弱値概念と基礎

てんそる (KEK,UTokyo)

平成 29 年 3 月 23 日

目 次

1　状態概念と測定

量子力学を学ぶと意識されるが、古典では意識されない概念として「状態」と「測定」が挙げられる。高校以降[1]物理を学ぶ時にこれらは実際のところは素朴には思うところではあると思うが、ほとんど整理されていない。そこで、あえて古典版を考え、そして、量子論におけるそれを理解しようと思う。

我々が物事を認識する時は常に、何らかの区別を与える。例えば、箱に物を入れる時に、それが「入った」状態と「入っていない」という状態を定義し、いずれかで判定するというような寸法で、箱の中の状態に意味を与えて、それでもって区別を与えておき、与えた区別を元にして物事を認識する。

今の場合はあるかないかの「二値」問題だが、ものさしで長さを図るような問題にすれば多値の問題になる。物事を認識して、理解する上で都合のいいように使うモデルは常に取り替えられるもので、都合が悪い時には別の手法を使うことで必要に応じた、曖昧さのない、認識のモデルを作る努力をしてきているし、おおよそ科学の対象として成立させてきた物事というのは、必要な程度で、それに成功したものだと言えるだろう。したがって、我々は何らかの尺度で、曖昧さなしに、適切な区別を与えて、認識ができるモデルを生成できる、と考えて良いだろう。

物理の議論というのは、何か特徴付けるような区別をいくつか用意した時、それらの一部を決定しただけで、他の性質を論理的非自明ながらなぜか決定できてしまう場合に、その非自明な部分を究明するのが大きな柱となっている。例えば熱力学の場合、「示量変数」と「示強変数」があるが、前者を決めてしまえば、後者がなぜか決まってしまうという現象に対して、その決まってしまう値がどうすれば求められるか、を教えてくれる。

このように、一部の変数を決めたら他全部が決まってしまうというのであれば、その一部の変数を知ってれば、物理系の情報を全部押さえてしまっていて物理系そのものを認知の枠で捉え切ったかのように思う事もあるだろう。ともかく、物理の理論として、得られる最大限の情報を一意に確定させるような物を「状態」と呼ぶ。熱力学の理論であれば、それは「示量変数」のペアを一つ決めるごとに対応する熱力学系に対していうべきだろう「状態」という言葉を、少なくとも熱力学の理論の文脈では変数のペアを知ってるだけで他全部わかるわけだからペア自信を「状態」と言っても差し支えないだろう、という形でペアを状態と呼んでいる。

古典の場合、状態はもちろんモデル依存ではあるのだが、先に述べたような「区別」のうち、他の特徴を決定できる必要十分な変数で選べば良い。そして、もっと大事なのは、変数のペアのうち、1つでも異なる数値を取る状態があれば、それは明確に「違う状態」である。ということが古典の特徴である。

[1]小中学校理科でないとは限らないがあまり意識はしないだろう。

では、量子力学ではどうか、というと、量子力学の場合は、古典で区別されるような状態だけではないのではないか、と考える。つまるところ何かと言うと、そもそもの議論、我々がその数値を知るには、「測定」という行為が必ずあるが、そういった行為は果たして常に考える物理系に影響を必ず与えないようにできるのだろうか、という問題がある。例えば、長さを決めるためにものさしを当てるが、ものさしを当てたことは何か別の特徴に対して影響を与える可能性がある。影響を絶対に与えないという保証はどこにあるのだろうか。

したがって、何かを測定したとしても、もし別の何かを測定すると、後ろの測定が原因で最初の測定結果がずれてしまうかもしれない。しかもそれが本質的なもので、どんな技術改良によっても避けられない可能性もあるだろう。

量子力学ではそのような影響を記述するために、次のような発想をする。すなわち、古典的に区別する認識では足らずに、それらに「ベクトル性」を与え、つまり、スカラー倍や足し算を認めて、そこで得られた結果をも「状態」に認めさせ、そのようなものが一般的な状態であるものとする。先の「有無」の区別であれば、有を $|1>$、無を $|0>$ などという書き方をすることにして、一般的な状態 $|\Psi>$ は

$$|\Psi >= c_1|1> + c_0|0>$$

とするようなものであると考える。もちろん実際には測定したら有るかないかのいずれかな訳だが、そのいずれかに当たるのは $c_1 = 0, c_0 = 1$ ないしその逆というような場合にすればいいわけで、ある意味で古典的な認識を拡張したものである。もっとも、現状ではそのような古典的な状態と違う状態がどんな意味を持つのかは全くわからない。この拡張された状態のことを「重ね合わせ状態」といい、量子力学の特徴の一つである。のちにそれについての一般的に認められている議論をする。

次に、測定の議論をする。といっても、一般的な測定方法ほどのことは考えずに、状態から簡単にその状態を特徴付けるパラメータを取り出すこととする。その時には、あるかないかの議論であれば、あるもしくはないことが明らかという経験事実と照らして、測定という行為は状態を変化させてしまい、その後の測定は全て同じ結果を引き出すということが言えるだろう。先のあるないのベクトルで考えれば、それの基底になっている $|1>$ もしくは $|0>$ になってしまう。このように、ベクトルのとある基底の方向になってしまうという意味で「射影測定」という。

この時、一般的な状態から観測でどの状態になるか、と結合の係数について、ボルンの確率仮説と呼ばれるものがあり、係数の絶対値自乗が確率 (連続量の場合は確率密度) を与えると考えられている。

射影測定は一般の測定の議論ではない。実際、測定装置は我々が考えている物理系とは違うもので、それと調べる物理系の相互作用があるはずだし、だいたい、実際に測定できる量と測定したい量が違うことがほとんどの場合である。例えば γ 線のエネルギーを調べ

たい時、γ 線をシンチレータという装置に入射させ、シンチレータ内で光電吸収ないしコンプトン散乱を起こし、それで出てきた光電子のエネルギーが周りの電子を励起状態にすることで静止していくが、励起させる電子の数が多いほど同時にでる光子数が多いことになるため、光の強さとエネルギーには対応があり、これをさらに光電子増倍管で電流の信号に変換する。したがって、最終的に測定するのは電流である。電流の強さとエネルギー強度には対応があるというわけだ。しかし、電流と γ 線エネルギーは全く別のものである。その意味で、測定プロセスの議論はより丁寧な議論をする場合には、射影単独だけで考えないことが多い。

2 弱値の概念

弱値とは状態が $|i>$ から $|f>$ に変化するような時に、物理量 $\hat{A}$ に対して次のように定義される量である。

$$A_w = \frac{<f|\hat{A}|i>}{<f|i>}$$

という形で定義される。したがって、弱値とは、欲しい物理量に対し、初期状態と終状態によって一意に決定されるもので、終状態を指定できるような実験であれば、そのような値は決定可能なのである。

我々が通常の測定で見るのは射影した値であるが、一つの問題として、

その実験でどの値が見られるかは判定できない

という問題がある。つまり、実験をした時、実際に測定される値がどのような値になるかを量子力学では「候補」とその「確率」までは教えてくれるが、実際にその値になるということまでは何も教えてくれない。一方で、弱値は実験ごとに決定可能な物理量であり、基礎論的な意味で興味を持たれているようである。

弱値は状態ベクトルに「次元」があると考えれば、オペレータと同じ次元を持つ量で、確かに何か意味がありげな量に見えるのだが、この量の変な特徴として、「弱値のとりうる値はオペレータの固有値の外に出ることがある」ということが挙げられる。この特徴はある程度自明なところで、始状態と終状態とが直交していれば分母は 0 だが、その時に値が発散しないなどというのであれば、分子も 0 にならなくてはならないが、オペレータは一般的には直交している状態を曲げて、平行な成分を作り出すようなものもあるから当然である。

ところで量子情報理論などの枠組みを考える時や、スピンのようなものを考える時にはオペレータは 2 値のものを考えることが多い。私が Lee のモデルを適用した実験も、前任者の森澤が担当していた、2008 年の Hosten の実験でも 2 値型の演算子の弱値を見ていた。そこで、演算子を 2 値型のものとして、次のようなものにする。

$$\hat{A} = |1><1| - |-1><-1|$$

上記オペレータがあった時、$|1>$ は固有値 1 を返す固有状態で、$|-1>$ は固有値-1 を返す固有状態であると考えられ、状態はこの二つの線型結合によって完全に記述できるような現象を考える。

$$|i>= c_1|1> +c_2|-1>$$
$$|f>= c_3|1> +c_4|-1>$$

と置くことにする。この時 A_w は

$$A_w = \frac{c_1c_3^* - c_2c_4^*}{c_1c_3^* + c_2c_4^*}$$

となる。分母を 0 に近づけるようにすれば自明に発散していく様子がわかるだろう。

3　弱測定 (事後選択を伴う測定)

弱値という値があって、それが始状態のみならず終状態にも依存し、射影と違って、理論的に最後まで予測できるという利点はあるが、そんなものを実際に測定するすべはあるのか、という問題があるだろう。実際、終状態は「測定」というプロセスで決めるわけにはいかない。だが、ならばどうやって決めるのか、という話になってくるだろう。期待値であればたくさん実験すればいいが、弱値の場合は別にそういうわけでもない。のだが、弱値を (近似的に) 測定するすべが存在する。それは先に紹介したフォンノイマン型測定を上手に使う必要がある。

フォンノイマン型測定は、

1. 系と独立な測定系を用意し、(結合して) 相互作用できるようにする
2. ユニタリー発展で系と測定系を相互作用させる
3. 測定系を切り離し、測定系を射影測定する

というのがメソッドだが、3 の時に同時に「系の状態を限定する」という操作をするのが「ポストセレクション」である。

もっと具体的に式で表そう。系の状態を $|\Psi>$、測定系を $|Phi>$ と記述することにする。相互作用の直前の状態は

$$|\Psi> \otimes |\Phi>$$

と記述できる。これに対してユニタリー発展の演算子を、系に対してのエルミート演算子を $\hat{A}$、測定系に対してのエルミート演算子を $\hat{X}$ とし、十分小さなパラメータ g に対して $e^{-ig\hat{A}\otimes\hat{X}}$ と記述されるものとする。この時、ユニタリー発展後の状態は

$$e^{-ig\hat{A}\otimes\hat{X}}|\Psi> \otimes |\Phi>$$

と記述される。これに対して系の終状態を $|\Psi_f>$ にすることにすると、それは $|\Psi_f>$ への射影測定をしている[2]と考えて、射影測定したい測定系の状態 $|\Phi_f>$ は

$$|\Phi_f>=(<\Psi_f|e^{-ig\hat{A}\otimes\hat{X}}|\Psi>)|\Phi>$$

と記述できる[3]。

普通の射影測定を思い出そう。射影測定の時に求める「期待値」はどう計算すればよかったか。答えは、欲しい物理量のオペレータを $\hat{X}$ としたら $<\Psi|\hat{X}|\Psi>$ が期待値である。今はその操作を測定系の終状態について行う。今回の計算では B.Dixon の実験の例に照らしてユニタリー発展の演算子と測定の演算子が同一の例を見ることにする。まず、上記の式のカッコの係数を評価することにしよう。この係数の評価は面倒で 2 値型のオペレータの場合であれば厳密な評価は可能だが一般的なことを想定し、g が十分小さい[4]とすることで近似的に捉えることとする。

$e^{-ig\hat{A}\otimes\hat{X}}$ を指数についてのテーラー展開で 1 次までに限定して取り出す。すると $1-ig\hat{A}\times\hat{X}$ となる。これの左から終状態、右に始状態を選ぶことで、

$$<\Psi_f|\Psi>\otimes\mathrm{Id}-ig<\Psi_f|\hat{A}|\Psi>\otimes\hat{X}$$

弱値の定義を用いることで

$$<\Psi_f|\Psi>(\mathrm{Id}-igA_w\hat{X})$$

とすることができる。位置の期待値は g が 0 の場合に当初の期待値と一致するように規格化することで

$$<\Phi|\hat{X}|\Phi>-ig(A_w-A_w^*)<\Phi|X^2|\Phi>$$

となる。したがって、弱値の虚部から値が生じ、それが当初の位置の期待値からずれる値を返すようになっている。系から受ける測定系の変化はこのような形で弱値に比例するような形で得られるため、ポストセレクションをする実験では弱値 (今回の場合であればその虚部について) を実験的に得ることができる。

この式が指し示すところの意味は、測定系を物理系に取りつけた時に出てくる X の測定値は、物理系に取り付けずに X を測定した値に、同じく、取り付けなかった時の、分散の値を弱値の虚部の 2 倍と、g の積だけ足してくれ、というもので、弱値を含む第二項は物理系が測定系に与える影響を評価していると考えられる。

なお、高次項を評価した場合には、残念ながらそのような結果は得られない。その厳密な評価は今回扱った問題のように、$\hat{A}$ が 2 値の演算子で、$|\Phi>$ が計算しやすい、波動関数がガウス分布になっている簡単な例においては 2013 年の J.Lee,I.Tsutsui の論文によって示されている。

---

[2]欲しい物理量を知るための射影ではないが、系に対してどの状態かを指定する時には射影することになる。

[3]規格化はここでは考えていないことに注意する必要がある。

[4]B.Dixon の実験では 10^{-6} のような大きさになるためこの近似はほとんどの状況で正しい例である。

3.1 弱値に虚部は現れるか

弱値の定義に戻る。弱値の定義は

$$\frac{< f|\hat{A}|i >}{< f|i >}$$

である。$\hat{A}$ はエルミート演算子であるから、固有値は全て実数だが、この計算に出てくる内積は複素数に値をとる。したがって、一般的には複素数をとる。B.Dixon の実験の具体例ではむしろ実部が 0 となる例になっていて、具体的には、

$$|i >= \frac{1}{\sqrt{2}}(ie^{i\theta}|1 > +e^{-i\theta}| - 1 >)$$
$$|f >= \frac{1}{\sqrt{2}}(|1 > +i| - 1 >)$$

この計算では $A_w = -i \cot \theta$ となる。

4 B.Dixon の実験への実装

B.Dixon の実験では次のようなセットアップによって実現されている。まず、レーザー光を偏光状態を揃えてから、干渉計に入れる。その干渉計は Sagnac 干渉計というもので 50/50 の Beam Splitter を通じて光を経路に入れ、経路を一周させるが、この時、片方の出力ともう片方の出力が反対向きに光路をたどるようにする。

次に、HWP と呼ばれるものだが、こちらは偏光状態を 90 度回転させる装置である。また、SBC と呼ばれるものが入っているが、これは偏光ベクトルに対して相対位相を与える装置である。

光の経路がどちらを辿ったか、というものを量子状態と考え、フォトン 1 個 1 個に対して最後に検出器で出てくるときの波動関数を考える。Piezo-Driven Mirror を動かすことで光路がわずかにズレる。しかもそれは右向きか左向きかによって、光が辿り着くと想定される位置がズレる。このズレは幾何的にはミラーの傾きの sin に比例するが、このわずかなズレに過ぎないと予想されるそれが干渉を経ると増幅して捉えることができるというのが今回の実験である。ズレは先の計算に基づいて

$$2ka^2 \Im A_w$$

と予想される。このズレはビームの幅とシステム系の状態の指定によって、つまり、SBC の角度の指定によってなすことができる。ただし、$a = \sqrt{< \Phi|X^2|\Phi >}$ で定義している。

4.1 実験セットアップの理論における意味

理論において「システム系」と「メーター系」の 2 つの物理系が存在し、それらがノイマン型相互作用をすることが弱測定において重要なポイントである。

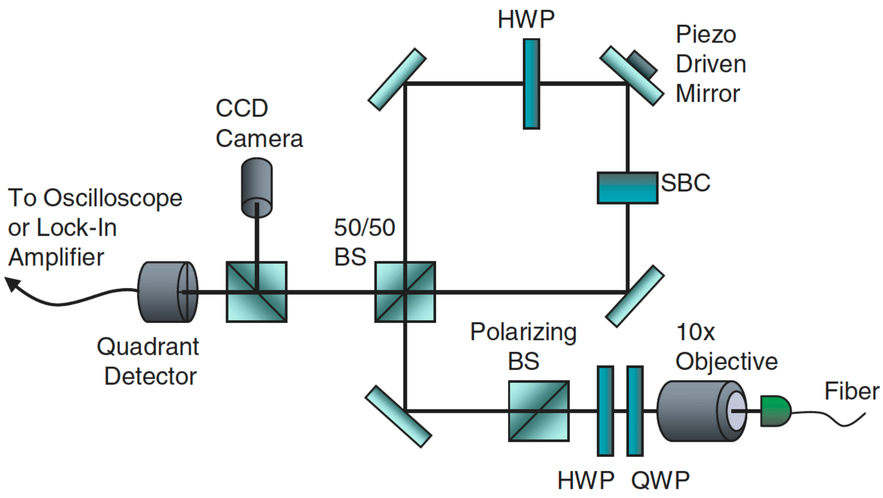

図 1: 実験のセットアップ

システム系はフォトンである。正確に言えば、干渉計の中にあるフォトンの状態であり、その固有状態は干渉計を「右回り」もしくは「左回り」か、という 2 値[5]で把握され、終状態は、フォトンのうち、ビームスプリッターを出てくる時、入った方とは逆側から出てきた、ということで指定する。一方で、始状態は干渉計に光を通して、右回りないし左回りでビームスプリッターに戻ってきて 2 つが干渉しているその時点で決定している。

メーター系はビームスプリッターを通過した後、漏れ出た光の行き着く位置測定器の上の位置の波動関数である。こうして 2 つの、本来独立な物理系が用意された[6]わけだが、ピエゾミラーによって少し傾きを与えることで光線が本来の光路とわずかに異なる光路をたどり、それが干渉を経て幾何的に予想されるよりはるかに大きなズレを引き起こす。幾何的に予想されるズレを

4.2　始状態と終状態の指定方法

弱値の定義上、始状態と終状態を指定する操作が必要である。今回の場合、それを担うのは二つの装置で「ビームスプリッター」と「SBC」である。

4.2.1　ビームスプリッターと干渉計

ビームスプリッターは今回の事後選択において最も重要な役割を果たす装置である。今回の配置において、ビームスプリッターに入った光は干渉によって元の入ったポートから出てくる。ビームスプリッターは 50:50 で、ロスのない出力をするものとして考える。この時、ビームスプリッターには 4 つの面があるが、うちの 2 つずつで組みをなしており、

[5]正確には、SBC ないし HWP がない場合に右回りか左回りか、という状態で把握する。

[6]位置の波動関数を決定するのは今回のモデルにおいては入射するレーザービームの強度であると考えている。したがって、「右回り」か「左回り」か、と位置波動関数は本来は独立である。

A,B のいずれかに入射すると C,D に同一強度で出力されると考える。

量子力学的な認識においては、光子は A に入射した状態は C と D が均等に重ね合わされた状態として認識される。また、A と B は明確に違う状態であると同時に、C と D は明確に違う (観測によって得られる値) であるため、それぞれは直交状態である。

したがって、A,B を C,D に書き換える変換はユニタリー変換である。その変換行列を定式化しよう。ユニタリー変換であるから、$UU^{\dagger} = 1$ したがって、$|detU|^2 = 1$ であり、50:50 であるから、全成分の絶対値は $\frac{1}{\sqrt{2}}$ に限られる。これ以上のことについては、ビームスプリッターの仕様に応じて物によって異なるようだが、今回の実験では次のようなモデルであるようだ。

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{pmatrix} \tag{1}$$

これに任意性として $e^{i\theta}$ を施す任意性が残る。

干渉計は何もしなければ出てきた入力をそのまま元に戻す (逆行列は自分自身で、もう一回掛けると元の状態にされる)。したがって、A,B のあるポート側と、干渉計側すなわち C,D 側で異なる状態空間を貼るモデルを考えることになる。

ところでこれを古典的に考えれば、単に位相の変化による干渉現象である。したがって、量子力学的な位相を変えるには干渉の位相を変えれば良い。今回は SBC と呼ばれるものを使うことで得られる。

4.2.2 SBC

Soleil-Babinet Compensator という。誘電率異方性のある物質内部で電磁波を通すと電磁波の振動方向に応じて光速度がズレ、相対位相を与えることができる。この結晶の厚みを変えることで欲しい位相差を与える装置が SBC である。

SBC を用いると偏光状態同士に位相差が加わるのでポストセレクションとして非常に都合が良い。

5 弱測定の誤差論

弱測定の場合の誤差評価の手法の研究 [2] を B.Dixon の実験の場合に適用したのが私の初研究となった。ということで、弱測定の誤差論を簡単に紹介する。

弱測定であるが、基本的には実験であるから、実験装置の測定について誤差を考えれば良い。今回の実験は光子に対して波動方程式を考えるので、測定は光子１つ１つについて位置を測定し、統計をとっていると考えれば良い。その測定について、各種の誤差を評価

すれば良く、弱値特有の事情は各誤差の意味を見ながら考えることでわかる。

そこで、一般的な意味での誤差論を述べる。主には誤差は「系統誤差」「統計誤差」があるが、今回のように理論予想と比較する場合、理論計算で近似があれば、その近似が怪しい可能性が否定できない。弱値の場合には、今までに述べたように、ユニタリ発展の計算で近似をしているため、それに起因する計算の誤りに相当するズレ「近似誤差」を考える必要がある。

5.1 系統誤差

測定器の置かれている環境や測定方法の問題によって生ずる誤差である。この誤差は統計的なばらつきに起因するようなものではなく、有意な影響をもたらす可能性があるため危険な誤差であり、注意しなくてはならない。

例えば、とても簡単なものとしては、物差しの原点調整が悪いまま位置を測定するようなケースである。この場合、原点のズレに相当した誤差がすべての測定値に反映されてしまう。系統誤差の生じる原因は様々だが、常に一定程度のそれはあるものと考えなくてはならない。

Lee. の研究では系統誤差は「測定値によらず一定の数値以内である」という考え方をし、その最大値を決めておく”δ_Q uncertainty-model”を採用している。

5.2 統計誤差

確率的にばらつくことがわかっている現象を見たときに、実験で得られた頻度分布が理論的な確率分布と一致するかと言われると、そのようなことは厳密にはない。簡単な話が、コイントスで、コイントスでは確率それぞれ 1/2 な訳だが、この実験を一回行なった後の頻度分布はどちらかのみ 1 で、もう片方は 0 なのである。

確率的事象において、何らかの平均値を測定すると考えよう。つまり、ある値と、その値の頻度をかけ、全事象で割った値を見る。このとき測定できるのは「平均値」であって、「期待値」ではない。理論的に予想できるのは「期待値」である。この「期待値」と「平均値」のズレが「統計誤差」である。

弱値の場合には、終状態を与えて、その場合のフォトンのみを使って測定するので、

5.3 近似誤差

弱値特有の事象だが、3 節で見たように指数を一次で近似して弱値を取り出している。しかし、実際の計算で高次項を計算すると実は正しくない。その場合について、一般的に一次近似を使わずに計算できるのか、という問題があるが、J.Lee の研究では

- システム系の値が 2 値の時
- メーター系の波動関数がガウス型の時

については厳密な計算を行い、評価できることを書いてある。システム系が 2 値というのは量子情報においては非常に便利なものであり、メーター系がガウス型であるというのは、例えばレーザー光の位置の波動関数[7]など、よくある例になっている。したがって、かなり具体的な例であるが、かなり有用な近似誤差を与えるメソッドを提供している。

A　量子力学の基本的公理と性質

通常の量子力学では、次のような基本公理にしたがって教育される。

1. 状態はヒルベルト空間の要素である
2. 物理量は状態に対するエルミート演算子である
3. 状態を固有状態で展開した時、各固有状態の結合係数は、その複素ノルム二乗が、その状態を観測する確率である
4. 複合系はテンソル積空間によって記述される

ここから有用な定理をいくつか紹介する。

A.1　エンタングルメント

複合系はテンソル積空間によって記述されると述べた。系 2 つ (それぞれ A 及び B と呼ぶことにしよう) の複合系を考えよう。この時の A の状態空間を $\mathcal{H}_A$、B の状態空間を $\mathcal{H}_B$ と記述する。

この時の $\mathcal{H}_A$ の要素はその基底を用いて

$$|A>=\sum_i c_i|i>$$

同様に $\mathcal{H}_B$ の要素は

$$|B>=\sum_j d_j|j>$$

となる。テンソル積空間の基底は、これらの基底のテンソル積 $|i>\otimes|j>$ であり、一般に

$$|\Psi>=\sum_{i,j} e_{i,j}|i>\otimes|j>$$

のようになっている。この時、$|\Psi>=|A>\otimes|B>$ と記述できる場合とできない場合があり、前者を積状態、後者を"Entangled state" と呼ぶ。

[7] レーザーの場合はガウス型では厳密にはない

Entangled state の存在はほぼ自明で、なぜなら $|A> \otimes |B>$ で記述できるような状態は c_i と d_i を動かして組み合わせ $e_{i,j}$ を構成できる場合と言っているので、自由度はそれぞれの自由度の和である一方、$e_{i,j}$ の持つ自由度はそれらの積であり、一般には圧倒的に大きい。

具体例を見よう。よく使われるのはスピン系で

$$|\Psi>= \frac{1}{\sqrt{2}}(|1>|-1> - |-1>|1>)$$

である。こんな状態が積状態だとしたら以下の方程式が満たされねばならない。

$$c_1 d_1 = 0 \tag{2}$$
$$c_1 d_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \tag{3}$$
$$c_{-1} d_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}} \tag{4}$$
$$c_{-1} d_{-1} = 0 \tag{5}$$

2 の要請から、c_1 もしくは d_{-1} は 0 である。c_1 が 0 だとすると 3 に代入すると矛盾する。したがって、この状態は Entangled state である。

A.2 エルミート演算子は必ずユニタリー演算子で対角化でき、固有値は実である

後者から証明しよう。つまり、あるベクトル $|a>$ があって、エルミート演算子 $\hat{A}$ に対して、ケットに演算子が作用したとして計算すると

$$< a|\hat{A}|a >= a < a|a >$$

となるが、ブラに対して作用したとすると

$$< a|\hat{A}|a >= a^* < a|a >$$

したがって、これらが一致するには $a = a^*$ が満たされなくてはならない。

次に、ユニタリー演算子で対角化できるには、対角化するための基底が正規直交であることが求められる。が、固有状態にスカラー倍をかけたものも同じ固有値を示すので、正規性はそれでうまく調整すれば良い。一方で、直交性については、$\hat{A}|a >= a|a >, \hat{A}|b >= b|b >$ という固有状態を用意し、$< b|\hat{A}|a >$ をやはり同様に左側及び右側に作用する場合を考えて、それが等しいことを用いると $(b-a) < b|a >= 0$ を要請される。これはつまり、b と a が異なる場合、内積が 0 すなわち、直交していることになる。一方、同じの場合はというと、$|a>$ と $|b>$ が一次独立な基底であるならば、固有値が同じになるベクトルの向きが 2 つ以上あることを示しているのであり、この時、$|a>$ と $|b>$ の任意の線形結合状態が固有状態を占めるため、シュミットの直交化法にしたがって、直交状態に選べば良い。

A.3 no-cloning 定理

量子力学である状態があった時、その状態に何らの影響も与えずに、別の状態をその状態に書き換えることができない。理由は次のように言える。まず複合系を用意する。$|\Psi>|e>$ これをユニタリー発展で $|\Psi>|\Psi>$ にできたとしよう。それが別の状態 $|Phi>$ についても同様にできるとしよう。ユニタリー発展だから $|\Psi>|\Psi>=U|\Psi>|e>$ と記述できる。$<\Phi|\Psi>=<\Phi|<e|e>|\Psi>=<\Phi|<e|U^{\dagger}U|e>|\Psi>=|<\Phi|\Psi>|^2$ となる。これが満たされるには $<\Psi|\Phi>=0,1$ すなわち、$|\Psi>$ と $|\Phi>$ は全く同じ状態か全く違う状態でなくてはならない。

したがって、量子状態を考えるとそれが劣化されることなく、ちゃんと複製することはできない。もしできる状態があったとしても、そのプロセスで複製することができる状態はその (偶然) できる状態か、それに直交する状態だけで重ね合わされる状態を複製できない。

量子力学の複製不能定理が示唆するところ、我々のフォンノイマン測定においても、測定系は物理系に何らの影響を与えることなく、コピーすることによって射影測定をするわけではないことも言える。

B 純粋状態と混合状態、密度演算子

量子力学は本質的に確率的挙動を示すのだが、そこで扱う確率的挙動は古典的な確率モデルとは違う。古典的な確率モデルは各状態に対して一定の確率で現れるもので、各状態は観測される状態に対して確率をかけて線型結合したものとして理解するモデルが便利であるが、量子力学の結合係数は確率ではない。大学の講義で扱われる学科の量子力学は「純粋状態」である。しかし、統計力学を考える場合などは「混合状態」を扱う必要がある。混合状態とは何かといえば、「サイコロ」ないし「くじ」である。つまり、古典的な確率に基づいて「どの純粋状態が出て来るかがばらつく状態」と思えばいい。

もう少し丁寧にいえば、何らかの純粋状態のセット、例えば、エネルギー固有状態 $|E_i>$ について、その状態である確率が p_i というような対応が決定できているような「確率混合」状態を考える。

そのような状況があった時、密度演算子というものが定義される。これは純粋状態に対して (先の例で言えばエネルギー固有状態に対して) 作用させると、その純粋状態がどれだけの確率で現れるかを教えてくれる演算子として定義する。密度演算子は「どの純粋状態がどれだけの確率で現れるか」を分かっていれば、そのセットに対して対角行列である。というか、そのようにしてまず定義を与えておくのが普通である。

密度行列を構成するために、エネルギー固有状態について、それがどの確率分布か、という例を考える。つまり、統計力学のカノニカル分布に対応する「密度行列」を構成しよ

う。カノニカル分布で実現される確率は、あらゆる状態を i で識別した時に、

$$p_i = \frac{e^{-\beta E_i}}{\sum_i e^{-\beta E_i}}$$

というものである。これが、その密度演算子なるものが、(その固有) 状態 i に作用した時に値を返すように定義したいので、

$$\rho = \frac{e^{-\beta \hat{H}}}{\mathrm{tr} e^{-\beta \hat{H}}}$$

として定義する。と、エネルギー固有状態 i に作用すれば、$\hat{H}$ は固有値 E_i に生まれ変わるし、tr の定義上、あらゆる固有値を求めて、それを代入してから足し算しろ、という指示なので、分母の形を保持しており、密度演算子の要請を満たしている。

量子力学の面白い特性として、基底を取り替えることができる点がある。ある密度演算子を考えても、それに対応する基底を選ばないという選択肢も存在する。しかし、それが密度演算子であるならば、混合状態か純粋状態かを議論するには対角化すればいい。純粋状態というのは、定義上、密度演算子の固有状態のどれかだけ固有値 1 で、他が 0 の状態と考えることができる。

密度演算子の定義から、固有値は確率でなくてはならないから、全ての確率の和は 1 すなわち

$$\mathrm{tr}\rho = 1$$

及び、確率の値は全て正でなくてはならないので固有値は正である。この点は密度行列を特徴付ける性質である。

C 情報エントロピー

シャノンエントロピーと呼ばれる量がある。これは状態があった時、

$$S = -\sum_i p_i \mathrm{log} p_i$$

で定義される。この量が熱力学的なエントロピーと類似する性質を持つ[8]ことについては次のような例を見るとわかる。まず、状態が 2 値の問題を考える。そして、2 値のいずれかについて、どちらになるかが完全に予測できるような状況にあったとしよう。その場合、いずれかの確率が 1 でいずれかが 0 である。この場合、エントロピーは 0 である。一方で、そのような判定ができるような情報を忘れてしまったとしよう。その場合、どちらになりやすいか、という情報を持ってないことになるので、(ベイズ的な?) 予測としてはどちらも 1/2 であり、エントロピーは log2 である。2 値型のモデルでエントロピーを計算すると、最大の値をとるのはそのような「忘却した」事例である。一般の場合にも、確率分布が均

[8] しかし常にそれが熱力学エントロピーと一致するかの議論は未だに終わってはいない。

等である、という場合にエントロピーが最大化されるということがわかっている。

統計力学を思い出そう。その場合、「ミクロカノニカル分布」と呼ばれる確率分布モデルを考える。すなわち、「エネルギーが同一の全ての状態はどれも均等な確率で実現される」という考え方をする。そのようにして、全ての状態の数を数えだし、それの対数をとるものを「ボルツマンエントロピー」といい、統計力学ではこれは「熱力学的平衡状態のエントロピー」という主張をするわけだが、忘却している状況を「平衡状態」と考えると、そのエントロピーが最大化された状態では $p_i = \frac{1}{N}$ であるから、エントロピーは $S = \log N$ となり、ボルツマンエントロピーと一致し、統計力学の公理としてそれは平衡状態の熱力学エントロピーと一致することになる。しかも平衡エントロピーは非平衡状態に比べてエントロピーが高いということにも似たことが起きている[9]。

シャノンエントロピーが出てきたが、シャノンエントロピーは古典状態に対して定義されたものである。量子力学のような重ね合わせを考えられない。しかしここまで読んできた人であればわかるように、古典における状態は両氏における「固有」状態と読み替えてオペレータを構築するというのが例に漏れず今回でも自然だろう。

すなわち、確率の固有値を吐き出すオペレータ密度演算子を考え、それを全状態で足しあげるすなわち、トレースを取れ、という方向で定義する。すなわち

$$S = -\mathrm{tr}\rho\log\rho$$

を「フォンノイマンエントロピー」と呼ぶ。フォンノイマンエントロピーはシャノンエントロピーから自然な形で拡張したエントロピーだが、シャノンエントロピーとはいくらか異なる性質を示すこともある。それらについては [1] に詳しい。

D 古典電磁気学に絡んだ補遺

量子力学の成立において光が果たした役割は大きい。特に「粒子波動双対性」において通常の物質は「粒子」が古典的な立場で、そこに波動側の性質を付与したのに対して、光側は逆側の経路をたどる。すなわち、古典では光は「波動」だが、それが光電効果実験などでは粒子性も現れるという考え方をする。波動側の性質を「付与」する時に光は大きな役割を果たす存在で、結果から言えば、量子力学の現代の理論でも光を波動として捉えた場合の波動の扱い方は古典電磁気学のそれと全く同じなのである。

それゆえ、量子的実験を考える時にその波動的な扱いをする時に光学系を用いるのは非常に都合がいい。既存の古典電磁気学を使えばそのまま量子力学に適用できるからである。

[9] 非平衡状態については熱力学的なエントロピーは一意的に決まらず、例えば [3] にあるように、部分系に分割して、局所的に平衡と考えられるような例に限定すれば、エントロピーを出して全体を足すと、その値の最大状態が選ばれるという形で第二法則を記述する議論が掲載されているが、局所的に平衡とは限らない例もあり、そのような一般的な例で純熱力学的なエントロピーはできない。一方で、情報エントロピーの場合には系の分割の議論をテンソル積にしてしまうと局所平衡を実現し、かつ全体として非平衡にするという記述に支障をきたす。それはそうで、テンソル積は基本的には相互に独立な状態を考えるのだから。

しかし、古典電磁気学は非常に豊かな内容を持つため、全容を理解している人は少ないだろう。そこで今回のテーマに関連した補遺をつけておく。

D.1　誘電率異方性と光の伝搬

誘電率異方性のある物質中の光の伝搬を取り扱うのは電磁気学の教科書としては少なく、基本的には光学の教科書を参考にすることが多い。そこで一般に誘電率テンソルが与えられた時にそのような物質中で光がどのように伝播するかをここで記述する。

まず、誘電率テンソルとは、次のようなものである。つまり、電束密度ベクトル $\vec{D}$ と電場ベクトル $\vec{E}$ とを結びつけるテンソル ϵ すなわち

$$\vec{D} = \epsilon \vec{E}$$

とする。ここで ϵ は対称テンソルである[10]。

誘電率テンソルが直交行列で対角化できるような例を考える。直交行列で対角化するというのは簡単に言えば正規直交基底をうまい向きに取るだけで、各々の方向で閉じた議論ができるようになるということである。基底は 3 本あるので、最も一般的には 3 つのそれぞれの規定で固有値が独自の値を持つ場合だが、今回はその軸のうちの 1 つをポインティングベクトル (波数ベクトル) の向きに合わせる。したがって、その方向について $\vec{D}$ は 0 なので、合わせて $\vec{E}$ も 0 となるため、考える固有値は 2 つで事足りる。それぞれ ϵ_1, ϵ_2 と表示することにする。透磁率についても本来は異方性がある可能性があるが、今回は異方性はないものとする[11]。

このようにしてからマクスウェル方程式を考える。すなわち

$$\nabla \cdot \vec{D} = 0 \tag{6}$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \tag{7}$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0 \tag{8}$$

$$\nabla \times \vec{B} = \mu_0 \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \tag{9}$$

から波動方程式を考える。(7) に対して両辺回転を取ると

$$\nabla \times (\nabla \times \vec{E}) = -\frac{\partial}{\partial t}(\nabla \times \vec{B}) = -\mu_0 \frac{\partial^2}{\partial t^2}\vec{D}$$

このような式に対して、誘電率テンソルを対角化した表示を用いて成分ごとに記述し直し、自明でない電場の解を得られるように考えると行列式を与えることができる。具体的な展開はめんどくさいので Jackson 電磁気学 [4] 演習問題 7.16、ランダウ [5]、Fowles 光学

[10] 対称テンソルでないと起こる問題は後述する。

[11] したがって、$\vec{B} = \mu_0 \vec{H}$ すなわち真空中での対応がそのまま使えるため、以降の式ではそれを最初から適用して考える。

[6]6.7 節あたりを参照。

いずれにせよ、結晶内部で偏光ベクトルごとに異なる速度を持たせることができ、そのような結晶を通った光は位相差を与えることができる。

参考文献

[1] M.Nielsen, I.Chuang "Quantum Computation and Quantum Information" Cambridge Press

[2] J.Lee, I.Tsutsui "Merit of Amplification by Weak Measurement in view of Measurement uncertainty"

[3] 清水明「熱力学の基礎」東京大学出版会

[4] J.D.Jackson "Classical Electrodynamics"

[5] L.D.Landau,E.M.Lifshitz "Electrodynamics of Continuous Media"

[6] G.Fowles "Introduction to Modern Optics"