

# 量子力学の誕生と数学

仲 滋文

## はじめに

20 世紀前半に基本的構造の確立された量子力学は、19 世紀以降の成熟した数学の恩恵の下に奥行きのある体系をもつことができたが、同時に幾つかの要となる内容で物理から数学の側への興味深い揺さぶりを掛け、現在もなお“場の量子論”のような広いい意味での量子力学に関わる問題で刺激を与え続けている。以下、このような意識の下に、量子論と数学の交流をその誕生の前後を中心としながら、現在も続く 2 分野の合流と発展の歴史として整理する。

## 量子力学の背景をなす 19 ~ 20 世紀初頭の数学

幾何学を群論の立場から系統立てたエルランゲン・プログラムで知られる F. クラインは、1907 年から 1919 年にわたり数学と数理物理学に関わる歴史的視点を含む包括的な私的講義を行い、それが没（1925 年）後 1 年の内に「Vorlesungen über die Entwicklung der Mathematik im 19. Jahrhundert I（和訳：19 世紀の数学）」として刊行されている<sup>1)</sup>。その構成は、

19 世紀の数学（F. クライン, 1926）

§ 序論

§1 ガウス

§2 19 世紀初頭におけるフランスとエコール・ポリテクニク

§3 クレレ誌の創刊とドイツにおける純粋数学の開花

§4 メービウス・プリュッカー・シュタイナー以後の代数

§5 1880 年ころまでのドイツとイギリスにおける力学と数理物理学

§6 リーマンとヴァイエルシュトラスによる複素関数の一般論

## §7 代数的図形の本性に対する徹底的究明

## §8 群論と関数論；保型関数

となっている。章の表題から推察されるように、§4は線形空間や行列代数、その延長上にある  $n$  次元多様体の発展に触れたものであり、§5は正準力学や後に古典力学と量子力学の橋渡しの基礎となるポアソン括弧式、また電磁場の方程式に結び付く偏微分方程式の発展などが述べられている。これらは、いずれも量子力学の建設する上での数理物理学的背景として必要なものであり、そのあるものは物理の側から発展させられた。クラインは、§5の最後に「数学は絶えず物理学的な考え方を従えて進み、逆に数学は物理学のほうから提起された諸問題を通して強い刺激を受けた」と述べ、「次の章で再び純粋数学に戻る」と記している。ところが現代では、§8の主題を含むその後の章の内容も再び物理学の発展に重要な意味を持つものとなっている。もちろん上書には、ヒルベルト(1904 ~ 1910)の積分方程式の研究に端を発し、ノイマンにより整備されたある種の位相空間の考え方<sup>2)</sup>は、まだ登場していない。これらは、量子力学建設の刺激の下で数学者によりその後の発展を得た分野であり、物理と数学が思いもよらぬ接点をもつことの証しとなった。

## 前期量子論の数学

ハイゼンベルグが量子力学の本質を明らかにする以前の前期量子論の試みは、古典力学の側から原子の力学の本質に迫ろうとする物理的創造力に富んだものであるが、数学的には19世紀の天体力学やハミルトン・ヤコビの正準力学の域を超えていない。例えば、水素原子に関するボーア理論の成功の延長上に発展したハミルトン・ヤコビの手法に基づく多重周期運動の理論では、まず作用関数が  $S = \int S_k(q_k)$  と書ける変数分離可能な多 ( $f$ ) 自由度周期系に対し作用変数

$$I_k = \oint p_k dq_k = n_k h, \quad (k=1, 2, \dots, f)$$

を定義し、角変数  $w_k = \frac{\partial S}{\partial I_k}$  を導入する。このとき、 $w_k$  は時間の1次関数  $w_k = v_k t + \text{const.}$  となり、 $q_k$  は  $n = (n_1, \dots, n_f)$  を整数の組としてフーリエ級数

$$q_k(t) = \sum_n C_n^{(k)} e^{2\pi i(n, w)}$$

に展開される。この方法は、本質的に 1846 年に Delaunay により天体力学で開発された手法と同等とも言える<sup>3)</sup>。前期量子論に至って、ゾンマーフェルト、ウイリソン、石原（1915）等<sup>4)</sup>が原子の力学として新たに付け加えたのは作用変数の量子化条件  $I_k = n_k h$ 、( $n_k =$  整数) であり、Delaunay の手法は 70 年を経て原子物理学への活用の路を開かれることになった。

ハミルトン・ヤコビの作用変数について、以下の二点を補足しておく。その一つは、作用関数の量子化条件に対するアインシュタインの考え方である。アインシュタインは  $p_k = \frac{\partial S_k}{\partial q_k}$  に注意して量子化条件を  $\oint dS = (\sum_k n_k) h$  と書き、ゾンマーフェルト等の条件を含むより広い要請と考えた<sup>5)</sup>。この右辺がゼロと異なるなら  $S$  は多価関数であり、この積分は量子論と相空間のトポロジック構造の関係を示唆している。もう一つは、 $\hbar$  をシュレディンガー方程式に含まれる摂動量とする考え方でハミルトン・ヤコビの理論を引き出す、*W.K.B* 近似（1926）の手法である。ヴェンツェル、ブリルアン<sup>6)</sup> は定常状態の波動関数を

$$\Psi = e^{iS/\hbar}, S = S_0 + (\frac{\hbar}{i}) S_1 + (\frac{\hbar^2}{i^2}) S_2 + \dots$$

と展開し、 $S_0$  がハミルトン・ヤコビの作用関数に他なら無いことを導いた。一方、クラマース<sup>7)</sup> は 1 次元の問題で  $S_1$  まで含めた波動関数を調べ、運動の回帰点における解の接続を注意深く検討することにより、前期量子論を修正する量子化条件  $I = (n + \frac{1}{2}) h$  を導いた。*W.K.B* の手法は、歴史的には数学者のジェフリー（1923）による先駆的な仕事もあり、現在では偏微分方程式の摂動論として数理物理学の一分野を形成している<sup>8)</sup>。しかし数学と物理の関わりとしては、1925 年以前には積分方程式の研究からヒルベルト、リース、バナッハらにより整備されつつあった関数空間論<sup>9)</sup> はまだ物理とは独立した路を歩んでおり、やがて  $\hbar$  の世界で激しい合流点を持つことは予想されていなかった。

## 量子力学の誕生と数学的背景

量子力学の誕生は、ハイゼンベルグの論文<sup>10)</sup>「運動学的かつ力学的な関係の量子論的再解釈（1925）」とされる。この論文で、ハイゼンベルグは観測可能な量子論的振動は状態ではなく状態間で生じること注目

し、力学変数を状態間の量子数対を持った要素の集合  $\{q_{n, n'}\}$  に対応させてクラマースの分散関係、非調和振動子のエネルギー等を導いた。2ヶ月後に出たボルン-ヨルダンの論文<sup>11)</sup>では、“ハイゼンベルグ(の力学変数の)積”が行列の積に対応すること、及び正準運動方程式の成立することから、行列の対角成分の意味で正準交換関係  $pq - qp = \frac{\hbar}{2\pi i}$  が導かれた。さらに2ヶ月後にディラック<sup>12)</sup>は、ハイゼンベルグ積で特徴づけられる力学変数の微分の代数的構造から、正準交換関係と古典力学のポアソン括弧の関係

$$xy - yx = \frac{\hbar}{2\pi i} \{x, y\}, \quad (\text{記号 } \{*, *\} \text{ はポアソン括弧})$$

を導き、古典力学から量子力学を導く“正準量子化”の手順を確立した。

さて、ボルンは、行列を相似変換と行列の対角化で知られるフロベニウスの系列の講義から学んでいたが、クラインの解説にあるように、固有値問題を含む行列理論は19世紀後半にケイリー等により整備され、ハミルトンの4元数もこの一例であることが明らかにされていた。ボルン-ヨルダンの論文に引用されているように、1924年には行列の解説を含んだクーラン-ヒルベルトの「数理物理学の方法」も出版され、物理学者にも行列の教養はあったと言える。ただし、量子論で扱われる行列は無次元行列で、これはフーリエ級数やある種の微分方程式の理論に内在していたが、より一般的には積分方程式の理論からヒルベルト、リース、ワイルなどにより関数解析として整備される途上にあった。ボルンは、初期の行列力学が多重周期運動に基礎を置くことを不満とし、1926年に「原子力学の諸問題」の講義を行うためにマサチューセッツ工科大学に滞在した際、数学者のN.ウイナーと協力して行列に代わる演算子表現を試みている<sup>13)</sup>。その論文では、行列  $\{q_{n, m}\}$  の代わりに

$$q(t) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^T ds \left( \sum q_{m, n} e^{\frac{2\pi i}{\hbar} (W_m + W_n t)} \right)$$

を用いることを提案しているが、背後にある状態空間については考えが及んでいなかった。

量子力学のもう一つの定式化は、ド・ブロイの物質波の延長上にシュレディンガーにより導かれた波動方程式<sup>14)</sup>であるが、導出の拠り所は再びハミルトン-ヤコビの方程式であった。波動方程式の第1論文「固

有値問題としての量子化 ( Ann. Phys. 79 ( 1926 ) ) では、作用関数を  $S = K \log \Psi$  とおいたハミルトン-ヤコビの方程式を  $W \equiv \Psi^2 \{ H(q, \frac{\partial W}{\partial q}) - E \} = 0$  と書き、量子化は  $W = 0$  を変分による極値条件

$$\frac{1}{2} \delta \int dV W = \int dV \delta \Psi \left\{ -\frac{K^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V(q) - E \right\} + (\text{境界条件}) = 0$$

に変更し、その上で  $K^2 = \frac{h}{2\pi}$  と考える。この場合、 $K$  は波のアイコナール表示と異って実数であり、 $K^2$  の前の負号は  $\hbar$  ではなく部分積分により出たものである。このような波動方程式の導出の物理的根拠は弱く、第 2 論文ではド・ブロイに従って波と粒子の対応を推し進めた形に改められるが、論文の付記にあるように、第 1 論文の方法は規格化の付帯条件付きの変分問題として考えれば自然である。現実には、シュレディンガーはまず第 2 論文の方法で水素原子の固有値問題を扱えることに気付き、その方程式の根拠を第 1 論文の筋書きに仕上げたようである。

方程式を解くために第 1 論文で引用されている文献は、L. シュレジンジャーの「微分方程式 ( 1900 )」である。この中にほぼ必要な技術は用意されていたものの、シュレディンガーは固有問題を解くに当って H. ワイルに助力を求めている。シュレディンガー方程式の固有解となる特殊関数の多くは 19 世紀の数理解物理学の成果として準備されており、波動力学の登場に間に合う形で「数理解物理学の方法 ( 上掲 )」や「力学と物理学に現れる微分方程式と積分方程式 ( フランク-ミーゼス, 1925 )」が出版されていたが、原子物理学に必須の数学的技術になるとは考えられていなかった。

## 変換理論から関数解析へ

量子力学の誕生後、古典力学の正準変換に対応すべき“変換理論”が、1926 年の内に幾つかの観点から調べられた。行列力学では、ボルン - ハイゼンベルグ - ヨルダン<sup>15)</sup>とヨルダン<sup>16)</sup>の仕事で、古典力学の正準変換に対応する行列の変換をユニタリ変換  $Q_i = S q_i S^{-1}$ ,  $P_i = S p_i S^{-1}$  の形に書けることが突き止められた。また、行列力学と波動力学の関係がシュレディンガー<sup>17)</sup>、ディラック<sup>18)</sup>により、さらに波動力学における正準変換の問題がロンドン<sup>19)</sup>により調べられた。とりわけ、ディラックの議論は構造的で全ての変換理論の本質を含み、連続行列をも扱うために

$\delta(\xi-\xi')=0, (\xi \neq \xi'); \int d\xi \delta(\xi-\xi')=1$  で定義されるデルタ関数<sup>20)</sup>が導入された。

ディラックは、デルタ関数を通常の関数の極限から理解できる意味のある演算技術として扱ったが、数学者の側からむしろやい反応があった。ノイマン-ヒルベルト-ノルドハイム<sup>21)</sup>は、関数空間上でデルタ関数を含む演算子の代数を議論して量子力学の数学的整備を試みたが、関数空間を後のヒルベルト空間として公理化する立場には至らなかった。二乗可積分な空間を基本として、この上の積分変換の形で量子力学的演算子を定義する考え方は、シュレディンガーに先駆けて波動(積分形)方程式を導いたランチョス<sup>22)</sup>にも見られ、ヨルダン<sup>23)</sup>により内容が深められた。一方、ノイマンはデルタ関数の使用を変換理論の数学的弱点と考え、まずヒルベルト空間を波動関数の関数空間として公理化し、この中の射影演算子のシュルチェス積分の形として物理的演算子をスペクトル分解形で表す定式化を行った<sup>23)</sup>。ノイマンは、さら量子力学の統計や観測の問題にも研究をすすめ、その成果は「量子力学の数学的基礎(1932)」として出版されて<sup>24)</sup>、理論物理と数学の双方に大きな影響を与えた。しかし、シュバルツの超関数(1944~'50)<sup>25)</sup>やゲルファンドの一般関数<sup>26)</sup>の登場によりデルタ関数も数学的意味付けが与えられ、現在では、量子力学はヒルベルト空間( $\mathcal{H}$ )単独ではなく、その上の汎関数空間( $\Omega$ )と汎関数の核空間( $\mathcal{H} \subset \Omega^*$ )の三つ組構造 $\Omega \subset \mathcal{H} \subset \Omega^*$ の上に成り立つと考えられている<sup>27)</sup>。興味深いことに、ディラックが導入したブラ、ケットの記号法は、この三つ組み構造を自然に表現するものであった。

量子力学の誕生により、クラインが純粹数学として分類した“群論”もまた、幅広い応用の路が開けることになった。これは、古典力学(ネーターの定理)と同様に量子力学の対称性も対称変換の生成子となる保存量を導くが、この変換群の既約表現を知ることにより、波動方程式を解かずに系のエネルギー状態を類別することができる為である<sup>28)</sup>。この考え方はウイグナーにより発展させられ“群ペスト”と呼ばれるほどに広まり、現在では素粒子の構造を探る際の基本的な手法<sup>29)</sup>の一つともなっている。

## 場の量子論と経路積分

1927年、ディラック<sup>30)</sup>は量子論を原子や電子と異なり時空連続体で

ある輻射場に適用することを試みた。この手法は、ヨルダン、ハイゼンベルグ-パウリ達により完成され、粒子の量子的表現であった物質波自身もまた量子化の対象で、結果として粒子の生成消滅を自然に扱うことが可能になった。これにより、量子論は多体問題や素粒子反応への適用の路が開け、ミクロの世界の強力な攻略の武器となった。数学的には、量子化された場は超関数的な演算子であり、これに関連して現れる発散の問題と“くり込み”と呼ばれる処理法の発展<sup>31)</sup>は、数学者にも強い刺激を与えた。

ところで、1942年（学術誌に現れたのは1948年）になって、量子論の考え方と計算技術に、“経路積分”と呼ばれる行列力学とも波動力学とも異なる第3の定式化が、ファインマン<sup>32)</sup>により与えられた。ファインマンは、微小時間での位置の遷移振幅  $\langle q_b | q_a \rangle$  が  $L$  をラグランジアンとして  $e^{iL}$  に類似すると指摘したディラックの考え方<sup>32)</sup>を発展させ、有限時間  $(t_a, t_b)$  の遷移振幅を  $q_a$  から  $q_b$  に至るすべての経路の和

$$\langle q_b | q_a \rangle = \int_a^b Dq e^{i/\hbar \int_{t_a}^{t_b} dt L}$$

で表した。この表現式は、量子力学と古典力学を作用積分を通して結び付ける新しい考えを提供し、同時に場の量子論を含む多くの問題への強力な計算技術をもたらした。面白いことに、経路積分の立場からは、W.K.B. 近似は積分に古典軌道を反映させる結果であることも解った。

経路積分は数学者にも強い影響を与えた。1949年に、M.カッツ<sup>34)</sup>はポテンシャル場で決まる重みの下でブラウン運動を行う粒子軌道を平均することにより、時間を  $t$  と  $t + \epsilon$  と解析接続したシュレディンガー方程式の解が求まることを示した。このような平均を行う（無限次元の）積分測度は、1930年にN. ウィーナにより研究されたものであり、キャメロン（1944）のような確率過程の研究者もカッツ以前に類似の問題を調べていた。経路積分は、ゲルファンド-ヤグロム<sup>35)</sup>と言った数学者も巻き込み、物理と数学の流れの合流点の一つとなった<sup>36)</sup>。さらにこの手法では、様々な物理量の量子力学的あるいは統計力学的期待値が、作用の指数関数を重みとする物理量の経路積分で表せることからコンピューターによる数値解析にも新しい観点をもち<sup>37)</sup>、非摂動的な効果が本質的でないいくつかの問題を攻略する上で必須の手段となっている。

## まとめ

量子力学は、既にあった数学的体系の上に建設されたものであるが、これを完成させ、これから派生した問題点を明らかにして行く過程でしばしば数学自体の整備が必要となり、物理と数学の興味深い研究上の合流点を生じた。結果として、クラインの「19世紀の数学」には登場していない数学の幾つかの分野が、量子力学の刺激の下で発展した。さらには、クラインが純粹数学として分類した幾つかの主題も、量子力学の研究・応用に伴って、自明でない形で物理学に登場するようになった。例えば、量子力学の波動関数は本質的に複素数で位相因子をもつが、このためにある種のトポロジーの問題が物理的な意味を持つようになった。また、1次元の広がりを持つ素粒子の量子論的模型では保型関数の理論が重要な役割を果たすようになり<sup>38)</sup>、逆にこの分野の数学に従来に無い観点を付け加えることになった。19世紀の数学者は、保型関数と素粒子の相互作用が結び付くとは、想像もできなかった。数学と物理の合流点には、興味深い知的緊張と対決の歴史があり、その一つ一つに分析を加えて行くことは、今後の科学技術の行く末を占う上で大いに意味のあることである。

## 参考文献

- 1) F. Klein, *Vorlesungen über die Entwicklung der Mathematik im 19. Jahrhundert I* (Springer, 1926) 邦訳: F. クライン、「19世紀の数学」(共立出版, 1995)
- 2) J. von Neumann, *Mathematische Begründung der Quantenmechanik*, Gött. Nach. Vol.1 No.9 1-57
- 3) C. Lanczos, *The Variational Principle of Mechanics* (Univ. Toronto Press, 1949), p254 に同趣の記述がある。; Delaunay 自身は、月の運動を摂動論的に解く目的で角変数の周期関数と見做せる変数を導入している: Y. Hagihara, *Celestial Mechanics* Vol. II, Part 1, Chapter 9 (The MIT Press, 1972)
- 4) A. Sommerfeld, *Annalen der Physik* 51(1916), 125 (Bohr, Ishihara の論文と共に、邦訳が物理学古典論文叢書(3)前期量子論、東海大学出版会に収録されている)
- 5) A. Einstein, *Deutsch Physikalische Gesellschaft* 19(1917), 82
- 6) G. Wentzel, *Z. Physik* 38(1926), 518; L. Brillouin, *C. R. Acad. Sci.*,



- Paris 183( 1926 ), 24
- 7 ) H. A. Klamers, *Z. Physik* 39( 1926 ), 828
- 8 ) V. P. マスロフ, 「摂動論と漸近的方法」( 岩波書店, 1976 ); 歴史的な文献を多く含むものとしては、J. Heading, *An Introduction to Phase-Integral Methods*( London: Mrthuen & Co Ltd., New York: John Wiley & Sons Inc., 1962 )
- 9 ) M. Kline, *Mathematical Thought from Ancent to Mordern Times*, §46 ( New York, OXFORD UNIVERSITY PRESS, 1972 )
- 10 ) W. Heisenberg, *Z. Physik*, 33( 1925 ), 879
- 11 ) M. Born and P. Jordan, *Z. Physik* 34( 1925 ), 858
- 12 ) P. A. M. Dirac, *Proc. Royal Soc. A* 109( 1926 ) 642
- 13 ) M. Born and N. Wiener, *Z. Physik*, 36( 1926 )590
- 14 ) E. Schrödinger, *Ann. Physik* 79 ( 1926 ) 361,489; 80 ( 1926 ), 437; 81 ( 1926 ), 109
- 15 ) M. Born, W. Heisenberg and P. Jordan, *Z. Physik* 35( 1925 ) 557
- 16 ) Von P. Jordan, *Z. Physik* 37 ( 1926 ), 383; Von P. Jordan, *Z. Physik* 38 ( 1926 ) 513
- 17 ) E. Schrödinger, *Ann. Physik*, 79( 1926 ), 734
- 18 ) P. A. M. Dirac, *Proc. Royal Soc. A* 110( 1926 ) 561
- 19 ) F. London, *Z. Physik* 40 ( 1926 ) 193; F. London, *Z. Physik* 37 ( 1926 ), 915
- 20 ) P. A. M. Dirac, *Proc. Royal Soc. A* 113( 1927 ) 621
- 21 ) J. von Neumann, D. Hilbert and L. Nordheim, *Math. Ann.* 98 Vol.1 No.8 1-30
- 22 ) Von K. Lanczos, *Z. Physik* 35( 1926 ), 812
- 23 ) Von P. Jordan, *Z. Physik* 40( 1926 ) 809
- 24 ) J. von Neumann, *Die Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik* ( Springer-Verlag, Berlin, 1932 ); 邦訳 : J. V. ノイマン, 「量子力学の数学的基礎」( みすず書房, 1957 )
- 25 ) L. Schwartz, *Théorie des Distribution*, I et II( Herman, 1950, 1951 ) 邦訳 : 「超関数の理論」( 原書第 3 版 ) 岩村、石垣、鈴木 共訳 ( 1971, 岩波書店 )
- 26 ) I. M.Gelfand and G. E. Shilov, *Generalized Functions*, 2( Academic Press, 1968 ) I. M.Gelfand and N. Ya. Villenkin, *Generalized Functions*, 4( Academic Press, 1964 )
- 27 ) P. Kristensen, L. Mejlbo, and E. T. Paulsen, *Comm. in Math. Phys.* 1 ( 1965 ), 175 A. Böhm, *Rigid Hilbert Space and Mathematical Description of Physical System*, *Lectures in Theoretical Physics* Vol. IX,

- Gordon and Breach, Science Pub., Inc. (1967), 255 ポゴリユーボフ他,  
「場の理論の数学的方法 (第2章)」(東京図書, 1971)
- 28) H. Weyl, *The Quantum Theory of Groups and Quantum Mechanics*  
(Dover Publications, Inc. No. 486-60269-9, 1950)
- 29) F. J. Dyson, *Symmetry Groups in Nuclear and Particle Physics*  
(Benjamin, Inc., 1966)
- 30) P. A. M. Dirac, Proc. Roy Soc. (London) A 114 (1927), 243
- 31) 場の量子論の萌芽から初期のくりこみ理論に至る論文が、下記の論文選  
集に集められている: *Quantum Electrodynamics*, (Edited by J.  
Schwinger, Dover Publications, Inc. No. 486-6044-6, 1958)
- 32) R. P. Feynman, Rev. Mod. Phys. 20 (1948), 367
- 33) P. A. M. Dirac, *The Lagrangian in Quantum Mechanics* (1933, [31] に収  
録)
- 34) M. Kac, Proc. 2nd Berkeley Sympos. Math. Stat. and Prob., (1951),  
189; M. Kac, *Probability and Related Topics in Physical Science*,  
Lecture in Applied Mathematics Vol. 1 (Interscience Publishers, Ltd.,  
London, 1959)
- 35) I. M. Gel'fand and A. M. Yaglom, Journal of Mathematical Physics, 1  
(1960), 48
- 36) J. R. Klauder, *The Feynman Path Integral: An Historical Slice in it A  
Garden of Quanta, Essays in Honor of Hiroshi Ezawa* (World Scientific,  
2003)
- 37) N. Metropolis, A. Rosenbluth, A. W. Rosenbluth, M. N. Teller, and E.  
Teller, Journal of Chemical Physics 21 (1953), 1087
- 38) 数多くの論文がある。例えば: M. Kaku, *Introduction to Superstrings  
Chapter 5* とその引用文献 (Springer-Verlag, 1988)

(日本大学理工学部教授)