

# 正準交換関係の大域化と量子力学における 作用域・境界・位相・測度の障害

議論整理ノート

2026年6月

## 概要

本稿は、円周上の角度と角運動量、極座標における動径運動量、Podolsky による曲線座標量子化、水素原子の運動量表示、有限区間の井戸型ポテンシャル、時間作用素、準正則表現および半密度形式を、一つの作用素論的観点から整理する。中心的主張は、形式的交換関係

$$[Q, P] = i\hbar 1$$

が局所的な微分式として成立することと、自己共役作用素が Weyl 関係を満たし、大域的なユニタリ変換群を生成することとは同値でない、という点である。配置空間の位相、境界、自然測度、作用域、スペクトル制約が、この差を生む。

## 目次

1	問題の所在：形式計算から作用素論へ	3
2	円周 $S^1$ 上の角度と角運動量	3
2.1	角運動量は自己共役だが、角度は大域座標ではない	3
2.2	通常の Robertson 不等式が破綻する理由	4
2.3	自然な量は $e^{i\theta}$	5
3	$\mathbb{R}^2 \cdot \mathbb{R}^n$ の極座標と動径運動量	5
3.1	自然測度と形式的対称性	5
3.2	対称性と自己共役性は異なる	6
3.3	幾何学的直観：半群はあるが群はない	6
3.4	$p_r^2$ と動径運動エネルギー	7
4	Podolsky の曲線座標量子化	7
4.1	古典的同値式は量子論では同値でない	7
4.2	自然測度表示と平坦測度表示	8
4.3	Euclid 空間の曲線座標と真に曲がった配置空間	8

5	水素原子の運動量表示と Lombardi–Ogilvie の問題提起	8
5.1	二つの「運動量表示」	9
5.2	Lombardi–Ogilvie の批判の位置づけ	9
6	有限区間と無限井戸	9
6.1	一次微分作用素の自己共役拡張	9
6.2	無限井戸 Hamiltonian との不一致	10
6.3	有限区間は半直線への単純な反例ではない	10
7	半密度と準正則表現	10
7.1	平方根 Jacobian の由来	10
7.2	Podolsky · DeWitt · 半密度の統一	11
7.3	経路積分との関係	11
8	時間作用素と CCR / Weyl 関係	12
8.1	Pauli 型議論の強い仮定	12
8.2	Galapon 型時間作用素	12
9	統一的整理	12
9.1	各例に現れる障害	12
9.2	局所 Lie 代数と大域 Lie 群	13
9.3	実際の問題を調べる手順	14
付録 A	付録 A：境界形式から見る対称性	15
付録 B	付録 B：角度不確定性の境界項	15
付録 C	付録 C：半直線運動量の deficiency indices	15
付録 D	付録 D：用語上の注意	16

## 1 問題の所在：形式計算から作用素論へ

量子力学では、古典的正準変数  $(q, p)$  に対して

$$\{q, p\} = 1 \quad \longrightarrow \quad [Q, P] = i\hbar \mathbf{1}$$

と置く。しかし、無限次元 Hilbert 空間上の作用素は一般に非有界であり、交換子は単なる代数式ではない。実際、

$$[Q, P]\psi = (QP - PQ)\psi$$

を定義するには少なくとも

$$\psi \in \text{Dom}(QP) \cap \text{Dom}(PQ)$$

が必要である。さらに、 $Q$  と  $P$  が対称か、自己共役か、どの境界条件をもつか、それぞれの指数関数が全実数パラメータのユニタリ群を作るかは別問題である。

### 三段階の区別

本稿で一貫して区別するのは次の三段階である。

1. **形式的微分式**：たとえば  $[-i\hbar\partial_q, q] = -i\hbar$ 。
2. **稠密部分空間上の正準交換関係**：ある共通作用域  $\mathcal{D}$  上で  $[Q, P] = i\hbar \mathbf{1}$ 。
3. **Weyl 関係**：自己共役作用素の指数関数が

$$e^{isQ}e^{itP} = e^{-ist\hbar}e^{itP}e^{isQ}$$

を全ての  $s, t \in \mathbb{R}$  について満たす。

一般に  $3 \Rightarrow 2$  であるが、 $2 \Rightarrow 3$  ではない。

この差は、円周  $S^1$ 、半直線  $\mathbb{R}_+$ 、有限区間  $[0, a]$  など、配置空間が  $\mathbb{R}$  でない場合に特に顕著になる。

## 2 円周 $S^1$ 上の角度と角運動量

### 2.1 角運動量は自己共役だが、角度は大域座標ではない

Hilbert 空間を

$$\mathcal{H} = L^2(S^1, d\theta) \simeq L^2([0, 2\pi), d\theta)$$

とする。周期的境界条件

$$\psi(2\pi) = \psi(0)$$

を含む適切な Sobolev 作用域上で、角運動量作用素

$$L = -i\hbar \frac{d}{d\theta}$$

は自己共役であり、固有状態と固有値は

$$\psi_m(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\theta}, \quad L\psi_m = m\hbar\psi_m, \quad m \in \mathbb{Z}$$

である。

一方、 $\theta$  は円周上の大域的な一価実関数ではない。切断点を選んで  $[0, 2\pi)$  上の掛け算作用素

$$(\Theta\psi)(\theta) = \theta\psi(\theta)$$

を定義することはできる。この  $\Theta$  自体は有界自己共役作用素である。しかし、それは切断点に依存し、回転に対して内在的ではなく、しかも一般に

$$\Theta \text{Dom}(L) \not\subset \text{Dom}(L)$$

である。周期関数  $\psi$  に  $\theta$  を掛けると、端点で周期条件が失われるからである。

したがって形式的な

$$[L, \Theta] = -i\hbar 1$$

を、自己共役作用素の共通不変作用域上の等式として無条件に使うことはできない。

## 2.2 通常の Robertson 不等式が破綻する理由

Robertson 型不等式

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle|$$

は、 $A\psi, B\psi, AB\psi, BA\psi$  が適切に定義されることを前提とする。角度と角運動量では、この作用域条件がまさに問題になる。

角運動量固有状態では

$$\Delta L = 0$$

であるが、角度分布は一様

$$|\psi_m(\theta)|^2 = \frac{1}{2\pi}$$

である。区間表示の通常分散は有限であり、たとえば切断を  $[-\pi, \pi)$  に取れば

$$(\Delta\Theta)^2 = \frac{\pi^2}{3}.$$

これは矛盾ではない。そもそも状態非依存の

$$\Delta L \Delta\Theta \geq \frac{\hbar}{2}$$

が成立していないからである。

より正確には、区間  $[0, 2\pi)$  で部分積分すると境界項を含む不等式

$$\Delta\Theta \Delta L \geq \frac{\hbar}{2} |1 - 2\pi|\psi(0)|^2|$$

が得られる。角運動量固有状態では  $|\psi(0)|^2 = 1/(2\pi)$  なので、右辺は 0 になる。

#### 「角度が完全に不確定」の意味

実直線上では分布が広がるほど位置分散が大きくなる。しかし円周はコンパクトなので、「角度が完全に不確定」とは分散が無限になることではなく、確率分布が一様になることである。線形分散をそのまま円周へ移すと、切断点依存性が残る。

### 2.3 自然な量は $e^{i\theta}$

円周上で大域的に定義されるのは角度そのものではなく

$$U = e^{i\Theta}$$

である。これはユニタリ作用素で、

$$[L, U] = \hbar U$$

を満たす。角度の集中度は

$$|\langle U \rangle| = |\langle e^{i\theta} \rangle|$$

や circular variance

$$V_{\text{circ}} = 1 - |\langle e^{i\theta} \rangle|^2$$

で測る方が自然である。これは、円周の群構造を保った定式化である [4, 5, 6]。

## 3 $\mathbb{R}^2 \cdot \mathbb{R}^n$ の極座標と動径運動量

### 3.1 自然測度と形式的対称性

$\mathbb{R}^n$  の極座標では体積要素は

$$d^n x = r^{n-1} dr d\Omega$$

である。したがって動径部分の Hilbert 空間は

$$L^2(\mathbb{R}_+, r^{n-1} dr)$$

となる。この測度に関して  $-i\hbar\partial_r$  は形式的に対称ではない。形式的に対称な一次微分作用素は

$$p_r = -i\hbar \left( \frac{d}{dr} + \frac{n-1}{2r} \right)$$

である。

特に

$$n=2: \quad p_r = -i\hbar \left( \partial_r + \frac{1}{2r} \right), \quad n=3: \quad p_r = -i\hbar \left( \partial_r + \frac{1}{r} \right).$$

この補正項は、自然測度の Jacobian から生じる。実際、ユニタリ写像

$$U : L^2(\mathbb{R}_+, r^{n-1} dr) \longrightarrow L^2(\mathbb{R}_+, dr), \quad (U\psi)(r) = r^{(n-1)/2} \psi(r)$$

によって

$$U p_r U^{-1} = -i\hbar \frac{d}{dr}$$

となる。

### 3.2 対称性と自己共役性は異なる

$L^2(\mathbb{R}_+, dr)$  上で

$$P_+ = -i\hbar \frac{d}{dr}$$

を、たとえば

$$\text{Dom}(P_+) = \{f \in L^2 : f \text{ は局所絶対連続, } f' \in L^2, f(0) = 0\}$$

上に定義すると、 $P_+$  は閉対称作用素になる。しかし随伴作用素の deficiency 方程式

$$P_+^* f = \pm i\lambda f$$

の平方可積分解は一方の符号にしか存在せず、deficiency indices は不等しい。したがって  $P_+$  は自己共役でなく、自己共役拡張も持たない。動径運動量  $p_r$  もこれとユニタリ同値なので同じ結論になる [7]。

#### 教科書の表現の現代的読み替え

- 「 $p_r$  はエルミート」：適切な小さい作用域上で対称である。
- 「 $p_r$  はエルミートだがオブザーバブルではない」：自己共役でないため、通常の射影値測定による可観測量ではない。
- 「 $r$  に共役な運動量は存在しない」： $r$  と強い意味で正準共役な自己共役作用素、特に Weyl 関係を満たす並進生成子は存在しない。

これらは必ずしも互いに矛盾しない。

### 3.3 幾何学的直観：半群はあるが群はない

自己共役作用素  $P_r$  が存在すれば Stone の定理により

$$e^{-iaP_r/\hbar}, \quad a \in \mathbb{R}$$

は双方向のユニタリ群になる。正準的な並進であれば  $r$  を  $r+a$  に移すはずである。しかし半直線では、右方向への移動はできて、原点を越える左方向への移動は全状態について可逆に定義できない。

実際、右シフトは

$$(S_a f)(r) = \begin{cases} f(r-a), & r \geq a, \\ 0, & 0 < r < a \end{cases} \quad (a > 0)$$

という等長写像半群を作るが、全射ではなくユニタリでない。この「群ではなく半群」という事実が、半直線上の運動量の非自己共役性を幾何学的に表している。

ただし、形式的 CCR だけから直ちに非自己共役性を証明する議論には注意が必要である。有限区間では、位置のスペクトルが有界でも、別の境界条件を課した一次微分作用素に自己共役拡張が存在し、狭い共通部分空間上で CCR が成立し得る。このため、厳密な結論には作用域または deficiency indices の検討が必要である [7, 9]。

### 3.4 $p_r^2$ と動径運動エネルギー

形式的に計算すると

$$p_r^2 = -\hbar^2 \left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{n-1}{r} \frac{d}{dr} + \frac{(n-1)(n-3)}{4r^2} \right).$$

したがって自由 Hamiltonian の分解は

$$H = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{L^2}{2mr^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{(n-1)(n-3)}{4r^2}$$

となる。追加項は  $n = 1, 3$  では消えるが、 $n = 2$  では消えない [8]。さらに、ここでの等式は微分式としての等式であり、 $p_r^2$  と自己共役 Hamiltonian の作用域が自動的に一致するわけではない。

## 4 Podolsky の曲線座標量子化

### 4.1 古典的同値式は量子論では同値でない

Podolsky の 1928 年論文は、Cartesian 座標で正しい置換

$$p_j \mapsto -i\hbar \partial_{x_j}$$

を、一般座標の古典 Hamiltonian にそのまま適用すると誤った Schrödinger 方程式を与え得ることを、水素原子の球座標表示を例に示した [1]。なお、この論文は 1929 年ではなく、*Physical Review* 32, 812–816 (1928) である。

古典的運動エネルギー

$$T = \frac{1}{2m} g^{ij}(q) p_i p_j$$

では  $g^{ij}$  と  $p_i$  は通常の数なので順序は問題にならない。しかし量子化後は

$$[p_i, g^{jk}(q)] \neq 0$$

であるから、

$$g^{ij} p_i p_j, \quad p_i g^{ij} p_j, \quad g^{-1/4} p_i g^{1/2} g^{ij} p_j g^{-1/4}$$

などは別の作用素になる。

## 4.2 自然測度表示と平坦測度表示

Riemann 計量  $g_{ij}$  をもつ配置空間上で、スカラー波動関数を

$$\mathcal{H}_g = L^2(M, \sqrt{g} d^n q)$$

に置くと、標準的な運動エネルギーは Laplace–Beltrami 作用素

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_g, \quad \Delta_g = \frac{1}{\sqrt{g}} \partial_i (\sqrt{g} g^{ij} \partial_j)$$

で与えられる。

一方、波動関数を

$$\tilde{\psi} = g^{1/4} \psi$$

として平坦測度  $d^n q$  の Hilbert 空間へ移すと、Hamiltonian は

$$\tilde{H} = \frac{1}{2m} g^{-1/4} p_i g^{1/2} g^{ij} p_j g^{-1/4} + V, \quad p_i = -i\hbar \partial_i,$$

という Podolsky 型の順序になる。Podolsky 論文が区別した二種類の波動関数の規格化は、現代的にはこのユニタリ変換として理解できる。

### 二つの問題を混同しない

Podolsky の主要問題は、測度と演算子順序を正しく選び、正しい微分作用素を得ることである。しかし、得られた一次作用素が自己共役かどうかは別問題である。動径運動量では、形式的対称な式を選んでも半直線の境界により自己共役性が失敗する。

## 4.3 Euclid 空間の曲線座標と真に曲がった配置空間

$\mathbb{R}^n$  を極座標で書き直すだけなら、空間の Riemann 曲率はゼロであり、必要なのは主として Jacobian、Laplace–Beltrami 作用素、作用域の処理である。これに対し、真に曲がった配置空間上の量子化では、採用する量子化法や経路積分の正規化によって  $\hbar^2 R$  型の項が問題になることがある。これは Podolsky の Euclid 空間内の座標変換問題から一段進んだ量子化の非一意性であり、区別して扱うべきである [3]。

## 5 水素原子の運動量表示と Lombardi–Ogilvie の問題提起

## 5.1 二つの「運動量表示」

水素原子については、少なくとも次の二つを区別する必要がある。

1. Cartesian 運動量  $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$  の同時スペクトル表示：

$$\tilde{\psi}(\mathbf{p}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int_{\mathbb{R}^3} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar} \psi(\mathbf{x}) d^3x.$$

これは通常の Fourier 変換であり、確立した自己共役な三つの Cartesian 運動量のスペクトル表示である。積分を球座標で計算すること自体には問題はない。

2.  $(r, \theta, \phi)$  の各座標に形式的に共役な  $(p_r, p_\theta, p_\phi)$  を独立の自己共役可観測量とみなし、それらの固有関数で展開する表示。この解釈には、角度の大域性と動径運動量の自己共役性の障害がある。

したがって、「Cartesian Fourier 変換で得られる水素原子の運動量空間波動関数」と「自己共役な radial momentum のスペクトル表示」は同じものではない。

## 5.2 Lombardi–Ogilvie の批判の位置づけ

Lombardi と Ogilvie は、Podolsky–Pauling の球座標的運動量変数の扱いが、Podolsky 自身の曲線座標量子化の注意と整合しないと批判し、DeWitt 型の変換を用いた別の表示を提案した [10, 11]。この問題提起は、

- 座標に「共役な運動量」を形式置換だけで定義してよいか、
- 自然測度に対する Hermite 形式をどう選ぶか、
- その作用素が自己共役可観測量か、

という本稿の主題と直接つながる。

ただし、彼らの「Fourier 変換は Cartesian 座標でのみ正しい」という表現は、そのまま受け取ると強すぎる。Fourier 変換は  $\mathbb{R}^3$  の加法群に対応する Cartesian 運動量のスペクトル変換であり、その積分を任意の座標で書き直せる。問題は、球座標の各座標に形式的に共役な変数を、Cartesian 運動量の球座標表示と同一視する点にある。

## 6 有限区間と無限井戸

### 6.1 一次微分作用素の自己共役拡張

Hilbert 空間

$$\mathcal{H} = L^2(0, a)$$

で最小運動量作用素

$$P_0 = -i\hbar \frac{d}{dx}, \quad \text{Dom}(P_0) = C_c^\infty(0, a)$$

を考える。これは対称だが自己共役ではない。半直線と異なり、二つの deficiency indices は等しいため、一パラメータ族の自己共役拡張を持つ。典型的な作用域は

$$\text{Dom}(P_\alpha) = \{\psi \in H^1(0, a) : \psi(a) = e^{i\alpha}\psi(0)\}, \quad \alpha \in [0, 2\pi)$$

である [9]。

この境界条件は端点を位相付きで貼り合わせるので、幾何学的には区間というより円周上の並進に対応する。

## 6.2 無限井戸 Hamiltonian との不一致

無限井戸の Hamiltonian は通常

$$H_D = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}, \quad \psi(0) = \psi(a) = 0$$

という Dirichlet 境界条件で自己共役にする。しかし Dirichlet 条件は、一次微分作用素  $-i\hbar d/dx$  の自己共役作用域ではない。

したがって無限井戸では、自己共役 Hamiltonian が存在しても、それを同じ Hilbert 空間上の自然な自己共役運動量  $P$  の平方

$$H_D = \frac{P^2}{2m}$$

として実現できるとは限らない。形式的な  $p^2/2m$  と、作用域まで含めた作用素の平方を区別する必要がある。

## 6.3 有限区間は半直線への単純な反例ではない

有限区間では自己共役な  $P_\alpha$  が存在し、 $X = x$  は有界自己共役であり、 $C_c^\infty(0, a)$  上では

$$[X, P_\alpha] = i\hbar \mathbf{1}$$

と形式的に書ける。しかし  $X$  は  $\text{Dom}(P_\alpha)$  を保存しない。したがってこの CCR は Weyl 関係へ指数化されない。この例は、

稠密部分空間上の CCR  $\not\equiv$  Weyl 関係

を具体的に示す。

## 7 半密度と準正則表現

### 7.1 平方根 Jacobian の由来

群  $G$  が測度空間  $(X, \mu)$  に作用するとき、単純な pullback

$$f(x) \mapsto f(g^{-1}x)$$

は、 $\mu$  が不変でなければユニタリでない。そこで準正則表現では

$$(U_g f)(x) = \left( \frac{d(g_*^{-1} \mu)}{d\mu}(x) \right)^{1/2} f(g^{-1} x)$$

と平方根 Jacobian を入れる。この因子は、確率密度ではなく振幅を変換するための  $1/2$  乗である [14]。

一パラメータ変換の生成ベクトル場を  $X$  とすると、生成子には概念的に

$$-i\hbar \left( X + \frac{1}{2} \operatorname{div}_\mu X \right)$$

が現れる。動径方向では  $\mu = r^{n-1} dr$  なので

$$\frac{1}{2} \operatorname{div}_\mu(\partial_r) = \frac{n-1}{2r},$$

したがって

$$p_r = -i\hbar \left( \partial_r + \frac{n-1}{2r} \right)$$

が得られる。

## 7.2 Podolsky · DeWitt · 半密度の統一

以下は同じ構造の異なる表現である。

- 曲線座標の自然測度  $\sqrt{g} d^n q$ 、
- 波動関数の変換  $\tilde{\psi} = g^{1/4} \psi$ 、
- 準正則表現の平方根 Radon–Nikodym 因子、
- 一次微分生成子の  $\frac{1}{2} \operatorname{div}$  補正、
- half-density としての波動関数。

これらは、座標変換のもとで内積を保つための局所的・測度論的補正を説明する。ただし、半直線の境界が作る deficiency indices の不均衡までは解消しない。すなわち half-density は「正しい形式的対称作用素」を与えるが、「自己共役性」を保証しない。

## 7.3 経路積分との関係

曲線座標の経路積分でも、時間分割測度、Jacobian、演算子順序、短時間核の選択が同じ問題を別の形で現す。崎田の多変数系・場の量子論や、その後の曲がった空間上の経路積分の議論では、古典的座標変換を量子経路積分へそのまま移すと追加項や測度因子を見落とすことが強調される [15, 3]。作用素形式と経路積分形式は、どちらも「量子化は単なる変数置換ではない」という点で合流する。

## 8 時間作用素と CCR / Weyl 関係

### 8.1 Pauli 型議論の強い仮定

Hamiltonian  $H$  と時間作用素  $T$  が自己共役で Weyl 関係を満たすなら、形式的には

$$e^{isT} H e^{-isT} = H - s\hbar$$

となり、 $H$  のスペクトルは任意の実数平行移動に不変でなければならない。したがって  $H$  が下に有界なら、この強い Weyl 型の正準共役は存在しない。

しかし、稠密部分空間  $\mathcal{D}$  上の

$$[T, H]\psi = i\hbar\psi, \quad \psi \in \mathcal{D}$$

から Weyl 関係が自動的に従うわけではない。松澤はこの点を明示し、半直線上の  $(q_+, p_+)$  を代表例としている [12]。

### 8.2 Galapon 型時間作用素

離散スペクトル

$$H e_n = E_n e_n$$

をもつ Hamiltonian に対して、Galapon 型時間作用素は概略

$$T\psi = i\hbar \sum_n \sum_{m \neq n} \frac{\langle e_m, \psi \rangle}{E_n - E_m} e_n$$

という形で構成される。CCR は Hilbert 空間全体でも各固有状態上でもなく、典型的には

$$\mathcal{D}_c = \text{l.i.h.} \{e_n - e_m : n, m \in \mathbb{N}\}$$

のような特別な稠密部分空間上で成立する。ここでも作用域の選択が本質である。

時間作用素の例は、角度・動径・有限区間と同じ論理構造を持つ。

- スペクトルが半直線または離散集合に制約される。
- 強い Weyl 関係はそのスペクトル制約と両立しない。
- それでも狭い稠密部分空間上の CCR は成立し得る。
- したがって「CCR が書ける」ことと「通常の正準対が存在する」ことは同じでない。

## 9 統一的整理

### 9.1 各例に現れる障害

対象	大域的制約	主な作用素論的帰結
角度 $\theta$ と $L$	配置空間が $S^1$ 、角度は周期的	枝を選んだ $\Theta$ は定義できるが、 $\text{Dom}(L)$ を保存せず、通常の $\Delta\theta\Delta L \geq \hbar/2$ は成立しない。 $e^{i\theta}$ が自然。
動径 $r$ と $p_r$	$r > 0$ 、原点に境界	形式的対称な $p_r$ は半直線運動量にユニタリ同値。deficiency indices が不等で自己共役拡張なし。
曲線座標 Hamiltonian	自然測度が $\sqrt{g} dq$	Jacobian と演算子順序が必要。正しい運動エネルギーは Laplace–Beltrami 型。
水素の運動量表示	Cartesian 運動量と座標共役変数の区別	Fourier 表示と radial momentum のスペクトル表示を同一視できない。
有限区間	両端境界	一次微分作用素には位相付き周期境界による自己共役拡張があるが、無限井戸の Dirichlet Hamiltonian とは作用域が異なる。
時間 $T$ と $H$	$H$ が半有界・離散的	強い Weyl 対は阻害されるが、適切な稠密部分空間上の CCR は成立し得る。

## 9.2 局所 Lie 代数と大域 Lie 群

形式的交換関係

$$[Q, P] = i\hbar 1$$

は、無限小変換、すなわち Lie 代数レベルの情報に対応する。これを指数化した Weyl 関係は、大域的な Lie 群表現の情報である。

この指数化には、

- 作用素の自己共役性、
- 指数関数の全実数パラメータでの存在、
- 共通不変作用域、
- 配置空間を保つ大域的群作用、
- スペクトルの平行移動不変性、

が必要である。円周の周期性、半直線の境界、有限区間の端点、Hamiltonian の下限は、この大域化を妨げる。

### 本稿の中心命題

正準共役とは、局所的な微分式  $[Q, P] = i\hbar$  だけで決まるものではない。二つの作用素の作用域、自己共役性、生成されるユニタリ群、配置空間の位相と境界、自然測度、スペクトルを合わせた大域的構造である。

### 9.3 実際の問題を調べる手順

新しい座標や新しい「共役運動量」が現れたときは、次の順序で調べると混乱が少ない。

1. 配置空間  $M$  と自然測度  $d\mu$  を確定する。
2. 形式的微分作用素ではなく、Hilbert 空間と作用域を明記する。
3. 部分積分で境界形式を求め、対称性を確認する。
4. 随伴作用素の作用域を求める。
5. deficiency indices または境界 triple により自己共役性・自己共役拡張を調べる。
6. CCR が成立する共通部分空間を明示する。
7. Weyl 関係への指数化が可能かを別途確認する。
8. 得られた作用素が生成する変換が、配置空間の大域構造を保つかを見る。
9. 不確定性関係を使う場合、Robertson 不等式の作用域条件と境界項を確認する。

## 付録 A 付録 A：境界形式から見る対称性

一次微分作用素  $P = -i\hbar d/dx$  について、十分正則な  $\phi, \psi$  に対して

$$\langle \phi, P\psi \rangle - \langle P\phi, \psi \rangle = -i\hbar \left[ \overline{\phi(x)}\psi(x) \right]_{x=a}^{x=b}$$

である。作用素の対称性は、この境界形式が作用域内の任意の二関数について消えることに対応する。

- 実直線：無限遠での消失条件により境界項が消える。
- 半直線：原点の条件が必要。対称にはできるが deficiency indices が不等。
- 有限区間： $\psi(b) = e^{i\alpha}\psi(a)$  により境界形式を消し、自己共役拡張が得られる。
- 円周：周期境界条件は有限区間の位相付き条件の  $\alpha = 0$  に相当する。

## 付録 B 付録 B：角度不確定性の境界項

$\mathcal{H} = L^2([0, 2\pi])$ 、 $L = -i\hbar d/d\theta$ 、 $\psi(2\pi) = \psi(0)$  とする。 $\mu = \langle \Theta \rangle$  と置くと Cauchy-Schwarz より

$$\Delta\Theta \Delta L \geq |\text{Im} \langle (\Theta - \mu)\psi, (L - \langle L \rangle)\psi \rangle|.$$

平均値を含む項は消えるので、部分積分から

$$\begin{aligned} \text{Re} \int_0^{2\pi} (\theta - \mu) \bar{\psi} \psi' d\theta &= \frac{1}{2} [(\theta - \mu)|\psi|^2]_0^{2\pi} - \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} |\psi|^2 d\theta \\ &= \pi |\psi(0)|^2 - \frac{1}{2}. \end{aligned}$$

したがって

$$\Delta\Theta \Delta L \geq \frac{\hbar}{2} |1 - 2\pi |\psi(0)|^2|.$$

右辺は切断点での確率密度を含むため、通常の線形分散が円周に内在的でないことも明瞭になる。

## 付録 C 付録 C：半直線運動量の deficiency indices

$\hbar = 1$  とし、 $P = -id/dr$  を半直線上の最小閉対称作用素として考える。随伴作用素の deficiency 方程式は

$$(P^* - i)f = 0, \quad (P^* + i)f = 0.$$

それぞれ

$$f_+(r) = Ce^{-r}, \quad f_-(r) = Ce^r$$

を与える。一方だけが  $L^2(0, \infty)$  に属するため、二つの deficiency indices は  $(1, 0)$  または符号規約により  $(0, 1)$  である。いずれにせよ不等なので、von Neumann の定理により自己共役拡張は存在しない。

## 付録 D 付録 D：用語上の注意

古い物理学文献では“Hermitian”、“real”、“self-adjoint”が必ずしも現在の作用素論の意味で区別されていない。

形式的 Hermite	微分式を部分積分したとき、境界項を無視すれば随伴と一致する。
対称作用素	$\text{Dom}(A) \subset \text{Dom}(A^*)$ かつ $A\psi = A^*\psi$ が $\text{Dom}(A)$ 上で成立する。
自己共役作用素	$A = A^*$ 、特に $\text{Dom}(A) = \text{Dom}(A^*)$ 。
本質的自己共役	閉包 $\bar{A}$ が自己共役。
最大対称	真に大きな対称拡張を持たないが、自己共役とは限らない。半直線運動量が代表例。

## 参考文献

- [1] B. Podolsky, “Quantum-Mechanically Correct Form of Hamiltonian Function for Conservative Systems,” *Physical Review* **32**, 812–816 (1928). <https://doi.org/10.1103/PhysRev.32.812>
- [2] P. A. M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics*, 4th ed., Oxford University Press; see especially pp. 152–153 in editions cited in the radial-momentum literature.
- [3] B. S. DeWitt, “Point Transformations in Quantum Mechanics,” *Physical Review* **85**, 653–661 (1952). <https://doi.org/10.1103/PhysRev.85.653>
- [4] P. Carruthers and M. M. Nieto, “Phase and Angle Variables in Quantum Mechanics,” *Reviews of Modern Physics* **40**, 411–440 (1968). <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.40.411>
- [5] Z. Hradil, J. Řeháček, Z. Bouchal, R. Čelechovský, and L. L. Sánchez-Soto, “Minimum uncertainty measurements of angle and angular momentum,” arXiv:quant-ph/0605137. <https://arxiv.org/abs/quant-ph/0605137>
- [6] S. Tanimura, “Uncertainty relation between angle and orbital angular momentum: interference effect in electron vortex beams,” arXiv:1411.0823. <https://arxiv.org/abs/1411.0823>
- [7] G. Paz, “The non-self-adjointness of the radial momentum operator in  $n$  dimensions,” *Journal of Physics A: Mathematical and General* **35**, 3727–3731 (2002), arXiv:math-ph/0009016. <https://arxiv.org/abs/math-ph/0009016>
- [8] G. Paz, “On the connection between the radial momentum operator and the Hamiltonian in  $n$  dimensions,” *European Journal of Physics* **22**, 337–342 (2001), arXiv:quant-ph/0009046. <https://arxiv.org/abs/quant-ph/0009046>
- [9] G. Bonneau, J. Faraut, and G. Valent, “Self-adjoint extensions of operators and the teaching of quantum mechanics,” *American Journal of Physics* **69**, 322–331 (2001), arXiv:quant-ph/0103153. <https://arxiv.org/abs/quant-ph/0103153>
- [10] J. R. Lombardi and J. F. Ogilvie, “The hydrogen atom in the momentum representation; a critique of the variables comprising the momentum representation,” *Chemical Physics* **538**, 110886 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.chemphys.2020.110886>
- [11] J. R. Lombardi, “The Momentum Representation of the Hydrogen Atom in Paraboloidal Coordinates,” arXiv:1906.02375. <https://arxiv.org/abs/1906.02375>
- [12] 松澤泰道, 「時間作用素と正準交換関係について」, 数理解析研究所講究録 **1658**, 78–83 (2009). <https://www.kurims.kyoto-u.ac.jp/~kyodo/kokyuroku/contents/pdf/1658-07.pdf>
- [13] S. Ohmori and J. Takahashi, “Rigged Hilbert Space Approach for Non-Hermite Systems with Positive Definite Metric,” arXiv:2209.01598. <https://arxiv.org/abs/2209.01598>
- [14] 小林俊行・大島利雄, リー群と表現論, 岩波書店, 2005年。
- [15] B. Sakita, *Quantum Theory of Many-Variable Systems and Fields*, World Scientific Lecture Notes in Physics, Vol. 1, World Scientific (1985).