

新量子論. 現状と課題

伊東由文

徳島大学総合科学部自然システム学科
770-8502 徳島市南常三島町 1-1, Japan

Abstract

Even if there was a pioneering work [1], it becomes about 11 years since we really began to investigate the new quantum theory. Thus, in this article, we wish to summarize the research of the new quantum theory in these 11 years.

In the section 1, we give a more clear and evident formulation of Ito [2], [3].

In the section 2, we give a more precise representation of Ito-Kayama [6], [7].

In the section 3, we summarize the papers [8], [9], [10].

In the section 4, we mention the philosophical consideration of the new quantum theory.

In the section 5, we mention several problems of the new quantum theory.

Keywords: new quantum theory, black body radiation, specific heat.

2000 Mathematics Subject Classification. Primary 81P10; Secondary 81P05, 82B10.

序

伊東 [1] のような先駆的研究はあったけれども、新量子論の研究を本格的に始めてから 11 年近くになる。

新量子論の初期の著作の中には旧量子論の影響がまだ沢山残っている。最近の著作では旧量子論の影響から抜け出しつつある。今後の著作や研究において旧量子論の影響を完全に消し去るようにしたいと思っている。

そこで、この 11 年間の新量子論の研究の総括を行い、今後の研究の展望を試みたい。

著作としては、伊東 [1], Ito [5] が最初にできている。その後、伊東 [4] の著書の原稿が完成する。これは旧量子論におけるアインシュタイン・ボーア論争に対する完全な解決を与えるものである。

伊東 [4] の中で言葉で表現されているものに数学的表現を与えたのが Ito [2], [3] の論文である。これによって新量子論の枠組みが完成し、ヒルベルトの第 6 問題に対する一つの解答が与えられた。

伊東・萱間 [6], [7] において、量子系のエネルギー

期待値を与えるエネルギー汎関数に対する変分問題を解くための、オイラー方程式として、定常状態のシュレーディンガー方程式が導かれることを示した。変数分離の方法の逆をたどって、時間依存のシュレーディンガー方程式が導かれることを示した。この導出法には、旧量子論で用いた量子化のマジックを用いていないことが特徴である。これによってシュレーディンガー方程式が従来から知られている線形の方程式しかないことが分かった。

このようにして確立された新量子論の観点から具体的な量子現象が合理的に理解されるようになった。

現在までに次の三つの結果が得られている。

伊東・萱間・鴨下 [8] において黒体輻射に対するプランクの輻射公式を研究した。Ito-Uddin [9] において固体の比熱を研究し、Ito-Uddin [10] において理想気体の比熱を研究した。

新量子論の数学的研究の部分については初めから終わりまで純粋に論理的に研究できる。しかし、具体的な量子現象を新量子論にもとづいて研究しようとするときには、数学的研究だけでは完結しない。最

終的には実験結果と理論的結果の一致が要求される。したがって、数学的理論的結果を実験結果と一致させるためには、ある時点で、実験的・経験的に得られたデータを理論に持ち込む必要が生じる。これは実際の具体的量子現象を研究するためには避けることのできない道である。

本論文においては、第1節において、Ito [2], [3] のより簡明な定式化を与える。

第2節において、伊東・萱間 [6], [7] をより詳しく調べた。特に、ハミルトニアンが連続スペクトルを持つ場合の一般的表現を与えた。

第3節において、論文 [8], [9], [10] の概要を述べた。

第4節において、新量子論の哲学的考察を述べた。

第5節において、新量子論の諸課題について述べた。

1. 新量子論の公理

物理学は物体の運動、すなわち、物体の状態の時間発展を探究する学問である。対象とする物体は、古典力学すなわちニュートン力学では、1粒子、多体系、剛体から天体までにわたり、電磁気学では、電磁場である。新量子論の対象は原子、分子や電子などの微粒子系の集団である量子系である。物理の基本原理解は、物体の運動が力の相互作用によって引き起こされるということである。自然界には次の四つの力の相互作用が存在することが知られている。すなわち、1. 重力相互作用、2. 電磁相互作用、3. 弱い力の相互作用と、4. 強い力の相互作用の四つである。弱い力と強い力の相互作用は核力に関係した相互作用で、それによって粒子の生成消滅現象が発現する。

新量子論で扱う量子系の運動は、粒子の生成消滅を伴わないもので、したがって、核力には関係しないと考えてよい。その運動状態は位置や運動量、エネルギー、角運動量やスピンのような変数や物理量の時間的変動によって表される。この場合、量子系の運動を引き起こす力の相互作用は重力相互作用と電磁相互作用である。量子系を構成する微粒子の質量は非常に小さいので、重力相互作用はしばしば無視し得ることが多い。したがって、とくに電磁相互作用が主要な力の相互作用になる。量子系を構成する微粒子系の運動はニュートンの運動方程式に従って決まる。したがって、各々の微粒子系の位置変数や運動量変数は各時刻において確定した値をもつと考えることができる。量子系を構成する微粒子系は無数にあると考えるから、たとえ1個1個の微粒子系は

ニュートンの運動方程式に従って運動しているとしても、量子系を構成する微粒子系の集団としての振る舞いはニュートンの運動方程式だけでは追跡できない。新量子論ではこのような量子系を構成する微粒子系の集団としての振る舞いを探究する。微粒子系の集団としての振る舞いは微粒子系の位置変数や運動量変数の量子確率分布状態によって記述される。

量子現象を新量子論によって研究するとき、(1) 量子系、(2) 量子状態、(3) 量子系の運動という概念を規定しなければならない。この規定を新量子論の公理という。

新量子論の公理は次のように述べられる。これについては、文献 [2], [3], [6]-[10] を参照。

公理 I (量子系). 量子系 Ω は確率空間 (Ω, \mathbf{B}, P) であると仮定する。ここで、 Ω は微粒子系 ρ の集合で、 \mathbf{B} は Ω の部分集合からなる σ 代数で、 P は \mathbf{B} 上の完全加法的確率測度である。

公理 II (量子状態). 量子系 $\Omega = \Omega(\mathbf{B}, P)$ ($= (\Omega, \mathbf{B}, P)$) の量子状態は量子系を構成する微粒子系 ρ の位置変数 $\mathbf{r}(\rho)$ と運動量変数 $\mathbf{p}(\rho)$ の量子確率分布状態であると定義する。ここで、 n 次元ユークリッド空間 \mathbf{R}^n とその双対空間 \mathbf{R}_n の直交座標系を考えている。ここで、 $n = dM$ とおいた。ただし、 d は物理空間の次元を表し、 M は一つの根元事象 ρ を構成する微粒子の個数を表す。

(II₁) 位置変数 $\mathbf{r} = \mathbf{r}(\rho)$ の量子確率分布は、条件

$$\int |\psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = 1$$

を満たす \mathbf{R}^n 上の L^2 密度 $\psi(\mathbf{r})$ によって決定される。ここで、 $d\mathbf{r}$ は \mathbf{R}^n 上のルベーク測度を表す。積分領域を省略したとき、積分は全空間上の積分を表すとする。

(II₂) 運動量変数 $\mathbf{p} = \mathbf{p}(\rho)$ の量子確率分布は、 ψ のフーリエ変換 $\hat{\psi}$ によって決定される。ここで、

$$\hat{\psi}(\mathbf{p}) = (2\pi\hbar)^{-n/2} \int \psi(\mathbf{r}) e^{-i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})/\hbar} d\mathbf{r},$$

$$\psi(\mathbf{p}) = (2\pi\hbar)^{-n/2} \int \hat{\psi}(\mathbf{p}) e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})/\hbar} d\mathbf{p},$$

$$\mathbf{r} = (x_1, x_2, \dots, x_n), \mathbf{p} = (p_1, p_2, \dots, p_n),$$

$$\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} = p_1 x_1 + p_2 x_2 + \dots + p_n x_n$$

とおいている。ここで、 $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ で、 h はプランクの定数を表す。

(II₃) \mathbf{R}^n のルベーク可測集合 A に対し、

$$\mu(A) = \int_A |\psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}$$

とおく. このとき,

$$P(\{\rho \in \Omega; \mathbf{r}(\rho) \in A\}) = \mu(A)$$

であると仮定する. そのとき, $\mu(A)$ は “ $\mathbf{r}(\rho)$ が A に属する” という事象の確率を表す. これによって確率空間 $(\mathbf{R}^n, \mathcal{M}_n, \mu)$ が得られる. ここで, \mathcal{M}_n は \mathbf{R}^n のルベーグ可測集合全体の族を表す.

(II₄) \mathbf{R}^n のルベーグ可測集合 B に対し,

$$\nu(B) = \int_B |\hat{\psi}(\mathbf{p})|^2 d\mathbf{p}$$

とおく. このとき,

$$P(\{\rho \in \Omega; \mathbf{p}(\rho) \in B\}) = \nu(B)$$

であると仮定する. このとき, $\nu(B)$ は “ $\mathbf{p}(\rho)$ が B に属する” という事象の確率を表す. これによって確率空間 $(\mathbf{R}_n, \mathcal{N}_n, \nu)$ が得られる. ここで, \mathcal{N}_n は \mathbf{R}_n のルベーグ可測集合全体の族を表す.

公理 III (量子系の運動). 時刻 t に依存する量子系の L^2 密度 $\psi(\mathbf{r}, t)$ の時間発展を量子系の運動という. 量子系の運動法則はシュレーディンガー方程式によって記述される. シュレーディンガー方程式をこの量子系の運動方程式という.

シュレーディンガー方程式は

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi$$

の形の方程式で表される. 作用素 H をハミルトニアンという. これは各量子系に対応して種々の形がある. H はあるヒルベルト空間上の自己共役作用素であると仮定する.

旧量子論では, 量子系や量子状態という言葉は使われていたけれども, どういう物理系のどういう物理的状态であるかということに関しては何の意味付けもできていなかったのである.

量子論の公理は, 数の公理やユークリッド幾何学の公理のように定型的なものではなく, 群や環の公理のように類型的なものである. 量子論の公理は量子現象を理解する枠組みであって, 量子論の公理は具体的な量子系のそれぞれによって具体的内容が定まるものである.

2. シュレーディンガー方程式の導出

この節においては, 変分原理と局所変分原理を用いてシュレーディンガー方程式を導出する方法について述べる. これについては文献 [6]-[10] を参照.

確率空間 $\Omega = \Omega(\mathbf{B}, P)$ は一つの量子系であるとする. Ω の根元事象 ρ はいくつかの微粒子の結合系すなわち微粒子系を表す. このとき微粒子系 ρ の位置変数を $\mathbf{r} = \mathbf{r}(\rho) = (x_1(\rho), \dots, x_n(\rho))$, 運動量変数を $\mathbf{p} = \mathbf{p}(\rho) = (p_1(\rho), \dots, p_n(\rho))$ と表す. 変数 \mathbf{r} は空間 \mathbf{R}^n において変動し, 変数 \mathbf{p} は空間 \mathbf{R}_n において変動すると考える. このとき公理 II によって, L^2 密度 $\psi(\mathbf{r})$ は位置変数 \mathbf{r} の量子確率分布法則を表し, そのフーリエ変換 $\hat{\psi}(\mathbf{p})$ は運動量変数 \mathbf{p} の量子確率分布法則を表す.

各微粒子系 ρ の全エネルギーは古典力学によって定まっているもので, その値は

$$\sum_{i=1}^n \frac{1}{2m_i} p_i(\rho)^2 + V(\mathbf{r}(\rho))$$

によって与えられる. ここで, 第 1 項は微粒子系 ρ の運動エネルギーを表し, 第 2 項はポテンシャルエネルギーを表している. ここで, m_i は微粒子の質量を表す. 一つの微粒子に対応する m_i の値は同じと考える. このエネルギー変数は量子系を表す確率空間 Ω で定義されている量子確率変数と考えられる.

このエネルギー変数の期待値, すなわち, エネルギー期待値の計算は次のように行われる.

結果として導かれるハミルトニアン H が離散スペクトルを持つ場合と連続スペクトルを持つ場合は計算の仕方が異なることを注意する.

まず, ハミルトニアン H が離散スペクトルを持つ場合を考える. このとき, エネルギー期待値の計算は公理 II を用いて次のように行われる. すなわち, A を \mathbf{R}^n の領域, B を \mathbf{R}_n の領域とするとき, 関係式

$$P(\{\rho \in \Omega; \mathbf{r}(\rho) \in A\}) = \int_A |\psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r},$$

$$P(\{\rho \in \Omega; \mathbf{p}(\rho) \in B\}) = \int_B |\hat{\psi}(\mathbf{p})|^2 d\mathbf{p}$$

が成り立つことを用いて, 次のように計算が行われる. すなわち,

$$\begin{aligned} E \left[\sum_{i=1}^n \frac{1}{2m_i} p_i(\rho)^2 + V(\mathbf{r}(\rho)) \right] \\ = E \left[\sum_{i=1}^n \frac{1}{2m_i} p_i(\rho)^2 \right] + E[V(\mathbf{r}(\rho))] \\ = \int \left(\sum_{i=1}^n \frac{1}{2m_i} p_i^2 \right) |\hat{\psi}(\mathbf{p})|^2 d\mathbf{p} + \int V(\mathbf{r}) |\psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} \end{aligned}$$

$$= \int \left(\sum_{i=1}^n \frac{\hbar^2}{2m_i} |\psi_{x_i}(\mathbf{r})|^2 + V(\mathbf{r}) |\psi(\mathbf{r})|^2 \right) d\mathbf{r}.$$

ここで、フーリエ変換に対するプランシェレルの等式が用いられている。 ψ_{x_i} は ψ の変数 x_i に関する偏導関数を表す。ここで、このエネルギー期待値を

$$J[\psi] = \int \left(\sum_{i=1}^n \frac{\hbar^2}{2m_i} |\psi_{x_i}(\mathbf{r})|^2 + V(\mathbf{r}) |\psi(\mathbf{r})|^2 \right) d\mathbf{r}$$

とおく。この $J[\psi]$ をエネルギー汎関数ということがある。許容し得る量子状態の中から実際に実現される量子状態を決定するために、ここで、一つの原理として、次の原理 I を考える。

原理 I (変分原理). 量子系の定常状態は、その量子系のエネルギー期待値がある条件のもとに停留値を取るような状態として実現される。

この原理 I にもとづいて次の変分問題を解いて、シュレーディンガー方程式が導かれることを示す。

問題 I. 条件

$$\int |\psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = 1$$

を満たし、エネルギー汎関数 $J[\psi]$ を停留値とするように関数 ψ を決定せよ。

この変分問題を解いて、オイラー方程式として、次の方程式

$$-\sum_{i=1}^n \frac{\hbar^2}{2m_i} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_i^2} + V\psi = \mathcal{E}\psi$$

が得られる。ここで、 \mathcal{E} はラグランジュの未定乗数である。これこそシュレーディンガーが試行錯誤の後に発見したシュレーディンガー方程式である。我々の考察においては、旧量子論で用いられた量子化のマジックを用いずに、全く合理的にシュレーディンガー方程式が導かれるところに著しい特徴がある。

このシュレーディンガー方程式の解として上の問題 I の解である関数 ψ が求められる。

一般に、一つの量子系で、エネルギー期待値を停留値とする定常状態は沢山ある。この定常状態を表す L^2 密度は上のシュレーディンガー方程式の固有関数であり、そのエネルギー汎関数の停留値は固有値である。このような固有関数の表す量子確率分布に従う部分量子系を固有量子系ということにする。このとき、考えている量子系はそのような固有量子系の混合状態と考えられる。このとき量子系を表す L^2 密度は固有関数を用いて固有関数展開されてい

る。このとき各固有量子系のエネルギー期待値は対応する固有値に等しい。旧量子論では、この固有値を固有量子系のエネルギー準位と呼んでいた。

しかし、旧量子論でエネルギー準位というのは何か意味がよくわからない。1個の微粒子系で見ると位置変数は時間的には連続に変動する量であるし、運動量変数は時間的にはほとんどいたるところ連続に変動する量である。しかも、微粒子系の集団を構成する微粒子系の位置変数や運動量変数は一定時刻には微粒子系毎にランダムに変動する量である。そういうランダムに変動する位置変数や運動量変数の関数であるエネルギー変数がある時刻にある微粒子系についてエネルギー準位といわれるような特定の限られた値しかとり得ないというのはどうしても理解しようがない。

この固有値がある時刻における固有量子系のエネルギー期待値であると考え、それが数学的な意味で定まったとびとびの値であるということは、そういう現象が起こり得ることだという意味で理解可能である。したがって、エネルギー準位という言葉を使うのはやめにして、そのかわりに固有量子系のエネルギー期待値という言葉を用いることにすればよい。

このとき、変数分離の方法の逆の過程をたどることによって、時間依存のシュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left\{ -\sum_{i=1}^n \frac{\hbar^2}{2m_i} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + V \right\} \psi$$

が得られる。

次にハミルトニアンが連続スペクトルをもつ場合を考える。このときは、ハミルトニアン固有関数に相当するものは、一般に L^2 ではなく、 L^2_{loc} に属する関数となる。 L^2_{loc} は \mathbf{R}^n の任意のコンパクト集合上で2乗可積分関数の空間である。そのために、公理 II の規定する量子状態の代わりに、一般化量子状態を考える必要が生じる。そこで、次の公理 II' において一般化量子状態を規定する。公理 I と公理 III はそのまましておく。

公理 II' (一般化量子状態). 量子系 $\Omega = \Omega(\mathbf{B}, P)$ の一般化量子状態は量子系を構成する微粒子系 ρ の位置変数 $\mathbf{r} = \mathbf{r}(\rho)$ と運動量変数 $\mathbf{p} = \mathbf{p}(\rho)$ の一般化量子確率分布の状態であると考え。ここで、 n 次元ユークリッド空間 \mathbf{R}^n とその双対空間 \mathbf{R}_n の直交座標系を考える。

一般化量子状態は次のように決定される：

(II'₁) 位置変数 $\mathbf{r} = \mathbf{r}(\rho)$ の一般化量子分布状態は L^2_{loc} 関数 ψ によって決定される。

(II'₂) 運動量変数 $\mathbf{p} = \mathbf{p}(\rho)$ の一般化量子分布状態は $\hat{\psi}$ によって決定される. ここで, $\hat{\psi}$ は ψ の局所フーリエ変換として決定される関数である. すなわち,

$$\hat{\psi}_S(\mathbf{p}) = (2\pi\hbar)^{-n/2} \int \psi_S(\mathbf{r}) e^{-i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})/\hbar} d\mathbf{r},$$

$$\psi_S(\mathbf{r}) = (2\pi\hbar)^{-n/2} \int \hat{\psi}_S(\mathbf{p}) e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})/\hbar} d\mathbf{p},$$

$$\mathbf{r} = (x_1, \dots, x_n), \mathbf{p} = (p_1, \dots, p_n),$$

$$\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} = p_1 x_1 + \dots + p_n x_n$$

とする. ここで, S は \mathbf{R}^n の任意のコンパクト集合で, S の特性関数を

$$\chi_S(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1, & (\mathbf{r} \in S), \\ 0, & (\mathbf{r} \notin S) \end{cases}$$

と定義するとき, ψ_S は関数 $\psi_S(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r})\chi_S(\mathbf{r})$ であると定義する. すなわち, ψ_S は S 上の ψ の切断関数である. $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ とおいた. ここで, h はプランクの定数を表す. 上において古典的フーリエ変換が用いられている.

(II'₃) \mathbf{R}^n のルベーグ可測集合 A に対し,

$$P(\{\rho \in \Omega; \mathbf{r}(\rho) \in A \cap S\}) = \frac{\int_{A \cap S} |\psi_S(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}}{\int_S |\psi_S(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}} = \mu_S(A)$$

と仮定する. これは領域 S において運動している微粒子系の位置変数 $\mathbf{r}(\rho)$ が $A \cap S$ に属する確率を与える. これによって ψ_S に対する相対確率空間 $(S, \mathcal{M}_n \cap S, \mu_S)$ を得る. ここで, \mathcal{M}_n は \mathbf{R}^n におけるルベーグ可測集合の族である.

(II'₄) \mathbf{R}_n のルベーグ可測集合 B に対し,

$$P(\{\rho \in \Omega; \mathbf{r}(\rho) \in S, \mathbf{p}(\rho) \in B\}) = \frac{\int_B |\hat{\psi}_S(\mathbf{p})|^2 d\mathbf{p}}{\int |\hat{\psi}_S(\mathbf{p})|^2 d\mathbf{p}} = \nu_S(B)$$

と仮定する. これは領域 S において運動する微粒子 ρ の運動量変数 $\mathbf{p}(\rho)$ が B に属する確率を与える. これによって $\hat{\psi}_S$ に対応する相対確率空間 $(\mathbf{R}_n, \mathcal{N}_n, \nu_S)$ が得られる. ここで, \mathcal{N}_n は \mathbf{R}_n のルベーグ可測集合の族を表す.

このとき, 公理 II' によって L^2_{loc} 密度 $\psi(\mathbf{r})$ は位置変数 \mathbf{r} の一般化量子確率分布法則を決定し, その局所フーリエ変換 $\hat{\psi}_S(\mathbf{p})$ は運動量変数 \mathbf{p} の一般化量子確率分布法則を決定する. このとき, 各微粒子系の全エネルギーは古典力学によって決定される. その値は

$$\sum_{i=1}^n \frac{1}{2m_i} p_i(\rho)^2 + V(\mathbf{r}(\rho))$$

によって与えられる.

このエネルギー変数は量子系を表す確率空間 Ω 上で定義された一般化量子確率変数であると考えられる. このエネルギー変数の局所期待値, すなわち局所エネルギー期待値の計算は公理 II' を用いて行われる. すなわち, \mathbf{R}^n の任意のコンパクト集合 S と \mathbf{R}^n の部分集合 A と \mathbf{R}_n の部分集合 B に対する関係式

$$P(\{\rho \in \Omega; \mathbf{r}(\rho) \in A \cap S\}) = \frac{\int_{A \cap S} |\psi_S(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}}{\int_S |\psi_S(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}},$$

$$P(\{\rho \in \Omega; \mathbf{r}(\rho) \in S, \mathbf{p}(\rho) \in B\}) = \frac{\int_B |\hat{\psi}_S(\mathbf{p})|^2 d\mathbf{p}}{\int |\hat{\psi}_S(\mathbf{p})|^2 d\mathbf{p}}$$

を用いる. そのとき局所エネルギー期待値 \bar{E}_S として,

$$\bar{E}_S = E_S \left[\sum_{i=1}^n \frac{1}{2m_i} p_i(\rho)^2 + V(\mathbf{r}(\rho)) \right]$$

$$= E_S \left[\sum_{i=1}^n \frac{1}{2m_i} p_i(\rho)^2 \right] + E_S [V(\mathbf{r}(\rho))]$$

$$= \frac{\int (\sum_{i=1}^n \frac{1}{2m_i} p_i^2) |\hat{\psi}_S(\mathbf{p})|^2 d\mathbf{p}}{\int |\hat{\psi}_S(\mathbf{p})|^2 d\mathbf{p}} + \frac{\int_S V(\mathbf{r}) |\psi_S(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}}{\int_S |\psi_S(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}}$$

$$= \frac{\int_S (\sum_{i=1}^n \frac{\hbar^2}{2m_i} |\frac{\partial \psi_S(\mathbf{r})}{\partial x_i}|^2 + V(\mathbf{r}) |\psi_S(\mathbf{r})|^2) d\mathbf{r}}{\int_S |\psi_S(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}}$$

を得る。ここで、フーリエ変換に対するプランシェレルの等式が用いられている。ここで、この局所エネルギー期待値を

$$J_S[\psi_S] = \frac{\int_S \left(\sum_{i=1}^n \frac{\hbar^2}{2m_i} \left| \frac{\partial \psi_S(\mathbf{r})}{\partial x_i} \right|^2 + V(\mathbf{r}) |\psi_S(\mathbf{r})|^2 \right) d\mathbf{r}}{\int_S |\psi_S(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}}$$

と表す。\$J_S[\psi_S]\$ を局所エネルギー汎関数という。

ここで次の原理を提示する。

原理 II (局所変分原理). 量子系のハミルトニアンが連続スペクトルを持つ場合、定常状態は、局所的に考えられたその量子系のエネルギー期待値がある条件の下に停留値をとる状態として実現される。

この原理を用いて、この量子系に対して許容し得る \$L^2_{\text{loc}}\$ 密度の中から真の \$L^2_{\text{loc}}\$ 密度を選び出す。そこで、次の問題 II を考える。ここでは、話を確定するために、ハミルトニアンの連続スペクトルが非負実数である場合を考える。具体的な量子系に対しては、ハミルトニアンの形に応じて種々の場合が考えられるところである。

問題 II. \$\{r_j\}\$ は正の数のある単調増大列とする：
\$0 < r_1 \leq r_2 \leq \dots \leq r_j \leq \dots\$

\$\{K_j\}\$ は \$\mathbf{R}^n\$ の空でないコンパクト集合のある取り尽くし単調増大列とする。すなわち、それは次の条件 (i) と (ii) を満たしているとする：

- (i) \$\emptyset \neq K_1 \subset K_2 \subset \dots \subset K_j \subset \dots \subset \mathbf{R}^n\$,
- (ii) \$\cup_{j=1}^{\infty} K_j = \mathbf{R}^n\$.

このとき、任意の非負実数 \$\mathcal{E} \geq 0\$ に対し、局所 2 乗可積分関数 \$\psi^{(\mathcal{E})}(\mathbf{r})\$ を次の条件 (1)~(6) が満たされようように決定せよ。

- (1) \$\psi^{(\mathcal{E})}|_{K_n} = \psi_n, (n = 1, 2, \dots)\$.
- (2) \$\psi_{n+1}|_{K_n} = \psi_n, (n = 1, 2, \dots)\$.
- (3) \$\int_{K_n} |\psi_n(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = r_n > 0, (n = 1, 2, \dots)\$.
- (4) \$\int \psi^{(\mathcal{E}')}(\mathbf{r})^* \psi^{(\mathcal{E})}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \delta(\mathcal{E}' - \mathcal{E}),\$
\$(\mathcal{E}', \mathcal{E} \geq 0)\$.

ここで、\$\delta(\mathcal{E})\$ はデルタ関数を表す。

- (5) \$\int_0^{\infty} \psi^{(\mathcal{E})}(\mathbf{r}')^* \psi^{(\mathcal{E})}(\mathbf{r}) d\mathcal{E} = \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}),\$
\$(\mathbf{r}, \mathbf{r}' \in \mathbf{R}^n)\$.
- (6) 汎関数

$$J_n[\psi_n] = \frac{\int_{K_n} \left(\sum_{i=1}^n \frac{\hbar^2}{2m_i} \left| \frac{\partial \psi_n(\mathbf{r})}{\partial x_i} \right|^2 + V(\mathbf{r}) |\psi_n(\mathbf{r})|^2 \right) d\mathbf{r}}{\int_{K_n} |\psi_n(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}}$$

は条件 (2) (3) のもとに停留値をとる。

この変分問題を解いて、オイラー方程式として、次のシュレーディンガー方程式

$$-\sum_{i=1}^n \frac{\hbar^2}{2m_i} \frac{\partial^2 \psi_n(\mathbf{r})}{\partial x_i^2} + V(\mathbf{r}) \psi_n(\mathbf{r}) = \mathcal{E} \psi_n(\mathbf{r}), \mathbf{r} \in K_n, \\ (n = 1, 2, \dots)$$

を得る。ここで、\$\mathcal{E}\$ はラグランジュの未定乗数である。このとき、問題 II の条件 (1), (2), (3) を満たすような \$L^2_{\text{loc}}\$ 密度 \$\psi^{(\mathcal{E})}(\mathbf{r})\$ で、ある \$\mathcal{E} \geq 0\$ に対し、

$$\psi^{(\mathcal{E})}(\mathbf{r}) = \psi_n(\mathbf{r}), \mathbf{r} \in K_n, (n = 1, 2, \dots)$$

を満たすものを得る。その時、\$\psi^{(\mathcal{E})}(\mathbf{r})\$ はシュレーディンガー方程式

$$-\sum_{i=1}^n \frac{\hbar^2}{2m_i} \frac{\partial^2 \psi^{(\mathcal{E})}(\mathbf{r})}{\partial x_i^2} + V(\mathbf{r}) \psi^{(\mathcal{E})}(\mathbf{r}) = \mathcal{E} \psi^{(\mathcal{E})}(\mathbf{r}), \\ \mathbf{r} \in \mathbf{R}^n$$

を満たす。

一般展開定理によつて、任意の \$\psi(\mathbf{r}) \in L^2(\mathbf{R}^n)\$, \$\int |\psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = 1\$, に対し、\$c(\mathcal{E})\$ を

$$c(\mathcal{E}) = \int \psi^{(\mathcal{E})}(\mathbf{r})^* \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$$

と定義すると、

$$\psi(\mathbf{r}) = \int_0^{\infty} c(\mathcal{E}) \psi^{(\mathcal{E})}(\mathbf{r}) d\mathcal{E}$$

が成り立つ。

ここで変数分離の方法を逆にたどる。まず、関数

$$\psi^{(\mathcal{E})}(\mathbf{r}, t) = \psi^{(\mathcal{E})}(\mathbf{r}) \exp(-i \frac{\mathcal{E}}{\hbar} t)$$

を考える。この関数を \$t\$ で偏微分して、

$$i\hbar \frac{\partial \psi^{(\mathcal{E})}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \mathcal{E} \psi^{(\mathcal{E})}(\mathbf{r}) \exp(-i \frac{\mathcal{E}}{\hbar} t)$$

を得る。ここで、定常状態のシュレーディンガー方程式のハミルトニアンを

$$H = -\sum_{i=1}^n \frac{\hbar^2}{2m_i} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + V(\mathbf{r})$$

と表す. このとき,

$$H\psi^{(\mathcal{E})}(\mathbf{r}) = \mathcal{E}\psi^{(\mathcal{E})}(\mathbf{r})$$

を得る. ゆえに,

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi^{(\mathcal{E})}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= \{H\psi^{(\mathcal{E})}(\mathbf{r})\} \exp(-i\frac{\mathcal{E}}{\hbar}t) \\ &= H\psi^{(\mathcal{E})}(\mathbf{r}, t) \end{aligned}$$

を得る. ゆえに,

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \int_0^\infty c(\mathcal{E})\psi^{(\mathcal{E})}(\mathbf{r}, t)d\mathcal{E}$$

とおくと,

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = H\psi(\mathbf{r}, t)$$

を得る. これは全量子系 Ω の時間発展のシュレーディンガー方程式である. すなわち公理 III を満たす.

ハミルトニアンが連続スペクトルをもつ場合にも, 全量子系の量子状態を決めるシュレーディンガー方程式の解 $\psi(\mathbf{r}, t)$ は各時刻に L^2 密度である.

確率保存の法則によって, 時間発展のシュレーディンガー方程式は上の形以外にはないことが分かる.

旧量子論では, このシュレーディンガー方程式の解である関数 ψ を波動関数と呼んでいた. しかし, 量子系の運動を波動というのは意味がよく分からない. 新量子論の公理によれば, シュレーディンガー方程式の解である関数 ψ は, 位置変数の量子確率分布を定める L^2 密度である. したがって, 関数 $\psi = \psi(\mathbf{r})$ が実変数の関数であることが自然に理解される. 直接的には関数 ψ に波あるいは波動という意味はない.

微視的物質は微粒子として存在し, ある条件下には振動運動としての波動運動をすると考えられる. いつでも直線運動をするわけではない. しかし決してそれらの微粒子は波のような存在ではない. それらは粒子と波動の二重性を持った存在ではないということである. シュレーディンガー方程式の解である関数は如何なる意味でも微粒子それ自体を表現するものではない. 旧量子論で空間的に局在する関数である波束が微粒子であるかのように考えていたのは間違いである.

3. 種々の量子系

本節では新量子論の公理の枠組みで種々の量子系の量子現象が合理的に理解できることを示す. 以下の三つの小節において, 旧量子論の出発点におい

て取り上げられた三つの問題を考える. 我々の理論を用いて, 黒体輻射の問題, 固体の比熱と理想気体の比熱の問題が合理的に理解できるようになったことの概略を述べる.

3.1. 黒体輻射

この小節については, 文献 [8] を参照.

黒体を構成する微粒子はポテンシャルの中で運動していると考ええる. 平衡点の近くでは微粒子は調和振動子として運動していると考えてよい. 微粒子の大きさに比べ周りの空間は十分大きいので, 数学的近似において, 調和振動子は全空間において調和振動していると考ええる.

1次元調和振動子のモデルを考える. 量子系はこのような質量 m の調和振動子 ρ の集団である. 1個の調和振動子 ρ の位置座標を $x = x(\rho)$, 運動量座標を $p = p(\rho)$ と表す. 各調和振動子 ρ のエネルギーは古典力学によって定まっているもので, その値は

$$\frac{1}{2m}p(\rho)^2 + \frac{1}{2}m\omega^2x(\rho)^2$$

によって与えられる. ここで, ω は角振動数を表す. 第1項は調和振動子 ρ の運動エネルギーを表し, 第2項は調和振動子 ρ のポテンシャルエネルギーを表している. このエネルギー変数は量子系を表す確率空間 Ω 上で定義されている量子確率変数と考える.

このエネルギー変数の期待値は, 公理 II を用いて行われる. すなわち, $x = x(\rho)$ と $p = p(\rho)$ の量子確率分布を決定する許容 L^2 密度 $\psi(x)$ とそのフーリエ変換 $\hat{\psi}(p)$ を用いて, 次のように計算が行われる:

$$\begin{aligned} J[\psi] &= E\left[\frac{1}{2m}p(\rho)^2 + \frac{1}{2}m\omega^2x(\rho)^2\right] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \left| \frac{d\psi(x)}{dx} \right|^2 + \frac{1}{2}m\omega^2x^2|\psi(x)|^2 \right\} dx. \end{aligned}$$

許容 L^2 密度 ψ の中から実際に平衡状態を実現する L^2 密度 ψ を決定するために, 原理 I の変分原理を用いる. この時, 次の変分問題を解くことが問題である.

問題 I. 条件 $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$ のもとで, エネルギー汎関数 $J[\psi]$ を停留値とするように関数 ψ を決定せよ.

この変分問題を解いて, オイラー方程式として, 次のシュレーディンガー方程式

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\psi(x) = \mathcal{E}\psi(x)$$

が導かれる。\$\mathcal{E}\$ はラグランジュの未定乗数である。

上の固有値問題の解として、\$n = 0, 1, 2, \dots\$ に対し、次の固有値 \$\mathcal{E}_n\$ と固有関数 \$\psi_n(x)\$ が得られる。すなわち、

$$\begin{aligned}\mathcal{E}_n &= (n + \frac{1}{2})\hbar\omega, \\ \psi_n(x) &= \sqrt{\frac{1}{2^n n!}} \sqrt{\frac{1}{\pi} \cdot \frac{m\omega^2}{\hbar}} H_n(\sqrt{\frac{m}{\hbar}}\omega x) \\ &\quad \cdot \exp[-\frac{1}{2} \frac{m}{\hbar} \omega^2 x^2].\end{aligned}$$

ここで、

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \cdot \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}.$$

とおいた。

いま、\$\psi(x) \in L^2(\mathbf{R}^1)\$ は \$\int |\psi(x)|^2 dx = 1\$ を満たすとする。このとき、複素数列 \$\{c_n\}_{n=0}^\infty\$ がただ一つ存在して、

$$\psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n(x)$$

と展開される。このとき、

$$\sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 = 1$$

が成り立つ。

このとき変数分離の方法を逆にたどって、時間依存のシュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = (-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2) \psi(x,t)$$

が得られる。このとき、上の \$\psi(x)\$ を初期条件とする解 \$\psi(x,t)\$ は

$$\psi(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n(x) \exp[-i \frac{\mathcal{E}_n}{\hbar} t]$$

によって与えられる。いま、経験的事実から、

$$\begin{aligned}|c_n|^2 &= (1 - \exp[-\frac{\hbar\omega}{k_B T}]) (\exp[-\frac{\hbar\omega}{k_B T}])^n, \\ &\quad (n = 0, 1, 2, \dots)\end{aligned}$$

と仮定する。ここで、\$T\$ は絶対温度を表し、\$k_B\$ ボルツマン定数を表す。このとき、初期分布が平衡状態であるとする、

$$\begin{aligned}J[\psi] &= \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 J[\psi_n] \\ &= \frac{1}{2} \hbar\omega + \frac{\hbar\omega}{\exp[\frac{\hbar\omega}{k_B T}] - 1}\end{aligned}$$

がえられる。これはプランクの輻射公式と一致する。

このことは、量子系 \$\Omega\$ が定常状態において次のような構造をもつと考えられる。\$\Omega\$ は

$$\Omega = \sum_{n=0}^{\infty} \Omega_n \text{ (直和)}$$

のように直和に分けられている。このとき、\$n = 0, 1, 2, \dots\$ に対して、確率空間 \$(\Omega_n, \mathbf{B} \cap \Omega_n, P_{\Omega_n})\$ を第 \$n\$ 固有量子系ということにする。ここで、\$P_{\Omega_n}(\cdot)\$ は条件付確率を表す。このとき、これまでの結果から、\$n = 0, 1, 2, \dots\$ に対し、

$$P(\Omega_n) = |c_n|^2 = (1 - \exp[-\frac{\hbar\omega}{k_B T}]) (\exp[-\frac{\hbar\omega}{k_B T}])^n$$

であると仮説を立てる。このとき、

$$\sum_{n=0}^{\infty} P(\Omega_n) = \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 = 1.$$

このとき、\$\mathbf{R}^1\$ の領域 \$A\$ と \$\mathbf{R}_1\$ の領域 \$B\$ に対して

$$P_{\Omega_n}(\{\rho \in \Omega_n; x(\rho) \in A\}) = \int_A |\psi_n(x)|^2 dx,$$

$$P_{\Omega_n}(\{\rho \in \Omega_n; p(\rho) \in B\}) = \int_B |\hat{\psi}_n(p)|^2 dp$$

とする。したがって、固有量子系 \$\Omega_n\$ のエネルギー期待値は

$$J[\psi_n] = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega, \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$$

である。このとき、全量子系と固有量子系の関係から、

$$\begin{aligned}E[\frac{1}{2m} p(\rho)^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 x(\rho)^2] \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} P(\Omega_n) E_{\Omega_n}[\frac{1}{2m} p(\rho)^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 x(\rho)^2] \\ &= \frac{1}{2} \hbar\omega + \frac{\hbar\omega}{\exp[\frac{\hbar\omega}{k_B T}] - 1}\end{aligned}$$

が従う. これがプランクの輻射公式の新しい意味である.

黒体輻射の定常状態においては, 1次元調和振動子からなる量子系は固有量子系の混合状態として実現されている. この混合の割合が数列 $\{|c_n|^2\}_{n=0}^{\infty}$ によって定まっている. その結果, 従来はエネルギー準位と呼んでいた \mathcal{E}_n は第 n 固有量子系のエネルギー期待値であることが示された. さらに, 各調和振動子のエネルギーは必ずしも離散的ではなく, 実現される固有量子系のエネルギー期待値が離散的な値をとり, その最小値が正の値をとることが分かった. つまり, いままで零点エネルギーと呼ばれていたものは, 固有量子系のエネルギー期待値の最小値である. したがって, エネルギー量子と呼ばれていた h は, 固有量子系のエネルギー期待値の最小単位ということになる. これによって, プランクのエネルギー量子の新しい意味が分かった.

3.2. 固体の比熱

この小節については, 文献 [9] を参照.

我々は無限に広がった単原子固体を考える. 固体中の各原子は熱によって振動している. 近似的には各原子は平衡点の近くで調和振動子と考える. このような固体の比熱を考えよう.

この比熱はモル比熱であるとする. それは一つの振動の自由度に関する比熱の $3N$ 倍である. N はアボガドロ数を表す.

したがって, ここで考える量子系はその根元事象が1次元ユークリッド空間 \mathbf{R}^1 において調和振動している調和振動子であるような確率空間 Ω である. そのとき, 一つの調和振動子 ρ の位置変数を $x = x(\rho)$, ρ の運動量変数を $p = p(\rho)$ と表す.

このとき各調和振動子 ρ の全エネルギーは古典力学によって決定されている. その値は

$$\frac{1}{2m}p(\rho)^2 + \frac{m}{2}\omega(\rho)^2x(\rho)^2$$

である. ここで, m は調和振動子 ρ の質量を表し, $\omega(\rho)$ はその角振動数を表す.

このエネルギー変数は確率空間 Ω 上の量子確率変数であると考え.

$x(\rho)$ の量子確率分布法則は L^2 密度 $\psi(x)$ によって決定され, $p(\rho)$ の量子確率分布法則はそのフーリエ変換 $\hat{\psi}(p)$ によって決定される. さらに, $\omega(\rho)$ は Ω 上の確率変数で, その確率分布法則は次の条件 (1)-(3) を満たす確率密度 $D(\omega)$ によって与えられると仮定する:

$$(1) 0 \leq D(\omega) \leq \infty.$$

$$(2) \int_0^{\infty} D(\omega) d\omega = 1.$$

$$(3) \int_0^{\infty} \omega D(\omega) d\omega < \infty.$$

そのとき, 次のエネルギー期待値 \bar{E} を得る:

$$\begin{aligned} \bar{E} &= E\left[\frac{1}{2m}p(\rho)^2 + \frac{1}{2}m\omega(\rho)^2x(\rho)^2\right] \\ &= \int_0^{\infty} E\left[\frac{1}{2m}p(\rho)^2 + \frac{1}{2}m\omega(\rho)^2x(\rho)^2; \right. \\ &\quad \left. \omega(\rho) = \omega\right] D(\omega) d\omega. \end{aligned}$$

そのとき, 許容 L^2 密度 ψ に対して,

$$\begin{aligned} &E\left[\frac{1}{2m}p(\rho)^2 + \frac{1}{2}m\omega(\rho)^2x(\rho)^2; \omega(\rho) = \omega\right] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \left| \frac{d\psi(x)}{dx} \right|^2 + \frac{1}{2}m\omega^2x^2|\psi(x)|^2 \right\} dx \end{aligned}$$

を得る. ここで, この条件付エネルギー期待値を

$$J[\psi; \omega] = \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \left| \frac{d\psi(x)}{dx} \right|^2 + \frac{1}{2}m\omega^2x^2|\psi(x)|^2 \right\} dx$$

と表す. この汎関数に対する変分問題の解として, 平衡状態において実際に実現される L^2 密度 ψ が得られる. 上の変分問題の解は, オイラー方程式として得られるシュレーディンガー方程式

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\psi(x) = \mathcal{E}\psi(x)$$

を満たす. ここで, \mathcal{E} はラグランジュの未定乗数である. 上の固有値問題の解として, $n = 0, 1, 2, \dots$ に対し, 次の固有値 \mathcal{E}_n と固有関数 $\psi_n(x)$ が得られる:

$$\mathcal{E}_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega,$$

$$\begin{aligned} \psi_n(x) &= \sqrt{\frac{1}{2^n n!} \sqrt{\frac{1}{\pi} \cdot \frac{m\omega^2}{\hbar}}} H_n\left(\sqrt{\frac{m}{\hbar}}\omega x\right) \\ &\quad \cdot \exp\left[-\frac{1}{2} \frac{m}{\hbar} \omega^2 x^2\right], \quad (n = 0, 1, 2, \dots). \end{aligned}$$

ここで,

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \cdot \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}.$$

とおいた.

全量子系の初期分布が L^2 密度 $\psi(x)$ で決定されているとすると, ある複素数列 $\{c_n\}_{n=0}^{\infty}$ が存在して,

$$\psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n(x)$$

と展開される. このとき, 経験的事実にもとづいて,

$$|c_n|^2 = (1 - \exp[-\frac{\hbar\omega}{k_B T}]) (\exp[-\frac{\hbar\omega}{k_B T}])^n, \\ (n = 0, 1, 2, \dots)$$

と仮定する. ここで, T は絶対温度を表し, k_B はボルツマン定数を表す. このとき, 初期分布が平衡状態であるとする,

$$J[\psi; \omega] = \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 J[\psi_n; \omega] \\ = \frac{1}{2} \hbar\omega + \frac{\hbar\omega}{\exp[\frac{\hbar\omega}{k_B T}] - 1}$$

を得る. したがって, 全量子系のエネルギー期待値

$$\bar{E} = \frac{1}{2} \hbar\bar{\omega} + \int_0^{\infty} \frac{\hbar\omega}{\exp[\frac{\hbar\omega}{k_B T}] - 1} D(\omega) d\omega$$

を得る. ここで,

$$\bar{\omega} = \int_0^{\infty} \omega D(\omega) d\omega$$

とおいた.

以上から, 平衡状態において全量子系は次の構造を持つことが分かる.

$$\Omega = \bigcup_{\omega} \Omega(\omega),$$

$$\Omega(\omega) = \{\rho \in \Omega; \omega(\rho) = \omega\}$$

と分割され, 各 $\Omega(\omega)$ は固有量子系に

$$\Omega(\omega) = \sum_{n=0}^{\infty} \Omega_n(\omega)$$

と分割される.

ここで, $n = 0, 1, 2, \dots$ に対し,

$$P_{\omega}(\Omega_n(\omega)) = |c_n|^2 \\ = (1 - \exp[-\frac{\hbar\omega}{k_B T}]) (\exp[-\frac{\hbar\omega}{k_B T}])^n$$

であると仮定する. ここで, P_{ω} は $\Omega(\omega)$ 上の条件付確率測度である. また, 第 n 固有量子系 $\Omega_n(\omega)$ 上の位置変数 x の量子確率分布は L^2 密度 $\psi_n(x)$ によって決定され, 運動量変数 p の量子確率分布は L^2 密度 $\hat{\psi}_n(p)$ によって決定されている. このとき, 各 ω に対して, 固有量子系 $\Omega_n(\omega)$ のエネルギー期待値として,

$$E_{\Omega_n(\omega)}[\frac{1}{2m} p(\rho)^2 + \frac{1}{2} m\omega(\rho)^2 x(\rho)^2; \omega(\rho) = \omega] \\ = J[\psi_n; \omega] = (n + \frac{1}{2}) \hbar\omega$$

が得られる. このとき,

$$E[\frac{1}{2m} p(\rho)^2 + \frac{1}{2} m\omega(\rho)^2 x(\rho)^2; \omega(\rho) = \omega] \\ = \sum_{n=0}^{\infty} P_{\omega}(\Omega_n(\omega)) E_{\Omega_n(\omega)}[\frac{1}{2m} p(\rho)^2 + \frac{1}{2} m\omega(\rho)^2 x(\rho)^2; \\ \omega(\rho) = \omega]$$

$$= \frac{1}{2} \hbar\bar{\omega} + \frac{\hbar\omega}{\exp[\frac{\hbar\omega}{k_B T}] - 1}$$

が得られる. このとき, 全量子系のエネルギー期待値 \bar{E} は

$$\bar{E} = E[\frac{1}{2m} p(\rho)^2 + \frac{1}{2} m\omega(\rho)^2 x(\rho)^2] \\ = \int_0^{\infty} J[\psi; \omega] D(\omega) d\omega \\ = \frac{1}{2} \hbar\bar{\omega} + \int_0^{\infty} \frac{\hbar\omega}{\exp[\frac{\hbar\omega}{k_B T}] - 1} D(\omega) d\omega$$

で与えられる. ここで,

$$\bar{\omega} = \int_0^{\infty} \omega D(\omega) d\omega$$

とおいた.

このとき, 単原子固体において, 各原子は調和振動子として自由度 3 をもつ. したがって, 考えている単原子固体のモル比熱 C は

$$C = 3N \frac{d\bar{E}}{dT}$$

によって与えられる. ここで, N はアボガドロ数である.

ここで, 単原子固体の比熱のデバイモデルを考える. したがって,

$$D(\omega) = \begin{cases} \frac{3}{\omega_D^3} \omega^2, & (\omega < \omega_D), \\ 0, & (\omega > \omega_D) \end{cases}$$

とおく. ここで, ω_D はデバイ振動数を表す. このとき,

$$C = 9Nk_B \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx$$

が得られる. ここで,

$$\theta_D = \frac{\hbar\omega_D}{k_B}$$

とにおいて, θ_D をデバイ温度と呼ぶ. これは固体の比熱のデバイモデルに対する新しい意味を与える.

デバイモデルは理論的結果と実験結果のよい一致を示す.

3.3. 理想気体の比熱

この小節については, 文献 [10] を参照.

無限に広がった単原子分子からなる理想気体を考える. 体積 V の領域の中に N 個の分子が存在しているとす. 理想気体が非常に希薄で, 分子は相互作用していないとする. 分子には力の作用はなく自由に運動しているとする. 各分子はニュートンの運動方程式

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = 0$$

に従って運動している. ここで, m は1個の分子の質量を表す.

理想気体の定積比熱 C_V とモル比熱 C_M を考えよう.

そのとき,

$$C_V = nC_M$$

の関係が成り立つ. ここで, $N = nN_A$ とする. N_A はアボガドロ数を表す.

各分子は3次元ユークリッド空間で自由運動しているが, ここではその一つの運動の自由度について考えればよい.

したがって, ここで考える量子系は1次元ユークリッド空間 \mathbf{R}^1 において自由運動している分子を根元事象とする確率空間 Ω である. そのとき, 一つの分子 ρ の位置変数を $x = x(\rho)$, ρ の運動量変数を $p = p(\rho)$ と表す.

このとき, 各分子の全エネルギーは古典力学にしたがって, $\frac{1}{2m} p(\rho)^2$ である. このエネルギー変数は確率空間 Ω 上の量子確率変数であると考え.

今の場合ハミルトニアンは連続スペクトルを持つことになるので, 一般化量子状態を考える必要がある.

$x(\rho)$ の量子確率分布法則は L^2_{loc} 密度 $\psi(x)$ によって決定され, $p(\rho)$ の量子確率分布法則はその局所フーリエ変換 $\psi_S(p)$ によって決定される. ここで, S は \mathbf{R}^1 の任意のコンパクト集合をあらわす. ここで, $\psi_S(x) = \psi(x)\chi_S(x)$ とし, $\chi_S(x)$ は S の特性関数とする.

このとき, 局所エネルギー期待値 \bar{E}_S は

$$\bar{E}_S = E_S \left[\frac{1}{2m} p(\rho)^2 \right] = \frac{\int_S \frac{\hbar^2}{2m} \left| \frac{d\psi_S(x)}{dx} \right|^2 dx}{\int_S |\psi_S(x)|^2 dx}$$

によって与えられる.

このとき, 局所変分問題を解くことによって, オイラー方程式として, シュレーディンガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = \mathcal{E} \psi(x)$$

が導かれる. ここで, \mathcal{E} はラグランジュの未定乗数である. この方程式の解として, 一般化固有関数

$$\psi^{(p)}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}, \quad (\mathcal{E} = \frac{p^2}{2m})$$

が得られる.

このとき, フーリエ変換の理論によって, $\psi(x) \in L^2(\mathbf{R}^1)$ に対して, $c(p) \in L^2(\mathbf{R}_1)$ が存在して,

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} c(p) e^{ipx/\hbar} dp,$$

$$c(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) e^{-ipx/\hbar} dx$$

が成り立つ.

全量子系 Ω の量子状態は L^2 密度 $\psi(x)$ を初期分布として決定される. このとき, 一般固有関数展開

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c(p) \psi^{(p)}(x) dp,$$

$$c(p) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^{(p)}(x)^* \psi(x) dx$$

が成り立つ。ここで、* 印は複素共役を表す。このとき、エネルギー期待値は

$$\bar{E} = J[\psi] = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{p^2}{2m} |\hat{\psi}(p)|^2 dp = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{p^2}{2m} |c(p)|^2 dp$$

によって与えられる。 $\frac{p^2}{2m} = \mathcal{E}$ だから、

$$\bar{E} = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} \mathcal{E} \sqrt{\frac{2m}{\mathcal{E}}} (|c(-\sqrt{2m\mathcal{E}})|^2 + |c(\sqrt{2m\mathcal{E}})|^2) d\mathcal{E}$$

が成り立つ。

いま、

$$I(\mathcal{E}) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2m}{\mathcal{E}}} (|c(-\sqrt{2m\mathcal{E}})|^2 + |c(\sqrt{2m\mathcal{E}})|^2),$$

$$\mathcal{E} > 0$$

とおくと、

$$\int_0^{\infty} I(\mathcal{E}) d\mathcal{E} = \int_{-\infty}^{\infty} |c(p)|^2 dp = 1.$$

したがって、

$$\bar{E} = J[\psi] = \int_0^{\infty} \mathcal{E} I(\mathcal{E}) d\mathcal{E}$$

が成り立つ。経験事実と合わせるために、

$$I(\mathcal{E}) = \frac{2}{k_B T} \exp\left(-\frac{2\mathcal{E}}{k_B T}\right)$$

と仮定する。ここで、 T は絶対温度で、 k_B はボルツマン定数を表す。

このとき、

$$\bar{E} = \frac{1}{2} k_B T$$

が成り立つ。

3次元自由運動は自由度が3であるから、3次元の場合の全量子系のエネルギー期待値は

$$\bar{E} = \frac{3}{2} k_B T$$

である。これは1個の分子に対するエネルギー期待値である。したがって、定積比熱 C_V とモル比熱 C_M は

$$C_V = N \frac{d\bar{E}}{dT}, \quad C_M = N_A \frac{d\bar{E}}{dT}$$

で与えられる。すなわち、

$$C_V = \frac{3}{2} N k_B, \quad C_M = \frac{3}{2} N_A k_B$$

となる。 $N = nN_A$ とおくと、関係

$$C_V = nC_M$$

を得る。これらの結果はこれまで単原子分子からなる理想気体の比熱と考えられていたものである。このことが新量子論の観点から確かめられた。我々の結果は新量子論の観点において合理的に導かれた。新旧の結果はその立脚点が異なっている。

4. 新量子論の哲学的考察

Ito [2], [3] の論文において新量子論の公理を提出する際に、(1) 量子系、(2) 量子状態と (3) 量子系の運動の三つの概念を規定する必要があることを指摘した。その際、量子現象の三つの特徴、すなわち、

- (i) 粒子と波動の二重性、
- (ii) 物理量の離散性、
- (iii) 正準交換関係とハイゼンベルグの不確定性関係

をうまく説明できるように新量子論の公理を定式化する必要があると述べてある。

しかし、伊東・萱間・鴨下 [8] や伊東・ウツディン [9], [10] において具体的な量子現象を我々の新量子論の観点にもとづいて研究してみると、これらの量子現象の三つの特徴と考えられていたものは実際の量子現象において何の意味もないことが分かった。すなわち、実際の量子現象は次の通りである。

微粒子は粒子として存在しており、その運動は一般に振動運動している。シュレーディンガー方程式の解である L^2 密度は微粒子系の位置変数の量子確率分布状態を決定し、そのフーリエ変換は運動量変数の量子確率分布状態を決定する。しかし、それは決して微粒子系が波のような存在であることを意味しない。したがって、シュレーディンガー方程式の解を波動関数と呼ぶことは何の意味もないから、波動関数という用語は使用しないことにする。

調和振動子が平衡状態においてとるハミルトニアン固有値のような離散的量はエネルギー準位といわれ、調和振動子がとり得るエネルギーがこのような離散的な値をとると考えられていた。しかし、我々の研究で、これらの固有値は固有関数によって決まる固有量子系のエネルギー期待値であることが分かった。全量子系はそのような固有量子系の混合状態であると考えられる。このように、固有量子系のエネルギー期待値が離散的な値をとることは何の不思議もない。一つ一つの微粒子のエネルギーは時間と共

に連続的に変動していると考えられる。エネルギー量子あるいは作用量子といわれるプランクの定数 h はエネルギーの最小単位ではなく、固有量子系のエネルギー期待値の最小単位であることが分かった。

理想気体の場合のように、運動量やエネルギーが連続量である場合にも量子現象は発現している。量子現象においても物理量は離散的である必要はない。この場合のように、ハミルトニアンが連続スペクトルを持つ場合、一般化固有量子系の一般化量子状態は L^2_{loc} 密度によって決定される。

正準交換関係とハイゼンベルグの不確定性関係は一つ一つの物理量が不確定になるというのではなく、位置変数と運動量変数などで、正準交換関係を満たす二つの力学変数の標準偏差の満たすべき関係と考えられる。統計的な関係式であるから、量子系の量子確率分布法則が決まると自然に定まる関係式である。位置と運動量のように、一方を正確に測定すればする程もう一方があいまいになるといったようなものではない。統計的な関係式として一つ一つの量子系毎に確定した関係式である。

量子論が確立したからといって、ニュートン力学やマクスウェルの電磁気学が不要になるのではない。これらは対象とする物理現象が異なるのである。種々の物理理論は自然現象の様々な様相に対応して異なった形をとる。物体の運動が力の相互作用によって引き起こされるといふ物理学の基本原理解は、天体の運動から原子や分子の運動までにわたって、すべての自然存在の運動にあてはまるのである。

ノイマンの公理系は数学的な理論である作用素論としては正しい。しかし、ノイマンの意味で量子系や量子状態というのは言葉としては表現されているが、それがどういう物理系のどういう物理的状态を意味するのか不明である。

ボルンやコペンハーゲン学派の提出した確率解釈というのは数学的な意味で全くナンセンスである。1個の粒子がある確率でどこかに存在するなどというものは無意味な表現である。

シュレーディンガー方程式は、エネルギー期待値に対する変分原理から、変分問題の解として得られる。その結果、シュレーディンガー方程式は線形で、現在までに知られている形しかないと分かる。その結果、 L^2 密度の重ね合わせが可能となり、二重スリットの実験のような電子の示す干渉現象が説明できる。

微粒子は観測によって攪乱されるから、因果律は成り立たないという。ニュートン力学では、力学的状态を決定する位置変数の時間的変化がニュートンの運動方程式に従う限りにおいて因果律が成り立って

いる。新量子論では量子状態を決定する L^2 密度の時間的変化がシュレーディンガー方程式に従う限りにおいて因果律が同様に成り立っている。すなわち、どちらも物理的状态が運動方程式に従って時間発展している限りにおいて因果律が成り立つのである。

量子現象は決して神秘的なものではない。我々の新量子論の公理にもとづいて合理的に理解できる。物質存在に対する古典的描像は依然として有効である。

古典力学を量子化して初めて量子現象が発現するのではない。微粒子系の集団に対して量子現象が発現しているので、それを新量子論で説明し、理解するのである。

20世紀に生まれた量子論と相対論はどちらも観測量にもとづいて理論を構築しようとしたためにどちらもパラドックスを内包するという運命をもってしまった。真の物理理論は自然存在のモデルについての理論であって、人間の観測とは無関係に存在している自然存在の様相を反映するように創らなければならない。新量子論はそのような理論の一つである。

5. 諸課題

旧量子論については20世紀のほぼ1世紀間における研究の歴史がある。パラドックスを含んだ奇妙で神秘的な理論にもかかわらず、量子現象は沢山発見されて、多くの実用的成果を生み出した。

新量子論が発見され、旧量子論で神秘的に説明されていた量子現象が合理的に理解できることが分かった。したがって、今現在、20世紀中に発見された多くの量子現象を新量子論の観点に立って新しく説明し、理解し直すことが問題である。

新量子論においても基礎方程式であるシュレーディンガー方程式を解くということが問題である。そのためには、シュレーディンガー作用素の自己共役性の問題、固有関数展開やスペクトル分解などがやはり解決すべき問題である。これに関しては20世紀に研究された多くの研究はそのまま意味がある。新量子論で大きく変わるのは自然哲学や自然観の部分である。全く合理的な自然哲学や自然観が確立されたのである。量子現象の合理的理解が可能になったのである。

新量子論における数学的計算はヒルベルト空間の枠組みで行えば十分である。ディラックのブラベクトルとケットベクトルによる記述は不要であるし、新量子論の計算を正しく反映していない。今後新量子論においてはディラックのブラベクトルとケットベクトルによる枠組みを用いずに理論を構成したい。

文 献

新量子論で扱う量子現象は粒子の生成消滅を伴わないものである。それに対して、核反応や素粒子の現象においては粒子の生成消滅が問題である。そのような現象を扱う理論として場の量子論がある。場の量子論は、旧量子論で量子状態を表すと考えられていた波動関数を作用素あるいはむしろ作用素値超関数に置き換えた理論であると考えられるようになった。

新量子論では、旧量子論で波動関数と呼ばれていた関数は、位置変数の量子確率分布法則を決定する L^2 密度であるということになった。そうすると、単なるベクトルではなくて、 L^2 密度を作用素値超関数に置き換えたとき、それは物理的には何を表すのか分からなくなる。

それだけではない。場の量子論で粒子の生成消滅を数学的に表現しているといわれる生成消滅演算子は本当に粒子の生成消滅を表わしているかどうか疑問が生じて来た。フォック空間表現で考えると、いわゆる生成消滅演算子は粒子の位置座標を表す変数の関数を一つ増やしたり減らしたりしているだけである。どうしてこれが本当に粒子の生成消滅を表現しているのか理解できない。

実際の粒子の生成消滅現象を数学的に表現することはまだ本当に分かっていない。

場の量子論における作用素の計算は一般化されたテンソル解析の計算であると考えられる。その意味で場の量子論の方法を用いて多様体の幾何学的な性質が研究できるのである。しかし、物理の理論としては無意味であることが分かっている。

そういう作用素値超関数に対するいわゆる一般化されたテンソル解析の計算をしても、数学的には何らかの重要な情報が得られるとはいえ、物理的にはどんな情報を得られるのか全く分からない。

このように、場の量子論が物理の理論として全く無意味であるとする、それにもとづいて作られている素粒子論、クォーク理論、ストリング理論等も物理の理論としては無意味になってしまう。

それにもかかわらず、自然界には粒子の生成消滅現象が常に発現している。これらの現象を説明し、理解する真の物理理論の創造が待ち望まれている。

- [1] 伊東由文, 正確率測度の理論, 数理解析研究所講究録 **558**, pp.96-113, 1985.
- [2] Y. Ito, New Axiom of Quantum Mechanics-Hilbert's 6th Problem-, J. Math. Tokushima Univ., Vol. **32**, pp.43-51, 1998.
- [3] Y. Ito, New Axiom of Quantum Mechanics-Hilbert's 6th Problem-, Real Analysis Symposium 1998 Takamatsu, pp.96-103, 1999.
- [4] 伊東由文, 量子力学の数学的原理. 新理論, サイエンスハウス, 2000.
- [5] Y. Ito, Theory of Quantum Probability, J. Math. Tokushima Univ., Vol. **34**, pp.23-50, 2000.
- [6] 伊東由文・萱間顕誠, 変分原理とシュレーディンガー方程式, 徳島大学総合科学部 自然科学研究 第 **15** 巻, pp.1-7, 2002.
- [7] 伊東由文・萱間顕誠, 変分原理とシュレーディンガー方程式, 数理解析研究所講究録 **1278**, pp.86-95, 2002.
- [8] 伊東由文・萱間顕誠・鴨下豊, 新量子論とプランクの輻射公式の新しい意味, 徳島大学総合科学部 自然科学研究 第 **16** 巻, pp.1-10, 2003.
- [9] Y. Ito and Md Sharif Uddin, New Quantum Theory and New Meaning of Specific Heat of a Solid, Preprint, 2003.
- [10] Y. Ito and Md Sharif Uddin, New Quantum Theory and New Meaning of Specific Heat of an Ideal Gas, Preprint, 2004.