

Space-time Approach to Non-Relativistic Quantum Mechanics

R.P.Feynman*

1948 年

概要

ここでは、非相対論的量子力学が異なる方法で公式化される。しかしながら、それは我々に馴染みのある公式化と等価なものである。量子力学では、幾つか異なる仕方で生起する事象の確率は、各々の仕方から得られる複素数の寄与の合計の絶対値の二乗をとったものとなる。1つの粒子の経路 $x(t)$ が時空領域中の何処かに見出される確率は、領域中の各々の経路からの寄与の和を二乗したものとなる。一つの経路からの寄与は指数関数と仮定され、その位相は(純虚数であり)、問題としている経路の (\hbar を単位とした) 古典的作用であるとする。過去から x, t に至る全ての経路からの寄与の合計が波動関数 $\psi(x, t)$ となる。それがシュレディンガー方程式を満たすことが示される。行列と演算子代数との関係が議論される。応用例として、特に量子電磁力学の方程式から場の振動子の座標を排除する方法を紹介する。

1 導入

興味深い歴史的事実であるが、現代的な量子力学は2つの全く異なった数学的公式化、すなわちシュレディンガーの微分方程式とハイゼンベルグの行列代数で始まった。一見、似ても似つかぬこの2つのアプローチは、数学的に等価であることが証明された。この2つの視点はお互いに補完し合い、最終的には「ディラックの変換理論」の中で統合される運命にあった (to be synthesized in Dirac's transformation theory).

主として (essentially) この論文で述べるのは、非相対論的量子力学の第3の公式化のことで

* Cornell University, Ithaca, New York

ある。この公式化は、古典的作用^{*3}と量子力学の関係についてディラックが数篇の論評^{*1} ^{*2}を行ったことで提案されたものである。確率振幅は、ある特定の時間における粒子の位置と言うよりは、時間の関数としての粒子運動全体に結び付けて考えるものとする。

この定式化は、通常の定式化と数学的には同等である。従って、基本的には新しい結果はない。しかし、古いものを新しい視点で認識することには喜びがある。また、新しい視点を持つことで明らかに有利になる問題もある。例えば、2つの系 A と B が相互作用する場合、一方の系、例えば B の座標は、 A の運動を記述する方程式から取り除くことが出来る。 B との相互作用は、 A の運動に関する確率振幅の公式の補正として表現される。これは、 B の影響が A の運動方程式の変更 (A に作用する力を表わす項の導入) によって表される古典的な状況と類似している。このようにして、場の振動子の横方向および縦方向の座標は、量子電気力学の方程式から除外することが出来る。

また、新しい見方によって、現在の理論を修正したり現在の実験結果を包含するのに必要なアイデアがインスパイア (鼓舞) されることが常に期待される。

まず、量子力学における確率振幅の重ね合わせという一般的な概念について説明する。次に、この概念を直接拡張して、時空内の任意の運動や経路 (位置対時間) に対する確率振幅を定義できることを示す。「この確率振幅の位相は、この経路に対して古典的に計算される作用に比例する」と仮定すると、通常の量子力学が生じることが示される。これは、作用が速度の2次関数の時間積分である場合に当てはまることである。

行列代数や演算子代数との関係は、できるだけ新しい定式化の言語に近い形で議論する。これには実用上の利点はないが、作用関数のより広いクラスに一般化することを考えた場合、この公式は非常に示唆的である。最後に、この定式化の応用について述べる。具体的な例として、調和振動子の座標をそれが相互作用する系の運動方程式からどのように取り除くことが出来るかを示す。この方法は、量子電磁気学に直接適用することが出来る。また、スピンや相対性理論の効果を含む正式な拡張についても説明する。

^{*3} この論文を通して、「作用」という術語は経路に沿ったラグランジュアン¹の時間積分に対して使用される。この経路が古典力学的運動する粒子が実際に動いたものである場合には、その積分は「ハミルトンの第1原理の関数」と呼んだ方がより適切である。

^{*1} P. A. M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics* (The Clarendon Press, Oxford, 1935), second edition, Section 33 (→perhaps 32?); also, *Physik. Zeits. Sowjetunion* **3**, 64 (1933).

^{*2} P. A. M. Dirac, *Rev. Mod. Phys.* **17**, 195 (1945).

2 確率振幅の重ね合わせ

ここで紹介する定式化は、時間の関数として完全に指定された運動に関連する確率振幅の概念を本質的なアイデアとして含んでいる。したがって、確率振幅の重ね合わせという量子力学的な概念を詳細に検討することは価値のあることと思われる。ここでは、古典物理学から量子物理学へ移行する際に、どんな物理的世界観の本質的変更が要求されるかを検討する。

この目的のために、仮想実験を考え、そこでは時間的に連続した3つの測定を行なえよう。最初は量 A 、次に B 、そして C である。これらが異なる量である必要は全くない。連続した3つの位置測定の例を念頭に置くことも全くオーケーである。 a は測定 A から得られる可能性のある多数の結果の1つであり、 b は B から得られる可能性のある結果であり、 c は3番目の測定 C から得られる可能性のある結果であると仮定する*4。量子力学の場合、測定 A, B, C は状態を完全に指定するタイプの測定であると仮定する。つまり、例えば、 B が値 b を持つ状態は縮退していないとする。

量子力学が確率を扱うことはよく知られているが、当然ながらそれだけではない。古典理論と量子理論の関係をより明確に示すために、「古典力学も確率を扱っているのだが、すべての確率は0か1なのだ」と考えることも出来る。もっと良い方法は、古典力学的な場合の確率は、古典統計力学の意味（その場合、たぶん内部座標は完全には指定されていない）での確率であると想像することである。

我々は P_{ab} を、測定 A が結果 a を与えた場合に、測定 B が結果 b を与える確率と定義する。同様に P_{bc} は、測定 B が結果 b を与えるならば、測定 C が c を与えるという確率である。さらに P_{ac} は、 A が a を与えるならば C が c を与えるという確率である。最後に、3つのすべての確率、すなわち A が a を与えるならば、 B が b を与え、 C が c を与えるという確率を P_{abc} で表わす。 a と b の間の事象が b と c の間の事象と独立である場合は次となる：

$$P_{abc} = P_{ab}P_{bc} \quad (1)$$

量子力学によれば、上式が成り立つのは「 B が b である」という記述が状態を完全に指定する場合である。

*4 我々の議論では、 a, b, c の内のある値は量子力学では排除され得るが古典力学ではそうでないと言うようなことはあまり重要ではない。簡単化のために、何方においても値は同じであると仮定する。しかし、ある値の確率はゼロであってよいと仮定する。

どのような事象でも, 次の関係が成り立つと予想する:

$$P_{ac} = \sum_b P_{abc} \quad (2)$$

なぜなら, 最初に測定 A が a を与え, その後で測定 C を行うと系が c を与えることが分かったとするならば, A と C の間の時間に量 B は必ず何らかの値を与えているはずだからである. それが b であった確率が P_{abc} である. \sum_b は互いに排他的な全ての b について和または積分を行うことを表している.

さて, 古典物理学と量子物理学の本質的な違いは式 (2) にある. 古典物理学ではこの式は常に真である. しかし量子力学ではしばしば偽である. ここでは, A の測定で a が得られた後に, C の測定で c が得られる量子力学的な確率を P_{ac}^q とする. すると量子力学では, 式 (2) は次のような驚くべき法則に置き換えられる*⁵:

$$P_{ab} = |\varphi_{ab}|^2, \quad P_{bc} = |\varphi_{bc}|^2, \quad \text{and} \quad P_{ac}^q = |\varphi_{ac}|^2 \quad (3)$$

式 (1) と式 (2) を結合することで得られる次の古典物理学的な確率法則:

$$P_{ac} = \sum_b P_{ab}P_{bc} \quad (4)$$

は, 量子物理学では次式で置き換えられる:

$$\varphi_{ac} = \sum_b \varphi_{ab}\varphi_{bc} \quad (5)$$

もし式 (5) が真であるならば, 通常では式 (4) の方は正しくないことになる. 式 (4) を推論する際に犯した論理的な誤りは, 当然ながら, a から c になるためには, B がある一定の値 b を持つような状態を経なければならぬと仮定したことにある.

このことを検証するために, 試みに実験 A と実験 C の間に測定 B を行ったとする. するとその場合には, 公式 (4) は実は正しいことになる. より正確に言うならば, B を測定する装置を設置して使用するが, A と C の相関関係だけを記録し研究するという意味で B の測定結果は利用しないならば, 公式 (4) は真となる. これは B の測定器が実は役割を果たしているからである. つまり, その気になれば状況を何ら乱すことなくいつでもメーターを読み取ることが出

*⁵ ここでは, 状態 b は縮退していないと仮定し, 従って式 (1) が成立するとした. 恐らく, 量子力学を幾分一般化して, 純粋な状態 b であっても式 (1) が成立しないとするならば, 式 (2) は次のように置き換えられると予想される: $P_{abc} = |\varphi_{abc}|^2$ となる複素数 φ_{abc} が存在し, 式 (5) に相当する式は次となる: $\varphi_{ac} = \sum_b \varphi_{abc}$.

来るからである。従って、 a と c を与える実験は、 b の値によってグループ分けすることが出来ることになる。

確率を頻度 (frequency) の観点から見ると、式 (4) は単純に「 a と c を与えた各実験に於いて B は何らかの値を持っていた」という記述に起因して成り立つ式である。式 (4) が成立しないのは、「 B は何らかの値を持っていた」という記述が場合によって無意味になってしまう時だけである。式 (5) が式 (4) の代わりになるのは B を測定しようとしなかった場合だけであることに注目すると、「 B には何らかの値を持っていた」という記述は、 B を測定しようとしなかったときには常に無意味である可能性があると言わざるを得ない*6。

従って、 a と c の相関については、 B を測定するかしないかによって、式 (4) と式 (5) という異なる結果が得られることになる。どんなに巧妙にやっても、 B を測定しようとする、少なくとも式 (5) の結果から式 (4) の結果に変わるほどに系は乱されなければならない*7。測定は、実際に必要な乱れを引き起こす。そして本質的に式 (4) は誤りであるということは、ハイゼンベルクが不確定性原理で初めて明確に述べた (enunciate) ことである。式 (5) の法則は、シュレーディンガーの研究、ボルンとヨルダンの統計的解釈、そしてディラックの変換理論*8の結果である。

式 (5) は、物質の波動性を表わす代表的なものである。ここで、 a から c に行く粒子が、幾つかの異なる道筋 (異なる b の値) を取る粒子として発見される確率は、どの道筋を通ったかを決定する試みが為されない場合には、幾つかの (利用可能な道筋毎に一つずつの) 複素量の合計の 2 乗として表される。

確率は典型的な「干渉現象」を提示することが出来る。干渉現象は通常は波に付随し、その強度は異なる源からの寄与の合計の二乗で与えられる。電子は、粒子であることを確認しようとしないう限り、いわゆる波として式 (5) の振舞いをする。ただし、粒子であるとして、電子がど

*6 「 B を測定しようと思えば出来た」と指摘しても無駄である。本当は「そうしなかった」のだから。

*7 測定が系を乱すとき、実際にどのような具合で式 (4) が式 (5) になるのかは、特に J. フォン・ノイマンによって研究されている (*Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik* (Dover Publications, New York, 1943)). 測定器の擾乱の効果は、事実上、干渉する成分の位相を、例えば θ_b だけ変えることであり、これにより式 (5) は $\phi_{ac} = \sum_b e^{i\theta_b} \phi_{ab} \phi_{bc}$ となる。しかし、フォン・ノイマンが示したように、 B を測定した場合、位相のずれは未知のままではなければならないので、結果として得られる確率 P_{ac} は、すべての位相 θ_b を平均した ϕ_{ac} の 2 乗である。その結果は式 (4) となる。

*8 もし \mathbf{A} と \mathbf{B} が測定 \mathbf{A} と \mathbf{B} に相当する演算子であり、 ψ_a と χ_b が $\mathbf{A}\psi_a = a\psi_a$, そして $\mathbf{B}\chi_b = b\chi_b$ の解ならば、

$$\psi_{ab} = \int \chi_b^* \psi_a dx = (\chi_b^*, \psi_a)$$

従って ψ_{ab} は、 \mathbf{A} が対角的となる表示から \mathbf{B} が対角的となる表示 (representation) への変換に対応する変換行列 (transformation matrix) の要素 $\langle a|b \rangle$ である

のような経路で移動したかを決めようと思えば、それは可能である。しかし、そうすると式 (4) が適用されてしまい、電子は粒子のように振舞うことになる。

これらのことは、もちろんよく知られていることであり、すでに何度も説明されている。しかし、これらはすべて式 (5) の直接的な結果に過ぎないという事実を強調しておく価値はあると思われる。なぜなら、私の量子力学の定式化においては、本質的に式 (5) が基本となっているからである*9。

式 (4) と式 (5) を、 A, B, C, D, \dots, K という多数の測定値に一般化すると、値が a, b, c, d, \dots, k という連続となる確率は、当然ながら次のようになる：

$$P_{abcd\dots k} = |\varphi_{abcd\dots k}|^2$$

例えば、 b, d, \dots が測定された場合に、結果 a, c, k が得られる確率は、次の古典的な公式となる：

$$P_{ack} = \sum_b \sum_d \cdots P_{abcd\dots k} \quad (6)$$

他方、 A と C 間の測定そして C と K 間の測定が行われなかった場合に、同じ値の列 a, c, k が得られる確率は、次のようになる：

$$P_{ack}^q = \left| \sum_b \sum_d \cdots \varphi_{abcd\dots k} \right|^2 \quad (7)$$

この量 $\varphi_{abcd\dots k}$ は、 $A = a, B = b, C = c, D = d, \dots, K = k$ となる場合の「確率振幅」と呼ぶことが出来る。(これはもちろん、積 $\varphi_{ab}\varphi_{bc}\varphi_{cd}\cdots\varphi_{jk}$ で表すことが出来る)。

3 時空経路の確率振幅

前節の物理的アイデアは、「特定の完全に指定された時空経路に対する確率振幅の定義」へと容易に拡張することが出来る。その方法を説明するために、1次元の問題に限定して説明するが、多次元へ一般化できることは明らかである。座標 x がいろいろな値を取れる粒子を考える。その粒子に対して膨大な数の連続した位置測定を行うことを考え、例えば、それを小さな時間間隔 ε で区切って行うとする。すると前述の A, B, C, \dots のような連続した測定値は、連続した時間 t_1, t_2, t_3, \dots における座標 x の連続した測定値としてよい。ここで $t_{i+1} = t_i + \varepsilon$ である。時刻 t_i での座標の測定から得られる可能性のある値を x_i とする。従って A が t_1 に

*9 前記のことは、例えば、次を参照すべし：W. Heisenberg, *The Physical Principles of the Quantum Theory* (University of Chicago Press, Chicago, 1930). particularly Chapter IV.

於ける x の測定値であれば、 x_1 は以前 a で表したものである。古典的な見方をすれば、座標の連続した値 x_1, x_2, x_3, \dots は、実質的に 1 つの経路 $x(t)$ になる。当然ながら、最終的には極限 $\varepsilon \rightarrow 0$ とする。

そのような経路の確率は、 $x_1, x_2, \dots, x_i, \dots$ の関数、例えば $P(\dots, x_i, x_{i+1}, \dots)$ である。経路が時空中の特定な領域 R にある確率は、古典的には P をその領域で積分することによって得られる。従って、 x_i が a_i と b_i の間にあり、 x_{i+1} が a_{i+1} と b_{i+1} の間、などにある確率は次となる：

$$\begin{aligned} \dots \int_{a_i}^{b_i} \int_{a_{i+1}}^{b_{i+1}} \dots P(\dots x_i, x_{i+1}, \dots) \dots dx_i dx_{i+1} \dots \\ = \int_R P(\dots x_i, x_{i+1}, \dots) \dots dx_i dx_{i+1} \dots, \end{aligned} \quad (8)$$

記号 \int_R は、積分が領域 R 内にある変数の範囲で行われることを意味している。上式 (8) は、単に式 (6) の a, b, \dots を x_1, x_2, \dots に置き換え、和を積分に置き換えたものである。

量子力学で、式 (8) が正しい公式となるのは、 $x_1, x_2, \dots, x_i, \dots$ が実際に全て測定され、それらの経路が R 内を通る場合である。そのような詳細な測定が行われなかった場合、結果は異なったものになることが予想される。経路が R 内の何処かにあるとしか判断できないような測定が行われると想定してみよう。

その測定は「理想的な測定」と呼べるものでなければならない。系に更なる擾乱を与えることなしに、同じ測定から更に詳しい情報を得ることは出来ないと仮定する。私は正確な定義は見い出せていない。例えば、ずっと多くの情報が測定されてもそれが利用されなかった場合には余計なものとなるので平均化しなければならない。そのような余計な不定さは避けようとしている。我々は全ての x_i で式 (5) または式 (7) を利用し、式 (4) の方法で合計するような部分が残らないようにしたいのである。

「理想的な測定」によって「粒子は領域 R 中に確実に存在する」ことが分かる確率は、ある複素数の 2 乗、すなわち $|\varphi(R)|^2$ であると予想する。数値 $\varphi(R)$ は、領域 R の「確率振幅」と呼ぶことが出来るもので、式 (7) で a, b, \dots を x_i, x_{i+1}, \dots に置き換え、和を積分に置き換えることで与えられる：

$$\varphi(R) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_R \Phi(\dots x_i, x_{i+1} \dots) \dots dx_i dx_{i+1} \dots \quad (9)$$

複素量の数値 $\Phi(\dots x_i, x_{i+1} \dots)$ は、経路を定義する変数 x_i の関数である。実際には、時間間隔 ε がゼロに近づき、従って φ は本質的に、特定の時刻 t_i での値 $x_i = x(t_i)$ だけに依存すると

言うよりは、経路 $x(t)$ 全体に依存すると考える。 φ は経路 $x(t)$ の「確率振幅関数」と呼べるかも知れない。

これらの考えは、第 1 番目の「公準」(postulate) としてまとめることが出来る：

I. 粒子の経路が時空のある領域に存在するかどうかを決定するための理想的な測定を行なうとき、その結果が肯定的になる確率は、その領域中の各経路毎に一つずつ得られる複素数の寄与を合計しその絶対値を 2 乗したものである。

この公準の記述は不完全である。「各々の」経路に対して一個ずつの項合計という意味が曖昧である。式 (9) で与えられる正確な意味は次の通りである：経路はまず位置 x_i たちだけで定義される。経路はその位置を等間隔の時間 $t_i = t_{i-1} + \varepsilon$ で通過することになる^{*10}。このとき、 R 内の座標値はすべて同じ重みを持つ。重みの実際の大きさは ε に依存し、確実に生起する事象の確率が 1 に正規化されるように選ぶことが出来る。最善ではないかも知れないが、比例定数中のこの重み因子は 2 番目の公準に残しておこう。(It may not be best to do so, but we have left this weight factor in a proportionality constant in the second postulate.) 計算の最後で、 $\varepsilon \rightarrow 0$ の極限を取らなければならない。

系が複数の自由度を持つ場合には、座標空間 x は複数の次元を持つので、記号 x は k 個の自由度を持つ系の座標集合 $(x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(k)})$ を表わすことになる。経路とは、連続する時間に対する一連の配位であり、それは配位 x_i 、または $(x_i^{(1)}, x_i^{(2)}, \dots, x_i^{(k)})$ によって、すなわち、各時間 t_i に対して k 個の座標値を与えることによって記述される。記号 dx_i は、 k 次元の配位空間の (時刻 t_i での) 体積要素を表していると解釈できる。この公準の記述は、使用する座標系には依存しない。

この公準は、位置測定の結果を定義することに限定されている。例えば、運動量測定の結果を定義するために何をしなければならないかは書かれていない。しかし実際には、これは実際の制限とはならない。なぜなら、原理的に 1 粒子の運動量測定は他の粒子の位置測定、例えばメーターインジケーター測定によって行えるからである。従って、そのような実験の分析によって、最初の粒子の運動量を決定するのは何なのかが定まるであろう。

^{*10} 過程の細分化と制限を回避する試みには、非常に興味深い数学的問題が存在する。ある種の複雑な測度が、関数 $x(t)$ の空間に関連付けられる。予想外の状況下では、有限の結果は得られる。そこでは、測度はどこでも正しいわけではなく、多くの経路からの寄与はほとんど相殺されるからである。このような奇妙な数学的問題は、細分化の過程で回避される。しかし、微積分が発明される前にピラミッドの体積を計算していたカヴァリエーリのような気持ちにはなるものだ。

4 経路に対する確率振幅の算出

最初の公準は、確率を計算するために量子力学が必要とする数学的枠組みを規定している。第2の公準は、この枠組みに特定な内容を与えるものであり、重要な量である各経路の Φ を計算する方法を規定する：

II. 各経路の寄与の度合いは同じである。しかし、それらの寄与の位相は (\hbar を単位とする) 古典的な作用、すなわち経路に沿ってラグランジアンを時間積分したものである。

つまり、ある経路 $x(t)$ からの寄与 $\Phi[x(t)]$ は $\exp(iS[x(t)]/\hbar)$ に比例する。ただし、作用 $S[x(t)] = \int L(\dot{x}(t), x(t)) dt$ は、問題の経路に沿って取られた古典的ラグランジアン $L(\dot{x}, x)$ の時間積分である。ラグランジアンは、時間の明示的な関数である場合もあるが、位置と速度の関数である。ラグランジアンが速度の2次関数であると仮定すると、「より一般的な量子力学の定式化とこの公準とが数学的に等価であること」を示すことが出来る。

第一公準を解釈するためには、連続する時刻 t_i で経路が通過する点 x_i の連続性のみを与えて経路を定義する必要があった。 $S = \int L(\dot{x}, x) dt$ を計算するには、 x_i だけでなく全地点での経路を知る必要がある。 t_i と t_{i+1} の間の関数 $x(t)$ は、ラグランジアン L を持つ古典的な粒子が時刻 t_i で位置 x_i から出発して時刻 t_{i+1} に位置 x_{i+1} に至る経路であると仮定する。この仮定は、不連続な経路に対する第二公準を解釈するために必要である。量 $\Phi(\dots, x_i, x_{i+1}, \dots)$ は必要に応じて (様々な ε に対して) 正規化することが出来て、確実な事象の確率は $\varepsilon \rightarrow 0$ のとき 1 に正規化される。

位置の時間微分が1次よりも高次なものに L が依存しないならば、時刻 t_i で速度の急激な変化に遭遇しても、作用積分を実行することは困難ではない。更に、もし L がこのように制限されていないと仮定すると、端点は古典的な経路を定義するのに十分でない。古典的経路は作用を最小にするものであるから、次のように書くことが出来る：

$$S = \sum_i S(x_{i+1}, x_i), \quad (10)$$

ただし、

$$S(x_{i+1}, x_i) = \text{Min.} \int_{t_i}^{t_{i+1}} L(\dot{x}(t), x(t)) dt \quad (11)$$

このように書くと、古典力学に求めるのはラグランジュ関数の提供だけであることになる。実際、第二公準を単に「 Φ は $x(t)$ と $\dot{x}(t)$ の1次時間微分の実関数を積分したものに i を掛け合

わせたものを指数とする指数関数である」と考えることも出来る。そうすると古典的な運動方程式は、次元を無限大にする極限をとった後に導出できるかも知れない。そして「 x と \dot{x} の関数は、定数係数の付いた古典的ラグランジアンである」ことを示すことが出来よう。

実際、式 (10) の和は有限の ε であっても無限であり、従って、(時間の範囲が無限であるため) 和をとることは無意味である。これは公準の更なる不完全性を示すものである。「時間間隔は(無限小ではなく)有限であっても、任意の長さである」という制限が必要がある。

二つの公準を一緒にし、そして式 (10) を用いると次が得られる：

$$\varphi(R) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_R \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_i S(x_{i+1}, x_i) \right] \cdots \frac{dx_{i+1}}{A} \frac{dx_i}{A} \cdots, \quad (12)$$

ただし、正規化係数を時間の各瞬間ごとに係数 $1/A$ (その正確な値はここで決定して行く) に分割している。積分は、領域 R 中にある値 x_i, x_{i+1}, \dots だけについてとる。この式と、 $S(x_{i+1}, x_i)$ の定義式 (11), そして $|\varphi(R)|^2$ の物理的な解釈を「粒子が R 中に見つかる確率である」とすることにより、我々の量子力学の定式化が完結することになる。

5 波動関数の定義

次に、これらの公準が通常量子力学の定式化と同等であることを示す。それを2つのステップで行なう。この節では、波動関数を新しい観点ではどのように定義するかを示す。次節では、波動関数がシュレーディンガーの微分波動方程式を満たすことを示す。波動関数の特性を持った量の定義が可能となるのは、 S を式 (10) のように和の式に表せるため、従って Φ を経路の連続した部分からの寄与の積として表現できるためであることが分かるであろう。

このことを明確にするために、ある特定の時間 t を選び、式 (12) の領域 R を t に対して未来の部分と過去の部分に分割することを考えよう (図 1 を参照)。 R は次のように分割できると考える：(a) 空間的には何らかの方法で制限されるが、 $t' < t$ となる時刻 t' よりも時間が完全に早い領域 R' ；(b) 空間的には任意に制限されるが、 $t'' > t$ となる時刻 t'' よりも時間が完全に遅い領域 R'' ；(c) t' と t'' の間の領域であって、 x 座標のすべての値が制限されていない領域、すなわち t' と t'' の間のすべての時空領域。領域 (c) は絶対に必要という訳ではない。それは必要に応じて時間的に狭くとることが出来る。しかし、 R' と R'' を再定義することなく、 t を少し変化させて考えることができるのは便利である。このとき $|\varphi(R', R'')|^2$ は経路が R' と R'' を占める確率である。 R' は R'' よりも完全に以前の領域なので、時刻 t を現在と考えると、 $|\varphi(R', R'')|^2$ は「領域 R' にあった経路が、その後に領域 R'' に存在する確率である」と表現できる。確率を再正規化するために係数、即ち経路が R' に存在する確率、で割り算すると次とな

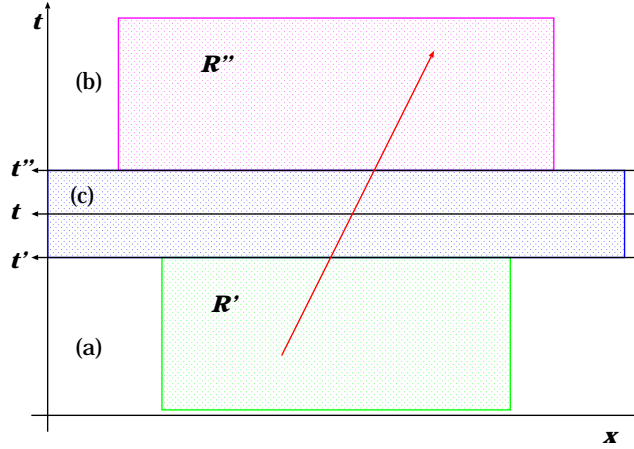


図 1

ることが分かる：「値 $|\varphi(R', R'')|^2$ は、領域 R' にあった系が、その後に領域 R'' で発見される (相対的な) 確率である」。

これはもちろん、多くの実験結果を予測する上で重要な量である。我々は、ある方法で系 (例えば、それは領域 R' にあった系) を準備し、それから他の特性 (例えば、系は領域 R'' に見つかるか) を測定する。式 (12) はこの量を計算することについて、もっと正確に言えば、それが量 $\varphi(R', R'')$ の 2 乗であることについて、何を提示するであろうか？

式 (12) に於いて、時間 t は、時間を目盛り ε に細分化したときのある特定の点 k に対応している、すなわち $t = t_k$ と仮定しよう。ただし、インデックス k はもちろん細分化 ε に依存している。そして指数関数はその指数部が和の形をした指数関数であり、従ってそれは 2 つの因子の積に分割することが出来る：

$$\exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{i=k}^{\infty} S(x_{i+1}, x_i) \right] \cdot \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{i=-\infty}^{k-1} S(x_{i+1}, x_i) \right] \quad (13)$$

第 1 の因子には添字 k 以上の座標のみが含まれ、第 2 の因子には添字 k 未満の座標のみが含まれる。このような分割が可能なのは式 (10) の結果であり、本質的にはラグランジアンが位置と速度のみの関数であることに起因している。まず、第 1 因子に於いて、 $i > k$ のすべての変数 x_i の積分が実行可能である。その結果は x_k の関数 (に第 2 因子を掛け合わせたもの) となる。次に、 $i < k$ の全ての変数 x_i の積分が第 2 因子でも実行され、その結果 x_k の関数が得られる。最後に x_k 積分を行うことが出来る。すなわち、 $\varphi(R', R'')$ は 2 つの因子の積を x_k について積

分したものと書くことが出来る。これらを $\chi^*(x_k, t)$ と $\psi(x_k, t)$ と呼ぶことにする：

$$\varphi(R', R'') = \int \chi^*(x, t) \psi(x, t) dx, \quad (14)$$

ただし

$$\psi(x_k, t) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{R'} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{i=-\infty}^{k-1} S(x_{i+1}, x_i) \right] \frac{dx_{k-1}}{A} \frac{dx_{k-2}}{A} \cdots, \quad (15)$$

そして

$$\chi^*(x_k, t) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{R''} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{i=k}^{\infty} S(x_{i+1}, x_i) \right] \frac{1}{A} \frac{dx_{k+1}}{A} \frac{dx_{k+2}}{A} \cdots, \quad (16)$$

ψ の積分に付いている記号 R' は、座標積分を領域 R' で行なうことを表している。そして t' と t 間の時間 t_i に於ける座標積分は全空間にわたって行なう。同様に、 χ^* の積分は領域 R'' で行ない、時間 t と t'' 間の座標積分は全空間にわたって行なう。 χ^* のアスタリスク記号は、それが複素共役であること表している。というのは、「式 (16) は、ある量 χ の複素共役として定義する方が便利であること」が分かるからである。

量 ψ は t 以前の領域 R' だけに依存し、その領域が既知であれば完全に定義される。また、時間 t の後で系に何が行われるかには一切依存しない。この後者の情報は χ に含まれている。従って、 ψ と χ により、系が未来に経験する事柄を過去の歴史から分離した訳である。これにより、過去と未来の関係を通常の方法で語る事が可能である。従って、ある粒子が時空中のある領域 R' にいたとすると、時間 t でその粒子は「ある条件」または「ある状態」に存在すると言える。その状態は過去によってのみ決定され、いわゆる波動関数 $\psi(x, t)$ によって記述される。この関数には、未来の確率を予測するのに必要なものがすべて含まれている。例えば、別の状況では領域 R' が異なっていて、例えば r' であったとする。また、おそらく t 以前の時間のラグランジアンも変更されたとしよう。しかし、それでも式 (15) の量が同じになったとしよう。このとき、系が終状態で任意の領域 R'' に存在している確率は、式 (14) により R' の場合も r' の場合も同じはずである。従って将来の測定に於いては、系が過去に「 R' を占めていたか」または「 r' を占めていたのか」を識別することはないであろう。従って、波動関数 $\psi(x, t)$ は、過去の歴史を除外し将来の挙動を決定する属性を定義するのに十分なものである。

同様に、関数 $\chi(x, t)$ は、系が受けようとしている経験、つまりそれを我々は「実験」と呼んでいる、を特徴付けるものである。仮に領域が異なる領域 r'' であり、時間 t の後のラグランジアンも異なっていたとしても、式 (16) が与える $\chi^*(x, t)$ が領域 R'' の場合と同じであるならば、以前の設定 ψ がどうであっても、式 (14) は R'' で系を発見する確率と r'' で系を発見する確率

が常に同じであることを示している。 R'' と r'' の2つの「実験」は、同じ結果が得られるので等価である。大雑把に言えば、これらの実験は「系がどのような確率で状態 χ に存在するかを決定するものである」。実は、この言い方はよくない。系は実際には状態 ψ にあるからである。状態と実験を結び付けることができる根拠は、「理想的な実験では、実験が確実に成功する状態は、結局は一つだけ存在する（その波動関数は $\chi(x, t)$ である）ことになる」からである。

従って、次のように言うことが出来る。状態 ψ にあった系が、特性状態が χ である実験によって発見される確率は次である：

$$\left| \int \chi^*(x, t) \psi(x, t) dx \right|^2. \quad (17)$$

これらの結果は、勿論だが通常の量子力学の原理と一致する。それは、ラグランジアンが位置、速度、時間のみの関数であるという事実の帰結である。

6 波動関数

通常の定式化と等価であることを証明するには、前節の式 (15) によって定義された波動関数が、実際にシュレーディンガー波動方程式を満たすことを示さなければならない。それが成功するのは、実は、式 (11) のラグランジアン L が「速度 $\dot{x}(t)$ の2次式だがおそらくは非斉次な形の式」である場合にのみである。しかし、これは制限とはならない。なぜなら、シュレーディンガー方程式が実験で検証されるのは全てその場合だからである。

波動方程式は、波動関数の時間変化を記述するものである。 ε が有限の場合、式 (15) は単純な再帰的關係を構築することが出来ることに注目すれば、それにアプローチすることが可能ではないかと考える。時刻 t の次の瞬間（時刻 t_{k+1} ）に於ける ψ を計算するとしたら、式 (15) はどうなるかを考えてみよう：

$$\psi(x_{k+1}, t + \varepsilon) = \int_{R'} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{i=-\infty}^k S(x_{i+1}, x_i) \right] \frac{dx_k}{A} \frac{dx_{k-1}}{A} \dots \quad (15')$$

この式は式 (15) と似ている。しかし、追加された変数 x_k についての積分が付加し、指数関数の指数部の和に余分な項が付加することだけが違っている。これは、式 (15') の積分が因子 $(1/A) \exp(i/\hbar) S(x_{k+1}, x_k)$ 以外は式 (15) の積分と同じであることを意味している。この付加部分には i が k より小さい場合の変数 x_i が含まれていないので、 dx_{k-1} までの dx 積分はこの因子を除いて実行できる。しかし、これらの積分結果は式 (15) から単に $\psi(x_k, t)$ となる*1。

*1 [訳注] 式 (15') の $\psi(x_{k+1}, t + \varepsilon)$ は、付加部分を分離してから式 (15) を利用することで、次のように書けるか

従って、式 (15') から次の関係が得られる：

$$\psi(x_{k+1}, t + \varepsilon) = \int \exp \left[\frac{i}{\hbar} S(x_{k+1}, x_k) \right] \psi(x_k, t) \frac{dx_k}{A} \quad (18)$$

ψ の時間変化を与えるこの関係は A を適切に選択した簡単な例では、シュレーディンガー方程式と等価であることが示される。しかし、実は式 (18) は厳密なものではなく、 $\varepsilon \rightarrow 0$ の極限でのみ成り立つものである。そこで式 (18) は ε の 1 次まで有効であると仮定して、シュレーディンガー方程式を導出する*2。式 (18) は、小さな ε に対して ε の 1 次まで**成立しさえすればよい**。なぜなら、式 (15) の因子たちを有限の時間間隔 T で考えると、因子の数は T/ε になるからである。そして各々で ε^2 オーダーの誤差が生じたとしても、結果として生じる誤差は $\varepsilon^2(T/\varepsilon)$ 即ち $T\varepsilon$ のオーダーを超えて蓄積されることはなく、これは $\varepsilon \rightarrow 0$ の極限でゼロとなるからである。

ここでは、式 (18) とシュレーディンガー方程式との関係を、電位 $V(x)$ の中を 1 次元で動く粒子という簡単な場合に適用して説明する。しかし、その前に、式 (11) で与えられた値 $S(x_{i+1}, x_i)$ を少し近似することについて説明したい。それは式 (18) に対しては十分な近似である。

式 (11) で定義された $S(x_{i+1}, x_i)$ を、古典力学を用いて任意の ε で正確に計算するのは難しいことである。しかし、実は $S(x_{i+1}, x_i)$ の近似式が必要なのは式 (18) で使用するときだけであり、近似の誤差は ε の 1 次よりも小さいオーダーであることが条件となる。ここでは、ラグランジアンが速度 $\dot{x}(t)$ の 2 次式だがおそらく非同次である場合に限定する。後述するように、重要な経路は $x_{i+1} - x_i$ が $\varepsilon^{1/2}$ のオーダーになる経路である。そのような状況下では、式 (11) の積分は**自由粒子**の古典的経路で計算すれば十分である*11。**直交座標**では*12、自由粒子の経路は直線であるため、式 (11) の積分は直線に沿って取ることが出来る。そのような状況下で

らである：

$$\begin{aligned} \psi(x_{k+1}, t + \varepsilon) &= \int \exp \left[\frac{i}{\hbar} S(x_{k+1}, x_k) \right] \frac{dx_k}{A} \int \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{i=-\infty}^{k-1} S(x_{i+1}, x_i) \right] \frac{dx_{k-1}}{A} \frac{dx_{k-2}}{A} \dots \\ &= \int \frac{dx_k}{A} \exp \left[\frac{i}{\hbar} S(x_{k+1}, x_k) \right] \psi(x_k, t) \end{aligned}$$

*2 [訳注] ここから式 (30) までの議論の内容は、Feynman & Hibbs の § 4.1 により詳しく述べられている。

*11 力はスカラーポテンシャルおよびベクトルポテンシャルを介して入り、それらに速度の 2 乗の項は含まれていないと仮定する。より一般的に、「自由粒子」が意味するのは、そのラグランジアンに於いて速度に線形な項や速度に依存しない項を省略する変更を施したものである。

*12 より一般的には、ラグランジアン $L(\dot{x}, x)$ 中の速度の 2 次項の係数が定数となるような座標系の場合である。

は、積分を台形公式 (trapezoidal rule) *3に置き換えても十分に正確である：

$$S(x_{i+1}, x_i) = \frac{\varepsilon}{2} L\left(\frac{x_{i+1} - x_i}{\varepsilon}, x_{i+1}\right) + \frac{\varepsilon}{2} L\left(\frac{x_{i+1} - x_i}{\varepsilon}, x_i\right) \quad (19)$$

または、より便利であることが分かるならば、

$$S(x_{i+1}, x_i) = \varepsilon L\left(\frac{x_{i+1} - x_i}{\varepsilon}, \frac{x_{i+1} + x_i}{2}\right) \quad (20)$$

これらの式は、一般的な座標系、例えば球座標系では正しくない。さらに、ベクトルポテンシャルや速度に比例する項がない場合には、もっと単純な近似を用いることが出来る (式 (30) 以降の記述を参照のこと)：

$$S(x_{i+1}, x_i) = \varepsilon L\left(\frac{x_{i+1} - x_i}{\varepsilon}, x_{i+1}\right) \quad (21)$$

従って、質量 m の粒子がポテンシャル $V(x)$ の下で1次元の運動をしているという単純な例では、次のように設定することが出来る：

$$S(x_{i+1}, x_i) = \frac{m\varepsilon}{2} \left(\frac{x_{i+1} - x_i}{\varepsilon}\right)^2 - \varepsilon V(x_{i+1}). \quad (22)$$

この例の場合では、式 (18) は次となる：

$$\psi(x_{k+1}, t + \varepsilon) = \int \exp\left[\frac{i\varepsilon}{\hbar} \left\{ \frac{m}{2} \left(\frac{x_{k+1} - x_k}{\varepsilon}\right)^2 - V(x_{k+1}) \right\}\right] \psi(x_k, t) \frac{dx_k}{A} \quad (23)$$

$x_{k+1} = x$ そして $x_{k+1} - x_k = \xi$ と呼ぼう。すると $x_k = x - \xi$ である。すると式 (23) は次となる：

$$\psi(x, t + \varepsilon) = \int \exp\left(\frac{im\xi^2}{\varepsilon \cdot 2\hbar}\right) \cdot \exp\left(\frac{-i\varepsilon V(x)}{\hbar}\right) \cdot \psi(x - \xi, t) \frac{d\xi}{A}. \quad (24)$$

*3 [訳注] 区間 $[a, b]$ を n 等分して $x_0 = a, x_j = x_{j-1} + (b-a)/n$ とするとき、積分は次式で近似される：

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{b-a}{n} \left[\frac{1}{2} \{f(a) + f(b)\} + \sum_{j=1}^{n-1} f(x_j) \right]$$

この場合には $a = t_i, b = t_{i+1}, n = 1, (b-a)/n = t_{i+1} - t_i = \varepsilon$ であるから、

$$\begin{aligned} S(x_{i+1}, x_i) &= \int_{t_i}^{t_{i+1}} L(\dot{x}, x) dt \approx \varepsilon \frac{1}{2} \{L(\dot{x}_i, x_i) + L(\dot{x}_{i+1}, x_{i+1})\} \\ &= \frac{\varepsilon}{2} \left\{ L\left(\frac{x_{i+1} - x_i}{\varepsilon}, x_i\right) + L\left(\frac{x_{i+1} - x_i}{\varepsilon}, x_{i+1}\right) \right\} \end{aligned}$$

大きな x のとき $\psi(x, t)$ が十分に減少するならば ($\int \psi^*(x)\psi(x)dx = 1$ であれば確実にそうなる), ξ の積分は収束する. ξ の積分では ε が非常に小さいので $im\xi^2/2\hbar\varepsilon$ の指数は $\xi = 0$ 付近の領域を除いて, 非常に速く振動する ($|im\xi^2/2\hbar\varepsilon| \sim 1$ とすると $\xi^2 \sim 2\hbar\varepsilon/m$ なので, ξ のオーダーは $(\hbar\varepsilon/m)^{1/2}$ である). 関数 $\psi(x - \xi, t)$ は ξ の比較的滑らかな関数である (ε は必要に応じて小さく取ることができる) ので, 指数が急速に振動する領域では正と負の寄与がほぼ完全に打ち消されるためにほとんど寄与しない. 小さな ξ だけが有効なので, $\psi(x - \xi, t)$ はテイラー級数として展開できる. 従って,

$$\begin{aligned} \psi(x, t + \varepsilon) &= \exp\left(\frac{-i\varepsilon V(x)}{\hbar}\right) \\ &\times \int \exp\left(\frac{im\xi^2}{2\hbar\varepsilon}\right) \left[\psi(x, t) - \xi \frac{\partial\psi(x, t)}{\partial x} + \frac{\xi^2}{2} \frac{\partial^2\psi(x, t)}{\partial x^2} - \dots \right] \frac{d\xi}{A}. \end{aligned} \quad (25)$$

ここで,

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(\frac{im\xi^2}{2\hbar\varepsilon}\right) d\xi &= \sqrt{\frac{i2\pi\hbar\varepsilon}{m}}, \\ \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(\frac{im\xi^2}{2\hbar\varepsilon}\right) \xi d\xi &= 0, \\ \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(\frac{im\xi^2}{2\hbar\varepsilon}\right) \xi^2 d\xi &= \frac{i\hbar\varepsilon}{m} \sqrt{\frac{i2\pi\hbar\varepsilon}{m}}, \end{aligned} \quad (26)$$

他方, ε^3 を含む積分は ε を持つ積分と同様に奇数の積分値を持つのでゼロであり, ε^4 を含む積分は, 上式で保持している積分よりも少なくとも ε のオーダーだけ小さい*13. 左辺を ε の一次まで展開すると, 式 (25) は次のようになる:

$$\begin{aligned} \psi(x, t) + \varepsilon \frac{\partial\psi(x, t)}{\partial t} &= \exp\left(\frac{-i\varepsilon V(x)}{\hbar}\right) \frac{(2\pi i\hbar\varepsilon/m)^{1/2}}{A} \\ &\times \left[\psi(x, t) + \frac{i\hbar\varepsilon}{m} \frac{\partial^2\psi(x, t)}{\partial x^2} + \dots \right] \end{aligned} \quad (27)$$

両辺が ε のゼロ次のオーダーとなるためには, A は次としなければならない:

$$A = \sqrt{\frac{2i\pi\hbar\varepsilon}{m}} \quad (28)$$

*13 実際には, これらの積分は振動的であり定義出来ないのであるが, しかし, 収束係数を使用することで定義することが可能である. そのような因子は, 式 (24) の $\psi(x - \xi, t)$ によって自動的に付与される. より正式な手順が必要な場合は, 例えば δ を $\hbar(1 - i\delta)$ に置き換える. ただし δ は小さな正数とし, そして $\delta \rightarrow 0$ とする.

それから $V(x)$ を含んだ指数関数を展開する。すると次となる：

$$\psi(x, t) + \varepsilon \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar} V(x)\right) \times \left(\psi(x, t) + \frac{i\hbar\varepsilon}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}\right). \quad (29)$$

両辺から $\psi(x, t)$ を消去し、 ε の 1 次の項を比較し、そして $-\hbar/i$ を掛け合わせると次を得る：

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}\right)^2 \psi + V(x)\psi, \quad (30)$$

これが、今考えている問題に対するシュレディンガー方程式である。

χ^* に対する方程式も同じ議論展開で求められるが、今度は因子を付加すると時間が一段階**減少する**。つまり、 χ^* は式 (30) のような式を満たすが、時間の符号が逆になる。複素共役を取ることにより、 χ は ψ と同じ方程式を満たすと結論づけることが出来る。つまり、ある実験はそれに対応する特定の状態 χ によって定義され得る^{*14}。

この例では、 $\psi(x_{k+1}, t + \varepsilon)$ への寄与のほとんどが $\psi(x_k, t)$ の x_k 、それは x_{k+1} に非常に近い (互いの距離はオーダー ε^2 に過ぎない)、の値によるものであり、従って、極限を取ると積分方程式 (23) は微分方程式に置き換えられることを示している。「速度」 $(x_{k+1} - x_k)/\varepsilon$ は、重要な因子であるが、これは非常に大きくてオーダーは $(\hbar/m\varepsilon)^{1/2}$ であるので、 $\varepsilon \rightarrow 0$ の極限で発散してしまう。従って、関係する経路は連続的ではあるが微分を持たない。これはブラウン運動の研究でよく知られているタイプのものである。

式 (11) から $S(x_{k+1}, x_k)$ を近似する際に注意が必要なのは、このような大きな速度である^{*15}。 $V(x_{k+1})$ を $V(x_k)$ で置き換えると、当然ながら式 (18) の指数部分は $i\varepsilon[V(x_k) - V(x_{k+1})]/\hbar$ だけ変化する。これは $\varepsilon(x_{k+1} - x_k)$ のオーダーである。従って、式 (29) の右辺には ε よりも高次で重要でない項が生じる。このような理由から、ベクトルポテンシャルが存在しない場合、式 (20) と式 (21) は $S(x_{i+1}, x_i)$ に対して同様に満足のいく近似となる。しかし、ベクトルポテンシャルから発生する、例えば $A \dot{x} dt$ のような速度に線形な項は、より慎重に取

^{*14} Dr. Hartland Snyder は、プライベートな会話の中で、実験によって測定された状態を準備することが出来ない量子力学の一般化が存在するかもしれないという、非常に興味深い可能性を指摘した。即ち、ある特定の試験で結果が確実に得られるような場合に相当する状態が存在しない可能性がある。関数 χ の集合は、利用可能な状態 ψ の集合と同一ではない。このようなことは、例えば、 χ が ψ と異なる方程式を満たす場合に生じる。

^{*15} 式 (11) に対して、ポテンシャルが 2 次よりも高次の x 項を含んでいない場合 (自由粒子、調和振動子など) で ε が任意である場合の $S(x_{i+1}, x_i)$ を用いると、実際には式 (18) は厳密な式となる。しかし、 A にはより正確な値を使用する必要がある。 A は次のように定義することが出来る。 k 個の自由度を持つ古典的な粒子が、運動量空間中では一様な密度を持った状態で点 x_i, t_i から出発すると仮定する。ある運動量成分が範囲 dp に持つ粒子の数を dp/p_0 と書く。ただし p_0 は一定とする。このとき、 $A = (2\pi\hbar i/p_0)^{k/2} \rho^{1/2}$ となる。ただし ρ は、 k 次元座標空間中で、粒子たちの時間 t_i での位置 x_{i+1} に於ける密度である。

り扱わなければならない。その場合、 $S(x_{k+1}, x_k)$ 中の項、例えば項 $A(x_{k+1})(x_{k+1} - x_k)$ は項 $A(x_k)(x_{k+1} - x_k)$ とオーダー $(x_{k+1} - x_k)^2$ の項だけ、従ってオーダー ε だけ違っている。このような項があると、結果的に波動方程式が変わってしまう。このため近似式 (21) は、式 (11) の十分に正確な近似式ではない。従って、式 (20) のような近似式 (または式 (20) と ε よりも高次の項だけ違う式 (19) のような近似式) を使用しなければならない。A がベクトルポテンシャルを表わし $\mathbf{p} = (\hbar/i)\nabla$ が運動量演算子であるとすると、式 (20) はハミルトニアン演算子中に

$$\frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \cdot \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)$$

という項を与え、式 (21) は

$$\frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} \cdot \mathbf{p} - \frac{2e}{c} \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} + \frac{e^2}{c^2} \mathbf{A} \cdot \mathbf{A} \right)$$

を与える。これらの2式は $(\hbar e/2imc)\nabla \cdot \mathbf{A}$ だけ異なっており、これはゼロでない可能性がある。この問題は、速度が2次になる項の係数に於いて更に重要となる。それらの項については、一般的に式 (19) と式 (20) は、式 (11) を十分正確に表わすことが出来ない。式 (19) や式 (20) を式 (11) の代わりとすることが出来るのは、係数が一定の場合である。もし式 (19) のような表式が、式 (11) の有効な近似式ではない場合、例えば球座標の場合に用いられると、ハミルトニアン演算子の一部の運動量演算子と座標の順序が間違ったシュレーディンガー方程式が得られる。従って、式 (11) は「古典的ハミルトニアン $H(p, q)$ 中の p 及び q を、非可換量である2つの演算子 $(\hbar/i)(\partial/\partial q)$ と q で置き換える」という通常の規則に於ける曖昧さを解消するものである。

表式 (11) が座標系に依存しないことは明らかである。従って、任意の座標系に於いて式 (11) が与える波動方程式 (微分方程式) を求めるには、まず直交座標で方程式を求め、次に座標系を所望のものに変換するのが最も簡単な手順である。従って、公準とシュレーディンガー方程式の関係は、直交座標に於いて示せば十分である。

ここで示した1次元での導出は、3次元デカルト座標系で任意の個数 K 個の粒子たちがポテンシャルを介して相互作用し、そしてそれらがベクトルポテンシャルで記述される磁場中にある場合の導出に直接拡張することが出来る。ベクトルポテンシャルの項は、ガウス積分の場合に通常行われている指数部の完全平方を実行する必要がある。変数 x は $x^{(1)}$ から $x^{(3K)}$ までの組に入れ替える必要がある。ただし $x^{(1)}, x^{(2)}, x^{(3)}$ は質量 m_1 を持った1番目の粒子の座標であり、 $x^{(4)}, x^{(5)}, x^{(6)}$ は質量 m_2 を持った2番目の粒子の座標などなどである。記号 dx は $dx^{(1)} dx^{(2)} \dots dx^{(3K)}$ に置き換えられ、 dx 積分は $3K$ 重の積分 ($3K$ -fold integral) に置き換

えられる。定数 A は、この場合、 $A = (2\pi\hbar i/m_1)^{1/2}(2\pi\hbar i/m_2)^{1/2}\dots(2\pi\hbar i/m_K)^{1/2}$ という値を持つ。ラグランジアンは同じ問題の古典的ラグランジアンであり、結果として得られるシュレーディンガー方程式は、その古典的ラグランジアンから導かれる古典的ハミルトニアンに相当する式となる。他の座標系での方程式は、変換によって得ることが出来る。これにはシュレーディンガー方程式が実験で検証された全ての場合が含まれている。従って、スピンを無視すれば、我々の公準 (postulate) が記述できるのは、非相対論的な量子力学が記述できる現象である。

7 波動方程式の議論 – 古典的な極限

この節で、新旧2つの定式化が同等であることの証明を完結する。ここでは、重要な式 (18) について少し触れておきたい。

この式 (18) が示しているのは、小さな時間間隔での波動関数の展開である。物理的には、これは物質波に対するホイヘンスの原理を表わしていると解釈してよい。幾何光学では、不均質な媒質中の光線はフェルマーの最小時間の原理を満たす。波動光学におけるホイヘンスの原理は次のように述べる事が出来る。ある表面で波の振幅が分かっている場合、その表面近傍の点での振幅は、表面上の全点からの寄与の合計と考えることが出来る。各々の寄与の位相は、表面から光が幾何光学の最小**時間**の光線に沿った点へ到達するのにかかる**時間**に比例した量だけ遅れる。式 (22) は、最初にハミルトンの最小作用を第一原理とする古典力学または「幾何学的」力学に類似した方法で考えることが出来る。波の振幅 ψ が、与えられた「表面」、特に時間 t に於ける全ての x から成る「表面」で既知である場合、時間 $t + \varepsilon$ に於ける特定な近傍の点での ψ 値は、 t における表面の全点からの寄与の合計である。各々の寄与は、作用が古典力学の最小**作用**の経路に沿って表面からその近傍の点に到達することを要求するが、各々の寄与の位相は、その**作用**に比例した量だけ遅れる*¹⁶。

Each contribution is delayed in phase by an amount proportional to the action it would require to get from surface to the point along the path of least action of classical mechanics. (= Each contribution is delayed in phase by an amount proportional to the action and each contribution would require the action to get from surface to the point along the path of least action of classical mechanics.!?)

実は、光学ではホイヘンスの原理は正しくない。ホイヘンスの原理は、キルヒホッフの修正に取って代わられ、「振幅とその微分の両方が隣接する表面上で知られていなければならない」と

*¹⁶ これに関連したシュレーディンガーの大変面白い寸評があるので参照のこと：Ann. d. Physik **79**, 489 (1926).

される。これは、光学の波動方程式が時間について2次である結果である。量子力学の波動方程式は、時間について1次であるので物質波に対してホイヘンスの原理は正しい。ただし、時間は作用に置き換わる。

この方程式は、通常の(量子力学の)公式化に現れる量と数学的に比較することも出来る。シュレーディンガーの方法では、波動関数の時間発展は次式のように与えられる：

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \mathbf{H} \psi, \quad (31)$$

この方程式の解は、(\mathbf{H} が時間に依存しないならば) 任意の ε に対して次となる：

$$\psi(x, t + \varepsilon) = \exp\left(-\frac{i\varepsilon \mathbf{H}}{\hbar}\right) \psi(x, t) \quad (32)$$

従って、式(18)は ε が小さい場合に演算子 $\exp(-i\varepsilon H/\hbar)$ を積分演算子で近似した表現になっている：

$$\psi(x, t + \varepsilon) = \exp\left(-\frac{i\varepsilon \mathbf{H}}{\hbar}\right) \psi(x, t) \Leftrightarrow \psi(x, t + \varepsilon) = \int \frac{dx}{A} \exp\left[\frac{i}{\hbar} S(x + \xi, x)\right] \psi(x, t)$$

ハイゼンベルグ表示での見方では、例えば時刻 t での位置は演算子 \mathbf{x} と考える。後の時刻 $t + \varepsilon$ での位置 \mathbf{x}' は、時刻 t での位置を演算子で表した式を用いて、次のように表現できる：

$$\mathbf{x}' = \exp\left(\frac{i\varepsilon \mathbf{H}}{\hbar}\right) \mathbf{x} \exp\left(-\frac{i\varepsilon \mathbf{H}}{\hbar}\right). \quad (33)$$

ディラックの変換理論により、時間 $t + \varepsilon$ における波動関数 $\psi(\mathbf{x}', t + \varepsilon)$ は \mathbf{x}' が対角的となる表現の状態を表わしていると考えられ、他方、 $\psi(x, t)$ は同じ状態を \mathbf{x} が対角的となる表現で表していると考えられる。従って、それらは変換関数 $(x'|x)_\varepsilon$ を通して関連しており、それらの表現は次式によって結び付いている：

$$\psi(\mathbf{x}', t + \varepsilon) = \int (x'|x)_\varepsilon \psi(x, t) dx$$

従って、式(18)の内容は、小さな ε に対して次式とすることが出来ることを示している：

$$(x'|x)_\varepsilon = \frac{1}{A} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S(x', x)\right) \quad (34)$$

ただし、 $S(x', x)$ は式(11)の中で定義されているものとする。

$(x'|x)_\varepsilon$ と量 $\exp(iS(x',x)/\hbar)$ の間に密接な類似性があることは Dirac によって何度か指摘されて来た*¹. 実際, 今や, 十分な近似を行えばこれら 2 つの量は互いに比例していると思ふことができることが分かっている. この Dirac の指摘が, この議論展開の出発点であった. 古典的な極限 $\hbar \rightarrow 0$ への移行に関する彼の指摘は非常に美しいものであり, 従って, ここでその内容を簡単にご紹介しておく.

まず, 時刻 t'' に於ける x'' での波動関数は, 時刻 t' に於ける x' での波動関数から次のようにして得られることに注意する:

$$\psi(x'', t'') = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int \cdots \int \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{i=0}^{j-1} S(x_{i+1}, x_i) \right] \psi(x', t') \frac{dx_0}{A} \frac{dx_1}{A} \cdots \frac{dx_{j-1}}{A}, \quad (35)$$

ただし $x_0 \equiv x'$ 及び $x_j \equiv x''$ とし, $\varepsilon_j = t'' - t'$ とする (t' と t'' の間では積分領域に制限はないとする). 上式は, 式 (18) を繰り返し適用するか, または式 (15) から直接求めることができる. さて次は $\hbar \rightarrow 0$ のとき, 中間の座標 x_i のどの値が積分に最も強く寄与するかを問うて見よう. それらの値は, 実験で見出す可能性が最も高い値であり, 従ってそれらは, 極限に於いて古典的な経路を決定することになる. \hbar が非常に小さい場合, 指数部はその変数 x_i に対して非常に急速に変化する関数となる. そして x_i が変化すると, 指数部の正負の寄与はほぼ相殺される. x_i が最も強く寄与する領域は, 指数部の位相が x_i に対して最も急速変化しない領域である (停留位相法). 指数部の和を S と呼ぶ:

$$S = \sum_{i=0}^{j-1} S(x_{i+1}, x_i) \quad (36)$$

そうすると, 古典的な軌道は, おおよそ S の x_i に対する変化率が小さい点 x_i , あるいは \hbar が小さい極限ではゼロ, すなわち, 全ての x_i に対して $\partial S / \partial x_i = 0$ となる点を通過することになる. 極限 $\varepsilon \rightarrow 0$ をとると, 式 (36) は式 (11) を考慮して次のようになる:

$$S = \int_{t'}^{t''} L(\dot{x}(t), x(t)) dt. \quad (37)$$

従って, 古典的な経路とは「経路を変化させても積分値 (37) が一次的に変化しない経路」であることが分かる. これがハミルトンの原理であり, ラグランジュの運動方程式に直結することになる.

*¹ 脚注 1 に同じ. [訳注] 元論文では section 33 と記されているが, Dirac の本 (第 4 版) を見ると, 同様な内容が書かれているのは § 32 のようである.

8 演算子の代数 – 行列要素

波動関数とシュレーディンガー方程式が与えられれば、当然ながら演算子や行列代数のすべての機構を展開することが出来る。しかし、これらの概念をやや異なる言語で、すなわち公準を述べるときに使われたものに近いもので表現することはかなり興味深いことである。演算子代数を解明する上で、それによって得られるものはほとんどない。(Little will be gained by this in elucidating operator algebra.) 実際、それによる結果は単純な演算子の方程式をやや煩雑な記法に変換するだけである。他方、この新しい表記法と視点は、序論で述べたある種の応用に於いて非常に有用である。更に、この方程式の形式は、通常考えられているよりも広い演算子のクラス(例えば、2つ以上の異なる時間を参照する量を含むもの)への自然な拡張を可能にする。作用関数のより広い類(class)への一般化が可能であるならば、それから得られる式は重要な役割を果たすであろう。

これらの点を次節以降(三つの節)で説明して行く。この節では、主に定義について説明する。ここでは2つの状態間の「遷移要素」と呼ばれる量を定義する。これは本質的には行列要素である。しかし、行列要素では状態 ψ と「同じ時間」の別の状態 χ を考えるが、遷移要素の2つの状態は「異なる時間」に属するものとする(refer to)。次の節では、遷移要素間の基本的な関係が展開され、そこから座標と運動量の間通常の交換則が推論される。同じ関係式からは、ニュートンの運動方程式も行列形式で得られる。最後に、第10節では、時間をずらす操作(the operation of displacement in time)とハミルトニアンとの関係について議論する。

まず、ある状態から別の状態に遷移する確率という観点から、「遷移要素」を定義する。より正確には、式(17)の導出で述べたような状況があるとする。領域 R は、 t' 以前の領域 R' 、 t' から t'' までの全空間、 t'' 以降の領域 R'' から成る。ここでは、領域 R' にある系が、後に領域 R'' で発見される確率を調べる。それは式(17)で与えられる。本節で議論するのは「 t' と t'' の間でラグランジアンが変わるとどのように変化するか」である。第10節では、準備(標本 preparation) R' の変化や実験 R'' の変化によって、その確率がどのように変化するかを議論する。

時刻 t' での状態は、準備 R' によって完全に定義される。それは式(15)のようにして得られる波動関数 $\psi(x', t')$ によって指定されるが、時間 t' までの積分のみを含む。同様に、実験の状態の特徴(領域 R'')は、式(16)から得られる関数 $\chi(x'', t'')$ に t'' 以降の積分のみを加えたもので定義できる。時刻 t'' における波動関数 $\psi(x'', t'')$ も、もちろん、式(15)を適切に用いることで得ることが出来る。また、式(35)によって $\psi(x', t')$ からも得ることが出来る。 t の代わりに

t'' を使用した式 (17) によると, ψ で準備された系が χ の状態で見つかる確率は「遷移振幅」と呼ばれる式: $\int \chi^*(x'', t'') \psi(x'', t'') dx''$ の 2 乗である. これを t'' での χ と t' での ψ で表現したい. それは式 (35) の助けを借りて行うことが出来る. すると, 時刻 t' で状態 $\psi_{t'}$ に準備された系が, 後の時刻 t'' では状態 $\chi_{t''}$ になっていることが判明する確率は, 次式の遷移振幅:

$$\langle \chi_{t''} | 1 | \psi_{t'} \rangle_S = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int \cdots \int \chi^*(x'', t'') \exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right) \psi(x', t') \frac{dx_0}{A} \cdots \frac{dx_{j-1}}{A} dx_j, \quad (38)$$

の 2 乗である. ただし省略形 (36) を用いている.

通常の量子力学での表現では, ハミルトニアン \mathbf{H} が一定の場合,

$$\psi(x, t'') = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(t'' - t')\mathbf{H}\right] \psi(x, t')$$

となり, 式 (38) は状態 $\chi_{t''}$ と状態 $\psi_{t'}$ 間の $\exp[-i(t'' - t')\mathbf{H}/\hbar]$ の行列要素になる.

F を $t' < t_i < t''$ に於ける座標 x_i の任意関数とすると, 作用 S で ($x'' \equiv x_j, x' \equiv x_0$) としたとき, t' に於ける状態 ψ と t'' に於ける状態 χ の間の「遷移要素」 F を次式で定義する:

$$\begin{aligned} \langle \chi_{t''} | F | \psi_{t'} \rangle &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int \cdots \int \chi^*(x'', t'') F(x_0, x_1, \cdots, x_i) \\ &\quad \times \exp\left[\frac{i}{\hbar} \sum_{i=0}^{j-1} S(x_{i+1}, x_i)\right] \psi(x', t') \frac{dx_0}{A} \cdots \frac{dx_{j-1}}{A} dx_j. \end{aligned} \quad (39)$$

極限 $\varepsilon \rightarrow 0$ をとったとき, F は経路 $x(t)$ の汎関数となる.

なぜこのような量が重要なのか, をこれから確かめて行く. ちょっと立ち止まって, その量が従来の表記法では何に相当するのかを知ると, より理解しやすくなるだろう. F が単に x_k であるとしよう. ただし k はある時間 $t = t_k$ に相当している. すると式 (39) の右辺で x_0 から x_{k-1} までの積分を実行すると $\psi(x_k, t)$ つまり $\exp[-i(t - t')\mathbf{H}/\hbar]\psi_{t'}$ が得られる. 同様に, $j \geq i > k$ の x_i 上の積分は $\chi^*(x_k, t)$ つまり $\{\exp[-i(t'' - t)\mathbf{H}/\hbar]\chi_{t''}\}^*$ を与える. 従って x_k の遷移要素は,

$$\begin{aligned} \langle \chi_{t''} | F | \psi_{t'} \rangle_S &= \int \chi^* e^{i\mathbf{H}(t''-t)/\hbar} x e^{-i\mathbf{H}(t-t')/\hbar} \psi_{t'} dx \\ &= \int \chi^*(x, t) x \psi(x, t) dx \end{aligned} \quad (40)$$

であり, これは時刻 t' で $\psi_{t'}$ の状態から発展した時刻 t での状態と, 時刻 t'' で $\chi_{t''}$ の状態から発展した時刻 t での状態との間の, 時刻 $t = t_k$ に於ける x の行列要素である. 従って, これは

それらの状態間の $\mathbf{x}(t)$ の行列要素である*4.

同様にして, $F = x_{k+1}$ とした式 (39) によれば, x_{k+1} の遷移要素は $\mathbf{x}(t + \varepsilon)$ の行列要素となる. $F = (x_{k+1} - x_k)/\varepsilon$ の遷移要素は, 式 (40) から容易に示されるように, $(\mathbf{x}(t + \varepsilon) - \mathbf{x}(t))/\varepsilon$ または $i(\mathbf{H}\mathbf{x} - \mathbf{x}\mathbf{H})/\hbar$ の行列要素である. これは「速度 $\dot{\mathbf{x}}(t)$ の行列要素」と呼ぶことが出来る.

最初の問題とはちがう第 2 の問題, 例えば, ポテンシャルが少量の $U(\mathbf{x}, t)$ によって増強されるなどの問題を考えるとしよう. すると, 新しい問題では S は $S' = S + \sum_i \varepsilon U(x_i, t_i)$ に置き換えられる. 式 (38) に代入すると, すぐに次式が得られる:

$$\begin{aligned} \langle \chi_{t''} | 1 | \psi_{t'} \rangle_{S'} &= \left\langle \chi_{t''} \left| \exp \left(\frac{i}{\hbar} \sum_i \varepsilon U(x_i, t_i) \right) \right| \psi_{t'} \right\rangle_S \\ &= \left\langle \chi_{t''} \left| \exp \left(\frac{i\varepsilon}{\hbar} \sum_{i=1}^j U(x_i, t_i) \right) \right| \psi_{t'} \right\rangle_S \end{aligned} \quad (41)$$

従って F が作用表現の変化 δS から何らかの形で生じる可能性がある限り, 式 (39) のような遷移要素は重要である. オブザーバブル (観測可能量) の汎関数とは, 作用 S の可能な変化によって生じる変化の式で (おそらく間接的に) 定義できる汎関数 F のことを指している (We denote, by observable functionals, those functionals F which can be defined, (possibly indirectly) in terms of the changes which are produced by possible changes in the action S). 汎関数がオブザーバブルであるという条件は, 演算子がエルミートであるという条件と多少似ている. 作用は速度の 2 次関数でなければならないので, オブザーバブルの汎関数は限られた類 (class) である. 一つのオブザーバブルの汎関数から他の汎関数を導き出すことが出来る. 例えば,

$$\langle \chi_{t''} | F | \psi_{t'} \rangle_S = \left\langle \chi_{t''} \left| F \exp \left(\frac{i\varepsilon}{\hbar} \sum_{i=1}^j U(x_i, t_i) \right) \right| \psi_{t'} \right\rangle_S \quad (42)$$

は, 式 (39) より導くことが出来る.

ちなみに, 式 (41) は重要な摂動公式に直結する. U の影響が小さければ, 指数関数は U の 1

*4 [訳注] 原論文の式 (40) の積分因子の符号に印刷ミスがある様なので注意する:

$$\langle \chi_{t''} | F | \psi_{t'} \rangle_S = \int \chi^* e^{-i\mathbf{H}(t''-t)/\hbar} x e^{-i\mathbf{H}(t-t')/\hbar} \psi_{t'} dx$$

次まで展開することが出来て ($e^{iU/\hbar} \approx 1 + iU/\hbar$), 次のようになる:

$$\langle \chi_{t''} | 1 | \psi_{t'} \rangle_{S'} = \langle \chi_{t''} | 1 | \psi_{t'} \rangle_S + \frac{i}{\hbar} \left\langle \chi_{t''} \left| \sum_i \varepsilon U(x_i, t_i) \right| \psi_{t'} \right\rangle_S. \quad (43)$$

特に重要なのは, 外乱 U が存在しないと $\chi_{t''}$ の状態に $\psi_{t'}$ が全く見つからないような場合 (即ち, 上式右辺の第 1 項が $\langle \chi_{t''} | 1 | \psi_{t'} \rangle_S = 0$ の場合) である. その場合,

$$\frac{1}{\hbar^2} \left| \left\langle \chi_{t''} \left| \sum_i \varepsilon U(x_i, t_i) \right| \psi_{t'} \right\rangle_S \right|^2 \quad (44)$$

は, 1 次の摂動展開で導出される遷移確率である. 通常の記法では次となる ($j\varepsilon = t'' - t'$ とし, そして $\sum_i \varepsilon = \int dt$ として):

$$\begin{aligned} \left\langle \chi_{t''} \left| \sum_i \varepsilon U(x_i, t_i) \right| \psi_{t'} \right\rangle_S &= \left\langle \chi_{t''} \left| \int \mathbf{U}_I(t) dt \right| \psi_{t'} \right\rangle_S \\ &= \int \left\{ \int \chi_{t''}^* e^{i\mathbf{H}(t''-t)/\hbar} \mathbf{U} e^{-i\mathbf{H}(t-t'')/\hbar} \psi_{t'} dx \right\} dt \end{aligned}$$

従って, 式 (44) は通常の時間に依存する摂動展開の表現^{*17} に還元される.

9 ニュートンの方程式 – 交換関係

この節では, 異なる汎関数が任意の 2 つの状態間で取られたときに同一の結果を与え得ることを確かめる. 汎関数間のこのような等価性は, 新しい言語 (公式化) における演算子方程式の記述となる.

F が様々な座標に依存する場合, その変数の 1 つ, 例えば $x_k (0 < k < j)$ に関して微分することで, 当然ながら, 新しい汎関数 $\partial F / \partial x_k$ を定義することが出来る. $\langle \chi_{t''} | \partial F / \partial x_k | \psi_{t'} \rangle_S$ を式 (39) で計算するなら, その右辺の積分は $\partial F / \partial x_k$ を含むことになる. 変数 x_k が登場するのは S の中だけである. 従って x_k 積分は部分積分が出来る. 積分項はゼロとなり (波動関数は無限大でゼロとなると仮定する), そして量 $-F \frac{\partial}{\partial x_k} \exp(iS/\hbar)$ を持つ積分が残る. しかし $\frac{\partial}{\partial x_k} \exp(iS/\hbar) = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial x_k} \exp(iS/\hbar)$ であるから, 右辺は $-\frac{i}{\hbar} F \frac{\partial S}{\partial x_k}$ の遷移要素を表して

^{*17} P. A. M. Dirac, The Principles of Quantum Mechanics (The Clarendon Press, Oxford, 1935), second edition, Section 47, Eq. (20). これも第 4 版 (1968) では, § 45 の式 (20) になっているようである.

いることになる。

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial F}{\partial x_k} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[x_k]\right) dx_k = F \exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right) \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} F \exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right) \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial x_k} dx_k$$

即ち,

$$\left\langle \chi_{t''} \left| \frac{\partial F}{\partial x_k} \right| \psi_{t'} \right\rangle_S = -\frac{i}{\hbar} \left\langle \chi_{t''} \left| F \frac{\partial S}{\partial x_k} \right| \psi_{t'} \right\rangle_S \quad (45)$$

この非常に重要な関係は、任意の2つの状態間の遷移要素に対して異なる2つの汎関数が同じ結果を与えることが出来ることを示している。これらは同等であると言い、その関係を次のような記号で表わす：

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial F}{\partial x_k} \overset{S}{\longleftrightarrow} F \frac{\partial S}{\partial x_k} \quad (46)$$

ただし記号 $\overset{S}{\longleftrightarrow}$ は、汎関数は一つの作用の下では等価となるが他の作用の下では等価とはならないことを強調するためのものである。式(46)中の量はオブザーバブルである必要はない。それでも等価性は成り立つ。式(36)を利用すると、次のように書くことが出来る*5：

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial F}{\partial x_k} \overset{S}{\longleftrightarrow} F \left[\frac{\partial S(x_{k+1}, x_k)}{\partial x_k} + \frac{\partial S(x_k, x_{k-1})}{\partial x_k} \right]. \quad (47)$$

この方程式は ε のゼロ次および1次まで正当であり、その結果、運動量と座標の交換関係、および行列形式でのニュートンの運動方程式を得る。

単純な1次元問題の場合、 $S(x_{i+1}, x_i)$ は式(22)で与えられる*6。従って、

$$\begin{aligned} \frac{\partial S(x_{k+1}, x_k)}{\partial x_k} &= \frac{m\varepsilon}{2} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{x_{k+1} - x_k}{\varepsilon} \right)^2 = \frac{m\varepsilon}{2} \cdot 2 \left(\frac{x_{k+1} - x_k}{\varepsilon} \right) \cdot \frac{-1}{\varepsilon} \\ &= -m \frac{x_{k+1} - x_k}{\varepsilon} \end{aligned}$$

そして、

$$\begin{aligned} \frac{\partial S(x_k, x_{k-1})}{\partial x_k} &= \frac{\partial}{\partial x_k} \left\{ \frac{m\varepsilon}{2} \left(\frac{x_k - x_{k-1}}{\varepsilon} \right)^2 - \varepsilon V(x_k) \right\} \\ &= +m \frac{x_k - x_{k-1}}{\varepsilon} - \varepsilon V'(x_k); \end{aligned}$$

*5 [訳注] 式(36)は $S = \sum_{i=0}^{j-1} S(x_{i+1}, x_i) = \dots + S(x_{k+1}, x_k) + S(x_k, x_{k-1}) + \dots$ であるから $\partial S / \partial x_k$ は2つの偏微分項となることに注意する。

*6 [訳注] 原論文では式(15)となっているが、これは明らかに式(22)の間違いと思われるので修正した。

ただし、ポテンシャルの微分、即ち力を $V'(x)$ と書いている。すると式 (47) は次となる：

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial F}{\partial x_k} \xleftrightarrow{S} F \left[-m \left(\frac{x_{k+1} - x_k}{\varepsilon} - \frac{x_k - x_{k-1}}{\varepsilon} \right) - \varepsilon V'(x_k) \right]. \quad (48)$$

F が変数 x_k に依存しない場合は、ニュートンの運動方程式が得られる。例として、 F が定数、例えば 1 とするならば、式 (48) は (ε で割ると) 次のようになる：

$$0 \xleftrightarrow{S} -\frac{m}{\varepsilon} \left(\frac{x_{k+1} - x_k}{\varepsilon} - \frac{x_k - x_{k-1}}{\varepsilon} \right) - V'(x_k).$$

従って、任意の 2 つの状態間での質量×加速度 $[(x_{k+1} - x_k)/\varepsilon - (x_k - x_{k-1})/\varepsilon]/\varepsilon$ の遷移要素は、同じ状態間での力の遷移要素 $-V'(x_k)$ と等しくなる。これは、量子力学で成立するニュートンの法則の行列表現である。

F が x_k に依存する場合はどうなるのであろうか？ 例えば $F = x_k$ とする。すると、このときの式 (48) は、 $\partial F/\partial x_k = 1$ なので次となる：

$$-\frac{\hbar}{i} \xleftrightarrow{S} x_k \left[-m \left(\frac{x_{k+1} - x_k}{\varepsilon} - \frac{x_k - x_{k-1}}{\varepsilon} \right) - \varepsilon V'(x_k) \right]$$

または、($\varepsilon \rightarrow 0$ とするので) オーダー ε の項 $\varepsilon V'(x_k)$ は無視するならば、

$$m \left(\frac{x_{k+1} - x_k}{\varepsilon} \right) x_k - m \left(\frac{x_k - x_{k-1}}{\varepsilon} \right) x_k \xleftrightarrow{S} \frac{\hbar}{i} \quad (49)$$

式 (49) のような式を通常表記法に移すには、 $x_k x_{k+1}$ のような量に相当するのはどんな行列であるかを見つけなければならない。 F を例えば $f(x_k)g(x_{k+1})$ とした場合、式 (40) に相当する演算子が次式のようになることは、式 (39) の検討から明らかである*7：

$$e^{-i(t'' - t - \varepsilon)\mathbf{H}/\hbar} g(\mathbf{x}) e^{-i\varepsilon\mathbf{H}/\hbar} f(\mathbf{x}) e^{-i(t - t')\mathbf{H}/\hbar}.$$

ただし、行列要素は状態 $\chi_{t''}$ と $\psi_{t'}$ の間で取るとする。 x_{k+1} の関数に相当する演算子は、 x_k の関数に相当する演算子の左側に現れる。つまり、「**行列演算子の積の項の順序は、汎関数中の因**

*7 [訳注] $f(x_k)g(x_{k+1})$ の遷移要素は次式のように書けることに注意する：

$$\begin{aligned} \langle \chi_{t''} | g(x_{k+1}) f(x_k) | \psi_{t'} \rangle &= \int \chi^*(x_{k+1}, t) g(x_{k+1}) f(x_k) \psi(x_{k+1}, t) dx_k, \\ \psi(x_{k+1}, t) &= \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (t + \varepsilon - t') H \right] \psi(t'), \quad \chi^*(x_{k+1}, t) = \left\{ \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \{t'' - (t + \varepsilon)\} H \right] \chi_{t''} \right\}^*, \\ \therefore \langle \chi_{t''} | g(x_{k+1}) f(x_k) | \psi_{t'} \rangle &= \int \chi_{t''}^* \exp \left[\frac{i}{\hbar} (t'' - t - \varepsilon) H \right] g(x) f(x) \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (t + \varepsilon - t') H \right] \psi_{t'} dx \end{aligned}$$

子の時間順序に相当する」。従って、各項に於いて後の時間に対応する因子が前の項に対応する因子の左側に現れるように汎関数を書くことが出来、また書かれている場合、演算子の順序を汎関数と同じにしておけば、相当する演算子は直ちに書き下すことが出来る*18。当然のことながら、汎関数内の因子の順序は何の意味もない。順番を決めることで、従来の演算子表記に変換し易くなるだけである。式(49)を翻訳しやすいように書くには、左辺第2項は因子の順番を逆にする必要がある。すると、次式となることが分かる：

$$\mathbf{p}x - x\mathbf{p} = \frac{\hbar}{i}$$

ただし、演算子 $m\dot{x}$ を \mathbf{p} と書いた。

汎関数とそれに対応する演算子の関係は、上述のように時間に於ける因子の順序で定義される。この法則は、速度や高次の微分を含む量の場合には特に注意して守らなければならないことを指摘しておく。演算子 (\dot{x}^2) を表現する正しい汎関数は $[(x_{k+1} - x_k)/\varepsilon]^2$ ではなく、実際には $(x_{k+1} - x_k)/\varepsilon \cdot (x_k - x_{k-1})/\varepsilon$ である。前者の量は $\varepsilon \rightarrow 0$ で $1/\varepsilon$ として発散する。これは、式(49)の第2項を時間的に ε 後の瞬間に計算されたその値 $x_{k+1} \cdot m(x_{k+1} - x_k)/\varepsilon$ で置き換えることで分かることである。この場合、方程式は ε のゼロ次まで変化しない。従って ($-m\varepsilon$ で割ると) 次のようになる：

$$\begin{aligned} m \left(\frac{x_{k+1} - x_k}{\varepsilon} \right) x_k - x_{k+1} m \left(\frac{x_{k+1} - x_k}{\varepsilon} \right) &= m \left(\frac{x_{k+1} - x_k}{\varepsilon} \right) (x_k - x_{k+1}) \xleftrightarrow{S} \frac{\hbar}{i}, \\ \therefore \left(\frac{x_{k+1} - x_k}{\varepsilon} \right)^2 &\xleftrightarrow{S} -\frac{\hbar}{im\varepsilon} \Leftrightarrow \left(\frac{x_{k+1} - x_k}{\varepsilon} \right) \xleftrightarrow{S} \sqrt{\frac{i\hbar}{m\varepsilon}} \end{aligned} \quad (50)$$

これにより、経路の連続する2つの位置の間の「速度」 $(x_{k+1} - x_k)/\varepsilon$ の二乗平均平方根が $\varepsilon^{-1/2}$ のオーダーになるという、前に述べた結果が得られる。

そうすると、運動エネルギーの汎関数を、例えば単純に次のように書いてはいけないことになる：

$$\frac{1}{2} m \left(\frac{x_{k+1} - x_k}{\varepsilon} \right)^2 \quad (51)$$

なぜなら、この量は $\varepsilon \rightarrow 0$ のとき無限大になってしまうからである。実際、それは観測可能な汎関数ではない。

粒子の質量変化による遷移振幅の一次変化を考慮することで、運動エネルギーを観測可能な汎関数として得ることが出来る。 t_k 付近の短い時間、例えば ε の間に m を $m(1 + \delta)$ に変化

*18 ディラックは、異なる時間を参照する量を含む演算子についても研究している。参考文献2を参照のこと。

させるとしよう。作用の変化は $\delta\varepsilon \frac{1}{2} m [x_{k+1} - x_k] / \varepsilon]^2$ で、これを微分すると*8、式 (51) のような式が得られる。しかし m の変化は作用だけでなく、 dx_k に対応する正規化定数 $1/A$ も変化させる。正規化定数は $(2\pi\hbar\varepsilon i/m)^{-1/2}$ から $(2\pi\hbar\varepsilon i/m(1+\delta))^{-1/2}$ へ、或いは δ の 1 次のオーダーでは $\frac{1}{2}\delta(2\pi\hbar\varepsilon i/m)^{-1/2}$ だけ変化する。質量変化による式 (38) の全変化は δ の 1 次のオーダーで次となる：

$$\left\langle \chi_{t''} \left| \delta\varepsilon \frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \left(\frac{x_{k+1} - x_k}{\varepsilon} \right)^2 + \frac{\delta}{2} \right| \psi_{t'} \right\rangle$$

時間 ε に対して δ オーダーの持続時間変化は $\delta\varepsilon$ のオーダーであると予想される。従って、運動エネルギーの汎関数は $\delta\varepsilon i/\hbar$ で割り算して、次のように定義することが出来る：

$$K.E. = \frac{1}{2} m \left(\frac{x_{k+1} - x_k}{\varepsilon} \right)^2 + \frac{\hbar}{2\varepsilon i} \quad (52)$$

式 (50) を考慮すると、これは $\varepsilon \rightarrow 0$ で有限である*9。また、式 (48) の F に $m(x_{k+1} - x_k)/\varepsilon$ を代入して得られる式を利用すると、式 (52) が (ε のオーダーで) 次式と等価であることを示すことが出来る：

$$K.E. = \frac{1}{2} m \left(\frac{x_{k+1} - x_k}{\varepsilon} \right) \left(\frac{x_k - x_{k+1}}{\varepsilon} \right) \quad (53)$$

つまり、速度の累乗を含む観測可能な汎関数を作る最も簡単な方法は、これらの累乗を速度の積に置き換えることである。ただし、各因子はわずかに異なる時間で取らなければならない。

10 ハミルトニアン – 運動量

ハミルトニアン演算子は、通常の量子力学の定式化において中心的な重要性を持っている。この節では、この演算子に対応する汎関数について検討する。位置エネルギーに運動エネルギーの汎関数式 (52) または式 (53) を加えることで、ハミルトニアン関数を直ちに定義することが出来る。この方法は人為的であり、時間とハミルトニアン間の重要な関係を示すものではない。そこで我々は、状態が時間的に移動したときに生じる変化によって、ハミルトニアンの汎関数を定義することにする。

*8 [訳注] それは $\delta\varepsilon$ で割り算することと等しい。Feynman&Hibbs の § 7-3 の式 (7.52) 付近を参照のこと。

*9 [訳注] 第 1 項に式 (50) の右辺を用いると、次のようになるからである：

$$K.E. = \frac{1}{2} \cdot \left(-\frac{\hbar}{im\hbar} \right) + \frac{\hbar}{2\varepsilon i} = -\frac{\hbar}{2\varepsilon i} + \frac{\hbar}{2\varepsilon i} = 0$$

そのためには、少し脱線して時間を等間隔に分割する必要はないことを指摘しなければならない。明らかに、時間を任意の瞬間 t_i に細分化しても結構である。ただし、極限は最大の間隔である $t_{i+1} - t_i$ がゼロに近づくようにとるとする。すると、全作用 S は次のような和で表されるはずである：

$$S = \sum_i S(x_{i+1}, t_{i+1}; x_i, t_i), \quad (54)$$

この時

$$S(x_{i+1}, t_{i+1}; x_i, t_i) = \int_{t_i}^{t_{i+1}} L(\dot{x}(t), x(t)) dt, \quad (55)$$

ただし積分は t_i での x_i と t_{i+1} での x_{i+1} 間の古典経路に沿って行なうものとする。単純な一次元の例では、これは十分な精度で次のようになる：

$$S(x_{i+1}, t_{i+1}; x_i, t_i) = \left\{ \frac{m}{2} \left(\frac{x_{i+1} - x_i}{t_{i+1} - t_i} \right)^2 - V(x_{i+1}) \right\} (t_{i+1} - t_i); \quad (56)$$

このとき dx_i 積分についての規格化定数は次である：

$$A = \left(\frac{2\pi\hbar i(t_{i+1} - t_i)}{m} \right)^{-1/2} = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i(t_{i+1} - t_i)}}$$

ここで、時間的な変位に伴う状態の変化と H の関係を調べてみよう。時空領域 R' で定義される状態 $\psi(t)$ を考える。ここで我々は、時間 t で別の領域 R'_δ によって定義された別の状態 $\psi_\delta(t)$ を考えるとしてみよう。領域 R'_δ は R' と全く同じであるが、時間が δ だけ早くなっている、つまり物質的に時間 δ だけ過去に向かって移動しているとする。 R'_δ の系を準備するための装置は R' のための装置とすべて同じであるが、時間が δ だけ早く操作される。 L が明示的な時間依存している場合には、それも変位させる。すなわち、状態 ψ_δ は L_δ から得られる。 L_δ は状態 ψ に用いた L と同じだが、その中の時間 t を $t + \delta$ で置き換えたものである。 ψ_δ の状態は $\psi(t)$ とどう違うのであろうか？どのような測定でも、系が固定領域 R'' にあることを発見する確率は、領域 R' の場合と R'_δ の場合で異なってくる。シフト δ によって生じる遷移要素 $\langle \chi | 1 | \psi \rangle_{S_\delta}$ の変化を考えてみよう。このシフトは $i \leq k$ では t_i のすべての値を δ だけ減少させ、 $i > k$ ではすべての t_i を固定したままにすることで生じると考えることができる (図 2 を参照)。ただし時間 t は t_{k+1} と t_k の区間内にあるとする^{*19}。この変更は、 t_{i+1} と t_i の両方

^{*19} 数学的な厳密性の観点から、 δ が有限である場合、 $\varepsilon \rightarrow 0$ になると、例えば区間 $t_{k+1} - t_k$ が有限のままになってしまうという難点がある。これは、 δ が時間とともに変化し、 $t = t_k$ の前にスムーズにオンになり、 $t = t_k$ の後にスムーズにオフになると仮定することで、解決することが出来る。すると δ の時間変化を固定したまま $\varepsilon \rightarrow 0$ とし、そして $\delta \rightarrow 0$ として 1 次の変化を求める。この結果は、上記の粗い手順の場合と基本的には同じである。

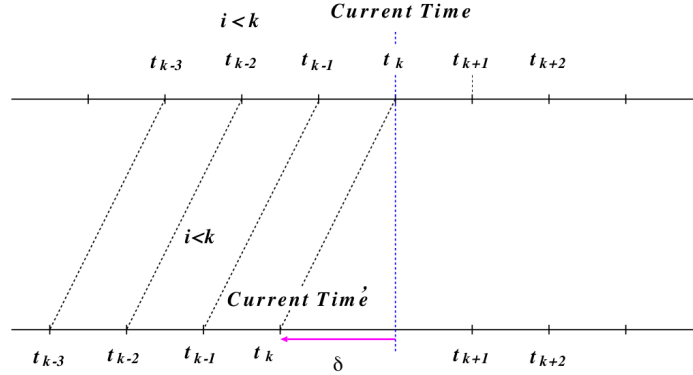


図2 考えている時刻 t_k 以前の時間を δ だけ過去に動かす. すると $i \leq k$ 以前の時間間隔は一様に δ だけシフトして減少するだけでその間隔は変化しない.

が同じ量だけ変更される限り, 式 (55) で定義される $S(x_{i+1}, t_{i+1}; x_i, t_i)$ には影響を与えない. 一方, $S(x_{k+1}, t_{k+1}; x_k, t_k)$ は $S(x_{k+1}, t_{k+1}; x_k, t_k - \delta)$ に変更される. また, dx_k 上の積分の定数 $1/A$ は $(2\pi\hbar i(t_{k+1} - t_k + \delta)/m)^{-1/2}$ に変更される. これらの変更による遷移要素への影響は δ の一次で次となる:

$$\langle \chi | 1 | \psi \rangle_S - \langle \chi | 1 | \psi_\delta \rangle_{S_\delta} = \frac{i\delta}{\hbar} \langle \chi | H | \psi \rangle_S, \quad (57)$$

この場合のハミルトニアン汎関数 H_k は次で定義される:

$$H_k = \frac{\partial S(x_{k+1}, t_{k+1}; x_k, t_k)}{\partial t_k} + \frac{\hbar}{2i(t_{k+1} - t_k)} \quad (58)$$

最後の項は $1/A$ の変化によるもので, $\varepsilon \rightarrow 0$ のとき H_k を有限に保つ役割を果たす. 例えば, 式 (56) では次のようになる:

$$H_k = \frac{m}{2} \left(\frac{x_{k+1} - x_k}{t_{k+1} - t_k} \right)^2 + \frac{\hbar}{2i(t_{k+1} - t_k)} + V(x_{k+1})$$

これはちょうど, 運動エネルギー汎関数の式 (52) とポテンシャルエネルギー $V(x_{k+1})$ の汎関数との和になっている.

勿論のことであるが, 波動関数 $\psi_\delta(x, t)$ は時間 δ 後の $\psi(x, t)$ と同じ状態, すなわち $\psi(x, t + \delta)$ を表している. 従って, 式 (57) は演算子方程式 (31) と密接に関係している.

また, 最終状態 χ の時間変化による変化も考えられる. 勿論だが, 重要なのは χ と ψ の相対的な変化であるから, このやり方では新しい結果は得られない. H_k は別の表現をすることも

出来る :

$$H_k = -\frac{\partial S(x_{k+1}, t_{k+1}; x_k, t_k)}{\partial t_{k+1}} + \frac{\hbar}{2i(t_{k+1} - t_k)} \quad (59)$$

これは式 (58) とオーダー ε の項差があるだけである。関数の時間変化率は、初期状態と最終状態の両方を一緒にシフトする効果を考慮して計算することが出来る。これは、後の時間を参照する関数の遷移要素を計算するのと同じ効果がある。その結果は、次のような演算子方程式の類似式となる :

$$\frac{\hbar}{i} \dot{\mathbf{f}} = \mathbf{H} \mathbf{f} - \mathbf{f} \mathbf{H}.$$

運動量汎関数 p_k は、今度は位置移動による変化を考えることで同様に定義できる :

$$\langle \chi | 1 | \psi \rangle_S - \langle \chi | 1 | \psi \rangle_{S_\Delta} = \frac{i\Delta}{\hbar} \langle \chi | p_k | \psi \rangle_S.$$

状態 ψ_Δ は領域 R'_Δ から準備されるが、その領域は空間内を距離 Δ だけ移動している以外は領域 R' と同一である。(ラグランジアンが x_i に明示的に依存する場合、 t より前の時間ではそれを $L_\Delta = L(\dot{x}, x - \Delta)$ に変更しなければならない)。すると次を得る*²⁰ :

$$p_k = \frac{\partial S(x_{k+1}, x_k)}{\partial x_{k+1}} = -\frac{\partial S(x_{k+1}, x_k)}{\partial x_k} \quad (60)$$

$\psi_\Delta(x, t)$ は $\psi(x - \Delta, t)$ に等しいので、 p_k と波動関数の x 微分の間には密接な関係が成立する。角運動量演算子は、同様の仕方で回転と関係している。

$S(x_{i+1}, t_{i+1}; x_i, t_i)$ の t_{i+1} に対する導関数は H_i の定義に出現する (式 (58) を見よ)。また上式 (60) より「 x_{i+1} に関する導関数は p_i を定義する」と言える。しかし $S(x_{i+1}, t_{i+1}; x_i, t_i)$ の t_{i+1} に対する導関数は x_{i+1} に対する導関数と関係がある。なぜなら、式 (55) で定義される関数 $S(x_{i+1}, t_{i+1}; x_i, t_i)$ は Hamilton-Jacobi 方程式を満たすからである。従って、Hamilton-Jacobi 方程式は H_i を p_i で表した方程式である。つまり、状態の時間的な変位が、同じ状態の空間的な変位に関係していることを表現しているのである。この考え方は、シュレーディンガー方程式の導出に直結しており、式 (30) の導出で示したものよりもはるかにエレガントなものになっている。

*²⁰ 式 (60) の p_i をすぐ式 (47) へ代入することはしなかった。それは、その時の式 (47) が ε の 0 次と 1 次の両方で有効だとは言えないからである。よって、交換関係は導出できるが、運動方程式を導出することは出来ない。式 (60) の 2 式は、区間 t_i から t_{i+1} の各端における運動量を表している。これらは $\varepsilon V(x_{k+1})$ だけ異なっているが、それは時間 ε の間に作用する力のためである。

11 定式化の不十分な点

ここで与えられた定式化には重大な欠点がある。必要な数学的概念は新しいものである。現在のところ、方程式の意味を明確にするためには、時間間隔を不自然で煩雑に細分化する必要がある。関数の数学の記法と概念を使えば、かなりの改善が可能である。しかし、最初の発表ではこれを避けるのが最善だと考えた。加えて、汎関数の引数関数 $x(t)$ の空間を表す適切な測度 (measure) が必要である *10。

また、それは物理学的にも不完全である。量子力学の最も重要な特徴の 1 つは、ユニタリー変換のもとで不変であることである。これは、古典力学の正準変換に相当するものである。もちろん、ここでの定式化は通常の設定と同等であり、これらの変換の下で不変であることを数学的に証明することができる。しかし、それが不変であることが「物理的に」明らかになるようには定式化されていない。この不完全さははっきりとした形で現れている。位置以外の量の測定を記述するための直接的な手順がないのである。例えば、ある粒子の運動量の測定値は、他の粒子の位置の測定値で定義することが出来る。このような状況を分析した結果は、運動量の測定が波動関数のフーリエ変換と関連していることを示している *10。しかし、これはそのような重要な物理的結果を得るための、かなり遠回りな方法である。「時空間 R の領域内の経路」という考え方を「クラス R の経路」あるいは「特性 R を持つ経路」に置き換えることで、この定理が一般化されることが期待される。しかし、どの性質がどのような物理的測定に対応するかは、一般的な方法では定式化されていない。

12 可能な一般化

この定式化は、明らかな一般化を提示している。興味深い古典問題がある。それは「最小作用の原理を満たすが、作用が位置と速度の関数の積分として書けない」問題だ。例えば、作用には加速度が含まれているかもしれない。また、相互作用が瞬間的でない場合は、 $\int x(t)x(t+T) dt$ のように 2 つの異なる時間における座標の積が関係しているかもしれない。その場合、作用は式 (10) のような小さな寄与の総和には分割出来ない。結果として、状態を記述する波動関数は得られない。とはいえ、ある領域 R' から別の領域 R'' に入るための遷移確率は定義できる。遷移要素 $\langle \chi_{t''} | F | \psi_{t'} \rangle_S$ の理論のほとんどは引き継ぐことができる。単に、

*10 [訳注] 和訳本：「ファインマン 経路積分の発見」での訳では否定文になってしまっているので注意する。

式 (39) のような式で $\langle R''|F|R' \rangle_S$ のような記号を考案するだけであるが、 ψ と χ に対する式 (19) と式 (20) を代入し、より一般的な作用を S に代入している。ハミルトニアンと運動量の関数は第 10 節のように定義できる。詳細は筆者の学位論文を参照されたい*²¹。

13 場の演算子排除への応用

目下の新しい定式化の特徴は、ある状況下での時空間関係を鳥瞰できることである。 x での積分が式 (39) のような式で実行される前に、様々な F 関数を挿入することができる一種のフォーマットがある。量子力学系で異なる時間に起こっていることが、どのように関連しているかを研究することが可能である。このような漠然としたことを少しでも明確にするために、例を挙げて議論する。

古典的な電気力学では、例えば二つの粒子の相互作用を記述する場合は、一組の振動子として表わされる。これらの振動子の運動方程式を解くことは可能であり、振動子は本質的に排除される (Lienard-Wiechert ポテンシャル)。その結果として生じる相互作用には、ある時刻の一方の粒子の動きと別の時刻の他方の粒子の動きとの関係が含まれる。量子電気力学では、場はやはり一組の振動子として表わされる。しかし、振動子の動きを解明することは出来ず、振動子は排除される。縦波を表わす振動子を無くすことが出来ることは確かである。その結果、瞬時に静電的な相互作用が生じることになる。静電的除去法は、自己相互作用の難しさを端的に示しており、非常に参考になる。実際、非常に明確に示されているので、どの項が間違っているのを省略すべきかを決めるのに曖昧さがない。この全過程は相対論的に不変ではなく、省略された項も不変ではない。横波を表わす振動子も無くすことが出来れば、非常に望ましいことと思われる。これは従来の量子力学ではほとんど乗り越えられない問題である。ある時点での粒子 a の動きは、前の時点での粒子 b の動きに依存し、その逆もまた同様であると考えられる。しかし、波動関数 $\psi(x_a, x_b; t)$ は、一つの時間における両方の粒子の動作を記述することしか出来ない。粒子 a の振る舞いを決めるために粒子 b が過去に何をしたかを追跡する方法はないのである。唯一の方法は、時刻 t に於ける一組の振動子の状態を指定することであり、それは粒子 b (と粒子 a) が何をしていたかを「記憶」する役割を果たす。

目下の定式化では、全ての振動子の動きを解いて、粒子を記述する方程式から振動子を完全

*²¹ Rev. Mod. Phys. Phys. 17, 157 (1945) で J. A. Wheeler と R. P. Feynman が述べた電磁気学の理論は、粒子の座標のみを含む最小作用の原理で表現することが出来る。この理論を場によらずに量子化しようとしたことが、著者にここで与えられた量子力学の定式化を研究させるきっかけとなった。より一般的な作用関数の場合をカバーするためのアイデアの拡張は、1942年にプリンストン大学に提出した博士論文 "The principle of least action in quantum mechanics" で展開された。

に取り除くことが可能である。それは簡単に行われる。粒子の様々な変数 x_i について積分する前に、単に振動子の動きを解けばよいのである。 x_i についての積分は、過去の歴史を1つの状態関数に凝縮しようとするもので、これは避けたいことだ。もちろん、結果は振動子の初期状態と最終状態に依存する。それらが指定されている場合、結果は式 (38) のような $\langle \chi_{t''} | 1 | \psi_{t'} \rangle$ の方程式となるが、因子として $\exp(iS/\hbar)$ の他に、粒子経路を記述する座標にのみ依存する別の汎関数 G を含むことになる。

非常に単純な場合に、それがどのように行われるかを簡単に説明する。系のラグランジアン中の項 $\gamma(x, t)q(t)$ を介して、座標 $x(t)$ 、ラグランジアン $L(\dot{x}, x)$ の粒子が、座標 $q(t)$ 、ラグランジアン $\frac{1}{2}(\dot{q}^2 - \omega^2 q^2)$ の振動子と相互作用しているとする。ただし $\gamma(x, t)$ は、粒子の座標 $x(t)$ と時間の任意関数である*²²。我々が求めたいのは時刻 t' の状態からの遷移確率であり、時刻 t'' で粒子の波動関数が $\psi_{t''}$ で、振動子がエネルギー準位 n である状態から、時刻 t' では粒子が $\chi_{t'}$ で振動子がエネルギー準位 m である状態に遷移するとしよう。この確率は次式の2乗である：

$$\begin{aligned} \langle \chi_{t''} \phi_m | 1 | \psi_{t'} \phi_n \rangle_{S_p + S_o + S_I} &= \int \cdots \int \phi_m^*(q_j) \chi_{t''}^*(x_j) \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(S_p + S_o + S_I)\right\} \\ &\times \psi_{t'}(x_0) \phi_n(q_0) \cdot \frac{dx_0}{A} \frac{dq_0}{a} \cdots \frac{dx_{j-1}}{A} \frac{dq_{j-1}}{a} dx_j dq_j \quad (61) \end{aligned}$$

ここで $\phi_n(q)$ は状態 n の振動子の波動関数である。 S_p は作用

$$\sum_{i=0}^{j-1} S_p(x_{i+1}, x_i)$$

であり、振動子が無い場合の粒子に対して計算される。作用

$$S_o = \sum_{i=0}^{j-1} \left[\frac{\varepsilon}{2} \left(\frac{q_{i+1} - q_i}{\varepsilon} \right)^2 - \frac{\varepsilon \omega^2}{2} q_{i+1}^2 \right]$$

は振動子だけの作用である。そして

$$S_I = \sum_{i=0}^{j-1} \gamma_i q_i$$

は、粒子と振動子との間の相互作用に対する作用である。ただし $\gamma_i = \gamma(x_i, t_i)$ である。振動子に対する規格化定数 a は $(2\pi\varepsilon i/\hbar)^{-1/2}$ である。すると指数関数は全ての q_i に対して2次依存

*²² γ が粒子の速度 \dot{x} に依存する場合に一般化しても問題は生じない。

となる。従って、 $0 < i < j$ である全ての q_i についての積分は容易に実行できる。その積分は一連のガウス積分を集めたものとなるからである。

これらの積分の結果は $T = t'' - t'$ と書くならば、

$$\left(\frac{\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega T} \right)^{1/2} \exp \{ i(S_p + Q(q_j, q_0)) / \hbar \}$$

となる。このときの $Q(q_j, q_0)$ は、ちょうど強制調和振動子に対する古典的作用となる (文献 15 を見よ)。明示的に書くならば、

$$\begin{aligned} Q(q_j, q_0) = & \frac{\omega}{2 \sin \omega T} \left[(q_j^2 + q_0^2) \cos \omega T - 2q_j q_0 \right. \\ & + \frac{2q_0}{\omega} \int_{t'}^{t''} \gamma(t) \sin \omega(t - t') dt + \frac{2q_j}{\omega} \int_{t'}^{t''} \gamma(t) \sin \omega(t'' - t) dt \\ & \left. - \frac{2}{\omega^2} \int_{t'}^{t''} dt \int_{t'}^t ds \gamma(t) \gamma(s) \sin \omega(t'' - t) \sin \omega(s - t') \right] \end{aligned}$$

ここでは $\gamma(t)$ が時間の連続関数であるかのように書かれている。しかし実際には、積分をリーマン和に分割し、量 $\gamma(x_i, t_i)$ を $\gamma(t_i)$ で置き換える必要がある。このように、 Q は $\gamma(x_i, t_i)$ を通して常に粒子の座標に依存し、時刻 t' と t'' に於ける振動子の座標のみに依存する。従って、式 (61) の量は次となる：

$$\begin{aligned} \langle \chi_{t''} \phi_m | 1 | \psi_{t'} \phi_n \rangle_{S_p + S_o + S_I} = & \int \cdots \int \chi_{t''}^*(x_j) G_{mn} \exp \left(\frac{iS_p}{\hbar} \right) \psi_{t'}(x_0) \\ & \times \frac{dx_0}{A} \cdots \frac{dx_{j-1}}{A} dx_j = \langle \chi_{t''} | G_{mn} | \psi_{t'} \rangle_{S_p} \end{aligned}$$

これに含まれているのは、もはや粒子の座標だけであり、量 G_{mn} は次で与えられる：

$$G_{mn} = \sqrt{\frac{\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega T}} \iint \phi_m^*(q_i) \exp \left\{ \frac{iQ(q_i, q_0)}{\hbar} \right\} \phi_n(q_0) dq_j dq_0$$

同様の方法を進めて行けば、電磁場の振動子はすべて、電荷の運動の記述から除外できることが分かる。

14 統計力学 – スピンと相対論

測定理論や量子統計力学の問題は、ここで述べたような視点で設定するとしばしば単純化される。例えば、系を乱す測定器の影響は、振動子で詳述した仕方で原理的に分離統合すること

が出来る。統計力学の密度行列には、かなり明白で有用な一般化がなされる。それは式 (38) の二乗を考慮することで得られる。これは式 (38) に似ているが、二組の変数 dx_i と dx'_i の積分を含んでいる。指数関数は $\exp\{i(S - S')/\hbar\}$ で置き換えられる。ただし S' は x' の関数であり、それは x の関数である S と同じものである。これが必要となるのは、例えば、場の振動子を消去した結果の記述である。ここでは、最終状態は特定せずに全ての最終状態 m の和だけが要求される。

スピンは、型通りのやり方で含めることが出来る。パウリのスピン方程式は、以下のような仕方で得ることが出来る：式 (13) から生じる $S(x_{i+1}, x_i)$ 中のベクトルポテンシャルの相互作用項

$$\frac{e}{2c}(\mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{x}_i) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}_i) + \frac{e}{2c}(\mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{x}_i) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}_{i+1})$$

を、次の式

$$\frac{e}{2c}(\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{x}_i))(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}_i)) + \frac{e}{2c}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}_{i+1}))(\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{x}_i))$$

で置き換える。ただし \mathbf{A} はベクトルポテンシャル、 \mathbf{x}_{i+1} と \mathbf{x}_i は時刻 t_{i+1} 及び t_i の粒子の位置ベクトル、そして $\boldsymbol{\sigma}$ は Pauli のスピンベクトル行列である。すると量 Φ は今や $\prod_i \exp \frac{iS(x_{i+1}, x_i)}{\hbar}$ と表現されるべきである。なぜなら、これは $S(x_{i+1}, x_i)$ の和の指数関数とは異なっているからである。従って Φ は今やスピン行列である。

相対論的なクライン-ゴルドン方程式も、経路を特定するための第 4 の座標を付加することで形式的に得ることが出来る。「経路」はパラメータ τ の 4 元関数 $x^\mu(\tau)$ によって特定されると考える。以前の変数 t が経過した様に、今やパラメータ τ がステップ ε で経過する。量 $x^{(1)}(t), x^{(2)}(t), x^{(3)}(t)$ は粒子の空間座標であり、そして $x^{(4)}(t)$ は該当する時間である。用いられるラグランジアンは次である：

$$\sum_{\mu=1}^4 \left[\left(\frac{dx^\mu}{d\tau} \right)^2 + \frac{e}{c} \cdot \frac{dx^\mu}{d\tau} \mathbf{A}_\mu \right]$$

ここで A_μ は 4 元ベクトルポテンシャルであり、 $\mu = 1, 2, 3$ の和の項は逆符号を持つとする。時間が τ に依存する波動関数を求めるならば、それはクライン・ゴルドン方程式を満たさなければならないことを示すことが出来る。ディラック方程式はクライン・ゴルドン方程式に用いられるラグランジアンを修正することで得ることが出来る。これはパウリ方程式を得るのに非相対論的ラグランジアンの修正が必要であるのと似ている。直接に得られる結果は、通常のディラック演算子の 2 乗である。

スピンと相対性理論に関するこれらの結果は、純粹に形式的なものであり、これらの方程式の理解を深めるものではない。Dirac 方程式を求める方法は他にもあり、この重要で美しい方程式に、より明確な物理的解釈を与えることが期待される。

著者は、H.C. コルベン教授夫妻と H.A. ベーテ教授の有益な助言に心から感謝している。また、研究の初期段階で多くの議論を交わした J.A. ウィーラー教授にも感謝したい。