交換関係・不確定性：Schwarz の不等式

July 3, 2020 9:07am Schwarz 不等式不確定性.tex

ある不等式を導こう。[Donald A. McQuarrie, Quantum Chemistry 2nd ed. Chap.4 p.188-p.189 University Science Book (2008)] $f(x)$ と $g(x)$ が性質のよい関数であるなら，

$$\left[\int f^*(x)f(x)\mathrm{d}x\right]\left[\int g^*(x)g(x)\mathrm{d}x\right] \geq \frac{1}{4}\left[\int \{f^*(x)g(x)+f(x)g^*(x)\}\,\mathrm{d}x\right]^2 \tag{1}$$

となる。これを示すために，以下のように A, B, C を定義する。

$$A=\int f^*(x)f(x)\mathrm{d}x, \quad B=\int f^*(x)g(x)\mathrm{d}x, \quad C=\int g^*(x)g(x)\mathrm{d}x \tag{2}$$

λ は実数として以下の積分を考える。

$$\int[\lambda f^*(x)+g^*(x)][\lambda f(x)+g(x)]\mathrm{d}x = A\lambda^2+(B+B^*)\lambda+C \tag{3}$$

実数の λ に対して上の式は，ゼロか正の値をもつことを示す。また，$A>0, C>0$ の時，$A\lambda^2+(B+B^*)\lambda+C=0$ という 2 次形式の λ の根が実数にはなりえない条件が，以下の式を満たした時にのみ起こることを証明する。

$$AC \geq \frac{1}{4}(B+B^*)^2 \tag{4}$$

これは式 (1) の不等式と同じである。

[証明]

ある複素数 z を, 二つの実数 a, b と純虚数 i で $z=a+bi$ と表すと，$z^*=a-ib$ となる。従って，$z^*z=(a-ib)(a+ib)=a^2+iab-iab+(-i)(i)b^2=a^2+b^2\geq 0$ となる。また，$z'=c+id$ とすると，$z^*z'+z(z')^*=(a-ib)(c+id)+(a+ib)(c-id)=ac+iad-ibc+bd+ac-iad+ibc+bd=2ac+2bd$ となる。従って，ゼロでない関数では $A>0, C>0$ となるが，$B+B^*$ は実数となるが符号の制限はない。$h(x)=\lambda f(x)+g(x)$ とすると $h^*(x)h(x)$ は，$h^*(x)h(x)\geq 0$ となり，その積分も

$$\begin{aligned}\int h^*(x)h(x)\mathrm{d}x &= \int[\lambda f^*(x)+g^*(x)][\lambda f(x)+g(x)]\mathrm{d}x \geq 0 && (5)\\ & A\lambda^2+(B+B^*)\lambda+C\geq 0 && (6)\end{aligned}$$

となる。この式がゼロ以上であれば，Fig.1 の緑より上の赤の線になる。$A\lambda^2+(B+B^*)\lambda+C=0$ の λ の解は，

$$\lambda = \frac{-(B+B^*)\pm\sqrt{(B+B^*)^2-4AC}}{2A} \tag{7}$$

(6) 式がゼロ以上のなる場合，Fig.1 の緑または赤の線になる。その場合，判別式（ルートの中）は負またはゼロとなる。

$$\begin{aligned}(B+B^*)^2-4AC &\leq 0 && (8)\\ AC &\geq \frac{1}{4}(B+B^*)^2 && (9)\end{aligned}$$

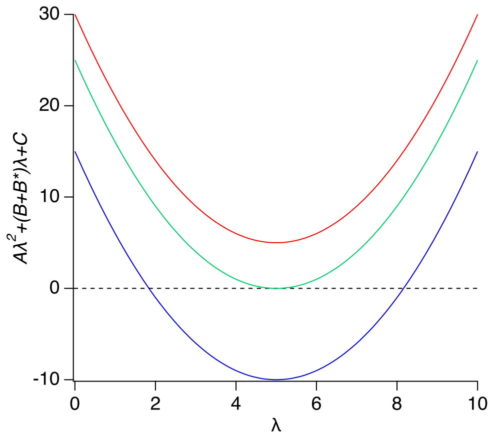

Figure 1: 2 次曲線：判別式が正（青），判別式がゼロ（緑），判別式が負 (赤)

A, B, C に (2) 式を代入すると，以下の式が証明された。

$$\left[\int f^*(x)f(x)\mathrm{d}x\right]\left[\int g^*(x)g(x)\mathrm{d}x\right] \geq \frac{1}{4}\left[\int \{f^*(x)g(x)+f(x)g^*(x)\}\,\mathrm{d}x\right]^2 \tag{10}$$

ここで，$f(x)=\left(\hat{A}-\langle\hat{A}\rangle\right)\psi(x)=(\Delta\hat{A})\psi(x)=\Delta\hat{A}|\psi\rangle$ と $g(x)=i\left(\hat{B}-\langle\hat{B}\rangle\right)\psi(x)=i(\Delta\hat{B})\psi(x)=i\Delta\hat{B}|\psi\rangle$ とする。また，以下の平均と分散で不確定性を定義する。

$$\Delta A = \langle\Delta\hat{A}\rangle = \int \psi^*(x)\Delta\hat{A}\psi(x)\mathrm{d}x, \quad (\Delta A)^2 = \langle(\Delta\hat{A})^2\rangle = \int \psi^*(x)(\Delta\hat{A})^2\psi(x)\mathrm{d}x \tag{11}$$

$$\Delta B = \langle\Delta\hat{B}\rangle = \int \psi^*(x)\Delta\hat{B}\psi(x)\mathrm{d}x, \quad (\Delta B)^2 = \langle(\Delta\hat{B})^2\rangle = \int \psi^*(x)(\Delta\hat{B})^2\psi(x)\mathrm{d}x \tag{12}$$

$\hat{A}-\langle\hat{A}\rangle, \hat{B}-\langle\hat{B}\rangle$ はエルミート演算子（固有値が実数）であることを仮定しているので，

$$\int f^*(x)f(x)\mathrm{d}x = \int[(\Delta\hat{A})^*\psi^*(x)][(\Delta\hat{A})\psi(x)]\mathrm{d}x = \langle\psi|\Delta\hat{A}\Delta\hat{A}|\psi\rangle = \langle\psi|(\Delta\hat{A})^2|\psi\rangle = (\Delta A)^2 \tag{13}$$

$$\int g^*(x)g(x)\mathrm{d}x = \int[(-i)(\Delta\hat{B})^*\psi^*(x)][i(\Delta\hat{B})\psi(x)]\mathrm{d}x = \langle\psi|\Delta\hat{B}\Delta\hat{B}|\psi\rangle = \langle\psi|(\Delta\hat{B})^2|\psi\rangle = (\Delta B)^2 \tag{14}$$

$$\begin{aligned}
(\Delta A)^2(\Delta B)^2 &= \left[\int f^*(x)f(x)\mathrm{d}x\right]\left[\int g^*(x)g(x)\mathrm{d}x\right] && (15)\\
(\Delta A)^2(\Delta B)^2 &\geq \frac{1}{4}\left[\int \{f^*(x)g(x)+f(x)g^*(x)\}\,\mathrm{d}x\right]^2 && (16)\\
&= \frac{1}{4}\left[\langle\psi|(\Delta\hat{A})i(\Delta\hat{B})|\psi\rangle+\langle\psi|(-i)(\Delta\hat{B})(\Delta\hat{A})|\psi\rangle\right]^2 && (17)\\
&= -\frac{1}{4}\left[\langle\psi|(\hat{A}-\langle\hat{A}\rangle)(\hat{B}-\langle\hat{B}\rangle)|\psi\rangle-\langle\psi|(\hat{B}-\langle\hat{B}\rangle(\hat{A}-\langle\hat{A}\rangle)|\psi\rangle\right]^2 && (18)\\
&= -\frac{1}{4}\left[\langle\psi|(\hat{A}\hat{B}-\hat{A}\langle\hat{B}\rangle-\hat{B}\langle\hat{A}\rangle+\langle\hat{A}\rangle\langle\hat{B}\rangle-\hat{B}\hat{A}+\hat{B}\langle\hat{A}\rangle+\hat{A}\langle\hat{B}\rangle-\langle\hat{A}\rangle\langle\hat{B}\rangle|\psi\rangle\right]^2 && (19)\\
&= -\frac{1}{4}\left[\langle\psi|(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A})|\psi\rangle\right]^2 = -\frac{1}{4}\left[\langle\psi|\left[\hat{A},\hat{B}\right]|\psi\rangle\right]^2 && (20)\\
(\Delta A)^2(\Delta B)^2 &\geq -\frac{1}{4}\left\{\int \mathrm{d}x\psi^*(x)\left[\hat{A},\hat{B}\right]\psi(x)\right\}^2 && (21)
\end{aligned}$$

平方根をとると，目的である Schwarz の不等式が得られる。

$$\Delta A\Delta B \geq \frac{1}{2}\left|\int \mathrm{d}x\psi^*(x)\left[\hat{A},\hat{B}\right]\psi(x)\right| \tag{22}$$