

量子力学の誕生と数学

はじめに

20世紀前半に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興行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「場の量子論」のような広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。この様な意識の下に、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、現在もなお続く2分野の合流と発展の推移を整理する。

量子力学の背景をなす 19～20世紀初頭の数学

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「19世紀の数学 (1926)」として刊行されている。その構成は、x10x3 ガウスの登場からにおける純粋数学の開花までの歴史、x4 は線形空間や行列代数とその延長上にある n 次元多様体の発展、x5 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となっている。これらは、いずれも量子力学が誕生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、x5 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、その後の章の内容も物理学の発展に伴い重要な意味を持って来ている。

前期量子論の数学

量子力学が確立される以前の前期量子論の試みは、古典力学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でいたが、数学的には19世紀の天体力学、ハミルトン・ヤコビの正準力学の範疇にあった。ただし、多重周期運動を作用変数と角変数の正準変数で表現する手法は、前期量子論の発展の過程で飛躍的に発展して整備されたが、これらの正準変数は本質的に1846年に Delaunay により天体力学の研究で導入されていたとも言われている。これは今後の研究を必要とするが、そうであれば、前期量子論に至ってゾンマーフェルト (1915) 等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であり、天体力学の手法は70年を経て原子物理学への活用の路を開かれたことになる。

量子力学の誕生と数学的背景

量子力学の誕生は、力学変数を観測可能な状態間の量子論的振動の要素の集合に対応させてクラマースの分散関係等を導いたハイゼンベルグの論文 (1925) とされる。続くボルン-ヨルダンの論文では、「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とから、対角成分の意味で正準交換関係 $pq - qp = \frac{h}{2\pi i} 1$ が導かれた。次いで、ディラックは、行列の積で特徴づけられる力学変数の微分の代数から正準交換関係と古典力学のポアソン括弧の関係を導き、古典力学を量子力学に移す「正準量子化」の手順を確立した。固有値問題を含む行列理論は19世紀後半に整備され、1924年に出版されたクーラン-ヒルベルトの「数理物理学の方法」にも含まれており、物理学者にも無縁ではなかった。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、一般的な形はヒルベルト、リース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、行列力学が多重周期運動に基礎を置くことを不満とし、N. ウィーナーと協力して行列に代わる演算子表現を試みたが (1926)、量子力学の背後にある状態空間については深く考えなかった。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である (1926)。実際に固有問題を解くに当って H. ワイル に助力を求めているように、波動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波動力学の登場に間に合う形で準備されていたが、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、行列力学の立場からボルン-ハイゼンベルグ-ヨルダンとヨルダン (1926) により、行列力学と波動力学の関係がシュレディンガー、ディラック、ヨルダンにより。とりわけ、ディラックの議論は変換理論の本質を含み、連続行列をも扱うためのデルタ関数が導入された。変換理論は数学者からもすばやい反応があった。ノイマン-ヒルベルト-ノルドハイム (1927) は、関数空間上でデルタ関数を含む演算子の代数から量子力学の数学的整備を試みたが、関数空間を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する量子力学の定式化は、シュレディンガーに先駆けて波動方程式を導いたランチョスや、ヨルダンが試みた。一方、ノイマンはデルタ関数を避けてヒルベルト空間を波動関数の空間として公理化し、この中の射影演算子のスチュルチェス積分として物理的演算子をスペクトル分解で表す定式化を行った。その成果は「量子力学の数学的基礎 (1932)」として出版され、物理学と数学の双方に大きな影響を与えた。しかし、後にシュバルツの超関数やゲルファンド等によりデルタ関数の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 (H) 単独ではなく、その上の汎関数空間 (\mathfrak{A}^E) と核空間 (\mathfrak{a}) の三つ組構造 $\mathfrak{a} \subset H \subset \mathfrak{A}^E$ の上に構成される。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、この三つ組み構造に適ったものであった。

場の量子論と経路積分

1927 年、ディラックは量子論を原子ではなく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、量子論を基に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、ミクロの世界を攻略する強力な武器となった。数学的には、量子化された場は超関数的の演算子であり、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等は、数学者にも強い刺激を与えた。一方、1942-1948 年に、「経路積分」と呼ばれる量子力学の第 3 の定式化がファインマンにより与えられた。ファインマンは、微小時間での位置の遷移振幅 $\langle q_A, t | q_i, t_i \rangle$ が L をラグランジアンとする因子 $e^{i\int \dot{A} t L}$ に類似する (ディラック) ことから、有限時間の遷移振幅をこの因子の始点から終点に至るすべての経路の和で表した。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。経路積分は数学者にも強い影響を与えた。1949 年に、M. カッツはポテンシャル場の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、虚数時間 $\hat{u} = \hat{A} i t$ でのシュレディンガー方程式の解を与えた。経路積分は、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り、現在では、コンピュータによる数値解析の手法への影響も含めて、非摂動的な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、19 世紀の数学の上に建設されたが、これを完成させ、これから派生した問題を明らかにして行く過程で数学自体の整備も必要となり、物理と数学の興味深い合流点を生じた。結果として、20 世紀の数学の幾つかの分野が量子力学の刺激の下で発展し、さらにはクラインが純粋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。量子力学に係わる物理と数学の合流点には、興味深い知的緊張の歴史があり、その一つ一つが意味のある研究課題と言える。