

デモ

2025 年 2 月 18 日

目次

なぜ線形代数？

ヒルベルト空間って？

ベクトル

内積

完備性

ヒルベルト空間

ヒルベルト空間から \mathbb{C}^N へ

同型

線形写像

表現行列

量子力学の公理

目次 (つづき)

量子系の状態

測定とは？

スピン系

テンソル積

量子テレポーテーション

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？

(時間に依存しない) シュレーディンガー方程式

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

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

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

は (*1) の解になっている。

⇒ (*1) は線型方程式。

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

ヒルベルト空間って？

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

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

とする.

このとき,

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

もベクトル.

\mathbf{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．

$$1. (\psi + \varphi) + \xi = \psi + (\varphi + \xi)$$

$$2. \psi + \mathbf{0} = \mathbf{0} + \psi = \psi$$

$$3. \psi + (-\psi) = \mathbf{0}$$

$$4. \psi + \varphi = \varphi + \psi$$

$$5. c(\psi + \varphi) = c\psi + c\varphi$$

$$6. (a + b)\psi = a\psi + b\psi$$

$$7. (ab)\psi = a(b\psi)$$

$$8. 1\psi = \psi$$

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．

⇒ 5 ページで考えた ψ もベクトル．

- N 次の縦ベクトル ${}^t(a_1 \ a_2 \ \cdots \ a_N)$
- 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 $\varphi(x_1, \dots, x_N) \leftarrow$ **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.

縦ベクトルの内積

$\mathbf{x}, \mathbf{y} : N$ 次元ベクトル

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle := \sum_{i=1}^N x_i^* y_i \quad (*2)$$

を**内積**という.

ベクトルの長さ (**ノルム**) は,

$$\|\mathbf{x}\| := \sqrt{\langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle} \quad (*3)$$

注意

(*3) の右辺の $\sqrt{\quad}$ 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. $\langle \psi, a\varphi + b\xi \rangle = a\langle \psi, \varphi \rangle + b\langle \psi, \xi \rangle$ (線形性)
2. $\langle \psi, \varphi \rangle = \langle \varphi, \psi \rangle^*$
3. $\langle \psi, \psi \rangle \geq 0$ であり, $\langle \psi, \psi \rangle = 0 \iff \psi = 0$ (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.

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：

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

シュレーディンガー方程式の解はベクトル.

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

$$\langle \psi, \xi \rangle := \iiint \psi^*(\mathbf{r}) \xi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (*4)$$

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

「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 ψ_1, ψ_2, \dots が ψ_* に収束するとは、

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|\psi_* - \psi_n\| = 0$$

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 ψ_1, ψ_2, \dots が**コーシー列**であるとは,

$$\lim_{m,n \rightarrow \infty} \|\psi_m - \psi_n\| = 0$$

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

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|\psi_* - \psi_n\| = 0$$

となる V のベクトル ψ_* 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

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 (ψ, ξ, \dots)
- 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

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

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!

\implies 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

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

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

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 $\frac{d^n}{dx^n}$ ，積分演算子 $\int dx$
- ベクトル ψ を固定した時の内積 $\langle \psi, \xi \rangle$
- 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 $f(x) = a_2x^2 + a_1x + a_0$ を微分する演算子： $\hat{D} := \frac{d}{dx}$.

もちろん,

$$(\hat{D}f)(x) = \frac{df}{dx} = 2a_2x + a_1$$

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

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

D を**表現行列**という.

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 φ_i は, \mathbb{C}^N の基底 $\mathbf{e}_i = {}^t(0 \ \cdots \ 1 \ \cdots \ 0)$ 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

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 \mathcal{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

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

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.

オブザーバブルには, 対応する**エルミート演算子 (行列)** A が存在する.

A の固有ベクトル $|\varphi_i\rangle$ は \mathcal{H} の正規直交基底になっている.

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

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |\varphi_i\rangle \quad (*5)$$

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

$$\langle\psi|\hat{P}_a\psi\rangle \quad (*6)$$

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)。

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.

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

$$|\psi\rangle \rightarrow |\varphi_a\rangle$$

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：

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

\mathcal{H} は 2 次元内積空間なので、

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

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 $|\psi\rangle = {}^t(a \ b)$, $|\xi\rangle = {}^t(c \ d)$ 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

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

3 つ以上のテンソル積も, $|\psi\rangle \otimes (|\xi\rangle \otimes |\xi\rangle)$ 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,

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

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，

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \otimes \underbrace{\begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix}}_B = \begin{pmatrix} aB & bB \\ cB & dB \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a\alpha & a\beta & b\alpha & b\beta \\ a\gamma & a\delta & b\gamma & b\delta \\ c\alpha & c\beta & d\alpha & d\beta \\ c\gamma & c\delta & d\gamma & d\delta \end{pmatrix}$$

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

演算子のテンソル積の作用

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

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

$${}^t(0 \ 1 \ 1 \ 0) = \{ {}^t(1 \ 0) \otimes {}^t(0 \ 1) \} + \{ {}^t(0 \ 1) \otimes {}^t(1 \ 0) \} \quad (*8)$$

は, \mathbb{C}^2 の 2 つのベクトルを使って

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

という形で書くことができない.

(*8) をスピン状態で書き換えれば

$$|\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle + |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle \quad (*9)$$

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

$$|\uparrow\rangle_A \otimes |\downarrow\rangle_B + |\downarrow\rangle_A \otimes |\uparrow\rangle_B \quad (*9)$$

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

$$|\uparrow\rangle_A \otimes |\downarrow\rangle_B$$

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

$$|\xi\rangle_X = a|\uparrow\rangle + b|\downarrow\rangle$$

を転送したいとする.

$|\xi\rangle_X$ 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 $|\xi\rangle_X$ を転送することができる.

もちろん状態 $|\xi\rangle_X$ 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.

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

$$|\Phi^+\rangle_{A,B} := \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_A \otimes |\uparrow\rangle_B + |\downarrow\rangle_A \otimes |\downarrow\rangle_B)$$

$$|\Phi^-\rangle_{A,B} := \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_A \otimes |\uparrow\rangle_B - |\downarrow\rangle_A \otimes |\downarrow\rangle_B)$$

$$|\Psi^+\rangle_{A,B} := \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_A \otimes |\downarrow\rangle_B + |\downarrow\rangle_A \otimes |\uparrow\rangle_B)$$

$$|\Psi^-\rangle_{A,B} := \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_A \otimes |\downarrow\rangle_B - |\downarrow\rangle_A \otimes |\uparrow\rangle_B)$$

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

$$|\Phi^+\rangle_{A,B} := \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\rangle_A \otimes |\uparrow\rangle_B + |\downarrow\rangle_A \otimes |\downarrow\rangle_B \right)$$

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

$$|\xi\rangle_X = a|\uparrow\rangle + b|\downarrow\rangle$$

を Bob に転送する．

量子テレポーテーションの手順①-2

X, A, B を合わせた系の状態は

$$\begin{aligned} |\xi\rangle_X \otimes |\Phi^+\rangle_{A,B} &= \frac{1}{2} |\Phi^+\rangle_{X,A} \otimes (a|\uparrow\rangle_B + b|\downarrow\rangle_B) \\ &+ \frac{1}{2} |\Phi^-\rangle_{X,A} \otimes (a|\uparrow\rangle_B - b|\downarrow\rangle_B) \\ &+ \frac{1}{2} |\Psi^+\rangle_{X,A} \otimes (b|\uparrow\rangle_B + a|\downarrow\rangle_B) \\ &+ \frac{1}{2} |\Psi^-\rangle_{X,A} \otimes (-b|\uparrow\rangle_B + a|\downarrow\rangle_B) \end{aligned} \quad (*10)$$

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 $|\Phi^+\rangle, |\Phi^-\rangle, |\Psi^+\rangle, |\Psi^-\rangle$ 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)
$ \Phi^+\rangle$	$a \uparrow\rangle + b \downarrow\rangle$
$ \Phi^-\rangle$	$a \uparrow\rangle - b \downarrow\rangle$
$ \Psi^+\rangle$	$b \uparrow\rangle + a \downarrow\rangle$
$ \Psi^-\rangle$	$-b \uparrow\rangle + a \downarrow\rangle$

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 $|\Phi^+\rangle$ を観測した場合、何もしない。
2. Alice が $|\Phi^-\rangle$ を観測した場合、 $|\downarrow\rangle$ の符号を反転する。
3. Alice が $|\Psi^+\rangle$ を観測した場合、 $|\uparrow\rangle$ と $|\downarrow\rangle$ の係数を入れ替える。
4. Alice が $|\Psi^-\rangle$ 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 $|\Phi^+\rangle$ を観測した場合，何もしない．
2. Alice が $|\Phi^-\rangle$ を観測した場合，系 B にユニタリ変換 σ^z を施す．
3. Alice が $|\Psi^+\rangle$ を観測した場合，系 B にユニタリ変換 σ^x を施す．
4. Alice が $|\Psi^-\rangle$ を観測した場合，系 B にユニタリ変換 $\sigma^z\sigma^x = i\sigma^y$ を施す．

ただし， σ^i はパウリ行列として表される：

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

量子テレポーテーションの注意

Alice が持っていた状態 $|\xi\rangle_X$ 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。