

2024 年度
青山学院大学審査学位論文

指導教員 古川信夫 教授

置換不変密度行列が保持する量子情報量を用いた
量子多体現象の解析

The analysis of quantum many-body systems
using quantum information stored in the permutationally invariant
part of the density matrix

青山学院大学大学院

理工学研究科

理工学専攻

宮崎優希

要旨

今日量子多体系の示す物理現象の解析において、量子情報理論に基づくアプローチが有効に用いられている。例えば量子 Hall 効果におけるトポロジカル秩序相は磁化などの秩序変数を定義することが不可能であり、異なるトポロジカル秩序相間の量子相転移は対称性の破れを伴わないため、従来の Ginzburg-Landau 理論 [1] では説明できない。しかし秩序変数ではなく「量子状態そのもの」が保持する量子情報量であるエンタングルメントエントロピーに着目することによって、Ginzburg-Landau 理論の枠組みを超えた汎用性の高い量子相の特徴付けが可能となった [2, 3]。我々は「量子状態そのもの」を数学的に密度行列を用いて表すことができ、系の密度行列がわかれば原理的にエンタングルメントエントロピーをはじめとする種々の量子情報量を得ることができる。しかし一般的な固体物質系では密度行列の構築は困難である。一方、光格子中の冷却原子気体系 [4]、イオントラップ系 [5] をはじめとする人工量子系では、その高いクリーンネスと制御性を活かし、同一の量子状態を準備して様々な物理量の測定を繰り返すことによって密度行列の再構築が行われている。これを量子状態トモグラフィー (quantum state tomography, QST) と呼ぶ。とはいえ、QST は粒子数に関して指数関数的に増大する実験コストによりスケールアップが困難である。更には、粒子毎に異なる量子化軸の回転操作は、光格子系の実験において現状の局所操作技術の分解能では特に困難とされる。

本研究では系の置換不変密度行列 (permutationally invariant part of the density matrix, PIDM) に注目し、量子多体系における PIDM の持つ役割を探索した。PIDM は、密度行列に対し全通りの粒子の置換を施したものを平均することで得られる。QST の文脈では、完全な密度行列の場合と異なり、PIDM の構築は多項式回数で可能であることが知られている [6]。我々は、このスケーラブルに取得可能な量が量子相転移における基底状態の性質をどのように反映するかを探索した。本論文では PIDM の (2 次の) Rényi エントロピーを、密度行列繰り込み群法とテンソルネットワークを用いて数値計算する手法を開発した。またこの数値計算手法を用いて、特に横磁場 Ising 鎖と XXZ 鎖を例に、基底状態に対して PIDM の Rényi エントロピーを計算した。結果として我々は、PIDM の Rényi エントロピーは対称化操作によって空間構造の情報を捨てることで生じる不確かさ、すなわち元の量子状態が保持する空間構造の情報を定量化していることを見出した。更に、量子相の差異が PIDM の Rényi エントロピーのスケーリング則の差異に反映される可能性を見出した [7]。

- [1] V. L. Ginzburg, and L. D. Landau, *Journal of Experimental and Theoretical Physics* **20**, 1064 (1950).
- [2] A. Kitaev and J. Preskill, *Physical Review Letters* **96**, 110404 (2006).
- [3] M. Levin and X.-G. Wen, *Physical Review Letters* **96**, 110405 (2006).
- [4] I. Bloch, *Nature Physics* **1**, 23 (2005).
- [5] R. Blatt and C. F. Roos, *Nature Physics* **8**, 277 (2012).
- [6] G. Tóth *et al.*, *Physical Review Letters* **105**, 250403 (2010).
- [7] Y. Miyazaki, G. Marmorini, N. Furukawa, and D. Yamamoto, *Physical Review A* **110**, 052422 (2024).

Abstract

It is becoming clear that the concepts originating from quantum information theory are useful for the analysis of quantum many-body physics. For example, topological ordered phases which appear in quantum Hall effect can not be explained by conventional Ginzburg-Landau theory [1], because we cannot define any order parameter and no symmetry breaking occurs. However, it has been shown that it is possible to characterize quantum phases with high generality beyond the framework of the Ginzburg-Landau theory by considering entanglement entropy, which is one of quantum information stored in the quantum state itself (density matrix) [2, 3]. We can mathematically express a quantum state by a density matrix. Given the density matrix of a system, we can, in principle, obtain quantum information about the system, including its entanglement entropy, when the system is divided into two parts. However, in the field of solid state physics, experimentally obtaining the density matrix of a system is challenging. In artificial quantum systems including cold atomic gases in an optical lattice [4], trapped-ion systems [5], etc., the reconstruction of a density matrix of multi-qubit systems has been successfully achieved by preparing the identical state repeatedly and measuring the various microscopic observables, taking advantage of the cleanness and high controllability of such systems. This process is known as quantum state tomography (QST). However, scaling up QST is hard due to the exponentially increasing cost with respect to the system size. Moreover, especially in the experiments of cold atomic gases in an optical lattice, the local rotation of quantization axes is hard within currently-available optical techniques.

In this work, we focus on the permutationally invariant part of the density matrix (PIDM), and investigate the role of PIDM in quantum many-body systems. PIDM is defined as the average over all possible site permutations of the density matrix. In the context of QST, it is recognized that PIDM requires only a polynomial number of measurements, in contrast to the exponential cost associated with reconstructing a full density matrix [6]. We examine how this experimentally tractable quantity reflects the property of the ground state of the system across a quantum phase transition. In this doctoral thesis, we develop a calculation method of second-order Rényi entropy of PIDM using density-matrix renormalization-group algorithm and tensor network. Applying this procedure, we compute the second-order Rényi entropy of PIDM for the ground state of the transverse-field Ising and XXZ chains. As a result, we find that the Rényi entropy of PIDM quantifies the uncertainty raised in discarding information regarding special structure by symmetrization, in other words, it quantifies the special information of the original quantum state. Moreover, we obtain the insight that the difference of the scaling law of the Rényi entropy of PIDM reflects the difference of quantum phases[7].

- [1] V. L. Ginzburg, and L. D. Landau, *Journal of Experimental and Theoretical Physics* **20**, 1064 (1950).
- [2] A. Kitaev and J. Preskill, *Physical Review Letters* **96**, 110404 (2006).
- [3] M. Levin and X.-G. Wen, *Physical Review Letters* **96**, 110405 (2006).
- [4] I. Bloch, *Nature Physics* **1**, 23 (2005).
- [5] R. Blatt and C. F. Roos, *Nature Physics* **8**, 277 (2012).
- [6] G. Tóth *et al.*, *Physical Review Letters* **105**, 250403 (2010).
- [7] Y. Miyazaki, G. Marmorini, N. Furukawa, and D. Yamamoto, *Physical Review A* **110**, 052422 (2024).

目次

第 1 章	イントロダクション	1
1.1	研究背景	1
1.2	本論文の構成	5
第 2 章	量子情報理論と人工量子系	6
2.1	量子状態の表し方	6
2.1.1	純粋状態と混合状態	6
2.1.2	トレース	8
2.1.3	密度行列	9
2.1.4	Rényi エントロピー・von Neumann エントロピー	11
2.1.5	種々のエントロピー	12
2.2	量子多体系における量子情報量	14
2.2.1	量子エンタングルメント	14
2.2.2	部分トレースと縮約密度行列	16
2.2.3	エンタングルメントエントロピー	20
2.2.4	量子物性物理学における量子情報量と密度行列測定の現実	22
2.3	人工量子系	23
2.3.1	歴史的背景	23
2.3.2	原子の冷却：Doppler 冷却	23
2.3.3	原子の捕獲：光双極子トラップ	25
2.3.4	原子の整列：光格子中の冷却原子系	26
2.3.5	原子の観測：量子気体顕微鏡 (QGM)	30
2.3.6	その他の人工量子系	32
第 3 章	量子状態トモグラフィー (QST) と置換不変量子状態トモグラフィー (PIQST)	34
3.1	密度行列の再構築	34
3.1.1	Pauli 基底による展開	34
3.1.2	直交基底による展開の一般化	36
3.2	QST の課題点	38
3.2.1	観測基底の指数関数的増大	38
3.2.2	量子化軸の局所的回転の困難	41
3.3	置換不変密度行列 (PIDM)	41
3.3.1	定義	41
3.3.2	置換不変基底による展開	43
3.4	PIQST の利点	45
3.4.1	線形独立な置換不変基底の数	45
3.4.2	置換不変基底の線形変換と大域的量子化軸回転	46

3.5	PIQST の実験	47
3.6	一般の純粋状態に対する PIDM	48
第 4 章	テンソルネットワークを用いた PIDM の 2 次の Rényi エントロピーの数値計算手法	50
4.1	本研究の位置付け	50
4.2	テンソルのダイアグラム表記	51
4.3	テンソル縮約	51
4.4	行列積状態 (MPS)	53
4.5	行列積演算子 (MPO)	56
4.6	PIDM の Rényi エントロピー	57
第 5 章	置換不変密度行列による量子相の特徴付け	61
5.1	横磁場 Ising 鎖	61
5.1.1	ハミルトニアンと基底状態	61
5.1.2	数値計算上の工夫	62
5.1.3	横磁場に対する PIDM の Rényi エントロピーの振舞い	63
5.1.4	高磁場領域 ($\Gamma \gg 1$) における摂動論的アプローチ	66
5.1.5	低磁場領域 ($\Gamma \ll 1$): 強磁性相互作用	67
5.1.6	低磁場領域 ($\Gamma \ll 1$): 反強磁性相互作用	71
5.1.7	PIDM の Rényi エントロピーのサイト数依存性	77
5.2	XXZ 鎖	81
5.2.1	ハミルトニアンと基底状態	81
5.2.2	容易軸異方性パラメータに対する PIDM の Rényi エントロピーの振舞い	82
5.2.3	PIDM の Rényi エントロピーのサイト数依存性	85
5.3	PIDM の Rényi エントロピーと量子相の関係	88
第 6 章	まとめと展望	89
6.1	まとめ	89
6.2	展望	90
謝辞		91
付録 A	数学的補足	93
A.1	テンソル積 (Kronecker 積)	93
A.2	Rényi エントロピーから von Neumann エントロピーの導出	94
A.3	対角化と特異値分解	95
A.4	Frobenius 内積	96
A.5	忠実度	97
A.6	摂動論	98
付録 B	PIDM の Rényi エントロピーの最大ボンド次元依存性	101
参考文献		103

第 1 章

イントロダクション

1.1 研究背景

相転移 (phase transition) 現象は我々の生活の中で馴染みがあるだけでなく、物理学者の間でも幅広い知見を与えてくれる非常に興味深い物理現象として知られている。相転移とは、ミクロスケールの同種粒子 (原子や電子など) が無数に集まったとき、温度などの外部パラメータによってそのマクロな性質が変化する現象である。系全体でマクロな性質が同じである状態を相 (phase) と呼ぶ。相転移はその名の通り、「相」が別の「相」へと「転移」する現象である。一番有名な相転移の例は氷 (固相)、水 (液相)、水蒸気 (気相) の間の状態変化であろう。これらは全て水分子の集合体であるにもかかわらず、温度や気圧というパラメータによって異なる相に変化する。他にも磁性原子 (磁気モーメントを持つ原子) の集合体である磁性体は、温度によって磁石の性質を持つ強磁性相と磁石の性質を持たない常磁性相を示す。このように有限温度において起こる相転移は古典相転移 (classical phase transition)、または単に相転移と呼ばれる。一方、絶対零度において磁場などの温度以外のパラメータ変化に伴う相転移は量子相転移 (quantum phase transition) と呼ばれる。超伝導体において外部磁場の強さを変化させたときの超伝導-常伝導転移が有名な例である。1980 年頃まで、量子相転移を含めた相転移現象はギンツブルグ-ランダウ理論 (Ginzburg-Landau theory, GL theory) [1] によってすべて説明できると考えられていた。GL 理論では、秩序変数 (order parameter) ψ を定義し、 ψ の関数として系の自由エネルギー $f(\psi)$ を与える。そして相転移現象は $f(\psi)$ の最小化に伴う系の対称性の破れ (symmetry breaking) で説明することができ、各相は ψ によって特徴づけられる。例えば磁性体における常磁性-強磁性転移では秩序変数 ψ は磁化であり、温度によって $f(\psi)$ の最小値を与える ψ の値が変化する。高温では $f(\psi)$ は $\psi = 0$ で唯一の最小値を取る関数であり、各磁気モーメントは無秩序な方向を向いているため回転対称性を保持している。従ってマクロにみると磁性体の磁気モーメントはゼロとなり磁石の性質が失われる。これが常磁性相である。温度を下げると $f(\psi)$ はいわゆるワインボトル型 (またはメキシカンハット型) の関数となり、最小値を与える ψ は有限になる。従って、巨視的な数の磁気モーメントがある同一の方向を一斉に向き (回転対称性が破れ)、系全体で有限の磁気モーメントを持つため磁石の性質を保持する強磁性相に転移する (図 1.1)。また超伝導-常伝導転移では秩序変数 ψ は波動関数であり、磁場の強さに依って $f(\psi)$ の形が変化する。高磁場では波動関数の位相に関する対称性であるゲージ対称性を保持した常伝導相 ($\psi = 0$) であり、低磁場では波動関数が有限の位相を獲得することでゲージ対称性が破れ、超伝導相に転移する。

しかし、時代は進み GL 理論を適用できない相転移現象が発見されることになる。1973 年に発見された 2 次元の古典 XY 模型におけるベレジンスキー-コステリッツ-サウレス転移 (Berezinskii-Kosterlitz-Thouless transition, BKT transition) [2] がその有名な例である。BKT 転移では転移温度よりも高温側では単独の渦が無数に発生する無秩序相が、低温側では渦と反渦が必ずペアで現れる準長距離秩序相が現れる。この 2 つの相では自由エネルギーを記述する秩序変数を定義することができず、BKT 転移の前後で系の対称性は破れていないことが知られている。また量子相転移でも、1980 年に発見された量子 Hall 効果 (quantum Hall effect) [3] において GL 理論が適用できないことが分かっている。量子 Hall 効果とは、半導体-絶縁体界面や半導体のヘテロ接合などの 2 次元の電子系に対して垂直方向に極端に強い磁場を印加した際に起こる、横電気伝導率が量子化される現象である。ここで異なる横電気伝導率を持つ状態間の相転移では対称性が破れておらず、秩序変数も定義することができない。この相転移はトポロジカル

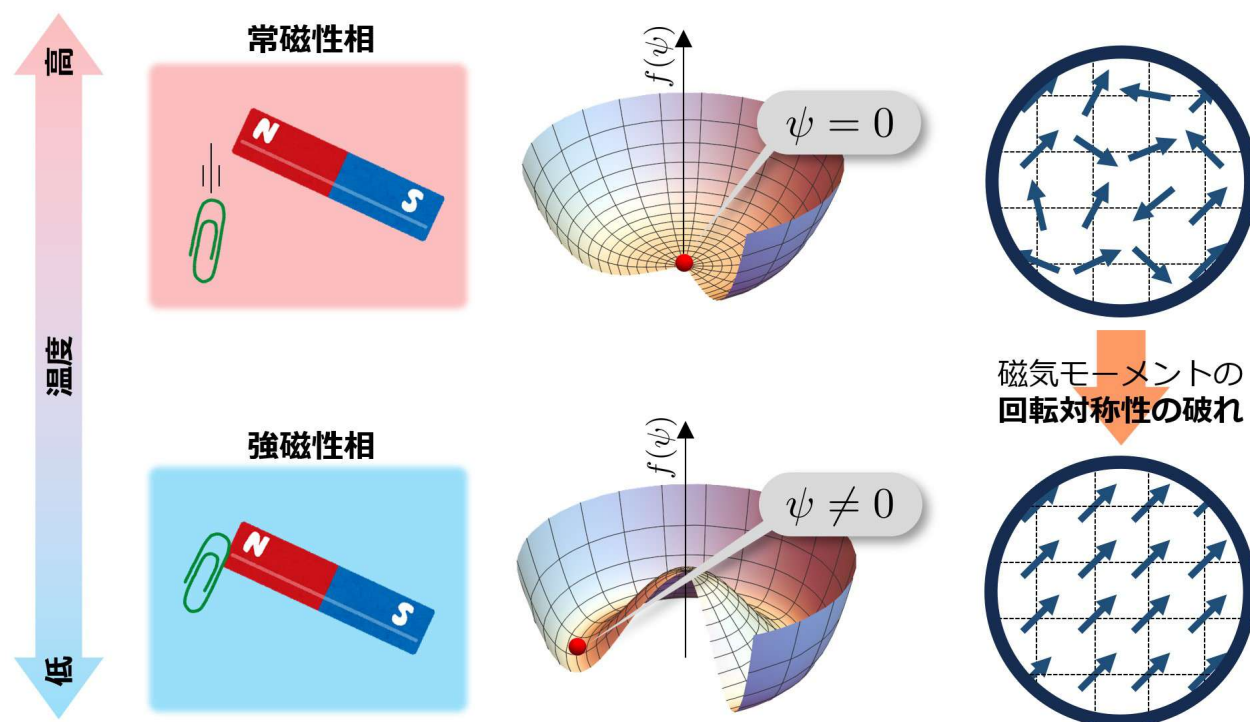


図 1.1 常磁性-強磁性転移における GL 理論

相転移 (topological phase transition) と呼ばれる^{*1}。このように GL 理論だけでは相転移現象を完全に理解することはできないため、ブレイクスルーが必要であった。

そこで注目されたのが量子情報理論 (quantum information theory) であった。情報理論 (または古典情報理論) とは、Claude Elwood Shannon による論文『A Mathematical Theory of Communication』[4] を始まりとする通信に関わる数学の理論であり、元々は物性物理学とは関係のない理論であった。1967 年、Helstrom は情報理論の概念を量子力学に应用することを考え [5, 6]、量子情報理論の基礎を作っていた。その後の量子情報理論の発展に伴い、2006 年、Kitaev らはついに問題解決の糸口を見出したのである。Kitaev らは情報理論における Shannon エントロピーを量子力学に应用したエンタングルメントエントロピーという量に注目し、そのスケーリング則によってトポロジカル秩序相を特徴づけられることを発見した [7, 8]。他にもエンタングルメントスペクトラムの構造は磁気秩序相と Haldane 相を区別することが示されている [9, 10]。エンタングルメントエントロピーをはじめとする量子情報量は秩序変数になるような物理量とは異なり「量子状態そのもの」によって決まる量であり、GL 理論における秩序変数と自由エネルギーに替わる指標として注目されている。このように今や量子情報理論は量子物性物理学と切っても切り離せない学問として理解されており、現在もお量子物性物理学は量子情報理論との融合による発展が目覚ましい。特に、素粒子論から物性理論、そして宇宙論といったスケールが異なる物理学が「量子情報」を合言葉に統一的に理解され始めている^{*2} (図 1.2)。量子状態は大きく分けて純粋状態と混合状態の二種類に分類される。純粋状態は一つの波動関数 (ケットベクトル) で表される状態で、原理的に取得可能な全ての情報を保持する量子状態である。対して混合状態は、複数の異なる純粋状態がある古典的確率で混合している状態であり、情報に「不確かさ」が残る量子状態である。混合状態を含めた量子状態は密度行列 (density matrix) によって表すことができる。密度行列は系の大きさに関し

^{*1} BKT 転移は古典的なトポロジカル相転移である。

^{*2} ベッケンシュタインとホーキングが発見したブラックホールのエントロピーの公式が有名な例であろう。ブラックホールはアインシュタインの一般相対性理論から導かれる興味深い解の一つであり、その内部の情報は外部から取り出すことはできない。そのため、ブラックホールになる前にもともと星が持っていた情報はブラックホール内に隠れていると期待される。この隠れた情報量をブラックホールのエントロピーと呼び、 $S_{BH} = k_B c^3 A_{BH} / 4 G \hbar$ (A_{BH} はブラックホールの表面積) で与えられる。この公式の美しくかつ興味深い点は、それぞれ一般相対論、量子力学、電磁気学、統計力学における基本的な物理定数である、重力定数 G 、ディラック定数 $\hbar$ 、真空中の光速 c 、ボルツマン定数 k_B が一つの式の中に現れている点であり、まさにスケールの異なる多分野を情報理論によって統一的に理解する必要があることを示唆している。

て指数関数的に大きくなる行列であり、例えば L qubit 系の密度行列は $2^L \times 2^L$ 行列となる。量子力学ではエルミート行列（エルミート演算子）は観測可能な量であり、エルミート行列である密度行列も観測可能である。より正確には、密度行列自体を観測することは不可能であるが、適当な物理量の観測データから「再構築」することが可能である。これが量子状態トモグラフィー（quantum state tomography, QST）[11, 12, 13, 14] と呼ばれるプロトコルである。QST では同一の量子状態を準備し、適当な多体相関関数を測定するプロセスを何度も繰り返すことで一つの密度行列を再構築する。固体物質系では同一の状態を何度も準備することが困難であるため QST も困難である。そこで注目されているのが光格子中の冷却原子系 [15, 16, 17, 18] やイオントラップ系 [19, 20] をはじめとする人工量子系（artificial quantum systems）である。人工量子系ではそのクリーンネスと各種パラメータの高い制御性を活かして、QST が実際に行われている。このようにして密度行列が与えられると、我々は原理的にエンタングルメントエントロピーをはじめとする種々の量子情報量を計算することができる。

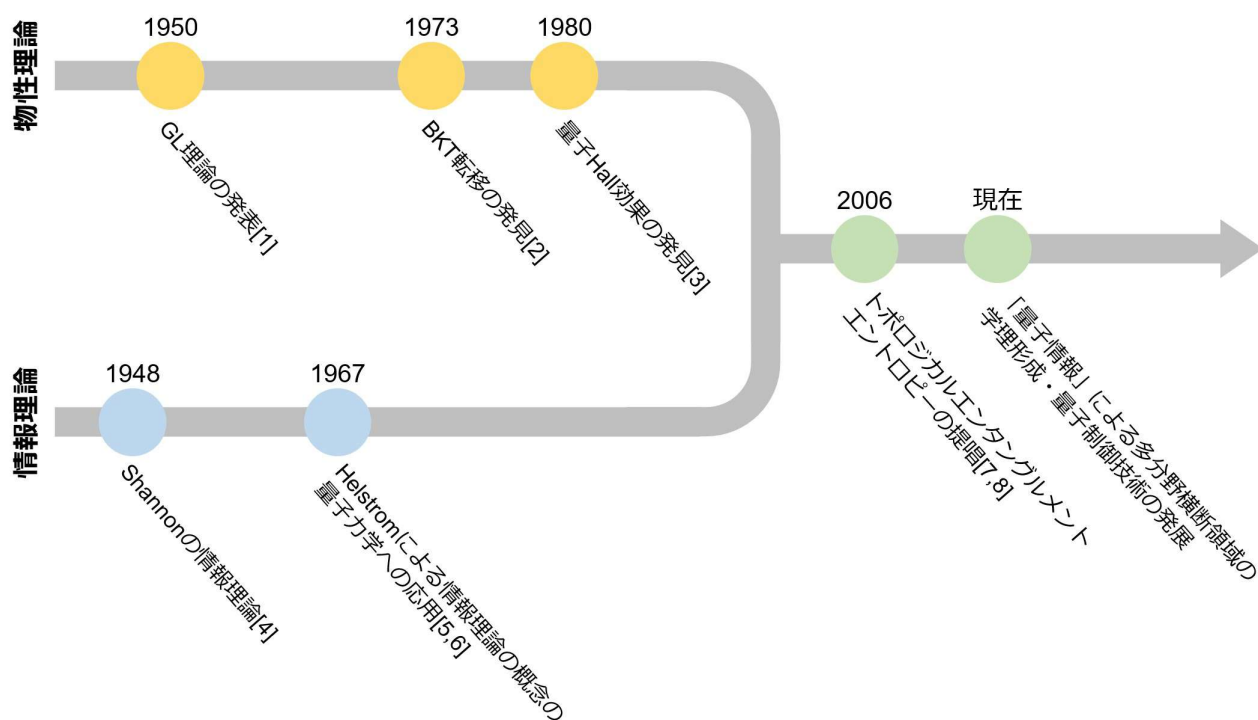


図 1.2 物性理論と情報理論の融合の歴史

とはいうものの、密度行列は系を構成する粒子数に関して指数関数的に大きくなる行列であるため、QST でも指数関数的な実験コストがかかってしまう。また多体相関関数を測定する際に必要となる、粒子毎の量子化軸の回転操作は、光格子中の冷却原子系において現状の実験技術では不可能である。このように現実問題 QST のスケールアップは残念ながら困難である。本研究では QST の抱えるスケーラビリティに関する問題に対して、置換不変量子状態トモグラフィー（permutationally invariant quantum state tomography, PIQST）[21, 22, 23] に着目した。PIQST は密度行列の代わりに置換不変密度行列（permutationally invariant part of the density matrix, PIDM）を構築するプロトコルである。PIDM は、密度行列に対し全通りの粒子の置換を施したものを対称化することで定義される。PIQST は、もともと Dicke 状態 [24] の密度行列を効率よく再構築する方法として考案された。Dicke 状態は PIDM と密度行列が一致する特殊な状態であり、このような量子状態に対しては PIQST によって実験コストを粒子数に関する冪オーダーまでに抑制しながら、かつ量子化軸の大域的回転のみで密度行列を再構築することができる。一方、一般の量子状態ではその密度行列と PIDM は一致せず、PIDM がどのような量子情報を持つのかは調べられていない。そこで本研究では、量子多体系における PIDM がどのような量子情報を保持するのかを解明し、PIDM から得られる量子情報量を量子多体系の解析へ応用することを目的とする。将来的には PIDM というスケラブルに取得可能な量による量子物性物理学と量子情報理論の統合推進への貢献を目指す。

本博士学位申請論文では、PIDM が量子相転移における基底状態の変化をどのように反映するかを探索した。研究成果としては、PIDM の (2 次の) Rényi エントロピー [25] が数値的に計算可能であることを見出し、テンソルネットワークを用いた計算手法を開発した。また開発した手法を用いて、特に横磁場 Ising 鎖と XXZ 鎖を例に、基底状態に対して PIDM の Rényi エントロピーを計算した。結果として、PIDM の Rényi エントロピーは対称化操作によって空間構造の情報を捨てることで生じる不確かさを定量化していることを見出した。言い換えると、元の量子状態が保持する空間構造の情報を定量化していることを見出した。これは、エンタングルメントエントロピーが部分系の情報を捨てることで生じる残りの部分系が持つ不確かさを定量化していること、つまり元の量子状態が持つエンタングルメントの大きさを定量化していることに対応している。更に、相の差異が PIDM の Rényi エントロピーのスケーリング則の差異に反映される可能性を見出した [26]。

1.2 本論文の構成

本論文の以降の構成は以下の通りである（図 1.3 参照）。第 2 章では本研究の基盤となる量子情報理論の基礎事項、及び量子多体系における種々の量子情報量の物理的な意味を説明する。また量子情報量の実験的測定のプラットフォームである人工量子系について説明する。第 3 章では QST とその課題点について説明する。また QST の課題を踏まえ、置換不変量子状態トモグラフィー（PIQST）についてレビューする。特に人工量子系での実験技術と PIQST の親和性、一般の量子状態に対する PIDM の持つ物理的な意味について言及する。第 4 章では前章を受けて本研究の位置付けを明確にし、我々が開発した、テンソルネットワークを用いた PIDM の Rényi エントロピーの数値計算手法について説明する。第 5 章では、前章で説明した数値計算手法によって得られた、一次元横磁場 Ising 鎖と一次元 XXZ 鎖の基底状態に対する PIDM の Rényi エントロピーの計算結果を述べ、その振る舞いについて考察する。第 6 章では本論文をまとめ、今後の展望を述べる。

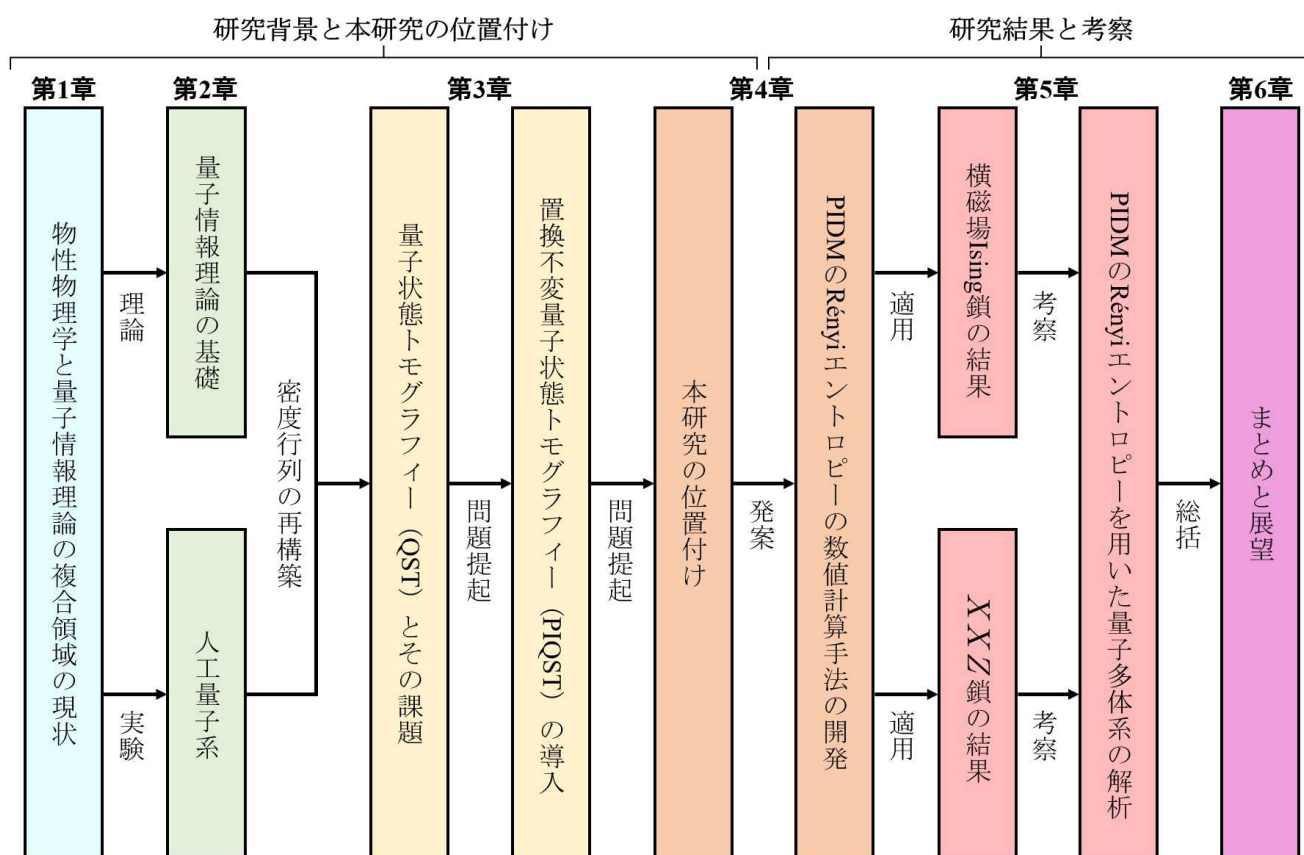


図 1.3 本論文の構成

なお本博士学位申請論文は、査読付き原著論文

[26] Y. Miyazaki, G. Marmorini, N. Furukawa, and D. Yamamoto, Physical Review A **110**, 052422 (2024) として出版した。

第 2 章

量子情報理論と人工量子系

今日の量子物性物理学は量子情報理論との融合による発展が顕著である。特に、量子情報理論に基づくアプローチが量子多体系における解析に有益であることがわかってきている。2.1, 2.2 節では、本研究の基盤となる量子情報理論の基礎事項を説明する。教科書としては、J.J.Sakurai 著『現代の量子力学（上・下）』（吉岡書店）[27] や石坂智・小川朋宏・河内亮周・木村元・林正人著『量子情報科学入門』（共立出版）[28]、Michael A. Nielsen, Isaac L. Chung 著『Quantum Computation and Quantum Information』（Cambridge University Press）[29]、中田芳史著『量子情報理論：情報から物理現象の理解まで』（朝倉書店）[30]、細谷 暁夫著『量子力学選書：量子と情報』（裳華房）[31] などが参考になる。2.3 節では、量子情報量の実験的な測定に関して重要とされている人工量子系について、代表的な例を挙げながらその概要と利点を説明する。教科書としては、富田隆文著『物性物理と量子計算のための冷却原子入門』（第 68 回物性若手夏の学校テキスト）[32] や中島秀太著『〈講義ノート〉冷却原子系を用いた量子シミュレーション実験』[33] などが参考になる。

2.1 量子状態の表し方

2.1.1 純粋状態と混合状態

古典力学における物体の運動はある一つに確定した（不確定性のない）状態である。例えば、ボールを投げたときの放物運動や振り子の往復運動は、Newton の運動方程式を解くことによりある時刻における位置と運動量が厳密に一意に定まる。一方量子力学では、粒子は波の性質も持っていることから、同時に複数の状態を「重ね合わせる」ことが許される。この量子力学的に「重ね合わさった」状態は、量子力学の基礎方程式である Schrödinger 方程式から自然に導かれる解であり、量子状態（quantum state）と呼ばれる。

時間依存しない Schrödinger 方程式は

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (2.1)$$

で与えられる。 $\hat{H}$ はハミルトニアン演算子、 E はその固有エネルギー、 $|\psi\rangle$ は各固有エネルギーに対応した固有状態である。名前に「固有」という言葉がついていることからわかるように、式 (2.1) は数学的には行列 $\hat{H}$ の固有方程式と見ることができる。すなわち、 $\hat{H}$ は行列、 E はその固有値、 $|\psi\rangle$ は固有値に対応する固有ベクトルである。量子力学において、この状態を表す縦ベクトル $|\psi\rangle$ をケットベクトルと呼ぶ。Schrödinger 方程式の解のように一つのケットベクトル $|\psi\rangle$ で表すことができる量子状態を純粋状態（pure state）と呼ぶ。純粋状態は原理的に得られる全情報を保持している量子状態である。

本論文では $S = 1/2$ の量子スピン系を扱う。 $S = 1/2$ の粒子（qubit^{*1}とも呼ぶ）には内部自由度が 2 つ存在し、しばしば「0」と「1」や「アップ」と「ダウン」などとラベリングする。ここでは前者を採用しよう。粒子が「0」で

^{*1} qubit とは quantum binary digit の略である。そもそも binary digit（略して bit）とは「0」か「1」の 2 値を取る古典コンピュータにおける情報の最小単位である。qubit は式 (2.3) のように「0」と「1」の 2 つの状態を量子力学的に重ね合わせたもので、量子コンピュータにおける情報の最小単位である。

ある状態」と「1」である状態」を

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2.2)$$

と表すと決めておくことと便利である。これをローカルな（局所的な）基底と呼ぶ。基底の決め方には自由度があるが、正規直交基底である必要がある。ここで定めた基底を用いると、1粒子の純粋状態は

$$c_0 |0\rangle + c_1 |1\rangle = \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix} \quad (2.3)$$

と書くことができる。ここで c_0, c_1 は複素数であり、 $|c_0|^2 + |c_1|^2 = 1$ を満たすものとする。式 (2.3) が表す量子状態を観測すると、確率 $|c_0|^2$ で状態 $|0\rangle$ が、確率 $|c_1|^2$ で状態 $|1\rangle$ が出現する。ここで大切なのは、我々はその「重ね合わさった」状態自体を直接観測することはできないという点である。「重ね合わさった」状態は、我々が観測した瞬間に「崩壊」し、唯一つに確定した状態になる。

次に2粒子系の純粋状態の表し方を考える。便宜上、各粒子を粒子 A、粒子 B と呼ぶことにする。2粒子系を観測したときに実現する状態は、「粒子 A も粒子 B も “0” である状態」、「粒子 A が “0” で粒子 B が “1” である状態」、「粒子 A が “1” で粒子 B が “0” である状態」、「粒子 A も粒子 B も “1” である状態」の4通りである。つまり4つの基底が必要である。これらの基底は系全体をの状態を記述する基底なので、グローバル（大域的）な基底と呼ぶ。グローバルな基底は、ローカルな基底のテンソル積 $\otimes$ （詳細は付録 A を参照せよ）によって定義すると見通しがつきやすい。上記の4状態を $|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle$ と表すことにすると、今必要な4つのグローバルな基底は

$$|00\rangle \equiv |0\rangle \otimes |0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |01\rangle \equiv |0\rangle \otimes |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |10\rangle \equiv |1\rangle \otimes |0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |11\rangle \equiv |1\rangle \otimes |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2.4)$$

で定義できる。テンソル積を用いて定義された基底をよく見てみると、2進数で表された基底 $|n_{(2)}\rangle$ は、 $n_{(2)}$ を10進数に変換した値を $m_{(10)}$ と書くと、上から $m_{(10)} + 1$ 番目の成分が1でそれ以外の成分が0の縦ベクトルで表されることが分かる。よって、2粒子系の純粋状態は

$$c_{00} |00\rangle + c_{01} |01\rangle + c_{10} |10\rangle + c_{11} |11\rangle = \begin{pmatrix} c_{00} \\ c_{01} \\ c_{10} \\ c_{11} \end{pmatrix} \quad (2.5)$$

で表すことができる。

以降このアナロジーで L 粒子系を考えることができる。 L 粒子系の純粋状態は

$$c_{00\dots 00} |00\dots 00\rangle + c_{00\dots 01} |00\dots 01\rangle + \dots + c_{11\dots 11} |11\dots 11\rangle = \begin{pmatrix} c_{00\dots 00} \\ c_{00\dots 01} \\ \vdots \\ c_{11\dots 11} \end{pmatrix} \quad (2.6)$$

のように 2^L 次元の複素縦ベクトルで表される。このケットベクトルたちは 2^L 次元の Hilbert 空間と呼ばれる複素内積空間に存在している。なお、通常ケットベクトル $|\psi\rangle$ は縦ベクトルとして扱い、そのエルミート共役はブラベクトルと呼び $\langle\psi|$ で表す。また、同一のケット $|\psi\rangle$ の n 個のテンソル積を $|\psi\rangle^{\otimes n}$ と表す。

ところで量子状態は全て純粋状態であるわけではなく、実際問題むしろ純粋状態であることの方がレアである。例えば、現実の系では絶対零度ではないため、熱揺らぎによってわずかながらも古典的な確率で複数の純粋状態が混合してしまう。他にも量子コンピューティングの文脈では、熱ゆらぎや電磁波などの影響で理想的な量子演算は不可能であ

り、ある程度の古典確率で qubit の反転エラーや位相反転エラーといったノイズが含まれてしまう*2。このようにいくつかの純粋状態が古典的な確率で混合したものを混合状態 (mixed state) と呼ぶ。すなわち我々は何らかの「不確かさ」を持つ量子状態を混合状態で表現する。混合状態は一つのケットベクトルで表すことができないため、量子力学では密度行列 (density matrix) を用いて表す。

2.1.2 トレース

密度行列を考えるために、まずはトレース (trace) と呼ばれる数学的演算を定義する。トレースとは任意の $n \times n$ 正方行列 $A = \{a_{ij}\}$ に対して

$$\text{Tr}(A) = \sum_{i=1}^n a_{ii} \quad (2.7)$$

で定義される*3。すなわち対角成分の和を返す演算である。トレースは、 $\text{Tr}(c_1 A_1 + c_2 A_2) = c_1 \text{Tr}(A_1) + c_2 \text{Tr}(A_2)$ (A_1, A_2 は行列、 c_1, c_2 は複素数) を満たす線形演算である他、巡回不変性 $\text{Tr}(A_1 A_2 A_3) = \text{Tr}(A_3 A_1 A_2) = \text{Tr}(A_2 A_3 A_1)$ を満たす演算である。また、正方行列同士のテンソル積に対して、 $\text{Tr}(A_1 \otimes A_2) = \text{Tr}(A_1) \text{Tr}(A_2)$ という性質を持つ。

トレースを違った見方で考えてみよう。行列 A のトレースは n 次元 Hilbert 空間の正規直交基底 $\{|e_i\rangle\}$ を用いて

$$\text{Tr}(A) = \sum_{i=1}^n \langle e_i | A | e_i \rangle \quad (2.8)$$

と書くこともできる。具体例として 3×3 行列

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

のトレースを考えると、

$$\begin{aligned} \text{Tr}(A) &= \sum_{i=1}^3 \langle e_i | A | e_i \rangle \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \\ &\quad \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \\ &\quad \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= a_{11} + a_{22} + a_{33} \end{aligned} \quad (2.10)$$

と、確かに対角成分を抜き出して和を取っていることが理解できる。

以降、行列 A がエルミート行列 ($A^\dagger = A$) である場合を考える。 A はユニタリー行列 U ($U^\dagger U = U U^\dagger = I$, I は単位行列) を用いて $A = U \Lambda U^\dagger$ と対角化されるのであった。 $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$ ($\{\lambda_i\}$ は A の固有値) は対角行列である。すると A のトレースは、

$$\text{Tr}(A) = \text{Tr}(U \Lambda U^\dagger) = \text{Tr}(U^\dagger U \Lambda) = \text{Tr}(\Lambda) = \sum_{i=1}^n \lambda_i \quad (2.11)$$

と計算できる。ここでトレースの巡回不変性と U のユニタリー性を用いた。すなわち、エルミート行列のトレースはその行列の固有値の和である。

*2 これらのエラーが発生しても正しい量子計算ができる量子コンピュータの開発のために、量子誤り訂正 (quantum error correction) [34] や量子誤り抑制 (quantum error mitigation) [35] といった研究が盛んに行われている。

*3 教科書や論文によってはトレースの記号を tr と小文字で表すこともあるが、本論文と同じ定義である。

ところで、しばしば行列の指数関数または対数関数に対してトレースを計算することがある。行列指数関数 (**matrix exponential**) は

$$e^A = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{A^k}{k!} = I + A + \frac{A^2}{2!} + \frac{A^3}{3!} + \cdots \quad (2.12)$$

で定義される。この行列は任意の A に対して収束することが知られている。 e^A のトレースは

$$\begin{aligned} \text{Tr}(e^A) &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \text{Tr}(A^k) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \text{Tr}(U^\dagger A^k U) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \text{Tr}(A^k) \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \text{Tr} \begin{pmatrix} (\lambda_1)^k/k! & & & \\ & (\lambda_2)^k/k! & & \\ & & \ddots & \\ & & & (\lambda_n)^k/k! \end{pmatrix} \\ &= \text{Tr} \begin{pmatrix} e^{\lambda_1} & & & \\ & e^{\lambda_2} & & \\ & & \ddots & \\ & & & e^{\lambda_n} \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^n e^{\lambda_i} \end{aligned} \quad (2.13)$$

と計算でき、その行列の固有値を指数の肩に乗せた値の和であることが分かる。

行列対数関数 (**logarithm of a matrix**) $\log(A)$ は $e^B = A$ となる行列 B であり、

$$\log(A) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k-1}}{k} (A - I)^k \quad (2.14)$$

で定義される^{*4}。 $\log(A)$ のトレースは

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\log(A)) &= \text{Tr} \left(\sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k-1}}{k} (A - I)^k \right) \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k-1}}{k} \text{Tr} (U^\dagger (A - I) U U^\dagger (A - I) U \cdots U^\dagger (A - I) U) \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k-1}}{k} \text{Tr} ((U^\dagger A U - I)(U^\dagger A U - I) \cdots (U^\dagger A U - I)) \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k-1}}{k} \text{Tr} ((A - I)^k) \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} \text{Tr} \begin{pmatrix} (-1)^{k-1}(\lambda_1 - 1)^k/k & & & \\ & (-1)^{k-1}(\lambda_2 - 1)^k/k & & \\ & & \ddots & \\ & & & (-1)^{k-1}(\lambda_n - 1)^k/k \end{pmatrix} \\ &= \text{Tr} \begin{pmatrix} \log(\lambda_1) & & & \\ & \log(\lambda_2) & & \\ & & \ddots & \\ & & & \log(\lambda_n) \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^n \log(\lambda_i) \end{aligned} \quad (2.15)$$

と計算でき、その行列の固有値を真数とする対数の和であることが分かる。

2.1.3 密度行列

トレースという演算を定義したところで、量子状態を表す密度行列を定義する。いま複数の純粋状態 $\{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \dots, |\psi_d\rangle\}$ がそれぞれ古典的な出現確率 $\{p_1, p_2, \dots, p_d\}$ (但し $p_1 + p_2 + \dots + p_d = 1$, $d = 2^L$) で混合した混合状態を考える。ここで $\{|\psi_m\rangle\}_{m=1}^d$ は互いに直交していなくてもよい。この混合状態を表す密度行列を

^{*4} 正方行列 A のすべての固有値の実数部分が正であれば $\log(A)$ は収束することが知られている。特に A が密度行列であればその固有値は正の実数なので、 $\log(A)$ は収束する。

密度行列

$$\rho = \sum_{m=1}^d p_m |\psi_m\rangle \langle \psi_m| \quad (2.16)$$

で定義する。一般に L 個の $S = 1/2$ スピン系の密度行列は $2^L \times 2^L$ 行列である。状態ベクトル $|\psi\rangle$ 自体を測定することは不可能であるが、量子力学において物理量は行列で表されるため密度行列は測定可能な量である^{*5}。

密度行列を $|\psi_m\rangle$ に作用させると

$$\rho |\psi_m\rangle = \left[\sum_{m'=1}^d p_{m'} |\psi_{m'}\rangle \langle \psi_{m'}| \right] |\psi_m\rangle = \sum_{m'=1}^d p_{m'} |\psi_{m'}\rangle \delta_{m,m'} = p_m |\psi_m\rangle \quad (2.17)$$

より、密度行列の固有値は $\{p_m\}$ であることがわかる。

密度行列は、 $\text{Tr}(\rho) = 1$ (**unit trace**)、半正定値性 (**positive semi-definiteness**)^{*6} の2つの性質を持つ正方行列である。以下でその性質を簡単に示す。

- $\text{Tr}(\rho) = 1$

ρ の固有値は古典確率 $\{p_m\}$ であり、 $\text{Tr}(\rho)$ は固有値の和なので $\text{Tr}(\rho) = 1$ が成り立つ。もしくは愚直に計算すると、

$$\text{Tr}(\rho) = \text{Tr} \left[\sum_{m=1}^d p_m |\psi_m\rangle \langle \psi_m| \right] = \sum_{m=1}^d p_m \text{Tr}(|\psi_m\rangle \langle \psi_m|) \quad (2.18)$$

ここで $|\psi_m\rangle$ はノルムが1のベクトルであり、適当なユニタリー行列 U を作用させることで $(1, 0, \dots, 0)^\top$ のような「見やすい」ベクトルに変換できる。すなわち、

$$\sum_{m=1}^d p_m \text{Tr}(|\psi_m\rangle \langle \psi_m|) = \sum_{m=1}^d p_m \text{Tr}(U |\psi_m\rangle \langle \psi_m| U^\dagger) = \sum_{m=1}^d p_m = 1 \quad \blacksquare \quad (2.19)$$

- 半正定値性： $\rho \succeq 0$

半正定値性とは固有値がすべて0以上の実数である性質であり、 $\rho \succeq 0$ で表す。 ρ の固有値は古典確率 $\{p_m\}$ であるため、自明に成り立つ。もしくは

$$\rho \succeq 0 \Leftrightarrow \forall |x\rangle, \langle x|\rho|x\rangle \geq 0 \quad (2.20)$$

であり、

$$\forall |x\rangle, \langle x|\rho|x\rangle = \sum_m p_m \langle x|\psi_m\rangle \langle \psi_m|x\rangle = \sum_m p_m |\langle x|\psi_m\rangle|^2 \geq 0 \quad \blacksquare \quad (2.21)$$

ところで、純粋状態は「ある1つの状態が確率1で混合した混合状態」と考えることができ、その密度行列は $\rho = |\psi\rangle \langle \psi|$ と書ける。すなわち、純粋状態は混合状態の特別なケースと見ることができる。また、 $\rho = I/2^L$ は最大混合状態 (**maximally mixed state**) と呼ばれ、Hilbert 空間内を張る全ての純粋状態を等確率で混合した状態である。言い換えると、無限温度における Gibbs 状態である。

密度行列の数学的な定義と性質を確認したところで、物理的な状況における密度行列を考えよう。いま温度 T の熱浴に接した粒子数の変化のない系が熱平衡状態にあったとする。この系の示すマクロな性質はカノニカルアンサンブルによって記述される。カノニカルアンサンブルでは、各状態が Boltzmann 因子による確率分布、すなわち

$$p_m = \frac{e^{-\beta E_m}}{\mathcal{Z}} = \frac{e^{-\beta \langle \psi_m | \hat{H} | \psi_m \rangle}}{\sum_m e^{-\beta \langle \psi_m | \hat{H} | \psi_m \rangle}} = \frac{\langle \psi_m | e^{-\beta \hat{H}} | \psi_m \rangle}{\sum_m \langle \psi_m | e^{-\beta \hat{H}} | \psi_m \rangle} = \frac{\langle \psi_m | e^{-\beta \hat{H}} | \psi_m \rangle}{\text{Tr}(e^{-\beta \hat{H}})} \quad (2.22)$$

^{*5} 実はこの性質こそが第3章にて説明する量子状態トモグラフィー [11, 12, 13, 14] のモチベーションにつながる。量子状態トモグラフィーは、量子状態を観測することはできない代わりに、測定データから観測する前の量子状態を再構築するというアイデアである。

^{*6} 半正定値性により、密度行列のエルミート性 ($\rho^\dagger = \rho$) は前提として成り立っている。

によって出現する^{*7}。ここで $\beta = 1/k_B T$ (k_B は Boltzmann 定数) は逆温度、 $\mathcal{Z}$ は分配関数である。このとき任意の物理量 $\hat{O}$ の期待値は

$$\begin{aligned}\langle \hat{O} \rangle &= \sum_m p_m \langle \psi_m | \hat{O} | \psi_m \rangle = \sum_{m'} \sum_m p_m \langle \psi_m | \psi_{m'} \rangle \langle \psi_{m'} | \hat{O} | \psi_m \rangle = \sum_{m'} \sum_m p_m \langle \psi_{m'} | \hat{O} | \psi_m \rangle \langle \psi_m | \psi_{m'} \rangle \\ &= \sum_{m'} \langle \psi_{m'} | \hat{O} \rho | \psi_{m'} \rangle = \text{Tr}(\hat{O} \rho)\end{aligned}\quad (2.23)$$

で計算することができる。

さてここで、ある混合状態の密度行列が与えられたとき、純粋状態の密度行列の和へ分解は必ずしも一意に定まらないということに注意したい。すなわち古典確率と純粋状態の組 $\{p_m, |\psi_m\rangle\}$ について

$$\sum_m p_m |\psi_m\rangle \langle \psi_m| = \sum_m q_m |\phi_m\rangle \langle \phi_m| \quad (2.24)$$

という関係が成り立つ、別の古典確率と純粋状態の組 $\{q_m, |\phi_m\rangle\}$ が存在する可能性があるのである。具体的には、密度行列 ρ の固有値がいずれも縮退していない場合、純粋状態への分解は一意的である。一方、一つでも固有値が縮退しているとその縮退した固有値に対応する固有ベクトル（純粋状態）には任意性が生じるため、分解が一意に定まらない。すなわち

$$\text{古典確率 } p_m \text{ で純粋状態 } |\psi_m\rangle \text{ が混合した状態} \implies \rho = \sum_{m=1}^d p_m |\psi_m\rangle \langle \psi_m| \quad (2.25)$$

は成り立つが、この逆は必ずしも成り立たない。例えば、

$$\rho = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} |0\rangle \langle 0| + \frac{1}{2} |1\rangle \langle 1| = \frac{1}{2} |+\rangle \langle +| + \frac{1}{2} |-\rangle \langle -| \quad (2.26)$$

が成り立つ。但し、 $|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$, $|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$ である。

2.1.4 Rényi エントロピー・von Neumann エントロピー

密度行列を定義したことによって混合状態まで含めた一般の量子状態を数学的に表すことができた。ここで純粋度 (purity) と呼ばれる量を次式で定義する。

純粋度

$$P(\rho) = \text{Tr}(\rho^2) \quad (2.27)$$

純粋度がどのような意味を持つのか考えよう。いま ρ は古典確率 $\{p_n\}$ ($p_1 \geq p_2 \geq \dots \geq p_d \geq 0$, $d = 2^L$) の混合状態であり、 ρ を対角化するユニタリー行列を U ($\rho = U \Lambda U^\dagger$) とすると、

$$P(\rho) = \text{Tr}(\rho\rho) = \text{Tr}(\rho U U^\dagger \rho U U^\dagger) = \text{Tr}(U^\dagger \rho U U^\dagger \rho U) = \text{Tr}(\Lambda^2) = \sum_{m=1}^d p_m^2 \quad (2.28)$$

と変形できる。まず ρ が純粋状態の時、 $p_1 = 1$, $p_2 = p_3 = \dots = p_d = 0$ であり、 $P(\rho) = 1$ となる。次に $p_1 = 1 - \varepsilon$, $p_2 = \varepsilon$, $p_3 = p_4 = \dots = p_d = 0$ (但し $0 < \varepsilon \leq 1/2$) の混合状態を考えてみる。このとき純粋度は $P(\rho) = 1 - \varepsilon(2 - \varepsilon)$ となる。 $\varepsilon(2 - \varepsilon) > 0$ であることから、純粋度は純粋状態のときのみ 1 をとり、ほんの僅かにでも状態が混合すると 1 から下がる。混合状態の中で最も純粋度が低くなるのは、 $p_1 = p_2 = \dots = p_d = \frac{1}{d}$ となる最大混合状態 (maximally mixed state) であり、その値は $P(\rho) = \frac{1}{d}$ である。実際、確率分布が $p_1 = \frac{1}{d} + \varepsilon$, $p_2 = p_3 = \dots = p_{d-1} = \frac{1}{d}$, $p_d = \frac{1}{d} - \varepsilon$ (但し $0 < \varepsilon \leq 1/d$) で与えられる最大混合状態からわずかにずれた混合状態の純粋度は、

^{*7} $e^{\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle^k}{k!} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\langle \psi | \hat{A}^k | \psi \rangle}{k!} = \langle \psi | \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\hat{A}^k}{k!} | \psi \rangle = \langle \psi | e^{\hat{A}} | \psi \rangle$ を用いた。なおこの式変形は $|\psi\rangle$ が $\hat{A}$ の固有状態であるため成り立つことに注意せよ。

$P(\rho) = \frac{1}{d} + 2\varepsilon^2$ である。以上より $1/d \leq P(\rho) \leq 1$ が成り立つことが分かる。すなわち、純粋度 $P(\rho)$ は密度行列 ρ で表される量子状態がどれだけ純粋状態 (もしくは最大混合状態) に近いかを定量化する量である。

$$\rho \text{ が純粋状態} \iff P(\rho) = 1 \quad (2.29)$$

$$\rho \text{ が混合状態} \iff \frac{1}{d} \leq P(\rho) < 1 \quad (2.30)$$

ところで密度行列が純粋状態か混合状態かを調べる量は純粋度だけではない。例えば (α 次の) **Rényi エントロピー** (α th-order Rényi entropy) [25] がある。Rényi エントロピーは次式で定義される。

α 次の Rényi エントロピー

$$S_\alpha(\rho) = \frac{1}{1-\alpha} \log \text{Tr}(\rho^\alpha) \quad (2.31)$$

α は $\alpha \in (0, 1) \cup (1, \infty)$ をとる実数である。 $\alpha = 2$ の場合は、純粋度 $P(\rho)$ を用いて $S_2(\rho) = -\log P(\rho)$ と表すことができる。このように Rényi エントロピーは、定性的には α の値に依らず純粋度に関して単調減少する関数であり、

$$\rho \text{ が純粋状態} \iff S_\alpha(\rho) = 0 \quad (2.32)$$

$$\rho \text{ が混合状態} \iff 0 < S_\alpha(\rho) \leq \log d \quad (2.33)$$

が成り立つ。特に α が自然数の場合、 $\log d \geq S_1(\rho) \geq S_2(\rho) \geq \dots \geq S_\infty(\rho) \geq 0$ という関係式が知られている。 $\alpha = 1$ のときは、式 (2.31) の分母が発散して愚直に定義式を使うことができないため、 $\alpha \rightarrow 1$ の極限值として

von Neumann エントロピー

$$S(\rho) = \lim_{\alpha \rightarrow 1} S_\alpha(\rho) = -\text{Tr}(\rho \log \rho) = -\sum_{m=1}^d p_m \log p_m \quad (2.34)$$

と定義する (導出は付録 A を参照せよ)。この量は **von Neumann エントロピー** (von Neumann entropy) と呼ばれる。von Neumann エントロピーは Rényi エントロピーと同様

$$\rho \text{ が純粋状態} \iff S(\rho) = 0 \quad (2.35)$$

$$\rho \text{ が混合状態} \iff 0 < S(\rho) \leq \log d \quad (2.36)$$

を満たす。なお $p_m = 0$ のときは愚直に $-p_m \log p_m$ が計算できないため、極限值として $-p_m \log p_m = \lim_{x \rightarrow 0} (-x \log x) = 0$ と考える (図 2.1 参照)。

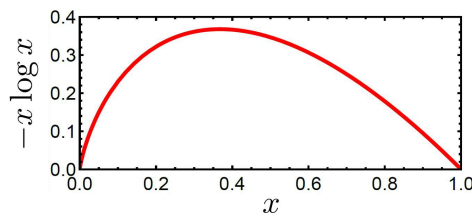


図 2.1 関数 $f(x) = -x \log x$

2.1.5 種々のエントロピー

Claude Elwood Shannon は “起こりにくい (レアな) 事象が起こったときは、得られる「情報量」が大きい” と考え、「情報量」という新しい量を

$$I(x) = -\log p(x) \quad (2.37)$$

で定義した*8。ここで x は事象、 $p(x)$ はその事象が起こる確率である。つまりレアな事象 x (小さな $p(x)$) が起こった時の情報量は大きく、ありふれた事象 x (大きな $p(x)$) が起こった時の情報量は小さいと考えたのである。Shannon は $I(x)$ の期待値として **Shannon エントロピー (Shannon entropy)** [4]

$$H(X) = - \sum_{x \in X} p(x) \log p(x) \quad (2.38)$$

を定義した*9。 $X = \{x_1, x_2, \dots\}$ は確率変数である。 $H(X)$ は観測によって確率変数 X が確定したときに、観測者の情報量が大体どのくらい増えるのかを表し、確率変数 X の「不確かさ」とも意味付けされる量である。ここで式 (2.34) と式 (2.38) の形が似ていいことに気が付く。更には対応している $p(x)$ と p_m は、両者とも確率という意味を持つ変数である。実は **von Neumann エントロピー** は **Shannon エントロピー** の「量子版」ということができ、**von Neumann エントロピー** は量子状態の「不確かさ」を表す量である。すなわち、純粋状態は原理的に全情報を保持している不確かさのない状態であるため、von Neumann エントロピーは 0 となる。反対に、混合状態には不確かさが残るため有限の von Neumann エントロピーが得られると解釈できる。

量子状態の「不確かさ」と von Neumann エントロピーの関係

$$\rho \text{ は純粋状態} \iff \rho \text{ は「不確かさ」のない状態} \iff S(\rho) = 0 \quad (2.39)$$

$$\rho \text{ は混合状態} \iff \rho \text{ は「不確かさ」のある状態} \iff 0 < S(\rho) \leq \log d \quad (2.40)$$

ところで「エントロピー」という単語が入った量は、量子情報理論をはじめ、Shannon の古典情報理論、熱力学、統計力学など異なる分野で登場するが、これには理由がある。それは種々のエントロピーは図 2.2 に示ような関係で繋がっており、定義式や考えている状況は異なるもののいずれのエントロピーも「不確かさ」という意味を持つ量として共通しているからである。

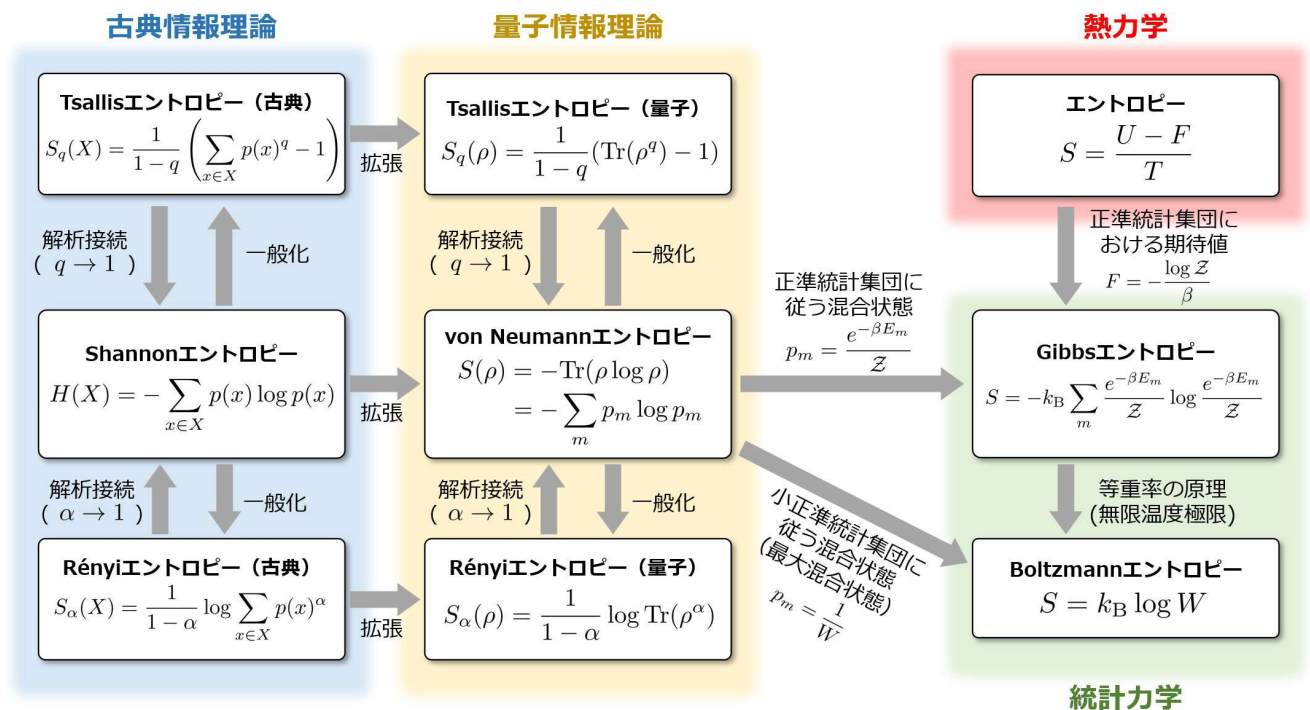


図 2.2 種々のエントロピーの関係

*8 $I(x)$ の関数形 (対数の底などの自由度は除く) は、(i) $p(x)$ に関して単調減少、(ii) 2つの独立な事象 x, y に対して $I(xy) = I(x) + I(y)$ を満たす、(iii) 連続である、という条件によって決まる。本論文では自然対数を用いたが、情報理論ではしばしば底が 2 の対数を用いる。

*9 情報量も Shannon エントロピーも無次元量である。底が 2, e , 10 のものにはそれぞれ bit, nat, hartley という単位が使われる。

Rényi エントロピー、von Neumann エントロピーを定義したことで、与えられた量子状態が純粋状態なのか混合状態なのかを式 (2.39), (2.40) のように判別することが可能となった。以降ではこの「不確かさの定量化」を応用した物理的に意味のある種々の量子情報量を紹介しよう。

2.2 量子多体系における量子情報量

2.2.1 量子エンタングルメント

量子力学特有の性質のうち歴史的に最も物議を醸したもののといえば、量子エンタングルメント (quantum entanglement) であろう。量子エンタングルメントとは量子的な状態の重ね合わせに起因する非局所的な相関のことである。量子エンタングルメントの存在は、1935 年に局所实在論^{*10}を唱える Einstein, Podolsky, Rosen による思考実験 [36] (現在では EPR パラドックスとして知られる) によって否定的な議論がなされ、局所实在論を破る量子力学の不完全さが謳われていた。量子エンタングルメントの存在は物理学の根幹に関わる基礎的な問題として特に注目されたのであった。しかし 1982 年、実験的に量子エンタングルメントが確認されると [37]、これまで否定されていた量子力学が肯定されることになり、パラダイムシフトが起こった。

例として 2 粒子系の量子エンタングルメントを考えよう。いま Alice と Bob^{*11}がそれぞれ 1 粒子を持っており、全体系が $|\psi\rangle = |0\rangle \otimes |1\rangle$ で表される状態を取っているとする (図 2.3)。ここで 1 つ目のケットが Alice、2 つ目のケットが Bob の系を表す。この $|\psi\rangle$ という状態を壊さないように 2 粒子間の距離をあけ、1 つ目の粒子は Alice が、2 つ目の粒子は Bob が観測などの量子的な操作ができる状況を考えよう。 $|\psi\rangle$ は確率 1 で状態 $|0\rangle \otimes |1\rangle$ となる状態である。つまり Alice が自分の系を測定すると 100% で状態 $|0\rangle$ を得る。このとき Bob は自分の系を観測しなくても確実に 100% で $|1\rangle$ であることが言える。このとき A の観測は B の観測結果に何も影響を与えておらず、量子エンタングルメントは存在していない。つまり古典的な状態である。

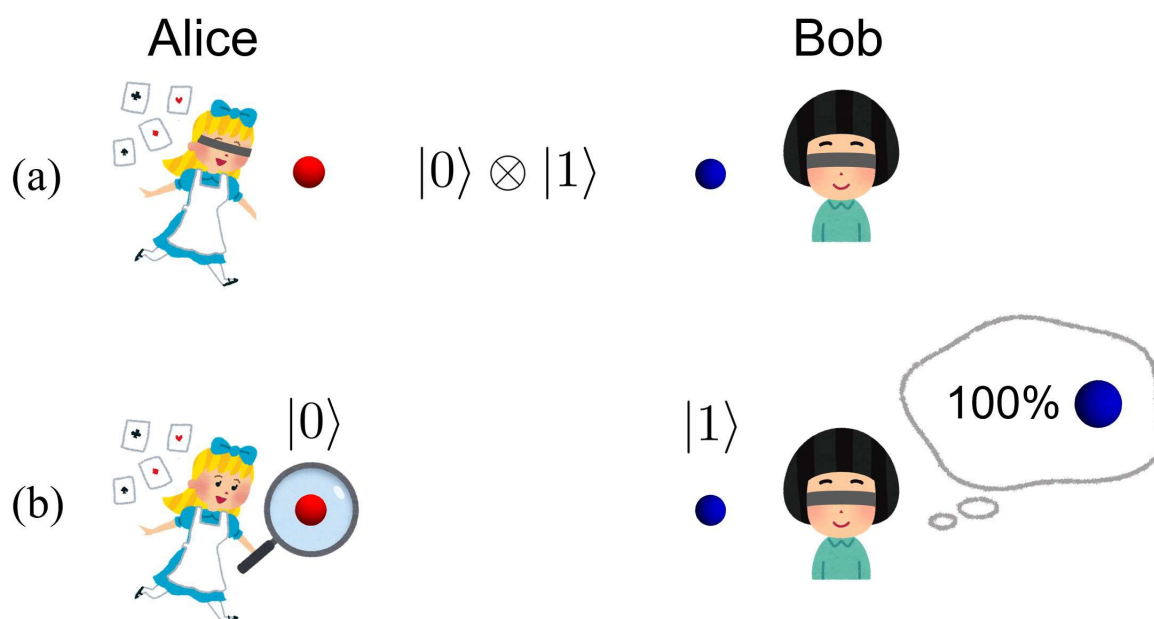


図 2.3 量子エンタングルメントの無い状態の概念図。(a) Alice と Bob はエンタングルの無い純粋状態を共有している。このとき両者はまだ自分の系を測定していない。(b) Alice が自分の粒子を測定する。Bob は測定していない。しかし、Bob の粒子の状態は測定しなくても状態が確定する。

^{*10} 「局所性」と「实在論」を合わせた理論。「局所性」は「ある地点で起こった事象によって、遠くの地点での実験結果が直ちに変わることは無い」という性質、实在論とは「物体の状態は観測とは無関係にもともと確定している」という考え方である。古典力学、古典電磁気学は局所实在論に基づく理論である。

^{*11} 量子情報分野ではしばしば、2 つの離れた粒子に対してそれぞれ LOCC を行う架空の人物 Alice と Bob が登場する。この二人に加え第三の当事者として Carol もしくは Charlie や、量子暗号理論などでは Alice と Bob の間の量子通信を盗聴する Eve が登場する。

一方、 $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle \otimes |1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle \otimes |0\rangle$ という量子状態を考えてみよう (図 2.4(a))。 $|\psi\rangle$ は確率 $1/2$ で状態 $|0\rangle \otimes |1\rangle$ 確率 $1/2$ で状態 $|1\rangle \otimes |0\rangle$ が現れる量子状態である。ここで Alice が自分の粒子の測定を行い、仮にその観測結果が $|0\rangle$ であったとする。Bob は測定は行わない。すると測定によって量子状態 $|\psi\rangle$ は崩壊し、唯一つの状態に確定する。同時に 2 つ目の粒子は測定しなくても $|1\rangle$ の状態に確定してしまう。つまり Alice の測定結果が Bob の粒子の状態に影響を及ぼしてしまうのである。これが量子エンタングルメントという古典力学では現れない性質である。ここで「Alice が粒子を測定した瞬間に Bob は粒子の状態がわかる」というのは正しい理解ではないことに注意する。言い方を変えようと、情報が一瞬で (光速を超えて) 伝わるようなことは無い。正しくは、Alice の測定によって Bob の粒子の状態は確定しているが、Bob 自身はまだ粒子の状態はわからないのである (図 2.4(b))。Alice が粒子の測定結果を何かしらの古典的通信手段 (電話やメールなど) で Bob に伝えた瞬間に Bob は自分の粒子の状態がわかるのである (図 2.4(c))。つまり情報は有限の時間をもって伝わるのである。以上のように、Alice は Alice の量子系、Bob は Bob の量子系にのみ何かしらの量子操作を行い、お互いの情報交換は古典的なツールによって行われるプロトコルの枠組みを局所操作と古典通信 (local operations and classical communication, LOCC) [38] と呼ぶ^{*12}。

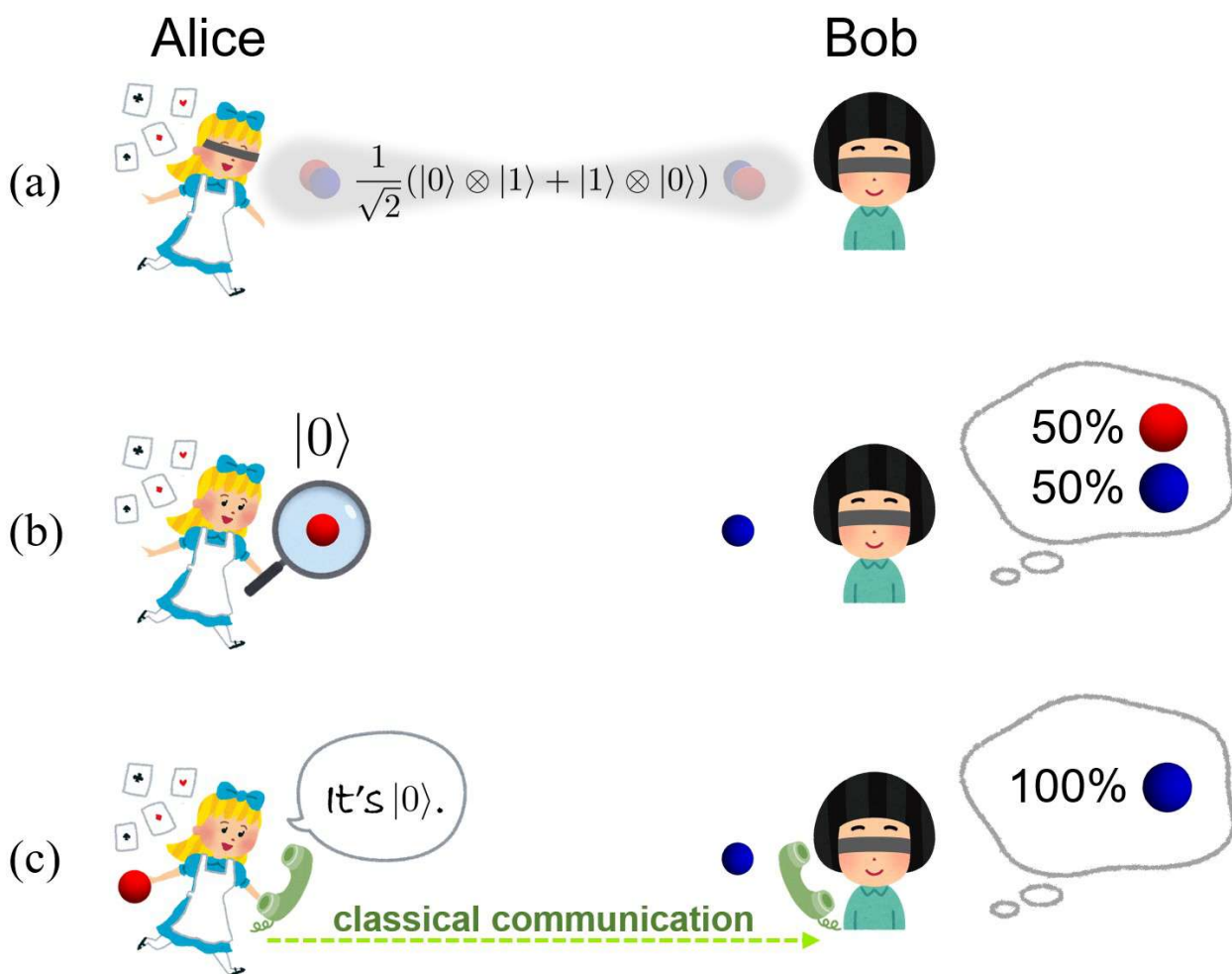


図 2.4 量子エンタングルメント及び LOCC の概念図。(a) Alice と Bob はエンタングルした純粋状態を共有している。このとき両者はまだ自分の系を測定していない。(b) Alice が自分の粒子を測定する (LO)。Bob は測定していない。このときははじめの量子状態は崩壊しただ一つの状態に確定するが、Alice の持っている情報を Bob に伝えない限り、Bob には粒子の状態に「不確かさ」が残る。(c) Alice が Bob に電話で測定結果を伝える (CC)。この瞬間 Bob は自分の粒子の状態が確定する。

^{*12} LOCC の枠組みで実行可能なプロトコルとしては、量子テレポーテーション [39] やエンタングルメント濃縮 [40]、エンタングルメント希釈 [40] などが有名な例である。

量子エンタングルメントは量子多体系で良く現れる重要な性質であり、量子状態の同定や相転移現象をはじめとする量子多体現象の解析において量子エンタングルメントを定量化することは有益である。次節では、密度行列を用いて量子エンタングルメントを定量化する方法を紹介しよう。実は関係式 (2.39) と (2.40) を使うと、量子エンタングルメントをうまく定量化できるのである。

2.2.2 部分トレースと縮約密度行列

量子エンタングルメントの定量化のために、まずは部分トレース (**partial trace**) と呼ばれる演算を定義しよう。まず L 粒子系を2つの補完的な部分系 A と B に分け、それぞれに含まれる粒子数が L_A, L_B である状況を考える ($L_A + L_B = L$)。すなわち各部分系の状態を表すベクトルは、それぞれ $d_A (= 2^{L_A})$ 次元、 $d_B (= 2^{L_B})$ 次元 Hilbert 空間に存在し、その正規直交基底を $\{|a\rangle\}_{a=1}^{d_A}, \{|b\rangle\}_{b=1}^{d_B}$ と書くことにする。

全体系の純粋状態 $|\psi\rangle$ は

$$|\psi\rangle = \sum_{a=1}^{d_A} \sum_{b=1}^{d_B} C_{a,b} |a\rangle \otimes |b\rangle \quad (2.41)$$

と表すことができる。係数 $C_{a,b}$ は2階テンソルであり、その (a, b) 成分が $C_{a,b}$ である行列 C を特異値分解 (singular value decomposition, SVD) (詳細は付録 A を参照せよ) すると、

$$C = U \Sigma V^\dagger, \quad C_{a,b} = \sum_{i=1}^{\chi} U_{a,i} \Sigma_{i,i} V_{i,b}^\dagger \quad (2.42)$$

より、

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_{a=1}^{d_A} \sum_{b=1}^{d_B} \sum_{i=1}^{\chi} U_{a,i} \Sigma_{i,i} V_{i,b}^\dagger |a\rangle \otimes |b\rangle \\ &= \sum_{i=1}^{\chi} \Sigma_{i,i} \left(\sum_{a=1}^{d_A} U_{a,i} |a\rangle \right) \otimes \left(\sum_{b=1}^{d_B} V_{i,b}^\dagger |b\rangle \right) \\ &= \sum_{i=1}^{\chi} \sigma_i |\alpha_i\rangle \otimes |\beta_i\rangle \end{aligned}$$

と変形できる^{*13}。この変形を **Schmidt 分解 (Schmidt decomposition)** と呼ぶ。但し $\chi = \min(d_A, d_B)$ とした。 χ を **Schmidt ランク** と呼ぶ。 $\{|a\rangle\}, \{|b\rangle\}$ が正規直交基底なので、それをユニタリー変換した $\{|\alpha_i\rangle\}, \{|\beta_i\rangle\}$ も正規直交基底である。 $\{\sigma_i\}_{i=1}^{\chi}$ を C の特異値 (**singular value**) と呼び、 $\sigma_i \rightarrow \tilde{\sigma}_i = \sqrt{\sigma_i / \sum_i \sigma_i}$ と規格化することで、 $(\tilde{\sigma}_i)^2$ は状態 $|\alpha_i\rangle \otimes |\beta_i\rangle$ が出現する確率を与える。一般に純粋状態はその部分系の正規直交基底を使って必ず Schmidt 分解できることが知られている。

さて、改めて全体系の純粋状態が

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{\chi} \sigma_i |\alpha_i\rangle \otimes |\beta_i\rangle \quad (2.43)$$

で与えられているとき、その密度行列は

$$\begin{aligned} \rho = |\psi\rangle \langle\psi| &= \left(\sum_{i=1}^{\chi} \sigma_i |\alpha_i\rangle \otimes |\beta_i\rangle \right) \left(\sum_{j=1}^{\chi} \sigma_j \langle\alpha_j| \otimes \langle\beta_j| \right) \\ &= \sum_{i=1}^{\chi} \sum_{j=1}^{\chi} \sigma_i \sigma_j |\alpha_i\rangle \langle\alpha_j| \otimes |\beta_i\rangle \langle\beta_j| \end{aligned} \quad (2.44)$$

^{*13} 行列 C は $L_A = L_B$ の場合は正方行列、 $L_A \neq L_B$ の場合は長方形列となるが、特異値分解は任意の行列に対して実行可能である。

と書くことができる。ここで ρ を部分系 B の完全正規直行基底で挟んで和を取ると

$$\begin{aligned}
 \rho_A &\equiv \text{Tr}_B(\rho) = \text{Tr}_B \sum_i \sum_j \sigma_i \sigma_j |\alpha_i\rangle \langle \alpha_j| \otimes |\beta_i\rangle \langle \beta_j| \\
 &= \sum_m \langle \beta_m | \left[\sum_i \sum_j \sigma_i \sigma_j |\alpha_i\rangle \langle \alpha_j| \otimes |\beta_i\rangle \langle \beta_j| \right] | \beta_m \rangle \\
 &= \sum_m \sum_i \sum_j \sigma_i \sigma_j |\alpha_i\rangle \langle \alpha_j| \otimes \langle \beta_m | \beta_i \rangle \langle \beta_j | \beta_m \rangle \\
 &= \sum_m \sum_i \sum_j \sigma_i \sigma_j |\alpha_i\rangle \langle \alpha_j| \delta_{m,i} \delta_{j,m} \\
 &= \sum_i \sum_j \sigma_i \sigma_j |\alpha_i\rangle \langle \alpha_j| \delta_{j,i} \\
 &= \sum_i \sigma_i^2 |\alpha_i\rangle \langle \alpha_i|. \tag{2.45}
 \end{aligned}$$

と変形でき、和を取らなかった部分系 A のみに関する密度行列が残る。すなわち、部分トレースをとった部分系に関する情報はなくなってしまふ。これが部分トレースという演算であり、 ρ_A を A の縮約密度行列 (**reduced density matrix**) と呼ぶ。部分トレースの記号 Tr_x の添え字 x は部分系 x の正規直交基底で部分トレースをとること、縮約密度行列の記号 ρ_y の添え字 y は部分系 y の正規直交基底によって記述されていることを表しており、一般に $y = \bar{x}$ が成り立つ。部分系 A についての縮約密度行列は $d_A \times d_A$ 行列、部分系 B についての縮約密度行列は $d_B \times d_B$ 行列になる。

式 (2.45) を見ると、 $\{\sigma_i\}$ のうち一つが 1 でそれ以外が 0 の場合、縮約密度行列は純粋状態であることがわかる。このとき式 (2.43) より、部分トレースを行う前の状態は $|\psi\rangle = |\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle$ である。このような純粋状態はセパラブル状態 (**separable state**) もしくは積状態 (**product state**) と呼ばれる。これはまさに図 2.3 のように量子エンタングルメントが存在しない状態である (図 2.5(a))。また ρ_A が純粋状態であることは、B の情報を捨てても A に関する情報は保持され、A には「不確かさ」がないことを意味している。一方、有限の σ_i が複数存在する場合はエンタングル状態 (**entangled state**) と呼ばれ、縮約密度行列は混合状態になる (図 2.5(b))。これは、B の情報を捨てたときに A の状態に「不確かさ」が生じることを意味している。

今度は密度行列が行列として与えられたときに、部分トレースがどのような演算か見てみよう。まずは簡単のため 2 粒子系

$$|\psi\rangle = c_{00}|0\rangle \otimes |0\rangle + c_{01}|0\rangle \otimes |1\rangle + c_{10}|1\rangle \otimes |0\rangle + c_{11}|1\rangle \otimes |1\rangle \tag{2.46}$$

を考える。ここでは 1 粒子目を部分系 A、2 粒子目を部分系 B として考え、それぞれの部分系に関するケット (もしくはブラ) を赤、青で区別している。全系の密度行列は

$$\begin{aligned}
 \rho &= c_{00}c_{00}^*|0\rangle \langle 0| \otimes |0\rangle \langle 0| + c_{00}c_{01}^*|0\rangle \langle 0| \otimes |0\rangle \langle 1| + \cdots + c_{11}c_{11}^*|1\rangle \langle 1| \otimes |1\rangle \langle 1| \\
 &\equiv c_{00,00}|0\rangle \langle 0| \otimes |0\rangle \langle 0| + c_{00,01}|0\rangle \langle 0| \otimes |0\rangle \langle 1| + \cdots + c_{11,11}|1\rangle \langle 1| \otimes |1\rangle \langle 1| \\
 &= \begin{pmatrix} c_{00,00} & c_{00,01} & c_{01,00} & c_{01,01} \\ c_{00,10} & c_{00,11} & c_{01,10} & c_{01,11} \\ c_{10,00} & c_{10,01} & c_{11,00} & c_{11,01} \\ c_{10,10} & c_{10,11} & c_{11,10} & c_{11,11} \end{pmatrix} \tag{2.47}
 \end{aligned}$$

で与えられる。部分系 B に関する部分トレースは定義 (2.45) より

$$\begin{aligned}
 \text{Tr}_B(\rho) &= \sum_m \langle \beta_m | \rho | \beta_m \rangle \\
 &= \sum_m (c_{00,00}|0\rangle \langle 0| \otimes \langle \beta_m | 0 \rangle \langle 0 | \beta_m \rangle + c_{00,01}|0\rangle \langle 0| \otimes \langle \beta_m | 0 \rangle \langle 1 | \beta_m \rangle + \cdots + c_{11,11}|1\rangle \langle 1| \otimes \langle \beta_m | 1 \rangle \langle 1 | \beta_m \rangle) \tag{2.48}
 \end{aligned}$$

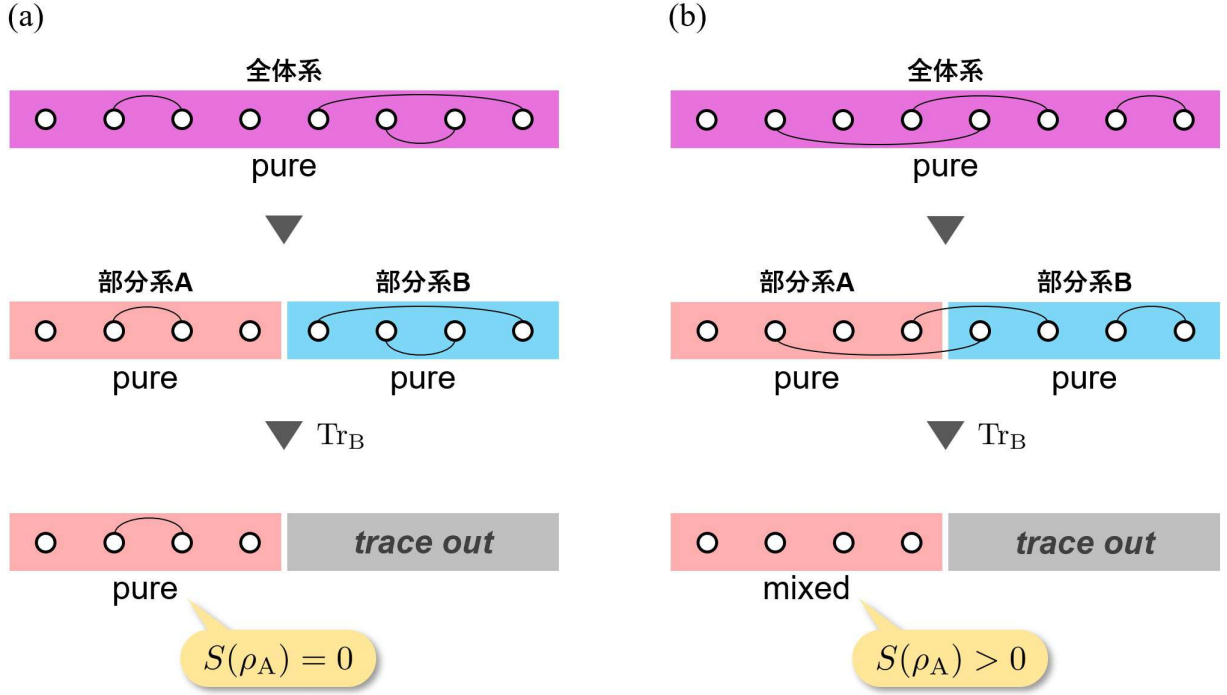


図 2.5 (a) セパラブル状態（積状態）と (b) エンタングル状態における部分トレースとエンタングルメントエントロピーの概略。丸は粒子を表し、丸同士をつなぐ線は量子エンタングルメントの存在を模式的に表している。

と書ける。ここで m の和を取ったときに残る項は、

$$\begin{aligned}
 & c_{00,00} |0\rangle\langle 0| \otimes |0\rangle\langle 0| + c_{00,11} |0\rangle\langle 0| \otimes |1\rangle\langle 1| + c_{01,00} |0\rangle\langle 1| \otimes |0\rangle\langle 0| + c_{01,11} |0\rangle\langle 1| \otimes |1\rangle\langle 1| + \\
 & c_{10,00} |1\rangle\langle 0| \otimes |0\rangle\langle 0| + c_{10,11} |1\rangle\langle 0| \otimes |1\rangle\langle 1| + c_{11,00} |1\rangle\langle 1| \otimes |0\rangle\langle 0| + c_{11,11} |1\rangle\langle 1| \otimes |1\rangle\langle 1|
 \end{aligned} \quad (2.49)$$

である。つまり、4通りの $|\alpha_i\rangle\langle \alpha_j|$ に対して、 $|0\rangle\langle 0|$ と $|1\rangle\langle 1|$ の場合のみ残る。ここで式 (2.47) において、 ρ を 2×2 のブロックごとに区切ると、

$$\rho = \left(\begin{array}{cc|cc} c_{00,00} & c_{00,01} & c_{01,00} & c_{01,01} \\ c_{00,10} & c_{00,11} & c_{01,10} & c_{01,11} \\ \hline c_{10,00} & c_{10,01} & c_{11,00} & c_{11,01} \\ c_{10,10} & c_{10,11} & c_{11,10} & c_{11,11} \end{array} \right) \equiv \left(\begin{array}{cc} C_{00} & C_{01} \\ C_{10} & C_{11} \end{array} \right) \quad (2.50)$$

となり各ブロックの要素は $|\alpha_i\rangle\langle \alpha_j|$ が同じ項の係数であることが分かる。また各ブロックの対角成分は、部分系 B が $|0\rangle\langle 0|$ と $|1\rangle\langle 1|$ である成分であることに気が付く。すなわち縮約密度 ρ_A は

$$\rho_A = \left(\begin{array}{cc} \text{Tr}(C_{00}) & \text{Tr}(C_{01}) \\ \text{Tr}(C_{10}) & \text{Tr}(C_{11}) \end{array} \right) \quad (2.51)$$

と書くことができる。

以上の議論は以下のように一般化することができる。 $L_B (\leq L)$ サイトの部分系 B に関する部分トレースをとるということは、 ρ を $2^{L_B} \times 2^{L_B}$ 毎にブロック行列に分け、各ブロック行列でトレースを取ることである。このように考えると、部分トレースはその名の通り行列に対して「部分」的に「トレース」を行う演算であることが視覚的に良く理解できる。図 2.6 に $L = 4$ における部分トレースの例を模式的に示す。なお、部分系 A に関して部分トレースを行うときや、部分系のとり方を複雑にして部分トレースを行うときは、図 2.6 のような簡単な描像ではないが、基本的なアイデアは同じである。

ここで 2 粒子系の具体例で縮約密度行列計算してみよう。1 番目 (2 番目) の粒子を部分系 A (B) とおく。セパラ

ブル状態 $|0\rangle \otimes |1\rangle$ を考える。密度行列は

$$\rho = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.52)$$

である。縮約密度行列は

$$\rho_A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \rho_B = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.53)$$

と計算できる。 ρ_A, ρ_B の固有値はともに 1,0 であり、純粋状態であることが確認できる。次にエンタングルメント状態 $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \otimes |1\rangle + |1\rangle \otimes |0\rangle)$ を考える。同様に計算すると、

$$\rho = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \rho_A = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix}, \quad \rho_B = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix} \quad (2.54)$$

を得る。 ρ_A, ρ_B の固有値はともに 1/2, 1/2 であり、混合状態であることが確認できる。2 つ目の例はまさに前節で Alice と Bob が共有していた状態である。Alice が 1 粒子目、Bob が 2 粒子目を操作できる。「Alice が自分の粒子に対して $|0\rangle$ か $|1\rangle$ かの状態を測定すること」は、 ρ に対して「Alice 系に関する部分トレースをとること」に他ならない。その結果 Bob の粒子は ρ_B で表される混合状態になってしまう。

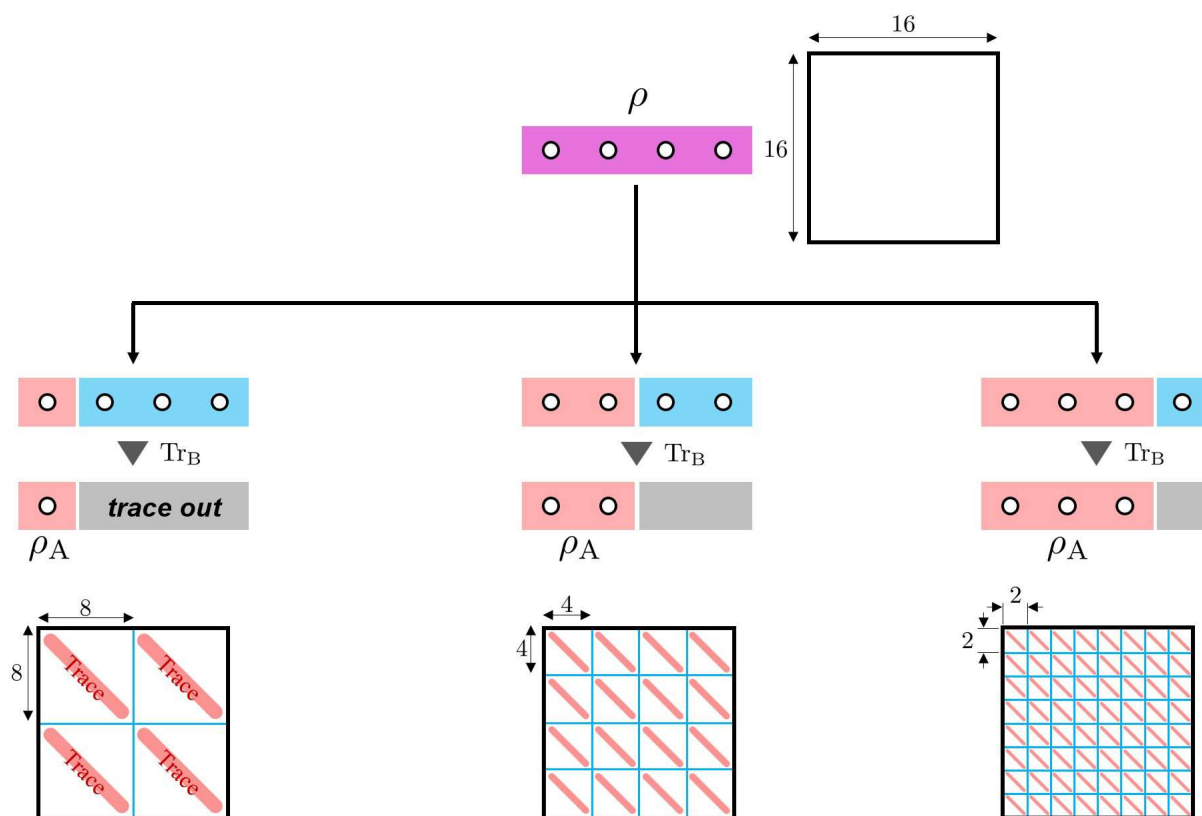


図 2.6 4 粒子系における部分トレースの例

2.2.3 エンタングルメントエントロピー

さていよいよ量子エンタングルメントの定量化を行う。これまでに、量子エンタングルメントと縮約密度行列の関係は以下のようにまとめられることがわかった。

$$\rho \text{ は部分系 } A-B \text{ 間にエンタングルメント無し} \iff \rho_A \text{ (または } \rho_B \text{)} \text{ は純粋状態} \quad (2.55)$$

$$\rho \text{ は部分系 } A-B \text{ 間にエンタングルメント有り} \iff \rho_A \text{ (または } \rho_B \text{)} \text{ は混合状態} \quad (2.56)$$

一方、純粋状態か混合状態かは von Neumann エントロピーを用いることで区別できるのであった。つまり、例えば引数を縮約密度行列にした von Neumann エントロピーを考えることで、エンタングルメントを定量化できそうだ。そこで、エンタングルメントエントロピー $S(\rho_A)$ を以下の式で定義する。

エンタングルメントエントロピー

$$S(\rho_A) = -\text{Tr}(\rho_A \log \rho_A) \quad (2.57)$$

エンタングルメントエントロピーは

$$\rho \text{ は部分系 } A-B \text{ 間にエンタングルメント無し} \iff S(\rho_A) = 0 \quad (2.58)$$

$$\rho \text{ は部分系 } A-B \text{ 間にエンタングルメント有り} \iff 0 < S(\rho_A) \leq \log d_A \quad (2.59)$$

を満たす^{*14}。ここで d_A は部分系 A の Hilbert 空間の次元である。

このように $S(\rho_A)$ (もしくは $S_2(\rho_A)$) は、片方の部分系の情報を捨て去ったときに残った系の持つ「不確かさ」の度合いを定量化し、転じて2つの部分系間に存在するエンタングルメントの強さを定量化する量である^{*15}。なおこの性質は A と B どちらの部分系に関して部分トレースを行っても変わらない。すなわち

$$S(\rho_A) = S(\rho_B) \quad (2.60)$$

が成り立つ。これは A の情報を捨てようが B の情報を捨てようが、残った部分系の持つ「不確かさ」は同じであるという解釈から自然なものと言える。

エンタングルメントエントロピーは $\chi = d_A = d_B$ のときかつ縮約密度行列が最大混合状態のとき最大値を取る。このとき、もとの状態は式 (2.43) より $|\psi\rangle = \sum_i \frac{1}{\sqrt{2L/2}} |\alpha_i\rangle \otimes |\beta_i\rangle$ で与えられる。この状態を最大エンタングル状態 (maximally entangled state) と呼び、そのエンタングルメントエントロピーは $S(\rho_A) = \frac{L}{2} \log 2$ で与えられる。セパラブル状態 (積状態)、エンタングル状態、最大エンタングル状態に対する von Neumann エントロピー及びエンタングルメントエントロピーの値は表 2.1 の通りである。

ところで、エンタングルメントの定量化の指標として、von Neumann エントロピーを一般化した Rényi エントロピーを用いて

α 次のエンタングルメント Rényi エントロピー

$$S_\alpha(\rho_A) = \frac{1}{1-\alpha} \log[\text{Tr}(\rho_A^\alpha)] \quad (2.61)$$

を定義することも可能である。実際に現状の実験ではしばしば $\alpha = 2$ の $S_\alpha(\rho_A)$ が使われているが [41, 42, 43]、基本的な性質はエンタングルメントエントロピーと同じである。

^{*14} エンタングル状態であっても部分系の取り方によっては $S(\rho_A)$ (もしくは $S_2(\rho_A)$) は 0 をとることに注意。

^{*15} エンタングルメントエントロピーは混合状態のエンタングルメントを必ずしも正しく定量化できるとは限らない。例えば純粋状態 $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$ は $S(\text{Tr}_B(|\psi\rangle\langle\psi|)) = \log 2$ のエンタングル状態である。一方セパラブル状態のみで構成された混合状態 $\rho = \frac{1}{2}|00\rangle\langle 00| + \frac{1}{2}|11\rangle\langle 11|$ も同様に $S(\rho_A) = \log 2$ を示してしまう。実際混合状態は純粋状態への分解の仕方が一意に定まらないためそのエンタングルメントの定量化は難しい。「混合状態がエンタングルしていること」の必要十分条件は「密度行列がエンタングルしていない純粋状態の確率的混合の形で書けないこと」と考えられる [45]。しかしこれを判定する万能な方法は未だに見つかっておらず、現在もなお議論が続いている。

表 2.1 純粋状態の種類に対する $S(\rho)$ 及び $S(\rho_A)$ の値

名称	$ \psi\rangle$	$S(\rho)$	$S(\rho_A)$
セパラブル状態 (積状態)	$ \alpha\rangle \otimes \beta\rangle$	0	0
エンタングル状態	$\sum_{i=1}^X \sigma_i \alpha_i\rangle \otimes \beta_i\rangle$	0	$-\sum_{i=1}^X (\sigma_i^2 \log \sigma_i^2)$
最大エンタングル状態	$\sum_{i=1}^{2^{L/2}} \frac{1}{\sqrt{2^{L/2}}} \alpha_i\rangle \otimes \beta_i\rangle$	0	$\frac{L}{2} \log 2$

最後にエンタングルメントエントロピーを含めたより広い概念であるエンタングルメントスペクトラム (**entanglement spectrum**) [44] を紹介しよう。縮約密度行列 ρ_A はエルミート行列であるため、サイズの同じ別のエルミート行列 H^{ent} を用いて $\rho_A = e^{-H^{\text{ent}}}$ と表すことができる*16。ここで

$$H^{\text{ent}} = -\log(\rho_A) \quad (2.62)$$

はエンタングルメントハミルトニアン (**entanglement Hamiltonian**) と呼ばれる。エンタングルメントハミルトニアンの固有値の集合

エンタングルメントスペクトラム

$$\{E_i^{\text{ent}}\}_{i=1}^{d_A} = \{-\log(\tilde{\sigma}_1), -\log(\tilde{\sigma}_2), \dots, -\log(\tilde{\sigma}_{d_A})\} \quad (2.63)$$

をエンタングルメントスペクトラムと呼ぶ。ここで $\{\tilde{\sigma}_i\}_{i=1}^{d_A}$ は ρ_A の固有値である。つまり、セパラブル状態のエンタングルメントスペクトラムは $\{0, \infty, \dots, \infty\}$ となり、エンタングルメントハミルトニアンの「基底状態」と「励起状態」のギャップが無限に大きくなる。エンタングルメント状態のエンタングルメントスペクトラムは「基底状態」と「励起状態」のギャップは有限の値になる (図 2.7)。

一方、ハミルトニアンが H^{ent} で与えられる温度 $\beta = 1$ のカノニカルアンサンブルを考えてみよう。エンタングルメントハミルトニアンの各固有状態を取る確率は

$$p_i^{\text{ent}} = \frac{e^{-\beta E_i^{\text{ent}}}}{\mathcal{Z}} = \frac{e^{\log(\tilde{\sigma}_i)}}{\sum_i e^{\log(\tilde{\sigma}_i)}} = \frac{\tilde{\sigma}_i}{\sum_i \tilde{\sigma}_i} = \tilde{\sigma}_i \quad (2.64)$$

である。つまり、セパラブル状態に対するエンタングルメントハミルトニアンの「基底状態」($E^{\text{ent}} = 0$) の出現確率は $p^{\text{ent}} = 1$ であり、「励起状態」($E^{\text{ent}} = \infty$) の出現確率は $p^{\text{ent}} = 0$ である。これは「基底状態」にどれだけ「エネルギー」を注入しても「励起状態」に励起することではなく、必ず「基底状態」が実現すると解釈できる。エンタングルメント状態に対しては「基底状態」と「励起状態」のギャップが有限であるため、「温度」 $\beta = 1$ のアンサンブルでは準位間の励起が可能であり、複数の状態が $\{p_i^{\text{ent}}\}$ という確率分布で出現する。ここでこのアンサンブルの Gibbs エントロピーは、

$$S_{\text{Gibbs}} = -k_B \sum_i p_i^{\text{ent}} \log(p_i^{\text{ent}}) = -k_B \sum_i \tilde{\sigma}_i \log(\tilde{\sigma}_i) \quad (2.65)$$

で与えられ、 $k_B = 1$ とすると $S_{\text{Gibbs}} = S(\rho_A)$ が成り立っていることに気づく。つまりエンタングルメントエントロピーは、「ハミルトニアン」が H^{ent} で与えられる「温度」 $\beta = 1$ のカノニカルアンサンブルの Gibbs エントロピーである。エンタングルメントスペクトラムはエンタングルメントエントロピーの情報に加え、「エネルギー準位」という新たな情報を提供してくれる。例えば先行研究 [9] では、エンタングルメントスペクトラムの「エネルギー準位」の縮退度は Haldane 相と他の磁気秩序相の区別に役立つことが示されている。

*16 任意の行列の指数関数は収束することが知られている。

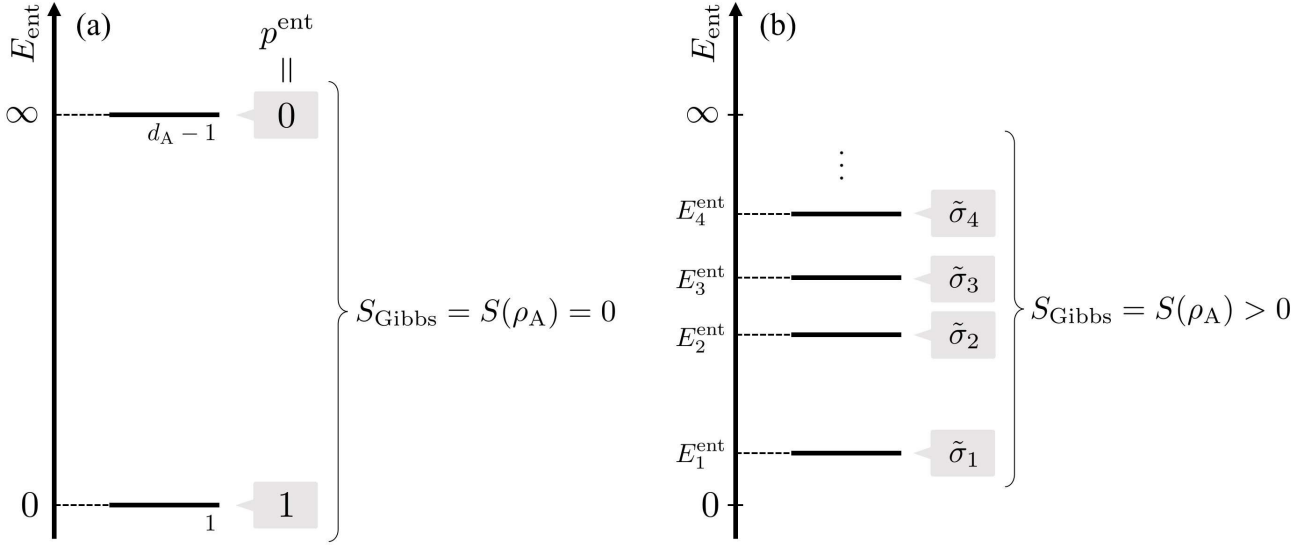


図 2.7 (a) セパラブル状態と (b) エンタングル状態のエンタングルメントスペクトラム

2.2.4 量子物性物理学における量子情報量と密度行列測定の実現

我々は系の密度行列が分かれば、原理的にエンタングルメントエントロピーをはじめとする種々の量子情報を得ることができる。そして、今日の量子物性物理学では量子情報理論の視点による量子多体現象を解析が重要視されている。例えば 1980 年頃までの物性物理学では、量子相転移を含めた相転移現象は Ginzburg-Landau 理論 [1] によって全て説明が可能であると考えられていた。しかし、1980 年に発見された量子 Hall 効果 [3] では秩序変数を定義することができないトポジカル秩序相が現れ、異なるトポジカル秩序相間は系の対称性を保ったまま起こることが明らかとなった。そのため、従来の Ginzburg-Landau 理論は限界を迎え、より汎用性の高い量子相の特徴付けの方法が求められるようになった。この問題に対し、2006 年、Kitaev らは密度行列から計算できる量

$$S_{\text{topo}}(\rho) = S(\rho_A) + S(\rho_B) + S(\rho_C) - S(\rho_{A \cap B}) - S(\rho_{B \cap C}) - S(\rho_{A \cap C}) + S(\rho_{A \cap B \cap C}) \quad (2.66)$$

を定義し、この値によってトポジカル秩序相を特徴付けられることを発見した [7, 8]。ここでは系の相関長よりも十分に大きいスケールのディスク型の部分系を考え、ディスクを A, B, C の 3 領域分割する (図 2.8(a))。

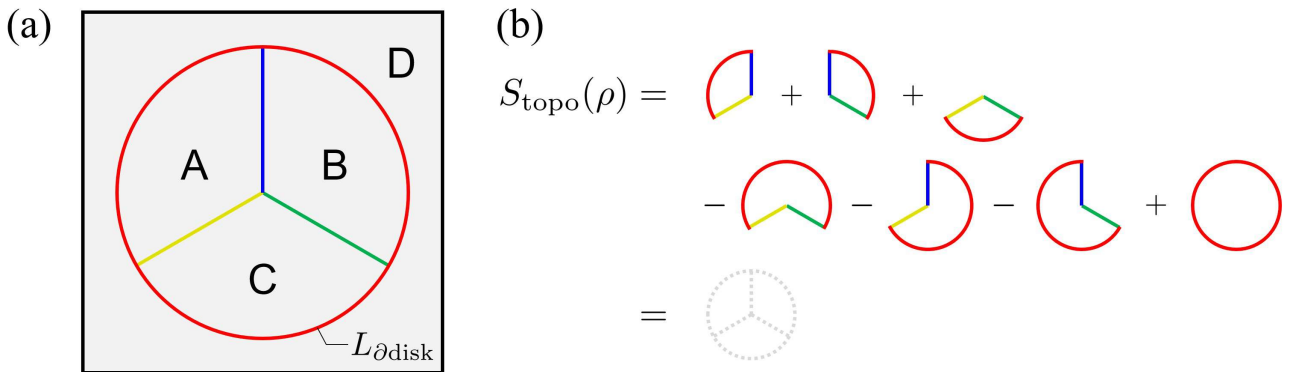


図 2.8 (a) 2次元系の 4 つの部分系への分割と (b) トポジカルエンタングルメントエントロピーの概要

$\rho_x = \text{Tr}_{\bar{x}}(\rho)$ は領域 x に関する縮約密度行列であり、 $S(\rho_x)$ は部分系 x の境界近傍のエンタングルメントを定量化する。式 (2.66) は各部分系間近傍のエンタングルメントを恣意的に除くように定義された量であり (図 2.8(b))、

$\rho_{\text{disk}} = \text{Tr}_D(\rho)$ のエンタングルメントエントロピーをディスクの境界の長さを $L_{\partial\text{disk}}$ の関数として

$$S(\rho_{\text{disk}}) = \alpha L_{\partial\text{disk}} - S_{\text{topo}}(\rho) + \dots \quad (2.67)$$

と書いたとき、ディスクの形に依らない普遍的な定数として現れる。トポロジカル秩序相では $S(\rho_{\text{disk}})$ が有限の値になることが知られており、トポロジカルエンタングルメントエントロピー (**topological entanglement entropy**) と呼ばれる。このように秩序変数という物理量ではなく密度行列という「量子状態そのもの」に注目した解析によって、物性物理学ではブレイクスルーが起きたのである。

実験においてこのような量子情報量が測定可能となれば、量子多体現象を「量子情報」という新たな視点によって深く理解することができ、また未知の現象に対してもより広いアプローチの仕方で解析することが可能となる。しかし固体物質系では基本的に密度行列の構築を構築することは困難である。そこで注目されているのが、次節で説明する人工量子系 (**artificial quantum systems**) である。本研究では人工量子系における量子多体現象を量子情報理論で解析することを目標とする。

2.3 人工量子系

2.3.1 歴史的背景

量子力学に従う粒子がたくさん集まった量子多体系 (**quantum many-body systems**) の物理を厳密に解くことは一般に困難である。1981 年の『1st conference on Physics and Computation』において、Richard Phillips Feynman は、

... , because nature isn't classical, dammit, and if you want to make a simulation of nature, you'd better make it quantum mechanical, and by golly it's a wonderful problem, because it doesn't look so easy. Thank you.

と、自身の講演を締めくくった [46]。「量子的な要素を用いて量子系のふるまいを計算させる」という量子シミュレーション^{*17}のアイデアは、この講演によって初めて明確に言及されたと言われている。このアイデアのもと、現在では冷却原子系、イオントラップ系、光子系、超伝導回路をはじめとする種々の人工量子系 (**artificial quantum systems**) の実験技術が確立されている。近年では、量子多体現象のシミュレーションや、新奇量子現象の開拓、量子コンピューティングのテストなど、人工量子系は様々な用途で有効に用いられている。人工量子系は、固体物質中では完璧に取り除くことが困難な不純物や欠陥が無く、クリーンな環境を提供する。そして量子多体系を構成・制御する種々のパラメータに関して高い制御性を持つ。このような特徴を生かして、理想的なハミルトニアンを人工的に作り出し、「自然に量子多体問題を解かせる」ことができるのである。以下では人工量子系の代表例をいくつか説明する。

2.3.2 原子の冷却：Doppler 冷却

人工的に量子多体系のハミルトニアンを再現するためには、まずは原子を何かしらの方法で捕獲し、自由自在に制御する必要がある。良く用いられる原子種は、ボーズ原子としては ^{87}Rb , ^{23}Na , ^7Li 、フェルミ原子としては ^{40}K , ^6Li , ^{173}Yb , ^{83}Sr などが挙げられる。このような電氣的に中性な原子を気化させ冷却、捕獲した系を冷却原子系 (**cold atomic gases**) と呼ぶ。大きな運動量を持つ気体原子を捕獲して制御するため、まずは原子を冷却して運動量のある程度小さくする必要がある。ここでいう冷却は冷凍機などを使って達成できるような温度ではなく、数 μK から数 nK のオーダーまでの冷却を指す。そこで良く用いられる手法が **Doppler 冷却** である。Doppler 冷却は Steven Chu, Claude Cohen-Tannoudji, William D. Phillips によって開発された手法で、1997 年 “for development

^{*17} より厳密には“アナログ”量子シミュレーションというべきである。“アナログ”量子シミュレーションは、シミュレートしたい量子系のハミルトニアンを別の量子系で再現してシミュレートすることである。対して、“デジタル”量子シミュレーションという考えもある。こちらはシミュレートしたいハミルトニアンを 1 量子ビットゲート（もしくは 2 量子ビットゲート）の組み合わせに分解し、元のハミルトニアンによる時間発展を近似的に再現する手法である。

of methods to cool and trap atoms with laser light”を授賞理由としてノーベル物理学賞が贈られた技術である。

1つの原子にレーザー光を照射することを考えよう。原子には電子のエネルギー準位構造として基底状態 $|g\rangle$ と励起状態 $|e\rangle$ が存在し、それぞれのエネルギーを E_g, E_e と書くことにする。はじめ原子は基底状態であり、 $+x$ 方向に運動量 $\mathbf{p}_{\text{atom}}$ で運動しているとする。ここでレーザー光をこの原子に向かって $-x$ 方向に照射する。光子の運動量は $\hbar \mathbf{k}_{\text{photon}}$ ($\mathbf{k}_{\text{photon}}$ は $\mathbf{p}_{\text{atom}}$ と向きが逆の波数ベクトル) とする。レーザー光の周波数 ω が二準位間のエネルギー差に対応する共鳴周波数 $\omega_0 = (E_e - E_g)/\hbar$ に十分近いとき、原子は光子1つを吸収し励起状態に遷移する。このとき運動量保存則より、励起状態となった原子の運動量は $\mathbf{p}_{\text{atom}} + \hbar \mathbf{k}_{\text{photon}}$ となり、減速する。励起状態の原子はランダムな方向にエネルギー $\hbar \omega_0$ の光子を1つ自然放出して基底状態に戻ろうとする。この光子の運動量を $\hbar \mathbf{k}'_{\text{photon}}$ と書く。このとき原子は反作用として運動量 $-\hbar \mathbf{k}'_{\text{photon}}$ を受け取る。光を原子に照射し続けると上記のプロセスが何度も繰り返される。 $\mathbf{k}'_{\text{photon}}$ の方向は毎回ランダムなので、原子が受け取る反作用としての運動量もランダムである。つまり原子はレーザー光を吸収して減速し、光子放出に伴う反作用の取得は平均的にゼロとなる。結果として原子は $+x$ 方向の運動量を十分失い、冷却される。これをレーザー冷却という (図 2.9)。

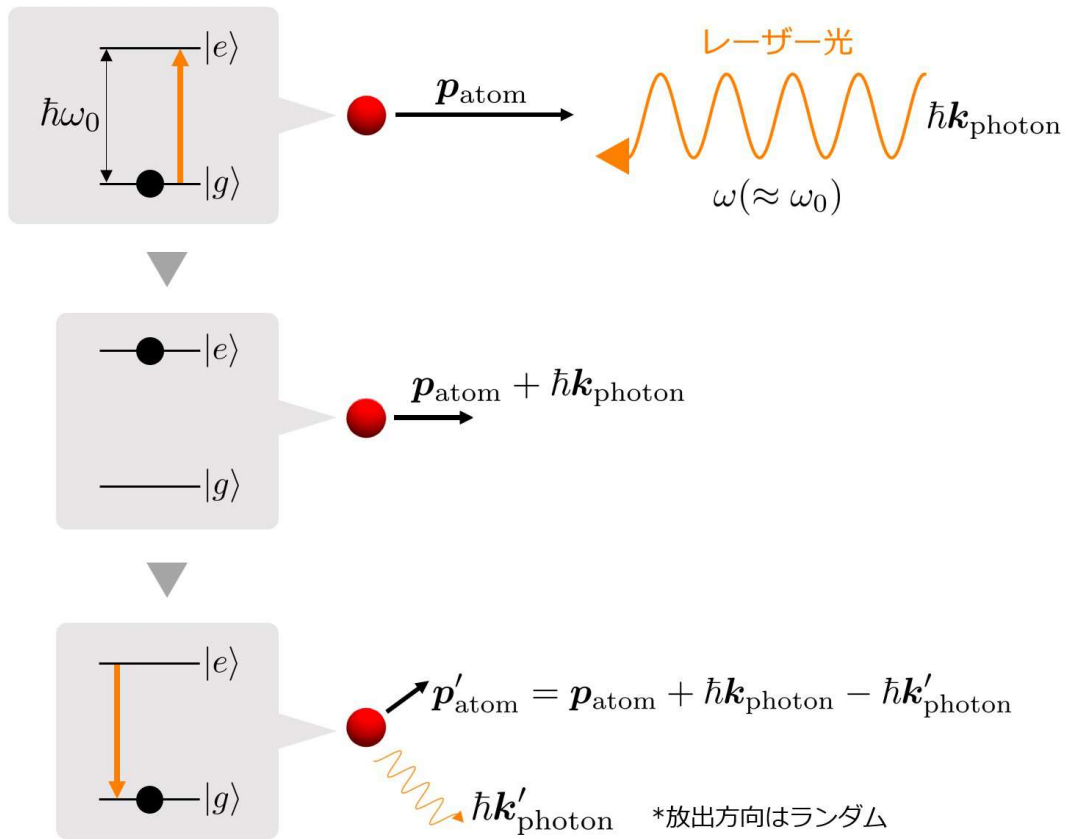


図 2.9 レーザー冷却のしくみ

さて、減速された原子にもなお光を照射し続けると今度は $-x$ 方向に加速してしまうのではないかと懸念される。これを回避するためにレーザー光の周波数 ω にある工夫を施す。その工夫とは、 ω を共鳴周波数 ω_0 よりも若干小さく設定しておくというものである。すると Doppler 効果により、 $+x$ 方向に進む原子から見たレーザー光の周波数は $\omega + k|\mathbf{p}_{\text{atom}}|/m$ (m は原子の質量) となり、共鳴周波数に一致することで光子の吸収が起こる (図 2.10(a))。原子が減速した後は共鳴周波数とはもはや一致しないため、懸念点は解消される (図 2.10(b))。実際の Doppler 冷却では、乱雑に運動する気体原子集団に対し $\pm x, \pm y, \pm z$ 方向からレーザー光を照射することで全方向からの運動を抑制する。

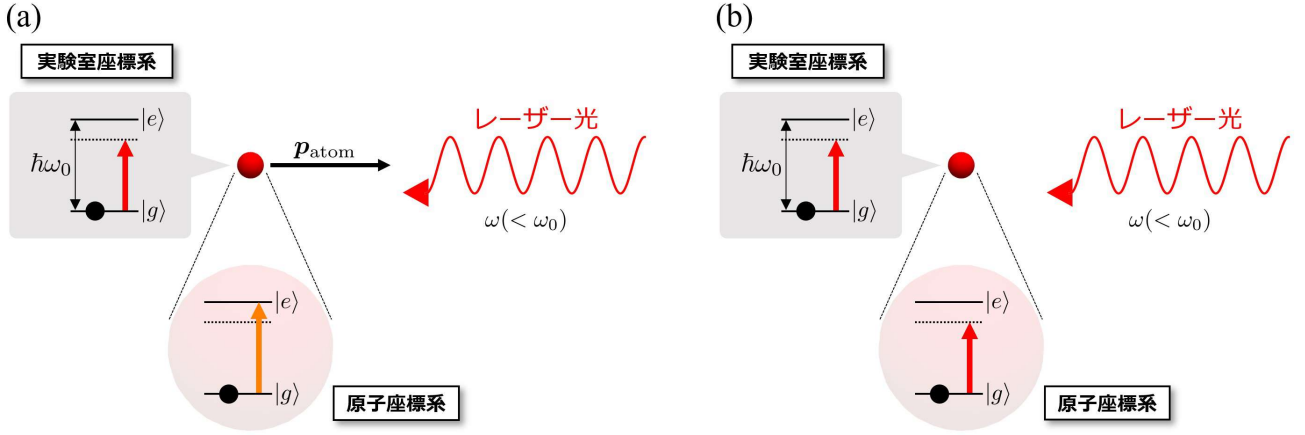


図 2.10 (a) 実験室座標系と (b) 原子座標系における Doppler 冷却

2.3.3 原子の捕獲：光双極子トラップ

Doppler 冷却などにより運動量がある程度小さくなった原子は、レンズによって集光したレーザー光によって捕獲（トラップ）することが可能である。これを光双極子トラップ（optical dipole trap）と呼ぶ。まず、水素様原子の基底状態のように電氣的に中性で最外殻電子が s 軌道で等方的な原子を静電場 $\mathcal{E}$ の中に入れたときのエネルギー変化を考えよう。電気双極子 $\hat{\mathbf{d}} = -\tilde{e} \sum_i \hat{\mathbf{r}}_i$ と静電場 $\mathcal{E}$ は

$$\hat{\mathcal{H}}' = -\hat{\mathbf{d}} \cdot \mathcal{E} \quad (2.68)$$

という形で相互作用する。ここで $\tilde{e}(> 0)$ は電気素量、 $\hat{\mathbf{r}}_i$ は原子核の中心から測った i 番目の電子の位置演算子である。一見、水素様原子は電場と相互作用を起こさない（1 次摂動ではエネルギーが変化しない）ように見えるが、電場によって電子雲が原子核から僅かに引き離されて分極することで電気双極子 $\langle \hat{\mathbf{d}} \rangle = \alpha \mathcal{E}$ (α は分極率) を形成し相互作用が生まれる（2 次摂動ではエネルギーが変化する）。このプロセスにおけるエネルギー変化 ΔE は電場の微小変化 $d\mathcal{E}$ に対するエネルギー変化

$$\frac{d\langle \hat{\mathcal{H}} \rangle}{d\mathcal{E}} = -\langle \hat{\mathbf{d}} \rangle = -\alpha \mathcal{E} \quad (2.69)$$

を積分して

$$\Delta E = \int \frac{d\langle \hat{\mathcal{H}} \rangle}{d\mathcal{E}} d\mathcal{E} = -\frac{1}{2} \alpha \mathcal{E}^2 \quad (2.70)$$

で与えられる。一方、このプロセスはハミルトニアン $\hat{\mathcal{H}}'$ に対する 2 次摂動であるため、

$$\Delta E = -\sum_e \frac{|\langle e | \hat{\mathcal{H}}' | g \rangle|^2}{E_e - E_g} = \sum_e \frac{|\langle e | \hat{\mathbf{d}} \cdot \mathcal{E} | g \rangle|^2}{E_e - E_g} = -\tilde{e} \sum_e \sum_i \frac{|\langle e | \hat{\mathbf{r}}_i \cdot \mathcal{E} | g \rangle|^2}{E_e - E_g} = -\tilde{e} \sum_e \sum_i \frac{|\langle e | \hat{\mathbf{r}}_i \cdot \boldsymbol{\epsilon} | g \rangle|^2}{E_e - E_g} \mathcal{E}^2 \quad (2.71)$$

と計算できる。ここで $\boldsymbol{\epsilon}$ は偏光方向の単位ベクトルである。式 (2.70) と (2.71) 比較することで α の具体的な表式が

$$\alpha = 2\tilde{e} \sum_e \sum_i \frac{|\langle e | \hat{\mathbf{r}}_i \cdot \boldsymbol{\epsilon} | g \rangle|^2}{E_e - E_g} \quad (2.72)$$

と得られる。明らかに $\alpha > 0$ であり、 $\Delta E < 0$ であることが分かる。このように光の作る電場によって電氣的中性原子のエネルギーが下がることを **Stark シフト** と呼ぶ。

次に本題のレーザー光について考えよう。レーザー光は特に波の位相が揃った振動電場である。すなわち $\mathcal{E}(\mathbf{r}, t) = \mathcal{E} e^{-i\omega t} + \mathcal{E}^* e^{i\omega t}$ に対して原子のエネルギー変化を考える。このときのエネルギー変化は

$$\Delta E = -\frac{1}{2} \alpha(\omega) \langle \mathcal{E}(\mathbf{r}, t)^2 \rangle_t \quad (2.73)$$

与えられる。ここで $\langle \rangle_t$ は時間平均を表す。注目すべき点は、分極率が電場の周波数に依存しており、基底状態に対しても $\alpha(\omega) > 0$ が成り立つとは限らない点である。 $\alpha(\omega)$ を量子力学的に具体的に計算すると、

$$\alpha(\omega) = \sum_e \frac{2(E_e - E_g) |\langle e | \hat{\mathbf{d}} \cdot \boldsymbol{\epsilon} | g \rangle|^2}{(E_e - E_g)^2 - (\hbar\omega)^2} \quad (2.74)$$

与えられることが知られている [47]。ここで基底状態と特定の励起状態のエネルギー差を $(E_e^* - E_g) = \hbar\omega_0$ とおき、他の遷移から十分に遠い場合は

$$\begin{aligned} \alpha(\omega) &= \frac{2\hbar\omega_0 |\langle e | \hat{\mathbf{d}} \cdot \boldsymbol{\epsilon} | g \rangle|^2}{(\hbar\omega_0)^2 - (\hbar\omega)^2} + \sum_{|E_e - E_g - \hbar\omega_0| > 0} \frac{2(E_e - E_g) |\langle e | \hat{\mathbf{d}} \cdot \boldsymbol{\epsilon} | g \rangle|^2}{(E_e - E_g)^2 - (\hbar\omega)^2} \\ &\approx \frac{2\hbar\omega_0 |\langle e | \hat{\mathbf{d}} \cdot \boldsymbol{\epsilon} | g \rangle|^2}{(\hbar\omega_0)^2 - (\hbar\omega)^2} \end{aligned} \quad (2.75)$$

と書ける。光の周波数 ω が ω_0 に十分近いとき、

$$\alpha(\omega) = \frac{1}{\hbar} \frac{2\omega_0 |\langle e | \hat{\mathbf{d}} \cdot \boldsymbol{\epsilon} | g \rangle|^2}{\omega_0^2 - \omega^2} \approx \frac{2}{\hbar} \frac{|\langle e | \hat{\mathbf{d}} \cdot \boldsymbol{\epsilon} | g \rangle|^2}{\omega_0 - \omega} \quad (2.76)$$

となる。すなわち、 $\omega < \omega_0$ (赤方離調) であれば $\alpha > 0$ となり、電場が強いほどエネルギーが下がる。一方で、 $\omega > \omega_0$ (青方離調) であれば $\alpha < 0$ となり、電場が弱いほどエネルギーが下がる。このように電場の周波数によって ΔE が変化する Stark シフトを **AC Stark シフト** と呼ぶ。光双極子トラップで良く使われる TEM00 ガウシアンビームでは、光の強度 $I(r) \propto \mathcal{E}^2$ がビーム断面の中心からの動径距離 r の関数として $I(r) = I_0 e^{-2r^2/w_0^2}$ で与えられるため、赤方離調の場合は原子をビームの中心に捕捉することができる。一方、青方離調の場合は原子は動径方向に拡散してしまうためトラップとして使うことはできない^{*18}。

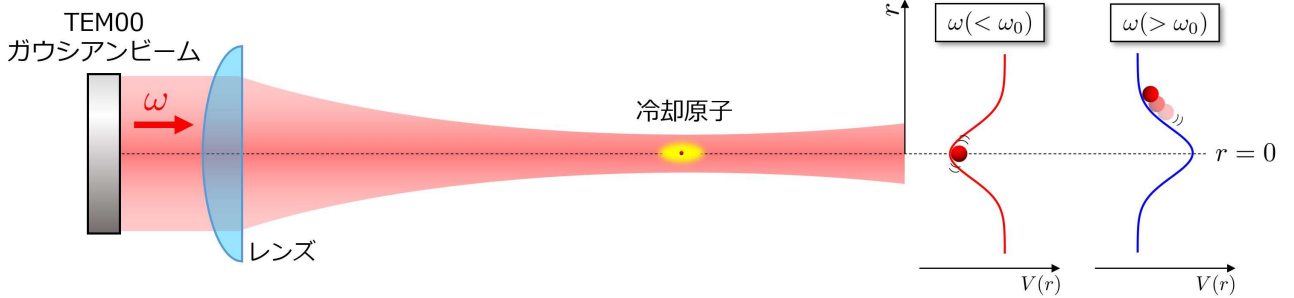


図 2.11 TEM00 ガウシアンビームの作るポテンシャル

2.3.4 原子の整列：光格子中の冷却原子系

光双極子トラップを応用すると、原子を周期的に整列させることが可能である。その手法の一つとしてまずは光格子 (optical lattice) [15, 16, 17, 18] を紹介しよう。光格子は、レーザー光を対向方向に照射することでできる定在波を利用した周期ポテンシャルである。 $+x$ 方向と $-x$ 方向に進行する 2 つのレーザー光を重ね合わせると、その電場は

$$\mathcal{E}(x, t) = \mathcal{E}_0 \cos(kx - \omega t) + \mathcal{E}_0 \cos(-kx - \omega t) = 2\mathcal{E}_0 \cos(kx) \cos(\omega t) \quad (2.77)$$

と表される。冷却原子が感じるポテンシャル $V(x)$ は電場の 2 乗の時間平均

$$\langle |\mathcal{E}(x, t)|^2 \rangle_t = \frac{1}{T} \int_0^T \mathcal{E}_0^2 \cos^2(kx) \cos^2(\omega t) dt = 2\mathcal{E}_0^2 \cos^2(kx) \quad (2.78)$$

^{*18} 青方離調であっても、レーザーの断面がドーナツ型のラゲルガウスビームであれば「ドーナツの穴」に原子をトラップすることができる

に比例するので

$$V(x) = V_0 \cos^2(kx) \quad (2.79)$$

で表すことができる（図 2.12(a)）。この周期ポテンシャルは固体物質中の陽子を作る周期的なポテンシャルの形と似ており、固体物質中の電子の物理を光格子中の冷却原子としてシミュレーションすることが可能となる。

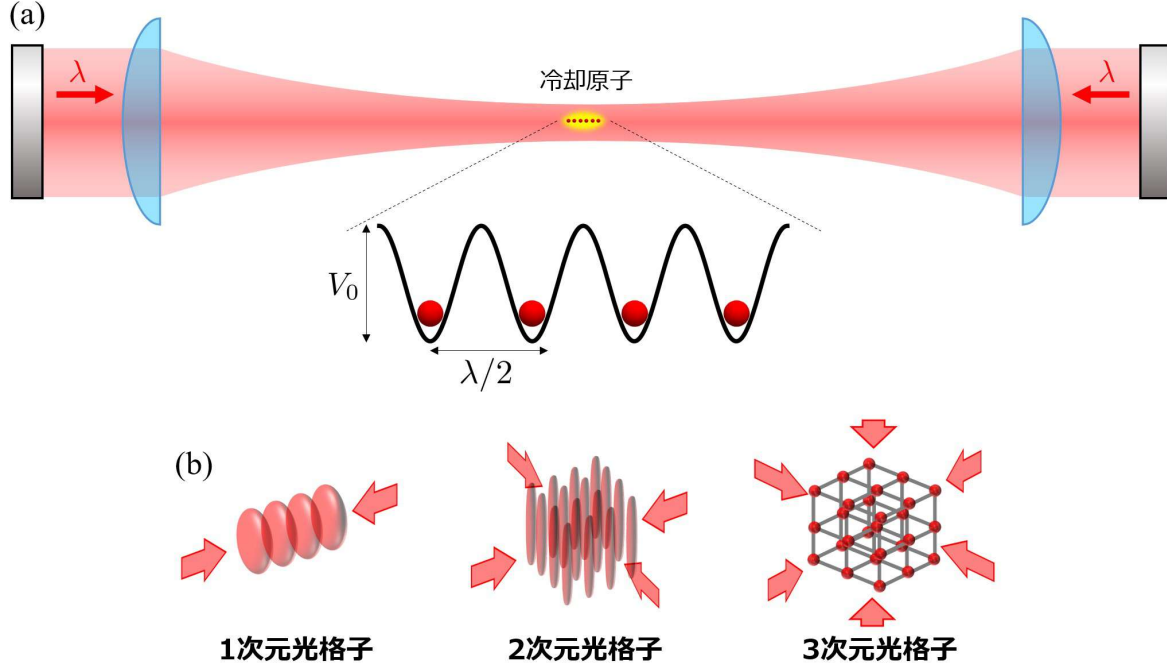


図 2.12 (a)1 次元光格子と (b)1, 2, 3 次元光格子のポテンシャルの模式図（原画は [32] より引用）

V_0 は光格子の深さと呼ばれる量で、レーザー光の強度により調節可能なパラメータである。赤方離調されたレーザー光で光格子を作った場合 $V_0 < 0$ となり、光の強度の極大点に原子がトラップされる。光格子の格子定数 a は用いたレーザーの波長を λ とすると $a = \lambda/2$ で与えられるため、可視光レーザーを用いると格子定数は数 $100\text{nm}(= 10^3 \text{ \AA})$ オーダーである。実際レーザー光はガウシアンビームがしばしば用いられる。例えば 1 次元光格子のポテンシャルは、照射方向の周期ポテンシャルとガウシアンビームの動径方向のトラップが合わさった、「パンケーキ型」のトラップとなる。2 次元系であれば「葉巻型」のトラップになる（図 2.12(b)）。光格子はレーザーの数や角度などを工夫することで正方格子や三角格子、カゴメ格子など様々な幾何学的構造を実現することが可能である（図 2.13(a)-(d)）。また波長の異なるレーザーを重ね合わせることで光超格子と呼ばれる構造を作ることにも可能である（図 2.13(e)）。

このような光格子にフェルミ原子を充填させることで、**Fermi-Hubbard 模型**

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}} (\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + \text{H.c.}) + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \quad (2.80)$$

で表される、固体物質中の電子などの物理をシミュレートすることが可能となる^{*19}。第一項は粒子の飛び移り（粒子の遍歴性）を記述し $t(>0)$ はその強度を表す。対して第二項は粒子の局在性を記述し、 U は同じサイトに粒子が存在するときのエネルギー損失を表す。そのため両者の効果は競合している。従って両者の比 U/t の値によって系の振る舞いは大きく変わる。 U/t が大きいときは t によるエネルギー利得が小さく U によるエネルギー損失が大きいため、粒子のホッピングが抑制され 1 サイトに 1 粒子が局在した **Mott 絶縁体状態** が実現する。一方、 U/t が小さいときは t によるエネルギー利得が大きく U によるエネルギー損失が少ないため、系は粒子を遍歴させることでエネルギーを低くし、**金属状態** となる。 U/t は原子のサイト間のホッピングのしやすさであり、光格子の深さ（レーザー光の強度）によって制御することが可能である。深い光格子はサイト間のポテンシャル障壁が大きいため原子のホッピングが抑制さ

^{*19} ^{173}Yb や ^{83}Sr をはじめとするアルカリ土類（様）原子種を用いることで $\text{SU}(\mathcal{N} > 2)$ Hubbard モデルを実現することもできる [53, 54, 55]。

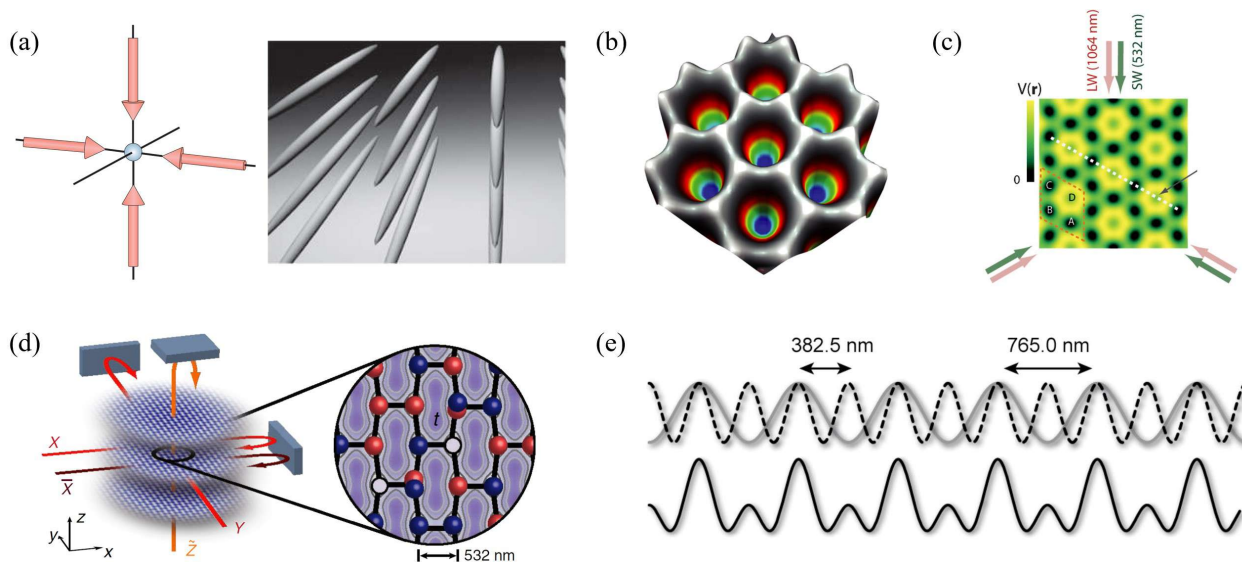


図 2.13 様々な光格子の例。(a) 二次元正方格子, (b) 二次元三角格子, (c) 二次元籠目格子. (d) 二次元ハニカム格子, (e) 一次元超格子の例 (原画はそれぞれ [48], [49], [50], [51], [52] より引用)

れる。つまり大きな U/t に対応する。反対に浅い光格子は小さな U/t に対応する。先行研究 [56] では量子気体顕微鏡 (詳細は次節) を用いて、光格子の深さを変化させることで ${}^6\text{Li}$ の Mott 絶縁体と金属状態の転移を測定することに成功している (図 2.14)。

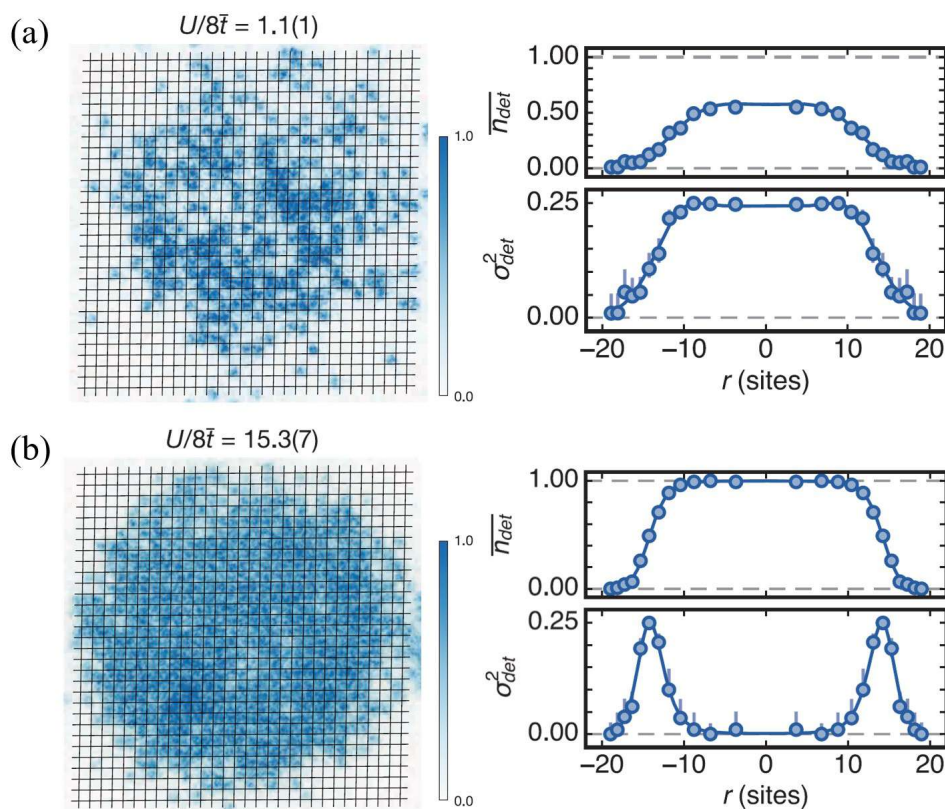


図 2.14 (a) 浅い光格子と (b) 深い光格子における各サイト当たりの平均粒子数と分散の違い (原画は [56] より引用)

同様にボーズ原子を用いれば、**Bose-Hubbard 模型**

$$\hat{\mathcal{H}} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \text{H.c.}) + \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) \quad (2.81)$$

の物理をシミュレートすることが可能となる。この模型でも光格子が十分深い場合は Mott 絶縁体相が実現する。光格子の深さが浅いときは巨視的な数のボーズ原子が同一の量子状態をとることが可能なので、超流動 (superfluid) 状態が実現する。先行研究 [57] では異なる深さの光格子に ^{87}Rb (ボーズ粒子) を充填させ、time of flight (TOF) 法 (図 2.15(a)) を用いて原子集団の運動量分布を測定している。TOF 法では光格子ポテンシャルを急峻に止め、拡散する原子集団の運動量分布を測定する手法である。超流動相の場合、ほとんどすべての原子は同じ運動量を持っているため、運動量分布には特定の波数点でピークが現れるはずである。一方、Mott 絶縁体状態の場合は各原子は光格子の「谷」近傍に留まっている。この「谷」近傍のポテンシャルは調和ポテンシャルで近似することができるため、各原子はランダムな運動量を持ち、かつ等方的な運動量分布を示すはずである。TOF の結果は図 2.15(b) に示すとおりである。I から IV では特定の波数点でピークが現れていることから超流動状態であることが予想される。I では光格子が無く系の周期構造が無いいため運動量空間にも周期構造はない (ブリルアンゾーンはない)。V と VI ではそのピーク構造が消え等方的な運動量分布になっていることから Mott 絶縁体状態であることが予想される。

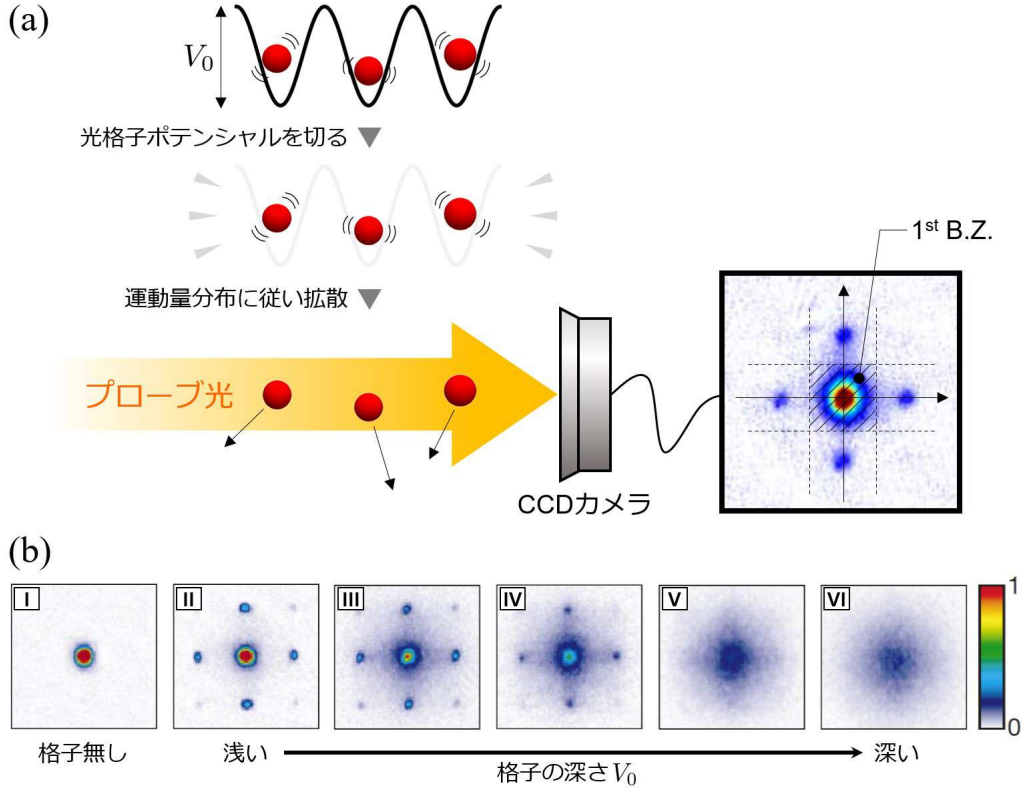


図 2.15 (a) TOF 法の概要 (右下の原画は [58] より引用)。 (b) 光格子の深さを变化させたときの原子集団の運動量分布の測定結果 (原画は [57] より引用)。

光格子系は理想的な孤立系である一方、熱浴・粒子浴を接触させることが困難であるため、一見開放量子系のシミュレーションは困難と思われる。しかし近年では、電子ビームによるロス [59] や光会合によるロス [60] などの人工的な散逸 (dissipation) を導入することが可能となり、開放量子系のシミュレーションにまで手が届くようになった。このように、光格子を用いた人工量子系は、今や幅広い量子多体系の量子シミュレーションを可能とする重要なプラットフォームとして位置づけられている。

2.3.5 原子の観測：量子気体顕微鏡（QGM）

今日の光格子中の冷却原子系を用いたシミュレーションにおいて、量子気体顕微鏡（quantum gas microscope, **QGM**）[61, 62, 63, 64] は必要不可欠な観測技術である。量子気体顕微鏡は光格子の冷却原子系において、粒子がいるかないかを1サイトレベルの分解能で測定することができる技術である（図 2.16）。QGM では光会合レーザーと呼ばれるレーザーを系に照射することで同一サイトにいる2粒子を1分子に変化させる。このとき1つの分子の運動エネルギーは例えば Na 原子では $E_m \sim 24\text{K}$ 程度であり、 $V_0 \sim 1\text{K}$ 程度の光格子ポテンシャルを越えて散逸してしまう。すると最終的には1サイトの占有数は0か1のどちらかになる。単原子は脱励起し、放出された光は対物レンズによって集められたのち高感度 CCD カメラによって観測される。このようにして粒子の「いる」「いない」が1サイトレベルの分解能で測定することが可能となる。ここで「いる」サイトはももとの占有数が奇数のサイト、「いない」サイトは偶数のサイトである。

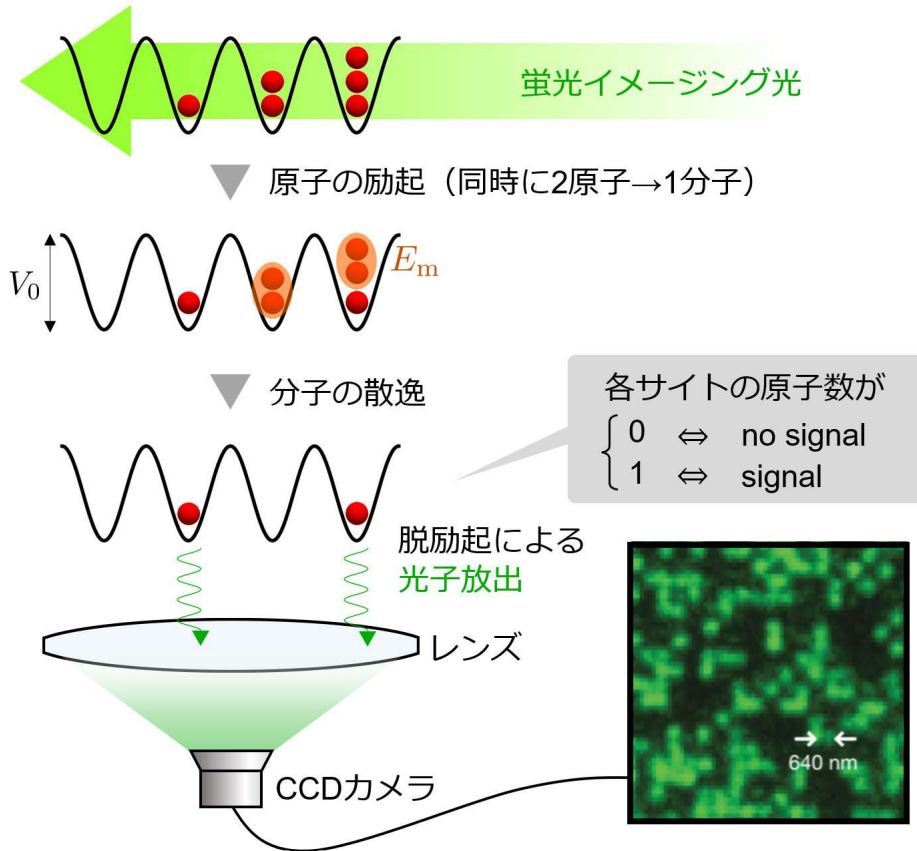


図 2.16 QGM のしくみ（右下の画像は [61] より引用）。

また擬スピン系において、ビームを照射することで特定の擬スピンを取り除くことができる（図 2.17(a)）。このとき同一サイトに2粒子が存在する場合、分子状態に励起し散逸が発生する。例えば $|0, \uparrow, \downarrow, \uparrow, \downarrow\rangle$ という状態を考えよう。ここで0は粒子の無いサイト、 $\uparrow$ ($\downarrow$) はアップ（ダウン）の擬スピンの原子が1つ存在するサイト、 $\uparrow\downarrow$ は両方の擬スピンの原子が1つずつ存在するサイトを表している。この状態に対してアップ（ダウン）のみを除くレーザーを当て QGM で測定すると

$$|0, \uparrow, \downarrow, \uparrow, \downarrow\rangle \xrightarrow{\uparrow\text{の除去}} |0, 0, \downarrow, 0\rangle \xrightarrow{\text{QGM}} |0, 0, 1, 0\rangle \quad (2.82)$$

$$|0, \uparrow, \downarrow, \uparrow, \downarrow\rangle \xrightarrow{\downarrow\text{の除去}} |0, \uparrow, 0, 0\rangle \xrightarrow{\text{QGM}} |0, 1, 0, 0\rangle \quad (2.83)$$

という結果を得る。ここで例えば式 (2.82) を見ると、QGM で1（シグナルあり）と観測されたサイトにはもともと $\downarrow$ がただ1つ存在していたことがわかる。言い換えると、QGM では各サイトのスピンの z 成分を測定することができ

る。更には系全体に粒子の量子化軸を回転させる適当な Rabi パルス光を照射することで、スピンの x 成分や y 成分を測定することができる。

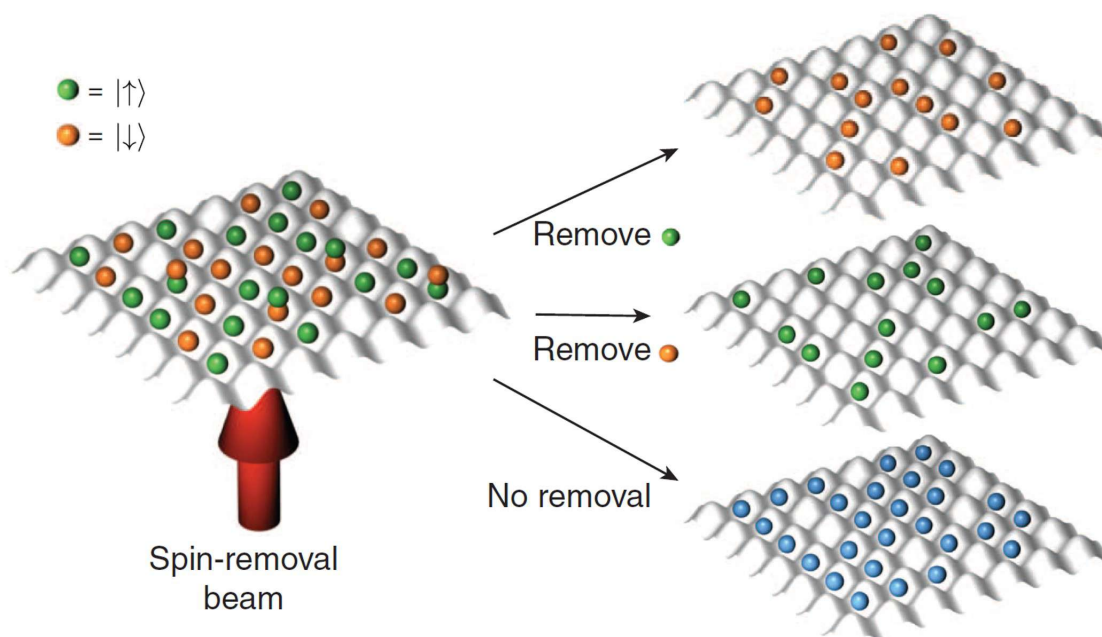


図 2.17 光格子中の擬スピン系における特定の擬スピンの除去 (画像は [65] より引用)

この手法と QGM を組み合わせることで、スピン系の示す磁性の観測が報告されている。例えば先行研究 [66] では擬スピン $\uparrow, \downarrow$ (^6Li の超微細構造の安定な 2 準位) によって作られる反強磁性秩序の観測に成功している。反強磁性状態とは、各サイトに原子が 1 つずつ存在し、かつ隣り合う (擬) スピンが反対方向を向いた秩序を持つ状態である。この実験ではまず反強磁性状態の出現するパラメータ領域を準備し、QGM で測定を行っている。結果は図 2.18(a) であり、確かに各サイトに 1 粒子が存在している様子が見られる。ここで $\downarrow$ のみを散逸させるビームを照射し、再び QGM で測定した結果が図 2.18(b) である。残っている原子は全て $\uparrow$ 状態のはずであり、粒子が 1 サイト置きに配置している様子が伺える。つまり、もともとは $\uparrow$ と $\downarrow$ が 1 サイトごとに交互に並んだ反強磁性状態が実現できていたことが間接的にわかるのである。ここでビーム照射後の結果において、シグナルの無かったサイトは $\downarrow$ が存在していたか $\uparrow, \downarrow$ の両方が存在していたかは区別できないことに注意する。

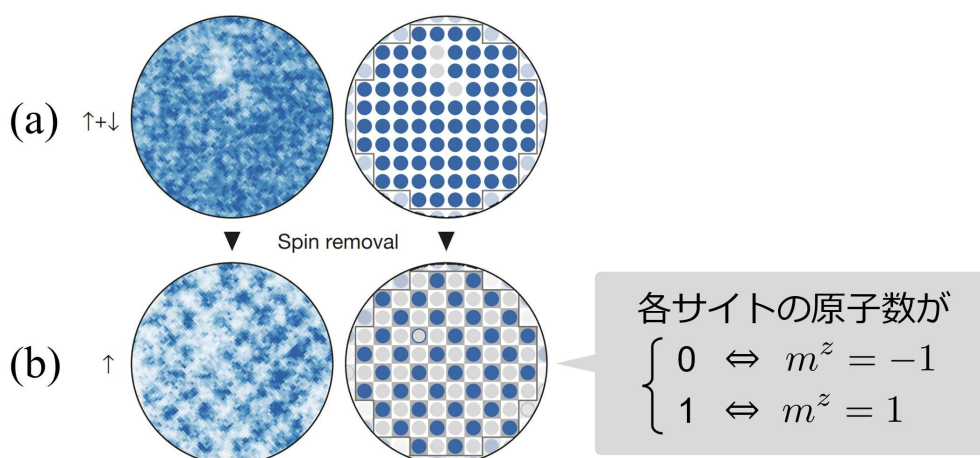


図 2.18 QGM を用いた (a) 擬スピン $\downarrow$ を除去する前と (b) 除去した後の反強磁性状態の測定結果。 (画像は [66] より引用)。

2.3.6 その他の人工量子系

人工量子系は光格子中の冷却原子系だけではない。本節ではその他の良く用いられる人工量子系について簡単に紹介する。まずは、光双極子トラップの応用例をもう一つ紹介しよう。それは光ピンセット (**optical tweezer**) と呼ばれる技術である。まず、レーザー光を対物レンズによって小さな領域に集光することで、その集光点に単一の原子をトラップすることができる。ここでレーザー光を空間光変調器 (Spatial Light Modulator, SLM) と呼ばれる光学素子の表面で反射させてから対物レンズで集光させることで、多数の集光点を自由な位置に作るすることができる。すなわち原子を好みの位置に一つ一つトラップすることができるのである (図 2.19)。

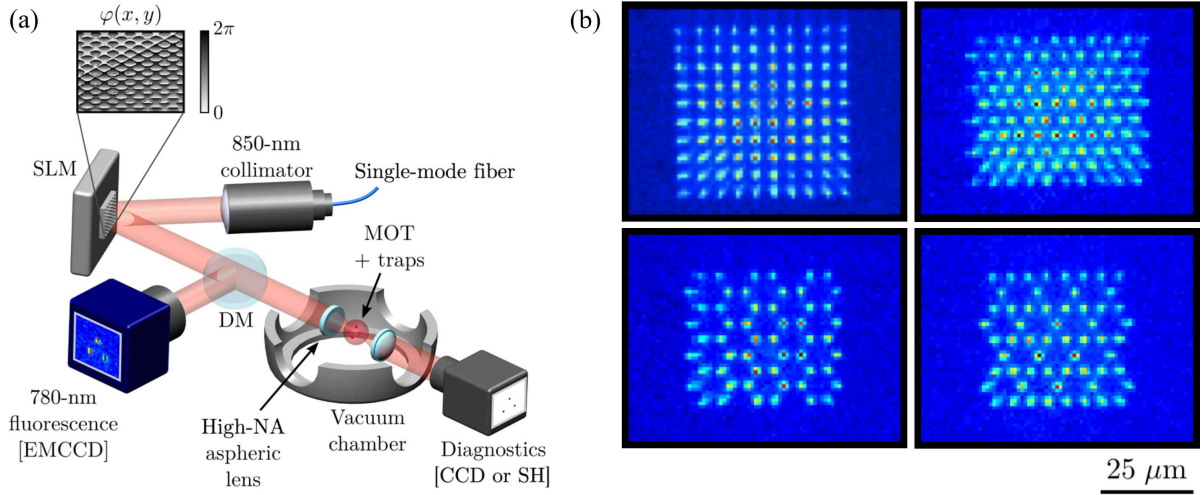


図 2.19 光ピンセットによる原子トラップ。(a) 実験でのセットアップと (b) 様々な形の原子配列の例 (原画は [67] より引用)

集光点間の距離は数 μm であり、光格子の格子定数より大きくなるため、サイト間のホッピングは基本的には起こらない。そのため Hubbard モデルで表されるような量子多体系のシミュレーションには不向きである。その代わり、**Rydberg 原子 (Rydberg atom)** を用いて長距離相互作用するスピン系を実現することができる [67, 68, 69, 70, 71]。Rydberg 原子とは最外殻電子が高い主量子数に励起した巨大な原子であり、大きな電気双極子モーメントを持つため、光双極子トラップによって捕獲が可能である。この励起した状態を Rydberg 状態と呼ぶ。Rydberg 原子配列では基底状態 $|g\rangle$ と Rydberg 状態 $|r\rangle$ を二準位系と見なしてスピン系を構成する。Rydberg 原子を用いることで実装できるスピン系の代表例が横磁場 Ising 模型 (**transverse-field Ising model**) である。横磁場 Ising 模型のハミルトニアンは

$$\hat{H} = \sum_{i<j} J_{ij} \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^z + B^\perp \sum_i \hat{\sigma}_i^x + \sum_i B_i^\parallel \hat{\sigma}_i^z \quad (2.84)$$

で与えられる。ここで $J(>0)$, $B^\perp$, $B_i^\parallel$ はそれぞれ反強磁性的交換相互作用、横方向の磁場の強さ、縦方向の磁場の強さを表す。光ピンセット中の Rydberg 原子配列では、交換相互作用を van der Waals 相互作用、横磁場を 2 準位間のエネルギー差に対応した Rabi 周波数として焼き直して実装する。他にも異なる Rydberg 状態を用いることで量子 XY 模型

$$\hat{H}/\hbar = \sum_{i \neq j} \frac{C_3}{R_{ij}^3} (\hat{\sigma}_i^+ \hat{\sigma}_j^+ + \hat{\sigma}_i^- \hat{\sigma}_j^-) \quad (2.85)$$

の実装 [72] や、更には原子間の相互作用の強さの角度依存性を上手く使うことによって、トポロジカル相の現れる最も単純なトイモデルである **Su-Schrieffer-Heeger (SSH) 模型**

$$\hat{H} = - \sum_{i \in A, j \in B} J_{ij} (\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_i) \quad (2.86)$$

の実装 [73] が行われている。

冷却原子系では電氣的に中性な原子種を用いていたが、イオントラップ系 (**trapped-ion systems**) [19, 20] ではその名の通りイオン、すなわち荷電粒子を用いることにより、適当な電磁場を用いてイオンを真空中に静止させ捕獲することができる。主なトラップ方法としては、静電場と静磁場を用いる Penning トラップと、静電場と振動電場を用いる Paul トラップの2つが存在する。イオントラップ系では、イオンの内部状態のうち寿命の長い2準位を量子ビット $|0\rangle, |1\rangle$ として採用する。典型例として、 $^{40}\text{Ca}^+$ の基底電子状態 $|4S_{1/2}\rangle$ と準安定電子状態 $|3D_{5/2}\rangle$ (寿命 1s) や、 $^{171}\text{Yb}^+$ や $^{43}\text{Ca}^+$ の基底超微細構造準位などをよく用いる。原子の状態が安定している系ではあるが、現状トラップできるイオンの数が他の人工量子系よりも少なく、スケールアップが課題となる。

光子系 (**photonic systems**) [74, 75] もまた量子ビット系のシミュレーターとして良く用いられる。光子系では、一つの光子に対して水平方向の偏光状態 $|H\rangle$ と垂直方向の偏光状態 $|V\rangle$ をローカルな基底として採用し、量子ビット系を成す。この光子による量子ビットは常温でも動作するため取扱が比較的容易である利点がある。

最後に超伝導回路 (**superconducting circuits**) [76] を紹介する。超伝導回路と呼ばれる特別な電子回路のチップを超伝導状態になるまで冷却し、例えば超伝導回路に流れる電流の向き (右回り・左回り) を $|0\rangle$ と $|1\rangle$ として表現する。超伝導回路は集積化に適しており、量子コンピューティングへの応用が盛んに研究されているが、ノイズに弱く、また冷却装置が必要であるデメリットも持つ。

第 3 章

量子状態トモグラフィー（QST）と置換不変量子状態トモグラフィー（PIQST）

量子状態は観測した瞬間に崩壊してしまうため、量子状態を直接「測定」することはできない。その代わりに、測定した様々な物理量のデータをうまく組み合わせると量子状態を「再構築」することが可能である。このプロトコルを量子状態トモグラフィー [11, 12, 13, 14] と呼ぶ。本章の 3.1, 3.2 節では、スピン $S = 1/2$ 系における量子状態トモグラフィーの基本原則と、実験の先行研究をレビューする。また、3.3, 3.4, 3.5 節では置換不変量子状態トモグラフィーという手法を紹介し、いかに量子状態トモグラフィーの抱える問題を解決するのか説明する。最後に 3.6 節では一般の量子状態に対する PIDM の持つ物理的な意味について考える。

3.1 密度行列の再構築

3.1.1 Pauli 基底による展開

ローカルに作用する演算子の定義

L 量子ビット系の密度行列は $2^L \times 2^L$ のトレースが 1 のエルミート行列であった。つまり、一つの密度行列を決定するためには、対角成分の実数 $2^L - 1$ 個、非対角成分の実部 $2^L(2^L - 1)/2$ 個、虚部 $2^L(2^L - 1)/2$ 個、合わせて $4^L - 1$ 個の独立な実パラメータを定める必要がある。これらを決定するために、密度行列を Pauli 行列によって展開する方法が知られている。

Pauli 行列は

$$\sigma_1 = X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = Y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.1)$$

で定義される 2×2 エルミート行列である。物理的には $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ は $S = 1/2$ 粒子のスピン成分の x, y, z 成分を与える演算子としてはたらく^{*1}。以降、 2×2 単位行列を

$$\sigma_0 = I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.2)$$

で表すことにする。単位行列と Pauli 行列は

$$\text{Tr}(\sigma_\kappa \sigma_\lambda) = 2\delta_{\kappa,\lambda} \quad (3.3)$$

を満たす。この性質を直交性（orthogonality）と呼ぶ（行列の内積は付録 A を参照せよ。）

^{*1} 厳密には $\frac{\hbar}{2}\sigma_\mu$ がスピン演算子である。

1 量子ビットの密度行列

簡単のために1粒子の密度行列から考えよう。密度行列は $\sigma_0, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ を用いて

$$\rho = \frac{u_0}{2}\sigma_0 + \frac{u_1}{2}\sigma_1 + \frac{u_2}{2}\sigma_2 + \frac{u_3}{2}\sigma_3 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} u_0 + u_3 & u_1 - iu_2 \\ u_1 + iu_2 & u_0 - u_3 \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

と展開することができる。密度行列を一つに定めるためには、 $3(=4^1 - 1)$ 個の実パラメータ u_1, u_2, u_3 を決定すればよい。 u_0 はトレースが1であることにより、自明に $u_0 = 1$ である。他の u_κ は、式 (3.4) と Pauli 行列の直交性 (3.3) を用いると、

$$u_\kappa = \text{Tr}(\rho\sigma_\kappa) = \langle \sigma_\kappa \rangle \quad (3.5)$$

で決定できる。実験では粒子のスピン成分の x, y, z を何度も測定し、期待値をとることで決定できる。最終的に、式 (3.4) は

$$\rho = \sum_{\mu=0}^3 \frac{\langle \sigma_\mu \rangle}{2} \sigma_\mu \quad (3.6)$$

と書き換えられ、これで1量子ビットの密度行列を再構築する表式が得られた。

2 量子ビットの密度行列

次に2量子ビット系の密度行列を Pauli 行列で展開することを考えよう。密度行列は 4×4 行列である。2量子ビットの状態を表す基底をローカル基底のテンソル積で定義したように、密度行列を Pauli 行列のテンソル積 $\{\sigma_{\kappa_1} \otimes \sigma_{\kappa_2}\}$ として採用しよう。ここで定義した基底は直交性

$$\text{Tr}[(\sigma_{\kappa_1} \otimes \sigma_{\kappa_2})(\sigma_{\lambda_1} \otimes \sigma_{\lambda_2})] = 4\delta_{\kappa_1, \lambda_1} \delta_{\kappa_2, \lambda_2} \quad (3.7)$$

を満たす^{*2}。この基底を用いると密度行列は

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{u_{00}}{4}(\sigma_0 \otimes \sigma_0) + \frac{u_{01}}{4}(\sigma_0 \otimes \sigma_1) + \frac{u_{02}}{4}(\sigma_0 \otimes \sigma_2) + \frac{u_{03}}{4}(\sigma_0 \otimes \sigma_3) + \\ &\quad \frac{u_{10}}{4}(\sigma_1 \otimes \sigma_0) + \frac{u_{11}}{4}(\sigma_1 \otimes \sigma_1) + \frac{u_{12}}{4}(\sigma_1 \otimes \sigma_2) + \frac{u_{13}}{4}(\sigma_1 \otimes \sigma_3) + \\ &\quad \frac{u_{20}}{4}(\sigma_2 \otimes \sigma_0) + \frac{u_{21}}{4}(\sigma_2 \otimes \sigma_1) + \frac{u_{22}}{4}(\sigma_2 \otimes \sigma_2) + \frac{u_{23}}{4}(\sigma_2 \otimes \sigma_3) + \\ &\quad \frac{u_{30}}{4}(\sigma_3 \otimes \sigma_0) + \frac{u_{31}}{4}(\sigma_3 \otimes \sigma_1) + \frac{u_{32}}{4}(\sigma_3 \otimes \sigma_2) + \frac{u_{33}}{4}(\sigma_3 \otimes \sigma_3) \\ &= \frac{1}{4} \begin{pmatrix} u_{00} + u_{03} + u_{30} + u_{33} & u_{01} + u_{31} - i(u_{02} + u_{32}) & u_{10} + u_{13} - i(u_{20} + u_{23}) & u_{11} - u_{22} - i(u_{12} + u_{21}) \\ u_{01} + u_{31} + i(u_{02} + u_{32}) & u_{00} - u_{03} + u_{30} - u_{33} & u_{11} + u_{22} + i(u_{12} - u_{21}) & u_{10} - u_{13} - i(u_{20} - u_{23}) \\ u_{10} + u_{13} + i(u_{20} + u_{23}) & u_{11} + u_{22} - i(u_{12} - u_{21}) & u_{00} + u_{03} - u_{30} - u_{33} & u_{01} - u_{31} - i(u_{02} - u_{32}) \\ u_{11} - u_{22} + i(u_{12} + u_{21}) & u_{10} - u_{13} + i(u_{20} - u_{23}) & u_{01} - u_{31} + i(u_{02} - u_{32}) & u_{00} - u_{03} - u_{30} + u_{33} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.8)$$

と展開できる。 u_{00} はトレースが1になるように $u_{00} = 1$ と直ちに決まるので、求めるべきパラメータは $u_{01}, u_{02}, u_{03}, u_{10}, u_{11}, u_{12}, u_{13}, u_{20}, u_{21}, u_{22}, u_{23}, u_{30}, u_{31}, u_{32}, u_{33}$ の $15(=4^2 - 1)$ 個である。式 (3.8) と直交性 (3.7) を用いると、パラメータは

$$u_{\kappa_1 \kappa_2} = \text{Tr}[\rho(\sigma_{\kappa_1} \otimes \sigma_{\kappa_2})] = \langle \sigma_{\kappa_1} \otimes \sigma_{\kappa_2} \rangle \quad (3.9)$$

で求めることができる。実験では各粒子のスピン成分の x, y, z 成分、及び $xx, xy, xz, yx, yy, yz, zx, zy, zz$ 相関関数を何度も測定し、その期待値から得られる。

^{*2} $\text{Tr}[(\sigma_{\kappa_1} \otimes \sigma_{\kappa_2})(\sigma_{\lambda_1} \otimes \sigma_{\lambda_2})] = \text{Tr}[\sigma_{\kappa_1} \sigma_{\lambda_1} \otimes \sigma_{\kappa_2} \sigma_{\lambda_2}] = \text{Tr}[\sigma_{\kappa_1} \sigma_{\lambda_1}] \cdot \text{Tr}[\sigma_{\kappa_2} \sigma_{\lambda_2}] = 2\delta_{\kappa_1, \lambda_1} \cdot 2\delta_{\kappa_2, \lambda_2} = 4\delta_{\kappa_1, \lambda_1} \delta_{\kappa_2, \lambda_2}$

最終的に式 (3.8) を書き換えて

$$\rho = \sum_{\kappa_1=0}^3 \sum_{\kappa_2=0}^3 \frac{\langle \sigma_{\kappa_1} \otimes \sigma_{\kappa_2} \rangle}{4} (\sigma_{\kappa_1} \otimes \sigma_{\kappa_2}) \quad (3.10)$$

を得る。

L 量子ビットの密度行列

では最後に 1, 2 量子ビットの話を一一般化し、L 量子ビットの密度行列の展開を考えよう。L 粒子系の密度行列は $2^L \times 2^L$ のエルミート行列である。密度行列を表現する基底を $\{\sigma_{\kappa_1} \otimes \sigma_{\kappa_2} \otimes \cdots \otimes \sigma_{\kappa_L}\}$ としよう。この基底は直交性

$$\text{Tr}[(\sigma_{\kappa_1} \otimes \sigma_{\kappa_2} \otimes \cdots \otimes \sigma_{\kappa_L})(\sigma_{\lambda_1} \otimes \sigma_{\lambda_2} \otimes \cdots \otimes \sigma_{\lambda_L})] = 2^L \delta_{\kappa_1, \lambda_1} \delta_{\kappa_2, \lambda_2} \cdots \delta_{\kappa_L, \lambda_L} \quad (3.11)$$

を満たす。この直交基底を用いると密度行列は

$$\rho = \frac{u_{00\cdots 0}}{2^L} (\sigma_0 \otimes \sigma_0 \otimes \cdots \otimes \sigma_0) + \frac{u_{00\cdots 1}}{2^L} (\sigma_0 \otimes \sigma_0 \otimes \cdots \otimes \sigma_1) + \cdots + \frac{u_{33\cdots 3}}{2^L} (\sigma_3 \otimes \sigma_3 \otimes \cdots \otimes \sigma_3) \quad (3.12)$$

と展開できる。密度行列を決めるパラメータは

$$u_{\kappa_1 \kappa_2 \cdots \kappa_L} = \text{Tr}[\rho (\sigma_{\kappa_1} \otimes \sigma_{\kappa_2} \otimes \cdots \otimes \sigma_{\kappa_L})] = \langle \sigma_{\kappa_1} \otimes \sigma_{\kappa_2} \otimes \cdots \otimes \sigma_{\kappa_L} \rangle \quad (3.13)$$

で得られる。従って、L 量子ビットの密度行列は

密度行列の Pauli 基底による展開

$$\rho = \sum_{\kappa_1=0}^3 \sum_{\kappa_2=0}^3 \cdots \sum_{\kappa_L=0}^3 \frac{\langle \sigma_{\kappa_1} \otimes \sigma_{\kappa_2} \otimes \cdots \otimes \sigma_{\kappa_L} \rangle}{2^L} (\sigma_{\kappa_1} \otimes \sigma_{\kappa_2} \otimes \cdots \otimes \sigma_{\kappa_L}) \quad (3.14)$$

と展開することができることが分かった。実験から求める値は多体の相関関数の期待値 $\{\langle \sigma_{\kappa_1} \otimes \sigma_{\kappa_2} \otimes \cdots \otimes \sigma_{\kappa_L} \rangle\}$ である。このように、同一の量子状態を準備、様々な物理量を観測することを繰り返して得られたデータを組み合わせ、密度行列を「再構築」することを量子状態トモグラフィー (quantum state tomography, QST) [11, 12, 13, 14]^{*3} と呼ぶ。

3.1.2 直交基底による展開の一般化

前節では天下り式に密度行列を Pauli 行列による基底で展開し、QST の理論式 (3.14) を求めた。ここでは Pauli 行列に縛られず、一般の直交基底を用いた場合の表式を求める。実はここでの考え方が次章に繋がる。

まず話を簡単にするため、ベクトル $\mathbf{a}$ を直交基底 $\{\mathbf{v}_\mu\}$ によって分解することを考える (図 3.1)。ここで直交基底は規格化されていなくて良く

$$\mathbf{v}_\mu \cdot \mathbf{v}_\nu = |\mathbf{v}_\mu|^2 \delta_{\mu, \nu} \quad (3.15)$$

を満たす。すると

$$\mathbf{a} = \sum_{\mu} \tilde{c}_\mu \frac{\mathbf{v}_\mu}{\|\mathbf{v}_\mu\|} = \sum_{\mu} c_\mu \mathbf{v}_\mu \quad (3.16)$$

と書ける。係数 $\{c_\mu\}$ は

$$c_\mu = \tilde{c}_\mu \frac{1}{\|\mathbf{v}_\mu\|} = \mathbf{a} \cdot \frac{\mathbf{v}_\mu}{\|\mathbf{v}_\mu\|} \frac{1}{\|\mathbf{v}_\mu\|} = \frac{\mathbf{a} \cdot \mathbf{v}_\mu}{\|\mathbf{v}_\mu\|^2} \quad (3.17)$$

で与えられる。

^{*3} “tomography” とは、ラテン語の tomo (切断する) と graph (描く) の合成語である。もともとは地質探査や医療診断等で調査対象をその周辺の様々な方向から多数の投影データを取得し、それらを用いて画像化する技術として用いられる言葉である。例えば X 線を利用して体の内部の断面像を得る CT 検査は Computed Tomography の略である。QST も似たニュアンスがあり、「様々な方向からの投影」は「様々な基底での測定」、「画像化」は「密度行列の再構築」に対応している。

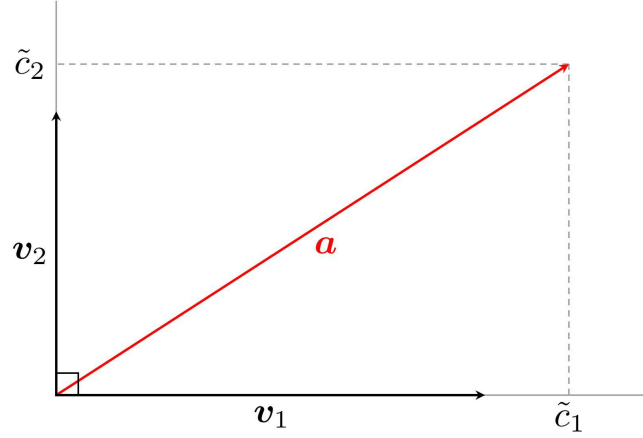


図 3.1 2次元ベクトルの直交基底による分解

この要領で行列 ρ の直交基底 $\{M_\mu\}$ による分解

$$\rho = \sum_{\mu} C_{\mu} M_{\mu} \quad (3.18)$$

を考える。 ρ はエルミート行列であるので、 $\{M_\mu\}$ もエルミート行列と考えることにする。ここでベクトル同士の内積は行列同士の Frobenius 内積に置き換えることができる（詳細は付録 A を参照せよ）。 $\{M_\mu\}$ の直交性は

$$\text{Tr}(M_{\mu} M_{\nu}) = \text{Tr}(M_{\mu}^2) \delta_{\mu, \nu} \quad (3.19)$$

と表すことができる。式 (3.17) をもとに考えると係数 $\{C_{\mu}\}$ は、

$$C_{\mu} = \frac{\text{Tr}(\rho M_{\mu})}{\text{Tr}(M_{\mu}^2)} = \frac{\langle M_{\mu} \rangle}{\text{Tr}(M_{\mu}^2)} \quad (3.20)$$

で与えられる。よって

密度行列の直交基底による分解

$$\rho = \sum_{\mu} \frac{\langle M_{\mu} \rangle}{\text{Tr}(M_{\mu}^2)} M_{\mu} \quad (3.21)$$

を得る。 $\{M_{\mu}\}$ の例として、Pauli 行列のテンソル積によって定義される直交基底

$$M_{\mu} = \sigma_{\kappa_1^{(\mu)}} \otimes \sigma_{\kappa_2^{(\mu)}} \otimes \cdots \otimes \sigma_{\kappa_L^{(\mu)}} \quad (3.22)$$

を選んでみよう。ここで $\kappa_i^{(\mu)} \in \{0, 1, 2, 3\}$ をとるとし、配列 $\{\kappa_1^{(\mu)}, \kappa_2^{(\mu)}, \dots, \kappa_L^{(\mu)}\}$ は $\mu \in [1, 4^L]$ によって一意に定まるものとする。式 (3.21) の分母は

$$\begin{aligned} \text{Tr}(M_{\mu}^2) &= \text{Tr} \left[(\sigma_{\kappa_1^{(\mu)}} \otimes \sigma_{\kappa_2^{(\mu)}} \otimes \cdots \otimes \sigma_{\kappa_L^{(\mu)}}) (\sigma_{\kappa_1^{(\mu)}} \otimes \sigma_{\kappa_2^{(\mu)}} \otimes \cdots \otimes \sigma_{\kappa_L^{(\mu)}}) \right] \\ &= \text{Tr} \left[\left(\sigma_{\kappa_1^{(\mu)}} \right)^2 \otimes \left(\sigma_{\kappa_2^{(\mu)}} \right)^2 \otimes \cdots \otimes \left(\sigma_{\kappa_L^{(\mu)}} \right)^2 \right] \\ &= \text{Tr} [I \otimes I \otimes \cdots \otimes I] = [\text{Tr}(I)]^L = 2^L \end{aligned} \quad (3.23)$$

となる。つまり、

$$\rho = \sum_{\mu} \frac{\langle \sigma_{\kappa_1^{(\mu)}} \otimes \sigma_{\kappa_2^{(\mu)}} \otimes \cdots \otimes \sigma_{\kappa_L^{(\mu)}} \rangle}{2^L} (\sigma_{\kappa_1^{(\mu)}} \otimes \sigma_{\kappa_2^{(\mu)}} \otimes \cdots \otimes \sigma_{\kappa_L^{(\mu)}}) \quad (3.24)$$

と書ける。これはまさに式 (3.14) の形そのものである。

3.2 QST の課題点

3.2.1 観測基底の指数関数的増大

式 (3.14) を見ると、QST を実験で行うのはあまりにも現実的でないことがわかる。その理由の一つが粒子数 L に関して指数関数的に増大する実験コストである。実験で得る値は $\{\langle \sigma_{\mu_1} \otimes \sigma_{\mu_2} \otimes \cdots \otimes \sigma_{\mu_L} \rangle\}$ であった。つまり、必要となる異なる期待値は $4^L - 1$ 個である。そのためこのままでは量子多体系に対して適用することが困難である。実際に 2025 年 3 月 11 日現在で報告された人工量子系における QST の実験例^{*4}を見てみよう。

超伝導回路による QST : 2 ~ 5 量子ビット

先行研究 [77] では、ローカルな量子ゲート操作と読み出しを得意とする超伝導回路を用いて、2 ~ 5 qubit の **Greenberger–Horne–Zeilinger 状態 (GHZ state)** [78, 79]

$$|\text{GHZ}_L\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle^{\otimes L} + |1\rangle^{\otimes L}) \quad (3.25)$$

を用意し QST を行っている。理想的な密度行列は

$$\rho = |\text{GHZ}_L\rangle \langle \text{GHZ}_L| = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & \cdots & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 1/2 & 0 & \cdots & 0 & 1/2 \end{pmatrix} \quad (3.26)$$

である。ここでは初期状態 $|0\rangle^{\otimes L}$ を準備し、図 3.2(b) に示す量子回路を通して $|\text{GHZ}_L\rangle$ を準備する。

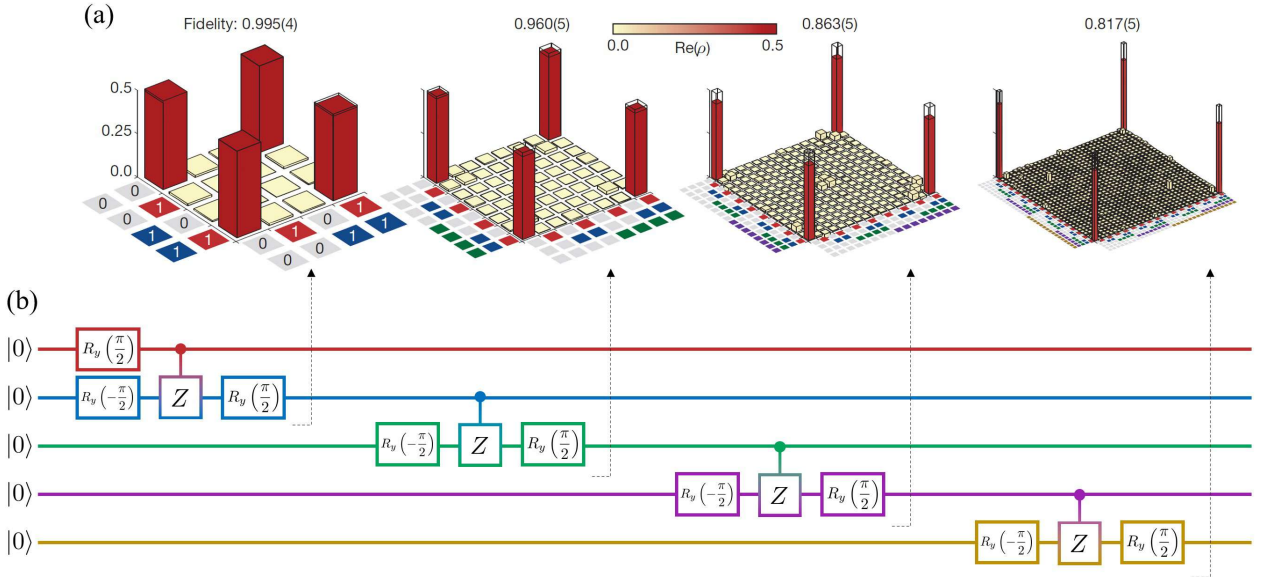


図 3.2 (a) $L = 2, 3, 4, 5$ における $|\text{GHZ}_L\rangle \langle \text{GHZ}_L|$ の QST の結果 (図は文献 [77] より引用) と (b) $|\text{GHZ}_L\rangle$ を生成する量子回路

量子回路内で登場する 1 量子ビット量子ゲートは

$$R_y(\varphi) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\varphi}{2} & -\sin \frac{\varphi}{2} \\ \sin \frac{\varphi}{2} & \cos \frac{\varphi}{2} \end{pmatrix} \quad (3.27)$$

^{*4} QST は様々な文脈で実験がなされているが、ここでは全系の密度行列を真面目に再構築した例を挙げている。

であり、Bloch 球上のある点の状態を y 軸中心に φ 回転させた点の状態に変換する役割を持つ。2 量子ビット量子ゲートは制御 Z ゲート (controlled- Z gate)

$$CZ = |0\rangle\langle 0| \otimes I + |1\rangle\langle 1| \otimes Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (3.28)$$

である。制御 Z ゲートは制御量子ビットと標的量子ビットの 2 量子ビットに作用する量子ゲートである。制御量子ビットが $|0\rangle$ であれば標的量子ビットには操作を行わず、制御量子ビットが $|1\rangle$ であれば標的量子ビットに Z (Pauli 行列 σ_3) を作用させる。式 (3.28) は一つ目の量子ビットが制御量子ビット、二つ目の量子ビットが標的量子ビットとしたものである。例えば 3 量子ビット系で、二つ目、三つ目の量子ビットをそれぞれ制御量子ビット、標的量子ビットとするのであれば $CZ = I \otimes |0\rangle\langle 0| \otimes I + I \otimes |1\rangle\langle 1| \otimes Z$ となる。回路図では制御量子ビットに黒丸、標的量子ビットに四角を置き、両者を線で結んで表す。再構築された密度行列は図 3.2(a) の通りであり、おおよそ式 (3.26) と同じ行列ができていことが分かる。QST の正確さはしばしば忠実度 (fidelity) (詳細は付録 A を参照せよ) によって評価される。再構築した密度行列が理想的な密度行列と一致するとき忠実度は 1 をとり、直交するときは 0 を取る。この QST の忠実度は $L = 2, 3, 4, 5$ でそれぞれ 0.995(4), 0.960(5), 0.863(5), 0.817(5) である。

フォトン系による QST : 4 量子ビット

先行研究 [80] ではフォトン系を用いて 4qubit の **Dicke 状態 (Dicke state)** [24]

$$|D_4^{(2)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} (|0011\rangle + |0101\rangle + |0110\rangle + |1001\rangle + |1010\rangle + |1100\rangle) \quad (3.29)$$

の QST を行っている。 $|0\rangle, |1\rangle$ はそれぞれ水平方向、垂直方向に偏光したフォトンの状態を表す。実際のセットアップを図 3.3 に示す。一つの光を 3 つのビームスプリッター (BS) を用いて 4 つに分解することで $|D_4^{(2)}\rangle$ を作り出している。また分けた光をそれぞれの偏光ビームスプリッター (PBS) に通す。PBS は状態 $|0\rangle$ と $|1\rangle$ を分けることができ、分けた先にそれぞれ光子の検出器を置くことで各フォトンの量子状態を測定することができる。この状態の理想的な密度行列を図 3.4 (a) に示す。この密度行列はすべての成分が実数であり、虚部は 0 である。また、QST によって得られた密度行列の実部及び、理想的な密度行列との差をそれぞれ図 3.4 (b), (c) に示す。得られた忠実度は 0.844 ± 0.008 であった。

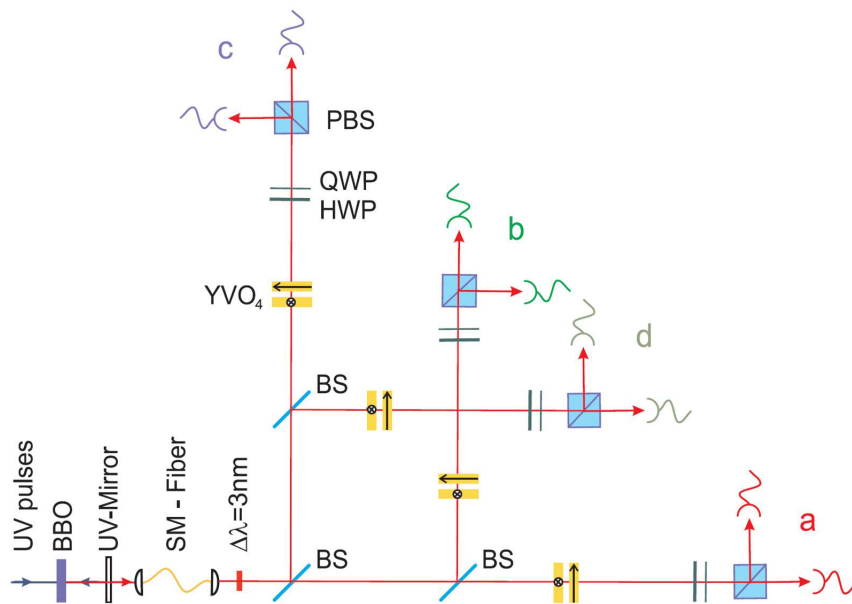


図 3.3 $|D_4^{(2)}\rangle$ を準備・測定するためのセットアップ (図は文献 [80] より引用)

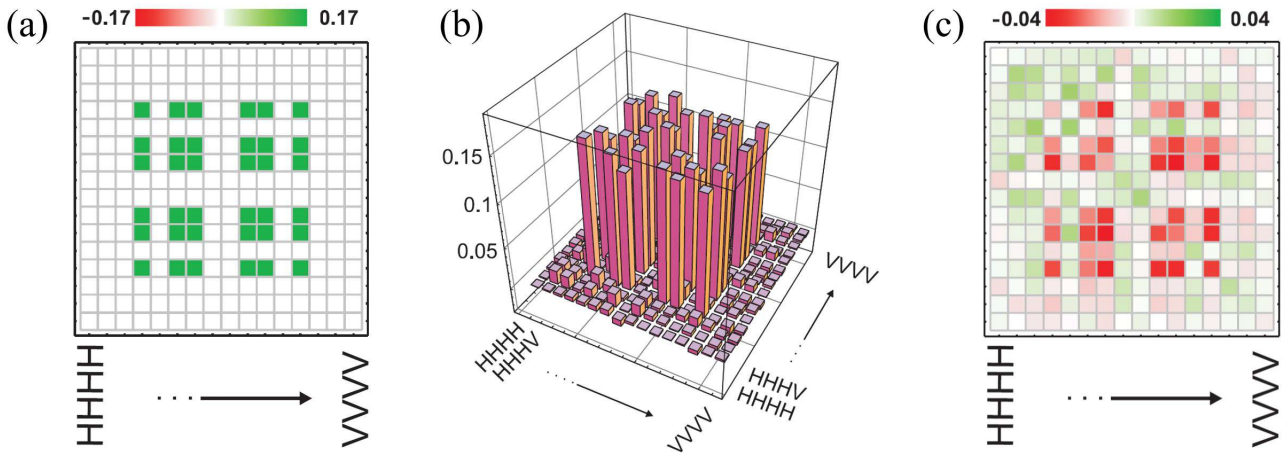


図 3.4 $|D_4^{(2)}\rangle$ の (a) 理想的な密度行列 (実部のみ), (b) QST によって得られた密度行列の実部, (c) 理想的な密度行列と QST の結果の差 (図は文献 [80] より引用)

イオントラップ系による QST : 8 量子ビット

最後にイオントラップ系における QST を紹介する [81]。この実験では $^{40}\text{Ca}^+$ イオンを一次元的にトラップし、8qubit の W 状態 [82, 83, 84]*5

$$|W_8\rangle = \frac{1}{\sqrt{8}} (|10\cdots 0\rangle + |010\cdots 0\rangle + \cdots + |0\cdots 01\rangle) \quad (3.30)$$

を実現させて QST を行っている。得られた密度行列は図 3.5 に示す通りで、忠実度は 0.72 であった。この研究は 2025 年 3 月 11 日時点で報告された一番粒子数の多い QST である。このように全体系の QST はスケールアップが困難であることがわかる。

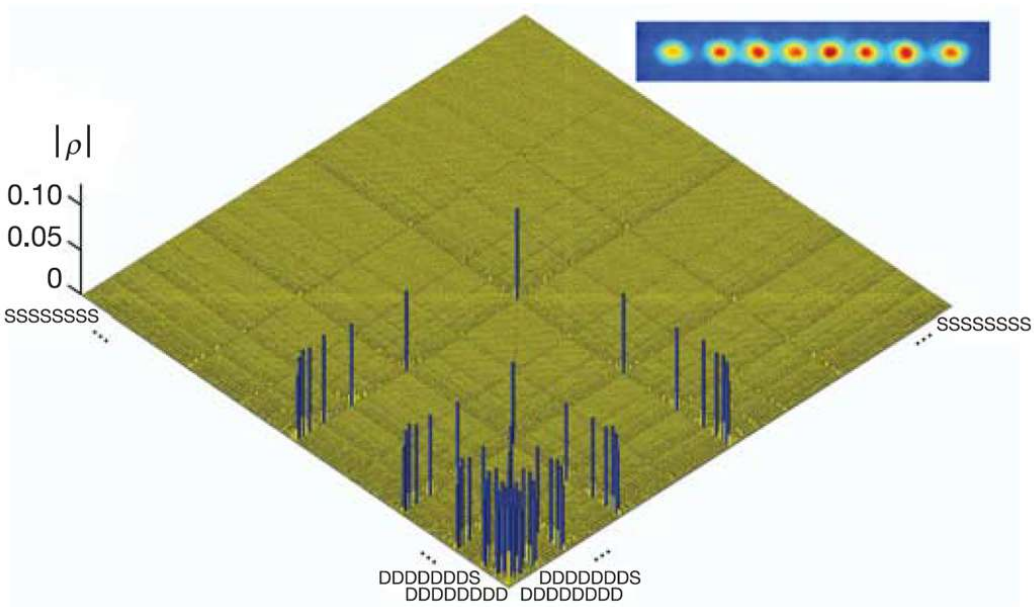


図 3.5 イオントラップ系を用いて再構築された 8 粒子 W 状態 $|W_8\rangle$ の密度行列。各要素は絶対値を取っている。右上の画像は実際にトラップされたイオンの様子である (図は文献 [81] より引用)。

*5 W 状態は L 粒子のうち 1 粒子が励起した Dicke 状態と一致する。

3.2.2 量子化軸の局所的回転の困難

光格子中の冷却原子系と QGM を用いた QST はさらに困難となる。その理由は $\{\langle \sigma_{\mu_1} \otimes \sigma_{\mu_2} \otimes \cdots \otimes \sigma_{\mu_L} \rangle\}$ を測定するためには粒子毎に量子化軸を回転させなければならないからである。例えば、量子気体顕微鏡ではスピンの z 成分を観測することができるため、 $\{\langle Z^{\otimes L} \rangle\}$ は簡単に得られる。また、系全体に量子化軸を回転させる Rabi パルス光を適当に照射して測定をすることで、 $\{\langle X^{\otimes L} \rangle\}$ や $\{\langle Y^{\otimes L} \rangle\}$ など全ての粒子に対して同じ成分の測定は容易に行うことができる (図 3.6(a))。問題になるのは、それら以外の「向きがバラバラ」な基底 (例えば $\{\langle X \otimes Y \otimes X \otimes Z \otimes X \otimes Y \otimes Y \rangle\}$ など) の測定であり、ローカルに Rabi パルス光を照射して測定しなければならない (図 3.6(b))。この局所操作^{*6}は粒子数が多くなると非常に手間のかかる作業である。特に光格子中の冷却原子系においては、格子定数 (粒子間距離) が $\mathcal{O}(10^{-7}\text{m})$ (レーザー光の波長オーダー) であり、現状の技術では局所的な Rabi パルス光照射は分解能的に不可能である。

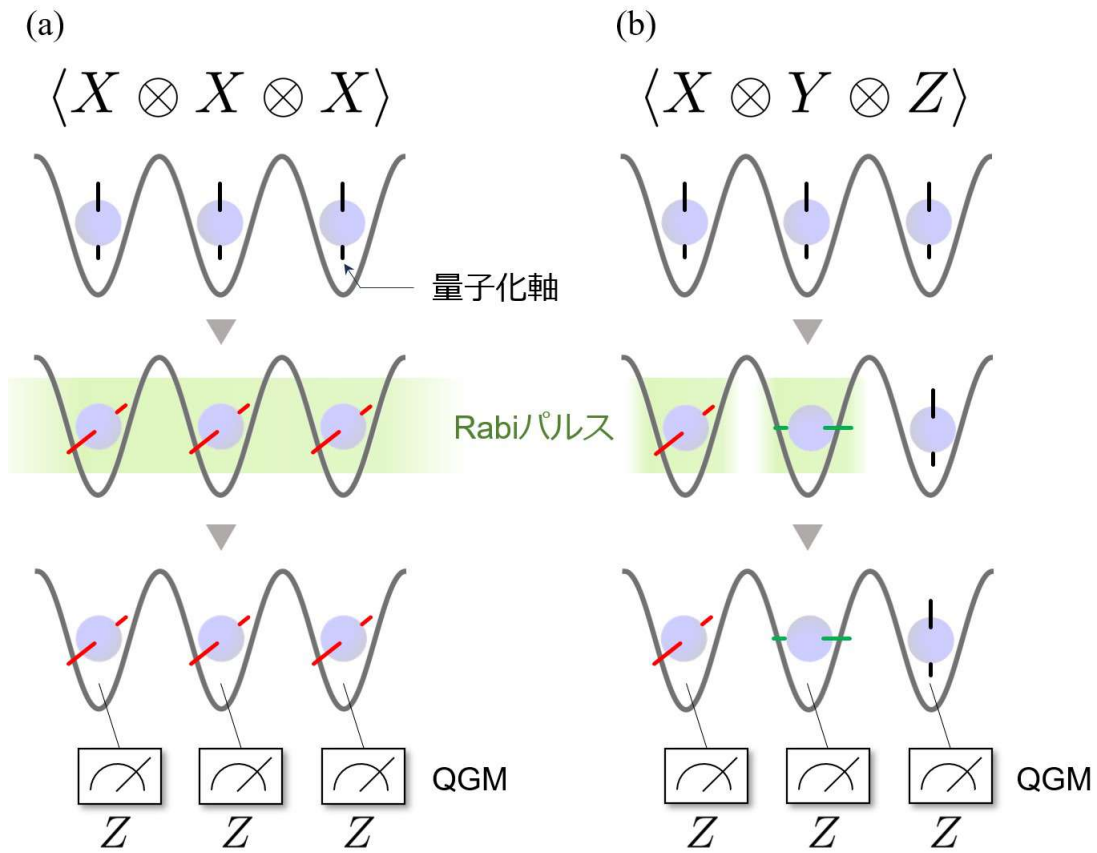


図 3.6 QGM を用いた (a) 大域 Rabi パルス光照射及び (b) 局所 Rabi パルス光照射を必要とする基底の観測

3.3 置換不変密度行列 (PIDM)

3.3.1 定義

QST は $\mathcal{O}(4^L)$ で増加する観測回数と QGM における局所量子化軸回転の問題を抱えており、これらの問題を解決することでスケラブルな QST が期待される。そこで本章では置換不変量子状態トモグラフィー (**permutationally invariant quantum state tomography, PIQST**) [21, 22, 23] に注目する。QST は密度行列を再構築する手法

^{*6} ここで言う「局所」は「量子多体系の中の一部の粒子」の意味で用いている。

であったのに対し、PIQST は置換不変密度行列 (**permutationally invariant part of the density matrix, PIDM**) を構築する手法である。PIDM は以下の式で定義される。

置換不変密度行列 (PIDM)

$$\Pi(\rho) = \frac{1}{L!} \sum_{s \in \mathfrak{S}_L} \hat{\mathcal{P}}_s \rho \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger \quad (3.31)$$

ここで $\mathfrak{S}_L$ は L 次の対称群 (**symmetric group**) でありその元 s は置換 (**permutation**) である。置換とは L 個のものをある順番で 1 列に並べ替える操作であり、例えば「1,2,3,4」を「2,4,1,3」に並び替える置換 s は

$$s = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ s(1) & s(2) & s(3) & s(4) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 4 & 1 & 3 \end{pmatrix} \quad (3.32)$$

と表す。すなわち $\mathfrak{S}_L$ の元は $L!$ 個存在する。また、 $\hat{\mathcal{P}}_s$ は L 個の粒子を置換 s によって並び替える演算子である。すなわち

$$\hat{\mathcal{P}}_s |q_1 q_2 \cdots q_L\rangle = |q_{s(1)} q_{s(2)} \cdots q_{s(L)}\rangle \quad (3.33)$$

である。ここで $|q_1 q_2 \cdots q_L\rangle = |q_1\rangle \otimes |q_2\rangle \otimes \cdots \otimes |q_L\rangle$ であり、 $|q_i\rangle$ は i 番目の qubit の状態を表す。演算子 $\hat{\mathcal{P}}_s$ はユニタリー演算子であり、

$$\hat{\mathcal{P}}_s = \sum_{j=1}^L \sum_{q_j \in \{0,1\}} \bigotimes_{i=1}^L \hat{F}_{s(q_i)}^{q_i} \quad (3.34)$$

によって得られる*7。ただし $\hat{F}_\nu^\mu = |\mu\rangle \langle \nu|$, $(\mu, \nu \in \{0,1\})$ である。PIDM は、エルミート性 (**Hermicity**)、 $\text{Tr}(\rho) = 1$ (**unit trace**)、半正定値性 (**positive semi-definiteness**) の 3 つの性質を持つため、密度行列としての意味を持った行列である。以下でその性質を簡単に示す。

- エルミート性 ($\Pi(\rho)^\dagger = \Pi(\rho)$)

$$\Pi(\rho)^\dagger = \frac{1}{L!} \sum_{s \in \mathfrak{S}_L} (\hat{\mathcal{P}}_s \rho \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger)^\dagger = \frac{1}{L!} \sum_{s \in \mathfrak{S}_L} = (\hat{\mathcal{P}}_s^\dagger)^\dagger \rho^\dagger \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger = \frac{1}{L!} \sum_{s \in \mathfrak{S}_L} \hat{\mathcal{P}}_s \rho \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger = \Pi(\rho) \quad \blacksquare \quad (3.35)$$

- $\text{Tr}[\Pi(\rho)] = 1$

$$\text{Tr}[\Pi(\rho)] = \frac{1}{L!} \sum_{s \in \mathfrak{S}_L} \text{Tr} [\hat{\mathcal{P}}_s \rho \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger] = \frac{1}{L!} \sum_{s \in \mathfrak{S}_L} \text{Tr}(\rho) = \frac{1}{L!} \cdot L! = 1 \quad \blacksquare \quad (3.36)$$

ここでトレースの巡回不変性と $\hat{\mathcal{P}}_s$ のユニタリー性を用いた。

- 半正定値性 ($\Pi(\rho) \succeq 0$)

$$\Pi(\rho) \succeq 0 \Leftrightarrow \forall |x\rangle, \langle x | \Pi(\rho) | x \rangle \geq 0 \quad (3.37)$$

を示す。

$$\langle x | \Pi(\rho) | x \rangle = \frac{1}{L!} \sum_{s \in \mathfrak{S}_L} \langle x | \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger \rho \hat{\mathcal{P}}_s | x \rangle = \frac{1}{L!} \sum_{s \in \mathfrak{S}_L} \langle x | \rho | x \rangle \geq 0 \quad \blacksquare \quad (3.38)$$

ここで $\langle x | \rho | x \rangle \geq 0$ を用いた。

式 (3.31) によると、 $\Pi(\rho)$ とは、ある ρ に対し $N!$ 通り全ての置換を施して平均化 (対称化) したものである。図 3.7 が PIDM における粒子の置換のイメージ図である。尚、本研究では PIDM の指数 ρ は純粋状態として考える。

*7 $\hat{\mathcal{P}}_s \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger = \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger \hat{\mathcal{P}}_s = I$ が成り立つ。エルミート性 $\hat{\mathcal{P}}_s^\dagger = \hat{\mathcal{P}}_s$ は必ずしも成り立つわけではない。エルミート性が成り立つときは $\hat{\mathcal{P}}_s^2 = I$ が成り立つため 2 回作用させて元の状態に戻る置換である。

$$\begin{aligned}\Pi(\rho) &= \frac{1}{L!} \left(\rho + \hat{\mathcal{P}}_{s_2} \rho \hat{\mathcal{P}}_{s_2}^\dagger + \hat{\mathcal{P}}_{s_3} \rho \hat{\mathcal{P}}_{s_3}^\dagger + \cdots + \hat{\mathcal{P}}_{s_L} \rho \hat{\mathcal{P}}_{s_L}^\dagger \right) \\ &= \frac{1}{L!} \left(\text{red} \text{---} \text{orange} \text{---} \text{green} \text{---} \text{blue} + \text{red} \text{---} \text{orange} \text{---} \text{blue} \text{---} \text{green} + \text{red} \text{---} \text{green} \text{---} \text{orange} \text{---} \text{blue} + \cdots + \text{blue} \text{---} \text{green} \text{---} \text{orange} \text{---} \text{red} \right)\end{aligned}$$

図 3.7 PIDM における粒子の置換のイメージ。円が連なった絵は各置換を行った状態の密度行列を表す。

3.3.2 置換不変基底による展開

$\Pi(\rho)$ は実験ではどのように構築できるのだろうか。つまり、我々は QST における式 (3.14) の「PIQST 版」が欲しいわけである。実は QST の式を導いたように、直交する基底によって展開することが可能である。今回は直交基底として

$$\mathcal{B}_\mu^{(n)} \equiv \Pi(X^{\otimes k_\mu} \otimes Y^{\otimes l_\mu} \otimes Z^{\otimes m_\mu} \otimes I^{\otimes n}) \quad (3.39)$$

を選ぼう。但し k_μ, l_μ, m_μ, n は 0 を含めた自然数であり、 $k_\mu + l_\mu + m_\mu + n = L$ を満たすものとする。また μ を一つ指定すると自然数の組 $\{k_\mu, l_\mu, m_\mu\}$ が決まるものとする。直交性は

$$\text{Tr}[\mathcal{B}_\mu^{(n)} \mathcal{B}_{\mu'}^{(n')}] = \frac{k_\mu! l_\mu! m_\mu! n!}{L!} 2^L \delta_{\mu, \mu'} \delta_{n, n'} \quad (3.40)$$

で表される*8。従って式 (3.21) より、

PIDM の置換不変基底による展開

$$\Pi(\rho) = \frac{L!}{2^L} \sum_{n=0}^L \sum_{\substack{\mu \\ k_\mu + l_\mu + m_\mu + n = L}} \frac{\langle \mathcal{B}_\mu^{(n)} \rangle}{k_\mu! l_\mu! m_\mu! n!} \mathcal{B}_\mu^{(n)} \quad (3.41)$$

を得る。これが目標としていた式 (3.14) の「PIQST 版」である。

ここで $\Pi(X^{\otimes k_\mu} \otimes Y^{\otimes l_\mu} \otimes Z^{\otimes m_\mu} \otimes I^{\otimes n})$ の取り扱いについて確認しておこう。 $\hat{\mathcal{P}}_s$ はあるケットに作用させると、粒子に置換 s を施した状態を作るのであった。簡単のため $L = 2$ とし、

$$\Pi(X \otimes Y) = \frac{1}{2!} \sum_{s \in \mathfrak{S}_2} \hat{\mathcal{P}}_s (X \otimes Y) \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger \quad (3.42)$$

*8 ここで

$$\begin{aligned}& \text{Tr}((\mathcal{B}_\mu^{(n)})^2) \\ &= \frac{1}{\left(\frac{L!}{k_\mu! l_\mu! m_\mu! n!}\right)^2} \text{Tr} \left[\left(\sum_{s \in \mathfrak{S}_L} \hat{\mathcal{P}}_s (X^{\otimes k_\mu} \otimes Y^{\otimes l_\mu} \otimes Z^{\otimes m_\mu} \otimes I^{\otimes n}) \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger \right) \left(\sum_{s' \in \mathfrak{S}_L} \hat{\mathcal{P}}_{s'} (X^{\otimes k_\mu} \otimes Y^{\otimes l_\mu} \otimes Z^{\otimes m_\mu} \otimes I^{\otimes n}) \hat{\mathcal{P}}_{s'}^\dagger \right) \right] \\ &= \frac{1}{\left(\frac{L!}{k_\mu! l_\mu! m_\mu! n!}\right)^2} \text{Tr} \left[\sum_{s \in \mathfrak{S}_L} \hat{\mathcal{P}}_s \left((X^2)^{\otimes k_\mu} \otimes (Y^2)^{\otimes l_\mu} \otimes (Z^2)^{\otimes m_\mu} \otimes (I^2)^{\otimes n} \right) \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger \right] \\ &= \frac{1}{\left(\frac{L!}{k_\mu! l_\mu! m_\mu! n!}\right)^2} \sum_{s \in \mathfrak{S}_L} \text{Tr} [\hat{\mathcal{P}}_s (I^{\otimes L}) \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger] = \frac{1}{\left(\frac{L!}{k_\mu! l_\mu! m_\mu! n!}\right)^2} \times \frac{L!}{k_\mu! l_\mu! m_\mu! n!} \times (\text{Tr} I)^L = \frac{k_\mu! l_\mu! m_\mu! n!}{L!} 2^L\end{aligned}$$

を用いた。但し、 $\sum_{s \in \mathfrak{S}_L}$ は全ての非自明な並び替えに関する和である。

を考える。この演算子の状態 $|q_1 q_2\rangle$ に対する期待値を計算すると

$$\begin{aligned}
 \langle q_1 q_2 | \Pi(X \otimes Y) | q_1 q_2 \rangle &= \frac{1}{2!} \sum_{s \in \mathfrak{S}_2} \langle q_1 q_2 | \hat{\mathcal{P}}_s(X \otimes Y) \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger | q_1 q_2 \rangle \\
 &= \frac{1}{2!} (\langle q_1 q_2 | X \otimes Y | q_1 q_2 \rangle + \langle q_2 q_1 | X \otimes Y | q_2 q_1 \rangle) \\
 &= \frac{1}{2!} (\langle q_1 q_2 | X \otimes Y | q_1 q_2 \rangle + \langle q_1 q_2 | Y \otimes X | q_1 q_2 \rangle) \\
 &= \left\langle q_1 q_2 \left| \frac{1}{2!} (X \otimes Y + Y \otimes X) \right| q_1 q_2 \right\rangle
 \end{aligned} \tag{3.43}$$

すなわち

$$\Pi(X \otimes Y) = \frac{1}{2!} (X \otimes Y + Y \otimes X) \tag{3.44}$$

である。また、この結果から $\Pi(X \otimes Y) = \Pi(Y \otimes X)$ が言える。

$L = 3$ での例も見ておこう。例えば

$$\Pi(X \otimes Y \otimes Z) = \frac{1}{3!} \sum_{s \in \mathfrak{S}_3} \hat{\mathcal{P}}_s(X \otimes Y \otimes Z) \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger. \tag{3.45}$$

を同様に計算してみると

$$\begin{aligned}
 \langle q_1 q_2 q_3 | \Pi(X \otimes Y \otimes Z) | q_1 q_2 q_3 \rangle &= \frac{1}{3!} \sum_{s \in \mathfrak{S}_3} \langle q_1 q_2 q_3 | \hat{\mathcal{P}}_s(X \otimes Y \otimes Z) \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger | q_1 q_2 q_3 \rangle \\
 &= \frac{1}{3!} (\langle q_1 q_2 q_3 | X \otimes Y \otimes Z | q_1 q_2 q_3 \rangle + \langle q_1 q_3 q_2 | X \otimes Y \otimes Z | q_1 q_3 q_2 \rangle + \\
 &\quad \langle q_2 q_1 q_3 | X \otimes Y \otimes Z | q_2 q_1 q_3 \rangle + \langle q_2 q_3 q_1 | X \otimes Y \otimes Z | q_2 q_3 q_1 \rangle + \\
 &\quad \langle q_3 q_1 q_2 | X \otimes Y \otimes Z | q_3 q_1 q_2 \rangle + \langle q_3 q_2 q_1 | X \otimes Y \otimes Z | q_3 q_2 q_1 \rangle) \\
 &= \frac{1}{3!} (\langle q_1 q_2 q_3 | X \otimes Y \otimes Z | q_1 q_2 q_3 \rangle + \langle q_1 q_2 q_3 | X \otimes Z \otimes Y | q_1 q_2 q_3 \rangle + \\
 &\quad \langle q_1 q_2 q_3 | Y \otimes X \otimes Z | q_1 q_2 q_3 \rangle + \langle q_1 q_2 q_3 | Y \otimes Z \otimes X | q_1 q_2 q_3 \rangle + \\
 &\quad \langle q_1 q_2 q_3 | Z \otimes X \otimes Y | q_1 q_2 q_3 \rangle + \langle q_1 q_2 q_3 | Z \otimes Y \otimes X | q_1 q_2 q_3 \rangle) \\
 &= \left\langle q_1 q_2 q_3 \left| \frac{1}{3!} (X \otimes Y \otimes Z + X \otimes Z \otimes X + Y \otimes X \otimes Z \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + Y \otimes Z \otimes X + Z \otimes X \otimes Y + Z \otimes Y \otimes X) \right| q_1 q_2 q_3 \right\rangle
 \end{aligned} \tag{3.46}$$

すなわち

$$\begin{aligned}
 \Pi(X \otimes Y \otimes Z) &= \frac{1}{3!} (X \otimes Y \otimes Z + X \otimes Z \otimes X + Y \otimes X \otimes Z + \\
 &\quad + Y \otimes Z \otimes X + Z \otimes X \otimes Y + Z \otimes Y \otimes X)
 \end{aligned} \tag{3.47}$$

である。すなわち $\Pi(X \otimes Y \otimes Z) = \Pi(X \otimes Z \otimes Y) = \Pi(Y \otimes X \otimes Z) = \Pi(Y \otimes Z \otimes X) = \Pi(Z \otimes X \otimes Y) = \Pi(Z \otimes Y \otimes X)$ が成り立つ。同じ Pauli 演算子を複数含む場合は、例えば

$$\Pi(X \otimes X \otimes Z) = \frac{1}{3!} \sum_{s \in \mathfrak{S}_3} \hat{\mathcal{P}}_s(X \otimes X \otimes Z) \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger. \tag{3.48}$$

を同様に計算してみると

$$\begin{aligned}
\langle q_1 q_2 q_3 | \Pi(X \otimes X \otimes Z) | q_1 q_2 q_3 \rangle &= \frac{1}{3!} \sum_{s \in \mathfrak{S}_3} \langle q_1 q_2 q_3 | \hat{\mathcal{P}}_s(X \otimes X \otimes Z) \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger | q_1 q_2 q_3 \rangle \\
&= \frac{1}{3!} (\langle q_1 q_2 q_3 | X \otimes X \otimes Z | q_1 q_2 q_3 \rangle + \langle q_1 q_3 q_2 | X \otimes X \otimes Z | q_1 q_3 q_2 \rangle + \\
&\quad \langle q_2 q_1 q_3 | X \otimes X \otimes Z | q_2 q_1 q_3 \rangle + \langle q_2 q_3 q_1 | X \otimes X \otimes Z | q_2 q_3 q_1 \rangle + \\
&\quad \langle q_3 q_1 q_2 | X \otimes X \otimes Z | q_3 q_1 q_2 \rangle + \langle q_3 q_2 q_1 | X \otimes X \otimes Z | q_3 q_2 q_1 \rangle) \\
&= \frac{1}{3!} (\langle q_1 q_2 q_3 | X \otimes X \otimes Z | q_1 q_2 q_3 \rangle + \langle q_1 q_2 q_3 | X \otimes Z \otimes X | q_1 q_2 q_3 \rangle + \\
&\quad \langle q_1 q_2 q_3 | X \otimes X \otimes Z | q_1 q_2 q_3 \rangle + \langle q_1 q_2 q_3 | X \otimes Z \otimes X | q_1 q_2 q_3 \rangle + \\
&\quad \langle q_1 q_2 q_3 | Z \otimes X \otimes X | q_1 q_2 q_3 \rangle + \langle q_1 q_2 q_3 | Z \otimes X \otimes X | q_1 q_2 q_3 \rangle) \\
&= \left\langle q_1 q_2 q_3 \left| \frac{1}{3!} (X \otimes X \otimes Z + X \otimes Z \otimes X + Z \otimes X \otimes X) \right| q_1 q_2 q_3 \right\rangle \quad (3.49)
\end{aligned}$$

すなわち

$$\Pi(X \otimes X \otimes Z) = \frac{1}{3!} (X \otimes X \otimes Z + X \otimes Z \otimes X + Z \otimes X \otimes X) \quad (3.50)$$

である。ここでは $\Pi(X \otimes X \otimes Z) = \Pi(X \otimes Z \otimes X) = \Pi(Z \otimes X \otimes X)$ が成り立つ。まとめると、

$$\Pi(X^{\otimes k_\mu} \otimes Y^{\otimes l_\mu} \otimes Z^{\otimes m_\mu} \otimes I^{\otimes n}) = \frac{1}{L!} \sum_{s \in \mathfrak{S}_L} \hat{\mathcal{P}}_s(X^{\otimes k_\mu} \otimes Y^{\otimes l_\mu} \otimes Z^{\otimes m_\mu} \otimes I^{\otimes n}) \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger$$

であり、 Π は L 個の局所的な演算子に対して全ての非自明な置換を行い対称化する。言い換えると、 Π は同じ数だけ $\{X, Y, Z, I\}$ を持つ演算子を全て同じとみなす操作である (例: $\Pi(X \otimes Y) = \Pi(Y \otimes X)$)。大雑把には、この「演算子の同一化」が PIQST における実験コストの削減に繋がっている。では次に、具体的にどれほどコストが削減されるのか数学的に考えてみよう。

3.4 PIQST の利点

3.4.1 線形独立な置換不変基底の数

PIDM の構築には

置換不変基底

$$\mathcal{B}_\mu^{(n)} \equiv \Pi(X^{\otimes k_\mu} \otimes Y^{\otimes l_\mu} \otimes Z^{\otimes m_\mu} \otimes I^{\otimes n}) \quad (3.51)$$

の期待値が必要であった。独立な置換不変基底の数は $k_\mu + l_\mu + m_\mu + n = L$ を満たす非負整数の組 $\{k_\mu, l_\mu, m_\mu, n\}$ の場合の数を求めることと同値である。まず $n = 0$ の場合を考える。このとき、求めるべき場合の数は

$$D_L \equiv {}_{L+2}C_L = \frac{L^2 + 3L + 2}{2} \quad (3.52)$$

で求まる^{*9}。次に $0 < n \leq L$ の場合も同様に考えると、各 n に対し D_{L-n} 通り存在することが分かる。結局、独立な置換不変基底の数は

$$\sum_{n=0}^L D_{L-n} = \frac{L^3 + 6L^2 + 11L + 6}{6} \quad (3.53)$$

と計算できる。つまり、**PIQST** で必要な期待値の数は $\mathcal{O}(L^3)$ である。これは従来の QST が $\mathcal{O}(4^L)$ であったことを考えると大幅に実験コストを削減できていることがわかる。

^{*9} L 個の「○」と 2 本の「|」を一行に並べる場合の数 (いわゆる「重複組み合わせ」) と一致する。一行に並べたときに「|」で区切られた 3 区間の中にあるそれぞれの「○」の数は、 $\{k_\mu, l_\mu, m_\mu\}$ と対応させることができる。

3.4.2 置換不変基底の線形変換と大域的量子化軸回転

ここで置換不変基底 $\{\mathcal{B}_\mu^{(n)}\}_{\mu=1}^{D_{L-n}}$ と線形変換で繋がる新たな基底 $\{\mathcal{A}_\nu^{(n)}\}_{\nu=1}^{D_{L-n}}$ を

置換不変基底・その2

$$\mathcal{A}_\nu^{(n)} \equiv \Pi \left(A_\nu^{\otimes(L-n)} \otimes I^{\otimes n} \right) \quad (3.54)$$

で定義する。ここで $A_\nu = \alpha_\nu X + \beta_\nu Y + \gamma_\nu Z$ であり、 $\alpha_\nu, \beta_\nu, \gamma_\nu$ は $(\alpha_\nu)^2 + (\beta_\nu)^2 + (\gamma_\nu)^2 = 1$ を満たす実数とする。つまり位置ベクトル

$$\mathbf{a}_\nu = \begin{pmatrix} \alpha_\nu \\ \beta_\nu \\ \gamma_\nu \end{pmatrix} \quad (3.55)$$

で決まる点は半径1の球面上に存在する (図3.8)。

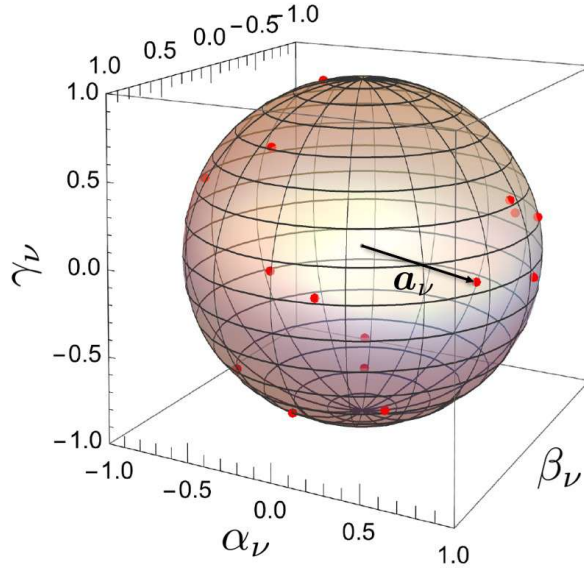


図3.8 ランダムベクトル $\mathbf{a}_\nu$

$\{\mathcal{A}_\nu^{(n)}\}_{\nu=1}^{D_{L-n}}$ 互いに直交はしていないが互いに線形独立であるため、 $\{\mathcal{B}_\mu^{(n)}\}_{\mu=1}^{D_{L-n}}$ と同じ空間を張ることができ、PIDM を表現することができる。 $\{\mathcal{B}_\mu^{(n)}\}$ と $\{\mathcal{A}_\nu^{(n)}\}$ の間の線形変換を

$$\mathcal{B}_\mu^{(n)} = \sum_{\nu=1}^{D_{L-n}} C_{\mu\nu}^{(n)} \mathcal{A}_\nu^{(n)} \quad (3.56)$$

と表すことにしよう。変換行列 $C^{(n)} = \{C_{\mu\nu}^{(n)}\}$ は以下のように解析的に求めることができる。

$$((C^{(n)})^{-1})_{\nu\mu} = \frac{\text{Tr} \left[\mathcal{A}_\nu^{(n)} \mathcal{B}_\mu^{(n)} \right]}{\text{Tr} \left[\left(\mathcal{B}_\mu^{(n)} \right)^2 \right]} = \frac{(2\alpha_\nu)^{k_\mu} (2\beta_\nu)^{l_\mu} (2\gamma_\nu)^{m_\mu} (L-n)!}{k_\mu! l_\mu! m_\mu! 2^{L-n}}. \quad (3.57)$$

この行列成分は $\mathcal{B}_\mu^{(n)}$ と $\mathcal{A}_\nu^{(n)}$ を構成する要素のみで決まることがわかる。つまり $\{\langle \mathcal{A}_\nu^{(n)} \rangle\}_{\nu=1}^{D_{L-n}}$ を測定できたとする、式 (3.56) を通して、PIQST に必要な $\{\langle \mathcal{B}_\mu^{(n)} \rangle\}_{\mu=1}^{D_{L-n}}$ が直ちに求まるのである。ここで大切なのは $\mathcal{A}_\nu^{(n)}$ を構成するローカルな演算子は A_ν のみであるということである。言い換えると、 $\mathcal{A}_\nu^{(n)}$ は全てのサイトで量子化軸を $\mathbf{a}_\nu$ 方向に向けて測定を行えば得られる。つまり PIQST は、置換不変基底を上手く変換できるおかげでローカルな量子化軸回転が不要となり、代わりに大域的な回転で実行可能となるのである。このロジックにより、PIQST は光格子系における

量子気体顕微鏡による測定と相性が良く、現実的に実行可能なプロトコルであると言える。これが PIQST の2つ目の強力な点である。

3.5 PIQST の実験

PIQST はもともと4粒子の Dicke 状態 [24] における効率的な密度行列の再構築法 (量子状態トモグラフィー) として考案された [21]。Dicke 状態とは

$$|D_L^{(n)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{L C_n}} \sum_{s \in \mathfrak{S}_L} \frac{\hat{P}_s \left(|0\rangle^{\otimes(L-n)} \otimes |1\rangle^{\otimes n} \right)}{(L-n)!n!} \quad (3.58)$$

で定義される量子状態であり、この先行研究では $L = 4, n = 2$ の Dicke 状態を扱っている。すなわち

$$|D_4^{(2)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} (|0011\rangle + |0101\rangle + |0110\rangle + |1001\rangle + |1010\rangle + |1100\rangle) \quad (3.59)$$

を考える。この密度行列 $\rho_{\text{theory}} = |D_4^{(2)}\rangle \langle D_4^{(2)}|$ は $H(\rho) = \rho$ が成り立つ特別な状態である。そのため PIQST を用いることで、本来 QST で生じる問題を避けながら密度行列を再構築することができる。この先行研究ではフォトン系を用いて $|D_4^{(2)}\rangle$ を用意したうえで、ベクトル $\{\mathbf{a}_\nu\}_{\nu=1}^{15}$ を「ランダム分布」(図 3.9(a)) で決めた PIQST と、球面一様分布に「最適化した分布」(図 3.9(d)) で決めた PIQST を行っている。前者及び後者の方法によって構築された密度行列 (PIDM) をそれぞれ $\rho_{\text{exp}}^{\text{random}}, \rho_{\text{exp}}^{\text{optimized}}$ と書くことにする。「ランダム分布」で行った $\{\mathcal{B}_\mu^{(n)}\}$ の測定結果及び $\rho_{\text{exp}}^{\text{random}}$ はそれぞれ図 3.9(b),(c) の通りである。得られた相関関数の値は従来の QST による値とおおよそ合っているものの分散が大きく、忠実度は $F(\rho_{\text{theory}}, \rho_{\text{exp}}^{\text{random}}) = 0.814(59)$ であった。一方、「最適化した分布」で行った $\{\mathcal{B}_\mu^{(n)}\}$ の測定結果及び $\rho_{\text{exp}}^{\text{optimized}}$ はそれぞれ図 3.9(e),(f) の通りである。得られた相関関数の値は従来の QST による値とほとんど合致しており、分散も小さいことが読み取れる。忠実度は $F(\rho_{\text{theory}}, \rho_{\text{exp}}^{\text{optimized}}) = 0.852(9)$ であった。またこの論考研究では、従来の QST も行い2種類の PIQST のパフォーマンスと比較している。この QST で得られた密度行列を $\rho_{\text{exp}}^{\text{full}}$ と書くと、忠実度は $F(\rho_{\text{theory}}, \rho_{\text{exp}}^{\text{random}}) = 0.880, F(\rho_{\text{theory}}, \rho_{\text{exp}}^{\text{optimized}}) = 0.947$ となり、「最適化した分布」で行った PIQST は従来の QST とほとんど変わらない結果を得られることがわかる。これは実験ではランダムベクトルを正確に制御することができずノイズが入ってしまうため、なるべく方向がオーバーラップしない分布の方が制度が良いと考えられている。

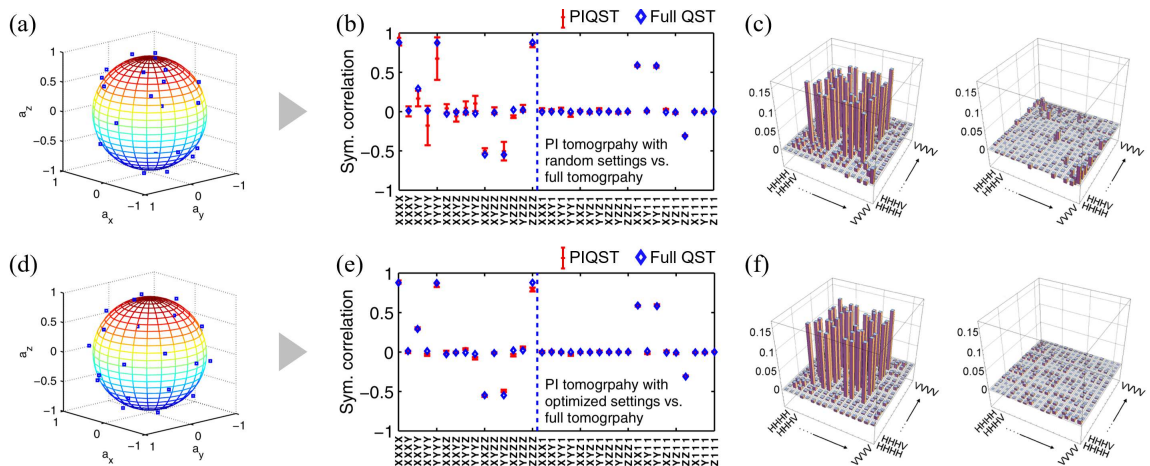


図 3.9 (a) ランダム分布. (b) ランダム分布の PIQST によって得られた相関関数の測定値. (c) ランダム分布の PIQST によって再構築された密度行列の実部 (左) と虚部 (右). (d) 最適化した分布. (e) 最適化分布の PIQST によって得られた相関関数の測定値. (f) 最適化分布の PIQST によって再構築された密度行列の実部 (左) と虚部 (右) (原画は [21] より引用)

3.6 一般の純粋状態に対する PIDM

Dicke 状態のようにその密度行列がその PIDM を完全一致する ($\Pi(\rho) = \rho$ を満たす) 状態にとって PIQST は「効率の良い QST」であり、PIDM によって全情報を取得することができる。しかし $\Pi(\rho) = \rho$ が成り立つ量子状態はレアであり、一般の量子状態は $\Pi(\rho) \neq \rho$ となる。では一般に $\Pi(\rho)$ は物理的にどのような情報を提供してくれるのか考えよう。そのために第2章で述べた「純粋状態の量子エンタングルメントと縮約密度行列の関係」についておさらいする。縮約密度行列 ρ_A は、密度行列 ρ に対して部分トレース

$$\text{Tr}_B : \mathbb{D} \longrightarrow \mathbb{D}_A, \rho \longmapsto \rho_A \quad (3.60)$$

を施すことで得られる密度行列である。ここで $\mathbb{D}$ は状態空間 (考えている系で取りうる全密度行列が所属する空間)^{*10}、 $\mathbb{D}_A$ は部分系 A に関する状態空間 (部分系 A で取りうる全密度行列が所属する空間) である。つまり部分トレースとは部分系の情報を捨てる操作といえる。そのため一般に残りの部分系の情報には「不確かさ」が生じる。この「不確かさ」を逆手に取ることで、部分トレースを取る前のエンタングルメントの強さを議論することができる。すなわち、 ρ_A が純粋状態 (「不確かさ」なし) であればもともと部分系間にエンタングルメントは無く、混合状態 (「不確かさ」あり) であればエンタングルしていることがわかるのである (表 3.1 上段)。

表 3.1 部分トレースと対称化によって捨てられる情報と得られる情報の比較

ρ に施す操作	操作で捨てる情報	操作で得られる密度行列 $\tilde{\rho}$	$\tilde{\rho}$ の純粋/混合	ρ に関する情報
部分トレース Tr_B	部分系の状態	縮約密度行列 ρ_A	純粋 混合	セパラブル状態 (積状態) エンタングル状態
対称化 Π	空間構造	PIDM $\Pi(\rho)$	純粋 混合	置換不変状態 置換不変状態でない

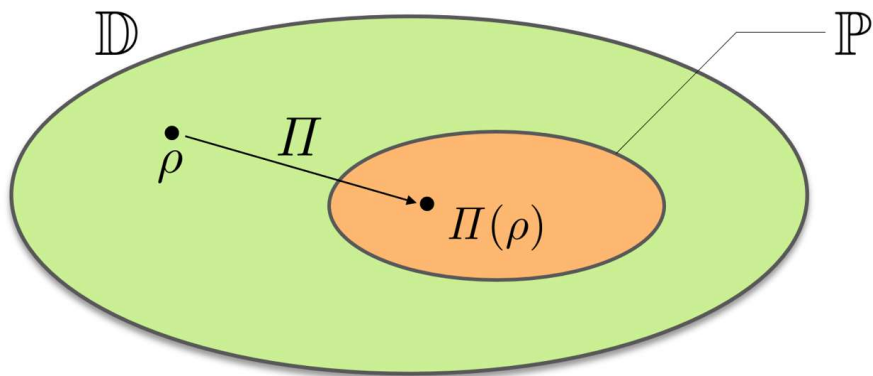
では話を PIDM に戻そう。ここでも ρ は純粋状態とする。PIDM $\Pi(\rho)$ は ρ に対して対称化操作

$$\Pi : \mathbb{D} \longrightarrow \mathbb{P}, \rho \longmapsto \Pi(\rho) \quad (3.61)$$

を施すことで得られる密度行列である。ここで $\Pi(\rho)$ が存在する空間を $\mathbb{P}$ と表した。 $\mathbb{P}$ には密度行列のうち対称化された (もしくは初めから対称的な) もののみが所属するため、 $\mathbb{P}$ は $\mathbb{D}$ の部分空間である。 $\Pi(\rho)$ は $\mathbb{P}$ の外の空間 $\bar{\mathbb{P}} = \mathbb{D} \setminus \mathbb{P}$ には存在しない (図 3.10)。対称化という操作は、どのような状態の粒子がどこに配置されているか、どの粒子間に量子相関が存在しているかといった空間構造の情報を捨てる操作と考えることができる。つまり PIDM には一般に空間構造に関する「不確かさ」が生じる。ここで量子エンタングルメントの定量化に倣って、この「不確かさ」を上手く利用しよう。対称化操作を行っても空間構造に「不確かさ」が無い (PIDM が純粋状態となる) 場合は、Dicke 状態をはじめとする置換不変状態であることが言える。逆に「不確かさ」が残る (PIDM が混合状態となる) 場合は置換不変ではない状態であることがわかる (表 3.1 下段)。

量子状態の「不確かさ」を定量化するツールと言えば von Neumann エントロピーである。実際 von Neumann エントロピー $S(\rho) = -\text{Tr}(\rho \log \rho)$ の ρ を ρ_A に置き換えることで、エンタングルメントの定量化を行うことができ、これをエンタングルメントエントロピーと呼んだ。また、エンタングルメントハミルトニアン $-\log(\rho_A)$ の固有値であるエンタングルメントスペクトラムによって、エンタングルメントエントロピーを含めたより多くの情報を得ることができ

^{*10} トレースが 1 に規格化された半正定値エルミート行列が所属する凸空間である。凸空間とはその元 $\forall \rho_1 \in \mathbb{D}, \forall \rho_2 \in \mathbb{D}$ 及び $\forall p \in (0, 1)$ について $\tilde{\rho} = p\rho_1 + (1-p)\rho_2 \in \mathbb{D}$ が成り立つ空間である。

図 3.10 状態空間 $\mathbb{D}$ とその部分空間 $\mathbb{P}$

た。これに倣って ρ を $\Pi(\rho)$ に置き換えた“新たなエントロピー” $S(\Pi(\rho)) = -\text{Tr}[\Pi(\rho) \log \Pi(\rho)]$ を定義すると、“置換不変性”を定量化する何かしらの値が

$$\rho \text{ が置換不変状態} \iff S(\Pi(\rho)) = 0 \quad (3.62)$$

$$\rho \text{ が置換不変状態} \iff 0 < S(\Pi(\rho)) \leq L \log 2 \quad (3.63)$$

と得られる。なお定性的には PIDM の Rényi エントロピーも同様の振る舞いを示す。また“ハミルトニアン” $-\log(\Pi(\rho))$ を定義しその固有値を見ると、置換不変状態のスペクトラムは“基底状態”と“励起状態”のギャップが無限大であり、置換不変でない状態のスペクトラムは、有限のギャップが存在することになる。 $S(\Pi(\rho))$ の値は、ハミルトニアンが $-\log(\Pi(\rho))$ で与えられる、「温度」 $\beta = 1$ のカノニカルアンサンブルにおける Gibbs エントロピーである ($k_B = 1$ とする)。

第 4 章

テンソルネットワークを用いた PIDM の 2 次の Rényi エントロピーの数値計算手法

本章では本研究で開発した、テンソルネットワークを用いた PIDM の 2 次の Rényi エントロピーの数値計算手法について説明する。4.1 節では、第 3 章を踏まえて本研究の位置付けを明確にする。4.2, 4.3, 4.4, 4.5 節では、テンソルネットワークの基礎事項を説明する。教科書としては例えば、西野友年 著『テンソルネットワークの基礎と応用』（サイエンス社）[85] や西野友年 著『テンソルネットワーク入門』（講談社）[86] などが参考になる。4.6 節では開発した数値計算手法及び実験におけるプロトコルについて説明する。

4.1 本研究の位置付け

我々は量子多体系の密度行列 ρ が与えられれば、エンタングルメントエントロピーをはじめとする種々の量子情報量を得ることができ、量子多体現象の解析に用いることができる。しかし実験において ρ を再構築する QST は、観測回数に指数関数ファクター及び局所量子化軸回転の必要性によりスケールアップが困難である（図 4.1 上段）。 ρ に対しその PIDM $\Pi(\rho)$ を構築する PIQST では、この指数関数ファクターが冪オーダーに落ち着き、更に大域的量子化軸回転で実行可能となる。そのため、Dicke 状態 [24] や GHZ 状態 [78, 79]、W 状態 [82, 83, 84] をはじめとする $\Pi(\rho) = \rho$ を満たす特別な量子状態に対しては圧倒的に楽に密度行列を再構築することができる [21]。

ところでスピン系のハミルトニアン基底状態は一般に $\Pi(\rho) \neq \rho$ の状態であるため、 $\Pi(\rho)$ の持つ情報と ρ の持つ情報は異なるはずである。また、PIQST の $\{\mathcal{B}_\mu^{(n)}\}$ で表現できる行列は QST の Pauli 基底で表現できる行列よりも明らかに少ないため、PIDM の保持する情報も元の密度行列の情報よりも少ないことが考えられる。しかし、「まだ物理的に意味のある情報が残っているのではないか?」、また残っているのであれば「どれぐらい情報が減っているか?」という疑問が自然に湧いてくる。PIDM にどのような情報が保持されるのか、またもとの密度行列から抽出される情報量との関係が存在するのかなどは非自明な問題であり、一般の量子状態に対して PIDM の持つ量子情報を明らかにすることは、今日の量子物性学と量子情報理論の発展途上の現状を鑑みても需要の高い研究である。そこで本研究では量子多体系における PIDM の保持する情報を解明し、PIDM の量子情報量を量子多体現象の解析へ応用することを目的とする（図 4.1 下段）。将来的には、本研究によってこのスケラブルに取得可能な量の持つ量子情報によって、量子物性学と量子情報理論の統合の推進を目指す。

“PIDM がどれだけ情報を保持しているか”という問題は、“PIDM にはどれだけ「不確かさ」が存在するか”という問題として捉え直すことができる。「不確かさ」を調べるツールと言えば本論文の 2 章で説明した von Neumann エントロピーや Rényi エントロピーが思い出される。そこで PIDM に対する von Neumann エントロピー $S(\Pi(\rho))$ や Rényi エントロピー $S_\alpha(\Pi(\rho))$ といった量に注目することにしよう。しかし $S(\Pi(\rho)) = -\text{Tr}[\Pi(\rho) \log \Pi(\rho)]$ は行列対数関数を含むため、行列 $\Pi(\rho)$ の対角化を行って固有値から計算する必要がある。つまり $\Pi(\rho)$ を行列として格納するために 2^{2L} 程度の膨大なメモリが必要となり、大きな系では計算が容易でないことが想像できる。では $S_\alpha(\Pi(\rho))$ はどうだろうか。一見こちらでも PIDM を計算するコストが必要であるように見えるが、後述するように $\alpha = 2$ の場合は

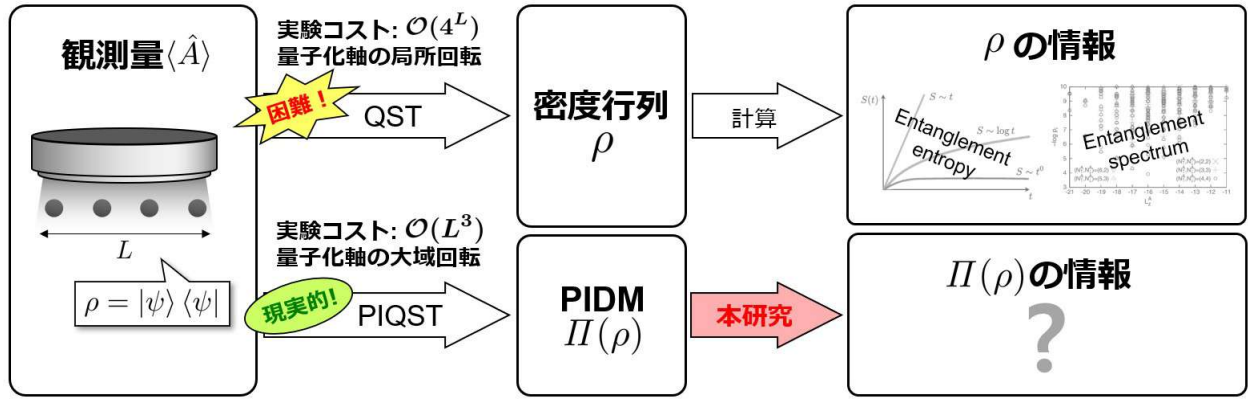
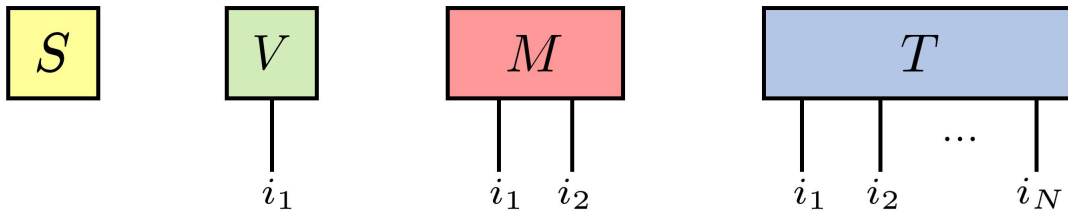


図 4.1 QST・PIQST の概要と本研究の位置付け

PIDM の計算を経由せずに上手く値を計算することが可能である。本博士論文では、PIDM の2次の Rényi エントロピーが量子相転移における基底状態の変化をどのように反映するかを探索した。

4.2 テンソルのダイアグラム表記

テンソル (tensor) とは、ベクトルや行列などの線形的な幾何概念を一般化したものである。 N 個の添え字の配列の組 $\{i_1, i_2, \dots, i_N\}$ によって一つの値が定まるテンソルを N 階テンソル (N -rank tensor) と呼び、 $T_{i_1 i_2 \dots i_N}$ などと表す。従ってスカラー S 、ベクトル $V = \{V_{i_1}\}$ 、行列 $M = \{M_{i_1 i_2}\}$ は、それぞれ0階テンソル、1階テンソル、2階テンソルと考えることができる。テンソルネットワークでは図 4.2 のようにテンソルを「箱」として表し、そのテンソルの「添え字」を箱から伸びる「脚」で表す。つまり N 階テンソルは N 本の脚が伸びた箱で表す。実はこのように表記しておくことで、物理量の期待値計算をはじめとするテンソル縮約という演算において見通しが良くなる。

図 4.2 テンソルのダイアグラム表記の例。左から0階テンソル (スカラー)、1階テンソル (ベクトル)、2階テンソル (行列)、 N 階テンソルを表す。

4.3 テンソル縮約

2つのテンソルに対して、それぞれ特定の添え字を同じにして要素の積を取って和をとる演算をテンソル縮約 (tensor contraction) と呼ぶ^{*1}。ダイアグラムでは、縮約を取る添え字に対応する脚同士を「線」で繋ぐことで表す。この「線」は Kronecker のデルタと呼ばれる2階テンソル

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & (i = j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases} \quad (4.1)$$

である。逆に言えば、ダイアグラムで「箱」が「線」で繋がっていたらそこには δ_{ij} が隠れており、テンソル縮約が行われていると考える。簡単なテンソル縮約の例を見てみよう。例えば、「ベクトル同士の内積」は1階テンソルと1階

^{*1} N 階テンソルと M 階テンソルに対して r 個の添え字について縮約を取ってできる新たなテンソルは $N + M - 2r$ 階テンソルである。

テンソルの縮約から0階テンソルを作る演算である。式では

$$\sum_{i,j} A_i \delta_{ij} B_j = \sum_i A_i B_i = C \quad (4.2)$$

と書くことができ、このテンソル縮約に対応するダイアグラムは図4.3である。

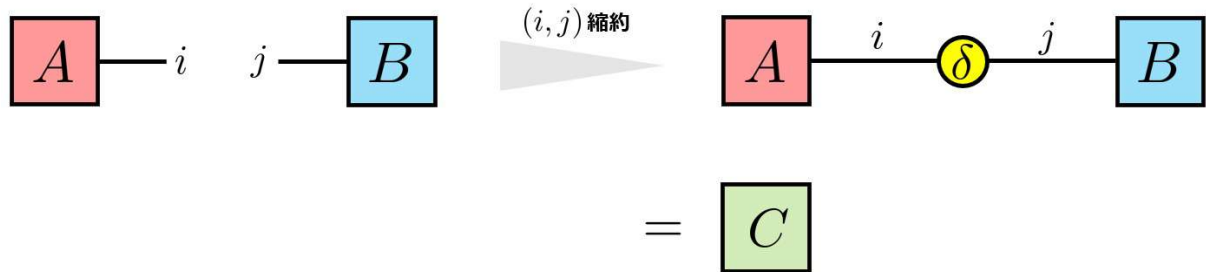


図4.3 ベクトルの内積のダイアグラム

また、「行列同士の積」は2階テンソルの片方の脚と別の2階テンソルの片方の脚を縮約して新たな2階テンソルを作る演算であり、式では

$$\sum_{j,k} A_{ij} \delta_{jk} B_{kl} = \sum_j A_{ij} B_{jl} = C_{il}, \quad (4.3)$$

対応するダイアグラムは図4.4である。

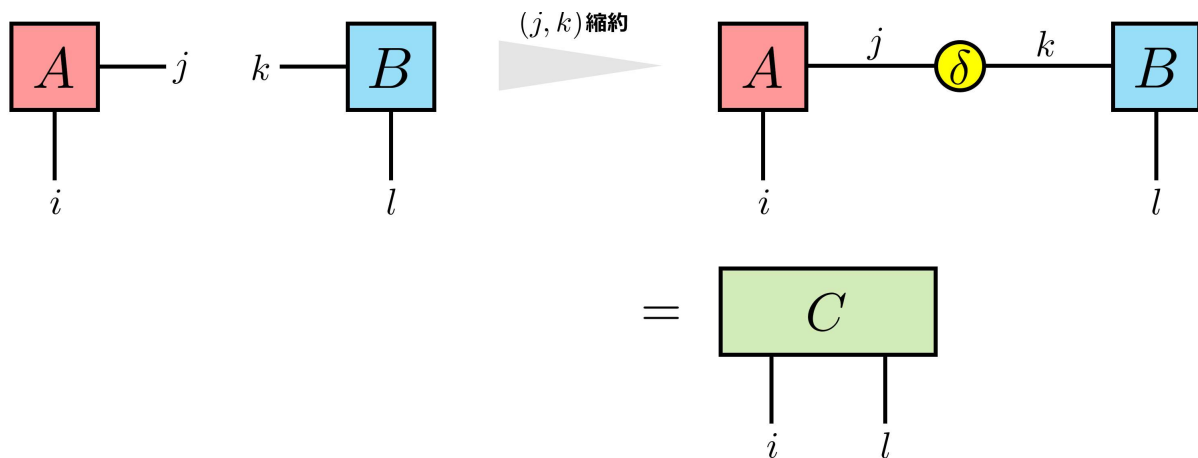


図4.4 行列の積のダイアグラム

「行列のトレース」は2階テンソルの2つの脚同士を縮約して0階テンソルを作る演算であり、式では

$$\sum_i A_{ij} \delta_{ij} = \sum_i A_{ii} = C, \quad (4.4)$$

対応するダイアグラムは図4.5である。

このようにテンソル縮約によってテンソル同士の脚を繋ぐことで構成される「網状組織」をテンソルネットワーク (tensor network) と呼ぶ。

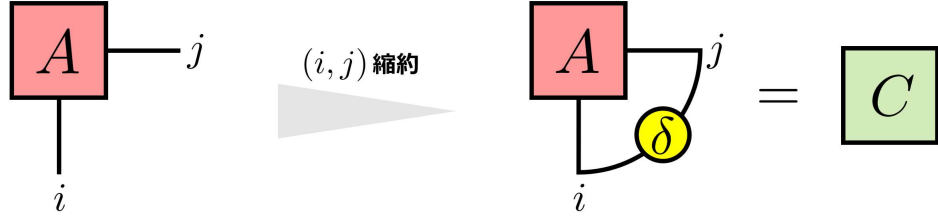


図 4.5 行列のトレースのダイアグラム

4.4 行列積状態 (MPS)

L 粒子系の波動関数は一般に系全体の波動関数

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1} \sum_{i_2} \cdots \sum_{i_L} \Psi^{i_1 i_2 \cdots i_L} |i_1\rangle \otimes |i_2\rangle \otimes \cdots \otimes |i_L\rangle \quad (4.5)$$

で表すことができる。 $S = 1/2$ 系の場合、 i は $\{0, 1\}$ や $\{\uparrow, \downarrow\}$ などを取る。係数 $\Psi^{i_1 i_2 \cdots i_L}$ は L 階テンソルであり、 L 本の脚を持つダイアグラムで表される。波動関数を指定するために巨大なテンソルを取り扱うのは一般に大変であるが、系を構成する粒子の相互作用が最近接のみの場合、これを L 個の小さなテンソルの積

$$\Psi^{i_1 i_2 \cdots i_L} \approx \sum_{a_1} \sum_{a_2} \cdots \sum_{a_L} (A_1)_{a_1}^{i_1} (A_2)_{a_1 a_2}^{i_2} \cdots (A_L)_{a_{L-1}}^{i_L} \quad (4.6)$$

として表す近似方法が有効であることが知られている。これを行列積状態 (matrix product state, MPS) [87, 88] と呼ぶ。MPS のダイアグラムを図 4.6 に示す。

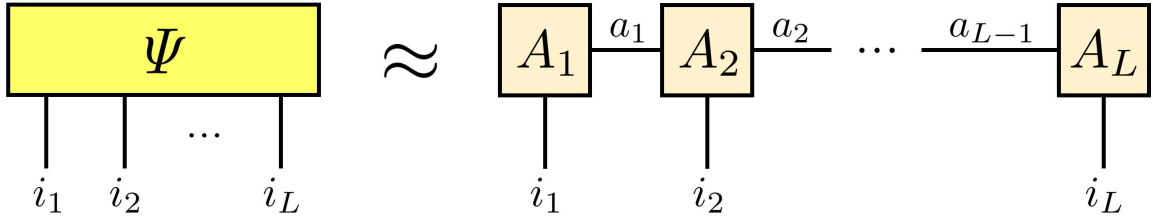


図 4.6 行列積状態

MPS は $\Psi^{i_1 i_2 \cdots i_L}$ に対して特異値分解 (singular value decomposition, SVD) (詳細は付録 A を参照せよ) を逐次行うことで得られる。SVD は、任意の大きさの行列 Ψ に対して

$$\Psi = \mathcal{L} \Sigma \mathcal{R}, \quad \Psi_{a,b} = \sum_{i=1}^{\chi} \mathcal{L}_{a,i} \Sigma_{i,i} \mathcal{R}_{i,b} \quad (4.7)$$

と分解することである。具体的には、 $\Psi^{i_1 i_2 \cdots i_L}$ の添え字を i_1 と $\{i_2 \cdots i_L\}$ に分け、後者の添え字の組から決まる新たな添え字 j を定義しておく。

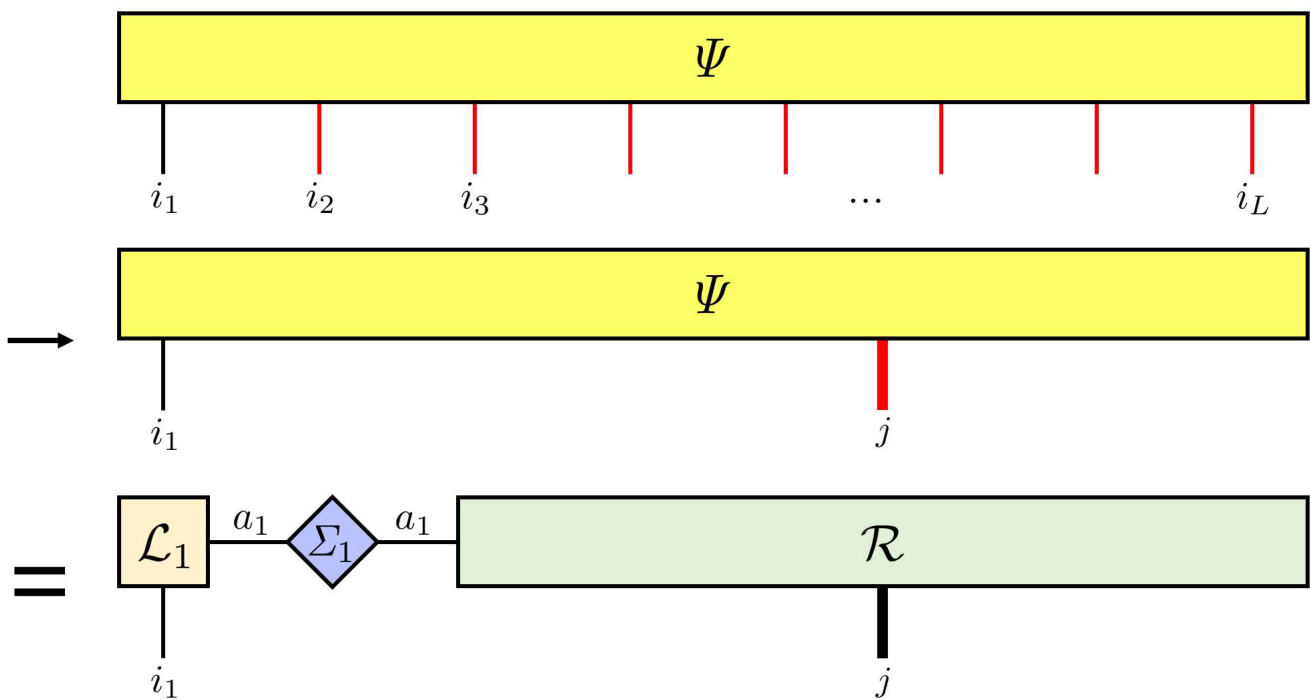
$$\Psi^{i_1 i_2 \cdots i_L} \rightarrow \Psi^{i_1 j} \quad (4.8)$$

$\Psi^{i_1 j}$ を 2 階テンソル (行列) と見なし、SVD を施すと、

$$\Psi^{i_1 j} = \sum_{a_1=1}^{\chi} (\mathcal{L}_1)_{a_1}^{i_1} (\Sigma_1)_{a_1 a_1} \mathcal{R}_{a_1}^j \quad (4.9)$$

と書くことができる*2。ここまでの手続きはダイアグラムでは図 4.7 で表される。

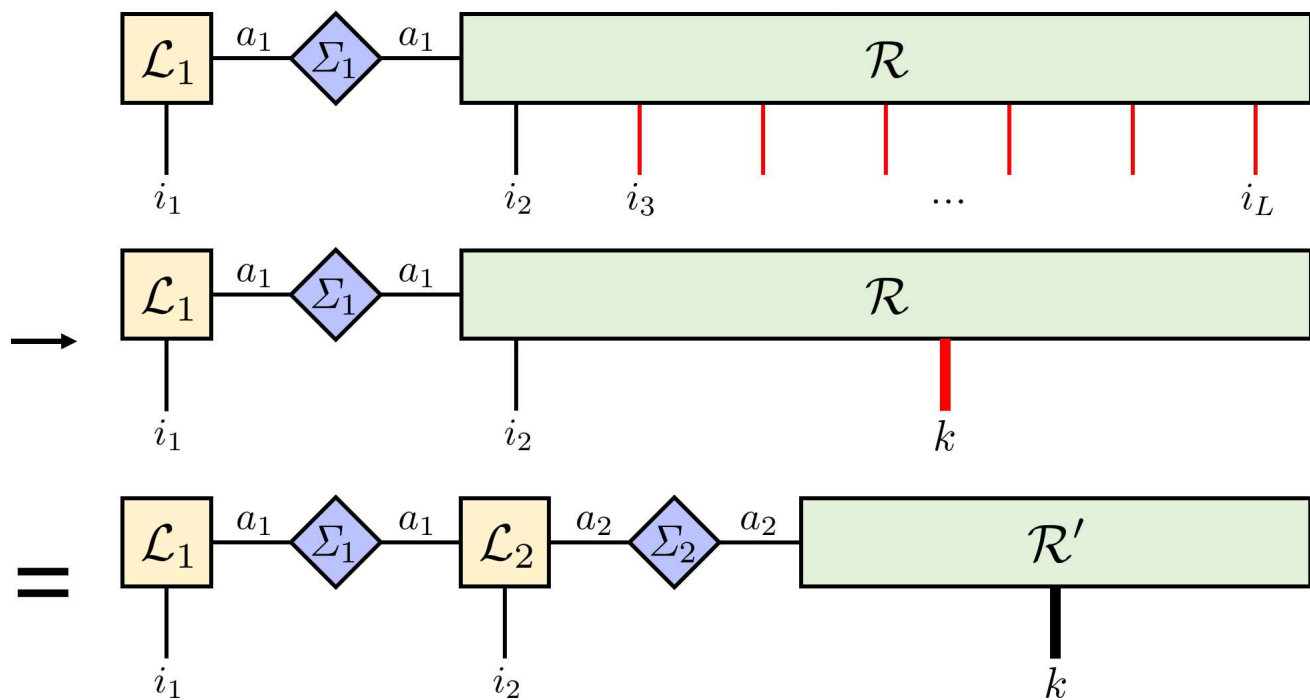
*2 テンソルの添え字は、テンソル同士を繋ぐものを下付き、繋がらないものを上付きで表している。

図 4.7 L 階テンソルの SVD その 1

ここで $\mathcal{R}$ の添え字について

$$\mathcal{R}_{a_1}^j = \mathcal{R}_{a_1}^{i_2 i_3 \dots i_L} \rightarrow \mathcal{R}_{a_1}^{i_2 k} \quad (4.10)$$

と取り直し、再び $\mathcal{R}$ に SVD を施す。

図 4.8 L 階テンソルの SVD その 2

以上の操作を何度も繰り返すこと、

$$\Psi^{i_1 i_2 \dots i_L} = \sum_{a_1=1}^{\chi_1} \sum_{a_2=1}^{\chi_2} \dots \sum_{a_L=1}^{\chi_L} (\mathcal{L}_1)_{a_1}^{i_1} (\Sigma_1)_{a_1 a_1} (\mathcal{L}_2)_{a_1 a_2}^{i_2} (\Sigma_2)_{a_2 a_2} \dots (\Sigma_{L-1})_{a_{L-1} a_{L-1}} \tilde{\mathcal{R}}_{a_{L-1}}^{i_L} \quad (4.11)$$

という式を得る。更に各特異値行列 Σ をその右隣のテンソルと縮約をとることで、最終的に MPS の表式

$$\Psi^{i_1 i_2 \dots i_L} = \sum_{a_1} \sum_{a_2} \dots \sum_{a_L} (A_1)_{a_1}^{i_1} (A_2)_{a_1 a_2}^{i_2} \dots (A_L)_{a_L}^{i_L} \quad (4.12)$$

を得ることができる。なお、特異値分解の定義より

$$\begin{aligned} & \chi_1, \chi_2, \dots, \chi_{\frac{L}{2}-1}, \chi_{\frac{L}{2}}, \chi_{\frac{L}{2}+1}, \dots, \chi_{L-1}, \chi_L \\ &= 2, 4, \dots, 2^{\frac{L}{2}-1}, 2^{\frac{L}{2}}, 2^{\frac{L}{2}+1}, \dots, 4, 2 \end{aligned} \quad (4.13)$$

である。このように原理的に全ての特異値を拾うことで、厳密に式 (4.12) の等号が成り立つが、数値計算では例えばこの特異値のうち大きい方から多くとも d 個だけ使うといった近似を行う。この d をボンド次元 (**bond dimension**) と呼ぶ。式 (4.5) より、 $d = 1$ のときは直積状態のみしか表すことができず、一般のエンタングル状態を表現するためにはある程度の bond dimension が必要である。一般に bond dimension が大きいほど精度良く量子状態を記述できる。MPS 同士の内積 $\langle \psi | \psi \rangle$ は、

$$\begin{aligned} \langle \psi | \psi \rangle &= \sum_{i_1, j_1} \dots \sum_{i_L, j_L} \Psi^{i_1 \dots i_L} (\Psi^*)^{j_1 \dots j_L} \langle i_1 | j_1 \rangle \otimes \dots \otimes \langle i_L | j_L \rangle \\ &= \sum_{i_1, j_1} \dots \sum_{i_L, j_L} \sum_{a_1, a'_1} \dots \sum_{a_L, a'_L} (A_1)_{a_1}^{i_1} (\bar{A}_1)_{a'_1}^{j_1} \dots (A_L)_{a_L}^{i_L} (\bar{A}_L)_{a'_L}^{j_L} \langle i_1 | j_1 \rangle \otimes \dots \otimes \langle i_L | j_L \rangle \\ &= \sum_{i_1, j_1} \dots \sum_{i_L, j_L} \sum_{a_1, a'_1} \dots \sum_{a_L, a'_L} (A_1)_{a_1}^{i_1} (\bar{A}_1)_{a'_1}^{j_1} \dots (A_L)_{a_L}^{i_L} (\bar{A}_L)_{a'_L}^{j_L} \delta_{i_1, j_1} \dots \delta_{i_L, j_L} \\ &= \sum_{i_1} \dots \sum_{i_L} \sum_{a_1, a'_1} \dots \sum_{a_L, a'_L} (A_1)_{a_1}^{i_1} (\bar{A}_1)_{a'_1}^{i_1} \dots (A_L)_{a_L}^{i_L} (\bar{A}_L)_{a'_L}^{i_L} \\ &= \sum_{a_1, a'_1} \dots \sum_{a_L, a'_L} (A_1)_{a_1}^{i_1} (\bar{A}_1)_{a'_1}^{i_1} \dots (A_L)_{a_L}^{i_L} (\bar{A}_L)_{a'_L}^{i_L} \end{aligned} \quad (4.14)$$

と計算できるので、ダイアグラムでは

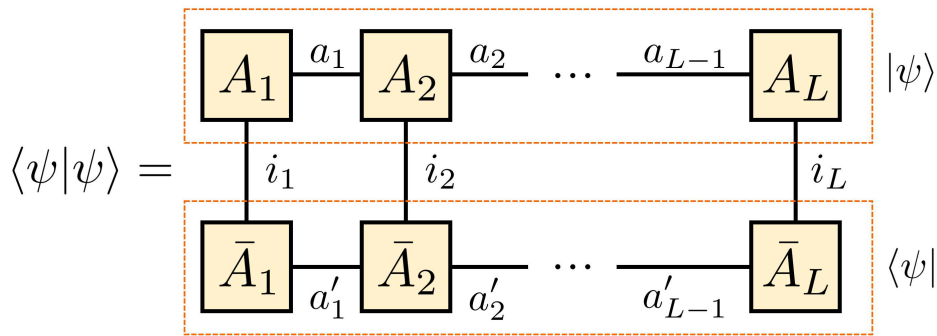


図 4.9 MPS の内積

のように MPS とそのエルミート共役を用意し、各脚をそれぞれ繋ぐことで計算できる。なお、 A は特異値分解によって作られているため、直交性

$$\sum_{i_1} (A_1)_{a_1}^{i_1} (\bar{A}_1)_{a'_1}^{i_1} = \delta_{a_1, a'_1}, \quad \sum_{i_2} \sum_{a_1} (A_2)_{a_1 a_2}^{i_2} (\bar{A}_2)_{a'_1 a'_2}^{i_2} = \delta_{a_2, a'_2}, \dots, \quad \sum_{i_L} (A_L)_{a_{L-1}}^{i_L} (\bar{A}_L)_{a'_{L-1}}^{i_L} = \delta_{a_{L-1}, a'_{L-1}} \quad (4.15)$$

を満たす。すなわち、図 4.9 において縦線でつながれた部分は「1 を表すただの線」となる。

4.5 行列積演算子 (MPO)

一般に、 L 階テンソルで表される純粋状態 $|\psi\rangle$ に演算子 $\hat{O}$ を作用させた後の状態 $\hat{O}|\psi\rangle$ は、同じく L 階テンソルで表されるはずである。このときテンソルネットワークでは、演算子 $\hat{O}$ を $2L$ 階テンソル $O_{i'_1 i'_2 \dots i'_L}^{i_1 i_2 \dots i_L}$ を用いて

$$\begin{aligned}\hat{O} &= \sum_{i_1, i'_1} \sum_{i_2, i'_2} \cdots \sum_{i_L, i'_L} O_{i'_1 i'_2 \dots i'_L}^{i_1 i_2 \dots i_L} (|i'_1\rangle \otimes |i'_2\rangle \otimes \cdots \otimes |i'_L\rangle) (\langle i_1| \otimes \langle i_2| \otimes \cdots \otimes \langle i_L|) \\ &= \sum_{i_1, i'_1} \sum_{i_2, i'_2} \cdots \sum_{i_L, i'_L} O_{i'_1 i'_2 \dots i'_L}^{i_1 i_2 \dots i_L} |i'_1\rangle \langle i_1| \otimes |i'_2\rangle \langle i_2| \otimes \cdots \otimes |i'_L\rangle \langle i_L| \end{aligned} \quad (4.16)$$

と表すことができる。実際に $\hat{O}|\psi\rangle$ を計算してみると

$$\begin{aligned}\hat{O}|\psi\rangle &= \sum_{i_1, i'_1} \sum_{i_2, i'_2} \cdots \sum_{i_L, i'_L} \sum_{j_1} \sum_{j_2} \cdots \sum_{j_L} O_{i'_1 i'_2 \dots i'_L}^{i_1 i_2 \dots i_L} \Psi^{j_1 j_2 \dots j_L} |i'_1\rangle \langle i_1| j_1 \rangle \otimes |i'_2\rangle \langle i_2| j_2 \rangle \otimes \cdots \otimes |i'_L\rangle \langle i_L| j_L \rangle \\ &= \sum_{i_1, i'_1} \sum_{i_2, i'_2} \cdots \sum_{i_L, i'_L} \sum_{j_1} \sum_{j_2} \cdots \sum_{j_L} O_{i'_1 i'_2 \dots i'_L}^{i_1 i_2 \dots i_L} \Psi^{j_1 j_2 \dots j_L} \delta_{i_1, j_1} \delta_{i_2, j_2} \cdots \delta_{i_L, j_L} |i'_1\rangle \otimes |i'_2\rangle \otimes \cdots \otimes |i'_L\rangle \\ &= \sum_{i_1, i'_1} \sum_{i_2, i'_2} \cdots \sum_{i_L, i'_L} O_{i'_1 i'_2 \dots i'_L}^{i_1 i_2 \dots i_L} \Psi^{i_1 i_2 \dots i_L} |i'_1\rangle \otimes |i'_2\rangle \cdots \otimes |i'_L\rangle \\ &\equiv \sum_{i'_1} \sum_{i'_2} \cdots \sum_{i'_L} \tilde{\Psi}^{i'_1 i'_2 \dots i'_L} |i'_1\rangle \otimes |i'_2\rangle \cdots \otimes |i'_L\rangle \end{aligned} \quad (4.17)$$

のように、確かに結果が L 階テンソルで表されることがわかる。ダイアグラムでは

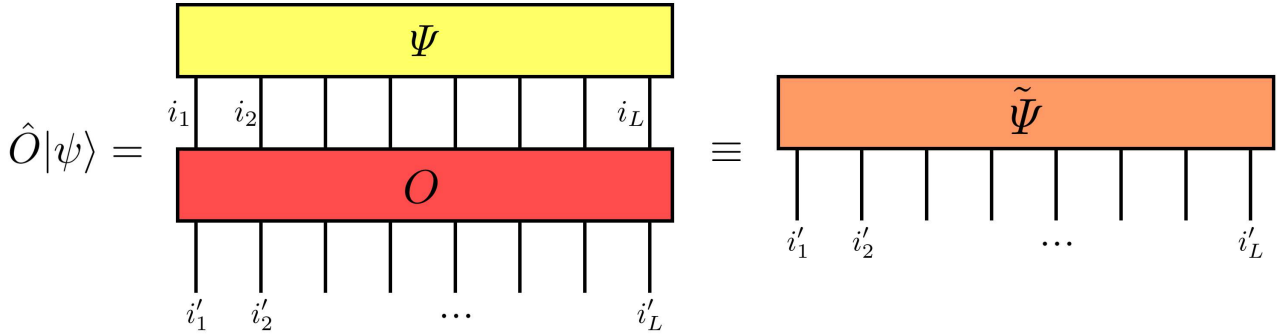


図 4.10 テンソルネットワークにおける演算子の作用

で表される。SVD を用いて MPS 状態を定義したように、演算子 $\hat{O}$ も小さなテンソルの積に分解することができる。これを行列積演算子 (matrix product operator, MPO) と呼ぶ (図 4.11)。

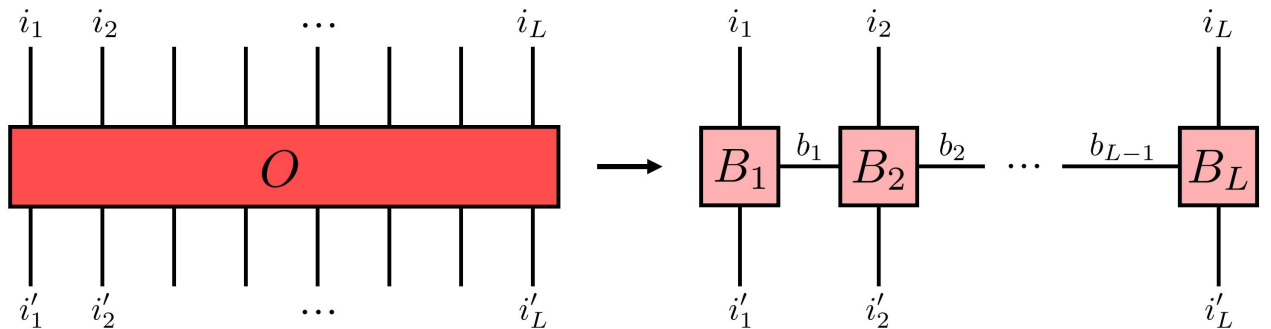


図 4.11 行列積演算子

$\hat{O}$ の期待値は $|\psi\rangle$ と $\hat{O}|\psi\rangle$ の内積と考えることができる。つまり、ダイアグラムでは図 4.12 のようにして求めることができる。ローカルな物理量 $\langle \hat{O}_i \rangle$ は図 4.12 において i 番目以外の B を全て単位行列にすることで、また相関関数 $\langle \hat{O}_i \hat{O}_j \rangle$ は i, j 番目以外の B を全て単位行列にすることで計算することができる。

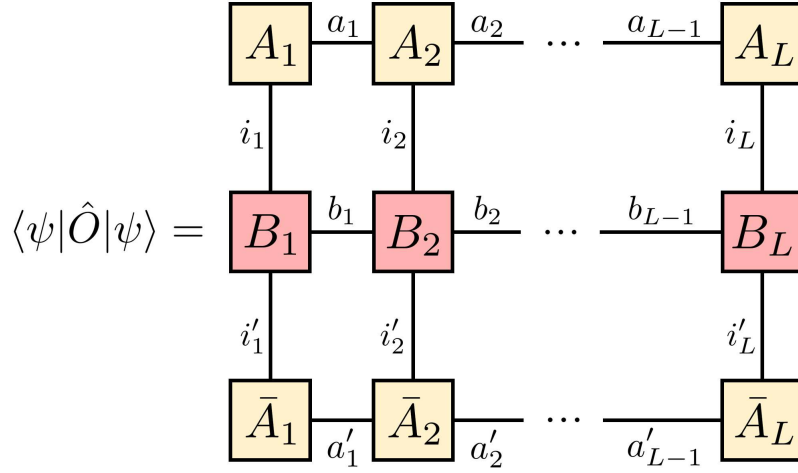


図 4.12 MPO の期待値

ところで物理量の期待値は $\text{Tr}(\rho \hat{O})$ でも計算できるが、ダイアグラムでは図 4.13 で表される。このダイアグラムは実質図 4.12 と同じであることが分かる。

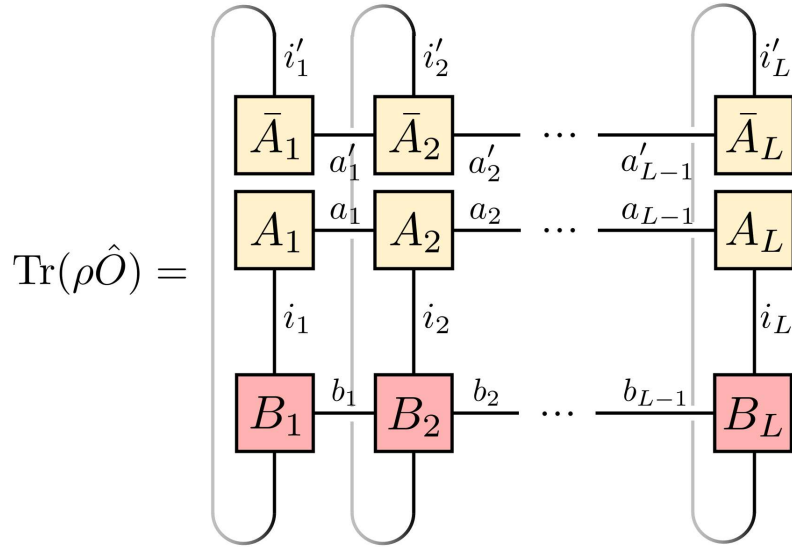


図 4.13 MPO の期待値その 2

4.6 PIDM の Rényi エントロピー

我々の目的は PIDM の Rényi エントロピーを計算することである。しかし、密度行列ないし PIDM は粒子数 L に関して指数関数的に大きくなる行列であり、愚直に計算しようとする膨大なメモリ ($\sim 2^{2L} L!$) が必要なためスケールアップが難しい。そこで、量子多体系の基底状態を MPS を用いて低コストで精度良く記述する手法を用いることにする。さて、PIDM の定義は

$$\Pi(\rho) = \frac{1}{L!} \sum_{s \in \mathfrak{S}_L} \hat{P}_s \rho \hat{P}_s^\dagger \quad (4.18)$$

であるため、PIDM は $L!$ 通りの異なる $\hat{\mathcal{P}}_s$ (MPO) でそれぞれ密度行列を挟んで縮約を取り、全て足し合わせて $1/L!$ をかけることによって得られる。しかし、これはあまりに手間とコストがかかる。そこで PIDM 自体を構築することなく計算できる量はないか考えてみよう。実は PIDM の2次の Rényi エントロピー

$$S_2(\Pi(\rho)) = -\log [\text{Tr} [\Pi(\rho)^2]] \quad (4.19)$$

は、式 (3.41) を用いると

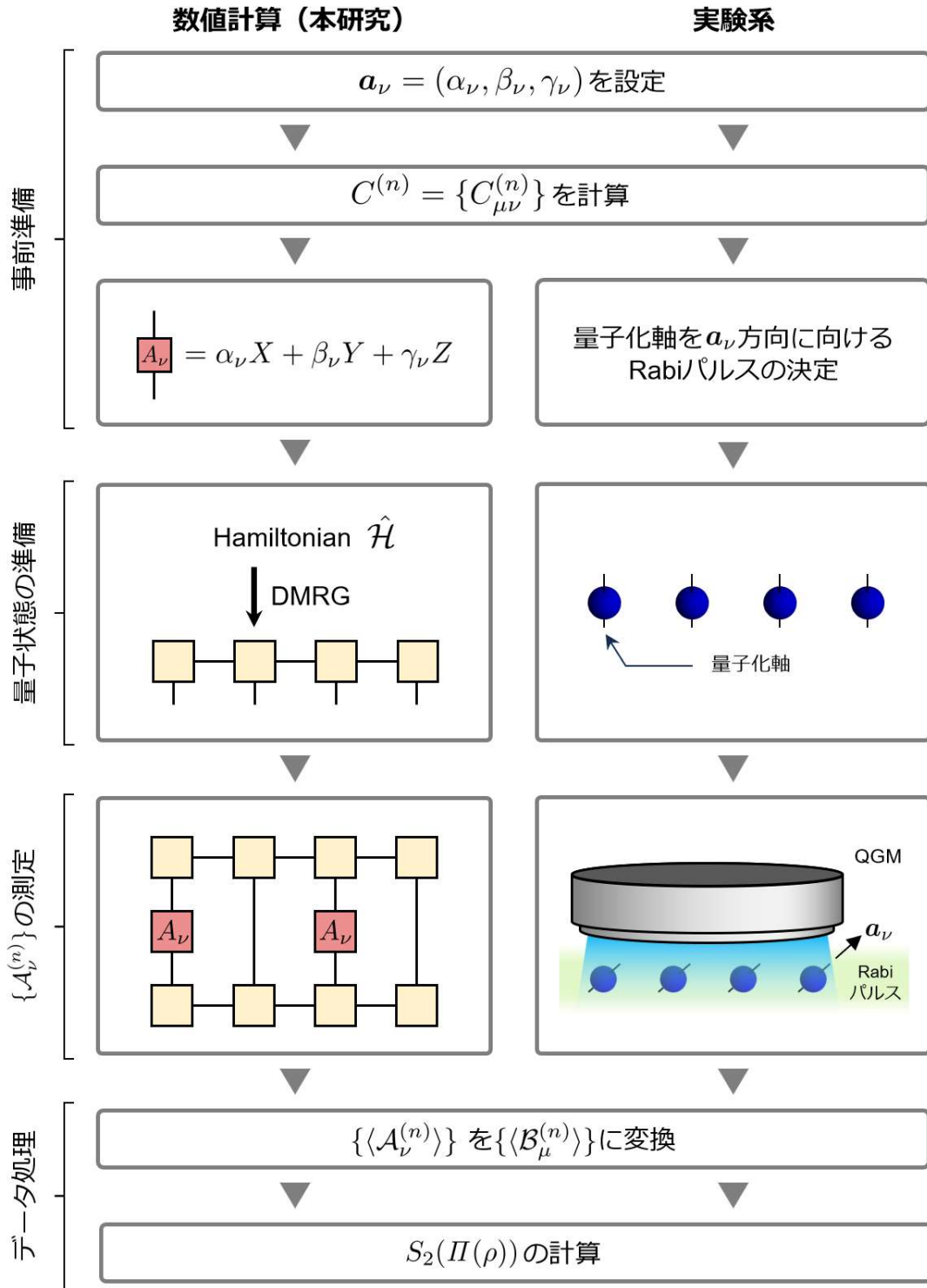
$$\begin{aligned} S_2(\Pi(\rho)) &= -\log \left[\left(\frac{L!}{2^L} \right)^2 \text{Tr} \left(\left(\sum_{n=0}^L \sum_{\mu} \frac{\langle \mathcal{B}_\mu^{(n)} \rangle}{k_\mu! l_\mu! m_\mu! n!} \mathcal{B}_\mu^{(n)} \right) \left(\sum_{n'=0}^L \sum_{\mu'} \frac{\langle \mathcal{B}_{\mu'}^{(n')} \rangle}{k_{\mu'}! l_{\mu'}! m_{\mu'}! n'!} \mathcal{B}_{\mu'}^{(n')} \right) \right) \right] \\ &= -\log \left[\left(\frac{L!}{2^L} \right)^2 \sum_{n=0}^L \sum_{n'=0}^L \sum_{\mu} \sum_{\mu'} \frac{\langle \mathcal{B}_\mu^{(n)} \rangle}{k_\mu! l_\mu! m_\mu! n!} \frac{\langle \mathcal{B}_{\mu'}^{(n')} \rangle}{k_{\mu'}! l_{\mu'}! m_{\mu'}! n'!} \text{Tr} (\mathcal{B}_\mu^{(n)} \mathcal{B}_{\mu'}^{(n')}) \right] \\ &= -\log \left[\left(\frac{L!}{2^L} \right)^2 \sum_{n=0}^L \sum_{n'=0}^L \sum_{\mu} \sum_{\mu'} \frac{\langle \mathcal{B}_\mu^{(n)} \rangle}{k_\mu! l_\mu! m_\mu! n!} \frac{\langle \mathcal{B}_{\mu'}^{(n')} \rangle}{k_{\mu'}! l_{\mu'}! m_{\mu'}! n'!} \frac{k_\mu! l_\mu! m_\mu! n!}{L!} 2^L \delta_{\mu, \mu'} \delta_{n, n'} \right] \\ &= -\log \left[\left(\frac{L!}{2^L} \right)^2 \sum_{n=0}^L \sum_{\mu} \frac{\langle \mathcal{B}_\mu^{(n)} \rangle^2}{(k_\mu! l_\mu! m_\mu! n!)^2} \frac{k_\mu! l_\mu! m_\mu! n!}{L!} 2^L \right] \\ &= -\log \left[\frac{L!}{2^L} \sum_{n=0}^L \sum_{\mu} \frac{\langle \mathcal{B}_\mu^{(n)} \rangle^2}{k_\mu! l_\mu! m_\mu! n!} \right] \quad (4.20) \end{aligned}$$

と変形できる。つまり PIDM の2次の Rényi エントロピーは期待値 $\{\langle \mathcal{B}_\mu^{(n)} \rangle\}$ から直接求めることができる量である^{*3}。PIDM を一度構築してから量子情報量を数値的に計算しようとする、メモリの問題で大きな L を扱うことが困難なため、測定によって得られた期待値のデータから直接求められることは数値計算的に都合が良い。実際、DMRG によって基底状態を格納するためには $\mathcal{O}(\chi^2 L)$ のメモリが (χ はボンド次元)、また $S_2(\Pi(\rho))$ を計算するためには $\mathcal{O}(L^3)$ のメモリが必要と考えられる。 $\mathcal{O}(2^{2L} L!)$ と比較するとメモリコストが抑えられていることが分かる。

本研究で用いた $S_2(\Pi(\rho))$ の数値計算手法及び実験での測定プロトコルは以下の通りである (図 4.14)。

1. D_L 個のベクトル $\{\mathbf{a}_\nu = (\alpha_\nu, \beta_\nu, \gamma_\nu) \mid (\alpha_\nu)^2 + (\beta_\nu)^2 + (\gamma_\nu)^2 = 1\}_{\nu=1}^{D_L}$ を決める。
2. 変換行列 $C^{(n)} = \{C_{\mu\nu}^{(n)}\}$ を計算する。
3. (数値計算) MPO $\{A_\nu\}$ を用意する。(実験) 量子化軸を $\mathbf{a}_\nu$ 方向に向かせる Rabi パルスを準備する。
4. (数値計算) 密度行列繰り込み群法 (density-matrix renormalization-group algorithm, DMRG) [89, 90, 91] を用いてハミルトニアン H の基底状態 $|\psi\rangle$ を MPS 形式で計算する。(実験) ハミルトニアンを実装し、量子状態を準備する。
5. (数値計算) MPO $\{A_\nu\}$ を MPS $|\psi\rangle$ のテンソル縮約によって期待値 $\{\langle \psi | \mathcal{A}_\nu^{(n)} | \psi \rangle\}$ を計算する。(実験) 系全体に Rabi パルスを照射し、QGM で各原子の Z を測定する。一つの ν に対して何度も同じ測定を行い期待値を出す。
6. 式 (3.56) を用いて $\{\langle \mathcal{A}_\nu^{(n)} \rangle\}$ を $\{\langle \mathcal{B}_\mu^{(n)} \rangle\}$ に変換する。
7. 式 (4.20) を用いて $S_2(\Pi(\rho))$ を計算する。

^{*3} $S_\alpha(\Pi(\rho))$ は $\alpha \geq 3$ の場合は、 Tr の中身が3つ以上の $\mathcal{B}_\mu^{(n)}$ の積となり、 $\mathcal{B}_\mu^{(n)}$ の直交性がうまく使えないため、式 (4.20) のような綺麗な形式では書くことができない。

図 4.14 (左) 本研究で用いた $S_2(\Pi(\rho))$ の数値計算方法と (右) 実験における測定方法

実験では、まず特定のハミルトニアンを再現するように環境パラメータを制御することで基底状態を自然に用意する。ここで全粒子の量子化軸をあらかじめ用意していたランダムベクトル $\mathbf{a}_\nu$ の方向に向ける Rabi パルスを系全体に適当に照射し、量子気体顕微鏡で Z 測定を行う。これにより各サイトでの A_ν の値が得られる。 $\{\langle A_\nu^{(n)} \rangle\}$ はこのデータから適当な粒子の A_ν の値を選択して掛け算する操作を何度も繰り返すことで得られる。 $\{\langle A_\nu^{(n)} \rangle\}$ のデータ収集以降の手順は数値計算と同じである。実験では、数値計算における MPS の bond dimension のコストが無く、また $\{\langle A_\nu^{(n)} \rangle\}$ の計算にかかるコストも、テンソル縮約から掛け算に削減されるため、比較的大きな系でも実行可能である。

と期待される。

具体的なモデルでの計算に入る前に、 $S_2(\Pi(\rho))$ の持つ意味を考えてみよう。但し ρ は純粋状態とする。Rényi エントロピーの性質 (2.32), (2.33) より

$$\Pi(\rho) \text{ が純粋状態} \iff S_2(\Pi(\rho)) = 0 \quad (4.21)$$

$$\Pi(\rho) \text{ が混合状態} \iff S_2(\Pi(\rho)) > 0 \quad (4.22)$$

が言える。 $\Pi(\rho)$ は ρ に全ての置換を施して平均化 (対称化) したものであった。具体的に2つの例で PIDM を考えてみよう。まず直積強磁性状態 $\rho = |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle\langle\uparrow\uparrow\uparrow|$ を考える。この PIDM は

$$\Pi(\rho) = \frac{1}{4!}(|\uparrow\uparrow\uparrow\rangle\langle\uparrow\uparrow\uparrow| + |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle\langle\uparrow\uparrow\uparrow| + |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle\langle\uparrow\uparrow\uparrow| + \cdots + |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle\langle\uparrow\uparrow\uparrow|) = |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle\langle\uparrow\uparrow\uparrow| = \rho \quad (4.23)$$

となる。いま ρ は純粋状態であるため、 $\Pi(\rho)$ も純粋状態のままある。従ってこの場合 $S_2(\Pi(\rho)) = 0$ となる。また直積状態でなくても $\Pi(\rho) = \rho$ が成り立つ置換不変な純粋状態 (Dicke 状態 [24] や GHZ 状態 [78, 79] など) では、 $S_2(\Pi) = 0$ を得る。

一方、直積反強磁性状態 $\rho = |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle\langle\uparrow\downarrow\uparrow|$ を考えると、PIDM は

$$\Pi(\rho) = \frac{1}{4!}(|\uparrow\downarrow\uparrow\rangle\langle\uparrow\downarrow\uparrow| + |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle\langle\uparrow\downarrow\uparrow| + |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle\langle\uparrow\downarrow\uparrow| + \cdots + |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle\langle\downarrow\uparrow\downarrow|) \neq \rho \quad (4.24)$$

となり、 $\Pi(\rho)$ は混合状態になる。従って PIDM の Rényi entropy は $S_2(\Pi(\rho)) > 0$ となる。一般にハミルトニアン基底状態は $\Pi(\rho) \neq \rho$ となる状態である。

$S_2(\Pi(\rho)) = 0$ となるのは置換不変な状態、すなわちいかなる粒子の置換に対しても元の空間構造を保ったままでいられる状態である。また $S_2(\Pi(\rho)) > 0$ となるのは粒子の置換を行うと元の空間構造が壊れてしまう状態である。つまり、 $S_2(\Pi(\rho))$ は対象化操作 Π によって空間構造の情報を捨てることで生じる「不確かさ」を定量化していると考えることができる。例えば直積強磁性状態 $|\uparrow\uparrow\uparrow\rangle$ は全てのスピンの $\uparrow$ であり、どのローカルなスピンも特別ではない。そのため平均化操作を行っても状態は混合せず、位置関係の情報損失は無く、これが $S_2(\Pi(\rho)) = 0$ に対応していると考えられる。

第 5 章

置換不変密度行列による量子相の特徴付け

本章では本研究の研究結果を説明する。本研究では、2つのモデルの基底状態について前章で説明した数値計算手法によって PIDM の Rényi エントロピーを計算した。5.1 節では横磁場 Ising 鎖における結果を説明する。横磁場に対するの振舞いを数値計算及び摂動論的な解析計算について説明する。5.3 節では 5.2 節では XXZ 鎖における結果を説明する。最後に 5.3 節では得られた結果をもとに PIDM の Rényi エントロピーを用いた量子多体系の解析手法を提案する。

5.1 横磁場 Ising 鎖

5.1.1 ハミルトニアンと基底状態

まずは横磁場 Ising 鎖を考える。ハミルトニアンは

$$\hat{\mathcal{H}} = J \sum_{i=1}^{L-1} \hat{Z}_i \hat{Z}_{i+1} - \Gamma \sum_{i=1}^L \hat{X}_i \quad (5.1)$$

で与えられる。 $\hat{X}_i, \hat{Z}_i$ はそれぞれサイト i に作用する Pauli 行列を表す。 J は交換相互作用 (exchange coupling) であり、 $J < 0$ のときは隣り合うスピンの同じ方向を向いたがる強磁性的相互作用 (ferromagnetic interaction)、 $J > 0$ のときは隣り合うスピンの反並行方向を向いたがる反強磁性的相互作用 (antiferromagnetic interaction) を表す。 Γ は横磁場の強さを表す。本研究では L が偶数の場合を考え、開境界条件 (open boundary conditions, OBC) を課す。

横磁場 Ising モデルの基底状態相図を図 5.1 に示す。 $\Gamma = 0$ のときハミルトニアンは古典的であり、その基底状態は $J < 0$ では古典的強磁性 (FM) 状態 $|\uparrow\rangle^{\otimes L}$ 、 $J > 0$ では古典的反強磁性 (AFM) 状態 $|\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}}$ となる^{*1}。 Γ が少しでも有限になるとハミルトニアンは量子的となる。 $0 < \Gamma/J < 1$ では横磁場項の寄与が比較的小さく交換相互作用が優勢であるため、 $J < 0$ では FM 相、 $J > 0$ では AFM 相となる。 $\Gamma/J > 1$ の領域になると交換相互作用よりも横磁場項の寄与が強く、各スピンの x 軸方向に向いたほうがエネルギーを得できるので常磁性 (PM) 相となる。ここで「 x 方向に向いたスピン」の状態は X の固有値 1 の固有状態 $|\rightarrow\rangle = (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle)/\sqrt{2}$ である。特に $\Gamma/J \rightarrow \infty$ の極限ではハミルトニアンは横磁場項のみとみなすことができ、その基底状態は各スピンの $|\rightarrow\rangle$ の直積状態である。この状態は

$$|\rightarrow\rangle^{\otimes L} = \left(\frac{|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle}{\sqrt{2}} \right)^{\otimes L} = \frac{1}{2^{L/2}} \sum_{n=0}^L \sum_{s \in \mathfrak{S}_L} \frac{\hat{P}_s \left(|\uparrow\rangle^{\otimes (L-n)} \otimes |\downarrow\rangle^{\otimes n} \right)}{(L-n)!n!} \quad (5.2)$$

と書くことができ、 2^L 次元 Hilbert 空間の全ての基底が等しい重みで重ね合わさった状態、すなわち観測したときに各スピンの状態がランダムに決まる無秩序な状態である。 $\Gamma/|J| = 1$ は量子臨界点 (quantum critical point, QCP) であり、量子揺らぎが非常に大きな点である。この点は中心電荷 $c = 1/2$ の共形場理論 (conformal field theory, CFT) で記述されることが知られており [92]、このときのエンタングルメントエントロピーは部分系の長さ L_A に対して $\log L_A$ で大きくなることが知られている。系が短距離的な量子相関を持っているとき、エンタングルメントエントロピーは境

^{*1} より正確には、 $J < 0$ の場合 $c_1 |\uparrow\rangle^{\otimes L} + c_2 |\downarrow\rangle^{\otimes L}$ 、 $J > 0$ の場合 $c_1 |\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} + c_2 |\downarrow\uparrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}}$ ($|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$) が基底状態となる。

界近傍のエンタングルメントを拾うため 1 次元系であれば定数、2 次元系であれば部分系の周の長さに比例した値を取る。これを面積測 (area law) と呼ぶ。一方、長距離相関を持った系では境界近傍以外のエンタングルメントも拾うので、部分系の大きさに比例した値を取る。これを体積則 (volume law) と呼ぶ。横磁場 Ising 鎖の QCP では体積則が成り立つため、長距離的なエンタングルメントが存在していることを示唆している。

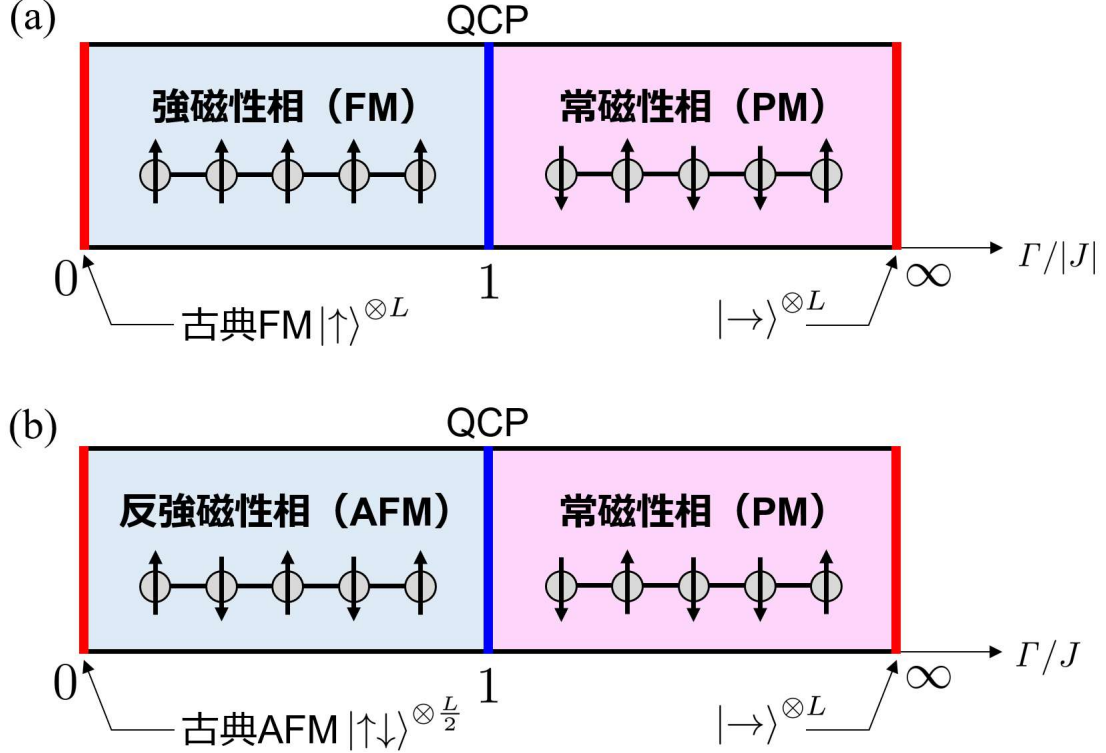


図 5.1 (a) 強磁性相互作用及び (b) 反強磁性相互作用する横磁場 Ising 鎖における、横磁場の強さに対する基底状態相図

5.1.2 数値計算上の工夫

一般的なワークステーションで我々の開発したアルゴリズムによって $S_2(\Pi(\rho))$ を計算してみると、図 5.2 に示す時間がかかった^{*2}。本アルゴリズムの中で特に計算時間がかかるのが期待値 $\{\langle \psi | A_\nu^{(n)} | \psi \rangle\}$ を計算するパートである。これはある $\langle \psi | A_\nu^{(n)} | \psi \rangle$ を計算するときに $L!/(L-n)!n!$ 通りの期待値の和をボンド次元分のテンソル縮約を行い足し上げる演算が必要となるためであると考えられる。そこで本計算ではこの計算コストを減らす工夫をした。いまハミルトニアンは全スピンを x 軸周りに π 回転させる操作 $\hat{Z}_i \rightarrow -\hat{Z}_i, \hat{Y}_i \rightarrow -\hat{Y}_i$ に関して不変であるので、基底状態もこの操作に関して不変な状態である。つまり、ある $\mathbf{a}_\nu = (\alpha_\nu, \beta_\nu, \gamma_\nu)$ に対して計算される期待値と $\tilde{\mathbf{a}}_\nu = (\alpha_\nu, -\beta_\nu, -\gamma_\nu)$ に対して計算される期待値は同じであることを意味する。従って数値計算上では $\mathbf{a}_\nu$ について期待値を計算すれば、そのペアの $\tilde{\mathbf{a}}_\nu$ に関する期待値は得られたデータをコピーすればよく、テンソル縮約をもう一度行わなくてよくなる。この工夫によりテンソル縮約による期待値計算を約半分に軽減することができた。厳密にはこのペアを作る方法だと、途中で $\{\mathbf{a}_\nu\}$ が線形従属になってしまうことがわかったので、 L に対して $\text{ceil}(D_L/2)$ 個のペアを作り、追加で線形独立となるベクトルを追加することで期待値を計算した。結果、図 5.2 に示す通り計算時間が短縮でき、横磁場 Ising モデルでは $L = 22$ までのデータを取得することができた。なお実験でもやることは原理的に同じであるが、数値計算におけるボンド次元分のテンソル縮約を取る計算コストがはかからないため、より大きな計での測定が可能であると期待できる。

^{*2} 用いた計算機のスペックは、メモリ 256.0 GB, プロセッサ AMD® Ryzen threadripper 7980x 64-cores $\times$ 128, ディスク容量 1.0TB である。

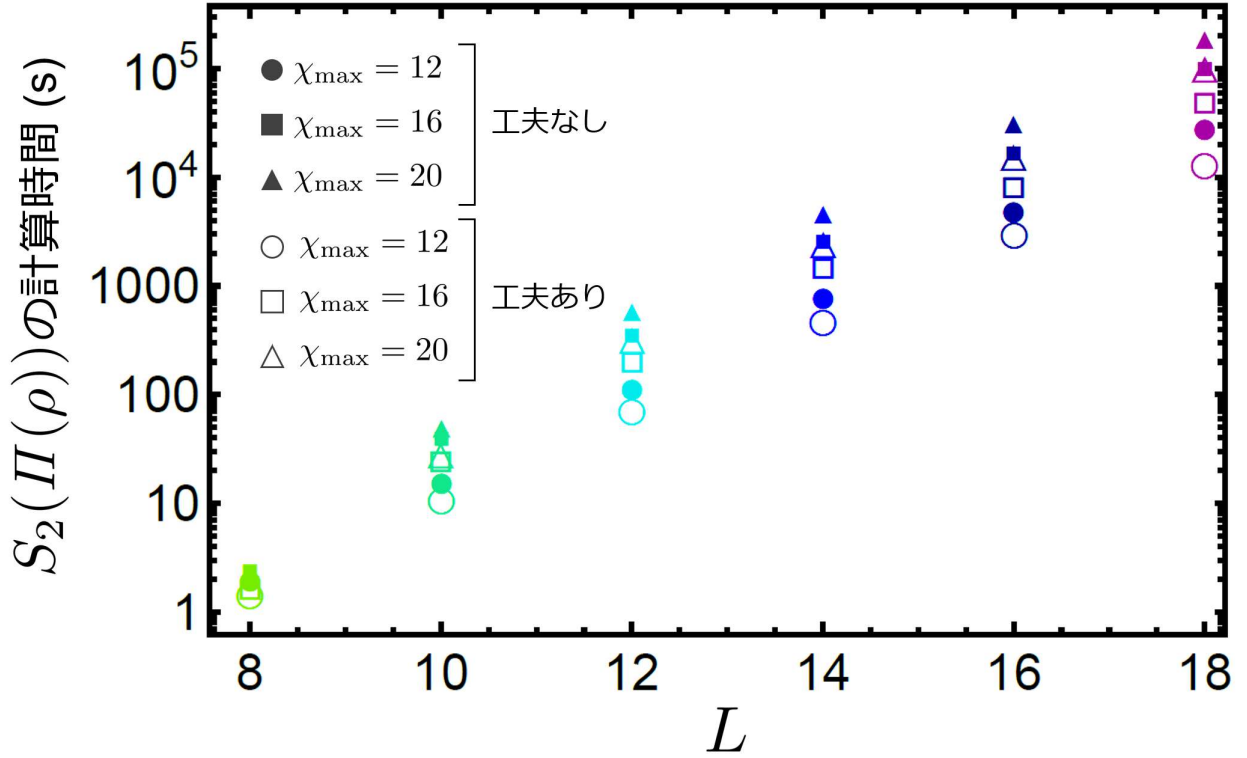


図 5.2 $S_2(\Pi(\rho))$ の計算時間。本データは強磁性相互作用する横磁場 Ising 鎖における量子臨界点 ($\Gamma/|J| = 1$) での計算時間を示している。丸、四角、三角のプロットはそれぞれ最大ボンド次元が 12, 16, 20 のときのデータを表し、白抜きのプロットは横磁場 Ising 模型の持つ対称性を利用して $\{\langle \psi | A_i^{(n)} | \psi \rangle\}$ の計算方法を工夫したときデータである。

5.1.3 横磁場に対する PIDM の Rényi エントロピーの振舞い

強磁性相互作用の場合

横磁場 $\Gamma/|J|$ の大きさを変化させたときの、基底状態に対する PIDM の純粋度 $P(\Pi(\rho))$ 及び Rényi エントロピー $S_2(\Pi(\rho)) = -\log P(\Pi(\rho))$ を図 5.3 に示す。計算コストの都合上、基底状態を表現する MPS の最大ボンド次元 $\chi_{\max}$ は $L = 10$ までは $\chi_{\max} = 2^{\frac{L}{2}}$ (最大値)、 $L = 12, 14, 16, 18, 20, 22$ は $\chi_{\max} = 16, 10, 4, 4, 4, 4$ として計算した ($S_2(\Pi(\rho))$ の $\chi_{\max}$ 依存性は付録 B を参照せよ)。 $\Gamma/|J| = 0$ では $P(\Pi(\rho)) = 1$, $S_2(\Pi(\rho)) = 0$ となっている。この点では基底状態は古典的な FM 状態、すなわち $\Pi(\rho) = \rho$ が成り立つ置換不変状態である。 ρ はいま純粋状態であるため、 $\Pi(\rho)$ もまた純粋状態であり $P(\Pi(\rho)) = 1$ が得られる。そのため対称化操作 Π による空間構造の情報の損失は無いので $S_2(\Pi(\rho)) = 0$ は自明な結果である。また横磁場が十分弱い領域 ($\Gamma/|J| \ll 1$) でも強磁性状態に近い状態であるため、有限ではあるものの $P(\Pi(\rho))$ は 1 に近い値、 $S_2(\Pi(\rho))$ は小さな値となっている。横磁場が十分強い領域 ($\Gamma/|J| \gg 1$) では、横磁場を強くするほど $S_2(\Pi(\rho))$ は 0 に近づく様子が見られた。これは無限磁場極限 ($\Gamma/|J| \rightarrow \infty$) でも基底状態が $\Pi(\rho) = \rho$ となるためである。そして量子臨界点 $\Gamma/|J| = 1$ 近傍ではのブロードなピーク構造が現れ、このピークは L が大きくなるほど顕著なものになっている。量子臨界点近傍では基底状態は粒子同士が複雑にエンタングルしている状態である。そのため対称化操作によってどの粒子とどの粒子がエンタングルしているかという空間構造の情報が多く失われピーク構造が現れたと考えられる。

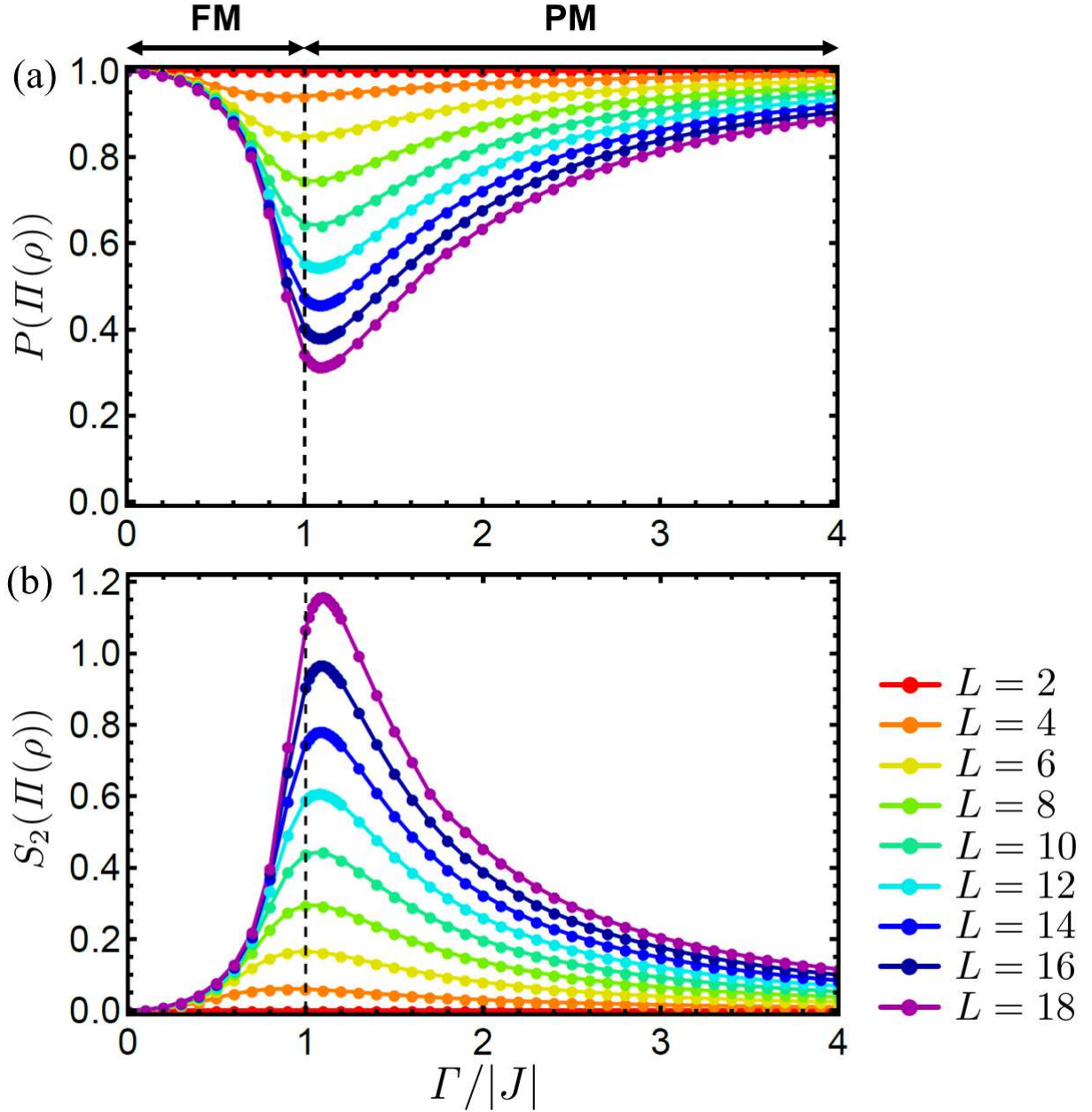
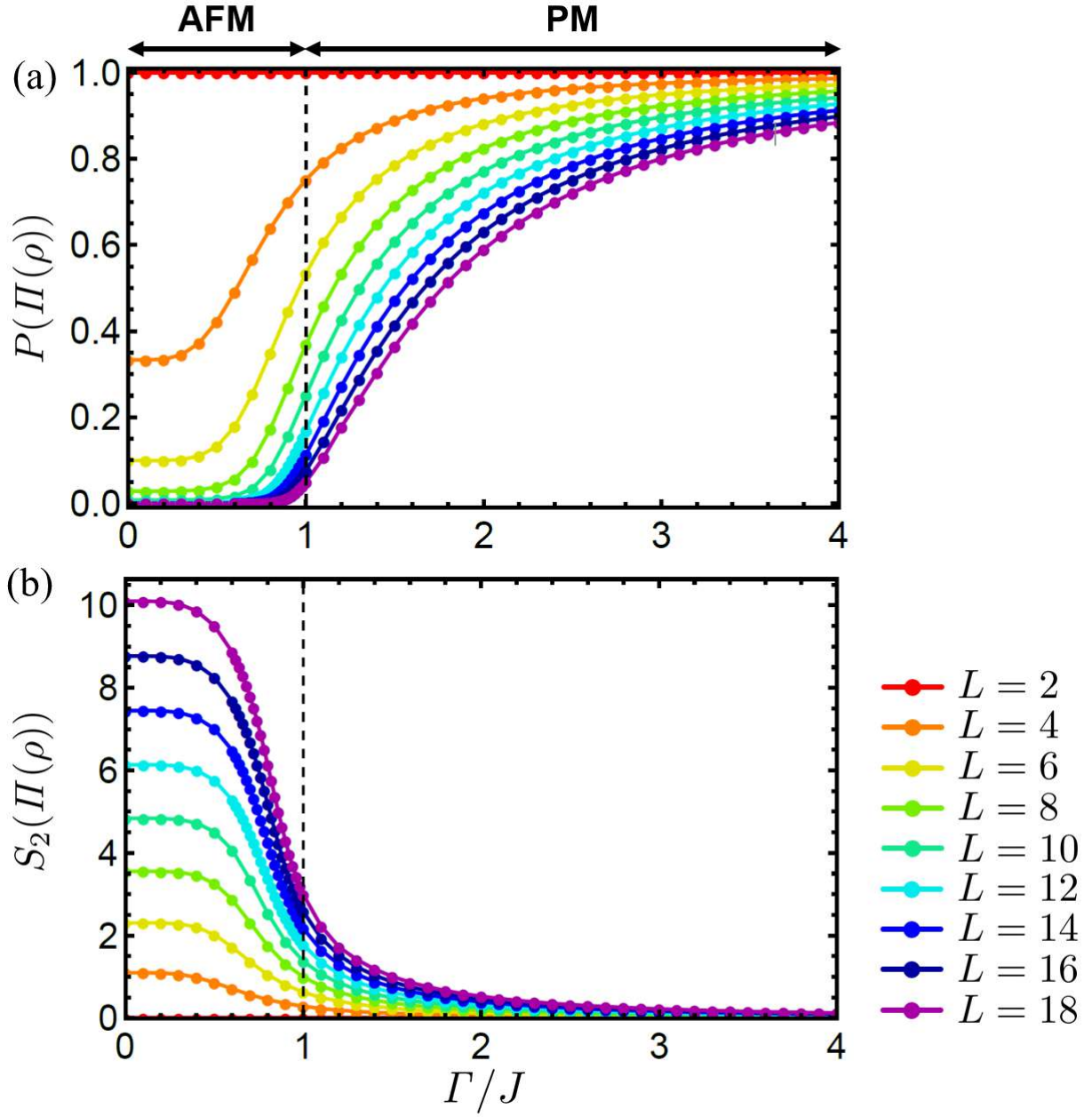


図 5.3 強磁性相互作用する横磁場 Ising 鎖における (a) $P(\Pi(\rho))$ 及び (b) $S_2(\Pi(\rho))$ の $\Gamma/|J|$ 依存性

反強磁性相互作用の場合

横磁場 Γ/J の大きさを变化させたときの、基底状態に対する PIDM の純粋度 $P(\Pi(\rho))$ 及び Rényi エントロピー $S_2(\Pi(\rho)) = -\log P(\Pi(\rho))$ を図 5.4 に示す。反強磁性相互作用の場合はピーク構造は消え、ステップ的な振る舞いが現れた。横磁場が十分強い領域 ($\Gamma/|J| \gg 1$) では、強磁性相互作用の場合と同じ物理により横磁場を強くするほど $P(\Pi(\rho))$ は 1 に近づき、 $S_2(\Pi(\rho))$ は 0 に近づいている。

一方横磁場が十分弱い領域 ($\Gamma/|J| \ll 1$) では、基底状態は置換不変でないので対称化操作により有限の $S_2(\Pi(\rho))$ が現れる。ゼロ磁場における基底状態 $c_1 |\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} + c_2 |\downarrow\uparrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}}$ ($|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$) では、 c_1, c_2 の値に依って $S_2(\Pi(\rho))$ の値が変わってしまう。そこで無限小の横磁場を入れた際の基底状態として計算した値を採用することにする。このと

図 5.4 反強磁性相互作用する横磁場 Ising 鎖における (a) $P(\Pi(\rho))$ 及び (b) $S_2(\Pi(\rho))$ の Γ/J 依存性

きの基底状態は $c_1 = c_2 = 1/\sqrt{2}$ となることが知られている [96]。この状態の PIDM の Rényi エントロピーは

$$\begin{aligned}
 & S_2 \left(\Pi \left(\frac{|\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} + |\downarrow\uparrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}}}{\sqrt{2}} \frac{\langle \uparrow\downarrow |^{\otimes \frac{L}{2}} + \langle \downarrow\uparrow |^{\otimes \frac{L}{2}}}{\sqrt{2}} \right) \right) \\
 &= -\log \left[\text{Tr} \left[\left(\frac{1}{L!} \sum_{s \in \mathfrak{S}_L} \hat{\mathcal{P}}_s \frac{|\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} \langle \uparrow\downarrow |^{\otimes \frac{L}{2}} + |\downarrow\uparrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} \langle \downarrow\uparrow |^{\otimes \frac{L}{2}}}{2} \frac{|\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} + |\downarrow\uparrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}}}{\sqrt{2}} \langle \downarrow\uparrow |^{\otimes \frac{L}{2}}}{\sqrt{2}} \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger \right)^2 \right] \right] \\
 &= -\log \left[\frac{1}{4(L!)^2} \sum_{s \in \mathfrak{S}_L} \sum_{s' \in \mathfrak{S}_L} \text{Tr} \left[\hat{\mathcal{P}}_s \left(|\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} \langle \uparrow\downarrow |^{\otimes \frac{L}{2}} + |\downarrow\uparrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} \langle \downarrow\uparrow |^{\otimes \frac{L}{2}} \right) \frac{|\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} + |\downarrow\uparrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}}}{\sqrt{2}} \langle \downarrow\uparrow |^{\otimes \frac{L}{2}}}{\sqrt{2}} \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. \hat{\mathcal{P}}_{s'} \left(|\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} \langle \uparrow\downarrow |^{\otimes \frac{L}{2}} + |\downarrow\uparrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} \langle \downarrow\uparrow |^{\otimes \frac{L}{2}} \right) \frac{|\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} + |\downarrow\uparrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}}}{\sqrt{2}} \langle \downarrow\uparrow |^{\otimes \frac{L}{2}}}{\sqrt{2}} \right) \hat{\mathcal{P}}_{s'}^\dagger \right] \right] \\
 &= -\log \left[\frac{1}{4(L!)} \times \text{Tr}(I) \times \left(\frac{L}{2} \right)! \left(\frac{L}{2} \right)! \times L! \times 4 \right] \\
 &= -\log \left[\frac{2 \left(\frac{L}{2} \right)! \left(\frac{L}{2} \right)!}{L!} \right] \simeq L \log 2 - \frac{1}{2} \log L - \log \sqrt{2\pi}
 \end{aligned} \tag{5.3}$$

となる*3。また、ゼロ磁場極限と無限磁場極限では摂動論を用いて $S_2(\Pi(\rho))$ の値を解析的に求めることができる。次節ではその解析計算について説明する。

5.1.4 高磁場領域 ($\Gamma \gg 1$) における摂動論的アプローチ

横磁場 Ising 鎖の低磁場領域、及び高磁場領域における PIDM の Rényi エントロピー $S_2(\Pi(\rho))$ の表式を、2 次の摂動論（詳細は付録 A を参照せよ）を用いて解析的に導出する。つまり

$$S_2(\Pi(\rho)) \simeq S_2^{(0)}(\Pi(\rho)) + \lambda S_2^{(1)}(\Pi(\rho)) + \lambda^2 S_2^{(2)}(\Pi(\rho)) \quad (5.4)$$

という形を目指す。 $\lambda \ll 1$ は摂動パラメータと呼ばれる。 L は偶数であり、周期的境界条件を課している。

横磁場 Ising 鎖のハミルトニアンを以下のように変形する。

$$\hat{\mathcal{H}}/\Gamma = \hat{\mathcal{H}}^{(0)} + \lambda \hat{\mathcal{H}}', \quad (5.5)$$

ここで

$$\hat{\mathcal{H}}^{(0)} = - \sum_{i=1}^L \hat{X}_i, \quad (5.6)$$

$$\hat{\mathcal{H}}' = \sum_{i=1}^{L-1} \hat{Z}_i \hat{Z}_{i+1} \quad (5.7)$$

とおいた。 $\hat{\mathcal{H}}^{(0)}$ は非摂動ハミルトニアン (unperturbed Hamiltonian)、 $\hat{\mathcal{H}}'$ は摂動 (perturbation) であり、 $\lambda = J/\Gamma$ が摂動パラメータである。 $\hat{\mathcal{H}}^{(0)}$ の固有状態は

$$\text{基底状態: } |g^{(0)}\rangle = |\rightarrow\rangle^{\otimes L} \quad (5.8)$$

$$\text{励起状態: } |e^{(0)}\rangle = (|\rightarrow\rangle \text{ or } |\leftarrow\rangle)^{\otimes L} \quad (5.9)$$

ここで $|\rightarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle)$, $|\leftarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle)$ とした。基底状態と励起状態の固有エネルギーをそれぞれ $E_g^{(0)}$, $E_e^{(0)}$ と書くことにする。 $\hat{\mathcal{H}}/\Gamma$ の基底状態 $|\text{HF}\rangle$ を摂動論の公式で展開すると、

$$\begin{aligned} |\text{HF}\rangle &\simeq |g^{(0)}\rangle + \frac{J}{\Gamma} \sum_e \frac{\langle e^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}' | g^{(0)} \rangle}{E_g^{(0)} - E_e^{(0)}} |e^{(0)}\rangle + \mathcal{O}(\lambda^2) \\ &= |\rightarrow\rangle^{\otimes L} + \frac{J}{\Gamma} \sum_e \sum_{m=0}^{L-2} \frac{\langle e^{(0)} | \psi_m \rangle}{E_g^{(0)} - E_e^{(0)}} |e^{(0)}\rangle \\ &= |\rightarrow\rangle^{\otimes L} + \frac{J}{\Gamma} \sum_{m=0}^{L-2} \frac{1}{-L - (-L+4)} |\psi_m\rangle \\ &= |\rightarrow\rangle^{\otimes L} - \frac{J}{4\Gamma} \sum_{m=0}^{L-2} |\psi_m\rangle \end{aligned} \quad (5.10)$$

と書くことができる*4。ここで $|\psi_m\rangle = |\rightarrow\rangle^{\otimes m} \otimes |\leftarrow\rangle^{\otimes 2} \otimes |\rightarrow\rangle^{\otimes (L-m-2)}$ とした。更に規格化して、

$$|\text{HF}\rangle \simeq \frac{1}{\mathcal{N}} \left(|\rightarrow\rangle^{\otimes L} - \frac{J}{4\Gamma} \sum_{m=0}^{L-2} |\psi_m\rangle \right), \quad \mathcal{N} = \left(1 + \frac{1}{16} \left(\frac{J}{\Gamma} \right)^2 (L-1) \right)^{1/2} \quad (5.11)$$

を得る。密度行列 $\rho = |\text{HF}\rangle \langle \text{HF}|$ は

$$\rho = \frac{1}{\mathcal{N}^2} \left[|\rightarrow\rangle^{\otimes L} \langle \rightarrow|^{\otimes L} - \frac{J}{4\Gamma} \sum_{m=0}^{L-2} |\rightarrow\rangle^{\otimes L} \langle \psi_m| - \frac{J}{4\Gamma} \sum_{m=0}^{L-2} |\psi_m\rangle \langle \rightarrow|^{\otimes L} \right] \quad (5.12)$$

*3 Stirling の公式 $\log(L!) \simeq L \log L - L + \log \sqrt{2\pi L}$ を用いた。

*4 $\mathcal{O}(\lambda^2)$ の項は 0 である。

となり、PIDM $\Pi(\rho)$ は

$$\begin{aligned}\Pi(\rho) &= \frac{1}{L!} \sum_{s \in \mathfrak{S}_L} \hat{\mathcal{P}}_s \rho \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger \\ &= \frac{1}{\mathcal{N}^2} \frac{1}{L!} \left[L! |\rightarrow\rangle^{\otimes L} \langle \rightarrow|^{\otimes L} - \frac{\lambda}{4} \sum_{s \in \mathfrak{S}_L} \sum_{m=0}^{L-2} |\rightarrow\rangle^{\otimes L} \langle \psi_m | \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger - \frac{\lambda}{4} \sum_{s \in \mathfrak{S}_L} \sum_{m=0}^{L-2} \hat{\mathcal{P}}_s |\psi_m\rangle \langle \rightarrow|^{\otimes L} \right] \quad (5.13)\end{aligned}$$

$$= \frac{1}{\mathcal{N}^2} \frac{1}{L!} [A + B + C] \quad (5.14)$$

と書ける。これを2乗してトレースをとると、 $\text{Tr}(AB) = \text{Tr}(BA) = 0$ と $\text{Tr}(BC) = \text{Tr}(CB)$ より

$$\text{Tr} [\Pi(\rho)^2] = \frac{1}{\mathcal{N}^4} \frac{1}{(L!)^2} \text{Tr}(A^2 + 2BC) \quad (5.15)$$

が残る。

$$\text{Tr}(A^2) = (L!)^2 \text{Tr} [|\rightarrow\rangle^{\otimes L} \langle \rightarrow|^{\otimes L} |\rightarrow\rangle^{\otimes L} \langle \rightarrow|^{\otimes L}] = (L!)^2 \text{Tr} [|\rightarrow\rangle^{\otimes L} \langle \rightarrow|^{\otimes L}] = (L!)^2 \quad (5.16)$$

及び

$$\begin{aligned}\text{Tr}(BC) &= \frac{1}{16} \left(\frac{J}{\Gamma} \right)^2 \sum_{s, s' \in \mathfrak{S}_L} \sum_{m, m'=0}^{L-2} \text{Tr} [|\rightarrow\rangle^{\otimes L} \langle \psi_{m'} | \hat{\mathcal{P}}_{s'}^\dagger \hat{\mathcal{P}}_s |\psi_m\rangle \langle \rightarrow|^{\otimes L}] \\ &= \frac{1}{16} \left(\frac{J}{\Gamma} \right)^2 (L-2)! 2! L! (L-1)^2 \quad (5.17)\end{aligned}$$

より、

$$\begin{aligned}\text{Tr} [\Pi(\rho)^2] &= \frac{1}{\mathcal{N}^4} \frac{1}{(L!)^2} \left[(L!)^2 + 2 \cdot \frac{1}{16} \left(\frac{J}{\Gamma} \right)^2 (L-2)! 2! L! (L-1)^2 \right] \\ &= \frac{1}{\mathcal{N}^4} \left[1 + \frac{1}{4} \left(\frac{J}{\Gamma} \right)^2 \left(1 - \frac{1}{L} \right) \right] \\ &= \left[1 + \frac{1}{16} \left(\frac{J}{\Gamma} \right)^2 \right]^{-2} \left[1 + \frac{1}{4} \left(\frac{J}{\Gamma} \right)^2 \left(1 - \frac{1}{L} \right) \right] \\ &\simeq \left[1 - \frac{1}{8} \left(\frac{J}{\Gamma} \right)^2 \right] \left[1 + \frac{1}{4} \left(\frac{J}{\Gamma} \right)^2 \left(1 - \frac{1}{L} \right) \right] \\ &= 1 + \left(\frac{J}{\Gamma} \right)^2 \frac{-4L^2 + 12L - 8}{32L} \\ &\xrightarrow{L \rightarrow \infty} 1 + \left(\frac{J}{\Gamma} \right)^2 \left(\frac{L}{8} - \frac{3}{8} \right) \quad (5.18)\end{aligned}$$

よって PIDM の Rényi エントロピーは

$$S_2(\Pi(\rho)) = -\log \left[1 + \left(\frac{J}{\Gamma} \right)^2 \left(\frac{L}{8} - \frac{3}{8} \right) \right] \simeq -\left(\frac{J}{\Gamma} \right)^2 \left(\frac{L}{8} - \frac{3}{8} \right) = \frac{1}{8} \left(\frac{J}{\Gamma} \right)^2 L - \frac{3}{8} \left(\frac{J}{\Gamma} \right)^2 \quad (5.19)$$

と計算できる*5。

5.1.5 低磁場領域 ($\Gamma \ll 1$): 強磁性相互作用

低磁場領域の摂動論を考えるため、ハミルトニアンを

$$\hat{\mathcal{H}}/|J| = \hat{\mathcal{H}}^{(0)} + \lambda \hat{\mathcal{H}}', \quad (5.20)$$

*5 $\log(1+ax) \simeq ax$ (但し $x \ll 1$) を用いた。

と変形しておこう。ここで

$$\hat{\mathcal{H}}^{(0)} = \text{sgn}(J) \sum_{i=1}^{L-1} \hat{Z}_i \hat{Z}_{i+1}, \quad (5.21)$$

$$\hat{\mathcal{H}}' = - \sum_{i=1}^L \hat{X}_i. \quad (5.22)$$

とおいた。摂動パラメータは $\lambda = \Gamma/|J|$ である。まず強磁性相互作用 ($J < 0$) の場合から考えよう。今回は $\hat{\mathcal{H}}^{(0)}$ の基底状態は $|\uparrow\rangle^{\otimes L}$ と $|\downarrow\rangle^{\otimes L}$ で2重縮退している。従って基底状態をこれらを対象化した状態を基底状態として考える。つまり

$$\text{基底状態: } |g^{(0)}\rangle = \frac{|\uparrow\rangle^{\otimes L} + |\downarrow\rangle^{\otimes L}}{\sqrt{2}} \quad (5.23)$$

$$\text{励起状態: } |e^{(0)}\rangle = (|\uparrow\rangle \text{ or } |\downarrow\rangle)^{\otimes L} \setminus \{|\uparrow\rangle^{\otimes L}, |\downarrow\rangle^{\otimes L}\} \quad (5.24)$$

と考えられる。 $\hat{\mathcal{H}}/|J|$ の基底状態 $|\text{LF}_{\text{FM}}\rangle$ を摂動論の公式で展開すると、

$$\begin{aligned} |\text{LF}_{\text{FM}}\rangle &\simeq |g^{(0)}\rangle + \frac{\Gamma}{|J|} \sum_e \frac{\langle e^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}' | g^{(0)} \rangle}{E_g^{(0)} - E_e^{(0)}} |e^{(0)}\rangle \\ &= \frac{|\uparrow\rangle^{\otimes L} + |\downarrow\rangle^{\otimes L}}{\sqrt{2}} + \frac{\Gamma}{|J|} \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_e \left[\frac{\langle e^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}' | \uparrow \rangle^{\otimes L}}{E_g^{(0)} - E_e^{(0)}} + \frac{\langle e^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}' | \downarrow \rangle^{\otimes L}}{E_g^{(0)} - E_e^{(0)}} \right] |e^{(0)}\rangle \\ &= \frac{|\uparrow\rangle^{\otimes L} + |\downarrow\rangle^{\otimes L}}{\sqrt{2}} - \frac{\Gamma}{|J|} \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_e \sum_{m=0}^{L-1} \left[\frac{\langle e^{(0)} | \psi_m \rangle}{E_g^{(0)} - E_e^{(0)}} + \frac{\langle e^{(0)} | \phi_m \rangle}{E_g^{(0)} - E_e^{(0)}} \right] |e^{(0)}\rangle \\ &= \frac{|\uparrow\rangle^{\otimes L} + |\downarrow\rangle^{\otimes L}}{\sqrt{2}} - \frac{\Gamma}{|J|} \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{1}{(L-1) - (L-3)} (|\psi_0\rangle + |\psi_{L-1}\rangle + |\phi_0\rangle + |\phi_{L-1}\rangle) + \right. \\ &\quad \left. \frac{1}{(L-1) - (L-5)} \sum_{m=1}^{L-2} (|\psi_m\rangle + |\phi_m\rangle) \right] \\ &= \frac{|\uparrow\rangle^{\otimes L} + |\downarrow\rangle^{\otimes L}}{\sqrt{2}} - \frac{1}{2} \frac{\Gamma}{|J|} \left[\frac{|\psi_0\rangle + |\phi_0\rangle}{\sqrt{2}} + \frac{|\psi_{L-1}\rangle + |\phi_{L-1}\rangle}{\sqrt{2}} \right] - \frac{1}{4} \frac{\Gamma}{|J|} \sum_{m=1}^{L-2} \frac{|\psi_m\rangle + |\phi_m\rangle}{\sqrt{2}} \end{aligned} \quad (5.25)$$

と書くことができる。ここで $|\psi_m\rangle = |\uparrow\rangle^{\otimes m} \otimes |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle^{\otimes (L-m-1)}$, $|\phi_m\rangle = |\downarrow\rangle^{\otimes m} \otimes |\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle^{\otimes (L-m-1)}$ とおいた。更に規格化して、

$$|\text{LF}_{\text{FM}}\rangle \simeq \frac{1}{\mathcal{N}} \left(\frac{|\uparrow\rangle^{\otimes L} + |\downarrow\rangle^{\otimes L}}{\sqrt{2}} - \frac{1}{2} \frac{\Gamma}{|J|} \left[\frac{|\psi_0\rangle + |\phi_0\rangle}{\sqrt{2}} + \frac{|\psi_{L-1}\rangle + |\phi_{L-1}\rangle}{\sqrt{2}} \right] - \frac{1}{4} \frac{\Gamma}{|J|} \sum_{m=1}^{L-2} \frac{|\psi_m\rangle + |\phi_m\rangle}{\sqrt{2}} \right) \quad (5.26)$$

$$\mathcal{N} = \left(1 + \left(\frac{\Gamma}{|J|} \right)^2 \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{16}(L-2) \right) \right)^{1/2} \quad (5.27)$$

を得る。式が長いので

$$A = \frac{|\uparrow\rangle^{\otimes L} + |\downarrow\rangle^{\otimes L}}{\sqrt{2}} \quad (5.28)$$

$$B = -\frac{1}{2} \frac{\Gamma}{|J|} \left[\frac{|\psi_0\rangle + |\phi_0\rangle}{\sqrt{2}} + \frac{|\psi_{L-1}\rangle + |\phi_{L-1}\rangle}{\sqrt{2}} \right] \quad (5.29)$$

$$C = -\frac{1}{4} \frac{\Gamma}{|J|} \sum_{m=1}^{L-2} \frac{|\psi_m\rangle + |\phi_m\rangle}{\sqrt{2}} \quad (5.30)$$

とおこう。すると密度行列 $\rho = |\text{LF}_{\text{FM}}\rangle \langle \text{LF}_{\text{FM}}|$ は

$$\rho = \frac{1}{\mathcal{N}^2} [AA^\dagger + AB^\dagger + AC^\dagger + BA^\dagger + CA^\dagger] \quad (5.31)$$

と書ける。PIDM $\Pi(\rho)$ は

$$\Pi(\rho) = \frac{1}{\mathcal{N}^2} \frac{1}{L!} \left[\tilde{A} + \tilde{B} + \tilde{C} + \tilde{D} + \tilde{E} \right] \quad (5.32)$$

と書ける。但し、

$$\tilde{A} = \sum_{s \in \mathfrak{S}_L} \hat{\mathcal{P}}_s A A^\dagger \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger = L! \frac{|\uparrow\rangle^{\otimes L} + |\downarrow\rangle^{\otimes L}}{\sqrt{2}} \frac{\langle \uparrow |^{\otimes L} + \langle \downarrow |^{\otimes L}}{\sqrt{2}} \quad (5.33)$$

$$\tilde{B} = \sum_{s \in \mathfrak{S}_L} \hat{\mathcal{P}}_s A B^\dagger \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger = -\frac{1}{2} \frac{\Gamma}{|J|} \sum_{s \in \mathfrak{S}_L} \frac{|\uparrow\rangle^{\otimes L} + |\downarrow\rangle^{\otimes L}}{\sqrt{2}} \left[\frac{\langle \psi_0 | + \langle \phi_0 |}{\sqrt{2}} + \frac{\langle \psi_{L-1} | + \langle \phi_{L-1} |}{\sqrt{2}} \right] \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger \quad (5.34)$$

$$\tilde{C} = \sum_{s \in \mathfrak{S}_L} \hat{\mathcal{P}}_s A C^\dagger \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger = -\frac{1}{4} \frac{\Gamma}{|J|} \sum_{s \in \mathfrak{S}_L} \sum_{m=1}^{L-2} \frac{|\uparrow\rangle^{\otimes L} + |\downarrow\rangle^{\otimes L}}{\sqrt{2}} \frac{\langle \psi_m | + \langle \phi_m |}{\sqrt{2}} \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger \quad (5.35)$$

$$\tilde{D} = \sum_{s \in \mathfrak{S}_L} \hat{\mathcal{P}}_s B A^\dagger \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger = -\frac{1}{2} \frac{\Gamma}{|J|} \sum_{s \in \mathfrak{S}_L} \hat{\mathcal{P}}_s \left[\frac{|\psi_0\rangle + |\phi_0\rangle}{\sqrt{2}} + \frac{|\psi_{L-1}\rangle + |\phi_{L-1}\rangle}{\sqrt{2}} \right] \frac{\langle \uparrow |^{\otimes L} + \langle \downarrow |^{\otimes L}}{\sqrt{2}} \quad (5.36)$$

$$\tilde{E} = \sum_{s \in \mathfrak{S}_L} \hat{\mathcal{P}}_s C A^\dagger \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger = -\frac{1}{4} \frac{\Gamma}{|J|} \sum_{s \in \mathfrak{S}_L} \sum_{m=1}^{L-2} \hat{\mathcal{P}}_s \frac{|\psi_m\rangle + |\phi_m\rangle}{\sqrt{2}} \frac{\langle \uparrow |^{\otimes L} + \langle \downarrow |^{\otimes L}}{\sqrt{2}} \quad (5.37)$$

とおいた。これを2乗してトレースをとると、 $\langle \uparrow |^{\otimes L} | \psi_m \rangle, \langle \downarrow |^{\otimes L} | \psi_m \rangle, \langle \uparrow |^{\otimes L} | \phi_m \rangle, \langle \downarrow |^{\otimes L} | \phi_m \rangle$ が現れる項は全てゼロになるので、結局

$$\text{Tr} [\Pi(\rho)^2] = \frac{1}{\mathcal{N}^4} \frac{1}{(L!)^2} \text{Tr} (\tilde{A}^2 + 2\tilde{B}\tilde{D} + 2\tilde{B}\tilde{E} + 2\tilde{C}\tilde{D} + 2\tilde{C}\tilde{E}) \quad (5.38)$$

が残る。各トレースを計算すると、

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\tilde{A}^2) &= (L!)^2 \text{Tr} \left[\frac{|\uparrow\rangle^{\otimes L} + |\downarrow\rangle^{\otimes L}}{\sqrt{2}} \frac{\langle \uparrow |^{\otimes L} + \langle \downarrow |^{\otimes L}}{\sqrt{2}} \frac{|\uparrow\rangle^{\otimes L} + |\downarrow\rangle^{\otimes L}}{\sqrt{2}} \frac{\langle \uparrow |^{\otimes L} + \langle \downarrow |^{\otimes L}}{\sqrt{2}} \right] \\ &= \frac{(L!)^2}{4} \text{Tr} \left[\left(|\uparrow\rangle^{\otimes L} \langle \uparrow |^{\otimes L} + |\uparrow\rangle^{\otimes L} \langle \downarrow |^{\otimes L} + |\downarrow\rangle^{\otimes L} \langle \uparrow |^{\otimes L} + |\downarrow\rangle^{\otimes L} \langle \downarrow |^{\otimes L} \right)^2 \right] \\ &= \frac{(L!)^2}{4} \text{Tr} \left[|\uparrow\rangle^{\otimes L} \langle \uparrow |^{\otimes L} + |\uparrow\rangle^{\otimes L} \langle \downarrow |^{\otimes L} + |\downarrow\rangle^{\otimes L} \langle \uparrow |^{\otimes L} + |\downarrow\rangle^{\otimes L} \langle \downarrow |^{\otimes L} \right] \\ &= (L!)^2 \end{aligned} \quad (5.39)$$

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\tilde{B}\tilde{D}) &= \frac{1}{4} \left(\frac{\Gamma}{|J|} \right)^2 \times \\ &\quad \sum_{s, s' \in \mathfrak{S}_L} \text{Tr} \left[\frac{|\uparrow\rangle^{\otimes L} + |\downarrow\rangle^{\otimes L}}{\sqrt{2}} \left(\frac{\langle \psi_0 | + \langle \phi_0 |}{\sqrt{2}} + \frac{\langle \psi_{L-1} | + \langle \phi_{L-1} |}{\sqrt{2}} \right) \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger \right. \\ &\quad \left. \hat{\mathcal{P}}_{s'} \left(\frac{|\psi_0\rangle + |\phi_0\rangle}{\sqrt{2}} + \frac{|\psi_{L-1}\rangle + |\phi_{L-1}\rangle}{\sqrt{2}} \right) \frac{\langle \uparrow |^{\otimes L} + \langle \downarrow |^{\otimes L}}{\sqrt{2}} \right] \\ &= \frac{1}{4} \left(\frac{\Gamma}{|J|} \right)^2 (L-1)! L! \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right)^2 \cdot 2 \cdot 4 \\ &= \left(\frac{\Gamma}{|J|} \right)^2 (L-1)! L! \end{aligned} \quad (5.40)$$

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\tilde{B}\tilde{E}) &= \frac{1}{8} \left(\frac{\Gamma}{|J|} \right)^2 \times \\ &\quad \sum_{s, s' \in \mathfrak{S}_L} \sum_{m=1}^{L-2} \text{Tr} \left[\frac{|\uparrow\rangle^{\otimes L} + |\downarrow\rangle^{\otimes L}}{\sqrt{2}} \left(\frac{\langle \psi_0 | + \langle \phi_0 |}{\sqrt{2}} + \frac{\langle \psi_{L-1} | + \langle \phi_{L-1} |}{\sqrt{2}} \right) \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger \hat{\mathcal{P}}_{s'} \frac{|\psi_m\rangle + |\phi_m\rangle}{\sqrt{2}} \frac{\langle \uparrow |^{\otimes L} + \langle \downarrow |^{\otimes L}}{\sqrt{2}} \right] \\ &= \frac{1}{8} \left(\frac{\Gamma}{|J|} \right)^2 (L-1)! L! \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right)^2 \cdot 2 \cdot 2(L-2) \\ &= \frac{1}{4} \left(\frac{\Gamma}{|J|} \right)^2 (L-1)! L! (L-2) \end{aligned} \quad (5.41)$$

$$\begin{aligned}
\text{Tr}(\tilde{C}\tilde{D}) &= \frac{1}{8} \left(\frac{\Gamma}{|J|} \right)^2 \times \\
&\quad \sum_{s,s' \in \mathfrak{S}_L} \sum_{m=1}^{L-2} \text{Tr} \left[\frac{|\uparrow\rangle^{\otimes L} + |\downarrow\rangle^{\otimes L}}{\sqrt{2}} \frac{\langle \psi_m | + \langle \phi_m |}{\sqrt{2}} \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger \hat{\mathcal{P}}_{s'} \left(\frac{\langle \psi_0 | + \langle \phi_0 |}{\sqrt{2}} + \frac{\langle \psi_{L-1} | + \langle \phi_{L-1} |}{\sqrt{2}} \right) \frac{|\uparrow\rangle^{\otimes L} + |\downarrow\rangle^{\otimes L}}{\sqrt{2}} \right] \\
&= \frac{1}{8} \left(\frac{\Gamma}{|J|} \right)^2 (L-1)!L! \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right)^2 \cdot 2 \cdot 2(L-2) \\
&= \frac{1}{4} \left(\frac{\Gamma}{|J|} \right)^2 (L-1)!L!(L-2)
\end{aligned} \tag{5.42}$$

$$\begin{aligned}
\text{Tr}(\tilde{C}\tilde{E}) &= \frac{1}{16} \left(\frac{\Gamma}{|J|} \right)^2 \times \\
&\quad \sum_{s,s' \in \mathfrak{S}_L} \sum_{m,m'=1}^{L-2} \text{Tr} \left[\frac{|\uparrow\rangle^{\otimes L} + |\downarrow\rangle^{\otimes L}}{\sqrt{2}} \frac{\langle \psi_m | + \langle \phi_m |}{\sqrt{2}} \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger \hat{\mathcal{P}}_{s'} \frac{|\psi_{m'}\rangle + |\phi_{m'}\rangle}{\sqrt{2}} \frac{|\uparrow\rangle^{\otimes L} + |\downarrow\rangle^{\otimes L}}{\sqrt{2}} \right] \\
&= \frac{1}{16} \left(\frac{\Gamma}{|J|} \right)^2 (L-1)!L! \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right)^2 \cdot 2 \cdot (L-2)^2 \\
&= \frac{1}{16} \left(\frac{\Gamma}{|J|} \right)^2 (L-1)!L! \cdot (L-2)^2
\end{aligned} \tag{5.43}$$

という値になるので、

$$\begin{aligned}
\text{Tr}[\Pi(\rho)^2] &= \frac{1}{\mathcal{N}^4} \frac{1}{(L!)^2} \left[(L!)^2 + 2 \cdot \left(\frac{\Gamma}{|J|} \right)^2 (L-1)!L! + 2 \cdot \frac{1}{4} \left(\frac{\Gamma}{|J|} \right)^2 (L-1)!L!(L-2) + \right. \\
&\quad \left. 2 \cdot \frac{1}{4} \left(\frac{\Gamma}{|J|} \right)^2 (L-1)!L!(L-2) + 2 \cdot \frac{1}{16} \left(\frac{\Gamma}{|J|} \right)^2 (L-1)!L!(L-2)^2 \right] \\
&= \frac{1}{\mathcal{N}^4} \frac{1}{(L!)^2} \left[(L!)^2 + 2 \cdot \left(\frac{\Gamma}{|J|} \right)^2 (L-1)!L! + \left(\frac{\Gamma}{|J|} \right)^2 (L-1)!L!(L-2) + \frac{1}{8} \left(\frac{\Gamma}{|J|} \right)^2 (L-1)!L!(L-2)^2 \right] \\
&= \frac{1}{\mathcal{N}^4} \left[1 + 2 \cdot \left(\frac{\Gamma}{|J|} \right)^2 \frac{1}{L} + \left(\frac{\Gamma}{|J|} \right)^2 \frac{L-2}{L} + \frac{1}{8} \left(\frac{\Gamma}{|J|} \right)^2 \frac{(L-2)^2}{L} \right] \\
&= \frac{1}{\mathcal{N}^4} \left[1 + \left(\frac{\Gamma}{|J|} \right)^2 \frac{1}{L} \left(\frac{L^2}{8} + \frac{L}{2} + \frac{1}{2} \right) \right] \\
&= \left[1 + \left(\frac{\Gamma}{|J|} \right)^2 \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{16}(L-2) \right) \right]^{-2} \left[1 + \left(\frac{\Gamma}{|J|} \right)^2 \frac{1}{L} \left(\frac{L^2}{8} + \frac{L}{2} + \frac{1}{2} \right) \right] \\
&\simeq \left[1 - \left(\frac{\Gamma}{|J|} \right)^2 \left(1 - \frac{1}{8}(L-2) \right) \right] \left[1 + \left(\frac{\Gamma}{|J|} \right)^2 \frac{1}{L} \left(\frac{L^2}{8} + \frac{L}{2} + \frac{1}{2} \right) \right] \\
&= 1 + \left(\frac{\Gamma}{|J|} \right)^2 \left(-\frac{1}{4} + \frac{1}{2L} \right)
\end{aligned} \tag{5.44}$$

よって PIDM の Rényi エントロピーは

$$S_2(\Pi(\rho)) = -\log \left[1 - \left(\frac{\Gamma}{|J|} \right)^2 \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{2L} \right) \right] \simeq \left(\frac{\Gamma}{|J|} \right)^2 \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{2L} \right) \tag{5.45}$$

と計算できる。

5.1.6 低磁場領域 ($\Gamma \ll 1$): 反強磁性相互作用

最後に反強磁性相互作用 ($J > 0$) の場合における低磁場領域の摂動論を考えよう。今回も $\hat{\mathcal{H}}^{(0)}$ の基底状態は $|\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}}$ と $|\downarrow\uparrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}}$ で2重縮退している。従って基底状態をこれらを対象化した状態を基底状態として考える。つまり

$$\text{基底状態: } |g^{(0)}\rangle = \frac{|\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} + |\downarrow\uparrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}}}{\sqrt{2}} \quad (5.46)$$

$$\text{励起状態: } |e^{(0)}\rangle = (|\uparrow\rangle \text{ or } |\downarrow\rangle)^{\otimes L} \setminus \{|\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}}, |\downarrow\uparrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}}\} \quad (5.47)$$

と考えられる。 $\hat{\mathcal{H}}/J$ の基底状態 $|\text{LFAFM}\rangle$ を摂動論の公式で展開すると、

$$\begin{aligned} |\text{LFAFM}\rangle &\simeq |g^{(0)}\rangle + \frac{\Gamma}{J} \sum_e \frac{\langle e^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}' | g^{(0)} \rangle}{E_g^{(0)} - E_e^{(0)}} |e^{(0)}\rangle \\ &= \frac{|\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} + |\downarrow\uparrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}}}{\sqrt{2}} + \frac{\Gamma}{J} \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_e \left[\frac{\langle e^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}' | \uparrow\downarrow \rangle^{\otimes \frac{L}{2}}}{E_g^{(0)} - E_e^{(0)}} + \frac{\langle e^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}' | \downarrow\uparrow \rangle^{\otimes \frac{L}{2}}}{E_g^{(0)} - E_e^{(0)}} \right] |e^{(0)}\rangle \\ &= \frac{|\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} + |\downarrow\uparrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}}}{\sqrt{2}} - \frac{\Gamma}{J} \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_e \sum_{m=0}^{\frac{L}{2}-1} \left[\frac{\langle e^{(0)} | (|\psi_m^{(\uparrow)}\rangle + |\psi_m^{(\downarrow)}\rangle)}{E_g^{(0)} - E_e^{(0)}} + \frac{\langle e^{(0)} | (|\phi_m^{(\uparrow)}\rangle + |\phi_m^{(\downarrow)}\rangle)}{E_g^{(0)} - E_e^{(0)}} \right] |e^{(0)}\rangle \\ &= \frac{|\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} + |\downarrow\uparrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}}}{\sqrt{2}} - \\ &\quad \frac{\Gamma}{J} \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{1}{-(L-1) - (-(L-5))} \sum_{m=0}^{\frac{L}{2}-2} |\psi_m^{(\uparrow)}\rangle + \frac{1}{-(L-1) - (-(L-3))} |\psi_{\frac{L}{2}-1}^{(\uparrow)}\rangle + \right. \\ &\quad \left. \frac{1}{-(L-1) - (-(L-3))} |\psi_0^{(\downarrow)}\rangle + \frac{1}{-(L-1) - (-(L-5))} \sum_{m=1}^{\frac{L}{2}-1} |\psi_m^{(\downarrow)}\rangle + \right. \\ &\quad \left. \frac{1}{-(L-1) - (-(L-3))} |\phi_0^{(\uparrow)}\rangle + \frac{1}{-(L-1) - (-(L-5))} \sum_{m=1}^{\frac{L}{2}-1} |\phi_m^{(\uparrow)}\rangle \right. \\ &\quad \left. \frac{1}{-(L-1) - (-(L-5))} \sum_{m=0}^{\frac{L}{2}-2} |\phi_m^{(\downarrow)}\rangle + \frac{1}{-(L-1) - (-(L-3))} |\phi_{\frac{L}{2}-1}^{(\downarrow)}\rangle \right] \\ &= \frac{|\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} + |\downarrow\uparrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}}}{\sqrt{2}} + \frac{\Gamma}{J} \frac{1}{4\sqrt{2}} \left[\sum_{m=0}^{\frac{L}{2}-2} (|\psi_m^{(\uparrow)}\rangle + |\phi_m^{(\downarrow)}\rangle) + \sum_{m=1}^{\frac{L}{2}-1} (|\psi_m^{(\downarrow)}\rangle + |\phi_m^{(\uparrow)}\rangle) \right] + \\ &\quad \frac{\Gamma}{J} \frac{1}{2\sqrt{2}} \left[|\psi_{\frac{L}{2}-1}^{(\uparrow)}\rangle + |\phi_{\frac{L}{2}-1}^{(\downarrow)}\rangle + |\psi_0^{(\downarrow)}\rangle + |\phi_0^{(\uparrow)}\rangle \right] \end{aligned} \quad (5.48)$$

と書くことができる。更に規格化して

$$|\text{LFAFM}\rangle \simeq \frac{1}{\mathcal{N}} \left\{ \frac{|\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} + |\downarrow\uparrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}}}{\sqrt{2}} + \frac{\Gamma}{J} \frac{1}{4\sqrt{2}} \left[\sum_{m=0}^{\frac{L}{2}-2} (|\psi_m^{(\uparrow)}\rangle + |\phi_m^{(\downarrow)}\rangle) + \sum_{m=1}^{\frac{L}{2}-1} (|\psi_m^{(\downarrow)}\rangle + |\phi_m^{(\uparrow)}\rangle) \right] + \right. \\ \left. \frac{\Gamma}{J} \frac{1}{2\sqrt{2}} \left[|\psi_{\frac{L}{2}-1}^{(\uparrow)}\rangle + |\phi_{\frac{L}{2}-1}^{(\downarrow)}\rangle + |\psi_0^{(\downarrow)}\rangle + |\phi_0^{(\uparrow)}\rangle \right] \right\} \quad (5.49)$$

$$\mathcal{N} = \left(1 + \left(\frac{\Gamma}{J} \right)^2 \left(\frac{L}{16} + \frac{3}{8} \right) \right)^{1/2} \quad (5.50)$$

を得る。ここで

$$|\psi_m^{(\uparrow)}\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes m} \otimes |\uparrow\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes (\frac{L}{2}-m-1)} \quad (5.51)$$

$$|\psi_m^{(\downarrow)}\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes m} \otimes |\downarrow\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes (\frac{L}{2}-m-1)} \quad (5.52)$$

$$|\phi_m^{(\uparrow)}\rangle = |\downarrow\uparrow\rangle^{\otimes m} \otimes |\uparrow\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes (\frac{L}{2}-m-1)} \quad (5.53)$$

$$|\phi_m^{(\downarrow)}\rangle = |\downarrow\uparrow\rangle^{\otimes m} \otimes |\downarrow\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes (\frac{L}{2}-m-1)} \quad (5.54)$$

とおいた。式が長いので

$$A = \frac{|\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} + |\downarrow\uparrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}}}{\sqrt{2}} \quad (5.55)$$

$$B = \frac{\Gamma}{J} \frac{1}{4\sqrt{2}} \left[\sum_{m=0}^{\frac{L}{2}-2} \left(|\psi_m^{(\uparrow)}\rangle + |\phi_m^{(\downarrow)}\rangle \right) + \sum_{m=1}^{\frac{L}{2}-1} \left(|\psi_m^{(\downarrow)}\rangle + |\phi_m^{(\uparrow)}\rangle \right) \right] \quad (5.56)$$

$$C = \frac{\Gamma}{J} \frac{1}{2\sqrt{2}} \left[|\psi_{\frac{L}{2}-1}^{(\uparrow)}\rangle + |\phi_{\frac{L}{2}-1}^{(\downarrow)}\rangle + |\psi_0^{(\downarrow)}\rangle + |\phi_0^{(\uparrow)}\rangle \right] \quad (5.57)$$

とおこう。すると密度行列 $\rho = |\text{LFAFM}\rangle \langle \text{LFAFM}|$ は

$$\rho = \frac{1}{\mathcal{N}^2} [AA^\dagger + AB^\dagger + AC^\dagger + BA^\dagger + CA^\dagger] \quad (5.58)$$

と書ける。PIDM $\Pi(\rho)$ は

$$\Pi(\rho) = \frac{1}{\mathcal{N}^2} \frac{1}{L!} [\tilde{A} + \tilde{B} + \tilde{C} + \tilde{D} + \tilde{E}] \quad (5.59)$$

と書ける。但し、

$$\tilde{A} = \sum_{s \in \mathfrak{S}_L} \hat{\mathcal{P}}_s A A^\dagger \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger = \sum_{s \in \mathfrak{S}_L} \hat{\mathcal{P}}_s \frac{|\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} + |\downarrow\uparrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}}}{\sqrt{2}} \frac{|\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} + |\downarrow\uparrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}}}{\sqrt{2}} \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger \quad (5.60)$$

$$\begin{aligned} \tilde{B} &= \sum_{s \in \mathfrak{S}_L} \hat{\mathcal{P}}_s A B^\dagger \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger \\ &= \frac{1}{4\sqrt{2}} \frac{\Gamma}{J} \sum_{s \in \mathfrak{S}_L} \hat{\mathcal{P}}_s \frac{|\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} + |\downarrow\uparrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}}}{\sqrt{2}} \left[\sum_{m=0}^{\frac{L}{2}-2} \left(\langle \psi_m^{(\uparrow)} | + \langle \phi_m^{(\downarrow)} | \right) + \sum_{m=1}^{\frac{L}{2}-1} \left(\langle \psi_m^{(\downarrow)} | + \langle \phi_m^{(\uparrow)} | \right) \right] \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger \end{aligned} \quad (5.61)$$

$$\begin{aligned} \tilde{C} &= \sum_{s \in \mathfrak{S}_L} \hat{\mathcal{P}}_s A C^\dagger \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger \\ &= \frac{1}{2\sqrt{2}} \frac{\Gamma}{J} \sum_{s \in \mathfrak{S}_L} \hat{\mathcal{P}}_s \frac{|\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} + |\downarrow\uparrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}}}{\sqrt{2}} \left[\langle \psi_{\frac{L}{2}-1}^{(\uparrow)} | + \langle \phi_{\frac{L}{2}-1}^{(\downarrow)} | + \langle \psi_0^{(\downarrow)} | + \langle \phi_0^{(\uparrow)} | \right] \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger \end{aligned} \quad (5.62)$$

$$\begin{aligned} \tilde{D} &= \sum_{s \in \mathfrak{S}_L} \hat{\mathcal{P}}_s B A^\dagger \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger \\ &= \frac{1}{4\sqrt{2}} \frac{\Gamma}{J} \sum_{s \in \mathfrak{S}_L} \hat{\mathcal{P}}_s \left[\sum_{m=0}^{\frac{L}{2}-2} \left(|\psi_m^{(\uparrow)}\rangle + |\phi_m^{(\downarrow)}\rangle \right) + \sum_{m=1}^{\frac{L}{2}-1} \left(|\psi_m^{(\downarrow)}\rangle + |\phi_m^{(\uparrow)}\rangle \right) \right] \frac{|\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} + |\downarrow\uparrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}}}{\sqrt{2}} \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger \end{aligned} \quad (5.63)$$

$$\begin{aligned} \tilde{E} &= \sum_{s \in \mathfrak{S}_L} \hat{\mathcal{P}}_s C A^\dagger \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger \\ &= \frac{1}{2\sqrt{2}} \frac{\Gamma}{J} \sum_{s \in \mathfrak{S}_L} \hat{\mathcal{P}}_s \left[|\psi_{\frac{L}{2}-1}^{(\uparrow)}\rangle + |\phi_{\frac{L}{2}-1}^{(\downarrow)}\rangle + |\psi_0^{(\downarrow)}\rangle + |\phi_0^{(\uparrow)}\rangle \right] \frac{|\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} + |\downarrow\uparrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}}}{\sqrt{2}} \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger \end{aligned} \quad (5.64)$$

とおいた。これを2乗してトレースをとると、 $\langle \uparrow\downarrow |^{\otimes \frac{L}{2}} | \psi_m^{(\uparrow\text{or}\downarrow)} \rangle, \langle \downarrow\uparrow |^{\otimes \frac{L}{2}} | \psi_m^{(\uparrow\text{or}\downarrow)} \rangle, \langle \uparrow\downarrow |^{\otimes \frac{L}{2}} | \phi_m^{(\uparrow\text{or}\downarrow)} \rangle, \langle \downarrow\uparrow |^{\otimes \frac{L}{2}} | \phi_m^{(\uparrow\text{or}\downarrow)} \rangle$ が現れる項は全てゼロになるので、結局

$$\text{Tr} [\Pi(\rho)^2] = \frac{1}{\mathcal{N}^4} \frac{1}{(L!)^2} \text{Tr} (\tilde{A}^2 + 2\tilde{B}\tilde{D} + 2\tilde{B}\tilde{E} + 2\tilde{C}\tilde{D} + 2\tilde{C}\tilde{E}) \quad (5.65)$$

が残る。各トレースを計算はやや複雑なので一つ一つ丁寧に計算を追う。

$\text{Tr}(\tilde{A}^2)$ の計算は、

$$\tilde{A} = \frac{1}{2} \sum_{s \in \mathfrak{S}_L} \left(\hat{\mathcal{P}}_s |\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} \langle \uparrow\downarrow|^{\otimes \frac{L}{2}} \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger + \hat{\mathcal{P}}_s |\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} \langle \downarrow\uparrow|^{\otimes \frac{L}{2}} \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger \right) \times 2 \quad (5.66)$$

を用いて、

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\tilde{A}^2) &= \sum_{s, s' \in \mathfrak{S}_L} \text{Tr} \left[\hat{\mathcal{P}}_s |\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} \langle \uparrow\downarrow|^{\otimes \frac{L}{2}} \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger \hat{\mathcal{P}}_{s'} |\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} \langle \uparrow\downarrow|^{\otimes \frac{L}{2}} \hat{\mathcal{P}}_{s'}^\dagger + \hat{\mathcal{P}}_s |\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} \langle \downarrow\uparrow|^{\otimes \frac{L}{2}} \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger \right. \\ &\quad \left. \hat{\mathcal{P}}_{s'} |\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} \langle \downarrow\uparrow|^{\otimes \frac{L}{2}} \hat{\mathcal{P}}_{s'}^\dagger + \hat{\mathcal{P}}_s |\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} \langle \downarrow\uparrow|^{\otimes \frac{L}{2}} \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger \hat{\mathcal{P}}_{s'} |\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} \langle \downarrow\uparrow|^{\otimes \frac{L}{2}} \hat{\mathcal{P}}_{s'}^\dagger + \right. \\ &\quad \left. \hat{\mathcal{P}}_s |\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} \langle \downarrow\uparrow|^{\otimes \frac{L}{2}} \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger \hat{\mathcal{P}}_{s'} |\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} \langle \uparrow\downarrow|^{\otimes \frac{L}{2}} \hat{\mathcal{P}}_{s'}^\dagger + \hat{\mathcal{P}}_s |\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} \langle \downarrow\uparrow|^{\otimes \frac{L}{2}} \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger \hat{\mathcal{P}}_{s'} |\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} \langle \uparrow\downarrow|^{\otimes \frac{L}{2}} \hat{\mathcal{P}}_{s'}^\dagger \right] \\ &= \left(\frac{L}{2} \right)! \left(\frac{L}{2} \right)! L! 2 \end{aligned} \quad (5.67)$$

と実行できる。

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\tilde{B}\tilde{D}) &= \frac{1}{32} \left(\frac{\Gamma}{J} \right)^2 \times \\ &\quad \sum_{s, s' \in \mathfrak{S}_L} \text{Tr} \left[\hat{\mathcal{P}}_s \frac{|\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} + |\downarrow\uparrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}}}{\sqrt{2}} \left\{ \sum_{m=0}^{\frac{L}{2}-2} \left(\langle \psi_m^{(\uparrow)} | + \langle \phi_m^{(\downarrow)} | \right) + \sum_{m=1}^{\frac{L}{2}-1} \left(\langle \psi_m^{(\downarrow)} | + \langle \phi_m^{(\uparrow)} | \right) \right\} \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger \right. \\ &\quad \left. \hat{\mathcal{P}}_{s'} \left\{ \sum_{m=0}^{\frac{L}{2}-2} \left(| \psi_m^{(\uparrow)} \rangle + | \phi_m^{(\downarrow)} \rangle \right) + \sum_{m=1}^{\frac{L}{2}-1} \left(| \psi_m^{(\downarrow)} \rangle + | \phi_m^{(\uparrow)} \rangle \right) \right\} \frac{\langle \uparrow\downarrow|^{\otimes \frac{L}{2}} + \langle \downarrow\uparrow|^{\otimes \frac{L}{2}}}{\sqrt{2}} \hat{\mathcal{P}}_{s'}^\dagger \right] \\ &= \frac{1}{32} \left(\frac{\Gamma}{J} \right)^2 \sum_{s, s' \in \mathfrak{S}_L} \\ &\quad \text{Tr} \left[\hat{\mathcal{P}}_s \frac{|\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} + |\downarrow\uparrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}}}{\sqrt{2}} \left(\sum_{m=0}^{\frac{L}{2}-2} \langle \psi_m^{(\uparrow)} | + \sum_{m=1}^{\frac{L}{2}-1} \langle \phi_m^{(\uparrow)} | \right) \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger \hat{\mathcal{P}}_{s'} \left(\sum_{m=0}^{\frac{L}{2}-2} | \psi_m^{(\uparrow)} \rangle + \sum_{m=1}^{\frac{L}{2}-1} | \phi_m^{(\uparrow)} \rangle \right) \frac{\langle \uparrow\downarrow|^{\otimes \frac{L}{2}} + \langle \downarrow\uparrow|^{\otimes \frac{L}{2}}}{\sqrt{2}} \hat{\mathcal{P}}_{s'}^\dagger \right] + \\ &\quad \text{Tr} \left[\hat{\mathcal{P}}_s \frac{|\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} + |\downarrow\uparrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}}}{\sqrt{2}} \left(\sum_{m=0}^{\frac{L}{2}-2} \langle \phi_m^{(\downarrow)} | + \sum_{m=1}^{\frac{L}{2}-1} \langle \psi_m^{(\downarrow)} | \right) \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger \hat{\mathcal{P}}_{s'} \left(\sum_{m=0}^{\frac{L}{2}-2} | \phi_m^{(\downarrow)} \rangle + \sum_{m=1}^{\frac{L}{2}-1} | \psi_m^{(\downarrow)} \rangle \right) \frac{\langle \uparrow\downarrow|^{\otimes \frac{L}{2}} + \langle \downarrow\uparrow|^{\otimes \frac{L}{2}}}{\sqrt{2}} \hat{\mathcal{P}}_{s'}^\dagger \right] \\ &= \frac{1}{64} \left(\frac{\Gamma}{J} \right)^2 \sum_{s, s' \in \mathfrak{S}_L} \left\{ \text{Tr} \left[\left(\langle \uparrow\downarrow|^{\otimes \frac{L}{2}} + \langle \downarrow\uparrow|^{\otimes \frac{L}{2}} \right) \hat{\mathcal{P}}_{s'}^\dagger \hat{\mathcal{P}}_s \left(|\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} + |\downarrow\uparrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} \right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left(\sum_{m=0}^{\frac{L}{2}-2} \langle \psi_m^{(\uparrow)} | + \sum_{m=1}^{\frac{L}{2}-1} \langle \phi_m^{(\uparrow)} | \right) \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger \hat{\mathcal{P}}_{s'} \left(\sum_{m=0}^{\frac{L}{2}-2} | \psi_m^{(\uparrow)} \rangle + \sum_{m=1}^{\frac{L}{2}-1} | \phi_m^{(\uparrow)} \rangle \right) \right] + \\ &\quad \text{Tr} \left[\left(\langle \uparrow\downarrow|^{\otimes \frac{L}{2}} + \langle \downarrow\uparrow|^{\otimes \frac{L}{2}} \right) \hat{\mathcal{P}}_{s'}^\dagger \hat{\mathcal{P}}_s \left(|\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} + |\downarrow\uparrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} \right) \right. \\ &\quad \left. \left(\sum_{m=0}^{\frac{L}{2}-2} \langle \phi_m^{(\downarrow)} | + \sum_{m=1}^{\frac{L}{2}-1} \langle \psi_m^{(\downarrow)} | \right) \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger \hat{\mathcal{P}}_{s'} \left(\sum_{m=0}^{\frac{L}{2}-2} | \phi_m^{(\downarrow)} \rangle + \sum_{m=1}^{\frac{L}{2}-1} | \psi_m^{(\downarrow)} \rangle \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (5.68)$$

ここで1つ目のトレースを $\mathcal{T}_1$ 、2つ目のトレースを $\mathcal{T}_2$ とおいて更に計算を進めよう。例えば $\mathcal{T}_1$ の中の項の一つ

$$\sum_{s, s' \in \mathfrak{S}_L} \sum_{m, m'=0}^{\frac{L}{2}-2} \text{Tr} \left[\langle \uparrow\downarrow|^{\otimes \frac{L}{2}} \hat{\mathcal{P}}_{s'}^\dagger \hat{\mathcal{P}}_s |\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} \langle \psi_m^{(\uparrow)} | \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger \hat{\mathcal{P}}_{s'} | \psi_{m'}^{(\uparrow)} \rangle \right] \quad (5.69)$$

を考える。この値は $\langle \uparrow\downarrow |^{\otimes \frac{L}{2}} \hat{\mathcal{P}}_{s'}^\dagger \hat{\mathcal{P}}_s | \uparrow\downarrow \rangle^{\otimes \frac{L}{2}} = 1$ かつ $\langle \psi_m^{(\uparrow)} | \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger \hat{\mathcal{P}}_{s'} | \psi_{m'}^{(\uparrow)} \rangle = 1$ となる $\{s, s', m, m'\}$ の組の場合の数であり、この値は

$$\left(\frac{L}{2}\right)! \left(\frac{L}{2} - 1\right)! L! \left(\frac{L}{2} - 1\right)^2 \equiv T \quad (5.70)$$

で与えられる。この議論をもとに、 $\langle \alpha |^{\otimes \frac{L}{2}} \hat{\mathcal{P}}_{s'}^\dagger \hat{\mathcal{P}}_s | \beta \rangle^{\otimes \frac{L}{2}} = 1$ ($\alpha, \beta \in \{\uparrow\downarrow, \downarrow\uparrow\}$) かつ $\langle \gamma_m^{(\uparrow)} | \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger \hat{\mathcal{P}}_{s'} | \delta_{m'}^{(\uparrow)} \rangle = 1$ ($\gamma, \delta \in \{\psi, \phi\}$) となる場合の数は以下ようになる。

表 5.1 $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ による場合の数

$\alpha, \beta \backslash \delta, \gamma$	ψ, ψ	ψ, ϕ	ϕ, ψ	ϕ, ϕ
$\uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow$	T	0	0	T
$\uparrow\downarrow, \downarrow\uparrow$	0	T	T	0
$\downarrow\uparrow, \uparrow\downarrow$	0	T	T	0
$\downarrow\uparrow, \downarrow\uparrow$	T	0	0	T

従って

$$\mathcal{T}_1 = 8T = 8 \left(\frac{L}{2}\right)! \left(\frac{L}{2} - 1\right)! L! \left(\frac{L}{2} - 1\right)^2 \quad (5.71)$$

を得る。

同様に考えると $\mathcal{T}_2$ は $\langle \alpha |^{\otimes \frac{L}{2}} \hat{\mathcal{P}}_{s'}^\dagger \hat{\mathcal{P}}_s | \beta \rangle^{\otimes \frac{L}{2}} = 1$ ($\alpha, \beta \in \{\uparrow\downarrow, \downarrow\uparrow\}$) かつ $\langle \gamma_m^{(\downarrow)} | \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger \hat{\mathcal{P}}_{s'} | \delta_{m'}^{(\downarrow)} \rangle = 1$ ($\gamma, \delta \in \{\psi, \phi\}$) となる場合の数であり、

$$\mathcal{T}_2 = 8T = 8 \left(\frac{L}{2}\right)! \left(\frac{L}{2} - 1\right)! L! \left(\frac{L}{2} - 1\right)^2 \quad (5.72)$$

を得る。従って、

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\tilde{B}\tilde{D}) &= \frac{1}{64} \left(\frac{\Gamma}{J}\right)^2 \cdot 8 \left(\frac{L}{2}\right)! \left(\frac{L}{2} - 1\right)! L! \left(\frac{L}{2} - 1\right)^2 \cdot 2 \\ &= \frac{1}{4} \left(\frac{\Gamma}{J}\right)^2 \left(\frac{L}{2}\right)! \left(\frac{L}{2} - 1\right)! L! \left(\frac{L}{2} - 1\right)^2 \end{aligned} \quad (5.73)$$

と計算できる。

$$\begin{aligned}
\text{Tr}(\tilde{B}\tilde{E}) &= \frac{1}{16} \left(\frac{\Gamma}{J} \right)^2 \times \\
&\sum_{s,s' \in \mathfrak{S}_L} \text{Tr} \left[\hat{\mathcal{P}}_s \frac{|\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} + |\downarrow\uparrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}}}{\sqrt{2}} \left\{ \sum_{m=0}^{\frac{L}{2}-2} \left(\langle \psi_m^{(\uparrow)} | + \langle \phi_m^{(\downarrow)} | \right) + \sum_{m=1}^{\frac{L}{2}-1} \left(\langle \psi_m^{(\downarrow)} | + \langle \phi_m^{(\uparrow)} | \right) \right\} \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger \right. \\
&\quad \left. \hat{\mathcal{P}}_{s'} \left[|\psi_{\frac{L}{2}-1}^{(\uparrow)}\rangle + |\phi_{\frac{L}{2}-1}^{(\downarrow)}\rangle + |\psi_0^{(\downarrow)}\rangle + |\phi_0^{(\uparrow)}\rangle \right] \frac{\langle \uparrow\downarrow |^{\otimes \frac{L}{2}} + \langle \downarrow\uparrow |^{\otimes \frac{L}{2}}}{\sqrt{2}} \hat{\mathcal{P}}_{s'}^\dagger \right] \\
&= \frac{1}{32} \left(\frac{\Gamma}{J} \right)^2 \sum_{s,s' \in \mathfrak{S}_L} \left\{ \text{Tr} \left[\left(\langle \uparrow\downarrow |^{\otimes \frac{L}{2}} + \langle \downarrow\uparrow |^{\otimes \frac{L}{2}} \right) \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger \hat{\mathcal{P}}_s \left(|\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} + |\downarrow\uparrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} \right) \right. \right. \\
&\quad \left. \left(\sum_{m=0}^{\frac{L}{2}-2} \langle \psi_m^{(\uparrow)} | + \sum_{m=1}^{\frac{L}{2}-1} \langle \phi_m^{(\uparrow)} | \right) \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger \hat{\mathcal{P}}_{s'} \left(|\psi_{\frac{L}{2}-1}^{(\uparrow)}\rangle + |\phi_0^{(\uparrow)}\rangle \right) \right] + \\
&\quad \text{Tr} \left[\left(\langle \uparrow\downarrow |^{\otimes \frac{L}{2}} + \langle \downarrow\uparrow |^{\otimes \frac{L}{2}} \right) \hat{\mathcal{P}}_{s'}^\dagger \hat{\mathcal{P}}_s \left(|\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} + |\downarrow\uparrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} \right) \right. \\
&\quad \left. \left(\sum_{m=0}^{\frac{L}{2}-2} \langle \phi_m^{(\downarrow)} | + \sum_{m=1}^{\frac{L}{2}-1} \langle \psi_m^{(\downarrow)} | \right) \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger \hat{\mathcal{P}}_{s'} \left(|\phi_0^{(\downarrow)}\rangle + |\psi_{\frac{L}{2}-1}^{(\downarrow)}\rangle \right) \right] \right\} \\
&= \frac{1}{32} \left(\frac{\Gamma}{J} \right)^2 \cdot \left(\frac{L}{2} \right)! \left(\frac{L}{2} - 1 \right)! L! \left(\frac{L}{2} - 1 \right) \cdot 16 \\
&= \frac{1}{2} \left(\frac{\Gamma}{J} \right)^2 \cdot \left(\frac{L}{2} \right)! \left(\frac{L}{2} - 1 \right)! L! \left(\frac{L}{2} - 1 \right) \tag{5.74}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{Tr}(\tilde{C}\tilde{D}) &= \frac{1}{16} \left(\frac{\Gamma}{J} \right)^2 \times \\
&\sum_{s,s' \in \mathfrak{S}_L} \text{Tr} \left[\hat{\mathcal{P}}_s \frac{|\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} + |\downarrow\uparrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}}}{\sqrt{2}} \left[\langle \psi_{\frac{L}{2}-1}^{(\uparrow)} | + \langle \phi_{\frac{L}{2}-1}^{(\downarrow)} | + \langle \psi_0^{(\downarrow)} | + \langle \phi_0^{(\uparrow)} | \right] \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger \right. \\
&\quad \left. \hat{\mathcal{P}}_{s'} \left\{ \sum_{m=0}^{\frac{L}{2}-2} \left(|\psi_m^{(\uparrow)}\rangle + |\phi_m^{(\downarrow)}\rangle \right) + \sum_{m=1}^{\frac{L}{2}-1} \left(|\psi_m^{(\downarrow)}\rangle + |\phi_m^{(\uparrow)}\rangle \right) \right\} \frac{\langle \uparrow\downarrow |^{\otimes \frac{L}{2}} + \langle \downarrow\uparrow |^{\otimes \frac{L}{2}}}{\sqrt{2}} \hat{\mathcal{P}}_{s'}^\dagger \right] \\
&= \frac{1}{32} \left(\frac{\Gamma}{J} \right)^2 \sum_{s,s' \in \mathfrak{S}_L} \left\{ \text{Tr} \left[\left(\langle \uparrow\downarrow |^{\otimes \frac{L}{2}} + \langle \downarrow\uparrow |^{\otimes \frac{L}{2}} \right) \hat{\mathcal{P}}_{s'}^\dagger \hat{\mathcal{P}}_s \left(|\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} + |\downarrow\uparrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} \right) \right. \right. \\
&\quad \left. \left(\langle \psi_{\frac{L}{2}-1}^{(\uparrow)} | + \langle \phi_0^{(\uparrow)} | \right) \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger \hat{\mathcal{P}}_{s'} \left(\sum_{m=0}^{\frac{L}{2}-2} |\psi_m^{(\uparrow)}\rangle + \sum_{m=1}^{\frac{L}{2}-1} |\phi_m^{(\uparrow)}\rangle \right) \right] + \\
&\quad \text{Tr} \left[\left(\langle \uparrow\downarrow |^{\otimes \frac{L}{2}} + \langle \downarrow\uparrow |^{\otimes \frac{L}{2}} \right) \hat{\mathcal{P}}_{s'}^\dagger \hat{\mathcal{P}}_s \left(|\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} + |\downarrow\uparrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} \right) \right. \\
&\quad \left. \left(\langle \psi_0^{(\downarrow)} | + \langle \phi_{\frac{L}{2}-1}^{(\downarrow)} | \right) \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger \hat{\mathcal{P}}_{s'} \left(\sum_{m=0}^{\frac{L}{2}-2} \langle \phi_m^{(\downarrow)} | + \sum_{m=1}^{\frac{L}{2}-1} \langle \psi_m^{(\downarrow)} | \right) \right] \right\} \\
&= \frac{1}{32} \left(\frac{\Gamma}{J} \right)^2 \cdot \left(\frac{L}{2} \right)! \left(\frac{L}{2} - 1 \right)! L! \left(\frac{L}{2} - 1 \right) \cdot 16 \\
&= \frac{1}{2} \left(\frac{\Gamma}{J} \right)^2 \cdot \left(\frac{L}{2} \right)! \left(\frac{L}{2} - 1 \right)! L! \left(\frac{L}{2} - 1 \right) \tag{5.75}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{Tr}(\tilde{C}\tilde{E}) &= \frac{1}{8} \left(\frac{\Gamma}{J} \right)^2 \times \\
&\sum_{s,s' \in \mathfrak{S}_L} \text{Tr} \left[\hat{\mathcal{P}}_s \frac{|\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} + |\downarrow\uparrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}}}{\sqrt{2}} \left[\langle \psi_{\frac{L}{2}-1}^{(\uparrow)} | + \langle \phi_{\frac{L}{2}-1}^{(\downarrow)} | + \langle \psi_0^{(\downarrow)} | + \langle \phi_0^{(\uparrow)} | \right] \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger \right. \\
&\quad \left. \hat{\mathcal{P}}_{s'} \left[|\psi_{\frac{L}{2}-1}^{(\uparrow)}\rangle + |\phi_{\frac{L}{2}-1}^{(\downarrow)}\rangle + |\psi_0^{(\downarrow)}\rangle + |\phi_0^{(\uparrow)}\rangle \right] \frac{\langle \uparrow\downarrow |^{\otimes \frac{L}{2}} + \langle \downarrow\uparrow |^{\otimes \frac{L}{2}}}{\sqrt{2}} \hat{\mathcal{P}}_{s'}^\dagger \right] \\
&= \frac{1}{16} \left(\frac{\Gamma}{J} \right)^2 \sum_{s,s' \in \mathfrak{S}_L} \left\{ \text{Tr} \left[\left(\langle \uparrow\downarrow |^{\otimes \frac{L}{2}} + \langle \downarrow\uparrow |^{\otimes \frac{L}{2}} \right) \hat{\mathcal{P}}_{s'}^\dagger \hat{\mathcal{P}}_s \left(|\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} + |\downarrow\uparrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} \right) \right. \right. \\
&\quad \left. \left(\langle \psi_{\frac{L}{2}-1}^{(\uparrow)} | + \langle \phi_0^{(\uparrow)} | \right) \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger \hat{\mathcal{P}}_{s'} \left(|\psi_{\frac{L}{2}-1}^{(\uparrow)}\rangle + |\phi_0^{(\uparrow)}\rangle \right) \right] + \\
&\quad \left. \text{Tr} \left[\left(\langle \uparrow\downarrow |^{\otimes \frac{L}{2}} + \langle \downarrow\uparrow |^{\otimes \frac{L}{2}} \right) \hat{\mathcal{P}}_{s'}^\dagger \hat{\mathcal{P}}_s \left(|\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} + |\downarrow\uparrow\rangle^{\otimes \frac{L}{2}} \right) \right. \right. \\
&\quad \left. \left(\langle \psi_0^{(\downarrow)} | + \langle \phi_{\frac{L}{2}-1}^{(\downarrow)} | \right) \hat{\mathcal{P}}_s^\dagger \hat{\mathcal{P}}_{s'} \left(|\psi_0^{(\downarrow)}\rangle + |\phi_{\frac{L}{2}-1}^{(\downarrow)}\rangle \right) \right] \right\} \\
&= \frac{1}{16} \left(\frac{\Gamma}{J} \right)^2 \cdot \left(\frac{L}{2} \right)! \left(\frac{L}{2} - 1 \right)! L! \cdot 16 \\
&= \left(\frac{\Gamma}{J} \right)^2 \cdot \left(\frac{L}{2} \right)! \left(\frac{L}{2} - 1 \right)! L!
\end{aligned} \tag{5.76}$$

さて、これで PIDM を計算するパーツが出そろった。結局

$$\begin{aligned}
\text{Tr} [\Pi(\rho)^2] &= \frac{1}{\mathcal{N}^4} \frac{1}{(L!)^2} \left[\left(\frac{L}{2} \right)! \left(\frac{L}{2} \right)! L! 2 + 2 \cdot \frac{1}{4} \left(\frac{\Gamma}{J} \right)^2 \left(\frac{L}{2} \right)! \left(\frac{L}{2} - 1 \right)! L! \left(\frac{L}{2} - 1 \right)^2 + \right. \\
&\quad \left. 2 \cdot \frac{1}{2} \left(\frac{\Gamma}{J} \right)^2 \left(\frac{L}{2} \right)! \left(\frac{L}{2} - 1 \right)! L! \left(\frac{L}{2} - 1 \right) + 2 \cdot \frac{1}{2} \left(\frac{\Gamma}{J} \right)^2 \left(\frac{L}{2} \right)! \left(\frac{L}{2} - 1 \right)! L! \left(\frac{L}{2} - 1 \right) \right. \\
&\quad \left. 2 \cdot \left(\frac{\Gamma}{J} \right)^2 \left(\frac{L}{2} \right)! \left(\frac{L}{2} - 1 \right)! L! \right] \\
&= \frac{1}{\mathcal{N}^4} \left[\frac{2 \left(\frac{L}{2} \right)! \left(\frac{L}{2} \right)!}{L!} + \left(\frac{\Gamma}{J} \right)^2 \frac{\left(\frac{L}{2} \right)! \left(\frac{L}{2} - 1 \right)!}{L!} \left(\frac{L^2}{8} + \frac{L}{2} + \frac{1}{2} \right) \right] \\
&= \left[1 + \left(\frac{\Gamma}{J} \right)^2 \left(\frac{L}{16} + \frac{3}{8} \right) \right]^{-2} \left[\frac{2 \left(\frac{L}{2} \right)! \left(\frac{L}{2} \right)!}{L!} + \left(\frac{\Gamma}{J} \right)^2 \frac{\left(\frac{L}{2} \right)! \left(\frac{L}{2} - 1 \right)!}{L!} \left(\frac{L^2}{8} + \frac{L}{2} + \frac{1}{2} \right) \right] \\
&\simeq \left[1 - \left(\frac{\Gamma}{J} \right)^2 \left(\frac{L}{8} + \frac{3}{4} \right) \right] \left[\frac{2 \left(\frac{L}{2} \right)! \left(\frac{L}{2} \right)!}{L!} + \left(\frac{\Gamma}{J} \right)^2 \frac{\left(\frac{L}{2} \right)! \left(\frac{L}{2} - 1 \right)!}{L!} \left(\frac{L^2}{8} + \frac{L}{2} + \frac{1}{2} \right) \right] \\
&= \frac{2 \left(\frac{L}{2} \right)! \left(\frac{L}{2} \right)!}{L!} + \left(\frac{\Gamma}{J} \right)^2 \left[-\frac{2 \left(\frac{L}{2} \right)! \left(\frac{L}{2} \right)!}{L!} \left(\frac{L}{8} + \frac{3}{4} \right) + \frac{\left(\frac{L}{2} \right)! \left(\frac{L}{2} - 1 \right)!}{L!} \left(\frac{L^2}{8} + \frac{L}{2} + \frac{1}{2} \right) \right]
\end{aligned} \tag{5.77}$$

よって PIDM の Rényi エントロピーは

$$\begin{aligned}
S_2(\Pi(\rho)) &= -\log \left[\frac{2 \left(\frac{L}{2} \right)! \left(\frac{L}{2} \right)!}{L!} + \left(\frac{\Gamma}{J} \right)^2 \left[-\frac{2 \left(\frac{L}{2} \right)! \left(\frac{L}{2} \right)!}{L!} \left(\frac{L}{8} + \frac{3}{4} \right) + \frac{\left(\frac{L}{2} \right)! \left(\frac{L}{2} - 1 \right)!}{L!} \left(\frac{L^2}{8} + \frac{L}{2} + \frac{1}{2} \right) \right] \right] \\
&\simeq L \log 2 - \frac{1}{2} \log L - \log \sqrt{2\pi} - \left(\frac{\Gamma}{J} \right)^2 \left(\frac{1}{2L} + \frac{1}{4} \right)
\end{aligned} \tag{5.78}$$

と計算できる。

5.1.7 PIDM の Rényi エントロピーのサイト数依存性

物理量のスケーリング則 (scaling law) は、その物理量が示量性を持つのか示強性を持つのかといった重要な情報を与える。ここでは $S_2(\Pi(\rho))$ のスケーリング則について注目する。

強磁性相互作用の場合

図 5.3 に関して縦軸を $S_2(\Pi(\rho))$ 、横軸を L としてプロットすると図 5.5 を得た。

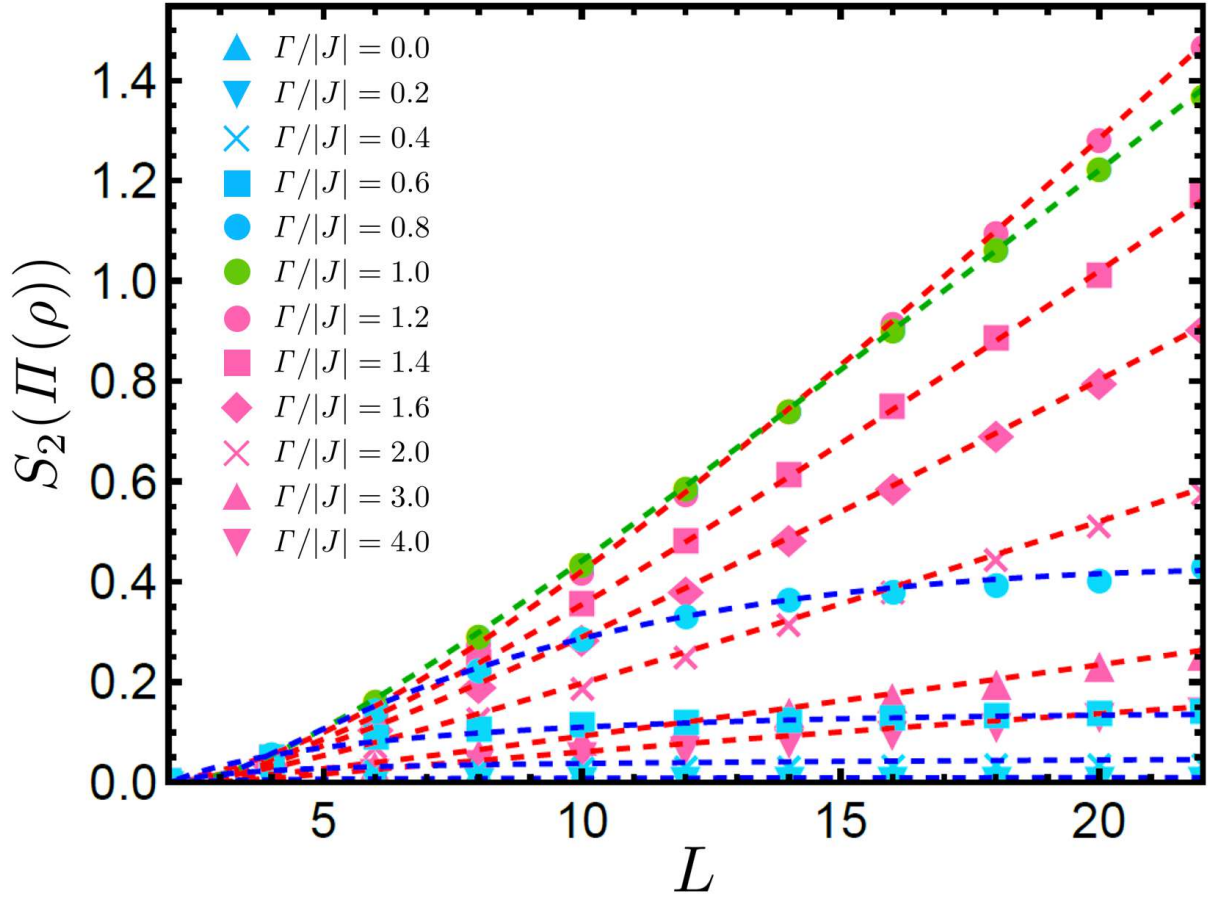


図 5.5 強磁性相互作用する横磁場 Ising 鎖における $S_2(\Pi(\rho))$ vs. L

図 5.5 を見ると、 L を大きくすると FM 相 (青いプロット) では $S_2(\Pi(\rho))$ はある値に収束し、PM 相 (赤いプロット) では線形に発散するような定性的な振舞いの違いが見られた。また量子臨界点 (緑のプロット) では常磁性相同様の線形的な発散が見られるが、その傾きがその中でも最大に近いことがわかる。傾きが最大ではないのは図 5.3 においてピークが量子臨界点からわずかにずれていることに由来すると考えられる。

具体的なスケーリング則を調べるため、このプロットデータを

$$f_{S_2}(L) = p_1 L + p_2 + \frac{p_3}{L} + p_4 \log L \quad (5.79)$$

をフィッティング関数としてフィッティングパラメータ p_1, p_2, p_3, p_4 の値を求めた。 $f_{S_2}(L)$ の関数形は高磁場領域における $S_2(\Pi(\rho))$ を二次の摂動論を用いて計算したときに現れる関数の形によって採用した。図 5.5 中のはフィッティングの結果である。フィッティングの結果を図 5.6 に示す。図 5.6 中の青色、赤色の点線はそれぞれ低磁場、高磁場領域にお

ける二次摂動による解析計算の結果

$$\text{低磁場領域 (FM)} : S_2(\Pi(\rho)) = \left(\frac{\Gamma}{|J|} \right)^2 \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{2L} \right) \quad (5.80)$$

$$\text{高磁場領域} : S_2(\Pi(\rho)) = \frac{1}{8} \left(\frac{|J|}{\Gamma} \right)^2 L - \frac{3}{8} \left(\frac{|J|}{\Gamma} \right)^2 \quad (5.81)$$

によるものであり、得られたフィッティングパラメータとコンシステントな結果であることが分かる。FM 相では $p_1 = 0, p_4 = 0$ であり、 p_2, p_3 は Γ の値によって有限の値になることが分かる。熱力学的極限では p_3 の項は無視できるので、 p_2 の項のみが残ると考えられる。PM 相では p_1 も有限の値を取ることから、熱力学的極限では p_1, p_2 の項が残ると考えられる。すなわち、熱力学極限では

$$S_2(\Pi(\rho)) = \begin{cases} \mathcal{O}(1) & \text{(FM)} \\ p_1 L + \mathcal{O}(1) & \text{(PM)} \end{cases} \quad (5.82)$$

のようにスケールすることが考えられる。

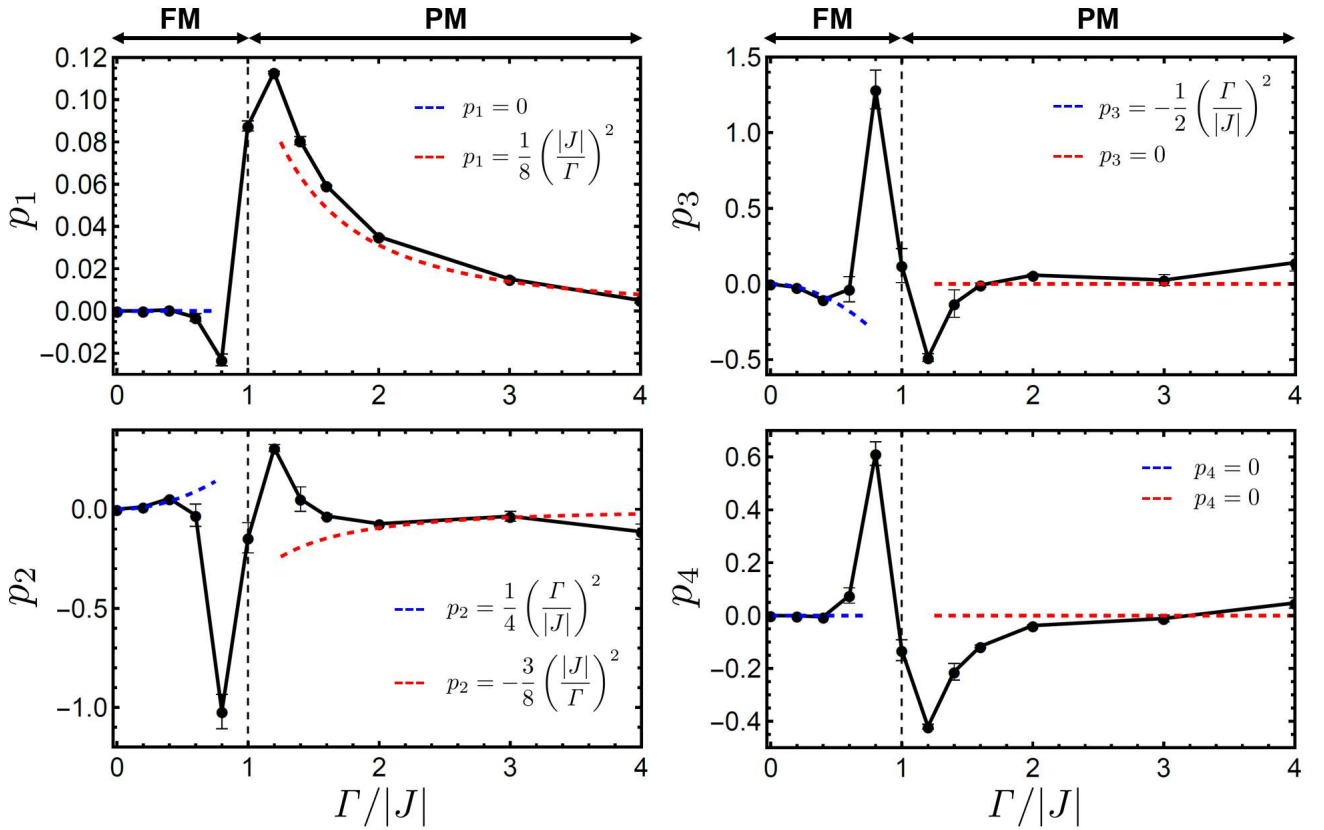
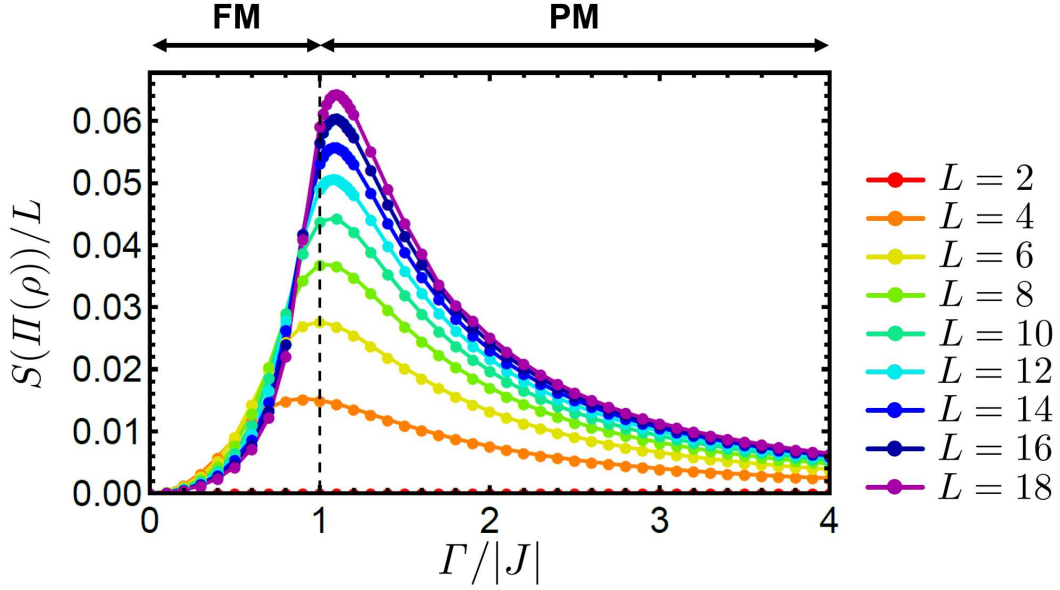


図 5.6 強磁性相互作用する横磁場 Ising 鎖におけるフィッティングパラメータ p_1, p_2, p_3, p_4 の値

本研究で得た図 5.3 ではピークの頂点が QCP からずれている。一方 QCP では、1 サイトのエンタングルメントエントロピーや次近接 2 サイトのコンカレンス^{*6}が最大値を取ることが知られている [97]。 $S_2(\Pi(\rho))$ の頂点が QCP 直上になる理由はないが、エンタングルメントが複雑に存在する状態では対称化操作による空間構造の情報損失が大きいと考えられるため、同様に QCP でピークを取る可能性はある。そこで縦軸をサイト数 L で割ってプロットすると図 5.7 を得た。このようにプロットすると、発散の速さが最大な項が $\mathcal{O}(L)$ の関数は L を上げてても発散しないので、熱力

^{*6} 混合状態のエンタングルメントを定量化するエンタングルメント測度として、生成エンタングルメント (entanglement of formation) [38] が挙げられる。生成エンタングルメントは一般に計算不可能であるが、2qubit 系であればコンカレンスと呼ばれる量を用いて厳密に計算することが可能である [98]。コンカレンスは $C(\rho) = \max(0, \lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 - \lambda_4)$ で定義される量で、セパラブル状態で $C = 0$ 、最大エンタングル状態で $C = 1$ を取る。但し、 $\{\lambda_i\}$ ($\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3 \geq \lambda_4$) は、行列 $\sqrt{\rho} \tilde{\rho} \sqrt{\rho}$ ($\tilde{\rho} = (Y \otimes Y) \rho (Y \otimes Y)$) の固有値である。

図 5.7 強磁性相互作用する横磁場 Ising 鎖における $S_2(\Pi(\rho))/L$ の $\Gamma/|J|$ 依存性

学極限での振る舞いが見やすくなる。図 5.7 を見るとピークの位置は少しずつ左に動いているが、少なくとも $L = 18$ までのプロットでは $S_2(\Pi(\rho))/L$ の値はまだ収束しておらず、 L をより大きくしたときにピークの位置が QCP に近づくかどうかは断定できなかった。 L を大きくしたときにピークの頂点が QCP に近づく可能性は残っている。

反強磁性相互作用の場合

図 5.4 に関して PIDM の Rényi エントロピーのサイト数依存性を図 5.8 に示す。 L を大きくしていくと、反強磁性相（青いプロット）も常磁性相（赤いプロット）も線形に発散するような振る舞いが見られた。こちらもスケーリング則を調べるため、フィッティング関数 $f_{S_2}(L)$ を用いてフィッティングした。フィッティングパラメータ p_1, p_2, p_3, p_4 の値を図 5.9 に示す。二次摂動による解析計算（青色・赤色の点線）は

$$\text{低磁場領域 (AFM): } S_2(\Pi(\rho)) = L \log 2 - \frac{1}{2} \log L - \log \sqrt{2\pi} - \left(\frac{\Gamma}{J}\right)^2 \left(\frac{1}{2L} + \frac{1}{4}\right) \quad (5.83)$$

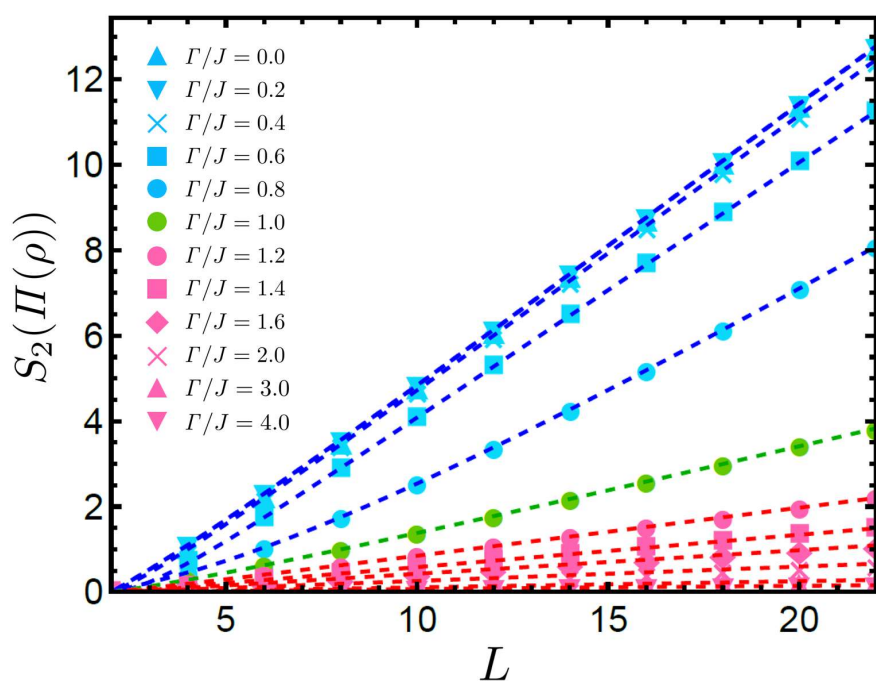
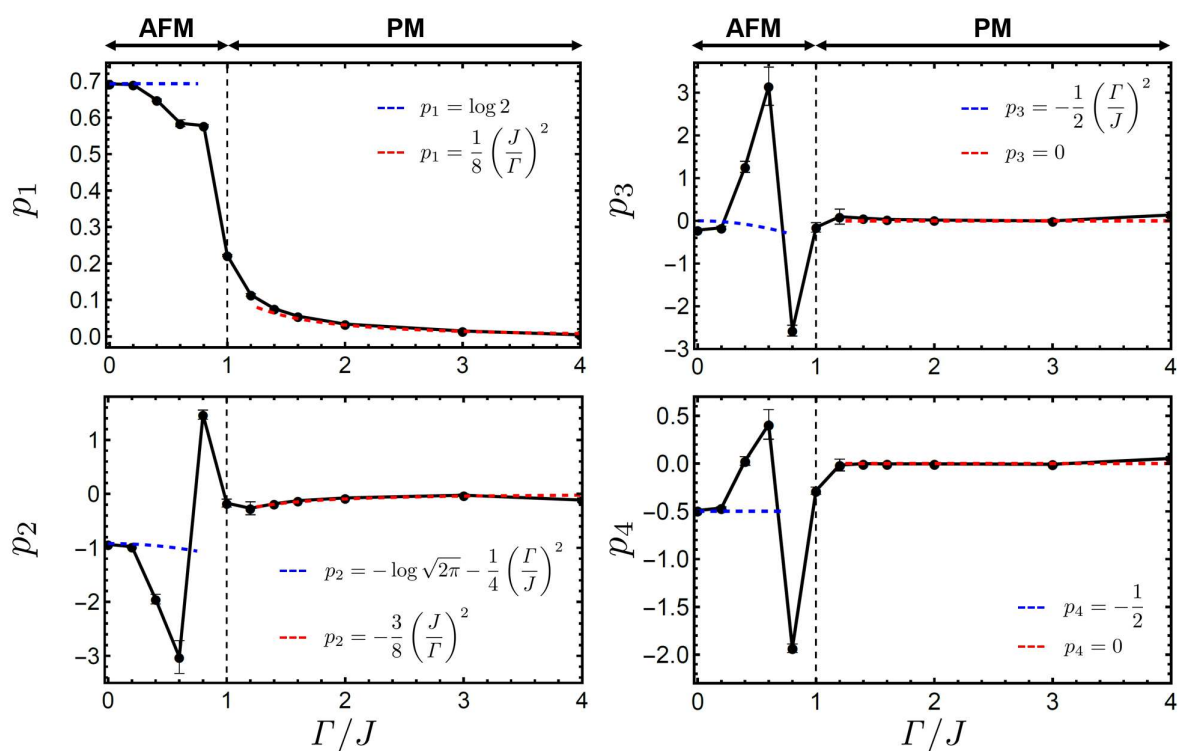
$$\text{高磁場領域: } S_2(\Pi(\rho)) = \frac{1}{8} \left(\frac{J}{\Gamma}\right)^2 L - \frac{3}{8} \left(\frac{J}{\Gamma}\right)^2 \quad (5.84)$$

によるものであり、こちらもフィッティングパラメータとコンシステントな結果であることが分かる。AFM 相ではすべてのフィッティングパラメータが有限に表れており、熱力学的極限では p_1, p_2, p_4 の項が残ると考えられる。PM 相は強磁性相互作用の場合と同様、 p_1, p_2 の項が残ると考えられる。すなわち考えられるスケーリング則は

$$\begin{cases} p_1 L + p_4 \log L + \mathcal{O}(1) & (\text{AFM}) \\ p_1 L + \mathcal{O}(1) & (\text{PM}) \end{cases} \quad (5.85)$$

である。

強磁性相互作用の場合にピークが QCP 近傍に現れたように、反強磁性相互作用の場合でも QCP 近傍に現れる特徴的なものは何だろうか。図 5.4 を見ると $\Gamma/J \simeq 0.8$ で変曲点が存在しそうである。そこで縦軸を Γ/J で数値微分すると、図 5.10(a) のように QCP 近傍にピーク構造が現れた。このピークの位置の変化を見やすくするため数値微分の値をサイト数 L で割った時のプロットを 5.10(b) に示す。ピークの頂点は L を増やしていくと少しずつ右にずれていることが分かる。こちらも強磁性相互作用の場合と同様に $L \leq 18$ では値は収束しておらず、 L を更に大きくしていくとピークの位置もまだまだ変化し、熱力学極限で QCP 直上に移動する可能性がある。

図 5.8 反強磁性相互作用する横磁場 Ising 鎖における $S_2(\Pi(\rho))$ vs. L 図 5.9 反強磁性相互作用する横磁場 Ising 鎖におけるフィッティングパラメータ p_1, p_2, p_3, p_4 の値

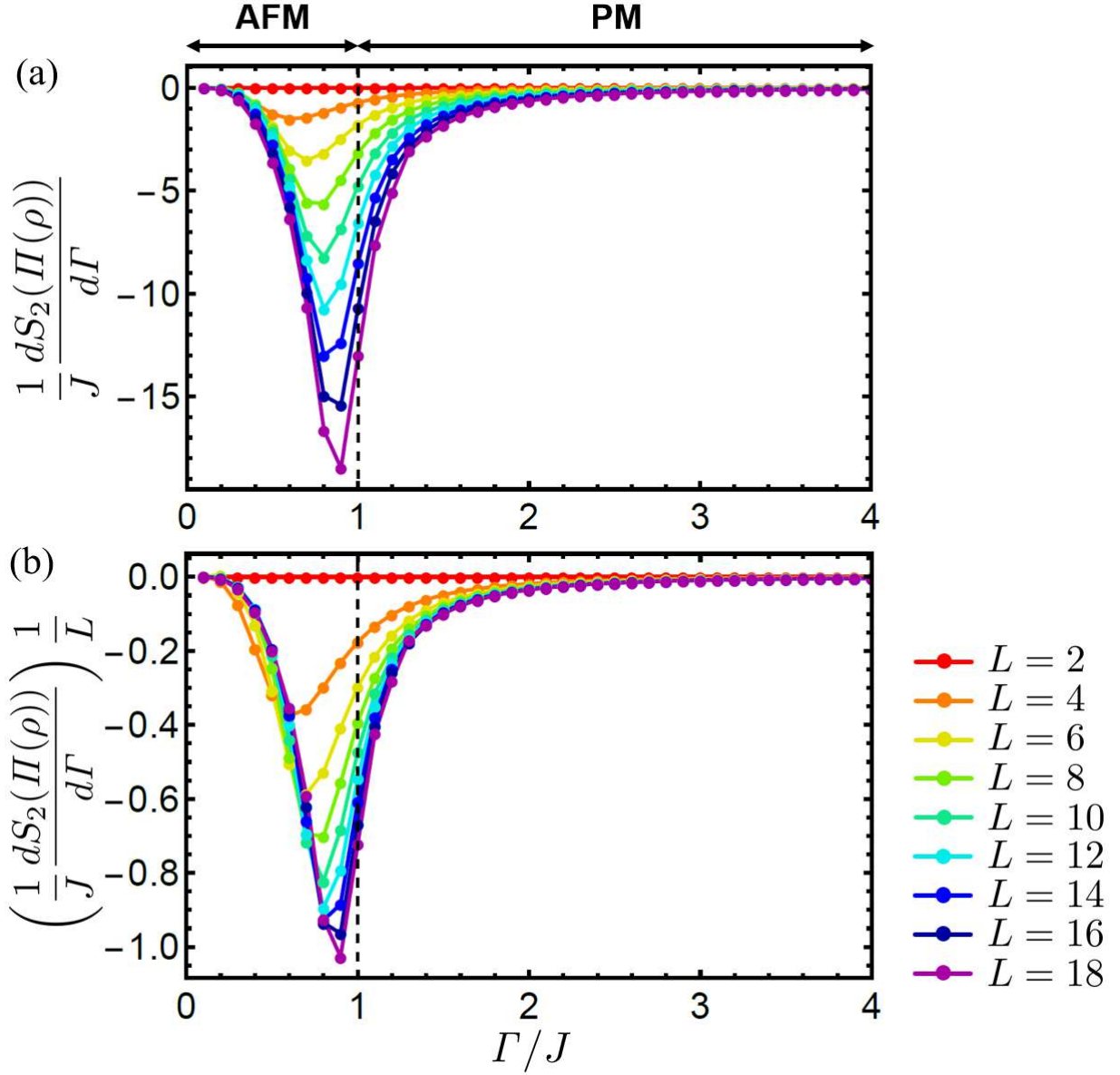


図 5.10 反強磁性相互作用する横磁場 Ising 鎖における (a) $S_2(\Pi(\rho))$ の Γ/J に関する数値微分と (b) 数値微分を L で割った値

5.2 XXZ 鎖

5.2.1 ハミルトニアンと基底状態

横磁場 Ising 鎖での解析を通し、PIDM の Rényi エントロピーは対称化操作によって空間構造の情報捨てることで生じる不確かさを定量化することで元の状態が保持する空間構造の情報を定量化すること、また FM 相、AFM 相、PM 相によってそのスケーリング則が変化するという知見を得た。本研究ではより広い知見を得るために、横磁場 XXZ 鎖における解析も行った。ハミルトニアンは

$$\hat{\mathcal{H}} = J \sum_{i=1}^{L-1} \left(\hat{X}_i \hat{X}_{i+1} + \hat{Y}_i \hat{Y}_{i+1} + \Delta \hat{Z}_i \hat{Z}_{i+1} \right), \quad (5.86)$$

で与えられる。 $\hat{X}_i, \hat{Y}_i, \hat{Z}_i$ はそれぞれサイト i に作用する Pauli 行列を表す。 J は交換相互作用であり、 $J < 0, J > 0$ のときそれぞれ強磁性的、反強磁性的の相互作用をする。 Δ はスピン間相互作用の異方性を表す無次元パラメータで

ある。 $\Delta = 1$ では異方性の無い Heisenberg モデル、 $\Delta = 1$ では容易面異方性のある XY モデルのような振る舞い、 $\Delta \gg 1$ では容易軸異方性のある Ising モデルのような振る舞いをする。本モデルでも L は偶数とし、OBC を課す。

交換相互作用が強磁性的であるとき、 $\Delta \geq 1$ では z 軸方向の強磁性相互作用の寄与が比較的大きくなるため、系は隣接するスピンの z 軸方向に同じ方向を向いた強磁性相 (FM) をとる。一方、 $0 \leq \Delta < 1$ では x, y 軸方向の強磁性相互作用の寄与が比較的大きくなるため、スピンは $x-y$ 平面に向いたほうがエネルギーを得できる。このとき系は朝永-Luttinger 液体 (Tomonaga-Luttinger liquid, TLL) [93, 94, 95] と呼ばれる状態であり、強磁性的なしかし準長距離秩序 (quasi-long-range order) を持つ相が実現する (以降 TLL_{FM} と書くことにする)。準長距離秩序とは、相関関数が距離の冪で減衰する磁気秩序である。同様に反強磁性的相互作用の場合は、 $\Delta \geq 1$ では隣接スピンの z 軸方向に反平行を向いた反強磁性相 (AFM) をとり、 $0 < \Delta < 1$ では反強磁性的な TLL となる (以降 TLL_{AFM} と書くことにする)。

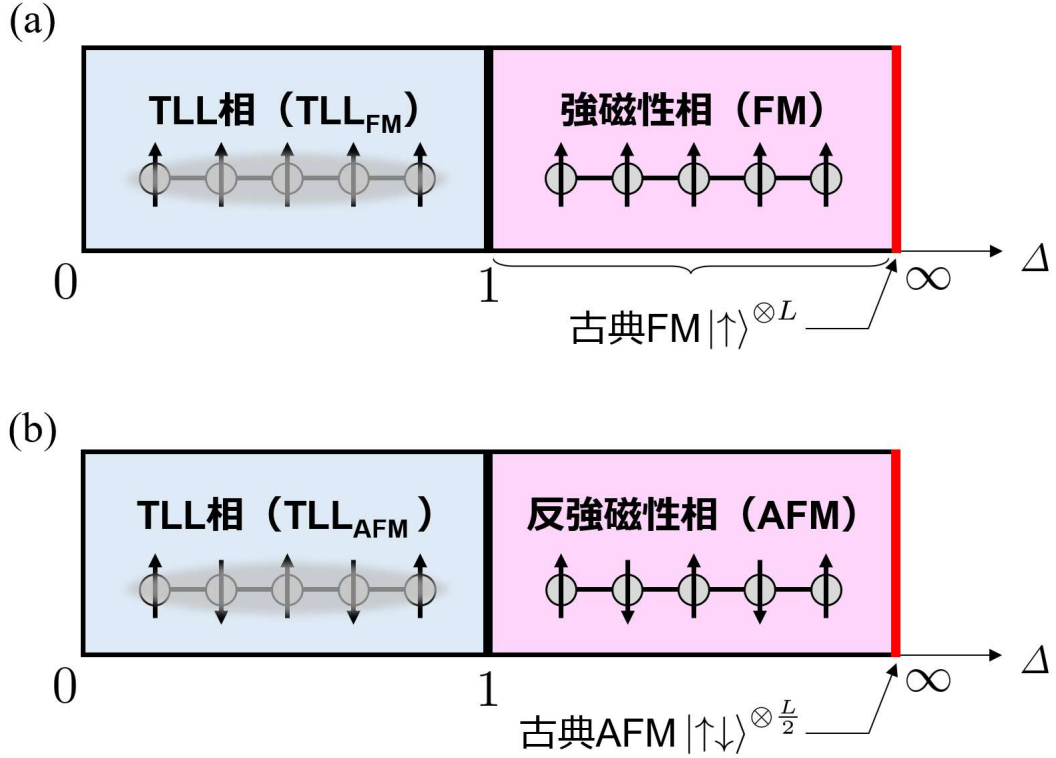


図 5.11 (a) 強磁性相互作用及び (b) 反強磁性相互作用する横磁場 Ising 鎖における、横磁場の強さに対する基底状態相図

5.2.2 容易軸異方性パラメータに対する PIDM の Rényi エントロピーの振舞い

強磁性相互作用の場合

強磁性相互作用する XXZ 鎖における基底状態に対する PIDM の純粋度 $P(\Pi(\rho))$ 及び Rényi エントロピー $S_2(\Pi(\rho)) = -\log P(\Pi(\rho))$ を図 5.12 に示す^{*7}。計算コストの都合上、基底状態を表現する MPS の最大ボンド次元 n $\chi_{\max}$ は $L = 10$ までは $\chi_{\max} = 2^{\frac{L}{2}}$ (最大値)、 $L = 12, 14, 16, 18$ は $\chi_{\max} = 10, 10, 10, 10$ として計算した。容易軸異方性が強い領域 ($\Delta \geq 1$) では、 $P(\Pi(\rho))$ は常に 1、 $S_2(\Pi(\rho))$ は常に 0 となっている。この領域では各サイトのスピンの同じ方向を向いており、いかなる置換に対しても不変であるためこの振る舞いは自明である。一方、容易面異方性が強い領域 ($0 \leq \Delta < 1$) では $P(\Pi(\rho))$ は 1 より小さな値をとり、 $S_2(\Pi(\rho))$ は有限の値をとっている。 Δ が小さくなる程 $S_2(\Pi(\rho))$ は大きな値をとり、各システムサイズで $\Delta = 0$ で最大値をとっている。この領域では Δ が小さくな

^{*7} 横磁場 Ising 模型のようにグローバルなスピン回転対称性が無く XXZ 模型では D_L 個のランダムベクトルに対して個別に期待値を計算しているため、 $L = 18$ までの結果となっている。

る程、ハミルトニアンは一次元 XY モデルに近くなるため準長距離秩序が強くなる。この準長距離秩序は対称化操作によってその空間構造の情報が失われるため、 $S_2(\Pi(\rho))$ は Δ の減少に伴い大きくなっていると考えられる。

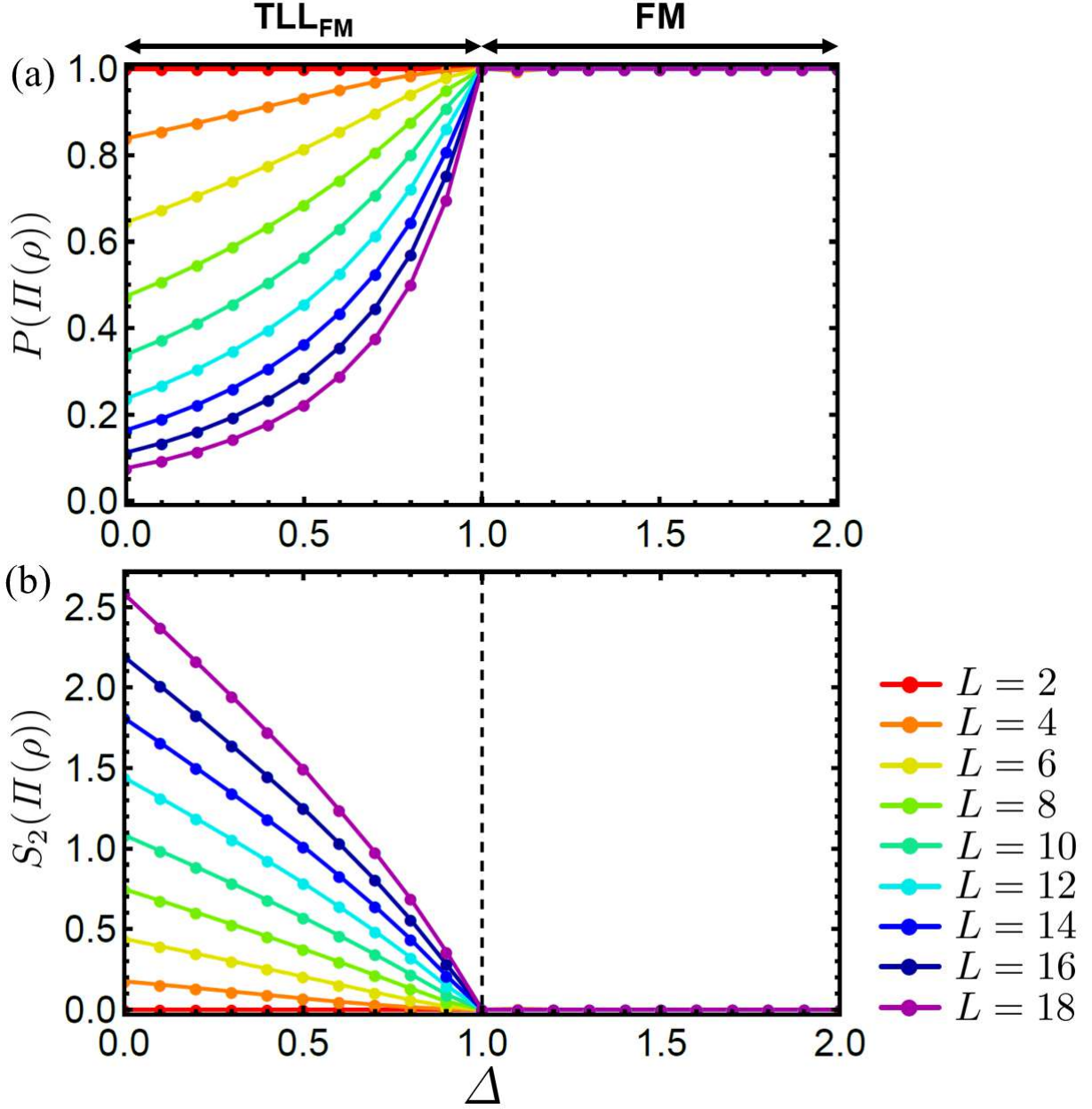


図 5.12 強磁性相互作用する XXZ 鎖における (a) $P(\Pi(\rho))$ 及び (b) $S_2(\Pi(\rho))$ の Δ 依存性

反強磁性相互作用の場合

反強磁性相互作用する XXZ 鎖における基底状態に対する PIDM の純粋度 $P(\Pi(\rho))$ 及び Rényi エントロピー $S_2(\Pi(\rho))$ を図 5.13 に示す。この場合は Δ の全領域で、 $S_2(\Pi(\rho))$ は有限の値をとっている。 Δ を十分大きくすると $S_2(\Pi(\rho))$ の値は $L \log 2 - \frac{1}{2} \log L - \log \sqrt{2\pi}$ に近づいている。この値は横磁場 Ising モデルにおけるゼロ磁場極限での値であり、モデルが Ising-like であることとコンシステントな結果である。非自明な結果としては、量子相転移点直上ですべての L で $S_2(\Pi(\rho))$ が極小値を取ることを見つけた。例として $L = 4, 14$ 量子相転移点近傍での $S_2(\Pi(\rho))$ の振る舞いの拡大図を 5.14 に示す。この極小点の出現の理由は明らかではないが、 $S_2(\Pi(\rho))$ は XXZ 鎖の相転移点をはっきりと反映する量である知見を得た。

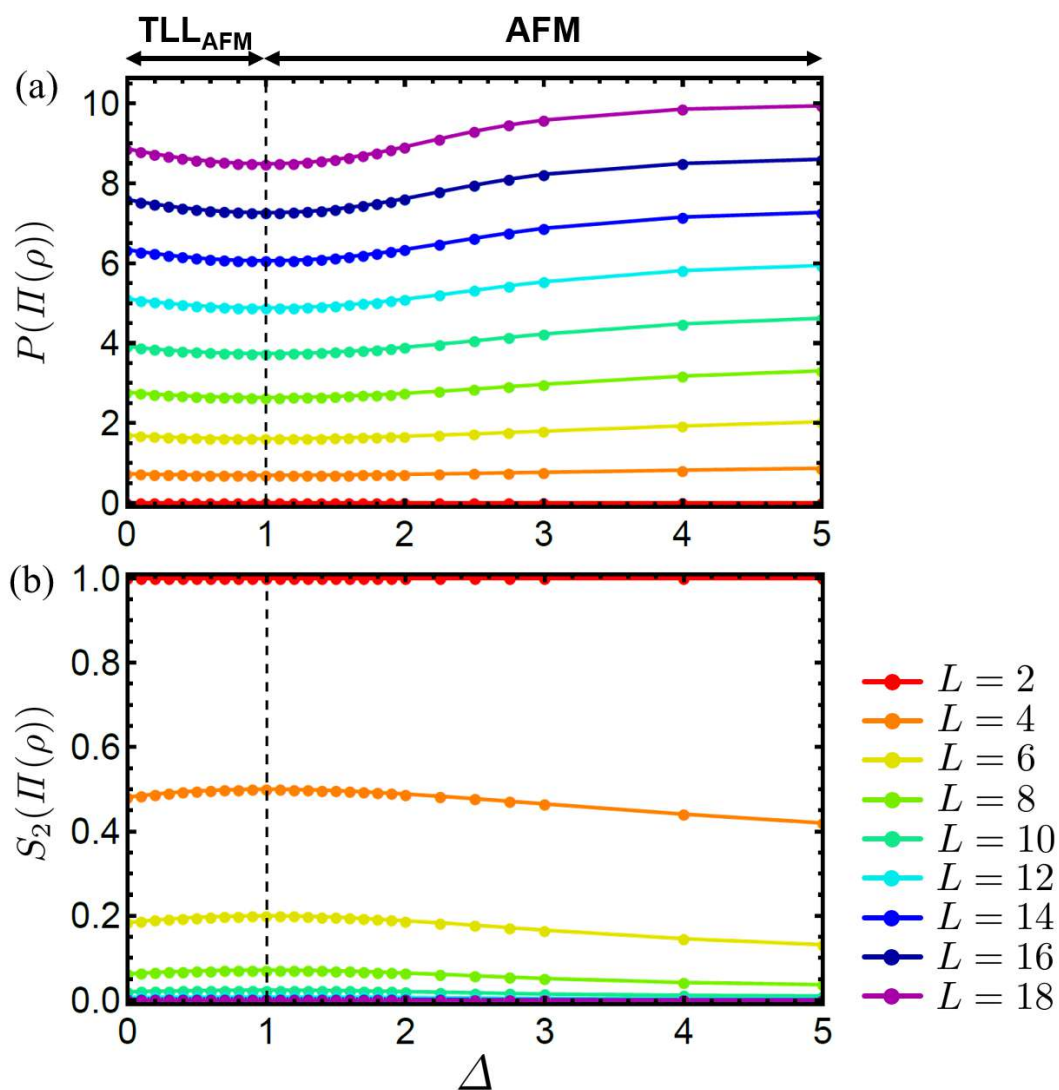
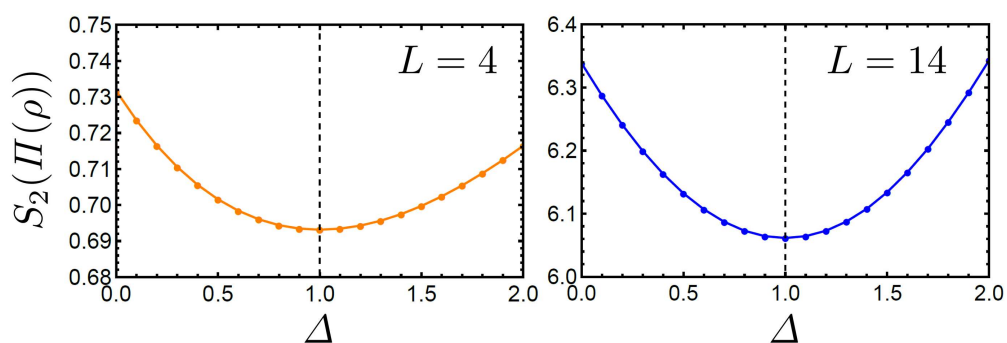
図 5.13 反強磁性相互作用する横磁場 Ising 鎖における $S_2(\Pi(\rho))$ vs. Δ 

図 5.14 図 5.13(b) の相境界近傍の拡大図

5.2.3 PIDM の Rényi エントロピーのサイト数依存性

強磁性相互作用の場合

横磁場 Ising 鎖と同様に、図 5.12, 5.13 に関して、縦軸に $S_2(\Pi(\rho))$ 、横軸に L を取ってプロットすると図 5.15 を得た。 L を大きくしていくと、 TLL_{FM} 相（青いプロット）は線形に発散するような振る舞いが見られた。FM 相（赤いプロット）は自明に常に 0 である。横磁場 Ising 鎖とのスケーリング則の差異を見るため、フィッティング関数を

$$f_{S_2}(L) = p_1 L + p_2 + \frac{p_3}{L} + p_4 \log L \quad (5.87)$$

$$g_{S_2}(L) = p_1 L + p_2 + \frac{p_3}{L} \quad (5.88)$$

の 2 通りでフィッティングした。フィッティングパラメータ p_1, p_2, p_3, p_4 の値を図 5.16 に示す。赤色、青色のプロットはそれぞれ $f_{S_2}(L), g_{S_2}(L)$ による結果である。FM 相では自明にすべてのフィッティングパラメータが 0 であり、 $S_2(\Pi(\rho))$ はサイト数 L に依らず一定の値を取ることがわかる。一方、 TLL_{FM} 相では、フィッティングパラメータの値が滑らかに変化しており、FM 相へ自然な形で繋がっていることから、 $f_{S_2}(L)$ よりも $g_{S_2}(L)$ の方がよくスケーリング則を記述できていると考えられる。 p_3 の項は熱力学的極限で 0 に収束すると考え、スケーリング則は

$$S_2(\Pi(\rho)) = \begin{cases} \mathcal{O}(1) & (\text{FM}) \\ p_1 L + \mathcal{O}(1) & (\text{TLL}_{\text{FM}}) \end{cases} \quad (5.89)$$

となることが考えられる。図 5.12 中の点線は $g_{S_2}(L)$ によってフィッティングした結果である。

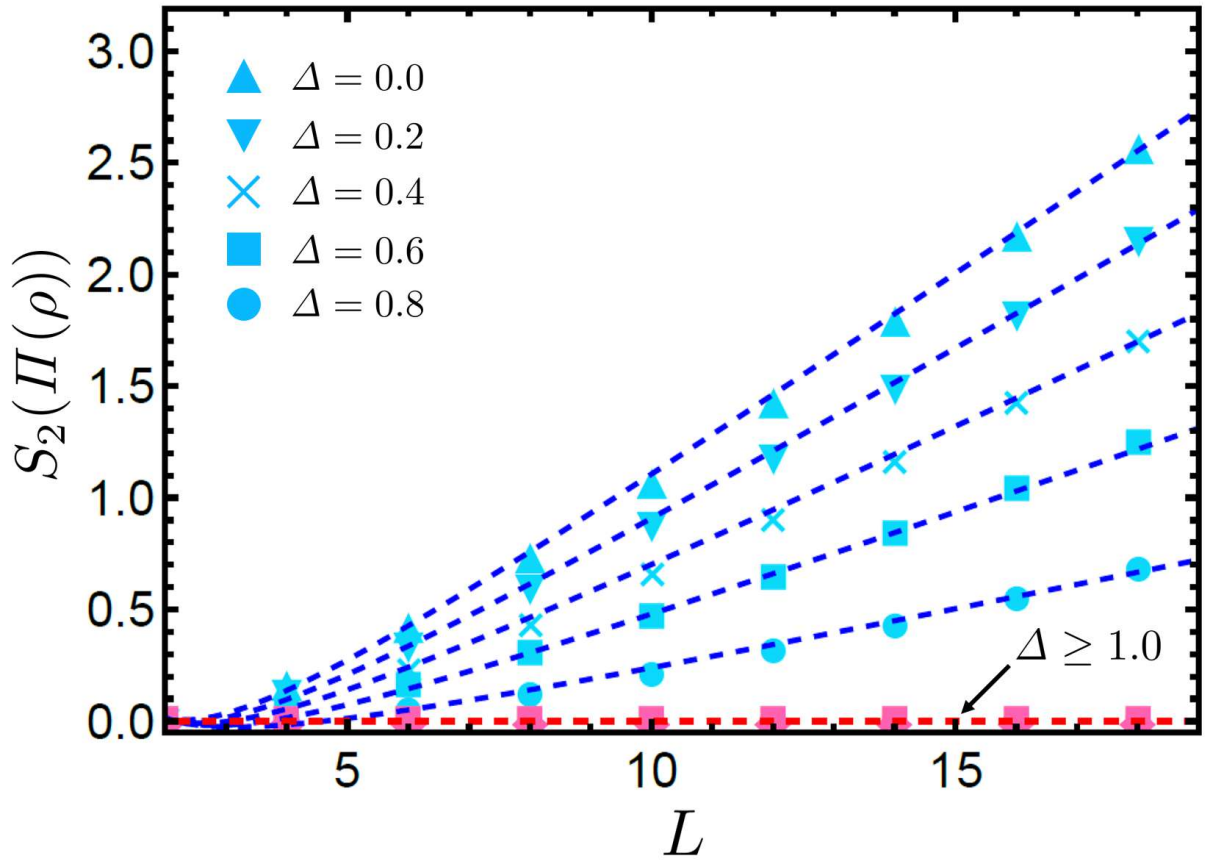


図 5.15 強磁性相互作用する XXZ 鎖における $S_2(\Pi(\rho))$ vs. L

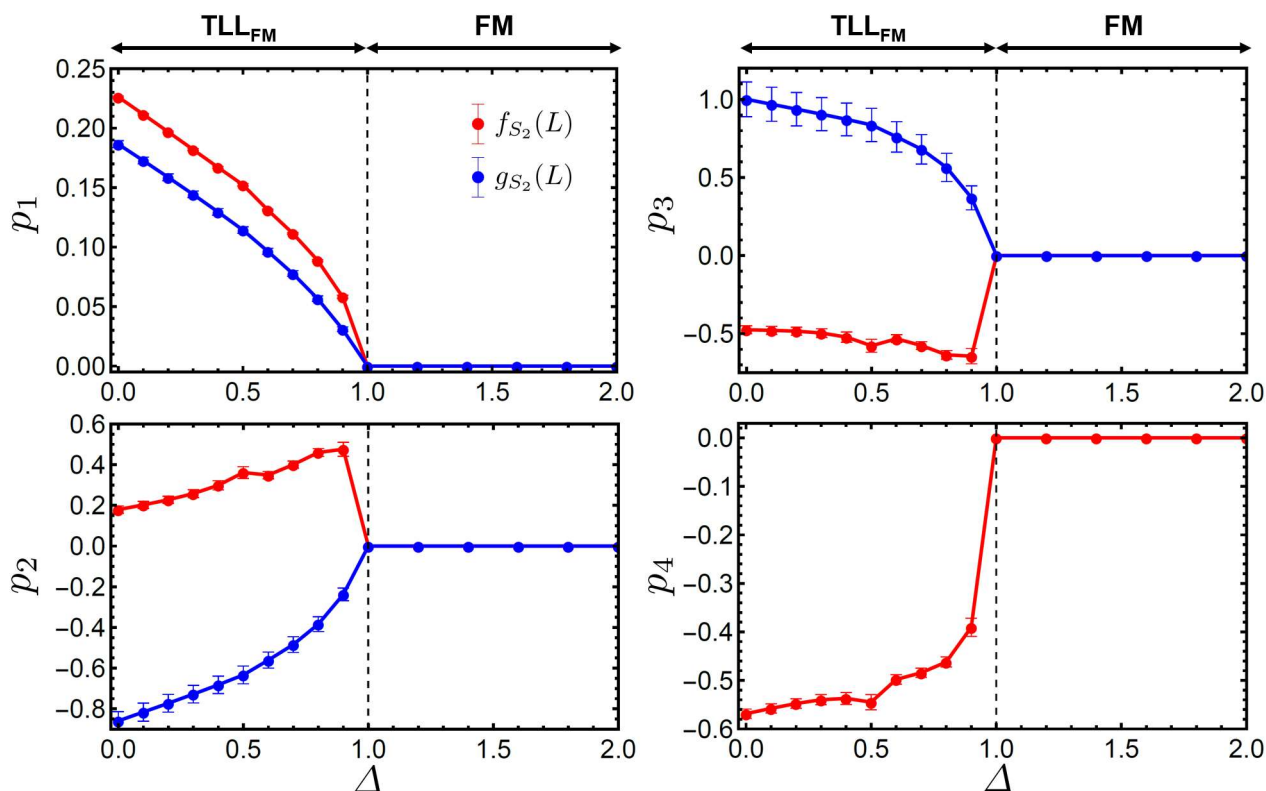


図 5.16 強磁性相互作用する XXZ 鎖におけるフィッティングパラメータ p_1, p_2, p_3, p_4 の値。赤色、青色のプロットはそれぞれ $f_{S_2}(L), g_{S_2}(L)$ によって得られたデータである。

反強磁性相互作用の場合

反強磁性相互作用の場合における PIDM の Rényi エントロピーのサイト数依存性を図 5.17 に示す。 L を大きくしていくと、TLL_{AFM} 相 (青いプロット) も AFM 相 (赤いプロット) もおおそ同じような関数形で発散する振る舞いが見られた。

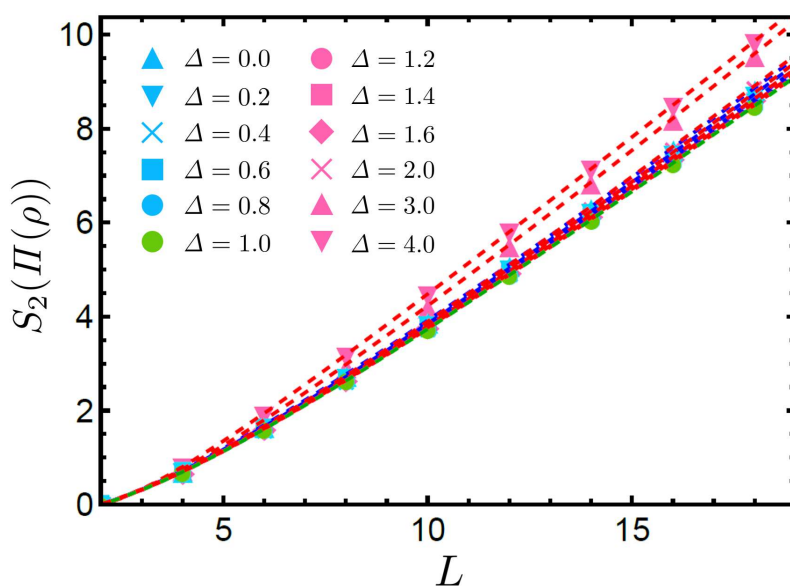


図 5.17 反強磁性相互作用する XXZ 鎖における $S_2(I(\rho))$ vs. L

ここでも $f_{S_2}(L), g_{S_2}(L)$ の2通りでフィッティングした。フィッティングパラメータ p_1, p_2, p_3, p_4 の値を図 5.18 に示す。赤色、青色のプロットはそれぞれ $f_{S_2}(L), g_{S_2}(L)$ による結果である。AFM 相では、 $f_{S_2}(L)$ のエラーバーの幅はほとんど0であり、 Δ^{-1} を十分小さくすると (Δ を十分大きくすると)、古典 Ising 極限 ($\Delta^{-1} = 0$) における値に近づいていることがわかる。よって $f_{S_2}(L)$ は $S_2(\Pi(\rho))$ のスケーリング則をうまく記述していると考えられる。 p_1 から p_4 まで有限の値をとっていることから、熱力学的極限におけるスケーリング則は $p_1 L + p_2 + p_4 \log L$ という形になると考えられる。また関数 $f_{S_2}(L)$ での結果は AFM 相と TLL_{AFM} 相の間が滑らかに繋がっており、XY 極限では p_2 の値はほとんど0となっている。これらの事実から我々は、スケーリング則が

$$S_2(\Pi(\rho)) = \begin{cases} p_1 L + p_4 \log L + \mathcal{O}(1) & (\text{AFM}) \\ p_1 L + p_4 \log L & (\text{TLL}_{\text{AFM}}) \end{cases} \quad (5.90)$$

で与えられると考えた。

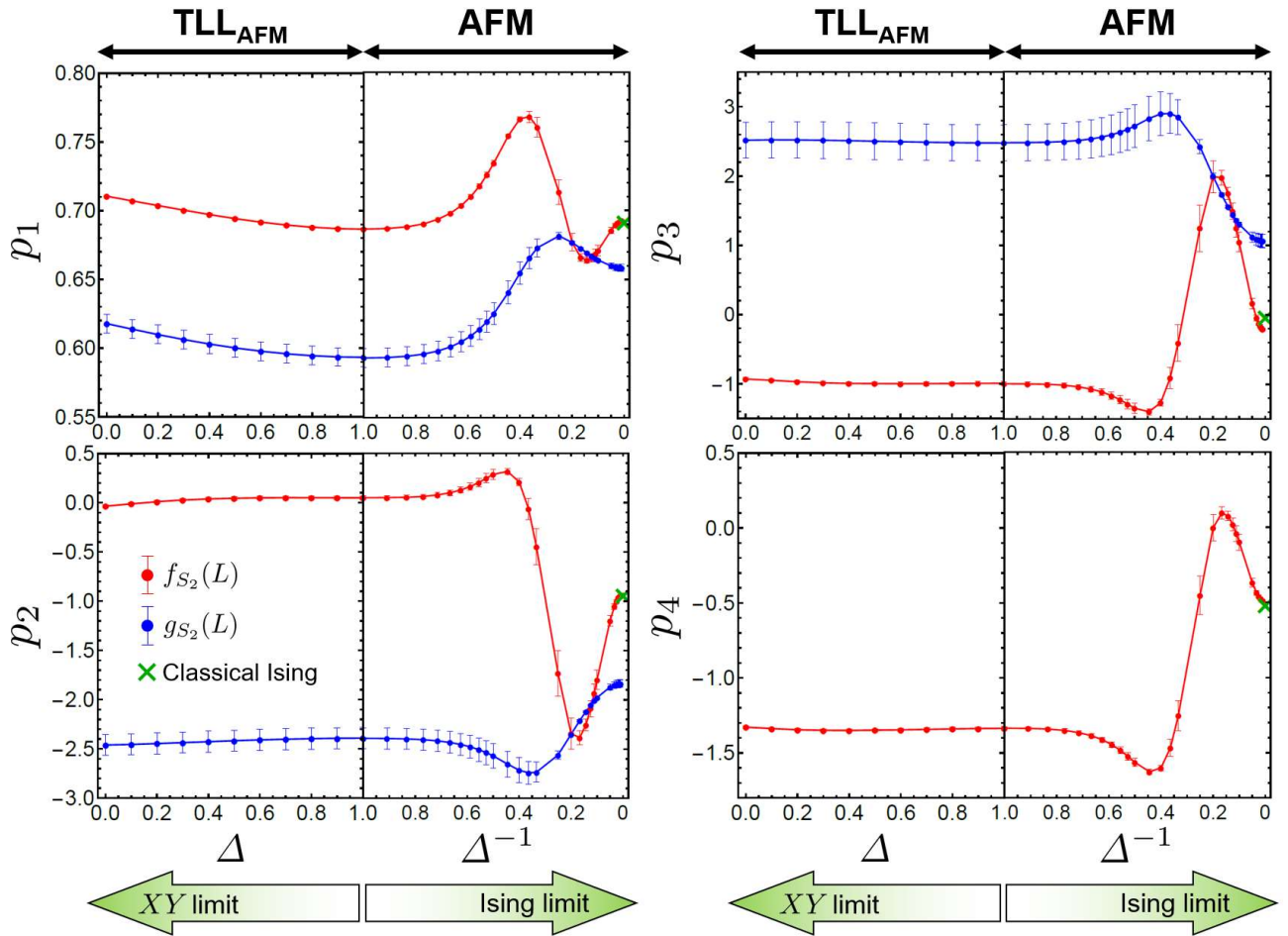


図 5.18 強磁性相互作用する XXZ 鎖におけるフィッティングパラメータ p_1, p_2, p_3, p_4 の値。各パネルの横軸は、左半分が Δ (軸の向きは右)、右半分は Δ^{-1} (軸の向きは左) であり、パネル中央 $\Delta = \Delta^{-1} = 1$ が Heisenberg point である。すなわち左端は XY 極限、右端は Ising 極限である。赤色、青色のプロットはそれぞれ $f_{S_2}(L), g_{S_2}(L)$ によって得られたデータである。 $\Delta^{-1} = 0$ における緑色のバツ印は古典 Ising モデルにおける値を表す。

5.3 PIDM の Rényi エントロピーと量子相の関係

ここでは横磁場 Ising 鎖及び XXZ 鎖で得た結果をまとめ、PIDM の Rényi エントロピー $S_2(\Pi(\rho))$ と量子相の関係について考察する。

まず $S_2(\Pi(\rho))$ は状態 ρ に対称化操作 Π を施すことで生じる ρ の空間構造に関する情報の損失を定量化することが分かった。言い換えると、 $S_2(\Pi(\rho))$ は状態 ρ がもともと保持している空間構造に関する情報を定量化する。すなわち純粋状態 ρ に対して、

$$S_2(\Pi(\rho)) = 0 \Leftrightarrow \Pi(\rho) \text{ は純粋状態のまま} \Leftrightarrow \rho \text{ は空間構造の情報が無い状態} \quad (5.91)$$

$$S_2(\Pi(\rho)) > 0 \Leftrightarrow \Pi(\rho) \text{ は混合状態になる} \Leftrightarrow \rho \text{ は空間構造の情報がある状態} \quad (5.92)$$

という関係でまとめられる。「空間構造の情報がある」という性質はやや抽象的であるが、ここでは「置換不変でない」という意味で用いている。

また一般に物理量のサイト数依存性は系の重要な情報を与えるものである。我々が得た各相における $S_2(\Pi(\rho))$ のスケーリング則をまとめると、横磁場 Ising 鎖では

$$S_2(\Pi(\rho)) = \begin{cases} \mathcal{O}(1) & (\text{FM}) \\ p_1 L + p_4 \log L + \mathcal{O}(1) & (\text{AFM}) \\ p_1 L + \mathcal{O}(1) & (\text{PM}) \end{cases} \quad (5.93)$$

XXZ 鎖では

$$S_2(\Pi(\rho)) = \begin{cases} \mathcal{O}(1) & (\text{FM}) \\ p_1 L + p_4 \log L + \mathcal{O}(1) & (\text{AFM}) \\ p_1 L + \mathcal{O}(1) & (\text{TLL}_{\text{FM}}) \\ p_1 L + p_4 \log L & (\text{TLL}_{\text{AFM}}) \end{cases} \quad (5.94)$$

であった。FM 相と AFM 相におけるスケーリング則は両モデルにおいてコンシステントなものになっている。したがって、 $S_2(\Pi(\rho))$ のスケーリング則はモデルに依らず、強磁性・反強磁性秩序を特徴づけることができると考えられる。また TLL 相でもスケーリング則の差異が見られ、同じ強磁性秩序を持っている相でも $S_2(\Pi(\rho))$ のスケーリング則によって長距離秩序・準長距離秩序を区別できる可能性がある。一方で、これらの結論はたかだか $L \leq 22$ までの比較的小さな系での数値計算と、特定の範囲で有効となる 2 次の摂動論及び、2 次の摂動論を基にしたスケーリングによる結果であり、解析的に証明されたわけではない。正しいスケーリング則を明らかにするためにはより大きな系での数値解析及び実験における測定が必要であると考えられる。とはいえ、特に実験における測定は数値計算で生じるボンド次元分のテンソル縮約に起因する計算時間コストがないため、そのスケーラビリティによってこの問題は解決できると期待される。

第 6 章

まとめと展望

6.1 まとめ

本研究では、人工量子系における量子状態の持つ量子情報量の測定というスケールアップの困難な問題に対し、密度行列でなく PIDM の構築という観点からアプローチし、PIDM から得られる量子情報を探索した。特に横磁場 Ising 鎖及び XXZ 鎖において、基底状態に対する PIDM の Rényi エントロピーの振る舞いを数値解析した。

横磁場 Ising 鎖では、強磁性相互作用の場合 PIDM の Rényi エントロピーはゼロ磁場及び無限磁場の極限で 0 をとり、量子臨界点近傍ではブロードなピークが現れた。反強磁性相互作用の場合はこのピーク構造は消え、反強磁性相のパラメータ領域全体で PIDM の Rényi エントロピーは無限に発散する傾向がみられた。これらの振る舞いの原因は、基底状態の保持する空間構造に関する情報によって理解することができることを見出した。すなわち、PIDM の Rényi エントロピーは粒子の置換を行って平均化する操作 Π によって捨てられる空間構造の情報を定量化していると考えられる。そのため強磁性相互作用の場合、ゼロ磁場および無限磁場両極限では基底状態はどのサイトも同じスピンの状態をとっているため、 Φ による情報損失は無く PIDM の Rényi エントロピーは 0 をとる。また量子臨界点近傍ではエンタングルメントの空間構造が複雑な状態のため、 Π による情報損失が大きくピーク構造が現れたと考えられる。反強磁性相互作用の場合、PIDM の Rényi エントロピーは常磁性相の領域は強磁性相互作用の場合と同じ理屈で小さな値を取り、反強磁性相では置換不変でない状態であることから Π による情報損失が大きく、高い値が出ている。また一般に物理量のサイト数依存性は系の重要な情報を保持するため、PIDM の Rényi エントロピーをサイト数 L に関してプロットし、 L, L^0, L^{-1} 及び $\log L$ の項を含む関数を用いてフィッティングを行った。結果、量子相の差異が PIDM の Rényi エントロピーのスケーリング則の差異に反映される知見を得た。

以上の振る舞いが普遍的なものか知見を得るため、同様の解析を XXZ 鎖においても行った。強磁性相互作用の場合は強磁性相のパラメータ領域全体で PIDM の Rényi エントロピーが 0 になり、 TLL_{FM} 相では有限の値をとった。反強磁性相互作用の場合は全パラメータ領域において PIDM の Rényi エントロピーは有限の値を取ったが、量子相転移点直上でサイト数に依存せず、非自明な極小点が現れた。こちらもサイト数に関してフィッティングを行ったところ、強磁性相、反強磁性相のサイト数依存性は横磁場 Ising 鎖と同じ結果となった。このことから PIDM の Rényi エントロピーは、モデルに依らず強磁性・反強磁性秩序を特徴づけられる可能性があることがわかった。また強磁性相と強磁性的な TLL 相（または反強磁性相と反強磁性的な TLL 相）の間でもスケーリング則の差異が見られ、同じ磁性秩序でも長距離秩序・準長距離秩序の差異が PIDM の Rényi エントロピーのスケーリング則に現れる可能性を見出した。しかし本研究で見出したスケーリング則は解析的に証明できたものではないため、今後は更に大きな系における数値計算による解析及び実験による測定が望まれる。特に実験による測定では、数値計算においてコストが大きかったボンド次元分のテンソル縮約演算が発生しないためスケールアップが期待される。

6.2 展望

本研究は、置換不変状態以外の一般の純粋状態を対象に、その PIDM によって得られるスケーラブルな量子情報を探索する重要な第一歩である。今後は本研究で得られた知見をもとにして、理論的にも実験的にも多くの展望が期待される。理論的には、より大きな系での解析または厳密計算により、本研究で言及した PIDM の Rényi エントロピーのスケーリング則を解明することができると考えられる。またそれに伴い、PIDM の Rényi エントロピーが強磁性・反強磁性秩序を特徴づけられるのか、長距離・準長距離秩序の判定に有益な量であるかどうかが明らかになる。

我々はいくつかの非自明な PIDM の Rényi エントロピーの振舞いを得た。特に強磁性横磁場 Ising 鎖における PIDM の Rényi エントロピーはエンタングルメントの指標の一つであるコンカレンスと似た振る舞いを示した。このことから、PIDM の Rényi エントロピーはエンタングルメントに関する何かしらの情報を拾っていると考えられる。今後は PIDM から計算されるエンタングルメントエントロピーと従来のエンタングルメント測度との関係を明らかにすることで、PIDM を通したスケーラブルなエンタングルメントに関する量子情報量の測定方法の開発が見込める。他にも、PIDM によって定義される量によりトポロジカル秩序相をはじめとする秩序変数が定義できない状態を特徴づけられるのか、なども興味深い問題である。

本研究に引き続き、PIDM に関する多方面からの研究、さらには将来的に量子物性理論と量子情報理論の統合の推進を期待したい。

謝辞

まずはじめに、学部4年から6年間指導教員を受け持っていた古川信夫教授に厚く感謝申し上げます。古川研究室での研究生活は、学部3年で抱いた「量子力学を使った研究がしたい」という漠然とした希望からはじまりました。そのため具体的に興味のある物理現象もなく、更に研究とは何をするのか右も左もわからない状態でした。全くわからない教科書や論文を読み、同期が研究を順調そうに進めていることを目撃し、作成した発表資料や書類について数え切れないくらいの修正を繰り返し、ときには自分は研究というものが向いていないのではないかと暗礁に乗り上げることもありました。しかし古川教授が研究環境を整えいつもサポートしていただいたお陰で、ここまで研究を続けることができました。この6年間何度も苦しい時期がありましたが、いつしか学部3年で抱いた漠然とした目標は具体化され、その苦しさの中にもやりがいを見出して充実した時間を過ごすことができました。特に毎週のランチミーティングは、先輩、同期、後輩と和気藹々とした雰囲気の中で研究の進捗報告や相談ができ、定期的に気持ちをリフレッシュしながら研究を進めることができました。ランチミーティングは心の安定剤としてだけでなく、自分の意見を上手に人に伝える練習の場としても有意義なものでした。古川研究室ではこれに加え、学会等の発表練習、セミナー発表など、人前でスライドを使って説明する機会を数多くの提供していただいたお陰で、社会に出て役に立つプレゼンテーション能力を鍛えることができました。日本物理学会第76回年次大会において学生優秀発表賞を受賞することができたのは、資料作りに拘り綿密な発表練習ができる古川研という環境があつてのことだと感じております。この6年間を通して、研究遂行能力、コミュニケーション能力、精神力など、たくさんの大切なことを学びました。これから社会に出て困難に直面したとき、古川研究室で過ごした6年間の思い出し、ここで培った自己マネジメント能力を発揮して精進し続けたいと思います。

日本大学山本大輔准教授には、学部4年から修士1年の間は当時の助教として、修士2年から現在に至っては共同研究者として大変お世話になりました。研究室に配属されて初めて取り組んだ研究テーマを進めるに当たり、山本准教授には基礎的な物理を丁寧に教えていただきました。この頃に学んだ量子力学の考え方は今でも役に立つものばかりです。また研究で行き詰まったときは、全てを教えずヒントを出して導く指導により、自分で頭の中を整理しながら考えて研究する力を伸ばすことができました。山本准教授から教えてもらったのは物理の勉強だけではなく、学術的な文章の書き方、研究に向かう姿勢・心得など、今後研究者を目指す上で大切なことを数多く教えていただきました。また、山本准教授が主宰者の一人として毎年行われている量子物性若手交流研究会には、学部4年のころから毎年参加させていただきました。自分の研究と親和性が高い研究発表を聞くことができただけでなく、同年代の学生の研究発表を見ることで学内だけでは得ることのできない刺激を感じることができました。ここまで研究を続けることができたのは、時に厳しく時に優しく接していただいた山本准教授のお陰です。

本研究の共同研究者である Giacomo Marmorini 氏には学部4年のころからお世話になりました。研究開始当初は英語を話すことも読むことも共に苦手意識を持っていましたが、Marmorini 氏が日常的に英会話の練習をしてくださったり、英語で輪講を行う journal club に誘ってくださったりしたお陰で、その苦手意識を少しずつ払拭することができました。また、学術論文の執筆や国際学会におけるアブストラクト、スライド、ポスターなどの準備の際も、手厚く英語の添削をしていただきました。思えば6年前の自分は、現在のように英語を積極的につかて研究をしていることは想像できませんでした。ここまで自分の英語力を成長させてくれたのは、優しく教え導いていただいた Marmorini 氏のお陰です。卒業後も引き続き自身の英語能力に磨きをかけ、国際的に活躍する研究者を目指して頑張りたいと思います。

以上の方々に加え、他にも多くの研究者の方々にお世話になりました。松川宏教授と北野晴久教授には本博士論文の副査として貴重なご意見をいただきました。お二人の的確なご指摘により博士論文発表会及び本博士論文の内容は洗練されたものとなりました。土屋准教授（中央大学）、段下准教授（近畿大学）、國見助教（東京理科大学）、金子助教（上智大学）、鏡原助教（中央大学）には量子物性若手交流研究会をはじめとする多くの研究会にて本研究について興味を持っていただき、有意義な議論が展開されました。また研究内容だけでなく、生活面などの相談にも乗っていただきました。段下准教授や下川助教（OIST）にはセミナー発表という貴重な機会を与えていただきました。廣澤助教（青山学院大学）には、博士課程の3年間、助教としてお世話になりました。本研究について有意義なコメントをいただいただけでなく、日本学術振興会特別研究員をはじめとする申請書類についての的確な指摘をしていただきました。この他にも、切磋琢磨できる学内及び学外の同期や後輩、多くの研究者の支えがあり、本博士論文を執筆することができました。改めて厚く感謝申し上げます。

最後に、経済的な支援をしていただいた両親、そして研究生活を支えてくれた妻に感謝いたします。

本研究は JSPS 科研費 Grant Nos. 23KJ1867（宮崎優希; 日本学術振興会 特別研究員（DC2））, 23K25830, 24K06890（山本大輔）, 21H05185（Giacomo Marmorini・山本大輔）, 23K22442（古川信夫・山本大輔）, JST PRESTO Grant No. JPMJPR2118, JPMJPR245D（山本大輔）, 及び青山学院大学 “EarlyEagle” grant program（宮崎優希）の支援により行われました。

付録 A

数学的補足

A.1 テンソル積 (Kronecker 積)

量子情報分野ではしばしばテンソル積を用いて量子多体系を表現する。ここではテンソル積 $\otimes$ の数学的な定義と重要な性質についてまとめる。

テンソル積は任意の $m \times n$ 行列 $A = \{a_{ij}\}$ と $p \times q$ 行列 $B = \{b_{ij}\}$ の間で定義可能であり、

$$\begin{aligned}
 A \otimes B &= \begin{pmatrix} a_{11}B & \cdots & a_{1n}B \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1}B & \cdots & a_{mn}B \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} a_{11}b_{11} & \cdots & a_{11}b_{1q} & a_{12}b_{11} & \cdots & a_{12}b_{1q} & \cdots & a_{1n}b_{11} & \cdots & a_{1n}b_{1q} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \cdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{11}b_{p1} & \cdots & a_{11}b_{pq} & a_{12}b_{p1} & \cdots & a_{12}b_{pq} & \cdots & a_{1n}b_{p1} & \cdots & a_{1n}b_{pq} \\ a_{21}b_{11} & \cdots & a_{21}b_{1q} & a_{22}b_{11} & \cdots & a_{22}b_{1q} & \cdots & a_{2n}b_{11} & \cdots & a_{2n}b_{1q} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \cdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{21}b_{p1} & \cdots & a_{21}b_{pq} & a_{22}b_{p1} & \cdots & a_{22}b_{pq} & \cdots & a_{2n}b_{p1} & \cdots & a_{2n}b_{pq} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{m1}b_{11} & \cdots & a_{m1}b_{1q} & a_{m2}b_{11} & \cdots & a_{m2}b_{1q} & \cdots & a_{mn}b_{11} & \cdots & a_{mn}b_{1q} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \cdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1}b_{p1} & \cdots & a_{m1}b_{pq} & a_{m2}b_{p1} & \cdots & a_{m2}b_{pq} & \cdots & a_{mn}b_{p1} & \cdots & a_{mn}b_{pq} \end{pmatrix} \quad (\text{A.1})
 \end{aligned}$$

のようにして $mp \times nq$ 行列を作る演算である。以下によく用いられるテンソル積の性質を挙げる。

- 結合法則: $(A \otimes B) \otimes C = A \otimes (B \otimes C)$
- 分配法則*1: $A \otimes (B + C) = A \otimes B + A \otimes C$
- テンソル積同士の積*2: $(A \otimes B)(C \otimes D) = AC \otimes BD$

証明

$$\begin{aligned}
 (A \otimes B)(C \otimes D) &= \begin{pmatrix} a_{11}B & \cdots & a_{1n}B \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1}B & \cdots & a_{mn}B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{11}D & \cdots & c_{1r}D \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{n1}D & \cdots & c_{nr}D \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} \sum_{k=1}^n a_{1k}c_{k1}BD & \cdots & \sum_{k=1}^n a_{1k}c_{kr}BD \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{k=1}^n a_{mk}c_{k1}BD & \cdots & \sum_{k=1}^n a_{mk}c_{kr}BD \end{pmatrix} = AC \otimes BD \quad \blacksquare \quad (\text{A.2})
 \end{aligned}$$

*1 B と C は同じサイズの行列とする。

*2 A と C 及び B と D は行列の積が定義できる適当なサイズの行列とする。

- テンソル積のエルミート共役： $(A \otimes B)^\dagger = A^\dagger \otimes B^\dagger$

証明

$$(A \otimes B)^\dagger = \begin{pmatrix} a_{11}B & \cdots & a_{1n}B \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1}B & \cdots & a_{mn}B \end{pmatrix}^\dagger = \begin{pmatrix} a_{11}^*B^\dagger & \cdots & a_{1m}^*B^\dagger \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{1n}^*B^\dagger & \cdots & a_{mn}^*B^\dagger \end{pmatrix} = A^\dagger \otimes B^\dagger \quad \blacksquare \quad (\text{A.3})$$

- テンソル積のトレース： $\text{Tr}(A \otimes B) = \text{Tr}A \cdot \text{Tr}B$

証明

$$\text{Tr}(A \otimes B) = \text{Tr} \begin{pmatrix} a_{11}B & \cdots & a_{1n}B \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1}B & \cdots & a_{nn}B \end{pmatrix} = \sum_{k=1}^n a_{kk} \text{Tr}B = \text{Tr}A \cdot \text{Tr}B \quad \blacksquare \quad (\text{A.4})$$

量子多体系における応用例としては、各粒子に対する演算子の作用が挙げられる。1つの粒子の状態 $|\psi\rangle$ に対して、ある演算子 $\hat{O}$ の作用は $\hat{O}|\psi\rangle$ である。次に2粒子系における演算子の作用を考える。2粒子系の状態は一般に $|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle$ と定義される。ここで1つ目の粒子には演算子 $\hat{O}_1$ を、2つ目の粒子には演算子 $\hat{O}_2$ をそれぞれ作用させたとき、系全体に作用させる演算子は $\hat{O}_1 \otimes \hat{O}_2$ で表すことができる。実際テンソル積同士の積の性質より、

$$(\hat{O}_1 \otimes \hat{O}_2) |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle = \hat{O}_1 |\psi_1\rangle \otimes \hat{O}_2 |\psi_2\rangle \quad (\text{A.5})$$

となることが確かめられる。これを一般化すると、 L 粒子系において i 番目の粒子に演算子 $\hat{O}_i$ を作用させたいとき、系全体に作用させる演算子は

$$\hat{O}_1 \otimes \hat{O}_2 \otimes \cdots \otimes \hat{O}_L \quad (\text{A.6})$$

で与えられる。このようにテンソル積を用いることで、量子多体系におけるローカルな演算が直感的で非常に扱いやすい形で記述できる。なお、ある粒子に何も操作を施さない場合は、施さないサイトに対応する演算子を単位行列に置き換えれば良い。

A.2 Rényi エントロピーから von Neumann エントロピーの導出

極限值

$$S(\rho) = \lim_{\alpha \rightarrow 1} S_\alpha(\rho) = - \lim_{\alpha \rightarrow 1} \frac{\log \text{Tr}(\rho^\alpha)}{\alpha - 1} \quad (\text{A.7})$$

を求めよう。分子分母をそれぞれ α で微分すると

$$- \lim_{\alpha \rightarrow 1} \frac{d}{d\alpha} (\log \text{Tr}(\rho^\alpha)) \quad (\text{A.8})$$

となる。この極限值がある値に収束するのであれば、l'Hopital の定理より $S(\rho)$ も同じ値に収束する。

ここで ρ を対角化するユニタリ行列を U とすると ($\rho = U \Lambda U^\dagger$)、

$$\log \text{Tr}(\rho^\alpha) = \log \text{Tr}((U^\dagger \rho U)^\alpha) = \log \text{Tr}(\Lambda^\alpha) = \log \left(\sum_m p_m^\alpha \right) \quad (\text{A.9})$$

である。これを α で微分して

$$\frac{d}{d\alpha} (\log \text{Tr}(\rho^\alpha)) = \frac{1}{\sum_m p_m^\alpha} \cdot \sum_n \frac{d}{d\alpha} p_n^\alpha = \frac{1}{\sum_m p_m^\alpha} \cdot \sum_n p_n^\alpha \log p_n \quad (\text{A.10})$$

を得る。最後に $\alpha \rightarrow 1$ の極限をとると値は

$$\lim_{\alpha \rightarrow 1} \frac{d}{d\alpha} (\log \text{Tr}(\rho^\alpha)) = \sum_n p_n \log p_n = \text{Tr}(\rho \log \rho) \quad (\text{A.11})$$

に収束する。したがって $S(\rho) = -\text{Tr}(\rho \log \rho)$ が示された。■

A.3 対角化と特異値分解

ここでは部分トレースや MPS などの文脈で登場する、行列の特異値分解について、行列の対角化との比較を行いながら説明する。

まずは $n \times n$ 行列 A に対して、

$$\begin{cases} Av_1 = \lambda_1 v_1 \\ Av_2 = \lambda_2 v_2 \\ \vdots \\ Av_n = \lambda_n v_n \end{cases} \quad (\text{A.12})$$

を満たす $\{\lambda_i, v_i\}$ の組を考える。つまり、 A を作用しても元の定数倍となるようなベクトルを考える。このとき $\{\lambda_i\}$ を A の固有値 (eigenvalue)、 $\{v_i\}$ を A の固有ベクトル (eigenvector) と呼ぶ。式 (A.12) は行列を用いて

$$A \begin{pmatrix} v_1 & v_2 & \cdots & v_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_1 & v_2 & \cdots & v_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_n \end{pmatrix} \quad (\text{A.13})$$

と書くことができる。 $V = (v_1 \ v_2 \ \cdots \ v_n)$, $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$ と定義すると、

$$A = V \Lambda V^{-1} \quad (\text{A.14})$$

と書ける。これが行列の対角化 (diagonalization) である。対角化は V の逆行列が存在しない場合は不可能なため、必ずできるとは限らない。 $\text{rank} V < n$ となると V は逆行列を持たない。 V は A の固有ベクトルを縦に並べた正方行列であり、固有ベクトルの中に一つでも線形独立でないものが含まれると $\text{rank} V$ は n より小さくなるため、このとき対角化は不可能となる。量子力学では物理量はエルミート行列で表されるため、しばしばエルミート行列の対角化を行う。 A がエルミート行列のとき V は $V^\dagger V = V V^\dagger = I$ を満たすユニタリー行列であることが知られている。つまり、

$$A = V \Lambda V^\dagger \quad (\text{A.15})$$

と対角化される。なおこの場合は、 $V^{-1} = V^\dagger$ なので必ず対角化できる。では上記の議論を、正方行列でない一般の $m \times n$ 行列 ($m \neq n$) に拡張して考えてみよう。もちろん対角化は正方行列でないと不可能であるが、“対角化のような操作”が可能かどうかを考える。いま $m \times n$ 行列 B に対し、

$$\begin{cases} Bv_1 = \sigma_1 u_1 \\ Bv_2 = \sigma_2 u_2 \\ \vdots \\ Bv_k = \sigma_k u_k \end{cases} \quad (\text{A.16})$$

を満たす $\{\sigma_i, u_i, v_i\}$ の組を考える。ここで $k = \min(m, n)$ である。いま u_i は m 次元縦ベクトル、 v_i は n 次元縦ベクトルであることに注意する。式 (A.16) の各方程式のエルミート共役を取って変形すると、

$$\begin{cases} B^\dagger u_1 = \sigma_1^* (v_1^\dagger)^{-1} u_1^\dagger u_1 \\ B^\dagger u_2 = \sigma_2^* (v_2^\dagger)^{-1} u_2^\dagger u_2 \\ \vdots \\ B^\dagger u_k = \sigma_k^* (v_k^\dagger)^{-1} u_k^\dagger u_k \end{cases} \quad (\text{A.17})$$

を得る。ここで

$$u_i^\dagger = u_i^{-1}, \quad v_i^\dagger = v_i^{-1}, \quad \sigma_i^* = \sigma_i \quad (\text{A.18})$$

という条件を課すと、式 (A.17) は

$$\begin{cases} B^\dagger \mathbf{u}_1 = \sigma_1 \mathbf{v}_1 \\ B^\dagger \mathbf{u}_2 = \sigma_2 \mathbf{v}_2 \\ \vdots \\ B^\dagger \mathbf{u}_k = \sigma_k \mathbf{v}_k \end{cases} \quad (\text{A.19})$$

という綺麗な形にまとまる。ここで、式 (A.16) と (A.19) を一つの式にまとめると

$$B \begin{pmatrix} \mathbf{v}_1 & \mathbf{v}_2 & \cdots & \mathbf{v}_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{u}_1 & \mathbf{u}_2 & \cdots & \mathbf{u}_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sigma_k \end{pmatrix} \quad (\text{A.20})$$

と書くことができる。 $U = (\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_k)$, $V = (\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_k)$, $\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_k)$ と定義する。 U は $m \times k$ 行列、 V は $n \times k$ 行列、 Σ は $k \times k$ 行列である。式 (A.18) より、行列 U, V は

$$U^\dagger U = I_{k \times k}, \quad UU^\dagger = I_{m \times m} \quad (\text{A.21})$$

$$V^\dagger V = I_{k \times k}, \quad VV^\dagger = I_{n \times n} \quad (\text{A.22})$$

を満たす“ユニタリー行列”^{*3}である。ここで $I_{a \times a}$ は $a \times a$ 単位行列である。すると

$$B = U \Sigma V^\dagger \quad (\text{A.23})$$

と書くことができる。これが行列の特異値分解 (singular value decomposition, SVD) である。このとき $\{\sigma_i\}$ を B の特異値 (singular value)、 $\mathbf{u}_i$ と $\mathbf{v}_i$ をそれぞれ B の左特異ベクトル (left-singular vector)、右特異ベクトル (right-singular vector) と呼ぶ。式 (A.18) より、特異値は実数である。特異値分解は対角化とは異なり逆行列を求める必要がないため、任意の行列に対して実行可能である。

ここで $BB^\dagger, B^\dagger B$ はエルミート行列であるため対角化が可能であり、実際

$$BB^\dagger = U \Sigma^2 U^\dagger \quad (\text{A.24})$$

$$B^\dagger B = V \Sigma^2 V^\dagger \quad (\text{A.25})$$

を見ると対角化の式 (A.15) と同じ形である事に気づく。式 (A.24), (A.25) は、 $\mathbf{u}_i$ は $BB^\dagger$ の固有値 σ_i^2 に対応する固有ベクトルであり、 $\mathbf{v}_i$ は $B^\dagger B$ の固有値 σ_i^2 に対応する固有ベクトルであることを示している。なお一般に行列 $BB^\dagger, B^\dagger B$ は半正定値行列 ($\sigma_i^2 \geq 0$) であるため σ_i は必ず実数であり、式 (A.18) と矛盾はない。つまり、 B の特異値を σ_i 、 $BB^\dagger$ (もしくは $B^\dagger B$) の固有値を λ_i とおくと、 $\sigma_i^2 = \lambda_i$ が成り立つ。よって、任意の行列 B の特異値は $BB^\dagger$ (もしくは $B^\dagger B$) の固有値の平方根^{*4}で与えられることが分かる。特に、 B が正定値行列かつエルミート行列 ($B^\dagger = B$) であるとき、式 (A.24), (A.25) は $B^2 = U \Sigma^2 U^\dagger = V \Sigma^2 V^\dagger$ となる。一方、対角化の式 (A.15) より $B^2 = V \Lambda^2 V^\dagger$ である。よって B の特異値は $BB^\dagger = B^\dagger B$ の固有値と一致し、対角化と特異値分解は同じ演算になる。

A.4 Frobenius 内積

行列間に定義される内積を考えよう。まずは簡単にベクトル間の内積をおさらいし、そのアイデアを行列版へと自然に拡張する。

2つのベクトル

$$\mathbf{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} \quad (\text{A.26})$$

^{*3} ユニタリー行列の定義は $X^\dagger X = X X^\dagger = I$ を満たす正方行列 X であるため、 U, V はユニタリー行列ではない。

^{*4} 慣習として正の平方根とする。負の平方根でも理論上問題はない。

の内積は

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = a_1^* b_1 + a_2^* b_2 + \cdots + a_n^* b_n = \sum_{i=1}^n a_i^* b_i \quad (\text{A.27})$$

で定義されるのであった。内積は「各成分の積（片方は複素共役）の和」ととらえることができる。そこで2つの行列

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1n} \\ b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{n1} & b_{n2} & \cdots & b_{nn} \end{pmatrix} \quad (\text{A.28})$$

の内積を

Frobenius 内積

$$\text{Tr}(A^\dagger B) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij}^* b_{ij} \quad (\text{A.29})$$

で定義し、**Frobenius 内積**（**Frobenius inner product**）と呼ぶ。ベクトルの直交性を内積で定義したように、行列の直交性は Frobenius 内積を用いて

行列の直交性

$$A \perp B \iff \text{Tr}(A^\dagger B) = 0 \quad (\text{A.30})$$

で定義する。

A.5 忠実度

QST の精度の指標の一つとして忠実度（**fidelity**）がしばしば用いられる。忠実度はその名の通り、QST によってどれだけ忠実に理想的な密度行列が再構築できているかを表す量である。忠実度の定義は一つではないが一番直感的に理解しやすい定義は

$$F(\rho, \rho_{\text{QST}}) = \text{Tr}(\rho \rho_{\text{QST}}) \quad (\text{A.31})$$

である。 ρ は理論的な密度行列、 ρ_{QST} は QST で再構築した密度行列である。式 (A.31) は ρ と ρ_{QST} の Frobenius 内積そのものであるため、

$$\rho_{\text{QST}} = \rho \iff F(\rho, \rho_{\text{QST}}) = 1 \quad (\text{A.32})$$

$$\rho_{\text{QST}} \perp \rho \iff F(\rho, \rho_{\text{QST}}) = 0 \quad (\text{A.33})$$

が成り立つ。特に密度行列が純粋状態で $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$, $\rho_{\text{QST}} = |\psi_{\text{QST}}\rangle\langle\psi_{\text{QST}}|$ と表されるとき、

$$F(\rho, \rho_{\text{QST}}) = \text{Tr}(|\psi\rangle\langle\psi| |\psi_{\text{QST}}\rangle\langle\psi_{\text{QST}}|) = \langle\psi| \psi_{\text{QST}}\rangle \text{Tr}(|\psi\rangle\langle\psi_{\text{QST}}|) = \langle\psi| \psi_{\text{QST}}\rangle \langle\psi_{\text{QST}}| \psi\rangle = |\langle\psi_{\text{QST}}| \psi\rangle|^2 \quad (\text{A.34})$$

と変形でき、内積の2乗と一致する。

$$F(\rho_{\text{QST}}, \rho) = \text{Tr} \sqrt{(\rho_{\text{QST}})^{\frac{1}{2}} \rho (\rho_{\text{QST}})^{\frac{1}{2}}} \quad (\text{A.35})$$

という定義もしばしば使われる。密度行列が純粋状態で $\rho = \sqrt{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$, $\rho_{\text{QST}} = \sqrt{\rho_{\text{QST}}} = |\psi_{\text{QST}}\rangle\langle\psi_{\text{QST}}|$ と表されるとき、

$$\begin{aligned} F(\rho, \rho_{\text{QST}}) &= \text{Tr} \sqrt{|\psi_{\text{QST}}\rangle\langle\psi_{\text{QST}}| \psi\rangle\langle\psi| \psi_{\text{QST}}\rangle\langle\psi_{\text{QST}}|} = \sqrt{\langle\psi_{\text{QST}}| \psi\rangle \langle\psi| \psi_{\text{QST}}\rangle \text{Tr} \sqrt{|\psi_{\text{QST}}\rangle\langle\psi_{\text{QST}}|}} \\ &= \sqrt{|\langle\psi_{\text{QST}}| \psi\rangle|^2 \text{Tr}(\rho_{\text{QST}})} = \sqrt{|\langle\psi_{\text{QST}}| \psi\rangle|^2} \quad (\text{A.36}) \end{aligned}$$

と変形できる。つまり一つ目の忠実度の平方根であり、式 (A.32), (A.33) を満たす。

A.6 摂動論

摂動論は、解が知られたハミルトニアンに対して微小な刺激を与えたときの挙動を解析的に計算することができる手法である。ここでは摂動論の公式の導出を示す。

既知事項：あるハミルトニアン $\hat{\mathcal{H}}^{(0)}$ の固有状態 $\{|\psi_n^{(0)}\rangle\}$ とそのエネルギー $\{E_n^{(0)}\}$ が解けている。

$$\hat{\mathcal{H}}^{(0)} |\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{(0)}\rangle \quad (\text{A.37})$$

目標： $\hat{\mathcal{H}}^{(0)}$ に微小な刺激 $\lambda\hat{\mathcal{H}}'$ ($\lambda \ll 1$) を加えたときの固有状態 $\{|\psi_n\rangle\}$ とそのエネルギー $\{E_n\}$ を求める。

$$(\hat{\mathcal{H}}^{(0)} + \lambda\hat{\mathcal{H}}') |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle \quad (\text{A.38})$$

指針： $\{|\psi_n\rangle\}, \{E_n\}$ が

$$|\psi_n\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi_n^{(2)}\rangle + \dots \quad (\text{A.39})$$

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \quad (\text{A.40})$$

と展開できると仮定し、 $\{|\psi_n^{(1)}\rangle, E_n^{(1)}\}, \{|\psi_n^{(2)}\rangle, E_n^{(2)}\}, \dots$ を既知の情報を用いて逐次求める。

1 次の摂動論

$$E_n^{(1)} = \langle \psi_n^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}' | \psi_n^{(0)} \rangle \quad (\text{A.41})$$

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = - \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_m^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}' | \psi_n^{(0)} \rangle}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} |\psi_m^{(0)}\rangle \quad (\text{A.42})$$

2 次の摂動論

$$E_n^{(2)} = - \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \psi_m^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}' | \psi_n^{(0)} \rangle|^2}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} \quad (\text{A.43})$$

$$|\psi_n^{(2)}\rangle = \sum_{m \neq n} \sum_{l \neq n} \frac{\langle \psi_m^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}' | \psi_l^{(0)} \rangle \langle \psi_l^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}' | \psi_n^{(0)} \rangle}{(E_m^{(0)} - E_n^{(0)})(E_l^{(0)} - E_n^{(0)})} |\psi_m^{(0)}\rangle - \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_m^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}' | \psi_n^{(0)} \rangle \langle \psi_n^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}' | \psi_n^{(0)} \rangle}{(E_m^{(0)} - E_n^{(0)})^2} |\psi_m^{(0)}\rangle \quad (\text{A.44})$$

導出：

まず式 (A.39) , (A.40) を愚直に式 (A.38) に代入する。

$$(\hat{\mathcal{H}}^{(0)} + \lambda\hat{\mathcal{H}}')(|\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi_n^{(2)}\rangle + \dots) = (E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots)(|\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi_n^{(2)}\rangle + \dots) \quad (\text{A.45})$$

を得る。ここで λ の次数が同じ項同士を比較すると、

$$\lambda \text{ の } 0 \text{ 次} : \hat{\mathcal{H}}^{(0)} |\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{(0)}\rangle \quad (\text{A.46})$$

$$\lambda \text{ の } 1 \text{ 次} : \hat{\mathcal{H}}^{(0)} |\psi_n^{(1)}\rangle + \hat{\mathcal{H}}' |\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)} |\psi_n^{(0)}\rangle \quad (\text{A.47})$$

$$\lambda \text{ の } 2 \text{ 次} : \hat{\mathcal{H}}^{(0)} |\psi_n^{(2)}\rangle + \hat{\mathcal{H}}' |\psi_n^{(1)}\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{(2)}\rangle + E_n^{(1)} |\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)} |\psi_n^{(0)}\rangle \quad (\text{A.48})$$

を得る (3 次以降も同様)。式 (A.46) はまさに式 (A.37) であり、摂動を加えていないハミルトニアンの Schrödinger 方程式である。では $E_n^{(1)}$ と $|\psi_n^{(1)}\rangle$ を求めよう。 $|\psi_n^{(1)}\rangle$ が既知の $\{|\psi_m^{(0)}\rangle\}$ を使って

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_m c_{nm} |\psi_m^{(0)}\rangle \quad (\text{A.49})$$

と書けると考える。これを式 (A.47) に代入すると、

$$\begin{aligned}
\sum_m c_{nm} \hat{\mathcal{H}}^{(0)} |\psi_m^{(0)}\rangle + \hat{\mathcal{H}}' |\psi_n^{(0)}\rangle &= \sum_m c_{nm} E_n^{(0)} |\psi_m^{(0)}\rangle + E_n^{(1)} |\psi_n^{(0)}\rangle \\
\sum_m c_{nm} E_m^{(0)} |\psi_m^{(0)}\rangle + \hat{\mathcal{H}}' |\psi_n^{(0)}\rangle &= \sum_m c_{nm} E_n^{(0)} |\psi_m^{(0)}\rangle + E_n^{(1)} |\psi_n^{(0)}\rangle \\
\langle \psi_n^{(0)} | \left(\sum_m c_{nm} E_m^{(0)} |\psi_m^{(0)}\rangle + \hat{\mathcal{H}}' |\psi_n^{(0)}\rangle \right) &= \langle \psi_n^{(0)} | \left(\sum_m c_{nm} E_n^{(0)} |\psi_m^{(0)}\rangle + E_n^{(1)} |\psi_n^{(0)}\rangle \right) \\
\sum_m c_{nm} E_m^{(0)} \delta_{m,n} + \langle \psi_n^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}' | \psi_n^{(0)} \rangle &= \sum_m c_{nm} E_n^{(0)} \delta_{m,n} + E_n^{(1)} \\
\langle \psi_n^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}' | \psi_n^{(0)} \rangle &= E_n^{(1)}
\end{aligned} \tag{A.50}$$

と変形でき式 (A.41) が示された。また式 (A.47) を変形して、

$$\begin{aligned}
(\hat{\mathcal{H}}^{(0)} - E_n^{(0)}) |\psi_n^{(1)}\rangle &= (E_n^{(1)} - \hat{\mathcal{H}}') |\psi_n^{(0)}\rangle \\
\sum_m c_{nm} (\hat{\mathcal{H}}^{(0)} - E_n^{(0)}) |\psi_m^{(0)}\rangle &= (E_n^{(1)} - \hat{\mathcal{H}}') |\psi_n^{(0)}\rangle \\
\sum_m c_{nm} (E_m^{(0)} - E_n^{(0)}) |\psi_m^{(0)}\rangle &= (E_n^{(1)} - \hat{\mathcal{H}}') |\psi_n^{(0)}\rangle
\end{aligned} \tag{A.51}$$

両辺に左側から $\langle \psi_k^{(0)} |$ ($k \neq n$) をかけることで

$$\begin{aligned}
\langle \psi_k^{(0)} | \left(\sum_m c_{nm} (E_m^{(0)} - E_n^{(0)}) |\psi_m^{(0)}\rangle \right) &= \langle \psi_k^{(0)} | (E_n^{(1)} - \hat{\mathcal{H}}') |\psi_n^{(0)}\rangle \\
\sum_m c_{nm} (E_m^{(0)} - E_n^{(0)}) \delta_{k,m} &= - \langle \psi_k^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}' | \psi_n^{(0)} \rangle \\
c_{nk} (E_k^{(0)} - E_n^{(0)}) &= - \langle \psi_k^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}' | \psi_n^{(0)} \rangle \\
c_{nk} &= - \frac{\langle \psi_k^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}' | \psi_n^{(0)} \rangle}{E_k^{(0)} - E_n^{(0)}}
\end{aligned} \tag{A.52}$$

より、式 (A.42) が示された。

同様に $E_n^{(2)}$ と $|\psi_n^{(2)}\rangle$ を求めよう。 $|\psi_n^{(2)}\rangle$ が既知の情報を使って

$$|\psi_n^{(2)}\rangle = \sum_m d_{nm} |\psi_m^{(0)}\rangle \tag{A.53}$$

と書けると考え、式 (A.48) に代入すると、

$$\begin{aligned}
\sum_m d_{nm} \hat{\mathcal{H}}^{(0)} |\psi_m^{(0)}\rangle + \hat{\mathcal{H}}' |\psi_n^{(1)}\rangle &= \sum_m d_{nm} E_n^{(0)} |\psi_m^{(0)}\rangle + E_n^{(1)} |\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)} |\psi_n^{(0)}\rangle \\
\sum_m d_{nm} E_m^{(0)} |\psi_m^{(0)}\rangle + \hat{\mathcal{H}}' |\psi_n^{(1)}\rangle &= \sum_m d_{nm} E_n^{(0)} |\psi_m^{(0)}\rangle + E_n^{(1)} |\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)} |\psi_n^{(0)}\rangle \\
\langle \psi_n^{(0)} | \left(\sum_m d_{nm} E_m^{(0)} |\psi_m^{(0)}\rangle + \hat{\mathcal{H}}' |\psi_n^{(1)}\rangle \right) &= \langle \psi_n^{(0)} | \left(\sum_m d_{nm} E_n^{(0)} |\psi_m^{(0)}\rangle + E_n^{(1)} |\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)} |\psi_n^{(0)}\rangle \right) \\
\sum_m d_{nm} E_m^{(0)} \delta_{m,n} + \langle \psi_n^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}' | \psi_n^{(1)} \rangle &= \sum_m d_{nm} E_n^{(0)} \delta_{m,n} + E_n^{(2)} \\
E_n^{(2)} &= \langle \psi_n^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}' | \psi_n^{(1)} \rangle \\
&= - \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_m^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}' | \psi_n^{(0)} \rangle}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} \langle \psi_n^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}' | \psi_m^{(0)} \rangle \\
&= - \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \psi_m^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}' | \psi_n^{(0)} \rangle|^2}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}}
\end{aligned} \tag{A.54}$$

より式 (A.43) が示された。また式 (A.48) を変形して、

$$\begin{aligned}
 (\hat{\mathcal{H}}^{(0)} - E_n^{(0)}) |\psi_n^{(2)}\rangle &= (E_n^{(1)} - \hat{\mathcal{H}}') |\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)} |\psi_n^{(0)}\rangle \\
 \sum_m d_{nm} (\hat{\mathcal{H}}^{(0)} - E_n^{(0)}) |\psi_m^{(0)}\rangle &= - \sum_{l \neq n} \frac{\langle \psi_l^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}' | \psi_n^{(0)} \rangle}{E_l^{(0)} - E_n^{(0)}} (\langle \psi_n^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}' | \psi_n^{(0)} \rangle - \hat{\mathcal{H}}') |\psi_l^{(0)}\rangle + E_n^{(2)} |\psi_n^{(0)}\rangle
 \end{aligned} \quad (\text{A.55})$$

両辺に左側から $\langle \psi_k^{(0)} |$ ($k \neq n$) をかけることで

$$\begin{aligned}
 \langle \psi_k^{(0)} | \left(\sum_m d_{nm} (E_m^{(0)} - E_n^{(0)}) |\psi_m^{(0)}\rangle \right) &= \langle \psi_k^{(0)} | \left(- \sum_{l \neq n} \frac{\langle \psi_l^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}' | \psi_n^{(0)} \rangle}{E_l^{(0)} - E_n^{(0)}} (\langle \psi_n^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}' | \psi_n^{(0)} \rangle - \hat{\mathcal{H}}') |\psi_l^{(0)}\rangle + E_n^{(2)} |\psi_n^{(0)}\rangle \right) \\
 \sum_m d_{nm} (E_m^{(0)} - E_n^{(0)}) \delta_{k,m} &= - \sum_{l \neq n} \frac{\langle \psi_l^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}' | \psi_n^{(0)} \rangle}{E_l^{(0)} - E_n^{(0)}} \langle \psi_n^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}' | \psi_n^{(0)} \rangle \delta_{k,l} + \sum_{l \neq n} \frac{\langle \psi_l^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}' | \psi_n^{(0)} \rangle}{E_l^{(0)} - E_n^{(0)}} \langle \psi_k^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}' | \psi_l^{(0)} \rangle \\
 d_{nk} (E_k^{(0)} - E_n^{(0)}) &= - \frac{\langle \psi_k^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}' | \psi_n^{(0)} \rangle \langle \psi_n^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}' | \psi_n^{(0)} \rangle}{E_k^{(0)} - E_n^{(0)}} + \sum_{l \neq n} \frac{\langle \psi_k^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}' | \psi_l^{(0)} \rangle \langle \psi_l^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}' | \psi_n^{(0)} \rangle}{E_l^{(0)} - E_n^{(0)}} \\
 d_{nk} &= - \frac{\langle \psi_k^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}' | \psi_n^{(0)} \rangle \langle \psi_n^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}' | \psi_n^{(0)} \rangle}{(E_k^{(0)} - E_n^{(0)})^2} + \sum_{l \neq n} \frac{\langle \psi_k^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}' | \psi_l^{(0)} \rangle \langle \psi_l^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}' | \psi_n^{(0)} \rangle}{(E_k^{(0)} - E_n^{(0)})(E_l^{(0)} - E_n^{(0)})}
 \end{aligned} \quad (\text{A.56})$$

より、式 (A.44) が示された。3 次以降の摂動計算も同様の原理で導くことができる。

相転移現象の解析では特に基底状態に興味を持つことが多い。そこでハミルトニアン $\hat{\mathcal{H}}^{(0)}$ の固有状態のうち基底状態 (縮退なし) を $|g^{(0)}\rangle$ 、励起状態を $\{|e^{(0)}\rangle\}$ と書くことにすると、摂動を入れたときの基底状態は式 (A.42), (A.44) より

$$\begin{aligned}
 |g\rangle &= |g^{(0)}\rangle - \lambda \sum_e \frac{\langle e^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}' | g^{(0)} \rangle}{E_e^{(0)} - E_g^{(0)}} |e^{(0)}\rangle \\
 &\quad + \lambda^2 \sum_e \sum_{e'} \frac{\langle e^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}' | e'^{(0)} \rangle \langle e'^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}' | g^{(0)} \rangle}{(E_e^{(0)} - E_g^{(0)})(E_{e'}^{(0)} - E_g^{(0)})} |e^{(0)}\rangle - \lambda^2 \sum_e \frac{\langle e^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}' | g^{(0)} \rangle \langle g^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}' | g^{(0)} \rangle}{(E_e^{(0)} - E_g^{(0)})^2} |e^{(0)}\rangle + \dots
 \end{aligned} \quad (\text{A.57})$$

$$E_g = E_g^{(0)} + \lambda \langle g^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}' | g^{(0)} \rangle - \lambda^2 \sum_e \frac{|\langle e^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}' | g^{(0)} \rangle|^2}{E_e^{(0)} - E_g^{(0)}} + \dots \quad (\text{A.58})$$

で与えられる。すなわち、基底状態のエネルギーの 2 次摂動は必ず負になる。

付録 B

PIDM の Rényi エントロピーの最大ボンド次元 依存性

ここでは PIDM の Rényi エントロピー $S_2(\Pi(\rho))$ の ρ の最大ボンド次元 $\chi_{\max}$ 依存性を示す。まず横磁場 Ising 鎖における $S_2(\Pi(\rho))$ の $\chi_{\max}$ 依存性を図 B.1 に示す。

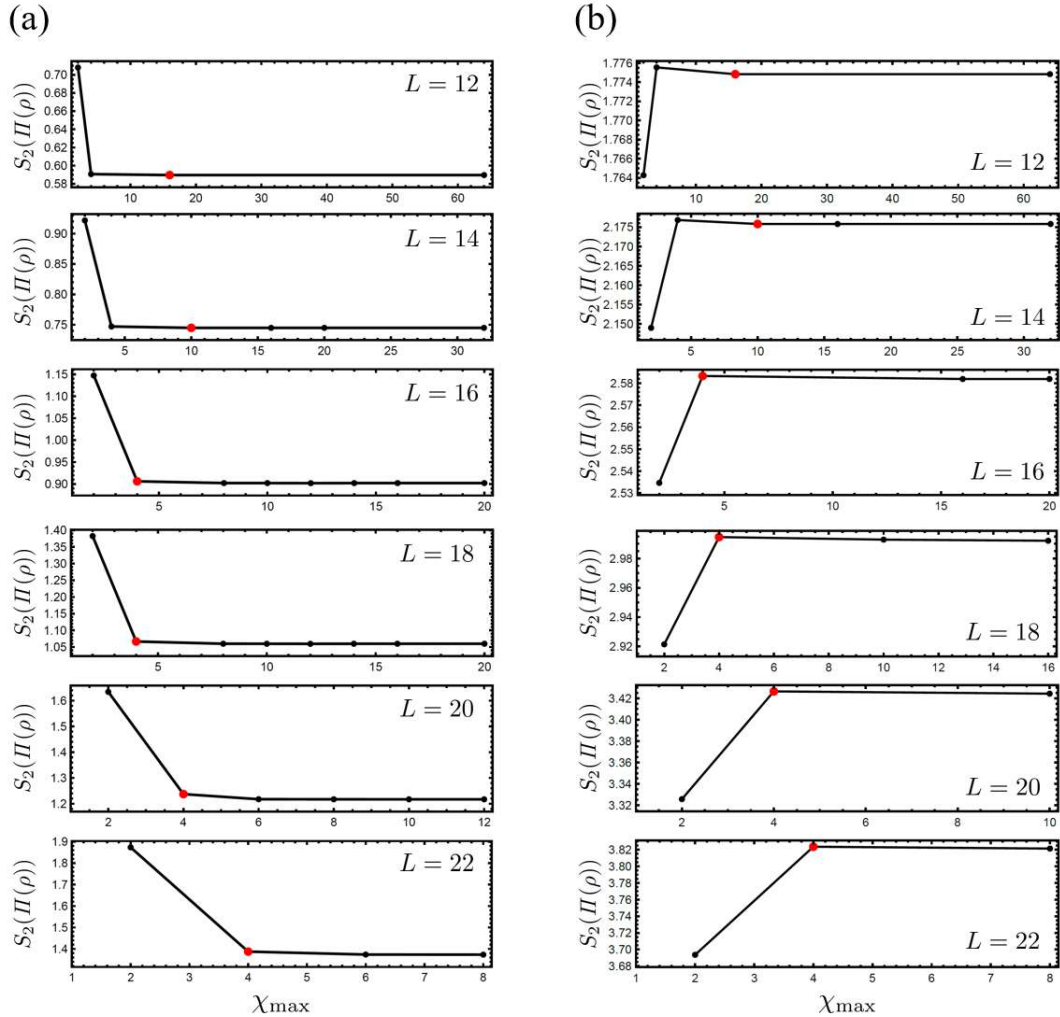


図 B.1 (a) 強磁性及び (b) 反強磁性相互作用する横磁場 Ising 鎖の基底状態に対する PIDM の Rényi エントロピーの最大ボンド次元依存性。データは $\Gamma/|J| = 1$ において計算したものであり、本文中の計算結果は赤点での結果である。

次に XXZ 鎖における $S_2(\Pi(\rho))$ の $\chi_{\max}$ 依存性を図 B.2 に示す。

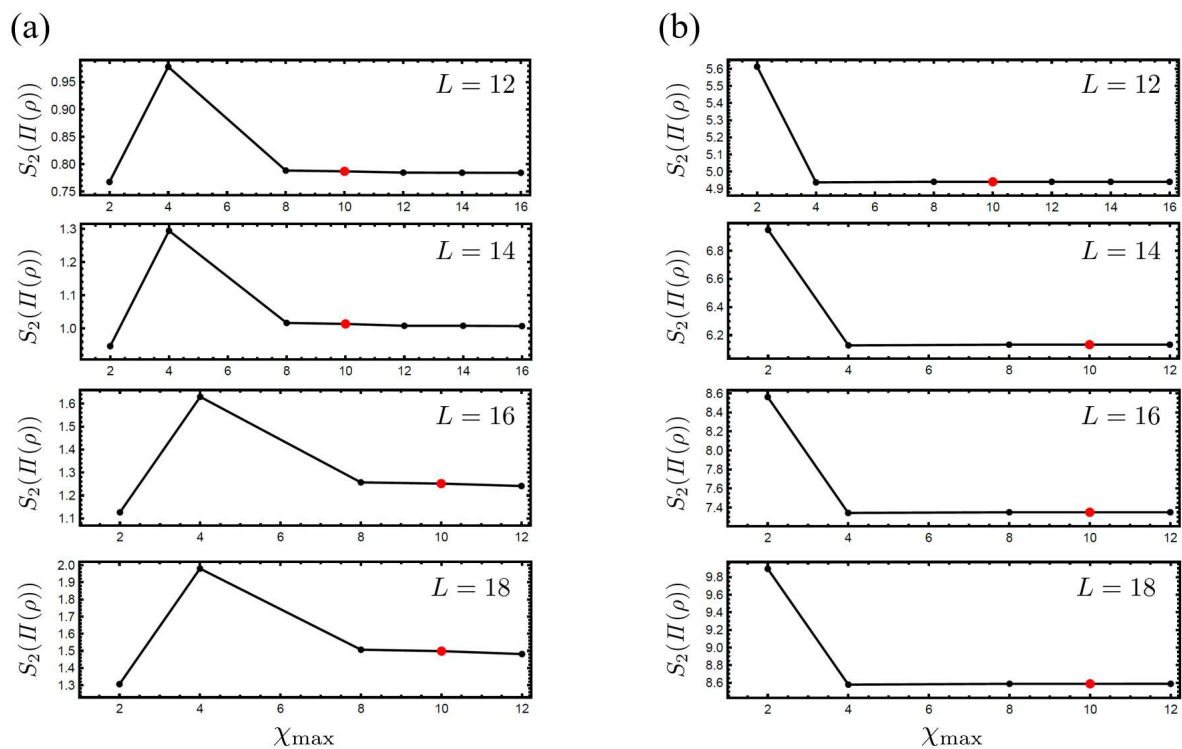


図 B.2 (a) 強磁性及び (b) 反強磁性相互作用する XXZ 鎖の基底状態に対する PIDM の Rényi エントロピーの最大ボンド次元依存性。データは $\Delta = 0.5$ において計算したものであり、本文中の計算結果は赤点での結果である。

参考文献

- [1] V. L. Ginzburg, and L. D. Landau, Journal of Experimental and Theoretical Physics **20**, 1064 (1950).
- [2] J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, Journal of Physics C: Solid State Physics **6**, 1181 (1973).
- [3] K. v. Klitzing, G. Dorda, and M. Pepper, Physical Review Letters **45**, 494 (1980).
- [4] C. E. Shannon, Bell System Technical Journal **27**, 379 (1948).
- [5] C. W. Helstrom, Information and Control **10**, 254 (1967).
- [6] C. W. Helstrom, Physical Letters A **25**, 101 (1967).
- [7] A. Kitaev and J. Preskill, Physical Review Letters **96**, 110404 (2006).
- [8] M. Levin and X.-G. Wen, Physical Review Letters **96**, 110405 (2006).
- [9] F. Pollmann, A. M. Turner, E. Berg, and M. Oshikawa, Physical Review B **81**, 064439 (2010).
- [10] A. M. Turner, F. Pollmann, and E. Berg, Physical Review B **83**, 075102 (2011).
- [11] G. M. D' Ariano, M. G. A. Paris, and M. F. Sacchi, Advances in Imaging and Electron Physics **128**, 205 (2003).
- [12] U. Fano, Reviews of Modern Physics **29**, 74 (1957).
- [13] M. Paris and J. Řeháček, Lecture Notes in Physics **649** *Quantum State Estimation* (Springer, Heidelberg, 2004).
- [14] M. Hayashi, *Asymptotic Theory in Quantum Statistical Inference: Selected Papers*, World Scientific (2005).
- [15] I. Bloch, Nature Physics **1**, 23 (2005).
- [16] I. Bloch, J. Dalibard, and S. Nascimbène, Nature Physics **8**, 267 (2012).
- [17] C. Gross and I. Bloch, Science **357**, 995 (2017).
- [18] Y. Takahashi, Proceedings of the Japan Academy, Series B **98**, 141 (2022).
- [19] R. Blatt and C. F. Roos, Nature Physics **8**, 277 (2012).
- [20] C. Monroe, W. C. Campbell, L. M. Duan, Z. X. Gong, A. V. Gorshkov, P. W. Hess, R. Islam, K. Kim, N. M. Linke, G. Pagano, P. Richerme, C. Senko, and N. Y. Yao, Reviews of Modern Physics **93**, 025001 (2021).
- [21] G. Tóth, W. Wieczorek, D. Gross, R. Krischek, C. Schwemmer, and H. Weinfurter, Physical Review Letters **105**, 250403 (2010).
- [22] T. Moroder, P. Hyllus, G. Tóth, C. Schwemmer, A. Niggebaum, S. Gaile, O. Gühne, and H. Weinfurter, New Journal of Physics **14**, 105001 (2012).
- [23] T. Gao, F. Yan, and S. J. van Enk, Physical Review Letters **112**, 180501 (2014).
- [24] R. H. Dicke, Physical Review **93**, 99 (1954).
- [25] A. Rényi, *On Measures of Entropy and Information*, University of California Press, Berkeley, California **1**, 547 (1961).
- [26] Y. Miyazaki, G. Marmorini, N. Furukawa, and D. Yamamoto, Physical Review A **110**, 052422 (2024).
- [27] J. J. Sakurai 著『現代の量子力学（上・下）』（吉岡書店）.
- [28] 石坂智・小川朋宏・河内亮周・木村元・林正人著『量子情報科学入門』（共立出版）.
- [29] Michael A. Nielsen, Isaac L. Chung 著『Quantum Computation and Quantum Information』（Cambridge University Press）.

- [30] 中田芳史著『量子情報理論：情報から物理現象の理解まで』（朝倉書店）。
- [31] 細谷 暁夫著『量子力学選書：量子と情報』（裳華房）。
- [32] 富田隆文著『物性物理と量子計算のための冷却原子入門』（第 68 回物性若手夏の学校テキスト）。
- [33] 中島秀太著『〈講義ノート〉冷却原子系を用いた量子シミュレーション実験』。
- [34] S. J. Devitt, W. J. Munro, and K. Nemoto, Reports on Progress in Physics **76**, 076001 (2013).
- [35] Z. Cai, R. Babbush, S. C. Benjamin, S. Endo, W. J. Huggins, Y. Li, J. R. McClean, and T. E. O’ Brien, Reviews of Modern Physics **95**, 045005 (2023).
- [36] A. Einstein, B. Podolsky, and N. Rosen, Physical Review **47**, 777 (1935).
- [37] A. Aspect, J. Dalibard, and G. Roger, Physical Review Letters **49**, 1804 (1982).
- [38] C. H. Bennett, D. P. DiVincenzo, J. A. Smolin, and W. K. Wootters, Physical Review A **54**, 3824 (1996).
- [39] C. H. Bennett, G. Brassard, C. Crépeau, R. Jozsa, A. Peres, and W. K. Wootters, Physical Review Letters **70**, 1895 (1993).
- [40] C. H. Bennett, H. J. Bernstein, S. Popescu, and B. Schumacher, Physical Review A **53**, 2046 (1996).
- [41] R. Islam, R. Ma, P. M. Preiss, M. E. Tai, A. Lukin, M. Rispoli, and M. Greiner, Nature **528**, 77 (2015).
- [42] A. M. Kaufman, M. E. Tai, A. Lukin, M. Rispoli, R. Schittko, P. M. Preiss, and M. Greiner, Science **353**, 794 (2016).
- [43] T. Brydges, A. Elben, P. Jurcevic, B. Vermersch, C. Maier, B. P. Lanyon, P. Zoller, R. Blatt, and C. F. Roos, Science **364**, 260 (2019).
- [44] H. Li and F. D. M. Haldane, Physical Review Letters **101**, 010504 (2008).]
- [45] R. Wanner, Physical Review A **40**, 4277 (1989). 6).
- [46] R. P. Feynman, International Journal of Theoretical Physics **21**, 467 (1982).
- [47] C. J. Pethick and H. Smith, *Bose–Einstein condensation in dilute gases*, Cambridge university press (2008).
- [48] I. Bloch, Nature Physics **1**, 23 (2005).
- [49] C. Becker, P. Soltan-Panahi, J. Kronjäger, S. Dörscher, K. Bongs and K. Sengstock, New Journal of Physics **12**, 065025 (2010).
- [50] G.-B. Jo, J. Guzman, C. K. Thomas, P. Hosur, A. Vishwanath, and D. M. Stamper-Kurn, Physical Review Letters **108**, 045305 (2012).
- [51] T. Uehlinger, G. Jotzu, M. Messer, D. Greif, W. Hofstetter, U. Bissbort, and T. Esslinger, Physical Review Letters **111**, 185307 (2013).
- [52] S. Fölling, S. Trotzky, P. Cheinet, M. Feld, R. Saers, A. Widera, T. Müller, and I. Bloch, Nature **448**, 1029 (2007).
- [53] S. Taie, R. Yamazaki, S. Sugawa, and Y. Takahashi, Nature Physics **8**, 825 (2012).
- [54] C. Hofrichter, L. Riegger, F. Scazza, M. Höfer, D. R. Fernandes, I. Bloch, and S. Fölling, Physical Review X **6**, 021030 (2016).
- [55] S. Taie, E. Ibarra-García-Padilla, N. Nishizawa, Y. Takasu, Y. Kuno, H.-T. Wei, R.-T. Scalettar, K. R. A. Hazzard, and Y. Takahashi, Nature Physics **18**, 1356 (2022).
- [56] D. Greif, M. F. Parsons, A. Mazurenko, C. S. Chiu, S. Blatt, F. Huber, G. Ji, and M. Greiner, Science **351**, 953 (2016).
- [57] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hänsch, and I. Bloch, Nature **415**, 39 (2002).
- [58] T. Tomita, S. Nakajima, I. Danshita, Y. Takasu, and Y. Takahashi, Science advances **3**, e1701513 (2017).
- [59] G. Barontini, R. Labouvie, F. Stubenrauch, A. Vogler, V. Guarrera, and H. Ott, Physical Review Letters **110**, 035302 (2013).
- [60] T. Tomita, S. Nakajima, I. Danshita, Y. Takasu, and Y. Takahashi, Science Advances **3**, e1701513 (2017).
- [61] W. S. Bakr, J. I. Gillen, A. Peng, S. Fölling, and M. Greiner, Nature **462**, 74 (2009).
- [62] C. Weitenberg, M. Endres, J. F. Sherson, M. Cheneau, P. Schauß, T. Fukuhara, I. Bloch, and S. Kuhr,

- Nature **471**, 319 (2011).
- [63] E. Haller, J. Hudson, A. Kelly, D. A. Cotta, B. Peaudecerf, G. D. Bruce, and S. Kuhr, Nature Physics **11**, 738 (2015).
- [64] C. Gross and W. S. Bakr, Nature Physics **17**, 1316 (2021).
- [65] M. F. Parsons, A. Mazurenko, C. S. Chiu, G. Ji, D. Greif, and M. Greiner, Science **353**, 1253 (2016).
- [66] A. Mazurenko, C. S. Chiu, G. Ji, M. F. Parsons, M. Kanász-Nagy, R. Schmidt, F. Grusdt, E. Demler, D. Greif, and M. Greiner, Nature **545**, 462 (2017).
- [67] F. Nogrette, H. Labuhn, S. Ravets, D. Barredo, L. Béguin, A. Vernier, T. Lahaye, and A. Browaeys, Physical Review X **4**, 021034 (2014).
- [68] H. Bernien, S. Schwartz, A. Keesling, H. Levine, A. Omran, H. Pichler, S. Choi, A. S. Zibrov, M. Endres, M. Greiner, V. Vuletić, and M. D. Lukin, Nature (London) **551**, 579 (2017).
- [69] A. Browaeys and T. Lahaye, Nature Physics **16**, 132 (2020).
- [70] P. Scholl, M. Schuler, H. J. Williams, A. A. Eberharter, D. Barredo, K.-N. Schymik, V. Lienhard, L.-P. Henry, T. C. Lang, T. Lahaye, A. M. Läuchli, and A. Browaeys, Nature (London) **595**, 233 (2021).
- [71] S. Ebadi, T. T. Wang, H. Levine, A. Keesling, G. Semeghini, A. Omran, D. Bluvstein, R. Samajdar, H. Pichler, W. W. Ho, S. Choi, S. Sachdev, M. Greiner, V. Vuletić, and M. D. Lukin, Nature (London) **595**, 227 (2021).
- [72] D. Barredo, H. Labuhn, S. Ravets, T. Lahaye, A. Browaeys, and C. S. Adams, Physical Review Letters **114**, 113002 (2015).
- [73] S. de Léséleuc, V. Lienhard, P. Scholl, D. Barredo, S. Weber, N. Lang, H. P. Büchler, T. Lahaye, and A. Browaeys, Science **365**, 775 (2019).
- [74] A. Aspuru-Guzik and P. Walther, Nature Physics **8**, 285 (2012).
- [75] C. Noh and D. G. Angelakis, Reports on Progress in Physics **80**, 016401 (2016).
- [76] A. A. Houck, H. E. Türeci, and J. Koch, Nature Physics **8**, 292 (2012).
- [77] R. Barends, J. Kelly, A. Megrant, A. Veitia, D. Sank, E. Jeffrey, T. C. White, J. Mutus, A. G. Fowler, B. Campbell, Y. Chen, Z. Chen, B. Chiaro, A. Dunsworth, C. Neill, P. O' Malley, P. Roushan, A. Vainsencher, J. Wenner, A. N. Korotkov, A. N. Cleland, and J. M. Martinis, Nature **508**, 500 (2014).
- [78] D. M. Greenberger, M. A. Horne, A. Shimony, A. Zeilinger, American Journal of Physics **58**, 1131 (1990).
- [79] M. S. Kaznady and D. F. V. James, Physical Review A **79**, 022109 (2009).
- [80] N. Kiesel, C. Schmid, G. Tóth, E. Solano, and H. Weinfurter, Physical Review Letters **98**, 063604 (2007).
- [81] H. Häffner, W. Hänsel, C. F. Roos, J. Benhelm, D. Chek-al-kar, M. Chwalla, T. Körber, U. D. Rapol, M. Riebe, P. O. Schmidt, C. Becher, O. Gühne, W. Dür, and R. Blatt, Nature **438**, 643 (2005).
- [82] W. Dür, G. Vidal, and J. I. Cirac, Physical Review A **62**, 062314 (2000).
- [83] C. F. Roos, M. Riebe, H. Häffner, W. Hänsel, J. Benhelm, G. P. T. Lancaster, C. Becher, F. Schmidt-Kaler, R. Blatt, Science **304**, 1478 (2004).
- [84] H. Häffner, W. Hänsel, C. F. Roos, J. Benhelm, D. Chek-al-kar, M. Chwalla, T. Körber, U. D. Rapol, M. Riebe, P. O. Schmidt, C. Becher, O. Gühne, W. Dür, and R. Blatt, Nature (London) **438**, 643 (2005).
- [85] 西野友年 著『テンソルネットワークの基礎と応用』(サイエンス社) .
- [86] 西野友年 著『テンソルネットワーク入門』(講談社) .
- [87] G. Vidal, Physical Review Letters **91**, 147902 (2003).
- [88] S. Östlund and S. Rommer, Physical Review Letters **75**, 3537 (1995).
- [89] S. R. White, Physical Review Letters **69**, 2863 (1992).
- [90] S. R. White, Physical Review B **48**, 10345 (1993).
- [91] U. Schollwöck, Annals of physics **326**, 96 (2011).
- [92] G. Vidal, J. I. Latorre, E. Rico, and A. Kitaev, Physical Review Letters **90**, 227902 (2003).

- [93] S. Tomonaga, Progress of Theoretical Physics **5**, 544 (1950).
- [94] J. M. Luttinger, Journal of Mathematical Physics **4**, 1154 (1963).
- [95] M.Haldane, J. Phys. C **14**, 2585 (1981).
- [96] P. Pfeuty, Annals of Physics **57**, 79 (1970).
- [97] T. J. Osborne and M. A. Nielsen, Physical Review A **66**, 032110 (2002).
- [98] W. K. Wootters, Physical Review Letters **80**, 2245 (1998).