

Heisenberg 描像の観測演算子の固有値問題と 非可逆性について

最上 嗣生

理化学研究所, 351-0198 埼玉県和光市広沢 2-1

e-mail: mogami@brain.riken.go.jp

2005 年 4 月 7 日

量子力学では、Heisenberg 描像と Schrödinger 描像は全く等価であると考えられている。しかし、この二つは境界条件においてわずかな違いがある。このわずかな違いが時間反転対称でない減衰モードの原因になることと、それが非可逆現象と関係している事を以下に説明する。

熱が低温がわに移動する現象が典型であるが、非可逆現象は広範に見られる物理現象である。しかし力学の基本法則は時間反転不変である。時間反転不変であるとは $A \rightarrow B$ という変化が起こるならば $B \rightarrow A$ という変化も起こりうるという事である。そのために、もし熱が低温側に移動できるならば、反対に高温側に移動する現象も起きなくてはならない。しかしそのような事は実際は起こらない。これは熱力学ができた時からの基本的パラドクスであり未だに解けてはいない。

Schrödinger 描像では力学は Schrödinger 方程式

$$id \psi / dt = H \psi$$

として記述される。Schrödinger 方程式が、時間反転不変であるのは H が Hermite すなわち $H^* = H^T$ であるからである。例えば $H = \int dx (p^2/2m + V(x))$ のような Hamiltonian の Hermiticity を証明するには、 $p = -i \partial_x$ が Hermitian である事を証明すれば充分である。

$p = -i \partial_x$ のような演算子の転置 p^T は

$$\int dx \phi(x) (p^T \psi(x)) \equiv \int dx \psi(x) (p^T \phi(x))$$

として定義されている。 p が Hermitian である事は

$$\begin{aligned} \int dx \phi(x) (p^T \psi(x)) &= \int dx \psi(x) (p^T \phi(x)) \\ &= [-i \phi(x) \psi(x)]_{-\infty}^{\infty} - \int dx \phi(x) (p \psi(x)) \end{aligned}$$

と、さらに $p^* = -p$ であることと $x \rightarrow \pm\infty$ で $\psi(x) = 0$ であることを使って証明される。 $x \rightarrow \pm\infty$ で $\psi(x) = 0$ という条件は見落としがちであるが、実はここにちょっと問題がある。 p は普通は常に Hermitian であり固有値は実であると思われているが、 $\psi(x) = 0$ の境界条件がなければ $\psi(x) = e^x$ のように虚の固有値を持つ固有状態が存在する。

さて一方、量子力学によって知りうることの全ては、任意の観測量 A の任意の状態 $|\psi\rangle$ に対する期待値 $\langle \psi | A | \psi \rangle$

から知ることができる。Schrödinger 描像ではこの ψ が $id \psi / dt = H \psi$ として時間発展するわけである。これを使うと $i(d/dt) \langle \psi | A | \psi \rangle = \langle \psi | (AH - HA) | \psi \rangle$ である。この方程式を反対に ψ が不変で A が $idA/dt = AH - HA$ という方程式に従って変化すると考えても良い。これが Heisenberg 描像である。このような計算によって両者は全く同一だと考えられている。

しかし良く見てみると観測量 A に対して ψ と同様に $x \rightarrow \pm\infty$ で $A \rightarrow 0$ を要求するべき理由は特段ない。遠方で増大しようとかまわさない。もっとも初歩的な観測である「何もしない観測」 $A = 1$ ですらこの条件をみたしていない。

また $\rho = |\psi\rangle \langle \psi|$ として $\langle \psi | A | \psi \rangle = \text{tr } \rho A$ である。これは ρ の空間と A の空間が双対であることを言っている。 ρ が $x \rightarrow \pm\infty$ で $\psi(x) \rightarrow 0$ である全ての関数の集合であれば、その線形な双対の空間の自然な定義は $x \rightarrow \pm\infty$ で $A(x) \rightarrow 0$ であるものと $A(x) \rightarrow 0$ でないものの全てを含んだ集合である。この理由からも A に対して無限大で落ちている事を要求しない事は自然である。

A が無限大で落ちていなければ A に対する線形演算 $L : AL \equiv AH - HA$ に対しては ψ の Hermite 性を証明した時のような部分積分による議論は成立しない。従って L は Hermite ではなく、虚の固有値を持つ可能性がある。虚の固有値は減衰あるいは増大するモードの存在を意味する。その片方しかなければその系は非可逆である。

さて $A(t=0)$ をもとにして $A(t), t > 0$ を求めるという初期値問題を解かなくてはならない。これは retarded propagator を使って $A(t) = \int d\omega e^{-i\omega t} A(t=0) / (L - \omega - i\varepsilon)$ として求める事ができる。ここで ε は無限小である。(任意の物理的な問いは $t > 0$ の結果を知れば知るのである。従って、 $t < 0$ について解を求める必要はない。)

ここで、例示の為に具体的に $H = H_0 + V$ のように自由部分と相互作用部分にわけることができて、さらに摂動論が適用可能であるとし $A(t=0) = \sum_k |k\rangle a_k \langle k|$ という状態の時間発展を考える。 $|k\rangle$ は H_0 の固有値 E_k の固有状態である。固有値は縮退しているかもしれないし E の有限の区間に限り無くたくさん状態がつまっているかも知れない。 $*L = [* , H] = [* , H_0] + [* , V] \equiv *L_0 + *L_V$ と分けて、二次までの摂動で

$$A(t) = \int d\omega e^{-i\omega t} A(t=0) \{ L^- - L^- L_V L^- + L^- L_V L^- L_V L^- \}$$

である。 $L^- \equiv (L_0 - \omega - i\varepsilon)^{-1}$ ここで $L_V L^- L_V = X(\omega)$ と置き換えて、 $\omega = 0$ の周りで Taylor 展開し 0 次だけの近似をする。 $X(0)$ は有限の虚の成分を持つことに注意。 $\text{Im} X > 0$ と正定値である。

$$A(t) = \int d\omega e^{-i\omega t} A(t=0) \{ L^- - L^- L_V L^- + L^- X(0) L^- \}$$

これから

$$a_k(t) = a_k(0) - itV_{kk}a_k(0) + it \sum_{k'} X(0)_{kk'} a_{k'}'(0)$$

ただし、 t が大きい時の近似である。第二項は普通にポテンシャルによるエネルギーシフトである。第三項は虚数値の為に a_k のある線形結合に減衰をもたらす。これをくり返せば指数関数的に減衰するだろう。虚の成分を explicit に書くと

$$a_k(t) = a_k(0) - it \times (\text{エネルギーシフト})$$

$-\sum_{k'} 2\pi\delta(E_k - E_{k'}) |V_{kk'}|^2 a_k + \sum_{k'} 2\pi\delta(E_k - E_{k'}) |V_{kk'}|^2 a_{k'}$
 H を N 粒子の気体のモデルだと思えば、この表式は B-BGKY 近似なしで気体のモデルの確率の移行を表した方程式と形式的に同じである。ただし、これは確率ではなく observable である。そして最終的には $a_k = f(E_k)$ に、つまり同じエネルギーに対しては同じ重みであるような演算子に、収束して終わる。ここで f はなんらかの連続関数である。

ここまでで、いくつものおおまかな近似を行った。しかし、Hamiltonian の関数 $A(t) = f(H)$ が近似無し的发展方程式の安定点になっている事は確かである。そして $A(t)$ には多くの減衰するモードがある事が分かった。だからここではきちんと証明する事はできないが $A(t)$ は $f(H)$ に向かって収束するでしょう。¹

さて、ここまでで、一般的に理解されている時間反転不変性が自然に破れている事、それが何か減衰のような現象を引き起こす事、そしてそれが気体などの確率論的方程式に似ていることまではわかった。ではこれでどのように物理的な非可逆現象を説明できるのであろうか。統計力学の基本的仮定として等重率の仮定がある。これはエネルギーが（ほとんど）等しい全ての状態の間で重みが等しいという仮定である。ほとんどの統計力学の結果はこの仮定から導き出す事ができる。だから等重率の仮定を正当化すればよい。

量子力学で状態の重みが等しくない事を観測する演算子 $A = \sum_{\vec{k}} |\vec{k}\rangle a_{\vec{k}} \langle \vec{k}|$ を考える。ここで $|\vec{k}\rangle$ は全 Hamiltonian H の固有値 \tilde{E}_k の固有状態である。特に \tilde{E}_k が非常に小さな幅 ΔE の中に限られていてかつ $\sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}} = 0$ となるようなものが「重みが等しくないことを観測する演算子」である。これらの演算子が大きな値を示せば等重率からずれている

¹ただし全てのオペレータがそうではない。先に議論した通り無限遠で落ちているオペレータに対しては L は Hermitian であるから、その時間発展には X から来る虚部がなく減衰も収束もしない。従ってあるクラスのエベレータのみが $f(H)$ に収束するのである。どのようなクラスかは将来の研究にゆだねることにしよう。しかし、この後に述べる「重みが等しくない事を観測する演算子」が収束する事は文献 [1] で摂動的に証明した。

ことを表し、ゼロになれば重みが等しいことを表す。だから $A \rightarrow 0$ を示せばよい。

$A \rightarrow f(H)$ ということは、 $a_{\vec{k}} \rightarrow f(\tilde{E}_k)$ と言う事である。確率の保存と同様に $\sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}}$ が保存するので、 $f(x) = 0$ でなければならない。従って $A \rightarrow 0$ である。これをもって等重率は証明されたことになる。

最後に、以上の議論では摂動の最初の方だけで $A \rightarrow f(H)$ であることを示したが、これを摂動的に全オーダーで行おうとした試みが文献 [1] である。

文献

[1] Mogami, T., Statistical mechanics and the duality of quantum mechanical time evolution, cond-mat/0402583