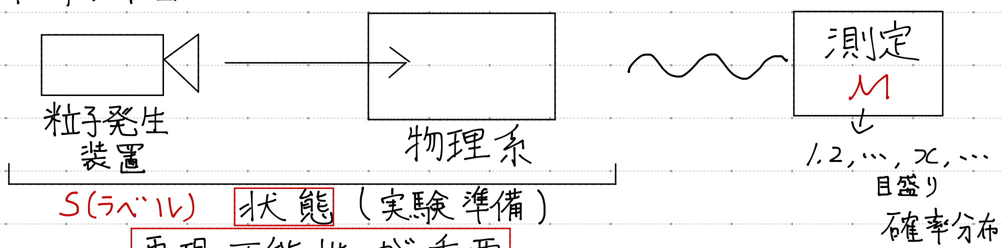
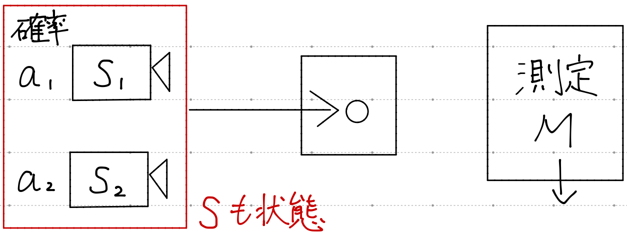
3-1 イントロ



S(ラベル) 状態 (実験準備)

再現可能性が重要

「状態」は凸集合の性質をもつ



Sも状態

$a_1 + a_2 = 1$

$a_1, a_2 \geq 0$

確率分布は

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

となる。

∵ $i = 1, 2$ ラベル

$P(i, x) = a_i P_{S_i}^M(x)$

これを周辺化する。

2つの状態 S, T に対して

$\forall M$: 測定

$$P_S^M(x) = P_T^M(x) \quad (\forall x)$$

となるとき、SとTは同じ状態とみなす。

[S] (同値類)

(凸性 $[S] = a_1[S_1] \oplus a_2[S_2]$)　定義してない

このような凸性を持つラベル(状態)の集合

≀≀

ベクトル空間の凸部分集合

$\mathcal{L}(\mathcal{H})$ (正方行列全体)　　$\mathcal{S}(\mathcal{H})$ トレース1, 非負定値

量子力学 ⊂ 一般確率論 というのもある。

3-2 量子系の公理

量子系は $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ で表現される。

(1) 状態 $\rho \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$, $\rho \geq 0$, $\mathrm{Tr}\rho = 1$　　cf. pure state $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ これが波動関数

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

状態全体

$\rho \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ を密度行列 (density operator)

(2) 測定

$$S(\mathcal{H}) \xrightarrow[\text{affine map}]{} \text{確率分布 全体}$$

$$\left[P^M_{a_1\rho_1+a_2\rho_2}(x) = a_1 P^M_{\rho_1}(x) + a_2 P^M_{\rho_2}(x)\right]$$

これは次の形で書ける (一意に書ける)

$$P^M_\rho(x) = \mathrm{Tr}\,\rho M_x$$

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

$$M_x \geq 0, \quad \sum_x M_x = I$$

を満たす $\{M_x\}$

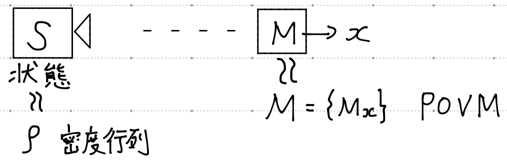
非負定値行列の集合

測定値 1, 2, 3, $\{M_1, M_2, M_3\}$ $M_1, M_2, M_3 \geq 0$, $M_1+M_2+M_3 = I$

$\{M_x\} \equiv$ 測定, POVM (Probability Operator Valued Measure) と呼ぶ

(作用素値確率測度)

$P^M_\rho(x) = \mathrm{Tr}\,\rho M_x$



P^M_ρ が確率になる (確認)

$\rho \geq 0$, $M_x \geq 0$ より $\mathrm{Tr}\,\rho M_x \geq 0$

$$\begin{aligned} \sum_x \mathrm{Tr}\,\rho M_x &= \mathrm{Tr}\,\rho \underbrace{\left(\sum_x M_x\right)}_{I} \quad \text{POVMの定義} \\ &= \mathrm{Tr}\,\rho \quad \text{密度行列の定義} \\ &= 1 \end{aligned}$$

量子力学の公理 (今はやらない)

- 測定後の状態変化
- 状態の時間発展

3-3 古典系との対応

$\rho \in S(\mathcal{H})$ $\dim \mathcal{H} = n$

$$\rho = \sum_{k=1}^{n} \lambda_k |e_k\rangle\langle e_k| \quad \text{固有値分解}$$

$$\approx \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & 0 \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \lambda_n \end{pmatrix}$$

ONS $|e_k\rangle$

$\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n$ は確率分布

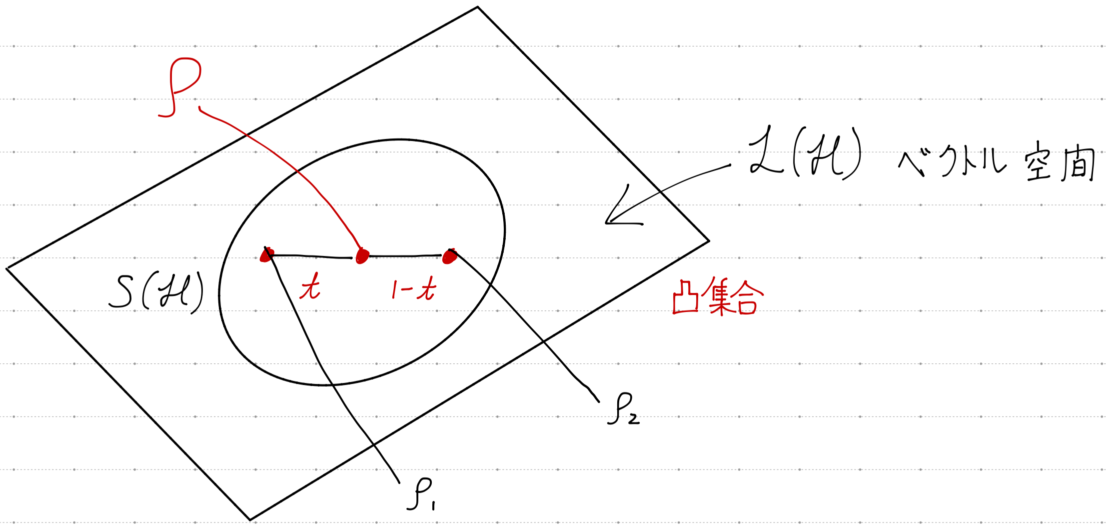
同じ ONS で別の状態 $\sigma \in S(\mathcal{H})$ を考えると

$$\sigma = \begin{pmatrix} \ddots & 0 \\ 0 & \ddots \end{pmatrix}$$

確率

一般には同時対角化できない.

3-4 純粋状態と混合状態



凸集合

$(1-t)\rho_1 + t\rho_2 \in S(\mathcal{H})$

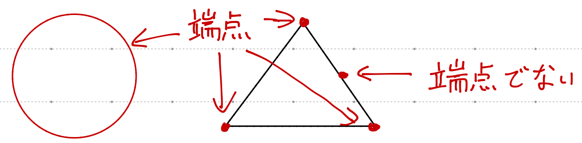
ベクトルの内分

流れ

◎ 凸集合の $\boxed{\text{端点}}$ (はじっこ) ⟶ 純粋状態

◎ 端点でない ⟶ 混合状態

例



Def 混合状態 (mixed state)

$\exists \sigma_1, \sigma_2 \in S(\mathcal{H})$, $\sigma_1 \neq \sigma_2$

$\exists t$, $0 < t < 1$

$\rho = (1-t)\sigma_1 + t\sigma_2$

となるとき ρ を $\boxed{\text{混合状態}}$ という

Def 純粋状態 (pure state)

混合状態でない状態を純粋状態という。

Lem $\rho \in S(\mathcal{H})$ について以下は同値

(1) ρ は pure state

(2) $\exists |\psi\rangle \in \mathcal{H}$, $\|\psi\| = 1$, $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ ← $|\psi\rangle$ は状態ベクトル

(3) ρ の固有値 $\lambda_1 \cdots \lambda_n$ ($n = \dim \mathcal{H}$) について唯一 1 をとり他は 0

(4) $\mathrm{rank}\, \rho = 1$

状態ベクトルの ONS $\{|e_k\rangle\}$ についての成分 $\langle e_k|\psi\rangle (= \underset{\text{波動関数}}{\underline{\psi(k)}})$

<u>証明</u> (2) $\Leftrightarrow$ (3) $\Leftrightarrow$ (4) を示す

固有値分解を考える

$$\rho = \sum_k \lambda_k |e_k\rangle\langle e_k|$$

これより (2) $\Leftrightarrow$ (3) は明らか。

$$\mathrm{rank}\,\rho := \dim \mathrm{Im}\,\rho$$
$$= \dim \{\rho|x\rangle \mid |x\rangle \in \mathcal{H}\}$$

$\rho|x\rangle$ の動く範囲を考える

$$|\lambda_1| \geq |\lambda_2| \geq \cdots \geq |\lambda_r| \neq 0$$
$$\lambda_{r+1} \cdots \lambda_n = 0$$

固有値を絶対値順に並べる

$$\rho = \sum_{k=1}^{r} \lambda_k |e_k\rangle\langle e_k|$$
$$\rho|x\rangle = \sum_{k=1}^{r} \lambda_k |e_k\rangle\langle e_k|x\rangle$$
$$= \sum_{k=1}^{r} \lambda_k \boxed{\langle e_k|x\rangle} |e_k\rangle$$

$\langle e_k|x\rangle$ は任意に動かせる。よって,

$$\mathrm{Im}\,\rho = \mathrm{span}\{|e_1\rangle \cdots |e_r\rangle\}$$
$$\dim \underset{\mathrm{rank}\,\rho}{\underset{\shortparallel}{\mathrm{Im}\,\rho}} = r$$

よって 0 でない固有値の個数が rank であり

これより, $\sum_k \lambda_k = 1$ と合わせて (3) $\Leftrightarrow$ (4)