量子論ことはじめ　ディラックを中心に

北野 正雄

大阪大学 QIQB, 京都大学

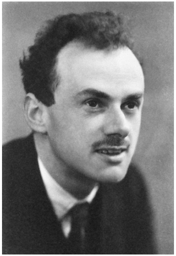
2025 年 9 月 16 日
2025 年日本物理学会 年会

国際量子科学技術年記念シンポジウム
「量子エレクトロニクス・量子情報科学の発展」

広島大学

(もくじ)

Paul Adrian Maurice Dirac, 1902–1984



- 量子論 100 年を振り返るにあたって,
立役者の一人, ディラックの貢献に注目したい.
- 彼は量子論の先駆というよりも, それに引き続く
量子電磁力学 (QED, 1927) と相対論的電子論 (ディラック方程式, 1928) などの華々しい貢献が目立っている.
- しかし, ハイゼンベルクの行列力学を承けて確立した正準量子化 (正準交換関係) は, 古典力学に根ざす的確な定式化であり, こちらも注目されるべき点である.
- 量子論のテキストを生涯にわたって改訂したこと, その過程で導入されたブラケット記法, デルタ関数にも注目したい.
- 量子論の基盤，根幹を支え続けてきたディラックの業績の一端を振り返ってみたい.

佐藤文隆先生との共同事業

- 新 SI 単位と電磁気学, 佐藤文隆, MK (岩波, 2018)

- 物理学講義ノート 佐藤文隆，MK (共編) (サイエンス社, 2017.3–) 全 7 巻

まぼろしの第 1 巻

(もくじ)

正準交換関係による量子化

Proc. Roy. Soc. A **109**, 642 (1925)

The Fundamental Equations of Quantum Mechanics.

By P. A. M. Dirac, 1851 Exhibition Senior Research Student, St. John's College, Cambridge.

(Communicated by R. H. Fowler, F.R.S.—Received November 7th, 1925.)

- ハイゼンベルクの行列の無限小変化が反対称積 (交換子)

$$[\hat{A}, \hat{B}] := \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

  の形になることを導き，古典力学のポアソン括弧式との代数的類似性に気づいた．　図書館のエピソード

- ボーア・ゾンマーフェルトの量子条件と対応原理を用いて，交換子の古典極限を導いた．

$$\frac{2\pi}{ih}[\hat{A}, \hat{B}] \xrightarrow{\text{古典極限}} \{A, B\}_{\mathsf{PB}} := \frac{\partial A}{\partial q}\frac{\partial B}{\partial p} - \frac{\partial A}{\partial p}\frac{\partial B}{\partial q}$$

次元の対応に注意: $[h] = [pq]$

回想録から

「その発想は最初, 一瞬のうちに思い浮かんだのだったと思います. そしてもちろんいくらかは興奮しましたし, それに続いて当然,『いや, これはきっと間違っている』と思い直しました. [.....] そして心がむちゃくちゃにかき乱されてしまって, すぐにポアソン括弧式について自分の知識を磨き直さなければという気持ちになったのです.」

(でも手元にはポアソンの括弧式に関する資料が何もなかった.)

「それは日曜の夜だったので, 図書館は全部閉まっており, わたしには何もできませんでした. [.....] 翌朝わたしは, 図書館が開く時間に急いで押しかけました.」

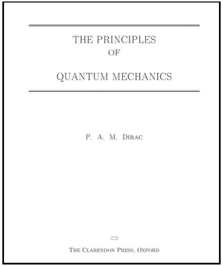
(そして, 書棚の 1 つから Whittaker の「解析力学」を引っ張り出した.)

グレアム ファーメロ, 吉田三知世 (訳):「量子の海, ディラックの深淵」(早川書房) から

(もくじ)

The Principles of Quantum Mechanics

- 1930 1st edition　(わずか 27 歳)
  ベクトルを ψ, 反線形ベクトルを ϕ
- 1935 2nd edition
- Math. Proc. Cambridge Phil. Soc. **35**, 416 (1939)
  "A new notation for quantum mechanics"
- 1947 3rd edition ブラケット記法を採用
  $\psi \to |\psi\rangle, \quad \phi \to \langle\psi|$
- 1958 4th edition
- 1967 Revised 4th edition



日本語版は第 2 版から.
仁科芳雄, 朝永振一郎, 小林稔, 玉木英彦 (訳):　「量子力学」(岩波書店, 1936)
第 1 版翻訳中に原著第 2 版の完成の情報が著者から届く.

1st ed. (1930) — ブラケット以前

10. Conjugate Complex Observables 25

Now let α be any observable and consider the equation

$$\overline{\phi_s \alpha \psi_r} = \phi_r \beta \psi_s \tag{17}$$

where ψ_r and ψ_s are any two ψ's and ϕ_r and ϕ_s are their conjugate imaginaries. We can consider this equation as defining a new observable β, since we can assume (17) holds for a complete set of independent ψ_r's and for a complete set of independent ψ_s's, and since, as is easily verified, if (17) holds for two values of ψ_r it must hold also for any linear combination of them, and similarly for ψ_s. In fact if (17) holds for $\psi_r = \psi_1$ and for $\psi_r = \psi_2$, we have the equations

$$\overline{\phi_s \alpha \psi_1} = \phi_1 \beta \psi_2, \qquad \overline{\phi_s \alpha \psi_2} = \phi_2 \beta \psi_2,$$

from which we can deduce

$$\begin{aligned} \overline{\phi_s \alpha (c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2)} &= \overline{c_1}\, \overline{\phi_s \alpha \psi_1} + \overline{c_2}\, \overline{\phi_s \alpha \psi_2} \\ &= \overline{c_1} \phi_1 \beta \psi_s + \overline{c_2} \phi_2 \beta \psi_s \\ &= (\overline{c_1} \phi_1 + \overline{c_2} \phi_2) \beta \psi_s, \end{aligned}$$

which shows that (17) holds also for $\psi_r = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2$.

https://archive.org/details/principlesquantummechanics1stdirac1930/

3rd ed. (1947) — ブラケットの導入

defined depends linearly on $\langle B|$, so we may look upon it as the result of some linear operator applied to $\langle B|$. This linear operator is uniquely determined by the original linear operator α and may reasonably be called the same linear operator operating on a bra. In this way our linear operators are made capable of operating on bra vectors.

A suitable notation to use for the resulting bra when α operates on the bra $\langle B|$ is $\langle B|\,\alpha$, as in this notation the equation which defines $\langle B|\,\alpha$ is

$$\{\langle B|\,\alpha\}\,|A\rangle = \langle B|\,\{\alpha\,|A\rangle\} \tag{3}$$

for any $|A\rangle$, which simply expresses the associative axiom of multiplication for the triple product of $\langle B|$, α and $|A\rangle$. We therefore make the general rule that *in a product of a bra and a linear operator, the bra must always be put on the left.* We can now write the triple product of $\langle B|$, α and $|A\rangle$ simply as $\langle B|\,\alpha\,|A\rangle$ without brackets. It may easily be verified that the distributive axiom of multiplication holds for products of bras and linear operators just as well as for products of linear operators and kets.

https://archive.org/details/PrinciplesQuantumMechanics3rdedDirac1947/

(もくじ)

デルタ関数

- 連続スペクトルの場合の固有ベクトルの正規直交条件

$$\langle x'|x\rangle = \delta(x'-x) \qquad \text{cf. 離散の場合：} \quad \langle i|j\rangle = \delta_{ij}$$

- $\delta(x)$ は任意の滑らかな関数 $f(x)$ について

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x)\mathrm{d}x = f(0),$$

を満たす関数のようなもの — 各点 x における値には意味がない.

- 後に, 関数 f に対する汎関数として数学的に定式化 (Schwartz)

$$\delta_x(f) = \langle \delta_x, f\rangle = f(x)$$

L. シュワルツ: 物理数学の方法 (岩波, 1966)

デルタ関数の微分

- **デルタ関数の n 階微分 $\delta^{(n)}$** 何回でも微分できる!

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta^{(n)}(x)\mathrm{d}x = (-1)^n f^{(n)}(0),$$

- **重要な公式**

$$x\delta'(x) = -\delta(x) \qquad (*)$$

- **正準交換関係 $[\hat{x},\hat{p}] = \mathrm{i}\hbar\hat{1}$ から**

$$\langle x'|(\hat{x}\hat{p}-\hat{p}\hat{x})|x\rangle = (x'-x)\langle x'|\hat{p}|x\rangle = \mathrm{i}\hbar\langle x'|x\rangle = \mathrm{i}\hbar\delta(x'-x)$$

- **これより運動量 $\hat{p}$ の行列要素は**

$$\langle x'|\hat{p}|x\rangle = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\delta'(x'-x)$$

なぜか公式 $(*)$ は第 3 版以降消えている．シュワルツの教科書には出ている．

(もくじ)

Dirac のブラケット記法 $\langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle$

- 量子論における標準言語
- 基底に依存しない記述が可能 (成分より実体)
- 固有値が離散, 連続どちらの場合も統一的に扱える

$$c_n = \langle n|\psi\rangle, \quad \psi(\boldsymbol{x}) = \langle\boldsymbol{x}|\psi\rangle, \quad \psi_n(\boldsymbol{x}) = \langle n, \boldsymbol{x}|\psi\rangle$$

- 式の見通しがよく, 計算が簡単になる
  - 1 の分解 $\hat{1} = \sum_{i=1}^{n} |e_i\rangle\langle e_i|$
  - 密度行列演算子 $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$
  - 弱値 $\langle\hat{A}\rangle_{\mathrm{w}} = \dfrac{\langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle}{\langle\phi|\psi\rangle}$ 弱演算子 $\hat{w} = \dfrac{|\psi\rangle\langle\phi|}{\langle\phi|\psi\rangle}$
  - Bargmann 不変量 $\gamma = \arg\langle\psi_1|\psi_2\rangle\langle\psi_2|\psi_3\rangle\langle\psi_3|\psi_1\rangle = \mathrm{Tr}\,\hat{\rho}_1\hat{\rho}_2\hat{\rho}_3$

Dirac 曰く

In mathematical thoeries the question of notation, while not of primary importance, is yet worthy of careful consideration, since a good notation can be of great value in helping the development of a theory, by making it easy to write down those quantities or combination of quantities that are important, and difficult or impossible to write down those that are unimportant.

P.A.M. Dirac: “A new notation for quantum mechanics,” Math. Proc. Cambridge Phil. Soc. **35**, 416 (1939)

Dirac 曰く

In mathematical thoeries the question of notation, while not of primary importance, is yet worthy of careful consideration, since a good notation can be of great value in helping the development of a theory, by making it easy to write down those quantities or combination of quantities that are important, and difficult or impossible to write down those that are unimportant.

P.A.M. Dirac: "A new notation for quantum mechanics," Math. Proc. Cambridge Phil. Soc. **35**, 416 (1939)

たかが記法，されど記法

ブラケット記法の現実

- 量子論の文献の多くはブラケット記法を採用
  - 特に量子情報関係では不可欠
- しかし，量子論の教科書で，ブラケット記法を系統的に説明し，活用しているものは意外に少ない．
  - 教える側の問題か (記法の意味が十分理解されていない)
- ブラケット記法の普及を妨げる「誤解」
  - 内積 (ϕ, ψ) を格好つけて書いているだけ，という理解が大半．
  - 内積との折衷記法 $\langle\phi|\hat{A}\psi\rangle$ の跋扈

$$\langle\phi|\hat{A}\psi\rangle = \langle\hat{A}^\dagger\phi|\psi\rangle \quad \text{本来は} \quad \langle\phi|\{\hat{A}|\psi\rangle\} = \{\langle\phi|\hat{A}\}|\psi\rangle$$

- 共役演算子の導入のために折衷記法が使われる

$$\text{本来は} \quad \hat{A}|\psi\rangle \Leftrightarrow \langle\psi|\hat{A}^\dagger$$

(もくじ)

Dirac は dual を知っていた！

- Whenever we have a set of vectors in any mathematical theoy, we can always set up a second set of vectors, which mathematicians call the dual vectors.

  The Priciples of Quantum Mechanics 3rd ed., Sec. 6
- 量子論の定式化に不可欠であることを認識していた．「内積より双対」
- ブラケット記法は「内積構造」よりも「双対構造」に適合するようデザインされている.

双対空間の簡単な歴史

- 双対 (ベクトル) は関数空間 (無限次元) 上の汎関数として，その重要性が徐々に認識されるようになった (F. Riesz, 1909).

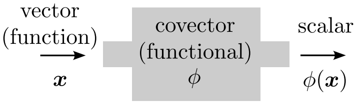
$$A[f] = \int_X f(x)\,\mathrm{d}\mu_A(x)$$

- 汎関数がなす線形空間の有用性　(e.g. 超関数 $=$ 急減少関数の汎関数)
- しかし，有限次元では，“... before 1930 nobody had a correct conception of duality between finite dimensional vector spaces;” (by Dieudonne in History of Functional Analysis)
- 双対 (dual) という用語は Bourbaki による　($\sim$ 1938).

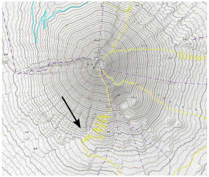
大学の「線形代数」で取り上げられる機会は少ない.「物理学」でも共通的普遍的概念としては扱われていない.

双対ベクトルのイメージ

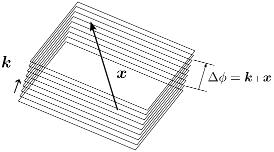
- 線形ブラックボックス



- 等高線・等圧線



- 波数ベクトル



量子論における双対空間

- 状態空間 $\mathcal{H}$ の要素であるケット $|\psi\rangle$ に対して, 複素数 $\phi(|\psi\rangle)$ を線形的に割り当てる関数 $\phi(\ )$ — 線形汎関数

$$\phi(\ ) : |\psi\rangle \in \mathcal{H} \quad \mapsto \quad \phi(|\psi\rangle) \in \mathbb{C}$$

- 線形汎関数の集合が双対空間 $\mathcal{H}^*$
- $\phi(\ )$ を $\langle\phi|$ と表わすことで, $\phi(|\psi\rangle) = \langle\phi|\psi\rangle$ と表記するのが Dirac のアイデアである.
- (参考) 内積 $(|\phi\rangle, |\psi\rangle)$ はケット間の演算であり, 双対空間は現れない.

$$(\ ,\ ) : |\phi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H} \quad \mapsto \quad (|\phi\rangle, |\psi\rangle) \in \mathbb{C}$$

双対 $+$ 共役 $=$ 計量 (内積)

- 通常, 線形代数学は「3 次元ユークリッド空間」を下敷きにして教えられるので, 最初から〈内積付き〉.
- そのため双対構造が意識される場面が少ない.
- 物理では殆どの分野で双対構造が本質的な役割を演じている.
  (例) 量子論, 固体物理, 相対論, 電磁気，熱力学, ...
- しかし, 双対が表に出ないアプローチがとられがち (双対隠し).
  (例) 折衷記法, 逆格子, 計量テンソル, ベクトル・スカラー記法, ...

(もくじ)

ブラケット記法の利点は結合則

- $\langle\phi|\hat{A}\hat{B}|\phi\rangle$ に相当するおける結合則

$$\langle\phi|(\hat{A}\hat{B}|\phi\rangle) = (\langle\phi|\hat{A})(\hat{B}|\phi\rangle) = (\langle\phi|\hat{A}\hat{B})|\phi\rangle$$

を折衷記法で内積的に表すと,

$$\langle\phi|\hat{A}\hat{B}\phi\rangle = \langle\hat{A}^\dagger\phi|\hat{B}\phi\rangle = \langle\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger\phi|\phi\rangle$$

となって, 表現の不明瞭な冗長性のため見通しが悪くなる.

折衷記法にはない, シンプルな「結合則」がブラケット記法のパワーの源と一つといってよい.

圏論も結合則が命

- **対象** (object):　A, B, C, D, ... (集合の要素に相当)
- **射** (morphism, arrow):　f, g, h, ... (対象をつなぐ矢印たち)
  $$A \xrightarrow{f} B$$
- $A \xrightarrow{f} B$, $B \xrightarrow{g} C$ **に対して，合成射** $A \xrightarrow{g \circ f} C$ **が必ず存在する.**
- **すべての対象** A **に恒等射** $A \xrightarrow{\mathrm{id}_A} A$ **が存在.** (図では省略されることが多い.)
- **単位律**: $\mathrm{id}_B \circ f = f = f \circ \mathrm{id}_A$
- **結合律**: $h \circ (g \circ f) = (h \circ g) \circ f$

$$\begin{tikzcd} A \arrow[r, "f"'] \arrow[rr, bend left, "g \circ f"] & B \arrow[r, "g"] \arrow[rr, bend right, "h \circ g"'] & C \arrow[r, "h"] & D \end{tikzcd}$$

ブラケット記法の圏論的理解

$$\begin{tikzcd} \mathbb{C} \arrow[loop left, "\alpha\ldots"] \arrow[r, bend left, "|\psi\rangle\ldots"] & \mathcal{H} \arrow[l, bend left, "\langle\phi|\ldots"] \arrow[loop right, "\hat{A}\ldots"] \end{tikzcd}$$

- **対象**: $\{\mathbb{C}, \mathcal{H}\}$
- **射**: $\mathbb{C} \to \mathbb{C}$ (スカラー), $\mathcal{H} \to \mathcal{H}$ (演算子)
  $\mathbb{C} \to \mathcal{H}$ (ケット), $\mathcal{H} \to \mathbb{C}$ (ブラ)

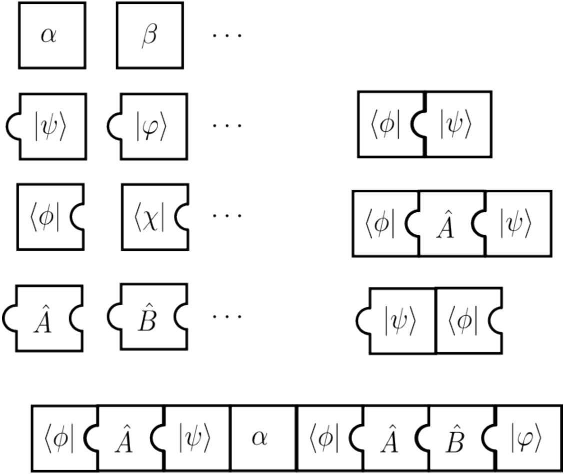
  $\mathbb{C}$ から $\mathcal{H}$ の線形写像と $\mathcal{H}$ の要素の間には 1 対 1 対応.
- **ブラケットによる正しい表式は, この圏における合成射に相当する.**

$$\langle\phi|\psi\rangle\alpha, \quad \hat{B}|\psi\rangle\langle\phi|\hat{A}, \ldots$$

ブラケット式は右から左に読む.

C. Heunen and J. Vicary: Categories for Quantum Theory (Oxford,2019)

jigsaw for bracket



(もくじ)

ディラック定数 $\hbar$ — まとめに代えて

- プランクの普遍定数 h　(作用の次元 $\mathrm{J\,s}$)

$$E = h\nu \quad \text{アインシュタインの関係式}$$
$$p = h/\lambda \quad \text{ド・ブロイの関係式}$$

- ディラックは早い時期から h の代わりに $\hbar := h/(2\pi)$
  — ディラック定数, 換算 (reduced) プランク定数

$$E = \hbar\omega$$
$$p = \hbar k$$

- 正準交換関係も簡潔に

$$[\hat{q}, \hat{p}] = \mathrm{i}\hbar\hat{1}$$

角度に独立次元をもたせると, $\hbar$ の単位は $\mathrm{J\,s/rad}$ (角運動量の次元)

MK: 角度の次元とプランク定数, 大学の物理教育 **31**, 63 (2025).