

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 6 月 19 日現在

機関番号：32702

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2014～2016

課題番号：26400421

研究課題名(和文) 動力的に形成された量子絡み合いの統計的普遍性の広がりとその応用

研究課題名(英文) Expansion of statistical universality of dynamically formed quantum entanglement and its application

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

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,600,000円

研究成果の概要(和文)：量子絡み合いは、2つ部分系の状態間に現れる量子系固有の相関である。2つの系の状態間に量子絡み合いがなくとも、その系の間には相互作用があれば動力的時間発展によって量子絡み合いが形成される。量子絡み合いはSchmidt分解で表され、Schmidt固有値で絡み合いの性質が示される。そこで、まず、ランダム行列の最大Schmidt固有値に注目し、その分布関数を解析的に導出した。それを基準とするランダム性の指標を導入し、動力的に形成された量子絡み合いの統計分布から、量子絡み合いを形成する動力学が、十分に発達したカオスであるのか、弱いカオスであるのか、または可積分であるのか判定可能であることを示した。

研究成果の概要(英文)：Quantum entanglement is a correlation peculiar to quantum systems composed of two subsystems. Even if there is no quantum entanglement between the states of the subsystems, quantum entanglement could be formed by dynamical evolution while interacting between the two subsystems. Quantum entanglement and its properties are respectively expressed mathematically by the Schmidt decomposition and Schmidt eigenvalues. So, first of all, we focused on the largest Schmidt eigenvalue of random matrix and derived its statistical distribution function analytically. By introducing an indicator of randomness with respect to the distribution function, we showed that it is possible to judge from the statistical distribution of dynamically formed quantum entanglement whether the underlying dynamics forming quantum entanglement is sufficiently developed chaos, weak chaos or integrable.

研究分野：複雑系科学

キーワード：量子カオス 量子絡み合い ランダム行列理論 Schmidt固有値 最大固有値 多変数超幾何関数

1. 研究開始当初の背景

(1) 量子絡み合いは、2つの部分系の状態間に見られる量子系固有の相関である。

数学的には、量子絡み合いの存在は全系の量子状態ベクトルの Schmidt 分解で示される。全系を2つの部分系に分割し、それぞれの Hilbert 状態空間を考える。2つの状態空間それぞれに正規直交基底 $\{|i\rangle_1 | i=1, 2, \dots\rangle\}$ と $\{|j\rangle_2 | j=1, 2, \dots\rangle\}$ を構成する。これらの正規直交基底を使うと、全系の量子状態 $|\Phi(t)\rangle_{12}$ は、

$$|\Phi(t)\rangle_{12} = \sum_{i=1} \sum_{j=1} A_{ij}(t) |i\rangle_1 \otimes |j\rangle_2$$

と複素展開係数 $A_{ij}(t)$ を使って2重和で展開することができる。さらに正規直交基底を毎時刻に取り直せば、全系の状態 $|\Phi(t)\rangle_{12}$ は、

$$|\Phi(t)\rangle_{12} = \sum_{i=1} \sqrt{x_i(t)} |\tilde{i}\rangle_1 \otimes |\tilde{i}\rangle_2$$

と常に1重和で展開することができる。これが Schmidt 分解である。ここで、 $\{|\tilde{i}\rangle_1 | i=1, 2, \dots\rangle\}$ と $\{|\tilde{j}\rangle_2 | j=1, 2, \dots\rangle\}$ は各時刻に取り直された正規直交基底である。Schmidt 分解による展開係数の2乗根 $x_i(t)$ は Schmidt 固有値と呼ばれる。

量子状態の Schmidt 固有値 $\{x_i\}$ は量子絡み合いの特徴を表わす。例えば、正の Schmidt 固有値が1つしかない場合、

$$x_1=1, x_i=0 (i \geq 2)$$

は絡み合いのない状態であり、正の Schmidt 固有値が2つ以上ある場合、

$$x_1 > 0, x_i > 0 (i \geq 2)$$

は絡み合い状態であることを示している。

(2) 部分系の状態間に量子絡み合いがなくとも、部分系間に相互作用があると部分系の動力学によって量子絡み合いが形成される。

そのことは、動的に形成された量子絡み合いとそれを形成する動力学とはどのような関係があるのだろうか? という問いを生み出す。

(3) われわれは、先行研究[1][2]で、十分に発達したカオス動力学を持つ部分系では、動的に形成された量子絡み合い状態の Schmidt 固有値の一体分布が固定跡複素ランダム行列の Schmidt 固有値の一体分布関数と一致することを示した。なお、ここで考えている量子状態の統計性は、一つの状態を時間発展させ一定時間間隔ごとにサンプリングすることによって得られる量子状態の統計標本に見られるものである。

われわれの結果は、部分系の動力学が強いカオスの場合には量子絡み合いがランダム性という統計的普遍性を獲得することを示しており、動的に形成された量子絡み合いとそれを形成する動力学との一つの対応関係を見つけたことになる。

[1] H. Kubotani, S. Adachi and M. Toda, Phys. Rev. Lett. 100 (200) 240501.

[2] S. Adachi, M. Toda and H. Kubotani, Annals

of Physics 324 (2009) 2278-2358.

2. 研究の目的

本研究の目的は、われわれの先行研究[1][2]を進め、部分系の動力学が強いカオス以外の場合、つまり、弱いカオス系や可積分系などでも、動力学的に形成された量子絡み合いの統計的性質に普遍性が現われるかどうか、現れるとしたらどのような普遍性を明らかにすることにある。

3. 研究の方法

われわれの更に詳細な解析によれば[3]、強いカオス動力学によって形成された量子絡み合い状態を固定跡複素ランダム行列と比較すると、Schmidt 固有値の一体分布が Soft edge (固有値の大きい側の端) においてわずかながらずれている。この結果は、系の動力学のカオス性が強まるに従い Schmidt 固有値がランダム性という普遍的な統計性を獲得していくものの、最大 Schmidt 固有値には量子動力学に由来する痕跡を残している可能性を示唆している。

そうだとすれば、十分に強いカオス性を有する部分系に対しても、ランダム行列からのずれとの比較には、全 Schmidt 固有値のなす一体分布より最大 Schmidt 固有値の統計分布に注目するのが直接的である。

以上を踏まえ研究の方法を以下のようにする。まず、最大 Schmidt 固有値のランダム行列理論を構築する。次に、動力学によって形成された量子絡み合い状態とランダム行列との比較を、最大 Schmidt 固有値を使って行う。

[3] H. Kubotani, S. Adachi and M. Toda, Phys. Rev. E87 (2013), 062921.

4. 研究成果

(1) 最初に、固定跡複素ランダム行列の Schmidt 固有値のうち最大のものに注目し、その分布関数の解析を行った。その結果、固定跡複素ランダム行列の最大 Schmidt 固有値の分布関数は多変数超幾何関数によって厳密に表現されることを示した[4]。

(2) 次に、量子絡み合いを形成する力学モデルを導入し、数値シミュレーションを行なった。“キックされるコマ”(kicked top) と呼ばれるよく知られたモデルを部分系とし、2つのキックコマを結合したものを全系とした。3,200 万ステップ (1ステップはキックの時間間隔) の時間発展をシミュレーションした。

このシミュレーションによって、絡み合った量子状態のサンプルがおよそ 3,200 万個得られる。これを量子状態の統計標本として、最大 Schmidt 固有値の統計解析を行った。

図1は、部分系の Hilbert 空間の大きさ n が、2つの部分系で等しく 97 である場合の最大 Schmidt 固有値の統計分布である。2つ

の部分系ともに動力学は強いカオスである。比較のため、(1)で得られた正方固定跡複素ランダム行列($n=97$)の最大 Schmidt 固有値の分布関数も描いている。部分系間の結合係数を大きくしていくと、最大 Schmidt 固有値の分布が固定跡複素ランダム行列の分布関数に近づいていく。部分系間の結合が強くなると、全系の動力学がカオス的なものになり、量子絡み合い状態にランダム性が現われることを示している。

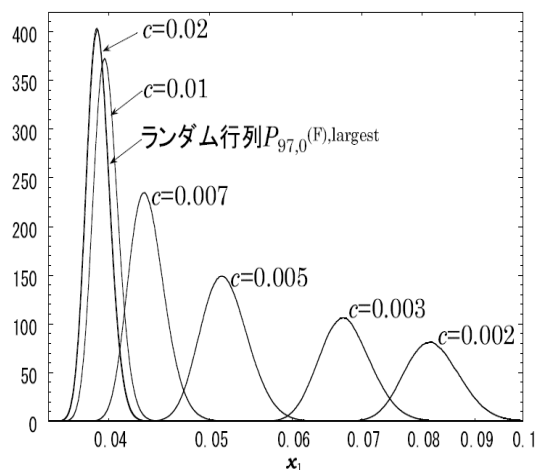


図 1 強いカオス系 ($n=97$) の結合系において動的に形成された量子絡み合いの最大 Schmidt 固有値の統計分布と正方固定跡複素ランダム行列 ($n=97$) の最大 Schmidt 固有値の分布関数。部分系間の結合係数 c を 6 段階変化させている。

われわれは、固定跡複素ランダム行列の最大 Schmidt 固有値の分布関数を厳密に得ているので、期待値も厳密に評価可能である。その最大 Schmidt 固有値の期待値を μ_{RM} とする。また、結合系において動的に形成された量子絡み合い状態の最大 Schmidt 固有値の平均値を μ_{QM} とする。最大 Schmidt 固有値に現れるランダム性の指標として、

$$\Delta\mu \equiv \frac{\mu_{QM} - \mu_{RM}}{\mu_{RM}}$$

を導入する。図 2 は、2 つの部分系の動力学

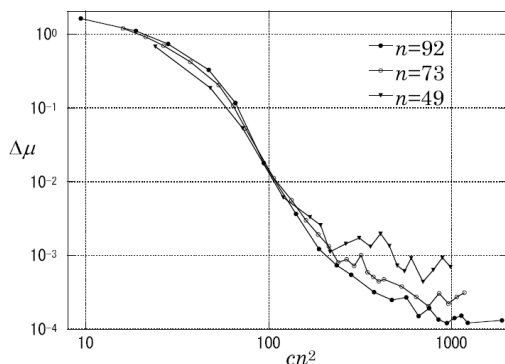


図 2 強いカオス系の結合系の量子絡み合い状態の最大 Schmidt 固有値の平均値 μ_{QM} とランダム行列の最大 Schmidt 固有値の期待値 μ_{RM} の差を無次元化した量 $\Delta\mu$ に対する結合係数 c 依存性

がともに強いカオスの場合に、ランダム性の指標 μ が部分系間の結合係数にいかに関与するかを示したものである。部分系の Hilbert 空間の大きさ n によらず、部分系間の結合が強くなり全系の量子カオス性が強くなるに従い量子絡み合い状態がランダム性を獲得していることが読み取れる。

以上の比較を系統的に行い、結果を論文[4]としてまとめ投稿準備中である。

[4] S. Adachi, H. Kubotani and M. Toda, 投稿準備中。

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7件)

寺本央、戸田幹人、高橋正彦、河野裕彦、小松崎民樹、化学反応の行き先を変える”スイッチ” - エネルギーの上昇で反応経路が切り替わる新現象 -、化学、査読無、Vol.71、No.5、2016、pp.25-30

H. Teramoto, M. Toda, H. Kono, M. Takahashi, T. Komatsuzaki, Mechanism and Experimental Observability of Global Switching Between Reactive and Nonreactive Coordinates at High Total Energies, Physical Review Letters, 査読有, Vol.115, 2015, 093003(5 pages), <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.115.093003>

H. Teramoto, M. Toda, T. Komatsuzaki, Breakdown Mechanisms of Normally Hyperbolic Invariant Manifolds in terms of unstable periodic orbits and homoclinic/heteroclinic orbits in Hamiltonian Systems, Nonlinearity, 査読有, Vol.28, 2015, pp.2677-2698, <http://dx.doi.org/10.1088/0951-7715/28/8/2677>

H. Teramoto, M. Toda, T. Komatsuzaki, A coarse graining method to extract cooperative modes of water molecules, Advances in Science, Technology and Environmentology, 査読有, Vol.11, 2015, pp.7-11

H. Teramoto, M. Toda, T. Komatsuzaki, Understandings of Chemical Reaction Dynamics in terms of Dynamical System Theory, AIP Conf. Proc., 査読有, Vol.1702, 2015, 090042 (4 pages), <http://dx.doi.org/10.1063/1.4938850>

H. Teramoto, M. Toda, T. Komatsuzaki, A new method to improve validity range of Lie canonical perturbation theory: with a central focus on a concept of non blow up region, Theoretical Chemistry Account, 査読有, Vol.133, 2014, 1571(15 pages), <http://dx.doi.org/10.1007/s00214-014-1571-9>

鎌田真由美、戸田 幹人、タンパク質分子の構造ダイナミクス：ウェーブレット変換による解析、統計数理、査読有、Vol.62、2014、pp. 203-220

〔学会発表〕(計37件)

足立悠、戸田幹人、オンライン上の不満や意見に見られる言語表現に対する特性抽出、統計学共同研究集会「社会物理学の新展開」、2017/03/25、統計数理研究所(東京)

足立悠、戸田幹人、オンラインヘルプデスクの言語表現に対する特性抽出、日本物理学会年会(ポスター発表)、2017/03/20、大阪大学(豊中キャンパス)

戸田幹人、寺本央、高橋正彦、河野裕彦、小松崎民樹、相空間構造解析に基づく新たな反応動力学理論の展開と新規の反応メカニズム「反応座標スイッチング」の予測、「物質デバイス共同研究拠点」G3グループ発表会(ポスター発表)、2016/12/01、北海道大学(札幌)

M. Toda, Time series analysis using wavelet for molecular dynamics simulation of proteins, Energy Landscapes: Theory and Applications(招待講演)(国際学会), 2016/07/01, Porquerolles(France)

森田紗代、戸田幹人、結合振動子系における多様な動的現象の解析 3、日本物理学会年会(ポスター発表)、2016/03/20、東北学院大学

神戸舞、富士香奈、戸田幹人、Fermi-Pasta-Ulam 結合振動子系における動的緩和現象の解析 4、日本物理学会年会(ポスター発表)、2016/03/20、東北学院大学

M. Toda, Dynamical Reaction Theory Beyond Conventional Statistical Reaction Theory, Workshop on "Theory of Gas Phase Scattering and Reactivity for Astrophysics"(招待講演)(国際学会), 2015/11/27, Max-Planck Institute for Extraterrestrial Physics, Munchen (Germany)

戸田幹人、大自由度力学系の特徴集出、ワークショップ「大自由度分子系における化学反応機序の理解と制御」(招待講演)、2015/11/01、北海道大学(札幌)

戸田幹人、大自由度力学系の集団運動、研究会「非線形現象の捉え方」(招待講演)、2015/10/10、福岡工業大学セミナーハウス(大分・由布院)

神戸舞、富士香奈、戸田幹人、Fermi-Pasta-Ulam 結合振動子系における動的緩和現象の解析 3、日本物理学会秋季大会(ポスター発表)、2015/09/17、関西大学

寺本央、戸田幹人、小松崎民樹、特異点論を用いた非断熱交差の安定性と分岐の解析、日本物理学会秋季大会、2015/09/16、関西大学

M. Toda, Geometry and Dynamics in systems of more than 2 dof, Workshop on

"Geometry of Chemical Reaction Dynamics in Gas and Condensed Phases"(招待講演)(国際学会), 2015/08/05, Telluride Science Research Center, Telluride, Colorado (USA)

M. Toda, Dynamical reaction theory from micro to macro through mesoscopic levels, R. Stephen Berry Tribute Symposium(招待講演)(国際学会), 2015/06/25, Telluride Science Research Center, Telluride, Colorado (USA)

M. Toda, Time-frequency approach to molecular dynamics simulation of proteins, Workshop on "The Complexity of Dynamics and Kinetics from Single Molecules to Cells"(招待講演)(国際学会), 2015/06/18, Telluride Science Research Center, Telluride, Colorado (USA)

寺本央、戸田幹人、小松崎民樹、A Global Dynamical Switching of a Reaction Coordinate and its Experimental Observability、第31回化学反応討論会、2015/06/03、北海道大学

戸田幹人、非線形動力学に依拠した情報発掘法の開拓と生体分子への応用、第5回物質・デバイス領域共同研究拠点報告会(ポスター発表)、2015/04/20、九州大学(伊都キャンパス)

神戸舞、戸田幹人、Fermi-Pasta-Ulam 結合振動子系における動的緩和現象の解析 2、日本物理学会年会(ポスター発表)、2015/03/22、早稲田大学

藤崎弘士、古田忠臣、戸田幹人、非平衡分子動力学を用いた生体分子内のエネルギー移動の解析、日本物理学会年会、2015/03/21、早稲田大学

櫛田茉実、富士香奈、藤崎弘士、戸田幹人、大自由度力学系における振動エネルギー移動の解析、日本物理学会年会、2015/03/21、早稲田大学

森田紗代、戸田幹人、結合振動子系における多様な動的現象の解析 2、日本物理学会年会(ポスター)、2015/03/21、早稲田大学

②足立悠、戸田幹人、SNSの発言間における参照関係と感情表現のネットワーク、日本物理学会年会(ポスター)、2015/03/21、早稲田大学

②H. Teramoto, M. Toda and T. Komatsuzaki, Understandings of Chemical Reaction Dynamics in terms of Dynamical System Theory, Computational Chemistry (CC) Symposium in ICCMSE 2015(招待講演), 2015/03/20, Athens(Greece)

③戸田幹人、大自由度系における振動エネルギー移動の解析、Workshop on Dynamical Systems and Computation 2015、2015/03/05、北海道大学

④M. Toda, Time series analysis using wavelets to extract collective motion of proteins, Spectroscopy and Dynamics of

Molecules and Clusters 2015 (SDMC2015) (招待講演), 2015/02/22, Nainital(India)

②⑤足立遥、戸田幹人、SNSにおける感情の伝播現象に関する研究～投稿の参照関係に基づく感情語ネットワークの特性～、第6回テキストマイニング・シンポジウム、2015/02/05、ティーオージー会議室(大阪・梅田)

②⑥足立遥、戸田幹人、SNSにおける感情表現とその相互作用関係の抽出、第220回自然言語処理研究会(情報処理学会)、2015/01/19、九州大学

②⑦戸田幹人、大自由度力学系に対する時系列解析:ウェーブレット変換を用いた試み、環瀬戸内応用数理研究部会シンポジウム、2014/12/05、加計学園国際学術交流センター(岡山県倉敷市)

②⑧H. Adachi, M. Toda, A network structure of emotional interactions in an electronic bulletin board, Social Modeling and Simulations + Econophysics Colloquium 2014, 2014/11/04, 神戸ポートアイランドセンター

②⑨K. Fuji, M. Toda, Time series analysis of the protein SNase: its dynamics and function, Japan-Slovenia Seminar on Nonlinear Science (Kansai 2014), 2014/10/29, Nara women's university

③⑩寺本央、戸田幹人、小松崎民樹、正準変換摂動理論の有効領域の拡張法とそれによる振動子間の非線形共鳴によるエネルギー移動の解明、日本物理学会、2014/09/09、中部大学

③⑪神戸舞、戸田幹人、Fermi-Pasta-Ulam 結合振動子系における動的緩和現象の解析、日本物理学会(ポスター)、2014/09/08、中部大学

③⑫森田紗代、戸田幹人、結合振動子系における多様な動的現象の解析、日本物理学会(ポスター)、2014/09/08、中部大学

③⑬榎田茉実、富士香奈、戸田幹人、藤崎弘士、大自由度力学系におけるエネルギー移動の解析3、日本物理学会(ポスター)、2014/09/08、中部大学

③⑭M. Toda, Chemical Ratchet: a possible mechanism to break the detailed balance, Workshop "What kinds of dynamical feature can we extract from data?", 2014/08/27, ニセコ

③⑮H. Teramoto, M. Toda and T. Komatsuzaki, Reaction Coordinate Switching Mechanism, on the Possibility of Its Experimental Verification and Its Quantum Manifestation, The 10th AIMS (American Institute of Mathematical Science) Conference on Dynamical Systems, Differential Equations and Applications Special Session 113 "Normal Forms and Molecules in Motion Through Phase Space Bottlenecks" (招待講演), 2014/07/08,

Madrid(Spain)

③⑯M. Toda, Time Series Analysis using Wavelet To Extract Collective Behavior of Proteins, Let's face chaos through nonlinear science(招待講演), 2014/07/04, 4, Maribor(Slovenia)

③⑰寺本央、戸田幹人、小松崎民樹、生体分子と水の過渡的な集団運動の抽出、第17回理論化学討論会、2014/05/22、名古屋大学 ES 総合館

[図書](計1件)

H. Adachi, M. Toda, A network structure of emotional interactions in an electronic bulletin board, Proceeding of Social Modeling and Simulations + Econophysics Colloquium, Springer, 2015, pp. 311-322, 10.1007/978-3-319-20591-5_28, オープンアクセス

[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・自然科学系・准教授

研究者番号: 70197896

足立 聡(Adachi Satoshi)

東京工業大学・理学院・助教

研究者番号: 90211698

(3)連携研究者

該当なし()

研究者番号:

(4)研究協力者

該当なし()