Physics Lab. 2024 量子班
聞 駿軒

量子もつれとエントロピー

1　はじめに

このポスターは線形代数と少しの量子力学の知識を仮定している箇所があります。

2　純粋状態と混合状態

物理学では、同じ「状態」を同じ作り方で用意されたものと定義します。ここで、状態 S が、「ある確率 p で状態 S_1、確率 $(1-p)$ で別の状態 A_2 が現れる」と見てもよい[*1]ときがあります。このような状態を**混合状態**とよび、そうでない状態を**純粋状態**とよびます。つまり、純粋状態は曖昧さが原理的に最小になるまで詳細を指定し尽くした状態で、混合状態とは純粋状態の確率混合である状態です。

大学に入って最初に学ぶ純粋状態についての量子力学では、純粋状態を**複素ヒルベルト空間**[*2]というベクトル空間の元として $|\Psi\rangle$ と表し、これを**状態ベクトル**といいます。量子論の重要な特徴の一つは、状態の重ね合わせができることです。これは、純粋状態 $|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle$ に対し、$|\varphi\rangle = c_1|\phi_1\rangle + c_2|\phi_2\rangle$ も純粋状態であるということです。

混合状態を含めた一般の状態を表すには**密度演算子**と呼ばれるものを使います。$|\psi\rangle$ で表される純粋状態に対し、密度演算子は

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$$

$|\psi_1\rangle, \cdots, |\psi_n\rangle$ を確率 $p_1, p_2, \cdots, p_n$ で混合したものを

$$\hat{\rho} = p_1|\psi_1\rangle\langle\psi_1| + \cdots + p_n|\psi_n\rangle\langle\psi_n|$$

で表します。密度演算子を用いることで、量子的な重ね合わせと確率混合を両立した定式化ができるのです。また、逆に $\mathrm{Tr}\,\hat{\rho} = 1$ を満たす半正定値 (固有値がすべて 0 以上) な自己共役演算子はすべてある状態と一対一に対応します。

3　エンタングルメント

系 A と系 B の合成系の純粋状態は両者の状態ベクトルの直積の重ね合わせで表されます。

$$|\Psi\rangle_{AB} = \sum_i \alpha_i |\psi\rangle_{A,i} \otimes |\phi\rangle_{B,i}$$

ここで大事なのは、全体系で純粋状態でも、片方の系にのみ着目すれば一般には混合状態であるということです。このようなとき、系 A と系 B には古典的には実現できない相関をもち、これを**エンタングルメント**といいます。

混合状態についてのエンタングルメントは、合成系が直積の確率混合で表せない、つまり合成系の密度演算子が

$$\hat{\rho}_{AB} = \sum_i p_i \hat{\rho}_{A,i} \otimes \hat{\rho}_{B,i}, \quad \sum_i p_i = 1$$

と書けないとき、系はエンタングルしているといいます。

4　エントロピー

ここで、情報理論におけるエントロピーという概念を量子論に導入します。状態 $1, 2, \cdots, n$ の確率分布が $p_1, p_2, \cdots, p_n$ であるとき、この確率分布のシャノンエントロピー (平均情報量) は

$$S = -\sum_{i=1}^{n} p_i \log p_i$$

で表されます。シャノンエントロピーは系の「曖昧さ」を定量的に表したものですこれを先ほど議論した量子状態に拡張すると、量子系のエントロピーは

$$S = -\,\mathrm{Tr}[\hat{\rho}\log\hat{\rho}]$$

で表され、これを**フォン・ノイマンエントロピー**といいます。物理量を測定するとその確率分布が得られますが、そのときの曖昧さ（シャノンエントロピー）の下限がフォン・ノイマンエントロピーです。

5　エンタングルメント測度

合成系がどれだけのエンタングルメントを持っているか定量的に表す方法はあるでしょうか。実は、**純粋状態対してはエントロピーがその尺度になる**ことが知られています。すなわち、A と B の合成系の純粋状態を片方の系 (例えば A) だけに着目したときの混合状態の確率分布についてのエントロピー

$$S_A = -\,\mathrm{Tr}[\hat{\rho}_A \log \hat{\rho}_A],\ \hat{\rho}_A = \mathrm{Tr}_B[\hat{\rho}_{AB}]$$

は、エンタングル量を表すことができます。しかし、エンタングルメントエントロピーは混合状態については適切な指標を与えないことが知られており、混合状態でも使えるエンタングルメント測度は様々なものが提案されています [1]。

参考文献

[1] 日合文雄.『行列解析から学ぶ量子情報の数理』. サイエンス社 (2023).

---

*1 正確には、任意の物理量を測ったとき、その確率分布 $P_A(S)$ が $pP_A(S_1) + (1-p)P_A(S_2)$ となることをいいます。
*2 内積が定義される完備な複素ベクトル空間