量子プログラミングのための量子力学入門

音との比較で、重ね合わせとトンネル効果を理解する

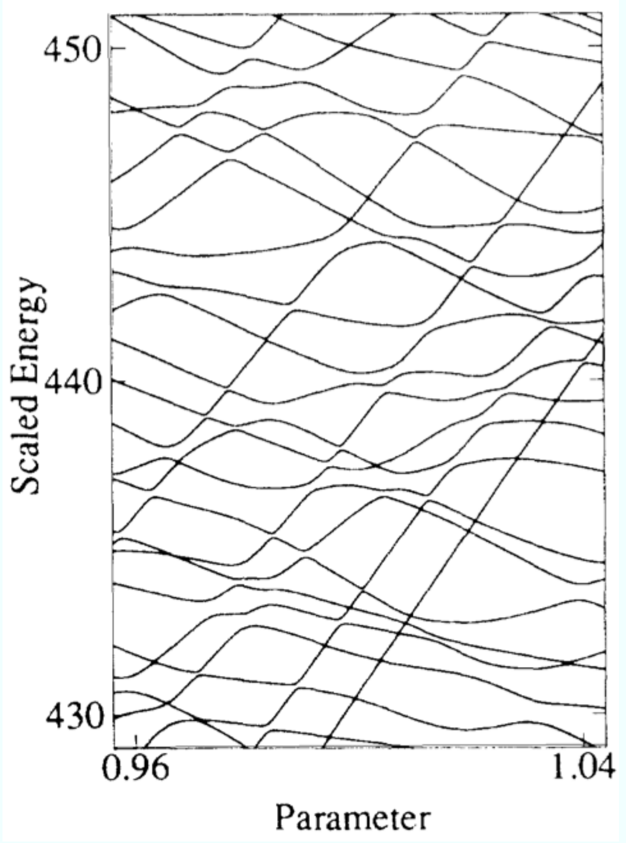
と、数式

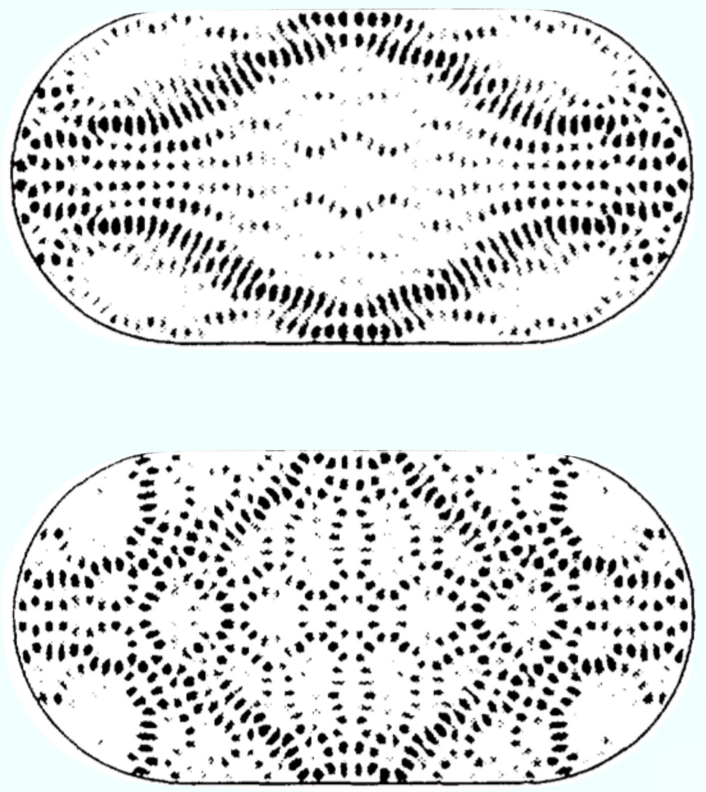
2024年11月20日

高見　利也

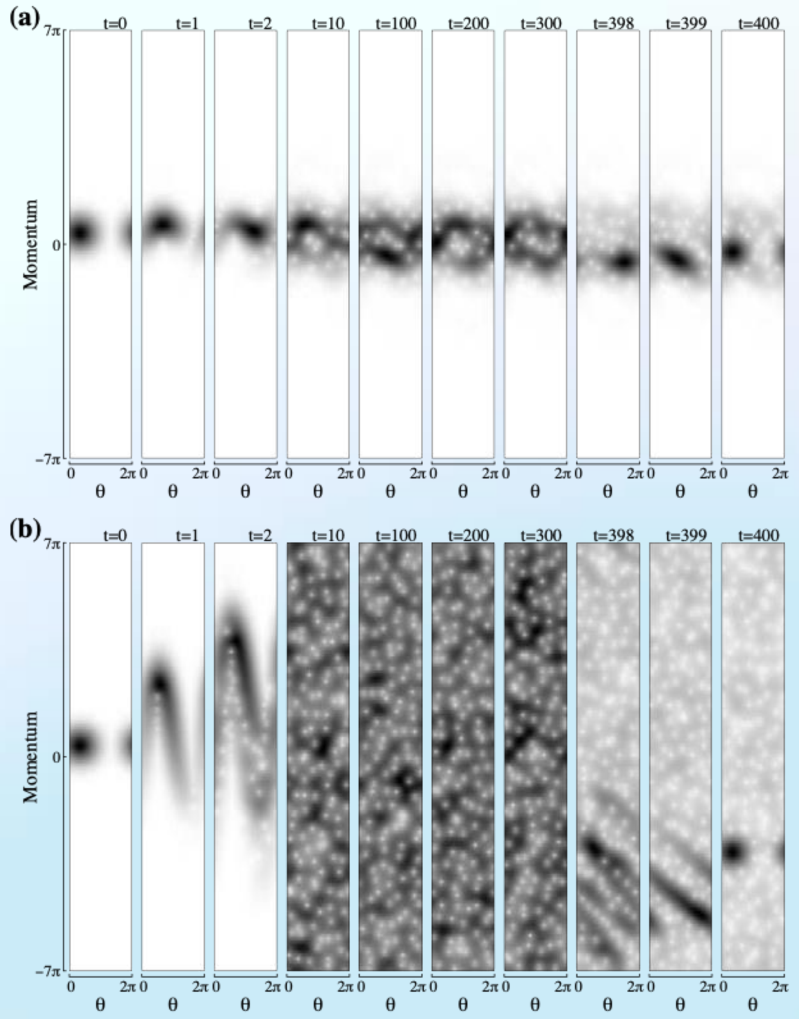
自己紹介

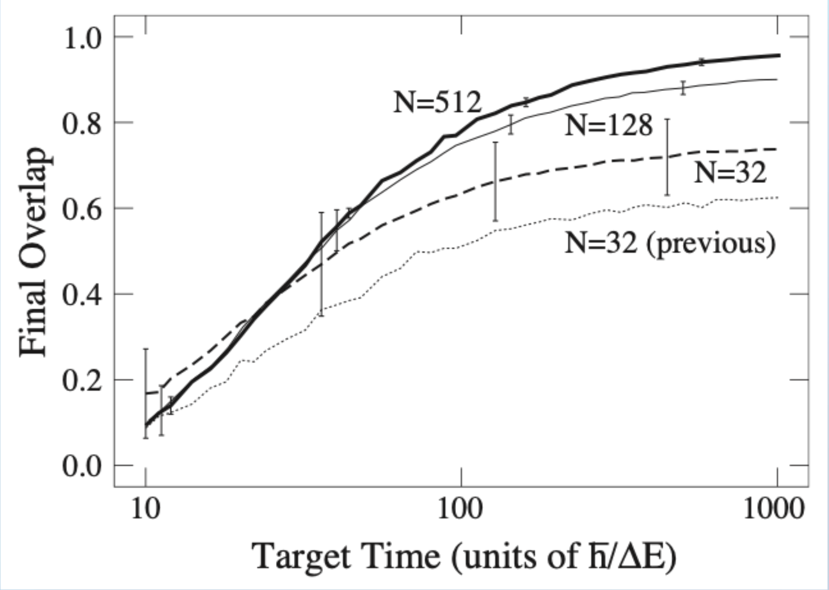
my winding life





- 氏名：高見　利也
- 所属：大分大学　理工学部　知能情報システム・DX人材育成基盤
- 生まれ：兵庫県　（その後は、京都、愛知、福岡、大分の順）
- 趣味：はしること（早朝とか休みの日は、別府湾あたりを・・・）
- 現在の専門：群れの動力学、時系列分析（若い頃の専門は、量子カオス）





今日の内容

量子プログラミングのための量子力学入門

- 量子力学のはじまり
  - 「つぶつぶ」から「波」へ
- 量子力学の性質
  - 重ね合わせの原理
  - トンネル効果
- 量子ビットと量子ゲート

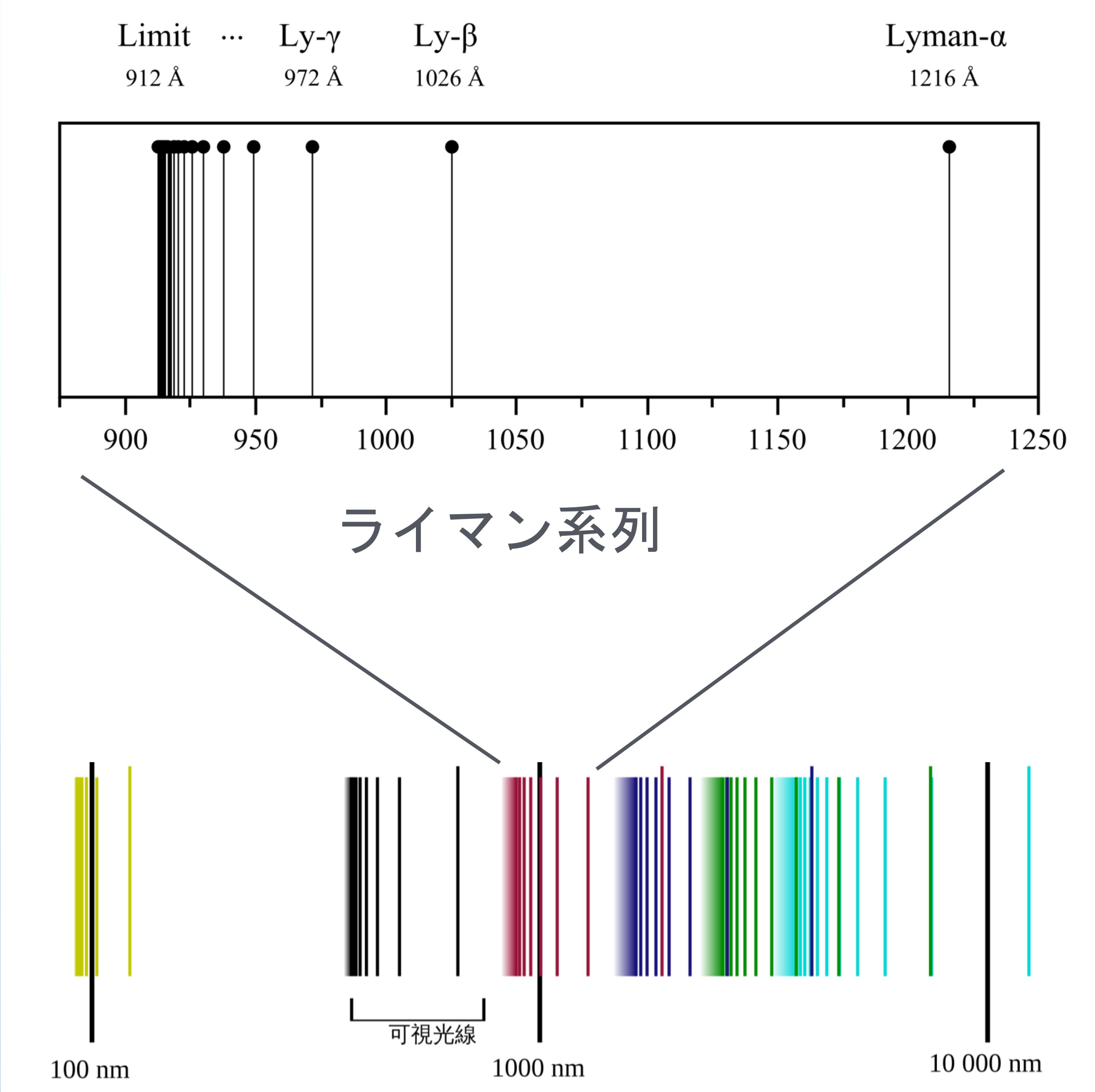
（注意点）この解説では、歴史的な順序や数学的な厳密性よりもわかりやすさを第一に進めます。
高校までの数学と、ちょっとした想像力だけで量子の世界を理解しようという試みです。

ボーアの水素原子模型(1913年)

量子性

量子力学の育ての親：　ニールス・ボーア

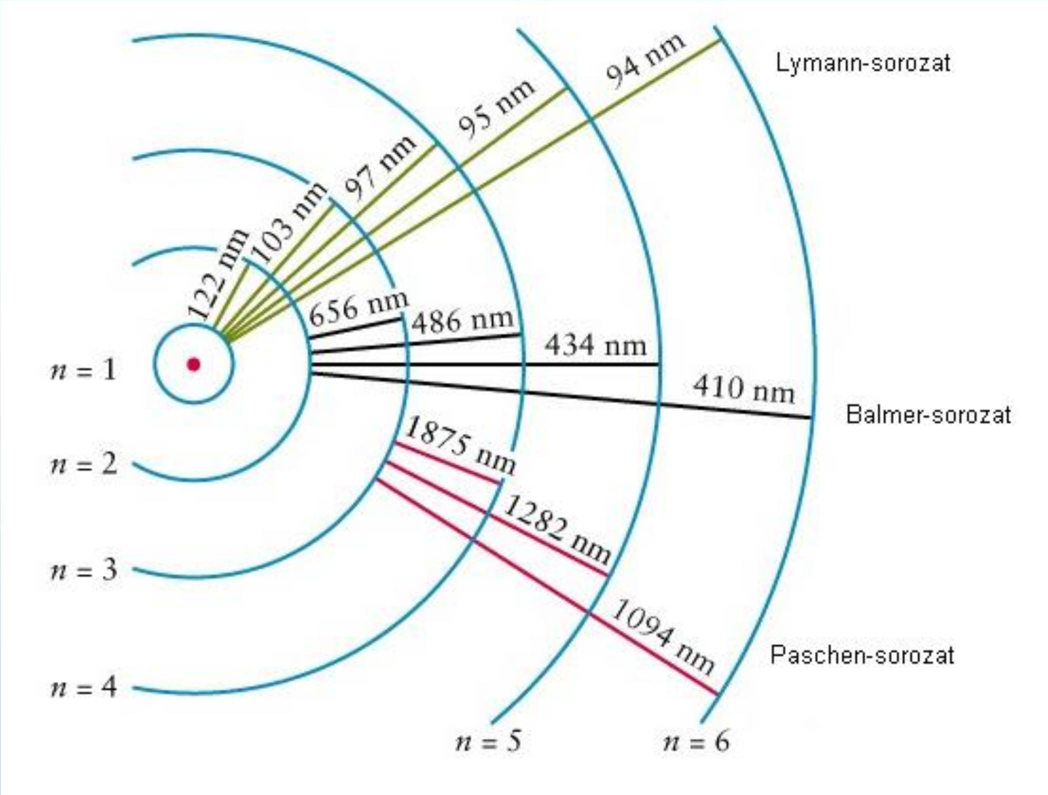
- 離散スペクトルを説明するための模型：$\dfrac{1}{\lambda} = \dfrac{E_n - E_m}{hc} = R_\infty \left(\dfrac{1}{m^2} - \dfrac{1}{n^2} \right)$



水素原子のスペクトル

h：プランク定数（エネルギー量子)

c：光の速さ（3.0×10^8 (m/s)）



光は軌道間の遷移で生まれる

ミクロの世界は
つぶつぶである

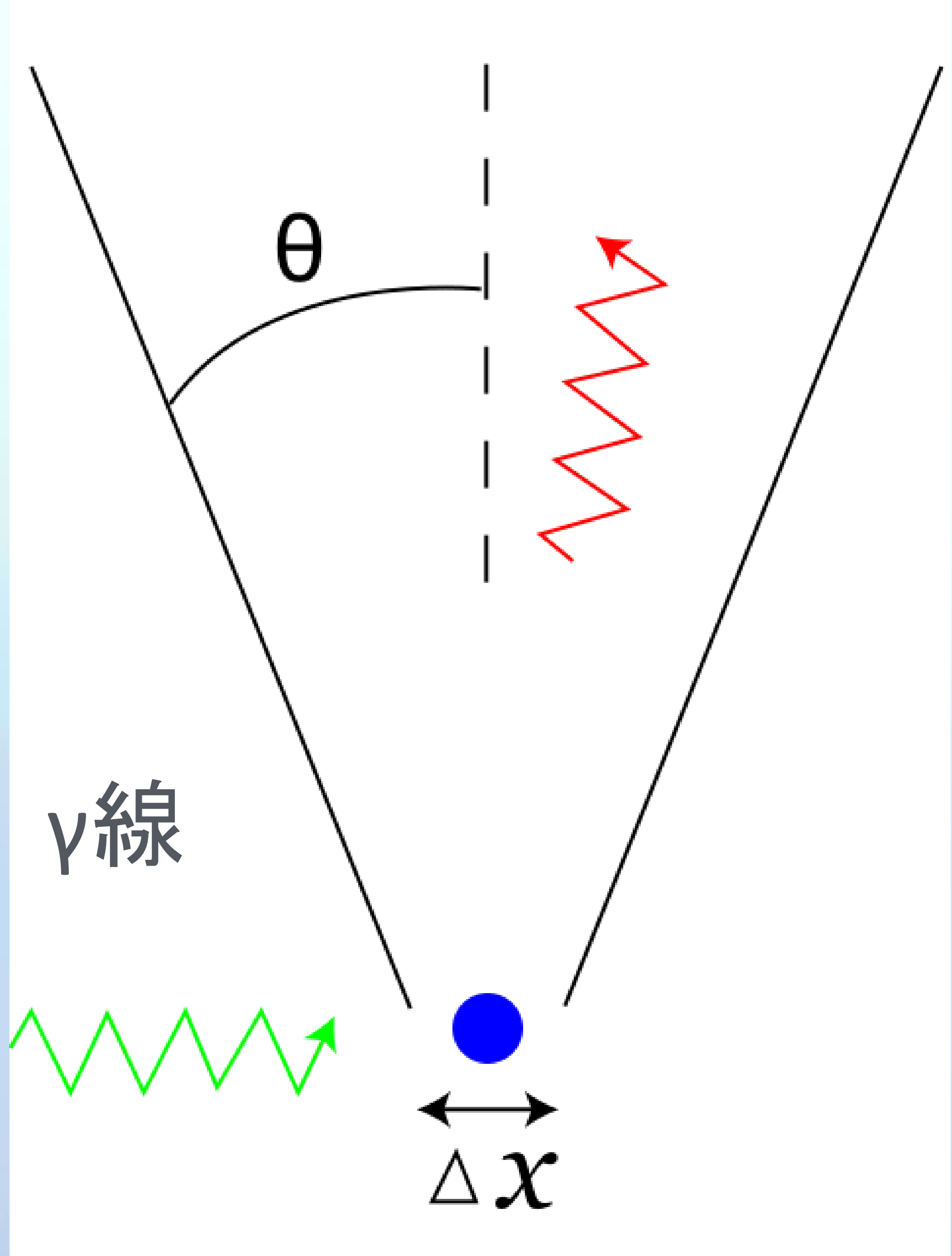
ニールス・ボーア (1885-1962)

不確定性原理(1927年)

ヴェルナー・ハイゼンベルク

ミクロ世界の論理

- 思考実験：小さな粒子を「見る」ことを想像すると？
  - 粒子は小さいため、γ線(可視光より周波数の高い光)を使う必要がある。
  - γ線はエネルギーが高く、粒子を跳ね飛ばしてしまう(非破壊測定の困難)



$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

Δx：位置の測定誤差

Δp：運動量の測定誤差

$\hbar$：プランクのエネルギー量子の 1/2π 倍

ヴェルナー・ハイゼンベルク
(1901-1976)

この厳密測定の不可能性は、実験精度の不備ではなく、ミクロの世界においては原理的なものと考えられる。

量子力学のはじまり：正準交換関係

量子性はどこから来たか？

$$xp - px = i\hbar$$

i ：虚数単位 ($i^2 = -1$)

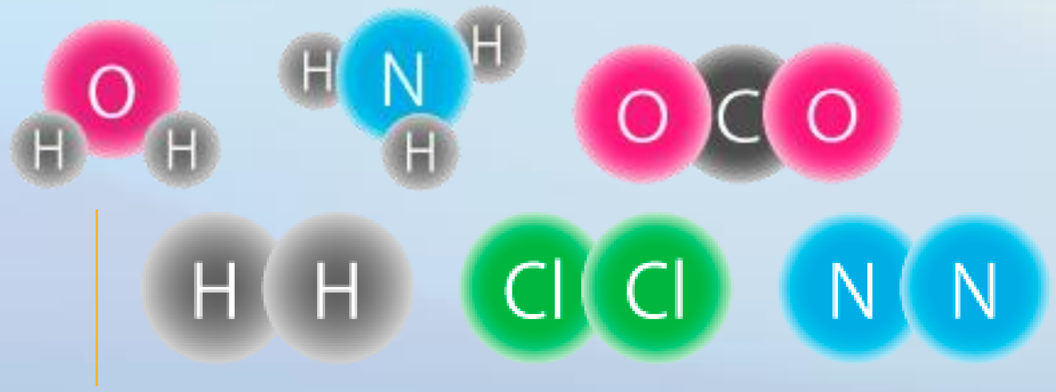
$\hbar$：プランク定数 [6.626×10^{-34} (J·s)] / 2π

x：粒子の位置、p：運動量＝[質量] x [速度]

量子力学の世界：

$\hbar$ の有限性が意味を持つぐらい

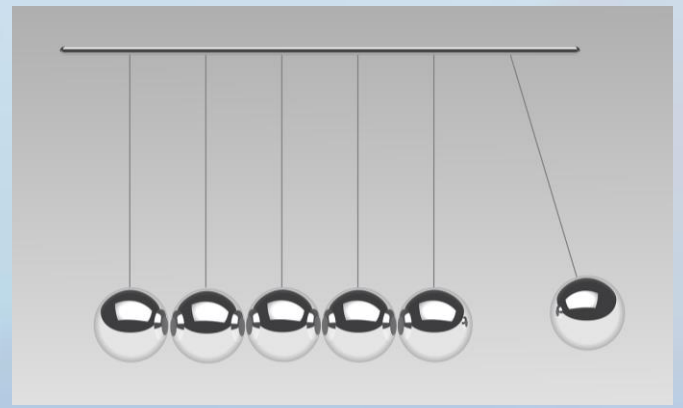
小さなスケールの世界



我々が知っている通常の世界：

$\hbar \approx 0$ としても問題ないぐらい

大きなスケールの世界



演算子と行列

普通の数では、交換関係の式は成立しない

- では、$xp - px \neq 0$ が成立するような x や p は、いったい何者？
  - **「演算子」**： $x = x, \quad p = -i\hbar\dfrac{d}{dx}$
  - **「行列」**： 積に対して可換ではないという性質

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots \\ 1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \ddots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \ddots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}, \quad p = i\sqrt{\frac{\hbar}{2}}\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 & \cdots \\ 1 & 0 & -\sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{3} & \ddots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \ddots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}$$

交換関係を満たす行列の例：ハイゼンベルク、ボルン、ヨルダンの行列力学より

演算子の場合の交換関係の計算

演算子　＝　後ろのモノに作用するもの

- $x = x, p = -i\hbar \dfrac{d}{dx}$　の時に、交換関係がどうなるか計算してみます。

$$(xp - px)f(x) = \left(-i\hbar x \frac{d}{dx} + i\hbar \frac{d}{dx} x\right) f(x)$$

$$= -i\hbar x \frac{df(x)}{dx} + i\hbar \frac{d}{dx}[xf(x)]$$

$$= \cancel{-i\hbar x \frac{df(x)}{dx}} + i\hbar f(x) + \cancel{i\hbar x \frac{df(x)}{dx}}$$

$$= i\hbar f(x)$$

(参考) 行列の場合の交換関係の計算

行列　＝　ベクトルに対する演算子

- 行列 x と p の n 行 m 列要素を X_{nm}、P_{nm} と書くことにすると($n, m = 1,2,3,\cdots$)

$$X_{nm} = \delta_{n,m+1}\sqrt{\frac{m\hbar}{2}} + \delta_{n+1,m}\sqrt{\frac{n\hbar}{2}}, \qquad P_{nm} = i\delta_{n,m+1}\sqrt{\frac{m\hbar}{2}} - i\delta_{n+1,m}\sqrt{\frac{n\hbar}{2}},$$

- 行列の計算方法に従うと

$$(XP)_{nm} = \sum_{k=1}^{\infty} X_{nk}P_{km} = \sum_{k=1}^{\infty}\left(\delta_{n,k+1}\sqrt{\frac{k\hbar}{2}} + \delta_{n+1,k}\sqrt{\frac{n\hbar}{2}}\right)\left(i\delta_{k,m+1}\sqrt{\frac{m\hbar}{2}} - i\delta_{k+1,m}\sqrt{\frac{k\hbar}{2}}\right)$$
$$= \frac{i\hbar}{2}\delta_{nm} + \frac{i\hbar}{2}\sqrt{m(m+1)}\delta_{n,m+2} - \frac{i\hbar}{2}\sqrt{n(n+1)}\delta_{n+2,m}$$

$$(PX)_{nm} = \sum_{k=1}^{\infty} P_{nk}X_{km} = \sum_{k=1}^{\infty}\left(i\delta_{n,k+1}\sqrt{\frac{k\hbar}{2}} - i\delta_{n+1,k}\sqrt{\frac{n\hbar}{2}}\right)\left(\delta_{k,m+1}\sqrt{\frac{m\hbar}{2}} + \delta_{k+1,m}\sqrt{\frac{k\hbar}{2}}\right)$$
$$= -\frac{i\hbar}{2}\delta_{nm} + \frac{i\hbar}{2}\sqrt{m(m+1)}\delta_{n,m+2} - \frac{i\hbar}{2}\sqrt{n(n+1)}\delta_{n+2,m}$$

よって、$(XP)_{nm} - (PX)_{nm} = i\hbar\delta_{nm}$ (ただし、右辺は対角行列)

その演算子が作用する関数とは？

運動量演算子の固有関数を求めてみる

- 運動量を表す微分演算子： $p = -i\hbar \dfrac{d}{dx}$
- 線形演算子 p $\leftrightarrow$ 固有関数 $\varphi(x)$、固有値 p'

$$-i\hbar \frac{d}{dx}\varphi(x) = p'\varphi(x)$$

- これを解くと(高校の数学は超えますが)

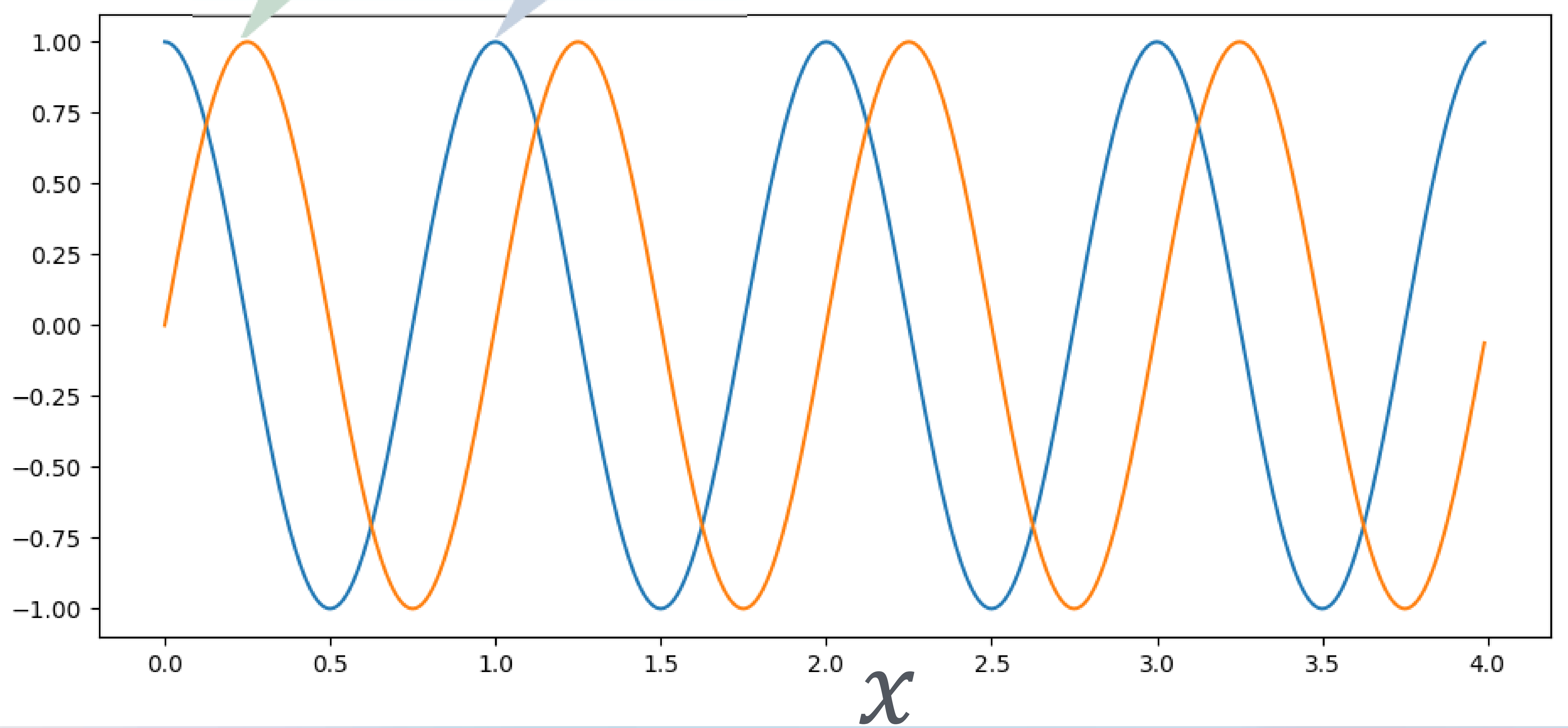
$$\varphi(x) \propto \exp\left(-\frac{p'x}{i\hbar}\right)$$

ド・ブロイ波長

$\dfrac{2\pi\hbar}{p'}$ 波長

虚部

実部



x

シュレーディンガー方程式(1926年) 動く波

波動関数は、どんなふうに動くのか？

• ハミルトン・ヤコビ方程式：

$$\frac{\partial S(x,t)}{\partial t} = H\left(x, \frac{\partial S}{\partial x}, t\right)$$

・ド・ブロイ波(1924年)：

$$\nu = \frac{E}{h}, \lambda = \frac{h}{p}$$

エルヴィン・シュレーディンガー
(1887-1961)

エネルギー関数：

$$H(x,p) = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

類推

実現

あらゆる物質は、振動数 ν と波長 λ を持つ波である

波動関数が従う偏微分方程式：

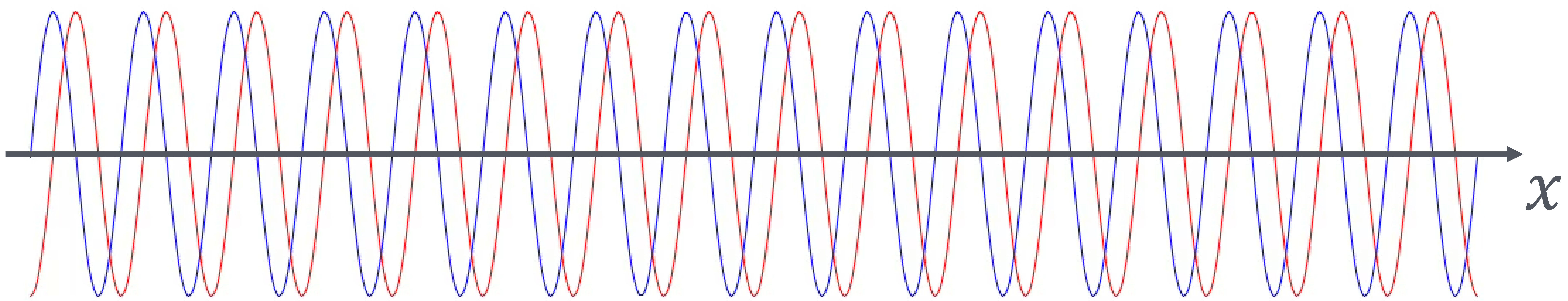
$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right]\psi(x,t)$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = H\left(x, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, t\right)\psi(x,t)$$

波動関数の動き

シュレーディンガー方程式に従って動かしてみる

- まずは、運動量固有状態 $\varphi(x) = \exp\left(-\frac{p'x}{i\hbar}\right)$ の動き：



- 右 ($p' > 0$ の場合) に一定の速度で動く
- でも、そもそもこの波は、何を表してるんだろう？

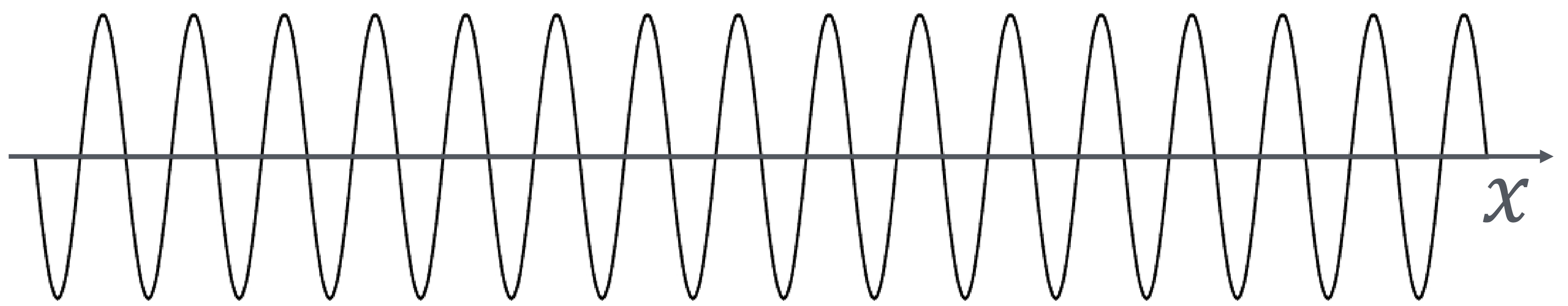
波動関数の意味

確率の波とは？

- 通常の波が表現するものは？
  - 水の波(水面波)は**水面の高さ**を表現
  - 音波は、空気中の**音圧**の値を表現

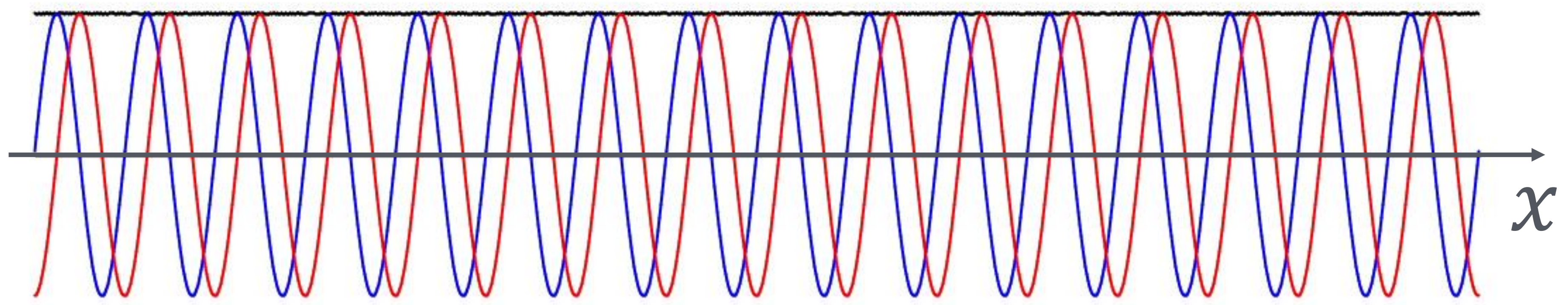
- 量子力学のコペンハーゲン解釈：
  - 波動関数は粒子の**存在確率**を表す
  - **観測**によって、波動関数は**特定の状態**に収縮する

音波



単一周波数

量子波



運動量固有状態

波動関数の意味

確率の波とは？

- 通常の波が表現するものは？
  - 水の波(水面波)は**水面の高さ**を表現
  - 音波は、空気中の**音圧**の値を表現

- 量子力学のコペンハーゲン解釈：
  - 波動関数は粒子の**存在確率**を表す
  - **観測**によって、波動関数は**特定の状態**に収縮する

音波

単一周波数

量子波

運動量固有状態

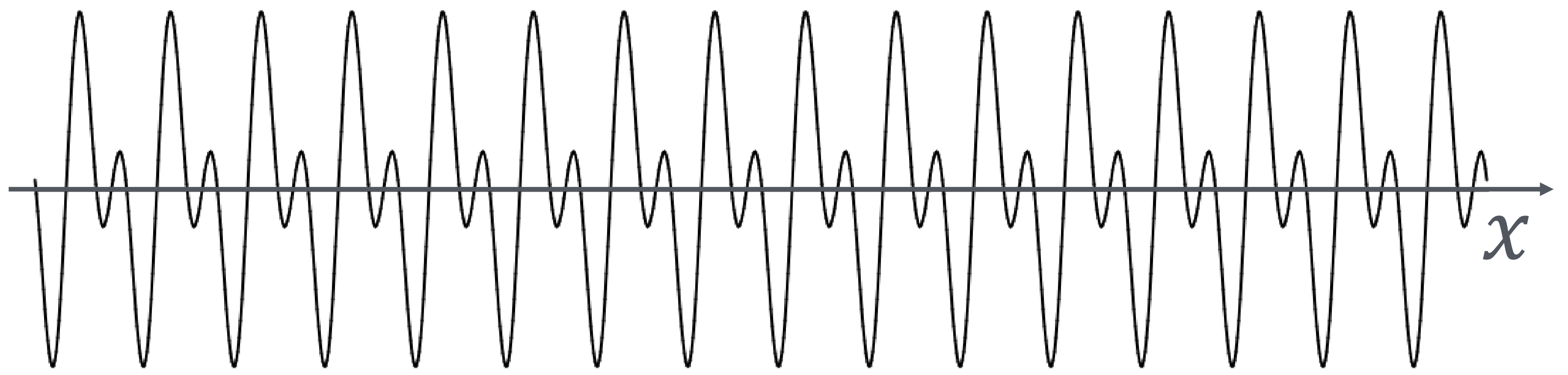
音波と量子波の比較

確率波は音の伝わり方とどう違うのか？

- 空気中の音の**波形は変化しない**
  ＝ 音速は周波数依存性(分散性)を持たない

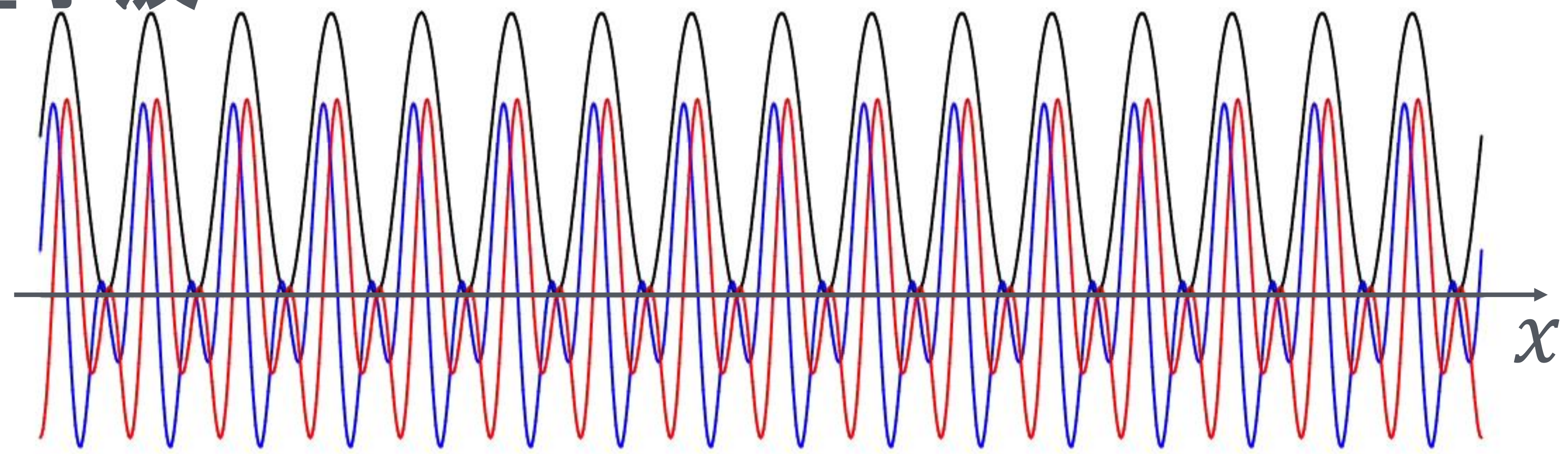
- 量子波は、形が**変化する(分散性がある)**
  ↑もともとド・ブロイ波は、
  運動量(速度)に依存する周波数。

音波



二つの周波数

量子波



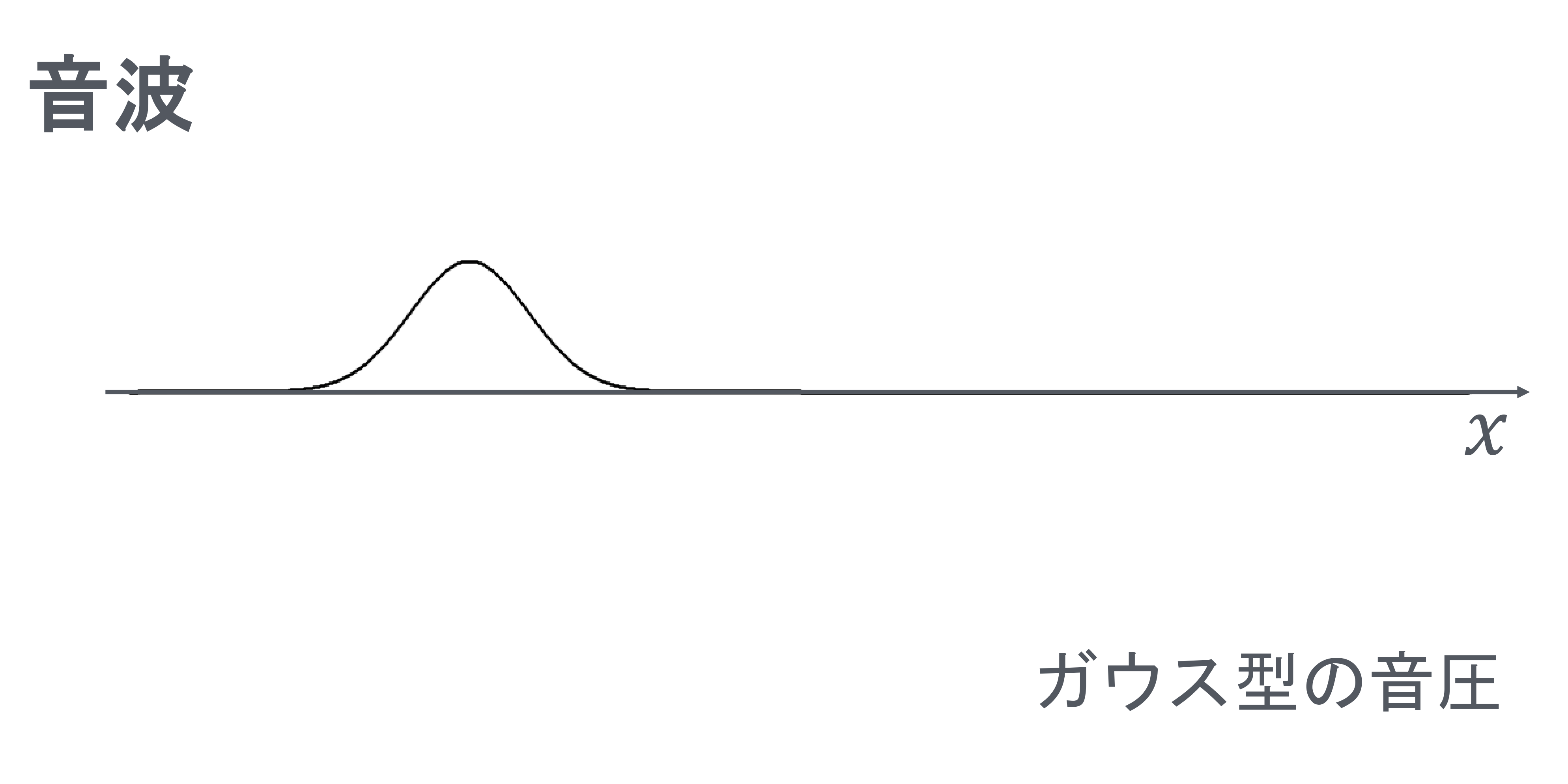
運動量の違う二つの粒子

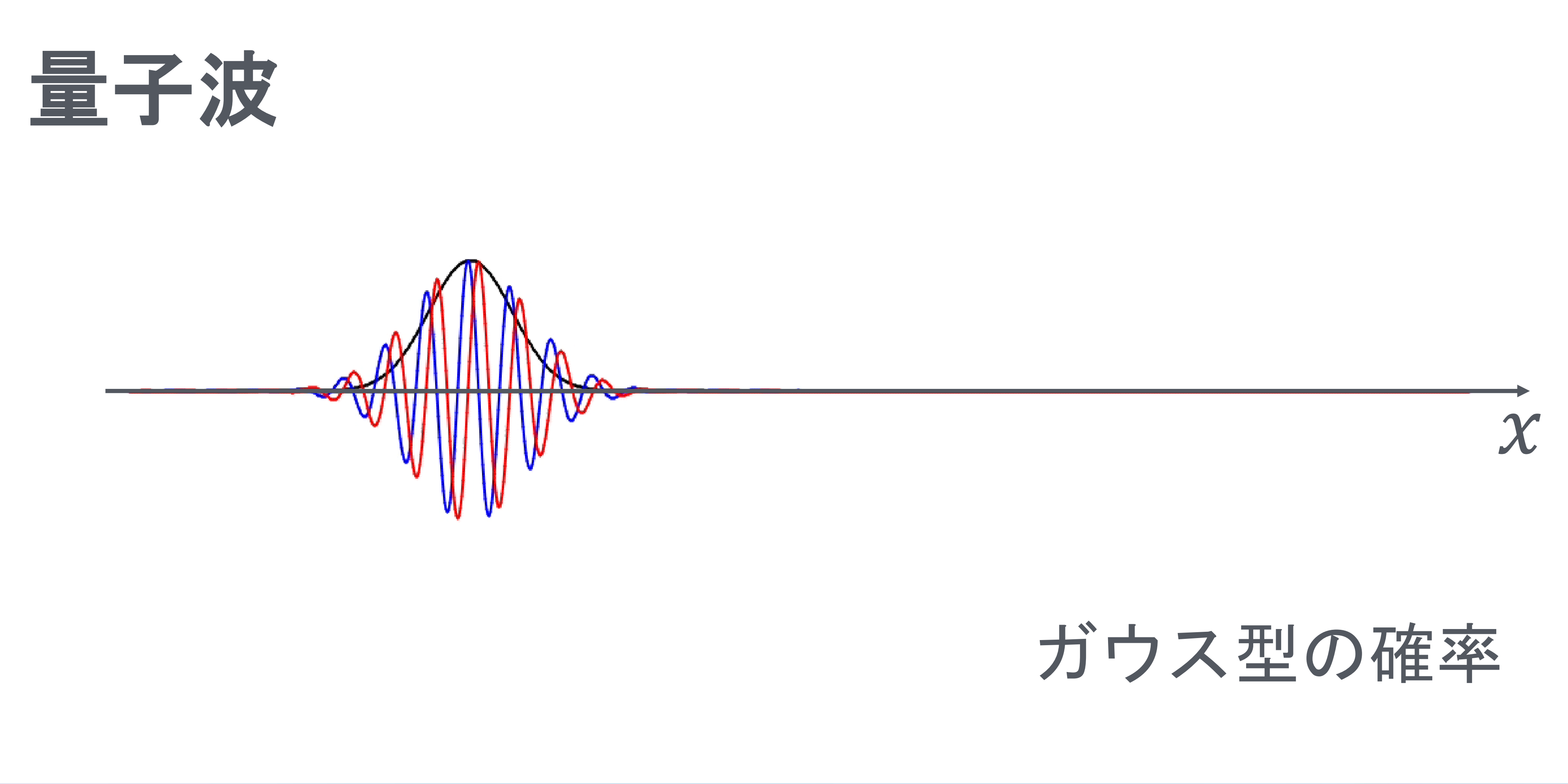
音波と量子波の比較

確率波は音の伝わり方とどう違うのか？

- 空気中の音の**波形は変化しない**
  ＝ 音速は周波数依存性(分散性)を持たない

- 量子波は、形が**変化する(分散性がある)**
  ↑もともとド・ブロイ波は、
  運動量(速度)に依存する周波数。





「量子力学のはじまり」のまとめ

多すぎる数式で見通しを見失わないために

- 20世紀初頭の実験事実：黒体輻射、分光学
- 不確定性原理
- 交換関係、非可換代数
- シュレーディンガー方程式
- コペンハーゲン解釈

量子力学の性質(1)：重ね合わせ

量子波の干渉とコヒーレンス

- 音波も量子波も線形波なので、重ね合わせができます：波としては当たり前の性質

音波

音の波の重ね合わせ

量子波

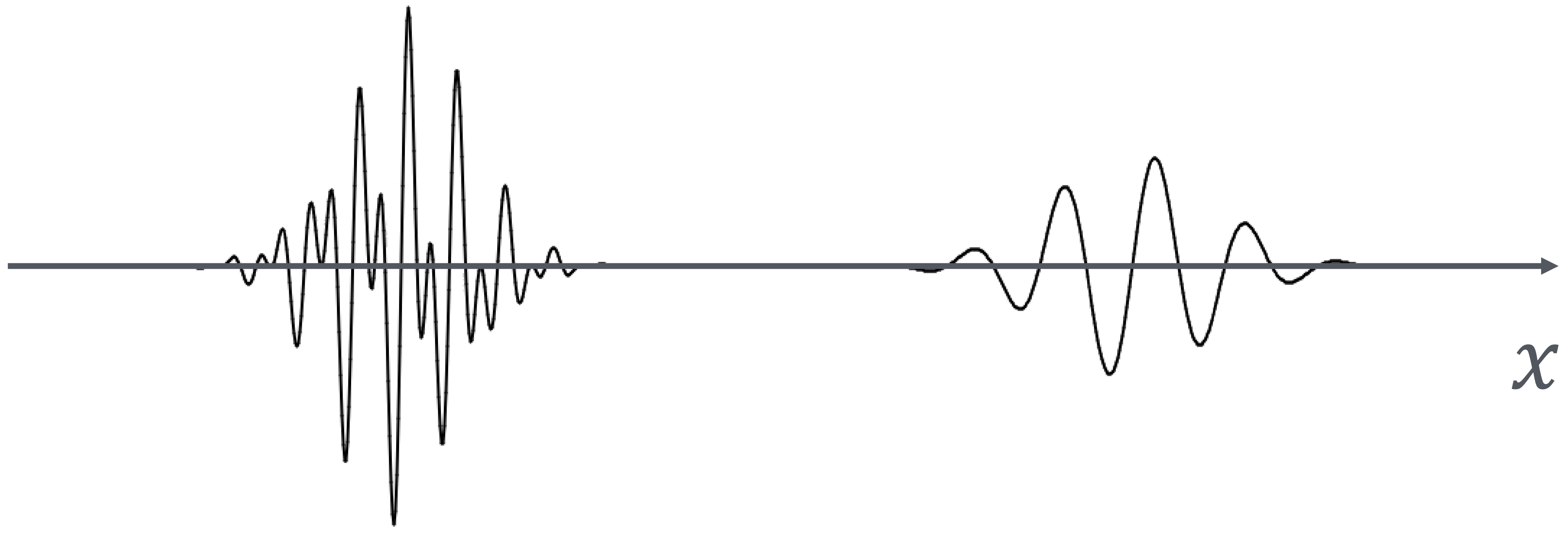
量子の波の重ね合わせ

量子力学の性質(1)：重ね合わせ

量子波の干渉とコヒーレンス

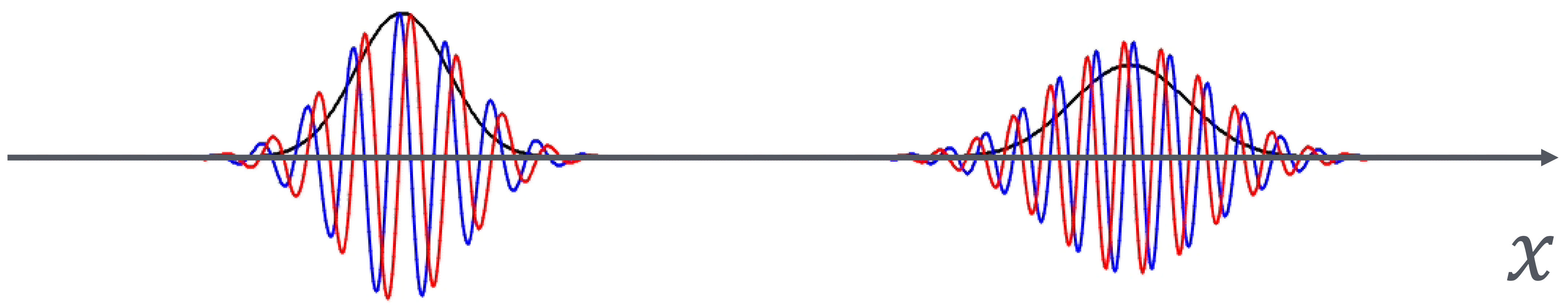
- 音波も量子波も線形波なので、重ね合わせができます：波としては当たり前の性質

音波



音の波の重ね合わせ

量子波

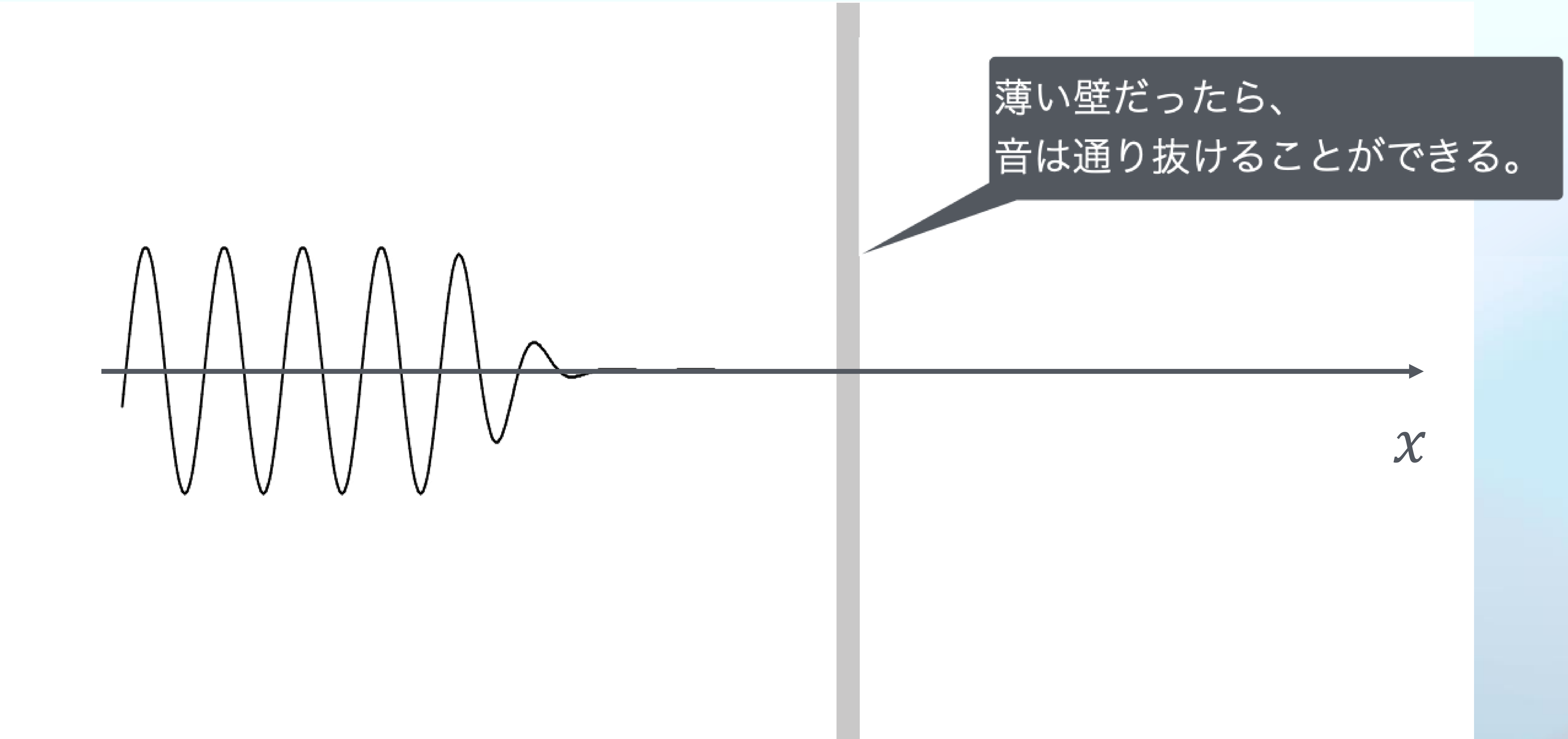


量子の波の重ね合わせ

量子力学の性質(2)：トンネル効果(1/3)

壁を通り抜ける音波

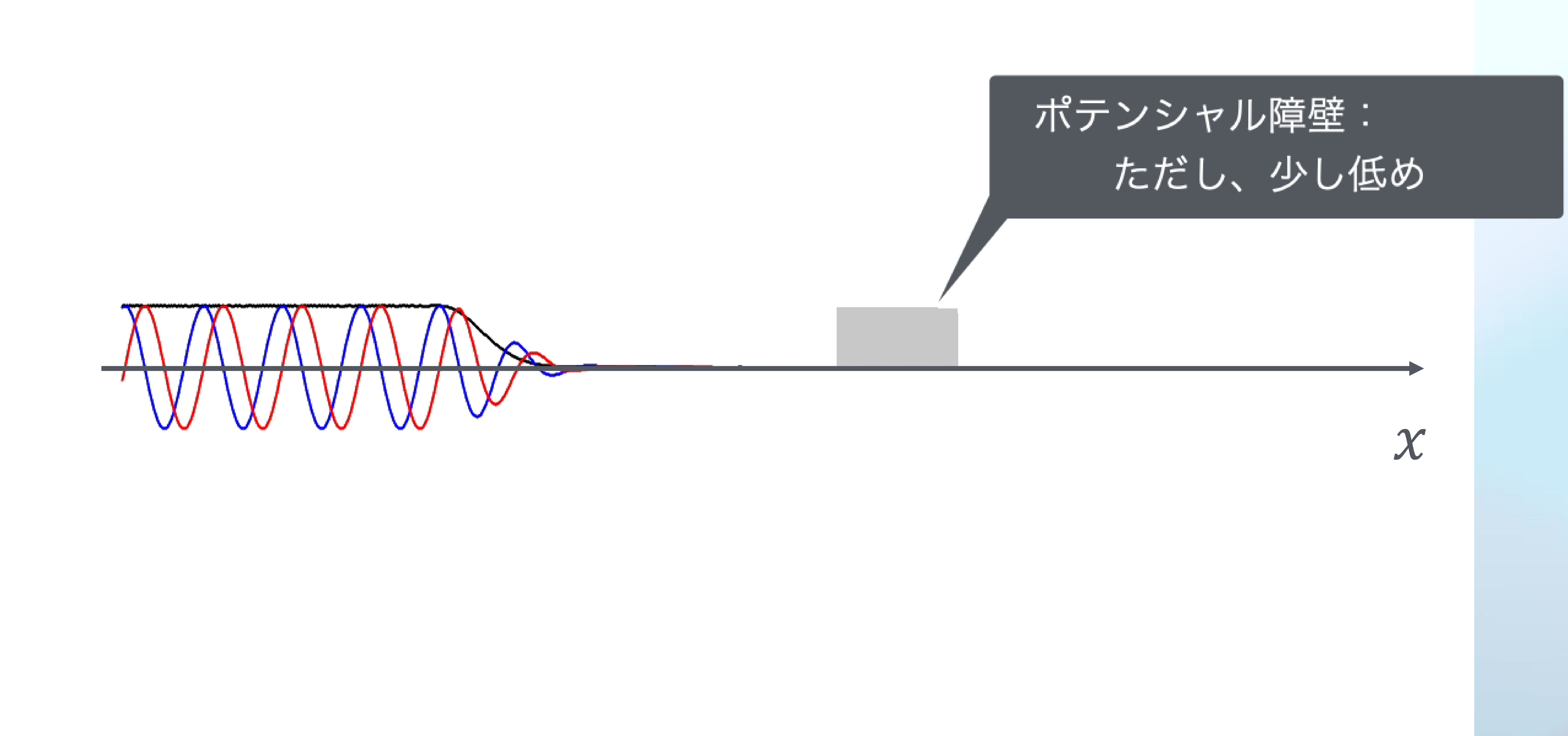
- 実は音波も壁を通り抜けられます。でもトンネル効果とは少し仕組みが異なります。



量子力学の性質(2)：トンネル効果(2/3)

壁を通り抜ける量子の波

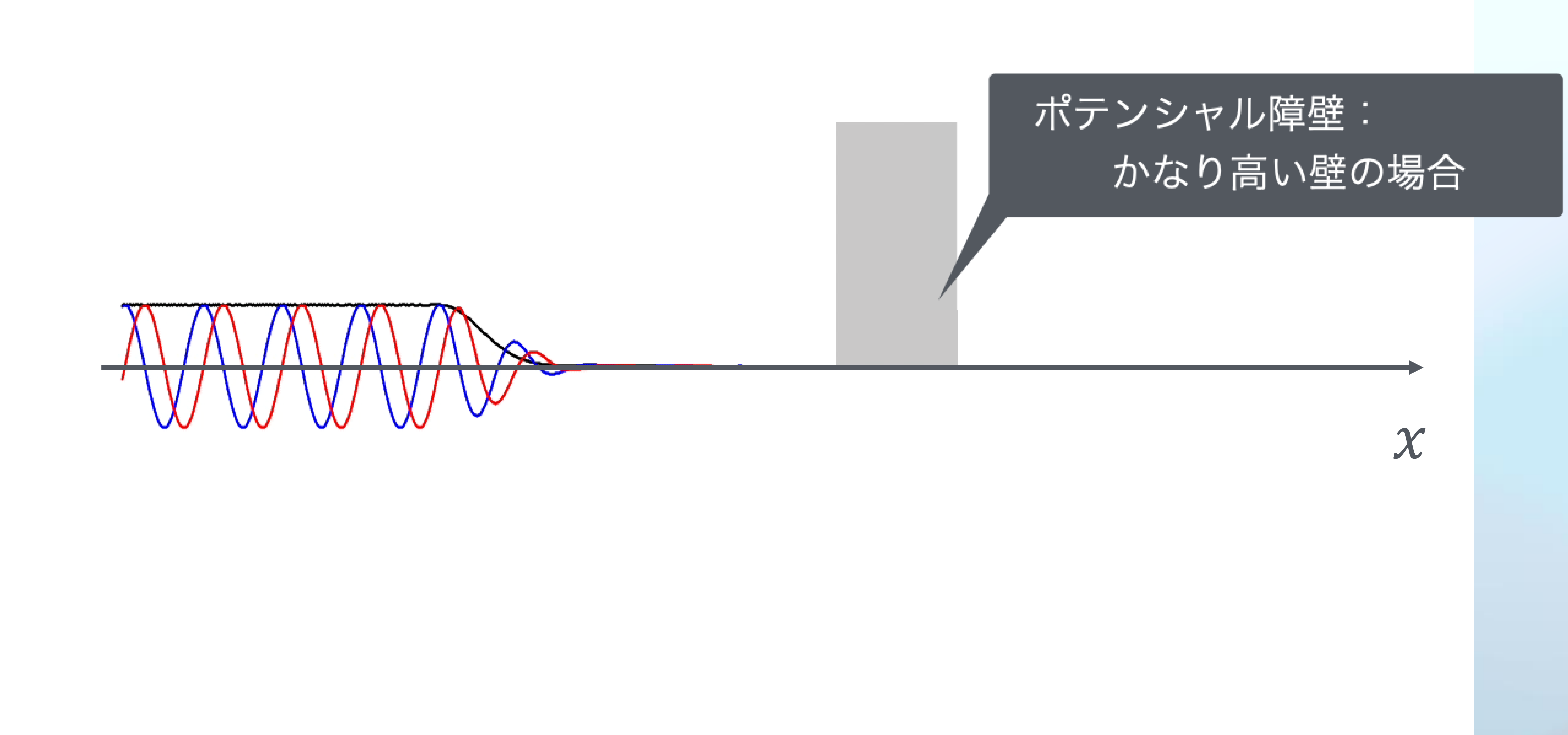
- 量子の波にも、音波と同じように壁(ポテンシャル障壁)を透過する現象があります。



量子力学の性質(2)：トンネル効果(3/3)

壁を通り抜ける量子の波

- でも、壁(ポテンシャル障壁)が強固になると、別の現象(トンネル現象)が生じます。



前半のまとめ

初等的な量子力学の理解とアニメーションで見る量子波の性質

- 20世紀初めに作り上げられた量子力学の概要
  - 原子模型、不確定性原理、交換関係、固有関数、シュレーディンガー方程式
- 量子力学の基本的な性質
  - 重ね合わせの原理、トンネル効果

波動関数から量子ビットへ

離散的な量子状態のイメージ

- **量子コンピュータで使われるのは、連続空間の波ではありません**
  - 空間に分布する確率の波：　波動関数
    空間座標が連続的な状態(あるいは、連続と見なせるぐらいたくさんある状態)は、力学的な性質に従って時間発展する。
  - 離散的な状態の確率分布：　量子状態ベクトル
    現実空間とは違って、離散的な空間なので、時間変化の仕方を自由に設定可能。状態は複素ベクトルで表現される。

1量子ビット(1-qubit)の世界

波動関数を一番シンプルな形で離散化したら・・・

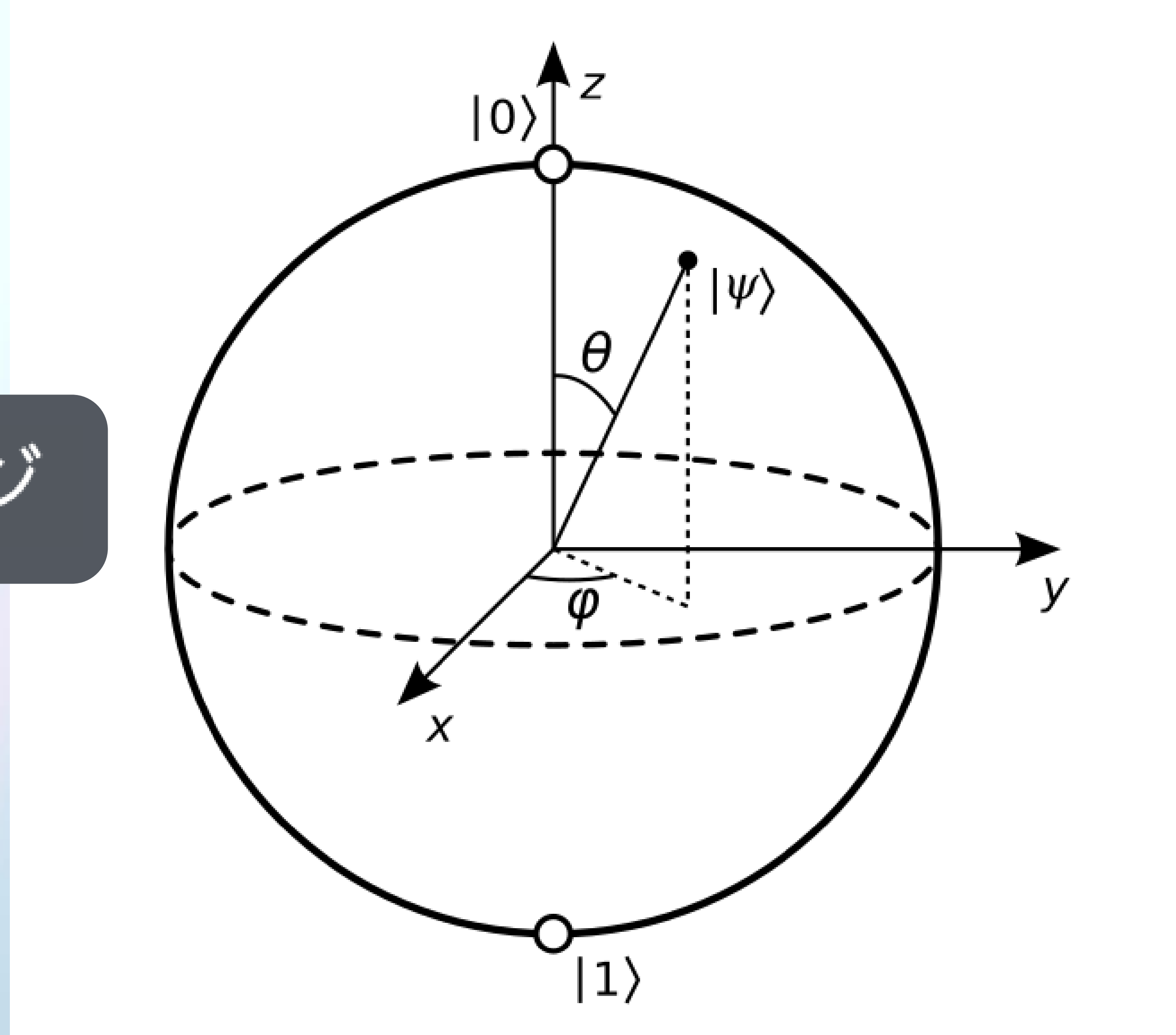
- これまで**一次元の連続値** x を引数にした波動関数 $\psi(x)$ の動きを考えてきましたが、
  これを究極まで簡単にして、$x=0$ または $x=1$ の**2箇所だけの波動関数**を考えてみます。
  - 2量子状態の世界の波動関数： $\psi=\alpha\psi(0)+\beta\psi(1)$
    [ただし、α,β は複素数で、$|\alpha|^2+|\beta|^2=1$ を満たす]

→ 一般には $|\psi\rangle=\alpha|0\rangle+\beta|1\rangle$ と書いて、
これを **1-qubit の状態**とします。

[ただし、$\alpha=\cos\frac{\theta}{2}$、$\beta=e^{i\varphi}\sin\frac{\theta}{2}$]

スピンのイメージ

この量子状態は、ブロッホ球上の点として表現される



ブロッホ球

1量子ビットの操作

２次元のベクトル表現と量子ゲート

- α と β という二つの複素数で表現する　⇔　２次元の複素ベクトル空間 $\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$

　→　量子ビットの変換 (量子ゲート)：２×2行列 (ユニタリ行列) で表す

ブロッホ球上での回転などの操作として変換を表す。

- 有名な量子ゲート：

パウリゲート

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$Y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

位相ゲート

$$S = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}$$

$$T = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\pi/4} \end{pmatrix}$$

$$P(\varphi) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\varphi} \end{pmatrix}$$

Hadamardゲート

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

回転ゲート

$$Rx(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -i\sin\frac{\theta}{2} \\ -i\sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

$$Ry(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -\sin\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

$$Rz(\theta) = \begin{pmatrix} e^{-i\theta/2} & 0 \\ 0 & e^{i\theta/2} \end{pmatrix}$$

2量子ビット(2-qubits)の世界

量子ビットが複数になったら？

- ブロッホ球上の点というスピンのイメージを一つの単位(qubit)として、複数に増やしてみる：

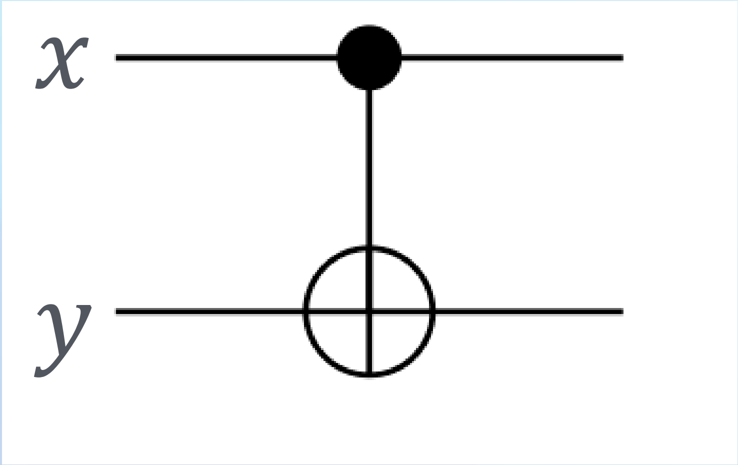
・量子状態は4つの複素数で表現される：$|\psi\rangle = c_0|00\rangle + c_1|01\rangle + c_2|10\rangle + c_3|11\rangle$

（４次元の複素ベクトルで表現）

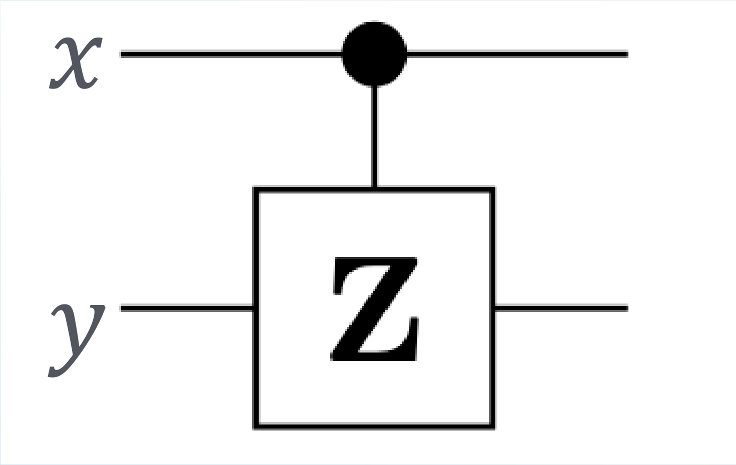
[ただし、$|c_0|^2 + |c_1|^2 + |c_2|^2 + |c_3|^2 = 1$]

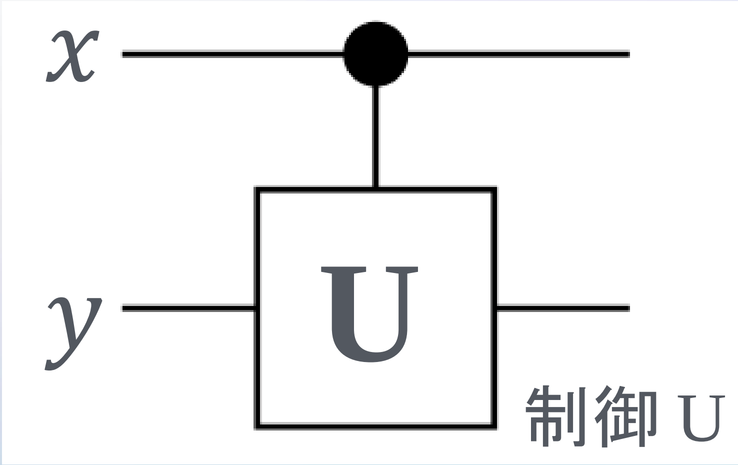
・2量子ビットに対する量子ゲートは４×４行列：

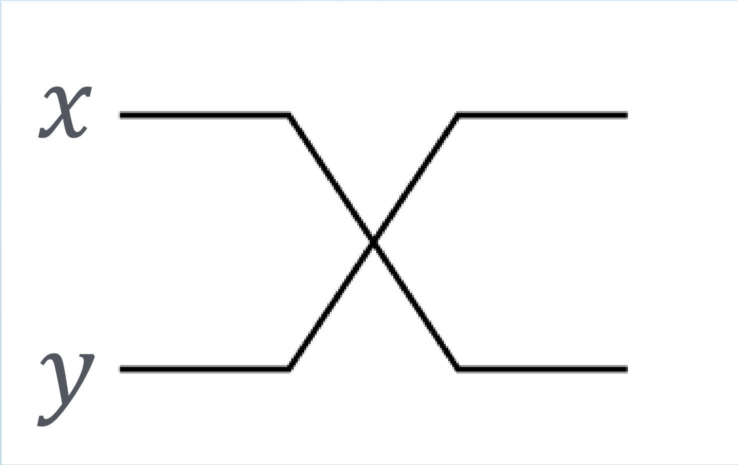
$$CNOT = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad CZ = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad CU = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{U} & \\ 0 & 0 & & \end{pmatrix} \quad SWAP = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$



$|xy\rangle \Longrightarrow |x, x \oplus y\rangle$





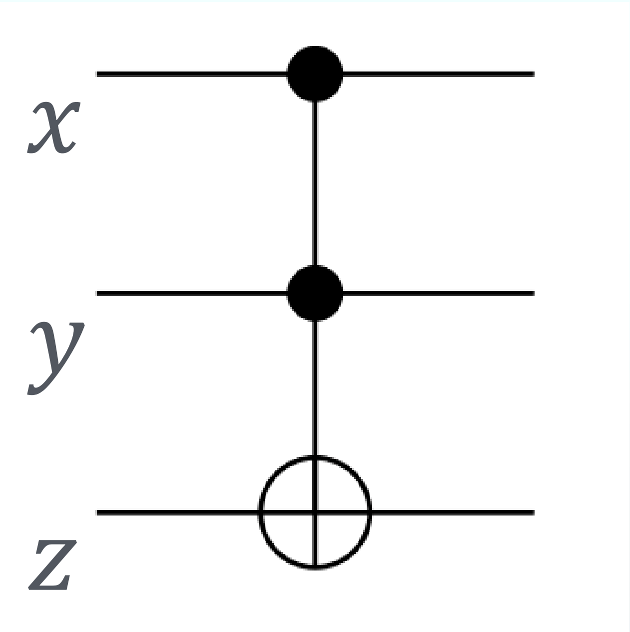


$|xy\rangle \Longrightarrow |yx\rangle$

n量子状態(n-qubits)の世界

たくさん量子ビットがあると・・・

- 一般に n-qubits の量子状態は 2^n 次元の複素ベクトルで表現される：
  - 基底ベクトル：$|q_{n-1} \cdots q_2 q_1 q_0\rangle$ (実は、$|q_{n-1}\rangle \otimes \cdots \otimes |q_1\rangle \otimes |q_0\rangle$ という意味)
  - 例えば、3量子ビットに対する量子ゲート：トフォリゲート



$$|xyz\rangle \Longrightarrow |xy, (x \wedge y) \oplus z\rangle$$

$$CCX = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

まとめ

量子プログラミングのための量子力学入門

- 約100年前の量子論の時代の実験結果・思考実験から**正準交換関係**が**必**要とされた：
  ・力学量は、積の交換則を満たさない**微分演算子**(または行列)になる。
  ・微分演算子の**固有関数**としてド・ブロイ波が現れる。
  ・量子の**波を動かす方程式**がシュレーディンガーによって生み出される。
- 量子の波と音波と比較すると：
  ・**重ね合わせ**という基本的な性質は同じだが、進み方が微妙に違う。
  ・壁を通り抜ける方法には、似ている部分と違う部分がある(**トンネル効果**)。
- 波動関数を**離散化**すると、量子ビットになる：
  ・たくさん集めた**量子ビット**を操作する　$\Longrightarrow$　量子コンピュータ