

角度と軌道角運動量の不確定性関係とその一般化¹

谷村 省吾²

名古屋大学大学院情報科学研究科

Uncertainty relation between angle and orbital angular momentum, and its generalization

Shogo Tanimura

Graduate School of Information Science, Nagoya University

Chikusa-ku, Nagoya 464-8601, Japan

概要: 角度と軌道角運動量の不確定性関係を定式化しようとするときに出くわす問題点を概観し, 角度分布に対する秩序変数を導入することによってこれらの問題点を克服して不確定性関係を定式化する. この方式を利用して一般の対称性の生成子と秩序変数との不確定性関係も定式化できることを示す.

1 目的

角度と軌道角運動量の不確定性関係を定式化することが本研究の目的である. それは誰でも思いつきそうな問題なのに, なぜいまだで答えが出なかったのか, あるいは, なぜいまだに出された答えに満足できないのか, その問題点も整理する.

また, 角運動量は回転変換の生成子であり, 角度は回転変換を受ける変数だということを考えると, 角運動量と角度との関係は, 群作用の生成子と群作用を受ける等質空間上の関数との関係に一般化される. それらの間に成立する量子力学的な不確定性関係を定式化する. こうして得られた5つの不等式 (34), (39), (43), (46), (49) が本論文の主たる結果である.

2 問題点

2次元平面 $\mathbb{R}^2$ 上の粒子の力学を考える. 直交座標 (x, y) に対して極座標 (r, θ) は

$$x = r \cos \theta, \quad y = r \sin \theta \quad (1)$$

で定められる. あるいは

$$r = \sqrt{x^2 + y^2}, \quad \theta = \tan^{-1} \frac{y}{x} \quad (2)$$

¹数理解析研究所研究集会『量子系の統計的推測とその幾何学的構造』にて 2014 年 11 月 10 日講演.

²e-mail: tanimura[AT]is.nagoya-u.ac.jp

と書かれる。任意の整数 n に対して座標 (r, θ) と $(r, \theta + 2\pi n)$ は同一の点を指す。言い換えると、角度座標 θ は平面上の多価関数である。

古典力学では角度座標の多価性はとくに問題にならない。ひっくり返して言うと、古典力学は多様体上の微分方程式を扱う理論である。多様体は複数の座標チャートを座標変換で貼り合わせたものなので、座標関数は大域的な一価関数である必要はない。余接空間 $T^*\mathbb{R}^2 = \mathbb{R}^4$ の座標 (x, y, p_x, p_y) を用いて標準的なシンプレクティック形式 $\Omega = dp_x \wedge dx + dp_y \wedge dy$ を定めると、軌道角運動量は

$$L := xp_y - yp_x \quad (3)$$

で定義される。また、 $\mathbb{R}^4$ 上の適当な座標チャートに限定された関数として角度関数 θ は意味を持ち、Poisson 括弧は $\{\theta, L\} = 1$ となる。

それに対して、量子力学では角度座標は素直に扱えない。量子力学は、Hilbert 空間上の自己共役演算子で物理量を表し、Hilbert 空間の単位ベクトルで系の状態を表す。演算子という概念は Hilbert 空間上の大域的概念であって、座標チャートに限定して定義できるものではない。平面上の粒子の量子力学の場合、状態 Hilbert 空間として $L^2(\mathbb{R}^2)$ が採用され、軌道角運動量は微分演算子

$$\hat{L} = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \theta} \quad (4)$$

で表現される。軌道角運動量は量子力学でも問題なく記述できるのだが、問題は角度の方で、素朴に角度を $\theta = \tan^{-1} \frac{y}{x}$ による掛け算演算子

$$\hat{\theta} \psi(x, y) = \theta(x, y) \psi(x, y) \quad (5)$$

で表現しようとしても、 θ 自体が (x, y) の多価関数なので、右辺の値が一意的に定まらない。要するに、角度演算子などというものはない。

もしも $[\hat{\theta}, \hat{L}] = i\hbar$ という交換関係を満たす角度演算子 $\hat{\theta}$ があったとすると、標準偏差に関する Kennard-Robertson 流の不確定性関係

$$\sigma(\hat{\theta}) \sigma(\hat{L}) \geq \frac{1}{2} \hbar \quad (6)$$

が成立するはずである [1]。そうだとすると、角運動量の標準偏差 $\sigma(\hat{L})$ がゼロに近づくとき、角度の標準偏差 $\sigma(\hat{\theta})$ が無限大に発散するが、角度というものが $-\pi \leq \theta < \pi$ のような有界な範囲でのみ幾何学的意味を持つことを考えると、「角度の不確かさが無限大になる」という表現はナンセンスである。

量子論の文脈を離れて、円周 S^1 上の確率密度関数 $\rho(\theta)$ を考えて、参照パラメータとして実数 a を導入して、「角度の平均値」 $\langle \hat{\theta} \rangle$ を

$$\langle \hat{\theta} \rangle := \int_{a-\pi}^{a+\pi} \theta \rho(\theta) d\theta \quad (7)$$

で定めると、この値は基点 a の採り方に依存する。言い換えると、右辺の積分値は座標チャート $a - \pi \leq \theta < a + \pi$ に依存する。「角度の分散」 $V(\hat{\theta}) = \langle \hat{\theta}^2 \rangle - \langle \hat{\theta} \rangle^2$ も同様に基点 a に依存する。

座標としての角度は、加法的な量ではないし、アフィン空間の量でもないので、「角度の平均値」や「角度の分散」は well-defined ではないのである。そのため、「角度の統計的ちらばりぐあい」の定量的指標を定義するのは難儀であり、角度に関する不確定性関係を定式化するのは無理がある。それでも、位置と運動量に不確定性関係があるように、角度と軌道角運動量にも何らかの不確定性関係があると期待するのは自然であり、それを定式化しようとする試みが繰り返されてきた。

Judge [2, 3, 4] は波動関数 $\psi(\theta) \in L^2(S^1)$ に対して

$$V(a) := \int_{a-\pi}^{a+\pi} (\theta - a)^2 |\psi(\theta)|^2 d\theta \quad (8)$$

$$\Delta_\theta^2 := \inf_a V(a) \quad (9)$$

で定められる Δ_θ^2 を角度分布の広がり の指標として導入し、

$$\sqrt{V(a)} \cdot \sigma(\hat{L}) \geq \frac{1}{2} \hbar \left\{ 1 - 2\pi |\psi(a + \pi)|^2 \right\} \quad (10)$$

$$\frac{\Delta_\theta}{1 - \frac{3}{\pi^2} \Delta_\theta^2} \cdot \sigma(\hat{L}) \geq 0.15 \hbar \quad (11)$$

という不等式を証明した。

また、大貫・北門 [5] は、 S^1 上の位置を記述するためには多価の角度座標 θ よりも S^1 上の一価関数である $U = e^{i\theta}$ を用いる方が適切であると考え、角度座標に対応する自己共役演算子の代わりに $e^{i\theta}$ に対応するユニタリ演算子を用いて S^1 上の量子力学の代数を定義した。彼らは、 S^1 上の量子力学代数の既約表現が無限個あることを示し、既約表現の分類も完成した。

谷村 [6] は、大貫・北門の理論を用いて S^1 上の量子力学における角度と角運動量の不確定性関係を調べた。しかし、Judge 以降の研究は半径一定の円周に束縛された粒子のみを扱っており、平面上や3次元空間中に確率分布を持つ粒子には適用できない。

そこで、本研究では、任意次元の空間中の粒子の確率分布を任意の平面に射影したときに定まる確率分布について、平面内の角度分布の不確定性と、平面上の回転に対応する軌道角運動量の不確定性との間に成立する不確定性関係を定式化する。主たる結果は (34), (39), (43) である。

3 Robertson の不等式

Heisenberg [7] が提唱した不確定性関係は、さまざまな数学的定式化がなされている。その中でも我々が注目した定式化は Robertson の不等式 [8] と呼ばれる定式化である。

これはよく知られている不等式だが、本論文を自己完結させるためにいちおう導出も書いておく。

Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ の任意の 2 つのベクトル $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$ に対して Schwarz の不等式

$$\langle\alpha|\alpha\rangle\langle\beta|\beta\rangle \geq \left|\langle\alpha|\beta\rangle\right|^2 \quad (12)$$

が成立する。等号は、2 つのベクトル $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$ が一次従属のときのみ成立する。いま、 $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ を単位ベクトルとする。 $\mathcal{H}$ 上の自己共役演算子 $\hat{A}, \hat{B}$ に対して

$$\langle\hat{A}\rangle := \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle, \quad (13)$$

$$\Delta\hat{A} := \hat{A} - \langle\hat{A}\rangle\hat{I}, \quad (14)$$

$$|\alpha\rangle := \Delta\hat{A}|\psi\rangle, \quad (15)$$

$$|\beta\rangle := \Delta\hat{B}|\psi\rangle \quad (16)$$

とおく。ここで $\hat{I}$ は $\mathcal{H}$ 上の恒等演算子である。これらに Schwarz 不等式 (12) を適用すると、

$$\langle\psi|(\Delta\hat{A})^2|\psi\rangle\langle\psi|(\Delta\hat{B})^2|\psi\rangle \geq \left|\langle\psi|\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}|\psi\rangle\right|^2 \quad (17)$$

を得る。状態 $|\psi\rangle$ における物理量 $\hat{A}$ の標準偏差は

$$\sigma(\hat{A}) := \left(\langle\psi|(\Delta\hat{A})^2|\psi\rangle\right)^{\frac{1}{2}} \quad (18)$$

で定められる。また、たやすく見て取れることだが、

$$\begin{aligned} \Delta\hat{A}\Delta\hat{B} &= \frac{1}{2}(\Delta\hat{A}\Delta\hat{B} + \Delta\hat{B}\Delta\hat{A}) + \frac{1}{2}(\Delta\hat{A}\Delta\hat{B} - \Delta\hat{B}\Delta\hat{A}) \\ &= \frac{1}{2}\{\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\} + \frac{1}{2}[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}] \\ &= \frac{1}{2}\{\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\} + \frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}] \end{aligned} \quad (19)$$

が成り立つ。 $\langle\psi|\{\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\}|\psi\rangle$ は実数で、 $\langle\psi|[\hat{A}, \hat{B}]|\psi\rangle$ は純虚数なので、(17) の右辺は

$$\left|\langle\psi|\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}|\psi\rangle\right|^2 = \frac{1}{4}\langle\psi|\{\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\}|\psi\rangle^2 + \frac{1}{4}\left|\langle\psi|[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}]|\psi\rangle\right|^2 \quad (20)$$

に等しい。ゆえに (17) から

$$\begin{aligned} \sigma(\hat{A})^2\sigma(\hat{B})^2 &\geq \frac{1}{4}\langle\psi|\{\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\}|\psi\rangle^2 + \frac{1}{4}\left|\langle\psi|[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}]|\psi\rangle\right|^2 \\ &\geq \frac{1}{4}\left|\langle\psi|[\hat{A}, \hat{B}]|\psi\rangle\right|^2 \end{aligned} \quad (21)$$

を得る。両辺の平方根をとれば

$$\sigma(\hat{A}) \cdot \sigma(\hat{B}) \geq \frac{1}{2}\left|\langle\psi|[\hat{A}, \hat{B}]|\psi\rangle\right| \quad (22)$$

を得る。これが **Robertson** の不等式である。もしも $\langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle \neq 0$ ならば物理量 $\hat{A}$ と $\hat{B}$ は、この状態 $|\psi\rangle$ において確定値を持つことができず、それらの測定値は必ず統計的ばらつきを伴う。

(21) の最後の行に移行するときに省いた項は

$$\begin{aligned} C_s(\hat{A}, \hat{B}) &:= \frac{1}{2} \langle \psi | \{ \Delta \hat{A}, \Delta \hat{B} \} | \psi \rangle = \frac{1}{2} \langle \psi | \{ \Delta \hat{A}, \hat{B} \} | \psi \rangle = \frac{1}{2} \langle \psi | \{ \hat{A}, \Delta \hat{B} \} | \psi \rangle \\ &= \frac{1}{2} \langle \psi | \{ \hat{A}, \hat{B} \} | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \langle \psi | \hat{B} | \psi \rangle \end{aligned} \quad (23)$$

とも書かれ、 $\hat{A}$ と $\hat{B}$ の対称化された共分散 (symmetrized covariance) と呼ばれる。この項を省かずに残しておくと (21) は

$$\sigma(\hat{A})^2 \cdot \sigma(\hat{B})^2 \geq \left| C_s(\hat{A}, \hat{B}) \right|^2 + \frac{1}{4} \left| \langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle \right|^2 \quad (24)$$

と書ける。この式は **Schrödinger** の不等式と呼ばれる [9]。

4 角度分布の秩序変数と角運動量の不確定性不等式

この節では本論文の主要な結果を提示する。2 以上の次元の配位空間中の粒子の量子力学を考える。配位空間内の任意の 2 次元面に注目し、面上の直交座標を x, y とし、共役な運動量を p_x, p_y とする。これらに対応する演算子 $\hat{x} = \hat{x}_1, \hat{y} = \hat{x}_2, \hat{p}_x = \hat{p}_1, \hat{p}_y = \hat{p}_2$ は正準交換関係 $[\hat{x}_j, \hat{p}_k] = i\hbar\delta_{jk}$, $[\hat{x}_j, \hat{x}_k] = 0$, $[\hat{p}_j, \hat{p}_k] = 0$ を満たす。我々は次の演算子を導入する：

$$\hat{Z} := \hat{x} + i\hat{y}, \quad \hat{L} := \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x. \quad (25)$$

演算子 $\hat{Z}$ は自己共役ではないが、正規（実部と虚部が可換）である。したがって、 $\hat{Z}$ のスペクトルは複素数であり、粒子の位置を指すものと解釈できる。演算子 $\hat{L}$ は自己共役であり、軌道角運動量 (orbital angular momentum, OAM) と呼ばれる。これらは交換関係

$$[\hat{L}, \hat{Z}] = \hbar \hat{Z} \quad (26)$$

を満たし、任意の自然数 $n = 1, 2, 3, \dots$ に対し

$$[\hat{L}, \hat{Z}^n] = n\hbar \hat{Z}^n \quad (27)$$

を満たす。単位ベクトル $\psi \in \mathcal{H}$ に対して

$$\langle \hat{L} \rangle := \langle \psi | \hat{L} | \psi \rangle, \quad \Delta \hat{L} := \hat{L} - \langle \hat{L} \rangle \hat{I} \quad (28)$$

とおく。さらに、

$$|\alpha\rangle = \Delta \hat{L} |\psi\rangle, \quad |\beta\rangle = \hat{Z} |\psi\rangle \quad (29)$$

とおけば, $\langle \alpha | = \langle \psi | \Delta \hat{L}^\dagger = \langle \psi | \Delta \hat{L}$ および $\langle \beta | = \langle \psi | \hat{Z}^\dagger$ である. これらについて Schwarz 不等式 (12) を書くと,

$$\langle \psi | (\Delta \hat{L})^2 | \psi \rangle \langle \psi | \hat{Z}^\dagger \hat{Z} | \psi \rangle \geq \left| \langle \psi | \Delta \hat{L} \hat{Z} | \psi \rangle \right|^2 \quad (30)$$

となり,

$$\sqrt{\langle (\Delta \hat{L})^2 \rangle} \sqrt{\langle \hat{Z}^\dagger \hat{Z} \rangle} \geq \left| \langle \Delta \hat{L} \hat{Z} \rangle \right| \quad (31)$$

を得る. これとは別に,

$$|\alpha\rangle = \hat{Z}^\dagger |\psi\rangle, \quad |\beta\rangle = \Delta \hat{L} |\psi\rangle \quad (32)$$

に Schwarz 不等式 (12) を適用すると

$$\sqrt{\langle \hat{Z} \hat{Z}^\dagger \rangle} \sqrt{\langle (\Delta \hat{L})^2 \rangle} \geq \left| \langle \hat{Z} \Delta \hat{L} \rangle \right| \quad (33)$$

を得る. 式 (31), (33) を足して 2 で割った式を書き, 任意の複素数 a, b についての三角不等式 $|a| + |b| \geq |a - b|$ を用いると

$$\begin{aligned} \sqrt{\langle (\Delta \hat{L})^2 \rangle} \sqrt{\langle \hat{Z}^\dagger \hat{Z} \rangle} &\geq \frac{1}{2} \left\{ \left| \langle \Delta \hat{L} \hat{Z} \rangle \right| + \left| \langle \hat{Z} \Delta \hat{L} \rangle \right| \right\} \\ &\geq \frac{1}{2} \left\{ \left| \langle \Delta \hat{L} \hat{Z} - \hat{Z} \Delta \hat{L} \rangle \right| \right\} \\ &= \frac{1}{2} \left\{ \left| \langle [\hat{L}, \hat{Z}] \rangle \right| \right\} \\ &= \frac{1}{2} \hbar \left| \langle \hat{Z} \rangle \right| \end{aligned} \quad (34)$$

を得る. ここで, $\hat{Z} \hat{Z}^\dagger = \hat{Z}^\dagger \hat{Z}$ と, 交換関係 (26), $[\Delta \hat{L}, \hat{Z}] = [\hat{L}, \hat{Z}] = \hbar \hat{Z}$ を用いた. この不等式 (34) が主結果の 1 つである.

上の推論中の演算子 $\hat{Z}$ を $\hat{Z}^n$ で置き換えて, 交換関係 (27) を用いれば

$$\sqrt{\langle (\Delta \hat{L})^2 \rangle} \sqrt{\langle (\hat{Z}^\dagger \hat{Z})^n \rangle} \geq \frac{1}{2} n \hbar \left| \langle \hat{Z}^n \rangle \right| \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (35)$$

を得る. 非負実数

$$\sigma(\hat{L}) := \sqrt{\langle \psi | (\Delta \hat{L})^2 | \psi \rangle} = \sqrt{\langle \psi | \hat{L}^2 | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{L} | \psi \rangle^2} \quad (36)$$

は軌道角運動量の標準偏差であり, 複素数

$$\begin{aligned} \langle \hat{Z}^n \rangle &= \langle \psi | (\hat{x} + i\hat{y})^n | \psi \rangle = \iint_{-\infty}^{\infty} (x + iy)^n \rho(x, y) dx dy \\ &= \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \int_0^{\infty} dr r^{n+1} e^{in\theta} \rho(r \cos \theta, r \sin \theta) \end{aligned} \quad (37)$$

は状態 $|\psi\rangle$ における xy 平面上の確率分布の n 次モーメント (n -th moment of position distribution) である. もし xy 平面上の確率分布 $\rho(x, y)$ が回転不変ならば, すべての

モーメントは消えて $\langle \hat{Z}^n \rangle = 0$ ($n = 1, 2, 3, \dots$) となる。対偶として、もし、ある n に対してノンゼロのモーメント $\langle \hat{Z}^n \rangle \neq 0$ があれば、確率分布 $\rho(x, y)$ は回転不変ではない。したがって、期待値 $\langle \hat{Z}^n \rangle$ は回転対称性の破れの秩序変数 (order parameter) だと言える。また、

$$\mu_n := \frac{\langle \hat{Z}^n \rangle}{\sqrt{\langle (\hat{Z}^\dagger \hat{Z})^n \rangle}} = \frac{\langle (\hat{x} + i\hat{y})^n \rangle}{\sqrt{\langle (\hat{x}^2 + \hat{y}^2)^n \rangle}} = \frac{\langle r^n e^{in\theta} \rangle}{\sqrt{\langle r^{2n} \rangle}} \quad (38)$$

を規格化された n 次モーメント (normalized n -th moment) とか角度分布の秩序変数 (angular order parameter) と呼ぶ。 μ_n は平面上の粒子の位置の角度分布の非対称性・偏りの指標である。これを用いると (35) は

$$\sigma(\hat{L}) \geq \frac{1}{2}n\hbar \frac{|\langle \hat{Z}^n \rangle|}{\langle (\hat{Z}^\dagger \hat{Z})^n \rangle^{1/2}} = \frac{1}{2}n\hbar |\mu_n| \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (39)$$

と書ける。これが本論文の2つ目の主結果である。この不等式は次のように解釈できる (本論文の最終ページに概念図を表示する) :

(i) 不等式 (39) は、軌道角運動量の不確かさ $\sigma(\hat{L})$ が小さいとき、すべての n 次モーメント $|\mu_n|$ も小さいことを意味する。このとき、粒子の角度分布の偏りは小さい。言い換えると、角度の不確かさは大きい。

(ii) 角度の不確かさが小さいとは、粒子の角度分布が偏っていることであり、モーメント $|\mu_n|$ の大きな値として現れる。この場合、不等式 (39) は、軌道角運動量の不確かさ $\sigma(\hat{L})$ が大きいことを意味する。

以上のように、(39) によれば、角度分布の不確かさと軌道角運動量の不確かさを同時に小さくすることはできない。この意味で (39) は角度分布と軌道角運動量の不確定性関係を表している。

5 よりタイトな不等式

$n = 1$ のモーメントに対する不確定性不等式 (34) の等号成立の必要十分条件は、2つの Schwarz 不等式 (31), (33) の等号と、もう1つの等号 $\langle \Delta \hat{L} \hat{Z} \rangle = -\langle \hat{Z} \Delta \hat{L} \rangle$ が同時に成立することである。じつは、この3つの条件を満たす状態ベクトルは $\hat{L}$ の固有ベクトルしかない。このとき (34) の両辺はともにゼロになる。(34) の両辺がゼロではない値になって等号が成立することはない。等号を達成しにくいという意味において、(34) はタイトな不等式ではない。同様のことは $n \geq 2$ の不等式 (39) についても言える。つまり、(39) の等号は両辺がゼロになる状態においてのみ成立する。

そこで、よりタイトな不等式を見い出そう。そのために $\hat{Z} = \hat{x} + i\hat{y}$ の n 乗の実部と虚部にあたる自己共役演算子

$$\hat{x}_n := \frac{1}{2}(\hat{Z}^n + \hat{Z}^{\dagger n}), \quad \hat{y}_n := \frac{1}{2i}(\hat{Z}^n - \hat{Z}^{\dagger n}) \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (40)$$

を導入する。もちろん,

$$\hat{Z}^n = (\hat{x} + i\hat{y})^n = \hat{x}_n + i\hat{y}_n \quad (41)$$

が成り立つ。これらを用いれば

$$\begin{aligned} \Delta\hat{L}\hat{Z}^n &= \frac{1}{2}\{\Delta\hat{L}, \hat{Z}^n\} + \frac{1}{2}[\Delta\hat{L}, \hat{Z}^n] \\ &= \frac{1}{2}\{\Delta\hat{L}, (\hat{x}_n + i\hat{y}_n)\} + \frac{1}{2}n\hbar\hat{Z}^n \\ &= \frac{1}{2}\{\Delta\hat{L}, \hat{x}_n\} + i\frac{1}{2}\{\Delta\hat{L}, \hat{y}_n\} + \frac{1}{2}n\hbar(\hat{x}_n + i\hat{y}_n) \end{aligned} \quad (42)$$

が容易に確かめられる。ゆえに, 1つの Schwarz 不等式 (30) は

$$\begin{aligned} \langle(\Delta\hat{L})^2\rangle \cdot \langle\hat{Z}^\dagger\hat{Z}\rangle &\geq \left|\frac{1}{2}\langle\{\Delta\hat{L}, \hat{x}_n\}\rangle + \frac{1}{2}n\hbar\langle\hat{x}_n\rangle\right|^2 + \left|\frac{1}{2}\langle\{\Delta\hat{L}, \hat{y}_n\}\rangle + \frac{1}{2}n\hbar\langle\hat{y}_n\rangle\right|^2 \\ &= \left|C_s(\hat{L}, \hat{x}_n) + \frac{1}{2}n\hbar\langle\hat{x}_n\rangle\right|^2 + \left|C_s(\hat{L}, \hat{y}_n) + \frac{1}{2}n\hbar\langle\hat{y}_n\rangle\right|^2 \end{aligned} \quad (43)$$

と同値である。ここで共分散の定義式 (23), $C_s(\hat{A}, \hat{B}) = \frac{1}{2}\langle\psi|\{\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\}|\psi\rangle = \frac{1}{2}\langle\psi|\{\Delta\hat{A}, \hat{B}\}|\psi\rangle$ を用いた。不等式 (43) が本論文の 3 つ目の主結果である。

先ほどの不確定性不等式 (34) は 3 つの不等式から導かれたので, 右辺の下限値を小さめに見積もっていたのに対して, こちらの不確定性不等式 (43) は 1 つの Schwarz 不等式そのものであり, 右辺の下限値としてはより大きな値を与える。

しかし, 調べてみると, (43) の等号は角運動量の固有状態によってのみ達成されることがわかる。もともと Robertson の不等式 (22) も, 一般論としての等号成立条件はわかっているが, 具体的な物理量に対して等号を達成する状態があるかという問題は, 一概には答えられないし, 非自明な等号成立状態があるとも限らないので, これはしかたのないことであろう。

6 実験検証に向けて

我々は 3 通りの不確定性不等式 (34), (39), (43) を導いた。これらの関係式を検証するためには, 粒子の軌道角運動量を制御したり測定したりする方法が必要である。

光子の軌道角運動量を制御・測定する方法は光学の実験家の間では近年ポピュラーになっている。Franke-Arnold, Padgett ら [10, 11] は光を使って Judge [2] と Berbett, Pegg [12] の不確定性関係 (10) をテストしている。

内田と外村 [13] は, 格子欠陥を持つグラファイト結晶に電子ビームを照射して電子の軌道角運動量を変化させ, ノンゼロの軌道角運動量を持つコヒーレントな (干渉性のよい) 電子ビームを生成することに成功した。そのような電子ビームは, 波動関数の等位相面の形状から電子らせんビーム (electron vortex beam) とも呼ばれる。Verbeeck ら [14] と McMorran ら [15] は, フォーク型と呼ばれる微細な回折格子を作成し, これに電子ビームを照射して, 電子ビームの進行方向を屈折させると同時に電子の軌道角

運動量を変えるという実験に成功した。彼らが作った回折電子ビームは、進行方向を z 軸とすると運動量 p_z と軌道角運動量 L_z の同時固有状態である。この電子の空間分布は z 軸周りに回転対称であり、角度の不確かさは最大かつ角運動量の不確かさは最小の状態になっている。

2013 年に長谷川・齋藤ら [16, 17, 18] は、微細なフォーク型回折格子を 2 つ並べて、2 通りの経路を通った電子ビームを重ね合わせるという実験を行った。これは、いわゆるダブルスリット実験の設定で、スリットごとに異なる軌道角運動量を電子に与える状況になっている。異なった軌道角運動量状態を重ね合わせるのだから、結果的には角運動量が不確定な状態ができて、角度分布はいくぶん確定した状態、すなわち回転に関して非対称な確率分布になることが予想される。実際に、彼らは、回転非対称な干渉像を観察した。ただし、不確定性関係の定量的な検証には至っていない。

7 一般化

交換関係 (26) は、任意の実数 α に対する関係式

$$e^{i\alpha\hat{L}/\hbar} \hat{Z} e^{-i\alpha\hat{L}/\hbar} = e^{i\alpha} \hat{Z} \quad (44)$$

と同等であり、軌道角運動量 $\hat{L}$ が複素位置座標 $\hat{Z}$ に回転の生成子として作用することを意味している。もし、状態 $|\psi\rangle$ が回転不変ならば

$$\langle\psi|\hat{Z}|\psi\rangle = \langle\psi|e^{i\alpha\hat{L}/\hbar} \hat{Z} e^{-i\alpha\hat{L}/\hbar}|\psi\rangle = e^{i\alpha} \langle\psi|\hat{Z}|\psi\rangle \quad (45)$$

が任意の $\alpha \in \mathbb{R}$ に対して成り立ち、したがって $\langle\psi|\hat{Z}|\psi\rangle = 0$ である。対偶として、 $\langle\psi|\hat{Z}|\psi\rangle \neq 0$ ならば状態 $|\psi\rangle$ は回転不変ではない。

このように、あるパラメータの値がノンゼロであることが対称性の破れの十分条件になっているとき、そのパラメータを秩序変数 (order parameter) という。我々が示した不確定性不等式 (34), (39), (43) はすべて、回転変換の生成子である角運動量と秩序変数の関係になっている。

以上の関係に類似の関係は、一般の対称性変換の生成子である自己共役演算子 $\hat{G}$ と、自己共役とは限らない演算子 $\hat{\phi}$ との間にも成り立つ。不等式 (34) を導いたのと同様の推論により、

$$\sigma(\hat{G}) \geq \frac{|\langle[\hat{G}, \hat{\phi}]\rangle|}{\sqrt{\langle\hat{\phi}^\dagger \hat{\phi}\rangle} + \sqrt{\langle\hat{\phi} \hat{\phi}^\dagger\rangle}} \quad (46)$$

を証明できる。 $\hat{G}$ は保存チャージ (charge) と呼ばれ、 $\langle[\hat{G}, \hat{\phi}]\rangle = \langle\psi|[\hat{G}, \hat{\phi}]|\psi\rangle$ は秩序変数に他ならない。不等式 (46) が本論文の 4 つ目の主結果である（これを先に証明すれば他の不等式はその特別な場合として導けるものであった）。

この (46) の意味は明らかであろう。 $\sigma(\hat{G})$ はチャージの標準偏差である。右辺の $[\hat{G}, \hat{\phi}]$ は、 $\hat{G}$ による $\hat{\phi}$ の変換を表している。もし、状態 $|\psi\rangle$ が $\hat{G}$ の変換の下で不変ならば、状

態 $|\psi\rangle$ は $\hat{G}$ の固有状態であり, $\sigma(\hat{G}) = 0$ であり, 秩序変数はゼロ $\langle\psi|[\hat{G}, \hat{\Phi}]|\psi\rangle = 0$ である.

対偶として, 秩序変数がノンゼロ $\langle\psi|[\hat{G}, \hat{\Phi}]|\psi\rangle \neq 0$ ならば, $\sigma(\hat{G}) \neq 0$ であり, $|\psi\rangle$ はチャージの値が不確かな状態になっている. 以上のような関係を不等式 (46) は定量的に表している.

8 適用例

前節の不確定性不等式 (46) は, 大域的ゲージ変換の場合に適用できる. その場合は, 交換関係 $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$ を満たす boson の生成消滅演算子 $\hat{a}^\dagger, \hat{a}$ によって記述される系を考える. チャージとして boson 数演算子 $\hat{G} = \hat{N} := \hat{a}^\dagger \hat{a}$ を採り, 秩序変数を定める演算子として $\hat{\Phi} = \hat{a}^n$ を採る (n は任意の自然数). 数学的帰納法により

$$\hat{a}^{\dagger n} \hat{a}^n = \hat{N}(\hat{N} - 1)(\hat{N} - 2) \cdots (\hat{N} - (n - 1)), \quad (47)$$

$$\hat{a}^n \hat{a}^{\dagger n} = (\hat{N} + 1)(\hat{N} + 2)(\hat{N} + 3) \cdots (\hat{N} + n) \quad (48)$$

を証明できる. このとき一般化不確定性不等式 (46) は

$$\begin{aligned} \sigma(\hat{N}) &\geq \frac{|\langle[\hat{N}, \hat{a}^n]\rangle|}{\sqrt{\langle\hat{a}^{\dagger n} \hat{a}^n\rangle} + \sqrt{\langle\hat{a}^n \hat{a}^{\dagger n}\rangle}} \\ &= \frac{n|\langle\hat{a}^n\rangle|}{\sqrt{\hat{N}(\hat{N} - 1) \cdots (\hat{N} - (n - 1))} + \sqrt{(\hat{N} + 1)(\hat{N} + 2) \cdots (\hat{N} + n)}} \end{aligned} \quad (49)$$

となる. これは「粒子数と位相の不確定性関係」と呼ばれ, 雑に $\Delta N \cdot \Delta \phi \gtrsim 1$ と書かれる概念を厳密に定式化した式である.

物理では, $\langle\psi|\hat{a}|\psi\rangle \neq 0$ となるような状態 $|\psi\rangle$ は Bose-Einstein 凝縮状態として知られている. $\langle\psi|\hat{a}|\psi\rangle = 0$ かつ $\exists n \geq 2, \langle\psi|\hat{a}^n|\psi\rangle \neq 0$ となるような状態 $|\psi\rangle$ があればそれを n 次の Bose-Einstein 凝縮状態と呼びたいが, そのような物理的例はまだ知られていない.

なお, $\hat{a}^n \hat{a}^{\dagger n}$ を normal ordering に並び替えるには次の公式が便利である:

$$\begin{aligned} \hat{a}^n \hat{a}^{\dagger n} &= \sum_{k=0}^n \frac{(n!)^2}{(n-k)!(k!)^2} (\hat{a}^\dagger)^k \hat{a}^k \\ &= \hat{a}^{\dagger n} \hat{a}^n + n^2 (\hat{a}^\dagger)^{n-1} \hat{a}^{n-1} + \frac{1}{2} \{n(n-1)\}^2 (\hat{a}^\dagger)^{n-2} \hat{a}^{n-2} \\ &\quad + \frac{1}{3!} \{n(n-1)(n-2)\}^2 (\hat{a}^\dagger)^{n-3} \hat{a}^{n-3} + \cdots + n! \hat{a}^\dagger \hat{a} + n! \end{aligned} \quad (50)$$

この公式を使えば, 例えば $|\psi\rangle$ がコヒーレント状態 ($\exists z \in \mathbb{C}, \hat{a}|\psi\rangle = z|\psi\rangle$) を満たす状態ベクトル) だった場合の期待値 $\langle\psi|\hat{a}^{\dagger n} \hat{a}^n|\psi\rangle, \langle\psi|\hat{a}^n \hat{a}^{\dagger n}|\psi\rangle$ を系統的に計算できる.

9 残された課題

粒子数と位相の不確定性関係に関係して、粒子性と波動性の相補性とか、経路識別と干渉の相補性と呼ばれる概念があるが、これは厳密な定式化がされていない [19]。本論文で提案した不等式が相補性の定式化に利用できるとよいと思うが、未解決である。

本研究では、物理量の値の不確かさの指標として標準偏差を用いたが、測定値の不確かさの指標は標準偏差だけとは限らない。小澤 [20] は不確かさの指標として測定誤差（真値と読み取り値との差）と擾乱（測定過程の前後の値の差）を導入し、これらの指標の間に成り立つ関係式（不等式）を証明した。さらに Branciard [21] は小澤の不等式よりもタイトな不等式を証明した。ただし、彼らの不等式は自己共役演算子で表される物理量に関するものであり、角度のように自己共役演算子で表せない物理量には適用できない。角度の不確かさの指標として誤差や擾乱を用いた不確定性関係を定式化できるかという問題は課題として残っている。

不確定性関係はさまざまな観点から定式化されているが、もう一つ、推定理論における不確定性という観点もある。ここでいう推定とは、有限回の測定によって物理量の真の期待値を推定することである。有限回の測定によって得られる標本値は統計的にゆらいているため、標本値の平均値が、母集団の真の期待値と一致するとは限らない。推定理論は、より正確な推定のための方法を与えたり、推定の誤差を評価したりする理論である。渡辺優ら [22, 23] は推定理論の観点から不確定性関係を定式化している。また、林 [24] は群作用の推定に関する不確定性関係を、また別の観点から定式化している。こういった推定問題の観点から角度と軌道角運動量の不確定性関係も調べる必要があると考えられる。

謝辞

タイトな不確定性不等式 (43) は渡辺圭亮氏が導いたものです。また、高次のモーメントがノンゼロであるような確率分布の図も渡辺圭亮氏が作成したものです。彼はこの研究の実質的な共同研究者です。

齋藤晃氏とは、電子らせんビームの実験について詳細な討論をさせていただき、実験の見学もさせていただきました。田中信夫氏には電子顕微鏡の理論の手ほどきから、スピン偏極電子ビームの計画まで教えていただきました。彼らとの共同研究によって本研究が動機付けられたことを感謝しています。熊谷亘氏には本研究集会にお誘いいただいたことを感謝しています。田中冬彦氏からは方向統計 (directional statistics) や円統計 (circular statistics) という分野があることを教えていただきました。おかげで角度の統計的扱いについての研究を知ることができました。

本研究の内容の一部は、2013年に近畿大学および神戸大学でのセミナーで発表し、2014年に日本で開催された第3回 QUATUO 研究会, The Fifth Nagoya Winter Workshop on Quantum Information, Measurement, and Foundations, QMKEK5 研究会, 日本物

理学会第 69 回年次大会 (東海大学), QIT30 研究会, および, ウズベキスタンで開催された Workshop on wave dynamics in low-dimensional branched structures でも講演しています。これらの発表の機会をくださった世話人の方々に感謝しています。本論文では, ウズベキスタン講演の報告論文 [25] よりも boson 演算子の扱いについて詳しく書きました。なお, 本研究は科研費基盤研究 (C) 課題番号 26400417 の助成を受けています。

参考文献

- [1] Schiff, L. I., *Quantum Mechanics*, 3rd edition, McGraw-Hill (1968). In Eq. (3.2) of the textbook the naive uncertainty relation $\Delta\phi \cdot \Delta J_z \gtrsim \hbar$ is shown.
- [2] Judge, D., “On the uncertainty relation for L_z and φ ,” *Phys. Lett.* **5**, 189 (1963).
- [3] Kraus, K., “Remark on the uncertainty between angle and angular momentum,” *Z. Physik* **188**, 374 (1965).
- [4] Carruthers, P., Nieto, M. M., “Phase and angle variables in quantum mechanics,” *Rev. Mod. Phys.* **40**, 411 (1968).
- [5] Ohnuki, Y., Kitakado, S., “Fundamental algebra for quantum mechanics on S^D and gauge potentials,” *J. Math. Phys.* **34**, 2827 (1993).
- [6] Tanimura, S., “Gauge field, parity and uncertainty relation of quantum mechanics on S^1 ,” *Prog. Theor. Phys.* **90**, 271 (1993).
- [7] Heisenberg, W., “Über den anschaulichen Inhalt der quantentheoretischen Kinetik und Mechanik,” *Z. Physik* **43**, 172 (1927).
- [8] Robertson, H. P., “The uncertainty principle,” *Phys. Rev.* **34**, 163 (1929).
- [9] Schrödinger, E., “Zum Heisenbergschen Unschärfeprinzip,” *Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften, Physikalisch-mathematische Klasse* **19**, 296 (1930).
- [10] Franke-Arnold, S., Barnett, S. M., Yao, E., Leach, J., Courtial, J., Padgett, M., “Uncertainty principle for angular position and angular momentum,” *New J. Phys.* **6**, 103 (2004).
- [11] Pegg, D. T., Barnett, S. M., Zambrini, R., Franke-Arnold, S., Padgett, M., “Minimum uncertainty states of angular momentum and angular position,” *New J. Phys.* **7**, 62 (2005).
- [12] Barnett, S. M., Pegg, D. T., “Quantum theory of rotation angles,” *Phys. Rev. A* **41**, 3427 (1990).
- [13] Uchida, M., Tonomura, A., “Generation of electron beams carrying orbital angular momentum,” *Nature* **464**, 737 (2010).
- [14] Verbeeck, J., Tian, H., Schattschneider, P., “Production and application of electron vortex beams,” *Nature* **467**, 301 (2010).

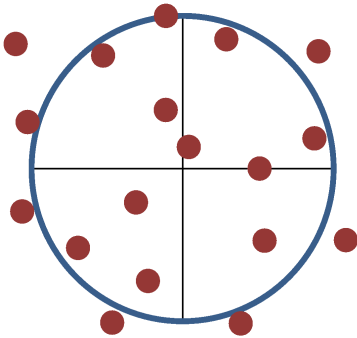
- [15] McMorran, B. J., Agrawal, A., Anderson, I. M., Herzing, A. A., Lezec, H. J., McClelland, J. J., Unguris, J., "Electron vortex beams with high quanta of orbital angular momentum," *Science* **331**, 192 (2011).
- [16] Hasegawa, Y., Saitoh, K., Tanaka, N., Tanimura, S., Uchida, M., "Young's interference experiment with electron beams carrying orbital angular momentum," *J. Phys. Soc. Jap.* **82**, 033002 (2013).
- [17] Hasegawa, Y., Saitoh, K., Tanaka, N., Uchida, M., "Propagation dynamics of electron vortex pairs," *J. Phys. Soc. Jap.* **82**, 073402 (2013).
- [18] 古田彩「不確定性原理で電子の記憶を消す」日経サイエンス 2013年5月号 pp.16-17. (別冊日経サイエンス No.199「量子の逆説」 pp.38-39 (2014年6月) に再録)
- [19] Tanimura, S., "The incompatibility relation between visibility of interference and distinguishability of paths," e-print arXiv quant-ph/0703118 (2007).
- [20] Ozawa, M., "Universally valid reformulation of the Heisenberg uncertainty principle on noise and disturbance in measurement," *Phys. Rev. A* **67**, 042105 (2003).
- [21] Branciard, C., "Error-tradeoff and error-disturbance relations for incompatible quantum measurements," *Proceedings of the National Academy of Science of the United States of America* **110**, 6742 (2013). Supporting Information is also available.
- [22] Watanabe, Y., Sagawa, T., Ueda, M., "Uncertainty relation revisited from quantum estimation theory," *Phys. Rev. A* **84**, 042121 (2011).
- [23] Watanabe, Y., *Formulation of Uncertainty Relation Between Error and Disturbance in Quantum Measurement by Using Quantum Estimation Theory*, Springer (2014).
- [24] Hayashi, M., "Fourier analytic approach to quantum estimation of group action," e-print arXiv 1209.3463v2 (2012).
- [25] Tanimura, S., "Uncertainty relation between angle and orbital angular momentum: interference effect in electron vortex beams," e-print arXiv 1411.0823v2. To be published in the journal, *Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics*.

角度と軌道角運動量の不確定性関係

軌道角運動量 $\hat{L}$ の標準偏差 $\sigma(\hat{L})$ と、平面上の位置演算子 $\hat{x}, \hat{y}$ の期待値について

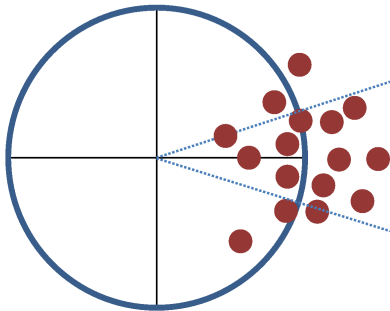
$$\sigma(\hat{L})^2 \geq \frac{\hbar^2 |\langle \hat{x} + i\hat{y} \rangle|^2}{4 \langle \hat{x}^2 + \hat{y}^2 \rangle} = \frac{\hbar^2}{4} |\mu|^2$$

μ は、角度分布に関する、規格化されたモーメント.



$$\text{小さな } \sigma(\hat{L}) \Rightarrow \text{小さな } \mu = \frac{\langle \hat{x} + i\hat{y} \rangle}{\sqrt{\langle \hat{x}^2 + \hat{y}^2 \rangle}}$$

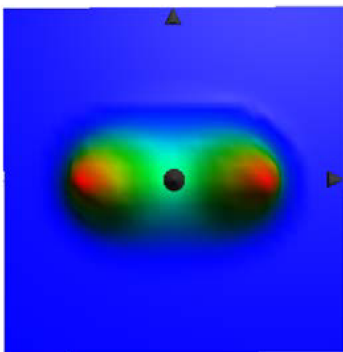
軌道角運動量の不確かさが小さいと、
角度分布の不確かさが大きくなる
(角度分布の偏りが弱く、モーメントは小さい).



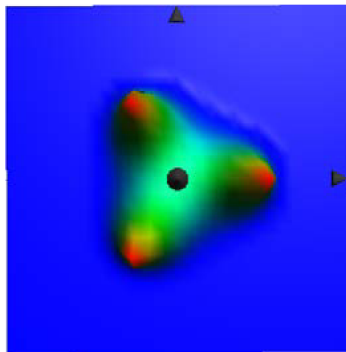
$$\text{大きな } \mu = \frac{\langle \hat{x} + i\hat{y} \rangle}{\sqrt{\langle \hat{x}^2 + \hat{y}^2 \rangle}} \Rightarrow \text{大きな } \sigma(\hat{L})$$

角度分布の不確かさが小さいと、
軌道角運動量の不確かさが大きくなる
(角度分布の偏りが強く、モーメントが大きい).

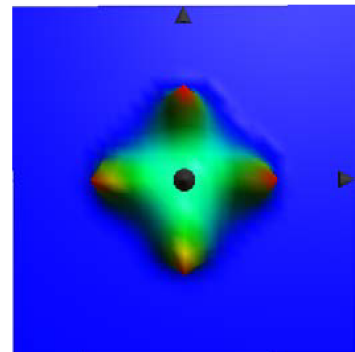
高次のモーメントがノンゼロであるような確率分布



a) $\langle \hat{Z} \rangle = 0, \langle \hat{Z}^2 \rangle \neq 0$



b) $\langle \hat{Z} \rangle = \langle \hat{Z}^2 \rangle = 0, \langle \hat{Z}^3 \rangle \neq 0$



c) $\langle \hat{Z} \rangle = \langle \hat{Z}^2 \rangle = \langle \hat{Z}^3 \rangle = 0, \langle \hat{Z}^4 \rangle \neq 0$