Chapter 1

量子力学のリテラシー

リテラシーとは“読み・書き・計算できる能力”のことで，特定の分野を“理解・応用・活用できる力”と考えてよい．それに則（のっと）れば，量子力学の基礎を学びながら，具体的な問題を解き，応用力を培（つちか）っていくプロセスが“量子力学のリテラシー”の習得につながるだろう．

ミクロな世界を扱う量子力学はマクロな世界の古典物理学とは異質で，非常識にみえる現象に溢（あふ）れている．しかし，この非常識こそが，2つの世界を統一する自然観や物質観を与える常識であり，量子力学のリテラシーの根幹を成すものである．

1.1　現代の物理学

古典物理学と量子力学の科学史的な境界は1900年である．では，“現代の”物理学という観点から，これらの間に境界はあるのだろうか？

1.1.1　古典物理学と量子力学

特殊相対性理論と一般相対性理論，そして量子力学は，現代の物理学の三本柱であり，これらはすべて，20世紀の最初の四半世紀頃（1900年～1928年）に登場した学問である．

特殊相対性理論（1905年）は，力学と電磁気学との矛盾を解消するために提唱された理論である．この理論によって，慣性系で光速に近い速さで運動する物体の諸現象の謎が解明された．それから10年後に提唱されたのが，**一般相対性理論**（1915年）である．この理論は，特殊相対性理論が準拠する慣性系という特殊な条件を取り払って，非慣性系（加速度系）まで一般化したもので，重力を時空の幾何学に結び付け，現代の宇宙論の基礎を与える理論である．これら2つの理論は共に，アインシュタインがたった一人で構築したもので，一般に，**相対性理論**とよばれている．

それに対して，**量子力学**は，原子や分子サイズのミクロな世界の現象を説明するために，世界中の多くの研究者たちによって構築された理論である．この理論の完成までに，およそ 30 年（1900 年～1928 年）の歳月が費やされた．

相対性理論は，大きなスケール（日常的な意味での空間や宇宙空間）で生じる現象，いい換えれば，マクロな世界で起こる現象に関わる理論である．一方，量子力学は，電子などのミクロな粒子が登場するミクロな世界で起こる現象に関わる理論で，力学や電磁気学とは異質な理論である．そのため，量子力学が登場するまでの力学や電磁気学を中心とする物理学を**古典物理学**（あるいは**古典論**）とよんで，量子力学と区別するのが一般的である．

ただ，古典物理学という呼称は，力学や電磁気学がもはや現代の物理学ではないという誤解を与える恐れがある．

周囲を見渡せばわかるように，私たちは多くの電気製品や電子機器を使っている．例えば，テレビ，冷蔵庫，エアコンなどの家電製品，そして，携帯電話やパソコンなどの電子情報機器．あるいは，宇宙空間にはカーナビゲーションに使われる GPS（全地球測位システム）の衛星や宇宙ステーションがある．このような製品や装置，構造物などの基礎は，古典物理学（力学や電磁気学など）や相対性理論によって与えられている．もちろん，これらの基礎には高度な通信技術やナノスケールでのエレクトロニクス技術が駆使されているので，量子力学は不可欠である．

このように，現代の科学技術の発展や進化をみれば，マクロな世界の物理現象に対する古典物理学とミクロな世界の物理現象に対する量子力学との間に境界はなく，共に**現代の物理学**であることは明らかだろう．

1.1.2　ミクロな世界とマクロな世界

力学や電磁気学などの古典物理学は，身の回りにあるマクロな現象が対象である．そのため，直接に目でみることができるので，直観的に理解しやすい．

力学では，例えば，図 1.1 のようにグラウンドで投げ上げたボールの動きは目で追うことができるので，ボールの運動は古典物理学である**ニュートンの運動方程式**

$$m\frac{d^2\boldsymbol{r}(t)}{dt^2} = \boldsymbol{F} \tag{1.1}$$

に従っていることが確認できる．この式を解けば，時刻 t におけるボールの位置 $\boldsymbol{r}$ が正確に求まる．そして，この運動方程式によって，人工衛星や宇宙ス

Chapter 3

ミクロな世界を記述する式

アインシュタインの光量子仮説（1905 年）と光子の運動量に関する仮説（1916 年）に基づいた実証実験により，光（つまり電磁波）のような波がもつ粒子的な性質が明らかになった．その後，これとは真逆の関係 — 粒子がもつ波動的な性質 — をド・ブロイが予想し，**物質波仮説**を提唱した（1923 年）．そして，日常的な経験からは理解しがたい**粒子と波動の二重性**という奇妙な性質を巧みにとり入れて，シュレーディンガーが量子力学の基礎方程式（**シュレーディンガー方程式**）を導き，**波動力学**を構築した（1926 年）．

3.1　ド・ブロイの物質波仮説

ド・ブロイの提唱した物質波仮説(1.3)が，量子力学のコアになる最も重要なもので，量子力学におけるミクロな粒子の奇妙な振る舞いの起源は，すべてこの式にある．

3.1.1　アインシュタイン - ド・ブロイの関係式

速さ v で運動する質量 m の粒子は，運動量（の大きさ）$p = mv$ をもつ．このとき，この粒子には

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} \tag{1.3}$$

で決まる波長 λ の波が付随することを，ド・ブロイは提唱した（1923 年）．この波を**ド・ブロイ波**，または**物質波**とよび，波長を**ド・ブロイ波長**という．そして，この波の定在波によってボーアの量子条件の物理的な意味が解釈できることを，ド・ブロイは示した（例題 3.1 を参照）．

［例題 3.1］　定在波とボーアの量子条件

水素原子内の原子核の周りを回る電子は，原子核の周りを回って伝播する1つの波に対応する．原子核を一回りした波が元の波に一致するならば，これは定在波になる．これを電子の定常状態とみなせば，ボーアの量子条件(2.62)は直観的に理解できることを示せ．

［**解**］　図 3.1 のように，円形に進行する波が定在波をつくるためには，半径 r の円軌道に沿って，ちょうど n 個の波が立てばよい．図 3.1 は $n = 4$ と $n = 6$ の物質波で，振幅を円からのズレで表している（円の内側が負の振幅，円の外側が正の振幅に対応）．

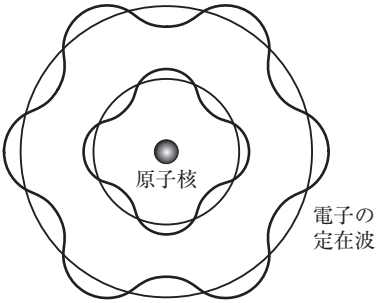


図 3.1　ド・ブロイの物質波の例 ($n = 4, 6$)．物質波の定常波が“ボーアの量子条件”の直観的な解釈を与える．

このように，軌道の円周が波長の整数倍であれば定在波になるから

$$\frac{2\pi r}{\lambda} = n \qquad (n = 1, 2, 3, \cdots) \tag{3.1}$$

が成り立てばよい．これにド・ブロイの物質波仮説(1.3)の $\lambda = h/p$ を使うと

$$2\pi rp = nh \tag{3.2}$$

になる．これは，まさに量子条件(2.62)を具体的に表した(2.64)と同じものである．なお，rp は角運動量であることを注意しておきたい．　¶

ド・ブロイの式(1.3)は，一見すると，アインシュタインが提唱した光子の運動量の式(2.45)の両辺を入れ替えただけのものであるが，その背後にあるアイデアは深淵である．

いうまでもなく，光子は質量ゼロの粒子だから，(2.45)の運動量 $p = E/c$ は質量 m を含まない．ド・ブロイは，この運動量 p が質量ゼロの光子だけでなく，質量 m をもつ粒子（物質粒子）にも拡張できると予想した．そして，エネルギー $E = \sqrt{m^2c^4 + c^2p^2}$ をもつ粒子には，$E = h\nu$ の光量子仮説の式((2.38))から

（本質的な）理由は“粒子と波動の二重性”のためであるが，数学的な理由は，分散式(3.33)からわかるように，角振動数 ω のベキ（1 次）と波数 k のベキ（2 次）の次数が異なるためである．両辺のベキの次数が合っていれば，虚数単位 i は消せるので，方程式に i は現れない．例えば，(3.16)の分散式は，両辺が共に 1 次であるから，両辺の虚数は消える．シュレーディンガー方程式に虚数単位 i が含まれていることは，普通の波動方程式と本質的に異なる重要な特徴である．

（特徴 4）　波動関数は複素数である　シュレーディンガー方程式(3.35)の右辺の $(\hbar^2/2m)(\partial^2/\partial x^2)$ は実数で，左辺の $i\hbar(\partial/\partial t)$ は虚数であるから，もし波動関数 Ψ が実数であれば，$(\hbar^2/2m)(\partial^2\Psi/\partial x^2)$ は実数で，$i\hbar(\partial\Psi/\partial t)$ は虚数になる．そのため，Ψ が実数であれば，両辺の属性（虚数と実数）が異なるから，(3.35)は物理的に意味のない式になる．したがって，両辺の属性を一致させるには，波動関数 Ψ は複素数でなければならないことがわかる（章末問題 [3.6]）．

（特徴 5）　波動関数は実在し得ない波　普通の波動方程式は波の変位や振幅（これらを u とする）を表す微分方程式である．この u は実際に観測される量だから，当然，実数の値をもつ関数（実数関数）である．したがって，複素数の波動関数 Ψ は実在の波を表すものではない．

Note 3.2　量子力学と古典力学の違い　普通の波の場合，波動方程式を解いて得られる波動関数（振幅）$u(x,t)$ は実数である．そのため，u は常に観測される量である．それに対して，量子力学ではシュレーディンガー方程式を解いて $\Psi(x,t)$ を求めても，Ψ は複素振幅なので，観測というプロセスを考えなければ意味がない．そのために，第 4 章で説明するような Ψ の確率解釈が必要になる（Note 4.1 を参照）．計算結果と測定値の関係を与える確率解釈を理解してモヤモヤ感をなくせば，量子力学の問題は基本的に，古典力学の波動方程式を解く問題と変わらない．

以上，シュレーディンガー方程式の特徴をいくつかみてきたが，シュレーディンガー方程式を具体的な問題に適用するには，「波動関数 Ψ は一体何を表しているのか」に答えなければならない．そこで，次の章では，この波動関数 Ψ について解説しよう．

なお，上記のような特徴をもつシュレーディンガー方程式に基づいて構築された量子力学を**波動力学**とよぶが，それはハイゼンベルクの**行列力学**と区別するためである（11.6 節を参照）．しかし，2 つの力学が等価なものであることは，後にシュレーディンガー自身によって証明されている．

章末問題

［**3.1**］ 1 K の低温に冷やされたヘリウム原子 $^4\mathrm{He}$（質量 $m = 4 \times 1.66 \times 10^{-27}$ kg）のド・ブロイ波長 λ を求めよ．ただし，温度 T における運動エネルギー（K とする）は $K = (3/2)k_\mathrm{B}T$ である．なお，$k_\mathrm{B} = 1.38 \times 10^{-23}\,\mathrm{J/K}$，$h = 6.6 \times 10^{-34}\,\mathrm{Js}$ とせよ．

［**3.2**］ $E = 54\,\mathrm{V}$ で加速した電子線の電子をニッケル結晶（格子間隔 $d_1 = 2.15 \times 10^{-8}\,\mathrm{cm}$）に衝突させると，$\theta = 50^\circ$ の方向で強い反射が得られた．ブラッグの反射の式

$$d_1 \sin\theta = n\lambda_i \qquad (\lambda_i \text{ は入射光の波長}) \tag{3.59}$$

を使って，$n = 1$ の場合の入射光の波長 λ_i の値を求め，この値が電子のド・ブロイ波長 λ にほぼ一致することを示せ．なお，$h = 6.6 \times 10^{-34}\,\mathrm{Js}$ とせよ．

［**3.3**］ 角振動数 ω の波数 k に対する依存性を表す分散式(3.25)を導け．

［**3.4**］ 弱い剛性（スティッフネス）をもったスチール弦を伝播する長波長の波は分散することが知られている．このとき，波動の分散式は $\omega = ak - bk^3$ で表せる（$a > 0, b > 0$ で，係数 b が分散性を与える）．この分散式から波動方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a\frac{\partial u}{\partial x} + b\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = 0 \tag{3.60}$$

を導け．(3.60)は弱分散性の媒質内を伝わる波を記述する一般的な方程式である．

［**3.5**］ ハミルトニアン $\widehat{H}$ が時間 t を陽に含む場合，波動関数 $\Psi(x,t)$ を(3.48)の変数分離型 $\Psi(x,t) = \phi(x)f(t)$ に仮定してもシュレーディンガー方程式(3.42)は解けないことを示せ．

［**3.6**］ 波動関数 $\Psi(x,t)$ の実部を $u(x,t)$，虚部を $v(x,t)$ とすると，Ψ は

$$\Psi(x,t) = u(x,t) + iv(x,t) \tag{3.61}$$

で表せる．シュレーディンガー方程式(3.43)を使って，Ψ が実数であれば $\Psi = 0$ になることを示せ．この結果から，波動関数 Ψ は複素数でなければならないことがわかる．

Chapter 5

量子力学の前提

1.3.2 項で述べたように，古典力学は“3 つの法則”を前提にして演繹的に導かれる．同様に，量子力学も，本章で示すように，いくつかの前提や原理から演繹的に構築することができるが，それらを古典力学の 3 法則のように簡潔に表現することはできない．その上，どの前提や原理を優先的に記述するか，という基本的なコンセプトがあるわけでもない．しかし，今日の量子力学が拠り所とするものは**コペンハーゲン解釈**とよばれるものであり，この解釈のもとで，量子力学は矛盾を含まないように構築され，具体的な計算が可能になっているのである．

5.1　コペンハーゲン解釈

4.2.1 項の二重スリットの実験から推測できるように，量子力学では，測定値は確率論的に決まるが，その確率を定める波動関数はシュレーディンガー方程式に従って決定論的に決まる．このように，波動関数の変化（時間発展）には，確率論的な変化と決定論的な変化の 2 種類がある．

5.1.1　ボーアとアインシュタイン

量子力学の基礎であるシュレーディンガー方程式からは確率振幅しか決まらないという事実は，個々の観測結果は全くランダムで，それらを確実に予言することは原理的に不可能であることを意味する．特に，観測されるまでは空間全体に広がっている波動関数が，観測された瞬間に収縮するという**波動関数の収縮**（または**状態の収縮**や**波束の収縮**）という現象によって，電子の位置が確定されるという考え方は，古典物理学では考えられない．したがって，量子力学の正当性に対して，不安（疑念）を抱くのは自然なことだろう．

実際，アインシュタインは量子力学をミクロな世界の様々な現象を矛盾なく

説明できる理論であることは認めていたが，究極の正しい理論であるとは考えていなかった．そして，「神はサイコロを振らない」という有名な言葉を残した．

このようなアインシュタインの懐疑的な考え方に対して，ボーアは次のように主張した．

「測定が行われるまでは実在というものを考えてはいけない．
確率振幅という情報のみが存在する．」　(5.1)

これをコアとする量子力学の解釈が，**コペンハーゲン解釈**である．

現在の量子力学は，波動関数が観測により，なぜ・どのようにして収縮を起こすのか，あるいは，観測しないときに電子はどの位置にいるのか，といった問いに答えることはできず，ただ，「観測によって検証できない内容は物理学の範疇（はんちゅう）ではない」というスタンスをとっている．その代わり，観測できる現象については，量子力学は完璧な予想を与えることができる．

要するに，量子力学の枠内で波動関数の変化（時間発展）を考えるとき，決定論的なものと確率論的なものの2種類があることになる．そして，量子力学を計算ツールとして使うためには，「因果的な時間発展はシュレーディンガー方程式で記述できる」という大前提が必要になる．

ちなみに，“コペンハーゲン解釈”という呼称の由来は，この解釈がデンマークの首都コペンハーゲンにあるニールス・ボーア研究所に集まった研究者たちによってつくられたものであったことによる．

5.1.2　系の時間発展（前提 1）

【前提 1】　波動関数 Ψ の時間発展はシュレーディンガー方程式で決まる

波動関数の因果的な時間発展は，一般的なシュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = \hat{H}\,\Psi(x,t) \qquad (\mathbf{3.42})$$

で決まる．

古典力学におけるニュートンの運動方程式が何らかの原理から導けるものではなく，単なる経験則であるのと同じように，このシュレーディンガー方程式(3.42)も経験則である．そして，量子力学は，この方程式を前提として構築されている．

3.3.2 項で示したように，ハミルトニアン $\hat{H}$ が時間を陽に含まなければ，(3.42)の一般解は

団子，$Y_1^{\pm 1}$ は z 軸周りのドーナツ（トーラス）の形をしている．$Y_1^{\pm 1}$ が同じ形になる（つまり，区別できない）理由は，$|Y_1^1| = |Y_1^{-1}|$ のためである．

これらの関数は $\hat{L}_z$ の固有関数であり，$\hat{L}_x, \hat{L}_y$ の固有関数ではない．そのため z 軸が特別扱いになっており，関数をプロットしても x, y 軸と z 軸との対称性は良くない．しかし，3 次元空間で z 軸を特別扱いする理由はないので，x, y, z に関して対称的な関数をつくることもできるはずで，これが次に説明する“接球面図”である．実際，このような対称性をもった関数の方が実用性があり，特に物理化学の分野では重要である．

Note 9.2　**ボーア軌道のイメージ**　角運動量の波動関数の 2 乗 $|Y_l^m(\theta, \phi)|^2$ は，粒子の存在確率の方向分布を表す．いま，図 9.4 の(b)と(d)，あるいは(e)と(i)のような角運動量の z 成分が最大（$m = +l$）と最小（$m = -l$）の図をみると，（これら以外の m の値の図よりも）軌道面が xy 平面に近いことがわかる．

この場合の波動関数は（表 9.2 を参照）

$$Y_l^l(\theta, \phi) \propto \sin^l \theta \, e^{\pm il\phi} \tag{9.99}$$

のような l 依存性をもつから，$\theta = \pi/2$ に近いほど（つまり，xy 平面に近いほど），粒子の存在確率が大きくなることがわかる（章末問題 [9.6]）．この存在確率は，l の増大と共に大きくなり，$l \to \infty$ の極限では粒子は xy 平面にしか存在できなくなる．この極限がボーア軌道のイメージと完全に一致することになる（Note 10.1 を参照）．

✻接球面図　波動関数 $\Phi_m(\phi)$ を指数関数 $e^{\pm im\phi}$ の代わりに実部（$\cos m\phi$）と虚部（$\sin m\phi$）に分けると，$Y_l^m \pm Y_l^{-m}$ の組み合わせにより，実数の波動関数をつくることができる．この実数型波動関数は $\hat{L}_z$ の固有関数ではないが，実数であるから確率密度（実数）に似た振る舞いをする．そのため，物理化学や量子化学の分野などでは，この実数型波動関数がよく用いられる．

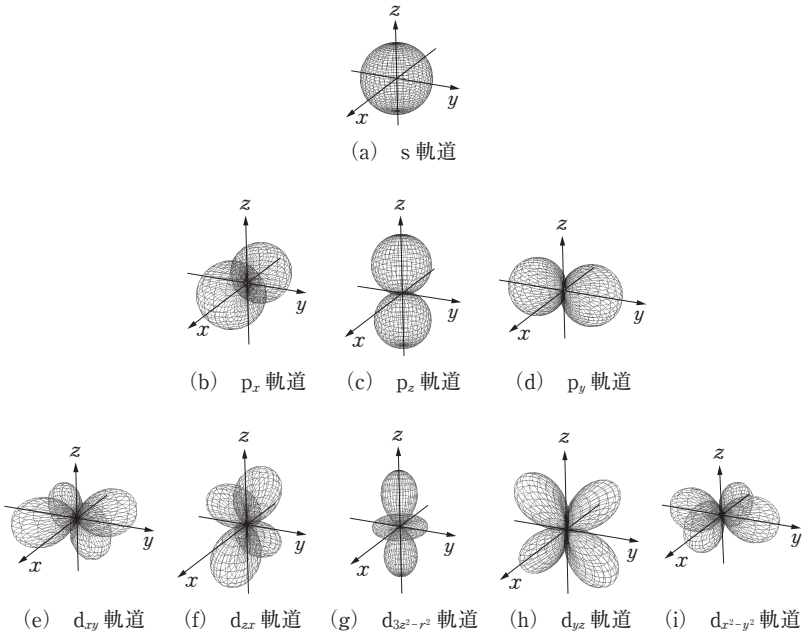
$l = 1$（p 状態）の場合　図 9.4(c) の Y_1^0 が z 軸の串団子のような分布状態になるのは，Y_1^0 が z 軸方向に偏りをもつためである．つまり，$Y_1^0 = \sqrt{3/4\pi}\cos\theta = \sqrt{3/4\pi}\, z/r$ から推測されるように，z/r の項が z 軸方向への偏り（串団子の形）を与えるのである．そのため，この Y_1^0 を **p_z 軌道**という（$\mathrm{p}_z = Y_1^0$）．

一方，Y_1^1 と Y_1^{-1} は同じエネルギー状態に対応する固有関数だから，$Y_1^{\pm 1}$ の任意の 1 次結合（線形結合）も同じエネルギーをもつ固有関数になる．そこで，次のような組み合わせをつくると Y_1^0 の z/r と同じ構造（つまり，x/r と y/r）になり，x 軸方向と y 軸方向の串団子ができる．それぞれを **p_x 軌道**，

p_y 軌道という．

$$\begin{cases} \mathrm{p}_x = \dfrac{1}{\sqrt{2}}(Y_1^{-1} - Y_1^{1}) = \sqrt{\dfrac{3}{4\pi}}\sin\theta\cos\phi = \sqrt{\dfrac{3}{4\pi}}\dfrac{x}{r} \\ \mathrm{p}_y = \dfrac{i}{\sqrt{2}}(Y_1^{-1} + Y_1^{1}) = \sqrt{\dfrac{3}{4\pi}}\sin\theta\sin\phi = \sqrt{\dfrac{3}{4\pi}}\dfrac{y}{r} \end{cases} \tag{9.100}$$

図 9.5(b)～(d)に，p_x 軌道，p_y 軌道，p_z 軌道を示している．これらの図を p 軌道の**接球面図**という．



(a)　s 軌道

(b)　p_x 軌道　(c)　p_z 軌道　(d)　p_y 軌道

(e)　d_{xy} 軌道　(f)　d_{zx} 軌道　(g)　$\mathrm{d}_{3z^2-r^2}$ 軌道　(h)　d_{yz} 軌道　(i)　$\mathrm{d}_{x^2-y^2}$ 軌道

図 9.5　実数型波動関数からつくった接球面図

$l = 2$（d 状態）の場合　5 つの固有関数 $Y_2^{\pm 2}$，$Y_2^{\pm 1}$，Y_2^0 の極図形は図 9.4(e)～(i)のような形をしている．これらから，3 次元対称性をもった d 軌道の接球面図を $l = 1$ の場合と同様な方法でつくることができる．

Y_2^0 の極図形が z 軸に沿った分布になる理由は，

$$Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta - 1) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}\,\frac{3z^2 - r^2}{r^2} \tag{9.101}$$

のように，z 軸方向に偏り（$Y_2^0 \propto 3z^2/r^2 - 1 \propto z^2/r^2$）をもつためで，この軌道を **$\mathrm{d}_{3z^2-r^2}$ 軌道**という（$\mathrm{d}_{3z^2-r^2} = Y_2^0$）．

そこで，次のような線形結合をとると，対称性の良い軌道ができる．それぞれを **d_{xy} 軌道**，**d_{zx} 軌道**，**d_{yz} 軌道**，**$\mathrm{d}_{x^2-y^2}$ 軌道**という．

$$\begin{cases} \mathrm{d}_{xy} = \dfrac{i}{\sqrt{2}}\left(Y_2{}^{-2} + Y_2{}^{2}\right) = \sqrt{\dfrac{15}{16\pi}}\sin^2\theta\sin 2\phi = \sqrt{\dfrac{15}{4\pi}}\dfrac{xy}{r^2} \\ \mathrm{d}_{zx} = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(Y_2{}^{-1} - Y_2{}^{1}\right) = \sqrt{\dfrac{15}{4\pi}}\sin\theta\cos\theta\cos\phi = \sqrt{\dfrac{15}{4\pi}}\dfrac{zx}{r^2} \\ \mathrm{d}_{yz} = \dfrac{i}{\sqrt{2}}\left(Y_2{}^{-1} + Y_2{}^{1}\right) = \sqrt{\dfrac{15}{4\pi}}\sin\theta\cos\theta\sin\phi = \sqrt{\dfrac{15}{4\pi}}\dfrac{yz}{r^2} \\ \mathrm{d}_{x^2-y^2} = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(Y_2{}^{-2} + Y_2{}^{2}\right) = \sqrt{\dfrac{15}{16\pi}}\sin^2\theta\cos 2\phi = \sqrt{\dfrac{15}{16\pi}}\dfrac{x^2-y^2}{r^2} \end{cases} \tag{9.102}$$

図 9.5(e)～(i)は d_{xy} 軌道，d_{zx} 軌道，$\mathrm{d}_{3z^2-r^2}$ 軌道，d_{yz} 軌道，$\mathrm{d}_{x^2-y^2}$ 軌道を描いた接球面図である．d_{xy} 軌道は z 軸対称で xy 面内に，d_{zx} 軌道は y 軸対称で zx 面内に，d_{yz} 軌道は x 軸対称で yz 面内にそれぞれある．そして，$\mathrm{d}_{x^2-y^2}$ 軌道は d_{xy} 軌道を z 軸の周りに 45° 回転させたものになっている．球面調和関数そのものよりも，このような実数関数で表した軌道の方が分子構造の指向性を表すので便利である．

表 9.3　角度方向の実数型波動関数 $Y_l{}^m = (-1)^{(m+|m|)/2}\Theta_l{}^m(\theta)\,\Phi_m(\phi)$ の例

l	m	$\Theta_l{}^m\Phi_m$（極座標表示）	$\Theta_l{}^m\Phi_m$（直交座標表示）	記号
0	0	$\dfrac{1}{\sqrt{4\pi}}$	$\dfrac{1}{\sqrt{4\pi}}$	s
1	1	$\sqrt{\dfrac{3}{4\pi}}\sin\theta\cos\phi$	$\sqrt{\dfrac{3}{4\pi}}\dfrac{x}{r}$	p_x
1	−1	$\sqrt{\dfrac{3}{4\pi}}\sin\theta\sin\phi$	$\sqrt{\dfrac{3}{4\pi}}\dfrac{y}{r}$	p_y
1	0	$\sqrt{\dfrac{3}{4\pi}}\cos\theta$	$\sqrt{\dfrac{3}{4\pi}}\dfrac{z}{r}$	p_z
2	2	$\sqrt{\dfrac{15}{16\pi}}\sin^2\theta\cos 2\phi$	$\sqrt{\dfrac{15}{16\pi}}\dfrac{x^2-y^2}{r^2}$	$\mathrm{d}_{x^2-y^2}$
2	−2	$\sqrt{\dfrac{15}{16\pi}}\sin^2\theta\sin 2\phi$	$\sqrt{\dfrac{15}{4\pi}}\dfrac{xy}{r^2}$	d_{xy}
2	1	$\sqrt{\dfrac{15}{4\pi}}\sin\theta\cos\theta\cos\phi$	$\sqrt{\dfrac{15}{4\pi}}\dfrac{zx}{r^2}$	d_{zx}
2	−1	$\sqrt{\dfrac{15}{4\pi}}\sin\theta\cos\theta\sin\phi$	$\sqrt{\dfrac{15}{4\pi}}\dfrac{yz}{r^2}$	d_{yz}
2	0	$\sqrt{\dfrac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta - 1)$	$\sqrt{\dfrac{5}{16\pi}}\dfrac{3z^2-r^2}{r^2}$	$\mathrm{d}_{3z^2-r^2}$

Chapter 11

ディラックのブラ・ケット記法

量子力学の基本は，「物理状態は重ね合わせ状態である」というアイデアで，これを記述する最適な数学ツールはベクトルである．ディラックは，量子力学的な状態を表すベクトルとして**ケットベクトル**を導入し，それを記号$|\ \rangle$で表現した．また，記号$\langle\ |$で表現される**ブラベクトル**も導入した．例えば，αという物理状態に対するケットベクトルは$|\alpha\rangle$（ケット・アルファ），ブラベクトルは$\langle\alpha|$（ブラ・アルファ）である．

このようなベクトルが存在する空間が**ヒルベルト空間**という複素数空間で，実数のベクトル空間（つまり，古典力学で普通に使っているユークリッド空間）を複素数にまで拡張したものである．

ディラックのブラ・ケット記法を用いて，これまでに学んできた量子力学の基本的な諸性質を より一般的な観点から見直すことは，さらなる深い理解につながるだけではなく，将来，量子力学のアドバンストコースを学ぶときにも役立つはずである．

11.1　ベクトルで考える

11.1.1　普通のコインと量子コイン

普通のコインを使ってコイン投げをして手のひらで受けると，コインは表か裏のどちらかを示す．いま，図 11.1 のように，水平なテーブルの上に不透明な円筒を立てて，その中にコインを投げ入れる実験をする．そして，コインが円筒内で静止する音を聞いた後に，観測者が円筒の中を覗いてテーブル上のコインの

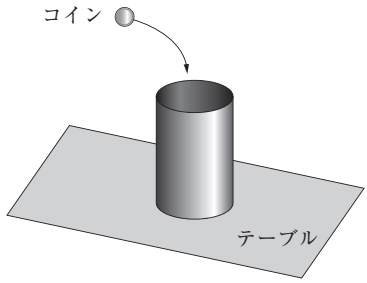


図 11.1　円筒の中にコインを投げ入れる実験

面が表か裏かを調べる．当然，コインのとり得る状態は表か裏の 2 通りだけであり，これは観測者が（実際に）観測しなくても変わらない事実である（コインが立つような特別な場合は考えない）．

そこで，最終状態が表か裏の 2 つの状態しか存在しない状況を表現するために，表の状態と裏の状態をそれぞれ

$$\text{表} \longleftrightarrow \boldsymbol{e}_1, \qquad \text{裏} \longleftrightarrow \boldsymbol{e}_2 \tag{11.1}$$

のようなベクトル $\boldsymbol{e}_1$ と $\boldsymbol{e}_2$ に対応させ，図 11.2(a)のように 2 次元平面内で互いに直交しているとする（ただし，$\boldsymbol{e}_1$ と $\boldsymbol{e}_2$ の長さはそれぞれ 1 とする）．

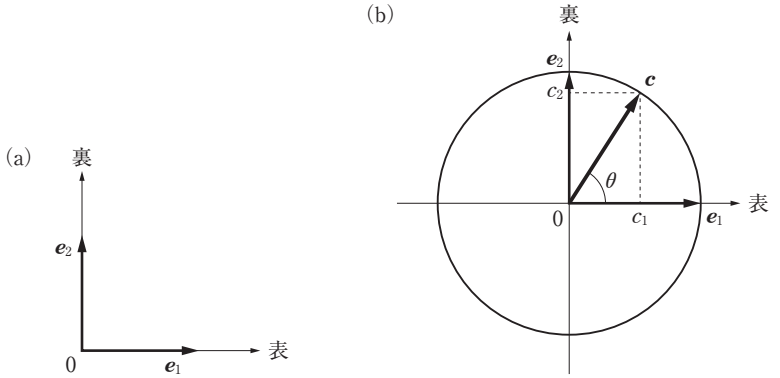


図 11.2　コインの状態
(a)　“普通のコイン”の表と裏の状態を表す 2 次元平面内の単位ベクトル $\boldsymbol{e}_1$ と $\boldsymbol{e}_2$
(b)　“量子コイン”の状態ベクトル $\boldsymbol{c}$ は $\boldsymbol{e}_1$ と $\boldsymbol{e}_2$ の重ね合わせ状態

対照的に，このコインが量子力学的な振る舞いをする（空想上の）“量子コイン”だとすると，円筒内に投げ入れたコインは観測するまでは表でも裏でもなく，表と裏が重ね合わさった状態になる（このような状態は日常の経験からはイメージできないが）．そのような円筒内のコインの量子状態は，図 11.2(b)のように，ベクトル $\boldsymbol{c}$ で

$$\boldsymbol{c} = c_1\boldsymbol{e}_1 + c_2\boldsymbol{e}_2 \tag{11.2}$$

と表すことができる（$\boldsymbol{c}$ の長さは 1 とする）．ここで，$\boldsymbol{c}$ と $\boldsymbol{e}_1$ のなす角度を θ とすると，係数は $c_1 = \cos\theta$，$c_2 = \sin\theta$ である．

ベクトル $\boldsymbol{c}$ のように，量子状態（いまはコインの状態）を表すベクトルのことを，一般に**状態ベクトル**という．量子コインの場合，表でも裏でもない状態があらゆる方向（360 度）に存在するので，状態の数は無限個である．

Chapter 14

量子力学の検証と応用

量子力学は様々な仮説や解釈や要請の積み重ねによって築かれてきた．前期量子論の時代から量子力学誕生の頃に提案された“不思議な仮説”はどれも難解であったが，科学技術の進歩によってそれらの多くが検証できるようになってきた．

14.1　量子もつれ状態（量子エンタングルメント）

アインシュタインは，「自然の事象が本質的に確率的である」ことを主張する量子力学の基本的な考え方を受け入れることができず，**EPR パラドックス**とよばれる思考実験を提唱した（1935 年）．これは量子力学の観測問題であり，「神はサイコロを振らない」と信じ，かつ「誰もみていないときでも，月は存在するはずだ」と，信奉する素朴実在論を比喩的に語っていたアインシュタインが，コペンハーゲン解釈の第一人者ボーアに突きつけた難問であった．

一方で，シュレーディンガーは EPR パラドックスに基づいて，2 つの粒子の重ね合わせにおいて“**量子もつれ**（**量子エンタングルメント**）”という奇妙な状態が生じることを指摘した．

14.1.1　粒子ペアの量子もつれ状態

いま，図 14.1 のようにスピン 1/2 の電子 1 と電子 2 のペアが，「合成スピン＝0」の状態で粒子源から生成され，互いに反対方向（y 軸方向）に遠ざかっているとしよう．

合成スピンがゼロのペアのスピン状態は，12.4 節で示した，スピン 1/2 の 2 個の電子から成る系の 1 重項状態（シングレット状態）と同じなので，

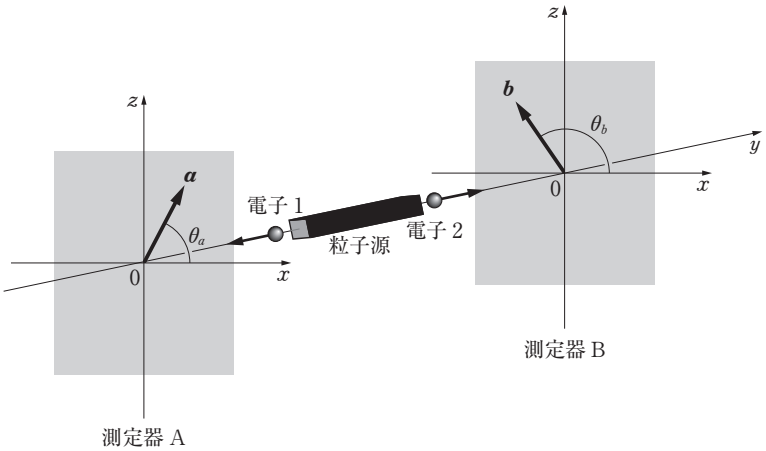


図 14.1　電子ペアの量子もつれ状態とスピン相関の測定実験

$$|\varphi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow_1\rangle \otimes |\downarrow_2\rangle - |\downarrow_1\rangle \otimes |\uparrow_2\rangle\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow_1\rangle|\downarrow_2\rangle - |\downarrow_1\rangle|\uparrow_2\rangle\right) \tag{14.1}$$

と表せる．これは，2 個の電子が $|\uparrow_1\rangle|\downarrow_2\rangle$ の状態と $|\downarrow_1\rangle|\uparrow_2\rangle$ の状態の重ね合わせ状態に，それぞれ（の振幅が $1/\sqrt{2}$ のため）50 %の確率で存在することを意味する．そのため，(14.1)の状態を測定すれば，重ね合わせ状態は $|\uparrow_1\rangle|\downarrow_2\rangle$ か $|\downarrow_1\rangle|\uparrow_2\rangle$ のどちらかに確定する．

ここで，電子 1 の測定結果だけに着目すれば，スピンは $|\uparrow\rangle$ 状態と $|\downarrow\rangle$ 状態にランダムに現れることになる．同様に，電子 2 の測定結果だけに着目すれば，スピンは $|\downarrow\rangle$ 状態と $|\uparrow\rangle$ 状態にランダムに現れることになる．

しかし，これら 2 つの電子の測定結果を付き合わせると，一方が $|\uparrow\rangle$ $(|\downarrow\rangle)$ であれば他方は必ず $|\downarrow\rangle$ $(|\uparrow\rangle)$ になることがわかる．つまり，観測により一方の状態が確定すると，もう一方の電子の状態も一瞬で自動的に決まるから，この現象は 2 つの電子の間に強い相関があることを意味する．しかし，2 つの電子がどれだけ離れていても瞬時に起こるから，この現象は局所的な相関ではない．

このような**非局所的な相関**をもつれ状態にある 2 電子（もっと一般的に 2 つの粒子）系を，**量子もつれ状態**という．(14.1)のように，量子もつれ状態では，2 つの粒子の状態はそれぞれの状態の単純な積で表すことはできない（Note

14.1 を参照）．特に，(14.1)の 1 重項（シングレット）の状態を **EPR 状態**という．

Note 14.1　**分離可能な系**　一般に，2 粒子の波動関数の積が

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_1\rangle + |\downarrow_1\rangle) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_2\rangle + |\downarrow_2\rangle) \tag{14.2}$$

のように，粒子 1 と粒子 2 で分離（因子化）して表せるとき，**分離可能な系**という．このような系では，量子もつれ状態（量子エンタングルメント）は生じない．

14.1.2　電子スピンの相関

量子もつれ状態にある 2 電子系のスピンを実際に測定した場合，どのような相関が期待されるだろうか？ それを調べるため，次のような実験を考えてみよう．図 14.1 のように y 軸上の離れた 2ヶ所に測定器 A と測定器 B をセットし，それぞれの z 軸から θ_a, θ_b だけ傾けた軸方向での粒子スピンを測定する．

それぞれの軸方向の単位ベクトルを $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}$ とし，その方向に沿ったスピン成分を検出するために $O^{(1)} = \boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{\sigma}^{(1)}$，$O^{(2)} = \boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{\sigma}^{(2)}$ のような内積をつくると，状態 $|\varphi\rangle$ のもとでのスピン 1 と 2 の相関 $C(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b})$ は

$$C(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}) \equiv \frac{1}{\hbar^2}\langle\varphi|O^{(1)}O^{(2)}|\varphi\rangle = -\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b} = -\cos(\theta_b - \theta_a) \tag{14.3}$$

となる（章末問題 [12.6] の (12.90) と (12.91) の $S(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b})$ を $\hbar^2 C(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b})$ とおいたものである）．例えば，$\theta_b = \theta_a$ の場合，(14.3) から $C = -1$ となり，完全な負の相関になる．この結果は，測定器 A の値が $+1$ (-1) であれば，測定器 B の値は -1 $(+1)$ になることを表しており，(14.1) のもつれ状態であることと完全に一致する．

✻組み合わせた相関の値　いま，測定器 A の設定を $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{a}'$ の 2 通りに，測定器 B の設定を $\boldsymbol{b}, \boldsymbol{b}'$ の 2 通りに選択できるようにして，それぞれの場合の相関を測定する．そして，それらの測定結果を組み合わせて

$$\bar{C} = |C(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}) - C(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}')| + |C(\boldsymbol{a}', \boldsymbol{b}) + C(\boldsymbol{a}', \boldsymbol{b}')| \tag{14.4}$$

のような相関 $\bar{C}$ を定義する．（この定義はベルが与えた．14.2.2 項を参照．）

相関 $\bar{C}$ の大きさは，具体的な角度を (14.4) に代入すれば求まる．例えば，$\theta_a = 0$, $\theta_b = \theta_a + \pi/4$, $\theta'_a = \theta_b + \pi/4$, $\theta'_b = \theta'_a + \pi/4$（つまり，$\theta_a = 0$, $\theta_b = \pi/4$, $\theta'_a = 2\pi/4$, $\theta'_b = 3\pi/4$）とおいてみよう．この場合，

$$C(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}) = \cos(\theta_b - \theta_a) = \cos(\pi/4),\quad C(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}') = \cos(\theta'_b - \theta_a) = \cos(3\pi/4)$$

$$C(\boldsymbol{a}', \boldsymbol{b}) = \cos(\theta_b - \theta'_a) = \cos(-\pi/4),\quad C(\boldsymbol{a}', \boldsymbol{b}') = \cos(\theta'_b - \theta'_a) = \cos(\pi/4)$$

という不等式になる．これが**ベルの不等式**とよばれるもので，因果律を前提とした局所的な理論（つまり，遠隔作用を含まない理論）が満たさなければならない関係である．

14.3　EPR 相関と量子情報科学

ベルの不等式の検証から，“EPR パラドックス”はパラドックスではなく，量子力学に内在する固有の相関（EPR 相関）であることがわかった．今日，**量子情報科学**（QIS：Quantum Information Science）の分野において，EPR 相関は「量子テレポーテーション」,「量子コンピュータ」,「量子暗号」などの最先端の技術の理論的な基礎となっている．

14.3.1　ベルの不等式の破れ

ベルの不等式(14.19)は，“隠れた変数理論”が満たすべき相関 $\bar{C}$ の上限が 2 であることを教えている．一方，量子力学で相関 $\bar{C}$ を計算すると，もつれ状態のために $\bar{C}$ が 2 よりも大きくなり，ベルの不等式が成り立たなくなる場合がある．実際，(14.5)の $\bar{C} = 2\sqrt{2} \approx 2.8$ のように，ベルの不等式の上限を大きく破る場合がある．したがって，ベルの不等式を実験で調べれば，量子力学と局所的な隠れた変数理論に基づく量子論の正否を検証できることになる．

ベルの不等式の検証は，ここで説明したスピンではなく，光子のペアの偏向の相関を測定して行われた．そして，この不等式が実際には破れていることを，アスペ，グレンジャー，ロージャーたちのグループが実証した（1982 年）．ベルの不等式を破る実験は非常に難しく，実験結果の解釈を局所実在論的な理論でも可能にする“抜け穴”があった．そのため，不等式を使わずに隠れた変数の理論を反証できる方法として，グリーンバーガー，ホーン，ツァイリンガーたちが 3 個以上の粒子のもつれ状態（これを，彼ら 3 名の頭文字をとって **GHZ 状態**という）を使う方法を提唱した（1989 年）．さらに，ハーディー－ヨルダンの方法（不等式のないベルの定理）なども提案された（1994 年）．

複数のグループによる実験から，測定値がベルの不等式の上限値（2）を標準偏差の 45 倍から 100 倍程度も破っていることがわかり，量子力学の正しさが確証された．そして，アインシュタインの“局所性”の概念と“実在の要素”（つまり，実在論）は放棄せざるを得なくなった．いい換えれば，量子力学は局所的でも因果的でもない理論であることが実証されたことになる．

EPR 相関　アインシュタインらによる“EPR パラドックス”の提唱によ

って，量子力学の理解が深まった．そして，“EPR パラドックス”の検証から次のことが明らかになった．

「もつれ状態にある原子のスピン状態は，測定されるまでは(14.1)のような重ね合わせ状態のままで，確定したスピン状態ではない．しかし，一方の粒子の状態を測定した瞬間に，それとは空間的に離れたもう一方の粒子の状態も確定する」

という**非局所的な相関**が存在する．

このような非局所的相関の存在は，“EPR パラドックス”が実はパラドックスではなかったことを意味するので，現在では，この相関は **EPR 相関**とよばれている．EPR 相関をもった系は，量子情報を処理する上で重要な役割を果たす．その具体例として，次項で，空想力や想像力を駆り立てる“量子テレポーテーション”について解説しよう．

14.3.2　量子テレポーテーション

量子もつれ状態という EPR 相関を利用して，未知の量子状態を遠隔地に転送する操作を**量子テレポーテーション**という．ここで（誤解のないように）強調しておきたいことは，転送されるのは粒子の状態だけであり，粒子自体が転送されるわけではないということである．図 14.3 は，量子テレポーテーションの基本構成を示したものである．

量子テレポーテーションの具体的な計算手順を説明しよう．

(1)「未知の光子 X」の状態 $|\Psi\rangle_X$ を次のように与える．

$$|\Psi\rangle_X = \alpha|\mathrm{H}\rangle_X + \beta|\mathrm{V}\rangle_X = \begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix} \tag{14.20}$$

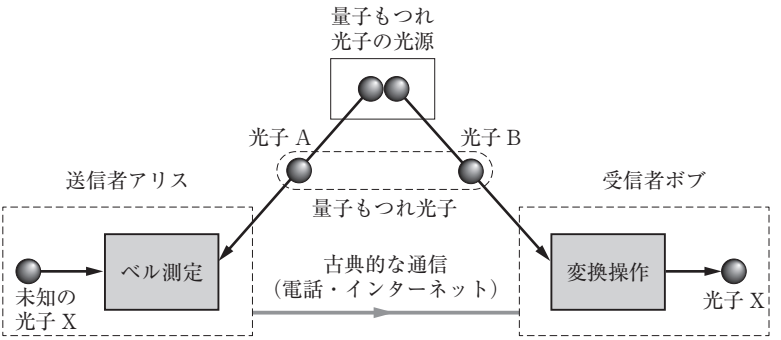


図 14.3　量子テレポーテーションの基本構成