数学者のための量子力学入門*

原　隆
九州大学大学院　数理学研究院
hara@math.kyushu-u.ac.jp

概 要

量子力学とは何か，数学者むけに簡単にまとめる．数学者向きの量子力学の成書もたくさんあることを念頭において，量子力学の数学的枠組みを簡潔に示し，かつその物理的解釈を解説することを，その基礎的な部分に限って行う．

目 次

1　初めに **1**
1.1　歴史と背景 2
1.2　粒子性と波動性 3

2　古典力学の世界像（粒子系） **3**

3　有限自由度の粒子系の量子力学の数学的構造 **5**
3.1　量子力学の舞台 6
3.2　正準交換関係とその表現の一意性 10
3.3　不確定性原理とその解釈 12
3.4　時間発展 13
3.5　観測の公理とその問題 17

4　簡単な例 **18**
4.1　１次元空間での粒子 19
4.2　水素原子：束縛状態と散乱状態 20
4.3　一般の系 20

5　量子力学の発展 **21**
5.1　スピン：系の対称性と保存則，群の表現論 21
5.2　経路積分 21
5.3　場の理論とその問題 22

6　文献について **23**

1　初めに

この解説は「数学者のための」と題しているが，まずこの点についての言い訳から始めたい．と言うのも，量子力学こそは今世紀初頭に数学（特に関数解析）と物理学が密接にかかわり合いつつ誕生したものであり，その

*これは十年以上前，数学・物理学教育関連の科研費研究報告のために書いたものをベースにし，この講義のために加筆・訂正を行ったものである．

数学的枠組みは Hilbert, von Neuman などによりほぼ完全に解きあかされてしまったからである．その上，数学者の中には量子力学を専門に研究している人々もたくさんいるので，量子力学の数学的構造について解くことは，対象とする数学者によっては「釈迦に説法」の愚に陥る危険性がある．そこで，この解説は読者対象として，量子力学を専門的に研究している数学者ではなく，学部 4 年生から大学院修士課程程度の数学科の学生を想定する．そのような読者に，

1. 量子力学の数学的構造の粗筋を述べ，
2. その数学的構造のあらわす「量子力学の世界」（これは古典力学の世界，つまり，我々の日常見ている世界とはかなり異なる）をどのように解釈すべきか，説明する

ことを目標としたい．

もちろん，このような長さの解説で量子力学を完全に理解できるように説明するのは（たとえその最も基礎的な部分に限ったとしても）筆者の力量では不可能であり，その点は成書にまかせるしかない（最後の文献案内参照）．しかし，それらの本は大部でもあるし，また，大部分は物理的な色合いが非常に強い．つまり，これらの本は「必要な数学的知識はあまりないが，物理的直感力をもって押し進める人」を主な読者に想定している．そこで，この解説ではその反対に「必要な数学的基礎知識を持った人が日常感覚から出発して量子力学を学ぼうとした場合に面食らう点」を特に重視して説明することで，量子力学の世界への抵抗を少しでも減らせたら，と考えている．

少し予備知識のある人のための註：通常，物理で「量子力学」と言うときは有限自由度の系の量子力学を言い，この解説でもそれを中心とする．無限自由度の系（場の量子論）では話は全く別で，これは数学的に未解決の問題の宝庫である．この点については最後の 5.3 節で少しだけ触れる．

1.1 歴史と背景

この節の残りでは数学的議論に入る前の準備として,「量子力学」の成立した背景を簡単に述べる．そんなことはどうでも良いから早く数学に行きなさいと言う人は次節に行って下さって全く差し支えない．ただ，量子力学は我々の常識とはかけ離れたものなので，心の準備をしたいと思う．

19 世紀の終わり頃，物理学はかなり完成した状態にあった．ニュートン以来の力学的自然観が大成功をおさめ，この世の基礎法則を全て手に入れた，後はこの基礎法則を以下に具体的問題に適用していくかだ（ある意味で「物理は終わった...」)，とまで思えるほどであった．

しかし，その中にも幾つか問題点の潜んでいることは当時の優秀な物理学者にはわかっていた．例えば[1]：

- 古典電磁気学の問題：古典電磁気学によれば，加速度運動している電荷は電磁波を放射する．これは原子の安定性に関する深刻な問題を引き起こす：原子というのは原子核の周りを電子が廻って出来ているらしい．しかし，廻っていると言うことは加速度運動であるから，この電子はどんどん電磁波を放出してエネルギーを失い，原子核に落ち込んでいってしまう.（この時間を古典電磁気学で計算すると，10^{-11} 秒などと [1, p.86] とても短いことがわかる！）これでは安定な原子など存在できないし，我々もこの地球も安定に存在できない！
- 古典統計力学（黒体輻射）の問題：古典統計力学の大きな成果の一つは「エネルギー等分配則」（運動の各自由度毎に kT のエネルギーが分配されることを主張する）の発見である．ところがこれを無批判に使うとおかしな結果が色々でてくる．例えば，容器の中に閉じこめた電磁波の自由度は無限大（いくらでも短い波長が存在）であるから，この容器の比熱は無限大である！

このような問題が次から次へとでてきたため,「古典力学は正しくない」ことが次第に認識されるに至った[2]．

[1] より詳しくは，[1, 2] 等を参照

[2] ただし，古典力学が正しくないのは一般にはミクロな系—つまり原子や素粒子数個の振る舞い—または極低温の極限などに関してであることは重要である．われわれが日常経験する現象については，もちろんニュートン以来の古典力学が満足する答えを与える．以下では日常経験するような現象を簡単のために「マクロな」現象と言う．

その結果，古典力学を置き換えるものとして，量子力学が誕生したのである．繰り返しになるが，量子力学はその誕生以前の「古典力学」を**置き換える**ものであって，古典力学に何かを「つけ加える」ものではない．これは以下に説明するように両者の数学的構造が全く異なることを見れば明らかである．ただし，次のようなことは言える．

仮設 1.1 (古典力学と量子力学の対応) 現在のところ，量子力学は**最も根本的な物理の基礎法則**と思われている．一方，日常見る現象の殆どが古典力学で記述できることは我々の経験の教えるところである．基礎法則が量子力学であるならば，日常経験する事柄も量子力学で記述できるべきであり，このような「巨視的な」事象については古典力学と量子力学の記述は（近似的にでも）一致すべきである．

このように，物理学が正しく機能するためには，古典力学は量子力学の「巨視的」極限になっていなければならない（実際そうであることは経路積分を用いるとかなり明らかになる）．この意味で，その適用範囲だけ見ると量子力学の中に古典力学が含まれるように見えるのであるが，これはあくまで,「元々全く違うものがある状況下 —— 巨視的な世界の運動の記述 —— で似た振る舞いを示す」ものととらえるべきだと筆者は考える．

1.2 粒子性と波動性

さて,「古典力学が正しくない」とされた大きな理由の一つに，原子程度のミクロなものは粒子としての性質と波動としての性質を両方持っているように見えることがあった．これを簡単に述べておこう．(物理的側面に興味のない読者は次節に飛ばれても差し支えない.)

「粒子」の性質とは何か？１つ，２つ，３つ，のように「**基本単位を基にその整数倍しか観測されないこと**」である．例えば，ピンポンのボールは１つ，２つ，と数えられる．同様に，物質を構成している原子，素粒子なども日常感覚では「粒子」である．つまり，これらは決まった質量，電荷，などを持った基本単位の整数倍しか観測されない．これは基本的な塊があって，これが n 個あるのだと考えるのが日常感覚と合っている．古典的な粒子を数学的にどう記述すべきかは，2 節で考える．

一方,「波動」とは我々が見る波のことであって,「基本的な単位のないこと」および,「干渉・回折をおこすこと」が特徴である．代表的な例は音や（古典力学的に考えた）光である．光の強度はいくらでも連続的に変えられる（ように見える）—— 基本的な単位はない．また，日常，直接見えない場所からの音が聞こえることはよく経験する．これは音波が障害物を回り込んできたわけで，回折の例である[3]．(光は波長が大変短いので，日常では回折は見えにくいが，ミクロに見れば観測できる.)

我々の日常感覚ではこの両者は相いれないものである.「粒子」とはどこかに局在しているわけであるが,「波」は拡がっていて捉えどころがない．粒子がものの陰へ回り込んでいったと言うことは聞いたことがないし，逆に波の強さが何かの整数倍になっている例も知らない．

ところが，ミクロの世界ではこの２つの性質は両立していると考えざるをえないことがわかってきた．むしろ，基本的なものは「粒子」と「波」の両方の性質を持っているらしい．実際，今では粒子の代表格と思われた電子も（光のように）干渉縞を示すし，逆に波の代表選手と思われた光も，粒子の性質（エネルギーや運動量が基本単位の整数倍）を示すことが実験的にも確立されている（光電効果など）．量子力学の発見とは，この２つの性質が如何に共存可能であるかを探る過程でもあった．

残念ながらこの解説ではこのようなわくわくする話を詳しく述べる余裕はないが，少なくとも読者がこのような謎に物理の文献を通して迫れるよう，量子力学の枠組みを述べたいと思う．興味のある読者は最後に挙げた文献，特に [1, 3] などを参照されたい．

2 古典力学の世界像（粒子系）

「古典力学」というのは物理の用語で，量子力学以前の，いわゆるニュートン力学を指す（特殊・一般相対論も含む）．この古典力学による世界像を復習しておこう．

[3]勿論，粒子であっても，それに働く力によってはものの陰に回り込むように見えたりする．しかし，波の場合は力が働いていなくてもいつでも回り込むのである

考える対象としては，ひとまず，有限自由度（以下で定義）の粒子系に話を限る．古典的な場（つまり，波動）に関しては簡単に 5.3 節で考える．

さて，外場[4]の中の質点[5] 1 つからなる系をまず考える．その運動はどう記述すれば良いだろう？勿論，３次元空間の中でのその粒子の位置 $\boldsymbol{q}(t)$ を時間 t の関数として与えればよい．これを追っていけば，その粒子がどのように時間とともに移動していったかがわかるという意味で完璧である．

では，少し違った質問をしてみよう．物理の（一つの）神髄はその予言可能性にあるわけだから，現在の粒子の何を知ったらその未来の運動を予言できるだろうか？この答えはニュートン力学が与えてくれるわけであって，現在 $t=0$ での粒子の位置 $\boldsymbol{q}(0)$ とその速度 $\dfrac{d\boldsymbol{q}}{dt}(0)$ を知ればよい．(後はニュートンの運動方程式を解けば終わりである.)

もう少し違った言い方をすると：

> 物理系の現在[6]はその位置と速度を知れば完全に決まる．その他の物理量（例えばエネルギー）は粒子の位置と速度の関数として一意に定まるのである．

このように，ニュートン力学というのは（少なくともその構造は）かなり簡単であって，あとはどのような系を考えるかでニュートンの運動方程式が変わってくるからそれを解けば良いのである．この記述方法は我々の日常感覚ともぴったりである[7]．

量子力学ではこれが完全にひっくり返るのであるが，その前にもう少し量子力学に入り安い様に形式を整備しておこう．まず，以上では 1 粒子の系を考えてきたが，これを多粒子系に拡張することは容易である（単にそれぞれの粒子の位置と速度を全て同時に考えればよい）．更に，速度の代わりに座標に共軛な運動量を用いても良いことに注意しておこう．実は量子力学は正準座標で議論すると大変見通しの良い物になる．そこで，これからは系の現在を決めるのには，正準変数であるところのその位置 $q_i(t)$ と運動量 $p_i(t)$ を与えて考えることにしよう（もちろんここの「位置」や「運動量」は一般化座標でよい）．ここで $i=1,2,\ldots,n$ は系の独立な運動成分に対応し，この n をもって「この系は n-自由度である」と言う．なお，記法を簡単にするため，ベクトル $(q_1(t),q_2(t),\ldots,q_n(t))$ を $\boldsymbol{q}(t)$，ベクトル $(p_1(t),p_2(t),\ldots,p_n(t))$ を $\boldsymbol{p}(t)$ と書くことにしよう．

この $(\boldsymbol{q}(t),\boldsymbol{p}(t))$ の空間を「相空間」と言う．

仮設 2.1 (古典力学の構造)
有限自由度系の古典力学は以下のように記述できる．

- **古典力学の舞台：** n-自由度の系の現在はその正準座標［位置 $q_i(t)$ と運動量 $p_i(t)$ $(i=1,2,\ldots,n)$］で決まる．その他の物理量はこれらの位置と運動量の関数になっている．この意味で，古典力学の舞台は相空間である．

- **時間発展：** 粒子の現在 $(\boldsymbol{q}(t),\boldsymbol{p}(t))$ が与えられた場合，その未来は運動方程式（正準方程式，$i=1,2,\ldots,n$）

$$\frac{dp_i}{dt}=-\frac{\partial H(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})}{\partial q_i},\qquad \frac{dq_i}{dt}=\frac{\partial H(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})}{\partial p_i} \tag{2.1}$$

  を解くことにとって決まる．ここで $H(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})$ は系の**ハミルトニアン**と呼ばれる関数で，系の全エネルギーに相当する．

要点は，

[4]用語の註・「外場」: 例えば地上でボールを投げた場合，本来はボールとそれ以外（特に地球）の運動を併せて解く必要がある．特に，ボールと「それ以外」は互いに力を及ぼしあって運動する（作用・反作用の法則）ので，両者の運動を連立して追うことが原理的には必要になる．しかし，現実には（特に地球とボールのような圧倒的な差のある場合には）ボールが地球に及ぼす反作用は無視できて，地球の運動は（ボールがどう動こうが）時間の関数として既知のものとして扱える．このような場合,「それ以外」のボールに及ぼす力を「外から与えられたもの」としてまとめて取り扱い,「外場」と呼ぶ．要するに,「外場」とは（考えている粒子からの）反作用を全く受けないような，仮想的な外部の系（からの力，作用）である

[5]用語の註・「質点」:「質点」とは，物理での理想化で,「質量は持つが大きさは無限小の粒子」くらいの意味である．大きさを持った粒子はそれ自身が変形したり回転したりしてややこしいので，まず質点から考えるのである

[6]ここでわざわざ「現在」と言って「状態」などと言わないのは，量子力学では「状態」に特殊な意味が持たされるからである（仮設 3.1 参照）

[7]勿論，これでニュートンの偉大さを否定するつもりは毛頭ない．彼が（その人格はともかく）最も偉大な物理学者の一人であることは議論の余地がない．特に殆ど一人で現在の数理科学の基礎を作ってしまった様に見えるのは驚異である

(1) 系の現在は上の「舞台」と書いたように相空間の点として規定され，

(2) その時間発展は系毎に運動方程式を解いて決まる

ことである．

例：ポテンシャル $V(q)$ の中を一次元的に運動する粒子

典型的な例として，ポテンシャル $V(q)$ の中を一次元的に運動する粒子を考えてみる．この系の自由度は 1 で，この場合は位置，運動量ともに（ベクトルではなく）実数．ハミルトニアンは

$$H(q,p) = \frac{p^2}{2m} + V(q) \tag{2.2}$$

と与えられる（ここで $m > 0$ は粒子の質量）．$V(q)$ としては，例えば

$$V(q) = \frac{m\omega^2}{2} q^2 \qquad \text{（調和振動子）} \tag{2.3}$$

等を考える（$\omega > 0$ は角振動数にあたる定数）．

3　有限自由度の粒子系の量子力学の数学的構造

さて，以上の古典力学は日常感覚ともマッチしたものであった．これが量子力学になると完全に（というのは言い過ぎだが非常に）変更を受ける．特に，量子力学は我々の世界観の根本的な変更を迫る（様に見える）．この世界観が日常感覚とかなりかけ離れたものであるために，物理学者の中にも「量子力学はわかったような気がしない」と思っている人は（筆者を含め）たくさんいる筈である．ただし，どのようにわからないのか，どこがわかるのかははっきりさせる必要がある．

- 量子力学を数学的に定式化する事は簡単である（これから行う）．数学的には関数解析，または作用素環の表現論と言うことになる．
- その答え（どのような表現があるか）も有限自由度の場合は von Neuman 等がほぼ完全に出している．この意味で有限自由度の量子力学の定式化には数学的にやましいところはあまりない[8]．
- 具体的な系について（物理学者には許容範囲の数学的ごまかしなども用いて）解いてみた結果は驚くほど実験結果とあっている．筆者の知る限り，量子力学が実験事実と矛盾している例は一つもない．また，殆どの物理学者は現在の量子力学の与えてくれる情報以上の予言は原理的に不可能だと思っている．この意味で実際にはミクロの世界の物理の理論としては量子力学はほぼ満点である．
- 無限自由度の系については問題が山積しているが，これは後に回す（5.3 節）．
- では，何が「わからない」か？量子力学の系を数学的に解いた後，その結果をどのように現実世界と結びつけるかにおける概念的，哲学的問題である．量子力学は一応，どのようにその結果を解釈するかの処方箋は与える（でないと物理の理論としては成立しない）．しかし，その解釈は（1）古典的な我々の感覚と随分異なり，(2）更に巨視的な系と微視的な系を元々区別して考えているようなところがあるので，どうも気持ち悪いのである．この２つをひっくるめて「観測の問題」と言っている．
- ただし，上の（1）の「気持ち悪さ」は我々が古典論の（巨視的な）世界に固執しているためである可能性が高いことには注意を要する．実際，最近のハイテク実験技術により，量子力学の予言するミクロの世界が直接検証されつつある．それによると，ミクロの世界は実際にそんな「気持ち悪い」振る舞いをしているようなのである．考えを変えるべきは我々の方である可能性が強い．

[8] ただし，個々の系を量子力学的に取り扱った結果がどうなるか（どの様な現象を予言できるか）は全く別問題で，それぞれの系を解析して行くしかない．また，実際に考える系が以下で述べる公理を満たすかどうか（演算子の自己共軛性の問題など，仮設 3.4 参照），も確かめる必要がある [4]

- （2）については，ここ十年くらい，かなりの進展があった．これについては，3.5 節で少しだけ述べる．

以下ではまず，量子力学の数学的構造を天下りに与える．その後，その物理的解釈（気持ち悪さ）に入ることにする．通常の物理の講義では「気持ち悪さ」から入って最後に数学的構造に行くわけである[9]が…

3.1 量子力学の舞台

この 3.1 節から 3.3 節では，量子力学では系の現在をどの様に記述するのか説明しよう．その時間発展は 3.4 節で考える．まず 3.1 節では一般的な枠組みを述べる．量子力学の数学的構造は以下の仮設 3.1，3.4，3.5 に要約される．

仮設 3.1 (量子力学の舞台 I．状態) 系の現在は可分な複素ヒルベルト空間 $\mathcal{H}$ の規格化された，つまりノルムが 1 のベクトル（**状態ベクトル**，または単に**状態**，**state** と言う）で与えられる．

なぜ規格化されたベクトルを考えるかは，すぐ後で確率解釈が導入されると明らかになる

記法 3.2 (Dirac I) この解説では以下のような Dirac の記法を採用する [5].

1. $\mathcal{H}$ の元，つまり状態は $|\psi\rangle$，$|\phi\rangle$ のように $|\cdot\rangle$ で表し，
2. 一方 $\mathcal{H}$ の共軛空間（勿論，$\mathcal{H}$ がヒルベルト空間なので $\mathcal{H}$ と同一視できるが）の $|\psi\rangle$ に対応する元を $\langle\psi|$ と書く．
3. ベクトル $|\psi\rangle$ と $|\phi\rangle$ の内積は $\langle\psi,\phi\rangle$ または $\langle\psi|\phi\rangle$ と書く．ここで内積は前の引数につき半線型，後ろにつき線型とする．(数学では前の方について線型，後ろについて半線型とすることが多いので注意)

註 3.3 (仮設 3.1 はより正確には) より正確に言うと，定数倍だけ異なる二つのベクトルは同一の状態を表すものと考える．ただ，仮設 3.1 で規格化されたもののみを状態と考えることにしたので，仮設 3.1 に加えて位相の異なるベクトルは同一の状態を表すと考えることになる：つまり $|\psi\rangle$ と $e^{i\alpha}|\psi\rangle$ （$\alpha\in\mathbb{R}$）は同じ状態とみなす．この意味では状態はベクトルでなく，射線（ray)，つまり**全ての**ベクトルに対する同一の位相変換（ゲージ変換）の自由度を同一視したものである．(蛇足だが，ここで「**全ての**ベクトルに対する」と言うところは重要．つまり，二つの異なる状態の線形結合を考える際，それらの相対的な位相は依然として物理的意味を持つ.）ただ，通常（この解説でも）「状態は射線である」ことは暗黙の前提として，規格化されていないベクトル $|\psi\rangle$ でも「状態 $|\psi\rangle$」などと呼ぶことがある．

まず，粒子の古典力学と決定的に異なる点として，仮設 3.1 の主張するように，系の現在がヒルベルト空間の元になってしまった．これは特に，ある状態と別の状態の**線形結合**（を規格化したもの）をも実現可能な状態と認めることを意味する[10]．この「**重ね合わせの原理**」は粒子の古典力学にはない，量子力学の大きな特徴である．(この解釈については 3.3 節も参照)．

でも，これだけでは通常，物事を観測した結果（測定値，観測値）との関係がわからない．この点に関して，以下の 2 つの仮設を置く．実は「観測とはなにか」を考え出すと泥沼に陥る危険性があるので，ここでは感覚的に「我々が電子の位置を計ること」「我々が水素原子のエネルギーを計ること」などととらえておく（詳しくは 3.5 節）．

仮設 3.4 (量子力学の舞台 II．物理量)
(a) 観測できる物理量（*observable*）は $\mathcal{H}$ の上の（自己共軛な）演算子（作用素）で与えられる．
(b) ［対応原理・その I］古典的対応物があると思っている系に対しては，これらの演算子は古典力学での物理量の関係を尊重するように決められる．

[9]筆者は物理出身であるにもかかわらず，以下のような入り方もあって良いと思っている．ただ，これでは身も蓋もない，感はぬぐい去れない

[10]ただし，3.4.6 節の超選択則を除いて

（用語の注）物理では「演算子」というが，数学では「作用素」という方が普通かもしれない．英語ではともに operator である．

上の仮設の (a) は，物理量（観測できるもの：例としては位置，運動量，エネルギーなど）は作用素であると言っている．でも，我々が個々の測定で得るのはもちろん実数の観測値である．その観測値がどのような頻度で与えられるかは以下の仮設 3.5 により与えられる．この際，自己共軛性が観測値の実数性を保証する．

上の (b) は古典力学との対応関係を仮設 1.1 の意味で尊重するよう，つけ加えたものである．この一例として，系のエネルギーは，古典力学でのハミルトニアンの表式 (2.2) に於いて，q と p を量子力学的作用素として解釈することで定義される（q と p 自身をどう決めるかは 3.2 節で考える）．なおこの置き換えに際して，(一般に量子力学においては物理量同士が可換でなくなるので）演算子の順序が問題になる．一般的にどのように置き換えたらうまく行くという処方箋はないが，自己共軛性の要請からある程度定まる場合もある（例：古典力学で qp と言う積があると，これは — $\hat{q}, \hat{p}$ が自己共軛なので — 量子力学では $(\hat{q}\hat{p}+\hat{p}\hat{q})/2$ と解釈すべきである）．

さて，状態 $|\psi\rangle$ で物理量 $\hat{A}$ を観測した場合の結果は以下の仮設で与えられる[11]．

仮設 3.5 (量子力学の舞台 III．物理量の値（観測値）)
(a) 状態 $|\psi\rangle$ にある系においては，ある物理量 $\hat{A}$ を観測した**観測値**は $\hat{A}$ のスペクトル（固有値）の一つになる．
(b) $\hat{A}$ のスペクトル分解

$$\hat{A} = \int d\hat{P}_{\mathrm{A}}(a)\, a \tag{3.1}$$

を用いると，観測結果が半閉区間 $(a_1, a_2]$ に落ちる確率は

$$\left\langle \psi, \left\{ \hat{P}_{\mathrm{A}}(a_2) - \hat{P}_{\mathrm{A}}(a_1) \right\} \psi \right\rangle \tag{3.2}$$

で与えられる．

さて，ここで当然に問題になるのは，仮設 3.5 で言うところの「測定値がある区間に落ちる確率」の解釈である．どんな母集団を考えた上での確率なのだろう？この点は「観測の問題」とも絡んで少し微妙なので後に回す（3.5 節）ことにし，一応，以下のように無難な解釈をしておく．

解釈 3.6 (観測の公理 I) 今，考えている系を非常に多く（無限個！）同じ状態 $|\psi\rangle$ に用意する．用意した上で，そのそれぞれで物理量 $\hat{A}$ を観測し，その結果を記録する．すると，最初に用意した「状態 $|\psi\rangle$ にある系」を母集団として，その内のどのくらいの割合がどのような観測結果を出すか，という確率が仮設 3.5 で与えられるのである．

このように書くと，ではどのようにして「状態 $|\psi\rangle$ にある系」を用意するのか，または，どのようにして「系が状態 $|\psi\rangle$ にある」か否か判定するのか，という疑問が湧いてくる．と言うのは，物理の理論としては，考えている系が状態 $|\psi\rangle$ にあることを判断できる必要があるからである（そうでないと，上の公理が実験とあうかどうか，そもそも判断できない）．これはかなり微妙な問題を含んでいるので 3.5 節にまわし，ここでは何らかの方法で「系が状態 $|\psi\rangle$ にある」か否かを判断できると考えておこう．

仮設 3.5 の言わんとするところをもう少し述べておく．古典力学では観測結果にばらつきがあると，それは我々の状態の規定が甘かったためで，より細かく状態を選り分けていくと観測値が確定した状態がえられる筈だと考える．例えば，位置を測定してばらつきがでるなら，これは元々位相空間の違う点を区別せずに見たためである（系に関する情報の欠如）と考える．このように，古典力学においては，確率というものは本来でてきてはいけないもの（でてくるのは我々が系を十分に知らないから；もっと系を知る —— つまり位置をもっと精度よく計ったりする —— 努力をすれば消えるものである！）と考える[12]．

ところが，量子力学においては，仮設 3.5 がこのような考えを否定する．つまり，系について我々の知り得る

[11] 通常はこの後に，観測した後の**状態**がどうなるかを規定する仮設が続くが，これは仮設 3.22 まで待つことにする

[12] もちろん，統計力学のように，実際問題として確率が有効な記述法になることは多々あるが，これらはあくまで近似的記述法であり，我々が自然をどのように簡単化して見たいか，に関わる問題である

情報は状態 $|\psi\rangle$ の中に全て含まれると考え，測定値にばらつきがでたとしたら，それはその状態の持って生まれた性質で，それ以上はどうにもならないと考えるのである.（実際，3.5 節で述べる観測の公理 II によると，観測を行うことでその物理量の確定した状態を作ることは出来る．ただ，それでは系の状態自身が観測によって観測前の状態から変化してしまっているのである.）以下の節で見るように，量子力学では（例えば）位置と運動量が同時に確定した状態は存在しえない．量子力学はこのように**必然的に確率解釈を必要とする**のである.

註 3.7 この仮設 3.5 に従うと，物理量 $\hat{A}$ の状態 $|\psi\rangle$ での**期待値** $\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$ は，観測を行った際の観測値の，上の解釈 3.6 の意味での平均値をあらわす．これは

$$\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \int \langle\psi, d\hat{P}_{\mathrm{A}}(a)\psi\rangle\, a \tag{3.3}$$

と書けることからも示唆される.

まとめ：

古典力学においては同じものと見えていた「状態」「物理量」「観測値」が，量子力学においては上で見たように**3つに分離**した．古典力学においては，状態とはまさしく相空間の点であったから，系の状態を指定することは (q,p) の値を指定する事であり，状態は観測値で指定された．ところが，量子力学においては，系の状態とその状態における物理量の観測結果には 1 体 1 の関係はない．**物理量**はあくまで**演算子**であり，その**観測結果**は**固有値** $\{a_n\}_n$ のどれか[13]である．さらに系の**状態** ψ はその固有値 a_n が $\langle\psi, \hat{P}_n\psi\rangle$ の確率で現れる，というように観測値の**出現確率**を規定する.

なお，古典力学系が与えられたとき，仮設 3.1，3.4，3.5 に従って古典力学系を量子力学の言葉に読み変える操作を，一般に「系を**量子化**する」と表現する.

3.1.1 Dirac の記法と三つ組み

以上が一番大まかな量子力学の骨組みであるが，次に進む前に，Dirac の記法について説明して，通常の物理の文献との対応を付けておこう．Dirac の記法は字義通りに解釈するには数学的に少し問題があるが，その便利さの故に多くの物理学の文献で使われている．そこで物理の文献へ近づきやすくなるよう，どのように数学としては解釈すべきか，簡単に説明する．２段階に分けて行う.

（第一段：数学の範囲での書き直し）少し移行しやすいように，(数学ではそれほどやらないのかも知れないが) スペクトル分解の式を連続スペクトルと点スペクトルの部分に分けて書く：

$$\hat{A} = \sum_n \hat{P}_n a_n + \int d\hat{P}(a)\, a \tag{3.4}$$

ここで， $\hat{P}_n$ は $\hat{A}$ の固有値 a_n の点スペクトルに対応する固有空間への射影作用素，$\hat{P}(a)$ は $\hat{A}$ の a 以下の連続スペクトルの「固有空間」への射影作用素のつもり．勿論，これらの射影演算子は単位の分解になっており（$\mathbb{1}$ は恒等作用素)：

$$\mathbb{1} = \sum_n \hat{P}_n + \int d\hat{P}(a), \tag{3.5}$$

このスペクトル分解を用いて $|\psi\rangle$ を

$$|\psi\rangle = \sum_n \hat{P}_n\,|\psi\rangle + \int d\hat{P}(a)\,|\psi\rangle \tag{3.6}$$

と書ける．さてこの時，ψ での物理量 $\hat{A}$ の観測結果は上の仮説 3.5 によると：

- 点スペクトル a_n に対してはその確率が $\langle\psi, \hat{P}_n\psi\rangle$ で,
- 連続スペクトル a に関しては，その確率密度が $\langle\psi, d\hat{P}(a)\psi\rangle$ で,

[13] 無用に記号を複雑にしないため，点スペクトルしかない例で記述している

で与えられるのである，と言うわけであった．

（第２段：Dirac の記法）では，いよいよ Dirac の記法を導入する．

記法 3.8 (Dirac II) Dirac は記法 3.2 に加えて以下の様な記法を導入した．

1. 単位ベクトル $|\varphi\rangle$ があると，このベクトルの張る一次元空間への射影作用素 $\hat{P}_\varphi$ を $\hat{P}_\varphi = |\varphi\rangle\langle\varphi|$ と書く（この心は $|\varphi\rangle\otimes\langle\varphi|$ のつもり?）．こうすると一般のベクトル $|\psi\rangle$ の $|\varphi\rangle$-成分は $\hat{P}_\varphi|\psi\rangle = |\varphi\rangle\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\varphi|\psi\rangle\,|\varphi\rangle$ と自然に計算できる．

2. 自己共軛演算子 $\hat{A}$ の固有ベクトル $|\varphi_n\rangle$（固有値 a_n）の張る固有空間への射影作用素は，従って $|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|$ と書かれる（この心も $|\varphi_n\rangle\otimes\langle\varphi_n|$ のつもり？）．ここで，固有値 a_n に対する固有空間が２次元以上のときは，a_n に対する固有ベクトルを適当に正規直交化して $|\varphi_{n,m}\rangle$ と添字 m で縮退を解くことにすると，$\hat{P}_n \equiv \sum_m |\varphi_{n,m}\rangle\langle\varphi_{n,m}|$ となる．

3. （ここが問題）連続スペクトルの部分に対する射影作用素も $d\hat{P}(a) \equiv da\,|\varphi(a)\rangle\langle\varphi(a)|$ と書く（この心は $d\hat{P}(a) \equiv da\,|\varphi(a)\rangle\otimes\langle\varphi(a)|$ のつもり？）．

4. （ついでに悪のりして）上の $|\varphi(a)\rangle$ を単に $|a_n\rangle$，$|\varphi(a)\rangle$ を $|a\rangle$ とまで略記することもある．(作用素 $\hat{A}$ だから a でラベルしている．）なお，縮退のある時は $|a,k\rangle$ のように縮退を解く添字 k を入れて切り抜ける．

要は対応する固有ベクトルの存在しない連続スペクトルの部分まであたかも固有ベクトル $|a\rangle$ が存在するかのように書くことがこの記法の特徴である．註 3.9 で述べるようにこれを割合 Dirac に忠実に（つまり連続スペクトルの場合の $|a\rangle$ 等に意味を持たせて）解釈することも可能であるが，数学的には上のような「スペクトル分解の略記法である」と解釈しておけば特に問題はない．

このように書くことにすると，(3.4)–(3.6) はそれぞれ（簡単のため縮退はないとして）

$$\hat{A} = \sum_n a_n\,|a_n\rangle\langle a_n| + \int da\,a\;|a\rangle\langle a|, \tag{3.7}$$

$$\mathbb{1} = \sum_n |a_n\rangle\langle a_n| + \int da\;|a\rangle\langle a|, \tag{3.8}$$

$$|\psi\rangle = \sum_n \langle a_n|\psi\rangle\;|a_n\rangle + \int da\,\langle a|\psi\rangle\;|a\rangle \tag{3.9}$$

と書ける．ここで (3.9) では $\langle a_n|\psi\rangle$ や $\langle a|\psi\rangle$ は展開係数とみなせる．特に，(3.7)–(3.8) は連続スペクトルを点スペクトルと形式的に同等に扱うことを可能にするので，物理学者には重宝がられている．物理の文献ではこれらの式で和と積分すら区別せず，場合（つまり連続スペクトルか離散スペクトルか）に応じて適宜解釈するものが多い．

この記法を用いると，ψ での物理量 $\hat{A}$ の観測結果は仮説 3.5 によると：

- 点スペクトル a_n に対してはその確率が $|\langle a_n|\psi\rangle|^2$ で[14]，
- 連続スペクトル a に関しては，その確率密度が $|\langle a|\psi\rangle|^2$ で，

で与えられるのである，となる．

註 3.9 (Gelfand の三つ組み) 最後に，Dirac の記法を字義通り解釈する試みについて簡単に触れておく．Dirac の記法の最大の（唯一の？）問題点は元々存在しない筈の連続スペクトルに対する「固有状態」$|a\rangle$ とその共軛 $\langle a|$ が（ともに状態空間＝ヒルベルト空間の元として）存在するかのようなふりをするところにある．従って，この困難から逃れるには $|\cdot\rangle$ の空間を $\mathcal{H}$ より小さく，$\langle\cdot|$ の空間はその共軛空間として $\mathcal{H}$ より大きくとり，$\mathcal{H}$ と併せてこの３つの階層構造を考えてやればよい．これは数学的には **Gelfand の三つ組み**として実現可能である（例えば $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n) \subset \mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^n) \subset \mathcal{S}'(\mathbb{R}^n)$，[6] などを参照）．

[14] 縮退のある時は $\sum_k |\langle a_n,k|\psi\rangle|^2$ で

3.2 正準交換関係とその表現の一意性

さて，どのような系を考えるかに応じて，3.1 節でのヒルベルト空間 $\mathcal{H}$ は適当なものをとる必要がある．そもそも今までは一般論に終始してどのような $\mathcal{H}$ をとればいいのか，何も言っていない．実は（古典的対応物のある）有限自由度の系についてはどのような $\mathcal{H}$ をとるべきかが本質的に一意に解けてしまうので，これをこれから見ていく．(実際は粒子には固有のスピンが付随しているが，これは 5.1 節で扱う．) この節は時間的余裕から，[7, §16.5] に多くを負う形になってしまった．

一つ記号を導入する．演算子 $\hat{A}$ と $\hat{B}$ の**交換子**（commutator）を

$$\left[\hat{A}, \hat{B}\right]_{-} := \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \tag{3.10}$$

として定義する．ここで定義域は右辺が定義できる範囲で考える．

古典的にはこの系の状態は正準座標であるところの位置 $\boldsymbol{q}$ と運動量 $\boldsymbol{p}$ で記述される（2 節）．古典力学ではこれらは一般座標でよいのだが，以下に述べる事情から量子力学ではこれらはあまり一般的なものではいけない（註 3.16 参照）．とりあえず，これらは本来の位置と運動量と言う意味を持った物だとしておく．さて，これを量子力学的に扱う場合，その位置と運動量は作用素になるが（仮設 3.4），これらは以下の関係を満たす様，要請される．

仮設 3.10 (正準交換関係，CCR) n-自由度の古典系を表すヒルベルト空間はその上[15]で「位置の演算子」$\hat{q}_j$ とその共軛の「運動量の演算子」$\hat{p}_j$ が**正準交換関係**（Canonical Commutation Relation，CCR）

$$[\hat{q}_j, \hat{p}_k]_{-} = i\hbar\delta_{j,k} \tag{3.11}$$

$$[\hat{q}_j, \hat{q}_k]_{-} = [\hat{p}_j, \hat{p}_k]_{-} = 0 \tag{3.12}$$

を満たすよう，表現できるものである（$j = 1, 2, \ldots, n$，$k = 1, 2, \ldots, n$）．ここで $\hbar$ は**プランク定数**と呼ばれる定数[16]で，その価は

$$\hbar \approx 1.0545887 \times 10^{-34}\ \mathrm{J} \cdot \mathrm{sec}. \tag{3.13}$$

i は虚数単位で $i\hbar$ は恒等演算子 $\mathbb{1}$ の $i\hbar$ 倍をあらわす．また，$\delta_{j,k}$ はクロネッカーの記号

$$\delta_{j,k} = \begin{cases} 1 & (j = k) \\ 0 & (j \neq k) \end{cases}$$

である．

ここで少し脇道であるが，対応原理について述べよう．上では CCR を天下りに導入したが，これをもっと一般的な「原理」から示唆することもできる．つまり，

仮設 3.11 (対応原理)
古典力学から量子力学に移行するには，古典力学における Poisson 括弧 $\{\cdot, \cdot\}$ を以下のように量子力学的な交換関係 $[\cdot, \cdot]_{-}$ と読み変えよ（このような交換関係を満たすようにヒルベルト空間とその上の作用素を表現せよ）:

$$\{A, B\} \Longrightarrow \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A}, \hat{B}\right]_{-} \tag{3.14}$$

実際，位置 q_j と運動量 p_k の Poisson 括弧 は $\delta_{j,k}$ であるから，仮設 3.11 を認めると仮設 3.10 がでてくる．

さて，正準交換関係を実現するには有限次元の空間では足りないことは（表現行列の trace をとると）すぐわかる．また，$\hat{q}_j$，$\hat{p}_j$ が同時には有界作用素ではあり得ないことも簡単にわかる[17]ので，$\hat{q}, \hat{p}$ の定義域が $\mathcal{H}$ 全体になることはない．

[15] 実は上の形での正準交換関係を $\mathcal{H}$ 全体で要求するのは数学的には不可能である（作用素が本質的に有界でないためにおこる定義域の問題）．数学的な記述は以下参照

[16] 歴史的には $\hbar$ の 2π 倍をプランク定数と呼ぶのが正しいのかも知れない，現在では両者ともにプランク定数と呼ぶ

[17] 1 自由度で示す．もし，$\hat{q}, \hat{p}$ が有界なら，CCR を文字どおりに解釈できて，$\hat{q}^n\hat{p} - \hat{p}\hat{q}^n = in\hbar^n\hat{q}^{n-1}$ が全ての正の整数について成り立つ．この両辺のノルムをとってやると $n\|\hat{q}^{n-1}\|\hbar^n \leq 2\|\hat{q}^n\| \cdot \|\hat{p}\|$ となるが，$\|\hat{q}^n\| \leq \|\hat{q}^{n-1}\| \cdot \|\hat{q}\|$ を併せ用いると $n\hbar^n \leq 2\|\hat{q}\| \cdot \|\hat{p}\|$ となって，n が任意なことから有界性と矛盾．この議論は [7, p.318] によった

そこで，CCR を $\mathcal{H}$ 全体で要求することは不可能で，何らかの制限を付けねばならない．この制限付きで考えた場合，CCR の既約表現は（ユニタリー同値なものを除き）一意であることは以下の定理で証明されている．(どの様に制限を付けるかによって幾つかのバージョンがある.）まず，CCR の表現として我々が認めるものの例を挙げておこう．

定義 3.12 (正準交換関係の Schrödinger 流表現) ヒルベルト空間 $\mathcal{H}$ としては $L^2(\mathbb{R}^n)$ をとり（座標空間と呼ぶ），その上で（$j=1,2,\ldots,n$）

- **位置の演算子：** かけ算演算子

$$\hat{q}_j : \psi(\boldsymbol{q}) \mapsto q_j\psi(\boldsymbol{q}) \tag{3.15}$$

$$\text{定義域は } \{\psi(\boldsymbol{q}) \in L^2(\mathbb{R}^n) : q_j\psi(\boldsymbol{q}) \in L^2(\mathbb{R}^n)\} \tag{3.16}$$

- **運動量演算子：** 微分演算子

$$\hat{p}_j : \psi(\boldsymbol{q}) \mapsto -i\hbar\frac{\partial\psi(\boldsymbol{q})}{\partial q_j} \tag{3.17}$$

$$\text{定義域は } \{\psi(\boldsymbol{q}) \in L^2(\mathbb{R}^n) : \psi(\boldsymbol{q}) \text{ は絶対連続で } \frac{\partial\psi(\boldsymbol{q})}{\partial q_j} \in L^2(\mathbb{R}^n)\} \tag{3.18}$$

として位置，運動量の演算子を導入したものを **CCR の Schrödinger 流表現** (Schrödinger representation) という[18]．

上のように定義した場合，CCR が $\mathcal{H}$ の稠密な部分集合［例えば，急減少関数の集合 $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$］の上で字義通りに成立していることはすぐに確かめられる．この表現は位置 $\hat{q}_j$ を対角にする表示なので，**座標表示**とも言う．同様に $\hat{p}_j$ を対角化する表示も可能で，これを**運動量表示**と言う．両者はフーリエ変換で結ばれていて，ユニタリー同値である．

さて，以下の２つの定理は， CCR の表現は本質的に上の Schrödinger 流表現と同じものであることを主張する．(段々と添字 j を付けたりするのが面倒になってきたので， 1 自由度に限って述べる.）まず，CCR を $\mathcal{H}$ で稠密な部分空間に限って要求するものとして

定理 3.13 (Rellich-Dixmier) 可分なヒルベルト空間 $\mathcal{H}$ の上の演算子 $\hat{q},\hat{p}$ が

1. 閉作用素，対称，かつ共通の定義域は $\mathcal{H}$ で稠密
2. $\hat{q},\hat{p}$ で不変，かつ $\mathcal{H}$ で稠密な部分空間 Ω があって，その上で $[\hat{q},\hat{p}]_- = i\hbar$
3. この Ω 上では $\hat{q}^2+\hat{p}^2$ が本質的に自己共軛

を満たすとき，このような $\hat{q},\hat{p}$ は自己共軛であり，かつ,「CCR の Schrödinger 流表現」（か，その直和）とユニタリー同値である．

がある．この定理の仮定は Schrödinger 表示でも満たされるものだから，物理学としては十分納得できるものである．

一方，CCR にまつわる非有界性の問題を避けるため，Weyl は以下のようなものを考えた．

定義 3.14 (正準交換関係の Weyl 表現) ヒルベルト空間におけるユニタリー作用素 $\hat{U}(a)$，$\hat{V}(b)$ （$a,b\in\mathbb{R}$）が

- 「Weyl 型の交換関係」

$$\begin{aligned}\hat{U}(a)\hat{V}(b) &= \hat{V}(b)\hat{U}(a)e^{-iab}\\ \hat{U}(a)\hat{U}(b) &= \hat{U}(a+b), \qquad \hat{V}(a)\hat{V}(b)=\hat{V}(a+b)\end{aligned} \tag{3.19}$$

を満たし，かつ,

[18] Dirac の記法 3.8 によると $\hat{q}$ の「固有ベクトル」を $|q\rangle$ と書いて，$\psi(\boldsymbol{q}) \equiv \langle\boldsymbol{q}|\psi\rangle$ にあたる

- a, b について強連続である

場合，これを **CCR の Weyl 型の表現**という．

心としては，$\hat{U}(a)$, $\hat{V}(b)$ は $\hat{q}$，$\hat{p}$ から

$$\hat{U}(a) := e^{ia\hat{q}}, \qquad \hat{V}(b) := e^{ib\hat{p}} \tag{3.20}$$

とユニタリー化したつもりになっている．[実際，CCR と (3.19) のどちらかからもう一方を形式的に導ける．] ユニタリー化によって定義域を $\mathcal{H}$ 全体に無理なく拡げたのである．

定理 3.15 (von Neuman) 可分な Hilbert 空間における CCR の Weyl 型表現で既約なものは（ユニタリー同値なものを除き）一意に定まり,「CCR の Schrödinger 流表現」とユニタリー同値である．

このように，1 自由度の系では正準交換関係を要求するとその表現が本質的に一意に定まってしまう（この事情は有限自由度の場合も同じである；上の定理は記法を少し変えてやればそのまま成立）.「CCR の Schrödinger 流表現」を採用すると，位置の演算子はただのかけ算演算子，運動量演算子は微分演算子になり，扱いやすい（様に見える）．この理由から「CCR の Schrödinger 流表現」は物理や化学の文献では大変ポピュラーで，座標表示のみで話をすませている教科書も散見されるが，これでは量子力学の構造が見えにくいように感じるのは筆者だけであろうか？

註 3.16 上の一意性定理から考えると，正準交換関係を任意の一般化された正準共軛量に要求するのは無理があることがわかる．例えば，3 次元で極座標をとってその動径座標 r と動径方向の運動量 p_r に対して CCR を要求することはできない．もし要求するとそれらのスペクトルは「CCR の Schrödinger 流表現」と同じ，つまり $(-\infty, \infty)$ にまたがってしまい，動径座標の制限 $r \geq 0$ と矛盾するからである．同様に，時間 t とエネルギー H も（共軛であるかのように見え，似たような不確定性が成り立つように見えるが）量子力学の意味では正準共軛ではない（なぜなら，安定な系ではエネルギー H は下に有界であるべきであるから）．

3.3 不確定性原理とその解釈

この節では，以上の正準交換関係からすぐに導かれる「不確定性原理」とその一般化について考える．

3.3.1 数学の定理

不確定性原理は，数学的には以下の定理で表される．状態 $|\psi\rangle$ での演算子 $\hat{A}$ の期待値を

$$\left\langle \hat{A} \right\rangle_{\psi} \equiv \langle \psi, \hat{A}\psi \rangle \tag{3.21}$$

と書くことにしよう．すると，

定理 3.17 (不確定性原理) 一般に作用素 $\hat{O}$ と状態 $|\psi\rangle$ に対してその観測値の偏差 $\Delta\hat{O}$ を

$$\Delta\hat{O} \equiv \left\langle \left(\hat{O} - \langle \hat{O} \rangle_{\psi} \right)^2 \right\rangle_{\psi}^{1/2} \tag{3.22}$$

として定義すると，任意の自己共軛作用素 $\hat{A}, \hat{B}$ と状態 $|\psi\rangle$ に対して

$$\Delta\hat{A}\,\Delta\hat{B} \geq \frac{1}{2} \left| \left\langle [\hat{A}, \hat{B}]_- \right\rangle_{\psi} \right| \tag{3.23}$$

が成立する（勿論，両辺が意味を持つ範囲で）．特に正準交換関係から，位置 $\hat{q}$ と運動量 $\hat{p}$ に関して

$$\Delta\hat{q}_j \cdot \Delta\hat{p}_k \geq \frac{\hbar}{2} \delta_{j,k} \tag{3.24}$$

証明：この定理は基本的に Schwartz の不等式である．状態（$t \in \mathbb{R}$）

$$|\phi\rangle \equiv \left(\hat{A} + it\hat{B} \right) |\psi\rangle \tag{3.25}$$

の $(ノルム)^2$ が非負であることに注意し，ここの $\hat{A}$，$\hat{B}$ を定理の $\hat{A} - \left\langle \hat{A} \right\rangle_{\psi}$，$\hat{B} - \left\langle \hat{B} \right\rangle_{\psi}$ であると思うとすぐ出る． □

3.3.2　物理的解釈その１

さて，この結果を解釈しよう．$\Delta\hat{A}$ はこの状態で $\hat{A}$ を観測したときの測定値のばらつきを表している（解釈 3.6）．よって定理 3.17 は状態 $|\psi\rangle$ で $\hat{A}$，$\hat{B}$ を観測したときの観測値のばらつきの下限を与えている．特に，(3.24) は運動量と位置が**両方とも確定**しているような状態は**あり得ない**，ことを主張している．多分，この点が量子力学に於いて最も常識と異なっているところではないだろうか？何度も強調したように，古典力学では系の現在は位置と運動量の両方を決めて初めて決定された．ところが量子力学では正に位置と運動量の**両方が確定値**になっているような**状態はあり得ない**，ことを主張するのである．

なお，ここで考えている測定は $\hat{A}$，$\hat{B}$ を続けて行うものではない，ことを強調しておく．定理はあくまで，何らかの方法で状態 $|\psi\rangle$ をたくさん用意して，その内の半分には $\hat{A}$ の測定を行い，もう半分には $\hat{B}$ の測定を行うというような，解釈 3.6 の線上にある結果について述べているのである．$\hat{A}$，$\hat{B}$ を続けて行った際の結果は 3.5 節に基づいて議論される．

3.3.3　物理的解釈その２

さて，以上が一般的な不確定性原理の解釈である．数学的には 3.1 節の枠組みを認めると不確定性原理が出てしまうのだが，どうも気持ちが悪い．そこで 3.1 節の枠組みが少しでも認められるように，少し物理的に考察したい．

まず，問題に深入りする前に押さえておくべきこととして

> 不確定性は我々が日常見ている巨視的現象とは何ら矛盾するものではない．プランク定数は大変小さい数である (3.13) から，(3.24) で与えられる下限は大変小さく，巨視的な物体の運動を見ても誤差の範囲で，まず見えない

ということがある．

さて，不確定性の一つの物理的解釈は以下のようなものである．

1.2 節でものべたように，量子力学の黎明期から，電子などの微小な粒子は「粒」としての性質と，「波」としての性質を兼ね備えているらしいことが次第にわかってきた．(我々が日常生活でボールなどを触っても，波としての性質はもちろん見えないが，これはボールの波としての波長があまりにも短いためであって，電子の波動性とは矛盾しない．) 電子が波の性質をも持っているとすると，その位置と運動量（波数）の間には不確定性関係が成り立つ．というのは，色々な波数の波を重ね合わせて局在した波（波束）を作ろうとすると，その波数のばらつきと位置のばらつきの積には有限な下限が存在するからである．座標表示で示唆されるように，粒子の波数 k と運動量 p の間には $p = \hbar k$ の関係があるので，これから不確定性関係が示唆される．

この意味で，不確定性原理は，電子の持つ「粒子性」と「波動性」の２重性の表れと考えられる．なお，3.1 節での一見唐突とも見える枠組みはこの「粒子性」と「波動性」の性質をうまく両立させるものである（波の性質は「重ね合わせの原理」で，粒子の性質は作用素の固有値が観測されるという点で）．歴史的には以上に述べたような考察を経て 3.1 節の枠組みに到達したのだから，不確定性原理が 3.1 節での枠組みから出てきたのは自然といえるかも知れない．

実は不確定性原理には Heisenberg などによるもう一つの見方があるが，これについて説明する余裕がなくなった．参考文献 [8] などを参照されたい．この辺りの事情に関しては最近，かなりの進展があったが，筆者の不勉強のため，現時点ではまだ解説することができない．

3.4　時間発展

さて，3.1〜3.3 節ではある時刻での系の状態をどう記述するかを延々と述べ，これから直ちに導かれる量子力学特有の性質（不確定性）等について述べた．この節ではいよいよ系の時間発展について考える．この小節の殆どではハミルトニアンが時間によらない場合に話を限る．時間による場合は 3.4.7 節で簡単に述べる．

時間発展には Schrödinger picture と Heisenberg picture（およびその中間の interaction picture）という複数の表現がある．これらはもちろん同等であるが，Schrödinger picture から述べる．

注意： Schrödinger picture と以前に出てきた Schrödinger representation を混同しないこと！

3.4.1 Schrödinger picture

仮設 3.18 (時間発展：Schrödinger picture) （量子力学的な）系のハミルトニアン $\hat{H}$ と呼ばれる自己共軛な演算子があって，系の状態ベクトルの時間発展は，**Schrödinger の運動方程式**（時刻 t での状態を $|\psi(t)\rangle$ と書く）

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \tag{3.26}$$

で与えられる．(古典的対応物のある系では $\hat{H}$ は，仮設 3.4 に従って，その古典力学的ハミルトニアンにおいて座標と運動量をそれぞれ $\hat{q}$，$\hat{p}$ で置き換えたもので与えられると考える．)

註 3.19 (用語)

1. 日本語では picture を「描像」と訳すことが多い．これは CCR をどのように表現するかというときに用いた representation（表示）とは直交する分類であることに注意．
2. Schrödinger は (3.26) をまず座標表示で書き下したので，特に座標表示で書いた (3.26) を Schrödinger 方程式と言うこともある．座標表示では一般に（ハミルトニアンが運動量の２次式なので）放物型の線形偏微分方程式になる．

数学的には，上の仮設では少し心許ない．一般には，ハミルトニアンの定義域は $\mathcal{H}$ 全体ではあり得ないから[19]，(3.26) の右辺の解釈が問題になる．一応，ここでは (3.26) は本当はその積分形

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(\frac{\hat{H}t}{i\hbar}\right) |\psi(0)\rangle \tag{3.27}$$

を意味するものと解釈しておく．ここで右辺の指数関数はハミルトニアンのスペクトル分解 dP_{H} を用いて

$$\exp\left(\frac{\hat{H}t}{i\hbar}\right) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(\frac{Et}{i\hbar}\right) dP_{\mathrm{H}}(E) \tag{3.28}$$

として定義したものである．勿論，この背後には，(3.26) を $\mathcal{H}$ の稠密な集合でまず考えて (3.27) にたどりつき，次に連続性などで全体に拡げる，という常套手段がある．

3.4.2 その他の pictures

少し脇道にそれるが，Schrödinger picture に加えて，Heisenberg Picture，Interaction picture も紹介しておく．元々，量子力学では物理量とその観測値が「状態」「作用素」「その固有値」と分離したのは 3.1 節で強調したことであるが，このおかげで，系の時間発展の記述に自由度が生まれる（観測結果が同じになるような幾つかの方法があり得る）．上の Schrödinger picture は系の状態変化を全て状態ベクトルに押しつけた形になっている．しかし，これを作用素の方に押しつけることも可能であって，Schrödinger picture と形式的には同等な，以下の仮設にたどりつく．

[19]例えば (2.2) では前の $\frac{\hat{p}^2}{2}$ の部分だけでも無理である — Schrödinger 表示，定義 3.12 参照

仮設 3.20 (時間発展：Heisenberg picture) 系の時間発展は，(系の状態ベクトルは時間的に不変で，代わりに）全ての物理量が

$$i\hbar\frac{d}{dt}\hat{A}_{\rm H}(t)=\left[\hat{A}_{\rm H}(t),\hat{H}\right]_{-} \tag{3.29}$$

に従って時間発展すると考えても同じである．

上で (3.29) の数学的意味付けはまた厄介なので，ここでは

$$\hat{A}_{\rm H}(t)=\exp\!\left(-\frac{\hat{H}t}{i\hbar}\right)\hat{A}_{\rm H}(0)\,\exp\!\left(\frac{\hat{H}t}{i\hbar}\right) \tag{3.30}$$

を意味するものと考えておこう．このように解釈すると，Schrödinger picture と Heisenberg picture はユニタリー同値であることが明らかになる．

註 3.21 (対応原理再び) ここで数学的な問題に目をつぶって (3.30) でなくわざわざ (3.29) を書いたのは，(微分形の法則を与えたいということもあるが）以下の理由による：古典力学における運動方程式は

$$\frac{d}{dt}A(t)=\{A(t),H\} \tag{3.31}$$

と書くことができる（$\{\cdot,\cdot\}$ は Poisson 括弧）．ここへ対応原理（仮設 3.11）を用いると仮設 3.20 が直ちに導かれるのである．この意味でこの節で述べている時間発展も対応原理（仮設 3.11）の帰結であると言うことができる．このように考えると，以下のように系の時間発展の仮設を設定することも出来る．つまり，仮設 3.11 を古典力学系の運動方程式 (3.31) に対して当てはめて仮設 3.20 を「導き」，その後で Heisenberg picture と Schrödinger picture のユニタリー同値性から仮設 3.18 を「導く」のである．この立場に立つと，根本は対応原理（仮設 3.11）ということになる．ただ，以上の道筋は古典的対応物のある系にしか適用できない．筆者としては，量子力学は全ての系に適用できる普遍的なものであると考えたいので，敢えて対応原理を前面に押し出さない順で記述した．

最後に Interaction Picture も紹介しておこう．これは系のハミルトニアンが

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}_{\rm int} \tag{3.32}$$

と２つに分離できて，かつ，$\hat{H}_0$ に従う時間発展が簡単に解けるとき（散乱問題など）に便利な表示である．まず，$\hat{H}_0$ と $\hat{H}_{\rm int}$ が可換の場合に説明する．時間発展の演算子 $e^{\hat{H}t/(i\hbar)}$ はこの場合２つにわけて

$$\exp\!\left(\frac{\hat{H}t}{i\hbar}\right)=\exp\!\left(\frac{\hat{H}_0t}{i\hbar}\right)\exp\!\left(\frac{\hat{H}_{\rm int}t}{i\hbar}\right) \tag{3.33}$$

と書ける．そこでこのそれぞれを物理量と状態ベクトルに押しつける．つまり，物理量は

$$\hat{A}_{\rm int}(t)=\exp\!\left(-\frac{\hat{H}_0t}{i\hbar}\right)\hat{A}_{\rm int}(0)\,\exp\!\left(\frac{\hat{H}_0t}{i\hbar}\right) \tag{3.34}$$

と変化し，状態ベクトルは

$$|\psi(t)\rangle_{\rm int}=\exp\!\left(\frac{\hat{H}_{\rm int}t}{i\hbar}\right)|\psi(0)\rangle_{\rm int} \tag{3.35}$$

と変化すると考えるのである．

実際は $\hat{H}_0$ と $\hat{H}_{\rm int}$ は可換でないことが多いので，その場合には物理量は (3.34) のように変化するが，状態ベクトルの方は

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle=\hat{H}_{\rm int}(t)\,|\psi(t)\rangle \tag{3.36}$$

で変化すると考える．ただし，ここで $\hat{H}_{\rm int}(t)$ 自身も (3.34) で与えられる時間発展を行うとするのである．(3.36) の積分形は時間順序指数関数（chronological exponential）を用いて[20]

$$|\psi(t)\rangle_{\rm int}=\left[\sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^n\int_0^t dt_n\int_0^{t_n}dt_{n-1}\cdots\int_0^{t_2}dt_1\hat{H}_{\rm int}(t_n)\hat{H}_{\rm int}(t_{n-1})\cdots\hat{H}_{\rm int}(t_1)\right]|\psi(0)\rangle_{\rm int} \tag{3.37}$$

[20]数学的には逐次近似法をやっているだけ

として与えられる．上の大括弧の中の量を T-exp $\left\{\frac{1}{i\hbar}\int_0^t ds\hat{H}_{\rm int}(s)\right\}$ と略記する事もある．

3.4.3　全確率の保存

この小節の残りでは幾つかの性質を見て行く．

まず，(3.27) から直ちに，全確率の保存

$$\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \langle\psi(0)|\psi(0)\rangle \qquad (= 1, \quad \text{ベクトルの規格化から}) \tag{3.38}$$

がでる．この性質は量子力学の確率解釈の基になり，仮設 3.1 での規格化を $t = 0$ で要求すればそれを $t > 0$ でも保証するものであるが，数学的には時間発展がユニタリーであることから保証されている．

3.4.4　定常状態

さて，これらの時間発展の仮設によると，ハミルトニアンの固有状態は特別の意味を持ってくることがわかる．つまり，Schrödinger picture で考えると，$|\psi\rangle$ が $\hat{H}$ の固有状態（固有値 E）であるなら，つまり，

$$\hat{H}\,|\psi\rangle = E\,|\psi\rangle \tag{3.39}$$

であるなら，その時間発展は

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iEt/\hbar}\,|\psi\rangle \tag{3.40}$$

と与えられ，その位相のみが変化することがわかる．つまり，状態としては変化しない（註 3.3）わけであるので，これを**定常状態**と呼ぶ．時間的に変化しない物（例えば安定な原子）等は全てこのような定常状態だと考えられる．定常状態を規定する式 (3.39) はこのように大変重要であるので，こちらの方（を座標表示で書いたもの）も Schrödinger 方程式と呼ぶ．

3.4.5　保存量

以上の運動方程式から，保存量が規定される．今，物理量 $\hat{A}$ がハミルトニアン $\hat{H}$ と可換だとする：

$$\left[\hat{A}, \hat{H}\right]_- = 0 \tag{3.41}$$

この時， $\hat{A}$ は以下に述べる意味で**保存量**である．

1. 状態 $|\psi\rangle$ が固有値 a に対する $\hat{A}$ の固有状態であるなら，それが時間発展しても固有値 a に対する $\hat{A}$ の固有状態である．

2. 状態 $|\psi\rangle$ が $\hat{A}$ の固有状態でない場合でも，この状態における $\hat{A}$ の期待値は時間に依存しない．

上の 1 の場合にはいつ $\hat{A}$ を観測しても価は a．この意味で古典力学と同じように観測値が時間によって変わらない．一方，2 の場合は，観測値は $\hat{A}$ のスペクトルの色々になるが，その確率分布は時間とともに変わらない．

ただし，ここでも状態 $|\psi\rangle$ に時間の経過とともに 2 回の測定を行うのでは**ない**ことを強調しておく．ここで考えているのは不確定性原理の時と同じく，$t = 0$ で状態 $|\psi\rangle$ にある系をたくさん用意して，その半分は時刻 $t = 0$ に $\hat{A}$ の測定を行い，後の半分は時刻 $t = 1$ に $\hat{A}$ の測定を行うような場合である.（もし同じ状態に対して時刻 $t = 0$ と $t = 1$ に 2 回の測定を行ったとしたら，その結果は上とは別になる．と言うのも，第一回目の測定で状態は $\hat{A}$ の固有状態の一つに遷移してしまっているからである．3.5 節参照.）

3.4.6　超選択則

ついでに，保存量の中には特別な意味を持つものがあるらしいことを述べておこう．仮設 3.1 では量子力学の大きな特徴は任意の状態間の重ね合わせも状態と認める，つまり**重ね合わせの原理**を満たすところである，と書いた．この表現は完全には正確ではない．というのは，ある種の重ね合わせは原理的には許されるにも拘わらず，自然界では実現されていないかの様だからである．一例を挙げると，系の全電荷は保存量であるが，この場合，例えば全電荷が 0 の状態と全電荷が 1 の状態の線形結合のような状態は今まで観測されていない[21]．このように量子力学の枠内では説明できない理由で状態の線形結合が近似されている場合，これを**超選択則**と呼ぶ．

3.4.7　ハミルトニアンが時間による場合

いままではハミルトニアンが時間によらないとしてきたが，時間による場合も考え方は同じである．つまり，時間発展の法則の微分形 (3.26) や (3.29) を仮設として設定するのである．この場合，$\hat{H}$ が時間によっているから，その積分形は chronological exponential を用いて書く必要がある．それ以外は特に違いはない．

ただし，実際の系を解いた結果はもちろん異なる．例えば，時刻 $t = 0$ にハミルトニアンの固有状態であっても $t > 0$ では（ハミルトニアンが変わっているから）一般には固有状態とは言えない．状態の遷移がおこっていることになる．

3.5　観測の公理とその問題

いままでは観測の問題を故意に避けて話をしてきた．特に仮設 3.5 の後では，最低限の仮定に話をとどめた．この節では不完全ながら，どのように観測を考えていくべきか，伝統的な解釈と，その問題点を紹介する．不要な煩雑さを避けるため，でてくる演算子は全て点スペクトルのみを持ち，かつ縮退はないかのように記述する．

まず，今までの公理に欠けていたものとして，伝統的な量子力学の解釈（コペンハーゲン解釈）では以下を補充する．

仮設 3.22 (量子力学の舞台 IV．観測の公理 II) 状態 $|\psi\rangle$ での $\hat{A}$ の観測を行うと，その結果は $\hat{A}$ のスペクトルのいずれかになるが（仮設 3.5），その結果，系の状態ベクトルはその際にでた固有値（a_n としよう）に対応する固有ベクトル（$|\varphi_n\rangle$ としよう）に移る．

これを認めてしまうと，ある状態 $|\psi\rangle$ に観測 $\hat{A}$ を続けて行った結果を議論できる．つまり，一回目の観測で a_n という固有値がでると，状態は相当する固有ベクトル $|\varphi_n\rangle$ に移る．この直後もう一回 $\hat{A}$ を測定すると，今度は仮設 3.5 によって確定値 a_n がえられるわけである．(実はこのような実験結果に合致するように，仮設 3.5 を要求したわけである．)

また，この公理は,「ある状態 $|\psi\rangle$ に系を用意する」にはどうすればよいか，も教えてくれる．つまり，その状態 $|\psi\rangle$ を固有状態の一つに持つような物理量 $\hat{A}$ で観測し，その結果が $|\psi\rangle$ に対応する固有値になったものだけ拾い出せば良いことになる．(そんな都合のいい物理量がいつでもあるのか，とか言う問題はひとまず置く．)

これで一応，今まで「この問題は 3.5 節に廻す」として来たことに回答が与えられた．実際，1920 年代の量子力学の発見以来，上のような解釈に基づいた量子力学の応用はめざましい成果を上げてきた．これで一応，メデタシメデタシとなる...

3.5.1　観測の問題

では，いよいよ上の仮設に関して筆者が不満とするところを述べよう．(この小節の中身は多分に物理的，かつ筆者の主観を強く反映したものであることをお断りしておく．)

[21] 超選択則がなくても，ある状態で電荷を観測すると結果は電荷演算子の固有値になる．つまり，電荷演算子が整数固有値を持つと仮定すれば，電荷はいつでも整数になる．超選択則が言っているのはもっと強く「全ての状態において電荷の測定結果はばらつかない」と言うことである．もし異なる電荷の固有値に属する固有状態の線形結合があれば，電荷の測定結果は（色々な整数値をとりつつ）ばらつくはずであるので，この実験結果から,「実現される状態は全電荷の演算子の固有状態のみである」と結論される

観測の公理（仮設 3.22）はよく考えると以下のように何か変である．

今までの量子力学の仮設を振り返ると，系の時間発展に関して２通りの仮設を設けてしまったことがわかる：

1. ひとつは勿論 3.4 節の仮設 3.18 などに代表される，連続的・決定論的な時間発展である（つまり，系の状態ベクトルは (3.27) で時間発展する）．繰り返しになるが，系の状態そのものは，(3.27) ではあくまで連続的・決定論的に時間発展している．

2. ところが，観測の公理，仮設 3.22，はもう一種類の「時間発展」を規定した．つまり，(我々が）状態 $|\psi\rangle$ にある系で物理量 $\hat{A}$ を観測した瞬間に，系の状態は $\hat{A}$ の固有状態の一つに「移る」．この変化は瞬時におこると考えねばならず,「波束の収縮」と言われる[22]．この波束の収縮は非決定論的である．と言うのも，観測の結果，系が $\hat{A}$ の固有状態のどれに移るかは確率的に予言できるだけだから．

なぜこんな変なことになったのか考えてみよう．量子力学の誕生以来，量子力学の枠組みには「観測」と言うものがいつも顔を出してきた．基本的な仮設にすら,「系を観測した結果は...」（仮設 3.5 など）と観測が顔を出している．ここで暗黙の了解となっていた（または，了解と見えるような書き方を故意にしてきた）ことは,「観測は，**我々が**，行う」ことであり，その**我々**は巨視的な系だから量子力学の適用される微視的な系とは何か違うんである，と言うことである．このように「ミクロ」と「マクロ」に本質的な差があると考えて来たため，上の２通りの時間発展をついうっかり認めてしまったのである．乱暴にまとめると,「マクロの系である我々は古典力学に従う．ミクロの系である原子などは量子力学に従う．原子は単独では (3.27) に従って連続的・決定論的に時間発展するが，我々と相互作用（観測）すると，不連続・確率的な状態の遷移（波束の収縮）をおこす」と言うものである．このような考えは「ミクロ」と「マクロ」に本質的な差があると考える限り，特に問題にはならない．

しかし，上のように乱暴にまとめてしまうと，では「我々」と「ミクロ」の**境界**はどこにあるのか，という問題に突き当たってしまう．通常,「ミクロ」は有限自由度の系,「マクロ」は無限自由度の系，と言った逃げ方で区別するが，よく考えると我々も有限自由度系なのだ．もし，量子力学がこの世の根本原理であるとする立場に立つならば[23]，我々自身もこの世の構成物である有限自由度系だから，当然我々自身も，我々とミクロの系の相互作用（観測）も量子力学で矛盾なく記述できるべきである．

このように我々とミクロのものを同じレベルで考えることにすると，上の仮設 3.18 と 3.22 は「系の時間発展について二枚舌（ミクロとマクロ）を使っている」誠に不誠実なものと映ってくる．

これが（筆者の考えでは）伝統的な量子力学の解釈の不満な点である[24]．勿論，これは筆者だけの主張ではなく，量子力学の成立当時から似たような不満を持った人々はたくさんいた．例えば，von Neuman [9, 5 章] や Pauli はその先駆的な例であり，量子力学一元論の立場から，観測の公理を説明する（または導く）ことを目指したものである（このような立場に立つ研究を狭義の「観測の理論」と言う）．しかし，その後の活発な研究にも関わらず，まだ完全な解決がなされたとは言えないようである．大雑把な予想としては，マクロな系の自由度の多さが効いているのであろう，と思われるが，満足な解決はまだであるような印象を受ける．筆者はこの問題については専門家ではないのでこれ以上の深入りはできないが，興味を持たれた方は [10] などの文献を参照されたい．

さらにここ十年くらい，観測問題についての進歩には目覚ましいものがあるようだが，筆者の不勉強のため，現時点ではこの進歩について解説することはできない．

4 簡単な例

以上で量子力学の基本的な枠組みを説明した．これが与えられれば実際の問題を量子力学で扱うのは，数学的にはよく定義された問題になる（もちろん，個々の問題は簡単ではないが）．この節では幾つかの典型的な例を見ておく．

[22] なぜ「波束の収縮」と言われるか説明しよう．例えば，4.1.1 節で考える自由粒子の位置を測定したとすると，測定の直前までは空間に拡がった存在確率を持っていた状態が測定の瞬間に位置の測定値のところに局在した状態になる（収縮）ように見える．これは空間に拡がっていた「波」が収縮するのである，と言うわけ

[23] 勿論，量子力学を根本法則とは認めない，立場もあり得る．そのような立場に立てば，このあたりの議論は全く無意味であろうから，この節の残りはとばして下さって差し支えない

[24] 伝統的な解釈は作業仮設としては大変うまくできていた：このように観測ということを棚上げにすることにより，問題の本質をえぐり出すことに成功したのだろうと思われる．筆者はこの意味で伝統的な解釈を高く評価する．しかし，一旦量子力学の枠組みが完成したと思われたら，今度はこの作業仮設が他の公理から導けるものなのかどうか，検討すべきであろう

4.1　1次元空間での粒子

最も簡単な例はポテンシャル $V(q)$ で表される力を受けつつ直線上を運動する粒子の系であろう．この系のハミルトニアンは粒子の質量を m として

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(q) \tag{4.1}$$

で与えられ，座標表示での Schrödinger 方程式は

$$i\hbar \frac{\partial \psi(q,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(q,t)}{\partial q^2} + V(q)\psi(q,t) \tag{4.2}$$

となる．また，定常状態：$\psi(q,t) = \phi(q)e^{-iEt/\hbar}$ は

$$E\phi(q) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi(q)}{dq^2} + V(q)\phi(q) \tag{4.3}$$

を満たす，$L^2(\mathbb{R})$ の元である．後は色々な $V(q)$ に対してこれらの微分方程式を解いてやればよい．

この方程式は性質の良い $V(q)$ に対しては Sturm–Liouville 型の固有値問題を規定するので，常微分方程式論の膨大な蓄積が利用できる．

幾つかの例をごく簡単に述べる．興味を持たれた方は量子力学の（物理サイドからの）教科書 [1, 3, 5, 11, 12] などを参照されたい．

4.1.1　自由粒子

最も簡単な例は $V(q) \equiv 0$，つまり力が全く働いていない質点（自由粒子）である．この際，(4.2) は時間を虚数にした拡散方程式の形をしているので，フーリエ変換などを用いて簡単に解ける．

その結果の解釈を述べよう．3.3 節では粒子の運動量と位置を同時に確定することはできない（と言うより，そのように確定した状態はあり得ない）ことを見た．そこで，例えば，時刻 $t = 0$ において粒子の位置を $q = 0$ に確定したとして，この状態の時間発展を見てみよう．厳密に言うと，位置が $q = 0$ に確定した「状態」は Dirac のデルタ関数のような物であるから，これは状態のヒルベルト空間 $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$ の元ではない．ただし，位置が $q = 0$ のまわりに大変狭く局在している状態を考えることはできるので，

$$\psi(q,0) \equiv \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{-q^2/\alpha} \tag{4.4}$$

と言う初期条件を考えてみるのである（$0 < \alpha \ll 1$）．時間発展を具体的に解いてみると，粒子の位置の平均値は 0 のままであるが，その位置の分散が時間とともに大きくなっていることを示す（波束の拡散）．

これは不確定性原理から考えると自然に思えることを注意しておこう．というのは，位置を $q = 0$ に確定したと言うことは，不確定性より，その運動量は $(-\infty, \infty)$ のどれでもあり得ると言うことである．よって，時間が経つにつれて粒子の位置の可能性が広がってくることは自然ではあるのだ．

4.1.2　調和振動子

次に簡単な例は $V(q) = \frac{m\omega^2}{2}q^2$ という，調和振動子の場合であろう．この場合は，定常状態の方程式

$$E\phi(q) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi(q)}{dq^2} + \frac{m\omega^2}{2} q^2 \phi(q) \tag{4.5}$$

は完全に解けて，$n = 0, 1, 2, \dots$ に対して固有値

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \tag{4.6}$$

固有関数

$$\phi_n(q) \equiv C_n H_n(x) e^{-x^2/4}\Big|_{x=(2m\omega/\hbar)^{1/2}\,q}, \qquad C_n \equiv \left(\frac{1}{n!}\right)^{1/2} \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \tag{4.7}$$

が存在することがわかる（ここで $H_n(x) \equiv (-1)^n e^{x^2/2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2/2}$ は n 次のエルミート多項式）．エネルギー固有値が等間隔にでているのが見られる．

この問題の特徴は，上の固有関数系 $\{\phi_n\}_n$ が $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$ の**完全系**をなしており，それらが全て粒子が局在したような状態になっていることである．つまり，この場合のハミルトニアンは自己共軛であり，かつ点スペクトルのみを持つことが，以上のように初等的に解いてみることでわかった．

物理的には，この系のポテンシャルは無限遠で無限大になるものなのでいつまで経っても粒子は外へは逃げていけない．この意味で，この系では可能な状態の全てが粒子の局在した状態（束縛状態）となっている．

4.2 水素原子：束縛状態と散乱状態

さて，1次元を離れて，もっと現実問題に近い物を考えよう．例えば，水素原子を考えてみる．水素原子は陽子と電子各1個づつからなるが，これの重心運動は単なる並進運動だから今は考えない．重心の周りの互いの相対運動は3次元空間内の1粒子の運動とみなすことができる．この系のハミルトニアンは

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{Q^2}{r} \tag{4.8}$$

と書ける．ここで ∇^2 は3次元ラプラシアン，r は動径座標，Q は電気素量（つまり陽子の電荷は Q，電子の電荷は $-Q$）．

この系の定常状態は完全に解けて，ハミルトニアンは $E < 0$ のところに点スペクトル，$E \geq 0$ に連続スペクトルを持つことがわかる．

まず，$E < 0$ の状態は

$$E_n = -\frac{mQ^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2} \qquad (n = 1, 2, \ldots) \tag{4.9}$$

と正の整数 n で番号づけられ，各 E_n のエネルギーに対応する固有状態は n^2 重に縮退していることがわかる．（この縮退は異なる角運動量を持つ状態が同じエネルギーを持つことによる．）これらの固有状態は2乗可積分であり，電子が陽子のまわりに局在している様子を示している．このように局在している状態を**束縛状態**と言う．

また，$E > 0$ の固有空間に相当するところは2乗可積分ではない．これは電子が全空間に拡がっている，**散乱状態**を表す．実際に世の中にある系ではこのように束縛状態と散乱状態の両方があることが多い（先の 4.1.2 節の調和振動子はポテンシャルが無限遠で無限大になる，むしろ例外的な系である）．

なお，異なる n の価に対応するエネルギーの差：

$$E_n - E_m = -\frac{mQ^4}{2\hbar^2}\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right) \tag{4.10}$$

は量子力学の歴史上，重要な意味を持っている．と言うのは，水素原子はこのエネルギー差に等しいエネルギーを持った光（光子）を放出する[25]ので，そのスペクトルは大変特徴的な $(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2})$ に比例する系列になるからである．なぜこのようなスペクトルが観測されるのかを説明したい，と言うのが量子力学の発見の大きな動機づけになった．

4.3 一般の系

さて，以上では正確に解ける例のみを見てきたが，一般の系についての数学的な解析もすばらしい勢いで進んでいる．筆者はこの点については専門家ではないので，文献 [4, 13] を挙げるにとどめておこうと思う．（物理的な解析については [1, 3, 5, 11, 12] など．）

[25] なぜ，このエネルギー差が光子として放出されるのか，はもちろん今までの議論からではわからない．ここを理解するには，光（電磁場）をも量子力学的に取り扱う（量子電磁力学）ことが必要となるが，これは Dirac 等によりここで説明した議論がでて2年も経たない内になされた．今から見ると，1920 年代の物理学の発展のスピードには驚異的なものがある

5　量子力学の発展

5.1　スピン：系の対称性と保存則，群の表現論

さて，以上の議論では極めて量子力学的な性質，粒子のスピン，が入っていなかった．ここで簡単にスピンとは何か，説明しよう．

量子力学の一般原理（3.1 節）によると，系はある可分なヒルベルト空間のベクトルで表現されるのであった．この表現は何でも良い訳ではなくて，系の対称性を尊重する様なものである必要がある．

実際，系の対称性と保存量は密接に結びついているが，一般論は [5, §25,§35] などにゆずり，ここではスピンについて述べる．少し厳密性を犠牲にして書くと以下のようになる．

今，回転に関して不変な系を考え，それを回転したとする．議論をはっきりさせるために座標系の回転を単に R で，それに対応する系の状態ベクトルの変化を表す作用素を $\hat{R}$ と書くことにする：

$$|\psi_1\rangle = \hat{R}\,|\psi_0\rangle. \tag{5.1}$$

問題は R と $\hat{R}$ の関係である．物理的考察から，回転に関して不変な系では $\hat{R}$ の全体は**３次元空間の回転群**（要するに R の全体）**の表現**になっている必要があることが以下のようにわかる．今２通りの回転 R_1，R_2 を考え，これらを引き続いて行うことを考える．座標に対してはその結果は $R_2 \circ R_1$ で表される回転の筈．一方，状態ベクトルに対しては，初めの回転で

$$|\psi_1\rangle \equiv \hat{R}_1(|\psi_0\rangle) \tag{5.2}$$

に移った後，

$$|\psi_{0\to 1\to 2}\rangle = \hat{R}_2(|\psi_1\rangle) = \hat{R}_2 \circ \hat{R}_1(|\psi_0\rangle) \tag{5.3}$$

に移る筈である.（ここで，２回目の回転が $\hat{R}_2$ で表されること，つまり，この際の回転がそれまでの履歴（$0 \to 1$）によらないこと，は系の回転対称性の帰結である.）つまり，座標への作用が $R_2 \circ R_1$ である回転の，状態ベクトルへの作用は $\hat{R}_2 \circ \hat{R}_1$ で与えられるわけで，これは（大体）群の表現の定義そのものである．

さて，孤立系を考えると，これは回転対称と考えられる．従って，その状態は回転群の表現で表されねばならない．

実際に電子などの性質を調べていくと，これらの粒子は「(固有）スピン」と呼ばれる，古典的対応物のない自由度を持っていると考えざるをえないことがわかってきた．電子の状態空間は前節までの空間運動を表すヒルベルト空間 $\mathcal{H}_{\mathrm{space}}$ と内部のスピン自由度を表す空間 $\mathcal{H}_{\mathrm{spin}}$ のテンソル積になっている：

$$\mathcal{H}_{\mathrm{total}} = \mathcal{H}_{\mathrm{space}} \otimes \mathcal{H}_{\mathrm{spin}} \tag{5.4}$$

ここで $\mathcal{H}_{\mathrm{space}}$ は 3.2 節のように正準交換関係を表現できるようになっていなければならない．一方， $\mathcal{H}_{\mathrm{spin}}$ は古典的対応物のない，粒子の内部自由度（スピン）を表すもので，回転群の表現空間になっている必要がある．

物理では $2n+1$ 次元表現の場合を「スピンが n」と呼ぶ習わしである．電子，陽子などはスピンが 1/2 であることがわかっている．スピンが 1/2 と言うのは２次元表現であるから $SO(3)$ の２価表現になっているわけであって，一回転しても状態ベクトル自身は元に戻らない.［$SU(2)$ の表現になっている.］自然が $O(3)$ というより $SU(2)$ を知っているのは何となく面白い．

5.2　経路積分

この解説では古典力学から出発して正準交換関係を要求する（3.2 節）ことで量子力学に移行する，という道筋を解説してきた．この道筋は**正準量子化**（canonical quantization）と呼ばれる．

一方，これとは全く異なる道筋を Feynman が発明（発見？）し，**経路積分**（path integral）による量子化と呼んだ．この方法は

1. 形式的には正準量子化法と同等で，

2. 非常に直感的,

3. 古典力学との対応が付けやすく（特に，プランク定数がゼロに行った極限で，量子力学が古典力学に移行する様子が形式的には見て取れる）

4. 更に拘束系などの厄介な問題でも形式的にはどんどん進める

と言った利点があり，特に場の理論の専門家を中心にして大いに普及している．

この経路積分の考え方から出発して量子力学を組み立てていくことも大変面白いのであるが，残念ながら時間がなくなってしまった．文献 [14, 13] などを参照されたい．

5.3 場の理論とその問題

5.3.1 場の量子力学？

さて，自然界には本質的に無限自由度であるような系が存在する．その典型は電磁場，重力場などの「場」である．物理学の基本要請からすると,（１）因果律を満たしてかつ,（２）局所的な相互作用から物理法則を書こうとすると「場」を導入するのが自然になるのである．

さて，このような場は時空の各点で存在するものであるから，その自由度は（大体）時空点の数（＝無限大）である．この世が量子力学で記述されるものとすれば，場も量子力学に従うはずである．そこで，場を量子力学的に扱うには，当然，正準交換関係を無限自由度に対して拡張したものを要請したい．

仮設 5.1 (場の量子論の要請（物理）) 古典的な場（電磁場など）を量子力学的に取り扱うには，これに対して粒子系と同じことを行う．すなわち

1. 系を正準形式で書く．

2. 独立な正準変数に対して正準交換関係を要請する．

原理的にはこれで十分な筈である．実際，量子力学の成立から２年も経たない内に，このような考えに基づいて光の輻射を扱うことは Dirac 等によりなされた．このプログラムを実行すると，なんと，光は粒粒になって観測されることが導かれ，水素原子からの光の放出などもきちんと扱えるようになった．この意味で光については，1.2 節でのべた「粒子」と「波動」の二重性は解決されてしまった．

なお,「場の量子力学」を通常「場の量子論」と呼んでいる．

5.3.2 「粒子」と「波動」の二重性

上のシナリオを振り返って見よう．この解説の 4 節までは「古典力学的には粒子と考えられるもの」の量子力学について解説してきた．しかし，一旦，これがわかってしまうと「波」の量子力学も，5.3.1 節のように考えるのが自然に見える．その結果，古典的な電磁場の量子力学を考えることにより，光については二重性が問題ではなくなった．

となると，もともと粒子だと思っていた電子も実はその基礎には（光の場合の電磁場に相当する）古典的な場があって，これの量子力学（場の量子論）を考えると電子の粒子としての性質がでてくるのではないか，と期待される．実際この考えが正しいことは Dirac, Heisenberg などによりすぐ示された（この場合,「古典的な場」としては Dirac 方程式に従う場を考える）．

このように，1.2 節で問題提起した「粒子」と「波動」の二重性については,「場の量子論」という形でまとめられることが次第に明らかになってきた．現在の素粒子論では（少なくとも重力を考えに入れない範囲では）この世の中は場の量子論で書けるものと期待されている．

（補足）なお，場の量子論を押し進めた動機の一つには，相対論との相性の問題もある．量子力学はその枠組みからして時間を空間座標とは別扱いしており，相対性理論とは（少なくとも表面的には）相いれない形になっている．量子力学の枠組みを保ちつつ相対論と融合すること，これは場の量子論により（相対論的に共変な古典場の量子力学を考えるという形で）達成されたのである．

5.3.3　場の量子論の問題

これで一応,「初等的」な量子力学はおしまいになるのだが，実は場の量子論は未解決問題の宝庫である．この点について少し述べて結びとしたい．

場のような無限自由度の系では有限自由度の系と本質的な差がある．つまり，

無限自由度の CCR の表現は（互いに同値でないものが）無数にある．

ということで[26]，これは大変な問題である．有限自由度の場合は一意性定理があったから，便利な表現をとって徹底的に調べれば良かった．ところが場の理論では結果がどの表現をとるかによってくるわけだから，様々な表現を調べ，考えている物理的状況に合った表現をとる必要がでてくる．

このようなわけで，数学的な解析はかなり不満足な状況にある.（実は 5.3.2 節で「○○がわかった」などと書いたのは「まあ，物理的に許せるくらいの議論で○○であると思われる」くらいの意味であって，数学的に満足のいく定理があるわけではない.）このような不満な状況を乗り越えるため，幾つかの試みがなされている．大きく分けると

- 公理論的場の理論：場の理論が満たすべき最低限の性質を仮定し（仮定した性質を満たす系の存在は仮定する），その中で厳密に導けることを証明しようとする試み．この成果としては「スピンと統計の関係」,「CPT 定理」などの一般的性質を導いたことが挙げられる．
- 構成的場の理論：公理論的場の理論がモデルの存在を仮定して一般的性質を求めたのに対し，具体的な個々のモデルから出発して実際に場の理論のモデルを作る試みである．成果としては２次元，３次元での意味のある場の理論のモデルの構成などが挙げられる．
- 作用素環論からのアプローチ：正準交換関係（やその仲間）の表現論を C^*-環，von Neuman 環等の理論を用いて研究する方法．他の方法ではえられない，非常に細かい結果を得られることがある．

などの試みが続いている．

6　文献について

量子力学についてはたくさんの文献がある．筆者が学生時代に感銘を受けた物を中心に文献表に挙げておいた．この解説で量子力学に関心を持たれた方のために，少し文献案内をしておこう．

１．　まず，量子力学の数学的側面についての古典的名著として，[9] がある．この内容を物理学者でも何とか読めるように（関数解析の基礎の説明から始めて）解説したのが [7] である．これは数学者には少しくどいところもあるかも知れないが，物理的意味にもよく配慮して書かれている．また，[15] の量子力学の項は，数学的な非常に簡潔なまとめである．量子力学の（この解説以上の）発展を 1970 年代の時点でまとめたものとしては [16] がある．

２．　一方，物理の側から量子力学の本質を解明しようとした名著を挙げると，[5, 1, 3, 2, 17] と言ったあたりになろう．このうち [5] は数学的に都合のいいことを全て仮定して進んでしまう誠に恐ろしい本であるが,「ここの所は本当はこういうことを言いたいんだな，このところはこんな仮定があるんだな」と言ったことを他の本，例えば [9, 7]，で補っていただければ，実は大変明快に読め，著者の気迫が伝わってくる名著である．[1, 3, 2] は完全に物理の記述だが，歴史的発展を批判的に追うことにより，量子力学の哲学を浮き上がらせようとしたものである.（このうち，[1, 3] は実際の歴史を並べ替え，袋小路に陥った試みは捨て去って，説明が明快になるような「疑似歴史」に沿って説明している.）科学においてはできあがったものが一番重要であるのは言を待たないが，歴史的発展というのは「日常感覚から出発して，それが実験事実により否応なしに改変されていく過程」を教え

[26] この問題は系の相転移と関連して 1960 年代には広く認識されることとなった．それまでも問題の存在はわかっていたのだと思う．ただ，物理で重要なのは可能な表現の中の一つだけ — Fock 表現 — という思いこみがあった．60 年代,「対称性の自発的破れ」の重要性が認識されるようになり，特に Higgs 機構と Weinberg-Salam 理論が登場して以来，非同値表現が重要であることが認識されたように思われる．なお，2008 年度のノーベル物理学賞の中心的テーマはまさにその「対称性の自発的な破れ」であった

てくれるので，このような進み方も本質をえぐり出すには教訓的だと考える．なお，[17] は誠にユニークな本で，簡単化した系（「スピン」を持った粒子—5.1 節参照）を例にとって，「状態」「重ね合わせの原理」などを導入し，量子力学の本質をえぐり出そうとしたものである．記述は物理的だが，量子力学の枠組みが大変明快に捉えられており，是非おすすめしたい．

３． なお，量子力学の基本的構造はわかったから実際の系に即して色々な応用を知りたい，と言う向きには，２で挙げたものに加えて [11, 12] などをおすすめする．

４． 無限自由度系については現在も進展中であり，文献を挙げるのは容易でない．少し古いが筆者のよく知っているものとして，公理論，構成論，作用素環論の立場から [6, 18, 19, 20] を挙げるにとどめる．

参考文献

[1] 朝永振一郎. 量子力学 I. みすず書房, (1977(2e)).

[2] 高林武彦. 量子力学の発展史. みすず書房, (1977).

[3] 朝永振一郎. 量子力学 II. みすず書房, (1952).

[4] 加藤敏夫. 量子力学の関数解析. 量子物理学の展望, pp. 669–686. 岩波書店, (1978).

[5] P.A.M. Dirac. *The Principles of Quantum Mechanics*. Oxford, (1958).

[6] Bogoliubov, Lognov, and Todorov. 場の量子論の数学的方法（翻訳， 原題＝ Axiomatic Quantum Field Theory）. 東京図書, (1980). 江沢・亀井・関根他訳.

[7] 江沢洋. 量子力学の構造. 量子力学 II, 岩波講座・現代物理学の基礎 4, pp. 247–484. 岩波書店, (1978).

[8] 湯川秀樹. 量子力学的世界像. 量子力学 II, 岩波講座・現代物理学の基礎 4, pp. 557–602. 岩波書店, (1978).

[9] von Neuman. *Die Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*. Springer, (1932). （邦訳「量子力学の数学的基礎」みすず，1957）.

[10] 高林武彦. 観測の問題. 量子物理学の展望, pp. 557–594. 岩波書店, (1978).

[11] L.D. Landau and I.M. Lifshitz. 量子力学 I，II（非相対論的理論）. ランダウ・リフシッツ理論物理学教程. 東京図書, (19).

[12] 湯川秀樹, 並木美喜雄, 江沢洋, 豊田利幸, 高木修二, 田中正, 位田正邦. 量子力学 I. 岩波講座・現代物理学の基礎 3. 岩波書店, (1978).

[13] B. Simon. *Functional Integration and Quantum Physics*. Academic Press, (1979).

[14] R.P. Feynman and Hibbs. *Path Integrals and Quantum Mechanics*. MacGrow-Hill, (1965).

[15] 日本数学会. 数学事典（第２版，第３版）. 岩波書店.

[16] 江沢洋, 恒藤敏彦. 量子物理学の展望（上・下）. 岩波書店, (1978).

[17] R.P. Feynman, R.B. Leighton, and M. Sands. *Quantum Mechanics*. The Feynman Lectures on Physics. Addison-Wesley, (1965).

[18] R.F. Streater and A.S. Wightman. *PCT, Spin and Statistics, and All That*. Benjamin, (1964).

[19] R. Fernández, J. Fröhlich, and A.D. Sokal. *Random Walks, Critical Phenomena, and Tiviality in Quantum Field Theory*. Springer, (1992).

[20] O. Brattelli and H. Robinson. C^**-algebras and Quantum Statistical Mechanics*. Springer, (19).