不確定性関係

エルミート演算子の不確定性関係を求めます。

適当な状態 $|\phi\rangle$ による演算子 T の期待値を $<T>$ と書くことにします。エルミート演算子 $A=A^\dagger, B=B^\dagger$ があり、それらから

$$\Delta A = A - <A> \ , \ \Delta B = B - <B>$$

として演算子 $\Delta A, \Delta B$ を作ります。A, B はエルミート演算子なので、これらはエルミート演算子です (エルミート演算子の期待値は実数)。$\Delta A^2 = (\Delta A)^2$ は期待値の性質 (線形性)

$$<v+w> = <v> + <w> \ , \ <v<w>> = <v><w>$$

から

$$<\Delta A^2> = <(A - <A>)^2> = <A^2> - <A>^2$$

$<\Delta A^2>$ を分散、$\sqrt{<\Delta A^2>}$ を標準偏差と呼び、分散は期待値からのばらつきを表わしています。$<\Delta A>$ は平均二乗偏差と呼ばれ

$$<\Delta A> = \sqrt{<(A - <A>)^2>}$$

となっています。
　このとき

$$<\Delta A^2><\Delta B^2> \geq \frac{1}{4}|<[A,B]>|^2$$

という不等式が成立します。これが不確定性関係 (uncertainty relation) の一般的な形で、ロバートソンの不等式とも呼ばれます。不確定性関係によって、量子論では現実的に無茶だと思えるような発想を可能とさせています。
　A, B を位置 x と運動量 p にして、演算子として計算されたものが

$$<\Delta x^2><\Delta p^2> \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

となり、不確定性関係と言った時はこれを指すことが多いです。この不等式はケナードによって示されたために、ケナードの不等式とも呼ばれます。また、ハイゼンベルクの不確定性原理としてこれが示されることがあります

が、ハイゼンベルクが示した不確定性原理の意味は異なっています (ハイゼンベルクは測定の誤差と測定による擾乱に対する関係として与えていた)。

このように位置と運動量の間に制限があるために（状況を決定させるための情報が足りない)、古典論のように決定した状況を作れないとも言えます。また、３次元空間を考えて、例えば位置が z 成分で、運動量が y 成分であるとすれば、不確定性関係は適用されず同時決定することが可能です。

不確定性関係を示していきます。ベクトルの内積とノルムに対する不等式として、シュワルツ (Schwarz) の不等式と呼ばれるものがあり、それはベクトルを v, w とすれば

$$|v\cdot w|^2 \leq v^2w^2$$

となっています。| | は絶対値、「$\cdot$」は内積です。状態 $|\Delta A\rangle, |\Delta B\rangle$ にすれば、左辺はブラケットの内積、右辺はブラケットのノルムになるので

$$|\langle\Delta A|\Delta B\rangle|^2 \leq \langle\Delta A|\Delta A\rangle\langle\Delta B|\Delta B\rangle \tag{1}$$

$|\Delta A\rangle, |\Delta B\rangle$ は、適当な状態 $|\phi\rangle$ にエルミート演算子 $\Delta A, \Delta B$ が作用したものとすれば、演算子の期待値を $<T>=\langle\phi|T|\phi\rangle$ として

$$\langle\Delta A|\Delta B\rangle = \langle\phi|\Delta A\Delta B|\phi\rangle =<\Delta A\Delta B>$$

右辺も同様に

$$\langle\Delta A|\Delta A\rangle = \langle\phi|\Delta A\Delta A|\phi\rangle =<\Delta A^2>$$

なので、シュワルツの不等式 (1) は

$$|<\Delta A\Delta B>|^2 \leq <\Delta A^2><\Delta B^2>$$

となります。

左辺は

$$\begin{aligned}
<\Delta A\Delta B> &= \frac{<\Delta A\Delta B>-<\Delta B\Delta A>+<\Delta A\Delta B>+<\Delta B\Delta A>}{2}\\
&= \frac{<[\Delta A,\Delta B]>+<\{\Delta A,\Delta B\}>}{2}\\
&= \frac{<[A-<A>,B-<B>]>+\{<\Delta A>,<\Delta B>\}}{2}\\
&= \frac{<[A,B]>}{2}+\frac{<\{\Delta A,\Delta B\}>}{2}
\end{aligned}$$

$\{T_1, T_2\} = T_1T_2 + T_2T_1$ は反交換関係です。$[A- < A >, B- < B >]$ は、$< A >, < B >$ はただの数なので $[A, B]$ になります。

第 1 項の交換関係は、A, B がエルミート演算子なので

$$< [A, B]^\dagger > = < (AB - BA)^\dagger > = - < (AB - BA) > = - < [A, B] >$$

任意の演算子 T の期待値 $< T > = \langle\phi|T|\phi\rangle$ は複素数で、$AB - BA$ が作用した状態を

$$|\psi\rangle = (AB - BA)|\phi\rangle \ , \ \langle\psi| = |\psi\rangle^\dagger = ((AB - BA)|\phi\rangle)^\dagger = \langle\phi|(AB - BA)^\dagger$$

として、$\langle\psi|\phi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle^*$ を使えば

$$(\langle\phi|(AB - BA)|\phi\rangle)^* = (\langle\phi|\psi\rangle)^* = \langle\psi|\phi\rangle = \langle\phi|(AB - BA)^\dagger|\phi\rangle$$

これから $< [A, B] >^* = < [A, B]^\dagger > = - < [A, B] >$ と分かります。よって、複素共役でマイナスがつくために $< [A, B] >$ は純虚数です。

同様にすると、反交換関係では符号が反転しないことから、$< \{\Delta A, \Delta B\} >$ は実数と分かります。そうすると、実数 a, b によって $< [A, B] > = ib, \ < \{\Delta A, \Delta B\} > = a$ として、絶対値を取ったとき

$$| < [A, B] > + < \{\Delta A, \Delta B\} > |^2 = |a + ib|^2 = a^2 + b^2 \geq b^2 = | < [A, B] > |^2$$

なので

$$\Big|\frac{1}{2} < [A, B] > \Big|^2 \leq \Big|\frac{< [A, B] >}{2} + \frac{< \{\Delta A, \Delta B\} >}{2}\Big|^2 \geq$$

よって

$$\Big|\frac{1}{2} < [A, B] > \Big|^2 \leq < \Delta A^2 >< \Delta B^2 >$$

として不確定性関係が求められます。

かなりひねった方法ですが、シュワルツの不等式を使わなくても導けます。不確定性関係をエルミート演算子 A, B とブラケットを使って

$$\langle\phi|A^2|\phi\rangle\langle\phi|B^2|\phi\rangle \geq \frac{1}{4}|\langle\phi|[A, B]|\phi\rangle|^2$$

と書くことにします。実数 a による

$$a^2\langle\phi|B^2|\phi\rangle - a\langle\phi|i[A,B]|\phi\rangle + \langle\phi|A^2|\phi\rangle \tag{2}$$

という式を、演算子は交換しないことに注意して変形していくと

$$\begin{aligned} a^2\langle\phi|B^2|\phi\rangle - a\langle\phi|i[A,B]|\phi\rangle + \langle\phi|A^2|\phi\rangle &= \langle\phi|(a^2B^2 - ai(AB-BA) + A^2)|\phi\rangle \\ &= \langle\phi|(A+iaB)(A-iaB)|\phi\rangle \\ &= |(A-iaB)|\phi\rangle|^2 \geq 0 \end{aligned}$$

最後へは A, B がエルミート演算子なので

$$(A-iaB)|\phi\rangle = |\psi\rangle\ ,\ ((A-iaB)|\phi\rangle)^\dagger = \langle\phi|(A+iaB) = \langle\psi|$$

となることと、ブラケットのノルムの定義 $\langle\psi|\psi\rangle \geq 0$ を使っています。このように (2) は 0 以上の実数です。そして

$$\langle\phi|A^2|\phi\rangle = \langle\phi|AA|\phi\rangle = \langle\phi|A^\dagger A|\phi\rangle = |A|\phi\rangle|^2$$

から、(2) の第一項と第三項は実数なので、第二項の $\langle\phi|i[A,B]|\phi\rangle$ も実数です。

そうすると、(2) は a の 2 次不等式に対する判別式から

$$(\langle\phi|i[A,B]|\phi\rangle)^2 - 4\langle\phi|A^2|\phi\rangle\langle\phi|B^2|\phi\rangle \leq 0$$

$\langle\phi|[A,B]|\phi\rangle$ は純虚数なので、$\langle\phi|[A,B]|\phi\rangle = ic$ (c は実数) として

$$(\langle\phi|i[A,B]|\phi\rangle)^2 = -(\langle\phi|[A,B]|\phi\rangle)^2 = -(ic)^2 = c^2$$

一方で、$\langle\phi|[A,B]|\phi\rangle$ の絶対値も c^2 なので、これに置き換えれば

$$|\langle\phi|[A,B]|\phi\rangle|^2 - 4\langle\phi|A^2|\phi\rangle\langle\phi|B^2|\phi\rangle \leq 0$$

となり、不確定性関係が出てきます。

ちなみに、古典論 (力学) の運動方程式は初期条件さえ与えてしまえば、粒子の未来の動きは記述されます。つまり、未来の動きを記述するのに必要な情報が確定しています。対して、量子論では不確定性関係によって、例えば運動量と位置を同時に確定した情報として入手できない、言い換えれば古典論に比べて必要な情報が欠如し

ていると言えます。これが未来の動きは確定した情報として得られずに、確率的にしか分からないということのもっともらしい理由になります。

不確定性関係は位置と運動量以外でも、例えば角運動量なんかでも作れます。しかし、時間による不確定性関係は今の方法ではできなく、意味も少し違っています。その原因は、時間は状態のパラメータであって、運動量、位置、ハミルトニアンといった観測量とは異なった扱いをしているからです。また、何をもって時間とエネルギーの不確定性関係とするかの統一的な見解もないようです。実際に、ある系のエネルギーを観測したときに、エネルギーのばらつきと観測時間との間には不確定性関係は現れないようです。

こういった事情がありますが、時間とエネルギーの不確定性関係として

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

このようなものがあります (期待値の $< >$ を外して書いています)。このときの ΔE は見ている系のエネルギー期待値 $< E >$ からのばらつきで、Δt はその系のある観測量が変化したと考えられる時間間隔です。Δt の意味は言い換えると、Δt より少ない時間間隔で測定してもその観測量の変化は観測されないということです。というわけで、この不確定性関係は、系においてある観測量が変化するのを見るには、観測時間が $\hbar/2\Delta E$ 以上でなければならないことを表現しています。言い換えると、系がばらつき ΔE 以内のある状態 (例えばエネルギー E の状態) であることを観測で決定するには、観測時間が $\hbar/2\Delta E$ 以上必要であるということです。また、もし $\Delta E = 0$ であれば、その系の時間間隔は無限大になり、確定した状態 (定常状態) となります。

この時間とエネルギーの不確定性関係の応用として代表的なものは不安定粒子の寿命 (崩壊するまでの時間の目安) で、エネルギー準位の差が ΔE での不安定粒子の寿命 τ は大雑把に $\tau \sim \hbar/\Delta E$ 程度と見積もられます。このことから、寿命の短い粒子は可能なエネルギー範囲が広く、寿命の長い粒子は可能なエネルギー範囲が狭くなっていると考えられます。

時間とエネルギーの不確定性関係の導出を簡単に見ておきます。ハイゼンベルク方程式から、ある観測量 A の期待値 $< A >$ に対して

$$i\hbar \frac{d < A >}{dt} =< [A, H] >$$

A は演算子で時間に依存し、H はハミルトニアン演算子です。通常の不確定性関係から、演算子 A と H は

$$< \Delta A^2 >< \Delta H^2 > \geq \Big| \frac{1}{2} < [A, H] > \Big|^2$$

これにハイゼンベルク方程式を入れれば

$$\begin{aligned} < \Delta A^2 >< \Delta H^2 > &\geq \frac{1}{4} \Big| i\hbar \frac{d < A >}{dt} \Big|^2 \\ &\geq \frac{1}{4} \hbar^2 \Big| \frac{d < A >}{dt} \Big|^2 \end{aligned}$$

期待値 $< H >$ はエネルギーに対応しているので E とし

$$< \Delta A >< \Delta E > \geq \frac{1}{2} \hbar \Big| \frac{d < A >}{dt} \Big|$$

ここで、時間の次元を持った

$$\Delta t = \frac{<\Delta A>}{|\frac{d<A>}{dt}|}$$

というのを定義してみます。そうすると、

$$|\frac{d<A>}{dt}|\Delta t = <\Delta A>$$

これより Δt は、ある観測量 $<A>$ の時間変化が、観測量 A の期待値 $<A>$ からのばらつき ΔA になるのに必要な時間間隔と見ることが出来ます。つまり、時間 Δt だけ経てば、ばらつき ΔA ぐらい期待値 $<A>$ が変化するということです。ばらつきを超えれば観測量が変化したことになるので、Δt はある観測量 A が変化するのに必要な時間 (系が変化するのに必要な時間) と考えられます。ということで、時間とエネルギーの不確定性関係

$$<\Delta E> \Delta t \geq \frac{1}{2}\hbar$$

が求まり、時間とエネルギーに対する Mandelstam-Tamm の不確定性関係と呼ばれます。

粒子の寿命との関係をはっきりさせます。期待値を時間 $t=0$ での状態 $|\psi\rangle$ によって

$$<A> = \langle\psi|A|\psi\rangle$$

時間 t での状態 $|\psi;t\rangle$ はシュレーディンガー方程式から

$$|\psi;t\rangle = e^{-iHt/\hbar}|\psi\rangle$$

演算子 A を

$$A = |\psi;t\rangle\langle\psi;t|$$

とすると

$$<A> = \langle\psi|A|\psi\rangle = \langle\psi|\psi;t\rangle\langle\psi;t|\psi\rangle = P(t)$$

$P(t)$ は時間 t で $|\psi;t\rangle$ が $|\psi\rangle$ になる確率です。$<\Delta A>$ は

$$
\begin{aligned}
< \Delta A >&= \sqrt{\langle\psi|(A-\langle\psi|A|\psi\rangle)^2|\psi\rangle} \\
&= \sqrt{\langle\psi|(A^2+(\langle\psi|A|\psi\rangle)^2-2A\langle\psi|A|\psi\rangle)|\psi\rangle} \\
&= \sqrt{\langle\psi|A^2|\psi\rangle+(\langle\psi|A|\psi\rangle)^2-2(\langle\psi|A|\psi\rangle)^2} \\
&= \sqrt{< A^2 > - < A >^2}
\end{aligned}
$$

$< A^2 >$は

$$
< A^2 >= \langle\psi|\psi;t\rangle\langle\psi;t|\psi;t\rangle\langle\psi;t|\psi\rangle = \langle\psi|\psi;t\rangle\langle\psi;t|\psi| = P(t)
$$

よって

$$
< \Delta A >= \sqrt{P(t)-P^2(t)}
$$

となり

$$
\Delta t = \frac{< \Delta A >}{|\frac{d<A>}{dt}|} = \frac{\sqrt{P(t)-P^2(t)}}{|\frac{dP(t)}{dt}|}
$$

不等式は

$$
\begin{aligned}
\frac{\sqrt{P(t)-P^2(t)}}{|\frac{dP(t)}{dt}|} &\geq \frac{\hbar}{2 < \Delta E >} \\
|\frac{dP(t)}{dt}| &\leq \frac{2 < \Delta E >}{\hbar}\sqrt{P(t)-P^2(t)}
\end{aligned}
$$

絶対値を外して、係数をプラスとすれば

$$
\int \frac{dx}{\sqrt{x(1-x)}} = 2\arcsin\sqrt{x}
$$

から

$$
\begin{aligned}
\int \frac{dP}{\sqrt{P(t)-P^2(t)}} &\leq \frac{2 < \Delta E >}{\hbar}\int dt \\
\arcsin\sqrt{P(t)} &\leq \frac{< \Delta E >}{\hbar}t + C
\end{aligned}
$$

C は積分定数です。$P(t)$ は $t=0$ で

$$P(0) = \langle\psi|\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle = 1$$

これを初期条件として

$$\arcsin\sqrt{P(t)} - \frac{\pi}{2} \leq \frac{<\Delta E>}{\hbar}t$$

$\arcsin x$ は $-1 \leq x \leq +1$ で $-\pi/2$ から $+\pi/2$ の値を持ちます。$\sqrt{P}$ は正の値しか持たなく、正の領域で $\arcsin x$ の最大値は $\pi/2$ で、右辺は全て正の量なので

$$0 \leq \frac{<\Delta E>}{\hbar}t \tag{3}$$

マイナスにした場合では

$$-\int\frac{dP}{\sqrt{P(t)-P^2(t)}} \leq \frac{2<\Delta E>}{\hbar}\int dt$$
$$-\arcsin\sqrt{P(t)} \leq \frac{<\Delta E>}{\hbar}t + C$$

同じように初期条件を与えれば

$$\frac{\pi}{2} - \arcsin\sqrt{P(t)} \leq \frac{<\Delta E>}{\hbar}t$$

このときの左辺は正なので、これで (3) も含めた不等式となります。$P(t)$ は確率なので 0 から 1 の範囲に制限されますが、右辺で

$$t = \frac{\pi\hbar}{2<\Delta E>}$$

を超えると、不等式上において $0 \leq P(t) \leq 1$ の制限がなくなるので、これを時間の上限とします。

逆三角関数の関係

$$\frac{\pi}{2} - \arcsin x = \arccos x$$

を使えば

$$\arccos\sqrt{P(t)} \leq \frac{<\Delta E>}{\hbar}t$$

$$\sqrt{P(t)} \geq \cos(\frac{<\Delta E>}{\hbar}t)$$

$$P(t) \geq \cos^2(\frac{<\Delta E>}{\hbar}t) \quad (0 \leq t \leq \frac{\pi\hbar}{2<\Delta E>})$$

ある時間 τ で確率が 1/2 になるとしてみると

$$\frac{1}{2} \geq \cos^2(\frac{<\Delta E>}{\hbar}\tau)\ ,\ 0 \leq \tau \leq \frac{\pi\hbar}{2<\Delta E>}$$

cos の値から τ の最低値は $\pi\hbar/4<\Delta E>$ なので

$$\frac{\pi\hbar}{4<\Delta E>} \leq \tau$$

$$<\Delta E>\tau \geq \frac{\pi\hbar}{4}$$

この結果は、始状態 $|\psi\rangle$ が他の状態になる確率が 1/2($|\psi\rangle$ のままでいる確率が 1/2) となるときの時間 τ とエネルギーのバラつきの関係を与えています。つまり、エネルギーのバラつきが大きいほど短い時間で粒子は崩壊する (別の状態になる) と言えます。