

エンタングルメントのお気持ちを知る

量子物理学班 樋口一輝

2022年5月14日

1 モチベーションと構成

エンタングルメントは量子情報の分野に登場するキーワードだった。それが今や、宇宙や物性などの物理の諸分野に登場する重要なキーワードへと発展してきた。この記事では、エンタングルメントの構造が物性の分野でどのように活用されているのかということに注目し、物性と量子情報の交わりの話題で筆者が興味を持ったものを説明することを目的とした。大きく3つのトピックを取り上げる。1つ目は超伝導体におけるエンタングルメント、2つ目は熱場のダイナミクスとエンタングルメント、3つ目は熱平衡化とエンタングルメントである。記事の分量が多くなってしまったので、この記事を読むガイドを記そうと思う。

- ▶ まずはじめの節では、簡単な系でエンタングルメントがどういうものなのかなど、基本的な事項を確認する。さらに、後に必要な基本的な量や性質についても解説した。適宜、参照した式番号との対応を確認して読まれることを想定している。
- ▶ 超伝導の節では、 s 波一様系の超伝導体の基底状態について、エンタングルメントの構造からどのようなことが言えるのかをまとめた。基底状態の表式を平均場近似を用いて求めることから始まり、エンタングルメントエントロピーやコンカレンスを計算するところまで記事にした。
- ▶ 次の節では熱場のダイナミクス (TFD) を説明し、非常に簡単な系で TFD を用いて計算し、量子ゆらぎやエンタングルメントエントロピーがどのように振る舞うのかをまとめた。
- ▶ 最後の節では、「孤立系全体が初期状態からずっと純粋状態として時間発展する一方で、部分系のエンタングルメントが伝播し、それが部分的なエントロピーを生成し、系が熱平衡化する」ということを確認した実験を解説する。
- ▶ また補遺に、関連度は低いが見たい話題をまとめた。議論が横道に逸れるのを避けるために補遺とした。必要があれば読まれることを想定している。

途中の計算もなるべく記したので分量は多くなってしまったが、各トピックはそれぞれ自立しているので興味のある節を読むことでも良いと思う。補足しておくとして、ここに挙げなかった有名な例というものも存在する。それはたとえば、トポロジカル量子系やブラックホールなどであ

る。エンタングルメントという構造が，時間的にも空間的にもここに書ききれないほど広く奥深いものであることを先に述べておく。

目次

1	モチベーションと構成	1
2	合成系の状態とエンタングルメント	3
2.1	必要な知識	3
2.2	さらに勉強するために	9
3	超伝導	10
3.1	超伝導基底状態	10
3.2	Bogoliubov-Valentin 変換	13
3.3	エンタングルメントの構造	14
3.4	コンカレンス	18
3.5	コヒーレント状態	19
4	熱場ダイナミクス，熱揺らぎと量子揺らぎ	20
4.1	二重ヒルベルト空間の定義と性質	20
4.2	2 スピン系でのエンタングルメント	21
4.3	係数の意味	24
4.4	エンタングルメントエントロピー (EE)	25
5	熱平衡化	26
5.1	導入	26
5.2	エンタングルメントを測る	27
5.3	EE のダイナミクス	28
補遺 A	RE \rightarrow EE の確認	33
補遺 B	コヒーレント状態	34
補遺 C	スクイズド状態	36
C.1	直交位相振幅	36
C.2	スクイズド状態	37
C.3	Overcomplete set	38

2 合成系の状態とエンタングルメント

2.1 必要な知識

1つの量子系に対する量子力学の基本的な部分は既知とする。ブラケット記法や密度演算子がわからない場合は、まず他の解説記事を読むことをオススメする。

以下では合成系について考えたいので、はじめに合成系の取り扱い方を確認する。

2つの量子系 A, B を考えてそれぞれの Hilbert 空間が $\mathcal{H}_A, \mathcal{H}_B$ であるとする。 \mathcal{H}_A の正規直交基底を $\{|\psi_i\rangle\}$, \mathcal{H}_B の正規直交基底を $\{|\phi_j\rangle\}$ と書くことにする。 \mathcal{H}_A の状態が $|\psi_i\rangle$, \mathcal{H}_B の状態が $|\phi_j\rangle$ である時に合成系 AB の状態はテンソル積で、 $|\psi_i\rangle \otimes |\phi_j\rangle$, あるいは、 $|\psi_i\rangle |\phi_j\rangle$, $|\psi_i \phi_j\rangle$ と書く。あるいは、 $|\psi_i\rangle_A |\phi_j\rangle_B$ などと A, B を明示する場合もある。ここで、 $\{|\psi_i\rangle |\phi_j\rangle\}$ は合成系の Hilbert 空間の基底である。実際、

$$\langle \psi_{i'} | \langle \phi_{j'} | \psi_i \rangle | \phi_j \rangle = \delta_{i,i'} \delta_{j,j'},$$

と定義するとこれは正規直交基底となる。

一般に、合成系の状態ベクトルは複素数 c_{ij} に対し

$$\sum_{i,j} c_{ij} |\psi_i\rangle |\phi_j\rangle,$$

とかける。とくに系 A の状態が $|\psi\rangle = \sum_i a_i |\psi_i\rangle$, 系 B の状態が $|\phi\rangle = \sum_j b_j |\phi_j\rangle$ と書ける時、

$$|\psi\rangle |\phi\rangle = \sum_{i,j} a_i b_j |\psi_i\rangle |\phi_j\rangle. \quad (2.1)$$

この様に、合成系の状態が部分系の状態の積で書かれているとき、合成系の状態は積状態であるという。合成系の状態が純粋状態である場合は、積状態のことをセパラブル状態ともいう。そして、セパラブルでない状態をエンタングルド状態という。たとえば、 $\sum_i c_i |\psi_i\rangle |\phi_i\rangle$ ^{*1} は式 (2.1) の例と同じ様に考えると積の形にかけていない。

系 A の演算子は $\hat{A} = \sum_{i,j} \alpha_{ij} |\psi_i\rangle \langle \psi_j|$, 系 B の演算子は $\hat{B} = \sum_{m,n} \beta_{mn} |\phi_m\rangle \langle \phi_n|$ と書ける。これらのテンソル積を

$$\begin{aligned} \hat{\rho} &= \hat{A} \otimes \hat{B} = \sum_{i,j,m,n} \alpha_{ij} \beta_{mn} |\psi_i\rangle \langle \psi_j| \otimes |\phi_m\rangle \langle \phi_n| \\ &= \sum_{i,j,m,n} \alpha_{ij} \beta_{mn} |\psi_i\rangle |\phi_j\rangle \langle \psi_m| \langle \phi_n|, \end{aligned} \quad (2.2)$$

と定義すると、これが合成系 AB の演算子であることがわかる。密度演算子による表現は嬉しいこととして、 $\text{Tr} \hat{\rho}^2 = 1$ なら状態 $\hat{\rho}$ が純粋状態、 $\text{Tr} \hat{\rho}^2 < 1$ なら混合状態という性質がある。なので、 $\text{Tr} \hat{\rho}^2$ を純粋度 (purity) と呼ぶことがある^{*2}。

^{*1} $c_i \neq 0$ となる i が2つ以上あるとする。

^{*2} Tr は行列の対角和 (Trace) を表す。頭に書くと、 $\text{Tr} \hat{A} = \sum_i \langle \psi_i | \hat{A} | \psi_i \rangle$ である。

今、合成系 $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ 上の演算子が式 (2.2) のように与えられる場合を考える。系 \mathcal{H}_A 上の任意の行列 \hat{X} に対して、

$$\mathrm{Tr}(\mathrm{Tr}_{\mathcal{H}_B} \hat{\rho}) \hat{X} = \mathrm{Tr} \hat{\rho} (\hat{X} \otimes \hat{I}_{\mathcal{H}_B}),$$

を満たす系 \mathcal{H}_A を考えると、次の式 (2.3) を満たす状態 $\mathrm{Tr}_{\mathcal{H}_B} \hat{\rho}$ ($\hat{\rho}$ の部分トレース) が存在する。このとき、系 \mathcal{H}_A だけに注目して系 \mathcal{H}_A 上の状態は $\mathrm{Tr}_{\mathcal{H}_B} \hat{\rho}$ で与えられると解釈できるのである。

$$\mathrm{Tr}_{\mathcal{H}_B} \hat{\rho} = \sum_{i,j} \sum_m \alpha_{i,j} \beta_{m,j} |\psi_i\rangle \langle \phi_m|. \quad (2.3)$$

なおトレースの添字は、わかりづらい場合を除き、 $\mathrm{Tr}_{\mathcal{H}_B} \bullet$ のことを $\mathrm{Tr}_B \bullet$ などと表現する。さらに、2つの系 A と B がそれぞれ密度演算子 $\hat{\rho}$ と $\hat{\sigma}$ で表されるときに相違度について述べておこう。よく使われるのは次の2つである。トレース距離 $D(\hat{\rho}, \hat{\sigma})$ は

$$D(\hat{\rho}, \hat{\sigma}) := \frac{1}{2} \mathrm{Tr} |\hat{\rho} - \hat{\sigma}|. \quad (2.4)$$

式 (2.4) は“距離”が表すように、2つの状態が一致すると0、離れていくと大きな値を持つようになる。フィデリティ $F(\hat{\rho}, \hat{\sigma})$ は

$$F(\hat{\rho}, \hat{\sigma}) := \mathrm{Tr} \sqrt{\hat{\rho}^{1/2} \hat{\sigma} \hat{\rho}^{1/2}}. \quad (2.5)$$

もし、片方（たとえば $\hat{\sigma}$ ）が純粋状態 $|\psi\rangle$ だとすると、

$$\begin{aligned} F(\hat{\rho}, |\psi\rangle\langle\psi|) &= \mathrm{Tr} \sqrt{\langle\psi|\hat{\rho}|\psi\rangle |\psi\rangle\langle\psi|} = \sqrt{\langle\psi|\hat{\rho}|\psi\rangle}, \\ (F(\hat{\rho}, |\psi\rangle\langle\psi|))^2 &= \langle\psi|\hat{\rho}|\psi\rangle = \mathrm{Tr} \hat{\rho} \hat{\sigma} =: \tilde{F}(\hat{\rho}, \hat{\sigma}), \end{aligned} \quad (2.6)$$

を得る。このとき得た \tilde{F} のことをこの記事では擬忠実度 (psuedo フィデリティ) と呼ぶことにするが、式 (2.5) で定義されたフィデリティではなく、式 (2.6) をフィデリティと呼ぶ場合もある。フィデリティは、2つの状態が一致するときに1、離れていくと0に近づく。

先に、一般的なエンタングルド状態（セパラブルでない状態）について述べたが、次にその具体例として有名な **Bell** 状態を紹介する。Qubit^{*3} $|0\rangle, |1\rangle$ と、それらからなる 2-qubit 系を考える。2-qubit 系の 4次元 Hilbert 空間の正規直交基底はたとえば、

$$\{|0\rangle|0\rangle, |0\rangle|1\rangle, |1\rangle|0\rangle, |1\rangle|1\rangle\},$$

ととれる。そこで、

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle|1\rangle - |1\rangle|0\rangle), \quad (2.7)$$

を考える。これは

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle|1\rangle - |1\rangle|0\rangle) = (\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle)(\gamma|0\rangle + \delta|1\rangle),$$

*3 2 準位系、顕に書けば、 $|0\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$, $|1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$.

となる係数 $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ が存在したと仮定すると,

$$\alpha\gamma = 0, \quad \alpha\delta \neq 0, \quad \beta\gamma \neq 0, \quad \beta\delta = 0,$$

を満たすはずだが, そのような係数たちは存在しない. したがって式 (2.1) のように積の形には書き表せないのがエンタングルメント状態だとわかる. 同様に,

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle|1\rangle + |1\rangle|0\rangle), \quad (2.8)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle|0\rangle + |1\rangle|1\rangle), \quad (2.9)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle|0\rangle - |1\rangle|1\rangle), \quad (2.10)$$

はエンタングルメント状態で, とくに Bell 基底, ないし, EPR ペアという名前で有名である. これらは, エンタングルメントの大きさの単位として用いられることもしばしばあり, Bell 状態は 1 ebit のエンタングルメントの大きさをもつという.

今, A と B のそれぞれの qubit に対し, $|0\rangle$ か $|1\rangle$ かを決める測定を行ったとすると, (i) A の測定結果が $|0\rangle$ なら B の測定結果は $|1\rangle$, (ii) B の測定結果が $|0\rangle$ なら A の測定結果は $|1\rangle$ となる. これが重ね合わされていて, 量子相関を持っている. つまり, 別のどの基底で測定を行っても, 今述べたのと同様に相関がある. たとえば, $|0\rangle$ と $|1\rangle$ を θ だけ回転させた正規直交基底

$$\begin{aligned} |\theta\rangle &= \cos\theta|0\rangle + \sin\theta|1\rangle, \\ |\theta_\perp\rangle &= -\sin\theta|0\rangle + \cos\theta|1\rangle, \end{aligned}$$

を考えると簡単な計算により式 (2.7) は

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle|1\rangle - |1\rangle|0\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\theta\rangle|\theta_\perp\rangle - |\theta_\perp\rangle|\theta\rangle), \quad (2.11)$$

とわかる. これもまたエンタングルメント状態である. だから, A と B のそれぞれの qubit に対し, $|\theta\rangle$ か $|\theta_\perp\rangle$ かを決める測定を行ったとすると, $|0\rangle$ と $|1\rangle$ の場合と同様に, やはり相関を持っているのである. このようにエンタングルメント状態では異なる基底での測定に対しても相関を持っている. また, 式 (2.11) のような状態はスピンスिंगレットと呼ばれる.

さて, 系 \mathcal{H} が状態 $\hat{\rho}$ にあるときの系の情報を考える. 重要な量に, von Neumann エントロピー $H(\hat{\rho})$ がある.

$$H(\hat{\rho}) := -\text{Tr} \hat{\rho} \log \hat{\rho}. \quad (2.12)$$

この量が大きいほど, 系のランダムな度合いが大きくなる.

状態 $\hat{\rho}$ の固有値 λ_i の固有状態が $|i\rangle$ なら $\hat{\rho} = \sum_i \lambda_i |i\rangle\langle i|$ で,

$$H(\hat{\rho}) = -\sum_i \lambda_i \log \lambda_i, \quad (2.13)$$

とも書ける.

他にも,

$$\psi(s | \hat{\rho}) := \log \text{Tr} \hat{\rho}^{1-s}, \quad (2.14)$$

もランダムな度合いを表す量になる. 式 (2.14) から $(1-s)$ 次の (Petz-) Rényi エントロピー; **RE** ^{*4} $H_{1-s}(\hat{\rho})$ が定義される.

$$H_{1-s}(\hat{\rho}) := \frac{\psi(s | \hat{\rho})}{s} = \frac{1}{s} \log \text{Tr} \hat{\rho}^{1-s}. \quad (2.15)$$

Rényi エントロピーもまた, ランダムな度合いが大きくなると大きな値をとる. さらに, $s \rightarrow 0$ の極限をとると von Neumann エントロピーが得られて,

$$H(\hat{\rho}) = \lim_{s \rightarrow 0} H_{1-s}(\hat{\rho}),$$

である. これについては [補遺 A](#) に詳しく説明した.

もちろん量子情報の分野で注目されるエントロピーなどの量は他にも種類があり, 問題設定によってはそれらが有用になることもある. たとえば次の max エントロピー, min エントロピー [1] である.

$$\begin{aligned} H_{\max}(\hat{\rho}) &:= \log \text{rank} \hat{\rho} = \lim_{s \rightarrow 1} H_{1-s}(\hat{\rho}), \\ H_{\min}(\hat{\rho}) &:= -\log \|\hat{\rho}\| = \lim_{s \rightarrow -\infty} H_{1-s}(\hat{\rho}). \end{aligned}$$

しかし以下ではわかりやすいので主に, Rényi エントロピー; **RE** と次のエンタングルメントエントロピー; **EE** とに注目していくことにする.

式 (2.3) で見たように, 系全体の Hilbert 空間が $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ であるときに A の縮約密度行列は全体の系の密度行列から B をトレースアウトすればよかった. この $\hat{\rho}_A$ に対して von Neumann エントロピーを考えると,

$$\hat{\rho}_A := \text{Tr}_B[\hat{\rho}_{AB}], \quad S_A := -\text{Tr}[\hat{\rho}_A \log \hat{\rho}_A], \quad (2.16)$$

なる S_A のことをエンタングルメントエントロピー^{*5} と呼ぶ. これは A と B の間のエンタングルメントを測る量である. 合成系 AB が純粋状態なら $S_A = S_B$ である. 今回, 対数の底は Napier 数 e に選んだが, 底を 2 に選んだときの **EE** の大きさの単位は “ebit” (entanglement bit) と呼ばれることもある. 底の変換は定数倍の変化なので, どちらを選ぶかは大きな問題ではない.

^{*4} エントロピーたちには似た名前, 似た定義のものが多い. 以下特に断りがなければ Rényi エントロピーはこれを指すものとする.

^{*5} エンタングルメントエントロピーについて,

$$S_A = -k_B \text{Tr}[\hat{\rho}_A \log \hat{\rho}_A],$$

と, 定義から Boltzmann 定数倍されている文献もある. この記事では係数に Boltzmann 定数 k_B はかけない定義のまま進める.

たとえば式 (2.7) で考えた Bell 基底のエンタングルメントの大きさ (その EE) は,

$$\begin{aligned} |\text{Bell}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle - |11\rangle), \\ \hat{\rho}_A &= \text{Tr}_B[|\text{Bell}\rangle\langle\text{Bell}|] = \frac{1}{2}(|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|), \\ H(\hat{\rho}) &= -\left(\frac{1}{2}\log\frac{1}{2}\right) * 2 = \log 2 \quad (1 \text{ ebit}), \end{aligned}$$

となる. 式 (2.8), 式 (2.9), 式 (2.10) で考えた状態についても同じ大きさの EE を与える. もう少し一般化すれば, 複合系 \mathcal{H}_{AB} の状態が

$$|\psi\rangle_{AB} = c|00\rangle + \sqrt{1-c^2}|11\rangle, \quad (2.17)$$

と与えられているときにこれはエンタングルド状態 ($c \neq 0, 1$) で,

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_A &= c^2|0\rangle\langle 0| + (1-c^2)|1\rangle\langle 1|, \\ S_A = S_B &= -c^2\log c^2 - (1-c^2)\log(1-c^2), \end{aligned}$$

である. 図 1 からわかるように $c = 0, 1$ のときは $S_A = 0$, $c = 1/\sqrt{2}$ のときは最大値 $S_A = \log 2$ になり, Bell 基底のそれと一致することがわかる. このように Bell 基底は最大限エンタングルしている (あるいは, maximally entangled states である). ここで 1 つ注意をしておく. 仮に系 \mathcal{H}_{AB} が混合状態

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}(|00\rangle\langle 00| + |11\rangle\langle 11|),$$

にあるとする. これは, 「系 A と系 B はどちらも同じ $|0\rangle$ または $|1\rangle$ である状態が 50% の確率で生じる」場合であり, 2 つの純粋状態の重ね合わせ (線型結合) だから, 混合状態である. これはエンタングルメントを持たないと考える. 式 (2.11) と同様に基底変換しても同じ表現を得ないことからわかる. しかしながら, 定義の式 (2.16) から計算すると

$$S_A = \log 2 \quad (1 \text{ ebit})$$

を得る. つまり, 混合状態に対してエンタングルメントエントロピーをこの意味で単純に計算することはできない. その取り扱いについては, この記事では扱わない.

また, もし $\hat{\rho}_A$ が温度 $T =: 1/\beta$ で表されるカノニカル分布の密度行列 $\hat{\rho} = e^{-\beta\hat{H}}/Z$ と一致するなら, EE は熱力学エントロピー S_{th} と一致する*6.

$$\begin{aligned} S_A &= Z^{-1} \text{Tr}[(\log Z + \beta\hat{H})e^{-\beta\hat{H}}] = \langle \log Z + \beta\hat{H} \rangle \\ &= \log Z + \beta E = \beta(-F + E) = S_{\text{th}}. \end{aligned}$$

*6 EE が熱力学的なエントロピーと対応づけられるのはおもしろい.

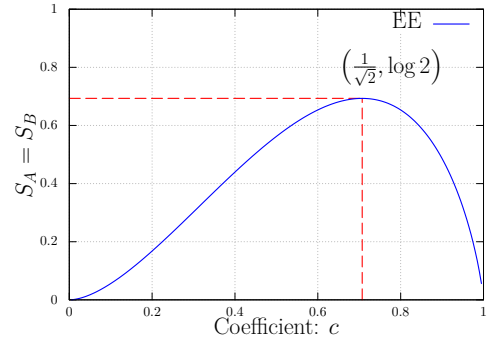


図 1: 式 (2.17) での係数 c に対する EE の変化.

ただし, Z, E, F はそれぞれ, 分配関数, エネルギー, 自由エネルギーを表す.

さて, エンタングルメントの尺度として EE を説明したが, 他にもコンカレンス (Concurrence) C が用いられることもある. まずは 1-qubit 系でコンカレンスを考える [2]. 任意の状態 $|\psi\rangle$ のスピン反転状態を $|\tilde{\psi}\rangle$ とする. つまり, Pauli 行列^{*7} σ_i と状態の複素共役 $|\psi^*\rangle$ を用いて

$$|\tilde{\psi}\rangle := \sigma_y |\psi^*\rangle,$$

で与えられる. このときコンカレンスを

$$C := |\langle\psi|\tilde{\psi}\rangle|, \quad (C \in [0, 1])$$

とする.

興味があるのは 2-qubit 系である. エンタングルメントの大きさ^{*8}は binary エントロピー関数 $H(x)$ とコンカレンスを用いて,

$$\mathfrak{E}_F(\hat{\rho}) := H\left(\frac{1 + \sqrt{1 - (C(\hat{\rho}))^2}}{2}\right), \quad (2.18)$$

$$H(x) = -x \log_2(x) - (1-x) \log_2(1-x), \quad (2.19)$$

$(x \in [0, 1])$

と書ける. このコンカレンスはたとえば, 2-qubit 状態の $\hat{\rho}$ については計算することができる [2–4]. 具体的な計算を見ておこう. 任意の 2-qubit 状態

$$|\psi\rangle = a|00\rangle + b|01\rangle + c|10\rangle + d|11\rangle,$$

このスピン反転状態は

$$|\tilde{\psi}\rangle = (\sigma_y \otimes \sigma_y) |\psi\rangle = d^*|00\rangle + c^*|01\rangle + b^*|10\rangle + a^*|11\rangle,$$

だから, コンカレンスは

$$C = |\langle\psi|\tilde{\psi}\rangle| = 2||ad| - |bc||, \quad (2.20)$$

と与えられる.

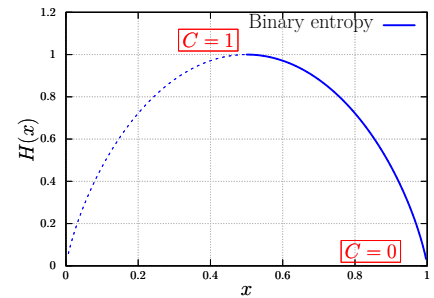


図 2: binary エントロピー関数 $H(x)$ で, $[0.5, 1.0]$ の部分がコンカレンスと対応する.

^{*7} Pauli 行列は次の 3 つである. その深い意味はこの記事では説明しない.

$$\hat{\sigma}_x = |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0| = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\hat{\sigma}_y = -i|0\rangle\langle 1| + i|1\rangle\langle 0| = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$$

$$\hat{\sigma}_z = |0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1| = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

^{*8} Entanglement of formation のこと.

あるいは公式として,

$$R := \sqrt{\sqrt{\hat{\rho}}\tilde{\rho}\sqrt{\hat{\rho}}}, \quad \tilde{\rho} := (\hat{\sigma}^y \otimes \hat{\sigma}^y)\hat{\rho}^*(\hat{\sigma}^y \otimes \hat{\sigma}^y),$$

なる行列 R の4つの固有値 λ_i ($i = 1, 2, 3, 4$) を計算し, 大きい順に $\lambda_1 > \lambda_2 > \lambda_3 > \lambda_4 (> 0)$ と並べる. 補足としてこのとき, 行列 R の固有値が行列 $\tilde{\rho}$ の固有値の平方根に等しくなっている. 結局,

$$C(\hat{\rho}) = \max[\lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 - \lambda_4, 0],$$

で計算される. エンタングルメントの大きさ $\mathfrak{E}_F(\hat{\rho})$ はコンカレンス $C(\hat{\rho})$ の単調増加関数なので, コンカレンス自体をエンタングルメントの大きさとみなすことができる.

2.2 さらに勉強するために

ここまでで解説記事を理解するのに必要な基礎は説明した. この節の残りで, この解説記事を理解するのに直接は必要ないが, 基礎として有名な事実を紹介しようと思う. 証明はしないので, [1, 5, 6]などを参考にすると詳しいことがわかる.

Schmidt 分解

状態 $|\psi\rangle$ が合成系 AB の純粋状態であるとする. このとき, 系 A の直交基底状態 $|i\rangle_A$ と系 B の直交基底状態 $|i\rangle_B$ があって, それは

$$|\psi\rangle = \sum_i \lambda_i |i\rangle_A |i\rangle_B,$$

を満たす. ただし, λ_i は非負数で, $\sum_i \lambda_i^2 = 1$ を満たす.

純粋化 (purification)

系 A の状態 $\hat{\rho}_A$ が与えられたとき, 次のような参照系 R を導入することができる. それは, 合成系 AR の純粋状態 $|AR\rangle$ に対して, $\hat{\rho}_A = \text{Tr}_R(|AR\rangle\langle AR|)$ となるものである. つまり, 系 A と参照系を合わせると, 純粋状態 $|AR\rangle\langle AR|$ と混合状態 $\hat{\rho}_A$ を結びつけることができるのである.

強い劣加法性 (strong subadditivity)

系 A, B, C およびその合成系の EE に関して,

$$S_{AC} + S_{BC} \geq S_C + S_{ABC},$$

が成り立つ. これは重要な性質の1つである. とくに, 自明な系として C を空とすると, $S_A + S_B \geq S_{AB}$ である. そのため, 相互情報量 $I(A : B)$ という量が非負である.

$$I(A : B) := S_A + S_B - S_{AB} \geq 0.$$

操作論的なエンタングルメント

系 A と系 B が空間的に隔てられているとする。それぞれの系に対して何か“操作”したり、“測定”したりすることを局所（量子）操作; local (quantum) operation と呼ぶ。その操作を行う者が電話やメールなど、古典通信; classical communication でお互いの情報をやり取りするとする。このような操作は、それぞれの頭文字から **LOCC** と呼ばれる。LOCC と Bell 状態を用いると、1 ebit の 1 量子ビットの状態を“テレポート”することができる。

このことから自然に、「ある状態 $\hat{\rho}_{AB}$ から Bell 状態を最大 N 個分取り出せれば、エンタングルメントも N 単位存在する。逆に、 N 個の Bell 状態からもとの量子状態に戻せれば、その量子状態は N 個の Bell 状態と等価である」という風に考えられる。

そこで、「量子状態 $\hat{\rho}_{AB}$ の M 個のコピーから LOCC で最大 N 個の Bell 状態を取り出した」(distillation) とき

$$\text{LOCC} : (\hat{\rho}_{AB})^M \rightarrow (|\text{Bell}\rangle)^N, \quad E_D(\hat{\rho}_{AB}) = \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{N}{M},$$

とする。 E_D をエンタングルメント抽出と呼ぶ。また、「状態 $\hat{\rho}_{AB}$ の M' 個のコピーを LOCC 生成でする際に必要最小限の Bell 状態が N' 個である」(formation) とき

$$\text{LOCC} : (|\text{Bell}\rangle)^{N'} \rightarrow (\hat{\rho}_{AB})^{M'}, \quad E_C(\hat{\rho}_{AB}) = \lim_{M' \rightarrow \infty} \frac{N'}{M'},$$

とする。 E_C をエンタングルメントコストと呼ぶ。

一般に、LOCC はエンタングルメントコストを増やさないので $E_D(\hat{\rho}_{AB}) \leq E_C(\hat{\rho}_{AB})$ であるが、とくに $\hat{\rho}_{AB}$ が純粋状態なら $E_D = E_C$ となる！さらに、

$$E_C(|\psi\rangle_{AB}) = E_D(|\psi\rangle_{AB}) = (\log_2 e)S_A,$$

と、EE と一致する！

3 超伝導

3.1 超伝導基底状態

前節では「量子情報」の基礎となる部分を解説した。次に、「物性物理」の分野で重要なキーワードである超伝導について一番 simple な場合を簡単にまとめておく。

以下では s 波の一様系の超伝導基底状態*9について考える。Bardeen, Cooper, Schrieffer

*9 この但し書きがよくわからない読者は、「一番 simple な系を考えているのだな」と思って読み進めてもらっ

ら [7] による有名な論文で、その基底状態について明らかにされた。原論文と議論の進め方は異なるが、基底状態を求める手順を簡単に^{*10}追いたい [8–10] と思う。

波数 \mathbf{k} , スピン σ の電子 (fermion) の消滅, 生成演算子を $c_{\mathbf{k},\sigma}, c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger$ と書く。これは次の反交換関係 $\{A, B\} = AB + BA$ を満たす。

$$\{c_{\mathbf{k},\sigma}, c_{\mathbf{k}',\sigma'}^\dagger\} = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\delta_{\sigma,\sigma'}, \quad (3.1)$$

$$\{c_{\mathbf{k},\sigma}, c_{\mathbf{k}',\sigma'}\} = 0, \quad (3.2)$$

また数演算子を $n_{\mathbf{k},\sigma} := c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma}$ と書く。s 波の一樣系の超伝導について考えることにしたので、2つの電子間の引力相互作用により $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = \mathbf{q} = 0$, つまり $(\mathbf{k}, \uparrow; -\mathbf{k}, \downarrow)$ の組 (Cooper ペア) を電子が作り、これが Bose-Einstein 凝縮する^{*11}ことで生じると解釈できる。このペアの消滅, 生成演算子を

$$B_{\mathbf{k}} := c_{-\mathbf{k},\downarrow} c_{\mathbf{k},\uparrow}, \quad B_{\mathbf{k}}^\dagger := c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger,$$

とすると、これは次の反交換関係 $\{A, B\} = AB + BA$ と交換関係 $[A, B] = AB - BA$ を満たす。

$$[B_{\mathbf{k}}, B_{\mathbf{k}'}^\dagger] = (1 - n_{\mathbf{k},\uparrow} - n_{-\mathbf{k},\downarrow})\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}, \quad [B_{\mathbf{k}}, B_{\mathbf{k}'}] = 0. \quad (3.3)$$

$$\{B_{\mathbf{k}}, B_{\mathbf{k}'}\} = 2B_{\mathbf{k}}B_{\mathbf{k}'}(1 - \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}). \quad (3.4)$$

式 (3.3) は boson の消滅, 生成演算子の交換関係として自然であるが、式 (3.4) は不自然である。というのも、boson の消滅, 生成演算子 $\hat{b}_{\mathbf{k},\sigma}, \hat{b}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger$ は、

$$[\hat{b}_{\mathbf{k},\sigma}, \hat{b}_{\mathbf{k}',\sigma'}^\dagger] = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\delta_{\sigma,\sigma'}, \quad [\hat{b}_{\mathbf{k},\sigma}, \hat{b}_{\mathbf{k}',\sigma'}] = 0,$$

を満たすからである。この不自然さから、あくまでも fermion が 2 つ集まって boson の “ように” 振る舞っているということに注意が必要であろう。なお式 (3.1), 式 (3.2) から式 (3.3), 式 (3.4) は簡単な計算でわかる。

さて、2 電子間の相互作用を表すハミルトニアンを考える。今 s 波の一樣な超伝導体を考えていて、フェルミ面上で等方的なギャップが現れる。超伝導状態を特徴づける平均場はペアポテンシャル $\Delta_{\mathbf{k}}$ と呼ばれて

$$\Delta_{\mathbf{k}} := - \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} \langle \Phi | c_{\mathbf{k}',\uparrow} c_{-\mathbf{k},\downarrow} | \Phi \rangle = - \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k}',\uparrow} c_{-\mathbf{k}',\downarrow} \rangle,$$

で定義される。今、等方的なギャップなのでこのペアポテンシャルはどの波数についても同じだとして $\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta$ となる場合^{*12}を考える。さらにペアポテンシャルは一般に複素数なので、

て構わないと思う。

^{*10} 詳しい手順はトポロジカル物性班の超伝導についての解説記事 (to be published) をご覧ください。

^{*11} 本当に Bose-Einstein 凝縮, BEC と呼んで良いのかについて疑問は残るが、ここでは踏み込まないものとする。

^{*12} 相互作用の強さも $V_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} = V$ と波数によらない定数で書いても良い。しかし添字があったほうがわかりやすいと思い、残している。

振幅 $\Delta_0 \in \mathbb{R}$ と位相部分 $e^{i\theta}$ に分割して、 $\Delta = \Delta_0 e^{i\theta}$ と書き表す。運動量の和は実効的な引力が働く Fermi 面近傍に制限される。この平均場がゼロでない値をもつと超伝導が実現したとみなすのである。

超伝導を表すハミルトニアンは、化学ポテンシャル μ から測った運動エネルギー $\epsilon_{\mathbf{k}}$ 、つまり $\xi_{\mathbf{k}} := \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu$ を用いて

$$H = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{-\mathbf{k}, \sigma} + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}', \mathbf{k}} c_{\mathbf{k}', \uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}, \downarrow} c_{\mathbf{k}, \uparrow},$$

$$=: H_0 \qquad \qquad \qquad =: H_1$$

と表せて、第2項（相互作用項） H_1 を平均場近似する。つまり、 $c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}, \uparrow}$ 同士の積を無視して、平均場 $\Delta_{\mathbf{k}}$ の1次までで展開する。

$$\begin{aligned} H_1 &= \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}', \mathbf{k}} \left(\langle c_{\mathbf{k}', \uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}', \downarrow}^\dagger \rangle + c_{\mathbf{k}', \uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}', \downarrow}^\dagger - \langle c_{\mathbf{k}', \uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}', \downarrow}^\dagger \rangle \right) \left[\langle c_{-\mathbf{k}, \downarrow} c_{\mathbf{k}, \uparrow} \rangle + c_{-\mathbf{k}, \downarrow} c_{\mathbf{k}, \uparrow} - \langle c_{-\mathbf{k}, \downarrow} c_{\mathbf{k}, \uparrow} \rangle \right] \\ &\approx \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}', \mathbf{k}} \left[\langle c_{\mathbf{k}', \uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}', \downarrow}^\dagger \rangle \langle c_{-\mathbf{k}, \downarrow} c_{\mathbf{k}, \uparrow} \rangle + \langle c_{\mathbf{k}', \uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}', \downarrow}^\dagger \rangle c_{-\mathbf{k}, \downarrow} c_{\mathbf{k}, \uparrow} + c_{\mathbf{k}', \uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}', \downarrow}^\dagger \langle c_{-\mathbf{k}, \downarrow} c_{\mathbf{k}, \uparrow} \rangle \right] \\ &\approx - \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}}^* c_{-\mathbf{k}, \downarrow} c_{\mathbf{k}, \uparrow} - \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^\dagger + \sum_{\mathbf{k}} \frac{|\Delta_{\mathbf{k}}|^2}{V_{\mathbf{k}}}. \end{aligned}$$

こうして得られた平均場ハミルトニアンは

$$H_{\text{MF}} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}, \sigma} - \sum_{\mathbf{k}} \left(\Delta_{\mathbf{k}}^* c_{-\mathbf{k}, \downarrow} c_{\mathbf{k}, \uparrow} + \Delta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^\dagger \right), \quad (3.5)$$

である。ここから、変分法を用いて計算を進める。それは、ペアポテンシャルの位相 θ を用いて変分試行関数を

$$|\Phi\rangle = \prod_{\mathbf{k}} \left(u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} e^{i\theta} c_{\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^\dagger \right) |\Phi_{\text{v}}\rangle = \bigotimes_{\mathbf{k}} \left(u_{\mathbf{k}} |00\rangle_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} e^{i\theta} |11\rangle_{\mathbf{k}} \right), \quad (3.6)$$

として、エネルギー期待値

$$W = \langle \Phi | H_{\text{MF}} | \Phi \rangle, \quad (3.7)$$

が最小となるような $u_{\mathbf{k}}$ と $v_{\mathbf{k}}$ を探るのである。2つは一般に複素係数であるが、これから出てくる式 (3.10) からわかるように $u_{\mathbf{k}}$ と $v_{\mathbf{k}}$ はどちらも実数としてよい。ところで式 (3.6) はおもしろい形をしている。 $|\Phi_{\text{v}}\rangle$ は Cooper ペアが1つも無い真空を表している。そこに、ある波数の Cooper ペアがないときの重み $u_{\mathbf{k}}$ と、ペアが生成されたときの重み $v_{\mathbf{k}}$ をかけて、すべてを取り込んでいる。さらにわかりやすく書いたのが2つ目の等号で、ある波数の Cooper ペアのない状態が $|00\rangle_{\mathbf{k}}$ で、ある状態が $|11\rangle_{\mathbf{k}}$ である。

計算に戻ろう。まずは式 (3.6) の規格化条件より

$$1 = \langle \Phi | \Phi \rangle = u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 \quad (\text{for all } \mathbf{k}) \quad (3.8)$$

である。これを微分すると、

$$\frac{\partial u_{\mathbf{k}}}{\partial v_{\mathbf{k}}} = -\frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}}, \quad (3.9)$$

を得る。式 (3.7) を最小にするので微係数が 0 となるところを探すと、式 (3.9) も用いて、

$$W = 2 \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^2 - 2 \sum_{\mathbf{k}} (\Delta_0 e^{i\theta}) e^{-i\theta} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}$$

$$\frac{\partial W}{\partial u_{\mathbf{k}}} = 4 \xi_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} + 2 \sum_l V_{l,\mathbf{k}} u_l v_l \left(u_{\mathbf{k}} - \frac{v_{\mathbf{k}}^2}{u_{\mathbf{k}}} \right) = 0$$

$$2 \xi_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} - (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) \Delta_0 = 0.$$

式 (3.8) から

$$u_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right)}, \quad v_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right)}, \quad \text{where } E_{\mathbf{k}} := \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_0^2}, \quad (3.10)$$

これで、平均場近似でエネルギー最小となる試行関数の表現 (BCS 基底状態) が式 (3.10) の係数を用いて求まった。ただし、ペアポテンシャルの位相 θ はここまでの議論からは決定されない。

3.2 Bogoliubov-Valentin 変換

さて、式 (3.5) を行列の形で表しておこう。計算には式 (3.1), $\xi_{\mathbf{k}} = \xi_{-\mathbf{k}}$ を用いた。

$$H_{\text{MF}} = \sum_{\mathbf{k}} \begin{bmatrix} c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger & c_{-\mathbf{k},\downarrow} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \xi_{\mathbf{k}} & -\Delta_{\mathbf{k}} \\ -\Delta_{\mathbf{k}}^* & -\xi_{\mathbf{k}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_{\mathbf{k},\uparrow} \\ c_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \end{bmatrix} + \text{const.}$$

これを対角化するために **Bogoliubov-Valentin** 変換を導入する。それは

$$\begin{bmatrix} c_{\mathbf{k},\uparrow} \\ c_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_{\mathbf{k}} & -v_{\mathbf{k}} e^{i\theta} \\ v_{\mathbf{k}} e^{i\theta} & u_{\mathbf{k}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_{\mathbf{k},\uparrow} \\ \alpha_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \end{bmatrix}, \quad (3.11)$$

なる変換である。実際に計算すれば、

$$H_{\text{MF}} = \sum_{\mathbf{k}} \begin{bmatrix} \alpha_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger & \alpha_{-\mathbf{k},\downarrow} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{\mathbf{k}}^* & v_{\mathbf{k}} e^{i\theta} \\ -v_{\mathbf{k}} e^{-i\theta} & u_{\mathbf{k}}^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \xi_{\mathbf{k}} & -\Delta_{\mathbf{k}} \\ -\Delta_{\mathbf{k}}^* & -\xi_{\mathbf{k}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{\mathbf{k}} & -v_{\mathbf{k}} e^{i\theta} \\ v_{\mathbf{k}} e^{i\theta} & u_{\mathbf{k}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_{\mathbf{k},\uparrow} \\ \alpha_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \end{bmatrix}$$

$$= \sum_{\mathbf{k}} \begin{bmatrix} \alpha_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger & \alpha_{\mathbf{k},\downarrow} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_{\mathbf{k}} & 0 \\ 0 & -E_{\mathbf{k}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_{\mathbf{k},\uparrow} \\ \alpha_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \end{bmatrix}$$

$$= \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} \left(\alpha_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger \alpha_{\mathbf{k},\uparrow} + \alpha_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \alpha_{-\mathbf{k},\downarrow} \right) + \text{const.},$$

となり、対角化されている。また、新しく導入された演算子 $\alpha_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger$ と $\alpha_{\mathbf{k},\sigma}$ は bogolon と呼ばれる準粒子を表し、それもまた fermion の反交換系式 (3.1), 式 (3.2) を満たす。さらにこの bogolon は自由なフェルミ粒子のように振る舞う。それはつまり、

$$\langle \alpha_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger \alpha_{\mathbf{k},\uparrow} \rangle = \langle \alpha_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \alpha_{-\mathbf{k},\downarrow} \rangle = f(E_{\mathbf{k}}), \quad f(E_{\mathbf{k}}) = \frac{1}{e^{\beta E_{\mathbf{k}}} + 1}, \quad (3.12)$$

と振る舞うということである。

3.3 エンタングルメントの構造

3.3.1 エンタングルメントスペクトラムと有効温度

式 (3.6) で表される BCS 基底状態は各波数についてみると典型的なエンタングルド状態である。確認するためには式 (2.7) で議論したのと同様にして

$$|\Phi\rangle = \prod_{\mathbf{k}} \left(u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} e^{i\theta} c_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger} \right) |\Phi_v\rangle = \prod_{\mathbf{k}} \left(\alpha_{\mathbf{k}} + \beta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} \right) \left(\gamma_{\mathbf{k}} + \delta_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger} \right) |\Phi_v\rangle,$$

となるような複素係数 $\alpha_{\mathbf{k}}, \beta_{\mathbf{k}}, \gamma_{\mathbf{k}}, \delta_{\mathbf{k}}$ が存在しないことを確かめれば良い。実際、

$$\alpha\gamma \neq 0, \quad \alpha\delta = 0, \quad \beta\gamma = 0, \quad \beta\delta \neq 0,$$

となる係数 $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ は存在しない。

では、EE を計算していこう。第 2 節では系 A と系 B の qubits を考えてそれらの間の EE を計算していた。今の状況に焼きなおすと、波数とスピんで指定される系 (\mathbf{k}, \uparrow) と系 $(-\mathbf{k}, \downarrow)$ の間の EE を計算するわけである。このように注目する粒子のグループとそれ以外のグループという風に分割^{*13} しているのでとくに、**particle partitioning** エントロピーと呼ぶこともある。あるいは、スピんで部分系を指定しているということから **spin-EE** [11] と呼ぶこともある。系をどのように分割してエンタングルメント (エントロピー) を考えるのかということは大事である。

EE を計算するには、合成系の密度行列から縮約密度行列を計算し、そのトレースをとれば良かった。だから、

$$\begin{aligned} \rho^{\uparrow,\downarrow} &= |\Phi\rangle\langle\Phi| \\ &= \bigotimes_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left(|u_{\mathbf{k}}|^2 |00\rangle_{\mathbf{k}} \langle 00|_{\mathbf{k}'} + |v_{\mathbf{k}}|^2 |11\rangle_{\mathbf{k}} \langle 11|_{\mathbf{k}'} + u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* |00\rangle_{\mathbf{k}} \langle 11|_{\mathbf{k}'} + v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}'} |11\rangle_{\mathbf{k}} \langle 00|_{\mathbf{k}'} \right), \\ \rho^{\uparrow} &= \text{Tr}_{\downarrow} \rho^{\uparrow,\downarrow} \\ &= \bigotimes_{\mathbf{k}} \left(|u_{\mathbf{k}}|^2 |0\rangle_{\mathbf{k}} \langle 0| + |v_{\mathbf{k}}|^2 |1\rangle_{\mathbf{k}} \langle 1| \right), \end{aligned}$$

ここで、式 (3.12) で見たように fermi 粒子のように振る舞うことを見ておく。相関関数を用いて [12] で議論されているが、

$$\text{Tr} \rho^{\uparrow} \alpha_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} \alpha_{\mathbf{k}\uparrow} = \langle \alpha_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} \alpha_{\mathbf{k},\uparrow} \rangle = |u(\xi_{\mathbf{k}})|^2, \quad (3.13)$$

という関係が成り立つ。そこで、有効逆温度 β_e を次のように定義する。

$$|u(\xi_{\mathbf{k}})|^2 =: \frac{1}{1 + e^{\beta_e \xi_{\mathbf{k}}}}, \quad (3.14)$$

$$\beta_e(\xi_{\mathbf{k}}) := \frac{2}{\xi_{\mathbf{k}}} \text{Arccoth} \chi = \frac{1}{\xi_{\mathbf{k}}} \log \left(\frac{\chi + 1}{\chi - 1} \right), \quad \text{where} \quad \chi := \frac{\sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_0^2}}{\xi_{\mathbf{k}}} \quad (3.15)$$

^{*13} 今回は粒子ごとに分割する例を紹介しているが、空間で分割して部分系を考えると良い場合もある。わかりやすく言うなら、長さ L の系を考えて、長さ L_A と長さ $L_B = L - L_A$ の部分系に分割しその間のエンタングルメントを考えるということである。

今度は $\xi_{\mathbf{k}} = \pm\Delta_0$ のときを考えてみる. このときの有効逆温度を β_e^0 なる定数とおくと,

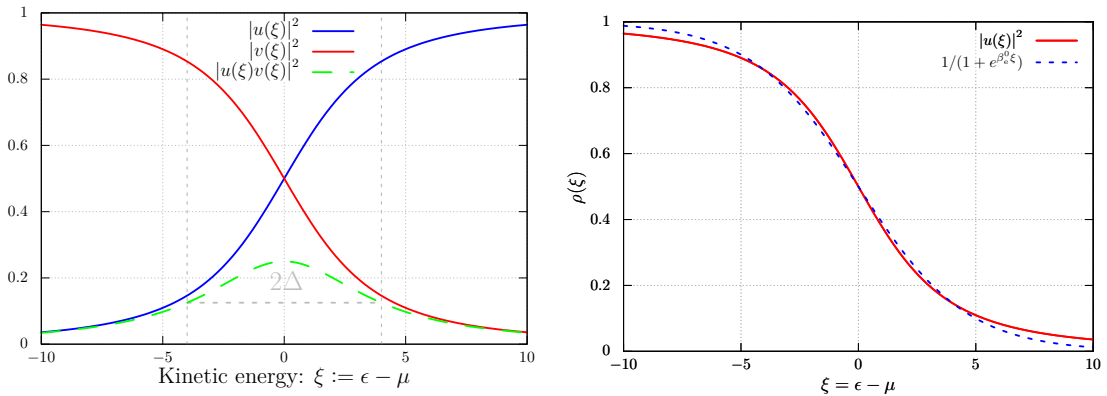
$$\beta_e^0 = \frac{2}{\Delta_0} \operatorname{Arccoth} \sqrt{2} = \frac{1}{\Delta_0} \log \left(\frac{\sqrt{2} + 1}{\sqrt{2} - 1} \right) \approx \frac{1.7627}{\Delta_0}, \quad (3.16)$$

を得る. 図 3a からわかるように, $\xi_{\mathbf{k}} \in [-\Delta_0, \Delta_0]$ の範囲ではエンタングルメントが大きく, $\beta_e \rightarrow \beta_e^0$ と近似できるぐらいの値である. この β_e^0 を用いて 図 3b をプロットした. エンタングルメントスペクトラム (Bogolon が 1 つある期待値) が fermi 分布にかなり近いことがわかる. また [7] において, 臨界逆温度とギャップの間には

$$\beta_c = \frac{\pi e^{-\gamma}}{\Delta_0} \approx \frac{1.7639}{\Delta_0}, \quad (3.17)$$

という関係が成り立つと指摘された. ただし, γ は Euler-Mascheroni 定数である. 式 (3.16) と式 (3.17) がおよそ一致していることがわかる.

このように, 超伝導体にはエンタングルメントが存在している. 他方, 常伝導体の金属はエンタングルしていない. この 2 つの状態間で EE が異なるというのは, 2 つの状態の間の自由エネルギーが異なるという物理的な解釈と同様に, 解釈できるかもしれない.



(a) 波数 (スピン) で分割された BCS 基底状態のエンタングルメントスペクトラム ($\{|u|^2, |v|^2\}$). $|uv|^2$ からはエンタングルメントの大きさがわかる. $|u| \approx |v|$ のあたりで大きく, それ以外で小さい. (今 $\Delta_0 = 4$ とした.)

(b) エンタングルメントスペクトラム $|u|^2$ と有効逆温度 β_e^0 における関数 $f(\xi) = 1/(1 + e^{\beta_e^0 \xi})$ のプロット. この関数は Fermi 分布関数である. 両者がおよそ一致していることがわかる ($\Delta_0 = 4$).

図 3: エンタングルメントスペクトラムはこのように変化する. [11] を参考にした.

3.3.2 EE の計算とその結果

さて, EE の計算に戻ろう. BCS 基底状態における波数全体の EE は $S^\uparrow = -\operatorname{Tr} \rho^\uparrow \log \rho^\uparrow$ で, 各波数 \mathbf{k} についての EE の $S_{\mathbf{k}}^\uparrow \in [0, \log 2]$ の総和である. ただし, 図 3a からわかるように $\xi_{\mathbf{k}}$ が十分大きい領域では EE は小さい. そこで $\Delta_0 \ll \varepsilon_c \ll \varepsilon_F$ となるようなカットオフエネルギー ε_c を選ぶ. これは現実の超伝導体で, 転移点温度が数 K, Fermi 温度 $T_F = \varepsilon_F/k_B$

が1万 K ぐらいであることから選べる。カットオフには、よく Debye 温度 (数百 K ぐらい) が選ばれる。

波数 \mathbf{k} に注目した EE は

$$S^\uparrow(\xi_{\mathbf{k}}) = \text{Tr}[\rho^\uparrow \log \rho^\uparrow] = -\left(|u(\xi_{\mathbf{k}})|^2 \log |u(\xi_{\mathbf{k}})|^2 + |v(\xi_{\mathbf{k}})|^2 \log |v(\xi_{\mathbf{k}})|^2\right),$$

であり、その総和は積分の形で

$$S^\uparrow = \int_{-\varepsilon_D}^{\varepsilon_D} S(\xi)g(\xi) d\xi,$$

とかける。ここで $g(\xi)$ は状態密度; DOS で、 $g(\xi) = \sqrt{\xi + \mu} = \sqrt{\varepsilon}$ である。その振る舞いは図 4 のようである。ギャップが Debye エネルギーよりもじゅうぶん小さい ($\Delta \ll \varepsilon_D$) のときには、式 (??) の積分区間 (Debye shell) の中で $g(\xi) \approx g(0) = \sqrt{\mu}$ とみなせる。また $S(\xi)$ のもつピークの幅は 2Δ でそれよりも積分区間が十分に広いことから、積分区間を $(-\infty, \infty)$ に拡張すれば、

$$S^\uparrow = -g(0) \int_{-\infty}^{\infty} \left(|u(\xi_{\mathbf{k}})|^2 \log |u(\xi_{\mathbf{k}})|^2 + |v(\xi_{\mathbf{k}})|^2 \log |v(\xi_{\mathbf{k}})|^2\right) d\xi = \pi g(0)\Delta, \quad (3.18)$$

を得る。この $\Delta \ll \varepsilon_F$ なる極限において、EE である S^\uparrow が $g(0)\Delta$ に比例している。 $g(0)\Delta$ は厚さが 2Δ までの Fermi 面上のおよその電子数であり、いわば“接触している面積”に比例している。系 A と系 A_\perp の間の EE には、複合系を系 A と系 A_\perp に分割する曲面の面積^{*14}に比例するという面積則が成り立つ場合もあり^{*15}、それと対応する。

*14 ここで言う面積は、 $d + 1$ 次元空間に対する d 次元を指していて、 $d = 2$ なら普段使う意味での面積。

*15 面積則が破れる場合もある。

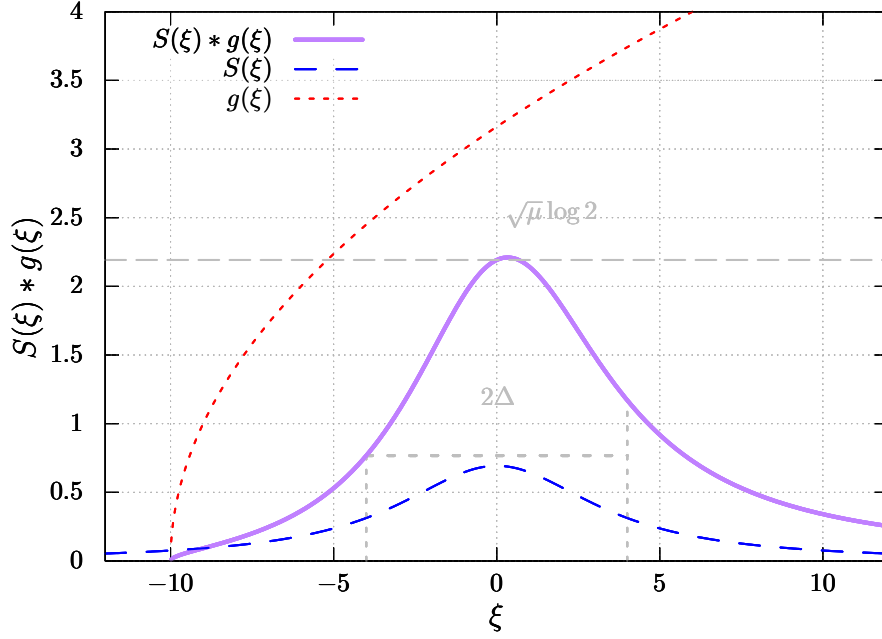


図 4: 運動エネルギーに対する spin-EE と化学ポテンシャルの変化をプロットした。ピークの幅はおよそ 2Δ で、 $\xi = 0$ の近くでピークをもっている。[11] を参考にした。

さらに、 $\Delta \rightarrow 0$ のときに $S^\uparrow \rightarrow 0$ となることもわかる。すなわち、エネルギーギャップが消える（スピンアップとスピンドアウンとの相関が無くなる）と超伝導から常伝導に相転移するので。

これは温度に着目しても整合する。今、系の（絶対）温度は $T (\geq 0)$ だとする。式 (3.13), 式 (3.14), 式 (3.15) で見たように、臨界温度 T_c はギャップ Δ に比例する。超伝導ギャップが消えるときは $T_c \rightarrow 0$ となるので、 $T > T_c$ となり常伝導。このとき $|u_{\mathbf{k}}|^2 = 1$, $|v_{\mathbf{k}}|^2 = 0$ となり $S_{\mathbf{k}} = 0$ ($T > T_c$) を得る。超伝導ギャップが大きいときは $T < T_c$ となるので超伝導。極限として $T = 0$ の場合を考えれば $|u_{\mathbf{k}}| = |v_{\mathbf{k}}| = 1/2$ となり、 $S_{\mathbf{k}} = \log 2$ を得る。

3.3.3 粒子数ゆらぎ

超伝導基底状態式 (3.6) では電子数が常にゆらいでいる。確かめるのは straightforward*¹⁶で、電子数の期待値の分散を計算すれば良い。スピンアップの電子数の期待値の分散を計算してみると、結果は

$$\sigma_{\uparrow}^2 = \text{Tr} \left[\left(N_{\uparrow} - \langle N_{\uparrow} \rangle \right)^2 \rho_{\uparrow} \right] = \sum_{\mathbf{k}} |u_{\mathbf{k}}|^2 |v_{\mathbf{k}}|^2,$$

で与えられる。EE を計算したときと同じ極限 ($\Delta \ll \varepsilon_D \ll \varepsilon_F$) で計算すると、

$$\sigma_{\uparrow}^2 \approx \frac{1}{4} \pi g(0) \Delta,$$

*¹⁶ 道のりはまっすぐだが、面倒な計算が待っている。詳しく知りたい場合は [10] などが助けになるであろう。

を得る。実はこれは、スピニアップとダウン両方の電子数の期待値の分散 $\sigma_{\uparrow,\downarrow}^2 = \pi g(0)\Delta$ の $1/4$ 倍である。この関係は次のように解釈し得る。

ギャップ Δ によって制御されたペア相互作用は、BCS 基底状態におけるペア数ゆらぎに繋がる。だから、反対スピンのペアが増えたり減ったりする。反対スピンの電子数のゆらぎの相互関係は、縮約状態 $\rho_{\uparrow}, \rho_{\downarrow}$ の決定の不確定性をもたらす。したがって、エンタングルメントエントロピーは 0 にはならない。事実、BCS 基底状態での spin-EE と粒子数ゆらぎは同じであって、 $S_{\uparrow} = \sigma_{\uparrow,\downarrow}^2 = 4\sigma_{\uparrow}^2$ である。

3.4 コンカレンス

EE は上で計算してみた。次は式 (2.20) でみたようにコンカレンスを計算 [13] しよう。ある波数 \mathbf{k} に着目すると

$$|\Phi\rangle = \bigotimes_{\mathbf{k}} \left(u_{\mathbf{k}} |00\rangle_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} e^{i\theta} |11\rangle_{\mathbf{k}} \right), \quad C_{\mathbf{k}} = 2|u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}|,$$

である。

式 (3.10) で得た表式から

$$C_{\mathbf{k}} = \sqrt{1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}^2}{E_{\mathbf{k}}^2}} = \frac{\Delta_0}{E_{\mathbf{k}}} = \frac{\Delta_0}{\sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_0^2}} = \frac{1}{\sqrt{1 + (\xi_{\mathbf{k}}/\Delta_0)^2}},$$

である。 $\xi_{\mathbf{k}} = 0$ なら $C_{\mathbf{k}} = 1$ となり、式 (2.18), 式 (2.19) で確認した、エンタングルメントの大きさ \mathfrak{E}_F は最大。 $\xi_{\mathbf{k}} \gg \Delta_0$ なら $C_{\mathbf{k}} \rightarrow 0$ となり、 \mathfrak{E}_F は最小。これは EE での議論と符合する。

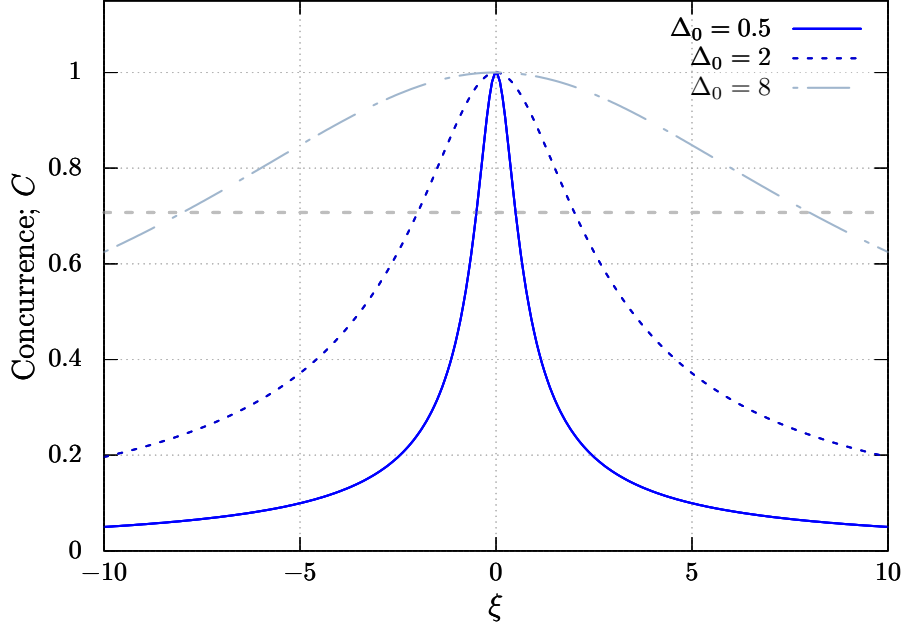


図 5: いくつかのギャップ Δ_0 について、運動エネルギー ξ に対するコンカレンスの変化をプロットした。ピーク $\xi = 0$ との高さの比が $1/\sqrt{2}$ になるところの幅が $2\Delta_0$ である。

3.5 コヒーレント状態

ところで、超伝導はスクイズドコヒーレント状態である。コヒーレント状態については補遺 B で詳しく解説している。

BCS 基底状態がコヒーレントであることを簡単に確認するには、式 (3.6) を

$$\begin{aligned}
 |\Phi\rangle &= \prod_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} \left(1 + \frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} e^{i\theta} c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \right) |\Phi_{\mathbf{v}}\rangle \\
 &= \prod_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} \exp\left(\frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} e^{i\theta} c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \right) |\Phi_{\mathbf{v}}\rangle \\
 &= \left(\prod_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} \right) \exp\left(\sum_{\mathbf{k}} \frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} e^{i\theta} c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \right) |\Phi_{\mathbf{v}}\rangle,
 \end{aligned}$$

と変形すれば良い。1 行目から 2 行目の変形には Pauli の排他律より、 $(c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger)^n = 0$ ($n > 1$) であることを用いた。頭を書くなら、規格化定数 $\mathcal{N} = \prod_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}$ 、振幅 α の “pair” 生成演算子 $\alpha a^\dagger = \sum_{\mathbf{k}} (v_{\mathbf{k}}/u_{\mathbf{k}}) c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger$ を用いて書き直せて、これは式 (B.8) と対応する。

$$|\Phi\rangle = \mathcal{N} e^{\alpha a^\dagger} |\Phi_{\mathbf{v}}\rangle.$$

この表現は次のように解釈することができる。(励起の) 真空 $|\Phi_{\mathbf{v}}\rangle$ に許される状態として、波数とスピんで指定される状態を考える。ある状態の組 A とそれと対になる組 A_\perp を考えるとそれらは重複しないので直積状態 $|\Phi_{\mathbf{v}}\rangle = |\Phi_A\rangle \otimes |\Phi_{A_\perp}\rangle$ と表される。この直積状態が指数演

算子によって混合され（時間発展ないし虚時間発展）、BCS 基底状態へエンタングルしていくと解釈できる。

4 熱場ダイナミクス、熱揺らぎと量子揺らぎ

4.1 二重ヒルベルト空間の定義と性質

Thermofield dynamics; **TFD**^{*17}（熱場ダイナミクス）について述べる。文献は [14–16] を参考にした。

有限温度においては通常、物理量を Boltzmann 分布による期待値で表現する、つまり混合状態を扱っている。これを等価な純粋状態（真空表現、熱的真空）で表すことを考えてみる。処方箋として、今考えている系の状態空間のコピーとなる状態空間を導入するとよい。一般に purification（純粋化）と呼ばれる操作で、熱浴系を対象系のコピーにとるということである。初めに対象の系の Hilbert 空間 $\hat{\mathcal{H}}$ の 1 つの完全系を $\{|n\rangle\}$ とする。このコピーとなるチルダ空間 $\tilde{\mathcal{H}}$ を導入し、その 1 つの完全系を $\{|\tilde{n}\rangle\}$ とする。

チルダ空間上の演算は

$$\begin{aligned} (u|m\rangle + v|n\rangle)^\sim &= u^*|\tilde{m}\rangle + v^*|\tilde{n}\rangle, \\ (AB)^\sim &= \tilde{A}\tilde{B}, \\ (c_1\hat{A} + c_2B)^\sim &= c_1^*\tilde{A} + c_2^*\tilde{B}, \end{aligned}$$

という性質を持つ。また identity $|I\rangle$ は

$$|I\rangle := \sum_n |n\rangle \otimes |\tilde{n}\rangle = \sum_n |n, \tilde{n}\rangle, \quad (4.1)$$

で、これは maximally entangled state である。さらに、identity $|I\rangle$ は任意の完備直交ベクトルの組み $\{|i\rangle\}$ に対しても不変で、

$$|I\rangle := \sum_n |n, \tilde{n}\rangle = \sum_i |i, \tilde{i}\rangle,$$

である。確認するためにはエルミートな行列 $\{U_{ni}\}$ を用いて整理すればよく、

$$\begin{aligned} |I\rangle &= \sum_n |n, \tilde{n}\rangle = \sum_{n,i,j} U_{ni} U_{n,j}^* |i, \tilde{j}\rangle \\ &= \sum_{i,j} \left(\sum_n (U^\dagger)_{jn} U_{ni} \right) |i, \tilde{j}\rangle \\ &= \sum_{i,j} \delta_{i,j} |i, \tilde{j}\rangle = \sum_i |i, \tilde{i}\rangle, \end{aligned}$$

とわかる。

^{*17} Thermofield Double と呼ばれる場合もある。

式 (4.1) の identity を用いて, もとの Hilbert 空間の状態に作用する演算子 \hat{A} のトレースをとると,

$$\langle I|\hat{A} \otimes \tilde{I}|I\rangle = \sum_{m,n} \langle m|\hat{A}|n\rangle \langle \tilde{m}|\tilde{n}\rangle = \sum_m \langle m|\hat{A}|m\rangle \delta_{m,m} = \text{Tr } \hat{A},$$

となる.

温度が T つまり, 逆温度 $\beta := 1/(k_{\text{B}}T)$ での熱的な真空状態 $|O(\beta)\rangle$ を用いて \hat{A} の期待値をとることを考える. 系のハミルトニアンが $\hat{\mathcal{H}}$ の場合, Gibbs 状態の (今考えている Boltzmann 分布を表す) 密度行列 $\hat{\rho} = \exp(-\beta\hat{\mathcal{H}})$ は正值なので $(\hat{\rho}^{1/2})^2 = \hat{\rho}$ なる正定値演算子 $\hat{\rho}^{1/2}$ を定義して

$$|O(\beta)\rangle := \hat{\rho}^{1/2} |I\rangle, \quad (4.2)$$

と定め, 期待値をとると

$$\langle O(\beta)|\hat{A}|O(\beta)\rangle = \langle I|\hat{\rho}^{1/2}\hat{A}\hat{\rho}^{1/2}|I\rangle = \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{A}), \quad (4.3)$$

となり, 演算子 \hat{A} の統計平均が熱的真空の式 (4.2) を用いて表した式 (4.3) の期待値で書けた.

4.2 2 スピン系でのエンタングルメント

次の式 (4.4) のハミルトニアンで表される 2 スピン系を考える. ただし, 基底は $|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle$ の順である.

$$\hat{H} = J\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2 = \begin{bmatrix} J/4 & & & & \\ & -J/4 & J/2 & & \\ & J/2 & -J/4 & & \\ & & & & J/4 \end{bmatrix}. \quad (4.4)$$

このハミルトニアンからなる密度行列は $K = \beta J$ とおくと,

$$\begin{aligned} \hat{\rho} &= \frac{1}{Z} e^{-\beta\hat{H}} \\ &= \frac{1}{Z} e^{-K/4} \begin{bmatrix} e^{K/2} & & & & \\ & \cosh(K/2) & \sinh(K/2) & & \\ & \sinh(K/2) & \cosh(K/2) & & \\ & & & & e^{K/2} \end{bmatrix} \\ &= \frac{1}{2\{e^{K/2} + \frac{1}{2}(e^{K/2} + e^{-K/2})\}} \begin{bmatrix} e^{K/2} & & & & \\ & (1/2)(e^{K/2} + e^{-K/2}) & (1/2)(e^{K/2} - e^{-K/2}) & & \\ & (1/2)(e^{K/2} - e^{-K/2}) & (1/2)(e^{K/2} + e^{-K/2}) & & \\ & & & & e^{K/2} \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

なので, 簡単のために,

$$b := e^{-K}, \quad x := \sqrt{\frac{1}{3+b}}, \quad y := \sqrt{\frac{b}{3+b}},$$

とおくと,

$$\hat{\rho} = \frac{1}{3+b} \begin{bmatrix} 1 & & & \\ & (1/2)(1+b) & (1/2)(1-b) & \\ & (1/2)(1-b) & (1/2)(1+b) & \\ & & & 1 \end{bmatrix},$$

$$\hat{\rho}^{1/2} = \begin{bmatrix} x & & & \\ & (1/2)(x+y) & (1/2)(x-y) & \\ & (1/2)(x-y) & (1/2)(x+y) & \\ & & & x \end{bmatrix} \quad (4.5)$$

と計算できる. ここまでが問題の設定である.

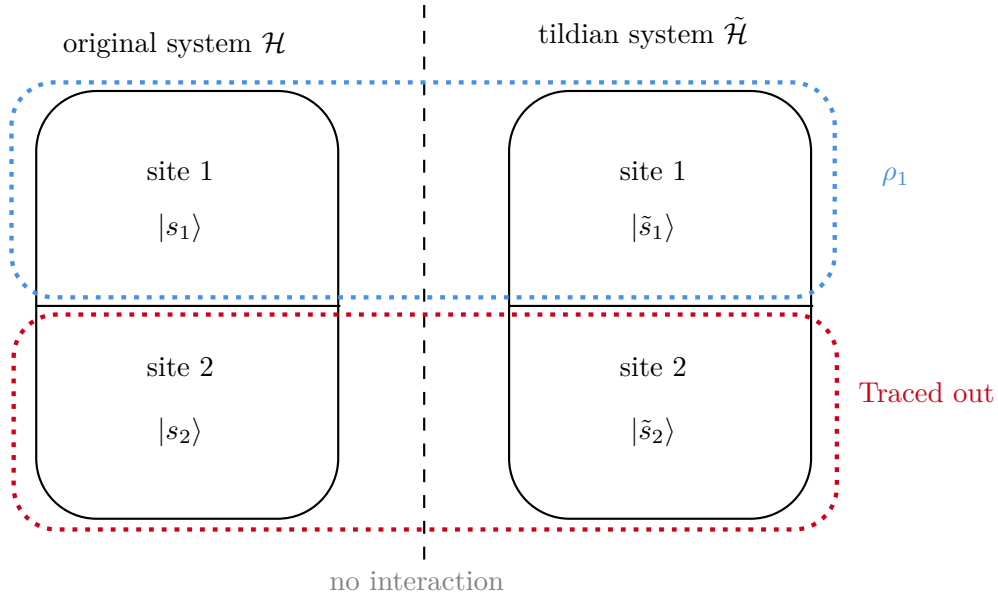


図 6: もともとの系 \hat{H} とそのコピー \tilde{H} の間には相互作用はない. サイト 2 の情報をトレースアウトするとサイト 1 とそのチルダ空間上の密度演算子 $\hat{\rho}_1$ を得る.

ここから, 系のエンタングルメントの構造に注目する. 図 6 のようにサイト 1, サイト 2 のエンタングルメントについて調べる. そのためには, 熱的真空で表される密度行列からサイト 2 の情報をトレースアウトしてあげれば良い. サイト 1 のスピン s_1 とサイト 2 のスピン s_2 , それぞれのチルダ空間を合わせて,

$$|s, \tilde{s}\rangle := |s_1, \tilde{s}_1\rangle_1 |s_2, \tilde{s}_2\rangle_2,$$

と書くことにすると, 式 (4.2) 熱的真空からなる密度行列 ρ_{12} は式 (4.5) を用いて

$$\rho_{12} = |O(\beta)\rangle\langle O(\beta)| = \sum_{s_1, s_2} \sum_{t_1, t_2} \hat{\rho}^{1/2} |s_2, \tilde{s}_2\rangle |s_1, \tilde{s}_1\rangle \langle t_1, \tilde{t}_1| \langle t_2, \tilde{t}_2| (\hat{\rho}^{1/2})^\dagger,$$

と表せる。だからサイト 1 についての縮約密度行列は

$$\begin{aligned}
\hat{\rho}_1 &= \text{Tr}_2 \rho_{12} \\
&= \sum_{\gamma_2, \tilde{\gamma}'_2} \sum_{s_1, s_2} \sum_{t_1, t_2} \langle \gamma_2, \tilde{\gamma}'_2 | \hat{\rho}^{1/2} | s_2, \tilde{s}_2 \rangle | s_1, \tilde{s}_1 \rangle \langle t_1, \tilde{t}_1 | \langle t_2, \tilde{t}_2 | (\hat{\rho}^{1/2})^\dagger | \gamma_2, \tilde{\gamma}'_2 \rangle \\
&= \sum_{\gamma_2, \gamma'_2} \sum_{s_1, s_2} \sum_{t_1, t_2} \delta_{\gamma'_2, s_2} \langle \gamma_2 | \hat{\rho}^{1/2} | s_2 \rangle | s_1, \tilde{s}_1 \rangle \langle t_1, \tilde{t}_1 | \langle t_2 | (\hat{\rho}^{1/2})^\dagger | \gamma_2 \rangle \delta_{t_2, \gamma'_2} \\
&= \sum_{\gamma_2, \gamma'_2} \sum_{s_1} \sum_{t_1} \langle \gamma_2 | \hat{\rho}^{1/2} | \gamma'_2 \rangle | s_1, \tilde{s}_1 \rangle \langle t_1, \tilde{t}_1 | \langle \gamma'_2 | (\hat{\rho}^{1/2})^\dagger | \gamma_2 \rangle \\
&= \sum_{s_1, t_1} (\text{Tr}_2 \hat{\rho}) | s_1, \tilde{s}_1 \rangle \langle t_1, \tilde{t}_1 |,
\end{aligned}$$

と求められる。最終行では与えられたハミルトニアンから計算した $\hat{\rho}$ についての縮約密度行列をとっている。変形が正しいことを確かめておく。

まずは、式 (4.5) の各成分を $a_{\alpha_1, \beta_2, \alpha'_1, \beta'_2}$ と表すことにする、つまり、

$$\hat{\rho}^{1/2} =: \sum_{\alpha_1, \beta_2, \alpha'_1, \beta'_2} a_{\alpha_1, \beta_2, \alpha'_1, \beta'_2} |\alpha_1, \beta_2\rangle \langle \alpha'_1, \beta'_2|,$$

と書くと、1 行目から 2 行目の変形は

$$\begin{aligned}
\langle \gamma_2 | \hat{\rho}^{1/2} | \gamma'_2 \rangle &= \sum_{\alpha_1, \beta_2, \alpha'_1, \beta'_2} a_{\alpha_1, \beta_2, \alpha'_1, \beta'_2} |\alpha_1\rangle \langle \alpha'_1| \langle \gamma_2 | \beta_2 \rangle \langle \beta'_2 | \gamma'_2 \rangle \\
&= \sum_{\alpha_1, \alpha'_1} a_{\alpha_1, \gamma_2, \alpha'_1, \gamma'_2} |\alpha_1\rangle \langle \alpha'_1|.
\end{aligned}$$

3 行目から 4 行目の変形は

$$\sum_{\gamma_2, \gamma'_2} \langle \gamma_2 | \hat{\rho}^{1/2} | \gamma'_2 \rangle \langle \gamma'_2 | (\hat{\rho}^{1/2})^\dagger | \gamma_2 \rangle = \sum_{\gamma_2} \langle \gamma_2 | \hat{\rho}^{1/2} (\hat{\rho}^{1/2})^\dagger | \gamma_2 \rangle = \text{Tr}_2 (\hat{\rho}^{1/2})^2 = \text{Tr}_2 \hat{\rho}.$$

これで変形が正しいことを確かめた。

改めて $\hat{\rho}_1$ の係数について着目すると

$$\begin{aligned}
\hat{\rho}_1 &= \sum_{\alpha_1, \beta_1, \alpha'_1, \beta'_1} b_{\alpha_1, \beta_1, \alpha'_1, \beta'_1} |\alpha_1, \tilde{\beta}_1\rangle \langle \alpha'_1, \tilde{\beta}'_1|, \\
b_{\alpha_1, \beta_1, \alpha'_1, \beta'_1} &= \sum_{\gamma_2, \gamma'_2} a_{\alpha_1, \gamma_2, \beta_1, \gamma'_2} a_{\alpha'_1, \gamma_2, \beta'_1, \gamma'_2}^*
\end{aligned}$$

である。これは次の係数 b_d , b_{cf} , b_{qe} を用いて顕に書くことができる。

$$\begin{aligned}\hat{\rho}_1 = & b_d \left(|\uparrow, \tilde{\uparrow}\rangle\langle\uparrow, \tilde{\uparrow}| + |\downarrow, \tilde{\downarrow}\rangle\langle\downarrow, \tilde{\downarrow}| \right) \\ & + b_{cf} \left(|\uparrow, \tilde{\uparrow}\rangle\langle\downarrow, \tilde{\downarrow}| + |\downarrow, \tilde{\downarrow}\rangle\langle\uparrow, \tilde{\uparrow}| \right) + b_{qe} \left(|\uparrow, \tilde{\downarrow}\rangle\langle\uparrow, \tilde{\downarrow}| + |\downarrow, \tilde{\uparrow}\rangle\langle\downarrow, \tilde{\uparrow}| \right).\end{aligned}\quad (4.6)$$

ただしその係数たちは次のように表される。

$$\begin{aligned}b_d := & b_{\uparrow, \uparrow, \uparrow, \uparrow} = b_{\downarrow, \downarrow, \downarrow, \downarrow} \\ = & \sum_{\gamma_2, \gamma'_2} a_{\uparrow, \gamma_2, \uparrow, \gamma'_2} a_{\uparrow, \gamma_2, \uparrow, \gamma'_2}^* = x^2 + \left(\frac{1}{2}(x+y) \right)^2 \\ = & \frac{1}{3+e^{-K}} + \frac{1}{4} \left(\frac{1}{\sqrt{3+e^{-K}}} + \frac{1}{\sqrt{1+3e^K}} \right)^2.\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}b_{cf} := & b_{\uparrow, \uparrow, \downarrow, \downarrow} = b_{\downarrow, \downarrow, \uparrow, \uparrow} \\ = & \sum_{\gamma_2, \gamma'_2} a_{\uparrow, \gamma_2, \uparrow, \gamma'_2} a_{\downarrow, \gamma_2, \downarrow, \gamma'_2}^* = \frac{x}{2}(x+y) + \frac{x}{2}(x+y) \\ = & \frac{1}{3+e^{-K}} + \frac{1}{\sqrt{(3+e^{-K})(1+3e^K)}}.\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}b_{qe} := & b_{\uparrow, \downarrow, \uparrow, \downarrow} = b_{\downarrow, \uparrow, \downarrow, \uparrow} \\ = & \sum_{\gamma_2, \gamma'_2} a_{\uparrow, \gamma_2, \downarrow, \gamma'_2} a_{\uparrow, \gamma_2, \downarrow, \gamma'_2}^* = \left(\frac{1}{2}(x-y) \right)^2 \\ = & \frac{1}{4} \left(\frac{1}{\sqrt{3+e^{-K}}} - \frac{1}{\sqrt{1+3e^K}} \right)^2.\end{aligned}$$

これで、サイト 1 とそのチルダ空間を合わせた系の縮約密度行列を求めることができた。これからエンタングルメントについて考えていく。

4.3 係数の意味

ここまででその表式が明らかになった係数 b には、その特徴から次のような名前をつけると意味が分かりやすい。▷ b_d は対角成分 (diagonal components) で、行列の対角部分 $|\uparrow, \tilde{\uparrow}\rangle\langle\uparrow, \tilde{\uparrow}|$ と $|\downarrow, \tilde{\downarrow}\rangle\langle\downarrow, \tilde{\downarrow}|$ の係数となっている。▷ b_{cf} は熱ゆらぎ (classical fluctuations) で、温度 $T \rightarrow 0$ つまり $-K \rightarrow \infty$ のときにこれは 0 になる。▷ b_{qe} は量子エンタングルメント (quantum entanglement) で、温度 $T \rightarrow 0$ つまり $-K \rightarrow \infty$ のときにもこれは有限の値をもつ。絶対零度 ($T = 0$) でも量子ゆらぎで系はゆらいでいる。

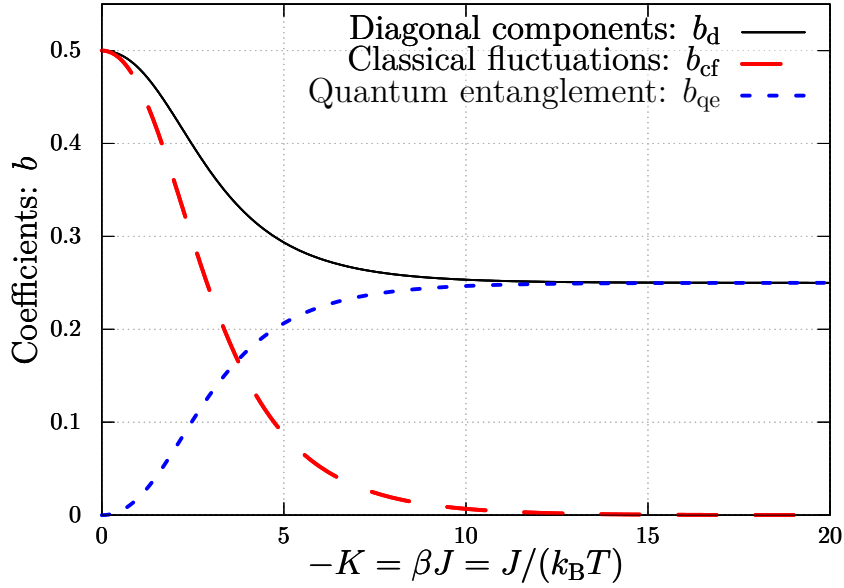


図 7: 温度 T によって決まるパラメタ $-K$ に対する係数 b_d , b_{cf} , b_{qe} の変化を示した。温度 T がゼロのとき熱ゆらぎを表す b_{cf} が消えている。温度をゼロから上げていくとエンタングルメントを表す b_{qe} が小さくなり、逆に b_{cf} が大きくなる。温度が無限大に大きくなると、ミクロな系に特有のエンタングルメントは消えてしまうことがわかる。

4.4 エンタングルメントエントロピー (EE)

式 (4.6) の規格化条件から

$$\odot \text{Tr } \hat{\rho}_1 = 2b_d + 2b_{qe} = x^2 + \left(\frac{1}{2}(x+y)\right)^2 + \left(\frac{1}{2}(x-y)\right)^2 = 1.$$

また、簡単な計算から

$$b_d = b_{cf} + b_{qe},$$

$$\odot x^2 + \left(\frac{1}{2}(x+y)\right)^2 = x(x+y) + \left(\frac{1}{2}(x-y)\right)^2$$

であることもわかる。以下の計算ではこれらの関係式を使って整理することもできる。改めて、元のサイト 1 とそのチルダ空間、元のサイト 2 とそのチルダ空間の間の EE を計算してみる。式 (2.13) でみたように、固有値がわかれば計算できる。

$$\hat{\rho}_1 = \begin{bmatrix} b_d & b_{cf} & & & \\ b_{cf} & b_d & & & \\ & & & b_{qe} & \\ & & & & b_{qe} \end{bmatrix},$$

だから、固有値は $b_d \pm b_{cf}$ と b_{qe} である。

EE を計算すると,

$$\begin{aligned}
 S_1 &= -\left((b_d + b_{cf}) \log(b_d + b_{cf}) + (b_d - b_{cf}) \log(b_d - b_{cf}) + 2b_{qe} \log b_{qe}\right), \\
 &= -\left(b_d \log(b_d^2 - b_{cf}^2) + b_{cf} \log\left(\frac{b_d + b_{cf}}{b_d - b_{cf}}\right) + 2b_{qe} \log b_{qe}\right), \\
 &= -\left(b_d \log(b_d^2 - b_{cf}^2) + 2b_{cf} \operatorname{Arccoth}\left(\frac{b_d}{b_{cf}}\right) + 2b_{qe} \log b_{qe}\right),
 \end{aligned} \tag{4.7}$$

である.

b_{qe} からの EE への寄与を S_{qe} とし, b_d, b_{cf} からの寄与を S_{cf} と書くことにすれば, EE は $S_1 = S_{qe} + S_{cf}$ と表せて, その振る舞いは 図 8 のようになる. 今, 元のサイト 1 とそのチルダ空間の合成系が (熱的) 純粋状態にあることを思い出せば, 有限温度 ($T > 0$) で, 小さかったエンタングルメントが絶対零度 ($T = 0$) に近づくにつれて大きくなるという描像がわかる.

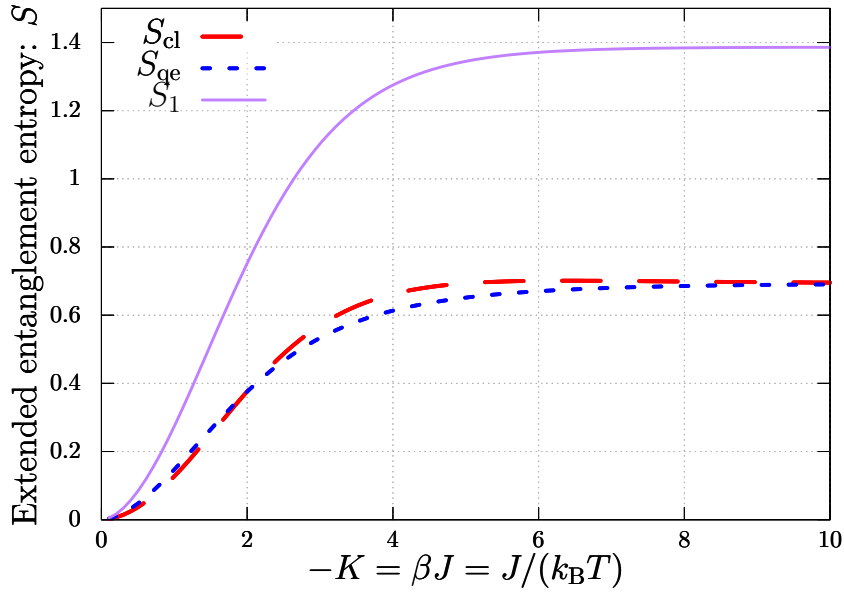


図 8: 式 (4.7) のように計算された EE を温度に対してプロットした.

5 熱平衡化

5.1 導入

この節では系の熱平衡化とエンタングルメントの関わりについて [17] を参考に述べる. 引用した図の出典も同じである.

まず, 熱力学が適用できるような (マクロな) 系を考えてみる. これは熱力学第二法則が示すように, エントロピーが減少することはない, つまり最大エントロピー状態が熱平衡の状態として考えられて, 最大化するように時間発展すると考えるのが自然である. 一方, 量子力学が適用できるような (ミクロな) 系で孤立した系を考えてみる. 初め純粋状態にあった系は孤立しているので, Schrödinger 方程式に従った時間発展ののち, 純粋状態である. つまり, エン

トロピーが0の状態に固定されている。この違いを、エンタングルメントを用いて明らかにしていきたい。結論としては、(ミクロな)系を観察したとき、

- ▶ 全体は初期状態から純粋状態を保つ
- ▶ エンタングルメントにより部分的にエントロピーが生成されて熱平衡化する

ということである。

5.2 エンタングルメントを測る

これまでの節で見てきたように、エンタングルメントはなにも特別なものではなく、そこに相関があればある。どうすればエンタングルメントを測定できるのか？そこで純粋度に注目し、図9のような実験を考える。

2次元光格子に載せられた、Bose-Einstein凝縮した⁸⁷Rbを高解像度の画像画像処理で観察する。原子が格子上をホップ(遷移)する描像は、Bose-Hubbardハミルトニアン

$$\hat{H} = - \left(J_x \sum_{x,y} \hat{a}_{x,y}^\dagger \hat{a}_{x+1,y} + J_y \sum_{x,y} \hat{a}_{x,y}^\dagger \hat{a}_{x,y+1} + \text{h.c.} \right) + \frac{U}{2} \sum_{x,y} \hat{n}_{x,y} (\hat{n}_{x,y} - 1),$$

でモデルに取り込まれる。ただし $\hat{a}_{x,y}^\dagger$, $\hat{a}_{x,y}$ はbosonの生成、消滅演算子で、 $\hat{n}_{x,y} = \hat{a}_{x,y}^\dagger \hat{a}_{x,y}$ は位置 $\{x,y\}$ にある粒子の個数演算子である。また、h.c.はエルミート共役を表す。粒子は確率 J_i で隣の格子に移る(トンネルする)ことができるが、複数の原子が同一格子上にあると反発してエネルギー U だけ損するので、遷移が抑制される。 J_i は格子の深さによって変えられるので、 J_i/U を大きくしたり、小さくしたりして粒子の遷移をある程度コントロールできるわけである。

実験では、各格子に粒子があるかないかがわかる。 y 方向のコピーを $k=1,2$ でラベル付ける。測定で、格子 i 上の粒子数が偶数(奇数)のときにパリティ $p_i^{(k)} = 1 (-1)$ であるとする。全体のパリティは $P^{(k)} = \prod_i p_i^{(k)}$ である。 y 方向の2つのコピーのそれぞれの密度行列を $\hat{\rho}_1, \hat{\rho}_2$ とすると、

$$\langle P^{(1)} \rangle = \langle P^{(2)} \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho}_1 \hat{\rho}_2),$$

である。また、2つのコピーに対する準備と操作は同じなので、 $\hat{\rho}_1 = \hat{\rho}_2 = \hat{\rho}$ となる。つまり、 $k=1,2$; $\langle P^{(k)} \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho}^2)$ を得る。

また、式(2.15)で定義したRényiエントロピーの2次の表式を思い出すと、

$$H_2(\hat{\rho}) = -\log \text{Tr}(\hat{\rho}^2),$$

となり、純粋度の対数が(2次の)Rényiエントロピー。

5.3 EE のダイナミクス

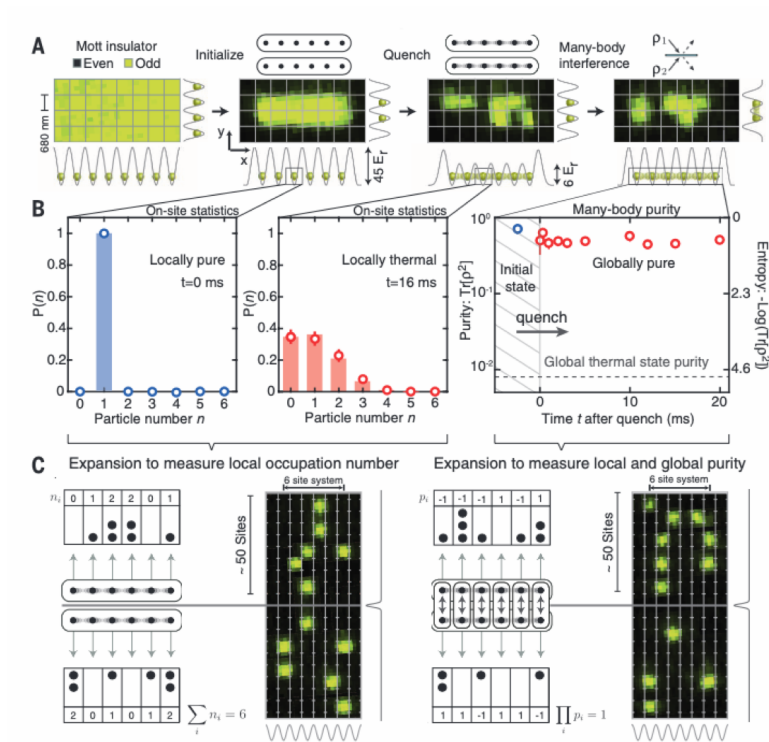


図 9: [17] より引用した。実験の概要がまとまっている。Mott 絶縁体上に 2×6 の領域を用意し、初期状態としてそれぞれに 1 個ずつ局在させる。第 1 ステップで x 方向の 6 つをトンネルできるようにすると、局所的に熱平衡化した状態が 2 つできる。このときに Rényi エントロピーを測定する。第 2 ステップで y 方向のそれぞれをトンネルできるようにする。このときに全体の純粋度を測定する。

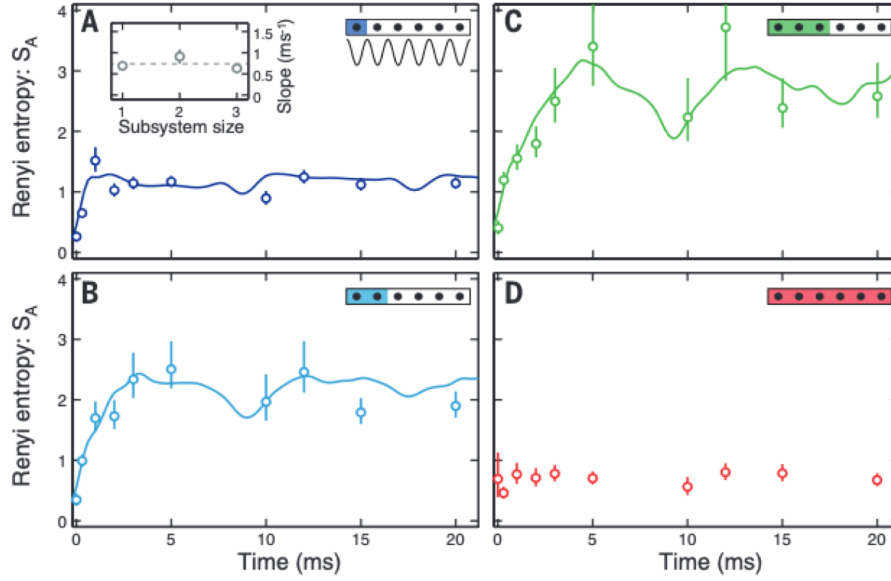


図 10: [17] より引用した. EE の時間変化. 初めはエンタングルメントが小さい. 全体的な量子クエンチ (パラメタを瞬間的に変化させる操作) が大きいスケールのエンタングルメントに繋がる. A は 1 サイト, B は 2 サイト, C は 3 サイトの部分系で, D は系全体で RE を測った. D は全体系をみたときに低い RE であるが, A, B, C では 部分系の RE が D のそれより大きくなっていることがわかる. また, 時間が経つと RE は飽和している. 実線は数値計算による結果. エラーバーは標準誤差; SEM ($SEM = SD/\sqrt{n}$, 標準偏差; SD) である. C (3 サイト) では多くの微視的状态があるので, 統計的な不確かさが大きくなっている. A で示された, 系のサイズと勾配のグラフは A, B, C でのそれぞれの RE の増加する部分の勾配を表している. 点線は 3 つの平均である. これはエンタングルメントが部分系で伝搬する速度がおよそ一定であることを示している.

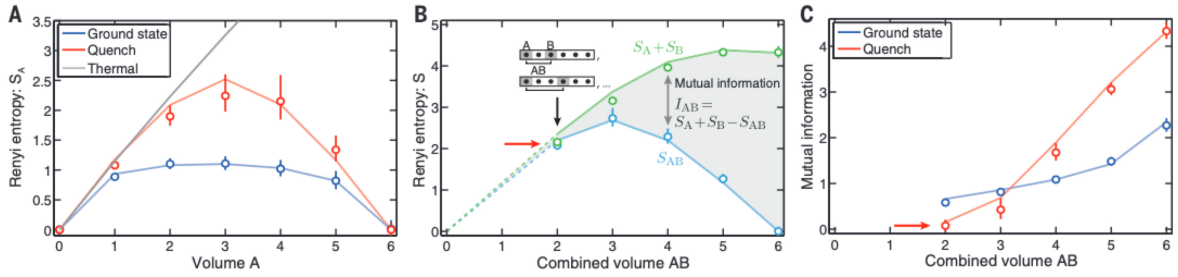


図 11: [17] より引用した. 系のサイズに対する EE, 相互情報量の変化. まず, EE が熱力学的なエントロピーの役割を果たすなら, EE は部分系のサイズに比例して大きくなるはずである (体積則). A では体積則に近い結果を得た. Thermal では, 体積 A に比例してエントロピーが増大する (体積則) が期待される. Quench では, 体積則に近い RE の増大が見られた. 一方 Ground state では, Bose-Hubbard 模型の超流動基底状態にある場合を示していて, エンタングルメントが抑制されて, ゆっくりな対数的増大が見られた. また, 全体系では純粋状態なので, $S_{AB}(V_{\text{full}}) = 0$ となっており, 折り返しの対称性 $S_A(V_A) = S_A(V_{\text{full}} - V_A)$ を持つ. B で系のサイズと (RE から計算した) 相互情報量

$$I_{AB} = S_A + S_B - S_{AB},$$

を測っている. 部分系のサイズが小さいと体積則が成り立っているので, $S_A + S_B \approx S_{AB}$ となっている. 他方, 部分系のサイズが大きいと, $S_A + S_B > S_{AB} \rightarrow 0$ となっている.

C では相互情報量について, 部分系のサイズが大きいと Quench の方が Ground state より大きいことがわかる. ただし, 部分系のサイズが小さいとそれが逆転していることに注意する. 実線は数値計算による結果. 一つ注意を述べると, EE は非局所相関をもつ (因果律を破るわけではないが, 一方の部分系の情報を知ると他方の部分系の情報が決まる) わけだが, 熱平衡状態においてはそのような長距離相関は存在しない.

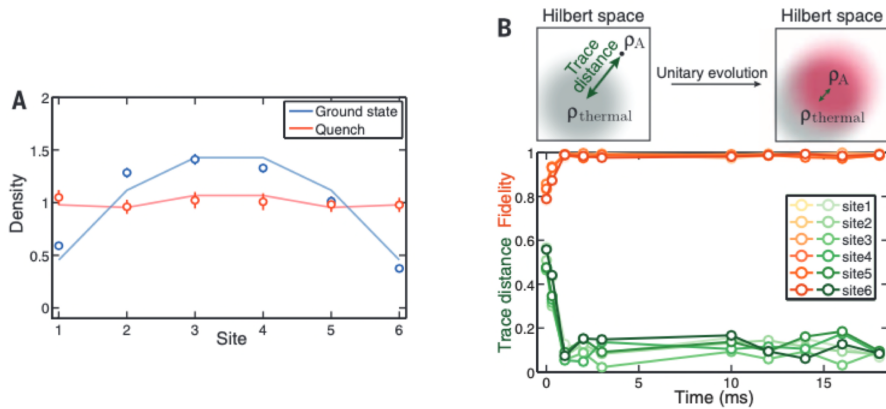


図 12: [17] より引用した. 局所的に熱平衡化することの観測. A では, クエンチした後の各サイトごとの飽和した平均粒子数がプロットされている. **Quench** では, 各サイトごとに一定値 (局所的に熱平衡状態) をとることがわかる. **Ground state** では, 一定ではない (曲線) ことがわかる.

B では, 各サイトにおける, 時間経過に対するフィデリティ^{*18}とトレース距離^{*19}がプロットされている. つまり, 局所的な 1 サイト密度行列 $\hat{\rho}_A$ (これは測定結果からわかる!) が温度 T の熱平衡状態における密度行列 $\hat{\rho}_A(T)$ とどれくらい同じか, あるいは違うかを示している. 結局, 熱平衡状態に近づくということがわかる. 実線はデータ点を繋いだもの.

*19 式 (2.4) で確認していた.

$$\text{Trace distance} = \frac{1}{2} \text{Tr}(|\hat{\rho}_A(T) - \hat{\rho}_A|).$$

*19 式 (2.5) で確認していた.

$$\text{Fidelity} = \text{Tr} \left(\sqrt{\sqrt{\hat{\rho}_A(T)} \hat{\rho}_A \sqrt{\hat{\rho}_A(T)}} \right).$$

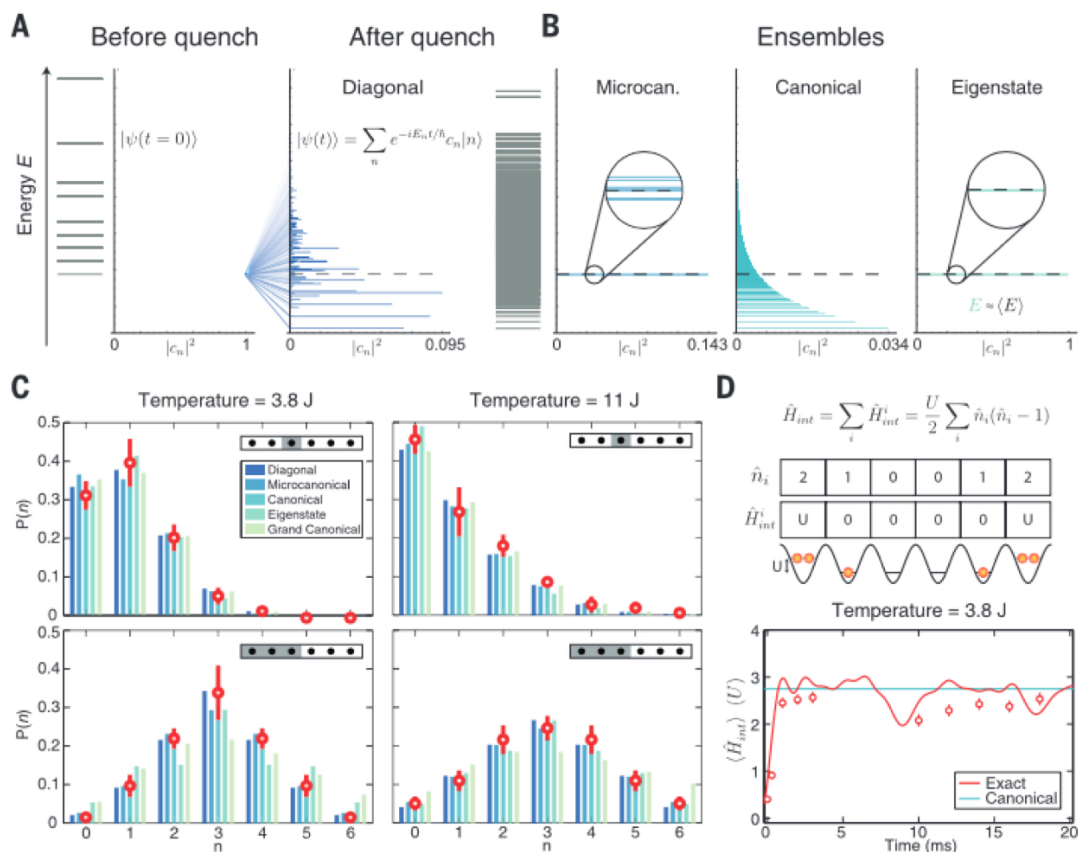


図 13: [17] より引用した．全体が純粋状態のときの局所観測量のデータである．A は，初期時刻で基底状態にあった系がクエンチ後に，各エネルギー固有状態へ射影されてスプリットする様子を表している．点線はエネルギー期待値 $\langle E \rangle$ を表し，横軸はエネルギー固有状態 $|n\rangle$ の振幅 $|c_n|^2$ を表している．

B は，ミクロカノニカル，カノニカル，エネルギー固有状態のそれぞれを図示したもの．

C では局所物理量が熱平衡化する様子がわかる．2つの温度下（エネルギーで表すと 3.8 J, 11 J）で光子数をカウントし，得られた粒子数期待値が赤色でプロットされている．これは，対角アンサンブル，ミクロカノニカル分布，カノニカル分布，固有状態，グランドカノニカル分布のいずれのモデルから計算した期待値ともよく整合している．また，部分系のサイズが全体系のサイズに比べて大きいとき（サイト数が 1 ではなく 3 のとき）にグランドカノニカル分布，単一のエネルギー固有状態はデータの再現度が他に比べて低い．これらは全体系に対する部分系のサイズ比に鋭敏かもしれないことを示している．エラーバーは時間 10 ms から 20 ms にわたるデータの標準偏差が取られた．

D では式 (5.1) 全体系の相互作用エネルギー \hat{H}_{int} の期待値が熱平衡化する様子を示している．この実験データは，厳密な数値計算およびカノニカル分布による計算結果とよく整合している．各部分系が熱平衡化し，その部分系の演算子 \hat{H}_{int}^i の和としての \hat{H}_{int} も熱平衡化している．エラーバーは SEM.

図 13. B でマイクロカノニカル分布, カノニカル分布が登場したので簡単に確認しておく [18].
 ミクロカノニカル分布は, 一定体積 V の孤立系でエネルギーと粒子数が保存している. それは, エネルギー固有値 E_n が $E - V\delta < E_n \leq E$ を満たすエネルギー固有状態 $|n\rangle$ がすべて同じ重みで現れると定義される. カノニカル分布は, 一定体積だが外界との熱のやり取りを許す閉じた系である. 平衡状態においてエネルギーは時間的に揺らぐがその期待値は一定とみなせる.

図 13. D で定義された全体系の相互作用エネルギーは

$$\hat{H}_{\text{int}} = \sum_i \hat{H}_{\text{int}}^i = \frac{U}{2} \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1), \quad (5.1)$$

である. これは時刻 0 のときに 0 である, というのも最初は各サイトに粒子が偏在しているからである.

上述の実験結果から, 全体系は純粋状態として時間発展する一方で, 部分系にはエンタングルメントが伝播し, 熱平衡化が進み, 全体系の熱平衡化に繋がることがわかる. よく系の熱平衡化について固有状態熱平衡化仮説 (ETH) が考えられている. それは単一の励起エネルギー固有値の局所縮約密度行列と, 全体系が熱状態の局所縮約密度行列の等価性を意味する. この等価性はエンタングルメントと, それにより部分系が混合状態になることによるのみ可能となり, クエンチ後のほとんどの物理量の熱平衡化を保証する. この実験は粒子数が一定の閉じた系だったが, それを変えて行う実験など展望がある.

補遺 A RE \rightarrow EE の確認

エンタングルメントエントロピー (von Neumann エントロピー; EE) S_{EE} , n 次の Rényi エントロピー; RE $S_{\text{RE}}^{(n)}$, Tsallis エントロピー; TE $S_{\text{TE}}^{(n)}$ を導入する. このセクションでは, 正実数の n に対して $n \rightarrow 1$ の極限で, EE と RE と TE が一致することを示す. 考えている系は純粋な量子状態とし, 密度行列を $\hat{\rho}$ とする. その固有値たちは $\{\lambda_i\}$ とする. EE は式 (2.12), 式 (2.13) で定義したように,

$$S_{\text{EE}} := -\text{Tr}(\hat{\rho} \log \hat{\rho}) = -\sum_{i=1}^m \lambda_i \log \lambda_i,$$

式 (2.15) を思い出すと, ($n \in (0, 1) \cup (1, \infty)$) において n 次の RE は

$$S_{\text{RE}}^{(n)} := \frac{1}{1-n} \log \text{Tr}(\hat{\rho}^n).$$

n 次の TE は

$$S_{\text{TE}}^{(n)} := \frac{1}{n-1} \left(1 - \text{Tr} \hat{\rho}^n\right) = \frac{1}{n-1} \left(1 - \sum_i \lambda_i^n\right), \quad (\text{A.1})$$

と定義される.

l'Hopital の定理を用いると, $\text{Tr } \hat{\rho} = 1$ なので,

$$\lim_{n \rightarrow 1} S_{\text{TE}}^{(n)} = - \lim_{n \rightarrow 1} \frac{\text{Tr}(\hat{\rho}^n) - \text{Tr } \hat{\rho}^1}{n-1} = - \lim_{n \rightarrow 1} \frac{d}{dn} (\text{Tr } \hat{\rho}^n) = - \frac{\lim_{n \rightarrow 1} \frac{d}{dn} (\text{Tr}(\hat{\rho}^n))}{\lim_{n \rightarrow 1} \text{Tr } \hat{\rho}^n} = - \lim_{n \rightarrow 1} \frac{d}{dn} \log \text{Tr}(\hat{\rho}^n). \quad (\text{A.2})$$

$$\lim_{n \rightarrow 1} S_{\text{RE}}^{(n)} = - \lim_{n \rightarrow 1} \frac{\log \text{Tr}(\hat{\rho}^n) - \log \text{Tr } \hat{\rho}}{n-1} = - \lim_{n \rightarrow 1} \frac{d}{dn} \log \text{Tr } \hat{\rho}^n. \quad (\text{A.3})$$

となる.

$$\text{式 (A.2) と 式 (A.3) より } n \rightarrow 1 \text{ で } \lim_{n \rightarrow 1} S_{\text{TE}}^{(1)} = \lim_{n \rightarrow 1} S_{\text{RE}}^{(1)}.$$

次に,

$$\lambda_i^n = \lambda_i \lambda_i^{(n-1)} = \lambda_i e^{(n-1) \log \lambda_i} = \lambda_i \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left\{ (n-1) \log \lambda_i \right\}^k,$$

だから, 式 (A.1) より

$$S_{\text{RE}}^{(n)} = - \sum_{i=1}^m \lambda_i \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k!} (n-1)^{k-1} (\log \lambda_i)^k,$$

と計算される. $n \rightarrow 1$ では $k-1=0$ のタームが残るので,

$$\lim_{n \rightarrow 1} S_{\text{TE}}^{(n)} = - \sum_{i=1}^m \lambda_i \log \lambda_i = - \text{Tr}(\hat{\rho} \log \hat{\rho}) = S_{\text{EE}},$$

となる. 以上の議論から, $n \rightarrow 1$ において EE, RE, TE が一致するとわかった.

補遺 B コヒーレント状態

[19, 20] を参考にまとめた. Boson の生成, 消滅演算子を \hat{a}^\dagger, \hat{a} とおく. 変位演算子 (Displacement operator) を $\hat{D}(\alpha)$ ($\alpha \in \mathbb{C}$) とする.

$$\hat{D}(\alpha) := \exp(\alpha \hat{a}^\dagger - \alpha^* \hat{a}). \quad (\text{B.1})$$

この変位演算子は, ユニタリ演算子で, 生成 (消滅) 演算子を α (α^*) だけ “変位” させる. それは,

$$\hat{D}^\dagger(\alpha) \hat{a} \hat{D}(\alpha) = \hat{a} + \alpha, \quad (\text{B.2})$$

$$\hat{D}^\dagger(\alpha) \hat{a}^\dagger \hat{D}(\alpha) = \hat{a}^\dagger + \alpha^*, \quad (\text{B.3})$$

$$\hat{D}(\alpha) \hat{a} \hat{D}^\dagger(\alpha) = \hat{a} - \alpha, \quad (\text{B.4})$$

$$\hat{D}(\alpha) \hat{a}^\dagger \hat{D}^\dagger(\alpha) = \hat{a}^\dagger - \alpha^*, \quad (\text{B.5})$$

を満たすということである.

ユニタリであることを確認する.

$$\begin{aligned}\hat{D}(\alpha)\hat{D}^\dagger(\alpha) &= \exp(\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a})\exp(-\alpha\hat{a}^\dagger + \alpha^*\hat{a}) = \hat{I}. \\ \hat{D}^\dagger(\alpha)\hat{D}(\alpha) &= \dots = \hat{I}. \\ \odot e^{\hat{A}}e^{\hat{B}} &= e^{\hat{A}+\hat{B}}, \quad \text{when } [\hat{A}, \hat{B}] = 0.\end{aligned}$$

確認できた.

“変位”であることを確認する. $\alpha \in \mathbb{C}$ だから α, α^* を独立変数とみなせて,

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} [\hat{D}^\dagger(\alpha)\hat{a}\hat{D}(\alpha)] = \hat{D}^\dagger(\alpha)[\hat{a}, \hat{a}^\dagger]\hat{D}(\alpha) = \hat{D}^\dagger(\alpha)\hat{D}(\alpha) = \hat{I},$$

これを $[0, \alpha]$ で積分すると式 (B.2) が得られて,

$$\hat{D}^\dagger(\alpha)\hat{a}\hat{D}(\alpha) - \hat{a} = \alpha.$$

同様にして, 式 (B.3), 式 (B.4), 式 (B.5) も示せる.

“変位”の別の示し方を書き記しておく. Baker-Campbell-Hausdorff の公式 (BCH 公式) より

$$e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}e^{-\hat{A}} = \hat{B} + [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2!}[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \frac{1}{3!}[\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]] + \dots \quad (\text{B.6})$$

$\hat{A} = -\alpha\hat{a}^\dagger + \alpha^*\hat{a}$, $\hat{B} = \hat{a}$ と置くと, 式 (B.2)

$$\hat{D}^\dagger(\alpha)\hat{a}\hat{D}(\alpha) = \hat{a} + [-\alpha\hat{a}^\dagger + \alpha^*\hat{a}, \hat{a}] + \frac{1}{2!}[\dots] + \dots = \hat{a} + \alpha.$$

同様にして, 式 (B.3), 式 (B.4), 式 (B.5) も示せる.

コヒーレント状態 $|\alpha\rangle$ は式 (B.1) を用いて

$$|\alpha\rangle := \hat{D}(\alpha)|0\rangle, \quad (\text{B.7})$$

で定義される. 性質として,

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \hat{D}(\alpha)\hat{D}^\dagger(\alpha)\hat{a}\hat{D}(\alpha)|0\rangle = \hat{D}(\alpha)(\hat{a} + \alpha)|0\rangle = \alpha\hat{D}(\alpha)|0\rangle = \alpha|\alpha\rangle.$$

である. つまり, コヒーレント状態から boson を 1 個消滅させてもまだコヒーレントを保つわけである.

さて, $[\hat{A}, \hat{B}] = \text{const.}$ のとき $[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] = [\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0$ となるので,

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}e^{-\frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}]} = e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}\text{const.}$$

これは式 (B.6) で用いた BCH 公式とは形が異なるが、同様に BCH 公式と呼ばれる。これを用いると

$$\hat{D}(\alpha) = \exp(\alpha \hat{a}^\dagger - \alpha^* \hat{a}) = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} e^{\alpha \hat{a}^\dagger} e^{-\alpha^* \hat{a}}$$

を得る。指数演算子の肩に消滅演算子があるので $e^{-\alpha^* \hat{a}} |0\rangle = |0\rangle$ であることに注意すると、式 (B.7) で定義されたコヒーレント状態の表式は、

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle &= \hat{D}(\alpha) |0\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} e^{\alpha \hat{a}^\dagger} |0\rangle, \\ &= e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle \\ &:= e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle, \end{aligned} \tag{B.8}$$

を得る。このコヒーレント状態の平均粒子数 \bar{n} を測定すると Poisson 分布を得る。つまり、

$$P(n) := |\langle n|\alpha\rangle|^2 = e^{-|\alpha|^2} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!}, \quad \bar{n} := \sum_{n=0}^{\infty} nP(n) = |\alpha|^2,$$

である。さらにコヒーレント状態は次の性質を持つ。

(i) 粒子数の 2 乗平均について

$$\overline{n^2} = \sum_{n=0}^{\infty} n^2 P(n) = \bar{n}^2 + \bar{n}.$$

(ii) 粒子数のゆらぎの 2 乗 (分散) は

$$\langle (\Delta n)^2 \rangle = \overline{n^2} - \bar{n}^2 = \bar{n}.$$

(iii) $\alpha = |\alpha|e^{i\phi}$ なるとき、

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle &= e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^n}{\sqrt{n!}} (e^{i\phi})^n |n\rangle \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{\bar{n}}{2}} \frac{\bar{n}^{n/2}}{\sqrt{n!}} (e^{i\phi})^n |n\rangle \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{P(n)} (e^{i\phi})^n |n\rangle. \end{aligned}$$

補遺 C スクイズド状態

C.1 直交位相振幅

直交位相振幅を

$$\hat{a}_1 := \frac{1}{2}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger), \quad \hat{a}_2 := \frac{1}{2i}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger),$$

と定める。このとき、

$$\begin{aligned} [\hat{a}_1, \hat{a}_2] &= \frac{1}{4} [\hat{a} + \hat{a}^\dagger, -i(\hat{a} - \hat{a}^\dagger)] \\ &= \frac{1}{4} (-i[\hat{a}^\dagger, \hat{a}] + i[\hat{a}, \hat{a}^\dagger]) = \frac{i}{2} \\ &\Rightarrow \Delta\hat{a}_1 \Delta\hat{a}_2 \geq \frac{1}{4}, \end{aligned}$$

となり、不確定性には下限がある。

さらに、

$$\begin{aligned} \langle \alpha | \hat{a}_1 | \alpha \rangle &= \frac{1}{2}(\alpha + \alpha^*). \\ \langle \alpha | \hat{a}_2 | \alpha \rangle &= \frac{1}{2i}(\alpha - \alpha^*). \\ \langle \alpha | \hat{a}_1^2 | \alpha \rangle &= \left\langle \alpha \left| \frac{1}{4}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^2 \right| \alpha \right\rangle = \left\langle \alpha \left| \frac{1}{4}(\hat{a}^2 + (\hat{a}^\dagger)^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger) + \hat{a}^\dagger\hat{a} \right| \alpha \right\rangle \\ &= \frac{1}{4}(\alpha^2 + \alpha^{*2} + 2\alpha\alpha^* + 1) = \frac{1}{4}((\alpha + \alpha^*)^2 + 1). \\ \langle \alpha | \hat{a}_2^2 | \alpha \rangle &= \left\langle \alpha \left| -\frac{1}{4}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger)^2 \right| \alpha \right\rangle = \left\langle \alpha \left| -\frac{1}{4}(\hat{a}^2 + (\hat{a}^\dagger)^2 - \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a}) \right| \alpha \right\rangle \\ &= \frac{1}{4}(-(\alpha - \alpha^*)^2 + 1). \end{aligned}$$

なので、

$$\begin{aligned} \Delta\hat{a}_1 &= \sqrt{\langle \alpha | \hat{a}_1^2 | \alpha \rangle - \langle \alpha | \hat{a}_1 | \alpha \rangle^2} = \sqrt{\frac{1}{4}((\alpha + \alpha^*)^2 + 1) - \frac{1}{4}(\alpha + \alpha^*)^2} = \frac{1}{2}. \\ \Delta\hat{a}_2 &= \sqrt{\langle \alpha | \hat{a}_2^2 | \alpha \rangle - \langle \alpha | \hat{a}_2 | \alpha \rangle^2} = \sqrt{\frac{1}{4}(-(\alpha - \alpha^*)^2 + 1) - \frac{1}{4}(\alpha - \alpha^*)^2} = \frac{1}{2}. \\ &\quad \odot \Delta\hat{a}_1 = \Delta\hat{a}_2 = \frac{1}{2}, \end{aligned}$$

を得る。こうして得た $\Delta\hat{a}_1, \Delta\hat{a}_2$ はどちらも不確定性が下限の状態にあるので、標準量子限界と呼ばれる。

C.2 スクイズド状態

次に実数 r を用いて、

$$\hat{b} = e^r \hat{a}_1 + i e^{-r} \hat{a}_2 = \hat{a} \frac{e^r + e^{-r}}{2} + \hat{a}^\dagger \frac{e^r - e^{-r}}{2} = \hat{a} \cosh r + \hat{a}^\dagger \sinh r, \quad (\text{C.1})$$

と書くと、これはボゾンのコヒーレント状態に対する消滅演算子になっている。

$$\begin{aligned}\hat{b}|S\rangle &=:\beta|S\rangle. \\ \beta &= \langle S|\hat{b}|S\rangle = \langle \hat{a}\rangle \cosh r + \langle \hat{a}^\dagger\rangle \sinh r, \\ \odot \Delta a_1 &= \frac{1}{2}e^{-r}, \quad \Delta a_2 = \frac{1}{2}e^r.\end{aligned}$$

となり、一方の標準偏差を大きく、他方の標準偏差を小さくする（スクイーズする）という形になっている。

ところで式 (C.1) は、Bogoliubov-Valentin (B-V) 変換である。簡単に確認するなら、 $\mu = \cosh r$, $\nu = \sinh r$ とおいて

$$\begin{aligned}\hat{b} &= \mu\hat{a} + \nu\hat{a}^\dagger, \\ [\hat{b}, \hat{b}^\dagger] &= [\mu\hat{a} + \nu\hat{a}^\dagger, \nu\hat{a} + \mu\hat{a}^\dagger] = \mu^2 - \nu^2 = 1.\end{aligned}$$

これは boson に対する B-V 変換になっている！

式 (3.11) は fermion に対する B-V 変換であった。改めて違いを眺めてみると、

$$\begin{aligned}\hat{\alpha} &= \hat{a} \cos \phi - e^{i\theta} \hat{a}^\dagger \sin \phi, \\ \hat{\alpha}^\dagger &= \hat{a} e^{-i\theta} \sin \phi + \hat{a}^\dagger \cos \phi,\end{aligned}$$

となっていることである。

C.3 Overcomplete set

コヒーレント状態は

$$|\alpha\rangle = \exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha|^2\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle$$

だから

$$\begin{aligned}\langle \alpha|\beta\rangle &= \left(\exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(\alpha^*)^m}{\sqrt{m!}} \langle m| \right) \left(\exp\left(-\frac{|\beta|^2}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\beta^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \right) \\ &= \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2} - \frac{|\beta|^2}{2} + \alpha^*\beta\right) \neq \delta_{\alpha,\beta}.\end{aligned}$$

つまり、コヒーレント状態は直交していない。しかしながら $|\alpha - \beta|^2 \gg 0$ か $|\alpha - \beta|^2 = 0$ となっているときには

$$|\langle \alpha|\beta\rangle|^2 = \exp\left(-|\alpha|^2 - |\beta|^2 + \alpha^*\beta + \alpha\beta^*\right) = \exp\left(-|\alpha - \beta|^2\right) \cong \delta_{\alpha,\beta},$$

となり直交する。

さらに

$$\frac{1}{\pi} \int |\alpha\rangle\langle\alpha| d^2\alpha = \hat{I},$$

と完全系を張る。このベクトルたちの集合は complete (完備) であるが, non-orthogonal (各ベクトルが直交していない) ので, **overcomplete set** と呼ばれる。

確認してみる。

$$\begin{aligned} \int |\alpha\rangle\langle\alpha| d^2\alpha &= \int \left[\exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \right] \left[\exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha^*)^n}{\sqrt{n!}} \langle n| \right] d^2\alpha \\ &= \int \exp(-|\alpha|^2) \sum_{m,n=0}^{\infty} \frac{\alpha^m (\alpha^*)^n}{\sqrt{m!n!}} |m\rangle\langle n| d^2\alpha \\ &= \sum_{m,n} \frac{1}{\sqrt{m!n!}} |m\rangle\langle n| \int \exp(-|\alpha|^2) \alpha^m (\alpha^*)^n d^2\alpha, \end{aligned}$$

ここで, 複素数 α を極形式 $\alpha = r e^{i\varphi}$ と表せば, 積分の部分は

$$\begin{aligned} \int \exp(-|\alpha|^2) \alpha^m (\alpha^*)^n d^2\alpha &= \int_0^{\infty} r dr \int_0^{2\pi} d\varphi e^{-r^2} r^m r^n e^{i(m-n)\varphi} \\ &= \int_0^{\infty} r dr e^{-r^2} r^{(m+n)} \int_0^{2\pi} d\varphi e^{i(m-n)\varphi} \\ &= 2\pi \int_0^{\infty} r dr e^{-r^2} r^{2m} \delta_{m,n} \\ &= 2\pi \int_0^{\infty} \frac{dt}{2} e^{-t} t^m \delta_{m,n} \quad (r^2 = t) \\ &= \pi \int_0^{\infty} dt e^{-t} t^m \delta_{m,n}, \\ &= \Gamma(m+1) = m! \end{aligned}$$

となる。したがって

$$\int |\alpha\rangle\langle\alpha| d^2\alpha = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\pi n!}{\sqrt{n!n!}} |n\rangle\langle n| = \pi \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n| = \pi \hat{I}.$$

謝辞

この記事の内容を決める際に, 東京大学理学部物理学教室上田正仁教授よりおもしろいテーマを教えてくださいました。末筆ながらここで改めてお礼を申し上げます。

参考文献

- [1] 林 正人, 「量子情報への表現論的アプローチ」(共立出版株式会社).
- [2] W. K. Wootters, [Physical Review Letters](#) **80**, 2245 (1998).
- [3] W. K. Wootters, [Quantum Info. Comput.](#) **1**, 27 (2001).
- [4] 柴田 史明, 有光 俊彦, 番 雅司, 北島 佐和子, 「量子と非平衡系の物理 量子力学の基礎と量子情報・量子確率過程」(東京大学出版会).
- [5] M. A. Nielsen and I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information*, 10th ed. (Cambridge University Press, Cambridge; New York, 2010).
- [6] 高柳 匡, 「量子エンタングルメントから創発する宇宙」(共立出版).
- [7] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer, [Physical Review](#) **108**, 1175 (1957).
- [8] 田中 由喜夫, 「超伝導接合の物理」(名古屋大学出版会).
- [9] Rafael M. Fernandes, Lecture Notes: BCS theory of superconductivity.
- [10] 丹羽 雅昭, 「超伝導の基礎」, 第3版 ed. (東京電機大学出版局).
- [11] X. M. Puspus, K. H. Villegas, and F. N. C. Paraan, [Physical Review B](#) **90**, 155123 (2014).
- [12] I. Peschel, [Journal of Physics A: Mathematical and General](#) **36**, L205 (2003).
- [13] C. Dunning, J. Links, and H.-Q. Zhou, [Physical Review Letters](#) **94**, 227002 (2005).
- [14] 松枝 宏明, 「量子系のエンタングルメントと幾何学 ホログラフィー原理に基づく異分野横断の数理」(森北出版株式会社).
- [15] 鈴木 増雄, 「経路積分と量子解析 量子古典対応から量子現象にせまる」(サイエンス社).
- [16] Y. Hashizume and M. Suzuki, [Physica A: Statistical Mechanics and its Applications](#) **392**, 3518 (2013).
- [17] A. M. Kaufman, M. E. Tai, A. Lukin, M. Rispoli, R. Schittko, P. M. Preiss, and M. Greiner, [Science](#) **353**, 794 (2016).
- [18] 田崎 晴明, 「統計力学 II」(培風館).
- [19] 上田 正仁, 「現代量子物理学入門—基礎と応用—」(培風館).
- [20] 沙川 貴大 上田 正仁, 「量子測定と量子制御 (電子版)」(サイエンス社).