前回のつづき

$\mathcal{L}(\mathcal{H}) = \{ A \mid A : \mathcal{H} \xrightarrow[\text{linear}]{} \mathcal{H} \}$ 正方行列全体 ベクトル空間

$\langle\langle A, B \rangle\rangle = \mathrm{Tr}\, A^* B$: Hilbert - Schmidt 内積

Lem

$A, B \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$, $A \geq 0$ $B \geq 0$ について

$\mathrm{Tr}\, AB \geq 0$

等号成立 $(\mathrm{Tr}\, AB = 0) \Leftrightarrow AB = 0$

$\because$ $\mathrm{Tr}\, AB = \mathrm{Tr} \sqrt{A}\sqrt{A}\sqrt{B}\sqrt{B} = \mathrm{Tr}(\sqrt{B}\sqrt{A})(\sqrt{A}\sqrt{B})$

$= \mathrm{Tr}(\sqrt{A}\sqrt{B})^*(\sqrt{A}\sqrt{B})$

$= \langle\langle \sqrt{A}\sqrt{B}, \sqrt{A}\sqrt{B} \rangle\rangle \geq 0$

等号成立 内積の性質(3)

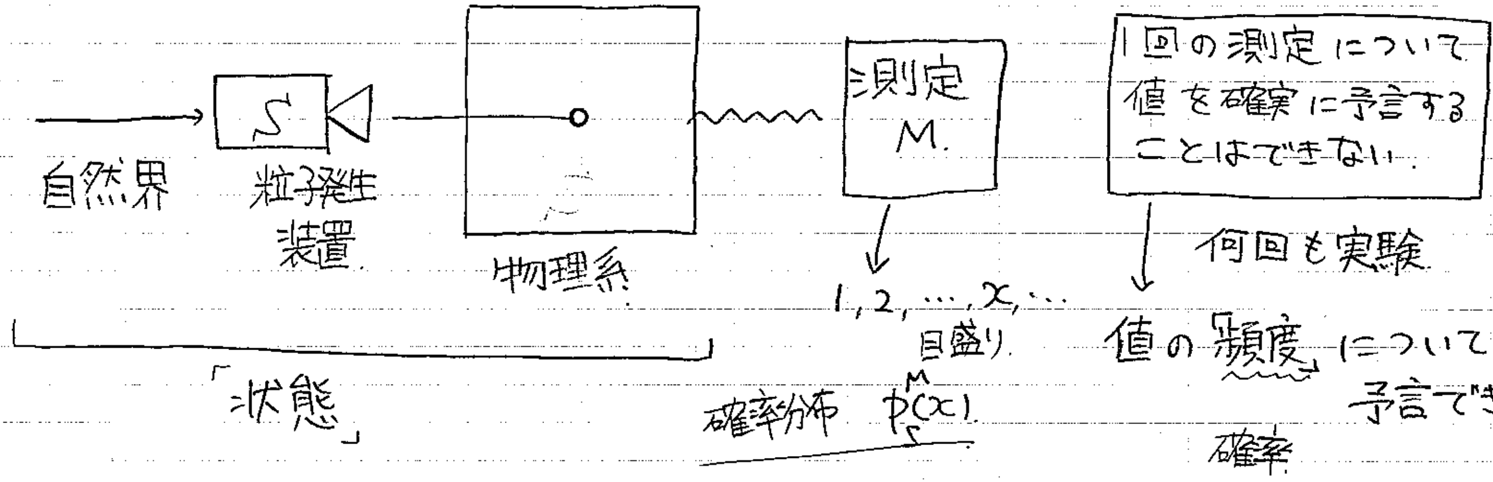
$\Leftrightarrow \sqrt{A}\sqrt{B} = 0$

$\Rightarrow AB = 0$ 左から$\sqrt{A}$, 右から$\sqrt{B}$をかける

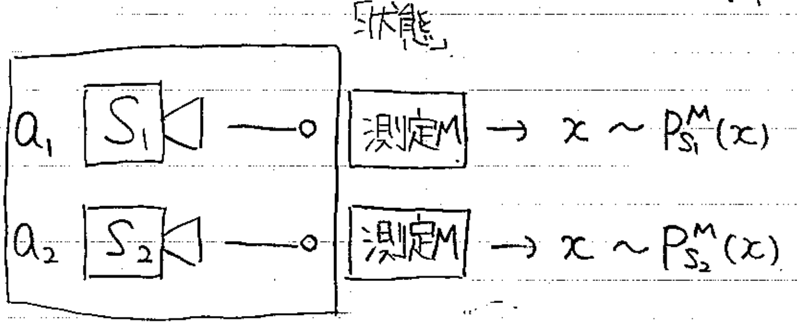
$\Rightarrow \mathrm{Tr}\, AB = 0$ (等号成立)

3. 量子系の状態と測定

3-1. イントロ



「状態」全体は凸集合の性質を持つ.



$a_1 + a_2 = 1,\ 0 \leq a_i \leq 1$

・S_1, S_2 はそれぞれ確率 a_1, a_2 で選ばれるとする.

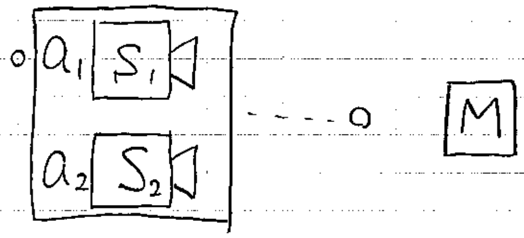
このとき測定値の従う確率分布は,

$$a_1 P_{S_1}^M(x) + a_2 P_{S_2}^M(x)$$

になっている.

∵ 状態のラベルと測定値の同時確率は,

$$P(S_i, x) = a_i P_{S_i}^M(x) \qquad i \in \{1, 2\}$$



「状態」S

※ 確率論的な話題(量子に限らない)

(1) 確率的重ね合わせも状態 S　　凸性

(2) $P_S^M(x) = a_1 P_{S_1}^M(x) + a_2 P_{S_2}^M(x)$　　アファイン性 affine性

数学的なFact.

(1)の性質をみたす.

[ ]：測定によって得られる同値類の代表元
同じ測定結果が得られる

$$\left(\underset{\text{凸性}}{[S] = a_1[S_1] + a_2[S_2]} \right)$$

集合はベクトル空間内の凸部分集合で表現される.

例として, 古典確率論や量子力学などがある.(他にもある)

Remark

測定とは.

$$\underset{S}{\text{状態}} \xrightarrow[\text{affine写像}]{M} P_S^M(x) \quad \text{確率}$$

3-2 量子力学の公理

量子系は Hilbert空間 $\mathcal{H}$ 上の $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ の中で表現される.

(1) 状態 $\rho \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ は.

$$\rho \geq 0, \ \mathrm{Tr}\rho = 1.$$

のような ρ と表現される. 以下では状態全体を

$$\mathcal{S}(\mathcal{H}) = \{ \rho \in \mathcal{L}(\mathcal{H}) \mid \rho \geq 0, \mathrm{Tr}\rho = 1 \}$$

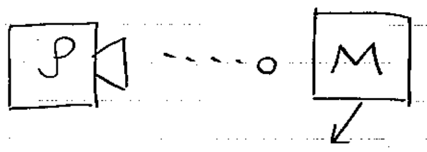
と表す. ($\mathcal{S}(\mathcal{H})$の要素を行列とみたときは.密度行列と呼ばれる)
density operator

(2) 測定 は以下の写像

$$\mathcal{S}(\mathcal{H}) \ni \overset{\text{状態}}{\rho} \longmapsto \underset{\text{確率}}{P_\rho^M(x)} = \mathrm{Tr}\rho M_x$$

ただし, $M_x \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$

$$M_x \geq 0, \ \sum_{x \in \mathcal{X}} M_x = I \qquad \mathcal{X}：\text{測定値全体}$$



$$\underbrace{\{1,2,3,\cdots,x,\cdots\}}_{=\mathcal{X}}$$

$$P_\rho^M(x) = \mathrm{Tr}\,\rho M_x$$

の確率で、測定値xが得られる。

◦ このようなM_xの組

$$M = (M_x)_{x\in\mathcal{X}} = \{M_1, M_2, M_3, \cdots, M_x, \cdots\}$$

をPOVM (Positive Operator Valued Measure) とよぶ。

POVM Mを測定とよぶことにする。

◦ $P_\rho^M(x)$は確率 (0以上で 全て足すと1)

$$P_\rho^M(x) = \mathrm{Tr}\,\underset{\overset{\vee\!\shortmid}{0}}{\rho}\,\underset{\overset{\vee\!\shortmid}{0}}{M_x} \geq 0.$$

$$\sum_{x\in\mathcal{X}} P_\rho^M(x) = \sum_{x\in\mathcal{X}} \mathrm{Tr}\,\rho M_x = \mathrm{Tr}\,\rho \sum_{x\in\mathcal{X}} M_x$$

$$= \mathrm{Tr}\,\rho I = \mathrm{Tr}\,\rho = 1.$$

量子系の公理として、他に

◎測定後の状態変化

◎孤立系の時間発展

今はやらない。

3-3 古典系との対応

$\rho \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ $(\rho \geq 0,\ \mathrm{Tr}\rho = 1,\ \rho = \rho^*)$ $n = \dim \mathcal{H}$

$$\rho = \sum_{j=1}^{n} \lambda_j |e_j\rangle\langle e_j| \qquad (\text{固有値分解})$$

ρの固有値 $\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n$ は確率分布になる.

$\because$ $\rho \geq 0$ より $\forall j\ \lambda_j \geq 0$.

また固有値分解をしているので $(|e_1\rangle, \cdots, |e_n\rangle)$ は ONS.

$$\because \mathrm{Tr}\rho = \sum_{j=1}^{n} \langle e_j | \rho | e_j \rangle$$

$$= \sum_{j=1}^{n} \langle e_j | \sum_{k=1}^{n} \lambda_k |e_k\rangle\langle e_k | e_j\rangle$$

$$1 = \sum_{j=1}^{n} \lambda_j$$

ONSを固定して考えると,

$$\rho = \begin{pmatrix} \boxed{\lambda_1 \ \ddots \ \lambda_n} & 0 \\ 0 & \end{pmatrix}$$

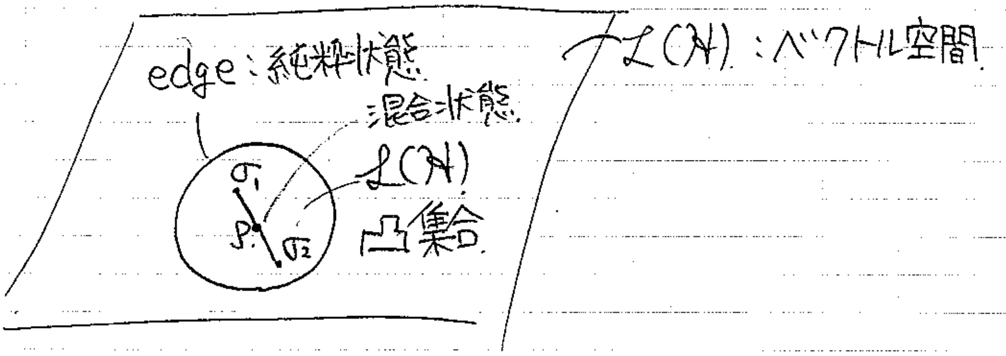
固有値, 確率ベクトル

ただし 同じONSのもとで 別の状態を考えると

$$\sigma = \begin{pmatrix} \boxed{\ \ddots\ } & * \\ * & \end{pmatrix}$$

対角成分以外に非零が現れる表現行列となる.

3-4. 純粋状態と混合状態



密度行列（≈状態）全体は凸集合

○凸性

Sを集合とする $\forall a \in (0,1)$ $\forall x, y \in S$, $ax+(1-a)y \in S$

$\Updownarrow$ def

Sは凸集合

—

$\sigma_1, \sigma_2 \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ $\forall a \in (0,1)$. $\rho = a\sigma_1 + (1-a)\sigma_2$

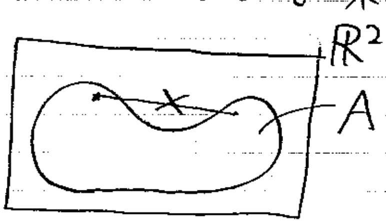
ここで $\rho \geq 0$ は明らか また

$$\mathrm{Tr}\rho = \mathrm{Tr}(a\sigma_1 + (1-a)\sigma_2) = a\,\mathrm{Tr}\sigma_1 + (1-a)\mathrm{Tr}\sigma_2$$
$$= a + (1-a) = 1$$

$\therefore \rho \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$

$\therefore \mathcal{L}(\mathcal{H})$は凸集合 $\lrcorner$

※以下のような集合は凸集合でない



Def：混合状態

$\exists \sigma_1, \sigma_2 \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ $\exists a \in (0,1)$

$\rho = a\sigma_1 + (1-a)\sigma_2$, $\sigma_1 \neq \sigma_2$

$\Updownarrow$ def

ρは混合状態 (mixed State)

◎ ρ は混合状態でないとき、純粋状態という. (pure state)