様式Ｃ－１９

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成 24 年 6 月 8 日現在

機関番号：３２７０２
研究種目：基盤研究（C）
研究期間：２００９～２０１１
課題番号：２１５４０４１３
研究課題名（和文）量子絡み合いにおける統計的普遍性の解明と量子推定・量子制御への応用

研究課題名（英文）Study of universality in quantum entanglement and its application to quantum tomography and quantum control
研究代表者
窪谷 浩人（Kubotani Hiroto）
神奈川大学・工学部・教授
研究者番号：60281143

研究成果の概要（和文）：
２自由度結合系において動力学的に形成される量子絡み合いの統計性を調べた。研究の主要な点は以下の２点である。（１）量子絡み合い状態のモデルとして、行列要素が確率変数となるランダム行列を採用し、その行列のランダム行列理論を独自の手法で構築した。（２）大規模な数値計算を行い、量子動力学的に形成された絡み合い状態の Schmidt 固有値の一体分布関数を精密高く求めた。これを、（１）で導出したランダム行列の Schmidt 固有値の一体分布関数と比較した。この比較により、量子カオス動力学によって作られた状態がランダム行列とみなせることを明らかにした。

研究成果の概要（英文）：
We studied the universality of the statistics in the quantum entanglement generated by the dynamics of a bipartite system. The main points in our studies are two as follows. (1) We adopted the random matrices whose elements are all statistically random to model entangled quantum states. To this end, we developed theory of the random matrices in our original way. (2) We performed a large scale simulation of the quantum dynamics and obtained accurate one-body distribution of the Schmidt eigenvalues of entangled states generated by the quantum dynamics. We compared the one-body distribution with that derived in (1). This comparison revealed that the quantum chaotic dynamics shows the statistics of random matrices.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合 計
２００９年度	900,000	270,000	1,170,000
２０１０年度	1,200,000	360,000	1,560,000
２０１１年度	1,200,000	360,000	1,560,000
年度			
年度			
総 計	3,300,000	990,000	4,290,000

研究分野：数物系科学
科研費の分科・細目：物理学・原子・分子・量子エレクトロニックス
キーワード：量子情報量子・コンピュータ・ランダム行列理論・多変数超幾何関数

１．研究開始当初の背景

量子力学の黎明期において、量子絡み合い状態は、その非古典的相関がパラドックスとして論争の的となったが[1]、今や、活用可能な資源として量子計算・量子情報分野で精力的に研究されている。特に、量子絡み合いの動的形成過程は、観測過程に代表される量子論における不可逆性の起源や量子宇宙の古

典化など量子干渉性の喪失を説明する物理過程として研究されてきたのみならず、量子計算や量子情報処理の実用化を阻む要因としてもますます注目を集めている。

特に、本研究が明らかにしようとした動的に形成された量子絡み合いの統計的普遍性については以下のような先行研究があった。

（１）<u>量子カオスによる量子絡み合いの動的形成</u>

量子絡み合いの動的形成の従来の議論は局所注目系とその外部環境系とが絡み合う場合を想定している。そこでの外部環境系のモデルは無限自由度の熱浴である。確かに、連続なエネルギースペクトルを持った熱浴と共鳴的に結合した局所注目系は量子絡み合いを不可逆的に形成していくであろう。しかし、可算有限個の系の極限として熱浴の性質が量子系に現れることは Fermi-Pasta -Ulam 問題と同様自明ではなく、量子論的熱浴の由来がそもそも不明である。

そこで、全系が可算有限個である場合の量子カオスの役割の理解が必要になる。一番簡単な問題として足立[2]や窪谷ら[3]によって量子カオスを示す２自由度結合系が調べられた。全系の状態は

$$|\Phi>_{12}=\sum_{i,j}A_{ij}(t)\,|i>_1\otimes|j>_2 \qquad (1)$$

と書くことができる。ここで、$|i>_1$や$|j>_2$は各自由度の正規直交基底であり、Aij(t)は複素数係数である。任意の状態(1)に対し Schmidt 分解を施すと、適当な正規直交基底$|\tilde{i}>_1$, $|\tilde{j}>_2$によって

$$|\Phi>_{12}=\sum_{i}\sqrt{x_i(t)}\,|\tilde{i}>_1\otimes|\tilde{j}>_2 \qquad (2)$$

と書くことができる。ここで$\sqrt{x_i(t)}$は Schmidt 固有値と呼ばれる非負の実数であり、絡み合いの仕方を特徴的に表している。例えば、１自由度を粗視化してできる縮約密度行列のノイマン・エントロピーS_Nは、

$$S_N=-\sum_i x_i\ln(x_i) \qquad (3)$$

と表される。確かに、各自由度が量子カオス系の場合S_Nが増大していくことが示された[2, 3]。以降、エントロピー生成率とリャプノフ数との関係や量子古典対応などを通して量子絡み合いと動力学的性質との関係が多くの研究者[4] によって調べられ続けている。

（２）<u>量子絡み合いの統計的普遍性</u>

２自由度すべてがカオス系の場合、式(1)の複素係数$A_{ij}(t)$を成分とする行列$A(t)$はどのような性質を持つのであろうか？行列$A(t)$をランダム行列とみなすことができれば、Schmidt 固有値の統計分布関数を予言することができる[5, 6]。具体的な量子系モデルにおける Schmidt 固有値の一体分布関数とランダム行列の一体分布関数 $P_{1,N}^{(F)}(x)$とを比較すると、実際の量子系における Schmidt 固有値の一体分布は、初期条件に依存しないだけではなく、ランダム行列理論が予言する$P_{1,N}^{(F)}(x)$と非常によく一致している。従って、動的に形成された量子絡み合いに統計的普遍性があると結論づけられる[6]。

[1] A. Einstein, B. Podolsky and N. Rosen, Phys. Rev. **47**, 777 (1935).

[2] S. Adachi, in *Proceedings of International Symposium on Information Physics* (Kyushu Institute of Technology, Iizuka, 1992), pp.76-83.

[3] H. Kubotani, T. Okamura and M. Sakagami, Physica A **214**, 560 (1995); M. Sakagami, H. Kubotani and T. Okamura, Prog. Theor. Phys. **95**, 703 (1996).

[4] P.A. Miller and S. Sarkar, Phys. Rev. E **80**, 5524 (1998); A. Tanaka, H. Fujisaki and T. Miyadera, *ibid*, **66**, 045201 (2002); H. Kubotain and M. Den, Phys. Lett. A **319**, 475 (2003) etc.

[5] H. Kubotani, M. Toda and S. Adachi, Phys. Rev. A **74**, 032314 (2006).

[6] H. Kubotani, S. Adachi and M. Toda, Phys. Rev. Lett. **100**, 240501 (2008).

２．研究の目的

本研究の第一の目的は、従来の研究[1,2]をさらに進め、動的に形成された量子絡み合いの統計的普遍性を他の動力学状況においても調べることである。

近年量子制御のためのさまざまな実験技術が開発されている。例えば、Chaudhury ら[3]は、封じ込められた希薄な Cs ガスに偏光レーザーを照射し続けながら外部磁場を時間変動させることにより Cs 原子のスピン状態を高い信頼度(fidelity)で任意に制御することに成功している。さらに、Ghose ら[4]は、Chaudhury らと同じ実験セットアップを使って Cs 原子のスピンを量子カオス的に運動させる方法を提案している。

そこで、本研究の第二の目的は、動的に形成された量子絡み合いの統計的普遍性を利用する以下の応用法を考案することである。

- 量子推定

全系が持つ統計的普遍性のクラス（タイプ）を知りえたとして、部分系に関する密度行列から全系の量子状態を推定する量子推定の方法を開拓する。

- 量子制御

上述のように実際のスピン系において量子カオス動力学による絡み合い形成が実現しつつある。統計的普遍性を利用した信頼度の高い状態制御の方法を開拓する。

[1] H. Kubotani, M. Toda and S. Adachi, Phys. Rev. A **74**, 032314 (2006).
[2] H. Kubotani, S. Adachi and M. Toda, Phys. Rev. Lett. **100**, 240501 (2008).
[3] S. Chaudhury et al, Phys. Rev. Lett. **99**, 163002 (2007).
[4] S. Ghose et al, Phys. Rev. A**78**, 042318 (2008).

３．研究の方法

（１）<u>量子絡み合いの動的形成のシミュレーション解析</u>

まず、古典的動力学がよく知られた Kicked top などのモデルを２つ結合させたものを全系として量子動力学のシミュレーションを行う。これにより、式(1)が表現となる状態から $A_{ij}(t)$の時間変化が得られる。次に、一定時間間隔ごとに $A_{ij}(t)$にサンプリングを行い、行列要素を $A_{ij}(t)$とする M×N 複素行列 $A(t)$の統計アンサンブルをつくる。そのアンサンブルにおける Schmidt 固有値の統計分布を１体分布・２体相関などで評価する。Schmidt 固有値の統計分布の分析を数種類のモデルに対して行い統計的普遍性の発見を行う。

（２）<u>ランダム行列理論の構築</u>

モデルのシミュレーションの結果を多数示しても普遍性の存在を証明しつくしたとは言いがたい。そこで、M×N 複素行列 A に対する数学的モデルとしてのランダム行列理論を構築する。ランダム行列理論が予言する Schmidt 固有値の分布関数を実際の量子系における Schmidt 固有値の分布と比較することにより統計的普遍性の存在の説得力ある証拠が得られる。さらに、その統計的普遍性をランダム行列の対称性として特徴づけることも可能となる。

ここで、ランダム行列理論の構築において重要な数学的手法は、N 体分布関数から１体分布関数を導出する際利用される金子積分[1]である。金子[1]は、Selberg 積分[2]の拡張版である金子積分 $S_{n,m}$が holonomic 系微分方程式の解であり、多変数の超幾何関数で表現できることを示した。このような多変数超幾何関数に関する応用数学分野での目覚しい進展を物理学へ応用する例は知られていないようだが、我々の研究はランダム行列理論を構築する上で非常に有用であることを示している。

（３）<u>量子状態推定・制御への活用</u>

全系の純粋状態、式(1)の密度行列

$$\rho_{\rm tot} = |\Phi>_{12}<\Phi|_{12}$$

に対して第２自由度の粗視化を行うと、第１自由度に関する縮約密度行列ρ_1は、

$$\rho_1 = \sum_{i,i'} \left(\sum_j A_{ij} A^*_{i'j} \right) |i>_1 <i'|_1$$

となる。このρ_1を対角化することによって得られる固有値は、状態(1)の Schmidt 固有値の２乗である。従って、縮約密度行列から全系の Schmidt 固有値を知ることができる。

全系が統計的普遍性のあるクラスに属していることを所与とすれば、このことを利用して第１自由度の縮約密度行列から第２自由度の Hilbert 空間の大きさや動力学的性質などを知ることができるだろう。

このように第２自由度に対して量子推定を行う方法を開発し、それを利用して信頼性の高い量子制御の方法を考案する。

[1] J. Kaneko, SIAM J. Math. Anal.{¥bf 24}, 1086 (1993).
[2] M.L. Mehta, Chapter 17 in *Random Mtrices* (Academic Press, New York, 2004), 3rd ed.

４．研究成果

（１）<u>量子絡み合いの動的形成のシミュレーション解析</u>

Kicked Top と名付けられた力学モデルを２つ結合させ量子動力学の大規模シミュレーションを行った。従前の我々のシミュレーションに対して、行列の大きさで 64 倍、計算ステップ数で 320 倍の規模である。

時間発展する１量子状態の異なる時刻の状態を行列 A(t)のサンプルとし、A(t)の Schmidt 固有値の $x_i(t)$ の一体分布関数を解析した。

まず、①量子動力学によって作られた絡み合い状態の Schmidt 固有値の一体分布関数と A(t)がランダム行列となっている場合の一体分布関数とを比較し、これら２つの一体分布関数の差の L^1 ノルムを指標として、力学系の性質（パラメータ）依存性を系統的に求めた。その結果、Kicked Top 系が量子カオス性を強く示すほど L^1 ノルムが小さくなり、かつ、その小さくなり方に法則性があることを見つけた。

また、②量子系の Schmidt 係数の統計性とランダム行列の Schmidt 係数の統計性とを、一体分布関数のズレに統計解析を行い、物理的解釈を与えた。具体的に行ったのは、カイ2 乗解析と自己相関関数解析である。

（２）<u>ランダム行列理論の構築</u>

行列$A_{ij}(t)$の数理的モデルとしてのランダム

行列理論の構築をさらに進めた。先行研究で、Selberg-Kaneko積分の被積分関数を拡張し、ランダム行列のSchmidt固有値x_iの１体分布関数を解析的に得ている。その際、その積分の満たすべき微分方程式系も得ている。この新しく開発されたランダム行列の解析方法は、Vandermonde行列式を直交多項式で表現しその直交性を利用し変数の積分を実行する従来の形式に替わるものとなることが期待される。

まず、固定跡の複素ランダム行列のSchmidt固有値の一体分布関数の標識を整理した。さらに、この形式を用いることにより始めて一体分布関数の漸近解を系統的に求めることができた。これにより、微分方程式系の性質から分布関数の性質を調べる我々の手法のメリットを示すことができた。

５．主な発表論文等
（研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線）

〔雑誌論文〕（計 15 件）

① M. Toda, Time series analysis of molecular dynamics simulation using wavelet, 8th International Summer School/Conference LET'S FACE CHAOS THROUGH NONLINEAR DYNAMICS, 査読有, 2012,（掲載決定）.

② S. Adachi, M. Toda and H. Kubotani, Asymptotic analysis of singular values of rectangular complex matrices in the Laguerre and fixed-trace ensembles, Journal of Physics A: Math. Theor., 査読有, Vol. 44, 2011, 292002.

③ Hiroshi Teramoto, Mikito Toda, Tamiki Komatsuzaki, Dynamical Switching of a Reaction Coordinate to Carry the System through to a Different Product State at High Energies, Physical Review Letters, 査読有, Vol.106, 2011, 054101-1～054101-4.

④ Mayumi Kamada, Mikito Toda, Masakazu Sekijima, Masami Takata, Kazuki Joe, Analysis of motion features for molecular dynamics simulation of proteins, Chemical Physics Letters, 査読有, Vol.502, 2011, 241-247.

⑤ H. Teramoto, M. Toda and T. Komatsuzaki, Dynamical Switching of a Reaction Coordinate to Carry the System through to a Different Product State at High Energies, Physical Reveiw Letters, 査読有, Vol. 106, 2011, 054101.

⑥ M. Kamada, M. Toda, M. Sekijima, M. Takata, K. Joe, Analysis of motion features for molecular dynamics simulation of proteins, Chemical Phsysics Letters, 査読有, Vol. 502, 2011, 241-247.

⑦ Tamiki Komatsuzaki, Akinori Baba, Shinnosuke Kawai, Mikito Toda, John E. Straub, R. Stephen Berry, Ergodic Problems for Real Complex Systems in Chemical Physics, Advances in Chemical Physics, 査読有, Vol.145, 2011, 171-220.

⑧ Shinnosuke Kawai, Hiroshi Teramoto, Chun-Biu Li, Tamiki Komatsuzaki, Mikito Toda, Dynamical Reaction Theory based on Geometric Structures in Phase Space, Advances in Chemical Physics, 査読有, Vol.145, 2011, 123-170.

⑨ David M. Leitner, Akira Shojiguchi, Mikito Toda, Yasuhiro Matsunaga, Chin-Biu Li, and Tamiki Komatsuzaki, Non-Brownian Phase Space Dynamics of Molecules, the Nature of their Vibrational States, and non-RRKM Kinetics, Advances in Chemical Physics, 査読有, Vol. 145, 2011, 83-122.

⑩ Mayumi Kamada, Sachi Kimura, Mikito Toda, Masami Takata, Kazuki Joe, Clustering the Temporal Sequences Feature of 3D Protein Structure, Proceeding of the 2009 International Conference on Parallel and Distributed Processing Techniques and applications (PDPTA'09), ed. Hamid R. Arabnia, CSREA Press, 査読有, 2010, p. 749-755.

⑪ S. Adachi, M. Toda and H. Kubotani, Random matrix theory of singular values of rectangular complex matrices I: Exact formula of one-body distribution function in fixed-trace ensemble, Annals of Physics, 査読有, Vol. 324, 2009, 2278－2358.

⑫ C-B Li, M. Toda and T. Komatsuzaki, Bifurcation of No-return Transition States in Many-body Chemical Reactions, Journal of Chemical Physics, 査読有, Vol. 130, 2009,

124116-124122.

⑬ Mikito Toda, Dynamical Reaction Theory for Vibrationally Highly Excited Molecules, Progress in Ultrafast Intense Laser Physics IV, ed. K.Yamanouchi, A. Becker, R. Li and S.L.Chin, Springer, 査読有, 2009, 91-112.

⑭ T. Hyouguchi, R. Seto and S. Adachi, Overlooked Branch Cut in Steepest Descent Method ― Switching Line and Atomic Domain―, Progress of Theoretical Physics, 査読有, Vol. 122, 2009, 1311-1346.

⑮ T. Hyouguchi, R. Seto and S. Adachi, Overlooked Degree of Freedom in Steepest Descent Method ― Steepest Descent Method Corresponding to Divergence-Free WKB Method―, Progress of Theoretical Physics, 査読有, Vol. 122, 2009, 1347-1376.

〔学会発表〕（計２件）

① Mikito Toda, Universality in Dynamical Formation of Entanglement for Quantum Chaos, 12th Japan-Slovenia Seminar on Nonlinear Science, 2009/10/07, Hotel PIRAMIDA, Maribor, Slovenia.

② Mikito Toda, Fractional Behavior and Entanglement in Chaos, Nonlinear Dynamics in Quantum Systems, 2009/07/10, Siberian Federal University, Krasnoyarsk, Russia.

〔図書〕（計０件）

〔産業財産権〕

○出願状況（計０件）

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
出願年月日：
国内外の別：

○取得状況（計０件）

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
取得年月日：
国内外の別：

〔その他〕

ホームページ等
該当なし

６．研究組織

(1)研究代表者

窪谷　浩人（Kubotani Hiroto ）
神奈川大学・工学部・教授
研究者番号：60281143

(2)研究分担者

戸田　幹人（Toda Mikito）
奈良女子大学・理学部・准教授
研究者番号：70197896

足立　聡（Adachi Satoshi）
東京工業大学・理工学研究科・助教
研究者番号：90211698

(3)連携研究者

該当なし　　　（　　）

研究者番号：