

概要

これまでに幾何学的な位相を中心に基礎理論をみてきた。他方で複雑系においてもカオスの理論のような再帰性が量子力学的な系に応用できる研究も進んでいる。筆者はこれらの関係を統合して時間の新しい概念を仮定し、観測の問題などで未解決な相対論と量子力学の統合ための考察を深める。本部は熱統計力学の基礎をあつかった第3部との関連が深いので必要とあれば、参照して欲しい。本部では観測の問題等の量子論の理論的な側面を考察するが、現在では応用面として量子コンピューターや量子デバイスが急速に発展している。この分野は第10部で扱うことにする。

本部は未完成部分が多く、今後加筆修正する予定である。参考文献を見て学習に役立ててほしい。

1 量子観測 [26][124]

量子論が登場した当時、1927年に第5回ソルベー会議で量子論の確率解釈が認められ、物理学の局所性が破られることが一部認められることになる。有名なアインシュタインらによるEPRパラドックスとして、多くの反対意見もあったが、今日確率密度として波動関数が伝達していくという理論は結果的に量子論を発展させ、量子コンピューターなどの技術として実現してきている。

ただ、原理な所で本質的な解決にいたっていない。筆者は確率解釈の立場ではなく量子論と相対論の局所、非局所のつながりをつける原理的な理論をつくることが本部の目的である。従って確率解釈ですまされない物理の理論を見いだす必要があると筆者は考える。この理論は後章でおこなう。まずは確率解釈について学ぶ。

1.1 完備関係式

はじめに直感的なシュレーディンガーの観測記号 $||$ を紹介しよう。

はじめに有用なパウリ行列を次のようにおく。

$$I = \sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \sigma_1 = X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_2 = Y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_3 = Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (1.1)$$

次のようにある a から観測 A によって b が得られたとする。これを観測器 A で図上のように表す。

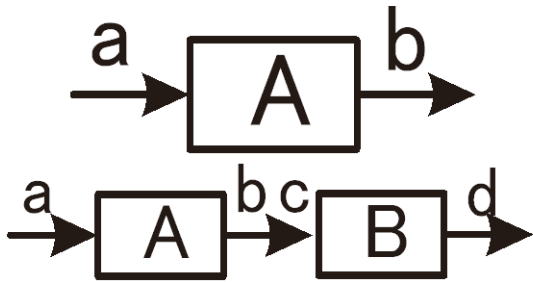


図 1.1: $b = c$ であれば上の観測器と同じであるが $b \neq c$ であれば a から d の観測は起きない

これを次のような記号で表現する。

$$|ab|$$

すると別に c から d が得られた観測 B があると両者の積は

$$AB = |ab||cd|$$

となる。これは b と c が等しいか異なるかで次のような違いが生じる

$$AB = \delta(b, c)|ad| \quad (1.2)$$

$$\delta(b, c) = \begin{cases} 1 & (b = c) \\ 0 & (b \neq c) \end{cases} \quad (1.3)$$

つまりこの δ はクロネッカーのデルタである。

ここでは最も単純な演算子が観測をつなげる役割を与えたわけだ。

また、この観測器については次のような代数が成り立つとする。

$$|ab\rangle + |ab\rangle = 2|ab\rangle$$

$|ab\rangle$ は a が入射し、 b が出ていくと考えるので次のように a の消滅と b の生成の組み合わせに対応させる。

この関係は順番があることに留意する。Dirac は次のような記号でこれを表した。

$$\begin{aligned} |ab\rangle &= \langle a|b\rangle \\ a : in \ b : out &= \langle a| : \text{生成}, |b\rangle : \text{消滅} \end{aligned} \quad (1.4)$$

これをディラックのブラケットという。

そうすると式 1.3 から

$$|a\rangle \langle b|c\rangle \langle d| = \delta(bc) |a\rangle \langle d|$$

これから

$$\langle b|c\rangle = \delta_{bc}$$

を満たせばよい。これはベクトルの規格直交化の条件である。

$$\mathbf{e}_k \cdot \mathbf{e}_l = \delta_{kl}$$

さらに完全性の条件は

$$\sum_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k = 1$$

となる。これから有用な関係

$$\sum_a |a\rangle \langle a| = I \quad (1.5)$$

が恒等的になりたち、これを完備関係式、またはクロージャーと呼ぶ。

これらにより、観測表現が確立論とつながり、量子論が内積、外積代数で表現されるようになった。

シューウィングアの観測記号 $||$ は大きさをとる記号と混同しやすいので、今後はディラックのブラケットを利用する。

さらに次節で直交しない場合観測の過程はある基本軸への射影であることを見る。

しかし、量子論の観測をみるためには、より広い空間を意識して、いくつかの部分空間を考えていく必要があることを覚悟しないとイケない。

1.2 観測演算子

1.2.1 ポインター基底測定 [124]

次に量子論に数学的な枠組みを与えてきたフォンノイマン (von Neumann) による量子測定の解釈をみてみよう。

これはポインター基底測定 (pointer basis measurement) と呼ばれる仮想実験である。

ポインターとはマクロな測定器のメーターの針の意味である。目的の量子系 S のある物理量 \hat{A}_S を測定することを考えよう。

測定する前の S の状態は次のベクトルで表される。

$$|\phi\rangle_S$$

実数値 x を示すメーターの針をもつ仮想測定器を D とする。この D の量子状態も次の状態ベクトルで表す。

$$|\phi\rangle_D$$

これらベクトルは振幅と位相を持っていて、このままでは関数値にならない。

この測定する前の S, D の状態は純粋状態と呼ばれる。

そこで、これと対になる相手として、この場合はメーターの針になるので、次のように内積を定義して次の関数が得られる。

$$\phi_D(x) = \langle x|\phi\rangle \quad (1.6)$$

ただし、 D にも内部自由度があるが、ここでは無視をしておく。この時の針の状態

$$\{|x\rangle\}$$

は基底ベクトルと考えることができる。 S, D も熱的な振動から逃げられないので、厳密には運動エネルギーを持つが、ここでは無視して、測定時間が系の変化より、十分短い時間で行われるとしよう。この条件で \hat{A}_S を測定することを考えると、最低限のハミルトニアンが必要でこれを \hat{H}_m とすれば最も単純に

$$\hat{H}_m(t) = g(t)\hat{A}_S\hat{p}_D \quad (1.7)$$

のようにかける。現実的なハミルトニアンになるためには共役演算子の積が必要なのでここでは針の位置演算子 \hat{x}_D に共役な運動量演算子を \hat{p}_D とした。これでいつでも物理的な観測数値は

$$\hat{x}_D |x\rangle_D = x |x\rangle_D$$

$$\hat{p}_D |p\rangle_D = p |p\rangle_D$$

のように固有値として得ることができる。また、 $g(t)$ は結合定数の役割を果たし、短時間だけ 0 でない値を取る関数とする。

ここで S のヒルベルト空間に作用する \hat{A}_S を測定対象 S と観測器 D の合成ヒルベルト空間に作用するように拡張したとき、

$$\hat{A}_S = \hat{A}_{SD} = \hat{A} \otimes \hat{I}$$

の直積であるとし、運動量演算子は D のヒルベルト空間のみに作用するとして

$$\hat{p}_D = \hat{I} \otimes \hat{p}$$

である。ちなみに (2×2) 型で $\{0, 1\}$ 成分を持つ A, B のテンソル積は次のように (4×4) 型になる。

$$A \otimes B = \begin{pmatrix} A_{00}B_{00} & A_{00}B_{01} & A_{01}B_{00} & A_{01}B_{01} \\ A_{00}B_{10} & A_{00}B_{11} & A_{01}B_{10} & A_{01}B_{11} \\ A_{10}B_{00} & A_{10}B_{01} & A_{11}B_{00} & A_{11}B_{01} \\ A_{10}B_{10} & A_{10}B_{11} & A_{11}B_{10} & A_{11}B_{11} \end{pmatrix}$$

後に詳しくみるが、純粋状態は直積の形になっている必要がある。

従って \hat{A}, \hat{p} の次元構造に差があっても \hat{A}_S, \hat{p}_D の次元構造は同じになるように全体の空間がつくられる。

量子論では、対称としているヒルベルト空間が異なると演算子は古典論のように交換する。

$$[\hat{A}_S, \hat{p}_D] = 0$$

ここで、測定する前の S の状態には量子的な揺らぎがあると考え、メーターの針の始状態を原点にして ϵ の揺らぎを仮定する。

ここでの揺らぎは量子論の本質的なもので、理論的には後に考察する。誤差的なものではない。

ここではこれを揺らぎ作用と呼ぶ。

そこで、この揺らぎ作用を考慮して、式 1.6 の形を見積もってみよう。

ここでは $x > 0$ の時のみ 1 を取る、ステップ関数 $\Theta(x)$ を用いる。

つまり、初期状態では

$$\phi_{D0}(x) = \sqrt{\frac{1}{\epsilon}} \Theta\left(\frac{\epsilon}{2} - |x|\right)$$

として、時間変化は関数 $g(t)$ に任せて、時刻 $t = 0$ から時刻 $t = T$ の間のみ 0 ではない値をとる。従って、時間変化のハミルトニアンを $\hbar = 1$ として時間推進演算子を

$$\hat{U}_{PBM} = \exp[-iH\Delta t] = \exp[-igT\hat{A}_S\hat{p}_D]$$

とする。添え字 **PBM** は pointer basis measurement であることを表す。

よって、時刻 T 以後の S, D の混合系の状態が

$$\begin{aligned} |\Phi, x\rangle_{SD} &= \hat{U}_{PBM} |\psi\rangle_S \phi_{D0}(x) \\ &= \exp[-igT\hat{A}_S\hat{p}_D] \sqrt{\frac{1}{\epsilon}} \Theta\left(\frac{\epsilon}{2} - |x|\right) |\psi\rangle_S \end{aligned} \quad (1.8)$$

となる。ここで \hat{A}_S の固有値の 1 つを a_n として

$$\hat{A}_S |a_n\rangle_S = a_n |a_n\rangle_S$$

の固有方程式が成り立つとして、第 4 部でみたスペクトル分解を使うと、縮退がないとして、

$$\hat{A}_S = \sum_n a_n |a_n\rangle_S \langle a_n|_S$$

と固有値分解できるから式 1.8 は十分短時間であれば指数演算子は位相をずらし、

$$\begin{aligned} |\Phi, x\rangle_{SD} &= \sum_n |a_n\rangle_S \langle a_n|\psi\rangle \exp[-gT a_n \partial_x] \phi_{D0}(x) \\ &= \sum_n |a_n\rangle_S \langle a_n|\psi\rangle (1 - gT a_n \partial_x) \phi_{D0}(x) \\ &= \sum_n \langle a_n|\psi\rangle |a_n\rangle_S \phi_{D0}(x - gT a_n) \end{aligned}$$

と計算される。この時

$$c_n = \langle a_n|\psi\rangle$$

$$\begin{aligned} u_n(x) &= \phi_{D0}(x - gT a_n) \\ &= \sqrt{\frac{1}{\epsilon}} \Theta\left(\frac{\epsilon}{2} - |x - gT a_n|\right) \end{aligned}$$

とおけば

$$|\Phi, x\rangle_{SD} = \sum_n c_n |a_n\rangle_S u_n(x) \quad (1.9)$$

である。ステップ関数の広がりが

$$\Theta\left(\frac{\epsilon}{2} - |x|\right) \rightarrow \Theta\left(\frac{\epsilon}{2} - |x - gT a_n|\right)$$

と変化したので異なる固有値の最小差

$$gT > \frac{\epsilon}{\min_{n \neq m} |a_n - a_m|} \quad (1.10)$$

を満たす g, T を選ぶと、はりの位置は

$$x \in \left[gT a_n - \frac{\epsilon}{2}, gT a_n + \frac{\epsilon}{2} \right] \quad (1.11)$$

の中で十分離れて区別できることになる。従って、

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} u_n(x)^* u_m(x) dx &= \frac{1}{\epsilon} \int_{-\infty}^{+\infty} \Theta(gT(a_n - a_m)) \Theta(gT(a_m - a_n)) dx \\ &= \delta_{nm} \end{aligned}$$

これは式 1.9 において、直交し合う針の状態 $u_n(x)$ と観測 \hat{A}_S の固有値との間に相関があることを示す。つまり、メータ針の測定である 1 つの $u_n(x)$ が選ばれると、 \hat{A}_S は固有値 a_n をとっていることになる。さて、この辺のベクトル相関をイメージできるだろうか。

一方で合成系 $|a_n\rangle u_n(x)$ もヒルベルト空間内で直交する量子状態であるので、ある $u_n(x)$ が観測される確率が a_n が観測される確率と一致しないとイケない。この確率を p_n とすると

$$p_n = \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \langle a_n | u_n(x)^* | \Phi, x \rangle dx \right|^2 = |c_n|^2 = |\langle a_n | \psi \rangle|^2 \quad (1.12)$$

となる。これは測定前に $|\psi\rangle_S$ にあった状態が \hat{A}_S が作用した状態にうつる確率を表している。

1.2.2 コペンハーゲン解釈 [124]

ここで文献 [124] で先のポインター仮説実験のコペンハーゲン解釈を見る。

先の系 S を 2 準位スピン系とする。測定する物理量はパウリ演算子の第 3 成分

$$\hat{\sigma}_3$$

とする。2 準位状態を $|\pm\rangle$ として固有値も単に \pm で表す。

まず測定者アリスの前に系 S が

$$|\psi\rangle_S = c_+ |+\rangle_S + c_- |-\rangle_S$$

としてあるとする。

一方で測定器の始状態は

$$|0\rangle_D$$

とする。

物理的な観測はあるユニタリー演算子 $\hat{U}_{SD}^{(vN)}$ が作用することだから、2 つの結合系に

$$\hat{U}_{SD}^{(vN)} |\psi\rangle_S |0\rangle_D = c_+ |+\rangle_S |u_+\rangle_D + c_- |-\rangle_S |u_-\rangle_D \quad (1.13)$$

のように作用して、ポインターを変化させる。先の結果式 1.10 から

$$T > \frac{\epsilon}{2g} \quad (1.14)$$

だけ立てば、測定器の量子状態は次のように直交する。

$$|u_+\rangle_D \perp |u_-\rangle_D$$

マクロな系でアリスが D を理想的に測定して $|u_{\pm}\rangle_D$ を観測する。
 するとミクロな系である S は $|\pm\rangle_S$ が対応する。これをコペンハーゲン解釈では確率と結びつけて、
 ボルン則と呼ばれる次で定義し、これを公理とした。

$$p_+ = \left| \langle + |_S \langle u_+ |_D \left(\hat{U}_{SD}^{(vN)} |\psi\rangle_S |0\rangle_D \right) \right|^2 = |c_+|^2 \quad (1.15)$$

$$p_- = \left| \langle - |_S \langle u_- |_D \left(\hat{U}_{SD}^{(vN)} |\psi\rangle_S |0\rangle_D \right) \right|^2 = |c_-|^2 \quad (1.16)$$

これが量子論の確率解釈の第一歩となったわけだが、後に見る特異値分解をユニタリ変換をしても同じ固有値を観測するようにこの仮想実験でも観測側の量子状態は1つではない。

それでも、つまり、だれでも針の目盛は同じに読み取る。

アリスの観測を様々なプロセスを含めて、マクロな系として系 A も含めて、合成系 SDA としよう。

この SDA を観測するボブを登場させる。基本的に日常の観測は電磁相互作用が主であるのでこの作用をユニタリ変換

$$\hat{U}_{DA}^{(em)}$$

で表す。これも初期には $|0\rangle_A$ にあり、様々な相互作用があるとしてもインフォメーションとしては±の2値として、

$$\hat{U}_{DA}^{(em)} |u_+\rangle_D |0\rangle_A = |u_+\rangle_D |+\rangle_A$$

$$\hat{U}_{DA}^{(em)} |u_-\rangle_D |0\rangle_A = |u_-\rangle_D |-\rangle_A$$

とする。この表現はユニタリ演算子 $\hat{U}_{DA}^{(em)}$ は状態ベクトル $|u_{\pm}\rangle_D$ には影響を与えない。

これを測定器は時間変化に対して、不変と考え、この演算子が先のハミルトニアンのように時間発展を担うと考える。

するとアリスの観測する SDA 系は次のようになる。

$$\hat{U}_{DA}^{(em)} \hat{U}_{SD}^{(vN)} |\psi\rangle_S |0\rangle_D = c_+ |+\rangle_S |u_+\rangle_D |+\rangle_A + c_- |-\rangle_S |u_-\rangle_D |-\rangle_A \quad (1.17)$$

1.2.3 フォンノイマン鎖 [124]

この解釈を堀田氏の処方に従って先のポインター測定を針を観測者が読み取り、それを記憶していくことを転写モデルとして考えよう。

少なくとも脳の記憶が電磁相互作用を基本としているので $U^{(em)}$ というユニタリ行列を考える。さらに、アリスという定番の役者に加えて、合成系 SDA を含む系を観測する第2の測定者ボブを登場させる。

まず、次の図のように $|+\rangle_A, |-\rangle_A$ でアリスが観測をしたとする。

四角い箱が量子ビット測定機 D を表し、顔が観測者の状態ベクトルである。

あるユニタリ変換 $U^{(em)}$ により状態が固有ベクトルに移行する。

$$U^{(em)} \left| \begin{array}{c} \text{箱} \\ \text{+} \\ \text{顔} \end{array} \right\rangle = \left| \begin{array}{c} \text{箱} \\ \text{+} \\ \text{顔} \end{array} \right\rangle \left| \begin{array}{c} \text{脳} \\ \text{+} \end{array} \right\rangle$$

$$U^{(em)} \left| \begin{array}{c} \text{箱} \\ \text{-} \\ \text{顔} \end{array} \right\rangle = \left| \begin{array}{c} \text{箱} \\ \text{-} \\ \text{顔} \end{array} \right\rangle \left| \begin{array}{c} \text{脳} \\ \text{-} \end{array} \right\rangle$$

図 1.2: [124] より:アリスによるポインターの読み取りと記憶

この記憶の操作をアリスの脳への転写と考える。

次にマクロな重ね合わせとして、次のように観測者自身を量子的な状態として扱う。

この時合成系に $U^{(em)}$ を作用させると、状態は2つの状態の和になる。それぞれに重み係数かかる。ここで式 1.14 の仮定をとると

$$\langle u_+ | u_- \rangle_D = 0$$

であり、アリスの状態ははじめ、

$$|0\rangle_A$$

であるとする。この時、次を満たすユニタリ演算子 $U_{DA}^{(em)}$ を考えることができる。

$$U_A^{(em)} |u_+\rangle |0\rangle_A = |u_+\rangle_D |+\rangle_A$$

$$U_A^{(em)} |u_-\rangle |0\rangle_A = |u_-\rangle_D |-\rangle_A$$

この図が次のようになる。

$$\begin{aligned}
 & U^{(em)} (c_+ |+\rangle \left| \begin{array}{|c|} \hline \oplus \\ \hline \end{array} \right\rangle + c_- |-\rangle \left| \begin{array}{|c|} \hline \ominus \\ \hline \end{array} \right\rangle \left| \begin{array}{|c|} \hline \text{☺} \\ \hline \end{array} \right\rangle \Big) \\
 &= c_+ |+\rangle \left| \begin{array}{|c|} \hline \oplus \\ \hline \end{array} \right\rangle \left| \begin{array}{|c|} \hline \text{☺} \\ \hline \end{array} \right\rangle \\
 & \quad + c_- |-\rangle \left| \begin{array}{|c|} \hline \ominus \\ \hline \end{array} \right\rangle \left| \begin{array}{|c|} \hline \text{☹} \\ \hline \end{array} \right\rangle
 \end{aligned}$$

図 1.3: [124] より:重ね合わせにより合成する

この時の $U_{DA}^{(em)}$ は測定機 D の量子状態を乱すことなく、その中の情報を A に書き込んでいる。例えば、単純な例として、 $U_{DA}^{(em)}$ をアリスがメーターを見る相互作用を記述する演算子であるとする。ここでアリスの観測を様々なプロセスを含めて、マクロな系として系 A も含めて、合成系 SDA としよう。ここで式 1.13 からユニタリ演算子 $\hat{U}_{SD}^{(vN)}$ が、2つの結合系に

$$\hat{U}_{SD}^{(vN)} |\psi\rangle_S |0\rangle_D = c_+ |+\rangle_S |u_+\rangle_D + c_- |-\rangle_S |u_-\rangle_D$$

と作用したから、アリスが測定後の合成系 SDA の量子状態は次のようになる。

$$U_{DA}^{(em)} \hat{U}_{SD}^{(vN)} |\psi\rangle_S |0\rangle_D |0\rangle_A = c_+ |+\rangle_S |u_+\rangle_D |+\rangle_A + c_- |-\rangle_S |u_-\rangle_D |-\rangle_A$$

この式はアリスが測定器をみて、 S の量子状態を量子状態 $|\pm\rangle_S$ に変化したことを認識したことを表す。つまり、もはやどちらかの観測結果になる、量子的な純粋状態はこわれている。しかし、ボブはこの SDA 系を観測しなければ、時間経過に関係なく、まだ、純粋状態が続いている。ボブが観測をすると $\langle u_+ | u_- \rangle_D = 0$ だから式 1.17 を入れると

$$\begin{aligned}
 p_+ &= \left| \langle + |_S \langle u_+ |_D \left(\hat{U}_{DA}^{(em)} \hat{U}_{SD}^{(vN)} |\psi\rangle_S |0\rangle_D |0\rangle_A \right) \right|^2 = |c_+|^2 \\
 p_- &= \left| \langle - |_S \langle u_- |_D \left(\hat{U}_{DA}^{(em)} \hat{U}_{SD}^{(vN)} |\psi\rangle_S |0\rangle_D |0\rangle_A \right) \right|^2 = |c_-|^2
 \end{aligned}$$

となり、これはアリスの観測する確率と同じである。

この関係はさらに広げることができる。つまり、アリスとボブと測定器を見るクリスが登場させればよい。このように系を広げていっても確率が保存されることが確率解釈の量子論の柱になる。

さらに、理論上この測定時間差はどこまでも広げることができる。

しかし、この理論では過去は同じようにはいかない。波動関数に重なりがあると、直交性が維持されない。アリスが観測した時刻の現在と過去付近において、ボブは SDA 系をつくることができなくなる。

従って、ボブにとっての純粋状態はマクロな時間経過後も純粋状態である。このように外部測定者の枠組を広げて、いくことをフォンノイマン鎖 (von Neumann chain) と呼ぶ。

留意すべきは連鎖にあるとマクロな線形重ね合わせとしてつながっていくが、測定結果の確率分布は c_-, c_+ に依存し続ける。確率の保存がなされることである。

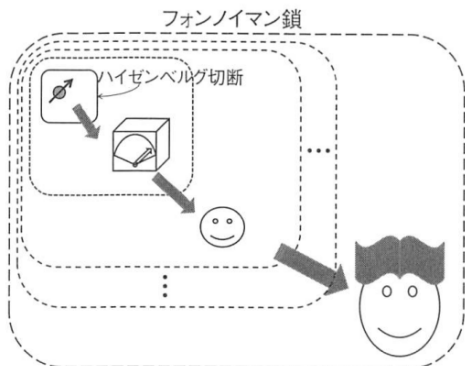


図 1.4: [124] より:フォンノイマン鎖とハイゼンベルグ切断

連鎖モデルでは我々のイズに関係なく量子論的な純粋状態がつくれる。我々を包み込む大きな存在があれば、我々が扱っているマクロな観測値は粗視化されてしまって純粋状態として見えることになる。しかし、最初のミクロとマクロの間の相互作用をどこかに決めないと、規格化ができない。時間に向きの不平等があるように、スケールにも不平等があるのだろうか。はじめのミクロとマクロの直接相互作用をハイゼンベルグ切断と呼ぶ。基本的な最初の情報の転写が起こるのがここである。

1.2.4 縮退のある 1 ビット状態

これは縮退があっても問題はない。そこで縮退を表す添え字 k を加えて、状態を

$$|+, k\rangle_A, |-, k\rangle_A$$

で表し、同時に測定機 D についても μ を加えて

$$|\mu_+, \mu\rangle_D, |\mu_-, \mu\rangle_D$$

のように表す。添え字の異なる状態は全て直交関係にあるとする。

始状態をそれぞれ、 $|0\rangle_D, |0'\rangle_A$ として、 \pm の 1 ビットの情報を誤差なく、 S, D, A と複製していく演算子を考えよう。

次の 2 つのユニタリー変換でこれを定義する。

$$U_{SD}^{(vN)} |\pm\rangle_S |0\rangle_D = \sum_{\mu} m_{\mu}^{(1)} |\phi_{\pm}, \mu\rangle_S |\mu_{\pm}, \mu\rangle_D$$

$$U_{DA}^{(em)} |\mu_{\pm}, \mu\rangle_D |0'\rangle_A = \sum_{\mu'k} m_{\mu\mu'k}^{(2)} |\mu_{\pm}, \mu'\rangle_D |\pm, k\rangle_A$$

ここでの展開係数 $m_{\mu}^{(1)}, m_{\mu\mu'k}^{(2)}$ は複素数値をとれることに留意する。さらに状態 $|\phi_{\pm}, \mu\rangle_S$ は測定 \pm, μ が観測された後の状態である。理想測定ではない場合は \pm や μ が異なっても $|\phi_{\pm}, \mu\rangle_S$ は一般に直交しない。

$U_{DA}^{(em)}$ の操作が終わると合成系 SDA の状態は次の $|\Omega\rangle$ で表すことができる。

$$|\Omega_{\pm}\rangle_{SDA} = \sum_{\mu\mu'k} m_{\mu}^{(1)} m_{\mu\mu'k}^{(2)} |\phi_{\pm}, \mu\rangle_S |\mu_{\pm}, \mu'\rangle_D |\pm, k\rangle_A \quad (1.18)$$

この合成状態は係数 $m_\mu^{(1)} m_{\mu\mu'k}^{(2)}$ を引き継ぎ、足し合わせが膨大に増えている。
これに2つの測定演算子を作用させ、

$$U_{DA}^{(em)} U_{SD}^{(vN)} |\psi\rangle_S |0\rangle_D |0'\rangle_A = c_+ |\Omega_+\rangle_{SDK} + c_- |\Omega_-\rangle_{SDK} \quad (1.19)$$

となる。測定演算子の計算は複雑になるが、結果に交差項

$$\langle \Omega_+ | \Omega_- \rangle = 0$$

が0になるため、確率部分 c_+, c_- は先の場合と同じである。つまり、系のサイズを超えて確率は保存していく。量子論の確率解釈を支える1つの柱になっている。

1.2.5 マクロな量子状態

素粒子の世界では当たり前の量子論でもマクロな世界ではあまりみることができない。それはどうしてだろうか。

これは式 1.18 の係数がより複雑になっても全ての足し合わせを実行しないと確率が保存されなくなる。マクロな系の演算子 U の合成は対角成分以外にも多くの成分を持つので決めるのがむずかしくなるだろう。しかし、問題の本質はその複雑さではなくて理論が未だ未解決であることである。

前節の合成演算子は

$$U_{DA}^{(em)} U_{SD}^{(vN)} |\psi\rangle_S |0\rangle_D |0\rangle_A = c_+ |+\rangle_S |u_+\rangle_D |+\rangle_A + c_- |-\rangle_S |u_-\rangle_D |-\rangle_A$$

となり、これは量子論的な純粋状態である。しかし、純粋状態であるためにはボブは S, D, A の量子情報を全て集めていないといけませんが、まだ測定はしてはいけない。この測定をマクロで表現するために

$$\begin{aligned} |M_+\rangle_{SDA} &= |+\rangle_S |u_+\rangle_D |+\rangle_A \\ |M_-\rangle_{SDA} &= |-\rangle_S |u_-\rangle_D |-\rangle_A \end{aligned}$$

は波として干渉性を観測前まではもっている。実際に

$$|\Psi\rangle_{SDA} = c_+ |M_+\rangle_{SDA} + c_- |M_-\rangle_{SDA}$$

がボブが見る波動関数で、この時の物理観測は

$$O_{SDA}^{(macro)} = |M_+\rangle_{SDA} \langle M_-|_{SDA} + |M_-\rangle_{SDA} \langle M_+|_{SDA}$$

として、 $|\Psi\rangle_{SDA}$ に作用させると

$$c_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}, c_- = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\theta}$$

とした時の期待値が

$$\langle \Psi |_{SDA} O_{SDA}^{(macro)} | \Psi \rangle_{SDA} = \cos \theta$$

となり、干渉している。

しかし、観測がおこれば

$$\text{Tr} [|\Psi\rangle \langle \Psi|]$$

が重要な役割を果たす。±の1ビットの場合確率1/2で固有値±が観測され、その後は

$$|\Psi_\pm\rangle_{SDA} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|M_+\rangle_{SDA} \pm |M_-\rangle_{SDA})$$

となる。観測がはじめの状態の情報をリセットしてしまう。

よく問題にされるシュレディンガーの猫は再びよみがえる確率が半分出ることになる。

後章で見るように量子コヒーレンスを保つためにはアリスから出てくるフォトンの情報も制御しないとけない。

このマイクロな光子の γ の偏極状態を $|\gamma_{\pm}\rangle$ とそれ以外のマクロな系 M' の状態 $|M'_{\pm}\rangle_{M'}$ にわけると

$$|\Psi\rangle_{SDAM'\gamma} = c_+ |+\rangle_S |u_+\rangle_D |M'_+\rangle_{M'} |\gamma_+\rangle_{\gamma} + c_- |+\rangle_S |u_+\rangle_D |M'_-\rangle_{M'} |\gamma_-\rangle_{\gamma}$$

となる。 $\langle\gamma_+|\gamma_-\rangle = 0$ とできるので、もしこの光子 γ を捉えられないと、残りの系は

$$\begin{aligned} \text{Tr}[|\Psi\rangle_{SDM'\gamma}\langle\Psi|_{SDM'\gamma}] &= |c_+|^2 (|+\rangle_S |u_+\rangle_D |M'_+\rangle_{M'}) (\langle+|_S \langle u_+|_D \langle M'_+|_{M'}) \\ &\quad + |c_-|^2 (|+\rangle_S |u_+\rangle_D |M'_-\rangle_{M'}) (\langle+|_S \langle u_+|_D \langle M'_-|_{M'}) \end{aligned}$$

となり、これはもはや混合状態になる。

後に詳しく考察をするが、ある物理量の量子状態が、その環境の対角和で実現されることが重要である。

量子的な純粋状態の難しさは微少な粒子が系の外に出たことが、それ以外の量子状態の干渉性を消してしまう。

もちろん、ここにはまだ理論的に不十分な内容がある。後章でこれを明らかにしていきたい。

1.2.6 ベルの不等式 [98]

EPR パラドックスに決着をつけたのがベルの不等式である。この結果は当時の実験技術でも確認することができた。現在では Time-bin された光子を用いてさらに詳しい実験がさばれている。

量子力学的な純粋状態と物理的な保存則、例えば角運動量保存が成立し続ける環境をつくれば様々な対称に応用できる。

例えば図の上について A(Alice) は z 方向について+の観測値を得たとすると B(Bob) 側は-の観測値を得る。これは元の量が0であれば必ずそうなる保存則である。量子力学は観測が行われる前までは+か-かは重ね合わせの状態であることを規定するのでこの時の状態ベクトルは

$$|S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle + |-\rangle)$$

のように書ける。これが古典論との決定的な相違点である。観測が行われないならば+か-かどちらにもなれる状態にあるわけである。古典論では観測者が見えないだけで+または-のどちらかの状態にある。

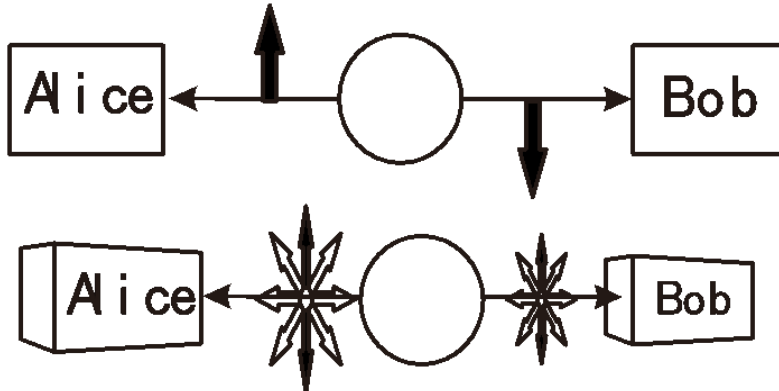


図 1.5: ベルの不等式：上図は古典的なスピンで上下どちらか、下図は状態が重ね合わせされている

どちらが正しいか、それを統計的な実験結果から判断しようとするのがベルの不等式である。

2 粒子を考え、それぞれに 2 つ、合計 4 つの状態ベクトル $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}, \mathbf{d}$ が作用する場合を考える。

どれも $+, -$ の 2 値のみを取るとする。

粒子 1 のスピンを σ_1 、粒子 2 のスピンを σ_2 とし、量子化の軸を \mathbf{a}, \mathbf{b} と \mathbf{c}, \mathbf{d} とする。
ただし、この軸は直交しているとは限らないとする。

観測量は

$$a = \mathbf{a} \cdot \sigma_1 = -\mathbf{a} \cdot \sigma_2$$

$$b = \mathbf{b} \cdot \sigma_1 = -\mathbf{b} \cdot \sigma_2$$

$$c = \mathbf{c} \cdot \sigma_2 = -\mathbf{c} \cdot \sigma_1$$

$$d = \mathbf{d} \cdot \sigma_2 = -\mathbf{d} \cdot \sigma_1$$

Table 1

(1.20)

を撮る場合がある。しかし、どれも ± 1 しかとらないので

$$(a - c)b - (a + c)d = \pm 2 \quad (1.21)$$

という恒等式が成り立つ。この観測を N 回繰り返して得た観測量を

$$a_j, b_j, c_j, d_j \quad (j = 1, 2, \dots, N)$$

とする。ここで粒子 1, 2 の測定が独立に行われたとすると ab の平均値を $\langle ab \rangle$ とすると

$$\langle ab \rangle = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N a_j b_j$$

となるので、式 1.21 を展開して絶対値をとれば

$$|\langle ab \rangle - \langle bc \rangle - \langle ad \rangle - \langle cd \rangle| \leq 2$$

が成り立ち、これをベルの不等式 (**CHSH 不等式**) と呼ぶ。

量子論では重ね合わせの状態をとれるので、これを **EPR 状態** とし、

$$|s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle |-\rangle - |-\rangle |+\rangle)$$

を考える。この演算子の全角運動量は

$$\sigma_1 + \sigma_2 = 0$$

$$\sigma_i \sigma_i = 1$$

だから

$$\langle s | ac | s \rangle = \langle s | \mathbf{a} \cdot \sigma_1 \mathbf{c} \cdot \sigma_2 | s \rangle$$

$$=$$

$$= -\langle s | \mathbf{a} \cdot \sigma_1 \mathbf{c} \cdot \sigma_1 | s \rangle$$

$$= -\mathbf{a} \cdot \mathbf{c}$$

となるので、最初の関係式 1.20 から

$$|\langle ab \rangle - \langle bc \rangle - \langle ad \rangle - \langle cd \rangle| = |\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} + \mathbf{b} \cdot \mathbf{c} + \mathbf{a} \cdot \mathbf{d} - \mathbf{c} \cdot \mathbf{d}| \quad (1.22)$$

となる。4つの量子化軸を適当に選ぶと、次の図のような角度をなすと、この値は最大値 $2\sqrt{2}$ を取ることがわかる。

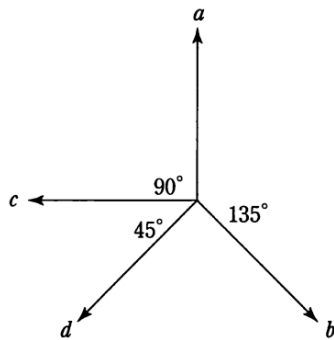


図 1.6: [98] より：ベルの不等式を破る量子化軸の配置例

これは光子の偏向を用いたアスペの実験で実証された。

これは量子力学的な相関が非局所的であると呼ばれることでもある。

純粋状態ではない古典的な相関の例として、密度行列 ρ を次のようにおいてみる。

$$\rho = \frac{1}{2} (|+\rangle|-\rangle\langle+|\langle-| + |-\rangle|+\rangle\langle-|\langle+|)$$

純粋状態であれば

$$\text{Tr}[\rho^2] = 1$$

を満たす。平均値はこの密度行列を用いて

$$\begin{aligned} \langle ab \rangle &= \text{Tr}[\rho ab] \\ &= \text{Tr}\left[\frac{1}{2} (|+\rangle|-\rangle\langle+|\langle-| + |-\rangle|+\rangle\langle-|\langle+|) ab\right] \\ &= -a_z b_z \end{aligned}$$

1.3 確率解釈

ある量 A を測定し、ある結果 a を得たとし $|a\rangle$ で表す。

次に特定されていないある量 B を測定し、これを $M(B)$ で表す。この時に左から右の順で記述することに注意する。

つまり、この観測の流れは

$$\langle a| M(B)$$

と、表す。この連続した操作の後、ある確率である数値を得るために最後に右に $|a\rangle$ かけて閉じる。

この閉じる操作がないと値が決まらない。よって観測の一連の動作が

$$p(a, M(B)) = \langle a| M(B) |a\rangle$$

という操作がブラケットで表される。

よくみると両側がベクトルであるので例えば $M(B)$ は次のような演算子でなくてはならない。

$$M(B) = |a\rangle \langle b|$$

また $b_1 \neq b_2$ として連続測定を考えると次のように書ける。

$$\begin{aligned}
M(B) &= |b_1\rangle\langle b_1| + |b_2\rangle\langle b_2| \\
p(a, b_1 \text{ or } b_2) &= \langle a| \{ |b_1\rangle\langle b_1| + |b_2\rangle\langle b_2| \} |a\rangle
\end{aligned}$$

さらに複数の連続測定を考えると物体が連続していくためには

$$M(B) = \sum_i |b_i\rangle\langle b_i| = I \quad (1.23)$$

とする必要があり、これを完全性という。一方でこれは確率の条件である。この確率の条件が物理の物体の連続性とマッチしたわけだ。この条件で $\langle | \rangle \langle | \rangle$ のように 2 回かかることに注意する。

$$\begin{aligned}
p(a, 1) &= \langle a| \sum_i |b_i\rangle\langle b_i| |a\rangle \\
&= \sum_i p(a, b_i) = 1
\end{aligned}$$

この時、式 1.23 が成り立つことが重要である。この時の全ての i は端点を決められた古典軌道では気にしなくてもいいかもしれないが、量子的な過程でははじめから明らかなわけではないので足し合わせる必要がある。また確率解釈 p を得るためにブラケットが 2 組出てくるので

$$p(a, b) = |\langle a|b\rangle|^2 \quad (1.24)$$

であることになる。これが波動関数を確率振幅 (確率密度) として定義する根拠になる。ただし、通常確率は数を扱うが、量子論の確率密度は複素行列を扱う。これは次のように物理的な観測過程から導かれた。複素数の体系で考えれば負の確率を許すことになる。従って複素共役をとる操作が必要になり

$$p = |\psi\psi^*|^2$$

のようにかけるべきであろう。さらにもう一つ問題がある。確率的には $\langle a|b\rangle$ と $\langle b|a\rangle$ は同じに振る舞うが物理的な観測過程では相違がある。これらの問題を解決する規則を決めることを考えよう。確率解釈だけではない内容があるので次のように物理的な B の測定を分類させて考えてみよう。

1. 測定器 B は使用するが b の選択を区別する場合

$$\begin{aligned}
M(B) &= |b\rangle\langle b| + |b'\rangle\langle b'| \neq 1 \\
p(a, b, b') &= \langle a|b\rangle\langle b|a\rangle + \langle a|b'\rangle\langle b'|a\rangle \\
&= p(a, b) + p(a, b') \neq 1
\end{aligned}$$

で表される。これは混合過程であり、各確率の和になる。

2. B の測定として全ての b を区別なく選択する場合

$$M(B) = \sum_i |b_i\rangle\langle b_i| = I$$

$$\begin{aligned}
p(a, 1) &= \langle a | \sum_j |b_j\rangle \langle b_j| a \rangle \\
&= \sum_j p(a, b_j) = 1
\end{aligned}
\tag{1.25}$$

これは純粋過程であり、量子論は全ての可能性を区別していないことを意味する。

和の確率になり全体で1が保たれる。

もちろん選択、非選択は人間の意思ではない。

ミクロ、マクロの関係や、境界条件などが絡み簡単ではないが、明らかにすべき課題である。

この関係は測定を増やしていても同様に成り立つ。非選択的な測定は次の和は共に1なので

$$p(a, b', c) = \sum_b p(ab) \sum_c p(bc) = 1 \times 1 = 1$$

となるが一般には

$$p(a, b', c) \neq p(a, 1, c) \tag{1.26}$$

である。この例を次節で見る。

もう一つおさえないといけない内容が

$$\langle a|b\rangle \neq \langle b|a\rangle$$

であり、

$$p(a, b) = |\langle a|b\rangle|^2 = |\langle b|a\rangle|^2$$

が成り立つ必要があるということである。つまり、

ブラケット表示には数学的な内積以上の情報をもっていて、物理的な時間経過が左→右にあり、例えば粒子の生成と消滅に対応しているの、簡単に逆にできない。

これを説明するために、自然に複素数が導入されることになる。つまり

$$\langle a|b\rangle = \langle b|a\rangle^*$$

であり、ブラケットの順序変換は複素共役を取るようになる。

さらに成分が行列になると内積の結果はスカラーになるとは限らない。

これを解決するために転置複素共役が対応する。行と列が正方であるとは限らないので、注意する。

$$\begin{aligned}
|a\rangle^\dagger &= \langle a| \\
\langle b|^\dagger &= |b\rangle
\end{aligned}$$

従って観測量は実数であるが、物理の舞台は複素数が少なくとも必要になる。

1.3.1 測定両立可能性

量子論では第2部で見たようにAとBの2つの方向を同時に決められない原則がある。

つまり、両立できるとはAとBの観測を同時に正確に測定することである。

一般に観測量A,Bが両立できれば

$$[A, B] = 0$$

両立できなければ

$$[A, B] \neq 0$$

が成り立つ。これは原理的な内容で両立できないときは A と B の測定に関して、A の測定の精度を上げれば必ず B の測定の精度は下げないといけないということである。

状態ベクトルは物理的な観測が可能である場合には実数の固有値を持つ。しかし、A と B のベクトルが同じ固有値を持つこともある。このとき 2 つの固有値は縮退しているという。このへんの数学的な割り切りと物理的な中身との関係は留意しておかないといけない。次のように固有ベクトルが異なっても同じ固有値を持つことがある。

$$A|a\rangle = a|a\rangle$$

$$B|a'\rangle = a'|a'\rangle$$

この時、 $a = a'$ となると固有ベクトルが直交性を保てなくなる。つまり、固有ベクトルの次元が A の異なる固有値の数より大きい場合にはケットベクトル $|a\rangle$ の張る空間が物理的な観測と合わないものになってしまう。

これを救うには何か別の交換子 B を持ってこないといけない。そこで次の定理を使う。

定義. 両立観測量 : A と B が両立できる観測量であり、A の固有値が縮退をしていないとする。このときの B の行列要素

$$\langle a'|B|a\rangle$$

は全て対角型である。

Proof. 両立できる観測量はその作用素 A, B が交換したので

$$\langle a'|[A, B]|a\rangle = \langle a'|AB - BA|a\rangle = (a' - a)\langle a'|B|a\rangle = 0$$

となる。よって

$$a' = a$$

□

つまり、観測が両立する場合は演算子が交換する。AB と BA の操作は同じ所に戻ることを意味し、ABA は閉じたループになる。

これが式 1.3 の関係を自然に導き、

これは第 6 部でみたように $[X, Y]$ の交換積が図のように曲面上に水平持ち上げられた結果、基本ベクトル場が作れたことの逆に

$$A^\# = 0$$

を満たすように観測過程があることになる。

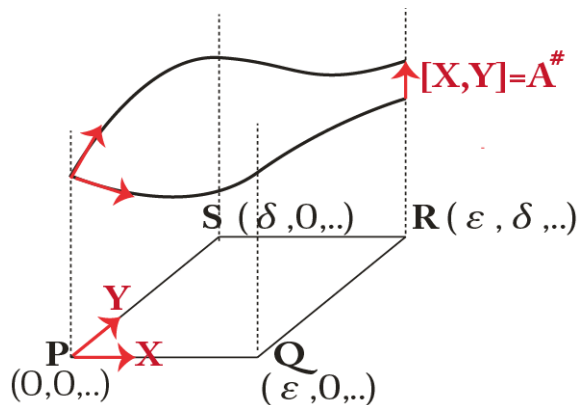


図 1.7: 交換積のイメージ

これによって $[A, B] = 0$ が成り立てば

$$\langle a' | A | a \rangle = \delta_{aa'} \langle a | A | a \rangle$$

$$\langle a' | B | a \rangle = \delta_{aa'} \langle a | B | a \rangle$$

であり、同じ対角成分を持つ。加えて、非対角成分が 0 になる。これは数学的に行列を見ると、かなり厳しい条件になる。

物理的には対角成分に特別の意味があり、物理測定を時間平面で連結していくように示唆を与える。

簡単に見える物体の観測は極めて、希な条件の中で成立していくことになる。同時に物理学者は深みにはまるだろう。

1.3.2 同時固有ケットベクトル [88]

前節の議論から物理的に両立できる状態ベクトル $|a\rangle, |b\rangle$ が

$$\begin{aligned} B |a\rangle &= \delta_{a'a''} \sum_{a''} |a''\rangle \langle a'' | B | a' \rangle \langle a' | a \rangle \\ &= \langle a' | B | a' \rangle |a\rangle \\ &= b |a\rangle \end{aligned}$$

となるのでこれは固有値

$$b = \langle a' | B | a' \rangle$$

を持つ B の固有方程式である。従って、ケットベクトル $|a\rangle$ が A, B の同時固有ケットになっている。これを次のようにまとめて表す。

$$|a, b\rangle$$

固有方程式は

$$A |a, b\rangle = a |a, b\rangle$$

$$B |a, b\rangle = b |a, b\rangle$$

のように表す。

例として、次章のシュテルン・ゲルラッハの実験の準備もかねて、角運動量を考える。

第 2 部でみたように軌道角運動量の 2 乗 L^2 と軌道角運動量の z 成分 L_z について

$$L^2 |a\rangle = l(l+1) |a\rangle$$

$$L_z |b\rangle = m |b\rangle$$

(1.27)

$$L_z |b\rangle = m |b\rangle$$

とかけた。ただし、 m は $2l+1$ 通りあり、 $l = 1, 2, \dots$ に対して

$$m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$$

と決まった。角運動量は後節でも見るように

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} \sigma_k$$

の関係があったので3次元回転の任意の2つの軸回転は交換しない。
しかし、演算子の2乗とは交換した、よって式 1.27 は次のように表現できる。

$$|K\rangle = |a, b\rangle \quad (1.28)$$

この考えはさらに

$$[A, B] = [B, C] = [C, D] = \dots = 0$$

のように一般化すると

$$|K\rangle = |a, b, c, d, \dots\rangle$$

となる。同時測定の条件

$$\langle K|K'\rangle = \delta_{aa'}\delta_{bb'}\dots$$

$$\sum_K |K\rangle \langle K| = \sum_{abc\dots} |a, b, c, \dots\rangle \langle a, b, c, \dots| = 1$$

が成り立つ。

固有値に縮退がないならば、これは A の測定が B の測定に影響を与えない。言い換えると、情報量の変化がなく、可逆である。では縮退がある場合はどうか、これは式 1.28 の線形結合を考えることになる。例えば b のみに縮退があり、その縮退度が n であれば、

$$\sum_i^n c_a^{(i)} |a, b^{(i)}\rangle$$

として、 $|a, b^{(i)}\rangle$ は演算子 A に対しては同じ固有値 a を持ち、 B の測定に関してはある $b^{(i)}$ を選ぶ。

しかし、 A, B が交換していれば、次に A の測定をすれば B の測定に関係なく a が観測される。

これが、両立の意味である。

角運動量でいえば、 x 軸周りと y 軸まわりの角運動量は両立できないが、 x 軸周りと角運動量のエネルギーは両立する。

1.3.3 射影

射影演算子を $P_{a'}$ とし、

$$P_{a'} \equiv |a'\rangle \langle a'| \quad (1.29)$$

で定義する。これは、任意の状態ベクトル $|\alpha\rangle$ にかけると

$$P_{a'} |\alpha\rangle = |a'\rangle \langle a'|\alpha\rangle$$

となり、これは内積 $\langle a'|\alpha\rangle$ が2つのベクトルのなす角を θ として $\cos\theta$ をかけることを表す。

確率解釈ではある測定 A の期待値が

$$\langle \alpha | A | \alpha \rangle$$

で与えられるが、これはクロージャーを用いて

$$\langle \alpha | A | \alpha \rangle = \sum_{aa'} \langle \alpha | a' \rangle \langle a' | A | a \rangle \langle a | \alpha \rangle$$

となり、これは連続した射影であることを表す。そこでさらに次の固有方程式が成り立てば

$$A |a\rangle = a |a\rangle$$

測定 A で測定値 a を得る場合に

$$\begin{aligned}
\langle \alpha | A | \alpha \rangle &= \sum_{aa'} a \langle \alpha | a' \rangle \langle a' | a \rangle \langle a | \alpha \rangle \\
&= \sum_a a \langle \alpha | a' \rangle \delta_{aa'} \langle a | \alpha \rangle \\
&= \sum_a a |\langle \alpha | a \rangle|^2
\end{aligned}$$

が自然に導ける。完全性とクロージャーは1対であり、これが波動関数の定常波をつくる条件になっている。留意点はこれは期待値であり、平均的測定値と対応していることである。

この関係から正方行列 $\langle a' | A | a \rangle$ は対角型、つまり $\delta_{aa'}$ であれば式 1.29 から次のように射影演算子で表現できる。

$$\begin{aligned}
A &= \sum_{aa'} |a'\rangle \langle a' | A | a \rangle \langle a | \\
&= \sum_a a |a\rangle \langle a| = \sum_a a P_a
\end{aligned} \tag{1.30}$$

1.4 スピン演算子

シュテルン・ゲルラッハの実験を準備するために前節の角運動量からさらに第2部で学んだスピンの復習をしておこう。

スピンは以下に見るように交換しない方向があるので、前節の議論から同時観測ができない方向については量子的な干渉がおきる。よってスピンはこの実験だけではなく、量子論的な仮想実験から、現在の量子コンピューターまで、もっとも多く利用される。

ここでは次の内容を考え、簡単のため2次元で考える。

はじめにスピンは上向き、下向きしかないので上向きスピン $|+\rangle$ と下向きスピン $|-\rangle$ をケットベクトルを $(2,1)$ 型として、ブラベクトルは $(1,2)$ 型になるから

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \psi_+ \tag{1.31}$$

$$|-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \psi_-$$

$$\langle + | = (1, 0) = \psi_+^\dagger \tag{1.32}$$

$$\langle - | = (0, 1) = \psi_-^\dagger$$

で表す。

次にスピン演算子を

$$S_x = \frac{1}{2} \{ |+\rangle \langle - | + |-\rangle \langle + | \} = \frac{1}{2} \left(\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} (0, 1) + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} (1, 0) \right) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$S_y = \frac{i}{2} \{ - |+\rangle \langle - | + |-\rangle \langle + | \} = \frac{i}{2} \left(\begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix} (0, 1) + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} (1, 0) \right) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$S_z = \frac{1}{2} \{ |+\rangle \langle +| - |-\rangle \langle -| \} = \frac{1}{2} \left(\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

よくみればこれはパウリ行列であらわすことができる。

Pauli 行列 σ を用いて、以後 $x = 1, y = 2, z = 3$ のように添え字は使うとすると

$$\sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$S_k = \frac{1}{2} \sigma_k \quad (1.33)$$

パウリ行列の交換関係は

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} \sigma_k \quad (1.34)$$

から

$$\sigma_x \sigma_y = i \sigma_z$$

が成り立ち、反交換関係

$$\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij} I$$

$$\sigma_x \sigma_y + \sigma_y \sigma_x = 0$$

が成り立ち、これらから

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} I + i \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} \sigma_k$$

$$2\sigma_i \sigma_j = \{\sigma_i, \sigma_j\} + [\sigma_i, \sigma_j], \quad i, j = 1, 2, 3$$

が成り立つ。

とすると、 z 方向に対しては

$$S_z |+\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} |+\rangle$$

$$S_z |-\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{1}{2} |-\rangle$$

となり、固有値 $\pm 1/2$ を得る。しかし、 x 方向は

$$S_x |+\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} |-\rangle \quad (1.35)$$

$$S_x |-\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} |+\rangle \quad (1.36)$$

となり、基底が変換される。 y 方向は

$$S_y |+\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{i}{2} |-\rangle$$

$$S_y |-\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{-i}{2} |+\rangle$$

となり、固有値は実数ではない。

スピン演算子には次の昇降演算子を定義すると便利である。

$$S_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, S_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.37)$$

この演算子は

$$\begin{aligned} S_+ |+\rangle &= 0 \\ S_- |+\rangle &= |-\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} S_+ |-\rangle &= |+\rangle \\ S_- |-\rangle &= 0 \end{aligned}$$

のように状態を上げ下げし、2つしかないの面白みはないが、+を上げたり、-を下げたりすると0になる。多次元の場合はここではふれませんが、例えば3次元では次のようになる。

$$S_+ = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$S_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}$$

これを用いるとスピン演算子

$$\begin{aligned} S_x &= \frac{1}{2} (S_+ + S_-) \\ S_y &= \frac{1}{2i} (S_+ - S_-) \end{aligned}$$

をつくることができる。しかし、どんなに頑張っても線形和で S_z をつくることができない。そこで次の演算子も定義しておく。

$$\hat{S}_+ = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \hat{S}_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

この演算子は+に+、-に-が作用しても何もしない、恒等演算子のように振る舞い、+に-、-に+が作用すると0になる。

$$\begin{aligned} \hat{S}_+ |+\rangle &= |+\rangle \\ \hat{S}_- |+\rangle &= 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{S}_+ |-\rangle &= 0 \\ \hat{S}_- |-\rangle &= |-\rangle \end{aligned}$$

同様に3次元では次のようになる。

$$\hat{S}_+ = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}$$

これによって

$$S_z = \frac{1}{2} (\hat{S}_+ - \hat{S}_-)$$

のように S_z を表すことができる。

これは S_z が $|+\rangle, |-\rangle$ の固有方程式を作ったので

$$S_{\pm} = S_x \pm S_y$$

$$S_z = \frac{1}{i} [S_x, S_y]$$

の関係にあり、

この演算子を用いて z 軸回りの ϕ の回転を考えると回転後の状態には添え字 R をつけることにして、

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle_R &= D_z(\phi) |\alpha\rangle \\ D_z(\phi) &= \exp(-iS_z\phi) \end{aligned}$$

となる。この回転を具体的に見ると

$${}_R \langle \alpha | S_x | \alpha \rangle_R = \langle \alpha | D_z^\dagger(\phi) S_x D_z(\phi) | \alpha \rangle$$

となるので \pm の状態に戻して計算すると

$$\begin{aligned} S_z &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ \exp(iS_z\phi) S_x &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} e^{i\phi/2} & 0 \\ 0 & -e^{i\phi/2} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (1.38)$$

となるから

$$\begin{aligned} \exp(iS_z\phi) S_x \exp(-iS_z\phi) &= \frac{1}{2} \exp(iS_z\phi) \{|+\rangle \langle -| + |-\rangle \langle +|\} \exp(-iS_z\phi) \\ &= \frac{1}{2} \left(e^{i\phi/2} |+\rangle \langle -| e^{i\phi/2} + e^{-i\phi/2} |-\rangle \langle +| e^{-i\phi/2} \right) \\ &= \frac{1}{2} [\{|+\rangle \langle -| + |-\rangle \langle +|\}] \cos \phi \\ &\quad + i [\{|+\rangle \langle -| - |-\rangle \langle +|\}] \sin \phi \\ &= S_x \cos \phi - S_y \sin \phi \end{aligned}$$

が得られ y 軸回転が出現する。

このスピン演算子と関わりの深い量子観測問題の教科書的なものが次で紹介するシュテルン・ゲルラッハの実験である。

1.5 シュテルン・ゲルラッハの実験

量子測定を実際に実験した例として有名なものがシュテルン・ゲルラッハの実験である。1922年にフランクフルトで最初の実験がおこなわれた。古い実験であるが、量子論の観測の問題を考える良い例題である。量子論の導入としてよく用いられている。ここでやや古いが教育的な価値が高く、物理的な洞察に優れた **Julian Schwinger** が [26] で扱ったものを中心に紹介する。

また、文献 [88] の櫻井氏の著書には、この実験と光の偏光実験の対比があり面白い。

実験は銀原子を加熱して、スリットを通し、ビーム状にして磁場に入れる。加熱が十分であれば原子のスピンはバラバラの状態に偏った向きを持たない。銀原子は47個の電子をもつが、このうち46個が球対称な電子雲を持ち、47番目の電子のみが5s軌道にあって、この電子の磁気モーメント \mathbf{S} が原子の磁気モーメント μ とみなせる。

$$\mu \propto \mathbf{S}$$

この式の比例定数は約0.2%の精度で電子の質量を m_e として

$$\frac{e}{m_e c}$$

である。

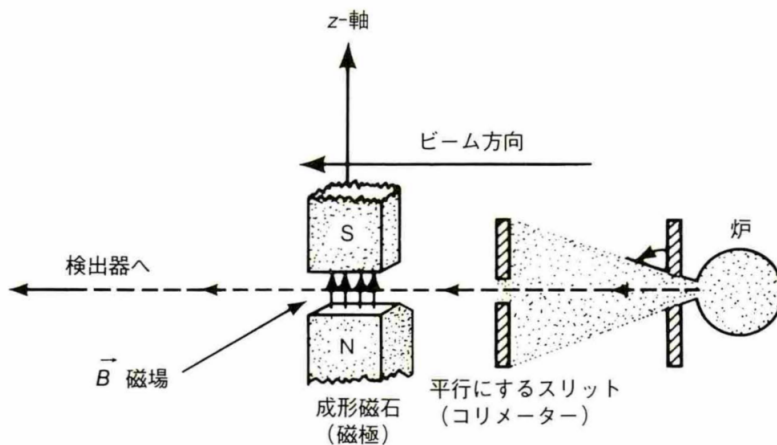


図 1.8: [88] より:シュテルン・ゲルラッハの実験

簡単のため磁場は z 方向のみ考える。

原子の磁気モーメントを μ としてポテンシャルエネルギーが $-\mu \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}) = -\mathbf{mSB} = -\mathbf{m}\Phi$ だから

$$\mathbf{F} = -\nabla(-\mu \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r})) = \nabla\mu \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r})$$

から

$$F_z = \mu_z \left(\frac{\partial}{\partial z} B_z \right)$$

とする。

下図のようにスリットにより、 x 方向に一様なビームをつくり、 $-z$ 方向に磁場をかける。

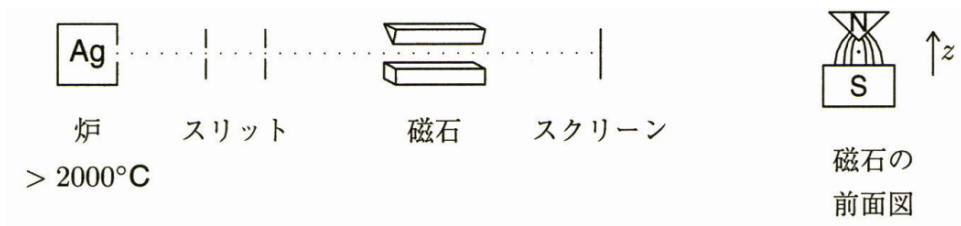


図 1.9: [26] より：シュテルン・ゲルラッハの実験

この実験では磁気モーメント μ の z 成分をスクリーン上の強度分布で測定する。炉の温度が十分であれば、銀原子のスピン方向はバラバラになっているので、下向きの磁場をかけられたとしても観測結果の磁気モーメント μ は $-\mu$ から $+\mu$ に一様に分し、スクリーンの強度分布は次のようになるはずである。



図 1.10: [26] より：古典的な分布

しかし、結果は次のように 2 つに分かれた。これを説明するのに、量子論が必要になるわけである。



図 1.11: [26] より：量子的な分布

これは炉から出た原子がこれから通過するであろう z 方向の磁場の存在を予想し、 z 軸に対して上向きと下向きのスピに分かれていることになる。しかし、炉の温度を十分高温にしても結果が変わらない。まるで、2 スリットを通過する波のような現象が銀原子に起きているのだろうか。

この現象を **Julian Schwinger** が [26] で次のように独自の観測記号 $||$ を用いて説明している。また、桜井氏は [88] で $SG\hat{z}$ という記号を用いて測定装置を表して説明している。どちらもこの現象の説明のためにまず複数の観測過程を考えている。この逐次測定が鍵になる。さらに、この時、後で紹介するように我々の観測にかからない。局所的な位相が必要になる。

1.5.1 桜井氏の逐次測定実験 [88]

はじめに明快な桜井氏の考察を紹介する。

シュテルン・ゲルラッハの実験において原子ビームを通過させていく装置を SG 装置として磁場の向きを添え字でつける。

たとえば z 方向に磁場があれば $SG\hat{z}$ とする。磁場の強さは不均一とする。

図の上部の実験でははじめに $-z$ 方向をとめて、 $+z$ ビームにして 2 回目の $SG\hat{z}$ 装置に入れる。

結果は明らかに $+z$ 方向の成分のみの強度が観測される。
 実験の過程ではこの装置と一側のビームをカットする装置をセットで考える。
 このセットは量子観測の基本になるので、これを選択的射影とここで呼ぶことにする。

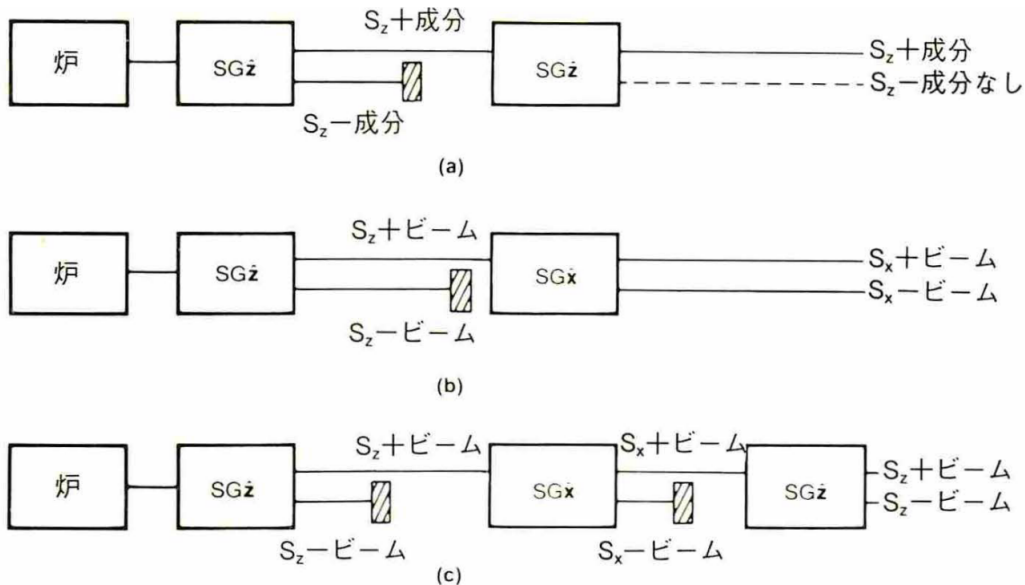


図 1.12: [88] より:シュテルン・ゲルラッハの逐次選択実験

2 番目では同じように $+z$ ビームにして 2 回目には $SG\hat{x}$ に入れる。この装置には x 方向の不均一磁場がかけ
 ている。

すると、同じ強度で $+x, -x$ の成分が観測できるのである。

3 番目はさらに興味ある結果になる。2 番目の装置で $-x$ ビームをカットし、 $+x$ ビームをつくり、3 番目の
 $SG\hat{z}$ に入れる。

すると最初でカットされたはずの $-z$ の強度が現れ、 $+z, -z$ が同じ強度で観測される。

これは SG 装置が単純にフィルターのような役割をしているわけではない。

つまり、2 回目の $SG\hat{x}$ を間に入れると 3 回目は 1 回目の操作を全く記憶していないで z 方向に対しては振
 り出しに戻る。

桜井氏の記法を用いて行列で表現してみよう。

S_x+ のビームが $SG\hat{z}$ の装置を通ると、 $S_z\pm$ に同じ強度で分かれることを表現する。

確率密度では $1/\sqrt{2}$ になるので

$$|\langle S_z : + | S_x : + \rangle| = |\langle S_z : - | S_x : + \rangle| = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

となる。

しかし、ブラケットが絶対値の中にはいっているの、射影の際に適当な位相

$$e^{i\delta}$$

を入れても複素共役を取るときに消える。

従って、次のように状態ベクトルを書き換えても結果に関与しないことがわかる。

$$|S_x : + \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\delta_1} |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ e^{i\delta_1} \end{pmatrix} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\delta_1} \end{pmatrix}$$

ここでは位相部分を $|-\rangle$ にかけてたが、 $|+\rangle$ 側にかけてもよい。

しかし、どちらかに決めないといけない。

観測ではどの方向にしろ今の仮定では +, - の 2 つしかないので、 $|S_x : -\rangle$ を上の状態ベクトルと直交させて

$$|S_x : -\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\delta_1} |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ e^{i\delta_1} \end{pmatrix} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{i\delta_1} \end{pmatrix}$$

と選ぶ。これによって規格直交条件

$$\begin{aligned} \langle S_x : + | S_x : - \rangle &= \langle S_x : - | S_x : + \rangle = 0 \\ \langle S_x : + | S_x : + \rangle &= \langle S_x : + | S_x : + \rangle = 1 \end{aligned}$$

が確認できる。

これから測定演算子をつくと固有値は明らかに ± 1 だから、式 1.30 に従い、射影演算子の和になり、

$$\begin{aligned} S_x : + &= \frac{1}{2} (|S_x : +\rangle \langle S_x : +| - |S_x : -\rangle \langle S_x : -|) \\ &= \frac{1}{2} \left(\begin{pmatrix} 1 & e^{-i\delta_1} \\ e^{i\delta_1} & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & -e^{-i\delta_1} \\ -e^{i\delta_1} & 1 \end{pmatrix} \right) \\ &= \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\delta_1} \\ e^{-i\delta_1} & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{1.39}$$

となる。この時、 δ_1 はどう選んでもよい。

同様に S_y の演算子もつくることができ、方向を選ぶのは任意だから、先と全く同様にして

$$\begin{aligned} |S_y : +\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\delta_2} |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ e^{i\delta_2} \end{pmatrix} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\delta_2} \end{pmatrix} \\ |S_y : -\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\delta_2} |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ e^{i\delta_2} \end{pmatrix} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{i\delta_2} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

と置いてみる。ただし、局所位相は x 方向と異なるとし δ_2 とした。この場合も固有値は明らかに ± 1 だから

$$S_y = \frac{1}{2} (|S_y : +\rangle \langle S_y : +| - |S_y : -\rangle \langle S_y : -|)$$

ここでこの、局所位相 δ が空間的に z 軸周りの xy 平面の回転と関係するという仮定をしよう。

つまり、どう選ぶかは自由ではない。

これにより y 方向を

$$\delta_1 \rightarrow \delta_1 + \frac{\pi}{2}$$

とすると、この位相変化は複素平面では

$$e^{i\frac{\pi}{2}} = i$$

に相当する。従って、

$$\begin{aligned} S_y &= \frac{1}{2} (|S_y : +\rangle \langle S_y : +| - |S_y : -\rangle \langle S_y : -|) \\ &= \frac{1}{2} \left(\begin{pmatrix} 1 & -ie^{-i\delta_1} \\ ie^{i\delta_1} & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & ie^{-i\delta_1} \\ -ie^{i\delta_1} & 1 \end{pmatrix} \right) \\ &= \begin{pmatrix} 0 & -ie^{-i\delta_1} \\ ie^{i\delta_1} & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{1.40}$$

を得る。もちろんこれは前節の式 1.33 からパウリ行列が次で与えられたことから

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

一斉に共通して $\delta_1 \rightarrow 0$ を選べば

$$S_x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \sigma_x \quad (1.41)$$

$$S_y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \sigma_z \quad (1.42)$$

と表現できる。パウリ行列を知らなくても、この結果が導けたわけである。

1.5.2 選択的射影 [88]

この結果を桜井氏はシューウィングアの考察を踏まえて、測定装置の回転を量子論の角運動量で説明している。

つまり、量子論では第 2 部で見たように S_x と S_z の 2 つの方向を同時に決められない原則がある。角運動量 S に対して次の交換関係が成り立った。

$$[S_i, S_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} S_k$$

次に選択的測定を表現することを考える。

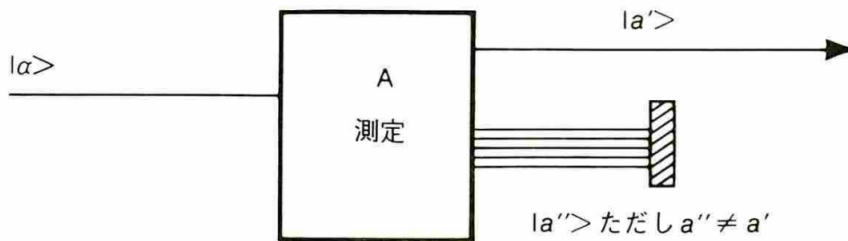


図 1.13: [88] より:選択的測定

これを 1 つの射影と考えて、**選択的射影**とも呼ぶ。

桜井氏は次のように説明している。もし、同時固有ケットが存在するならば、固有値は交換するので

$$AB|a, b\rangle = ab|a, b\rangle$$

$$BA|a, b\rangle = ab|a, b\rangle$$

となるから

$$[A, B] = 0$$

となる必要がある。しかし、例外が 1 つあり、式 1.27 において $l = 0$ の場合である。

これは電子配置が s 軌道をとる場合で、この時、 L_x, L_y は交換しないが、同時固有状態をつくる。

つまり、固有値 0 の演算子を共に持つ。この場合、部分空間の次元が 1 になっていることに留意する。

次のような選択的測定を考えよう。

A ではある特定の $|a'\rangle$ を選び、他の測定を排除し、B では $|b'\rangle$ を選び、他を排除し、さらに C では $|c'\rangle$ を選び他を排除する。

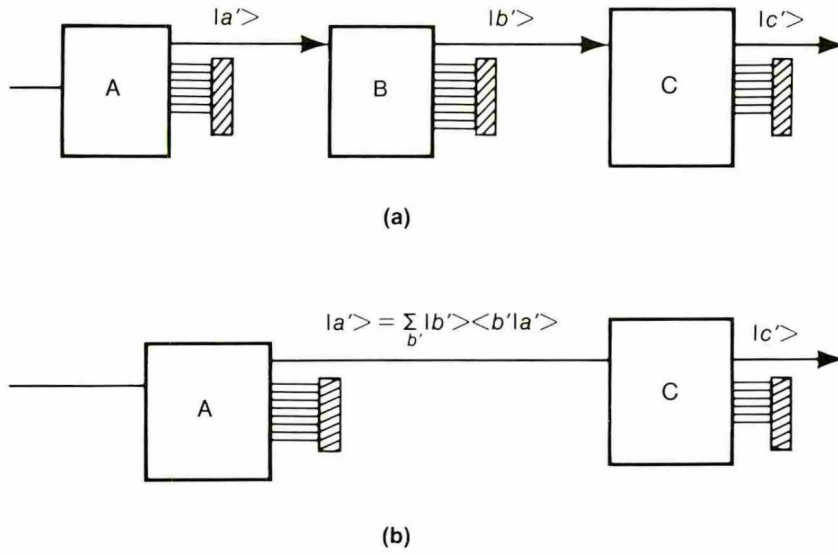


図 1.14: [88] より:逐次選択実験

第一の A の測定を通った後の原子ビームを 1 に規格化しておく。

この時に $|c'\rangle$ を得る確率は式 1.25 から

$$p(a', b')p(b', c') = |\langle c'|b'\rangle|^2 |\langle b'|a'\rangle|^2$$

となる。ここで、1 番目の b' のみを通して c' に達する確率を記録し、次に第 2 の b' のみ許して、同じ手順を繰り返すと、

図 (a) の場合は

$$\sum_{b'} |\langle c'|b'\rangle|^2 |\langle b'|a'\rangle|^2 = \sum_{b'} \langle c'|b'\rangle \langle b'|a'\rangle \langle a'|b'\rangle \langle b'|c'\rangle \quad (1.43)$$

となる。

次に図 (b) の場合は B は何もしない。シューウィンガー的に表せば

$$\begin{aligned} p(a', 1, c') &= |\langle c'|a'\rangle|^2 = \left| \sum_{b'} \langle c'|b'\rangle \langle b'|a'\rangle \right|^2 \\ &= \sum_{b'b''} \langle c'|b'\rangle \langle b'|a'\rangle \langle a'|b''\rangle \langle b''|c'\rangle \end{aligned} \quad (1.44)$$

この時、どちらも第一の A の測定では原子ビームが

$$|a'\rangle = \sum_{b'} |b'\rangle \langle b'|a'\rangle$$

であり、これは B の固有ケットである。式 1.43 と式 1.44 が異なることが重要である。

これは測定 B が入ると入力 A は同じでも出力 C が異なることになる。

これが式 1.77 の具体例である。式 1.43 と式 1.44 が等しくなるためには縮退がない場合は

$$[A, B] = 0 \text{ or } [B, C] = 0$$

である。

1.5.3 不確定性関係 [88]

これらの観測は1粒子ではなく、非常に多くの粒子を対象にしている。そこで観測量には次の分散が定義できる。

まず、与えられた観測量を A とし、平均値からのずれを偏差として

$$\Delta A \equiv A - \langle A \rangle$$

として、分散は次の偏差の2乗の期待値として定義できて

$$\begin{aligned} \langle (\Delta A)^2 \rangle &= \langle A^2 - 2A \langle A \rangle + \langle A \rangle^2 \rangle \\ &= \langle A^2 \rangle - 2 \langle A \rangle \langle A \rangle + \langle A \rangle^2 \\ &= \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \end{aligned}$$

とすることができる。つまり、2乗して平均をとったものから平均の2乗を引く。

これを平均2乗偏差という。

統計的な分散と異なり、期待値をとる状態が A の固有状態であれば、明らかに分散は0になる。

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

例えば式 1.41 を用いると

$$\begin{aligned} \langle S_x^2 \rangle - \langle S_x \rangle^2 &= \frac{1}{4} (1,0) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{4} (1,0) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \cdot (1,0) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{4} (1,0) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{4} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle S_x^2 \rangle - \langle S_x \rangle^2 &= \text{Tr} \left[\frac{1}{4} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right] - \frac{1}{4} \text{Tr} \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right] \text{Tr} \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right] \\ &= \text{Tr} \left[\frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right] = \frac{1}{2} \end{aligned}$$

であるが、 S_z は

$$\begin{aligned} \langle S_z^2 \rangle - \langle S_z \rangle^2 &= \frac{1}{4} (1,0) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{4} (1,0) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \cdot (1,0) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{4} (1,0) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{4} = 0 \end{aligned}$$

となる。つまり、分散が

$$\begin{aligned} \langle (\Delta S_z)^2 \rangle &= 0 \\ \langle (\Delta S_x)^2 \rangle &= \frac{1}{4} \end{aligned}$$

となるので S_z+ の状態での S_z 観測は鋭く、 S_x の観測はぼやける。

発展させて不確定性原理を見てみよう。ここでは $\Delta A, \Delta B$ をエルミート演算子として

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle \langle (\Delta B)^2 \rangle \geq |\langle \Delta A \Delta B \rangle|^2 \quad (1.45)$$

であり、

$$\Delta A \Delta B = \frac{1}{2} [\Delta A, \Delta B] + \frac{1}{2} \{\Delta A, \Delta B\}$$

とおけたから、複素数の場合は

$$([A, B])^\dagger = (AB - BA)^\dagger = BA - AB = -[A, B]$$

$$(\{A, B\})^\dagger = (AB + BA)^\dagger = BA + AB = \{A, B\}$$

よって、次の第1項は純虚数、第2項は実数とみなせる。

$$\langle \Delta A \Delta B \rangle = \frac{1}{2} \langle [\Delta A, \Delta B] \rangle + \frac{1}{2} \langle \{\Delta A, \Delta B\} \rangle$$

次に2乗をとるが、複素共役を使うので対角項が消え、次のようになる。

$$|\langle \Delta A \Delta B \rangle|^2 = \frac{1}{4} |\langle [\Delta A, \Delta B] \rangle|^2 + \frac{1}{4} |\langle \{\Delta A, \Delta B\} \rangle|^2$$

これを式 1.45 に入れると、一般に次の不確定性関係が成り立つ。

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle \langle (\Delta B)^2 \rangle \geq \frac{1}{4} |\langle [\Delta A, \Delta B] \rangle|^2$$

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle \langle (\Delta B)^2 \rangle \geq \frac{1}{4} |\langle \{\Delta A, \Delta B\} \rangle|^2$$

さらに

$$\begin{aligned} [\Delta A, \Delta B] &= [A - \langle A \rangle, B - \langle B \rangle] \\ &= [A, B] \end{aligned}$$

であるから

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle \langle (\Delta B)^2 \rangle \geq \frac{1}{4} |\langle [A, B] \rangle|^2$$

が成り立ち、これは一般的な不確定性関係である。

1.5.4 シュウインガーの逐次測定実験 [26]

次に桜井氏も参照している。シュウインガーの考察を紹介する。

やや旧いが文献 [26] には非常に細かく、確率解釈の説明がされている。

はじめに偏りのない1本のビームがあるとして、原子が上に曲がる場合は z_+ 、下に曲がる場合は z_- とする。

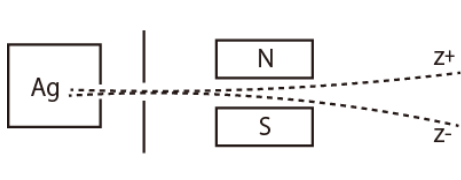


図 1.15: シュテルン・ゲルラッハの実験のビーム

ここでシュウインガーは次のようにビームの選択器を考え、次のような逐次測定を考察した。

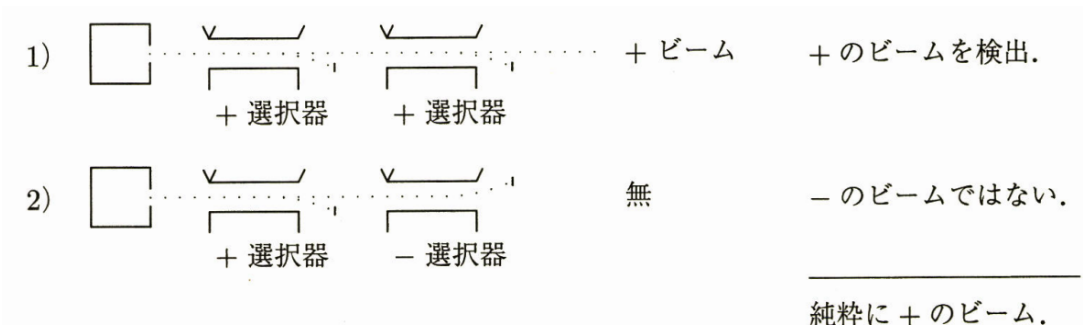


図 1.16: [26] より：選択器

最初の 1) では z_- ビームのカットを繰り返して、 z_+ ビームを検出している。

これは桜井氏の最初の上の図と同じ内容を表す。

次の 2) では z_- と z_+ が交互に連続して働くのでビームが検出されていない。

具体的にビームの向きが変化することをコントロールするのは磁場と原子のスピンとの相互作用の時間が大きい。

うまくいけば次の図のように z_+ が z_- に向きを変える。

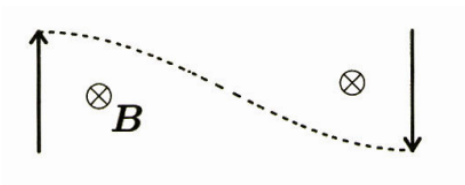


図 1.17: [26] より：スピン、磁場相互作用

このようにシューウィンガーは観測 A と選択 a が連続して時間的に並べられていく作業が測定であり、これを逐次測定とした。そして観測 A によって a が選択される行為は

$$|aa\rangle$$

観測 B によって a が選択される行為は

$$|ba\rangle$$

というように左から右の時間系列で表す。もちろん a, b は次の固有値に相当する。

$$A|a\rangle = a|a\rangle$$

$$B|b\rangle = b|b\rangle$$

測定行為に対して、全てを受け入れる場合を 1, 全てを排除する場合を 0 で表す。

これによって逐次測定は

$$|aa\rangle|aa\rangle = |aa\rangle$$

さらに $a \neq a'$ の場合

$$|aa\rangle|a'a'\rangle = 0$$

になる。従って、観測の過程では

$$|ab\rangle \neq |ba\rangle$$

が自然である。そのために非可換の演算子の導入が必要で、観測記号を X, Y とした時、次で交換子、反交換子を定義しておく。

$$[X, Y] \equiv XY - YX$$

$$\{X, Y\} \equiv XY + YX$$

この演算子から次の恒等式が導ける。

$$XY = \frac{1}{2} (\{X, Y\} + [X, Y])$$

$$YX = \frac{1}{2} (\{X, Y\} - [X, Y]) \quad (1.46)$$

筆者はこの関係は量子論的な観測で本質的な関係式の1つと考える。つまり、どんな演算子も、交換子、反交換子の合成でなければならないということである。これらは共形的に入れ子構造をつくり、量子論と関わりが後に深く、同じ0演算子でも

$$\{XY\} = \pm [X, Y]$$

の場合で異なることを意味する。後に考察するとして、これを演算子の基本関係と呼ぶことにする。

1.5.5 観測効果

観測する、しないが実験結果に影響することが量子論の大きな特徴である。これを数学的に説明したのが確率解釈であった。これを具体的にシュテルン・ゲルラッハの実験で考えよう。図のように z 方向のスピンを 90° 角度をずらした A, B, C で観測する。 z 方向には \pm の2通りがあり、 90° に観測する確率は $1/2$ とする。 $A \rightarrow C$ の間に B を設ける。

この B が選択的な実験をする場合としない場合の確率

$$p(a, b, c), p(a, 1, c)$$

を調べてみる。

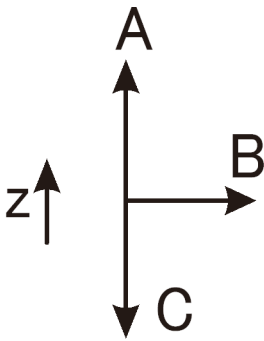


図 1.18: 直交した3方向での磁気モーメントの観測

結果的には選択的な実験ではそれぞれの選択 (b) での確率の和の積としてつながり、非選択的な実験では単に確率の和になる。

$$\sum_c p(a, b, c) = \overbrace{\sum_b p(a, b)}^1 \overbrace{\sum_c p(b, c)}^1 = 1$$

$$\sum_c p(a, 1, c) = \sum_c p(a, c) = 1 \quad (1.47)$$

この関係が量子論によって自然界におきていることが示された。量子論的な効果と呼ばれるのは後者の式のほうで

後に示すように確率密度は波のように干渉を示す。シュテルン・ゲルラッハの実験の図 1.6 も実は干渉がおきているわけである。

もちろん、観測は人間の意思には無関係であるので、シンプルな相互作用しかないマイクロな系であるほど、われわれの狙った量子効果が得やすい。しかし、マクロになってくる意図しない相互作用が複雑に入り込み量子的な干渉が消えていくわけである。筆者は確率論の立場にない、量子論にはさらに重要なしくみがまだ、まだ、あるのである。

ここでは、この確率を使って式 1.47 を詳しくみていこう。

はじめにを**選択的実験**を調べる。

z 方向の + で入射し、b を経由して c に至る確率は次の $p(+, b, +), p(+, b, -)$ の 2 通りしかない。よって各確率は $1/2$ であるとして、b で ± をとる場合はそれぞれ独立しているので

$$p(+, b, +) = p(+, +, b)p(+, b, +) + p(+, -, b)p(+, b, +) = \frac{1}{4} + \frac{1}{4} = \frac{1}{2}$$

$$p(+, b, -) = p(+, +, b)p(+, b, -) + p(+, -, b)p(+, b, -) = \frac{1}{4} + \frac{1}{4} = \frac{1}{2}$$

であり両者を足せば 1 になる。ただし、この時

$$M(B) = \sum_b |b\rangle \langle b| = I$$

の完備関係式を利用していることに注意する。

つまり、B では何もしないで全てを受け入れている式 1.24 の関係になっていることに注意する。

次に第 2 式の**非選択的実験**を調べる。

z 方向で + である場合は -z 方向では負になるわけだからこの確率は逆に

$$p(+, 1, +) = p(+, +) = 0$$

$$p(+, 1, -) = p(+, -) = 1$$

となり、これらの和はやはり 1 になる。つまり全体で見れば

$$p(a, b, c) = p(a, 1, c)$$

である。

しかし、個々で見るとどうなるか、そのためには観測と結果のブラケットの 1 組の積が必要になる。

この時も完備関係式

$$I_b = |+\rangle \langle +| + |-\rangle \langle -| \quad (1.48)$$

を ${}_a \langle +|$ と ${}_c | \pm \rangle$ で挟むことにある。結果は 0 のはずだから式 1.24 から $p(+, 1, +)$ は確率を引き算してから **2** 乗しないとイケない。したがって次のような計算になる。

$$\begin{aligned} p(+, 1, +) &= |{}_a \langle +| \langle +| + \rangle {}_c | + \rangle + {}_a \langle +| \langle -| + \rangle {}_c | - \rangle|^2 \\ &= \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right|^2 = 0 \end{aligned} \quad (1.49)$$

ここに引き算が出てくるのが量子論の持つからくりで単純な確率ではないことがわかる。

この負の確率はきちんと理論的に次節で紹介する。

一方で $p(+_a, 1, -_c)$ は確率を足し算してから 2 乗する。

$$p(+_a, 1, -_c) = |{}_a \langle +|+ \rangle \langle +|- \rangle_c + {}_a \langle +|- \rangle \langle -|- \rangle_c|^2$$

$$\left| \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \right|^2 = 1 \quad (1.50)$$

という中身をもっていることになる。具体的な計算は次節でおこなうが、これはまさに弱めあいと強めあいで波の干渉のようなことが起きているのである。B の測定を行わないならば 2 乗をつくるのが後で和が先になり、

$$p(a, 1, c) = \left| \sum_{b'} \langle a|b' \rangle \langle b'|c \rangle \right|^2 \quad (1.51)$$

となるが、B が非選択的に全て受け入れる場合は 2 乗するのが先で和が後になり

$$p(a, b', c) = \sum_{b'} |\langle a|b' \rangle \langle b'|c \rangle|^2 \quad (1.52)$$

となる。観測が入ることで系を乱している様子を見るために B の観測を M_b で表すと

$$p(a, b', c) = \sum_{b'} |\langle a|b' \rangle \langle b'|c \rangle|^2 = |\langle a|M_b|c \rangle|^2 \quad (1.53)$$

となる。この M を観測演算子としてここでは定義する。

$$M_{b'} \equiv \sum_{b'} |b' \rangle \langle b'| = I \quad (1.54)$$

完備関係を持てばこの和は単位行列になる。

量子論ではこの足し合わせの添え字 b' のイメージを拡大しないといけない。

単純な数値ではなく、多次元的な空間領域と思ったほうがいい。ここでの $\| \|^2$ も複素空間で考え、非選択的測定にも原理的に次の式のように 2 つの異なる b の積と考える。

つまり、 $b' \neq b''$ となる領域も含むのである。

そこで式 1.51 を $b' = b''$ の部分は絶対値をとり、展開すると

$$p(a, 1, c) = \sum_{b'} \langle a|b' \rangle^* \langle b'|c \rangle^* \sum_{b''} \langle a|b'' \rangle \langle b''|c \rangle$$

$$= \sum_{b'} |\langle a|b' \rangle \langle b'|c \rangle|^2 + \sum_{b' \neq b''} \langle a|b' \rangle^* \langle b'|c \rangle^* \langle a|b'' \rangle \langle b''|c \rangle \quad (1.55)$$

と書ける。 $b' \neq b''$ の非対角項が第 2 項として残る。

従って第 2 項がおちれば式 1.52 が得られるわけだ。

これは観測により

$$\sum_{b' \neq b''} \langle a|b' \rangle^* \langle b'|c \rangle^* \langle a|b'' \rangle \langle b''|c \rangle \rightarrow 0 \quad (1.56)$$

が起きていると考えられる。これは観測による干渉項の消滅という。

前章でのベルの不等式を破るのはこの干渉項の存在である。

これは位相反転した波の重ね合わせで定常波ができていていると考えられる。

後章で詳しく考察する。

1.5.6 行列代数

具体的にシュテルン・ゲルラッハの実験を計算をする準備をしよう。これは前部でもみたように行列 P, Q について

$$PQ - QP = I \quad (1.57)$$

という関係を満たす実数も、実数行列も存在しなかったので、複素行列つまり、パウリ行列を準備しないといけない。しかも、この実験では z 方向が特別であるが、量子論ではその過程で前方向の演算子を用意する必要がある。

これは結果としてパウリ行列であり最初の節で見たように

$$\sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

となるはずである。

はじめにシュテルン・ゲルラッハの実験で ± 1 の値をとる z 方向の磁気モーメント $\mu_z/\mu = \sigma_z$ を考える。

しかし、ここではこの結果はわからないとして $+1$ を観測する $(1, 0)$ と -1 を観測する $(0, 1)$ という状態ベクトルから出発する。つまり、これまでの共役の条件から式 1.31 を用いて

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (1.58)$$

$$\langle +| = (1, 0) \quad (1.59)$$

を状態ベクトルとして考える。

観測の効果を考え、磁気モーメント σ_z が ± 1 の固有値を持たないといけない。

よって、

$$(\sigma_z - 1)(\sigma_z + 1) = \sigma_z^2 - 1 = 0$$

が成り立つべきであるから

$$\sigma_z^2 = 1$$

である。前節での観測の記号を用いると式 1.4 から

$$\begin{aligned} |++\rangle &= |+\rangle \langle +| \\ &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} (1, 0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \frac{\sigma_z - (-1)}{1 - (-1)} = \frac{1 + \sigma_z}{2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} |--\rangle &= |-\rangle \langle -| \\ &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} (0, 1) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{\sigma_z - 1}{-1 - 1} = \frac{1 - \sigma_z}{2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} |+-\rangle &= |+\rangle \langle -| \\ &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} (1, 0) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
| - + \rangle &= | - \rangle \langle + | \\
&= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} (0, 1) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{1.60}$$

これも前節でみた生成、消滅演算子の式 1.37 になっている。

これから

$$\begin{aligned}
| + + \rangle \langle + + | + | - - \rangle \langle - - | &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = I
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
| + + \rangle \langle - - | - | - - \rangle \langle + + | &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \sigma_z
\end{aligned}$$

を満たすことがわかる。さらに積についても $\sigma_z^2 = I$ より次の有用な関係が導ける。

$$\begin{aligned}
| + + \rangle \langle + + | &= \left(\frac{1 + \sigma_z}{2} \right)^2 \\
&= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\
&= \frac{1 + \sigma_z}{2} \\
&= | + + \rangle \langle + + |
\end{aligned} \tag{1.61}$$

$$\begin{aligned}
| - - \rangle \langle - - | &= \left(\frac{1 - \sigma_z}{2} \right)^2 \\
&= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\
&= \frac{1 - \sigma_z}{2} \\
&= | - - \rangle \langle - - |
\end{aligned} \tag{1.62}$$

つまり行列の積が連続観測に対応していて、 $++$, $--$ の観測の結果は何度繰り返しても同じである。

ところが次のように+の磁気モーメントを観測し、次に-の磁気モーメントを観測しても結果は0になる。

$$\begin{aligned}
| + + \rangle \langle - - | &= \left(\frac{1 + \sigma_z}{2} \right) \left(\frac{1 - \sigma_z}{2} \right) \\
&= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\
&= 0
\end{aligned} \tag{1.63}$$

次に z 方向以外のパウリ行列を次節で導く。

1.5.7 パウリ行列

次に z 方向の磁気モーメントを 2 回測定する $|\sigma_z \sigma'_z\rangle$ を考えよう。 σ_z はそれぞれ ± 1 をとるので全体の組み合わせは $2^2 = 4$ 通りということになる。これは空間が等質であれば x, y 方向にも同じことが成り立ち

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1 \quad (1.64)$$

となるはずである。これを指針にして、観測の記号で σ_x, σ_y を表すことを考えよう。まず

$$\sigma_x = | - + \rangle \langle + + | + | + - \rangle \langle - + |$$

としてみると、行列表現では

$$\begin{aligned} \sigma_x &= | - + \rangle \langle + + | + | + - \rangle \langle - + | \\ &= | - \rangle \langle + | + | + \rangle \langle - | \\ &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} (1, 0) + \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} (0, 1) \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

となるので

$$[| - + \rangle \langle + + | + | + - \rangle \langle - + |]^2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = 1$$

を満たしている。問題なのは空間が 2 次元ではないことである。

平面であれば σ_x, σ_z で済むが 3 次元の空間を考えると直交したもう一つの基底がいる。

これは実数の体系では不可能で 3 次元を構成するためには式 1.66 の問題のように行列表では複素数を含めないといけない。

そこで σ_y を次のようにおく。

$$\sigma_y = i | + - \rangle \langle - | - i | - + \rangle \langle + |$$

虚数単位が登場したので差にしておかないと、 $\sigma_y^2 = 1$ を満たさない。

これも行列表で書き表すと、

$$\begin{aligned} \sigma_y = i | + \rangle \langle - | - i | - \rangle \langle + | &= i \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} - i \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

となり、結果としてパウリマトリックスが全て揃った。

先の σ_z の場合もまとめると

$$\begin{aligned} | + \rangle \langle + | &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} (1, 0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} (I + \sigma_z) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} |-\rangle\langle -| &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} (0, 1) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2}(I - \sigma_z) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} |-\rangle\langle +| &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \left(\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + i \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \right) \\ &= \frac{1}{2}(\sigma_x + i\sigma_y) \end{aligned} \tag{1.65}$$

$$\begin{aligned} |+\rangle\langle -| &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \left(\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} - i \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \right) \\ &= \frac{1}{2}(\sigma_x - i\sigma_y) \end{aligned} \tag{1.66}$$

となるから

$$\begin{aligned} [|-\rangle\langle +|]^2 &= \frac{1}{4}(\sigma_x + i\sigma_y)^2 \\ &= \frac{1}{4}(1 - 1 + i(\sigma_x\sigma_y + \sigma_y\sigma_x)) \\ &= 0 \end{aligned}$$

となるので次の反交換関係が成り立つことになる。

$$\sigma_x\sigma_y + \sigma_y\sigma_x = 0$$

さらに

$$\frac{1}{4}(\sigma_x + i\sigma_y)(\sigma_x - i\sigma_y) = \frac{1}{4}(1 + 1 - 2i\sigma_x\sigma_y)$$

となるが左辺は式 1.62 から

$$\begin{aligned} |+\rangle\langle -|-\rangle\langle +| &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = |-\rangle\langle -| = \frac{1 - \sigma_z}{2} \\ |-\rangle\langle +|+\rangle\langle -| &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = |+\rangle\langle +| = \frac{1 + \sigma_z}{2} \end{aligned}$$

となるので

$$\frac{1 + \sigma_z}{2} = \frac{1}{4}(1 + 1 - 2i\sigma_x\sigma_y)$$

$$\sigma_x\sigma_y = i\sigma_z \tag{1.67}$$

という関係を得る。

一般化すると結局式 1.34 のパウリ行列の性質が導ける。

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} \sigma_k$$

σ は異なる成分の積が複素空間を張る。またこれは

$$\sigma_x \sigma_y \sigma_z = iI$$

でもある。

単位行列がかかることには注意がいるが本来磁気モーメントの成分であることを思い出すと、これらの積から虚数単位が出てくることは面白い。つまり、この空間は単位行列も含めて次の 4 つで構成されている。 $I = \sigma_0$ として、

$$\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z, \sigma_0$$

さて、これでおあずけにしていた式 1.49, 1.50 の具体的な計算が可能になった。

$$\begin{aligned} \langle +|+ \rangle &= \langle +|\cdots|+ \rangle \\ &= \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} p(+_a, 1, +_c) &= |\langle +|+ \rangle \langle +|- \rangle + \langle +|- \rangle \langle -|- \rangle|^2 \\ &= \left| (1, 0) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} (1, 0) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + (1, 0) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} (0, 1) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right|^2 \end{aligned} \quad (1.68)$$

$$= 0 \quad (1.69)$$

$$\begin{aligned} p(+_a, 1, -_c) &= |\langle +|+ \rangle \langle +|+ \rangle + \langle +|- \rangle \langle -|+ \rangle|^2 \\ &= \left| (1, 0) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} (1, 0) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + (1, 0) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} (0, 1) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right|^2 \end{aligned} \quad (1.70)$$

$$= 1 \quad (1.71)$$

この計算では A と C が 180 度回転しているので

$$+_a = \langle +|$$

$$+_c = \langle -|$$

のように始状態と終状態が反転することに注意して、

$$\begin{aligned} p(+_a, 1, +_c) &= |\langle +|+ \rangle \langle +|- \rangle + \langle +|- \rangle \langle -|- \rangle|^2 \\ &= \left| (1, 0) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} (1, 0) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + (1, 0) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} (0, 1) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right|^2 \end{aligned} \quad (1.72)$$

$$= 0 \quad (1.73)$$

$$\begin{aligned} p(+_a, 1, -_c) &= |\langle +|+ \rangle \langle +|+ \rangle + \langle +|- \rangle \langle -|+ \rangle|^2 \\ &= \left| (1, 0) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} (1, 0) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + (1, 0) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} (0, 1) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right|^2 \end{aligned} \quad (1.74)$$

$$= 1 \quad (1.75)$$

となる。行列計算の結果が、確率計算と一致したわけだ。

1.5.8 角度変化と逐次観測

前節での内容は1方向のみを考えていたが、磁気モーメントの観測を例にあらゆる方向からの観測を考える。

ここでも **Julian Schwinger** が [26] で説明している内容を参照する。

スピンを持った粒子ビームを磁場によって向きを変える。粒子ビームは上向き、下向きのみスピンを持つとする。

ただし、z方向のスピンのみとは限らない。次の図のように3つの向きに粒子ビームを入射し、磁場に入るとどうなるだろうか。はじめに入射するビームのスピンは+にそろえておくとする。

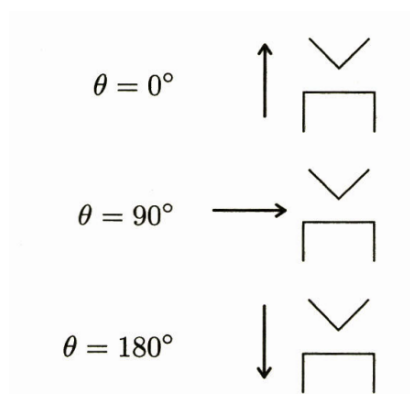


図 1.19: [26] より：磁場にビームの向きを変えて入射する。

一番上の例 $\theta = 0^\circ$ の場合は z_+ のビームが入射し、磁場通過後のビームは全て上に曲げられる。

二番目の例 $\theta = 90^\circ$ の場合は x_+ のビームが入射し、磁場通過後のビームは上下半分に分けられる。

三番目の例 $\theta = 180^\circ$ の場合は z_- のビームが入射し、磁場通過後のビームは上下半分に分けられる。

この結果を統計的に平均をとると1番目は0度で+1、2番目は90度で0、3番目は180度で-1である。

従って、連続的に角度 θ として変化を与えたら平均値は

$$\cos \theta$$

がかかることは明らかだろう。この結果を期待値と考えて、

$$\cos \theta = (+1)p(+,+) + (-1)p(+,-)$$

で表す。ただし、最初を+にそろえると確率 $p(+,)$ は次の上下の2つしかないので

$$1 = p(+,+) + p(+,-)$$

を満たす必要がある。この2つの式を単純に解くと、

$$\begin{aligned} p(+,+) &= \frac{1 + \cos \theta}{2} = \cos^2 \frac{\theta}{2} \\ p(+,-) &= \frac{1 - \cos \theta}{2} = \sin^2 \frac{\theta}{2} \end{aligned} \tag{1.76}$$

となる。

$$\cos^2 \left(\frac{1}{2}(\pi - \theta) \right) = \sin^2 \left(\frac{1}{2}\theta \right)$$

を用いると、半径1の円/4を使って次のような関係がある。

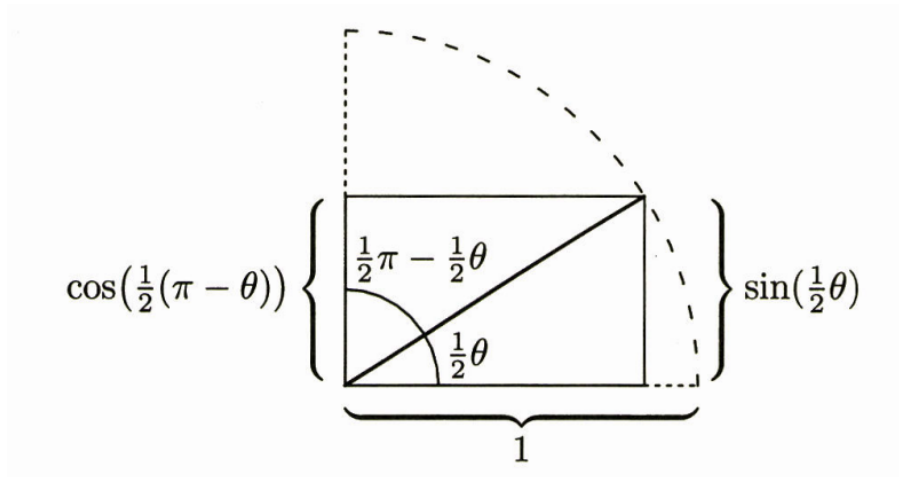


図 1.20: [26] より：確率振幅とビームの回転の幾何関係

つまり、2つの確率が基底ベクトルのように作用している。

この結果は、はじめのビームが $-$ の場合にもすぐに応用できる。この時は $p(-, -)$ の確率があるので

$$p(-, +) = \frac{1 - \cos \theta}{2} = \sin^2 \frac{\theta}{2}$$

$$p(-, -) = \frac{1 + \cos \theta}{2} = \cos^2 \frac{\theta}{2}$$

従って全ての確率を $p(i, j)$ で表すと 2×2 の行列ができて、これを p_{ij} , ($i, j = +, -$) とすると

$$p_{ij} = \begin{pmatrix} \cos^2 \frac{\theta}{2} & \sin^2 \frac{\theta}{2} \\ \sin^2 \frac{\theta}{2} & \cos^2 \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

となる。

1.5.9 局所位相の導入

前節のように観測の過程が、角度依存することからシューウインガーは次のような局所位相を導入して説明した。

$\phi(b')$ を実数として

$$M_b = \sum_{b'} |b'\rangle e^{i\phi(b')} \langle b'| \quad (1.77)$$

とかく。この位相 ϕ があると

$$\langle a|b''\rangle \langle b''|c\rangle \rightarrow \langle a|b''\rangle e^{i\phi(b'')} \langle b''|c\rangle \quad (1.78)$$

$$\langle a|b'\rangle^* \langle b'|c\rangle^* \rightarrow \langle a|b'\rangle^* e^{-i\phi(b')} \langle b'|c\rangle^*$$

となるのでこの位相の項は $b'' = b'$ の場合、式 1.56 のように積をつくると位相部分は複素共役の積になるので次のように変化を与えない。

$$e^{i\phi(b'')} e^{-i\phi(b'')} = 1$$

ところが $b'' \neq b'$ の場合は次のよう位相部分が残る

$$e^{-i\phi(b'')} e^{i\phi(b')} = e^{-i(\phi'' - \phi')}$$

この位相が量子論的な干渉を生成している。そこで実数としていた位相 ϕ が虚数であるとしよう。

すると

$$I = e^{(\phi'' - \phi')}$$

であり

$$\phi'' - \phi' \rightarrow -\infty$$

であれば干渉項が消滅する。しかし、逆に

$$\phi'' - \phi' \rightarrow \infty$$

は抑えられないといけない。この位相が複素数を取り得ることで量子論とつながる。

また、観測がその中で特別な位相を選択していることになる。

この不可逆性が観測には重要である。

量子論において先の位相は任意であるとすれば、確率解釈につながる。

従って観測量も確率的なものになり、古典論とは異なった概念ができる。

例えば先の仮想実験において a 原子の観測で B (大文字は演算子) という物理量が得られたとする。

これは次のようにまさに統計学の期待値と等しい。

この a 原子の観測で得られる物理量 B を期待値は b' を得られる確率を足し合わせ

$$\begin{aligned}\langle B \rangle_a &= \sum_{b'} p(a, b') b' \\ &= \langle a | \left(\sum_{b'} |b'\rangle b' \langle b'| \right) |a\rangle \\ &= \langle a | b' \rangle b' \langle b' | a \rangle\end{aligned}$$

と表すことができる。

2回の $\langle a | b' \rangle \langle b' | a \rangle$ がかかるが統計学と異なるのはここに観測者と被観測者の立場がわかれていることである。

つまり何が測定されたかという被観測者

$$B = \sum_{b'} |b'\rangle b' \langle b'|$$

と、観測者側の状態

$$\langle a |, |a\rangle$$

が組み合わされる。

しかし、式 1.77 のように複素数として位相がからむことが重要である。

観測者側は異なる $\langle a |, |a\rangle$ ではさんで観測値を得ることが有限の時間で被観測者と相互作用していることになる。

はさまれていないなら開いた状態であるが、古典的な波の定常波の生成のように反射させてもどすような閉じたループがあることを意味する。

後にこれをホロノミー概念を借りて考察する。

位相があることで干渉が起きるが、定常状態をつくるような条件があれば固有値が期待値として得られる。

また、有限時間の相互作用があるので厳密にはあらゆる観測は被観測者を変化させることになる。

つまり、観測においてエネルギーの散逸過程が厳密には起きる。これも後に議論する。

これから物理量 B のと状態 b, b'' の観測は、まず固有方程式

$$\langle b | B = \sum_{b'} \langle b | b' \rangle b' \langle b' | = b \langle b |$$

を得る場合に $\delta(b', b)$ が成り立てばよく

$$B |b''\rangle = \sum_{b'} |b'\rangle b'' \langle b'|b''\rangle = b'' |b'\rangle$$

を得る場合には $\delta(b', b'')$ が成り立てば良い。結局

$$b = b''$$

となるわけである。

つまり、物理的な観測値は日常的には同じものを見ていても、観測側の状態と非観測側の状態が絶えず変化しながら

一定の固有値をつくるような動的な関係が見てとれる。

これらが次に見るように連続的に観測すれば連続的な変数を扱える。

1.5.10 位置・運動量連続変数

先の B の観測において連続的に b_1, b_2, \dots を観測したとすると B^2 の観測も固有値 b_1^2, b_2^2, \dots を得る。これから I を単位行列として

$$B - b_1 I |b'\rangle = \sum_{b'} |b'\rangle (b' - b_1 I) |b'\rangle \langle b'|$$

さらには作用する状態ベクトルを省略して書くと

$$\begin{aligned} (B - b_1 I) \cdots (B - b_n I) &= \sum_{b'} |b'\rangle (b' - b_1) \cdots (b' - b_n) \langle b'| \\ &= \sum_{b'} |b'\rangle \left[\prod_{k=1}^n (b' - b_k) \right] \langle b'| \end{aligned}$$

よってどこかで $b' = b_k$ となれば上の式は 0 になる。

これがあらゆる次数で成立すれば次のように $n-1$ 次多項式をつくることができる。

$$\begin{aligned} f(B) &= a_0 + a_1 B + \cdots + a_n B^{n-1} \\ &= \sum_{b'} f(b') |b'\rangle \langle b'| = \sum_{b'} |b'\rangle f(b') \langle b'| \end{aligned}$$

さらに δ の意味を明らかにするために次の定義をする。

$$\delta(B, b) = \prod_{b' (b' \neq b)} \frac{B - b'}{b - b'} \quad (1.79)$$

これによっても B が固有値 b をとれば約分が成立し、 1 になるが B が固有値 b' をとると 0 である。同じ式を先の観測の記号を用いて表わすと

$$\delta(B, b) = \sum_{b'} |b'\rangle \delta(b', b) \langle b'| = |bb\rangle$$

となり、これは b を観測する操作に対応する。これから完全性の条件として次のようにあらゆる b について和をとる。すると必ず約分が成立する b を含めるわけであり、ここに確率的な解釈ができるようになる。

$$\sum_b \delta(B, b) = \sum_b \prod_{b' (b' \neq b)} \frac{B - b'}{b - b'} = \sum_b p(b) = 1 \quad (1.80)$$

たとえば $b = b_3$ までとして具体的に B の関数として次のように計算する。

$$f(B) = \sum_b^{b_3} \prod_{b' (b' \neq b)} \frac{B - b'}{b - b'} = \frac{B - b_2}{b_1 - b_2} \frac{B - b_3}{b_1 - b_3} + \frac{B - b_1}{b_2 - b_1} \frac{B - b_3}{b_2 - b_3} + \frac{B - b_1}{b_3 - b_1} \frac{B - b_2}{b_3 - b_2}$$

となるが

$$f(b_1) = 1 + 0 + 0 = 1$$

$$f(b_2) = 0 + 1 + 0 = 1$$

$$f(b_3) = 0 + 0 + 1 = 1$$

となることがわかる。従ってこれは和の記号を取り去れば単位行列であることがわかり、式 1.79 が確認できた。

量子力学では無限の自由度をもつ状態ベクトルを許すことになるので完全性の条件とは式 1.80 では存在する範囲の中に分母の値とキャンセルする項を必ず持つように和をとることである。

これは第 1 部で紹介した留数の小節における $n = -1$ の特異性と関係する。

一般的な複素関数 $f(z)$ はローラン展開を用いれば

$$f(z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n (z - a)^n, \quad r < |z - a| < R$$

$$a_n = \frac{1}{2\pi i} \oint_{|\zeta - a| = \rho} \frac{f(\zeta)}{(\zeta - a)^{n+1}} d\zeta$$

から $n = -1$ の時の係数は

$$a_{-1} = \frac{1}{2\pi i} \oint_{|\zeta - a| = \rho} f(\zeta) d\zeta$$

となりこれを留数とした。

一方、一般に任意の状態ベクトル $|u_k\rangle$ は次の完全性の条件を満たす。

$$1 = \sum_k |u_k\rangle \langle u_k| \quad (1.81)$$

ここでの k は離散変数であるが連続的な変数を扱う場合は例えば、位置 q_k と運動量 p_k に対して、微小無次元量 ϵ をもってきて次のような置き換えをおこなう。

$$\langle u_k | = \sqrt{\epsilon} \langle q_k | \quad (1.82)$$

$$\langle v_k | = \sqrt{\epsilon} \langle p_k | \quad (1.83)$$

よって完全性の条件は

$$1 = \sum_k |q_k\rangle \epsilon \langle q_k| \quad (1.84)$$

$$= \sum_k |p_k\rangle \epsilon \langle p_k| \quad (1.85)$$

さらに測度を

$$\Delta q = \epsilon = q_{k+1} - q_k$$

$$\Delta p = \epsilon = p_{k+1} - p_k$$

で決めれば式 1.84 か

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{\infty} dq |q\rangle \langle q| \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dp |p\rangle \langle p| \end{aligned}$$

のように積分表示に代わる。これにより対角可ができる。

さらに一般的な波動関数 $\phi_1(q), \phi_2(q)$ との内積は次のように表現される。

$$\langle \phi_1(q) | \phi_2(q) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle 1|q' \rangle dq' \langle q'|2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dq' \phi_1^*(q') \phi_2(q')$$

これを確率解釈すると

状態ベクトル $\langle a|$ が a を測定しようとするとき双対である $|a\rangle$ を組み合わせて dq のレンジで、

$$dP = dq |\phi^*(a)\phi(a)| = dq |\phi(a)|^2$$

が存在すると考えて

$$\langle a|a \rangle = \int dP = \int_{-\infty}^{\infty} dq |\phi(a)|^2 = 1$$

となるように我々の都合上から波動関数は企画化される。そのために波動関数は

$$\phi(q) \rightarrow 0 \quad |q| \rightarrow \infty$$

となるのが前提になる。しかし、これらの定義はあいまいで別な解釈を与えることができる。

物理量は異なる次元のかけ合わせで構成される。そこで次のような変換関数が必要になる。

古典的な位置 q と運動量 p について

$$\langle p|q \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ipq}$$

1.82 から

$$\langle u_k | v_l \rangle = \sqrt{\epsilon} \langle p|q \rangle \sqrt{\epsilon} = \frac{1}{\sqrt{2\pi/\epsilon^2}} e^{i(k\epsilon)(l\epsilon)}$$

となる。一方で量子論の基本関係から

$$pq = \frac{1}{2} (\{p, q\} + [p, q])$$

$$qp = \frac{1}{2} (\{p, q\} - [q, p])$$

これらはそれぞれ、 qp 平面に直交した虚軸方向の成分をもつが、その成分は

$$pq + qp$$

をつくることで打ち消す。

さらに興味あることは一般的なベクトル \mathbf{a}, \mathbf{b} について

$$\sigma \cdot \mathbf{a} \sigma \cdot \mathbf{b} = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} + i\sigma \cdot \mathbf{a} \times \mathbf{b} \quad (1.86)$$

というクリフォード代数に似た関係式が得られる。

これは積の一般化であり σ を基底とみなすと、この積は回転とスカラーを共に含んだものになる。式 1.46 の基本関係

$$\begin{aligned} XY &= \frac{1}{2} (\{X, Y\} + [X, Y]) \\ YX &= \frac{1}{2} (\{X, Y\} - [X, Y]) \end{aligned}$$

のベクトル版ともいえる。

特にベクトルが単位ベクトル $\mathbf{a} = \mathbf{b} = \mathbf{e}$ であれば式 1.86 から

$$(\sigma \cdot \mathbf{e})^2 = 1$$

が得られる。これは σ のどの方向の成分を測定してもその 2 乗は ± 1 でしかないことを表している。

これを満たす実数は ± 1 しかない。つまりあらゆる方向から同じように見えるということは物体が並進しても変化しないこととは独立して成り立つ事項である。

これには式 1.64, 1.67 が重要な役割を果たしている。

観測者はあらゆる方向から連続的に角度を変えて観測しても測定の結果は離散的な値になるのは異なる成分どうしは非可換であるということである。

これは前節の式 1.77 において局所位相を導入したように本来の状態ベクトルには

$$e^{i\phi} |a\rangle$$

のように位相成分が含まれているということである。これによって

$$e^{-i\phi'} \langle a| e^{i\phi} |b\rangle = e^{i(\phi-\phi')} \langle a|b\rangle \quad (1.87)$$

となり、シューウィンガーの位相は外積であるが、同じ 1.77 の局所位相がかかる。

1.5.11 随伴演算子

さらにシューウィンガーはこれまでの演算子の作用を左から右に読んで来たが、いくつかの連続した作用で、その順序はいくつかの取り方があることに言及している。物理学が普遍性を維持するために、これらの順序の入れ替えに対しても変わらない理論を作る必要がある。そのために登場する考え方が随伴演算子である。

シューウィンガーの観測記号を使うと $a \rightarrow b$ の観測が

$$|ab\rangle$$

であり、 $b \rightarrow a$ の観測が

$$|ba\rangle$$

である。これらは一般に

$$|ab\rangle \neq |ba\rangle$$

この関係を表すのに行列代数の転置複素の共役をとるエルミート共役を用いる。

前節でみたように状態ベクトルからスカラーを得る際にこの共役関係を使う。

$$|a\rangle^\dagger = \langle a|$$

$$\langle a |^\dagger = |a\rangle$$

のように入れ替わるのである。これはスカラーを得るために必要であるから全ての観測できる物理作用はエルミート共役をとっても等しく、これをエルミートという。実数であれば複素共役は $b^* = b$ だから、例えば

$$B = \sum_b |b\rangle b \langle b|$$

とすると

$$B^\dagger = \sum_b |b\rangle^\dagger b^* \langle b|^\dagger = \sum_b |b\rangle b \langle b| = B$$

である。これを前節で導いた観測記号で確かめると

$$I = \sigma_0 = |++\rangle\langle ++| + |--\rangle\langle --| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (1.88)$$

は明らかに

$$I^\dagger = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}^\dagger = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = I$$

である。また、

$$\sigma_x = |--\rangle\langle ++| + |+\rangle\langle -| = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

についても

$$\sigma_x^\dagger = |+\rangle\langle -| + |--\rangle\langle ++| = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \sigma_x$$

である。

$$\sigma_y = i|+-\rangle\langle -| - i|--\rangle\langle ++| = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

についても

$$\sigma_y^\dagger = -i|+-\rangle\langle -| + i|--\rangle\langle ++| = -i \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + i \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \sigma_y$$

になる。

$$\sigma_z = |++\rangle\langle ++| + |--\rangle\langle --| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

についても

$$\sigma_z^\dagger = |--\rangle\langle --| + |++\rangle\langle ++| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \sigma_z$$

である。これによってこの σ 演算子がエルミートであり、物理量をつくる片役を担っていることがわかる。さらに式 1.86 のエルミート共役をとると \mathbf{a}, \mathbf{b} は実数ベクトルだから

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b} = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a} \times \mathbf{b})^\dagger &= \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} - i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a} \times \mathbf{b} \\ &= \mathbf{b} \cdot \mathbf{a} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{a} \\ &= \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a} \end{aligned}$$

であり、同じように順番を変えるとエルミート共役をとることになる。

いいかえるとこのエルミート共役が時間連続の1つの役割を担う。この関係も後に考察する。

1.5.12 行列表現と観測記号

パウリ行列 σ_x と σ_y はある物理量 B を別の物理量 A の観測記号で表すことができる例である。今 I は単位行列とすると前節の観測記号 $|a'a''\rangle$ を用いて

$$\begin{aligned} B &= IBI \\ &= \sum_{a'} |a'\rangle \langle a'| B \sum_{a''} |a''\rangle \langle a''| \\ &= \sum_{a', a''} \langle a'| B |a''\rangle |a'a''\rangle \end{aligned}$$

つまり量子力学は常にあらゆる状態についての足し合わせが両サイドにかかる。よく出てくる表現であるが、現実における状態をどうみつけるかは言及がない。このあらゆる状態をどう瞬時に見るかはおおきな問題で後に考察する。これにより行列要素が a' 行、 a'' 列として次のように決まる。

$$\begin{pmatrix} \langle a_1| B |a_1\rangle & \cdots & \langle a_1| B |a_n\rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle a_n| B |a_1\rangle & \cdots & \langle a_n| B |a_n\rangle \end{pmatrix}$$

この行列が観測記号 $|a'a''\rangle$ の前にかかる。観測記号はこの行、列を示していたわけだ。例えばパウリ行列はスピンのように 2 値 (+, -) を観測記号で表現し、

$$\begin{array}{cc} & + & - \\ \sigma_x : & + & 0 & 1 \\ & - & 1 & 0 \end{array}$$

つまり行と列は成分値を取り出すために必要であり、観測記号 $|a'a''\rangle$ に対応する。従ってエルミート共役は次のように観測記号の順序を変えることになる。

$$\begin{aligned} X &= \sum_{a', a''} \langle a''| B |a'\rangle |a'a''\rangle \\ X^\dagger &= \sum_{a', a''} \langle a''| B |a'\rangle^* |a''a'\rangle \end{aligned}$$

一方で

$$\langle a'| X^\dagger |a''\rangle = \langle a''| X |a'\rangle^*$$

であるから観測記号は次のように外積で表現できることになる。

$$|a'a''\rangle = |a'\rangle \langle a''|$$

よって観測記号をつかうことなく

$$X = \sum_{a', a''} |a'\rangle \langle a'| X |a''\rangle \langle a''|$$

これにより自然に単位行列

$$|aa\rangle = \sum_{a''} |a''\rangle \langle a''| = 1$$

となることがわかる。

この過程でエルミート共役

$$\langle a|b\rangle^* = |b\rangle^\dagger \langle a|^\dagger = \langle b|a\rangle$$

$$\langle a|X|b\rangle^* = |b\rangle^\dagger X^\dagger \langle a|^\dagger = \langle b|X^\dagger|a\rangle$$

の関係があることは重要である。つまり内積の値には共役の外積演算が対応している。

ただ、演算記号を見て、共役をとり、外積表現にするのは形式的にできるが、現実には観測の時間順を遡ることはできない。そこにはエントロピーや不可逆性の問題がある。演算が数値を作っても、数値を演算に戻すのは一意にはきまらない。ここではこれを観測による情報の消失ということにして後章での課題にしたい。

1.5.13 対角和

観測が成立するためには $|a'\rangle \langle a''|$ からスカラー値を得る必要がある。そのためには $\langle a'|, |a''\rangle$ が必要である。つまり、これまで見てきたようにどんな単純な観測にも観測器と観測対象、そして再び観測器が必要になった。これを数学的に処理する演算がトレース (対角和) Tr である。

$$\langle a''|a'\rangle = \delta(a', a'') = \text{Tr} [|a'a''] = \text{Tr} [|a'\rangle \langle a'']$$

例えば、次のように観測 $|b'b''\rangle$ を行った場合は

$$|b'b''\rangle = \sum_{a', a''} |a'\rangle \langle a'| |b'\rangle \langle b''| |a''\rangle \langle a''|$$

となったのでこれは次のように書き換えると行列の対角和になる。

$$\begin{aligned} \text{Tr} [|b'b''\rangle] &= \sum_{a', a''} \langle b''|a''\rangle \langle a''|a'\rangle \langle a'|b'\rangle \\ &= \langle b''|b'\rangle \\ &= \delta(b', b'') \end{aligned}$$

このように対角和をとる時に内積の演算になるのでブラケットの位置を入れ替えることができ、次の有用な関係が成り立つ。

$$\begin{aligned} \text{Tr} [|a'a'\rangle |b'b'\rangle] &= \langle a'|b'\rangle \langle b'|a'\rangle \\ \langle a'|X|a''\rangle &= \text{Tr} [X|a''a'\rangle] = \text{Tr} [|a''a'\rangle X] \\ \text{Tr} [\{XY\}] &= \text{Tr} [\{YX\}] \end{aligned}$$

$$\text{Tr} [[XY]] = \text{Tr} [[YX]] \tag{1.89}$$

Tr は対角和であるので行列から数値を導く作用素であり元の行列 $|b'b''\rangle = |b'\rangle \langle b''|$ の情報から対角和をとっている。

元の行列の対角部分のさらに和になり、情報はかなり消失している。行列が大きくなるほど、同じ対角和になる異なった行列はいくつもできることになる。ここでの実験で登場したパウリ行列では

$$\text{Tr} [\sigma_i] = 0, (i = 1, 2, 3) \tag{1.90}$$

を満たしている。さらに単位行列からは次元の数が出てくる。

$$\text{Tr} [1_{n \times n}] = n$$

対角和で重要なのはこれが確率解釈に適応できる点である。前節式 1.23 のクロージャーの関係が確率解釈には重要であった。

$\delta(B, b') = |b'b'|$ とすると

$$\langle \delta(B, b) \rangle_{a'} = p(a', b') = \text{Tr} [|a'a'| |b'b'|]$$

と考えることができる。つまり、行列要素をトレースで書き出すと

$$\langle B \rangle_{a'} = \sum_{a'} \langle a' | B | a' \rangle = \text{Tr} [|a'a'| B] \quad (1.91)$$

となる。そこで式 1.86 の Tr を取ると式 1.89 から次の公式が成り立つ。

$$\text{Tr}[\sigma \cdot \mathbf{a} \sigma \cdot \mathbf{b}] = 2\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \quad (1.92)$$

となることに注意する。トレースの公式を先のシュテルン・ゲルラッハの実験に用いる。式 1.61 から

$$\begin{aligned} \sigma'_{z+} &= |++\rangle = \frac{1+\sigma_z}{2} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \sigma'_{z-} &= |--\rangle = \frac{1-\sigma_z}{2} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

という結果になったが、

$$|\sigma'_z \sigma'_z| = |++\rangle + |--\rangle = \frac{1}{2}(1 + \sigma_z \sigma_z)$$

が成立した。これを回転させ $\sigma \cdot \mathbf{n}_1, \sigma \cdot \mathbf{n}_2$ を作用させることを考える。ただし、 $\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2$ は単位方向ベクトルとし、

$$\mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{n}_2 = \cos \theta$$

のなす角を持つとすると次のように計算できる。式 1.90 から

$$\begin{aligned} p(\sigma'_1, \sigma'_2) &= \text{Tr} \left[\frac{1 + \sigma'_1 \sigma \cdot \mathbf{n}_1}{2} \cdot \frac{1 + \sigma'_2 \sigma \cdot \mathbf{n}_2}{2} \right] \\ &= \frac{1}{4} \text{Tr} [1 + \sigma'_1 \sigma \cdot \mathbf{n}_1 + \sigma'_2 \sigma \cdot \mathbf{n}_2 + \sigma'_1 \sigma'_2 \sigma \cdot \mathbf{n}_1 \sigma \cdot \mathbf{n}_2] \\ &= \frac{1}{2} (1 + \sigma'_1 \sigma'_2 \mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{n}_2) \\ &= \frac{1}{2} (1 + \sigma'_1 \sigma'_2 \cos \theta) \\ &= \frac{1}{2} (1 \pm \cos \theta) \end{aligned}$$

すなわち

$$p(+, +) = p(-, -) = \frac{1 + \cos \theta}{2} = \cos^2 \frac{\theta}{2} \quad (1.93)$$

$$p(+, -) = p(-, +) = \frac{1 - \cos \theta}{2} = \sin^2 \frac{\theta}{2} \quad (1.94)$$

が成り立ち、これは実験結果と一致する。

$$p(+, +) + p(+, -) = p(-, -) + p(-, +) = 1$$

であるので確率条件を満たしている。

従って、観測 A と観測 B を連続する確率は次のような対角和で定義する。

$$p(A, B) = \text{Tr}[A, B] \quad (1.95)$$

1.5.14 3次元化

一般に下図のような空間単位ベクトルを \mathbf{n} としパウリ行列 $\sigma(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ も空間成分を持つとする。これからパウリ行列の空間軸への射影成分を次の内積で表すことができる。

$$\begin{aligned}\sigma \cdot \mathbf{n} &= \sigma_x \sin \theta \cos \phi + \sigma_y \sin \theta \sin \phi + \sigma_z \cos \theta \\ &= \begin{pmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta)(\cos(\phi) - i \sin(\phi)) \\ \sin(\theta)(\cos(\phi) + i \sin(\phi)) & -\cos(\theta) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta)e^{-i\phi} \\ \sin(\theta)e^{i\phi} & -\cos(\theta) \end{pmatrix}\end{aligned}$$

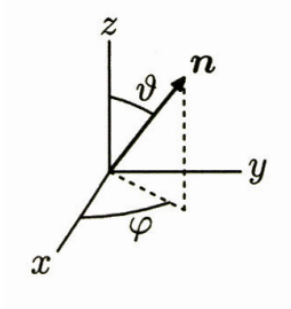


図 1.21: [26] より : 3次元空間の単位ベクトル $\mathbf{n} = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta)$

しかし、ここで次のようにパウリ行列を4成分に拡大してみよう。

$$\hat{\sigma} = (\sigma_0, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z) = (\sigma_0, \sigma)$$

ただし、式 1.88 から

$$\sigma_0 = |++\rangle\langle++| + |--\rangle\langle--| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = I$$

とし、単位ベクトルも次のように4次元に拡大する。

$$\hat{n} = \frac{1}{2}(1, \sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta)$$

とすると

$$|\hat{n}|^2 = 1$$

であり、拡大されたパウリ行列の方向ベクトル \hat{n} 方向への射影は

$$\hat{\sigma} \cdot \hat{n} = \frac{I + \sigma \cdot \mathbf{n}}{2} \quad (1.96)$$

となる。一方で3次元の場合に σ_z 方向の観測 $|++\rangle\langle++|$ が前節の結果から

$$\begin{aligned}|+\rangle\langle+| &= \begin{pmatrix} 1 & \\ 0 & \end{pmatrix} (1, 0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2}(I + \sigma_z)\end{aligned} \quad (1.97)$$

で表された。

この観測は σ_z 基底で観測結果を

$$\langle \sigma_z | + \rangle \langle + | \sigma'_z \rangle = \langle \sigma_z | \frac{I + \sigma_z}{2} | \sigma'_z \rangle$$

と表すことができる。

これから任意の方向の測定演算子を $\sigma_z \rightarrow \sigma \cdot \mathbf{n}$ で書き換えて、観測 $|\sigma'_n \sigma'_n\rangle$ を

$$\begin{aligned} |\sigma'_n\rangle \langle \sigma'_n| &= \frac{I + \sigma \cdot \mathbf{n}}{2} \\ &= \begin{pmatrix} \frac{1+\cos(\theta)}{2} & \frac{1}{2} \sin(\theta) e^{-i\phi} \\ \frac{1}{2} \sin(\theta) e^{i\phi} & \frac{1-\cos(\theta)}{2} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (1.98)$$

$$= \begin{pmatrix} \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) & \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-i\phi} \\ \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\phi} & \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{pmatrix} \quad (1.99)$$

とおく。この $\sigma'_n : +1$ での観測を σ_z 基底で表すと式 1.97 から直接に

$$\begin{aligned} \langle \sigma_z | \sigma'_n : +1 \rangle \langle \sigma'_n : +1 | \sigma'_z \rangle &= \langle \sigma_z | \frac{I + \sigma \cdot \mathbf{n}}{2} | \sigma'_z \rangle \\ &= \begin{pmatrix} \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) & \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-i\phi} \\ \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\phi} & \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (1.100)$$

が求まる。

つまり、量子論的な観測は拡大空間から実空間への射影とみなせる。

$|\sigma'_n\rangle \langle \sigma'_n|$ は列ベクトルと行ベクトルの積でかけたから式 1.32 から

$$\begin{aligned} \langle \sigma'_n : +1 | &= \left(\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\frac{\phi}{2}}, \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-i\frac{\phi}{2}} \right) \\ |\sigma'_n : +1\rangle &= \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-i\frac{\phi}{2}} \\ \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\frac{\phi}{2}} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (1.101)$$

としても 1.99 を満たす。

ただし、対称性を見やすくするために第 1 式は $e^{-i\frac{\phi}{2}}$ 、第 2 式は $e^{i\frac{\phi}{2}}$ をかけた。

次に $\sigma'_n : -1$ の場合を考えよう。

そこで一般に次の図のように z 軸と θ をなす単位ベクトル \mathbf{n} とする。式 1.99 の $\sigma'_n : -1$ が $-\mathbf{n}$ の方向に対して

$$\sigma'_n : +1$$

となるので図 1.14 を z 軸を横と上からみれば次の図の関係がある。

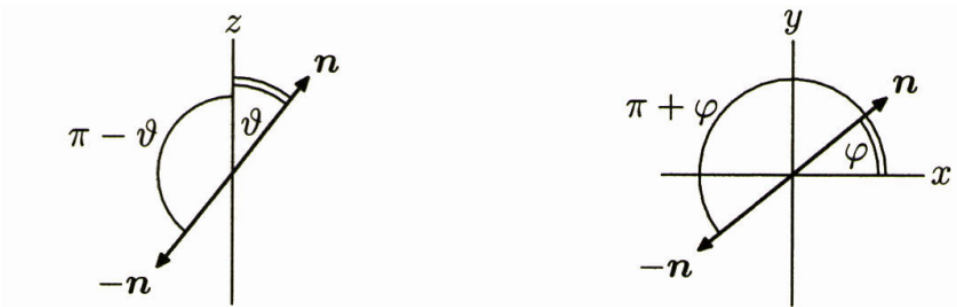


図 1.22: [26] より: $\sigma'_n : -1$ を $-\mathbf{n}$ として考える

3次元空間の単位ベクトルとなるので $\mathbf{n} \rightarrow -\mathbf{n}$ の変換は

$$\begin{aligned} \theta &\rightarrow \pi - \theta \\ \phi &\rightarrow \pi + \phi \end{aligned}$$

の置き換えをやればよい。従って $\pi/2$ の回転が加わるので $e^{i\pi/2} = +i$ だから

$$\psi_{+1}(\sigma'_n) = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\pi-\theta}{2}\right) e^{-\frac{i(\pi+\phi)}{2}} \\ \sin\left(\frac{\pi-\theta}{2}\right) e^{\frac{i(\pi+\phi)}{2}} \end{pmatrix} = i \begin{pmatrix} -\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-\frac{i\phi}{2}} \\ \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{\frac{i\phi}{2}} \end{pmatrix} = i\psi_{-1}(\sigma'_n)$$

係数に i がかかる。

つまり、測定の効果は位相に現れて、一般には全体の位相変化は式 1.77 から

$$\psi_{+1} = e^{i\alpha}\psi_{-1}$$

のように不確定な位相が入ることを考える。例えば

$$\alpha = \frac{\pi}{2}$$

が選ばれたとすると、どんな位相を定義しても確率密度が複素数の 2 乗として作られていれば

$$p(\sigma'_n, \sigma'_n) = |\psi_{\sigma'_n}(\sigma'_z)|^2 \quad (1.102)$$

となるので、この位相部分は確率密度から見えない。

以上からここでは $|\sigma'_n : -1\rangle$ を次のように定義する。

$$\begin{aligned} \langle \sigma'_n : -1 | &= \left(-\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{\frac{i\phi}{2}}, \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-\frac{i\phi}{2}} \right) \\ |\sigma'_n : -1\rangle &= \begin{pmatrix} -\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-\frac{i\phi}{2}} \\ \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{\frac{i\phi}{2}} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (1.103)$$

この結果、2つのベクトルは互いに共役 (転置複素共役) な関係を満たしている。

これらから次の観測の場合も測定演算子が同様に求められる。

$$\begin{aligned} \langle \sigma_z | \sigma'_n : -1 \rangle \langle \sigma'_n : -1 | \sigma'_z \rangle &= \langle \sigma_z | \frac{I - \sigma \cdot \mathbf{n}}{2} | \sigma'_z \rangle \\ &= \begin{pmatrix} \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) & -\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-i\phi} \\ -\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\phi} & \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (1.104)$$

また、式 1.101 から

$$\begin{aligned} \langle \sigma'_n : +1 | &= \left(\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{\frac{i\phi}{2}}, \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-\frac{i\phi}{2}} \right) \\ |\sigma'_n : +1\rangle &= \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-\frac{i\phi}{2}} \\ \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{\frac{i\phi}{2}} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

であったので、

$$\langle \sigma_z | \sigma'_n : +1 \rangle \langle \sigma'_n : -1 | \sigma'_z \rangle = \begin{pmatrix} -\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) & \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-i\phi} \\ -\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\phi} & \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{pmatrix} \quad (1.105)$$

となる。また、状態ベクトルから式 1.101 を用いて、次の 2 つの波動関数を用意する。

$$\begin{aligned} |\sigma'\rangle_{n=+1} &= \psi_{+1}(\sigma'_z) = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-\frac{i\phi}{2}} \\ \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{\frac{i\phi}{2}} \end{pmatrix} \\ |\sigma'\rangle_{n=-1} &= \psi_{-1}(\sigma'_z) = \begin{pmatrix} -\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-\frac{i\phi}{2}} \\ \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{\frac{i\phi}{2}} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (1.106)$$

この2つのベクトルは単位ベクトルで、次のように内積をとると0になる。

$$\langle \sigma'_{n=+1} | \sigma'_{n=-1} \rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{\frac{i\phi}{2}} \cdot -\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-\frac{i\phi}{2}} + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-\frac{i\phi}{2}} \cdot \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{\frac{i\phi}{2}} = 0$$

従って、直交していることがわかる。これは他にも

$$\langle \sigma'_{n=+1} | \sigma'_{n=+1} \rangle = \left(\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{\frac{i\phi}{2}}, \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-\frac{i\phi}{2}} \right) \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-\frac{i\phi}{2}} \\ \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{\frac{i\phi}{2}} \end{pmatrix} = 1$$

$$\langle \sigma'_{n=-1} | \sigma'_{n=-1} \rangle = \left(-\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{\frac{i\phi}{2}}, \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-\frac{i\phi}{2}} \right) \begin{pmatrix} -\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-\frac{i\phi}{2}} \\ \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{\frac{i\phi}{2}} \end{pmatrix} = 1$$

となり、1か0かという結果になる。

以上から前節の測定演算子を用いて確率密度を計算することができるようになった。

式 1.95 から

$$\begin{aligned} p(+, +) &= \langle \sigma_{z+} | \sigma'_n : +1 \rangle \langle \sigma'_n : +1 | \sigma'_{z+} \rangle & (1.107) \\ &= \langle \sigma_z | \frac{I + \sigma \cdot \mathbf{n}}{2} | \sigma'_z \rangle \\ &= (1, 0) \begin{pmatrix} \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) & \frac{1}{2} \sin(\theta) e^{-i\phi} \\ \frac{1}{2} \sin(\theta) e^{i\phi} & \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= (1, 0) \begin{pmatrix} \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ \frac{1}{2} \sin(\theta) e^{i\phi} \end{pmatrix} \\ &= \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} p(-, -) &= \langle \sigma_{z-} | \sigma'_n : -1 \rangle \langle \sigma'_n : -1 | \sigma'_{z-} \rangle & (1.108) \\ &= \langle \sigma_z | \frac{I - \sigma \cdot \mathbf{n}}{2} | \sigma'_z \rangle \\ &= (0, 1) \begin{pmatrix} \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) & \frac{1}{2} \sin(\theta) e^{-i\phi} \\ \frac{1}{2} \sin(\theta) e^{i\phi} & \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= (0, 1) \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \sin(\theta) e^{-i\phi} \\ \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{pmatrix} \\ &= \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} p(+, -) &= \langle \sigma_{z+} | \sigma'_n : +1 \rangle \langle \sigma'_n : -1 | \sigma'_{z-} \rangle & (1.109) \\ &= (0, 1) \begin{pmatrix} -\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) & \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-i\phi} \\ -\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\phi} & \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= (0, 1) \begin{pmatrix} -\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\phi} \end{pmatrix} \\ &= \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\phi} \end{aligned}$$

となる。

1.5.15 一般化

一般に観測過程をブラケット表記で

$$\langle \alpha | A | \alpha \rangle$$

と書くと、これは大雑把に3点の関係になる。3点は1つの平面をつくる。同一平面にあれば1軸の回転で表すことができるのでこれは交換するわけである。ところが量子論は

$$\langle \alpha | A | \alpha \rangle = \sum_{aa'} \langle \alpha | a' \rangle \langle a' | A | a \rangle \langle a | \alpha \rangle$$

のように、実は4点関係にある。前章の図のように

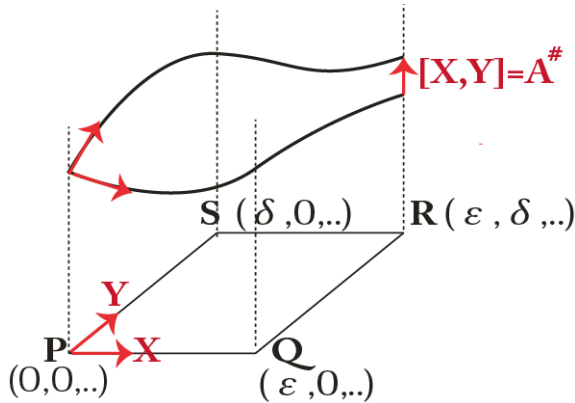


図 1.23: 交換積のイメージ

$$[A, B] \neq 0$$

の場合には2軸の回転が関与する。そのために2つの異なる方向を考え、任意の方向への振幅を得るように拡張しよう。

任意の2つの方向の単位ベクトルを $\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2$ とする。

前節での定義から次のように関数表現できる。

$$\begin{aligned} \langle \sigma_1 | \sigma_2 \rangle &= \sum_{\sigma_z} \langle \sigma_1 | \sigma_z \rangle \langle \sigma_z | \sigma_2 \rangle \\ &= \sum_{\sigma_z} \psi_{\sigma_1}(\sigma_z)^* \psi_{\sigma_2}(\sigma_z) \end{aligned}$$

例えば式 1.107 から

$$\langle +, 1 | +, 2 \rangle = \cos\left(\frac{\theta_1}{2}\right) \cos\left(\frac{\theta_2}{2}\right) e^{\frac{i}{2}(\phi_1 - \phi_2)} + \sin\left(\frac{\theta_1}{2}\right) \sin\left(\frac{\theta_2}{2}\right) e^{-\frac{i}{2}(\phi_1 - \phi_2)} \quad (1.110)$$

となる。2つの角度 θ, ϕ があるので、共に xy 平面内の場合を考えると

$$\theta_1 = \theta_2 = \frac{\pi}{2}$$

として、結果は

$$\begin{aligned} \langle +, 1 | +, 2 \rangle &= \frac{1}{2} e^{\frac{i}{2}(\phi_1 - \phi_2)} + \frac{1}{2} e^{-\frac{i}{2}(\phi_1 - \phi_2)} \\ &= \cos\left(\frac{1}{2}(\phi_1 - \phi_2)\right) \end{aligned}$$

となる。この結果は実数になるので観測値として可能である。
次に共に x, z 平面にある時は

$$\phi_1 = \phi_2 = 0$$

だから

$$\begin{aligned} \langle +, 1 | +, 2 \rangle &= \cos\left(\frac{\theta_1}{2}\right) \cos\left(\frac{\theta_2}{2}\right) + \sin\left(\frac{\theta_1}{2}\right) \sin\left(\frac{\theta_2}{2}\right) \\ &= \cos\left(\frac{1}{2}(\theta_1 - \theta_2)\right) \end{aligned}$$

となる。この結果も実数値であるので観測値として可能である。
しかし、一般には次のように複素数の絶対値の2乗を計算する。

$$\begin{aligned} \left| \cos\left(\frac{\theta_1}{2}\right) \cos\left(\frac{\theta_2}{2}\right) e^{\frac{i}{2}(\phi_1 - \phi_2)} + \sin\left(\frac{\theta_1}{2}\right) \sin\left(\frac{\theta_2}{2}\right) e^{-\frac{i}{2}(\phi_1 - \phi_2)} \right|^2 &= \Psi = \cos^2\left(\frac{\theta_1}{2}\right) \cos^2\left(\frac{\theta_2}{2}\right) \\ &+ \sin^2\left(\frac{\theta_1}{2}\right) \sin^2\left(\frac{\theta_2}{2}\right) \\ &+ \cos\left(\frac{\theta_1}{2}\right) \cos\left(\frac{\theta_2}{2}\right) \\ &\times \sin\left(\frac{\theta_1}{2}\right) \sin\left(\frac{\theta_2}{2}\right) \\ &\times (\Phi) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Phi &= e^{\frac{i}{2}(\phi_1 - \phi_2)} \left(e^{-\frac{i}{2}(\phi_1 - \phi_2)} \right)^* + \left(e^{\frac{i}{2}(\phi_1 - \phi_2)} \right)^* e^{-\frac{i}{2}(\phi_1 - \phi_2)} \\ &= e^{i(\phi_1 - \phi_2)} + e^{-i(\phi_1 - \phi_2)} \\ &= 2 \cos(\phi_1 - \phi_2) \end{aligned}$$

よって

$$\begin{aligned} 1 &= \left(\cos^2\left(\frac{\theta_1}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{\theta_1}{2}\right) \right) \left(\cos^2\left(\frac{\theta_2}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{\theta_2}{2}\right) \right) \\ &= \cos^2\left(\frac{\theta_1}{2}\right) \cos^2\left(\frac{\theta_2}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{\theta_1}{2}\right) \sin^2\left(\frac{\theta_2}{2}\right) \\ &+ \frac{1}{4}(-\cos(\theta_1 + \theta_2) - \cos(\theta_1 - \theta_2) + 2) \end{aligned}$$

だから

$$\begin{aligned} \Psi &= \frac{1}{2} (1 + \cos(\theta_1 + \theta_2) + \cos(\theta_1 - \theta_2) + \sin \theta_1 \sin \theta_2 \cos(\phi_1 - \phi_2)) \\ &= \frac{1}{2} (1 + \cos \theta_1 \cos \theta_2 + \sin \theta_1 \sin \theta_2 \cos(\phi_1 - \phi_2)) \end{aligned}$$

となる。

2 確率空間

この章で考察するダイバージェンスは2点間の距離に似ているが、より広い概念である。2点間を微小としてリーマン距離とみなすことができるが、対称である必要がない。双対性という条件をリーマン構造に加えるとどうなるかという空間を考えるわけである。量子論の持っている空間的な構造を知る手がかりとして学んでおきたい内容である。

2.1 準備

2.1.1 内積

内積は (\cdot, \cdot) や $\langle \cdot, \cdot \rangle$ を使う。C 空間を考えるので次の関係が成り立つ。

$$\left(|v\rangle, \sum_i \lambda_i |\omega_i\rangle \right) = \sum_i \lambda_i (|v\rangle, |\omega_i\rangle)$$

$$\left(\sum_i \lambda_i |\omega_i\rangle, |v\rangle \right) = \sum_i \lambda_i^* (|\omega_i\rangle, |v\rangle)$$

$$(|v\rangle, |\omega\rangle) = (|\omega\rangle, |v\rangle)^*$$

$$(|v\rangle, |v\rangle) \geq 0, \text{ (equality, } |v\rangle = 0)$$

$$\langle x_1 \cdots x_n | y_1 \cdots y_n \rangle = ((x_1 \cdots x_n), (y_1 \cdots y_n)) = \sum_i^n x_i^* y_i = (x_1^*, \cdots, x_n^*) \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

左が共役をとった、横 (列ベクトル) $[1, n]$ 型で右が横 (行ベクトル) $[n, 1]$ 型である。

直交条件は

$$\langle i | j \rangle = \delta_{ij}$$

である。

グラム・シュミットの直交化 (Gram-Schmit proceduer) は単位ベクトル

$$|j_1\rangle \equiv \frac{|w_1\rangle}{\| |w_1\rangle \|}$$

とすると直交している既知な $|j_1\rangle \cdots |j_k\rangle$ までを用いて

$$|j_{k+1}\rangle = \frac{|w_{k+1}\rangle - \sum_{i=1}^k \langle j_i | w_{k+1} \rangle |j_i\rangle}{\| |w_{k+1}\rangle - \sum_{i=1}^k \langle j_i | w_{k+1} \rangle |j_i\rangle \|} \quad (2.1)$$

で表される。基底が異なる場合でも

$$\langle v | \omega \rangle = \left(\sum_i v_i |i\rangle, \sum_j \omega_j |j\rangle \right) = \sum_{ij} v_i^* \omega_j \delta_{ij} = \sum_i v_i^* \omega_i = (v_1^*, \cdots, v_n^*) \begin{pmatrix} \omega_1 \\ \vdots \\ \omega_n \end{pmatrix}$$

また、基底については完全性を満たすので

$$\sum_i |i\rangle \langle i| = I$$

という単位行列をつくる。これから

$$\left(\sum_i |i\rangle \langle i| \right) |v\rangle = \sum_i |i\rangle \langle i | v \rangle = \sum_i v_i |i\rangle = |v\rangle$$

ここで行列 A が $V \rightarrow W$ の線形作用素としてあればその成分 A_{ij} は次で定義される。

$$\begin{aligned} A &= I_W A I_V \\ &= \sum_{ij} |w_j\rangle \langle w_j | A |v_i\rangle \langle v_i| \\ &= \sum_{ij} \langle w_j | A |v_i\rangle |w_j\rangle \langle v_i| \\ &= A_{ji} I_{ji} \end{aligned}$$

である。

また、コーシー・シュワルツの不等式 (Cauchy-Schwarz inequality)

$$\begin{aligned}\langle v|v\rangle \langle w|w\rangle &= \sum_i \langle v|i\rangle \langle i|v\rangle \langle w|w\rangle \\ &\geq \frac{\langle v|w\rangle \langle w|v\rangle}{\langle w|w\rangle} \langle w|w\rangle \\ &= \langle v|w\rangle \langle w|v\rangle = |\langle v|w\rangle|^2\end{aligned}$$

が成り立つ。

2.1.2 固有空間

第4部の行列のところで行列とその固有値について学んだ、量子論では主要な言語になるので簡単に復習しておく。

次の固有方程式

$$A|v\rangle = a|v\rangle$$

がなりたてば次の固有方程式 (characteristic equation)

$$(A - aI)|v\rangle = 0$$

が成り立つので、行列式をとれば特性関数

$$c(a) \equiv \det |A - aI|$$

から固有値が求まる。固有値と固有関数が求まると次のように A が対角化できる。

$$A = \sum_i a_i |i\rangle \langle i|$$

例えば式 1.1 のパウリ行列の Z は固有値 $1, -1$ を持つことから

$$Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = |0\rangle \langle 0| - |1\rangle \langle 1|$$

これは2次元の固有空間を持っている。これは行列の rank と関係していて、次のような3次の行列 A をもつてくると

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = 2|0\rangle \langle 0| + 2|1\rangle \langle 1|$$

となり、これも固有空間は2次元である。

ところが次のような行列は行列式が0であり、対角化できない。

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

2.1.3 射影演算子

V は d 次元、 W はその部分空間で k 次元ベクトル空間とする。 ($k < d$)

$$V \rightarrow W$$

この時の射影演算子は

$$P \equiv \sum_{i=1}^k |i\rangle \langle i|$$

となる。 P はエルミートで

$$P^\dagger = P$$

が成り立つ。さらに演算子 Q を

$$|k+1\rangle, \dots, |d\rangle$$

に広げられた空間への射影とすると

$$Q \equiv I - P$$

が成り立つ。

2.2 ダイバージェンス関数 [129]

空間を点の集まりとして考えると、各点が周りに n 次元的に広がっているものを多様体と考えることができた。

例えばユークリッド空間はデカルト座標を導入すると、

$$\xi = (\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n)$$

のように n 個の数字で表される。 n 次元多様体とはこのように各点のまわりで n 次元的な広がりを持ち、 n 次元座標 ξ を用いて表すことができるものをいう。

しかし、残念なことにそう単純ではない。例えば球のようなものは各点では 2 次元的なユークリッド空間かもしれないが、もし、俯瞰することができれば全体が閉じているのでこの場合はトポロジーが異なる。しかし、座標系を複数用意してもいいというルールにすれば球の表面も座標系で表すことができる。

座標系 ξ を用いて微分可能で、逆が存在する関数 ζ を考える。

$$\zeta = \zeta(\xi)$$

この ζ を新しい座標とすることができて、

$$\zeta_i(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n)$$

と汎関数のように表すことができる。この時、座標系 ξ と ζ の 2 つで表される系は $\xi \rightarrow \zeta$ の変換がヤコビ行列

$$A = \frac{\partial \zeta}{\partial \xi}$$
$$A_{ij} = \left(\frac{\partial \zeta^i}{\partial \xi^j} \right)$$

によって 1 対 1 で対応する。これはどちらの系も対等であるので逆も存在する。しかし、対等ではないような関係があるときは必ずしもうまくいかない。

ここまで多くの写像を見てきたがここでは次部のことも考慮して、確率分布空間が多様体になることを見る。

2.2.1 離散確率密度

x を平均 μ 、分散 σ^2 のガウス分布とする。この時の確率密度関数は

$$p(x; \mu, \sigma^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left[-\frac{(x - \mu)^2}{2\sigma^2}\right]$$

となる。従って、この空間は座標系 (μ, σ) を考えれば 2 次元多様体になる。

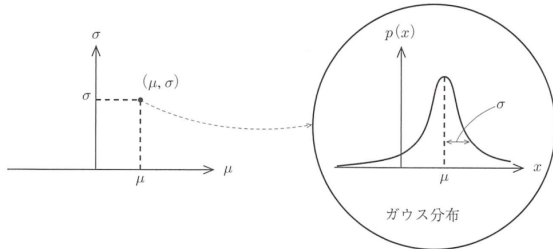


図 2.1: [129] より : ガウス分布の座標系

確率変数 x は離散とし、 $\{0, 1, 2, \dots, n\}$ の $n + 1$ 個の値をとるとする。確率は

$$p_i = \text{Prob}\{x = i\}, i = 0, 1, 2, \dots, n$$

とおける。この空間では確率分布

$$\mathbf{p}(p_0, p_1, \dots, p_n)$$

が 1 つのベクトルとして考えることができる。

もちろん次の確率の条件を満たしている。

$$\sum_{i=0}^n p_i = 1, p_i > 0$$

この確率分布の全体を S_n とする。これは第 5 部で学んだ n 次元単体 (シンプレックス) を用いて表現できる。例えば $n = 2$ ならば正三角形、 $n = 3$ ならば正四面体のようなになる。この n 次元多様体を確率単体と呼ぶことにする。

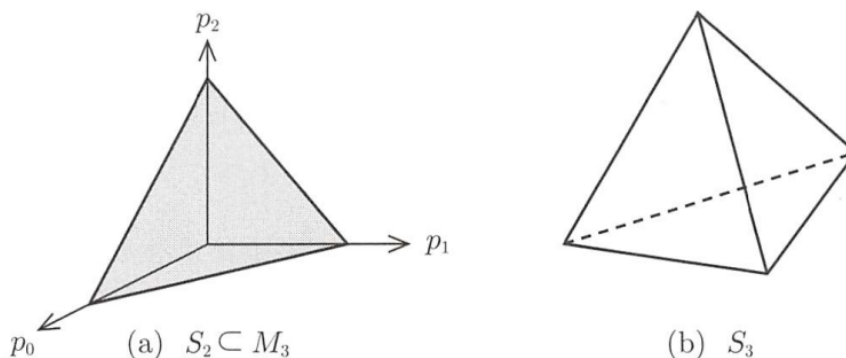


図 2.2: [129] より : 離散確率空間を単体で表現する。

この時、 $n + 1$ 個の内、座標としてとるのは n までで、1 つ残して、次のベクトル ξ を定義しておく。

$$\xi = (p_1, p_2, \dots, p_n)$$

これを座標系として考えればよい。

確率変数として次の2値

$$\delta_i(x) = \begin{cases} 1 & x = i \\ 0 & x \neq i \end{cases}$$

を用意すれば確率変数は

$$p(x, \xi) = \sum_{i=1}^n \xi_i \delta_i(x) + p_0 \delta_0(x)$$

ただし、

$$p_0 = 1 - \sum \xi_i$$

とかける。

一般には、この $p(x, \xi)$ 全体の集合を

$$S = \{p(x, \xi)\}$$

とする。また、確率分布の条件から $\sum_{i=0}^n p_i = 1$ を除いたものは正測度空間と呼ばれる。

これは各 p_i に重み関数 ω_i をかけた線形結合である。物理の情報としては画像や、音声などの多くの場合にみられる。

これはユークリッド空間の第一象限に

$$\mathbb{R}_+^{n+1}$$

を対応させた $n+1$ 次元多様体である。これを今後 M_{n+1} で表す。すると、先の離散分布空間 S_n はその部分空間であり、

$$\sum_{i=0}^n p_i = 1$$

の束縛条件が1つ追加されたものと見なすことができる。

例えば画像空間を考えると、 $x-y$ 平面上の画像を $s(x, y)$ と書く。縦横を n 等分すれば、これは n^2 個の要素上の正測度空間であり、 M_{n^2} と表現する。

そこで n 次元正定値行列を P とする。これは対称行列であるとする。このような空間は行列の上(下)三角の面積、すなわち、

$$\frac{n(n+1)}{2}$$

次元多様体になる例である。この場合の各座標値には、固有値が全て正になるという条件がつく。

さらに縮退していない $n \times n$ の行列全体は n^2 次元多様体をつくる。

この場合は行列式が0にならないという条件がつく。

行列のかけ算からなる群構造を入れることができ、一般にリー群と呼ぶ。

一般線形行列群は $GL(n)$ で表す。直交行列は

$$\frac{n(n-1)}{2}$$

次元の部分多様体になり、これもリー群 $O(n)$ と呼ばれる。

2.2.2 ダイバージェンス関数

今後重要になるのが2点間の関係で、これまで第5部で計量や接続を学んだ。ここではダイバージェンス関数を紹介する。

多様体の2点 P, Q に対して次の条件を満たす関数 $D[P:Q]$ を PQ 間の分離度(ダイバージェンス)と定義する。

定義. 分離度 (divergence)

- 1. $D[P : Q] \geq 0$ で微分可能
- 2. $P = Q$ の時に限り $D[P : Q] = 0$
- 3. P, Q が近い時に次のようにテーラー展開ができる。
つまり、 P, Q の座標を $\xi, \xi + d\xi$ とすると

$$D[\xi : \xi + d\xi] = \frac{1}{2} \sum g_{ij}(\xi) d\xi_i d\xi_j$$

と展開できて、行列 $G(\xi) = \{g_{ij}(\xi)\}$ が正値対称行列になる。

ダイバージェンスは2点間がどれだけ分離しているかの目安になる量である。

すると、距離でいいのではないかと思うが、距離とは異なり、ダイバージェンスは次のように対称でなくともよい。

$$D[Q : P] \neq D[P : Q]$$

つまり、三角不等式も成立せず、向きを持つ。これは一般化距離の2乗の次元と同じであるので、次のリーマン空間の不変距離

$$ds^2 = \sum g_{ij}(\xi) d\xi_i d\xi_j$$

を一般化して、非対称でも可とし、さらに、微少である必要もないとしたものである。

例. 1. ユークリッド空間

簡単なユークリッド空間は次のように対称になるダイバージェンス関数である。

$$D[\xi : \xi'] = \frac{1}{2} \sum (\xi_i - \xi'_i)^2$$

例. 2. 確率分布空間 Kullback-Leibler

2つの確率分布を $p(x)$ と $q(x)$ のダイバージェンスを

$$D_\alpha [p(x) : q(x)] = \int p(x) \log \frac{p(x)}{q(x)} dx$$

で定義し、これを **KL ダイバージェンス** $KL[p : q]$ で表す。

これは非対称である。さらに離散分布の場合は α をパラメタとして

$$D_\alpha [p(x) : q(x)] = \frac{4}{1 - \alpha^2} \left\{ 1 - \int p(x)^{\frac{1-\alpha}{2}} q(x)^{\frac{1+\alpha}{2}} dx \right\}$$

で定義する。これは α ダイバージェンスと呼ばれる。

3. 正定値行列

次のような例がある。

統計でよく利用されるのが P, Q を分散として、平均0の多次元ガウス分布のKLダイバージェンスとして

$$D[P : Q] = \text{Tr}[PQ^{-1}] - \log |PQ^{-1}| - n$$

がある。後に量子情報論で扱うものが

$$D[P : Q] = \text{Tr} P \log P - P \log Q - P + Q$$

さらに α ダイバージェンスの拡張として

$$D[P : Q] = \frac{4}{1 - \alpha^2} \text{Tr} \left[-P^{\frac{1-\alpha}{2}} Q^{\frac{1+\alpha}{2}} + \frac{1-\alpha}{2} P + \frac{1+\alpha}{2} Q \right]$$

がある。

2.2.3 双対平坦構造

多様体 M 上の微分可能な凸関数 $\psi(\xi)$ が与えられたとすると次のヘシアンは正定値行列になる。

$$H(\xi) = \left(\frac{\partial^2}{\partial \xi_i \partial \xi_j} \psi(\xi) \right)$$

3 密度行列

観測の問題はミクロとマクロ間の相互作用でもあるが、これを表す最も重要な演算子が密度演算子である。これは内部と外部との関係でもあり、量子論的な粗視化のメカニズムを持つ。ここではこの演算子のイメージをつかむために、多面的に考察を試みる。後半の Green 関数との関連で非常に重要な概念が得られる。

3.1 密度演算子

3.1.1 純粋と混合

量子力学の状態は重ね合わせの成り立つ純粋状態として考える。さらに干渉性が消失した状態が混合した、混合状態を区別することが観測を考える上で重要である。はじめに2つの純粋状態を空間回転 ϕ, θ を用いて

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \cos \frac{\theta}{2} |0\rangle + e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} |1\rangle \\ &= c_1 |0\rangle + c_2 |1\rangle \end{aligned}$$

とあらわすと、この状態の含まれる割合が比

$$\frac{c_1}{c_2} = \frac{\cos(\frac{\theta}{2})}{e^{i\phi} \sin(\frac{\theta}{2})}$$

で表され、これらは回転角に依存しする、コヒーレントな状態である。これに対しインコヒーレントな状態をどう表すかを考えよう。そのための c_1, c_2 の係数は

$$\sum_i c_i = 1$$

を満たし、統計学のアンサンブル平均を利用し

$$[A] = \sum_i c_i \langle \psi^{(i)} | A | \psi^{(i)} \rangle$$

を考えよう。これは観測量を重みをつけて足し合わせていることになる。さらに単位行列の展開を用いて

$$\begin{aligned} [A] &= \sum_i c_i \sum_{a,b} \langle \psi^{(i)} | a \rangle \langle a | A | b \rangle \langle b | \psi^{(i)} \rangle \\ &= \sum_{a,b} \left(\sum_i c_i \langle b | \psi^{(i)} \rangle \langle \psi^{(i)} | a \rangle \right) \langle a | A | b \rangle \end{aligned} \tag{3.1}$$

と表すことができる。この i は純粋状態の数であり、 a, b は状態空間の次元数である。最後の項が特定の観測量 A に依存しないことが重要である。ここで密度演算子 (density_operator) ρ を次のように定義する。

$$\rho \equiv \sum_i c_i |\psi^{(i)}\rangle \langle \psi^{(i)}| \quad (3.2)$$

行列要素は

$$\langle b|\rho|a\rangle = \sum_i c_i \langle b|\psi^{(i)}\rangle \langle \psi^{(i)}|a\rangle$$

これを用いると一般に力学量の期待値は

$$\langle A\rangle = \sum_{a,b} \langle b|\rho|a\rangle \langle a|A|b\rangle = \sum_b \langle b|A|b\rangle = \text{Tr}[\rho A] \quad (3.3)$$

となり、対角和で表される。単純に密度演算子 ρ の対角和をとると

$$\text{Tr}[\rho] = \sum_i \sum_a c_i \langle a|\psi^{(i)}\rangle \langle \psi^{(i)}|a\rangle = \sum_i c_i \langle \psi^{(i)}|\psi^{(i)}\rangle = 1$$

である。よって規格化されている。

さらに密度演算子は式 3.2 からエルミートであることがわかる。

また、この式から純粋状態の密度演算子も

$$\rho \equiv |\psi^{(i)}\rangle \langle \psi^{(i)}| \quad (3.4)$$

とかける。この時

$$\rho^2 = \rho$$

であり、

$$\rho(\rho - 1) = 0$$

であるので純粋状態であれば

$$\text{Tr}[\rho^2] = 1 \quad (3.5)$$

も成り立っていることがわかる。

これを純粋条件と呼ぶ。

具体的には純粋状態の密度演算子是对角化すると n を rank 数として

$$\rho = \frac{1}{n} \begin{pmatrix} 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & & & \vdots \\ 0 & & 1 & & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix} \quad (3.6)$$

のように表すことができる。対角和の 2 乗も 1 になる。

これは最大値で純粋状態でなければ 1 より小さい。

例えば状態 1 のみの状態は

$$\rho = |1\rangle \langle 1| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

であり、純粋状態である。

次に状態 1 と 0 が次のように重ね合わせで含まれている場合。

$$\begin{aligned}
 \rho &= |A_{\pm}\rangle\langle A_{\pm}| \\
 &= \left(\frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle \pm |0\rangle) \right) \left(\frac{1}{\sqrt{2}}(\langle 1| \pm \langle 0|) \right) \\
 &= \frac{1}{2} \left(\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \pm \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \pm \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right) \\
 &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & \pm 1 \\ \pm 1 & 1 \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

だから

$$\rho^2 = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & \pm 1 \\ \pm 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \pm 1 \\ \pm 1 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 2 & \pm 2 \\ \pm 2 & 2 \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

となり、やはり、対角和の 2 乗だけみれば 1 であるので純粋状態である。

次に状態 1 と 0 が次のように含まれている場合を考えよう。

$$\begin{aligned}
 \rho &= \frac{1}{2}(|A_+\rangle\langle A_+|) + \frac{1}{2}(|A_-\rangle\langle A_-|) \\
 &= \frac{1}{2} \left(\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right) \\
 &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

だから

$$\rho^2 = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.8)$$

よって

$$\text{Tr}[\rho^2] < 1 \quad (3.9)$$

であるのでこれは混合状態である。

式 3.9 を混合条件と呼ぶことにする。

3.1.2 一意性

密度行列を一般化し、密度作用素を考える。ヒルベルト空間 \mathcal{H} とし、力学量を \mathcal{H} 上の自己共役作用素

$$A \in \mathcal{B}(\mathcal{H}) (A^\dagger = A)$$

が付随し、 \mathcal{H} 上の有界な自己共役作用素の空間を

$$\mathcal{D}(\mathcal{H}) \equiv \{A \in \mathcal{B}(\mathcal{H}) (A^\dagger = A)\}$$

で表すと力学量 $A \in \mathcal{D}(\mathcal{H})$ の期待値を $\psi \in \mathcal{H}$ として、次のように内積で表される。

$$\langle A \rangle = (\psi, A\psi) \in \mathbb{R}$$

ここで条件として正值と対角和が 1 となることを満たす作用空間を \mathcal{S} とし、Cauchy 列を \mathcal{C} とすると

$$\mathcal{S}(\mathcal{H}) \equiv \{\rho \in \mathcal{C}(\mathcal{H}); i) \rho \geq 0, ii) \text{Tr}[\rho] = 1\}$$

で密度作用素空間を定義する。

$$A|a_n\rangle = a_n|a_n\rangle$$

$$\hat{\rho} = \sum_n |a_n\rangle\langle a_n|$$

この時、期待値 $\langle A \rangle$ は次のように対角和で定義される。

式 3.3 から

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \sum_{n,n'} \langle b_{n'}|a_n\rangle \langle a_n|a_{n'}\rangle \langle a_{n'}|A|b_{n'}\rangle \\ &= \sum_{n,n'} \langle b_{n'}|\rho|a_n\rangle \langle a_n|A|b_{n'}\rangle \\ &= \sum_{n'} \langle b_{n'}|\rho A|b_{n'}\rangle \\ &= \text{Tr}[\rho A] \in \mathbb{R} \end{aligned}$$

であり、密度作用素は一意であることが保証される。つまり、

$$\text{Tr}[\rho_1 A] = \text{Tr}[\rho_2 A] \Leftrightarrow \rho_1 = \rho_2$$

となる。観測過程は密度演算子が物理量 A に作用し、その対角和から期待値ができる。

3.2 粗視化の原理

3.2.1 浮力の作用点変化

まず、高校物理の内容を例に、古典的にも粗視化される例があることをみておこう。

水中に木片を沈めて行く場合の浮力の作用点は木片が沈んだ深さに対応して変化する。この時の浮力の仕事は浮力の作用点が変わるので木片の変位と浮力の作用点の変位は異なる。しかし、木片は剛体として扱えば、浮力の作用点変化を仕事で計算するときは関知しない。つまり、どこの内部位置で木片を押しても力 F は F のままである。

例えば下図のように密度 ρ の液体中に一様材質で断面積 S の円柱を深さ h まで沈めて放すと浮力が働き、この浮力が仕事をする。深さ $h/2$ まで浮き上がった時に、浮力のした仕事を考えよう。

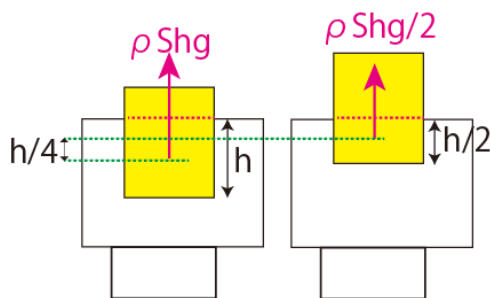


図 3.1: 浮力の作用点の変化

この時の浮力の移動は作用点が水中にある部分の重心になるから、図のように

$$y(h) = \frac{h}{2} \rightarrow \frac{h}{4}$$

である。この間に浮力 F は

$$F(y) : \rho Shg \rightarrow \rho Shg/2$$

だけ変化するので、浮力の仕事を W_F とすると

$$F(y) = 2\rho Sgy$$

として、次のように計算すべきであろう。

$$W_F = 2\rho Sg \int_{h/4}^{h/2} y dy = \rho Sg \cdot \frac{3h^2}{4} \quad (3.10)$$

一方で、水面から下の体積 V , 浮力の作用点までの深さ y での浮力の位置エネルギー $U(y) = \rho Vgy$ の差と考えると

$$\begin{aligned} U(1) - U(2) &= \rho Sgh \cdot \frac{h}{2} - \frac{\rho Sgh}{2} \cdot \frac{h}{4} \\ &= \rho Sg \cdot \frac{3h^2}{8} \end{aligned}$$

である。

しかし、高校の物理で習ったように浮力の位置エネルギーは浮力が保存力になるのでこの結果が正しい。つまり、浮力は変化しているが線形的な変化なので平均値 $F' = 3\rho Shg/2$ 変位は $\Delta y = h/4$ だから

$$W'_F = F' \cdot \Delta y = \frac{3\rho Shg}{2} \cdot \frac{h}{4} = \rho Sg \cdot \frac{3h^2}{8}$$

である。つまり、剛体を考えた時に浮力の作用する位置は粗視化される。

3.2.2 波動的側面

第6部では前半で量子論の波動的側面を中心にみた。この時、定常波の存在から粗視化を考えた。この内容を復習しておく。古典的に図のような2つの波源のある水面波をイメージした。

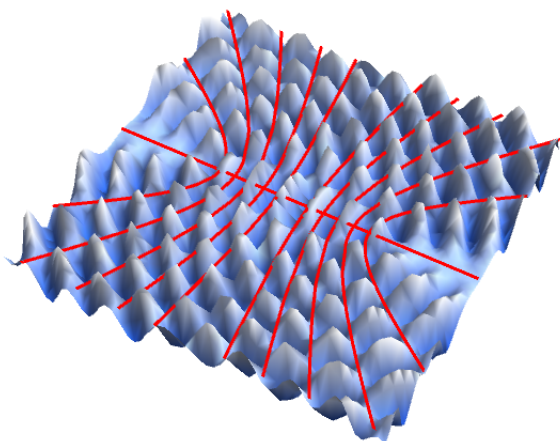


図 3.2: 2波源のある水面にできる定常波

場の表現は常に生成演算子と消滅演算子が共に現れる。

$$\phi(x) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{1}{\sqrt{2E_{\mathbf{p}}}} (a_{\mathbf{p}} e^{-ip \cdot x} + a_{\mathbf{p}}^\dagger e^{ip \cdot x}) \quad (3.11)$$

これから異なる空間位置での交換子が計算できて

$$\begin{aligned} [\phi(x), \phi(y)] &= \sum (u_k(x) u_k^*(y) - u_k^*(x) u_k(y)) \\ &= \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{2\omega_k} (e^{-ik(x-y)} - e^{ik(x-y)}) \end{aligned} \quad (3.12)$$

とした。つまり、交換子には向きの異なる2つの波が現れる。

古典的には正負に進行する波から定常波が空間全体に広がった様子を表している。

これを4次元に拡張し次のように定義した。

$$[\phi(x), \phi(y)] = \int_C \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \left(\frac{-i}{k^2 - m^2} \right) e^{-ik(x-y)} \equiv \Delta(x, y) \quad (3.13)$$

これは4次元積分であり、特に時間 k^0 積分は振動数の積分になるから、これを実施して、交換子となることをもう一度見る。重要なのは図のように $k = k \pm \Delta k$ だけ離れた2点に波源をもつ波の重ね合わせを考えたことである。

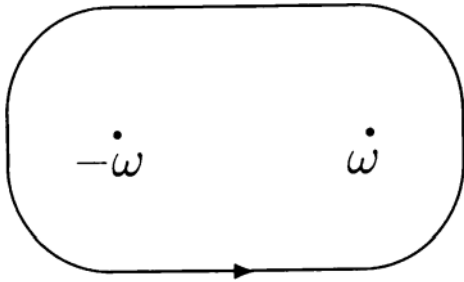


図 3.3: [95] より：複素平面上に正負の振動数を持つ点源を考える。

4次元成分を用いると積分路 C は図のようにとり、

$$(k^0)^2 = \mathbf{k}^2 + m^2$$

の関係があるので k^0 が \pm の解をとることなる。そこで

$$k_0 = E_{\mathbf{k}} = \pm \omega_{\mathbf{k}}, \quad \omega_{\mathbf{k}} = \sqrt{\mathbf{k}^2 + m^2}$$

とすれば留数積分から

$$\begin{aligned} \int_C dk_0 \left(\frac{-i}{k^2 - m^2} \right) e^{-ik(x-y)} &= \int_{C_{+\omega}} dk_0 \left(\frac{-i}{(k_0 - \omega_{\mathbf{k}})(k_0 + \omega_{\mathbf{k}})} \right) e^{-ik(x-y)} \\ &\quad + \int_{C_{-\omega}} dk_0 \left(\frac{-i}{(k_0 - \omega_{\mathbf{k}})(k_0 + \omega_{\mathbf{k}})} \right) e^{-ik(x-y)} \\ &= 2\pi i \frac{-i}{2\omega_{\mathbf{k}}} (e^{-ik(x-y)} - e^{ik(x-y)}) \end{aligned} \quad (3.14)$$

となる。つまり、2つの特異点が1つの正のエネルギー $\omega_{\mathbf{k}}$ で粗視化され、

ここではじめて向かい合う内向きの2つの波の合成が見える形になった。

これは $-\omega, +\omega$ を結ぶ実軸上で2つの波源の間とそれ以外を明確に区別することになる。

この区別がここでの制限された密度行列の考え方に重要になる。

端点が存在し、波源の間には定常波が合成され、それを超えると進行波しか見えない。
 これは同時に2つの波源があり、その境界上に観測者をおくことである。
 これは波源間の定常波が固有値を共有したことになる。
 この境界は2つの波源を仮定することと等しい。これは観測の原理である。
 第6部では観測的伝播関数として次で定義した。

$$\Delta(x, y) \equiv [\phi(x), \phi(y)] = \int_C \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} \left(\frac{-i}{k^2 - m^2} \right) e^{-ik(x-y)} = \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{1}{2\omega_k} \left(e^{-ik(x-y)} - e^{ik(x-y)} \right) \quad (3.15)$$

この粗視化の原理は密度行列をつくる上でも同じように必要であることをここで示したい。

3.2.3 測定と密度演算子

ここで前章での量子的な観測は後に扱う2ビットの qubit では $|0\rangle, |1\rangle$ しかないために次のような重ね合わせの状態をつくることができる。

$$|\Psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$$

この係数は $|0\rangle, |1\rangle$ を観測をする確率として、確率論では

$$P_0 = |\alpha|^2, P_1 = |\beta|^2$$

になった。さらに次のようなペアは射影演算子で

$$M_0 = |0\rangle\langle 0|$$

$$M_1 = |1\rangle\langle 1|$$

とすると

$$M_0|\Psi\rangle = \alpha|0\rangle$$

$$M_1|\Psi\rangle = \beta|1\rangle$$

(3.16)

のように取り出すことができ、このノルムから

$$|M_0|\Psi\rangle|^2 = \langle\Psi|M_0^\dagger M_0|\Psi\rangle = |\alpha|^2 = P_0$$

$$|M_1|\Psi\rangle|^2 = \langle\Psi|M_1^\dagger M_1|\Psi\rangle = |\beta|^2 = P_1$$

となる。ここで確率となるためには次のように確率条件を満たす必要がある。

$$\sum_i P_i = 1 \quad (3.17)$$

よって一般に M_i によってある i という状態が得られる確率は

$$P_i = \langle\Psi|M_i^\dagger M_i|\Psi\rangle \quad (3.18)$$

となるので式 3.16 から、多くの状態の線形和 $|\Psi\rangle$ とその要素の状態 $|\Psi_i\rangle$ には一般に

$$|\Psi\rangle = \sum_i \alpha_i |\Psi_i\rangle$$

とすれば射影演算子 M_i は次のような作用をする。

$$M_i|\Psi\rangle = \alpha_i |\Psi_i\rangle$$

また、射影演算子も確率条件式 3.17 から次を満足する必要がある。

$$\sum_i M_i^\dagger M_i = I$$

これはまさに式 1.5 のクロージャーであり完全性の条件である。

この時の α_i は一般には確率の平方根で複素数と考えると負の確率をゆるす。

射影演算子は状態を取り出す固有方程式のような役割をする。

これから

$$|\Psi_i\rangle = \frac{M_i |\Psi\rangle}{\alpha_i} = \frac{M_i |\Psi\rangle}{\sqrt{\langle \Psi | M_i^\dagger M_i | \Psi \rangle}} \quad (3.19)$$

である。

つまり、元の 1 つの波動関数（進行波）を知りたいときに全体に M_i を作用させればよい。

しかし、実際の確率や観測を得るには $M_i^\dagger M_i$ がセットで現れることに留意する。

これが前節の観測の原理の行列版である。次節の **POVM** につながる。

3.2.4 POVM

この状態の線形和から 1 つの状態へ射影する考えは密度行列にもあてはまる。

そこで式 3.18 を密度行列で表すことを考えよう。

密度演算子 ρ が p_k の割合で状態 $|\psi_k\rangle$ が混合している時には式 3.2 から

$$\rho = \sum_k p_k |\psi_k\rangle \langle \psi_k|$$

となった。ただし、

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= \sum_k \alpha_k |\psi_k\rangle \\ p_k &= |\alpha|^2 > 0 \end{aligned}$$

とする。

確率 P_k は $\langle \psi_{k'} | \psi_k \rangle$ は $k = k'$ のみ値をとるから

$$\begin{aligned} P_k &= \langle \Psi | M_k^\dagger M_k | \Psi \rangle = \sum_k \langle \psi_k | \alpha_k^* \alpha_k | \psi_k \rangle \\ &= \sum_{kk'} \langle \psi_k | \psi_{k'} \rangle \alpha_k^* \alpha_k \langle \psi_{k'} | \psi_k \rangle \\ &= \sum_{k'} \langle \psi_k | \psi_{k'} \rangle p_k \langle \psi_{k'} | \psi_k \rangle \\ &= \text{Tr} \left(\sum_k p_k |\psi_k\rangle \langle \psi_k| \right) \\ &= \text{Tr} [\rho] \end{aligned}$$

ただし、

$$|\alpha_k|^2 = p_k$$

逆に

$$\begin{aligned} P_k &= \text{Tr} \left(\rho M_k^\dagger M_k \right) \\ &= \sum_{k'} \langle \psi_{k'} | \sum_k p_k |\psi_k\rangle \langle \psi_k| M_k^\dagger M_k | \psi_{k'} \rangle \end{aligned}$$

である。ここで正定値演算子測度 (Positive Operator Valued Measure) と呼ばれるものを紹介しよう。量子情報論では式 3.19 のように測定後の波動関数を問題にすることなく、実際の観測に関わる $M_i^\dagger M_i$ のセットを問題にして、確率を計算する場合が多い。もちろんこの部の本題は量子論の基本理論にあるので、確率密度とか確率振幅とよばれるものを構成する M は重要である。しかし、ここでは確率論を中心に考える。そこでこのセットを

$$E_i = M_i^\dagger M_i \quad (3.20)$$

とにおいて、この集合 $\{E_i\}$ を扱い、量子計算していいこうというわけである。これまで見てきたようにこの E_i は次の確率の条件をみたす。

$$\sum_i E_i = I$$

$$\langle \psi | E_i | \psi \rangle \geq 0$$

であり半正定値をとる。この関係を満たすものを正定値演算子測度 (Positive Operator Valued Measure) という。従って、この別表現として確率が対角和

$$P_i = \langle \psi | E_i | \psi \rangle = \text{Tr}(\rho E)$$

で表すことができる。しかしその中身は式 3.20 のように双対表現になっていることが数学的な確率と異なることは重要で後に考察を深めたい。

3.2.5 部分トレース

先の 2 つの波源を考えたのをここでは全系が A, B の 2 つの領域のみからなる単純な場合を考えよう。この時の全系の密度演算子を A は部分系になるので、この A の密度演算子は次のようになる。

$$\hat{\rho}^{A+B}$$

最初の章でシュテルン・ゲルラッハの実験において、何もしない選択として、単位演算子をかけた。ここで B を無視して A を測定することを考えよう。これは単純に A だけを見ればよい。いうわけではなく重要な問題がある。前節でみた部分系というのがどういうものかをはじめに確認する。例えば A に対するある測定演算子を

$$\{M_i^A\}$$

とする。感覚的にこの測定に対して、密度演算子 $\hat{\rho}^{A+B}$ と $\hat{\rho}^A$ が区別できないならば $\hat{\rho}^A$ は $A+B$ の系の部分系となるはずである。

この時、 $\hat{\rho}_A$ が作用するためには次のように $\{M_i^{A+B}\}$ をわかる必要がある。

$$\{M_i^{A+B}\} = \{M_i^A \otimes I^B\}$$

B が変化をあたえないということは単位行列との直積で表せる必要がある。これが観測による粗視化の量子力学版である。行列の次元は落とさないが、部分的に単位行列にしてしまう。この時、観測 i を得る確率 P は前節の結果から

$$P_i = \text{Tr}(\hat{\rho}^{A+B} M_i^{A+B})$$

$$= \text{Tr}(\hat{\rho}^{A+B} (M_i^A \otimes I^B)) \quad (3.21)$$

一方で同じ観測 i を得る確率は $\hat{\rho}^A$ が部分系であれば

$$P_i = \text{Tr} (\hat{\rho}_A M_i^A) \quad (3.22)$$

となるはずである。あくまで確率とした時に両者が等しくなるためには式 3.21 から

$$\begin{aligned} P_i &= \text{Tr} (\hat{\rho}^{A+B} (M_i^A \otimes I^B)) \\ &= \sum_a \sum_b \langle a | \langle b | \hat{\rho}^{A+B} (M_i^A \otimes I^B) | b \rangle | a \rangle \\ &= \sum_a \sum_b \langle a | \langle b | \hat{\rho}^{A+B} | b \rangle M_i^A | a \rangle \end{aligned}$$

となるが

$$\text{Tr}_B (\hat{\rho}^{A+B}) = \sum_b \langle b | \hat{\rho}^{A+B} | b \rangle \quad (3.23)$$

で部分トレースを定義すると

$$\begin{aligned} P_i &= \sum_a \sum_b \langle a | \langle b | \hat{\rho}^{A+B} M_i^A | b \rangle | a \rangle \\ &= \sum_a \sum_b \langle a | \langle b | \hat{\rho}^{A+B} | b \rangle M_i^A | a \rangle \\ &= \sum_a \langle a | \text{Tr}_B (\hat{\rho}^{A+B}) M_i^A | a \rangle \\ &= \text{Tr}_A (\text{Tr}_B (\hat{\rho}^{A+B}) M_i^A) \end{aligned}$$

となる。これと式 3.22 をくらべれば次の重要な関係

$$\hat{\rho}^A = \text{Tr}_B (\hat{\rho}^{A+B})$$

が得られる。

これは領域 A の密度関数が領域 B でトレースをとるつまり

$$M_i^B \rightarrow I^B$$

とみなしてしまうことを表す。

つまり、トレースをとることが粗視化に相当する。

次に B が純粋状態であれば A, B の状態関数 $|\psi_n\rangle_A$ と $|\phi_n\rangle_B$ として第 8 部の結果から次のように直積空間で表す。

$$\hat{\rho}^{A+B} = \sum_n p_n |\psi_n\rangle_{AA} \langle \psi | \otimes |\phi_n\rangle_{BB} \langle \phi_n | \quad (3.24)$$

次の対角和の公式を用いる。

$$\begin{aligned} \text{Tr} \hat{\rho}^B &= \text{Tr} (|\phi_n\rangle_{BB} \langle \phi |) = \sum_m \langle m | \phi_n \rangle_{BB} \langle \phi_{nm} | m \rangle_B \\ &= \langle \phi_n | \sum_m | m \rangle_{BB} \langle m | \phi_n \rangle_B \\ &= \langle \phi_n | \phi_n \rangle_B = 1 \end{aligned}$$

これは行列の情報を対角成分の和だけに落としている。

第 6 部でスリットの干渉性について触れたが、無限遠のスリットを有限にもってくるのが

干渉性と関係したことが、部分トレースでは起きている。
 A も部分系になるので、この A の密度演算子は次のように定義できる。
 ただし、 Tr_B は系 B のみについて部分トレースを取ることを意味する。

$$\hat{\rho}^A \equiv \text{Tr}_B (\hat{\rho}^{A+B}) = \sum_n p_n |\psi_n\rangle_{AA} \langle\psi_n| \quad (3.25)$$

つまり、 A の密度行列は系 B の対角和をとればよい、逆に B の密度行列は系 A の対角和を取る。
 その結果、上式のように系 B の領域が ${}_B \langle\phi_n|\phi_n\rangle_B = 1$ と粗視化される。
 その結果、式 3.25 のように A の密度行列が定義できる。
 特にこの $\hat{\rho}^A$ を A に対する還元密度演算子と呼ぶことがある。
 ただし、観測する物理量 \hat{O}^A が系 A のみから作られていると、次は区別できない。

$$\text{Tr}_A (\hat{\rho}^A \hat{O}^A) = \text{Tr} (\hat{\rho} \hat{O}^A)$$

もちろんはじめから系 A での密度演算子は A だけで

$$\hat{\rho}_A = |\psi_n\rangle_{AA} \langle\psi_n|$$

で定義すればよいかと思うし、多くの教科書の定義である。

しかし、 $\text{Tr} \hat{\rho}_B$ がその前にかかっている、これが純粋状態であれば 1 になっているところが重要である。

物理現象を観測者も含めて議論する場合にはトータル次元は保存され、 A を見ようとするとその補集合の領域 \bar{A} を $I^{\bar{A}}$ 化して、対角和をとるのである。つまり、あらゆる密度行列には必ず内外の境界があり、他方の部分系の情報を縮約しトレースを取ることにすると

$$\begin{aligned} \hat{\rho}^A &= \text{Tr}_B (\hat{\rho}^{A+B}) = \text{Tr}_B \left[\sum_{n,m} p_{nm} |\psi_n\rangle_{AA} \langle\psi|_n \otimes |\phi_m\rangle_{BB} \langle\phi_m| \right] \\ &= \text{Tr} (|\phi_m\rangle_{BB} \langle\phi_m|) \sum_n p_n |\psi_n\rangle_{AA} \langle\psi_n| \end{aligned} \quad (3.26)$$

とかけるべきである。 A も純粋状態であれば

$$\sum_n \pm \sqrt{p_n} |\psi_n\rangle_A = |\Psi_A\rangle$$

として合成波を見た時に

$$\hat{\rho}_A = |\Psi_A\rangle \langle\Psi_A|$$

に戻る。

波動関数表現で $\psi(x)$ は行列と次のように内積で対応していた

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$$

トレースを取るときには

$$\text{Tr} (|\psi\rangle \langle\psi|) = \sum_n \langle x_n|\psi\rangle_{nn} \langle\psi|x_n\rangle = \sum \psi_n(x) \psi_n^*(x)$$

のようになる。これは式 3.11 で生成と消滅演算子のセットで場を考えたのと同様に内向きの波を考えていることになる。

3.2.6 部分トレース例

実際に次のような2ビットの場合の部分トレースを計算してみる。

$$A : \{|a_0\rangle, |a_1\rangle\}, B : \{|b_0\rangle, |b_1\rangle\}$$

ここで次のような系の状態ベクトルを考える。

$$\Psi^{A+B} = |a_0\rangle |b_1\rangle$$

この系の密度行列は次のように純粋状態で書くことができる。

$$\rho^{A+B} = |a_0\rangle |b_1\rangle \langle a_0| \langle b_1|$$

つまり、この系は純粋状態にある。

式 3.26 から

$$\begin{aligned} \rho^A &= \text{Tr}_B [\rho^{A+B}] \\ &= \sum_i \langle b_i | (|a_0\rangle |b_1\rangle \langle a_0| \langle b_1|) |b_i\rangle \\ &= |a_0\rangle \langle a_0| \sum_i \langle b_i | b_1\rangle \langle b_1 | b_i\rangle \\ &= |a_0\rangle \langle a_0| (\langle b_0 | b_1\rangle \langle b_1 | b_0\rangle + \langle b_1 | b_1\rangle \langle b_1 | b_1\rangle) \end{aligned}$$

従ってこの結果は正規直交基底であれば

$$\langle b_0 | b_1\rangle = 0, \langle b_1 | b_1\rangle = 1$$

であるから

$$\rho_A = |a_0\rangle \langle a_0|$$

であるので進行波としては

$$|\psi_A\rangle = |a_0\rangle$$

となる。

次に $|a\rangle |b\rangle$ の積からエンタングルドな系

$$|\Psi^{A+B}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|a_0\rangle |b_0\rangle + |a_1\rangle |b_1\rangle)$$

を考える。同様に密度行列は

$$\begin{aligned} \rho^{A+B} &= \frac{1}{2} (|a_0\rangle |b_0\rangle + |a_1\rangle |b_1\rangle) (\langle a_0| \langle b_0| + \langle a_1| \langle b_1|) \\ &= \frac{1}{2} (|a_0\rangle |b_0\rangle \langle a_0| \langle b_0| + |a_0\rangle |b_0\rangle \langle a_1| \langle b_1| + |a_1\rangle |b_1\rangle \langle a_0| \langle b_0| + |a_1\rangle |b_1\rangle \langle a_1| \langle b_1|) \end{aligned}$$

である。これは式 3.7 でみたように2ビット状態とみなすと

次のようにかける。

$$\begin{aligned} \rho &= \left(\frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle + |0\rangle) \right) \left(\frac{1}{\sqrt{2}} (\langle 1| + \langle 0|) \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right) \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

よって

$$\rho^2 = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 2 \end{pmatrix}$$

となるので純粋条件

$$\text{Tr}[(\rho^{A+B})^2] = 1$$

を満たす純粋状態である。

次に部分トレースをとると0にならないもののみを拾い出して、

$$\begin{aligned} \rho^A &= \text{Tr}_B [\rho^{A+B}] \\ &= \frac{1}{2} \langle b_0 | (|a_0\rangle |b_0\rangle \langle a_0| \langle b_0|) |b_0\rangle + \frac{1}{2} \langle b_1 | (|a_1\rangle |b_1\rangle \langle a_1| \langle b_1|) |b_1\rangle \\ &= \frac{1}{2} \left(\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right) \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

となるので

$$(\rho^A)^2 = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

となるので混合条件

$$\text{Tr}[(\rho^A)^2] = \frac{1}{2} < 1$$

を満たす。

興味あることに純粋状態の部分系を取り出すと、量子的な干渉稿が消え、対角和は1より小さくなっている。これは第1章でのシュテルンゲルラッハの実験において、途中で成分の観測を入れた結果に等しい。

3.3 時間発展

前節から自然に時間発展が次のように定義できる。ただし、波動関数は完全性の条件を満たしているとする。

$$\begin{aligned} \rho(x, x', t) &= \sum_{n,m} a_{nm} \psi_n^*(x', t) \psi_m(x, t) \\ &= \sum_{n,m} \psi_n^*(x', t) \psi_m(x, t) e^{-\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n)t} \end{aligned}$$

ただし、次のように時間、空間成分が分離できるとする。

$$\psi_m(x, t) = \psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_m t}$$

3.4 全体と部分

3.4.1 伝播関数の復習

同じような2つの領域の関係を第6部では波動関数として、波の干渉を考えた。この時、虚軸を横切る境界を考え、仮想的な粒子を考えた。後に、ここでの密度行列との対比のためにはじめに、手続きも含めて、Green関数法を以下で復習しておく。

ただし、ボソンの場合を考える。

ファインマンの伝播関数は順序積 T を用いて、定常波を意識し、

$$\begin{aligned}\Delta_F &\equiv \langle 0|T\phi(x)\phi(y)|0\rangle \\ &= \langle 0|\theta(x^0 - y^0)\phi(x)\phi(y) + \theta(y^0 - x^0)\phi(y)\phi(x)|0\rangle\end{aligned}\tag{3.27}$$

で表す。 $\phi(x)$ の展開式

$$\phi(x) = \sum_k a_k u_k(x) + \sum_k a_k^\dagger u_k^*(x)$$

を用いると

$$\Delta_F(x, y) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{1}{2E_p} \left[\theta(x^0 - y^0) e^{-ip \cdot x(x-y)} + \theta(y^0 - x^0) e^{ip \cdot x(x-y)} \right]$$

となる。留数積分の際に $x^0 > y^0$ の時は $p_0 = E_p$ の極のみをとり、 $x^0 < y^0$ の時は $p_0 = -E_p$ の極のみをとり

上半面、下半面で閉回路をつくる。

第6部でみたように虚数成分の大きいところで0とみなせるので、実数上の積分ができる。

そこで次の図のように $\pm i\epsilon$ だけずらし、としてファインマンの伝播関数を次のようにおいた。

$$\Delta_F(x, y) \equiv \int_{closed} \frac{d^4p}{(2\pi)^4} \left(\frac{i}{p^2 - m^2 + i\epsilon} \right) e^{-ip \cdot (x-y)}\tag{3.28}$$

この時 p^0 は

$$p^0 = \pm (E_p - i\epsilon)$$

をとるので、先の図のようにファインマンの伝播関数は上面半分、下面半分の閉経路共に得点を含む。

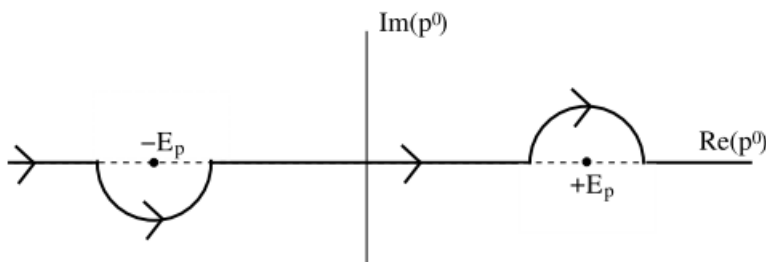


図 3.4: [113] より:Feynman 伝播関数の積分経路 ; $x^0 > y^0$ なので時計回り

伝播関数を次のように場合分けし、

$$D_F(x-y) = \begin{cases} D(x-y) & x^0 > y^0 \\ D(y-x) & x^0 < y^0 \end{cases}$$

として、双方を含めるために次のように順序積 T で表す。

$$D_F(x-y) \equiv \theta(x^0 - y^0) \langle 0 | \phi(x) \phi(y) | 0 \rangle + \theta(x^0 - y^0) \langle 0 | \phi(x) \phi(y) | 0 \rangle \\ = \langle 0 | T \phi(x) \phi(y) | 0 \rangle$$

KG 方程式から Green 関数は微小定数 ϵ を加えた次の方程式の解になる。

$$(\square + m^2 - i\epsilon) D_F(x-y) = \int \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} \frac{i}{p^2 - m^2 + i\epsilon} (-p^2 + m^2 - i\epsilon) e^{-ip \cdot (x-y)} \\ = -i\delta^4(x-y)$$

を満たす。この微小部分は非常に重要な意味がある。最終的には

$$\epsilon \rightarrow 0$$

を実施する。

$$(\square_E + m^2) G(x, y) = \delta^4(x-y)$$

これは観測の効果と関係する。ここではその過程に注目しよう。

この ϵ は次の図のように 2 つの特異点が実軸を交差するように現れる。

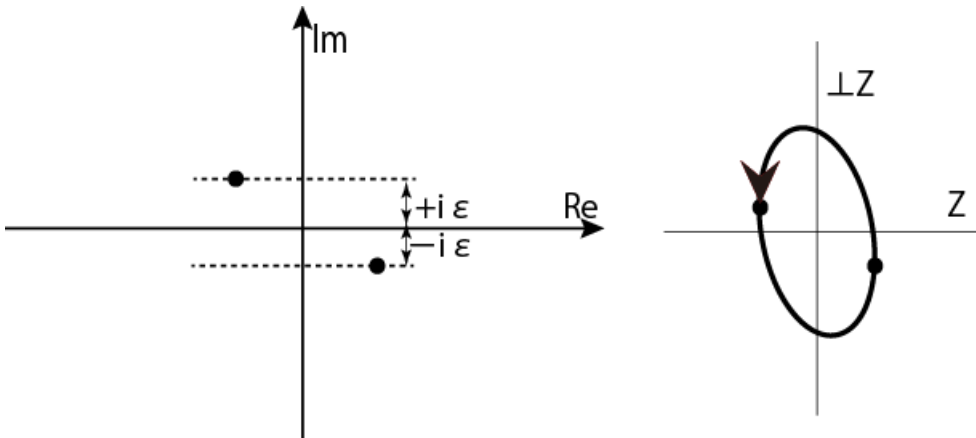


図 3.5: 極を虚軸方向にずらす、左図のように p^0 を複素空間にわけて、2 つの特異点をつくる

そこで、この積分を k_0 を虚軸にとり、虚軸に沿っておこなうことを考える。
つまり次のように解析的に変形する。

$$G(x, y) = \int_{-i\infty}^{+i\infty} dk_0 \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^4} \left(\frac{i}{k^2 - m^2} \right) e^{-ik(x-y)} \quad (3.29)$$

ここでミンコフスキー時空をユークリッド化して、

$$k_0 = ik_4$$

$$x^0 = ix^4$$

とするとこの積分はユークリッド化したグリーン関数を G_E として

$$G(x, y) = \int \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} \left(\frac{1}{k^2 + m^2} \right) e^{ik(x-y)} \\ = G_E(x, y) |_{x^4 = -ix^0, y^4 = -iy^0}$$

とかける。ただし、ユークリッド化により

$$k^2 = \mathbf{k} \cdot \mathbf{k} + k_4^2$$

$$k(x-y) = \mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y}) + k_4(x^4 - y^4)$$

である。これは伝播関数がユークリッド化により x^4, y^4 の虚数値に解析接続されたと考える。これによりクライン・ゴルドン方程式は

$$(\square + m^2) \mathcal{G}(x, y) = -i\delta^4(x - y)$$

に従うとみなせる。

これらの伝播に向きが入る。 $x^0 < y^0$ の時は粒子の伝播は $x \rightarrow y$ であり、 $x^0 > y^0$ の時は粒子の伝播は $y \rightarrow x$ である。

そこで経路積分の伝播 K を用いて

$$K(x, y) = \begin{cases} \langle \mathbf{x}, x^0 | \mathbf{y}, y^0 \rangle & (x^0 > y^0) \\ \langle \mathbf{y}, y^0 | \mathbf{x}, x^0 \rangle & (x^0 < y^0) \end{cases}$$

であり、時間推進をハミルトニアンが担ったから 2 点間の確率振幅として

$$K(x, y) = \theta(x^0 - y^0) \langle \mathbf{x} | e^{-iH(x^0 - y^0)} | \mathbf{y} \rangle + \theta(y^0 - x^0) \langle \mathbf{y} | e^{-iH(y^0 - x^0)} | \mathbf{x} \rangle \quad (3.30)$$

となる。

これは $x \rightarrow y, y \rightarrow x$ の波の合成である。

このように交換子 $[\phi(x), \phi(y)]$ が定常波の合成であると考えるのは興味深い。

交換するような古典論では、たまたま定常波の節の部分を見ているだけだと考えられる。

問題なく、計算するために前節の式 3.28 の Green 関数でみたように p^0 を複素平面で表す。

次の図のように $\pm i\epsilon$ だけずらし、ファインマンの伝播関数は仮想粒子を取り入れて次のように改めておく。

$$\Delta_F(x-y) \equiv \int \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} \frac{i}{p^2 - m^2 + i\epsilon} e^{-ip \cdot (x-y)} \quad (3.31)$$

KG 方程式から Green 関数は次の方程式の解になる

$$\begin{aligned} (\partial_t^2 - \square + m^2) D_F(x-y) &= \int \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} \frac{i}{p^2 - m^2} (-p^2 + m^2) e^{-ip \cdot (x-y)} \\ &= -i\delta^4(x-y) \end{aligned}$$

を満たすことになる。この後で $\epsilon \rightarrow 0$ を施す。

4次元版で片道だけでなく両方向を考えると遅延 Green 関数が

$$G_R = \begin{cases} \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \frac{1}{2E_p} (e^{-ip(x-y)} - e^{ip(y-x)}) & x^0 > y^0 \\ 0 & x^0 < y^0 \end{cases}$$

となる。これは下図左のように

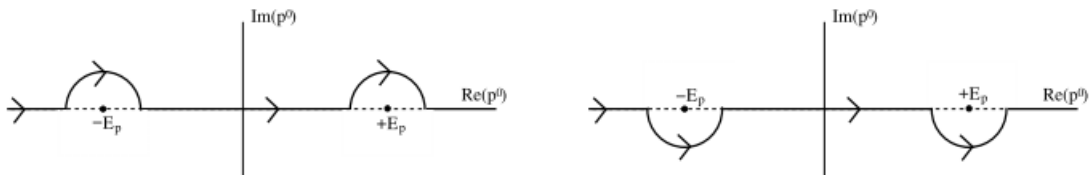


図 3.6: [113] より:遅延 (左)、先進 (右)

Feynman 伝播関数を用いて次のようにかける。

$$G_R = \begin{cases} D(x-y) - D(y-x) & x^0 > y^0 \\ 0 & x^0 < y^0 \end{cases}$$

これらは次の KG 方程式を満足する。

$$\partial^\mu \partial_\mu \phi + m^2 \phi = J(x)$$

ただし、調整のための関数を $J(x)$ とした。Green 関数の選び方は幾通りもあるが、時間順序をうまく考慮した

$$\langle 0 | T(\phi(x)\phi(y)) | 0 \rangle = G(x, y)$$

を満たすためには **Feynman 伝播関数**である必要がある。

3.4.2 純粋系

次に熱統計力学的な視点で考えてみよう。

自由度が非常に大きい場合は全体の系を対象と部分に分ける必要がある。

これは対象を観測することについて避けられない内容である。統計力学では外界の影響は確率的に取り込む。

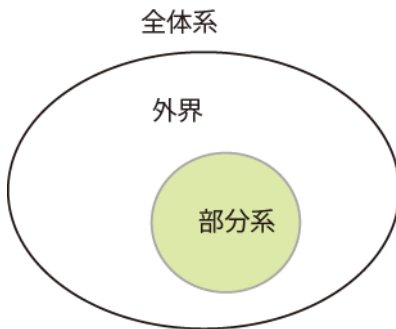


図 3.7: 純粋系

前節でみたように、空間相関がない、つまり外界と部分系の上に相互作用がないならばこの部分系は純粋系である。

この場合、波動関数が次のような重ね合わせで定義できる。

時間的な相関を見るために、次のように時間 t の関数とする。

定常的な状態であれば腹や節のように時間依存する場所としない場所が現れる。

部分系の全座標を $\xi \equiv \{x_1, x_2, \dots, x_N\}$ として

$$\Phi(\xi, t) = \sum_{\nu} a_{\nu} \phi_{\nu}(\xi, t)$$

この波動関数 ϕ_{ν} は完全規格直交系で

$$P_N = \int |\Phi|^2 = 1$$

から

$$\sum_{\nu} |a_{\nu}|^2 = 1 \tag{3.32}$$

が満たされ、部分系の演算子 \hat{O} を用いて期待値は

$$\mathcal{O} \equiv \int \Phi^* \hat{O} \Phi d\xi = \sum_{\nu\nu'} a_\nu a_{\nu'}^* \int \phi_{\nu'}^* \hat{O} \phi_\nu d\xi \quad (3.33)$$

となる。

この部分系にわたる操作は有限の時間を想定しないと実現できない。

従って純粋系は微小時間後との間に最も高い相関がある。この相関を R_t とすると、式 3.32 から

$$R_t = \sum_{\nu} |a_\nu|^2$$

とし、時間相関が波動関数の規格化を決めると仮定する。

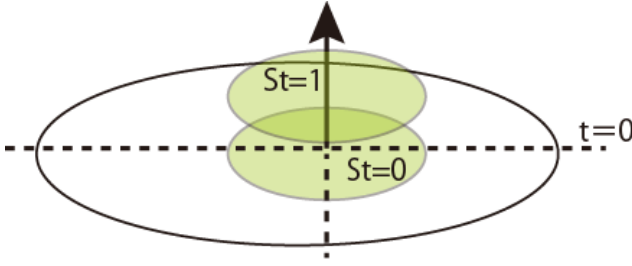


図 3.8: 純粋系の時間相関

3.4.3 混合系

一方で混合状態では前節でみたように、各対象の係数は 1 より小さい。

$$\rho = \frac{1}{2} (|A_+\rangle \langle A_+|) + \frac{1}{2} (|A_-\rangle \langle A_-|)$$

そこで混合系では 3.33 の展開係数を次のような平均値で表す。

$$\omega_{\nu\nu'} \equiv \langle a_\nu a_{\nu'}^* \rangle$$

これらは各対象の係数の和だから

$$\sum_{\nu} \omega_{\nu\nu} = 1 \quad (3.34)$$

とする。ただし、この規格化は異なる座標系との間で同時刻での空間的な接続を考えることになる。従って次の図のように 2 つの部分系を考えると密度行列を 2 つの座標系を引数に加えて定義する。

$$\rho(\xi, \xi', t) \equiv \sum_{\nu\nu'} \omega_{\nu\nu'} \phi_\nu(\xi, t) \phi_{\nu'}^*(\xi', t) \quad (3.35)$$

ただし、密度行列はエルミートで正値行列であるとする。

これは外界と部分系との間に何らかの相互作用があることを表している。

接続により時間と空間が分離できれば密度行列に対するシュレディンガー方程式が

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho(\xi, \xi', t) = (\hat{H}_\xi - \hat{H}_{\xi'}^*) \rho(\xi, \xi', t)$$

よって混合系の演算子 \hat{O} が期待値として条件 $\xi = \xi'$ の境界上の積分で定義できる。

$$\begin{aligned} \mathcal{O}(t) &\equiv \sum_{\nu\nu'} \omega_{\nu\nu'} \int \phi_{\nu'}^* \hat{O} \phi_\nu d\xi \\ &= \int \hat{O} \rho(\xi, \xi', t)|_{\xi=\xi'} d\xi \end{aligned}$$

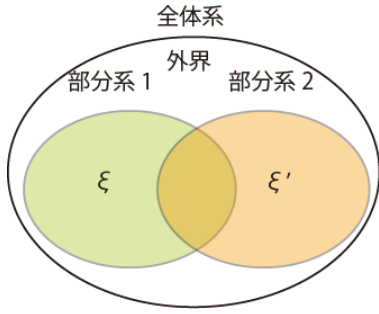


図 3.9: 混合系

次に、この相互作用の結果、系が平衡状態になった場合を考える。

3.4.4 平衡状態

平衡状態の密度行列はエネルギー固有状態 $\phi_\nu(\xi)$ とすると

$$\Psi_\nu(\xi, t) = \phi_\nu(\xi) e^{-iE_\nu t/\hbar}$$

と展開できたので、密度行列は

$$\rho(\xi, \xi'; t) = \sum_\nu \omega_{\nu\nu'} \phi_\nu(\xi) \phi_{\nu'}^*(\xi') e^{-i(E_\nu - E_{\nu'})t/\hbar} \quad (3.36)$$

となる。

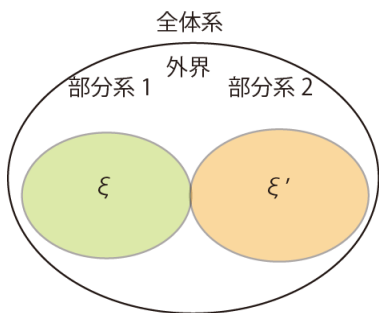


図 3.10: 部分系間の相互作用

平衡状態では ρ が時間依存しないとすると、

$$\omega_{\nu\nu'} \propto \delta_{\nu\nu'} \quad (3.37)$$

とみなせるから式 3.36 から、

$$\rho(\xi, \xi') = \sum_\nu \omega_\nu \phi_\nu(\xi) \phi_\nu^*(\xi') \quad (3.38)$$

となる。

ただし、これは安易で第 6 部で見たように、時間的には 2 つの波の合成から時間積分で $\delta_{\nu\nu'}$ が出てくる。

2 つの進行波の結果として定常波になり式 3.37 が成り立つ。

図のように 2 つの隣接する領域がある場合は部分系は独立しているとして部分系 1, 2 の複合系の確率を $p^{(1+2)}$, それぞれの確率をそれぞれ $p^{(1)}, p^{(2)}$ とすると、次が成り立つ。

$$p^{(1+2)} = p^{(1)} p^{(2)}$$

対数をとれば

$$\log p^{(1+2)} = \log p^{(1)} + \log p^{(2)}$$

この関係がエネルギー E にも成り立つから

$$E^{(1+2)} = E^{(1)} + E^{(2)}$$

つまり、確率はエネルギーで表すことができ、比例関係にあるから未知な定数 α, β をもって来て、次のような関係が成り立つ。

$$\log p(E) = \alpha - \beta E \quad (3.39)$$

$$\alpha^{(1+2)} = \alpha^{(1)} + \alpha^{(2)}$$

$$\beta^{(1)} = \beta^{(2)} = \beta$$

さらに規格化から式 3.39 を用いて全ての和をとると

$$1 = \sum_{\nu} \omega_{\nu} = \sum_{\nu} e^{\alpha - \beta E_{\nu}} \quad (3.40)$$

となるので対数をとると

$$0 = \log \sum_{\nu} e^{\alpha - \beta E_{\nu}}$$

よって

$$\alpha = -\log \sum_{\nu} e^{-\beta E_{\nu}}$$

とおける。熱力学からエネルギーが低いと出現確率が高くなるから

$$\alpha \equiv \beta F$$

と定義すれば

$$F = -\frac{1}{\beta} \log \sum_{\nu} e^{-\beta E_{\nu}} \quad (3.41)$$

であり、熱力学の自由エネルギー F は分配関数を Z として

$$F = -\tau \log Z$$

であったから式 3.41 は自由エネルギーを表していて、さらに β は

$$\beta \equiv \frac{1}{k_B T} > 0$$

と考えることができる。

$$dS = -k_B d(\log p(E)) = -\beta k_B d(F - E)$$

とすれば平衡状態で $dF = 0$ だから

$$k_B \beta = -\frac{d(F - E)}{dS} = \frac{dE}{dS} \equiv \frac{1}{T}$$

であり

$$\beta = \frac{1}{k_B T}$$

β は正値で大きな値をとると ω は大きくなる。

つまり実現期待値が高まる目安になっている。

この式は温度の定義でもある。

N 粒子の交換がある場合は確率分布関数を $\omega_{\nu N}$ として

次のように大正準集団と化学ポテンシャル μ を用いて次のように変形すればよい。

$$\omega_{\nu N} = e^{\beta(G - E_{\nu} + \mu N)} \quad (3.42)$$

この相加性の仮定は部分系 1 と部分系 2 で粒子の交換がある場合にも応用できる。つまりエネルギー E と同様に粒子数 N

にも相加性があると考え、化学ポテンシャルを μ として、自由エネルギー F を拡張し、

$$G = -\frac{1}{\beta} \log \sum_{\nu, N} e^{-\beta(E_{\nu} - \mu N)} \quad (3.43)$$

と置き換えればよい。この時の確率分布関数は

$$\omega_{\nu N} = e^{-\beta(G - E_{\nu} + \mu N)}$$

であり、これは第 3 部で扱った熱統計力学の大正準集団 (`grand_canonical_ensemble`) である。量子論と統計理論の類似性がここからみられる。

3.5 密度行列の第 2 量子化

3.5.1 置換対称性

第 6 部で同種多粒子系の置換演算子について触れた。同種粒子の N 粒子系のハミルトニアンを考え他粒子との相互作用を V として、次のように置く。

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^N \left[\frac{\hat{p}_j^2}{2m} + U(\mathbf{r}_j) \right] + \sum_{i < j} V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$$

このハミルトニアンはまとめて次のようにかけるとする。

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^N h_j^{(1)} + \sum_{i < j} h_{ij}^{(2)}$$

このハミルトニアンは互換演算子 \hat{P} と可換になり、

$$\hat{P} \hat{H} \hat{P}^{-1} = \hat{H}$$

が成り立つ。ここでは \hat{P} は互換演算子とする。これを 2 粒子系で確かめてみると

$$\begin{aligned} \hat{P}_{12} \hat{H} \hat{P}_{12}^{-1} &= \left[\frac{\hat{p}_2^2}{2m} + \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + U(\mathbf{r}_2) + U(\mathbf{r}_1) + V(|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|) \right] \hat{P}_{12} \hat{P}_{12}^{-1} \\ &= \hat{H} \end{aligned} \quad (3.44)$$

となり、ハミルトニアンに変化はない。よって \hat{P} と \hat{H} は同時対角化が可能である。

基本的には \hat{H} に時間依存性がないと置換演算子を作用させても、 \hat{P} の期待値は変化しない。

よって以下では置換演算子を \hat{P} で表す。これは次の性質を満たす。

\hat{P}_{12} が密度行列や射影行列のように

$$\hat{P}_{12}^2 = I$$

の性質を持つので、この \hat{P}_{12} 演算子の固有値を σ とすると

$$\hat{P}_{12} |\psi\rangle = \sigma |\psi\rangle$$

よって

$$\langle\psi| \hat{P}_{12}^\dagger \hat{P}_{12} |\psi\rangle = \langle\psi| \sigma^* \sigma |\psi\rangle$$

となるので

$$\begin{aligned} \sigma^2 &= 1 \\ \sigma &= \pm 1 \end{aligned}$$

が成り立ち、さらに第2部でみたように Pauli によってスピンとの関係が

$$\sigma = \begin{cases} +1 & \text{Bose (spin} = 1, 2, \dots) \\ -1 & \text{Fermi (spin} = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots) \end{cases}$$

さらにこの互換演算子は任意の置換演算子に拡張でき、前節の結果から、互換演算子の奇、偶数回の積によって次が成り立つ。

$$\sigma^P = \begin{cases} 1 & (P=\text{even}) \\ -1 & (P=\text{odd}) \end{cases}$$

よって N 粒子の場合、置換演算子は次のように作用する。多粒子系を区別するために ν の添え字を用意して、

$$\hat{P}\Psi_\nu(x_1, x_2, \dots, x_N) \equiv \Psi_\nu(x_{p_1}, x_{p_2}, \dots, x_{p_N})$$

のように表す。また、この \hat{P} の固有関数が Ψ_ν であるので、固有方程式

$$\hat{P}\Psi_\nu(x_1, x_2, \dots, x_N) = \sigma^P \Psi_\nu(x_1, x_2, \dots, x_N)$$

が成り立つ。これから多粒子系においてそこで \hat{P}_{12} が密度行列や射影行列のように

$$\hat{P}_{12}^2 = I$$

の性質を持つので、この \hat{P}_{12} 演算子の固有値を σ とすると

$$\hat{P}_{12} |\psi\rangle = \sigma |\psi\rangle$$

よって

$$\langle\psi| \hat{P}_{12}^\dagger \hat{P}_{12} |\psi\rangle = \langle\psi| \sigma^* \sigma |\psi\rangle$$

となるので

$$\begin{aligned} \sigma^2 &= 1 \\ \sigma &= \pm 1 \end{aligned}$$

が成り立ち、さらに第2部でみたように Pauli によってスピンとの関係が

$$\sigma = \begin{cases} +1 & \text{Bose (spin} = 1, 2, \dots) \\ -1 & \text{Fermi (spin} = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots) \end{cases} \quad (3.45)$$

さらにこの互換演算子は任意の置換演算子に拡張でき、前節の結果から、互換演算子の奇、偶数回の積によって次が成り立つ。

$$\sigma^P = \begin{cases} 1 & (P = \text{even}) \\ -1 & (P = \text{odd}) \end{cases} \quad (3.46)$$

よって N 粒子の場合、置換演算子は次のように作用する。多粒子系を区別するために ν の添え字を用意して、

$$\hat{P}\Psi_\nu(x_1, x_2, \dots, x_N) \equiv \Psi_\nu(x_{p_1}, x_{p_2}, \dots, x_{p_N})$$

のように表す。また、この \hat{P} の固有関数が Ψ_ν であるので、固有方程式

$$\hat{P}\Psi_\nu(x_1, x_2, \dots, x_N) = \sigma^P \Psi_\nu(x_1, x_2, \dots, x_N)$$

が成り立つ。これから多粒子系において

$$|x_{p_1}, x_{p_2}, \dots, x_{p_N}\rangle = \sigma^P |x_1, x_2, \dots, x_N\rangle \quad (3.47)$$

が成立する。

また、多粒子系 ν の状態を $\Psi_\nu(x_1, x_2, \dots, x_N)$ で表し、このブラケットを次で定義する。

$$|\Psi_\nu\rangle \equiv \int dy_1 \int dy_2 \cdots \int dy_N |y_1 y_2 \cdots y_N\rangle \Psi_\nu(y_1, y_2, \dots, y_N) \quad (3.48)$$

$$\langle \Psi_\nu | \equiv \int dy_1 \int dy_2 \cdots \int dy_N |y_1 y_2 \cdots y_N\rangle \Psi_\nu^*(y_1, y_2, \dots, y_N) = (|\Psi_\nu\rangle)^\dagger$$

ただし、ここでは $y_i = \mathbf{r}_i \alpha_i$ で積分すると \mathbf{r}_i の積分と α_i の和を意味するとする。

生成、消滅演算子の性質から次のように座標を引き出すことができる。

$$\hat{\psi}(x_1) |\Psi_\nu\rangle = \sqrt{N} \int dy_2 \cdots \int dy_N |y_2 y_3 \cdots y_N\rangle \Psi_\nu(x_1, y_2, y_3, \dots, y_N)$$

$$\hat{\psi}(x_2) \hat{\psi}(x_1) |\Psi_\nu\rangle = \sqrt{N(N-1)} \int dy_3 \cdots \int dy_N |y_3 y_4 \cdots y_N\rangle \Psi_\nu(x_1, y_2, y_3, \dots, y_N)$$

$$\hat{\psi}(x_N) \cdots \hat{\psi}(x_2) \hat{\psi}(x_1) |\Psi_\nu\rangle = \sqrt{N!} |0\rangle \Psi_\nu(x_1, x_2, x_3, \dots, x_N)$$

ただし、 Ψ_ν の次元は不変である。観測系の局所座標で $x_1, x_2, x_3, \dots, x_N$ で決められた時に次のように内積から波動関数が決められるようになる。

$$\langle x_1, x_2, x_3, \dots, x_N | \Psi_\nu \rangle = \Psi_\nu(x_1, x_2, x_3, \dots, x_N) \quad (3.49)$$

これから逆に $|\Psi_\nu\rangle$ が定義できる。

$$|\Psi_\nu\rangle \equiv \int dx_1 \int dx_2 \cdots \int dx_N |x_1 x_2 \cdots x_N\rangle \langle x_1 x_2 \cdots x_N | \Psi_\nu \rangle$$

いいかえると、次のように $|x_1 x_2 \cdots x_N\rangle$ は置換演算子 \hat{P} の固有空間に対して、完全系になっている。

さらに必要なのは \hat{P} の固有空間ではない任意の関数 $\bar{\Psi}(x_1, x_2, x_3, \dots, x_N)$ についても式 3.48 より、

$$|\bar{\Psi}\rangle = A_N \int dy_1 \int dy_2 \cdots \int dy_N |y_1 y_2 \cdots y_N\rangle \bar{\Psi}(y_1, y_2, \dots, y_N) \quad (3.50)$$

が成り立つので規格化定数 A_N が決まらないが、積分 $dy_1 \int dy_2 \cdots \int dy_N$ が対称・反対称な部分のみを引き出す。

ただし、 $\bar{\Psi}(x_1, \dots, x_N)$ は \hat{P} の固有空間にない、任意の関数とする。

これは非固有関数 $\bar{\Psi}$ を \hat{P} の固有空間に埋め込む操作とみなすことができる。

これから \hat{P} の固有関数は次のようになる。式 3.49 から

$$\begin{aligned} \Psi(x_1, x_2, \dots, x_N) &\equiv \langle x_1, x_2, x_3, \dots, x_N | \bar{\Psi} \rangle \\ &= \frac{A_N}{N!} \sum \sigma^P \bar{\Psi}(x_{p_1}, x_{p_2}, \dots, x_{p_N}) \end{aligned} \quad (3.51)$$

が成り立つ。

また、これらのブラケット表示は規格直交関係を次のように表す。

$$\langle \Psi_\mu | \Psi_\nu \rangle = \delta_{\mu\nu}$$

$$\sum_\nu |\Psi_\nu\rangle \langle \Psi_\nu| = I$$

が成り立つ。

以上から式 3.44 のハミルトニアンは次のように生成消滅演算子で書き換えることができる。

$$\hat{H} = \int dx_1 \hat{\psi}^\dagger(x_1) \left[\frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m} + U(\mathbf{r}_1) \right] \hat{\psi}(x_1) + \frac{1}{2} \int dx_1 \int dx_2 \hat{\psi}(x_1) \hat{\psi}^\dagger(x_2) V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \hat{\psi}(x_2) \quad (3.52)$$

ただし、多粒子系の状態ベクトルは次のように表す。

$$|\Psi\rangle = \int dx_1 \cdots \int dx_N |x_1 \cdots x_N\rangle \Psi_\nu(x_1, \cdots, x_N)$$

これは、ハミルトニアンを場の演算子、 $\hat{\psi}, \hat{\psi}^\dagger$ で表しているのので第 1 量子化と呼ぶことができる。

3.5.2 第 2 量子化

次に第 2 量子化をするために、完全規格直交関数 ϕ を用いて、場の演算子を次のように展開する。

$$\hat{\psi}(x) = \sum_k \hat{c}_k \phi_k(x), \quad \hat{\psi}^\dagger(x) = \sum_k \hat{c}_k^\dagger \phi_k^*(x) \quad (3.53)$$

ただし、Bose 系を +、Fermi 系を - の交換積を用いて消滅、生成演算子は

$$[\hat{c}_k, \hat{c}_{k'}^\dagger]_{\pm} = \delta_{kk'} \quad (3.54)$$

$$[\hat{c}_k, \hat{c}_{k'}]_{\pm} = 0 \quad (3.55)$$

をみたした。このように統計が、展開係数の交換関係で決まることには意味があり、後に考察したい。

自由粒子であればハミルトニアンは

$$\hat{H}_0 = \int dx_1 \hat{\psi}^\dagger(x_1) \left[\frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m} + U(\mathbf{r}_1) \right] \hat{\psi}(x_1) \quad (3.56)$$

であるの。ここで 1 粒子の場合の解は式 3.53 を満たす次のような ϕ_k であることがわかっているとしよう。

$$\left[\frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m} + U(\mathbf{r}_1) \right] \phi_k(x_1) = \epsilon_k \phi_k(x_1)$$

このとき、固有関数 $\phi_k(x)$ は完全規格直交性を満たすとする。

$$\phi_k(x) = \langle x|k\rangle$$

$$\langle k|k'\rangle = \int \phi_k^*(x_1) \phi_{k'}(x_1) dx_1 = \delta_{kk'}$$

$$\sum_k \phi_k(x_1) \phi_k^*(x_2) = \delta(x_1, x_2)$$

よって式 3.56 のハミルトニアンはエネルギー固有値 ϵ_k を用いて次のように表すことができる。

$$\hat{H}_0 = \sum_k \epsilon_k \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k$$

となった。

次に \hat{H}_0 の固有ブラケットを求めよう。

1 粒子の波動関数の N 個の積を

$$\bar{\Psi}_\nu(x_1, \dots, x_N) \equiv \prod_{j=1}^N \langle x_j | k_j \rangle$$

とする。式 3.51 から置換対称性を持つ波動関数は次で定義された。

$$\begin{aligned} \Psi_\nu(x_1, x_2, \dots, x_N) &= \frac{A_N}{N!} \sum \sigma^P \bar{\Psi}(x_{p_1}, x_{p_2}, \dots, x_{p_N}) \\ &= \frac{A_N}{N!} \sum \sigma^P \langle x_1 | k_1 \rangle \langle x_2 | k_2 \rangle \cdots \langle x_N | k_{p_N} \rangle \end{aligned} \quad (3.57)$$

これは Bose 粒子と Fermi 粒子を両方扱うことができる。

例えば $\sigma = -1$ の時が **Fermi** 粒子であり、次のように Slater 行列式で書き換えられる。

$$\Psi_\nu^{(F)}(x_1, x_2, \dots, x_N) = \frac{A_N}{N!} \det \begin{bmatrix} \langle x_1 | k_1 \rangle & \cdots & \langle x_1 | k_N \rangle \\ \vdots & & \vdots \\ \langle x_N | k_1 \rangle & \cdots & \langle x_N | k_N \rangle \end{bmatrix} \quad (3.58)$$

これから行列式の中に同じもの $x_i = x_{i+1}$ や $k_i = k_{i+1}$ があると 0 になる。

これが Fermi 粒子の同じ座標には 1 つしか粒子をおけないという性質を表す **Pauli** の排他原理である。

残されている係数 $A_N^{(F)}$ は次から求めることができる。式 3.45 から

$$\begin{aligned} 1 &= \int dx_1 \cdots \int dx_N \left| \Psi_\nu^{(F)}(x_1, \dots, x_N) \right|^2 \\ &= \left(\frac{A_N^{(F)}}{N!} \right)^2 \sum_P \sum_{P'} (-1)^{P+P'} \prod_{j=1}^N \langle k_{p'_j} | k_{p_j} \rangle \\ &= \left(\frac{A_N^{(F)}}{N!} \right)^2 \sum_P \sum_{P'} (-1)^{P+P'} \prod_{j=1}^N \delta_{p_j p'_j} \\ &= \left(\frac{A_N^{(F)}}{N!} \right)^2 \end{aligned} \quad (3.59)$$

よって

$$A_N^{(F)} = \sqrt{N!} \quad (3.60)$$

次に **Bose** 粒子の場合を考える。

この場合は同じ状態に複数の粒子が入ることになる。

例えば k_1 に n_1 個、 k_2 に n_2 個のように入る場合を考えよう。この組を次のように ν で表す。

$$\nu = \{k_1, \dots, k_1, k_2, \dots, k_2, \dots, k_\ell, \dots, k_\ell\}$$

ただし、総粒子数は N として、

$$\sum_{j=1}^{\ell} n_j = N$$

また、置換の場合の数は

$$\begin{aligned} \sum_{P'} \prod_{j=1}^N \langle k_{p'_j} | k_{p_j} \rangle &= N! \prod_{j=1}^N \langle k_j | k_{p_j} \rangle \\ \sum_p \prod_{j=1}^N \langle k_j | k_{p_j} \rangle &= n_1! n_2! \cdots n_\ell! \langle k_j | k_{p_j} \rangle^N = n_1! n_2! \cdots n_\ell! \end{aligned}$$

だから、3.57 から 3.59 に対して次が成り立つ。

$$\begin{aligned} 1 &= \int dx_1 \cdots \int dx_N \left| \Psi_\nu^{(B)}(x_1, \dots, x_N) \right|^2 \\ &= \left(\frac{A_N^{(B)}}{N!} \right)^2 N! \sum_p \prod_{j=1}^N \langle k_{p'_j} | k_{p_j} \rangle \\ &= \frac{A_N^{(B)2}}{N!} n_1! n_2! \cdots n_\ell! \end{aligned}$$

となる。これから Bose 粒子の規格化定数が

$$A_N^{(B)} = \frac{\sqrt{N!}}{\sqrt{n_1! n_2! \cdots n_\ell!}} \quad (3.61)$$

となる。

各重複度が $n_1 = n_2 = \cdots = 1$ の時に

$$A_N^{(F)} = A_N^{(B)}$$

となる。

これらから波動関数を決めることができる。式 3.54, 3.55 を用いて、

Fermi 粒子の場合は式 3.57 から $\sigma = -1$ として、

$$\begin{aligned} \left| \Psi_\nu^{(F)} \right\rangle &= \frac{A_N}{N!} \sum \sigma^P \left| \bar{\Psi}^{(F)} \right\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sqrt{N!} \hat{c}_{k_1}^\dagger \hat{c}_{k_2}^\dagger \cdots \hat{c}_{k_N}^\dagger |0\rangle \\ &= \hat{c}_{k_1}^\dagger \hat{c}_{k_2}^\dagger \cdots \hat{c}_{k_N}^\dagger |0\rangle \end{aligned} \quad (3.62)$$

と求まる。この表現は Slater 行列の列の入れ替え $k_i \leftrightarrow k_j$ での波動関数の符号の変化を

$\hat{c}_{k_i}^\dagger \leftrightarrow \hat{c}_{k_j}^\dagger$ の入れ替えによる $\left| \Psi_\nu^{(F)} \right\rangle$ の符号の変化に対応している。

多粒子系の場合 ν の中身の k_j が 1 粒子の低エネルギーから順に並んだものは **Fermi 真空** と呼ばれる基底状態を表す。

次に **Bose** 粒子の場合は式 3.57 から $\sigma = +1$ として、各状態に n_i の縮退があるから

$$\begin{aligned} \left| \Psi_\nu^{(B)} \right\rangle &= \frac{A_N}{N!} \sum \sigma^P \left| \bar{\Psi}^{(B)} \right\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \cdots n_\ell!} \sqrt{N!}} \sqrt{N!} \hat{c}_{k_1}^{\dagger n_1} \hat{c}_{k_2}^{\dagger n_2} \cdots \hat{c}_{k_\ell}^{\dagger n_\ell} |0\rangle \\ &= \frac{\hat{c}_{k_1}^{\dagger n_1} \hat{c}_{k_2}^{\dagger n_2} \cdots \hat{c}_{k_\ell}^{\dagger n_\ell}}{\sqrt{n_1! n_2! \cdots n_\ell!}} |0\rangle \end{aligned} \quad (3.63)$$

となる。ただし、この式を展開するとき Fermi 粒子の場合は

$$\hat{c}_k^2 |0\rangle = 0$$

が成り立つので両式はまとめて、超対称的に

$$|\Psi_\nu^{(BF)}\rangle = \frac{\hat{c}_{k_1}^{\dagger n_1} \hat{c}_{k_2}^{\dagger n_2} \cdots \hat{c}_{k_\ell}^{\dagger n_\ell}}{\sqrt{n_1! n_2! \cdots n_\ell!}} |0\rangle \quad (3.64)$$

となる。Fermi 粒子の場合は $n_1 = n_2 = \cdots = 1$ としてもよい。

3.5.3 平衡状態の第 2 量子化

ここで先の熱力学的な考えに戻る。カノニカル分布の密度行列はハミルトニアン \hat{H} を用いて、式 3.38, 3.40 から

$$\hat{\rho} = \sum_\nu e^{-\beta(F-\hat{H})} |\Psi_\nu\rangle \langle\Psi_\nu|$$

$$F = -\frac{1}{\beta} \log \sum_\nu e^{-\beta E_\nu}$$

とする。

これから演算子 \mathcal{O} の期待値は次のように対角和から求まる。

$$\mathcal{O}(t) \equiv \sum_\nu e^{-\beta(F-\hat{H})} \langle\Psi_\nu| \mathcal{O} |\Psi_\nu\rangle = \text{Tr}(\hat{\rho} \mathcal{O})$$

となるので、粒子密度演算子の期待値は

$$\hat{n}(x) = \hat{\psi}^\dagger \hat{\psi}$$

と定義され、その期待値が

$$n(x) \equiv \sum_\nu e^{-\beta(F-\hat{H})} \langle\Psi_\nu| \hat{\psi}^\dagger \hat{\psi} |\Psi_\nu\rangle = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{\psi}^\dagger \hat{\psi})$$

である。粒子交換がある場合は式 3.43 を用いて

$$\hat{\rho} = \sum_{\nu, N} e^{-\beta(-G+\hat{H}-\mu\hat{N})} |\Psi_{\nu, N}\rangle \langle\Psi_{\nu, N}| \quad (3.65)$$

$$G = -\frac{1}{\beta} \log \sum_{\nu, N} e^{-\beta(E_\nu - \mu N)}$$

とすればよい。ただし粒子演算子を式 5.21 より

$$\hat{N} \equiv \int \hat{\psi}^\dagger(x_1) \hat{\psi}(x_1) dx_1 = \sum_k \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k$$

とする。

このとき交換関係から相互作用のないハミルトニアンと密度演算子は式 3.65 から

$$\hat{H}_0 = \sum_k \epsilon_k \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k$$

$$\hat{\rho}_0 = \sum_\nu e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})} |\Psi_\nu\rangle \langle\Psi_\nu|$$

次の展開式を代入する

$$|\Psi_\nu\rangle = \prod_k \frac{(\hat{c}_k^\dagger)^{n_k}}{\sqrt{n_k!}} |0\rangle_k$$

$$|n\rangle_k = \frac{(c_k^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle_k$$

以上から相互作用がない大正準集団の密度行列が次のようにかかる。

$$\hat{\rho}_0 = \prod_k \frac{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)n} |n\rangle_k \langle n|_k}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)n}} \quad (3.66)$$

これにより密度行列を粒子数状態で表したことになり、これを密度行列の第 2 量子化という。ここで時間的な粗視化として次の因子が統計的に入ることになる。

$$p_k = e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)} \quad (3.67)$$

ここでこれを統計因子と呼ぶことにしよう。

粒子表現での分配関数 z_k を粒子数 n に対して

$$p_k = z_k^n \sqrt{z_k}$$

である。

これは Fermi 粒子でも Bose 粒子でも同じように扱うことができる。ただし、Fermi 粒子の場合は

$$n = 0, 1$$

に限られ、

$$\hat{c}_k^2 |0\rangle_k = 0$$

である。

3.5.4 密度行列の縮約

式 3.52 のハミルトニアンを量子化版

$$\hat{H} = \int dx_1 \hat{\psi}^\dagger(x_1) \left[\frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m} + U(\mathbf{r}_1) \right] \hat{\psi}(x_1) + \frac{1}{2} \int dx_1 \int dx_2 \hat{\psi}(x_1) \hat{\psi}^\dagger(x_2) V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \hat{\psi}(x_2) \hat{\psi}(x_1) \quad (3.68)$$

これで、2 粒子を扱う場合、縮約された密度行列を扱うことが便利になる。

そこで 1 粒子と 2 粒子の場合の縮約した密度行列を次で定義する。 $\langle \dots \rangle$ は期待値とすると、

$$\rho^{(1)}(x_1, x'_1) \equiv \text{Tr} \left[\hat{\rho} \hat{\psi}^\dagger(x'_1) \hat{\psi}(x_1) \right] = \langle \hat{\psi}^\dagger(x'_1) \hat{\psi}(x_1) \rangle \quad (3.69)$$

$$\rho^{(2)}(x_1, x_2; x'_1, x'_2) \equiv \text{Tr} \left[\hat{\rho} \hat{\psi}^\dagger(x'_1) \hat{\psi}^\dagger(x'_2) \hat{\psi}(x_2) \hat{\psi}(x_1) \right] = \langle \hat{\psi}^\dagger(x'_1) \hat{\psi}^\dagger(x'_2) \hat{\psi}(x_2) \hat{\psi}(x_1) \rangle \quad (3.70)$$

これで \hat{H} を書き換えると

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= \int dx_1 \left[\frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m} + U(\mathbf{r}_1) \right] \rho^{(1)}(x_1, x'_1) \Big|_{x'_1=x_1} \\ &\quad + \frac{1}{2} \int dx_1 \int dx_2 \hat{\psi}(x_1) V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \rho^{(2)}(x_1, x_2; x'_1, x'_1) \end{aligned} \quad (3.71)$$

となるので、 $\rho^{(1)}$, $\rho^{(2)}$ が求まれば計算が可能になる。そこで、これらを第 1 量子化の表記にもどすと次のように式 3.48 より再び、分配関数が現れる。

$$\rho^{(1)}(x_1, x'_1) = \sum_{\nu} e^{\beta(F - \hat{H})} N \int dy_2 \cdots \int dy_N \Psi_{\nu}(x_1, y_2, \cdots, y_N) \Psi_{\nu}^*(x'_1, y_2, \cdots, y_N)$$

$$\rho^{(2)}(x_1, x_2; x'_1, x'_1) = \sum_{\nu} e^{\beta(F-\hat{H})} N(N-1) \int dy_3 \cdots \int dy_N \Psi_{\nu}(x_1, x_2, y_3, \cdots, y_N) \Psi_{\nu}^*(x'_1, x'_1, y_3, \cdots, y_N)$$

となる。この縮約された密度行列が Yang の超流動の秩序変数を扱う時に利用されている。

3.6 Bloch-deDominics の定理

3.6.1 Wick の定理

第 6 部の Wick の定理で場の相関関数は場 ϕ で構成される演算子 $A_1(x_1), \cdots, A_N(x_N)$ の相関として次のようになった。

$$\langle 0|T(A_1(x_1) \cdots A_N(x_N))|0\rangle = \frac{1}{Z} \int D\phi A_1(x_1) \cdots A_N(x_N) e^{iS[\phi]} \quad (3.72)$$

ただし、 T は時間順序積で、 Z は分配関数で

$$Z = \int D\phi e^{iS[\phi]}$$

となる。この相関関数を具体的に次のように計算できた。

この書式は古典的に $A_1(x_1) \cdots A_N(x_N)$ の期待値であり、経路積分を表している。つまり経路積分とは各点の相関関数を意味し、それは局所演算子の期待値を表している。ただし、時空の各点の相関は時間順序でソートしないとイケない。

ここで場 $\phi(x)$ の N 点相関関数を

$$\langle 0|T(\phi(x_1) \cdots \phi(x_N))|0\rangle = \frac{1}{Z} \int D\phi \phi(x_1) \cdots \phi(x_N) e^{iS[\phi]} \quad (3.73)$$

とする。これは次のようにソース項付きの分配関数

$$Z[J] = \int D\phi e^{iS[\phi] + i \int d^4x J(x)\phi(x)}$$

この時、ソース $J(x)$ に関して汎関数微分を作用させれば

$$\langle 0|T(A_1(x_1) \cdots A_N(x_N))|0\rangle = \frac{1}{Z} \frac{\delta}{\delta J(x_1)} \cdots \frac{\delta}{\delta J(x_N)} Z[J]|_{J=0} \quad (3.74)$$

とすることができた。

さらに第 6 部の Feynman 伝播関数が次のように得られる。

$$D_F(x-y) = \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{e^{-ik(x-y)}}{k^2 - m^2 + i\epsilon} \quad (3.75)$$

これから変数変換

$$\psi(x) = \psi'(x) - i \int d^d y D_F(x-y) J(y)$$

を行うと分配関数は

$$Z[J] = N' \exp\left(-\frac{1}{2} \int d^d x d^d y J(x) D_F(x-y) J(y)\right)$$

とかける。これは $N' = odd$ の場合、式 3.72 式から

$$\langle 0|T(\psi(x_1) \cdots \psi(x_N))|0\rangle = 0 \quad (3.76)$$

であり $N' = even$ の場合、

$$\langle 0|T(\psi(x_1)\cdots\psi(x_N))|0\rangle = \sum D_F(x_{i_1} - x_{i_2})\cdots D_F(x_{i_{N-1}} - x_{i_N})$$

となるが、ここでの和は $\{1, \dots, N\}$ からの対 $(i_1, i_2), \dots, (i_{N-1}, i_N)$ を取る全ての組についての和になる。
特に $N = 2$ の場合は

$$\langle 0|T(\psi(x_1)\psi(x_N))|0\rangle = \sum D_F(x_1 - x_2) \quad (3.77)$$

となる。つまり自由粒子の N 点関数は 2 点関数の積になる。これを **Wick** の定理という。
これをここに応用しよう。

3.6.2 Bloch-deDominicis の定理

先の Wick の定理を使うと多粒子系を 2 粒子系で期待値をとる計算に置き換えられることが示唆される。
そこで生成消滅演算子 $\hat{c}^\dagger \hat{c}$ をまとめて \hat{C} で表し、 2 粒子ペア $\langle \hat{C}_i \hat{C}_{i+1} \rangle_0$ に分解することを以下のように考える。

ただし、 $\langle \rangle$ 内は添え字の小さい順で並べられているとする。

$$\begin{aligned} \langle \hat{C}_1 \hat{C}_2 \cdots \hat{C}_{2n} \rangle_0 &\equiv \text{Tr} [\hat{\rho}_0 \hat{C}_1 \hat{C}_2 \cdots \hat{C}_{2n}] \\ &= \sum_{P(p_i < p_j)} \sigma^P \langle \hat{C}_{p_1} \hat{C}_{p_2} \rangle_0 \langle \hat{C}_{p_3} \hat{C}_{p_4} \rangle_0 \cdots \langle \hat{C}_{p_{2n-1}} \hat{C}_{p_{2n}} \rangle_0 \end{aligned} \quad (3.78)$$

これを **Bloch-de Dominicis** の定理という。これは前節の Wick の定理でもある。

一般に演算子対の期待値をとることを縮約 (**contract**) するという。

これを証明してみよう。

まず、前節のように相互作用のない大正準集団を考える。式 3.66 から

$$p_k = e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)}$$

として次が成り立つ。添え字 k を省略すると

$$\begin{aligned} \hat{c} \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle p^n \langle n| &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\hat{c}^\dagger)^{n-1}}{(n-1)!} |0\rangle p^n \langle 0| \hat{c}^n \\ &= p \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\hat{c}^\dagger)^n}{n!} |0\rangle p^n \langle 0| \hat{c}^{n+1} \\ &= p \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle p^n \langle n| \hat{c} \end{aligned}$$

とかける。このエルミート共役をとると

$$\hat{c}^\dagger \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle p^n \langle n| = p^{-1} \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle p^n \langle n| \hat{c}^\dagger$$

となる。この関係は

$$Q = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle p^n \langle n|$$

とおくと、

$$\begin{aligned} pQ\hat{c} &= \hat{c}Q \\ p\hat{c}^\dagger Q &= Q\hat{c}^\dagger \end{aligned} \quad (3.79)$$

のように交換作用がある。
式 3.66 から次が恒等式になる。

$$\begin{aligned}\hat{c}_k \hat{\rho}_0 &= p_k \hat{\rho}_0 \hat{c}_k \\ \hat{c}_k^\dagger \hat{\rho}_0 &= p_k^{-1} \hat{\rho}_0 \hat{c}_k^\dagger\end{aligned}\quad (3.80)$$

また、次のように統計因子 p_k の定義にも使える。

$$p_k \hat{\rho}_0 = \hat{c}_k \hat{\rho}_0 \hat{c}_k^\dagger$$

一般に \hat{C} の交換関係は σ を含む形で超対称的に扱えたから、次の交換関係が成り立つ。

$$[\hat{C}_i, \hat{C}_j] \equiv \hat{C}_i \hat{C}_j - \sigma \hat{C}_j \hat{C}_i = (ij) \quad (3.81)$$

置換対称性があるので結果の (ij) は単なる定数である。よって多粒子の期待値は次のように減らしていける。

$$\begin{aligned}\langle \hat{C}_1 \hat{C}_2 \cdots \hat{C}_{2n} \rangle_0 &= (12) \langle \hat{C}_3 \cdots \hat{C}_{2n} \rangle_0 + \sigma (13) \langle \hat{C}_2 \hat{C}_4 \cdots \hat{C}_{2n} \rangle_0 + \cdots \\ &+ \sigma^{2n-2} (1, 2n) \langle \hat{C}_2 \hat{C}_3 \cdots \hat{C}_{2n-1} \rangle_0 + \sigma^{2n-1} \langle \hat{C}_2 \hat{C}_3 \cdots \hat{C}_{2n} \hat{C}_1 \rangle_0\end{aligned}\quad (3.82)$$

ただし、この時の最後の項のように、巡回値は最後に最初の \hat{C}_1 が入り $() = 1$ となる。
ここで先の式 3.79 と恒等式 3.80 を使うと最後の項は次のように変形ができる。

$$\langle \hat{C}_2 \hat{C}_3 \cdots \hat{C}_{2n} \hat{C}_1 \rangle_0 = p^\lambda \langle \hat{C}_1 \hat{C}_2 \hat{C}_3 \cdots \hat{C}_{2n} \rangle_0$$

ただし、

$$\lambda = \begin{cases} 1 & (\hat{C}_1 = \hat{c}_1) \\ -1 & (\hat{C}_1 = \hat{c}_1^\dagger) \end{cases}$$

である。この p^λ を式 3.82 の最後の項に作用して、左辺に移項すると

$$(1 - \sigma p_1^\lambda)^{2n-2} \langle \hat{C}_1 \hat{C}_2 \cdots \hat{C}_{2n} \rangle_0 = (12) \langle \hat{C}_3 \cdots \hat{C}_{2n} \rangle_0 + \sigma (13) \langle \hat{C}_2 \hat{C}_4 \cdots \hat{C}_{2n} \rangle_0 + \cdots + \sigma^{2n-2} (1, 2n) \langle \hat{C}_2 \hat{C}_3 \cdots \hat{C}_{2n-1} \rangle_0$$

とまとめることができる。

これは $2n - 2$ 個の σ の和が 1 つの循環期待値に因子

$$(1 - \sigma p_1^\lambda)^{2n-2}$$

をかけたもので表すことを示す。ここでの証明は $p > 0$ であれば統計的な性質は無関係に成り立つ。

そこで次の展開を用いると式 3.43 から

$$G = -\frac{1}{\beta} \log \sum_{\nu, N} e^{-\beta(E_\nu - \mu N)} = -\frac{n}{\beta} \log p$$

となるので

$$\log p = (p - 1) - \frac{1}{2}(p - 1)^2 + \frac{1}{3}(p - 1)^3 + \cdots$$

エントロピー S として、

ここで特に $n = 1$ の場合は

$$\langle \hat{C}_1 \hat{C}_2 \rangle_0 = \frac{(12)}{1 - \sigma p_1^\lambda}$$

である。これから

$$\langle \hat{C}_1 \hat{C}_2 \cdots \hat{C}_{2n} \rangle_0 = \langle \hat{C}_1 \hat{C}_2 \rangle_0 \langle \hat{C}_3 \cdots \hat{C}_{2n} \rangle_0 + \sigma \langle \hat{C}_1 \hat{C}_3 \rangle_0 \langle \hat{C}_2 \hat{C}_4 \cdots \hat{C}_{2n} \rangle_0 + \cdots + \sigma^{2n-2} \langle \hat{C}_1 \hat{C}_{2n} \rangle_0 \langle \hat{C}_2 \hat{C}_3 \cdots \hat{C}_{2n-1} \rangle_0$$

となる。これを繰り返すと式 3.78 が得られる。

この定理は生成消滅演算子を次のようにユニタリ変換 U_{kj} で線形結合して、作成した \hat{b}_j にも利用できる。

$$\hat{b}_j \equiv \sum_k U_{kj} \hat{c}_k$$

この時も、次のようにカップル積の巡回和になる。

$$\langle \hat{B}_1 \hat{B}_2 \cdots \hat{B}_{2n} \rangle_0 \equiv \text{Tr} \left[\hat{\rho}_0 \hat{B}_1 \hat{B}_2 \cdots \hat{B}_{2n} \right] = \sum_{P(p_i < p_j)} \sigma^P \langle \hat{B}_{p_1} \hat{B}_{p_2} \rangle_0 \langle \hat{B}_{p_3} \hat{B}_{p_4} \rangle_0 \cdots \langle \hat{B}_{p_{2n-1}} \hat{B}_{p_{2n}} \rangle_0$$

特に有用なのは相互作用がない場合、縮約された密度行列は式 3.70 から次のようにカップル積の和になる。

$$\begin{aligned} \rho_0^{(2)}(x_1, x_2; x'_1, x'_2) &= \langle \hat{\psi}^\dagger(x'_1) \hat{\psi}^\dagger(x'_2) \hat{\psi}(x_2) \hat{\psi}(x_1) \rangle_0 \\ &= \langle \hat{\psi}^\dagger(x'_1) \hat{\psi}(x_1) \rangle_0 \langle \hat{\psi}^\dagger(x'_2) \hat{\psi}(x_2) \rangle_0 + \sigma \langle \hat{\psi}^\dagger(x'_1) \hat{\psi}(x_2) \rangle_0 \langle \hat{\psi}^\dagger(x'_2) \hat{\psi}(x_1) \rangle_0 \\ &= \rho_0^{(1)}(x_1, x'_1) \rho_0^{(1)}(x_2, x'_2) + \sigma \rho_0^{(1)}(x_1, x'_2) \rho_0^{(1)}(x_2, x'_1) \end{aligned}$$

4 熱力学的な展開

前章で熱力学的な密度関数の取り扱いを見てきた。また、第 6 部でも熱統計力学を用いて粗視化領域と量子論との関係を扱った。熱統計では、ある領域では平均値で、物理量をふっつてしまい、個々の値はみない。これは量子論の 2 重性において、粒子の生成、消滅が周囲の空間にランダムな位相を持つ波を発生するからである。熱力学のように粗視化された領域にはエネルギー等分配によってエネルギー量子 $k_B T$ がふられる。しかし、量子論の 2 重性はランダムな位相の波と同時に方向性をもつ粒子が生まれる。これはペアとして未来と過去に進む。

この時の位相が次の関係を満たす。

$$\beta = \frac{1}{k_B T} = i\hbar t \quad (4.1)$$

この時空間的な構造は後に考察をすることで、現在を挟んだ 2 つの領域に向きの反対になる進行波が現れるのでこの領域に定常波ができる。指数関数の位相部分が波動関数として振る舞い、干渉性を持つ。

興味あることに熱伝導方程式は t の 1 次微分方程式で、これはシュレディンガー方程式と同じである。

4.1 熱力学的ポテンシャル

熱力学的なポテンシャル G は 3.43 から

$$G(T, V, \mu)$$

のような、古典的な関数でおける。そこでハミルトニアン of 断熱近似で

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{int} \quad (4.2)$$

のように相互作用項と分離できるとする。この時、式 3.68 から量子化を用いて

$$\hat{H}_0 \equiv \int \hat{\psi}^\dagger(x) \left[\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(\mathbf{r}) - \mu \right] \hat{\psi}(x) dx = \sum_k (\epsilon_k - \mu) \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k \quad (4.3)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_{int} &\equiv \frac{1}{2} \int dx_1 \int dx_2 \hat{\psi}(x_1) \hat{\psi}^\dagger(x_2) V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \hat{\psi}(x_2) \hat{\psi}(x_1) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{klk'l'} V_{k'l';kl} \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_l^\dagger \hat{c}_l \hat{c}_k \end{aligned} \quad (4.4)$$

ただし、 μ を化学ポテンシャル、 U は外場、 V は相互作用ポテンシャルであり、固有値 ϵ_k に対する固有関数を $\phi_k(x)$

として式 3.53 から

$$\hat{\psi}(x) = \sum_k \hat{c}_k \phi_k(x), \quad \hat{\psi}^\dagger(x) = \sum_k \hat{c}_k^\dagger \phi_k^*(x)$$

とすると、

$$\begin{aligned} V_{k'l';kl} &= \frac{1}{2} \int dx_1 \int dx_2 V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \phi_{k'}^*(x_1) \phi_{l'}^*(x_2) \phi_l(x_2) \phi_k(x_1) \\ &= V_{kl;k'l'}^* \end{aligned}$$

である。

分配関数を

$$Z_G \equiv \text{Tr} e^{-\beta \hat{H}}$$

で定義すると、次のようにこの系の熱力学ポテンシャルが決まる。

$$G = -\frac{1}{\beta} \log Z_G \quad (4.5)$$

4.2 作用摂動展開

第 6 部で古典論では、3 次元の正準座標と正準運動量に対して、正準量子化を次で定義した。

$$[\phi(\mathbf{x}), \pi(\mathbf{y})] = i\hbar \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \quad (4.6)$$

これは量子論の不確定性関係

$$\Delta p \Delta x \geq \hbar$$

これと次の無限区間のフーリエ変換

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\kappa y} dy = 2\pi \delta(\kappa)$$

これは第 6 部のスリット回折のところで定義した有限フーリエ変換

$$\mathcal{F}(\mathbf{k}, d) = \int_{-d}^d \exp[i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}] [-i\kappa y] dy$$

において、

4.2.1 古典的作用積分と母関数

第 2 部で古典的な作用積分をあつかった。ここでは式 4.1 の対応で統計的な量子化をする前に古典的な作用積分を復習しておく。

時間推進の母関数はハミルトニアン H になることで次の変化に対して

$$t \rightarrow t + a$$

この時、古典的作用積分を

$$S = \int d^3x dt (\pi_r \partial_0 \varphi_r) - \int H dt \quad (4.7)$$

として定義する。変分原理から正準座標と、正準運動量

$$\begin{aligned}\partial_0\varphi_r &= \frac{\partial H}{\partial\pi_r} \\ \partial_0\pi_r &= -\frac{\partial H}{\partial\varphi_r}\end{aligned}$$

となった。ただしこの時の母関数 G は

$$G = H = \int_V d^3x (\pi_r \partial_0\varphi_r - L) \quad (4.8)$$

であった。ポアソン括弧から

$$\begin{aligned}\{t, G\} &= \int_V d^3x \left(\frac{\delta t}{\delta\varphi_r(\mathbf{x})} \frac{\delta G}{\delta\pi_r(\mathbf{x}')} - \frac{\delta t}{\delta\pi_r(\mathbf{x})} \frac{\delta G}{\delta\varphi_r(\mathbf{x}')} \right) \\ &= \int_V d^3x \left(\frac{\delta t}{\delta\varphi_r(\mathbf{x})} \partial_0\varphi_r + \frac{\delta t}{\delta\pi_r(\mathbf{x})} \partial_0\pi_r \right) \\ &= \delta t\end{aligned}$$

となり、確かに時間変化が現れる。

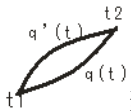
作用積分を J で表す。ハミルトンの原理では両端は固定されるのでラグランジュ関数 L に任意の関数 F が次のように入ってもかまわないことになる。

$$J' = \int_{t_1}^{t_2} dt \left(L + \frac{dF}{dt} \right) = \int_{t_1}^{t_2} dt L + F(t_2) - F(t_1) \quad (4.9)$$

いいかえると次のように L に任意の関数の全微分が加わってもラグランジュの方程式は不変であった。

$$L' = L + \frac{dW}{dt}$$

これは図のように作用積分が閉じた経路 c_1+c_2 の作る曲面を扱っていることによる。



変分では図のように端点が固定される。 t_1 と t_2 での関数の差が 0 なら作用積分は影響をうけない。

図 4.1: 作用積分の経路

従って次の図のように t_1 と t_2 の間に関数 F が連続的に変化しても作用積分 J には影響しない。

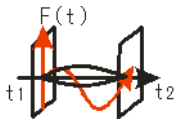
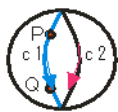


図 4.2: 作用積分の不定項

さらに経路の変分に対して作用積分は最小値をとるかどうかは注意が必要である。

次の図のように球面上においては P から Q への経路は 2 通り存在する。最短路 c_1 では最小値であっても c_2 では異なる。



図のような球面上の積分では経路によって積分値が異なる。作用積分は局所的な視点の選択が必要になる。

図 4.3: 球面上の積分

これから作用積分には P と Q への最短路が決まる局所的な限定が必要になる。
 作用積分が最小であるということより作用積分が停留値をとることに意味がある。
 ハミルトンの原理は PC 間を眺める大局的な決定がその間の経路を決定するという局所的な視点と相互に関係している。
 そこで端点を固定しない次の場合についてみる。



図 4.4: 端点が固定されない場合

この場合の q の変分を

$$\delta q^i(t) = q'^i(t) - q^i(t) + q^i(t + \delta t) - q^i(t) \quad (4.10)$$

とし、次のように表現する。

$$\bar{\delta} q^i(t) = q'^i(t) - q^i(t) \quad (4.11)$$

$$\delta q^i = \bar{\delta} q^i(t) + \dot{q}^i(t) \delta t \quad (4.12)$$

ただし、 q^i の変分は $\bar{\delta} q^i$ で関数の変化を δt で時間変化を表す。この時作用積分 J の変分は次のようにおける。

$$\delta J[q] = \int_{t_1 + \delta t_1}^{t_2 + \delta t_2} dt L(q + \delta q, \dot{q} + \delta \dot{q}, t) - \int_{t_1}^{t_2} dt L(q, \dot{q}, t) \quad (4.13)$$

ここで図 4.2.1 から t の変化は両端付近で、
 関数の変化は中間領域で大きいとすると t の変化を次のように分けることができる。

$$= \left\{ \int_{t_1 + \delta t_1}^{t_1} + \int_{t_2}^{t_2 + \delta t_2} \right\} dt L(q, \dot{q}, t) + \int_{t_1}^{t_2} dt \{ L(q + \delta q, \dot{q} + \delta \dot{q}, t) - L(q, \dot{q}, t) \} \quad (4.14)$$

$$= L(q_2, \dot{q}_2, t_2) \delta t_2 - L(q_1, \dot{q}_1, t_1) \delta t_1 + \bar{\delta} \int_{t_1}^{t_2} dt L(q, \dot{q}, t) \quad (4.15)$$

がほぼ断熱的に時間をとめた変分であるとするとき次が成り立つ

$$\delta \dot{q}^i = \frac{d}{dt} \bar{\delta} q^i \quad (4.16)$$

とすると式 4.15 は部分積分により

$$\delta J[q] = [L(q, \dot{q}, t) \delta t]_{t_1}^{t_2} + \int_{t_1}^{t_2} dt \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} \bar{\delta} \dot{q}^i(t) + \frac{\partial L}{\partial q^i} \bar{\delta} q^i \right) \quad (4.17)$$

$$= \left[L(q, \dot{q}, t) \delta t + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} \bar{\delta} q^i(t) \right]_{t_1}^{t_2} - \int_{t_1}^{t_2} dt \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} \right) \bar{\delta} q^i + \int_{t_1}^{t_2} dt \frac{\partial L}{\partial q^i} \bar{\delta} q^i \quad (4.18)$$

$$= \left[L(q, \dot{q}, t) \delta t + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} \bar{\delta} q^i(t) \right]_{t_1}^{t_2} + \int_{t_1}^{t_2} dt \left(\frac{\partial L}{\partial q^i} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} \right) \right) \bar{\delta} q^i \quad (4.19)$$

ラグランジュの方程式が成り立てば第2項は0とみなせる。すると作用積分の変分が結果として端点のみで決まることを表している。

そこで運動の経路 c 上であれば第1項は式 4.12 より $\delta q^i = \bar{\delta} q^i(t) + \dot{q}^i(t) \delta t$ だから

$$[\Theta(t)]_{t_1}^{t_2} = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} \delta q^i(t) - \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} \dot{q}^i(t) - L \right) \delta t \quad (4.20)$$

となる。これは端点による変化を空間と時間の変化で表している。

左辺は次のように単純に示すことができる。

$$\delta J[q] = \Theta(t_2) - \Theta(t_1) \quad (4.21)$$

作用積分の極値をとる経路として、古典的な経路が決定された。

正準運動量を

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}$$

で定義し、ハミルトニアン H を次で定義する。

$$H(p, q) = p_i \dot{q}^i - L \quad (4.22)$$

これを用いるとハミルトンの正準形式で次のように表現できる。

$$\Theta_H(t) = p_i \delta q^i(t) - H(p, q) \delta t \quad (4.23)$$

式 4.22 では p_i と q^i は独立変数のようにとるとすると次のように微分できる。

$$dH = p_i d\xi^i + \xi^i dp_i - \left(\frac{\partial L(q, \xi)}{\partial q^i} dq^i + \frac{\partial L}{\partial \xi^i} d\xi^i \right) \quad (4.24)$$

正準関係から

$$dH = \xi^i dp_i - \frac{\partial L(q, \xi)}{\partial q^i} dq^i \quad (4.25)$$

となる。これは H の変化が $\frac{\partial L}{\partial \xi^i} d\xi^i$ 項を含まないことになる。つまりラグランジアンが次のように変化しても H の変化に影響しないことを示す。

$$L' = L + \frac{dF(q)}{dt} \quad (4.26)$$

式 4.27 から次のようにハミルトンの運動方程式が導ける。

$$dH = \dot{q}^i dp_i - \dot{p}_i dq^i \quad (4.27)$$

$$\dot{q}^i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad (4.28)$$

$$\dot{p}^i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad (4.29)$$

式 4.22 から次のように L が書ける。

$$L = p_i \dot{q}^i - H(q, p) \quad (4.30)$$

これから図 4.2.1 の作用積分は

$$J[q, p] = \int_{t_1}^{t_2} dt (p_i \dot{q}^i - H(q, p)) \quad (4.31)$$

両端を固定して変分をとると

$$\begin{aligned} \delta J[q, p] &= \int_{t_1}^{t_2} dt \left(p_i \delta \dot{q}^i + \dot{q}^i \delta p_i - \frac{\partial H}{\partial q^i} \delta q^i - \frac{\partial H}{\partial p^i} \delta p^i \right) = 0 \\ &= \int_{t_1}^{t_2} dt \left(p_i \frac{d(\delta q^i)}{dt} + \dot{q}^i \delta p_i - \frac{\partial H}{\partial q^i} \delta q^i - \frac{\partial H}{\partial p^i} \delta p^i \right) \end{aligned}$$

はじめの項に部分積分をすると

$$\delta J[q, p] = [p_i \delta q^i]_{t_1}^{t_2} + \int_{t_1}^{t_2} dt \left(-\dot{p}_i \delta q^i + \dot{q}^i \delta p_i - \frac{\partial H}{\partial q^i} \delta q^i - \frac{\partial H}{\partial p^i} \delta p^i \right) \quad (4.32)$$

第 1 項は端点を固定すると 0 になる。よって

$$\delta J[q, p] = \int_{t_1}^{t_2} dt \left\{ -\left(\dot{p}_i + \frac{\partial H}{\partial q^i} \right) \delta q^i + \left(\dot{q}^i - \frac{\partial H}{\partial p^i} \right) \delta p^i \right\} = 0 \quad (4.33)$$

を得るからこれから正準方程式が得られる。 δq^i と δp^i が独立ではないので拘束条件が存在し、未定係数法で正準方程式を導かないといけない。

ハミルトン形式で H の時間変化は次のようになるが

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial q^i} \dot{q}^i + \frac{\partial H}{\partial p^i} \dot{p}_i \quad (4.34)$$

式 4.33 が成り立てば常に両者の変化が次のように打ち消しされ 0 になる。

$$\frac{dH}{dt} = -\dot{p}_i \dot{q}^i + \dot{q}^i \dot{p}_i = 0 \quad (4.35)$$

よって H は時間的に不変な物理量であるエネルギーの総和を表すと考えられる。

ここで式 4.33 より正準関係は直交している δp と δq との係数であるから式 4.35 の第 1 項と第 2 項の和については注意がいる。

\dot{q}, \dot{p} が独立しているとして双対な関係あり、積 $\dot{p}_i \dot{q}^i$ の積分は相手については断熱的な変化として時間積分の前に出す。

すると

$$H = \left(-\dot{q}^i \int \dot{p}_i dt + \dot{p}_i \int \dot{q}^i dt \right) / 2 \quad (4.36)$$

と書ける。ところが \dot{q}, \dot{p} は次の図のような閉曲線にあるので

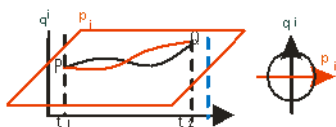


図 4.5: pq 平面での経路、図右は t 軸を紙面表から裏に見る

式 4.36 の第 1 項については時間を反転する。つまり

$$H = \left(-\dot{q}^i \int_t^0 \dot{p}_i dt + \dot{p}_i \int_0^t \dot{q}^i dt \right) / 2 \quad (4.37)$$

と表現される。これから次のように運動エネルギー T とポテンシャルエネルギー V を決めると

$$2V = \dot{p}_i \int_0^t \dot{q}^i dt = \dot{q}^i \dot{p}_i \quad (4.38)$$

$$2T = \dot{q}^i \int_0^t \dot{p}_i dt = \dot{q}^i p_i \quad (4.39)$$

となるから式 4.30 から次が導ける。

$$L = T - V$$

$$H = T + V$$

また式 4.23 に変わる関係として

$$\Theta[t] = \frac{d}{dt} \{q^i, p_i\} \quad (4.40)$$

という関係がある。式??からは $\Theta_L(t)$ が一定であれば

$$p(q, \dot{q})\delta q^i(t) - E(q, \dot{q})\delta t = \text{Const} \quad (4.41)$$

である。これはエネルギーと時間の作る体積空間が運動量と長さのつくる体積空間と相補的であることを示す。

前に端点を固定しない時の作用積分の変化を見た。

$$\begin{aligned} \delta J[q] &= \left\{ \int_{t_1+\delta t_1}^{t_1} + \int_{t_2}^{t_2+\delta t_2} \right\} dt L(q, \dot{q}, t) + \int_{t_1}^{t_2} dt \{L(q + \delta q, \dot{q} + \delta \dot{q}, t) - L(q, \dot{q}, t)\} \\ &= L(q_2, \dot{q}_2, t_2)\delta t_2 - L(q_1, \dot{q}_1, t_1)\delta t_1 + \bar{\delta} \int_{t_1}^{t_2} dt L(q, \dot{q}, t) \end{aligned} \quad (4.42)$$

δ がほぼ断熱的に時間をとめた変分であるとする次が成り立つ

$$\delta \dot{q}^i = \frac{d}{dt} \bar{\delta} q^i \quad (4.43)$$

とすると式 4.42 は部分積分により

$$= \left[L(q, \dot{q}, t)\delta t + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} \bar{\delta} q^i(t) \right]_{t_1}^{t_2} + \int_{t_1}^{t_2} dt \left(\frac{\partial L}{\partial q^i} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} \right) \right) \bar{\delta} q^i \quad (4.44)$$

ラグランジュの方程式が成り立てば第 2 項は 0 とみなせる。

作用積分の変分が結果として端点のみで決まることを表している。

そこで運動の経路 c 上であれば第 1 項は

$$[\Theta(t)]_{t_1}^{t_2} = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} \delta q^i(t) - \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} \dot{q}^i(t) - L \right) \delta t$$

となる。これは端点による変化を空間と時間の変化で表している。

左辺は次のように単純に示すことができる。

$$\delta J[q] = \Theta(t_2) - \Theta(t_1) \quad (4.45)$$

$$H(p, q) = p_i \dot{q}^i - L \quad (4.46)$$

ハミルトンの正準形式で次のように表現できる。

$$\Theta_H(t) = p_i \delta q^i(t) - H(p, q) \delta t \quad (4.47)$$

位相変換は前節のラグランジアンとの関係している。

そこで次に 4 元座標 x に依存した一般的な変換をユニタリ行列を U として次のように表しておく。

$$U = \exp(-i\omega(x)) \quad (4.48)$$

この場合 gauge 変換は

$$\partial^\mu (U(x)\phi(x)) = U(x) (\partial^\mu \phi(x) + U(x)^{-1} \phi(x) \partial^\mu U(x))$$

また

$$\phi'(x') = \phi(x) + \delta\phi(x)$$

であるが、ある方向

$$x^0 = ict$$

H は拡大した位相空間上の関数で H の変化が座標系に依存した関数の微分の虚成分に等しいとして

$$\Delta H = -i\partial^\mu \omega(x)$$

$$H' = H + \Delta H = H - i\partial^\mu \omega(x)$$

について定数を g として固有方程式

$$\begin{aligned} H' \phi'(x') &= H U(x) \phi(x) - i\partial^\mu \omega(x) U(x) \phi(x) \\ &= U(x) (H \phi(x) - i\partial^\mu \omega(x) \phi(x)) \end{aligned}$$

これから

$$\partial^\mu \phi(x) + U(x)^{-1} \phi(x) \partial^\mu U(x) = H \phi(x) - i\partial^\mu \omega(x) \phi(x)$$

となるので

$$\partial^\mu \phi(x) = H \phi(x)$$

と同一視できる条件上では

$$U(x)^{-1} \phi(x) \partial^\mu U(x) = -i\partial^\mu \omega(x) \phi(x)$$

が成り立ち $U(x)^{-1} \neq 0$ であれば

$$\partial^\mu U(x) = (-i\partial^\mu \omega(x)) U(x)$$

が成り立つ。

$$\partial^\mu (U(x)\phi(x)) = U(x) \partial^\mu \phi(x) - i\phi(x) U(x) \partial^\mu \omega(x)$$

$$\phi(x)\partial^\mu U(x) + U(x)\partial^\mu \phi(x) = U(x)\partial^\mu \phi(x) - i\phi(x)U(x)\partial^\mu \omega(x)$$

$$\partial^\mu U(x) = -iR_{g*}U(x)\partial^\mu \omega(x)$$

また、一般的な場 ϕ を次のようにおく

$$\partial_\mu \phi(x) = (\dot{\phi}/c, \nabla \phi)$$

またラグランジアン密度は \mathcal{L} は

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}(\partial_\mu \phi(x), \phi)$$

$$L = \int \mathbf{d}^3 \mathbf{x} \mathcal{L}(\partial_\mu \phi(x), \phi)$$

さらに作用 J は次のようになる。

$$J = \int_{\Omega} d^4 x \mathcal{L}(\partial_\mu \phi(x), \phi)$$

次のように座標と場の無限小変化をおく。

$$x^{\mu'} = x^\mu + \delta x^\mu$$

$$\phi'(x') = \phi(x) + \delta \phi(x)$$

また同じ座標での変化量、リー微分を次のように定義された。

$$\delta_L \phi(x) = \phi'(x) - \phi(x) = \delta \phi(x) - \delta x^\mu \partial_\mu \phi(x)$$

よって

$$\delta J = \int_{\Omega} d^4 x \left[\delta_L \phi(x) \left\{ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi)} \right\} + \partial_\mu \left\{ \delta_L \phi \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi)} + \delta x^\mu \mathcal{L} \right\} \right] \quad (4.49)$$

そこで式に対応して

$$\Theta(\phi) = \delta_L \phi(x) \left\{ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi)} \right\} + \partial_\mu \left\{ \delta_L \phi \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi)} + \delta x^\mu \mathcal{L} \right\} \quad (4.50)$$

をとする。

ネーターカレントを N^μ として

$$N^\mu = \delta_L \phi \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi)} + \delta x^\mu \mathcal{L} \quad (4.51)$$

とすると

$$\partial_\mu N^\mu = 0 \quad (4.52)$$

である。これは次のように空間、時間成分に分けることができる。

$$\partial_0 N^0 = \partial_k N^k \quad (4.53)$$

$$\int d^3x N^0 = icN \quad (4.54)$$

通常 $x \rightarrow \infty$ で $N=0$ とするとネーターのカレントの時間成分は全空間で不変になる。

$$\delta J^\mu = \delta\phi \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \phi)} - \delta x_\nu T^{\mu\nu} \quad (4.55)$$

ただし

$$T^{\mu\nu} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \phi)} \partial^\nu \phi - \frac{\delta x^\mu}{\delta x_\nu} \mathcal{L} \quad (4.56)$$

であるが

$$\delta x^\mu = g^{\mu\nu} \delta x_\nu \quad (4.57)$$

なので

$$T^{\mu\nu} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \phi)} \partial^\nu \phi - g^{\mu\nu} \mathcal{L}$$

一般化運動量は次で表されるから

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}$$

ハミルトニアン H は

$$H(p, q) = p_i \dot{q}^i - L$$

ハミルトンの正準形式で次のように表現できる。

$$\Theta_H(t) = p_i \delta q^i(t) - H(p, q) \delta t$$

つまり端点の変化が空間変分と時間変分を引き起こし、その係数が空間変分に対して運動量が与えられ、時間変分に対してはハミルトニアンが与えられる。さらに式の第1項を

$$\theta_L^i \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} dq^i = p_i dq^i$$

と定義するとこの θ_L は座標系によらないで成立する。

$$p_i dq^i = P_i dQ^i \quad (4.58)$$

$$\delta J[q] = \left[L(q, \dot{q}, t) \delta t + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} \delta q^i(t) \right]_{t_1}^{t_2} + \int_{t_1}^{t_2} dt \left(\frac{\partial L}{\partial q^i} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} \right) \right) \delta q^i$$

$$\delta J[q] = [p_i \delta q^i]_{t_1}^{t_2} + \int_{t_1}^{t_2} dt \left(-\dot{p}_i \delta q^i + \dot{q}^i \delta p_i - \frac{\partial H}{\partial q^i} \delta q^i - \frac{\partial H}{\partial p^i} \delta p^i \right)$$

を得るからこれから正準方程式が得られる。 δq^i と δp^i が独立ではないので拘束条件が存在し、未定係数法で正準方程式を導かないといけない。

ハミルトン形式で H の時間変化は次のようになるが

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial q^i} \dot{q}^i + \frac{\partial H}{\partial p^i} \dot{p}^i \quad (4.59)$$

正準方程式が成り立てば常に両者の変化が次のように打ち消しされ0になる。

$$\frac{dH}{dt} = -\dot{p}_i \dot{q}^i + \dot{q}^i \dot{p}_i = 0$$

よって H は時間的に不変な物理量であるエネルギーの総和を表すと考えられる。

第 1 項と第 2 項の和については注意がいる。

\dot{q}, \dot{p} が独立しているとして双対な関係あり、積 $\dot{p}_i \dot{q}^i$ の積分については相手については断熱的な変化として時間積分の前に出す。すると

$$H = \left(-\dot{q}^i \int \dot{p}_i dt + \dot{p}_i \int \dot{q}^i dt \right) / 2$$

と書ける。ところが \dot{q}, \dot{p} は次の図のような閉曲線にあるので

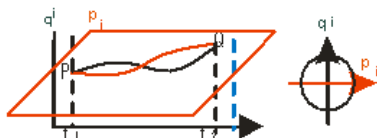


図 4.6: pq 平面での経路、図右は t 軸を紙面表から裏に見る

第 1 項については時間を反転する。つまり

$$H = \left(-\dot{q}^i \int_t^0 \dot{p}_i dt + \dot{p}_i \int_0^t \dot{q}^i dt \right) / 2$$

と表現される。これから次のように運動エネルギー T とポテンシャルエネルギー V を決めると

$$2V = \dot{p}_i \int_0^t \dot{q}^i dt = q^i \dot{p}_i \quad (4.60)$$

$$2T = \dot{q}^i \int_0^t \dot{p}_i dt = \dot{q}^i p_i \quad (4.61)$$

となるから前部の式から次が導ける。

$$L = T - V \quad (4.62)$$

$$H = T + V \quad (4.63)$$

ここでエネルギー運動量テンソル $T_{\mu\nu}$ とし、スピンの寄与からくる $B_{\alpha\mu\nu}$ を加え、

$$T_{\mu\nu} = \partial_\mu \phi_r \frac{\partial L}{\partial(\partial^\nu \phi_r)} - \eta_{\mu\nu} L + \partial^\alpha B_{\alpha\mu\nu}$$

これから母関数 P は時間、空間推進をまとめて次のようにかける。

$$P_\mu = (H, P_i) = \int_V d^3x T_{\mu 0}$$

例えば、ローレンツ変換は $\delta x^\mu = \omega^{\mu\nu} x_\nu$ で表された。

この時、の母関数は

$$M_{\mu\nu} = \int_V d^3x (x_\mu T_{\nu 0} - x_\nu T_{\mu 0})$$

となる。

4.2.2 統計因子の量子化

ここまで、この分配関数と量子論との関係を見てきたので、ここで Z_G を相互作用のハミルトニアン \hat{H} で展開することを考える。摂動展開するために次のように統計因子を S 演算子で書き換える。

$$\begin{aligned} e^{-\beta\hat{H}} &= e^{-\beta\hat{H}_0} \hat{S}(\beta) \\ \hat{S}(\beta) &= e^{\beta\hat{H}_0} e^{-\beta\hat{H}} \end{aligned} \quad (4.64)$$

この時 \hat{S} を用いて分配関数が次のように S 演算子の期待値で表される。

$$Z_G = \text{Tr} \left[e^{-\beta\hat{H}_0} \hat{S}(\beta) \right] = \text{Tr} \left[e^{-\beta\hat{H}_0} \right] \frac{\text{Tr} \left[e^{-\beta\hat{H}_0} \hat{S}(\beta) \right]}{\text{Tr} \left[e^{-\beta\hat{H}_0} \right]} = Z_{G_0} \left\langle \hat{S}(\beta) \right\rangle_0$$

ただし、ここで $\langle \dots \rangle_0$ は大正準集団での期待値を表し、 Z_{G_0} でその大分配関数を表すとする。これを式 4.5 に代入すると、相互作用がない場合の熱力学ポテンシャルを G_0 として

$$\begin{aligned} G_0 &= -\frac{1}{\beta} \log Z_{G_0} = -\frac{1}{\beta} \log \left(\text{Tr} e^{-\beta\hat{H}_0} \right) \\ G &= -\frac{1}{\beta} \log Z_G = -\frac{1}{\beta} \log Z_{G_0} \left\langle \hat{S}(\beta) \right\rangle_0 \\ &= G_0 - \frac{1}{\beta} \log \left\langle \hat{S}(\beta) \right\rangle_0 \end{aligned} \quad (4.65)$$

となる。式 4.64 を β で微分すると式 4.2 から

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{S}(\beta)}{d\beta} &= e^{\beta\hat{H}_0} \left(\hat{H}_0 - \hat{H} \right) e^{-\beta\hat{H}} = -e^{\beta\hat{H}_0} \hat{H}_{int} e^{-\beta\hat{H}_0} e^{\beta\hat{H}_0} e^{-\beta\hat{H}} \\ &= -\hat{H}_{int}(\beta) \hat{S}(\beta) \end{aligned} \quad (4.66)$$

ただし、

$$\begin{aligned} \hat{H}_{int}(\beta) &= -e^{\beta\hat{H}_0} \hat{H}_{int} e^{-\beta\hat{H}_0} \\ \hat{S}(\beta=0) &= 1 \end{aligned}$$

である。よって \hat{S} は状態数演算子であることがわかる。

式 4.4 から相互作用表示を用いて

$$\begin{aligned} \hat{H}_{int}(\beta) &= \frac{1}{2} \int dx_1 \int dx_2 V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_{1'}) e^{\beta\hat{H}_0} \hat{\psi}^\dagger(x_1) \hat{\psi}^\dagger(x'_1) \hat{\psi}(x'_1) \hat{\psi}(x_1) e^{-\beta\hat{H}_0} \\ &= \frac{1}{2} \int dx_1 \int dx_2 V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_{1'}) \hat{\psi}^\dagger(x_1\beta) e^{\beta\hat{H}_0} \hat{\psi}^\dagger(x'_1) e^{-\beta\hat{H}_0} e^{\beta\hat{H}_0} \hat{\psi}(x'_1) e^{\beta\hat{H}_0} \hat{\psi}(x_1\beta) \\ &= \frac{1}{2} \int dx_1 \int dx_2 V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_{1'}) \hat{\psi}^\dagger(x_1\beta) \hat{\psi}^\dagger(x'_1\beta) \hat{\psi}(x'_1\beta) \hat{\psi}(x_1\beta) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{klk'l'} V_{k'l';kl} \hat{c}_{k'}^\dagger(\beta) \hat{c}_l^\dagger(\beta) \hat{c}_l(\beta) \hat{c}_k(\beta) \end{aligned} \quad (4.67)$$

となる。

ただし、相互作用表示では第 6 部で見たように相互作用描像のシュレディンガー方程式が

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi_I(t)\rangle = H'_I(t) |\Psi_I(t)\rangle$$

$$H'_I(t) = e^{iH_0 t/\hbar} H'(0) e^{-iHt/\hbar}$$

となった。これは相互作用描像では場の量は相互作用のない自由場としてふるまい、時間依存性はヒルベルト空間のベクトルが担うことを意味している。これは場の演算子

$$\hat{\psi}^\dagger(x_1, \beta), \hat{\psi}(x_1, \beta)$$

はエルミート共役にならないことを意味するので注意する。
次に演算子 \hat{c}_k を決める必要がある。そこで

$$\hat{c}_k(\beta) = e^{\beta \hat{H}_0} \hat{c}_k e^{-\beta \hat{H}_0}$$

の両辺を β で微分して、式 4.3 $\hat{H}_0 = \sum_{k'} (\epsilon_{k'} - \mu) \hat{c}_{k'}^\dagger \hat{c}_{k'}$ を代入し、次のように変形する。
前節の式 3.81 $[\hat{C}_i, \hat{C}_j] \equiv \hat{C}_i \hat{C}_j - \sigma \hat{C}_j \hat{C}_i = (ij)$ を利用して、

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{c}_k(\beta)}{d\beta} &= e^{\beta \hat{H}_0} (\hat{H}_0 \hat{c}_k - \hat{c}_k \hat{H}_0) e^{-\beta \hat{H}_0} \\ &= e^{\beta \hat{H}_0} \sum_{k'} (\epsilon_{k'} - \mu) (\hat{c}_{k'}^\dagger \hat{c}_{k'} \hat{c}_k - \hat{c}_k \hat{c}_{k'}^\dagger \hat{c}_{k'}) e^{-\beta \hat{H}_0} \\ &= e^{\beta \hat{H}_0} \sum_{k'} (\epsilon_{k'} - \mu) (\hat{c}_{k'}^\dagger \sigma \hat{c}_k \hat{c}_{k'} - (\delta_{kk'} + \sigma \hat{c}_{k'}^\dagger \hat{c}_k) \hat{c}_{k'}) e^{-\beta \hat{H}_0} \\ &= -e^{\beta \hat{H}_0} (\epsilon_k - \mu) \hat{c}_k e^{-\beta \hat{H}_0} \\ &= -(\epsilon_k - \mu) \hat{c}_k(\beta) \end{aligned}$$

となり、あたかも運動量のような平衡移動演算子のようにエネルギー分ずらす。
この式は微分方程式なので初期条件として

$$\hat{c}_k(\beta = 0) = \hat{c}_k$$

とすると、

$$\hat{c}_k(\beta) = e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)} \hat{c}_k$$

が得られる。同様にして \hat{c}_k^\dagger は次の交換関係に注意して

$$\hat{c}_{k'}^\dagger \hat{c}_{k'} \hat{c}_k^\dagger - \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_{k'}^\dagger \hat{c}_{k'} = \hat{c}_{k'}^\dagger (\delta_{kk'} + \sigma \hat{c}_{k'}^\dagger \hat{c}_k) - \sigma \hat{c}_{k'}^\dagger \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_{k'} = \delta_{kk'} \hat{c}_k$$

同様に次が得られる。

$$\hat{c}_k^\dagger(\beta) = e^{\beta(\epsilon_k - \mu)} \hat{c}_k^\dagger$$

これらが生成、消滅演算子の β 発展を表すが、 β が実数なので注意する。

4.3 作用積分

前節の内容から経路積分のように β の変化を逐次実行することができるようになる。
そこでまず、 $\beta \rightarrow \tau_1$ の置き換えをして、式 4.66 を積分すると

$$\frac{d\hat{S}(\beta)}{d\beta} = -\hat{H}_{int}(\beta) \hat{S}(\beta)$$

から $\hat{S}(0) = 1$ の初期条件で $0 \leq \tau_1 \leq \beta$ とすると 式 4.7 に対応して、

$$\hat{S}(\beta) = 1 - \int_0^\beta d\tau_1 \hat{H}_{int}(\tau_1) \hat{S}(\tau_1)$$

とおく。これは左辺に $\hat{S}(\tau_1)$ を含むので、再帰的に繰り返しになり経路積分で見たように

$$\begin{aligned}
\hat{S}(\beta) &= 1 - \int_0^\beta d\tau_1 \hat{H}_{int}(\tau_1) \hat{S}(\tau_1) \\
&= 1 - \int_0^\beta d\tau_1 \hat{H}_{int}(\tau_1) \left[1 - \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \hat{H}_{int}(\tau_2) \hat{S}(\tau_2) \right] \\
&= 1 - \int_0^\beta d\tau_1 \hat{H}_{int}(\tau_1) + \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \hat{H}_{int}(\tau_1) \hat{H}_{int}(\tau_2) \left[1 - \int_0^{\tau_2} d\tau_3 \hat{H}_{int}(\tau_3) \hat{S}(\tau_3) \right] \\
&= 1 + \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \cdots \int_0^{\tau_{n-1}} d\tau_n \hat{H}_{int}(\tau_1) \hat{H}_{int}(\tau_2) \cdots \hat{H}_{int}(\tau_n)
\end{aligned} \tag{4.68}$$

となる。ここで順序積を T_τ を導入して式 3.46 より、 σ^p を用いて

$$\begin{aligned}
T_\tau \hat{C}_k(\tau_1) \hat{C}_l(\tau_2) &\equiv \begin{cases} \hat{C}_k(\tau_1) \hat{C}_l(\tau_2) & \tau_1 \geq \tau_2 \\ \sigma \hat{C}_l(\tau_2) \hat{C}_k(\tau_1) & \tau_2 > \tau_1 \end{cases} \\
&= \sigma T_\tau \hat{C}_l(\tau_2) \hat{C}_k(\tau_1)
\end{aligned}$$

を利用すると簡単に表記できて、式 4.67 から \hat{H}_{int} は 4 つの場の演算子の積であったから

$$\begin{aligned}
\hat{S}(\beta) &= 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \cdots \int_0^{\tau_{n-1}} d\tau_n T_\tau \hat{H}_{int}(\tau_1) \hat{H}_{int}(\tau_2) \cdots \hat{H}_{int}(\tau_n) \\
&= T_\tau \exp \left[- \int_0^\beta d\tau \hat{H}_{int}(\tau) \right]
\end{aligned} \tag{4.69}$$

と書くことができる。天下りのであるが、 T_τ 演算子が指数展開の形をうまく作っている。これは第 6 部の Green 関数の N 点関数

$$G(x_1, x_2, \dots, x_N) = \langle 0 | T \phi(x_1) \phi(x_2) \cdots \phi(x_N) | 0 \rangle$$

の定義とも関連する。第 6 部の観測的伝播関数を定義したことと同じ内容である。

具体的に $n = 2$ の場合で 4.68 と 4.69 を比べてみよう。

積分区間に留意して、

$$\begin{aligned}
\int_0^\beta d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 T_\tau \hat{H}_{int}(\tau_1) \hat{H}_{int}(\tau_2) &= \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \hat{H}_{int}(\tau_1) \hat{H}_{int}(\tau_2) + \int_0^\beta d\tau_1 \int_{\tau_1}^\beta d\tau_2 \hat{H}_{int}(\tau_2) \hat{H}_{int}(\tau_1) \\
&= \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \hat{H}_{int}(\tau_1) \hat{H}_{int}(\tau_2) + \int_0^\beta d\tau_2 \int_0^{\tau_2} d\tau_1 \hat{H}_{int}(\tau_2) \hat{H}_{int}(\tau_1) \\
&= 2 \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \hat{H}_{int}(\tau_1) \hat{H}_{int}(\tau_2)
\end{aligned}$$

となる。以上から式 4.65 を解く準備ができた。

順序積 T_τ と \hat{H}_{int} 演算子が可換になるので式 4.69 から

$$\langle \hat{S}(\beta) \rangle_0 = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \cdots \int_0^{\tau_{n-1}} d\tau_n \left\langle T_\tau \prod_{i=1}^n \hat{H}_{int}(\tau_i) \right\rangle_0 \tag{4.70}$$

とまとめることができる。

次に生成演算子を消滅演算子の左に移動する正規積化をおこなう。これは第 6 部の真空状態で次のように定義した。

$$: a_1^\dagger a_2 a_3^\dagger := a_1^\dagger a_3^\dagger a_2$$

$$: a_1^\dagger a_2 a_3^\dagger := -a_1^\dagger a_3^\dagger a_2$$

ただし、今回の置換の偶奇により因子 σ^P が生じることに注意する。つまり正規順化を次で定義する。

$$: \hat{\psi}(x_1) \hat{\psi}^\dagger(x'_1) := \sigma \hat{\psi}^\dagger(x'_1) \hat{\psi}(x_1)$$

これを式 4.70 に用いると式 3.71 のハミルトニアンを用いて次のように時間順序積と正規順積を用いて表すことができる。

$$\begin{aligned} \langle \hat{S}(\beta) \rangle_0 &= 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{2^n n!} \left(\prod_{i=1}^n \int_0^\beta d\tau_i \int dx_i \int dx'_i \right) \\ &\times \left\langle T_r \prod_{i=1}^n V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}'_i) : \hat{\psi}^\dagger(x_i, \tau_i) \hat{\psi}(x_i, \tau_i) \hat{\psi}^\dagger(x'_i, \tau_i) \hat{\psi}(x'_i, \tau_i) : \right\rangle_0 \end{aligned}$$

ここでポテンシャルを次のように制限する。

$$\begin{aligned} \bar{V}(i - i') &= \delta(\tau_i - \tau'_i) V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}'_i) \\ i &= x_i, \tau_i \end{aligned}$$

よって

$$\langle \hat{S}(\beta) \rangle_0 = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{2^n n!} \left(\prod_{i=1}^n \int di \int di' \right) \left\langle T_r \prod_{i=1}^n \bar{V}(i - i') : \hat{\psi}^\dagger(i) \hat{\psi}(i) \hat{\psi}^\dagger(i') \hat{\psi}(i') : \right\rangle_0 \quad (4.71)$$

と表すことができ、これは次のように 4 つの粒子の生成、消滅のからむ Feynman 図に対応する。

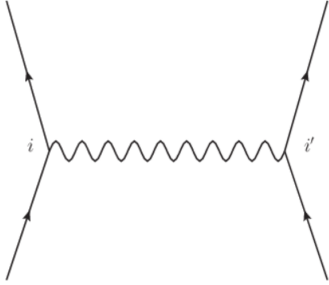


図 4.7: Feynman 図

実際の計算には第 6 部での Wick の定理をつかう。

4.4 Green 関数

第 6 部でみたように式 4.71 は消滅・生成演算子のペアになっている。この時には期待値が有限収束する。そこで次の期待値を定義する

$$G^0(1, 2) \equiv \langle T_r \hat{\psi}(1) \hat{\psi}(2) \rangle_0$$

非摂動 Green 関数とよばれ、いいかえれば伝播関数としてふるまう。

第 6 部でも見たように次のステップ関数を導入する。

5 量子代数 [98, 99]

量子論の重要な特徴は対象を観測するのに常に環境との相互作用としてとらえていくことである。

古典的にも例えばクーロン力のように相互作用 F_{AB} は A が B に及ぼす力は、空間的に離れた 2 点 A, B 間に働く。つまり、

$$F_{AB} = -F_{BA} \quad (5.1)$$

である。しかし、直接遠隔的に瞬時にこの力が伝達するわけではない。 B 点での電荷はその周囲に電場 E_B をつくり、それが A 点での電荷に作用するわけである。つまり、 B 点での電荷が A 点での電荷 Q_A に作用し

$$F_{BA} = Q_A E_B$$

が成り立ち、逆に B 点での電荷は

$$F_{AB} = Q_B E_A$$

である。式 5.1 で 1 つの力で表現されていたものが、場と荷の積が決めている。

この時、大局的な保存量である荷というものと、局所的な観測量である場がセットになっていることが重要である。

われわれは観測対象と環境を自然に区別しているが、観測は常に自分の外の環境の影響を受ける。

しかし、非常に小さな対象であった場合に、これをどう区別していくべきだろうか。

量子論の基礎では環境と対象を意識的に区別する必要があり、これを理解していくのに密度演算子が重要になる。

5.1 シュミット分解

前節の内容から、密度演算子を分解する必要が出てくる。そこで第 4 部でみたシュミット分解を密度演算子に利用する。

2 つの系 A, B の任意の状態ベクトル $|\Psi\rangle_{AB} \in \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ は各ヒルベルト空間の直交規格基底 $|n\rangle$ を用いて展開する。

シュミット分解では次のように規格直交基底で分解できる。 $p_n > 0$ として

$$|\Psi\rangle_{AB} = \sum_n \sqrt{p_n} |n\rangle_A \otimes |n\rangle_B \quad (5.2)$$

ここで、係数 $\sqrt{p_n}$ はシュミット係数と呼ばれ、次のように確率則を満たす。

$$\sum_{k=1}^n p_k = 1$$

これはまずクロージャーを用いて

$$|\Psi\rangle_{AB} = \sum_n |n\rangle_{AA} \langle n|\Psi\rangle_{AB} = \sum_n |n\rangle_A |\bar{n}\rangle_B \quad (5.3)$$

と表す。ただし、

$$|\bar{n}\rangle_B \equiv_A \langle n|\Psi\rangle_{AB} \quad (5.4)$$

とする。これは一般には直交基底になるとは限らない。

しかし、還元密度演算子 $\hat{\rho}_A$ をここで考えると

$$\hat{\rho}_A = \sum_n p_n |n\rangle_{AA} \langle n|$$

となる。これは規格直交化されているので式 5.3 に用いると B 系で対角和をとるので

$$\begin{aligned}\rho_A &= \text{Tr}(|\Psi\rangle_{ABAB}\langle\Psi|) \\ &= \sum_{n,n'} |n\rangle_{AA} \langle n'| \text{Tr}_B(|\bar{n}\rangle_{BB}\langle\bar{n}|) \\ &= \sum_{n,n'} |n\rangle_{AA} \langle n'|_B \langle\bar{n}|\bar{n}\rangle_B\end{aligned}$$

となる。両式を比較すると

$${}_B\langle\bar{n}|\bar{n}\rangle_B = p_n \delta_{nn'}$$

となる。従って、

$$|\bar{n}\rangle_B = \sqrt{p_n} |n\rangle_B$$

であることがわかる。これを式 5.4 とすれば式 5.2 が成り立つ。

この結果から異なった2つの純粋状態 $|\Psi\rangle_{AB}$ と $|\Phi\rangle_{AB}$ をシュミット分解すると、同じ基底にはならない。混合状態であれば、同じ基底をとることができる。

さらにシュミット分解で3つ以上の合成系はつくれない。

前節の結果では全体の密度演算子を用いてもよかったので密度行列の対角和

$$\hat{\rho}_B = \text{Tr}_A \rho_{AB} = \sum_n p_n |n\rangle_{BB} \langle n|$$

となるはずである。一方で

$$\hat{\rho}_A = \text{Tr}_B \rho_{AB} = \sum_{n'} p'_{n'} |n'\rangle_{AA} \langle n'|$$

とすることもできる。

従って、 $\hat{\rho}_A$ と $\hat{\rho}_B$ の零でない対角要素の数(シュミットランク)とその値が等しくなる。

これは行列の Rank が等しければ零である対角行列の数は異なってもよいことになる。

また、密度行列が2乗不変なので

$$\text{Tr}(\rho_A^2) = \text{Tr}(\rho_B^2)$$

も成り立つ。

従ってシュミット分解は零でない対角要素が全て異なっていれば一意に決まりそうである。

ただし、前節でみたように位相変化

$$e^{i\theta} |n\rangle$$

がかかっている、位相変化は複素共役との積で見えなくなる。

以下の定理が成り立つ。

定理. Schumit 分解

2つの量子系 A, B の純粋状態 $|\psi^{AB}\rangle$ は次の A, B の正規直交ベクトルの組 $\{|\alpha_i\rangle\}, \{|\beta_i\rangle\}$ を用いて

$$|\psi^{AB}\rangle = \sum_i \sigma_i |\alpha_i\rangle |\beta_i\rangle \quad (5.5)$$

と書ける。

Proof. これはまず、 A, B の正規直交基底(行列)を

$$\{|\alpha_i\rangle\}_{i=1}^N, \{|\beta_i\rangle\}_{i=1}^M$$

とすると、純粋状態はテンソル積

$$|\psi^{AB}\rangle = \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^M \psi_{jk} |\alpha_j\rangle |\beta_k\rangle \quad (5.6)$$

と表すことができる。

第4部での特異値分解を使うと固有値の平方根をもつ対角行列を Σ とし、ユニタリ行列を U, V として、

$$\Psi = U \Sigma V^\dagger$$

と書けた。これを成分で

$$\psi_{jk} = \sum_i u_{ij} \sigma_i v_{ik}$$

式5.6から

$$\begin{aligned} |\psi^{AB}\rangle &= \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^M \left(\sum_i u_{ij} \sigma_i v_{ik} \right) |a_j\rangle |b_k\rangle \\ &= \sum_i \sigma_i \left(\sum_j u_{ij} |a_j\rangle \right) \left(\sum_k v_{ik} |b_k\rangle \right) \\ &= \sum_i \sigma_i |\alpha_i\rangle |\beta_i\rangle \end{aligned}$$

となる。

□

5.2 特異値分解 [81]

第4部の行列の章で特異値分解に触れたが、ここでは量子論中心に振り返ろう。まず A がエルミートであれば正方行列でなくても

$$AA^\dagger = A^\dagger A$$

が成り立つ。そこで次のように観測演算子 M を定義する。

$$M \equiv AA^\dagger = A^\dagger A$$

M の固有値を λ 、固有ベクトルを $|v\rangle$ とすると

$$(A^\dagger A) |v\rangle = M |v\rangle = \lambda |v\rangle$$

となるので、左から $|v\rangle$ をかけるとノルムの定義が得られ、

$$\langle v | A^\dagger A |v\rangle = \langle v | M |v\rangle = \lambda = |A |v\rangle|^2 \geq 0$$

となる。固有値は常に非負である。このような行列を準正定値行列 (positive_semi_definite_matrix) という。ただ、ここで重要なのは AA^\dagger または $A^\dagger A$ を1つのまとめた行列 M として見ていることである。

この性質から少なくとも M は正方行列である必要がある。

これは第6部でみたように1つの進行波ではなくて、反射波とセットにした合成波としてみることになる。古典的な波では定常波は時間と空間の位相変化に分離できた。

つまり M の固有値は定常波として、共役関係に分離された固有関数をとれる。

A のランクを r とすれば、第4部で議論したように $A^\dagger A$ の0でない固有値は重複度も含めれば全部で r 個ある。

従って $N \geq r$ 次のユニタリ行列 V をもってきて次のように対角化できた。

$$V^\dagger (A^\dagger A) V = \langle v | M |v\rangle = \begin{pmatrix} \lambda_1 & \cdots & 0 & | & \\ \vdots & \ddots & \vdots & | & 0 \\ 0 & \cdots & \lambda_r & | & \\ - & - & - & + & - \\ & 0 & & | & 0 \end{pmatrix}$$

となる。ただし、以後、固有値列は大きい順に並んでいるとする。

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_r > 0$$

さらに固有ベクトルの行、列を次の V で表す。

$$V = (|v_1\rangle, |v_2\rangle, \cdots |v_r\rangle, |v_{r+1}\rangle, \cdots |v_N\rangle), (1 < r < N)$$

また、規格化のために次のベクトルを定義しておく、

$$|u_j\rangle = \frac{1}{\sqrt{\lambda_j}} A |v_j\rangle, (j = 1, 2, \cdots r)$$

これらのベクトルは **Gram-Schmidt** の直交化 2.1 を用いて直交化した後に次の U を定義する。

$$U = (|u_1\rangle, \cdots |u_r\rangle, |u_{r+1}\rangle, \cdots |u_M\rangle), (1 < r < M)$$

内積を確かめておくと

$$\langle u_i | u_j \rangle = \frac{1}{\sqrt{\lambda_i \lambda_j}} \langle v_i | A^\dagger A | v_j \rangle = \frac{\lambda_j}{\sqrt{\lambda_i \lambda_j}} \langle v_i | v_j \rangle = \delta_{ij}$$

となる。よって次の M 行 N 列の行列ができる。

$$\begin{aligned} U^\dagger A V &= \begin{pmatrix} \langle u_1 | \\ \vdots \\ \langle u_M | \end{pmatrix} (A |v_1\rangle, \cdots A |v_N\rangle) \\ &= \begin{pmatrix} \langle u_1 | A |v_1\rangle & \cdots & \langle u_1 | A |v_r\rangle & | & \\ \vdots & \ddots & \vdots & | & O \\ \langle u_r | A |v_1\rangle & \cdots & \langle u_r | A |v_r\rangle & | & \\ - & - & - & + & - \\ & O & & | & O \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \sqrt{\lambda_1} & \cdots & 0 & | & \\ \vdots & \ddots & \vdots & | & O \\ 0 & \cdots & \sqrt{\lambda_r} & | & \\ - & - & - & + & - \\ & O & & | & O \end{pmatrix} \end{aligned}$$

となる。

このようにして対角化変形することを**特異値標準形**といい、固有値の平方根 $\sqrt{\lambda_1}, \sqrt{\lambda_2} \cdots \sqrt{\lambda_r}$ を**特異値**という。以後これを簡単に

$$A = U A V^\dagger = U \Sigma V^\dagger \quad (5.7)$$

で表すことが多い。成分表示で

$$A_{ij} = \sum_{l=1}^r U_{il} \sqrt{\lambda_l} \bar{V}_{jl} \quad (5.8)$$

とかけ、これを一般に**特異値分解**と呼ぶ。

量子論と関係させるには特異値の非負性を利用して、

$$P_l = \frac{\lambda_l}{\sum_{i=1}^r \lambda_i} \quad (5.9)$$

のような規格化定数をかければ良い。

これらの式は量子論の確率解釈の前章式 1.30 の完全性の表現である。
 波動からみれば、定常波をつくる条件になる。
 特異値の値は不変なので、物理の観測量として適応する。
 さらに、この特異値分解はスケール不変性と関係が深い。
 これは後章の情報エントロピーで考察する。

5.3 ユニタリー相補性 [26]

さらに部分系 A で定義される局所ユニタリ変換を U_A 、同様に部分系 B で定義される局所ユニタリ変換を U_B とする。

このユニタリ変換によって

$$|\phi'_k\rangle_A = U_A |\phi_k\rangle_A$$

$$|\phi'_k\rangle_B = U_B |\phi_k\rangle_B$$

として、全体系の純粋状態は

$$\begin{aligned} (U_A \otimes U_B) |\Phi\rangle_{AB} &= (U_A \otimes U_B) \sum_{k=1}^n \sqrt{p_k} |\phi_k\rangle_A |\phi_k\rangle_B \\ &= \sum_{k=1}^n \sqrt{p_k} (U_A |\phi_k\rangle_A) (U_B |\phi_k\rangle_B) \\ &= \sum_{k=1}^n \sqrt{p_k} |\phi'_k\rangle_A |\phi'_k\rangle_B \end{aligned}$$

となるのでユニタリ変換でシュミットランクやシュミット係数は不変である。

ここで、互いに相補関係にある 2 つの演算子の作用を考える。
 ユニタリ演算子は 1 つの正規直交ベクトルの集合を別の集合に変換することができる。
 例えば単位演算子は

$$I^\dagger I = II = I$$

を満たす、最も簡単なユニタリー演算子である。そこでシュウィンガーが次のような円周上のユニタリ変換を考えた。

$$U |a_k\rangle = |a_{k+1}\rangle \tag{5.10}$$

$$U |a_n\rangle = |a_1\rangle$$

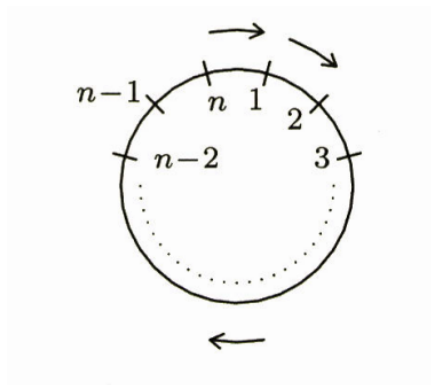


図 5.1: [26] より：円周上で上昇・下降演算子を考える

例えば既に見てきた演算子 σ_x は最も簡単な場合で

$$\begin{aligned}\sigma_x |-\rangle &= |+\rangle \\ \sigma_x |+\rangle &= |-\rangle\end{aligned}$$

のように作用し、次の射影演算子としての性質も持っている。

$$\sigma_x^2 = I$$

一般には

$$\begin{aligned}U^2 |a_k\rangle &= U |a_{k+1}\rangle = |a_{k+1}\rangle \\ U^n |a_k\rangle &= U |a_{k+n}\rangle = |a_k\rangle\end{aligned}$$

この時の添え字 k は n を法としていて

$$n + 2 \equiv n + 2 \pmod{n} = 2$$

のように表せば

$$U^n = 1$$

となり、 n は U の周期と考えることができる。従って、この関係を満たす関数 u' は次のような位相表記で表現できる。

$$\begin{aligned}(u')^n &= 1 \\ u' &= e^{2\pi i \frac{k}{n}}, k = 1, 2, 3 \dots n\end{aligned}$$

つまり、 u' とは 1 の異なる n 乗根である。この時、次の代数的な関係がある。 n 個の因数を持つから

$$U^n - I = \prod_{k=1}^n (U - u_k) = 0 \quad (5.11)$$

ただし、

$$u_k = e^{2\pi i \frac{k}{n}}$$

となる。ここで数学的な数列の和の関係

$$1 + X + X^2 + \dots + X^{n-1} = \frac{X^n - 1}{X - 1}$$

が成り立つので $u_k^n = 1$ だから、

$$U^n - I = \left(\frac{U}{u_k}\right)^n - I = \left(\frac{U}{u_k} - I\right) \sum_{l=0}^{n-1} \left(\frac{U}{u_k}\right)^l$$

によって、因子 $\left(\frac{U}{u_k} - I\right)$ を引き出すことができる。

円周を使っているので $l=0$ は $l=n$ と等しい。よって次のよう $(U - u_k)$ をかけても変わらない。

$$(U - u_k) \sum_{i=1}^n (u/u_k)^l = \sum_{l=1}^n (u/u_k)^l (U - u_k)$$

従って観測操作は U_k の測定で u_k を得る時、

$$|u_k\rangle \langle u_k| = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(\frac{U}{u_k}\right)^l$$

とおける。これは $U \rightarrow u_k$ の時、

$$|u_k\rangle \langle u_k| \rightarrow I$$

となることを表す。この級数は U がエルミート演算子であれば

$$\begin{aligned} (|u_k\rangle \langle u_k|)^\dagger &= \frac{1}{n} \sum_l \left(\frac{U^\dagger}{u_k^*} \right)^l = \frac{1}{n} \sum \left(\frac{U}{u_k} \right)^{-l} \\ &= \frac{1}{n} \sum_{l=0}^{n-1} \left(\frac{U}{u_k} \right)^{n-l} = \frac{1}{n} \sum_{l=1}^n \left(\frac{U}{u_k} \right)^l \\ &= |u_k\rangle \langle u_k| \end{aligned}$$

となり、 $|u_k\rangle \langle u_k|$ もエルミートになる。

そこで固有方程式 5.10 から

$$\begin{aligned} |u_k\rangle \langle u_k| a_n \rangle &= \frac{1}{n} \sum_{l=1}^n u_k^{-l} U^l |a_n\rangle \\ &= \frac{1}{n} \sum_{l=1}^n u_k^{-l} |a_l\rangle \end{aligned} \quad (5.12)$$

に左から $\langle a_n|$ を作用させると次の結果を得る。

$$\langle a_n | u_k \rangle \langle u_k | a_n \rangle = \frac{1}{n}$$

これから次のようにおけることが予想される。

$$\langle u_k | a_n \rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \quad (5.13)$$

よって規格化された状態ベクトルが

$$\begin{aligned} |u_k\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{l=1}^n |a_l\rangle e^{-\frac{2\pi i}{n} kl} \\ \langle u_k| &= \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{l=1}^n \langle a_l| e^{\frac{2\pi i}{n} kl} \end{aligned}$$

のようにかければ

$$\langle u_k | a_l \rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{i=1}^n e^{\frac{2\pi i}{n} kl}$$

となり、確かに $l = n$ の時に式 5.13 を満たし、

$$\langle u_k | a_n \rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \quad (5.14)$$

となる。これで円周上に n 個の規格直交したベクトルが得られたことになる。

これら巡を回的に置換する次のような演算子を考えよう。

$$\begin{aligned} \langle u_k | V &= \langle u_{k+1} | \\ &\vdots \\ \langle u_k | V^m &= \langle u_{k+m} | \\ &\vdots \\ \langle u_k | V^n &= \langle u_k | \end{aligned}$$

よって

$$V^n = 1, v_l = e^{2\pi i \frac{l}{n}}$$

とにおいて、一般的な観測が

$$|v_l\rangle \langle v_l| = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n (V/v_l)^k$$

で表すことができ

$$\langle u_n | v_l \rangle \langle v_l| = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n e^{-\frac{2\pi i}{n} kl} (V/v_l)^k$$

そこで

$$\langle u_n | v_l \rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}$$

とすれば次のように展開できることがわかる。

$$\begin{aligned} \langle v_l| &= \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{k=1}^n e^{-\frac{2\pi i}{n} kl} \langle u_k| \\ |v_l\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{k=1}^n |u_k\rangle e^{\frac{2\pi i}{n} kl} \end{aligned}$$

さらに式 5.12, 5.14 を使うと

$$\frac{1}{\sqrt{n}} e^{\frac{2\pi i}{n} kl} = \langle u_k | a_l \rangle$$

だったから

$$|v_l\rangle = \sum_{k=1}^n |u_k\rangle \langle u_k | a_l \rangle = \sum_{k=1}^n |u_k\rangle \frac{1}{\sqrt{n}} e^{\frac{2\pi i}{n} kl} = |a_l\rangle$$

となり、元に戻る。

このようにして、互いに相補的に定義される次のような 2 個のユニタリ演算子が導入できる。

$$U |v_l\rangle = |v_{l+1}\rangle, \langle u_k | V = \langle u_{k+1} |$$

これらは共に n が最大分割数だから

$$U^n = 1, V^n = 1$$

そこで、これらの積演算が次のように定義できる。

$$\begin{aligned} \langle u_k | VU &= \langle u_{k+1} | U = e^{\frac{2\pi i}{n}(k+1)} \langle u_{k+1} | \\ \langle u_k | UV &= e^{\frac{2\pi i}{n}k} \langle u_k | V = e^{\frac{2\pi i}{n}k} \langle u_{k+1} | \end{aligned} \quad (5.15)$$

これから次の関係が得られる。

$$VU = e^{\frac{2\pi i}{n}} UV \quad (5.16)$$

また、互いの状態ベクトルの内積をとると

$$\langle u_k | v_l \rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} e^{\frac{2\pi i}{n} kl}$$

となり、演算子では式 5.15 から

$$\begin{aligned} \langle u_m | V^l U^k &= \langle u_{m+l} | U^k = e^{\frac{2\pi i}{n} k(m+l)} \langle u_{m+l} | \\ \langle u_m | U^k V^l &= e^{\frac{2\pi i}{n} km} \langle u_m | V^l = e^{\frac{2\pi i}{n} km} \langle u_{m+l} | \end{aligned}$$

となるので、これから積演算子の関係が次のようになることがわかる。

$$V^l U^k = e^{\frac{2\pi i}{n} kl} U^k V^l \quad (5.17)$$

例えば $n = 2$ の時は

$$U^2 = 1, V^2 = 1, UV = -UV \quad (5.18)$$

のように反交換関係を満たす。

これはパウリ演算子の σ_x と σ_y の関係に等しい。

この考え方のおもしろいところは、この反交換の関係が $n \rightarrow \infty$ とすると交換関係に連続的に移行することである。

シュウィンガーはこれから量子論と古典論の関係だと説明している。

興味あるところに $n = 2$ の場合に 2 つ演算子の積から作られる 4 つの演算子はパウリ行列をつくる。

$$\begin{aligned} U^1 V^1 &= \sigma_x \sigma_y = i\sigma_z \\ U^1 V^2 &= \sigma_x \\ U^2 V^1 &= \sigma_y \\ U^2 V^2 &= 1 \end{aligned}$$

さらに一般には n^2 個の演算子が 2 つの組み合わせでできることになる。

この関数を求めるために $u_k = e^{\frac{2\pi i}{n} k}$ だったから

$$\begin{aligned} |u_k\rangle \langle u_k| &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(\frac{U}{u_k} \right)^i \\ &= \frac{1}{n} \sum_l e^{-\frac{2\pi i}{n} kl} U^l \end{aligned}$$

となるので右から V^{m-k} をかけると

$$\langle u_k | V_{m-k} = \langle u_m |$$

となったから

$$|u_k\rangle \langle u_m| = \frac{1}{n} \sum_l e^{-\frac{2\pi i}{n} kl} U^l V^{m-k}$$

従って、一般に n^2 個の連続測定 $|u'\rangle \langle u''|$ の線形結合で観測演算子 F を定義できて

$$F = \sum_{k,l=1}^n f_{kl} U^k V^l = f(U, V)$$

となる。これらは U の観測で u' を測定した後に V の測定において観測結果が v' となるので

$$u' = u_k, v' = v_l$$

としてその確率を

$$p(u', v') = \left| \frac{1}{\sqrt{n}} e^{\frac{2\pi i}{n} kl} \right|^2 = \frac{1}{n}$$

とすることができる。この結果が v', u' に依存しないことから、確率論として考えることができる。

第 1 章で議論したシュテルン・ゲルラッハの実験において、非選択的実験を扱ったが、それは

$$p(u', v, u'') = \sum_{v'} p(u', v') p(v', u'') = \sum_{v'} \frac{1}{n} \frac{1}{n} = \frac{1}{n} \frac{1}{n} = \frac{1}{n}$$

となり、1回の測定とみなせるが、これは、観測を行わない次の場合

$$p(u', 1, u'') = p(u', u'') = \delta(u', u'')$$

と明らかにことなることを示せた。

つまり、 V の観測が最初の u' を得た情報を完全にこわしているとみなせる。

これは第1章で見た両立する観測かどうかである。ここでは両立しない観測量を相補的であるとしている。

1つの観測をすることで他方の測定以前の情報を失うことをボアの相補性という。

5.4 純粋状態と混合状態

5.4.1 POVM[124]

実際の量子系に対して行われる測定は誤差の影響から測定後の状態が測定された固有値に対する固有状態にならない場合が多い。理想測定とは異なるこのような測定を、一般測定 (general measurement) という。

このような測定には測定演算子 (measurement_operator) や正演算子値測度 (positive_operator_valued_measure) などの道具が使える。とくに、正演算子値測度は **POVM** と呼ばれることが多い。

一般的な測定がエルミート行列の組で表されたから ω を連続値もとれる。 ω が離散値をとる時の Ω の要素の数を $|\mathbf{M}|$

とすると、正演算子測度は

$$\mathbf{M} := \{M_\omega\}_{\omega \in \Omega}$$

$$M_\omega \geq 0, \sum_{\omega \in \Omega} M_\omega = I$$

と表すことができる。この物理的な意味が、密度行列 ρ に代表される状態に \mathbf{M} に対応する測定をおこなうと、

測定値 ω が得られる確率が

$$P_\rho^{\mathbf{M}}(\omega) := \text{Tr}[\rho M_\omega] \quad (5.19)$$

となるわけである。トレースをとることで上の条件が満たされ、純粋状態であれば

$$\text{Tr}\rho = 1, \rho \geq 1$$

であったので、確率としての条件

$$\sum_{\omega \in \Omega} \text{Tr}\rho M_\omega = \text{Tr} \sum_{\omega \in \Omega} M_\omega = \text{Tr}\rho I = 1$$

が成り立つ。

密度行列が複数あり、その集合を $\mathcal{S}(\mathcal{H})$ で表す。この時の \mathcal{H} はヒルベルト空間である。

例えば系が確率 λ で状態 ρ_1 、 $1 - \lambda$ で状態 ρ_2 にあるとする。この時はある測定 $\mathbf{M} = \{M_\omega\}$ が行われると

$$\lambda \text{Tr}\rho_1 M_\omega + (1 - \lambda) \text{Tr}\rho_2 M_\omega = \text{Tr}[(\lambda\rho_1 + (1 - \lambda)\rho_2) M_\omega]$$

となる。よく見ると確率がかけ算されていることがわかる。この時の状態を新たに密度行列

$$\rho' = \lambda\rho_1 + (1 - \lambda)\rho_2$$

で置き換えたと考えれば

$$\text{Tr}[\rho' M_\omega]$$

とすることができる。

この時確率波は非干渉 (incoherent) な重ね合わせであるという。
従って量子力学の純粋状態はノルムが1のベクトル

$$u \in \mathcal{H}$$

を用いて

$$|u\rangle\langle u| \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$$

と表す。このノルムが1のベクトルの集合を \mathcal{H}^1 と表すこともある。
一方で混合状態は純粋状態の重ね合わせであると考えられる。この時 \mathcal{H} の次元を d とすると

$$\frac{1}{d}I$$

は完全混合状態と呼ばれ、 ρ_{mix} で表す。

POVMM = $\{M_\omega\}$ が M_ω の射影になるとき、この POVMM は PVM 射影値測定と呼ぶ。これは任意の異なる ω, ω' とするとき

$$M_\omega M_{\omega'} = 0$$

で、射影の射影が0になることを表し、密度行列の条件

$$\rho^2 = \rho$$

を意味している。

今後、エルミート行列 X の固有値を x^i とし、この固有値に対する固有空間への射影を $P_{x,i}$ で表す。
ここで X のスペクトル分解を

$$X = \sum_i x^i P_{x,i}$$

で定義すると確率論での期待値のように扱うことができる。この時、射影の全体は

$$\mathbf{P}_X = \{P_{x,i}\}$$

となり、これが PVM となる。例えば縮退があるような場合は同一の固有値に対応する固有ベクトルが複数存在する。

この場合は

$$X = \sum_{i=1}^d x^i |u_i\rangle\langle u_i|$$

は一意ではない。しかし、スペクトル分解は一意となる。

PVMP $_X$ をある状態 ρ に対して行い、その期待値が式 5.19 から

$$\text{Tr}[\rho X]$$

となり、分散が

$$\text{Tr}[\rho X^2] - (\text{Tr}[\rho X])^2$$

で計算できる。これからエルミート行列は PVM の表現になっている。また、PVMP $_X$ をエルミート行列 X の測定と呼ぶ。

2つのエルミート行列 X, Y が可換であれば、共通の基底で対角化できる。

前章で議論した両立する測定になるわけである。

しかし、一般には POVMM = $\{M_\omega\}$ の各要素と ρ は可換ではない。この場合は両立しない観測であった。これをピンチングという写像 κ_M を用意し、

$$\kappa_M(\rho) \equiv \sum_\omega M_\omega \rho M_\omega$$

を考えると ρ と M_ω を可換にすることができる。

5.4.2 射影測定と確率論

具体的に先のシュテルン・ゲルラッハの実験のようなスピンを用いて射影測定を見ていこう。前章の 1.32 をここでは次のように状態ベクトルを改めて定義する。

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$|\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\langle\uparrow| = (1, 0)$$

$$\langle\downarrow| = (0, 1)$$

これから固有ベクトルを次で定義する。

$$|+\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle)$$

$$|-\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle)$$

これら純粋状態であり、密度行列をつくると

$$\begin{aligned} \rho_+ = |+\rangle\langle+| &= \frac{1}{2} \left(\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right) \left(\begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} \right) \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

であり、

$$\text{Tr}[\rho_+^2] = 1$$

となるのでこれは純粋状態である。

一方で混合状態として 50% が $|+\rangle$ の場合

$$|\uparrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle)$$

$$|\downarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle - |-\rangle)$$

と構成できて、どちらを観測しても 50% が +、もう 50% が - になる。

次に純粋状態では

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle)$$

とする。これは明らかに 100% が + になり、

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) = |+\rangle$$

である。

この時の射影演算子は次のようになる。

$$P_+ = |\uparrow\rangle\langle\uparrow| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$P_- = |\downarrow\rangle\langle\downarrow| = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

この演算子は見ても通り、rank = 1 である。また、

$$P_+ + P_- = I$$

$$P_+ P_- = 0$$

を満たすので単位行列の直交分解になっている。

固有値は $\pm 1/2$ とすると観測演算子が決まり、

$$\begin{aligned} M &= \frac{1}{2}P_+ - \frac{1}{2}P_- \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

である。これはパウリ行列にしたら第 3 成分でスピン S_z に対応している。

一般には

$$M = \sum_i \lambda_i P_i$$

となる。シュテルン・ゲルラッハの実験においても

$$M = \frac{1}{2} |+\rangle\langle+| - \frac{1}{2} |-\rangle\langle-|$$

であったので、状態 $|\xi\rangle$ に作用させれば

$$\langle\xi|M|\xi\rangle$$

で期待値が得られる。

例えば

$$\langle+|M|+\rangle = \frac{1}{2}$$

である。

はじめに状態 $|\xi\rangle$ にあって、 $+1/2$ を得る確率は

$$\begin{aligned} p_b(+)&= \langle\xi|P_+|\xi\rangle \\ &= \langle\xi|+\rangle\langle+|\xi\rangle \\ &= |\langle+|\xi\rangle|^2 \end{aligned}$$

これは次のように考えることができる。最初の状態 $|\xi\rangle$ に射影演算子 P_+ を作用させると

$$P_+ |\xi\rangle = P_+ (|+\rangle\langle+| + |-\rangle\langle-|) |\xi\rangle = \sqrt{p_b(+)} |+\rangle$$

が得られる。これから測定後の状態が観測の結果次のようになる。

$$\frac{P_+ |\xi\rangle}{\sqrt{p_b(+)}} = |+\rangle$$

同様にはじめに状態 $|\xi\rangle$ にあって、 $-1/2$ を得る確率は

$$\begin{aligned} p_b(-)&= \langle\xi|P_-|\xi\rangle \\ &= \langle\xi|-\rangle\langle-|\xi\rangle \\ &= |\langle-|\xi\rangle|^2 \end{aligned}$$

これは次のように考えることができる。最初の状態 $|\xi\rangle$ に射影演算子 P_+ を作用させると

$$P_- |\xi\rangle = P_- (|- \rangle \langle -| + |+ \rangle \langle +|) |\xi\rangle = \sqrt{p_b} |- \rangle$$

が得られる。これから測定後の状態が観測の結果次のようになる。

$$\frac{P_- |\xi\rangle}{\sqrt{p_b(-)}} = |- \rangle$$

ここで、測定が射影で表され、この場合は $+$, $-$ しかないので、どちらかに射影する。射影すると状態は $|+\rangle$ か $|-\rangle$ になるわけだが、測定前の状態についてどちらかということを知るすべがない。ただ一つ、最初が 0 であれば、いかなる測定後も $|0\rangle$ になるので、知ることができる。1回の測定では測定前の情報を得ることができないのである。

5.4.3 測定的一般化

ここで確率論が登場する。つまり、測定を複数回おこなうとどうなるかである。

前節での結果から、測定前の情報を得ることができないが、測定を複数回おこなうことで統計的予測できるだろうというわけである。

この時、統計的な平均 $\langle A \rangle$ と同じように量子的な状態を $|\psi\rangle$ とすると

$$\langle \psi | A | \psi \rangle$$

とすればいいだろう。

一般化するために固有値 λ を測定する射影を P_λ とし、物理量を表す M をスペクトル分解する。第4部のスペクトル理論で見たように対角化可能な行列は次のように固有値で展開できた。

$$M = \sum_i \lambda_i P_{\lambda_i}$$

射影演算子の集合は $\{P_\lambda\}$ で表す。この射影演算子を用いて、一般的な状態 $|\xi\rangle$ に作用させると固有値 λ_i を得る確率が次のようになる。

$$p_b(\lambda_i) = \langle \xi | P_{\lambda_i} | \xi \rangle$$

先と同様に測定後に状態は

$$\frac{P_{\lambda_i} |\xi\rangle}{\sqrt{p_b(\lambda_i)}}$$

になる。

そこで、複数回の測定の場合も考えられるように射影演算子の代わりに測定演算子を考えよう。固有値を m とし、汎用的にこの m を考えて、測定1つ1つに対応させ m_i の i は省略する。この時、測定結果 m を得る確率は

$$p_b(m) \equiv \langle \psi | M^\dagger M | \psi \rangle$$

で定義される。これから測定後の状態が

$$\frac{M_m |\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | M_m^\dagger M_m | \psi \rangle}}$$

となり、測定演算子の条件式 1.54 から

$$\sum_m M_m^\dagger M_m = I$$

であり、確率の条件から

$$\sum_m p_b(m) = \text{Tr} [M_m^\dagger M_m] = 1$$

を満たすとする。

さらに次で正演算子 (psitive operator) を定義する。

$$E_m \equiv M_m^\dagger M_m$$

$$\sum_m E_m = I$$

$$p_b(m) = \langle \psi | E_m | \psi \rangle$$

この時完全系 $\{E_m\}$ を **POVM** と呼ぶ。

射影測定はこの E_m の中の特別な場合で、直交条件と完全性を満たす。

$$P_m P_n = \delta_{m,n} P_m$$

$$\sum_m P_m = I$$

これにより、観測を統計的に扱うことができる。

5.4.4 量子相関

量子論では物理的な空間を対象系 \mathcal{H}_S と環境系 \mathcal{H}_E にわけ共に Cauchy 列を満たす Hilbert 空間であるとする。

これらを合成したものはテンソル積 $\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_E$ で与えられ、

$$\psi_i \in \mathcal{H}_S, \phi_j \in \mathcal{H}_E$$

とし、それぞれで正規直交性を満たすとする。この時

$$\psi_i \otimes \phi_j \in \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_E$$

であり、直交性は

$$(\psi_i \otimes \phi_j, \psi_k \otimes \phi_l) = \delta_{ik} \delta_{jl}$$

である。この環境と対象を含めた系で改めて系 S の力学量 \mathcal{D}_S を考えると

$$\mathcal{D}_S(\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_E) \equiv \{A \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_E); \exists A_S \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_S), A = A_S \otimes \mathbb{I}_E\}$$

のように書くことができる。これを**全体系**としよう。

全体系の密度演算子を S を対象、 E を環境として、

$$\rho_{tot} \in \mathcal{S}(\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_E)$$

とおくと環境系の自由度に対して次のように部分トレースをとった密度作用素を定義する。

$$\rho_S = \text{Tr}_E[\rho_{tot}] \in \mathcal{C}(\mathcal{H}_S) \tag{5.20}$$

これは対象の密度行列が環境できめることを表すので対象の空間の内外を決めることに等しい。対角和については

$$\text{Tr}_S[\text{Tr}_E[A]] = \sum_{j=1}^{\infty} (\psi_i, \text{Tr}_E[A|\psi_i]) = \sum_{i,j=1}^{\infty} (\psi_i \otimes \phi_j | A | \psi_i \otimes \phi_j) = \text{Tr}[A]$$

が成り立つ。よって ρ_S は次の対象系の密度演算子としての性質を満たす

$$i) \rho_{tot} \geq 0 \Rightarrow \rho_S \geq 0$$

$$ii) 1 = \text{Tr}[\rho] = \text{Tr}[\rho_{tot}] = \text{Tr}_S[\rho_S]$$

従って $\rho_S \in \mathcal{S}(\mathcal{H}_S)$ である。これは縮約された密度作用素ということができる。
ある自己共役な力学量 $A_S \otimes \mathbb{I}_E \in \mathcal{B}_S(\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_E)$ の期待値を求めると $\text{Tr}_E[\rho_{tot}] = 1$ だから

$$\langle A_S \rangle = \text{Tr}_{SE}(\rho_{tot} A_S \otimes \mathbb{I}_E) = \text{Tr}_S(\text{Tr}_E \rho_{tot}) A_S = \text{Tr}_S A_S$$

である。これから全体系の密度作用素 ρ_{tot} に対して $\rho_S \in \mathcal{S}(\mathcal{H}_S), \rho_E \in \mathcal{S}(\mathcal{H}_E)$ が存在し、

$$\rho_{tot} = \rho_S \otimes \rho_E$$

と表される時、 $\rho_{tot} \in \mathcal{S}(\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_E)$ は相関がないという。これは干渉性ではない。このとき

$$\text{Tr}[\rho_S] = \text{Tr}_E[\rho_{tot}], \text{Tr}[\rho] = \text{Tr}_S[\rho_{tot}]$$

が成り立つ。

自己共役な力学量 $A = A^\dagger \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_S), B = B^\dagger \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_S)$ に対して相関がない場合は次のように積の期待値は期待値の積になる。

$$\langle A \otimes B \rangle = \langle A \rangle \langle B \rangle$$

縮約された密度作用演算子について Landau が次のような定理を示している。

対象とする系の状態が純粋であれば、系はどの環境とも相関を持たない。
すなわち、

$$\exists \phi \in \mathcal{H}_S; \rho_S = |\phi\rangle\langle\phi| \Rightarrow \exists \rho_E \in \mathcal{S}(\mathcal{H}_E); \rho_{tot} = \rho_S \otimes \rho_E$$

が成り立つ。

これは相関の測定には対象系と環境系の双方の測定が必要であるがここではどちらか一つを測定すれば十分であることを示す。

また、この定理の対偶をとると、相関がある系は混合状態である。

とすることができるがこれには注意がいる。

全体系が純粋状態であっても部分に注目すると混合状態になることがあるのである。

このような混合状態を第2種混合状態と呼ぶことがある。これを示してみよう。

$$\rho_{tot} = \sum_{n=1}^{\infty} P_n |\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|, P_n > 0$$

とする。この時の部分の密度演算子は直交性から

$$\begin{aligned} \rho_i &= (\phi_i \rho_S \phi_i) = (\phi_i, \text{Tr}_E \rho_{tot} \phi_i) = \sum_{j=1}^{\infty} (\phi_i \otimes \psi_j, \rho_{tot} \phi_i \otimes \psi_j) \\ &= \sum_{j,n=1}^{\infty} P_n \|(\Psi_n, \phi_i \otimes \psi_j)\|^2 = \sum_{n=1}^{\infty} P_n \sum_{j=1}^{\infty} \|(\Psi_n, \phi_i \otimes \psi_j)\|^2 \end{aligned} \quad (5.21)$$

と表すことができる。 \mathcal{H}_S 上の ϕ_i を利用し、任意の n について

$$\Psi_n = \sum_{i=1}^{\infty} \phi_i \otimes \Phi_i^{(n)}$$

とおくと直交性から内積をとれば $\sum_i^\infty \phi_i^2 = 1$ をまず使い、

$$(\Psi_n, \phi_i \otimes \psi_j) = (\Phi_i^{(n)}, \psi_j)$$

これを式 5.21 に代入すると $\sum_i^\infty \psi_i^2 = 1$ を使い、

$$\rho_i = \sum_{n,j=1}^\infty P_n \|(\Phi_i^{(n)}, \psi_j)\|^2 = \sum_{n,j=1}^\infty P_n \|\Phi_i^{(n)}\|^2$$

を得る。 $P_n > 0$ だから、これから

$$\rho_i = 0 \Rightarrow \forall n \in \mathbb{N}, \Phi_i^{(n)} = 0$$

となり、行列要素の中身が決まる。

式 3.6 から純粋状態はある i 番目の $\rho_i = 1$ で残りは 0 であった。

よってこれから $i = 1$ のみ、 $\rho = 1$ の時に

$$\rho_{tot} = |\phi_1\rangle\langle\phi_1| \otimes \sum_{n=1}^\infty P_n |\Phi_1^{(n)}\rangle\langle\Phi_1^{(n)}| \quad (5.22)$$

と表すことができる。

つまり全体系の密度作用素は純粋状態 $\rho_S = |\phi_1\rangle\langle\phi_1|$ と環境系 $\sum_{n=1}^\infty P_n |\Phi_1^{(n)}\rangle\langle\Phi_1^{(n)}|$ のテンソル積になっていて相関のない純粋状態である。

次章ので再び純粋化で考察する。

5.4.5 波動関数

一般にある状態ベクトル $|b\rangle$ は別のベクトルの線形結合でかける。

$$|b\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle \langle a'|b\rangle$$

つまり、完全性の関係をどこに挿入してもいいことになる。

これから行列で表現してきた内容が波動関数で表せることになる。つまり a' 成分を取りさせば

$$\langle a'|b\rangle = \psi_b(a')$$

のように表して、

$$|b\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle \psi_b(a')$$

であり、このエルミート共役は

$$\langle b| = \sum_{a'} \psi_b(a')^* \langle a'|$$

となる。内積をとると

$$\langle b|b'\rangle = \sum_{a'a''} \psi_b(a')^* \langle a'|a''\rangle \psi_{b'}(a'')$$

となるが

$$\langle a'|a''\rangle = \delta(a', a'') \quad (5.23)$$

を用いれば

$$\langle b|b'\rangle = \sum_{a'} \psi_b(a')^* \psi_{b'}(a')$$

であるし、完備関係式を直接挿入しても

$$\begin{aligned}\langle b|b'\rangle &= \langle b|\sum_{a'}|a'\rangle\langle a'|b'\rangle \\ &= \sum_{a'}\psi_b(a')^*\psi_{b'}(a')\end{aligned}$$

となる。これはクロネッカーの δ は式 1.24 と同じことをしていることになる。

つまり、はじめのシュウィンガーの観測記号にもどれば、同一観測者が、観測を初めて終わることを表している、

もともどり、閉じる、まさにクロージャーの関係を表している。

波動の考え方では進行波と反射波が干渉することになる。これは第 6 部で見た観測的波動関数を表している。ベクトルの内積からベクトルの大きさが定義できた。 $b = b'$ とすれば

$$\langle b|b\rangle = \sum_{a'}|\psi_b(a)|^2 > 0$$

となる。このようにユークリッド幾何学のように扱えるベクトルはユニタリーである。

第 6 部で次のような考察をした。1 粒子系を考え、実数ポテンシャル $V(\mathbf{r})$ として、シュレディンガー方程式は非相対論の範囲で次のように時間に関しては 1 階の微分方程式になる。これまでの議論からすると、ポテンシャル V を測定の効果として考えることができるはずである。

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi = \hat{H}\psi$$

この解を次のように変数分離できる波動関数とする。

$$\psi(\mathbf{r}, t) = u(\mathbf{r})\chi(t)$$

これはシュレディンガー方程式を満たす。

$$\begin{aligned}\hat{H}u &= Eu \\ i\hbar\frac{d\chi}{dt} &= E\chi\end{aligned}$$

解の 1 つは次のようにおける。

$$\chi(t) = C\exp\left(\frac{-iEt}{\hbar}\right) \quad (5.24)$$

これを数学的に眺めると、 E が実数の場合と虚数の場合での振る舞いは大きく異なる。

しかし、最初の式から演算子 \hat{H} がエルミートであれば固有値が実数になることが保証される。

では境界値問題はどうか。

そこで、内部と外部で ψ, ϕ の波動関数を考える。まずエルミートであれば恒等的に 0 になる次の式

$$\Psi = (\phi, \hat{H}\psi) - (\hat{H}\phi, \psi)$$

を考え、この体積積分を、ガウスの定理で表面積分で置き換える。

第一部の境界問題で見たように関数 $u(\mathbf{x})$ が閉曲面、 S の外部領域 V_1 で調和、 S を含めて C^1 関数で無限遠で正則であれば

微小面積を $dS = d^2f$ 、この面積に垂直な方向微分を $\frac{\partial}{\partial n}$ として

$$\begin{aligned}\int_{V_1}(\nabla u)^2 dV &= \int_S u \frac{\partial u}{\partial n} dS \\ u(\mathbf{x}) &= \frac{1}{4\pi} \int_S \left(\frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial n} - u \frac{\partial}{\partial n} \left(\frac{1}{r} \right) \right) dS\end{aligned}$$

が成り立った。ただし、 $\partial/\partial n$ は V_1 から見て外向きである。
従ってこの場合、

$$\int_V \Psi dV = \oint_S \left(\phi^* \frac{\partial \psi}{\partial n} - \frac{\partial \phi^*}{\partial n} \psi \right) = 0$$

が成り立つ。従って、自己共役であれば境界において零値をとることができる。
これは式 5.24 が進行波の重ね合わせの定常波であることを意味する。
連続的な固有値をとることもできるが、ここでは離散的な場合を考えて、

$$\psi(\mathbf{r}, t) = u_\nu(\mathbf{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_\nu t\right)$$

を

$$\hat{H}u_\nu = E_\nu u_\nu$$

の解とおくと

$$|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = |u_\nu(\mathbf{r})|^2$$

となるので、量子論的には粒子の存在密度は時間依存しない。したがってこの状態を定常状態といえることができる。つまり、エネルギー固有状態は定常状態であるが、この逆も正しいだろうか。
そこで、重ね合わせの原理から

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_\nu c_\nu u_\nu(\mathbf{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_\nu t\right)$$

$$u(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}\right)$$

とにおいて存在確率を $\nu \neq \nu'$ の場合も考慮し、

$$\begin{aligned} P(\mathbf{r}, t) &= |\psi(\mathbf{r})|^2 \\ &= \sum_\nu |c_\nu|^2 |u_\nu(\mathbf{r})|^2 + \sum_\nu \sum_{\nu' \neq \nu} c_\nu c_{\nu'}^* u_\nu u_{\nu'}^* \exp\left(-\frac{i}{\hbar} (E_\nu - E_{\nu'}) t\right) \end{aligned} \quad (5.25)$$

となる。従って、存在確率が一意に決まるためには

$$E_\nu = E_{\nu'}$$

となる必要があり、固有エネルギーは1つでないといけない。
この式が 1.55 に対応している。

$$p(a, 1, c) = \sum_{b'} |\langle a|b'\rangle \langle b'|c\rangle|^2 + \sum_{b' \neq b''} \langle a|b'\rangle^* \langle b'|c\rangle^* \langle a|b''\rangle \langle b''|c\rangle$$

つまり、固有エネルギーがきまることと式 1.55 の第 2 項が消えることではない。
式 1.78 から

$$\langle a|b''\rangle \langle b''|c\rangle \rightarrow e^{i(\theta' - \theta)}$$

と対応させると

$$\theta' = \theta$$

が決まることである。位相がきまれば、干渉の強弱がはっきりとして、エネルギーが決まることを示す。

しかし、これは正確ではない。式 5.25 の位相は変数として $\Delta E \cdot t$ になっている。
従って、 $\Delta E = E_\nu - E_{\nu'}$ があっても t が小さいければ $P(\mathbf{r}, t)$ の時間変化は見えないだろう。
つまり、 $P(\mathbf{r}, t)$ の変化の感知は時間変化とエネルギー変化の積

$$\Delta E \Delta t$$

の大きさに依存する。よってこの積はスカラーであるべきである。
位相の中に入れるためにこの積を \hbar で割るとエネルギー・時間の不確定性関係

$$\Delta E \Delta t \sim \hbar$$

で結ばれる。これは

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} \int e^{i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r})} \tilde{\psi}(\mathbf{p}, t) d^3 \mathbf{p}$$

の時に位相部分の大きさが 1 になる。また、

$$u(x) = \exp(-i \frac{(p_\nu - p_{\nu'}) \cdot x}{\hbar})$$

としても式を満たすから位相部分の大きさが 1 になる条件をつけると運動量・位置の不確定性関係

$$\Delta p \Delta x \sim \hbar$$

があることがわかる。

これらは干渉性があれば位相 θ が消えずに残ることを表し、この位相の最小単位が不確定性を示すことになる。

シュレディンガー方程式から確率密度は

$$\rho_\nu(\mathbf{r}) = |u_\nu(\mathbf{r})|^2 \tag{5.26}$$

$$\mathbf{J}_\nu(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{2im} \left\{ u_\nu^*(\mathbf{r}) \frac{\partial u_\nu}{\partial \mathbf{r}} - \frac{\partial u_\nu^*(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} u_\nu(\mathbf{r}) \right\} \tag{5.27}$$

とおくと、時間的に一定であり、

$$\frac{\partial \rho_\nu}{\partial t} = 0$$

から S を内部領域を含む閉曲面として

$$\nabla \cdot \mathbf{J} = 0$$

$$\oint_S \mathbf{J}_\nu \cdot d\mathbf{s} = 0$$

となるので、この確率流は沸きだしの無い、磁場のような閉じた流線になる。

これにより、量子論の波動関数が確率密度の波としてふるまうイメージが確立していった

5.4.6 波束の収縮 [99]

量子論での観測は 1 つの作用素と見なすことができた。そこでこれらのオペレーターを

$$\{M_m\}$$

で表す。添え字 m は実験により外からの入力を区別する。量子状態が $|\psi\rangle$ のとき、観測は確率

$$p(m) = \langle \psi | M_m^\dagger M_m | \psi \rangle$$

でおきる。観測後の状態は

$$\frac{M_m}{\sqrt{\langle \psi | M_m^\dagger M_m | \psi \rangle}} |\psi\rangle$$

に移る。つまり、あらゆる状態の中の1つになるわけだが、このあらゆる状態がはじめからきめられている問題がある。

これらのオペレーターには I を単位行列として

$$\sum_m M_m^\dagger M_m = I$$

が成り立ち、これから確率保存則

$$1 = \sum_m p(m) = \sum_m \langle \psi | M_m^\dagger M_m | \psi \rangle$$

が成り立つ。簡単な例として 1bit の場合

$$M_0 = |0\rangle \langle 0|, M_1 = |1\rangle \langle 1|$$

の場合は

$$I = M_0^\dagger M_0 + M_1^\dagger M_1$$

が成り立つが

$$M_0^2 = |0\rangle \langle 0| |0\rangle \langle 0| = |0\rangle \langle 0| = M_0$$

$$M_1^2 = |1\rangle \langle 1| |1\rangle \langle 1| = |1\rangle \langle 1| = M_1$$

が成り立つので

$$I = M_0^\dagger M_0 + M_1^\dagger M_1 = M_0 + M_1$$

が成り立つことになる。

そこで次の状態から出発すると

$$|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$$

となるので出力に 0 をとる確率は

$$p(0) = \langle \psi | M_0^\dagger M_0 | \psi \rangle = \langle \psi | M_0 | \psi \rangle = \langle \psi | 0 \rangle \langle 0 | \psi \rangle = |a|^2$$

となる。同様にして 1 をとる確率が

$$p(1) = \langle \psi | M_1^\dagger M_1 | \psi \rangle = \langle \psi | M_1 | \psi \rangle = \langle \psi | 1 \rangle \langle 1 | \psi \rangle = |b|^2$$

したがって

$$p(0) + p(1) = |a|^2 + |b|^2 = 1$$

が成り立っていないといけない。つまり、観測されていない未知なものもふくめて、全確率の和が 1 になるように知っておく必要がある。

一端観測がおこなわれれば、その状態は確率に関係なく $|1\rangle$ または $|0\rangle$ に決まることになる。

これは波動関数の収縮 (collapse_of_wave_function) という。

$$\frac{M_0 |\psi\rangle}{|a|} = \frac{a}{|a|} |0\rangle$$

$$\frac{M_1 |\psi\rangle}{|b|} = \frac{a}{|b|} |1\rangle$$

このように観測後の状態が決まる。重要なのはこの $|0\rangle, |1\rangle$ というベクトルは重ね合わせの状態ではないということである。

状態 $|\psi\rangle$ は重ね合わせの状態であり、波動性を持っている。しかし、もし、

$$|0\rangle = c|x\rangle + d|y\rangle$$

のように分けたとすると、もはや異なる物理が導入されたことになってしまう。

つまり、観測の問題には境界問題や接続、連続性の問題など課題が多い。

5.5 量子相関 [98]

古典的な相関は状態が $|0\rangle$ と $|1\rangle$ しかなければ、 $|0\rangle$ を選択すれば残りは $|1\rangle$ と決まる。この相関は強力のように思う。

しかし、これから取り上げる量子的な相関はさらにそれより強いのである。

量子論では重ね合わせを許すのでこの状態を

$$|0\rangle + |1\rangle$$

とし、これを $|1\rangle$ に作用させると

$$(|0\rangle + |1\rangle)|1\rangle = |0\rangle|1\rangle + |1\rangle|1\rangle$$

となる。これに後節で述べる制御 NOT のような演算をさせると

$$|0\rangle|1\rangle + |1\rangle|0\rangle$$

という重ね合わせができる。これは4つの情報の内、1つが決まれば、後の3つが決まることを意味し、古典的な相関より強い。

第1節でも取り上げたシュテルン・ゲルラッハの実験を再び、量子計算をする例でとり上げる。

下図のように z 方向に不均一磁場をかけて $|\downarrow\rangle|\uparrow\rangle$ にわけてから $|\uparrow\rangle$ のみを取り出し、今度は x 方向に不均一磁場をかけると

$$|\uparrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\rightarrow\rangle + |\leftarrow\rangle)$$

にわけることができる。さらにまた、1本のみを取り出して、分けることを繰り返すことができる。

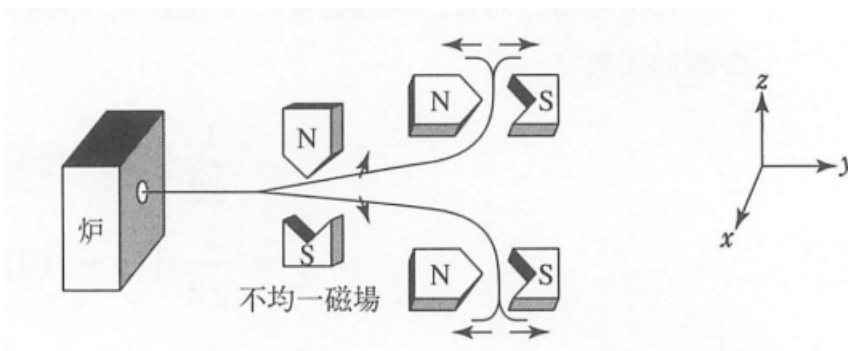


図 5.2: [98] より：シュテルン・ゲルラッハの実験

これは古典的な混合と異なり、外部からの作用で量子的な状態を、重ね合わせの状態に分けたと考えられる。これを一般的な経路 $path P$ と考えて次のように表現する。

$$|\uparrow\rangle |path P\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} (|\leftarrow\rangle |path P_1\rangle + |\rightarrow\rangle |path P_2\rangle) \quad (5.28)$$

これが次節で扱うエンタングルドな状態である。
 どちらかの $|pass\rangle$ に遅延ラインを入れることもできる。これにより、重ね合わせの位相を制御することができる。

実際に磁気双極子モーメント μ を持つスピン $1/2$ 粒子の場合のハミルトニアンは

$$H = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = -\omega \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}$$

ただし、 $\omega = \mu B$ をラーマー振動数とした。 n は磁束密度方向の単位ベクトルで

$$n = \frac{\mathbf{B}}{|\mathbf{B}|}$$

である。また、パウリスピ行列は

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

である。この時のシュレディンガー方程式は

$$i \frac{\partial \psi(t)}{\partial t} = H \psi(t)$$

だから簡単に解けて、初期値

$$\psi(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

に対して $\theta/2$ を z 軸と磁場のなす角として、

$$\begin{aligned} \psi(t) &= \exp(i\omega \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} t) \psi(0) \\ &= (\cos \omega t + i \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} \sin \omega t) \psi(0) \\ &= \begin{pmatrix} i \cos \frac{\theta}{2} \\ i e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

となった。

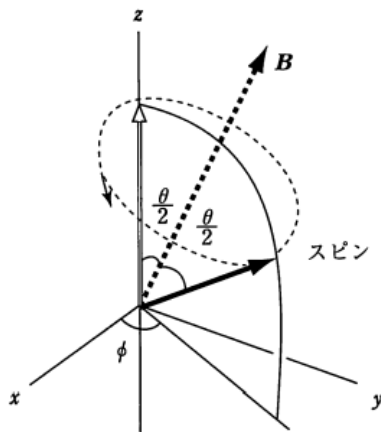


図 5.3: [98] より : 磁場によりスピン軸の回転

そこで式 5.28 の例を次のように考えよう。

はじめに位置 x の波動関数 $\phi(x)$ の積

$$|\psi(0)\rangle = (\alpha|\uparrow\rangle + \beta|\downarrow\rangle)\phi(x)$$

をつくる。ただし、 $\phi(x)$ は $x=0$ にピークを持つとし、遠方では 0 なり、

$$\int |\phi(x)|^2 = 1$$

を満たす。ここでハミルトニアンは位置 x の共役運動量をここでは p として

$$H = \sigma_z p$$

として

$$\sigma_z |\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle$$

$$\sigma_z |\downarrow\rangle = -|\downarrow\rangle$$

である。これをハミルトニアンを用いて時間推進させると次のようにエンタングルメントを引き起こす。

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt} |\psi(0)\rangle = \alpha |\uparrow\rangle \phi(x-t) + \beta |\downarrow\rangle \phi(x+t)$$

つまり、先進と遅延の 2 つ進行波の重ね合わせが現れる。

興味あることに、粒子の位置を観測し、スピンはみないことにすると、純粋状態の密度行列

$$\rho = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|$$

でスピンについてトレースをとればよいから

$$\begin{aligned} \text{Tr}_{spin}(\rho) &= \text{Tr}_{spin}(|\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|) \\ &= |\alpha|^2 |\phi(x-t)|^2 + |\beta|^2 |\phi(x+t)|^2 \end{aligned} \quad (5.29)$$

であることがわかる。先進、遅延の進行波は時間的にピークの位置が遠ざかることに留意すると、次の図上のように波動関数の重なりがなくなってくるので強度 $|\alpha|^2$ で x の正方向にある上向きスピンを観測し、強度 $|\beta|^2$ で x の負方向にある下向きスピンを観測することになる。

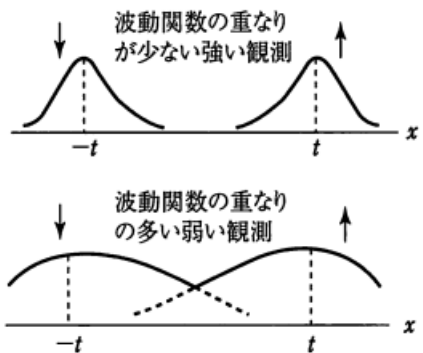


図 5.4: [98] より：磁場によりスピン軸の回転

一方で図下のように重なりが残っているような短時間の観測には量子相関が残り、 x の正方向の波束であっても下向きのスピンを観測する確率が出てくる。

次に粒子の位置座標を見ずにスピンのみを見ることにすると、位置 x でトレースをとるので次のように積分する。

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}_x(\rho) &= \mathrm{Tr}_x(|\psi\rangle\langle\psi|) \\ &= \int dx (\alpha|\uparrow\rangle\phi(x-t) + \beta|\downarrow\rangle\phi(x+t)) (\alpha^*\langle\uparrow| \phi^*(x-t) + \beta^*\langle\downarrow| \phi^*(x+t)) \\ &= |\alpha|^2|0\rangle\langle 0| + |\beta|^2|1\rangle\langle 1| + s\alpha\beta^*|0\rangle\langle 1| + s^*\alpha^*\beta|1\rangle\langle 0|\end{aligned}$$

ただし、波動関数の重なりを

$$s = \int dx \phi(x-t)\phi^*(x+t)$$

$$s^* = \int dx \phi^*(x-t)\phi(x+t)$$

とした。

次のようにこの重なり部分は行列で表現したときの非対角項である。

$$\rho_{spin} = \begin{pmatrix} |\alpha|^2 & s\alpha\beta^* \\ s^*\alpha^*\beta & |\beta|^2 \end{pmatrix}$$

このように観測は重なり部分を壊す働きがある。

5.5.1 エルゴード定理

前節の演算子 F はトレースを次のように計算できる。

$$\langle u'|F|v'\rangle = \langle u'|\sum_{k,l} f_{kl}U^kV^l|v'\rangle = f(u',v')\langle u'|v'\rangle$$

よってトレースは

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}[F] &= \sum_{u'} \langle u'|F|u'\rangle = \sum_{u',v'} \langle u'|F|v'\rangle \langle v'|u'\rangle \\ &= \sum_{u',v'} \langle u'|F|v'\rangle \langle v'|u'\rangle \\ &= \sum_{u',v'} f(u',v')|\langle v'|u'\rangle|^2\end{aligned}$$

これは以下のように書ける。トレースが n 個の和をつくるので

$$\mathrm{Tr}[f(U,V)] = \frac{1}{n} \sum_{u',v'} f(u',v')$$

従って、 F が物理量であれば

$$F = \sum_{f'} |f'\rangle f' \langle f'|$$

と書くことができ、

$$\mathrm{Tr}[|f'\rangle\langle f'|] = 1$$

であるので

$$\mathrm{Tr}[F] = \sum_{f'} f'$$

となるので

$$\sum_{f'} f' = \frac{1}{n} \sum_{u',v'} f(u',v')$$

となる。これは $f(U, V)$ の全ての物理的な値の和は、 U と V に対する値を独立に指定された数 $f(u', v')$ の総和に等しい。

これがエルゴードの定理である。

ここで、次の関係が成り立つ。

$$\begin{aligned} \sum_l \langle u_k | v_l \rangle \langle v_l | u_m \rangle &= \delta_{km} \\ &= \frac{1}{n} \sum_l \left(e^{\frac{2\pi i l}{n}} \right)^{k-m} \end{aligned}$$

とかける。これが1の n 乗根の $(k-m)$ 乗になっていることに留意する。これは $k=m$ を除いて、0になることが予想される。

$$\frac{1}{n} \sum_{u'} (u')^r = \begin{cases} 1 & (r=0) \\ 0 & (0 < r < n) \end{cases}$$

例えば次のように Mathematica で定義する。

$$\text{Ue}(n_ , r_) := \frac{\sum_i^n \exp^r \left(\frac{i2\pi i}{n} \right)}{n}$$

これを $r=40$ で固定し、 $n=1$ から $n=400$ までの結果をプロットさせると次のようになる。

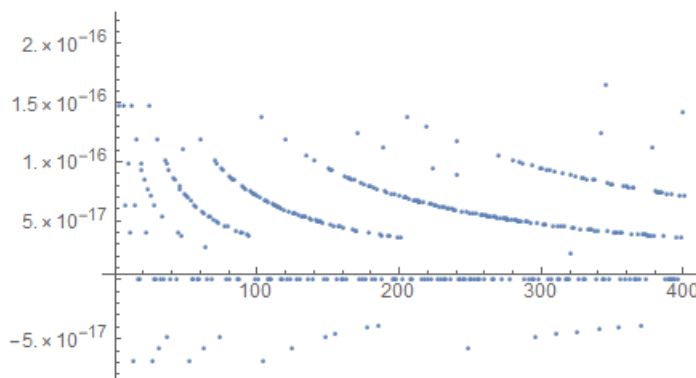


図 5.5: $\text{Ue}(n_ , r_) := \frac{\sum_i^n \exp^r \left(\frac{i2\pi i}{n} \right)}{n}, n=1$ から $n=400$

演算子では式 5.18 を一般化して、

$$\text{Tr}[U^k V^l] = \frac{1}{n} \sum_{u'v'} (u')^k (v')^l$$

のようにトレースを取る。明らかに $k=l=n$ であれば $n=0$ と等しく

$$\text{Tr}[I] = 1$$

が成り立つ。しかし、それ以外の組み合わせ ($n^2 - 1$ 通りある) ではトレースは 0 になる。

5.5.2 量子自由度 [26]

量子的な複合系はユニタリ行列が回転を表すので

$$n = n_1 n_2$$

のように整数の積で表される。例えば 2 つの系では

$$U_1 = U^{n_2}, U_2 = U^{n_1}$$

$$V_1 = V^{l_1 n_2}, V_2 = V^{l_2 n_1}$$

ここで次のように規格化しておく。

$$U_1^{n_1} = U^n = 1, U_2^{n_2} = U^n = 1,$$

$$V_1^{n_1} = V^{l_1 n} = 1, V_2^{n_2} = V^{l_2 n} = 1$$

この時、 U, V との積は式 5.17 より、

$$V_1 U_2 = V^{l_1 n_2} U^{n_1} = e^{\frac{2\pi i}{n} l_1 n} U_2 V_1 = U_2 V_1$$

さらに

$$l_1 n_2 = 1 \pmod{n_1}$$

とすると

$$V_1 U_1 = V^{l_1 n_2} U^{n_2} = e^{\frac{2\pi i}{n} l_1 n_2^2} U_1 V_1 = e^{\frac{2\pi i}{n_1}} U_1 V_1$$

6 量子状態 [124]

6.1 qubit

ここでシュテルン・ゲルラッハの実験で見たような $+, -$ の 2 値のみを持つ量子状態を一般化しておく。基本的にユニタリ変換と観測の組み合わせである。

量子力学の重ね合わせの原理を用いて量子的な情報処理を考えてみよう。

0 と 1 の状態の重ね合わせで基本単位としてキュービット **qubit** を次のように定義する。

$$|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle \tag{6.1}$$

ただし、

$$\alpha, \beta \in \mathbb{C}, |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \tag{6.2}$$

である。

この状態はベクトルとして、次節のプロット球上に表現され、2019 年現在でも応用化が進み、IBM や Google などから個人的に利用できるソフトウェアが提供されている。

しかし、この単純な空間ベクトルは 3 次元の $SO(3)$ 空間ではなく、4 次元の $SU(2)$ 空間上にあることに留意がいる。

この変換のユニタリ行列は式 6.2 を満たすためには

$$U = \begin{pmatrix} \alpha & -\beta^* \\ \beta & \alpha^* \end{pmatrix}$$

となるので実数 a, b, c, d を用いて

$$\alpha = a + bi$$

$$\beta = c + di$$

とすると

$$a^2 + b^2 + c^2 + d^2 = 1$$

を満たす 4 次元単位球の表面の位置を表す。
 これは第 4 部の HopfBundle で次の図のように

$$\mathbb{R}^4 \rightarrow S^2$$

への射影を扱った時のように、3 次元空間から逸脱した視点が必要になる。

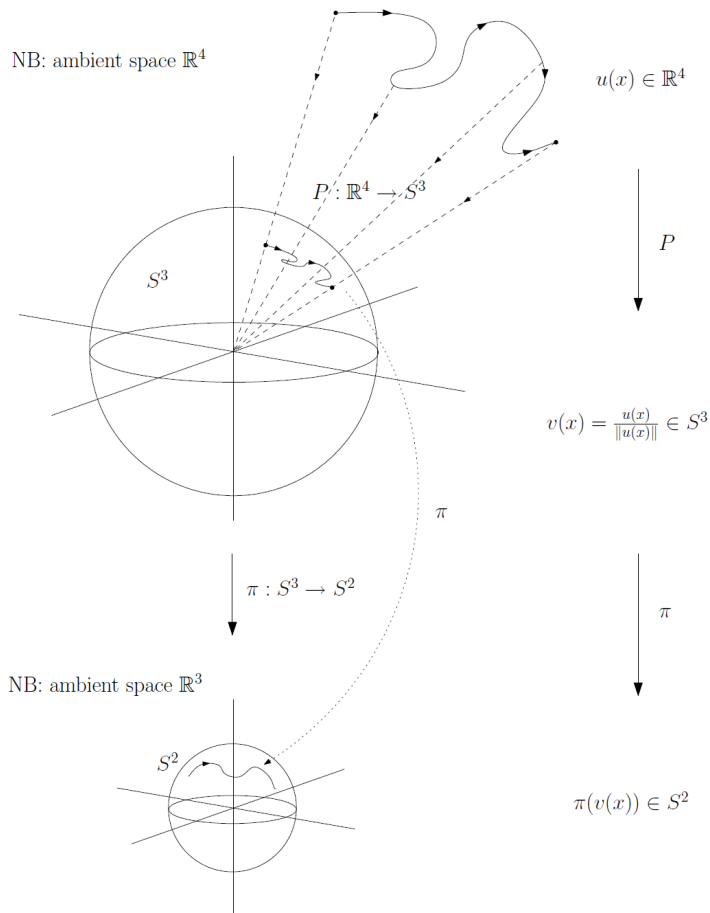


Figure 3.1: illustration of the projection sequence $\pi \circ P: \mathbb{R}^4 \rightarrow S^3 \rightarrow S^2$

図 6.1: [47] より : Hopfbundle

そこで

$$1 - a^2 = b^2 + c^2 + d^2$$

と変形すると $a = 1$ では

$$U = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

と変形すると $a = -1$ では

$$U = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

が対応する。従って $SU(2)$ は単連結なのに対し、 $SO(3)$ が単連結でないために、連続的な変形が原理的にできない。

従って 2 位の巡回群 C_2 を用意して、次のように同相になる。

$$SO(3) = SU(2)/C_2$$

従って切れたひもの両端を連結するような操作が必要になる。

1点を固定して3次元で回転して元に戻すためには 4π の回転が必要になるわけである。

量子論の状態ベクトルにはこうした背景があることは後に深く考察をしたい。

次節のブロッホ球もこのようなからくりを入れている。

6.1.1 ブロッホ球 [98, 99]

キュービットを幾何学的に表現するのに便利なのがブロッホ球 (Bloch sphere) である。

図のような球面において

$$|\psi\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + e^{-i\phi}\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle \quad (6.3)$$

で表すことができる。

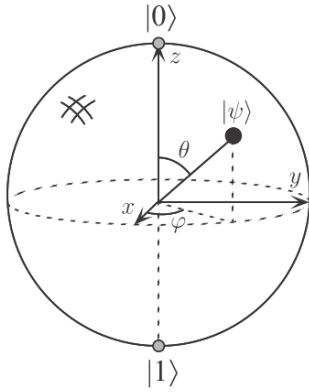


図 6.2: [130] より:ブロッホ球

古典的な0と1のみの情報に対し、 θ と ϕ の自由度が加わっている。

この球の北極点に $|0\rangle$ 状態が対応し、南極点に $|1\rangle$ が対応する。

観測をしていない状態で0なのか1なのか、だけではなく、この球面のどこなのかは決まらない状態を取れるわけである。

ただし、これは式 1.101 で導かれたように位相に $\theta/2$ を用いているので半球の空間で 2π をつくる。

図で π 離れたところが直交関係にあることに留意する。

第1章の式 6.3 の密度演算子は

$$\begin{aligned} \rho &= |\psi\rangle\langle\psi| = \left(\cos\frac{\theta}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + e^{-i\phi}\sin\frac{\theta}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \right) \left(\cos\frac{\theta}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right) \\ &= \cos^2\frac{\theta}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2} \left(e^{-i\phi} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + e^{+i\phi} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right) + \sin^2\frac{\theta}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1+\cos\theta}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \frac{\sin\theta}{2} \left(e^{-i\phi} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + e^{+i\phi} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right) + \frac{1-\cos\theta}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1+\cos\theta & e^{-i\phi}\sin\theta \\ e^{i\phi}\sin\theta & 1-\cos\theta \end{pmatrix} \end{aligned}$$

となる。ここでパウリ行列を拡張し

$$I = \sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

とおき、次のような球座標を用意して ρ を表現すると

$$\begin{cases} x = \sin \theta \cos \phi \\ y = \sin \theta \sin \phi \\ z = \cos \theta \end{cases}$$

$e^{i\phi} = \cos \phi + i \sin \phi$ だから

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{1}{2} \left(\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \sin \theta (\cos \phi - i \sin \phi) \\ \sin \theta (\cos \phi + i \sin \phi) & 0 \end{pmatrix} + \cos \theta \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right) \\ &= \frac{1}{2} (1\sigma_0 + x\sigma_x + y\sigma_y + z\sigma_z) = \frac{1}{2} (I + \mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \end{aligned}$$

のようにまとまる。

ただし、 \mathbf{r} は 3次元実ベクトルで、純粋状態であれば

$$|\mathbf{r}| = 1$$

である。

また、ブロッホ球上の 2つの状態ベクトル ψ_1, ψ_2 は球面上の位置ベクトル $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ を用いて次のように表現できることになる。

$$|\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle|^2 = \text{Tr}(\rho_1 \rho_2) = \frac{1}{2} (1 + \mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2)$$

これから状態ベクトルが直交している場合は

$$|\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle|^2 = 0$$

であり、この時

$$\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2 = -1, \quad \mathbf{r}_1 = -\mathbf{r}_2 \tag{6.4}$$

であることがわかる。

ここで 2準位状態のブロッホ球上に表される次のような 2×2 のユニタリ行列を考えよう。

$$U = |0\rangle \langle 0| + e^{i\phi} |1\rangle \langle 1| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\phi} \end{pmatrix}$$

とすると、これは次のように作用する。

$$U|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\phi} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |0\rangle$$

$$U|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\phi} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = e^{i\phi} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = e^{i\phi} |1\rangle$$

これからそれぞれの固有値が $1, e^{i\phi}$ であることがわかる。さらにこのユニタリ演算子 U は状態ベクトルの位相をグローバルに変化させる。例えば

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |1\rangle)$$

を考え、これに U を作用させると

$$U \left(\frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |1\rangle) \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + e^{i\phi} |1\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\phi} \end{pmatrix}$$

となり $|+\rangle$ ベクトルは z 軸の周りに ϕ だけ回転している。

量子論ではブロッホ球上の直交するベクトルは式 6.4 から符号が反転する。密度演算子を用いて

$$\rho|0\rangle = (|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|)|0\rangle = \rho(\mathbf{r})$$

$$\rho|1\rangle = (|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|)|1\rangle = \rho(-\mathbf{r})$$

とすると、位相変化の演算子の作用は密度演算子 ρ を用いて一般に次のようにかける。

$$U(\mathbf{r}, \phi) = \rho(\mathbf{r}) + e^{i\phi}\rho(-\mathbf{r})$$

6.1.2 2 準位状態

式 6.3 のように 2 つの qubit の純粋状態は 3 次元の Bloch 球と 2 組の位相因子 $(\theta_A, \phi_A), (\theta_B, \theta_B)$ で表すことができた。Chu-Ryang Wie らはさらに 3 番目の球上の位相 ζ を用いて次のように 2 つの純粋状態を定義した。

$$\begin{pmatrix} \alpha + \beta i \\ \gamma + \delta i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha + \beta i \\ \gamma + \delta i \end{pmatrix} \left(\cos \frac{\theta_B}{2} + \sin \frac{\theta_B}{2} e^{k\phi_B i} \right) e^{k\zeta_B}$$

彼らは S^7 上の 2 つの qubit の純粋状態を考えるのに先の位相因子 $(\theta_A, \phi_A), (\theta_B, \theta_B)$ に加えて、量子論的に絡み合った entanglement な状態と関係する位相 (χ, ξ) を加え、さらに ζ_B を加えた 7 つの位相パラメタを考えた。

まずはじめに Hopf Fibration を 2-Qubit の状態にあてはめることを考えよう。この状態を

$$|\Psi_{AB}\rangle = \alpha|00\rangle + \beta|01\rangle + \gamma|10\rangle + \delta|11\rangle$$

のように表す。ただし

$$\alpha, \beta, \gamma, \delta \in \mathbb{C}, |\alpha|^2 + |\beta|^2 + |\gamma|^2 + |\delta|^2 = 1$$

である。

6.1.3 純粋状態

量子情報理論では量子状態を混合状態も含めて統一的に扱うことをめざしている。

そのために便利なのは、前節で登場した密度関数である。前節の TPCP 写像の条件から密度演算子 $\hat{\rho}$ は次の性質を満たす。

ケース 1. $\hat{\rho}$ はエルミート演算子である。 $\hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho}$

ケース 2. 固有値は正値である。 $\hat{\rho} \geq 0$

ケース 3. 確率の条件をみたく。 $Tr[\hat{\rho}] = 1$

ただし、ここではコペンハーゲンの確率解釈をとり、個々の測定者が変化しても、系の測定には変化を及ぼすことがないとする。式の 1.1 の拡張パウリ行列を用いて

$$I = \sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \sigma_1 = X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_2 = Y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_3 = Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

として、密度行列を

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} \left(\hat{I} + u_1 \hat{\sigma}_1 + u_2 \hat{\sigma}_2 + u_3 \hat{\sigma}_3 \right)$$

とおくと、これは先のブロッホ球である。

つまり、密度演算子は単位演算子を 3 次元ベクトル \mathbf{u} とパウリ行列 $\boldsymbol{\sigma}$ との内積に加えた線形演算子である。

$$2\hat{\rho} = \hat{I} + \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (6.5)$$

ただし、内積は行列に拡張されているので注意する。従って

$$|\mathbf{u}| = 1$$

であれば純粋状態の密度行列になる。これは前節の観測のところでは純粋状態があらゆるものと相関をもたず、式 5.22 からつまり全体系の密度作用素は純粋状態 $\rho_S = |\phi_1\rangle\langle\phi_1|$ と環境系 $\sum_{n=1}^{\infty} P_n |\Phi_1^{(n)}\rangle\langle\Phi_1^{(n)}|$ のテンソル積になっている

$$\rho_{tot} = |\phi_1\rangle\langle\phi_1| \otimes \sum_{n=1}^{\infty} P_n |\Phi_1^{(n)}\rangle\langle\Phi_1^{(n)}|$$

で表された。つまり、式 3.2 から

$$\rho = |\psi^{(i)}\rangle\langle\psi^{(i)}|$$

と表すことができた。純粋状態で対角和は 1 になる。

また、固有値は

$$\frac{1}{2} \left(1 - \sqrt{u_x^2 + u_y^2 + u_z^2} \right), \frac{1}{2} \left(\sqrt{u_x^2 + u_y^2 + u_z^2} + 1 \right)$$

なので $|\mathbf{u}| = 1$ であれば複素数の範囲で ± 1 をとる。

ただ、行列で考えた場合に注意がいるが、ここでは複素数値として考える。

よって、第 6 部の粗視化で見たように行列要素は

$$\hat{\rho} = \sum_i \sum_j c_i c_j^* |u_i\rangle\langle u_j|$$

ただし、 $\{|u_i\rangle\}$ が直交基底で

$$\rho_{ij} \equiv \langle u_i | \hat{\rho} | u_j \rangle = c_i c_j^* \quad (6.6)$$

純粋状態の状態ベクトルは次のように純粋状態の足し合わせである。

$$|\psi\rangle = \sum_i |u_i\rangle c_i, \quad c_i = \langle u_i | \psi \rangle$$

よって、この密度行列が純粋状態であるときは次のように、射影演算子になった。

$$\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$$

従って純粋状態による、ある力学量 \hat{F} の期待値は

$$\langle F \rangle = \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle = \text{Tr}(\hat{F} \hat{\rho})$$

のように対角和で計算できた。

6.2 純粋化

第 6 部でも、粗視化において任意の混合状態をより大きな系で見れば、純粋状態として扱えることができることを見た。

これを混合状態の純粋化 (**purification**) という。

そのためには次の補助系 R が必要になる。

前章の式 5.22 から全体系が図のように部分系と分けられていれば、全体系の密度行列は

$$\rho_{tot} = |\phi_1\rangle\langle\phi_1| \otimes \sum_{n=1}^{\infty} P_n \left| \Phi_1^{(n)} \right\rangle \left\langle \Phi_1^{(n)} \right| \quad (6.7)$$

のように書けた。つまり全体系の密度作用素は純粋状態 $\rho_S = |\phi_1\rangle\langle\phi_1|$ と環境系 $\sum_{n=1}^{\infty} P_n \left| \Phi_1^{(n)} \right\rangle \left\langle \Phi_1^{(n)} \right|$ のテンソル積になっていて相関のない純粋状態でになった。

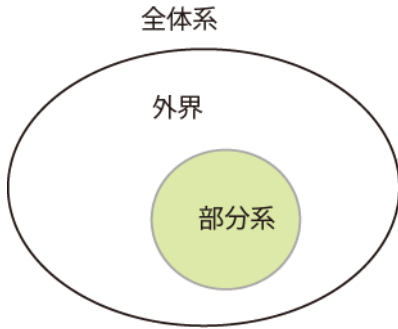


図 6.3: 純粋系

量子系 S のヒルベルト空間としての次元を N_S とする。

これより、等しいか、大きな次元を持つヒルベルト空間の補助系 (ancilla system) R を考える。

S の密度行列 $\hat{\rho}_S$ のスペクトル分解を

$$\hat{\rho}_S = \sum_{n=1}^{N_S} p_n |n\rangle_S \langle n|_S \quad (6.8)$$

と書く。この R のヒルベルト空間の中の互いに直交する N_S 本の任意の単位ベクトルを

$$|u_n\rangle_R \quad (n = 1 \sim N_S)$$

として、この空間内の S と R の状態ベクトルを

$$|\Psi\rangle_{SR} = \sum_{n=1}^{N_S} \sqrt{p_n} |n\rangle_S |u_n\rangle_R \quad (6.9)$$

と定義する。これは次小節のシュミット分解から決まる。

式 6.8 より、前章の 5.20 から部分トレースをとると

$$\hat{\rho}_S = \text{Tr}_R [|\Psi\rangle_{SR} \langle\Psi|_{SR}] \quad (6.10)$$

となる。これは $\hat{\rho}_S$ が $|\Psi\rangle_{SR} \langle\Psi|_{SR}$ に対して R に関する部分トレースをとった縮約状態 (reduced_state) であることを表す。

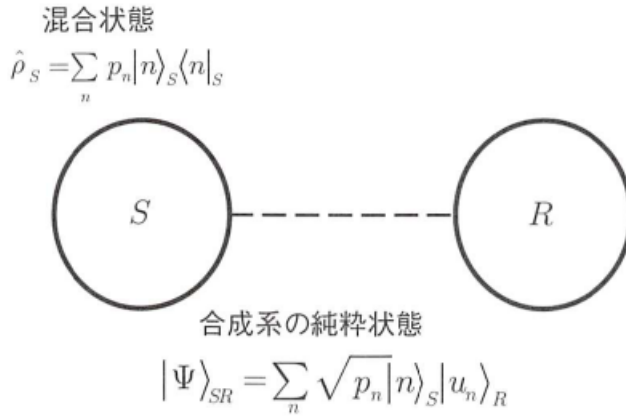


図 6.4: [124] より：混合状態にある量子系 S は量子系 R との合成系の純粋状態

つまり、式 6.9 の純粋状態 $|\Psi\rangle_{SR}$ が $\hat{\rho}_S$ に対して一意ではなく、 R のヒルベルト空間内の $\{|u_n\rangle_R\}$ のユニタリ変換の自由度が残されている。これにより、混合状態 $\hat{\rho}_S$ を作る、マクロな実験装置や実験者でもそれらを外部系 R とみなし、マクロな混合状態の純粋系 $|\Psi\rangle_{SR}$ をつくるのが原理的に可能になる。注意点は混合状態で解析をする場合、部分量子系の局所的な操作をするときのみ解析は正しくなる。もし、外部系とつながる局所的な操作をすると、量子的な相関があらわれる。この応用が量子テレポーテーションである。式 6.9 は任意の純粋状態であれば必ず表すことができる。一般的なシュミット分解になっている。そこで、次節でシュミット分解を復習する。

6.2.1 シュミット分解

純粋状態を変化させていくとき、よく利用するのが次のシュミット分解である。これは同じヒルベルト空間の次元を持つ 2 つの量子系 A, B の合成系が、純粋状態 $|\Psi\rangle_{AB}$ として

$$|\Psi\rangle_{AB} = \sum_n \sqrt{p_n} |u_n\rangle_A |v_n\rangle_B \quad (6.11)$$

と分解できる。ただし、非負数値 p_n は

$$\sum_n p_n = 1$$

であり、確率分布の条件を満たす。また、 $\{|u'_n\rangle_A\}, \{|v'_n\rangle_B\}$ は A, B のある正規完全直交基底である。

Proof. シュミット分解

まず、適当な正規完全直交基底 $\{|u'_n\rangle_A\}, \{|v'_n\rangle_B\}$ を持ってきて、合成系は

$$|\Psi\rangle_{AB} = \sum_n P_{nm} |u'_n\rangle_A |v'_m\rangle_B \quad (6.12)$$

と展開する。前章式 7.5 見た特異値分解を用いて U, V をユニタリ行列、 D を非負対角行列として、

$$P = UDV \quad (6.13)$$

と表すことができる。まず、これを示す。

$P^\dagger P$ が非負演算子だから零固有値を持たなければ、

エルミート行列 $P^\dagger P$ が非負演算子なのであるユニタリ行列 U を持って来て、

$$P^\dagger P = UD^2U^\dagger = (UDU^\dagger)^2$$

のように対角行列 D の 2 乗で書ける。この式は行列積の UDU^\dagger が平方根を生成していることが面白い。従って、 $\sqrt{P^\dagger P}$ も同じユニタリ行列 U を使って、

$$\sqrt{P^\dagger P} = UDU^\dagger$$

と書け、対角化される。つまり、

$$\sqrt{P^\dagger P} P = UDU^\dagger P$$

を考えると、これはユニタリ行列である。そこで新たに

$$V = U^\dagger \left(\sqrt{P^\dagger P} \right)^{-1} P \quad (6.14)$$

でユニタリ行列 V を定義すると

$$P = \sqrt{P^\dagger P} \left(\sqrt{P^\dagger P} \right)^{-1} P = UDU^\dagger \left(\sqrt{P^\dagger P} \right)^{-1} P = UDV$$

となり、式 6.13 が示せた。

次に元の式 6.11 の証明の戻る。

成分表示で

$$P = [P_{nm}]$$

$$D = [\sqrt{p_n} \delta_{nm}]$$

として、

$$P_{nm} = \sum_l \sqrt{p_l} U_{nl} V_{lm}$$

$$|u_n\rangle_A = \sum_{n'} U_{nn'} |u'_{n'}\rangle_A$$

$$|v_n\rangle_B = \sum_{n'} V_{nn'} |v'_{n'}\rangle_A$$

を式 6.12 に代入すると

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle_{AB} &= \sum_n P_{nm} |u'_n\rangle_A |v'_n\rangle_B \\ &= \sum_{n'} \sum_l \sqrt{p_l} U_{nl} V_{lm} |u'_n\rangle_A |v'_n\rangle_B \\ &= \sum_n \sqrt{p_n} |u_n\rangle_A |v_n\rangle_B \end{aligned}$$

となり、式 6.11 が得られる。 □

ここでは $P^\dagger P$ が零固有値を持たないとしたが、仮に零固有値を持ったとしても、実パラメタ ϵ をもってきて、

$$\epsilon \rightarrow 0 \Rightarrow P_\epsilon^\dagger P_\epsilon \rightarrow P^\dagger P$$

とできるような行列 P_ϵ があれば式 6.14 の行列 V を見つけることができる。

また、ヒルベルト空間の次元が A の次元より大きく、非正方行列になる場合でも特異値分解ができたのでシュミット分解もできることになる。

6.2.2 Quantum Dice

実際に大きな系では純粋状態を維持することはとても難しい。実験的にも理論的にも大きな課題である。そこでマクロな混合状態を作り出す例として量子サイコロ (Quantum_dice) を考えよう。

これはより、大きな量子系の純粋状態を S へ縮約したものとして $\hat{\rho}_S$ とみなし、理想的なサイコロとして 1 から N までの自然数値とるものを用意し、離散変数 μ が確率 p_μ で生成されるとする。

ただし、この N は S のヒルベルト空間の次元 N_S よりも大きくてもかまわない。

ある値 μ が出力さえれば、これに対応する $|\mu\rangle_S$ を S 系に用意する。

異なる μ に対応する $|\mu\rangle_S$ 同士も直交している必要もない。この過程で平均的に生成れる混合状態 $\hat{\rho}_S$ は

$$\hat{\rho}_S = \sum_{\mu=1}^N p_\mu |\mu\rangle_S \langle \mu|_S \quad (6.15)$$

で与えられる。ここで与えられた物理的ダイスがマクロな量子系と考えることができる。

そこで、これを用いてマクロな量子の純粋状態の系 D をとする。

さらに量子ダイス D の初期状態を純粋化するマクロな外部補助系を D' とする。

この時、 S の混合状態 $\hat{\rho}_S$ をつくるのは次の図のようにあるユニタリー変換 \hat{U}_{DS} を考える。

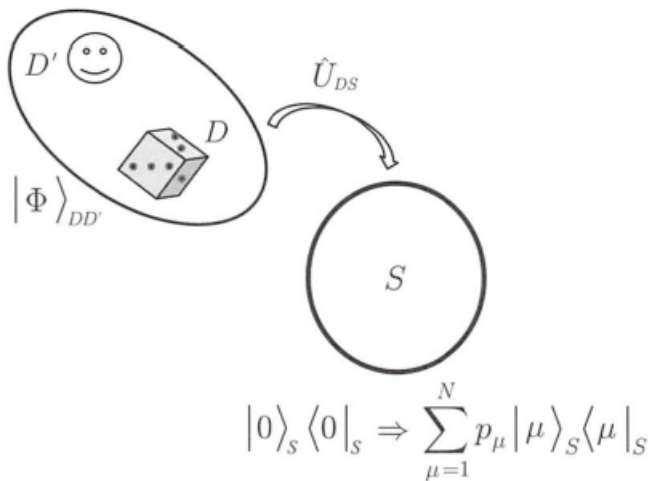


図 6.5: [124] より : 注目系 S において状態を確率的に発生させ、平均化する

つまり、ダイスを含めた合成系 DD' の始状態を純粋状態 $|\Psi\rangle_{DD'}$ として先のシュミット分解を用いて

$$|\Psi\rangle_{DD'} = \sum_{\mu=1}^N \sqrt{p_\mu} |d_\mu\rangle_D |v_\mu\rangle_{D'} \quad (6.16)$$

という形にできる。ただし、 $\{|d_\mu\rangle_D\}$ は D の完全正規直交系であり、

$|v_\mu\rangle_{D'}$ は D' 系の互いに直交する N 個の単位ベクトルである。

この状態で D の物理測定を

$$\hat{O}_D = \sum_{\mu=1}^N \mu |d_\mu\rangle_D \langle d_\mu|_D$$

として測定する。つまり、状態に作用させる。これは量子ダイスで確率 p_μ で期待値 μ を得ることになる。

$$\begin{aligned} \langle \Psi|_{DD'} \hat{O}_D |\Psi\rangle_{DD'} &= \sum_{\mu=1}^N \mu p_\mu \langle v_\mu|v_\mu\rangle \\ &= \sum_{\mu=1}^N \mu p_\mu \end{aligned}$$

かりに

$$p_\mu = \frac{1}{N}$$

とすると

$$\sum_{\mu=1}^N \mu p_\mu = \sum_{\mu=1}^N \frac{\mu}{N} = \frac{1}{N} + \frac{2}{N} + \cdots + \frac{N}{N}$$

となり、完全乱数を発生する。

一般にヒルベルト空間の次元 N 以下の N' の互いに直交する別なユニタリ演算子 \hat{U} が存在するので次の純粋状態を用いた基底の変換を表す、ユニタリ演算子 \hat{U}_{DS} が存在する。

$$\hat{U}_{DS} : \{|0\rangle_S |d_\mu\rangle_D\} \rightarrow \{|\mu\rangle_S |d_\mu\rangle_D\}$$

$$\hat{U}_{DS} |0\rangle_S |d_\mu\rangle_D = |\mu\rangle_S |d_\mu\rangle_D$$

このユニタリ変換を合成系 SDD' での始状態 $|0\rangle_S |\Psi\rangle_{DD'}$ に作用させると、これが量子ダイスを振る操作になり、

ダイスの出力値 μ の情報が S に移るので式 6.16 より

$$|\Psi'\rangle_{SDD'} = \hat{U}_{DS} |0\rangle_S |\Psi\rangle_{DD'} = \sum_{\mu=1}^N \sqrt{p_\mu} |\mu\rangle_S |d_\mu\rangle_D |v_\mu\rangle_{D'}$$

となる。

これは DD' に関して部分トレースをとると式 6.15 より

$$\hat{\rho}_S = \text{Tr}_{DD'} [|\Psi'\rangle_{SDD'} \langle\Psi'|_{SDD'}] = \sum_{\mu=1}^N p_\mu |\mu\rangle_S \langle\mu|_S$$

を得る。これは S 系の密度行列である。

これにより $|\Psi'\rangle_{SDD'}$ はシュミット分解で表すこともできて、 $|u_n\rangle_{DD'}$ は N_S 個の直交しあう DD' 系のベクトルとして、

$$|\Psi'\rangle_{SDD'} = \sum_{\mu=1}^{N_S} \sqrt{p'_\mu} |\mu\rangle_S |u_n\rangle_{DD'}$$

ただし、 p'_n は $\hat{\rho}_S$ の固有値で

$$\hat{\rho}_S |n\rangle_S = p'_n |n\rangle_S$$

である。この $|n\rangle_S$ は $|\mu\rangle_S$ とは異なる状態ベクトルであるので

$$p'_n \neq p_\mu$$

であることに注意する。

このように古典的な確率過程であるサイコロ振りからマクロな量子外部系を扱い、純粋状態でのユニタリな記述ができた。これが量子サイコロ (Quantum_dice) である。

6.2.3 純粋化

シュミット分解により、純粋状態にある量子系を、適当な正規直交系を持って来て分解できることがわかった。

これから次の重要な定理が合成系に成り立つ。

定理. 純粋化 :

ある合成系

$$A \otimes B$$

の中には A の中の任意の混合状態があり、その密度演算子を ρ^A とすると純粋状態 ρ^{AB} を用いて

$$\rho^A = \text{Tr}_B[\rho^{AB}] = \rho^A$$

となる。つまり、混合状態を含む系から見ると純粋状態になることがありえる。

Proof. $A \otimes B$ の中で純粋系となる系の密度演算子 ρ^{AB} は

$$\rho^{AB} = |\psi^{AB}\rangle \langle \psi^{AB}|$$

また、 A は混合状態なので

$$\rho^A = \sum_k p_k |k\rangle \langle k| \quad (6.17)$$

となる。先のシュミット分解の定理から

$$|\psi^{AB}\rangle = \sum_i \sigma_i |\alpha_i\rangle |\beta_i\rangle$$

とかけた。これを代入すると

$$\begin{aligned} \rho^{AB} &= |\psi^{AB}\rangle \langle \psi^{AB}| \\ &= \sum_i \sum_j \sigma_i \sigma_j |\alpha_i\rangle \langle \alpha_j| \otimes |\beta_i\rangle \langle \beta_j| \end{aligned}$$

よって B で部分トレースを取ると

$$\text{Tr} [|\beta_i\rangle \langle \beta_j|] = \delta_{ij} \quad (6.18)$$

だから

$$\begin{aligned} \text{Tr}_B [\rho^{AB}] &= \sum_i \sum_j \sigma_i \sigma_j |\alpha_i\rangle \langle \alpha_j| \text{Tr} [|\beta_i\rangle \langle \beta_j|] \\ &= \sum_i \sum_j \sigma_i \sigma_j |\alpha_i\rangle \langle \alpha_j| \delta_{ij} \\ &= \sum_i \sigma_i^2 |\alpha_i\rangle \langle \alpha_i| \end{aligned} \quad (6.19)$$

となるが、式 6.17 から

$$\sigma_i = \sqrt{p_i}$$

$$|\alpha_i\rangle = |k\rangle$$

となればよい。 □

つまり、純粋系の部分系は系の中で混合状態としてあり、純粋系の部分トレースで密度行列を表すことができる。

これは物理系が混合状態にあってもより、大きな系からみれば熱力学の等分配則のように、系の足し合わせの重みに関する情報が潰され純粋状態となることを表している。

前節で純粋状態の密度行列を $\hat{\rho}$ は次で定義した。

$$\rho = |\psi\rangle \langle \psi| \quad (6.20)$$

これは規格化されていて

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1$$

であり、行列要素はこれは純粋状態の状態ベクトルを次のように展開して、

$$|\psi\rangle = \sum_i |u_i\rangle c_i, \quad c_i = \langle u_i | \psi \rangle$$

式 6.20 を代入すると

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle \langle \psi| = \sum_i \sum_j c_i c_j^* |u_i\rangle \langle u_j| \quad (6.21)$$

である。 $\{|u_i\rangle\}$ が直交基底であるから行列要素では

$$\rho_{ij} \equiv \langle u_i | \hat{\rho} | u_j \rangle = c_i c_j^* \quad (6.22)$$

となる。

この密度行列が純粋状態であるときは次のように、射影演算子になる。

$$\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$$

従って純粋状態による、ある力学量 \hat{F} の期待値は

$$\langle F \rangle = \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle = \text{Tr}[\hat{F} \hat{\rho}]$$

である。つまり、密度行列を作用させ、対角和をとることで期待値を得られる。

次に混合状態を考えてみよう。

状態ベクトル $|\psi_m\rangle$ を統計的な要素としてみなし、それぞれが重み ω_m を持つと考える。この重みを掛けて足し合わせた状態は混合状態である。この状態で期待値を考えると

$$\langle \langle F \rangle \rangle = \sum_m \omega_m \langle \psi_m | \hat{F} | \psi_m \rangle = \text{Tr}[\hat{F} \bar{\rho}]$$

ただし、

$$\bar{\rho} = \sum_m \omega_m |\psi_m\rangle \langle \psi_m|$$

である。明らかに

$$\bar{\rho}^2 \neq \bar{\rho}$$

従って $m = 1$ とすれば

$$\hat{\rho} = \bar{\rho}$$

である。式 6.22 は非対角項を持つ。しかし、混合状態の密度行列は式 6.21 から重みを連続変数として

$$\omega = e^{ikx}$$

とすると

$$\begin{aligned} \bar{\rho} &= \int e^{(k-k')x} dx \sum_{k,k'} |c_k c_{k'}| |u_k\rangle \langle u_{k'}| \\ &= \delta_{kk'} \sum_{k,k'} |c_k c_{k'}| |u_k\rangle \langle u_{k'}| \\ &= \sum_k |c_k|^2 |u_k\rangle \langle u_k| \end{aligned}$$

で非対角項が消えて、干渉性が消失する。

6.2.4 伝搬関数

この役割は位相積分の結果の $\delta_{kk'}$ である。

$$\delta_{kk'} = \int e^{(k-k')x} dx$$

第6部ではこれが波の衝突により、定常波ができることと次のように関係することを見た。

第6部では真空の期待値を計算すると、次のようになった。

$$\begin{aligned} D(x-y) &\equiv \langle 0 | \phi(x)\phi(y) | 0 \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d^3 p d^3 p'}{(2\pi)^6} \frac{1}{\sqrt{E_{\mathbf{p}} E_{\mathbf{p}'}}} \langle 0 | a_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}'}^\dagger | 0 \rangle e^{-ip \cdot x + ip' \cdot y} \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d^3 p d^3 p'}{(2\pi)^6} \frac{1}{\sqrt{E_{\mathbf{p}} E_{\mathbf{p}'}}} \langle 0 | (2\pi)^3 2p^0 \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') + a_{\mathbf{p}}^\dagger a_{\mathbf{p}} | 0 \rangle e^{-ip \cdot x + ip' \cdot y} \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \frac{1}{2E_{\mathbf{p}}} e^{-ip(x-y)} \end{aligned} \quad (6.23)$$

この $D(x-y)$ を y から x への伝播関数 (propagators) とした。

さらに波源の間には定常波が合成され、観測的伝播関数として次で定義した。

$$\Delta(x, y) \equiv [\phi(x), \phi(y)] = \int_C \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} \left(\frac{-i}{k^2 - m^2} \right) e^{-ik(x-y)} = \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{1}{2\omega_k} \left(e^{-ik(x-y)} - e^{ik(x-y)} \right) \quad (6.24)$$

この操作はまさに対角和をとることに相当する。

つまり、マクロな部分系を純粋状態の中に見るときに系 B の内外で内向き、外向きの波が存在していることになる。

つまり、特異値分解できていれば式 7.55 のように

$$\Psi = U \Sigma V^\dagger = \left(U \Sigma^{1/2} \right) \left(V \Sigma^{1/2} \right)^\dagger = \tilde{U} \tilde{V}^\dagger$$

しかし、重要なのは今、 $A \otimes B$ のほうが純粋系になるので、式 6.18 において部分対角和をとり、

$$\text{Tr} [|\beta_i\rangle \langle \beta_j|] < 1$$

で混合状態を引き出したが、純粋状態からみれば第6部のスリット回折のみたように無限領域から、この部分がカットオフされ、単位行列になり、有限のスリット幅を通過する波のように干渉が可能になるのである。

よって前節の式 5.22 で見たように全体系の密度行列は 1 になる。

また、熱力学的にも重要な内容がある。対角和をとることで混合状態を見いだすことは系のエントロピーは増大する。

これは混合状態の取り方が一意でなく、たくさんあることになる。例えば純粋状態の $|\psi^{AB}\rangle$ から部分系として ρ^A

を与える時、 B に作用するユニタリ演算子を U_B とすると

$$(I \otimes U_B) |\psi^{AB}\rangle$$

も ρ^A を与える。これは前小節のシュミット分解と関わり、式 5.5 の規格化された固有値の根 $\{\sigma_i\}$ は U_A, U_B のユニタリー変換で共通している。つまり、シュミット分解により、テンソル積にさえかかれば、

$$(U_A \otimes U_B) \sum_i \sigma_i |\alpha_i\rangle |\beta_i\rangle = \sum_i \sigma_i (U_A |\alpha_i\rangle) (U_B |\beta_i\rangle) \quad (6.25)$$

とかけるので

$$U_A |\alpha_i\rangle = |a\rangle$$

$$U_B |\beta_i\rangle = |b\rangle$$

として、状態ベクトルをユニタリ変換で変化させれば同じ固有値を持つことがわかる。

また、 $|\psi^{AB}\rangle$ がテンソル積にならない場合を考えよう。

この時の部分系は式 5.5 純粋状態とはいえないが、次章で扱うエンタングルド状態である。

つまり、式 6.19 のように純粋状態のエンタングルドは局所ユニタリー変換では不変である。

また、この時 σ_i はエンタングルドの強さを示している。ある i について

$$\sigma_i = 1$$

であれば $|\psi^{AB}\rangle$ が積状態でエンタングルドはない。しかし

$$\sigma_i < 1$$

であればエンタングルドしている。

6.3 TPCP 写像 [124]

前節で補助系を考えることで、全体の密度行列は式 6.7 から

$$\rho_{tot} = |\phi_1\rangle \langle \phi_1| \otimes \sum_{n=1}^{\infty} P_n |\Phi_1^{(n)}\rangle \langle \Phi_1^{(n)}|$$

のようにテンソル積を用いて表すことができた。これから対角和が保存されることと物理観測の関係をここで考える。

6.3.1 定義

量子的な状態の変化を考えると、量子系 A が状態 $\hat{\rho}_A$ にあるとしユニタリー演算子 \hat{U}_A によってこれまでの議論から

$$\hat{\rho}'_A = \hat{U}_A \hat{\rho}_A \hat{U}_A^\dagger$$

のようにかけることがわかった。ユニタリー変換である限り、純粋状態から混合状態に変化することはない。

ところが量子的な補助系 R を用意することで、純粋状態にユニタリ演算子を作用させ、混合状態実現できるようになる。

そこで R の状態として始めの $\hat{\rho}_A$ に依存しない状態として $\hat{\omega}_R$ という状態を用意する。

この A と R の合成系に作用するユニタリー演算子を \hat{U}_{AR} とする。この操作の後で、 R には無関係で A のみに注目した縮約状態 $\hat{\rho}'_A$ を

$$\hat{\rho}'_A = \text{Tr}_R \left[\hat{U}_{AR} (\hat{\rho}_A \otimes \hat{\omega}_R) \hat{U}_{AR}^\dagger \right] \quad (6.26)$$

のようにテンソル積にユニタリ演算子を作用させて表す。すると、 $\hat{\rho}_A$ が純粋状態であったとしても、この結果は混合状態になる。

このような作用は物理的には一般的なもので、実際の実験には純粋状態 $\hat{\rho}_A$ を用意したつもりでも、意図しない $\hat{\omega}_R$ が入ることがしばしばある。

量子情報論では A が空間的に離れた量子系 A_1 と A_2 の合成系 $A_1 A_2$ を扱うことも多い。例えば A_1 と A_2 が光ファイバーなどの量子通信で結ばれていて、その中を光子などが情報キャリアとして移動する場合である。

この時、 A_1 の始状態を $\hat{\rho}_{A_1}^{in}$ とし、 A_2 の始状態はこれに依存しない $\hat{\xi}_{A_2}$ とすると、この合成系が

$$\hat{\rho}_{A_1 A_2} = \hat{\rho}_{A_1}^{in} \otimes \hat{\xi}_{A_2}$$

とおける。ここで式 6.26 の部分トレースを A_1 についてとると式 6.25 から

$$\hat{\rho}_{A_2}^{out} = \text{Tr}_{A_1 R} \left[\hat{U}_{A_1 A_2 R} (\hat{\rho}_{A_1 A_2} \otimes \hat{\omega}_R) \hat{U}_{A_1 A_2 R}^\dagger \right]$$

これは A_2 における縮約情報をもっている。このように量子情報論では A_1 と A_2 の次元が異なってもかなわない。

A 系の次元を N_A 、 A' 系の次元を $N_{A'}$ とする。このとき $A \rightarrow A'$ の状態が

$$\hat{\rho} \rightarrow \Gamma(\hat{\rho})$$

のように変化したとする。始状態では

$$\hat{\rho} \geq 0, \text{Tr}[\hat{\rho}] = 1$$

の純粋状態であったとして、もし、量子情報空間が A が先のシュテルン・ゲルラッハの実験のように 2 つの状態で分割できれば

$$\hat{\rho} = p\hat{\rho}_1 + (1-p)\hat{\rho}_2 \quad (6.27)$$

ただし、

$$0 \leq p \leq 1$$

として、表すことができた。従って、この時の Γ にアフィン性があれば

$$\Gamma[\hat{\rho}] = p\Gamma[\hat{\rho}_1] + (1-p)\Gamma[\hat{\rho}_2]$$

となるはずである。これは別にある任意の物理測定の演算子 \hat{O} を作用して、平均値を得るために対角和を取ると

$$\text{Tr}[\hat{O}\Gamma[\hat{\rho}]] = p\text{Tr}[\hat{O}\Gamma[\hat{\rho}_1]] + (1-p)\text{Tr}[\hat{O}\Gamma[\hat{\rho}_2]]$$

が期待値になるが、これは式 6.27 によって、最初に 2 つの状態を混ぜてから測定をしても同じ期待値を得る。純粋状態であれば

$$\text{Tr}[\hat{\rho}] = 1 \rightarrow \text{Tr}[\Gamma[\hat{\rho}]] = 1$$

であり、この時、任意の演算子 $\hat{\sigma}$ に対して

$$\text{Tr}[\Gamma[\hat{\sigma}]] = \text{Tr}[\hat{\sigma}]$$

であり、純粋状態では対角和は保存される。これをトレース保存写像 (trace_preserving_map) という。次に A, A' 以外にもう一つの外部量子系 B を考える。 A と B 合成系を新たに $\hat{\Omega}_{AB}$ を用意する。ここで先に式 1.44 で見たように部分系 B に対しては何もしないという選択を取ることにする。つまり恒等写像を I として、

$$I_B[\hat{\rho}_B] = \hat{\rho}_B$$

を作用させたと考える。これを表現すると、この場合の合成写像は

$$\Gamma_A \otimes I_B$$

を A, B の合成系に作用させたことになる。これを

$$(\Gamma_A \otimes I_B) \left[\hat{\Omega}_{AB} \right]$$

と表す。これを1つの演算子とみなし、物理的に有効な観測であれば、これはエルミート演算子であり、正値をとる必要がある。以上から $\hat{\rho} \rightarrow \Gamma(\hat{\rho})$ の変換において、物理的に観測される条件として次の3つが考えられる。

観測条件：

1. 線形性

$$\Gamma \left[\sum_n c_n \hat{\sigma}_n \right] = \sum_n c_n \Gamma[\hat{\sigma}]$$

2. トレース保存

$$\text{Tr}[\Gamma[\hat{\sigma}]] = \text{Tr}[\hat{\sigma}]$$

3. 完全正値性

$$\hat{\Omega}_{AB} \geq 0 \rightarrow (\Gamma_A \otimes I_B) [\hat{\Omega}_{AB}] \geq 0$$

この3つの条件を満たすとき、 Γ はトレース保存完全正値写像 (`tracepreserving_completely_positive_map`) とよばれ、

TPCP 写像と略す。

この3つの条件を満たす TPCP 写像が物理現象を表していることを次で見てください。

6.3.2 クラウス表現

定理. 観測条件を満たす Γ は A のヒルベルト空間から A' のヒルベルト空間に写像する演算子の組 $\{\hat{K}_\alpha\}$ を用いて

$$\Gamma[\hat{\rho}] = \sum_\alpha \hat{K}_\alpha \hat{\rho} \hat{K}_\alpha^\dagger \quad (6.28)$$

を満たす。

これは後章の量子コンピューティングの基本形になるので証明しておく。

Proof. そのためにヒルベルト空間 A の次元を N_A として、この次元と同じになる、ある量子系 B を持つてくる。

A の完全正規直交系を

$$\{|n\rangle_A : n = 1 \sim N_A\}$$

とし、 A' の完全正規直交系を

$$\{|a_m\rangle_{A'} : m = 1 \sim N_{A'}\}$$

とし、 B' の完全正規直交系を

$$\{|b_n\rangle_B : m = 1 \sim N_{A'}\}$$

とする。複合状態

$$|\Psi\rangle_{AB} = \frac{1}{\sqrt{N_A}} \sum_n |n\rangle_A |b_n\rangle_B$$

を定義する。この状態に $\Gamma_A \otimes id_B$ を作用させる。条件3から

$$(\Gamma_A \otimes id_B) [|\Psi\rangle_{AB} \langle\Psi|_{AB}] \geq 0$$

となるので、スペクトル分解ができて、式 6.12 から次のように表すことができる。

$$(\Gamma_A \otimes id_B) [|\Psi\rangle_{AB} \langle\Psi|_{AB}] = \sum_{\alpha} p_{\alpha} |\Phi_{\alpha}\rangle_{A'B} \langle\Phi_{\alpha}|_{A'B} \quad (6.29)$$

ただし、

$$\sum_{\alpha} p_{\alpha} = 1, p_{\alpha} > 0$$

さらに、 $|\Phi_{\alpha}\rangle_{A'B}$ の B の部分を完全系 $\{|b_n\rangle_B\}$ で次のように展開する。

$$|\Phi_{\alpha}\rangle_{A'B} = \sum_n |f_{\alpha n}\rangle_{A'} |b_n\rangle_B$$

条件 1 より、

$$\frac{1}{N_A} \sum_{nn'} \Gamma_A [|n\rangle_A \langle n'|_A] \otimes |b_n\rangle_B \langle b_{n'}|_B = \sum_{nn'} \sum_{\alpha} p_{\alpha} |f_{\alpha n}\rangle_{A'} \langle f_{\alpha n'}|_{A'} \otimes |b_n\rangle_B \langle b_{n'}|_B$$

$\{|b_n\rangle_B\}$ の完全性の条件から

$$\Gamma_A [|n\rangle_A \langle n'|_A] = \sum_{\alpha} N_A |f_{\alpha n}\rangle_{A'} \langle f_{\alpha n'}|_{A'} \quad (6.30)$$

と簡単になる。ここで行列成分が

$$\langle a_m|_{A'} \hat{K}_{\alpha} |n\rangle_A = \sqrt{N_A p_{\alpha}} \langle a_m|f_{\alpha n}\rangle_{A'}$$

となる行列 \hat{K}_{α} を定義する。これは

$$\hat{K}_{\alpha} |n\rangle_A = \sqrt{N_A p_{\alpha}} |f_{\alpha n}\rangle_{A'}$$

を満たす。従って式 6.30 は

$$\Gamma_A [|n\rangle_A \langle n'|_A] = \sum_{\alpha} \hat{K}_{\alpha} |n\rangle_A \langle n'|_A \hat{K}_{\alpha}^{\dagger}$$

となる。よって Γ は線形性を持つから、任意の状態を

$$\hat{\rho}_A = \sum_{nn'} \langle n|\hat{\rho}_A|n'\rangle (|n\rangle_A \langle n'|_A)$$

で定義すれば式 6.28 が示される。

$$\Gamma[\hat{\rho}_A] = \sum_{\alpha} \hat{K}_{\alpha} \hat{\rho}_A \hat{K}_{\alpha}^{\dagger}$$

□

これを TPCP 写像のクラウス表現 (**Kraus representation**) と呼ぶ。

ただし、この表現は決まった Γ に対して一意ではない。観測条件 2 から、 A のヒルベルト空間に作用する任意の演算子 $\hat{\lambda}_A$ に対して、次のようにトレース不変になる。

$$\text{Tr} \left[\sum_{\alpha} \hat{K}_{\alpha} \hat{\lambda}_A \hat{K}_{\alpha}^{\dagger} \right] = \text{Tr} [\hat{\lambda}_A] \quad (6.31)$$

これを变形すると

$$\text{Tr} \left[\left(\sum_{\alpha} \hat{K}_{\alpha} \hat{K}_{\alpha}^{\dagger} \right) \hat{\lambda}_A \right] = \text{Tr} [\hat{\lambda}_A]$$

となるので

$$\sum_{\alpha} \hat{K}_{\alpha} \hat{K}_{\alpha}^{\dagger} = \hat{I}_A \quad (6.32)$$

を満たす必要がある。

この条件を満たす \hat{K}_α をクラウス演算子 (Kraus operator) という。

これは現実の物理現象において重要な条件である。

ヒルベルト空間の次元が $N_A N_{A'}$ である補助量子系 R があって、このヒルベルト空間の正規直交系

$$\{|r_\alpha\rangle_R : \alpha = 1 \sim N_A N_{A'}\}$$

とする。

AR 系のヒルベルト空間に作用するユニタリー演算子を \hat{U}_{AR} とすると

$$\hat{K}_\alpha = \langle r_\alpha |_R \hat{U}_{AR} |r_1\rangle_R$$

とかける。この時、確かにユニタリー性から

$$\begin{aligned} \sum_\alpha \hat{K}_\alpha \hat{K}_\alpha^\dagger &= \sum_\alpha \langle r_\alpha |_R \hat{U}_{AR} |r_1\rangle_R \langle r_1 |_R \hat{U}_{AR} |r_\alpha\rangle_R \\ &= \sum_\alpha \langle r_\alpha |_R \hat{U}_{AR} |r_\alpha\rangle_R \\ &= \sum_\alpha r_\alpha^2 = 1 \end{aligned}$$

を満たしている。そこで純粋状態の密度演算子 $\hat{\omega}_R$ を

$$\hat{\omega}_R = |r_1\rangle_R \langle r_1|_R$$

とおけば、式 6.31 から式 6.26 は

$$\begin{aligned} \Gamma[\hat{\rho}_A] &= \text{Tr}_R \left[\hat{U}_{AR} (\hat{\rho}_A \otimes \hat{\omega}_R) \hat{U}_{AR}^\dagger \right] \\ &= \text{Tr}_R \left[\hat{U} (\hat{\rho} \otimes |r_1\rangle_R \langle r_1|_R) \hat{U}^\dagger \right] \end{aligned}$$

とかける。これは任意の TPCP 写像 Γ が注目系と外部系の合成としてのユニタリ変換で生成されることを示す。

従って任意の物理的な操作が TPCP 写像 Γ と等価であり、クラウス表現で表すことができる。ことになる。

6.3.3 部分トレース [124]

TPCP の操作は部分トレースをとっている。そこで、 A を A' と R の合成系として始状態を

$$\hat{\rho}_A = \hat{\rho}'_{A'R}$$

とおく、次に R の部分トレースを取ると

$$\Gamma_{PT}[\hat{\rho}_A] = \text{Tr}_R[\hat{\rho}'_{A'R}]$$

となるが、これは前節の観測条件を満たしている。つまり TPCP 写像である。

では部分トレースをとるということは物理的にどういう観測をしているのだろうか。

これは前章の式 1.44 のシュテルン・ゲルラッハの実験において、何もしないことと同じになる。

任意の A' の物理量を $\hat{O}_{A'}$ とすると

$$\text{Tr}_{A'R} \left[\hat{O}_{A'} \hat{\rho}'_{A'R} \right] = \text{Tr}_{A'} \left[\hat{O}_{A'} \text{Tr}_R \left[\hat{\rho}'_{A'R} \right] \right]$$

と書いても問題ない。これは \hat{O} の測定に対して式 6.10 のように縮約している $\Gamma_{PT}[\hat{\rho}_A]$ を考えればよいことになる。

純粋状態であれば

$$\text{Tr} [\rho] = 1$$

なので対角和に対して、純粋状態は変化を与えない。

つまり、観測操作をしても部分系を残せば、その系の量子コヒーレンスを保つことができることになる。これを次に見ておこう。

6.3.4 選択量子コヒーレンス

一般に量子系 S を考え、任意の始状態を $\hat{\rho}_{in}$ とする。これまでの議論では、終状態 $\hat{\rho}_{out}$ へは TPCP 変換写像 Γ が存在して

$$\hat{\rho}_{out} = \Gamma [\hat{\rho}_{in}] \quad (6.33)$$

が成り立つ。しかし、この Γ に一意性は保証されていない。

そこで同じヒルベルト空間の次元を持つ、補助系 S' を持つてくる。

これは次のような添え字入れ替えのユニタリ変換をとする。

$$\hat{U}_{SS'}^{(SWAPP)} |n\rangle_S |n'\rangle_{S'} = |n'\rangle_S |n\rangle_{S'}$$

これによって変換写像 Γ は

$$\Gamma_{SWAP} [\hat{\rho}] = \text{Tr}_{S'} \left[\hat{U}_{SS'}^{(SWAPP)} (\hat{\rho}_S \otimes \hat{\rho}_{outS'}) \hat{U}_{SS'}^{(SWAPP)\dagger} \right]$$

となる。

このような選択をしても式 6.33 が成立する。後章では、これを利用して量子的な纏れについて考える。

物理的観測がユニタリ操作に対応することになる。

これは外部系との相互作用になるので、問題は操作後に注目した系のコヒーレンスを維持することである。そのために局所的なユニタリ変換を考えればよい。

例えば量子ビット A に

$$U_A = \exp(-i\theta\hat{\sigma}_{3A})$$

というユニタリ変換をおこなうとする。この時、外部の制御系としてマクロなコヒーレント状態にある調和振動子系 R を設定して、無次元化した位置演算子を \hat{q}_R とする。時間 T の間だけ A と R の間に次の相互作用があるとすると、

$$\hat{H} = g\hat{\sigma}_{3A}\hat{q}_R$$

という相互作用があるとすると、この作用が働いた T 後には

$$\hat{U}_{AR} = \exp(-ig\hat{\sigma}_{3A}\hat{q}_RT)$$

となることが期待される。

ここで、 A の始状態を $|\psi\rangle$ 、 R の始状態の振幅を c とし、コヒーレント状態を

$$|c\rangle_R = e^{-\frac{|c|^2}{2}} \exp(c\hat{a}_R) |0\rangle_R$$

とおく。これは後の位相演算子の章の光子のコヒーレント状態式 10.73 である。

従ってこの時の \hat{a}_R は消滅演算子であり、次の関係を満たす。

$$[\hat{a}_R, \hat{a}_R^\dagger] = 1$$

さらに位置演算子とは

$$\hat{q}_R = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a}_R + \hat{a}_R^\dagger)$$

で結ばれている。

6.4 部分測定

一般測定は式 1.8 で見たポインター基底測定のように注目系 S と測定機系 D の相互作用を考え、その後でマクロなメーターを理想測定する。 D には S と接触するプローブ系 P が含まれていて、 P が取得する S の信号は D の信号増幅部分により、マクロ化し、メーターを動かすと考え。

この時、 D のメーターのヒルベルト空間の次元をプローブ系の次元と同じとしてこれを N_D とかく。

$$N_D \equiv \dim[D] = \dim[P]$$

一方で S のヒルベルト空間の次元 N_S は N_D と一致するとは限らない。しかし、情報の書き込みがおこなわれるためには

$$N_D > N_S$$

D に S の情報を書き込むことができる。しかし、

$$N_D < N_S$$

の場合は、この測定で部分的にしか S の情報を D に書き込むことができない。これが部分測定になる。

ここで測定される未知の S の状態を $\hat{\rho}_S$ とかく。ただし、測定機 D の初期状態は既知として $\hat{\rho}_D$ とは独立して、これを $\hat{\omega}_D$

とかく。合成系を SD とすると、この始状態は

$$\hat{\rho}_S \otimes \hat{\omega}_D$$

のテンソル積で表される。時刻、 $t = 0$ から $t = T$ までの間のみ相互作用したとすると、この系の時間発展演算子はユニタリーになり、

$$\hat{U}_{SD}$$

で表す。相互作用中に D の状態は未知の $\hat{\rho}_S$ に依存して、時間発展するので $\hat{\rho}_S$ に含まれていた情報が測定機 D の状態に転写される。この情報量は \hat{U}_{SD} にも、 $\hat{\omega}_D$ にも依存するだろう。さらに \hat{U}_{SD} には S に関する振動を D の中でマクロレベルに増幅するマクロ作用が含まれているとする。相互作用が切れたあとでは状態が変化し、

$$\hat{U}_{SD} (\hat{\rho}_S \otimes \hat{\omega}_D) \hat{U}_{SD}^\dagger$$

になる。この状態で D の物理量 \hat{O}_D の理想測定を行う。 \hat{O}_D の固有値を O_n には縮退がないとして、

6.5 量子状態トモグラフィ

第 6 部で伝播関数について波動的な視点から考察し、散乱や経路積分を考えた。

ここでは量子情報論の視点で確率振幅を具体的に計算することを考えよう。

筆者はこの確率解釈の立場ではない。しかし、測定をくりかえせば確率分布を得ることができる。

これから密度行列を具体的に計算ができるようになる。マクロな領域で量子的な純粋状態を構成できる。

こうして発展してきたのが量子トモグラフィの分野で、量子コンピューターや量子テレポーテーションもこの分野に入る。

ブロッホ状態を次で表す。

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} \left(\hat{I} + u_1 \hat{\sigma}_1 + u_2 \hat{\sigma}_2 + u_3 \hat{\sigma}_3 \right)$$

ここではパウリ行列 $\hat{\sigma}_k$ の添え字関数 $k = 1, 2, 3$ を 3 つの物理量として測定をすることを考えよう。

まず、確率解釈では測定値の確率分布として対角和をとれば

$$p_k(\pm 1) = \frac{1}{2} (1 \pm u_k)$$

と計算できた。

これによって複数測定を行えば具体的な確率分布を得ることができる。

つまり式 6.5 が第 3 部で考えたエルゴード仮説から試行を多数繰り返した結果と等価であるという仮説をここではとる。そこで得られた p_k から σ_k の平均値を ± 1 の期待値の和として

$$\langle \hat{\sigma}_k \rangle = p_k(+1) - p_k(-1)$$

と求めることができる。よってこの値を用いれば $\hat{\rho}$ が式 6.5 から求めることができる。

これを集合的に考えれば $\hat{\rho}$ は確率分布の集合と等価である。

$$\hat{\rho} \simeq \{p_k(\pm 1) | k = 1, 2, 3\}$$

このような事情が量子測定に確率論を定着させてきた。

これを連続測定に応用する。例えば 1 次元空間を運動する点粒子を考え、

$$[\hat{q}, \hat{p}] = i$$

とする。

例えば物理量に対応した演算子を l を定数の長さとして、角度変数 θ に依存した次の物理量を考える。

$$\hat{A}(\theta) = \hat{q} \cos \theta + l^2 \hat{p} \sin \theta \quad (6.34)$$

この固有値は連続的に分布していて、確率密度分布は 7.8 から対角和で計算できる。

そこで問題は密度行列の決定であるが、まず次の固有値 a を得る確率 $P(\theta, a)$ を求める。

$$\hat{A}(\theta) |a, \theta\rangle = a |a, \theta\rangle$$

固有値分解から $\hat{A}(\theta)$ の連続固有値を a' として

$$\hat{A} = \int a' |a'\rangle \langle a'| da'$$

と展開する。スペクトル分解では一般的なエルミート演算子 \hat{X} について

$$\hat{X} = \int x |x\rangle \langle x| dx$$

のように分解したときにデルタ関数に入れると、そのまま外に出せて、

$$\delta(\hat{X}) = \int \delta(x) |x\rangle \langle x| dx$$

となったから、

$$\hat{A}(\theta) - aI = 0$$

という固有方程式を δ 関数の中に入れてしまおうというアイデアである。

これによって

$$\begin{aligned} P(\theta, a) &\equiv \text{Tr} \left[\delta(\hat{A}(\theta) - a) \hat{\rho} \right] = \int_{-\infty}^{+\infty} da' \delta(a' - a) \langle a', \theta | \hat{\rho} | a', \theta \rangle \\ &= \langle a, \theta | \hat{\rho} | a, \theta \rangle \end{aligned} \quad (6.35)$$

である。これは、式 6.5 から

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P(\theta, a) da = 1$$

を満たしているので確率の条件を満足する。

さらに密度行列の成分は Wigner 関数を用いて次の公式で決めることができる。

公式：密度行列

$$\langle \bar{q} | \hat{\rho} | q \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{du}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} da P \left(\operatorname{arccot} \left(l^2 \frac{u}{\bar{q} - q} \right), a \right) \exp \left(i \left(a \sqrt{u^2 + \left(\frac{\bar{q} - q}{l^2} \right)^2} - \frac{\bar{q} + q}{2} u \right) \right) \quad (6.36)$$

証明は次節でおこなう。ここではこれを利用すると、密度行列 $\hat{\rho}$ が確率密度分布を合わせていると考えることができる。

$$\hat{\rho} \simeq \{ P(\theta, a) | 0 \leq \theta < \pi \}$$

このように確率密度分布の集合から量子状態を構築することを量子状態トモグラフィ (quantum state tomography) という。

式 5.29 で量子的な相関について環境のトレースを取ることをみたのでここでも次のような相関を考える。

量子状態は $\chi(q, p)$ を相関関数の母関数として、

$$\chi(q, p) = \operatorname{Tr}[\hat{\rho} \exp(ip\hat{q} - iq\hat{p})] \quad (6.37)$$

として、 q, p を変数として偏微分をし、最後に $(q, p) = (0, 0)$ と置くと次のような相関関数を表すエルミート多項式がえられる。

$$\partial_q \partial_p \chi(0, 0) = \operatorname{Tr} \left[\frac{1}{2} [(\hat{q}\hat{p} + \hat{p}\hat{q})\hat{\rho}] \right]$$

式 6.37 は積分を用いて

$$\begin{aligned} \chi(q, p) &= \operatorname{Tr} \left[\exp(iq\hat{p}) \exp\left(-\frac{i}{2}q\hat{p}\right) \hat{\rho} \exp\left(-\frac{i}{2}q\hat{p}\right) \hat{\rho} \right] \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dq' e^{ipq'} \langle q' | \exp\left(-\frac{i}{2}q\hat{p}\right) \hat{\rho} \exp\left(-\frac{i}{2}q\hat{p}\right) | q' \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dq' e^{ipq'} \left\langle q' - \frac{q}{2} \left| \hat{\rho} \right| q' + \frac{q}{2} \right\rangle \end{aligned} \quad (6.38)$$

とすることができる。これはフーリエ変換になっている。

従って、逆フーリエ逆変換から $\chi(q, t)$ がわかれば

$$\langle q' | \hat{\rho} | q \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \chi(q - q', p) \exp\left(-\frac{i}{2}p(q' + q)\right) dp$$

が得られる。興味あることに

第 6 部の Feynman 核では演算子 P, Q の固有値を p, q として、ハミルトニアンが α を用いて

$$H^{[\alpha]}(p, q; t) \equiv \int \left\langle p + \left(\frac{1}{2} - \alpha\right) u \left| H(P, Q; t) \right| p - \left(\frac{1}{2} + \alpha\right) u \right\rangle e^{iqu/\hbar} du$$

で定義できた。ただし、

$$\begin{aligned} p_1 &= p + \left(\frac{1}{2} - \alpha\right) u, & q_1 &= q + \left(\frac{1}{2} + \alpha\right) v \\ p_2 &= p - \left(\frac{1}{2} + \alpha\right) u, & q_2 &= q - \left(\frac{1}{2} - \alpha\right) v \end{aligned}$$

Weyl 順であれば $\alpha = 0$ である。これは式 6.38 において転換

$$p \longleftrightarrow q$$

とした関係になっている。密度行列とハミルトニアンが幾何的に関係していることがわかる。

つまり、有限時間の Feynman 核が時間推進を

$$U(t_N, t_0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \langle q_N | \prod_{j=1}^N dp_j dq_j \frac{1}{2\pi\hbar} e^{ip_j(q_j - q_{j-1})/\hbar - i\Delta t H_j^{[\alpha]}/\hbar} \int dq_0 \langle q_0 |$$

として

$$K(q_f, t_N; q_i, t_0) = \langle q_f | U(t_N, t_0) | q_i \rangle$$

となったように、時間逆推進が密度行列が関係することが示唆される。

6.5.1 Wigner 関数

式 6.36 を示すために、Wigner 関数を復習する。

これは第 6 部で見たように擬似的な古典的確率を (q, p) 空間で得るものである。これを混合状態を含む量子的期待値を計算するのに利用しようというわけである。まず Wigner 関数を次で定義する。

定義. Wigner 関数：位置 x, y 正準共役な運動量 p として Wigner 関数 $P(p, x)$ を

$$P(p, x) \equiv \frac{1}{\pi\hbar} \int \psi^*(x+y)\psi(x-y)e^{2ipy/\hbar} dy$$

で定義する。

これから固有方程式

$$\hat{q}|q\rangle = q|q\rangle$$

に対して、密度関数の Wigner 関数を

$$W(q, p) \equiv \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \langle q - u/2 | \hat{\rho} | q + u/2 \rangle \exp(ipu) du \quad (6.39)$$

で定義する。

ここでは \hat{q}, \hat{p} の正規順序積のみを考えると、例えば

$$G(\hat{q}, \hat{p}) = g_0 + g_{10}\hat{q} + g_{01}\hat{p} + g_{20}\hat{q}^2 + g_{11}(\hat{q}\hat{p} + \hat{p}\hat{q}) + \dots$$

のような相関演算子を考えると第 6 部でみたように交換積が 0 であれば対角和計算に書き換えができて

$$\text{Tr}[G(\hat{q}, \hat{p})] = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} G(q, p)W(q, p)dqdp \quad (6.40)$$

が成り立つ。この関係を利用して混合状態を含む密度行列を計算することができる。

$$\langle q | \hat{\rho} | q' \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} W\left(\frac{q+q'}{2}, p\right) \exp(iq(q-q')) dp \quad (6.41)$$

つまり、情報量で考えると Wigner 関数 $W(q, p)$ と密度行列 $\hat{\rho}$ は等価である。

そこで式 6.34 で表される次の

$$\hat{A}(\theta) = \hat{q} \cos \theta + l^2 \hat{p} \sin \theta$$

物理量の測定値の確率密度分布を式 6.35 から

$$P(\theta, a) = \text{Tr}[\delta(\hat{A}(\theta) - a) \hat{\rho}]$$

として、これを計算することを考えると、デルタ関数の定義から

$$\delta(\hat{A}(\theta) - a) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp[ib(\hat{q} \cos \theta + l^2 \hat{p} \sin \theta - a)] db$$

となり、この中には \hat{q}, \hat{p} の正規順序積しか含まれていないから式 6.40 から対角和は積分になり。

$$\begin{aligned} P(\theta, a) &= \text{Tr}[\delta(\hat{A}(\theta) - a) \hat{\rho}] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(\hat{q} \cos \theta + l^2 \hat{p} \sin \theta - a) W(q, p) dq dp \end{aligned} \quad (6.42)$$

とすることができる。そこで第 6 部でみたように、 $P(\theta, a)$ のフーリエ変換

$$\int P(\theta, a) e^{i\eta a} da$$

を考え、フーリエ変数は第 6 部の Green 関数の所で見たとように

$$0 \leq \eta < \infty$$

で制限し、

$$\begin{aligned} u &= \eta \cos \theta, v = \eta \sin \theta \\ \eta &= \sqrt{u^2 + v^2} \end{aligned} \quad (6.43)$$

$$\theta = \text{arccot} \left(\frac{u}{v} \right) \quad (6.44)$$

と変数変換して、次の期待値関数を定義する。

$$F(u, v) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} P(\theta, a) e^{i\eta a} da \quad (6.45)$$

よって式 6.42 から積分が実行できて、

$$F(u, v) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} W(q, p) \exp[i(qu + l^2 pv)] dq dp$$

これは $F(u, v)$ が $W(q, p)$ のフーリエ変換に対応している。よって逆フーリエ変換を使うと

$$W(q, p) = \frac{l^2}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} F(u, v) \exp[-i(qu + l^2 pv)] dudv$$

となるので式 6.41 に代入し、式 6.43、6.45 を用いて、

$$\begin{aligned} \langle q | \hat{\rho} | q' \rangle &= \frac{l^2}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} da \int_{-\infty}^{\infty} du \int_{-\infty}^{+\infty} dv \int_{-\infty}^{+\infty} dp P(\theta, a) \\ &\quad \times \exp \left[i \left(a \sqrt{u^2 + v^2} - \frac{q + q'}{2} u + p(q - q' + l^2 v) \right) \right] \end{aligned}$$

を得る。従って p 積分から δ 関数が出てきて式 6.44 があるので、結局公式

$$\langle q | \hat{\rho} | q' \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{du}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} da P \left(\text{arccot} \left(l^2 \frac{u}{q - q'} \right), a \right) \exp \left(i \left(a \sqrt{u^2 + \left(\frac{q - q'}{l^2} \right)^2} - \frac{q + q'}{2} u \right) \right)$$

を得る。

7 エンタングルメントエントロピー [81]

7.1 導入

7.1.1 ブラックホール・エントロピー

一般相対性論を量子力学に応用すると高エネルギー領域でゆらぎにより紫外発散が頻繁におきるようになる。

これを避けるために物質の最小単位を点ではなく、線にしようというアイデアが超弦理論である。

このようなミクロの重力理論の問題だけではなく、マクロな重力理論にも課題があり、その1つがブラックホールのエントロピーである。

ブラックホールは通常その中身が見えない、つまり情報の最小単位であるエントロピーの考え方に極めて合致する。

ベッケンシュタイン・ホーキングのブラックホールの面積公式 S を用いてブラックホールのエントロピーを表すと

$$S_{BH} = \frac{k_B c^3}{4G_N \hbar} \cdot S \quad (7.1)$$

とベッケンシュタインは定義した。この式がどうして得られたかはその物理定数の構成からして興味あるところである。

今後は自然単位系 $G_N = \hbar = k_B = c = 1$ とする。するとブラックホールのエントロピーは

$$S_{BH} = \frac{1}{4} \cdot S$$

である。

歴史的には1980年後半からこの研究ははじまり、まずブラックホールを球殻内の領域 B と見立てる。それ以外の領域は A と呼ぶことにしよう。

ここ量子論の観測を持ってきて、エンタングルメント・エントロピーを計算するわけである。

一方でトフットとサースキンらがホログラフィー理論を提案した。

これは逆にブラックホールのエントロピーが表面積に比例することを原理として導入しようというものである。

この理論がある時の時空 M における重力理論はその境界 ∂M における重力を含まない理論と同等である。というホログラフィー原理に発展した。

その後1995年にポルティンスキーによってDブレインが発見された。

これは非常に重く電荷を帯びた物体で、Dブレインを多くあつめるとブラックホールができる。

このブラックホールには、ボソンとフェルミオンを入れ替える対称性を持つことがわかった。

Dブレインはエネルギーを与えて励起すると膜のように振動し、いくつかの固有状態をつくる。

この状態数からブラックホールのエントロピーを計算できるようになった。

驚くことにこれが式7.1と一致したのである。

さらに1997年にマルセダナは、ブラックホールのDブレインが一般的な枠組みの特殊な例にすぎないことを示した。

この枠組みが `anti_de_Sitter_spacetime` と `conformal_field_theory` で略して **AdS/CFT** と呼ばれる。

Dブレインを何枚か集めると反ドジッター時空ができる。

これには時間的境界が存在し、その境界が平坦なミンコフスキー時空になるというものである。つまり

AdS/CFT 対応は反ドジッター時空の量子重力理論はその境界上の共形場理論と同じである。

7.1.2 隠れた次元

量子論の特徴的な状態にエンタングルド（量子的もつれ）は特異値分解にもつながり、1つ上の次元という発想を与えてくれるので導入としておこう。

$x_1, x_2 \in \mathbb{C}$ とし、次のような2変数の関数を考える。

$$f(x_1, x_2) = (x_1 + x_2)^2 = x_1^2 + 2x_1x_2 + x_2^2$$

これは、独立した関数 $g(x_1), g(x_2)$ の直積に書くことができない。

$$f(x_1, x_2) \neq g(x_1)g(x_2)$$

つまり、 x_1x_2 はもつれていて局所的に表すことができない。

ところが1つ次元を増やした世界からみるとどうか？正確には1つ以上増やせばいいのだが、次のように $f(x_1, x_2)$ をあらわす。

$$\begin{aligned} f(x_1, x_2) &= (1, x_1, x_1^2) \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ x_2 \\ x_2^2 \end{pmatrix} \\ &= \mathbf{x}^\dagger(x_1) \mathbf{A} \mathbf{x}(x_2) \end{aligned}$$

と表すことができる。この時、

$$\text{rank}[A] = 3$$

となり、最初の次元より1つ多い。

これは x_1, x_2 の直交軸以外に隠れた次元が存在するかのようふるまい、これがもつれの原因なる。仮にもつれがなければ

$$x_1^2 + x_2^2 = (1, x_1, x_1^2) \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ x_2 \\ x_2^2 \end{pmatrix} \quad (7.2)$$

と表すことができるので

$$\text{rank}[A] = 2$$

で隠れた次元は存在しない。

式7.2を対角化することができれば直交する基底を見つけることができる。

そこで最初の

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

とおくと、特性方程式が

$$\begin{aligned} \det(\lambda E - A) &= \lambda^2(2 - \lambda) - (2 - \lambda) \\ &= (2 - \lambda)(\lambda^2 - 1) \\ &= 0 \end{aligned}$$

となるのでこの固有値は

$$\lambda = 2, \pm 1$$

となる。これは前節での特異値で固有ベクトルは

$$A\mathbf{u} = \lambda\mathbf{u}$$

$\lambda = 2$ に対して

$$\begin{pmatrix} -2 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -2 \end{pmatrix} \mathbf{u}_2 = \mathbf{0}$$

$$-2u_{2x} + u_{2z} = 0$$

$$u_{2x} - 2u_{2z} = 0$$

$\lambda = \pm 1$ に対して

$$\begin{pmatrix} \pm 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 \pm 1 & 0 \\ 1 & 0 & \pm 1 \end{pmatrix} \mathbf{u}_{\pm 1} = \mathbf{0}$$

$$\pm u_{\pm x} + u_{\pm z} = 0$$

$$u_{\pm x} \pm u_z = 0$$

規格化された固有ベクトルは次のようになる。

$$\mathbf{u}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \mathbf{u}_{\pm 1} = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 0 \\ \pm 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

変換行列を

$$\begin{aligned} U &= (\mathbf{u}_{-1}, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_1) \\ &= \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} \\ 0 & 1 & 0 \\ -1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

とすると

$$\begin{aligned} f(x_1, x_2) &= \mathbf{x}^\dagger(x_1) U U^{-1} A U U^{-1} \mathbf{x}(x_2) \\ &= \mathbf{X}^\dagger(x_1) U^{-1} A U \mathbf{X}(x_2) \end{aligned}$$

を得る。ただし対角化変換によって

$$A' = U^{-1} A U = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{7.3}$$

で見事に対角化され、この時の基底は $j = 1, 2$ として

$$\mathbf{X}(x_j) = U^{-1} \mathbf{x}(x_j) = \begin{pmatrix} (1 - x_j^2)/\sqrt{2} \\ x_j \\ (1 + x_j^2)/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

となる。ただし、直交させるために内積が 0 になることを考えないといけない。

そこで規格化定数を $C_\alpha(a)$ として、次で内積を定義する。 α, β は 3 成分をもつことを表す。

$$\int_{-a}^a dx \bar{X}_\alpha(x) X_\beta(x) = C_\alpha(a) \delta_{\alpha\beta}$$

この内積積分区間 a に依存する。

例えば $X_1, X_2; X_2, X_3$ の場合は奇関数になるので積分は 0 になる。

X_1, X_3 の場合は

$$\int_{-a}^a dx \frac{1-x^2}{\sqrt{2}} \frac{1+x^2}{\sqrt{2}} = a \left(1 - \frac{a^4}{5} \right)$$

となるので

$$a^4 = 5$$

とすれば変換された \mathbf{X}_α は直交することになる。式 7.3 の平方値にも意味があり、これは密度行列が

$$\begin{aligned} \rho(x, x') &= |x\rangle \langle x'| \\ &= \int dy \langle y|x\rangle \langle x'|y\rangle \\ &= \int dy f(x, y) f(y, x') \end{aligned}$$

とかけるので

$$\begin{aligned} \rho(x, x') &= \mathbf{X}^\dagger(x) A' \mathbf{X}(x') \\ &= \mathbf{X}^\dagger(x) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \mathbf{X}(x') \end{aligned}$$

となる。これは正定値行列である。特異値の 2 乗がこの対角値になっている。

7.1.3 特異値分解

A を $M \times N$ 行列とする。エルミート行列であれば次を満たす。

$$(A^\dagger A)^\dagger = A^\dagger (A^\dagger)^\dagger = A^\dagger A$$

そこで $A^\dagger A$ の固有値と固有ベクトルを $\lambda, |v\rangle$ とすると

$$(A^\dagger A) |v\rangle = \lambda |v\rangle$$

が成り立つ。また、ノルムは

$$\langle v | A^\dagger A |v\rangle = \lambda = |A|v\rangle|^2$$

5.7 から特異値標準形 Σ として

$$\begin{aligned}
U^\dagger AV &= \begin{pmatrix} \langle u_1 | \\ \vdots \\ \langle u_M | \end{pmatrix} (A|v_1\rangle, \dots, A|v_N\rangle) \\
&= \begin{pmatrix} \langle u_1 | A | v_1 \rangle & \cdots & \langle u_1 | A | v_r \rangle & | & \\ \vdots & \ddots & \vdots & | & O \\ \langle u_r | A | v_1 \rangle & \cdots & \langle u_r | A | v_r \rangle & | & \\ - & - & - & + & - \\ & O & & | & O \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \sqrt{\lambda_1} & 0 & | & \\ & \ddots & | & O \\ 0 & \sqrt{\lambda_r} & | & \\ - & - & - & + & - \\ & O & & | & O \end{pmatrix} = \Sigma
\end{aligned}$$

この行列 A を

$$A = U\Sigma V^\dagger \quad (7.4)$$

$$A_{ij} = \sum_{l=1}^r U_{il} \sqrt{\lambda_l} \bar{V}_{jl} \quad (7.5)$$

と表すことができる。これを行列 A の特異値分解という。状態がセパラブルであれば

$$\psi(x, y) = \sum_{\ell} \sqrt{\lambda_{\ell}} (u \otimes v)_{\ell\ell}^{xy}$$

のようにベクトルの直積の和になるが添え字 ℓ が共通しているのでセパラブルである。特異値は非負なので次の規格化

$$P_l = \frac{\lambda_l}{\sum_{i=1}^r \lambda_i} \quad (7.6)$$

とすると確率の概念が導入される。これは後に見る情報エントロピーである。つまり、情報量は小さいときは確率は大きくなる。

$$S(\chi) = - \sum_{l=1}^{\chi} p_l \log p_l \quad (7.7)$$

ただし、確率分布は並べ替え

$$p_1 \geq p_2 \geq \cdots \geq p_{\chi} \geq \cdots \geq p_N$$

がなされているとする。これは確率の高い χ 個を採用し、 $S(\chi)$ を定義するという粗視化をおこなう手順に
応用できる。

次の節でみる画像処理では粗視化は非常に近い相関でおこなわれる。

しかし、密度行列の線り込み群として後に利用する場合は長距離の相関になる。

また、機械学習などにも応用され、粗視化によるエントロピーについても後節 QFT で考える。

新しい場の理論に指針が立ったのである。

7.1.4 von_Neumann エントロピー [81]

次に量子力学的なエントロピーを考えよう。先駆者は Neumann である。
前章から任意の観測の期待値が

$$\langle O \rangle = \langle \Psi | O | \Psi \rangle$$

であらわされる。この状態は純粋状態であるが、混合状態では必ずある熱浴と接していい、平衡状態にあると考え、

統計的平均をとるため、密度演算子 ρ_{tot} を考えて系全体のヒルベルト空間を \mathcal{H}_{tot} として

$$\langle O \rangle = \text{Tr}_{\mathcal{H}_{tot}} [O \cdot \rho_{tot}] \quad (7.8)$$

$$\text{Tr}[\rho_{tot}] = 1$$

で表される。純粋状態では

$$\rho_{tot} = |\Psi\rangle \langle \Psi|$$

となった。

量子系のエントロピーを

$$S(\rho) = -\text{Tr}[\rho \log \rho] \quad (7.9)$$

とおく、これは後に示す von_Neumann エントロピーである。
よく知られたエントロピーは

$$S = k \log W$$

と少し異なる。しかし、この定義が適当であることを次で見る。

密度行列 ρ は数値ではないが、簡単に数値で扱ってしまうと状態数 W が

$$W = \rho^\rho$$

のようにつくれていることを示唆する。

密度行列の固有値が固有状態の実現確率を与える。

というこれまでの処方から次の関係は自然である。

$$\text{Tr}[\rho] = 1$$

そこで特異値 λ_i を用いて、この行列を次のように展開する。

$$\rho = \sum_i \lambda_i |\phi_i\rangle \langle \phi_i| \quad (7.10)$$

$$\sum_i \lambda_i = 1$$

これから

$$\begin{aligned} S(\rho) &= - \sum_j \langle \phi_j | \left(\sum_i \lambda_i |\phi_i\rangle \langle \phi_i| \sum_i \lambda_i \log \lambda_i |\phi_i\rangle \langle \phi_i| \right) | \phi_j \rangle \\ &= - \sum_i \lambda_i \log \lambda_i \end{aligned}$$

と数値になり、エントロピーは

$$S(\rho) \geq 0$$

が成り立つ。等号が成立するのは $\lambda_i = 1$ の時でこの時、式 7.10 から

$$\rho = |\phi_i\rangle \langle \phi_i|$$

であり、純粋状態である。この時は次が成り立つ。

$$\begin{aligned}\rho^2 &= \rho \\ \rho(\rho - 1) &= 0\end{aligned}$$

これは量子論の特徴的な性質で、純粋状態というのはエントロピーが 0 であり、可逆であることを表す。また、最初に純粋系であった波動関数から出発して、どこかで部分系を取り出すとその部分系が混合状態になることがあるわけである。

Tr をとっているので演算子の巡回不変性からエントロピーは表示に依存しない。そこで 2 つの領域 A, B の ρ_1, ρ_2 について $0 < t < 1$ とし全領域の ρ を

$$\rho_{tot} = t\rho_1 + (1-t)\rho_2 \quad (7.11)$$

とおくと、まさにエントロピー増大の法則として **Peierls の不等式**

$$S(\rho_{tot}) \geq tS(\rho_1) + (1-t)S(\rho_2) \quad (7.12)$$

が成り立つ。

これをエントロピーの凹性 (**concavity**) という。

この内容は次節で扱うのでここでは密度行列とエントロピーの関係を深めてみよう。そのために熱力学的な視点を取り入れる。まず $0 \leq x \leq 1$ とし次の関数

$$\eta(x) = -x \log x$$

を導入する。密度行列は

$$\rho = \sum_i \lambda_i |\phi_i\rangle \langle \phi_i| = \sum_i \langle \phi_i | \rho | \phi_i \rangle |\phi_i\rangle \langle \phi_i|$$

とかけるから式 7.11 を用いて式 7.12 から

$$\begin{aligned}S(\rho) &= -\sum_i \lambda_i \log \lambda_i \\ &= \sum_i \eta(t \langle \phi_i | \rho_1 | \phi_i \rangle + (1-t) \langle \phi_i | \rho_2 | \phi_i \rangle) \\ &\geq t \sum_i \eta(\langle \phi_i | \rho_1 | \phi_i \rangle) + (1-t) \sum_i \eta(\langle \phi_i | \rho_2 | \phi_i \rangle) \\ &= tS(\rho_1) + (1-t)S(\rho_2)\end{aligned}$$

が成り立つ。

ここでの拘束条件 f は k 個の条件がある場合

$$g^{(k)} = -\text{Tr} [f^{(k)} \rho]$$

$$g = -\text{Tr} [\rho]$$

とする。例えば

$$f^{(1)} = \beta H, \quad g^{(1)} = \beta E$$

とすると、 $g^{(1)}$ は系のエネルギー期待値が E のカノニカル分布 Z を次のように表す。
量子論では外部から観測する効果を考えて

$$Z = g = -\text{Tr}(\rho) \quad (7.13)$$

また、エントロピーを

$$f = S = -\text{Tr}[\rho \log \rho] \quad (7.14)$$

として

式 7.41 から確率 $p(x)$ の汎関数である最適化関数を次のようにおく

$$\begin{aligned} L &= f + (\lambda - 1)g + \sum_k \lambda_k g^{(k)} \\ &= S - (\lambda - 1)\text{Tr}[\rho] - \sum_k \lambda_k \text{Tr} \left(f^{(k)} \rho \right) \end{aligned}$$

先と同様にこの関数 L の停留条件を考えればいいのだが、量子系の場合、非可換性があり、

$$[\rho, \delta\rho] \neq 0$$

であることに注意する。従って

$$\begin{aligned} \delta L &= -\text{Tr} \{ (\rho + \delta\rho) \log (\rho + \delta\rho) \} - (\lambda - 1)\text{Tr}(\rho + \delta\rho) - \sum_k \lambda_k \text{Tr} \left(f^{(k)} (\rho + \delta\rho) \right) \\ &\quad + \text{Tr} \{ \rho \log \rho \} - (\lambda - 1)\text{Tr}(\rho) - \sum_k \lambda_k \text{Tr} \left(f^{(k)} \rho \right) \\ &= \text{Tr} \{ \rho \log \rho \} - \text{Tr} \{ (\rho + \delta\rho) \log (\rho + \delta\rho) \} - (\lambda - 1)\text{Tr}(\delta\rho) - \sum_k \lambda_k \text{Tr} \left(f^{(k)} (\delta\rho) \right) \\ &= \text{Tr} \{ \rho \log \rho \} - \text{Tr} \{ (\rho + \delta\rho) \log \rho \} - \text{Tr} \{ (\rho + \delta\rho) \log (1 + \rho^{-1} \delta\rho) \} \\ &\quad - (\lambda - 1)\text{Tr}(\delta\rho) - \sum_k \lambda_k \text{Tr} \left(f^{(k)} (\delta\rho) \right) \\ &= -\text{Tr} \{ \delta\rho \log \rho \} - \text{Tr} \{ (\rho + \delta\rho) \log (1 + \rho^{-1} \delta\rho) \} \\ &\quad - (\lambda - 1)\text{Tr}(\delta\rho) - \sum_k \lambda_k \text{Tr} \left(f^{(k)} (\delta\rho) \right) \end{aligned}$$

ここで、第 2 項 $\text{Tr} \{ (\rho + \delta\rho) \log (1 + \rho^{-1} \delta\rho) \}$ をテーラー展開し、1 次のみをとると

$$\begin{aligned} \delta L &= -\text{Tr} \{ \delta\rho \log \rho \} - \text{Tr} \{ (\rho + \delta\rho) (1\rho^{-1} \delta\rho) \} - (\lambda - 1)\text{Tr}(\delta\rho) - \sum_k \lambda_k \text{Tr} \left(f^{(k)} (\delta\rho) \right) \\ &= -\text{Tr} \{ \delta\rho \log \rho \} - \lambda \text{Tr} \delta\rho - \sum_k \lambda_k \text{Tr} \left(f^{(k)} (\delta\rho) \right) \\ &= \text{Tr} \left\{ \left(-\log \rho - \lambda - \sum_k \lambda_k f^{(k)} \right) \delta\rho \right\} \end{aligned}$$

とまとめることができる。よって $\delta L = 0$ から

$$\log \rho = -\lambda - \sum_k \lambda_k f^{(k)}$$

これを式 7.13 に代入すると

$$Z = \text{Tr}[\rho] = \text{Tr} \exp \left(-\sum_k \lambda_k f^{(k)} \right)$$

または

$$\rho = \exp\left(-\sum_k \lambda_k f^{(k)}\right)$$

を得る。

次に式 1.64 から混合状態の例として温度 $T = 1/\beta$ のカノニカル分布から密度行列を考えよう。

ハミルトニアン H が与えられれば第 3 部の熱統計力学で見たように分配関数を用いて密度演算子は次のようになる。

$$\rho_{tot} = \frac{e^{-\beta H}}{Z} \quad (7.15)$$

式 7.8 から分配関数 Z は次のように自由エネルギー F で与えることができる。

$$\begin{aligned} Z &= \langle e^{-\beta H} \rangle \\ &= \text{Tr}_{\mathcal{H}_{tot}} [e^{-\beta H} \cdot \rho_{tot}] = e^{-\beta F} \end{aligned} \quad (7.16)$$

ただし、

$$\begin{aligned} F &= -\frac{1}{\beta} \log Z = -T \log Z \\ E &= \frac{1}{Z} \text{Tr}_{\mathcal{H}_{tot}} [H e^{-\beta H}] \end{aligned}$$

という関係がある。さらに

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \beta} (\log Z) &= \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = \frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial \beta} (\text{Tr}_{\mathcal{H}_{tot}} [e^{-\beta H} \cdot \rho_{tot}]) \\ &= -\frac{1}{Z} (\text{Tr}_{\mathcal{H}_{tot}} [H e^{-\beta H}]) = -E \end{aligned}$$

となることを用いて

$$\begin{aligned} S_{tot} &= -\frac{\partial F}{\partial T} = -\frac{\partial F}{\partial (1/\beta)} = \beta^2 \frac{\partial F}{\partial \beta} \\ &= -\beta^2 \left(\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \beta} (\log Z) + \log Z \frac{\partial}{\partial \beta} \left(\frac{1}{\beta} \right) \right) \\ &= \frac{1}{Z} (\text{Tr}_{\mathcal{H}_{tot}} [\beta H e^{-\beta H}] + Z \log Z) \\ &= \beta (E - F) \end{aligned} \quad (7.17)$$

とかける。よってよく知られた

$$F = E - TS$$

という熱力学の自由エネルギーの式が得られる。

しかし、式 7.17 は密度行列を用いて式 7.15 から

$$\begin{aligned} S_{tot} &= \frac{1}{Z} (\text{Tr}_{\mathcal{H}_{tot}} [\beta H e^{-\beta H}] + Z \log Z) \\ &= \text{Tr}_{\mathcal{H}_{tot}} [\beta H] + \log [\text{Tr}_{\mathcal{H}_{tot}} [e^{-\beta H} \cdot \rho_{tot}]] \\ &= \text{Tr}_{\mathcal{H}_{tot}} [\beta H] + \log [\text{Tr}_{\mathcal{H}_{tot}} [e^{-\beta H} \cdot e^I \cdot \rho_{tot}]] \\ &= \text{Tr}_{\mathcal{H}_{tot}} [\beta H] - \text{Tr}_{\mathcal{H}_{tot}} [\beta H] - \text{Tr}_{\mathcal{H}_{tot}} [\rho_{tot} \log \rho_{tot}] \\ &= -\text{Tr}_{\mathcal{H}_{tot}} [\rho_{tot} \log \rho_{tot}] \end{aligned} \quad (7.18)$$

これが密度行列に対する **von_Neumann** エントロピーである。
 以上、見てきたところでは古典的なエントロピーと量子的なエントロピーに大きな差がないように見える。
 しかし、実際に状態数を数え上げることを考えると、同じようにはいかない。
 決定的な差は量子論には次に見る纏れた状態というのがある。

7.2 エンタングルメント [92][93]

7.2.1 もつれの尺度 [93]

エンタングルメントエントロピーとは次の図のように部分系 A にいる観測者が、 A の外の環境 B と情報をやりとりする時、観測者が外界 B の情報を観測せずに、領域 A の中から B の情報を推察する情報量の尺度といえる

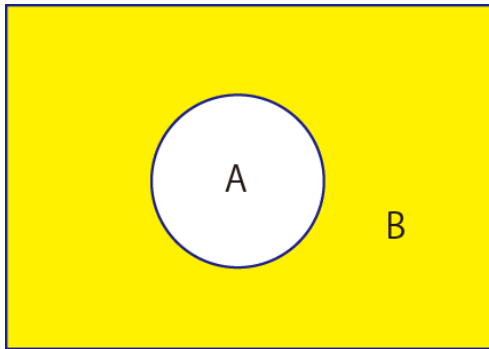


図 7.1: 領域 A から領域 B の情報を推察

B を観測しないで、 B の情報を得ることは矛盾しているように見えるが、全体のルールを設定すれば A を観測することで B の情報を知ることができる。
 まず、カラムだけのユニタリー行列 (列ベクトル) を $U_n(a), V_n(b)$ として次の基底を定義する。

$$|U_n\rangle = \sum U_n(a) |a\rangle$$

$$|V_n\rangle = \sum V_n(b) |b\rangle$$

特異値分解をつかうと次の関数をつくれれば

$$\Psi(a, b) = \sum_n U_n(a) \sqrt{\lambda_n} V_n(b) \tag{7.19}$$

全体の波動関数をこの関数で次のように展開できた。

$$|\Psi\rangle = \sum_{a,b} \Psi(a, b) |a\rangle \otimes |b\rangle$$

つまり、schmit 分解により

$$|\Psi\rangle = \sum_{a,b} \sum_n U_n(a) \sqrt{\lambda_n} V_n(b) |a\rangle \otimes |b\rangle$$

$$= \sum_n \sqrt{\lambda_n} |U_n\rangle \otimes |V_n\rangle$$

となる。ここで得られる特異値 $\sqrt{\lambda_n}$ がもつれ (エンタングルド) の尺度になっている。
 これは次のように確かめることができる。

既に式 3.26 で A の密度行列は B のトレースで決まったから、これを関数表現に直し、それぞれの領域の密度行列を次で定義する。式 7.19 から

$$\begin{aligned}\rho_A(a, a') &= \text{Tr}_B [|V_n\rangle \langle V_n| |U_n\rangle \langle U_n|] = \sum_b \Psi(a, b) \bar{\Psi}(a', b) = \sum_n U_n(a) \lambda_n \bar{U}_n(a') \\ \rho_B(b, b') &= \text{Tr}_A [|U_n\rangle \langle U_n| |V_n\rangle \langle V_n|] = \sum_a \Psi(a, b) \bar{\Psi}(a, b') = \sum_n V_n(b) \lambda_n \bar{V}_n(b')\end{aligned}\quad (7.20)$$

これは密度行列 ρ_A, ρ_B の固有値はどちらも λ_n になっていることがわかる。

$$\begin{aligned}\rho_A |U_n\rangle &= \lambda_n |U_n\rangle \\ \rho_B |V_n\rangle &= \lambda_n |V_n\rangle\end{aligned}\quad (7.21)$$

おもしろいことにこれは上図の境界を共有していることが関係している。

$$\partial A = \partial B \quad (7.22)$$

境界面が重要な働きをするので次にこれを考えてみよう。

7.2.2 Renyi のエントロピー [93]

量子系でエントロピーを考えるための場を準備する。そのために有限次元のヒルベルト空間 \mathcal{H}_α を考え、 α をこのインデックスとする。後にあつかうキュービットのヒルベルト空間がこれに対応する。

$$\mathcal{H}_\alpha \simeq \mathcal{H}_{\text{qubit}}$$

重要な点は量子力学的な純粋状態 $|\Psi\rangle$ が次のようにこの \mathcal{H}_α のテンソル積で表されることである。

$$|\Psi\rangle \in \otimes_\alpha \mathcal{H}_\alpha$$

そこで図のようにインデックス α に対応した間隔 ϵ の格子点上の領域を考え、この格子点の情報から $|\Psi\rangle$ を定義できるとする。

そして、領域内を A 、領域外を A^C とし、その境界を ∂A で表す。この時、

$$\otimes_\alpha \mathcal{H}_\alpha \simeq \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_{A^C}$$

のようにテンソル積で表すことができる時、境界 ∂A はエンタングルメント表面 (entangling_surface) という。

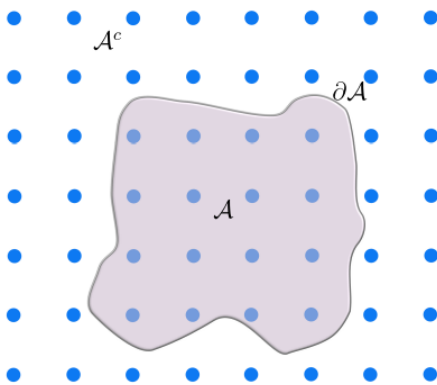


図 7.2: [92] より：格子空間上に領域 A とその外部をつくる

この時、ヒルベルト空間は分割されて2つのテンソル空間になったと考える。
前節の観測の理論から領域 A の密度演算子は外部の A^C での対角和で表される

$$\rho_A = \text{Tr}_{A^C} (|\Psi\rangle\langle\Psi|)$$

この定義で領域 A での状態を自由度を観測することが領域 A^C で何が起きているかには全く依存しないと仮定する。

従って、もし $|\Psi\rangle$ のテンソル積の因子が決定できないであれば \mathcal{H}_A は純粋状態を保っていることになる。

この場合は量子的なもつれ（エンタングルメント）状態として \mathcal{H}_A の全ての可能性の確率を数え上げることになる。

これは前節のフォン・ノイマンのエントロピーの考えを借り、エンタングルメントのエントロピーを次のように定義する。

$$S_A = -\text{Tr}_A (\rho_A \log \rho_A) \quad (7.23)$$

この定義は B に依存していない。しかし、式 7.20 から

$$S_B = -\text{Tr}_B (\rho_B \log \rho_B) \quad (7.24)$$

であるが、密度行列 ρ_A は固有値 λ_i を持つ。固有値とトレースの性質と式 7.20 から

$$S_A = -\sum_i (\lambda_i \log \lambda_i) = S_B$$

とかくこともできる。純粋状態で次節で確認するが $S_B = S_A$ となること意味する。

これは特徴的なパラメタ q を持つ次の **Renyi_entropies** と呼ばれるものの1つである。あえて、パラメタを1つ増やしたことによって混合状態と純粋状態を合わせて見ることができる。

縮約された密度行列を用いて次のように表される。

$$S_A^{(q)} = \frac{1}{1-q} \log \text{Tr}_A (\rho_A^q) = \frac{1}{1-q} \log \left(\sum_i \lambda_i^q \right) \quad (7.25)$$

q は正準状態であれば

$$q \in \mathbb{Z}_+$$

であるが

$$q \in \mathbb{R}_+$$

に拡張できる。とくにここでの S_A は

$$S_A = \lim_{q \rightarrow 1} S_A^{(q)} \quad (7.26)$$

となる。純粋状態の密度行列が

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$$

であれば

$$\text{Tr} (\rho_\psi) = 1$$

であり、

$$\text{Tr} (\rho_\psi^2) = 1$$

になるが、混合状態では

$$\text{Tr} (\rho_\psi^2) < 1$$

になるので Renyi_entropies は状態の純粋度を測るのに適している。

7.2.3 エントロピー一定原理

量子論的な純粋状態は補空間の固有値の式 7.26 は正值積分の **RenyiIndex** q について積分したものを要求をしていると考える。

そこで天下一的に q で微分した次の **modular_entropy** を定義する。

$$\tilde{S}_A^{(q)} \equiv \frac{1}{q^2} \partial_q \left(\frac{q-1}{q} S_A^{(q)} \right) \quad (7.27)$$

これは興味あることに古典的な熱力学において温度を

$$T \sim \frac{1}{q} \quad (7.28)$$

のようにみなすと Renyi のエントロピーよりも直感的に古典的なエントロピーの概念に近い。

これをみるために、次のように modular ハミルトニアン \mathcal{K} を定義しておく。

ただし、縮約済みであるとする。

$$\mathcal{K}_A = -\log \rho_A \quad (7.29)$$

規格化のための因子 $1-q$ は既に式 7.25 にあるので式 7.28、7.27 より、Renyi のエントロピーは

$$S_A^{(q)} = -\frac{1}{q-1} \log T_r (e^{-q\mathcal{K}_A})$$

となる。一方で modular エントロピーは

$$\tilde{S}_A^{(q)} = -\frac{1}{q^2} \partial_q \left(\frac{1}{q} \log T_r (e^{-q\mathcal{K}_A}) \right)$$

となる。

ここに熱力学の公式を用いると自由エネルギーとエントロピーは

$$F = -T \log Z = -\frac{1}{\beta} \log T_r (e^{-\beta H})$$

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = -\beta^2 \partial_\beta \left(\frac{1}{\beta} \log T_r (e^{-\beta H}) \right)$$

で与えられたことを考えれば modular エントロピーは $q \sim 1/T$ にそのまま対応していることがわかる。

これから modular エントロピーは重力の双対性下で起きている現象をホログラフィックな双対性でおきる現象に置き換えて理解するための示唆が多く含まれている。

しかし、重要な点はこれらのエントロピーの状態の数として数えているのが ρ_A の密度行列の固有値であることである。

これから領域 A の密度行列 ρ_A かそれ以外の領域 A^C の密度行列 ρ_{A^C} の分けられた行列に依存するのではない。エンタングルドな状態を変化させるのは共通の領域

$$A \cup A^C$$

の上で同時にユニタリー化できるかに唯一依存する。

よって量子論的なエントロピーは体積ではなく、境界面の面積が重要になることが示唆される。

前節で考察したように、全体の密度行列は純粋状態で

$$|\Psi\rangle\langle\Psi|$$

であり、シュミットの直交化により

$$|\Psi\rangle = \sum_i \lambda_i |\alpha_i\rangle_A |\beta_i\rangle_{A^C}$$

のように表すことができた。

しかし、純粋状態であるためには $|\alpha_i\rangle_A, |\beta_i\rangle_{A^c}$ の固有値 ρ_A, ρ_{A^c} は同じでないといけない。
よって

$$\text{Tr}_A(\rho_A^q) = \text{Tr}_{A^c}(\rho_{A^c}^q)$$

が成り立つ。従って全ての q においてエンタングルメントエントロピーは互いの補空間のエントロピーと等しい

$$S_A^{(q)} = S_{A^c}^{(q)}$$

これは熱力学的なエントロピーと明確な相違点である。

つまり、境界内外で同じ固有値を共有しているときエントロピーは不変で可逆になる。

さらに境界面の面積はどちらも共有しているのでエントロピーがこの境界面の面積を表していると考えてよい。物理的な情報はこの境界面でのみやりとりされていることになる。決して遠隔的なやりとりがあるわけではなく、これは相対論の考え方と合致する。

これをエンタングルメントエントロピー—一定原理と呼ぶことにする。

7.2.4 エンタングルメントエントロピー

前節で定義したエンタングルメントの状態は第 10 部の量子コンピューターのところで量子回路のゲートの 1 つとして組み込まれる。量子論の本質的な部分の 1 つになる。

そこで一般に量子多体系を考えて、具体的に考察を深めよう。

これを部分系 A, B を次の図のように重複がないように分ける。

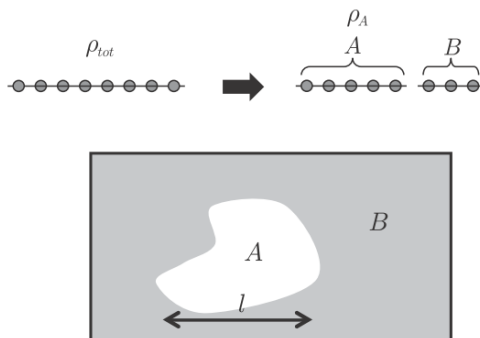


図 7.3: [81] より：ヒルベルト空間の分割

この時、トータルなヒルベルト空間 \mathcal{H}_{tot} は次のように直積でかける。

$$\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$$

これをスピン系を例に考えてみよう。直積は行列の縦横共に積で増えていくので実際に計算する場合はいくつかの工夫が必要になる。

全体で n 個のスピンを考え A 系を k 個のスピンにとれば部分系 B は $n - k$ 個のスピンになる。

k の取り方は任意である。しかし、実際にはこれを決めて、前節から A に制限された密度行列をつくると

$$\rho_A = \text{Tr}_{\mathcal{H}_B}[\rho_{tot}]$$

で定義する。これは

$$\dim \rho_{tot} > \dim \rho_A$$

であり、部分トレースを取ることを意味する。

ただし、このトレースは \mathcal{H}_B の領域で取るわけだ。

これで A の密度行列が決まると A の任意の物理量（期待値）が次のように求めることができる。

$$\langle O_A \rangle = \text{Tr}_{\mathcal{H}_{tot}} [O_A \rho_{tot}] = \text{Tr}_{\mathcal{H}_{tot}} [O_A \text{Tr}_{\mathcal{H}_B} [\rho_{tot}]] = \text{Tr}_{\mathcal{H}_{tot}} [O_A \rho_A]$$

この時 A に制限された密度行列 ρ_A に対するエントロピーが 7.23 から

$$S_A = -\text{Tr}_{\mathcal{H}_A} [\rho_A \log \rho_A] \quad (7.30)$$

となった。

7.2.5 エントロピー計算例

エンタングルメントエントロピーの計算例を見るために 2 つの電子スピンの系を考えよう。はじめに次の全体系の波動関数を考える。

$$|\Psi\rangle = \cos\theta |0\rangle_A |1\rangle_B + \sin\theta |1\rangle_A |0\rangle_B \quad (7.31)$$

実際に計算する場合は広大な行列の部分的な領域を拾うことになる。この時

$$\langle 0|1\rangle = \langle 1|0\rangle = 0, \quad {}_A\langle 1|1\rangle_B = {}_A\langle 0|0\rangle_B = 0$$

となるので、

$$\begin{aligned} \rho_{tot} &= |\Psi\rangle\langle\Psi| \\ &= (\cos\theta |0\rangle_A |1\rangle_B + \sin\theta |1\rangle_A |0\rangle_B) (\cos\theta {}_A\langle 0|_B \langle 1| + \sin\theta {}_A\langle 1|_B \langle 0|) \\ &= \cos^2\theta |0\rangle_A |1\rangle_{BA} \langle 0|_B \langle 1| + \sin^2\theta |1\rangle_A |0\rangle_{BA} \langle 1|_B \langle 0| \\ &\quad + \cos\theta \sin\theta |0\rangle_A |1\rangle_{BA} \langle 1|_B \langle 0| + \sin\theta \cos\theta |1\rangle_A |0\rangle_{BA} \langle 0|_B \langle 1| \end{aligned}$$

となる。従って A に制限した密度行列は

$$\begin{aligned} \rho_A &= \text{Tr}_B |\Psi\rangle\langle\Psi| \\ &= {}_B\langle 0|\Psi\rangle\langle\Psi|0\rangle_B + {}_B\langle 1|\Psi\rangle\langle\Psi|1\rangle_B \\ &= \cos^2\theta |0\rangle_{AA} \langle 0| + \sin^2\theta |1\rangle_{AA} \langle 1| \end{aligned}$$

となり、

$$\text{Tr} [\rho_A^2] = 1$$

の純粋条件を満たす。

これからエンタングルドエントロピーを計算すると式 7.30 から対数については 0 にならない項のみを残し、

$$\begin{aligned} S_A &= -\text{Tr}_{\mathcal{H}_A} [\rho_A \log \rho_A] \\ &= -\langle 1| (\cos^2\theta |0\rangle_{AA} \langle 0| \log (\cos^2\theta |0\rangle_{AA} \langle 0|) + \sin^2\theta |1\rangle_{AA} \langle 1| \log (\sin^2\theta |1\rangle_{AA} \langle 1|)) |1\rangle \\ &\quad - \langle 0| (\cos^2\theta |0\rangle_{AA} \langle 0| \log (\cos^2\theta) + \sin^2\theta |1\rangle_{AA} \langle 1| \log (\sin^2\theta)) |0\rangle \\ &= -(\cos^2\theta \log (\cos^2\theta) + \sin^2\theta \log (\sin^2\theta)) \end{aligned}$$

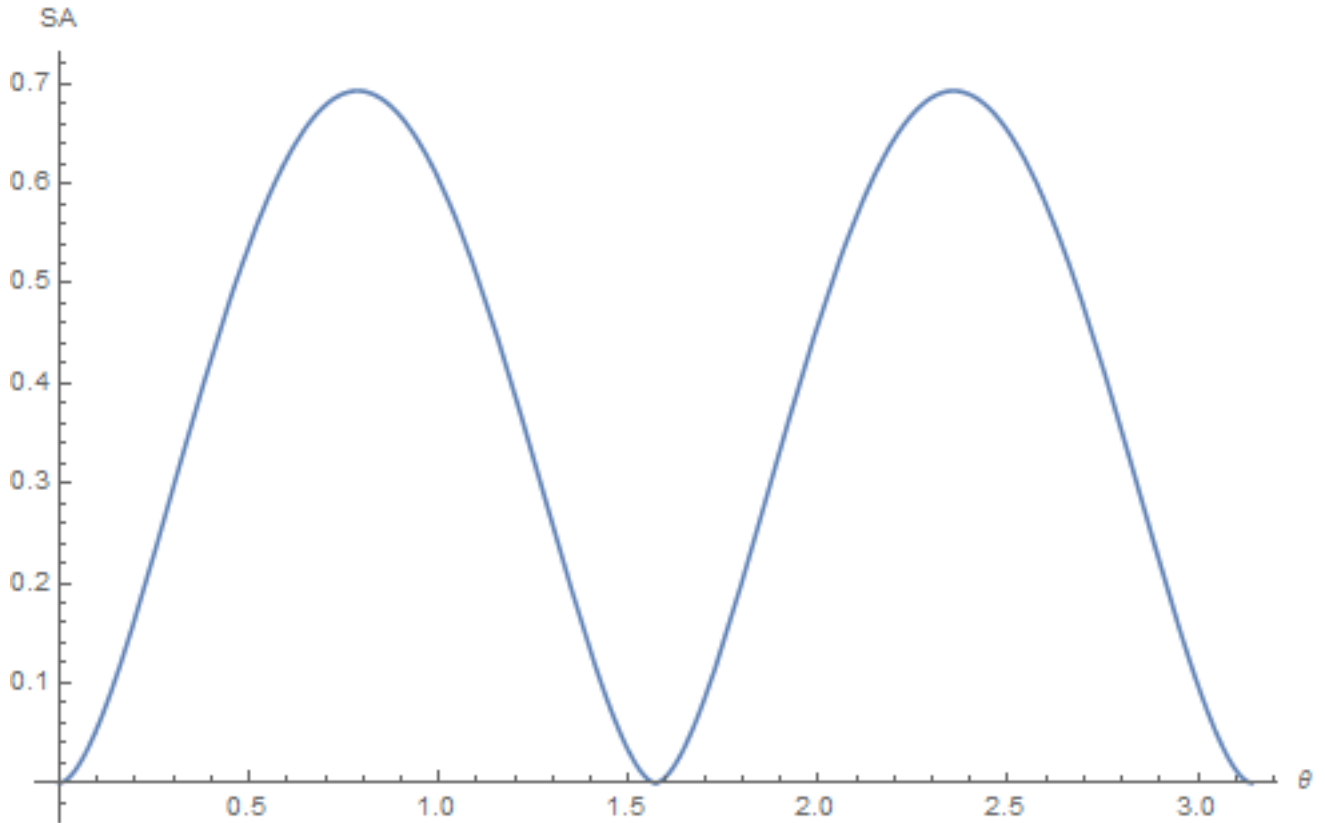


図 7.4: S_A のグラフ

この S_A は上グラフのように $\theta = \pi/4, 3\pi/4 (0 \leq \theta \leq \pi)$ の所に最大値をとり、 $\theta = \pi/2$ で最小値 0 を取ここで回転角 θ が意味を持つようになり、行列の対角成分に変化を与えている。

エントロピーが最大になるときの S_A は式 7.31 から

$\theta = \pi/4$ の時に

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle_A |1\rangle_B + |1\rangle_A |0\rangle_B)$$

$\theta = 3\pi/4$ の時に

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (-|0\rangle_A |1\rangle_B + |1\rangle_A |0\rangle_B)$$

この時のエンタングルメントエントロピーは共に $\log 2$ であり、ヒルベルト空間の次元が 2 であることを意味する。

さらに A,B の上向き下向きが分かれていて、角運動量が保存されている。

これから、このペアを特別に **EPR** ペア、ベルペアと呼ぶことがある。

重要なのはこれは少なくとも今の議論の中では物理的な距離に依存しないことで

$|0\rangle_A |1\rangle_B$ と $|1\rangle_A |0\rangle_B$ は同じ確率でどちらかを観測する。

これは非局所的な相関がもっとも強く、それがエントロピーを大きくしている。

一方で $\theta = \pi/2$ の場合は

$$|\Psi\rangle = |1\rangle_A |0\rangle_B$$

となり、エンタングルメントが完全に解消される。

これ以外の θ ではエンタングルメントした状態の重みは等しく分配されない。

これが Renyi_entropies が状態の純粋度を測るのに対して、

エンタングルメントエントロピーが $|A\rangle |B\rangle$ の相関を測っている。

ただし、エンタングルメントな状態は純粋状態を保つことに留意する。

よって純粋状態の場合で量子エンタングルメントが存在しないときは

$$|\Psi\rangle = |\alpha\rangle_A \otimes |\beta\rangle_B$$

のように表現し、混合状態で量子エンタングルメントが存在しないときは密度行列で

$$\rho_{tot} = \sum_i p_i \rho_A^i \otimes \rho_B^i$$

のように統計的確率 p_i がある

式 7.25 でしたようにエンタングルドエントロピーもパラメタ q を増やして拡張することができて、Renyi と Tsallis によって次のようなエントロピーが考えられた。

Renyi エントロピーは

$$S_A^{R(q)} = \frac{\log(\text{Tr}_{\mathcal{H}_A}(\rho_A)^q)}{1-q}$$

Tsallis エントロピーは

$$S_A^{R(q)} = \frac{\log(\text{Tr}_{\mathcal{H}_A}(\rho_A)^q)}{1-q}$$

であり、どちらも $q \rightarrow 1$ の極限でエンタングルドエントロピー S_A になる。

特に 2 進法で状態を表す場合の必要最低限な桁数 (ビット数) の期待値を情報エントロピー $S(p)$ という。

$$S(p) = -\sum_{i=1}^n p_i \log_2 p_i$$

7.3 情報エントロピー

7.3.1 Shannon のエントロピー

情報量のような古典的な離散系を考える。ラベル $i = 1, 2, \dots, m$ で指定される状態を考え、その状態が実現する確率を $\{p_i\}$ とすると、確率の保存則は

$$\sum_{i=1}^m p_i = 1 \tag{7.32}$$

と表される。単純で重要なことだが、確率は未来に対してしか意味をもたない。既に起きた事象については、おきたことが全てになる。同時に、情報を得るということは既知の知識に加えて新しい知識を得る時に意味をもつ。既知なことが繰り返し起きる状況においては情報量としては多くならない。つまり我々が情報を得るとエントロピーは減少する。

この性質をもつ情報量 (自己情報量) γ を表すのに

$$\gamma(p_i) = -\log p_i \tag{7.33}$$

と定義することは妥当と思われる。

それは情報が確率 p_i に対して単調な連続関数であることと、全情報量は個々の情報量の和になるべきだからである。

つまり、2 つの独立事象の確率が p, q であるとする、同時に起こる確率が pq の積になるから

$$\gamma(pq) = \gamma(p) + \gamma(q) \tag{7.34}$$

を満たす必要がある。これは対数関数であれば満たされる。

さらに確率の保存が成り立つためには

$$q = 1 - \epsilon \leq 1$$

とおくと、

$$\gamma(pq) = \gamma(p(1-\epsilon)) = \gamma(p) + \gamma(1-\epsilon)$$

となるから、式 7.34 より

$$\begin{aligned} \frac{d}{dp}\gamma(p) &= \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \frac{\gamma(p) - \gamma(p-\epsilon p)}{\epsilon p} \\ &= \frac{1}{p} \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \frac{\gamma(p) - \gamma(p(1-\epsilon))}{\epsilon} \\ &= -\frac{1}{p} \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \frac{\gamma(1-\epsilon)}{\epsilon} \\ &= -\frac{A}{p} \end{aligned} \tag{7.35}$$

と負符号が自然に出てくる。ただし

$$A = \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \frac{\gamma(1-\epsilon)}{\epsilon} \tag{7.36}$$

であり、これは情報の尺度を表す正値定数である。

情報系の場合はこれを単純に 1 とすれば、微分方程式 7.35 はすぐに解けて

$$\gamma(p) = -\log p + B$$

であり、

$$\gamma(1) = 0$$

とすれば $B = 0$ であり、式 7.33 が示された。

情報エントロピー S はこの情報量の期待値と考えればよい。すなわち、

$$S(p_1, \dots, p_m) = \langle \gamma \rangle = \sum_{i=1}^m p_i \gamma(p_i) = -\sum_{i=1}^m p_i \log p_i \tag{7.37}$$

先に情報量を p_i で定義し、さらに確率 p_i をかけているので対数を展開すれば p_i のベキ和である。

これを **Shannon** のエントロピーという。通常対数の底は e を取る。情報理論では 2 をとる。

この詳細は後節で述べる。

従ってまれにしか起こらない事象のエントロピーは非常に小さくなる。

平均化されることで情報量にさらに微小係数がかかることには注意がいる。

$$\lim_{\epsilon \rightarrow +0} \epsilon \log \epsilon = 0$$

この $-x \log x$ 型の関数は物理ではしばしば登場する。 $-\log x$ と異なり単調増加ではない。

$x = 0.367879$ で同じ値の極値をとる

$-\log x$ と共にグラフの形を示しておく

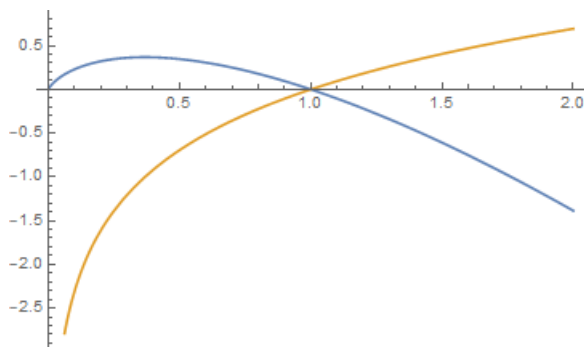


図 7.5: $-x \log x, -\log x$ のグラフ

7.3.2 情報エントロピー

エンタングルド・エントロピーは情報の単位としても成立する。後部の量子コンピューターの基本単位である。

これを示すために前節で扱った情報エントロピー (シャノンのエントロピー) を考えよう。

情報理論の立場でここでは状態を 2 進法で表すことにする。

n 種類の情報が (p_1, p_2, \dots, p_n) の確率で現れたとする。ビット数の期待値として N 回測定する場合は 2 進法で状態を表す場合に最低限必要な桁数の N 回測定した場合の和を M として

$$S(p) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{M}{N}$$

で定義する。例えば 1 種類であれば $p_1 = 1, p_2 = p_3 = \dots = p_n = 0$ だから 2 進法の 0 のみ、つまり 1 つでいいことになる。

よって $M = 1, S(p) = 0$ である。もっとも $N \rightarrow \infty$ があるので M が有限になれば、エントロピーは 0 である。

逆に全てが同じ数だけあれば場合、 $N \rightarrow \infty$ で n 種類あるから全ての確率が等しく

$$p_1 = p_2 = \dots = p_n = \frac{1}{n}$$

となる。この場合は n 種類の状態を全て表すためには粒子を取り出す回数で割り、 (M/N) 個のコインの表裏で n を表すことに等しいから

$$2^{(M/N)} = n \quad (N \rightarrow \infty)$$

とおける。この式の両辺の 2 を底として対数をとると $N \rightarrow \infty$ の時に

$$\frac{M}{N} \log_2 2 = \log_2 n$$

$$\frac{M}{N} = \log_2 n$$

となるのでエントロピーは

$$S(p) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{M}{N} = \log_2 n \quad (7.38)$$

となる。

我々がある情報を得ればエントロピーは減少する。そこでシャノンの処方に従って次を考える。

はじめに、ある事象 E が起こった時に受け取る選択情報量 $I(E)$ を事象 E が起きる確率 $p(E)$ を用いて

$$I(E) \equiv \log_2 \frac{1}{p(E)} = -\log_2 p(E) \quad (7.39)$$

で定義する。つまり確率が大きくなると選情報量 (橙色) は次の図のように減少していく。

$$\left\{ -\frac{x \log(x)}{\log(2)}, -\frac{\log(x)}{\log(2)}, -\frac{\log(x)}{\log(2)} - \frac{1}{\log(2)} \right\}$$

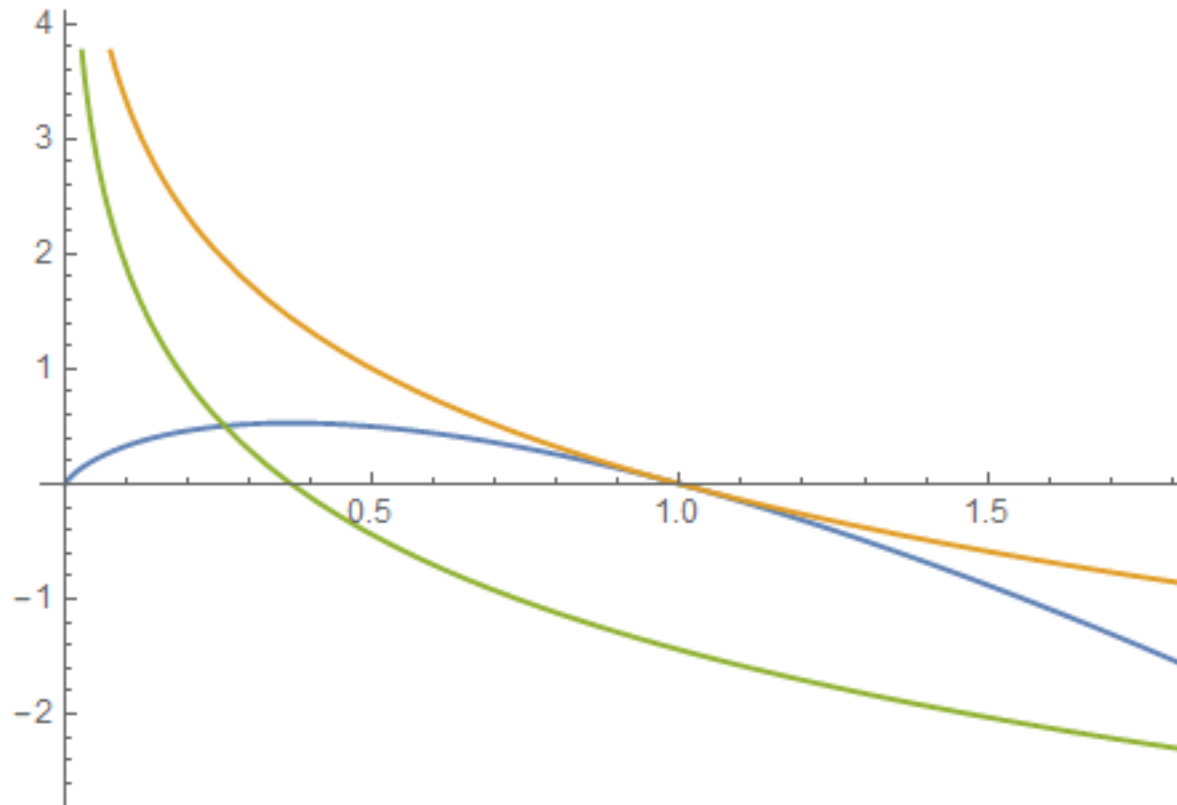


図 7.6: $-\log_2 x$, $-x \log_2 x$, とその微分のグラフ

従って情報エントロピーを求めるために、シャノンは選択情報量にその確率をかけて、全ての場合で足し合わせる。

つまり、情報量の平均期待値を情報エントロピーとして

$$S(p(E)) \equiv - \sum_i^n p_i(E) \log_2 p_i(E) \quad (7.40)$$

で定義した。これが前節の式 7.37 の背景である。

このスカラー的な確率を行列としての密度行列に拡張し、量子論に応用したのが式 7.18 のフォンノイマンエントロピーである。

$$S_{Neumann} = -\text{Tr}_{\mathcal{H}_{tot}} [\rho_{tot} \log \rho_{tot}]$$

古典的な熱力学的エントロピーは微視的状态数に \log をつけて定義されていたが例えば N 個の粒子にラベルをつけると

場合の数 W は $N = \sum N_i$ として

$$W = \frac{N!}{N_1! N_2! \cdots N_n!}$$

スターリングの公式から N が大きいとき、 $\log N! = N \log N - N$ だから $p_i = N_i/N$ として

$$\log W = N \log N - \sum_{i=1}^n N_i \log N_i = -N \sum_{i=1}^n p_i \log p_i$$

これを粒子を取り出す回数 N で割れば情報エントロピーが得られる。

これに対し、古典的なエントロピーは

$$S = k_B \log W$$

ボルツマン定数はエネルギー等分配則

$$E = \frac{1}{2} k_B T$$

で定義された、自由度あたりのエネルギーと平衡温度の比である。

これが情報論や量子論では非常にシンプルになるのは興味深い。

確率 $p(E)$ は

$$\sum_{i=1}^m p_i = 1$$

を満たすので単純に

$$p_i = \frac{1}{m}$$

とおける場合を考えれば式 7.40 より

$$S = - \sum_{i=1}^m \frac{1}{m} \log \frac{1}{m} = \log m$$

となる。これは式 7.42 の関係に等しい。

熱統計学での平衡温度による等分配の法則が面白いことに量子論の粗視化に相当していることになる。

これから情報エントロピーが最大になるための確率 p_i の条件を求めてみるのは教育的である。

Lagrange の未定乗数法をつかう。 $k = 1, 2, \dots, m$ として、式 7.37 から

$$f(p_1, p_2, \dots, p_m) = S = - \sum_k p_k \log p_k$$

M 個の拘束条件として

$$\sum_{i=1}^m p_i f_i^{(k)} = g^{(k)}$$

とおくと、確率の和が 1 であることから、拘束条件として $g = 0$ をつくと

$$g(p_1, p_2, \dots, p_n) = \sum_k p_k - 1$$

とすればよい。

この時、次の関数 L の停留条件を求めればよい。Lagrange の未定乗数を λ として

$$L = f + \lambda g \tag{7.41}$$

に対応して

$$L = S - (\lambda - 1) \sum p_i - \sum_k \lambda_k \sum_i p_i f_i^{(k)}$$

を考え、これを最適化関数とする。この関数の停留条件

$$\frac{\partial}{\partial p_i} L = -\log p_i - 1 - (\lambda - 1) - \sum_k \lambda_k f_i^{(k)} = 0$$

から

$$p_i = \exp \left(-\lambda - \sum_k \lambda_k f_i^{(k)} \right)$$

がエントロピーを最大にする確率になる。

これを確率保存の式に入れると

$$\sum_{i=1}^m \exp\left(-\sum \lambda_k f_i^{(k)}\right) = e^\lambda = Z(\lambda_1, \lambda_2 \cdots \lambda_M)$$

となり、この Z が系の分配関数になる。

つまり、カノニカル分布は拘束条件が1つで $M=1$ 、 $\lambda_1 = \beta$ 、 $f_i^{(1)} = E_i$ の場合で $g^{(1)}$ は確率がかかるのでちょうどエネルギーの期待値であることがわかる。一般には

$$g^{(k)} = \sum_{i=1}^m p_i f_i^{(k)} = \frac{1}{Z} \sum_{i=1}^m f_i^{(k)} \exp\left(-\sum \lambda_k f_i^{(k)}\right) = -\frac{\partial}{\partial \lambda_k} \log Z$$

が成り立つ。

例えば拘束条件が簡単な場合には

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial p_i} L &= \frac{\partial}{\partial p_i} \left(-\sum_{k=1}^m p_k \log p_k + \lambda \left(\sum_{k=1}^m p_k - 1 \right) \right) = 0 \\ &-(1 + \log p_k) + \lambda = 0 \end{aligned}$$

を得る。これは p_k の値が全て等しいことを表すので式 7.32 より

$$p_k = \frac{1}{m}$$

の時、エントロピーが最大になる。この時、

$$S_{Max} = -\sum_{i=1}^m \frac{1}{m} \log \frac{1}{m} = \log m \quad (7.42)$$

となる。つまり、先の古典系でのエントロピーである。

逆に量子空間は各試行の確率が決まっていなとみなすことができる。

いわば量子論の確率の期待値が古典的な確率である。

7.3.3 連続関数のエントロピー [93]

次に、古典的な連続変数 x に対する確率密度関数を $p(x)$ とすると情報エントロピーは

$$S = -\int_X dx p(x) \log p(x)$$

のように積分で表すことができる。ただし、 X は変数 x の定義域である。

ここで確率変数 x が平均 μ 、分散 σ とすると、この場合のエントロピー最大となる確率分布は

$$p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left\{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right\}$$

の正規分布であることもラグランジュの未定乗数法で確かめておこう。

この時の拘束条件は $-\infty < X < \infty$ として、確率の和が

$$\int_X dx p(x) = 1 \quad (7.43)$$

となり、さらに分散については

$$\int_X dx p(x) (x-\mu)^2 = \sigma^2 \quad (7.44)$$

となる。このもとでエントロピー

$$f = \int_{-\infty}^{\infty} dx (-p(x) \log p(x))$$

の最大値をとる $p(x)$ を決定する。そのためには Lagrange の未定乗数を λ_1, λ_2 として、次の最適化関数 L の停留条件を求めればよい。

$$L = f + \lambda_1 \left(\int_X dx p(x) (x - \mu)^2 - \sigma^2 \right) + \lambda_2 \left(\int_X dx p(x) - 1 \right)$$

これを次のように、やや天下りのだが、積分因子を出せるように定数を書き換える。

$$L = \int_{-\infty}^{\infty} dx \left\{ -p(x) \log p(x) - \kappa p(x) (x - \mu)^2 - (\lambda - 1)p(x) \right\}$$

よって停留条件は積分の中の関数を L' として

$$\frac{\partial}{\partial p} L' = -\log p(x) - \kappa(x - \mu)^2 - \lambda = 0 \quad (7.45)$$

を得る。よって

$$p(x) = e^{-\lambda} \exp \left\{ -\kappa(x - \mu)^2 \right\}$$

となる。式 7.43、7.44 に代入し、

$$e^{-\lambda} \frac{\sqrt{\pi}}{\kappa^{1/2}} = 1$$

$$e^{-\lambda} \frac{\sqrt{\pi}}{2\kappa^{3/2}} = \sigma^2$$

より

$$\kappa = \frac{1}{2\sigma^2}, \quad e^{-\lambda} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}$$

を得る。

7.4 エントロピーの凹性

全体系が A, B に分かれる場合について考える。

もし、系全体は純粋系であるとする、任意に A を選択したとしても

$$S_A = S_B \quad (7.46)$$

が成り立つ。つまり密度行列は共に

$$\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi| \quad (7.47)$$

である。これを示すには第 4 部みた Schmidt の分解を用いて Ψ を次のように固有値 λ_i^2 で展開できることを利用する。

$$|\Psi\rangle = \sum_{i=1}^M \lambda_i |\alpha_i\rangle_A |\beta_i\rangle_B$$

ただし、 M を \mathcal{H}_A と \mathcal{H}_B の次元のうち小さい方と約束する。

すると式 7.47 は ρ_A, ρ_B 共に $M \times M$ の固有値 λ_i^2 の行列になり、区別されない。

これから式 7.46 が成り立つことになる。

系の大きさがエントロピーと無関係であるところは、熱力学的なエントロピーと非常に異なる。

単に体積というところの場合、領域を A, B にみで分割しているので A が大きくなれば、 B が小さくなる。

それでも両者のエントロピーが等しい関係を維持する。したがって、エントロピーは大きさに無関係である。これは距離にも無関係になることから、EPR パダボックスにも関係し、今後、時空間との関係を考える必要がある。

固有値が区別されないということは純粋状態では観測と被観測が対等である。ことを意味する。

エントロピーに関与するのは A,B の境界を作っている表面積が重要になる。境界面は波動関数によって波のように揺らぐが古典的な水面波のように定常波ができると節の位置が決まる。これが固有値のイメージになる。前章で見た水面波の定常波では波源から波源の直線上にのみ節ができる。A の波源だけでは節ができない。

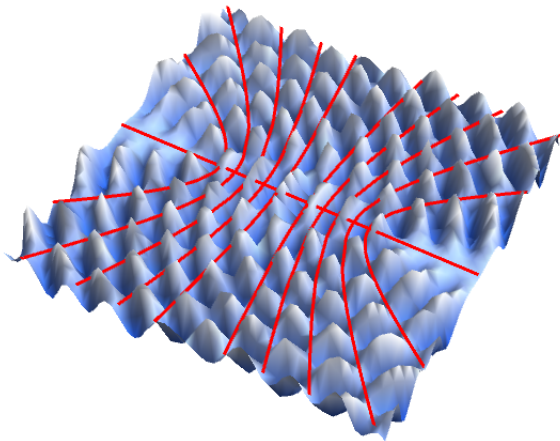


図 7.7: 水面波の波源から波源の直線上にのみ節ができる。

一方で全体系が混合状態の場合は一般に、 $S_A = S_B$ は成り立たない。この点ではいくつかの課題があり、後にこれを考察する。

ここでは系全体を

$$\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B \otimes \mathcal{H}_C$$

のように分ける。そして \mathcal{H}_C に関して対角和をとる $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ に制限された密度行列のエンタングルド・エントロピーを S_{AUB} とすると次の関係が成り立つ。

$$S_{AUBUC} + S_B \leq S_{AUB} + S_{BUC} \quad (7.48)$$

これを強劣加法性 (**Strong subadditivity**) という。

これを以下で示すが、一見するとエントロピー増大の法則と反対に見える。

つまり

$$S_{AUB} \leq S_A + S_B$$

が示唆され、制限した後のエントロピーの方が個々のエントロピーより小さい。

以下でこれを証明しよう。

はじめに簡単に A, B, C を数と考えるとこの式 7.48 を

$$S(A + B + C) + S(B) \leq S(A + B) + S(B + C)$$

と考え、

$$A = C = \frac{x - y}{2}, \quad B = y$$

とおくと、

$$\frac{S(x) + S(y)}{2} \leq S\left(\frac{x+y}{2}\right)$$

となるので関数 $S(x)$ は 2 点 x, y の中点の値の方が大きく、下に凹 (上に凸) の関数であることがわかる。これは先に登場したエントロピーの凹性 (Concave) という。

一般に全体系が混合状態であっても、新しく純粋状態のヒルベルト空間を直積すると全体として純粋状態をつくることができる。

先にみたように 1 次元量子系は Trotter 軸を加えた 2 次元古典系に変えられた。これを純粋化と呼ぶ。これから先の強劣加法性が C をもってくることによって純粋状態となったとすると

$$S_C = S_{A \cup B}$$

が成り立つ。しかし、 $A \cup C, B \cup C$ は純粋状態とは限らないのでエントロピーは大きくなり、

$$S_{A \cup C} + S_{B \cup C} \geq S_A + S_B \geq S_{A \cup B} \quad (7.49)$$

となる。さらに

$$\begin{aligned} S_{A \cup C} &\leq S_A + S_C \\ S_{B \cup C} &\leq S_B + S_C \end{aligned}$$

と表すことができる。

さらに

$$\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B \otimes \mathcal{H}_C \otimes \mathcal{H}_D$$

と拡張したヒルベルト空間が純粋状態であるとする

$$S_{A \cup B \cup C} = S_D$$

$$S_{B \cup C} = S_{A \cup D}$$

となるから式 7.48、

$$S_B \leq S_{A \cup B} + S_{B \cup C} - S_{A \cup B \cup C}$$

$$S_B + S_D \leq S_{A \cup B} + S_{A \cup D}$$

が得られる。ここで $S_D = 0$ とすると

$$S_B \leq S_{A \cup B} + S_A$$

以上から次の荒木・リーブの不等式が得られる。

$$|S_A - S_B| \leq S_{A \cup B} \leq S_A + S_B$$

が得られる。

この左側を荒木・リーブ不等式といい右側が先にも触れた劣加法性である。

また、相互情報量 (mutual_information) を $I(A : B)$ を次で定義する。

$$I(A : B) = S_A + S_B - S_{A \cup B} \geq 0$$

この時、強劣加法性が

$$I(A : B \cup C) \geq I(A : B)$$

相互情報量 $I(A : B)$ は部分系 A と B がどれだけエンタングルしているかの目安であり、非負をとる。

7.5 調和振動子

具体的にエンタングルドのイメージを持つために相互作用のある2つの調和振動子 A, B についてエンタングルメント・エントロピーを計算しよう。

ハミルトニアンは λ を相互作用の強さを表すパラメータにとり、

$$H = a^\dagger a + b^\dagger b + \lambda(a^\dagger b^\dagger + ab) \quad (7.50)$$

とおく、 $a, a^\dagger, b, b^\dagger$ は生成消滅演算子で

$$[a, a^\dagger] = 1, [b, b^\dagger] = 1$$

を満たす。

式 7.50 は λ を係数として、相互作用項を持つ。エルミート性を満たすように生成消滅演算子を加えた。第4部で見たようにこの H は適当な Helmite 変換で対角化できる。

対角化された演算子には \tilde{a} をつけて、

$$\begin{aligned} \tilde{a} &= \cosh \theta \cdot a + \sinh \theta \cdot b^\dagger \\ \tilde{b} &= \cosh \theta \cdot a^\dagger + \sinh \theta \cdot b \end{aligned} \quad (7.51)$$

ただし、ボゴリューボフ変換を参考にして次のように λ を選ぶ。

$$\lambda = \frac{2 \sinh \theta \cosh \theta}{1 + 2 \sinh^2 \theta}$$

これで式 7.50 を変換すると対角化できて、

$$H' = \frac{1}{1 + 2 \sinh^2 \theta} (\tilde{a}^\dagger \tilde{a} + \tilde{b}^\dagger \tilde{b} - 2 \sinh^2 \theta)$$

となる。

第7部で扱ったように個数演算子の固有状態で表される Fock 空間表示では

$$\{n_1(\mathbf{k}_1), n_1(\mathbf{k}_1), n_1(\mathbf{k}_1), \dots\} = \left\{ \frac{1}{\sqrt{n_1}} \frac{1}{\sqrt{n_2}} \frac{1}{\sqrt{n_3}} \dots \right\} (a_{\mathbf{k}}^\dagger)^{n_1}, (a_{\mathbf{k}}^\dagger)^{n_2} (a_{\mathbf{k}}^\dagger)^{n_3} \dots |0\rangle$$

であり、この表示で $\hbar \mathbf{k}$ の運動量を持つ n 個の粒子状態は

$$|n(\mathbf{k})\rangle = \frac{1}{\sqrt{n(\mathbf{k})!}} (\hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger)^{n(\mathbf{k})} |0\rangle$$

となるが、これは調和振動子のように n 番目の励起状態と考えるのではなく、 n 個の粒子状態と解釈する Fock 状態を考えた。ここでフォック空間の真空を消滅演算子を用いて

$$a |0\rangle_A = 0$$

$$b |0\rangle_B = 0$$

と定義する。この調和振動子の基底状態は

$$\tilde{a} |\Psi\rangle = \tilde{b} |\Psi\rangle = 0$$

となるから、式 7.51 より

$$(\cosh \theta \cdot a + \sinh \theta \cdot b^\dagger) |\Psi\rangle = 0$$

$$(\sinh \theta \cdot a^\dagger + \cosh \theta \cdot b) |\Psi\rangle = 0$$

となる。これを満たす状態 $|\Psi\rangle$ はフェック空間表示で

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\cosh \theta} \cdot e^{-\tanh \theta a^\dagger b^\dagger} |0\rangle_A \otimes |0\rangle_B \quad (7.52)$$

となる。

よってこれに生成演算子を複数回作用させれば部分系 \mathcal{H}_A に制限された密度行列が得られる。

式 7.23 から補空間 \mathcal{H}_B でトレースをとり、

$$\begin{aligned} \rho_A &= \text{Tr}_{\mathcal{H}_B} [\rho_{tot}] \\ &= \frac{1}{\cosh^2 \theta} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\tanh \theta)^{2n}}{n!} (a^\dagger)^n |0\rangle_A \langle 0|_A a^n \\ &= \frac{1}{\cosh^2 \theta} \sum_{n=0}^{\infty} (\tanh \theta)^{2n} |n\rangle_A \langle n|_A \end{aligned}$$

となる。ただし、正規化された励起状態は

$$|n\rangle_A = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle_A$$

である。この A に対応する密度行列は第 3 部での熱力学で温度 T のカノニカル分布

$$e^{-1/T} = \tanh^2 \beta$$

に対応している。

この ρ_A を用いてエンタングルド・エントロピーが式 7.30 を参考にして

$$\begin{aligned} S_A &= -\text{Tr}_{\mathcal{H}_A} [\rho_A \log \rho_A] \\ &= \cosh^2 \theta \cdot \log \cosh^2 \theta - \sinh^2 \theta \cdot \log \sinh^2 \theta \end{aligned}$$

となる。これは式 7.23 と異なり、単調増加関数である。

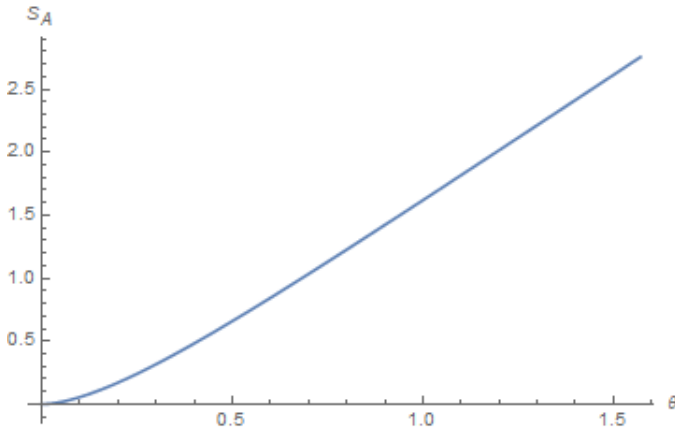


図 7.8: S_A のグラフ

とくに相互作用がないとして $\lambda = 0$ とすると $\theta = 0$ となり

$$S_A = 0$$

となり、相互作用がなければエンタングルドしないことがわかる。

古典的な連成振動のように系としての振動数をいくつかのモードで持つことになる。

これが境界面を見ることである。

7.6 セパラブルとエンタングルド

7.6.1 スーパーブロック

ここでは「量子的なもつれ」と呼ばれる、量子相関を維持した複合状態を考える。

はじめに複合系の量子状態が、それを構成する部分系の量子状態の直積で記述できるときをこの部分系を分割可能という。

逆に、もつれている状態とは部分系の量子状態の直積で記述できない場合であると考えられる。

このもつれた状態をエンタングルド状態という。

対応する分割可能な状態をセパラブル状態という。

これらと量子力学的な純粋状態、混合状態との相違を明確にしておくことは重要である。

まず、セパラブル状態とエンタングルド状態の相違点を見る。

そこを2つの部分系 X, Y となる系の全系の純粋状態を

$$|\psi\rangle = \sum_{x \in X} \sum_{y \in Y} \psi(x, y) |x\rangle \otimes |y\rangle$$

で表す。ただし、 M 次元状態ベクトル $|x\rangle \in X$ と N 次元の状態ベクトル $|y\rangle \in Y$ とする。

$$|x\rangle = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_M \end{pmatrix}, |y\rangle = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix}$$

この時の M, N は等しくなる必要はない。

この時のテンソル積 \otimes は

$$|x\rangle \otimes |y\rangle = \begin{pmatrix} x_1 |y\rangle \\ x_2 |y\rangle \\ \vdots \\ x_M |y\rangle \end{pmatrix}$$

とするので $|x\rangle \otimes |y\rangle$ は $x_i |y\rangle$ のベクトルを縦に並べた行列である。

単に

$$|x\rangle \otimes |y\rangle = |xy\rangle \tag{7.53}$$

と表現する場合もある。これは全体系の基底になるので、これをスーパーブロックまたはユニバースと呼ぶことがある。

7.6.2 セパラブル

セパラブルである場合は波動関数 $\psi(x, y)$ が

$$\psi(x, y) = u(x)v(y)$$

に分離できる場合である。従って、 $u(x), v(y)$ をスカラー関数として

$$|\psi\rangle = \left(\sum_{x \in X} u(x) |x\rangle \right) \otimes \left(\sum_{y \in Y} v(y) |y\rangle \right) \tag{7.54}$$

と表すことができるはずである。

ここで部分系の縮約された密度行列は前節の定義から X, Y に制限した密行列は

$$\rho_X(x, x') = \sum_{y \in Y} \psi(x, y) \psi^*(x', y) = u(x) u^*(x') \sum_{y \in Y} v(y) v^*(y)$$

$$\rho_Y(y, y') = \sum_{x \in X} \psi(x, y) \psi^*(x, y') = v(y) v^*(y') \sum_{x \in X} u(x) u^*(x')$$

となる。

つまり、部分系の情報のみをもっているので部分系のエンタングルメントは発生していない。

このように A 領域の密度演算子は B 領域の状態ベクトルの和から得られる。

この和を内積でとり、スカラー値になったものが係数としてかかるわけである。

この値は領域 A の座標に依存する。同じ関係が領域 B でもいえる。

つまり、観測系、被観測系の少なくとも 2 つの領域がないと密度演算子は定義できない。

この関係は A の荷と B の場から力 F が定義された関係と同じである。

しかし、エンタングルドしている状態は波動関数を部分系に分離可能になる。

セパラブル状態とエンタングルド状態を区別する重要な道具が先に見た特異値分解である。

後節でその例をみるが、内部自由度を導入すると特異値分解 (7.4) は U, V をユニタリ行列、固有値の行列を Σ として式 5.7 から

$$\psi = U \Sigma V^\dagger = \left(U \Sigma^{1/2} \right) \left(V \Sigma^{1/2} \right)^\dagger = \tilde{U} \tilde{V}^\dagger \quad (7.55)$$

と表すことができる。

8 QFT[92]

QFT といえば QuantumFieldTheory であり前部で扱った場の理論である。また、QuantumFourierTransform

でもある。ここではその両方を考察し、前章までのエンタングルドな状態を場の理論で考えていく。

こうした試みは量子コンピューターなどの応用例が急速に発展する今日において、参考文献 [92] にあるような基礎理論の枠組みを考えていく本部の観測の問題にとって重要な内容になる。

8.1 格子上のエンタングルメント

はじめに下図のような格子点モデルを考える。前節の内容から量子的な純粋状態は部分的なヒルベルト空間のテンソル積で表すことができた。格子モデルの単位サイトを α でインデックスをつけ純粋状態を

$$|\Psi\rangle \in \otimes_\alpha \mathcal{H}_\alpha$$

で表す。

前節で見たように領域 A とそれ以外の A^c さらには境界 ∂A に全空間を分ける。図の格子点の間隔は ϵ 程度とする。

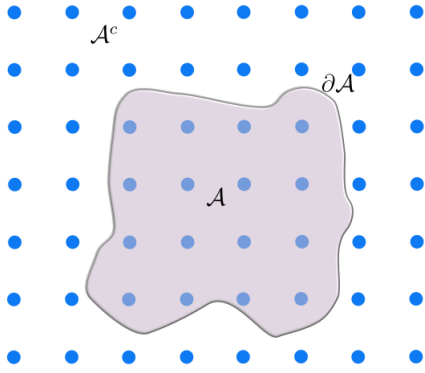


図 8.1: [92] より：ヒルベルト空間の分割

前節でみたようにエンタングルしている場合は境界 ∂A は重要でこの面を通してみる双方の固有値は式 7.21 のように一致した。

全空間はこの2つの空間に分割でき、

$$\otimes_{\alpha} \mathcal{H}_{\alpha} \simeq \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$$

となる。さらに式 7.23 より A に制限された密度行列は

$$\rho_A = \text{Tr}_{A^c} [|\Psi\rangle\langle\Psi|]$$

となる。対角和をとってしまったので我々はもはや A^c で何が起きているかの詳細なことは無視することになる。これが古典波が定常状態になった時に進行波の位相や振幅をもはやみないことに対応した。

前節からシュミットの直交化により

$$|\Psi\rangle = \sum_i \lambda_i |\alpha_i\rangle_A |\beta_i\rangle_{A^c}$$

のように表すことができた。

純粋状態であるためには $|\alpha_i\rangle_A, |\beta_i\rangle_{A^c}$ の固有値 ρ_A, ρ_{A^c} は同じでないといけない。

よって

$$\text{Tr}_A (\rho_A^q) = \text{Tr}_{A^c} (\rho_{A^c}^q)$$

が成り立つ。

従って全ての q においてエンタングルメントエントロピーは互いの補空間のエントロピーと等しくなった。

$$S_A^{(q)} = S_{A^c}^{(q)}$$

そこで場の理論とつなげるために

$$\epsilon \rightarrow 0$$

のように連続極限をとってみる。これはそれぞれのヒルベルト空間が消滅し、間の障害物が消えていく。次節で詳しく見る。

8.2 連続場でのエンタングルメント

8.2.1 量子フーリエ変換

古典的に我々は離散的な定義から連続的な定義に発展させることはいくつか経験している。その重要な例の1つはフーリエ変換である。そこでフーリエ変換を応用しよう。

量子的な観測とフーリエ変換は粒子性、波動性をつなげるものとして基本的な原理である。
 q 個のデータ u_0, u_1, \dots, u_{q-1} に重みをつけた和を

$$f_n = \frac{1}{\sqrt{q}} \sum_{k=0}^{q-1} u_k e^{2\pi i n k / q} (n = 0, 1, \dots, q-1) \quad (8.1)$$

を考える。第 6 部での異なる波長、振幅の平面波の重ね合わせとみることができる。
 この時に得られる $f_0 \dots f_{q-1}$ を u_0, \dots, u_{q-1} の離散フーリエ変換という。
 また、逆変換を

$$u_k = \frac{1}{\sqrt{q}} \sum_{n=0}^{q-1} e^{-2\pi i k n / q} f_n (k = 0, 1, \dots, q-1) \quad (8.2)$$

と書くことができる。従って、 f_n は u_k を

$$e^{-2\pi i k n / q} = \cos\left(\frac{2\pi n}{q} k\right) - i \sin\left(\frac{2\pi n}{q} k\right)$$

で展開しているときの係数とみなせる。これは角周波数

$$\omega_n = \frac{2\pi n}{q}$$

を単位ベクトルのように思えば、 u_k はその成分に等しい。

このフーリエ変換を量子論理回路で実行することを量子フーリエ変換 (quantum_Fourier_transform) とい
 い、**QFT** と呼ぶ。

8.3 ミンコフスキー時空

前節までの内容からエンタングルメントが量子的に成り立つと領域の境界で共通した固有値を見る。
 これを相対論とつなげるために d 次元のミンコフスキー時空を考える。
 まず、QFT を用いて前節の離散フーリエ変換から連続体の場合を考える。つまり、

$$\Delta q = \epsilon \rightarrow 0$$

を考えればよい。さらにコンパクトではないヒルベルト空間の一般化が必要になる。

そこで次の図のような **Cauchy** スライス Σ を考え、これを領域 \mathcal{A} と Σ/\mathcal{A} に分けてこれを前節と同じよう
 に \mathcal{A}^C とおく。

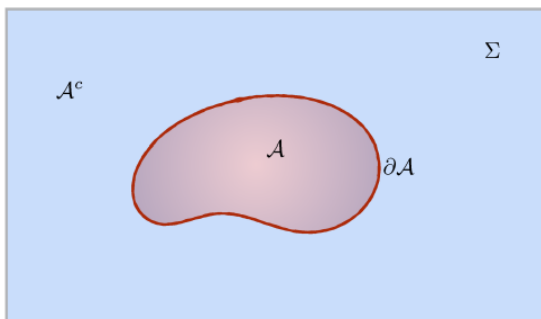


図 8.2: [92] より：連続体を 2 つに分ける

この 2 つの領域をわけているのは 2 次元の表面でこれをエンタングリング表面と呼ぶ。このエントロピー $S_{\mathcal{A}}$
 を求めることを考えたい。

ここでは d 次元の相対論的な場の理論 QFT をローレンツ空間 \mathcal{B} で考える。
 この時のローレンツ不変を保つ時空間 \mathcal{B} は大局的な双曲線幾何に従い、平坦なミンコフスキー時空を採用する。この時空では時間軸を 1 次元にとるので次のようになる。

$$\mathcal{B}_d = \mathbb{R}^{1,d-1}$$

\mathcal{B}_d は大局的な双曲線とみなせるので、時間短冊をとる空間として **Cauchy slice** をとることができる。
 そこで Σ_{d-1} 上の量子論的な純粋状態を

$$\Psi[\Phi(x)]$$

で表す。

密度行列は一般的に Σ_{d-1} 上の座標 x を用いて密度行列 ρ_Σ で与えることができる。
 例えば今、CauchySlice 上 1 つの領域 \mathcal{A} を考える。この領域の余次元が 1 つつまり

$$\dim(\Sigma_{d-1}/\mathcal{A}) = 1 \tag{8.3}$$

とすると、次の 2 つの領域が Σ_{d-1} 上にとれる。

$$\mathcal{A} \cup \mathcal{A}^C = \Sigma_{d-1} \tag{8.4}$$

$$\mathcal{A}^C = \Sigma \setminus \mathcal{A}$$

である。

ここで重要なのは前節でみたように境界 $\partial\mathcal{A}$ の次元である。
 式 8.3 から境界の次元は 1 へることになり、その商空間の次元になるので

$$\dim(\mathcal{B}/\partial\mathcal{A}) = 2$$

となる。この意味は重要である。境界 $\partial\mathcal{A}$ が双曲線幾何上の **2 次元超曲面** になることを示す。

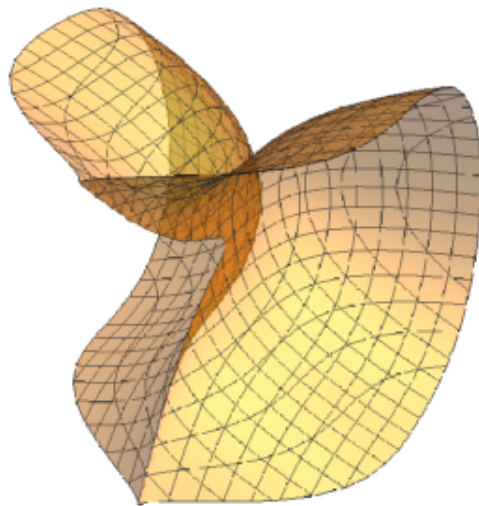


図 8.3: 2 次元超曲面の例

そこで、2つに分割したヒルベルト空間上で QFT を構成すると

$$\otimes_{\alpha} \mathcal{H}_{\alpha} \simeq \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_{A^c}$$

のように考えればいいのだが、量子論でゲージ不変性を要求すると問題になる。

ここでは過去と未来という領域を導入したため、 $\mathcal{H}_A, \mathcal{H}_{A^c}$ のどちらかからのリンクがこわれる。

局所的な相対論的 QFT は Cauchy スライスが空間 \mathcal{B} につながるように構成しないとイケないが単純ではない。

過去と未来のスライス Σ の集合を $D^+[\Sigma]$ と $D^-[\Sigma]$ として

$$D^+[\Sigma] \cup D^-[\Sigma] = \mathcal{B}$$

とする。この表現により、例えば \mathcal{A} に依存した集合は \mathcal{A}^c を用いずに

$$D[\mathcal{A}] = D^+[\mathcal{A}] \cup D^-[\mathcal{A}]$$

のようにつながっていくと考える。

ところが、ある集合の \mathcal{A} と \mathcal{A}^c の依存性はこれだけでは全空間を覆うことができない。

$$D^+[\mathcal{A}] \cup D^-[\mathcal{A}^c] \neq \mathcal{B}$$

である。これはミンコフスキー空間の光円錐が点になり、特異点をつくることに問題があるのである。



図 8.4: 光円錐：現在 $t = 0$ で接平面がとれない

この事情を見るために第5部で扱った超曲面とリー群との関係を復習する必要がある。

8.3.1 超曲面

第5部で扱った内容をここでは復習する。

線形空間 $GL(n, \mathbf{R})$ を考える。これは簡単には n 行、 n 列の正方行列 A で表すことができるので

$$\dim(A) = n^2$$

の次元を持つと思われるが、重要なのは逆が存在することで $A \in GL(n, \mathbf{R})$ として

$$N : \det(A) = 0 \tag{8.5}$$

を除外しないとイケないことである。この行列式が0になるということは、物理的に特異点を与える重要な役割を持つ。

この行列式が0になる条件を満たす集合が閉集合になるので

$$GL(n, \mathbf{R}) = \mathbb{R}^{n^2} - N$$

は開集合である。よって、式8.5を満たす集合 N は $x_0 \in N$ として、

$$\lim_{\nu \rightarrow \infty} x_\nu = x_0$$

とすると

$$\lim_{\nu \rightarrow \infty} \det(x_\nu) = \det(x_0)$$

だから、 $x \in GL(n, \mathbf{R})$ の点 x の十分近い近傍として、半径 ϵ の球 V を考えると、開集合になるおかげで

$$V = \{y \in \mathbb{R}^{n^2} \mid |y - x| < \epsilon\}$$

は図のように $GL(n, \mathbf{R})$ の中にすっぽりと入れることができる。

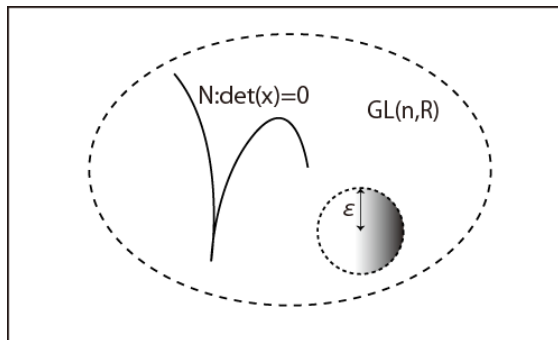


図 8.5: 行列式が0になる集合は微分できない点をもつ曲線、 $GL(n, \mathbf{R})$ は開集合になり、開球を取めることができる。

さらに $SL(n, \mathbf{R})$ の場合は

$$\det(x) = 1$$

という条件がつく。従って、この超曲面は特異点のないなめらかな曲面である。

言い換えるとどこでも接平面をとれて、局所的にユークリッド座標をとれる。

例えば超曲面は代数的に定義できるので例えば次のような4次元空間の方程式を考えよう。

$$F(x_1, x_2, x_3, x_4) = 0 \tag{8.6}$$

ただし、連続的に微分可能であるとする。この時ある定点 x^0 （上付にして座標と区別する）をとり、ここで接平面の方程式が

$$\sum_{i=1}^4 \frac{\partial F}{\partial x_i}(x^0)(x_i - x_i^0) = 0 \quad (8.7)$$

で表すことができる。

これは次の図のように点 x^0 で接平面上のベクトル $x - x^0$ と $\text{grad}F(x^0)$ が直交することを示している。

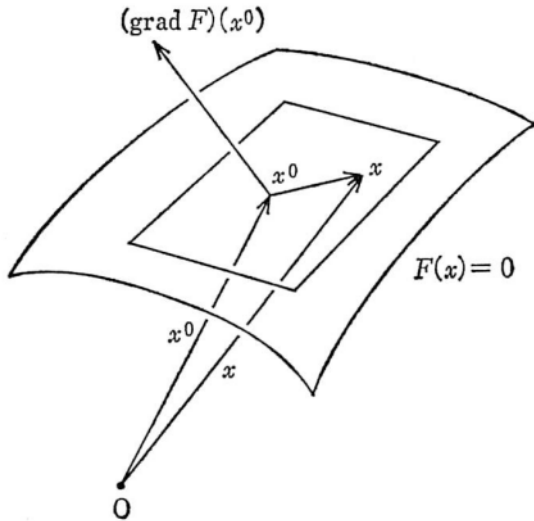


図 8.6: [120] より：多様体上の接平面とその法線ベクトル

ここで $SL(2, \mathbf{R})$ の場合について接平面を求める具体的な計算例を示す。
この場合の行列式は 1 となるので \mathbb{R}^4 の中で

$$F(x_{11}, x_{12}, x_{21}, x_{22}) = x_{11}x_{22} - x_{12}x_{21} - 1 = 0 \quad (8.8)$$

が超曲面を表す式である。偏微分を下付添え字で表すことにして

$$F_{x_{11}} = x_{22}, F_{x_{22}} = x_{11}, F_{x_{12}} = -x_{21}, F_{x_{21}} = -x_{12}$$

と点 x^0 ではさらに超曲面の式を満たすから

$$F(x^0) = x_{11}^0 x_{22}^0 - x_{12}^0 x_{21}^0 - 1 = 0 \quad (8.9)$$

よって少なくともどこかの成分は 0 ではなく、

$$\text{grad}F(x^0) = (x_{22}^0, -x_{21}^0, -x_{12}^0, x_{11}^0) \neq 0$$

が言えて、接平面は存在し、式 8.9 から $x_{11}^0 x_{22}^0 - x_{12}^0 x_{21}^0 = 1$ を代入し、

$$\begin{aligned} \text{grad}F(x^0) \cdot (x - x^0) &= x_{11}^0 (x_{22} - x_{22}^0) - x_{12}^0 (x_{21} - x_{21}^0) - x_{21}^0 (x_{12} - x_{12}^0) + x_{22}^0 (x_{11} - x_{11}^0) \\ &= \begin{vmatrix} x_{11} & x_{12} \\ x_{21}^0 & x_{22}^0 \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} x_{11}^0 & x_{12}^0 \\ x_{21} & x_{22} \end{vmatrix} - 2 = 0 \end{aligned} \quad (8.10)$$

となるので接平面の式は

$$\begin{vmatrix} x_{11} & x_{12} \\ x_{21}^0 & x_{22}^0 \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} x_{11}^0 & x_{12}^0 \\ x_{21} & x_{22} \end{vmatrix} = 2 \quad (8.11)$$

これは x^0 で $x_{22}^0 \neq 0$ を満たせば、その近傍でも $x_{22} \neq 0$ とすることができて、 $SL(2, \mathbf{R})$ の方程式として式 8.9 から超曲面上で

$$x_{11} = \frac{x_{12}x_{21} + 1}{x_{22}} \quad (8.12)$$

を選ぶことができる。この時、 x_0 の近傍で 3 次元のパラメタ t をとり、

$$t_1 = (x_{12} - x_{12}^0), t_2 = (x_{21} - x_{21}^0), t_3 = (x_{22} - x_{22}^0)$$

とおくと、式 8.10 から式 8.12 を用いて次の対応が得られる。

$$\begin{pmatrix} t_1 \\ t_2 \\ t_3 \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} \frac{x_{12}x_{21}+1}{x_{22}} \\ x_{12} \\ x_{21} \\ x_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{(t_1+x_{12}^0)(t_2+x_{21}^0)+1}{x_{22}} \\ t_1 + x_{12}^0 \\ t_2 + x_{21}^0 \\ t_3 + x_{22}^0 \end{pmatrix} \quad (8.13)$$

これは第 4 部での Hopf 写像と同様に次元を 1 つ上げて、ファイバー束をつくり、1 つの成分を、曲面の式から求めている。

必ず、式 8.12 の商に他の成分が入ってくるので特異点が生じる。

第 4 部の Hopf 写像では複素座標として $z \in S^3 \subset \mathbb{C}^2$ をとり、 $m = n = 1$ の場合

$$\Phi : S^1 \times S^3 \rightarrow S^3$$

$$(e^{i\theta}, z) \mapsto e^{i\theta} z \quad (8.14)$$

を考え、この時の Hopf 写像を

$$\pi : \mathbb{C}^2 \rightarrow \mathbb{R}^3$$

$$\begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} 2\operatorname{Re}(z_1 \bar{z}_2) \\ 2\operatorname{Im}(z_1 \bar{z}_2) \\ |z_1|^2 - |z_2|^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{z}_1 z_2 + z_1 \bar{z}_2 \\ i(\bar{z}_1 z_2 - z_1 \bar{z}_2) \\ |z_1|^2 - |z_2|^2 \end{pmatrix}$$

とした。

ここで式 8.13 の逆像を Hopf 写像で考える。

そのため \mathbb{R}^4 を \mathbb{C}^2 として考える。つまり、改めて $z_1 = x + iy, z_2 = z + iw$

として $x, y, z, w \in \mathbb{R}$ とする。

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ w \end{pmatrix} \simeq \mu = \begin{pmatrix} x + iy \\ z + iw \end{pmatrix}$$

この時、 S^3 は

$$S^3 = \{\psi \in \mathbb{C} \mid |\psi| = 1\} \quad (8.15)$$

と表される。そこで単位ベクトルを $\mu \in \mathbb{C}^2$ とし、複素平面上的 μ 方向の複素直線を

$$L_\mu = \{c\mu \mid c \in \mathbb{C}\}$$

とする。また、 S^3 と、 L_μ の境界部分を

$$C_\mu = L_\mu \cap S^3 = \{e^{i\phi} \mu \mid \phi \in \mathbb{R}\}$$

とすると、これは S^3 表面上の円 S^1 であり、この円によって結合された領域を考えた。
 視覚化するために \mathbb{R}^4 を S^3 へ立体射影する変換を考える。
 $\mu \in \mathbb{R}^4$ を 3次元の球座標からの類推で次のようにおいてみる。

$$\begin{cases} x = \sin \alpha \sin \beta \sin \gamma \\ y = \sin \alpha \sin \beta \cos \gamma \\ z = \sin \alpha \cos \beta \\ w = \cos \alpha \end{cases}$$

ここで $\alpha, \beta \in [0, \pi], \gamma \in [0, 2\pi)$ であることに注意する。
 実際に C_μ はこの変換を μ に作用させると

$$C_\mu = e^{i\phi} \begin{pmatrix} x + iy \\ z + iw \end{pmatrix} \simeq \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi & 0 & 0 \\ \sin \phi & \cos \phi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos \phi & -\sin \phi \\ 0 & 0 & \sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ w \end{pmatrix}$$

立体射影の類推で

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ w \end{pmatrix} \mapsto \frac{1}{1-w} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

の射影を考えると、 \mathbb{R}^3 の図が下のようになられた。

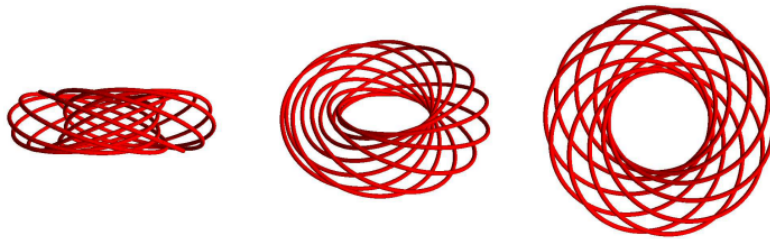


図 8.7: [45] より

これらから Hopf fibration の簡単なイメージとして次の図のようにまとめられた。
 \mathbb{R}^4 上の S^3 の絡んだ円 $h^{-1}(P), h^{-1}(Q)$ は \mathbb{R}^3 上の S^2 球面上の点 P, Q のファイバーになっていて、図のよ
 うに S^3 から射影される。一方で同じ円 $h^{-1}(P), h^{-1}(Q)$ は立体射影により \mathbb{R}^3 上の絡んだ円に写さる。

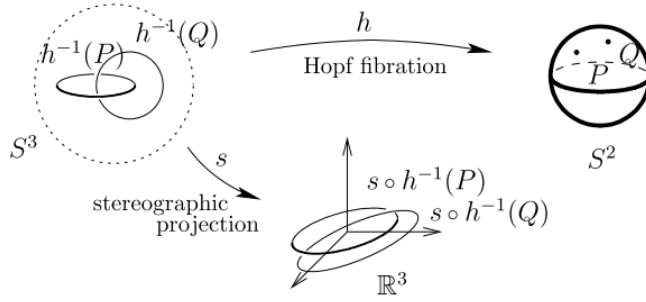


Figure 10: Stereographic projections of Hopf fibers. Any two projected fibers are linked circles, except $s \circ h^{-1}(1, 0, 0)$ is a line.

図 8.8: [40] より

従って、式 8.13 の \mathbb{R}^3 上の点 $P(t_1, t_2, t_3)$ は $SL(2, \mathbf{R})$ の $P' \left(\frac{x_{12}x_{21}+1}{x_{22}}, x_{12}, x_{21}, x_{22} \right)$ の曲線から写される。しかし、これも全ての領域をカバーしていない。 $x_{22} \neq 0$ という条件がつく。

一般に $SL(2, \mathbf{R})$ の接平面の式 8.11 はある点 x^0 の行列式を変数座標で置き換えた形になっているが、これは一般的に拡張できる。

そこで次のように $\det(x^0)$ の第 i 行を変数 (x_{i1}, \dots, x_{in}) で置き換えたものを $\det^{(i)}(x, x_0)$ で定義する。

$$\det^{(i)} = \begin{vmatrix} x_{11}^0 & \cdots & x_{1n}^0 \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ x_{i1} & \cdots & x_{in} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ x_{n1}^0 & \cdots & x_{nn}^0 \end{vmatrix}$$

これで式 8.11 を表すと

$$\sum_{i=1}^n \det^{(i)}(x, x^0) = n$$

を得る。特に x^0 を単位行列 1_n と選ぶと

$$\det^{(i)}(x, 1_n) = \begin{vmatrix} 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ x_{i1} & \cdots & x_{ii} \cdots & x_{in} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ 0 & \cdots & 1 \end{vmatrix} = x_{ii}$$

となる。従って、

$$\sum_{i=1}^n x_{ii} = \text{Tr}[x] = n$$

この時、 $x = x^0$ での接ベクトルは

$$X = x - x^0$$

$$\text{Tr}[X] = \text{Tr}[x] - \text{Tr}[x^0] = n - n = 0 \quad (8.16)$$

となり、対角和が 0 になるという結果が得られる。

これは $SL(2, \mathbf{R})$ が $n^2 - 1$ 次元の ϵ -球と微分同相な近傍をもっていることになる。

一方で、 $\det(x) = 0$ を満たした超曲面 N は特異点を持ち、この点では安定した接平面を持ってない。

この場合は円錐の頂点に相当する。
単純に $\det(x) = k$ を満たす場合を

$$\begin{vmatrix} x & y \\ y & x \end{vmatrix} = k$$

として $k = 1$ と $k = 0$ の場合を作図すると次のようになる。

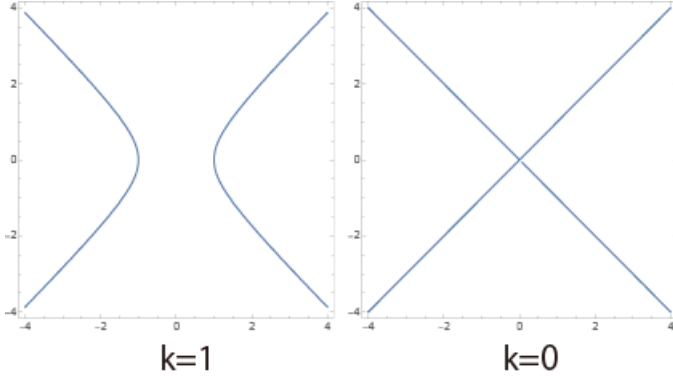


図 8.9: $k = 0$ では原点で特異点を持つ

これから Lie 群は $GL(n, \mathbf{R}), SL(n, \mathbf{R})$ の中でも群を形成し、局所的に $n^2, n^2 - 1$ 次元のユークリッド空間内の近傍 (ϵ -Sphere)

と微分同相になる。

そこで逆を持ち、分母が 0 にならない解析関数で定義できて、部分群 G が局所的にユークリッド空間と微分同相になる群を

リー群という。簡単にはここまでみてきたように接線の引ける多様体になっているような群ができた。

ここでは光円錐の交点の問題にこのアイデアを使おうというわけである。次節に考察を加えて紹介する。

8.3.2 量子論的時空間

以上から文献 [92] ではミンコフスキーと A に制限された密度行列 ρ_A が A においてハミルトンの作用原理を満たすような領域を

次の図のように考えた。

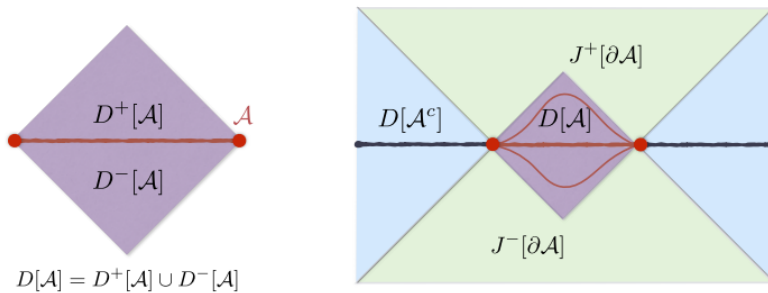


図 8.10: [92] より：領域の依存性；2つの領域はさらに右図のように分けられる

簡単には前節の $k = 0$ での特異点を $k = 1$ のように、余分な次元をもって来て、上図左のように点を線に拡張する。

これは境界 ∂A 上の過去と未来を点 $p \in B$ を用いて $J^\pm(p)$ で表すと図右のように

$$J^\pm[\partial A]$$

が加わることを意味する。重要なのは $J^\pm[\partial\mathcal{A}]$ は \mathcal{A}^C を用いずに

$$B = D[\mathcal{A}] \cup D[\mathcal{A}^C] \cup J^+[\partial\mathcal{A}] \cup J^-[\partial\mathcal{A}]$$

とかけることである。

また境界表面は2次元のように振る舞うはずだから、相対論的には2次元ミンコフスキー空間のように振る舞うはずである。

縮約された密度行列 $\rho_{\mathcal{A}}$ の固有値は $\mathcal{H}_{\mathcal{A}}$ 上のユニタリー変換で影響をうけない。

よって Renyi や Neumann のエントロピーがユニタリー変換の元で不変になる。

筆者はここに前章での定常波と進行波の関係を加えて次の図のようなイメージを仮定したい。

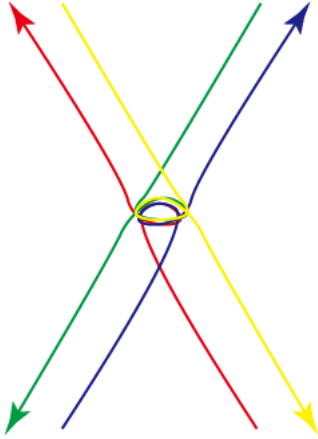


図 8.11: 量子論的時空のイメージ

そこで次に考えたいのはある領域 \mathcal{A} が異なる Cauchy スライス領域 \mathcal{A}' に移るような場合である。

$D[\mathcal{A}] \in B$ は開集合でエンタングルメントな集合 $D[\mathcal{A}] = D[\mathcal{A}^C]$ を考える。新しいスライスを Σ' とする。つまり、

$$\rho_{\Sigma} \rightarrow \rho_{\Sigma'}$$

を考える。

異なるスライスに移動したとしてもエンタングルメントの強度 $\rho_{\mathcal{A}}$ 変わらないと期待できる。

また、 \mathcal{A}^C 上で出発しても同じ結果になるべきである。

ハミルトニアン H の摂動論から時間の連続性として $t \rightarrow -\infty$ を考慮し、

ある時空領域 $\tau_{\delta\mathcal{H}}$ が因果律を満たす未来の領域につながると考える。

逆に他のいかなる領域も $J^+[\tau_{\delta\mathcal{H}}]$ を横切ることはない。

よって、上図右のように $J^+[\tau_{\delta\mathcal{H}}]$ と $J^-[\tau_{\delta\mathcal{H}}]$ は一点でつながる。

他のいかなるケースも過去の $\tau_{\delta\mathcal{H}}$ を未来につなげられないので時間の順序付けが必要になる。

よって、エンタングルメントな強度 $\rho_{\mathcal{A}}$ は集合 $D[\mathcal{A}]$ に依存し、Cauchy スライスを選択には依存しない。

これを **wedge_observable** という。

また、エンタングルメントな強度 $\rho_{\mathcal{A}}$ は局所的な $D[\mathcal{A}]$ または、 $D[\mathcal{A}]$ 上のハミルトニアンの変化に無関係である。

量子力学では状態 \mathcal{A} と \mathcal{A}^C のエンタングルメントされた密度行列は前節でみたように

$$\rho_{\mathcal{A}} := \text{Tr}_{\mathcal{H}_{\mathcal{A}^C}}(\rho_{\Sigma})$$

で表された。これは縮約されていれば式 7.9 の von Neumann のエントロピーから計算できる。

。

この様子を大雑把にみれば熱平衡が作られる過程とよく似ている。

。

式 7.28 のように Renyi のインデックスが温度のように振る舞うわけである。(下図右)
従って、 \sum_{d-1} や \mathcal{A} の密度行列を与えるとユニタリ行列として各領域の依存性を反映しながら発展することになる。

8.4 鈴木-Trotter の公式 [93]

前節で 1 つ上の次元からみることで相関を変化できることをみたが、その多次元化を考える。

Trotter の公式を用いると短距離相互作用をしている空間 d 次元量子形の問題を空間 $d+1$ 次元の古典形に変換できる。

第 4 部でみた Hopf 束のように 4 次元を 3 次元空間で見ようというわけである。

この考え方は Ising モデルなどのシミュレーションの基本理論として、鈴木-Trotter の公式はよく利用される。

この時、加えられた $+1$ 次元は **Trotter 軸** と呼ばれる。

これは経路積分の時間分割に似ていて、時間軸に関し、量子論的なイメージへの示唆を与えてくれる。

ここでは第 3 部でみた Ising モデルに応用してみる。

簡単にここでは 1 次元の単一横磁場を考える。

このモデルではハミルトニアンは外場の影響と隣接相互作用のみを考える。

ここではパウリ行列を σ を

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

として上付き指数でスピン配置 (成分)、下付き指数で格子を表すとして **1 次元横磁場 Ising 模型** のハミルトニアンを

$$H = -J \sum_{i=1}^L \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z - \lambda \sum_{i=1}^L \sigma_i^x \quad (8.17)$$

とおく。この時の分配関数 Z はあるスピンの配置の集合を $\{\sigma^1\}$ で表し、

$$Z = \text{Tr}(e^{-\beta H}) = \sum_{\{\sigma^1\}} \langle \{\sigma^1\} | e^{-\beta H} | \{\sigma^1\} \rangle \quad (8.18)$$

のように表すことができる。

この分配関数が変形の出発になる。鈴木-Trotter 分解では次のように特定スピン配置の状態 $|\{\sigma^k\}\rangle$ に σ_i^z を作用させる

$$\sigma_i^z |\{\sigma^k\}\rangle = \sigma_i^k |\{\sigma^k\}\rangle \quad (8.19)$$

が得られることを用いる。 z 方向のスピンが作用し、特定の k 方向のスピンが引き出されている。

これから鈴木-Trotter 分解で分配関数を Trotter 軸に M をとって次のようになる。

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\{\sigma^1\}} \left\langle \{\sigma^1\} \left| \left[\exp \left\{ \frac{\beta J}{M} \sum_{i=1}^L \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \right\} \exp \left\{ \frac{\beta \lambda}{M} \sum_{i=1}^L \sigma_i^x \right\} \right]^M \right| \{\sigma^1\} \right\rangle \\ &= \sum_{\{\sigma^1\}} \left\langle \{\sigma^1\} \left| \left[\exp \left\{ a \sum_{i=1}^L \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \right\} \exp \left\{ b \sum_{i=1}^L \sigma_i^x \right\} \right]^M \right| \{\sigma^1\} \right\rangle \end{aligned} \quad (8.20)$$

となる。ただし、Trotter 数を M として

$$a = \frac{\beta J}{M}, \quad b = \frac{\beta \lambda}{M} \quad (8.21)$$

である。経路積分の手法を用いて、これに全スピン配置で足し合わせれば次の完全系を挿入できる。

$$\sum_{\{\sigma^k\}} |\{\sigma^k\}\rangle \langle \{\sigma^k\}| = 1$$

が成り立つ。さらに周期的境界条件

$$|\{\sigma^1\}\rangle = |\{\sigma^{M+1}\}\rangle$$

が成り立つとすると式 8.19 より z 軸は k に変化する。

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\{\sigma^1\}} \cdots \sum_{\{\sigma^M\}} \prod_{k=1}^M \left\langle \{\sigma^k\} \left| \left[\exp \left\{ a \sum_{i=1}^L \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \right\} \exp \left\{ b \sum_{i=1}^L \sigma_i^x \right\} \right] \right| \{\sigma^{k+1}\} \right\rangle \\ &= \sum_{\{\sigma^1\}} \cdots \sum_{\{\sigma^M\}} \prod_{k=1}^M \exp \left\{ a \sum_{i=1}^L \sigma_i^k \sigma_{i+1}^k \right\} \left\langle \{\sigma^k\} \left| \left[\exp \left\{ b \sum_{i=1}^L \sigma_i^x \right\} \right] \right| \{\sigma^{k+1}\} \right\rangle \end{aligned}$$

となる。ここで

$$e^{b\sigma^x} = 1 + b\sigma^x + \frac{1}{2!} (b\sigma^x)^2 + \frac{1}{3!} (b\sigma^x)^3 + \cdots$$

が成り立つから、パウリ行列を用いて

$$\begin{aligned} \langle + | e^{b\sigma^x} | - \rangle &= \cosh b \\ &= \sqrt{\frac{1}{4} (e^b + e^{-b})^2} \\ &= \sqrt{\frac{1}{4} (e^b - e^{-b}) (e^b + e^{-b}) (e^b + e^{-b}) (e^b - e^{-b})^{-1}} \\ &= A \sqrt{\coth b} \\ &= A \exp \left\{ \frac{1}{2} \log (\coth b) \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle + | e^{b\sigma^x} | - \rangle &= \sinh b \\ &= \sqrt{\frac{1}{4} (e^b - e^{-b})^2} \\ &= \sqrt{\frac{1}{4} (e^b + e^{-b}) (e^b - e^{-b}) (e^b - e^{-b}) (e^b + e^{-b})^{-1}} \\ &= A \sqrt{\tanh b} \\ &= A \exp \left\{ \frac{1}{2} \log (\tanh b) \right\} \end{aligned} \tag{8.22}$$

と変形できる。ただし、

$$A = \sqrt{\frac{1}{2} \sinh 2b}$$

とおいた。これからスピン $\sigma, \sigma' = \pm 1$ として

$$\left\langle \sigma \left| e^{\frac{\beta}{M} \lambda \sigma^x} \right| \sigma' \right\rangle = A \exp \left\{ \frac{1}{2} \sigma \sigma' \log \left(\coth \frac{\beta}{M} \lambda \right) \right\}$$

が一般的に成り立つ。

よって分配関数は式 8.18 より

$$Z = \sum_{\{\sigma^1\}} \cdots \sum_{\{\sigma^M\}} A^M \prod_{k=1}^M \exp \left\{ \frac{\beta}{M} J \sum_{i=1}^L \sigma_i^k \sigma_{i+1}^k \right\} \exp \left\{ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^L \sigma_i^k \sigma_{i+1}^k \log \left(\coth \frac{\beta}{M} \lambda \right) \right\} \tag{8.23}$$

となり、有効ハミルトニアンは式 8.17 に対して

$$H_{eff} = - \sum_{i=1}^L \sum_{k=1}^M (J_1 \sigma_i^k \sigma_{i+1}^k + J_2 \sigma_i^k \sigma_i^{k+1})$$

ただし、

$$\begin{cases} J_1 = \frac{J}{M} \\ J_2 = \frac{1}{2\beta} \log \left\{ \coth \left(\frac{\beta}{M} \lambda \right) \right\} \end{cases}$$

である。この結果は 2 次元異方的な古典 Ising 模型である。

ただし、座標系は 8.22 により新しい座標系に変換され、この座標軸を **Trotter 軸** という。

つまり、1 次元量子系は Trotter 軸を加えた 2 次元古典系に変えられた。

この横磁場 Ising モデルは $\lambda = J$ の場合、1 次元量子系が絶対零度で $\beta \rightarrow \infty$ 、かつ Trotter 数 $M \rightarrow \infty$ とすると式 8.23 の分配関数が等方的な系で $T = T_C$ で等しくなるためには $J_1 = J_2$ が必要になる。

この時

$$x = \frac{\beta J}{M} = \frac{\beta J}{L}$$

が収束するとして、この時、

$$x = \frac{1}{2} \log (\coth x)$$

であり、この解は

$$x = \frac{1}{2} \log (1 + \sqrt{2}) = \beta_C J$$

となるので分配関数を式 8.23 から次のようにまとめることができる。

$$Z = \sum_{\{\sigma^1\}} \cdots \sum_{\{\sigma^M\}} A^M \exp \left\{ \beta_C J \sum_{i=1}^L \sum_{k=1}^L (\sigma_i^k \sigma_{i+1}^k + \sigma_i^k \sigma_i^{k+1}) \right\} \quad (8.24)$$

これは $\beta_C \simeq 1/T_C$ に対応する臨界点での分配関数になっている。

8.4.1 古典系

Ising モデルのように有効ハミルトニアンが明確ではない場合、よく使われる有用な方法が転送行列である。はじめに 1 次元、古典系で考える。この時のハミルトニアンは第 3 部でみたように格子点間を考えて

$$H(N) = -J \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1}$$

とおける。ただし

$$\sigma_i = \pm 1$$

であり、古典的にはスカラーである。

周期的境界条件から

$$\sigma_{N+1} = \sigma_1$$

となる。これから例えば $N = 4$ であれば

$$H(4) = -J (\sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_1 + \sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_1) = 4J$$

となるが、指数に入るので行列を用いて $N = 2$ の時、

$$A_{ij} \equiv e^{\beta J \sigma_i \sigma_j} = \begin{pmatrix} e^{\beta J} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J} \end{pmatrix}$$

を定義すると、状態和が式 8.23 から

$$\begin{aligned} Z(N) &= \text{Tr} e^{-\beta H} = \sum_{\sigma_1} \cdots \sum_{\sigma_N} e^{-\beta H} = \sum_{\sigma_1} \cdots \sum_{\sigma_N} \prod_i e^{\beta J \sigma_i \sigma_{i+1}} \\ &= \sum_{\sigma_1} \cdots \sum_{\sigma_N} A_{\sigma_1 \sigma_2} A_{\sigma_2 \sigma_3} \cdots A_{\sigma_{N-1} \sigma_N} = \text{Tr} (A^N) \end{aligned} \quad (8.25)$$

とかける。たとえば $N = 2$ の時、

$$\begin{aligned} Z(2) &= A_{12} A_{21} + A_{21} A_{12} + A_{11} A_{22} + A_{22} A_{11} = \text{Tr} (A^2) \\ &= 2e^{-2\beta J} (e^{4\beta J} + 1) \end{aligned}$$

となる。

分配関数が等価な行列の積で表されたので、これを一様行列積と呼ぶ。

重要なのはこれが、局所的に定義された行列 A の固有値で表すことができることである。

つまり、 A の固有値を λ とすると N に関係なく、

$$\lambda_{\pm} = e^{\beta J} \pm e^{-\beta J}$$

となるので分配関数は

$$\begin{aligned} Z(N) &= \lambda_+^N + \lambda_-^N \\ Z(2) &= 2e^{-2\beta J} (e^{4\beta J} + 1) \end{aligned}$$

である。これは局所的に A を決めれば、系の分配関数が決まることを示す。

例えば具体的に次の式を得る。

$$\begin{aligned} Z(N) &= \lambda_+^N + \lambda_-^N \\ &= \left(e^{\beta J} - e^{\beta(-J)} \right)^n + \left(e^{\beta(-J)} + e^{\beta J} \right)^n \\ &= 2^n \sinh^n(\beta J) + 2^n \cosh^n(\beta J) \end{aligned}$$

この分配関数は $n \rightarrow \infty$ であれば第 2 項が効くが結合エネルギー J にも依存し、温度 β にも依存する。

この n を切り離して、trotter 変数にみなせると示唆される。しかし、古典論の分配関数には、交差項がない。

基本的には急激な単調増加関数である。

8.4.2 量子系

次に量子系を考える。ハミルトニアンが行列になり、式 8.17 を用いないといけない。

前節でみたように有効ハミルトニアンをとれば古典的な結果を利用することができる。

しかし、古典系に加えて Trotter 軸が入る。式 8.21 から、分割を次のようにとる。

$$\tau = \frac{\beta}{M}$$

分配関数は式 8.20 から式 8.25 に対応する量子版が次のように求まる。

$$Z(M) = \text{Tr} \left(\prod_{i=1}^M e^{-\tau H} \right) \quad (8.26)$$

この M 個の演算子の間に完全系

$$\sum_{\alpha} |\alpha\rangle \langle \alpha| = I$$

を挿入していくと、次の内積の和になる。

$$Z(M) = \sum_{\alpha^1} \cdots \sum_{\alpha^M} \prod_{i=1}^M \langle \alpha^{i+1} | e^{-\tau H} | \alpha^i \rangle$$

見方によっては M 回の連続観測だから 1 回の観測を実空間転送行列 T として

$$\langle \alpha^{i+1} | T | \alpha^i \rangle \sim \langle \alpha | T | \alpha \rangle$$

から、熱的な拡散に似た式

$$T \equiv e^{-\tau H}$$

を定義する。よって、

$$Z(M) = \sum_{\alpha} \langle \alpha | T^M | \alpha \rangle = \text{Tr}(T)^M$$

とできる。実際の計算にはハミルトニアンを偶数のボンドの集合 A と奇数のボンドの集合 B に分割する。

$$H = H_1 + H_2$$

$$H_1 = \sum_{i \in A} V_i$$

$$H_2 = \sum_{i \in B} V_i$$

この分割方法は次の図のようなチェス盤にみなせるのでチェス盤分割 (CBD) と呼ばれる。

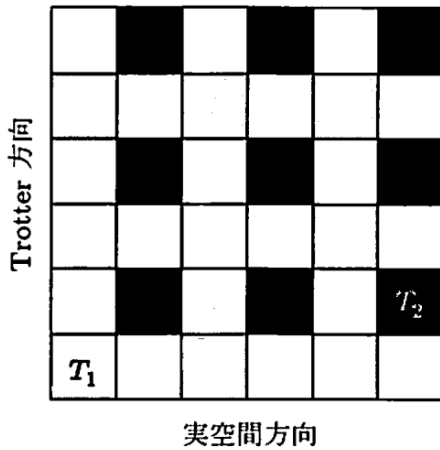


図 8.12: [93] より : チェス盤格子

Hausdroff の公式から

$$\exp[-\tau(H_1 + H_2)] = e^{-\frac{1}{2}\tau H_1} e^{-\tau H_2} e^{-\frac{1}{2}\tau H_1} + O(\tau^3)$$

として近似を使うと転送行列は

$$T = T_1^{1/2} T_2 T_1^{1/2}$$

ただし、

$$T_1 = \prod_{i \in A} t_i$$

$$T_2 = \prod_{i \in B} t_i$$

$$t_i = e^{-\tau V_i}$$

とする。ここでの t_i が量子 Ising 模型で古典模型の A に相当するが、 t_i は 2×2 の局所転送行列という。よってチェス盤分割を用いた分配関数が

$$Z_{CBD}(M) = \sum_{\alpha^1} \cdots \sum_{\alpha^M} \prod_{i=1}^M \langle \alpha^{2i+1} | e^{-\tau H} | \alpha^{2i} \rangle \langle \alpha^{2i} | e^{-\tau H} | \alpha^{2i-1} \rangle$$

と求まる。これにより、第3部でみたようなモンテカルロ法などのシミュレーションが可能になる。尚、チェス盤の転送方向を Trotter 軸から実空間に変えても計算は可能である。

8.4.3 Hubbard 模型

例えば強相関電子系の基本として非可換な運動エネルギーとポテンシャルを持つ **Hubbard 模型** を見る。遷移金属酸化物の d 軌道の電子状態としてよく用いられるハミルトニアンは次で与えられる。

$$H = -t \sum_{i,j,\sigma} \left(c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + h.c \right) + U \sum_i n_{i+}, n_{i-}$$

第1項は電子の運動エネルギーを表し、 $h.c$ はエルミート共役である。これは最隣接サイト間の電子のホッピングとみなせる。第2項は電子間に働くクーロンポテンシャルであり、上向き $+$ 、下向き $-$ のスピンの数を足し合わせている。

この時の相互作用は強く、デルタ関数的とする。 $c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma}$ は生成、消滅演算子で次のように反交換関係を持つ。

$$\left\{ c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma'} \right\} = \delta_{ij} \delta_{\sigma\sigma'}$$

となる。

8.4.4 Schur 対称多項式

前節の1粒子の場合は先に完全性をつくり、各スケールにおけるエンタングルメントを行列積で表した。次に多体系を考える。このばあいの直交関数をどうさがしたらよいだろうか。

はじめに周期的境界条件を持つ N 個の1次元自由電子系を考える。質量 $m = \hbar = c = 1$ として

$$\hat{p}_i = i \frac{\partial}{\partial q_i}$$

とするとポテンシャルを考えないので

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial^2 q_i^2} = \sum_{i=1}^N \hat{H}_i$$

となる。1体の演算子 H_i に対する波動関数の周期的境界条件は

$$\psi(q + L) = (-1)^{N-1} \psi(q)$$

となる。これは粒子数が奇数の時に境界条件は偶関数のように振る舞い、偶数のときには奇関数のようにふるまうからである。

よって許される波数の条件が

$$k \in \begin{cases} \mathbb{Z} & N : \text{odd} \\ \mathbb{Z} + 1/2 & N : \text{even} \end{cases}$$

となる。

8.5 経路積分によるレプリカ法

ここでいよいよエンタングルメント・エントロピーを場の理論に応用することを考える。

量子多体系において空間領域を A と B に分ける。格子系であればスピンの属するヒルベルト空間を $\mathcal{H}_A, \mathcal{H}_B$ とする。

これで多体系において、格子間隔を零にするような極限がとれ、時間一定な面で空間を A, B に分けることができる。

そこで次のような $d+1$ 次元の質量 m の実自由スカラー場理論の作用を考える。

$$S = \int dt d^d x \left[\frac{1}{2} (\partial_t \phi)^2 - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^d (\partial_i \phi)^2 - \frac{1}{2} m^2 \phi^2 \right]$$

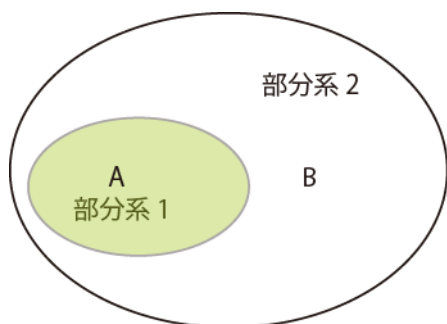


図 8.13: 例えば格子空間を A, B に分ける

ここで、スカラー場の d 次元空間成分を正方格子に離散化することを考える。

そこで、空間微分を次のような差分に置き換える。格子点の座標 \mathbf{x} と i 方向の単位ベクトルを \mathbf{n}_i として

$$\partial_i \phi(x) \simeq \frac{\phi_{\mathbf{x}+\epsilon \mathbf{n}_i} - \phi_{\mathbf{x}}}{\epsilon}$$

離散化により、無限個の調和振動子があると考えてよい。

A, B に属するヒルベルト空間を $\mathcal{H}_A, \mathcal{H}_B$ とする。

前章でみてきたように境界 $\partial A = \partial B$ があれば幾何学的にエントロピーが定義できる。

まず、

$$\frac{\partial}{\partial n} \log x^n = \log x$$

$$\frac{\partial}{\partial n} x^n = x^n \log x$$

であり、 $n=0$ で両者は一致する。

そこで $\text{Tr}_{\mathcal{H}_A} \rho_A^n = \text{Tr} \rho_A^n$ として、幾何学的にエントロピーを次のように定義する。

ただし、 n で微分した後に極限 $n \rightarrow 1$ をとるとする。

$$S_A = \lim_{n \rightarrow 1} \left[-\frac{\partial}{\partial n} \text{Tr} \rho_A^n \right] = \lim_{n \rightarrow 1} \left[-\frac{\partial}{\partial n} \log (\text{Tr} \rho_A^n) \right] \quad (8.27)$$

が元の理論の n 重のコピーをとったものの分配関数とみなせるのでレプリカ法という。

従って前節の内容から通常自然数の n に関して解析接続する必要がある。

この A に制限したトレースを計算するのにここでは経路積分を使う。

まず、関係する第 6 部でのファインマン核の導出を次で復習する。

8.5.1 PQ 順序付け

第 6 部の経路積分をここで復習すると時間順序をつけるために 1 つパラメータ α を増やして経路積分の振幅を次で定義した。

$$\begin{aligned}\langle q_i | H(P, Q; t_j) | q_{j-1} \rangle &= \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{ip_j(q_j - q_{j-1})/\hbar} H_j^{[\alpha]}(p_j, q_j^{(\alpha)}) \\ q^{(\alpha)} &= \left(\frac{1}{2} - \alpha\right) q_j + \left(\frac{1}{2} + \alpha\right) q_{j-1}\end{aligned}$$

α を加えたことで、次のように空間の自由度が広がり、順序づけがされた。

$\alpha = 1/2$ は **PQ** 順序

$$P^m Q^n = p^m q^n$$

$\alpha = -1/2$ は **QP** 順序

$$Q^m P^n = q^m p^n$$

$\alpha = 0$ は **Weyl** 順序

$$\frac{1}{2} (PQ + QP) = pq$$

$$\frac{1}{3} (P^2Q + PQP + QP^2) = p^2q$$

これから **Feynman** 核を次で定義した。

$$\begin{aligned}K(q_j, t_j; q_{j-1}, t_{j-1}) &= \int_{-\infty}^{\infty} dp \frac{1}{2\pi\hbar} e^{ip_j(q_j - q_{j-1})/\hbar} \left(1 - \frac{i}{\hbar} H_j^{[\alpha]}(p_j, q_{j-1}) \Delta t\right) \\ &\simeq \int_{-\infty}^{\infty} dp \frac{1}{2\pi\hbar} e^{ip_j(q_j - q_{j-1})/\hbar - i\Delta t H_j^{[\alpha]}/\hbar}\end{aligned}$$

同様に時間推進の演算子も

$$K(q_f, t_N; q_i, t_0) = \langle q_f | U(t_N, t_0) | q_i \rangle$$

$$U(t_N, t_0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \langle q_N | \prod_{j=1}^N dp_j dq_j \frac{1}{2\pi\hbar} e^{ip_j(q_j - q_{j-1})/\hbar - i\Delta t H_j^{[\alpha]}/\hbar} \int dq_0 \langle q_0 |$$

とおけて、分離できる。

ただし、ハミルトニアンと α の関係が次のようになる。

$\alpha = 1/2$ は **PQ** 順序

$$P^m Q^n = p^m q^n$$

$$H_j^{[1/2]}(p_j, q_{j-1})$$

$\alpha = -1/2$ は **QP** 順序

$$Q^m P^n = q^m p^n$$

$$H_j^{[-1/2]}(p_j, q_j)$$

$\alpha = 0$ は Weyl 順序で中点処方とも呼ばれ

$$\frac{1}{2} (PQ + QP) = pq$$

$$H_j^{[0]}(p_j, \frac{q_j + q_{j-1}}{2})$$

となる。

例えば次のようなハミルトニアンを考える。

$$H = PQP$$

QP 順序では

$$H^{(QP)} = QP^2 - i\hbar P$$

PQ 順序では

$$H^{(PQ)} = P^2Q + i\hbar P$$

である。

例えば古典的な粒子はハミルトニアンが

$$H(P, Q) = \frac{P^2}{2m} + V(Q)$$

の時、

$$H^{[\alpha]}(p, q) = \frac{p^2}{2m} + V(q)$$

となる。これから Feynman 核は次の積分公式を用いると、

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp e^{ap^2+bp} = \sqrt{\frac{\pi}{-a}} e^{-b^2/4a^2}$$

$$\Delta q_j \equiv q_j - q_{j-1}$$

$$p = m \left(\frac{\Delta q}{\Delta t} \right)$$

として

$$\begin{aligned} K(q_f, t_N; q_i, t_0) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{j=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{\infty} dq_j \prod_{j=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_j}{2\pi\hbar} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \left\{ p_j \Delta q_j - \Delta t \left(\frac{p_j^2}{2m} + V(q_j^{(\alpha)}) \right) \right\} \right] \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} \prod_{j=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} dq_j \\ &\quad \times \exp \left[\frac{i}{\hbar} \Delta t \sum_{j=1}^N \left\{ \frac{m}{2} \left(\frac{\Delta q_j}{\Delta t} \right)^2 - V(q_j^{(\alpha)}) \right\} \right]_{q_N=q_f, q_0=q_i} \end{aligned} \quad (8.28)$$

のよう Feynman 経路積分公式が求まる。

最後の位相項の $\frac{\Delta q_j}{\Delta t}$ は古典的な粒子速度であるが dp でガウス積分し運動量項は定数化され、第 1 項の $p_j \Delta q_j$ から来る Δp とともに時間推進の $(1 - \frac{i}{\hbar} \Delta t H)$ から来る Δt の比からなることに留意がいる。

さらに単純な自由粒子であれば

$$H^{[\alpha]}(p, q) = \frac{p^2}{2m} = \hat{H} \quad (8.29)$$

であるから p でガウス積分を実行し、

$$\begin{aligned} K(q_f, t_f; q_i, t_i) &= \langle q_f | \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_f - t_i) \right] | q_i \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dp \langle q_f | \exp \left[-\frac{ip^2}{2m\hbar}(t_f - t_i) \right] | p \rangle \langle p | q_i \rangle \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dp \langle p | \exp \left[-\frac{ip^2}{2m\hbar}(t_f - t_i) \right] | p \rangle \exp \left[\frac{i}{\hbar} (q_f - q_i) p \right] \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{2\pi m\hbar}{i(t_f - t_i)}} \exp \left[\frac{im(q_f - q_i)^2}{2\hbar(t_f - t_i)} \right] \\ &= \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i(t_f - t_i)}} \exp \left[\frac{im(q_f - q_i)^2}{2\hbar(t_f - t_i)} \right] \end{aligned} \quad (8.30)$$

と求まる。一般に次の振幅を求める。

$$K(q_f, t_f; q_i, t_i) = \langle q_f, t_f | q_i, t_i \rangle \quad (8.31)$$

として、隣接間について次のように H を外に出す。

$$\begin{aligned} K(q_{j+1}, t_{j+1}; q_j, t_j) &= \langle q_{j+1} | \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t_{j+1} \right] \exp \left[\frac{i}{\hbar} \hat{H} t_j \right] | q_i \rangle \\ &= \langle q_{j+1} | \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \hat{H} (t_{j+1} - t_j) \right] | q_i \rangle \\ &= \langle q_{j+1} | \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \tau \right] | q_i \rangle \\ &= \langle q_{j+1} | \left(1 - \frac{i}{\hbar} \hat{H} \tau + \dots \right) | q_i \rangle \\ &= \delta(q_{j+1} - q_j) - \frac{i}{\hbar} \tau \langle q_{j+1} | \hat{H} | q_i \rangle \end{aligned} \quad (8.32)$$

ただし、

$$\tau \equiv \frac{t_f - t_i}{n}$$

とした。ここに順序積が関係してくる。

第2項について Weyl 順序を用いれば

$$\begin{aligned} \langle q_{j+1} | \hat{H} | q_i \rangle &= \int dp_j \langle q_{j+1} | p_j \rangle \langle p_j | \hat{H} | q_i \rangle \\ &= \int dp_j \langle q_{j+1} | p_j \rangle \langle p_j | q_j \rangle \hat{H} \left(p, \frac{q_{j+1} + q_j}{2} \right) \end{aligned}$$

平均値を

$$\bar{q} \equiv \frac{q_{j+1} + q_j}{2}$$

とすると

$$\langle q_{j+1} | \hat{H} | q_j \rangle = \int dp_j \langle q_{j+1} | p_j \rangle \langle p_j | q_j \rangle \hat{H}(p, \bar{q}) = \langle q_j | p_j \rangle \hat{H}(p, \bar{q})$$

となる。

これから次のポテンシャルを含むハミルトニアンの場合について

$$H^{[\alpha]}(p, q) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{q})$$

まず、運動量部分について完全性を2つはさみ

$$\begin{aligned} \langle q_{j+1} | \frac{\hat{p}^2}{2m} | q_i \rangle &= \int dp_j dp'_j \langle q_{j+1} | p_j \rangle \langle p_j | p'_j \rangle \langle p'_j | q_i \rangle \frac{p_j'^2}{2m} \\ &= \int dp_j dp'_j \frac{1}{2\pi\hbar} \exp\left[\frac{i}{\hbar} q_{j+1} p_j - q_j p'_j\right] \delta(p_j - p'_j) \frac{p_j'^2}{2m} \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp_j \exp\left[\frac{i}{\hbar} p_j (q_{j+1} - q_j)\right] \frac{p_j^2}{2m} \end{aligned}$$

ポテンシャル項については、この場合 q のみの関数を考えているので

$$\begin{aligned} \langle q_{j+1} | V(\hat{q}) | q_i \rangle &= V(\bar{q}) \langle q_{j+1} | q_j \rangle \\ &= V(\bar{q}) \delta(q_{j+1} - q_j) \end{aligned}$$

が得られる。 δ 関数の定義から

$$\delta(q_{j+1} - q_j) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dp_j \exp\left[\frac{i}{\hbar} p_j (q_{j+1} - q_j)\right] \quad (8.33)$$

とおくと 8.32 は次のように計算できる。

$$\begin{aligned} \langle q_{j+1}, t_{j+1} | q_j, t_j \rangle &= \delta(q_{j+1} - q_j) - \frac{i}{\hbar} \tau \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp_j \exp\left[\frac{i}{\hbar} p_j (q_{j+1} - q_j)\right] H(p_j, \bar{q}_j) + \dots \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp_j \exp\left[\frac{i}{\hbar} p_j (q_{j+1} - q_j)\right] - \frac{i}{\hbar} \tau \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp_j \exp\left[\frac{i}{\hbar} p_j (q_{j+1} - q_j)\right] H(p_j, \bar{q}_j) + \dots \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp_j \exp\left[\frac{i}{\hbar} p_j (q_{j+1} - q_j)\right] \left(1 - \frac{i}{\hbar} \tau H(p_j, \bar{q}_j) + \dots\right) \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp_j \exp\left[\frac{i}{\hbar} \{p_j (q_{j+1} - q_j) - H(p_j, \bar{q}_j) \tau\}\right] \end{aligned}$$

となることからこれを次々に挿入し、全振幅が

$$\begin{aligned} \langle q_f, t_f | q_i, t_i \rangle &= \int \dots \int dq_1 \dots dq_n \langle q_f, t_f | q_n, t_n \rangle \langle q_n, t_n | q_{n-1}, t_{n-1} \rangle \dots \langle q_1, t_1 | q_i, t_i \rangle \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \int \prod_{j=1}^n dq_j \frac{1}{2\pi\hbar} \int \prod_{j=0}^n dp_j \exp\left[\frac{i}{\hbar} \sum_{j=0}^n \{p_j (q_{j+1} - q_j) - H(p_j, \bar{q}_j) \tau\}\right] \end{aligned}$$

と求まる。この式で $n \rightarrow \infty$ とすれば

$$\langle q_f, t_f | q_i, t_i \rangle = \iint Dq Dp \exp\left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_f} d\tau \{p\dot{q} - H^{[\alpha]}(p, q; \tau)\}\right] \quad (8.34)$$

とかけるのでこれをハミルトニアン経路積分公式という。
また、式 8.28 でも同様に $N \rightarrow \infty$ とすれば

$$K(q, t; q_0, t_0) = \int Dq \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau \left\{ \frac{m}{2} \dot{q}^2 - V(q) \right\} \right]$$

となり、これをラグランジアン積分公式という。

8.5.2 レプリカ場

経路積分が基本的には時空間を分割して、粒子がどこに行くか確率的に表しているので、複数の系を含む密度行列の算出と関係する。ここで式 8.27 の幾何学的にエントロピーにもどる。

$$S_A = \lim_{n \rightarrow 1} \left[-\frac{\partial}{\partial n} T_r \rho_A^n \right] = \lim_{n \rightarrow 1} \left[-\frac{\partial}{\partial n} \log (T_r \rho_A^n) \right]$$

まず、ユークリッド化でやったように時間 t のウィック回転を用いて

$$x_0 = it \tag{8.35}$$

で置き換える。ここでは簡単のために $d = 1$ の 2 次元の場合を考える。座標を時空表示に書き換えて、作用 S を場 $\phi(x_0, x_1)$ の汎関数とする。

ユークリッド化した分配関数 Z は式 8.28 から次のような経路積分で表すことができる。

$$Z = \int \prod_{-\infty < x_0 < \infty} \prod_{x_1} [D\phi(x_0, x_1)] e^{-S[\phi(x_0, x_1)]} \tag{8.36}$$

ここで時刻 $x_0 = X_0$ での波動関数 Ψ は場の配位関数 $\phi(X_0, x_1)$ の汎関数である。
時間並進対称性があれば適当な基準として

$$X_0 = 0$$

とすることができる。そこでこの波動関数を $\Psi[\phi(0, x_1)]$ と書くことにする。
ここでのアイディアは一般にこの場合の汎関数を式 8.33 から逆に δ 関数をもってきて、

$$\delta(q_{j+1} - q_j) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dp_j \exp \left[\frac{i}{\hbar} p_j (q_{j+1} - q_j) \right]$$

が成り立ったので

$$\begin{aligned} \phi(0, x_1) &= q_{j+1} \\ \phi(x_0, x_1) &= q_j \\ x_0 &= p_j \end{aligned}$$

とみなせば、

$$\delta[\phi(0, x_1) - \phi(x_0, x_1)] = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 \exp [ix_0 (\phi(0, x_1) - \phi(x_0, x_1))]$$

が成り立つ。

そこで

$$\Psi[\phi(x_0, x_1)] = \frac{1}{\sqrt{Z}} \int \prod_{-\infty < x_0 < 0} \prod_{x_1} [D\phi(x_0, x_1)] e^{-S[\phi(x_0, x_1)]} \delta[\phi(0, x_1) - \phi(x_0, x_1)] \tag{8.37}$$

とかく。また、この複素共役が時間を未来に移して

$$\Psi^* [\phi(x_0, x_1)] = \frac{1}{\sqrt{Z}} \int \prod_{0 < x_0 < \infty} \prod_{x_1} [D\phi(x_0, x_1)] e^{-S[\phi(x_0, x_1)]} \delta[\phi(0, x_1) - \phi(x_0, x_1)] \quad (8.38)$$

とおく。

さて、時間反転し、ユークリッド時間 x_0 に関して $-\infty$ まで積分することを考える。

演算子表現では時間推進演算子であるハミルトニアン H と式 8.35 から

ウィック回転の効果から $it \rightarrow -T$ で置き換えると

$$\lim_{T \rightarrow \infty} e^{-TH}$$

という作用をさせることになり、これは基底状態とみなせる。

ここで任意の汎関数 $G[\phi(x_1)]$ に対して δ 関数の性質から

$$\int \prod_{x_1} [D\phi(x_1)] G[\phi(x_1)] \cdot \delta[\phi(x_1) - \tilde{\phi}(x_1)] = G[\tilde{\phi}(x_1)]$$

が成り立つ。さらに式 8.37 から、規格化条件

$$\int \prod_{x_1} [D\phi(x_1)] \Psi[\phi(x_1)] \Psi^*[\phi(x_1)] = 1$$

も成り立つことがわかる。よって全体系の密度行列 ρ_{tot} がこの波動関数を用いて一般に

$$[\rho_{tot}]_{\phi_-(x_1)\phi_+(x'_1)} = \Psi[\phi_-(x_1)] \Psi^*[\phi_+(x'_1)]$$

のようにかける。

ここから前章の部分トレースをとることを波動関数でおこなう。

具体的には次のように δ 関数がつくられる作られる仕組みができる。

この添え字（足）が関数になっていることに留意する。

この時、下図 (a) のようにこの関数 ϕ_{\pm} は過去から未来への接続が必要なリーマン葉を接続する。

つまり、場の理論のヒルベルト空間は時刻 $x_0 = 0$ に配位関数 $\phi(x_1)$ の関数全体で張られる空間になる。

さらに詳しく図 (a) のように空間領域を A と B に分ける。

$x_0 = t_E$ はユークリッド化した時間で、空間方向 $x_1 = x$ の 2 次元上に場の理論をつくっている。

A に制限された密度行列 ρ_A は B に関してトレースをとる必要がある。

これは B に関してトレースをとるので $x_0 = 0$ における B 上の場の配位について経路積分することに等しい。つまり、経路積分をおこなう領域は全体から $x_0 = 0$ の領域 A を除いた領域になる。

従って、領域 A の上側と下側での場の値が ρ_A の行列としての足になるわけである。

つまり、領域 A の上側からの境界条件は場の未来方向への伝播のみで

$$\delta[\phi(+0, x_1) - \phi_+(x_1)]$$

であり、領域 A の下側からの境界条件は場の過去方向の伝播のみで

$$\delta[\phi(-0, x_1) - \phi_-(x_1)]$$

となる。

従って、時刻 $x_0 = 0$ において $\phi(x_0 = 0)$ を挟んで、

$$\begin{aligned} [\rho_A]_{\phi_-\phi_+} &= |\Psi[\phi_-(x_1)] \langle \Psi^*[\phi_+(x'_1)] | \\ &= \frac{1}{Z} \int \prod_{0 < x_0 < \infty} \prod_{x_1} [D\phi(x_0, x_1)] e^{-S[\phi(x_0, x_1)]} \\ &\quad \cdot \prod_{x_1 \in A} \delta[\phi(-0, x_1) - \phi_-(x_1)] \cdot \delta[\phi(+0, x_1) - \phi_+(x_1)] \end{aligned} \quad (8.39)$$

のようにかける。

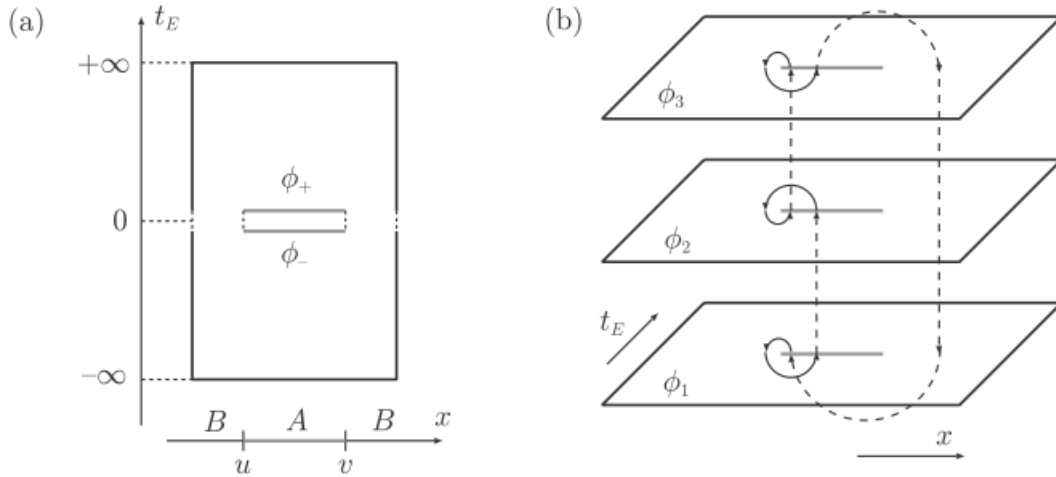


図 8.14: [81] より : a) は経路積分を表している。b) 3 葉のリーマン面を表している。

これは図 (b) のように ϕ_{tot} は A, B の全空間をループして、かつ、点線で示されているように各リーマン葉を同じ回転の向きに閉じている。

この 2 つの δ 関数の存在で、式 7.36 から分配関数式 8.36 を用いると

$$\text{Tr} \rho_A = \sum_{\phi_- = \phi_+} [\rho_A]_{\phi_- \phi_+} = 1$$

が成り立っている。

次に $\text{Tr} \rho_A^n$ を計算することを考える。

これは経路積分を n 回コピーして隣り合ったもの同士の上側と下側の配位に関してトレースをとればよい。

$$\left(\prod_{j=1}^n [D\phi_j] \right) [\rho_A]_{\phi_1 \phi_2} [\rho_A]_{\phi_2 \phi_3} \cdots [\rho_A]_{\phi_n \phi_1}$$

これは図 (b) のように $\text{Tr} [\rho_A^n]$ は裏表のある板を貼り合わせて 2 次元リーマン面 Σ_n 上の分配関数を規格化したものとみなせる。

式 8.39 より

$$\text{Tr} [\rho_A^n] = (Z)^{-n} \prod_{(x_0, x_1) \in \Sigma_n} [D\phi(x_0, x_1)] e^{-S[\phi]}$$

別にレプリカ場を用いることができる。場の理論は局所的には拡張ユークリッド空間 $\mathbb{R}^2 = \mathbb{C}$ 上に展開できる。

リーマン葉のイメージ各葉をシートに対応させ、1 枚の 2 次元シートを考えるのである。

それぞれに、に等価な n 個のレプリカ場

$$\phi^{(1)}, \phi^{(2)}, \dots, \phi^{(n)}$$

を導入する。もともと領域 A でシートはつながっていたから、 u, v を領域 A での両端点 ∂A での複素座標とする。

つまり、ここで裏面と表面が接続するのだから次の境界条件が成り立つ。

$$\phi^{(k)}(e^{2\pi i}(\omega - u)) = \phi^{(k+1)}(\omega - u)$$

$$\phi^{(k)}(e^{2\pi i}(\omega - v)) = \phi^{(k-1)}(\omega - v) \quad (8.40)$$

ただし、2次元の座標を $x_0 + ix_1$ とし、 ω は任意の複素数である。

このように両端点の周りで A をまたぐように1周すると次のシートに移る Σ_n の幾何学的特徴を表している。従って次の図のような単純なモデルに帰着できる。

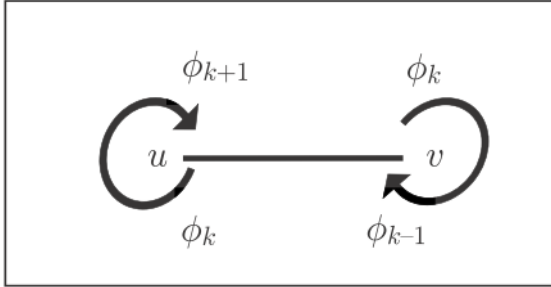


図 8.15: [81] より: $Tr\rho_A^n$ の計算に現れるレプリカ場の境界条件

ただし、この境界条件があると \mathbb{R}^2 のレプリカ場の分配関数が計算できれば $Tr[\rho_A^n]$ が求まる。

このメリットは高次元化が用意であることである。

例えば領域 A が $x_1 > 0$ で定義される場合、全空間 \mathbb{R}^d の半分で与えられる。

この場合には (x_0, x_1) で張られる \mathbb{R}^2 とそれ以外の \mathbb{R}^{d-1} に分けると \mathbb{R}^{d-1} 側は自明な直積になる。

よって、2次元の理論がそのまま使えることになる。次のこの方法をみていく。

8.6 計算例

場の理論上でのエンタングルメントエントロピーの計算を $d+1$ 次元の自由スカラー場で考えてみる。

次の図のように時間一定面を (x_1, x_2, \dots, x_d) で張られる d 次元の空間 \mathbb{R}^d で表す。これを $d-1, 1$ 次元に分け、 A, B とする。

また、この境界面を $x_1 = 0$ とする。

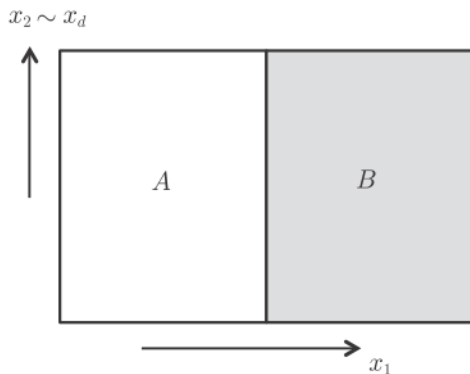


図 8.16: [81] より:部分系 A, B に分ける

簡単のため、ウィック回転 $t = -ix_0$ を用いて \mathbb{R}^{d+1} 空間全体をユークリッド化する。

自由ボソン粒子のハミルトニアンを

$$H^2 \simeq \hbar^2 k^2 + m^2 c^2$$

とし、ここでは $\hbar = c = 1$ とする。

さらに座標 x_0, \dots, x_d をフーリエ変換した時の波数を k_0, \dots, k_d として、自由スカラー場の分配関数は次のようになる。

$$\log Z_{\mathbb{R}^{d+1}} = -\frac{1}{2} \frac{V_{d+1}}{(2\pi)^{d+1}} \int_{|k| \leq \Lambda} d^{d+1}k \log(k^2 + m^2)$$

ただし、 V_{d+1} は \mathbb{R}^{d+1} の無限大の体積である。

$\Lambda = \frac{1}{\epsilon}$ 運動量の最大値として、フーリエ変換のカットオフである。

この分配関数をシュウィンガーのパラメタ s で書き換えると

$$\begin{aligned} \log Z_{\mathbb{R}^{d+1}} &= \frac{V_{d+1}}{(2\pi)^{d+1}} \int_{\epsilon^2}^{\infty} \frac{ds}{s} \int d^{d+1}k e^{-s(m^2+k^2)} \\ &= V_{d+1} \int_{\epsilon^2}^{\infty} \frac{ds}{2s} (4\pi s)^{-\frac{d+1}{2}} e^{-sm^2} \end{aligned} \quad (8.41)$$

となる。

エンタングルドエントロピーを計算するのは $\text{Tr} \rho_A^n$ を求めないといけない。

ここで前節の式 8.40 のような周期性を考え、 \mathbf{n} が自然数の場合は対角和 $\text{Tr} \rho_A^n$ は境界 ∂A の周りに n 周巻きつけてできている $d+1$ 空間での分配関数と解釈する。

また、 $n = 1/N$ の場合は対角和 $\text{Tr} \rho_A^n$ は \mathbb{R}^{d+1} を N 分の $\mathbf{1}$ にしたオービーフィールド空間とみなす。

この場合は $\frac{\mathbb{R}^2}{\mathbb{Z}_N}$ を (x_0, x_1) で貼られる \mathbb{R}^2 を角度 $\theta = \frac{2\pi}{N}$ の回転角の変換行列 g を用いて

$$g : (x_0, x_1) \rightarrow (\cos \theta \cdot x_0 - \sin \theta \cdot x_1, \sin \theta \cdot x_0 + \cos \theta \cdot x_1)$$

を同一視した空間になる。 $g^N = 1$ なので群としては \mathbb{Z}_N であり、対角和 $\text{Tr} \rho_A^n$ は空間

$$\frac{\mathbb{R}^2}{\mathbb{Z}_N} \times \mathbb{R}^{d-1}$$

の分配関数とみなすことができる。

レプリカ法は n に関して解析接続する必要があるが n が自然数の場合も $n = 1/N$ の分数の場合も同じ結果になると期待できる。

そこで同一視の条件 $g = 1$ を考慮するために射影演算子

$$\sum_{j=0}^{N-1} \text{Tr} \left(\frac{g^j}{N} \right)$$

を挿入して対角和をとると式 8.41 より、

$$\log Z_{\mathbb{R}^2/\mathbb{Z}_N \times \mathbb{R}^{d-1}} V_{d-1} \int_{\epsilon^2}^{\infty} \frac{ds}{2s} (4\pi s)^{-\frac{d-1}{2}} e^{-sm^2} \cdot \sum_{j=0}^{N-1} \text{Tr} \left(\frac{g^j}{N} \right)$$

となる。 $j \neq 0$ の場合は

$$\text{Tr} g^j = \int d^2k \langle \mathbf{k} | g^j | \mathbf{k} \rangle = \int d^2k \delta^2(\mathbf{k} - g^j \cdot \mathbf{k}) = \frac{1}{4 \sin^2 \frac{\pi j}{N}}$$

と計算できる。 $|\mathbf{k}\rangle$ は運動量状態を表す。ここで次の級数の公式を利用する。

$$\sum_{j=1}^{N-1} \frac{1}{\sin^2 \frac{\pi j}{N}} = \frac{N^2 - 1}{3}$$

さらにレプリカの公式を利用し、 A に制限されたエントロピーが次のように求まる。

$$S_A = -\frac{\partial}{\partial(1/N)} \left(\log Z_{\mathbf{R}^2/Z_N \times \mathbf{R}^{d-1}} - \frac{1}{N} \log Z_{\mathbf{R}^{d+1}} \right) \\ = \frac{\pi}{3} V_{d-1} \int_{\epsilon^2}^{\infty} \frac{ds}{2s} (4\pi s)^{-\left(\frac{d+1}{2}\right)} e^{-sm^2}$$

となる。ここで $j=0$ の寄与は相殺していることに留意する。積分区間の $\epsilon \rightarrow 0$ とすると、これは紫外極限とみなせるが明らかに

発散してしまう。この時の主要項は $d > 1$ の場合に

$$S_A = \frac{V_{d-1}}{6(d-1)(4\pi)^{\frac{d-1}{2}}} \cdot \frac{1}{\epsilon^{d-1}} + O\left(\epsilon^{-(d-3)}\right) \quad (8.42)$$

となることがわかる。

$d=1$ の場合は簡単に

$$S_A = -\frac{1}{6} \log(m\epsilon)$$

となる。場の理論が無限大の自由度を扱うのでエントロピーは発散する。そのために紫外カットオフを最初に指定しないとイケない。

紫外発散の問題が残る。質量が 0 でスカラーの場合はシンプルに $O(\epsilon^{-(d-1)})$ の主要項のみになる。

8.7 面積則

式 8.42 は発散の主要項が A と B を分ける境界 ∂A の面積に比例していることがわかる。

場の理論の面積則は $d+1 > 2$ の次元について

$$S_A = \gamma \cdot (\text{Surface of } \partial A) \cdot \frac{1}{\epsilon^{d-1}} + O\left(\epsilon^{-(d-2)}\right)$$

と表される。ここでの γ は理論で決定できる数値定数である。紫外固定点があり、高エネルギーでスケール対称性を持つ。

ただし、 $d=1$ の場合はスケール不変な理論では第 1 部の調和関数の 2 次元の場合のように

$$S_A = \log \frac{\text{Length of } \partial A}{\epsilon}$$

となり、log 的な振る舞いをする。

一般のエネルギーギャップがある量子多体系でも ϵ を紫外カットオフ、もしくは格子間隔のように解釈して、相互作用が局所的であれば基底状態に対して面積則が成り立つ。

自由場理論では証明もあり、相互作用が強い場合は AdS/CFT を用いて確認されている。

よって、熱力学なエントロピーが体積に比例しているのに対し、エンタングルメント・エントロピーは表面積に比例する。

これは系が純粋状態であれば任意の A の取り方に対して式 7.46 のように

$$S_A = S_B$$

が成り立つ。

8.8 アンダーソン局在

量子論的な粒子をモデル化する取り組みとして古くはアンダーソンにより式??から

系に乱れを含んだ離散的な空間格子モデルのハミルトニアンとして

$$h = \sum_{x,y} \epsilon_{xy} |x\rangle \langle y| + \sum_x v_x |x\rangle \langle x|$$

として、 ϵ_{xy} は x, y が最近接の時のみ $\epsilon_{xy} = \epsilon > 0$ の値をとり、 v_x は区間 $[-W, W]$ において、一様分布に従って、ランダムな値をとるものとした。

アンダーソン自身は ϵ_{xy} が距離の -3 乗より速く減少するケースを考えていた。

このような格子モデルは量子コンピューターの基本になった。

時刻 t , 位置 site x における粒子の確立振幅を $a_x(t)$ とすると。シュレディンガー方程式から

$$i \frac{d}{dt} a_x(t) = \sum_y \epsilon_{xy} a_y(t) + v_x a_x(t)$$

アンダーソンの局在定理は時刻 $t = 0$ において site k に集中した波動関数

$\{a_j(t)\}_j (a_j(0) = \delta_{jk})$ は $t \rightarrow \infty$ においても site k に集中する。この波動関数の空間的局在が系の乱れに起因している。

というものである。

おもしろいことに相関のないランダムさが空間上に局在をつくる。

相関のない分布からガウス分布が得られたが、これは波動関数と関係する。

この関係は前節の Ising モデルでもみたように繰り込みにも関係した。基礎的な物理内容を含んでいる。

8.9 応用例 [93]

8.9.1 画像処理

特異値分解をつかう応用例として画像処理を考える。

画像データを $M \times N$ の行列 A と考える。例えば $A(x, y)$ がピクセル (x, y) 座標の色を表すと考えればよい。

M, N のサイズは異なってもよい。はじめに画像データを特異値分解用いて要素に分解する。

$$r = \text{rank} A$$

として、式 7.5 より U_l, V_l を直交行列として l を階層構造を表すパラメタとして

$$A(x, y) = \sum_{l=1}^r U_l(x) \sqrt{\lambda_l} V_l(y)$$

$$A^{(l)}(x, y) = U_l(x) \sqrt{\lambda_l} V_l(y) \quad (8.43)$$

ただし、 $\sqrt{\lambda_l}$ が大きい順に

$$\lambda_1 > \lambda_2 > \dots > \lambda_\chi \quad (\chi \leq r)$$

に対して、

$$A_\chi(x, y) = \sum_{l=1}^{\chi} A^{(l)}(x, y)$$

を導入すると、この固有値は大きいので $A(x, y)$ に対する最適な χ 次近似とすることができる。

よって $A_\chi(x, y)$ がもつ情報量が式 7.7 の $S(\chi)$ で表すことができる。

ここで特異値分解の隠れたスケール分解を調べる。

例として次の図を考え、色のついているピクセルにより構成されている部分を構造と呼ぶことにする。

図の左半分には大きな (2×2) の正方形の構造があり、右上にはそれより小さい構造がある。

色のついたピクセルを $A(x, y) = +1$ 、これ以外は $A(x, y) = -1$ で表すと、この図は

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \end{pmatrix}$$

となる。

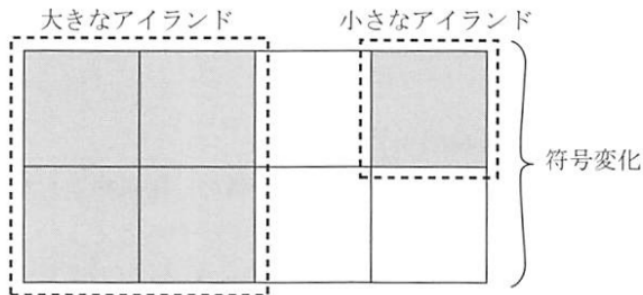


図 8.17: [93] より : 2×4 ピクセルの画像

ここで画像の各成分の密度行列を次のように計算する。

$$\rho_x = AA^t = \begin{pmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 4 \end{pmatrix}$$

$$\rho_y = A^t A = \begin{pmatrix} 2 & 2 & -2 & 0 \\ 2 & 2 & -2 & 0 \\ -2 & -2 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

のように異なるランクの行列になるが固有値を計算すると

$$\rho_x \rightarrow \{6, 2\}$$

$$\rho_y \rightarrow \{6, 2, 0, 0\}$$

となるので 0 ではない固有値は一致し、

$$\lambda_1 = 6, \lambda_2 = 2$$

とする。 ρ_y はブロック対角化されている。

ゼロとなる非対角項は小さい構造を含んだ 4 列目のベクトルと大きな構造に含まれる列ベクトルとの内積によるものである。つまり、内積の計算で符号が反対になり、値が 0 になる。これは物性論の乱雑位相近似の考えとよく似ている。

逆に 3×3 の部分は符号が同じベクトルの内積なので絶対値が等しくなる。

従って対角化はバンド理論のエネルギー準位の混成軌道と同様に、固有値が大きいものとゼロとに分裂する。そこで具体的に画像お n 再構成をおこなうと。部分密度行列 ρ_x の固有ベクトルが

$$|u_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, |u_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

部分密度行列 ρ_y の固有ベクトルが

$$|v_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |v_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

となることから、これらの外積の組み合わせで式 8.43 から

$$A^{(1)} = U_l(x)\sqrt{\lambda_l}V_l(y) = \sqrt{6}|u_1\rangle\langle v_1| = \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$A^{(2)} = U_l(x)\sqrt{\lambda_l}V_l(y) = \sqrt{2}|u_2\rangle\langle v_2| = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

となり

$$A = \sum_{n=1}^2 A^{(n)} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \end{pmatrix}$$

が再構成できる。このように特異値分解はランク (スケール) の異なるデータを分解するのに便利である。

8.9.2 フラクタル画像のエントロピー

前章でエンタングルメントエントロピーが系の大きさに依存せず、境界面の面積と関係することを見た。

ここではフラクタル次元を取り入れて、これをさらに深めたい。

相似な図形が対称的に現れるフラクタル図形は特異値分解と相性がよい。

まず次のようにテンソル積を用いてフラクタルを定義する。

はじめにフラクタルの単位格子を $h \times h$ 行列 H とする。

図の有名な Sierpinski のカーペットの場合は白ピクセルを 0、黒ピクセルを 1、 $h = 3$

として、

$$H = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

となる。

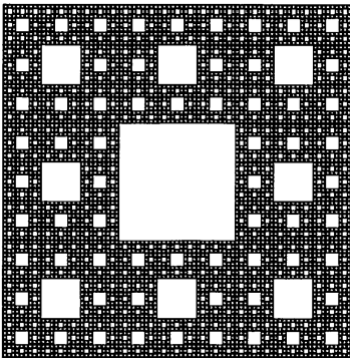


図 8.18: [93] より : Sierpinski のカーペット

これを単位格子として N 回のスケール変換をおこなうと、フラクタル図形は

$$M = H \otimes H \otimes \cdots \otimes H$$

とテンソル積になる。

例えば $N = 2$ の場合は次のようになる。

$$H \otimes H = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

行列 M を $L \times L$ の正方行列とすとフラクタル単位格子 $H = h \times h$ で構成されるから

$$L = h^N$$

となることがわかる。上の例では $H \otimes H$ の行、列共に 3^2 になっている。

また、単位格子行列 H のゼロでない固有値は 2 つあることがわかる。

これは $\sum \gamma = 1$ で規格化しておく

$$\gamma_1 = \frac{1 \pm \sqrt{3}}{2}$$

となっていることがわかる。

さらに次の 2 乗行列を考えると

$$M^2 = H^2 \otimes H^2 \otimes \dots \otimes H^2$$

と表すことができる。 H^2 の固有値は規格化して

$$\gamma_2 = \frac{1}{2} \pm \frac{\sqrt{3}}{4}$$

である。常に 2 つの固有値 γ_{\pm} について

$$\gamma_- = 1 - \gamma_+$$

が成り立つ。この時の M^2 の固有値も

$$\lambda_i = \gamma_+^i \gamma_-^{N-i} = \gamma_+^i (1 - \gamma_+)^{N-i}$$

が成り立ち、縮重度 g はこの 2 項係数で与えられる。よってこの場合のエントロピーは

$$S = - \sum_{i=1}^N C_{N;i} \lambda_i \log \lambda_i = \left(- \sum_{i=\pm} \gamma_i \log \gamma_i \right) N \propto \log L$$

と書ける。つまり、エントロピーはシステムサイズ L の対数に依存する。

9 量子光学 [5][96][133]

9.1 空洞の熱平衡 [133]

何もない空洞にもエネルギーがある。これが輻射によるエネルギーである。第 5 部で電磁波については扱い、その場の理論は第 6 部で主に扱う。それらの基本は歴史的にも黒体輻射として、空洞のエネルギーモードが考察されてきた。主題である量子論の観測の問題は第 9 部で扱うが、そこでは環境の密度行列が重要になる。興味あることにここでも空洞という場に有限の領域を考え、その境界条件が理論の柱になる。

例えば図のような1辺 L の立方体を考えることが多い。この時、空洞の壁は完全な導体として電場 \mathbf{E} の接線成分は0になるとするわけである。

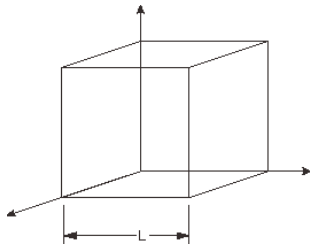


図 9.1: 1 辺 L の立方空洞

この空洞が温度 T で熱平衡になっているとする。内部の電場を \mathbf{E} とすると波動方程式

$$\nabla^2 \mathbf{E} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t^2}$$

と Maxwell 方程式は内部に電荷は無いので

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 0$$

電場 \mathbf{E} の境界での接線成分が0になるので条件を満たす電場の成分は

$$E_x(\mathbf{r}, t) = E_x(t) \cos(k_x x) \sin(k_y y) \sin(k_z z)$$

$$E_y(\mathbf{r}, t) = E_y(t) \cos(k_x x) \cos(k_y y) \sin(k_z z)$$

$$E_z(\mathbf{r}, t) = E_z(t) \sin(k_x x) \sin(k_y y) \cos(k_z z)$$

であり、境界条件から整数 n として

$$k_x = n_x \frac{\pi}{L}, k_y = n_y \frac{\pi}{L}, k_z = n_z \frac{\pi}{L} \quad (9.1)$$

が成り立つ必要がある。ただし、これは境界の空間の形状に依存することになる。

また、空洞内の電場が0ではないためには、整数 n_x, n_y, n_z のうちに1つしか0をとれない。ここでさらに、 $\mathbf{E}(t)$ が \mathbf{k} と直交する条件をつける。

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}(t) = 0$$

これは電場の変位方向と、進行方向が直交することになる。したがって、例えば z 方向に進行した場合、 x, y の2つの方向が独立した自由度をもつ。

また、境界条件は波動ベクトルの成分が n_x, n_y, n_z で指定される離散値をとる。

この組 (n_x, n_y, n_z) が1つのモードを表すが、先に述べたように、2つの独立自由度があるので2つの自由度のペア組を決める。

例えば $n = 0, 1, 2, 3, 4$ の場合が次の図のようになるが、 n_x, n_y, n_z のうち2つ以上が0になるところは格子点上にはない。

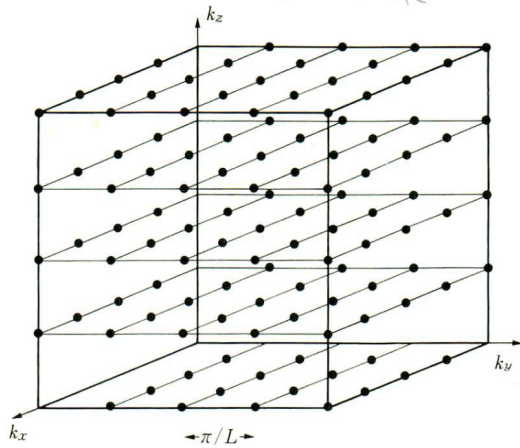


図 9.2: [133] より：各格子点が可能なモードを表す。

このモデルは波数空間を表しているので、波数ベクトルが k と $k + dk$ の間にあるような場のモードの数を求めると、これ半径 k と $k + dk$ の球殻内の体積を考えればよいが、 $k > 0$ とするとこの体積は

$$V(k) = \frac{1}{8} 4\pi k^2 dk \quad (9.2)$$

である。一方で基本状態の単位体積は式 9.1 より $n = 1$ として、

$$\left(\frac{\pi}{L}\right)^3$$

の空間を占めているので、モードの数は 2 つの自由度を考慮して

$$N = \frac{1}{8} \frac{4\pi k^2 dk}{(\pi/L)^3} \times 2 \quad (9.3)$$

となる。

この時の場のモード密度を ρ_k として、空洞の単位体積当たりのモード数は式 9.3 から

$$\rho_k dk = \frac{N}{V} = \frac{N}{L^3} = \frac{1}{\pi^2} k^2 dk \quad (9.4)$$

となる。この結果は一般的に成り立ち、空洞の形状と無関係である。

あるモードの角振動数 ω と波数 k の間には次の関係が $V = f\lambda$ の波の式に対応して、

$$\omega = ck$$

が成り立つ。式 9.4 から

$$\rho_\omega d\omega = \frac{1}{\pi^2 c^3} \omega^2 d\omega$$

が得られる。実際の計算にはこの式が有用である。

例えば波数での足し合わせは次のように積分で表すことができる。

$$\sum_k \rightarrow \int \frac{V k^2}{\pi^2} dk \rightarrow \int \frac{V \omega^2}{\pi^2 c^3} d\omega$$

9.2 場のエネルギー量子化 [133]

前節によって電磁場が空間依存することがわかった。第 3 部の熱統計力学の考えを利用して量子化をする。

電場の単振動の式から

$$\frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = -\omega^2 \mathbf{E}(t)$$

$$\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}_0 \exp(-i\omega t)$$

となる。第5部でみた電磁場のエネルギーは空洞の体積を V として

$$\frac{1}{2} \int_V \left(\epsilon_0 \mathbf{E}^2 + \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B}^2 \right) dV \quad (9.5)$$

$$c = (\epsilon_0 \mu_0)^{-1/2}$$

単振動をしているので複素量 C の積の平均値を次で定義しておく、実効値の定義と同様で、これをサイクル平均という。

$$\overline{(\operatorname{Re}[C_1]) \cdot (\operatorname{Re}[C_2])} = \frac{1}{2} \operatorname{Re}(C_1 C_2^*)$$

場には電場以外に磁場がり、各モードで次の Maxwell 方程式を満たす。

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$$

これから

$$\mathbf{B}(t) = \mathbf{B}_0 \exp(-i\omega t)$$

$$\mathbf{E}(x) = \mathbf{E}_0 \exp(-ikx)$$

とすると $c = \omega/k$ から

$$\mathbf{B}_0 = \left(\frac{k}{\omega} \right) \mathbf{E}_0 = (\epsilon_0 \mu_0)^{1/2} \mathbf{E}_0$$

の関係がある。従って電場のエネルギーへの寄与と磁場のエネルギーへの寄与は等しく、全エネルギーの平均値をどちらかで表すことができ、電場を用いると式 9.5 から

$$U = \frac{1}{2} \int_V \epsilon_0 |\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)|^2 dV$$

となる。

ここに Plank の量子仮説を取り入れて

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \quad (9.6)$$

というエネルギーを振動子が持つとすると、これが U に等しいとして

$$\frac{1}{2} \int_V \epsilon_0 |\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)|^2 dV = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega$$

のように量子化される。この式は半古典的で、左辺は空間に広がる波の振幅の大きさの2乗を足し合わせている。しかし、右辺は零点エネルギーに加えて、存在する量子の数である。ただし、これに振動数が1次でかかっている。左辺の式の中に直接 ω は出てこない。

このエネルギー準位と光子の生成消滅過程を以下に図示する。

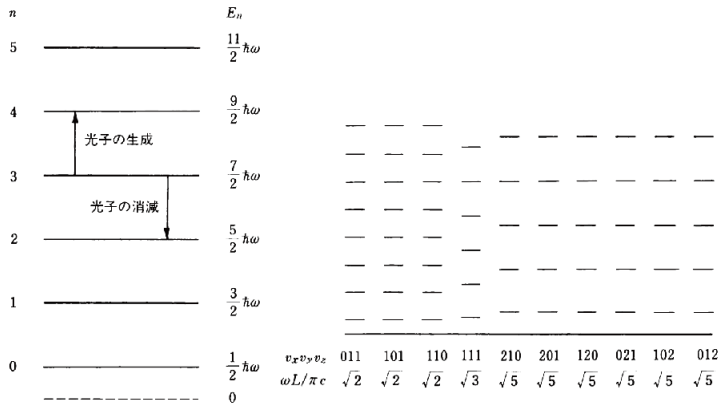


図 9.3: [133] より：エネルギー準位

9.3 Planck の法則 [133]

空洞輻射の比熱を解決したのが前節の半古典的な量子化を取り入れたプランクであった。温度 T で熱平衡にあるとき、第 n 励起状態に熱的に励起する確率を考えよう。

Boltzmann 因子を k_B とここではおいて

$$P_n \equiv \frac{\exp(-E_n/k_B T)}{\sum_n \exp(-E_n/k_B T)} \quad (9.7)$$

とする。これは熱統計力学の基本の式でもあるが、量子論が確率論と関係していく基本式にもなった。

第 6 部では、粗視化領域と量子論との関係を扱ったが、熱統計でもある領域では平均値で、物理量をふってしまい、個々の値はみない。鍵になるエネルギー量子 $k_B T$ は次の関係をつかうと

$$\frac{1}{k_B T} = i\hbar t$$

指数関数の位相部分が波動関数としてふるい、干渉性を持つ。興味あることに熱伝導方程式は t の 1 次微分方程式で、これはシュレディンガー方程式と同じである。

量子化された式 9.6 を式 9.7 に代入すると

$$U = \exp(-\hbar\omega/k_B T)$$

とおきかえて、

$$P_n = \frac{U^n}{\sum_n U^n}$$

と簡単になる。等比数列の公式から

$$P_n = \frac{U^n}{\sum_n U^n} = \frac{U^n}{1/1-U} = (1-U)U^n \quad (9.8)$$

となる。これから温度 T でこの場のモードに励起されている光子数を \bar{n} とすると

$$\begin{aligned} \bar{n} &= \sum_n n P_n \\ &= (1-U) \sum_n n U^n \\ &= (1-U) U \frac{\partial}{\partial U} \left(\sum_n U^n \right) \\ &= (1-U) U \frac{\partial}{\partial U} \left(\frac{1}{1-U} \right) \\ &= \frac{U}{1-U} \end{aligned} \quad (9.9)$$

となるので平均光子数が

$$\bar{n} = \frac{1}{\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1} \quad (9.10)$$

と求まる。これは次のようなグラフになる。

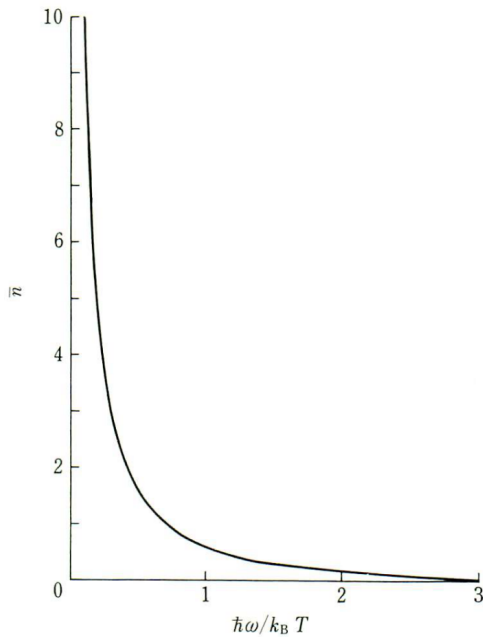


図 9.4: [133] より : 温度 T で励起した角周波数 ω の平均光子数

これから角振動数が ω から $\omega + d\omega$ に含まれる単位体積あたりの光子数を計算できる。平均エネルギー密度を $\bar{W}_T(\omega)d\omega$ とすると

$$\begin{aligned} \bar{W}_T(\omega)d\omega &= \bar{n}\hbar\omega\rho_\omega d\omega \\ &= \bar{n}\frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} d\omega \\ &= \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{d\omega}{\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1} \end{aligned}$$

となり、 $\bar{W}_T(\omega)$ と $\hbar\omega/k_B T$ の関係は次のようなグラフになる。

この $k_B T \gg \hbar\omega$ である高温側の古典的極限 ($\hbar \rightarrow 0$) が Rayleigh の法則で、 $\hbar\omega \gg k_B T$ の低温側の極限が Wien の公式になる。Plank がこの 2 つの式を 1 つにできたのはエネルギー量子というエネルギーを持つ粒子性を波である光に与えたことによる。

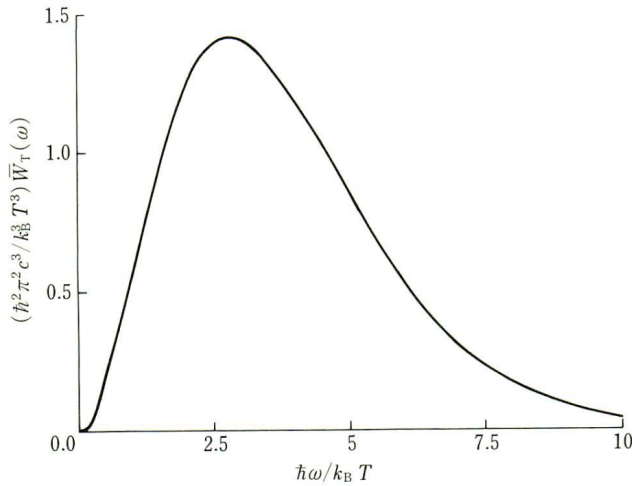


図 9.5: [133] より：温度 T での平均エネルギー密度の Planck の法則

9.4 Einstein の誘導係数 [133]

原子の光の吸収と放出理論は Einstein により量子論が確率される以前に示されている。光子の放出、吸収過程に 2 つの確率を表す係数 A, B を導入して説明をした。はじめにこの考え方を学ぶ。

今、 N 個の同一原子を持つ空洞を考えて、1 対の束縛状態を

$$\hbar\omega = E_2 - E_1$$

とする。次の図のように 2 つの準位の原子数 N_1, N_2 とし、縮退度を g_1, g_2 とする。

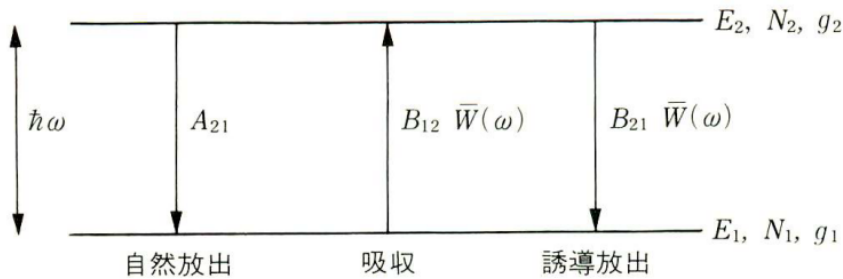


図 9.6: [133] より：光子の放出過程

ここで外部の電磁波からのエネルギー密度を \bar{W}_E 、空洞内部の熱的なエネルギー密度を \bar{W}_T として全エネルギー密度を

$$\bar{W}(\omega) = \bar{W}_E(\omega) + \bar{W}_T(\omega) \quad (9.11)$$

とする。実際には電磁波のエネルギー密度は熱的な輻射のように空間的に等方的ではないが、ここではそれは無視しておく。つまり、Einstein 理論は原子の遷移角振動数 ω に全エネルギー密度が穏やかに依存していないといけな

い。光子が自発的に状態 1 に落ちて $\hbar\omega$ の光子を 1 個放出する。この確率が A_{21} である。

これを自然放出という。この時放出される光子の位相に特別な相関がない。

状態 1 にある原子が角周波数 ω の放射がない場合には原子は状態 2 に遷移することができない。

エネルギー密度 \bar{W} があると、 $\hbar\omega$ の光子の吸収により上向き遷移 $1 \rightarrow 2$ が起こる。

この確率が $\bar{W}(\omega)$ に比例するはずだから

$$B_{12}\bar{W}(\omega)$$

の確率が遷移の確率になる。この B の係数は誘導放出係数といい、アインシュタインの B 係数ともいう。現在の我々は既に量子論の粒子数密度が

$$\hat{n} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$$

のように生成、消滅演算子と必ずセットになっていたように、この遷移の確率は反対向き $2 \rightarrow 1$ の確率も持つこと知っているがアインシュタインは直感的に

$$B_{21}\bar{W}(\omega)$$

とセットで考えた。これらが自然放出と、吸収、誘導放出という関係で上図に示されている。

これらの係数の関係は次章で量子論によって説明される。

しかし、以下で示すように自然放出の速さがその系の統計的な平均値 T と、局所的に外部の変化と感応する誘導係数との積に比例する結果は量子論の枠組みにおいても重要な関係である。

ここでは占位数 N_1, N_2 との関係のみをみておく。

この占位数の変化が準位の粒子数に比例し、先の確率を掛ければ

$$\frac{dN_1}{dt} = -\frac{dN_2}{dt} = N_2 A_{21} - N_1 B_{12} \bar{W}(\omega) + N_2 B_{21} \bar{W}(\omega) \quad (9.12)$$

が成り立つはずである。

これをレート方程式という。

9.4.1 熱平衡の場合

このレート方程式を平衡条件 $dN = 0$ を使って解くことを考える。式 9.12 から

$$N_2 A_{21} - N_1 B_{12} \bar{W}(\omega) + N_2 B_{21} \bar{W}(\omega) = 0$$

よって、

$$\bar{W} = \frac{N_2 A_{21}}{N_1 B_{12} - N_2 B_{21}} = \frac{A_{21}}{(N_1/N_2) B_{12} - B_{21}} \quad (9.13)$$

となるが、熱平衡の場合は $\langle \bar{W}_E \rangle = 0$ とできるので

$$\bar{W}_T(\omega) = \frac{A_{21}}{(N_1/N_2) B_{12} - B_{21}}$$

が成り立つ。また、Boltzman の法則から

$$\frac{N_1}{N_2} = \frac{g_1 \exp(-E_1/k_B T)}{g_2 \exp(-E_2/k_B T)} = \frac{g_1}{g_2} \exp(\hbar\omega/k_B T) \quad (9.14)$$

となるので式 9.13 に代入すると

$$\bar{W}_T(\omega) = \frac{A_{21}}{(g_1/g_2) \exp(\hbar\omega/k_B T) B_{12} - B_{21}}$$

を得る。ここで第 3 部でみたプランクの法則

$$\bar{W}_T(\omega) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{1}{\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1} \quad (9.15)$$

と比べると

$$\frac{g_1}{g_2} B_{12} = B_{21} \quad (9.16)$$

$$\frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} B_{21} = A_{21} \quad (9.17)$$

が成り立つ必要がある。

これからアインシュタインの3つの係数 A_{21}, B_{12}, B_{21} は全て関係をしていることがわかる。温度 T で平衡にあるとすると分配関数は前節の Plank の法則の繰り返しで、

$$Z_n(T) = \exp(-E_n/k_B T)$$

であり、 n 励起状態に熱的に励起される確率を P_n とすると

$$P_n = \frac{Z_n}{\sum_n Z_n}$$

となるので基底状態を

$$U = \exp(-\hbar\omega/k_B T) \quad (9.18)$$

とすると、等比数列の公式から

$$P_n = \frac{U^n}{\sum_n U^n} = \frac{U^n}{1/1-U} = (1-U)U^n \quad (9.19)$$

となる。これから温度 T でこの場のモードに励起されている光子数を \bar{n} とすると

$$\begin{aligned} \bar{n} &= \sum_n n P_n \\ &= (1-U) \sum_n n U^n \\ &= (1-U) U \frac{\partial}{\partial U} \left(\sum_n U^n \right) \\ &= (1-U) U \frac{\partial}{\partial U} \left(\frac{1}{1-U} \right) \\ &= \frac{U}{1-U} \end{aligned} \quad (9.20)$$

となるので平均光子数が

$$\bar{n} = \frac{1}{\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1} \quad (9.21)$$

となる。これを 9.15 に用いると

$$B_{21} \bar{W}_T(\omega) = A_{21} \bar{n}$$

となることがわかる。

つまり、熱的な誘導放出の速さは自然放出の速さに遷移周波数 ω に等しい角周波数を持つ放射場の各モードの平均光子数をかけたものに等しい。

という重要な関係が得られた。この時、誘導放出の速さが、各モードの平均光子数という統計的な値で決まることが重要である。

従って、2種類の放出速度を加えると、

$$B_{21} \bar{W}_T(\omega) + A_{21} = A_{21} (\bar{n} + 1)$$

これは遷移周波数 ω と同関係するだろうか。両辺を $B_{21} \bar{W}_T(\omega)$ で割ると

$$\frac{A_{21}}{B_{21} \bar{W}_T(\omega)} + 1 = \frac{A_{21} (\bar{n} + 1)}{B_{21} \bar{W}_T(\omega)}$$

よって式 9.21 より、

$$\frac{A_{21}}{B_{21} \bar{W}_T(\omega)} = \frac{1}{\bar{n}} = \exp(\hbar\omega/k_B T) - 1 \quad (9.22)$$

が得られる。例えば室温 $T = 300K$ とすると、

$$\frac{\hbar\omega}{k_B T} = 1$$

となる振動数が

$$f = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{k_B T}{2\pi\hbar} \sim 6.0 \times 10^{12} [\text{Hz}]$$

であり、この時の波長は

$$\lambda = \frac{c}{f} \sim 50\mu\text{m}$$

であり、これは遠赤外線領域に相当する。

従って、これより波長の長いマイクロ波や、無線周波数領域では式 9.22 から

$$\hbar\omega \ll k_B T, A_{21} \ll B_{21} \bar{W}_T(\omega)$$

となり、可視光、紫外、X線領域では

$$\hbar\omega \gg k_B T, A_{21} \gg B_{21} \bar{W}_T(\omega)$$

となる。つまり、 $6.0 \times 10^{12} [\text{Hz}]$ の前後で自然放出と誘導放出の速さが入れ替わることになる。

高い振動数であれば自然放出が目立って増加する。

普通の室温程度では熱的に励起したエネルギー密度 $\bar{W}_T(\omega)$ は非常に小さく、後者の自然放出の速さが誘導放出の速さを大きく上回る。

また、式 9.22、9.20 から 9.14 より平均励起粒子数 \bar{n} を次のように求めることができる。

$$\frac{N_1}{N_2} = \frac{g_1}{g_2} \exp(\hbar\omega/k_B T) = \frac{g_1}{g_2} \left(1 + \frac{1}{\bar{n}}\right)$$

よって

$$\frac{\bar{n}}{1 + \bar{n}} = \frac{g_1 N_2}{g_2 N_1}$$

$$\bar{n} = \frac{g_1 N_2}{g_2 N_1 - g_1 N_2} \quad (9.23)$$

となる。これから n 励起状態に熱的に励起される確率を P_n も式 9.19、9.20 より

$$U = \frac{\bar{n}}{1 + \bar{n}}$$

$$P_n = \frac{(\bar{n})^n}{(1 + \bar{n})^{1+n}} \quad (9.24)$$

となるから式 9.23 より、

$$P_n = \left(\frac{g_1 N_2}{g_2 N_1}\right)^n \left(1 - \frac{g_1 N_2}{g_2 N_1}\right)$$

のように縮退度と遷移粒子数のみで表現できる。

9.4.2 光子数のゆらぎ

量子論の重要な基本概念にゆらぎがある。これは最も基本的な波でもある。

この概念の本質を求めるために、空洞内の放射場を利用しよう。

各モードでのゆらぎは特有の時間スケールを持つ。エルゴードの定理を使えば時間平均は多数の相似な系がある時の系全体の平均と一致する。スケールを統一する必要はない。相似な系の仮想的な集団をアンサンブルとしよう。この系の中には特定の確率分布に従ういくつかの集団がある。

たとえば、空洞内の特定のモードにある光子を考えると、多数の相似な同じモードのアンサンブルを考える必要がある。

アンサンブルの中の空洞モードは一定数の光子を持つ。

n 個の光子を持つ空洞モードが式 9.19 から

$$P_n = (1 - U)U^n$$

の確率で得られたので、1つのモードの光子数の時間平均が式 9.37 の

$$\bar{n} = \frac{1}{\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1}$$

であると考えられる。また、式 9.20 から

$$U = \frac{\bar{n}}{1 + \bar{n}}$$

だから

$$P_n = \frac{(\bar{n})^n}{(1 + \bar{n})^{1+n}} \tag{9.25}$$

となるが、この具体的なグラフは次のようになる。

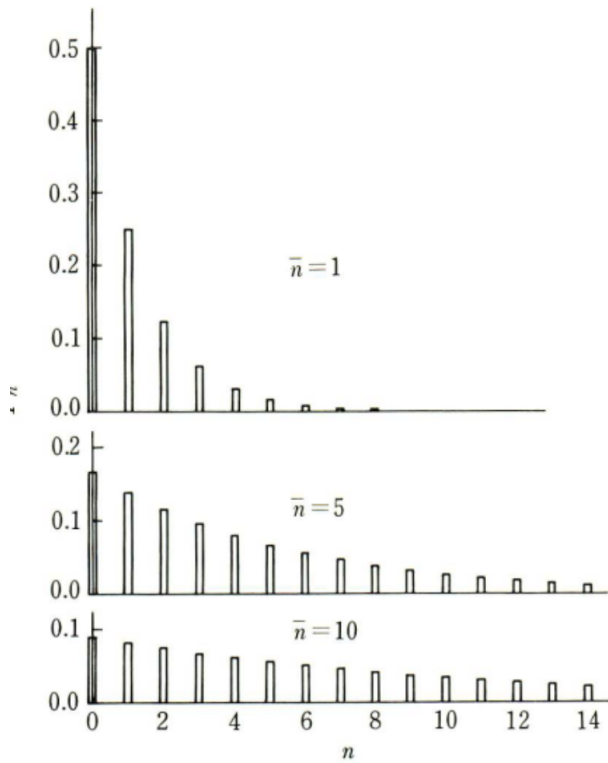


図 9.7: [133] より：平均光子数 \bar{n} の 3 つの値に対する Plank の光子数分布

この分布は **Plank** の熱分布または、幾何分布と呼ばれる。

これは r 次階乗モーメントを次で定義すると

$$\overline{n(n-1)\cdots(n-r+1)} = \sum_n n(n-1)\cdots(n-r+1)P_n$$

この 1 次階乗モーメントは式 9.20 の平均光子数と等しい。

$$\sum_n nP_n = \bar{n}$$

式 9.25 を用いると

$$\begin{aligned}
 \overline{n(n-1)\cdots(n-r+1)} &= \sum_n n(n-1)\cdots(n-r+1)P_n \\
 &= \sum_n n(n-1)\cdots(n-r+1)\frac{(\bar{n})^n}{(1+\bar{n})^{1+n}} \\
 &= r(r-1)\cdots 1(\bar{n})^r \\
 &= r!(\bar{n})^r
 \end{aligned} \tag{9.26}$$

ここで励起した光子数のゆらぎを求める。これは根 2 乗平均の偏差 Δn を用いて、 $\sum nP_n = \bar{n}$ だから

$$\begin{aligned}
 (\Delta n)^2 &\equiv \sum_n (n - \bar{n})^2 P_n \\
 &= \sum_n (n^2 P_n - 2n\bar{n}P_n + \bar{n}^2 P_n) \\
 &= \bar{n}^2 - 2(\bar{n})^2 + (\bar{n})^2 \\
 &= \bar{n}^2 - (\bar{n})^2
 \end{aligned}$$

で定義する。

式 9.26 から $r = 2$ の時に

$$\overline{n(n-1)} = \bar{n}^2 - \bar{n} = 2(\bar{n})^2$$

が成り立つので

$$\bar{n}^2 - \bar{n} = 2(\bar{n})^2$$

となるから \bar{n}^2 を消去すると、

$$\begin{aligned}
 \Delta n &= \left\{ (\bar{n})^2 + \bar{n} \right\}^{1/2} \\
 &= \left\{ \bar{n}(\bar{n} + 1) \right\}^{1/2}
 \end{aligned}$$

が得られる。この n のゆらぎの大きさは \bar{n} より大きい。

つまり、先の図のように、確率分布の広がり大きいことを意味する。

さらに \bar{n} が大きいと次のような値に漸近する。

$$\Delta n = \bar{n} + \frac{1}{2}, \quad (\bar{n} \gg 1)$$

ここでの結果からゆらぎの大きさと、測定の時間分解能の関係が重要になることがわかる。

つまり、光子数のゆらぎには特定の時間スケールがあることが示唆される。

エルゴードの定理は時間平均が多数の系の平均から得られるものと一致することを意味するが、

これが成り立つためには光子数の測定間隔をゆらぎの時間スケールより短くしないとイケない。

後節で詳しく考察する。

9.4.3 放射過程 [133]

具体的に単一の空洞モードに励起された光の入射ビームを次の図のように考えよう。

この時、図の 3 つの過程が考えられる。重要なのは励起から誘導放出で発生した光は、その発光を起こした入射光と同じ空洞モードで現れることである。つまり、放出光と入射ビームは同じ位相を持つ。

そのために誘導放出は、入射ビームと干渉する。つまり、入射ビームの強度を強めることができる。

空洞モードが重要になるのはこのためである。

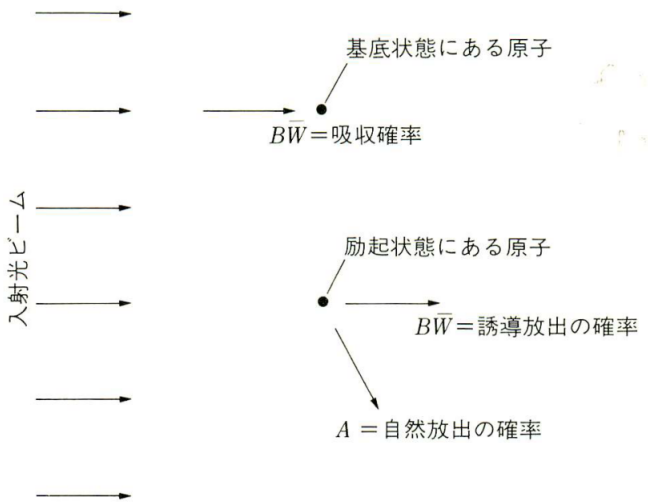


図 9.8: [133] より : 3 種類の放射過程と指向性

一方で、自然放出はどの空洞モードに対しても無関係である。これは方向性がランダムであることを意味する。この割合は次の式で決まる。式 9.57 から吸収された全てのエネルギーの内、勝手な向きに放出されるエネルギーの割合は

$$\frac{A}{A + B\bar{W}} = \frac{1}{1 + (\pi^2 c^3 \bar{W} / \hbar \omega^3)}$$

となる。

自然放出速度と誘導放出速度が等しくなる時は

$$A = B\bar{W} \tag{9.27}$$

とかけるから、この時の角振動数が

$$\omega \sim 3 \times 10^{15} [Hz]$$

になる。フォトンのエネルギーは

$$\hbar \omega \sim 3 \times 10^{-19} [J]$$

になる。

第 3 部の空洞モードからこの時の場のモードのエネルギー密度は

$$\rho_\omega d\omega = \left(\frac{\hbar \omega^3}{\pi^2 c^3} \right) d\omega \sim 3.4 \times 10^{-14} d\omega Jm^{-3}$$

になる。従って 9.27 の条件では

$$\bar{W} d\omega = \hbar \rho_\omega d\omega = \left(\frac{A}{B} \right) d\omega = \left(\frac{\hbar \omega^3}{\pi^2 c^3} \right) d\omega \sim 10^{-14} d\omega Jm^{-3}$$

となる。これから誘導放出と自然放出の速さが等しくなる時の光ビーム強度が式から

$$\bar{I} d\omega \sim 3 \times 10^{-6} d\omega Wm^{-2}$$

を得る。

普通のスペクトル光源の周波数の広がり

$$10^{10} Hz$$

程度で見積もると、この式から両速度が釣り合う時の強度は

$$\bar{I} = 2 \times 10^5 \text{ W m}^{-2}$$

となる。以下に文献 [133] によると主な \bar{I}, E 等の値は次の表にまとめてある。

	\bar{I} (W m ⁻²)	E (V m ⁻¹)	n/V (m ⁻³)	光子/モード
水銀灯	10 ⁴	10 ³	10 ¹⁴	10 ⁻²
連続レーザー	10 ⁵	10 ⁴	10 ¹⁵	10 ¹⁰
パルスレーザー	10 ¹³	10 ⁸	10 ²³	10 ¹⁸

† 水銀灯の数字は 253.7 nm の発光線に関するもので、普通用いられている分光光源の出力の上限を示す。レーザーの数字は上限値ではなく、代表値である。

図 9.9: [133] より：主な光源のサイクル平均強度、電場、光子数密度、モード中の光子数

9.5 位相速度と群速度

古典的なハミルトンの変分原理において時間を陽に含まない場合を考えよう。この時、最小作用の原理

$$\delta \int \sum_i \left(\frac{\delta L}{\delta \dot{q}_i} \right) dq_i = 0 \quad (9.28)$$

が満たされると考えて良い。この括弧の中は共役運動量

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$$

である。これは粒子速度 v_m に比例するから最小作用の原理は式 9.28 より

$$\delta \int v_m ds = 0 \quad (9.29)$$

でもよいことになる。ただし、 ds は質点の微小変位であり、

$$ds = \sqrt{(dx)^2 + (dy)^2 + (dz)^2}$$

となる。一方で、フェルマーの原理から屈折率を n として行路長が最小になるから

$$\delta \int n ds = 0 \quad (9.30)$$

これは $v = c/n$ から 2 点間の時間 ds/v を最小にすると考えても良い。

$$\delta \int \frac{1}{v} ds = 0 \quad (9.31)$$

この式は 9.29 と、異なった形をしているが、質量を持つ粒子のド・ブroy波を考えると、その振動数は

$$\nu_0 = \frac{E}{h} = \frac{mc^2}{h}$$

である。速度比を

$$\beta = \frac{v_m}{c}$$

とするとド・ブroy波はこの質点が z 方向に速度 v_m で動くと、ローレンツ変換を用いて

$$\exp(i\omega t) = \exp(2\pi i\nu_0 t) = \exp\left(\frac{2\pi i\nu_0}{\sqrt{1-\beta^2}} \left(t - \frac{\beta}{c} z\right)\right) \quad (9.32)$$

のように観測される。従ってこの波の位相速度 v_p は

$$v_p = \frac{c}{\beta} = \frac{c^2}{v_m} \quad (9.33)$$

となる。これがド・ブroy波の位相速度と考えることができる。

$v_m < c$ であれば、明らかに光速を超えることになる。

ところが質量のない場合の式に古典的な式を入れてしまうと

$$v_p' = \frac{E}{p} = \frac{\frac{1}{2}mv^2}{mv} = \frac{v}{2} \quad (9.34)$$

となってしまう。これは光速を超えないが、実速度の半分で位相速度ではない。

これから式 9.31 において

$$v = v_p$$

とすれば式 9.29 の関係が導ける。

一方、相対論的な粒子のエネルギーを

$$E = \sqrt{m^2c^4 + c^2p^2} \quad (9.35)$$

とすると、この粒子の群速度は

$$v_g = \frac{\partial E}{\partial p} = \frac{c^2p}{\sqrt{m^2c^4 + c^2p^2}} = \frac{cp}{m\sqrt{c^2 + \frac{p^2}{m^2}}}$$

ここで

$$p = \frac{mv_m}{\sqrt{1 - \frac{v_m^2}{c^2}}}$$

とおけるから

$$\begin{aligned} v_g &= \frac{cp}{m\sqrt{c^2 + c^2\frac{v_m^2}{c^2 - v_m^2}}} = \frac{p}{m\sqrt{1 + \frac{v_m^2}{c^2 - v_m^2}}} = \frac{p}{mc}\sqrt{c^2 - v_m^2} \\ &= \frac{mv_m}{mc\sqrt{1 - \frac{v_m^2}{c^2}}}\sqrt{c^2 - v_m^2} = v_m \end{aligned}$$

となり、粒子の速度は群速度に等しい。逆に式 9.35 のエネルギーは群速度のエネルギーである。

よって、式 9.33 は

$$v_p \cdot v_g = c^2 \quad (9.36)$$

と書く方が本質的である。

ド・ブroy波と粒子波のどちらかが光速を超えれば、片方は光速以下でないといけない。

ド・ブroy波が位相速度、粒子波が群速度のように振る舞うところが興味深い。

そこで、一般に2つの平面波が同じ向きに伝播する例を考え、

$$f_1 = e^{-i(k_1z - \omega_1t)}$$

$$f_2 = e^{-i(k_2z - \omega_2t)}$$

とおく。 $f_1 + f_2$ の合成波を考えた時、合成波の速さを v_g として

$$v_1 = \frac{\omega_1}{k_1}$$

$$v_2 = \frac{\omega_2}{k_2}$$

$$v_g = \frac{\Delta\omega}{\Delta k} = \frac{\omega_1 - \omega_2}{k_1 - k_2}$$

で与えられる。例えば Δk が小さい場合次のようなグラフになる。

は z 軸の正方向に速さの異なる波を 2 つ描き、下にその合成波を描く。各縦軸の上にその速さを示してある。

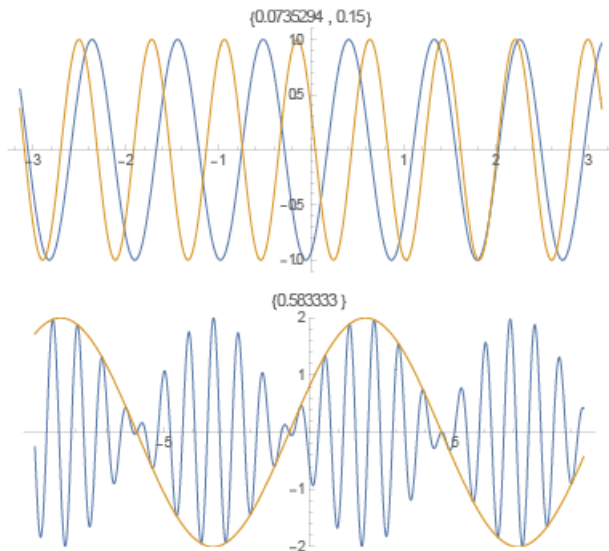


図 9.10: 同一方向に進む波、 Δk が小さい場合。群速度の方が速い。縦軸の上に速さを表示してある

この図の場合は Δk が小さくなれば 1 つのうなりの中に多くの振動が含まれることがわかる。

2 つの波の波数の差が小さければ

$$\Delta k = k_1 - k_2 = \frac{1}{2\pi} \frac{\lambda_2 - \lambda_1}{\lambda_1 \lambda_2}$$

から 2 つの波長の差も小さい。この時、各波長部分の振幅はなだらかに変化するので

図の下段の合成波の 1 波長に含まれる波長の数が増える。

極端に $\Delta k = 0$ ならば、全ての波長を含み、合成波の波長が無限大になる。

後に量子化を考えると、振幅は光子数と関係する。従って光子数の生成・消滅がなだらかに変化すると合成波の 1 つのうなりの中の各波数が増える。

生成・消滅が激しく変化すれば振動数が大きき波のエネルギーは増す。

この図では位相速度より群速度のほうが速いことになる。

相対論の要請を考えると現実的でないので次に $\Delta\omega$ を小さくして、群速度を小さくすることを考える。

ただし、 Δk を大きくしてしまうと振幅の変化が激しくなり、後にみるように合成波の波長を特定することが難しい。

下図では $\omega_1 = \omega_2$ としている。このとき、群速度は静止する。

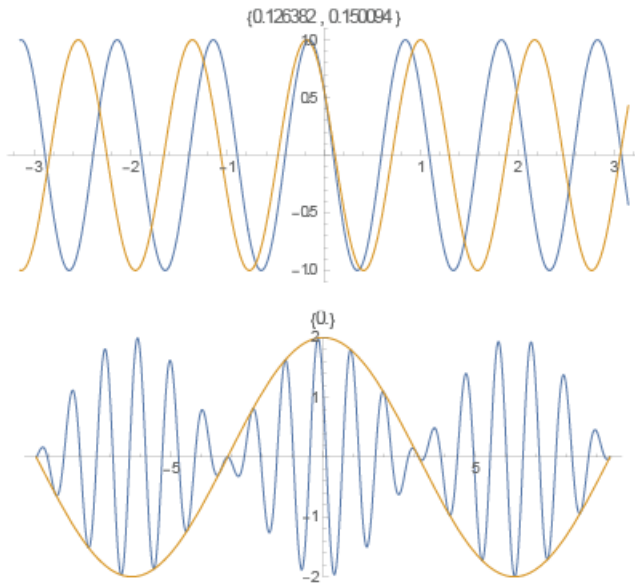


図 9.11: $\Delta\omega$ が 0 の場合、位相速度の方が速い

次に k と ω は異なるが、波 1 と波 2 の速さが等しい場合を考える。
これは例えば電磁波のように波の速さは常に等しい場合である。

$$\frac{\omega_1}{k_1} = \frac{\omega_2}{k_2}, \frac{\omega_2}{\omega_1} = \frac{k_2}{k_1}$$

となるから合成波の速度は

$$\frac{\omega_1 - \omega_2}{k_1 - k_2} = \frac{\omega_1 \left(1 - \frac{k_2}{k_1}\right)}{k_1 \left(1 - \frac{\omega_2}{\omega_1}\right)} = \frac{\omega_1}{k_1} = \frac{\omega_2}{k_2}$$

とみなせる。よって合成波の速さも等しくなる。

$$v_g = v_p = c$$

これはさらに波の数を増やせば明らかなように波の速さに分散がない場合である。

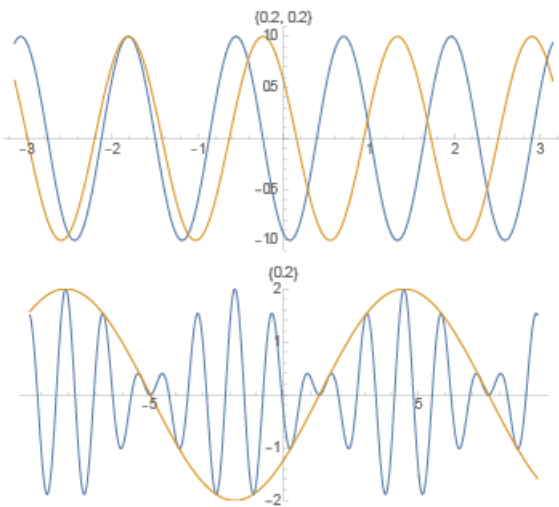


図 9.12: 群速度と位相速度が等しい場合

さらに $\Delta\omega$ に比べて Δk を大きくすると

$$v_g = \frac{\Delta\omega}{\Delta k}$$

が小さくなり、位相速度のほうが速くなる。しかし、合成波の振幅が激しく変化する。

下図のように合成波の波長を決めることは困難になる。今の場合には2つの波の合成しかしていないので、この影響は顕著である。

足し合わせる数を増やして行けば合成波の振幅変化も周期性をみれるようになり、合成波の波長は一般に決めやすくなるだろう。

この状況はフーリエ級数と同じである。

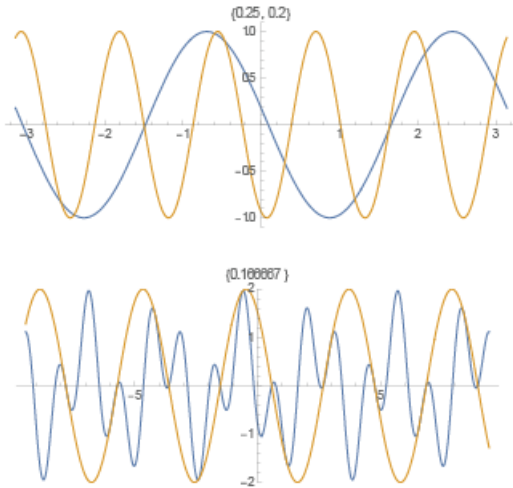


図 9.13: 2つの波の位相速度のほうが合成波の群速度より速い。

一般に位相速度を

$$v_p = \frac{\omega}{k_p} = \frac{2\pi f}{\lambda_p}$$

として、群速度は

$$v_g = \frac{\partial\omega}{\partial k}$$

である。

式 9.36 から $v_p \cdot v_g = c^2$ だから $v_m = v_g < c$ の場合は、 $v_p > c$ になる。

相対論の要請に従えば、この速さは実空間上に実現はできない。

この時の波長 λ_p より小さい長さは観測できない。長さの計量の最小限界が決められることになる。

逆に、定数を h として

$$\lambda_p = \frac{h}{p}$$

とした時の p には上限が存在することになる。これから不確定性原理が自然に導かれる。

この時のド・ブローイ波の伝達は相対論を破ることを許される。つまり、光円錐の外側に広がっている。

一方で $v_m = v_g > c$ の場合は、 $v_p < c$ になる。この場合、我々はド・ブローイ波を見ることができる。

しかし、相対論の要請から物質の運動が光円錐の外でおきていて、その事象を我々は見ることはできない。

さらに v_p, v_m は 0 に近づけることができるが 0 にすることができない。

そう考えると式 9.36 $v_p \cdot v_g = c^2$ は観測・被観測の関係をよく表していると示唆される。

角速度が波数の関数として

$$\omega(k + dk) \simeq \omega(k) + \frac{\partial\omega}{\partial k} dk$$

とすれば

$$\omega(k + dk) \simeq v_p k_p + v_g dk$$

9.6 フェルマーの原理

式 9.32 が z 方向への平面波であるので

$$x' = \frac{dx}{dz}, \quad y' = \frac{dy}{dz}$$

とすれば、これが光の場合は光軸を z 軸にとることができる

$$ds = \sqrt{1 + (x')^2 + (y')^2} dz$$

とすることができる。よって光路長を

$$N(x', y', z') \equiv n(x, y, z) \sqrt{1 + (x')^2 + (y')^2} \quad (9.37)$$

とすれば、最短時間の経路をとるフェルマーの定理は

$$\delta \int N dz = 0$$

を満たす。そこで作用原理との類推で $N \rightarrow L, dz \rightarrow dt$ とみなすと

$$\begin{aligned} \tilde{p}_x &= \frac{\partial N}{\partial x'} = \frac{nx'}{\sqrt{1 + (x')^2 + (y')^2}} \equiv n \cos \alpha \\ \tilde{p}_y &= \frac{\partial N}{\partial y'} = \frac{ny'}{\sqrt{1 + (x')^2 + (y')^2}} \equiv n \sin \alpha \end{aligned} \quad (9.38)$$

とおけるので、同様にハミルトニアンを類推すると

$$H(q, p) = \sum_i \dot{q}_i \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) - L(q_i, \dot{q}_i)$$

から式 9.38 より

$$\begin{aligned} \tilde{H} &= \left(\frac{\partial N}{\partial x'} \right) x' + \left(\frac{\partial N}{\partial y'} \right) y' - N \\ &= \frac{n(x'^2 + y'^2)}{\sqrt{1 + (x')^2 + (y')^2}} - n \sqrt{1 + (x')^2 + (y')^2} \\ &= -\frac{n}{\sqrt{1 + (x')^2 + (y')^2}} \equiv -n \cos \gamma \end{aligned}$$

とおける。ただし、 z 方向の余弦を $\cos \gamma$ とおいた。

特に光軸がほぼ z 軸と平行の場合は式 9.37 を次で近似できる。

$$N \simeq n \left(1 + \frac{(x')^2 + (y')^2}{2} \right)$$

これは近軸近似 (paraxial approximation) という。

9.6.1 スネルの法則

式 9.38 が x に無関係であれば

$$n \cos \alpha = \text{Const.}$$

となるが、これは $x-z$ 面を境界とする式スネルの法則である。

例えば次の図において行路長は媒質 1、媒質 2 の屈折率を n_1, n_2 として

$$P_0C = \ell_0 = n_1 \sqrt{x_c^2 + z_0^2}$$

$$CP_1 = \ell_1 = n_2 \sqrt{(x_1 - x_c)^2 + z_1^2}$$

となるので、全行路長は

$$\ell = \ell_0 + \ell_1 = n_1 \sqrt{x_c^2 + z_0^2} + n_2 \sqrt{(x_1 - x_c)^2 + z_1^2}$$

ここで式 9.30 のフェルマーの原理は

$$\frac{d\ell}{dx} = \frac{n_1 x_c}{\sqrt{x_c^2 + z_0^2}} - \frac{n_2 (x_1 - x_c)}{\sqrt{(x_1 - x_c)^2 + z_1^2}} = 0 \quad (9.39)$$

となる。また、図から

$$\sin \phi_1 = \frac{x_c}{\sqrt{x_c^2 + z_0^2}}$$

$$\sin \phi_2 = \frac{x_1 - x_c}{\sqrt{(x_1 - x_c)^2 + z_1^2}}$$

なので式 9.39 から

$$n_1 \sin \phi_1 = n_2 \sin \phi_2$$

が得られる。

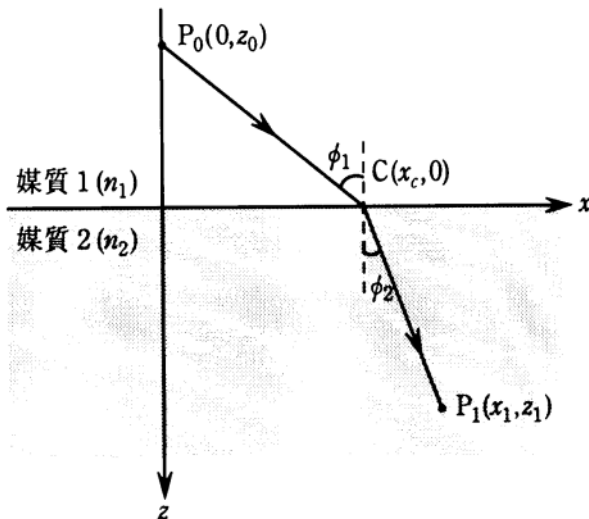


図 9.14: [96] より

9.6.2 光ファイバ

次に図のような光ファイバーを考える。
光ファイバーの屈折率は z 方向には一定だが、 x 軸方向には次の式を満たすとする。

$$n(x) = n(0) \cdot \left\{ 1 - \frac{(gx)^2}{2} \right\} \quad (9.40)$$

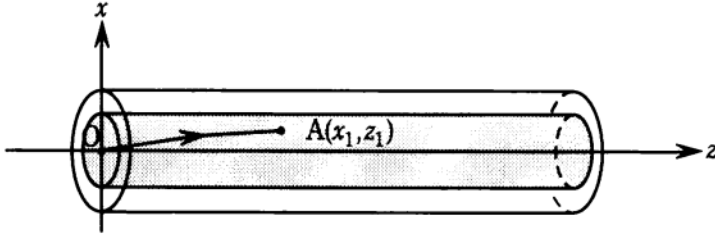


図 9.15: [96] より: O 点から入射し、A 点に伝播

式 9.37 から光線の進む距離は

$$ds = \sqrt{1 + (x')^2 + (y')^2} dz$$

となるのでこの場合の行路長は

$$N(x', y', z) \equiv n(x) \sqrt{1 + (x')^2} \quad (9.41)$$

である。フェルマーの原理から

$$\delta \int N dz = 0$$

よってラグランジュの方程式は

$$\frac{\partial N}{\partial x} - \frac{d}{dz} \left(\frac{\partial N}{\partial x'} \right) = 0$$

これに 9.41 を代入して、

$$\frac{d^2 x}{dz^2} = \frac{1}{n(x)} \cdot \frac{dn}{dx} \cdot \left\{ 1 + (x')^2 \right\}$$

を得る。ここで光線と z 軸のなす角が小さい (光軸近似) とすると

$$|x'| \ll 1, |gx| \ll 1$$

として式 9.40 から

$$\frac{d^2 x}{dz^2} = \frac{1}{n(x)} \cdot \frac{dn}{dx} \cdot \left\{ 1 + (x')^2 \right\} \simeq \frac{1}{n(0)} \cdot \{-n(0)(g^2 x)\}$$

とかける。よって光線の満たす方程式は

$$\frac{d^2 x}{dz^2} + g^2 x = 0$$

となる。境界条件 $O(0, 0), A(x_1, z_1)$ として

$$x(z) = \frac{x_1}{\sin(gz_1)} \sin(gz)$$

を得る。これはファイバー中を図のようにうねりながら伝播していることになる。

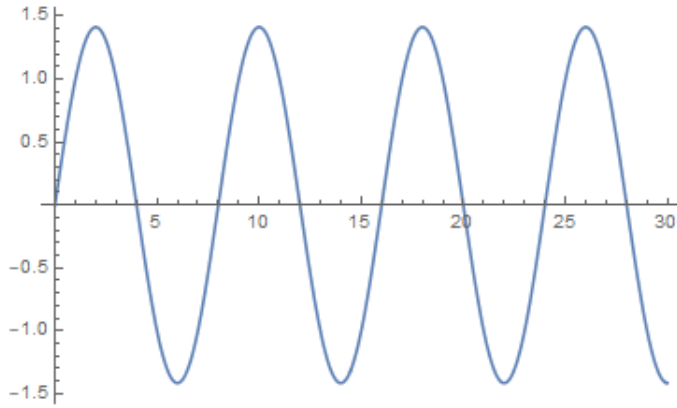


図 9.16: ファイバー中の光路の射影面

9.6.3 アイコナール

ここでラグランジアン L による作用を

$$S = \int L dt$$

とするとハミルトンの原理は終点を動かす場合から

$$\frac{\partial S}{\partial t} = L - \sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \dot{q}_i = -H \quad (9.42)$$

$$\frac{\partial S}{\partial q} = \int \frac{\partial L}{\partial q} dt = \int \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) dt = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = p$$

であったが、始点を (q^0, t_0) として、これを動かす場合は

$$\frac{\partial S}{\partial t_0} = H_0$$

$$\frac{\partial S}{\partial q^0} = -p^0$$

となる。 L が陽に t を含まないならエネルギー保存則からポテンシャルを表すものとして

$$W = \int_{q_0}^q \sum_i \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) dq_i$$

を定義すると

$$\frac{\partial W}{\partial q_i} = p_i \quad (9.43)$$

$$\frac{\partial W}{\partial q_i^0} = -p_i^0$$

となる。この関数 W はハミルトンの特性関数と呼ばれる。

また、この式は全エネルギー E が一定で始点 P_0 が一定であれば $W = Const.$ となる曲面は常に軌道と直交していることがわかる。

式 9.42 から $H \left(q_i, p_i = \frac{\partial S}{\partial q_i} \right)$ とすると

$$H \left(q_i, \frac{\partial S}{\partial q_i} \right) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0$$

となるが、式 9.43 より

$$H\left(q_i, \frac{\partial W}{\partial q_i}\right) = E$$

と表すことができ、これをハミルトンヤコビの偏微分方程式という。

式 9.37 より光軸 z と時間軸 t の対応が考えられる。そこで光路長を改めて

$$S(x^0, y^0, z^0; x, y, z) \equiv \int_{z^0}^z n(x, y, z) \sqrt{1 + (x')^2 + (y')^2} dz$$

とおく。または一般に

$$W(x^0, y^0, z^0; x, y, z) \equiv \int n ds$$

をアイコナル (**Eikonal**) という。

これは力学的な W が一定となる曲面は運動の軌道と直交していたように、アイコナルが一定な曲面は光線と直交する。

これは幾何光学的波面とみなせる。電気力線と等電位面との関係といってもよい。

特徴的なのは、このアイコナルは光路長に対応している。微分系は

$$\left(\frac{\partial W}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial W}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial W}{\partial z}\right)^2 = n^2$$

となる。これはアイコナル方程式とも呼ばれる。

これは幾何光学を波動光学仲介を果たすとしてよく登場する。

系の始点と、終点のみで記述ため、電気回路の 4 端子回路網にも対応している。

今、考えている系は可逆であるとし、 S を 2 つの変数で偏微分するとき、順序依存を考えない。従って

$$\frac{\partial^2 S}{\partial q_r^0 \partial q_s} = \frac{\partial^2 S}{\partial q_s \partial q_r^0} \quad (9.44)$$

が成り立つ。これを相反性と呼ぶ。

ここで 9.43 から

$$\frac{\partial p_s}{\partial q_r^0} = -\frac{\partial p_r}{\partial q_s}$$

を得る。従って、 2×2 の行列 M を用いた 4 端子回路網

$$\begin{bmatrix} q \\ p \end{bmatrix} = M \begin{bmatrix} q^0 \\ p^0 \end{bmatrix}$$

と行列表示できる。式 9.44 が成り立つためには

$$\det M = 1 \quad (9.45)$$

である必要がある。

例えば係数行列を M として光学系が光軸の周りに回転対称性を持つ場合を考える。

光軸上の光源から出た光は、反射や屈折などをしてはじめての光線がなす平面内に留まるから、この平面内で光線の軌跡を考えればよい。

このような光線の追跡を **ray_tracing** という。

図のように光軸 z と垂直に x 軸をとる。 $x(z)$ が光線の高さを表す、式では q に対応する。

この接線ベクトルを $p(z)$ として $z = z_0$ の面を出発した光線 (x_0, p_0) が光学系を進み、 $z = z_1$ の面に到達した時、 (x_1, p_1)

で表せば

$$x_1 = x_1(x_0, p_0)$$

$$p_1 = p_1(x_0, p_0)$$

となる。これを行列 $ABCD$ を用いて

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ p_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_0 \\ p_0 \end{bmatrix}$$

と書き、この行列は光学では **ABCD** 行列と呼ばれる。

一般には光は直進して、屈折をしたりするが、これをこの行列で表そうというわけである。

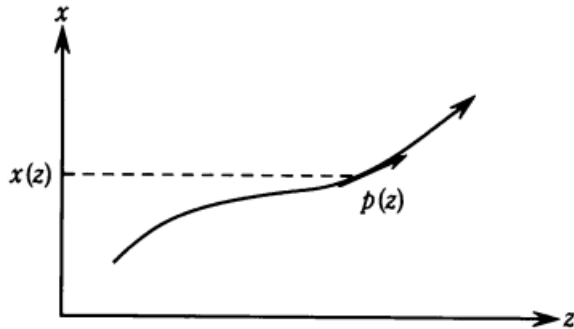


図 9.17: [96] より: 光線の高さが $x(z)$ 、光線の進む向きが $p(z)$

ここで光学近似をとる。光線と光軸のなす角を ϕ とすると

$$p(z) \simeq n \cdot \frac{dx}{dz} \simeq n \tan \phi \simeq n\phi$$

となるので下図のような簡単な直進であれば、距離 d だけ進むときの高さ x_1 は

$$x_1 = x_0 + d \cdot \tan \phi \simeq x_0 + d \frac{p_0}{n}$$

$$p_1 = p_0$$

とかけるから

$$\begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & \frac{d}{n} \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

となる。これは行列式が 1 となる条件式 9.45

$$AD - BC = 1 - 0 = 1$$

が成立している。

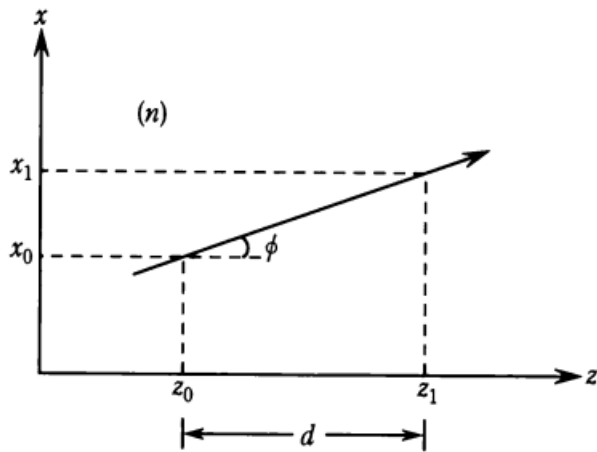


図 9.18: [96] より:屈折率 n の媒質中の距離 d 離れた地点への光の経路

これは、この光学系が光をマクロ的に吸収することはなく、逆行させても同じ $ABCD$ 行列で表されることを示している。

この逆行性が成り立つのはよく知られているレンズや鏡系で次の図のような場合がある。

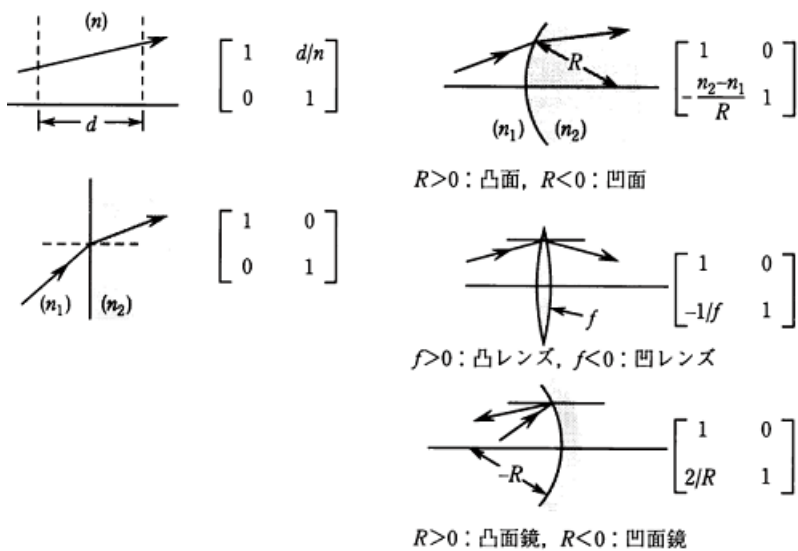


図 9.19: [96] より:行列式が 1 になる可逆な光学系の例

ここで行列式が 1 と相反性の関係である式 9.45 が重要な役割を果たしている。

そこで次に逆行する場合を考えてみる。

次の図のように $z = z_2$ で媒質に入射し、 $z = z_1$ において射出するような場合である。

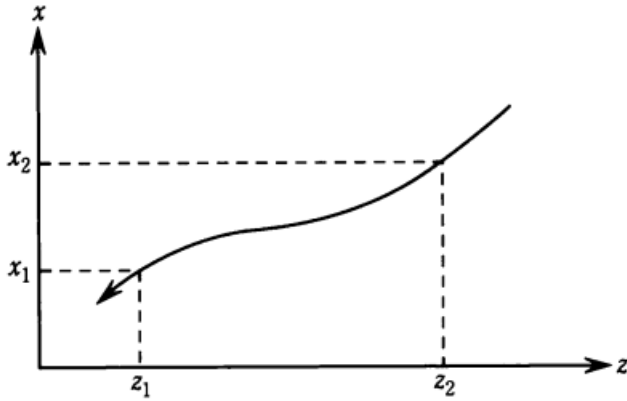


図 9.20: [96] より:相反性を示す、逆向きの光軌跡

この場合 p ベクトルが負になることから

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ -p_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_2 \\ -p_2 \end{bmatrix}$$

とかける。これは

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ p_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A & -B \\ -C & D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_2 \\ p_2 \end{bmatrix}$$

と同等である。順行の場合が

$$\begin{bmatrix} x_2 \\ p_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ p_1 \end{bmatrix}$$

となるので、これに代入すれば

$$\begin{bmatrix} x_2 \\ p_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A & -B \\ -C & D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_2 \\ p_2 \end{bmatrix}$$

となる必要がある。これから、積行列が単位行列になる条件

$$\begin{aligned} A^2 - CB &= 1, -AB + BD = 0 \\ AC - CD &= 0, -CB + D^2 = 1 \end{aligned}$$

によって

$$\begin{aligned} (A^2 - CB)(-CB + D^2) &= A^2D^2 - A^2CB - D^2CB + C^2B^2 \\ &= A^2D^2 - ABCD - ABCD + C^2B^2 \\ &= 1 \end{aligned}$$

となるので

$$(AD - BC)^2 = 1$$

であり M 行列の行列式が ± 1 をとればよいことになる。

ところが入射と射出が非常に近い場合を考えると

$$|z_1 - z_2| \rightarrow 0; |x_1 - x_2| \rightarrow 0, |p_1 - p_2| \rightarrow 0$$

となるべきだから

9.7 古典的な強度測定

量子力学的な位相を表現する演算子はこれまでにいくつか考えられてきている。しかし、どれもいくつかの問題を抱えている。具体的にこの問題を量子光学を用いて考えていこう。まず次のような古典的な2つの経路による。光の干渉を考える。ここでの光は電界成分が入射面に平行な TE 波とする。

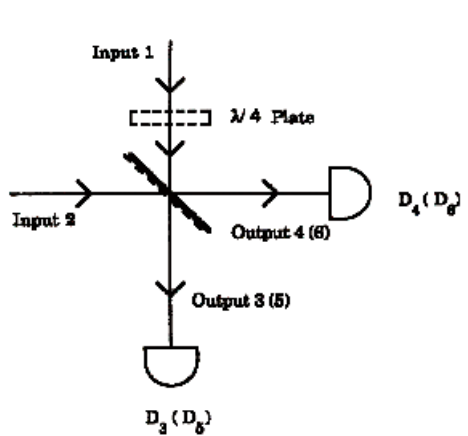


図 9.21:

図のように Input1, Input2 から単色光を入れ、中央の 45 度のビームスプリッター BM1 でちょうど半分に分岐させる。その後、強度測定器 D1, D2 に入射していく。

BM1 から等距離にある光の入射複素振幅を V_1, V_2 とする。また 2 つ強度 I は振幅の位相差は次のように一定である。

$$I_1 = |V_1(t)|^2, \quad I_2 = |V_2(t)|^2 \quad (9.46)$$

$$\arg V_2 - \arg V_1 = \phi_2 - \phi_1 \quad (9.47)$$

さらにビームスプリッターの表面の複素透過率と反射率を t, r とし、裏面の複素透過率と反射率を t', r' とし、次のように単純におく

$$|r| = |r'| = |t| = |t'| = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (9.48)$$

また、複素透過率と反射率の偏角は次で定義する。

$$\arg t = \theta_1, \arg r = \psi_1 \quad (9.49)$$

すると図の BM1 通過後の振幅は V_3 は表面から透過し、裏面で反射しているの

$$V_3 = (tV_1 + r'V_2) \quad (9.50)$$

さらに V_4 は裏面から透過し、表面で反射しているの

$$V_4 = (rV_1 + t'V_2) \quad (9.51)$$

とおける。対称的な BM1 では次の関係がある。

$$\psi_2 - \theta_1 = \frac{\pi}{2} \quad (9.52)$$

$$\theta_2 - \psi_1 = \frac{\pi}{2} \quad (9.53)$$

従って測定器 D_3 の強度は次のようになる。

$$\begin{aligned} I_3 &= |V_3(t)|^2 = |(tV_1 + r'V_2)|^2 \\ &= \frac{1}{2} \left(|V_1(t)|^2 + |V_2(t)|^2 + 2\sqrt{|V_1(t)|^2 |V_2(t)|^2} \cos(\arg V_2 - \arg V_1 + \arg t - \arg r') \right) \end{aligned} \quad (9.54)$$

ここで式 9.48、9.50 から

$$\begin{aligned} I_3 &= \frac{1}{2} \left(I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2} \cos(\phi_2 - \phi_1 + \psi_2 - \theta_1) \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(I_1 + I_2 - 2\sqrt{I_1 I_2} \sin(\phi_2 - \phi_1 + \psi_2 - \theta_1 - \frac{\pi}{2}) \right) \end{aligned}$$

同様に I_4 についても

$$\begin{aligned} I_4 &= |V_4(t)|^2 = |(rV_1 + t'V_2)|^2 \\ &= \frac{1}{2} \left(|V_1(t)|^2 + |V_2(t)|^2 + 2\sqrt{|V_1(t)|^2 |V_2(t)|^2} \cos(\arg V_2 - \arg V_1 + \arg t' - \arg r) \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2} \cos(\phi_2 - \phi_1 + \theta_2 - \psi_1) \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2} \sin(\phi_2 - \phi_1 + \theta_2 - \psi_1 + \frac{\pi}{2}) \right) \end{aligned} \quad (9.55)$$

が成り立つ。実際に測定器の結果はある周期 T でこの強度を足しあげることになるので α を係数として

$$W_3 = \alpha \int_t^{t+T} I_3(t') dt' \quad (9.56)$$

$$W_4 = \alpha \int_t^{t+T} I_4(t') dt' \quad (9.57)$$

を定義する。すると先の結果から

$$W_3 = \frac{1}{2} \left(W_1 + W_2 - 2W_{12} \sin(\phi_2 - \phi_1 + \psi_2 - \theta_1 - \frac{\pi}{2}) \right) \quad (9.58)$$

$$W_4 = \frac{1}{2} \left(W_1 + W_2 + 2W_{12} \sin(\phi_2 - \phi_1 + \theta_2 - \psi_1 + \frac{\pi}{2}) \right) \quad (9.59)$$

となる。ただし

$$W_{12} = \alpha \int_t^{t+T} \sqrt{I_1(t') I_2(t')} dt' \quad (9.60)$$

である。 \sin, \cos の演算子を得るためにまず 9.58、9.59 から三角関数の和積公式

$$\sin(A + B) - \sin(A - C) = 2 \cos\left(A + \frac{B + C}{2}\right) \sin\left(\frac{B - C}{2}\right)$$

を用いて

$$\begin{aligned}
W_4 - W_3 &= W_{12} \left(\sin(\phi_2 - \phi_1 + \theta_2 - \psi_1 + \frac{\pi}{2}) - \sin(\phi_2 - \phi_1 + \psi_2 - \theta_1 - \frac{\pi}{2}) \right) \\
&= 2W_{12} \left(\cos(\phi_2 - \phi_1 + \frac{\pi}{2} + \frac{\theta_2 - \theta_1 + \psi_2 - \psi_1}{2}) \sin(\frac{\pi}{2}) \right) \\
&= 2W_{12} \left(\sin(\phi_2 - \phi_1 + \frac{\theta_2 - \theta_1 + \psi_2 - \psi_1}{2}) \right)
\end{aligned}$$

よって

$$\sin(\phi_2 - \phi_1 + \frac{\theta_2 - \theta_1 + \psi_2 - \psi_1}{2}) = \frac{W_4 - W_3}{2W_{12}} \quad (9.61)$$

を得る。式 9.52 が成り立つ対称的なビームスプリッタであれば

$$\sin(\phi_2 - \phi_1) = \frac{W_4 - W_3}{2W_{12}} \quad (9.62)$$

で Sin 成分が表される。これらは周期 T に比べて光の強度の揺らぎが小さいのであれば式 9.56、9.57 は次のような時間平均値でよい近似を得る。

$$W_j = \alpha \langle I_j \rangle T \quad (9.63)$$

$$W_{12} = \alpha \langle \sqrt{I_1 I_2} \rangle T \quad (9.64)$$

従ってこのような状況下であれば式 9.62 は $\phi_2 - \phi_1$ が一定である限り同じ観測値を得るはずである。しかし $\phi_2 - \phi_1$ を決めるためには Sin が 0 から 2π で 2 価の関数だからこれと直交した $\cos(\phi_2 - \phi_1)$ の値を測定する必要がある。そこで図 9.21 のように Input1 の経路に $\lambda/4$ 板を挿入して同じ観測をする。

この場合は式 9.56、9.59 は次のように変わる

$$W_5 = \frac{1}{2} \left(W_1 + W_2 - 2W_{12} \cos(\phi_2 - \phi_1 + \psi_2 - \theta_1 - \frac{\pi}{2}) \right) \quad (9.65)$$

$$W_6 = \frac{1}{2} \left(W_1 + W_2 + 2W_{12} \cos(\phi_2 - \phi_1 + \theta_2 - \psi_1 + \frac{\pi}{2}) \right) \quad (9.66)$$

$\cos^2\theta + \sin^2\theta = 1$ なので

$$4W_{12}^2 = (W_6 - W_5)^2 + (W_4 - W_3)^2 \quad (9.67)$$

が得られ、Cos, Sin の成分は次のように決定される。

$$\sin(\phi_2 - \phi_1) = \frac{W_4 - W_3}{((W_6 - W_5)^2 + (W_4 - W_3)^2)^{1/2}} \quad (9.68)$$

$$\cos(\phi_2 - \phi_1) = \frac{W_5 - W_6}{((W_6 - W_5)^2 + (W_4 - W_3)^2)^{1/2}} \quad (9.69)$$

そこでさらにはじめから $\lambda/4$ の波長板を組み込んだ次の図のような装置を考える。

ビームスプリッタ BS 1 から BS5 はどれも透過と反射が半分の理想的な 45 度のものとする。

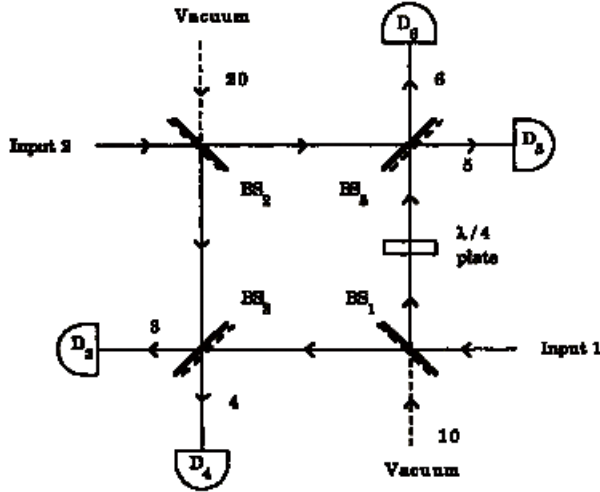


図 9.22:

式 9.50 と同様に各光電測定器に入る強度は次の関係式が成り立つ。

$$V_3 = (t'tV_1 + rr'V_2) \quad (9.70)$$

$$V_4 = (r'tV_1 + tr'V_2) \quad (9.71)$$

$$V_5 = (r'rV_1 + ttV_2) \quad (9.72)$$

$$V_6 = (rt'V_1 + t'rV_2) \quad (9.73)$$

従って式 9.58 と 9.59 から式 9.48 が成り立つとして

$$W_3 = \frac{1}{4} \left(W_1 + W_2 - 2\sqrt{W_1W_2}\cos(\phi_2 - \phi_1) \right) \quad (9.74)$$

$$W_4 = \frac{1}{4} \left(W_1 + W_2 + 2\sqrt{W_1W_2}\cos(\phi_2 - \phi_1) \right) \quad (9.75)$$

さらに式 9.65 と 9.66 から

$$W_5 = \frac{1}{4} \left(W_1 + W_2 - 2\sqrt{W_1W_2}\sin(\phi_2 - \phi_1) \right) \quad (9.76)$$

$$W_6 = \frac{1}{4} \left(W_1 + W_2 + 2\sqrt{W_1W_2}\sin(\phi_2 - \phi_1) \right) \quad (9.77)$$

ただし 9.52 関係は次のようになる。

$$\theta_1 + \theta_2 - \psi_1 - \psi_2 = \pm\pi \quad (9.78)$$

よって古典的な強度測定では位相差によって各測定器の強度は決まる。

ただし、式 9.56、9.57 は任意の時間間隔 T の平均として考えていた。しかし光子の強度は光子数に依存し、この時間間隔は光子の吸収と関係してくる。ここでは古典的に取り扱い次のようにこれらの強度表現を一般的に次のように表す。各光電管の測定器に記録された発光回数を m として

$$\langle m_j \rangle = W_j = \alpha \int_t^{t+T} I_j(t') dt' \quad (9.79)$$

古典的である特徴としてこの強度分散は相関がランダムである **Poisson** 統計に次のように従う。

$$[\langle (\Delta m_j)^2 \rangle]^{1/2} = \sqrt{W_j} \quad (9.80)$$

従って十分な光子数がある古典光の場合は $W_j \gg 1$ であるから

$$[\langle (\Delta m_j)^2 \rangle]^{1/2} / \langle m_j \rangle = \frac{1}{\sqrt{W_j}} \ll 1 \quad (9.81)$$

となることがわかる。従って式 9.68、9.69 から次のように位相の測定が決まる。

$$S_M = \text{Sin}(\phi_2 - \phi_1) = \frac{m_6 - m_5}{((m_4 - m_3)^2 + (m_6 - m_5)^2)^{1/2}} \quad (9.82)$$

$$C_M = \text{Cos}(\phi_2 - \phi_1) = \frac{m_4 - m_3}{((m_4 - m_3)^2 + (m_6 - m_5)^2)^{1/2}} \quad (9.83)$$

この時時間周期 T についてはバンド幅を $\Delta\omega$ として

$$T \gg 1/\Delta\omega \quad (9.84)$$

である必要があり、十分な数の光子数であれば上記の式が利用できる。

$$W_1, W_2 \gg 1 \quad (9.85)$$

9.8 古典的希薄光子統計

次に位相に揺らぎがある場合を考慮する。先節の結果から希薄光子状態 $W_1, W_2 \ll 1$ の場合を考えよう。

ポアソン分布 (**Poisson distribution**) によれば単位時間に平均で λ 回発生する事象が k 回発生する確率は次で与えられる。

$$P(N = k) = \frac{e^{-\lambda} \lambda^k}{k!} \quad (9.86)$$

従って次のように各測定器の 4 つの関連した発光回数の平均の確率は

$$p(m_3, m_4, m_5, m_6) = \left\langle \frac{W_3^{m_3}}{m_3!} e^{-W_3} \frac{W_4^{m_4}}{m_4!} e^{-W_4} \frac{W_5^{m_5}}{m_5!} e^{-W_5} \frac{W_6^{m_6}}{m_6!} e^{-W_6} \right\rangle \quad (9.87)$$

となる。しかし、この表現式は問題点を含んでいる。例えばもっとも単純な場合として

$$m_3 = m_4 = m_5 = m_6 = 0 \quad (9.88)$$

の場合は式 9.87 は

$$p(0, 0, 0, 0) = \langle \exp(-(W_3 + W_4 + W_5 + W_6)) \rangle \quad (9.89)$$

となるが式 9.83、9.82 は 0 で意味をなさない。そこでこの問題を回避するためにはくりこみを施す必要がある。

この式は

$$m_3 = m_4, m_5 = m_6 \quad (9.90)$$

で定義されないのでもまず $W_3 + W_4 + W_5 + W_6 = W_1 + W_2$ であるから

$$p(0,0,0,0) = \langle \exp(-(W_1 + W_2)) \rangle \quad (9.91)$$

として確率の和を 1 とするために繰り込み因子 N は

$$N = \langle 1 - \exp(-(W_1 + W_2)) \rangle \quad (9.92)$$

と決めて式 9.87 は

$$1 = \sum p \rightarrow \frac{\sum p}{N} \quad (9.93)$$

とする必要がある。これがくりこみの方法である。これを以下で用いると式 9.87 から $m_3 = m_4, m_5 = m_6$ とすると

$$\sum_{m_3} \sum_{m_5} p(m_3, m_3, m_5, m_5) = \sum_{m_3} \sum_{m_5} \left\langle \frac{W_3^{m_3}}{m_3!} e^{-W_3} \frac{W_3^{m_3}}{m_3!} e^{-W_3} \frac{W_5^{m_5}}{m_5!} e^{-W_5} \frac{W_5^{m_5}}{m_5!} e^{-W_5} \right\rangle \quad (9.94)$$

$$= \sum_{m_3} \sum_{m_5} \left\langle \frac{W_3^{m_3}}{m_3!} \frac{W_4^{m_3}}{m_3!} \frac{W_5^{m_5}}{m_5!} \frac{W_6^{m_5}}{m_5!} e^{-(W_3+W_4+W_5+W_6)} \right\rangle \quad (9.95)$$

$$= \sum_{m_3} \sum_{m_5} \left\langle \frac{W_3^{m_3} W_4^{m_3}}{m_3! m_3!} \frac{W_5^{m_5} W_6^{m_5}}{m_5! m_5!} \exp(-(W_1 + W_2)) \right\rangle \quad (9.96)$$

となる。ここで次の関係をみたすベッセル関数を導入する。

$$I_n(x) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m! \Gamma(m+n+1)} \left(\frac{1}{2}x\right)^{2m+n} \quad (9.97)$$

これから $n = 0$ として

$$I_0(2\sqrt{W_3 W_4}) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m! m!} (W_3 W_4)^m \quad (9.98)$$

が使えるので式 9.96 は次のようにかける。

$$\sum_{m_3} \sum_{m_5} p(m_3, m_3, m_5, m_5) = \left\langle I_0(2\sqrt{W_3 W_4}) I_0(2\sqrt{W_5 W_6}) \exp(-(W_1 + W_2)) \right\rangle \quad (9.99)$$

従って繰り込み因子は次のように表される。

$$N = 1 - \left\langle I_0(2\sqrt{W_3 W_4}) I_0(2\sqrt{W_5 W_6}) \exp(-(W_1 + W_2)) \right\rangle \quad (9.100)$$

もし $\langle W_j \rangle \ll 1$ であれば

$$N = \langle 1 - \exp(-(W_1 + W_2)) \rangle \quad (9.101)$$

であり、この条件の下で式 9.96 より次の近似関係が成り立つ

$$p(1,0,0,0) = \langle W_3 \rangle \quad (9.102)$$

$$p(0,1,0,0) = \langle W_4 \rangle \quad (9.103)$$

$$p(0,0,1,0) = \langle W_5 \rangle \quad (9.104)$$

$$p(0, 0, 0, 1) = \langle W_6 \rangle \quad (9.105)$$

よってこの繰り込み因子を用いることで式 9.82、9.83 は

$$\langle S_M \rangle = \left\langle \frac{m_6 - m_5}{((m_4 - m_3)^2 + (m_6 - m_5)^2)^{1/2}} \right\rangle \quad (9.106)$$

$$\simeq \frac{\langle W_6 \rangle - \langle W_5 \rangle}{\langle 1 - \exp(-(W_1 + W_2)) \rangle} \quad (9.107)$$

式 9.76、9.77 から

$$\langle W_6 \rangle - \langle W_5 \rangle = \sqrt{W_1 W_2} \langle \sin(\phi_2 - \phi_1) \rangle \quad (9.108)$$

だから

$$\langle S_M \rangle \simeq \frac{\sqrt{W_1 W_2} \langle \sin(\phi_2 - \phi_1) \rangle}{\langle W_1 \rangle + \langle W_2 \rangle} \quad (9.109)$$

を得る。同様に cos 成分についても式 9.74、9.75 から

$$\langle C_M \rangle = \text{Cos}(\phi_2 - \phi_1) = \frac{W_4 - W_3}{((m_4 - m_3)^2 + (m_6 - m_5)^2)^{1/2}} \quad (9.110)$$

$$= \left\langle \frac{m_4 - m_3}{((m_4 - m_3)^2 + (m_6 - m_5)^2)^{1/2}} \right\rangle \quad (9.111)$$

$$\simeq \frac{\sqrt{W_1 W_2} \langle \cos(\phi_2 - \phi_1) \rangle}{\langle W_1 \rangle + \langle W_2 \rangle} \quad (9.112)$$

となる。非常に弱い光を考えると

$$\sqrt{W_1 W_2} \leq (W_1 + W_2)/2 \quad (9.113)$$

が成り立つので

$$\langle \sin(\phi_2 - \phi_1) \rangle > \langle S_M \rangle \quad (9.114)$$

$$\langle \cos(\phi_2 - \phi_1) \rangle > \langle C_M \rangle \quad (9.115)$$

という関係が成る。また

$$\langle S_M \rangle^2 + \langle C_M \rangle^2 = 1 \quad (9.116)$$

なので 9.106 から 2 乗平均を考えると $(m_4 - m_3)^2 = (m_6 - m_5)^2$ とみなせる弱い場においては

$$\langle S_M \rangle^2 = \langle C_M \rangle^2 = \frac{1}{2} \quad (9.117)$$

が成り立つ。さらに次のような累乗の平均を考える。式 9.83、9.82 は 0 で使えないので

式 9.74、9.75 から $W_4 - W_3$ をつくり Cos 成分を表現するとを得る。位相と強度が相関をもたなくなり、

$$\langle C_I^r \rangle = \langle \cos^r(\phi_2 - \phi_1) \rangle = \frac{\langle (W_4 - W_3)^r \rangle}{\langle (W_1 W_2)^{r/2} \rangle} \quad (9.118)$$

同様に式 9.76、9.77 から $W_6 - W_5$ をつくり、Sin 成分を表現すると

$$\langle S_I^r \rangle = \langle \sin^r(\phi_2 - \phi_1) \rangle = \frac{\langle (W_6 - W_5)^r \rangle}{\langle (W_1 W_2)^{r/2} \rangle} \quad (9.119)$$

となる。

さらに次のような階乗の平均を考える m が整数であるので r 階乗モーメントは次のように表現する。

$$\langle W_j^r \rangle = \langle m_j(m_j - 1)(m_j - 2) \cdots (m_j - r + 1) \rangle \equiv \langle m_j^{(r)} \rangle \quad (9.120)$$

$$\langle W_i^r W_j^s \rangle \equiv \langle m_i^{(r)} m_j^{(s)} \rangle \quad (9.121)$$

すると式 9.118、9.119 から r 個の中から s 個選ぶ場合を足し合わせて

$$\langle C_I^r \rangle = \frac{\sum_{s=0}^r \binom{r}{s} \langle (m_4^{(r-s)} - m_3^{(s)})^r \rangle}{\langle (W_1 W_2)^{r/2} \rangle} \quad (9.122)$$

$$\langle S_I^r \rangle = \frac{\sum_{s=0}^r \binom{r}{s} \langle (m_6^{(r-s)} - m_5^{(s)})^r \rangle}{\langle (W_1 W_2)^{r/2} \rangle} \quad (9.123)$$

この 2 式と 9.116 から $r = 2n$ であれば $W_1 W_2$ は次のように決まる。

$$\langle W_1 W_2 \rangle = \langle m_3^{(2)} \rangle + \langle m_4^{(2)} \rangle + \langle m_5^{(2)} \rangle + \langle m_6^{(2)} \rangle - 2 \langle m_4 m_3 \rangle - 2 \langle m_6 m_5 \rangle \quad (9.124)$$

しかし、これでは r が奇数であるときは決まらない。

そこで位相平均と強度が相関を持つことを過程してみよう。この場合はもはや位相平均部分と強度部分をわけすることはできず

式 9.64 に変えて入射光の振幅を用いて次のような複素相互干渉 Γ を考える。

$$\Gamma_{12} = \alpha T \langle V_1^* V_2 \rangle \quad (9.125)$$

よって偏角の余弦、正弦を次のようにおいて

$$\cos(\arg \Gamma_{12}) = \frac{\langle W_4 \rangle - \langle W_3 \rangle}{|\Gamma_{12}|} \quad (9.126)$$

$$\sin(\arg \Gamma_{12}) = \frac{\langle W_6 \rangle - \langle W_5 \rangle}{|\Gamma_{12}|} \quad (9.127)$$

式 9.74、9.75 から

$$\langle W_3 \rangle = \frac{1}{4} (W_1 + W_2 - 2 |\Gamma_{12}| \cos(\arg \Gamma_{12})) \quad (9.128)$$

$$\langle W_4 \rangle = \frac{1}{4} (W_1 + W_2 + 2 |\Gamma_{12}| \cos(\arg \Gamma_{12})) \quad (9.129)$$

得る。

式 9.127、9.126 を 2 乗和すると位相は消去できる。式 9.120 から強度平均 $\langle W_j \rangle$ を観測平均の $\langle m_j \rangle$ でおきかえて

$$|\Gamma_{12}| = ((\langle W_4 \rangle - \langle W_3 \rangle)^2 + (\langle W_6 \rangle - \langle W_5 \rangle)^2)^{1/2} \quad (9.130)$$

$$= ((m_4 - m_3)^2 + (m_6 - m_5)^2)^{1/2} \quad (9.131)$$

次に式 9.127、9.126 から具体的に Γ を消去し、置き換えることができる。

$$\text{Cos}(arg\Gamma_{12}) = \frac{\langle m_4 \rangle - \langle m_3 \rangle}{((m_4 - m_3)^2 + (m_6 - m_5)^2)^{1/2}} \quad (9.132)$$

$$\text{Sin}(arg\Gamma_{12}) = \frac{\langle m_6 \rangle - \langle m_5 \rangle}{((m_4 - m_3)^2 + (m_6 - m_5)^2)^{1/2}} \quad (9.133)$$

この結果には式 9.83、9.82 と異なったものになっている。

位相差 $\phi_2 - \phi_1$ が一定であれば観測時間周期 T は任意に決めることができ W は m に対応する。 $\sin(\phi_2 - \phi_1)$, $\cos(\phi_2 - \phi_1)$ は 1 回の測定値 m_3, m_4, m_5, m_6 により決定する。しかし、位相に揺らぎがある場合は観測時間周期 T は干渉時間 $1/\Delta\omega$ より短くなくてはならない。さらにこの場合は光子強度 W によって統計が異なる。

$W_j \gg 1$ であれば式 9.829.83 の S_M, C_M になるが $W_j \ll 1$ であれば相互干渉を考慮し、式 9.123 の S_I, C_I を計算することはできるが実際に測定した結果はこれらと少々異なった統計を示す。

9.9 量子統計

9.9.1 量子化の基礎

次に量子場での考察に移行しよう。はじめに図 9.7 について考える。

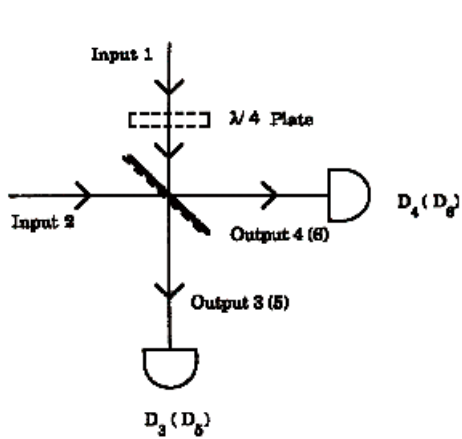


図 9.23:

一般に生成、消滅演算子について次の交換関係が成立する。

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j] = [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] = 0 \quad i, j = 1, 2, 3, 4 \quad (9.134)$$

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij} \quad i = 1, 2 \quad j = 3, 4 \quad (9.135)$$

さらに量子場では光子数の演算子 \hat{n} が次のようにきまる。

$$\hat{n} = \hat{a}^\dagger \hat{a} \quad (9.136)$$

これらから前節の実験を書き換えてみると式 9.48 と同様にして

$$\hat{a}_3 = (t\hat{a}_1 + r'\hat{a}_2) \quad (9.137)$$

$$\hat{a}_4 = (r\hat{a}_1 + t'\hat{a}_2) \quad (9.138)$$

これから次のように粒子数演算子が定義できる。

$$\hat{n}_3 = \hat{a}_3^\dagger \hat{a}_3 = (t\hat{a}_1 + r'\hat{a}_2)^\dagger (t\hat{a}_1 + r'\hat{a}_2) \quad (9.139)$$

$$= (|t|^2 \hat{n}_1 + |r'|^2 \hat{n}_2 + t^* r' \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 + t r'^* \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1) \quad (9.140)$$

$$\hat{n}_4 = \hat{a}_4^\dagger \hat{a}_4 = (r\hat{a}_1 + t'\hat{a}_2)^\dagger (r\hat{a}_1 + t'\hat{a}_2) \quad (9.141)$$

$$= (|r|^2 \hat{n}_1 + |t'|^2 \hat{n}_2 + r^* t' \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 + r t'^* \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1) \quad (9.142)$$

次の測定において beam1 に $\lambda/4$ 板を挿入すると位相が $\pi/2$ だけずれるのでこれはちょうど i 倍すればいいから

$$\hat{a}_5 = (it\hat{a}_1 + r'\hat{a}_2) \quad (9.143)$$

$$\hat{a}_6 = (ir\hat{a}_1 + t'\hat{a}_2) \quad (9.144)$$

よって

$$\hat{n}_5 = \hat{a}_5^\dagger \hat{a}_5 = (it\hat{a}_1 + r'\hat{a}_2)^\dagger (it\hat{a}_1 + r'\hat{a}_2) \quad (9.145)$$

$$= (|t|^2 \hat{n}_1 + |r'|^2 \hat{n}_2 - it^* r' \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 + i t r'^* \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1) \quad (9.146)$$

$$\hat{n}_6 = \hat{a}_6^\dagger \hat{a}_6 = (ir\hat{a}_1 + t'\hat{a}_2)^\dagger (ir\hat{a}_1 + t'\hat{a}_2) \quad (9.147)$$

$$= (|r|^2 \hat{n}_1 + |t'|^2 \hat{n}_2 - i r^* t' \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 + i r t'^* \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1) \quad (9.148)$$

古典光との対応では粒子数が m に対応するので上式の差をとることで

$$\hat{n}_4 - \hat{n}_3 = (r t'^* - t r'^*) \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 + (r^* t' - t^* r') \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 \quad (9.149)$$

となるが

$$|t| = |r| = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (9.150)$$

であれば括弧の中は位相差のみで表すことができ式 9.127、9.126 から

$$\hat{n}_4 - \hat{n}_3 = e^{i(\theta_r - \theta_{t'})} \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 + e^{-i(\theta_r - \theta_{t'})} \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 \quad (9.151)$$

同様に

$$\hat{n}_6 - \hat{n}_5 = i e^{i(\theta_r - \theta_{t'})} \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 - i e^{-i(\theta_r - \theta_{t'})} \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 \quad (9.152)$$

となる。量子場では粒子数の差の演算子は極めて自然に位相差 π の平面波の重ね合わせで表現される。

そこで次のように比例定数 K をかけて位相演算子を定義する。

$$\hat{S} = K_1 \left(e^{i(\theta_r - \theta_{t'})} \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 + e^{-i(\theta_r - \theta_{t'})} \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 \right) \quad (9.153)$$

$$\hat{C} = K_2 \left(i e^{i(\theta_r - \theta_{t'})} \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 - i e^{-i(\theta_r - \theta_{t'})} \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 \right) \quad (9.154)$$

しかし、 $\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1$ はもはや古典的数ではないので

$$[\hat{C}, \hat{S}] = 2iK_1K_2(\hat{n}_2 - \hat{n}_1) \neq 0 \quad (9.155)$$

のように $\hat{n}_2 - \hat{n}_1$ に依存する。これは量子力学では古典場と異なり \hat{C}, \hat{S} が同時に観測することが原理的にできないことを意味する。

しかし、これらの位相演算子は次のように粒子数演算子の和と保存する。

$$[\hat{S}, \hat{n}_1 + \hat{n}_2] = [\hat{C}, \hat{n}_1 + \hat{n}_2] = 0 \quad (9.156)$$

つまりこれら位相演算子は光子総数と直交関係を保つ。さらに各部分では次のように交換しない。

$$[\hat{S}, \hat{n}_1] = i(K_1/K_2)\hat{C} \quad (9.157)$$

$$[\hat{S}, \hat{n}_2] = -i(K_1/K_2)\hat{C} \quad (9.158)$$

$$[\hat{C}, \hat{n}_1] = -i(K_2/K_1)\hat{S} \quad (9.159)$$

$$[\hat{C}, \hat{n}_2] = i(K_2/K_1)\hat{S} \quad (9.160)$$

これらの関係は *SusskindGlogower* の関係に類似している。

位相差の決定は Cos と Sin が分離されているとできないことがわかる。

つまり位相は直交した2つの空間をつなげるものとして全空間の保存量と関係している。

9.9.2 量子化2

次に図 9.7 について考察する。このとき *Input1,2* に加えて真空場からの入射を考慮し、

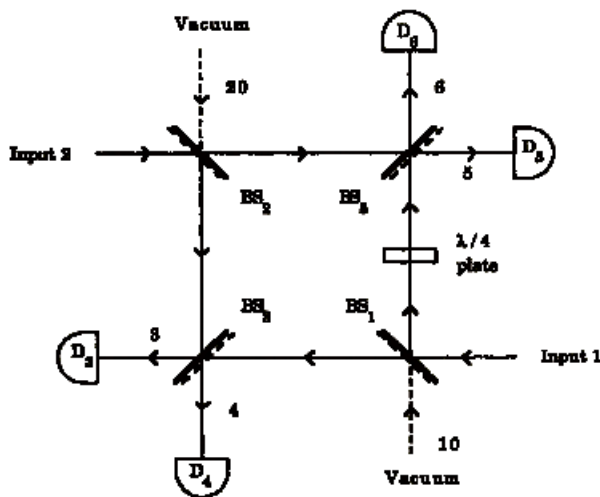


図 9.24:

BS 1、BS2 には入射振幅 \hat{a}_1, \hat{a}_2 の他に図にあるように真空からの寄与 $\hat{a}_{01}\hat{a}_{02}$ が加わるので

BS1 通過後には

$$\hat{b}_1 = (t\hat{a}_1 + r'\hat{a}_{10}) \quad (9.161)$$

$$\hat{c}_1 = (r\hat{a}_1 + t'\hat{a}_{10}) \quad (9.162)$$

BS2 通過後には

$$\hat{b}_2 = (t'\hat{a}_2 + r\hat{a}_{20}) \quad (9.163)$$

$$\hat{c}_2 = (r'\hat{a}_1 + t\hat{a}_{10}) \quad (9.164)$$

である。よって D_3, D_4, D_5, D_6 の各測定器での振幅は

$$\begin{aligned} \hat{a}_3 &= (t'\hat{b}_1 + r\hat{c}_2) \\ &= (tt'\hat{a}_1 + rr'\hat{a}_2 + r't'\hat{a}_{10} + rt\hat{a}_{20}) \end{aligned} \quad (9.165)$$

$$\begin{aligned} \hat{a}_4 &= (r'\hat{b}_1 + t\hat{c}_2) \\ &= (tr'\hat{a}_1 + r't\hat{a}_2 + r'^2\hat{a}_{10} + t^2\hat{a}_{20}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{a}_5 &= (t\hat{b}_2 + ir'\hat{c}_1) \\ &= (irr'\hat{a}_1 + tt'\hat{a}_2 + ir't'\hat{a}_{10} + rt\hat{a}_{20}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{a}_6 &= (r\hat{b}_2 + it'\hat{c}_1) \\ &= (irt'\hat{a}_1 + rt'\hat{a}_2 + it^2\hat{a}_{10} + r^2\hat{a}_{20}) \end{aligned}$$

となる。これらは P という測定に対し、観測装置系のあらゆる経路の振幅 \hat{a}_{pi} の有限の和

$$\hat{a}_p = \sum_i^n \hat{a}_{pi} \quad (9.166)$$

になっているが観測装置の設置者の知る n が現実の全ての経路であるという保証はない。前節と同じように透過率と反射率を対称的に次のようにおく。

$$|t| = |r| = |t'| = |r'| = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (9.167)$$

よって

$$\hat{n} = \hat{a}^\dagger \hat{a} \quad (9.168)$$

だったから前節と同じように次のように Cos、Sin の演算子を定義すると第 1 項の $H..$ をエルミート共役として

$$\begin{aligned} \hat{C} &\equiv \hat{n}_4 - \hat{n}_3 \\ &= \frac{1}{4} (e^{i(\theta_t - \theta_{r'})} \hat{a}_1 + e^{i(\theta_{r'} - \theta_t)} \hat{a}_2 + e^{2i\theta_{r'}} \hat{a}_{10} + e^{2i\theta_t} \hat{a}_{20})^\dagger (e^{i(\theta_t - \theta_{r'})} \hat{a}_1 + e^{i(\theta_{r'} - \theta_t)} \hat{a}_2 + e^{2i\theta_{r'}} \hat{a}_{10} + e^{2i\theta_t} \hat{a}_{20}) \\ &\quad - \frac{1}{4} (e^{i(\theta_t - \theta_{t'})} \hat{a}_1 + e^{i(\theta_{r'} - \theta_r)} \hat{a}_2 + e^{i(\theta_{r'} - \theta_t')} \hat{a}_{10} + e^{i(\theta_r - \theta_t)} \hat{a}_{20})^\dagger (e^{i(\theta_t - \theta_{t'})} \hat{a}_1 + e^{i(\theta_{r'} - \theta_r)} \hat{a}_2 + e^{i(\theta_{r'} - \theta_t')} \hat{a}_{10} + e^{i(\theta_r - \theta_t)} \hat{a}_{20}) \\ &= \frac{1}{2} \left\{ \hat{a}_1^\dagger + e^{i(\theta_t - \theta_{r'})} \hat{a}_{10}^\dagger \right\} \left\{ \hat{a}_2 + e^{i(\theta_t - \theta_{r'})} \hat{a}_{20} \right\} + \frac{1}{2} H.. \end{aligned} \quad (9.169)$$

同様に

$$\begin{aligned}\hat{S} &\equiv \hat{n}_6 - \hat{n}_5 \\ &= \frac{1}{2} \left\{ -i\hat{a}_1^\dagger + ie^{i(\theta_t - \theta_{r'})} \hat{a}_{10}^\dagger \right\} \left\{ \hat{a}_2 - e^{i(\theta_t - \theta_{r'})} \hat{a}_{20} \right\} + \frac{1}{2} H.. \end{aligned} \quad (9.170)$$

となる。これから

$$[\hat{C}, \hat{S}] = 0 \quad (9.171)$$

となる。つまり真空場を付け加えることで位相差は同時測定が可能である。

また、真空場を無視して

$$\hat{n}_4 - \hat{n}_3 = \frac{1}{2} \left\{ \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 + \hat{a}_1 \hat{a}_2^\dagger \right\} \quad (9.172)$$

$$\hat{n}_6 - \hat{n}_5 = \frac{-i}{2} \left\{ \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 - \hat{a}_1 \hat{a}_2^\dagger \right\} \quad (9.173)$$

となるので

$$\begin{aligned}(\hat{n}_4 - \hat{n}_3)^2 + (\hat{n}_6 - \hat{n}_5)^2 &= \frac{1}{4} \left\{ \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 + \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 \hat{a}_1 \hat{a}_2^\dagger + \hat{a}_1 \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 + \hat{a}_1 \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 \hat{a}_2^\dagger \right\} \\ &\quad - \frac{1}{4} \left\{ \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 - \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 \hat{a}_1 \hat{a}_2^\dagger - \hat{a}_1 \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 + \hat{a}_1 \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 \hat{a}_2^\dagger \right\} \\ &= \frac{1}{2} \left\{ \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 \hat{a}_2 \hat{a}_2^\dagger + \hat{a}_1 \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 \right\} \\ &= \frac{1}{2} \{ \hat{n}_1 \hat{n}_2 + (1 - \hat{n}_1)(1 - \hat{n}_2) \} \end{aligned}$$

さらに観測に対応して規格化した演算子が次の関係を満たすように

$$\hat{S}_M^2 + \hat{C}_M^2 = 1 \quad (9.174)$$

次のように定義する。

$$\hat{C}_M = \frac{1}{2\sqrt{\hat{C}^2 + \hat{S}^2}} \left[\left\{ \hat{a}_1^\dagger + e^{i(\theta_t - \theta_{r'})} \hat{a}_{10}^\dagger \right\} \left\{ \hat{a}_2 + e^{i(\theta_t - \theta_{r'})} \hat{a}_{20} \right\} + H.. \right] \quad (9.175)$$

$$\hat{S}_M = \frac{1}{2\sqrt{\hat{C}^2 + \hat{S}^2}} \left[\left\{ -i\hat{a}_1^\dagger + ie^{i(\theta_t - \theta_{r'})} \hat{a}_{10}^\dagger \right\} \left\{ \hat{a}_2 - e^{i(\theta_t - \theta_{r'})} \hat{a}_{20} \right\} + H.. \right] \quad (9.176)$$

この演算子も次のように交換する。

$$[\hat{C}_M, \hat{S}_M] = 0 \quad (9.177)$$

また、この時の光子数の和に相当する演算子は前節のように交換する。

$$[\hat{C}_M, \hat{n}_1 + \hat{n}_2 + \hat{n}_{10} + \hat{n}_{20}] = [\hat{S}_M, \hat{n}_1 + \hat{n}_2 + \hat{n}_{10} + \hat{n}_{20}] = 0 \quad (9.178)$$

これは次のように書き直すことができる。

$$[\hat{C}_M, \hat{n}_1 + \hat{n}_2] = -[\hat{C}_M, \hat{n}_{10} + \hat{n}_{20}] \neq 0 \quad (9.179)$$

$$[\hat{S}_M, \hat{n}_1 + \hat{n}_2] = -[\hat{S}_M, \hat{n}_{10} + \hat{n}_{20}] \neq 0 \quad (9.180)$$

つまり真空場の寄与がないと位相と光子数は交換しない。これは不確定性原理を利用すると

$$\langle (\Delta \hat{C}_M)^2 \rangle \langle (\Delta(\hat{n}_1 + \hat{n}_2))^2 \rangle \geq 0 \quad (9.181)$$

$$\langle (\Delta \hat{S}_M)^2 \rangle \langle (\Delta(\hat{n}_1 + \hat{n}_2))^2 \rangle \geq 0 \quad (9.182)$$

であることを意味する。従って $n_1 + n_2$ が確定するとみなせる場合は交換する。さらに少々大変であるが式 9.169、9.170 からあからさまに次を計算することができる

$$\eta = e^{i(\theta_t - \theta_{r'})}$$

とにおいて

$$\begin{aligned} \hat{C}^2 + \hat{S}^2 &= \hat{n}_1 + \hat{n}_2 + \hat{n}_1 \hat{n}_2 + \hat{n}_2 \hat{n}_{10} + \hat{n}_{20} + \hat{n}_{10} + \hat{n}_1 \hat{n}_{20} + \hat{n}_{10} \hat{n}_{20} \\ &+ \eta \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 \hat{a}_{20} + \eta \hat{a}_{10}^\dagger \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2^2 + \eta^2 \hat{a}_{10}^\dagger \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 \hat{a}_{20} + \eta^3 \hat{a}_{10}^\dagger \hat{a}_2 \hat{a}_{20} + \eta^3 \hat{a}_{10}^\dagger \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_{20}^2 \\ &+ \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_{10} \hat{a}_{20} + \hat{a}_{10}^\dagger \hat{a}_{20}^\dagger \hat{a}_2 \hat{a}_1 \\ &+ \eta^* \hat{a}_2^{\dagger 2} \hat{a}_1 \hat{a}_{10} + \eta^* \hat{a}_{20}^\dagger \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1^2 + \eta^{*2} \hat{a}_{20}^\dagger \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 \hat{a}_{10} + \eta^{*3} \hat{a}_{20}^\dagger \hat{a}_1 \hat{a}_{10} + \eta^{*3} \hat{a}_{20}^\dagger \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_{10}^2 \\ &= \hat{D} + \hat{F} \end{aligned}$$

最後の行は次のように真空場を含まない単純な \hat{D} と含む \hat{F} に分けた。

$$\hat{D} = \hat{n}_1 + \hat{n}_2 + \hat{n}_1 \hat{n}_2 \quad (9.183)$$

古典場の場合は式 9.83、9.82 のように式 9.67 を用いて規格化したが、ここでは $\hat{C}^2 + \hat{S}^2$ の期待値が単純に求まらない。

観測結果の演算子 \hat{C}_M, \hat{S}_M は粒子数演算子 $\hat{n}_3, \hat{n}_4, \hat{n}_5, \hat{n}_6$ の累乗 (r 乗) で表されるとすればこれを次のように表現する。

$$\hat{C}_M^r = f(\{\hat{n}\}) \quad (9.184)$$

$$\hat{S}_M^r = g(\{\hat{n}\}) \quad (9.185)$$

量子力学の確率解釈によれば確率 $P(\{n\})$ を用いて量子力学的な期待値は次のように求まるはずである。

$$\langle \hat{C}_M^r \rangle = \langle f(\{\hat{n}\}) \rangle = \sum_{\{n\}} f(\{n\}) P(\{n\}) \quad (9.186)$$

ここで一般に

$$P(x) \equiv \frac{x_j}{\sum_x x_j}, \quad e^x \equiv \sum_n \frac{x^n}{n!} \quad (9.187)$$

だから

$$\begin{aligned}
P(\{n\}) &= \left\langle \prod_{j=3}^6 (\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j)^{n_j} / \sum_{n_j} (\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j)^{n_j} \right\rangle \\
&= \left\langle \prod_{j=3}^6 \frac{(\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j)^{n_j}}{n_j!} / \sum_{n_j} \frac{(\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j)^{n_j}}{n_j!} \right\rangle \\
&= \left\langle \prod_{j=3}^6 \frac{(\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j)^{n_j}}{n_j!} e^{-\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j} \right\rangle
\end{aligned} \tag{9.188}$$

となる。真空場を考慮すると光子数について

$$\hat{n}_1 + \hat{n}_2 = \hat{n}_3 + \hat{n}_4 + \hat{n}_5 + \hat{n}_6 - \hat{n}_{10} - \hat{n}_{20} \tag{9.189}$$

の関係がある。また式 9.165 から次のように書き換えられる。反射と透過の際に BM の裏面と表面で位相が π ずれる

ことを考慮し、

位相のみの変化を $t = -\pi/2, t' = +\pi/2, r = 0, r' = \pi$ として

$$\begin{aligned}
\hat{a}_3 &= \frac{1}{2}(\hat{a}_1 + e^{i\pi} \hat{a}_2 + e^{-i\pi/2} \hat{a}_{10} + e^{-i\pi/2} \hat{a}_{20}) \\
&= \frac{1}{2}(\hat{a}_1 - \hat{a}_2 - i\hat{a}_{10} - i\hat{a}_{20})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\hat{a}_4 &= \frac{1}{2}(e^{-i\pi/2} \hat{a}_1 + e^{-i\pi/2} \hat{a}_2 + \hat{a}_{10} + e^{-i\pi} \hat{a}_{20}) \\
&= \frac{1}{2}e^{-i\pi/2}(\hat{a}_1 + \hat{a}_2 + i\hat{a}_{10} - i\hat{a}_{20})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\hat{a}_5 &= \frac{1}{2}(ie^{i\pi} \hat{a}_1 + \hat{a}_2 + ie^{-i\pi/2} \hat{a}_{10} + e^{-i\pi/2} \hat{a}_{20}) \\
&= \frac{1}{2}(-i\hat{a}_1 + \hat{a}_2 + \hat{a}_{10} - i\hat{a}_{20})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\hat{a}_6 &= \frac{1}{2}(ie^{i\pi/2} \hat{a}_1 + e^{i\pi/2} \hat{a}_2 + ie^{i\pi} \hat{a}_{10} + \hat{a}_{20}) \\
&= \frac{1}{2}(-\hat{a}_1 + i\hat{a}_2 - i\hat{a}_{10} + \hat{a}_{20})
\end{aligned}$$

となる。これで 9.186 を計算する準備ができた。

$$\begin{aligned}
\langle f(\{\hat{n}_3, \hat{n}_4, \hat{n}_5, \hat{n}_6\}) \rangle &= \sum_{\{n\}} f(n_3, n_4, n_5, n_6) \left\langle \prod_{j=3}^6 \frac{(\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j)^{n_j}}{n_j!} e^{-\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j} \right\rangle \\
&= \sum_{\{n\}} f(n_3, n_4, n_5, n_6) \\
&\times \left\langle \frac{(\hat{a}_1^\dagger - \hat{a}_2^\dagger)^{n_3} (\hat{a}_1 - \hat{a}_2)^{n_3}}{4^{n_3} n_3!} \frac{(\hat{a}_1^\dagger + \hat{a}_2^\dagger)^{n_4} (\hat{a}_1 + \hat{a}_2)^{n_4}}{4^{n_4} n_4!} \right.
\end{aligned} \tag{9.190}$$

$$\left. \frac{(i\hat{a}_1^\dagger + \hat{a}_2^\dagger)^{n_5} (-i\hat{a}_1 + \hat{a}_2)^{n_5}}{4^{n_5} n_5!} \frac{(-\hat{a}_1^\dagger - i\hat{a}_2^\dagger)^{n_6} (-\hat{a}_1 + i\hat{a}_2)^{n_6}}{4^{n_6} n_6!} e^{-(\hat{n}_1 + \hat{n}_2)} \right\rangle \tag{9.191}$$

を得る。しかし、この式にも古典場と同様に $n_3 = n_4, n_5 = n_6$ ときは

$$\hat{a}_1 = \pm i \hat{a}_2 \quad (9.192)$$

となってしまうので 9.190 は 0 になってしまう。そこで式 19.99 と同様にベッセル関数 I_0 を導入し、確率を次のように定義しなおす。

$$P' \equiv \left\langle I_0 \left[(\hat{a}_1^{\dagger 2} - \hat{a}_2^{\dagger 2})(\hat{a}_1^2 - \hat{a}_2^2)/2 \right]^{1/2} I_0 \left[(\hat{a}_1^{\dagger 2} + \hat{a}_2^{\dagger 2})(\hat{a}_1^2 + \hat{a}_2^2)/2 \right]^{1/2} e^{-(\hat{n}_1 + \hat{n}_2)} \right\rangle \quad (9.193)$$

これにより $n_3 = n_4, n_5 = n_6$ 時は $1 - P'$ を用いて繰り込みしなおす必要がある。
非常に弱い場であれば

$$P' \simeq \left\langle e^{-(\hat{n}_1 + \hat{n}_2)} \right\rangle \quad (9.194)$$

である。

これで古典場と同様に $\langle f(\{\hat{n}_3, \hat{n}_4, \hat{n}_5, \hat{n}_6\}) \rangle$ による計算と実験による光子数による期待値 $\langle f(\{m_3, m_4, m_5, m_6\}) \rangle$ を比べる準備ができた。

ここで実際の実験に量子論的な効果が入るとして規格化されてない α 次の書き換えをおこなう。

$$\hat{a}^\dagger \hat{a} \rightarrow \alpha \hat{n} \quad (9.195)$$

これによると式 9.188 は次のように書き換えられる。

$$p(\{m\}) = \left\langle \prod_{j=3}^6 \alpha^{m_j} e^{-(\hat{n}_1 + \hat{n}_2)} \right\rangle \quad (9.196)$$

9.10 量子的希薄光子統計

古典場と同様に $\langle n_1 \rangle, \langle n_2 \rangle \ll 1$ の希薄な光子数の場合を考えよう。

式 9.69、9.68 から

$$\langle \hat{C}_M \rangle = \left\langle \frac{\hat{n}_4 - \hat{n}_3}{((\hat{n}_4 - \hat{n}_3)^2 + (\hat{n}_6 - \hat{n}_5)^2)^{1/2}} \right\rangle \quad (9.197)$$

式 9.190 から 9.169 を用いて $\langle n_1 \rangle, \langle n_2 \rangle$ の高次を無視すると分母分子に分けることが可能であるとして、分子については式 9.172、9.52 より n の高次を無視して交換関係 j から正規順に並べ変えると

$$\begin{aligned} \langle \hat{C}_M \rangle &= \left\langle \left(\frac{1}{2} \{ \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 + \hat{a}_1 \hat{a}_2^\dagger \} \left(\frac{1}{4} \{ \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 + \hat{a}_1 \hat{a}_2^\dagger \}^2 - \frac{1}{4} \{ \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 - \hat{a}_1 \hat{a}_2^\dagger \}^2 \right)^{-1/2} e^{(\hat{n}_1 + \hat{n}_2)} \right) e^{-(\hat{n}_1 + \hat{n}_2)} \right\rangle \\ &= \left\langle \left(\frac{1}{2} \{ \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 + \hat{a}_1 \hat{a}_2^\dagger \} \left(\frac{1}{2} \{ \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 \hat{a}_1 \hat{a}_2^\dagger + \hat{a}_1 \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 \} \right)^{-1/2} e^{(\hat{n}_1 + \hat{n}_2)} \right) e^{-(\hat{n}_1 + \hat{n}_2)} \right\rangle \\ &= \left\langle \left(\frac{1}{2} \{ \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 + \hat{a}_1 \hat{a}_2^\dagger \} \left(\frac{1}{2} \{ \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 \hat{a}_2 \hat{a}_2^\dagger + \hat{a}_1 \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 \} \right)^{-1/2} e^{(\hat{n}_1 + \hat{n}_2)} \right) e^{-(\hat{n}_1 + \hat{n}_2)} \right\rangle \\ &= \left\langle \left(\frac{1}{2} \{ \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 + \hat{a}_1 \hat{a}_2^\dagger \} \left(\frac{1}{2} \{ \hat{n}_1(\hat{n}_2 + 1) + (\hat{n}_1 + 1)\hat{n}_2 \} \right)^{-1/2} (1 + \hat{n}_1 + \hat{n}_2) \right) e^{-(\hat{n}_1 + \hat{n}_2)} \right\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle \hat{n}_4 - \hat{n}_3 \rangle &= \left\langle \left(\frac{1}{2} \{ \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 + \hat{a}_1 \hat{a}_2^\dagger \} e^{(\hat{n}_1 + \hat{n}_2)} \right) e^{-(\hat{n}_1 + \hat{n}_2)} \right\rangle \\
&\simeq \left\langle \left(\frac{1}{2} \{ \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 + 1 \} (1 + \hat{n}_1 + \hat{n}_2) \right) e^{-(\hat{n}_1 + \hat{n}_2)} \right\rangle \\
&\simeq \left\langle \left(\frac{1}{2} \{ \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 + \hat{a}_1 \hat{a}_2^\dagger + \hat{n}_1 + \hat{n}_2 \} \right) e^{-(\hat{n}_1 + \hat{n}_2)} \right\rangle
\end{aligned}$$

次に分母について

$$\left\langle ((\hat{n}_4 - \hat{n}_3)^2 + (\hat{n}_6 - \hat{n}_5)^2)^{1/2} \right\rangle = \quad (9.198)$$

だから

$$\begin{aligned}
\langle \hat{C}_M \rangle &= \frac{\left\langle (\hat{n}_1 + \hat{n}_2 + \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1) e^{-(\hat{n}_1 + \hat{n}_2)} \right\rangle}{4 \langle 1 - e^{-(\hat{n}_1 + \hat{n}_2)} \rangle} \\
&\quad - \frac{\left\langle (\hat{n}_1 + \hat{n}_2 - \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 - \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1) e^{-(\hat{n}_1 + \hat{n}_2)} \right\rangle}{4 \langle 1 - e^{-(\hat{n}_1 + \hat{n}_2)} \rangle} \\
&\simeq \frac{\langle \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 \rangle}{2(\langle \hat{n}_1 \rangle + \langle \hat{n}_2 \rangle)} + \dots
\end{aligned}$$

を得る。同様に

$$\langle \hat{S}_M \rangle = \left\langle \frac{\hat{n}_6 - \hat{n}_5}{((\hat{n}_4 - \hat{n}_3)^2 + (\hat{n}_6 - \hat{n}_5)^2)^{1/2}} \right\rangle \quad (9.199)$$

についても 9.173、9.52 より n の高次を無視して交換関係 j から正規順に並べ変えると分子について

$$\begin{aligned}
\langle \hat{n}_6 - \hat{n}_5 \rangle &= \left\langle \left(\frac{-i}{2} \{ \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 - \hat{a}_1 \hat{a}_2^\dagger \} e^{(\hat{n}_1 + \hat{n}_2)} \right) e^{-(\hat{n}_1 + \hat{n}_2)} \right\rangle \\
&= \left\langle \left(\frac{-i}{2} \{ \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 - \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 - 1 \} (1 + \hat{n}_1 + \hat{n}_2) \right) e^{-(\hat{n}_1 + \hat{n}_2)} \right\rangle
\end{aligned}$$

だから

$$\langle \hat{S}_M \rangle \simeq \frac{-i \langle \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 - \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 \rangle}{2(\langle \hat{n}_1 \rangle + \langle \hat{n}_2 \rangle)} + \dots \quad (9.200)$$

を得る。

これから 2 次のモーメントも簡単に計算できる。

$$\begin{aligned}
\langle \hat{C}_M^2 \rangle &= \left\langle \frac{(\hat{n}_4 - \hat{n}_3)^2}{((\hat{n}_4 - \hat{n}_3)^2 + (\hat{n}_6 - \hat{n}_5)^2)} \right\rangle \\
&\simeq \frac{\left\langle (\hat{n}_1 + \hat{n}_2 + \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1) e^{-(\hat{n}_1 + \hat{n}_2)} \right\rangle}{4 \langle 1 - e^{-(\hat{n}_1 + \hat{n}_2)} \rangle} \\
&\quad + \frac{\left\langle (\hat{n}_1 + \hat{n}_2 - \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 - \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1) e^{-(\hat{n}_1 + \hat{n}_2)} \right\rangle}{4 \langle 1 - e^{-(\hat{n}_1 + \hat{n}_2)} \rangle} \\
&\simeq \frac{1}{2}
\end{aligned}$$

前節で見たように古典場において Sin、Cos は連続的な測定によって決定された。しかし、実際の光子集団との相違があり、r 次のモーメントととして決定された。

この推定された r 次のモーメントをそれぞれ次のように置く。

$$\langle C_I^r \rangle, \langle S_I^r \rangle \quad (9.201)$$

この状況は量子場では異なったものになる。観測される光子数は演算子 \hat{n} と関係するが、これらは交換しないので順序が影響する。

正規順として次のような記号を用いよう。

$$\hat{n}^r =: \hat{n}^r : \quad (9.202)$$

よって式 9.83、9.82 から

$$\langle C_I^r \rangle = \frac{\langle : (\hat{n}_4 - \hat{n}_3)^r : \rangle}{\langle (\hat{W}_1 \hat{W}_2)^{r/2} \rangle} \quad (9.203)$$

$$\langle S_I^r \rangle = \frac{\langle : (\hat{n}_6 - \hat{n}_5)^r : \rangle}{\langle (\hat{W}_1 \hat{W}_2)^{r/2} \rangle} \quad (9.204)$$

式 9.169 から

$$\begin{aligned} \langle C_I^r \rangle &= \frac{\langle : \left[\left\{ \hat{a}_1^\dagger + e^{i(\theta_t - \theta_{r'})} \hat{a}_{10}^\dagger \right\} \left\{ \hat{a}_2 + e^{i(\theta_t - \theta_{r'})} \hat{a}_{20} \right\} + \left\{ \hat{a}_2^\dagger + e^{-i(\theta_t - \theta_{r'})} \hat{a}_{20}^\dagger \right\} \left\{ \hat{a}_1 + e^{-i(\theta_t - \theta_{r'})} \hat{a}_{10} \right\} \right]^r : \rangle}{2^r \langle (\hat{W}_1 \hat{W}_2)^{r/2} \rangle} \\ \langle S_I^r \rangle &= \frac{\langle : \left[\left\{ -i\hat{a}_1^\dagger + ie^{i(\theta_t - \theta_{r'})} \hat{a}_{10}^\dagger \right\} \left\{ \hat{a}_2 - e^{i(\theta_t - \theta_{r'})} \hat{a}_{20} \right\} + \left\{ \hat{a}_2^\dagger - e^{-i(\theta_t - \theta_{r'})} \hat{a}_{20}^\dagger \right\} \left\{ i\hat{a}_1 - ie^{-i(\theta_t - \theta_{r'})} \hat{a}_{10} \right\} \right]^r : \rangle}{2^r \langle (\hat{W}_1 \hat{W}_2)^{r/2} \rangle} \end{aligned} \quad (9.205)$$

古典場と同様に次のようにおきかえる。

$$\hat{W}_1 \hat{W}_2 = \hat{n}_1 \hat{n}_2 \quad (9.206)$$

式 9.169、9.170 から真空場の項 $\hat{a}_{10}, \hat{a}_{20}$ は正規順では無視されるので式 9.172、9.173 から平均をとるので位相項は落ちる。

$$[\hat{a}_1^\dagger, \hat{a}_2] = [\hat{a}_2^\dagger, \hat{a}_1] = 0 \quad (9.207)$$

だから

$$\begin{aligned}
\langle :(\hat{n}_4 - \hat{n}_3)^2 : \rangle + \langle :(\hat{n}_6 - \hat{n}_5)^2 : \rangle &= \\
&= \left\langle \left[\frac{1}{2} \{ \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 + \hat{a}_1 \hat{a}_2^\dagger \} \right]^2 \right\rangle \\
&+ \left\langle \left[\frac{-i}{2} \{ \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 - \hat{a}_1 \hat{a}_2^\dagger \} \right]^2 \right\rangle \\
&= \left\langle \left[\frac{1}{2} \{ \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 \} \right]^2 \right\rangle \\
&+ \left\langle \left[\frac{-i}{2} \{ \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 - \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 \} \right]^2 \right\rangle \\
&= \left\langle \frac{1}{2} \{ \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 \hat{a}_1 \hat{a}_2^\dagger + \hat{a}_1 \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 \} \right\rangle \\
&= \langle : \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 : \rangle \\
&= \langle \hat{n}_1 \hat{n}_2 \rangle
\end{aligned}$$

を得るので式 9.205 から $r = 2$ について

$$\begin{aligned}
\langle C_I^2 \rangle &= \frac{\langle : [\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1]^2 : \rangle}{4 \langle \hat{n}_1 \hat{n}_2 \rangle} \\
\langle S_I^2 \rangle &= \frac{\langle : [i \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 - i \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2]^2 : \rangle}{4 \langle \hat{n}_1 \hat{n}_2 \rangle}
\end{aligned} \tag{9.208}$$

が得られる。

$$\langle C_I^2 \rangle + \langle S_I^2 \rangle = 1 \tag{9.209}$$

を用いても $\langle \hat{n}_1 \hat{n}_2 \rangle$ は消えない。古典的な

$$\sqrt{W_1 W_2} \tag{9.210}$$

に対応する量子場的な演算子がうまく求められない問題がある。

次のように図の場合の状態ベクトルを考える。

$$|\theta_1\rangle_1 |\theta_2\rangle_2 |vac\rangle_{10} |vac\rangle_{20} \tag{9.211}$$

位相状態では粒子数が平均として確定しているとすると \hat{C}_M, \hat{S}_M の期待値は 9.175、9.176 より

$$(\hat{C}^2 + \hat{S}^2)^{1/2} \rightarrow \hat{n}_1 \hat{n}_2 \tag{9.212}$$

と置き換えられて

$$[\hat{a}^\dagger, \hat{n}] = \hat{a}^\dagger (\hat{a}^\dagger \hat{a} - \hat{a} \hat{a}^\dagger) = \hat{a}^\dagger \tag{9.213}$$

だから $e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta$ より

$$\begin{aligned}
\langle \hat{C}_M \rangle &= \frac{1}{2\sqrt{\hat{C}^2 + \hat{S}^2}} \left[\left\{ \hat{a}_1^\dagger + e^{i(\theta_t - \theta_{r'})} \hat{a}_{10}^\dagger \right\} \left\{ \hat{a}_2 + e^{i(\theta_t - \theta_{r'})} \hat{a}_{20} \right\} + H.. \right] \\
&= \frac{1}{2} \langle \theta_1 | \hat{a}_1^\dagger \frac{1}{\sqrt{n_1}} | \theta_1 \rangle \langle \theta_2 | \hat{a}_2 \frac{1}{\sqrt{n_2}} | \theta_2 \rangle + c.c \\
&= \frac{1}{2} (e^{-i(\theta_2 - \theta_1)} + e^{i(\theta_2 - \theta_1)}) + c.c \\
&= \cos(\theta_2 - \theta_1)
\end{aligned} \tag{9.214}$$

$$\begin{aligned}
\langle \hat{S}_M \rangle &= \frac{1}{2\sqrt{\hat{C}^2 + \hat{S}^2}} \left[\left\{ -i\hat{a}_1^\dagger + ie^{i(\theta_t - \theta_{r'})} \hat{a}_{10}^\dagger \right\} \left\{ \hat{a}_2 - e^{i(\theta_t - \theta_{r'})} \hat{a}_{20} \right\} + H.. \right] \\
&= \frac{1}{2} \langle \theta_1 | -i\hat{a}_1^\dagger \frac{1}{\sqrt{n_1}} | \theta_1 \rangle \langle \theta_2 | \hat{a}_2 \frac{1}{\sqrt{n_2}} | \theta_2 \rangle + c.c \\
&= \frac{1}{2} (-ie^{-i(\theta_2 - \theta_1)} + e^{i(\theta_2 - \theta_1)}) + c.c \\
&= \sin(\theta_2 - \theta_1)
\end{aligned} \tag{9.215}$$

同様にして 2 次のモーメントを求めると。

$$\langle \hat{C}_M^2 \rangle = \cos^2(\theta_2 - \theta_1) \tag{9.216}$$

$$\langle \hat{S}_M^2 \rangle = \sin^2(\theta_2 - \theta_1) \tag{9.217}$$

となり分散が消え、位相が決まる。

$$\sqrt{W_1 W_2} \rightarrow \sqrt{\hat{n}_1 \hat{n}_2} \tag{9.218}$$

という簡単な置き換えをすると 9.205 から

$$\langle \hat{C}_I \rangle = \cos(\theta_2 - \theta_1) \tag{9.219}$$

$$\langle \hat{S}_I \rangle = \sin(\theta_2 - \theta_1) \tag{9.220}$$

という関係式を得る。

9.11 Dicke state[7]

既に 1960 年代に Dicke は N 個の 2 準位の分子なる系の自然放射の干渉についての取り扱いを示している。自然放射の干渉は放射率が干渉がない場合は N に比例するのに対して N^2 に比例する。

このような大きな放射率は N 個の分子の運動と深い関係がある。

結果として単一の量子モデルが適応できる。このような状態を今後 **DickeState** と呼ぶ。

ここでの N 個の分子の運動は角運動量の理論が応用できる。

そこでこの単一分子とみなしたのスピンの $\frac{1}{2}$ の 2 準位状態のモデルを超放射状態として全角運動量 r と量子数 m で次のように表す。

$$|r, m\rangle \quad (9.221)$$

この全角運動量 r は Dicke によれば**連携数** (cooperation_number) という。明らかに各スピンの相関度を示す。

もう一つの m は励起分子数を n_+ 非励起分子数を n_- として次のように定義し、この系のエネルギーを示す目安になる。

$$m = \frac{1}{2}(n_+ - n_-) \quad (9.222)$$

従って粒子数 N との間に次の関係が成り立つ。

$$|m| \leq r \leq \frac{1}{2}N \quad (9.223)$$

式 9.221 は明らかに N 個のスピン系の完全な基底とはいえない。しかし Dicke は熱平衡に系があるなら縮退があり

次を満足するとした。

$$|m| \simeq r \quad (9.224)$$

そこで次のような仮定をする。

1) 単一分子の波動関数はオーバーラップしない、つまり全波動関数の足し合わせの際の対称性の問題は無視できる。

2) 系は断熱されていて単一分子が遷移をした時の共鳴振動数を測定できる穴がある。

3) 系の密度は十分小さく、原子間の相互作用は電磁場による分子の結合エネルギーのみと考える。

このような単純なモデルのハミルトニアンは既に知られている。

$m = r$ とすることはスピン間に相関がない状態であり系をマクロとみなしてダイポールモーメントが次に比例している。

$$r^2 - m^2 \quad (9.225)$$

この状態は単に非励起状態の多い熱平衡な状態 ($m < 0$) でないだけでなく非干渉的なポンプシステム ($m > 0$)

のある状態でもない、全てが励起している全励起状態である。全励起状態は量子的なモデルで説明できる。

この状態では系はボーズ分布に従い分散は

$$\Delta(\bar{n}) \simeq \bar{n} \quad (9.226)$$

である。また $m = 0$ では 2 項分布にしたがい、ポアソン統計であるから分散は $r \rightarrow \infty$ では

$$\Delta(\bar{n}) \simeq \bar{n}^{1/2} \quad (9.227)$$

となる。これらは $r \gg m$ という状態とみなせて放射が r^2 に比例している。この状態を超放射状態と呼ぶ。

この状態は古典的なモデルとして説明できる。

エネルギー準位の差が

$$\hbar\omega \quad (9.228)$$

であるモデルを考え、Dicke による R 演算子を用いてダイポール近似として単一粒子とみなし、系のハミルトニアンを k を結合定数として仮定から次のように置く。

$$H = \hbar\omega R_3 + \hbar\omega a^\dagger a + \hbar k(a^\dagger R^- + a R^+) \quad (9.229)$$

ただし R_3 は固有値 m で $-N/2$ から $N/2$ の値をとり、

$$m = \frac{1}{2}(n_+ - n_-) \quad (9.230)$$

$$N = n_+ + n_- \quad (9.231)$$

である。よって式 9.229 の第 1 項は各分子のエネルギーの総和である。第 2 項は電磁場との相互作用である。 R^+ , R^- は N 個の粒子全スピンの反転演算子で次のような角運動量と同じ交換関係を満たす。

$$[R^+, R^-] = 2R_3, \quad [R_3, R^\pm] = \pm R^\pm \quad (9.232)$$

式 9.229 はラマン干渉やブリルアン散乱の時のハミルトニアンと同じ形である。これらは 3 重線形散乱 [8] として

説明される。例えば入射光子の振動数を ω_2 として非線形材質内の励起光子の振動数を ω_1 とすると散乱された音響子の振動数 ω_{pn} は

$$\omega_{pn} = \omega_2 - \omega_1 \quad (9.233)$$

で与えられる。位相の整合を考慮した相互作用のハミルトニアンは正確には次のようになる。

$$H = \hbar k(a_2^\dagger a_1 a + a^\dagger a_1^\dagger a_2) \quad (9.234)$$

ただし、 a_2 は入射光子、 a_1 は散乱音響子、 a は散乱光子の消滅演算子である。これらが古典的な数であれば次の値は同値である。

$$\langle a a_2^\dagger a_1 \rangle = \langle a \rangle \langle a_2^\dagger \rangle \langle a_1 \rangle \quad (9.235)$$

式 9.229 と式 9.234 との相違は準古典的な取り扱いとして

$$\langle a a_2^\dagger a_1 \rangle = \langle a \rangle \langle a_2^\dagger a_1 \rangle \quad (9.236)$$

とみなしていることにある。これは R^+ , R^- の取り扱いが 2 つの消滅演算子 a_1, a_2 を用いて式 9.229 から

$$R^+ = a_2^\dagger a_1 \quad (9.237)$$

$$R_3 = \frac{1}{2}(a_2^\dagger a_2 - a_1^\dagger a_1) \quad (9.238)$$

$$R = \frac{1}{2}(a_2^\dagger a_2 + a_1^\dagger a_1) \quad (9.239)$$

として $[a, a^\dagger] = 1$ より

$$\begin{aligned} |R|^2 &= \left| \frac{1}{4}(a_2^\dagger a_2 + a_1^\dagger a_1)(a_2^\dagger a_2 + a_1^\dagger a_1) \right| \\ &= \frac{1}{4} \left(a_2^\dagger a_2 a_2 a_2^\dagger + a_1^\dagger a_1 a_2 a_2^\dagger + a_2^\dagger a_2 a_1 a_1^\dagger + a_1^\dagger a_1 a_1 a_1^\dagger \right) \\ &= \frac{1}{4}(a_2^\dagger a_2 + a_1^\dagger a_1)(2 + a_2^\dagger a_2 + a_1^\dagger a_1) \\ &= R(R+1) \end{aligned}$$

が成り立つ。この関係を用いれば式 9.229 と式 9.234 は同じになる。
つまり次のような興味ある固有方程式が成り立つ。

$$|R|^2|r, m\rangle = r(r+1)|r, m\rangle \quad (9.240)$$

$$R_3|r, m\rangle = m|r, m\rangle \quad (9.241)$$

また、この全角運動量 r と、2 準位状態の数の差の半分を表す m の状態は $a_1^\dagger a_1$ と $a_2^\dagger a_2$ の固有状態である

$$|n_1, n_2\rangle \quad (9.242)$$

と次の関係で 1 対 1 の対応がある。

$$m = \frac{1}{2}(n_2 - n_1) \quad (9.243)$$

$$r = \frac{1}{2}(n_2 + n_1) \quad (9.244)$$

N 個の原子から干渉光の発光過程は $|r, m\rangle$ の結合した状態を用いてポンピング光 a_2 と音響場 a_1 の状態 $|n_1, n_2\rangle$ を用いて式 9.229 を用いて 3 重線形散乱と同じ過程で説明できた。しかし式 9.230 と式 9.243 では物理的な意味が若干異なる。 n_+, n_- は 2 準位状態のとりうる数であり、 n_1, n_2 は状態 $|r, m\rangle$ の干渉に関わる効果的な 2 つの準位の状態数である。

両者が等しくなるのはスピンの最大になる次の関係が成り立つ場合のみである。

$$r = \frac{1}{2}N \quad (9.245)$$

例えば $r = m$ と選ぶと式 9.243, 式 9.244 からは

$$n_2 = n_+ - n_-, \quad n_1 = 0 \quad (9.246)$$

となり、これは総原子数が $N = n_+ - n_-$ となり系は最高に励起した状態にある。
一方で超放射状態では次のような近似が成り立つ。

$$r \simeq \frac{1}{2}N \gg n_+ - n_- \quad n_1 \simeq n_2 \simeq \frac{1}{2}N \quad (9.247)$$

この場合十分干渉をつくるのに有効な光子数が励起され、は発振機の演算子 a_2, a_1 はエネルギーに効果的な状態にあり、式 9.229 のハミルトニアンが利用できる状態であるといえる。このようなことは n モードの調和振動子と対比できる。

一般に 1 つは自発的な発光は固有値 n が 0 の状態から始まるが超干渉状態からの発光と全励起状態からの発光には相違がある。

よって、実際に 9.229 のハミルトニアンは a_1 と a に完全な対称性が成り立つ。よって超干渉状態の時間発展は

$$n_1 = n_2 = r, \quad n = 0 \quad (9.248)$$

と

$$n_1 = 0, n_2 = r, \quad n = r \quad (9.249)$$

が同じ状態であることを示す。これは超干渉状態からの自然発光は実質的に既に有効な励起状態の数にある全励起状態により促されることを意味する。

これは現実的な自然発光が十分に励起された光子数があり、基底状態の光子数は0であることを示す。そこで式 9.229 を用いる。第1項と第2項の和については定数と考えて

$$R_3 + a^\dagger a = M \quad (9.250)$$

となるので改めてハミルトニアン H を次のようにおく。

$$H = \hbar k (a^\dagger R^- + R^+ a) \quad (9.251)$$

Heisenberg 方程式から

$$[H, a] = i\hbar \dot{a} = \hbar k \{ (a^\dagger R^- + R^+ a)a - a(a^\dagger R^- + R^+ a) \} \quad (9.252)$$

であるが

$$R^+ = a_2^\dagger a_1 \quad (9.253)$$

$$R^- = a_1^\dagger a_2 \quad (9.254)$$

であることを利用すると

$$\begin{aligned} [H, a] &= i\hbar \dot{a} = \hbar k \{ (a^\dagger a_1^\dagger a_2 a + a_2^\dagger a_1 a a - a a^\dagger a_1^\dagger a_2 - a a_2^\dagger a_1 a) \} \\ &= \hbar k \{ (a^\dagger a_1^\dagger a_2 a - a a^\dagger a_1^\dagger a_2) \} \\ &= \hbar k \{ [a^\dagger, a] a_1^\dagger a_2 \} \\ &= -\hbar k R^- \end{aligned}$$

となるので $1/k = 1$ とすると

$$\dot{a} = -iR^- \quad (9.255)$$

を得る。同様に

$$\dot{R}^- = 2iaR_3 \quad (9.256)$$

$$\dot{R}_3 = i(a^\dagger R^- - aR^+) \quad (9.257)$$

を得る。これは閉鎖的な系の期待値の方程式ではない。なぜなら次のように展開はできないからである。

$$\langle a^\dagger R^- \rangle \neq \langle a^\dagger \rangle \langle R^- \rangle \quad (9.258)$$

従って $a^\dagger R^-$ はまだ、原子と場の演算子の積に依存し、完全に Heisenberg 方程式を解くには無限の階層の方程式を解く必要が出てくる。

そこで次のような古典数としての置き換えを定義する。。

$$\langle R^\pm \rangle = r^\pm \quad (9.259)$$

$$\langle R_3 \rangle = r_3 \quad (9.260)$$

$$\langle a \rangle = \alpha \quad (9.261)$$

この置き換えで近似すれば系は閉じた系として扱え、非線形な部分は残るが完全に解を求めることができる。さらに次のように変数を実数として定義すると

$$i\alpha \rightarrow \alpha \quad (9.262)$$

$$r_1 = r^\pm \quad (9.263)$$

これらはよく知られた Bloch 方程式である。

$$\dot{r}_3 = -2\alpha r_1 \quad (9.264)$$

$$\dot{r}_1 = 2\alpha r_3 \quad (9.265)$$

$$\dot{\alpha} = r_1 \quad (9.266)$$

10 位相演算子

10.1 古典的な位相

古典的な単一モードの調和振動子のハミルトニアンは

$$H = \frac{1}{2} (p^2 + \omega^2 x^2) \quad (10.1)$$

であり、運動方程式が

$$\dot{p} = -\omega^2 x \quad (10.2)$$

となることから、例えば $p = A \sin \theta$, $\omega x = A \cos \theta$ とおける。この時、次が成り立つ。

$$\tan(\theta) = \frac{p}{\omega x} \quad (10.3)$$

これから位相 θ は次のようにおくことができる。

$$\theta = \arctan\left[\frac{p}{\omega x}\right] \quad (10.4)$$

これは多価関数なので θ は 0 から 2π の範囲とする。

この θ を用いて Poisson の方程式から θ の時間変化を求めると、

$$\begin{aligned} \frac{d\theta}{dt} &= [\theta, H]_p \\ &= \frac{\partial \theta}{\partial x} \frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial \theta}{\partial p} \frac{\partial H}{\partial x} \\ &= -\frac{\omega p}{p^2 + \omega^2 x^2} - \frac{\omega x}{p^2 + \omega^2 x^2} x \omega^2 \\ &= -\omega \left(\frac{p^2 + \omega^2 x^2}{p^2 + \omega^2 x^2} \right) = -\omega \end{aligned} \quad (10.5)$$

となり角速度 ω が生じる。

ここで周期性を持たせるため、 θ の範囲を次のように一般的にすると

$$\theta_0 \leq \theta < \theta_0 + 2\pi \quad (10.6)$$

Poisson 方程式は次のように変更される。

$$\frac{d\theta}{dt} = -\omega(1 - 2\pi\delta(\theta - \theta_0)) \quad (10.7)$$

従って位相 θ は時間 t を追っていくと ω の傾きでなめらかに減少していく。そして θ_0 になった瞬間に一気に 2π だけ変化して θ_0 に戻る。

次の条件を満たす位相に関する確率関数 P を考えよう。

$$\int_{\theta_0}^{\theta_0+2\pi} P(\theta)d\theta = 1 \quad (10.8)$$

先の定義から時間が δt だけ変化する間の位相変化は $-\omega\delta t$ となる。

これから位相の期待値の時間微分を技巧的であるが次のように計算できる。

$$\frac{d\langle\theta\rangle}{dt} = -\omega(1 - 2\pi P(\theta_0)) \quad (10.9)$$

10.2 位相演算子

第 8 部の量子論再考のはじめに出した問題によく似ている次の関係を満たす演算子をここで考えていきたい。

$$[\hat{A}, \hat{B}] = -iI$$

第 8 部では左辺が I であったが、今回は虚数単位である。

消滅生成演算子が粒子数と位相に分けられないかという試みが古くからなされた。

Dirac は古典論の Poisson 括弧との関係

$$\frac{d\theta}{dt} = -\omega = \{\theta, H\}$$

から $H = n\hbar\omega$ の場合

$$\begin{aligned} \{\theta, H\} &= \{\theta, n\hbar\omega\} = \hbar\omega \{\theta, n\} \\ &= -\omega \end{aligned}$$

となるので

$$\hbar\{\theta, n\} = -1$$

となることを利用して

$$[\hat{\theta}_D, \hat{n}] = -i \quad (10.10)$$

となるディラックの位相演算子を仮定した。

これからこの位相演算子 $\hat{\theta}_D$ が Hermite であれば正準変換に対応して次のユニタリな指数演算子が定義できることになる。

$$\hat{a} = \exp(i\hat{\theta}_D)\hat{n}^{1/2} \quad (10.11)$$

これは位相部分と粒子数を振幅にもつ部分に分解して消滅演算子を定義できる。ただし、

$$\hat{n}^{1/2} = \sqrt{n}|n\rangle\langle n| \quad (10.12)$$

である。式 10.11 から

$$\hat{n} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$$

は満たされる。

よって不確定性原理によれば

$$\Delta n \Delta \theta \geq \left| \left\langle \left[\hat{\theta}_D, \hat{n} \right] \right\rangle / 2 \right| = \frac{1}{2} \quad (10.13)$$

ただし、

$$\Delta x \equiv \sqrt{\langle \hat{x} \rangle^2 - \langle \hat{x}^2 \rangle}$$

である。

ところが式 10.10 から具体的な対角要素を求めると \hat{n} は対角成分のみだから

$$\langle n | \left[\hat{\theta}_D, \hat{n} \right] | n' \rangle = \langle n | \hat{\theta}_D \hat{n} | n' \rangle - \langle n | \hat{n} \hat{\theta}_D | n' \rangle \quad (10.14)$$

$$(n' - n) \langle n | \hat{\theta}_D | n' \rangle = -i \delta_{n, n'} \quad (10.15)$$

となる。よって $\hat{\theta}_D$ は対角成分以外の要素を持ち得ない。これは式 10.13 に矛盾する。

これから少なくとも式 10.10 の右辺は対角要素を持つスカラーとするのは間違いである。

10.2.1 SG 演算子

L.Suskind と J.Glogower はにこの $\hat{\theta}_D$ はエルミート演算子ではないので $\exp(i\hat{\theta}_D)$ はユニタリーにならないことを示した。

そこで式 10.11 から改めて $\exp(i\hat{\theta})$ を SG 演算子と呼ぶことにして次のように定義する。

($n=0$ を回避する)

$$\hat{a} = (\hat{n} + 1)^{1/2} \exp(i\hat{\theta}) \quad (10.16)$$

よって

$$\exp(i\hat{\theta}) = (\hat{n} + 1)^{-1/2} \hat{a} = |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 2| \dots = \sum_{n=0} |n\rangle\langle n+1|$$

$$\exp(i\hat{\theta})^\dagger = \hat{a}^\dagger (\hat{n} + 1)^{-1/2} = |1\rangle\langle 0| + |2\rangle\langle 1| \dots = \sum_{n=0} |n+1\rangle\langle n|$$

だから

$$\begin{aligned} \left[\exp(i\hat{\theta}), \exp(i\hat{\theta})^\dagger \right] &= \exp(i\hat{\theta}) \exp(i\hat{\theta})^\dagger - \exp(i\hat{\theta})^\dagger \exp(i\hat{\theta}) \\ &= |0\rangle\langle 0| \end{aligned}$$

であり

$$\exp(i\hat{\theta})\exp(i\hat{\theta})^\dagger = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n| = 1 \quad (10.17)$$

がなりたつので

$$\exp(i\hat{\theta})^\dagger\exp(i\hat{\theta}) = \sum_{n=0}^{\infty} |n+1\rangle\langle n+1| = 1 - |0\rangle\langle 0| \quad (10.18)$$

となりユニタリにならない。しかし次のような実部分、虚部分に分けた演算子をつくるとエルミート演算子になる。

$$\cos(\hat{\theta}) = (\exp(i\hat{\theta}) + \exp(i\hat{\theta})^\dagger) / 2 \quad (10.19)$$

$$\sin(\hat{\theta}) = (\exp(i\hat{\theta}) - \exp(i\hat{\theta})^\dagger) / 2i \quad (10.20)$$

また、式 10.18,10.17 から

$$\begin{aligned} \langle n|\cos^2(\hat{\theta})|n\rangle &= \langle n|(\exp(i\hat{\theta}) + \exp(i\hat{\theta})^\dagger)^2/4|n\rangle \\ &= \langle n|(\exp(2i\hat{\theta}) + \exp(i\hat{\theta})\exp(i\hat{\theta})^\dagger + \exp(i\hat{\theta})^\dagger\exp(i\hat{\theta}) + \exp(2i\hat{\theta})^\dagger)/4|n\rangle \\ &= \langle n|(1 + 1 - |0\rangle\langle 0|)/4|n\rangle \end{aligned}$$

となるので

$$\langle n|\cos^2(\hat{\theta})|n\rangle = \begin{cases} \frac{1}{2} & (n \geq 1) \\ \frac{1}{4} & (n = 0) \end{cases} \quad (10.21)$$

となり $\sin^2(\hat{\theta})$ についても同様なので

$$\sin^2(\hat{\theta}) + \cos^2(\hat{\theta}) = 1 - \frac{1}{2}|0\rangle\langle 0| \quad (10.22)$$

となる。これから真空の場合のみに不都合な状況になることがわかる。

つまり、真空がランダムな位相を持てば $\sin^2(\hat{\theta})$ の平均値は $1/2$ であるべきなのが $1/4$ になってしまう。次節でこの問題を解決した PB 演算子を紹介する。

10.2.2 PB 演算子

Loudon は単一モードの光子場において次の式の s を無限大にすることから PB 位相演算子を定義した。

$$|\theta\rangle = \frac{1}{\sqrt{s+1}} \sum_{n=0}^s e^{in\theta} |n\rangle \quad (10.23)$$

s は状態数と考える。 s は自然数である。

ただ、この s を 1 つの自由度とすると、これまでの位相演算子に 1 つ自由度を加えた立場からみることになる。

位相を決めるためには無限個の光子数状態を足し合わせる必要があることを示している。

いいかえれば光子数が決まった状態では位相が決定されない。ここに位相の大局性がある。

さらに無限大をとることに順番があることを注意する必要がある。

位相 θ は $-\infty, \infty$ の値をとることができるが 2π で周期的であるとする。

よって直交する状態ベクトルは

$$|\theta_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{s+1}} \sum_{n=0}^s e^{in\theta_0} |n\rangle \quad (10.24)$$

$$|\theta_m\rangle = \frac{1}{\sqrt{s+1}} \sum_{n=0}^s e^{in\theta_m} |n\rangle \quad (10.25)$$

として $m = 0$ から順に作っていくことで

$$\langle \theta_m | \theta | \theta_0 \rangle = \frac{1}{s+1} \sum_{n,m=0}^s e^{in\theta_n - im\theta_m} \langle m | n \rangle \quad (10.26)$$

から $s = 0$ の時は θ_m は θ_0 になるの後は $n = m$ の時だけ残り

$$\theta_m = \theta_0 + \frac{\theta}{s+1} \quad (10.27)$$

となるが次の直交条件が成り立つとする。

$$\langle \theta_m | \theta_0 \rangle = 0 \quad (10.28)$$

周期性を用いて $\theta = 2\pi m$ の時この条件を満たす。よって

$$\theta_m = \theta_0 + \frac{2\pi m}{s+1} \quad (10.29)$$

の時に

$$\begin{aligned} \langle \theta_m | \theta_0 \rangle &= \frac{1}{s+1} \sum_{n,m=0}^s e^{in\theta_0 - im\theta_m} \langle m | n \rangle \\ &= \frac{1}{s+1} \sum_{n,m=0}^s e^{in\theta_0 - im(\theta_0 + \frac{2\pi m}{s+1})} \langle m | n \rangle \\ &= \frac{1}{s+1} \sum_{n,m=0}^s e^{i(n-m)\theta_0} \text{Exp} \left[\frac{-2\pi im}{s+1} \right] \delta_n^m \\ &= \frac{1}{s+1} \sum_{m=0}^s \text{Exp} \left[\frac{-2\pi im}{s+1} \right] \\ &= 0 \end{aligned}$$

である。

これから $s+1$ 個の状態ベクトルは状態 θ_0 を用いて次のようにまとめられる。

$$|\theta_m\rangle = \sum_{n=0}^s \text{Exp} \left(\frac{2\pi im}{s+1} n \right) |\theta_0\rangle \quad (10.30)$$

s が 0 から 1 までの $s+1$ 個の状態について完全な規格直交系をつくることができた。例えば $s = 1$ までとると

$$|\theta_1\rangle = |\theta_0\rangle + e^{i\pi} |\theta_0\rangle = |\theta_0\rangle - |\theta_0\rangle \quad (10.31)$$

だから

$$\langle \theta_1 | \theta_0 \rangle = \langle \theta_0 | \theta_0 \rangle - \langle \theta_0 | \theta_0 \rangle = 0 \quad (10.32)$$

$$\langle \theta_1 | \theta_1 \rangle = \langle \theta_0 | \theta_0 \rangle + e^{i\pi} \langle \theta_0 | \theta_0 \rangle + e^{-i\pi} \langle \theta_0 | \theta_0 \rangle + \langle \theta_0 | \theta_0 \rangle = 2 \quad (10.33)$$

であり $s + 1 = 2$ が出てくる。

また、 $s = 2$ とすると

$$|\theta_1\rangle = |\theta_0\rangle + e^{2i\pi/3} |\theta_0\rangle + e^{4i\pi/3} |\theta_0\rangle \quad (10.34)$$

$$|\theta_2\rangle = |\theta_0\rangle + e^{4i\pi/3} |\theta_0\rangle + e^{8i\pi/3} |\theta_0\rangle \quad (10.35)$$

だから複素平面上で

$$\langle \theta_2 | \theta_0 \rangle = \langle \theta_0 | \theta_0 \rangle + e^{-4i\pi/3} \langle \theta_0 | \theta_0 \rangle + e^{-8i\pi/3} \langle \theta_0 | \theta_0 \rangle = 0 \quad (10.36)$$

を満たす。

$$\begin{aligned} \langle \theta_2 | \theta_2 \rangle &= \langle \theta_0 | \theta_0 \rangle + e^{4i\pi/3} \langle \theta_0 | \theta_0 \rangle + e^{8i\pi/3} \langle \theta_0 | \theta_0 \rangle \\ &\quad + e^{-4i\pi/3} \langle \theta_0 | \theta_0 \rangle + \langle \theta_0 | \theta_0 \rangle + e^{4i\pi/3} \langle \theta_0 | \theta_0 \rangle + e^{-8i\pi/3} \langle \theta_0 | \theta_0 \rangle + e^{-4i\pi/3} \langle \theta_0 | \theta_0 \rangle + \langle \theta_0 | \theta_0 \rangle \\ &= 3 \end{aligned}$$

となりやはり $s + 1 = 3$ が出てくる。

さらに複素平面上で

$$\begin{aligned} \langle \theta_1 | \theta_2 \rangle &= \langle \theta_0 | \theta_0 \rangle + e^{4i\pi/3} \langle \theta_0 | \theta_0 \rangle + e^{8i\pi/3} \langle \theta_0 | \theta_0 \rangle \\ &\quad + e^{-2i\pi/3} \langle \theta_0 | \theta_0 \rangle + e^{2i\pi/3} \langle \theta_0 | \theta_0 \rangle + e^{6i\pi/3} \langle \theta_0 | \theta_0 \rangle \\ &\quad + e^{-4i\pi/3} \langle \theta_0 | \theta_0 \rangle + \langle \theta_0 | \theta_0 \rangle + e^{4i\pi/3} \langle \theta_0 | \theta_0 \rangle \\ &= 2 \langle \theta_0 | \theta_0 \rangle + e^{8i\pi/3} \langle \theta_0 | \theta_0 \rangle + e^{6i\pi/3} \langle \theta_0 | \theta_0 \rangle + e^{4i\pi/3} \langle \theta_0 | \theta_0 \rangle \\ &\quad + e^{2i\pi/3} \langle \theta_0 | \theta_0 \rangle + e^{-2i\pi/3} \langle \theta_0 | \theta_0 \rangle + e^{-4i\pi/3} \langle \theta_0 | \theta_0 \rangle \\ &= 0 \end{aligned}$$

が導ける。これらは下図のような位相平面上を考える必要がある。

つまり、位相を決めてしまうと光子数が決まらなくなるので、 $n = 0, 1, \dots, s$ の $s + 1$ の有限な次元を考え、この $s + 1$ 個の光子数状態で計算をしてその後に s を無限大にもっていくことを考えた。

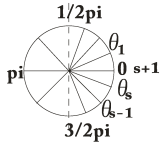


図 10.1: はじめに θ_0 を決め 2π を $s + 1$ 等分する

s が無限大になれば無限の規格直交系を作成することが可能である。しかし $s + 1$ を考えてから無限大にみなすので

図の 2π までの間に状態が無限だけあるとみなせる構造がもう一つ必要になる。

そのためには上の図を紙面裏から表にもう一つの軸を作り、中心を通る曲線上に拡大する。

位相が

$$-\infty < \phi < \infty$$

の範囲をとるが、状態としては 2π で周期的なので、任意に ϕ_0 をとり、常にそこから 2π の範囲で定義できればよい。

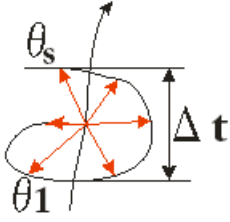


図 10.2: 立体化された位相平面

そこで Pegg らはこれから次のように位相演算子を定義した。

$$\hat{\theta} = \sum_{m=0}^s \theta_m |\theta_m\rangle \langle \theta_m| \quad (10.37)$$

しかし、この式は式 10.25 があるのでさらに n により足し合わせがあることに注意がいる。

$$|\theta_m\rangle = \frac{1}{\sqrt{s+1}} \sum_{n=0}^s e^{in\theta_m} |n\rangle \quad (10.38)$$

だったから m が n, n' が等しい時と異なる場合に分けて

式 10.25、10.29 を用いて粒子数状態に展開すると

$$\theta_m = \theta_0 + \frac{2\pi m}{s+1} \quad (10.39)$$

の最初の θ_0 については $n = n'$ であるとして n, n' について式 10.45 から

$$\hat{\theta} = \sum_m \left[\theta_0 + \frac{2\pi m}{s+1} \right]_{n'=n} \frac{1}{s+1} \sum_{n \neq n'} e^{i(n-n')\theta_0} e^{i(n-n')2\pi m/(s+1)} |n\rangle \langle n'| \quad (10.40)$$

$n = n'$ の時、位相は 0 になるので分離する。また θ_0 は定数だから $s+1$ 回の和をとるので

$$\begin{aligned} \hat{\theta} &= \left[\theta_0 \frac{s+1}{s+1} + \frac{2\pi}{(s+1)^2} \frac{s(s+1)}{2} \right]_{n=n'} \\ &+ \frac{1}{s+1} \sum_{m=0}^s \sum_{n \neq n'} [\theta_m]_{n \neq n'} e^{i(n-n')\theta_0} e^{i(n-n')2\pi m/(s+1)} |n\rangle \langle n'| \end{aligned}$$

ここで $n \neq n'$ の場合に θ_0 が含まれるので θ_m は

$$\hat{\theta} = \theta_0 + \frac{s\pi}{s+1} + \frac{1}{s+1} \sum_{m=0}^s \sum_{n \neq n'} \frac{2\pi m}{s+1} e^{i(n-n')\theta_0} e^{i(n-n')2\pi m/(s+1)} |n\rangle \langle n'| \quad (10.41)$$

最後の項は一般に

$$\sum_{m=0}^s m e^{ikm} = \frac{e^{ik} + e^{ik(2+s)}s - e^{ik(1+s)}(1+s)}{(e^{ik} - 1)^2} \quad (10.42)$$

$$\sum_{m=0}^s \text{Exp} \left[\frac{2\pi m}{s+1} \right] = 0 \quad (10.43)$$

$$e^{2\pi in} = 1 \quad (10.44)$$

が成り立つので

$$\begin{aligned}
\hat{\theta} &= \theta_0 + \frac{s\pi}{s+1} + \frac{2\pi}{(s+1)^2} \sum_{n \neq n'} \sum_{m=0}^s m e^{i(n-n')\theta_0} e^{i(n-n')2\pi m/(s+1)} |n\rangle \langle n'| \\
&= \theta_0 + \frac{s\pi}{s+1} \\
&\quad + \frac{2\pi}{(s+1)^2} \sum_{n \neq n'} \frac{\exp(i(n-n')\theta_0) \{ \exp[i(n-n')2\pi/(s+1)] \}}{(\exp[(i(n-n')2\pi/(s+1)] - 1)^2)} |n\rangle \langle n'| \\
&\quad + \frac{2\pi}{(s+1)^2} \sum_{n \neq n'} \frac{\exp(i(n-n')\theta_0) \{ s \exp[i(n-n')4s\pi] + s \exp[i(n-n')2\pi/(s+1)] - (1+s) \}}{(\exp[(i(n-n')2\pi/(s+1)] - 1)^2)} |n\rangle \langle n'| \\
&= \theta_0 + \frac{s\pi}{s+1} \\
&\quad + \frac{2\pi}{(s+1)^2} \sum_{n \neq n'} \frac{\exp(i(n-n')\theta_0) \{ \exp[i(n-n')2\pi/(s+1)] + s \exp[i(n-n')2\pi/(s+1)] - (1+s) \}}{(\exp[(i(n-n')2\pi/(s+1)] - 1)^2)} |n\rangle \langle n'| \\
&= \theta_0 + \frac{s\pi}{s+1} + \frac{2\pi}{(s+1)^2} \sum_{n \neq n'} \frac{\exp(i(n-n')\theta_0) \{ (\exp[i(n-n')2\pi/(s+1)] - 1)(1+s) \}}{(\exp[(i(n-n')2\pi/(s+1)] - 1)^2)} |n\rangle \langle n'| \\
&= \theta_0 + \frac{s\pi}{s+1} + \frac{2\pi}{s+1} \sum_{n \neq n'} \frac{\exp(i(n-n')\theta_0)}{\exp[(i(n-n')2\pi/(s+1)] - 1} |n\rangle \langle n'| \tag{10.45}
\end{aligned}$$

を得る。 s が大きいとこれは θ_0 に一致する。しかし、 s というパラメタが介在することで古典的な状態とは異なる状態が実現できる。

また、この結果は次のように単純に係数の $s+1 \rightarrow m$ としてから m を無限大にしたものと符号を除いて一致する。

$$\begin{aligned}
\hat{\theta} &= \theta_0 + \frac{s\pi}{s+1} + \frac{2\pi m}{(s+1)^2} \sum_{n \neq n'} \sum_{m=0}^s e^{i(n-n')\theta_0} e^{i(n-n')2\pi m/(s+1)} |n\rangle \langle n'| \\
&= \theta_0 + \frac{s\pi}{s+1} + \frac{2\pi}{s+1} \sum_{n \neq n'} \sum_{m=0}^{\infty} e^{i(n-n')\theta_0} e^{i(n-n')2\pi m/(s+1)} |n\rangle \langle n'| \\
&= \theta_0 + \frac{s\pi}{s+1} + \frac{2\pi}{s+1} \sum_{n \neq n'} \frac{\exp(i(n-n')\theta_0)}{\exp[(i(n-n')2\pi/(s+1)] - 1} |n\rangle \langle n'| \tag{10.46}
\end{aligned}$$

つまり一般に次のような有限の和

$$S = \frac{m}{s^2} \sum_{m=0}^s e^{2\pi i m/s} \tag{10.47}$$

は次の無限級数に等しい

$$S' = -\frac{1}{s} \sum_{m=0}^{\infty} e^{2\pi i m/s} \tag{10.48}$$

しかし

$$S = \frac{m}{s^2} \sum_{m=0}^{s-1} e^{2\pi i m/s} \tag{10.49}$$

とすると

$$S' = \frac{1}{s} \sum_{m=0}^{\infty} e^{2\pi i m/s} \tag{10.50}$$

に等しい。この符号は次の図でみるように有限の s, m の始点終点の取り方で入れ替わる。
 しかし、無限和と有限和は全く一致し周期的な和をとることで無限大をつくることと同様になるのはおもしろい。

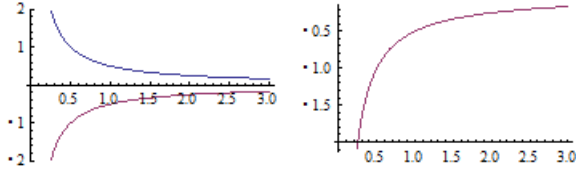


図 10.3: $S = \frac{m}{s^2} \sum_{m=0}^s e^{2\pi i m/s}, S' = -\frac{1}{s} \sum_{m=0}^{\infty} e^{2\pi i m/s}$ (left),
 $S = \frac{m}{s^2} \sum_{m=0}^{s-1} e^{2\pi i m/s}, S' = \frac{1}{s} \sum_{m=0}^{\infty} e^{2\pi i m/s}$ (right)

ところが周期 2π に対して、閉じないような $s-2$ のような値を有限にとると下図のように極めて激しい振動が見られる。これは $s-3$ とするほど、振動する領域は広がる。

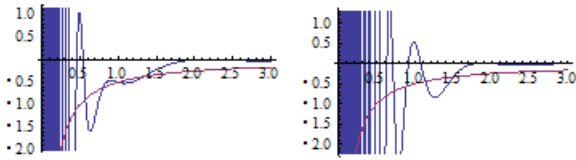


図 10.4: $S = \frac{m}{s^2} \sum_{m=0}^s e^{2\pi i m/s}, S' = -\frac{1}{s} \sum_{m=0}^{\infty} e^{2\pi i m/s}$ (left),
 $S = \frac{m}{s^2} \sum_{m=0}^{s-1} e^{2\pi i m/s}, S' = \frac{1}{s} \sum_{m=0}^{\infty} e^{2\pi i m/s}$ (right)

また、式 10.25 から次の外積の関係が導ける

$$|\theta_m\rangle\langle\theta_m| = (s+1)^{-1} \sum_{n,n'} \exp(i(n-n')\theta_m) |n\rangle\langle n'| \quad (10.51)$$

これはフーリエ変換とみなせるので次のような逆変換ができる。

$$|n\rangle\langle n| = (s+1)^{-1} \sum_{m,m'} \exp(-i(m-m')\theta_m) |\theta_m\rangle\langle\theta_{m'}| \quad (10.52)$$

また式 10.51 から次のように粒子数演算子も定義できる。

$$\begin{aligned} \hat{N} &\equiv \sum_{n=0}^s n |n\rangle\langle n| \\ &= (s+1)^{-1} \sum_{m,m'} m \exp(-i(m-m')\left(\theta_0 + \frac{2\pi}{s+1}\right)) |\theta_m\rangle\langle\theta_{m'}| \end{aligned}$$

$m = m'$ の場合を分離すると先の 10.46 が再び用いる事ができて

$$\begin{aligned} \hat{N} &= (s+1)^{-1} \frac{s(s+1)}{2} + \sum_{n \neq n'} \frac{|\theta_m\rangle\langle\theta_{m'}|}{\exp[(-i(m-m')2\pi/(s+1))] - 1} \\ &= \frac{s}{2} + \sum_{n \neq n'} \frac{|\theta_m\rangle\langle\theta_{m'}|}{\exp[(-i(m-m')2\pi/(s+1))] - 1} \end{aligned} \quad (10.53)$$

この式は $s \rightarrow \infty$ で発散する。

これから次のように逆に光子数の状態を位相状態で展開できる。

$$|n\rangle = (s+1)^{1/2} \sum_{m=0}^s \exp(-in\theta_m) |\theta_m\rangle \quad (10.54)$$

式 10.46 から $\theta_0 = 0$ と選ぶと次のような対応関係が導ける。

$$\hat{\theta}_0 = \frac{s\pi}{s+1} + \frac{2\pi}{s+1} \sum_{n \neq n'} \frac{|n\rangle \langle n'|}{\exp[(-i(n-n')2\pi/(s+1)) - 1]} \quad (10.55)$$

$$\frac{2\pi \hat{N}}{s+1} = \frac{s\pi}{s+1} + \frac{2\pi}{s+1} \sum_{m \neq m'} \frac{|\theta_m\rangle \langle \theta_{m'}|}{\exp[(-i(m-m')2\pi/(s+1)) - 1]} \quad (10.56)$$

位相状態で消滅演算子の期待値を次のように求めることができる。

$$\begin{aligned} \langle \theta | \hat{a} | \theta \rangle &= \frac{1}{s+1} \sum_{n,m=0}^s e^{i(n-m)\theta} \sqrt{n} \langle m | n-1 \rangle \\ &= \frac{1}{s+1} \sum_{n,m=0}^s e^{i(n-m)\theta} \sqrt{n} \delta_{n-1}^m \\ &= \frac{1}{s+1} \sum_{n,m=0}^s e^{i(n-n+1)\theta} \sqrt{n} \\ &= \frac{e^{i\theta}}{s+1} (s+1) \sqrt{n} \\ &\rightarrow \frac{2}{3} s^{1/2} e^{i\theta} \end{aligned}$$

これからある n の粒子数状態で位相 θ が 2π 内に閉じ込められることがわかる。

従って上図において Δt は粒子数と関係して自然数でなくてはならない。

粒子数と位相の関係を表しているといえる。さらにこの位相状態で次の期待値を求めてみる。

$$\begin{aligned} \langle \theta | \hat{n} | \theta \rangle &= \frac{1}{s+1} \sum_{n,m=0}^s e^{i(n-m)\theta} n \langle m | n \rangle \\ &= \frac{1}{s+1} \sum_{n=0}^s n e^{i(n-m)\theta} \delta_n^m \\ &= \frac{1}{s+1} \sum_{n=0}^s n \\ &= \frac{1}{s+1} \frac{1}{2} s(s+1) \\ &= \frac{1}{2} s \end{aligned} \quad (10.57)$$

$$\begin{aligned}
\langle \theta | \hat{n}^{1/2} | \theta \rangle &= \frac{1}{s+1} \sum_{n,m=0}^s e^{i(n-m)\theta} \sqrt{n} \langle m | n \rangle \\
&= \frac{1}{s+1} \sum_{n=0}^s \sqrt{n} e^{i(n-m)\theta} \delta_n^m \\
&= \frac{1}{s+1} \sum_{n=0}^s \sqrt{n} \\
&= \frac{2}{3} s^{1/2}
\end{aligned} \tag{10.58}$$

ただし、この場合は s は十分大きくないといけない (図左) s が小さいと次のようなグラフになる。 (図右)

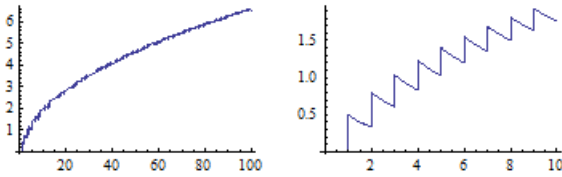


図 10.5:

$$\begin{aligned}
\left\langle \theta | \hat{a}^\dagger \frac{1}{\sqrt{n}} | \theta \right\rangle &= \frac{1}{s+1} \sum_{n,m=0}^s e^{i(n-m)\theta} \langle m+1 | n \rangle \\
&= \frac{1}{s+1} \sum_{n=0}^s e^{i(n-m)\theta} \delta_n^{m+1} \\
&= \frac{1}{s+1} (s+1) e^{i(n-n-1)\theta} \\
&= e^{-i\theta}
\end{aligned} \tag{10.59}$$

最後のケースでは $1/\sqrt{n}$ のために s に無関係になる。これは

$$\left\langle \theta | \hat{a}^\dagger \frac{1}{\sqrt{n}} | \theta \right\rangle \left\langle \theta | \frac{1}{\sqrt{n}} \hat{a} | \theta \right\rangle = 1 \tag{10.60}$$

となることを示す。

10.3 指数演算子

前節において位相状態は全ての粒子数状態の重ね合わせであり、粒子数状態は全ての位相状態の重ね合わせである。

どちらについてもある粒子数状態では位相を決めることができず、ある位相状態では粒子数を決めることができない。

これは

$$[\hat{\theta}, \hat{n}] \neq 0 \tag{10.61}$$

であることを意味する。また式 10.45 より $\hat{\theta}$ はエルミートであるから次のようにユニタリな演算子を定義できる。

$$\exp(\pm i\hat{\theta})|\theta_m\rangle = \exp(\pm i\theta_m)|\theta_m\rangle \quad (10.62)$$

この指数演算子を左から作用させると式 10.37 から

$$\exp(i\hat{\theta})|n\rangle = \exp\left[i\sum_{m=0}^s \theta_m|\theta_m\rangle\langle\theta_m|\right]|n\rangle \quad (10.63)$$

$$= (s+1)^{-1/2} \sum_{m=0}^s \exp(-i(n-1)\theta_m)|\theta_m\rangle \quad (10.64)$$

式 10.54、式 10.51 からこの指数演算子が次のように粒子数を 1 つ下げる演算子として定義できる。

$$\exp(i\hat{\theta})|n\rangle = \exp|n-1\rangle \quad (10.65)$$

$n=0$ を真空状態とすると式 10.29 より

$$\theta_m = \theta_0 + \frac{2\pi m}{s+1} \quad (10.66)$$

だったから真空状態では

$$\begin{aligned} (s+1)^{-1/2} \sum_{m=0}^s \exp(i\theta_m)|\theta_m\rangle &= (s+1)^{-1/2} \exp\left(\sum_{m=0}^s i\left(\theta_0 + \frac{2\pi m}{s+1}\right)\right)|\theta_m\rangle \\ &= (s+1)^{-1/2} \exp(i(s+1)\theta_0) \sum_{m=0}^s \exp\left(i\frac{2\pi}{s+1} \frac{s(s+1)}{2}\right)|\theta_m\rangle \\ &= (s+1)^{-1/2} \exp(i(s+1)\theta_0) \sum_{m=0}^s \exp(-is\theta_m)|\theta_m\rangle \\ &= \exp(i(s+1)\theta_0)|s\rangle \end{aligned}$$

これから次のように展開できる。

これは非常に面白いことに、対角レスであるがそのすぐ隣に値を持つ行列である。

$$\exp(i\hat{\theta}) = |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 2| \dots + |s-1\rangle\langle s| + \exp(i(s+1)\theta)|s\rangle\langle 0| \quad (10.67)$$

それでも、最後の項が循環をつくり、このため指数演算子はユニタリになる。

$$\begin{aligned} \exp(i\hat{\theta})\exp(i\hat{\theta})^\dagger &= |0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1| \dots + |s-1\rangle\langle s-1| + |s\rangle\langle s| \\ &= \sum_{i=0}^s |i\rangle\langle i| = 1 \end{aligned}$$

しかし、量子場は無限大の自由度を持ったヒルベルト空間である。そこでこの PB 演算子は有限の s をはじめに導入し、その後 s を無限大にする操作が必要である。

この操作には物理的な意味が対応する。

10.4 コヒーレント状態

光子数状態と位相状態が互に対応していることを見たが、古典的な光に近い状態といえば、振幅と位相が安定した状態である。

第7部であつかったが、R.J.Glauber は1963年に次のようなコヒーレント状態を導入した。
 単一モードの消滅演算子の固有状態 $|\alpha\rangle$ と固有値を次のように α とおく。

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle \quad (10.68)$$

左から $\langle n|$ をかけると

$$\begin{aligned} \langle n|\hat{a}|\alpha\rangle &= \alpha\langle n|\alpha\rangle \\ (n+1)^{1/2}\langle n+1|\alpha\rangle &= \alpha\langle n|\alpha\rangle \end{aligned}$$

よって次のように隣接2項の関係があるから

$$\begin{aligned} \langle n|\alpha\rangle &= \frac{\alpha}{n^{1/2}}\langle n-1|\alpha\rangle \\ &= \frac{\alpha}{(n(n-1))^{1/2}}\langle n-2|\alpha\rangle \\ &= \dots \\ &= \frac{\alpha^n}{(n!)^{1/2}}\langle 0|\alpha\rangle \end{aligned} \quad (10.69)$$

よって $|n\rangle$ が完全系であれば α を任意の複素数として

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \langle n|\alpha\rangle = \langle 0|\alpha\rangle \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{(n!)^{1/2}} |n\rangle$$

ここで $|\alpha\rangle$ の規格化のために次の条件を加える。

$$\langle \alpha|\alpha\rangle = |\langle 0|\alpha\rangle|^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^{2n}}{n!} = 1$$

それでも位相に任意性があるが

$$\langle 0|\alpha\rangle = \exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha|^2\right)$$

となるように決めると

$$|\alpha\rangle = \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \quad (10.70)$$

したがって

$$|\langle n|\alpha\rangle|^2 = \exp(-|\alpha|^2) \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} \quad (10.71)$$

となる。これは $|\alpha|^2$ を平均値とするポアソン分布である。

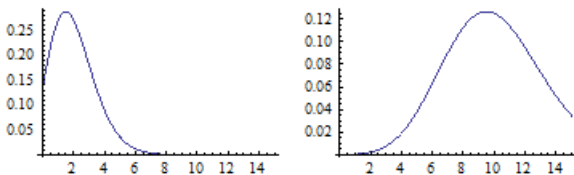


図 10.6: $\alpha = \sqrt{2}, \alpha = \sqrt{10}$ の場合

よって α の小さな分布が重なる領域では完全な直交系はつくれぬ。 α が大きくなれば正規分布になる。

異なるコヒーレント状態の相関を考えてみる。第7部でもみたように $|\alpha\rangle$ は α が複素数のために式 10.68 は満足しても次のように直交系を作らない。

$$\begin{aligned}\langle\alpha|\beta\rangle &= \exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha|^2 - \frac{1}{2}|\beta|^2\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha^*\beta)^n}{n!} \\ &= \exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha|^2 - \frac{1}{2}|\beta|^2 + \alpha^*\beta\right) \\ &= \exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha - \beta|^2\right)\end{aligned}$$

つまり複素数 α, β との差が大きいと近似的に直交することになる。さらに、次のように完全性の条件に π が登場するのはおもしろい。

$$\begin{aligned}\int |\alpha\rangle\langle\alpha| d^2\alpha &= \int \exp(-|\alpha|^2) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} |n\rangle\langle n| d^2\alpha \\ &= \int \exp(-r^2) 2\pi r dr \\ &= \pi\end{aligned}$$

さらに純粋状態の条件

$$\text{Tr}[|\alpha\rangle\langle\alpha|] = 1$$

を満たす。

コヒーレント状態 $|\alpha\rangle$ は実数の2乗の数だけあることになる。一方で数状態は $|n\rangle$ は自然数の数あることになる。

この差は大きい。 n 粒子状態は次のような関係があったから

$$|n\rangle = \frac{\hat{a}^{\dagger n}}{(n!)^{1/2}} |0\rangle$$

コヒーレント状態を数状態で表すことができ

$$\begin{aligned}|\alpha\rangle &= \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \\ &= \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \frac{\hat{a}^{\dagger n}}{(n!)^{1/2}} |0\rangle \\ &= \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) \frac{(\alpha\hat{a}^{\dagger})^n}{n!} |0\rangle \\ &= \exp\left(\alpha\hat{a}^{\dagger} - \frac{|\alpha|^2}{2}\right) |0\rangle\end{aligned}\tag{10.72}$$

となるが、一般に指数演算子について \hat{A}, \hat{B} が $[\hat{A}, \hat{B}]$ とそれぞれ交換するなら

$$\exp(\hat{A}) \exp(\hat{B}) = \exp\left(\hat{A} + \hat{B} + \frac{1}{2} [\hat{A}, \hat{B}]\right)$$

が成り立つので $[\hat{a}^{\dagger}, \hat{a}] = -1$ だから式 10.72 は真空状態について次のように書き換えられる。

$$\begin{aligned}
|\alpha\rangle &= \exp\left(\alpha\hat{a}^\dagger - \frac{|\alpha|^2}{2}\right)|0\rangle \\
&= \exp\left(\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a} + \alpha^*\hat{a} + \frac{1}{2}[\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a}, \alpha^*\hat{a}]\right)|0\rangle \\
&= \exp(\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a})\exp(\alpha^*\hat{a})|0\rangle \\
&= \exp(\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a})|0\rangle
\end{aligned} \tag{10.73}$$

指数関数の中には生成消滅演算子が対称的に入っているのは興味ある関係である。そこで次のように変位演算子を定義すれば

$$\hat{D}(\alpha) \equiv \exp(\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a}) \tag{10.74}$$

真空場からコヒーレント状態は次のように足し合わせなしで求めることができる。

$$|\alpha\rangle = \hat{D}(\alpha)|0\rangle$$

また、

$$\begin{aligned}
\hat{D}(\alpha)^\dagger \hat{a} \hat{D}(\alpha) &= \exp(\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a})^\dagger \hat{a} \exp(\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a}) \\
&= \exp(\alpha^*\hat{a} - \alpha\hat{a}^\dagger) \hat{a} \exp(\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a}) \\
&\simeq (1 + \alpha^*\hat{a} - \alpha\hat{a}^\dagger) \hat{a} (1 + \alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a}) \\
&= (\hat{a} + \alpha^*\hat{a}^2 - \alpha\hat{a}^\dagger\hat{a}) (1 + \alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a}) \\
&= \hat{a} + \alpha^*\hat{a}^2 - \alpha\hat{a}^\dagger\hat{a} \\
&\quad + \alpha\hat{a}\hat{a}^\dagger + |\alpha|^2\hat{a}^2\hat{a}^\dagger - \alpha^2\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger \\
&\quad - \alpha^*\hat{a}^2 - \alpha^{*2}\hat{a}^3 + |\alpha|^2\hat{a}^\dagger\hat{a}^2 \\
&= \hat{a} + \alpha[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] + O(\alpha^2) \\
&= \hat{a} + \alpha
\end{aligned}$$

単一モードではない場合は次のように各状態の積を表す。

$$\{|\alpha_k\rangle\} \equiv \prod_k |\alpha_k\rangle_k$$

コヒーレント状態を用いて z 方向に進む単一モードの平面波の電場を求めてみる。まず、古典的な電磁場のエネルギーから

$$\begin{aligned}
\hat{E}(t, z) &= i\epsilon \left\{ \hat{a}e^{-i(\omega t - kz)} - \hat{a}^\dagger e^{i(\omega t - kz)} \right\} \\
\epsilon &= \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\epsilon_0 V}}
\end{aligned} \tag{10.75}$$

ここで実数 x を用いて次のように直交位相振幅表示に変えると

$$\hat{a} \equiv \hat{x}_1 + i\hat{x}_2 \tag{10.76}$$

$$\hat{a}^\dagger \equiv \hat{x}_1 - i\hat{x}_2 \tag{10.77}$$

式 10.75 が

$$\hat{E}(t, z) = 2\epsilon \{ \hat{x}_1 \sin(\omega t - kz) - \hat{x}_2 \cos(\omega t - kz) \}$$

となり、これは古典的な直交 2 成分を持つ平面波電場に対応している。
また、式 10.77 は複素平面上で次のように位相、振幅に分けると

$$\alpha = |\alpha| e^{i\theta} \quad (10.78)$$

コヒーレント状態での電場の期待値は

$$\langle \alpha | \hat{E}(t, z) | \alpha \rangle = 2\epsilon |\alpha| \{ \sin(\omega t - kz - \theta) \} \quad (10.79)$$

平均 2 乗偏差を求めるために

$$\begin{aligned} \langle \alpha | \hat{E}^2(t, z) | \alpha \rangle &= -\epsilon^2 \langle \alpha | \left\{ \hat{a} e^{-i(\omega t - kz)} - \hat{a}^\dagger e^{i(\omega t - kz)} \right\}^2 | \alpha \rangle \\ &= -\epsilon^2 \langle \alpha | \left\{ \hat{a}^2 e^{-2i(\omega t - kz)} + \hat{a}^{\dagger 2} e^{2i(\omega t - kz)} - \hat{a}^\dagger \hat{a} - \hat{a} \hat{a}^\dagger \right\} | \alpha \rangle \\ &= -\epsilon^2 \left\{ |\alpha|^2 \left(e^{-2i(\omega t - kz)} + e^{2i(\omega t - kz)} \right) + \langle \alpha | \left\{ -\hat{a}^\dagger \hat{a} - \hat{a} \hat{a}^\dagger \right\} | \alpha \rangle \right\} \\ &= -\epsilon^2 \left\{ 2|\alpha|^2 \left(\frac{e^{-2i(\omega t - kz)} + e^{2i(\omega t - kz)}}{2} \right) + \langle \alpha | -[\hat{a}^\dagger, \hat{a}] - 2\hat{a} \hat{a}^\dagger | \alpha \rangle \right\} \\ &= -\epsilon^2 \{ 2|\alpha|^2 \cos(2(\omega t - kz)) - 2\alpha\alpha^* - 1 \} \end{aligned}$$

式 10.78 を用いれば

$$\begin{aligned} \langle \alpha | \hat{E}^2(t, z) | \alpha \rangle &= \epsilon^2 \{ 2|\alpha|^2 (2 \sin^2(\omega t - kz - \theta) - 1) + 2|\alpha|^2 + 1 \} \\ &= \epsilon^2 \{ 4|\alpha|^2 (\sin^2(\omega t - kz - \theta)) + 1 \} \end{aligned}$$

交換関係のために ΔE が 0 ではないことが次のように求まる。

$$\begin{aligned} \Delta E &= \sqrt{\langle \alpha | \hat{E}^2(t, z) | \alpha \rangle - \langle \alpha | \hat{E}(t, z) | \alpha \rangle^2} \\ &= \epsilon \end{aligned}$$

を得る。これは α に無関係である。

つまりコヒーレント状態の電場は $\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\epsilon_0 V}}$ の揺らぎを持つ。

これは次の図のように複素空間での α の揺らぎと時間表示を重ねて表示すると振幅は 10.79 から $2|\alpha|$ なので

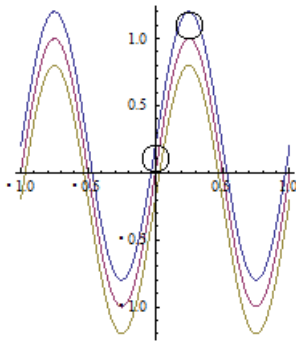


図 10.7: 振幅が 1、 α が 0.2 の場合。円は複素空間での α の揺らぎである。

揺らぎと振幅の比は

$$1/2|\alpha|$$

であり、振幅 $2|\alpha|$ が大きくなれば古典的な波とみなすことができる。
また、式 10.77 から

$$\begin{aligned} [\hat{x}_1, \hat{x}_2] &= \hat{x}_1\hat{x}_2 - \hat{x}_2\hat{x}_1 \\ &= \frac{i}{2} [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \frac{i}{2} \end{aligned}$$

となるので不確定性原理から一般に

$$\Delta x_1 \Delta x_2 \geq \frac{1}{4}$$

が成り立つ。コヒーレント状態では式 10.77 から

$$\hat{x}_1 = \frac{\hat{a} + \hat{a}^\dagger}{2}, \quad \hat{x}_2 = \frac{\hat{a} - \hat{a}^\dagger}{2i},$$

と逆に解けるから

$$\langle \alpha | \hat{x}_1 | \alpha \rangle = \frac{\alpha + \alpha^*}{2}$$

$$\langle \alpha | \hat{x}_1^2 | \alpha \rangle = \frac{\alpha^2 + 2\alpha\alpha^* + \alpha^{*2} + 1}{4}$$

となるので

$$\begin{aligned} \Delta x_1^2 &= \frac{1}{4} \\ \Delta x_2^2 &= \frac{1}{4} \end{aligned}$$

が求まる。よって

$$\Delta x_1 \Delta x_2 = \frac{1}{4}$$

であり、コヒーレント状態は直交位相振幅における最小不確定性状態である。
次に粒子数演算子の期待値を考えてみよう。式 10.69 から

$$\begin{aligned} \langle \alpha | \hat{n} | \alpha \rangle &= \langle \alpha | \hat{a}^\dagger \hat{a} | \alpha \rangle \\ &= |\alpha|^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle \alpha | \hat{n}^2 | \alpha \rangle &= \langle \alpha | \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a}^\dagger \hat{a} | \alpha \rangle \\ &= \langle \alpha | \alpha|^2 \hat{a} \hat{a}^\dagger | \alpha \rangle \\ &= \langle \alpha | \alpha|^2 \{ [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] + \hat{a}^\dagger \hat{a} \} | \alpha \rangle \\ &= \langle \alpha | \alpha|^2 \{ 1 + \hat{a}^\dagger \hat{a} \} | \alpha \rangle \\ &= |\alpha|^2 (|\alpha|^2 + 1) \end{aligned}$$

となるので

$$\begin{aligned}\Delta n &= \sqrt{\langle \alpha | \hat{n}^2 | \alpha \rangle - \langle \alpha | \hat{n} | \alpha \rangle^2} \\ &= |\alpha|\end{aligned}$$

が得られこれはポアソン分布の幅である。よって平均光子数は $|\alpha|^2$ 粒子数のゆらぎは $|\alpha|$ である。
 α が大きくなれば、粒子数のゆらぎが大きくなる。つまり古典論近似ではコヒーレント状態で粒子数は決まらない。

次に PB 演算子のコヒーレント状態での期待値を求めてみよう。

次のように式 10.72, 10.54 から確率関数 $P(\theta)$ を次のように求めておく

$$\begin{aligned}P(\theta) &= |\langle \theta | \alpha \rangle|^2 \\ &= \frac{1}{s+1} + \frac{2}{s+1} \sum_{n>n'} \exp(-|\alpha|^2) \frac{|\alpha|^{n+n'}}{\sqrt{n!n'}} |\exp(-in'(\theta_m - \theta)) \exp(in(\theta_m - \theta))| \\ &= \frac{1}{s+1} + \frac{2}{s+1} \sum_{n>n'} \exp(-|\alpha|^2) \frac{|\alpha|^{n+n'}}{\sqrt{n!n'}} \cos\{(n-n')(\theta_m - \theta)\}\end{aligned}\quad (10.80)$$

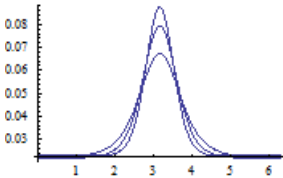


図 10.8: $P(\theta)$ のグラフ、 $\theta = \pi$ としている α が 1, 1.2, 1.4 の場合。 α が大きくなると急なピークができる。

この確率関数によってコヒーレント状態の位相の期待値が次のように求まる。式 10.46、10.39 から

$$\theta_0 = \theta - \frac{s\pi}{s+1}$$

と選ぶと

$$\theta_m = \theta_0 + \frac{2\pi m}{s+1} = \theta + \frac{(2m-s)\pi}{s+1}\quad (10.81)$$

とおけるので次のように $|\alpha|^2 \gg 1$ のところで漸近展開を用いると

$$\begin{aligned}\sum_n \frac{|\alpha|^{2n}}{n!(n+1)^{1/2}} &= \frac{\exp(|\alpha|^2)}{|\alpha|} \left(1 - \frac{1}{8|\alpha|^2} + \dots\right) \\ \sum_n \frac{|\alpha|^{2n}}{n!(n+1)^{1/2}(n+2)^{1/2}} &= \frac{\exp(|\alpha|^2)}{|\alpha|} \left(1 - \frac{1}{2|\alpha|^2} + \dots\right)\end{aligned}$$

となることを利用して次のように期待値を求めることができる。

式 10.72 から

$$|\alpha\rangle = \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle$$

を利用して、

$$\begin{aligned}
\langle \alpha | \hat{\theta} | \alpha \rangle &= \lim_{s \rightarrow \infty} \sum_{m=0}^s \theta_m P(\theta) \\
&= \lim_{s \rightarrow \infty} \sum_{m=0}^s \left(\theta + \frac{(2m-s)\pi}{s+1} \right) \left\{ \frac{1}{s+1} + \frac{2}{s+1} \sum_{n>n'} \exp(-|\alpha|^2) \frac{|\alpha|^{n+n'}}{\sqrt{n!n'}} \cos\{(n-n')(\theta_m - \theta)\} \right\} \\
&= \lim_{s \rightarrow \infty} \left\{ \theta + \frac{(s(s+1) - s(s+1))\pi}{(s+1)^2} \right\} \left\{ 1 + 2 \sum \frac{|\alpha|^{2(n-m)}}{n!m!} \right\} \\
&= \theta
\end{aligned}$$

となる。分散を求めるために $s \gg |\alpha|$ として $|\alpha|$ の 1 次までとると

$$\begin{aligned}
\langle \alpha | \hat{\theta}^2 | \alpha \rangle &= \lim_{s \rightarrow \infty} \sum_{m=0}^s \theta_m^2 P(\theta) \\
&= \lim_{s \rightarrow \infty} \sum_{m=0}^s \left\{ \theta^2 + \frac{2(2m-s)\pi}{s+1} \theta + \left(\frac{(2m-s)\pi}{s+1} \right)^2 \right\} \left\{ \frac{1}{s+1} + \frac{2|\alpha|}{s+1} \right\} \\
&= \lim_{s \rightarrow \infty} \left\{ (s+1)\theta^2 + \frac{2(s(s+1) - s(s+1))\pi}{s+1} \theta + \sum_{m=0}^s \frac{4m^2 - 4ms + s^2}{(s+1)^2} \pi^2 \right\} \left\{ \frac{1}{s+1} + \frac{2|\alpha|}{s+1} \right\} \\
&= \lim_{s \rightarrow \infty} \left\{ (s+1)\theta^2 + \left(\frac{2s(1+s)(1+2s)}{3} - 2s^2(s+1) + (s+1)s^2 \right) \left(\frac{\pi}{s+1} \right)^2 \right\} \left\{ \frac{1}{s+1} + \frac{2|\alpha|}{s+1} \right\} \\
&= \lim_{s \rightarrow \infty} \left\{ \theta^2 + \left(\frac{2s(1+2s)\pi^2}{3(s+1)^2} - \frac{2s^2\pi^2}{(s+1)^2} + \frac{\pi^2 s^2}{(s+1)^2} \right) \right\} \{1 + 2|\alpha|\} \\
&= \left(\theta^2 + \frac{\pi^2}{3} \right) (1 + 2|\alpha|)
\end{aligned}$$

10.5 位相粒子数交換関係

前節の Pegg らの PB 位相演算子である、式 10.46 を用いると前節の式 10.54 より位相と粒子数演算子の交換関係を計算することができる。

$$\begin{aligned}
[\hat{\theta}, \hat{N}] &= \frac{2\pi}{s+1} \sum_{n \neq n'} \sum_{m \neq m'} \left\{ \frac{\exp(i(n-n')\theta_0) |n\rangle \langle n'|}{\exp[(i(n-n')2\pi/(s+1)) - 1] - 1} \frac{|\theta_m\rangle \langle \theta_{m'}|}{\exp[(-i(m-m')2\pi/(s+1)) - 1] - 1} \right. \\
&\quad \left. - \frac{|\theta_m\rangle \langle \theta_{m'}|}{\exp[(-i(m-m')2\pi/(s+1)) - 1] - 1} \frac{\exp(i(n-n')\theta_0) |n\rangle \langle n'|}{\exp[(i(n-n')2\pi/(s+1)) - 1] - 1} \right\}
\end{aligned}$$

これは式 10.53 より $|\theta_m\rangle \langle \theta_{m'}|$ を消去すると

$$\begin{aligned}
\sum_{m \neq m'} \left\{ \frac{|\theta_m\rangle \langle \theta_{m'}|}{\exp[(-i(m-m')2\pi/(s+1)) - 1] - 1} \right\} &= - \sum_{n'=0}^s n |n\rangle \langle n| + \frac{s}{2} \\
&= \sum_{n'=0}^s n' |n'\rangle \langle n'| + \frac{s}{2}
\end{aligned}$$

だから粒子数状態では

$$[\hat{\theta}, \hat{N}] = \frac{2\pi}{s+1} \sum_{n \neq n'} \left\{ \frac{(n' - n) \exp[i(n - n')\theta_0] |n\rangle \langle n'|}{\exp[-i(n - n')2\pi/(s+1)] - 1} \right\}$$

となり、位相状態では

$$[\hat{\theta}, \hat{N}] = \frac{2\pi}{s+1} \sum_{m \neq m'} \left\{ \frac{(m - m') |\theta_m\rangle \langle \theta_{m'}|}{\exp[-i(m - m')2\pi/(s+1)] - 1} \right\}$$

これから

$$\langle n | [\hat{\theta}, \hat{N}] | n \rangle = 0$$

となる。従って対角項をもたない。

さらに n, n' が s より小さいという条件でもう少し簡単にしてみると分母の指数項を近似展開して

$$\begin{aligned} \langle n | [\hat{\theta}, \hat{N}] | n' \rangle &= \frac{2\pi}{s+1} \sum_{n \neq n'} \langle n | \left\{ \frac{(n' - n) \exp[i(n - n')\theta_0] |n\rangle \langle n'|}{\exp[-i(n - n')2\pi/(s+1)] - 1} \right\} | n' \rangle \\ &= \frac{2\pi}{s+1} \frac{s+1}{2\pi(-i)} \langle n | \left\{ \sum_n \exp(in\theta_0) |n\rangle \right\} \left\{ \sum_{n'} \exp(-in'\theta_0) \langle n'| \right\} | n' \rangle \\ &= i(1 - \delta_{n,n'}) \exp(i(n - n')\theta_0) \end{aligned}$$

となる。よって

$$[\hat{\theta}, \hat{N}] = -i + i \left\{ \sum_n \exp(in\theta_0) |n\rangle \right\} \left\{ \sum_{n'} \exp(-in'\theta_0) \langle n'| \right\}$$

となりこれは式 10.25 から次のように位相状態に置き換えできる。

$$[\hat{\theta}, \hat{N}] = -i(1 - (s+1)|\theta_0\rangle \langle \theta_0|)$$

従って物理的な状態 $|p\rangle$ に対する交換積の期待値は

$$\begin{aligned} \langle p | [\hat{\theta}, \hat{N}] | p \rangle &= -i \langle p | (1 - (s+1)|\theta_0\rangle \langle \theta_0|) | p \rangle \\ &= -i(1 - (s+1)|\langle p | \theta_0 \rangle|^2) \end{aligned}$$

であり、 $|\langle p | \theta_0 \rangle|^2$ は物理的な状態が位相 θ_0 をもつ確率である。 $s \rightarrow \infty$ の極限では式 10.9 から

$$|\langle p | \theta_0 \rangle|^2 \rightarrow P(\theta_0) \frac{2\pi}{s+1}$$

に対応する。この時 $P(\theta_0)$ は確率密度であり $\frac{2\pi}{s+1}$ は状態密度である。この書き換えによると

$$\langle p | [\hat{\theta}, \hat{N}] | p \rangle = -i \langle p | (1 - 2\pi P(\theta_0)) | p \rangle$$

一般には

$$\langle [\hat{\theta}, \hat{N}] \rangle = -i \langle (1 - 2\pi P(\theta_0)) \rangle \quad (10.82)$$

となる。しかし、古典論から量子論への対応関係

$$[\hat{u}, \hat{v}] \longleftrightarrow i\hbar [u, v]_p$$

を適応すると式 10.82 は次のように角速度を表すことになる。

$$\langle [\hat{\theta}, \hat{H}] \rangle = -\omega \langle (1 - 2\pi P(\theta_0)) \rangle \quad (10.83)$$

この期待値は θ_0 に依存する。同時に交換関係からくる不確定性原理も式 10.13 に対応して

$$\Delta n \Delta \theta \geq \frac{1}{2} |1 - 2\pi P(\theta_0)| \quad (10.84)$$

を得るがこれも θ_0 への依存性を持っている。 $P(\theta)$ が $\theta = \beta$ で極大になるような対称関数であるとする $\beta \pm \pi$ の区間を決めておく必要がある。

10.6 生成消滅演算子

前節での指数演算子と粒子数演算子を用いて次のように消滅演算子が定義できる。

$$\begin{aligned} \hat{a} &\equiv \exp(i\hat{\theta})\hat{N}^{1/2} \\ &= |0\rangle\langle 1| + 2^{\frac{1}{2}}|1\rangle\langle 2| \dots + s^{\frac{1}{2}}|s-1\rangle\langle s| + 0^{\frac{1}{2}}\exp(i(s+1)\theta)|s\rangle\langle 0| \\ &= |0\rangle\langle 1| + 2^{\frac{1}{2}}|1\rangle\langle 2| \dots + s^{\frac{1}{2}}|s-1\rangle\langle s| \end{aligned}$$

都合よく $\exp(i(s+1)\theta)|s\rangle\langle 0|$ の項が落ちる。生成演算子はこれのエルミート共役から作られる。

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger &\equiv \left(\exp(i\hat{\theta})\hat{N}^{1/2} \right)^\dagger \\ &= |1\rangle\langle 0| + 2^{\frac{1}{2}}|2\rangle\langle 1| \dots + s^{\frac{1}{2}}|s\rangle\langle s-1| \end{aligned}$$

しかし、最後の項があるために

$$\begin{aligned} [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] &= |0\rangle\langle 0| + \sum_{i=1}^{s-1} \{ (i+1)|i\rangle\langle i| - (i+1)|i+1\rangle\langle i+1| \} \\ &= 1 - (s+1)|s\rangle\langle s| \end{aligned}$$

となる。そのためこの交換積は対角項が存在しない。しかし

$$\begin{aligned} \langle s| [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] |s\rangle &= \langle s|s\rangle - (s+1)\langle s|s\rangle \\ &= 1 - |s\rangle\langle s| (1+s) \end{aligned}$$

さらに次の関係が成り立つ

$$\begin{aligned} [\hat{a}, \hat{a}^\dagger]^2 &= 1 - 2(s+1)|s\rangle\langle s| + (s^2 + 2s + 1)|s\rangle\langle s| \\ &= 1 - |s\rangle\langle s| (1 - (-s)^2) \end{aligned}$$

であり q を正の整数として一般に

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger]^q = 1 - |s\rangle\langle s| (1 - (-s)^q)$$

である。前節のコヒーレント状態 $|\alpha\rangle$ での期待値は

$$\langle \alpha | [\hat{a}, \hat{a}^\dagger]^q | \alpha \rangle = 1 - \exp(-|\alpha|^2) \frac{|\alpha|^{2s}}{s!} (1 - (-s)^q)$$

一般的な状態 $|p\rangle$ についても

$$\langle p | [\hat{a}, \hat{a}^\dagger]^q | p \rangle = 1 - |c_s|^2 (1 - (-s)^q)$$

ただし

$$c_s = \langle s | p \rangle$$

10.7 位相演算子と状態演算子

一般的な次のような粒子数の重ね合わせの状態は

$$|f\rangle = \sum_{n=0}^s c_n |n\rangle$$

式 10.54 によって次のように書き換えることができる。

$$|f\rangle = (s+1)^{-1/2} \sum_n \sum_{m=0}^s c_n \exp(-in\theta_m) |\theta_m\rangle$$

これから位相確率関数を次のように定義できる。

$$P(\theta) = |\langle \theta_m | f \rangle|^2 = (s+1)^{-1} \left| \sum_{n=0}^s c_n \exp(-in\theta_m) \right|^2 \quad (10.85)$$

従って期待値は

$$\langle \theta_m | \hat{\theta}_m | \theta_m \rangle = \sum_{m=0}^s \theta_m P(\theta)$$

と表すことができるので、これから分散は次のように表すことができる。

$$\Delta \hat{\theta}^2 = \sum_{m=0}^s \left(\theta_m - \langle \theta_m | \hat{\theta}_m | \theta_m \rangle \right)^2 P(\theta)$$

式 10.85 から b_n を正の実数として次のような仮想位相状態を考える。

$$|b\rangle = \sum_{n=0}^s b_n \exp(in\beta) |n\rangle$$

位相状態はこの内

$$b_n^2 = \frac{1}{s+1}$$

という係数になる。実際の物理的な状態は次のような内積の射影をつくることで得られると考える。

$$\begin{aligned}
|\langle \theta_m | b \rangle|^2 &= \frac{1}{s+1} \left| \sum_{n=0}^s b_n \exp(in\beta) \exp(-in\theta_m) \right|^2 \\
&= \frac{1}{s+1} \left| \sum_{n=0}^s b_n \exp(in(\beta - \theta)) \right|^2 \\
&= \frac{1}{s+1} \left| \sum_{n=0}^s b_n \{ \cos(n(\beta - \theta)) + i \sin(n(\beta - \theta)) \} \right|^2 \\
&= \frac{1}{s+1} + \frac{2}{s+1} \sum_{n>n'} b_n b_{n'} \cos \{ (n - n')(\beta - \theta_m) \}
\end{aligned} \tag{10.86}$$

ここで $\hat{\theta}_m$ は初期位相 θ_0 に依存する。そこで次のようにおく

$$\theta_0 = \beta - \frac{\pi s}{s+1} \tag{10.87}$$

さらにラベル m を次のように置き換える

$$\mu = m - \frac{s}{2} \tag{10.88}$$

すると式 10.87 は $\theta_m = \theta_0$ として

$$|\langle \theta_m | b \rangle|^2 = \frac{1}{s+1} + \frac{2}{s+1} \sum_{n>n'} b_n b_{n'} \cos \left\{ (n - n') \frac{2\pi\mu}{s+1} \right\} \tag{10.89}$$

ただしこの時 m が $1 \sim s$ をとると μ は $-s/2 \sim s/2$ の値をとる

よって式 10.87、10.46 から $\delta_{nn'}$ が出るので位相の期待値は次のように求まる。

$$\begin{aligned}
\langle b | \hat{\theta}_m | b \rangle &= \sum_{n,n'} b_n \exp(-in\beta) \langle n | \left\{ \theta_0 + \frac{s\pi}{s+1} + \frac{2\pi}{s+1} \sum_{n \neq n'} \frac{\exp(i(n-n')\theta_0)}{\exp[(i(n-n')2\pi/(s+1)] - 1]} \right\} b_{n'} \exp(in'\beta) | n' \rangle \\
&= b_n^2 \left\{ \theta_0 + \frac{s\pi}{s+1} \right\} (s+1) \\
&= \beta
\end{aligned}$$

を得る。よってこの θ_0 をとると式 10.88、10.81 から

$$\begin{aligned}
\theta_m &= \theta_0 + \frac{2\pi}{s+1} \left(\mu + \frac{s}{2} \right) \\
&= \theta_0 + \frac{2\pi\mu}{s+1} + \frac{\pi s}{s+1}
\end{aligned}$$

だから式 10.85 から次のように分散が決まる。

$$\begin{aligned}
\Delta \hat{\theta}^2 &= \sum_{m=0}^s \left(\theta_m - \langle |\hat{\theta}_m| \rangle \right)^2 P(\theta) \\
&= \left(\frac{2\pi}{s+1} \right)^2 \sum_{\mu=-s/2}^{s/2} |\langle \theta_m | b \rangle|^2 \mu^2
\end{aligned} \tag{10.90}$$

この計算をするために式 10.88 から次のように変数変換すると $d\mu = 1$ だから

$$\theta = \frac{2\pi\mu}{s+1}$$

$$d\theta = \frac{2\pi}{s+1}$$

よって 10.90 に「において $s \rightarrow \infty$ をとれば式 10.89 から次のように積分に置き換えられて

$$\begin{aligned} \Delta\hat{\theta}^2 &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \left\{ 1 + 2 \sum_{n>n'} b_n b_{n'} \cos[(n-n')\theta] \right\} \theta^2 d\theta \\ &= \frac{\pi^2}{3} + 4 \sum_{n>n'} b_n b_{n'} (-1)^{n-n'} (n-n')^{-2} \\ &= \frac{\pi^2}{3} + f(n, n') \end{aligned}$$

が得られる。最後の項 f は粒子数状態であれば 0 になる。しかし、位相状態であれば

$$b_n = \frac{1}{\sqrt{s+1}}$$

であるので s が十分大きければ

$$\sum_n^s \frac{(-1)^n}{n^2} = -\frac{\pi^2}{12} \quad (s \rightarrow \infty)$$

となるから

$$\Delta\hat{\theta}^2 = 0$$

となることが期待できる。

そこで例えば矩形的な状態として次のような位相、粒子状態を考える。

$$q \leq n < q+r \rightarrow b_n = \sqrt{r}$$

$$\text{上記以外} \rightarrow b_n = 0$$

粒子数状態では

$$|q\rangle \leq |n\rangle < |q+r-1\rangle \rightarrow |n\rangle = \text{Const.}$$

$$\text{上記以外} \rightarrow |n\rangle = 0$$

参考文献

- [1] 菅野礼治 ゲージ理論の解析力学 2007
- [2] G.M. ザスラフスキー 三島信彦、斉藤徹也、新藤 茂 訳 1989 カオス-古典および量子力学系-
- [3] 内山龍雄 相対性理論 1977 岩波全書
- [4] Tristan Needham **Visual complex analysis** 1997 培風館
- [5] J.W.Noh, A.Fougères, and L.Mandel **Operational approach to the phase of quantum field** 1992 Physical Review A 45

- [6] D.T.Pegg, S.M.Barnett **Phase properties of quantized single-mode electromagnetic field** 1989 Physical Review A 39
- [7] 小林昭七 接続の微分幾何とゲージ理論 1989 裳華房
- [8] 野水克己 現代微分幾何入門 1969 裳華房
- [9] 佐藤光 群と物理 1992 丸善株式会社
- [10] Tristan Needham **Visual Complex Analysis** 1997 OXFORD
- [11] 小沢哲也 曲線・曲面と接続の幾何 1997 倍風館
- [12] 中原幹生 理論物理学のための幾何学とトポロジー I,II 2000 ピアソン・エデュケーション
- [13] 丹羽雅昭 超伝導の基礎 2002 東京電機大学出版局
- [14] 矢吹治一 量子論における位相 1998 日本評論社
- [15] Tai Tsun Wu, Chen Ning Yang **Concept of nonintegrable factors and global formulation of gauge fields** 1975 Physical Review D 12
- [16] R.Glies **Reconstruction of gauge potentials from Wilson loops** 1981 Physical Review D 24
- [17] Pratul Bandyopadhyay **Geometry, Topology and Quantum Field Theory**
- [18] 深谷賢治 双曲幾何 岩波書店 2004
- [19] Shinichi Deguchi Kazuo Fujikawa **Second-quantized formulation of geometric phases** 2005 Physical Review A72
- [20] 大貫義朗 鈴木増雄 柏太郎 経路積分の方法 岩波 現代の物理学
- [21] 柏 太郎 サイエンス社 新版 演習 場の量子論
- [22] J.David Jackson **Classic Electrodynamics** 2001
- [23] 中村 哲・須藤彰三 電磁気学 朝倉書店 2012
- [24] Matthew N.O. **Elements of Electromagnetic**
- [25] **Lectures on Clifford(Geometric) Algebras and Applications** Rafal Ablamowicz Garret Sobczyk 2003
- [26] Julian Schwinger シュウインガ—量子力学 Springer 2000
- [27] 野村健太郎 トポロジカル絶縁体・超伝導体の基礎理論 September 11, 2013
- [28] 安藤陽一 トポロジカル絶縁体入門 2014
- [29] Brian R. Greene **STRING THEORY ON CALABI-YAU MANIFOLDS** Columbia University
- [30] 深谷 賢治 ゲージ理論とトポロジー 1995 Springer
- [31] Joseph L.Birman **Geometry, Particles, and Fields** Springer
- [32] Charles Nash Sinddhartha Sen **Topology and geometry for Physics** Mineola, New York

- [33] 二木 昭人 微分幾何講義-一般理論と現代物理への応用 サイエンス社
- [34] Andre Weil ケーラー多様体論入門 1958 Springer
- [35] 天野勝利 **Hopf** 代数とは 筑波大学
- [36] 谷村省吾 トポロジー・圏論・微分幾何 サイエンス社 SGC-52
- [37] 坪井 俊 幾何学3 微分形式 東京大学出版
- [38] Louis H.Kauffman **KNOTS AND PHYICS** World Sientific 1993
- [39] 服部昌夫 多様体のトポロジー 岩波 2003
- [40] David W. Lyons **An Elementary Introduction to the Hopf Fibration** Lebanon Valley College
- [41] Nicholas Wheeler **Transformational principles latent in the theory of CLIFFORD ALGEBRAS** Reed College Physics Department 2003
- [42] Mathematica Demonstration Richard Hennigan **Rotating the Hopf Fibration** <http://www.wolfram.com/>
- [43] Ana Cannas da Silva **Lectures on Symplectic Geometry** 2006
- [44] **Rotations of the three-sphere and symmetry of the Cliford Torus** John McCuan and Lafe Spietz October 5,1998
- [45] Maris Ozols **Geometry of qubit** 2007
- [47] Rupert Way **Dynamics in the Hopf bundle, the geometric phase and implications for dynamical systems** University of Surrey U.K 2008
- [48] Chris J Isham **Modern Differential Geometry for Physicists**
- [50] Robert Gilmore **Lie Groups, Lie Algebras, and Some of Their Applications**
- [51] Bo-Yu Hou, Bo-Yuan Hou **DIFFERENTIAL GEOMETRY FOR PHYSICS** World Scientific 1997
- [52] Thomas J.Bridges **The Orr-Sommerfeld equation on a manifold**
- [53] 佐古彰史 超対称性ゲージ理論と幾何学 2007 日本評論社
- [54] 早川尚男 連続体力学 京都大学大学院 平成 17 年
- [55] 岡部洋一 電磁気学 放送大学 2015
- [56] Bjorn Felsager **Geometry, Particles, and Fields** Springer 1997
- [57] 及川正行 偏微分方程式 岩波書店 1955
- [60] 三尾典克 変形体の力学 東京大学
- [61] Daniel Z.Freedman and Antoine Van Proeyen **Supergravity** CAMBRIGE
- [62] V.P Nair **Quantum Field Theory** 2005 Springer

- [63] **Diagrammatica The Path to Feynman Rules** Martinus Veltman 1995 Cambridge University Press
- [64] Martin Ammon Johanna Erdmenger **Gauge/Gravity Duality: Foundations and Applications** 2005 Cambridge University Press
- [65] Kawamura Yoshiharu 相対論的量子力学 裳華房
- [66] 泰泉寺雅夫 数物系のためのミラー対称性入門 2014 サイエンス社
- [67] 堀川穎二 複素代数幾何学入門 岩波書店
- [68] Shiing-shen Chern **Complex Manifolds Without Potential Theory** 1995 Springer Verlag New York,LLC
- [69] 安藤哲也 コホモロジー 2002 日本評論社
- [70] Joseph Polchinski **String Theory I,II** Cambridge University Press 1998
- [71] 坂本真人 量子力学から超対称性へ SGC ライブラリ 96 2012 サイエンス社
- [72] Barton Zwiebach **A First Course in STRING THEORY** 2009 Cambridge University Press
- [73] 深谷 賢治 編 ミラー対称性入門 2009 日本評論社
- [74] 白水 徹也 アインシュタイン方程式 2012 SGO ライブラリ サイエンス社
- [75] 唐木田健一 ひとりで学べる一般相対性理論 講談社 2015
- [76] 深谷賢治 数学者による数学者のための **StrigDuality** 京都大学
- [77] 坪井 俊 幾何学Ⅷ ホモロジー入門 東京大学出版会
- [78] 佐藤秀司・佐藤周友 代数的サイクルとエタールコホモロジー Springer 2012
- [79] 石橋延幸・村上公一 弦の場の理論 2012 SGO ライブラリ サイエンス社
- [80] 伊藤克司 共形場理論 2011 SGO ライブラリ サイエンス社
- [81] 高柳 匡 ホログラフィー原理と量子エンタングルメント サイエンス社
- [82] 江沢 洋、渡辺敬二、鈴木増雄、田崎晴明 繰り込み群の方法 1999 岩波書店
- [83] 今村 洋介 超弦理論の基礎 2010 SGO ライブラリ サイエンス社
- [84] 江口 徹 菅原 祐二 共形場理論 2015 岩波書店
- [85] 西森 秀稔 相転移・臨界現象の統計物理学 倍風館
- [86] Michael E.Peskin, Daniel V.Schroeder **An introduction to quantum Field Theory**
- [87] Charles Kittel and Herbrt Kroemer **THERMAL PHYSICS** W.H.Freeman and Company 1980
- [88] J.J Sakurai **Modern Quantum Mechanics** 1985 The Benbjamin/Cumming Publishng Company,Inc.
- [89] 松田 哲 複素関数 理工系の基礎数学5 岩波書店 1995
- [90] 小林 昭七 複素幾何 岩波書店 2005

- [91] 早川 尚男 非平衡統計力学 サイエンス社 SGC ライブラリ 2006
- [92] Mukund Rangamani & Tadashi Takayanagi “**Holographic Entanglement Entropy**“ 2017
- [93] 松枝 宏明 量子系のエンタングルメントと幾何学 森北出版 2016
- [94] 治部真里 高橋康 添削形式による場の量子論 日本評論社 1997
- [95] V.P. ナイア著 阿部泰裕 磯暁 訳 現代的視点からの場の量子論 Springer 2005
- [96] 大津 元一 現代光科学 Ⅷ、Ⅷ 光の物理的基礎 朝倉書店 1994
- [97] 日置 善郎 相対論的量子場 吉岡書店 2008
- [98] 細谷 暁夫 量子コンピューターの基礎 サイエンス社 1999
- [99] Michael A. Nielsen & Isaac L. Chuang **Quantum Computation and Quantum Information** Cambridge University press 2010
- [100] Brian C.Hall **Lie Groups, Lie Algebras, and Representations An Elementary Introduction** Springer 2015
- [101] 谷村省吾 ホロノミーと力学系 名古屋大学
- [102] Raffaele Rani **On Parallel Transport and Curvature** 2009
- [103] 塩濱 勝博, 成 慶明 曲面の微分幾何学 日本評論社 2005
- [104] 大槻 知忠 結び目の不変量 共立出版 2015
- [105] 鈴木 増雄 統計力学 岩波書店 1994
- [106] Anastasios Mallios **MODERN DIFFERENTIAL GEOMETRY IN GAUGE THEORIES** Springer 2009
- [107] **Lectures on Geometry** Edited by N.M,J.WOODHOUSE OXFORD university press 2017
- [108] 田中利夫・村上齊 トポロジー入門 サイエンス社 SGC ライブラリ 42 2005
- [109] 川村嘉春 基礎物理から理解するゲージ理論 サイエンス社 SGC ライブラリ 42 2017
- [110] 細谷 裕 ゲージヒッグス統合理論 サイエンス社 SGC ライブラリ 42 2018
- [111] 堺井義秀 山田憲和 野尻美保子 素粒子物理学 KEK 2012
- [112] 鈴木 増雄 経路積分と量子解析 サイエンス社 2017
- [113] David Tong **Quantum Field Theory** Universith of Cambridge 2006
- [114] 並木美喜雄 大場一郎 散乱の量子力学 岩波書店 1997
- [115] 福田礼次郎 フーリエ解析 岩波書店 1995
- [116] Adam Lupu-Sax **Quantum Scattering Theory and Applications** Harvard University 1998
- [117] 佐藤文隆 児玉英雄 一般相対性理論 岩波書店 1992
- [118] 松本幸夫 多様体の基礎 東京大学出版 1989
- [119] Wulf Rossmann **Lie Groups** OXFORD 2002

- [120] 佐武一郎 リー群の話 日本評論社 1982
- [121] F. シャトラン 行列の固有値 Springer 1988
- [122] 生西明夫 中神 臣 作用素環入門 1 岩波 2006
- [123] 黒田成俊 関数解析 共立出版 1980
- [124] 堀田昌寛 量子情報と時空の物理 第2版 サイエンス社 2019
- [125] 砂田利一 行列と行列式 岩波 2003
- [126] 太田 浩一 電磁気学の基礎 東京大学出版会 2013
- [127] J. マトウシエック著 岡本吉央訳 離散幾何学講義 丸善 2001
- [128] 根本香絵 量子力学の考え方 物理で読み解く量子情報論の基礎 サイエンス社 2008
- [129] 甘利 俊一 情報幾何学の新展開 サイエンス社 2014
- [130] Michael A.Nielsen Isaac L. Chuang **Quantum Computation and Quantum Information**
- [131] 佐川弘幸/吉田宣章 量子情報理論 第3版 丸善 2019
- [132] Leo.P.Kadanoff and Gordon Baym 1962 量子情報理論 丸善プラネット
- [133] Rodney Loudon **The quantum theory of light** Oxford University Press 1983
- [134] Leo.P.Kadanoff and Gordon Baym **Quantum Statistical Mechanics** PerseusBooks Publishing 1962
- [135] 長島順清 粒子と場 大阪大学
- [136] MARK THOMSON **Modern Particle Physics** University of Cambridge 2013
- [137] 中山 茂 **Qsikit** 量子プログラミング入門 Gaia 教育シリーズ 17 2019