量子コンピューターのための量子力学

量子ゼミ第４回@Zoom

細谷暁夫　２０２０・８・２８

4　量子力学の公理

まず、量子力学の基本的な前提を4項目掲げる。これは、今のところ他のことから証明できることではなく仮定せざるを得ないものである。

　まず大前提として、量子状態全体の空間であるヒルベルト空間 $\mathscr{H}$ があるとしよう。

　その中の区別できる2点、$|0\rangle, |1\rangle$ を取り上げて4つの公理を述べる。

はじめの3つは1粒子に関するもので、4つ目が多粒子に関するものである。

(1)　重ね合わせの原理

状態 $|0\rangle \in H$ と状態 $|1\rangle \in H$ が物理的に実現可能な状態ならば、そ の重ね合わせ

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \in \mathscr{H} \quad ; \alpha, \beta \in C$$

も物理的に可能な状態である。($\in C$ はその量が複素数であること を意味する。）

この原理が典型的に現れるのが、ヤングによる2重スリットの干渉実験である。
一つのスリットを通過する光子の状態 $|0\rangle$ ともう一つ のスリットを通過する光子の
状態 $|1\rangle$ の重ね合わせ状態が最終的にス クリーンに干渉パターンを生じさせる。

(2) シュレーディンガー方程式

状態の時間発展は物質の場合には
シュレーディンガー方程式:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi$$

に従う

ここに、H は(1粒子系の) ハミルトニアンと呼ばれる量 であり、

物理系を与えれば決まる。後に定義する物理量の一つであ るが、

もっとも重要な物理量である。 光子の場合にはマクスウェ ル方程式が

シュレーディンガー方程式の代わりをする。

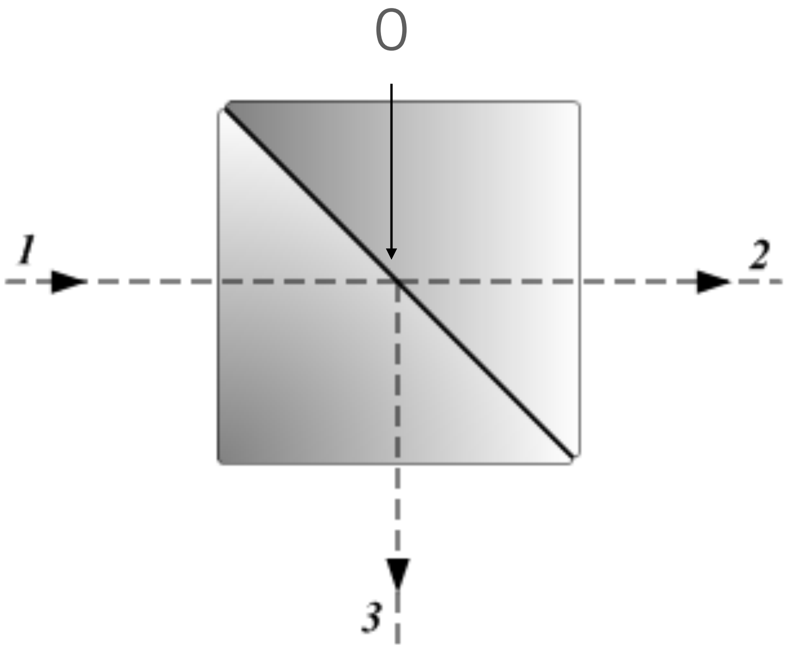
状態はユニタリー演算子 $U = e^{i\frac{Ht}{\hbar}}$ により時間発展する。

すな わち、

$$|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle. \qquad UU^\dagger = U^\dagger U = 1$$

例　ビームスプリッター

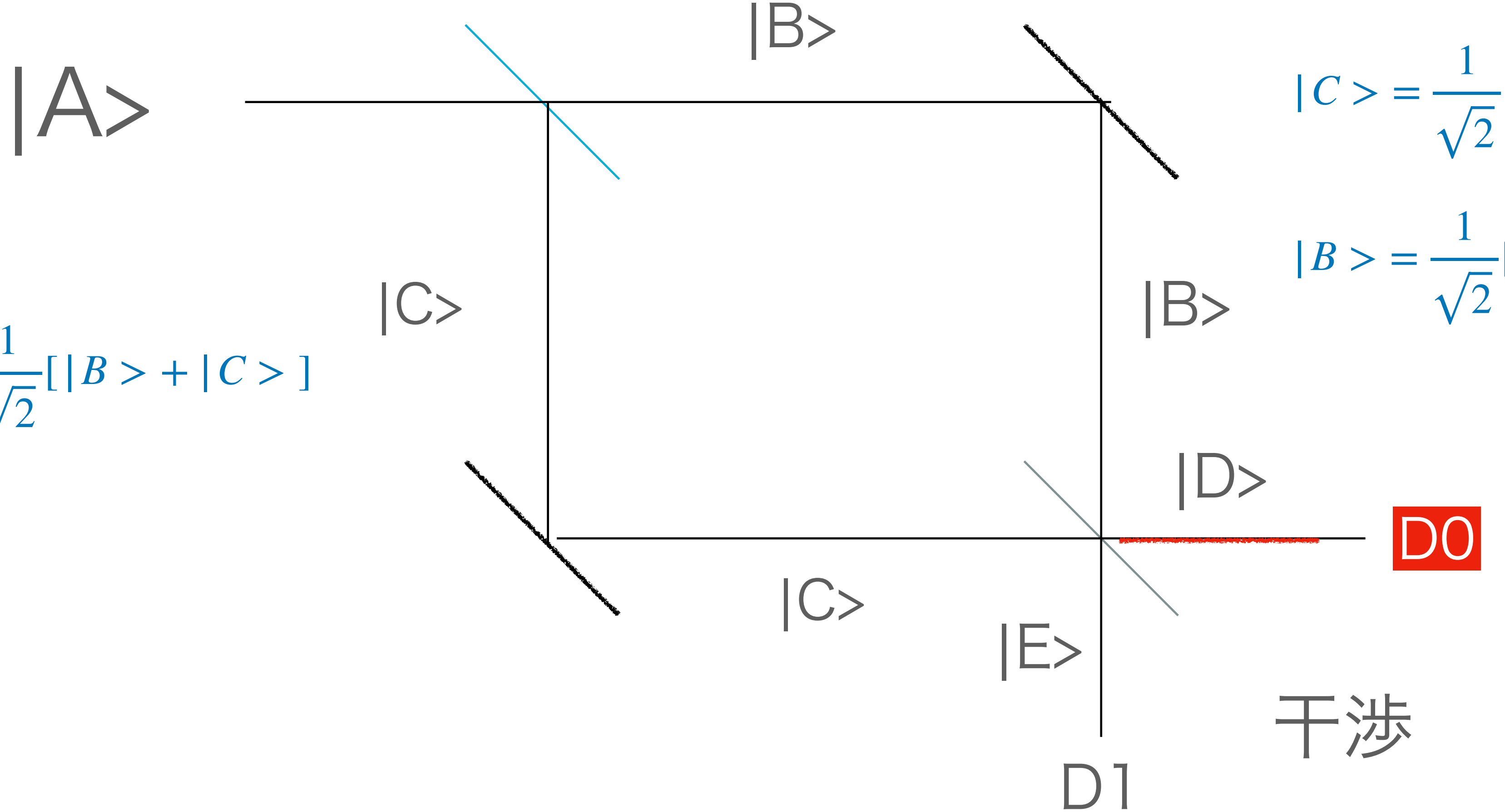
はユニタリー変換を引き起こす



$$|0> \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}[\,|2> - |3>\,]$$

$$|1> \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}[\,|2> + |3>\,]$$

マッハ・ツエンダー干渉計



$$|A> = \frac{1}{\sqrt{2}}[\,|B> + |C>\,]$$

$$|C> = \frac{1}{\sqrt{2}}[\,|D> + |E>\,]$$

$$|B> = \frac{1}{\sqrt{2}}[\,|D> - |E>\,]$$

(3) 波束の収縮と確率解釈

量子状態が重ね合わせ状態:

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \in \mathscr{H} \quad \alpha, \beta \in \mathrm{C}$$

にある時に、状態を判定することのできる測定すると状態は $|0\rangle$ か $|1\rangle$ のどちらかに変化し、その確率はそれぞれ係数の絶対値の2乗　$|\alpha|^2, |\beta|^2$ に比例する。

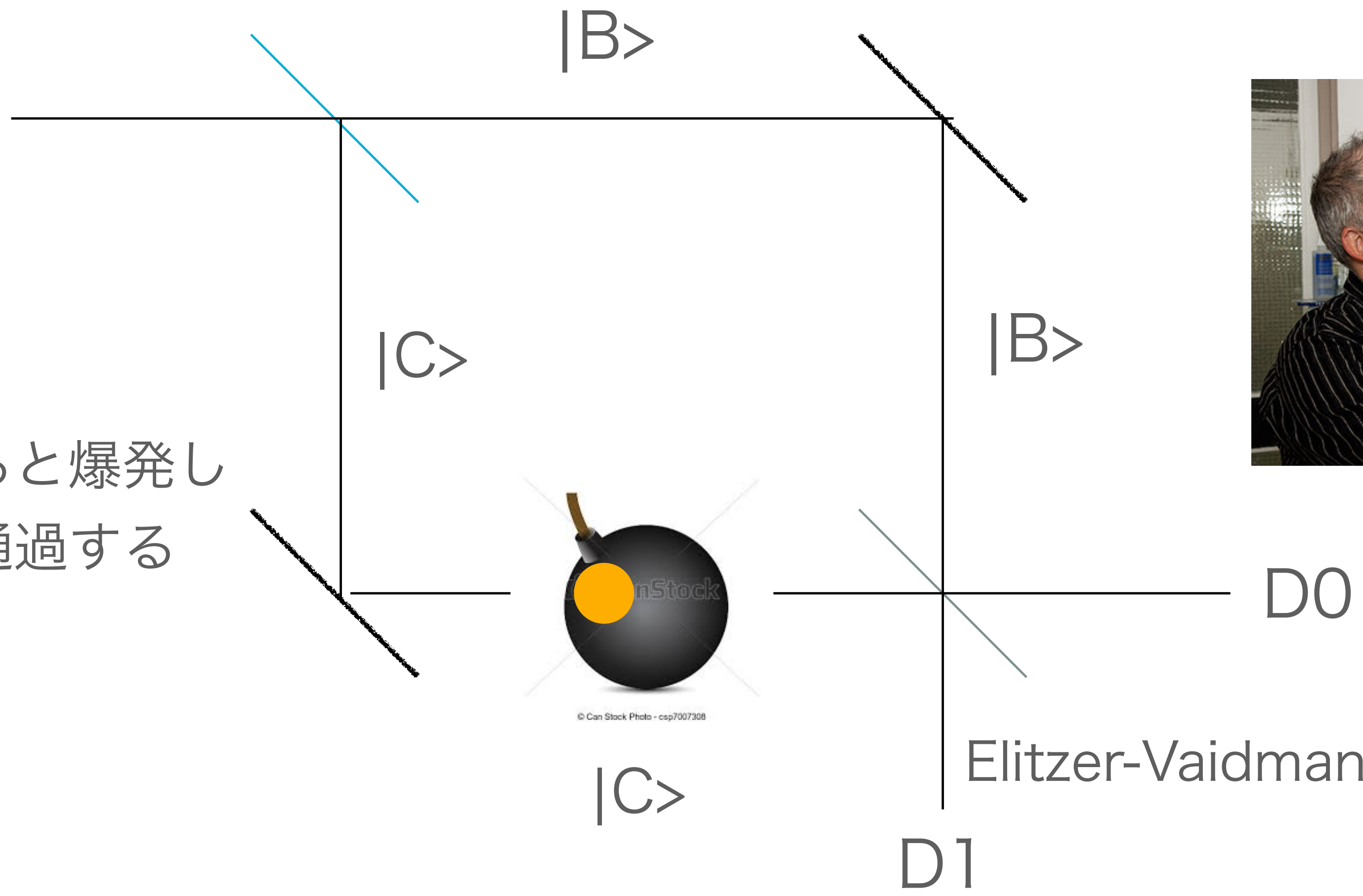
$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ と全体の大きさを1に規格化 しておけば、それぞれ確率になる。

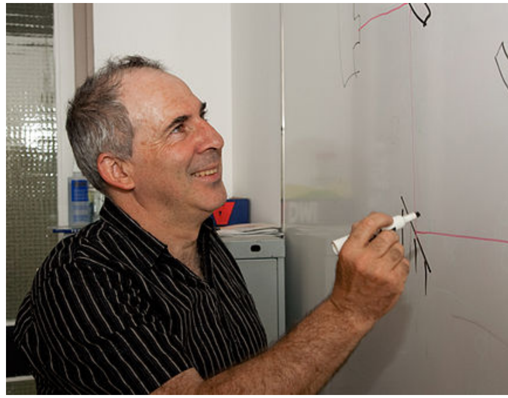
この項目がもっとも不自然とさ れ、量子力学の建設時から議論の的であった。

量子爆弾検査

$$|A> = \frac{1}{\sqrt{2}}[\,|B> + |C>\,]$$

|A>





爆弾が正常
ならば光子が当たると爆発し
不良ならば光子は通過する
●: 光子検出器

Elitzer-Vaidman(1993)

正常爆弾の場合

$$|A> = \frac{1}{\sqrt{2}}[\,|B> + |C>\,] \xrightarrow{\text{測定}}$$

$|B>$ 爆発なし 確率 1/2

$|C>$ 爆発あり 確率 1/2

$$|B> = \frac{1}{\sqrt{2}}[\,|D> + |E>\,] \xrightarrow{\text{測定}}$$

$|D>$ 確率 1/2

$|E>$ 確率 1/2

爆発なしの場合

$|E>$ の確率は 確率 1/4

不良爆弾の場合

はMZ干渉計と同じ

$$|A> = \frac{1}{\sqrt{2}}[|B> + |C>]$$

測定

$|D>$ 爆発なし 確率 1

$|E>$ 爆発なし 確率 0

不良爆弾のときには $|E>$ に光子は検出されない

したがって、

確率 1/4 で”いい爆弾”を選び出すことができる

任意の状態 |ψ⟩ は測定可能量 A の固有値 a の固有状態 |a⟩ で展開で きる。

$$|\psi> = \sum_a C_a |a> \in \mathscr{H} \quad , \qquad C_a \in \mathscr{C}$$

ここで、物理量 A の測定を行うと、その固有値のうちのどれかが 得られて、状態は

$$|\psi> \to |a>$$

と遷移する。その確率は

$$P(a) = |C_a|^2 = |<a|\psi>|^2$$

であたえられる。これをボルン則と呼ぶ

物理量Ａの測定を行ったときに、得られる値の平均値を計算しよう。

$$\bar{A} = \sum_a aP(a) = \sum_a a| < a|\psi > |^2 = \sum_a < \psi|a > < a|A|\psi > = < \psi|A|\psi >$$

ここで完全性 $\sum_a |a > < a| = 1$ を用いた。

$< \psi|A|\psi >$ を

状態$|\psi\rangle$ におけるAの期待値と呼ぶ。

(4) 多粒子状態

2粒子の量子状態 $|\psi(1,2)\rangle$ は1粒子状態2つ、$|\psi 1\rangle \in H1$ と $|\psi 1\rangle \in H2$ のテンソル積(積の線形結合)になる。例えば、

$$|\psi(1,2)\rangle = \alpha|\psi 1\rangle \otimes |\psi 2\rangle + \beta|\psi 1\rangle' \otimes |\psi 2\rangle' \in \mathscr{H}_1 \otimes \mathscr{H}_2;\ \ \alpha,\beta \in C$$

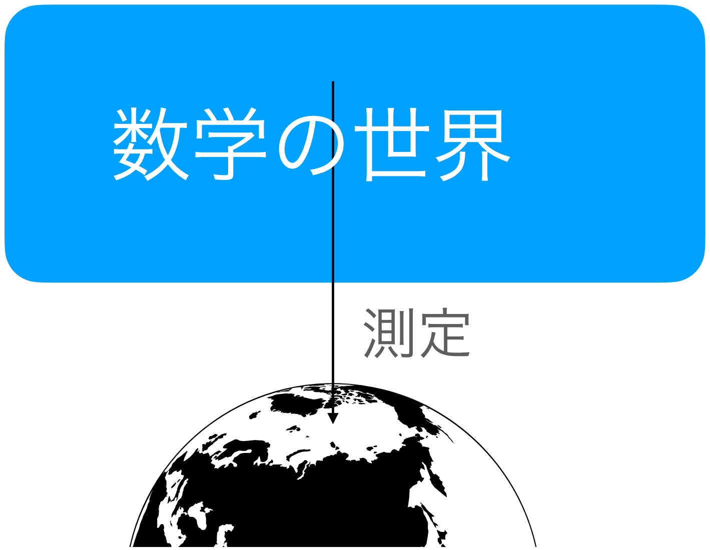
この事は、シュレーディンガー方程式の解の変数分離を言っている わけではなく、どこからも導く事ができないと思われている。量子 情報科学で主要な役割を果たすエンタングルメントは量子状態のテ ンソル積構造に起因する。 また、後述する測定理論において、対 象の物理系を測定器系の相互作用によるエンタングルメントが測定 過程では重要なので、全系のヒルベルト空間が対象系 HS のヒルベ ルト空間と測定器系のヒルベルト空間 HM のテンソル積 $HS \otimes HM$ であることが本質的である。

はじめの2つの項目は物質(光)の波動性に関わるもので、

3つ目の「波束の収縮と確率解釈」が粒子性を記述する。

ヤングの実験で入射光を 弱くして光子が一個だけが出るようにするとスクリーンの写真乾板の一 点が感光する。量子力学における波動と粒子の2重性とはこの事を言うのである。

また、はじめの2つの項目は状態の力学で言わば想定上のものであるが、3つ目が現実世界との関係をあたえる2元論的構成になっている。



（2）シュレーディンガー方程式

エネルギーレベルの定性的把握

シュレーディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial\psi(t,x)}{\partial t} = [-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle + V(x)]\psi(t,x)$$

において、$\psi(t,x) = e^{-i\frac{Et}{\hbar}}\psi(x)$　と置くと

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle + V(x)]\psi(x) = E\,\psi(x)$$

となり、定常状態　$\psi(x)$　に対するシュレーディンガー方程式と呼ばれる。Eはエネルギー固有値

自由粒子の場合（V＝0）

波動関数ψはシュレーディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\triangle\psi$$

にしたがう。ただし、ラプラシアンは $\triangle = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$と定義される。

平面波の解は

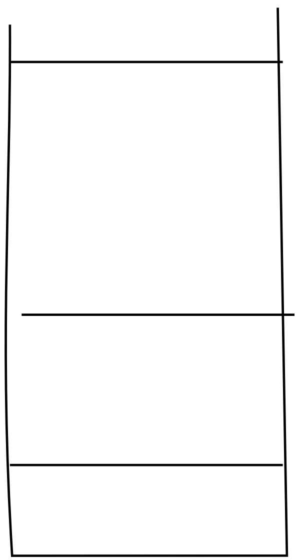
$$\psi_{in}(\mathbf{x}, t) = e^{i(-\omega t + \mathbf{k}\cdot\mathbf{x})}$$

である。

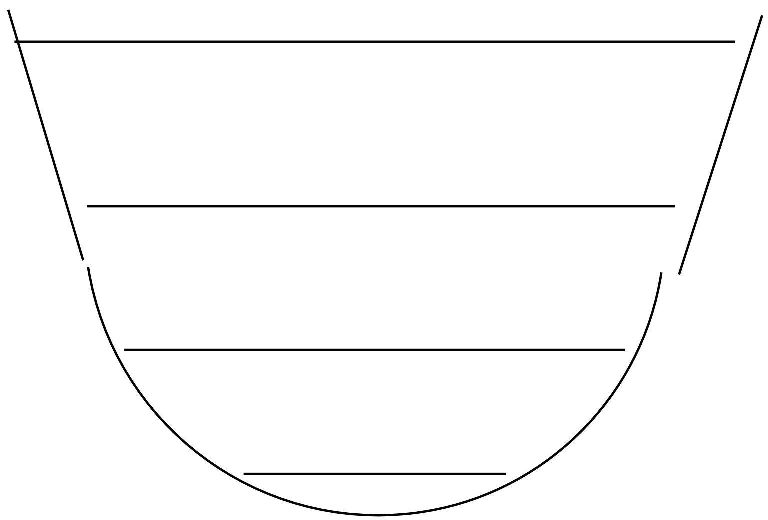
ただし、アインシュタイン・ドブロイの関係$\hbar\omega = E = \frac{p^2}{2m}$, $\hbar\mathbf{k} = \mathbf{p}$は了解済みとする。

ポテンシャル vs エネルギー準位

n^2に比例

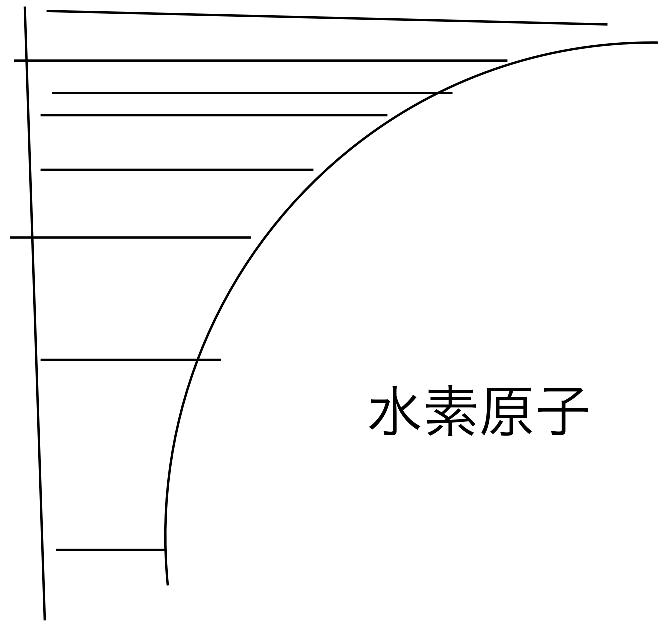


箱型ポテンシャル



n

調和振動子



$-\frac{1}{n^2}$

自由粒子の場合（V＝0）

波動関数ψはシュレーディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\triangle\psi$$

にしたがう。ただし、ラプラシアンは $\triangle = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$と定義される。

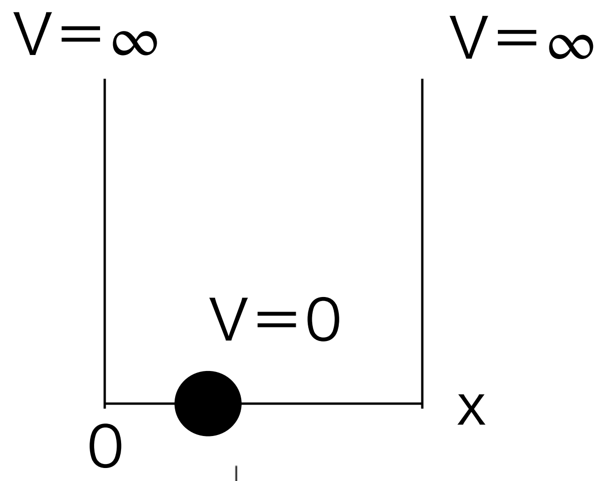
平面波の解は

$$\psi_{in}(\mathbf{x}, t) = e^{i(-\omega t + \mathbf{k}\cdot\mathbf{x})}$$

である。

ただし、アインシュタイン・ドブロイの関係$\hbar\omega = E = \frac{p^2}{2m}$, $\hbar\mathbf{k} = \mathbf{p}$は了解済みとする。

１次元自由粒子



長さ a の箱の中の自由粒子の量子力学を考える

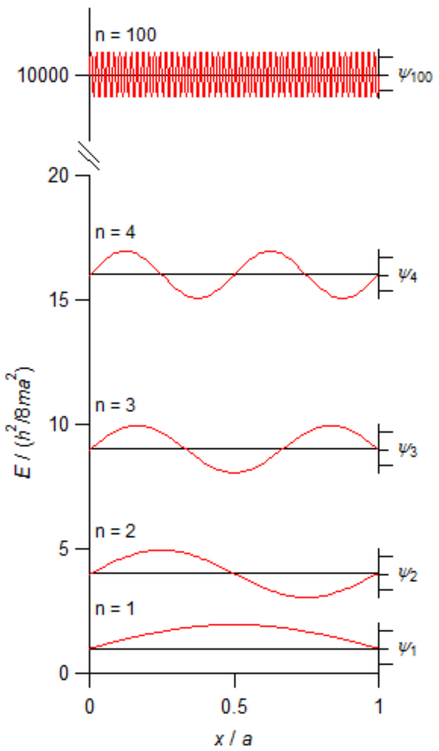
シュレーディンガー方程式：

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = E\psi(x) \qquad 0 \le x \le a$$

に対して、境界条件　$\psi(0) = \psi(a) = 0$ を課すと、解は

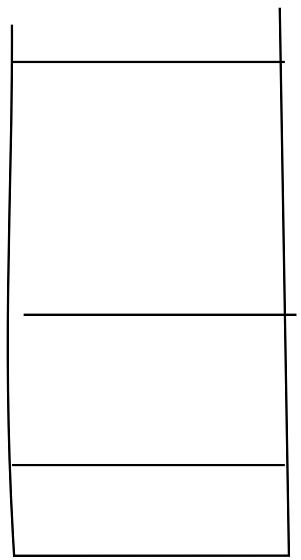
$$\psi(x) = N \sin k_n x \qquad k_n = \frac{n\pi}{a}$$

エネルギー固有値：$E_n = \dfrac{\hbar^2 k_n^2}{2m}$　　$n = 1,2,\cdots$

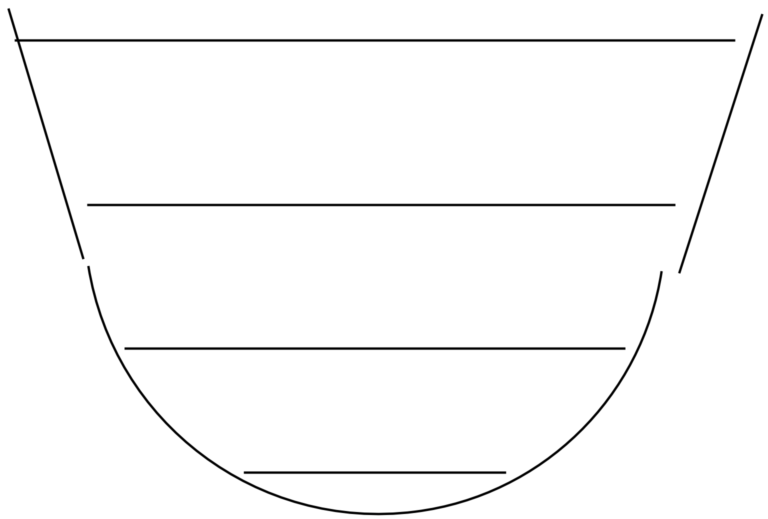


ポテンシャル vs エネルギー準位

n^2に比例

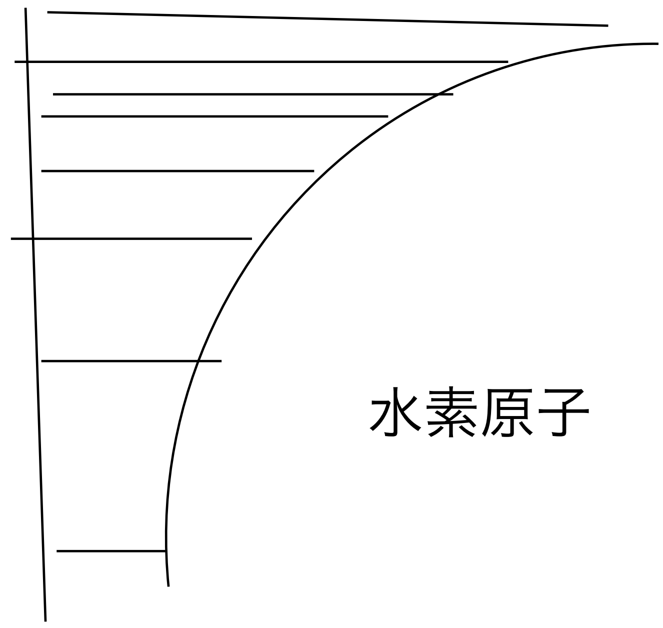


箱型ポテンシャル



n

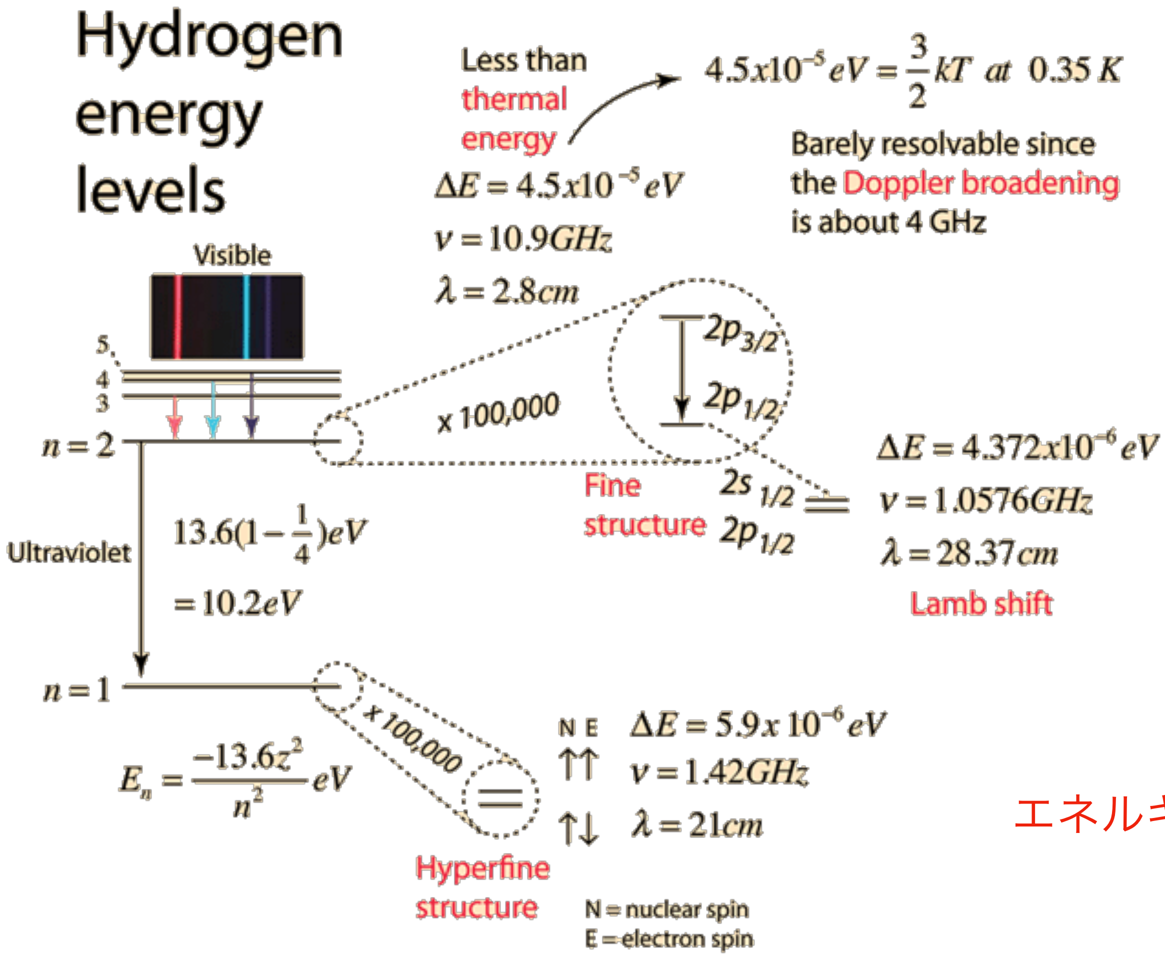
調和振動子

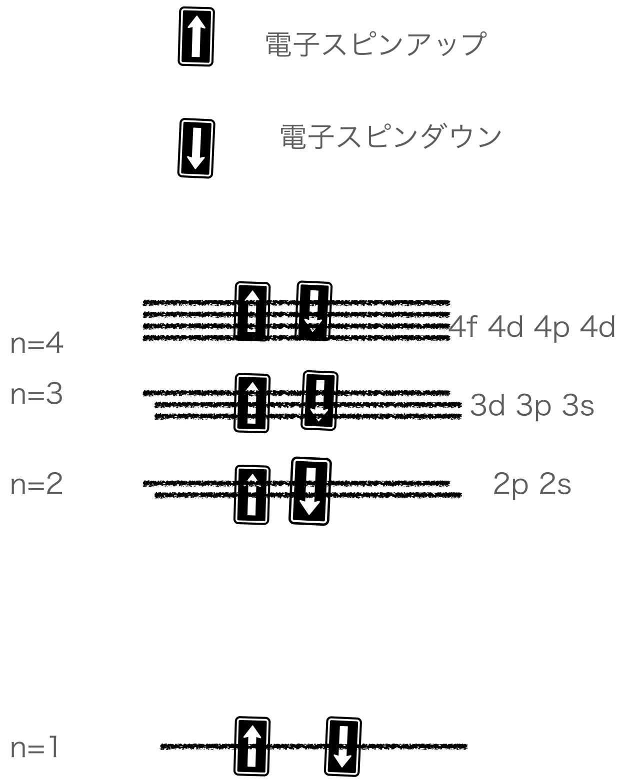


水素原子

$-\frac{1}{n^2}$

水素原子のエネルギーレベル

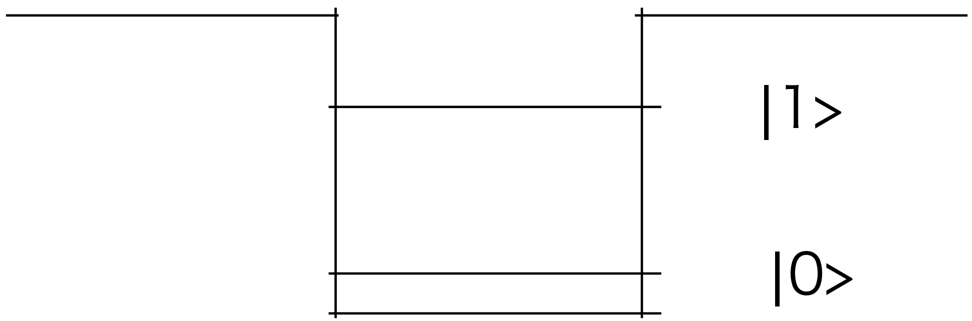


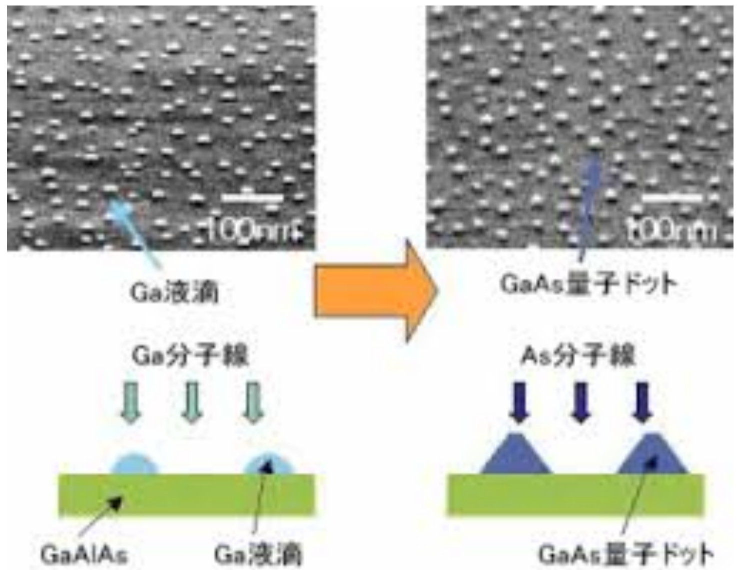


一つの量子状態に一つの電子しか入らな

エネルギーの高い状態から低い状態に遷移する時に光

井戸型ポテンシャル


|1>
|0>


100nm
100nm
Ga液滴
GaAs量子ドット
Ga分子線
As分子線
GaAlAs
Ga液滴
GaAs量子ドット

時間によるシュレディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)=\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x,t)\right\}\psi(x,t)$$

http://www.natural-science.or.jp/article/20111108002032.php

測定公理

量子爆弾テスト(Elitzser-Vaidman)

https://www.youtube.com/watch?v=wiW7jhdKDVA