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の活動の舞台が設定される. その舞台は線形代数で身近になった Hilbert 空間である.

定理 1 任意の孤立した物理システムに関して、システムの**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. システム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システムは **q ビット**である。q ビットは 2 次元状態空間を持つ。$|0\rangle$ と $\langle 1|$ 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。

$$|\psi\rangle = a\,|0\rangle + b\,|1\rangle \tag{2.82}$$

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 $|a|^2 + |b|^2 = 1$ と等価であり、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、正規直行の基底ベクトル集合 $|0\rangle$ と $|1\rangle$ を常に参照し、その規定は前もって固定していると考える。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。

任意の線型結合 $\sum_i \alpha_i\,|\psi_i\rangle$ 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、

$$\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \tag{2.83}$$

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

定理 2　閉じた量子システムの時間発展は**ユニタリー変換**で記述される。つまり、時刻 t_1 におけるシステムの状態 $|\psi\rangle$ は、時刻 t_2 におけるシステムの状態 $|\psi'\rangle$ 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。

$$|\psi'\rangle = U|\psi\rangle \tag{2.84}$$

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**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 $H|0\rangle \equiv (|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$, $H|0\rangle \equiv (|0\rangle - |1\rangle)/\sqrt{2}$ で定義され、行列表現では次のように与えられる:

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

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。この公理を発展させると、量子システムの進化を連続時間で記述できる。発展した公理を述べる前に以下、2 つのことを述べる。

- 表記状の注意：次の議論に現れる H は Hadamard オペレータと同じではない
- 次の公理には微分方程式が使われる

定理 2'　閉じた量子システムの状態の時間発展は **Schrödinger** 方程式

$$i\hbar\frac{d|\psi\rangle}{dt} = H|\psi\rangle \tag{2.86}$$

で記述される。$\hbar$ は **Planck** の定数。H は Hermite オペレータであり、閉じたシステム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。

$$H = \sum_E E|E\rangle\langle E| \tag{2.87}$$

状態 $|E\rangle$ は通常**エネルギー固有状態**または**定常状態**とも呼ばれ、E は状態 $|E\rangle$ の**エネルギー**である。最も低いエネルギーはシステムの**基底状態エネルギー**といい、対応するエネルギー固有状態

を**基底状態**という。$|E\rangle$ は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。

$$|E\rangle \to \exp(-iEt/\hbar)\,|E\rangle \tag{2.88}$$

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

$$H = \hbar\omega X \tag{2.89}$$

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、状態が $(|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$ と $(|0\rangle - |1\rangle)/\sqrt{2}$、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。　ダイナミックスを記述する Hamiltonian 描像の公理 $2'$ とユニタリーオペレータ描像の公理 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:

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

ここで、

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

と定義する。