孤立量子系のスピード限界

中嶋 慧

2022 年 6 月 5 日

概 要

このノートでは孤立量子系でのスピード限界

$$d(\rho(\tau), \rho(0)) \leq \int_0^\tau dt\ \Delta E \tag{0.1}$$

を示す (このノートでは $\hbar = 1$ とする)。ここで、$d(\rho(\tau), \rho(0))$ は Bures angle (§1) またはトレース距離 (§2) であり、ΔE はエネルギーゆらぎである。証明にはいずれの場合も純化の方法を用いる。

目 次

1 Mandelstam-Tamm relation

1.1 準備

$$\mathcal{L}(\rho,\sigma) \stackrel{\mathrm{def}}{=} \cos^{-1} F(\rho,\sigma), \tag{1.1}$$

$$F(\rho,\sigma) \stackrel{\mathrm{def}}{=} \mathrm{Tr}\sqrt{\sqrt{\rho}\sigma\sqrt{\rho}} \tag{1.2}$$

とする。$F(\rho,\sigma)$ はフィデリティーである。$\mathcal{L}(\rho,\sigma)$ は Bures angle である。孤立系では、Mandelstam–Tamm relation

$$\mathcal{L}(\rho(\tau),\rho(0)) \leq \int_0^\tau dt\ \Delta E \tag{1.3}$$

が成り立つ事を示す。ここで、

$$\Delta E \stackrel{\mathrm{def}}{=} \sqrt{\langle H^2\rangle - \langle H\rangle^2}, \quad \langle X\rangle \stackrel{\mathrm{def}}{=} \mathrm{Tr}(\rho X) \tag{1.4}$$

である。H はハミルトニアンである。$\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$, $\sigma = |\phi\rangle\langle\phi|$ のとき、

$$F(\rho,\sigma) = |\langle\psi|\phi\rangle| \tag{1.5}$$

となる。

1.2 純粋状態

不確定性関係より、

$$\Delta E\Delta A \geq \frac{1}{2}|\langle i[H,A]\rangle| \tag{1.6}$$

である。ここで、

$$\Delta A \stackrel{\mathrm{def}}{=} \sqrt{\langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2} \tag{1.7}$$

である。A は時間に依らないとすると、孤立系では、

$$\langle i[H,A]\rangle \ = \ \frac{d}{dt}\langle A\rangle \tag{1.8}$$

である。よって、

$$\Delta E\Delta A \geq \frac{1}{2}\left|\frac{d}{dt}\langle A\rangle\right| \tag{1.9}$$

である。特に、$A^2 = A \geq 0$ のときは、

$$\Delta A = \sqrt{\langle A\rangle - \langle A\rangle^2} \tag{1.10}$$

であり、

$$\frac{1}{2}\frac{1}{\Delta A}\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \frac{\frac{d}{dt}\sqrt{\langle A\rangle}}{\sqrt{1-\langle A\rangle}} \tag{1.11}$$

なので、

$$\Delta E \geq \left| \frac{\frac{d}{dt}\sqrt{\langle A \rangle}}{\sqrt{1-\langle A \rangle}} \right| \tag{1.12}$$

である。さて、

$$L \overset{\text{def}}{=} \left| \int_0^\tau dt \; \frac{\frac{d}{dt}\sqrt{\langle A \rangle}}{\sqrt{1-\langle A \rangle}} \right| \leq \int_0^\tau dt \left| \frac{\frac{d}{dt}\sqrt{\langle A \rangle}}{\sqrt{1-\langle A \rangle}} \right| \leq \int_0^\tau dt \; \Delta E \tag{1.13}$$

であり、

$$L = \left| \cos^{-1} \sqrt{\langle A \rangle_\tau} - \cos^{-1} \sqrt{\langle A \rangle_0} \right| \tag{1.14}$$

である。

特に、

$$A \;=\; |\psi(0)\rangle\langle\psi(0)|, \quad \rho = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| \tag{1.15}$$

とすると、

$$L = \cos^{-1} |\langle\psi(t)|\psi(0)\rangle| \tag{1.16}$$

となり、Mandelstam–Tamm relation が示された。

1.3　混合状態

$|i\rangle_S$ を注目系 S のある 1 つの (固定した) 正規直交基底とし、$|\phi_i\rangle_A$ をアンシラ系 (そのヒルベルト空間は系 S のそれと同じ (次元) とする) の 1 つの (固定した) 正規直交基底とし、

$$\alpha(|i\rangle_S) \overset{\text{def}}{=} |\phi_i\rangle_A \tag{1.17}$$

および、

$$\alpha(\sum_i a_i |i\rangle_S) \;=\; \sum_i a_i^* \alpha(|i\rangle_S) \tag{1.18}$$

とし、

$$|I\rangle\rangle \;\overset{\text{def}}{=}\; \sum_i |i\rangle_S \otimes \alpha(|i\rangle_S) \tag{1.19}$$

とする。今、

$$|\varphi_i\rangle_S \;\overset{\text{def}}{=}\; \sum_j U_{ij} |j\rangle_S \tag{1.20}$$

とし、U はユニタリー行列とすると、

$$|I\rangle\rangle = \sum_i |\varphi_i\rangle_S \otimes \alpha(|\varphi_i\rangle_S) \tag{1.21}$$

である。よって、$|I\rangle\rangle$ は注目系の基底の取り方には依らない。なお、$\alpha(|\varphi_i\rangle_S)$ も正規直交基底となる。

さて、

$$|\rho(t)\rangle\!\rangle \overset{\text{def}}{=} U(t)\sqrt{\rho(0)}|I\rangle\!\rangle \tag{1.22}$$

とする。ここで、

$$\frac{d}{dt}U \;=\; -iHU\,, \quad U(0)=1 \tag{1.23}$$

とする。このとき、

$$\frac{d}{dt}|\rho(t)\rangle\!\rangle \;=\; -i(H\otimes 1_A)|\rho(t)\rangle\!\rangle \tag{1.24}$$

である。また、

$$\rho(0) \;=\; \sum_i p_i|\phi_i\rangle_S\langle\phi_i| \tag{1.25}$$

と対角化すると、

$$|\rho(t)\rangle\!\rangle \;=\; \sum_i \sqrt{p_i}U(t)|\phi_i\rangle_S\otimes\alpha(|\phi_i\rangle_S) \tag{1.26}$$

であるから、

$$\mathrm{Tr}_A(|\rho(t)\rangle\!\rangle\langle\!\langle\rho(t)|) \;=\; U(t)\rho(0)U^\dagger(t)=\rho(t) \tag{1.27}$$

であり、$|\rho(t)\rangle\!\rangle$ は $\rho(t)$ の純化[1)] である。

よって、

$$A \;=\; |\rho(0)\rangle\!\rangle\langle\!\langle\rho(0)|\,, \quad \langle X\rangle=\langle\!\langle\rho(t)|X|\rho(t)\rangle\!\rangle \tag{1.28}$$

と置き換えて、(1.13) より、

$$\cos^{-1}|\langle\!\langle\rho(\tau)|\rho(0)\rangle\!\rangle| \leq \int_0^\tau dt\;\Delta E \tag{1.29}$$

を得る。注目系の演算子 X_S に対しては、$\langle X_S\rangle=\mathrm{Tr}(\rho(t)X_S)$ となる。また、

$$|\langle\!\langle\rho(t)|\rho(0)\rangle\!\rangle| \leq F(\rho(t),\rho(0)) \tag{1.30}$$

なので (§1.4)、

$$\cos^{-1}F(\rho(\tau),\rho(0)) \leq \cos^{-1}|\langle\!\langle\rho(\tau)|\rho(0)\rangle\!\rangle| \leq \int_0^\tau dt\;\Delta E \tag{1.31}$$

を得る。これより、Mandelstam–Tamm relation

$$\cos^{-1}F(\rho(\tau),\rho(0)) \leq \int_0^\tau dt\;\Delta E \tag{1.32}$$

が得られた。

純粋状態 $\rho(t)=|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$ では、

$$\begin{aligned}|\rho(t)\rangle\!\rangle \;&=\; U(t)|\psi(0)\rangle_S\otimes\alpha(|\psi(0)\rangle_S)\\ &=\; |\psi(t)\rangle_S\otimes\alpha(|\psi(0)\rangle_S)\end{aligned} \tag{1.33}$$

なので、

$$\langle\!\langle\rho(t)|\rho(0)\rangle\!\rangle \;=\; \langle\psi(t)|\psi(0)\rangle \tag{1.34}$$

である。

[1)] $(S+A)$ 系の純粋状態 $|\Psi\rangle\!\rangle$ が $\mathrm{Tr}_A(|\Psi\rangle\!\rangle\langle\!\langle\Psi|)=\rho$ を満たすとき、$|\Psi\rangle\!\rangle$ を ρ の純化という。純化の任意性については §1.4 で述べる。

1.4 純化とフィデリティー

$|I\rangle\rangle$ の定義には $|\phi_i\rangle_A$ を選ぶ自由度だけ任意性がある。今、

$$|\Phi_\rho\rangle\rangle \overset{\text{def}}{=} \sqrt{\rho}\sum_i V_S \otimes V_A |i\rangle_S \otimes |\phi_i\rangle_A \tag{1.35}$$

とすると、これは ρ の純化である。V_S, V_A はユニタリー演算子であり、V_A は $|\phi_i\rangle_A$ を選ぶ自由度である。$V_S = U(t)$, $V_A = 1$ の場合が $|\rho(t)\rangle\rangle$ である。フィデリティーは、

$$\begin{aligned} F(\rho,\sigma) &= \max_{|\Phi_\rho\rangle\rangle, |\Phi_\sigma\rangle\rangle} |\langle\langle\Phi_\rho|\Phi_\sigma\rangle\rangle| \\ &= \max_{|\Phi_\rho\rangle\rangle} |\langle\langle\Phi_\rho|\Phi_\sigma\rangle\rangle| \end{aligned} \tag{1.36}$$

で与えられる [1]。よって、

$$F(\rho(t),\rho(0)) \geq |\langle\langle\rho(t)|\rho(0)\rangle\rangle| \tag{1.37}$$

である。

2 トレース距離によるスピード限界

2.1 準備

トレースノルムを

$$||X||_1 \,=\, \mathrm{Tr}\sqrt{X^\dagger X} \tag{2.1}$$

とする。三角不等式

$$||X+Y||_1 \le ||X||_1 + ||Y||_1 \tag{2.2}$$

が成り立つ。密度演算子 ρ_1, ρ_2 の間のトレース距離は、$\frac{1}{2}||\rho_1-\rho_2||_1$ である。三角不等式より、

$$||\rho(\tau)-\rho(0)||_1 \le \int_0^\tau dt\ ||\frac{d\rho}{dt}||_1 \tag{2.3}$$

である。孤立系では、

$$\frac{d\rho}{dt} \,=\, -i[H,\rho] \tag{2.4}$$

である。次小節で

$$||[H,\rho]||_1 \le 2\Delta E\,, \quad \Delta E \stackrel{\mathrm{def}}{=} \sqrt{\mathrm{Tr}(\rho H^2) - [\mathrm{Tr}(\rho H)]^2} \tag{2.5}$$

を示す。よって、

$$\frac{1}{2}||\rho(\tau)-\rho(0)||_1 \le \int_0^\tau dt\ \Delta E \tag{2.6}$$

である。

2.2 証明

証明のアイデアは [2] による。

システムのヒルベルト空間が有限で、d 次元とする。状態

$$\rho \,=\, \sum_{i=1}^d p_i |i\rangle_S\langle i| \tag{2.7}$$

に対して、純化

$$|\rho\rangle\!\rangle \,=\, \sum_{i=1}^d \sqrt{p_i}|i\rangle_S|\phi_i\rangle_A \tag{2.8}$$

を考える。ここで、$|\phi_i\rangle_A$ はアンシラ系 (d 次元とする) の正規直交基底である。また、

$$\bar{H} \stackrel{\mathrm{def}}{=} H\otimes 1_A \tag{2.9}$$

とする。このとき、

$$\mathrm{Tr}_A(\bar{H}^n|\rho\rangle\!\rangle\langle\!\langle\rho|\bar{H}^k) \,=\, H^n\rho H^k \tag{2.10}$$

である。よって、

$$[H,\rho] = \mathrm{Tr}_A([\bar{H},|\rho\rangle\rangle\langle\langle\rho|]) \tag{2.11}$$

である。さて、任意の CPTP map Φ [1] に対して、

$$||\Phi(X)||_1 \leq ||X||_1 \tag{2.12}$$

である (X はエルミートまたは反エルミートでトレースレスとする。[1], 定理 9.2)。Tr_A は CPTP map なので (2.11), (2.12) より、

$$\begin{aligned} ||[H,\rho]||_1 &\leq ||[\bar{H},|\rho\rangle\rangle\langle\langle\rho|]||_1 \\ &= \mathrm{Tr}_{SA}\sqrt{X}, \end{aligned} \tag{2.13}$$

$$\begin{aligned} X &\stackrel{\text{def}}{=} [\bar{H},|\rho\rangle\rangle\langle\langle\rho|]^\dagger[\bar{H},|\rho\rangle\rangle\langle\langle\rho|] \\ &= \bar{H}|\rho\rangle\rangle\langle\langle\rho|\bar{H} + \langle E^2\rangle|\rho\rangle\rangle\langle\langle\rho| - \langle E\rangle(\bar{H}|\rho\rangle\rangle\langle\langle\rho| + |\rho\rangle\rangle\langle\langle\rho|\bar{H}) \\ &= (\langle E^2\rangle - \langle E\rangle^2)\big(|\rho_\perp\rangle\rangle\langle\langle\rho_\perp| + |\rho\rangle\rangle\langle\langle\rho|\big) \\ &= (\Delta E)^2\big(|\rho_\perp\rangle\rangle\langle\langle\rho_\perp| + |\rho\rangle\rangle\langle\langle\rho|\big), \end{aligned} \tag{2.14}$$

$$|\rho_\perp\rangle\rangle \stackrel{\text{def}}{=} \frac{(\bar{H} - \langle E\rangle)|\rho\rangle\rangle}{\sqrt{\langle E^2\rangle - \langle E\rangle^2}} \tag{2.15}$$

を得る。ここで、

$$\langle E^k\rangle \stackrel{\text{def}}{=} \langle\langle\rho|\bar{H}^k|\rho\rangle\rangle = \mathrm{Tr}(\rho H^k) \tag{2.16}$$

である。また、

$$\sqrt{X} = \Delta E\big(|\rho_\perp\rangle\rangle\langle\langle\rho_\perp| + |\rho\rangle\rangle\langle\langle\rho|\big) \tag{2.17}$$

なので、(2.5) を得る。
　なお純粋状態の場合は純化は不要であり、上の計算から、

$$||[H,\rho]||_1 = 2\Delta E \tag{2.18}$$

となる。

2.3 Mandelstam-Tamm relation からの導出

　トレース距離は、

$$1 - F(\rho,\sigma) \leq \frac{1}{2}||\rho-\sigma||_1 \leq \sqrt{1-[F(\rho,\sigma)]^2} \tag{2.19}$$

を満たす [1]。よって、

$$1 - \cos\mathcal{L}(\rho,\sigma) \leq \frac{1}{2}||\rho-\sigma||_1 \leq \sin\mathcal{L}(\rho,\sigma) \leq \mathcal{L}(\rho,\sigma) \tag{2.20}$$

である。この式と Mandelstam-Tamm relation (1.3) より (2.6) を得る。

参考文献

[1] M. A. Nielsen and I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information: 10th Anniversary Edition*, Cambridge University Press (2010).

[2] K. Funo, N. Shiraishi and K. Saito, "Speed limit for open quantum systems", New J. Phys. **21**, 013006 (2019).