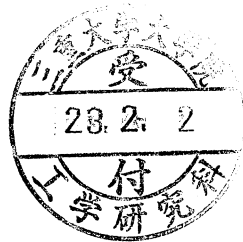


量子熱力学の オペレーショナルな展開

平成 22 年度修士論文
三重大学大学院工学研究科
博士前期課程 物理工学専攻

青柳 佑樹



概要

本研究では、量子熱力学のオペレーショナルな理論を展開することを目的とする。量子熱力学のオペレーショナルな理論の展開として我々は、熱力学的過程を生成する、正值演算子値測度を構成する unital な量子演算について考える。固定点解析の方法を用いて、この演算を繰り返し作用させた場合、対象系の状態を絶対零度における純粋基底状態から、非平衡状態を通じて、高温極限における完全ランダム状態へ推移することを示す。また、この演算による状態変化のもとで熱量と von Neumann エントロピーが単調増加することを示し、この演算によって不可逆な加熱過程が生成されることを述べる。さらに、簡単な例としてスピン 1/2 の 2 粒子系を考えて、この演算によって生成される熱力学的過程において、Clausius の不等式が破れることを示す。

目次

1	序論	1
2	量子熱力学	3
2.1	量子熱力学における熱力学的変数	3
2.2	von Neumann エントロピーの振る舞い	8
3	量子演算	10
3.1	量子演算の具体的な構成	10
3.2	量子演算の性質	12
4	Clausius の不等式	19
4.1	熱量とエントロピーの変化	19
4.2	Clausius の不等式	21
5	結論	31
	謝辞	32
	参考文献	33
	付録 A	34
	付録 B	40

1 序論

今日のナノサイエンス・ナノテクノロジーの段階は、フラレン、ナノチューブ、グラフェンなどの材料物性の研究が主である。しかしながら、近い将来機械工学的段階へと発展していくことは明らかである。そこで表れてくる重要な問題は、ナノマシンの熱力学的作動原理とはいかなるものかということである。特に、温度が 100K 程度でも、系のサイズが数 100nm 程度であれば、量子的な離散性が無視できない。このことからナノマシンの熱力学的作動原理において、量子力学が重要な役割を果たす。

ナノマシンのような開放系の量子論に対する伝統的なアプローチは、「対象系」+「環境系」+「対象系と環境系との弱い相互作用」という閉じた Hamilton ダイナミクスから出発し、環境系の自由度を消去することにより、対象系のサブダイナミクスを研究するというものであった。しかしながら、そのようなアプローチには、対象系と環境系との間の量子エンタングルメントの効果によって、対象系の簡約密度行列の完全正值性が一般に保障されないことが知られている[1-3]。密度行列の完全正值性とは、密度行列の全ての固有値の正值性のことであり、この密度行列の完全正值性が保障されない場合、密度行列の確率解釈が不可能となるという困難が存在する。一方、古典的な熱力学における環境系、すなわち熱浴はダイナミカルには取り扱われず、オペレーショナルな役割しか果たしていない。ここで、オペレーショナルな役割とは、系に対して熱を与えたり奪ったりするだけであり、熱浴自体のダイナミクスには一切触れないということの意味する。これらのことから、量子熱力学においてもオペレーショナルな理論を展開することは有意義である。

そこで、本研究の目的は量子熱力学のオペレーショナルな理論を展開することである。

統計力学における一般的な仮定として、環境系と相互作用する対象系は、任意の初期状態から不可逆に平衡状態へと推移する。これに対して、微視的なダイナミクスは可逆である。例として、閉じた Hamilton ダイナミクスにおいて、系の状態の時間発展はユニタリー変換によって記述されるが、一般にユニタリー変換には逆変換が存在するため、閉じた Hamilton ダイナミクスが可逆である

ことがわかる。すなわち、量子熱力学のオペレーショナルな理論において不可逆な状態変化について議論するためには、非ユニタリーな演算を考える必要がある(付録 A 参照)。

これらのことから、我々は量子熱力学のオペレーショナルな展開として、対象系の Hilbert 空間上で定義される、環境系の効果を含む正の非ユニタリーな演算を考える。とりわけ、参考文献[4,5]で提案された統計的な量子演算について考える。我々は、固定点解析の方法を用いて、この演算を繰り返し作用させた場合、系の状態が絶対零度における純粋基底状態から高温極限での完全ランダム状態へ推移することを示す。また、この演算による状態変化のもとで熱量と von Neumann エントロピーが単調増加することを示し、この演算によって不可逆な加熱過程が生成されることを述べる。さらに、簡単な例としてスピン 1/2 の 2 粒子系を考えて、この演算によって生成される熱力学的過程において、Clausius の不等式が破れることを示す。

この論文の構成について以下に示す。第 2 章では、量子熱力学における熱力学的変数を定義する。また、数学の unital と行列凹関数という概念を導入することで、von Neumann エントロピーが単調増加することを示す。第 3 章では、この演算の性質について考え、固定点解析の方法を用いて、演算を繰り返し作用させた場合、系の状態が絶対零度における純粋基底状態から高温極限での完全ランダム状態へと遷移することを示す。また、この統計的な演算が系に不可逆に熱を供給する加熱演算であり、この演算によって不可逆な加熱過程が生成されることを示す。第 4 章では、簡単な例としてスピン 1/2 の 2 粒子系を考えて、この演算によって生成される熱力学的過程において、Clausius の不等式が破れることを具体的に示す。上述の内容は現在投稿中の論文において議論されている[6]。

2 量子熱力学

ナノマシンの熱力学的作動原理は量子熱力学に従うことを第1章で述べた。量子熱力学に対するオペレーショナルな理論を展開するうえで、量子熱力学における熱量やエントロピーといった熱力学的変数がどのように定義されるかが問題となる。そこで、この章では量子熱力学における熱力学的変数、内部エネルギーや仕事、熱量、エントロピーなどを定義する。また、数学の **unital** や **operator concavity** という概念を導入することで、量子熱力学におけるエントロピーの振る舞いについて調べる。

2.1 量子熱力学における熱力学的変数

この節では量子熱力学における熱力学的変数を定義する。古典的な熱力学において、内部エネルギーは系のエネルギーの平均値で与えられる。それゆえ、量子熱力学でも内部エネルギーは系のエネルギーの期待値だと考える。ここで、対象系の密度行列を ρ 、Hamiltonian を H とすると、量子熱力学における内部エネルギーは Hamiltonian の期待値

$$U = \text{Tr}\{\rho H\} \quad (2.1)$$

で与えられる。この内部エネルギーの変化を考えると、熱力学第1法則から

$$\delta U = \delta' Q + \delta' W = \text{Tr}\{\delta\rho H\} + \text{Tr}\{\rho\delta H\} \quad (2.2)$$

となる。ここで、Hamiltonian H は系の運動を記述するため、 H の変化の期待値を仕事とみなす。ゆえに、(2.2)式から熱量の変化は状態の変化、

$$\delta' Q = \text{Tr}\{\delta\rho H\} \quad (2.3)$$

で与えられる。次に、量子熱力学におけるエントロピーを定義する。我々は、量子熱力学におけるエントロピーとして von Neumann エントロピー

$$S[\rho] = -k_B \text{Tr}\{\rho \ln \rho\} \quad (2.4)$$

を導入する。ここで k_B は Boltzmann 定数である。この von Neumann エントロピーの性質を以下に示す。

まず、von Neumann エントロピーがユニタリー変換のもとで不変であることを示す。任意のユニタリー演算子を U とすると、この演算子 U は

$$U^\dagger U = I \quad (2.5)$$

を満たす。ここで I は単位行列である。このユニタリー演算子による状態のユニタリー変換は

$$\rho \rightarrow U\rho U^\dagger \quad (2.6)$$

で表される。ユニタリー変換後の状態における von Neumann エントロピーを計算すると

$$S[U\rho U^\dagger] = -k_B \text{Tr}\{U\rho U^\dagger \ln(U\rho U^\dagger)\} \quad (2.7)$$

となる。ここで任意の演算子値関数 f に対して

$$f(U\rho U^\dagger) = Uf(\rho)U^\dagger \quad (2.8)$$

が成り立つため、(2.7)式は

$$\begin{aligned} S[U\rho U^\dagger] &= -k_B \text{Tr}\{U\rho U^\dagger U(\ln(\rho))U^\dagger\} \\ &= -k_B \text{Tr}\{U\rho(\ln(\rho))U^\dagger\} \\ &= -k_B \text{Tr}\{\rho \ln \rho\} = S[\rho] \end{aligned} \quad (2.9)$$

となり、von Neumann エントロピーが任意のユニタリー変換のもとで不変であることが示せた。閉じた Hamilton ダイナミクスにおける状態の時間発展は、ユニタリー変換で記述されるため、閉じた Hamilton ダイナミクスでは von Neumann エントロピーが不変に保たれることがわかる。次に、von Neumann エントロピーの性質について調べるため、系の状態を表す純粋状態と混合状態について説明する。対象系の状態を表す密度行列 ρ が

$$\rho^2 = \rho \quad (2.10)$$

を満たす場合、系の状態を純粋状態という。例として系の状態を表す密度行列 ρ が

$$\rho = |u_0\rangle\langle u_0| \quad (2.11)$$

の場合について考える。ここで、 $\{|u_n\rangle\}_{n=0,1,2,\dots}$ は Hamiltonian H の固有状態であり、完全正規直交系であると仮定する。この密度行列 ρ の 2 乗は

$$\rho^2 = |u_0\rangle\langle u_0|u_0\rangle\langle u_0| = |u_0\rangle\langle u_0| = \rho \quad (2.12)$$

となり、(2.10)式を満たしていることから、(2.11)式の密度行列によって表される状態が純粋状態であることがわかる。一方で、対象系の状態が混合状態である場合、密度行列 ρ は

$$\rho^2 \leq \rho \quad (2.13)$$

の不等式を満たす。例として系の状態を表す密度行列 ρ が

$$\rho = \sum_{n=0}^{d-1} p_n |u_n\rangle\langle u_n| \quad (2.14)$$

のように、状態の重ね合わせで記述される場合について考える。ここで d は対象系の Hilbert 空間の次元である。(2.14)式の係数 p_n は規格化条件

$$\sum_{n=0}^{d-1} p_n = 1 \quad (2.15)$$

を満たすものとする。この(2.14)式で表される密度行列 ρ の 2 乗は

$$\rho^2 = \sum_{n,m=0}^{d-1} p_n p_m |u_n\rangle\langle u_n|u_m\rangle\langle u_m| = \sum_{n=0}^{d-1} p_n^2 |u_n\rangle\langle u_n| \quad (2.16)$$

となる。ここで(2.15)式から $p_n \leq 1$ なので

$$p_n \geq p_n^2 \quad (2.17)$$

となり、(2.14)式の密度行列が $\rho \geq \rho^2$ を満たすことがわかる。それゆえ、(2.14)式の密度行列によって記述される状態が混合状態であることがわかる。この純

粋状態と混合状態での von Neumann エントロピーを計算する。(2.4)式で定義される von Neumann エントロピーにおいて

$$\ln \rho = \ln(I - (I - \rho)) = -(I - \rho) - \frac{1}{2}(I - \rho)^2 - \dots \quad (2.18)$$

のように $\ln \rho$ をテイラー展開する。系の状態が粋状態の場合、密度行列 ρ は (2.10)式を満たすため

$$\begin{aligned} S[\rho] &= -k_B \text{Tr}\{\rho \ln \rho\} = -k_B \text{Tr}\left\{\rho \left(- (I - \rho) - \frac{1}{2}(I - \rho)^2 - \dots\right)\right\} \\ &= -k_B \text{Tr}\left\{(\rho - \rho^2) \left(-1 - \frac{1}{2} - \dots\right)\right\} = 0 \end{aligned} \quad (2.19)$$

となり、粋状態での von Neumann エントロピーがゼロとなることがわかる。一方で、系の状態が混合状態であれば、(2.13)式から von Neumann エントロピーは有限の値を取ることがわかる。例として、(2.14)式の状態における von Neumann エントロピーを計算すると

$$S\left[\sum_{n=0}^{d-1} p_n |u_n\rangle\langle u_n|\right] = -k_B \sum_{n=0}^{d-1} p_n \ln p_n \quad (2.20)$$

となる。(2.15)式から $p_n < 1$ であるため、

$$\ln p_n < 0 \quad (n = 0, 1, 2, \dots, d-1) \quad (2.21)$$

となり、(2.20)式が有限の正の値を取ることがわかる。Lagrange の未定乗数法により、(2.15)式の条件のもとで von Neumann エントロピーの最大値を求める。Lagrange の未定乗数 λ を含むエントロピーを

$$\tilde{S}\left[\sum_{n=0}^{d-1} p_n |u_n\rangle\langle u_n|\right] = -k_B \sum_{n=0}^{d-1} p_n \ln p_n - \lambda \left(1 - \sum_{n=0}^{d-1} p_n\right) \quad (2.22)$$

とする。(2.22)式の極値は

$$\frac{\partial \tilde{S}}{\partial p_i} = 0 = -k_B (\ln p_i + 1) + \lambda \quad (2.23)$$

$$\frac{\partial \tilde{S}}{\partial \lambda} = 0 = 1 - \sum_{n=0}^{d-1} p_n \quad (2.24)$$

の2つの式で与えられる。(2.23)式を p_i について解くと

$$p_i = \exp\left(-1 + \frac{\lambda}{k_B}\right) \quad (2.25)$$

となる。これを(2.24)式に代入すると

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{d-1} \exp\left(-1 + \frac{\lambda}{k_B}\right) &= 1 \\ \exp\left(-1 + \frac{\lambda}{k_B}\right) &= \frac{1}{d} \end{aligned} \quad (2.26)$$

となることがわかる。よって p_i が

$$p_i = \frac{1}{d} \quad (i = 0, 1, 2, \dots, d-1) \quad (2.27)$$

の場合に(2.20)式の von Neumann エントロピーが極値

$$S\left[\sum_{n=0}^{d-1} p_n |u_n\rangle\langle u_n|\right] = k_B \ln d \quad (2.28)$$

となることがわかる。(2.27)式から、最大エントロピー状態が完全ランダム状態

$$\rho = \frac{I}{d} \quad (2.29)$$

であることがわかる。ここで I は $d \times d$ の単位行列を表す。(2.28)式で求めた値は統計力学の Boltzmann のエントロピーと対応する。

上に示した性質から、von Neumann エントロピーは系の状態がどの程度純粋状態からずれているかを表すものであり、また、ユニタリー変換のもとで von Neumann エントロピーが不変に保たれるため、状態を純粋状態から混合状態へと変化させる演算が非ユニタリーな演算であることがわかる。次節では、この von Neumann エントロピーの振る舞いについて考える。

2.2 von Neumann エントロピーの振る舞い

この節では、数学における unital と行列凹関数の 2 つの概念を導入することで、von Neumann エントロピーが unital な演算による状態変化のもとで単調増加することを示す。以下で行列凹関数と unital について説明する。

任意の 2 つのエルミート演算子 A, B と、 $\lambda \in [0, 1]$ を満たすような実数 λ に対して、ある演算子値関数 f が

$$f(\lambda A + (1 - \lambda)B) \geq \lambda f(A) + (1 - \lambda)f(B) \quad (2.30)$$

の不等式を満たす場合、この関数 f を行列凹関数と呼ぶ[7]。

2.1 節において、ユニタリー変換のもとで von Neumann エントロピーが不変であることを示した。ここでは、von Neumann エントロピーの生成を伴うような unital な演算 Φ として次のようなものを考える。

$$\rho \rightarrow \Phi(\rho) = \sum_n V_n \rho V_n^\dagger \quad (2.31)$$

ただし演算子 V_n は

$$\sum_n V_n V_n^\dagger = I \quad (2.32)$$

である。このように系の密度行列 ρ を変換する演算 Φ は明らかに非ユニタリーな演算である。(2.32)式から、この unital な演算 Φ は

$$\text{Tr}\{\Phi(\rho)\} = \text{Tr}\{\rho\} = 1 \quad (2.33)$$

を満たす。この unital な演算 Φ と行列凹関数 f に対して Ando の定理

$$f(\Phi(\rho)) \geq \Phi(f(\rho)) \quad (2.34)$$

が成り立つ(証明は付録 B 参照)。ここで、関数 f を

$$f(\rho) = -k_B \rho \ln \rho \quad (2.35)$$

とすると、この関数 f は行列凹関数なので unital な演算 Φ に対して Ando の定理が成り立つ。それゆえ、(2.34)式に(2.35)式を代入し、両辺のトレースをとると

$$S[\Phi(\rho)] \geq S[\rho] \quad (2.36)$$

となり、unital な演算 Φ による状態変化のもとで von Neumann エントロピーが単調増加することが示せた。このことから、演算 Φ を繰り返し作用させた場合、その極限において von Neumann エントロピーは

$$\lim_{N \rightarrow \infty} S[\Phi^N(\rho)] = S_{\max} = k_B \ln d \quad (2.37)$$

の最大エントロピーとなる。このことから、unital な演算 Φ によって von Neumann エントロピーが最大となることが示せた。

3 量子演算

この章では、量子熱力学のオペレーショナルな展開として、系の状態を変化させる正の非ユニタリーな演算を構成したい。我々はそのような演算として、参考文献[4,5]で提案された統計的な量子演算について考える。以下では、この量子演算とそれを表現する演算子の具体的な構成について示し、それら量子演算や演算子の性質を考える。特に、固定点解析の方法を用いて、この量子演算を繰り返し作用させた場合、系の状態を絶対零度における純粋基底状態から、非平衡状態を通じて、高温極限での完全ランダム状態へと推移することを示す。また、量子熱力学におけるエントロピー、すなわち von Neumann エントロピーがこの演算による固定点で最大値になることを示し、この演算によって熱力学的な過程が生成されることを述べる。

3.1 量子演算の具体的な構成

ここでは対象系として、 d 次元の Hamiltonian H によって記述される系を考える。ここで d は一般にいくらかでも大きな値をとることが可能である。この Hamiltonian H の固有状態の集合、 $H|u_n\rangle = \varepsilon_n|u_n\rangle$ を満たすような $\{|u_n\rangle\}_{n=0,1,2,\dots,d-1}$ 、ただし ε_n は n 番目のエネルギー固有値、が完全正規直交系であると仮定する。すなわち、

$$I = \sum_{n=0}^{d-1} |u_n\rangle\langle u_n| \quad (3.1)$$

と

$$\langle u_n | u_m \rangle = \delta_{nm} \quad (3.2)$$

を満たす。ここで I は $d \times d$ 単位行列であり、 δ_{nm} は Kronecker の δ である。この節では、このような d 次元の Hamiltonian H によって記述される対象系の状態を、絶対零度における純粋状態から高温極限における完全ランダム状態へと推移さ

せる、対象系の Hilbert 空間上で定義される演算の構成について述べる。

第 1 章で述べた開放系の量子論に対する伝統的なアプローチでは、「環境系」をダイナミカルに取り扱うことで、「環境系」や「対象系と環境系間の弱い相互作用」による効果を考える。一方、オペレーショナルな理論の展開ではこれら環境系の効果はすべて量子演算に含まれる。我々は量子演算が満たすべき 3 つの条件として、(i)完全正值性、(ii)線形性、(iii)trace-preserving を仮定する。(i)完全正值性は密度行列の確率解釈を保障する。この条件によって、開放系の量子力学に対する伝統的なアプローチにおける、密度行列の確率解釈が不可能となる困難を回避できる。(ii)線形性は量子力学特有の性質であり、(iii)trace-preserving は量子演算による状態変化のもとで、確率の規格化を保存するための条件である。これら 3 つの条件を満たすような、一般に非ユニタリーな正の量子演算 Φ として

$$\rho \rightarrow \Phi(\rho) = \sum_n V_n \rho V_n^\dagger \quad (3.3)$$

のような演算が知られている[8]。ここで ρ は対象系の密度行列である。今まで多くの他の研究で、(3.3)式で記述される一般的な演算についての抽象的な議論が行われてきた。しかしながら、そのような抽象的な議論では、演算の性質を調べることはできても、この演算による状態の変化や、演算によって生成される熱力学的過程の性質について議論することは不可能である。そこで我々は、この演算による量子熱力学について議論するために、(3.3)式の演算を構成する具体的な演算子を考える。我々は、(3.3)式の形で記述される量子演算として、参考文献[4,5]で提案された統計的な量子演算について考える。この統計的な量子演算を表現する具体的な演算子 V_n は

$$V_n = a_n (I - |u_0\rangle\langle u_0| - |u_n\rangle\langle u_n| + |u_0\rangle\langle u_n| + |u_n\rangle\langle u_0|) \quad (3.4)$$

となる。ここで $n = 0, 1, 2, \dots, d-1$ であり、 a_n は複素数である。今後、この a_n を“振幅”と呼ぶ。この演算子 V_n は、 H の固有状態の完全性(3.1)式において、基底状態 $|u_0\rangle\langle u_0|$ と任意の n 番目の状態 $|u_n\rangle\langle u_n|$ を、それらの状態間での遷移演算子、

$|u_0\rangle\langle u_n|$ と $|u_n\rangle\langle u_0|$ で置き換えたもので構成される。(3.4)式の演算子は対象系の状態のみで記述されており、環境系の自由度を一切含んでいない。それゆえ、この演算子によって構成される演算 Φ は対象系の Hilbert 空間上で定義されており、先ほど述べた環境系の効果は、基底状態と n 番目の状態をそれらの状態間における遷移演算子に置き換えることで表現される。次節において、この統計的な量子演算の性質や、演算による状態の変化を示す。

3.2 量子演算の性質

この節では、前節の統計的な量子演算について考える。特に、固定点解析の方法を用いて、演算 Φ を繰り返し作用させた場合、対象系の量子状態がどのように変化するのか考える。

(3.4)式の演算子 V_n は、振幅が規格化条件

$$\sum_{n=0}^{d-1} |a_n|^2 = 1 \quad (3.5)$$

を満たす場合、次の条件式

$$\sum_{n=0}^{d-1} V_n^\dagger V_n = I \quad (3.6)$$

を満たす。実際に、(3.4)式について計算すると

$$\begin{aligned} V_n^\dagger V_n &= |a_n|^2 \left(I - |u_0\rangle\langle u_0| - |u_n\rangle\langle u_n| + |u_0\rangle\langle u_n| + |u_n\rangle\langle u_0| \right)^2 \\ &= |a_n|^2 \left\{ I - |u_0\rangle\langle u_0| - |u_n\rangle\langle u_n| + |u_0\rangle\langle u_n| + |u_n\rangle\langle u_0| \right. \\ &\quad + \delta_{0,n} |u_0\rangle\langle u_n| - \delta_{0,n} |u_0\rangle\langle u_0| - |u_0\rangle\langle u_n| \\ &\quad + \delta_{0,n} |u_n\rangle\langle u_0| - |u_n\rangle\langle u_0| - \delta_{0,n} |u_n\rangle\langle u_n| \\ &\quad - \delta_{0,n} |u_0\rangle\langle u_0| + |u_0\rangle\langle u_0| + \delta_{0,n} |u_0\rangle\langle u_n| \\ &\quad \left. - \delta_{0,n} |u_n\rangle\langle u_n| + \delta_{0,n} |u_n\rangle\langle u_0| + |u_n\rangle\langle u_n| \right\} \\ &= |a_n|^2 I \end{aligned} \quad (3.7)$$

となり、(3.5)式から(3.6)式が成り立つ。この(3.6)式の条件式を満たすような $\{V_n^\dagger V_n\}_{n=0,1,2,\dots,d-1}$ を正值演算子値測度 (positive operator-valued measure, 略称 POVM) という。演算子 V_n が(3.6)式の条件を満たすことから、(3.3)式で表される量子演算 Φ のトレースは

$$\text{Tr}\{\Phi(\rho)\} = \text{Tr}\left\{\sum_{n=0}^{d-1} V_n \rho V_n^\dagger\right\} = \text{Tr}\left\{\sum_{n=0}^{d-1} V_n^\dagger V_n \rho\right\} = \text{Tr}\{\rho\} = 1 \quad (3.8)$$

となる。ここで、トレースの中で演算子の順序をサイクリックに変更できることを用いた。このことから、(3.4)式の演算子 V_n によって具体的に表現される量子演算 Φ が、前節で定義した量子演算が満たすべき条件(iii)を満たす。また、演算子 V_n は自身のエルミート共役である V_n^\dagger と交換するので ($[V_n, V_n^\dagger] = 0$)、(3.6)式で演算子の順序を交換すると

$$\sum_{n=0}^{d-1} V_n V_n^\dagger = I \quad (3.9)$$

が成り立つ。この(3.9)式は第2章で述べた **unital** の条件式であり、これらのことから量子演算 Φ が正值演算子値測度を構成する **unital** な演算であることがわかる。次に、この量子演算 Φ によって対象系の状態がどのように変化するか具体的に計算する。

初期状態として、絶対零度における基底状態 $\rho = |u_0\rangle\langle u_0|$ を考える。第2章で示したように、この状態は純粋状態であるため、初期状態 $\rho = |u_0\rangle\langle u_0|$ は純粋基底状態である。ここで、

$$\begin{aligned} V_n |u_0\rangle &= \alpha_n (|u_0\rangle - |u_0\rangle - \delta_{0,n} |u_n\rangle + \delta_{0,n} |u_0\rangle + |u_n\rangle) \\ &= \alpha_n (|u_n\rangle + \delta_{0,n} |u_0\rangle - \delta_{0,n} |u_n\rangle) \end{aligned} \quad (3.10)$$

となるため、純粋基底状態に演算 Φ を1回作用させてやると、

$$\begin{aligned}
\Phi(|u_0\rangle\langle u_0|) &= \sum_{n=0}^{d-1} |a_n|^2 (|u_n\rangle + \delta_{0,n}|u_0\rangle - \delta_{0,n}|u_n\rangle)(\langle u_n| + \delta_{0,n}\langle u_0| - \delta_{0,n}\langle u_n|) \\
&= \sum_{n=0}^{d-1} |a_n|^2 (|u_n\rangle\langle u_n| + \delta_{0,n}|u_n\rangle\langle u_0| - \delta_{0,n}|u_n\rangle\langle u_n| \\
&\quad + \delta_{0,n}|u_0\rangle\langle u_n| + \delta_{0,n}|u_0\rangle\langle u_0| - \delta_{0,n}|u_0\rangle\langle u_n| \\
&\quad - \delta_{0,n}|u_n\rangle\langle u_n| - \delta_{0,n}|u_n\rangle\langle u_0| + \delta_{0,n}|u_n\rangle\langle u_n|) \\
&= \sum_{n=0}^{d-1} |a_n|^2 |u_n\rangle\langle u_n| \\
&= \sum_{n=0}^{d-1} p_n^{(1)} |u_n\rangle\langle u_n|
\end{aligned} \tag{3.11}$$

となる。(3.11)式の係数 $p_n^{(1)}$ は $p_n^{(1)} = |a_n|^2$ で与えられる。演算後の状態は非対角成分が全てゼロであることから、この量子演算によって **perfect decoherence** が実現されていることがわかる。開放系の量子論に対する伝統的なアプローチにおいて、対象系と環境系の上に量子エンタングルメントが存在する場合、環境系の自由度を消去することによって得られた対象系の簡約密度行列は、一般に、**decoherence** が実現される。すなわち、演算 Φ を一回作用させることで、**perfect decoherence** が実現されるのは、演算 Φ に含まれる環境系の効果によるものであると解釈される。(3.11)式において、特別な例として係数 $p_n^{(1)}$ を

$$p_n^{(1)} = e^{-\beta \varepsilon_n} / Z(\beta) \tag{3.12}$$

とする。ここで、分配関数 $Z(\beta)$ は $Z(\beta) = \text{Tr}\{\exp(-\beta \varepsilon_n)\} = \sum_{n=0}^{d-1} \exp(-\beta \varepsilon_n)$ で与えられ、 β は逆温度 $\beta = 1/k_B T$ である。(3.11)式のように係数を取ると、演算 Φ によって、対象系の状態が絶対零度での純粋基底状態 $|u_0\rangle\langle u_0|$ から、有限温度 T におけるカノニカル分布

$$\rho_{\text{eq}} = \sum_{n=0}^{d-1} \frac{e^{-\beta \varepsilon_n}}{Z(\beta)} |u_n\rangle\langle u_n| \tag{3.13}$$

へ推移することがわかる。すなわち、演算 Φ によって、系を絶対零度での純粋基底状態 $|u_0\rangle\langle u_0|$ から有限温度 T における平衡状態 ρ_{eq} へと変換できることがわかる。ただし、一般に係数 $p_n^{(1)}$ は任意の値を取ることが可能であり、それゆえ演算 Φ を純粋状態に一回作用させた状態は非平衡状態である。

次に、固定点解析の方法を用いて、演算 Φ を繰り返し作用させた場合、絶対零度における純粋基底状態が、非平衡状態を通じて、高温極限における完全ランダム状態へと推移することを示す。任意の n 番目の状態に演算 Φ を作用させると

$$\begin{aligned}\Phi(|u_n\rangle\langle u_n|) &= \sum_{m=0}^{d-1} V_m |u_n\rangle\langle u_n| V_m^\dagger \\ &= (1 - p_n^{(1)}) |u_n\rangle\langle u_n| + (p_n^{(1)} - \delta_{0,n}) |u_0\rangle\langle u_0| + \delta_{0,n} \sum_{m=0}^{d-1} p_m^{(1)} |u_m\rangle\langle u_m|\end{aligned}\tag{3.14}$$

となる。よって純粋基底状態に演算 Φ を2回作用させた状態は

$$\begin{aligned}\Phi^2(|u_0\rangle\langle u_0|) &= \sum_{n=0}^{d-1} p_n^{(1)} \Phi(|u_n\rangle\langle u_n|) \\ &= \sum_{n=0}^{d-1} p_n^{(1)} \left\{ (1 - p_n^{(1)}) |u_n\rangle\langle u_n| + (p_n^{(1)} - \delta_{0,n}) |u_0\rangle\langle u_0| + \delta_{0,n} \sum_{m=0}^{d-1} p_m^{(1)} |u_m\rangle\langle u_m| \right\} \\ &= \sum_{n=0}^{d-1} (p_n^{(1)})^2 |u_0\rangle\langle u_0| + \sum_{k=1}^{d-1} \left\{ p_0^{(1)} p_k^{(1)} + (1 - p_k^{(1)}) p_k^{(1)} \right\} |u_k\rangle\langle u_k| \\ &= \sum_{n=0}^{d-1} p_n^{(2)} |u_n\rangle\langle u_n|\end{aligned}\tag{3.15}$$

となることがわかる。ここで、係数 $p_n^{(2)}$ は

$$\begin{aligned}
p_0^{(2)} &= \sum_{n=0}^{d-1} (p_n^{(1)})^2 \\
p_k^{(2)} &= p_k^{(1)} p_0^{(1)} + (1 - p_k^{(1)}) p_k^{(1)}
\end{aligned} \tag{3.16}$$

で与えられる。ただし $k=1,2,\dots,d-1$ である。(3.16)式は

$$\begin{aligned}
\sum_{n=0}^{d-1} p_n^{(2)} &= \sum_{n=0}^{d-1} (p_n^{(1)})^2 + \sum_{k=1}^{d-1} \{p_k^{(1)} p_0^{(1)} + (1 - p_k^{(1)}) p_k^{(1)}\} \\
&= \sum_{k=1}^{d-1} p_k^{(1)} + p_0^{(1)} \sum_{n=0}^{d-1} p_n^{(1)} \\
&= \sum_{n=0}^{d-1} p_n^{(1)} = 1
\end{aligned} \tag{3.17}$$

となり、係数 $p_n^{(2)}$ が規格化されていることがわかる。純粋基底状態に演算 Φ を 2 回作用させた状態を見ると、演算後の状態も非対角成分が全てゼロであることから、この演算 Φ による状態変化のもとで perfect decoherence が保存されていることがわかる。(3.11)式と(3.15)式から、純粋基底状態に N 回演算 Φ を作用させた状態は

$$\Phi^N (|u_0\rangle\langle u_0|) = \sum_{n=0}^{d-1} p_n^{(N)} |u_n\rangle\langle u_n| \tag{3.18}$$

となる。また、(3.14)式と(3.16)式から、演算 Φ を N 回作用させた場合の係数 $p_n^{(N)}$ は

$$\begin{aligned}
p_0^{(N)} &= \sum_{n=0}^{d-1} p_n^{(1)} p_n^{(N-1)} \\
p_k^{(N)} &= p_k^{(1)} p_0^{(N-1)} + (1 - p_k^{(1)}) p_k^{(N-1)}
\end{aligned} \tag{3.19}$$

で与えられることがわかる。(3.17)式と同様にして、(3.19)式の総和を計算すると

$$\begin{aligned}
\sum_{n=0}^{d-1} p_n^{(N)} &= \sum_{n=0}^{d-1} p_n^{(1)} p_n^{(N-1)} + \sum_{k=1}^{d-1} \{ p_k^{(1)} p_0^{(N-1)} - (1 - p_k^{(1)}) p_k^{(N-1)} \} \\
&= \sum_{k=1}^{d-1} p_k^{(N-1)} + p_0^{(N-1)} \sum_{n=0}^{d-1} p_n^{(1)} \\
&= \sum_{n=0}^{d-1} p_n^{(N-1)}
\end{aligned} \tag{3.20}$$

となる。任意の N に対して(3.20)式が成り立つので

$$\sum_{n=0}^{d-1} p_n^{(N)} = \sum_{n=0}^{d-1} p_n^{(N-1)} = \dots = \sum_{n=0}^{d-1} p_n^{(1)} = 1 \tag{3.21}$$

となり、係数 $p_n^{(N)}$ が規格化されていることがわかる。ここで演算 Φ を繰り返し作用させた場合の固定点を調べるため、(3.19)式において $N \rightarrow \infty$ の極限をとると

$$\begin{aligned}
p_0^{(\infty)} &= \sum_{n=0}^{d-1} p_n^{(\infty)} p_n^{(1)} \\
p_k^{(\infty)} &= p_k^{(1)} p_0^{(\infty)} + (1 - p_k^{(1)}) p_k^{(\infty)}
\end{aligned} \tag{3.22}$$

の連立方程式が得られる。この連立方程式は2つの解をもっており、1つは自明な解で

$$\begin{aligned}
p_0^{(\infty)} &= 1 \\
p_1^{(\infty)} &= p_2^{(\infty)} = \dots = p_{d-1}^{(\infty)} = 0
\end{aligned} \tag{3.23}$$

となる。この場合の演算 Φ は恒等演算である。もう一方の自明でない解、すなわち演算 Φ の固定点は

$$p_0^{(\infty)} = p_1^{(\infty)} = p_2^{(\infty)} = \dots = p_{d-1}^{(\infty)} = \frac{1}{d} \tag{3.24}$$

となることがわかる。このことから演算 Φ を繰り返し作用させた場合、その極限において純粋基底状態は

$$\Phi^\infty(|u_0\rangle\langle u_0|) = \frac{I}{d} \quad (3.25)$$

となる。(3.25)式で表される状態は高温極限における完全ランダム状態であるため、演算 Φ を繰り返し作用させた場合、対象系の状態が絶対零度の純粋基底状態から高温極限での完全ランダム状態へと推移することがわかる。また、(3.18)式の状態は一般に非平衡状態であるため、演算 Φ による状態の推移が、非平衡状態を通じて起きることがわかる。これらのことから、演算 Φ は繰り返し作用させることで系の温度を絶対零度から高温極限まで上昇させる演算であることがわかる。また、(3.25)式の状態は第2章で述べた von Neumann エントロピーの最大エントロピー状態なので、この状態における von Neumann エントロピーは

$$S[\Phi^\infty(|u_0\rangle\langle u_0|)] = k_B \ln d \quad (3.26)$$

となり、(2.36)式における unital な演算による最大エントロピーの値と一致する。これらのことから、演算 Φ による状態変化によって von Neumann エントロピーの生成を伴う不可逆な熱力学的過程が生成されることがわかる。

4 Clausius の不等式

第3章で、我々の構成した演算 Φ による状態変化によって、不可逆な熱力学的過程が生成されることを示した。この章では、演算 Φ によって生成される不可逆な熱力学的過程の性質について考える。特に、この熱力学的過程における熱量と von Neumann エントロピーの変化を具体的に計算し、演算 Φ によって生成される熱力学的過程で Clausius の不等式が破れることを示す。

4.1 熱量とエントロピーの変化

ここでは、演算 Φ によって生成される不可逆な熱力学的過程の性質について調べるため、その熱力学的過程における熱量と von Neumann エントロピーの変化について考える。N 回目の状態変化における熱量の変化は、(2.3)式から

$$\delta^{(N)}Q = \text{Tr}\{\delta^{(N)}\rho H\} \quad (4.1)$$

で表される。ここで N 回目の状態変化は、演算 Φ によって

$$\delta^{(N)}\rho = \Phi^{N+1}(\rho) - \Phi^N(\rho) \quad (4.2)$$

と表される。ここで $\Phi^0(\rho)$ は

$$\Phi^0(\rho) = \rho \quad (4.3)$$

と定義する。よって、(4.1)式に(4.2)式を代入すると、熱量の変化は

$$\delta^{(N)}Q = \text{Tr}\{H(\Phi^{N+1}(\rho) - \Phi^N(\rho))\} \quad (4.4)$$

となる。よって、(3.14)式より熱量の変化

$$\delta^{(N)}Q = \sum_{n=0}^{d-1} (p_n^{(N+1)} - p_n^{(N)}) \varepsilon_n \quad (4.5)$$

が求まる。(4.5)式に(3.18)式を代入すると

$$\begin{aligned}
\delta^{(N)}Q &= \varepsilon_0 \left\{ \sum_{n=0}^{d-1} p_n^{(1)} p_n^{(N)} - p_0^{(N)} \right\} + \sum_{k=1}^{d-1} \varepsilon_k \left\{ p_k^{(1)} p_0^{(N)} + (1 - p_k^{(1)}) p_k^{(N)} - p_k^{(N)} \right\} \\
&= \varepsilon_0 \left\{ (p_0^{(1)} - 1) p_0^{(N)} + \sum_{k=1}^{d-1} p_k^{(1)} p_k^{(N)} \right\} + \sum_{k=1}^{d-1} \varepsilon_k \left\{ p_k^{(1)} p_0^{(N)} - p_k^{(1)} p_k^{(N)} \right\} \\
&= -\varepsilon_0 \sum_{k=1}^{d-1} p_k^{(1)} (p_0^{(N)} - p_k^{(N)}) + \sum_{k=1}^{d-1} \varepsilon_k \left\{ p_k^{(1)} p_0^{(N)} - p_k^{(1)} p_k^{(N)} \right\} \\
&= \sum_{k=1}^{d-1} (\varepsilon_k - \varepsilon_0) p_k^{(1)} \left\{ p_0^{(N)} - p_k^{(N)} \right\}
\end{aligned} \tag{4.6}$$

となる。したがって、(4.6)式において

$$p_0^{(N)} \geq p_k^{(N)} \tag{4.7}$$

が成り立つ場合、熱量の変化が

$$\delta^{(N)}Q \geq 0 \tag{4.8}$$

を満たすことがわかる。熱力学的な過程において、系を基底状態に見出す確率 $p_0^{(N)}$ は、系を k 番目の励起状態に見出す確率 $p_k^{(N)}$ と比べて等しい、もしくは大きいいため、(4.7)式の条件は、演算 Φ による状態変化のもとで成り立つと考えてよい。(4.8)式で与えられる熱量の変化は、 $N \rightarrow \infty$ の極限、すなわち(3.24)式の高温極限における完全ランダム状態でゼロに収束する。このことから演算 Φ が系に熱を供給する加熱演算であることがわかる。

一方で、von Neumann エントロピーの変化は2つの形で定義される。1つ目は $N+1$ 回目と N 回目の状態における von Neumann エントロピーの差

$$\delta_I^N S = S[\Phi^{N+1}(\rho)] - S[\Phi^N(\rho)] \tag{4.9}$$

で定義される。これに対して、2つ目の定義は von Neumann エントロピーの定義である(2.4)式の変分

$$\delta S[\rho] = -k_B \text{Tr} \{ \delta \rho \ln \rho \} \tag{4.10}$$

に(4.2)式を代入した

$$\delta_{II}^N S = -k_B \text{Tr} \left\{ \left[\Phi^{N+1}(\rho) - \Phi^N(\rho) \right] \ln \Phi^N(\rho) \right\} \tag{4.11}$$

で定義される。ここでは、この von Neumann エントロピーの変化に対する2つの定義に対して、どちらか一方を採用するのではなくその両方について考える。次節では演算 Φ によって生成される加熱過程における、これらの振る舞いについて考える。

4.2 Clausius の不等式

前節で、演算 Φ によって生成される熱力学的過程における熱量とエントロピーの変化について定義した。この節では、簡単な例として、スピン 1/2 の2粒子系を考えて、前節で定義した熱量やエントロピーの変化について具体的に計算する。特に、平衡点近傍での振る舞いについて詳しく調べ、演算 Φ によって生成される熱力学的過程において Clausius の不等式が破れることを示す。

スピン 1/2 の2粒子系において、一方の粒子を A、もう一方を B とすると、この対象系の Hamiltonian H は

$$H = -J\sigma_A \cdot \sigma_B \quad (4.12)$$

で与えられる。ここで結合定数 J は

$$J < 0 \quad (4.13)$$

を満たす。(4.12)式の $\sigma_\alpha = (\sigma_{\alpha,x}, \sigma_{\alpha,y}, \sigma_{\alpha,z})$ ($\alpha = A, B$) はスピン A と B の Pauli 行列である。この Hamiltonian H の固有状態は

$$|u_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\rangle_A |\downarrow\rangle_B - |\downarrow\rangle_A |\uparrow\rangle_B \right) \quad (4.14)$$

$$|u_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\rangle_A |\downarrow\rangle_B + |\downarrow\rangle_A |\uparrow\rangle_B \right) \quad (4.15)$$

$$|u_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\rangle_A |\uparrow\rangle_B - |\downarrow\rangle_A |\downarrow\rangle_B \right) \quad (4.16)$$

$$|u_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\rangle_A |\uparrow\rangle_B + |\downarrow\rangle_A |\downarrow\rangle_B \right) \quad (4.17)$$

で定義される。この固有状態を表す状態ベクトル $|\uparrow\rangle_\alpha$ と $|\downarrow\rangle_\alpha$ は $\sigma_{\alpha,z}$ の固有値+1 と-1 のそれぞれに対応する固有状態である。これら(4.14)式から(4.17)式で表される状態は Bell 状態と呼ばれ、最大エンタングルメント状態である。この固有状態は正規完全直交化されており、4次元の Hilbert 空間上で定義される。これらの固有状態に対する固有値は

$$\varepsilon_0 = 3J, \quad \varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_3 = -J \quad (4.18)$$

となり、励起状態が3重縮退していることがわかる。

第3章では、演算 Φ による状態変化を計算する際に、初期状態として絶対零度における純粋基底状態を考えた。ここでは、演算 Φ によって生成される不可逆な加熱過程の熱力学的な性質について考えるため、(3.12)式の形で表される有限温度における平衡状態 ρ_{eq} を初期状態とする。スピン 1/2 の2粒子系の場合、

平衡状態 ρ_{eq} は

$$\rho_{eq} = \sum_{n=0}^3 \frac{e^{-\beta\varepsilon_n}}{Z(\beta)} |u_n\rangle\langle u_n| \quad (4.19)$$

となり、分配関数 $Z(\beta)$ は

$$\begin{aligned} Z(\beta) &= \sum_{n=0}^3 \exp(-\beta\varepsilon_n) \\ &= e^{-3\beta J} + 3e^{\beta J} \end{aligned} \quad (4.20)$$

で与えられる。以下、計算の簡略化のために(4.19)式を

$$\rho_{eq} = \sum_{n=0}^3 f_n |u_n\rangle\langle u_n| \quad (4.21)$$

と書くことにする。(4.20)式において係数 f_n は

$$f_n = \frac{e^{-\beta\varepsilon_n}}{Z(\beta)} \quad (4.22)$$

で与えられる、系を n 番目の状態に見出す確率である。この平衡状態の近傍での振る舞いを見るために、(3.4)式における振幅の絶対値の2乗を

$$|a_0|^2 = 1 - \Delta$$

$$|a_k|^2 = \frac{\Delta}{3} \quad (k=1,2,3) \quad (4.23)$$

とする。以下で、 Δ の上限と下限を求める。

密度行列の固有値は正の値であるため、(4.23)式からただちに Δ の下限が

$$\Delta > 0 \quad (4.24)$$

と求まる。一方、 Δ の上限は演算 Φ が加熱演算であるための条件式、(4.5)式から求める。この場合、熱量の変化は

$$\delta^{(N)}Q = 4J(p_0^{(N+1)} - p_0^{(N)}) \quad (4.25)$$

となる。ただし、(4.23)式から任意の N に対して

$$\sum_{k=1}^3 p_k^{(N)} = 3p_1^{(N)} \quad (4.26)$$

が成り立つことを用いた。演算 Φ が加熱演算であるため、全ての N に対して

$$p_0^{(N+1)} - p_0^{(N)} < 0 \quad (4.27)$$

が成り立つ。ここで、(3.19)式から $p_0^{(N+1)}$ は

$$\begin{aligned} p_0^{(N+1)} &= \sum_{n=0}^3 p_n^{(1)} p_n^{(N)} \\ &= p_0^{(1)} p_0^{(N)} + 3p_1^{(1)} p_1^{(N)} \\ &= p_0^{(1)} p_0^{(N)} + 3 \left\{ \frac{1}{9} (1 - p_0^{(1)}) (1 - p_0^{(N)}) \right\} \\ &= \frac{1}{3} - \frac{1}{3} (p_0^{(1)} + p_0^{(N)}) + \frac{4}{3} p_0^{(1)} p_0^{(N)} \end{aligned} \quad (4.28)$$

となる。ゆえに(4.27)式に(4.28)式を代入すると

$$\begin{aligned}
p_0^{(N+1)} - p_0^{(N)} &= \frac{1}{3} - \frac{1}{3} p_0^{(1)} - \frac{4}{3} p_0^{(N)} + \frac{4}{3} p_0^{(1)} p_0^{(N)} \\
&= \frac{4}{3} p_0^{(N)} (p_0^{(1)} - 1) + \frac{1}{3} (1 - p_0^{(1)}) \\
&= \frac{1}{3} \Delta - \frac{4}{3} \Delta p_0^{(N)} \\
&= \frac{1}{3} \Delta (1 - 4 p_0^{(N)}) < 0
\end{aligned} \tag{4.29}$$

となるため、 $p_0^{(N)}$ が

$$p_0^{(N)} > \frac{1}{4} \tag{4.30}$$

を満たす場合、全ての N に対して(4.27)式が成り立つ。(4.23)式と(4.30)式から

$$\begin{aligned}
\frac{1}{4} < p_0^{(1)} = 1 - \Delta \\
\Delta < \frac{3}{4}
\end{aligned} \tag{4.31}$$

となることがわかる。(4.24)式と(4.31)式から Δ の上限と下限は

$$0 < \Delta < \frac{3}{4} \tag{4.32}$$

となる。以下では、 Δ として(4.32)式の条件を満たすような正の微小量を考える。このような演算 Φ による状態変化の模式図を図 4.1 に示す。

我々は、平衡点近傍での演算 Φ によって生成される熱力学的過程について考えるため、(4.2)式で $N=0,1$ とした場合の熱量とエントロピーの変化について求める。演算 Φ による状態変化は

$$\begin{aligned}
\Phi(\rho_{eq}) &= \rho_{eq} - \Delta(f_0 - f_1)|u_0\rangle\langle u_0| + \frac{\Delta}{3}(f_0 - f_1)\sum_{m=1}^3|u_m\rangle\langle u_m| \\
&= \rho_{eq} + \frac{\Delta}{3}(f_0 - f_1)(I - 4|u_0\rangle\langle u_0|)
\end{aligned} \tag{4.33}$$

$$\Phi^2(\rho_{eq}) = \rho_{eq} + \left(\frac{2\Delta}{3} - \frac{4\Delta^2}{9} \right) (f_0 - f_1) (I - 4|u_0\rangle\langle u_0|) \quad (4.34)$$

となることがわかる。ただし、(4.33)式と(4.34)式において完全性の条件

$$I = \sum_{n=0}^3 |u_n\rangle\langle u_n| \quad (4.35)$$

を用いた。(4.33)式と(4.34)式を、以下の計算の簡略化のために

$$\Phi(\rho_{eq}) = \sum_{n=0}^3 (f_n + \Delta\kappa_n) |u_n\rangle\langle u_n| \quad (4.36)$$

$$\Phi^2(\rho_{eq}) = \sum_{n=0}^3 (f_n + \Delta\mu_n + \Delta^2\nu_n) |u_n\rangle\langle u_n| \quad (4.37)$$

と書き換えることにする。(4.36)式における Δ の1次の係数は

$$\begin{aligned} \kappa_0 &= -(f_0 - f_1) \\ \kappa_k &= \frac{1}{3}(f_0 - f_1) \quad (k=1,2,3) \end{aligned} \quad (4.38)$$

で与えられる。この(4.38)式で与えられる κ_n を用いて、(4.37)式の各係数は

$$\begin{aligned} \mu_n &= 2\kappa_n \\ \nu_n &= -\frac{4}{3}\kappa_n \quad (n=0,1,2,3) \end{aligned} \quad (4.39)$$

で表される。(4.38)式から κ_n が

$$\sum_{n=0}^3 \kappa_n = 0 \quad (4.40)$$

を満たし、このことから(4.36)式と(4.37)式の密度行列が規格化されていることがわかる。(4.21)式と(4.33)式、(4.34)式から、 $\delta\rho$ を求めると

$$\delta^{(0)}\rho_{eq} = \frac{\Delta}{3}(f_0 - f_1)(I - 4|u_0\rangle\langle u_0|) \quad (4.41)$$

$$\delta^{(1)}\rho_{eq} = \left(\frac{\Delta}{3} - \frac{4\Delta^2}{9}\right)(f_0 - f_1)(I - 4|u_0\rangle\langle u_0|) \quad (4.42)$$

となる。(4.41)式と(4.42)式を(4.4)式に代入すると、熱量の変化は

$$\delta^{(0)}Q = -4\Delta J(f_0 - f_1) \quad (4.43)$$

$$\delta^{(1)}Q = -\left(4\Delta - \frac{16\Delta^2}{3}\right)J(f_0 - f_1) \quad (4.44)$$

と求まる。次に、von Neumann エントロピーの変化を計算する。von Neumann エントロピーの変化は2つの式で定義されるので、まず(4.9)式から考える。そのために、平衡状態でのエントロピーと(4.36)式、(4.37)式の状態における von Neumann エントロピーを計算すると

$$S[\rho_{eq}] = -k_B \sum_{n=0}^3 f_n \ln f_n \quad (4.45)$$

$$S[\Phi(\rho_{eq})] = -k_B \sum_{n=0}^3 (f_n + \Delta\kappa_n) \ln(f_n + \Delta\kappa_n) \quad (4.46)$$

$$S[\Phi^2(\rho_{eq})] = -k_B \sum_{n=0}^3 (f_n + \Delta\mu_n + \Delta^2\nu_n) \ln(f_n + \Delta\mu_n + \Delta^2\nu_n) \quad (4.47)$$

となることがわかる。ここで、一般の演算子値関数 g に対して

$$g\left(\sum_n a_n |u_n\rangle\langle u_n|\right) = \sum_n g(a_n) |u_n\rangle\langle u_n| \quad (4.48)$$

が成り立つことを用いた。(4.46)式と(4.47)式において、 $\ln(1+x)$ 、ただし $x < 1$ のテイラー展開

$$\ln(1+x) = x - \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{3}x^3 + \dots \quad (4.49)$$

を用いると

$$\begin{aligned}
\ln(f_n + \Delta\kappa_n) &= \ln\left\{f_n\left(1 + \Delta\frac{\kappa_n}{f_n}\right)\right\} \\
&= \ln f_n + \Delta\frac{\kappa_n}{f_n} - \frac{1}{2}\Delta^2\left(\frac{\kappa_n}{f_n}\right)^2 + O(\Delta^3)
\end{aligned} \tag{4.50}$$

$$\begin{aligned}
\ln(f_n + \Delta\kappa_n) &= \ln\left\{f_n\left(1 + \Delta\frac{\mu_n}{f_n} + \Delta^2\frac{\nu_n}{f_n}\right)\right\} \\
&= \ln f_n + \Delta\frac{\mu_n}{f_n} + \Delta^2\frac{\nu_n}{f_n} - \frac{1}{2}\Delta^2\left(\frac{\mu_n}{f_n}\right)^2 + O(\Delta^3)
\end{aligned} \tag{4.51}$$

となることがわかる。これらのことから、(4.46)式と(4.47)式が

$$S[\Phi(\rho_{eq})] = S[\rho_{eq}] - 4\Delta k_B \beta J(f_0 - f_1) - \frac{1}{6}\Delta^2 k_B \frac{(f_0 - f_1)^2}{f_0 f_1} + O(\Delta^3) \tag{4.52}$$

$$\begin{aligned}
S[\Phi^2(\rho_{eq})] &= S[\rho_{eq}] - 8\Delta k_B \beta J(f_0 - f_1) + \frac{16}{3}\Delta^2 k_B \beta J(f_0 - f_1) \\
&\quad - \frac{2}{3}\Delta^2 k_B \frac{(f_0 - f_1)^2}{f_0 f_1} + O(\Delta^3)
\end{aligned} \tag{4.53}$$

となることがわかる。(4.52)式と(4.53)式からエントロピーの変化は

$$\delta_1^{(0)} S = -4\Delta k_B \beta J(f_0 - f_1) - \frac{1}{6}\Delta^2 k_B \frac{(f_0 - f_1)^2}{f_0 f_1} + O(\Delta^3) \tag{4.54}$$

$$\begin{aligned}
\delta_1^{(1)} S &= -4\Delta k_B \beta J(f_0 - f_1) \\
&\quad + \frac{1}{6}\Delta^2 k_B (f_0 - f_1) \left\{ 32\beta J - \frac{3(f_0 - f_1)}{f_0 f_1} \right\} + O(\Delta^3)
\end{aligned} \tag{4.55}$$

で与えられる。一方で、(4.11)式を同様に計算すると

$$\delta_{\text{II}}^{(0)} S = -\Delta k_B \sum_{n=0}^3 \kappa_n \ln f_n = -4\Delta k_B \beta J (f_0 - f_1) \quad (4.56)$$

$$\begin{aligned} \delta_{\text{II}}^{(1)} S &= -k_B \sum_{n=0}^3 \left\{ \Delta (\mu_n - \kappa_n) + \Delta^2 \nu_n \right\} \ln (f_n + \Delta \kappa_n) \\ &= -4\Delta k_B \beta J (f_0 - f_1) \\ &\quad + \frac{1}{3} \Delta^2 k_B (f_0 - f_1) \left\{ 16\beta J - \frac{(f_0 - f_1)}{f_0 f_1} \right\} + O(\Delta^3) \end{aligned} \quad (4.57)$$

となる。

(4.43)式と(4.56)式から、(4.11)式の定義を用いた場合、Clausius の等式

$$\delta_{\text{II}}^{(0)} S = \frac{\delta^{(0)} Q}{T} \quad (4.58)$$

が成り立つことがわかる。これは平衡状態からの 1 回の変化による熱力学的過程が、可逆過程であることを意味している。一方、(4.9)式の定義を用いると、

$$\delta_{\text{I}}^{(0)} S - \frac{\delta^{(0)} Q}{T} = -\frac{1}{6} \Delta^2 k_B \frac{(f_0 - f_1)^2}{f_0 f_1} + O(\Delta^3) < 0 \quad (4.59)$$

となり、Clausius の不等式が破れることがわかる。同様にして、 $N=1$ の場合

$$\delta_{\text{II}}^{(1)} S - \frac{\delta^{(1)} Q}{T} = -\frac{1}{3} \Delta^2 k_B \frac{(f_0 - f_1)^2}{f_0 f_1} + O(\Delta^3) < 0 \quad (4.60)$$

$$\delta_{\text{I}}^{(1)} S - \frac{\delta^{(1)} Q}{T} = -\frac{1}{2} \Delta^2 k_B \frac{(f_0 - f_1)^2}{f_0 f_1} + O(\Delta^3) < 0 \quad (4.61)$$

となり、平衡状態から 2 回の変化による熱力学的過程では、(4.9)式と(4.11)式の両方に対して Clausius の不等式が破れることを示せた。ここで(4.59)式、(4.60)式、(4.61)式を見てやると、全てにおいて Δ の 1 次のオーダーが消えることから、Clausius の不等式の破れは Δ の 2 次のオーダーで与えられることがわかる。これは、平衡状態近傍で系が可逆過程に留まろうとすることを表している。

ここで注意すべきことが 1 つある。平衡状態近傍における、演算 Φ によって生成される熱力学的過程において Clausius の不等式が破れることを示した。し

かしながら、(4.59)式や(4.60)式、(4.61)式で与えられる Clausius の不等式の破れが、ただちに、この熱力学的過程において熱力学第二法則の破れを証明するものではない。なぜならば、我々が考えた演算 Φ は、環境系の効果を含んでいるが、環境系そのものの情報を一切含んでいないため、例えば、環境系として対象系に熱を与えるような“装置”におけるエントロピー生成については一切議論できないからである。仮に、この環境系としての“装置”におけるエントロピーの生成を考えるには、環境系そのものをダイナミカルに取り扱ってやる必要がある。しかしながら、(4.59)式、(4.60)式、(4.61)式において、Clausius の不等式の破れは全て $(f_0 - f_1)^2$ に比例している。すなわち、エネルギーギャップが大きくなるほど Clausius の不等式は強く破れる。このことから、量子的な離散性が、これら Clausius の不等式の破れの本質であることがわかる。

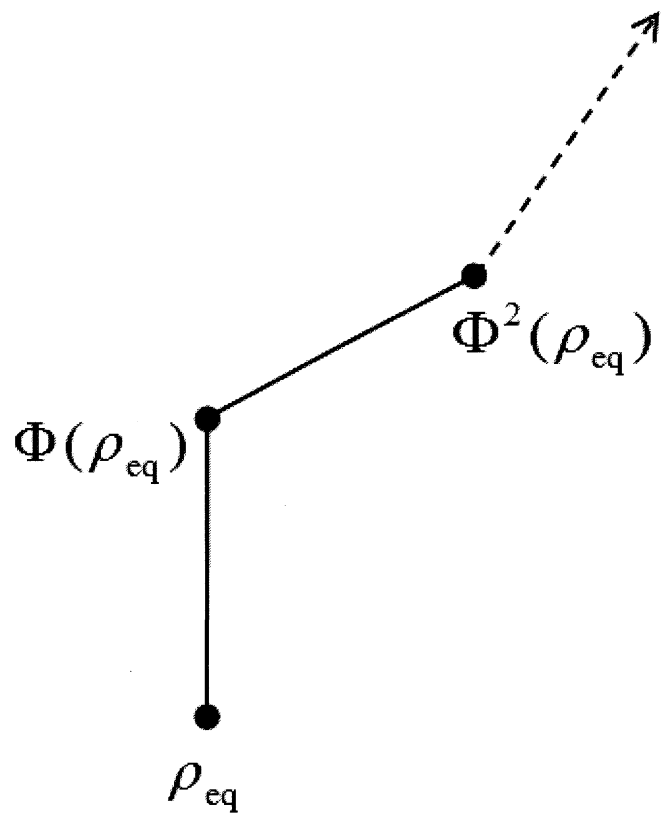


図 4.1 演算 Φ による状態変化図

5 結論

我々は量子熱力学のオペレーショナルな理論の展開として、熱力学的な観点から正の非ユニタリーな演算、特に統計的な演算 Φ について考えた。我々は固定点解析の方法を用いて、この演算 Φ を繰り返し作用させた場合、系の状態が絶対零度における純粋基底状態から、非平衡状態を通じて、高温極限での完全ランダム状態へと推移することを示した。また、量子熱力学における熱量の変化とエントロピーがこの演算による状態変化のもとで単調増加することを示し、それゆえにこの演算が加熱演算であることを述べた。我々は簡単な例として、スピン 1/2 の 2 粒子系を考えて、この演算 Φ によって生成される熱力学的過程において、Clausius の不等式が破れることを示した。また、この Clausius の不等式の破れが、エネルギーの量子的な離散性によるものであることを述べた。

謝辞

本研究を行うにあたり、ご指導いただきました阿部純義先生に深く感謝申し上げます。また、ご助言を与えてくださった松永守先生、鳥飼正志先生にも感謝申し上げます。

最後に、量子物理学研究室ならびに物性物理学研究室のスタッフ及び学生の皆様のおかげで、本研究を有意義に行うことができたこと、感謝いたします。

参考文献

- [1] P. Pechukas, Phys. Rev. Lett. **73**, 1060 (1994)
- [2] R. Alicki, Phys. Rev. Lett. **75**, 3020 (1995)
- [3] P. Pechukas, Phys. Rev. Lett. **75**, 3021 (1995)
- [4] S. Abe, A. R. Usha Devi, A. K. Rajagopal, J. Phys. A: Math. Theor. **43**, 045303 (2010)
- [5] S. Abe, Y. Itto, M. Matsunaga, Mod. Phys. Lett. B **24**, 2015 (2010)
- [6] S. Abe and Y. Aoyaghi, Submitted (2011).
- [7] R. Bhatia, *Matrix Analysis* (Springer-Verlag, New York, 1997)
- [8] G. Lindblad, Commun. math. Phys. **48**, 119-130 (1976)

付録 A : perfect decoherence と不可逆変化

ここでは、対象系と環境系の上に量子エンタングルメントが存在する場合、decoherence が生じることを示す。また、この場合に対象系の状態の時間発展が不可逆であることを示す。

対象系と環境系の 2 つの部分系に分かれた系について考える。この系の模式図を図 A.1 に示す。全系の Hilbert 空間 H は

$$H = H_S \otimes H_E \quad (\text{A.1})$$

で表される。ここで H_S は対象系の Hilbert 空間、 H_E は環境系の Hilbert 空間を表し、 \otimes はテンソル積である。対象系の Hilbert 空間の次元を d_S 、環境系の Hilbert 空間の次元を d_E とすると、全系の Hilbert 空間 H の次元 d は

$$d = d_S \cdot d_E \quad (\text{A.2})$$

で与えられる。

ここで全系の密度行列を ρ_{tot} 、対象系の密度行列を ρ_S 、環境系の密度行列を ρ_E と表記する。もし、対象系と環境系の上に量子エンタングルメントがない場合、全系の密度行列 ρ_{tot} は対象系と環境系の密度行列 ρ_S, ρ_E のテンソル積

$$\rho_{\text{tot}} = \rho_S \otimes \rho_E \quad (\text{A.3})$$

で表される。この場合、全系の Hamiltonian H_{tot} は

$$H_{\text{tot}} = H_S + H_E \quad (\text{A.4})$$

となる。ここで H_S は対象系の Hamiltonian、 H_E は環境系の Hamiltonian を表す。

全系は閉じた系なので、全系の密度行列 ρ_{tot} のダイナミクスは Liouville-von Neumann 方程式

$$i\hbar \frac{\partial \rho_{\text{tot}}}{\partial t} = [H_{\text{tot}}, \rho_{\text{tot}}] \quad (\text{A.5})$$

に従う。ここで $[H_{\text{tot}}, \rho_{\text{tot}}]$ は H_{tot} は ρ_{tot} の交換関係

$$[H_{\text{tot}}, \rho_{\text{tot}}] = H_{\text{tot}} \rho_{\text{tot}} - \rho_{\text{tot}} H_{\text{tot}} \quad (\text{A.6})$$

である。(A.5)式を形式的に解くと、全系の密度行列 ρ_{tot} の時間発展はユニタリー変換

$$\rho_{\text{tot}}(t) = U(t) \rho_{\text{tot}}(0) U^\dagger(t) \quad (\text{A.7})$$

で記述される。ここでユニタリー演算子 $U(t)$ は

$$U(t) = \exp(-iH_{\text{tot}}t/\hbar) \quad (\text{A.8})$$

で与えられる。全系の Hamiltonian H_{tot} が(A.4)式で与えられ、また、対象系と環境系の Hamiltonian は交換するため、(A.8)式のユニタリー演算子は

$$\begin{aligned} U(t) &= \exp\{-i(H_S + H_E)t/\hbar\} \\ &= \exp(-iH_S t/\hbar) \otimes \exp(-iH_E t/\hbar) \\ &= U_S(t) \otimes U_E(t) \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

となる。(A.7)式に(A.3)式と(A.9)式を代入すると

$$\rho_S(t) \otimes \rho_E(t) = U_S(t) \rho_S(0) U_S^\dagger(t) \otimes U_E(0) \rho_E(t) U_E^\dagger(t) \quad (\text{A.10})$$

となる。(A.10)式から対象系の密度行列 ρ_S の時間発展はユニタリー変換

$$\rho_S(t) = U_S(t) \rho_S(0) U_S^\dagger(t) \quad (\text{A.11})$$

で記述される。(A.11)式の両辺に、右から $U_S^\dagger(t)$ 、左から $U_S(t)$ を作用すると

$$\rho_S(0) = U_S^\dagger(t) \rho_S(t) U_S(t) \quad (\text{A.12})$$

となる。また、(A.9)式から $U_S^\dagger(t)$ を求めると

$$U_S^\dagger(t) = \exp(iH_S t/\hbar) = U(-t) \quad (\text{A.13})$$

となり、(A.11)式のユニタリー変換には逆変換が存在する。それゆえ、(A.11)式の状態の時間発展は可逆変化である。同様に、一般にユニタリー変換には逆ユニタリー変換が存在する。よって、(A.5)式で与えられる閉じた Hamilton ダイナミクスによる状態の時間発展は可逆変化である。対象系と環境系の間に量子

エンタングルメントが存在しない場合、対象系は閉じた系である。それゆえ、対象系の密度行列は完全正値性を保っており、対象系の状態に decoherence は生じない。

一方、対象系と環境系の間量子エンタングルメントが存在する場合について考える。この場合、全系の密度行列 ρ_{tot} は(A.3)式のように対象系と環境系の密度行列のテンソル積の形で書き表せない。以下、簡略化のためスピン 1/2 の 2 粒子系を考える。全系の密度行列 ρ_{tot} を

$$\rho_{\text{tot}} = |\Psi\rangle\langle\Psi| \quad (\text{A.14})$$

とする。ここで状態ベクトル $|\Psi\rangle$ は Bell 状態

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\rangle_{\text{S}} |\downarrow\rangle_{\text{E}} + |\downarrow\rangle_{\text{S}} |\uparrow\rangle_{\text{E}} \right) \quad (\text{A.15})$$

とする。ここで $|\uparrow\rangle_{\alpha}, |\downarrow\rangle_{\alpha}$ ($\alpha = \text{S, E}$) はそれぞれ対象系と環境系の Pauli 行列の z 軸成分の固有状態であり、完全正規直交系であるとする。この(A.15)式の状態は最大エンタングルメント状態である。(A.14)式に(A.15)式を代入すると、全系の密度行列 ρ_{tot} は

$$\begin{aligned} \rho_{\text{tot}} &= |\Psi\rangle\langle\Psi| \\ &= \frac{1}{2} \left(|\uparrow\rangle_{\text{SS}} \langle\uparrow| \otimes |\downarrow\rangle_{\text{EE}} \langle\downarrow| + |\uparrow\rangle_{\text{SS}} \langle\downarrow| \otimes |\downarrow\rangle_{\text{EE}} \langle\uparrow| \right. \\ &\quad \left. + |\downarrow\rangle_{\text{SS}} \langle\uparrow| \otimes |\uparrow\rangle_{\text{EE}} \langle\downarrow| + |\downarrow\rangle_{\text{SS}} \langle\downarrow| \otimes |\uparrow\rangle_{\text{EE}} \langle\uparrow| \right) \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

となる。(A.16)式の密度行列 ρ_{tot} は(A.3)式のように対象系と環境系の密度行列のテンソル積で書き表せないことがわかる。(A.16)式から対象系の密度行列 ρ_{S} を求めるために、環境系の自由度を消去すると

$$\begin{aligned} \rho_{\text{S}} &= \text{Tr}_{\text{E}} \{ \rho_{\text{tot}} \} \\ &= \frac{1}{2} \left(|\uparrow\rangle_{\text{SS}} \langle\uparrow| \text{Tr}_{\text{E}} \{ |\downarrow\rangle_{\text{EE}} \langle\downarrow| \} + |\uparrow\rangle_{\text{SS}} \langle\downarrow| \text{Tr}_{\text{E}} \{ |\downarrow\rangle_{\text{EE}} \langle\uparrow| \} \right. \\ &\quad \left. + |\downarrow\rangle_{\text{SS}} \langle\uparrow| \text{Tr}_{\text{E}} \{ |\uparrow\rangle_{\text{EE}} \langle\downarrow| \} + |\downarrow\rangle_{\text{SS}} \langle\downarrow| \text{Tr}_{\text{E}} \{ |\uparrow\rangle_{\text{EE}} \langle\uparrow| \} \right) \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

となる。ここで

$$\text{Tr} \{ |i\rangle\langle j| \} = \langle i | j \rangle \quad (\text{A.18})$$

より、(A.17)式は

$$\begin{aligned}\rho_S &= \text{Tr}_E \{ \rho_{\text{tot}} \} \\ &= \frac{1}{2} \left(\left| \uparrow \right\rangle_{SS} \langle \uparrow | + \left| \downarrow \right\rangle_{SS} \langle \downarrow | \right) = \frac{I}{2}\end{aligned}\tag{A.19}$$

となる。(A.19)式の対象系の密度行列 ρ_S は非対角成分が全てゼロである。このことから、対象系と環境系の上に量子エンタングルメントが存在する場合、対象系の簡約密度行列が **decoherence** することがわかった。特に、(A.15)式の状態は最大エンタングルメント状態であるため、(A.19)式の密度行列は **perfect decoherence** している。

対象系と環境系の上に量子エンタングルメントが存在する場合でも、全系は閉じた系であるため、全系の密度行列 ρ_{tot} のダイナミクスは(A.5)式の方程式に従う。したがって ρ_{tot} の時間発展はユニタリー変換

$$\rho_{\text{tot}}(t) = U(t) \rho_{\text{tot}}(0) U^\dagger(t)\tag{A.20}$$

で与えられる。ここでユニタリー演算子 $U(t)$ は

$$U(t) = \exp(-iH_{\text{tot}}t/\hbar)\tag{A.21}$$

となる。(A.21)式から対象系の密度行列 ρ_S の時間発展が

$$\begin{aligned}\rho_S(t) &= \text{Tr}_E \{ \rho_{\text{tot}}(t) \} \\ &= \text{Tr}_E \{ U(t) \rho_{\text{tot}}(0) U^\dagger(t) \}\end{aligned}\tag{A.22}$$

となる。対象系と環境系の上に量子エンタングルメントが存在しない場合、全系の Hamiltonian は(A.4)式で記述された。しかしながら、対象系と環境系が相互作用する場合、全系の Hamiltonian H_{tot} は

$$H_{\text{tot}} = H_S + H_E + I_{SE}\tag{A.23}$$

で与えられる。ここで I_{SE} は対象系と環境系の上の弱い相互作用を表す

Hamiltonian である。上述したように対象系と環境系の Hamiltonian は交換する。しかしながら、対象系の Hamiltonian H_S と対象系と環境系の上の弱い相互作用を表す I_{SE} は一般に交換しない。これは、 I_{SE} が対象系の自由度を含んでいないためである。すなわち(A.21)式は

$$\begin{aligned} U(t) &= \exp\{-i(H_S + H_E + I_{SE})t/\hbar\} \\ &\neq U_S(t) \otimes U_E(t) \end{aligned} \tag{A.23}$$

となる。(A.22)式と(A.23)式から対象系の密度行列 ρ_s の時間発展は一般に非ユニタリー変換であることがわかる。(A.22)式から導出される非ユニタリーな変換に対して、一般に逆変換は存在しない。それゆえ、対象系と環境系の上に量子エンタングルメントが存在する場合、すなわち対象系が開放系である場合には、系の状態は不可逆に変化することがわかる。

閉じた系

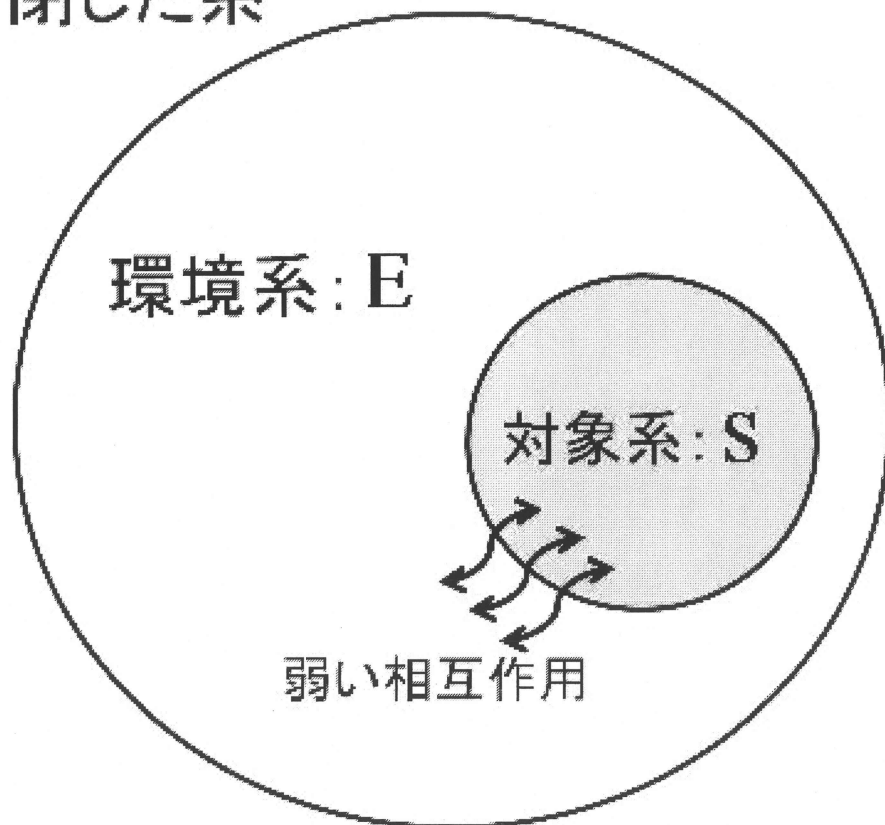


図 A.1 対象系と環境系の 2 つの部分系に分かれた系

付録 B : Ando の定理の証明

本文 2.2 節で用いた Ando の定理を証明する。そのための準備として、エルミート行列とその性質、さらに行列凹関数について以下に説明する。

H^N を N 次元 Hilbert 空間とする。任意のベクトル $|\psi\rangle, |\phi\rangle \in H^N$ に対して、 $|\psi\rangle$ と $|\phi\rangle$ のエルミート内積を $\langle\psi, \phi\rangle$ と表し、

$$\langle\psi, \phi\rangle = \langle\phi, \psi\rangle^* \quad (\text{B.1})$$

$$\langle\lambda\psi, \phi\rangle = \lambda^* \langle\psi, \phi\rangle \quad (\text{B.2})$$

を満たす。ただし、 $*$ は複素共役を表し、 λ は任意の複素数である。

以下では特に断らない限り、行列とは Hilbert 空間 H^N にのベクトルに作用する $N \times N$ 行列を指すとする。また、 H^N に属するベクトルも同様に、単にベクトルと表記することにする。

ベクトル $|\psi\rangle$ のノルム $\|\psi\|$ は

$$\|\psi\| = \sqrt{\langle\psi, \psi\rangle} \quad (\text{B.3})$$

で定義され、 $\|\psi\| \geq 0$ を満たす。

任意の行列 O に対して、ベクトル $|\phi\rangle$ とベクトル $O|\psi\rangle$ のエルミート内積を $\langle\phi, O\psi\rangle$ と表記する。同様にベクトル $O|\psi\rangle$ とベクトル $|\phi\rangle$ のエルミート内積は $\langle O\psi, \phi\rangle$ と表記する。行列 O に対するエルミート共役な行列は

$$\langle\psi, O\phi\rangle = \langle\phi, O^\dagger\psi\rangle^* \quad (\text{B.4})$$

を満たす行列 O^\dagger として定義される。もし、行列 O が $O = O^\dagger$ を満たす場合、行列 O をエルミート行列と呼ぶ。任意の行列 O とそのエルミート共役な行列 O^\dagger の積で表される行列 OO^\dagger はエルミート行列である。行列 OO^\dagger のエルミート共役を計算すると

$$(OO^\dagger)^\dagger = (O^\dagger)^\dagger O^\dagger = OO^\dagger \quad (\text{B.5})$$

となり、行列 OO^\dagger がエルミート行列であることが示せた。任意のエルミート行列 A 及びベクトル $|\psi\rangle$ に対して、 $\langle\psi, A\psi\rangle$ は実数である。このエルミート行列 A と任意のベクトル $|\psi\rangle$ に対して、 $\langle\psi, A\psi\rangle \geq 0$ が満たされている場合、 $A \geq 0$ と表記し、このような行列を正定値行列と呼ぶ。また、エルミート行列 A, B に対して $A - B \geq 0$ が成り立つとき、 $A \geq B$ と表記する。

行列 A のノルム $\|A\|$ は、 $\|\psi\| = 1$ を満たす任意のベクトル $|\psi\rangle$ に対して

$$\|A\| = \sup_{\|\psi\|=1} \|A\psi\| \quad (\text{B.6})$$

で定義される。ただし、 $\|A\psi\|$ はベクトル $A|\psi\rangle$ のノルムである。また、 $\|A\psi\| \geq 0$ より

$$\begin{aligned} \|A^\dagger A\| &= \sup_{\|\psi\|=1} \|A^\dagger A\psi\| \\ &\leq \sup_{\|\psi\|=1} \|A\psi\|^2 = \left[\sup_{\|\psi\|=1} \|A\psi\| \right]^2 = \|A\|^2 \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

となる。 A がエルミート行列である場合、ノルムは

$$\|A\| = \sup_{\|\psi\|=1} |\langle\psi, A\psi\rangle| \quad (\text{B.8})$$

で表される。行列 A のノルムが $\|A\| \leq 1$ を満たす場合、この行列 A を contraction という。行列 A が正定値行列ならば、単位行列 I に対して $A \leq I$ が成り立つ場合

のみ contraction となることを示す。 $\|\psi\|=1$ を満たす任意のベクトル $|\psi\rangle$ と正定値行列 A に対して、 $A \leq I$ ならば $\langle \psi, A\psi \rangle \leq 1$ であり、 $A > I$ ならば $\langle \psi, A\psi \rangle > 1$ となる。したがって、エルミート行列のノルムを表す(B.8)式から、 $A \leq I$ の場合、 $\|A\| \leq 1$ であるため A は contraction であり、 $A > I$ なら $\|A\| > 1$ なので A は contraction ではない。それゆえ、 A が正定値行列であれば、 $A \leq I$ の場合のみ contraction となる。

あるエルミート行列の固有値を $(\lambda_1, \dots, \lambda_N)$ とする。このとき A は、あるユニタリ行列 U と対角行列 $D = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_N)$ によって $A = UDU^\dagger$ と表すことができる。実関数 $f(t)$ に対して、対角行列の関数 $f(D)$ を

$$f(D) = \text{diag}[f(\lambda_1), \dots, f(\lambda_N)] \quad (\text{B.9})$$

と定義する。さらに関数 $f(A)$ を

$$f(A) = U f(D) U^\dagger \quad (\text{B.10})$$

と定義する。 $A \leq B$ を満たすような任意のエルミート行列 A, B に対して、 $f(A) \leq f(B)$ が成り立つ場合、関数 $f(t)$ を行列単調関数という。

2.2節で示したように、実関数 $f(t)$ が、任意のエルミート行列 A, B と $\lambda \in [0, 1]$ を満たす任意の実数 λ に対して

$$f(\lambda A + (1 - \lambda)B) \geq \lambda f(A) + (1 - \lambda)f(B) \quad (\text{B.11})$$

を満たす場合、 $f(t)$ を行列凹関数という。特に、連続実関数 $f(t)$ に対して(B.11)式で $\lambda = 1/2$ とした式

$$f\left(\frac{A+B}{2}\right) \geq \frac{f(A) + f(B)}{2} \quad (\text{B.12})$$

が任意のエルミート行列 A, B に成り立つ場合、行列凹関数となる。

実関数 $f(t)$ が行列凹関数であり、 $f(0) \geq 0$ を満たす。この場合、任意の contraction な行列 V 及びエルミート行列 A に対して

$$f(VAV^\dagger) \geq V f(A) V^\dagger \quad (\text{B.13})$$

が成り立つことを示す。

$2N \times 2N$ 行列 T を

$$T = \begin{pmatrix} A & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B.14})$$

と定義する。行列 V が contraction であるため $\|V\| \leq 1$ が成り立つ。ここで、

$\|VV^\dagger\| \leq \|V\|^2 \leq 1$ であるから、エルミート行列 VV^\dagger も contraction である。行列 VV^\dagger

は正定置行列であるため、 $VV^\dagger \leq I$ が成立する。したがって次の2つの行列

$$L = (I - VV^\dagger)^{\frac{1}{2}}, \quad M = (I - V^\dagger V)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{B.15})$$

が存在する。この2つの行列 L, M はエルミート行列である。この2つの行列 L, M を用いて、2つの $2N \times 2N$ 行列

$$U_1 = \begin{pmatrix} V & L \\ M & -V^\dagger \end{pmatrix}, \quad U_2 = \begin{pmatrix} V & L \\ -M & V^\dagger \end{pmatrix} \quad (\text{B.16})$$

を定義する。この2つの行列 U_1, U_2 がユニタリ行列であることを示す。まず、

$$V^\dagger (I - VV^\dagger)^{\frac{1}{2}} = (I - VV^\dagger)^{\frac{1}{2}} V^\dagger \quad (\text{B.17})$$

を示す。 $(I - VV^\dagger)^{\frac{1}{2}}$ のテイラー展開を用いて計算すると

$$\begin{aligned} V^\dagger (I - VV^\dagger)^{\frac{1}{2}} &= V^\dagger \left\{ I - \frac{1}{2}(VV^\dagger) - \frac{1}{8}(VV^\dagger)^2 - \dots \right\} \\ &= V^\dagger - \frac{1}{2}V^\dagger(VV^\dagger) - \frac{1}{8}V^\dagger(VV^\dagger)^2 - \dots \\ &= V^\dagger - \frac{1}{2}(V^\dagger V)V^\dagger - \frac{1}{8}(V^\dagger V)^2 V^\dagger - \dots \\ &= \left\{ I - \frac{1}{2}(V^\dagger V) - \frac{1}{8}(V^\dagger V)^2 - \dots \right\} V^\dagger \\ &= (I - VV^\dagger)^{\frac{1}{2}} V^\dagger \end{aligned} \quad (\text{B.18})$$

となり、(B.17)が示せた。(B.17)式を行列 L, M で表すと

$$V^\dagger L - M V^\dagger = 0 \quad (\text{B.19})$$

となる。(B.19)式と行列 L, M がエルミート行列であることに注意して $U_1^\dagger U_1$ を計算すると

$$\begin{aligned} U_1^\dagger U_1 &= \begin{pmatrix} V^\dagger & M^\dagger \\ L^\dagger & -V \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V & L \\ M & V^\dagger \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} I & V^\dagger L - MV^\dagger \\ (V^\dagger L - MV^\dagger)^\dagger & I \end{pmatrix} \\ &= I \end{aligned} \quad (\text{B.20})$$

となり、行列 U_1 はユニタリー行列であることが示せた。同様に、 $U_2^\dagger U_2$ を計算すると

$$\begin{aligned} U_2^\dagger U_2 &= \begin{pmatrix} V^\dagger & -M^\dagger \\ L^\dagger & V \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V & L \\ -M & V^\dagger \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} I & V^\dagger L - MV^\dagger \\ (V^\dagger L - MV^\dagger)^\dagger & I \end{pmatrix} \\ &= I \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

となる。したがって、行列 U_2 もユニタリー行列である。

以上で定義したユニタリー行列 U_1, U_2 による、行列 T のユニタリー変換は

$$U_1 T U_1^\dagger = \begin{pmatrix} VAV^\dagger & VAM \\ MAV^\dagger & MAM \end{pmatrix} \quad (\text{B.22})$$

$$U_2 T U_2^\dagger = \begin{pmatrix} VAV^\dagger & -VAM \\ -MAV^\dagger & MAM \end{pmatrix} \quad (\text{B.23})$$

と表される。(B.22)式と(B.23)式の2つの式の両辺を足して1/2をかけると

$$\begin{pmatrix} VAV^\dagger & 0 \\ 0 & MAM \end{pmatrix} = \frac{U_1 T U_1^\dagger + U_2 T U_2^\dagger}{2} \quad (\text{B.24})$$

となる。(B.24)式より

$$f\left(\frac{U_1 T U_1^\dagger + U_2 T U_2^\dagger}{2}\right) = \begin{pmatrix} f(VAV^\dagger) & 0 \\ 0 & f(MAM) \end{pmatrix} \quad (\text{B.25})$$

が成り立つ。ここで、実関数 $f(t)$ が行列凹関数であるため

$$f\left(\frac{U_1 T U_1^\dagger + U_2 T U_2^\dagger}{2}\right) \geq \frac{f(U_1 T U_1^\dagger) + f(U_2 T U_2^\dagger)}{2} \quad (\text{B.26})$$

が成り立つことを(B.25)式に代入すると

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} f(VAV^\dagger) & 0 \\ 0 & f(MAM) \end{pmatrix} &\geq \frac{f(U_1 T U_1^\dagger) + f(U_2 T U_2^\dagger)}{2} \\ &= \frac{U_1 f(T) U_1^\dagger + U_2 f(T) U_2^\dagger}{2} \\ &= \frac{1}{2} \left\{ U_1 \begin{pmatrix} f(A) & 0 \\ 0 & f(0) \end{pmatrix} U_1^\dagger + U_2 \begin{pmatrix} f(A) & 0 \\ 0 & f(0) \end{pmatrix} U_2^\dagger \right\} \end{aligned} \quad (\text{B.27})$$

となる。実関数 $f(t)$ は $f(0) \geq 0$ を満たすため

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} f(VAV^\dagger) & 0 \\ 0 & f(MAM) \end{pmatrix} &\geq \frac{1}{2} \left\{ U_1 \begin{pmatrix} f(A) & 0 \\ 0 & f(0) \end{pmatrix} U_1^\dagger + U_2 \begin{pmatrix} f(A) & 0 \\ 0 & f(0) \end{pmatrix} U_2^\dagger \right\} \\ &\geq \frac{1}{2} \left\{ U_1 \begin{pmatrix} f(A) & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} U_1^\dagger + U_2 \begin{pmatrix} f(A) & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} U_2^\dagger \right\} \\ &= \begin{pmatrix} V f(A) V^\dagger & 0 \\ 0 & M f(A) M \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{B.28})$$

となる。したがって、(B.28)式の両辺で 1×1 ブロックを比較すると

$$f(VAV^\dagger) \geq V f(A) V^\dagger \quad (\text{B.29})$$

が成立することを示せた。

行列 V_i ($i=1,2,\dots,n$) が 3.2 節で示した unital の条件

$$\sum_{i=1}^n V_i V_i^\dagger = I \quad (\text{B.30})$$

を満たす行列とする。このとき、任意のエルミート行列 A に対して

$$f\left(\sum_{i=1}^n V_i A V_i^\dagger\right) \geq \sum_{i=1}^n V_i f(A) V_i^\dagger \quad (\text{B.31})$$

が成立することを示す。

任意のエルミート行列 A に対して、 \tilde{A} を

$$\tilde{A} = \begin{pmatrix} A & & \\ & \ddots & \\ & & A \end{pmatrix} \quad (\text{B.32})$$

で定義される、対角ブロックのみが A で、非対角ブロックが 0 行列である、 n ブロック $\times n$ ブロック 行列とする。以下同様に、行列の非対角ブロックが全て 0 行列の場合、対角ブロックのみを表記する。また、 n ブロック $\times n$ ブロック 行列 \tilde{V} を

$$\tilde{V} = \begin{pmatrix} V_1 & V_2 & \cdots & V_n \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B.33})$$

と定義する。ここで

$$\tilde{V} \tilde{V}^\dagger = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^n V_i V_i^\dagger & & \\ & 0 & \\ & & \ddots \\ & & & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B.34})$$

となることから、 $\|\tilde{V} \tilde{V}^\dagger\| = 1$ となり、 $\|\tilde{V} \tilde{V}^\dagger\| = \|\tilde{V}\|^2$ より

$$\|\tilde{V}\| = 1 \quad (\text{B.35})$$

となる。したがって行列 \tilde{V} は contraction である。

\tilde{A}, \tilde{V} の定義から

$$\tilde{V} A \tilde{V}^\dagger = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^n V_i A V_i^\dagger & & \\ & 0 & \\ & & \ddots \\ & & & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B.36})$$

となる。(B.36)式から

$$f(\tilde{V} A \tilde{V}^\dagger) = \begin{pmatrix} f\left(\sum_{i=1}^n V_i A V_i^\dagger\right) & & & \\ & f(0) & & \\ & & \ddots & \\ & & & f(0) \end{pmatrix} \quad (\text{B.37})$$

となる。(B.37)式より

$$f(\tilde{V} A \tilde{V}^\dagger) \geq \tilde{V} f(A) \tilde{V}^\dagger \quad (\text{B.38})$$

が成り立つ。したがって、(B.37)式に(B.38)式と $f(0) \geq 0$ を用いると

$$\begin{pmatrix} f\left(\sum_{i=1}^n V_i A V_i^\dagger\right) & & & \\ & f(0) & & \\ & & \ddots & \\ & & & f(0) \end{pmatrix} \geq \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^n V_i f(A) V_i^\dagger & & & \\ & 0 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B.39})$$

となり、第1×1ブロックを見れば

$$f\left(\sum_{i=1}^n V_i A V_i^\dagger\right) \geq \sum_{i=1}^n V_i f(A) V_i^\dagger \quad (\text{B.40})$$

が成立することを示せた。

第3章で示したように、**unital** な演算 Φ によって密度行列 ρ は

$$\rho \rightarrow \Phi(\rho) = \sum_{n=0}^{d-1} V_n \rho V_n^\dagger \quad (\text{B.41})$$

と変換される。(B.40)式で任意のエルミート行列 A を密度行列 ρ とする。密度行列 ρ は正定値行列なので、**unital** な演算 Φ と行列凹関数 $f(t)$ に対して Ando の定理

$$f(\Phi(\rho)) \geq \Phi(f(\rho)) \quad (\text{B.42})$$

が成り立つ。