

2.2 量子力学の公理

9BSP1118 村岡海人

6月27日

2.2.1 状態空間

量子力学の最初の公理によって量子力学を記述するための概念が設定される。それが、Hilbert 空間である。

公理 1 任意の孤立した物理系に関して、系の**状態空間**と呼ぶ内積を伴う複素ベクトル空間 (つまり Hilbert 空間) が存在する。系は状態空間の単位ベクトルである**状態ベクトル**によって完全に記述できる。

最も簡単で我々が最も関心を持つ量子力学の系は **q ビット** である。q ビットは 2 次元状態空間の元である。 $|0\rangle$ と $|1\rangle$ がその状態空間の基底を形成する。そのとき状態空間における任意の状態ベクトルは次のように書ける。

$$|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle \quad (2.82)$$

ここで、 a と b は複素数である。 $|\psi\rangle$ が単位ベクトルであるという条件 $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ は $|a|^2 + |b|^2 = 1$ と等価である。また、条件 $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ を状態ベクトルの**正規化条件**と呼ぶ。

q ビットについて議論するとき、正規直交の基底ベクトル集合は $|0\rangle$ と $|1\rangle$ であり、その基底は前もって固定していると考ええる。直感的には状態 $|0\rangle$ と $|1\rangle$ はビットがとる 2 つの値 0 と 1 に相似している。q ビットがビットと異なるのは 2 つの状態の**重ね合わせ** $a|0\rangle + b|1\rangle$ が存在し得ることであり、その場合は q ビットが確定的に $|0\rangle$ 状態にあるとか確定的に $|1\rangle$ 状態にあるといえない。

任意の線形結合 $\sum_i \alpha_i |\psi_i\rangle$ は状態 $|\psi_i\rangle$ に対する**振幅** α_i を状態 $|\psi_i\rangle$ を以て重ねたものである。したがって、例えば、

$$\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \quad (2.83)$$

は状態 $|0\rangle$ に対して振幅 $1/\sqrt{2}$ 、状態 $|1\rangle$ に対して振幅 $-1/\sqrt{2}$ で、状態 $|0\rangle$ と $|1\rangle$ を重ね合わせたものである。

2.2.2 時間発展

公理 2 閉じた量子系の時間発展は**ユニタリー変換**で記述される。つまり、時刻 t_1 における系の状態 $|\psi\rangle$ は、時刻 t_2 における系の状態 $|\psi'\rangle$ と時刻 t_1 と t_2 だけに依存するユニタリーオペレータ U によって関係付けられる。

$$|\psi'\rangle = U |\psi\rangle \quad (2.84)$$

量子計算と量子情報において重要な、単一 q ビットに関するユニタリーオペレータの例を 2、3 見てみる。すでにそのようなユニタリーオペレータの例を 2.2.3 項で Pauli の行列を定義した。また、古典 NOT ゲートのアナロジーから X 行列は量子 NOT ゲートであることが知られている。Pauli の X と Z 行列はそれぞれ**ビット反転**および**位相反転**行列とも呼ばれている。

もう 1 つのユニタリーオペレータは **Hadamard ゲート**であり、 H と表記する。このオペレータの作用は $H|0\rangle \equiv (|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$, $H|1\rangle \equiv (|0\rangle - |1\rangle)/\sqrt{2}$ で定義され、行列表現では次のように与えられる:

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \quad (2.85)$$

公理 2 は 2 つの異なる時刻における閉じた量子状態がどのように関係するかについて述べている。この公理から、量子系を連続時間で記述できる。

公理 2' 閉じた量子系の状態の時間発展は **Schrödinger 方程式**

$$i\hbar \frac{d|\psi\rangle}{dt} = H |\psi\rangle \quad (2.86)$$

で記述される。 \hbar は **Dirac 定数** ($\hbar \equiv \frac{h}{2\pi}$, h は **Planck 定数**)。 H は Hermite オペレータであり、閉じた系のハミルトニアンと呼ぶ。

Hamiltonian は Hermite オペレータなので、固有値 E とそれに対応する正規化固有ベクトル $|E\rangle$ を用いてスペクトル分解できる。

$$H = \sum_E E |E\rangle \langle E| \quad (2.87)$$

状態 $|E\rangle$ は通常**エネルギー固有状態**または**定常状態**と呼ばれ、 E は状態 $|E\rangle$ の**固有エネルギー**である。最も低いエネルギーは系の**基底エネルギー**といい、対応するエネルギー固有状態を**基底状態**という。 $|E\rangle$ を定常状態と呼ぶのは、唯一の時間変化が全体にかかる位相因子にのみ現れるのが理由である。

$$|E\rangle \rightarrow \exp(-iEt/\hbar) |E\rangle \quad (2.88)$$

例えば、単一の q ビットの Hamiltonian が Pauli 行列のみを用いて、

$$H = \hbar\omega X \quad (\omega > 0) \quad (2.89)$$

で与えられたとする。この Hamiltonian のエネルギー固有状態は明らかに X の固有状態と同じであり、状態が $(|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$ と $(|0\rangle - |1\rangle)/\sqrt{2}$ である。また、それぞれに対応するエネルギーが $\hbar\omega$ と $-\hbar\omega$ で与えられる。したがって、基底状態は $(|0\rangle - |1\rangle)/\sqrt{2}$ 、基底状態エネルギーは $-\hbar\omega$ である。ダイナミクスを記述する公理 2 と公理 2' の関係は、Schrödinger 方程式の解を書き下すと得られ、次式が容易に証明できる:

$$|\psi(t_2)\rangle = \exp\left[\frac{-iH(t_2 - t_1)}{\hbar}\right] |\psi(t_1)\rangle = U(t_1, t_2) |\psi(t_1)\rangle \quad (2.90)$$

ここで、

$$U(t_1, t_2) \equiv \exp\left[\frac{-iH(t_2 - t_1)}{\hbar}\right] \quad (2.91)$$

と定義する。

量子計算と量子情報において特定の量子システムにユニタリーオペレータを適用するという表現をよくする。これは、我々がユニタリーオペレータを適用ということは、量子系と相互作用する「我々」が外部にいて、系は閉じられていないからである。この例はレーザー光を原子に収束した時に起きる。原子・レーザー系の Hamiltonian を書き下した後で原子だけへの効果を考えると、ほとんど完全に、原子の状態ベクトルは別の Hamiltonian である**原子の Hamiltonian**で記述できる。

一般にこのような多くの系に対して、系 Hamiltonian が一定ではなく、実験の途中で変化するような、量子系の**時間変化**をする Hamiltonian を書き下すことができる。

結論として、最初は量子系の時間発展を、しばしばユニタリーオペレータを用いて記述する。例外は量子測定であり、もう少し進むと他の系との相互作用により生じるユニタリー時間発展からのずれの可能性を詳しく調べて、現実の量子系のダイナミクスをより正確に理解することができる。