斥力型ポテンシャルの入った量子系における時間演算子の解析

早稲田大学 理工学研究科　中澤 恵太, 宮本 学 [1]

概 要

斥力型ポテンシャル系のハミルトニアンと正準交換関係を満たす演算子, すなわち時間演算子が考察される. 特に, 箱型ポテンシャル系における時間演算子に着目し, 二乗可積分な波動関数がその定義域に入るための十分条件が示される.

不確定性関係は古典系にはない極めて量子的な現象の一つである. その最も代表的なものは位置と運動量の不確定性関係であろう. 一方, この位置と運動量の組との類推から, 時間とエネルギーの組に対しても不確定性関係が考えられる. 時間演算子は, この時間とエネルギーの不確定性関係の研究において考案された.

時間とエネルギーの不確定性関係の導出は, しばしば量子系のモデルに負うなど様々であり, その解釈も含め現在でも盛んに研究が進められている. その原因の一つは, 時間は量子系においても古典系と同様にパラメータであって, 量子系での位置や運動量といった通常のオブザーバブルとは見なされない点にある. これは量子力学の数学的枠組にパラメータとしての時間に対応する演算子が存在しないことを意味する. しかし, 形式的にはハミルトニアン H と正準交換関係を満たす自己共役演算子 T の存在を想像できる: $[T,H]=i$. T は時間演算子と呼ばれる. ただし上記の理由から, T をパラメータとしての時間の量子化と考えることは出来ない. しかし, この T の存在を仮定すると, H のスペクトルが $-\infty$ から ∞ に渡り連続となり, H が離散スペクトルを持つ場合に矛盾が生じることを Pauli が指摘した [1]. したがって形式的にでさえ時間演算子を定義するすることは難しく見られた.

しかし, 近年の研究により, 時間演算子の数学的側面は部分的には明らかと成ってきた. 特に Aharonov-Bohm の時間演算子 [2] に関する解析から, 時間演算子は自己共役演算子を含むより広いクラスの対称演算子として捉えられることが明らかとなった (例えば, [3, 4, 5]). 時間演算子の解釈が不明瞭である時点では, 普通の意味でのオブザーバブルに要請される自己共役性に固執する積極的理由はないと言える. また, 量子情報理論に見られる POVM(positive operator valued measure) [6] の概念から, (極大な) 対称演算子としての時間演算子は “広義の” オブザーバブルとして形式的には理解でき, 特に状態が指定されれば, その状態における “測定値” の確率分布を一意的に構成できる特性を持つ. この “測定値” は到着時間との関連において詳細に調べられている (例えば, [7]).

一方, 時間とエネルギーの不確定性関係や量子系の到着時間の問題とは別に, 時間演算子と量子系の時間発展との関連が指摘されている. この事は次の厳密な不等式から示唆される [4]:

$$|\langle\psi|e^{-itH}\psi\rangle|^2 \leq \frac{4\langle T\psi|T\psi\rangle\|\psi\|^2}{t^2}. \tag{1}$$

[1] E-mail: miyamo@hep.phys.waseda.ac.jp

ここで, $|\langle\psi|e^{-itH}\psi\rangle|^2$ は ψ の自己相関関数(もしくは, 生存確率)であり, およそ, 初期状態と時刻 t の状態の重なり具合を示す量である. また, $t \in \mathbf{R}$ は時間のパラメータ, $\langle T\psi|T\psi\rangle$ は T の状態 ψ における二次のモーメントを表す. ただし, $\psi \in \mathrm{Dom}(T)$ (T の定義域) とする. この不等式は $\langle T\psi|T\psi\rangle$ が有限値をとるとき意味を持ち, それを保証する状態の集合が $\mathrm{Dom}(T)$ である. [2] この不等式は関係式: $e^{-itH}T = e^{-itH}(T+t)$ だけから導出され, T と H の具体的な実現には依らない(この関係式から $[T,H]=i$ は直ちに出る). 1次元自由粒子系を考えれば, T と H として Aharonov-bohm の時間演算子 $T_0 := \frac{1}{4}(QP^{-1}+P^{-1}Q)$ と自由ハミルトニアン $H_0 := P^2$ が取れる. ここで, Q, P はそれぞれ位置と運動量の演算子, P^{-1} は P の逆演算子で自己共役であることが示される. 不等式(1)が自明でないことは次の例から解かる. 初期波動関数として $\hat{\phi_\alpha}(k) = N_\alpha |k|^\alpha e^{-a_0k^2}$ を考える ($\alpha > -1/2$, $a_0 > 0$, N_α は規格化定数. ($\hat{}$) はフーリエ変換を表す). $\alpha > -1/2$ は, ϕ_α が二乗可積分であるための必要十分条件である. このとき, $|\langle\phi_\alpha|e^{-itH_0}\phi_\alpha\rangle|^2 = |\int_{-\infty}^{\infty}|\hat{\phi_\alpha}(k)|^2 e^{-itk^2}dk|^2 = (1+t^2/4a_0^2)^{-(\alpha+1/2)}$ と $\alpha > -1/2$ から, 1次元自由粒子系での自己相関関数は任意のベキで減衰し得ることがわかる. したがって, 不等式(1)は T [もしくは $\mathrm{Dom}(T)$] と自己相関関数の t^{-2}-減衰との間に何らかの非自明な関係が存在することを示唆する. また, $\tau_h(\psi) := \sup\{t>0 \mid |\langle\psi|e^{-itH}\psi\rangle|^2 = 1/2\}$ と置けば, (1)から $\tau_h(\psi) \le 2\sqrt{2}\langle T\psi|T\psi\rangle$ を得る. $\tau_h(\psi)$ は原理的には観測量であるから, この式は $\langle T\psi|T\psi\rangle$ が観測量と関係付くことを示す. これらの事実から, 時間演算子と量子系の時間発展との関連に着目するとき, $\langle T\psi|T\psi\rangle$ を有限にする状態とその集合 $\mathrm{Dom}(T)$ が注目される. 我々の目的は, これらの状態を調べることで, 時間演算子, 量子系の時間発展, そして, それらの関係等を明らかにすることである.

$\mathrm{Dom}(T)$ に属す状態を調べるとは, $\mathrm{Dom}(T)$ の具体形をもとめ, それのもつ数学的特徴を物理的な言葉で言い換えることであろう. Aharonov-Bohm の時間演算子 T_0 に関しては, $\mathrm{Dom}(T_0)$ の具体形が調べられている [4]:

$$\mathrm{Dom}(T_0) := \left\{ \psi \in L^2(\mathbf{R}) \;\middle|\; \begin{array}{l} \hat{\psi} \in AC(\mathbf{R}_k\backslash\{0\}),\quad \lim\limits_{k\to 0}\dfrac{\hat{\psi}(k)}{|k|^{1/2}} = 0, \\ \displaystyle\int_{\mathbf{R}_k}\left|\frac{d\hat{\psi}(k)/k}{dk} + \frac{1}{k}\frac{d\hat{\psi}(k)}{dk}\right|^2 dk < \infty \end{array} \right\}, \tag{2}$$

$$(\widehat{T_0\psi})(k) = \frac{i}{4}\left(\frac{d\hat{\psi}(k)/k}{dk} + \frac{1}{k}\frac{d\hat{\psi}(k)}{dk}\right), \quad \text{a.e. } k \in \mathbf{R}_k,\quad \psi \in \mathrm{Dom}(T_0). \tag{3}$$

(2)の積分, つまり $\langle T_0\psi|T_0\psi\rangle$ が有限値をとれば, 少なくとも $\hat{\psi}(k)$ は原点で0になることが示される(この証明に(2)の原点での境界条件は必要ない. 境界条件は T_0 が対称演算子であるために必要となる). 一般に $\hat{\psi}(0)=0$ のとき, その1次元自由粒子系での自己相関関数は t^{-1} より速く減衰することが知られている([9]. 上述の ϕ_α の例も見よ). したがって, 不等式(1)はこの事実と矛盾しない. しかし, これは単に無矛盾であるというだけで, $\mathrm{Dom}(T_0)$ に特徴的と言える性質を言い尽くし

[2]ある演算子 A を Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ 上の演算子として関数解析的に扱うとき, その定義域を考慮しなければならない: $\mathrm{Dom}(A) \subset \mathcal{H}$, $A : \mathrm{Dom}(A) \to \mathcal{H}$. 例えば $L^2(\mathbf{R})$ 上の位置演算子 Q の定義域は, $\mathrm{Dom}(Q) := \{\psi \in L^2(\mathbf{R}) \mid \int_{\mathbf{R}}|x\psi(x)|^2dx < \infty\}$, $(Q\psi)(x) := x\psi(x)$. $Q\psi$ が二乗可積分である条件は, $Q\psi \in L^2(\mathbf{R})$ であるために必要となる [8].

ているとは思われない．そこで，本研究では1次元ポテンシャル系の時間演算子 T_1 の定義域を具体的にもとめ，T_0 のそれと比較することでこの点を探った．

1次元ポテンシャル系の時間演算子 T_1 は，波動演算子 $W_\pm$ を用いて構成できる．波動演算子 [10] の定義は，$W_\pm := \text{s-}\lim_{t\to\pm\infty} e^{itH_1}e^{-itH_0}$．ここで，$H_1 := H_0 + V$ はポテンシャル系のハミルトニアン，V はポテンシャルである．H_1 が束縛状態を持つとき，$W_\pm$ は一般にユニタリーではない．ここでは簡単のため H_1 は束縛状態を持たないと仮定する．ここで着目する $W_\pm$ の性質は，H_0 から H_1 へのユニタリー変換を与えることである: $H_1 = W_\pm H_0 W_\pm^\dagger$．この事実から，$T_1 := W_- T_0 W_-^\dagger$ と置けば，$[T_0, H_0] = i$ から $[T_1, H_1] = i$ が自動的に伴い，T_1 はポテンシャル系の時間演算子と見なせる [11, 4]．W_+ に対しても同様である．この T_1 と H_1 が (1) を満たすことも明らかである．ハミルトニアンが束縛状態を持つ場合は，Hilbert 空間を散乱状態に制限することで構成できる．$\mathrm{Dom}(T_1)$ は形式的には次のように描ける:

$$\mathrm{Dom}(T_1) := W_-\,\mathrm{Dom}(T_0) = \left\{ \psi \in L^2(\mathbf{R}) \;\middle|\; \begin{array}{l} \hat{\psi_W} \in AC(\mathbf{R}_k\backslash\{0\}),\ \ \displaystyle\lim_{k\to 0}\frac{\hat{\psi_W}(k)}{|k|^{1/2}} = 0, \\ \displaystyle\int_{\mathbf{R}_k}\left|\frac{d\hat{\psi_W}(k)/k}{dk} + \frac{1}{k}\frac{d\hat{\psi_W}(k)}{dk}\right|^2 dk < \infty \end{array} \right\}, \tag{4}$$

ここで，$\psi_W := W_-^\dagger\psi$．しかし，上の積分条件は ψ にではなく，$W_-^\dagger\psi$ に関するため実質的な情報を持たない．$W_-^\dagger\psi$ は H_1 の定常解としての固有関数 $\varphi_\pm$ $(H_1\varphi_\pm = k^2\varphi_\pm)$ を使って描ける [10]:

$$(\widehat{W_\pm^*\psi})(k) = \int_{\mathbf{R}} \overline{\varphi_\pm(x,k)}\ \psi(x)\ dx, \quad \text{a.e. } k \in \mathbf{R}_k \setminus \{0\}. \tag{5}$$

$(\bar{\ })$ は複素共役を表す．さらに，$\varphi_\pm$ は1次元 Lippmann-Schwinger 方程式をみたす:

$$\varphi_\pm(x,k) = (2\pi)^{-1/2}e^{ikx} \mp \frac{1}{2i|k|}\int_{\mathbf{R}} e^{\mp i|k||x-y|}V(y)\ \varphi_\pm(y,k)\ dy. \tag{6}$$

この方程式は積分方程式であるから境界条件を含む．φ_- に関しては，$k > 0$ が左方投入問題に，$k < 0$ が右方投入問題に対応する．我々は $\mathrm{Dom}(T_1)$ に属す波動関数 ψ を求めるため，(5) と (6) を用いて (4) の積分，つまり $\langle T_1\psi|T_1\psi\rangle$ を評価した．ただし，$\psi \in \mathrm{Dom}(T_0)\cap\mathcal{S}(\mathbf{R})$ を仮定した．$\mathcal{S}(\mathbf{R})$ は急減少関数の集合である．この仮定は $\mathrm{Dom}(T_1)$ を $\mathrm{Dom}(T_0)$ からの "ずれ" として評価することを意味する．この仮定と (5), (6) とから，問題は ψ_W に代わって

$$(\widehat{W_-^\dagger\psi})(k) - \psi(k) = \int_{\mathbf{R}}\left[\frac{-1}{2i|k|}\int_{\mathbf{R}} e^{-i|k||x-y|}V(y)\ \varphi_-(y,k)\ dy\right]\ \psi(x)\ dx \tag{7}$$

が (4) の積分を有限値とするような ψ の条件を求めることに帰着される．このことは，$T_0(W_-^\dagger - I)\psi$ の二乗可積分性を調べることと同値である．

我々は，箱型ポテンシャル系においてこの条件の十分条件を求めた．ポテンシャルは $V(x) := V_0$ $(|x| \le d/2)$ or 0 $(|x| > d/2)$ $(V_0 > 0,\ d > 0)$ である．この系を選ぶ利点は，$\varphi_-(x,k)$ が具体的に求まる事にある．我々は次のような結果を得た:

$$\mathcal{D}_1 \subset \mathrm{Dom}(T_1), \quad \mathcal{D}_1 := \{\psi \in \mathrm{Dom}(T_0)\cap\mathcal{S}(\mathbf{R}) \ \mid \mathrm{supp}\ \psi \subset (-\infty, -d/2) \text{ or } (d/2, \infty)\}\ , \tag{8}$$

ここで, supp ψ は集合 $\{x \in \mathbf{R} \mid \psi(x) \neq 0\}$ の閉包である. $\mathcal{D}_1 \subset \mathrm{Dom}(T_1)$ の証明に, すなわち, $\psi \in \mathcal{D}_1$ に対し $T_0(W_-^\dagger - I)\psi$ が二乗可積分である事の証明に本質的なのは, I := supp V が有界であることと, $\varphi_-(x,k)$ が x を固定するとき k について 1 回連続微分可能であり,

$$\sup_{x\in \mathrm{I}, k\in\mathbf{R}_k\setminus\{0\}} |\varphi_-(x,k)| < \infty, \quad \sup_{x\in \mathrm{I}, k\in\mathbf{R}_k\setminus\{0\}} |\partial\varphi_-(x,k)/\partial k| < \infty, \quad \sup_{x\in \mathrm{I}, k\in\mathbf{R}_k\setminus\{0\}} |k^{-1}\varphi_-(x,k)| < \infty,$$

を満たすことである [12].

$\mathcal{D}_1$ に属す状態は, ポテンシャルとの相互作用領域から離れた波動関数と言える. この様な関数の具体例は, 関数 $h(x) := \exp[-(1-x^2)^{-1}]$ $(|x| < 1)$ or 0 $(|x| \geq 1)$ を $V(x)$ と重ならないように平行移動した後, それを適当に重ね合わせる事で作れる ($\psi \in \mathrm{Dom}(P^{-1})$ に対し, $(P^{-1}\psi)(x) = i\int_{-\infty}^x \psi(y)dy$, $\lim_{x\to\pm\infty}(P^{-1}\psi)(x) = 0$ に注意). また, 必然的に $\mathcal{D}_1 \subset \mathrm{Dom}(T_0) \cap \mathrm{Dom}(T_1)$ であるから, $\mathcal{D}_1$ に属す ψ は, (H_0, T_0), (T_1, H_1) のそれぞれの組に対し不等式 (1) を満たす. したがって, この ψ の自己相関関数は, 自由粒子系とポテンシャル系の両方において t^{-2} より速く減衰するという興味深い特性を持つ. しかし, $\mathcal{D}_1$ は明らかに $L^2(\mathbf{R})$ で稠密ではない. したがって, $\mathcal{D}_1$ が $\mathrm{Dom}(T_1)$ を本質的な点で特徴付けているかどうか疑問が残る. 我々は, $\mathrm{Dom}(T_1)$ に属す状態の具体例を $\mathrm{Dom}(T_0)$ からの "ずれ" として求め, その特徴を部分的にではあるが明らかにした. その物理的解釈も含め更なる特徴付けは今後の課題である.

有益な助言をくださった, 大場 一郎 教授 (早稲田大学), 中里 弘道 教授 (早稲田大学), および同研究室の皆様に感謝いたします. また, この第 9 回「非平衡系の統計物理シンポジウム」に参加させて下さった, 有光 敏彦 教授 (筑波大学) に感謝いたします.

参考文献

[1] W. パウリ, 量子力学の一般原理, 川口 教男, 堀 節子 共訳 (講談社, 1975), 106.

[2] Y. Aharonov and D. Bohm, Phys. Rev. **122** (1961), 1649.

[3] I. L. Egusquiza and J. G. Muga, Phys. Rev. A **61** (1999), 012104.

[4] M. Miyamoto, J. Math. Phys. **42** (2001), 1038.

[5] 数理科学, No.462 (2001), 12.

[6] A. S. Holevo, *Probabilistic and statistical aspects of quantum theory* (North Holland, Amsterdam, 1982).

[7] J. G. Muga, C. R. Leavens, and J. P. Palao, Phys. Rev. A **58** (1998), 4336.
Phys. Rev. A **56** (1997), 3425.

[8] 新井朝雄, ヒルベルト空間と量子力学 (共立講座 21 世紀の数学 第 16 巻, 共立出版, 1997).

[9] J. G. Muga, preprint, quant-ph/0105081.

[10] 黒田 成俊, スペクトル理論 II (岩波講座 基礎数学 解析学 (II) xi, 岩波書店, 1979).

[11] J. León, J. Julve, P. Pitanga, and F. J. de Urríes, Phys. Rev. A **61** (2000), 062101; A. D. Baute, I. L. Egusquiza, and J. G. Muga, Phys. Rev. A **64** (2001), 012501.

[12] M. Miyamoto, preprint, quant-ph/0105033, Appendix.