不確定性関係

一般に，一つの物理量演算子 $\hat{A}$ に注目すれば，その固有ベクトルが存在し，固有ベクトル状態においては，$\hat{A}$ の測定値は100% 確実に固有値に等しい．また，固有ベクトルでない状態においても，固有値の出現確率を求めることができた．

二つの物理量演算子 $\hat{A}, \hat{B}$ があったとき，両者が可換，つまり $\hat{B}\hat{A} = \hat{A}\hat{B}$ ならば，$\hat{A}$ と $\hat{B}$ の同時固有ベクトルが存在する．つまり $\hat{A}$ と $\hat{B}$ の値が両方とも確定した状態がある．また，同時固有ベクトルではない状態においても，$\hat{A}$ と $\hat{B}$ の値に関する結合確率を求めることができた．

しかし，物理量演算子 $\hat{A}, \hat{B}$ が非可換，つまり $\hat{B}\hat{A} \neq \hat{A}\hat{B}$ だと，$\hat{A}$ と $\hat{B}$ の値を一斉に確定させることができないことがある．$\hat{A}$ の値を確定させれば $\hat{B}$ の値が確定せず（確率的にばらつき），逆に $\hat{B}$ の値を確定させれば $\hat{A}$ の値が確定しないということが起こる．このようなとき $\hat{A}$ と $\hat{B}$ は不確定性関係にあるという．

不確定性関係は，量子力学が作られてすぐの頃，1927 年にハイゼンベルク (Heisenberg) によって見い出された．当初，ハイゼンベルクは不確定性関係を曖昧な形で述べたが，その後，多くの人がいろいろなバージョンの不確定性関係を数学的に厳密に仕上げた．いろいろなバージョンの不確定性関係というのは，数式の見かけが異なっているだけではなく，物理的内容も異なっている．また，不確定性関係を検証する実験も今日までに数多く行われている．ここでは，ケナードとロバートソンの流儀の不確定性関係を解説しよう．

コーシー・シュワルツの不等式

ヒルベルト空間の基本的性質であるコーシー・シュワルツの不等式 (Cauchy-Schwarz inequality) を証明しよう．ヒルベルト空間 $\mathscr{H}$ の任意のベクトル $|\phi\rangle, |\chi\rangle$ に対して

$$\langle\phi|\phi\rangle\langle\chi|\chi\rangle \geq \left|\langle\phi|\chi\rangle\right|^2 \tag{1}$$

が成り立つというのがコーシー・シュワルツの不等式である．これを，$\langle\chi|\chi\rangle = 0$ の場合と $\langle\chi|\chi\rangle \neq 0$ の場合に分けて証明する．

$\langle\chi|\chi\rangle = 0$ の場合は $|\chi\rangle = 0$ なので (1) の両辺ともにゼロであり，等号が成立する．

$\langle\chi|\chi\rangle \neq 0$ の場合は，任意の複素数 t に対して

$$|\theta\rangle := |\phi\rangle - t|\chi\rangle \tag{2}$$

とおき，$\langle\theta|\theta\rangle \geq 0$ という式を展開して

$$\langle\phi|\phi\rangle - t\langle\phi|\chi\rangle - t^*\langle\chi|\phi\rangle + |t|^2\langle\chi|\chi\rangle \geq 0 \tag{3}$$

を得る．t に

$$t = \frac{\langle\chi|\phi\rangle}{\langle\chi|\chi\rangle} \tag{4}$$

を代入して $\langle\chi|\phi\rangle = \langle\phi|\chi\rangle^*$ を使って式 (3) を整理すると (1) を得る．これにて証明終了．

問 1．内積の性質から，$|\chi\rangle = 0$ ならば $\langle\phi|\chi\rangle = 0$ であることを証明せよ．

問 2．式 (4) を (3) に代入して (1) を導け．

コーシー・シュワルツの不等式の幾何学的意味はベクトル $|\phi\rangle = t|\chi\rangle + |\theta\rangle$ を分解した $|\theta\rangle$ のノルムが非負だということに他ならない．

不等式 (1) の等号成立条件は $|\chi\rangle = 0$ または $|\theta\rangle = 0$ である．後者は $|\phi\rangle = t|\chi\rangle$ となる数 t の

存在を意味する．言い換えると，$|\phi\rangle$ と $|\chi\rangle$ が一次従属であることが (1) の等号成立の必要十分条件である．

不確定性関係

ミクロの世界においては，同じ状態の系を多数用意して同じ物理量を測定しても，測定値は同一の値にならず，測るたびに異なった値を得ることがある．状態ベクトル $|\psi\rangle$ における物理量 $\hat{A}$ の測定値の平均を

$$\langle \hat{A} \rangle := \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \tag{5}$$

と書く．測定値と平均値の差の 2 乗平均

$$V(\hat{A}) := \left\langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \right\rangle \tag{6}$$

を $\hat{A}$ の**分散** (variance) といい，分散の平方根

$$\sigma(\hat{A}) := \sqrt{\langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \rangle} \tag{7}$$

を $\hat{A}$ の**標準偏差** (standard deviation) という．なお，$\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle$ は正確には $\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle \hat{I}$ のことである．ここで $\hat{I}$ は恒等演算子．分散も標準偏差も「測定値のばらつきぐあい」の定量的な指標である．測定値が毎回同じ値なら，$V(\hat{A}) = 0$, $\sigma(\hat{A}) = 0$ になる．

自己共役演算子で表される任意の物理量 $\hat{A}, \hat{B}$ について

$$\sigma(\hat{A})\sigma(\hat{B}) \geq \frac{1}{2} \left| \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right| \tag{8}$$

が成り立つ．これを**ロバートソンの不確定性関係** (uncertainty relation of Robertson) という．

この不等式を証明しよう．そのために

$$\Delta \hat{A} = \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle \hat{I} \tag{9}$$

$$\Delta \hat{B} = \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle \hat{I} \tag{10}$$

$$|\phi\rangle = \Delta \hat{A} \, |\psi\rangle \tag{11}$$

$$|\chi\rangle = \Delta \hat{B} \, |\psi\rangle \tag{12}$$

をコーシー・シュワルツの不等式 (1) に代入すると

$$\langle \psi | (\Delta \hat{A})^2 | \psi \rangle \langle \psi | (\Delta \hat{B})^2 | \psi \rangle \geq \left| \langle \psi | \Delta \hat{A} \, \Delta \hat{B} | \psi \rangle \right|^2 \tag{13}$$

を得る．左辺に関しては標準偏差の定義 (7) から $\langle \psi | (\Delta \hat{A})^2 | \psi \rangle = \sigma(\hat{A})^2$ である．(13) の右辺の中身は

$$\Delta \hat{A} \, \Delta \hat{B} = \frac{1}{2} \{ \Delta \hat{A}, \Delta \hat{B} \} + \frac{1}{2} [\Delta \hat{A}, \Delta \hat{B}]$$

と書き直される．ここで $\{\hat{C}, \hat{D}\} = \hat{C}\hat{D} + \hat{D}\hat{C}$ という記法を使った．$\{\Delta \hat{A}, \Delta \hat{B}\}$ は自己共役，$[\Delta \hat{A}, \Delta \hat{B}]$ は反自己共役なので，$\langle \psi | \{\Delta \hat{A}, \Delta \hat{B}\} | \psi \rangle$ は実数，$\langle \psi | [\Delta \hat{A}, \Delta \hat{B}] | \psi \rangle$ は純虚数になる．従って，

$$\begin{aligned} & \left| \langle \psi | \Delta \hat{A} \, \Delta \hat{B} | \psi \rangle \right|^2 \\ = \; & \frac{1}{4} \langle \psi | \{ \Delta \hat{A}, \Delta \hat{B} \} | \psi \rangle^2 + \frac{1}{4} \left| \langle \psi | [\Delta \hat{A}, \Delta \hat{B}] | \psi \rangle \right|^2 \end{aligned}$$

となる．また，

$$[\Delta \hat{A}, \Delta \hat{B}] = [\hat{A}, \hat{B}]$$

もわかる．従って (13) から

$$\begin{aligned} \sigma(\hat{A})^2 \sigma(\hat{B})^2 \; & \geq \; \frac{1}{4} \langle \psi | \{ \Delta \hat{A}, \Delta \hat{B} \} | \psi \rangle^2 \\ & \quad + \frac{1}{4} \left| \langle \psi | [\Delta \hat{A}, \Delta \hat{B}] | \psi \rangle \right|^2 \\ & \geq \; \frac{1}{4} \left| \langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle \right|^2 \end{aligned} \tag{14}$$

を得る．両辺の平方根をとると，

$$\sigma(\hat{A})\sigma(\hat{B}) \geq \frac{1}{2} \left| \langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle \right| \tag{15}$$

となり，(8) が導かれた．

問 3. 分散の定義式 (6) から

$$V(\hat{A}) = \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2 \tag{16}$$

が成り立つことを示せ．

問 4. 演算子 $\hat{A}, \hat{B}$ は自己共役とする．

(i) 期待値 $\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$ は実数であることを

証明せよ．

(ii) $\{\hat{A},\hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$ は自己共役であることを示せ．つまり，$(\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A})^\dagger = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$ が成り立つことを示せ．

(iii) $[\hat{A},\hat{B}]$ は反自己共役，つまり $[\hat{A},\hat{B}]^\dagger = -[\hat{A},\hat{B}]$ が成り立つことを示せ．

(iv) 期待値 $\langle\psi|[\hat{A},\hat{B}]|\psi\rangle$ は純虚数であることを示せ．

問 5．ロバートソンの不等式の等号成立条件を考えよ．

位置と運動量の不確定性関係

前節では任意の物理量の不確定性関係を述べた．位置 $\hat{X}$ と運動量 $\hat{P}$ は特定の物理量であるが，重要な物理量であり，ハイゼンベルクが最初に発見したのも位置と運動量の不確定性関係なので，これを特別扱いして説明する．

位置 $\hat{X}$ と運動量 $\hat{P}$ は正準交換関係 $[\hat{X},\hat{P}] = i\hbar\hat{I}$ を満たすので，ロバートソンの不確定性関係 (15) より

$$\sigma(\hat{X})\sigma(\hat{P}) \geq \frac{1}{2}\hbar \tag{17}$$

が成り立つ．これを**ケナードの不確定性関係** (uncertainty relation of Kennard) という．右辺が状態ベクトル $|\psi\rangle$ に無関係な物理定数になったところが注目すべき点である．

問 6．(i) 以前にも出題したが，任意の正の実数 λ に対して次の等式（ガウス積分の公式）が成立することを証明せよ：

$$J(\lambda) := \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\lambda x^2}\,dx = \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}}. \tag{18}$$

(ii) 次の関係式を証明せよ：

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2\,e^{-\lambda x^2}\,dx = \frac{1}{2\lambda}\sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} \tag{19}$$

（ヒント：$J(\lambda)$ を λ で微分する）．

(iii) 次の関係式を証明せよ：

$$\int_{-\infty}^{\infty} x\,e^{-\lambda x^2}\,dx = 0. \tag{20}$$

(iv) 次の関係式を証明せよ：

$$\int_{0}^{\infty} x\,e^{-\lambda x^2}\,dx = \frac{1}{2\lambda}. \tag{21}$$

(v) a は任意の実数として，次の関係式を証明せよ：

$$\int_{-\infty}^{\infty} x\,e^{-\lambda(x-a)^2}\,dx = a\sqrt{\frac{\pi}{\lambda}}. \tag{22}$$

問 7．a,k は任意の実数，b は正の実数として，波動関数

$$\psi(x) = (2\pi b^2)^{-\frac{1}{4}}\cdot e^{-\frac{1}{4b^2}(x-a)^2+ikx} \tag{23}$$

について以下の問いに答えよ．

(i) 関数 $\rho(x) := |\psi(x)|^2$ のグラフを描け．

(ii) 関数 $f(x) := \mathrm{Re}\,\psi(x)$ のグラフを描け．

(iii)

$$\langle\psi|\psi\rangle := \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2\,dx = 1$$

であることを示せ．

(iv)

$$\langle\psi|\hat{X}|\psi\rangle := \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)^*\,x\,\psi(x)\,dx = a$$

であることを示せ．

(v)

$$\begin{aligned}\langle\psi|(\hat{X}-a)^2|\psi\rangle &:= \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)^*(x-a)^2\psi(x)\,dx \\ &= b^2\end{aligned}$$

であることを示せ．このことから

$$\sigma(\hat{X}) = b$$

であることがわかる．

(vi)

$$\begin{aligned}\langle\psi|\hat{P}|\psi\rangle &:= \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)^*\Big(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\Big)\psi(x)\,dx \\ &= \hbar k\end{aligned}$$

であることを示せ．

(vii)

$$\begin{aligned}
&\langle\psi|(\hat{P}-\hbar k)^2|\psi\rangle \\
:=\ &\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)^*\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}-\hbar k\right)^2\psi(x)\,dx \\
=\ &\frac{\hbar^2}{4b^2}
\end{aligned}$$

であることを示せ．このことから

$$\sigma(\hat{P})=\frac{\hbar}{2b}$$

であることがわかる．以上より，(23) の波動関数に関しては

$$\sigma(\hat{X})\sigma(\hat{P})=\frac{\hbar}{2}$$

が成り立つことがわかる．つまり，波動関数 (23) はケナードの不等式 (17) の等号が成立する状態になっている．このことから波動関数 (23) で表される状態のことを**最小不確定性波束** (minimum uncertainty wave-packet) ともいう．

参考文献

不確定性関係についての手短な解説が雑誌『パリティ』（丸善出版）2016 年 2 月号 p.41 に掲載されている．「多様化する不確定性関係」と題するさらに詳しい解説記事がウェブに公開されている．「多様化する不確定性関係」をキーワードとしてウェブ検索すればすぐに見つかる．