b dx$ と一致する．さて, この μ を $\mathcal{B}$ 上の測度に拡張する．実際 $\mathcal{B}$ 上の測度 $\tilde{\mu}$ で $\tilde{\mu}((a,b])=\mu((a,b])$ となるものがただひとつ存在することが示せる[4]．しかし $\tilde{\mu}$ はまだルベーグ測度ではない．というのは, このままでは $\tilde{\mu}(A)=0$, $A\in\mathcal{B}$, でも $N\subset A$ が $\mathcal{B}$ の元とは限らないのである．これを何とかしたい．つまり，長さがゼロの可測集合 A の任意の部分集合 N も可測集合であり, さらに $\mu(N)=0$ となってくれるのが自然であろう．この性質を備えた測度を完備な測度という．実は完備化という操作があり，σ 加法族 $\bar{\mathcal{B}}$ 上の完備な測度 $\bar{\mu}$ で,

$$\bar{\mathcal{B}}\supset\mathcal{B}\quad \text{かつ}\quad \mu(A)=\bar{\mu}(A),\quad A\in\mathcal{B}$$

というものが構成できる．

$$(\mathbb{R},\bar{\mathcal{B}},\bar{\mu})$$

がルベーグ測度の測度空間である．重要な注意をする．一点からなる集合 $\{a\}$ はルベーグ測度の可測集合である．なぜかというと

$$\{a\}=\left(\bigcup_{n=1}^\infty[a,a+\frac{1}{n})^c\right)^c$$

とかけるからだ．もちろん $\bar{\mu}(\{a\})=0$ である．

ルベーグ測度 $\bar{\mu}$ を構成したので, $\int f(x)\bar{\mu}(dx)$ と リーマン積分 $\int f(x)dx$ を比較してみよう．実はリーマン積分可能であればルベーグ積分可能であり，両者の積分の値は一致する．数学風にいえばルベーグ積分はリーマン積分の拡張になっているわけだ．そこで始めの問題に戻ろう．$\mathbb{Q}\cap[0,1]\in\bar{\mathcal{B}}$ であり, $\mu(\mathbb{Q}\cap[0,1])=0$ であることがわかる．なぜなら,

$$\mathbb{Q}\cap[0,1]=\{a_1,a_2,....\}$$

と番号をつけられるので, $\{a_j\}\in\bar{\mathcal{B}}$ より

$$\mathbb{Q}\cap[0,1]=\bigcup_{n=1}^\infty\{a_n\}\in\bar{\mathcal{B}}.$$

よって

$$\int_{[0,1]}\xi(x)\bar{\mu}(dx)=\mu(\mathbb{Q}\cap[0,1])=0$$

---

[3]全ての半開区間を含む σ 加法族の結びをとればよい.

[4]ホップの拡張定理.

となりルベーグ積分可能である．ルベーグ測度で考えれば, $y = \xi(x)$ と 2 直線 $x = 0$, $x = 1$ 及び x 軸で囲まれた図形の面積はゼロになる．これでスッキリした．以降 $\bar{\mu}(dx)$ のかわりに dx と簡単に書き表すことにする．

(ディラック測度) 長さの概念を考えたときに $m(\{a\}) = 0$ としてしまった．ユークリッド以来, 点は長さを持たなかったのだから仕方がない．しかし, そうともいえないようだ．

$$(\mathbb{R}, 2^{\mathbb{R}}, \delta_a)$$

という測度空間を考える．ここで δ_a とは

$$\delta_x(A) = \begin{cases} 1, & a \in A, \\ 0, & a \notin A. \end{cases}$$

であり, 測度になる．これをディラック測度と呼ぼう．δ_a で積分すれば

$$\int_R f(x)\delta_a(dx) = f(a)$$

となるから, 直観的には一点 a でのみ重さ（長さとはいい辛い）をもつような測度である．

(ガウス型測度) ルベーグ測度 dx に重みをつけた測度を考えることが出来る．ρ をルベーグ可測な非負関数とする．

$$\nu(A) = \int \chi_A(x)\rho(x)dx, \quad A \in \bar{\mathcal{B}},$$

と定めれば, やはりこれも測度になる．正確に書けば

$$(\mathbb{R}, \bar{\mathcal{B}}, \nu)$$

が測度空間になる．特に

$$\rho(x) = ae^{-b|x|^2}, \quad a, b > 0$$

のときガウス型測度という．これは数学のあらゆる分野に顔を出す非常に重要な測度である．詳細は述べないが, 実はディラック測度もガウス型測度の極限として表すことが出来る．

(ウイナー測度) 連続関数の空間 $W = C([0, \infty); \mathbb{R})$ 上にも測度が構成できる．3 章で述べるウイナー測度である．つまり

$$(W, \mathcal{B}_W, P_W^x)$$

という測度空間が構成できて, W 上の関数に対する積分

$$\int_W f(\omega)P_W^x(dw)$$

を考えることが出来る．これが今回の講演の主目的の一つである経路積分である．

1.4 ヒルベルト空間

ルベーグ測度を導入したので, 線形位相空間の一つであるヒルベルト空間の例をあげよう.

$$L^2(\mathbb{R}) = \left\{ f : \text{ルベーグ可測} \,\middle|\, \int_{\mathbb{R}} |f(x)|^2 dx < \infty \right\}$$

としよう. $L^2(\mathbb{R})$ は

$$(f, g) = \int_{\mathbb{R}} \bar{f}(x) g(x) dx \tag{1.7}$$

と定義すれば内積空間になる. さらにこの内積から次のノルム

$$\|f\| = \left(\int |f(x)|^2 dx \right)^{1/2}$$

が定義できる. 自明ではないが $L^2(\mathbb{R})$ は線形空間になる. つまり

$$f, g \in L^2(\mathbb{R}) \Longrightarrow af + bg \in L^2(\mathbb{R}). \tag{1.8}$$

さらに $\|\cdot\|$ は $L^2(\mathbb{R})$ 上に距離を定義する. $L^2(\mathbb{R})$ の世界で収束を考えるときはいつも $\|\cdot\|$ で考える. ユークリッド空間の距離と思ってもらっていい. つまり

$$\lim_{n\to\infty} f_n = f \Longleftrightarrow \lim_{n\to\infty} \|f_n - f\| = 0 \tag{1.9}$$

まとめると $L^2(\mathbb{R})$ は位相の備わった線形空間である.

さて $\{f_n\}$ が $\lim_{m,n\to\infty} \|f_n - f_m\| = 0$ となるときコーシー列という. 一般に位相空間の収束列はコーシー列であるが逆は成立しない. 逆が成立するとき完備であるという. 実は $L^2(\mathbb{R})$ は完備である. つまりコーシー列は収束列になっている. 正確に言えば $\lim_{m,n\to\infty} \|f_n - f_m\| = 0$ のとき $\lim_{n\to\infty} \|f_n - g\| = 0$ となる $g \in L^2(\mathbb{R})$ が唯一つ存在する. $L^2(\mathbb{R})$ の完備性は, ルベーグ積分で考えて成立する性質であり, リーマン積分で $L^2(\mathbb{R})$ を定義しても完備にはならない.

定義 1.1 完備な内積空間をヒルベルト空間という.

系 1.2 $L^2(\mathbb{R})$ はヒルベルト空間である.

ヒルベルト空間は次章で述べる量子力学を関数解析的に研究するための最も重要な概念の一つである. ヒルベルト空間なしには何も始まらないといっても過言ではない. 量子力学とヒルベルト空間について深い考察を行なったのは J. フォン・ノイマンである. 彼は 1932 年に「量子力学の数学的基礎」を出版し, 現代の作用素論の礎を築いた.

2　量子力学的世界像

2.1　シュレディンガー方程式ってなに?

この講演の本題であるシュレディンガー方程式について説明しよう．量子力学の歴史はたかだか 100 年である．数学の歴史に比べれば実に短く新しい学問である．しかし, 量子力学は人類が長い時間をかけて成熟させてきた自然科学の常識を翻すものであり, 相対論とともに 20 世紀の全ての学問領域に多大な影響を与えた．筆者が独断で選ぶ, 量子力学の創世にかかわるキーとなる出来事は

- 1900 年, M. プランク (42 歳) 登場, エネルギー量子仮説
- 1905 年, A. アインシュタイン (26 歳) 登場, 光量子仮説と光電効果
- 1913 年, N. ボーア (28 歳) 登場, 水素原子のスペクトルを解析
- 1924 年, L. ドブローイ (当時 32 歳) 登場, 物質波の理論
- 1925 年, W. ハイゼンベルグ (24 歳) 登場, 量子力学完成
- 1926 年, E. シュレディンガー (38 歳) 登場, シュレディンガー方程式の発見

である．敢えて年齢をつけたのは人間味をだすためだ．過去の偉人は必要以上に神格化され, 我々凡人とは DNA が異なる (ヒトじゃない) ようなイメージに塗り替えられやすい．それがヨーロッパの人間であればさらに強くなるような印象を受ける．

量子論を創始した偉人の中にも, 実際はいい人もいれば, 悪い人もいる．褒められて喜ぶ人や, 見栄っ張りもいる．他人に抜かされまいと一生懸命になって論文を書いて業績をあげた人もいる．実際はきわめて人間味にあふれている人が多い．さて, 余談はここまでにして量子論の歴史を簡単に紹介する．

1900 年 12 月 14 日ベルリンのドイツ物理学会例会でベルリン大学の M. プランク (当時 42 歳) がエネルギー量子という概念を導入した．これは従来の“ 連続的にエネルギーが変化する ”という常識を翻し, エネルギーにも最小単位 h が存在するという大仮説であった．この h は現在プランク定数といわれている．

その僅か 5 年後の 1905 年にはベルン特許局に勤めていた 26 才の若き A. アイシュタインが, M. プランクの仮説をもとに“ 光も粒子である ”という光量子仮説をたて 光電効果を説明した．この 1905 年は奇跡の年といわれている．A. アインシュタインが 3 月から 6 月にかけて立て続けに 3 編の論文, 光量子仮説，ブラウン運動の理論，特殊相対性理論を発表したからである．どの業績も 20 世紀の物理学の大きな礎となったものである．

1913年, 弱冠28歳のN. ボーアが水素原子のスペクトルを量子論で説明し, 1924年には, L. ドブローイ (当時32歳) は“ 電磁波が光子という粒子性を伴うように, 電子には逆に波動性が伴う ”という, 物質波の理論を提唱した. ここまでを前期量子論と呼ばれることがる.

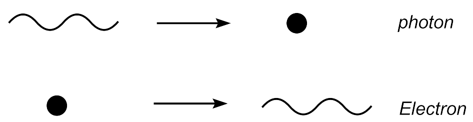

図 6: 光量子仮説と物質波

1925年, ゾンマーフェルトのミュンヘン大学からボーアのコペンハーゲンに半年滞在し, ミュンヘンに舞い戻った弱冠24歳のW. ハイゼンベルグが行列力学を創始し，量子力学を完成させた[5]. 彼は水素原子のエネルギー準位を無限次元行列を使って理論的に示したのである. ただ量子力学といい行列力学といい，古典論からかけ離れた理論に当時の人々は戸惑ったようである.

その翌年1926年に, チューリッヒ大学のE. シュレディンガー (当時38歳) は4編の論文を発表した. 彼は, 古典的な変分原理をL. ドブロイの物質波に適用して, ついに水素原子内の電子が満たすべき次の方程式に到達した.

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(x,t) + V(x)\psi(x,t) \tag{2.1}$$
$$\hbar = h/2\pi, \quad m : \text{電子の質量}, \quad V : \text{ポテンシャル}.$$

この方程式が今日シュレディンガー方程式といわれるものである. シュレディンガー方程式 (2.1) がW. ハイゼンベルグが前年に発表した行列力学と等価なものであることは後にわかるのだが, シュレディンガー方程式が変分原理という古典論でも馴染みの原理から導き出されているので, 当時の学会では受けたようである.

以降, 量子力学は相対論との融合，場の量子論へと発展していく. 簡単に紹介すれば, 1927年 W. パウリによる2成分波動関数のパウリ方程式の発見, P.A.M. ディラックの第2量子化による電磁場の量子化, 1928年 同じくディラックによるディラック方程式の発見とスピンの自然な導出, 1929年, W. ハイゼンベルグと W. パウリによる場の量子論の創出, 1932年 P.A.M. ディラックによる多時間理論の創出, 1940年 W. パウリの排他原理と統計の関係の発見などと続いていく.

[5]1925年6月8日に花粉症に苦しみながら閃いてブレイクスルーがあったそうだ.

2.2 量子化と確率解釈

一つの古典的な質点に対してその運動量を $p_{cl} = m\dot{x}$, 位置エネルギーを $V_{cl}(x)$ とおけばエネルギー E は運動エネルギーと位置エネルギーの和として

$$E = \frac{1}{2m}p_{cl}^2 + V_{cl}(x) \tag{2.2}$$

で表せる. ここで形式的に

$$E \to= i\hbar\frac{\partial}{\partial t}, \quad p_{cl} \to p = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \quad x \to q = x\times$$

と置き換えてみたものが, シュレディンガー方程式に他ならない. そこでこの置き換えを量子化ということがある. 古典的には可換であった運動量の測定と位置の測定の順序が, 量子化で非可換化されたとみることも出来る. つまり $[p, q] = -i$ である.

さてシュレディンガー方程式の解 ψ について考えてみよう. (2.1) の ψ は物質波の振幅を表しているのだろうか? $\psi : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ が複素数値関数であるため, 即座に振幅と断言するわけにもいかない. そこで, 通常の波動方程式でやるように ψ の実部だけをとって振幅としてもいいのだろうか? これもまずい. なぜなら電子を観測するといつも一点である. ψ の実部が無限に広がっているような関数である場合どのように解釈すればいいのか. E. シュレディンガーも ψ が複素数値であることにかなり悩んだようである. そこで大胆にも, ゲッチンゲン大学の M. ボルン (当時 39 歳) が ψ に確率解釈といわれるものを与えた. つまり $\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(x,t)|^2 dx = 1$ と仮定しておけば,

$$\int_I |\psi(x,t)|^2 dx \tag{2.3}$$

は電子が時刻 t で $I \subset \mathbb{R}^3$ に存在する確率を表すというのである. 電子の位置が確率でしか定まらないというのだから, これは, 大きな反響を呼び, A アインシュタイに, 有名な“ 神様はさいころをふらない ”を言わせた.

さらに, その翌年 1927 年には W. ハイゼンベルグが不確定性原理を確立し, 電子の位置 q と運動量 p を同時に測定した場合その誤差は

$$\Delta p \cdot \Delta q > \hbar/2 \tag{2.4}$$

となることを示した. またしても, 常識を翻す式が出てきた.

2.3 量子力学とヒルベルト空間

簡単に量子力学の創出の歴史をみた. エネルギー量子の導入から始まり, 光量子仮設, 物質波の理論, シュレディンガー方程式 (2.1) に虚数 $i = \sqrt{-1}$ が出てきたり, 確率解釈

や不確定性原理が出てきたり, 量子力学的世界像は古典論の常識を翻すものばかりであった. 詳細は省くがトンネル効果や相補性原理などは, 哲学や人間の生き方にまで口を出すようになってきた. さらにこの時期, 相対論も量子論以上に破格の衝撃を与えていた. 20世紀初頭とはこんな時代だった.

ケンブリッジ大学のP.A.M. ディラックは1930年 (当時彼は28歳) 形式的な記号をどしどし使って「Principle of Quantum Mechanics」を著した. これは現在でも読まれる量子力学の名著である.

さらに, 量子力学をヒルベルト空間論として捉えたのはプリンストン大学のJ. フォン・ノイマンである. W. ハイゼンベルグよりさらに2歳若い彼は1932年, 29才のときに「量子力学の数学的基礎」を著した. M. ボルンの確率解釈からシュレディンガー方程式 (2.1) の解 が $\psi \in L^2(\mathbb{R})$ であることと, $L^2(\mathbb{R})$ がルーベグ測度でヒルベルト空間になることから, 量子力学をヒルベルト空間上の作用素のスペクトル解析の理論とし て見事に定式化したのが, この本である. シュレディンガー方程式が発見された後僅か数年後に, ヒルベルト空間に注目して, このような本が書き上げられたことは驚愕に値する.

3 作用素解析

3.1 シュレディンガー作用素

前章で導入したシュレディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(x,t) + V(x)\psi(x,t) \tag{3.1}$$

の解 $\psi(x,t)$ について考える. (3.1) の解 $\psi(x,t)$ は時刻 $t=0$ で与えられた $\psi_0(x)$ の時刻 t での様子を表していると解釈できる. つまり時間発展

$$S_t : \psi_0 \mapsto \psi(\cdot, t) \tag{3.2}$$

を与える方程式である. もちろん時間が発展しても全空間での存在確率1は不変であるから,

$$\int |\psi_0(x)|^2 dx = \int |\psi(x,t)|^2 dx$$

が成立するだろう. ノルムで書けば

$$\|S_t\psi_0\| = \|\psi_0\|$$

となる．この S_t を求めたい．簡単のために空間1次元，時間1次元, $(x,t)\in\mathbb{R}\times\mathbb{R}$, とし, さらに $\hbar=1$, $m=1$ とする．初期条件を $\psi_0(x)=\psi(x,0)$ としよう．さて典型的な V の例は

$$V(x)=-\frac{1}{|x|},\qquad V(x)=\frac{1}{2}x^2$$

である．前者は水素原子内の電子のポテンシャルであり, 後者は調和振動子のポテンシャルである．数学的には V は実掛け算作用素であり, 適当なクラスを定義して解析を進める．さて, 純粋に (3.1) を数学的に解くことだけを考えよう．つまり，どのような ψ_0 に対してどのような意味で解が存在するのか?ということをヒルベルト空間論的に考える．思い出そう M. ボルンの確率解釈により $\psi\in L^2(\mathbb{R})$ であり, $L^2(\mathbb{R})$ は内積 $(\cdot,\cdot)$ の備わったヒルベルト空間であった．いま,

$$H=-\frac{1}{2}\Delta+V \tag{3.3}$$

を $L^2(\mathbb{R})$ からそれ自身への写像とみなす．つまり

$$H:\psi\to-\frac{1}{2}\Delta\psi+V\psi.$$

ただし H の定義域は $L^2(\mathbb{R})$ 全体ではない．例えば 微分作用素 $-i\dfrac{\partial}{\partial x}$ を作用させることが出来る関数 f は微分可能でなくてはならないだろうし, さらに $-i\dfrac{\partial f}{\partial x}\in L^2(\mathbb{R})$ とならねばならないからだ．作用素 T の定義域を $D(T)$ と書くことにする．作用素解析における基本的概念は作用と定義域である．有限次元 $\mathbb{R}^n$ 上の線形作用素の場合には一般に定義域は $\mathbb{R}^n$ 全体である．しかし，無限次元ヒルベルト空間上の作用素の定義域は一般には全体に広がらない．そのため定義域を決定すること自体が非常に重要な研究対象になる．定義域がヒルベルト空間全体に広がるかどうかは作用素の連続性という概念と密接にかかわっていてる．ここで作用素 T が連続とは

$$\|Tf\|\le M\|f\|$$

となる定数 M が存在することである．量子力学に現れる作用素は一般には稠密に定義されたもので, かつ非連続な作用素である．この事実は無限次元ヒルベルト空間上の作用素解析を非常に複雑にする．

さてシュレディンガー作用素に戻ろう．とりあえず面倒は避けて $D(H)=C_0^\infty(\mathbb{R})$ としておこう[6]．この H によって (3.1) は

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi=H\psi \tag{3.4}$$

と書き表せる．$H:L^2(\mathbb{R})\to L^2(\mathbb{R})$ と見たとき, 即座にわかる性質を以下に羅列しよう．

[6] $C_0^\infty(\mathbb{R})$ は台がコンパクトで無限回微分可能な関数全体を表す．

1. 線形性
2. 対称性

線形性とは

$$H(\alpha\psi+\beta\phi)=\alpha H\psi+\beta H\phi,\quad \psi,\phi\in C_0^\infty(\mathbb{R}),$$

をみたすことである．H が 2 回微分 $(-1/2)\Delta$ と掛け算作用素 $V\times$ の和なのでこれは明らかであろう．対称性とは $f,g\in D(H)=C_0^\infty(\mathbb{R})$ に対して

$$(f,Hg)=(Hf,g)$$

が成り立つことをいう．これも V が実であることと, 部分積分を 2 度行なえば以下のように容易に確かめることが出来る．

$$\begin{aligned}(f,Hg) &= \int\bar{f}(x)(-\frac{1}{2}\Delta g)(x)dx+\int\bar{f}(x)V(x)g(x)dx\\ &= \int\overline{(-\frac{1}{2}\Delta f)(x)}g(x)dx+\int\overline{V(x)f(x)}g(x)dx\\ &= (Hf,g)\end{aligned}$$

さて, 作用素 H の構成要員である

$$p=-i\frac{\partial}{\partial x},\qquad q=x\times$$

により H は

$$H=H(p,q)=\frac{1}{2}p^2+V(q) \tag{3.5}$$

とかける．ここでも簡単のために $D(p)=C_0^\infty(\mathbb{R})$, $D(q)=C_0^\infty(\mathbb{R})$ としておく．2 つの作用素 $q,p:L^2(\mathbb{R})\to L^2(\mathbb{R})$ も (1) 線形性, (2) 対称性, という性質を備えている．ここで, p を $p=\dfrac{\partial}{\partial x}$ としてしまうと対称作用素にはならない．このときは $(\dfrac{\partial}{\partial x})^*=-\dfrac{\partial}{\partial x}$ となってしまう．さらに交換子積

$$[A,B]=AB-BA$$

という記号を導入すれば, 次の交換関係を満たす．

$$[p,q]=-i. \tag{3.6}$$

これは左辺に $f\in C_0^\infty(\mathbb{R})$ を作用させれば $[p,q]f=-if$ となるという意味である．

p, q のみたす交換関係をもう少し見てみよう．いま，

$$e^{itp} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(itp)^n}{n!} \tag{3.7}$$

と定義すればテイラー展開の公式より

$$e^{itp} f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} f^{(n)}(x) = f(x+t) \tag{3.8}$$

となるから

$$e^{itp} : f(\cdot) \mapsto f(\cdot + t)$$

である．本来，f として (3.8) の無限級数が収束するようなものを取らねばならないが $f(\cdot) \mapsto f(\cdot + t)$ を e^{itp} の定義としてしまおう．これをずらし作用素という．

$$e^{itp} = e^{t\frac{\partial}{\partial x}}$$

なので“ ずらし ”の無限小変換は $\dfrac{\partial}{\partial x}$ といわれることもある．このように e^{itp} を定義すれば e^{itp} の定義域は $D(e^{itp}) = L^2(\mathbb{R})$ となる．さらに e^{itp} はずらしなのだから $L^2(\mathbb{R})$ から $L^2(\mathbb{R})$ への 1 対 1 上への写像で，かつ

$$\|e^{itp} f\| = \|f(\cdot + t)\| = \|f\|$$

である．つまり e^{itp} は長さを不変にする作用素である．

定義 3.1 ヒルベルト空間 $\mathcal{H}$ 上の作用素 T が $D(T) = \mathcal{H}$ で長さを不変にする，上への写像のときユニタリー作用素という．

ユニタリー作用素は必然的に 1 対 1 写像になる．e^{itp}, $t \in \mathbb{R}$, はユニタリー作用素の族である．さらに $e^{itp} e^{isp} = e^{i(t+s)p}$ をみたす．q の方も容易に e^{itq} がユニタリー作用素の族であることがわかる．これから全ての $f \in L^2(\mathbb{R})$ に対して

$$[e^{isq}, e^{itp}] f(x) = e^{isx} f(x+t) - e^{is(x+t)} f(x+t) = (1 - e^{ist}) e^{isq} e^{itp} f(x) \tag{3.9}$$

となるから

$$e^{itp} e^{isq} = e^{its} e^{isq} e^{itp} \tag{3.10}$$

という関係式が $L^2(\mathbb{R})$ 上で成立することになる．これをヴァイル関係式という．(3.10) の両辺を $t = 0$, $s = 0$ で形式的に微分すれば $[p, q] = -i$ が導かれることを注意しておく．

さて抽象的には，シュレディンガー方程式はヒルベルト空間 $\mathcal{H}$ 上の方程式

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi = H(P, Q) \psi \tag{3.11}$$

である．$H(P, Q)$ は $\mathcal{H}$ 上の対称作用素でヴァイル関係式 (3.10) をみたす P, Q で構成される．もちろん $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$, $P = p$, $Q = q$ はその一つの例ということになる．

3.2 線形代数：有限次元の話

抽象的に定義したシュレディンガー方程式 (3.11) を有限次元空間上で考えてみよう. $\mathbb{R}^n$ 上の対称行列 $A = H(P,Q)$ から決まる線形作用素 T_A を考えよう. $T_A v = Av$, $v \in \mathbb{R}^n$. T_A を簡単に A と書くことにする.

$$i\frac{\partial}{\partial t}v(t) = Av(t) \tag{3.12}$$

を解いてみよう. 線形代数の簡単な知識さえあればこれは簡単に解ける.

$$U^{-1}AU = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n \end{pmatrix}$$

と対角化すれば (3.12) は $U^{-1}v(t) = w(t)$ とおいて

$$i\frac{\partial}{\partial t}w(t) = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n \end{pmatrix} w(t) \tag{3.13}$$

となるから, 成分ごとに

$$i\frac{\partial}{\partial t}w_j(t) = \lambda_j w(t)$$

を解いて

$$w_j(t) = e^{-it\lambda_j}w_j(0)$$

となる. つまり

$$v(t) = Uw(t) = U\begin{pmatrix} e^{-it\lambda_1} & & \\ & \ddots & \\ & & e^{-it\lambda_n} \end{pmatrix} U^{-1}v(0)$$

となる. このように $H(P,Q)$ が有限次元空間に作用する線形作用素であれば (3.12) は容易に解ける. しかし, ヴァイル関係式をみたす P,Q の行列の組があるだろうか? すくなくても $[P,Q] = -i1$ を満たさなくてはならないのだが. 答えは「ノー」である. もし成り立てば, $PQ - QP = -i1$ の両辺のトレースをとって

$$0 = \mathrm{Tr}(PQ - QP) = -i\mathrm{Tr}1 = -in$$

となり矛盾してしまう.

結局有限次元空間上のシュレディンガー方程式は徒労だった. これは量子論を考察するときには少なくても無限次元空間上の作用素解析が必要であることを示している.

3.3 自己共役作用素

ここで話を無限次元空間 $L^2(\mathbb{R})$ に戻る．$p = -i\dfrac{\partial}{\partial x}$ の定義域は直感的には $L^2(\mathbb{R})$ 全体ではありえない．それは $L^2(\mathbb{R})$ は微分不可能な関数も十分多く含んでいるからである．そこで上 $D(p) = C_0^\infty(\mathbb{R})$ としたのだった．実際には p の定義域はもっと広げられる．一般に $L^2(\mathbb{R})$ 上の作用素 T の定義域を決定することは特別な場合を除いて容易ではない．

さて, 量子力学をヒルベルト空間上の作用素の解析とみる上で最も大切な概念である自己共役作用素について説明しよう．エルミート行列とは $A^* = A$ を満たす行列であった．ここで $A^* = \overline{{}^t\!A}$ のことである．自己共役作用素はエルミート行列の無限次元への拡張であるが, 定義域が全体に広がっていないのでその定義は少々ややこしい．$L^2(\mathbb{R})$ 上の作用素 X のアジョイント X^* を次のように定める．

定義 3.2 *(1)* 任意の $f \in D(X)$ に対して $(Xf, g) = (f, h_g)$ となる h_g が存在するとき, X のアジョイント X^* を次のように定義する．

$$X^* g = h_g, \qquad g \in D(X^*).$$

(2) $D(X) \subset D(X^*)$ で, $Xf = X^*f$, $f \in D(X)$, が成立するとき, X を対称作用素という．

定義 3.3 作用素 X が $X = X^*$ を満たすとき自己共役作用素という．

例えば $p = -i\dfrac{\partial}{\partial x}$ を $D(p) = C_0^\infty(\mathbb{R})$ と定義すれば全ての $f, g \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ に対して $(pf, g) = (f, pg)$ が成立するので, $g \in D(p^*)$ であるから, p は対称作用素である．これは明らかに自己共役作用素ではない．

一般に対称作用素 T の自己共役拡大は無数にある．また, T の定義域が $D(T) = L^2(\mathbb{R})$ であれば対称作用素ならば自己共役作用素である．定義域にこだわらない非厳密な理論を展開すれば対称作用素も自己共役作用素も同じものに見えてしまうことだろう．
$p = -i\frac{\partial}{\partial x}$, $q = x\times$ の自己共役拡大については次のことが知られている．

定理 3.4 $p = -i\dfrac{\partial}{\partial x}$, $D(p) = C_0^\infty(\mathbb{R})$, $q = x\times$, $D(q) = C_0^\infty(\mathbb{R})$ には自己共役な拡大 $\hat{p}$, $\hat{q}$ が其々ただひとつ存在する．

重要なことは“ ただひとつ ”存在することである．もちろん, $\hat{p}$, $\hat{q}$ も $L^2(\mathbb{R})$ 上でヴァイル関係式を満たす．

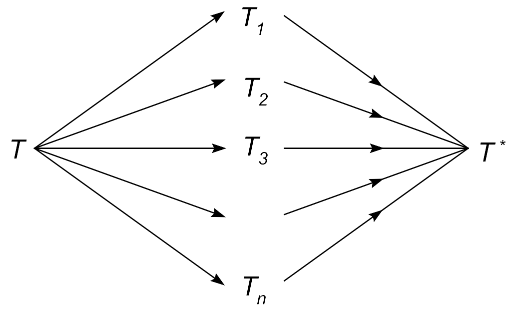

図 7: T の自己共役拡大 $T_1, T_2, \ldots$

定理 3.5 ヒルベルト空間 $\mathcal{H}$ 上の自己共役作用素 X, Y がヴァイル関係式

$$e^{itX}e^{isY} = e^{its}e^{isY}e^{itX} \tag{3.14}$$

を満たすならば $\mathcal{H} \cong \bigoplus^N L^2(\mathbb{R})$, $X \cong \bigoplus^N \hat{q}$, $Y \cong \bigoplus^N \hat{p}$ が成り立つ[7].

定理 3.5 はフォンノイマンの一意性定理とよばれ, 量子論の本質的な定理のひとつである. つまりヴァイル関係式を満たすような自己共役作用素の組は本質的に $L^2(\mathbb{R})$ の $\hat{q}, \hat{p}$ しかないということである. ここで重要な注意を与えておく. ヴァイル関係式を満たすものは本質的に $\hat{p}$ と $\hat{q}$ しかないわけだが, (3.14) を微分して導くことが出来る

$$[X, Y] = -i \tag{3.15}$$

の関係式を満たすものは $\hat{p}$, $\hat{q}$ 以外にも存在する. ただし, (3.15) を満たす作用素 X, Y は少なくとも一方は非連続になることが知られている. まとめると, シュレディンガー方程式をヒルベルト空間論的に解析するためには無限次元空間上の非連続な作用素を解析しなければならないということだ.

3.4 フーリエ変換

ここからフーリエ変換について簡単に説明しよう.

$$\mathcal{F} : f(x) \mapsto \hat{f}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} f(x) e^{-ikx} dx$$

を f のフーリエ変換という. $f \in L^1(\mathbb{R})$ であれば[8] $|\hat{f}(k)| < \infty$ となる. 実は次のことが知られている.

---

[7] $\cong$ はユニタリー同値を表す.

[8] $L^1(\mathbb{R}) = \{f :$ ルベーグ可測 $| \int_{\mathbb{R}} |f(x)| dx < \infty\}$.

定理 3.6 フーリエ変換 $\mathcal{F}$ は $L^2(\mathbb{R})$ から $L^2(\mathbb{R})$ へのユニタリー作用素である.

微分作用素を自己共役作用素として厳密に定義するにはフーリエ変換を介するのが便利である. $L^2(\mathbb{R})$ 上の作用素 T に対して $\mathcal{F}T\mathcal{F}^{-1} = \hat{T}$ とおけば簡単に次が示せる.

$$
\begin{aligned}
-i\frac{\partial}{\partial x} &\longrightarrow \widehat{(-i\frac{\partial}{\partial x})} = k \\
x &\longrightarrow \hat{x} = -i\frac{\partial}{\partial k} \\
-\Delta &\longrightarrow \widehat{-\Delta} = k^2
\end{aligned}
$$

そこで $-\Delta$ を単に 2 階微分する作用素というのではなく, フーリエ変換を経由して次のように定義する.

$$-\Delta f = \mathcal{F}^{-1}k^2\mathcal{F}f, \tag{3.16}$$

$$D(-\Delta) = \left\{ f \in L^2(\mathbb{R}) \middle| k^2\hat{f} \in L^2(\mathbb{R}) \right\}. \tag{3.17}$$

このように定義された $-\Delta$ は自己共役作用素である. 同様に p もフーリエ変換を介して定義すれば自己共役作用素になる. 実際このようにして定義した p は $\hat{p}$ と一致する. 以降, p, $-\Delta$ はこのように定義された自己共役作用素とする. 次の定理は自己共役性を示す最も一般的な定理で加藤ーレリッヒの定理といわれている.

定理 3.7 $D(-\Delta) \subset D(V)$ で

$$\|Vf\| \le a\|(-1/2)\Delta f\| + b\|f\|, \quad a < 1, \quad f \in D(-\Delta) \tag{3.18}$$

が成立するとき, H は $D((-1/2)\Delta)$ 上で自己共役作用素である.

例えば $V(x) = -1/|x|$ とした場合, 任意の $\epsilon > 0$ に対して上手く b_ϵ をとれば[9]

$$\|Vf\| \le \epsilon\|(-1/2)\Delta f\| + b_\epsilon\|f\|$$

が成り立つので, $(-1/2)\Delta + V$ は $D((-1/2)\Delta)$ 上で自己共役作用素である. ただ, この定理も万能ではない. 例えば最もよく調べられている $V(x) = (1/2)x^2$ ですら (3.18) は成立しない. 結果だけ述べれば

$$V(x) = P(x) = a_{2n}x^{2n} + \cdots + a_1 x + a_0, \quad a_{2n} > 0, \tag{3.19}$$

のような多項式のポテンシャルをもったシュレディンガー作用素 $(-1/2)\Delta + P(x)$ の定義域を $C_0^\infty(\mathbb{R})$ と仮定した場合, その自己共役拡大は一意的に存在することが知られている. 関数解析的にはこの一意的な自己共役拡大をもって $(-1/2)\Delta + P(x)$ の定義とするのが一般的である.

[9] ϵ が小さくなれば b_ϵ は大きくなる.

3.5 ユニタリー群とシュレディンガー方程式の解

$H_0 = (-1/2)\Delta$ とおこう．e^{-itH_0} を定義しよう．やはりこれもフーリエ変換を経由して以下のように定義する．

定義 3.8

$$e^{\alpha H_0} f = \mathcal{F}^{-1} e^{\alpha k^2} \mathcal{F} f, \quad \alpha \in \mathbb{C}. \tag{3.20}$$

$\alpha < 0$, $\alpha = it$ のときは $e^{\alpha H_0}$ が $L^2(\mathbb{R})$ 全体で定義できることは定義よりすぐに分かる．$S_t = e^{-itH_0}$ とおけば次の性質を確かめることが出来る．

1. S_t はユニタリー作用素
2. $S_s S_t = S_{s+t}$
3. $\lim_{t\to 0} S_t = 1$
4. $\displaystyle\lim_{t\to 0}(S_t f - f)/t = -iH_0 f$, $f \in D(H_0)$

一般に次の定理が成立する．

定理 3.9 *$L^2(\mathbb{R})$ 上のユニタリー作用素の族 $\{S_t\}$ が上の (1)-(3) を満たせば，自己共役作用素 H で*

$$\lim_{t\to 0}(S_t f - f)/t = -iHf, \quad f \in D(H), \tag{3.21}$$

を満たすものが一意的に存在する．逆に任意の自己共役作用素 H に対して (1)-(3) と (3.21) を満たすユニタリ作用素の族 $\{S_t\}$ が存在する．

この定理はストーンの定理として知られている．自己共役作用素 H に対するユニタリ作用素の族 S_t を

$$S_t = e^{-itH}$$

と表すことにする．例えば $S_a : f(\cdot) \mapsto f(\cdot + a)$ と定めれば $S_a = e^{ia\hat{p}}$ である．つまり S_a に付随する自己共役作用素は $\hat{p}$ である．

シュレディンガー方程式

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi = H\psi$$

に戻ろう．もし H が自己共役作用素であれば，(3.21) により，$\psi_0 \in D(H)$ に対してシュレディンガー方程式の解は $L^2(\mathbb{R})$ の意味で存在し，$e^{-itH}\psi_0$ と書き表せる．つまり e^{-itH} が (3.2) の S_t の正体である．

3.6 固有値

対称行列 A の固有値は全て実数であることが知られている. 無限次元ヒルベルト空間上の自己共役作用素も, 固有値が存在すれば実数である. 作用素 H の固有値全体を $\sigma_p(H)$ と表すことにしよう.

$$H\psi = \lambda\psi, \quad \lambda \in \sigma_p(H) \tag{3.22}$$

を解くことは量子力学において非常に重要である. ψ を λ に対する束縛状態という. 特に

$$E = \inf_{f \in D(H)} (f, Hf) \tag{3.23}$$

に対する束縛状態を基底状態といい, E を基底状態エネルギーという. なぜ束縛状態と名づけられたかというと, シュレディンガー方程式の解 $e^{-itH}\psi_0$ で初期状態として $H\psi = \lambda\psi$ となる関数 ψ をとればシュレディンガー方程式の解は

$$e^{-itH}\psi = e^{-it\lambda}\psi$$

となり, 任意の時刻 t で

$$\psi(x,t) = e^{-it\lambda}\psi(x)$$

となり, 初期状態との違いは高々 $e^{-it\lambda}$ である. M. ボルンの確率解釈より $I \subset \mathbb{R}$ に存在する確率は $\int_I |\psi(x,t)|^2 dx$ で与えられたのだから結局, 任意の $I \subset \mathbb{R}$ で

$$\int_I |\psi(x,t)|^2 dx = \int_I |\psi(x)|^2 dx$$

となり時間が経過しても任意の I での存在確率が不変になる. つまり電子はどこかに束縛されていると見える.

さて, シュレディンガー作用素の固有値の物理的意味はなんだろうか? 例えば ψ が (3.22) を満たしていれば, λ はエネルギーを表すと解釈する. そして ψ がエネルギー λ に対応する状態である. 例を示そう.

$$H_{\text{水素}} = -\frac{1}{2}\Delta - \frac{1}{|x|}$$

としよう. これは水素原子内の電子の満たすシュレディンガー方程式である. これは解ける. 実際

$$\sigma_p(H_{\text{水素}}) = \{-1, -1/2^2, -1/3^2, ...\}$$

となることが分かる. 固有値 $-1/n^2$ に対応する固有関数を ϕ_n とする. $n = 1$ は S 核, $n = 2$ は P 核, $n = 3$ は d 核の電子を表していると解釈する. このように解釈すれば水

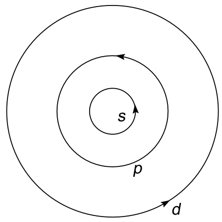

図 8: 水素原子

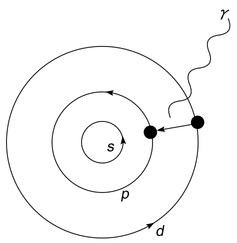

図 9: $d \to p$ に電子がおちて γ のエネルギを発散する

素原子内の電子エネルギーは離散的な値しかとらない. 事実, 実験では

$$\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}, \quad n, m = 1, 2, 3, ...$$

のエネルギーの吸収，発散しか観測されないのである. 逆にシュレディンガー方程式の固有値問題を解き, 実験と一致することが確認されてシュレディンガー方程式は正当化されたのだった.

4 ブラウン運動

4.1 ブラウン運動

経路積分について説明する. 経路積分は経路 (連続とは限らない) 全体の集合

$$\mathbb{R}^{[0,\infty)} = \{f : [0, \infty) \to \mathbb{R}\}$$

上に定義された測度による積分のことである. 経路積分といえば通常のリーマン積分から想像すれば神秘的な印象をうけるかもしれないが，測度論の一般論からみれば，さほど奇妙なものではない.

連続な経路全体の集合を

$$W = C([0, \infty), \mathbb{R})$$

とおく．W 上に σ 加法族 $\mathcal{B}_W$ を次のようにして構成する．方法はルベーグ測度を構成したときとほぼ同じである．ただ半開区間の変わりに柱状集合を取るのが異なる．$\mathcal{B}$ を $\mathbb{R}$ の全ての開集合を含む最小の σ 加法族とする．まず $\mathbb{R}^{[0,\infty)}$ の部分集合である柱状集合といわれるものを定義しよう．$x \in \mathbb{R}$ とする．$A_1 \in \mathcal{B}$, $A_2 \in \mathcal{B}$,..., $A_n \in \mathcal{B}$ と $0 = t_0 \le t_1 \le t_2 \le \cdots \le t_n$ に対して時刻 t_1 で A_1, 時刻 t_2 で A_2, ..., 時刻 t_n で A_n を通る経路の集まり

$$B_{t_1,...,t_n}(A_1,...,A_n) = \left\{\omega \in \mathbb{R}^{[0,\infty)} | \omega(t_0) = x, \omega(t_1) \in A_1, ..., \omega(t_n) \in A_n\right\}$$

を柱状集合という．全ての柱状集合を含む最小の σ 加法族を $\tilde{\mathcal{B}}$ とする．柱状集合

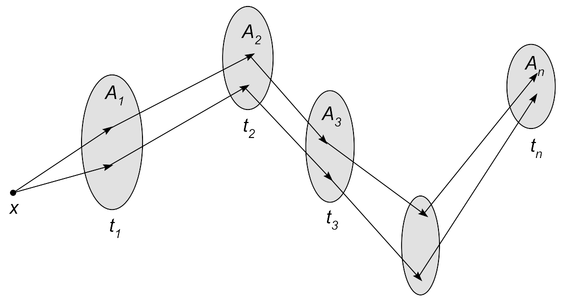

図 10: 柱状集合

$B_{t_1,...,t_n}(A_1,...,A_n)$ に対して測度 $P^x(B_{t_1,...,t_n}(A_1,...,A_n))$ を定義しよう．そのために時刻 r に y にいた粒子が時刻 $s > r$ に $A \in \mathcal{B}$ にいる確率を

$$\int_{\mathbb{R}} p_{s-r}(y,z)\chi_A(z)dz$$

で与える．ここで,

$$p_t(x,y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi t}} \exp\left(\frac{|x-y|^2}{2t}\right), \quad t > 0, \tag{4.1}$$

は熱核といわれる関数である．
そうすれば $P^x(B_{t_1,...,t_n}(A_1,...,A_n))$ は次で与えられることになる

$$\begin{aligned} &P^x(B_{t_1,...,t_n}(A_1,...,A_n)) \\ &= \int p_{t_0-t_1}(x,x_1)p_{t_2-t_1}(x_1,x_2)\cdots p_{t_n-t_{n-1}}(x_{n-1},x_n)\prod_{j=1}^n \chi_{A_j}(x_j)\prod_{j=1}^n dx_j. \end{aligned}$$

これらをルベーグ測度の構成と同様にホップの拡張定理で $\tilde{\mathcal{B}}$ 上の測度 $\tilde{P}^x$ に拡張する．これで $(\mathbb{R}^{[0,\infty)}, \tilde{\mathcal{B}}, \tilde{P}^x)$ が構成できた．実は, 説明は割愛させてもらうが, もう少し頑張ればここから $(W, \mathcal{B}_W, P_W^x)$ という測度空間が構成できる．

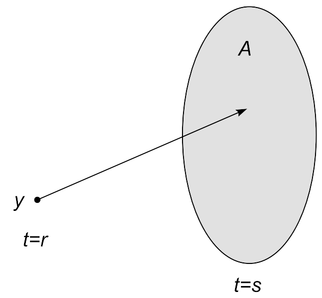

図 11: $\int p_s(x,y)\chi_A(y)dy$

$(W, \mathcal{B}_W, P_W^x)$ の性質を概括しよう. W 上の関数族 $(B_t)_{t\geq 0}$ を次で定義しよう.

$$B_t = B_t(\omega) = \omega(t), \quad \omega(\cdot) \in W.$$

慣れないと不思議に見えるかもしれないが, B_t は経路 $\omega \in W$ の関数で $B_t(\omega)$ は経路 ω の時刻 t での値として定義されている.

$$\int_W \cdots dP_W^x = \mathbb{E}^x[\cdots]$$

と書くことにしよう. 詳しい説明は割愛したので, わかり辛いかも知れないが

$$\int_W f(B_t)dP_W^x = \int_{\mathbb{R}^{[0,\infty)}} f(B_t)d\tilde{P}^x$$

が成り立っている. 測度 P_W^x は次を満たす.

1. $P^W(\{\omega \in W | B_0(\omega) = x\}) = 1$

2. $\mathbb{E}^x[B_t] = x$

3. $\mathbb{E}^x[(B_t - x)(B_s - x)] = \min\{t, s\}$

4. $\mathbb{E}^x[e^{i\alpha B_t}] = e^{-(\alpha^2/2)t + i\alpha x}$

確率論的にいえば, B_t は確率変数の族[10]であり, 2. は B_t の期待値が x で, 3. は共分散が $\min\{t, s\}$ といっている. 1. は確率 1 で経路は時刻 0 で x に存在するといっている. 最後の 4. は確率変数 B_t がガウス分布を持つことを示している. $(B_t)_{t\geq 0}$ はブラウン運動と呼ばれる.

[10]確率過程という.

4.2 C_0 半群

ブラウン運動と e^{-tH_0} には深い関係がある. それを説明しよう. $T_t = e^{-tH_0}$ は次の性質を満たす.

1. T_t は対称有界作用素
2. $T_0 = 1$
3. $T_s T_t = T_{s+t}$
4. $\lim_{t\to 0} T_t = 1$
5. $\lim\limits_{t\to 0}(T_t f - f)/t = -H_0 f$, $f \in D(H_0)$

自己共役作用素 H が

$$\inf_{f\in D(H)}(f, Hf) > -\infty$$

となるとき下から有界という. H_0 は下から有界な作用素である. また加藤-レリッヒの定理から自己共役性が示される $H = H_0 + V$ も下から有界な作用素である. 次の定理が成立する.

定理 4.1 $L^2(\mathbb{R})$ 上の対称有界作用素の族 $\{T_t\}$ が上の *(1)-(4)* を満たせば, 自己共役作用素 H で

$$\lim_{t\to 0}(T_t f - f)/t = -Hf, \quad f \in D(H), \tag{4.2}$$

を満たすものが一意的に存在する. 逆に任意の下から有界な自己共役作用素 H に対して *(1)-(4)* と *(4.2)* を満たす対称有界作用素族 $\{T_t\}$ が存在する.

この定理はヒレー吉田の定理とよばれている. T_t を

$$T_t = e^{-tH}$$

と書いて, C_0 半群という. さて, ブラウン運動と e^{-tH_0} の関係を見るために, $\mathbb{E}^x[f(B_t)]$ を計算してみよう.

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}^x[f(B_t)] &= \mathbb{E}^x\left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{\mathbb{R}} \check{f}(k)e^{-ikB_t}dk\right] \\
&= \int_{\mathbb{R}} \check{f}(k)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathbb{E}^x[e^{-ikB_t}]dk \\
&= \int_{\mathbb{R}} \check{f}(k)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-k^2t/2-ikx}dk \\
&= \left(\check{f}(k)e^{-k^2/2t}\right)^{\wedge} \\
&= \int_{\mathbb{R}} f(y)p_t(x,y)dy.
\end{aligned} \tag{4.3}$$

一方，フーリエ変換の章で述べたように, 定義より

$$e^{-tH_0}f = \left(e^{-t|k|^2/2}\hat{f}(k)\right)^{\check{}} = \int p_t(x,y)f(y)dy \tag{4.4}$$

だった. (4.3) と (4.4) を比べると答えが見えてくる. 結局, 次の恒等式を得る.

$$\mathbb{E}^x[f(B_t)] = e^{-tH_0}f(x) = \int_{\mathbb{R}} f(y)p_t(x,y)dy \tag{4.5}$$

さらに g との内積をとれば

$$(g, e^{-tH_0}f) = \int_{\mathbb{R}} \mathbb{E}^x[g(B_0)f(B_t)]dx \tag{4.6}$$

となる. これを繰り返せば, 次式を容易に示せるだろう.

定理 4.2

$$(f_0, e^{-(t_1-t_0)H_0}f_1 e^{-(t_2-t_1)H_0}\cdots e^{-(t_n-t_{n-1})H_0}f_n) = \int \mathbb{E}^x[f_0(B_{t_0})f_1(B_{t_1})\cdots f_n(B_{t_n})]dx. \tag{4.7}$$

細かい注意をすれば (4.7) は $f_0, f_n \in L^2(\mathbb{R})$ で $f_1, ..., f_{n-1} \in L^\infty(\mathbb{R})$ に対して成立する式である. 実際左辺をよくみれば, $e^{-(t_1-t_0)H_0}f_1 e^{-(t_2-t_1)H_0}\cdots e^{-(t_n-t_{n-1})H_0}f_n \in L^2(\mathbb{R})$ とならなければいけない. この (4.7) を応用すれば, いわゆるファインマン－カッツの公式を導くことが出来る.

4.3 トロッタ積公式とファインマン－カッツの公式

既に見たように任意の下から有界な自己共役作用素 H に対して e^{-tH} を定義することは出来た. しかし, これは抽象的な話であり, $e^{-tH}f$ が実際にどのような性質をもった関数なのか目に見える形ではかけない. たとえばシュレディンガー作用素 $H = H_0 + V$ に対して $e^{-tH}f$ を具体的に知ることは簡単ではない. しかし, 前章で定義した $(W, \mathcal{B}_W, P_W^x)$ とブラウン運動 B_t を使えば $e^{-tH}f$ が見えるようになる!

準備としてトロッタ積公式を復習しておこう. 正方行列 A に対して e^A は

$$e^A = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}A^n$$

だった. 一般に $AB \neq BA$ なので

$$e^{A+B} \neq e^A e^B$$

である．しかし次の便利な公式がある．

$$e^{A+B} = \lim_{n\to\infty} \left(e^{A/n}e^{B/n}\right)^n \tag{4.8}$$

これは リー・トロッタの積公式と呼ばれている．この積公式は無限次元ヒルベルト空間上に定義された自己共役作用素に対しても“ 適当な条件の下で ”で成立することが知られている．つまり

$$e^{-tH}f = \lim_{n\to\infty} \left(e^{-(t/n)H_0}e^{-(t/n)V}\right)^n f \tag{4.9}$$

が $L^2(\mathbb{R})$ の意味で成立する．ここで“ 適当な条件の下で ”と書いたが, これをここで論じるのは難しい．ただ, V が加藤-レリッヒの定理, 定理 3.7, と同じ条件を満たす場合や, V が (3.19) のような多項式の場合には (4.9) が成立することは知られている．さてこの (4.9) を用いれば次のファインマンーカッツの公式を示すことが出来る．

定理 4.3

$$(f, e^{-tH}g) = \int \mathbb{E}^x \left[\overline{f(B_0)}g(B_t)e^{-\int_0^t V(B_s)ds}\right] dx \tag{4.10}$$

または

$$e^{-tH}f(x) = \mathbb{E}^x \left[f(B_t)e^{-\int_0^t V(B_s)ds}\right]. \tag{4.11}$$

この (4.10),(4.11) の右辺が経路積分表示といわれるものである．その証明はトロッタ積公式と定理 4.2 から簡単に導くことが出来る．みてみよう．

$$\begin{aligned}(f, e^{-tH}g) &= \lim_{n\to\infty}(f, (e^{-(t/n)H_0}e^{-(t/n)V})^n g) \\ &= \lim_{n\to\infty}\int \overline{f(B_0)}f(B_t)e^{-\sum_{j=0}^n (t/n)V(B_{tj/n})}dP_W^x dx \\ &= \int \mathbb{E}^x[\overline{f(B_0)}g(B_t)e^{-\int_0^t V(B_s)ds}]dx.\end{aligned}$$

ここで最後の等式で $B_t = \omega(t)$ が t に関して連続であることを使っている．

さてここで紹介した ファインマンーカッツの公式 4.3 であるが, 多くの別証明がある．ここで詳しくノベル余裕はないが, 確率解析の伊藤の公式を使った別証明もある．また, ベクトルポテンシャル a の入った

$$H(a) = \frac{1}{2m}(\hat{p} - a(x))^2 + V$$

の経路積分表示やスピン

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

をもったシュレディンガー作用素

$$H(\sigma, a) = \frac{1}{2m}\left(\sum_{j=1}^{3}\sigma_j(\hat{p}_j - a_j)\right)^2 + V$$

の径路積分表示も知られている.

5 スペクトル解析

5.1 自己共役性再考

2 章で自己共役性の話をした. 一般に作用素を自己共役作用素として定義するのは容易ではない. しかし, ファインマン−カッツの公式を使って, 広いクラスのポテンシャル V に対して自己共役作用素 $H = H_0 + V$ を定義することが可能である.

$$T_t f(x) = \mathbb{E}^x[e^{-\int_0^t V(B_s)ds} f(B_t)]$$

で T_t を定義する. ここで右辺が有界になるような V のクラスとして kato クラスがよく知られている. T_t をこのように定めれば T_t は $T_0 = 1$, $T_t T_s = T_{t+s}$, $\lim_{t\to 0} T_t = 1$ を満たすことが示せる. よって定理 4.1 から, ただひとつの自己共役作用素 K が存在して $T_t = e^{-tK}$ と表せる. この K を $H_0 + V$ の自己共役作用素としての定義とする.

5.2 基底状態

$H\varphi_{\rm g} = E\varphi_{\rm g}$ を満たす固有関数 $\varphi_{\rm g}$ を基底状態といった. シュレディンガー作用素の基底状態 $\varphi_{\rm g}$ の形を考えてみよう.

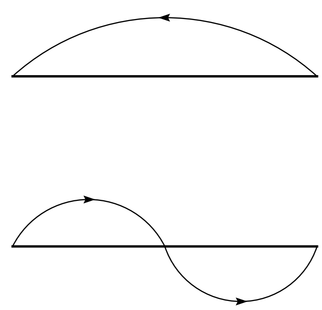

図 12: 基底状態と励起状態

いま, 両端を固定したギターの弦を考える. 一番低い音は図12の上のような形をしていて, 次に低い音は下のような形をしている. 音が高くなる毎に節の数が0,1,2,..., と増えていく. 同様のことがシュレディンガー方程式の固有関数に対しても予想される. 特に基底状態には節がない! これをファインマン－カッツの公式を使って示してみよう. 次の恒等式がポイントである.

$$e^{-tH}\varphi_{\rm g} = e^{-tE}\varphi_{\rm g}.$$

いま, $f, g \geq 0$ とする. $A = \{x \in \mathbb{R} | f(x) \neq 0\}$, $B = \{x \in \mathbb{R} | g(x) \neq 0\}$ としよう.

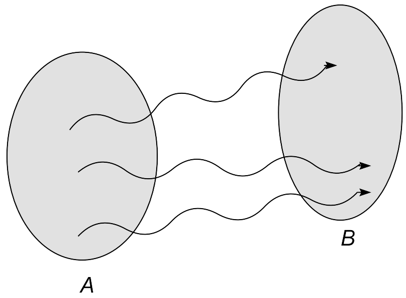

図 13: A から B に動くパスの集合 P

時刻0に A から出発して, 時刻 t で B に到達する経路全体 $P \subset \mathbb{R} \times W$ の測度は

$$\int dx \int dP_W^x \chi_P = \int \chi_A(x) dx \int p_t(x,y) \chi_B(y) dy > 0$$

であるから, ファインマン－カッツの公式より

$$\begin{aligned}(f, e^{-tH} g) &= \int_{\mathbb{R}\times W} f(B_0) g(B_t) e^{-\int_0^t V(B_s) ds} dP_W^x dx \\ &\geq \int_P f(B_0) g(B_t) e^{-\int_0^t V(B_s) ds} dP_W^x dx > 0\end{aligned}$$

となる. ここで $\omega \in P$ に対して $f(B_0(\omega)) g(B_t(\omega)) > 0$ を使った. 次の定理が成り立つ.

定理 5.1 $f \geq 0$, $g \geq 0$ であれば

$$(f, e^{-tH} g) > 0.$$

この定理の重要な部分は, 左辺がゼロより真に大きくなるということである. $g \geq 0$ に対して $e^{-tH} g$ はどんな正の関数 f と内積をとっても真に正なのだから

$$e^{-tH} g(x) > 0, \quad x \in \mathbb{R}, \tag{5.1}$$

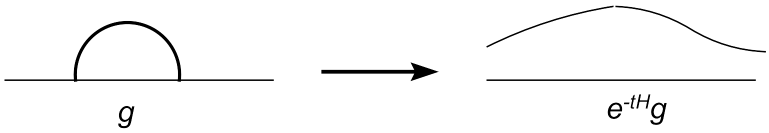

図 14: $e^{-tH}g(x) > 0$

とならなければならない.

いま $\varphi_{\rm g}$ を H の基底状態としよう. $\varphi_{\rm g}$ を実部と虚部にわける.

$$\varphi_{\rm g}^r + i\varphi_{\rm g}^i.$$

e^{-tH} は (5.1) より実関数を実関数にうつす作用素なので $e^{-tH}\varphi_{\rm g} = e^{-tE}\varphi_{\rm g}$ のとき, $\varphi_{\rm g}^r$ も $\varphi_{\rm g}^i$ も e^{-tH} の固有関数になっている. $\varphi_{\rm g}^r$ を改めて $\varphi_{\rm g}$ とおこう.

$$\varphi_{\rm g} = \varphi_{\rm g}^+ - \varphi_{\rm g}^-$$

と正負に分ける. そうすれば

$$e^{-tH}\varphi_{\rm g} = e^{-tH}\varphi_{\rm g}^+ - e^{-tH}\varphi_{\rm g}^- \leq e^{-tH}\varphi_{\rm g}^+ + e^{-tH}\varphi_{\rm g}^- = e^{-tH}|\varphi_{\rm g}|$$

となるから

$$(\varphi_{\rm g}, e^{-tE}\varphi_{\rm g}) = (\varphi_{\rm g}, e^{-tH}\varphi_{\rm g}) \leq (|\varphi_{\rm g}|, e^{-tH}|\varphi_{\rm g}|) \leq e^{-tE}(|\varphi_{\rm g}|, |\varphi_{\rm g}|)$$

となる. ここで

$$\sup_{f\in L^2(\mathbb{R})} (f, e^{-tH}f) \leq e^{-tE}(f, f)$$

を使った. これから $(\varphi_{\rm g}, e^{-tH}\varphi_{\rm g}) = (|\varphi_{\rm g}|, e^{-tH}|\varphi_{\rm g}|)$ が従い, これに $\varphi_{\rm g} = \varphi_{\rm g}^+ - \varphi_{\rm g}^-$ を代入すれば

$$(\varphi_{\rm g}^+, e^{-tH}\varphi_{\rm g}^-) = -(\varphi_{\rm g}^-, e^{-tH}\varphi_{\rm g}^+) \tag{5.2}$$

となる. $\varphi_{\rm g}^+$, $\varphi_{\rm g}^-$, $e^{-tH}\varphi_{\rm g}^+$, $e^{-tH}\varphi_{\rm g}^-$ が全て非負関数なので, (5.2) が成り立つためには, $\varphi_{\rm g}^+$ または $\varphi_{\rm g}^-$ が恒等的ににゼロにならなければならない. 結局, H の基底状態 $\varphi_{\rm g}$ は $\varphi_{\rm g}(x) > 0$ または $\varphi_{\rm g}(x) < 0$ となる.

定理 5.2 H の基底状態 $\varphi_{\rm g}$ は $\varphi_{\rm g}(x) > 0$ をみたす. 特に基底状態は節をもたない.

次に基底状態の次元を調べてみよう. まず基底状態の次元とは, 基底状態全体の作る部分空間 $G \subset L^2(\mathbb{R})$ の次元のことである. $L^2(\mathbb{R})$ は内積空間なので G の基底 $e_1, ..., e_n$ を互いに直交するようにとっておく.

$$(e_i, e_j) = \delta_{ij}.$$

さて次元は? 定理 5.2 から $e_j(x) > 0$, $j = 1, ..., n$, であるから G の次元が 2 以上になることはない. もし 2 つ以上基底があれば $(e_i, e_j) > 0$ となってしまうからである.

定理 5.3 シュレディンガー作用素 H の基底状態の次元は *1* 次元である.

この事実を, シュレディンガー作用素 H の基底状態は一意的であるという.

5.3 束縛状態の局所性

束縛状態 ϕ とは

$$H\phi = \lambda\phi \tag{5.3}$$

となる H の固有関数のことだった. 特に基底状態は節を持たない関数であることを前節で示した. 解けるシュレディンガー方程式の例として $V(x) = -1/|x|$ や $V(x) = (1/2)x^2$ などがある. これらの束縛状態は完全に分かっている. 実際, $V(x) = (1/2)x^2$ の場合

$$\sigma_p(H) = \left\{n + \frac{1}{2}\right\}_{n=1}^{\infty}$$

で $n + 1/2$ に対する束縛状態は

$$(\sqrt{2}/2^n n!)^{1/2} H_n(x) e^{-x^2/2} \tag{5.4}$$

という形をしている. ここで $H_n(x)$ はエルミート多項式といわれる高々 n 次の多項式である. また $V(x) = -1/|x|$ のとき,

$$\sigma_p(H) = \left\{-\frac{1}{n^2}\right\}_{n=1}^{\infty}$$

で $-1/n^2$ に対する束縛状態は

$$P_n(|x|)e^{-|x|/a_n} \tag{5.5}$$

という形をしている. ここで P_n は多項式, a_n は正の定数である (5.4), (5.5), いずれの場合も $|x| \to \infty$ で指数関数的に減衰している. これは束縛状態がどこかの軌道に局在しているという古典的な描像に合致している. さて, 一般の V ではどうだろうか? と考えるのは自然な疑問だろう. 考えてみよう. (5.3) から

$$\phi = e^{-tH}e^{-t\lambda}\phi$$

なのだからファインマン–カッツの公式を使えば

$$\phi = e^{-t\lambda}\mathbb{E}^x[e^{-\int_0^t V(B_s)ds}\phi(B_t)] \tag{5.6}$$

と表せる．この右辺を評価すれば，上手くいきそうだ．結果だけを記すことにする．$V(x)=x^{2n}$ のとき H の束縛状態 ϕ は

$$|\phi(x)| \le Ce^{-ax^{n+1}} \tag{5.7}$$

を満たす．これはカルモナの評価と呼ばれている．さらに基底状態 φ_{g} については $V(x)=x^{2n}$ のとき (5.7) に加え，

$$C'e^{-a'x^{n+1}} \le \varphi_{\mathrm{g}}(x) \tag{5.8}$$

となる．いずれの証明も本質的に (5.6) を使う．

6 お礼とお詫び

今回は公開講座にご参加していただき誠にありがとうございました．

私にとって，1 日でシュレディンガー作用素と経路積分の話を完結させるのは簡単ではありませんでした．皆様に少しでも興味を持っていただけたならば幸いです．

私の力量不足でアブストラクトも基本的なことしか書くことができませんでした．ミスプリも多数あるだろうと予想しております．また，読者の興味を削ぐことを恐れて，詳細を避けたところも多数あります．以上の点につき深くお詫び申し上げます．

経路積分，汎関数積分をつかったシュレディンガー方程式や場の量子論の研究は膨大なものがあります．ご興味がおありの方は公開講座で紹介した参考文献をご参考にしてください．