

<研究ノート>

化学バイオ系学生に対する量子力学教育その1 :

ブラベクトルの理解

早瀬修一

Education of quantum mechanics for the students majoring in chemistry or in
biotechnology No 1:

Understanding bra vector

HAYASE Shuichi

キーワード: (量子力学, ベクトル, 線型空間, 線型形式, ブラベクトル, 化学系学生,
教育)

Key words: (quantum mechanics, vector, linear space, linear form, bra vector, chemistry
students, education)

1 緒言

著者は、化学バイオ系学科の学生に対して、平成23年(2011年)から基礎量子化学および物理化学演習(いずれも1セメスターの授業。演習は平成30年(2018年)まで)の授業を行ってきた。本研究ノートはこの授業のための講義ノート兼テキストを作成するための教材研究のノートである。

現在の量子力学の原形は、1925年から1930年頃に完成したものである。それ以来、様々な教科書が作られ、その教育が行われてきた。かつての量子力学の教科書¹⁾の多くは、古典物理学の破綻の提示に始まり、Schrödinger方程式の導入、厳密解が得られる場合での具体的なSchrödinger方程式の解法、量子力学の数学的基礎、近似法、対称性、等と続いていく道筋で書かれている。しかし、この方法は学生たちに、例えば簡単な統計力学や様々な特殊関数に対する慣れといった極端に多くの予備知識を要求している。それは、もともとそれらの教科書が理学部・物理学科のカリキュラムに合わせて作られたものであり、化学系学科の学生を対象とはしていなかったからである。一方、これまでに化学系の学部学生用に書かれた、特に入門段階での量子力学のテキストの中には、“数学を使わない”とか“化学者のための”といった枕言葉が付いたのはなほだ不十分な物が少なからずあった。それらはなぜ不十分なのか?その理由は、そのようなテキストで学んだ学力では、卒業研究あるいは修士課程において研究論文・研究解説を読んだり、あるいはGaussianのようなソフトウェアのマニュアルや出力ファイルを理解したりすることが、ほとんど不可能だからである。このような要求を満たすためには、いくつか出ている上級のテキストを読むしかない。しかし、従来の化学系学生用の入門テキストと上級テキストの間のレベル差は、独学で克服するにはあまりにも大きかった。

¹⁾L.I.シッフ:「量子力学(上,下)」井上 健記,吉岡書店。

著者は、このような状況下における化学系の学生に対し、より効率的に、できる限り(物理、化学、数学の)予備知識なしに量子力学の基礎を学んでもらい、本格的な量子力学の教科書(例えば Dirac²⁾ や Sakurai³⁾, Zabo & Ostrand⁴⁾)を読みこなし、研究現場で計算化学のソフトウェアを使いこなせるようになってもらうために、現代的な化学系学生のための量子力学の教材を開発することを思い立った。そのために多くの教科書で述べられている量子力学の生い立ちの詳細は割愛し、量子力学の基本概念を出発点にして、可能な限り数学的論理展開のみを使って理論の大枠と筋道を理解できるような教材構成を採用した。

上記のような教材構成を可能にするためには、公理的な論理構成でのテキストが必要になる。すなわち論理展開の前提として必要な事項を定義としてできる限り書き出し、そののみを使って量子力学を作り上げていくやり方である。このやり方は、学生たちにとっては難しすぎるという意見も多々あることは承知している。しかし、彼らは現在の化学系学生たちの一部が、高校時代に数学は履修する一方で、物理を履修しない学生が増えていることに気づいていない。特にバイオ系学生はそうである。そのような学生に物理的なイメージを要求する従来の量子力学課程は、かえって解りづらいものとなる。それは、数式の量の多少の問題ではない。もちろん純粋数学の勉強をする訳ではないので、全てを公理から証明はしない。また、数学者により研究され十分に確立した結果は、そのまま使わせてもらった部分も多い。にもかかわらず上述の公理的な方法をとる量子力学の課程は、量子力学という数学的道具がどのような論理構造を持ち、どのような自然観を提供しているのかを、学生たちが最もよく理解できる方法であると著者は信じている。

上記のような公理的な論理展開を使って書かれた最初の量子力学の教科書は、おそらくは Dirac²⁾のそれである。彼の教科書の冒頭は、状態の重ね合わせの原理から出発するのであるが、本格的な物理学の話に入る前の準備段階で「ブラベクトル」(或いは略して「ブラ」と呼ぶ)という概念が出てくる。そしてこの概念が後々まで学習者の懸念に残り続け学習の障害となるという問題がある。この問題への対処は、

- 1) 単なる記号として割り切って使う。
- 2) わからないと諦めて、その時点でその教科書を使った学習をやめる。

の二つであると予想できる。では Dirac の教科書のやり方は、入門的量子力学の教育法としては無力なのか？私はそうは思わない。本稿では上記 1) 2) のどちらでもない第三の選択肢を与えるブラベクトルの明解な解説法を提示する。

ブラベクトルを定義するためには、抽象的なベクトル(量子論ではケットベクトルまたはケットと呼ばれる)そのものを定義する必要がある。そしてこのケットベクトルの定義が意外にも Dirac の本ではおざなりにされている。もちろん物理的な議論はされているのだが、数学的なベクトルの定義が明示されていないため、そのことが返って彼の教科書を理解困難なものにしている。私はこの様な困難を除くには、数学の形式をサボることなく理論を積み上げるのが実は最も時間の節約になると考えている。そこで、以下に私が授業で使用した教材に沿ったブラ及びケットベクトルの理解の方法を示す事にする。

²⁾ P.A.M.ディラック：「量子力学 原書第4版」朝永他訳，岩波書店。

³⁾ J.J.サクライ：「現代の量子力学(上，下)」桜井明夫訳，吉岡書店。

⁴⁾ A.ザボ・N.S.オストラッド：「新しい量子化学(上，下)」大野公男，東京大学出版会。

2 ベクトル (ケットベクトル) と双対ベクトル (ブラベクトル)

2-1) 線型空間 (ベクトル空間) とケット

ベクトルを定義するには、ベクトルの集合を定義することから始めなければならない。これは大学生を定義するには、大学生が所属している大学がどのようなものかを理解する必要があることと類似している。この類似例の「大学」に相当するのが、ベクトルを集めてできた集合である線型空間である。次の定義は線型空間がどのようなものかを明示するものである。

定義1：線型空間 V の定義

I. ある集合 V に含まれる任意の元(要素) $\forall x, \forall y \in V$ に対して、和 $x + y \in V$ が存在し、以下の規則が成立つ。 V の任意の元 $\forall x, \forall y, \forall z \in V$ に対して

- 1) $(x + y) + z = x + (y + z)$ (結合則)
- 2) $x + y = y + x$ (交換則)
- 3) ある元 $\exists o(o \in V)$ が存在し、任意の元 $\forall x$ に対して、 $o + x = x$ が成立つ。(単位元の存在)
- 4) 任意の元 $\forall x \in V$ に対して、逆元と呼ばれるある元 $\exists x' \in V$ がただ一つ存在し、 $x + x' = o$ が成立つ。(逆元の存在)

II. 任意の元 $\forall x \in V$ とスカラー体 $K^5)$ (K は本稿では複素数全体の集合) に属する任意の元 $\forall c \in K$ に対して、スカラー倍 $cx \in V$ が存在し、任意の元 $\forall x, \forall y \in V$, K の任意の元 $\forall c, \forall c' \in K$ に対して以下の法則が成立つ。

- 5) $c(x + y) = cx + cy$
- 6) $(c + c')x = cx + c'x$
- 7) $(cc')x = c(c'x)$
- 8) $1 \cdot x = x$

以上述べた条件 I-1)~4) と II-5)~8) を満たす集合 V をスカラー体 K 上の線型空間と言う。この集合、すなわち線型空間 V の元をベクトルとよぶ。

定義1を読むとわかるように、ベクトルとは線型空間の元のことであり、高校数学に出てくるような矢印は、定義1には存在しない。もちろん矢印で表記されるいわゆる矢線ベクトルも、ベクトルの一種である。しかし、定義1の条件を満たすものは、全てベクトルであるというのが本来のベクトルの定義である。量子力学で粒子の状態を表現するために使われているベクトルは、高校時代に習った矢線ベクトルや2項数ベクトル、3項数ベクトルのような幾何学的なベクトルではなく、粒子の出現確率に関連付けられたベクトルである。そして量子力学的状態を記述するベクトル(すなわちブラベクトル)は、先の定義1で定義された線型空間に内積(距離)と収束性(完備性)の二つを定義した集合の元である。次節では、この内積と収束性について述べることにする。

5) 体とは、四則演算ができ(和と積が存在し、単位元があり任意の元に逆元が存在する)、和と積の結合法則、交換法則、分配法則が成立つ集合を体と呼ぶ。有理数、実数、複素数全体の集合は、体の条件を満たしている。線型空間の定義で使われる和の集合は、スカラー体と呼ばれている。

2-2) ベクトルの内積と線型空間の完備性

ケットを定義するためには、線型空間 V の定義に加えて、 V の二つの元の内積を定義し、さらにそれを使って V の元のノルムを定義する必要がある。まず、内積の定義から始めよう。

定義2：内積の定義

二つのベクトル $\mathbf{a} \in V$ と $\mathbf{b} \in V$ の順序対 (\mathbf{a}, \mathbf{b}) ⁶⁾ に対してスカラー体 K ⁵⁾ の元 α を対応させる写像 ϕ を

$$\begin{array}{ccc} \phi: V \times V & \rightarrow & K \\ \Downarrow & & \Downarrow \\ (\mathbf{a}, \mathbf{b}) & \rightarrow & \alpha \end{array}$$

と定義する。 ϕ の (\mathbf{a}, \mathbf{b}) に対する像を $\phi(\mathbf{a}, \mathbf{b})$ とかく。この ϕ が、任意のベクトル $\mathbf{a} \in V$ と $\mathbf{b} \in V$ と任意のスカラー $x \in K$ に対して、以下の性質

- 1) $\phi(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \phi(\mathbf{b}, \mathbf{a})^*$,
- 2) $\phi(\mathbf{a}, \mathbf{b} + \mathbf{c}) = \phi(\mathbf{a}, \mathbf{b}) + \phi(\mathbf{a}, \mathbf{c})$,
- 3) $\phi(x\mathbf{a}, \mathbf{b}) = x^*\phi(\mathbf{a}, \mathbf{b})$,
- 4) $\phi(\mathbf{a}, \mathbf{a}) \geq 0$ (等号は $\mathbf{a} = \mathbf{o}$ の時),

を満たす時、写像 ϕ および ϕ の像 $\phi(\mathbf{a}, \mathbf{b})$ を \mathbf{a} と \mathbf{b} の内積と定義する。通常 ϕ の像 $\phi(\mathbf{a}, \mathbf{b})$ を単に (\mathbf{a}, \mathbf{b}) と書き、これをベクトル \mathbf{a} と \mathbf{b} の内積という。

高校数学では、二つのベクトルの長さとなす角の余弦により内積は定義された。しかし、現段階では、ベクトルの長さもなす角も定義されていない。上記の内積の定義を使うと、矢線ベクトルの長さに相当するベクトルのノルム (定義 2a), 及び二つのベクトル (V の元) 間の距離 (定義 2b) が定義される。なお、内積の定義された線型空間を計量線型空間という。

定義2 a: ノルム

K 上の線型空間 V に含まれる任意の元 \mathbf{a} (これを $\forall \mathbf{a} \in V$ と略記する) に対して、

$$\|\mathbf{a}\| = \sqrt{(\mathbf{a}, \mathbf{a})}$$

となる実数 $\|\mathbf{a}\|$ をベクトル \mathbf{a} のノルムと言う。

定義2 b: 距離

K 上の線型空間 V に含まれる任意の元 $\forall \mathbf{a} \in V$ と $\forall \mathbf{b} \in V$ に対して、

$$d(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \|\mathbf{a} - \mathbf{b}\| = \sqrt{(\mathbf{a} - \mathbf{b}, \mathbf{a} - \mathbf{b})}$$

で定義された函数 $d(\mathbf{a}, \mathbf{b})$ を \mathbf{a} と \mathbf{b} の間の距離という。

2-3) 線型空間 V の完備性

V に属するベクトル間の距離の定義により、ベクトル列の収束が定義できる。

定義3. 完備性

V の任意のベクトル列 $\{\mathbf{a}_i\} = \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3, \dots, \mathbf{a}_n, \dots \in V$ を考える。 $\{\mathbf{a}_i\}$ が

$$\|\mathbf{a}_n - \mathbf{a}_m\| \rightarrow 0 \quad (m, n \rightarrow \infty) \quad (3.1)$$

の時、 \mathbf{a}_n があるベクトル \mathbf{a} ($\in V$) に収束する。すなわち

⁶⁾ 線型空間 V の元 \mathbf{a}, \mathbf{b} をからつくられた数学的対象 (\mathbf{a}, \mathbf{b}) で、「 $(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = (\mathbf{c}, \mathbf{d})$ と $\mathbf{a} = \mathbf{c}$ かつ $\mathbf{b} = \mathbf{d}$ が同値である」という条件を満たすものを順序対という。

$$\|a_n - a\| \rightarrow 0 \quad (n \rightarrow \infty) \quad (3.2)$$

が成立つ。大切なのは、この時、その a が $a \in V$ であるならば、線型空間 V はノルム $\|\bullet\bullet\bullet\|$ に関して完備であるという。

ある集合（ここでは V ）が完備であることが重要なのは、 V の元で作った収束する列が収束する元が必ず V に含まれているということである。これは、実数の集合 R の元を各項とする収束数列が収束する先は、必ず R に含まれることに対応する。従って R も完備な集合である。この完備性は、量子力学で多用する状態ベクトルが基底ベクトルで展開できるという性質を保証することになる。（残念ながら本稿ではここまでは解説しない。）以上述べた完備性を持つ計量線型空間を Hilbert 空間という。ケットベクトルは、この Hilbert 空間の元である。

2-4) 線型型式とブラベクトル

線型空間の元に対して作用し別の元に対応させる作用、或いは対応関係は、一般に写像と呼ばれている。これは函数を一般化したものであり、通常函数が数から数への対応関係であるのに対し、写像は数の集合をも含む一般的な集合 V の元から他の集合 W の元への対応関係である。（もちろん $V=W$ であってもよい）これら写像の中には、 V の元 x に対してスカラー体 K の元 y を対応させるものがあり、それが以下に示す線型型式である。

定義 4：線型形式

スカラー体 K （ここでは複素数体を想定する）上の線型空間 V から K への写像 f が、 $x \in V$ を使って

$$\begin{array}{ccc} f: V & \rightarrow & K \\ \Downarrow & & \Downarrow \\ x & \rightarrow & f(x) \end{array}$$

と定義されている時、 f が任意のベクトル $\forall x, \forall y \in V$ および任意のスカラー $\forall \alpha \in K$ に対して

$$f(x+y) = f(x) + f(y) \quad (4.1)$$

$$f(\alpha x) = \alpha f(x) \quad (4.2)$$

を満たす時、 f を V 上の線型形式という。 $f(x)$ は $f \cdot x$ とも表記する。

一般に写像は和とスカラー倍が定義される。もちろん線型型式も同様である。ここでは、線型型式の場合の和とスカラー倍を定義して議論を進める。

定義 4 a：

線型形式 f と g 、および複素数体 K の元 $c (\in K)$ をとり、 f と g の和と f のスカラー倍を

$$\text{和} : : f+g : x \in V \rightarrow f(x) + g(x) \in K \quad (4.3)$$

$$\text{スカラー倍} : : cf : x \in V \rightarrow c \times f(x) \in K \quad (4.4)$$

と定義する。ただし、 \times は複素数の積を表す。またこの定義を

$$(f+g)(x) = f(x) + g(x) \quad (4.5)$$

$$(cf) \cdot (x) = c \times f(x) \quad (4.6)$$

とも書く。

定義4 a の(4.3)式と(4.4)式が可能であるためには、 $f(x) + g(x)$ 及び $c \times f(x)$ が K の元、すなわち複素数である必要があるが、複素数は和と積について閉じているので問題ない。

定義5. 双対空間

定義4 で定義された V 上の任意の線型形式 f を全て集めた集合に、定義4 a 定義された和とスカラー倍が存在する時、これを V^* と書き V の双対空間とよぶ。

上に述べた定義5 中の V^* は、定義4 a に示した和とスカラー倍が定義されている時、線型形式の定義と複素数の性質より線型空間の定義1 を満たすことがわかる。そのため以下の定理6 が成り立つ。

定理6. 双対空間は線型空間であること

線型空間 V の双対空間 V^* は、 K 上の線型空間である。

さらに、 V^* の任意の元である線型形式は、線型空間 V の二つの元の内積を使って以下のように表現することができる。

定理7：Riesz の表現定理

任意の線型形式 $\forall f \in V^*$ に対して、あるベクトル $\exists \phi_f \in V$ がただ一つ存在し、任意のベクトル $\forall \psi \in V$ に対して、 $f\psi = (\phi_f, \psi)$ と表される。

この定理7は、ブラベクトルの定義の基礎となる定理である。ディラックは彼のテキストの中で、定理7の中に出てくる集合 V のベクトル ψ をケットベクトル $|\psi\rangle$ と、 V のもう一つのベクトル ϕ_f をケットベクトル $|\phi_f\rangle$ と書く時、 V の双対空間 V^* の元 $f (\in V^*)$ をブラベクトル $\langle \phi_f |$ と書くと定義したのである。従って、 $f\psi = (\phi_f, \psi)$ をディラックの記法で書くと、

$$f|\psi\rangle = \langle \phi_f | \psi \rangle$$

となる。すなわちブラベクトル $\langle \phi_f |$ は、線型形式 f のことであり、ブラベクトルの集合は双対空間 V^* を意味する。従ってブラベクトルは、矢線ベクトルでは表せないにもかかわらず、確かにベクトルなのである。

初学者にとっては、写像がベクトルであるというディラックの主張に強い違和感を感じるのは、著者自身にも経験がある。しかし、線型形式が確かにベクトルの定義を満たしているという事実を踏まえると、動かし難い事実である。この事実、「線型形式はベクトルである」、を認識しないでいると、ブラベクトルが出てきた時点で初学者はディラックの教科書を読むことに必ず挫折するだろう。

3 跋語

著者は、授業の中で、線型空間、内積、距離、写像、線型形式の定義を「手を変え品を変え」詳述することになっている。それによって、ベクトルが矢線を意味するものではなく、ある種の演算法則を満たす集合の元を意味するものであることを頭に染み込ませることにより、量子力学の出発点に受講学生を立たせるのである。

ただし、学生たちが量子力学を記述するベクトルの認識をどこまで持っているのかを、単純な筆記試験で調べるのは難しい。彼らがこの認識をモノにするには、「基礎量子化学」の受講した後、注に挙げた文献⁷⁾の少なくとも一つを精読する必要があるだろう。ただ、そのモチベーションを私の授業が、あるいは私のテキストが彼らに与えられているかどうかは、残念ながら分からない。

4 謝辞

本稿は、私が工学部化学バイオ系学生のために開講してきた基礎量子化学のテキストとして用意し利用してきた教科書「化学の量子論⁸⁾」をベースにまとめたものである。この教材の開発にあたり、前鳥取大学教育センター准教授・後藤和夫博士に拙著を読んでいただき、数学的論理展開の確認に関する貴重なコメントをいただいた。この場を借りて感謝の言葉を贈りたい。ただし、教材中に今も残る不備な点に関しては、全面的にその責任は私個人にあることは言うまでもない。

早瀬修一 (鳥取大学工学研究科・化学バイオ系学科)

Abstract

The shortage of scientific understanding on physics has hindered chemistry students from understanding quantum mechanics in Japan. On the other hand, many of them studied full course of the high school level math. The author has made use of the math understanding to let the students understand quantum mechanics. As one of examples for usage of the math understanding, I suggest that a teaching method of “bra vector” in quantum mechanics by using axiomatic construction of linear algebra.

⁷⁾ C.J.アイシャム：「量子論」佐藤・森川 訳，吉岡書店
もしくは、

清水 明：「新版 量子論の基礎」サイエンス社
を推薦する。

⁸⁾ 早瀬修一：「化学の量子論」未発表。shu_bird@icloud.com へ「量子論テキスト請求」というタイトルで e-メールをいただければ pdf をお送りします。