
不確定性関係の一般化とその応用

名古屋大学多弦セミナー
2023/10/16

静岡大学 森田 健

Ref.

2109.08033 (PLB 2022) , 2109.02701 (PRD 2022)

with 相川 優 (静岡大学), 吉村 恒太 (University of Notre Dame, USA)

2208.09370 (PTEP 2023) TM

Introduction:

不確定性関係

$$\langle \Delta x^2 \rangle \langle \Delta p^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

拡張版

$$\langle x^m \rangle, \langle p^n \rangle, \langle p^k x^l \rangle, \dots$$

を含んだ関係に拡張できそう。

→ 知られていない(使えなそう)。

半正定値計画問題: SDP(SemiDefinite Programming) \doteq Bootstrap

→ 「不確定性関係の拡張版」は解析可能。

→ これを応用し, 様々なことができる。

- いろいろな不等式関係を求められる。

TM PTEP 2023

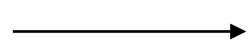
- Hamiltonianのスペクトラムの数値解析

Han-Hartnoll-Kruthoff PRL 2020

- ✓ Large-N limitの方がfinite Nより簡単.
- ✓ 符号問題OK.
- ✓ 厳密解を求められる場合がある.
- ✓ (いろいろ欠点もある.)

不確定性関係

$$\langle \Delta x^2 \rangle \langle \Delta p^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}$$



Sec.2 拡張版

$$\langle x^m \rangle, \langle p^n \rangle, \langle p^k x^l \rangle, \dots$$

を含んだ関係に拡張できそう。

→ 知られていない(使えなそう)。

半正定値計画問題: SDP(SemiDefinite Programming) \doteq Bootstrap

→ 「不確定性関係の拡張版」は解析可能。

→ これを応用し, 様々なことができる。

- いろいろな不等式関係を求められる。

TM PTEP 2023

Sec.3

- Hamiltonianのスペクトラムの数値解析

Han-Hartnoll-Kruthoff PRL 2020

Sec.4

- ✓ Large-N limitの方がfinite Nより簡単.
- ✓ 符号問題OK.
- ✓ 厳密解を求められる場合がある.
- ✓ (いろいろ欠点もある.)

Sec.2 不確定性関係の拡張

2. 不確定性関係の拡張

まともな量子力学系なら, 次が成立. [例として1次元QM]

O : Operators

ex) $O = x^m p^n$

$\langle O^\dagger O \rangle = |O\rangle^2 \geq 0$ is satisfied for $\forall O, \forall | \rangle$, and we obtain the following relation:

$$\tilde{O} = \sum_{i=1}^K c_i O_i \quad \left\{ \begin{array}{l} \{O_i\} : \text{a set of } K \text{ operators } (i = 1, \dots, K) \\ \{c_i\} : \text{constants} \\ K : \text{an integer} \end{array} \right. \quad \text{ex) } \{O_i\} = \underbrace{\{x, p, xp, \dots\}}_K$$

$$\Rightarrow \langle \tilde{O}^\dagger \tilde{O} \rangle = \vec{c}^\dagger M \vec{c} \geq 0 \quad \text{for } \forall \{c_i\}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{c}^T = (c_1, c_2, \dots, c_K) \\ M := \begin{pmatrix} \ddots & \vdots & & \\ \cdots & \langle O_i^\dagger O_j \rangle & \cdots & \\ & \vdots & & \end{pmatrix} \\ K \times K \text{ hermite matrix} \end{array} \right.$$

Eigenvalues of M are all **non-negative**.

→ 半正定値行列と呼び $M \succeq 0$ と書く.

$\langle O_i^\dagger O_j \rangle$ is highly constrained!

→ 実は不確定性関係の拡張とみなせる.

$$\langle \Delta x^2 \rangle \langle \Delta p^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

2. 不確定性関係の拡張

TM (2022)

$$M := \begin{pmatrix} \ddots & \vdots \\ \cdots & \langle O_i^\dagger O_j \rangle \cdots \\ & \vdots \end{pmatrix} \quad M \succeq 0 \rightarrow \text{A Generalization of Uncertainty Relation}$$

理由: $\tilde{O} = c_0 1 + c_1 x + c_2 p$

Curtright-Zachos (2001)

Uncertainty relation

$$M = \begin{pmatrix} 1 & \langle x \rangle & \langle p \rangle \\ \langle x \rangle & \langle x^2 \rangle & \langle xp \rangle \\ \langle p \rangle & \langle px \rangle & \langle p^2 \rangle \end{pmatrix} \xrightarrow{M \succeq 0} \langle \Delta x^2 \rangle \langle \Delta p^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4} \quad \text{for } \forall | \rangle$$

→ If we take $\tilde{O} = \underline{c_0 1 + c_1 x + c_2 p} + c_3 x^2 + c_4 p^2 + \dots$, $M \succeq 0$ provides **stronger constraints** involving **higher order moment** $x^m p^n$.

→ $M \succeq 0$ is a **generalized version of uncertainty relation**.

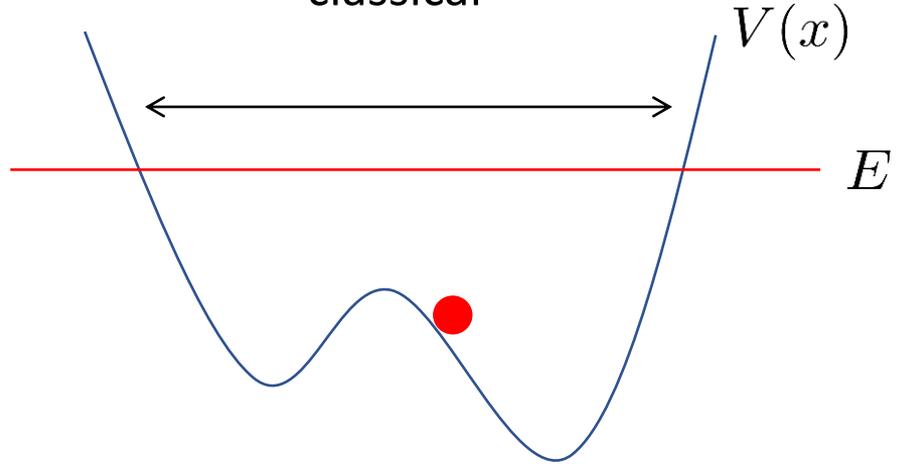
$M \succeq 0$ は**半正定値計画問題**(SDP)として, 数値的に扱える.

→ 有用な関係式を得られる.

Sec.3 様々な不等式関係

応用1: 様々な不等式関係

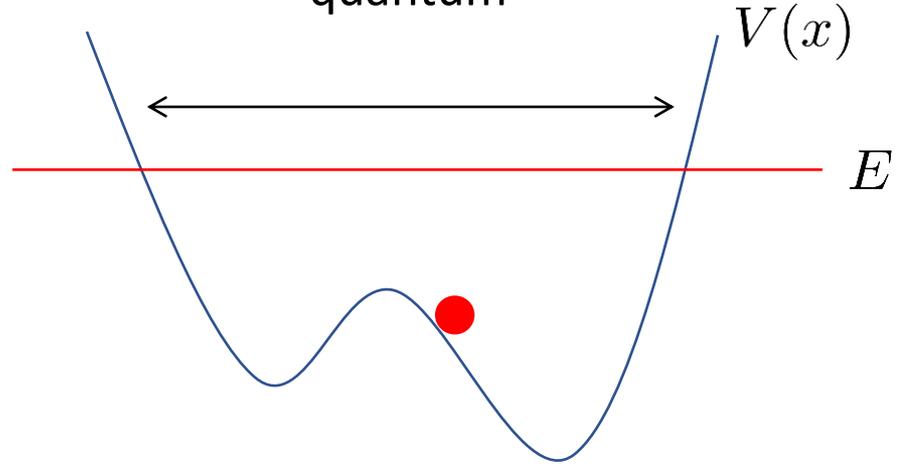
classical



Range of possible particle motion

→ Determined by **Energy Conservation**

quantum



Range of possible particle motion

→??

- (Correct but) Useless answer

$$-\infty \leq x \leq +\infty$$

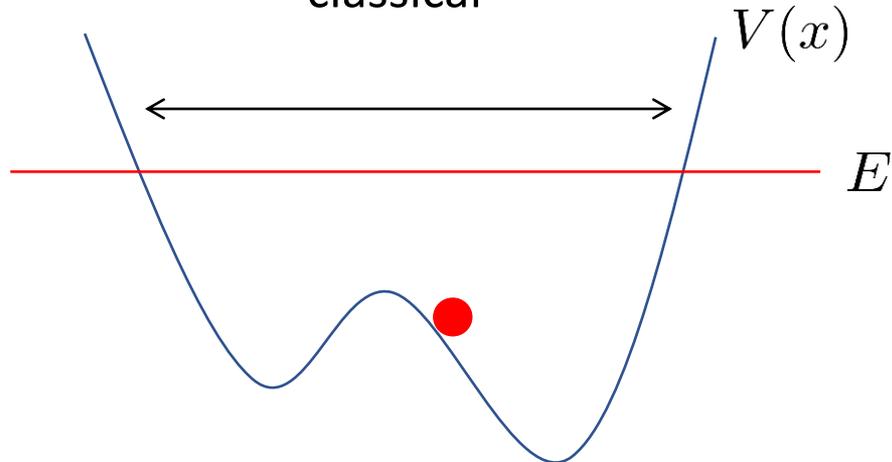
- Better answer

$$x_1 \leq \langle x \rangle \leq x_2, \quad E = \langle H \rangle$$

Q. How to compute x_1, x_2 ?

応用1: 様々な不等式関係

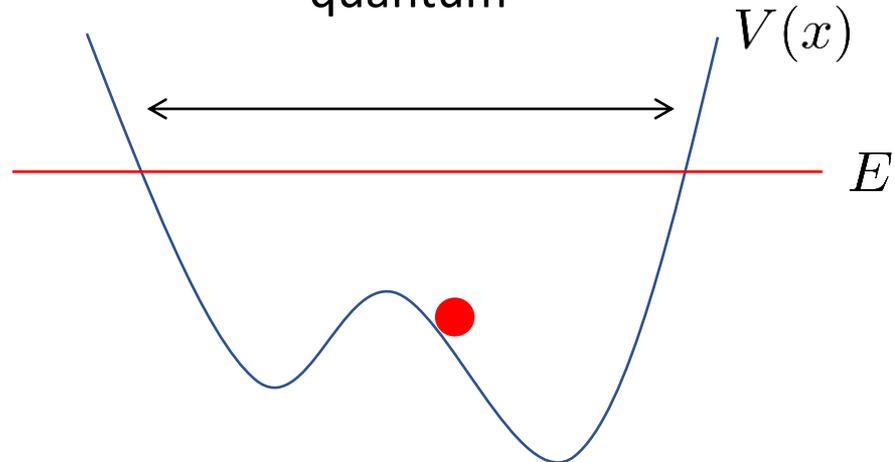
classical



Range of possible particle motion

→ Determined by **Energy Conservation**

quantum



Range of possible particle motion

→??

- (Correct but) Useless answer

$$-\infty \leq x \leq +\infty$$

- Better answer

$$x_1 \leq \langle x \rangle \leq x_2, \quad E = \langle H \rangle$$

Q. How to compute x_1, x_2 ?

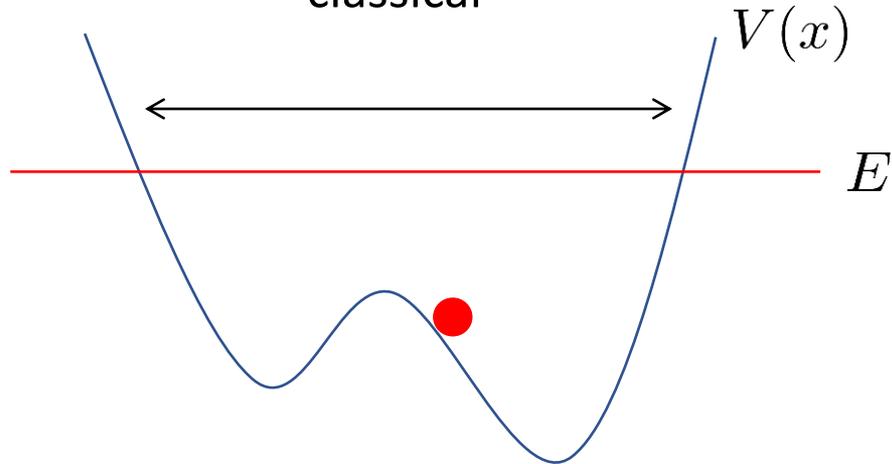
x_1, x_2 must depend on **the particle state**.
But **universal bounds** that are independent of states must exist.

→ We seek these universal bounds.

$$\text{cf. } \langle \Delta x^2 \rangle \langle \Delta p^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

応用1: 様々な不等式関係

classical



Range of possible particle motion

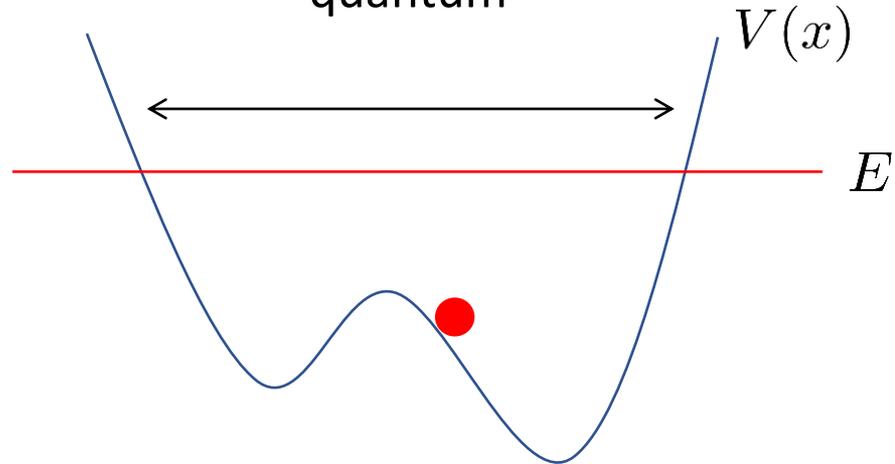
→ Determined by **Energy Conservation**

x_1, x_2 must depend on **the particle state**.
But **universal bounds** that are independent of states must exist.

→ We seek these universal bounds.

$$\text{cf. } \langle \Delta x^2 \rangle \langle \Delta p^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

quantum



Range of possible particle motion

→??

- (Correct but) Useless answer

$$-\infty \leq x \leq +\infty$$

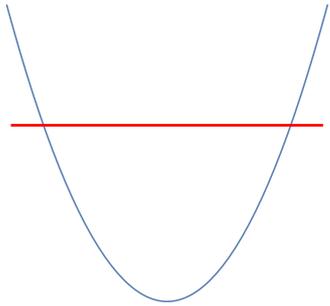
- Better answer

$$x_1 \leq \langle x \rangle \leq x_2, \quad E = \langle H \rangle$$

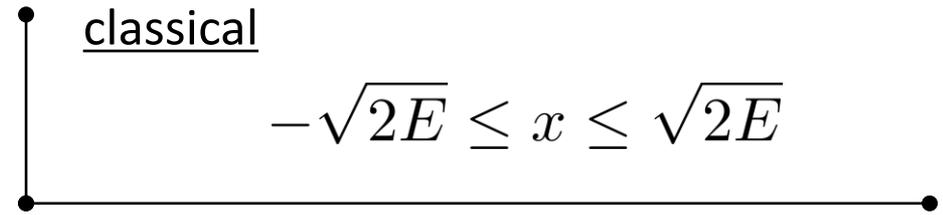
Q. How to compute x_1, x_2 ?

A. **不確定性関係(の一般化)でとける.**

例1) Harmonic Oscillator



$$H = \frac{1}{2}p^2 + \frac{1}{2}x^2.$$



QM We use $E = \langle H \rangle$.

$$\langle \Delta x^2 \rangle \langle \Delta p^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

$$E = \frac{1}{2} \langle p^2 \rangle + \frac{1}{2} \langle x^2 \rangle = \frac{1}{2} (\langle \Delta p^2 \rangle + \langle p \rangle^2) + \frac{1}{2} (\langle \Delta x^2 \rangle + \langle x \rangle^2) \quad \text{uncertainty relation}$$

$$\implies \langle x \rangle^2 + \langle p \rangle^2 = 2E - (\langle \Delta x^2 \rangle + \langle \Delta p^2 \rangle) \leq 2E - 2\sqrt{\langle \Delta x^2 \rangle \langle \Delta p^2 \rangle} \leq 2E - \hbar.$$

↑
arithmetic mean

$$-\sqrt{2(E - \hbar/2)} \leq \langle x \rangle \leq \sqrt{2(E - \hbar/2)}$$

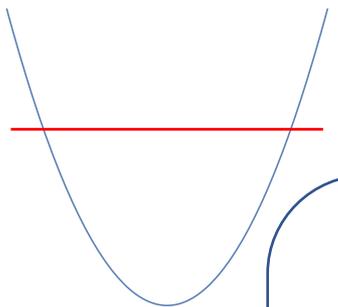
→ This result is equivalent to the classical result with $E \rightarrow E - \underline{\hbar/2}$.

zero-point energy

→ The classical result is **corrected by the zero-point energy**.

✓ It is not difficult to show that this bound is saturated by **coherent states**.

例1) Harmonic Oscillator



E

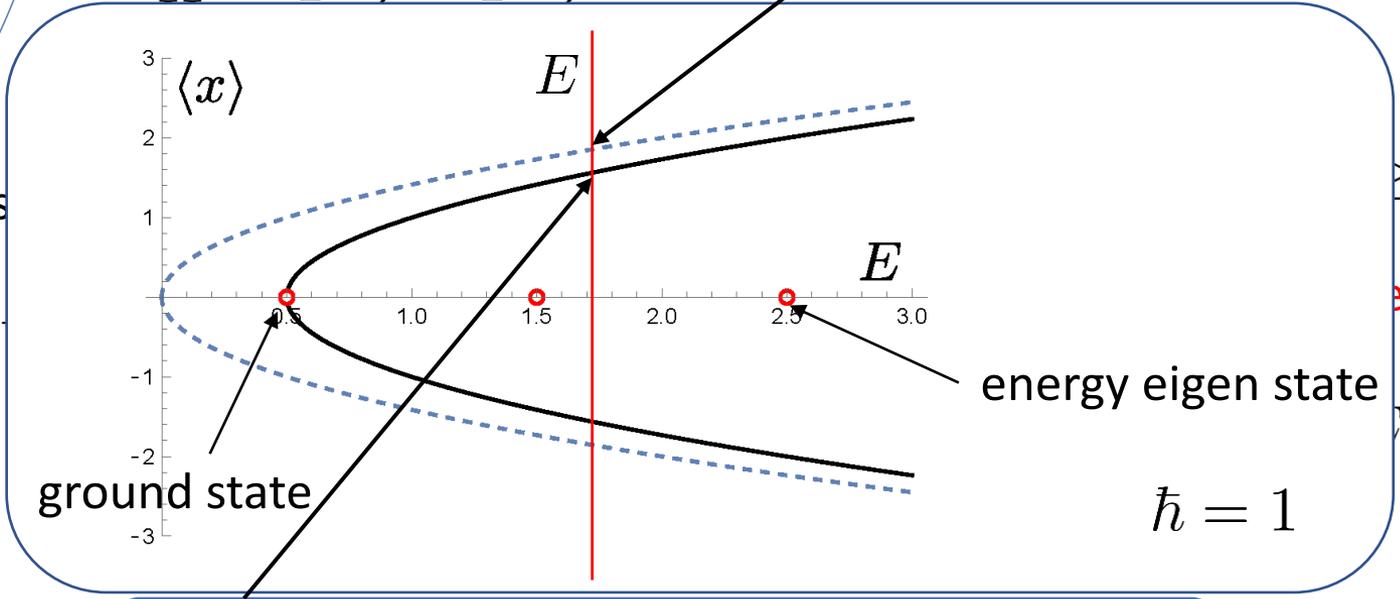
classical

$$-\sqrt{2E} \leq x \leq \sqrt{2E}$$

QM We use

$$E = \frac{1}{2} \langle p^2 \rangle$$

$$\Rightarrow \langle x \rangle^2$$



ground state

energy eigen state

$$\hbar = 1$$

$$-\sqrt{2(E - \hbar/2)} \leq \langle x \rangle \leq \sqrt{2(E - \hbar/2)}$$

→ This result is equivalent to the classical result with $E \rightarrow E - \hbar/2$.

zero-point energy

→ The classical result is corrected by the zero-point energy.

✓ It is not difficult to show that this bound is saturated by coherent states.

例2) Anharmonic Oscillator

$$E = \langle H \rangle = \frac{1}{2} \langle p^2 \rangle + \frac{1}{2} \langle x^2 \rangle + \frac{1}{4} \langle x^4 \rangle$$

不確定性関係では不十分

$$\langle \Delta x^2 \rangle \langle \Delta p^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4} \longrightarrow M \succeq 0,$$

$$H = \frac{1}{2} p^2 + \frac{1}{2} x^2 + \frac{1}{4} x^4$$

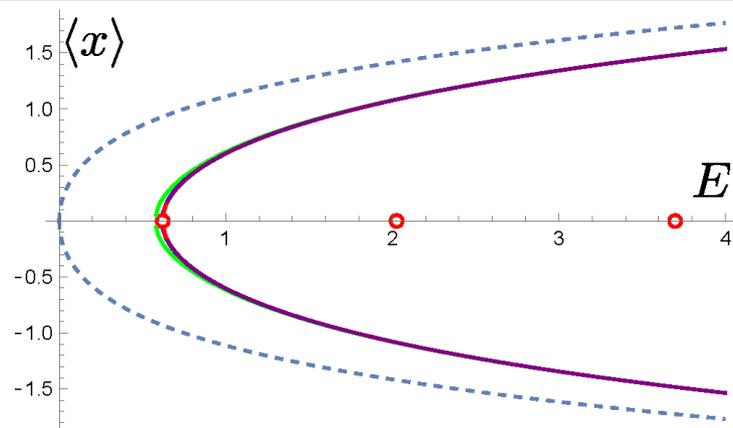
$$M = \begin{pmatrix} 1 & \langle x \rangle & \langle p \rangle & \dots & \langle x^{K_x} p^{K_p} \rangle \\ \langle x \rangle & \langle x^2 \rangle & \langle xp \rangle & \dots & \vdots \\ \langle p \rangle & \langle px \rangle & \langle p^2 \rangle & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle p^{K_p} x^{K_x} \rangle & \dots & \dots & \dots & \langle p^{K_p} x^{2K_x} p^{K_p} \rangle \end{pmatrix}.$$

Q. この条件の下で, $\langle x \rangle$ の取り得る範囲は?

この問題を手計算で解くのは難しいが, Mathematicaで次のようにすれば良い:

SemidefiniteOptimization[最小値を求めたい量, 条件]

→ 半正定値計画問題として可解(Mathematicaが即座に解いてくれる).



- classical
 - $(K_x, K_p) = (2, 2)$
 - $(K_x, K_p) = (3, 3)$
 - $(K_x, K_p) = (4, 4)$
 - $(K_x, K_p) = (5, 5)$
 - eigenstate
- ↓ size of M

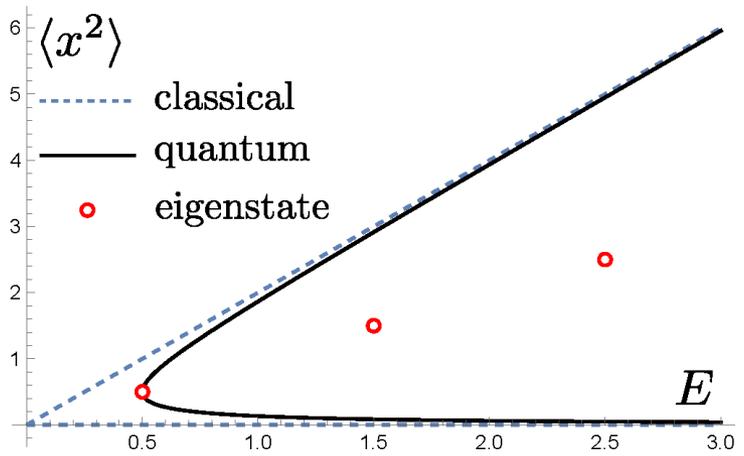
Larger M provide stronger bounds.

各 E を指定して, $\langle x \rangle$ と $-\langle x \rangle$ の最小値を求めた.

例3) 他の量

Bounds on $\langle x \rangle \rightarrow$ Bounds on $\langle x^m p^n \rangle$ Easy!

Example 1) $\langle x^2 \rangle$ in Harmonic Oscillator



$$E - \sqrt{E^2 - \hbar^2/4} \leq \langle x^2 \rangle \leq E + \sqrt{E^2 - \hbar^2/4}.$$

Example 2) $\langle p \rangle$ 任意のV(x)に対して, bound求まる.

$$H = \frac{1}{2}p^2 + V(x). \quad \rightarrow \quad |\langle p \rangle| \leq p_* := \sqrt{2(E - E_0)} \quad \left\{ \begin{array}{l} E_0 : \text{ground energy} \\ |0\rangle, \phi_0(x) : \text{ground state} \end{array} \right.$$

$e^{\pm ip_* \hat{x}/\hbar} |0\rangle$ saturates the bound. (波動関数 $e^{\pm ip_* x/\hbar} \phi_0(x)$)

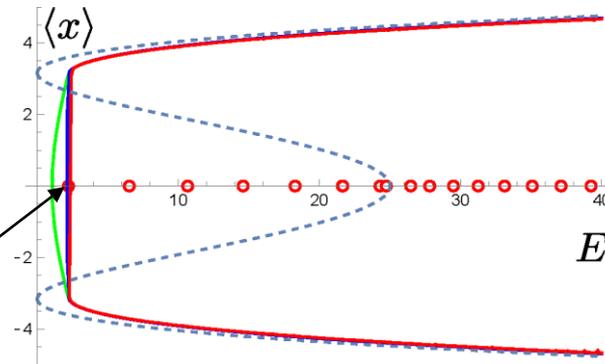
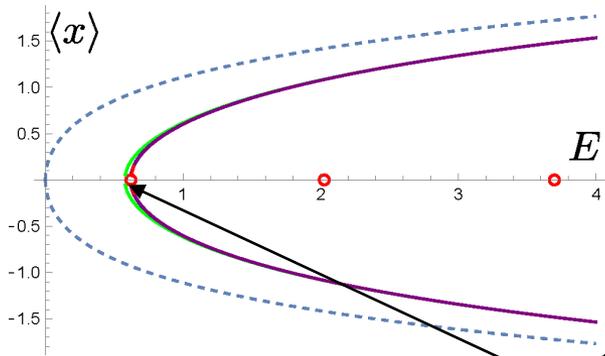
「各エネルギーで, 最大の運動量をもつ状態(最大運動量状態)」

基底エネルギー

★ Uncertainty Relation → Ground state

$$H = \frac{1}{2}p^2 + \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{4}x^4$$

$$H = \frac{1}{2}p^2 - 5x^2 + \frac{1}{4}x^4.$$



$M \succeq 0 \rightarrow$ Ground Stateを導出可能

Lawrence (2021)

Sec.4 Hamiltonianのスペクトラムの導出

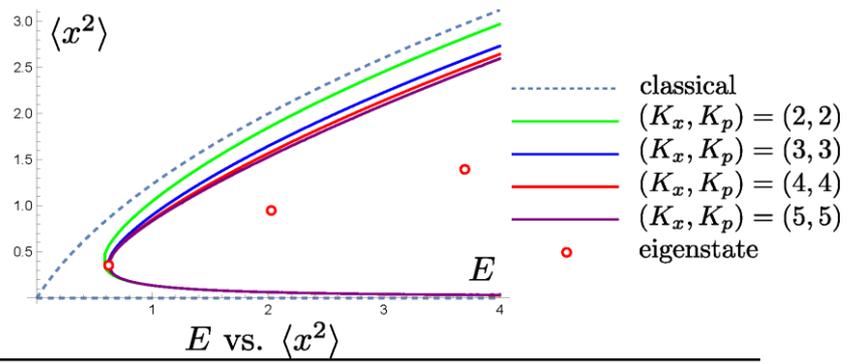
応用2: Hamiltonianのスペクトラムの導出

Anharmonic Oscillator $H = \frac{1}{2}p^2 + \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{4}x^4$

$$M = \begin{pmatrix} 1 & \langle x \rangle & \langle p \rangle & \dots & \langle x^{K_x} p^{K_p} \rangle \\ \langle x \rangle & \langle x^2 \rangle & \langle xp \rangle & \dots & \vdots \\ \langle p \rangle & \langle px \rangle & \langle p^2 \rangle & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle p^{K_p} x^{K_x} \rangle & \dots & \dots & \dots & \langle p^{K_p} x^{2K_x} p^{K_p} \rangle \end{pmatrix} \quad M \succeq 0,$$

$$E = \langle H \rangle = \frac{1}{2} \langle p^2 \rangle + \frac{1}{2} \langle x^2 \rangle + \frac{1}{4} \langle x^4 \rangle$$

任意の状態に対する可能領域



定常状態 (cf. 熱平衡状態) $\forall | \rangle \rightarrow | \text{stationary} \rangle$

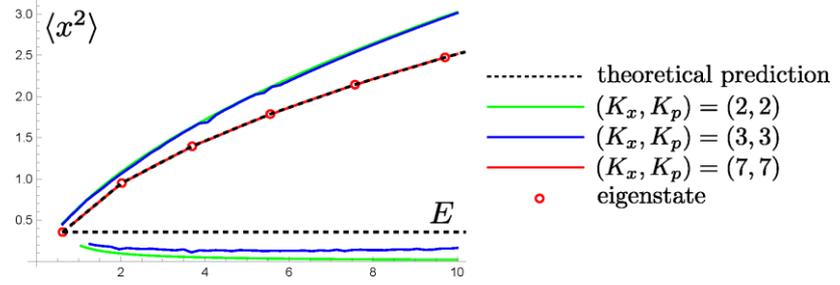
・定常状態は次を満たす. (O: 任意の演算子)

$$\langle \text{stationary} | [H, O] | \text{stationary} \rangle = 0$$

例) $O = x^2 \rightarrow \langle [H, O] \rangle = -i(\langle px \rangle + \langle px \rangle) = 0$

これらの条件を追加すれば良い.

定常状態に対する可能領域 TM (2022)



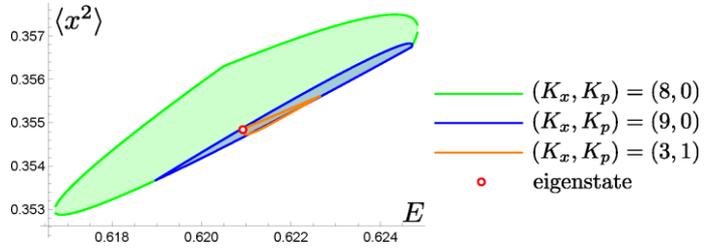
SemidefiniteOptimization[最小値を求めたい量, 条件]

エネルギー固有状態 Han-Hartnoll-Kruthoff PRL 2020

$$\forall | \rangle \rightarrow | E \rangle \quad \begin{cases} \langle [H, O] \rangle = 0 \\ \langle HO \rangle = E \langle O \rangle \end{cases}$$

例) $O = x^2 \rightarrow \langle HO \rangle = \langle p^2 x^2 \rangle / 2 + \langle x^4 \rangle / 2 + \langle x^6 \rangle / 4$
 $= E \langle x^2 \rangle \rightarrow$ 更に強い条件

エネルギー固有状態に対する可能領域



各固有値に収束していく. \rightarrow 固有値求まる. 17/21

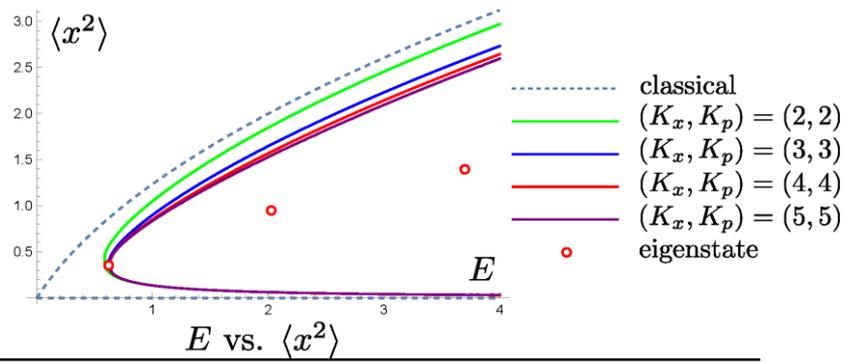
応用2: Hamiltonianのスペクトラムの導出

Anharmonic Oscillator $H = \frac{1}{2}p^2 + \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{4}x^4$

$$M = \begin{pmatrix} 1 & \langle x \rangle & \langle p \rangle & \dots & \langle x^{K_x} p^{K_p} \rangle \\ \langle x \rangle & \langle x^2 \rangle & \langle xp \rangle & \dots & \vdots \\ \langle p \rangle & \langle px \rangle & \langle p^2 \rangle & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle p^{K_p} x^{K_x} \rangle & \dots & \dots & \dots & \langle p^{K_p} x^{2K_x} p^{K_p} \rangle \end{pmatrix} \quad M \succeq 0,$$

$$E = \langle H \rangle = \frac{1}{2} \langle p^2 \rangle + \frac{1}{2} \langle x^2 \rangle + \frac{1}{4} \langle x^4 \rangle$$

任意の状態に対する可能領域

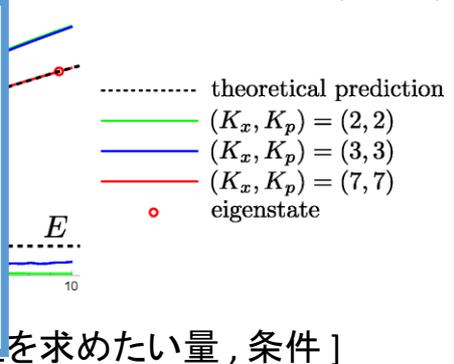


定常状態 (cf. 熱平衡状態) $\forall | \rangle \rightarrow |\text{stationary}\rangle$ 定常状態に対する可能領域 TM (2022)

定常状態は次を
 $\langle \text{stationary} | [H, O] | \text{stationary} \rangle = 0$

不確定性関係の拡張 + 付加条件

→ エネルギー固有値求まる.



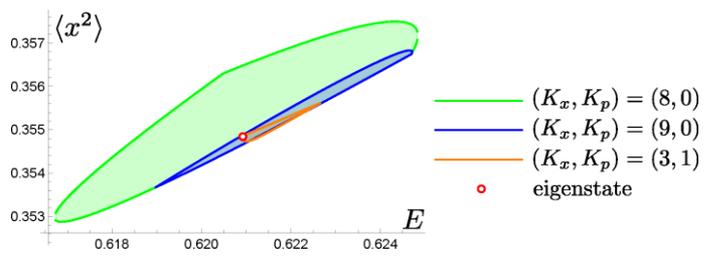
例) $O = x^2 \rightarrow$
 これらの条件を

エネルギー固有状態 Han-Hartnoll-Kruthoff PRL 2020

$$\forall | \rangle \rightarrow |E\rangle \quad \begin{cases} \langle [H, O] \rangle = 0 \\ \langle HO \rangle = E \langle O \rangle \end{cases}$$

例) $O = x^2 \rightarrow \langle HO \rangle = \langle p^2 x^2 \rangle / 2 + \langle x^4 \rangle / 2 + \langle x^6 \rangle / 4$
 $= E \langle x^2 \rangle \rightarrow$ 更に強い条件

エネルギー固有状態に対する可能領域



各固有値に収束していく. → 固有値求まる. 18/21

今回のBootstrap法(線形計画法)は数値解析として有用か?

50本程度の研究

- Anderson-Kruczenski (2016): GWW model, Lattice gauge theory
- Lin (2020), Kazakov-Zheng (2021): 0dim matrix models
- Han-Hartnoll-Kruthoff (2020): 1dim QM, Matrix quantum mechanics
- Lawrence: 1+1dim 格子場理論: scalar(2021), fermion(2023)

量子力学: 1dim かなり強力. 可解系では厳密解が導出できる(HO, 水素原子).

2dim 一応解ける.

Aikawa-TM-Yoshimura 2022

弱点: 相関関数?, 量子統計NG: 「2個のbose粒子系」と「2個のfermi粒子系」を区別できない.

多体系

	Monte Carlo	Bootstrap
厳密解	NG	可解系で厳密解が得られることがある.
$N = \infty$	NG	OK ($\langle \text{tr}(X^n) \rangle$, large-N factorization)
finite-N	OK	Very Hard
カノニカル分布	OK	NG TM 2023
ミクロカノニカル	NG	OK TM 2023
有限密度(符号問題)	Hard	OK (Hamilton形式)
θ -term	Hard	Partially OK Aikawa-TM-Yoshimura 2022

Summary

Summary:

不確定性関係

$$\langle \Delta x^2 \rangle \langle \Delta p^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4} \longrightarrow M \succeq 0,$$

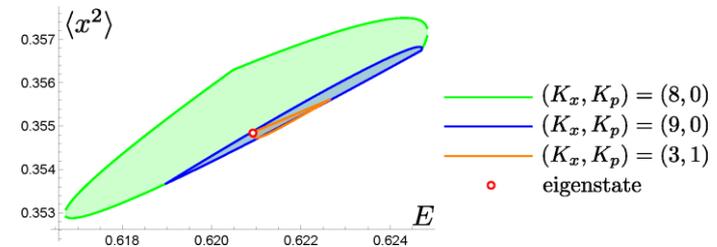
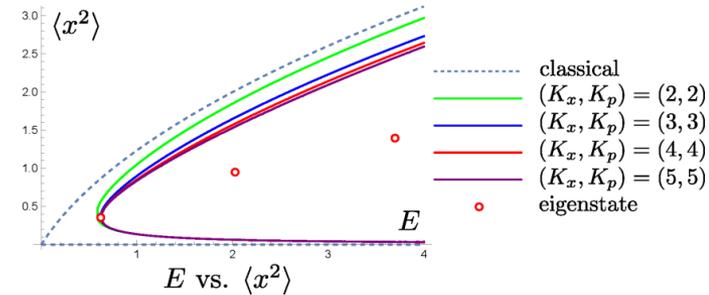
拡張版

$$M = \begin{pmatrix} 1 & \langle x \rangle & \langle p \rangle & \cdots \\ \langle x \rangle & \langle x^2 \rangle & \langle xp \rangle & \cdots \\ \langle p \rangle & \langle px \rangle & \langle p^2 \rangle & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}.$$

- いろいろな不等式関係を求められる.

調和振動子: $-\sqrt{2(E - \hbar/2)} \leq \langle x \rangle \leq \sqrt{2(E - \hbar/2)}$

- 最大運動量状態: $e^{\pm ip_* \hat{x} / \hbar} |0\rangle$
- Hamiltonianのスペクトラムの数値解析.
→ Bootstrap法 [Han-Hartnoll-Kruthoff PRL 2020](#)



Future Directions

- 不等式関係の使い道.
- 最大運動量状態の使い道.
- 数値Bootstrap法の改善と応用 (量子多体系, 格子系, 行列模型).