エンタングル状態

量子論の性質と関係するエンタングル状態の定義を与えます。先に密度行列による純粋状態と混合状態の定義を見ます。
ここでは 2 粒子までしか扱いませんが、n 粒子に一般化することができます。

ある系において、演算子 O の期待値が $\langle\psi|O|\psi\rangle$ で与えられるとします。このとき、状態は純粋状態 (pure state) と呼ばれます。これは量子力学の話で使われている状態です。

これに対して、ある系において状態 $|\psi_i\rangle$ が確率 P_i で現れるとします。なので、この系においては、O に対応する $\langle\psi_i|O|\psi_i\rangle$ $(i=1,2,3,\ldots)$ が、それぞれの状態 $|\psi_i\rangle$ での確率 P_i に従って観測されるとします。これは、$\langle\psi_1|O|\psi_1\rangle$, $\langle\psi_2|O|\psi_2\rangle$, $\ldots$ がある確率 $P_1, P_2, \ldots$ で現れるとしたときの O の期待値 $\langle O\rangle$ を求めることになります。なので、期待値 $\langle O\rangle$ が

$$\langle O\rangle = P_1\langle\psi_1|O|\psi_1\rangle + P_2\langle\psi_2|O|\psi_2\rangle + \cdots = \sum_i P_i\langle\psi_i|O|\psi_i\rangle$$

と与えられる状況になり (ある確率 P_i に従っているときの期待値)、このときを混合状態 (mixed state) と言います。確率は正の実数で

$$\sum_i P_i = 1$$

と規格化しています。見て分かるように、純粋状態に確率をくっつけて足し合わせたものです。

このように、系に対して純粋状態と混合状態という区別をすることができます。この区別は密度行列 (density matrix) によって与えることができるので、それを見ていきます。

まず、純粋状態だとします。$|i\rangle, |j\rangle$ を直交基底 (完全正規直交系) として、期待値 $\langle\psi|O|\psi\rangle$ に完全性を挟んで変形すると

$$\langle\psi|O|\psi\rangle = \sum_{i,j}\langle\psi|i\rangle\langle i|O|j\rangle\langle j|\psi\rangle = \sum_{i,j}\langle j|\psi\rangle\langle\psi|i\rangle\langle i|O|j\rangle \quad (\sum_i |i\rangle\langle i| = 1\ ,\ \sum_j |j\rangle\langle j| = 1)$$

和は i, j の取れる範囲全てに対してです。ここで

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$$

というエルミート演算子を定義します。演算子であることは

$$\rho|\phi\rangle = |\psi\rangle\langle\psi|\phi\rangle = c|\psi\rangle \quad (c = \langle\psi|\phi\rangle)$$

とできることから分かり、エルミート演算子であることは

$$\rho^\dagger = (|\psi\rangle\langle\psi|)^\dagger = |\psi\rangle\langle\psi| = \rho$$

から分かります。また、規格化 $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ から分かるように

$$\rho^2 = \rho^\dagger\rho = |\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle\langle\psi| = |\psi\rangle\langle\psi| = \rho$$

となっています。

ρ を $\langle i|$ と $|j\rangle$ で挟んだものを

$$\rho_{ij} = \langle i|\psi\rangle\langle\psi|j\rangle \quad (\rho_{ij} = \rho^*_{ji})$$

と定義し、これは ρ の行列表示になります (i, j は行列成分)。これによって期待値は

$$\langle\psi|O|\psi\rangle = \sum_{i,j}\langle j|\psi\rangle\langle\psi|i\rangle\langle i|O|j\rangle = \sum_{i,j}\rho_{ji}O_{ij} = \sum_j(\rho O)_{jj} = \mathrm{tr}(\rho O) \quad (O_{ij} = \langle i|O|j\rangle) \tag{1}$$

と書けることが分かります。最右辺へは、添え字 j の和が行列のトレース tr と同じだからで、トレースは離散的では

$$\mathrm{tr}O = \sum_n\langle n|O|n\rangle$$

連続的では

$$\mathrm{tr}O = \int dx\langle x|O|x\rangle$$

となっています。$\mathrm{tr}\rho$ は直交基底として何を選ぶかに依存していません。これは

$$\mathrm{tr}\rho = \sum_j\langle j|\rho|j\rangle = \sum_j\sum_i\langle j|\rho|i\rangle\langle i|j\rangle = \sum_j\sum_i\langle i|j\rangle\langle j|\rho|i\rangle = \sum_i\langle i|\rho|i\rangle$$

となるからです。

ここで定義した ρ は密度行列 (density matrix) と呼ばれます。ρ を密度演算子、ρ_{ij} を密度行列として区別するときもありますが、密度行列で演算子の場合も指すことが多いので、密度行列と言っていきます。

次に、混合状態の場合を見ます。混合状態でも期待値 $\langle O\rangle$ に完全性を挟むと

$$\langle O\rangle = \sum_i P_i\langle\psi_i|O|\psi_i\rangle = \sum_i\sum_{m,n}P_i\langle\psi_i|m\rangle\langle m|O|n\rangle\langle n|\psi_i\rangle = \sum_i\sum_{m,n}P_i\langle n|\psi_i\rangle\langle\psi_i|m\rangle\langle m|O|n\rangle$$

ここで

$$\sigma = \sum_i P_i|\psi_i\rangle\langle\psi_i|$$

$$\sigma_{nm} = \sum_i P_i\langle n|\psi_i\rangle\langle\psi_i|m\rangle$$

とすれば

$$\langle O\rangle = \sum_i\sum_{m,n}P_i\langle n|\psi_i\rangle\langle\psi_i|m\rangle\langle m|O|n\rangle = \sum_{m,n}\sigma_{nm}O_{mn} = \mathrm{tr}(\sigma O)$$

となり、(1) と同じ形になります。実際に、例えば $i = 1$ で $P_1 = 1,\ i \neq 1$ で $P_i = 0$ とすれば、(1) と一致します。

混合状態での密度行列もエルミート演算子です。密度行列は、確率 P_i は実数であることから

$$\sigma^\dagger = \big(\sum_i P_i|\psi_i\rangle\langle\psi_i|\big)^\dagger = \sum_i P_i|\psi_i\rangle\langle\psi_i| = \sigma$$

となり、エルミート演算子です。エルミート演算子であることから分かるように、σ の期待値は

$$\langle\psi|\sigma|\psi\rangle = \sum_i P_i\langle\psi|\psi_i\rangle\langle\psi_i|\psi\rangle = \sum_i P_i|\langle\psi|\psi_i\rangle|^2 \geq 0$$

となっています。

密度行列の性質を出します。σ のトレースは完全性を使えば（$\langle\psi_i|\psi_i\rangle = 1$ に規格化されているとして）

$$\begin{aligned}\mathrm{tr}\sigma = \mathrm{tr}\sum_i P_i|\psi_i\rangle\langle\psi_i| = \sum_j\langle j|\sum_i P_i|\psi_i\rangle\langle\psi_i|j\rangle &= \sum_i P_i\sum_j\langle j|\psi_i\rangle\langle\psi_i|j\rangle \\ &= \sum_i P_i\sum_j\langle\psi_i|j\rangle\langle j|\psi_i\rangle \\ &= \sum_i P_i\langle\psi_i|\psi_i\rangle \\ &= \sum_i P_i \\ &= 1\end{aligned}$$

P_i をなくせば純粋状態でも $\mathrm{tr}\rho = 1$ になっていることが分かります。これから、エルミート演算子でトレースが 1 であるものを密度行列と定義することもできます。

しかし、密度行列の 2 乗のトレースは混合状態と純粋状態で異なっています。σ^2 は

$$\sigma^2 = (\sum_i P_i|\psi_i\rangle\langle\psi_i|)^2 = (\sum_i P_i|\psi_i\rangle\langle\psi_i|)(\sum_j P_j|\psi_j\rangle\langle\psi_j|) = \sum_{i,j} P_iP_j|\psi_i\rangle\langle\psi_i|\psi_j\rangle\langle\psi_j| \neq \sigma$$

ですが、純粋状態での ρ^2 は $\rho^2 = \rho$ です。このため、σ^2 と ρ^2 のトレースは

$$\begin{aligned}&\mathrm{tr}\sigma^2 < 1 \\ &\mathrm{tr}\rho^2 = \mathrm{tr}\rho = 1\end{aligned}$$

となります。$\mathrm{tr}\sigma^2 < 1$ なのは、$P_i < 1$ なので $P_i^2 < P_i$ だからです。

密度行列は密度行列に分解することができます。ρ_1, ρ_2 を密度行列 (混合状態、純粋状態のどちらでも) としたとき

$$\rho = \alpha\rho_1 + (1-\alpha)\rho_2 \quad (0 < \alpha < 1)$$

とした ρ も密度行列です。これは凸結合 (convex combination) と呼ばれる形です。ρ は明らかにエルミート演算子で (エルミート演算子同士を足したものはエルミート演算子)、期待値は

$$\langle\psi|\rho|\psi\rangle = \alpha\langle\psi|\rho_1|\psi\rangle + (1-\alpha)\langle\psi|\rho_2|\psi\rangle \geq 0$$

トレースは

$$\mathrm{tr}\rho = \alpha\mathrm{tr}\rho_1 + (1-\alpha)\mathrm{tr}\rho_2 = \alpha + 1 - \alpha = 1$$

となっているので、ρ は密度行列です。

$|\psi_i\rangle$ が直交しているなら ($\langle\psi_i|\psi_j\rangle = \delta_{ij}$)

$$\sigma|\psi_j\rangle = \sum_i P_i|\psi_i\rangle\langle\psi_i|\psi_j\rangle = \sum_i P_i|\psi_i\rangle\delta_{ij} = P_j|\psi_j\rangle \tag{2}$$

となるので、P_i は密度行列 σ の固有値となります。

というわけで、密度行列によって、純粋状態は

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| \ , \ \mathrm{tr}\rho^2 = 1$$

混合状態は

$$\rho = \sum_i P_i|\psi_i\rangle\langle\psi_i| \ , \ \mathrm{tr}\rho^2 < 1$$

と与えられます。ここから、密度行列は特に区別が必要にならない限り ρ とします。

ここまでは 1 つの系でしたが、次に 2 つの系の場合を見ていきます。各系をそれぞれ系 A, B とします。そして、それらによって 1 つの系 (2 つの粒子による合成系)AB が作られているとします。その系 AB の状態 $|\psi_{AB}\rangle$ を考えます。「角運動量の合成」の補足で少し触れたように、$|\psi_{AB}\rangle$ は、ヒルベルト空間 H_A とヒルベルト空間 H_B のテンソル積による $H_A \otimes H_B$ での状態とします。このとき、H_A と H_B の基底のテンソル積は $H_A \otimes H_B$ での基底となります。このため、H_A の直交基底を $|a_i\rangle$、H_B の直交基底を $|b_j\rangle$ としたとき、$|a_i\rangle \otimes |b_j\rangle$ は $H_A \otimes H_B$ での直交基底となるので、$|\psi_{AB}\rangle$ は展開係数を c_{ij} として

$$|\psi_{AB}\rangle = \sum_{i,j=1}^{N} c_{ij}|a_i\rangle \otimes |b_j\rangle \tag{3}$$

と書けます。簡単のために H_A, H_B の次元を両方とも N としています (異なる次元でも話は同じ)。規格化から c_{ij} は

$$\sum_{i.j=1}^{N} |c_{ij}|^2 = 1$$

とします。

テンソル積の性質 (定義) を証明なしで示せば

$$\begin{aligned}
&c(|\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle) = c|\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle \\
&|\psi_A\rangle \otimes (|\psi_B\rangle + |\phi_B\rangle) = |\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle + |\psi_A\rangle \otimes |\phi_B\rangle \\
&|\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle = |\psi_B\rangle \otimes |\psi_A\rangle \\
&(|\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle)^\dagger = \langle\psi_A| \otimes \langle\psi_B|
\end{aligned}$$

c は任意の複素数です。演算子に対しては

$$
\begin{aligned}
&(S_A \otimes S_B)(|\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle) = S_A|\psi_A\rangle \otimes S_B|\psi_B\rangle \\
&(S_A \otimes S_B)(T_A \otimes T_B) = S_A T_A \otimes S_B T_B \\
&(S_A \otimes I)(I \otimes T_B) = S_A \otimes T_B \\
&(S_A \otimes I)(T_A \otimes I) = S_A T_A \otimes I \\
&\mathrm{tr}(S_A \otimes S_B) = \mathrm{tr}(S_A)\mathrm{tr}(S_B)
\end{aligned}
$$

S_A, T_A, S_B, T_B は系 A, B での演算子で、I は系 A, B での恒等演算子 (簡単に言えば 1 で、行列での単位行列) です。

$|\psi_{AB}\rangle$ に対する分類があります。$|\psi_{AB}\rangle$ が純粋状態のとき、H_A の状態 $|\phi_A\rangle$ と H_B の状態 $|\phi_B\rangle$ によって $|\psi_{AB}\rangle$ が

$$
|\psi_{AB}\rangle = |\phi_A\rangle \otimes |\phi_B\rangle
$$

と書けるなら product state、このように書けなければ $|\psi_{AB}\rangle$ はエンタングル状態 (entangled state) と定義されます。エンタングル状態を扱う話は、エンタングルメント（量子もつれ、entanglement）と呼ばれます。

エンタングルメントはアインシュタイン (Einstein)、ポドルスキー（Podolsky)、ローゼン (Rosen) によるいわゆる EPR 論文で最初に現れ、シュレーディンガーによってエンタングルメント (最初はドイツ語で Verschränkung) と呼ばれるようになりました。

単純に言えば、product state は

$$
|\psi_{AB}\rangle = \sum_{i,j} c_{ij}|\phi_i\rangle \otimes |\phi_j\rangle = \sum_i a_i|\phi_i\rangle \otimes \sum_i b_j|\phi_j\rangle
$$

のように書けるもので、これから product state と呼ばれる理由が分かると思います。そして、この形だとはっきりしますが、product state では系 A と系 B の間に相関がありません (系 A と系 B を別々に独立に用意出来ればいい)。このため、系 A での観測と系 B での観測はお互いに影響しない状況となっています。

他にも product state と呼ばれことが分かる形があります。系 AB での演算子 O の期待値は、系 AB の密度行列を ρ とすれば

$$
\langle\psi_{AB}|O|\psi_{AB}\rangle = \mathrm{tr}(\rho O) \quad (O = O_A \otimes O_B)
$$

$|\psi_{AB}\rangle$ は純粋状態としているので、$|\psi_{AB}\rangle$ が product state なら

$$
\rho = |\psi_{AB}\rangle\langle\psi_{AB}| = |\phi_A\rangle \otimes |\phi_B\rangle\langle\phi_A| \otimes \langle\phi_B| = |\phi_A\rangle\langle\phi_A| \otimes |\phi_B\rangle\langle\phi_B| = \rho_A \otimes \rho_B
$$

これによって期待値はテンソル積の性質から

$$
\mathrm{tr}(\rho O) = \mathrm{tr}(\rho O_A \otimes O_B) = \mathrm{tr}(\rho_A O_A \otimes \rho_B O_B) = \mathrm{tr}(\rho_A O_A)\mathrm{tr}(\rho_B O_B)
$$

と書けます。このように系 A と系 B による積の形に書けるので、product state と呼ばれます。これから、系 AB での密度行列が $\rho = \rho_A \otimes \rho_B$ という形で書けなければ、$|\psi_{AB}\rangle$ はエンタングル状態と定義することができます。

エンタングル状態として頻繁に出てくるのがスピン 1/2 による 1 重項です（「スピン 1/2」参照)。スピン 1/2 のとき、スピンの固有状態はスピンが上向きの状態 $|+\rangle$ と下向きスピンの状態 $|-\rangle$ の 2 つしかありません。このとき、2 つのスピン 1/2 の系を合わせたとき

$$
|\psi_{AB}\rangle = \big(a_+|+\rangle + a_-|-\rangle\big) \otimes \big(b_+|+\rangle + b_-|-\rangle\big)
$$

と書けるなら、定義から product state です ($a_\pm, b_\pm$ は適当な係数)。これに対して、1 重項は

$$|\psi_{AB}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle \otimes |-\rangle - |-\rangle \otimes |+\rangle)$$

となっていて、product state の形になっていません。よって、1 重項はエンタングル状態です。これは後で確かめます。

1 重項において射影仮説 (波束の収縮) を使えば、系 A でスピン状態 $|+\rangle$ を観測したとき、系 B は $|-\rangle$ の状態になります ($|+\rangle \otimes |-\rangle$ に収縮する)。つまり、系 B の結果は系 A の結果に依存しています。これがエンタングル状態の特徴です。

$|\psi_{AB}\rangle$ が純粋状態のとき、別の定義によって product state とエンタングル状態を区別できるので、それも出しておきます。

まず (3) を行列の性質を使って変形します。任意の複素行列は 2 つのユニタリー行列 U, V によって対角化することができます (場の量子論の「フェルミオン世代の混合」の補足参照)。c_{ij} を対角化 (対角成分以外 0 にする) したものを d_{ij} とすれば

$$c_{ij} = \sum_{k=1}^{N} U_{ik} d_{kk} V_{kj}$$

と書けます。そうすると

$$|\psi_{AB}\rangle = \sum_{i,j=1}^{N} c_{ij}|a_i\rangle \otimes |b_j\rangle = \sum_{i,j=1}^{N}\sum_{k=1}^{N} U_{ik} d_{kk} V_{kj}|a_i\rangle \otimes |b_j\rangle = \sum_{i,j=1}^{N}\sum_{k=1}^{N} d_{kk}(U_{ik}|a_i\rangle) \otimes (V_{kj}|b_j\rangle)$$

ここで

$$|a'_k\rangle = \sum_{i=1}^{N} U_{ik}|a_i\rangle \ , \ |b'_k\rangle = \sum_{j=1}^{N} V_{kj}|b_j\rangle$$

と定義すれば

$$|\psi_{AB}\rangle = \sum_{k=1}^{N} d_{kk}|a'_k\rangle \otimes |b'_k\rangle = \sum_{k=1}^{N} \sqrt{\lambda_k}|a'_k\rangle \otimes |b'_k\rangle$$

と書くことができ、この形はシュミット分解 (Schmidt decomposition) と呼ばれます。$\sqrt{\lambda_k}$ は d_{kk} の対角成分で、ルートをつけているのは利便性のためです (最右辺へは d_{kk} は対角成分しかないので、対角成分のみを取り出して $\sqrt{\lambda_k}$ としても同じ意味だから)。また、$|a_i\rangle$ は直交基底であることと、ユニタリー行列の定義 $U^{-1} = U^\dagger$ ($U^\dagger U = 1$) から

$$\langle a_i|a_j\rangle = \delta_{ij}$$
$$\langle a_i|U^\dagger U|a_j\rangle = \delta_{ij}$$
$$\langle a'_i|a'_j\rangle = \delta_{ij}$$

となるので、$|a'_k\rangle, |b'_k\rangle$ も直交基底になります。よって、規格化 $\langle\psi_{AB}|\psi_{AB}\rangle = 1$ から、λ_i は実数で、

$$\sum_{i=1}^{N} \lambda_i = 1$$

となります。

λ_k が何かを見るために、密度行列 $\rho = |\psi_{AB}\rangle\langle\psi_{AB}|$ に対して部分的なトレースを行います。それらは

$$\rho_A = \mathrm{tr}_B\rho \ , \ \rho_B = \mathrm{tr}_A\rho$$

として、tr_B は H_B の状態に対するトレース、tr_A は H_A の状態に対するトレースです。実際に ρ_A で行っていきます。$|\psi_{AB}\rangle$ をテンソル積の形にして

$$\begin{aligned}\rho_A &= \mathrm{tr}_B\rho \\ &= \mathrm{tr}_B\big(|\psi_{AB}\rangle\langle\psi_{AB}|\big) \\ &= \mathrm{tr}_B\big(\sum_{i=1}^{N}\sqrt{\lambda_i}|a'_i\rangle\otimes|b'_i\rangle\sum_{j=1}^{N}\sqrt{\lambda_j}\langle a'_j|\otimes\langle b'_j|\big)\end{aligned}$$

テンソル積は系 A と B の間によって与えられているので $|a'_i\rangle\otimes\langle a'_j|$ ということはおきなく

$$|a'_i\rangle\otimes|b'_i\rangle\langle a'_j|\otimes\langle b'_j|) = |a'_i\rangle\langle a'_j|\otimes|b'_i\rangle\langle b'_j|$$

となります。よって

$$\begin{aligned}\rho_A &= \mathrm{tr}_B\big(\sum_{i=1}^{N}\sqrt{\lambda_i}|a'_i\rangle\otimes|b'_i\rangle\sum_{j=1}^{N}\sqrt{\lambda_j}\langle a'_j|\otimes\langle b'_j|\big) \\ &= \mathrm{tr}_B\big(\sum_{i,j=1}^{N}\sqrt{\lambda_i}\sqrt{\lambda_j}|a'_i\rangle\langle a'_j|\otimes|b'_i\rangle\langle b'_j|\big)\end{aligned}$$

tr_B は系 B でのトレースなので、系 B での直交基底 $|B_m\rangle$ による

$$\mathrm{tr}_B O_B = \sum_m\langle B_m|O_B|B_m\rangle$$

という意味です。このことから

$$
\begin{aligned}
\rho_A &= \sum_{m=1}^{N} \langle B_m| \big(\sum_{i,j=1}^{N} \sqrt{\lambda_i}\sqrt{\lambda_j} |a'_i\rangle\langle a'_j| \otimes |b'_i\rangle\langle b'_j| \big) |B_m\rangle \\
&= \sum_{i,j=1}^{N} \sqrt{\lambda_i}\sqrt{\lambda_j} |a'_i\rangle\langle a'_j| \otimes \big(\sum_{m=1}^{N} \langle B_m|b'_i\rangle\langle b'_j|B_m\rangle \big) \\
&= \sum_{i,j=1}^{N} \sqrt{\lambda_i}\sqrt{\lambda_j} |a'_i\rangle\langle a'_j| \otimes \big(\sum_{m=1}^{N} \langle b'_j|B_m\rangle\langle B_m|b'_i\rangle \big) \\
&= \sum_{i,j=1}^{N} \sqrt{\lambda_i}\sqrt{\lambda_j} |a'_i\rangle\langle a'_j| \otimes \langle b'_j|b'_i\rangle \\
&= \sum_{i,j=1}^{N} \sqrt{\lambda_i}\sqrt{\lambda_j} |a'_i\rangle\langle a'_j| \delta_{ij} \\
&= \sum_{i=1}^{N} \lambda_i |a'_i\rangle\langle a'_i|
\end{aligned}
$$

これは混合状態での密度行列の形と同じです。そして、$|a'_i\rangle\langle a'_i|$ はエルミート演算子なので、ρ_A はエルミート演算子です。というわけで、ρ_A は混合状態での密度行列の性質を持ちます。よって、(2) から、$|a'_i\rangle$ と λ_i は ρ_A の固有状態と固有値です。これは ρ_B でも同様で、

$$
\rho_B = \sum_{i=1}^{N} \lambda_i |b'_i\rangle\langle b'_i|
$$

となり、$|b'_i\rangle$ と λ_i は ρ_B の固有状態と固有値です。ρ_A, ρ_B は reduced density matrix と呼ばれます。

シュミット分解から product state とエンタングル状態を分類することが出来ます。シュミット分解

$$
|\psi_{AB}\rangle = \sum_{k=1}^{N} \sqrt{\lambda_k} |a'_k\rangle \otimes |b'_k\rangle
$$

における λ_k は ρ_A, ρ_B の固有値です。このとき、ρ_A, ρ_B の 0 でない固有値が 1 つなら product state、2 以上ではエンタングル状態 (entanglement) と分類されます。0 でない固有値の個数はシュミット数 (Schmidt number) と呼ばれます (もしくは行列の階数との対応からシュミット階数)。シュミット数が 1 なら λ_k は 1 つしかないので

$$
|\psi_{AB}\rangle = |\phi_A\rangle \otimes |\phi_B\rangle
$$

という形で書け、純粋状態での product state となります。なので、シュミット数が 2 以上ではエンタングル状態となります (2 以上ではさらにテンソル積の項が加わっていくため)。

シュミット数に対して密度行列がどうなっているのかも見ておきます。密度行列は

$$
\rho = |\psi_{AB}\rangle\langle\psi_{AB}|
$$

これにシュミット分解したものを入れれば

$$
\rho = \sum_{i,j=1}^{N} \sqrt{\lambda_i}\sqrt{\lambda_j} |a'_i\rangle \otimes |b'_i\rangle\langle a'_j| \otimes \langle b'_j|
$$

シュミット数が 1 なら、ρ_A (ρ_B) の固有値 λ_i が 1 つしかないので

$$\rho = \lambda|a'\rangle \otimes |b'\rangle\langle a'| \otimes \langle b'|$$

そして、規格化

$$\sum_{i=1}^{N}\lambda_i = 1$$

から、$\lambda = 1$ として

$$\rho = |a'\rangle \otimes |b'\rangle\langle a'| \otimes \langle b'|$$

そうすると、ρ_A, ρ_B は

$$\rho_A = |a'\rangle\langle a'|\ ,\ \rho_B = |b'\rangle\langle b'|$$

なので、シュミット数が 1 のとき系 AB の密度行列は

$$\rho = \rho_A \otimes \rho_B$$

と書けます。よって、密度行列がこの形で書ければ product state、書けなければエンタングル状態となります。さらに、シュミット数が 1 での ρ_A は $\mathrm{tr}\rho_A^2 = 1$ (純粋状態) ですが、シュミット数が 2 以上であれば

$$\mathrm{tr}\rho_A^2 < 1 \quad (\sum_{i=1}^{N}\lambda_i^2 < 1)$$

となっています (混合状態)。これから、ρ_A(もしくは ρ_B) が純粋状態なら product state、混合状態ならエンタングル状態となります。

1 重項の密度行列で見てみます。1 重項での密度行列は

$$\begin{aligned}\rho = |\psi_{AB}\rangle\langle\psi_{AB}| &= \frac{1}{2}\big(|+_A\rangle \otimes |-_B\rangle - |-_A\rangle \otimes |+_B\rangle\big)\big(\langle +_A| \otimes \langle -_B| - \langle -_A| \otimes \langle +_B|\big)\\ &= \frac{1}{2}\big(|+_A\rangle\langle +_A| \otimes |-_B\rangle\langle -_B| - |+_A\rangle\langle -_A| \otimes |-_B\rangle\langle +_B|\\ &\qquad - |-_A\rangle\langle +_A| \otimes |+_B\rangle\langle -_B| + |-_A\rangle\langle -_A| \otimes |+_B\rangle\langle _B+|\big)\end{aligned}$$

これを系 B に対してトレースを取れば

$$
\begin{aligned}
\rho_A = \mathrm{tr}_B\rho = \frac{1}{2}\big(&\sum_m |+_A\rangle\langle +_A| \otimes \langle B_m|-_B\rangle\langle -_B|B_m\rangle \\
&-\sum_m |+_A\rangle\langle -_A| \otimes \langle B_m|-_B\rangle\langle +_B|B_m\rangle \\
&-\sum_m |-_A\rangle\langle +_A| \otimes \langle B_m|+_B\rangle\langle -_B|B_m\rangle \\
&+\sum_m |-_A\rangle\langle -_A| \otimes \langle B_m|+_B\rangle\langle _B+|B_m\rangle\big) \\
= \frac{1}{2}\big(&|+_A\rangle\langle +_A| \otimes \langle -_B|-_B\rangle \\
&-|+_A\rangle\langle -_A| \otimes \langle +_B|-_B\rangle \\
&-|-_A\rangle\langle +_A| \otimes \langle -_B|+_B\rangle \\
&+|-_A\rangle\langle -_A| \otimes \langle _B+|+_B\rangle\big) \\
= \frac{1}{2}\big(&|+_A\rangle\langle +_A| + |-_A\rangle\langle -_A|\big) \qquad (\langle\pm|\pm\rangle = 1\ ,\ \langle\mp|\pm\rangle = \langle\pm|\mp\rangle = 0)
\end{aligned}
$$

第一項と第二項は行列で言えば、対角成分になり ($+$ を 1, $-$ を 2 とすれば 11 成分と 22 成分)、固有値 λ_i は 2 つ (縮退している) あります。よって、エンタングル状態です。また、$\rho_A^2 = \rho_A^\dagger\rho_A$ は明らかに 1/4 による対角行列になるので、ρ_A^2 のトレースは 1/2 となり、ρ_A は混合状態の密度行列です。これからも 1 重項はエンタングル状態であることが分かります。

　具体的にすれば、$|\pm\rangle$ は行列で

$$
|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}\ ,\ |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}
$$

と書けるので、直積から

$$
\frac{1}{2}(|+_A\rangle\langle +_A| + |-_A\rangle\langle -_A|) = \frac{1}{2}I
$$

I は単位行列です。これから ρ_A^2 のトレースは

$$
\mathrm{tr}_A\rho_A^2 = \mathrm{tr}_A\frac{1}{4}I = \frac{1}{2} < 1
$$

となります。

　最後に $|\psi_{AB}\rangle$ が混合状態のときのエンタングル状態の定義を与えます $\rho_n^{(A)}$ を系 A の密度行列、$\rho_n^{(B)}$ を系 B の密度行列としたとき

$$
\rho = \sum_n P_n \rho_n^{(A)} \otimes \rho_n^{(B)}
$$

と書けるなら separable state と呼ばれ、書けなければエンタングル状態となります。純粋状態のときと同じように、期待値は密度行列によって

$$
\begin{aligned}
\langle O\rangle = \mathrm{tr}(\sigma O) = \mathrm{tr}(\sigma O_A\otimes O_B) &= \mathrm{tr}\big(\sum_n P_n\rho_n^{(A)}O_A\otimes\rho_n^{(B)}O_B\big)\\
&= \sum_n P_n\mathrm{tr}(\rho_n^{(A)}O_A\otimes\rho_n^{(B)}O_B)\\
&= \sum_n P_n\mathrm{tr}(\rho_n^{(A)}O_A)\mathrm{tr}(\rho_n^{(B)}O_B)
\end{aligned}
$$

と書けます。

ここで定義した separable state では、系 A と系 B は確率 P_n を共有しています ($P_n\rho_n^{(A)}\otimes\rho_n^{(B)}$)。このため、系 A, B には相関があります (確率 P_n となる観測結果を共有している)。しかし、separable state は、確率 P_n で $\rho_n^{(A)}\otimes\rho_n^{(B)}$ が得られたという手順を繰り返した結果でしかないです ($\rho_n^{(A)}\otimes\rho_n^{(B)}$ はお互いに影響を与えない)。これは通常の (日常的な) 確率による話と同じです。なので、古典的な相関であって、量子的な相関とは言えないです。このこととエンタングル状態は separable state でないという定義から、エンタングル状態が量子的な相関を含んでいる状態と言えます。また、separable state の密度行列は純粋状態での product state の凸結合になっています。

純粋状態ではシュミット分解によって product state とエンタングル状態を区別できますが、混合状態での separable state とエンタングル状態を区別する一般的な方法はまだないようです。