シュレーディンガーの不等式

中嶋慧

2022 年 10 月 6 日

概 要

混合状態に対してシュレーディンガーの不等式を導く。

目 次

1 シュレーディンガーの不等式

1.1 純化の方法

注目系 S の状態を対角化する：

$$\rho = \sum_n p_n |n\rangle_S \langle n|. \tag{1.1}$$

このとき、スペクトルは必ず離散である (トレースクラスの演算子のスペクトルは離散である)。S のヒルベルト空間と同じ次元のヒルベルト空間を持つ別の系 A(アンシラ系) を用意し、その 1 つの正規直交基底を $|\phi_n\rangle_A$ とする。このとき、

$$|\rho\rangle\rangle := \sum_n \sqrt{p_n} |n\rangle_S \otimes |\phi_n\rangle_A \tag{1.2}$$

とすると、系 S のエルミート演算子 A に対して、

$$\langle\langle\rho|A|\rho\rangle\rangle = \mathrm{Tr}_S(\rho A) =: \langle A\rangle \tag{1.3}$$

となる。系 S のエルミート演算子 A, B に対して、

$$\breve{A} := A - \langle A\rangle, \quad \breve{B} := B - \langle B\rangle \tag{1.4}$$

を定義する。また、λ を実パラメーターとして、

$$|\lambda\rangle\rangle := (\breve{A} + \lambda\langle\breve{A}\breve{B}\rangle^* \breve{B})|\rho\rangle\rangle \tag{1.5}$$

とする。このとき、

$$\langle\langle\lambda| = \langle\langle\rho|(\breve{A} + \lambda\breve{B}\langle\breve{A}\breve{B}\rangle) \tag{1.6}$$

であり、

$$
\begin{aligned}
\langle\langle\lambda|\lambda\rangle\rangle &= \langle\breve{A}^2\rangle + \lambda\langle\breve{A}\breve{B}\rangle^*\langle\breve{A}\breve{B}\rangle + \lambda\langle\breve{A}\breve{B}\rangle\langle\breve{A}\breve{B}\rangle^* + \lambda^2|\langle\breve{A}\breve{B}\rangle|^2\langle\breve{B}^2\rangle \\
&= \langle\breve{A}^2\rangle + 2\lambda|\langle\breve{A}\breve{B}\rangle|^2 + \lambda^2|\langle\breve{A}\breve{B}\rangle|^2\langle\breve{B}^2\rangle \qquad (1.7) \\
&= \langle\breve{B}^2\rangle|\langle\breve{A}\breve{B}\rangle|^2\Big(\lambda + \frac{1}{\langle\breve{B}^2\rangle}\Big)^2 - \frac{|\langle\breve{A}\breve{B}\rangle|^2}{\langle\breve{B}^2\rangle} + \langle\breve{A}^2\rangle \qquad (1.8)
\end{aligned}
$$

となる。$\langle\langle\lambda|\lambda\rangle\rangle \geq 0$ であるから上式で $\lambda = -\langle\breve{B}^2\rangle^{-1}$ とすることで、

$$
0 \leq -\frac{|\langle\breve{A}\breve{B}\rangle|^2}{\langle\breve{B}^2\rangle} + \langle\breve{A}^2\rangle
$$

すなわち、

$$
\langle\breve{A}^2\rangle\langle\breve{B}^2\rangle \geq |\langle\breve{A}\breve{B}\rangle|^2 \qquad (1.9)
$$

を得る。

今、

$$
\begin{aligned}
\Delta A &:= \sqrt{\langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2} = \sqrt{\langle\breve{A}^2\rangle}, \qquad (1.10) \\
\Delta B &:= \sqrt{\langle B^2\rangle - \langle B\rangle^2} = \sqrt{\langle\breve{B}^2\rangle}, \qquad (1.11) \\
C_{AB} &:= \langle AB\rangle - \langle A\rangle\langle B\rangle = \langle\breve{A}\breve{B}\rangle \qquad (1.12)
\end{aligned}
$$

とすると、(1.9) は

$$
\Delta A\Delta B \geq |C_{AB}| \qquad (1.13)
$$

となる。$C_{AB} = \langle\breve{A}\breve{B}\rangle$ を変形すると、

$$
\begin{aligned}
C_{AB} &= \frac{\langle\breve{A}\breve{B}\rangle + \langle\breve{B}\breve{A}\rangle}{2} + \frac{\langle[\breve{A},\breve{B}]\rangle}{2} \\
&= \frac{\langle\breve{A}\breve{B}\rangle + \langle\breve{B}\breve{A}\rangle}{2} + \frac{\langle[A,B]\rangle}{2} \qquad (1.14)
\end{aligned}
$$

となり、この式の † から

$$
C^*_{AB} = \frac{\langle\breve{A}\breve{B}\rangle + \langle\breve{B}\breve{A}\rangle}{2} - \frac{\langle[A,B]\rangle}{2} \qquad (1.15)
$$

を得る。上 2 式より、

$$
\mathrm{Re}(C_{AB}) = \frac{\langle\breve{A}\breve{B}\rangle + \langle\breve{B}\breve{A}\rangle}{2}, \quad \mathrm{Im}(C_{AB}) = \frac{\langle[A,B]\rangle}{2i} \qquad (1.16)
$$

がわかる。よって、

$$
\begin{aligned}
|C_{AB}| &= \Big[\Big(\frac{\langle\breve{A}\breve{B}\rangle + \langle\breve{B}\breve{A}\rangle}{2}\Big)^2 + \Big(\frac{\langle[A,B]\rangle}{2i}\Big)^2\Big]^{1/2} \\
&= \Big[\Big(\frac{\langle\{A,B\}\rangle}{2} - \langle A\rangle\langle B\rangle\Big)^2 + \Big(\frac{\langle[A,B]\rangle}{2i}\Big)^2\Big]^{1/2} \qquad (1.17)
\end{aligned}
$$

となる。これを (1.13) に代入して、シュレーディンガーの不等式

$$
\Delta A\Delta B \geq \Big[\Big(\frac{\langle\{A,B\}\rangle}{2} - \langle A\rangle\langle B\rangle\Big)^2 + \Big(\frac{\langle[A,B]\rangle}{2i}\Big)^2\Big]^{1/2} \qquad (1.18)
$$

を得る。

1.2 ヒルベルト・シュミット内積の方法

まず、任意の内積 $\langle X,Y\rangle$ に対して、コーシー・シュワルツの不等式

$$|\langle X,Y\rangle|^2 \le \langle X,X\rangle\langle Y,Y\rangle \tag{1.19}$$

を示す。λ を実数とし、

$$Z_\lambda := X + \lambda\langle X,Y\rangle^* Y \tag{1.20}$$

すると、

$$\begin{aligned} 0 &\le \langle Z_\lambda, Z_\lambda\rangle \\ &= \langle X,X\rangle + 2\lambda|\langle X,Y\rangle|^2 + \lambda^2|\langle X,Y\rangle|^2\langle Y,Y\rangle \end{aligned} \tag{1.21}$$

である。この λ に関する 2 次式の判別式は非正でなければならないから、(1.19) を得る。
さて、ヒルベルト・シュミット内積

$$\langle X,Y\rangle = \mathrm{Tr}(X^\dagger Y) \tag{1.22}$$

を考える。そして、エルミート演算子 A, B に対して、

$$\breve{A} := A - \langle A\rangle, \quad \breve{B} := B - \langle B\rangle \tag{1.23}$$

とする。ここで、$\langle X\rangle := \mathrm{Tr}(\rho X)$ である。さらに、

$$X := \breve{A}\rho^{1/2}, \tag{1.24}$$
$$Y := \breve{B}\rho^{1/2} \tag{1.25}$$

とすると、

$$\langle X,X\rangle = \langle \breve{A}^2\rangle = \langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2 =: (\Delta A)^2, \tag{1.26}$$
$$\langle Y,Y\rangle = \langle \breve{B}^2\rangle = \langle B^2\rangle - \langle B\rangle^2 =: (\Delta B)^2, \tag{1.27}$$
$$\langle X,Y\rangle = \langle \breve{A}\breve{B}\rangle = \langle AB\rangle - \langle A\rangle\langle B\rangle =: C_{AB} \tag{1.28}$$

となるから、コーシー・シュワルツの不等式より、

$$\Delta A\Delta B \ge |C_{AB}| \tag{1.29}$$

となる。これは (1.13) なので、後は §1 と同様にしてシュレーディンガーの不等式 (1.18) を得る。