デモ

2025 年 2 月 18 日

目次

目次 (つづき)

なぜ線形代数？

量子力学の基本方程式

量子力学の基本方程式といえば？

量子力学の基本方程式

量子力学の基本方程式といえば？

（時間に依存しない）シュレーディンガー方程式

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+V(\boldsymbol{r})\right]\psi(\boldsymbol{r})=E\psi(\boldsymbol{r}) \tag{*1}$$

量子力学の基本方程式といえば？

（時間に依存しない）シュレーディンガー方程式

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+V(\boldsymbol{r})\right]\psi(\boldsymbol{r})=E\psi(\boldsymbol{r}) \qquad (*1)$$

(*1) の解を $\psi(\boldsymbol{r}),\xi(\boldsymbol{r})$ とすると，任意の複素数 a,b に対して，

$$\eta(\boldsymbol{r}) \coloneqq a\psi(\boldsymbol{r})+b\xi(\boldsymbol{r}) \quad (a,b\text{ は複素数})$$

は (*1) の解になっている．

量子力学の基本方程式といえば？

（時間に依存しない）シュレーディンガー方程式

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+V(\boldsymbol{r})\right]\psi(\boldsymbol{r})=E\psi(\boldsymbol{r}) \qquad (*1)$$

(*1) の解を $\psi(\boldsymbol{r}),\xi(\boldsymbol{r})$ とすると，任意の複素数 a,b に対して，

$$\eta(\boldsymbol{r}) := a\psi(\boldsymbol{r})+b\xi(\boldsymbol{r}) \quad (a,b \text{ は複素数})$$

は (*1) の解になっている．

$\Longrightarrow$ **(*1) は線型方程式**．

数学的には・・・

方程式 (*1) の解 $\psi(\boldsymbol{r})$ 全体は，**ベクトル空間**をなす．

ヒルベルト空間って？

ヒルベルト空間

状態はヒルベルト空間のベクトルとしてあらわされる.

ではヒルベルト空間とは何か？

ヒルベルト空間

状態はヒルベルト空間のベクトルとしてあらわされる．

ではヒルベルト空間とは何か？

ヒルベルト空間の定義

内積をもつ**ベクトル空間**であって，内積から導かれる**ノルム**に関して**完備**なものを**ヒルベルト空間**という．

ヒルベルト空間って？

ベクトル

ユークリッド空間の例

3 次元ユークリッド空間 $\mathbb{R}^3$ の縦ベクトル

$$\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \quad (x_1, x_2, x_3 \text{ は複素数})$$

とする．

このとき，

$$a\boldsymbol{x} + b\boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} ax_1 + by_1 \\ ax_2 + by_2 \\ ax_3 + by_3 \end{pmatrix}$$

もベクトル．

ユークリッド空間の例

3 次元ユークリッド空間 $\mathbb{R}^3$ の縦ベクトル

$$\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \quad (x_1, x_2, x_3 \text{ は複素数})$$

とする．

このとき，

$$a\boldsymbol{x} + b\boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} ax_1 + by_1 \\ ax_2 + by_2 \\ ax_3 + by_3 \end{pmatrix}$$

もベクトル．

$\boldsymbol{x}$ はある意味**シュレーディンガー方程式の解 ψ に似ている**．

ベクトル空間の定義

ふつうの縦ベクトルについて考えれば当たり前のこと：

ベクトル空間の公理

集合 V の元 ψ, φ, ξ を**ベクトル**，a, b, c を**スカラー**（複素数）とする．

1. $(\boldsymbol{\psi} + \boldsymbol{\varphi}) + \boldsymbol{\xi} = \boldsymbol{\psi} + (\boldsymbol{\varphi} + \boldsymbol{\xi})$
2. $\boldsymbol{\psi} + \mathbf{0} = \mathbf{0} + \boldsymbol{\psi} = \boldsymbol{\psi}$
3. $\boldsymbol{\psi} + (-\boldsymbol{\psi}) = \mathbf{0}$
4. $\boldsymbol{\psi} + \boldsymbol{\varphi} = \boldsymbol{\varphi} + \boldsymbol{\psi}$
5. $c(\boldsymbol{\psi} + \boldsymbol{\varphi}) = c\boldsymbol{\psi} + c\boldsymbol{\varphi}$
6. $(a + b)\boldsymbol{\psi} = a\boldsymbol{\psi} + b\boldsymbol{\psi}$
7. $(ab)\boldsymbol{\psi} = a(b\boldsymbol{\psi})$
8. $1\boldsymbol{\psi} = \boldsymbol{\psi}$

ベクトル空間の定義

ふつうの縦ベクトルについて考えれば当たり前のこと：

ベクトル空間の公理

集合 V の元 ψ, φ, ξ を**ベクトル**，a, b, c を**スカラー**（複素数）とする．

1. $(\psi + \varphi) + \xi = \psi + (\varphi + \xi)$
2. $\psi + \mathbf{0} = \mathbf{0} + \psi = \psi$
3. $\psi + (-\psi) = \mathbf{0}$
4. $\psi + \varphi = \varphi + \psi$
5. $c(\psi + \varphi) = c\psi + c\varphi$
6. $(a + b)\psi = a\psi + b\psi$
7. $(ab)\psi = a(b\psi)$
8. $1\psi = \psi$

逆に，1–8 を満たすすものは，ぜんぶ「ベクトル」ということにする．

このとき，集合 V を**ベクトル空間**という．

$\Longrightarrow$ 5 ページで考えた ψ もベクトル．

ベクトルの例

- N 次の縦ベクトル　${}^{\mathrm{t}}(a_1 \;\; a_2 \;\; \cdots \;\; a_N)$
- N 次多項式　$p(x) = a_N x^N + a_{N-1} x^{N-1} + \cdots + a_1 x + a_0$
- 線形方程式の解　$\varphi(x_1, \ldots, x_N)$ ←**シュレーディンガー方程式の解！**

これらはすべてベクトル空間の公理を満たすベクトル．

ベクトル空間の基底と次元

このように定義されたベクトル空間には必ず**基底**と呼ばれるベクトルの組が存在する．

ベクトル空間 V の基底を構成するベクトルの数を**次元**という．

ヒルベルト空間って？

内積

ユークリッド内積

縦ベクトルがもっている重要な性質：**内積**の復習.

ユークリッド内積

縦ベクトルがもっている重要な性質：**内積**の復習．

縦ベクトルの内積

$\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}$：$N$ 次元ベクトル

$$\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \rangle \coloneqq \sum_{i=1}^{N} x_i^* y_i \tag{*2}$$

を**内積**という．

ベクトルの長さ（**ノルム**）は，

$$\|\boldsymbol{x}\| \coloneqq \sqrt{\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x} \rangle} \tag{*3}$$

注意

(*3) の右辺の $\sqrt{}$ の中身 ≥ 0 になるように，(*2) の x_i を複素共役にしてある．

内積の定義

(*2) は次の性質を満たす．

内積の公理

ベクトル ψ, φ, ξ とスカラー（複素数）a, b について

1. $\langle \boldsymbol{\psi},\ a\boldsymbol{\varphi} + b\boldsymbol{\xi} \rangle = a\langle \boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{\xi} \rangle + b\langle \boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{\varphi} \rangle$（**線形性**）
2. $\langle \boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{\varphi} \rangle = \langle \boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\psi} \rangle^*$
3. $\langle \boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{\psi} \rangle \geq 0$ であり，$\langle \boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{\psi} \rangle = 0 \iff \boldsymbol{\psi} = \mathbf{0}$（**正定値性**）

内積の定義

内積の公理

ベクトル ψ, φ, ξ とスカラー（複素数）a, b について

1. $\langle \psi,\ a\varphi + b\xi \rangle = a\langle \psi, \xi \rangle + b\langle \psi, \varphi \rangle$（**線形性**）
2. $\langle \psi, \varphi \rangle = \langle \varphi, \psi \rangle^*$
3. $\langle \psi, \psi \rangle \geq 0$ であり，$\langle \psi, \psi \rangle = 0 \iff \psi = \mathbf{0}$（**正定値性**）

上の条件を満たす計算 $\langle \bullet, \bullet \rangle$ を改めて「**内積**」と呼ぶことにする．

内積をもつベクトル空間を，**内積空間**と呼ぶ．

内積の定義

内積の公理

ベクトル ψ, φ, ξ とスカラー（複素数）a, b について

1. $\langle \psi,\ a\varphi + b\xi \rangle = a\langle \psi, \xi \rangle + b\langle \psi, \varphi \rangle$（**線形性**）
2. $\langle \psi, \varphi \rangle = \langle \varphi, \psi \rangle^*$
3. $\langle \psi, \psi \rangle \geq 0$ であり，$\langle \psi, \psi \rangle = 0 \iff \psi = \mathbf{0}$（**正定値性**）

上の条件を満たす計算 $\langle \bullet, \bullet \rangle$ を改めて「**内積**」と呼ぶことにする．

内積をもつベクトル空間を，**内積空間**と呼ぶ．

注意

1 と 2 をあわせると，$\langle a\psi + b\varphi,\ \xi \rangle = a^*\langle \psi, \xi \rangle + b^*\langle \varphi, \xi \rangle$（**反線形性**）である．

正規直交基底

内積空間はベクトル空間なので，基底をもつ．

特に，内積空間では**正規直交基底**という良い基底をとれる（ことがある）：

正規直交基底 (φ_i) の条件：

$$\langle \varphi_i, \varphi_j \rangle = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases}$$

関数の内積

シュレーディンガー方程式の解はベクトル．

では，関数 $\psi(\boldsymbol{r})$ と $\xi(\boldsymbol{r})$ の内積は？

関数の内積

シュレーディンガー方程式の解はベクトル．

では，関数 $\psi(\boldsymbol{r})$ と $\xi(\boldsymbol{r})$ の内積は？

$$\langle \psi, \xi \rangle := \iiint \psi^*(\boldsymbol{r})\,\xi(\boldsymbol{r})\,\mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{*4}$$

とすれば，前のページの性質を満たす．

ヒルベルト空間って？

完備性

内積空間の完備性

「収束しそうなベクトルの列」の極限が存在する内積空間を，**完備**であるという．

有限次元の内積空間はすべて完備であるから，あまり気にしなくてよい．

参考までに，ベクトルの列が収束することの定義は以下のとおり．

（参考）ベクトルの列の収束

ベクトルの列 $\boldsymbol{\psi}_1, \boldsymbol{\psi}_2, \dots$ が $\boldsymbol{\psi}_*$ に収束するとは，

$$\lim_{n \to \infty} \|\boldsymbol{\psi}_* - \boldsymbol{\psi}_n\| = 0$$

となることをいう．

（参考）完備性の定義

内積空間 V に属するベクトルの列 $\boldsymbol{\psi}_1, \boldsymbol{\psi}_2, \ldots$ が**コーシー列**であるとは，

$$\lim_{m,n\to\infty} \|\boldsymbol{\psi}_m - \boldsymbol{\psi}_n\| = 0$$

コーシー列は，番号が大きくなるにつれて 1 点に収束するように見える．その 1 点が V に含まれているかが問題である．

V のすべてのコーシー列が収束する，つまり

$$\lim_{n\to\infty} \|\boldsymbol{\psi}_* - \boldsymbol{\psi}_n\| = 0$$

となる V のベクトル $\boldsymbol{\psi}_*$ が存在するとき，V は**完備**であるという．

ヒルベルト空間って？

ヒルベルト空間

ヒルベルト空間

ヒルベルト空間の定義

内積をもつ**ベクトル空間**であって，内積から導かれる**ノルム**に関して**完備**なものを**ヒルベルト空間**という．

ヒルベルト空間から $\mathbb{C}^N$ へ

ヒルベルト空間から $\mathbb{C}^N$ へ

同型

同型（どうけい）とは：ベクトル空間の同型

8 ページのベクトル空間の定義に出てくるのは 3 つだけ：

- ベクトル（$\psi, \xi, \ldots$）
- ベクトルの和（$+$）
- スカラー倍（$\cdot$）

同型（どうけい）とは：ベクトル空間の同型

8 ページのベクトル空間の定義に出てくるのは 3 つだけ：

- ベクトル（$\psi, \xi, \ldots$）
- ベクトルの和（$+$）
- スカラー倍（$\cdot$）

よって，

- ベクトルの**かず**が同じ
- **線形構造**（和とスカラー倍）が同じ

である 2 つのベクトル空間は，同じものと見なしてもよい．

このとき，2 つは（ベクトル空間として）**同型**（どうけい）であるという．

同型とは：内積空間の同型

2 つの内積空間が，ベクトル空間として同型であり，さらに

- **内積構造**が同じ

なら，内積空間として同型であるといえる．

N 次元ベクトル空間どうしは同型

定理

2 つの N 次元内積空間（or ベクトル空間）は同型である．

空間 V の（正規直交）基底 $\{\varphi_i\}$，W の（正規直交）基底 $\{\varphi'_i\}$ をそれぞれ

$$\varphi_1 \leftrightarrow \varphi'_1, \quad \cdots, \quad \varphi_N \leftrightarrow \varphi'_N$$

のように対応させれば簡単に証明できる．

N 次元ベクトル空間どうしは同型

定理

2 つの N 次元内積空間（or ベクトル空間）は同型である．

空間 V の（正規直交）基底 $\{\varphi_i\}$，W の（正規直交）基底 $\{\varphi'_i\}$ をそれぞれ

$$\varphi_1 \leftrightarrow \varphi'_1, \quad \cdots, \quad \varphi_N \leftrightarrow \varphi'_N$$

のように対応させれば簡単に証明できる．

同型の意味

結局，**N 次元ベクトル空間は実質 1 つだけ！**

$\Longrightarrow$ 一番簡単な $\mathbb{C}^N$ を考えればよい．

ヒルベルト空間から $\mathbb{C}^N$ へ

線形写像

線形写像

ベクトル空間 V 上の**線形写像**とは，V から V 自身への写像 f であって，線形性

$$f(a\boldsymbol{\psi} + b\boldsymbol{\xi}) = a \cdot f(\boldsymbol{\psi}) + b \cdot f(\boldsymbol{\xi})$$

を満たすものをいう．

線形写像

ベクトル空間 V 上の**線形写像**とは，V から V 自身への写像 f であって，線形性

$$f(a\boldsymbol{\psi} + b\boldsymbol{\xi}) = a \cdot f(\boldsymbol{\psi}) + b \cdot f(\boldsymbol{\xi})$$

を満たすものをいう．

線形写像の例としては

- 行列 A
- 微分演算子 $\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}$，積分演算子 $\int \mathrm{d}x$
- ベクトル $\boldsymbol{\psi}$ を固定した時の内積 $\langle \boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{\xi} \rangle$
- などなど

ヒルベルト空間から $\mathbb{C}^N$ へ

表現行列

表現行列の導入

多項式関数 $f(x) = a_2 x^2 + a_1 x + a_0$ を微分する演算子：$\hat{D} \coloneqq \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$．

もちろん，

$$(\hat{D}f)(x) = \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} = 2a_2 x + a_1$$

表現行列の導入

多項式関数 $f(x) = a_2 x^2 + a_1 x + a_0$ を微分する演算子：$\hat{D} \coloneqq \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$.

もちろん，

$$(\hat{D}f)(x) = \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} = 2a_2 x + a_1$$

ところで，対応 $f \leftrightarrow (a_2\ a_1\ a_0)$ を考えると，これは次のように書ける

$$(\hat{D}f) \leftrightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 2a_2 \\ a_1 \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}}_{\mathsf{D}} \begin{pmatrix} a_2 \\ a_1 \\ a_0 \end{pmatrix}$$

表現行列の導入

多項式関数 $f(x) = a_2 x^2 + a_1 x + a_0$ を微分する演算子：$\hat{D} \coloneqq \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$．

もちろん，

$$(\hat{D}f)(x) = \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} = 2a_2 x + a_1$$

ところで，対応 $f \leftrightarrow (a_2 \ a_1 \ a_0)$ を考えると，これは次のように書ける

$$(\hat{D}f) \leftrightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 2a_2 \\ a_1 \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}}_{\mathsf{D}} \begin{pmatrix} a_2 \\ a_1 \\ a_0 \end{pmatrix}$$

D を**表現行列**という．

表現行列の形式的な定義

形式的には次のとおり．

1. 有限次元ベクトル空間 V は，$\mathbb{C}^N$ と同型．
2. V の基底 $\boldsymbol{\varphi}_i$ は，$\mathbb{C}^N$ の基底 $\boldsymbol{e}_i = {}^{\mathrm{t}}\begin{pmatrix} 0 & \cdots & 1 & \cdots & 0 \end{pmatrix}$ と対応．
3. V 上の線形写像 f は，$\mathbb{C}^N$ 上の線形写像 A に対応．
4. $\mathbb{C}^N$ 上の線形写像 A は，行列 A に対応．

A を f の**表現行列**という．

表現行列の形式的な定義

形式的には次のとおり．

1. 有限次元ベクトル空間 V は，$\mathbb{C}^N$ と同型．
2. V の基底 $\boldsymbol{\varphi}_i$ は，$\mathbb{C}^N$ の基底 $\boldsymbol{e}_i = {}^{\mathrm{t}}(0 \;\; \cdots \;\; 1 \;\; \cdots \;\; 0)$ と対応．
3. V 上の線形写像 f は，$\mathbb{C}^N$ 上の線形写像 A に対応．
4. $\mathbb{C}^N$ 上の線形写像 A は，行列 A に対応．

A を f の**表現行列**という．

表現行列の力

線形写像 f を考える代わりに，行列 A を考えればよい！

量子力学の公理

有限次元の状態

ここでは量子系の**有限次元である状態**について扱う．

有限次元（N 次元）ヒルベルト空間 $\mathscr{H}$ は $\mathbb{C}^N$ と同型だった（20 ページ）．

よって，$\mathscr{H} = \mathbb{C}^N$ 上のベクトルと線形写像を使って議論すればよい．

つまり，**数ベクトルと行列**を使って議論すればよい．

量子力学の公理

量子系の状態

量子系の状態とは？

量子力学的な系の状態は，次のような公理によって定義される．

公理：量子系の状態

量子系の状態は，ヒルベルト空間 $\mathscr{H}$ のベクトル $|\psi\rangle$ であらわされる．ただし

$$\langle\psi\,|\,\psi\rangle = 1$$

であり，位相のみが異なる 2 つのベクトル

$$|\psi'\rangle,\ e^{\mathrm{i}\theta}|\psi\rangle \quad （\theta \text{ は実数}）$$

は同じ状態とみなす．

量子力学の公理

測定とは？

オブザーバブルとエルミート行列

観測可能な物理量のことを**オブザーバブル**という．

公理：オブザーバブルとエルミート行列

オブザーバブルには，対応する自己共役演算子（**エルミート行列**）A が存在する．

A の固有ベクトル $|\varphi_i\rangle$ は $\mathscr{H}$ の正規直交基底になっている（$\because$ エルミート行列の性質）．

よって，$\mathscr{H}$ のすべての状態 $|\psi\rangle$ は，

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |\varphi_i\rangle \tag{*5}$$

と展開できる．

オブザーバブルの測定

以下，A **の固有ベクトルに縮退がない場合**を考える．

公理：オブザーバブルの測定

状態 $|\psi\rangle$ にある系に対してオブザーバブル A を観測すると，行列 A の固有値のいずれか 1 つが得られる．

固有値 a が得られる確率は

$$\langle\psi\,|\,\hat{P}_a\psi\rangle \tag{*6}$$

である．ただし $\hat{P}_a$ は**射影演算子**であり，縮退がない場合は

$$\hat{P}_a := |\varphi_a\rangle\langle\varphi_a|$$

（ただし $|\varphi_a\rangle$ は A の固有値 a に属する固有ベクトル）．

オブザーバブルの測定（つづき）

固有値 a が得られる確率 (*6) に，(*5) を代入すれば，

$$\langle \psi \,|\, \hat{P}_a \psi \rangle = |c_a|^2$$

という，なじみ深い式が得られる．

量子力学の公理

基底測定

オブザーバブルとエルミート行列の関係

オブザーバブル A の固有状態系 $|\varphi_i\rangle$ は，ヒルベルト空間 $\mathscr{H}$ の正規直交基底をなす．

$$\text{オブザーバブル}\,A \implies \text{エルミート行列}\,\mathrm{A} \implies \text{正規直交基底}\,|\varphi_i\rangle$$

オブザーバブルとエルミート行列の関係

オブザーバブル A の固有状態系 $|\varphi_i\rangle$ は，ヒルベルト空間 $\mathscr{H}$ の正規直交基底をなす．

$$\text{オブザーバブル } A \implies \text{エルミート行列 A} \implies \text{正規直交基底 } |\varphi_i\rangle$$

逆に，$\mathscr{H}$ の正規直交基底 $|\varphi_i\rangle$ に対して，それらを固有状態系にもつオブザーバブル A は存在するか？

つまり，**任意のエルミート行列 A に，対応するオブザーバブル A が存在するか？**

基底測定

量子力学の公理では，任意のエルミート行列 A に対して，オブザーバブル A が存在するとは限らない．

しかし，ここでは次のように仮定する．

公理ではない仮定：基底測定

$\mathscr{H}$ の任意の正規直交基底 $|\varphi_i\rangle$ を固有状態系にもつオブザーバブル A が存在する．

$\mathscr{H}$ の正規直交基底 $|\varphi_i\rangle$ に対応するオブザーバブル A の測定を，（その基底に対する）**基底測定**ということにする．

量子力学の公理

波速の収縮

波束の収縮

状態 $|\psi\rangle$ にある量子系のオブザーバブル A を測定しよう．

$|\psi\rangle$ を A の固有ベクトル $|\varphi_i\rangle$ で展開することができる：

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |\varphi_i\rangle$$

波束の収縮

オブザーバブル A の測定により，固有状態 $|\varphi_a\rangle$ に対応する値を得たとする．

このとき，測定によって，系の状態が

$$|\psi\rangle \to |\varphi_a\rangle$$

と変化する．（固有ベクトルに縮退はないとした）

スピン系

スピン

スピン 1/2 をもつ粒子のスピン状態：

$$\left.\begin{array}{l} |{\uparrow}\rangle : \text{アップスピン} \\ |{\downarrow}\rangle : \text{ダウンスピン} \end{array}\right\} \text{ヒルベルト空間 } \mathscr{H} \text{ の正規直交基底}$$

スピン

スピン 1/2 をもつ粒子のスピン状態：

$$\left.\begin{array}{l} |{\uparrow}\rangle：\text{アップスピン} \\ |{\downarrow}\rangle：\text{ダウンスピン} \end{array}\right\} \text{ヒルベルト空間 } \mathscr{H} \text{ の正規直交基底}$$

$\mathscr{H}$ は 2 次元内積空間なので，

$$|{\uparrow}\rangle \leftrightarrow {}^{\mathrm{t}}(1 \;\; 0), \quad |{\downarrow}\rangle \leftrightarrow {}^{\mathrm{t}}(0 \;\; 1)$$

という対応によって，$\mathbb{C}^2$ と同型である．

スピン

スピン 1/2 をもつ粒子のスピン状態：

$$\left.\begin{array}{l} |{\uparrow}\rangle : \text{アップスピン} \\ |{\downarrow}\rangle : \text{ダウンスピン} \end{array}\right\} \text{ヒルベルト空間 } \mathscr{H} \text{ の正規直交基底}$$

$\mathscr{H}$ は 2 次元内積空間なので，

$$|{\uparrow}\rangle \leftrightarrow {}^{\mathrm{t}}(1 \quad 0), \qquad |{\downarrow}\rangle \leftrightarrow {}^{\mathrm{t}}(0 \quad 1)$$

という対応によって，$\mathbb{C}^2$ と同型である．

スピンの重ね合わせ：

$$a|{\uparrow}\rangle + b|{\downarrow}\rangle \leftrightarrow \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

と簡潔に表現できる．

スピン系

テンソル積

多粒子系の扱い方：テンソル積

スピン 1/2 を持つ 2 粒子の状態 $|\psi\rangle = {}^{t}(a \quad b)$，$|\xi\rangle = {}^{t}(c \quad d)$ とする．

2 状態をあわせた $|\psi\rangle|\xi\rangle$ はどう表現する？

多粒子系の扱い方：テンソル積

スピン 1/2 を持つ 2 粒子の状態 $|\psi\rangle = {}^{\mathrm{t}}(a \ \ b)$，$|\xi\rangle = {}^{\mathrm{t}}(c \ \ d)$ とする．

2 状態をあわせた $|\psi\rangle|\xi\rangle$ はどう表現する？

答え：**テンソル積**

$$|\psi\rangle \otimes |\xi\rangle := \begin{pmatrix} a|\xi\rangle \\ b|\xi\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ac \\ ad \\ bc \\ bd \end{pmatrix} \tag{*7}$$

多粒子系の扱い方：テンソル積

スピン 1/2 を持つ 2 粒子の状態 $|\psi\rangle = {}^{\mathrm{t}}(a \;\; b)$，$|\xi\rangle = {}^{\mathrm{t}}(c \;\; d)$ とする．

2 状態をあわせた $|\psi\rangle|\xi\rangle$ はどう表現する？

答え：**テンソル積**

$$|\psi\rangle \otimes |\xi\rangle := \begin{pmatrix} a|\xi\rangle \\ b|\xi\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ac \\ ad \\ bc \\ bd \end{pmatrix} \tag{*7}$$

3 つ以上のテンソル積も，$|\psi\rangle \otimes \left(|\xi\rangle \otimes |\xi\rangle\right)$ のようにして定義できる．

テンソル積の空間

テンソル積空間 $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$ の基底は

$$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

の 4 つ．あるいは，これらを計算すると，

$$^{\mathrm{t}}(1\ \ 0\ \ 0\ \ 0), \quad ^{\mathrm{t}}(0\ \ 1\ \ 0\ \ 0), \quad ^{\mathrm{t}}(0\ \ 0\ \ 1\ \ 0), \quad ^{\mathrm{t}}(0\ \ 0\ \ 0\ \ 1)$$

つまり，

$$\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2 = \mathbb{C}^4$$

行列のテンソル積

行列のテンソル積も，

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \otimes \underbrace{\begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix}}_{\mathsf{B}} = \begin{pmatrix} a\mathsf{B} & b\mathsf{B} \\ c\mathsf{B} & d\mathsf{B} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a\alpha & a\beta & b\alpha & b\beta \\ a\gamma & a\delta & b\gamma & b\delta \\ c\alpha & c\beta & d\alpha & d\beta \\ c\gamma & c\delta & d\gamma & d\delta \end{pmatrix}$$

さらに，2 スピン系 $|\psi\rangle \otimes |\varphi\rangle$ に作用する演算子は，それぞれのスピンに作用する演算子（行列）$\hat{\mathscr{O}}_1, \hat{\mathscr{O}}_2$ を使うと

演算子のテンソル積の作用

$$(\hat{\mathscr{O}}_1 \otimes \hat{\mathscr{O}}_2)(|\psi\rangle \otimes |\varphi\rangle) = \hat{\mathscr{O}}_1|\psi\rangle \otimes \hat{\mathscr{O}}_2|\varphi\rangle$$

テンソル積で表せないテンソル積

$\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2 = \mathbb{C}^4$ のベクトル

$$
{}^{\mathrm{t}}(0 \;\; 1 \;\; 1 \;\; 0) = \left\{ {}^{\mathrm{t}}(1 \;\; 0) \otimes {}^{\mathrm{t}}(0 \;\; 1) \right\} + \left\{ {}^{\mathrm{t}}(0 \;\; 1) \otimes {}^{\mathrm{t}}(1 \;\; 0) \right\} \tag{*8}
$$

は，$\mathbb{C}^2$ の 2 つのベクトルを使って

$$
{}^{\mathrm{t}}(0 \;\; 1 \;\; 1 \;\; 0) = {}^{\mathrm{t}}(a \;\; b) \otimes {}^{\mathrm{t}}(c \;\; d) = {}^{\mathrm{t}}(ac \;\; ad \;\; bc \;\; bd)
$$

という形で書くことができない．

エンタングル状態

(*8) をスピン状態で書き換えれば

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|{\uparrow}\rangle_{\mathrm{A}} \otimes |{\downarrow}\rangle_{\mathrm{B}} + |{\downarrow}\rangle_{\mathrm{A}} \otimes |{\uparrow}\rangle_{\mathrm{B}}\Big) \tag{*9}$$

この状態は，$|\psi\rangle \otimes |\xi\rangle$ と書くことができない．

そのような状態を，**エンタングル状態**という．

エンタングル状態の測定

2 つのスピン A, B のエンタングル状態

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|{\uparrow}\rangle_\mathrm{A} \otimes |{\downarrow}\rangle_\mathrm{B} + |{\downarrow}\rangle_\mathrm{A} \otimes |{\uparrow}\rangle_\mathrm{B}\Big) \tag{*9}$$

に対し，粒子 A のスピンの向きを測定する．

エンタングル状態の測定

2 つのスピン A, B のエンタングル状態

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|{\uparrow}\rangle_{\mathrm{A}} \otimes |{\downarrow}\rangle_{\mathrm{B}} + |{\downarrow}\rangle_{\mathrm{A}} \otimes |{\uparrow}\rangle_{\mathrm{B}}\Big) \tag{*9}$$

に対し，粒子 A のスピンの向きを測定する．

A のスピン上向き（↑）を観測したら，状態は

$$|{\uparrow}\rangle_{\mathrm{A}} \otimes |{\downarrow}\rangle_{\mathrm{B}}$$

に収束する．

つまり，**A のスピンの向きを測定すると，B のスピンの向きも確定する．**

量子テレポーテーション

量子テレポーテーション

Alice が遠方にいる Bob に，自身が持っている状態

$$|\xi\rangle_{\mathrm{X}} = a|\uparrow\rangle + b|\downarrow\rangle$$

を転送したいとする．

$|\xi\rangle_{\mathrm{X}}$ **は未知．** つまり，Alice は a, b の値を知らない．

量子テレポーテーション

Alice が遠方にいる Bob に，自身が持っている状態

$$|\xi\rangle_{\mathrm{X}} = a|{\uparrow}\rangle + b|{\downarrow}\rangle$$

を転送したいとする．

$|\xi\rangle_{\mathrm{X}}$ **は未知．** つまり，Alice は a, b の値を知らない．

Alice は a, b を知らないまま，Bob に $|\xi\rangle_{\mathrm{X}}$ を転送することができる．

もちろん状態 $|\xi\rangle_{\mathrm{X}}$ にある粒子が Bob の居場所へテレポートするわけではなく，$|\xi\rangle$ を Bob の手元で再現できるということ．

とはいえ，状態が同じ 2 つの粒子は区別できないので，粒子がテレポートしたのと同じである．

ベル基底

$\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$ の正規直交基底として，**ベル基底**

$$
\begin{aligned}
|\Phi^+\rangle\!\rangle_{\mathrm{A,B}} &:= \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|{\uparrow}\rangle_{\mathrm{A}} \otimes |{\uparrow}\rangle_{\mathrm{B}} + |{\downarrow}\rangle_{\mathrm{A}} \otimes |{\downarrow}\rangle_{\mathrm{B}}\Big) \\
|\Phi^-\rangle\!\rangle_{\mathrm{A,B}} &:= \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|{\uparrow}\rangle_{\mathrm{A}} \otimes |{\uparrow}\rangle_{\mathrm{B}} - |{\downarrow}\rangle_{\mathrm{A}} \otimes |{\downarrow}\rangle_{\mathrm{B}}\Big) \\
|\Psi^+\rangle\!\rangle_{\mathrm{A,B}} &:= \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|{\uparrow}\rangle_{\mathrm{A}} \otimes |{\downarrow}\rangle_{\mathrm{B}} + |{\downarrow}\rangle_{\mathrm{A}} \otimes |{\uparrow}\rangle_{\mathrm{B}}\Big) \\
|\Psi^-\rangle\!\rangle_{\mathrm{A,B}} &:= \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|{\uparrow}\rangle_{\mathrm{A}} \otimes |{\downarrow}\rangle_{\mathrm{B}} - |{\downarrow}\rangle_{\mathrm{A}} \otimes |{\uparrow}\rangle_{\mathrm{B}}\Big)
\end{aligned}
$$

をとれる．

量子テレポーテーションの手順①-1

Alice と Bob が，エンタングル状態

$$|\Phi^{+}\rangle\!\rangle_{\mathrm{A,B}} := \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|{\uparrow}\rangle_{\mathrm{A}} \otimes |{\uparrow}\rangle_{\mathrm{B}} + |{\downarrow}\rangle_{\mathrm{A}} \otimes |{\downarrow}\rangle_{\mathrm{B}}\Big)$$

を所持しているとする．

これを使って，Alice が持っている未知状態

$$|\xi\rangle_{\mathrm{X}} = a|{\uparrow}\rangle + b|{\downarrow}\rangle$$

を Bob に転送する．

量子テレポーテーションの手順①-2

$\mathrm{X}, \mathrm{A}, \mathrm{B}$ を合わせた系の状態は

$$
\begin{aligned}
|\xi\rangle_{\mathrm{X}} \otimes |\Phi^+\rangle\!\rangle_{\mathrm{A,B}} = \frac{1}{2}|\Phi^+\rangle\!\rangle_{\mathrm{X,A}} \otimes \left(a|{\uparrow}\rangle_{\mathrm{B}} + b|{\downarrow}\rangle_{\mathrm{B}}\right) \\
+ \frac{1}{2}|\Phi^-\rangle\!\rangle_{\mathrm{X,A}} \otimes \left(a|{\uparrow}\rangle_{\mathrm{B}} - b|{\downarrow}\rangle_{\mathrm{B}}\right) \\
+ \frac{1}{2}|\Psi^+\rangle\!\rangle_{\mathrm{X,A}} \otimes \left(b|{\uparrow}\rangle_{\mathrm{B}} + a|{\downarrow}\rangle_{\mathrm{B}}\right) \\
+ \frac{1}{2}|\Psi^-\rangle\!\rangle_{\mathrm{X,A}} \otimes \left(-b|{\uparrow}\rangle_{\mathrm{B}} + a|{\downarrow}\rangle_{\mathrm{B}}\right)
\end{aligned}
\tag{*10}
$$

と書ける．

量子テレポーテーションの手順①

Alice は系 XA に対し，ベル基底による測定を行う．

すると，状態 $|\Phi^+\rangle\!\rangle, |\Phi^-\rangle\!\rangle, |\Psi^+\rangle\!\rangle, |\Psi^-\rangle\!\rangle$ のどれかをそれぞれ 1/4 の確率で観測する．

(*10) より，Alice が観測した系 XA の状態によって，Bob のもつ系 B の状態が確定する．

Alice (XA)	Bob (B)
$\lvert\Phi^+\rangle\!\rangle$	$a\lvert\uparrow\rangle + b\lvert\downarrow\rangle$
$\lvert\Phi^-\rangle\!\rangle$	$a\lvert\uparrow\rangle - b\lvert\downarrow\rangle$
$\lvert\Psi^+\rangle\!\rangle$	$b\lvert\uparrow\rangle + a\lvert\downarrow\rangle$
$\lvert\Psi^-\rangle\!\rangle$	$-b\lvert\uparrow\rangle + a\lvert\downarrow\rangle$

このとき，一瞬で（光速を超えて）Bob の状態が収束する．

量子テレポーテーションの手順②-1

Alice は何らかの手段（**古典通信**）によって，自分がどの状態を観測したか Bob に伝える．

Bob は系 B に対して，次のような操作を行う．

1. Alice が $|\Phi^+\rangle\rangle$ を観測した場合，何もしない．
2. Alice が $|\Phi^-\rangle\rangle$ を観測した場合，$|\downarrow\rangle$ の符号を反転する．
3. Alice が $|\Psi^+\rangle\rangle$ を観測した場合，$|\uparrow\rangle$ と $|\downarrow\rangle$ の係数を入れ替える．
4. Alice が $|\Psi^-\rangle\rangle$ を観測した場合，$|\uparrow\rangle$ と $|\downarrow\rangle$ の係数を入れ替え，さらに $|\uparrow\rangle$ と $|\downarrow\rangle$ の係数を入れ替える．

この操作により，系 B の状態が $|\xi\rangle = a|\uparrow\rangle + b|\downarrow\rangle$ になる．

量子テレポーテーションの手順②-2

具体的には，Bob は

1. Alice が $|\Phi^+\rangle\rangle$ を観測した場合，何もしない．
2. Alice が $|\Phi^-\rangle\rangle$ を観測した場合，系 B にユニタリ変換 σ^z を施す．
3. Alice が $|\Psi^+\rangle\rangle$ を観測した場合，系 B にユニタリ変換 σ^x を施す．
4. Alice が $|\Psi^-\rangle\rangle$ を観測した場合，系 B にユニタリ変換 $\sigma^z\sigma^x = \mathrm{i}\sigma^y$ を施す．

ただし，σ^i はパウリ行列として表される：

$$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad (*11)$$

量子テレポーテーションの注意

Alice が持っていた状態 $|\xi\rangle_{\mathrm{X}}$ は，手順の途中（Alice による系 XA の測定）で破壊されている．

この手順により，**超光速で Alice から Bob に情報が伝わるわけではない**．

Bob が状態 $|\xi\rangle$ を得ることができるのは，Alice から観測結果を**光速以下の速度で**伝えられた後である．