3-5-4. スピン演算子 $\hat{\sigma}_z$ の外積による表現

ここで、 $\hat{\sigma}_z$ の外積を使った表現を求めてみる。

任意の演算子$\hat{M}$ は基底ベクトルを使って次の式で表される(演習４の 7)、(3-4-30)式）。

$$\hat{M} = \sum_{k=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} |k><k|\hat{M}|j><j| \qquad (3\text{-}5\text{-}14)$$

$\hat{M}$を$\hat{\sigma}_z$と置き、$|1>$ を$|u>$ 、$|2>$ を$|d>$ とすると (N=2) 、(3-5-14)は

$$\begin{aligned}\hat{\sigma}_z = &|u><u|\hat{\sigma}_z|u><u| \quad + \quad |u><u|\hat{\sigma}_z|d><d| \\ &+|d><d|\hat{\sigma}_z|u><u| \quad + \quad |d><d|\hat{\sigma}_z|d><d| \qquad (3\text{-}5\text{-}15)\end{aligned}$$

と書ける。ここで、固有値方程式(3-5-4)(3-5-5)と基底ベクトルの規格直交性 (3-5-12) を使うと、

$$\hat{\sigma}_z = |u><u| - |d><d| \qquad (3\text{-}5\text{-}16)$$

となり、 $\hat{\sigma}_z$ の外積の表現が求まる[1]。この式は(3-4-31)式で$\hat{M}$を $\hat{\sigma}_z$ とおいた場合の「$\hat{\sigma}_z$ のスペクトル分解」になっていることに注意。

$$\hat{\sigma}_z = (+1)|u><u| + (-1)|d><d|$$

3-5-5. スピン演算子 $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y$ の外積による表現と行列表示

演算子 $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y$ の外積による表現は、

$$\hat{\sigma}_x = |u><d| + |d><u| \qquad (3\text{-}5\text{-}17)$$

$$\hat{\sigma}_y = -i|u><d| + i|d><u| \qquad (3\text{-}5\text{-}18)$$

のようになる。

$\hat{\sigma}_x$ の場合の求め方の一例を以下に示す。

(3-5-14)で $\hat{M}$を $\hat{\sigma}_x$と置き、$|1>$ を$|r>$ 、$|2>$ を$|l>$ とすると、$\hat{\sigma}_z$ の場合と同様にして、

$$\hat{\sigma}_x = |r><r| - |l><l| \qquad (3\text{-}5\text{-}19)$$

となる。あるいは、同じことだが「$\hat{\sigma}_x$ のスペクトル分解」と考えても良い。

ここで、(3-26)(3-27)を再掲すれば、

$$|r> = \frac{1}{\sqrt{2}}|u> + \frac{1}{\sqrt{2}}|d> \qquad (3\text{-}5\text{-}20)$$

$$|l> = \frac{1}{\sqrt{2}}|u> - \frac{1}{\sqrt{2}}|d> \qquad (3\text{-}5\text{-}21)$$

なので、これを(3-5-19)に代入して展開すれば、(3-5-17)を得る。

---

[1] この外積の表現から出発してσ_zの行列を求めることもできる。確かめてみよ。

$\hat{\sigma}_y$ の場合も同様にして、(3-5-14)(3-32)(3-33)より、(3-5-18)を得る。

続いて、$\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y$ に対応するPauliの行列の求め方の概略を述べる。(3-5-17)を、行列の成分を求める式、例えば、$(\sigma_x)_{uu} \equiv < u|\hat{\sigma}_x|u >$ に代入すると、

$$(\sigma_x)_{uu} \equiv < u|\hat{\sigma}_x|u > = < u|(|d >< u| + |u >< d|)|u > = 0$$

となる[2]。他の成分も同様に計算すると、

$$\hat{\sigma}_x \to \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad (3\text{-}5\text{-}22)$$

が容易に求まる。同じようにして、(3-5-18)式を使い、 $\hat{\sigma}_y$ の行列成分もすぐに求まる。

$$\hat{\sigma}_y \to \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad (3\text{-}5\text{-}23)$$

3-5-6. 基底の変換[3]

これまでは、主に$\hat{\sigma}_z$の固有状態の組 ($|u >, |d >$)を基底として選び、２次元の複素ベクトル空間を作った。しかし、もちろん、$\hat{\sigma}_x$ や $\hat{\sigma}_y$ の固有状態の組（$|r >, |l >$ や$|i >, |o >$）も正規直交基底をなすので、基底として選ぶことができる。

もし、$\hat{\sigma}_x$の固有状態$|r >, |l >$ を基底ベクトルに選んだとすると、その時、$\hat{\sigma}_x$に対応する行列は以下のような対角行列になるだろう。一方、$\hat{\sigma}_z$ や $\hat{\sigma}_y$ に対応する行列表現は対角行列とはならない。

$$\hat{\sigma}_x \to \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$ （**注意**：$\hat{\sigma}_x$の固有状態$|r >, |l >$ を基底ベクトルに選んだ場合）

したがって、$\hat{\sigma}_z$の固有状態の組 ($|u >, |d >$)を基底として選んだ時の$\hat{\sigma}_x$に対応する行列 $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ を対角化し、その固有値と固有ベクトルを求めれば、$\hat{\sigma}_x$の固有ベクトル（基底ベクトル） $|r >, |l >$ を$\hat{\sigma}_z$の固有状態の組 ($|u >, |d >$)の線型結合で $|r > = \frac{1}{\sqrt{2}}|u > + \frac{1}{\sqrt{2}}|d >$ と $|l > = \frac{1}{\sqrt{2}}|u > - \frac{1}{\sqrt{2}}|d >$ のように求めることができ、かつ、$\hat{\sigma}_x$ の固有状態での測定値（固有値、すなわち、行列の対角成分）が求まることになる。

これは、基底ベクトルを変換する場合の一例である。以下ではこれを一般化した議論を行う。

[2] **Pauli行列は、どれも、σ_zの固有ベクトル|u>, |d>を基底に選んだ時の表現**である事に注意。

[3] 講義の補足を含む

今、観測可能な物理量Mに対応したエルミート演算子 $\hat{M}$ と、Mとは異なる観測可能な物理量 M' に対応したエルミート演算子$\hat{M}'$ があるとする。これらの固有ベクトルの組 $\{|\lambda_i>\}$と$\{|\lambda'_i>\}$はそれぞれが正規直交基底をなすので、両者とも複素ベクトル空間の基底の組として採用できる。

これら２つの基底ケットの集合は、「**ユニタリー変換** (unitary transform)」と呼ばれる変換で結びついている。すなわち、「**ユニタリー演算子** (unitary operator)」と呼ばれる演算子 $\hat{U}$ を使い、

$$|\lambda'_i> = \hat{U}\,|\lambda_i> \qquad (i=1,\ldots,N) \qquad \text{(3-5-24)}$$

と表すことができる[4]。ここで、ユニタリー演算子とは次の性質を満たす演算子である。

$$\hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{I} \qquad \text{(3-5-25)}$$

この性質により、ユニタリー変換とはベクトルの長さを変えない変換であることがわかる。

（証明： $<\lambda'_i|\lambda'_i> = (<\lambda_i|\hat{U}^\dagger)(\hat{U}\,|\lambda_i>) = <\lambda_i|\hat{U}^\dagger\hat{U}\,|\lambda_i> = <\lambda_i|\lambda_i>$ ）

量子力学では状態は複素ベクトル空間のベクトルとして表された。ユニタリー変換は、この状態の変化（ベクトルの回転や時間変化など）を表現する際に使われる。その理由は、最初にベクトルが規格化されていればユニタリー変換後も規格化されたままなので、全確率が１であるという条件を変えずに状態の変化をもたらすことができるからである（規格化されていれば全確率が１になる（演習３の（３）確率保存の条件を参照））。状態の時間変化とユニタリー変換については3-7節でのべる。ここでは基底の変換の問題に集中する。

ところで、(3-5-25)より、(3-5-24)は

$$|\lambda_i> = \hat{U}^\dagger|\lambda'_i> \qquad (i=1,\ldots,N) \qquad \text{(3-5-26)}$$

とも表せる。これは、(3-5-24)の両辺に左から $\hat{U}^\dagger$ を作用させ、(3-5-25)を使えば、すぐに示すことができる。

このような基底の変換を実現するには、例えば $\hat{U}$ に対応する演算子を次の式のように表せば良い。

$$\hat{U} \to \sum_{k=1}^{N} |\lambda'_k><\lambda_k| \qquad \text{(3-5-27)}$$

実際、

$$\hat{U}\,|\lambda_i> = \sum_{k=1}^{N} |\lambda'_k><\lambda_k|\lambda_i> = \sum_{k=1}^{N} |\lambda'_k>\delta_{ki} = |\lambda'_i> \qquad \text{(3-5-28)}$$

となるので、式(3-5-24)が得られた。

さらに、 (3-5-27)で作った $\hat{U}$ はユニタリーの性質(3-5-25)を持つことも容易に示せる[5] 。

次に、$\hat{U}$ と $\hat{U}^\dagger$ に対応する行列（「ユニタリー行列」と呼ぶ）の要素 U_{kj}と$U^\dagger_{kj}$ は、基底$\{|\lambda_i>\}$を使って表すと、(3-5-24)より

$$U_{kj} = <\lambda_k|\hat{U}\,|\lambda_j> = <\lambda_k|\lambda'_j> \qquad \text{(3-5-29)}$$

$$U^\dagger_{kj} = <\lambda_k|\hat{U}^\dagger|\lambda_j> = <\lambda'_k|\lambda_j> \qquad \text{(3-5-30)}$$

となる（ (3-5-30)式では、$|\lambda'_k> = \hat{U}\,|\lambda_k>$ のブラバージョン $<\lambda'_k| = <\lambda_k|\hat{U}^\dagger$ を使った）。

すなわち、$\hat{U}$ と $\hat{U}^\dagger$の行列要素は、元の基底と新しい基底の内積で作られる事がわかる。

---

[4] 教科書によっては、基底の変換の式(3-5-24)を、UをU†として定義する場合もあるので注意

[5] 演習

3-5-7. エルミート行列の対角化と基底の変換[6]

スピンPauli行列の表示では $\hat{\sigma}_z$ の固有ベクトル $|u>$ と $|d>$ を基底ベクトルに選んでいるので、$\hat{\sigma}_z$ に対応する行列は $\hat{\sigma}_z$ の固有値を対角成分とする対角行列になっているが[7]、一方、$\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$ に対応するPauli行列は対角行列になっていない。これは、 $\hat{\sigma}_z$ の固有ベクトル $|u>$ と $|d>$ が $\hat{\sigma}_x$ や $\hat{\sigma}_y$ の固有ベクトルになってないからである。

では、$\hat{\sigma}_x$ や $\hat{\sigma}_y$ が対角行列になるような新しい基底（$\hat{\sigma}_x$ や $\hat{\sigma}_y$ の固有ベクトル）を見いだすにはどうしたら良いであろうか。

ここで再び、この問題を一般化しながら考える。任意のエルミート演算子$\hat{M}$ があったとする（例えば、$\hat{\sigma}_x$ や $\hat{\sigma}_y$)。元の正規直交基底 $\{|\lambda_i>\}$ は $\hat{M}$ の固有状態ではないとしよう（例えば、$\hat{\sigma}_z$ の固有状態）。その場合は、$\hat{M}$ に対応する行列は対角行列ではない（$\hat{\sigma}_x$ や $\hat{\sigma}_y$ に対応する行列は対角行列ではない）。今、(3-5-24)の$\hat{U}$ によるユニタリー変換で新しい正規直交基底 $\{|\lambda_i'>\}$ に移ったとすると、$\hat{M}$ はどのような行列に変換されるのかを見てみる。

元の基底での $\hat{M}$ の行列要素を M_{kj} 、基底変換後の行列要素を M'_{kj} とすると、

$$M_{kj} = <\lambda_k|\hat{M}|\lambda_j> \qquad \text{(3-5-31)}$$

$$M'_{kj} = <\lambda'_k|\hat{M}|\lambda'_j> = <\lambda_k|\hat{U}^\dagger\hat{M}\hat{U}|\lambda_j> = (\hat{U}^\dagger\hat{M}\hat{U})_{kj} \qquad \text{(3-5-32)}$$

となる。(3-5-32)で、

$$\hat{M}' = \hat{U}^\dagger\hat{M}\hat{U} \qquad \text{(3-5-33)}$$

とおけば、$M'_{kj} = <\lambda'_k|\hat{M}|\lambda'_j> = <\lambda_k|\hat{M}'|\lambda_j>$ となる。

今、変換後の新しい基底 $\{|\lambda'_i>\}$ が $\hat{M}$ （例えば、$\hat{\sigma}_x$ や $\hat{\sigma}_y$) の固有ベクトルになるように $\hat{U}$ を見つければ、$\hat{M}'$ に対応する行列 (3-5-32) （例えば、$\hat{\sigma}_x$ や $\hat{\sigma}_y$ の固有状態が作る基底での行列表示) は対角行列となるだろう。また、その対角成分は$\hat{M}$ の固有値 λ'_i となる。

すなわち、

$$M'_{kj} = <\lambda'_k|\hat{M}|\lambda'_j> = <\lambda'_k|\lambda'_j|\lambda'_j> = \delta_{kj}\lambda'_j \qquad \text{(3-5-34)}$$

となる。ここで、$|\lambda'_i>$ は$\hat{M}$ の固有ベクトルであるので、

$$\hat{M}|\lambda'_j> = \lambda'_j|\lambda'_j> \qquad \text{(3-5-35)}$$

となることを使った。

この対角化に必要なユニタリー行列の要素は(3-5-29)より

$$U_{kj} = <\lambda_k|\lambda'_j> \qquad \text{(3-5-36)}$$

と、求まる。

結局、対角化の問題は、固有値問題 (3-5-35)を解く問題と等価であることがわかる。
すなわち、元の基底における $\hat{M}$ の行列の固有ベクトルと固有値を求める問題となる。

求めるユニタリー行列は(3-5-36)で得られるが、これは、固有ベクトル（元の基底での表示）を順番に列に並べて作られたものになっている。なぜなら、 $<\lambda_k|\lambda'_j>$ は $|\lambda'_j> = a_1|\lambda_1> + a_2|\lambda_2> + \ldots + a_n|\lambda_N>$ とした時の係数 a_k になっているから、j を固定した時の $a_1, a_2, \ldots, a_N$ を縦に並べた列ベクトルは $|\lambda'_j>$ を元の基底で表示した固有ベクトルになっているからである。

具体的に$\hat{\sigma}_y$ の対角化を演習5の(8)で行う。

---

[6] 講義の補足

[7] 演習４の 8)参照.

演習5

(1) $\hat{\sigma}_z$ の行列表現 $\hat{\sigma}_z \to \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$と、列ベクトルの表現$|u> \to \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $|d> \to \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ の積を実際に計算し、固有値方程式 $\hat{\sigma}_z|u> = (+1)|u>$ 、$\hat{\sigma}_z|d> = (-1)|d>$ を満たしていることを確かめなさい。

(2) 演算子 $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y$ の外積による表現

$$\hat{\sigma}_x = |u><d| + |d><u| \qquad (3\text{-}5\text{-}37)$$

$$\hat{\sigma}_y = -i|u><d| + i|d><u| \qquad (3\text{-}5\text{-}38)$$

を求めなさい。（例えば、$\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y$ をスペクトル分解し、(3-26, 27)(3-32, 33)式を使う）

(3) (2)の外積による表現を使い、$\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y$の行列表現

$$\hat{\sigma}_x \to \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}、\quad \hat{\sigma}_y \to \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad (3\text{-}5\text{-}39)$$

を求めよ。

(4) Pauliスピン行列は全てエルミート行列であるが、同時にユニタリー行列でもある事を示せ。

(5) $\hat{M}$ がエルミート演算子ならば、$\hat{M}' = \hat{U}^\dagger \hat{M} \hat{U}$ で得られた$\hat{M}'$もエルミート演算子であることを示せ。ただし、$\hat{U}$ はユニタリー演算子で $\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{I}$ の性質を持つ。

(6) $\hat{M}$ がユニタリー演算子ならば、$\hat{M}' = \hat{U}^\dagger \hat{M} \hat{U}$ で得られた$\hat{M}'$もユニタリー演算子であることを示せ。ただし、$\hat{U}$ はユニタリー演算子である。

(7) $\hat{U} \equiv \sum_{k=1}^{N} |\lambda_k'><\lambda_k|$ で定義した演算子はユニタリー演算子の性質、$\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{I}$ を満たすことを示せ。

(8) $\hat{\sigma}_y$ に対応するPauli行列 $\hat{\sigma}_y \to \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ に関して以下のことを示せ

a) この行列の固有値を求めよ

b) この行列の固有ベクトルを求めよ（規格化して求めよ）

この結果は、

(3-32)式 $|i> = \frac{1}{\sqrt{2}}|u> + \frac{i}{\sqrt{2}}|d>$ と(3-33)式 $|o> = \frac{1}{\sqrt{2}}|u> - \frac{i}{\sqrt{2}}|d>$

に対応していることを示せ。

c) この行列を対角化するユニタリー行列 $\hat{U}$ を求めよ

d) $\hat{U}$ の 各列は b) の固有ベクトルになっていることを確かめよ

e) $\hat{U}^\dagger \hat{\sigma}_y \hat{U}$ に対応する行列を計算し、対角行列になっていることを示せ。

3-6. 不確定性関係[8]

「スピンによる実験」（３−１節）によって、我々は、スピンの２つ以上の異なる成分を再現可能な方法で知ることができない事がわかった。量子的なコマでは、その自転軸は、ある座標軸（例えばz軸）への射影成分（σ_z）を測定によって決めても、それ以外の成分（σ_x や σ_y）は両立して決めることができないので、きちっとその向きが定まらない、とでも言えようか。[9]　この時、スピンの各成分どうしの間には不確定性関係があるという。本節では、これを一般化し、ある状態に置ける観測可能な物理量の間の測定にまつわる不確定性について定量的に調べることにする。そこでは、どのような物理量の間に不確定性関係が生じるのかについても議論する。

ただし、一般に不確定性といっても、以下の３つのことが考えられるので注意を要する。

（１）測定器の誤差、測定に伴う系への影響（反作用）による不確定性
（２）純粋に量子状態そのものが持つ不確定性（量子ゆらぎ）。
（３）上の（１）と（２）が混在した不確定性

最初、Heisenberg（ハイゼンベルグ）はγ線を粒子に当てて跳ね返った光を測定し、ミクロな粒子の位置測定を行う思考実験を考えた。位置の精度を上げるために波長を短くすると光子のエネルギーは上がり粒子は大きく跳ね返されてしまう（運動量が不確定になる）。逆に波長を長くすると反跳は小さくなるが位置測定の精度は下がる。こうして、位置測定の測定誤差qと運動量の乱れpはトレードオフの関係となり、両者とも精密に測定できなくなること（$q \cdot p \sim \mathrm{h}$ ）を主張した。これが有名な**「Heisenbergの不確定性原理」**である。しかし、この場合、上の（２）の不確定性というより（１）か、（３）に対応した不確定性を議論していることになる。さらに、彼の主張では誤差や測定の影響を「厳密に」吟味したものでは無かった。その後、（２）の純粋に量子状態そのものが持つ不確定性（量子ゆらぎ）が量子力学の枠組みの範囲内で導かれるようになった[10]。これが本節での議論となる。結局、我々は（１）と（２）をきちっと区別して考えねばならぬ[11]。最近、小澤正直 (2003)は（１）や（３）の場合を理論的に厳密に取り扱い（小澤の不等式[12]）、Heisenberg流の測定限界以下でも精密な測定ができることを重力波の検出実験などの場合について示した。

本節では、実際の測定に伴う測定器の誤差や、測定に伴う系への影響（測定の反作用）は考えず、（２）の**純粋に量子状態そのものもが持っている不確定性（量子ゆらぎ）を問題にする**。

3-6-1. 準備（平均値、偏差、分散）

今、ある状態$|A>$を用意して、観測可能な物理量 M を測定することを繰り返し行うことを考えよう（繰り返すたびに、状態は$|A>$に戻し、各実験を独立に行う）。あるいは、$|A>$なる状態の同じ系をたくさん用意（この集団をアンサンブルと言う）して物理量 M を一斉に測定したとする（アンサンブルの考え方）。

この時の測定値の平均値 $<\hat{M}>$ は 演習4-(10) の(3-4-33)式

$$<\hat{M}>_A \equiv <A|\hat{M}|A> \qquad (3\text{-}6\text{-}1)$$

で定義する。

---

[8] 一部は講義の補足。「不確定性関係(uncertainty relation)」と呼ぶか「不確定性原理(uncertainty principle)」と呼ぶかは意見が別れている。ただし、不確定性は量子力学の枠組みの中で証明済みの定理とみなせるので、最近は「不確定性関係」と呼ぶことが多い。

[9] 別の表現をすれば、「スピンの量子状態は１つの演算子、例えばσ_zの固有値だけで完全に決まる」、とも言える。

[10] Robertson（1929）、Kennard （1927）など

[11] 最近でもこの辺の区別がなされていない教科書や記事が結構ある。

[12] 日経サイエンス 2012年4月号の特集記事、小澤正直「量子と情報」（青土社）（2018）

ここで、 $<\hat{M}>$ の添え字のAは状態 $|A>$ において M を測定した場合の平均値（期待値）であることをはっきりさせるためにつけた[13]。 $\hat{M}$ はエルミート演算子なので、期待値は $<\hat{M}>_A$ は実数である[14]。

さて、測定のばらつき[15]を問題にしたいので、まず、平均値からの測定値のずれ「**偏差** (deviation)」に対応した演算子を次の式で定義する。

$$\Delta\hat{M} \equiv \hat{M} - <\hat{M}> \hat{I} \qquad (3\text{-}6\text{-}2)$$

しかし、偏差の平均値を取ると、

$$<\Delta\hat{M}>_A = <A|(\hat{M} - <\hat{M}>_A \hat{I})|A> = <A|\hat{M}|A> - <A|<\hat{M}>_A \hat{I}|A>$$

$$= <\hat{M}>_A - <\hat{M}>_A = 0 \qquad (3\text{-}6\text{-}3)$$

となり、いつも０になってしまうので、ばらつきの度合いとはならない。

そこで、偏差の二乗の平均値である「**分散** (variance)」と呼ばれる量 $<(\Delta\hat{M})^2>_A$ を導入する（この値も実数）。偏差を二乗すれば必ず０以上の正の値になるので、その平均はいつもは０にはならず、その分布の「ばらつき（分布の幅）の指標」となるからである。

$<(\Delta\hat{M})^2>_A$ は $<A|(\hat{M} - <\hat{M}>_A \hat{I})^2|A>$ を展開して以下のような良く使う式に変形できる[16]。

$$<(\Delta\hat{M})^2>_A = <\hat{M}^2>_A - (<\hat{M}>_A)^2 \qquad (3\text{-}6\text{-}4)$$

すなわち、分散を求めるには、$\hat{M}^2$ の平均と $\hat{M}$ の平均の二乗の差を取れば良い。

分散は元の物理量を二乗してから平均を取ったものなので、実際のばらつきと次元を合わせるためにその平方根を取って、「**標準偏差**(standard deviation)」で表すことも多い（これも実数になる）。本講義ではこれを

$$(\delta\hat{M})_A \equiv \sqrt{<(\Delta\hat{M})^2>_A} \qquad (3\text{-}6\text{-}5)$$

のような表記で定義することにする[17]。

3-6-2. 不確定性関係

今、測定しようとしている状態が $|A>$ が $\hat{M}$ の固有状態であったなら、測定結果は必ずその時の固有値になるので、ばらつきは全くなく、偏差や分散は0となるだろう。

---

13 省略されることもある。

14 固有値が実数なのでその平均値も実数。

15 ばらつきと言っても測定器の誤差などによるものでは無い。p41の初めに述べた純粋に量子状態が持つ不確定性に由来する量子ゆらぎのことである。

16 演習

17 偏差、分散、標準偏差の記号は教科書や文献によって様々なので注意が必要である。

スピン測定の例で言えば、$|u>$ の状態で σ_z を測定すれば、必ず $\hat{\sigma}_z$ の固有値 +1 が観測されるので、 $<(\Delta\hat{\sigma}_z)^2>_u = 0$ となる。

しかし、$|u>$ の状態に戻して、σ_x を測定すれば その測定結果は+1と-1が50%ずつ観測されるので、 $<\hat{\sigma}_x>_u = 0$、 $<\hat{\sigma}_x{}^2>_u = (+1)^2 \times \frac{1}{2} + (-1)^2 \times \frac{1}{2} = 1$ となるから、

$<(\Delta\hat{\sigma}_x)^2>_u = <\hat{\sigma}_x{}^2>_u - (<\hat{\sigma}_x>_u)^2 = 1 - 0 = 1$ となる。　分散が1というのは、今のスピンの測定では最大のばらつき（ゆらぎ）を持った結果である[18]。

同様なことが σ_y 測定についても言えるので、σ_z が確定している$|u>$（あるいは$|d>$でも良い）の状態というのは、σ_x や σ_y 測定に最大のばらつきを与える状態なのである。逆に、σ_x や σ_y が確定している$|r>$や$|i>$（$|l>$や$|o>$でも良い）はσ_z 測定に最大のばらつきを与える状態と言える。こうして、我々は、スピンの任意の二つの成分が両者とも確定した値を持つ状態を作ることはできない。中間の状態を作ってチューニングしようと思っても、両者とも不確定な状態になってしまう。

一般に、観測可能な量 L、M があった時、任意の状態$|A>$において L、M を測定すると、その分散の間に以下のような不等式が生じることを示せる[19]。

$$<(\Delta\hat{L})^2>_A <(\Delta\hat{M})^2>_A \geq \frac{1}{4}|<[\hat{L},\hat{M}]>_A|^2 \qquad (3\text{-}6\text{-}6)$$

あるいは、

$$(\delta\hat{L})_A(\delta\hat{M})_A \geq \frac{1}{2}|<[\hat{L},\hat{M}]>_A| \qquad (3\text{-}6\text{-}7)$$

これを「**不確定性関係**」と呼ぶ[20]。この不確定性関係の式 (3-6-6)（あるいは(3-6-7)）は、L、M のばらつきの積には下限が存在することを示している。もし、右辺が０とならなければ、どんなに量子状態を調整しても L、M の分散を同時に０にすることはできないので、L、M の値が両者とも定まっている、ということはなく、L、M の測定は両立しない（これを「不確定性がある」とか「**量子ゆらぎ**」が存在する、と言う）。

この式の中の $[\hat{L},\hat{M}]$ は、 $\hat{L}$、$\hat{M}$ の**交換関係**（commutation relation）と呼ばれ、**交換子** [...] （commutator）は次のように定義される。

$$[\hat{L},\hat{M}] \equiv \hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L} \qquad (3\text{-}6\text{-}8)$$

例として、$\hat{L}$、$\hat{M}$ をスピン演算子に選ぶと、

$$\begin{aligned}[\hat{\sigma}_x,\hat{\sigma}_y] &= 2i\hat{\sigma}_z \\ [\hat{\sigma}_y,\hat{\sigma}_z] &= 2i\hat{\sigma}_x \qquad (3\text{-}6\text{-}9) \\ [\hat{\sigma}_z,\hat{\sigma}_x] &= 2i\hat{\sigma}_y\end{aligned}$$

という関係が得られる[21]

---

[18] 分散の期待値は$<\sigma_x{}^2>-<\sigma_x>^2$なので$<\sigma_x{}^2>$より大きくなることはない。

[19] 演習

[20] 「Robertsonの不確定性関係(1929) 」と呼ばれることもある。ここで、L、M のどちらかを測定後、常に|A>の状態に戻すことに注意せよ。あるいは、|A>の状態にセットしたたくさんの同じ系を用意し、そのうちのいくつかでをL測定し、いくつかはMを測定する事を考えても良い。

[21] 例えば、Pauli行列の積を計算することにより求めることができる（確かめよ）。

スピン演算子においては、 (3-6-9)より、どの成分どうしも交換関係は0にはならないことがわかる。これは、スピンの各成分の間には不確定性関係が存在することを示しており、成分どうしの測定は両立しない（演習では、スピンの測定のいくつかについて、不確定性関係の不等式(3-6-6)が実際に成り立っていることを確かめる）。

スピンだけではなく、位置と運動量にも $[\hat{x},\hat{p}_x]=i\hbar$ のような交換関係があるので、$\hat{x}$、$\hat{p}_x$ の間には不確定性関係がある。他の成分についても同様である。よって、ミクロな粒子の位置と運動量の同じ成分同士を同時に正確に決めれるような量子状態は無い。

結局、$\hat{L}$、$\hat{M}$ が、

$$[\hat{L},\hat{M}]\neq 0 \qquad (3\text{-}6\text{-}10)$$

のとき（$\hat{L}$ と$\hat{M}$ が交換しないとき）、LとM には不確定性関係がある。

3-6-3. 同時固有状態[22]

一方、$[\hat{L},\hat{M}]=0$ （$\hat{L}$ と$\hat{M}$ が交換する）ならば不確定性関係の不等式 (3-6-6) の右辺が０になるので、L、M の測定は両立する。このとき、$\hat{L}$ と $\hat{M}$ は「**同時固有状態**」（$\hat{L}$の固有状態は$\hat{M}$の固有状態でもある状態）をもつ事を示せる。

今、$\hat{L}$ と $\hat{M}$ の同時固有状態があったとし、それを、$|\lambda_i,\mu_i>$ のように表記することにする。この時、固有値方程式は、

$$\hat{L}|\lambda_i,\mu_i>=\lambda_i|\lambda_i,\mu_i> \qquad (3\text{-}6\text{-}11)$$

$$\hat{M}|\lambda_i,\mu_i>=\mu_i|\lambda_i,\mu_i> \qquad (3\text{-}6\text{-}12)$$

のように書ける。ここで、λ_i は$\hat{L}$の固有値、μ_i は$\hat{M}$の固有値である。

(3-6-11)の両辺の左から$\hat{M}$をかけると

$$\hat{M}\hat{L}|\lambda_i,\mu_i>=\hat{M}\lambda_i|\lambda_i,\mu_i>=\lambda_i\hat{M}|\lambda_i,\mu_i>=\lambda_i\mu_i|\lambda_i,\mu_i>、$$

(3-6-12)の両辺の左から$\hat{L}$をかけると

$$\hat{L}\hat{M}|\lambda_i,\mu_i>=\hat{L}\mu_i|\lambda_i,\mu_i>=\mu_i\hat{L}|\lambda_i,\mu_i>=\mu_i\lambda_i|\lambda_i,\mu_i>、$$

となるので、両者の差を取ると、

$$(\hat{L}\hat{M}-\hat{M}\hat{L})|\lambda_i,\mu_i>=[\hat{L},\hat{M}]|\lambda_i,\mu_i>=(\mu_i\lambda_i-\mu_i\lambda_i)|\lambda_i,\mu_i>=0 \qquad (3\text{-}6\text{-}13)$$

となるから、$[\hat{L},\hat{M}]=0$ となる。

この逆、$[\hat{L},\hat{M}]=0$ ならば、同時固有状態を持つことも示せる。

こうして、L とM の測定が両立するためには、$\hat{L}$ と$\hat{M}$ が交換し、同時固有状態を持てば良い。

$\hat{L}$ と$\hat{M}$ が交換する場合の測定手順の具体例として、例えば、最初に $\hat{L}$ の固有状態$|\lambda_i,\mu_i>$ で L を測定するとしよう。この時、必ず固有値 λ_i が観測される。しかし、この状態は$\hat{M}$の固有状態でもあるので、次にMを測定したとすると、必ずその状態の固有値 μ_i が観測される。こうして、それぞれの観測値にはばらつきがなく、測定が両立する。

[22] 講義の補足

演習6

(1) $<(\Delta\hat{M})^2>_A=<\hat{M}^2>_A-(<\hat{M}>_A)^2$を示せ

(2) 次の交換関係を証明せよ

$$[\hat{\sigma}_x,\hat{\sigma}_y]=2i\hat{\sigma}_z\ ,\ [\hat{\sigma}_y,\hat{\sigma}_z]=2i\hat{\sigma}_x\ ,\ [\hat{\sigma}_z,\hat{\sigma}_x]=2i\hat{\sigma}_y \qquad \text{(3-6-14)}$$

(3) $\hat{\sigma}_z$ の固有状態$|u>$ で σ_y を測定した時、その平均値$<\hat{\sigma}_y>_u$と分散$<(\Delta\hat{\sigma}_y)^2>_u$を求めよ。

（hint: $<\hat{\sigma}_y>_u=<u|\hat{\sigma}_y|u>$、 $<(\Delta\hat{\sigma}_y)^2>_u=<\hat{\sigma}_y{}^2>_u-(<\hat{\sigma}_y>_u)^2$）

(4) $\hat{\sigma}_z$ の固有状態$|u>$でσ_xを測定し、状態を$|u>$に戻してから σ_y を測定する[23]。この測定において、 $\hat{L}\to\hat{\sigma}_x$、$\hat{M}\to\hat{\sigma}_y$、$A\to u$ と置くと、不確定性関係(3-6-6)

$$<(\Delta\hat{L})^2>_A<(\Delta\hat{M})^2>_A\ \geq\frac{1}{4}|<[\hat{L},\hat{M}]>_A|^2 \qquad \text{(3-6-6再掲)}$$

を満たしている事を示しなさい。

(5) $\hat{\sigma}_x$ の固有状態$|r>$でσ_xを測定し、引き続き σ_y を測定する。 $\hat{L}\to\hat{\sigma}_x$、$\hat{M}\to\hat{\sigma}_y$、$A\to r$ と置くと、この場合も不確定性関係 (3-6-6）を満たしている事を示せ。

(6) $[\hat{x},\hat{p}_x]=i\hbar$ である事を示せ。（hint: $\hat{x}\to x$、$\hat{p}_x\to -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$ とし、交換子を波動関数 $\phi(x)$ に作用させることにより計算）

(7) 式(3-6-6)で $\hat{L}\to\hat{x}$、$\hat{M}\to\hat{p}_x$ と置くことにより、$\hat{x},\hat{p}_x$ の間の不確定性関係の不等式が

$$(\delta\hat{x})(\delta\hat{p}_x)\geq\frac{1}{2}\hbar \qquad \text{(3-6-15)}$$

となる事を示せ[24]。ここで、$(\delta\hat{x})=\sqrt{<(\Delta\hat{x})^2>}$、$(\delta\hat{p}_x)=\sqrt{<(\Delta\hat{p}_x)^2>}$

(8) 任意の演算子$\hat{A},\hat{B},\hat{C}$ に対して$[\hat{A},\hat{B}+\hat{C}]=[\hat{A},\hat{B}]+[\hat{A},\hat{C}]$である事を示せ。

(9) **[自習問題]** 不確定性関係の不等式(3-6-6)を証明する[25]。以下のことを示せ。

(a) $\hat{L}$ と$\hat{M}$がエルミート演算子の時、$[\hat{L},\hat{M}]=i\hat{N}$ ならば $\hat{N}$ はエルミート演算子

(b) ある状態$|A>$でL やM を測定する場合、それらの平均値を

$<\hat{L}>_A=<A|\hat{L}|A>$、 $<\hat{M}>_A=<A|\hat{M}|A>$、

偏差に対応する演算子を $\Delta\hat{L}=\hat{L}-<\hat{L}>$、$\Delta\hat{M}=\hat{M}-<\hat{M}>$ とすると、

$$[\Delta\hat{L},\Delta\hat{M}]=[\hat{L},\hat{M}] \qquad \text{(3-6-16)}$$

(c) 任意の実数 γ に対して、

$$J(\gamma)=<A|(\Delta\hat{L}-i\gamma\Delta\hat{M})(\Delta\hat{L}+i\gamma\Delta\hat{M})|A>\ \geq 0 \qquad \text{(3-6-17)}$$

(d) γ の２次式 $J(\gamma)$ の判別式を作ることにより、求める不確定性関係の不等式

$$<(\Delta\hat{L})^2>_A<(\Delta\hat{M})^2>_A\ \geq\frac{1}{4}|<[\hat{L},\hat{M}]>_A|^2 \qquad \text{(3-6-18)}$$

を示せ。

---

23 何度もこの手順を繰り返し観測する

24 「Kennardの不確定性関係(1927)」と呼ばれることもある。

25 一般にはSchwartz（シュワルツ）の不等式を使う（この演習のやり方もそれと同等である）。