Title	一般化された伏見関数と量子多体状態の複雑さ((1)量子カオスの基本概念と基礎理論,京大基研短期研究会「量子カオス：理論と実験の現状」,研究会報告)
Author(s)	杉田, 歩
Citation	物性研究 (2003), 80(1): 56-61
Issue Date	2003-04-20
URL	http://hdl.handle.net/2433/97534
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

一般化された伏見関数と量子多体状態の複雑さ

京都大学 基礎物理学研究所　杉田 歩 [1]

一般化された伏見関数を用いて量子多体状態の「複雑さ」の指標を定義する試みについて述べる。

1 イントロダクション

ある量子状態 $|\varphi\rangle$ の伏見関数 [1] は、コヒーレント状態 $|z\rangle$ を使って

$$\mathcal{H}_{|\varphi\rangle}(z) \equiv |\langle z|\varphi\rangle|^2 \tag{1}$$

と定義される。複素変数 z は、相空間の変数 (p,q) と $z=(q+ip)/\sqrt{2}$ の関係によって繋がっており、量子状態を相空間上の分布として考察することを可能にしてくれる。これは、量子系と古典ハミルトン系のダイナミクスを比較しつつ考察する上で非常に便利である。

多体問題においては、一般化されたコヒーレント状態を用いて伏見関数を定義することにより、新たな物理的意味を持つ伏見関数を構成することができる。この講演では、独立粒子的な状態を多体問題におけるコヒーレント状態と見ることにより伏見関数を定義し、その広がりが量子状態の複雑さの指標と見なせることを説明した。

2 一般化されたコヒーレント状態の構成

まず、一般化されたコヒーレント状態をどのように構成するかを説明しよう。

一体問題の場合には、コヒーレント状態は、消滅演算子 $\hat{a}=(\hat{q}+i\hat{p})/\sqrt{2}$ を用いて次のように定義することができる:

$$|z\rangle = \mathcal{N}(z)\exp(z\hat{a}^\dagger)|0\rangle \tag{2}$$

ここで $\mathcal{N}(z)$ は規格化定数、$|0\rangle$ は、$\hat{a}|0\rangle=0$ を満たす「真空」である。[2]

ここから読み取れる一般化の方針は、

生成演算子にパラメータを付けて指数関数の肩にのせ、「真空」にかけよ　(3)

ということである。この方針に沿って、様々な場合に一般化されたコヒーレント状態を定義してみよう。(ちなみに、これは Perelomov-Gilmore 型と呼ばれるコヒーレント状態の定義である [2]。これ以外にも一般化されたコヒーレント状態の定義は幾つかある。)

[1] E-mail: sugita@yukawa.kyoto-u.ac.jp

[2] ここで、「真空」という言葉は、$\hat{a}$ で定義されるモードの励起がないという意味で便宜上用いている。まだハミルトニアンを定義していないので、通常の意味での真空は定まっていない。リー群論の言葉で言うと、lowest weight の状態を取るということである。

2.1 スピン系

スピン系の場合は、$\{\hat{a}, \hat{a}^\dagger\}$ の代わりに $\{\hat{J}_+, \hat{J}_-, \hat{J}_z\}$ が基本的な演算子である。z 方向のスピンが最も小さい状態を「真空」とすると、他の状態は $\hat{J}_+$ を掛けていくことで生成できる。スピン J 表現のコヒーレント状態は、

$$|z\rangle = \mathcal{N}(z)\exp(z\hat{J}_+)|-J\rangle \tag{4}$$

となる。あるいは、$z\hat{J}_+$ の代わりに反エルミート化された形 $\zeta J_+ - \zeta^* J_-$ を用いて、

$$|\zeta\rangle = g(\zeta)|-J\rangle = \exp(\zeta J_+ - \zeta^* J_-)|-J\rangle \tag{5}$$

としてもよい。

スピンが幾つも集まっている系の場合は、このコヒーレント状態のテンソル積を取ればよい。例えば、n-qubit 系におけるコヒーレント状態は、

$$|\zeta\rangle = |\zeta_1\rangle \otimes \ldots \otimes |\zeta_n\rangle, \tag{6}$$

$$|\zeta_i\rangle = g(\zeta_i)|-1/2\rangle \tag{7}$$

である。(ζ は m 個のパラメータ $\{\zeta_1, ..., \zeta_m\}$ をまとめて表す。) 実は、スピン 1/2 の系の場合には、(4) は全ての状態を表すので、(6) は、全ての disentangled 状態を表している。つまり、

$$\text{コヒーレント状態} \iff \text{disentangled 状態}. \tag{8}$$

2.2 同種粒子系、粒子数固定の場合

次に、ボソン、フェルミオン等の同種粒子系で、粒子数が固定されている場合を考える。この場合、ヒルベルト空間は、particle-hole (ph) 演算子

$$X_i^j = a_i a_j^\dagger, \tag{9}$$

によって生成される。これらの演算子は、$U(N)$ (N は一粒子準位の数) のリー代数の交換関係を満たす：

$$[X_i^j, X_l^k] = X_l^j \delta_i^k - X_i^k \delta_l^j. \tag{10}$$

コヒーレント状態は、例えばフェルミオン系の場合なら $|0\rangle \equiv |0, \ldots, 0, 1 \ldots, 1\rangle$ を「真空」として、

$$|z\rangle = \mathcal{N}(z)\exp\left(\sum_{ij} z_j^i X_i^j\right)|0\rangle, \tag{11}$$

または、反エルミート化された演算子を用いて

$$|\zeta\rangle = g(\zeta)|0\rangle = \exp\left[\sum_{ij}(\zeta_j^i X_i^j - \zeta_j^{i*} X_i^j)\right]|0\rangle \tag{12}$$

とすればよい。実は、これは必ずスレーター行列式になっていて、また全てのスレーター行列式はこの形で表せる（Thouless の定理)。

このことは、定義式 (12) からは少し分かりにくいかもしれないが、次のように考えれば良い。X_i^j は一体的な演算子なので、それを指数化したものはある一粒子状態 φ_i を別の一粒子状態 φ_i' に変換する：

$$g(\zeta)\varphi_i = \varphi_i' \tag{13}$$

従って、$\varphi_1, \varphi_2, ..., \varphi_m$ から組まれたスレーター行列式は、

$$g(\zeta)\mathcal{A}\{\varphi_1(x_1)\varphi_2(x_2)\dots\varphi_m(x_m)\} = \mathcal{A}\{\varphi_1'(x_1)\varphi_2'(x_2)\dots\varphi_m'(x_m)\} \tag{14}$$

（$\mathcal{A}$ は反対称化演算子）のように別のスレーター行列式に変換される。また、この形で全てのスレーター行列式が生成できることも殆んど明らかだろう。従って、フェルミオン系の場合、

$$\text{コヒーレント状態} \iff \text{スレーター行列式} \tag{15}$$

ボソン系の場合には、「真空」は $|0,\dots,0,m\rangle$ になり、これに $g(\zeta)$ を掛けると、$\varphi(x_1)\dots\varphi(x_m)$ という同じ一粒子状態の積の形の波動関数が生成される。これは相関のない状態で、また逆に、完全に相関のない状態はこのタイプに限られることがわかるので、

$$\text{コヒーレント状態} \iff \text{disentangled 状態} \tag{16}$$

2.3 同種粒子系、粒子数非固定の場合

粒子数を固定しない場合、ph 励起に加えて、particle-particle(pp), hole-hole(hh) 励起も許される。これらの演算子全体は、$SO(2N)$（フェルミオン）、$Sp(2N,R)$（ボソン）の代数を成す。１つも粒子がない状態を「真空」とすると、コヒーレント状態は、pp 演算子 $X^{ij} = a_j^\dagger a_i^\dagger$ を掛けて、

$$|z\rangle = \mathcal{N}(z)\exp\left(\sum_{ij} z_{ij}X^{ij}\right)|0\rangle \tag{17}$$

となる。(ph,hh 演算子は掛けても 0 になるので必要ない。）詳しくは、[2] 参照。粒子数固定の場合、コヒーレント状態が独立粒子状態を表すのに対し、この場合は、独立準粒子状態のようなものを表す。

3 一般化された伏見関数の意味

さて、コヒーレント状態 $|z\rangle$ が定義できれば、ある量子状態 $|\varphi\rangle$ の伏見関数は、

$$\mathcal{H}_{|\varphi\rangle}(z) = |\langle z|\varphi\rangle|^2 \tag{18}$$

と簡単に定義出来る。この伏見関数の意味を考えてみよう。

前節で述べたように、多体系のコヒーレント状態は、最も相関の小さい、独立粒子的な状態を表している。また、コヒーレント状態は最も局在化した状態でもあるから、伏見関数においては、

$$\text{局在} \;\simeq\; \text{独立粒子的} \tag{19}$$

という関係が予想される。逆に言えば、

$$\text{非局在} \;\simeq\; \text{多体相関、エンタングルメント} \tag{20}$$

ということである。

この（非）局在性を定量的に測るには、分布のモーメント

$$M^{(q)}_{|\varphi\rangle} = \int d\mu(z) \left\{ \mathcal{H}_{|\varphi\rangle}(z) \right\}^q \tag{21}$$

を使うのがよい。ここで、$d\mu(z)$ は群構造から自然に決まる Haar measure である。特に q が正の整数の時は計算しやすい便利な量となる[3]。$M^{(q)}$ は分布が局在しているほど大きい値を持ち、最大値の時はコヒーレント状態であることが証明できる [3]。これは、例えば qubit 系なら、

$$M^{(q)}_{|\varphi\rangle} \text{ が最大} \iff |\varphi\rangle \text{ は disentangled} \tag{22}$$

ということを意味する。フェルミオン系なら、$M^{(q)}_{|\varphi\rangle}$ が最大のとき $|\varphi\rangle$ はスレーター行列式となる。

また、伏見関数の広がりは、系のダイナミクスとも直接関係する。一体問題の時には、容易に予想できるように、古典系のダイナミクスがカオス的なら、相空間上の関数である伏見関数は、それによってかき混ぜられて広がってしまう [3]。

多体問題の場合にも、コヒーレント状態全体が成す空間を相空間と見なすことが出来、その上に波束の運動方程式として一種の古典力学を定義することが出来る[4]。これは、qubit 系であれば古典スピンの運動方程式となり、フェルミオン系では TDHF(Time dependent Hartree-Fock) と呼ばれる方程式になる。その運動がカオス的であれば、伏見関数は広がり、モーメントは小さくなっていくであろうと予想できる。つまり、カオス的なダイナミクスは複雑な状態を生成するということである。図 3 に、フェルミオン系の場合の概念図を示した。

4 量子状態を分類するとは？

ここで改めて、量子状態を分類するとはどういうことか考えてみよう。分類とは、「類に分ける」ことだが、これは、1 つの類に含まれるものはある意味で同値とみなす、同値関係を設定することと同じである。しかし、無限にある量子状態に対して、いちいち手で

[3] 整数べきのモーメントは、展開係数等の量から代数的な公式で計算できる [3]。非整数べきのモーメントや、エントロピー $\int d\mu(z)\mathcal{H}\ln\mathcal{H}$ のような量を使っても構わないが、この場合は代数的な公式が存在せず、積分を数値的に評価しければならないので、あまり実用的ではない。

[4] 具体的には、コヒーレント状態をつかった経路積分の停留位相の条件によって定義できる。

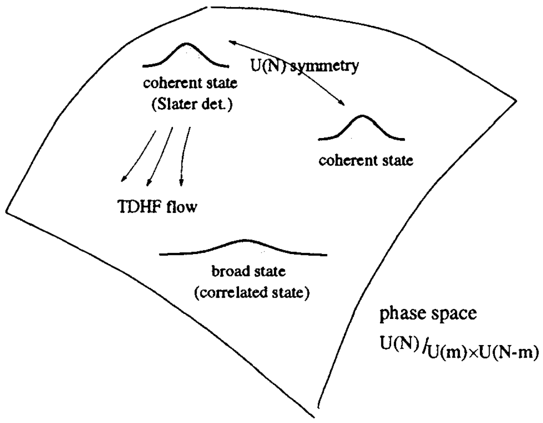

図 1: フェルミオン系の伏見関数の概念図。N 個の一粒子準位に m 個の粒子を詰めた場合、相空間は $U(N)/(U(m)\times U(N-m))$ となる。その上に伏見関数が定義され、最も局在化した波束がスレーター行列式に対応する。この相空間上には、TDHF 方程式による流れが定まっており、この流れのカオス性と、伏見関数の広がりは、密接に関連しているだろうと予想できる。

同値関係を与えていく訳にもいかないので、なにか基準が必要だ。標準的なのは、量子状態が成すヒルベルト空間に作用するある群 G を考えて、その群によってある状態から別の状態に移れる場合同値とみなす、というやり方だろう。つまり、

$$|A\rangle \sim |B\rangle \iff \exists g \in G,\ g|A\rangle = |B\rangle \tag{23}$$

考えられる G として一番大きいのは $U(N_H)$（N_H はヒルベルト空間の次元）だが、この場合は全ての状態が同値になってしまい、分類しないのと同じことである。従って、$U(N_H)$ より小さい部分群を取らなければならない。群が小さいほど、細かい分類をやることになる。各類を特徴付ける量を考えたければ、群 G の変換に対する不変量を探すことになる。

例えば、m qubit 系の場合、$N_H = 2^m$ で、標準的には、分類の為の群としてローカル（一体的）な変換 $G = \overbrace{SU(2)\times\ldots\times SU(2)}^{m} \subset U(2^m)$ を取る。これは、各 qubit に対してどの状態を $|0\rangle$ と $|1\rangle$ に取るかは任意性があるので、その定義の任意性に吸収できるような違いしか持たないような状態達は同値と見なそうということで、とても自然な発想である。qubit のエンタングルメントの分類とは、結局のところこの群 G の不変量をリストアップしていく作業になる。伏見関数のモーメントも、Haar measure の性質から当然この群の不変量になっており、モーメントの指数を変えることで多くの不変量を系統的に構成できる。

同様な発想で、フェルミオンやボソンの系を考えてみよう。一粒子準位が N 個あって、その中に m 個の粒子が存在するとすると、ヒルベルト空間の次元 N_H は、${}_NC_m$（フェルミオン）、${}_{N+m-1}C_m$（ボソン）となる。この場合スピン系と異なるのは、各粒子が区別できないので、各粒子を別々に変換するような操作ができないことである。従って、一体的な変換は、全ての粒子に共通な一粒子準位 N 個を回す変換 $G = U(N) \subset U(N_H)$ である。

上で定義した群以外の G はあるか、と考えると、なかなか難しい。数学的な意味では $U(N_H)$ の部分群はたくさんあるが、物理的に明確な意味を持つものはそう多くない。例

えば、qubit 系に関して、ローカルな変換より大きいもの（つまりより粗い分類）を考えようとしても、よく知られているように、ローカルな変換に適当な 2 体的変換を組み合わせると全てのユニタリー変換が生成できてしまうので、ローカルな変換と $U(N_H)$ の中間の大きさの群は考えにくい。

しかし、いくつかの異なる種類の分類を考えられる場合もある。§2.3 で述べた、粒子数非固定の同種粒子系の場合、スタンダードなコヒーレント状態の構成に従うと、$SO(2N)$（フェルミオン）または $Sp(2N, R)$（ボソン）で分類することになるが、これは、実はボゴリューボフ変換に対する不変量を構成することになっている。しかし、粒子数固定の場合のように、これより小さい群 $U(N)$ を取ることも可能である。例えば、フェルミオン系の場合、$SO(2N)$ で分類すると、BCS の波動関数と自由フェルミオンの基底状態の波動関数は共に最も単純な状態になるが、$U(N)$ で考えると異なる類に属することになる。（もちろん、BCS 状態のほうが複雑。）

5 まとめ

伏見関数のモーメントを使って、量子多体状態の複雑さを特徴付ける方法を見てきた。近年、多体系のエンタングルメントの分類はホットな話題になってきており、様々な方法が提案されているが、伏見関数のモーメントを使うメリットは、

1. qubit 系のような識別可能な粒子の系だけでなく、フェルミオンやボソンのような同種粒子系も自然な方法で扱うことができる
2. ダイナミクスとの関係が見えやすい
3. モーメントの指数を変えることによって、多くの指標を系統的に生成できる

等の点にある。

今後は、具体的な物理系でこれらの量を計算して、他の物理量や量子情報理論との関係を考えていきたいと思っている。

参考文献

[1] K. Husimi, Proc. Phys. Math. Soc. Japan **22** 264 (1940).

[2] A. Perelomov, *Generalized Coherent States and Their Applications*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1986.

[3] A. Sugita and H. Aiba, Phys. Rev. E **65** (2002) 036205; A. Sugita, J. Math. A: Math. Gen. **35** (2002) L621; A. Sugita, nlin.CD/0112042.