

ウェルナー・ハイゼンベルク(1901~1976)の功績

A meritorious deed of Werner Heisenberg (1901-1976)

村上 陽一 (東京工業大学)

Yoichi MURAKAMI (Tokyo Institute of Technology)

e-mail: murakami.y.af@m.titech.ac.jp



ウェルナー・ハイゼンベルク (1901~1976)

1. はじめに

プランクの法則[1]によって幕を開けた量子論は、1913年にボーアによって発表された原子論[2]を契機に急速な展開を見せ始めます。前期量子論と称されるこの過渡的な時期において、人々は量子論の古典論による類推を助けるボーアの対応原理を道具として様々な問題に取り組んでゆきます。すなわち、当時は「勘と技巧でもって個々の問題を対応原理的に処理し、あとからみて本質的に正しい関係式を結論する」[3] 状況にあったといえます。このような取り組みは一定の成果を挙げたものの、明確な公理系を伴わないことによる一般性の欠如が問題として付きまといました。

1925年の初夏、ゲッチンゲン大学の私講師だったハイゼンベルクは原子内電子の軌道の概念を問題から排し、定常状態間の遷移を中心に据えて対応原理の徹底的な精密化を行うことで、自己矛盾のない首尾一貫した数学形式、すなわち量子力学の構築に成功します。これにより前期量子論の時代は終わりを迎え、その翌年発表された(特殊相対性理論を指導原理としたド・ブロイの理論[4]に基いた)シュレディンガーの波動理論[5]とともに量子力学の時代が幕を開けることとなります。

2. 前期量子論の関連成果

2.1 ボーアの対応原理

水素原子の電子について半径 r の古典円運動を考えると、その全エネルギー(運動+位置)は

$$E = -\frac{e^2}{2r} \quad (1)$$

であり、軌道運動の周波数は

$$v^2 = \frac{e^2}{4\pi^2 m r^3} \quad (2)$$

と導かれます(ケプラーの第3法則)。式(1)と式(2)から r を消去すると円運動の振動数は

$$v = -\sqrt{\frac{2}{\pi^2 m e^4}} E^{\frac{3}{2}} \quad (3)$$

と表されます。古典論では周期運動を行う電荷は式(3)で表される振動数の光を放出すると考えられ、一般に楕円軌道運動を考えた場合には、電荷の運動により式(3)の基本振動数 v に加えてその τ 倍高調波 ($\tau = 1, 2, \dots$)

$$v_\tau \equiv \tau v = -\sqrt{\frac{2}{\pi^2 m e^4}} E^{\frac{3}{2}} \tau \quad (4)$$

が併せて放出されることとなります。

一方、量子論においてはバルマーの公式

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{v}{c} = R \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (5)$$

から、水素原子における n 番目の電子軌道から m 番目の軌道への遷移に伴う発光の振動数 $\nu_{n \rightarrow m}$ は

$$\nu_{n \rightarrow m} = R c \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (6)$$

と書かれます。式(6)とボーアの振動数条件[2]

$$\nu_{n \rightarrow m} = \frac{E_n - E_m}{h} \quad (7)$$

との比較から、水素原子のエネルギー準位

$$E_n = -\frac{hRc}{n^2} \quad (8)$$

が得られます。ここで $\tau \equiv n - m$ ($\tau = 1, 2, \dots$) を定義し、 $n \gg \tau$ の場合を考えると、 $n \rightarrow m (= n - \tau)$ の遷移で放出される光の振動数は

$$\nu_{n \rightarrow n-\tau} = Rc \left\{ \frac{2n\tau - \tau^2}{(n-\tau)^2 n^2} \right\} \cong \frac{2Rc}{n^3} \tau \quad (9)$$

となります。式(8)と式(9)から n を消去すると、

$$\nu_{n \rightarrow n-\tau} = -\frac{2}{\sqrt{h^3 Rc}} E^{\frac{3}{2}} \tau. \quad (10)$$

式(4)と式(10)は相似形であり、これは高い量子数間の遷移に伴って放出される光の振動数が古典論の振動数に漸近することを示唆します。実際、式(4)と式(10)の右辺を等号において解くと正しいリュードベリ定数 $R = 2\pi^2 m e^4 / (h^3 c) = 1.09 \times 10^7 \text{ [m}^{-1}\text{]}$ が得られることから、量子数 n が十分大きい場合には $\nu_{n \rightarrow n-\tau} \cong \nu_\tau$ が成立すると考えられます。

すなわち、量子論における $n \rightarrow n - \tau$ の遷移に対しては運動状態 n にある系が古典論に従って放出する光の基本振動数 ν の τ 倍高調成分が対応する、一般に言い換えれば「 $n \rightarrow \infty$ の極限で量子論は古典論の結果に漸近する」というのがボーアの対応原理の要点です。物理的には、 n が十分大きいときにはエネルギーのとびとびの間隔が微小になりエネルギーの不連続性が目立たなくなること、またそのような状況では電子は原子核から十分に離れ自由電子に近い運動すると考えられることから、 $n \rightarrow \infty$ の極限では状況が古典論で記述可能な場合に漸近すると解釈されます。

2.2 エーレンフェストの断熱仮説

固有振動を行っている力学系に外部から十分ゆっくりとした変化を加える場合（例えば振り子の糸の長さや振動弦の張力を振動周期より十分長い時間かけて緩やかに変化させる場合）を考えると、この変化とともに振動数 ν や系のエネルギー E は変化しますが、 E の変化の割合と ν の変化の割合は等しいことから、変化の過程で E/ν は一定の値を持ち続けます。このような変化における不変量を断熱不変量と呼びます。

具体的に、一次元の正弦振動子の運動量を p 、

座標を q とすると、系が固有状態にあるとき $p(t)$ と $q(t)$ が p - q 平面上に描くトラジェクトリは図 1(a) のような楕円になります。質量を m 、バネ定数を κ とすると、エネルギーと振動数はそれぞれ

$$E = \frac{1}{2m} p^2 + \frac{\kappa}{2} q^2 \quad (11)$$

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\kappa}{m}} \quad (12)$$

と表されます。一方、図 1(a) のトラジェクトリで囲まれた面積 J は

$$J = \oint p dq = 2\pi E \sqrt{\frac{m}{\kappa}} \quad (13)$$

と求められますが、これは式(12)によって

$$\frac{E}{\nu} = J \quad (14)$$

と書き換えられ、 J が断熱不変量であることが分かります。加えられた断熱的变化によりトラジェクトリは図 1(b) のように変化しますが、その過程で面積 J は不変であり、系は変化の途中および変化後も固有振動を行うこととなります。

エーレンフェスト (P. Ehrenfest, 1880 – 1933) は量子論における断熱不変量の研究を行い、次の仮説の提案により、量子力学が確立されるまでの過渡的方法論を提供しました。「力学系に外部から変化を与えるとき、この変化が無限にゆっくり行われるならば、その経過の途中、力学系の運動を通常の力学を用いて論ずることが許される。このとき、変化の始まる前に系が量子的に許された状態にあれば、この変化の途中およびその後も系はやはり量子的に許された状態にある。」[6]

2.3 一般化された量子条件

エーレンフェストの断熱仮説を基礎として、1910年代の中盤にかけて複数の物理学者によって次のような一般化された量子条件

$$J = \oint p dq = nh \quad (15)$$

が導かれます。式(15)に式(14)を適用すればプランク振動子の $E = nh\nu$ を確認できます。式(15)は、図 1(c) のように量子的に許される状態はトラジェクトリによって囲まれる面積がプランク定数の整数倍になるものに限られる（量子数が断熱不変量

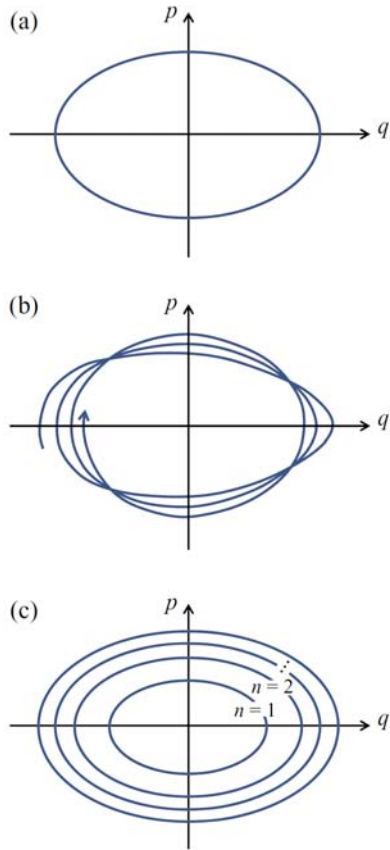


図1 (a) 正弦振動系のトラジェクトリ. (b) 断熱変化における推移の例. (c) 量子条件.

になっている) ということを示します.

一方、周期系の振動数 ν は E と J によって

$$\nu = \frac{dE(J)}{dJ} \Leftrightarrow \nu_\tau = \tau \nu = \tau \frac{dE(J)}{dJ} \quad (16)$$

と表され[6], これに式(15)を代入すると

$$\nu_\tau \Big|_{J=nh} \equiv \nu(n, \tau) = \frac{\tau}{h} \frac{dE(n)}{dn} \quad (17)$$

が得られます. 古典的な倍音関係に基づいたこの微分式に対しては、量子論ではボーアの振動数条件 (式(7)) により差分式

$$\nu_{n \rightarrow n-\tau} \equiv \nu(n; n-\tau) = \frac{E(n) - E(n-\tau)}{h} \quad (18)$$

が対応することになります. このような対応関係はボーアらによって確立されてゆきました.

3. 量子力学の発見

3.1 ハイゼンベルクの指針

ハイゼンベルクはそれまでの経験と考察から、実験的に観測されない古い量子論における原子内電子の軌道運動というものは理論の枠組みから追

放されるべきで、発光の振動数や強度として実際に観測される二つの定常状態間の「遷移」のみを扱わなければならないという考えに至ります[6,7]. このような考えの下、指導原理とするボーアの対応原理を徹底的に精密化してゆくことで、物理的意味が不明確な電子の軌道運動という概念に縛られた古い量子論からの脱却を試みたのです.

ハイゼンベルクの当初の目的は水素原子におけるバルマー線の発光強度を計算することにあります[8]. 古典的なマクスウェル理論では放射強度は振動双極子の振幅の絶対値の二乗に比例します. 一方、量子論においては遷移の頻度 (単位時間あたりの遷移確率) が放射の強度にあたります. ハイゼンベルクは対応原理に沿って進むため、まず (それ以前の対応原理的研究で行われていたように) 物理量を軌道運動の描像の下でフーリエ級数の形に書き出すことから始めます. 上述の発光強度を求める目的から、第一に重要な物理量は電子の振動振幅に関連する位置座標 x となります. 具体的に、 n 番目の定常状態にある電子の位置 x は古典周期運動の高調成分 $\nu(n, \tau)$ についてのフーリエ級数として次のように書かれます.

$$x(t) = \sum_{\tau=-\infty}^{+\infty} X(n, \tau) e^{2\pi i \nu(n, \tau) t} \quad (19)$$

ハイゼンベルクはこのような古い考えにおける電子の軌道運動のフーリエ級数の各項が量子的な各々の「遷移」に対応していると考えます. そして彼はこのような古い考えにおける軌道運動のフーリエ成分に対応して $n \rightarrow n - \tau$ の遷移を表す量子力学的な (遷移成分とも呼ぶべき) 量

$$X(n; n-\tau) e^{2\pi i \nu(n; n-\tau) t} \quad (20)$$

が存在していて、その絶対値の二乗が遷移の確率を与えるのに基本的な役割を果たすのに違いない、という見当から出発します[3,6]. すなわち古い考えでのフーリエ成分 (式(19)の各項) を遷移成分 (式(20)) によって置き換えてゆくという方針をとります. 以下、対応関係を記号「 \leftrightarrow 」によって結び、左側に軌道描像に立脚した古い量子論の形式、右側にそれに対応する新しい形式を示すことにします. これから、式(19)と式(20)の対応関係は $X(n, \tau) \leftrightarrow X(n; n-\tau)$ と表されます.

3.2 微分演算についての対応関係

2.3 節に示した式(17)と式(18)の対応関係（微分と差分の対応）は、これを定常状態ごとに値をもつ n の任意の関数 $F(n)$ に拡張して

$$\tau \frac{dF(n)}{dn} \leftrightarrow F(n) - F(n - \tau) \quad (21)$$

と書かれます。その他の重要な対応関係としては、式(17)と式(18)を比較した際と同じ議論から

$$v(n, \tau) = -v(n, -\tau) \leftrightarrow v(n; n - \tau) = -v(n - \tau; n). \quad (22)$$

（左側の関係は $v(n, \tau) = \tau v(n, 1)$ から。）また、 $x(t)$ が実数であるという条件からフーリエ係数の複素共役についての対応関係

$$X(n, \tau) = X^*(n, -\tau) \leftrightarrow X(n; n - \tau) = X^*(n - \tau; n) \quad (23)$$

が直ちに得られます。

式(21)では定常状態 n のみの関数を考えましたが、より重要な関数として、遷移に関する n と τ の両方を含む関数（例えば式(19)のフーリエ係数）があります。ここで、古い量子論において次のような微分項が現れた場合

$$\tau \frac{\partial v(n, \tau)}{\partial n} \quad (24)$$

を考えます。式(24)に式(17)の v を代入すると

$$\frac{\tau^2}{h} \frac{d^2 E(n)}{dn^2} \quad (25)$$

という2階微分となるので、2階微分の定義式

$$\frac{d^2 f}{dx^2} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\{f(x + \Delta x) - f(x)\} - \{f(x) - f(x - \Delta x)\}}{(\Delta x)^2} \quad (26)$$

に暗示を受けて、式(24)の新しい量子論における形式としては、式(26)で Δx を $\tau (= \Delta n)$ と読み換え

$$\frac{\tau^2}{h} \frac{\{E(n + \tau) - E(n)\} - \{E(n) - E(n - \tau)\}}{\tau^2} \quad (27)$$

$$= v(n + \tau; n) - v(n; n - \tau)$$

が類推され（右辺への移行は式(7)による）、さらにこの関係を任意 n と τ の関数 $F(n, \tau)$ に拡張して

$$\tau \frac{\partial F(n, \tau)}{\partial n} \leftrightarrow F(n + \tau; n) - F(n; n - \tau) \quad (28)$$

という対応関係が得られます。式(28)はハイゼンベルクが量子力学を発見する上で重要な役割を果たしたカギとなりました[3,6]。

3.3 積演算についての対応関係

このように電子の軌道運動の描像に立脚した古い理論を新しい形式に対応的に解説してゆく際、読み解くべき古い理論に変数同士の積が現れることがあります。典型的な例は x^2 であり、これを新しい形式でどのように対応させるべきかが問題となります。

まず、軌道運動の描像でフーリエ級数により表された x (式(19)) の二乗を考えます。このような x^2 においてもやはり同じ振動数 $v(n, \tau)$ を含む級数で表されることから、 τ 番目のフーリエ成分は

$$\sum_{\tau'=-\infty}^{+\infty} X(n, \tau') e^{2\pi i v(n, \tau') t} X(n, \tau - \tau') e^{2\pi i v(n, \tau - \tau') t} \quad (29)$$

$$= \sum_{\tau'=-\infty}^{+\infty} X(n, \tau') X(n, \tau - \tau') e^{2\pi i v(n, \tau) t}$$

と書かれます。ここで τ' は単なるダミー変数であり、両辺の指数部の関係は古典的な倍音振動則

$$v(n, \tau') + v(n, \tau - \tau') = v(n, \tau) \quad (30)$$

に基づいています（「A 倍波と B 倍波の振動数の和は A+B 倍波の振動数」ということ）。ここでは「 x^2 のフーリエ成分の振動数中に x のフーリエ成分に現れた振動数以外のものが一つも現れない」ということが本質的な点となっています。

一方、新しい形式では式(20)の遷移成分を考慮することになりますが、ここでも同様に「 x^2 の演算を行った際にそこに x の成分中に存在しなかった振動数が新たに現れてはいけない」という要求をおきます。この要求を満たす積演算を考案するにあたり、ハイゼンベルクは式(30)の倍音振動則には量子論における振動数結合則（リッツの結合則、式(7)に由来）

$$v(n; n - \tau') + v(n - \tau'; n - \tau) = v(n; n - \tau) \quad (31)$$

が対応すべきと考えます（「A→B の遷移振動数と B→C の遷移振動数の和は A→C の遷移振動数に等しい」ということ）。この対応関係の明察がハイゼンベルクを発見に導いた鍵となりました。これから直ちに新しい形式における x^2 の成分 ($n \rightarrow n -$

τ の遷移成分)として

$$\sum_{\tau'=-\infty}^{+\infty} X(n; n-\tau')X(n-\tau'; n-\tau)e^{2\pi i\nu(n; n-\tau)t} \quad (32)$$

が導かれます. この考えは任意の二つの量 Y, Z の積に一般化され, 積 YZ の遷移成分は

$$\sum_{\tau'=-\infty}^{+\infty} Y(n; n-\tau')Z(n-\tau'; n-\tau)e^{2\pi i\nu(n; n-\tau)t} \quad (33)$$

となります. この新しい演算規則の著しい特徴は, $n \rightarrow n - \tau$ の遷移を表す積演算では, 直接関係する始状態 (n) と終状態 ($n - \tau$) 以外に, 古典的には無関係であるはずのその他全ての状態 ($n - \tau', \tau': -\infty \dots 0 \dots \infty$) が中間状態として遷移に関係してくるという点にあります. そして, このような性質によって式(33)では YZ と ZY の積演算が一般に等しくならぬことが分かります. これは量子力学における演算の非可換性を表すものとなっています. このような一連の演算規則の発見と妥当性の確認(次節)を経て, ハイゼンベルクは新しい数学形式の発見に成功したのでした.

4. 新理論の性質と妥当性

4.1 新理論における量子条件

ハイゼンベルクの考えでは物理量は遷移成分の集合として与えられることから, 新しい形式に焼き直すにあたり, 古い理論における物理量はフーリエ級数に展開しておく必要があります. 古い量子条件(式(15))を読み解くために, p と q をフーリエ級数

$$p = \sum_{\tau=-\infty}^{+\infty} P(n, \tau)e^{2\pi i\nu(n, \tau)t} \quad (34)$$

$$q = \sum_{\tau=-\infty}^{+\infty} Q(n, \tau)e^{2\pi i\nu(n, \tau)t} \quad (35)$$

で表し, 式(15)に代入して周回積分を解くと

$$nh = 2\pi i \sum_{\tau=-\infty}^{+\infty} P(n, \tau)Q(n, -\tau) \frac{\nu(n, -\tau)}{\nu(n, 1)} \quad (36)$$

が得られます. ここで右辺の分数に式(22)の左側の関係と倍音関係 $\nu(n, \tau) = \tau\nu(n, 1)$ を用い, さらに $Q(n, -\tau)$ において式(23)の左側の関係を適用すると式(36)は

$$nh = -2\pi i \sum_{\tau=-\infty}^{+\infty} P(n, \tau)Q^*(n, \tau)\tau \quad (37)$$

と書き換えられ, これはフーリエ成分で表された量子条件となります. 続いて式(28)のカギを用いる目的で式(37)の両辺を n で微分すると,

$$h = -2\pi i \sum_{\tau=-\infty}^{+\infty} \tau \frac{\partial}{\partial n} \{P(n, \tau)Q^*(n, \tau)\}. \quad (38)$$

これに式(28)の対応関係を適用すると, 式(38)は

$$\begin{aligned} \frac{h}{2\pi i} = & - \sum_{\tau=-\infty}^{+\infty} P(n+\tau; n)Q^*(n+\tau; n) \\ & + \sum_{\tau=-\infty}^{+\infty} P(n; n-\tau)Q^*(n; n-\tau) \end{aligned} \quad (39)$$

と書き換えられます. ここで今度は式(23)の右側の関係を用い, 右辺第二項の和で $\tau \rightarrow -\tau$ の変数変換を行うと

$$\begin{aligned} \frac{h}{2\pi i} = & \sum_{\tau=-\infty}^{+\infty} P(n; n+\tau)Q(n+\tau; n) \\ & - \sum_{\tau=-\infty}^{+\infty} Q(n; n+\tau)P(n+\tau; n) \end{aligned} \quad (40)$$

と表されます. さらに, 運動量 p が $m\dot{q}$ で表される場合には, 式(35)を時間微分したものを式(15)に代入して同様に解き, 計算の途中で $Q^*Q = QQ^* = |Q|^2$ および式(23)の右側の関係を用いて

$$\begin{aligned} h = 4\pi^2 m \sum_{\tau=-\infty}^{+\infty} \{ & |Q(n+\tau; n)|^2 \nu(n+\tau; n) \\ & - |Q(n; n-\tau)|^2 \nu(n; n-\tau) \} \end{aligned} \quad (41)$$

と表されます. 式(40)および式(41)が新しい理論における量子条件となります.

4.2 新理論における振動振幅

続いて3節で発見された演算規則を用いて古い運動方程式を書き換えることを考えます. 簡単な場合として調和振動子(プランクの振動子)を考えると, その古典的運動方程式は

$$\ddot{x} + \frac{\kappa}{m}x = \ddot{x} + (2\pi\nu)^2 x = 0. \quad (42)$$

古い量子論における \ddot{x} は, 式(19)から

$$\ddot{x} = -\{2\pi\nu(n, \tau)\}^2 X(n, \tau)e^{2\pi i\nu(n, \tau)t} \quad (43)$$

と書かれ、式(42)に式(43)と式(19)を代入して

$$(2\pi)^2 \{v^2 - v(n, \tau)^2\} X(n, \tau) = 0 \quad (44)$$

が導かれますが、 $v = v(n, 1)$ および式(22)の左側の関係によって $\tau = \pm 1$ の場合のみフーリエ係数 $X(n, \tau)$ が非ゼロになる事がわかります(物理的には単振動には高調成分が存在しないことに対応)。

一方、新しい形式についてこれを対応的に考えると、 \ddot{x} は式(20)から

$$- \{2\pi v(n; n - \tau)\}^2 X(n; n - \tau) e^{2\pi i v(n; n - \tau)t} \quad (45)$$

と得られ、これを式(42)に代入して

$$(2\pi)^2 \{v^2 - v(n; n - \tau)^2\} X(n; n - \tau) = 0 \quad (46)$$

が得られますが、

$$v = v(n; n - 1) = -v(n - 1; n) = -v(n; n + 1) \quad (47)$$

が成立するので、古い考えの場合と同様、 $\tau = \pm 1$ の場合にのみ遷移振幅 $X(n; n - \tau)$ が非ゼロになる事がわかります(調和振動子における遷移選択則)。

$X(n; n \pm 1)$ の具体的な値は以下のように求められます。まず、式(41)の級数において $\tau = +1$ と -1 の項のみをピックアップすると

$$h = 8\pi^2 m v \left\{ |X(n+1; n)|^2 - |X(n; n-1)|^2 \right\} \quad (48)$$

が得られます。右辺の $\{ \}$ 括弧内は式(28)の微分に関する対応関係において $\tau = 1$ としたものであるから、この部分についての対応関係は

$$\frac{\partial}{\partial n} |X(n, 1)|^2 \leftrightarrow |X(n+1; n)|^2 - |X(n; n-1)|^2 \quad (49)$$

であり、さらに、 $X(n, 1) \leftrightarrow X(n; n - 1)$ の対応関係(3.1節)が成り立っているので、式(48)は

$$\frac{h}{8\pi^2 m v} = \frac{\partial}{\partial n} |X(n; n-1)|^2 \quad (50)$$

と書き直されます。この両辺を n で積分すると、式(46)における $\tau = +1$ の場合の遷移振幅の二乗

$$|X(n; n-1)|^2 = \frac{1}{8\pi^2 m v} n h \quad (51)$$

が求まります。一方、式(51)左辺の $|X|^2$ 内で複素共役をとってセミコロンで区切られた要素の順番を入れ替え、 $n \rightarrow n+1$ の変数変換を行うと、式(46)における $\tau = -1$ の場合の遷移振幅の二乗

$$|X(n; n+1)|^2 = \frac{1}{8\pi^2 m v} (n+1) h \quad (52)$$

が得られます。式(51)は与えられた n において x の振幅を定める関係式であり、量子条件(式(15))を遷移振幅によって対応原理的に書き直した形と言えます。実際、古典的な正弦振動の式 $q = X e^{2\pi i v t} + X^* e^{-2\pi i v t}$ (X : 振幅)に式(15)を適用して導かれる量子的に許された振幅の二乗($|X|^2$)が、式(51)の右辺と一致することが確かめられます。

4.3 新理論におけるエネルギー

ハイゼンベルクは、彼が導出した新しい形式において定常状態のエネルギー保存則が成り立っていること確かめる必要がありました。調和振動子のエネルギー E は古典的表現で

$$E = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 + \frac{1}{2} m (2\pi v)^2 x^2 \quad (53)$$

と書かれます。まず、 \dot{x}^2 の $n \rightarrow n - \tau$ についての遷移成分については、式(20)から求めた \dot{x} を式(32)の二乗の演算規則に代入して

$$- 2\pi^2 m \left\{ \sum_{\tau'=-\infty}^{+\infty} v(n; n - \tau') v(n - \tau'; n - \tau) \cdot X(n; n - \tau') X(n - \tau'; n - \tau) e^{2\pi i v(n; n - \tau)t} \right\} \quad (54)$$

が得られます。これに遷移振幅 $X(n; n - \tau)$ が $\tau = \pm 1$ の場合のみ非ゼロとなる事(4.2節)、式(23)の右側の関係、および式(47)を適用すると、 \dot{x}^2 は

$$4\pi^2 v^2 \left\{ |X(n; n-1)|^2 + |X(n; n+1)|^2 \right\} \text{ for } \tau = 0 \\ - 4\pi^2 v^2 X(n; n \mp 1) X(n \mp 1; n \mp 2) e^{2\pi i v(n; n \mp 2)t} \text{ for } \tau = \pm 2. \quad (55)$$

x^2 についても式(32)を用いて同様な演算を行い、

$$|X(n; n-1)|^2 + |X(n; n+1)|^2 \text{ for } \tau = 0 \\ X(n; n \mp 1) X(n \mp 1; n \mp 2) e^{2\pi i v(n; n \mp 2)t} \text{ for } \tau = \pm 2 \quad (56)$$

が導かれます。最後に式(55)と式(56)を式(53)に代入すると、エネルギー E を表す遷移成分

$$4\pi^2 v^2 m \left\{ |X(n; n-1)|^2 + |X(n; n+1)|^2 \right\} \text{ for } \tau = 0 \\ 0 \text{ for } \tau \neq 0 \quad (57)$$

が得られます。ここで重要なのは、エネルギーの遷移成分としては $\tau = 0$ のもの、すなわち $n \rightarrow n$ に対応して時間 t を含まないものだけが非ゼロの値

を持ち、他のものは全てゼロになるという点です。これは定常状態におけるエネルギー保存則が成り立っていることを示すものであり、これによりハイゼンベルクは数学的に自己無矛盾で首尾一貫した体系の構築に成功したことを確信したのでした。「最初の一項でエネルギー則が本当に確認されたときに、私はある興奮状態におちいってしまい、それから先の計算では何度も何度も計算のミスを繰り返してしまったほどだった。…私は心底から驚愕した。私は原子現象の表面を突き抜けて、その背後に深く横たわる独特の内部的な美しさをもった土台をのぞきみたような感じがした。」[7]

なお、式(57)に式(51)と式(52)を代入すると量子力学における n 番目の状態にあるプランク振動子のエネルギー

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) h\nu \quad (58)$$

が直ちに導かれ、ここには以前の実験結果から存在が期待されていたゼロ点振動エネルギー ($1/2h\nu$) が組み込まれていることがわかります。ハイゼンベルクはこの発見を「運動学的かつ力学的な関係の量子論的再解釈」という表題の論文[9]にまとめ (1925年7月投稿)、原稿をゲッチンゲン大学でハイゼンベルクの上司であったボルン (M. Born, 1882 – 1970, 1954年ノーベル物理学賞) に託して国外の旅へと出かけます[3]。

5. 行列力学への移行

5.1 行列表記の導入

ハイゼンベルクは行列力学の創始者と考えられていますが、彼は量子力学の発見時点では行列を知りませんでした(「若いハイゼンベルクが行列を知らずに行列力学を発見したことは面白い。新しい理論を発見するのに、必ずしもあらかじめそれにふさわしい数学を知っていなくともよい例である」[3])。ハイゼンベルクが発見した形式を行列表記に仕上げたのは、この理論が行列により簡便に表記できることに気づいたボルンおよび彼と協同したヨルダン (P. Jordan, 1902 – 1980) によるものです。ハイゼンベルクの形式が行列で記述されることは、積演算 (式(33)) における非可換性 ($YZ \neq ZY$)、あるいは正方行列の積 $\mathbf{X} = \mathbf{YZ}$ を考えたときに行列 \mathbf{X} の i 行 j 列の要素 x_{ij} が

$$x_{ij} = \sum_n y_{in'} z_{n'j} \quad (59)$$

と表されることから類推されます ($n': 1, 2, \dots$)。式(59)における n' の役割は、式 (33)における中間状態 $n - \tau'$ のそれに類似するものとなっています。

前節までは対応原理を用いる文脈で古典的描像を意識した“ $n \rightarrow n - \tau'$ ”という表記を用いてきましたが、今後は $n - \tau \equiv m$ として遷移を“ $n \rightarrow m$ ”と表すことにします。ハイゼンベルクの量子力学では座標 x や運動量 p などの物理量はそれぞれの遷移成分の集合と考えられます。今、ある物理量 A を考えると、 $n \rightarrow m$ の遷移成分 $A_{n,m} \equiv a_{n,m} \exp(2\pi i \nu_{n,m} t)$ の集合は、各成分を n 行 m 列の要素とする大きさ無限大の行列

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{1,1} \exp(2\pi i \nu_{1,1} t) & \dots & a_{1,m} \exp(2\pi i \nu_{1,m} t) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n,1} \exp(2\pi i \nu_{n,1} t) & \dots & a_{n,m} \exp(2\pi i \nu_{n,m} t) \end{bmatrix} \quad (60)$$

によって表すことができます。ここで各々の行列要素は $\nu_{n,m}$ の遷移振動数で振動しており ($n = m$ のときのみ振動数 0)、それらはリッツの結合則 (式(31)) を満たします。 \mathbf{A} が観測にかかるような実在的物理量を表す行列ならばその対角成分 ($A_{n,n}$) は実数であり、行列要素 $A_{n,m}$ は次の関係

$$A_{n,m} = A_{m,n}^* \quad (61)$$

を満足すること、すなわちエルミート行列である必要があります[10]。式(61)はハイゼンベルクが用いた複素共役関係 (式(23)の右側の関係) の行列版といえます。

5.2 交換関係および物理量の表現

ハイゼンベルクが導いた形式はボルンとヨルダンによって見通しの良い形式に仕上げられてゆきます。式(40)の量子条件は式(59)のアナロジーから位置および運動量を表す行列 \mathbf{X} と \mathbf{P} について

$$(\mathbf{PX})_{n,n} - (\mathbf{XP})_{n,n} = -i\hbar, \quad \hbar \equiv \frac{h}{2\pi} \quad (62)$$

と表され (添え字の n, n は積の対角成分を表す)、さらにその非対角要素が 0 となるという仮定を付すことで、式(40)に代わる新しい量子条件として

$$\mathbf{PX} - \mathbf{XP} = -i\hbar \mathbf{I} \quad (63)$$

という簡潔な形が導かれます[6] (\mathbf{I} は単位行列)。

式(63)は正準交換関係と称されます。

\mathbf{X} および \mathbf{P} は以下のように導かれます。式(46)から $\tau = \pm 1$ のときのみ $X(n; n - \tau)$ が非ゼロになること、および式(51)と式(52)から、調和振動子の位置行列 \mathbf{X} の行列要素 $X_{n,m}$ は

$$\begin{aligned} X_{n,n-1} &= \sqrt{\frac{nh}{8\pi^2 m \nu}} e^{2\pi i \nu t}, \\ X_{n-1,n} &= \sqrt{\frac{nh}{8\pi^2 m \nu}} e^{-2\pi i \nu t} \end{aligned} \quad (64)$$

であり、 $n \neq \pm 1$ 以外の要素は 0 となります（第二式の指数部の負号は式(22)の右側の関係による）。さらに $p = m\dot{x} = 2\pi i m \nu x$ を用いると、調和振動子の運動量行列 \mathbf{P} の行列要素 $P_{n,m}$ は

$$\begin{aligned} P_{n,n-1} &= i\sqrt{\frac{nhm \nu}{2}} e^{2\pi i \nu t}, \\ P_{n-1,n} &= -i\sqrt{\frac{nhm \nu}{2}} e^{-2\pi i \nu t} \end{aligned} \quad (65)$$

と求められます（同様に $n \neq \pm 1$ 以外の要素は 0）。式(64)と式(65)から、調和振動子の $t = 0$ における位置行列 \mathbf{X} および運動量行列 \mathbf{P} は

$$\mathbf{X} = \sqrt{\frac{h}{8\pi^2 m \nu}} \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} \\ \vdots & & \sqrt{3} & \ddots \end{bmatrix} \quad (66)$$

$$\mathbf{P} = i\sqrt{\frac{hm \nu}{2}} \begin{bmatrix} 0 & -\sqrt{1} & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & -\sqrt{2} & \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{3} \\ \vdots & & \sqrt{3} & \ddots \end{bmatrix} \quad (67)$$

と表されます。式(66)と式(67)は正準交換関係（式(63)）を満足するものとなっています。

5.3 ハイゼンベルクの運動方程式

運動方程式についてはハミルトンの正準方程式

$$\frac{d\mathbf{X}}{dt} = \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{P}}, \quad \frac{d\mathbf{P}}{dt} = -\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{X}} \quad (68)$$

が量子力学でもそのまま当てはまるという仮定から出発します。 \mathbf{H} は古典力学の場合と同様ハミルトニアンと呼びます。そして、もし式(63)が成り立っていれば、 \mathbf{X} と \mathbf{P} の関数である任意の行列 $\mathbf{A}(\mathbf{X}, \mathbf{P})$ について

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial \mathbf{X}} = \frac{i}{\hbar} (\mathbf{P}\mathbf{A} - \mathbf{A}\mathbf{P}), \quad \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial \mathbf{P}} = -\frac{i}{\hbar} (\mathbf{X}\mathbf{A} - \mathbf{A}\mathbf{X}) \quad (69)$$

が成立する事が示されます（証明は文献 6）。式(69)において $\mathbf{A} = \mathbf{H}$ としたものを式(68)に代入すると

$$\frac{d\mathbf{X}}{dt} = \frac{i}{\hbar} (\mathbf{H}\mathbf{X} - \mathbf{X}\mathbf{H}), \quad \frac{d\mathbf{P}}{dt} = \frac{i}{\hbar} (\mathbf{H}\mathbf{P} - \mathbf{P}\mathbf{H}) \quad (70)$$

が得られ、これは一般の行列 $\mathbf{A}(\mathbf{X}, \mathbf{P})$ に拡張して

$$-i\hbar \frac{d\mathbf{A}}{dt} = \mathbf{H}\mathbf{A} - \mathbf{A}\mathbf{H} \quad (71)$$

と書かれます[3,6]。式(71)は量子力学における運動方程式であり、ハイゼンベルクの運動方程式と呼ばれるものです。この式は力学量について 1 階の時間微分の形で書かれており、翌年に導かれたシュレディンガーの運動方程式 $i\hbar \dot{\phi} = \mathbf{H}\phi$ [5] と対応をなすものです。式(71)で $\mathbf{A} = \mathbf{H}$ とおくと $\dot{\mathbf{H}} = 0$ が得られ、これはハイゼンベルクが導いたエネルギー保存則（式(57)）を表現するものとなります。

ボルンとヨルダンは行列表記と正準形式による演算の発見（最も重要なものは式(63)の発見）を論文にまとめ、ハイゼンベルクの論文投稿から僅か 2 か月後の 1925 年 9 月、「量子力学について」という表題で投稿します[11]。さらに 1926 年初頭にはボルン・ハイゼンベルク・ヨルダンの共著による 59 ページに及ぶ集大成ともいえる論文が出版され（投稿は 1925 年 11 月）[12]、ハイゼンベルクが発見した量子力学はひとまずの完成をみることにになります。

6. ハイゼンベルクの生涯

6.1 生い立ち：大学入学まで

ハイゼンベルクは 1901 年ドイツのヴェルツブルグで生まれ、ギリシャ語を専門とする父親のミュンヘン大学教授就任に伴いミュンヘンに移ります。十代中頃は第一次世界大戦（1914 - 1918）に重なり、大戦末期には飢餓から逃れるため高地バイエルンの農場で作男として働き、終戦後は内戦状態の混乱に陥ったミュンヘンで短期間政府軍に協力して軍隊の営舎に勤務する生活を送ります。ハイゼンベルクは当時の雰囲気や「平和な時代の若者たちをとりまいていた家庭や学校による保護は、もはやこの混乱の時代にはほとんど失われて、

その代わりに若者たちがある程度自由に考える傾向が生まれていた。彼らはそれによって、まだ十分な基礎ができていない場合でも、自分自身の判断を信用するようになっていたのである」[7]と記しています。

このような必ずしも学校に正常に通学できない状況にあって数学には特に関心を抱き勉強を重ねたと伝えられています。この時期にはプラトンの「ティマイオス」と出会い、物質の一番小さな構成要素を立体幾何学の正多面体により説明した箇所に不満を抱きます。「プラトンのように非常に批判的に、かつ鋭くものを考えることのできる哲学者が、どうしてそのようなむちゃな思弁に陥ってしまったのかと、私はひどく理解に苦しんだ。… おそらくこの読書による最大の収穫は、もしも物質世界を理解しようというなら、その一番小さな部分について何かを知らなくてはならないという確信であった。」[7]

ハイゼンベルクは高校卒業試験を通過後、数学者ヘルマン・ワイルが相対性理論について記した「空間・時間・物質」という本に夢中になり、ミュンヘン大学において数学を勉強するという決心を一層強いものにしてゆきます。

6.2 研究の開始～ボーアとの出会い

大学入学と同時にハイゼンベルクは父の紹介により数学者リンデマンの教授室を訪ね、セミナーへの参加許可を請いますが断られてしまいます。落胆した彼は再度父と相談し、今度は理論物理学分野の著名な教授であったゾンマーフェルト (A. Sommerfeld, 1868 – 1951) を訪ねます。彼はハイゼンベルクを暖かく迎え、相対性理論の問題領域に惹かれるハイゼンベルクに助言を与えます。「一番難しい所からやったからといって、もっともやさしいことがひとりで理解できるようになると期待することはできませんよ。… そこへの道はあなたが今考えているよりもずっと遠いのです。あなたは伝統的な物理学の領域の中の、もっと手頃な、細かい仕事から始めなくてははいけません。」[7]

このようにして、1920年秋からゾンマーフェルトの研究室において理論物理の研究を開始します。研究室の先輩にはパウリ (W. Pauli, 1900 – 1958, 1945年ノーベル物理学賞) [13]がおり、歳が近く気安い相談相手だった彼から刺激と助言を受けた

ことはハイゼンベルクにとって大きな幸運でした。パウリは当初相対性理論に興味を傾いていたハイゼンベルクに対し、未解決な謎が多く残る原子論に向かう方が賢明であることを説きます。

1922年の初夏、ハイゼンベルクはゲッチンゲンで行われるボーアによる連続講義に出席する機会を得ます。そしてある回の講義の終わり頃に思い切って批判的な疑念を述べたところ、それが的確なものであったため、ボーアはハイゼンベルクと討論を続けるため講義後に彼を散歩に誘います。そこでハイゼンベルクはボーアと原子論の問題について話し合い、いずれボーアのコペンハーゲンの研究所を訪れるよう誘われます。「この散歩は、私のそれ以後の学問的生長にとって最も強い影響を与えたものであった。あるいは、むしろ私の学問的生長はこの散歩を機会に、ようやく始まったのだといった方がさらに適切かもしれない。」[7]

ミュンヘンへの帰途、ゾンマーフェルトはハイゼンベルクに流体力学の課題を与えます。ハイゼンベルクは1923年、1学期(半年)で乱流におけるポアズイユ流れの安定性に関する学位論文の仕事とその審査を済ませて博士号を取得します[14]。1923年の後学期をゲッチンゲンでボルンの助手として働いた後、1924年春、コペンハーゲンのボーアを訪ねるべくデンマークへと旅立ちます。

6.3 量子力学の発見～ノーベル賞の受賞

1924年から1925年、ハイゼンベルクはコペンハーゲンとゲッチンゲンを行き来しながら研究に取り組みます。そして、コペンハーゲンにおいてクラマース (H. A. Kramers, 1894 – 1952) と協同して光散乱の分散公式を導いた経験をふまえて、3節に記述した道筋に沿い、対応原理を精密化してゆく仕事に取り掛かります。1925年の初夏、ハイゼンベルクは重い枯草熱(花粉症)にかかったことからボルンに2週間の休暇を願い出て、北海にある小さな島に療養を訪れます。その静かな宿屋で問題に取り組んでいたある晩、ハイゼンベルクはついに量子力学を発見します[7]。

1926年の春、ハイゼンベルクはベルリン大学の物理学談話会で量子力学を発表するよう要請され、そこでアインシュタインと討論する機会を持ちます。しかし、原子内電子の軌道運動をそれが観測できないという理由により根本から排除してしま

ったハイゼンベルクの理論はアインシュタインには受け入れ難いものでした。この点に関する哲学の相違は、その後アインシュタインとコペンハーゲン学派との間に長く横たわることになります。

ハイゼンベルクは1927年には不確定性原理を発表し、量子力学の発展に重要な貢献を行います。1927年の末にはライプチヒ大学教授に就任し、1932年には31歳という若さでノーベル物理学賞を受賞します。

6.4 第二次世界大戦期とその後

1930年代初頭からドイツ国内を覆い始めたナチス台頭の影はハイゼンベルクに深い懸念と失望を与えます。ナチスによる大学への干渉が強まる中、ハイゼンベルクは抗議を示すため同僚たちと辞職することを考えますが、それについて助言を求めたプランクから、そのような辞職をしても効果は期待できず破局はいずれ避けられないこと、むしろ破局が終わった後の再生をどうするかに目標を向けるべきであることを説かれ思いとどまります[7]。第二次大戦は政権への協力義務も含めハイゼンベルクに著しい苦悩を与えたばかりでなく、末期には自身の家も空襲により焼失しています。

終戦後、ハイゼンベルクはマックス・プランク研究所の所長に就任し、物理学と原子力利用に関する様々な課題に取り組みながら、1970年の退職まで学術界の再生と発展に尽してゆきます。

参考文献

- [1] 花村克悟, マックス・プランクの功績, 伝熱, **48-205** (2009) 32.
- [2] 村上陽一, ニールス・ボーアの功績, 伝熱, **49-206** (2010) 25.
- [3] 量子力学の発展史, 高林武彦著, 中央公論社 (1977).
- [4] 村上陽一, ルイ・ド・ブロイの功績, 伝熱, **49-208** (2010) 52.
- [5] 芝原正彦, エルヴィン・シュレディンガーの功績, 伝熱, **49-209** (2010) 72.
- [6] 量子力学 I, 朝永振一郎著, みすず書房 (1969).
- [7] 部分と全体, ハイゼンベルク著, 山崎和夫訳, みすず書房 (1999).
- [8] この計算はハイゼンベルクの導いた形式 (および行列力学) では数学的に極めて複雑になり, 結局彼自身によっては解かれませんでした. この問題は技巧的数学を駆使したパウリによって行列力学を用いて部分的に解かれ, これによってハイゼンベルクの理論の妥当性が確認されることとなります.
- [9] W. Heisenberg, *Z. Physik*, **33** (1925) 879.
- [10] 一方, 観測にはかかからない非実在的物理量, 例えば生成・消滅を表す行列などはエルミート行列にはなりません.
- [11] M. Born, P. Jordan, *Z. Physik*, **34** (1925) 858.
- [12] M. Born, W. Heisenberg, P. Jordan, *Z. Physik*, **35** (1926) 557.
- [13] パウリは高校卒業の2か月後の18歳のときに一般相対性理論に関する人生最初の論文を出版し, 21歳の若さで水素分子イオンの量子論に関する学位論文により博士号を取得しています.
- [14] 文献7の訳者が述べるように, 通常ドイツで物理の学位をとるのに大学入学から8~9年かかるころ, 入学から3年, 実質半年で学位を取ったハイゼンベルクの才能がいかに並外れたものであったかが伺えます. この学位論文は数学的な技巧を駆使して複雑な非線形問題を扱ったもので, その結果は正しいものであったにもかかわらず, 完全に理解されるまでにはほぼ30年を要したそうです. このような学位研究の課題設定は, 量子論のような先端研究を行う際にも古典物理学の基礎は形成されているべきとしたゾンマーフェルトの方針によるものと思われます. なお, ゾンマーフェルト自身もミュンヘンに移る以前は流体潤滑の研究を行っており, すべり軸受の潤滑状態の評価に用いられるゾンマーフェルト数という無次元数を残しています.