

導入

近年、冷却原子気体を扱った研究が盛んに行われている。極低温に冷却された原子は量子的な性質が顕著に現れる。特にレーザーの干渉によって作られる周期ポテンシャルである光格子中の冷却原子気体に注目が集まっている。この系は高い制御性を持っており、量子シミュレーションにおいて重要な役割を担う。高い制御性の例としてレーザーの強度を変化させることで光格子中のポテンシャルの深さを自由に変化させることができる。このような実験において、隣接サイト間のトンネリングが支配的となり、粒子が光格子中を自由に行き来できる超流動状態と、粒子間の相互作用が支配的となり各サイトに1粒子ずつ入った状態に定常しているモット絶縁体状態間の相転移である超流動モット絶縁体転移などの量子相転移の観測が行われた。

他方量子コンピュータの研究、特に実験の進展により量子力学と情報が融合した量子情報分野の拡大が進んだ。従来のコンピュータでは0または1などいずれかの状態しか表さないビットを用いて計算を行う。一方で量子コンピュータは量子的な重ね合わせ状態で記述できる量子ビットを用いて計算を行うことができるため、 n 量子ビットで 2^n の状態を同時に計算することができる。

その量子コンピュータの計算においても重要な役割を担うのが量子エンタングルメントと呼ばれる性質である。量子エンタングルメントは量子力学特有の相関を表している。例えば2つのスピン1/2から成る系を考え、系全体の状態が $|\psi\rangle = |\uparrow\rangle_A |\downarrow\rangle_B$, $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_A |\downarrow\rangle_B + |\downarrow\rangle_A |\uparrow\rangle_B)$ と表される2つの状態を考える。前者の場合、Aの状態を測定しようがしまいがBの状態は $|\downarrow\rangle_B$ と決まっている。一方で後者の場合にはAの状態を $|\uparrow\rangle_A$ と測定した瞬間にBの状態が $|\downarrow\rangle_B$ と決まってしまう、Aの状態を $|\downarrow\rangle_A$ と測定した瞬間にBの状態が $|\uparrow\rangle_B$ と決まってしまう。このような量子系の中の相関を量子エンタングルメントとよぶ。量子コンピュータの計算の高速化の鍵はまさにこの量子エンタングルメントにある。またこの量子エンタングルメントはEPRのパラドクスやBellの不等式の破れなどの議論において重要な役割を担った。

量子エンタングルメントの理論的な研究は盛んに行われてきた。しかし凝縮系物理の実験においてエンタングルメントを直接測定することは非常に困難な課題であった。その中、光格子中のボース粒子の実験において量子多体干渉を使用したエンタングルメントの測定が可能となった。測定においては光格子中の各サイトにボース粒子が1粒子ずつ入った状態を2つ用意し、その状態を同じようにクエンチする。クエンチ後の二つの状態を干渉させ、原子気体顕微鏡で粒子数分布を測定することで、エンタングルメントの一つの指標となるRenyiエントロピーの測定が行われた。

研究目的と結果

本研究の目的は実験において測定可能となったエンタングルメントの時間発展ダイナミクスを理論的に調べることにある。そのために大きくわけて3つの点から理論的な解析を行う。

1つ目に相互作用がある場合の光格子中のボース粒子のエンタングルメントの時間発展についての解析を行なった。光格子中のボース粒子の振る舞いはBose-Hubbardハミルトニアン $H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} a_i^\dagger a_j + \frac{U}{2} \sum_i n_i(n_i - 1)$ で記述できる。ここで a_i^\dagger, a_i はそれぞれ*i*番目のサイトの生成演算子、消滅演算子である。また $n_i = a_i^\dagger a_i$ は粒子

数演算子である。 $\langle i, j \rangle$ は隣接サイトを表している。 J は格子間のトンネリング、 U は粒子間の相互作用になる。 J が支配的な場合は超流動相、 U が支配的な場合はモット絶縁体相となる。厳密対角化によってこのハミルトニアン
の固有値、固有状態を求め、時間発展後の状態 $|\psi(t)\rangle$ を求める。そしてエンタングルメントの指標である 2 次の
Renyi エントロピー $S = -\log [\text{Tr}_A [\rho_A^2]]$ を計算する。ここで A は部分系を表し、 $\rho_A = \text{Tr}_{A^c} \rho^2$ 、 $\rho = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$
である。各サイトに 1 粒子ずつ入った状態を初期状態とし、全サイト数 $N = 6$ 、 $J/U = 1.0$ のときの Renyi エ
ントロピーの振る舞いを表したのが図 1 である。また部分系のサイズをそれぞれ 2, 3 に固定し、全サイト数 N
を変化させたときの Renyi エントロピーの振る舞いを表したのが図 2 である。図 1 を見ると部分系のサイズに比
例して Renyi エントロピーの収束値が大きくなる、つまりエンタングルメントが Volume law に従うことがわ
かる。これは部分系のサイズが増えるにつれて、その内部にエンタングルメントが伸びていくためだと考えられ
る。また Renyi エントロピーが部分系のサイズが小さい順に全体の振る舞いから枝分かれしていることが確認で
きる。これはエンタングルメントが隣接サイト間、第二隣接サイト間、第三隣接サイト間の順に結ばれていくこ
とを仮定したときに、有限サイズの効果によって起きる分岐だと考えられる。図 2 を見ると赤丸や青丸で囲まれ
た部分の分岐時間が等しいことがわかる（数値計算の結果から正確に一致することを確認している）。これは部
分系のサイズが等しいと、有限サイズの効果による分岐が起きるタイミングが等しくなるためだと考えられる。
これは先程仮定したエンタングルメントが隣接サイト間、第二隣接サイト間、第三隣接サイト間の順に結ばれて
いくことを裏付けている。

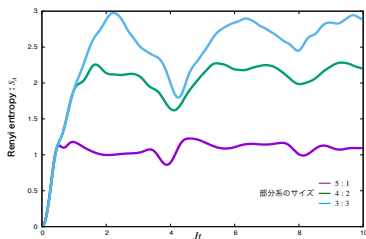


図 1: 部分系のサイズを変化させたときの Renyi エントロピーの振る舞い
($N = 6, J/U = 1.0$)

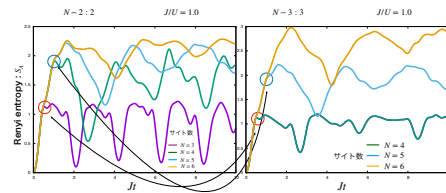


図 2: 部分系のサイズを 2, 3 に固定し、全サイト数を変化させたときの Renyi エントロピーの振る舞い
($J/U = 1.0$)

2 つ目に光格子中の理想ボース気体のエンタングルメントについて議論する。理想ボース気体は Bose-Hubbard
ハミルトニアンの相互作用項を 0 にしたときに対応する。理想ボース気体の Renyi エントロピーにおいては、長
距離ホッピングやハーモニックトラップなどの系にある条件が加わった場合を想定して計算を行うことができ
ること、厳密対角化や特異値分解が必要でなくなるので計算のメモリを抑えられ、全サイト数を増やすことが可
能であることが利点として挙げられる。理想ボース気体、長距離ホッピング、ハーモニックトラップの 3 点か
ら Renyi エントロピーの振る舞いの定性的な理解を行う。

図 3 は部分系のサイズを 1 に固定し、全サイト数 N を変化させたときの理想ボース気体の Renyi エントロ
ピーの振る舞いを表したものになる。これを見ると全サイト数が増えるにつれて再帰性が低くなっていることが
確認できる。また Renyi エントロピーの収束値が全サイト数に依らず一定値に収束していることも確認できる。
図 4 は全サイト数 $N = 8$ に固定し、部分系のサイズを変化させたときの理想ボース気体の Renyi エントロピー
の振る舞いを表したものになる。これを見ると部分系のサイズに比例して Renyi エントロピーの収束値が大き
くなっていることがわかる（綺麗に部分系のサイズに比例していないのは有限サイズの効果と想定できる）。そ
のため理想ボース気体の場合、エンタングルメントは Volume law に従うと考えられる。

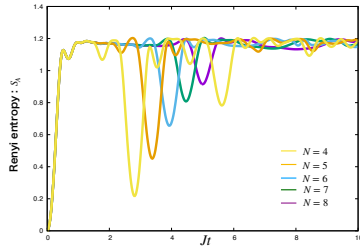


図 3: 部分系のサイズを固定し、全サイト数 N を変化させたときの理想ボース気体の Renyi エントロピーの振る舞い ($J = 1, U = 0$)

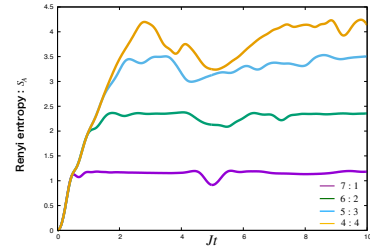


図 4: 全サイト数 $N = 8$ に固定し、部分系のサイズを変化させたときの理想ボース気体の Renyi エントロピーの振る舞い ($J = 1, U = 0$)

次に長距離ホッピングを考慮したときの Renyi エントロピーの振る舞いについて考える。その場合のハミルトニアンは $H = -\sum_n J_n \sum_i (a_i^\dagger a_{i+n} + h.c)$ のように書くことができる。ここで n はサイト間の距離を表している。図 5 は第二隣接サイト間のホッピング J_2 、図 6 は第三隣接サイト間のホッピング J_3 まで考慮したときの理想ボース気体の Renyi エントロピーの振る舞いを表したものになる。この 2 つの図を見ると、長距離ホッピングを考慮しないと同等の一定値に収束していることがわかる。また短時間でエンタングルメントが伝わるためその一定値により早く収束していることが確認できる。

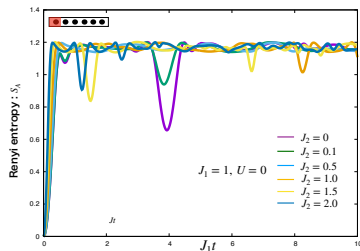


図 5: 第二隣接サイト間のホッピングまでを考慮したときの理想ボース気体の Renyi エントロピーの振る舞い

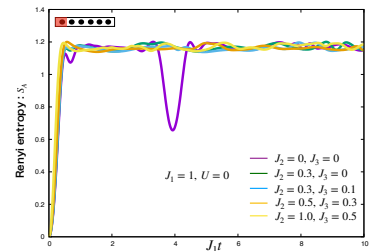


図 6: 第三隣接サイト間のホッピングまでを考慮したときの理想ボース気体の Renyi エントロピーの振る舞い

次にハーモニックポテンシャルを考慮した場合について考える。ハーモニックポテンシャルは系の中心部分に粒子が集まった方がエネルギー的に得になるよう形成されたポテンシャルである。この場合のハミルトニアンは $H = -J \sum_i^{N-1} (a_i^\dagger a_{i+1} + h.c) + \Omega \sum_{i=0}^{N-1} (i - \frac{N-1}{2})^2 a_i^\dagger a_i$ のように書くことができる。ここで Ω はポテンシャルの強度を表す。図 7 はハーモニックポテンシャルを考慮したときの理想ボース気体の Renyi エントロピーの振る舞いを表したものである。部分系は 1 : 5 に分けたときを考えている。この図を見るとハーモニックポテンシャルを考慮しない場合と同様の一定値に収束することが確認できる。図 8 は Ω をさらに大きくしたときの振る舞いを表している。この図を見ると Ω が大きくなるにつれて Renyi エントロピーの値が全体的に小さくなっていることが確認できる。また徐々に振動が現れ、やがて状態が完全に再帰することがわかる。これは Ω が大きくなるとエネルギースペクトルが Ω に依存するものとなり、そのエネルギー幅が等間隔になるためだと考えられる（実際に再帰の周期を $\Omega = 1.0$ と $\Omega = 2.0$ の振る舞いで比較すると、 $\Omega = 2.0$ の周期は $\Omega = 1.0$ の約 1/2 倍になっていることがわかる）。

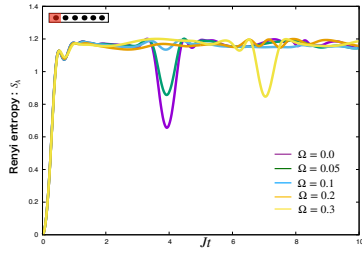


図 7: ハーモニックポテンシャルを考慮したときの理想ボース気体の Renyi エントロピーの振る舞い (Ω が小さい場合)

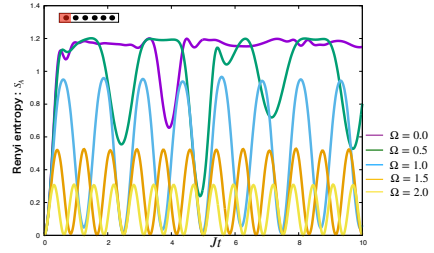


図 8: ハーモニックポテンシャルを考慮したときの理想ボース気体の Renyi エントロピーの振る舞い (Ω が大きい場合)

3 つ目に理想ボース気体のエンタングルメントの伝搬速度について議論する。図 9 は部分系のサイズを 1 に固定し、全サイト数を変化させたときの理想ボース気体の Renyi エントロピーの振る舞い (図 3) において、全体の振る舞いから分岐する時間とそのときのサイト間の距離の関係を表したものになる。このグラフ (Renyi エントロピーの差の指標を 8.0×10^{-6} にとったとき) の傾きからエンタングルメントの伝搬速度を求めると 2.023 という値が得られる。ボース粒子の群速度は $2J\sin(ka)$ となる。ここで k は波数、 a は隣接サイト間の距離を表す。 $a = 1$ とし、群速度の最大値を求めると 2.0 となる。そのためエンタングルメントの伝搬速度が群速度の最大値に非常に近い値をとることがわかる。図 10 は初期状態において系の左端の 2 サイトの状態をエンタングルさせ、それが右側の部分系に伝わる時間とサイト間の距離の関係を表したものになる。このグラフ (Renyi エントロピーの差の指標を 8.0×10^{-6} にとったとき) の傾きからエンタングルメントの伝搬速度を求めると 1.733 という値が得られる。群速度の最大値に一致はしないが、両者の差が 0.3 以内に収まり、ある程度近い値が得られることがわかった。

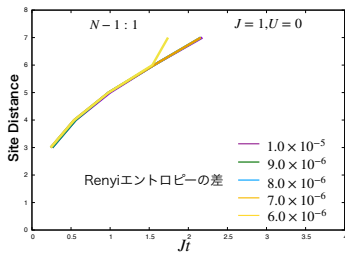


図 9: 部分系のサイズを 1 に固定したときの、全体の振る舞いからの分岐時間とサイト間の距離の関係 ($J = 1, U = 0$)

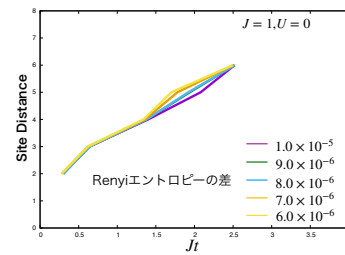


図 10: 初期状態の一部をエンタングルさせ、その状態が伝わる時間とサイト間の距離の関係 ($J = 1, U = 0$)

参考文献

- [1] R. Islam, R. Ma, P. M. Preiss, M. E. Tai, A. Lukin, M. Rispoli and M. Greiner Measuring entanglement entropy in a quantum many-body system Nature **528**, 77 (2015).
- [2] A. M. Kaufman, M. E. Tai, A. Lukin, M. Rispoli, R. Schittko, P. M. Preiss, M. Greiner Quantum thermalization through entanglement in an isolated many-body system Science Vol 353 Issue 6301 (2016).
- [3] 中原幹夫「量子物理学のための線形代数」培風館 (2016).