

Section 2.1, 2.2 and 2.A

岩本 祥 [ID:61508] (理学部物理学科 4 年)

2007 年 10 月 6 日

Section 2.1 Quantum Mechanics (Hilbert 空間論)

- 量子系の純粋状態は複素 Hilbert 空間上の射線として表現される。
- Observable は Hermitian 演算子として表現される。
- Ψ を観測したとき Ψ_n が得られる確率は、内積の平方となる。

この section で語っていることは、これだけである [1]。というわけで、いきなりだが、無限次元の Hilbert 空間について述べることにする。なお、この節の内容は、文献 [2] の第 1 章をかなり参考にしてある。詳しい証明や諸定理、具体例については同書を参照してほしい。

2.1.1 完備な内積空間

以下、係数体 \mathbb{F} は実数体 \mathbb{R} および複素数体 \mathbb{C} のどちらでも良いものとする。

内積空間

Vector 空間上の 2 元 Φ, Ψ に対し、

$(\Phi, \Psi) \in \mathbb{F}$ が線型・対称・正值・正定値

ならばその空間は内積空間である。

- 線型性 : $\forall \alpha, \beta \in \mathbb{F}, \begin{cases} (\Psi, \alpha\Phi_1 + \beta\Phi) = \alpha(\Psi, \Phi_1) + \beta(\Psi, \Phi) \\ (\alpha\Psi_1 + \beta\Psi_2, \Phi) = \alpha(\Psi_1, \Phi) + \beta(\Psi_2, \Phi) \end{cases}$
- 対称性 : $(\Psi, \Phi) = (\Phi, \Psi)^*$
- 正值性 : $(\Psi, \Psi) \geq 0$
- 正定値性 : $(\Psi, \Psi) = 0 \iff \Psi = \mathbf{0}$

即ち、これが P.49 で述べていることの全てである。

完備性

内積空間が完備であるとは、空間上の任意の Cauchy 列が収束することである。

Cauchy 列とは、

$$\forall \epsilon > 0, \exists N \in \mathbb{N} \text{ s.t. } \forall n, m \geq N, \|\psi_n - \psi_m\| < \epsilon$$

となるような点列 $\{\psi_n\}$ のことである。また、完備な内積空間のことを Hilbert 空間という。

ちなみに、Lebesgue 積分の意味で 2 乗可積分な関数空間は複素 Hilbert 空間を為す。これが量子力学を数学的に基礎付けているのであるが、ここでは詳細には立ち入らないことにする。

2.1.2 完全正規直交系

無限次元における定義

無限次元 Hilbert 空間 \mathcal{H} 上の正規直交系 $\{\psi_n\}_{n=1}^{\infty}$ は,

$$\forall \Phi \in \mathcal{H}, \quad \Phi = \sum_{n=1}^{\infty} \psi_n(\psi_n, \Phi)$$

であるとき完全である, と言う。

更に, 以下の 4 条件は同値である。

- (1) 構成可能性 : $\{\psi_n\}_{n=1}^{\infty}$ が完全である。
- (2) 恒等演算子 : $\forall \Phi, \Psi \in \mathcal{H}, \quad (\Psi, \Phi) = \sum_{n=1}^{\infty} (\Psi, \psi_n)(\psi_n, \Phi)$
- (3) Parseval : $\forall \Psi \in \mathcal{H}, \quad \|\Psi\|^2 = \sum_{n=1}^{\infty} |(\psi_n, \Psi)|^2$
- (4) 完全直交性 : $(\Psi, \psi_n) = 0$ for all $n \iff \Psi = 0$

物理状態は射線で表される。

- Hilbert 空間は射線の非交差和である : $\mathcal{H} = \bigoplus_{k \in \mathbb{R}} \mathcal{R}_k$.
- 同じ射線に属する元の norm は等しい。
- 物理的状態は, norm が 1 であるような射線として表現される。
- 無限次元 Hilbert 空間上の完全正規直交系 $\{\psi_k\}$ について, ψ_i と ψ_j は ($i \neq j$ ならば) 異なる射線に属する。
- 完全正規直交系は, それぞれの属する射線上で自由に選ぶことが出来る^{*1}。

2.1.3 OBSERVABLES は HERMITIAN 演算子である。

演算子 A に対する共役演算子 (adjoint) A^\dagger は,

$$\begin{cases} A \text{ が線型} \text{ のとき } (\Phi, A^\dagger \Psi) := (A\Phi, \Psi) & (2.1.5) \\ A \text{ が反線型} \text{ のとき } (\Phi, A^\dagger \Psi) := (A\Phi, \Psi)^* & (2.2.7) \end{cases}$$

として定義される。

Hilbert 空間上の Hermitian 演算子 H は $H^\dagger = H$ を満たすものであり, 量子力学では, 物理量は Hermitian 演算子として表される^{*2}。

Hermitian 演算子の固有値は実数であり, 射線 \mathcal{R} を固定したとき, $\forall \Psi \in \mathcal{R}$ に対して固有値は全て等しい。

^{*1} ψ_1 と ψ_2 が完全正規直交系を為しているなら, $e^i \psi_1$ と $e^{2i} \psi_2$ も完全正規直交系を為す。或いは, 数学的に書くなら, $\{\psi_k\}$ が完全正規直交系を為しているならば, 任意の n に対して

$$\{\psi_l\}_{l \neq n} \cup \{\xi \psi_n\} \quad (\forall \xi \in \mathbb{C} \text{ s.t. } |\xi|^2 = 1)$$

も完全正規直交系を為す, となる。

^{*2} 反線型かつ反 Hermitian でもいいのかなあ。そんなにマズそうな気はしないけど。

2.1.4 観測確率は内積の平方である。

正確に言おう。ある射線 \mathcal{R} として表されている系に対し、その系が直交射線の集合 $\{\mathcal{R}_a\}$ の中のどの状態にあるか、という観測を行ったとき、その観測結果が \mathcal{R}_a になる確率 P_a は

$$P(a) = |\langle \Psi, \Psi_a \rangle|^2 \quad (\forall \Psi \in \mathcal{R}, \quad \forall \Psi_a \in \mathcal{R}_a) \quad (2.1.7)$$

となる。

Section 2.2 Symmetries (変換の話)

2.2.1 本文に入る前に、連結と COMPACT の話。

- Compact ... 有界な閉領域
- 連結 ... つながってる

厳密な話は面倒なのでやめておこう。一応、用語の定義程度を、Section 2.β に付録しておいた。
Heine-Borel の被覆定理により、ユークリッド空間 \mathbb{R}^n の部分集合 S について、 S が有界閉集合であることと S が compact であることは同値である、ということが示されているので、我々は位相空間を意識せずとも良いわけだ。
また、連結性については、「 X が連結でないとは、 X が空でない 2 つの開集合の直和として表せる」ということなので、我々の直感的な理解も特に問題はないのだろう。

2.2.2 線型性とか、うにたり性とか。

対称な変換 (symmetry transformations) とは、実験結果を変えないような視点変換である。

言うことは、ray 上の変換 T について、少なくとも次のことが成立する必要がある：

$$P(\mathcal{R} \rightarrow \mathcal{R}_n) = P(T\mathcal{R} \rightarrow T\mathcal{R}_n). \quad (2.2.1)$$

そうすると、射線の変換 T に対応する、元 (vector) の変換 U_T に対しても制限が加わる。この制限は、

U_T は unitary かつ線型 OR 反 unitary かつ反線型

というものである。

この証明は Section 2.A に与えられている。比較的詳しく書かれているし、物理的には全然面白くないので、特に深入りはしない。一応、この résumé の末尾に、“reading guide” 的なものを付録しておいた。Weinberg を読んでみて行き詰まった時は、参考にして欲しい。

なお、最後に、恒等変換に“繋がる”ような変換は **unitary** 変換であることを確認しておく。つまり、単位元に連結な部分群は unitary 変換で表現される。あるいは、一般に無限小変換は、それが適切に表現できるならば (?) 微小量 $\epsilon \in \mathbb{R}^n$ および n 個の演算子 X_i を用いて

$$U = 1 + i\epsilon \cdot X \quad (2.2.2)$$

と書ける。ここで X たちはいわゆる「変換の生成子」であり、Hermitian である。

証明は

$$1 = U^\dagger U = (1 + i\epsilon X^\dagger)(1 - i\epsilon X) = 1 + i\epsilon(X^\dagger - X) + O(\epsilon^2) \quad (2.2.3)$$

とすればよい。

2.2.3 群を為すということ、および、元の変換。

群を為す。

射線の変換 T は、群を為している。線型でも反線型でも、ある群の要素としてみる事ができる。

群を為している、と云えば、積閉・結合・逆・単位 である。

元の変換

我々が使うのは、射線ではなく、元、つまり Hilbert 空間中の vector である。だから、射線の変換 T に対応するような、元の変換 $U(T)$ を考えなければならない。

射線の変換 T に対応するような元の変換というのは、無限にある。例えば、恒等変換 1_T に対応しては

$$e^{i\theta} \cdot \mathbf{1} \quad (\theta \in \mathbb{R})$$

の無限個が考えられる。

もちろん、 $U(T)$ が群を為すためには、 $\theta = 0$ ととって $U(1_T) = \mathbf{1}$ とせねばならない。すると、 1_T に連続な部分については $U(T)$ はそんなに自由に選べなくなっているはずだ。

さて、となると困る。 $U(T_2)U(T_1)$ と $U(T_2T_1)$ は本当に等しいのか。

$$U(T_2)U(T_1)\Psi_n = e^{i\phi_n(T_2, T_1)}U(T_2T_1)\Psi_n \quad (2.2.10)$$

までは言えるが、 $\phi_n \equiv 0$ なのか。

T の構造を反映するように $U(T)$ を構築するとき、単位元をうまく反映させるのは容易だが、そうすると、積の構造が一般には満たされなくなる。積の構造さえ満たしてくれれば「積閉」も「逆」も上手くいくのだが。困った。

素直に群になる場合。

$\forall \Psi_A, \Psi_B \in \mathcal{H}$ について、 $\Psi_A + \Psi_B$ という元が用意できる場合は、そんなに心配いらぬ。(2.2.11) 付近の議論により、まず位相 $\phi_n(T_1, T_2)$ が n に依存しないことが示せる。即ち

$$U(T_2)U(T_1)\Psi_n = e^{i\phi(T_2, T_1)}U(T_2T_1)\Psi_n \quad (2.2.14)$$

であるが、これは射影表現の 1 つの例である。**Section 2.7** で示すように、射影表現を持つような対称変換の群は、“物理的意味を拡張すること無しに” 普通の表現へと拡張でき、 $\phi = 0$ ととれる。よく意味が分からないが、詳しくは section 2.7 に先送り。

素直じゃない場合。

$\Psi_A + \Psi_B$ という元が用意できない場合は色々やこしいらしい。例えば、全角運動量が整数の Ψ_A と、半整数の Ψ_B の場合がこの場合に該当する。

そういう場合は、“superselection rule” とかいうので、 ϕ が class のみで決まる。つまり、 Ψ_n の角運動量が

$$\begin{aligned} \text{整数の場合} &: U(T_2)U(T_1)\Psi_n = e^{i\phi_A(T_2, T_1)}U(T_2T_1)\Psi_n \\ \text{半整数の場合} &: U(T_2)U(T_1)\Psi_n = e^{i\phi_B(T_2, T_1)}U(T_2T_1)\Psi_n \end{aligned}$$

となる。まあ当たり前であるが。

いずれにせよ、そんなに面白そうじゃないし、詳しくは先送りということにしておこう。

2.2.4 連結 Lie 群の構造

ここでは、連結 Lie 群の構造について、つまりよく謂う所の「構造定数 C^a_{bc} 」とかその辺りについてを考えてみる。以下では表現は射影表現ではなく、普通の表現であるものとする。

射線の変換群

連結 Lie 群の元として考えられるような射線の変換 T を考える。連結 Lie 群の元は、連結性を用いて恒等表現からつなげていくことを考えると、 n 個の実数 parameter、つまり $\theta \in \mathbb{R}^n$ を用いて表すことが出来る。

さて、ここで単位元は存在する。それは即ち恒等変換である。恒等変換が $\theta = 0$ に対応するように、 θ を parameterize することにしよう：

$$\text{単位 : } T(0) := 1.$$

ところで、「積閉」について閉じているので、

$$\text{積閉 : } T(\bar{\theta})T(\theta) = T(f(\bar{\theta}, \theta)) \quad \text{where } f: \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n \quad (2.2.15)$$

のような f が存在することと言い換えられる。もちろん θ の定義域が \mathbb{R}^n でない場合には写像 f の性質も変わってくるが、それはやはり物理の問題である。では、数学的にはどういう条件が課されるのだろうか。

f に課される条件は、

$$f^a(\theta, 0) = f^a(0, \theta) = \theta^a \quad (2.2.16)$$

である。 f を Taylor 展開すると、この条件より

$$f^a(\bar{\theta}, \theta) = \theta^a + \bar{\theta}^a + f^a_{bc} \bar{\theta}^b \theta^c + O(\theta^3) \quad (2.2.19)$$

となる。

元 (vector) の変換の群

更に議論を進めるため、vector Ψ の変換 U について考えよう。 $T(\theta)$ に対応するような変換を $U(T(\theta))$ と書く。これはもはや行列である。これが普通の表現になるためには、次の 3 つの式が欲しい：

$$\text{積閉 : } U(T(\bar{\theta}))U(T(\theta)) = U(T(f(\bar{\theta}, \theta))), \quad (2.2.19)$$

$$\text{逆 (Unitarity) : } \left[U(T(\Delta\theta)) \right]^{-1} = \left[U(T(\Delta\theta)) \right]^\dagger$$

$$\text{単位 : } U(T(0)) := 1.$$

ところで、 U はもはや行列になってしまったので、Taylor 展開できる。厳密に書くなら

$$U(T(\theta)) = U(T(0)) + \frac{\partial U}{\partial \theta^a}(T(0))\theta^a + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 U}{\partial \theta^b \partial \theta^c}(T(0))\theta^b \theta^c + \dots$$

となるわけだが、奇数次の項については i を引っ張り出して、

$$U(T(\theta)) = 1 + i\theta^a t_a + \frac{1}{2}\theta^b \theta^c t_{bc} + \frac{i}{6}\theta^d \theta^e \theta^f t_{def} + \dots \quad (2.2.17)$$

という形にしておこう。ここで t_a は適当な行列であり、特に t_a を生成子と云うのであった。 t_a が Hermitian であることは先に示したが、 t_a が全て Hermitian になるわけではない。^{*3}

^{*3} $[t_b, t_c] \neq 0$ のときに t_{bc} が Hermitian でないことは (2.2.21) 式からわかる。

さて。この Taylor 展開を使って, (2.2.19) 「積閉」を何とかしよう。真面目に計算すれば,

$$\begin{aligned} U(T(\phi))U(T(\theta)) &= (1 + i\phi^a t_a + \frac{1}{2}\phi^b \phi^c t_{bc})(1 + i\theta^a t_a + \frac{1}{2}\theta^b \theta^c t_{bc}) + O(\bullet^3) \\ &= 1 + i(\theta^a + \phi^a) t_a - \theta^a \phi^b t_a t_b + \frac{1}{2}(\theta^b \theta^c + \phi^b \phi^c) t_{bc} + O(\bullet^3) \\ U(T(f(\phi, \theta))) &= U(T(\theta + \phi + f^a_{bc} \phi^b \theta^c)) + O(\bullet^3) \\ &= 1 + i(\theta^a + \phi^a + f^a_{bc} \phi^b \theta^c) t_a + \frac{1}{2}(\theta^b + \phi^b)(\theta^c + \phi^c) t_{bc} + O(\bullet^3) \end{aligned}$$

となり, 見比べると

$$-\theta^a \phi^b t_a t_b = i f^a_{bc} \phi^b \theta^c t_a + \frac{1}{2}(\theta^b \phi^c + \theta^c \phi^b) t_{bc} \quad \therefore t_{bc} = -t_b t_c - i f^a_{bc} t_a \quad (2.2.21)$$

が分かる。となると構造定数 C^a_{bc} は

$$[t_b, t_c] =: i C^a_{bc} t_a, \quad (2.2.22)$$

$$C^a_{bc} = -(f^a_{bc} - f^a_{cb}) \quad (2.2.23)$$

となり, Lie 代数が構築できた。

単位元の近傍じゃないところでは

ここで, これまでの議論が単位元のごく近傍に限られていたことを確認しておく。

(2.2.15) 式や (2.2.19) 式は全体で成立する式であるが, f についての解析 (2.2.17) は単位元近傍で行っている。 U が T の積構造を反映しているのか, という問題については, 単位元近傍では解決したが, 遠いところでは未知である。

また, $U(T(\theta))$ は (2.2.20) 式のように表せて, t_{bc} も t_a で表せたので, 生成子が分かれば $U(T(\theta))$ は 2 次の程度まで知ることができるが, それ以上は分からない。

しかし, (2.2.22) 式を満たしさえすれば, t_a だけから $U(t)$ を「積構造をゲンミツに保つように」ゲンミツに構成することができる。これは, **Section 2.7 に先送り**することになっている。

Abelian

可換群 (Abelian group) とは, 生成子が全て交換する, つまり

$$[t_b, t_c] = 0 \quad (2.2.25)$$

となるような群のことである。このとき f は $f(\bar{\theta}, \theta) = \theta + \bar{\theta}$ となり, 一般に $U(T(\theta))$ は

$$U(T(\theta)) = \exp(it_a \theta^a) \quad (2.2.26)$$

となる。

Section 2.A Wigner の論理 (for Appendix A)

仮定

- (1) $|\langle \psi | \phi \rangle|^2 = |\langle T\psi | T\phi \rangle|^2$ (観測量は等しい)
- (2) $\exists T^{-1}$ s.t. $\forall \psi \in \mathcal{H}, T^{-1}(T\psi) = \psi$ (逆変換の存在)
- (3) $|\langle \psi | \phi \rangle|^2 = |\langle T^{-1}\psi | T^{-1}\phi \rangle|^2$ (逆変換でも観測量は等しい)*4

完全正規直交基底 $\{\psi_k\}_{k=1}^N$ について

- 射線の変換 T は, 元の変換 \mathcal{U} を幾つも含んでいる。
- T 中の任意の \mathcal{U} を用いて変換したものの $\{\mathcal{U}\psi_k\}$ も完全正規直交基底。
- 元の変換 \mathcal{U} の中には, $U[\psi_1 + \psi_k] = U\psi_1 + U\psi_k$ を満たすような変換 U が存在する。

この部分については, Weinberg の本文中にある
we can clearly adjust the phases of the too non-zero coefficients
はかなり不確かであるため, 文献 [3, p.252] に従って次のように議論を再構成した。
まず, ここでの変換は射線を射線に移す写像である。そのため, $\psi \mapsto \phi$ なる写像 U_0 と $\psi \mapsto \xi\phi$ なる写像 U は, $|\xi| = 1$ ならば同じ T に属するので全く同等であることに注意する。
ところで, ψ_k と $\Upsilon_k := \psi_1 + \psi_k$ を U_0 により写像した結果を $\phi_k \cdot \Omega_k$ としよう。このとき $\Omega_k = \xi_k(\phi_1 + \zeta_k\phi_k)$ であることはすぐに分かる。ただし $|\xi| = |\zeta| = 1$ である。
ここで写像 U を, $\psi_1 \mapsto \phi_1, \psi_k \mapsto \zeta_k\phi_k, \Upsilon_k \mapsto \xi_k^*\Omega_k$ で定義すると,
$$U(\psi_1 + \psi_k) = U\Upsilon_k = \xi_k^*\Omega_k = \phi_1 + \zeta_k\phi_k = U\psi_1 + U\psi_k$$

となる。ただし, ここではまだ $U(\psi_2 + \psi_3) = \phi_2 + \phi_3$ だとか $U(2\Upsilon_k) = 2\Omega_k$ のような主張はできないということに注意しておく。

一般の元について線型または反線型性が言えること

- $c_k/c_1 = c'_k/c'_1$ or $c_k/c_1 = (c'_k/c'_1)^*$ が成立する。(実数に対しての線型性!!)
- この条件は全ての k について同じ側を選ばなければならない。(線型 or 反線型が言えた)

一応, 式を書いておく。

$$\begin{aligned} \Phi = \psi_1 + \psi_k + \psi_l &\mapsto \Phi' = d'_1 \left[U\psi_1 + \left(\frac{d'_k}{d'_1}\right) U\psi_k + \left(\frac{d'_l}{d'_1}\right) U\psi_l \right] \\ &= d'_1 [U\psi_1 + U\psi_k + U\psi_l] \end{aligned}$$

$$\Psi = c_1\psi_1 + \dots \mapsto \Psi' = c'_1 \left[U\psi_1 + \sum \left(\frac{c'_k}{c'_1}\right) U\psi_k \right]$$

ところで, (2.A.14) 式・(2.A.15) 式を言うには, ψ_1 の前の係数 c_1 を omit せねばならない。つまり, 先ほど出てきた写像 U に更なる条件

$$\Psi = \sum c_k\psi_k \text{ と展開した時に } c_1 \neq 0 \text{ となるような } \Psi \text{ に対して, 写像 } U \text{ を} \\ \Psi \mapsto (c_1/c'_1)\Phi \text{ または } \Psi \mapsto (c_1^*/c'_1)\Phi \text{ と定義する。}$$

を付け加えなければならない。この条件は, これまでの条件 $\psi_1 \mapsto \phi_1, \Upsilon_k \mapsto \xi_k^*\Omega_k$ を含んでおり, また $\psi_k \mapsto \zeta_k\phi_k$ とは矛盾しない。

- 線型か反線型かは, 変換によってどちらかに決まる。(つまり, 元に依らない。)

*4 実は, 何よりも大きい仮定は, 物理的状態が Hilbert 空間上にあり, 更に射線について同一視できるということなのだ。

線型ならば **unitary**, 反線型ならば **antiunitary** である
簡単なので省略。

Section 2.β おまけ：位相空間とか^{*5}

位相空間

集合 X 上に, 以下の条件を満たす集合族 \mathcal{O} が定義できたとき, \mathcal{O} を位相といい, (X, \mathcal{O}) を位相空間という:

$$1. \quad \mathcal{O} \text{ の要素の任意の和集合は } \mathcal{O} \text{ の要素である。} \quad (2.\beta.1)$$

$$2. \quad O_1, O_2 \in \mathcal{O} \implies O_1 \cap O_2 \in \mathcal{O} \quad (2.\beta.2)$$

$$3. \quad \emptyset, X \in \mathcal{O}. \quad (2.\beta.3)$$

つまり \mathcal{O} は X 上の開集合の族と考えればよい。

Compact 性

位相空間 (X, \mathcal{O}) の部分集合 A が compact である, とは, A の任意の開被覆が有限部分被覆を持つこと, つまり $A \subset \bigcup O_\lambda$ となるような開集合たち $\{O_\lambda\}$ に対して, その有限個をもってきても A を覆うことができる, ということである。

連結性

位相空間 (X, \mathcal{O}) が, 空でない 2 つの開集合の非交差和で表されるとき, 連結でない, という。

Hausdorff の分離公理, **Hausdorff** 空間

Hausdorff の分離公理とは, 空間上の任意の相異なる 2 点 x, y に対し, 互いに交わらないようなそれらの開近傍が存在する, という性質。つまり「任意の 2 点には“その間”がある」という公理である。

これを満たすような位相空間を Hausdorff 空間という。

Hausdorff 空間の部分集合は, compact であるならば閉集合である。

Heine-Borel の被覆定理

Euclidean 空間 \mathbb{R}^n の部分集合について, 有界閉集合であることと compact であることは同値。

参考文献

- [1] 清水明. 『新版 量子論の基礎 — その本質のやさしい理解のために』. サイエンス社, Apr. 2004.
- [2] 新井朝雄, 江沢洋. 『量子力学の数学的構造 I』. 朝倉書店, Jul. 1999.
- [3] E. Wigner. *Gruppentheorie und ihre Anwendung auf die Quantenmechanik der Atomspektren*. No. 85 in Die Wissenschaft. Friedr. Vieweg & Sohn, 1931.
- [4] Wikipedia 日本語版. <http://ja.wikipedia.org>.

^{*5} 紙が半分ほど余ったので, Wikipedia[4] から引っ張ってきてみた。ちなみに, Section 2.α は, この résumé では Section 2.1 に吸収されている。