量子力学とスペクトル

山崎晃司

東京工業大学

August 7, 2021

量子力学の要請

量子力学の歴史で重要な発見は次の二つ。

- 黒体放射のスペクトル (Planck の公式)
- 光電効果 (Einstein の光量子仮説)

黒体放射のスペクトル

温度 T のとき、放射場の単位体積あたりのエネルギー密度の、振動数 ν に対する分布を $\rho_T(\nu)$ とする。
(すなわち、$\int_0^\infty \rho_T(\nu)d\nu$ が単位体積当たりのエネルギー密度になる。)
古典的には次が知られていた。

Rayleigh-Jeans の公式

ν が十分小さいとき、

$$\rho_T(\nu) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}kT$$

Wien の法則

ν が十分大きいとき、

$$\rho_T(\nu) = c_1\nu^3 \exp(-c_2\frac{\nu}{T})$$

黒体放射のスペクトル

1900年、PlanckはWienの法則を修正する形で、Rayleigh-Jeansの法則を含む次の式を提案した。

Planckの公式

$$\rho_T(\nu) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\frac{1}{\exp(\frac{h\nu}{kT}) - 1}$$

その後、この公式はPlanck自身の手で証明された。
証明のアイデアは、これまで連続的に分布すると考えられていたエネルギーが、$h\nu$の自然数倍しかとらないと仮定することであった。
エネルギーに対する積分を適切に総和に置き換えることで、統計力学の要請から、公式は証明される。
証明の肝は次の式である。

$$\frac{1}{1-\exp(-x)} = \sum_{n=0}^{\infty}\exp(-nx)$$

光電効果

物質に光を照射すると、電子を放出したり、電流が流れたりすることがある。
これを光電効果と呼ぶ。
Lenard の実験により、ある一定以下の振動数の光をいくら照射しても光電効果は起こらないことがわかっていた。
1905 年、Einstein はこのような現象を、「光量子仮説」によって説明した。
これにより、「量子」の存在が広く知れ渡るようになった。

量子力学の年表

1925 年-Heisenberg の行列力学
1926 年-Schrödinger の波動力学
1932 年-John von Neumann がヒルベルト空間形式の量子力学として統一
→古典的数理量子力学の完成
1940 年代-ロシア学派の活躍
1943 年-Gelfand-Neumark による非可換 C^* 環の特徴づけ
→代数的量子力学の開始、および Neumann 形式の量子力学との統一

ノイマン (Neumann) 形式の量子力学

Definition 2.1

ヒルベルト空間とは、エルミート内積を持つ $\mathbb{C}$-線形空間であって、ノルムが定める距離について完備なもののこと。
(有限次元とは限らない。)

以下 $\mathcal{H}$ を可分なヒルベルト空間とする。
(このとき、$\mathcal{H}$ は完全正規直交系を持つ。)
また、$\mathcal{H}$ の内積を $\langle \cdot, \cdot \rangle$ で表し、ノルムを $\| \cdot \|$ で表す。

Example 2.2

配位空間（位置空間）をリーマン多様体 M とする。
（3 次元ユークリッド空間上の N 個の粒子については $M=\mathbb{R}^{3N}$。）
M 上の L^2 空間 $L^2(M)$ を相空間または状態空間と呼ぶ。

Example 2.3

$M=\{0,1\}$ の時、$L^2(\{0,1\})\cong\mathbb{C}^2$ である。
$L^2(\{0,1\})$ の各元（の規格化）を量子ビットと呼ぶ。

有界作用素

Definition 2.4 (有界作用素)

線形写像 $T : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ が有界であるとは、$\|T(\psi)\| \leq C\|\psi\|({}^\forall\psi \in \mathcal{H})$ を満たす正定数 $C \in \mathbb{R}_{>0}$ が存在すること。有界な線形写像を有界線形作用素とも呼ぶ。

Propositoin 2.5

作用素が有界 $\Leftrightarrow$ 連続

レゾルベントとスペクトル

Definition 2.6 (レゾルベント)

$T : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ を有界線形作用素とする。
複素数 $\lambda \in \mathbb{C}$ に対し、$T - \lambda Id$ が線形同型かつ、逆写像が有界となるとき、$R_\lambda(T) = (T - \lambda Id)^{-1}$ を T のレゾルベント (resolvent) と呼ぶ。
レゾルベントが定義される複素数全体の集合を $\rho(T)$ と書く。

Definition 2.7 (スペクトル)

$T : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ を有界線形作用素とする。
T の点スペクトル (point spectrum) とは、T の固有値のこと。
T の点スペクトル全体の集合を $\sigma_p(T)$ と書く。
複素数 $\lambda \in \mathbb{C}$ が T のスペクトル (spectrum) であるとは、λ がレゾルベントを定めないこと。
T のスペクトル全体の集合を $\sigma(T)$ と書く。

$\sigma_p(T) \subset \sigma(T)$ に注意。$\mathcal{H}$ が有限次元ならば $\sigma_p(T) = \sigma(T)$。

状態と物理量

Definition 2.8

各ベクトル $\psi \in \mathcal{H}$(の規格化) を状態または状態ベクトルと呼ぶ。
各有界線形作用素 $T : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ を物理量または観測可能量 (observable) と呼ぶ。
物理量 $T : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ の観測値または測定値とは T のスペクトルのこと。

Axiom 2.9 (コペンハーゲン解釈)

物理量 T の観測を行い、観測値として点スペクトル λ が得られた場合、状態は λ に関する固有ベクトルへ遷移する。

Example 2.10

$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^f)$ とする。
$Q_i : L^2(\mathbb{R}^f) \to L^2(\mathbb{R}^f)$ を $\psi(x) \mapsto x_i\psi(x)$ で定める。
$P_i : L^2(\mathbb{R}^f) \to L^2(\mathbb{R}^f)$ を $P_i = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_i}$ で定める。
Q_i を i 番目の位置作用素と呼び、P_i を i 番目の運動量作用素と呼ぶ。

i : 虚数単位
$\hbar = \frac{h}{2\pi}$: ディラック定数
$\frac{\partial}{\partial x_i}$: (一般化された) 偏微分作用素

コンパクト台を持つ滑らかな関数の集合 $C_0^\infty(\mathbb{R}^f)$ は $L^2(\mathbb{R}^f)$ の内部で稠密。
よって、$C_0^\infty(\mathbb{R}^f)$ 上の偏微分作用素は $L^2(\mathbb{R}^f)$ 上へ拡張できる。

Example 2.11

$\mathbb{T}$ をトーラスとし、各元を $t \in \mathbb{T}$ で表す。
$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{T})$ とする。
$\{\exp(2n\pi\nu ti)\}_n$ は $L^2(\mathbb{T})$ の正規直交系 (フーリエ級数)。
$\Lambda : L^2(\mathbb{T}) \to L^2(\mathbb{T})$ を $\Lambda = -\frac{i}{2\pi}\frac{\partial}{\partial t}$ で定める。
$\{\exp(2n\pi\nu ti)\}_n$ は Λ のスペクトル分解。
Λ を振動数作用素と呼ぶ。
振動数作用素のスペクトル (またはその図) を輝線スペクトルと呼ぶ。

虚時間は逆温度に比例する

"虚数時間" ti と温度 T(と逆温度 $\beta = \frac{1}{kT}$) の間には次の関係がある。

$$ti = \frac{\hbar}{kT} = \hbar\beta$$

C^* 環

Definition 3.1

対合環とは、(可換とは限らない)$\mathbb{C}$-代数 $\mathbb{C} \to C$ であって、対合と呼ばれる環の反準同型 $C \to C; A \mapsto A^*$(積の順序をひっくり返す) を備え、対合の $\mathbb{C}$ への制限が複素共役に一致するもののこと。
バナッハ環とは、完備ノルム $\| - \|$ を備えた $\mathbb{C}$-代数であって、
$\|AB\| \leq \|A\|\|B\|$ を満たすもののこと。
C^* 環とは、対合バナッハ環であって、$\|A^*A\| = \|A\|\|A^*\|$ を満たすもののこと。(証明は難しいが、この時 $\|A\| = \|A^*\|$ が成り立つ。)

Example 3.2

ヒルベルト空間 $\mathcal{H}$ の有界線形作用素全体の集合を $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ と書く。
$\mathcal{B}(\mathcal{H})$ は非可換 C^* 環。

Example 3.3

コンパクトハウスドルフ空間 X 上の複素数値連続関数全体の集合を $C(X)$ と書く。
$C(X)$ は可換 C^* 環。

レゾルベントとスペクトルの再定義

C を C^* 環とし、$T \in C$ とする。

Definition 3.4 (レゾルベント)

複素数 $\lambda \in \mathbb{C}$ に対し、$T - \lambda$ が単元となるとき、$R_\lambda(T) = (T - \lambda)^{-1}$ を T のレゾルベント (resolvent) と呼ぶ。
レゾルベントが定義される複素数全体の集合を $\rho(T)$ と書く。

Definition 3.5 (スペクトル)

複素数 $\lambda \in \mathbb{C}$ が T のスペクトル (spectrum) であるとは、λ がレゾルベントでないこと。
T のスペクトル全体の集合を $\sigma(T)$ と書く。

極大スペクトル

Theorem 4.1 (ヒルベルトの零点定理)

k を代数的閉体とする。
多項式環 $k[X_1, \cdots, X_n]$ の極大イデアルは全て
$(X_1 - a_1, \cdots, X_n - a_n) (a_i \in k)$ の形をしている。

これにより、次の全単射が存在する。

$$\{k[X_1, \cdots, X_n] \text{の極大イデアル}\} \leftrightarrow k^n$$

Definition 4.2

可換環 R に対し、R の極大イデアル全体の集合を $Spm(R)$ や $Spec_m(R)$ などと書く。
$Spm(R)$ を R の極大スペクトル (maximal spectrum) と呼ぶ。

ゲルファント＝マズールの定理

Theorem 4.3 (ゲルファント＝マズールの定理)

C^* 環が可除環ならば $\mathbb{C}$ と同型。

<u>証明の概略</u>

$T \in C$ のスペクトル $\lambda \in \mathbb{C}$ を一つとれば $T - \lambda$ は非単元。可除環の非単元は 0 のみ。

C^* 環の極大スペクトル

Propositoin 4.4

C は可換 C^* 環とする。任意の環準同型 $\phi : \mathbb{C}[X] \to C$ は、極大イデアルを極大イデアルに引き戻す。

証明

C の任意の極大イデアル I をとる。$\phi^{-1}(I)$ は素イデアル。$\mathbb{C}[X]$ の素イデアルで極大イデアルでないものは (0) のみ。$\phi^{-1}(I) = (0)$ と仮定すると、ϕ は単射かつ $I = (0)$。このとき単射 $\mathbb{C}[X] \to \mathbb{C}$ が導かれることになり矛盾。よって $\phi^{-1}(I)$ は極大イデアル。

スペクトルの代数幾何的解釈

C は可換 C^* 環とし、$T \in C$ とする。
$X \mapsto T$ により、$\mathbb{C}$-準同型 $\phi_T : \mathbb{C}[X] \to C$ が定まる。
ϕ_T は写像 $\phi_T^* : Spm(C) \to Spm(\mathbb{C}[X]) \cong \mathbb{C}$ を定める。

$\lambda \in \mathbb{C}$ が T のレゾルベントを定める $\Leftrightarrow$ $T - \lambda$ が環 C の単元
$\lambda \in \mathbb{C}$ が T のスペクトル $\Leftrightarrow$ $T - \lambda$ が環 C の非単元

$T - \lambda$ が環 C の非単元ならば、$T - \lambda$ を含む極大イデアル $\mathfrak{m}$ が存在する。
環準同型 ϕ_T による $\mathfrak{m}$ の引き戻しは $(X - \lambda)$。
すなわち、ϕ_T^* による $\mathfrak{m}$ の像が λ。
さらに、$\sigma(T) = \mathrm{Im}(\phi_T^*)$。

数学と物理の対応

Table: 対応表

数学	幾何	解析
微分幾何	多様体	関数環
代数幾何	スキーム	可換環
Gelfand-Neumark	コンパクト・ハウスドルフ空間	可換 C^* 環
物理	相空間 (状態空間)	物理量
解析力学	余接束 T^*M	関数環 $C(T^*M)$
量子力学	???	(主に) 非可換 C^* 環

量子論の難しさは “非可換幾何学” の難しさにある。