付録 A

演算子の定義域と自己共役性

本文でも何度か触れたように、量子力学における状態（波動関数）と演算子は、線形代数におけるベクトルと行列の「無限次元版」とみなせる。そして、多くの場合には、無限次元であることをそっと忘れて、有限次元でのベクトルと行列についての様々な性質をそのまま使って量子力学の計算や推論を進めても大きな問題が生じないことも見てきた。

ただ、この安直なやり方が通用しないこともあった[*2]。8.2.3 節の例 4 で見たように、「エルミート行列は対角化できる」という線形代数の知識をそのまま使って「エルミート性を持つ演算子は『対角化』できる」と思ってしまうと、運動量演算子のような基本的な演算子についても問題が生じる。（この例については (A.2.7) で見る。）この問題の原因は、量子力学における演算子には定義域を設定しなくてはいけないこと、また、自己共役性の定義には定義域の微妙な性質が関わってくることにある。

この付録では量子力学の数学的な扱いの一部、特に演算子の定義域と自己共性に関わる部分を簡単に紹介する。自己共性の重要な帰結をまとめ、また、基本的な演算子について自己共役性を要求することで定義域（物理的には境界条件）が自然に定まることを見ていきたい。3 章の例題で扱った 1 次元の自由粒子の問題の境界条件が気まぐれに決められたものではなく、自己共役演算子の理論の中で正しく位置付けられたものだったということも納得できるはずだ。

ここで紹介する数学的な自己共役性の定義は「ちゃんと定義に従わないとうるさい数学の先生に叱られる」というような言葉の作法の問題ではないことを強調しておきたい。演算子が自己共役であることがわかれば、スペクトル定理や時間発展の存在など強力な定理が成り立つこ

[*1] **謝辞：**この付録を書くにあたって井田大輔、佐々木格、並木亮、松澤泰道の各氏に多くを教えていただいた。特に A.4 節と A.7 節の内容については並木氏に多くを負っている。もちろん、なんらかの間違いがあればそれは全て私の責任である。

[*2] だからといって量子力学を学ぶ人がかならず数学的な定式化を知るべきだと言いたいわけではない。結局、物理では、定義域や自己共役性などの面倒なことは細かく考えずに「普通に」計算し、何かおかしなことが起きたら「物理的に」原因を考え修正して先に進むというのが標準的なやり方だし、それは一つの正しい考え方なのだと思う。

とが保証される。そして、われわれは安心して物理に集中できるのだ。一見すると硬そうな数学の形式的な議論が物理をどう進めるべきかについての指針を与えてくれる好例と言っていいだろう。

私自身は量子力学に使う数学を完全に理解しているわけではないので、この付録を書くために物理学者向けの解説を含むいくつかの文献を参照し、また何人かの人にアドバイスをもらった。主要な「ネタ元」は [1] の第 16 章、[2] の第 3 章 、および [6] である[*3]。ここでは必要最低限のことがらだけをできる限り平易に（数学的な詳細に立ち入らず）解説することを目指した。様々な数学的な概念や道具立てについてもっと深く知りたい読者には、まず [2] の第 3 章を通読することを勧める。さらにしっかりと学びたいと思ったなら [1][*4]、さらに [3, 4, 5] などに進むのがいいだろう[*5]。

■記法について　この付録では本文とは少し違った（数学よりの）記法を使う。複素数 z の複素共役は $\bar{z}$ と書く。その代わり、$*$ は演算子 $\hat{A}$ の共役 $\hat{A}^*$ を表わすのに使う。共役 $\hat{A}^*$ は本文では $\hat{A}^\dagger$ と書いたものに相当するが、ここでは演算子の定義域をきちんと考えて議論するので数学の記号を使って区別しようというわけだ。

以下、この付録では特に断らない限りは区間 $[0, L]$ 上の 1 粒子の量子力学の問題を扱う。$\varphi(x)$ を $x \in [0, L]$ の複素数値関数とする。ここでは（デイラックのケットは用いず）関数そのものを $\boldsymbol{\varphi}$ のように太字で表わす。他の関数についても同様で、たとえば $\boldsymbol{\psi}$ は関数 $\psi(x)$ を表わす。

A.1　状態空間、演算子、演算子の定義域

まず、基本になる状態空間と演算子から始めよう。

■状態空間 $\mathsf{L}^2([0, L])$　本文と同様に、二つの関数 $\boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{\varphi}$ の内積を

$$\langle \boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{\varphi} \rangle := \int_0^L dx\, \overline{\psi(x)}\, \varphi(x) \tag{A.1.1}$$

と定義し、関数 $\boldsymbol{\varphi}$ のノルムを

$$\|\boldsymbol{\varphi}\| := \sqrt{\langle \boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\varphi} \rangle} \tag{A.1.2}$$

[*3] [6] はあまり読みやすいとは言えないのでお勧めしない。同様の趣旨のものとして [7] がある。

[*4] 江沢洋による [1] の第 VI 部は量子力学の基礎的な数理から出発して無限自由度の問題に及ぶ 240 ページ超の力作である。この部分のためだけでも [1] を入手する価値はあるだろう。

[*5] ただし、量子力学の数学をしっかりと学ぶには測度論や関数解析などかなり高度な基礎知識が必要なので、ほとんどの物理の学生にとっては荷が重過ぎるだろう。また、数学的定式化をマスターしたからと言って、それで量子力学の物理的理解が急激に深まるというものでもない（と私は思う）。[5] は（英語だが）物理の人にも読みやすいよくまとまった教科書である。なんと、完全な pdf ファイルを著者のサイトから合法的にダウンロードできる！

とする。状態空間は二乗可積分な関数の集まり

$$\mathsf{L}^2([0,L]) := \{\boldsymbol{\varphi} \mid \int_0^L dx\,|\varphi(x)|^2 < \infty\} \tag{A.1.3}$$

である（集合を決める条件は $\|\boldsymbol{\varphi}\| < \infty$ とも書ける）。ここで関数 $\boldsymbol{\varphi}$ が連続とか微分可能といったことは何も仮定しない。絶対値の二乗の積分が有限ということだけを要求する[*6]。$\mathsf{L}^2([0,L])$ は様々な関数を含むかなり大きな空間である。

ここで二つ注意しておくことがある。まず、この付録に登場する積分は全てルベーグ積分である。ルベーグ積分は（物理学科の数学で学ぶ）リーマン積分よりも強力で汎用性の高い積分だが、正確な定式化を学ぶにはかなりの予備知識がいる。物理を学ぶ人は、そういうものがあるらしいくらいに思って先に進めばいいだろう。また、$\mathsf{L}^2([0,L])$ の定義では、$\|\boldsymbol{\varphi} - \tilde{\boldsymbol{\varphi}}\| = 0$ を満たす二つの関数 $\boldsymbol{\varphi}$ と $\tilde{\boldsymbol{\varphi}}$ は「同じもの」とみなすという約束をする[*7]。例えば、いくつかの（実は可算無限個でもよい）点だけで値が異なるような二つの関数は「同じもの」だ。よって、厳密にいうと、状態空間 $\mathsf{L}^2([0,L])$ は関数の集合ではなく（上の意味で同一視した）関数の同値類の集合である。ただ、これについても物理を学ぶ人は深く気にせず「$\mathsf{L}^2([0,L])$ は二乗可積分な関数の集まり」と思っていて問題はないだろう。

$\mathsf{L}^2([0,L])$ は数学でヒルベルト空間と呼ばれる空間の一例である[*8]。$\mathsf{L}^2([0,L])$ の要素は関数（の同値類）だが、われわれは量子力学の設定に興味があるので、これから先は $\mathsf{L}^2([0,L])$ の要素を単に状態と呼ぼう（真面目に言えば、つねにゼロに等しい関数は状態ではないが、それは気にしない）。

■演算子と定義域　演算子 $\hat{A}$ とは、状態 $\boldsymbol{\varphi}$ を別の状態 $\hat{A}\boldsymbol{\varphi}$ に写す写像で、線形性 $\hat{A}(\alpha\boldsymbol{\varphi} + \beta\boldsymbol{\psi}) = \alpha\hat{A}\boldsymbol{\varphi} + \beta\hat{A}\boldsymbol{\psi}$（ここで α, β は任意の複素数）を満たすものである。ただし、8.1.4 節で注意したように、すべての $\boldsymbol{\varphi} \in \mathsf{L}^2([0,L])$ に対して $\hat{A}\boldsymbol{\varphi}$ が状態（つまり $\mathsf{L}^2([0,L])$ の要素）になるわけではない。数学的な量子力学の理論では演算子を考えるときには必ず対応する定義域 $\mathsf{D}(\hat{A}) \subset \mathsf{L}^2([0,L])$ を指定する。そして、演算子 $\hat{A}$ は $\mathsf{D}(\hat{A})$ に属する $\boldsymbol{\varphi}$ にのみ作用すると考えるのである。この先、いくつかの演算子について具体的に定義域を定めていく。

演算子に応じて定義域を定めると聞くと、それでは物理を進める上で困らないのかという疑問を抱くかもしれない。例えば、自己共役演算子 $\hat{A}$ がわれわれにとって興味のある物理量を表わしているとする。そして、$\hat{A}$ の定義域 $\mathsf{D}(\hat{A})$ は全状態空間 $\mathsf{L}^2([0,L])$ よりも真に小さいとする。このとき、全 $\mathsf{L}^2([0,L])$ には含まれるが $\mathsf{D}(\hat{A})$ に含まれないような状態 $\boldsymbol{\varphi}$ については物理量 $\hat{A}$ は測定できないのだろうか？　あるいは、より深刻な問題として、ハミルトニアン $\hat{H}$

[*6] 厳密には「$\varphi(x)$ が可測」という条件が必要だが、その意味はルベーグ積分を知らないとわからないので（物理を学ぶ人は）気にしなくていいと思う。

[*7] これら二つの波動関数で物理量を測定すると完全に同じ結果が得られるから、この「約束」は物理的な視点からも妥当である。

[*8] そのため、量子力学の状態空間のことをヒルベルト空間と呼ぶことも多い。

の定義域 $\mathsf{D}(\hat{H})$ に含まれない状態 $\boldsymbol{\varphi}$ があるとすると、この状態の時間発展を考えることができないのだろうか？　実は、このような心配はない。あるいは、このような心配が全く生じないことこそが自己共役演算子の理論の（物理から見て）最も重要な部分と言っていいかもしれない。演算子の定義域をどう選ぶかとは別に、われわれは全状態空間 $\mathsf{L}^2([0,L])$ の中の任意の状態を準備できると考える。そして、そのような状態については、必ず、自己共役演算子で表される物理量を測定することも、自己共役なハミルトニアンに対応する時間発展を考えることもできるのである。これらの点については A.4 節で述べる。

ところで、数学の文献では演算子のことを作用素と呼ぶ。これは物理の演算子と別のものを考えているということではなく、単に用語が違うだけである。英語では、数学でも物理でも operator と呼ぶので、概念を輸入した際に数学と物理のコミュニティで異なった訳語を選んでしまったということのようだ。

A.2　位置演算子と運動量演算子

基本となる位置演算子 $\hat{x}$ と運動量演算子 $\hat{p}$ の定義域について考えてみよう。有限区間での量子力学では、位置演算子の扱いは簡単だが、運動量演算子の方は一筋縄ではいかない。

■位置演算子　位置演算子 $\hat{x}$ は、関数 $\varphi(x)$ を関数 $x\,\varphi(x)$ に写す掛け算演算子である。$\boldsymbol{\varphi}\in\mathsf{L}^2([0,L])$ を任意の状態とし、ここに $\hat{x}$ を作用させて得られる $\hat{x}\,\boldsymbol{\varphi}$ が状態かどうかを調べよう。x は 0 と L の間だけを動くことを思い出せば、$\hat{x}\,\boldsymbol{\varphi}$ のノルムは、

$$\|\hat{x}\,\boldsymbol{\varphi}\|^2=\int_0^L dx\,|x\,\varphi(x)|^2\le L^2\int_0^L dx\,|\varphi(x)|^2=L^2\|\boldsymbol{\varphi}\|^2<\infty \tag{A.2.1}$$

のように有限である。よって、$\hat{x}\,\boldsymbol{\varphi}\in\mathsf{L}^2([0,L])$ であり、$\hat{x}$ を $\mathsf{L}^2([0,L])$ のどの状態に作用させても $\mathsf{L}^2([0,L])$ から「はみ出る」心配はない。

よって位置演算子 $\hat{x}$ の定義域は $\mathsf{L}^2([0,L])$ そのものにとればいい。まだ自己共役性を定義していないが、こうすると $\hat{x}$ は自己共役演算子になる。

■運動量演算子の広い定義域　運動量演算子 $\hat{p}=-i\hbar\frac{d}{dx}$ の場合はそう簡単ではない。例えば、$f(x)=\sqrt{2x}/L$ とすると明らかに $\boldsymbol{f}\in\mathsf{L}^2([0,L])$ である。しかし、$(\hat{p}\,\boldsymbol{f})(x)=-i\hbar/(L\sqrt{2x})$ だから、

$$\|\hat{p}\,\boldsymbol{f}\|^2=\frac{\hbar^2}{2L^2}\int_0^L\frac{dx}{x}=\infty \tag{A.2.2}$$

となる。つまり、$\hat{p}\,\boldsymbol{f}$ は $\mathsf{L}^2([0,L])$ の要素ではない。

このような状態には $\hat{p}$ は作用させられない。そこで、$\hat{p}$ を作用させると $\mathsf{L}^2([0,L])$ の外に

「はみ出して」しまうような状態は取り除いて、

$$\mathsf{D}_{\max}(\hat{p}) := \{\boldsymbol{\varphi} \,|\, \boldsymbol{\varphi} \in \mathsf{L}^2([0,L]),\ \hat{p}\,\boldsymbol{\varphi} \in \mathsf{L}^2([0,L])\} \tag{A.2.3}$$

という集合を作り、これを $\hat{p}$ の定義域としてみよう*9。これは $\hat{p}$ について考えうる最も広い定義域である。

おなじみの平面波状態 $\psi_k(x) = e^{ikx}/\sqrt{L}$ も $\mathsf{D}_{\max}(\hat{p})$ に入っている。波数 k は任意の実数でいい。もちろん、$\hat{p}\,\boldsymbol{\psi}_k = \hbar k \boldsymbol{\psi}_k$ なので、$\boldsymbol{\psi}_k$ は演算子 $\hat{p}$ の固有状態であり、対応する固有値は $\hbar k$ だ。固有値が「量子化」されないのはちょっと気になるが、これくらいならまあいいだろう。ところが、任意の複素数 α について、$\xi_\alpha(x) = A\,e^{\alpha x}$（$A$ はゼロでない定数）とすると、これも $\mathsf{D}_{\max}(\hat{p})$ に入っているし、$\hat{p}\,\boldsymbol{\xi}_\alpha = -i\hbar\alpha\boldsymbol{\xi}_\alpha$ を満たす。つまり、$\boldsymbol{\xi}_\alpha$ は固有値 $-i\hbar\alpha$ に対応する $\hat{p}$ の固有状態である。任意の複素数が運動量の固有値になるということだから（少なくとも物理としては）困った話である。「状態がはみ出さないように」という思想で作った (A.2.3) の定義域は広すぎたのだ*10。

■運動量演算子のエルミート性　定義域 (A.2.3) がダメだった理由は難しい数学を知らなくてもわかる。運動量演算子 $\hat{p}$ の定義域を $\mathsf{D}_{\max}(\hat{p})$ とすると、エルミート性の条件

$$\langle \boldsymbol{\psi}, \hat{p}\,\boldsymbol{\varphi} \rangle = \langle \hat{p}\,\boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{\varphi} \rangle \tag{A.2.4}$$

が成り立たないのだ。

これを確認するため、任意の $\boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{\varphi} \in \mathsf{D}_{\max}(\hat{p})$ について、

$$\begin{aligned}
\langle \boldsymbol{\psi}, \hat{p}\,\boldsymbol{\varphi} \rangle &= \int_0^L dx\, \overline{\psi(x)}\, \{-i\hbar\varphi'(x)\} \\
&= -i\hbar\bigl\{\overline{\psi(L)}\,\varphi(L) - \overline{\psi(0)}\,\varphi(0)\bigr\} + i\hbar \int_0^L dx\, \overline{\psi'(x)}\,\varphi(x) \\
&= -i\hbar\bigl\{\overline{\psi(L)}\,\varphi(L) - \overline{\psi(0)}\,\varphi(0)\bigr\} + \langle \hat{p}\,\boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{\varphi} \rangle
\end{aligned} \tag{A.2.5}$$

となることに注意する。部分積分を使った普通の計算だ。エルミート性 (A.2.4) が成り立つには、最右辺の一つ目の「余分な項」が消える必要がある。つまり、

$$\overline{\psi(L)}\,\varphi(L) - \overline{\psi(0)}\,\varphi(0) = 0 \tag{A.2.6}$$

が条件だ。

さて、広い定義域 $\mathsf{D}_{\max}(\hat{p})$ の状態には特段の境界条件は課されていないから、(A.2.6) は一般には満たされない。つまり、エルミート性 (A.2.4) は成り立たない。

*9 (A.2.3) の定義の $\hat{p}\,\boldsymbol{\varphi} \in \mathsf{L}^2([0,L])$ という部分で $\varphi(x)$ が微分可能であることも要請している。厳密には微分可能性よりは弱い絶対連続性という条件を要請するのだが、この付録ではそういった細かい点にまでは踏み込まないことにする

*10 このやり方でうまい定義域が得られる場合も多い。A.8 節をみよ。

■運動量演算子の狭い定義域　定義域が広すぎるからエルミート性が成り立たないようだから、定義域をもっと狭くとるのがよさそうだ。そこで（8.2.3 節の例 4 を知っている以上、ちょっとわざとらしいが）おなじみのゼロ境界条件を課した状態からなる定義域

$$\mathsf{D}_0(\hat{p}) := \{\boldsymbol{\varphi}\,|\,\boldsymbol{\varphi}\in\mathsf{L}^2([0,L]),\ \hat{p}\,\boldsymbol{\varphi}\in\mathsf{L}^2([0,L]),\,\varphi(0)=\varphi(L)=0\} \tag{A.2.7}$$

を考えてみよう。こうすると、明らかに任意の $\boldsymbol{\psi},\boldsymbol{\varphi}\in\mathsf{D}_0(\hat{p})$ について (A.2.6) が成り立つ。よって、任意の $\boldsymbol{\psi},\boldsymbol{\varphi}\in\mathsf{D}_0(\hat{p})$ についてエルミート性 (A.2.4) が成り立つ。次の節で述べる定義に従えば、$\mathsf{D}_0(\hat{p})$ を定義域とした運動量演算子 $\hat{p}$ はエルミート演算子である。

しかし、$\mathsf{D}_0(\hat{p})$ には、平面波状態 $\psi_k(x)=e^{ikx}/\sqrt{L}$ は入っていない。8.2.3 節の例 4 でも述べたように、$\mathsf{D}_0(\hat{p})$ の中には $\hat{p}$ の固有状態は一つもない。より一般的に、問題 8.5.1.c（61 ページ）で見たことから、$\mathsf{D}_0(\hat{p})$ 上の演算子 $\hat{p}$ の近似点スペクトル集合は空集合ということも示される[*11]。複素数ならなんでも固有値というのも困り物だが、固有値（あるいは、近似点スペクトル）が全くないというのでは物理としては使い物にならない。

■これからどうするか　運動量演算子 $\hat{p}$ の定義域として、(A.2.3) の $\mathsf{D}_{\max}(\hat{p})$ は広すぎたが、(A.2.7) の $\mathsf{D}_0(\hat{p})$ は狭すぎた。おそらく、これらの中間に、広すぎも狭すぎもしない、ちょうどいい大きさの定義域があるに違いない。

だが、そもそも、定義域の大きさが「ちょうどいい」というのはどういうことだろう？　狭めたり広げたりしながら固有値が「ほどほどに」出てきたらいいということにするのだろうか？　そういう曖昧な（あるいは恣意的な）やり方で定義域を決めてしまうのでは理論の組み立て方としていささか心許ない。

実は、演算子が（次の節で述べる意味で）自己共役になるためには、定義域が「広すぎも狭すぎもしない、ちょうどいい大きさ」であることが必要なのだ。自己共役性を要求することで、「ちょうどいい大きさ」を演算子自身に選んでもらえると言ってもいい。後に A.5 節と A.6 節で具体例をみる。

先に進む前に一つ注意を。上で見たように（そして本文の例でも見たように）同じ運動量演算子 $\hat{p}$ であっても、定義域の取り方によって性質が大きく変わってしまう。だから、厳密に言えば、演算子というのは必ず定義域とセットにして考えるべきものなのだ。上で見た例についても、$\mathsf{D}_{\max}(\hat{p})$ を定義域とする運動量演算子は $\hat{p}_{\max}$、$\mathsf{D}_0(\hat{p})$ を定義域とする運動量演算子は $\hat{p}_0$ のように、異なった名前で呼ぶのが正統なのかもしれない。ただ、「運動量演算子はいつでも微分演算子 $\hat{p}=-i\hbar\frac{d}{dx}$ であり、それが様々な定義域に作用する」というのが（少なくとも物理の人には）自然な考え方だと思う。この付録では、この流儀に従うことにして、「$\mathsf{D}_0(\hat{p})$ を定義域にした運動量演算子」や「$\mathsf{D}_0(\hat{p})$ 上の運動量演算子」のような（ちょっとしつこい）言

[*11] ところがこの演算子の（通常の定義での）スペクトル集合は $\mathbb{C}$ 全体になる。病的な演算子なのだ。

い方をする。

A.3　エルミート性と自己共役性

自己共役演算子の定義を述べる。ここでは話を 1 次元の粒子に限定する必要はないので、状態空間（可分なヒルベルト空間[*12]）$\mathcal{H}$ を持つ一般の量子力学系に適用できるように書く。もちろん、$\mathcal{H} = \mathsf{L}^2([0, L])$ と思って読んでもらっていい。水素原子の問題のように粒子が 3 次元の無限に広がった領域を動きうる場合には $\mathcal{H} = \mathsf{L}^2(\mathbb{R}^3)$ とする[*13]。

■エルミート演算子　$\hat{A}$ を演算子とし、その定義域を $\mathsf{D}(\hat{A}) \subset \mathcal{H}$ とする。また、定義域 $\mathsf{D}(\hat{A})$ は $\mathcal{H}$ の中で稠密（ちゅうみつ）だと仮定する。稠密というのは、任意の $\boldsymbol{\varphi} \in \mathcal{H}$ に対して、$\lim_{n\uparrow\infty} \|\boldsymbol{\varphi} - \boldsymbol{\psi}_n\| = 0$ となる無限列 $\boldsymbol{\psi}_1, \boldsymbol{\psi}_2, \ldots \in \mathsf{D}(\hat{A})$ がとれることをいう。大雑把に言えば、$\mathcal{H}$ の中に $\mathsf{D}(\hat{A})$ が「びっしりと」埋まっているということだ。

ここで、任意の $\boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{\varphi} \in \mathsf{D}(\hat{A})$ に対して

$$\langle \boldsymbol{\psi}, \hat{A}\boldsymbol{\varphi} \rangle = \langle \hat{A}\boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{\varphi} \rangle \tag{A.3.1}$$

が成り立つとき、演算子 $\hat{A}$ はエルミート演算子（あるいは対称演算子）であるという[*14]。上で見た $\mathsf{D}_0(\hat{p})$ 上の運動量演算子 $\hat{p}$ もエルミート演算子である。

■エルミート演算子の共役演算子　次にエルミート演算子 $\hat{A}$ の共役演算子 $\hat{A}^*$ を導入する。(実は、自己共役性の定義に必要なのは $\hat{A}^*$ でなく、その定義域 $\mathsf{D}(\hat{A}^*)$ の方である。自己共役性の概念だけを理解したい人は $\mathsf{D}(\hat{A}^*)$ の定義だけを理解すれば十分だ。）ここからこの節の最後までは普通の物理の本には出てこない話なので、読むペースを落として、丁寧に読んでほしい。$\hat{A}$ をエルミート演算子とする。いま、$\mathcal{H}$ の状態の組 $(\boldsymbol{\psi}, \tilde{\boldsymbol{\psi}})$ で、

$$\text{任意の } \boldsymbol{\varphi} \in \mathsf{D}(\hat{A}) \text{ について}\quad \langle \boldsymbol{\psi}, \hat{A}\boldsymbol{\varphi} \rangle = \langle \tilde{\boldsymbol{\psi}}, \boldsymbol{\varphi} \rangle \tag{A.3.2}$$

という性質を持つものを考えたい。まず、$\boldsymbol{\psi}$ を $\mathsf{D}(\hat{A})$ の任意の状態として $\hat{A}\boldsymbol{\psi}$ を $\tilde{\boldsymbol{\psi}}$ と呼ぶことにすれば、(A.3.2) の条件は (A.3.1) そのものであることに注意しよう。こうして、上の性質を持つ状態の組 $(\boldsymbol{\psi}, \tilde{\boldsymbol{\psi}})$ はたくさんあることがわかった。しかし、このような状態の組はもっと他にもあるかもしれない。上の性質を持つ組 $(\boldsymbol{\psi}, \tilde{\boldsymbol{\psi}})$ すべてを考えたときに $\boldsymbol{\psi} \in \mathcal{H}$ が動く範囲を $\mathsf{D}(\hat{A}^*)$ と書く。上の考察から $\mathsf{D}(\hat{A}^*) \supset \mathsf{D}(\hat{A})$ である。

[*12] 可算個の要素からなる正規直交完全系を持つヒルベルト空間を可分なヒルベルト空間という。有限個の粒子やスピンからなる量子力学系の状態空間は可分なヒルベルト空間である。

[*13] $\mathsf{L}^2(\mathbb{R}^3)$ は $\int d^3\boldsymbol{r}\, |\varphi(\boldsymbol{r})|^2 < \infty$ を満たす $\boldsymbol{r} \in \mathbb{R}^3$ の複素数値関数すべてからなるヒルベルト空間。

[*14] 用語の定義にはいくつかの流儀があり、エルミート演算子という場合には $\mathsf{D}(\hat{A})$ が $\mathcal{H}$ の中で稠密という条件を課さないこともある。

任意の $\psi \in \mathsf{D}(\hat{A}^*)$ に対して、上の組から決まる $\tilde{\psi}$ を $\hat{A}^*\psi$ であるとして、定義域 $\mathsf{D}(\hat{A}^*)$ を持つ演算子 $\hat{A}^*$ を定義する。上で見たように $\psi \in \mathsf{D}(\hat{A})$ ならば、$\hat{A}^*\psi = \hat{A}\psi$ である。つまり、$\hat{A}^*$ は $\mathsf{D}(\hat{A})$ 上では $\hat{A}$ と完全に同じ働きをするけれど、$\hat{A}$ よりも大きい（か等しい）定義域を持った演算子なのである。

■自己共役演算子　一般に（$\hat{A}$ の作用を保ったまま）$\mathsf{D}(\hat{A})$ を小さくすれば対応する $\mathsf{D}(\hat{A}^*)$ は大きくなる（か変化しない）。「任意の $\varphi \in \mathsf{D}(\hat{A})$ について」という条件が緩くなり、より多くの組 $(\psi, \tilde{\psi})$ が (A.3.2) の条件を満たす可能性が出てくるからだ。逆に（$\hat{A}$ の作用とエルミート性を保ったまま）$\mathsf{D}(\hat{A})$ をより大きく取れば $\mathsf{D}(\hat{A}^*)$ は小さくなる（か変化しない）。

ここで、$\mathsf{D}(\hat{A})$ を上手にギリギリまで大きくして、$\mathsf{D}(\hat{A})$ と $\mathsf{D}(\hat{A}^*)$ をバランスさせることができれば、定義域は「ちょうどよい大きさ」になると期待される。そのとき、エルミート演算子は自己共役でもあると定義する。

定義 A.1 **（自己共役演算子）**　$\hat{A}$ をエルミート演算子とする。$\mathsf{D}(\hat{A}) = \mathsf{D}(\hat{A}^*)$ となるとき $\hat{A} = \hat{A}^*$ と書き、$\hat{A}$ を自己共役演算子という。

A.4　自己共役演算子の性質

上のように定義した自己共役演算子の基本的な性質、特に、量子力学の理論を作る上で本質的な性質をまとめておこう。ここでも状態空間（可分なヒルベルト空間）$\mathcal{H}$ を持つ一般的な量子力学系を念頭において話を進める。

■スペクトル定理　本文の 49 ページの定理 8.4 で紹介したスペクトル定理をより正確に述べ、その意義を見る。$\hat{A}$ を自己共役演算子とし、その定義域を $\mathsf{D}(\hat{A}) \subset \mathcal{H}$ とする。ここでも、自己共役演算子 $\hat{A}$ のスペクトル集合 $\mathrm{spec}(\hat{A}) = \{a_1, a_2, \ldots\}$ が固有値のみからなる場合に話を限定する（記号を煩雑にしないため、縮退がある場合には、同じ値をとる a_j が縮退の次元と同じ数だけ重複して現れるとする）。

定理 A.2 **（スペクトル定理（スペクトルが固有値の場合））**　$\hat{A}$ の規格化された固有状態 ψ_j（つまり、$\|\psi_j\| = 1$ および $\hat{A}\psi_j = a_j\psi_j$ を満たす $\psi_j \in \mathsf{D}(\hat{A})$）をすべて集めた $\{\psi_j\}_{j=1,2,\ldots}$ が全状態空間 $\mathcal{H}$ の正規直交完全系になるように ψ_j を選ぶことができる。

$\{\psi_j\}_{j=1,2,\ldots}$ が $\mathcal{H}$ の正規直交完全系というのは、任意の状態 $\varphi \in \mathcal{H}$ を

$$\varphi = \sum_{j=1}^{\infty} \gamma_j \psi_j, \quad \gamma_j = \langle \psi_j, \varphi \rangle \tag{A.4.1}$$

のように展開できることである。本文の物理風の書き方では $\sum_{j=1}^{\infty}|\psi_j\rangle\langle\psi_j|=\hat{1}$ に相当する。ただし、(A.4.1) の右辺には無限和があるので注意が必要である。正確にいうと、(A.4.1) は

$$\lim_{n\uparrow\infty}\|\boldsymbol{\varphi}-\sum_{j=1}^{n}\gamma_j\boldsymbol{\psi}_j\|=0 \tag{A.4.2}$$

を意味する。これは、「二つの波動関数の差のノルムがゼロならそれらは同じもの」としたことと整合している。また、完全性を反映して状態のノルムは

$$\|\boldsymbol{\varphi}\|^2=\sum_{j=1}^{\infty}|\gamma_j|^2 \tag{A.4.3}$$

と表される。

任意の $\boldsymbol{\varphi}\in\mathcal{H}$ について (A.4.1), (A.4.3) が成り立つことは量子力学にとって根本的に重要である。全状態空間 $\mathcal{H}$ の中の任意の規格化された状態 $\boldsymbol{\varphi}$ について、$p_j=|\gamma_j|^2$ を状態 $\boldsymbol{\varphi}$ において自己共役演算子 $\hat{A}$ で表現される物理量を測定した際に測定値 a_j が得られる確率と解釈できるからだ[*15]。自己共役演算子 $\hat{A}$ の定義域 $\mathsf{D}(\hat{A})$ は一般には全状態空間 $\mathcal{H}$ よりも小さいわけだが、$\hat{A}$ の測定という概念は定義域の外にある状態についてもきちんと定式化されていることになる。ちなみに、状態 $\boldsymbol{\psi}_j$ への射影演算子（本文では $|\psi_j\rangle\langle\psi_j|$ と書いた）を $\hat{P}_j$ とすると、上の確率は $p_j=\langle\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{\psi}_j\rangle\langle\boldsymbol{\psi}_j,\boldsymbol{\varphi}\rangle=\langle\boldsymbol{\varphi},\hat{P}_j\boldsymbol{\varphi}\rangle$ とかけることを注意しておく。

本文では固有状態が作る正規直交完全系を使って演算子を $\hat{A}=\sum_{j=1}^{\infty}a_j|\psi_j\rangle\langle\psi_j|$ とスペクトル分解した。その厳密版として、任意の $\boldsymbol{\varphi}\in\mathsf{D}(\hat{A})$ について

$$\hat{A}\boldsymbol{\varphi}=\sum_{j=1}^{\infty}a_j\gamma_j\boldsymbol{\psi}_j,\quad \gamma_j=\langle\boldsymbol{\psi}_j,\boldsymbol{\varphi}\rangle \tag{A.4.4}$$

が成り立つ。ここでは（当然だが）$\hat{A}$ の定義域に属する状態 $\boldsymbol{\varphi}$ についてのみ等式が成立する。

自己共役演算子 $\hat{A}$ のスペクトル集合 $\mathrm{spec}(\hat{A})$ が固有値以外を含む場合にも同様の結果が成り立つ。ただ、それらを述べるにはやや複雑な道具立てが必要なのでここでは踏み込まないことにして、物理量の測定についての本質的な結果だけを述べておく。任意の自己共役演算子 $\hat{A}$ と任意の $a<b$ に対して射影演算子 $\hat{P}_{(a,b]}$ が定まる。そして、任意の規格化された状態 $\boldsymbol{\varphi}\in\mathcal{H}$ において自己共役演算子 $\hat{A}$ で表現される物理量を測定した際に測定結果 a_{meas} が $a<a_{\mathrm{meas}}\le b$ を満たす確率は $\langle\boldsymbol{\varphi},\hat{P}_{(a,b]}\boldsymbol{\varphi}\rangle$ で与えられる。これは上で述べた固有値の測定についての結果の一般化である。

■時間発展演算子の存在　ハミルトニアンの自己共役性と時間発展の性質についての定理を述べよう（以下に述べるのはストーンの定理の一部である）。ハミルトニアン $\hat{H}$ を任意の自己共

[*15] もちろん縮退があるときには必要な $|\gamma_j|^2$ を足し合わせる

役演算子とし[*16]、定義域を $\mathsf{D}(\hat{H})$ とする。任意の $t \in \mathbb{R}$ に対して $\hat{H}$ に対応する時間発展のユニタリー演算子 $\hat{U}(t)$ が存在する[*17]。ユニタリー演算子 $\hat{U}(t)$ の定義域は全状態空間 $\mathcal{H}$ であり、任意の $t, s \in \mathbb{R}$ について $\hat{U}(t+s) = \hat{U}(t)\hat{U}(s)$ となり、また $\lim_{t\to 0}\hat{U}(t) = \hat{1}$ が成り立つ。

時間発展のユニタリー演算子 $\hat{U}(t)$ はハミルトニアンを用いて

$$\hat{U}(t) = e^{-i(\hat{H}/\hbar)t} \tag{A.4.5}$$

と（見慣れた形に）書かれる。ここで、演算子の指数関数はスペクトル分解を用いて定義する。特に、ハミルトニアン $\hat{H}$ のスペクトル集合 $\mathrm{spec}(\hat{H})$ が固有値のみからなる場合には、全てのエネルギー固有状態を集めて作った正規直交完全系 $\{\boldsymbol{\psi}_j\}_{j=1,2,\dots}$ を用いて、任意の $\boldsymbol{\varphi} \in \mathcal{H}$ に対して、

$$\hat{U}(t)\boldsymbol{\varphi} = \sum_{j=1}^{\infty} e^{-i(E_j/\hbar)t}\gamma_j\boldsymbol{\psi}_j, \quad \gamma_j = \langle\boldsymbol{\psi}_j, \boldsymbol{\varphi}\rangle \tag{A.4.6}$$

とすればいい（もちろん $\hat{H}\boldsymbol{\psi}_j = E_j\boldsymbol{\psi}_j$ である）。スペクトル集合 $\mathrm{spec}(\hat{H})$ が固有値以外を含む場合にも（適切な道具を用いれば）(A.4.5) を厳密に定義できる。

任意の状態 $\boldsymbol{\varphi}(0) \in \mathsf{D}(\hat{H})$ について $\boldsymbol{\varphi}(t) = \hat{U}(t)\boldsymbol{\varphi}(0)$ とする。$\boldsymbol{\varphi}(t)$ は時刻 t での状態と解釈できる。実際、$\boldsymbol{\varphi}(t)$ は任意の t において $\mathsf{D}(\hat{H})$ の中にあり、さらにシュレディンガー方程式

$$i\hbar\frac{d}{dt}\boldsymbol{\varphi}(t) = \hat{H}\boldsymbol{\varphi}(t) \tag{A.4.7}$$

の（初期状態を $\boldsymbol{\varphi}(0)$ とした際の）一意的な解であることが証明されている。時間発展演算子 $\hat{U}(t)$ はシュレディンガー方程式による時間発展を正しく記述しているのである。ここで注意したいのは、$\boldsymbol{\varphi}(t) = \hat{U}(t)\boldsymbol{\varphi}(0)$ は $\boldsymbol{\varphi}(0) \in \mathcal{H}$ が $\mathsf{D}(\hat{H})$ に属していなくても定まっているということである。このような $\boldsymbol{\varphi}(t)$ については（そもそも $\hat{H}$ が作用できないのだから）シュレディンガー方程式 (A.4.7) は意味をなさない。つまりハミルトニアンの自己共役性に基づく時間発展演算子 $\hat{U}(t)$ はシュレディンガー方程式よりも広い範囲の状態の時間発展を記述するのである。これはおそらく物理的にも重要な点だろう。A.7 節で簡単な例を見る。

A.5　運動量演算子の自己共役拡大

一般論はここまでにして 1 次元の区間の粒子の問題に戻ろう。状態空間 $\mathcal{H}$ は $\mathsf{L}^2([0, L])$ である。A.3 節で述べた抽象的な自己共役性の定義だけではピンとこないと思うので、運動量演算子について具体的な定義域をとって、エルミート性と自己共役性を調べてみよう。

[*16] ハミルトニアンであればスペクトルに下界があるのだが、ここではその性質は使わない。

[*17] 一般にユニタリー演算子とはヒルベルト空間全体を定義域とする演算子で $\hat{U}^*\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^* = \hat{1}$ を満たすものをいう。8.2.1 節を参照。

■ゼロ境界条件での運動量演算子 まず、(A.2.7) の定義域 $\mathsf{D}_0(\hat{p})$ 上の演算子としての $\hat{p}$ について考える。これがエルミート演算子であることは A.2 節の最後で見た（$\mathsf{D}_0(\hat{p})$ が $\mathsf{L}^2([0,L])$ の中で稠密であることも示せる）。

ここでも重要なのは (A.2.5) の「余分な項」が消えるための条件 (A.2.6) である。いま、$\boldsymbol{\varphi} \in \mathsf{D}_0(\hat{p})$ なので、つねに $\varphi(0) = \varphi(L) = 0$ であり、$\psi(x)$ が何であろうと (A.2.6) は正しい。つまり、$\hat{p}\,\boldsymbol{\psi} \in \mathsf{L}^2([0,L])$ となる任意の $\boldsymbol{\psi} \in \mathsf{L}^2([0,L])$ について、$\tilde{\boldsymbol{\psi}} = \hat{p}\,\boldsymbol{\psi}$ とすれば、

$$\text{任意の } \boldsymbol{\varphi} \in \mathsf{D}_0(\hat{p}) \text{ について} \quad \langle \boldsymbol{\psi}, \hat{p}\,\boldsymbol{\varphi} \rangle = \langle \tilde{\boldsymbol{\psi}}, \boldsymbol{\varphi} \rangle \tag{A.5.1}$$

が成り立つということだ。これはまさに (A.3.2) に相当する関係である。つまり、

$$\mathsf{D}(\hat{p}^*) = \{\boldsymbol{\psi} \,|\, \boldsymbol{\psi} \in \mathsf{L}^2([0,L]),\, \hat{p}\,\boldsymbol{\psi} \in \mathsf{L}^2([0,L])\} \tag{A.5.2}$$

であることがわかった。これは (A.2.3) の $\mathsf{D}_{\max}(\hat{p})$ と同じ「めいっぱい大きい」定義域である。明らかに $\mathsf{D}(\hat{p}^*) \supsetneqq \mathsf{D}(\hat{p}) = \mathsf{D}_0(\hat{p})$ なので、定義域 $\mathsf{D}_0(\hat{p})$ 上の運動量演算子 $\hat{p}$ はエルミート演算子だが自己共役ではないことが確認された。

■周期境界条件での運動量演算子 そこで $\hat{p}$ の定義域をもう少し大きくとることを考えよう。多くの読者が予想していただろうが、周期境界条件を課した定義域

$$\mathsf{D}_{\mathrm{per}}(\hat{p}) := \{\boldsymbol{\varphi} \,|\, \boldsymbol{\varphi} \in \mathsf{L}^2([0,L]),\ \hat{p}\,\boldsymbol{\varphi} \in \mathsf{L}^2([0,L]),\, \varphi(0) = \varphi(L)\} \tag{A.5.3}$$

をとろう。$\mathsf{D}_{\mathrm{per}}(\hat{p})$ を定義域とした運動量演算子 $\hat{p}$ がエルミート演算子であることは簡単に確かめられる。問題は自己共役性だ。

「余分な項」が消える条件 (A.2.6) に注目する。いま、$\boldsymbol{\varphi} \in \mathsf{D}_{\mathrm{per}}(\hat{p})$ とすると $\varphi(0) = \varphi(L)$ だから、条件 (A.2.6) は

$$\overline{\{\psi(L) - \psi(0)\}}\,\varphi(0) = 0 \tag{A.5.4}$$

となる。これが任意の $\boldsymbol{\varphi} \in \mathsf{D}_{\mathrm{per}}(\hat{p})$ について成り立つためには $\psi(0) = \psi(L)$ が必要かつ十分。すぐ上の例では $\boldsymbol{\psi}$ は「何でもあり」だったのに、今度は $\boldsymbol{\psi}$ に自然に条件がついた。しかも、それは $\boldsymbol{\varphi}$ に課したのと同じ周期境界条件だ！ よって $\boldsymbol{\psi}$ が動く範囲は

$$\mathsf{D}(\hat{p}^*) := \{\boldsymbol{\psi} \,|\, \boldsymbol{\psi} \in \mathsf{L}^2([0,L]),\ \hat{p}\,\boldsymbol{\psi} \in \mathsf{L}^2([0,L]),\, \psi(0) = \psi(L)\} \tag{A.5.5}$$

であり、これはもちろん (A.5.3) の $\mathsf{D}_{\mathrm{per}}(\hat{p})$ と等しい。定義 A.1 を思い出せば、$\mathsf{D}_{\mathrm{per}}(\hat{p})$ を定義域とする運動量演算子 $\hat{p}$ が自己共役であることがわかる*18。実際、よく知っているように、

*18 ここで $\tilde{\boldsymbol{\psi}} = \hat{p}\,\boldsymbol{\psi}$ の形を仮定しなければ $\mathsf{D}(\hat{p}^*)$ がもっと広くとれるのではないかという疑問があるかもしれないが、その心配はない。もし $\boldsymbol{\psi} \notin \mathsf{D}_{\mathrm{per}}(\hat{p})$ について (A.3.2)（で $\hat{A} = \hat{p}$ とした関係）が成り立つなら、(A.2.5) より $\langle \tilde{\boldsymbol{\psi}}, \boldsymbol{\varphi} \rangle = -i\hbar\overline{\{\psi(L) - \psi(0)\}}\,\varphi(0) + \langle \hat{p}\,\boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{\varphi} \rangle$ でなくてはならない。しかし、任意の $\boldsymbol{\varphi} \in \mathsf{D}_{\mathrm{per}}(\hat{p})$ についてこれを実現するような $\tilde{\boldsymbol{\psi}} \in \mathsf{L}^2([0,L])$ はない（右辺第一項が出せない）。以下でも類似の状況な何度か出てくるが特にこのような断り入れない。

$\mathsf{D}_{\mathrm{per}}(\hat{p})$ の中には $\hat{p}$ の固有状態である平面波状態 $\psi_k(x) = e^{ikx}/\sqrt{L}$ も入っている（もちろん、k は正しく「とびとびの」値を取らなくてはいけない)。

ここまでをまとめると、運動量演算子 $\hat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx}$ は、狭い定義域 $\mathsf{D}_0(\hat{p})$ 上の演算子としてはエルミートだが自己共役ではなかった。ここで定義域をちょうどいい $\mathsf{D}_{\mathrm{per}}(\hat{p})$ まで広げてやると $\hat{p}$ は自己共役演算子になった。このようにエルミート演算子の定義域を広げて自己共役演算子にすることを自己共役拡大という[*19]。

■「ひねった周期境界条件」での運動量演算子 実は、$\mathsf{D}_0(\hat{p})$ 上の運動量演算子 $\hat{p}$ は別のやり方でも自己共役拡大できる。$\theta \in [0, 2\pi)$ として、

$$\mathsf{D}_{\mathrm{per},\theta}(\hat{p}) := \{\boldsymbol{\varphi} \,|\, \boldsymbol{\varphi} \in \mathsf{L}^2([0,L]),\ \hat{p}\boldsymbol{\varphi} \in \mathsf{L}^2([0,L]),\ e^{i\theta}\varphi(0) = \varphi(L)\} \tag{A.5.6}$$

という定義域を考えよう。境界を越えると波動関数の位相が θ だけずれるという、ちょっと変わった周期的境界条件だ[*20]。この場合にも (A.2.6) の条件を調べると、$\boldsymbol{\psi}$ の方も同じ境界条件 $e^{i\theta}\psi(0) = \psi(L)$ を満たさなくてはならないことが導かれる（簡単だし面白いのでやってみよう)。つまり $\mathsf{D}(\hat{p}^*)$ はもとの定義域 $\mathsf{D}_{\mathrm{per},\theta}(\hat{p})$ と一致し、運動量演算子 $\hat{p}$ は自己共役になる。

A.6 有界なポテンシャル中の粒子のハミルトニアンの自己共役拡大

区間 $[0, L]$ 上で、ポテンシャル $V(x)$ からの力を受ける粒子のハミルトニアン

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \tag{A.6.1}$$

についても同様の考察をしてみよう。ここでポテンシャル $V(x)$ は有界である、つまり定数 V_0 があって任意の $x \in [0, L]$ について $|V(x)| \le V_0$ が成り立つとする。有界かつ実であれば $V(x)$ はどんなものでもいい[*21]。また、特に全ての $x \in [0, L]$ で $V(x) = 0$ とした自由粒子のハミルトニアンを

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} \tag{A.6.2}$$

と書こう。本文でも最初に取り上げた簡単だが重要な例題だ。

[*19] エルミート演算子がかならず自己共役演算子に拡大できるわけではない。例えば、半無限直線上の運動量演算子 $\hat{p}$ は自己共役拡大できないことが知られている。

[*20] リング状の細線に電子が閉じ込められた系を理想化すれば周期境界条件を課した区間状の粒子の系とみなすことができる。さらに、リングを貫く磁束があると位相がずれる境界条件が実現されることが知られている。

[*21] 簡単のため有限個の点以外では連続と仮定しよう。物理に出てくる有界なポテンシャルを扱うにはこれで十分である。

■広すぎる定義域　まず、任意の $\boldsymbol{\varphi} \in \mathsf{L}^2([0,L])$ について $\hat{H}\boldsymbol{\varphi}$ が $\mathsf{L}^2([0,L])$ の外に出ないことだけを要求して作る「めいっぱい広い」定義域を考えよう。ここで $\hat{H}\boldsymbol{\varphi}$ のノルムについて三角不等式を使うと、

$$\|\hat{H}\boldsymbol{\varphi}\| = \|\hat{H}_0\boldsymbol{\varphi} + \hat{V}\boldsymbol{\varphi}\| \le \|\hat{H}_0\boldsymbol{\varphi}\| + \|\hat{V}\boldsymbol{\varphi}\| \tag{A.6.3}$$

である。さらに $V(x)$ の有界性から $\|\hat{V}\boldsymbol{\varphi}\| \le V_0\|\boldsymbol{\varphi}\| < \infty$ なので、結局、$\hat{H}\boldsymbol{\varphi} \in \mathsf{L}^2([0,L])$ となるための条件は、$\|\hat{H}_0\boldsymbol{\varphi}\| < \infty$ つまり $\hat{H}_0\boldsymbol{\varphi} \in \mathsf{L}^2([0,L])$ であることがわかる。よって「めいっぱい広い」定義域は

$$\mathsf{D}_{\max}(\hat{H}) := \{\boldsymbol{\varphi} \,|\, \boldsymbol{\varphi} \in \mathsf{L}^2([0,L]),\ \hat{H}_0\boldsymbol{\varphi} \in \mathsf{L}^2([0,L])\} \tag{A.6.4}$$

と書ける。二つ目の条件は $\hat{H}\boldsymbol{\varphi} \in \mathsf{L}^2([0,L])$ としてもよいわけだが、上のように書いておけば $\mathsf{D}_{\max}(\hat{H})$ がポテンシャルの選び方に依存しない（つまり、ポテンシャルを変えても状態空間は変わらない）ことがはっきりとわかるだろう（もちろん $\mathsf{D}_{\max}(\hat{H}) = \mathsf{D}_{\max}(\hat{H}_0)$ である）。これから先、他の定義域を定める際にも「はみ出ない」条件は $\hat{H}_0\boldsymbol{\varphi} \in \mathsf{L}^2([0,L])$ と書くことにする。

いうまでもなくこの定義域 (A.6.4) は広すぎる。そのため、任意の複素数 E が $\mathsf{D}_{\max}(\hat{H})$ 上の演算子としての $\hat{H}$ の固有値になってしまうのである。エネルギーが任意の複素数値をとるのでは物理には使えない。

任意の複素数が固有値であることは以下のようにして簡単に示せる。任意の $E \in \mathbb{C}$ を選び、(A.6.1) に対応するシュレディンガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi''(x) + V(x)\varphi(x) = E\,\varphi(x) \tag{A.6.5}$$

を、$\varphi(x)$ を決める常微分方程式とみなそう。本文の・・での議論と同様に、x を時間、$\varphi(x)$ を位置と思えば (A.6.5) はニュートン方程式ということになる。「初期条件」を適当に $\varphi(0)=1,\ \varphi'(0)=1$ とでも決めれば、常微分方程式の一般論から、すべての $x \in [0,L]$ で (A.6.5) を満たす複素数値関数 $\varphi(x)$ が一意的に定まることがいえる。これが（勝手に決めた）固有値 E に対応する固有状態である。自由粒子のハミルトニアン $\hat{H}_0$ の場合は特に簡単で（運動量の場合と同様）任意の $\alpha \in \mathbb{C}$ について $\xi_\alpha(x) = A\,e^{\alpha x}$（$A$ はゼロでない定数）とすると、$\hat{H}_0\boldsymbol{\xi}_\alpha = -(\hbar^2\alpha^2)/(2m)\,\boldsymbol{\xi}_\alpha$ となり、$\boldsymbol{\xi}_\alpha$ が $\hat{H}_0$ の固有状態とわかる。固有値は $E = -(\hbar^2\alpha^2)/(2m)$ であり、任意の複素数値を取る。

もちろん、こんなことになったのは、定義域 $\mathsf{D}_{\max}(\hat{H}_0)$ 上の $\hat{H}_0$ がエルミート演算子ではないからだ。

■エルミート性の条件　部分積分を二回行なうことで、ハミルトニアン (A.6.1) と任意の $\boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\psi} \in \mathsf{D}_{\max}(\hat{H})$ について、

$$\langle \boldsymbol{\psi}, \hat{H}\boldsymbol{\varphi} \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\overline{\psi(L)}\varphi'(L) - \overline{\psi(0)}\varphi'(0) - \overline{\psi'(L)}\varphi(L) + \overline{\psi'(0)}\varphi(0)\right\} + \langle \hat{H}\boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{\varphi} \rangle \quad \text{(A.6.6)}$$

が示せる（問題 8.2.1.c を参照）。ポテンシャルについては当たり前に $\langle \boldsymbol{\psi}, \hat{V}\boldsymbol{\varphi} \rangle = \langle \hat{V}\boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{\varphi} \rangle$ が成り立つから、この条件に $V(x)$ は顔を出さないことに注意しよう。

(A.6.6) は運動量についての (A.2.5) に相当する関係である。エルミート性

$$\langle \boldsymbol{\psi}, \hat{H}\boldsymbol{\varphi} \rangle = \langle \hat{H}\boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{\varphi} \rangle \quad \text{(A.6.7)}$$

が成立するための必要十分条件は

$$\overline{\psi(L)}\varphi'(L) - \overline{\psi(0)}\varphi'(0) - \overline{\psi'(L)}\varphi(L) + \overline{\psi'(0)}\varphi(0) = 0 \quad \text{(A.6.8)}$$

であることがわかる。

一般の $\boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\psi} \in \mathsf{D}_{\max}(\hat{H})$ について (A.6.8) が成り立たないことは明らかだろう。当然だが、$\mathsf{D}_{\max}(\hat{H})$ 上の $\hat{H}$ はエルミート演算子ではない。

■狭すぎる定義域　またしてもわざとらしいが、

$$\mathsf{D}_{00}(\hat{H}) := \{\boldsymbol{\varphi} \,|\, \boldsymbol{\varphi} \in \mathsf{L}^2([0,L]),\ \hat{H}_0\boldsymbol{\varphi} \in \mathsf{L}^2([0,L]),\ \varphi(0) = \varphi(L) = 0,\ \varphi'(0) = \varphi'(L) = 0\} \quad \text{(A.6.9)}$$

という定義域を考えてみよう。区間の両端では波動関数そのものも波動関数の導関数もゼロになるという、「ゼロゼロ境界」だ。任意の $\boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{\varphi} \in \mathsf{D}_{00}(\hat{H})$ について明らかに (A.6.8) が成り立つから、$\mathsf{D}_{00}(\hat{H})$ を定義域とするハミルトニアン $\hat{H}$ はエルミート演算子である（$\mathsf{D}_{00}(\hat{H})$ が $\mathsf{L}^2([0,L])$ の中で稠密なことも示せる）。

しかし、この定義域は狭すぎる。今度は、$\mathsf{D}_{00}(\hat{H})$ には $\hat{H}$ の固有状態は一つも入っていないのだ。それを見るには、再び E を任意の複素数として、シュレディンガー方程式 (A.6.5) を $\varphi(x)$ を決めるための常微分方程式とみなす。今度は境界条件に対応し、「初期条件」は $\varphi(0) = \varphi'(0) = 0$ となるわけだが、それに対応する常微分方程式の解は $\varphi(x) = 0$ のみである。

実際、この定義域をとると $\hat{H}$ が自己共役でないことが条件 (A.6.8) をよく見ればわかる。$\boldsymbol{\varphi} \in \mathsf{D}_{00}(\hat{H})$ ならば、$\varphi(0), \varphi(L), \varphi'(0), \varphi'(L)$ は全てゼロだから $\boldsymbol{\psi}$ が何だろうと条件 (A.6.8) は成立する。つまり $\mathsf{D}(\hat{H}^*) = \mathsf{D}_{\max}(\hat{H})$ である。ゼロ境界で運動量演算子を考えたときもそうだったが、$\boldsymbol{\varphi}$ が「一人でがんばりすぎ」なのだ。自己共役になるには $\boldsymbol{\varphi}$ と $\boldsymbol{\psi}$ が「同じくらいがんばって」条件 (A.6.8) を達成する必要があるのだ。

■ゼロ境界条件　おなじみのゼロ境界条件を課した状態の集まり

$$\mathsf{D}_0(\hat{H}) := \{\boldsymbol{\varphi}\,|\,\boldsymbol{\varphi}\in\mathsf{L}^2([0,L]),\ \hat{H}_0\boldsymbol{\varphi}\in\mathsf{L}^2([0,L]),\,\varphi(0)=\varphi(L)=0\} \tag{A.6.10}$$

は $\mathsf{D}_{\max}(\hat{H})$ より狭く $\mathsf{D}_{00}(\hat{H})$ より広い、ちょうどいい大きさの定義域だ。定義域 $\mathsf{D}_0(\hat{H})$ 上のハミルトニアン $\hat{H}$ はもちろんエルミート演算子だが、自己共役演算子でもある。

これを見るには $\boldsymbol{\varphi}\in\mathsf{D}_0(\hat{H})$ については、エルミート性の条件 (A.6.8) が

$$\overline{\psi(L)}\varphi'(L)-\overline{\psi(0)}\varphi'(0)=0 \tag{A.6.11}$$

となることに注意すればいい。これが任意の $\varphi'(0)$ と $\varphi'(L)$ について成り立たなくていけないのだから、$\psi(0)=\psi(L)=0$ が得られる。$\boldsymbol{\psi}$ も同じゼロ境界条件を満たすということだ。つまり、$\mathsf{D}(\hat{H}^*)=\mathsf{D}_0(\hat{H})$ であり、ゼロ境界条件での $\hat{H}$ が自己共役であることがわかった。「定義域 $\mathsf{D}_0(\hat{H})$ 上の $\hat{H}$」は「定義域 $\mathsf{D}_{00}(\hat{H})$ 上の $\hat{H}$」の自己共役拡大なのである。

また、$\mathsf{D}_0(\hat{H})$ 上のハミルトニアン $\hat{H}$ のスペクトル集合 $\mathrm{spec}(\hat{H})$ は固有値のみからなることが一般に示される*22。よって、定理 A.2 のスペクトル定理がそのまま適用できる。以下に述べる周期境界条件とノイマン境界条件の場合を課したハミルトニアンについても同じことがいえる。

■周期境界条件　やはりおなじみの周期境界条件を課した定義域

$$\mathsf{D}_{\mathrm{per}}(\hat{H}) := \{\boldsymbol{\varphi}\,|\,\boldsymbol{\varphi}\in\mathsf{L}^2([0,L]),\ \hat{H}_0\boldsymbol{\varphi}\in\mathsf{L}^2([0,L]),\,\varphi(0)=\varphi(L),\,\varphi'(0)=\varphi'(L)\} \tag{A.6.12}$$

はどうだろうか？　(A.5.3) の $\mathsf{D}_{\mathrm{per}}(\hat{p})$ とは違って波動関数の一階の導関数にも周期性を要求していることに注意しよう。

もちろん、この場合にも $\hat{H}$ はエルミートかつ自己共役になる。実際、$\boldsymbol{\varphi}\in\mathsf{D}_{\mathrm{per}}(\hat{H})$ ならエルミート性の条件 (A.6.8) は

$$\overline{\{\psi(L)-\psi(0)\}}\,\varphi'(0)-\overline{\{\psi'(L)-\psi'(0)\}}\,\varphi(0)=0 \tag{A.6.13}$$

と書きかえられる。これが任意の $\varphi(0)$ と $\varphi'(0)$ について成立するための条件は $\psi(0)=\psi(L)$ および $\psi'(0)=\psi'(L)$、つまり、上と同じ周期境界条件である。$\mathsf{D}(\hat{H}^*)=\mathsf{D}_{\mathrm{per}}(\hat{H})$ であり、周期境界条件での $\hat{H}$ が自己共役であることがわかった。「定義域 $\mathsf{D}_{\mathrm{per}}(\hat{H})$ 上の $\hat{H}$」も「定義域 $\mathsf{D}_{00}(\hat{H})$ 上の $\hat{H}$」の自己共役拡大なのである。

*22 自由粒子のハミルトニアン $\hat{H}_0$ については、(A.7.3) のように具体的に固有状態を求めて完全性を直接に証明すればよい。$\hat{H}_0$ についての結果と [4] の系 6.13 を合わせれば一般の $\hat{H}$ についてもスペクトルが固有値しかないことが証明できる。この証明法には汎用性がある。あるいは、1 次元系に特有の結果だが、[5] の Theorem 9.10 からも同じことがいえる。

■ノイマン境界条件 「定義域 $\mathsf{D}_{00}(\hat{H})$ 上の $\hat{H}$」の自己共役拡大は（本文でも何度も登場した）上の二つだけではない[*23]。例えばノイマン境界条件（の特別な場合）を課した定義域

$$\mathsf{D}_{\mathrm{N}}(\hat{H}) := \{\boldsymbol{\varphi}\,|\,\boldsymbol{\varphi}\in\mathsf{L}^2([0,L]),\ \hat{H}_0\boldsymbol{\varphi}\in\mathsf{L}^2([0,L]),\,\varphi'(0)=\varphi'(L)=0\} \tag{A.6.14}$$

をとっても $\hat{H}$ は自己共役になる。エルミート性の条件 (A.6.8) を吟味して確認してみると面白いと思う。

A.7 自由粒子の系でのエネルギーの測定と時間発展

ずっと抽象的な理論と計算が続いたので、初歩的な例として、ゼロ境界条件を課した有限区間上の自由粒子の系で、具体的な状態でのエネルギーの測定と時間発展を見ておこう[*24]。A.4 節で見た自己共役演算子の性質がどのように（普通は意識することなく）物理の現場に活かされているかが少しわかると思う。その際、「演算子の定義域などという難しいことは考えずに行列とベクトルの場合と同じように計算や推論を進めればいい」という、物理では「普通の」やり方がうまくいかない例も見ておくことにしよう[*25]。

A.6 節で見たように、(A.6.10) のゼロ境界条件を課した定義域

$$\mathsf{D}_0(\hat{H}_0) := \{\boldsymbol{\varphi}\,|\,\boldsymbol{\varphi}\in\mathsf{L}^2([0,L]),\ \hat{H}_0\boldsymbol{\varphi}\in\mathsf{L}^2([0,L]),\,\varphi(0)=\varphi(L)=0\} \tag{A.7.1}$$

上の自由粒子のハミルトニアン $\hat{H}_0=-\{\hbar^2/(2m)\}\frac{d^2}{dx^2}$ は自己共役演算子である。本文でもみたように、この場合の $\hat{H}_0$ のスペクトルは全て固有値であり、$n=1,2,\ldots$ について、エネルギー固有値は

$$E_n=\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\,n^2 \tag{A.7.2}$$

であり、対応するエネルギー固有状態は、

$$\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{L}}\,\sin\Bigl(\frac{n\pi}{L}x\Bigr),\quad x\in[0,L] \tag{A.7.3}$$

である。$\{\boldsymbol{\psi}_n\}_{n=1,2,\ldots}$ は全状態空間 $\mathsf{L}^2([0,L])$ の正規直交完全系である。

---

*23 [6] に可能な全ての自己共役拡大がまとめてある。

*24 自由粒子の場合はエネルギー固有状態やエネルギー固有値があからさまに（簡単に）計算できるので一般論のご利益（ごりやく）が感じられないというのも事実である。A.6 節での議論は、エネルギー固有値やエネルギー固有状態が計算できない、一般的なポテンシャルについても有効であることを強調しておこう。

*25 そうは言っても、269 ページの脚注 *2 に書いた考え方はほとんどの場合に正しい。

■放物線型の波動関数　規格化された放物線型の波動関数（状態）

$$\eta(x)=\frac{\sqrt{30}}{L^{5/2}}\,x(L-x),\quad x\in[0,L] \tag{A.7.4}$$

を考える[*26]。$\boldsymbol{\eta}$ は二乗可積分でゼロ境界条件を満たすから定義域 $\mathsf{D}_0(\hat{H}_0)$ に属している。状態 $\boldsymbol{\eta}$ をエネルギー固有状態によって

$$\boldsymbol{\eta}=\sum_{n=1}^{\infty}\alpha_n\boldsymbol{\psi}_n \tag{A.7.5}$$

と展開しよう。展開係数は（がんばって二回くらい部分積分することで）

$$\alpha_n=\langle\boldsymbol{\psi}_n,\boldsymbol{\eta}\rangle=\begin{cases}\dfrac{8\sqrt{15}}{\pi^3}\,\dfrac{1}{n^3} & n=1,3,5,\ldots,\\ 0 & n=2,4,6,\ldots\end{cases} \tag{A.7.6}$$

のように求められる。

状態 $\boldsymbol{\eta}$ においてエネルギー $\hat{H}_0$ を測定すると、確率 $|\alpha_n|^2$ で E_n という測定結果が得られる。エネルギーの期待値を定義どおりに愚直に計算すれば、

$$\langle\hat{H}_0\rangle_{\boldsymbol{\eta}}=\sum_{n=1}^{\infty}|\alpha_n|^2\,E_n=\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\Bigl(\frac{8\sqrt{15}}{\pi^3}\Bigr)^2\sum_{n=1,3,\ldots}\frac{1}{n^4}=\frac{5\hbar^2}{mL^2} \tag{A.7.7}$$

となる。また、エネルギーの二乗の期待値も、同様に、

$$\langle(\hat{H}_0)^2\rangle_{\boldsymbol{\eta}}=\sum_{n=1}^{\infty}|\alpha_n|^2(E_n)^2=\Bigl(\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\Bigr)^2\Bigl(\frac{8\sqrt{15}}{\pi^3}\Bigr)^2\sum_{n=1,3,\ldots}\frac{1}{n^2}=\frac{30\hbar^4}{m^2L^4} \tag{A.7.8}$$

と計算できる[*27]。

しかし、8.4.2 節で見たように、自己共役演算子の期待値はこんなふうに和をとって「ベタに」計算しなくても、演算子を状態で「挟む」ことで手軽に計算できるはずだ。それをやってみよう。まず、

$$(\hat{H}_0\boldsymbol{\eta})(x)=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\sqrt{30}}{L^{5/2}}\frac{d^2}{dx^2}\bigl\{x(L-x)\bigr\}=\frac{\sqrt{30}\,\hbar^2}{mL^{5/2}} \tag{A.7.9}$$

に注意すれば、$\hat{H}_0$ を $\boldsymbol{\eta}$ で両側から挟んだものは、

$$\langle\hat{H}_0\rangle_{\boldsymbol{\eta}}=\langle\boldsymbol{\eta},\hat{H}_0\boldsymbol{\eta}\rangle=\frac{\sqrt{30}\,\hbar^4}{mL^{5/2}}\int_0^L dx\,\eta(x)=\frac{5\hbar^2}{mL^2} \tag{A.7.10}$$

---

*26 これは「『普通に』計算すると変なことがおきる」有名な例である [2, 6, 7]

*27 $\sum_{n=1,3,\ldots}1/n^2=\pi^2/8$ および $\sum_{n=1,3,\ldots}1/n^4=\pi^4/96$ を用いた。

となる。2 次関数の積分だけで期待値が計算できた。もちろん、(わざわざ展開係数を求めて無限和をとった) (A.7.7) の計算よりも遥かに楽だ。エネルギーの二乗の期待値も同じようにやってみよう。(A.7.9) にさらに $\hat{H}_0$ を作用させれば $(\hat{H}_0)^2\boldsymbol{\eta}=0$ なので、$(\hat{H}_0)^2$ を $\boldsymbol{\eta}$ で両側から挟めば、

$$\langle(\hat{H}_0)^2\rangle_{\boldsymbol{\eta}} \stackrel{?}{=} \langle\boldsymbol{\eta},(\hat{H}_0)^2\boldsymbol{\eta}\rangle = 0 \tag{A.7.11}$$

となる。計算はこれ以上ないほどに楽だったが、結果は全く正しくない！　ちなみに、$\langle\hat{H}_0\boldsymbol{\eta},\hat{H}_0\boldsymbol{\eta}\rangle$ という量を計算すると、

$$\langle\hat{H}_0\boldsymbol{\eta},\hat{H}_0\boldsymbol{\eta}\rangle = \Bigl(\frac{\sqrt{30}\,\hbar^2}{mL^{5/2}}\Bigr)^2 L = \frac{30\hbar^2}{m^2L^4} \tag{A.7.12}$$

となり、これは (A.7.8) で求めた $\langle(\hat{H}_0)^2\rangle_{\boldsymbol{\eta}}$ の正しい値と一致する (しかも計算は定数の積分だけなのですごく楽だ！)。実際、「普通の計算」をしてよければ、$\langle\hat{H}_0\boldsymbol{\eta},\hat{H}_0\boldsymbol{\eta}\rangle$ は $\langle\boldsymbol{\eta},(\hat{H}_0)^2\boldsymbol{\eta}\rangle$ と等しいはずの量だった*28。

こういう妙なことになってしまったのは、もちろん、演算子の定義域を真面目に考えなかったからだ。放物線型の波動関数 $\boldsymbol{\eta}$ は確かに $\mathsf{D}_0(\hat{H}_0)$ に属しているが、(A.7.9) を見れば明らかなように、$\hat{H}_0\boldsymbol{\eta}$ はゼロ境界条件を満たさないので $\mathsf{D}_0(\hat{H}_0)$ には入っていない。ということは、$\boldsymbol{\eta}$ に $\hat{H}_0$ を一回だけ作用させる計算はしてもいいが、二回以上作用させる計算は「違法」なのだ。そう思って上の計算を見直すと、確かに、正しい結果を出した (A.7.10) と (A.7.12) は「合法的」にやっている！

「普通の計算」をしたつもりでも「違法」だと困ったことが起きる好例 (あるいは、悪例) として、同じ系での時間発展の問題を見ておこう。$\mathsf{D}_0(\hat{H}_0)$ 上の自由粒子のハミルトニアン $\hat{H}_0$ は自己共役だから、時間発展を表わす $\mathsf{L}^2([0,L])$ 上のユニタリー演算子 $\hat{U}(t)=\exp[-i\hat{H}_0t/\hbar]$ が存在する。時刻 0 での状態が $\boldsymbol{\psi}(0)$ なら時刻 t での状態は $\boldsymbol{\psi}(t)=\hat{U}(t)\,\boldsymbol{\psi}(0)$ となる。

ここで、時刻 0 での状態が放物線型の状態 $\boldsymbol{\eta}$ だったとしよう。「普通に」指数関数をテイラー展開して計算すれば、$n\ge 2$ については $\hat{H}_0^n\boldsymbol{\eta}=0$ だから、

$$\hat{U}(t)\,\boldsymbol{\eta} \stackrel{?}{=} \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\Bigl(-\frac{i\hat{H}_0t}{\hbar}\Bigr)^n\boldsymbol{\eta} = \boldsymbol{\eta} - \frac{i\sqrt{30}\,\hbar}{mL^{5/2}}\,t \tag{A.7.13}$$

のように時刻 t での状態が求められる。計算は楽だったが、これが正しい結果のはずがない！状態のノルムが時間に依存するし、そもそも時間発展のシュレディンガー方程式の解が 1 次関数ということはあり得ない*29。もちろん、エネルギー固有状態での展開を用いた (A.4.6) を使

*28 そもそもディラック記法ではこれら二つは同じ記号 $\langle\eta|\hat{H}_0\hat{H}_0|\eta\rangle$ で表わすしかないことを思い出そう。(もちろん、カッコを使えば、これらはそれぞれ $(\langle\eta|\hat{H}_0)(\hat{H}_0|\eta\rangle)$ および $\langle\eta|(\hat{H}_0\hat{H}_0|\eta\rangle)$ と書けるわけだが、こういうカッコはどんどん外していいというのがお約束だった。)

*29 (A.7.13) の「違法な」計算では演算子 $\hat{H}_0$ の指数関数 $\exp[-i\hat{H}_0t/\hbar]$ をテイラー展開している。演算子 $\hat{H}_0$ が有界でないのだからこのような展開は一般には正当化されない。ただし、場合によっては、このような展開が厳密な意味を持つこともある。[1] 17.1 節 b) あるいは [4] 2.7 節の解析ベクトルについての解説をみよ。

えば、時間発展のシュレディンガー方程式 (A.4.7) を満たす状態が得られる。

■一定値をとる波動関数　より極端な例として、一定値をとる規格化された波動関数（状態）

$$\kappa(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \tag{A.7.14}$$

を考えよう。$\boldsymbol{\kappa}$ はもちろん全状態空間 $\mathsf{L}^2([0,L])$ に属するが、ゼロ境界条件を破るので $\mathsf{D}_0(\hat{H}_0)$ の元ではない。それでも $\{\boldsymbol{\psi}_n\}_{n=1,2,\ldots}$ は全状態空間 $\mathsf{L}^2([0,L])$ の正規直交完全系なので、この状態を

$$\boldsymbol{\kappa} = \sum_{n=1}^{\infty} \beta_n \boldsymbol{\psi}_n \tag{A.7.15}$$

のように展開できる[*30]。展開係数は簡単な積分によって

$$\beta_n = \langle \boldsymbol{\psi}_n, \boldsymbol{\kappa} \rangle = \begin{cases} \dfrac{2\sqrt{2}}{\pi}\dfrac{1}{n} & n = 1,3,5,\ldots, \\ 0 & n = 2,4,6,\ldots \end{cases} \tag{A.7.16}$$

と求められる。

よって状態 $\boldsymbol{\kappa}$ においてエネルギーを測定したとき E_n という値が得られる確率は、n が偶数ならゼロであり、n が奇数なら $8/(\pi n)^2$ である。$E_n \propto n^2$ だからエネルギーの期待値 $\langle \hat{H}_0 \rangle_{\boldsymbol{\eta}} = \sum_{n=1}^{\infty} |\beta_n|^2 E_n$ は無限大になる。ただし、期待値が無限大だからといってエネルギーを測定したら「無限大」が得られる（そして装置が爆発する）というわけではないことに注意しよう。測定される値はいつも有限だが積算して期待値を求めると発散するということだ。このような状態を用意できるかどうかは別として、状態 $\boldsymbol{\kappa}$ でのエネルギーの測定に原理的な問題はない。

次に時間発展を見よう。素朴に考えると、$\hat{H}_0 \boldsymbol{\kappa} = 0$ だから状態 $\boldsymbol{\kappa}$ はそのままシュレディンガー方程式 (A.4.7) の定常解になっていると結論しそうになる。しかし、ゼロ境界条件というのは $x = 0$ と $x = L$ に無限に高いポテンシャルの壁のある状況なのだから、一定値をとる波動関数が定常解というのは物理的に考えても明らかにおかしい。状態 $\boldsymbol{\kappa}$ がシュレディンガー方程式の定常解なのは周期境界条件を課した場合の話だ。

状態 $\boldsymbol{\kappa}$ を初期状態とした時間発展は、A.4 節で述べた「シュレディンガー方程式では記述できないが時間発展演算子 $\hat{U}(t)$ で記述できる現象」の例である。実際、時間発展演算子の定義

[*30] この展開を $\kappa(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \beta_n \psi_n(x)$ と書いて $x = 0$ を代入すると、左辺は $\kappa(0) = 1$ だが右辺は $\sum_{n=1}^{\infty} \beta_n \psi_n(0) = 0$ となり等しくない。これは (A.7.15) の等式が、各点収束ではなく、(A.4.2) の意味での収束を表わしているからである。すでに強調したように、状態についてのこのような等式の使い方は（物理的な観点からも）量子力学に適している。

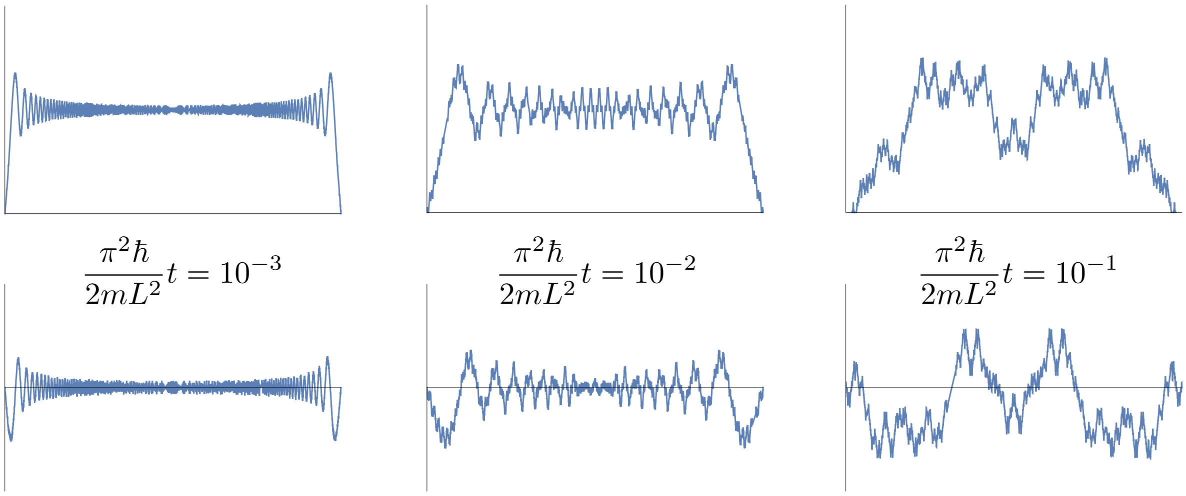

図 A.1 一定値をとる波動関数 (A.7.14) を初期状態とした場合のゼロ境界条件のもとでの自由粒子の時間発展。上段が波動関数の実部、下段が虚部を表わす。横軸はもちろん x（範囲は 0 から L）であり、縦軸は、実部については 0 から $2/\sqrt{L}$ まで、虚部については $-1/\sqrt{L}$ から $1/\sqrt{L}$ までの範囲を示している。Mathematica を用いて (A.7.17) の級数を 5000 項数値的に足し上げた。

(A.4.6) から時刻 t での波動関数が

$$(\hat{U}(t)\,\boldsymbol{\kappa})(x) = \frac{4}{\pi\sqrt{L}} \sum_{n=1,3,5,\ldots} \frac{1}{n^2}\, e^{-iE_n t/\hbar} \sin\!\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \tag{A.7.17}$$

となることがわかる。無限級数はもちろん任意の t において収束して（$\mathsf{L}^2([0,L])$ には入っているが $\mathsf{D}_0(\hat{H}_0)$ には属さない）状態が得られる。図 A.1 は三つの t の値で数値計算した波動関数のグラフである。これはもちろん人工的な例題だが、長さ L のリング状の領域に粒子を閉じ込めて基底状態に落ち着かせておき、ある瞬間にリングの一点に極めて高いポテンシャルの障壁を入れた状況を理想化したモデルと見ることができる。図 A.1 のグラフからも波動関数が壁の出現に「びっくりして」急激に形を変えている様子が見て取れる。

A.8 その他の系での自己共役演算子

これまで、ほとんど 1 次元の区間 $[0,L]$ 上の問題だけを考えてきたが、最後にもっと一般的な状況での演算子の自己共役性について簡単に触れておこう。

まず、無限に広がった 1 次元の世界、$\mathbb{R}$ 上での 1 粒子の問題を考える。この場合にも、状態空間は二乗可積分な関数の集まり

$$\mathsf{L}^2(\mathbb{R}) := \{\boldsymbol{\varphi} \mid \textstyle\int_{-\infty}^{\infty} dx\, |\varphi(x)|^2 < \infty\} \tag{A.8.1}$$

である。一般の演算子 $\hat{A}$ について、$\hat{A}\boldsymbol{\varphi}$ が $\mathsf{L}^2(\mathbb{R})$ の外に出ないことだけを考えて作った「め

いっぱい広い」定義域を

$$\mathsf{D}_{\max}(\hat{A}) := \{\boldsymbol{\varphi} \mid \boldsymbol{\varphi} \in \mathsf{L}^2(\mathbb{R}),\ \hat{A}\boldsymbol{\varphi} \in \mathsf{L}^2(\mathbb{R})\} \tag{A.8.2}$$

と書くことにしよう。応用にとって重要な位置演算子 $\hat{x}$、運動量演算子 $\hat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx}$、有界なポテンシャル $V(x)$ 中の粒子のハミルトニアン $\hat{H} = -\{\hbar^2/(2m)\}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$ は、いずれも定義域 $\mathsf{D}_{\max}(\hat{x})$, $\mathsf{D}_{\max}(\hat{p})$, $\mathsf{D}_{\max}(\hat{H})$ 上の演算子として自己共役であることが知られている。

これまでの例はいずれも人工的な例題だったが、数学の自己共役演算子の理論はもっと幅広い問題に適用できる。たとえば、3 次元においてクーロンポテンシャルを含むかなり一般的なポテンシャル中の粒子のハミルトニアンが適切な定義域のもとで自己共役になることが証明されている。ここで詳細に踏み込む余裕はないので [1, 4, 5] などの文献を参照していただきたい。特に [4] の 2 章には演算子の自己共役性についての詳しい解説がある。

参考文献

[1] 江沢 洋『量子力学 II』第 VI 部、岩波現代物理学の基礎 4（岩波オンデマンドブックス 2016 年）

[2] 井田 大輔『現代量子力学入門』（朝倉書店、近刊）

[3] 新井 朝雄、江沢 洋『量子力学の数学的構造 I, II』朝倉物理学大系 7, 8（朝倉書店）

[4] 新井 朝雄『量子現象の数理』朝倉物理学大系 12（朝倉書店）

[5] G. Teschl, *Mathematical Methods in Quantum Mechanics With Applications to Schrödinger Operators* (2nd ed), Graduate Studies in Mathematics 157 (American Mathematical Society, 2014)
以下の著者のサイトから合法的に pdf ファイルをダウンロードできる。
`https://www.mat.univie.ac.at/~gerald/ftp/book-schroe/schroe2.pdf`

[6] G. Bonneau, J. Faraut, and G. Valent, *Self-adjoint extensions of operators and the teaching of quantum mechanics*, Am. J. Phys. **69**, 322 (2001).
`https://arxiv.org/abs/quant-ph/0103153`

[7] F. Gieres, *Mathematical surprises and Dirac's formalism in quantum mechanics*, Rep.Prog.Phys. **63**, 1893 (2000).
`https://arxiv.org/abs/quant-ph/9907069v2`