

擬確率分布の一般論

梅川 舜

2023年9月14日

1 はじめに

量子論に特徴的な性質の一つとして物理量の値が確率的にしか分からないことがあげられます。けれど、量子論では、単に各物理量の値が確率的な振る舞いをするというだけでなく、複数の互いに非可換な演算子によって表される物理量の値についての同時確率分布はそもそも定めることさえできないのです。しかし、“確率”の取りうる値として0以上1以下の実数以外も許容することにすれば、複数の物理量についての「擬同時確率分布」というものを定義できることが知られています。また、擬確率分布の定式化の問題は、既知の古典物理量に対応する量子物理量をどのように定めるかという量子化の問題と深く結びついていることがわかっています。この記事では、擬確率分布と量子化の一般論を解説し、さらにそれを二準位系に適用したときに見られる興味深い性質について説明していきます。^{*1}

2 擬確率分布と量子化の一般論

この章では文献 [1, 2] によって導入された擬確率分布と量子化の一般論について説明していきます。まず初めに、通常の量子論の枠組を復習し、任意性なしに完全に決定される一変数物理量の量子化と確率分布の定め方 (Born 則) を整理します。そして、その一般化として、擬確率分布と量子化がどう双対的に定式化されるかを説明します。擬確率分布が持つ性質をいくつか議論した後、最後にその応用例を2つ紹介します。

^{*1} この記事は主に文献 [1] と [3] を解説したものとなっています。

2.1 量子論の復習

量子論においては、系の状態はベクトル $|\psi\rangle$ ^{*2}によって表されます。ただしこれは純粋状態の場合であって、混合状態も含めると、密度演算子と呼ばれる、系の状態はトレースが1のエルミート演算子^{*3} $\hat{\rho}$ によって表されます。ここで、純粋状態に対しては $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$ です。一方、物理量は演算子^{*4}として表され、特に可観測量と呼ばれる物理量はエルミート演算子 \hat{A} によって表されます。^{*5}

そして、物理量 A の値が a である確率は、以下のようにして射影演算子を用いて与えられます。まず、射影演算子 $\hat{E}_A(a)$ とは、状態ベクトル $|\psi\rangle$ に対して \hat{A} の固有値 a の固有空間への正射影を与える演算子のことで、

$$\hat{E}_A(a) = \sum_{\alpha} |a; \alpha\rangle\langle a; \alpha| \quad (1)$$

として与えられます。ここで、 $|a; \alpha\rangle$ は \hat{A} の固有値 a の固有ベクトルを表し、 α はその他のパラメータであって、縮退がない場合には単に $\hat{E}_A(a) = |a\rangle\langle a|$ となります。射影演算子を用いると、状態 ρ において物理量 A の値が a であるような確率分布関数は Born 則

$$P_{\rho}(a) = \text{Tr}[\hat{E}_A(a)\hat{\rho}] \quad (2)$$

によって与えられます。純粋状態の場合には、これは

$$P_{\rho}(a) = \langle\psi|\hat{E}_A(a)|\psi\rangle \quad (3)$$

となります。

可観測量 A の1変数関数として表される物理量 $f(A)$ の量子化^{*6}は、これもまた射影演算子を用いて

$$\hat{f}(\hat{A}) = \int_{-\infty}^{\infty} f(a)\hat{E}_A(a)da \quad (4)$$

*2 正確には Hilbert 空間上の射線

*3 Hilbert 空間上の核作用素

*4 Hilbert 空間上の有界線形作用素

*5 ここで、 A は抽象的な概念としての物理量のことで、 \hat{A} は量子論において物理量 A を表す演算子、 a は古典論において物理量 A を表す数値のこと、という記法を用いています。

*6 ここで、量子化とは既知の古典物理量に対応する量子物理量を作る方法のことであって、正準量子化や経路積分量子化のように量子論の枠組みを構成する方法のことではありません。

と与えられます。これは単に行列の関数を計算しているだけですが、 A の値が a に確定した状態において $f(A)$ の値が $f(a)$ に確定した状態になるということなので妥当だと言えます。ここで、 $f(A)$ もまた可観測量となります。

2.2 擬確率分布と量子化

しかし、複数の互いに非可換な演算子には一般には同時固有ベクトルを持たない*7ので、互いに非可換な演算子によって表される物理量の値は同時に確定しません。そのため、互いに非可換な演算子によって表される物理量には共通の射影演算子が存在せず、2.1 節の方法を単純に拡張することによって複数の物理量についての同時確率分布を定めることや、複数の可観測量の多変数関数として表される物理量を量子化することはできません。実際のところ、複数の非可換な物理量についての以下の確率の公理

$$\begin{aligned}
 & \text{(i) } \forall E, P(E) \in \mathbb{R}_{\geq 0}; \\
 & \text{(ii) } P(\Omega) = 1 \quad (\Omega \text{ は全体事象}); \\
 & \text{(iii) } P\left(\bigcup_{i=1}^{\infty} E_i\right) = \sum_{i=1}^{\infty} P(E_i) \quad (E_i \text{ は互いに素な集合})
 \end{aligned} \tag{5}$$

を満たす同時確率分布を定めることはできません。しかし、負の値や複素数値を許容すれば、確率の公理のうち (ii) と (iii) だけを満たすような「擬確率分布」というものを作ることができます。ただし、擬確率分布の定め方は一意ではなく、歴史的にも何通りもの方法が提案されてきました [5, 6, 7, 8]。また、多変数関数物理量の量子化にも物理量の非可換性に起因する任意性があります。なぜなら、例えば $f(x, p) = xp$ という物理量を考えると、古典では $xp = px$ ですが量子では $\hat{x}\hat{p} \neq \hat{p}\hat{x}$ なので、 $f(x, p)$ を $\hat{x}\hat{p}$ と量子化すべきか $\hat{p}\hat{x}$ と量子化すべきかわからないからです*8

非可換性に起因する任意性を持つ擬確率分布の定め方も物理量の量子化も 2.1 の拡張として以下のように互いに双対的に定めることができます。まず、射影演算子を違う観点から整理します。1 変数関数の量子化 (4)

*7 $[\hat{A}, \hat{B}]$ が固有値 0 の固有ベクトルを持つ場合それは A と B の同時固有ベクトルとなりますが、それだけでは状態空間を張れないので、2.1 節と同様の方法で確率分布や量子化を構成することはできません。

*8 この場合は $\hat{f}(\hat{x}, \hat{p})$ にエルミート性を課せば $\hat{f}(\hat{x}, \hat{p}) = \frac{\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}}{2}$ と定まりますが、もっと複雑な物理量の量子化はエルミート性を課しただけでは定まりません。

の特別なケースとして、指数関数 e^{-isA} の量子化は、

$$e^{-is\hat{A}} = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-isa} \hat{E}_A(a) da \quad (6)$$

と与えられます。ここで、右辺は射影演算子を Fourier 変換したものと見る事ができるので、逆に、

$$\hat{E}_A(a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \mathcal{F}^{-1}(e^{-is\hat{A}})(a) \quad (7)$$

と、射影演算子を物理量を表す演算子の指数関数 $e^{-is\hat{A}}$ の逆 Fourier 変換として定めた、と見る事ができます。

この拡張として、まず *hashed operator*[1] を:

$$\tilde{\#}_{\mathbf{A}}(\mathbf{s}) := \left(e^{-is_1\hat{A}_1}, e^{-is_2\hat{A}_2}, \dots, e^{-is_n\hat{A}_n} \text{を“任意に分解して適当な順序で混合したもの”} \right) \quad (\mathbf{s} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{A} = (A_1, \dots, A_n)) \quad (8)$$

と定義し、その逆 Fourier 変換として QJSD (*quasi-joint-spectral distribution*) [1] を

$$\hat{\#}_{\mathbf{A}}(\mathbf{a}) := \frac{1}{\sqrt{2\pi}^n} \mathcal{F}^{-1}(\tilde{\#}_{\mathbf{A}}(\mathbf{s}))(\mathbf{a}) \quad (9)$$

と定義することができます。“任意に分解して適当な順序で混合したもの”とは、例えば $\mathbf{A} = (A, B)$ の場合には

$$\tilde{\#}_{(A,B)}^K(s, t) = e^{-is\hat{A}} e^{-it\hat{B}}, \quad (10)$$

$$\tilde{\#}_{(A,B)}^{S\alpha}(s, t) = e^{-i\alpha s\hat{A}} e^{-it\hat{B}} e^{-i(1-\alpha)s\hat{A}}, \quad (11)$$

$$\tilde{\#}_{(A,B)}^{M\alpha}(s, t) = \frac{1+\alpha}{2} e^{-is\hat{A}} e^{-it\hat{B}} + \frac{1-\alpha}{2} e^{-it\hat{B}} e^{-is\hat{A}}, \quad (12)$$

$$\tilde{\#}_{(A,B)}^W(s, t) = e^{-i(s\hat{A}+t\hat{B})} = \lim_{N \rightarrow \infty} (e^{-i\frac{s}{N}\hat{A}} e^{-i\frac{t}{N}\hat{B}})^N, \quad (13)$$

$$\tilde{\#}_{(A,B)}^B(s, t) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 e^{-i\frac{1-k}{2}s\hat{A}} e^{-it\hat{B}} e^{-i\frac{1+k}{2}s\hat{A}} dk \quad (14)$$

などのことです。ここで、重要な点は hashed operator や QJSD には物理量の組 $(\hat{A}_1, \hat{A}_2, \dots, \hat{A}_n)$ の間の非可換性に起因する任意性があるということです。

QJSD を用いることで、擬同時確率分布は Born 則と同様にして

$$P_{\rho}(\mathbf{a}) = \text{Tr}[\hat{\#}_{\mathbf{A}}(\mathbf{a}) \hat{\rho}] \quad (15)$$

と定義されます [1]。特に、純粋状態の場合には

$$P_{\psi}(\mathbf{a}) = \langle \psi | \hat{\#}_{\mathbf{A}}(\mathbf{a}) | \psi \rangle \quad (16)$$

となります。多変数関数物理量の量子化も同様にして QJSD を用いて

$$\hat{f}(\hat{A}) = \int_{\mathbb{R}^n} f(\mathbf{a}) \hat{\#}_{\mathbf{A}}(\mathbf{a}) d^n \mathbf{a} \quad (17)$$

と定義されます [1]。重要な点は、QJSD を用いて定義されているので擬古典化*9にも量子化にもやはり物理量の非可換性に起因する任意性が表れているということです。特に、

$$\tilde{\#}_{\mathbf{A}}^{\mathbf{K}}(\mathbf{s}) := \prod_{k=1}^n e^{-i s_k \hat{A}_k} \quad (18)$$

という形の hashed operator によって定義される擬確率分布

$$K_{\rho}(\mathbf{a}) := \text{Tr}[\hat{\#}_{\mathbf{A}}^{\mathbf{K}}(\mathbf{a}) \hat{\rho}] \quad (19)$$

は Kirkwood-Dirac 分布として知られているものになります [1, 6]。また、

$$\tilde{\#}_{\mathbf{A}}^{\mathbf{W}}(\mathbf{s}) := e^{-i \sum_{k=1}^n s_k \hat{A}_k} \quad (20)$$

という形の hashed operator によって定義される擬確率分布

$$W_{\rho}(\mathbf{a}) := \text{Tr}[\hat{\#}_{\mathbf{A}}^{\mathbf{W}}(\mathbf{a}) \hat{\rho}] \quad (21)$$

は（一般化）Wigner 関数となります [1, 5]。歴史的に定められてきたその他の擬確率分布も同様にしてこの一般的枠組みによって定義され擬確率分布の一例となっています。

擬確率分布の定義の仕方には任意性があるとは言っても、確率の公理の (ii)、(iii) に加えて満たさなければならぬ条件があります。それは、

$$P_{\rho}^{A_k}(a_k) := \int_{\mathbb{R}^{n-1}} P_{\rho}^{\mathbf{A}}(\mathbf{a}) da_1 \dots da_{k-1} da_{k+1} \dots da_n \quad (k = 1, 2, \dots, n) \quad (22)$$

として計算される各物理量 A_k についての周辺分布は、 A_k の値が a_k を表すべきなのですが、これは量子論から任意性なしに

$$P_{\rho}^{A_k}(a_k) = \text{Tr}[\hat{E}_{A_k}(a_k) \hat{\rho}] \quad (23)$$

と計算できるものなので、それと一致しなければならないからです。定義 (8)、(9)、(15) を見ると、この枠組みによって定められる擬確率分布はどれもこの条件を満たすことが分かります。

*9 量子状態を表す密度演算子から相空間上の分布関数として状態を古典的に表す擬確率分布への写像のこと。

擬古典化と量子化の双対性は、以下のようにして理解することができます。状態 ρ における $f(\mathbf{A})$ の擬期待値は、状態を擬古典化して古典論的に

$$\langle f(\mathbf{A}) \rangle = \int_{\mathbb{R}^n} f(\mathbf{a}) P_\rho(\mathbf{a}) d^n \mathbf{a} \quad (24)$$

と計算することも、物理量を量子化して

$$\langle f(\mathbf{A}) \rangle = \text{Tr}[\hat{f}(\hat{\mathbf{A}}) \hat{\rho}] \quad (25)$$

と計算することもでき、これらの2つの方法で計算された擬期待値は同じ QJSD を用いていれば一致するのです。

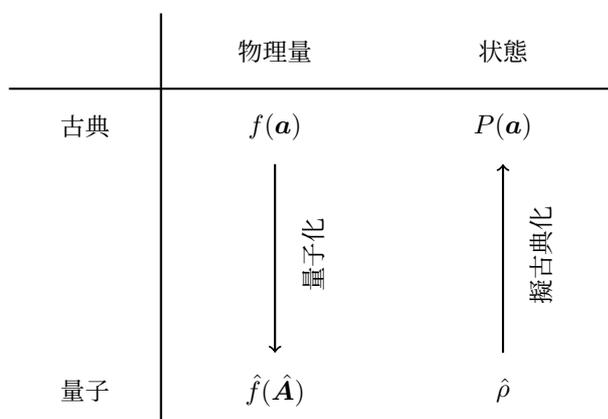


図1 擬古典化と量子化の双対関係

2.3 実量子化と実分布

擬確率は確率から「0以上1以下の実数値出なければならない」という条件を外したのですが、一般には複素数値を取ります。しかし一部の擬確率分布は、負の値にはなるものの実数の範囲に収まるようなものもあります。この節では、擬確率分布が実数の範囲に収まるための QJSD に対する条件を見ていきます。

(15) 式を見ると、密度演算子はエルミートなので任意の状態において擬確率分布が任意の点で実数値を取るための必要十分条件は、QJSD がエルミートであることと同値だということが分かります。QJSD のエルミ-

ト共役は、

$$\begin{aligned}
\hat{\#}_A^\dagger(\mathbf{a}) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}^n} \left(\mathcal{F}^{-1}(\tilde{\#}_A(\mathbf{s}))(\mathbf{a}) \right)^\dagger \\
&= \frac{1}{(2\pi)^n} \int_{\mathbb{R}^n} \tilde{\#}_A^\dagger(\mathbf{s}) e^{-i\mathbf{s}\cdot\mathbf{a}} d^n \mathbf{s} \\
&= \frac{1}{(2\pi)^n} \int_{\mathbb{R}^n} \tilde{\#}_A^\dagger(-\mathbf{s}) e^{i\mathbf{s}\cdot\mathbf{a}} d^n \mathbf{s} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi}^n} \mathcal{F}^{-1}(\tilde{\#}_A^\dagger(-\mathbf{s}))(\mathbf{a})
\end{aligned} \tag{26}$$

と与えられるので、結局、

$$\forall \hat{\rho}, P_\rho(\mathbf{a}) \in \mathbb{R} \iff \hat{\#}_A(\mathbf{a}) = \hat{\#}_A^\dagger(\mathbf{a}) \iff \tilde{\#}_A(\mathbf{s}) = \tilde{\#}_A^\dagger(-\mathbf{s}) \tag{27}$$

であると分かります [1]。そのため、一般化 Wigner 関数 (21) は実分布である一方、Kirkwood-Dirac 分布 (19) は一般には複素数値を取り得ます。また、擬確率分布が実となるような QJSD に対応する量子化は

$$\left(\hat{f}(\hat{A}) \right)^\dagger = \int_{\mathbb{R}^n} f(\mathbf{a}) \hat{\#}_A^\dagger(\mathbf{a}) d^n \mathbf{a} \tag{28}$$

$$= \hat{f}(\hat{A}) \tag{29}$$

となり、全ての物理量をエルミート演算子に量子化します。

2.4 有限準位系と取り得る値

2.1 節で見たように、量子論では物理量の観測値は必ずその固有値になります。そのため、状態空間の次元が有限次元であるような系（有限準位系）では、物理量の取り得る値は離散的になります。そうすると、Born 則 (2) によって得られる確率分布はその物理量の固有値のみで値を持つようなものでなければならず、 N 準位系では、それは数学的には

$$P_\rho^A(\mathbf{a}) = \sum_{k=1}^n c_k \delta(\mathbf{a} - \alpha_k) \tag{30}$$

のようにいくつかのデルタ関数の線形結合で表されるということになります。ここで、 $n \leq N$ 、 $c_1, \dots, c_n \in \mathbb{R}_{\geq 0}$ で規格化条件 $\sum_{k=1}^n c_k = 1$ を満たし、また、 α_k ($k = 1, 2, \dots, n$) は \hat{A} の固有値です。

しかし、擬確率分布は必ずしもそのようになりません。式 (22) によって得られる周辺分布は式 (30) の形になっていなければならないですが、擬確率分布自体はそうなっている必要はないのです。後の章で見る

ように、擬確率分布が

$$P_\rho^{\mathbf{A}}(\mathbf{a}) = \sum_{k_1=1}^{n_1} \sum_{k_2=1}^{n_2} \dots \sum_{k_m=1}^{n_m} c_{k_1 k_2 \dots k_m} \delta(a_1 - \alpha_{k_1}) \delta(a_2 - \alpha_{k_2}) \dots \delta(a_m - \alpha_{k_m}) \quad (31)$$

の形になる擬古典化の方法は限られているのです。ここで、 $n_1, n_2, \dots, n_m \leq N$ で、全ての $(k_1, k_2, \dots, k_m) \in ([1, n] \cap \mathbb{N})^m$ に対して $c_{k_1 k_2 \dots k_m} \in \mathbb{C}$ は規格化条件 $\sum_{k_1=1}^{n_1} \sum_{k_2=1}^{n_2} \dots \sum_{k_m=1}^{n_m} c_{k_1 k_2 \dots k_m} = 1$ を満たします。また、 α_{k_i} ($k_i = 1, 2, \dots, n$) は物理量 \hat{A}_i の固有値を表し、 $(\alpha_{k_1}, \alpha_{k_2}, \dots, \alpha_{k_m})$ を物理量の組 $\hat{\mathbf{A}} = (\hat{A}_1, \hat{A}_2, \dots, \hat{A}_m)$ の「取り得る値」[3] と呼びます。一般には、擬確率分布は全ての点において0でない値を持ち得るのです。

2.5 量子光学における Wigner 関数

まず、2.2 節で述べた一般的な枠組みのもとでの Wigner 関数の定義 (21) から、よく知られた位置と運動量についての Wigner 関数の表式

$$W_\psi(x, y) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x + \frac{\hbar}{2}t) \psi(x - \frac{\hbar}{2}t) e^{ipt} dt \quad (32)$$

を導きます。位置と運動量は、正準交換関係

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \quad (33)$$

にあります。正準交換関係は以下の Weyl 表現

$$e^{-is\hat{x}} e^{-it\hat{p}} = e^{-ist\hbar} e^{-it\hat{p}} e^{-is\hat{x}} \quad (34)$$

の形にもかけるので、これを使うと、Wigner 関数の hashed operator は

$$\begin{aligned} e^{-i\frac{t}{2}\hat{p}} e^{-is\hat{x}} e^{-i\frac{t}{2}\hat{p}} &= (e^{-i\frac{t}{2n}\hat{p}})^n (e^{-i\frac{s}{2n+1}\hat{x}})^{2n+1} (e^{-i\frac{t}{2n}\hat{p}})^n \\ &= e^{-i\frac{s}{2n+1}\hat{x}} (e^{-i\frac{t}{2n}\hat{p}})^n (e^{-i\frac{s}{2n+1}\hat{x}})^{2n-1} (e^{-i\frac{t}{2n}\hat{p}})^n e^{-i\frac{s}{2n+1}\hat{x}} \\ &= e^{-i\frac{s}{2n+1}\hat{x}} e^{-i\frac{t}{2n}\hat{p}} e^{-i\frac{s}{2n+1}\hat{x}} (e^{-i\frac{t}{2n}\hat{p}})^{n-1} (e^{-i\frac{s}{2n+1}\hat{x}})^{2n-3} (e^{-i\frac{t}{2n}\hat{p}})^{n-1} e^{-i\frac{s}{2n+1}\hat{x}} e^{-i\frac{t}{2n}\hat{p}} e^{-i\frac{s}{2n+1}\hat{x}} \\ &= \dots = (e^{-i\frac{s}{2n+1}\hat{x}} e^{-i\frac{t}{2n}\hat{p}})^{2n} e^{-i\frac{s}{2n+1}\hat{x}} \\ &\xrightarrow{n \rightarrow \infty} \lim_{N \rightarrow \infty} (e^{-i\frac{t}{N}\hat{p}} e^{-i\frac{s}{N}\hat{x}})^N \\ &= e^{-is\hat{x} - it\hat{p}} \\ &= \tilde{\#}_{x,p}^W(s, t) \end{aligned} \quad (35)$$

とわかる。そうすると、Wigner 関数は、

$$\begin{aligned}
W_\psi(x, p) &= \frac{1}{2\pi} \mathcal{F}^{-1} \left(\langle \psi | \tilde{\#}_{x,p}^W(s, t) | \psi \rangle \right) (x, p) \\
&= \frac{1}{2\pi} \mathcal{F}^{-1} \left(\langle \psi | e^{-i\frac{t}{2}\hat{p}} e^{-is\hat{x}} e^{-i\frac{t}{2}\hat{p}} | \psi \rangle \right) (x, p) \\
&= \frac{1}{2\pi} \mathcal{F}^{-1} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \langle \psi | e^{-i\frac{t}{2}\hat{p}} | x' \rangle \langle x' | e^{-is\hat{x}} e^{-i\frac{t}{2}\hat{p}} | \psi \rangle dx' \right) (x, p) \\
&= \frac{1}{2\pi} \mathcal{F}^{-1} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \left\langle \psi \left| x' + \frac{\hbar}{2}t \right. \right\rangle e^{-isx'} \left\langle x' - \frac{\hbar}{2}t \left| \psi \right. \right\rangle dx' \right) (x, p) \\
&= \frac{1}{2\pi} \mathcal{F}^{-1} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \delta(t - t') \left(\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x' + \frac{\hbar}{2}t') e^{-isx'} \psi(x' - \frac{\hbar}{2}t') dx' \right) dt' \right) (x, p) \\
&= \frac{1}{2\pi} \mathcal{F}^{-1} \left(\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-isx' - itp'} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x' + \frac{\hbar}{2}t') \psi(x' - \frac{\hbar}{2}t') e^{-ip't'} dt' \right) dx' dp' \right) (x, p) \\
&= \frac{1}{2\pi} \mathcal{F}^{-1} \left(\mathcal{F} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x' + \frac{\hbar}{2}t') \psi(x' - \frac{\hbar}{2}t') e^{-ip't'} dt' \right) (s, t) \right) (x, p) \\
&= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x + \frac{\hbar}{2}t) \psi(x - \frac{\hbar}{2}t) e^{-ipt} dt \tag{36}
\end{aligned}$$

となる。これはよく知られている Wigner 関数の伝統的な定義そのものである [9, 5]。2.3 節で述べたように、Wigner 関数は定義から実分布となっていないが、一般には負の値を取り得ます。しかし、コヒーレント状態やスクイーズド状態といった準古典状態においては Wigner 関数は正の値しか取らず、Wigner 関数の負性はある種系の状態の「非古典性」を表すことが知られています [10]。特に、文脈依存性と呼ばれる量子論に特有な性質と Wigner 関数の負性の間には深い関係があることが指摘されています [11, 12]。こうした有用な性質を持つ Wigner 関数は量子光学や量子計算の分野で利用されているようです。

2.6 Aharonov 弱値とその統計的解釈

Aharonov らによって提案された弱値 [14] と呼ばれる量が、弱測定と呼ばれる測定方法によって測定できることが知られています。物理量 A の Aharonov 弱値は、初期状態 $|i\rangle$ と終状態 $|f\rangle$ を指定することで

$$A_w[i, f] = \frac{\langle f | \hat{A} | i \rangle}{\langle f | i \rangle} \tag{37}$$

と定まる値であり、初期状態 $|i\rangle$ から終状態 $|f\rangle$ に変化する過程での A の「期待値のようなもの」を表しています。特に、未知の初期状態 $|\psi\rangle$ から初めて、別の物理量 B の射影測定を行ない、終状態として B の固有状

態に射影された状態 $|b\rangle$ が得られたような場合を想定すると、Aharonov 弱値は

$$A_w(b) = \frac{\langle b | \hat{A} | \psi \rangle}{\langle b | \psi \rangle} \quad (38)$$

となります。Aharonov 弱値は一般には複素数値を取り、「期待値のようなもの」と言ってもその解釈にはさまざまな議論があります。しかし、式 (38) は擬確率分布を用いると、以下のようにして厳密に「擬条件付き期待値」として解釈できることが知られています [1, 2, 15]。

確率分布 $P(a, b)$ で表される古典状態において、 B の値が b であるという条件の下での A の期待値は

$$E_P(A|B=b) = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} aP(a, b)da}{P_B(b)} \quad (39)$$

と与えられます。これと同様にして、量子状態 $\hat{\rho}$ において、それを擬確率分布 $P^T(a, b)$ によって表すとき、 B の値が b であるような A の「擬条件付き期待値」は、

$$E_\rho^T(A|B=b) = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} aP^T(a, b)da}{P_B(b)} \quad (40)$$

と定義されます。ここで、擬確率分布の定義の仕方の任意性に伴って、擬条件付き期待値の定義にも任意性があることに注意しましょう。擬確率分布として、Kirkwood-Dirac 分布^{*10}を採用したとき、

$$\begin{aligned} \mathcal{F}\left(\int_{-\infty}^{\infty} aK(a, b)\right)(t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-itb} \left(\int_{-\infty}^{\infty} aK(a, b)\right) db \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} ae^{-i0a-itb} K(a, b) da db \\ &= \sqrt{2\pi} i \frac{\partial}{\partial s} \left(\mathcal{F}(K(a, b))(s, t)\right) \Big|_{s=0} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} i \frac{\partial}{\partial s} \left(\text{Tr}[\hat{\rho} \tilde{\#}_{A, B}^K(s, t)]\right) \Big|_{s=0} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} i \frac{\partial}{\partial s} \left(\text{Tr}[\hat{\rho} e^{-it\hat{B}} e^{-is\hat{A}}]\right) \Big|_{s=0} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \text{Tr}[\hat{\rho} e^{-it\hat{B}} \hat{A}] \\ &= \mathcal{F}\left(\text{Tr}[\hat{\rho} \hat{E}_B(b) \hat{A}]\right)(t) \\ &= \mathcal{F}\left(\langle \psi | b \rangle \langle b | \hat{A} | \psi \rangle\right)(t) \end{aligned}$$

^{*10} ここでは、式 (18) とは A, B の順序が逆の方を採用している。

より、Kirkwood-Dirac 分布による擬条件付き期待値は Aharonov 弱値と一致します。

$$\begin{aligned}
 E_{\rho}^K(A|B=b) &= \frac{\int_{-\infty}^{\infty} aK(a,b)da}{P_B(b)} \\
 &= \frac{\langle \psi|b\rangle \langle b|\hat{A}|\psi\rangle}{|\langle b|\psi\rangle|^2} \\
 &= \frac{\langle b|\hat{A}|\psi\rangle}{\langle b|\psi\rangle} \\
 &= A_w(b).
 \end{aligned}$$

そのため、弱値は、Kirkwood-Dirac 分布を用いた Aharonov のものに限らず、他の擬確率分布に対する擬条件付き期待値として一般化できます。Aharonov 弱値は、弱測定を通して量子情報の分野で利用されているほか、不確定性関係の定式化にも使われています。[16]*¹¹。

3 二準位系における擬確率分布

上で見てきたように、擬確率分布は、どの系における、どの状態での、どの物理量についての、どの QJSD を用いて擬古典化した分布かを定めれば決まります。この章では二準位系における擬確率分布について考え、異なる擬古典化の方法を比較していきます。まず初めは擬確率分布を考える物理量をスピンの固定し、いくつかの擬確率分布の例を見た後、二準位系の擬確率分布についての一般的な命題を説明します。この章の議論は全て文献 [3] に基づいています。

3.1 二準位系とスピン

まず、二準位系とは、系の純粋状態が 2 次元 Hilbert 空間によって記述されるような系のことです。二準位系は量子系に特有の性質を示す最もシンプルな系であるので、Toy Model として使われていて、実際の物理系でも簡単な近似として用いられることもあります。

また、スピン演算子 $\{\hat{J}_i\}$ ($i = 1, 2, 3$) は一般には交換関係

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\epsilon_{ijk}\hat{J}_k \quad (41)$$

*¹¹ 通常の Robertson-Kerner の不等式より強い不等式を与え、またこの枠組みでは時間とエネルギーの不確定性関係も Cramer-Rao の不等式の形で定式化できます。[16]。

を満たすものとして定義され、Lie 代数 $\mathfrak{su}(2)$ の基底として理解されます。2.1 節で見たように、物理量は N 準位系では N 次元エルミート行列として表されるので、 N 準位系におけるスピンはその N 次元表現を考える必要があります。Lie 代数 $\mathfrak{su}(2)$ の N 次元既約表現はスピン $(N-1)/2$ 表現として知られています。スピン j 表現では、スピン演算子 $\{\hat{J}_i\}$ の固有値は $j, j-1, \dots, -j$ となり、スピンの大きさ

$$\hat{J}^2 := \hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 + \hat{J}_3^2 = j(j+1)I \quad (42)$$

が Casimir 演算子となります。

二準位系では、 $\mathfrak{su}(2)$ の既約表現はスピン $1/2$ 表現であり、スピン演算子 $\{\hat{J}_i\}$ は

$$\hat{J}_i = \frac{\hat{\sigma}_i}{2} \quad (43)$$

としてパウリ行列

$$\hat{\sigma}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \hat{\sigma}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \hat{\sigma}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (44)$$

を用いて表されます。2.4 節で見たように、有限準位系では物理量の取り得る値は離散化されるのですが、二準位系でのスピンの場合は、それが $1/2$ と $-1/2$ となります。二準位系の状態は、密度演算子だけでなく、3 方向のスピンの期待値の組 $(\langle \hat{J}_1 \rangle, \langle \hat{J}_2 \rangle, \langle \hat{J}_3 \rangle)$ によっても定まり、そのため Bloch 空間^{*12}内の点としても表されます。

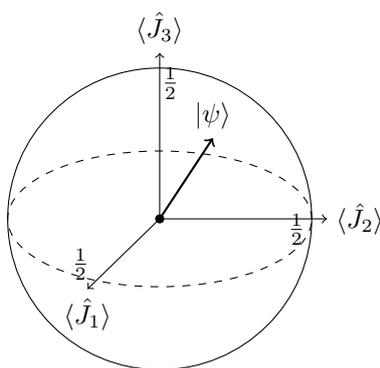


図2 Bloch 球

^{*12} $(\langle \hat{J}_1 \rangle, \langle \hat{J}_2 \rangle, \langle \hat{J}_3 \rangle)$ を座標軸とする 3 次元空間。この空間内の原点中心半径 $1/2$ の球を Bloch 球と呼び、面球面上の点が純粋状態を表し、それ以外の混合状態は球の内部の点によって表されます。

3.2 擬確率分布の例

この節では、二準位系における x 方向と y 方向のスピンについての擬同時確率分布のいくつかの例を見ていきます。まず初めに、スピン演算子の指数関数は

$$e^{-is\hat{J}_1} = \begin{pmatrix} \cos \frac{s}{2} & -i \sin \frac{s}{2} \\ -i \sin \frac{s}{2} & \cos \frac{s}{2} \end{pmatrix}, \quad e^{-it\hat{J}_2} = \begin{pmatrix} \cos \frac{t}{2} & -\sin \frac{t}{2} \\ \sin \frac{t}{2} & \cos \frac{t}{2} \end{pmatrix} \quad (45)$$

と計算されます。これを用いれば、hashed operator は以下のようにして計算されます。

$$\tilde{\#}_{J_1, J_2}^K(s, t) := e^{-is\hat{J}_1} e^{-it\hat{J}_2} = \begin{pmatrix} \cos \frac{s}{2} \cos \frac{t}{2} - i \sin \frac{s}{2} \sin \frac{t}{2} & -\cos \frac{s}{2} \sin \frac{t}{2} - i \sin \frac{s}{2} \cos \frac{t}{2} \\ \cos \frac{s}{2} \sin \frac{t}{2} - i \sin \frac{s}{2} \cos \frac{t}{2} & \cos \frac{s}{2} \cos \frac{t}{2} + i \sin \frac{s}{2} \sin \frac{t}{2} \end{pmatrix}, \quad (46)$$

$$\tilde{\#}_{J_1, J_2}^{S_{1/2}}(s, t) := e^{-i\frac{s}{2}\hat{J}_1} e^{-it\hat{J}_2} e^{-i\frac{s}{2}\hat{J}_1} = \begin{pmatrix} \cos \frac{s}{2} \cos \frac{t}{2} & -\sin \frac{t}{2} - i \sin \frac{s}{2} \cos \frac{t}{2} \\ \sin \frac{t}{2} - i \sin \frac{s}{2} \cos \frac{t}{2} & \cos \frac{s}{2} \cos \frac{t}{2} \end{pmatrix}, \quad (47)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\#}_{J_1, J_2}^{M_0}(s, t) &:= \frac{1}{2} (e^{-is\hat{J}_1} e^{-it\hat{J}_2} + e^{-it\hat{J}_2} e^{-is\hat{J}_1}) \\ &= \begin{pmatrix} \cos \frac{s}{2} \cos \frac{t}{2} & -\cos \frac{s}{2} \sin \frac{t}{2} - i \sin \frac{s}{2} \cos \frac{t}{2} \\ \cos \frac{s}{2} \sin \frac{t}{2} - i \sin \frac{s}{2} \cos \frac{t}{2} & \cos \frac{s}{2} \cos \frac{t}{2} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (48)$$

$$\tilde{\#}_{J_1, J_2}^W(s, t) := e^{-i(s\hat{J}_1 + t\hat{J}_2)} = \begin{pmatrix} \cos \sqrt{\left(\frac{s}{2}\right)^2 + \left(\frac{t}{2}\right)^2} & -i \sqrt{\frac{\left(\frac{s}{2}\right) - i\left(\frac{t}{2}\right)}{\left(\frac{s}{2}\right) + i\left(\frac{t}{2}\right)}} \sin \sqrt{\left(\frac{s}{2}\right)^2 + \left(\frac{t}{2}\right)^2} \\ -i \sqrt{\frac{\left(\frac{s}{2}\right) + i\left(\frac{t}{2}\right)}{\left(\frac{s}{2}\right) - i\left(\frac{t}{2}\right)}} \sin \sqrt{\left(\frac{s}{2}\right)^2 + \left(\frac{t}{2}\right)^2} & \cos \sqrt{\left(\frac{s}{2}\right)^2 + \left(\frac{t}{2}\right)^2} \end{pmatrix}, \quad (49)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\#}_{J_1, J_2}^B(s, t) &:= \frac{1}{2} \int_{-1}^1 e^{-i\frac{1-k}{2}s\hat{J}_1} e^{-it\hat{J}_2} e^{-i\frac{1+k}{2}s\hat{J}_1} dk \\ &= \begin{pmatrix} \cos \frac{s}{2} \cos \frac{t}{2} & \frac{\sin \frac{s}{2}}{s} \sin \frac{t}{2} - i \sin \frac{s}{2} \cos \frac{t}{2} \\ -\frac{\sin \frac{s}{2}}{s} \sin \frac{t}{2} - i \sin \frac{s}{2} \cos \frac{t}{2} & \cos \frac{s}{2} \cos \frac{t}{2} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (50)$$

これを用いれば、各状態に対して各種の擬確率分布を計算することができます。例えば、 $|z+\rangle$ 状態^{*13}における Kirkwood-Dirac 分布は、

$$\begin{aligned}
K_{z+}(x, y) &= \frac{1}{2\pi} \mathcal{F}^{-1} \left(\langle z+ | \hat{J}_{J_1, J_2}^K | z+ \rangle \right) (x, y) \\
&= \frac{1}{2\pi} \mathcal{F}^{-1} \left(\begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \frac{s}{2} \cos \frac{t}{2} - i \sin \frac{s}{2} \sin \frac{t}{2} & -\cos \frac{s}{2} \sin \frac{t}{2} - i \sin \frac{s}{2} \cos \frac{t}{2} \\ \cos \frac{s}{2} \sin \frac{t}{2} - i \sin \frac{s}{2} \cos \frac{t}{2} & \cos \frac{s}{2} \cos \frac{t}{2} + i \sin \frac{s}{2} \sin \frac{t}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right) \\
&= \frac{1}{4} (\delta(x-1/2) + \delta(x+1/2)) (\delta(y-1/2) + \delta(y+1/2)) \\
&\quad + \frac{i}{4} (\delta(x-1/2) - \delta(x+1/2)) (\delta(y-1/2) - \delta(y+1/2))
\end{aligned} \tag{51}$$

となります (図 3 (a)、(b))。同様にして、 $|z-\rangle$ 状態^{*14}の Kirkwood-Dirac 分布は、

$$\begin{aligned}
K_{z-}(x, y) &= \frac{1}{2\pi} \mathcal{F}^{-1} \left(\begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \frac{s}{2} \cos \frac{t}{2} - i \sin \frac{s}{2} \sin \frac{t}{2} & -\cos \frac{s}{2} \sin \frac{t}{2} - i \sin \frac{s}{2} \cos \frac{t}{2} \\ \cos \frac{s}{2} \sin \frac{t}{2} - i \sin \frac{s}{2} \cos \frac{t}{2} & \cos \frac{s}{2} \cos \frac{t}{2} + i \sin \frac{s}{2} \sin \frac{t}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right) \\
&= \frac{1}{4} (\delta(x-1/2) + \delta(x+1/2)) (\delta(y-1/2) + \delta(y+1/2)) \\
&\quad - \frac{i}{4} (\delta(x-1/2) - \delta(x+1/2)) (\delta(y-1/2) - \delta(y+1/2))
\end{aligned} \tag{52}$$

となります (図 3 (c)、(d))。この2つの分布を比べると、 $|z+\rangle$ 状態と $|z-\rangle$ 状態では、Kirkwood-Dirac 分布は実部は等しい一方虚部の符号が反転していることがわかります。

*13 \hat{J}_3 の固有値 $1/2$ の固有状態

*14 \hat{J}_3 の固有値 $-1/2$ の固有状態

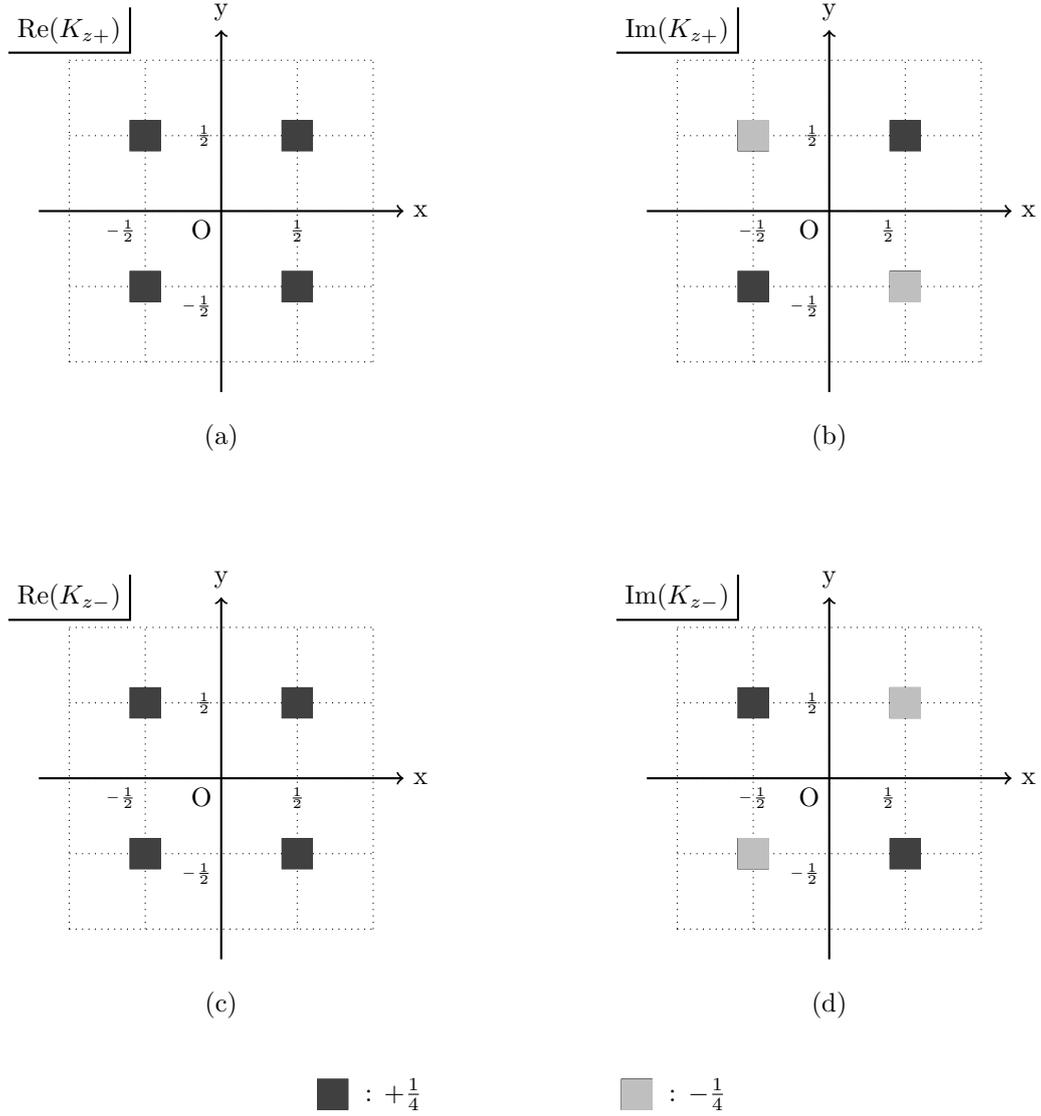


図3 $|z+\rangle$ 状態と $|z-\rangle$ 状態での Kirkwood-Dirac 分布の実部と虚部

一方、hashed operator $\tilde{\#}_{J_1, J_2}^{S_{1/2}}(s, t)$ (式 (47)) によって定義される擬確率分布は、

$$S_{z+}(x, y) = \frac{1}{4}(\delta(x - 1/2) + \delta(x + 1/2))(\delta(y - 1/2) + \delta(y + 1/2)), \quad (53)$$

$$S_{z-}(x, y) = \frac{1}{4}(\delta(x - 1/2) + \delta(x + 1/2))(\delta(y - 1/2) + \delta(y + 1/2)) \quad (54)$$

となり、 $|z+\rangle$ 状態と $|z-\rangle$ 状態では完全に一致し、ともに実数の範囲に収まっていることが分かります (図 4)。これは、 $|z+\rangle$ 状態と $|z-\rangle$ 状態は Kirkwood-Dirac 分布では区別できる一方、 $\tilde{\#}_{J_1, J_2}^{S_{1/2}}(s, t)$ によって定義される擬確率分布では区別できないことを意味しています。つまり、系の状態を擬確率分布で区別できるかど

うかは、その擬古典化の方法によって決まっているのです。ここで、擬古典化が量子状態を相空間上の分布関数として古典的にあらわそうというものであったことを考えると、系の状態を区別できるような擬確率分布の方が状態を古典的に表示するものとしては優れていると言えるでしょう。

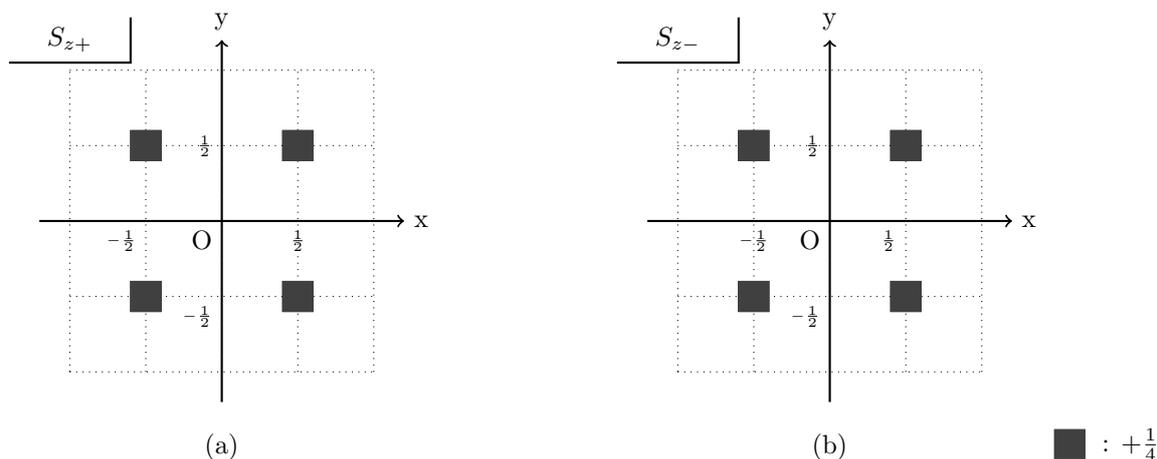


図4 (a)| $z+$ ⟩状態、(b)| $z-$ ⟩状態での $\tilde{\#}_{J_1, J_2}^{S_{1/2}}(s, t)$ によって定まる擬確率分布

次に、 $|y+\rangle$ 状態^{*15}について見てみましょう。Kirkwood-Dirac 分布と $\tilde{\#}_{J_1, J_2}^{S_{1/2}}(s, t)$ によって定められる擬確率分布は、 $|y+\rangle$ 状態では、

$$\begin{aligned}
 & K_{y+}(x, y) \\
 &= \frac{1}{2\pi} \mathcal{F}^{-1} \left(\left(\frac{1}{\sqrt{2}} \quad -\frac{i}{\sqrt{2}} \right) \begin{pmatrix} \cos \frac{s}{2} \cos \frac{t}{2} - i \sin \frac{s}{2} \sin \frac{t}{2} & -\cos \frac{s}{2} \sin \frac{t}{2} - i \sin \frac{s}{2} \cos \frac{t}{2} \\ \cos \frac{s}{2} \sin \frac{t}{2} - i \sin \frac{s}{2} \cos \frac{t}{2} & \cos \frac{s}{2} \cos \frac{t}{2} + i \sin \frac{s}{2} \sin \frac{t}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \right) \\
 &= \frac{1}{2} (\delta(x-1/2) + \delta(x+1/2)) \delta(y-1/2), \tag{55}
 \end{aligned}$$

$$S_{y+}(x, y) = \frac{1}{4} (\delta(x-1/2) + \delta(x+1/2)) (\delta(y-1/2) + \delta(y+1/2)) + \frac{1}{2} \delta(x) (\delta(y-1/2) - \delta(y+1/2)) \tag{56}$$

となります (図5)。ともに分布は実となっていますが、Kirkwood-Dirac 分布が $(J_1, J_2) = (\pm 1/2, 1/2)$ しか値を持たない一方、 $\tilde{\#}_{J_1, J_2}^{S_{1/2}}(s, t)$ によって定まる擬確率分布は、0 は J_1 の取り得る値でないにもかかわらず $(J_1, J_2) = (0, \pm 1/2)$ で値を持ってしまっています。つまり、2.4 節で言及したように、擬確率は一般には物理量の取り得る値以外で 0 とはならず、それが成り立つかどうかは擬古典化の方法によって決まっています。

*15 \hat{J}_2 の固有値 $1/2$ の固有状態

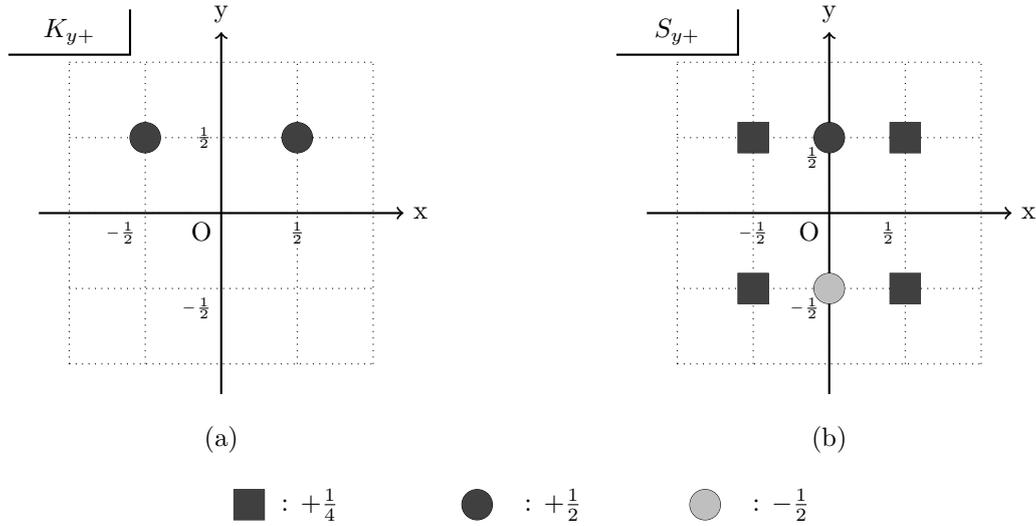


図5 $|y+\rangle$ 状態における (a)Kirkwood-Dirac 分布 (b) $\tilde{\#}_{J_1, J_2}^{S_{1/2}}(s, t)$ によって定まる擬確率分布

最後に、Wigner 関数についてみていきます。2.5 節で見たように、粒子の位置と運動量については Wigner 関数は非常に有用なものでした。しかし、 $|z+\rangle$ 状態と $|z-\rangle$ 状態でのスピン 1/2 についての Wigner 関数を計算すると、

$$\begin{aligned}
 W_{z+}(x, y) &= \frac{1}{2\pi} \mathcal{F}^{-1} \left(\langle z+ | \tilde{\#}_{J_1, J_2}^W | z+ \rangle \right) (x, y) \\
 &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \cos \sqrt{\left(\frac{s}{2}\right)^2 + \left(\frac{t}{2}\right)^2} e^{isx} e^{ity} \frac{ds dt}{2\pi} \\
 &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} \cos \frac{r}{2} e^{ixr \cos \theta} e^{iyr \sin \theta} r d\theta dr \\
 &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} r \cos \frac{r}{2} J_0(r\sqrt{x^2 + y^2}) dr \\
 &\simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi^3}} \int_0^{\infty} \sqrt{r'} \cos \frac{r'}{2\sqrt{x^2 + y^2}} \cos(r' - \pi/4) dr' \\
 &\rightarrow \pm\infty
 \end{aligned} \tag{57}$$

となり、 $|z+\rangle$ 状態と $|z-\rangle$ 状態を区別できず、また、スピンの「取り得る値」のみで値を持つどころかいたるところで発散してしまっています。これらの例から、擬確率分布の振る舞いは擬古典化の方法によってかなり異なることがわかり、良い性質を示す擬確率分布はどれか、という疑問が生じてきます。次節以降ではこの疑問に対する答えを与えていきます。

3.3 スピンについての Kirkwood-Dirac 分布の性質

前節で見てきた例を見ると、Kirkwood-Dirac 分布が他の分布と比べて良い振る舞いをしているように思われます。実際、Kirkwood-Dirac 分布は二準位系において良い性質を示す擬確率分布であって、以下その性質を一つずつ証明していきます。

まず、物理量の「取り得る値」についての問題については、以下の命題が成立します [3]。

命題 3.1. 二準位系における x 方向と y 方向のスピンについての *Kirkwood-Dirac* 分布は、任意の状態において、スピンの取り得る値である $(J_1, J_2) = (\pm 1/2, \pm 1/2)$ の点だけで非零の値を持つ：

$$\forall \hat{\rho}, K_{\rho}(x, y) = 0 \quad (\text{for } (x, y) \neq (\pm 1/2, \pm 1/2)) \quad (58)$$

証明. Kirkwood-Dirac 分布を定める QJSD は、hashed operator $\tilde{\#}_{J_1, J_2}^K(s, t)$ (式 (46)) の逆 Fourier 変換なので、その成分は、

$$\begin{aligned} (\hat{\#}_{J_1, J_2}^K(x, y))_{11} &= \frac{1}{4}(\delta(x - 1/2) + \delta(x + 1/2))(\delta(y - 1/2) + \delta(y + 1/2)) \\ &\quad + \frac{i}{4}(\delta(x - 1/2) - \delta(x + 1/2))(\delta(y - 1/2) - \delta(y + 1/2)), \end{aligned} \quad (59)$$

$$\begin{aligned} (\hat{\#}_{J_1, J_2}^K(x, y))_{12} &= \frac{1}{4}(\delta(x - 1/2) - \delta(x + 1/2))(\delta(y - 1/2) + \delta(y + 1/2)) \\ &\quad - \frac{i}{4}(\delta(x - 1/2) + \delta(x + 1/2))(\delta(y - 1/2) - \delta(y + 1/2)), \end{aligned} \quad (60)$$

$$\begin{aligned} (\hat{\#}_{J_1, J_2}^K(x, y))_{21} &= \frac{1}{4}(\delta(x - 1/2) - \delta(x + 1/2))(\delta(y - 1/2) + \delta(y + 1/2)) \\ &\quad + \frac{i}{4}(\delta(x - 1/2) + \delta(x + 1/2))(\delta(y - 1/2) - \delta(y + 1/2)), \end{aligned} \quad (61)$$

$$\begin{aligned} (\hat{\#}_{J_1, J_2}^K(x, y))_{22} &= \frac{1}{4}(\delta(x - 1/2) + \delta(x + 1/2))(\delta(y - 1/2) + \delta(y + 1/2)) \\ &\quad - \frac{i}{4}(\delta(x - 1/2) - \delta(x + 1/2))(\delta(y - 1/2) - \delta(y + 1/2)) \end{aligned} \quad (62)$$

と計算されます。この QJSD のどの成分も $\delta(x \pm 1/2)\delta(y \pm 1/2)$ の線形結合として表されているので、どんな密度行列をかけてトレースを取っても、また $\delta(x \pm 1/2)\delta(y \pm 1/2)$ の線形結合となります。そのため、系の状態によらず、二準位系における x 方向と y 方向のスピンについての Kirkwood-Dirac 分布は $\delta(x \pm 1/2)\delta(y \pm 1/2)$ の線形結合となります。 \square

この命題は、Kirkwood-Dirac 分布が、通常確率同様に物理量の取り得る値のみで 0 以外の値を持つ、という点でより「確率」らしい擬確率分布であるということを意味しています。3.2 節で他の擬確率分布がこの性質を満たさないような例を見たように、擬確率分布は一般にはこの性質を満たさないで、これは Kirkwood-Dirac 分布が他の擬確率分布と比べて優れていることの例の一つと言えるでしょう。

2 つ目のトピックは、擬確率分布によって系の状態が区別できるか、つまり、擬古典化によって系の状態についての情報が損なわれないかです。これについては、Kirkwood-Dirac 分布について以下の命題が成り立ちます [3]。

命題 3.2. 二準位系の状態は、 x 方向と y 方向のスピンについての *Kirkwood-Dirac* 分布によって完全に区別できる：

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}' \iff \forall (x, y) \in \mathbb{R}^2, K_{\rho}(x, y) = K_{\rho'}(x, y). \quad (63)$$

証明. 命題 3.1 によると、Kirkwood-Dirac 分布は

$$K_{\rho}(x, y) = \sum_{(\sigma, \tau) = (\pm, \pm)} K_{\sigma\tau} \delta(x \pm \sigma/2) \delta(y \pm \tau/2), \quad (64)$$

とスピンの取り得る値のみで値を持つデルタ関数の線形結合として表されます ($K_{\pm\pm} \in \mathbb{C}$ は複素係数)。二準位系の状態を表す密度演算子はトレースが 1 の 2 次元エルミート行列であるから、一般に実パラメータ $a, b, c \in \mathbb{R}$ を用いて

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} a & b - ic \\ b + ic & 1 - a \end{pmatrix} \quad (65)$$

の形にかける。この状態における Kirkwood-Dirac 分布は、 $K_{\pm\pm} \in \mathbb{C}$ が

$$K_{++} = \frac{1-i}{4} + \frac{i}{2}a + \frac{1}{2}(b+c), \quad (66)$$

$$K_{+-} = \frac{1+i}{4} - \frac{i}{2}a + \frac{1}{2}(b-c), \quad (67)$$

$$K_{-+} = \frac{1+i}{4} - \frac{i}{2}a - \frac{1}{2}(b-c), \quad (68)$$

$$K_{--} = \frac{1-i}{4} + \frac{i}{2}a - \frac{1}{2}(b+c) \quad (69)$$

であたえられる。この関係式は逆に解けて、

$$a = \frac{1+i}{2} - iK_{++} - iK_{--}, \quad (70)$$

$$b = -\frac{1}{2} + K_{++} + K_{+-}, \quad (71)$$

$$c = -\frac{1}{2} + K_{++} + K_{-+} \quad (72)$$

となるが、これは系の状態を指定するパラメータ (a, b, c) が Kirkwood-Dirac 分布の $(J_1, J_2) = (\pm 1/2, \pm 1/2)$ における値 $\{K_{\pm\pm}\}$ によって決定されるということなので、Kirkwood-Dirac 分布によって系の状態が完全に区別されることを意味する。□

3.2 節でいくつかの例を見たように、一般には二準位系の状態は擬確率分布によって区別することはできないので、命題 3.2 は Kirkwood-Dirac 分布が良い性質を示す擬確率分布であることを意味しています。これは、Kirkwood-Dirac 型の擬古典化が量子系の状態についての情報を損なわずに古典的にあらわせるものであることを意味するとともに、系の状態を識別する上で Kirkwood-Dirac 分布が有用であるということでもあります。

3つ目の疑問として、どの状態において擬確率分布が虚部を持つかという問題があります。2.3 節において、擬古典化の方法によっては任意の状態において擬確率分布が実となる一方、擬確率分布は一般には虚数値を取り得、kirkwood-dirac 分布は後者であることを見ました。ここで、実でない擬古典化が全ての量子状態を虚部を持つ分布へとうつすわけではなく、実でない擬古典化では、擬確率分布が虚部を持つような量子状態も存在するというには注意が必要です。そこで、ではある擬確率分布分布が虚部を持つような量子状態はどのような状態なのか？ という疑問が生じます。量子光学における Wigner 関数の負性が系の量子性を表していましたが、二準位系における Kirkwood-Dirac 分布の虚部から何かわかるのでしょうか。これについては以下の命題が成り立ちます [3]。

命題 3.3. 以下の2つの主張

(i) 系の状態は Bloch 空間内において xy 平面上の点として表される;

(ii) その状態における Kirkwood-Dirac 分布は実数値のみを取る

は同値である：

$$\langle \hat{J}_3 \rangle_\rho := \text{Tr}(\hat{J}_3 \hat{\rho}) = 0 \iff \forall (x, y) \in \mathbb{R}^2, K_\rho(x, y) \in \mathbb{R} \quad (73)$$

この命題を示すために、まずは以下の補題を証明する。

補題 3.1. Bloch 空間内において xy 平面上の点として表される状態を表す密度演算子は 2 つのパラメータ $\theta \in [0, \pi]$ 、 $\phi \in [0, 2\pi)$ を用いて

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & e^{-i\phi} \sin \theta \\ e^{i\phi} \sin \theta & 1 \end{pmatrix} \quad (74)$$

の形に書ける。

証明. まず、Bloch 球の極座標表示を考えると、3 方向のスピンの期待値が $(\langle \hat{J}_1 \rangle, \langle \hat{J}_2 \rangle, \langle \hat{J}_3 \rangle) = 1/2 (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta)$ であるような状態は純粋状態であり、この状態はベクトル

$$|\psi(\theta, \phi)\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (75)$$

によって表され、この状態を表す密度演算子は

$$|\psi(\theta, \phi)\rangle \langle \psi(\theta, \phi)| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \cos \theta & e^{-i\phi} \sin \theta \\ e^{i\phi} \sin \theta & 1 - \cos \theta \end{pmatrix} \quad (76)$$

となる。次に、混合状態を 2 つの純粋状態の和に分解する方法について考える。系の状態を表す Bloch 空間内の点を P とし、 P を通り xy 平面に直行する直線を l 、 l と Bloch 球の交点を A と B とする。極座標を用いて点 A を $(1/2, \theta, \phi)$ と表すと、点 B の極座標は $(1/2, \pi - \theta, \phi)$ となります (図 6)。

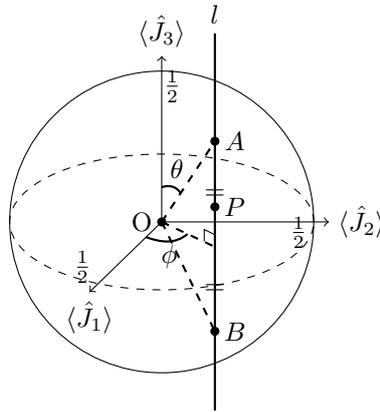


図 6 混合状態 P と純粋状態 A 、 B の Bloch 空間内における位置

点 A 、 B 、 P の定義により、点 P は必ず点 A と点 B の内分点となります。

$$\langle \hat{J}_i \rangle_P = m \langle \hat{J}_i \rangle_A + (1 - m) \langle \hat{J}_i \rangle_B, \quad m \in [0, 1], \quad i = 1, 2, 3. \quad (77)$$

特に、点 P が xy 面内にある時には、 P は A と B の中点となります。

$$\langle \hat{J}_i \rangle_P = \frac{1}{2} \langle \hat{J}_i \rangle_A + \frac{1}{2} \langle \hat{J}_i \rangle_B \quad (i = 1, 2, 3) \iff P \text{ is in the } xy \text{ plane.} \quad (78)$$

トレースの線形性により、物理量の期待値は系の状態を表す密度演算子の線形関数となり、また、3方向のスピンの期待値の組みが二準位系の状態を完全に決定することを考えると、点 P の状態を表す密度演算子は、

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_P &= m\hat{\rho}_A + (1-m)\hat{\rho}_B \\ &= m |\psi(\theta, \phi)\rangle \langle \psi(\theta, \phi)| + (1-m) |\psi(\pi - \theta, \phi)\rangle \langle \psi(\pi - \theta, \phi)| \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + (2m-1)\cos\theta & e^{-i\phi}\sin\theta \\ e^{i\phi}\sin\theta & 1 - (2m-1)\cos\theta \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (79)$$

となることが分かります。系の状態が xy 面内にあるのは $m = 1/2$ の場合なので、代入すれば補題の主張が確かめられます。 \square

この補題を用いて、命題 3.3 は以下のように証明されます。

命題 3.3 の証明. 式 (64)、(66)、(67)、(68)、(69) を見ると、Kirkwood-Dirac 分布 $K_\rho(x, y)$ が全ての (x, y) で実になるための必要十分条件は $a = 1/2$ であると分かります。密度演算子 (79) と (65) を見比べると、

$$a = \frac{1}{2} \iff m = \frac{1}{2} \iff \text{点 } P \text{ が } xy \text{ 面内にある.} \quad (80)$$

ことが分かります。そのため、

$$\begin{aligned} \forall (x, y) \in \mathbb{R}^2, K_\rho(x, y) \in \mathbb{R} &\iff a = 1/2 \\ &\iff m = 1/2 \\ &\iff \langle \hat{J}_3 \rangle_\rho = 0. \end{aligned} \quad (81)$$

\square

命題 3.3 は二準位系では x 方向と y 方向のスピンのための Kirkwood-Dirac 分布の虚部の有無が、スピンの期待値が残りの z 方向成分を持っているかどうかに対応しているということを意味しています。そのため、系のスピンの期待値が特定の方向成分を持っているかどうかはその方向と直行する2つの方向のスピンのための Kirkwood-Dirac 分布が虚部を持っているかどうかを見ればわかるということになります。

3.4 他の擬確率分布

3.3 節では Kirkwood-Dirac 分布が一般の擬確率分布では成り立たないような良い性質を示す擬確率分布であることを見ました。では逆に、擬確率分布がそのような良い振る舞いをするための擬古典化の方法に対する条件は何でしょうか。この節ではそれについてみていきます。

簡単のため、この節では hashed operator として、

$$\tilde{\#}_{J_1, J_2}^{T1}(s, t) = e^{-isa_1 \hat{J}_1} e^{-itb_1 \hat{J}_2} e^{-isa_2 \hat{J}_1} e^{-itb_2 \hat{J}_2} \dots e^{-isa_n \hat{J}_1} e^{-itb_n \hat{J}_2}, \quad (82)$$

$$\tilde{\#}_{J_1, J_2}^{T2}(s, t) = e^{-isa_1 \hat{J}_1} e^{-itb_1 \hat{J}_2} e^{-isa_2 \hat{J}_1} e^{-itb_2 \hat{J}_2} \dots e^{-isb_n \hat{J}_2} e^{-ita_{n+1} \hat{J}_1}, \quad (83)$$

$$\tilde{\#}_{J_1, J_2}^{T3}(s, t) = e^{-isb_1 \hat{J}_2} e^{-ita_1 \hat{J}_1} e^{-isb_2 \hat{J}_2} e^{-ita_2 \hat{J}_1} \dots e^{-isb_n \hat{J}_2} e^{-ita_n \hat{J}_1}, \quad (84)$$

$$\tilde{\#}_{J_1, J_2}^{T4}(s, t) = e^{-isb_1 \hat{J}_2} e^{-ita_1 \hat{J}_1} e^{-isb_2 \hat{J}_2} e^{-ita_2 \hat{J}_1} \dots e^{-isa_n \hat{J}_1} e^{-itb_{n+1} \hat{J}_2} \quad (85)$$

($\sum_i a_i = \sum_i b_i = 1, n \in \mathbb{N}$) の形のユニタリーなものだけを考えます。ここで、Wigner 型の hashed operator $\tilde{\#}_{J_1, J_2}^W(s, t)$ は $n \rightarrow \infty$ の極限として含まれます。この時、これらの hashed operator は $SU(2)$ の定義表現となります。hashed operator は一般にはこの形でないものも考えられていますが、この形のもの hashed operator の中で最も基本的なものであり、それ以外の hashed operator についても、これらの hashed operator の拡張として理解できます。

まず初めに、擬確率分布が物理量の取り得る値のみで非零の値を取るための擬古典化の方法に対する条件について考えていきます。命題 3.1 の証明での議論を思い返せば、この条件は QJSD の全ての成分がデルタ関数 $\delta(x \pm \frac{1}{2})\delta(y \pm \frac{1}{2})$ の線形結合であらわされる、つまりは hashed operator の全ての成分が指数関数 $e^{\pm i\frac{s}{2} \pm i\frac{t}{2}}$ の線形結合として表されることであると分かります。ここで、

$$e^{-isa_i \hat{J}_1} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{-i\frac{s}{2}a_i} + e^{i\frac{s}{2}a_i} & e^{-i\frac{s}{2}a_i} - e^{i\frac{s}{2}a_i} \\ e^{-i\frac{s}{2}a_i} - e^{i\frac{s}{2}a_i} & e^{-i\frac{s}{2}a_i} + e^{i\frac{s}{2}a_i} \end{pmatrix} \quad (86)$$

の成分は、 $e^{-i\frac{s}{2}a_i}$ と $e^{i\frac{s}{2}a_i}$ をともに含み、

$$e^{-itb_i \hat{J}_2} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{-i\frac{t}{2}b_i} + e^{i\frac{t}{2}b_i} & -i(e^{-i\frac{t}{2}b_i} - e^{i\frac{t}{2}b_i}) \\ i(e^{-i\frac{t}{2}b_i} - e^{i\frac{t}{2}b_i}) & e^{-i\frac{t}{2}b_i} + e^{i\frac{t}{2}b_i} \end{pmatrix} \quad (87)$$

の成分も $e^{-i\frac{t}{2}b_i}$ と $e^{i\frac{t}{2}b_i}$ をともに含むので、hashed operator (82) (83) (84) (85) の成分は一般には $e^{-i\frac{s}{2}(\pm a_1 \pm a_2 \dots \pm a_n) - i\frac{t}{2}(\pm b_1 \pm b_2 \dots \pm b_n)}$ の項を含みます。そのうちの一部の項が hashed operator の一部の成

分で消えることはありますが、全ての成分で $e^{\pm i\frac{\pi}{2} \pm i\frac{\pi}{2}}$ 以外の全ての項が打ち消されることは考えられないので、 $e^{-is\hat{J}_1}e^{-it\hat{J}_2}$ や $e^{-it\hat{J}_2}e^{-is\hat{J}_1}$ によって定まる Kirkwood-Dirac 型の分布だけがこのような性質を満たすと考えられます [3]。そのため、通常確率分布同様に物理量の「取り得る値」だけで擬確率分布が非零の値を持つかという観点では、Kirkwood-Dirac 分布は特別なものであるということが分かります。

次に、 x 方向と y 方向のスピンについての擬確率分布によって二準位系の状態が区別できるための擬古典化の方法に対する条件についてみていきます。この疑問に対する答えとしては、次の命題が成り立ちます [3]。

命題 3.4. 二準位系の状態が x 方向と y 方向のスピンについてのある擬確率分布によって完全に区別できるための必要十分条件は、その擬確率分布を定める $QJSD$ が非エルミートであることである。

この命題を示すために、以下の補題を示していきます。

補題 3.2. 二準位系の状態が x 方向と y 方向のスピンについてのある擬確率分布で区別できるための必要十分条件は、その擬確率分布を定める $QJSD$ の成分について関係式

$$(\hat{\#}_{J_1, J_2}(x, y))_{11} \neq (\hat{\#}_{J_1, J_2}(x, y))_{22} \quad (88)$$

が成り立つことである。

証明. 2.2 節で見たように、全ての擬確率分布は、各物理量についての周辺分布 (22) は通常量子論による計算 (23) と整合する全く同じ分布を与えます。そのため、擬古典化の方法によらず、 x 方向と y 方向のスピンについての擬確率分布から x 方向と y 方向のスピン期待値 ($\langle \hat{J}_1 \rangle$, $\langle \hat{J}_2 \rangle$) は周辺分布を通して計算できます。よって、 x 方向または y 方向のスピン期待値が異なるような 2 つの状態は擬古典化の方法によらず x 方向と y 方向のスピンについての擬確率分布で区別できます。二準位系の系の状態は 3 方向のスピン期待値の組 ($\langle \hat{J}_1 \rangle$, $\langle \hat{J}_2 \rangle$, $\langle \hat{J}_3 \rangle$) によって決定されるので、系の状態を完全に区別するためには、 z 方向のスピン期待値だけが異なる 2 つの状態を区別できれば良いことが分かります。系の状態を表す密度演算子から物理量の期待値を計算する方法の線形性を考えると、結局、 $|\psi(\theta, \phi)\rangle$ 状態と $|\psi(\pi - \theta, \phi)\rangle$ 状態を区別できれば良いことがわ

かります。 $|\psi(\theta, \phi)\rangle$ 状態と $|\psi(\pi - \theta, \phi)\rangle$ 状態での擬確率分布は、

$$P_{\theta, \phi}(x, y) = (\hat{\#}_{J_1, J_2}(x, y))_{11} \frac{1 + \cos \theta}{2} + (\hat{\#}_{J_1, J_2}(x, y))_{12} \frac{e^{i\phi} \sin \theta}{2} \\ + (\hat{\#}_{J_1, J_2}(x, y))_{21} \frac{e^{-i\phi} \sin \theta}{2} + (\hat{\#}_{J_1, J_2}(x, y))_{22} \frac{1 - \cos \theta}{2}, \quad (89)$$

$$P_{\pi - \theta, \phi}(x, y) = (\hat{\#}_{J_1, J_2}(x, y))_{11} \frac{1 - \cos \theta}{2} + (\hat{\#}_{J_1, J_2}(x, y))_{12} \frac{e^{i\phi} \sin \theta}{2} \\ + (\hat{\#}_{J_1, J_2}(x, y))_{21} \frac{e^{-i\phi} \sin \theta}{2} + (\hat{\#}_{J_1, J_2}(x, y))_{22} \frac{1 + \cos \theta}{2} \quad (90)$$

と計算されますから、

$$P_{\theta, \phi}(x, y) = P_{\pi - \theta, \phi}(x, y) \iff (\hat{\#}_{J_1, J_2}(x, y))_{11} = (\hat{\#}_{J_1, J_2}(x, y))_{22} \quad (91)$$

とわかります。そのため、 $(\hat{\#}_{J_1, J_2}(x, y))_{11} \neq (\hat{\#}_{J_1, J_2}(x, y))_{22}$ が二準位系の状態をその QJSD で定まる擬確率分布によって区別できるための必要十分条件であることがわかります。□

$$P_{z+}(x, y) = (\hat{\#}_{J_1, J_2}(x, y))_{11}, \quad (92)$$

$$P_{z-}(x, y) = (\hat{\#}_{J_1, J_2}(x, y))_{22} \quad (93)$$

ですから、補題 3.2 は全ての二準位系の状態が x 方向と y 方向のスピンについてのある擬確率分布で区別できるためには、結局 $|z+\rangle$ 状態と $|z-\rangle$ 状態を区別できれば良いということを意味しています。

補題 3.3. $SU(2)$ の定義表現の元

$$U = \begin{pmatrix} \mu & \nu \\ \kappa & \lambda \end{pmatrix} \in SU(2), \quad (94)$$

においては、

$$\mu = \lambda \iff \mu, \lambda \in \mathbb{R} \quad (95)$$

である。

証明. U は $SU(2)$ の定義表現なので、

$$\det U = \mu\lambda - \nu\kappa = 1, \quad (96)$$

$$UU^\dagger = \begin{pmatrix} |\mu|^2 + |\nu|^2 & \mu\kappa^* + \nu\lambda^* \\ \mu^*\kappa + \nu^*\lambda & |\kappa|^2 + |\lambda|^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (97)$$

$$U^\dagger U = \begin{pmatrix} |\mu|^2 + |\kappa|^2 & \mu^* \nu + \kappa^* \lambda \\ \mu \nu^* + \kappa \lambda^* & |\nu|^2 + |\lambda|^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (98)$$

が成り立ちます。そのため、

$$\begin{aligned} |\mu\lambda - 1|^2 &= |\nu|^2 |\kappa|^2 = (1 - |\mu|^2)(1 - |\lambda|^2) \\ 2\operatorname{Re}(\mu\lambda) &= |\mu|^2 + |\lambda|^2 \end{aligned} \quad (99)$$

よって、もし $\mu, \lambda \in \mathbb{R}$ なら、式 (99) は

$$2\mu\lambda = \mu^2 + \lambda^2 \quad \therefore \mu = \lambda \quad (100)$$

となります。また、もし $\mu = \lambda$ なら、式 (99) は

$$\operatorname{Re}(\mu^2) = |\mu|^2 \quad \therefore \mu \in \mathbb{R} \quad (101)$$

となります。これは $\mu = \lambda$ と $\mu, \lambda \in \mathbb{R}$ が同値であることを意味しています。 \square

さらに、式 (97) より、

$$\mu\kappa^* + \nu\lambda = 0 \quad (102)$$

ですから、 $0 \neq \mu = \lambda \in \mathbb{R}$ の時

$$\kappa^* = -\nu \quad (103)$$

も自動的に成立します。

補題 3.4. $(s, t) \rightarrow (-s, -t)$ という変換の元で、二準位系における x 方向と y 方向のスピンについての *hashed operator* の対角成分は不変であり、非対角成分は -1 倍となる。

証明. まず、もしある 2 つの 2 次元正方行列

$$A(s, t) = \begin{pmatrix} A_{11}(s, t) & A_{12}(s, t) \\ A_{21}(s, t) & A_{22}(s, t) \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} B_{11}(s, t) & B_{12}(s, t) \\ B_{21}(s, t) & B_{22}(s, t) \end{pmatrix} \quad (104)$$

が、 $(s, t) \rightarrow (-s, -t)$ という変換に対して、「その対角成分は不変で、非対角成分は -1 倍となる」という変換性を持つ

$$A(-s, -t) = \begin{pmatrix} A_{11}(-s, -t) & A_{12}(-s, -t) \\ A_{21}(-s, -t) & A_{22}(-s, -t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11}(s, t) & -A_{12}(s, t) \\ -A_{21}(s, t) & A_{22}(s, t) \end{pmatrix}, \quad (105)$$

$$B(-s, -t) = \begin{pmatrix} B_{11}(-s, -t) & B_{12}(-s, -t) \\ B_{21}(-s, -t) & B_{22}(-s, -t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_{11}(s, t) & -B_{12}(s, t) \\ -B_{21}(s, t) & B_{22}(s, t) \end{pmatrix} \quad (106)$$

ならば、その積

$$AB(s, t) = \begin{pmatrix} A_{11}(s, t)B_{11}(s, t) + A_{12}(s, t)B_{21}(s, t) & A_{11}(s, t)B_{12}(s, t) + A_{12}(s, t)B_{22}(s, t) \\ A_{21}(s, t)B_{11}(s, t) + A_{22}(s, t)B_{21}(s, t) & A_{21}(s, t)B_{12}(s, t) + A_{22}(s, t)B_{22}(s, t) \end{pmatrix} \quad (107)$$

も同様の変換性を満たすことが分かります。すると、式 (86) と式 (87) を見ると、指数関数 $e^{-isa_i \hat{J}_1}$ と $e^{-itb_i \hat{J}_2}$ が変換性 (105) を満たすので、その積として与えられる hashed operator(82)、(83)、(84) (85) も変換性 (105) を満たすことが分かります。□

では、これらの補題を用いて命題 3.4 は以下のように証明されます。

命題 3.4 の証明. まず、補題 3.2 から、二準位系の状態が x 方向と y 方向のスピンについてのある擬確率分布によって完全には区別できないための必要十分条件は、QJSD の成分の間の関係式

$$(\#_{J_1, J_2}(x, y))_{11} = (\#_{J_1, J_2}(x, y))_{22} \quad (108)$$

へ、さらにそれを逆 Fourier 変換して、hashed operator の間の関係式

$$(\tilde{\#}_{J_1, J_2}(s, t))_{11} = (\tilde{\#}_{J_1, J_2}(s, t))_{22} \quad (109)$$

へと言い換えられます。そして、この関係式は補題 3.3 から、

$$(\tilde{\#}_{J_1, J_2}(s, t))_{11} \in \mathbb{R}, (\tilde{\#}_{J_1, J_2}(s, t))_{22} \in \mathbb{R} \quad (110)$$

へと言い換えられます。ここで、このいずれかの条件が満たされる時、

$$(\tilde{\#}_{J_1, J_2}(s, t))_{21}^* = -(\tilde{\#}_{J_1, J_2}(s, t))_{12} \quad (111)$$

もまた成立します。^{*16}そうすると、補題 3.4 より、

$$(\tilde{\#}_{J_1, J_2}(-s, -t))_{12} = -(\tilde{\#}_{J_1, J_2}(s, t))_{12} \quad (112)$$

なので、

$$(\tilde{\#}_{J_1, J_2}(s, t))_{11} = (\tilde{\#}_{J_1, J_2}(s, t))_{22} \in \mathbb{R} \iff (\tilde{\#}_{J_1, J_2}(s, t))_{21}^* = (\tilde{\#}_{J_1, J_2}(-s, -t))_{12} \quad (113)$$

^{*16} $|z_{\pm}\rangle$ における擬確率分布に対する規格化条件から $(\tilde{\#}_{J_1, J_2}(s, t))_{11} \neq 0$ 及び $(\tilde{\#}_{J_1, J_2}(s, t))_{22} \neq 0$ なので。

であることが分かります。そのため、

$$\tilde{\#}_{J_1, J_2}^\dagger(-s, -t) = \tilde{\#}_{J_1, J_2}(s, t) \quad (114)$$

となります。ここで、2.3 節から、これは QJSD がエルミートになることと同値だと分かります。□

1 節で見たように、QJSD がエルミートであることは、擬古典化によって全ての量子状態が実分布へとうつされ、全ての物理量がエルミート演算子へと量子化されることの必要十分条件でした。そのため、命題 3.4 は、2 準位系では系の状態を 2 方向のスピンの擬確率分布で区別できるためには、擬確率分布の虚部が必要であることを意味しています。

3.5 他の物理量についての分布

3 章のこれまでの節では、二準位系における x 方向と y 方向のスピンの擬確率分布の振る舞いを調べ、Kirkwood-Dirac 分布が一般の擬確率分布では成り立たないような良い性質を示すことを見ました。そこで今節では、二準位系における他の物理量についての擬確率分布について考えます。Kirkwood-Dirac 分布については、以下の命題が成り立ちます。

命題 3.5. 二準位系の系の状態は、互いに非可換な任意の 2 つの物理量についての *Kirkwood-Dirac* 分布によって区別できる。

証明. 一般に、二準位系において、物理量は 2 次元エルミート行列で表されますが、これは

$$\hat{A} = a_0 \hat{I} + \sum_{i=1}^3 a_i \hat{\sigma}_i, \quad a_i \in \mathbb{R} \text{ for } i = 0, 1, 2, 3, \quad (115)$$

のように単位行列と $\mathfrak{su}(2)$ の定義表現の線形結合の形に書けます。ここで、実はある限られた特定の形の物理量について主張を示せば十分であることを示していきます。

まず、擬確率分布を考えたい物理量の一つをスカラー倍^{*17}しても、その物理量についての擬確率分布は

$$\begin{aligned}
K_\rho^{\alpha A, B}(x, y) &= \frac{1}{2\pi} \text{Tr}[\hat{\rho} \mathcal{F}^{-1}(\tilde{\#}_{\alpha A, B}^K(s, t))(x, y)] \\
&= \frac{1}{2\pi} \text{Tr}[\hat{\rho} \mathcal{F}^{-1}(e^{-is\alpha\hat{A}} e^{-it\hat{B}})(x, y)] \\
&= \frac{1}{2\pi} \text{Tr}[\hat{\rho} \mathcal{F}^{-1}(\tilde{\#}_{A, B}^K(\alpha s, t))(x, y)] \\
&= K_\rho^{A, B}(x/\alpha, y)
\end{aligned} \tag{116}$$

のように、単にその物理量についての軸について引き伸ばされたものになるだけなので、その擬確率分布によって系の状態が区別できるかどうかは変化しなません。また、物理量に単位行列を加えても、それは単に

$$\begin{aligned}
K_\rho^{A+I, B}(x, y) &= \text{Tr}[\hat{\rho} \hat{\#}_{A+I, B}^K(x, y)] \\
&= \frac{1}{2\pi} \text{Tr}[\hat{\rho} \mathcal{F}^{-1}(e^{-is(\hat{A}+I)} e^{-it\hat{B}})(x, y)] \\
&= \frac{1}{2\pi} \text{Tr}[\hat{\rho} \mathcal{F}^{-1}(e^{-is} e^{-is\hat{A}} e^{-it\hat{B}})(x, y)] \\
&= \text{Tr}[\hat{\rho} \hat{\#}_{A, B}^K(x-1, y)] \\
&= K_\rho^{A, B}(x-1, y)
\end{aligned} \tag{117}$$

と、分布全体をスライドさせるだけなので、これにもまたその擬確率分布によって系の状態が区別できるかどうかに影響しなません。そのため、物理量が $\mathfrak{su}(2)$ の元として表される場合だけを考えれば良いです。さらに、擬確率分布は基底を取り替える以下のようなユニタリー変換

$$\hat{\rho} \rightarrow U \hat{\rho} U^\dagger, \quad \tilde{\#} \rightarrow U \tilde{\#} U^\dagger, \tag{118}$$

に対して不変であるから、結局、それについての擬確率分布を考えたい互いに非可換な物理量のペアとして、

$$\hat{A} = \hat{\sigma}_3, \quad \hat{B} = \hat{\sigma}_3 \cos \varphi + \hat{\sigma}_1 \sin \varphi, \quad \varphi \neq n\pi, \quad n \in \mathbb{Z} \tag{119}$$

の形のものを考えれば良いことがわかります。

よって、以下この形の物理量に対して命題の主張を証明します。

$$e^{-it(\hat{\sigma}_3 \cos \varphi + \hat{\sigma}_1 \sin \varphi)} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} (1 + \cos \varphi)e^{-it} + (1 - \cos \varphi)e^{it} & \sin \varphi(e^{-it} - e^{it}) \\ \sin \varphi(e^{-it} - e^{it}) & (1 - \cos \varphi)e^{-it} + (1 + \cos \varphi)e^{it} \end{pmatrix} \tag{120}$$

^{*17} 0以外の実数

なので、Kirkwood-Dirac 型の hashed operator は、

$$\tilde{\#}_{A,B}^K(s,t) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{-is}\{(1 + \cos \varphi)e^{-it} + (1 - \cos \varphi)e^{it}\} & e^{-is}(e^{-it} - e^{it}) \sin \varphi \\ e^{is}(e^{-it} - e^{it}) \sin \varphi & e^{is}\{(1 - \cos \varphi)e^{-it} + (1 + \cos \varphi)e^{it}\} \end{pmatrix} \quad (121)$$

となります。そのため、状態 (65) における、式 (119) の物理量 A, B についての Kirkwood-Dirac 分布は、

$$K_{\rho}^{A,B}(x,y) = \sum_{(\pm,\pm)} K_{\pm\pm}^{\varphi} \delta(x \mp 1/2) \delta(y \mp 1/2), \quad (122)$$

$$K_{++}^{\varphi} = \frac{1 + \cos \varphi}{2} a + \frac{\sin \varphi}{2} (b + ic), \quad (123)$$

$$K_{+-}^{\varphi} = \frac{1 - \cos \varphi}{2} a - \frac{\sin \varphi}{2} (b + ic), \quad (124)$$

$$K_{-+}^{\varphi} = \frac{1 - \cos \varphi}{2} (1 - a) + \frac{\sin \varphi}{2} (b - ic), \quad (125)$$

$$K_{--}^{\varphi} = \frac{1 + \cos \varphi}{2} (1 - a) - \frac{\sin \varphi}{2} (b - ic) \quad (126)$$

となります。これを逆に解くと、

$$a = K_{++}^{\varphi} + K_{+-}^{\varphi}, \quad (127)$$

$$b = \frac{(K_{++}^{\varphi} + K_{-+}^{\varphi} - 1)}{\sin \varphi} - \frac{K_{++}^{\varphi} + K_{+-}^{\varphi}}{\tan \varphi}, \quad (128)$$

$$c = \frac{1}{i \sin \varphi} \left(K_{++}^{\varphi} + K_{--}^{\varphi} - \frac{1 + \cos \varphi}{2} \right), \quad (129)$$

となり、これは系の状態を指定するパラメータ (a, b, c) が Kirkwood-Dirac 分布の係数 $\{K_{\pm\pm}^{\varphi}\}$ から求められるということなので、二準位系の系の状態が物理量 A, B についての Kirkwood-Dirac 分布によって区別できることを意味しています。よって、結局、二準位系の系の状態は互いに非可換な任意の物理量のペアについての Kirkwood-Dirac 分布によって区別できることがわかります。□

この命題から、二準位系においては、系の状態を擬確率分布によって区別する上で、スピンの x 方向と y 方向は特別なわけではないことがわかります。

4 終わりに

2 章では、[1] に基づいて、擬確率分布がどう一般的な枠組みのもとに量子化と双対的に定式化されるのか、また、その応用として Wigner 関数と Aharonov 弱値についてみました。そして、3 章では、[3] に基づいて、

擬確率分布の一般的な枠組みのもと、2準位系における擬確率分布の性質を調べ、擬古典かの方法を比較しました。実は、3準位系でもほぼ同等の性質が成り立つことがわかっていて [3]、 N 準位系において一般に言えることもいくつかあります [3]。このように、擬確率分布には、量子論を古典的な確率分布的なものによって解釈しようという自然な発想であるとともに、豊かな性質をもち、量子的な性質を調べる上で有用で面白いものだと言えるでしょう。

参考文献

- [1] J. Lee, and I. Tsutsui. A General Framework of Quasi-probabilities and the Statistical Behaviour of Non-commuting Quantum Observables, Springer Proceedings in Mathematics & Statistics 261, pp.195-228, https://doi.org/10.1007/978-981-13-2487-1_9
- [2] J. Lee and I. Tsutsui. Quasi-probabilities in conditioned quantum measurement and a geometric/statistical interpretation of Aharonov's weak value, Prog. Theor. Exp. Phys., 2017(5), 05 2017. 052A01. <https://doi.org/10.1093/ptep/ptx024>
- [3] S. Umekawa, J. Lee and N. Hatano. Advantages of the Kirkwood-Dirac distribution among general quasi-probabilities for finite-state quantum systems, arXiv:2309.06836
- [4] H. F. Hofmann. Reasonable conditions for joint probabilities of non-commuting observables. Quantum Studies: Mathematics and Foundations, 1(1), 09 2014.
- [5] E. Wigner. On the quantum correction for thermodynamic equilibrium. Phys. Rev., 40:749-759, Jun 1932.
- [6] J. G. Kirkwood. Quantum statistics of almost classical assemblies. Phys. Rev., 44:31-37, Jul 1933.
- [7] P. A. M. Dirac. On the analogy between classical and quantum mechanics. Rev. Mod. Phys., 17:195-199, Apr 1945.
- [8] H. Margenau and R. N. Hill. Correlation between Measurements in Quantum Theory: . Prog. Theor. Phys., 26(5):722-738, 11 1961.
- [9] 『新版 量子光学と量子情報科学』, 古澤明, 武田俊太郎, サイエンス社 (2020)

- [10] A. Kenfack and K. Zyczkowski. Negativity of the wigner function as an indicator of non-classicality. *Journal of Optics B: Quantum and Semiclassical Optics*, 6(10):396, aug 2004.
- [11] R. W. Spekkens. Negativity and contextuality are equivalent notions of nonclassicality. *Phys. Rev. Lett.*, 101:020401, Jul 2008.
- [12] R. I. Booth, U. Chabaud, and P-E Emeriau. Contextuality and wigner negativity are equivalent for continuous-variable quantum measurements. *Phys. Rev. Lett.*, 129:230401, Nov 2022.
- [13] 谷村省吾. 弱値は以下にして負の確率を誘導するか -擬確率の幾何学的描像 https://www.phys.cs.i.nagoya-u.ac.jp/~tanimura/lectures/Tanimura_weak-value_QUATUO_201001.pdf
- [14] Y. Aharonov, D. Z. Albert, and L. Vaidman. How the result of a measurement of a component of the spin of a spin-1/2 particle can turn out to be 100. *Phys. Rev. Lett.*, 60:1351–1354, Apr 1988.
- [15] T. Morita, T. Sasaki, and I. Tsutsui. Complex probability measure and Aharonov’s weak value. *Progress of Theoretical and Experimental Physics*, 2013(5), 05 2013. 053A02.
- [16] J. Lee and I. Tsutsui. Uncertainty relation for approximation and estimation, *Phys. Lett. A* 380, 2045 (2016).