

博士論文

量子系における“時間演算子”の数学的基礎と
波束の長時間挙動

Mathematical Foundation of “Time Operators” and
Long-Time Behavior of Wave Packets in Quantum Systems

早稲田大学大学院 理工学研究科

物理学及応用物理学専攻 量子力学基礎論研究

宮本 学

2003 年 3 月

目次

| | | |
|-----|------------------------------|----|
| 第1章 | 序論 | 5 |
| 1.1 | 時間演算子の公理的取り扱い | 7 |
| 1.2 | 長時間領域でのベキ減衰の初期状態依存性 | 9 |
| 1.3 | 時間演算子とベキ減衰の初期状態依存性との関連 | 11 |
| 第2章 | 時間演算子の数学的基礎付けの試み | 15 |
| 2.1 | 弱 Weyl 関係式の導入 | 15 |
| 2.2 | 正準交換関係, Weyl 関係式, 弱 Weyl 関係式 | 16 |
| 2.3 | Aharonov-Bohm 時間演算子 | 18 |
| 2.4 | 時間演算子と生存確率の関係 | 23 |
| 2.5 | 最小不確定性状態の欠如 | 28 |
| 2.6 | 一般的な量子系における時間演算子の構成 | 31 |
| 第3章 | 1次元自由波束の漸近的振る舞いにおけるベキ減衰 | 35 |
| 3.1 | 自由波束の長時間領域での漸近展開 | 35 |
| 3.2 | 自由レゾルベントの漸近展開 | 37 |
| 3.3 | 時間発展演算子の漸近展開 | 41 |
| 3.4 | 初期波束のゼロ運動量近傍での振る舞いとベキ減衰との関係 | 45 |
| 3.5 | 自由波束に対する漸近展開式の適用限界 | 47 |
| 第4章 | 1次元ポテンシャル系の漸近的振る舞いにおけるベキ減衰 | 51 |
| 4.1 | 波束の長時間領域での漸近展開 | 51 |
| 4.2 | 箱型障壁ポテンシャル系への応用 | 55 |
| 4.3 | 初期波束のゼロ運動量近傍での振る舞いとベキ減衰との関係 | 58 |
| 4.4 | 有限井戸型ポテンシャル系への応用 | 62 |
| 4.5 | 初期波束のゼロ運動量近傍での振る舞いとベキ減衰との関係 | 64 |
| 4.6 | ゼロエネルギー共鳴とベキ減衰 | 66 |
| 第5章 | 結論 | 73 |

| | |
|--|----|
| 付録 A $\ T_0\psi\ $ を有限にする状態 ψ の性質 | 77 |
| 付録 B 1次元自由粒子系の時間発展演算子のスペクトル密度による記述 | 79 |
| 参考文献 | 83 |

第1章

序論

量子力学の確立と共に量子論は飛躍的な進歩を遂げてきた。学術的な進歩もさることながら、その技術面への貢献は計り知れないだろう。そして、この進展は現在において益々その高まりを見せ、中でも量子情報や量子コンピュータといった分野に始まる量子情報技術の展開に注目が集まっている。同時に、このような状況を契機に、量子力学の抱える基礎的問題への関心も高まりつつある。そこでは、観測行為に関する問題や、量子状態を効率的に制御する際に必要とされるデコヒーレンス抑制の問題等が、従来のような学術的観点からだけでなく、技術的側面からも重要となるからである。

我々はまだ量子論に関するこれらの問題を解決するには至っていない。また、実は量子論において解明されていない問題はこれだけではない。特に、量子論における“時間”に着目するとき様々な基礎的問題が挙げられる。例えば、時間とエネルギーの不確定性関係の理解、粒子の到着時間の量子論的記述、トンネル時間の記述、不安定量子系の短時間および長時間領域での崩壊様式の理解などである。これらの問題の解決は、量子系の時間発展のより深い理解をもたらし、量子状態の制御の問題に役立つ可能性がある。したがって、上述の観測問題やデコヒーレンスの問題に加え、これらの問題の解決による量子論の総合的な理解の進展が一層望まれていると考えられる。本研究では、量子論における“時間”に関する基礎的問題から二つの課題を扱う。第一の課題は時間とエネルギーの不確定性関係と深い関連を持つ時間演算子であり、もう一つの課題は初期波束の特性と波束の長時間領域でのベキ減衰との関連である。

第一の課題で扱う時間演算子は時間とエネルギーの不確定性関係と深く関わっている。時間とエネルギーの不確定性関係は、位置と運動量の不確定性関係と違い、量子力学の数学的枠組から演繹的に導出されていない特殊性を持つ。したがって、その物理的意味も導出の仕方に依存する形となる。実際、時間とエネルギーの不確定性関係を、エネルギーの測定精度とその測定に要する時間の関係と理解する場合もあれば、エネルギー準位幅と状態の遷移時間との関係と見る場合もある(例えば [1] を見よ)。“時間演算子”は、時間とエネルギーの不確定性関係からこのような曖昧さを取り去り、位置と運動量の不確定性関係と同じ立場に置く目的で考案された。それは、ハミルトニアンと正準交換関係を満たす形式的

な演算子として導入される。このとき、時間とエネルギーの不確定性関係を、位置と運動量の不確定性関係と同様に、演繹的に導出できる。しかし、Pauli の批判 [2] に代表されるように、それが数学的に矛盾なく定義できるのかどうかは疑問視されていた。その一方で、数学的に厳密なアプローチがなされてきた訳ではない。時間演算子が提案されておよそ 70 年以上が経つ現在、数学的に厳密な、公理的アプローチがなされても良い時期ではないだろうか。そこで本研究では、von Neumann により整備された公理的量子力学 (例えば [3, 4] を見よ) に基づいて時間演算子を扱い、その諸性質を明らかにする。また、ここでの調査は量子力学の公理や数学的構造を全く変えることなく進められる。したがって、本研究によって量子力学が内包する時間演算子に関する性質が暴かれる可能性もある。我々はさらに、時間演算子と量子ダイナミクスとの関連を模索することで、時間演算子の物理的意味の理解を目指すという大胆な試みを行う。その過程で、時間演算子と初期状態の生存確率とが密接に関連することを明らかにする。そして実際、この事実は時間演算子の定性的な理解を可能にしている。

もう一つの課題では、長時間領域での波束のベキ減衰に焦点が当てられる。ベキ減衰に関する研究は不安定量子系の研究と関連している。不安定系を量子力学的に扱うとき初期状態の生存確率を調べることが重要となるのだが、このときハミルトニアンの特値が連続で下に有界であれば、長時間領域において生存確率はベキ減衰する事が Paley-Wiener の定理から予言される (例えば [5, 6] 等を見よ)。¹ 実際、それは様々な理論的研究において確認されている (例えば [7, 8, 9, 10] とその参考文献を見よ)。また、このベキ減衰は Paley-Wiener の定理に基づくため、不安定系に限った現象ではない。実際、基本的な系の一つである 1 次元自由粒子系でも確認できる。この場合、生存確率のベキ減衰は、自由波束が (空間における各位置で) ベキ減衰する事実に基づく。² しかし、実はこれらのベキ減衰は不幸にも未だに実験的に観測されていない (例えば [11, 12, 13] を見よ)。このような状況から、ベキ減衰のより深い理論的な解明が必要と考えられる。一方近年、波束のベキ減衰に関する理論的研究において、ベキ減衰のベキの値が初期波束に依存していることが 1 次元自由波束で確認された [14, 15, 16, 17]。しかし、これらの研究では具体例を示すに留まり、したがって一般的な初期波束に関する結果ではなかった。そこで、本研究では長時間領域において自由波束を漸近展開することで、従来の研究結果の一般化を試みる。さらに、この問題をポテンシャル系へと拡張した場合の結果についても述べる。

以下、1.1 節と 1.2 節において上述の二つの研究課題が生じた背景を詳しく述べる。二つの研究は一見すると全く別物のように見えるかもしれないが、実はそこに深い関連性が隠

¹ 正確には、この定理は生存確率が長時間領域において指数関数より遅く減衰することを主張している。

² 自由粒子系において、生存確率や非逃避確率といった用語を使うのは適当ではないかもしれない。しかし、後に見るように、それらの数学的定義は従来の定義の自然な拡張になっている。また、その定義の意味する物理的意味も明らかであることが分かる。そこで、ここでは慣習としてこれらの用語を用いることにする。

されている. 1.3 節では, 事前に本研究の一部を紹介することで, この二つの研究課題の関連性を明らかにする. 実は, この関連を明らかにしたこと自体も本研究の成果の一つである. そして, 同時にそこで, 本論文の構成を述べて行くこととする.

1.1 時間演算子の公理的取り扱い

時間演算子が考案された理由は時間とエネルギーの不確定性関係の研究に深く関わっている. 不確定性関係と言った場合, その最も代表的な例は位置と運動量の不確定性関係であろう. この関係式は位置演算子 Q と運動量演算子 P が正準交換関係,

$$QP - PQ = i\hbar \quad (1.1)$$

を満たす事実から演繹される. ここで $\hbar = h/2\pi$ であり, また h は Planck 定数である. 一方, 時間とエネルギーの不確定性関係について, このような構造が量子力学に内在するかどうかは明らかではない. 何故なら, エネルギーに対応する演算子をハミルトニアン H に選んだとしても, 時間に対応する演算子を決められないからである. 決められない理由の一つは, 演算子として量子化されるべき, 古典的な力学変数としての時間が存在しない事にある. しかし, このような古典的対応が明らかではなくとも, 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 を形式的には導入できる. すなわち,

$$TH - HT = i\hbar. \quad (1.2)$$

演算子 T はしばしば “時間演算子” と呼ばれる (例えば [1, 18] とその参考文献を見よ). 仮にこのような演算子 T が存在すれば, 位置と運動量の不確定性関係の導出と同様にして, 時間とエネルギーの不確定性関係を正準交換関係 (1.2) から演繹できる. したがって, この意味で時間とエネルギーの不確定性関係を, 位置と運動量の不確定性関係と同じ立場で扱うことができる. 時間演算子の具体例として, Aharonov-Bohm[19] が提案した演算子 T_0 を挙げられる.

$$T_0 := \frac{m}{2}(QP^{-1} + P^{-1}Q). \quad (1.3)$$

ここで m は粒子の質量を表す. また P^{-1} は P の逆演算子である. ここでは演算子 T_0 を Aharonov-Bohm 時間演算子と呼ぶことにする. この演算子 T_0 が 1 次元自由ハミルトニアン $H_0 := P^2/2m$ と正準交換関係 (1.2) を形式的に満たすことは確認できる. したがって T_0 と H_0 との間不確定性関係を導出できそうに見える. しかし, T_0 の定義に現れる P の逆演算子 P^{-1} を矛盾なく定義できるかどうかという疑念が持たれていた. また, 実は (1.2) による時間演算子の形式的な導入さえもが Pauli の批判により疑問視されていた. Pauli の

批判とは次のようなものである [2]: 仮に (1.2) を満たす自己共役演算子 T が存在したとすると, (1.2) を形式的に繰り返し使うことで以下の関係式が示せる.

$$He^{i\epsilon T} = e^{i\epsilon T}(H + \epsilon), \quad \forall \epsilon \in \mathbf{R}. \quad (1.4)$$

いま, H の固有値を E , 対応する固有状態を ψ_E としよう. すると, (1.4) を ψ_E に作用すれば, 新たに $e^{i\epsilon T}\psi_E$ が H の固有値 $E + \epsilon$ に対応する固有状態と分かる. パラメータ ϵ は任意であるから, この事は H が全ての実数を固有値に持つ事を意味する. しかし, 実際には H のエネルギースペクトルは下に有界となる場合もあれば離散的な場合もあり得る. したがって, 任意の物理系に対し時間演算子を定義できるとは限らないと結論される. さらに, たとえ数学的に矛盾なく時間演算子を定義できたとしても, その物理的解釈の不明瞭さは残されたままである. したがって, それから導かれる時間とエネルギーの不確定性関係もまた同様である.

一見すると議論を挟む余地も無いように見えるが, 実は上記の論理的帰結は公理論的立場に立てば回避できる可能性がある. まず (1.3) 式における逆演算子 P^{-1} は矛盾なく定義可能であり, $L^2(\mathbf{R})$ 上の自己共役演算子となることが示せる (詳細は 2.3 節で述べられる). Pauli の批判については次のことを指摘できる. それは, この種の主張において使われている, 次のような命題に関係する: (1.2) \Rightarrow (1.4). 実は, 正準交換関係を数学的に厳密に扱うとき, このような命題は一般に正しくないことが示せる. ただし, この精密化に伴い, ここでは (1.2) と (1.4) をそれぞれ次のような意味で定式化し直している. (1.2) については,

$$TH\psi - HT\psi = i\psi, \quad \forall \psi \in \text{Dom}(TH) \cap \text{Dom}(HT). \quad (1.5)$$

ただし, 上式は (1.2) で $\hbar = 1$ と置いたものに対応する. ここでは, 上式における状況を指して, T と H が正準交換関係 (canonical commutation relations) を満たすと呼ぶことにする.³ また, (1.4) については,

$$He^{i\epsilon T}\psi = e^{i\epsilon T}(H + \epsilon)\psi, \quad \forall \psi \in \text{Dom}(H), \forall \epsilon \in \mathbf{R}. \quad (1.6)$$

ここで記号 $\text{Dom}(H)$ などは, 適当な Hilbert 空間 \mathcal{H} 上で定義される演算子 H の定義域を表す. この意味で Pauli の議論には数学的精密化の余地が残っていると言える. 実際, 反例として Hilbert 空間 $L^2([0, 1])$ 上の位置演算子 Q と運動量演算子 P を挙げられる [20]. (1.5) と (1.6) において, T を Q に, H を P に置き換えると, (1.5) は成り立つが, (1.6) は $\epsilon = 2\pi n$, $n \in \mathbf{Z}$ のときにしか成り立たない. 何故なら P が自己共役であるための条件として, その定義域 $\text{Dom}(P)$ に属す任意の状態 ψ は, 境界条件 $\psi(0) = \theta\psi(1)$ を満たさなければ

³我々は, 関係式 (1.5) が定義域 $\text{Dom}(TH) \cap \text{Dom}(HT)$ の部分空間上で成立していれば, (1.5) を正準交換関係と呼ぶことにする. ただし, いずれにしてもこれらの部分空間は Hilbert 空間 \mathcal{H} において稠密である事を要請する.

ならないからである. ここで θ は, $|\theta| = 1$ を満たす適当な複素定数である [21]. 実際, この境界条件により, $\psi \in \text{Dom}(P)$ が $e^{i\epsilon Q}\psi \in \text{Dom}(P)$ を満たす (つまり, P が $e^{i\epsilon Q}\psi$ に作用できる) ための必要十分条件は, $\psi(0) = \theta e^{i\epsilon}\psi(1)$ が成り立つこと, すなわち $\epsilon = 2\pi n$, $n \in \mathbb{Z}$ となることである.

以上の議論から, 公理的立場に立てば時間演算子を適切に扱える可能性があると言える. また, このような扱いにより時間演算子の持つ数学的に特異な性質を明らかにできるかもしれない. そして, そのような状況になって初めて, 時間演算子の真の物理的意味を考察できるのではないだろうか.

1.2 長時間領域でのベキ減衰の初期状態依存性

波束のベキ減衰に関する研究において, ポテンシャルのない自由な場合に関する研究は重要である. 特に, その完全な情報を得ることは, ポテンシャル系でのベキ減衰の研究に役立つと考えられる. 近年, 1次元自由波束の長時間でのベキ減衰に関する新しい報告がなされた. 初期波束に Gauss 波束を選ぶと, このベキ減衰は $t^{-1/2}$ となることが知られている. ところが, ある別の初期波束を選ぶと, 波束が長時間で示すベキ減衰は $t^{-1/2}$ からずれる事が報告されたのである. この節では, この事実の詳細を述べつつ, このずれが初期波束のどのような性質に依るのかを考察する.

1次元自由粒子系の自由ハミルトニアンを $H_0 = -(\hbar^2/2m)d^2/dx^2$ とする. 以下では, 簡単のために $\hbar = 1$, $2m = 1$ とする. このとき, Hilbert 空間 $L^2(\mathbb{R})$ から初期波束 $\psi(x)$ を選んだときの, Schrödinger 方程式の解は次のようになる.⁴ $\psi(x, t) = (e^{-itH_0}\psi)(x)$ とおけば,

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} e^{-itk^2} \widehat{\psi}(k) dk \quad (1.7)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{4\pi it}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i|x-y|^2/4t} \psi(y) dy. \quad (1.8)$$

ここで, $\widehat{\psi}(k)$ は $\psi(x)$ の Fourier 変換である. 特に, (1.8) からは, 長時間における波束 $\psi(x, t)$ が $t^{-1/2}$ で振る舞うように思われる. 実際, 初期波束に Gauss 波束を選べば, この見積もりが正しいことを確認できる. しかし, 実は初期波束を Gauss 波束以外のものを選ぶと, この評価は必ずしも正しくないことが確かめられる.

実際, $t^{-1/2}$ よりも速い波束の減衰が, いわゆる滞在時間 (dwell times) の研究において確認されている [17]. 波束 $\psi(x, t)$ で記述される粒子の区間 $[a, b]$ 内での滞在時間を

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt \int_a^b dx |\psi(x, t)|^2 \quad (1.9)$$

⁴厳密には, (1.7) での等号が各点 x で成立するのは, $\widehat{\psi}(k)$ が \mathbb{R}_k 上で絶対可積分のときである. 絶対可積分でない場合でも L^2 -収束の意味で正しい. 同様に, (1.8) での等号が各点 x で成り立つのは, $\psi(x)$ が \mathbb{R} 上で絶対可積分であるときである. 絶対可積分でない場合でも L^2 -収束の意味で成り立つ [22, 23].

で定義しよう. このとき, 仮に $\psi(x, t)$ が $t^{-1/2}$ で振る舞えば, この量は発散することが予想される. したがって, この量が有限であるためには, $t^{-1/2}$ より速い減衰を可能にする初期波束が必要である. そこで, そのような初期波束として, 以下のような関数が例示されている.

$$\hat{\psi}(k) := \Theta(k)ke^{-\alpha k^2}, \quad (1.10)$$

$$\hat{\psi}(k) := \Theta(k)(1 - e^{-\alpha k^2})e^{-\delta^2(k-k_0)^2 - ikx_0}. \quad (1.11)$$

これらの初期波束から時間発展した波束の原点での値 $\psi(0, t)$ は, 前者では t^{-1} で, 後者では $t^{-3/2}$ のように減衰する. ここで, 上の初期波束がいずれもゼロ運動量でゼロ ($\hat{\psi}(0) = 0$) となっている点に注意せよ.

一方, $t^{-1/2}$ 則よりも遅い波束の減衰も発見されている [14, 15, 16]. 初期波束として, 空間の無限遠でべき的に減衰する以下の関数を考えよう.

$$\psi(x) = N(x^2 + \gamma)^{-\alpha/2} \quad (\alpha > 1/2). \quad (1.12)$$

ここで, $\gamma > 0$, N は規格化定数である. また, $\alpha > 1/2$ という制限は, この $\psi(x)$ が 2 乗可積分となることを保証している. このとき, $\psi(0, t)$ は, $\alpha > 1$ では良く知られた $t^{-1/2}$ での減衰を示し, $1/2 < \alpha \leq 1$ では $t^{-1/2}$ より遅い減衰をすることが分かる. 実は, このような $t^{-1/2}$ より遅い減衰も, 上で述べた $t^{-1/2}$ より速い減衰と同様に, 初期波束のゼロ運動量付近の振る舞いと関連している. 上の $\psi(x)$ (1.12) の Fourier 変換のゼロ運動量付近での振る舞いは, 次のように評価される.

$$\begin{aligned} \hat{\psi}(k) &= N \frac{\sqrt{2}}{\Gamma(\alpha/2)} \left| \frac{k}{2\gamma^{1/2}} \right|^{(\alpha-1)/2} K_{(\alpha-1)/2}(\gamma^{1/2}|k|) \\ &= \begin{cases} -N \frac{\sqrt{2}}{\Gamma(1/2)} \log |k| + O(1) & (\alpha = 1) \\ N \frac{\sqrt{2}}{4\Gamma(3/2)\gamma} + O(|k| \log |k|) & (\alpha = 3) \\ N \frac{\sqrt{2}}{2\Gamma(\alpha/2)(2\gamma)^{(\alpha-1)/2}} [(\alpha-3)2!] + O(|k|^2) & (\alpha = 5, 7, \dots) \\ -N \frac{\sqrt{2}(|k|/2)^{\alpha-1}}{\Gamma(\alpha/2)\Gamma((\alpha+1)/2)} + O(1) & (\text{その他}) \end{cases} \quad (k \rightarrow 0). \quad (1.13) \end{aligned}$$

ここで, 関数 $K_\nu(x)$ は変形 Bessel 関数 (modified Bessel function) である. 上から分かるように, $\alpha > 1$ の場合には $\hat{\psi}(0)$ は 0 でない有限値を取り, $1/2 < \alpha \leq 1$ では $\hat{\psi}(0)$ は発散している. この $\hat{\psi}(0)$ が発散する場合の α の領域と $\psi(0, t)$ が遅い減衰を示す場合の α の領域とを比較すると, 実はこれらの領域が一致しているのが分かる. このことから, $t^{-1/2}$ より

遅い減衰に関しても、初期波束のゼロ運動量付近の振る舞いが関連しているものと予想される。

以上の考察から、初期波束のゼロ運動量付近の振る舞いと長時間領域での波束の減衰様式との間に、何らかの定量的な関係が存在することが予想される。この点をより深く探求すれば、量子系のベキ減衰に関する興味深い新たな知見が得られるのではないだろうか。

1.3 時間演算子とベキ減衰の初期状態依存性との関連

冒頭で述べたように本研究では二つの課題を扱う。第一の課題は 1.1 節で取り上げた時間演算子の公理的定式化に関する研究である。もう一つの課題は、1.2 節で考察した、初期波束の特性と 1 次元自由波束の長時間でのベキ減衰との関連である。これらの課題は、一見すると全く関連性を持たないように見えるが、実は深い関りを持つ。この関連を理解するためには、時間演算子の研究において我々が得た結果を事前に概観するのが都合が良い。以下ではその概観を行いながら同時に本論文の構成を述べて行く。

第 2 章では、公理的立場から時間演算子を扱いその諸性質を明らかにする。初めに 2.1 節において、時間演算子とハミルトニアンが満たす正準交換関係として、弱 Weyl 関係式と呼ばれるクラスを導入する。その名の由来は、それがある意味で Weyl 関係式の一般化となっている事による。1.1 節において見たように、一見同等に思われる二つの関係式 (1.2) と (1.4) は厳密には異なっていた。したがって、我々はどのような正準交換関係を問題とするのかを事前に規定しておく必要がある。正準交換関係 (1.5)、Weyl 関係式、弱 Weyl 関係式の関係については 2.2 節で述べる。2.3 節では、(1.3) の Aharonov-Bohm 時間演算子 T_0 が数学的に問題なく定式化でき、それがある意味で H_0 と弱 Weyl 関係式を満たす事を示す。この事実は、弱 Weyl 関係式を調査する意義を与えている。そこで、2.4 節と 2.5 節において、弱 Weyl 関係式を満たす T と H のスペクトルや不確定性関係に関する諸性質を明らかにする。2.6 節では、前節までの結果と Schrödinger 作用素論 [23, 24, 25] からの帰結を基に、ポテンシャル系における時間演算子の議論を展開する。特に、時間演算子を構成できる可能性を持つポテンシャル系について述べる。

また、我々は時間演算子と量子ダイナミクスとの関連を探ることで時間演算子の理解を目指すという野心的な試みを行う。時間演算子が量子ダイナミクスと関連する可能性は次の二点から示唆される。第一の点は、時間演算子がハミルトニアンと正準交換関係を通して直接に関係している点である。特に、正準交換関係はそれを満たす二つの演算子の定性的性質 (スペクトルの分布など) を決定するほど代数的に強い関係式である事が知られている点に注意すべきである。もう一つの点は、ハミルトニアンが時間発展演算子の生成子である点である。この二つの事実から、時間演算子と量子ダイナミクスとの間に何らかの

関係があることを素朴には期待できると思われる。実は、この試みによって得られる結果が波束のベキ減衰に関する研究課題と関連する。そこで、まずその結果の詳細を以下に述べることにする。

2.4節において、ハミルトニアン H と弱 Weyl 関係式を満たす時間演算子 T が、初期状態 ψ の生存確率と関係付くことが示される。初期状態 ψ の生存確率 (survival probability) $S(t)$ とは、ハミルトニアン H 、初期状態 ψ 、及び時間のパラメータ t により規定される物理量で、

$$S(t) := |\langle \psi, e^{-itH} \psi \rangle|^2 \quad (1.14)$$

で定義される。⁵ この量は、物理的には時刻 t での状態 $e^{-itH} \psi$ に初期状態 ψ を見出す確率を表す。このとき、この生存確率と時間演算子 T とが次の不等式を満たすことが示される。

$$\frac{4(\Delta T)_\psi^2 \|\psi\|^2}{t^2} \geq |\langle \psi, e^{-itH} \psi \rangle|^2, \quad \forall \psi \in \text{Dom}(T), \quad \forall t \in \mathbf{R} \setminus \{0\}. \quad (1.15)$$

ここで、 $(\Delta T)_\psi$ は状態 ψ における T の不確定性 (標準偏差) である。不等式は $(\Delta T)_\psi$ を $T\psi$ のノルム $\|T\psi\|$ で置き換えても成立する。この不等式は、 H と弱 Weyl 関係式を満たす T が存在すれば、生存確率は長時間において t^{-2} またはそれより速いオーダーで減衰しなければならないことを主張する。ただしこの制限は初期状態 ψ が $\text{Dom}(T)$ に属す場合に限ることに注意せよ。

ここで、我々は上述の時間演算子に関する研究と1次元自由波束のベキ減衰に関する研究との関連を述べるができる。不等式 (1.15) における T と H を、それぞれ Aharonov-Bohm 時間演算子 T_0 と H_0 とに置き換えた場合を考えよう。 T_0 と H_0 は弱 Weyl 関係式を満たすのだから、この置き換えは可能である。このとき、前段落の最後で強調したように、不等式 (1.15) は $\text{Dom}(T_0)$ に属す状態 (素朴には $\|T_0\psi\|$ を発散させない初期波束) についてのみ成り立つ。そのような状態を初期波束に選べば、波束そのものは長時間で t^{-1} またはそれより速いオーダーで減衰する事を不等式から見積もれる。これは、Gauss 波束を初期波束に選んだ場合の減衰、 $t^{-1/2}$ 、よりも相対的に速い減衰である。つまり、不等式 (1.15) は波束 (そして生存確率) の長時間での振る舞いが初期波束に依存することを如実に表しているのである。さらに重要なことは、初期波束の性質が十分良いと仮定すると、初期運動量分布に関して次の事実が得られる (証明は付録 A を見よ)。

$$\|T_0\psi\| < \infty \Leftrightarrow \hat{\psi}(k) = O(k^2) \quad (k \rightarrow 0). \quad (1.16)$$

このことは、不等式 (1.15) と合わせると、初期波束 $\hat{\psi}(k)$ が $k = 0$ でゼロとなることが、波束の $t^{-1/2}$ より速い減衰に関連する事を示唆する。この結果は、1.2節での考察から得られ

⁵生存確率は本研究において中心となる物理量の一つである。それは初期状態とハミルトニアンにも依存するのだが、そのことを $S(t)$ の引数としては明示しない。

た結論と完全に一致する。したがって、初期波束のゼロ運動量付近の振る舞いが波束の長時間での振る舞いにどのように影響するのかという視点が再び提起されることになる。

そこで第3章では、1次元自由波束とそれに関連した物理量（生存確率や非逃避確率など）の長時間における振る舞いが、初期波束の特性によりどのように特徴付けられるかを考察する。特に、我々は長時間領域において波束を漸近展開し、この展開を初期波束のゼロ運動量での微係数で記述することを試みる。このとき、初期波束のゼロ運動量近傍での振る舞いが、1.2節での予想通りに、波束の長時間での振る舞いを決定している事が明らかとなる。まず3.1節において、長時間領域での波束の漸近展開式を導出する。その導出は数学的厳密さを欠くものの非常に理解しやすいものとなっている。次に3.2節と3.3節において、この波束の漸近展開を再び提示する。ただし、ここでの展開は数学的に厳密な方法に基づく。二つの方法による結果は一致することが示される。3.4節において、前節までの解析結果を利用して、初期波束のゼロ運動量近傍での振る舞いが自由波束の長時間での振る舞いにどのように関連しているかを調べる。

第4章において1次元自由粒子系での議論を1次元（短距離型）ポテンシャル系へと拡張する。そして初期波束のゼロ運動量付近の振る舞いが波束の長時間領域でのベキ的振る舞いにどのように影響するかを調べる。このようなポテンシャル系への拡張は、自由粒子系で得られた結果が自由粒子系に特有な事実であるのかどうかを吟味するためにも重要である。我々はここでも1次元自由粒子系での議論と同じ方針を取る。まず4.1節においてポテンシャル系での波束の漸近展開を行う。実はここで開発したポテンシャル系での波束の漸近展開式そのものもこの研究での一つの成果である。そしてその応用例として、箱型障壁ポテンシャル系を4.2節と4.3節で、井戸型ポテンシャル系を4.4節、4.5節、および4.6節で扱う。そこで、初期波束のゼロ運動量付近の振る舞いが波束の長時間領域でのベキ的振る舞いにどのように影響するかを再び調べる。特に4.6節では、初期波束のゼロ運動量付近の振る舞いとハミルトニアン H のゼロエネルギー共鳴とが拮抗する形でベキ減衰に影響を及ぼす特殊な構造が明らかになる。

第5章において本研究の結果と今後の課題について述べる。

本論文末には付録Aと付録Bを収録した。付録Aでは、先ほど述べた関係式(1.16)が証明される。付録Bでは1次元自由粒子系の時間発展演算子をレゾルベントのFourier変換で記述する公式が導出される。この公式は、3.2節と3.3節において波束の漸近展開式を厳密に導出する際に必要となる。本論文の構成上、これらの証明は付録に記されるのが妥当であると考えた。なお、本研究では必然的に関数解析に関する知識が必要とされる。これに関しては、[4, 21, 26]等を参考にしている。

第2章

時間演算子の数学的基礎付けの試み

この章では時間演算子を公理的立場から調べることで、それが量子力学の数学的枠組の中でどのように捉えられるかを述べる。時間演算子 T はハミルトニアン H と正準交換関係を満たす演算子として定義されている。したがって、正準交換関係そのものに対する厳密な取り扱いが必要とされる。我々は正準交換関係の派生型の一つとして“弱 Weyl 関係式”を導入し、この関係式の定性的性質を明らかにする。その試みにおいて、 T と H に関する時間とエネルギーの不確定性関係や時間演算子 T と生存確率の時間発展との関連等について述べる。特に後者に関する結果はここでの試みの特色の一つであり、実は時間演算子の物理的意味に一つの回答を与える。また“弱 Weyl 関係式”は Aharonov-Bohm が提案した時間演算子 T_0 と 1次元自由粒子系の自由ハミルトニアン H_0 とが満たす。したがって、ここで得られた結果は全て T_0 と H_0 に対しても成り立つ [27].

2.1 弱 Weyl 関係式の導入

我々は公理的量子力学 (例えば [3, 4] を見よ) に基づいて時間演算子に関する議論を進めていく。1.1 節に述べた諸事実から、時間演算子の研究は必然的に (正準とは限らない、より一般的な) 交換関係の研究に関わってくる。例えば、次のような形式の交換関係、 $[H, iA] = C (C \geq 0)$ 、とこれを構成する自己共役演算子 H 及び A のスペクトルに関する研究が、Putnam [28], Kato [29], Lavine [30, 31] 等によりなされている (また、[32] を見よ)。しかし、ここではある意味でより強い制限ではあるが、以下の関係式に議論を制限する。この関係式は (1.4)[または (1.6)] における T と H を入れ替えたものであり、ここでは“弱 Weyl 関係式” (weak Weyl relations) と呼ぶことにする。¹

定義 2.1 (弱 Weyl 関係式) : \mathcal{H} を Hilbert 空間, T を \mathcal{H} 上の対称演算子, そして H を \mathcal{H} 上の自己共役演算子とする。このとき、演算子 T と H が弱 Weyl 関係式を満たすとは、

$$Te^{-itH}\psi = e^{-itH}(T+t)\psi, \quad \forall \psi \in \text{Dom}(T), \forall t \in \mathbf{R} \quad (2.1)$$

¹文献 [27] で T -弱 Weyl 関係式 (T -weak Weyl relations) と呼んでいた関係式のこと。本論文では単に弱 Weyl 関係式と呼ぶことにする。

が成り立つことをいう。

ここで, $\text{Dom}(T)$ は演算子 T の定義域である. 上の定義から, $\text{Dom}(Te^{-itH}) = \text{Dom}(T)$, $\forall t \in \mathbb{R}$ の成立が分かる. したがって, 弱 Weyl 関係式は以下のようなより簡単な形に表現される.

$$Te^{-itH} = e^{-itH}(T + t), \quad \forall t \in \mathbb{R}. \quad (2.2)$$

ここで我々は重要な仮定を置いた. それは, 上の定義において T を対称演算子としたことである. 我々は時間演算子がオブザーバブル (すなわち自己共役演算子) でなければならぬ先験的理由を今のところ見つけていない. したがって, 時間演算子が自己共役である事に固執する必要はない. ここで対称演算子とは, その特別の場合として自己共役演算子を含むより一般的な演算子である (例えば [4, 21, 26] および 2.3 節を参照). この要求は量子情報理論で用いられる POVM (probability operator-valued measures.² 例えば [33] を見よ) の意味で時間演算子を扱うとも言い換えられる [34].

実はこの種の関係式 (2.2) は, 既に Schmüdgen 等により詳細に検討されている事を述べておく ([35] 及びその参考文献を見よ). そこでは上の関係式を満たす T と H の表現論が研究されている. 特に適当な条件の下で, T と H がある境界条件を満たす運動量演算子と位置演算子にそれぞれユニタリー同値であることが示されている. 一方, 以下で展開する議論では, 弱 Weyl 関係式を満たす T と H のより定性的な性質に焦点を当てる. しかし, それは上の関係式を満たす T と H に新たな知見をもたらすだろう. また, 実は (1.3) の Aharonov-Bohm 時間演算子 T_0 は $L^2(\mathbb{R})$ 上の対称演算子であり, その対称拡大 \widetilde{T}_0 は H_0 と弱 Weyl 関係式を満たすことが示される (2.3 節で詳細を述べる). したがって, 弱 Weyl 関係式とそれを満たす T と H のスペクトルや不確定性関係等を調べれば, T_0 (もしくは \widetilde{T}_0) の定性的性質の理解は可能である.

2.2 正準交換関係, Weyl 関係式, 弱 Weyl 関係式

この節では, 弱 Weyl 関係式から演繹される諸事実を述べる前に, 正準交換関係, Weyl 関係式, 弱 Weyl 関係式の違いについて述べる. 2.1 節で述べたように, これらの関係式の区別は時間演算子を数学的に厳密に扱う試みにおいて必要不可欠である.

まず, 弱 Weyl 関係式は, Heisenberg 描像においてより簡潔に特徴付けられる. 実際, 弱 Weyl 関係式は次のような別の形に述べらる.

$$T_t = T + t. \quad (2.3)$$

²positive operator valued measures と呼ばれる.

ここで, $T_t := e^{itH}Te^{-itH}$ である. 上の式から, H と弱 Weyl 関係式を満たす演算子 T とは, Heisenberg 描像においては単に時間のパラメータ t だけずらされる演算子であると分かる. 弱 Weyl 関係式を満たす対称演算子 T が時間演算子と呼ばれるに相応しい演算子であると分かるであろう. また, このような T が必然的に非有界演算子であることも分かる. 対称演算子 T が (2.2) を満たすことと (2.3) を満たすことが互いに同値であることは, $\text{Dom}(T)$ が \mathcal{H} において稠密であること及び内積の連続性により示される. 正準交換関係 (1.5) と弱 Weyl 関係式との関係は次の命題によって与えられる [27].

命題 2.2 : T を H と弱 Weyl 関係式を満たす \mathcal{H} 上の閉対称演算子とする. このとき, 以下の (i), (ii), (iii) を満たす, \mathcal{H} で稠密なある部分空間 \mathcal{D} が存在する.

- (i) $\mathcal{D} \subset \text{Dom}(TH) \cap \text{Dom}(HT)$.
- (ii) $H : \mathcal{D} \rightarrow \mathcal{D}$.
- (iii) 任意の $\psi \in \text{Dom}(TH) \cap \text{Dom}(HT)$ に対して $TH\psi - HT\psi = i\psi$. さらに, T が自己共役であるならば, T と H は以下の Weyl 関係式 (Weyl relations) を満たす.

$$e^{-isT}e^{-itH} = e^{-ist}e^{-itH}e^{-isT}, \quad \forall s, \forall t \in \mathbf{R}. \quad (2.4)$$

証明は文献 [36] の定理 VIII.14 の系の証明と同様に行える. その際, 弱 Weyl 関係式により, $Te^{-itH}\psi$ が全ての $\psi \in \text{Dom}(T)$ に対して強連続であること, 並びに T の閉性に注意し, そして以下の \mathcal{H} の部分集合の元によって張られる部分空間を \mathcal{D} として選ぶと良い.

$$\left\{ \psi_f \in \mathcal{H} \mid \psi_f := \int_{-\infty}^{\infty} f(s)e^{-isH}\psi ds, \forall f \in C_0^\infty(\mathbf{R}) \text{ かつ } \forall \psi \in \text{Dom}(T) \right\}.$$

ここでの積分は Riemann 積分を意味しており, したがって, 強収束で定義される. 命題の最後の部分は以下のように証明される. T が自己共役である場合, 弱 Weyl 関係式 (2.2) から, 全ての $\phi \in \mathcal{H}$ と全ての $\psi \in \text{Dom}(T)$ について, 次式の成立が分かる.

$$\begin{aligned} \int_{\mathbf{R}} \lambda d\langle \phi, e^{itH}F(\lambda)e^{-itH}\psi \rangle &= \langle \phi, e^{itH}Te^{-itH}\psi \rangle = \langle \phi, (T+t)\psi \rangle \\ &= \int_{\mathbf{R}} (\lambda+t)d\langle \phi, F(\lambda)\psi \rangle = \int_{\mathbf{R}} \lambda d\langle \phi, F_t(\lambda)\psi \rangle. \end{aligned}$$

ここで, $\{F(B) \mid B \in \mathbf{B}\}$ は T のスペクトル測度, \mathbf{B} は \mathbf{R} の全ての開集合から生成される σ -加法族, そして $F_t(B) := F(\{\lambda - t \mid \lambda \in B\})$ である. 上の結果とスペクトル分解の一意性により, 全ての $t \in \mathbf{R}$ について $e^{itH}F(B)e^{-itH} = F_t(B)$ が成り立つ. このことから, 全ての $\psi \in \mathcal{H}$ と全ての $s \in \mathbf{R}$ に関して以下が成り立つ.

$$\begin{aligned} \langle \psi, e^{itH}e^{-isT}e^{-itH}\psi \rangle &= \int_{\mathbf{R}} e^{-is\lambda} d\langle \psi, e^{itH}F(\lambda)e^{-itH}\psi \rangle = \int_{\mathbf{R}} e^{-is\lambda} d\langle \psi, F_t(\lambda)\psi \rangle \\ &= \int_{\mathbf{R}} e^{-is(\lambda+t)} d\langle \psi, F(\lambda)\psi \rangle = \langle \psi, e^{-ist}e^{-isT}\psi \rangle. \end{aligned}$$

よって、偏極恒等式を使えば、Weyl 関係式 (2.4) が直ちに求まる。ところで、von Neumann の一意性定理 [36] によれば、Weyl 関係式を満たす二つの演算子のスペクトルは、共に実数全体となることが知られている。したがって、 H のスペクトルが下に有界であるような物理的状況を考慮した場合、 H と弱 Weyl 関係式を満たす演算子 T は自己共役ではあり得ない。このことから、弱 Weyl 関係式の定義において、 T を自己共役ではなく対称として緩めて定義しておくことは数学的にも妥当と言えるだろう。³ さらに、ある演算子 T と H の組が弱 Weyl 関係式を満たすとき、 T の閉包と H の組も弱 Weyl 関係式を満たすことが示せる。この事実から、弱 Weyl 関係式を満たす対称演算子 T は必然的に我々の定義の意味での正準交換関係 (1.5) を満たすと見なせる (命題 2.2 では T が閉であることが要求されていた)。ここで、Weyl 関係式、弱 Weyl 関係式、正準交換関係の相互関係をあらためて示しておく：

$$\begin{aligned} e^{-isT}e^{-itH}\psi &= e^{-ist}e^{-itH}e^{-isT}\psi, & \psi \in \mathcal{H} & \quad (\text{Weyl 関係式}) \\ \Rightarrow Te^{-itH}\psi &= e^{-itH}(T+t)\psi, & \psi \in \text{Dom}(T) & \quad (\text{弱 Weyl 関係式}) \\ \Rightarrow TH\psi - HT\psi &= i\psi, & \psi \in \text{Dom}(TH) \cap \text{Dom}(HT) & \quad (\text{正準交換関係}). \end{aligned}$$

しかし、2.1 節の例にもあるように、これらの逆が一般には成り立たないことは注意しなければならない。

2.3 Aharonov-Bohm 時間演算子

この節では、Aharonov-Bohm 時間演算子 T_0 が対称演算子であることを数学的に厳密に示し、さらに T_0 の対称拡大 \widetilde{T}_0 (対称拡大については後に述べる) を導入し、それが H_0 と弱 Weyl 関係式を満たすことを示す [27]。この事実は、弱 Weyl 関係式を解析する動機となっている。まず、 \mathbf{R} 上の 2 乗可積分関数から成る Hilbert 空間 $L^2(\mathbf{R})$ を考える。このとき、 T_0 は $L^2(\mathbf{R})$ 上の演算子として次のように定義される：

$$T_0 := \frac{1}{4}(QP^{-1} + P^{-1}Q), \quad (2.5)$$

$$\text{Dom}(T_0) := \text{Dom}(QP^{-1}) \cap \text{Dom}(P^{-1}Q). \quad (2.6)$$

ここで、演算子 P は 1 次元自由粒子系の運動量演算子である。公理的な立場では、 P は $L^2(\mathbf{R})$ 上の微分演算子 D_x を使って $P := -iD_x$ と定義される。 D_x は次のように定義される：

$$\text{Dom}(D_x) := \left\{ \psi \in L^2(\mathbf{R}) \mid \psi \text{ は絶対連続であって, } \int_{\mathbf{R}} \left| \frac{d\psi(x)}{dx} \right|^2 dx < \infty \right\}, \quad (2.7)$$

³演算子の自己共役性と対称性の区別の重要性は時間演算子の問題に限るわけではない。この区別の重要性は、例えば [4, 37] において指摘されている。

$$D_x \psi(x) := \frac{d\psi(x)}{dx}, \quad \psi \in \text{Dom}(D_x) . \quad (2.8)$$

ここで、連続微分可能な関数は少なくとも絶対連続 [38] であることを述べておく。演算子 P を使って、自由ハミルトニアン H_0 は $H_0 := P^2$ と定義される。また位置演算子 Q は、 x を掛ける $L^2(\mathbf{R})$ 上の掛け算演算子 M_x によって、 $Q := M_x$ と定義される。一般に、 \mathbf{R} 上の可測関数 $f(x)$ を掛ける $L^2(\mathbf{R})$ 上の掛け算演算子 M_f は、以下のように定義される:

$$\text{Dom}(M_f) := \left\{ \psi \in L^2(\mathbf{R}) \mid \int_{\mathbf{R}} |f(x)\psi(x)|^2 dx < \infty \right\}, \quad (2.9)$$

$$M_f \psi(x) := f(x)\psi(x), \quad \psi \in \text{Dom}(M_f) . \quad (2.10)$$

ここで、 T_0 の定義式のなかに含まれる P^{-1} は矛盾なく定義され、 $L^2(\mathbf{R})$ 上の自己共役演算子であることは注意すべきである。何故なら、一般に任意の自己共役演算子 A に対して、もしもその逆演算子 A^{-1} が存在するならば逆演算子 A^{-1} は自動的に自己共役となるからである [39]。1次元自由粒子系での運動量演算子 P の場合、 P は単射、つまり $\{\psi \in \text{Dom}(P) \mid P\psi = 0\} = \{0\}$ が成り立つ。したがって逆演算子 P^{-1} は定義可能で自己共役である。 T_0 の運動量表示は次のようになる:

$$FT_0F^{-1} = \frac{1}{4}(iD_k M_{1/k} + M_{1/k} iD_k) . \quad (2.11)$$

またその定義域は次のようになる:

$$F\text{Dom}(T_0) = \text{Dom}(FT_0F^{-1}) = \text{Dom}(D_k M_{1/k}) \cap \text{Dom}(M_{1/k} D_k) \quad (2.12)$$

$$= \left\{ \hat{\psi} \in \text{Dom}(M_{1/k}) \mid M_{1/k} \hat{\psi} \in \text{Dom}(D_k) \right\} \\ \cap \left\{ \hat{\psi} \in \text{Dom}(D_k) \mid D_k \hat{\psi} \in \text{Dom}(M_{1/k}) \right\} . \quad (2.13)$$

ここで、 F は Fourier 変換を表し、 $L^2(\mathbf{R})$ から $L^2(\mathbf{R}_k)$ へのユニタリー演算子でもある。特に、 $F^{-1}F = FF^{-1} = I$ (I は恒等演算子)、 $F\psi = \hat{\psi}$ [$\psi \in L^2(\mathbf{R})$] である。上式では、 $FQF^{-1} = iD_k$ 、 $FPF^{-1} = M_k$ 、 $FP^{-1}F^{-1} = M_{1/k}$ を使っている。

ところで T_0 の定義式 (2.5) のなかにある P^{-1} のために、一見 $\text{Dom}(T_0)$ は制限されているかのように思われる。実際このことは次の簡単な例から分かる [18]。次の2乗可積分関数、

$$\widehat{\phi}_n(k) := N_n k^n e^{-a_0 k^2/2} \quad (2.14)$$

を考えよう。ここで、 $n = 0, 1, \dots$ 、 $a_0 > 0$ 、 N_n は規格化定数である。直接計算することで、

$$(FT_0F^{-1}F\phi_n)(k) = FT_0F^{-1}\widehat{\phi}_n(k) = \frac{i}{4} \left[(2n-1)k^{n-2} - a_0 k^{n-1} - a_0 k^n \right] e^{-a_0 k^2/2} \quad (2.15)$$

が得られる。このとき、 $n = 2, 3, \dots$ の場合には上式右辺は2乗可積分であるから、 $\widehat{\phi}_n \in \text{Dom}(FT_0F^{-1})$ ($n = 2, 3, \dots$) である。一方、形式的に $n = 0, 1$ の場合を考えれば、右辺の関数は2乗可積分ではない。したがって $\widehat{\phi}_0, \widehat{\phi}_1 \notin \text{Dom}(FT_0F^{-1})$ である。

しかし, 実はこの例にもかかわらず, $\text{Dom}(T_0)$ は $L^2(\mathbf{R})$ で稠密である. 実際このことは, 以下で定義する部分空間 \mathcal{C}_i が $\text{Dom}(T_0)$ の部分空間であり, かつ $L^2(\mathbf{R})$ で稠密であることから分かる. \mathcal{C}_i は次のように定義される.

$$\mathcal{C}_i := \{\psi \in L^2(\mathbf{R}) \mid \widehat{\psi} \in C_0^\infty(\mathbf{R}_k) \text{ かつ } \text{supp } \widehat{\psi} \subset \mathbf{R}_k \setminus \{0\}\}. \quad (2.16)$$

ここで, $\text{supp } \widehat{\psi}$ は $\widehat{\psi}$ の台, すなわち集合 $\{k \in \mathbf{R}_k \mid \widehat{\psi}(k) \neq 0\}$ の閉包である. よって T_0 の共役演算子 T_0^* が定義可能であって [4, 21, 26], T_0 は対称演算子であることが以下の関係式から分かる:

$$T_0^* \supset \frac{1}{4}((QP^{-1})^* + (P^{-1}Q)^*) \supset \frac{1}{4}((P^{-1})^*Q^* + Q^*(P^{-1})^*) = T_0. \quad (2.17)$$

ここで, 記号 $(*)$ は共役演算子を表す. また $Q^* = Q$ および $(P^{-1})^* = P^{-1}$ を使った.

さて, T_0 と弱 Weyl 関係式の関係について考察する. まず, T_0 自身は H_0 と弱 Weyl 関係式, $T_0 e^{-itH_0} = e^{-itH_0}(T_0 + t)$ ($\forall t \in \mathbf{R}$), を満たさないことに注意する必要がある. 何故なら, (2.13) における定義域 $\text{Dom}(FT_0F^{-1})$ は任意の $t \neq 0$ における時間発展演算子 e^{-itk^2} の作用に対して不変ではないからである. 実際, 任意の $t \neq 0$ に対して, $\text{Dom}(FT_0F^{-1})$ に属す関数 $\widehat{\psi}$ で, $e^{-itk^2}\widehat{\psi} \notin \text{Dom}(FT_0F^{-1})$ となるような関数が具体的に求められる. 次のような 2 乗可積分関数 $\widehat{g}(k)$

$$\widehat{g}(k) := \begin{cases} e^{-1/k^2} \frac{1}{1+|k|^s} & (k \neq 0) \\ 0 & (k = 0) \end{cases} \quad (2.18)$$

を考よう. ここで, $1/2 < s \leq 3/2$ である. 関数 $g(k)$ は無限回連続微分可能な関数である. このとき, $\widehat{g}(k)$ は $\text{Dom}(FT_0F^{-1})$ には属すが, $e^{-itk^2}\widehat{g}(k)$ はどんな $t \neq 0$ に対しても $\text{Dom}(FT_0F^{-1})$ には属さない. このことは, 全ての $t \neq 0$ に関して $e^{-itk^2}\widehat{g}(k)$ が $\text{Dom}(D_k)$ に属さないことによる.

次に, T_0 の $L^2(\mathbf{R})$ 上での対称拡大を考える. 対称拡大とは, 対称演算子の対称性を保ちながらその定義域を (Hilbert 空間の中で) 拡大することである. したがって, もとの定義域上では, 拡大前と拡大後の演算子の作用は同じである. 以下で導入する T_0 の対称拡大を \widetilde{T}_0 と記す. この \widetilde{T}_0 は H_0 と弱 Weyl 関係式を満たすことが示される. 運動量表示において, \widetilde{T}_0 を次のように定義する.

$$\text{Dom}(\widetilde{T}_0) := \left\{ \psi \in L^2(\mathbf{R}) \left| \begin{array}{l} \widehat{\psi}(k) \text{ は } \mathbf{R}_k \setminus \{0\} \text{ 上で絶対連続で, } \lim_{k \rightarrow 0} \frac{\widehat{\psi}(k)}{|k|^{1/2}} = 0, \\ \int_{\mathbf{R}_k} \left| \frac{d}{dk} \left(\frac{\widehat{\psi}(k)}{k} \right) + \frac{1}{k} \frac{d\widehat{\psi}(k)}{dk} \right|^2 dk < \infty \end{array} \right. \right\},$$

$$FT_0F^{-1}\widehat{\psi}(k) = \frac{i}{4} \left[\frac{d}{dk} \left(\frac{\widehat{\psi}(k)}{k} \right) + \frac{1}{k} \frac{d\widehat{\psi}(k)}{dk} \right], \quad \text{a.e. } k \in \mathbf{R}_k \setminus \{0\}, \quad \forall \psi \in \text{Dom}(\widetilde{T}_0). \quad (2.19)$$

このとき、定義域 $\text{Dom}(F\widetilde{T}_0F^{-1})$ は $L^2(\mathbf{R}_k)$ の部分空間であって、 $F\widetilde{T}_0F^{-1}$ は $L^2(\mathbf{R}_k)$ 上の線形演算子と分かる。まず以下を示そう。

命題 2.3 : \widetilde{T}_0 は T_0 の対称拡大である。

証明 : 運動量表示で示そう。 $F\widetilde{T}_0F^{-1}$ が対称であることは以下の議論から分かる。まず、運動量 k を正とするとき、 $\text{Dom}(F\widetilde{T}_0F^{-1})$ に属す任意の $\widehat{\psi}$ と $\widehat{\phi}$ について

$$\begin{aligned} & \int_{(0,\infty)} \overline{\widehat{\phi}(k)} \frac{i}{4} \left[\frac{d}{dk} \left(\frac{\widehat{\psi}(k)}{k} \right) + \frac{1}{k} \frac{d\widehat{\psi}(k)}{dk} \right] dk - \int_{(0,\infty)} \frac{-i}{4} \left[\frac{d}{dk} \left(\frac{\overline{\widehat{\phi}(k)}}{k} \right) + \frac{1}{k} \frac{d\overline{\widehat{\phi}(k)}}{dk} \right] \widehat{\psi}(k) dk \\ &= \frac{i}{2} \left(\lim_{b \rightarrow \infty} \frac{\overline{\widehat{\phi}(b)}\widehat{\psi}(b)}{b} - \lim_{a \downarrow 0} \frac{\overline{\widehat{\phi}(a)}\widehat{\psi}(a)}{a} \right) = 0 \end{aligned}$$

が成り立つ。ここで $(-)$ は複素共役を表す。初めの等号では、有界区間 $[a, b]$ 上で部分積分をした後に極限を取っている。このとき上式の二つの積分が存在することに注意せよ。最後の等号は、二つの極限 $\lim_{b \rightarrow \infty} \overline{\widehat{\phi}(b)}\widehat{\psi}(b)/b$ と $\lim_{a \downarrow 0} \overline{\widehat{\phi}(a)}\widehat{\psi}(a)/a$ が共に 0 となることによる。特に、 $b \rightarrow \infty$ での極限が 0 になることは $\overline{\widehat{\phi}(k)}\widehat{\psi}(k)$ が絶対可積分であること、 $a \downarrow 0$ での極限が 0 になることは $\overline{\widehat{\phi}(k)}$ と $\widehat{\psi}(k)$ のゼロ運動量での境界条件から導かれる。同様に負の運動量 k の場合を考察することで、結局、 $\text{Dom}(F\widetilde{T}_0F^{-1})$ に属す任意の $\widehat{\psi}$ と任意の $\widehat{\phi}$ について、 $\langle \widehat{\phi}, F\widetilde{T}_0F^{-1}\widehat{\psi} \rangle = \langle F\widetilde{T}_0F^{-1}\widehat{\phi}, \widehat{\psi} \rangle$ が成り立つと分かる。これは、 $F\widetilde{T}_0F^{-1}$ が対称であることを意味する。 \widetilde{T}_0 が T_0 の拡大であること、すなわち、 $\widetilde{T}_0 \supset T_0$ 、であることを見るには、 $\text{Dom}(FT_0F^{-1})$ に属す全ての $\widehat{\psi}$ が $\text{Dom}(F\widetilde{T}_0F^{-1})$ の定義にある $k = 0$ での境界条件を満たすことを確認すれば十分である。このことは次のようにして分かる。 $\widehat{\psi}$ を $\text{Dom}(FT_0F^{-1})$ に属す任意のベクトルとする。このとき、 $\widehat{\psi}(k)/k$ は \mathbf{R}_k 上で絶対連続であるから、極限 $\lim_{k \rightarrow 0} \widehat{\psi}(k)/k$ が存在する。したがって、 $\lim_{k \rightarrow 0} |\widehat{\psi}(k)/|k|^{1/2}| = \lim_{k \rightarrow 0} |k|^{1/2}|\widehat{\psi}(k)/k| = 0$ となり、境界条件を満たすことが確認できた。 \blacksquare

この演算子 \widetilde{T}_0 はエネルギー表示に移ることでより理解し易くなり得る。この方向からの研究は、Egusquiza や Muga の他、多数の研究者によってなされ、既に \widetilde{T}_0 の不足指数などが議論されている ([34] 及びその参考文献を見よ)。

次に、 \widetilde{T}_0 が H_0 と弱 Weyl 関係式を満たすことを確認する。まず、拡大された定義域 $\text{Dom}(\widetilde{T}_0)$ が e^{-itH_0} の不変部分空間であることに注意せよ。何故なら、任意の $\psi \in \text{Dom}(\widetilde{T}_0)$ と任意の $t \in \mathbf{C}$ ($\text{Im } t \leq 0$) に対して、 $\lim_{k \rightarrow 0} e^{-itk^2} \widehat{\psi}(k)/|k|^{1/2} = 0$ であり、さらに $\mathbf{R}_k \setminus \{0\}$ 上のほとんどいたるところで次式が成り立つからである。

$$\frac{i}{4} \left[\frac{d}{dk} \left(e^{-itk^2} \frac{\widehat{\psi}(k)}{k} \right) + \frac{1}{k} \frac{d}{dk} \left(e^{-itk^2} \widehat{\psi}(k) \right) \right] = te^{-itk^2} \widehat{\psi}(k) + e^{-itk^2} \frac{i}{4} \left[\frac{d}{dk} \left(\frac{\widehat{\psi}(k)}{k} \right) + \frac{1}{k} \frac{d\widehat{\psi}(k)}{dk} \right].$$

ここで、上式の右辺は2乗可積分である。したがって、 $e^{-itk^2}\widehat{\psi}(k)$ は $\text{Dom}(F\widetilde{T}_0F^{-1})$ に属し、結果として \widetilde{T}_0 は H_0 と弱 Weyl 関係式を満たす:

$$\widetilde{T}_0 e^{-itH_0}\psi = e^{-itH_0}(\widetilde{T}_0 + t)\psi, \quad \forall \psi \in \text{Dom}(\widetilde{T}_0), \quad \forall t \in \mathbf{C} \ (\text{Im } t \leq 0). \quad (2.20)$$

この事実から、 \widetilde{T}_0 は自己共役でないことが直ちに分かる。何故なら、仮に自己共役であるとすれば、 \widetilde{T}_0 と H_0 は Weyl 関係式を満たすことになる。しかし、この帰結は明らかに H_0 のスペクトルが下に有界であることに矛盾する。

ここで、(2.16)における部分空間 \mathcal{C}_i を再び考察しよう。 T_0 (または \widetilde{T}_0) が部分空間 \mathcal{C}_i を不変にすることは重要である。つまり $T_0 : \mathcal{C}_i \rightarrow \mathcal{C}_i$ であって、 \mathcal{C}_i に属す任意のベクトルに対し T_0 を何度でも作用できる。この性質は T_0 や \widetilde{T}_0 の定義域については成り立たない。部分空間 \mathcal{C}_i は T_0 を特徴付ける重要な部分空間であることが予想される。実際この性質と (2.20) を使えば次の命題が得られる。

命題 2.4 : 任意の非負整数 n, m と $\psi, \phi \in \mathcal{C}_i$ に対して、

$$\lim_{t \rightarrow \pm\infty} |t|^n \left| \frac{d^m \langle \phi, e^{-itH_0}\psi \rangle}{dt^m} \right| = 0 \quad (2.21)$$

が成り立つ。つまり $\langle \phi, e^{-itH_0}\psi \rangle$ は $t \in \mathbf{R}$ の急減少関数である。

証明 : $\psi, \phi \in \mathcal{C}_i$ とする。このとき T_0 が \mathcal{C}_i を不変にすることから、 $T_0\phi, T_0\psi \in \mathcal{C}_i \subset \text{Dom}(T_0)$ である。(2.20) を使えば次の事実が分かる [\mathcal{C}_i 上では $T_0 = \widetilde{T}_0$ であることに注意]。

$$\begin{aligned} \langle \phi, e^{-itH_0}T_0\psi \rangle &= \langle \phi, (T_0 - t)e^{-itH_0}\psi \rangle \\ &= \langle T_0\phi, e^{-itH_0}\psi \rangle - t\langle \phi, e^{-itH_0}\psi \rangle. \end{aligned} \quad (2.22)$$

さらに、 H_0 が絶対連続 [23, 25, 40] であることから、 $w\text{-}\lim_{t \rightarrow \pm\infty} e^{-itH_0}\psi = 0$ が任意の $\psi \in L^2(\mathbf{R})$ に対して成り立つことに注意する [23, 41]。すると $\lim_{t \rightarrow \pm\infty} \langle \phi, e^{-itH_0}T_0\psi \rangle = \lim_{t \rightarrow \pm\infty} \langle T_0\phi, e^{-itH_0}\psi \rangle = 0$ が分かる。これらの事実と (2.22) により、結局

$$\lim_{t \rightarrow \pm\infty} t\langle \phi, e^{-itH_0}\psi \rangle = 0 \quad (2.23)$$

が成立する。任意の自然数 $n \geq 2$ と $\psi, \phi \in \mathcal{C}_i$ に対して $\lim_{t \rightarrow \pm\infty} t^n \langle \phi, e^{-itH_0}\psi \rangle = 0$ が成り立つことを示すには、任意の $j \in \mathbf{N}$ に対して $T_0^j : \mathcal{C}_i \rightarrow \mathcal{C}_i$ が成り立つことと、(2.22) と類似の次式を見れば良い。

$$\begin{aligned} \langle \phi, e^{-itH_0}T_0^{n+1}\psi \rangle &= \langle \phi, (T_0 - t)^{n+1}e^{-itH_0}\psi \rangle \\ &= \sum_{j=0}^n \frac{(-t)^j}{j!} \langle T_0^{n+1-j}\phi, e^{-itH_0}\psi \rangle + (-t)^{n+1} \langle \phi, e^{-itH_0}\psi \rangle. \end{aligned} \quad (2.24)$$

(2.23) と上式により, 帰納的に任意の $n \geq 2$ に対して $\lim_{t \rightarrow \pm\infty} t^n \langle \phi, e^{-itH_0} \psi \rangle = 0$ が得られる. $\langle \phi, e^{-itH_0} \psi \rangle$ が無限回連続微分可能であることを確認するためには, H_0 が \mathcal{C}_i を不変にする, つまり $H_0 : \mathcal{C}_i \rightarrow \mathcal{C}_i$ が成り立つことに注意すれば良い. このとき任意の $\psi \in \mathcal{C}_i$ と $t \in \mathbb{R}$ に対して $e^{-itH_0} \psi$ が無限回強連続強微分可能 [4] であることから, 求める結果が得られる. ■

物理的には, $|\langle \phi, e^{-itH_0} \psi \rangle|^2$ は初期状態 ψ が時刻 t で状態 ϕ に遷移する確率を表し, 遷移確率と呼ばれる. 特に, $\phi = \psi$ のときには遷移確率は初期状態 ψ の生存確率となる [(1.14) を見よ]. また $\langle \phi, e^{-itH_0} \psi \rangle$ を遷移振幅, $\phi = \psi$ のときには生存振幅 (survival amplitude) と呼ぶ.

上の命題から, $t \rightarrow \pm\infty$ のとき遷移振幅 $\langle \phi, e^{-itH_0} \psi \rangle$ は t の任意の逆べきよりも速く 0 に収束すると分かる. 実はこの事実は自明ではない. このことを確認するために, (2.14) で定義した関数 ϕ_n を再び考察してみよう (ただし $n = 2, 3, \dots$ とする). 実は, これらの関数は $\text{Dom}(\widetilde{T}_0)$ には属しているが, \widetilde{T}_0 の作用に対して不変である訳ではない. このことは (2.15) での議論と同様にして確かめられる. さて, この初期状態 ϕ_n の時刻 t での生存確率は $|\langle \phi_n, e^{-itH_0} \phi_n \rangle|^2 = (1 + t^2/4a_0^2)^{-n-1/2}$ と求まる. これらは $t \rightarrow \pm\infty$ で高々 t のべき関数として $|t|^{-(2n+1)}$ のように振る舞う. この結果は \mathcal{C}_i に属す関数の振る舞いとは明確に区別される. このことから, \widetilde{T}_0 の作用に対して不変であるのかどうかの違いは, 生存確率の長時間における振る舞いにも反映されていると言えるだろう. この考察から, 我々は $\text{Dom}(\widetilde{T}_0)$ (もしくは \widetilde{T}_0) と生存確率との間に何らかの関係があることを期待できる. この見解は, 実は Bhattacharyya[42] や Gislason-Sabelli[43] などの仕事からも動機付けられている.

2.4 時間演算子と生存確率の関係

この節では, 弱 Weyl 関係式を満たす演算子 T と H に関して得られるいくつかの結果を述べる. これらの結果は T と生存確率との間に成り立つ不等式 (1.15), 並びに T と H のそれぞれのスペクトルに関係している. これらの結果を述べる前に以下の定義を準備しておく. T を Hilbert 空間 \mathcal{H} 上の対称演算子とする. このとき, 任意のベクトル $\psi \in \text{Dom}(T)$ に対して ψ における T の期待値 $\langle T \rangle_\psi$ および不確定性 (標準偏差) $(\Delta T)_\psi$ を以下で定義する:

$$\langle T \rangle_\psi := \langle \psi, T\psi \rangle, \quad (\Delta T)_\psi := \|(T - \langle T \rangle_\psi)\psi\|. \quad (2.25)$$

この準備のもと, まず弱 Weyl 関係式を満たす演算子 T と生存確率との間に成り立つ不等式 (1.15) を示そう [27]. この不等式は, 実は 1.3 節で述べた自由波束の長時間領域でのべき減衰の初期波束依存性に関してだけでなく, T から計算される時間の不確定性 $(\Delta T)_\psi$ の物理的意味についても一つの示唆を与えてくれる (2.6 節で述べる). また, 時間の不確定性と

生存確率とを関係付ける試みは [42, 43] 等にも見られたが, 時間の不確定性を時間演算子から計算されるものとした我々の試みは従来にはなかったものと思われる.

命題 2.5 : T を \mathcal{H} 上の対称演算子, H を \mathcal{H} 上の自己共役演算子とする. このとき T と H が弱 Weyl 関係式を満たすならば, 任意の $\psi \in \text{Dom}(T)$ と $t \in \mathbf{R} \setminus \{0\}$ に対して次の不等式が成り立つ.

$$\frac{4(\Delta T)_\psi^2 \|\psi\|^2}{t^2} \geq |\langle \psi, e^{-itH}\psi \rangle|^2. \quad (2.26)$$

証明: 仮定より任意の $\psi \in \text{Dom}(T)$ と $t \in \mathbf{R}$ に対して弱 Weyl 関係式, $Te^{-itH}\psi = e^{-itH}(T+t)\psi$, が成り立つ. この関係式の両辺と ψ との内積をとれば,

$$\langle \psi, Te^{-itH}\psi \rangle - \langle \psi, e^{-itH}T\psi \rangle = t\langle \psi, e^{-itH}\psi \rangle. \quad (2.27)$$

ここで,

$$\langle \psi, Te^{-itH}\psi \rangle - \langle \psi, e^{-itH}T\psi \rangle = \langle \psi, (T - \langle T \rangle_\psi)e^{-itH}\psi \rangle - \langle \psi, e^{-itH}(T - \langle T \rangle_\psi)\psi \rangle \quad (2.28)$$

であるから, (2.27) に (2.28) を代入した後に Schwarz の不等式を使えば, 次の評価,

$$2(\Delta T)_\psi \|\psi\| \geq |\langle (T - \langle T \rangle_\psi)\psi, e^{-itH}\psi \rangle| + |\langle \psi, e^{-itH}(T - \langle T \rangle_\psi)\psi \rangle| \quad (2.29)$$

$$\geq |\langle (T - \langle T \rangle_\psi)\psi, e^{-itH}\psi \rangle - \langle \psi, e^{-itH}(T - \langle T \rangle_\psi)\psi \rangle| \quad (2.30)$$

$$= |t| |\langle \psi, e^{-itH}\psi \rangle| \quad (2.31)$$

が得られる. これは不等式 (2.26) に他ならない. ■

不等式 (2.26) から弱 Weyl 関係式を満たす T と H それぞれの固有値について, 以下の二つの系が示せる. ただし, ここでの固有値は関数解析における点スペクトルを指していることに注意せよ. すなわち, その固有値に属する固有ベクトルは考えている Hilbert 空間に属すものに限定されている. 例えば, 運動量演算子はこの意味では固有値を持たない. 何故なら平面波波動関数は 2 乗可積分ではないからである.

系 2.6 : T を \mathcal{H} 上の対称演算子, H を \mathcal{H} 上の自己共役演算子とする. このとき T と H が弱 Weyl 関係式を満たすならば, T は固有値をもたない.

証明: いま, T が固有値 $\lambda \in \mathbf{R}$ をもつと仮定し, その固有ベクトルを $\psi_\lambda \in \text{Dom}(T)$ とする. すなわち $T\psi_\lambda = \lambda\psi_\lambda$ が成り立ち, かつ $\|\psi_\lambda\| = 1$ とできる. このとき状態 ψ_λ における T の標準偏差 $(\Delta T)_\psi$ は

$$(\Delta T)_\psi = \|(T - \langle T \rangle_{\psi_\lambda})\psi_\lambda\| = \|(T - \lambda\|\psi_\lambda\|^2)\psi_\lambda\| = |\lambda| |1 - \|\psi_\lambda\|^2| \|\psi_\lambda\| = 0 \quad (2.32)$$

となる. また弱 Weyl 関係式の仮定より不等式 (2.26) が成り立つ. そこで (2.26) 式に (2.32) 式を代入すれば, $|\langle \psi_\lambda, e^{-itH} \psi_\lambda \rangle| = 0$, $t \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ が得られる. ところで任意の $t \in \mathbb{R}$ に対して e^{-itH} は強連続であるから, このことは $0 = \lim_{t \rightarrow 0} |\langle \psi_\lambda, e^{-itH} \psi_\lambda \rangle| = \|\psi_\lambda\|^2$ を意味する. これは $\|\psi_\lambda\| = 1$ に矛盾する. したがって T は固有値をもたない. \blacksquare

系 2.7 : T を \mathcal{H} 上の対称演算子, H を \mathcal{H} 上の自己共役演算子とする. このとき T と H が弱 Weyl 関係式を満たすならば, H は固有値を持たない.

証明 : 定義域 $\text{Dom}(T)$ は Hilbert 空間 \mathcal{H} で稠密であるから, 任意の $\psi \in \mathcal{H}$ に対して, ψ に収束するベクトル列で $\text{Dom}(T)$ に属するものを取りることができる. そこで, そのような列を $\{\psi_n\}_{n=1}^\infty \subset \text{Dom}(T)$ と記す. すなわち, $\psi_n \rightarrow \psi$ ($n \rightarrow \infty$) である. このとき,

$$\begin{aligned} & |\langle \psi, e^{-itH} \psi \rangle - \langle \psi_n, e^{-itH} \psi_n \rangle| \\ &= |\langle \psi, e^{-itH} \psi \rangle - \langle \psi, e^{-itH} \psi_n \rangle + \langle \psi, e^{-itH} \psi_n \rangle - \langle \psi_n, e^{-itH} \psi_n \rangle| \\ &\leq \|e^{itH} \psi\| \|\psi - \psi_n\| + \|\psi - \psi_n\| \|e^{-itH} \psi_n\| \\ &= (\|\psi\| + \|\psi_n\|) \|\psi - \psi_n\|. \end{aligned} \quad (2.33)$$

したがって,

$$\begin{aligned} \limsup_{t \rightarrow \pm\infty} |\langle \psi, e^{-itH} \psi \rangle| &\leq \limsup_{t \rightarrow \pm\infty} |\langle \psi_n, e^{-itH} \psi_n \rangle| + (\|\psi\| + \|\psi_n\|) \|\psi - \psi_n\| \\ &= (\|\psi\| + \|\psi_n\|) \|\psi - \psi_n\|. \end{aligned} \quad (2.34)$$

ここで, 最後の等式では $\psi_n \in \text{Dom}(T)$ と不等式 (2.26) を用いた. 上の不等式が任意の $n \in \mathbb{N}$ について成り立つことに注意すれば, $n \rightarrow \infty$ の極限で以下が成り立つ,

$$\forall \psi \in \mathcal{H}, \quad \lim_{t \rightarrow \pm\infty} \langle \psi, e^{-itH} \psi \rangle = 0. \quad (2.35)$$

これは H が固有値 (点スペクトル) を持たないことを意味する. 何故なら, 仮に H が点スペクトルを持つとしよう. それを $\lambda \in \mathbb{R}$ とする. すると, λ に属する固有ベクトル $\psi_\lambda \in \mathcal{H}$ が存在して, $H\psi_\lambda = \lambda\psi_\lambda$ を満たさなければならない. このとき ψ_λ は明らかに (2.35) を満たさない. これは矛盾である. \blacksquare

さらに, 実は上述の系と同じ条件の下で, H が絶対連続であることを示すことができる [27]. 以下に述べるその証明は本質的に [44] における定理に依っている. 後の便宜のために, ここで自己共役演算子 H に付随して規定される \mathcal{H} の部分空間 $\mathcal{H}_{\text{ac}}(H)$ を導入しておく: $\mathcal{H}_{\text{ac}}(H) := \{\psi \in \mathcal{H} \mid \|E(\cdot)\psi\|^2 \text{ は絶対連続}\}$. ここで, $\{E(B) \mid B \in \mathbf{B}\}$ は H のスペクトル測度である. $\mathcal{H}_{\text{ac}}(H)$ は H の絶対連続部分空間と呼ばれる [23, 25, 40].

定理 2.8 : T を \mathcal{H} 上の対称演算子, H を \mathcal{H} 上の自己共役演算子とする. このとき T と H が弱 Weyl 関係式を満たすならば, 次の不等式が全ての $\psi \in \text{Dom}(T)$ と全ての $B \in \mathcal{B}$ について成り立つ.

$$\|E(B)\psi\|^2 \leq \|T\psi\| \|\psi\| \|B\|. \quad (2.36)$$

ここで, $|B|$ は B の Lebesgue 測度である. 特に H は絶対連続である.

証明: 初めに以下の不等式を導出する. 任意の $\epsilon > 0$, 任意の $\lambda \in \mathbf{R}$ と任意の $\psi \in \text{Dom}(T)$ に対して,

$$|\text{Im}\langle \psi, R(\lambda + i\epsilon)\psi \rangle| \leq \pi \|T\psi\| \|\psi\|. \quad (2.37)$$

ここで $R(\lambda \pm i\epsilon) := (H - (\lambda \pm i\epsilon))^{-1}$ は H のレゾルベントである. まず次の関係式に着目する.

$$\begin{aligned} i \text{Im}\langle \psi, R(\lambda + i\epsilon)\psi \rangle &= \frac{1}{2} \int_{\mathbf{R}} \left(\frac{1}{\lambda' - \lambda - i\epsilon} - \frac{1}{\lambda' - \lambda + i\epsilon} \right) d\langle \psi, E(\lambda')\psi \rangle \\ &= \frac{i}{2} \int_{\mathbf{R}} \left[\int_0^\infty (e^{-it(\lambda' - \lambda - i\epsilon)} + e^{it(\lambda' - \lambda + i\epsilon)}) dt \right] d\langle \psi, E(\lambda')\psi \rangle \\ &= i \int_0^\infty e^{-\epsilon t} \langle \psi, \cos t(H - \lambda)\psi \rangle dt \\ &= \lim_{\delta \downarrow 0} \int_\delta^\infty \frac{e^{-\epsilon t}}{t} \langle \psi, [T, \sin t(H - \lambda)]\psi \rangle dt. \end{aligned} \quad (2.38)$$

ここで, 三番目の等号において Fubini の定理を, 最後の等号においては弱 Weyl 関係式から導かれる以下の式を使った.

$$[T, \sin(tH)] = it \cos(tH). \quad (2.39)$$

上の (2.38) の最右辺を評価するためには, 以下の積分を評価すれば十分である.

$$\lim_{\delta \downarrow 0} \int_\delta^\infty \frac{e^{-\epsilon t}}{t} \langle T\psi, \sin t(H - \lambda)\psi \rangle dt. \quad (2.40)$$

ここで, $(0, \infty) \times \mathbf{R}$ から \mathbf{R} への関数 $f(\epsilon, \lambda)$ を導入する,

$$f(\epsilon, \lambda) := \int_0^\infty e^{-\epsilon t} \frac{\sin t\lambda}{t} dt.$$

関数 $f(\epsilon, \lambda)$ は $(0, \infty) \times \mathbf{R}$ 上で連続である. このことは, $|e^{-\epsilon t} \sin t\lambda/t| \leq e^{-\epsilon t} |\lambda|$ が全ての正数 $t > 0$ で成り立つことと, Lebesgue の優収束定理 (dominated convergence theorem) により確認できる. さらに, 任意の正数 ϵ と任意の実数 λ に対して, $e^{-\epsilon t} \sin t\lambda$ は t の関数として $[0, \infty)$ 上で絶対可積分であるから, 関数 $f(\epsilon, \lambda)$ は λ を固定するとき任意の正の ϵ において微分可能である. したがって, 部分積分により, 以下の等式が全ての $\lambda \neq 0$ に対して成り立つ.

$$\partial_\epsilon f(\epsilon, \lambda) = -\frac{1}{\lambda} \frac{1}{1 + \epsilon^2/\lambda^2}.$$

ここで、任意の実数 λ について $\lim_{\epsilon \rightarrow \infty} f(\epsilon, \lambda) = 0$ であることに注意すれば、以下が得られる。

$$f(\epsilon, \lambda) = \pm \frac{\pi}{2} - \frac{1}{\lambda} \int_0^\epsilon \frac{1}{1 + \tau^2/\lambda^2} d\tau. \quad (2.41)$$

ここで \pm は λ の符号に対応している。この結果から、 $f(\epsilon, \lambda)$ は有界、つまり、 $|f(\epsilon, \lambda)| \leq \pi/2$ である。一方、(2.40) は $f(\epsilon, \lambda)$ を使って表せる。

$$\begin{aligned} \lim_{\delta \downarrow 0} \int_\delta^\infty \frac{e^{-\epsilon t}}{t} \langle T\psi, \sin t(H - \lambda)\psi \rangle dt &= \lim_{\delta \downarrow 0} \int_\delta^\infty \frac{e^{-\epsilon t}}{t} \left[\int_{\mathbf{R}} \sin t(\lambda' - \lambda) d\langle T\psi, E(\lambda')\psi \rangle \right] dt \\ &= \lim_{\delta \downarrow 0} \int_{\mathbf{R}} \left[\int_\delta^\infty e^{-\epsilon t} \frac{\sin t(\lambda' - \lambda)}{t} dt \right] d\langle T\psi, E(\lambda')\psi \rangle \\ &= \int_{\mathbf{R}} f(\epsilon, \lambda' - \lambda) d\langle T\psi, E(\lambda')\psi \rangle \\ &= \langle T\psi, f(\epsilon, H - \lambda)\psi \rangle. \end{aligned}$$

ここで、二番目の等号において Fubini の定理を、三番目の等号においては Lebesgue の優収束定理を使った。上の結果を (2.38) に代入すれば、

$$i \operatorname{Im} \langle \psi, R(\lambda + i\epsilon)\psi \rangle = \langle T\psi, f(\epsilon, H - \lambda)\psi \rangle - \langle f(\epsilon, H - \lambda)\psi, T\psi \rangle.$$

このとき、 $\|f(\epsilon, H - \lambda)\| \leq \pi/2$ であることに注意すれば (2.37) が得られる。(2.36) は、レゾルベントとスペクトル測度に関する Stone の公式と (2.37) から導出できる。最後に、 H が絶対連続であることは、 $\operatorname{Dom}(T)$ が \mathcal{H} で稠密であることと (2.36) から帰結される。■

この定理 2.8 における H をハミルトニアンとみると、この定理は、 H と弱 Weyl 関係式を満たす対称演算子 T が一つでも存在すれば、Hilbert 空間 (したがって着目している物理系) は散乱状態だけからなることを主張している。(2.3) によれば、期待値がパラメータ t に比例して発展する対称演算子が存在すれば、その物理系は散乱状態だけからなるとも言える。交換関係の数学的研究という視点から見ると、定理 2.8 は Putnam の結果 [45] の一般化となっていることが分かる。Putnam は、 $A_t = A_0 + t$ ($\forall t \in \mathbf{R}$) という関係式を満たす自己共役演算子 A_0 と H を考察した (ここで、 $A_t := e^{itH} A_0 e^{-itH}$)。この関係式は正に (2.3) に他ならない。このとき Putnam は、自己共役演算子のスペクトル分解の一意性に基づいて、 H が絶対連続であることを示した。これに対し、我々が示した定理 2.8 は、この A_0 が自己共役であるという仮定を対称にまで緩められることを主張している。また、実はいくつかの条件の下でこのような H が掛算演算子とユニタリー同値であることが Schmüdgen により証明されている [35]。掛算演算子は絶対連続であるから、我々の結果は彼の結果と矛盾してはいない。ところで、定理 2.8 は不等式 (2.36) に基づいていたのだが、この不等式は Putnam [46] と Kato [29] が証明した次の不等式に関連し得る： H 、 A 及び C (≥ 0) を、関係式 $[H, iA] = C$ を満たす有界な自己共役演算子とする。このとき、

$$\|C^{1/2} E(B)\psi\|^2 \leq \|A\| \|\psi\|^2 |B|, \quad \forall \psi \in \mathcal{H}, \quad \forall B \in \mathbf{B}$$

が成り立つ. 特に, $\text{Ker}(C) = \{0\}$, すなわち $\overline{\text{Ran}(C)} = \mathcal{H}$ を仮定すると, H が絶対連続であることが証明されている. 我々の導出した不等式 (2.36) は, 上の不等式における演算子 A と C を形式的に T と単位演算子とで置き換えたものと類似している. しかし, T は A と異なり非有界演算子であるから, このような置き換えは自明ではない.

2.5 最小不確定性状態の欠如

二つの演算子 T と H が弱 Weyl 関係式を満たすならば, それらの間には以下の不確定性関係が成り立つ.

$$(\Delta T)_\psi (\Delta H)_\psi \geq \frac{1}{2}, \quad \forall \psi \in \text{Dom}(TH) \cap \text{Dom}(HT) \quad (\|\psi\| = 1). \quad (2.42)$$

これは, 命題 2.2 により T と H が正準交換関係を満たすことから直ちに示される (次の定理 2.9 の証明においてその詳細を述べる). その導出は, 2.3 節で定義した位置演算子 Q と運動量演算子 P との間で成立する不確定性関係の導出と全く同様である. この場合, 不確定性関係において等号を満たす最小不確定性状態, すなわち Gauss 波束が存在し, それが正準交換関係の定義域 $\text{Dom}(QP) \cap \text{Dom}(PQ)$ に属することが知られている. これに対し, 次の定理はある意味で H のスペクトルが下に有界であれば, 不確定性関係 (2.42) において等号を満たす状態が存在しないことを主張する [27]. 特に, (2.20) により, この定理の諸条件を 1 次元自由粒子系での \widetilde{T}_0 と H_0 が満たしていることに注意すべきである.

定理 2.9 : T を \mathcal{H} 上の対称演算子, H を \mathcal{H} 上の自己共役演算子とし, T と H が弱 Weyl 関係式を満たすとする. このとき, H が非負 (すなわち, 任意の $\psi \in \text{Dom}(H)$ に対して $\langle \psi, H\psi \rangle \geq 0$) であり, さらに弱 Weyl 関係式が $\text{Im } t \leq 0$ である任意の複素数 $t \in \mathbb{C}$ についても成立するならば, 不確定性関係 (2.42) において等号を満たす状態は $\text{Dom}(TH) \cap \text{Dom}(HT)$ には存在しない.

この定理の証明の準備として, 以下に二つの補題を置く. また便宜上, ここでは正準交換関係の定義域 $\text{Dom}(TH) \cap \text{Dom}(HT)$ を \mathcal{D}_{CCR} と記す.

補題 2.10 : T と H を Hilbert 空間 \mathcal{H} 上の対称演算子とし, \mathcal{D}_{CCR} 上で正準交換関係 $TH - HT = i$ を満たすとする. このとき, T と H のどちらの固有ベクトルも (仮に存在したとしても) \mathcal{D}_{CCR} には属さない.

証明 : T の固有ベクトルが存在し, \mathcal{D}_{CCR} に属していると仮定する. この固有ベクトルを ψ_λ ($\neq 0$), 対応する固有値を λ と記す. このとき, $T\psi_\lambda = \lambda\psi_\lambda$ であり, したがって $\langle \psi_\lambda, (TH - HT)\psi_\lambda \rangle = 0$ を得る. 一方, 正準交換関係より, $\langle \psi_\lambda, (TH - HT)\psi_\lambda \rangle = i\|\psi_\lambda\|^2 \neq 0$

でなければならない. これは矛盾である. したがって部分空間 \mathcal{D}_{CCR} は T の固有ベクトルを含み得ない. H の固有ベクトルに関しても, T に関する証明と同様に示せる. \blacksquare

補題 2.11 : T と H を Hilbert 空間 \mathcal{H} 上の対称演算子とし, \mathcal{D}_{CCR} 上で正準交換関係 $TH - HT = i$ を満たすとする. このとき, ある状態 $\eta \in \mathcal{D}_{\text{CCR}}$ ($\|\eta\| = 1$) とある複素数の組 a, b ($\in \mathbb{C}$) で, 以下の二つの不等式,

$$(T + aH + b)\eta = 0, \quad (2.43)$$

$$\langle T\eta, H\eta \rangle + \langle H\eta, T\eta \rangle - 2\langle T \rangle_\eta \langle H \rangle_\eta = 0, \quad (2.44)$$

を満たすものが存在すれば, 複素数 a に関して $\text{Re } a = 0$ と $\text{Im } a > 0$ が成り立つ.

証明 : ベクトル η が補題の条件を満たすものと仮定する. このとき, 正準交換関係と条件 (2.43) から,

$$\langle T\eta, H\eta \rangle + \langle H\eta, T\eta \rangle = \langle \eta, (HT + i)\eta \rangle + \langle H\eta, T\eta \rangle = i - 2a\|H\eta\|^2 - 2b\langle \eta, H\eta \rangle.$$

が得られる. さらに条件 (2.43) から,

$$2\langle T \rangle_\eta \langle H \rangle_\eta = -2\langle \eta, (aH + b)\eta \rangle \langle \eta, H\eta \rangle = -2a\langle \eta, H\eta \rangle^2 - 2b\langle \eta, H\eta \rangle.$$

これらの式を (2.44) に代入すれば, 以下が得られる.

$$i - 2a\|H\eta\|^2 = -2a\langle \eta, H\eta \rangle^2. \quad (2.45)$$

次に, 上式の実部と虚部を順に考察する. まず実部の式, $(\text{Re } a)\|H\eta\|^2 = (\text{Re } a)\langle \eta, H\eta \rangle^2$, から $\text{Re } a = 0$ と分かる. 何故なら, 仮に $\text{Re } a \neq 0$ であれば, $\|H\eta\|^2 - \langle \eta, H\eta \rangle^2 = 0$ となるが, このことは η が $\langle \eta, H\eta \rangle$ を固有値とする H の固有ベクトルであることを意味する [$(\Delta H)_\eta^2 = \|(H - \langle H \rangle_\eta)\eta\|^2 = \|H\eta\|^2 - \langle \eta, H\eta \rangle^2 \geq 0$ に注意]. しかし, $\eta \in \mathcal{D}_{\text{CCR}}$ と仮定しているから, この結果は補題 2.10 に矛盾する. したがって, $\text{Re } a = 0$ でなければならない. 一方, 虚部からは $1 - 2(\text{Im } a)\|H\eta\|^2 = -2(\text{Im } a)\langle \eta, H\eta \rangle^2$ が得られるが, 上の議論により $\|H\eta\|^2 - \langle \eta, H\eta \rangle^2 > 0$ であるから $\text{Im } a > 0$ が結論される. \blacksquare

定理 2.9 の証明 : まず, \mathcal{D}_{CCR} に属す規格化されたベクトル ψ ($\|\psi\| = 1$) を考える. T と H は弱 Weyl 関係式を満たすから, 正準交換関係 (1.5) を満たす. このとき T と H の不確定性関係 (2.42) は以下のように導出される,

$$\begin{aligned} (\Delta T)_\psi (\Delta H)_\psi &= \|(T - \langle T \rangle_\psi)\psi\| \|(H - \langle H \rangle_\psi)\psi\| \\ &\geq |\langle (T - \langle T \rangle_\psi)\psi, (H - \langle H \rangle_\psi)\psi \rangle| \\ &\geq |\text{Im} \langle (T - \langle T \rangle_\psi)\psi, (H - \langle H \rangle_\psi)\psi \rangle| \\ &= \frac{1}{2} |\langle T\psi, H\psi \rangle - \langle H\psi, T\psi \rangle| = \frac{1}{2}. \end{aligned}$$

ここで、最初の不等式は Schwarz の不等式であるから、等号は以下の等式を満たす複素数 α が存在するとき、かつそのときに限って成立する。

$$(T - \langle T \rangle_\psi)\psi + \alpha(H - \langle H \rangle_\psi)\psi = 0.$$

二番目の不等式で等号が成立するための必要十分条件は以下の式が成り立つことである、

$$\operatorname{Re}\langle (T - \langle T \rangle_\psi)\psi, (H - \langle H \rangle_\psi)\psi \rangle = \langle T\psi, H\psi \rangle + \langle H\psi, T\psi \rangle - 2\langle T \rangle_\psi \langle H \rangle_\psi = 0.$$

したがって、 T と H の不確定性関係で等号を満たす状態 ψ ($\|\psi\| = 1$) が \mathcal{D}_{CCR} に存在しないことを示すためには、 \mathcal{D}_{CCR} に属すいかなる ψ ($\|\psi\| = 1$) といかなる複素数 α を選んでも、上の二つの等号成立条件が満たされないことを確認すれば良い。これら二つの条件式が補題 2.11 における二つの式、(2.43) と (2.44) のそれぞれと同じ形であることに注意してほしい。

そこで、二つの式 (2.43) と (2.44) を同時に満たす、 \mathcal{D}_{CCR} のベクトル η ($\|\eta\| = 1$) と複素数の組 a, b が存在すると仮定して、矛盾が起こることを示そう。補題 2.11 から、パラメータ a は純虚数であり、 $a = iq$, $q > 0$ と表せる。このとき (2.43) は $T\eta + iqH\eta + b\eta = 0$ となる。この式の両辺と η との内積をとれば、 $-q\langle \eta, H\eta \rangle = \operatorname{Im} b \leq 0$ が得られる。ここで、期待値 $\langle \eta, T\eta \rangle$ と $\langle \eta, H\eta \rangle$ が実数であること、並びに H が非負であることを使った (定理 2.9 の条件を見よ)。また、 $\operatorname{Im} t \leq 0$ である任意の複素数 t に対して、 e^{-itH} が有界演算子となり $e^{-itH}H \subset He^{-itH}$ を満たすことに注意する。すると、弱 Weyl 関係式から $Te^{-itH}\eta = e^{-itH}(T\eta + t\eta) = (-iqH - b + t)e^{-itH}\eta$ と分かる。 $\operatorname{Im} b \leq 0$ かつ $\operatorname{Im} t \leq 0$ であるから、特に $t = b$ と選べば $Te^{-ibH}\eta = -iqHe^{-ibH}\eta$ が得られる。ここで、 $e^{-ibH}\eta \neq 0$ である。何故なら、 e^{-ibH} は単射であり、また $\eta \neq 0$ だからである。このことは以下の関係式から理解できる、

$$\begin{aligned} \|e^{-ibH}\eta\|^2 &= \int_{[0, \infty)} |e^{-ib\lambda}|^2 d\|E(\lambda)\eta\|^2 \geq \int_{[0, N]} |e^{-ib\lambda}|^2 d\|E(\lambda)\eta\|^2 \\ &\geq \inf_{\lambda \in [0, N]} |e^{-ib\lambda}|^2 \int_{[0, N]} d\|E(\lambda)\eta\|^2 = e^{-2|\operatorname{Im} b|N} \int_{[0, N]} d\|E(\lambda)\eta\|^2. \end{aligned}$$

ここで $\{E(B) \mid B \in \mathbf{B}\}$ は H のスペクトル測度、 N は任意の自然数である。また、 H を非負に仮定している、したがって H のスペクトルが $[0, \infty)$ に含まれることを使った。いま、 $e^{-ibH}\eta = 0$ を仮定すると、上式から $0 = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{[0, N]} d\|E(\lambda)\eta\|^2 = \|\eta\|^2$ が結論されるが、これは明らかに $\|\eta\| = 1$ に矛盾する。次に、このベクトル $e^{-ibH}\eta$ と $Te^{-ibH}\eta = -iqHe^{-ibH}\eta$ の両辺とで内積をとれば、

$$\langle e^{-ibH}\eta, Te^{-ibH}\eta \rangle = -iq\langle e^{-ibH}\eta, He^{-ibH}\eta \rangle.$$

ここで, T と H の期待値は共に実数であることから, この式の両辺は 0 でなければならぬ。特に, $q > 0$ かつ $e^{-ibH}\eta \neq 0$ であることから, $0 = \langle e^{-ibH}\eta, He^{-ibH}\eta \rangle = \|H^{1/2}e^{-ibH}\eta\|^2$ が得られる。ここで, $H^{1/2}$ は, $H = H^{1/2}H^{1/2}$ を満たす非負の自己共役演算子である。したがって, $He^{-ibH}\eta = 0$ を得る。これは, $e^{-ibH}\eta$ ($\neq 0$ に注意) が H の固有値 0 に属す固有ベクトルであることを意味する。このことは, 系 2.7 (または定理 2.8) の主張と矛盾する。したがって, 補題 2.11 における二つの式 (2.43) と (2.44) が同時に満たされることは有り得ない。このことは, 定理 2.9 の条件の下では, T と H の不確定性関係 (2.42) において等号は決して成立しないことを意味する。 ■

最小不確定性状態に関するこの定理は, Kobe [18] による次の結果,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} (\Delta \widetilde{T}_0)_{F^{-1}\phi_n} (\Delta H_0)_{F^{-1}\phi_n} = \frac{1}{2}$$

に動機付けられている。ここで, ϕ_n ($n = 2, 3, \dots$) は (2.14) で定義された関数である。しかし, $n \rightarrow \infty$ の極限で, ϕ_n は L^2 -ノルムでは収束しないことに注意すべきである。この Kobe の結果は最小不確定性状態が存在しないことを示唆している。また, これと類似した結果が Wigner [47] や Baute 等 [48] によっても導かれている。この最小不確定性状態の欠如は, Weyl 関係式と弱 Weyl 関係式の違いを浮き彫りにする事実と言える。何故なら, Weyl 関係式を満たす二つの演算子の不確定性関係には最小不確定性状態が存在するからである。⁴

2.6 一般的な量子系における時間演算子の構成

この節では, 前節の結果および Schrödinger 作用素論からの帰結を用いて, 1次元自由粒子系を含むより一般的な量子系における時間演算子について議論する。特に注目すべき結果は, 1次元量子系のポテンシャル $V(x)$ が \mathbb{R} 上の実可測関数であって, 有界 ($0 \leq V(x) \leq$ 定数 a.e.) かつ \mathbb{R} 上で絶対可積分ならば, $L^2(\mathbb{R})$ 上のハミルトニアン $H_1 := H_0 + V$ と弱 Weyl 関係式を満たす $L^2(\mathbb{R})$ 上の対称演算子 T_1 , すなわち時間演算子が存在することである。このようなポテンシャルには, 箱型障壁ポテンシャルや $1/\cosh^2 x$ 型のポテンシャルなど我々に馴染みのものも多い。ここではまず, 1次元自由粒子系の Aharonov-Bohm 時間演算子 \widetilde{T}_0 に関して前節までの考察から導かれる結果をまとめる [27].

⁴実は, Weyl 関係式を満たす二つの演算子は, 2.3 節で定義した位置演算子 Q と運動量演算子 P (正確にはそれらの有限または可算無限個の直和) のそれぞれとユニタリー同値となっている (von Neumann の一意性定理 [36]). また, この節の冒頭でも述べたように, この Q と P との不確定性関係においては等号を満たす最小不確定性状態が存在する。したがって, Weyl 関係式を満たす二つの演算子の不確定性関係には最小不確定性状態が存在している。

系 2.12 :

- (i) (2.20) より \widetilde{T}_0 と H_0 は弱 Weyl 関係式を満たす. したがって命題 2.2 より, $\text{Dom}(\widetilde{T}_0 H_0) \cap \text{Dom}(H_0 \widetilde{T}_0)$ 上で正準交換関係および不確定性関係が成り立つ.
- (ii) 命題 2.5 より, 任意の $\psi \in \text{Dom}(\widetilde{T}_0)$ に対して $(\Delta \widetilde{T}_0)_\psi$ と生存確率との間で不等式 (2.26) が成り立つ. すなわち,

$$\frac{4(\Delta \widetilde{T}_0)_\psi^2 \|\psi\|^2}{t^2} \geq |\langle \psi, e^{-itH_0} \psi \rangle|^2, \quad t \in \mathbf{R} \setminus \{0\}. \quad (2.46)$$

- (iii) 系 2.6 より \widetilde{T}_0 は固有値を持たない.
- (iv) 定理 2.9 より \widetilde{T}_0 と H_0 との間の不確定性関係において等号を満たす状態は, $\text{Dom}(\widetilde{T}_0 H_0) \cap \text{Dom}(H_0 \widetilde{T}_0)$ には存在しない.

ここで上の系に関していくつか述べておく. まず (ii) に関して, (2.14) で定義した関数 ϕ_0 (Gauss 波束) は定義域 $\text{Dom}(\widetilde{T}_0)$ に属さないことが分かる. 何故なら, $t \rightarrow \infty$ の極限で 1 次元自由粒子系での Gauss 波束の生存確率は t^{-1} で減衰するからである. このことは, この定義域に属す波束の生存確率が t^{-2} またはそれより速いオーダーで減衰することを主張する不等式 (2.46) に矛盾する. したがって, $\phi_0 \notin \text{Dom}(\widetilde{T}_0)$ でなければならない. しかし, 一般的に空間次元が上がるごとに自由粒子の生存確率の減衰は速くなるので, このような議論は 1 次元でこそ有効であると言える. さらに, 不等式 (2.46) からは, Aharonov-Bohm 時間演算子 \widetilde{T}_0 の不確定性 (標準偏差) の物理的意味を理解できることを強調したい. いま, 各 $\psi \in \text{Dom}(\widetilde{T}_0)$ ($\|\psi\| = 1$) について最大半減時間 $\tau_h(\psi)$ (maximum half time) を $\tau_h(\psi) := \sup\{t > 0 \mid |\langle \psi, e^{-itH_0} \psi \rangle|^2 = 1/2\}$ で定義すれば, 不等式 (2.46) から次の結果が直ちに求まる.

$$2\sqrt{2}(\Delta \widetilde{T}_0)_\psi \geq \tau_h(\psi). \quad (2.47)$$

すなわち, $2\sqrt{2}(\Delta \widetilde{T}_0)_\psi$ は $\tau_h(\psi)$ の上限を与える. これは, 観測量 $\tau_h(\psi)$ と \widetilde{T}_0 との直接的な関係を与えている点で興味深いと言える. また, $t > \tau_h(\psi)$ では生存確率は決して $1/2$ 以上には回復しないことに注意してほしい (このことは, 不等式 (2.46), 生存確率の t に関する連続性, 並びに $\tau_h(\psi)$ の定義から理解できる). この事実と生存確率の物理的意味を思い起こせば, 時間の不確定性 $(\Delta \widetilde{T}_0)_\psi$ は, 初期状態から初期状態と区別できる別の状態への遷移時間の目安を与えている事が分かる. 次に (iv) に関して述べる. 確かに不確定性関係で等号を満たす状態は存在しないが, 少なくとも次のことが成り立つことを注意すべきであろう [18]:

$$\inf_{\|\psi\|=1, \psi \in \text{Dom}([\widetilde{T}_0, H_0])} (\Delta \widetilde{T}_0)_\psi (\Delta H_0)_\psi = \frac{1}{2}. \quad (2.48)$$

続いて, 時間演算子が存在する 1 次元自由粒子系以外の量子系について述べる [27]. そのための準備として, Putnam による次の定理を挙げる [49].

定理 2.13 (C. R. Putnam) : $V(x)$ を \mathbb{R} 上の実数値可測関数で, $0 \leq V(x) \leq \text{定数}$ a.e. および $V(x) \in L^1(\mathbb{R})$ を満たすとする (このとき $V(x) \in L^2(\mathbb{R})$ が成り立つ). さらに $L^2(\mathbb{R})$ 上の演算子 H_1 を $H_1 := H_0 + V(x)$ で定義する. このとき H_0 と H_1 は絶対連続であり, かつユニタリーな波動演算子 $U_{\pm} := s\text{-}\lim_{t \rightarrow \pm\infty} e^{itH_1} e^{-itH_0}$ が存在して $H_1 = U_{\pm} H_0 U_{\pm}^*$ をみたし, $L^2_{ac}(U_{\pm}) \supset \text{Ran}(V)$ が成り立つ. また, もし

$$\liminf_{b-a \rightarrow \infty} (b-a)^{-3} \int_{[a,b]} V^{-1}(x) dx = 0 \quad (2.49)$$

が成り立つならば, U_{\pm} のスペクトルは $\{\lambda \mid |\lambda| = 1\}$ である.

このとき, 上の定理におけるハミルトニアン H_1 と弱 Weyl 関係式を満たす $L^2(\mathbb{R})$ 上の対称演算子 T_1 を直ちに構成できる. それには $T_{1,\pm} := U_{\pm} \widetilde{T}_0 U_{\pm}^*$ と定義すれば良い. このとき U_{\pm} によって (2.20) 式をユニタリー変換すれば, 弱 Weyl 関係式

$$T_{1,\pm} e^{-itH_1} \phi = e^{-itH_1} (T_{1,\pm} + t) \phi, \quad \forall \phi \in \text{Dom}(T_{1,\pm}), \forall t \in \mathbb{C} \ (\text{Im } t \leq 0) \quad (2.50)$$

が得られる. ここで $\phi := U_{\pm} \psi$, $\psi \in \text{Dom}(\widetilde{T}_0)$ である. したがって, (2.50) により系 2.12 で挙げられた \widetilde{T}_0 と H_0 の間で成り立つ諸事実は全て T_{\pm} と H_1 との間でも成り立つ.

束縛状態を持つ一般的なポテンシャル系では, 波動演算子 $U_{\pm} := s\text{-}\lim_{t \rightarrow \pm\infty} e^{itH_1} e^{-itH_0}$ が存在すれば, その値域 $\text{Ran}(U_{\pm})$ は $\text{Ran}(U_{\pm}) \subset L^2_{ac}(H_1)$ を満たす. ここで $L^2_{ac}(H_1)$ は $L^2(\mathbb{R})$ における H_1 の絶対連続部分空間である (定理 2.8 の直前の記述を見よ). この事実注目すれば, 束縛状態を持つポテンシャル系にも上と全く同様にしてハミルトニアン H_1 と弱 Weyl 関係式を満たす時間演算子 T_1 を構成できる. ただし今述べた理由により, この方法で作られる T_1 の定義域は $L^2(\mathbb{R})$ の部分空間 $L^2_{ac}(H_1)$ 上に制限される. この一般的な場合における T_1 の構成は, Kuroda による次の定理に基づくのが明快である [23, 25, 28]. 定理 2.13 は, 実はこの定理に依拠している.

定理 2.14 (S. T. Kuroda) : 任意の $V(x) \in L^1(\mathbb{R}^n) \cap L^2(\mathbb{R}^n)$, $n \leq 3$ に対して演算子 $H_1 := H_0 + V$ を定義する. このとき波動演算子 U_{\pm} が存在して, $\text{Ran}(U_{\pm}) = L^2_{ac}(H_1)$ を満たす.

定理 2.13 を用いて時間演算子を構成したのと同様に, $T_{1,\pm} := U_{\pm} \widetilde{T}_0 U_{\pm}^*$ と定義すれば, $T_{1,\pm}$ は $L^2_{ac}(H_1)$ 上で定義された対称演算子であって, その定義域は $\text{Dom}(T_{1,\pm}) = U_{\pm} \text{Dom}(\widetilde{T}_0)$ である. そして $L^2_{ac}(H_1)$ 上に制限されたハミルトニアン $H_{1,ac} := H_1|_{L^2_{ac}(H_1)} = U_{\pm} H_0 U_{\pm}^*$ と弱 Weyl 関係式を満たす. $H_1|_{L^2_{ac}(H_1)}$ の定義域は, H_1 の定義域 $\text{Dom}(H_1) (\subset L^2(\mathbb{R}))$ の $L^2_{ac}(H_1)$ 上への制限として定義される. しかし, ハミルトニアン H_1 が束縛状態を持つ場合, すなわち $L^2(\mathbb{R}) \neq L^2_{ac}(H_1)$ である場合は, このような定義域の制限なしに H_1 と弱 Weyl

関係式を満たす $L^2(\mathbf{R})$ 上の対称演算子を構成することは決してできない. 何故なら系 2.7 (もしくは定理 2.8) により, 束縛状態を持つハミルトニアンと弱 Weyl 関係式を満たす対称演算子は存在しないからである.

第3章

1次元自由波束の漸近的振る舞いにおけるベキ減衰

この章では、1次元自由波束とそれに関連した物理量（生存確率や非逃避確率など）の長時間における振る舞いが、初期波束の特性によりどのように特徴付けられるかを考察する。この問題を扱うために、我々はまず長時間領域において自由波束の漸近展開を試みる。特に初期波束のゼロ運動量近傍での振る舞いと、自由波束の長時間での振る舞いとの関連を定量的に議論する [50, 51].

3.1 自由波束の長時間領域での漸近展開

この節では、長時間において各位置 x での1次元自由波束 $\psi(x, t)$ の漸近展開を行う。ここでの解析は、初期波束 $\psi(x)$ のゼロ運動量付近の振る舞いが自由波束 $\psi(x, t)$ の長時間での振る舞いとどのように関係しているかを調べるための準備である。

自由波束 $\psi(x, t)$ の漸近的振る舞いを見積もるため、まず1次元自由粒子系の Schrödinger 方程式の解 (1.7) または (1.8) を考える。すなわち、 $\psi(x, t) = (e^{-itH_0}\psi)(x)$ とするとき、

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} e^{-itk^2} \hat{\psi}(k) dk \quad (3.1)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{4\pi it}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i|x-y|^2/4t} \psi(y) dy, \quad (3.2)$$

である。これらの解の長時間領域での振る舞いは、[15] で使われている定常位相の方法 [52] や、Fourier 積分を部分積分する方法 [53, 54] を使って、(3.1) の積分を漸近展開すれば理解されるだろう。このとき、 $k = 0$ での $\hat{\psi}(k)$ の高階微分係数が自然に現れる。しかし、 $\psi(x, t)$ の漸近形の x 依存性を考慮に入れるには、(3.2) から始める方が便利である。実際、(3.1) から始めるのとは異なり、我々は単に (3.2) に現れる指数関数を十分大きな t で展開すれば漸近形が得られるし、そのとき x 依存性も自動的に確認できる。それは次のようになる [51]:

$$\psi(x, t) \sim \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^{j-1} \frac{\Gamma(j+1/2)}{\pi(it)^{j+1/2}} (G_{2j}\psi)(x). \quad (3.3)$$

ここで G_j は以下で定義される積分演算子である.

$$(G_j\psi)(x) := -\frac{1}{2(j!)} \int_{-\infty}^{\infty} |x-y|^j \psi(y) dy. \quad (3.4)$$

実は, G_j は自由レゾルベント $(H_0 - z)^{-1}$ の z に関する漸近展開の係数である. このことは次節で詳しく述べる. また, (3.3) で和と積分の順序が入れ替えられることを仮定した. (3.3) の $(G_{2j}\psi)(x)$ もまた, (3.1) から始めた場合に得られる結果と同じく, $k=0$ での $\hat{\psi}(k)$ の高階微分係数で記述できることは注意すべきである. このことは $\hat{\psi}(k)$ を形式的に展開すれば理解できる.

$$\begin{aligned} \hat{\psi}(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iky} \psi(y) dy \\ &= \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-ik)^j}{\sqrt{2\pi} j!} \int_{-\infty}^{\infty} y^j \psi(y) dy = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{k^j}{j!} \hat{\psi}^{(j)}(0). \end{aligned} \quad (3.5)$$

ただし, $\hat{\psi}^{(0)}(0) = \hat{\psi}(0)$ ならびに

$$\hat{\psi}^{(j)}(0) = \left. \frac{d^j \hat{\psi}(k)}{dk^j} \right|_{k=0} = \frac{(-i)^j}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} y^j \psi(y) dy \quad (3.6)$$

と置いた. このとき (3.4) で定義した $(G_{2j}\psi)(x)$ を次のように書き換えられる.

$$(G_{2j}\psi)(x) = -\frac{\sqrt{2\pi}}{2[(2j)!]} \sum_{n=0}^{2j} \binom{2j}{n} i^n \hat{\psi}^{(n)}(0) (-x)^{2j-n}. \quad (3.7)$$

ここで, 上で得た波束の漸近展開式を使って, 生存確率と非逃避確率の長時間での漸近展開式も導出しておこう. 1次元自由粒子系における初期波束 (状態) ψ の生存確率 $S(t)$ は, (1.14) で既に定義した通りである. 今の場合, H を H_0 に置き換えれば良い. すなわち,

$$S(t) = |\langle \psi, e^{-itH_0} \psi \rangle|^2 = \left| \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\psi(x)} \psi(x, t) dx \right|^2 \quad (3.8)$$

である. 一方, 非逃避確率 (nonescape probability) $P(t)$ は以下で定義される物理量である. それは, 時刻 t において, 粒子を直線上の有界閉区間 $[a, b]$ に見出す確率であって,

$$P(t) := \int_a^b |\psi(x, t)|^2 dx \quad (3.9)$$

で定義される. $S(t)$ と $P(t)$ の長時間での漸近的振る舞いを得るためには, (3.3) を (3.8) と (3.9) に代入すれば,

$$S(t) \sim \left| \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^{j-1} \frac{\Gamma(j+1/2)}{\pi(it)^{j+1/2}} \langle \psi, G_{2j}\psi \rangle \right|^2, \quad (3.10)$$

$$P(t) \sim \int_a^b \left| \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^{j-1} \frac{\Gamma(j+1/2)}{\pi(it)^{j+1/2}} (G_{2j}\psi)(x) \right|^2 dx \quad (3.11)$$

と求まる. (3.10) における $\langle \psi, G_{2j}\psi \rangle$ もまた微分係数 $\widehat{\psi}^{(j)}(0)$ で記述できる.

$$\langle \psi, G_{2j}\psi \rangle = \frac{(-1)^{j-1}\pi}{(2j)!} \sum_{n=0}^{2j} \binom{2j}{n} \overline{\widehat{\psi}^{(2j-n)}(0)} \widehat{\psi}^{(n)}(0). \quad (3.12)$$

(3.7) と (3.12) を見ると分かるように, 本質的に $\psi(x, t)$, $S(t)$, $P(t)$ などの展開係数は $\widehat{\psi}^{(k)}$ の $k = 0$ での微分係数で書き下される. このことは, $\psi(x, t)$ の長時間での振る舞いが, 何らかの意味で初期波束 ψ のゼロ運動量付近の振る舞いで決まることを示唆する. この点は, ここで求めた漸近展開式を使って, 3.4 節で詳細に調べられる.

3.2 自由レゾルベントの漸近展開

この節と次節では, 前節で示した $\psi(x, t)$, $P(t)$, $S(t)$ などの漸近展開を数学的により厳密に行う [50]. 特に 1 次元自由粒子系の時間発展演算子 e^{-itH_0} の漸近展開式を求めるが, その導出には, もともとポテンシャル系の時間発展演算子の漸近展開のために開発された方法 [55, 56, 57] を参考にすることとする. これらのポテンシャル系に関する研究では, 自由粒子系の時間発展演算子の漸近展開式は導かれていないが, それらの方法は自由粒子系へも直ちに適用できる. また本研究では 1 次元の場合のみを扱うが, 高次元への拡張も容易である.

まず 1 次元自由粒子系の時間発展演算子 e^{-itH_0} の長時間での漸近展開式を求めるために, e^{-itH_0} が自由レゾルベント $(H_0 - z)^{-1}$ の Fourier 変換で表されることに着目する (付録 B を見よ). そこで, この節では自由レゾルベント $(H_0 - z)^{-1}$ の漸近展開式を z の小さいもしくは大きいところにおいて求めることで, その z 依存性を調べる. その結果を用いて, e^{-itH_0} の長時間での漸近展開を次節で行う.

1 次元自由粒子系のハミルトニアン H_0 は運動量演算子 P [厳密な定義には (2.7) と (2.8) を用いる] を使って $H_0 := P^2$ で定義されるのであった. このとき自由レゾルベント $R_0(z) := (H_0 - z)^{-1}$ は以下のような $L^2(\mathbf{R})$ 上の積分演算子で表せる [22, 23],

$$(R_0(z)\psi)(x) = -\frac{1}{2iz^{1/2}} \int_{\mathbf{R}} e^{iz^{1/2}|x-y|} \psi(y) dy, \quad \forall \psi \in L^2(\mathbf{R}). \quad (3.13)$$

ただし複素数 z は $z \notin [0, \infty)$ であり, また $\text{Im } z^{1/2} > 0$ とする. このとき $R_0(z)$ は z について解析的である. しかし, 我々は演算子 $R_0(z)$ を ($L^2(\mathbf{R})$ 上の写像ではなく) $L^{2,s}(\mathbf{R})$ から $L^{2,-s'}(\mathbf{R})$ への写像として扱うことにする. ここで s と s' は適当な正数である. また, $L^{2,s}(\mathbf{R})$ は任意の実数 s について定義された重み付き L^2 -空間であって, そのノルムは

$$\|\psi\|_s := \left[\int_{\mathbf{R}} (1+x^2)^s |\psi(x)|^2 dx \right]^{1/2} \quad (3.14)$$

で与えられる. このとき, $\psi \in L^{2,s}(\mathbf{R})$ は $\|\psi\|_s < \infty$ を意味する. まず適当な正数 s と s' について, $L^{2,s}(\mathbf{R}) \subset L^2(\mathbf{R}) \subset L^{2,-s'}(\mathbf{R})$ が成り立つ. さらに, $L^{2,s}(\mathbf{R})$ から $L^{2,-s'}(\mathbf{R})$ への有界演算子 M の全体が作る Banach 空間を $B(s, -s')$ と記す. ただし, そのノルムは以下で定義される,

$$\|M\|_{s,-s'} := \sup_{\psi \in L^{2,s}(\mathbf{R}), \psi \neq 0} \frac{\|M\psi\|_{-s'}}{\|\psi\|_s}. \quad (3.15)$$

ここで, $M \in B(s, -s')$ はノルム $\|M\|_{s,-s'}$ が有限であることを意味する. 自由レゾルベントをこのように扱う理由は次の補題の最後の部分で明らかになる.

補題 3.1 : 任意の $s, s' > 1/2$ について, $R_0(z)$ は $B(s, -s')$ に属し, また $R_0(z)$ の C_+ への制限は $\overline{C}_+ \setminus \{0\}$ 上に連続的に拡張できる. ここで, $C_+ := \{z \in \mathbf{C} \mid \text{Im } z > 0\}$, \overline{C}_+ は C_+ の閉包である.

証明 : まず, 任意の $\psi \in L^{2,s}(\mathbf{R})$ と任意の $z \in C_+$ に対し, 次の評価が成立する.

$$\begin{aligned} \|R_0(z)\psi\|_{-s'}^2 &= \int_{\mathbf{R}} (1+x^2)^{-s'} \left| \frac{1}{2iz^{1/2}} \int_{\mathbf{R}} e^{iz^{1/2}|x-y|} \psi(y) dy \right|^2 dx \\ &\leq \frac{\|\psi\|_s^2}{|2iz^{1/2}|^2} \int_{\mathbf{R}} (1+x^2)^{-s'} dx \int_{\mathbf{R}} (1+y^2)^{-s} dy < \infty. \end{aligned}$$

このことは $R_0(z) \in B(s, -s')$ を意味する. 上の評価は明らかに $\overline{C}_+ \setminus \{0\}$ 上でも成り立つから, 補題の主張の最後の部分も成立することが分かる. \blacksquare

以下では $R_0(z)$ の $\overline{C}_+ \setminus \{0\}$ 上への拡大にも同じ記号 $R_0(z)$ を使うことにする. 自由レゾルベント $R_0(z)$ を $z = 0$ の近傍で形式的に展開すれば,

$$R_0(z) = \sum_{j=0}^{\infty} (iz^{1/2})^{j-1} G_j. \quad (3.16)$$

ここで, G_j ($j = 0, 1, \dots$) は積分演算子であって, 適当なベクトル ψ に対し次のように定義されている.

$$(G_j\psi)(x) := -\frac{1}{2j!} \int_{\mathbf{R}} |x-y|^j \psi(y) dy. \quad (3.17)$$

補題 3.2 : 積分演算子 G_j は $B(s, -s')$ に属す Hilbert-Schmidt 演算子である. ただし $s, s' > j + 1/2$ とする.

証明 : 補題の主張は $(1+x^2)^{-s'/2} G_j (1+y^2)^{-s/2}$ が $L^2(\mathbf{R})$ 上の Hilbert-Schmidt 演算子であることと同値であることに注意しよう. 一方, $(1+x^2)^{-s'/2} G_j (1+y^2)^{-s/2}$ が $L^2(\mathbf{R})$ 上の Hilbert-Schmidt 演算子であることは直ちに分かる: 全ての $s, s' > j + 1/2$ について,

$$\int_{\mathbf{R}} \int_{\mathbf{R}} \frac{|x-y|^{2j}}{(1+x^2)^{s'}(1+y^2)^s} dx dy \leq 2^{2j} \int_{\mathbf{R}} \int_{\mathbf{R}} \frac{|x|^{2j} + |y|^{2j}}{(1+x^2)^{s'}(1+y^2)^s} dx dy < \infty. \quad \blacksquare$$

形式的な展開 (3.16) の正当性は以下の意味で保証される.

補題 3.3 : $k = 0, 1, \dots$ とする. $R_0(z)$ は (3.16) の $j = k$ までの有限級数で近似できる. ただし, その剰余項のオーダーは $|z| \rightarrow 0$ のとき $B(s, -s')$ ($s, s' > k + 1/2$) のノルムで $o(|z|^{(k-1)/2})$ である.¹ 同様の意味で, (3.16) は各 $z \in \overline{\mathbf{C}}_+ \setminus \{0\}$ で何回でも微分可能である. つまり, z による有限級数の r 階導関数は $B(s, -s')$ ($s, s' > k + r + 1/2$) のノルムにおいて $(d^r/dz^r)R_0(z)$ と $o(|z|^{(k-1)/2-r})$ の誤差で一致する.

証明 : 初めに $k = 0$ の場合を考える. r を非負整数, $s, s' > r + 1/2$, そして $\psi \in L^{2,s}(\mathbf{R})$ とする. このとき次式が成り立つ.

$$\begin{aligned} & \left\| \frac{d^r R_0(z)}{dz^r} \psi - \frac{d^r (iz^{1/2})^{-1}}{dz^r} G_0 \psi \right\|_{-s'}^2 \\ &= \int_{\mathbf{R}} (1+x^2)^{-s'} \left| \int_{\mathbf{R}} \frac{d^r}{dz^r} \left[\frac{1}{2iz^{1/2}} (e^{iz^{1/2}|x-y|} - 1) \right] \psi(y) dy \right|^2 dx \\ &\leq \frac{\|\psi\|_s^2}{4} \int_{\mathbf{R}} \int_{\mathbf{R}} (1+x^2)^{-s'} (1+y^2)^{-s} \\ &\quad \times \left[A|z|^{-1-2r} |e^{iz^{1/2}|x-y|} - 1|^2 + \sum_{m,m'} A_{m,m'} |z|^m |x-y|^{m'} \right] dx dy. \quad (3.18) \end{aligned}$$

ここで, A と $A_{m,m'}$ は正の定数, m と m' は整数であって, それぞれ $-1-2r < m \leq -1-r$ と $0 < m' \leq 2r$ を満たすとする. $r = 0$ のとき, 和 $\sum_{m,m'}$ からの寄与はない. Lebesgue の優収束定理により, (3.18) を $|z|^{-1-2r}$ で割ったものは $z \rightarrow 0$ で 0 に収束する. 同様に, $k = 1, 2, \dots$ に対しては以下のようなになる.

$$\begin{aligned} & \left\| \frac{d^r R_0(z)}{dz^r} \psi - \sum_{j=0}^k \frac{d^r (iz^{1/2})^{j-1}}{dz^r} G_j \psi \right\|_{-s'}^2 \\ &= \int_{\mathbf{R}} (1+x^2)^{-s'} \\ &\quad \times \left| \int_{\mathbf{R}} \frac{d^r}{dz^r} \left[\frac{(iz^{1/2})^{k-1} |x-y|^k}{2(k-1)!} \left(\int_0^1 t^{k-1} e^{iz^{1/2}|x-y|(1-t)} dt - \frac{1}{k} \right) \right] \psi(y) dy \right|^2 dx \\ &\leq \frac{\|\psi\|_s^2}{|2(k-1)!|^2} \int_{\mathbf{R}} \int_{\mathbf{R}} (1+x^2)^{-s'} (1+y^2)^{-s} \left[B|z|^{k-1-2r} |x-y|^{2k} \right. \\ &\quad \times \left. \left| \int_0^1 t^{k-1} e^{iz^{1/2}|x-y|(1-t)} dt - \frac{1}{k} \right|^2 + \sum_{m,m'} B_{m,m'} |z|^m |x-y|^{m'} \right] dx dy. \quad (3.19) \end{aligned}$$

ただし $s, s' > k + r + 1/2$ とする. また, B と $B_{m,m'}$ は正の定数, m と m' は整数であって それぞれ $k-1-2r < m \leq k-1-r$ と $2k < m' \leq 2(k+r)$ を満たすとする. $z \rightarrow 0$ の極限を取れば, (3.19) を $|z|^{k-1-2r}$ で割ったものが 0 に収束することが分かる. これにより補題の証明は完了した. ■

次に大きい $|z|$ における $R_0(z)$ の評価を行う.

¹ある演算子 $A(z) \in \mathbf{B}(s, -s')$ ($z \in \mathbf{C}$) が $|z| \rightarrow 0$ で $\mathbf{B}(s, -s')$ のノルムで $o(|z|)$ であるとは, $\|A(z)\|_{s, -s'} = o(|z|)$ ($|z| \rightarrow 0$) を意味している.

補題 3.4 : $k = 0, 1, \dots$, かつ $s, s' > k + 1/2$ とする. このとき $R_0(z)$ は $B(s, -s')$ において各 $z \in \overline{C}_+ \setminus \{0\}$ で k 階微分可能であり, $|z| \rightarrow \infty$ の極限において $B(s, -s')$ のノルムで次のように振る舞う.

$$\frac{d^r R_0(z)}{dz^r} = O(|z|^{-(r+1)/2}), \quad r = 0, 1, \dots, k.$$

証明 : $s, s' > k + 1/2$ かつ $\psi \in L^{2,s}(\mathbf{R})$ とすると,

$$\begin{aligned} \left\| \frac{d^r R_0(z)}{dz^r} \psi \right\|_{-s'}^2 &\leq \frac{\|\psi\|_s^2}{4} \int_{\mathbf{R}} dx \frac{1}{(1+x^2)^{s'}} \int_{\mathbf{R}} dy \frac{1}{(1+y^2)^s} \\ &\quad \times \left[D|z|^{-1-r}|x-y|^{2r} + \sum_{m,m'} D_{m,m'} |z|^m |x-y|^{m'} \right] < \infty. \end{aligned}$$

ここで D と $D_{m,m'}$ は正の定数, m と m' は整数であってそれぞれ $-1 - 2r \leq m < -1 - r$ と $0 \leq m' < 2r$ を満たすとする. このとき $|z| \rightarrow \infty$ の極限で上式の右辺は $O(|z|^{-1-r})$ である. ■

最後に, 次式で定義されるスペクトル密度 $E'(\lambda)$ を考察しよう.

$$E'(\lambda) := (2\pi i)^{-1} (R_0(\lambda) - \overline{R_0}(\lambda)), \quad \forall \lambda > 0. \quad (3.20)$$

ここで, $\overline{R_0}(\lambda)$ は任意の $\psi \in L^{2,s}(\mathbf{R})$ に対して,

$$(\overline{R_0}(\lambda)\psi)(x) = \frac{1}{2i\lambda^{1/2}} \int_{\mathbf{R}} dy e^{-i\lambda^{1/2}|x-y|} \psi(y)$$

と定義されている. すなわち, この演算子 $\overline{R_0}(\lambda)$ は $R_0(\lambda - i\epsilon)$ の $\epsilon \downarrow 0$ での極限と見なせる. $E'(\lambda)$ は明らかに $B(s, -s')$ ($s, s' > 1/2$) に属し, $R_0(\lambda)$ と同様, 補題 3.1, 3.3, および 3.4 で記述される性質を持つ. さらに, 補題 3.3 から次のことが示せる: 任意の整数 $n \geq 0$ に対して,

$$E'(\lambda) = \pi^{-1} \sum_{j=0}^n (-1)^{j-1} \lambda^{j-1/2} G_{2j} + F_n(\lambda). \quad (3.21)$$

特に剰余項 $F_n(\lambda)$ は $B(s, -s')$ ($s, s' > 2n + (n+1) + 1/2 = 3n + 3/2$ とする) において $n+1$ 階微分可能であって, $\lambda \downarrow 0$ の極限で $(d/d\lambda)^r F_n(\lambda) = o(\lambda^{n-r-1/2})$ ($r = 0, 1, \dots, n+1$) である. ここで (3.21) において λ の整数ベキの項が存在しない点に注意せよ. 後に分かるように, この事は e^{-itH_0} の漸近展開式の形に直接影響する. 一方, 補題 3.4 から, $\lambda \rightarrow \infty$ の極限で $B(s, -s')$ において $(d/d\lambda)^r E'(\lambda) = O(\lambda^{-(r+1)/2})$ ($r = 0, 1, \dots, m+1$) であることを示せる. ただし $s, s' > (m+1) + 1/2 = m + 3/2$ とする. 特に $m \geq 1$ のとき任意の $\delta > 0$ に対し $(d/d\lambda)^{m+1} E'(\lambda)$ は区間 $[\delta, \infty)$ 上で絶対可積分であることが分かる.

3.3 時間発展演算子の漸近展開

この節では前節での自由レゾルベント $(H_0 - z)^{-1}$ の解析を踏まえ、時間発展演算子 e^{-itH_0} の長時間での漸近展開式を導出する。我々はまず次の公式に着目する (証明は、付録 B を見よ)。

$$e^{-itH_0} = \lim_{R \rightarrow \infty} \lim_{r \downarrow 0} \int_r^R E'(\lambda) e^{-it\lambda} d\lambda. \quad (3.22)$$

ただし極限は $B(s, -s')$ ($s, s' > 1/2$) での意味である。時間発展演算子 e^{-itH_0} の長時間での漸近展開式は、この公式と前節の最後の段落での $E'(\lambda)$ に関する結果を合わせれば求まる。以下にその導出を詳述するが、基本的には Jensen-Kato が提案した方法 [56] に従っている。

まず (3.22) の積分を次の分割

$$E'(\lambda) = \phi(\lambda)E'(\lambda) + (1 - \phi(\lambda))E'(\lambda) \quad (3.23)$$

に従って二つに分ける。ここで $\phi(\lambda)$ は $[0, \infty)$ 上の C_0^∞ -関数であって $\lambda = 0$ の近傍では $\phi(\lambda) = 1$ となる関数とする。そのような関数は、例えば次の関数

$$h(x) = \begin{cases} \exp[-1/(1-x^2)] & (|x| < 1) \\ 0 & (|x| \geq 1) \end{cases}, \quad (3.24)$$

を使って、 $f(\lambda) = 1 - \int_0^\lambda g(x-d)dx$ ($d > 1$) と定義すれば構成できる。ここで $g(x) = h(x)/\int_{\mathbf{R}} h(x)dx$ である。文献 [56] の補題 10.1 と前節の最後の段落での議論から、 $(1 - \phi(\lambda))E'(\lambda)$ の Fourier 変換は $B(s, -s')$ において e^{-itH_0} に $o(t^{-m-1})$ の寄与をすることが示せる。ただし $m \geq 1$ かつ $s, s' > m + 3/2$ とする。一方 $\phi(\lambda)E'(\lambda)$ の Fourier 変換は e^{-itH_0} の漸近展開の主要な部分となる [(3.21) を見よ]。このとき G_{2j} の係数は以下で与えられる。

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \phi(\lambda) \lambda^{j-1/2} e^{-it\lambda} d\lambda &= i^j \frac{d^j}{dt^j} \left[\int_0^\infty \lambda^{-1/2} e^{-it\lambda} d\lambda + \int_0^\infty (\phi(\lambda) - 1) \lambda^{-1/2} e^{-it\lambda} d\lambda \right] \\ &= \frac{\Gamma(j+1/2)}{(it)^{j+1/2}} + i^j \frac{d^j}{dt^j} \int_0^\infty (\phi(\lambda) - 1) \lambda^{-1/2} e^{-it\lambda} d\lambda. \end{aligned} \quad (3.25)$$

上式右辺の積分は広義積分であることに注意せよ。ここで、 $\phi(\lambda) - 1$ とその全ての導関数は $\lambda = 0$ の近傍で 0 となり、また $\phi \in C_0^\infty([0, \infty))$ であるから、(3.25) の最後の項はどんな逆ベキよりも速いオーダーで減衰することが分かる。さらに、再び文献 [56] の補題 10.2 と前節の最後の段落での議論から、 $s, s' > 3n + 3/2$ であれば、剰余項 $\phi(\lambda)F_n(\lambda)$ の Fourier 変換は $B(s, -s')$ において e^{-itH_0} に $o(t^{-n-1/2})$ の寄与をすることが示せる。以上の議論をまとめると、我々は最終的に次の結果を得る： $s, s' > \max\{3n + 3/2, 5/2\}$ の条件の下で、 $r \downarrow 0$ かつ $R \rightarrow \infty$ のとき、

$$\left\| e^{-itH_0} - \sum_{j=0}^n (-1)^{j-1} \frac{\Gamma(j+1/2)}{\pi(it)^{j+1/2}} G_{2j} \right\|_{s, -s'}$$

$$\begin{aligned} &\leq \left\| e^{-itH_0} - \int_r^R E'(\lambda) e^{-it\lambda} d\lambda \right\|_{s, -s'} \\ &\quad + \left\| \int_r^R E'(\lambda) e^{-it\lambda} d\lambda - \sum_{j=0}^n (-1)^{j-1} \frac{\Gamma(j+1/2)}{\pi(it)^{j+1/2}} G_{2j} \right\|_{s, -s'} \rightarrow 0 + o(t^{-n-1/2}). \end{aligned}$$

この結果は次のようにまとめられる [50].

定理 3.5 : $n = 0, 1, \dots$, かつ $s, s' > \max\{3n + 3/2, 5/2\}$ とする. このとき, $t \rightarrow \infty$ の極限において, $B(s, -s')$ のノルムで次式が成り立つ.

$$e^{-itH_0} = \sum_{j=0}^n (-1)^{j-1} \frac{\Gamma(j+1/2)}{\pi(it)^{j+1/2}} G_{2j} + o(t^{-n-1/2}). \quad (3.26)$$

ここで漸近展開 (3.26) を展開の第1項に着目しながら考察する. 自由ハミルトニアン H_0 の“一般化された (generalized)” ゼロエネルギー固有関数 $\varphi_0(x) := (2\pi)^{-1/2}$ を思い起こせば, 展開 (3.26) の第1項の積分演算子 G_0 は関数 φ_0 の張る固有空間への“射影演算子”を使って表せる: $G_0 = -\pi \langle \varphi_0, \cdot \rangle \varphi_0$ [(3.17) を見よ]. すると (3.26) は次のようになる.

$$e^{-itH_0} = \pi^{1/2} (it)^{-1/2} \langle \varphi_0, \cdot \rangle \varphi_0 + o(t^{-1/2}), \quad t \rightarrow \infty. \quad (3.27)$$

実は, この展開の形は, 短距離型ポテンシャル $V(x)$ を持つ1次元または3次元ポテンシャル系で, 系のハミルトニアン $H = H_0 + V$ にゼロエネルギー固有値はないがゼロエネルギー共鳴はある場合の時間発展演算子 e^{-itH} の漸近展開式の形と同じである. ここで, ゼロエネルギー固有値とはその固有関数が Hilbert 空間 (ここでは L^2 -空間) に属す場合を意味し, ゼロエネルギー共鳴とはその固有関数 ψ_0 が Hilbert 空間に属さない場合を指す. 特に ψ_0 は1次元では $G_0 V \psi_0 = 0$ を, 3次元では $(1 + G_0^{(3)} V) \psi_0 = 0$ を満たす. ここで, $G_0^{(3)}$ は3次元系での自由レゾルベントの漸近展開の係数である [詳しくは (3.28) を見よ]. ゼロエネルギー共鳴を持つポテンシャル系は“一般的 (generic)”ではないが [55, 56, 57, 58], 実はそのような特別な場合には (3.27) の φ_0 は ψ_0 で置き換えられる (ゼロエネルギー共鳴については4.4節と4.6節で再び取り上げる). この意味で1次元自由粒子系は例外的な系と言えるだろう. 一方3次元の場合では自由粒子系はむしろ一般的な系に見える. 何故なら, 3次元系での自由レゾルベントはエネルギー (z) の原点に特異性を持たず, e^{-itH_0} の漸近展開に $t^{-1/2}$ に比例する項が現れないからである. それに対し, 1次元系では (3.13) に見るように原点に特異性を持っている (また [59] を見よ). (3.25) での議論から分かるように, この特異性が $t^{-1/2}$ に比例する項をもたらす. 具体的に表すと, 3次元での自由レゾルベントの漸近展開は次のようになる.

$$R_0(z) = \sum_{j=0}^{\infty} (iz^{1/2})^j G_j^{(3)}. \quad (3.28)$$

ここで $G_j^{(3)}$ は関数 $|x - y|^{j-1}/4\pi j!$ ($x, y \in \mathbb{R}^3$) を積分核に持つ積分演算子である [56]. したがって 3次元での e^{-itH_0} の漸近形は,

$$e^{-itH_0} = \pi^{3/2}(it)^{-3/2} \langle \varphi_0^{(3)}, \cdot \rangle \varphi_0^{(3)} + o(t^{-3/2}), \quad t \rightarrow \infty. \quad (3.29)$$

ただし, ここでも等号は $B(s, s')$ のノルムで意味を持ち, また s と s' は十分大きいとする. ここで $\varphi_0^{(3)}(x) := (2\pi)^{-3/2}$ は H_0 の一般化されたゼロエネルギー固有関数である. しかし, この場合には, 1次元系と違い, $t^{-1/2}$ の項は存在しない.

この節の最後に, 漸近展開 (3.26) を使って波束 $\psi(x, t)$, 生存確率 (3.8), 非逃避確率 (3.9) などの長時間での漸近形を導いておく. それらの結果は当然 (3.3), (3.10), 及び (3.11) に一致する. 公式 (3.26) は, 一見 (3.3) と違って各点 x での情報を引き出すには不向きに思われるが, ノルムや内積を通じた計算により各点での情報も引き出すことができる. 一般的には次のように扱えば良い. まず, $s, s' > j + 1/2$, $\sigma \in \mathbb{R}$, そして $M \in B(-s', \sigma)$ とする. このとき, G_j は $B(s, -s')$ に属すると見なせるから, $\|MG_j\psi\|_\sigma$ が全ての $\psi \in L^{2,s}(\mathbb{R})$ について問題なく定義できることが分かる. したがって (3.26) を使えば, $s, s' > \max\{3n + 3/2, 5/2\}$ とするとき, $M \in B(-s', \sigma)$ と全ての $\psi \in L^{2,s}(\mathbb{R})$ に対して,

$$\begin{aligned} & \left\| Me^{-itH_0}\psi \right\|_\sigma - \left\| \sum_{j=0}^n (-1)^{j-1} \frac{\Gamma(j+1/2)}{\pi(it)^{-j-1/2}} MG_{2j}\psi \right\|_\sigma \\ & \leq \|\psi\|_s \|M\|_{-s', \sigma} \left\| e^{-itH_0} - \sum_{j=0}^n (-1)^{j-1} \frac{\Gamma(j+1/2)}{\pi(it)^{-j-1/2}} G_{2j} \right\|_{s, -s'} = o(t^{-n-1/2}) \end{aligned} \quad (3.30)$$

となる. 例えば, $\sigma = -s'$ と置くことで, $M \in B(-s', -s')$ として $(1+x^2)^{s'/2}E(B)$ を考えてみよう. ここで $E(B)$ は位置演算子 $Q[(2.9) とその周辺を見よ]$ のスペクトル測度で, その作用は次のように定義される.

$$(E(B)\psi)(x) := \begin{cases} \psi(x) & (x \in B) \\ 0 & (x \notin B) \end{cases}. \quad (3.31)$$

B は \mathbb{R} の任意の Borel 集合である. ただし, $(1+x^2)^{s'/2}E(B) \in B(-s', \sigma)$ を保証するために, ここでは B は有界な集合に限るとする. このとき $\|Me^{-itH_0}\psi\|_{-s'}^2 = \|E(B)e^{-itH_0}\psi\|^2 = \int_B |\psi(x, t)|^2 dx$ となり, 最後の量は正に非逃避確率 (3.9) を表している. 同様の議論により, $s, s' > \max\{3n + 3/2, 5/2\}$ かつ $s \geq s'$ のとき, 全ての $\phi, \psi \in L^{2,s}(\mathbb{R})$ に対して,

$$\begin{aligned} & \left| \langle \phi, e^{-itH_0}\psi \rangle - \sum_{j=0}^n (-1)^{j-1} \frac{\Gamma(j+1/2)}{\pi(it)^{j+1/2}} \langle \phi, G_{2j}\psi \rangle \right| \\ & \leq \|\phi\|_s \|\psi\|_s \left\| e^{-itH_0} - \sum_{j=0}^n (-1)^{j-1} \frac{\Gamma(j+1/2)}{\pi(it)^{j+1/2}} G_{2j} \right\|_{s, -s'} = o(t^{-n-1/2}). \end{aligned} \quad (3.32)$$

上式の ϕ に ψ を代入すれば ψ の生存確率 (3.8) の長時間での漸近展開式が求まる.

最後に, (3.32) の ϕ として δ 超関数への近似列 $\{g_\epsilon(x)\}_{\epsilon>0}$ を考えてみよう. ここで $g_\epsilon(x)$ は (3.24) の $h(x)$ を規格化した関数 $g(x)$ を使って $g_\epsilon(x) := g(x/\epsilon)/\epsilon$ で定義される ($g_\epsilon(x)$ の台が閉区間 $[-\epsilon, \epsilon]$ であることに注意). このとき任意の $\psi \in L^{2,s}(\mathbb{R})$ に対して,

$$\begin{aligned} |\langle g_\epsilon(x - \cdot), G_{2j}\psi \rangle - (G_{2j}\psi)(x)| &\leq \int_{[x-\epsilon, x+\epsilon]} g_\epsilon(x-y) |(G_{2j}\psi)(y) - (G_{2j}\psi)(x)| dy \\ &\leq \sup_{y \in [x-\epsilon, x+\epsilon]} |(G_{2j}\psi)(y) - (G_{2j}\psi)(x)| \rightarrow 0 \quad (\epsilon \downarrow 0). \end{aligned} \quad (3.33)$$

最後の極限操作で $(G_{2j}\psi)(x)$ が x の連続関数であることを使った. 同様に $|\langle g_\epsilon(x - \cdot), e^{-itH_0}\psi \rangle - \psi(x, t)| \rightarrow 0$ ($\epsilon \downarrow 0$) となる. ここでも $\psi(x, t)$ が x の連続関数であることを使った [(3.2) を見よ]. さらに $\lim_{\epsilon \downarrow 0} \|g_\epsilon(x - \cdot)\|_s \leq C(1+x^2)^{s/2}$ と評価できる. ここで C は x に依らない定数である. 以上の議論と (3.32) から波束 $\psi(x, t)$ の長時間での漸近形に関して以下の評価が得られる: $s > \max\{3n + 3/2, 5/2\}$ のとき全ての $\psi \in L^{2,s}(\mathbb{R})$ に対して,

$$\begin{aligned} &\left| \psi(x, t) - \sum_{j=0}^n (-1)^{j-1} \frac{\Gamma(j+1/2)}{\pi(it)^{j+1/2}} (G_{2j}\psi)(x) \right| \\ &\leq C(1+x^2)^{s/2} \|\psi\|_s \left\| e^{-itH_0} - \sum_{j=0}^n (-1)^{j-1} \frac{\Gamma(j+1/2)}{\pi(it)^{j+1/2}} G_{2j} \right\|_{s, -s'} \\ &= (1+x^2)^{s/2} o(t^{-n-1/2}). \end{aligned} \quad (3.34)$$

上の結果は以前に導出した漸近展開式 (3.3) と一致している. これまでの議論から分かるように, 上の漸近展開は初期波束 $\psi(x)$ が $L^{2,s}(\mathbb{R})$ (s は十分大きいとする) に属しているときに正しい評価を与える. $L^{2,s}(\mathbb{R})$ のノルムの定義 (3.14) を見れば分かるように, この $\psi(x)$ への制限は, 素朴には $\psi(x)$ が $|x|$ の逆ベキの多項式より十分速く $|x| \rightarrow \infty$ で減衰することを課している. したがって (3.3) の漸近展開が正当化されるためにはこのような初期波束への制限が必要である. また上の評価 (3.34) から, 漸近展開 (3.3) の $t \rightarrow \infty$ での近似の誤差は, 厳密には空間の各点 x に依存することが分かる. [実は (3.3) は上の定理に依ることなしに, より直接的に厳密に扱える. それには (3.2) の被積分関数にある指数関数を展開したとき, その剰余項まで考慮すれば良い. この場合には, 上の定理やその他の漸近公式が適用できるための s と s' に関する条件を緩めることができる].

以上の議論で見てきたように, 3.1 節で導出した漸近展開式が正しい評価を与えるためには, 初期波束に制限が必要であることが分かった. 実は, これらの数学的精密化はただ単に理論の厳密性を高めるだけでなく, 実際に我々の導出した漸近展開式を正しく用いるために必要な事項である. 言い方を変えると, これらの初期波束の条件が満たされない場合には, 漸近展開式は我々の導出したものとは違った形になり得る. 特に (3.3) に現れている $t^{-j-1/2}$ ($j = 0, 1, \dots$) とは違った種類の t の逆ベキ項の現れる可能性がある. この点については 3.5 節で述べる.

3.4 初期波束のゼロ運動量近傍での振る舞いとベキ減衰との関係

この章での目的は、初期波束のゼロ運動量付近での振る舞いが、波束、生存確率、非逃避確率などの物理量の長時間領域での振る舞いとどのように関連しているかを解明することである。この節では、これまでに求めた波束、生存確率、非逃避確率の漸近展開式を使ってその解析を行う。ここでは数学的厳密性に拘らずに3.1節での結果を基に議論を進める。

さて、我々は初期波束 ψ が以下の条件を満たす特別な場合を考察する。

$$\hat{\psi}(k) = O(k^m), \quad k \rightarrow 0. \quad (3.35)$$

ここで m は任意の正整数である。漸近展開 (3.5) から、条件 (3.35) が以下の条件と同等と分かる。

$$\hat{\psi}^{(j)}(0) = 0, \quad j = 0, 1, \dots, m-1. \quad (3.36)$$

初めに条件 (3.36) が波束 $\psi(x, t)$ の漸近的振る舞い (3.3) にどのような影響を及ぼすかを調べよう。条件 (3.36) を漸近展開 (3.3) に代入する。このとき $t^{-j-1/2}$ の係数 $(G_{2j}\psi)(x)$ は、 $j < \bar{m}$ のとき 0 となる。

$$(G_{2j}\psi)(x) = 0, \quad x \in \mathbf{R}, \quad j = 0, 1, \dots, \bar{m}-1. \quad (3.37)$$

ここで (3.7) を使った。また \bar{m} は $2(\bar{m}-1) \leq m-1$ を満たす最大の整数である。すなわち、

$$\bar{m} = \begin{cases} (m+1)/2 & (m:\text{奇数}) \\ m/2 & (m:\text{偶数}) \end{cases}. \quad (3.38)$$

一方、(3.3) の和に残る最初の項 $(G_{2\bar{m}}\psi)(x)$ は、(3.36) により次のようになる： m が奇数のとき、

$$(G_{2\bar{m}}\psi)(x) = -\frac{\sqrt{2\pi}i^m}{2[(m+1)!]} [i\hat{\psi}^{(m+1)}(0) - (m+1)\hat{\psi}^{(m)}(0)x], \quad (3.39)$$

m が偶数のとき、

$$(G_{2\bar{m}}\psi)(x) = -\frac{\sqrt{2\pi}}{2(m!)} i^m \hat{\psi}^{(m)}(0). \quad (3.40)$$

これらの事実と (3.3) を合わせることで、条件 (3.36) の下での自由波束の漸近公式が得られる。

$$\psi(x, t) = (-1)^{\bar{m}-1} \frac{\Gamma(\bar{m}+1/2)}{\pi(it)^{\bar{m}+1/2}} (G_{2\bar{m}}\psi)(x) + O(t^{-\bar{m}-3/2}). \quad (3.41)$$

この公式は $m=0$ でも成り立つことが確かめられる。この結果から、特に条件 (3.36) の下で $\psi(x, t)$ は各位置 x で漸近的に $t^{-\bar{m}-1/2}$ で減衰することが分かる。つまり、波束のベキ減

衰の指数は初期波束 ψ の条件 (3.36) により明確に決定されるのである [51]. このような構造は従来の研究 [14, 15, 16, 17] では明らかにされていなかった.

さて, 上の漸近公式に関して一つ興味深い事がある. (3.39) に注目すると, m が奇数のとき, $t^{-\bar{m}-1/2}$ の係数 $(G_{2\bar{m}}\psi)(x)$ がゼロとなる特別な位置 x_0 を一つだけ見出せる可能性がある. このことは, そのような位置で $\psi(x, t)$ が t の次のベキ, $t^{-\bar{m}-3/2}$, で振る舞うことを意味する. しかし, 直線全体の中の一点が持つ測度はゼロだから, このような事態は例外的であるかもしれない. (3.39) から, x_0 は $(G_{2\bar{m}}\psi)(x)$ の実の零点で

$$x_0 = i\hat{\psi}^{(m+1)}(0)/[(m+1)\hat{\psi}^{(m)}(0)]. \quad (3.42)$$

実際に, このような特別な点を生み出す初期波束を見つけることは難しくはない. しかし, (3.42) の右辺は, 勝手な初期波束に対しては必ずしも実とはならないので注意が必要である.

次に同じ条件 (3.35) [または (3.36)] が初期状態 ψ の生存確率 $S(t)$ の漸近的振る舞いについてのどのような影響を及ぼすかを調べる. まず条件 (3.36) が次の条件に同等であることに注意しよう.

$$\langle \psi, G_{2j}\psi \rangle = 0, \quad j = 0, 1, \dots, m-1. \quad (3.43)$$

実際, (3.36) から (3.43) を示すには, (3.36) を (3.12) に代入すれば良い. 逆に, (3.43) が成り立つと仮定すると, まず $\langle \psi, G_0\psi \rangle = 0$ から $\hat{\psi}(0) = 0$ を導ける [(3.12) を見よ]. このとき, さらに $\hat{\psi}(0) = 0$ と $\langle \psi, G_2\psi \rangle = 0$ とから $\hat{\psi}^{(1)}(0) = 0$ が得られる [再び (3.12) を見よ]. 同様にして, 帰納的に (3.36) が示せる. 条件 (3.36) の下で, (3.10) の和の中に残る最初の項 $\langle \psi, G_{2m}\psi \rangle$ は,

$$\langle \psi, G_{2m}\psi \rangle = \frac{(-1)^{m-1}\pi}{(m!)^2} |\hat{\psi}^{(m)}(0)|^2 \quad (3.44)$$

と表されるので, 生存確率 $S(t)$ の漸近公式は,

$$S(t) = \frac{\Gamma(m+1/2)^2}{(m!)^4 t^{2m+1}} |\hat{\psi}^{(m)}(0)|^4 + O(t^{-2m-2}) \quad (3.45)$$

となる [50, 51]. 実はこの公式も $m=0$ で成り立つことが確かめられる. この結果から, 特に条件 (3.36) の下で $S(t)$ は漸近的に t^{-2m-1} で減衰することが分かる. ここでも t のベキの値は初期波束 ψ の条件 (3.36) により決定される. 我々はまた, 条件 (3.35) を満たす初期状態に対する非逃避確率 $P(t)$ の漸近的減衰形を導くことができる. (3.37) を (3.11) に代入すれば, $t \rightarrow \infty$ において,

$$P(t) = \frac{\Gamma(\bar{m}+1/2)^2}{\pi^2 t^{2\bar{m}+1}} \int_a^b |(G_{2\bar{m}}\psi)(x)|^2 dx + O(t^{-2\bar{m}-2}). \quad (3.46)$$

(3.39) または (3.40) を使えば, 上の公式を微係数 $\hat{\psi}^{(j)}(0)$ を用いて書き表すことができる. 公式 (3.46) も $m=0$ で成り立つ.

ここで、生存確率の漸近形 (3.45) と非逃避確率の漸近形 (3.46) を比較してみよう。まず、(3.38) から、 m と \bar{m} が $m \geq 2$ で互いに異なる値を取ることに注意すべきである。この事実は $S(t)$ と $P(t)$ の減衰の速さの違いとして直接に反映される。 m を 2 以上の整数として、初期状態 ψ が $\widehat{\psi}(k) = O(k^m)$ を満たせば、 $S(t)$ は漸近的に t^{-2m-1} で減衰する。一方、 $P(t)$ は m が奇数のときは t^{-m-2} で、 m が偶数のときは t^{-m-1} で減衰する。したがって m が十分大きいときには、 $S(t)$ は $P(t)$ よりも速く減衰することになる。また、 m が奇数のときには $\bar{m} = \overline{m+1}$ が成り立つから、二つの異なる初期状態 $\widehat{\psi}(k) = O(k^m)$ と $\widehat{\psi}(k) = O(k^{m+1})$ を用意したとしても $P(t)$ の長時間での減衰の速さは同じになってしまう。一方、このような状況は $S(t)$ には起こり得ない [51]。

この節の最後に $S(t)$ と $P(t)$ の減衰形の差異を数値的に検討しよう。以下の三つの異なる初期波動関数 ϕ_0 , ϕ_1 , 及び ϕ_2 を用意する。

$$\widehat{\phi}_m(k) = N_m k^m e^{-a_0(k-k_0)^2/2-idk} \quad (m = 0, 1, 2). \quad (3.47)$$

ここで、 $a_0 > 0$, $k_0, d \in \mathbf{R}$, そして N_m は規格化定数である。これらの関数は k が小さい所で $\widehat{\phi}_m(k) = O(k^m)$ のように振る舞う。図 3.1 は $S(t)$ と $P(t)$ および (3.45) と (3.46) から予言されるそれらの漸近形を示している。図 3.1 (a) と (b) は、それぞれ初期状態 ϕ_0 と ϕ_1 に対する $S(t)$ および $P(t)$ を表している。図 3.1 (a) では $S(t)$ と $P(t)$ が漸近的に t^{-1} のように振る舞い、図 3.1 (b) では t^{-3} のように振る舞っていることが明確に分かる。これらの場合では、 $S(t)$ と $P(t)$ の振る舞いの間に差は見られない。一方、図 3.2 では初期状態 ϕ_2 が使われており、 $S(t)$ と $P(t)$ が長時間で異なる振る舞いをする事が分かる。前者は t^{-5} で、後者は t^{-3} で減衰している。この計算では、三つの初期状態のいずれにおいてもパラメータは $a_0 = 1.0$, $k_0 = 0.0$, $d = 0.0$ とし、さらに非逃避確率 $P(t)$ においては $a = -2.0$, $b = 2.0$ と選んだ。図 3.1 と 3.2 から、 $P(0) \sim 1$, したがって初期状態は区間 $[-2.0, 2.0]$ に十分局在していたことが分かる。

3.5 自由波束に対する漸近展開式の適用限界

自由波束の漸近展開 (3.3) は、3.3 節での議論により、初期波束への制限なしには正当化され得ないことが明らかとなった。実は、このことは単なる数学的精密化であるというだけでなく、漸近展開式 (3.3) が正しい予言を与えるかどうかに関わっている。そこで、この節ではこの問題を改めて考察し直す。

漸近展開 (3.34)[または (3.3)] は、初期波束 $\psi(x)$ が

$$\psi \in L^{2,s}(\mathbf{R}) \Leftrightarrow \|\psi\|_s = \left[\int_{-\infty}^{\infty} (1 + |y|^2)^s |\psi(y)|^2 dy \right]^{1/2} < \infty, \quad s > \max\{3n + 3/2, 5/2\} \quad (3.48)$$

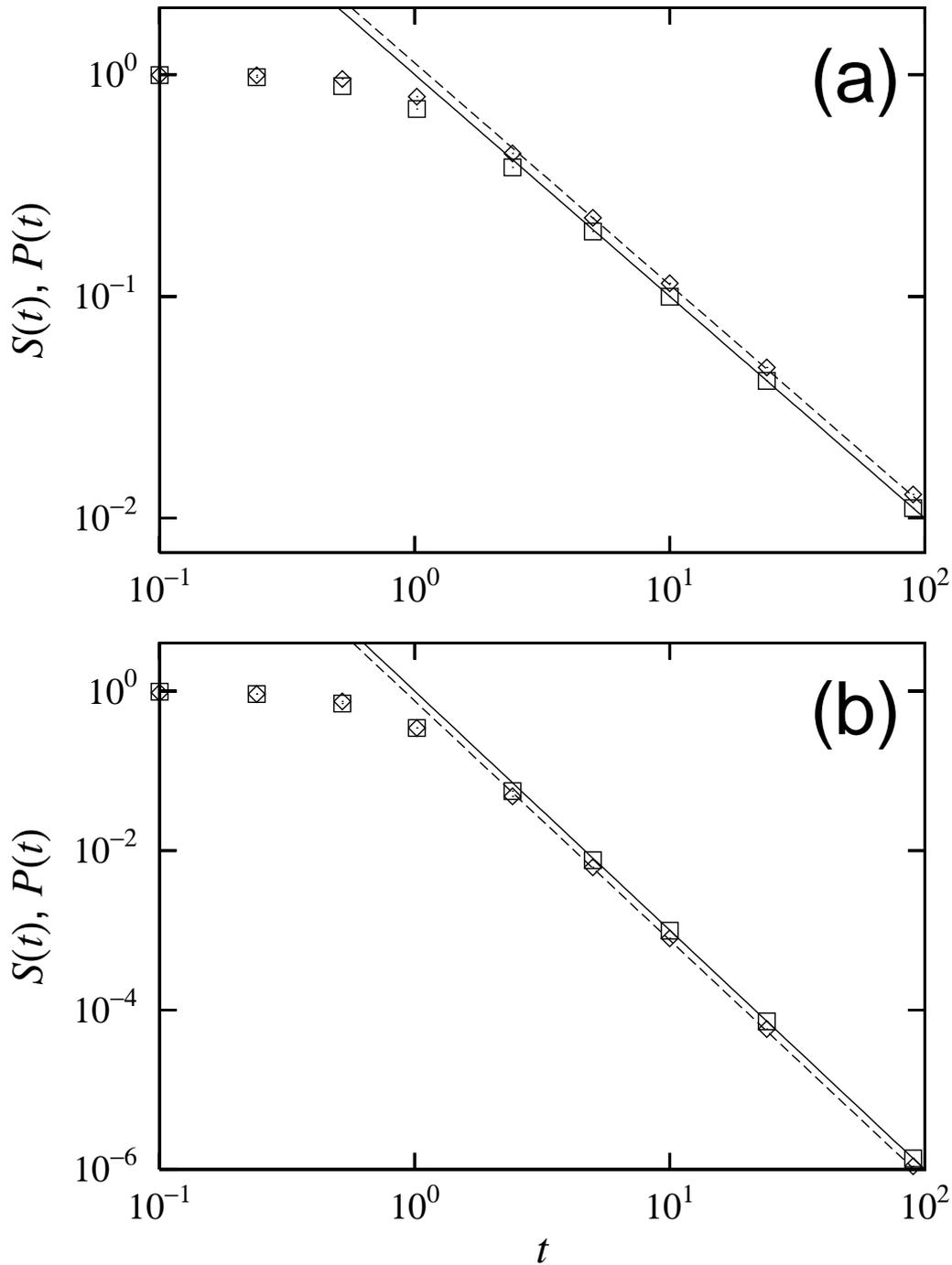


図 3.1: (a) (3.47) での波動関数 ϕ_0 の $S(t)$ と $P(t)$ (それぞれ正方形とひし形), および (3.45) と (3.46) から予言されるそれらの漸近線 (それぞれ実線と点線). この場合, $S(t)$ と $P(t)$ は長時間で同じ t^{-1} のべき減衰を示す. (b) 波動関数 ϕ_1 の $S(t)$ と $P(t)$, およびそれらの漸近線. 対応する記号は (a) におけるものと同じである. $S(t)$ と $P(t)$ は同じべき減衰を示すが, 今度は t^{-1} ではなく t^{-3} に従う.

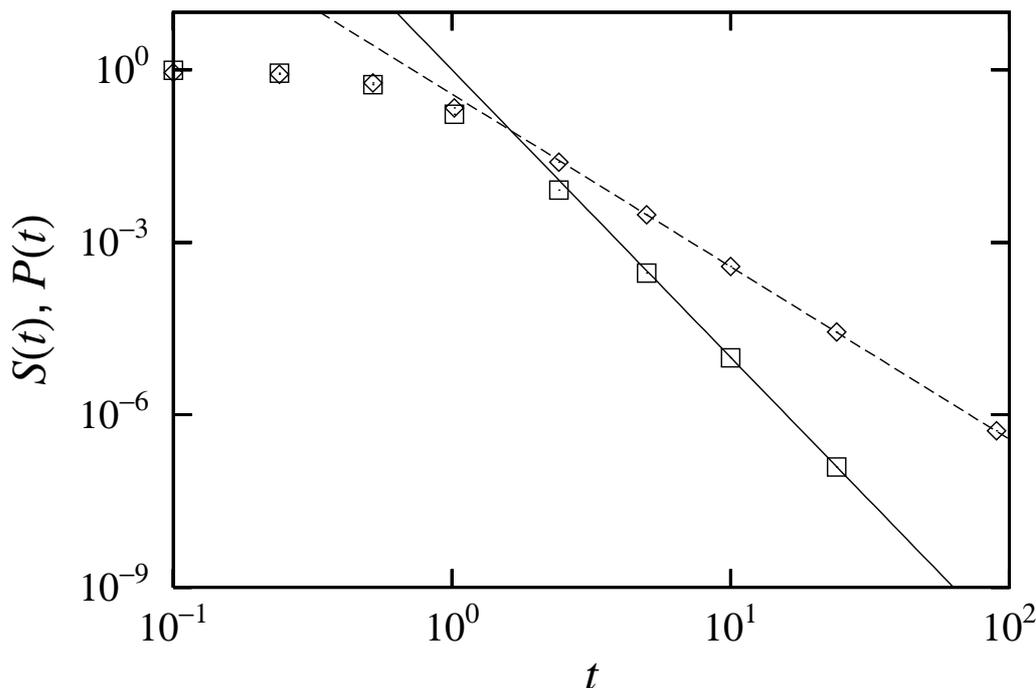


図 3.2: 波動関数 ϕ_2 の $S(t)$ と $P(t)$, およびそれらの漸近線. 対応する記号および用いたパラメータの値は図 3.1 におけるものと同じである. この場合, $S(t)$ と $P(t)$ は長時間で異なるべき減衰を示す. 前者は t^{-5} で, 後者は t^{-3} で振る舞う.

を満たす場合にその正当性が保証される (ここで, n は漸近展開において何番目の項までを評価するかによって決められる). この初期波束への条件を $k = 0$ での $\hat{\psi}(k)$ の微分係数と関連付けることを考える. 実際, 任意の $\psi \in L^{2,s}(\mathbf{R})$ に対して,

$$\begin{aligned} |\hat{\psi}^{(l)}(0)| &= \left| \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} y^l \psi(y) dy \right| \leq \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} |y|^l |\psi(y)| dy \\ &\leq \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} (1 + |y|^2)^{(l-s)/2} (1 + |y|^2)^{s/2} |\psi(y)| dy \leq \frac{\|1\|_{l-s} \|\psi\|_s}{\sqrt{2\pi}} < \infty \end{aligned} \quad (3.49)$$

が全ての $l = 0, 1, \dots, l'$ について成り立つことが分かる. ただし, l' は $s - 1/2$ より小さい最大の整数である. $s > \max\{3n + 3/2, 5/2\}$ により, 明らかに $l' \geq 3n \geq 2n$ が成り立つ. このとき, 上式と Lebesgue 積分に関する基礎的事実により, (3.6) における l 回の微分と積分の交換が厳密に正当化されることが分かる. 特に, $s > \max\{3n + 3/2, 5/2\}$ の場合には $j \geq 3n \geq 2n$ であるから, $2n + 1$ 個の微分係数 $\hat{\psi}^{(l)}(0)$ ($l = 0, 1, \dots, 2n$) が確定した値を持つことも分かる. この事実は, (3.7) を見れば分かるように, $j = 0$ から $j = n$ までの展開係数 $(G_{2j}\psi)(x)$ が微分係数によって表現できることを正当化している. $\psi \in L^{2,s}(\mathbf{R})$ (s は十分大きいとする) を満たす初期波束の例としては, 急減少関数 [rapidly decreasing function. 試験関数 (C_0^∞ -関数) を含む] を挙げることができる. この場合, 任意の s (したがって任意の n) に対して $\psi \in L^{2,s}(\mathbf{R})$ が成り立つ. Gauss 波束や調和振動子系のハミルトニアン

完全系などは急減少関数である.

ここで、逆にどのような関数が条件 (3.48) を満たさないかを考えることは興味深くまた教訓的でもある. 実は、文献 [17] で考察された波束 (1.10), (1.11) や、文献 [14, 15, 16] での波束 (1.12) (ただし $\alpha \leq 1$) は条件 (3.48) を満たさない. 実際、(1.12) の波束に対しては、既に波束の漸近展開の第1項 ($G_0\psi$)(x) が不定となる. このことは、

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(y)|^2 dy = \infty \quad (3.50)$$

であることによる [(3.4) または (3.7) を見よ]. また文献 [14, 15, 16] で示されているように、この波束 (1.12) ($\alpha \leq 1$) を初期波束に選ぶと、 $\psi(0, t)$ は我々の導出した漸近公式 (3.41) [または (3.3)] とは相容れない減衰の仕方を示す [1.2 節の議論を見よ]. 一方、(1.10) と (1.11) の波束が条件 (3.48) を満たさない理由は次のようになる. ここでは (1.10) についてのみ考察するが、(1.11) についても同様である. 波束 (1.10) は一見すると条件 (3.35) の $m = 1$ の場合に相当するように見える. しかしこの予想は正しくない. 次の点に注意しよう.

$$\lim_{k \uparrow 0} \frac{\hat{\psi}(k) - \hat{\psi}(0)}{k} = 0 \neq 1 = \lim_{k \downarrow 0} \frac{\hat{\psi}(k) - \hat{\psi}(0)}{k}. \quad (3.51)$$

つまり、波束 (1.10) の $k = 0$ での左微係数と右微係数は異なっている. 一方、条件 (3.48) の下ではこのような違いは起こり得ない. さらに、文献 [17] で示されているように、この波束 (1.10) を初期波束に選ぶと、 $\psi(0, t)$ は長時間では t^{-1} で減衰する. このような減衰形は我々の導出した漸近公式 (3.41) [または (3.3)] からは再現しようがない.

以上の議論から、初期波束が条件 (3.48) を満たさない場合には、漸近展開式 (3.3) では再現できないようなベキ減衰形が現れ得ることが分かった. したがって言い換えれば、漸近展開式 (3.3) を正しく用いるためには、初期波束が条件 (3.48) を満たすかどうかを事前に調べる必要があると言える.

第4章

1次元ポテンシャル系の漸近的振る舞いにおけるベキ減衰

前章では1次元自由波束の長時間領域でのベキ的振る舞いを考察した。特に、初期波束のゼロ運動量付近の振る舞いがそのベキ指数を決定していることを明らかにした。この章では、1次元自由粒子系での議論を1次元(短距離型)ポテンシャル系へと拡張し、初期波束のゼロ運動量付近の振る舞いと波束の長時間領域でのベキ的振る舞いを比較検討する。

我々の議論が1次元自由粒子系で展開できた最大の理由は、波束(もしくは時間発展演算子)の長時間での漸近展開式が具体的に求められた事にある。我々はここでも同じ方針を採り、まず次節でポテンシャル系での波束の漸近展開を行う。この導出は、Fourier積分の漸近展開理論を基に、特に被積分関数が特異性を持つ場合の結果を応用して達成される。ここでの漸近展開は前章までのように数学的に厳密なものではない。我々はその漸近展開が正しい評価を与えるための条件を厳密には見積もらないが、代わりにそれを具体例に適用することで検証する。具体例としては箱型障壁ポテンシャル系と井戸型ポテンシャル系を扱い、初期波束のゼロ運動量付近の振る舞いと波束の長時間領域でのベキ的振る舞いの関係を明らかにする [60].

4.1 波束の長時間領域での漸近展開

我々はまず1次元ポテンシャル系での波束の時間発展を考える。ただしポテンシャル $V(x)$ は、適当な正数 $c > 0$ と $\delta > 2$ について次式を満たす短距離型とする。

$$|V(x)| \leq \frac{c}{(1+|x|)^\delta} \quad (x \in \mathbf{R}). \quad (4.1)$$

このとき、ハミルトニアン H を

$$H := H_0 + V(x) \quad (4.2)$$

で定義する.¹ ここで, H_0 は1次元の自由ハミルトニアンで, 以前と同様, $H_0 := -d^2/dx^2$ である. このとき, 初期波束 (状態) を $\psi(x)$ ($\in L^2(\mathbf{R})$) に選ぶと, 時刻 $t > 0$ での波束 $\psi(x, t)$ は, H の固有関数展開により次のように表せる.²

$$\psi(x, t) = \sum_{n=0}^N e^{-itE_n} \varphi_n(x) \langle \varphi_n, \psi \rangle + \int_{-\infty}^{\infty} e^{-itk^2} \varphi(x, k) \left[\int_{-\infty}^{\infty} \overline{\varphi(y, k)} \psi(y) dy \right] dk. \quad (4.3)$$

ここで, 関数 $\varphi_n(x)$ は H の固有値 E_n に属する束縛状態である. また関数 $\varphi(x, k)$ ($k \in \mathbf{R} \setminus \{0\}$) は H の固有値 k^2 に属する散乱状態であり, 時間依らない Schrödinger 方程式

$$[H_0 + V(x)]\varphi(x, k) = k^2\varphi(x, k) \quad (4.4)$$

の定常解として求まる. しかし, より正確には次の1次元 Lippmann-Schwinger 方程式

$$\varphi(x, k) = (2\pi)^{-1/2} e^{ikx} \mp \frac{1}{2i|k|} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\mp i|k||x-y|} V(y) \varphi(y, k) dy \quad (4.5)$$

の解である [23]. ここで符号は複合同順である. $\varphi(x, k)$ は (+) または (-) のどちらかの方程式を満たせば良い. Lippmann-Schwinger 方程式は積分方程式であるから, 方程式 (4.4) とは違い, 既に解の境界条件を含んでいる. 我々は今後, (4.3) の第2項を単に $\psi(x, t)$ と記す. (4.3) の第1項を含めて考えている場合はその都度明記する.

我々の目的は, 波束 $\psi(x, t)$ の各位置 x での長時間における漸近的振る舞いを知ることである. 波束 $\psi(x, t)$ の長時間での漸近展開に関する研究は既に数多く報告されている. 例えば文献 [55, 56, 57] では, 短距離型ポテンシャル系において時間発展演算子の長時間での漸近展開式を求めている. それは, 時間発展演算子をスペクトル密度の Fourier 変換で表し, スペクトル密度 (もしくはレゾルベント) の漸近展開式を求める事に帰着している (3.2 節と 3.3 節で展開した議論はこの方法に従っていた). また, 文献 [8, 10] では, ハミルトニアン H の複素固有値 (S-行列の極) とその固有関数を使って波束 $\psi(x, t)$ を漸近展開する方法が示されている. この方法では, ベキ的減衰領域だけでなく, その手前の時間領域で現れる指数的減衰までも記述できる. いずれの方法も座標表示で計算されている. 我々はこれらの結果に頼ることもできるが, ここでは別の方法を提案する.

我々は (4.3) における k -積分に関して部分積分を実行することで波束 $\psi(x, t)$ を t^{-1} のベキ級数で漸近展開することを考える. ただし, ここで一つ注意すべき点がある. 素朴に部分積分を実行すれば, $\psi(x, t)$ の展開の各項のオーダーは t^{-1}, t^{-2}, \dots , と続くである

¹条件 (4.1) の下で, ハミルトニアン H は (連続スペクトルに埋め込まれるような) 正の固有値を持たないことが保証される [61]. また (4.1) を満たすポテンシャル $V(x)$ に対して, 適当な正数 ϵ を $2\delta - 4\epsilon > 3$ とするよう選ぶと $(1+x^2)^{1/2+\epsilon} V(x) \in L^2(\mathbf{R})$ が成り立つ. このような $V(x)$ は Agmon ポテンシャルと呼ばれる. このとき H が特異連続スペクトルを持たないことも保証される [62].

²(4.3) における等号は, 厳密には k -積分を L^2 -収束の極限として扱うときに意味を持つ [23]. したがって (4.3) における等号が各点で成り立つかどうかは議論の余地がある. しかしここではその点には立ち入らず, 素朴な理解に留める.

う。しかし、実際には初期波束が空間の無限遠で十分速く減衰する場合、正しい評価では $t^{-1/2}, t^{-3/2}, \dots$, といった半整数のべきとなることが知られている [55, 56, 57, 58, 8, 10].
そこで、ここでは (4.3) における k -積分を単純に部分積分するのではなく、まずエネルギー表示に移った後、特異な場合での Fourier 積分の漸近展開を考える。“特異な場合”の意味は直ぐ下で説明する。エネルギー表示に移るため、 $E = k^2$ という変数変換を行う。すると、(4.3) は次のようになる。

$$\psi(x, t) = \frac{1}{2} \sum_{\sigma=+1, -1} \int_0^\infty e^{-itE} E^{-1/2} f_\sigma(x, E) dE. \quad (4.6)$$

ここで、次の関数を導入した。

$$f_\sigma(x, E) := \varphi(x, \sigma E^{1/2}) \tilde{\psi}(\sigma E^{1/2}), \quad (4.7)$$

$$\tilde{\psi}(\sigma E^{1/2}) := \int_{-\infty}^\infty \overline{\varphi(y, \sigma E^{1/2})} \psi(y) dy. \quad (4.8)$$

(4.6) の被積分関数が $E^{-1/2}$ という因子を持ち、エネルギーの原点で特異性を持つことに注意せよ。一見この事実はエネルギー表示への移行を不都合に感じさせるが、被積分関数がこのように特異性を持つ場合でも Fourier 積分の漸近展開は可能である。実は、そのような特異な場合の結果として $t^{-1/2}$ または $t^{-3/2}$ に比例する項が導かれる。実際、Fourier 積分が特異性を持つ場合の漸近展開の公式 [53, 54] により、(4.6) は次のように評価できる：任意の $t > 0$ において、

$$\psi(x, t) = \frac{1}{2} \sum_{j=0}^{N-1} \frac{\Gamma(j+1/2)}{j!(it)^{j+1/2}} \lim_{E \downarrow 0} \sum_{\sigma=+1, -1} \partial_E^j f_\sigma(x, E) + R_N(t). \quad (4.9)$$

ここで、 $i^{j+1/2} := e^{i(j+1/2)\pi/2}$ であり、 $f_\sigma(x, E)$ は E に関して N 回連続微分可能であると仮定し、その E に関する j 階偏導関数を $\partial_E^j f_\sigma(x, E)$ と記している。一方、剰余項 $R_N(t)$ は次のように評価される。

$$|R_N(t)| \leq \lim_{E \downarrow 0} \frac{1}{2t^N} \int_E^\infty E_1^{-1/2} \left| \sum_{\sigma=+1, -1} \partial_E^N f_\sigma(x, E_1) \right| dE_1. \quad (4.10)$$

ただし、

$$\lim_{E \rightarrow \infty} \partial_E^j f_\sigma(x, E) = 0 \quad (4.11)$$

並びに、(4.9) における極限

$$\lim_{E \downarrow 0} \sum_{\sigma=+1, -1} \partial_E^j f_\sigma(x, E), \quad j = 0, 1, \dots, N-1, \quad (4.12)$$

が存在することを仮定している。上式では、極限 $\lim_{E \downarrow 0} \partial_E^j f_+(x, E)$ 及び $\lim_{E \downarrow 0} \partial_E^j f_-(x, E)$ の取り方を揃えてある。その理由は、それぞれの極限が個々に存在しなくとも、同時に極

限を取ることで、極限が存在する場合があることを考慮に入れているからである。この点は、(4.10)の積分についても同様である。さらに、定義(4.7)及び(4.8)から、(4.12)は次のように変形できる。

$$\begin{aligned} \lim_{E \downarrow 0} \sum_{\sigma=+1,-1} \partial_E^j f_\sigma(x, E) &= \lim_{E \downarrow 0} \sum_{\sigma=+1,-1} \sum_{q=0}^{j-1} \frac{(j-1+q)!(-1)^q \sigma^{j-q} \partial_k^{j-q} [\varphi(x, k) \tilde{\psi}(k)]|_{k=\sigma E^{1/2}}}{q!(j-1-q)!2^{j+q} E^{(j+q)/2}} \\ &= \lim_{E \downarrow 0} \sum_{\sigma=+1,-1} \sum_{q=0}^{j-1} \sum_{r=0}^{j-q} \sum_{s=0}^{j+q} \sum_{u=0}^s \frac{(j-1+q)!}{q!(j-1-q)!s!2^{j+q}} \binom{j-q}{r} \binom{s}{u} \sigma^{j-q+s} \\ &\quad \times (-1)^q \partial_k^{j-q-r+u} \varphi(x, \sigma) \tilde{\psi}^{(r+s-u)}(\sigma) E^{(-j+s-q)/2}. \end{aligned} \quad (4.13)$$

ここで、最初の等号において合成関数の微分に関する公式[63]を使った。また、 $\tilde{\psi}^{(n)}(k)$ は $\tilde{\psi}(k)$ の k に関する n 階導関数を表す。ただし、 $\tilde{\psi}^{(0)}(k) = \tilde{\psi}(k)$ とする。さらに、記号 σ_0 を次の意味で使った： $\tilde{\psi}^{(n)}(\sigma_0) = \lim_{k \rightarrow \sigma_0} \tilde{\psi}^{(n)}(k)$ 。もちろん、これらの極限が存在すること及び $\tilde{\psi}(k)$ と $\varphi(x, k)$ が k に関して高階微分可能であることも仮定した。特に、 $j=0$ と $j=1$ の展開係数は、具体的に次のように書き下せる。

$$\lim_{E \downarrow 0} \sum_{\sigma=+1,-1} f_\sigma(x, E) = \lim_{E \downarrow 0} \sum_{\sigma=+1,-1} \varphi(x, \sigma E^{1/2}) \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\varphi(y, \sigma E^{1/2})} \psi(y) dy. \quad (4.14)$$

$$\begin{aligned} \lim_{E \downarrow 0} \sum_{\sigma=+1,-1} \partial_E f_\sigma(x, E) &= \lim_{E \downarrow 0} \sum_{\sigma=+1,-1} \sum_{r=0}^1 \sum_{s=0}^1 \sum_{u=0}^s \frac{1}{s!2} \binom{1}{r} \binom{s}{u} \sigma^{1+s} \partial_k^{1-r+u} \varphi(x, \sigma) \tilde{\psi}^{(r+s-u)}(\sigma) E^{(-1+s)/2} \\ &= \lim_{E \downarrow 0} \sum_{\sigma=+1,-1} \frac{1}{2} \left[\left(\partial_k \varphi(x, \sigma) \tilde{\psi}(\sigma) + \varphi(x, \sigma) \tilde{\psi}^{(1)}(\sigma) \right) \sigma E^{-1/2} \right. \\ &\quad \left. + \partial_k^2 \varphi(x, \sigma) \tilde{\psi}(\sigma) + 2 \partial_k \varphi(x, \sigma) \tilde{\psi}^{(1)}(\sigma) + \varphi(x, \sigma) \tilde{\psi}^{(2)}(\sigma) \right]. \end{aligned} \quad (4.15)$$

漸近展開式(4.9)は我々の解析の基本となる公式である。この漸近展開の正当性を保証するためには、幾つかの条件が必要となることが予想される。本研究では、その条件の厳密な評価は行わないが、以下において大雑把な評価を求めておく。なお、次節以降では、具体例を解析的に調べ、それと数値計算の結果とを比較することで再検証することにする。

(4.9)が有効であるためには、少なくとも(4.12)における N 個の極限值が全て有限でなくてはならない。また、そのような N 個の有限な極限值の中で、0でないものが少なくとも一つは存在しなければ(4.9)は意味をなさない。逆に言えば、 N はそのように決められるべきである。さらに、実際に(4.9)を活用する際には、(4.12)[または(4.13)]における極限值を求めなければならない。このとき、(4.13)の中の $\tilde{\psi}^{(j)}(\sigma_0)$ といった因子を求める必要がある。(4.8)の定義に戻れば、

$$\tilde{\psi}^{(j)}(\pm 0) = \lim_{k \rightarrow \pm 0} \frac{d^j}{dk^j} \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\varphi(y, k)} \psi(y) dy$$

$$\begin{aligned}
&= \lim_{E \downarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\partial_k^j \varphi(y, \pm E^{1/2})} \psi(y) dy \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\partial_k^j \varphi(y, \pm 0)} \psi(y) dy.
\end{aligned} \tag{4.16}$$

ここで、極限操作、微分、積分等が交換可能であることを仮定した。これらの仮定が成立するための十分条件の一つは、定常解 $\varphi(x, k)$ と初期波束 $\psi(x)$ が

$$\int_{-\infty}^{\infty} \sup_{k \neq 0} |\partial_k^n \varphi(x, k)| |\psi(x)| dx < \infty \quad (n = 0, 1, \dots, j) \tag{4.17}$$

を満たすことである。この条件をポテンシャルの台が有界、すなわち適当な正数 R について、

$$V(x) = 0 \quad (|x| > R) \tag{4.18}$$

が成り立つ場合について考える。このとき、ハミルトニアン¹の定常解は $|x| > R$ では $G_+(k)e^{ikx} + G_-(k)e^{-ikx}$ という形になる。条件 (4.17) に代入すれば、次の評価を得る。

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} \sup_{k \neq 0} |\partial_k^n \varphi(x, k)| |\psi(x)| dx &\leq \int_{-R}^R \sup_{k \neq 0} |\partial_k^n \varphi(x, k)| |\psi(x)| dx \\
&\quad + \sum_{l=0}^n \binom{n}{l} \sup_{k \neq 0} (|G_+^{(n-l)}(k)| + |G_-^{(n-l)}(k)|) \\
&\quad \times \left(\int_{-R}^{-\infty} |x|^l |\psi(x)| dx + \int_R^{\infty} |x|^l |\psi(x)| dx \right).
\end{aligned} \tag{4.19}$$

したがって、上式右辺が有限値を取るためには、 $|G_{\pm}^{(n-l)}(k)|$ が k について全域で有界であり、初期波束 $\psi(x)$ はポテンシャルの遠方で x の十分に高次の逆べき程度よりは速く減衰する必要がある。すなわち、

$$\int_{-\infty}^{\infty} |x|^l |\psi(x)| dx < \infty \quad (l = 0, 1, \dots, j). \tag{4.20}$$

また、ポテンシャルの中心領域では、 $\sup_{k \neq 0} |\partial_k^n \varphi(x, k)|$ ($n = 0, 1, \dots, j$) は発散しないよう振る舞えば十分である。

以上をまとめると、漸近展開 (4.9) が有効であるための十分条件は、初期波束 $\psi(x)$ がポテンシャルから遠方で x の十分高次の逆べき程度よりは速く減衰すること。さらに、定常解 $\varphi(x, k)$ が k に関して多数回微分可能で、 $G_{\pm}^{(j)}(k)$ が一様有界であることである。後者の条件は、ポテンシャルに関する条件で規定されることが望ましい。

4.2 箱型障壁ポテンシャル系への応用

この節と次節では、漸近展開 (4.9) の有効性の検証および応用として、箱型障壁ポテンシャル系を考察する。ここでは、漸近展開の展開係数 (4.12) を $j = 0, 1$ まで求めることに

する. しかし, 実際には $j = 0$ の係数は消えてしまう. これは, 漸近展開 (4.9) が $t^{-3/2}$ の項から始まることを意味する. したがって, 箱型障壁ポテンシャル系の長時間領域におけるベキ減衰は, 1次元自由粒子系のそれよりも一般的に速いこととなる. しかし, このことは初期波束の選び方によって変わる可能性があることに注意が必要である. 初期波束への依存性, 特に自由粒子系で重要となったゼロ運動量近傍での振る舞いとの関連性は次節で議論される.

まず, 展開係数 (4.12) を求めるために, ハミルトニアン H の定常解 $\varphi(x, k)$ を考察する. ハミルトニアン H は (4.2) で与えられ, 箱型障壁ポテンシャル $V(x)$ はパラメータ $a > 0$, $V_0 > 0$ を用いて

$$V(x) := \begin{cases} V_0 & (|x| \leq a/2) \\ 0 & (|x| > a/2) \end{cases} \quad (4.21)$$

と表される. このハミルトニアンは束縛状態を持たない (より一般的には定理 2.13 を見よ). さて我々は, 定常解として Lippmann-Schwinger 方程式 (4.5) の (+) の解を採用する. しかし以下の議論は (-) 解を採用しても同様に行える. (+) 解を採用した場合, k が正であれば, 定常解 $\varphi(x, k)$ は時間に依存しない Schrödinger 方程式 (4.4) の左方投入問題に対する解となる. 左方投入問題の解を $\varphi_L(x, k)$ ($k > 0$), 右方投入問題の解を $\varphi_R(x, k)$ ($k < 0$) と書くことにする [64]. 左方投入問題に対応する解は, $k > k_0$ のとき,

$$\varphi_L(x, k) = \begin{cases} Ae^{ikx} + B(k)e^{-ikx} & (x < -a/2) \\ C(k)e^{i\kappa x} + D(k)e^{-i\kappa x} & (-a/2 \leq x \leq a/2) \\ F(k)e^{ikx} & (a/2 < x) \end{cases} \quad (4.22)$$

ここで, $A := (2\pi)^{-1/2}$, $\kappa := \sqrt{k^2 - k_0^2}$, $k_0 := \sqrt{V_0}$ である. また, 各係数 $B(k)$, $C(k)$, $D(k)$, $F(k)$ は,

$$\begin{aligned} B(k) &= i \frac{\kappa^2 - k^2}{2k\kappa} \sin(\kappa a) F(k), \\ C(k) &= \frac{\kappa + k}{2\kappa} e^{i(k-\kappa)a/2} F(k), \\ D(k) &= \frac{\kappa - k}{2\kappa} e^{i(k+\kappa)a/2} F(k), \\ F(k) &= \left[\cos(\kappa a) - i \frac{k^2 + \kappa^2}{2k\kappa} \sin(\kappa a) \right]^{-1} e^{-ika} A. \end{aligned} \quad (4.23)$$

$k_0 > k > 0$ の場合は, (4.22) と (4.23) において $i\kappa$ を $\rho := \sqrt{k_0^2 - k^2}$ で置き換えれば良い. また $k = k_0$ では, 特に $x \in [-a/2, a/2]$ において次のようになる.

$$\varphi_L(x, k) = (ik_0 x + 1 - ik_0 a/2) e^{ik_0 a/2} F(k_0). \quad (4.24)$$

ここで, $F(k_0) := (1 - ik_0 a/2)^{-1} e^{-ik_0 a/2} A$ である. 右方投入問題に対応する解は, $\varphi_L(x, k)$ において x を $-x$ で, k を $-k$ で置き換えれば求まる.

さて, $j = 0$ の展開係数 (4.14) を求めよう. この場合, (4.14) から, $\lim_{E \downarrow 0} \varphi(x, \pm E^{1/2})$ の振る舞いを調べれば十分と分かる. まず (4.23) から,

$$\lim_{k \downarrow 0} F(k) = 0, \quad \lim_{k \downarrow 0} \frac{F(k)}{k} = A[i(k_0/2) \sinh(k_0 a)]^{-1}, \quad (4.25)$$

と分かり, これより, $\lim_{k \downarrow 0} B(k) = -A$, $\lim_{k \downarrow 0} C(k) = \lim_{k \downarrow 0} D(k) = 0$ と求まる. これらは全ての位置 $x \in \mathbf{R}$ において,

$$\lim_{k \downarrow 0} \varphi(x, k) = \lim_{k \downarrow 0} \varphi_L(x, k) = 0 \quad (4.26)$$

が成り立つことを意味する [(4.23) を見よ]. $k < 0$ の場合も同様の結果が得られる. したがって,

$$\lim_{E \downarrow 0} \varphi(x, \pm E^{1/2}) = 0. \quad (4.27)$$

これは, 入射波のエネルギーがゼロの極限において, 入射波は全反射されることを意味する. この結果を $j = 0$ の展開係数 (4.14) に代入すれば,

$$\lim_{E \downarrow 0} \sum_{\sigma=+1,-1} f_\sigma(x, E) = 0 \quad (4.28)$$

が求まる. この評価は, 初期波束 $\psi(x)$ が $j = 0$ について (4.20) を満たしていれば, すなわち絶対可積分であれば厳密に成り立つ. 実際, 今の場合,

$$\sup_{k \neq 0} \sup_{x \in \mathbf{R}} |\varphi(x, k)| < \infty, \quad (4.29)$$

が示せるので, 前節の最後で議論したように, Lebesgue の優収束定理により (4.16) と (4.28) を厳密に導くことができる. (4.28) の結果は重要である. 何故なら, このことは漸近展開 (4.9) の展開係数は, $t^{-1/2}$ ではなく, $t^{-3/2}$ に比例する項から始まることを意味するからである. この事実は, 初期波束 $\psi(x)$ が絶対可積分であること以外の条件を必要としない点で, 箱型障壁ポテンシャル系特有の事実と言える [60]. したがって, 自由粒子系よりも箱型障壁ポテンシャル系の方が波束は速く減衰すると言える. このような状況は, 1次元ポテンシャル系でハミルトニアン の定常解が (4.27) を満たす時には何時でも起こると予想される. では, 逆に定常解が (4.27) を満たさない場合は有り得るのだろうか? この問題は, ゼロエネルギー共鳴と関連して, 後の 4.6 節で取り上げられる.

次に, $j = 1$ の展開係数 (4.15) を求める. 上の (4.28) の結果により, この作業は漸近展開 (4.9) から有益な評価を得るために必要となる. (4.15) に今の場合での結果 $\varphi(x, \pm 0) = 0$ と $\tilde{\psi}(\pm 0) = 0$ [(4.27) と (4.28) を見よ] を代入すると,

$$\lim_{E \downarrow 0} \sum_{\sigma=+1,-1} \partial_E f_\sigma(x, E) = \sum_{\sigma=+1,-1} \partial_k \varphi(x, \sigma 0) \tilde{\psi}^{(1)}(\sigma 0) \quad (4.30)$$

が得られる. したがって, $j = 1$ の展開係数を求めるためには, 実質的には $\partial_k \varphi(x, \pm 0)$ と $\tilde{\psi}^{(1)}(\pm 0)$ を計算すれば良い. ここでは結果のみを示す:

$$\partial_k \varphi(x, +0) = \begin{cases} 2iA(x + a/2) + 2A \frac{\cosh k_0 a}{ik_0 \sinh k_0 a} & (x < -a/2) \\ 2A \frac{\cosh[k_0(x - a/2)]}{ik_0 \sinh k_0 a} & (-a/2 \leq x \leq a/2) \\ 2A(ik_0 \sinh k_0 a)^{-1} & (a/2 < x) \end{cases}, \quad (4.31)$$

$$\partial_k \varphi(x, -0) = \begin{cases} -2A(ik_0 \sinh k_0 a)^{-1} & (x < -a/2) \\ -2A \frac{\cosh[k_0(x + a/2)]}{ik_0 \sinh k_0 a} & (-a/2 \leq x \leq a/2) \\ 2iA(x - a/2) - 2A \frac{\cosh k_0 a}{ik_0 \sinh k_0 a} & (a/2 < x) \end{cases}. \quad (4.32)$$

ここで, $\partial_k \varphi(x, +0)$ と $\partial_k \varphi(x, -0)$ が異なることに注意せよ. また, $\varphi(x, \pm 0) = 0$ だからと言って, $\partial_k \varphi(x, \pm 0)$ はゼロではないことにも注意が必要である. さらに, $\sup_{k \neq 0} |\partial_k \varphi(x, k)|$ は全ての位置 x で有限であり, また $|x| \rightarrow \infty$ で高々 $O(|x|)$ 程度に振る舞うことが示せる. したがって, 前節の最後に議論した通り, 初期波束 $\psi(x)$ が $j = 1$ について (4.20) を満たせば, $\tilde{\psi}^{(1)}(\pm 0)$ は (4.16) に従って厳密に求められる.

4.3 初期波束のゼロ運動量近傍での振る舞いとベキ減衰との関係

この節では, 1次元自由粒子系での議論を拡張して, 初期波束の特性が箱型障壁ポテンシャル系での波束, またはそれに関連した物理量 (生存確率など) の長時間領域におけるベキ的振る舞いにどのように関係しているかを考察する. 特にここでは, 波束が $t^{-3/2}$ よりも速い $t^{-5/2}$ のオーダーで減衰するための初期波束の条件を求める問題に限定する. 漸近展開 (4.9) と前節の結果に依れば, この問題は $j = 1$ の展開係数 (4.30) を消すための初期波束の条件を求めることに帰着する.

展開係数 (4.30) がゼロとなるのは, $\tilde{\psi}^{(1)}(\pm 0)$ が共にゼロのときに限る. これを確かめるには, 例えば $x < -a/2$ の領域で展開係数 (4.30) がゼロになる条件を考えれば良い.

まず, $\tilde{\psi}^{(1)}(+0) = 0$ となるための初期波束の条件を求めることを考えよう. (4.16) から, このことは (4.31) の関数 $\partial_k \varphi(x, +0)$ と “直交する” 初期波束の条件を求めることに帰着する. しかし, $\tilde{\psi}^{(1)}(+0)$ の具体的な表式から, この試みは非常に困難に思われる. 何故なら,

(4.31) を代入すると (4.16) は次のような複雑な表式となるからである.

$$\begin{aligned}\tilde{\psi}^{(1)}(+0) &= -2iA \int_{-\infty}^{-a/2} y\psi(y)dy - 2A \left(ia/2 + \frac{\cosh k_0 a}{ik_0 \sinh k_0 a} \right) \int_{-\infty}^{-a/2} \psi(y)dy \\ &\quad - 2A(ik_0 \sinh k_0 a)^{-1} \int_{-a/2}^{a/2} \cosh[k_0(y - a/2)]\psi(y)dy \\ &\quad - 2A(ik_0 \sinh k_0 a)^{-1} \int_{a/2}^{\infty} \psi(y)dy.\end{aligned}\quad (4.33)$$

そこで, ここでは $\tilde{\psi}^{(1)}(+0) = 0$ となる十分条件の一つを挙げるに留める. いま, 初期波束がポテンシャル (4.21) の左もしくは右の遠方に局在している場合を考える. ここでは左遠方の場合とすると,

$$\psi(x) = 0 \quad (-a/2 \leq x). \quad (4.34)$$

このとき, (4.33) の第 2 行と第 3 行の項はゼロとなる. ここで重要な点は, このような遠方の領域では, 定常解 $\varphi(x, k)$ が左向きと右向きの平面波の重ね合わせと見なせることである. この事実は, 初期波束の特徴付けとして自由粒子系で考察した運動量空間での振る舞い, $\hat{\psi}(k) = O(k^m)$ ($k \rightarrow 0$), がここでも利用できる可能性を示唆している. 実際, 条件 (4.34) の下で, (4.33) は次のようになる.

$$\tilde{\psi}^{(1)}(+0) = 2\hat{\psi}^{(1)}(0) - 2 \left(ia/2 + \frac{\cosh k_0 a}{ik_0 \sinh k_0 a} \right) \hat{\psi}(0). \quad (4.35)$$

したがって, $\hat{\psi}(0) = 0$ かつ $\hat{\psi}^{(1)}(0) = 0$, すなわち $\hat{\psi}(k) = O(k^2)$ ($k \rightarrow 0$) であれば, $\tilde{\psi}^{(1)}(+0) = 0$ となる. 同様に, 条件 (4.34) の下で,

$$\tilde{\psi}^{(1)}(-0) = 2(ik_0 \sinh k_0 a)^{-1} \hat{\psi}(0). \quad (4.36)$$

したがって, $\hat{\psi}(0) = 0$ であれば, $\tilde{\psi}^{(1)}(-0) = 0$ となる. 以上をまとめると, 条件 (4.34) と共に,

$$\hat{\psi}(k) = O(k^2) \quad (k \rightarrow 0) \quad \text{または} \quad \hat{\psi}^{(j)}(0) = 0 \quad (j = 0, 1), \quad (4.37)$$

が成立すれば, $j = 1$ の展開係数 (4.30) がゼロとなり, このとき $\psi(x, t) \sim t^{-5/2}$ が期待される. 上と同じ条件の下で 1 次元自由波束が $t^{-3/2}$ のように振る舞うことに注意すると [(3.38) と (3.41) を見よ], この場合でもポテンシャル系の方が速く減衰することが分かる [(4.29) の後の議論と比較せよ]. ところで, 従来の研究 (例えば [9, 10] を見よ) では特定の初期波束を用いたときに $\psi(x, t) \sim t^{-3/2}$ となることは知られていたが, 初期波束を変えることでこれとは異なるベキ減衰が現れ得る点は今まで明らかにされていなかったように思われる [60]. これらの結果を明瞭に理解するために, 条件 (4.34) の下での波束の漸近形を $\hat{\psi}(k)$ のゼロ運動量での微係数を使って書き下しておく: $t \rightarrow \infty$ において,

$$\psi(x, t) \sim \frac{\Gamma(3/2)}{2(it)^{3/2}} \left\{ \left[2\hat{\psi}^{(1)}(0) - 2 \left(ia/2 + \frac{\cosh k_0 a}{ik_0 \sinh k_0 a} \right) \hat{\psi}(0) \right] \partial_k \varphi(x, +0) \right.$$

$$+2(ik_0 \sinh k_0 a)^{-1} \widehat{\psi}(0) \partial_k \varphi(x, -0) \Big\}. \quad (4.38)$$

同様に生存確率 $S(t)$ は次のように求まる.

$$S(t) \sim \frac{\Gamma(3/2)^2}{4t^3} \left[\left| 2\widehat{\psi}^{(1)}(0) - 2 \left(ia/2 + \frac{\cosh k_0 a}{ik_0 \sinh k_0 a} \right) \widehat{\psi}(0) \right|^2 + \left| 2(ik_0 \sinh k_0 a)^{-1} \widehat{\psi}(0) \right|^2 \right]. \quad (4.39)$$

また条件 (4.34) と (4.37) を同時に満たす関数は実際に構成可能であることは注意すべきである. そのような関数を見つけるために, 以下の C_0^∞ -関数の導関数を考える.

$$\psi_L(x) = \begin{cases} \exp[-a_0/[d^2 - (x - d_0)^2]] & (|x - d_0| < d) \\ 0 & (|x - d_0| \geq d) \end{cases}. \quad (4.40)$$

ただし, a_0 と d は正数で, d_0 は $d_0 + d < -a/2$ を満たすとする. この関数 $\psi_L(x)$ は無限回微分可能で, その導関数の台は閉区間 $[d_0 - d, d_0 + d]$ である. ここで, $\psi_L(x)$ の j 階導関数の Fourier 変換, $\widehat{\psi}_L^{(j)}(k) = (ik)^j \widehat{\psi}_L(k)$, を考える. 定義 (4.40) から $\widehat{\psi}_L(0) \neq 0$ なので, $\widehat{\psi}_L^{(j)}(k) = O(k^j)$ ($k \rightarrow 0$) である. したがって, $\psi_L^{(2)}(x)$ が条件 (4.34) と (4.37) を同時に満たす関数と分かる.

最後に, 生存確率の公式 (4.39) の正当性を数値的に検証して, この節を終わりたい. 初期波束として以下の二つの関数を考える.

$$\widehat{\phi}_m(k) = N_m k^m e^{-a_0(k-k_0)^2/2 - idk} \quad (m = 0, 1). \quad (4.41)$$

ここで, $a_0 > 0$, $k_0, d \in \mathbf{R}$, そして N_m は規格化定数である. これらは以前 (3.47) で定義した波動関数と同じである. 我々は, これらの波束を箱型障壁ポテンシャルの左側に置き, それをポテンシャルに入射する状況を考える. ここで注意しなければならない点がある. それは上の波束が条件 (4.34) を満たさない事である. しかし, 波束をポテンシャルの十分遠方に用意すれば, 条件 (4.34) が成立していると思わせるだろう.

図 4.1 では, 波束 $\widehat{\phi}_0(k)$ (Gauss 波束) を初期波束に選んだ場合の, その生存確率と (4.39) から予言される漸近線が示されている. ここで初期波束の各パラメータは, $a_0 = 2.0$, $k_0 = 1.0$, $d = -20.0$ に選んでいる. このとき, 自由ハミルトニアン H_0 の期待値は $E_0 := \langle \phi_0, H_0 \phi_0 \rangle = 1.25$ である. また, ポテンシャルの高さ V_0 を四つ選び, それぞれ, 0.0 (自由な場合), $0.1E_0$, E_0 , $10.0E_0$ とした. ポテンシャルの幅は $a = 2.0$ である. 図 4.1 において, $t = 10^0$ から 10^1 までの時間領域では, $S(t)$ に V_0 に依る違いは見られず, 全て重なって見える. $t = 10^1$ から 10^2 までの時間領域では, $S(t)$ は激しく振動している. これは, 波束がポテンシャルに衝突し散乱された事によるものと考えられる. 一方, 図における三本の直

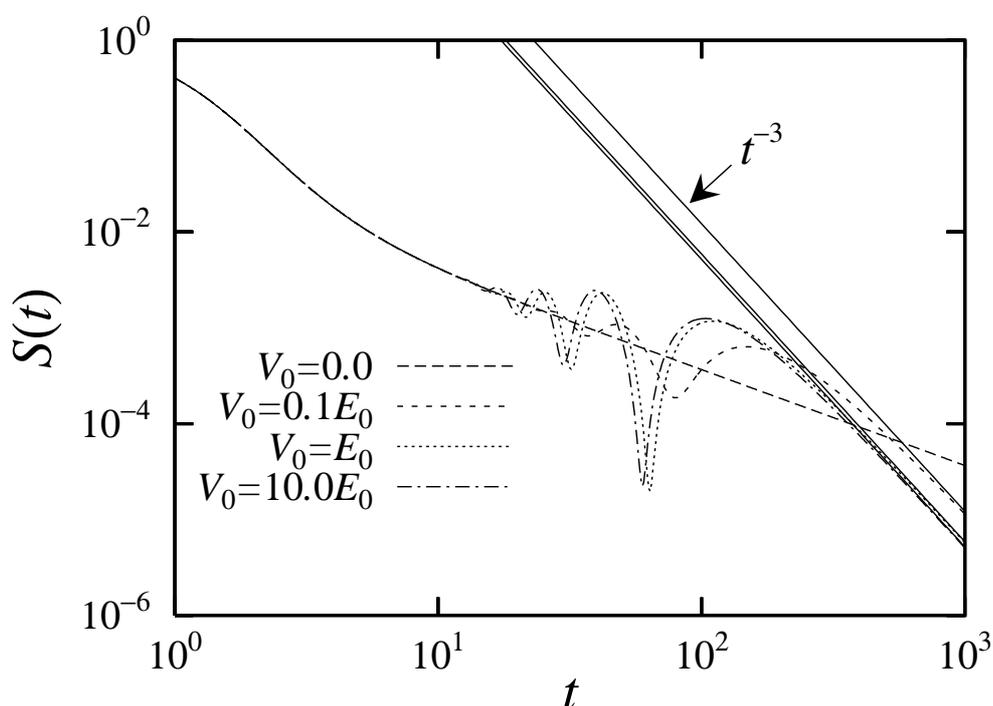


図 4.1: 波動関数 ϕ_0 を初期波束に選んだ場合の $S(t)$, および (4.39) から予言される漸近線 (実線). ポテンシャルの高さ V_0 を四つ選び, それぞれ, 0.0 (自由な場合), $0.1E_0$, E_0 , $10.0E_0$ である. E_0 は ϕ_0 における H_0 の期待値で 1.25 である. $t = 10^1$ 以前の時間領域では, $S(t)$ は全て重なっている. $t = 10^2$ 以後の領域で, これらの $S(t)$ と対応する漸近線は良く一致している. これらが示すベキ減衰は t^{-3} である. ここでは ϕ_0 のパラメータを $a_0 = 2.0$, $k_0 = 1.0$, $d = -20.0$, ポテンシャルの幅を $a = 2.0$ に選んでいる.

線 (その内の二本は重なっている) が公式 (4.39) による漸近線である. 図 4.1 から, $t = 10^2$ 以後の領域で, $S(t)$ と漸近線が極めて良く一致していることが分かる. これらが示す漸近的な振る舞いは t^{-3} である. また, $V_0 = 0.0$ のときの $S(t)$ の漸近線は, (3.45) から計算できる. このときその振る舞いは t^{-1} である.

図 4.2 では, 波束 $\widehat{\phi}_1(k)$ を初期波束に選んだ場合の, その生存確率と (4.39) から予言される漸近線が示されている. 初期波束のパラメータは図 4.1 の $\widehat{\phi}_0(k)$ におけるものと同じである. このとき, H_0 の期待値は $E_1 := \langle \phi_1, H_0 \phi_1 \rangle = 2.15$ である. またポテンシャルの高さ V_0 も図 4.1 の場合と同様に選んである. ただし, E_0 は E_1 で置き換えられる. 図 4.1 において, $t = 10^0$ から 10^1 までの時間領域では, $S(t)$ にポテンシャルの高さに依る違いは見られず, この場合も全て重なって見える. $t = 10^1$ から 10^2 の領域で, $S(t)$ は激しく振動している. この振動も波束がポテンシャルに衝突し散乱された事によるものと考えられる. ただし, 振動の始まる時刻は図 4.1 の場合よりも早いようである. これは, 素朴には $E_0 < E_1$ が原因と思われる. 一方, 図に示した直線が公式 (4.39) による漸近線である. 図 4.1 の場合と異なり, 今の場合の漸近線は V_0 や a には依らないことに注意せよ. 実際, $\widehat{\psi}(0) = \widehat{\phi}_1(0) = 0$

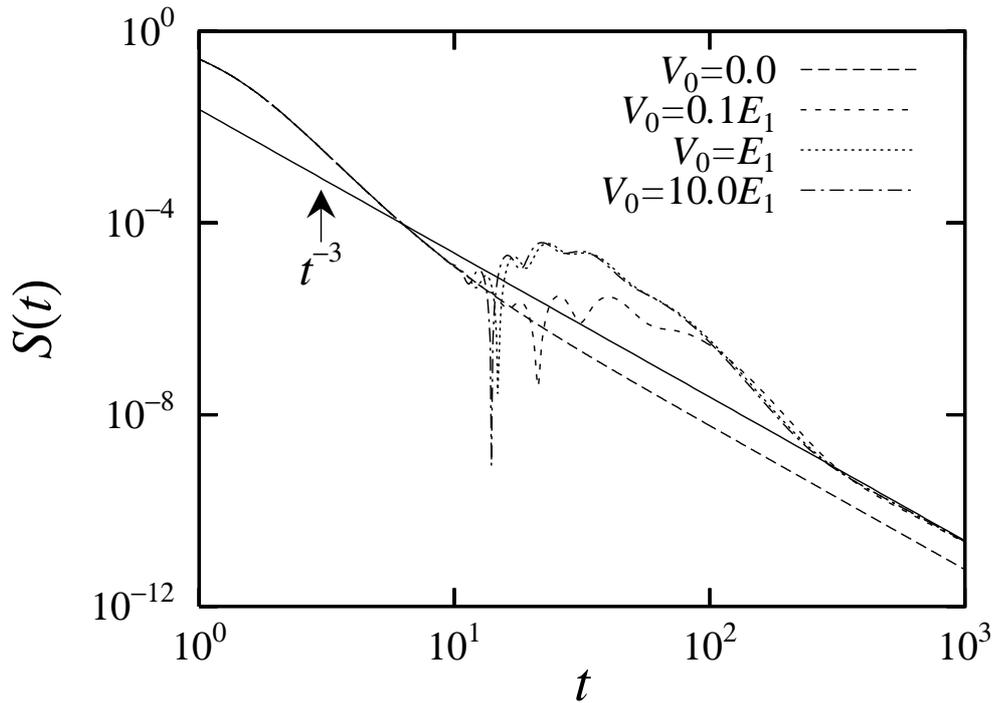


図 4.2: 波動関数 ϕ_1 を初期波束に選んだ場合の $S(t)$, および (4.39) から予言される漸近線 (実線). ポテンシャルの高さ V_0 を四つ選び, それぞれ, 0.0 (自由な場合), $0.1E_0$, E_0 , $10.0E_0$ である. E_1 は ϕ_1 における H_0 の期待値で 2.15 である. $t = 10^1$ 以前の時間領域では, $S(t)$ は全て重なっている. $t = 10^2$ 以後の領域で, $S(t)$ と漸近線は良く一致している. これらが示す漸近的な振る舞いは t^{-3} である. ここで用いた各パラメータの値は図 4.1 におけるものと同じである.

を (4.39) に代入すれば,

$$S(t) \sim \frac{\Gamma(3/2)^2}{t^3} \left| \widehat{\phi}_1^{(1)}(0) \right|^2 \quad (4.42)$$

となる. 図から, $t = 10^2$ 以後の領域で, $S(t)$ とこの漸近線が一致していることが分かる. これらが示す漸近的な振る舞いは t^{-3} である. また, $V_0 = 0.0$ のときの $S(t)$ の漸近線は, (3.45) から予言できる. その漸近的振る舞いは t^{-3} であり, 実は (4.42) の漸近線の値の $1/4$ 倍である.

4.4 有限井戸型ポテンシャル系への応用

この節と次の二つの節では, 漸近展開 (4.9) の有効性の検証および応用として, 井戸型ポテンシャル系を考察する. 箱型障壁ポテンシャル系と井戸型ポテンシャル系のそれぞれの定常解の類似性から, 一見すると, 前者と後者の長時間領域でのべき的振る舞いには大きな違いはないと思われる. しかし, 実は後者には前者にないゼロエネルギー共鳴が存在する [(3.27) の後の議論を見よ]. ゼロエネルギー共鳴とは, ハミルトニアン of ゼロ固有値に属する固有関数が Hilbert 空間に属さない場合を指す. これは時間発展演算子の漸近展開

解析において詳細に調べられている。箱型障壁ポテンシャル系では (4.27) が成立するのでこのような状況は起こらない。一方、井戸型ポテンシャル系では、ポテンシャルの深さが特別な値を取るときには (4.27) が成立せず、 $\lim_{E \downarrow 0} \varphi(x, \pm E^{1/2})$ が $L^2(\mathbb{R})$ に属さない関数として定まり得る。この事実は重要である。何故なら、このような状況では、漸近展開 (4.9) の $j = 0$ の展開係数 (4.14) が消えずに残るため、原理的に波束は $t^{-1/2}$ で減衰し得るからである。これは箱型障壁ポテンシャル系にはない振る舞いである [(4.29) の後の議論を見よ]。ポテンシャルの深さがこのような特別な値を取らなければゼロエネルギー共鳴は発生しない。このような場合は、箱型障壁ポテンシャル系と同様、波束は $t^{-3/2}$ またはそれより速いオーダーで減衰する。ゼロエネルギー共鳴の存在によってベキ減衰のベキが変わり得るといふ現象は既に指摘されていた [55, 56, 57, 58]。しかし、井戸型ポテンシャル系といった基本的な系による理解 [60] は、今までなされていなかったように思われる。ゼロエネルギー共鳴がない状況でのベキ減衰を次節で、ゼロエネルギー共鳴がある状況でのベキ減衰についてはその次の節で取り上げる。また、ここでは、初期波束への依存性、特に自由粒子系で重要となったゼロ運動量近傍での初期波束の振る舞いとの関連性をも議論する。この節では、それらの議論のための準備として、ゼロエネルギー共鳴がどのような場合に発生するかを考察する。

有限井戸型ポテンシャルを

$$V(x) := \begin{cases} -V_0 & (|x| \leq a/2) \\ 0 & (|x| > a/2) \end{cases} \quad (4.43)$$

で定義する。ここで、 $a > 0$, $V_0 > 0$ である。また、 $k_0 := \sqrt{V_0}$ と置く。ハミルトニアン H を (4.2) で定義する。この系では、任意の正の値 V_0 に対して H の束縛状態が存在し、しかも、 V_0 と a の値によって束縛状態の個数が変化する (例えば [64] を見よ)。これらの間には次の関係がある：

$$\text{束縛状態の個数} = \{k_0 a / \pi \text{ より小さい最大の整数} \} + 1. \quad (4.44)$$

ただし、ゼロ固有値 (対応する固有関数が Hilbert 空間に属す場合) は持たないことに注意せよ。我々は、箱型障壁ポテンシャル系と同様に、ここでも Lippmann-Schwinger 方程式の (+) 解 $\varphi(x, k)$ を採用する。このとき $\varphi(x, k)$ は時間に依存しない Schrödinger 方程式 (4.4) の左方投入問題に対する解となる。左方投入問題の解を $\varphi_L(x, k)$ 、右方投入問題の解を $\varphi_R(x, k)$ と書くことにする。定常解 $\varphi_L(x, k)$ ($k > 0$) は、箱型障壁ポテンシャル系の定常解の $|k| > k_0$ における式 (4.22) と (4.23) において、 V_0 を $-V_0$ で置き換えることで求まる。 $\varphi_R(x, k)$ ($k < 0$) も同様にして求まる。

まず $k_0 a \neq n\pi$ (n は自然数) の場合を考えよう。この場合は

$$\lim_{k \downarrow 0} F(k)/k = [-i(k_0/2) \sin(k_0 a)]^{-1} A, \quad (4.45)$$

となるから, 全ての位置 $x \in \mathbb{R}$ において,

$$\lim_{k \downarrow 0} \varphi_L(x, k) = 0, \quad (4.46)$$

が成り立つ. この事情は (4.26) と全く同じである. 同様に, $\lim_{k \uparrow 0} \varphi_R(x, k) = 0$ も示せる. したがってゼロエネルギー共鳴は発生しない.

次に, $k_0 a = n\pi$ (n は自然数) のときを調べる. この場合は, $\lim_{k \downarrow 0} F(k) = (-1)^n A$ であり, その他は $\lim_{k \downarrow 0} B(k) = \lim_{k \downarrow 0} C(k) = \lim_{k \downarrow 0} D(k) = 0$ となる. よって,

$$\lim_{k \downarrow 0} \varphi_L(x, k) = \begin{cases} A & (x < -a/2) \\ (-1)^n A \cos[k_0(x - a/2)] & (-a/2 \leq x \leq a/2) \\ (-1)^n A & (a/2 < x) \end{cases}, \quad (4.47)$$

が成り立つ. 同様に,

$$\lim_{k \uparrow 0} \varphi_R(x, k) = \begin{cases} (-1)^n A & (x < -a/2) \\ (-1)^n A \cos[k_0(x + a/2)] & (-a/2 \leq x \leq a/2) \\ A & (a/2 < x) \end{cases}. \quad (4.48)$$

これらの関数は, 固有値方程式 (4.4) のゼロ固有値に属する解である.³ また, これらは明らかに Hilbert 空間 (ここでは $L^2(\mathbb{R})$) に属さない. すなわち, $k_0 a = n\pi$ のときにはゼロエネルギー共鳴が生じていることを意味する. 実は, 関係式 (4.44) から, $k_0 a = n\pi$ は束縛状態の数が増える閾値に対応していることが分かる. したがって, 束縛状態の個数が増えるポテンシャルの深さ, すなわち $k_0 a = n\pi$ でゼロエネルギー共鳴が起こっている. このような特別な深さは高々可算個しかないことに注意しよう. 実は, この事実は井戸型ポテンシャル系に限らない一般的事実として知られている. また, 可算個の点からなる集合の Lebesgue 測度はゼロである. このことから, しばしばゼロエネルギー共鳴は一般的 (generic) 現象ではないと言われる (例えば [58] を見よ).

4.5 初期波束のゼロ運動量近傍での振る舞いとベキ減衰との関係

この節では, 井戸型ポテンシャル系でポテンシャルの深さが $k_0 a \neq n\pi$ を満たす場合の波束のベキ減衰を考察する. すなわち, ゼロエネルギー共鳴がない場合である. この場合は, 箱型障壁ポテンシャル系と同様, 波束は漸的に $t^{-3/2}$ またはそれより速く減衰することが示される. また, 初期波束への依存性, 特に自由粒子系で重要となったゼロ運動量近傍での初期波束の振る舞いとの関連性も議論する. ここでは, 波束の長時間での漸近展開

³厳密には超関数の意味で固有値方程式 (4.4) のゼロ固有値に属する解となっている [23].

(4.9) の展開係数 (4.12) の内, $j = 0$ の係数は消えることが直ちに分かるので [(4.46) を見よ], 次の $j = 1$ の係数を求める. これは箱型障壁ポテンシャル系での状況と全く同じである [(4.29) の後の議論を見よ].

$j = 0$ の展開係数はゼロとなるから, $j = 1$ の展開係数を求めるためには, 我々は (4.15) からではなく (4.30) から出発できる. したがって, $\partial_k \varphi(x, \pm 0)$ を求めれば十分である. 以下に結果のみを記す:

$$\partial_k \varphi(x, +0) = \begin{cases} 2iA(x + a/2) - 2A \frac{\cos k_0 a}{ik_0 \sin k_0 a} & (x < -a/2) \\ -2A \frac{\cos[k_0(x - a/2)]}{ik_0 \sin k_0 a} & (-a/2 \leq x \leq a/2) \\ -2A(ik_0 \sin k_0 a)^{-1} & (a/2 < x) \end{cases}, \quad (4.49)$$

$$\partial_k \varphi(x, -0) = \begin{cases} 2A(ik_0 \sin k_0 a)^{-1} & (x < -a/2) \\ 2A \frac{\cos[k_0(x + a/2)]}{ik_0 \sin k_0 a} & (-a/2 \leq x \leq a/2) \\ 2iA(x - a/2) + 2A \frac{\cos k_0 a}{ik_0 \sin k_0 a} & (a/2 < x) \end{cases}. \quad (4.50)$$

さらに, $\sup_{k \neq 0} |\partial_k \varphi(x, k)|$ は全ての位置 x で有限であり, また $|x| \rightarrow \infty$ で高々 $O(|x|)$ 程度に振る舞う. したがって, 箱型障壁ポテンシャル系での議論と同様, 初期波束 $\psi(x)$ が $j = 1$ について (4.20) を満たせば, $\tilde{\psi}^{(1)}(\pm 0)$ は (4.16) に従って厳密に求められる.

我々はここでも, 初期波束がポテンシャルの左もしくは右の遠方に局在している場合に議論を制限し, (4.34) の成立を仮定する. このとき, (4.35) に関する議論と全く同様にして,

$$\tilde{\psi}^{(1)}(+0) = 2\hat{\psi}^{(1)}(0) - 2 \left(ia/2 - \frac{\cos k_0 a}{ik_0 \sin k_0 a} \right) \hat{\psi}(0) \quad (4.51)$$

が得られる. 同様に,

$$\tilde{\psi}^{(1)}(-0) = -2(ik_0 \sin k_0 a)^{-1} \hat{\psi}(0). \quad (4.52)$$

したがって, 条件 (4.34) の下での波束の長時間での漸近形を $\hat{\psi}(k)$ のゼロ運動量での導関数を使って書き下せば, $t \rightarrow \infty$ において,

$$\psi(x, t) \sim \frac{\Gamma(3/2)}{2(it)^{3/2}} \left\{ \left[2\hat{\psi}^{(1)}(0) - 2 \left(ia/2 - \frac{\cos k_0 a}{ik_0 \sin k_0 a} \right) \hat{\psi}(0) \right] \partial_k \varphi(x, +0) - 2(ik_0 \sin k_0 a)^{-1} \hat{\psi}(0) \partial_k \varphi(x, -0) \right\}. \quad (4.53)$$

この結果から分かるように, 条件 (4.34) と共に条件 (4.37), すなわち, $\hat{\psi}^{(j)}(0) = 0$ ($j = 0, 1$), が満たされれば, 上の $t^{-3/2}$ の展開係数がゼロとなり, このとき $\psi(x, t) \sim t^{-5/2}$ が期待され

る。この機構は箱型障壁ポテンシャル系の場合と全く同じである。最後に、(4.53)に対応する生存確率 $S(t)$ も記しておく、

$$S(t) \sim \frac{\Gamma(3/2)^2}{4t^3} \left[\left| 2\hat{\psi}^{(1)}(0) - 2\left(ia/2 - \frac{\cos k_0 a}{ik_0 \sin k_0 a}\right)\hat{\psi}(0) \right|^2 + |2(ik_0 \sin k_0 a)^{-1}\hat{\psi}(0)|^2 \right]. \quad (4.54)$$

4.6 ゼロエネルギー共鳴とベキ減衰

この節では、井戸型ポテンシャル系でポテンシャルの深さが $k_0 a = n\pi$ を満たす場合の波束のベキ減衰を考察する。すなわち、ゼロエネルギー共鳴が存在する場合である。この場合は箱型障壁ポテンシャル系と違って、波束は、 $t^{-3/2}$ より遅い、 $t^{-1/2}$ で減衰し得る。これは1次元自由波束の振る舞いと同一である。また、初期波束への依存性、特に自由粒子系で重要となったゼロ運動量近傍での初期波束の振る舞いとの関連性も議論する。ただし、この節においても前節と同様、初期波束がポテンシャルの左もしくは右の遠方に局在している場合に議論を制限する。すなわち、(4.34)を仮定する。

まず、波束の長時間での漸近形を求めるために、漸近展開(4.9)の $j=0$ の展開係数を導出する。 $j=0$ の展開係数は、(4.47)と(4.48)を $j=0$ の展開係数(4.14)に代入すれば計算できる。まず、条件(4.34)の下で、

$$\lim_{E \downarrow 0} \sum_{\sigma=+1,-1} f_{\sigma}(x, E) = \hat{\psi}(0)\varphi(x, +0) + (-1)^n \hat{\psi}(0)\varphi(x, -0) \quad (4.55)$$

となる。したがって、漸近展開(4.9)は、初期波束 $\psi(x)$ のゼロ運動量での値 $\hat{\psi}(0)$ を使って次のように表せる: $t \rightarrow \infty$ において、

$$\psi(x, t) \sim \frac{\Gamma(1/2)}{2(it)^{1/2}} \left[\hat{\psi}(0)\varphi(x, +0) + (-1)^n \hat{\psi}(0)\varphi(x, -0) \right]. \quad (4.56)$$

ここで、上の公式は $\hat{\psi}(0) = 0$ のときには有効な評価を与えていないことに注意が必要である。この事実は1次元自由粒子系の場合と全く同様である。したがって、 $\hat{\psi}(0) = 0$ のときには、漸近展開(4.9)における次の展開係数 ($j=1$) を導出しなければならない。ちなみに(4.56)に対応する生存確率 $S(t)$ は次のようになる。

$$S(t) \sim \frac{\Gamma(1/2)^2}{t} |\hat{\psi}(0)|^4. \quad (4.57)$$

さて $\hat{\psi}(0) = 0$ の場合の漸近公式を求めるために、上で議論した通り、 $j=1$ の展開係数を導出する。 $\tilde{\psi}(+0) = \hat{\psi}(0) = 0$ と $\tilde{\psi}(-0) = (-1)^n \hat{\psi}(0) = 0$ を(4.15)に代入すれば、この

展開係数は,

$$\begin{aligned} \lim_{E \downarrow 0} \sum_{\sigma=+1,-1} \partial_E f_\sigma(x, E) &= \lim_{E \downarrow 0} \sum_{\sigma=+1,-1} \frac{1}{2} \varphi(x, \sigma 0) \tilde{\psi}^{(1)}(\sigma 0) \sigma E^{-1/2} \\ &+ \sum_{\sigma=+1,-1} \frac{1}{2} \left[2\partial_k \varphi(x, \sigma 0) \tilde{\psi}^{(1)}(\sigma 0) + \varphi(x, \sigma 0) \tilde{\psi}^{(2)}(\sigma 0) \right] \end{aligned} \quad (4.58)$$

となる. この式から分かるように, 前節とは違って, 我々は $\partial_k \varphi(x, \pm 0)$ だけでなく $\partial_k^2 \varphi(x, \pm 0)$ も求めなければならない. 以下に結果のみを示す. $k_0 a = n\pi$ (n は自然数) のとき,

$$\partial_k \varphi(x, +0) = \begin{cases} iAx & (x < -a/2) \\ i(-1)^n A \left[\frac{\sin[k_0(x - a/2)]}{k_0} - \frac{a}{2} \cos[k_0(x - a/2)] \right] & (|x| \leq a/2) \\ i(-1)^n A(x - a) & (a/2 < x) \end{cases} \quad (4.59)$$

$$\partial_k \varphi(x, -0) = \begin{cases} i(-1)^n A(x + a) & (x < -a/2) \\ i(-1)^n A \left[\frac{\sin[k_0(x + a/2)]}{k_0} + \frac{a}{2} \cos[k_0(x + a/2)] \right] & (|x| \leq a/2) \\ iAx & (a/2 < x) \end{cases} \quad (4.60)$$

$$\begin{aligned} \partial_k^2 \varphi(x, +0) &= \begin{cases} -Ax^2 & (x < -a/2) \\ (-1)^{n+1} A \left[\frac{(x - 3a/2) \sin[k_0(x - a/2)]}{k_0} + \frac{a^2}{4} \cos[k_0(x - a/2)] \right] & (|x| \leq a/2) \\ (-1)^{n+1} A(x - a)^2 & (a/2 < x) \end{cases} \end{aligned} \quad (4.61)$$

$$\begin{aligned} \partial_k^2 \varphi(x, -0) &= \begin{cases} (-1)^{n+1} A(x + a)^2 & (x < -a/2) \\ (-1)^{n+1} A \left[\frac{(x + 3a/2) \sin[k_0(x + a/2)]}{k_0} + \frac{a^2}{4} \cos[k_0(x + a/2)] \right] & (|x| \leq a/2) \\ -Ax^2 & (a/2 < x) \end{cases} \end{aligned} \quad (4.62)$$

次に, 初期波束が条件 (4.34) を満たすと仮定して, $\tilde{\psi}^{(1)}(\pm 0)$ と $\tilde{\psi}^{(2)}(\pm 0)$ を求める. まず, (4.59) と (4.60) を $j = 1$ での (4.16) に代入すると,

$$\tilde{\psi}^{(1)}(+0) = \hat{\psi}^{(1)}(0). \quad (4.63)$$

同様に,

$$\tilde{\psi}^{(1)}(-0) = (-1)^n [ia\hat{\psi}(0) + \hat{\psi}^{(1)}(0)]. \quad (4.64)$$

特に, ここでの仮定, $\hat{\psi}(0) = 0$, の下では, $\tilde{\psi}^{(1)}(-0) = (-1)^n \hat{\psi}^{(1)}(0)$ となる. 次に, (4.61) と (4.62) 式を $j = 2$ での (4.16) に代入すると,

$$\tilde{\psi}^{(2)}(+0) = \hat{\psi}^{(2)}(0). \quad (4.65)$$

同様に,

$$\tilde{\psi}^{(2)}(-0) = (-1)^n(\hat{\psi}^{(2)}(0) + 2ia\hat{\psi}^{(1)}(0) - a^2\hat{\psi}(0)). \quad (4.66)$$

特に仮定, $\hat{\psi}(0) = 0$, の下では, $\tilde{\psi}^{(2)}(-0) = (-1)^n(\hat{\psi}^{(2)}(0) + 2ia\hat{\psi}^{(1)}(0))$ となる. ここで, (4.58) の第1項の極限の収束性を評価する. (4.47) と (4.48) および, (4.63) と (4.64) から, $|x| > a/2$ の領域では

$$\lim_{E \downarrow 0} \sum_{\sigma=+1,-1} \frac{1}{2} \varphi(x, \sigma 0) \tilde{\psi}^{(1)}(\sigma 0) \sigma E^{-1/2} = 0 \quad (4.67)$$

と分かる. これは $\varphi(x, +0) \tilde{\psi}^{(1)}(+0) = \varphi(x, -0) \tilde{\psi}^{(1)}(-0)$ による. 一方, $|x| \leq a/2$ の領域では, このような打ち消しは起こらずこの値は不定となる. 以上の考察を基に, 初期波束が $\hat{\psi}(0) = 0$ を満たすときの, 波束の漸近展開式を導出すると次のようになる: $t \rightarrow \infty$ において,

$$\begin{aligned} \psi(x, t) \sim & \frac{\Gamma(3/2)}{4(it)^{3/2}} \left[2\hat{\psi}^{(1)}(0) \partial_k \varphi(x, +0) + \hat{\psi}^{(2)}(0) \varphi(x, +0) \right. \\ & \left. + 2(-1)^n \hat{\psi}^{(1)}(0) \partial_k \varphi(x, -0) + (-1)^n (\hat{\psi}^{(2)}(0) + 2ia\hat{\psi}^{(1)}(0)) \varphi(x, -0) \right]. \end{aligned} \quad (4.68)$$

ただし, この漸近公式は $|x| > a/2$ の領域でのみ成立する. 初期波束が条件 (4.34) を満たす仮定の下では, 上の結果を使って生存確率 $S(t)$ の長時間での漸近形も計算できる.

$$S(t) \sim \frac{\Gamma(3/2)^2}{t^3} |\hat{\psi}^{(1)}(0)|^4. \quad (4.69)$$

ここで, 仮定 $\hat{\psi}(0) = 0$ を用いている.

この節の最後に, 生存確率に関する公式 (4.54), (4.57), 及び (4.69) の正当性を数値的に検証しよう. ここでも初期波束として (4.41) の二つの波束 ϕ_0 と ϕ_1 を考える. 我々は, これらの波束を井戸型ポテンシャル (4.43) の左側に置き, それをポテンシャルに入射する状況を再び考える. しかし, 注意しなければならない点が二つある. 一つはこれらの波束が条件 (4.34) を満たさない点であるが, このことは波束をポテンシャルの十分遠方に設置すれば克服されるだろう. 実際, 図 4.1 と図 4.2 における結果はこの事を支持していると言える. もう一つは, 井戸型ポテンシャル系には束縛状態が存在する点である. この場合の生存確率は, 正確には (4.3) から次のようになる.

$$S(t) = \left| \sum_{n=0}^N |\langle \varphi_n, \psi \rangle|^2 e^{-itE_n} + \left\langle \psi, \int_{-\infty}^{\infty} e^{-itk^2} \varphi(\cdot, k) \left[\int_{-\infty}^{\infty} \overline{\varphi(y, k)} \psi(y) dy \right] dk \right\rangle \right|^2. \quad (4.70)$$

我々が得た公式 (4.54), (4.57), 及び (4.69) は, 上式における絶対値記号の中の第1項を無視した場合に相当する. しかし, 一般には初期波束と束縛状態との重なり (内積) $\langle \varphi_n, \psi \rangle$ を表した第1項はゼロにはならない. また, $t \rightarrow \infty$ の極限においても, 第1項は準周期的振

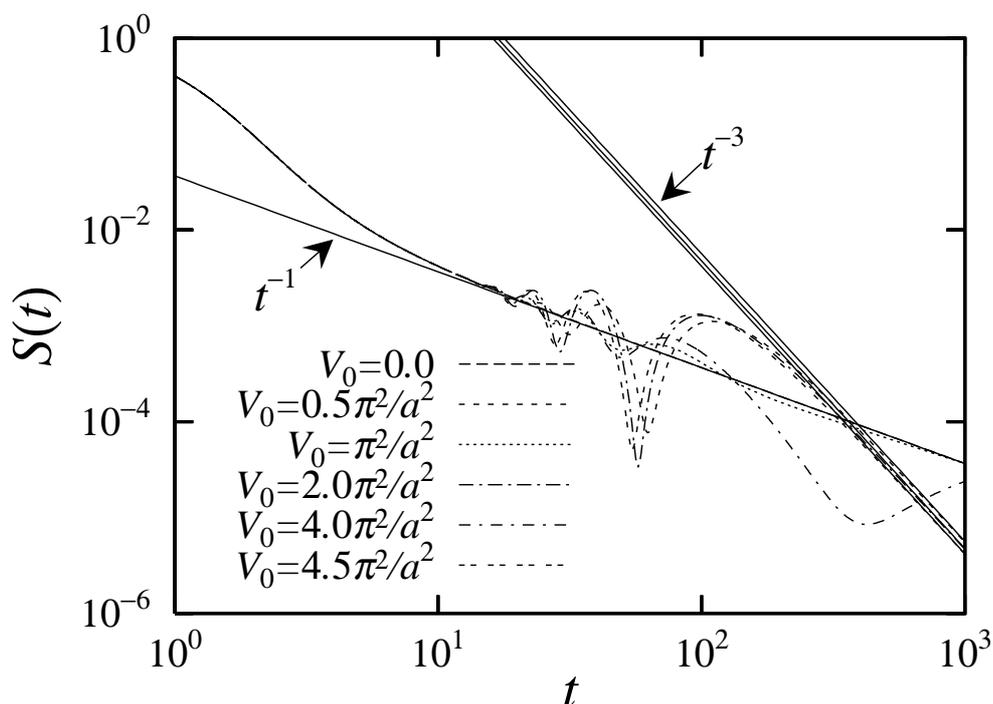


図 4.3: 波動関数 ϕ_0 を初期波束に選んだ場合の (4.70) の $S(t)$, および (4.54) と (4.57) から予言されるそれらの漸近線 (実線). ポテンシャルの深さ V_0 は, ゼロエネルギー共鳴のない三つの場合 ($V_0 = 0.5\pi^2/a^2, 2.0\pi^2/a^2, 4.5\pi^2/a^2$), ゼロエネルギー共鳴がある二つの場合 ($V_0 = 1.0\pi^2/a^2, 4.0\pi^2/a^2$), そして自由な場合 ($V_0 = 0.0$) を選んだ. $t = 10^1$ 以前の時間領域では, $S(t)$ はポテンシャルの深さによる違いを全く示さず, 全て重なっている. ゼロエネルギー共鳴がない場合, $t = 10^2$ 以後の領域で, $S(t)$ と漸近線 (t^{-3} に比例する実線) は良く一致している. ゼロエネルギー共鳴がある $V_0 = \pi^2/a^2$ の場合も, $t = 10^2$ 以後の領域で, $S(t)$ と漸近線 (t^{-1} に比例する実線) の一致が見られる. しかし, $V_0 = 4.0\pi^2/a^2$ のゼロエネルギー共鳴の場合, ここで見ている時間領域での一致は見られない. ここでは ϕ_0 のパラメータを $a_0 = 2.0$, $k_0 = 1.0$, $d = -20.0$, ポテンシャルの幅を $a = 2.0$ に選んでいる.

動を行い決してゼロには収束しないことに注意すべきである. したがって, 十分時間が経てば, いつかは第 1 項が $S(t)$ の支配的な項になるだろう. しかし, 初期波束をポテンシャルの十分遠方におけば, この重なりは十分小さくできる. このとき漸近公式は, 長時間領域におけるある一定期間において, (4.70) の $S(t)$ を良く近似すると考えられる. そこで, 我々は (4.70) の $S(t)$ と, 漸近公式 (4.54), (4.57), 並びに (4.69) を数値的に比較し考察した.

図 4.3 では, 波束 $\widehat{\phi}_0(k)$ (Gauss 波束) を初期波束に選んだ場合での, (4.70) の $S(t)$ と, (4.54) と (4.57) から予言される漸近線 (実線) が示されている. ここでは初期波束の各パラメータを $a_0 = 2.0$, $k_0 = 1.0$, $d = -20.0$ に選んでいる. また, ポテンシャルの深さ V_0 の値を五つ選び, それぞれ $0.5\pi^2/a^2$, π^2/a^2 , $2.0\pi^2/a^2$, $4.0\pi^2/a^2$, $4.5\pi^2/a^2$ とした. $V_0 = \pi^2/a^2, 4.0\pi^2/a^2$ のときがゼロエネルギー共鳴に対応する. またポテンシャルの幅は $a = 2.0$ である. さらに比較のため, $V_0 = 0.0$ の自由な場合も示した. 図 4.3 において, $t = 10^1$ 以前の時間領域では, $S(t)$ は V_0 の値による違いを示さず, 全て重なって見える. ま

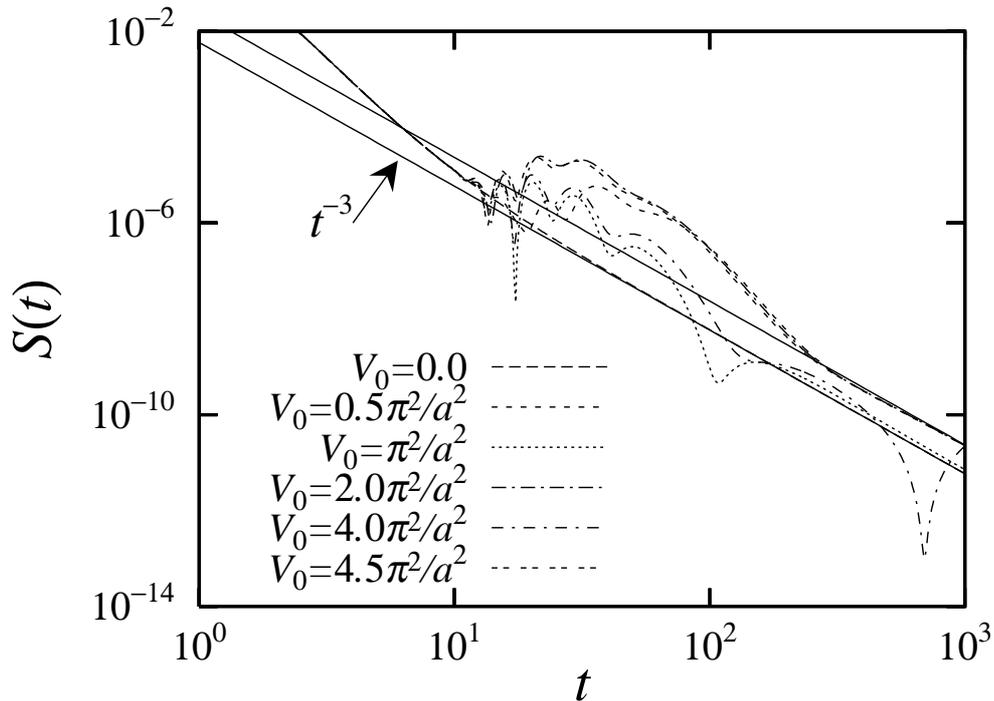


図 4.4: 波動関数 ϕ_1 を初期波束に選んだ場合の (4.70) の $S(t)$, および (4.54) と (4.69) から予言されるそれらの漸近線 (実線). ポテンシャルの深さ V_0 は, ゼロエネルギー共鳴のない三つの場合 ($V_0 = 0.5\pi^2/a^2, 2.0\pi^2/a^2, 4.5\pi^2/a^2$), ゼロエネルギー共鳴がある二つの場合 ($V_0 = 1.0\pi^2/a^2, 4.0\pi^2/a^2$), そして自由な場合 ($V_0 = 0.0$) を選んだ. $t = 10^1$ 以前の時間領域では, $S(t)$ はポテンシャルの深さによる違いを示さず, 全て重なっている. ゼロエネルギー共鳴がない場合, $t = 10^2$ 以後の領域で, $S(t)$ と漸近線 (4.54) (t^{-3} に比例する上側の実線) は良く一致している. ゼロエネルギー共鳴がある $V_0 = \pi^2/a^2$ の場合も, $t = 10^2$ 以後の領域で, $S(t)$ と漸近線 (4.57) (t^{-3} に比例する下側の実線) の一致が見られる. しかし, $V_0 = 4.0\pi^2/a^2$ のゼロエネルギー共鳴の場合, ここで見ている時間領域での一致は見られない. ここで用いた各パラメータの値は図 4.3 におけるものと同じである.

た, $t = 10^1$ から $t = 10^2$ までの領域では $S(t)$ は激しく振動している. この振動も波束がポテンシャルの影響を受けて散乱された事によるものと考えられる. 次に, 図の $t = 10^2$ 以後の時間領域に注目しよう. ゼロエネルギー共鳴が起きない場合, $S(t)$ と漸近線 (4.54) (t^{-3} に比例する実線) は良く一致している. 一方, ゼロエネルギー共鳴がある場合, $S(t)$ はこれらと異なった振る舞いをしている. 特に $V_0 = \pi^2/a^2$ の場合では, $S(t)$ は漸近線 (4.57) (t^{-1} に比例する実線) と一致していることが分かる. しかし, $V_0 = 4.0\pi^2/a^2$ の場合では, 図における時間領域での一致は見られない. また, $V_0 = 0.0$ の自由な場合の $S(t)$ の漸近線は (3.45) から予言できる. それはゼロエネルギー共鳴での漸近線 (4.57) と全く同じである. $t = 10^2$ 以後の領域では, 自由な場合の $S(t)$ は漸近線 (4.57) と全く重なってしまい区別ができない.

図 4.4 では, 波束 $\widehat{\phi}_1(k)$ を初期波束に選んだ場合での, 生存確率 $S(t)$ (4.70) と, (4.54) と (4.69) から予言される漸近線が示されている. 初期波束のパラメータの値は図 4.3 で用

いたものと同じである。また、ポテンシャルの深さ V_0 についても図 4.3 と同じ $0.5\pi^2/a^2$, π^2/a^2 , $2.0\pi^2/a^2$, $4.0\pi^2/a^2$, $4.5\pi^2/a^2$ の五つを選んだ。 V_0 が π^2/a^2 と $4.0\pi^2/a^2$ のときがゼロエネルギー共鳴に対応する。またポテンシャルの幅は $a = 2.0$ である。さらに、比較のため $V_0 = 0.0$ の自由な場合も示した。図 4.4 において、 $t = 10^1$ 以前の時間領域では、 $S(t)$ は V_0 の値による違いを全く示さず、全て重なってしまっている。また、 $t = 10^1$ から $t = 10^2$ までの時間領域では $S(t)$ は激しく振動している。この振動も波束がポテンシャルの影響を受けて散乱された事によるものと思われる。次に、図における、 $t = 10^2$ 以後の領域に注目しよう。ゼロエネルギー共鳴が起きない場合、 $S(t)$ と漸近線 (4.54) (t^{-3} に比例する上側の実線) が良く一致していることが分かる。この場合の漸近線も V_0 や a には依存しないことに注意せよ。実際、 $\hat{\psi}(0) = \hat{\phi}_1(0) = 0$ を (4.54) に代入すれば、

$$S(t) \sim \frac{\Gamma(3/2)^2}{t^3} \left| \hat{\phi}_1^{(1)}(0) \right|^2 \quad (4.71)$$

となる。実はこの漸近形は (4.42) と全く同じである。一方、ゼロエネルギー共鳴がある場合、 $S(t)$ はこれらと異なった振る舞いをしている。特に $V_0 = \pi^2/a^2$ の場合では、 $S(t)$ と漸近線 (4.69) (t^{-3} に比例する下側の実線) が一致していることが分かる。一方、 $V_0 = 4.0\pi^2/a^2$ の場合では、図における時間領域で一致は見られない。また、 $V_0 = 0.0$ の自由な場合の $S(t)$ の漸近線は (3.45) から予言できる。それはゼロエネルギー共鳴がある場合での漸近線 (4.69) と全く同じであり、ゼロエネルギー共鳴がない場合の漸近線 (4.71) の $1/4$ 倍でもある。

第5章

結論

本研究では二つのテーマを扱ってきた。一つは第2章で取り上げた時間演算子の公理的定式化に関する研究である。もう一つは第3章で述べた1次元自由波束が示す長時間領域でのベキ減衰とその初期状態依存性に関する研究である。特に後者に関してはポテンシャル系への拡張を第4章で行った。以下ではこれらの研究に関する成果と今後の課題を述べる。

第2章での目的の一つは、公理的立場から時間演算子を扱い、その諸性質を明らかにする事であった。そこで、まず正準交換関係の一種である弱 Weyl 関係式を導入した。また、Aharonov-Bohm 時間演算子 T_0 が $L^2(\mathbb{R})$ 上の対称演算子として定式化できる事を述べた。この事実は、量子情報理論における POVM の意味で、Aharonov-Bohm 時間演算子が扱える事を意味しており興味深いと言える。続いて、その対称拡大 \widetilde{T}_0 が H_0 と弱 Weyl 関係式を満たす事を示した。これを根拠に、我々はさらに弱 Weyl 関係式を満たす T と H のスペクトルや不確定性関係に関する諸性質を明らかにした。特に、 T と H が弱 Weyl 関係式を満たす状況では、 H は絶対連続である事を定理 2.8 で示した。この定理は、ある量子系において、ハミルトニアン H と弱 Weyl 関係式を満たす時間演算子 T が存在すれば、その系は散乱状態だけからなる事を述べている。また、弱 Weyl 関係式と幾つかの条件の下で、 T と H の不確定性関係においては最小不確定性状態が存在しない事を証明した。この結果は、Wigner [47] や Baute 等 [48] の Aharonov-Bohm 時間演算子に関する結果の精密化と言えるだろう。さらに、 T_0 と H_0 を波動演算子でユニタリー変換することで、(短距離型)ポテンシャル系にも時間演算子を構成できる事を指摘した。この構成方法は簡単なものだが、様々なポテンシャル系で時間演算子が定義できる事実は驚きと言える。本研究では構成方法のみを述べてきたが、近年この方法により構成された時間演算子の具体例の解析もなされている [65, 66]。また、本研究では離散スペクトルを持つハミルトニアンと正準交換関係を満たす時間演算子を扱わなかったが、近年そのような時間演算子の具体的な構成方法も明らかにされている [67]。特にコンパクトかつ自己共役な時間演算子が構成できるという興味深い結果が得られている。

我々のもう一つの目的は、時間演算子と量子ダイナミクスとの関連を明らかにし、それ

を基に時間演算子の物理的意味の理解を目指す事であった。この試みにおいて我々は、ハミルトニアン H と弱 Weyl 関係式を満たす時間演算子 T が、初期状態の生存確率と密接に関係付く事を見出した。それは興味深い不等式 (1.15)[または (2.26)] で表される。この不等式は、 H と弱 Weyl 関係式を満たす T が存在すれば、長時間において生存確率は t^{-2} またはそれより速いオーダーで減衰する事を主張する。また、時間演算子 T の状態 ψ における不確定性 (標準偏差) $(\Delta T)_\psi$ は、 ψ の生存確率がおよそ $1/2$ になる時刻の上限を与えることも確認した。生存確率の物理的意味を考慮すると、このことは $(\Delta T)_\psi$ だけ時間が経てば時間発展した後の状態と初期状態とが充分区別できることを表している。我々は、 T から計算される時間の不確定性の性質をこのような意味において明らかにできたと言えるだろう。一方、不等式 (1.15) は、関係式 (1.16) を經由することでさらに別の問題を提起した。それは、初期波束のゼロ運動量付近の振る舞いと波束の長時間での振る舞いととの定量的関係の解明という問題であった。

そこで第3章では、1次元自由波束とそれに関連した物理量 (生存確率や非逃避確率など) の長時間における振る舞いが、初期波束のゼロ運動量近傍での振る舞いとどのように関係しているかを考察した。この問題を扱うために、我々はまず長時間領域での波束の漸近展開を試みた。ここでは漸近展開の二つの導出方法が述べられた。一つは素朴な導出方法に基づいており、その意味ではより実践的であるとも言える。もう一つの導出方法は数学的に厳密な手立てに基づいている。二つの方法による結果は完全に一致しており、この意味で後者は前者を保証している。我々はこの漸近展開式を用いて、初期波束のゼロ運動量近傍での振る舞いが波束のベキ減衰のベキの値を決定している事を定量的に確認した。また、実は波束の減衰の速さは空間の各点に依存する事、さらに生存確率と非逃避確率とが互いに異なるベキ減衰を示し得る事を明らかにした。生存確率と非逃避確率の物理的意味は似かよっているにも関わらず、このような異なる振る舞いを示す点は興味深い。これらの研究成果を通して、我々は時間発展に関して量子力学に内在する新たな構造を垣間見たのかもしれない。なお、この漸近展開式が必ずしも任意の初期波束に対して有効ではない事には注意しなければならない。Gauss 波束のような急減少関数には十分有効だが、文献 [14, 15, 16, 17] で扱われた初期波束は適用範囲外である。我々の結果をこれらの初期波束にも適用できるように拡張することは今後の課題である。

さらに、第4章では、1次元自由粒子系での議論を1次元 (短距離型) ポテンシャル系へと拡張した。そこでの我々の方針は1次元自由粒子系での場合と同じである。まずポテンシャル系での波束の漸近公式を求めた。ポテンシャル系での波束の漸近展開に関しては、既に幾つかの方法が知られている [10, 55, 56, 57, 58]。しかし、ここでは新たに別の方法を開発した。この方法ではハミルトニアンの定常解が解析的に完全に求まっていれば漸近展開できる仕組みとなっている。これ自身も新しい成果の一つである。この導出は、Fourier

積分の漸近展開の理論に基づき、特に被積分関数が特異性を持つ場合の結果を応用して達成された。この漸近公式は急減少関数のような性質の良い初期波束に対して適用可能である。ここでの漸近展開は前章までのように数学的に厳密なものではなく、その収束性は明らかではない。特にハミルトニアン H の定常解のエネルギー依存性が十分解析的であることが要求される。将来的には、これら全ての仮定がポテンシャルのクラスと初期状態のクラスを規定する形で記述される事が望まれる。我々はここで導出した漸近公式の検証も兼ねて、それを箱型障壁ポテンシャル系と井戸型ポテンシャル系に応用した。そこでは、初期波束のゼロ運動量付近の振る舞いと長時間領域での波束のベキ的振る舞いととの関連を再び調べた。その結果、1次元自由粒子系で得た結果とは多少異なるが、確かに初期波束のゼロ運動量付近の振る舞いとベキ減衰のベキの値には関連性がある事を見出した。最後に井戸型ポテンシャル系ではゼロエネルギー共鳴が存在することを指摘した。我々は、ゼロエネルギー共鳴が存在する場合ではそれが存在しない場合に比べてベキ減衰が遅くなる事を示した。このゼロエネルギー共鳴とベキ減衰との関連については、既に多くの詳細な研究がなされている [55, 56, 57, 58]。しかし、井戸型ポテンシャル系といった基本的な系での具体的確認は今までなされていなかったように思われる。一方、このゼロエネルギー共鳴のベキ減衰への効果も、初期波束のゼロ運動量付近の振る舞いによっては打ち消されてしまう場合がある。これは今まで明らかにされていなかった事実であり、非常に興味深いと言えるだろう。

本研究では、量子論における“時間”に関する基礎的問題として二つの課題を扱ってきた。特に第一の課題では、時間演算子と生存確率の時間発展との関連を指摘したが、これは我々が提起した独自のものであり、時間演算子を理解する新しい試みとして期待されるものと思われる。また、文献 [67] の結果を用いて、離散スペクトルを持つ量子系に議論を拡張することも興味深い。第二の課題で扱った、初期波束のゼロ運動量付近の振る舞いと波束の長時間での振る舞いととの関連に関する研究は、量子系の長時間領域におけるベキ的減衰に関する新たな知見をもたらすことが期待される。また、初期波束(状態)の特性を考慮に入れたこれらの研究を不安定量子系などの現実的な系へ拡張することも考えられる。特に、長時間領域でのベキ減衰則が未だに実験的に観測されていない点から、初期状態の特性を生かしたベキ減衰則の実験的検証の可能性の探求といった方向性が重要と言える。

付録 A

$\|T_0\psi\|$ を有限にする状態 ψ の性質

この付録では初期波束 ψ を制限することで関係式 (1.16) を証明する [50]. まず, 初期波束 ψ は $L^{2,s}(\mathbf{R})$ ($s > 5/2$) に属するベクトルに限るものとする. このとき (3.49) での議論から, $\psi(x)$, $x\psi(x)$, $x^2\psi(x)$ 等は全て \mathbf{R} 上で絶対可積分である. また $\widehat{\psi}(k)$ は k について 2 回連続微分可能であることが保証される. したがって, 特に $k \rightarrow 0$ のとき,

$$\widehat{\psi}(k) = \widehat{\psi}(0) + k\widehat{\psi}^{(1)}(0) + O(k^2), \quad \widehat{\psi}^{(1)}(k) = \widehat{\psi}^{(1)}(0) + O(k). \quad (\text{A.1})$$

よって $k \rightarrow 0$ で,

$$(\widehat{T_0\psi})(k) = \frac{i}{4} \left(-\frac{\widehat{\psi}(0)}{k^2} + \frac{\widehat{\psi}^{(1)}(0)}{k} \right) + O(1). \quad (\text{A.2})$$

ここで T_0 (または \widetilde{T}_0) は Aharonov-Bohm 時間演算子である [(2.19) を参照]. さらに $\psi \in L^{2,s}(\mathbf{R}) \subset L^{2,1}(\mathbf{R})$ であるから, $\int_{\mathbf{R}} |x\psi(x)|^2 dx = \int_{\mathbf{R}_k} |\widehat{\psi}'(k)|^2 dk < \infty$ が成り立つ. したがって関数 $(\widehat{T_0\psi})(k)$ は, 運動量空間の原点近傍を除いた集合 $(-\infty, -\delta] \cup [\delta, \infty)$ 上で 2 乗可積分であることが保証される. ここで δ は任意の正数である.

さて, 初めに $\|T_0\psi\| < \infty$ (正確には $\psi \in \text{Dom}(T_0)$) と仮定しよう. この仮定は $(\widehat{T_0\psi})(k) \in L^2(\mathbf{R}_k)$ と同値である. すると L^2 -関数の持つ一般的な性質から関数 $(\widehat{T_0\psi})(k)$ は原点近傍の閉区間 $[-\delta, \delta]$ 上でも絶対可積分でなければならない. しかし, $\widehat{\psi}(0) = \widehat{\psi}^{(1)}(0) = 0$ でない限りこの結果は (A.2) に矛盾する. したがって $\widehat{\psi}(k) = O(k^2)$ が結論される. 次に $\widehat{\psi}(k) = O(k^2)$ と仮定しよう. すると (A.1) から $\widehat{\psi}(0) = \widehat{\psi}^{(1)}(0) = 0$ と分かる. この結果と (A.2) とから $(\widehat{T_0\psi})(k) \in L^2([-\delta, \delta])$ が導かれる. もともと関数 $(\widehat{T_0\psi})(k)$ は $(-\infty, -\delta] \cup [\delta, \infty)$ 上で 2 乗可積分であったから, 結局 $(\widehat{T_0\psi})(k)$ は $L^2(\mathbf{R}_k)$ に属することが分かる. これは $\|T_0\psi\| < \infty$ を意味する.

付録B

1次元自由粒子系の時間発展演算子の スペクトル密度による記述

この付録では時間発展演算子 e^{-itH_0} の漸近展開式を求める際に基本となる公式 (3.22) を証明する. この式は e^{-itH_0} をスペクトル密度 $E'(\lambda)$ の Fourier 変換で表す公式である.

我々はまず 1次元自由粒子系の時間発展演算子の積分表示 (3.2) に着目する. この表示は初期波束 $\psi(x)$ が $L^1(\mathbf{R}) \cap L^2(\mathbf{R})$ に属していれば各点 x で成立する [22, 23]. さらに, $s > 1/2$ のとき $L^{2,s}(\mathbf{R}) \subset L^1(\mathbf{R})$ であることに注意すると, e^{-itH_0} は $B(s, -s')$ に属す積分演算子として見なせる. ただし $s, s' > 1/2$ とする. そこで, 以下では $s, s' > 1/2$ かつ $\psi \in L^{2,s}(\mathbf{R})$ と仮定しよう. このとき次の等式が示せる.

$$\left(\int_r^R E'(\lambda) e^{-it\lambda} d\lambda \psi \right) (x) = \int_{\mathbf{R}} dy \left[\int_r^R \frac{\cos(\lambda^{1/2}|x-y|) e^{-it\lambda}}{2\pi\lambda^{1/2}} d\lambda \right] \psi(y), \quad \text{a.e. } x \in \mathbf{R}.$$

ここで r と R は正数である. このとき (3.2) から

$$\begin{aligned} & \left\| \int_r^R E'(\lambda) e^{-it\lambda} d\lambda \psi - e^{-itH_0} \psi \right\|_{-s'}^2 \|\psi\|_s^{-2} \\ & \leq \int_{\mathbf{R}} \int_{\mathbf{R}} \left| \int_r^R \frac{\cos(\lambda^{1/2}|x-y|) e^{-it\lambda}}{2\pi\lambda^{1/2}} d\lambda - \frac{e^{-|x-y|^2/4it}}{(4\pi it)^{1/2}} \right|^2 \frac{dx dy}{(1+x^2)^{s'}(1+y^2)^s} \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

が導ける. ここで次の評価が得られることに注目する.

$$\sup_{x \in \mathbf{R}, R > 0} \left| \int_0^R \frac{\cos(\lambda^{1/2}|x|) e^{-it\lambda}}{2\pi\lambda^{1/2}} d\lambda \right| < \infty. \quad (\text{B.2})$$

これを示すために, 以下の議論では $t > 0$ を仮定するが $t < 0$ の場合でも同様に行える.

(B.2) の積分を次のように変形する.

$$\begin{aligned} \left| \int_0^R \frac{\cos(\lambda^{1/2}|x|) e^{-it\lambda}}{2\pi\lambda^{1/2}} d\lambda \right| &= (2\pi)^{-1} \left| \int_{-R^{1/2}}^{R^{1/2}} e^{-it(\xi+a)^2} d\xi \right| \\ &= (2\pi)^{-1} \left| \left[\int_0^{R^{1/2}+a} e^{-it\xi^2} d\xi + \int_{-R^{1/2}+a}^0 e^{-it\xi^2} d\xi \right] \right|. \end{aligned}$$

ここで $a = |x|/2t$ とした. また最後の行にある二つの積分は, 複素平面の第 4 象限に積分経路を持つ複素積分でもって次のように見積もれる.

$$\begin{aligned} \left| \int_0^{|R^{1/2} \pm a|} e^{-it\xi^2} d\xi \right| &\leq \frac{\pi(1 - e^{-t|R^{1/2} \pm a|^2})}{4t|R^{1/2} \pm a|} + \int_0^{|R^{1/2} \pm a|} e^{-tr^2} dr \\ &\leq \frac{\pi}{4t} \sup_{x>0} \frac{1 - e^{-tx^2}}{x} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{t}} < \infty. \end{aligned}$$

この結果から (B.2) が導ける. また直接的に次式が示せる.

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \lim_{r \downarrow 0} \int_r^R \frac{\cos(\lambda^{1/2}|x-y|)e^{-it\lambda}}{2\pi\lambda^{1/2}} d\lambda = \frac{e^{-|x-y|^2/4it}}{(4\pi it)^{1/2}}. \quad (\text{B.3})$$

したがって, 以上の (B.1), (B.2), および (B.3) と Lebesgue の優収束定理とから, 次の結果が得られる.

$$\sup_{\psi \in L^{2,s}(\mathbf{R}), \psi \neq 0} \left\| e^{-itH_0} \psi - \int_r^R E'(\lambda) e^{-it\lambda} d\lambda \psi \right\|_{-s'}^2 \|\psi\|_s^{-2} \rightarrow 0 \quad (r \downarrow 0, R \rightarrow \infty).$$

これは公式 (3.22) が成り立つことを意味する.

謝辞

本研究を進めるにあたり, ご指導いただいた大場一郎教授, 中里弘道教授に感謝いたします。また, 山中由也博士との有益な議論に感謝いたします。大谷光春教授にはお忙しい中, 本論文の査読をしていただきましてありがとうございました。北海道大学新井朝雄教授には時間演算子の研究に関して貴重なご意見をいただきましてありがとうございました。

本研究は, 研究室の助手の方々や同僚の方々との何気ない会話の中で行われた様々な議論に多くの刺激を受けています。研究室の皆様に感謝いたします。

参考文献

- [1] *Time in Quantum Mechanics*, edited by J. G. Muga, R. Sala Mayato, and I. L. Egusquiza (Springer-Verlag, Berlin, 2001), Chap. 3.
- [2] W. Pauli, *Die Allgemeinen Prinzipien der Wellenmechanik*, edited by S. Flügge, Encyclopedia of Physics (Springer-Verlag, Berlin, 1958), Vol. V, pt. 1, pp. 1–168, p. 60 [川口教男, 堀節子訳: W. パウリ, 「量子力学の一般原理」 (講談社, 1975)].
- [3] J. von Neumann, *Die Mathematical Grundlagen Der Quantenmechanik* (Springer-Verlag, Berlin, 1932).
- [4] 新井朝雄, 「Hilbert 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).
- [5] L. A. Khal'fin, Zh. Eksp. Theor. Fiz. **33**, 1371 (1957) [Sov. Phys. JETP **6**, 1053 (1958)].
- [6] L. Fonda, G. C. Ghirardi, and A. Rimini, Rep. Prog. Phys. **41**, 587 (1977).
- [7] H. Nakazato, M. Namiki, and S. Pascazio, Int. J. Mod. Phys. B **10**, 247 (1996).
- [8] G. García-Calderón, J. L. Mateos, and M. Moshinsky, Phys. Rev. Lett. **74**, 337 (1995); Phys. Rev. Lett. **80**, 4354 (1998).
- [9] J. G. Muga, V. Delgado, and R. F. Snider, Phys. Rev. B **52**, 16 381 (1995).
- [10] W. van Dijk and Y. Nogami, Phys. Rev. Lett **83**, 2867 (1999); Phys. Rev. C **65**, 024608 (2002).
- [11] P. T. Greenland, *Nature* (London) **335**, 298 (1988).
- [12] E. B. Norman, S. B. Gazes, S. G. Crane, and D. A. Bennett, Phys. Rev. Lett. **60**, 2246 (1988).
- [13] C. A. Nicolaides and Th. Mercouris, J. Phys. B **29**, 1151 (1996).

- [14] K. Unnikrishnan, Am. J. Phys. **65**, 526 (1997); **66**, 632 (1998).
- [15] F. Lillo and R. N. Mantegna, Phys. Rev. Lett. **84**, 1061 (2000); **84**, 4516 (2000).
- [16] R. S. Mendes and C. Anteneodo, cond-mat/0003366 (2000).
- [17] J. A. Damborenea, I. L. Egusquiza, and J. G. Muga, Am. J. Phys. **70**, 738 (2002).
- [18] D. H. Kobe and V. C. Aguilera-Navarro, Phys. Rev. A **50**, 933 (1994).
- [19] Y. Aharonov and D. Bohm, Phys. Rev. **122**, 1649 (1961).
- [20] E. Galapon, Proc. R. Soc. London A **458**, 451 (2002).
- [21] N. I. Akhiezer and I. M. Glazman, *Theory of Linear Operator in Hilbert Space* (Dover, New York, 1963).
- [22] M. Reed and B. Simon, *Methods of Modern Mathematical Physics, Vol.II: Fourier Analysis, Self-Adjointness* (Academic Press, New York, 1975), Chap. IX, Sec. 7.
- [23] 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).
- [24] M. Reed and B. Simon, *Methods of Modern Mathematical Physics, Vol.III: Scattering Theory* (Academic Press, New York, 1979).
- [25] T. Kato, *Perturbation theory for linear operators* (Springer-Verlag, Berlin, 1966).
- [26] 藤田宏, 黒田成俊, 伊藤清三, 「関数解析 I, II, III」(岩波講座 基礎数学 解析学 (I) iv, 岩波書店, 1978).
- [27] M. Miyamoto, J. Math. Phys. **42**, 1038 (2001).
- [28] C. R. Putnam, *Commutation Properties of Hilbert Space Operators and Related Topics* (Springer-Verlag, Berlin, 1967).
- [29] T. Kato, Studia Math. T. **XXXI**, 535 (1968).
- [30] R. Lavine, Proc. Am. Math. Soc. **22**, 55 (1969).
- [31] R. Lavine, Comm. Math. Phys. **20**, 301 (1971).
- [32] 文献 [24], Chap. XIII, Secs. 6 and 7.

- [33] A. S. Holevo, *Probabilistic and Statistical Aspects of Quantum Theory* (North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1982), Chap. II.
- [34] I. L. Egusquiza and J. G. Muga, *Phys. Rev. A* **61**, 012104 (1999).
- [35] K. Schmüdgen, *J. Funct. Anal.* **50**, 8 (1983).
- [36] M. Reed and B. Simon, *Methods of Modern Mathematical Physics, Vol.I: Functional Analysis* (Academic Press, New York, 1972), Chap. VIII, Sec. 5.
- [37] 新井朝雄, 「数理科学」 No. 462, 12 (2001).
- [38] 伊藤清三, 「ルベーク積分入門」 (数学業書 4, 裳華房, 1963).
- [39] 文献 [21] Chap. 4, Sec. 46, または文献 [26] 10.1 節を見よ.
- [40] 文献 [36], Chap. VII, Sec. 2.
- [41] 文献 [24], Chap. XI, Sec. 3, Lemma 2.
- [42] K. Bhattacharyya, *J. Phys. A* **16**, 2993 (1983).
- [43] Eric A. Gislason and Nora H. Sabelli, *Phys. Rev. A* **31**, 2078 (1985).
- [44] 文献 [24], Theorem XIII. 19.
- [45] 文献 [28], Chap. II, Sec. 2.14.
- [46] 文献 [28], Theorem 2.2.4.
- [47] E. P. Wigner, in *Aspects of Quantum Theory*, edited by A. Salam and E. P. Wigner (Cambridge University Press, London 1972), p. 237.
- [48] A. D. Baute, R. Sala Mayato, J. P. Palao, J. G. Muga, and I. L. Egusquiza, *Phys. Rev. A* **61**, 022118 (2000).
- [49] 文献 [28], Theorem 5.16.2.
- [50] M. Miyamoto, *J. Phys. A* **35**, 7159 (2002).
- [51] M. Miyamoto, [quant-ph/0207067](https://arxiv.org/abs/quant-ph/0207067) (2002).
- [52] F. W. J. Olver, *Asymptotics and Special Functions* (Academic Press, New York, 1974).

- [53] E. T. Copson, *Asymptotic Expansions* (Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1965), Chap. 3, Secs. 10 and 11.
- [54] 江沢 洋, 「漸近解析」(岩波講座 応用数学 [方法 5], 岩波書店, 1995).
- [55] J. Rauch, *Comm. Math. Phys.* **61**, 149 (1978).
- [56] A. Jensen and T. Kato, *Duke Math. J.* **46**, 583 (1979).
- [57] M. Murata, *J. Funct. Anal.* **49**, 10 (1982).
- [58] W. O. Amrein, [quant-ph/0104049](#) (2001).
- [59] 文献 [1], Chap. 2.
- [60] M. Miyamoto, in preparation.
- [61] B. Simon, *J. Math. Phys.* **41**, 3523 (2000), Sec. V.
- [62] 文献 [24], Chap. XIII, Sec. 8 and Theorem XIII.33.
- [63] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series, and Products*, Sixth Edition (Academic Press, San Diego, 2000), p. 23.
- [64] L. I. Schiff, *Quantum Mechanics*, 3/e (McGraw-Hill, Singapore, 1968).
- [65] J. León, J. Julve, P. Pitanga, and F. J. de Urrés, *Phys. Rev. A* **61**, 062101 (2000).
- [66] A. D. Baute, I. L. Egusquiza, and J. G. Muga, *Phys. Rev. A* **64**, 012501 (2001).
- [67] E. Galapon, *Proc. R. Soc. London A* **487**, 2671 (2002).

研究業績

| | |
|--------------|--|
| ○ 論文 | Manabu Miyamoto, The various power decays of the survival probability at long times for a free quantum particle, <i>Journal of Physics A: Mathematical and General</i> , Vol. 35, No. 33 (August 2002) 7159–7171. |
| ○ 論文 | Manabu Miyamoto, A generalized Weyl relation approach to the time operator and its connection to the survival probability, <i>Journal of Mathematical Physics</i> , Vol. 42, No. 3 (March 2001) 1038–1052. |
| 講演 (国際会議) | Manabu Miyamoto, The various power decays of the survival probability at long times for a free quantum particle, <i>Waseda International Symposium on Fundamental Physics –New Perspectives in Quantum Physics–</i> , Waseda University, Japan, November 2002. |
| 講演 (学会) | 宮本学, 自由粒子系の時間発展における初期波動関数依存性, 日本物理学会, 第57回年次大会 (立命館大学), 2002年3月. |
| 講演 (学会) | 宮本学, 摂動による自由粒子波束の自己相関関数の減衰形の変形について, 日本物理学会, 2001年秋季大会 (沖縄国際大学・徳島文理大学), 2001年9月. |
| 講演 (学会) | 宮本学, 時間演算子に関連する波動関数とその時間発展の摂動に対する安定性, 日本物理学会, 第56回年次大会 (中央大学), 2001年3月. |
| 講演 (学会) | 宮本学, Survival Probability との関連を中心とした量子系における時間演算子の一般的議論, 日本物理学会, 2000年春の分科会 (近畿大学・関西大学), 2000年3月. |
| 講演 (学会) | 宮本学, 量子系における対称作用素としての時間演算子の数学的解析, 日本物理学会, 1999年秋の分科会 (島根大学・岩手大学), 1999年9月. |
| 講演 (研究会) | 宮本学, ポテンシャル系における波束のベキ減衰則への初期波束の影響, 第11回「凝縮系物理 (非平衡系の統計物理)」シンポジウム (Symposium on Condensed Matter (Non-Equilibrium Statistical) Physics) (筑波大学), 2002年12月. |

| | |
|-------------|---|
| 講演 (研究会) | 宮本学, Long time behavior of the autocorrelation functions and its relation to the Aharonov-Bohm time operator, 第10回「非平衡系の統計物理」シンポジウム (Symposium on Non-Equilibrium Statistical Physics) (筑波大学), 2002年1月. |
| 講演 (研究会) | 宮本学, 量子系の時間演算子と量子ダイナミクスとの関連の可能性について, 研究集会「量子情報とその周辺分野の解析的研究」(京都大学数理解析研究所), 2001年1月. 京都大学数理解析研究所講究録 (RIMS Report, Kyoto), No. 1266, (May 2002) 31-45. |
| 講演 (研究会) | 中沢恵太・宮本学, 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, 第9回「非平衡系の統計物理」シンポジウム (Symposium on Non-Equilibrium Statistical Physics) (筑波大学), 2001年1月. |
| 講演 (研究会) | 宮本学, 量子系における時間演算子の数学的解析, 第8回「非平衡系の統計物理」シンポジウム (Symposium on Non-Equilibrium Statistical Physics) (筑波大学), 1999年11月. 物性研究 (Bussei Kenkyu, Kyoto), Vol. 75, No. 5, (February 2001) 1080-1095. |