Koopman-von Neumann 形式の力学

かしゃるふぁ

2018 年 2 月 15 日

このノートでは Koopman-von Neumann 形式の力学について解説をする（ただし、証明は全て省く）。Koopman-von Neumann 形式の力学は、時間発展が Liouville 方程式で記述される古典力学を、量子力学のようなヒルベルト空間と演算子を用いた形で書き換えた理論である。古典速度限界を示すのに、この形式が使われている [1]。

1 Koopman-von Neumann 形式の力学

まず分布関数についての古典力学を復習しよう。時刻 t における相空間の分布関数を $\rho(t,x,p)$ とする。分布関数は規格化条件 $\int dxdp\rho(t,x,p)=1$ を満たす。この分布関数の時間発展は Liouville 方程式

$$i\frac{\partial}{\partial t}\rho(t,x,p)=i\left(-\frac{\partial H(x,p)}{\partial p}\frac{\partial}{\partial x}+\frac{\partial H(x,p)}{\partial x}\frac{\partial}{\partial p}\right)\rho(t,x,p)=:\hat{L}\rho(t,x,p) \tag{1}$$

により記述される。$\hat{L}$ は Liouville 演算子と呼ばれる。

ここで複素関数 $\psi(t,x,p)$ が規格化条件 $\int dxdp|\psi(t,x,p)|^2=1$ を満たし、また Liouville 方程式を満たすとしよう。

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi(t,x,p)=\hat{L}\psi(t,x,p) \tag{2}$$

すると、その絶対値の 2 乗 $\rho(t,x,p)=|\psi(t,x,p)|^2$ は分布関数と解釈でき、Liouville 方程式を満たすことが簡単に確かめられる。したがって $\psi(t,x,p)$ は古典系における波動関数みたいなもので、(2)式は波動関数の時間発展を記述するシュレディンガー方程式に相当することがわかる。ただし量子力学とは異なり、古典力学では位置 x と運動量 p は同時に測定ができる独立な物理量となるため、波動関数 $\psi(t,x,p)$ も位置 x と運動量 p 両方の関数となっている。また物理量 $A(x,p)$ の期待値 $\langle A\rangle$ も

$$\langle A\rangle:=\int dxdpA(x,p)\rho(t,x,p)=\int dxdp\psi^*(t,x,p)\hat{A}\psi(t,x,p) \tag{3}$$

と量子力学風に表すことができる。このように古典力学で分布関数 $\rho(t,x,p)$ の代わりに、$\psi(t,x,p)$ を用いて議論するのが Koopman-von Neumann 形式の力学である。

2 Koopman-von Neumann 形式の力学と量子力学の統合

次に Koopman-von Neumann 形式の力学と量子力学の両方を含んだ枠組みを考えてみよう。どちらの理論も状態が波動関数（状態ベクトル）で記述されるという共通点を持っている。そこで次の要請をする。

1. システムの状態は複素ヒルベルト空間の規格化されたベクトル $|\psi\rangle$ により表される（$\langle\psi|\psi\rangle = 1$)。
2. 物理量はエルミート演算子 $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$ であり、その期待値は $\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$ で与えられる。
3. 時間発展はあるエルミート演算子 $\hat{\mathcal{H}}$ を用いて、$i\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \hat{\mathcal{H}}|\psi(t)\rangle$ である。

Koopman‐von Neumann 形式の力学ではエルミート演算子 $\hat{\mathcal{H}}$ は Liouville 演算子 $\hat{L}$ で、量子力学では $\hat{\mathcal{H}}$ はハミルトニアンを $\hbar$ で割った $\hat{H}/\hbar$ である。位置演算子を $\hat{x}$、運動量演算子を $\hat{p}$ とする。これらの交換関係は、Koopman‐von Neumann 形式の力学では $[\hat{x}, \hat{p}] = 0$、量子力学では $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ である。

次に物理量の期待値 $\langle\psi(t)|\hat{x}|\psi(t)\rangle$ と $\langle\psi(t)|\hat{p}|\psi(t)\rangle$ の時間発展を議論しよう。物理量の期待値はニュートンの運動方程式に従うとことを課す。

$$m\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\hat{x}|\psi(t)\rangle = \langle\psi(t)|\hat{p}|\psi(t)\rangle \tag{4}$$
$$\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\hat{p}|\psi(t)\rangle = \langle\psi(t)| - U'(\hat{x})|\psi(t)\rangle \tag{5}$$

ここで $U(x)$ は系のポテンシャルであり、$U'(x)$ はポテンシャルを x で微分したものである、つまり $-U'(x)$ は力である。この仮定のもとで演算子 $\hat{\mathcal{H}}$ の満たすべき条件を導こう。運動方程式と要請 3 から、

$$im\langle\psi(t)|[\hat{\mathcal{H}}, \hat{x}]|\psi(t)\rangle = \langle\psi(t)|\hat{p}|\psi(t)\rangle \tag{6}$$
$$i\langle\psi(t)|[\hat{\mathcal{H}}, \hat{p}]|\psi(t)\rangle = \langle\psi(t)| - U'(\hat{x})|\psi(t)\rangle \tag{7}$$

が得られる。これが任意の状態ベクトルに対して成り立つとすると、

$$im[\hat{\mathcal{H}}, \hat{x}] = \hat{p},\ i[\hat{\mathcal{H}}, \hat{p}] = -U'(\hat{x}) \tag{8}$$

である。

量子力学の場合、(8)式の解を求めるのは簡単だ。$\hat{\mathcal{H}}$ が位置演算子を $\hat{x}$ と運動量演算子を $\hat{p}$ だけの関数だとすれば、正準交換関係を利用して

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{\hbar}\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\hat{x})\right) \tag{9}$$

と定まる。これは古典的なハミルトン関数 $H(x,p) = \frac{p^2}{2m} + U(x)$ を演算子にしたものに、$1/\hbar$ の定数倍を除いて一致している。

一方、古典系の場合には $\hat{x}$ と $\hat{p}$ は可換であるから、$\hat{\mathcal{H}}$ は $\hat{x}$ と $\hat{p}$ だけでは表すことができない。そこで新たな演算子 $\hat{\Lambda}_x, \hat{\Lambda}_p$ を導入し、これらが交換関係

$$[\hat{x}, \hat{\Lambda}_x] = [\hat{p}, \hat{\Lambda}_p] = i \tag{10}$$

を満たすとしよう。これら以外の交換関係はゼロとする: $[\hat{x}, \hat{p}] = [\hat{x}, \hat{\lambda}_p] = [\hat{p}, \hat{\lambda}_x] = [\hat{\lambda}_x, \hat{\lambda}_p] = 0$。以上の代数関係は KvN 代数とも呼ばれる。$\hat{\Lambda}_x, \hat{\Lambda}_p$ は補助的に導入した演算子であり、観測可能な物理量ではない。$\hat{\mathcal{H}}$ が $\hat{x}, \hat{p}$ に加えて、新たに加えた演算子 $\hat{\Lambda}_x, \hat{\Lambda}_p$ の関数だとすると、(8)式の解は

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}\hat{\Lambda}_x}{m} - U'(\hat{x})\hat{\Lambda}_p + f(\hat{x}, \hat{p}) \tag{11}$$

となる。ここで $f(x,p)$ は任意の実関数であり、$f(x,p) = 0$ とした場合には $\hat{\mathcal{H}}$ は Liouville 演算子 $\hat{L}$ に一致する。古典の場合には $\hat{\mathcal{H}}$ に不定性が残る。この不定性は分布関数 $\rho(t,x,p)$ の時間発展には効いてこない。実

際、波動関数 $\psi(t,x,p) := \langle x,p|\psi(t)\rangle$ に対する方程式は、

$$\left[i\frac{\partial}{\partial t} + i\frac{p}{m}\frac{\partial}{\partial x} - iU'(x)\frac{\partial}{\partial p} - f(x,p)\right]\psi(t,x,p) = 0 \tag{12}$$

となり、分布関数 $\rho(t,x,p) = |\psi(t,x,p)|^2$ の満たす方程式は

$$i\frac{\partial}{\partial t}\rho(t,x,p) = i\left[-\frac{p}{m}\frac{\partial}{\partial x} + U'(x)\frac{\partial}{\partial p}\right]\rho(t,x,p) \tag{13}$$

で Liouville 方程式に一致する。

以上の量子と古典の場合の議論を統合しよう。ここでは古典系の演算子を $\hat{x}, \hat{p}$ と書き、統合世界の位置と運動量演算子を $\hat{x}_\kappa, \hat{p}_\kappa$ とする。このとき交換関係は、

$$[\hat{x}_\kappa, \hat{p}_\kappa] = i\kappa\hbar,\ [\hat{x}_\kappa, \hat{\Lambda}_x] = [\hat{p}_\kappa, \hat{\Lambda}_p] = i \tag{14}$$

とする。ここで、$0 \le \kappa \le 1$ のパラメータを導入した。$\kappa = 1$ のとき量子の交換関係を再現し、$\kappa = 0$ のとき KvN 代数を再現する。$\hat{x}_\kappa, \hat{p}_\kappa$ の期待値について、ニュートンの運動方程式を課すと、時間発展の生成子 $\hat{\mathcal{H}}$ は

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{\hbar\kappa}\left(\frac{\hat{p}_\kappa^2}{2m} + U(\hat{x}_\kappa)\right) + f(\hat{x}_\kappa + \hbar\kappa\hat{\Lambda}_p, \hat{p}_\kappa - \hbar\kappa\hat{\Lambda}_x) \tag{15}$$

となる。ここで $\hat{x}_\kappa, \hat{p}_\kappa$ を古典系の演算子で表現してみよう。交換関係を満たすようにするためには、例えば

$$\hat{x}_\kappa = \hat{x} - \hbar\kappa\hat{\Lambda}_p/2,\ \hat{p}_\kappa = \hat{p} + \hbar\kappa\hat{\Lambda}_x/2 \tag{16}$$

が考えられる。これらは $\kappa \to 0$ の極限で古典の演算子に一致する。さらなる条件として、時間発展の生成子 $\kappa \to 0$ で $\hat{\mathcal{H}}$ が Liouville 演算子 $\hat{L}$ となるとしよう。すると不定性は無くなり、

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{\hbar\kappa}\left(\frac{\hat{p}_\kappa^2}{2m} + U(\hat{x}_\kappa)\right) - \frac{1}{\hbar\kappa}\left(\frac{1}{2m}(\hat{p}_\kappa - \hbar\kappa\hat{\Lambda}_x)^2 + U(\hat{x}_\kappa + \hbar\kappa\hat{\Lambda}_p)\right) \tag{17}$$

と定まる。これを古典の演算子で表すと、

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}\hat{\Lambda}_x}{m} + \frac{1}{\hbar\kappa}U(\hat{x} - \hbar\kappa\hat{\Lambda}_p/2) - \frac{1}{\hbar\kappa}U(\hat{x} + \hbar\kappa\hat{\Lambda}_p/2) \tag{18}$$

となり、確かに $\kappa \to 0$ で Liouville 演算子 $\hat{L} = \frac{\hat{p}\hat{\Lambda}_x}{m} - U'(\hat{x})\hat{\Lambda}_p$ に一致している。

参考文献

[1] Manaka Okuyama and Masayuki Ohzeki, Phys. Rev. Lett. **120**, 070402 (2018).

[2] Denys I. Bondar, Renan Cabrera, Robert R. Lompay, Misha Yu. Ivanov, and Herschel A. Rabitz Phys. Rev. Lett. **109**, 190403 (2012).