量子力学の数学とは何か？

山崎 雅人

KAVLI IPMU

THE UNIVERSITY OF TOKYO

東北大学数学専攻談話会

2024年4月22日

- このスライドは私のホームページで公開予定です
- 関連した『数理科学』2024年1月号の記事もあります

特集／重力と量子力学

量子力学の数学とは何か

山崎雅人

1. 量子力学の数学とは？*1)

まずは問いからはじめよう：「量子力学の数学」とは何だろうか？ 現在我々が教わる量子力学の基本的な体系は，量子力学の草創期に活躍した巨人たち（ハイゼンベルグ，ボルン，パウリ，シュレーディンガー，ディラックなど）により 100 年ほど前に一旦完成され

者の間では関数解析的な問題意識が共有されていないことも多いと思う．例えば，関数解析では作用素は定義域をきちんと定めて議論しないといけないし*5)，非有界作用素の取り扱いはかなり慎重でなければならないはずであるが，物理の本ではこの辺りがいい加減なことが多い．これは物理学者の数学が厳密でないというよくある話になっているかもしれないが，逆にいえ

https://member.ipmu.jp/masahito.yamazaki/files/2024/
2024_Jan_science_what_quantum_mathematics.pdf

動機

「場の量子論の数理」
について講義する

「場の量子論の数理」
について講義する

しかし，そもそも
「量子力学の数理」は？

量子力学は完成された理論，教科書も沢山

疑問：そもそも，量子力学はなぜ
現在の形を取っているのか？

問いの例：

- 量子力学は微小変形できるか？

(cf. 古典力学 → 量子力学,　修正重力理論)

問いの例：

- 量子力学を修正する量子重力の定式化は存在するか？

$$\underbrace{R_{\mu\nu}}_{\text{古典}} = \underbrace{\langle T_{\mu\nu} \rangle}_{\text{量子の期待値}}$$

[cf. Page - Geilker ('81)]

非線型量子力学？ [Weinberg ('89), …]

（ただし，以下では線型性は仮定する）

- 昔から論争の種．ここでは哲学的な議論は避けたい

- 以下では量子力学の数学的構造に着目して議論
  - 数学的な一般化により量子力学も一般化・変形？
  - ある公理系から出発することにより，量子力学の一意性を示せるか？（公理の選択には議論が必要，ただしその後の論理は誰でも合意できるはず）

- 物理学者の「知らない」こともいろいろある

- 私は専門家ではありません
- 文献では（程度の違いはあれ）知られていることばかりです

ヒルベルト空間

ヒルベルト空間 $\mathcal{H}$:

"内積 $\langle -, - \rangle$ を持つベクトル空間で、
ノルム $\|x\| := \sqrt{\langle x, x \rangle}$ について完備なもの"

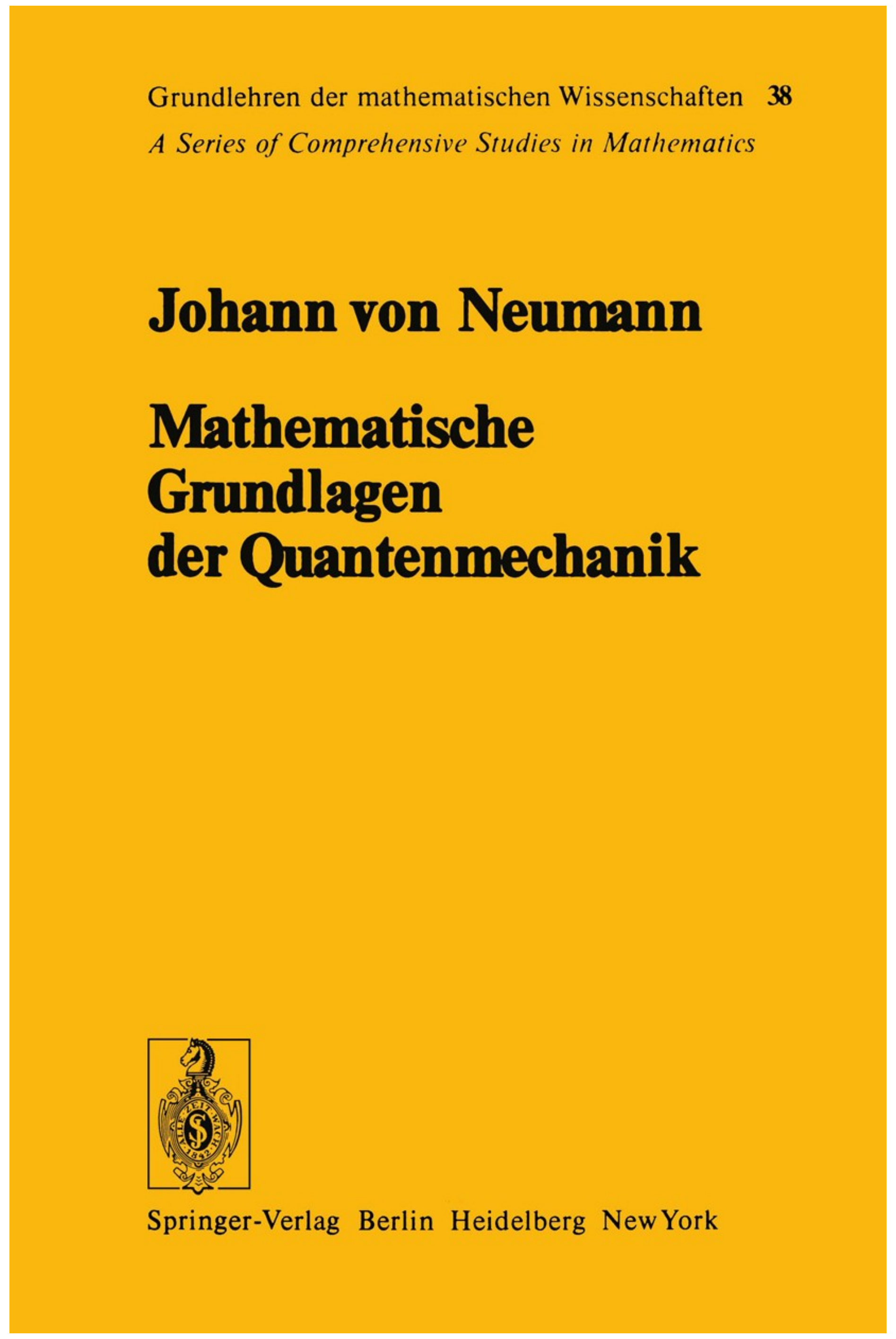
例: $L^2(\mathbb{R})$: 二乗可積分関数 $f(x)$ $(x \in \mathbb{R})$

$$\langle f, g \rangle := \int_{\mathbb{R}} \overline{f(x)}\, g(x)\, \underbrace{d\mu}_{\text{Lebesgue 測度}}$$

物理学者なら知っていることになっている？

「今日では、量子力学系に対する直観的な像を描くためにも、Hilbert空間はなくてはならぬ背景にさえなってしまった。それはNewton力学の背景である四次元空間にも比すべきものである。」

フォン・ノイマン
『量子力学の数学的基礎』('32)



フォン・ノイマンの当時の研究の目標の一つは，ヒルベルト空間における非有界作用素の理論を建設すること

"$A : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$"

有界作用素

$$\|A\| = \sup_{x \in \mathcal{H}} \frac{\|Ax\|}{\|x\|} < \infty$$

非有界作用素

扱いが難しい

$$A : \mathcal{D}(A) \to \mathcal{H}$$

$$\bigcap$$

$$\mathcal{H}$$

定義域がどこであるか
はとても重要

対称作用素 $\langle \underset{A^*}{\underbrace{A}} x, y \rangle = \langle x, Ay \rangle \quad (\forall x, y \in \underbrace{\mathcal{D}(A) \subseteq \mathcal{H}}_{\text{dense}})$

（※ 一般に $\mathcal{D}(A) \subsetneq \mathcal{D}(A^*)$）

自己共役作用素 対称かつ $\mathcal{D}(A) = \mathcal{D}(A^*)$

境界条件に注意が必要

※ 作用素の自己共役性を示すのは一般には簡単ではない.

例： $\hat{H} = -\dfrac{\hbar^2}{2m^2}\dfrac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad \text{in } L^2(\mathbb{R})$

ストーン & フォン・ノイマンの定理

大雑把な主張： $[\hat{p}, \hat{x}] = -i\hbar$

の既約な表現は標準的な表現にユニタリー同値

$\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}, \quad \hat{x} = x \quad \text{in} \quad L^2(\mathbb{R})$

証明のアイデア： 生成／消滅演算子 $a = \hat{x} + i\hat{p}, \quad a^\dagger = \hat{x} - i\hat{p}$

$a|\psi\rangle = 0$ から出発 $\{(a^\dagger)^n|\psi\rangle\}_{n=0,1,2,\ldots}$

ストーン & フォン・ノイマンの定理

正確な主張：有界作用素にして考える

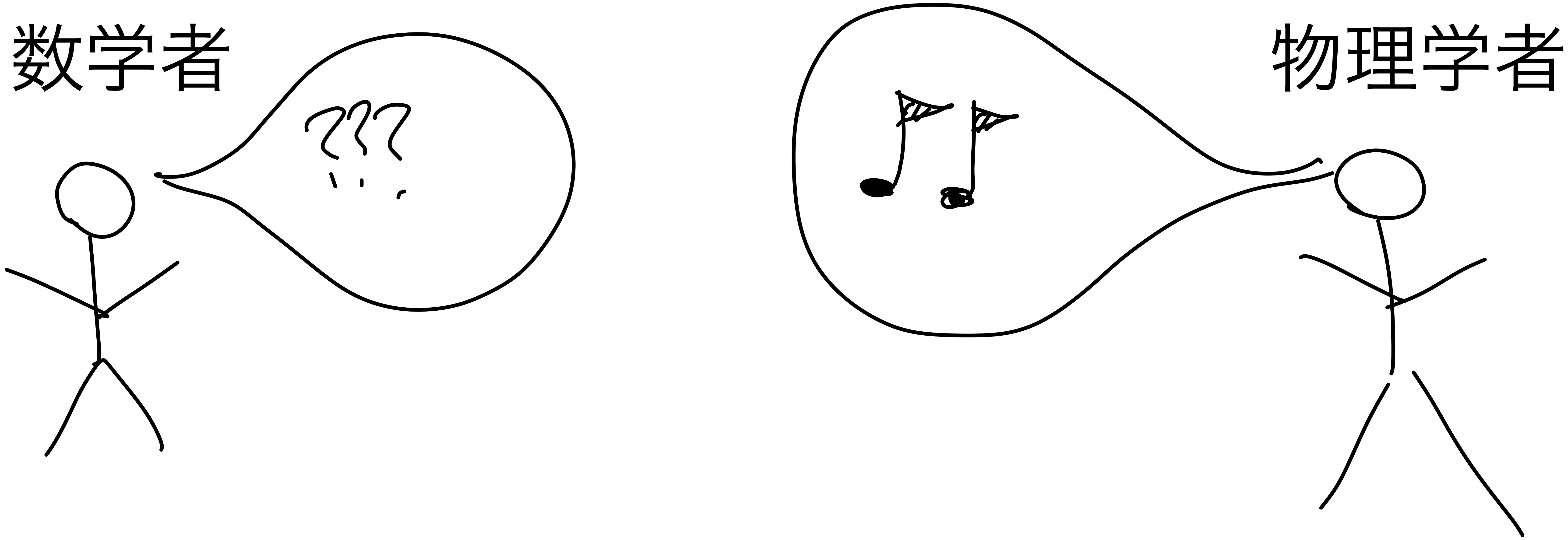
$$e^{is\hat{p}} e^{it\hat{x}} = e^{-ist\hbar} e^{it\hat{x}} e^{is\hat{p}}$$ (Weyl 代数)

(※ $[\hat{p}, \hat{x}] = -i\hbar$ のままだと反例あり)

ハイゼンベルクの行列力学とシュレーディンガーの波動力学の等価性を示す決定的な結果

面白いことに，物理の教科書のほとんど全ては完備化，作用素の非有界性…に関わる微妙さを無視している（ように見える）ことがあるが，ほとんどの場合「実用的に問題はない」

もちろん，最終的にはちゃんと考えると重要
（例えば教育的な説明としてquant-ph/0103153）



ヒルベルト空間論が量子力学の物理の
「本質」かどうかは自信がなくなってくる？？

cf. 最近の量子情報の発展のほとんどは有限サイズ行列に基づく
（無限次元空間であることの微妙さは忘れていい）

ヒルベルト空間論が量子力学の物理の
「本質」かどうかは自信がなくなってくる？？

cf. 最近の量子情報の発展のほとんどは有限サイズ行列に基づく
（無限次元空間であることの微妙さは忘れていい）

フォン・ノイマン ('35)

“I would like to make a confession which may seem immoral:
I do not believe absolutely in Hilbert space any more”

量子力学再考

以下はしばらく有限次元ヒルベルト空間の場合を考え，量子力学の数学的構造を考え直してみよう

量子力学のミニマルなデータ

観測量　A : Hilbert空間 $\mathcal{H}$ の Hermite operator

$\rightsquigarrow$ 固有値 $\{a_i\}_{i \in I}$

射影測定

P_i : 射影作用素

グリーソンの定理：

次元3以上のヒルベルト空間で射影演算子 P_i に対して与えられる加法的な測度 $\mu(P_i)$ は

$$\mu(P_i) = \mathrm{Tr}(\underbrace{\rho}_{\text{密度行列}} P_i) \qquad \text{（ボルン則）}$$

$$(\mathrm{Tr}\,\rho = 1,\quad \rho \geq 0)$$

そこでヒルベルト空間上の
エルミート演算子を考えよう

疑問：エルミート演算子の積はエルミートではない

$$A^\dagger = A, \quad B^\dagger = B$$

$$\rightsquigarrow (AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger = BA \neq AB$$

古典			量子		
observable		value	observable = Hermition operator		eigenvalue
A	$\to$	a	A	$\to$	a
B	$\to$	b	B	$\to$	b

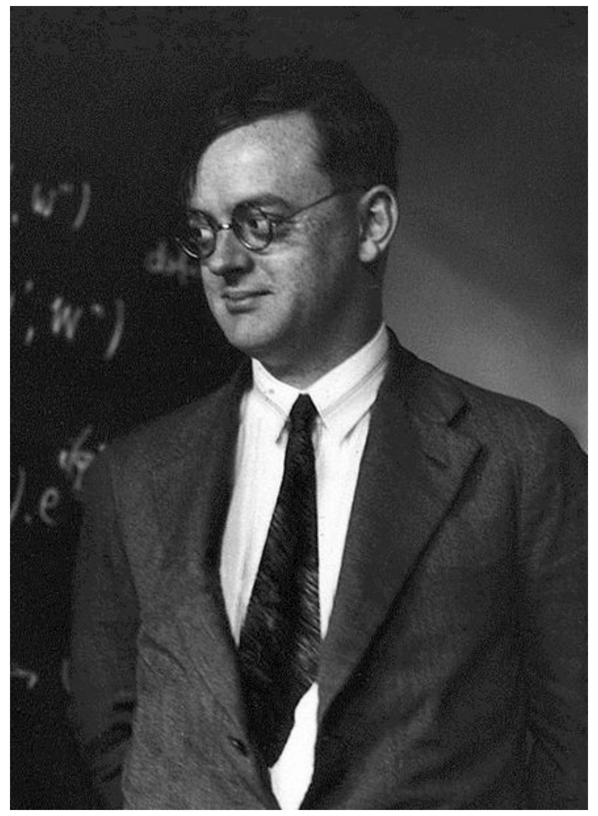
なら

AB	$\to$	ab	?? AB	$\to$	ab

一つの解決：「ワイル順序」を取れば良い

$$A \circ B \equiv (AB + BA)/2$$

$(\{A\}, \circ)$ ： ジョルダン代数



non-associative

$(A \circ B) \circ C \neq A \circ (B \circ C)$ in general

Jordan代数の性質

$\left(A \circ B = (A \cdot B + B \cdot A)/2 \right)$

(J1) $(A \circ B) \circ (A \circ A) = A \circ \left(B \circ (A \circ A) \right)$ (Jordan identity)

(J2) $A \circ B = B \circ A$ (commutative)

(J3) $\sum_{i=1}^{m} A_i \circ A_i = 0 \implies A_i = 0 \ (\forall i)$ (formally real)

(J1)-(J3): formally real Jordan algebra

分類

[Jordan - von Neumann - Wigner ('34)]

special Jordan algebras

$A \circ B = (A \cdot B + B \cdot A)/2$ ($\mathbb{R}$, $\mathbb{C}$, $\mathbb{H}$ 上の行列)

Clifford algebra $x^2 = \langle x, x \rangle$ in $\mathbb{R}^n$

exceptional Jordan algebra $\mathrm{Mat}_{3\times 3}(\mathbb{O})$

八元数

$\mathrm{Mat}_{3\times 3}(\mathbb{O})$ から「量子力学」を作れる

[Günaydin – Gürsey ('73), ⋯ see Townsend ('16) for review]

$$\dot{\rho} = -i[H, \rho] \rightsquigarrow \dot{\rho} = \underbrace{D}_{\text{derivation}}(\rho)$$

$$D(A \circ B) = D(A) \circ B + A \circ D(B)$$

$$\rightsquigarrow \dot{\rho} = x \circ (\rho \circ y) - (x \circ \rho) \circ y$$

$$=: [x, \rho, y]$$

余談：対称錐

[Koecher – Vinberg]

contains no line

domain of positivity for formally real Jordan alg. A
$$\|$$
$\{a^2 ; a \in A\}$ の内部

$\longleftrightarrow$

open / regular / homogeneous / self-dual convex cone

(※ 一般化確率論 との関連も)

量子力学の一意性？

※ Jordan代数よりはもっと条件が必要

e.g.: [Girgin-Petersen ('76)] see also [Kapustin ('13)]

アイデア

1. 積 $A \circ B$ に加えて対称変換を表わす Lie bracket $[A, B]$ を考える
2. 系の合成 $\odot$ を考える

Setup $\mathcal{A} = \{\mathcal{H}, \circ, [\,,\,]\}$ two-product algebra

- $\mathcal{H}$: 線型空間
- $\circ : \mathcal{H}\otimes\mathcal{H} \to \mathcal{H}$: 対称、 ← 本当は必要ない
- $[\,,\,] : \mathcal{H}\otimes\mathcal{H} \to \mathcal{H}$

st、

A) $[A,B] = -[B,A]$ anti-symmetric

B) $[A,[B,C]] + [B,[C,A]] + [C,[A,B]] = 0$ Jacobi $\quad \forall A,B,C \in \mathcal{H}$

C) $[A, B\circ C] = [A,B]\circ C + B\circ[A,C]$

compatibility of $\circ$ and $[\,,\,]$

系の合成を表現

a class $\mathcal{C}$ of two-product algebras $\mathcal{A}$ with

$$\odot : \mathcal{A} \times \mathcal{A} \to \mathcal{A} \quad \text{s.t.}$$

1) $\mathcal{A}_1, \mathcal{A}_2 \in \mathcal{C}$ & $\mathcal{A}_{12} = \mathcal{A}_1 \odot \mathcal{A}_2 \to \mathcal{H}_{12} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$

2) $(\mathcal{A}_1 \odot \mathcal{A}_2) \odot \mathcal{A}_3 = \mathcal{A}_1 \odot (\mathcal{A}_2 \odot \mathcal{A}_3)$

3) $\exists\, \mathcal{I} \in \mathcal{C}$ (自明な理論)

s.t. $\mathcal{I} \odot \mathcal{A} = \mathcal{A} = \mathcal{A} \odot \mathcal{I} \quad {}^\forall \mathcal{A} \in \mathcal{C}$

結果

- $(\mathcal{H}, \circ)$: Jordan algebra
- relation between $\circ$ and $[\ ,\ ]$:

$$(A\circ B)\circ C - A\circ(B\circ C) = \lambda[[A,C],B]$$

$[A,B] = \{A,B\}$, $A\circ B = A\cdot B$

- $\lambda = 0$: 古典
- $\lambda \neq 0$: 量子

$\lambda = \hbar^2$

"$[A,B] = \frac{1}{2i\hbar}(AB - BA)$

$A\circ B = \frac{1}{2}(A\cdot B + B\cdot A)$"

(inside associative envelope)

場の量子論 (QFT)

（無限次元自由度の量子力学）

- QM $\longrightarrow$ QFT

$[p_j, q_k] = -i\hbar\delta_{jk}$

"有限自由度"

"無限自由度"

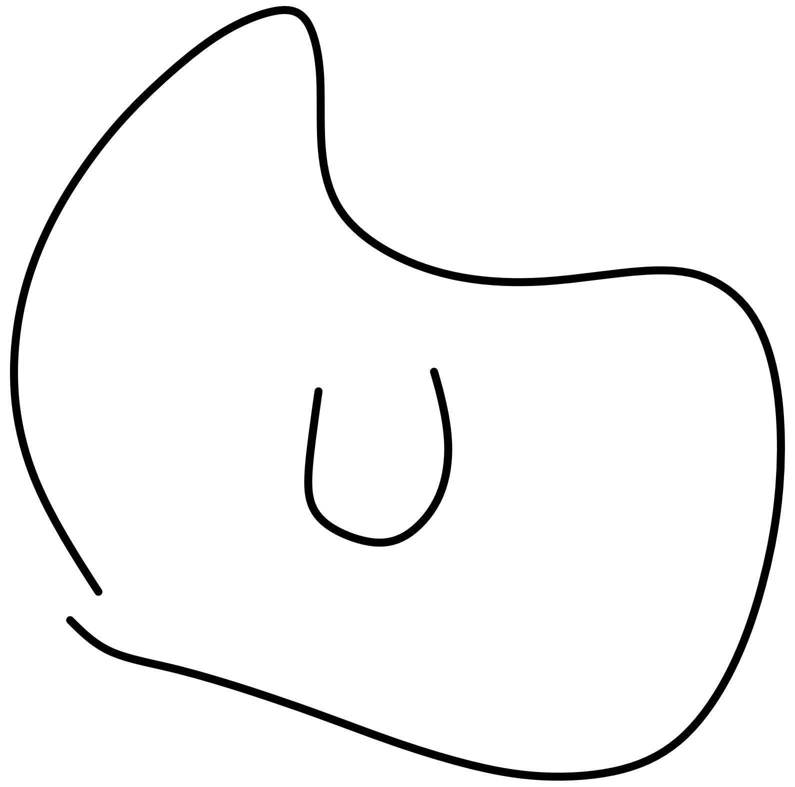
QFT

- local net [Haag-Kastler('64), ...]
  - C*/von-Neumann algebra
- factorization algebra [Beilinson-Drinfeld, Costello, ...]
  - 今週の Lecture
- ⋮

von-Neumann alg. $\subset$ (C^*-alg)

$\mathcal{A} \subset B(\mathcal{H})$: $\mathcal{H}$上の有界作用素

各点収束による位相で閉じている $*$-部分代数



$\rightsquigarrow \mathcal{A}(U)$

Hilbert空間の再構成

[Gelfond - Naimark - Segal construction]

状態

$\omega : \mathcal{A} \to \mathbb{C}$

$\longleftrightarrow$

表現 $(\mathcal{H}, \pi)$

$\mathcal{H}$: Hilbert space

$B(\mathcal{H})$: bounded ops on $\mathcal{H}$

$\pi : \mathcal{A} \to B(\mathcal{H})$: $*$-morphism

von-Neumann 環の分類

$\mathrm{I}_n,\ \mathrm{I}_\infty$

- Type I : contains nonzero minimal projector

$\mathrm{II}_1,\ \mathrm{II}_\infty$

- Type II : contains nonzero finite projector
  (no nonzero min. projector)

III

- Type III : no nonzero finite projector

場の量子論では一般にType IIIの
von-Neumann環が期待される

Araki-Woods ('73) ⋯
Bisognano-Wichmann ('75) ⋯
⋮

「素朴な無限」であるType I_∞の時とは
事情が異なるので注意が必要

ブラックホールの情報喪失問題は,
Type IIIをType I_∞にする問題？

Leutheusser-Liu ('21)
⋮

一方，「Type III的考え方」は場の量子論への別のアプローチには取り込まれていないように見える

(factorization algebra)

$\cup$

(deformation quantization)

「圏論的・ホモトピカルなType III」のための数学が必要？

まとめ

- ヒルベルト空間論は量子力学の数学的基礎
- しかし，（例えばJordan代数や圏論のように）別の数学的側面にも着目できる
- 量子力学の変形・一意性への数学的アプローチ：「量子力学それ自体のための数学」

展望

- 量子力学そのものの理論的定式化・実験的検証？

- 重力を取り込んだ量子論の定式化は？

- 現代数学における無限の概念が問い直される？
  （無限は創発する？）