

Quantum Education
For Future Technologies

オンラインコース・サマースクール・量子技術教育プログラム



量子技術序論

長田 有登
山崎 歴舟
野口 篤史



Q-LEAP 量子技術教育プログラム
量子技術序論

Alto, Rekishu, Atsushi

March 2021

目次

0.1	量子情報における共通言語	7
0.2	異なる量子物理系	8
0.3	温度の概念	8
0.4	本書の構成	10
第 I 部		12
第 1 章	量子力学における状態の記述と演算子	13
1.1	ベクトル空間	13
1.1.1	3次元空間ベクトル	13
1.1.2	多次元空間への拡張	16
1.1.3	行列と演算子	16
1.1.4	正方行列	18
1.1.5	多次元空間でのベクトルの性質と行列の成分表示のまとめ	20
1.2	古典と量子の運動方程式	21
1.3	波動関数	22
1.3.1	波動関数の内積	22
1.3.2	連続的な波動関数と離散的な波動関数	22
1.3.3	演算子	24
1.4	Dirac 表示	25
1.5	行列表示	26
1.6	波動関数の主な性質	28
1.7	合成系	29
1.7.1	合成系の演算子	31
1.7.2	合成系の行列表示	32
1.7.3	量子もつれ状態	33
1.7.4	しばしば使われる量子状態の記述	35
1.8	固有ベクトルと固有値	36
1.9	演算子の種類	37
1.9.1	Hermite 演算子	37
1.9.2	射影演算子	38
1.9.3	ユニタリー演算子	39

1.9.4	Pauli 行列	39
1.9.5	演算子関数	40
1.10	密度演算子	41
1.10.1	混合状態の例	43
1.10.2	密度演算子の一般的性質	43
1.10.3	合成系の密度演算子とその縮約	43
1.11	交換子と反交換子	45
1.11.1	Heisenberg の不確定性原理	45
第 2 章	量子力学の基礎	48
2.1	時間発展	48
2.1.1	時間に依存しない Schrödinger 方程式	48
2.1.2	ユニタリー演算子を用いた時間発展	49
2.1.3	3つの描像	50
2.1.4	Heisenberg の運動方程式	53
2.2	回転系へのユニタリ変換	53
第 3 章	摂動論	55
3.1	時間に依存しない摂動論	55
3.1.1	Zeeman 効果	57
3.2	時間に依存する摂動論	58
3.2.1	時間依存した摂動展開	62
第 II 部		65
第 4 章	二準位系と電磁波	66
4.1	二準位系、スピン、および Bloch 球	66
4.2	電磁波	67
4.2.1	調和振動子の昇降演算子	69
4.3	二準位系と電磁波の相互作用	70
4.3.1	Jaynes-Cummings 相互作用	70
4.4	二準位系と電磁波の例	71
4.4.1	自然放出と誘導放出	74
第 5 章	二準位系のダイナミクスと緩和	76
5.1	Bloch 方程式と緩和	76
5.1.1	Bloch 方程式	76
5.1.2	緩和がある場合の Bloch 方程式	78
5.2	Rabi 振動	80
5.3	Ramsey 干渉	81

5.4	スピンエコー法	82
第 6 章	調和振動子	84
6.1	Fock 状態	84
6.2	コヒーレント状態	84
6.3	スクイーズド状態	87
6.4	熱的状态	89
6.5	光子相関	89
6.5.1	振幅相関 / 一次のコヒーレンス	90
6.5.2	強度相関 / 二次のコヒーレンス	90
6.6	Wigner 関数	91
6.6.1	導入	91
6.6.2	Wigner 関数の例	92
6.6.3	コヒーレント状態	92
第 7 章	共振器量子電磁力学 (cavity QED)	95
7.1	Jaynes-Cummings モデル	95
7.2	弱結合・強結合領域	96
7.3	分散領域	98
第 8 章	電磁波共振器と入出力理論	101
8.1	共振器の性質	101
8.1.1	Q 値	102
8.1.2	フィネス (Finesse)	103
8.2	共振器の測定	104
8.2.1	反射測定と透過測定	104
8.2.2	実際の測定系	106
8.3	入出力理論 [17]	106
8.3.1	伝播モードと入出力関係	106
8.3.2	1 ポートの測定	108
8.3.3	2 ポートの測定	110
8.3.4	二準位系の自然放出	111
8.3.5	導波路結合した量子ビット-共振器結合系	112
第 9 章	量子実験系における種々の結合	116
9.1	原子イオンの例	116
9.1.1	原子-光相互作用	116
9.1.2	サイドバンド遷移	118
9.1.3	フォノン-フォノン相互作用	119
9.2	超伝導量子回路	121
9.2.1	LC 共振器の量子化	122

9.2.2	超伝導量子ビット	123
9.2.3	共振器とトランズモンの結合	125
9.3	共振器オプトメカニクス	126
9.3.1	導入	126
9.3.2	オプトメカニカル相互作用	128
9.3.3	オプトメカニカル相互作用の線形化	129

第 III 部 131

第 10 章 量子ゲート 132

10.1	一量子ビットゲート	133
10.1.1	X ゲート	133
10.1.2	Z ゲート	133
10.1.3	Hadamard ゲート H 、位相ゲート S 、 $\pi/8$ ゲート T	134
10.2	二量子ビットゲート	134
10.2.1	制御 NOT (Controlled-NOT, CNOT) ゲート	135
10.2.2	制御 Z (CZ) ゲート	135
10.2.3	i SWAP ゲートと SWAP ゲート	135
10.2.4	XX ゲートと ZZ ゲート	136
10.2.5	Hamiltonian から二量子ビットゲートの導出	136
10.3	Clifford ゲートと non-Clifford ゲート	138

第 11 章 量子状態の測定とエラーの評価 140

11.1	射影測定と一般化測定	140
11.2	量子状態の評価 - 量子状態トモグラフィ	141
11.3	フィデリティ	142
11.4	量子ゲートエラーの評価	143
11.5	ノイズ演算子	143
11.6	量子プロセストモグラフィ	145
11.6.1	ゲートフィデリティ	146
11.7	Randomized benchmarking	147

第 12 章 量子エラー訂正の基礎 149

12.1	スタビライザーによる定式化	150
12.2	三量子ビット反復符号	151
12.3	Shor 符号	152
12.4	発展的な量子ビットの符号化	154

第 13 章 個別量子系に関する DiVincenzo の基準 155

第 14 章 量子技術の概要	157
14.1 量子計算	157
14.1.1 Grover のアルゴリズム	157
14.2 量子鍵配送	158
14.2.1 BB84	158
14.3 量子センシング	159
14.3.1 Ramsey 干渉	159
14.3.2 エンタングルメントによる量子センシング	160
14.4 量子シミュレーション	161
14.5 量子インターネット	161
付 録 A 位置表示と運動量表示	162
付 録 B 回転系へのユニタリ変換の例	163
付 録 C 三準位系からの二準位系の抽出	165
付 録 D 原子の量子状態	168
D.1 Bohr モデル	168
D.2 微細構造	169
D.3 超微細構造	170
付 録 E 量子マスター方程式	171
E.1 Liouville-von Neumann 方程式	171
E.2 系と熱浴との相互作用	172
E.3 レート方程式	178
E.4 光 Bloch 方程式	179
付 録 F Schrieffer-Wolff 変換	181
F.1 一般的な手順	181
F.2 頻出する例	182
F.2.1 駆動されたスピン系	182
F.2.2 駆動されたスピン系の一般化	183
付 録 G Heisenberg Hamiltonian から SWAP ゲートの導出	184
付 録 H オプトメカニクスと共振器冷却	186
H.1 機械振動モードのサイドバンド冷却	186
H.1.1 量子ノイズスペクトルとレート方程式	186
H.1.2 共振器冷却の冷却限界	189

付録I	量子もつれとその応用	191
I.1	分離可能状態と量子もつれ状態	191
I.2	量子もつれの尺度	191
I.2.1	エンタングルメントエントロピー	192
I.2.2	ネガティビティ	193
I.3	量子テレポーテーション	195
I.4	エンタングルメントスワッピング	197
I.5	Local operation and classical communication (LOCC)	199
付録J	量子複製禁止定理	200

はじめに

0.1 量子情報における共通言語

量子力学は1900年代初頭から、Einstein、Dirac、Heisenberg、Schrödingerなど名高い物理学者による数々の議論により肉付けられ、相対論などとの融合も踏まえ大きく発展してきた。その枠組みから予想される一見非自明な物理現象の数々は、多くの物理学者を困らせたが、この長い歴史の中で未だにその体系が間違っているという観測は報告されていない。

量子力学自体は長い歴史をもつが、過去50年間の量子力学の発展は、実験的手法の成熟とそれに支えられた量子力学のさらなる考察にも大きく支えられてきている。核磁気共鳴(NMR)の発展による核スピン状態の観測・操作、真空中の原子やイオンの分光実験、高性能レーザーの開発や非線形光学の発展による光の量子性の検証、また外乱が多く量子性の担保が難しいと言われてきた固体素子の中でも様々な量子操作が確認されるようになってきている。これらの多彩な実験は量子力学を様々な角度から検証することを可能とするに伴い、これまでその性質を見極めるための「観測」がメインであった量子を「操作」の対象として成熟させた。つまり、今までは見る事が目的であった量子を人類は自由に操作する術を手に入れたのである。

そんな中、この20年くらいの間大きく発展してきたのが量子情報科学という分野である。実験手法の発展により各々の物理系の操作性が向上し、またそれら物理系がもつ固有の特色が顕になってきた。それら操作性や物理系の特色を活かした情報技術、特に量子の性質を活かした情報操作を行うという試みが大きく展開されてきたのである。この量子情報の研究により幾つかの新しい知見が生まれてきた。それは、一見全く異なる物理系においても量子を情報の起源と捉えることにより、多くの類似性を持つことがわかってきたのである。これまで各々の物理系はそれぞれ独立に進歩してきた。しかしこれらを量子情報という枠組みで俯瞰する事により異なる物理系を統一した共通言語のもとに包括的に理解することが可能となってきた。

本プロジェクトはその俯瞰的な視点を若い研究者に提供することにより、これまでの量子物理系の特色を量子情報という枠組みの中で捉え、今まで以上の量子系の発展を促す試みである。量子情報技術が社会へ進出するまでにはまだ時間が必要かもしれない。しかし、量子計算機、量子通信・インターネット、量子シミュレーション、量子センサーなど既存の技術を大きく超える提案が数々なされ、それらは社会のあり方さえも大きく変革すると言われている。これら量子技術の躍進には既存の量子技術と共に、若い人達の新しいアイデアが鍵となると考えている。これからの量子技術の発展のために、皆さんの力を大きく発揮していただきたい。

0.2 異なる量子物理系

本プロジェクトでは異なる量子系の操作とその特色を学んでいく。様々な量子系、例えばイオントラップ、冷却原子、量子ドット、超伝導回路など多くの系が存在するが、各々の量子系の長所によりもちろんそれぞれの強みと弱みが異なる。例えば既存のコンピュータが個々の部品、CPU、メモリー、ハードドライブ、インターネットアダプタ、で構成されているように、各々の量子系も活躍舞台が異なってくる。また幾つかの共通要素を持つ量子系も多くある。例えば作製方法（ファブリケーション）が似ている、操作に用いる装置が類似している、デバイスの置かれている環境（温度など）が同じなどである。類似な系では、一つの量子系を学ぶと他の理解が容易な場合が多くある。また一見大きく異なる量子系でも、実は主要素をよく考えるととても似ていると言う場合が多くある。そのためにも多くの物理系を学ぶことで包括的な理解が進むことが期待される。また先述のように、量子情報という枠において、その特色や類似性を捉えることが今まで予想もしなかった形で容易になることが多くある。そのような意味でもこれら多くの物理系の特色を学んでいくことが重要になる。

量子操作の成熟と共に、各々の量子系の長所を伸ばし、短所を抑圧するために幾つかの量子系を結合させた「ハイブリッド量子系」と呼ばれる量子系の開発も世界的に進められている。例えば光ファイバー中の光子は、長距離の量子状態伝送を可能とするが、その代わりに光子（つまり量子状態）を1箇所にとどめておくのは非常に困難である。この時に原子やイオントラップなどと光ファイバーを結合させることにより、量子状態を原子やイオンにとどめておく、また必要なときには光子として取り出しファイバーに送り込むというようなことをすることでメモリーと伝送の機能を両立させた新たな量子系の開発が可能となる。これらハイブリッド量子系の開発にも各々の物理系の特色を学ぶことが重要となってくる。

0.3 温度の概念

量子系には様々な類似点があげられることを述べてきたが、実験的に重要な長所として、量子系のエネルギーと操作に用いられる電磁波があげられる。それは実験時に、量子系を設置する環境の温度と密接に関係していることを以下に述べる。

多くの量子操作では、単一量子の操作が求められるがその手法は原子のエネルギー準位を用いると簡単に説明ができる。例えば図 1.1 にあるように、異なる2つのエネルギー準位、基底状態 $|g\rangle$ と励起状態 $|e\rangle$ を持つ原子があり、各々のエネルギーが E_g 、 E_e とする。通常電子は基底状態にいるが、エネルギー準位の差を埋めるようなエネルギーを持つ電磁波 ($E_0 = E_e - E_g$) が吸収されると電子は励起状態に上がる (図 1.1)。このときの電磁波が実験に用いられた電磁波であればよいが、そうでない場合はこちらが操作しようとしていないのに原子のエネルギー準位が変わってしまったことになる。

この「実験にもちいた以外の電磁波」はどこから来るのかを考える。環境温度が T のとき、その環境において熱平衡にあるボゾン粒子を考える。ボゾン粒子のエネルギー

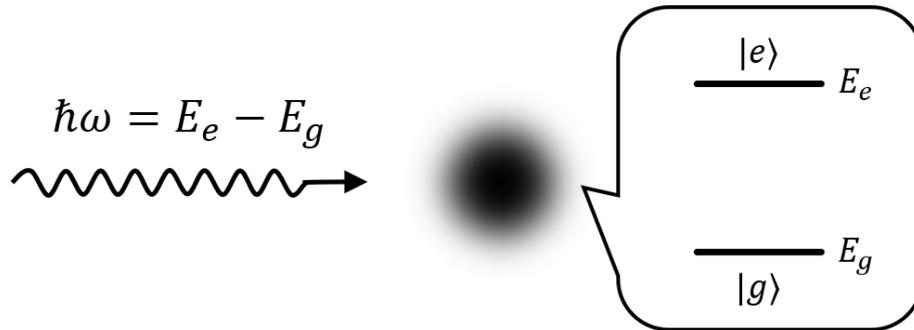


図 1: エネルギー固有状態間の遷移。「電磁波」あるいは遷移を引き起こす粒子は実験で意図したものとは限らず、熱的に励起された固体中のフォノンやスピンなど周囲の環境からのノイズも含まれる。

が粒子の振動角周波数 ω を用いて $E_{\text{Boson}} = \hbar\omega$ と書かれる時、その平均粒子数 $\langle n \rangle$ は Bose-Einstein 分布を用いて、

$$\langle n \rangle = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1}, \quad (0.3.1)$$

と記述される。ここで $\hbar = h/2\pi$, k_B は、それぞれ Dirac 係数と Boltzman 係数である。Dirac 係数は Planck 係数を 2π で割ったものであるが、量子光学や量子情報科学では Planck 係数よりも頻繁に用いられる

温度の換算エネルギー $k_B T$ がボゾン粒子のエネルギー $\hbar\omega$ より十分高いとき、この式は

$$\langle n \rangle \simeq \frac{k_B T}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}, \quad (0.3.2)$$

で近似される。この式からわかるように、量子を取り巻く環境ではその温度 T に比例した平均粒子数 $\langle n \rangle$ のボゾン粒子がうようよしている。固体中ではフォノンなどの素励起粒子、真空中ではその周りの壁の温度 T に熱平衡な電磁波（光子）といったボゾン粒子が飛び回っている。これら温度 T の環境にうよめく“熱ボゾン粒子”が邪魔者である「実験にもちいた以外の電磁波」になるのである。この影響を十分抑制するには、実験に用いる電磁波の角周波数 $\omega_0 = E_0/\hbar$ においてボゾン粒子が環境にほぼいない状況、つまり $\langle n \rangle \ll 1$ の状況を作れば良い。

そこから導かれる環境温度の条件は以下の式で与えられる、

$$T \ll \frac{\hbar\omega_0}{k_B}. \quad (0.3.3)$$

この式は環境温度が電磁波の換算温度 ($T_0 = \frac{\hbar\omega_0}{k_B}$) より十分低ければ、 $\langle n \rangle \ll 1$ となり熱ボゾン粒子の影響が小さくなることをあらわしている。電磁波を用いた量子操作実験では、マイクロ波もしくは光が用いられることが多いが、各々の周波数、換算温度、実際量子実験に用いられる装置の環境温度を表 1 にまとめた。

表 1: 電磁波周波数と実験環境温度の関係.

電磁波	周波数 ($\omega_0/2\pi$)	換算温度 (T_0)	実際の実験温度 (T)
マイクロ波	10 GHz	500 mK	10 mK
光	200 THz	10,000 K	300 K

この表からわかるように、マイクロ波を用いる実験では電磁波の換算温度が 500 mK 程度であることから、環境は希釈冷凍機などを用いてそれより十分低温にする必要がある。逆に光を用いる実験では、光の換算温度が 10,000 K 程度なため、室温の 300 K でも十分実験できることがわかる。これは我々の環境の壁 (300 K) が熱で光っていないことから $\langle n \rangle \ll 1$ が満たされているのがわかると思う。

このように、量子操作に用いる電磁波の周波数によって、装置の環境温度は大きく異なる。また、これによりマイクロ波と光では同じ電磁波でも実験に関する技術が異なることを覚えておきたい。

0.4 本書の構成

本書は上記のような量子系を俯瞰的に見る目や、それを筋よく実現するにはどうすればよいかという感覚を養うための下地としての基礎的な事柄を一冊の文書にまとめる、という目的で執筆されたものである。構成として大きく三つに分かれており、第部では量子技術で頻繁に用いる線形代数に基づいた量子状態の記述、および基礎的な量子力学の知識を量子技術を知るうえで最低限必要と思われるものに関して抜粋し、簡潔な形でまとめてある。第部では二準位系や電磁波を実際にどのようにとらえ、それらがどのように相互作用するのか、そして二準位系や電磁波あるいは調和振動子とその間の相互作用が実際にどのように実現されるのかについて記した。特に現在の量子技術ではほぼ必須の道具である共振器とその測定の仕方について詳説してある。第部では、量子ビットという抽象化された量子系の操作、測定、エラー訂正、そして量子技術の概要について書き記した。

解析力学、統計力学、量子力学、電磁気学の講義を一度は受けたことがある程度の知識があれば、それらを参照しつつ本書を読み進めることはできると思われる。とくに第部は量子力学の復習であるため、一度量子力学の本を読みとおした経験がある読者は第部から読み始め、適宜第部に立ち戻りながら読み進めていくような読み方でよいだろう。ただし第部に量子技術で頻繁にみられる記述の仕方や概念等も含まれており、目を通しておくことをお勧めしたい。こういった意味で、本書の対象はあえて言えば順当に勉学を進めてきた学部 3、4 年生あたりにある。ただし意欲的な 1、2 年生も読み進められると期待しているし、大学院生ひいては量子技術分野内外の研究者にとっても読んで得るものがあることを期待している。また、全体として物理現象として何が起きているかのイメージの獲得と理解を優先したため、理論的な厳密さを欠く部分が散見されるであろうことはご承知いただきたい。

本書の執筆にあたり、文章の校正、計算チェックなどにご協力いただいた東京大学野口研究室の重藤真人氏、中島悠来氏、渡辺玄哉氏、内容についてのたいへん有用なアドバイスをいただいた増山雄太氏にこの場で感謝の意を表したい。

第I部

第1章 量子力学における状態の記述と演算子

この章では量子力学の基礎を簡単にさらう。一般的に多くの大学では初級量子力学の授業において波動関数を用いた表示が多いが、量子情報科学では行列表示を用いる場合が多い。しかし、例外も多く量子間の相互作用の導出など波動関数を用いることも多々あるため、波動関数表示と行列表示を行ったり来たりする場合が頻繁に出てくる。そのため読者には両方の知識をつけてもらいたい。ここでは2つの表示方法ならびに量子力学の基礎、そしてツールとして用いられる線形代数の基礎、またこれらの表示の簡素化が可能な Dirac 表記を復習する。

1.1 ベクトル空間

量子状態はベクトル空間におけるベクトルとして扱われるが、ここでは簡単にベクトル空間の基礎を後に頻繁に用いられる用語を紹介しながら復習する。

1.1.1 3次元空間ベクトル

3次元空間における2つの任意のベクトル

$$\vec{V} = V_x \hat{x} + V_y \hat{y} + V_z \hat{z} \quad (1.1.1)$$

$$\vec{W} = W_x \hat{x} + W_y \hat{y} + W_z \hat{z}, \quad (1.1.2)$$

があるとする。ベクトルは基底 (basis) とよばれる単位成分ベクトル \hat{x} , \hat{y} , \hat{z} と、その振幅 (amplitude) である係数 V_x , V_y , V_z および W_x , W_y , W_z から構成される。計算に便利な行列表示を用いるとき、状態ベクトルは通常縦ベクトルで表される。単位成分ベクトルは

$$\hat{x} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \hat{y} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \hat{z} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (1.1.3)$$

と表され

$$\vec{V} = V_x \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + V_y \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + V_z \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V_x \\ V_y \\ V_z \end{pmatrix} \quad (1.1.4)$$

$$\vec{W} = W_x \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + W_y \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + W_z \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} W_x \\ W_y \\ W_z \end{pmatrix}, \quad (1.1.5)$$

となる。

内積

2つのベクトルの内積 (inner product) は

$$\vec{V} \cdot \vec{W} = V_x W_x + V_y W_y + V_z W_z, \quad (1.1.6)$$

と定義され、ベクトルの内積からはスカラー（数字）が計算される。行列表示を用いると内積はベクトルの転置 (transpose)

$$\vec{V}^T = (V_x \quad V_y \quad V_z) \quad (1.1.7)$$

を用いて

$$\vec{V} \cdot \vec{W} = \vec{V}^T \vec{W} = (V_x \quad V_y \quad V_z) \begin{pmatrix} W_x \\ W_y \\ W_z \end{pmatrix} = V_x W_x + V_y W_y + V_z W_z \quad (1.1.8)$$

となる。上記でわかるように、内積をとる2つのベクトルの次元数は同じでなければならない。

正規直交基底

上記のようにベクトル空間の基底は通常、長さ1になるように正規化 (normalized) されており、またこの例では図1.1(左)のように \hat{x} , \hat{y} , \hat{z} は全て直交している。このような基底を正規直交基底 (Orthonormal set of basis) とよぶ。基底 \hat{x} , \hat{y} , \hat{z} を $\hat{x}_i, i = 1, 2, 3$ で表すと、正規直交基底は

$$\hat{x}_i \cdot \hat{x}_j = \delta_{ij} \quad (1.1.9)$$

の式を満たす。

一般的には、基底は正規化もしくは直交している必要はない。図1.1(右)にあるように、正規直交基底ではない基底 \hat{x}' , \hat{y}' , \hat{z}' を用いて \vec{V} を記述することもできるが、各々の成分が他に依存しない正規直交基底の方がもちろん便利である。

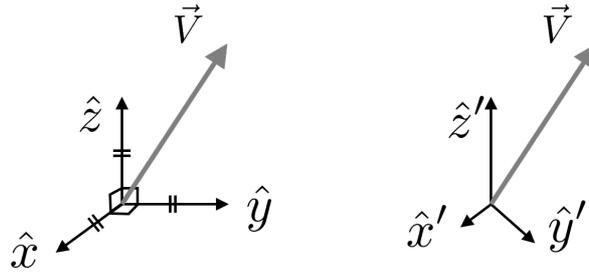


図 1.1: (左) 正規直交基底 $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ 、(右) 正規直交ではない基底 $\hat{x}', \hat{y}', \hat{z}'$ でも同じ \vec{V} を記述することは可能。

ベクトルの成分

ベクトル \vec{V} があたえられているとき、その振幅を内積を用いて求めることができる。例えば V_x を求めたい場合

$$V_x = \hat{x} \cdot \vec{V}, \tag{1.1.10}$$

と計算することができる。行列表示を用いると

$$V_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_x \\ V_y \\ V_z \end{pmatrix} = V_x \tag{1.1.11}$$

となる。

ノルム

各々の振幅からベクトルの“長さ”を計算することが出来るが、ベクトルの“長さ”は一般的にノルム (norm) とよばれ、内積を用いて

$$\text{norm}(\vec{V}) = \sqrt{\vec{V} \cdot \vec{V}} = \sqrt{V_x^2 + V_y^2 + V_z^2}, \tag{1.1.12}$$

と定義される。このノルムを用いて任意のベクトル \vec{V} を単位ベクトル \hat{v} に変換したい場合、もとのベクトルをノルムで割ることで

$$\hat{v} = \frac{\vec{V}}{\text{norm}(\vec{V})}, \tag{1.1.13}$$

と計算することができ、もちろん元のベクトルは

$$\vec{V} = \text{norm}(\vec{V})\hat{v}, \tag{1.1.14}$$

と書くことができる。

外積

先述した内積は、2つのベクトルからスカラーが計算されたが、ベクトルの外積は2つのベクトルから行列が計算される。先程用いたベクトル \vec{V} , \vec{W} の外積は行列表示を用いると

$$\vec{V} \otimes \vec{W} = \vec{V} \vec{W}^T = \begin{pmatrix} V_x \\ V_y \\ V_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} W_x & W_y & W_z \end{pmatrix} \quad (1.1.15)$$

$$= \begin{pmatrix} V_x W_x & V_x W_y & V_x W_z \\ V_y W_x & V_y W_y & V_y W_z \\ V_z W_x & V_z W_y & V_z W_z \end{pmatrix} \quad (1.1.16)$$

となる。上記ではどちらも3次元のベクトルから 3×3 の行列が計算されたが、外積の場合には2つのベクトルは次元数が異なっても大丈夫である。 m 次元と n 次元のベクトルからは $m \times n$ の大きさの行列が計算される。

1.1.2 多次元空間への拡張

これまでは実空間の3次元の例を用いたが、量子状態を扱うヒルベルト空間とよばれる多次元ベクトル空間では、3次元以上への拡張が必要となる。 $(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}) \rightarrow (\hat{x}_i, i = 1, 2, 3, 4, \dots)$ と拡張すると多次元における任意のベクトルは

$$\vec{V} = \sum_i V_i \hat{x}_i \quad (1.1.17)$$

$$\vec{W} = \sum_i W_i \hat{x}_i \quad (1.1.18)$$

と記述できる。

1.1.3 行列と演算子

先述では外積を用いてベクトルから行列が計算されたが、 $m \times n$ 次元の行列 \hat{A} は

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{m1} & A_{m2} & \dots & A_{mn} \end{pmatrix} \quad (1.1.19)$$

のように成分 A_{ij} をもつ行列表示ができる。

行列成分

行列のある成分、例えば A_{21} は単位ベクトル

$$\hat{x}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{x}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad (1.1.20)$$

を用いて

$$A_{21} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{m1} & A_{m2} & \dots & A_{mn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad (1.1.21)$$

と書ける。一般化すると

$$A_{ij} = \hat{x}_i^T \hat{A} \hat{x}_j \quad (1.1.22)$$

のように行列成分は横ベクトル・行列・縦ベクトルの積で書けることがわかる。

転置行列

先述の $m \times n$ 次元の行列 \hat{A} の転置行列 \hat{A}^T は

$$\hat{A}^T = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{21} & \dots & A_{n1} \\ A_{12} & A_{22} & \dots & A_{n2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{1m} & A_{2m} & \dots & A_{nm} \end{pmatrix} \quad (1.1.23)$$

のように $n \times m$ 次元の行列となり、行列要素は

$$A_{ij}^T = A_{ji} \quad (1.1.24)$$

を満たす。

行列の積

行列の積によって新たな行列が計算できるが、例えば $\hat{C} = \hat{A}\hat{B}$ のとき \hat{C} の行列要素は

$$C_{ij} = \sum_k A_{ik} B_{kj} \quad (1.1.25)$$

を満たす。この式からもわかるように、計算された \hat{C} が $l \times n$ の行列、 \hat{A} が $l \times m$ の行列のとき行列 \hat{B} は $m \times n$ と次元数があていなければならない。

この行列 \hat{C} の転置行列 \hat{C}^T の行列成分は指数を交換した形で

$$C_{ij}^T = C_{ji} = \sum_k A_{jk} B_{ki} \quad (1.1.26)$$

と表される。

1.1.4 正方行列

縦と横の次元数が同じ $m \times m$ の行列は正方行列と呼ばれ、最も使われる行列群である。

行列のトレース

正方行列 \hat{A} があるとき、行列 \hat{A} のトレースは

$$\text{Tr } \hat{A} = \sum_i A_{ii} \quad (1.1.27)$$

となるが、対角成分の和となっている。

また2つの行列の積 $\hat{C} = \hat{A}\hat{B}$ が正方行列のとき、そのトレースは

$$\text{Tr } C = \sum_i C_{ii} = \sum_{i,j} A_{ij} B_{ji} \quad (1.1.28)$$

と表される。

単位行列

特殊な正方行列の1つである単位行列 \hat{I} は、対角の全ての成分が1で他は全て0の行列である。3×3の単位行列は

$$\hat{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (1.1.29)$$

であり、行列成分 I_{ij} は

$$I_{ij} = \delta_{ij} \quad (1.1.30)$$

を満たす。また、単位行列は正規直交基底の外積を用いて、

$$\hat{I} = \sum_i \hat{x}_i \hat{x}_i^T \quad (1.1.31)$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix} + \dots + \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix} \quad (1.1.32)$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix} \quad (1.1.33)$$

と表すことができる。

演算子としての行列

ベクトル空間におけるベクトルは演算子によって作用を受けるが、行列演算を用いると簡単に記述できる。ベクトル \vec{W} が行列 \hat{A} とベクトル \vec{V} の積で計算されるとき、

$$\vec{W} = \hat{A}\vec{V} \quad (1.1.34)$$

と記述される。行列表示で

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{pmatrix} \quad (1.1.35)$$

$$\vec{V} = \begin{pmatrix} V_1 \\ V_2 \\ V_3 \end{pmatrix} \quad (1.1.36)$$

であるとき、

$$\vec{W} = \hat{A}\vec{V} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_1 \\ V_2 \\ V_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11}V_1 + A_{12}V_2 + A_{13}V_3 \\ A_{21}V_1 + A_{22}V_2 + A_{23}V_3 \\ A_{31}V_1 + A_{32}V_2 + A_{33}V_3 \end{pmatrix} \quad (1.1.37)$$

となる。指数を用いた表示では、

$$W_i = \sum_j A_{ij} V_j \quad (1.1.38)$$

と記述できる。

1.1.5 多次元空間でのベクトルの性質と行列の成分表示のまとめ

多次元空間でのベクトルの性質、ならびに行列の成分表示は後のマテリアルで頻繁に使われるため、重要な式を以下にまとめる。

多次元空間でのベクトル

$$\hat{x}_i \hat{x}_j = \delta_{ij} \quad (1.1.39)$$

$$V_i = \hat{x}_i \cdot \vec{V} \quad (1.1.40)$$

$$\text{ベクトルの正規化} \quad \sum_i V_i^2 = 1 \quad (1.1.41)$$

$$\text{ノルム} \quad \text{norm}(\vec{V}) = \sqrt{\sum_i V_i^2} \quad (1.1.42)$$

$$\text{内積} \quad \vec{V} \cdot \vec{W} = \sum_i V_i W_i \quad (1.1.43)$$

$$\text{外積} \quad (\vec{V} \otimes \vec{W})_{ij} = V_i W_j \quad (1.1.44)$$

最後の外積だけは計算された $\vec{V} \otimes \vec{W}$ の行列成分を表している。元のベクトルが各々 m 次元と n 次元の場合、 $i = 1 \dots m$, $j = 1 \dots n$ である。

行列の成分表示

行列 \hat{A} , \hat{B} , $\hat{C} = \hat{A}\hat{B}$ があり、またベクトル \vec{V} , \vec{W} が $\vec{W} = \hat{A}\vec{V}$ を満たすとき

$$\text{行列成分と基底の関係} \quad A_{ij} = \hat{x}_i^T \hat{A} \hat{x}_j \quad (1.1.45)$$

$$\text{積で与えられた行列の成分} \quad C_{ij} = \sum_k A_{ik} B_{kj} \quad (1.1.46)$$

$$\text{転置行列} \quad C_{ij}^T = C_{ji} = \sum_k A_{jk} B_{ki} \quad (1.1.47)$$

$$\text{トレース} \quad \text{Tr} C = \sum_i C_{ii} = \sum_{i,j} A_{ij} B_{ji} \quad (1.1.48)$$

$$\text{単位行列} \quad \hat{I} = \sum_i \hat{x}_i \hat{x}_i^T \quad (1.1.49)$$

$$\text{行列・ベクトル積} \quad W_i = \sum_j A_{ij} V_j \quad (1.1.50)$$

となる。

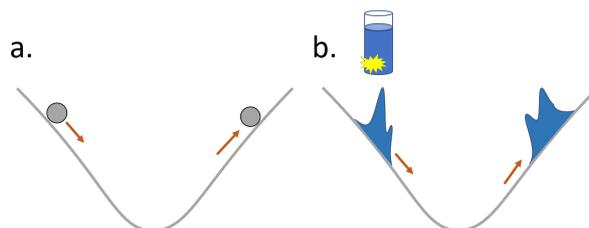


図 1.2: 古典的な運動 (左) と量子的な運動 (右)

1.2 古典と量子の運動方程式

古典力学でも量子力学でも、我々は「モノ」の運動について考えるが、何故か多くの人のために量子力学はとっつきにくいものである。古典力学では図 1a のように、あるポテンシャル $V(x)$ を質点 m が運動するさまをニュートンの法則を使って

$$m\ddot{x} = -\frac{\partial V(x)}{\partial x} \quad (1.2.1)$$

と記述できる。ここで $\dot{x} = dx/dt = d^2x/dt^2$ を表す。

それに対して、量子力学では図 1b のように割れたコップから流れ出た液体のような波動関数の運動を Schrödinger 方程式を用いて

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x,t) \quad (1.2.2)$$

と記述し、この方程式を解くことによって波動関数 Ψ を得る。この 2 つの力学では圧倒的に異なる部分がある。古典力学では、モノの位置 $x(t)$ が直接計算でき、その他の物理量 $v(t) = \frac{dx}{dt}$ や $p = mv$ などにもすぐに導ける、しかし、量子力学ではこの波動関数 $\Psi(x)$ と呼ばれるぶよぶよしたモノの関数が与えられるだけである。なんとも面倒だ...

この波動関数から有益な情報や物理量を抽出したり、波動関数自体を操作するためには演算子 (オペレーター) を使わなくては行けない。多くの学生にとって、この量子力学特有の手続きと不思議な全体構成が量子力学自体の敷居を上げているように見える。しかし、物理学者も色々工夫することで量子力学を簡素化してきた。その一つが線形代数である。すべての量子状態はヒルベルト空間上でベクトルとして記述され、それらの時間発展や物理量の抽出などはオペレーターを用いて可能である。つまり、かなり抽象的な“波動関数”とその操作と言う概念をベクトルや行列を用いて表現できることを我々は知っている。この章では、その基礎となる線形代数と量子力学の基礎を簡単にレビューする。

1.3 波動関数

1.3.1 波動関数の内積

1次元系における任意の波動関数 $\Psi(x)$ は関数空間における一つのベクトルとして考えられる。状態がベクトルで記述できるとき、内積の定義が必要になるが、2つの波動関数 Ψ と Φ があるとき、その内積は

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x)\Phi(x)dx \quad (1.3.1)$$

と定義される。このとき Ψ^* は Ψ の複素共役を表す。

波動関数 $\Psi(x)$ は線形独立な基底 $\psi_i(x)$ を用いて、

$$\begin{aligned} \Psi(x) &= c_1\psi_1(x) + c_2\psi_2(x) + \cdots + c_n\psi_n(x) \\ &= \sum_{i=1}^n c_i\psi_i(x) \end{aligned} \quad (1.3.2)$$

と記述することができる。 c_i は複素数の係数である。このとき基底 ψ_i は正規直交化されており、

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^*(x)\psi_j(x)dx = \delta_{ij} \quad (1.3.3)$$

を満たす。これを用いて波動関数 Ψ 自体の内積を計算すると

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x)\Psi(x)dx &= \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{i,j=1}^n c_i^*c_j\psi_i^*(x)\psi_j(x)dx \\ &= \sum_{i,j=1}^n c_i^*c_j\delta_{ij} = \sum_{i=1}^n |c_i|^2 \end{aligned}$$

となるため、波動関数の規格化は

$$\sum_{i=1}^n |c_i|^2 = 1 \quad (1.3.4)$$

と書くことができる。

1.3.2 連続的な波動関数と離散的な波動関数

波動関数の内積と規格化が定義できたので少し具体的に見てみよう。対象としている粒子を量子力学の初めに1次元の位置 x に対して図 1.3(a) のような波動関数

$$\Psi = \Psi(x) \quad (1.3.5)$$

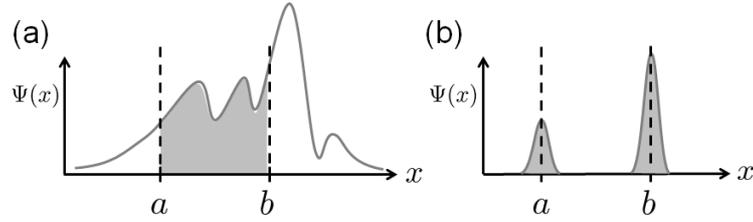


図 1.3: (a) 連続的な波動関数 (b) 離散的な波動関数

として習ったと思う。波動関数の絶対値の二乗 ($|\Psi|^2 = \Psi^*\Psi$) は確率密度を表すので、 $a \leq x \leq b$ に粒子がいる確率 $P(a \leq x \leq b)$ は、

$$P(a \leq x \leq b) = \int_a^b dx |\Psi(x)|^2 \tag{1.3.6}$$

で求められる。

量子情報ではこのような波動関数を扱う場合もあるが、情報をビットとして扱う場合など十分離散的な図 1.3(b) のような波動関数を扱う場合が多い。この場合、 $x = a$ 付近にいる Ψ_a と、 $x = b$ 付近にいる Ψ_b の2つの状態を個別の状態と考える。

$$\Psi_a = \Psi(x) \quad \text{for } x_a - \delta x < x < x_a + \delta x \tag{1.3.7}$$

$$\Psi_b = \Psi(x) \quad \text{for } x_b - \delta x < x < x_b + \delta x \tag{1.3.8}$$

このとき δx は $x = a, b$ の周辺で各々の波動関数を十分カバーする距離である。

各々の波動関数を規格化し、

$$\psi_a = \frac{\Psi_a(x)}{\sqrt{\int_{a-\delta x}^{a+\delta x} dx |\Psi_a|^2}} \tag{1.3.9}$$

$$\psi_b = \frac{\Psi_b(x)}{\sqrt{\int_{b-\delta x}^{b+\delta x} dx |\Psi_b|^2}} \tag{1.3.10}$$

としたとき、 ψ_a と ψ_b は重なりがないので

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_i^* \psi_j = \delta_{ij} \tag{1.3.11}$$

を満たし正規直交基底として扱える。

この波動関数を用いると全体の波動関数 Ψ は、

$$\Psi(x) = c_a \psi_a(x) + c_b \psi_b(x) \tag{1.3.12}$$

と表される。このとき $|c_a|^2 + |c_b|^2 = 1$ である。連続的に分布している波動関数も、あるパラメーターで十分分離されていれば（この例では位置 x に対して ψ_a, ψ_b が分離されていた。）離散的な状態として考えることができる。

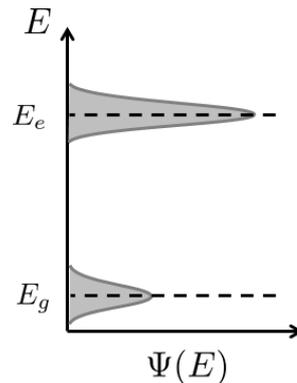


図 1.4: 離散的な波動関数のエネルギースペクトル

後に述べる量子ビットの多くは、図 1.4 のように波動関数を位置 x による状態表記ではなく、エネルギー軸での状態を用いている。この場合、同様の手法を用いて、

$$\Psi = c_g \psi_g + c_e \psi_e \quad (1.3.13)$$

と表せる。同様に波動関数全体の規格化条件から

$$|\Psi|^2 = |c_g|^2 + |c_e|^2 = 1 \quad (1.3.14)$$

であり、基底状態には $|c_g|^2$ 、励起状態には $|c_e|^2$ の確率で、離散的な状態に粒子が存在するように記述できる。実験的にはエネルギーというパラメーターに対して連続的に分布する量子状態も、その分布が十分別れていれば必要な範囲だけ積分することで、幾つかの離散的な状態として扱える。このような状態を用いて 0 の状態を $\psi_0 \equiv \psi_g$ 、1 の状態を $\psi_1 \equiv \psi_e$ とすることで量子ビットの状態、

$$\Psi = c_0 \psi_0 + c_1 \psi_1 \quad (1.3.15)$$

として用いることができる。

1.3.3 演算子

演算子 (operator) は波動関数に対する作用素として与えられ、本書の前半では区別のため \hat{A} とアクセント記号を付けて記述する。本書後半ではたくさんの演算子が登場し、見目が少しごちゃごちゃするのでアクセント記号を省略する。読者には後半に進むまでに、式の中のどれが演算子かわかるようになっていただきたい。

オペレーター \hat{A} を波動関数に作用させると、作用後の新たな波動関数は

$$\Psi' = \hat{A}\Psi \quad (1.3.16)$$

となる。ある物理量 O に対するオペレーターが \hat{O} の場合、波動関数 Ψ に対する物理量 O の期待値は

$$\langle O \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) \hat{O} \Psi(x) dx \quad (1.3.17)$$

を用いて求めることができる。

1.4 Dirac 表示

上記の波動関数及びオペレーターの記述を Dirac 表示という方法を用いて記述する。この方法は様々な意味で表示が簡素化され、直感的にもわかりやすい記述になっていることがすぐに理解できると思う。なお、以下の議論に本来必要な位置表示などの詳細は付録 A に記載する。

波動関数 Ψ で表される量子状態は Dirac 表示を用いて

$$\Psi \rightarrow |\Psi\rangle \quad (1.4.1)$$

と表す。英語で括弧のことを braket と呼ぶのにちなんで ket ベクトルと呼ばれる。この ket ベクトルには相対空間にある bra ベクトルというベクトルが存在し

$$\Psi^* \rightarrow \langle \Psi| \quad (1.4.2)$$

と記される。また波動関数が複数の量子数 (n, l, m, \dots) で表される場合などは、その量子数を用いて

$$\Psi_{nlm\dots} \rightarrow |nlm\dots\rangle \quad (1.4.3)$$

と書かれることが多い。この Dirac 表示を用いて2つの量子状態 $|\Psi\rangle$ と $|\Phi\rangle$ の内積は

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) \Phi(x) dx \rightarrow \langle \Psi|\Phi\rangle \quad (1.4.4)$$

と表示される。感の良い読者は気づいたかもしれないが、 $|\Psi\rangle$ や $\langle \Psi|$ のように braket が閉じていないものはベクトル状態であり、閉じているものは内積が取られた数字（スカラー）である。この便利な Dirac 表示を用いて量子状態の記述を以下にさらう。（多次元空間ベクトルのまとめ：式 1.1.39-1.1.44 と比較していただきたい）

波動関数 $|\Psi\rangle$ は線形独立な基底 $|\psi_i\rangle$ を用いて、

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= c_1 |\psi_1\rangle + c_2 |\psi_2\rangle + \dots + c_n |\psi_n\rangle \\ &= \sum_{i=1}^n c_i |\psi_i\rangle \end{aligned} \quad (1.4.5)$$

と記述することができる。またこの状態に対応した bra ベクトルは

$$\begin{aligned} \langle \Psi| &= c_1^* \langle \psi_1| + c_2^* \langle \psi_2| + \dots + c_n^* \langle \psi_n| \\ &= \sum_{i=1}^n c_i^* \langle \psi_i| \end{aligned} \quad (1.4.6)$$

である。

基底の正規直交化条件および波動関数 $|\Psi\rangle$ の規格化条件は各々

$$\langle\psi_i|\psi_j\rangle = \delta_{ij} \quad (1.4.7)$$

$$\begin{aligned} \langle\Psi|\Psi\rangle &= \sum_{i,j} c_i c_j^* \langle\psi_j|\psi_i\rangle = \sum_{i,j=1}^n c_i c_j^* \delta_{ij} \\ &= \sum_{i=1}^n |c_i|^2 = 1 \end{aligned} \quad (1.4.8)$$

と非常に簡便に書くことができる。

同様に演算子の作用も Dirac 表示で記述できる。 \hat{A} の作用を受けた状態 $|\Psi\rangle$ は

$$|\Psi'\rangle = \hat{A}|\Psi\rangle \quad (1.4.9)$$

となり。波動関数 Ψ に対する物理量 O の期待値は

$$\langle O \rangle = \langle\Psi|\hat{O}\Psi\rangle = \langle\Psi|\hat{O}|\Psi\rangle \quad (1.4.10)$$

と記述できる。もちろん物理量の期待値は数字として出てくるため bracket に囲まれた形になっている。最後の等号は同じことを表しているが、 $|\hat{O}\Psi\rangle$ は演算子 \hat{O} が $|\Psi\rangle$ に作用した後の状態というニュアンスが明示的に書かれている。

1.5 行列表示

Dirac 表示に続き状態の行列表示もここで紹介しよう。波動関数表示では関数を状態ベクトルとして捉えていたが、ベクトルとしては我々に馴染み深い行列の形で量子状態を記述することができる。

ket ベクトル $|\Psi\rangle$ は通常縦ベクトルとして記述される。このとき正規直交化された基底 $|\psi_i\rangle$ を用いると

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= c_1 |\psi_1\rangle + c_2 |\psi_2\rangle + \cdots + c_n |\psi_n\rangle \\ &= c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} + \cdots + c_n \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (1.5.1)$$

と表される。これに対し $\langle\Psi|$ は $|\Psi\rangle$ を横ベクトルにしたものに対して複素共役をとった

$$\langle\Psi| = \left(c_1^* \quad c_2^* \quad \cdots \quad c_n^* \right) \quad (1.5.2)$$

と記述される。内積は bra と ket ベクトルをそのまま並べて行列計算ができるように

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = \left(c_1^* \quad c_2^* \quad \cdots \quad c_n^* \right) \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix} \quad (1.5.3)$$

$$= \sum_{i=1}^n |c_i|^2 = 1 \quad (1.5.4)$$

となっている。また、上記から

$$\langle\Psi|\Psi'\rangle = \left(c_1^* \quad c_2^* \quad \cdots \quad c_n^* \right) \begin{pmatrix} c'_1 \\ c'_2 \\ \vdots \\ c'_n \end{pmatrix} \quad (1.5.5)$$

$$= \sum_{i=1}^n c_i^* c'_i = \sum_{i=1}^n (c_i c'_i)^* \quad (1.5.6)$$

$$= \langle\Psi'|\Psi\rangle^* \quad (1.5.7)$$

である。

演算子は行列として表され、例えば3つの基底からなる演算子 \hat{A} は

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{pmatrix} \quad (1.5.8)$$

の形で表され、演算子の作用は

$$\begin{aligned} |\Psi'\rangle &= \hat{A}|\Psi\rangle \\ &= \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} c_1 A_{11} + c_2 A_{12} + c_3 A_{13} \\ c_1 A_{21} + c_2 A_{22} + c_3 A_{23} \\ c_1 A_{31} + c_2 A_{32} + c_3 A_{33} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (1.5.9)$$

のように記述できる。また式 (1.5.2) より、

$$\langle \Psi' | \quad (1.5.10)$$

$$= \left(c_1^* A_{11}^* + c_2^* A_{12}^* + c_3^* A_{13}^* \quad c_1^* A_{21}^* + c_2^* A_{22}^* + c_3^* A_{23}^* \quad c_1^* A_{31}^* + c_2^* A_{32}^* + c_3^* A_{33}^* \right)$$

$$= \begin{pmatrix} c_1^* & c_2^* & c_3^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{11}^* & A_{21}^* & A_{31}^* \\ A_{12}^* & A_{22}^* & A_{32}^* \\ A_{13}^* & A_{23}^* & A_{33}^* \end{pmatrix}$$

$$= \langle \Psi | \hat{A}^\dagger \quad (1.5.11)$$

となる。最後の行の $\hat{A}^\dagger = (\hat{A}^T)^*$ は後に詳細を示すが行列 \hat{A} の Hermite 共役である。

また先述の $\langle \Psi | \Psi' \rangle = \langle \Psi' | \Psi \rangle^*$ を用いると、

$$\langle \Phi | \Psi' \rangle = \langle \Psi' | \Phi \rangle^* \quad (1.5.12)$$

$$\langle \Phi | \hat{A} | \Psi' \rangle = \langle \Psi' | \hat{A}^\dagger | \Phi \rangle^* \quad (1.5.13)$$

が導かれる。

量子系の解析では多くの演算子は正方行列として用いられるため、演算子のトレースが定義できる。行列のトレースと同じく

$$\text{Tr } \hat{A} = \sum_i \langle \psi_i | \hat{A} | \psi_i \rangle = \sum A_{ii} \quad (1.5.14)$$

と定義される。

1.6 波動関数の主な性質

波動関数の主な性質を下記にまとめる、先述した“多次元空間でのベクトルと行列の成分表示”と一対一の対応があるので慣れていなければ一度見返していただきたい。

$$\text{正規直交基底} \quad \langle \psi_i | \psi_j \rangle = \delta_{ij} \quad (1.6.1)$$

$$\text{波動関数成分} \quad c_i = \langle \psi_i | \Psi \rangle \quad (1.6.2)$$

$$\text{波動関数の正規化} \quad \sum_i |c_i|^2 = 1 \quad (1.6.3)$$

$$\text{ノルム} \quad \text{norm}(\Psi) = \sqrt{\sum_i \langle \Psi | \Psi \rangle} = \sqrt{\sum_i |c_i|^2} \quad (1.6.4)$$

$$\text{波動関数の内積} \quad \langle \Psi_a | \Psi_b \rangle = \sum_i a_i^* b_i \quad (1.6.5)$$

$$\text{波動関数の外積} \quad (|\Psi_a\rangle \langle \Psi_b|)_{ij} = \langle \psi_i | \Psi_a \rangle \langle \Psi_b | \psi_j \rangle = a_i^* b_j \quad (1.6.6)$$

演算子成分と基底の関係 $A_{ij} = \langle \psi_i | \hat{A} | \psi_j \rangle$ (1.6.7)

積で与えられた演算子の成分 $C_{ij} = \langle \psi_i | \hat{C} | \psi_j \rangle$
 $= \sum_k \langle \psi_i | \hat{A} | \psi_k \rangle \langle \psi_k | \hat{B} | \psi_j \rangle$
 $= \sum_k A_{ik} B_{kj}$ (1.6.8)

演算子の Hermite 共役 $C_{ij}^\dagger = \langle \psi_i | \hat{C}^\dagger | \psi_j \rangle = \langle \psi_j | \hat{C} | \psi_i \rangle^*$
 $= \sum_k \langle \psi_j | \hat{A} | \psi_k \rangle \langle \psi_k | \hat{B} | \psi_i \rangle^* = \sum_k A_{jk}^* B_{ki}^*$ (1.6.9)

トレース $\text{Tr } \hat{A} = \sum_i \langle \psi_i | \hat{A} | \psi_i \rangle = \sum A_{ii}$ (1.6.10)

完全系 $\hat{I} = \sum_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ (1.6.11)

演算子の作用 $c'_i = \langle \psi_i | \Psi' \rangle = \sum_j \langle \psi_i | \hat{A} | \psi_j \rangle \langle \psi_j | \Psi \rangle$
 $= \sum_j A_{ij} c_j$ (1.6.12)

上記では $|\Psi\rangle = \sum_i c_i |\psi_i\rangle$, $|\Psi'\rangle = \sum_i c'_i |\psi_i\rangle$, $\hat{C} = \hat{A}\hat{B}$ を用いた。

1.7 合成系

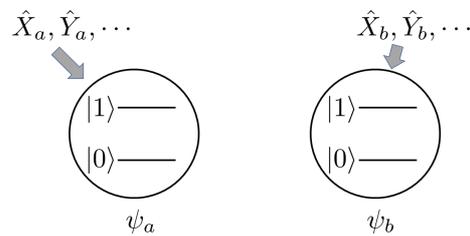


図 1.5: 二つの量子ビットの合成系

これまでは単一粒子の状態について考えてきたが、異なる粒子を同時に考えたりお互いの粒子が結合している様子を考える場合、複数の量子状態を1つの状態として簡便に記述する必要がある。例えば図 1.5 のように2つの量子ビットがある場合、これを1つの合成系と考えると直積記号 \otimes を用いて

$$\psi_a \text{ と } \psi_b \text{ の合成系: } |\psi_a\rangle \otimes |\psi_b\rangle \quad (1.7.1)$$

と記述できる。この合成系は下記の線形特性を持っている

$$\alpha(|\psi_a\rangle \otimes |\psi_b\rangle) = (\alpha|\psi_a\rangle) \otimes |\psi_b\rangle = |\psi_a\rangle \otimes (\alpha|\psi_b\rangle) \quad (1.7.2)$$

$$(|\psi_a\rangle + |\psi'_a\rangle) \otimes |\psi_b\rangle = |\psi_a\rangle \otimes |\psi_b\rangle + |\psi'_a\rangle \otimes |\psi_b\rangle \quad (1.7.3)$$

$$|\psi_a\rangle \otimes (|\psi_b\rangle + |\psi'_b\rangle) = |\psi_a\rangle \otimes |\psi_b\rangle + |\psi_a\rangle \otimes |\psi'_b\rangle. \quad (1.7.4)$$

また2つ以上の粒子、 $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n$ を扱う場合も、

$$|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_n\rangle \quad (1.7.5)$$

と拡張できる。記述を簡便にするために

$$|\psi_a\rangle \otimes |\psi_b\rangle \equiv |\psi_a\rangle |\psi_b\rangle \equiv |\psi\rangle_a |\psi\rangle_b \equiv |\psi_a\psi_b\rangle \quad (1.7.6)$$

$$|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_n\rangle \quad (1.7.7)$$

$$\equiv |\psi_1\rangle |\psi_2\rangle \dots |\psi_n\rangle \equiv |\psi\rangle_1 |\psi\rangle_2 \dots |\psi\rangle_n \equiv |\psi_1\psi_2 \dots \psi_n\rangle \quad (1.7.8)$$

など文献によって様々な記述がある。3つ目の記述方法 $|\psi_1\psi_2 \dots \psi_n\rangle$ は、前述した複数の量子数を持つ状態 $\Psi_{nlm\dots} \equiv |nlm\dots\rangle$ と混同する場合があるので気をつけていただきたい。

2つの合成系の状態が正規直交基底 $|\psi_i\rangle$ 、 $|\phi_i\rangle$ を用いて

$$|\Psi_a\rangle = |\psi_a\rangle |\phi_{a'}\rangle \quad (1.7.9)$$

$$|\Psi_b\rangle = |\psi_b\rangle |\phi_{b'}\rangle \quad (1.7.10)$$

と表されるとき、2つの状態の内積は

$$\begin{aligned} \langle \Psi_a | \Psi_b \rangle &= \langle \psi_a | \psi_b \rangle \langle \phi_{a'} | \phi_{b'} \rangle \\ &= \delta_{ab} \delta_{a'b'} \end{aligned} \quad (1.7.11)$$

となる。つまり個別系の片方でも直交している場合は合成系も直交していることとなる。

これを拡張して任意の状態が

$$|\Psi_a\rangle = \sum_{i,j} c_{ij} |\psi_i\rangle |\phi_j\rangle \quad (1.7.12)$$

$$|\Psi_b\rangle = \sum_{k,l} d_{kl} |\psi_k\rangle |\phi_l\rangle \quad (1.7.13)$$

と表されるとき、この2つの状態の内積は

$$\begin{aligned} \langle \Psi_a | \Psi_b \rangle &= \sum_{i,j,k,l} c_{ij}^* d_{kl} \langle \psi_i | \psi_k \rangle \langle \phi_j | \phi_l \rangle \\ &= \sum_{i,j,k,l} c_{ij}^* d_{kl} \delta_{ik} \delta_{jl} \\ &= \sum_{i,k} c_{ij}^* d_{kk} \end{aligned} \quad (1.7.14)$$

となる。

さて、図 1.5 の系を用いて具体的な例を紹介しよう。2つの量子状態が

$$|\psi_a\rangle = a_0 |0\rangle + a_1 |1\rangle \quad (1.7.15)$$

$$|\psi_b\rangle = b_0 |0\rangle + b_1 |1\rangle \quad (1.7.16)$$

のように与えられ、各々の量子状態 $|\psi_i\rangle$ は規格化されているので

$$\sum_{i=0}^1 |a_i|^2 = \sum_{i=0}^1 a_i^* a_i = |a_0|^2 + |a_1|^2 = 1 \quad (1.7.17)$$

$$\sum_{j=0}^1 |b_j|^2 = \sum_{j=0}^1 b_j^* b_j = |b_0|^2 + |b_1|^2 = 1 \quad (1.7.18)$$

である。

このとき合成系は

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= |\psi_a\rangle |\psi_b\rangle \\ &= (a_0 |0\rangle + a_1 |1\rangle) \otimes (b_0 |0\rangle + b_1 |1\rangle) \\ &= a_0 b_0 |00\rangle + a_0 b_1 |01\rangle + a_1 b_0 |10\rangle + a_1 b_1 |11\rangle \end{aligned} \quad (1.7.19)$$

となる。ここで、例えば $|01\rangle$ は、粒子 a が 0 状態 ($|0\rangle$) に粒子 b が 1 状態 ($|1\rangle$) にいる状態である。先述のように $|00\rangle$ 、 $|01\rangle$ 、 $|10\rangle$ 、と $|11\rangle$ はお互いに直交した状態である。

この合成系の内積は

$$\begin{aligned} \langle\Psi|\Psi\rangle &= (a_0^* b_0^* \langle 00| + a_0^* b_1^* \langle 01| + a_1^* b_0^* \langle 10| + a_1^* b_1^* \langle 11|) \\ &\quad \times (a_0 b_0 |00\rangle + a_0 b_1 |01\rangle + a_1 b_0 |10\rangle + a_1 b_1 |11\rangle) \\ &= a_0^* a_0 b_0^* b_0 + a_0^* a_0 b_1^* b_1 + a_1^* a_1 b_0^* b_0 + a_1^* a_1 b_1^* b_1 \\ &= (a_0^* a_0 + a_1^* a_1)(b_0^* b_0 + b_1^* b_1) = (|a_0|^2 + |a_1|^2)(|b_0|^2 + |b_1|^2) = 1 \end{aligned} \quad (1.7.20)$$

となり、合成前の状態 $|\psi_a\rangle$ 、 $|\psi_b\rangle$ が規格化されていれば合成系である $|\Psi\rangle$ は自動的に規格化されているのがわかる。

1.7.1 合成系の演算子

図 1.5 のように 2つの量子ビットが十分離れていて各々操作ができる場合、当然片方の操作はもう片方に影響がない。つまり量子状態が $|\psi\rangle = |\psi_a\rangle \otimes |\psi_b\rangle$ で書かれ、 $|\psi_a\rangle$ 、 $|\psi_b\rangle$ に対応する演算子が \hat{A} 、 \hat{B} の場合、合成系に作用する演算子は

$$\hat{A} \otimes \hat{B} \quad (1.7.21)$$

と記述され、その作用は

$$\begin{aligned} (\hat{A} \otimes \hat{B})|\psi\rangle &= (\hat{A} \otimes \hat{B})|\psi_a\rangle \otimes |\psi_b\rangle \\ &= \hat{A}|\psi_a\rangle \otimes \hat{B}|\psi_b\rangle \end{aligned} \tag{1.7.22}$$

となる。合成系のうち $|\psi_a\rangle$ にだけ \hat{A} を作用させるときは、図 1.6 のように片方だけ演算子が作用し合成系には $\hat{A} \otimes \hat{I}$ が作用される。合成系の演算子 $\hat{A} \otimes \hat{B}$ の Hermite 共役

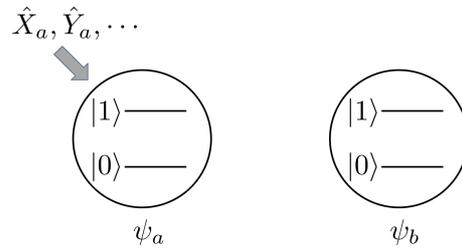


図 1.6: 二つの量子ビットの合成系

もしばしば必要となるが

$$(\hat{A} \otimes \hat{B})^\dagger = \hat{A}^\dagger \otimes \hat{B}^\dagger \tag{1.7.23}$$

となり、基本的には各々が独立しているのがわかる。

1.7.2 合成系の行列表示

合成系の演算も行列表示を用いると簡便なことが多い。先述のように2つの量子ビットの状態が

$$|\psi_a\rangle = a_0|0\rangle + a_1|1\rangle = \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} \tag{1.7.24}$$

$$|\psi_b\rangle = b_0|0\rangle + b_1|1\rangle = \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \end{pmatrix} \tag{1.7.25}$$

である場合、合成系 $|\psi\rangle = |\psi_a\rangle|\psi_b\rangle$ は行列表示を用いて、

$$\begin{aligned}
|\psi\rangle &= |\psi_a\rangle |\psi_b\rangle \\
&= \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} a_0 \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \end{pmatrix} \\ a_1 \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \end{pmatrix} \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} a_0 b_0 \\ a_0 b_1 \\ a_1 b_0 \\ a_1 b_1 \end{pmatrix} \tag{1.7.26}
\end{aligned}$$

と「入れ子」の形で記述される。同様に $|\psi_a\rangle$ に作用する \hat{X}_a と $|\psi_b\rangle$ に作用する \hat{Z}_b が各々

$$X_a = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{1.7.27}$$

$$Z_b = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{1.7.28}$$

とある場合、合成系の演算子は

$$X_a \otimes Z_b = \begin{pmatrix} 0 \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} & 1 \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ 1 \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} & 0 \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{1.7.29}$$

と同じく入れ子の形で記述される。当然入れ子の順番を間違えると変な行列ができてしまうので気をつけていただきたい。

1.7.3 量子もつれ状態

先程の例は2つの個別粒子の量子状態を直積の形で表したが、直積では記述できないような混合系の量子状態が存在する。例えば

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle) \tag{1.7.30}$$

と言う状態を考えたとき、この状態は直積状態として $|\psi_a\rangle \otimes |\psi_b\rangle$ の形で記述できない。直積で記述できる具体的な例として $|\Psi\rangle = |00\rangle + |01\rangle$ は、

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |01\rangle) = |0\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \tag{1.7.31}$$

のように直積で記述できる。

式 (1.7.30) ように直積で表せない状態を量子もつれ状態 (Entanglement State)、(もしくはもつれ状態、もつれ合い状態) とよび、量子情報では非常に重要な状態である。2つの量子ビットで頻繁に用いられるもつれ合い状態として以下の4つのベル状態とよばれるものがある。

$$|\Phi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle) \tag{1.7.32}$$

$$|\Phi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle - |11\rangle) \tag{1.7.33}$$

$$|\Psi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle) \tag{1.7.34}$$

$$|\Psi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |10\rangle) \tag{1.7.35}$$

式 (1.7.30) の例はベル状態の1つであることがわかる。このもつれ合い状態、例えば $|\Phi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$ は測定した場合、50%の確率で $|00\rangle$ か $|11\rangle$ に確定する。

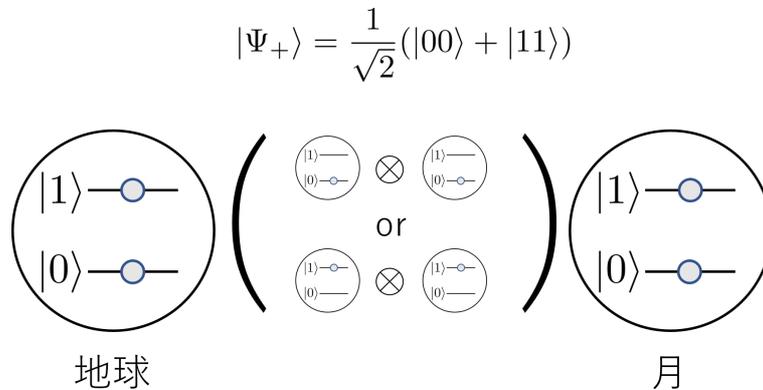


図 1.7: ベル状態の測定

これはよく考えるととても不思議である。例えば $|\Phi_+\rangle$ にある状態の2個の量子ビットのうち1個めを自分が、もう1つのを友人に渡した後その友人は月まで行ってしまったとする。ある日、自分が思いつきで自分の量子ビットを測定したとき $|1\rangle$ が観測された。この瞬間状態は $|11\rangle$ だということが確定するので、友人が持っている量子ビットが $|1\rangle$ だということが自分にはわかる。それはまるで、月までいる友人の量子ビットの状態の情報がこちらに一瞬で飛んで来たようである。ちなみに2人が前述した $|\psi_a\rangle|\psi_b\rangle = (a_0|0\rangle + a_1|1\rangle) \otimes (b_0|0\rangle + b_1|1\rangle)$ のような直積で記述できる状態を持っていると、例えば私が自分の状態が $|1\rangle$ だとわかってても月の友人の状態は $|0\rangle$ か $|1\rangle$ かわからない。もつれ合い状態から生まれるこの不思議な相関(2つの粒子の関係性)は量子相

関とよばれ、量子状態でのみ起きる古典的には無い相関である。この量子相関が量子情報処理などではそのパワーの重要な源として上げられるためとても重要な概念である。

1.7.4 しばしば使われる量子状態の記述

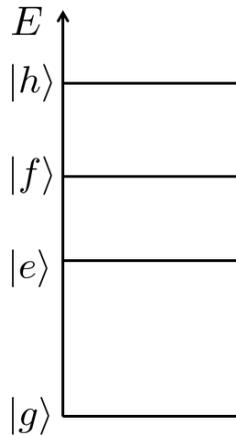


図 1.8: 離散的な量子状態の記法の例

表 1.1: 物理状態のよくある記述

物理系	状態	表記
原子	基底状態	$ g\rangle$
	励起状態	$ e\rangle$
	さらに上の励起状態	$ f\rangle, h\rangle, \dots$
量子ビット	0 状態	$ 0\rangle$
	1 状態	$ 1\rangle$
調和振動子	n 状態 $(0, 1, 2, \dots, n)$	$ 0\rangle, 1\rangle, 2\rangle, \dots, n\rangle$
光子	縦偏光	$ \downarrow\rangle$
	横偏光	$ \leftrightarrow\rangle$
	斜め右偏光	$ \nearrow\rangle$
	斜め左偏光	$ \nwarrow\rangle$
その他	補助準位	$ a\rangle$

本書では様々な量子状態を扱うが、主に二準位系と調和振動子の状態を扱っていく。二準位系の代表として量子ビットがあるが、 $|0\rangle$ と $|1\rangle$ を用いてその状態を表せる。また調和振動子はその粒子数から $|n\rangle$ という状態で記述することができる。しかし実験的には例えば原子などエネルギー状態を扱う場合、図 1.8(a) のように基底状態は $|g\rangle$ 、励

起状態は $|e\rangle$ 、さらに実験的補助準位として用いられるさらに上の状態は $|f\rangle$ 、 $|h\rangle$ と表記されることが多い。また様々な量子系でこれらの補助準位 (auxiliary state もしくは ancillary state) として $|a\rangle$ が用いられることがしばしばある。また光子では、その偏光状態を用いた状態記述など扱う量子系によって同じ二準位系や調和振動子を扱いつつも直感的にわかりやすい記述が各々の系で用いられることが多い。本書でも扱う代表的な状態表記を表 1.1 にまとめる。

1.8 固有ベクトルと固有値

量子状態が記述されるベクトル空間に作用する演算子には、演算子に付随する固有値と固有ベクトルというものが存在する。演算子 \hat{A} が状態 $|\psi\rangle$ に作用し

$$\hat{A}|\psi\rangle = a|\psi\rangle \quad (1.8.1)$$

となるとき、 a を演算子 \hat{A} の固有値、そして $|\psi\rangle$ は固有値 a に対応する固有ベクトルとよぶ。任意の演算子 \hat{A} の固有値は特性関数

$$c(\lambda) \equiv \det |\hat{A} - \lambda I| = 0 \quad (1.8.2)$$

の解 λ として計算できる。このとき I は単位行列を表す。

特性関数の式を見るとわかるが、固有値 λ は複数存在できるが、代数学からの帰結として少なくとも1つの固有値またそれに対応する固有ベクトルが任意の演算子には存在することが知られている。後に詳細を述べる重要な演算子として物理量の演算子がある。例えば運動量の演算子 \hat{p} を運動量の固有状態である波動関数 $|\Psi_p\rangle$ に作用させると

$$\hat{p}|\Psi_p\rangle = p|\Psi_p\rangle \quad (1.8.3)$$

となり、運動量 p が固有値として導ける。

ある演算子に複数の固有値 λ_i が存在し、それに対応する固有ベクトル $|\psi_i\rangle$ が正規直交化できる場合、

$$\begin{aligned} \hat{A} &= \sum_i^n \lambda_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \\ &= \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_n \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (1.8.4)$$

と記述できる場合がある。このとき行列の非対角項は全て0である。この表現を演算子の対角表現とよび、対角化できる演算子のことを対角化可能な演算子とよぶ。対角化された演算子の重要性は様々あり、計算が簡単なことや固有状態との対応がわかりやすいなどある。他にも後に述べる状態の量子測定などに便利である。

1.9 演算子の種類

量子状態が記述されるベクトル空間に作用する演算子には様々なものがあるが、演算子の特徴により分類分けができる。ここでは後に重要となる、Hermite、ユニタリー、そして正の演算子の定義とそれらが量子力学においてどのような性質を持つかを述べる。

1.9.1 Hermite 演算子

任意の演算子 \hat{A} に対して、Hermite 共役演算子 \hat{A}^\dagger は波動関数の内積を用いて

$$\langle \phi | \hat{A} \psi \rangle = \int \psi^* \hat{A} \phi dx = \int \psi (\hat{A}^\dagger \phi)^* dx = \langle \hat{A}^\dagger \phi | \psi \rangle \quad (1.9.1)$$

を満たす演算子と定義できる。行列を用いた表現だと \hat{A}^\dagger は非常に簡単に求めることができ

$$\hat{A}^\dagger = (\hat{A}^T)^* \quad (1.9.2)$$

と表される。このとき \hat{A}^T は行列 \hat{A} の転置、つまりもとの行列 \hat{A} の転置と複素共役を取れば Hermite 共役演算子が導ける。また、行列表示を用いると以下の Hermite 共役演算子の特徴が簡単に導ける。

$$(\hat{A}^\dagger)^\dagger = (((\hat{A}^T)^*)^T)^* = (\hat{A}^T)^T = \hat{A} \quad (1.9.3)$$

$$(c\hat{A})^\dagger = c^* \hat{A}^\dagger \quad (1.9.4)$$

$$(\hat{H}_1 + \hat{H}_2)^\dagger = \hat{H}_1^\dagger + \hat{H}_2^\dagger \quad (1.9.5)$$

$$(\hat{H}_1 \hat{H}_2)^\dagger = \hat{H}_2^\dagger \hat{H}_1^\dagger \quad (1.9.6)$$

ある演算子 \hat{H} の Hermite 共役演算子が \hat{H}^\dagger が元の演算子と同じ場合、つまり

$$\hat{H}^\dagger = \hat{H} \quad (1.9.7)$$

のとき、 \hat{H} は Hermite 演算子とよばれる。Hermite 演算子は波動関数の内積に関して以下の特徴をもつ。

$$\langle \psi | \hat{H} \phi \rangle = \langle \hat{H} \psi | \phi \rangle \quad (1.9.8)$$

Hermite 演算子は物理量と密接に結びついており、我々が測定する物理量に対応する演算子は全て Hermite 演算子である。

測定される物理量はその性質上、全て実数でなければならないため、もちろん期待値も実数になるはずである。以下では逆証明になるが、Hermite 演算子の期待値や固有値は実数になることを示す。Hermite 演算子 \hat{H} の期待値の複素共役を取ると

$$\langle H \rangle^* = \langle \Psi | \hat{H} \Psi \rangle^* = \langle \hat{H} \Psi | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{H} \Psi \rangle = \langle H \rangle \quad (1.9.9)$$

演算子 \hat{H} の期待値と同じになる、つまりこれは期待値が実数であることを表している。また、同様に Hermite 演算子の固有値 λ_i とそれに対応する固有ベクトル $|\psi_i\rangle$ があるとき $\langle H \rangle^*$ は、

$$\langle H \rangle^* = \left(\langle \psi_i | \hat{H} \psi_i \rangle \right)^* = (\lambda_i \langle \psi_i | \psi_i \rangle)^* = \lambda_i^* \quad (1.9.10)$$

$$\langle H \rangle^* = \left(\langle \psi_i | \hat{H} \psi_i \rangle \right)^* = \left(\langle \hat{H} \psi_i | \psi_i \rangle \right)^* \quad (1.9.11)$$

$$= (\lambda_i^* \langle \psi_i | \psi_i \rangle)^* = \lambda_i \quad (1.9.12)$$

と2つの答えが出るが、これを満たす固有値 λ_i は実数でなければならない。つまり、Hermite 演算子は必ずその固有値が実数になり、全ての物理量は Hermite 演算子で記述される。

1.9.2 射影演算子

Hermite 演算子の中でも重要な演算子が射影演算子である。ある任意の状態 $|\Psi\rangle$ があり、この状態を基底 $|\psi_i\rangle \equiv |i\rangle$ で展開すると

$$|\Psi\rangle = \sum_i c_i |i\rangle \quad (1.9.13)$$

となるとき。

この状態 $|\Psi\rangle$ を基底 $|\psi_m\rangle \equiv |m\rangle$ に射影する演算子は

$$|m\rangle\langle m| \quad (1.9.14)$$

と書かれ、射影後の状態 $|\Psi\rangle$ は

$$|m\rangle\langle m|\Psi\rangle = \sum_i c_i |m\rangle\langle m|i\rangle = c_m |m\rangle \quad (1.9.15)$$

となり、基底 $|m\rangle$ と射影成分 $c_m = \langle m|\Psi\rangle$ で表される。ベクトル空間を張る正規直交基底 $(|j\rangle)$ の射影演算子の和 P は、

$$P = \sum_j |j\rangle\langle j| = \sum_j |\psi_j\rangle\langle\psi_j| = I \quad (1.9.16)$$

となる。この性質は非常に使いやすい。例えばある波動関数 $|\Phi\rangle$ が先述とは異なる基底 $|\phi_i\rangle$ を用いて

$$|\Phi\rangle = \sum_i d_i |\phi_i\rangle \quad (1.9.17)$$

のように記述されている場合、式(1.9.16)を用いて

$$|\Psi\rangle = \sum_i d_i I |\phi_i\rangle \quad (1.9.18)$$

$$= \sum_{i,j} d_i |\psi_j\rangle\langle\psi_j|\phi_i\rangle \quad (1.9.19)$$

$$= \sum_j d_j \alpha_{ji} |\psi_j\rangle \quad (1.9.20)$$

のように簡単に基底変換、つまり任意の基底に書き換えることができる。このとき $\alpha_{ji} = \langle \psi_j | \phi_i \rangle$ である。

1.9.3 ユニタリー演算子

ある演算子 \hat{U} が

$$\hat{U}^\dagger \hat{U} = I \quad (1.9.21)$$

を満たすとき、 \hat{U} はユニタリー演算子とよばれる。任意の状態ベクトル $|\psi\rangle$ と $|\phi\rangle$ に演算子 \hat{U} を作用させたとき ($|\psi\rangle, |\phi\rangle \rightarrow \hat{U}|\psi\rangle \equiv |\alpha\rangle, \hat{U}|\phi\rangle \equiv |\beta\rangle$)、この2つの状態ベクトルの内積は

$$\begin{aligned} \langle \alpha | \beta \rangle &= \langle \psi | \hat{U}^\dagger \hat{U} | \phi \rangle \\ &= \langle \psi | \phi \rangle \end{aligned} \quad (1.9.22)$$

となり内積が保存されていることがわかる。後に詳細を述べるが、閉じた量子系における時間発展は全てユニタリー演算子を用いた変換、ユニタリー変換によって記述できる。また式 (1.9.21) は $U^{-1} = U^\dagger$ つまり全てのユニタリー演算子には逆演算子が存在すると言う意味である。これは物理的に言うと全てのユニタリー演算子で行える操作は可逆操作であることを表す。量子情報のコンテキストでは、全ての操作を損失なく可逆に行えるようにするのが理想である。そのためしばしば「理想の量子的な操作」と言う意味で「ユニタリーな操作」と言われることがある。

1.9.4 Pauli 行列

量子操作に重要な演算子として Pauli 演算子がある。Pauli 行列とも呼ばれるこの演算子は、後に述べるスピン-1/2 の角運動量を記述するのににに用いられるほか、物理全般で頻繁に使われるため是非覚えていただきたい。Pauli 演算子の表記には幾つかの異なる方法があるが、一般的に

$$\hat{\sigma}_0 \equiv \hat{I} \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (1.9.23)$$

$$\hat{\sigma}_1 \equiv \hat{\sigma}_x \equiv \hat{X} \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.9.24)$$

$$\hat{\sigma}_2 \equiv \hat{\sigma}_y \equiv \hat{Y} \equiv \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (1.9.25)$$

$$\hat{\sigma}_3 \equiv \hat{\sigma}_z \equiv \hat{Z} \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (1.9.26)$$

このどれかで記述される。

Pauli 演算子は全て

$$\sigma_i^\dagger = \sigma_i \quad (1.9.27)$$

$$\sigma_i^\dagger \sigma_i = I \quad (1.9.28)$$

なので、Hermite でありユニタリーな演算子である。また

$$\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \sigma_3^2 = -i\sigma_1\sigma_2\sigma_3 = I \quad (1.9.29)$$

を満たす。

後に示す Bloch 球を用いた二準位系の記述では Pauli 演算子の指数演算子が Bloch 球上での回転演算子 $\hat{R}_i(\theta)$ が導ける。 $\hat{A}^2 = I$ の演算子には

$$e^{i\theta\hat{A}} = \cos\theta\hat{I} + i\sin\theta\hat{A} \quad (1.9.30)$$

が使えるので、

$$\hat{R}_x(\theta) \equiv e^{-i\frac{\theta}{2}\hat{X}} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -i\sin\frac{\theta}{2} \\ -i\sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (1.9.31)$$

$$\hat{R}_y(\theta) \equiv e^{-i\frac{\theta}{2}\hat{Y}} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -\sin\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (1.9.32)$$

$$\hat{R}_z(\theta) \equiv e^{-i\frac{\theta}{2}\hat{Z}} = \begin{pmatrix} e^{-i\theta/2} & 0 \\ 0 & e^{i\theta/2} \end{pmatrix} \quad (1.9.33)$$

となる。 $\hat{R}_i(\theta)$ は i 軸に対して θ の回転を施す演算子となっている。

1.9.5 演算子関数

演算子 \hat{A} が関数の形 $f(\hat{A})$ を取って出てくることがしばしばある。Taylor 展開で任意の関数 $f(x)$ が

$$f(x) = f(0) + f'(0)x + \cdots + \frac{1}{n!}f^{(n)}(0)x^n + \cdots \quad (1.9.34)$$

と書けるのと同様に演算子の関数は、

$$f(\hat{A}) = f(0)\hat{I} + f'(0)\hat{A} + \cdots + \frac{1}{n!}f^{(n)}(0)\hat{A}^n + \cdots \quad (1.9.35)$$

と定義される。このとき $\hat{A}^n = \hat{A}\cdots\hat{A}$ と n 個の演算子 \hat{A} の積である。特に重要なのは演算子の指数関数で以下のように表される。

$$e^{\hat{A}} \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat{A}^n}{n!} = I + \hat{A} + \frac{\hat{A}^2}{2!} + \frac{\hat{A}^3}{3!} \cdots \quad (1.9.36)$$

上記の計算は面倒な時もあるが、幾つかの特別な場合に演算子関数は簡単に導ける。例えば関数 $f(x) = \sum_{i=0}^{\infty} c_i x^i$ のような多項式の場合、

$$f(\hat{A}) = \sum_{i=0}^{\infty} c_i \hat{A}^i \quad (1.9.37)$$

である。このとき $|\psi_n\rangle$ が \hat{A} の固有ベクトルの1つでその固有値が a_n であるとする、

$$\hat{A}^i |\psi_n\rangle = (a_n)^i |\psi_n\rangle \quad (1.9.38)$$

$$\Rightarrow f(\hat{A}) |\psi_n\rangle = f(a_n) |\psi_n\rangle \quad (1.9.39)$$

となる。この例と類似したもので重要なのが \hat{A} が対角化されているときである。例えば

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} A_1 & & \\ & A_2 & \\ & & A_3 \end{pmatrix} \quad (1.9.40)$$

とすると（省略している非対角要素は全て0である）、

$$\hat{A}^n = \begin{pmatrix} A_1^n & & \\ & A_2^n & \\ & & A_3^n \end{pmatrix} \quad (1.9.41)$$

となるため、

$$f(\hat{A}) = \begin{pmatrix} f(A_1) & & \\ & f(A_2) & \\ & & f(A_3) \end{pmatrix} \quad (1.9.42)$$

となるのがわかる。

後に詳細を述べるユニタリー演算子などでは、 $e^{\hat{A}}$ のような演算子の指数関数が頻繁に出てくる。下記に指数関数演算子の便利な公式を記す。

Baker-Hausdorff identity

$$e^{\alpha \hat{A}} \hat{B} e^{-\alpha \hat{A}} = \hat{B} + \alpha [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{\alpha^2}{2!} [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \dots \quad (1.9.43)$$

Glauber's formula

$$e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} = e^{\hat{A} + \hat{B}} e^{\frac{1}{2} [\hat{A}, \hat{B}]} \quad (1.9.44)$$

1.10 密度演算子

ここまでは、量子状態を ket ベクトル $|\psi\rangle$ で表してきた。この表し方によれば、その基底の張る複素ベクトル空間の元としての重ね合わせ状態や、基底のテンソル積により

張られる拡大された複素ベクトル空間における合成系の量子状態の記述が可能になる。例えば Stern-Gerlach の実験のセットアップで単一の上向きスピンの電子を入射させたときの電子の量子状態の時間発展は、この電子の量子状態 $|\uparrow\rangle$ に対する Schrödinger 方程式を解析することで得られるのである。このように ket ベクトルで書き表せるような量子状態を純粋状態という。

現実的には、例えばタングステン線などから出る熱電子のうち単一の電子をもしも取り出せたとして、それが上向きスピンであるか下向きスピンであるかは五分五分である。このようなときにはどういう量子状態になっているだろうか。もしも ket ベクトルで表したいならば上向きスピンと下向きスピンの重ね合わせ状態として表現することになるだろう。しかしこのように重ね合わせ状態として書き表せるならば、どこかの方向についてみればスピンの向きが確定しているはずである。現実には熱電子はどの方向で見てもスピンの向きが確定していないように統計的にばらついているものであるため、重ね合わせ状態を含めた純粋状態はこのような単一の熱電子の量子状態を正しく表せない。

より一般的な量子状態として、ある一定の確率でとある純粋状態に見出されるというようなものを考えよう。ただし異なる純粋状態の間には重ね合わせ状態のように位相関係が定まってなくてもよいという点で、単なる重ね合わせ状態よりも広範な量子状態に対応できる。このような量子状態を混合状態といい、熱電子の量子状態をよく表すものである。具体的に混合状態をどのように表記するかを以下に導入する。

まず電子の上向きスピン $|\uparrow\rangle = |\psi_1\rangle$ と下向きスピン $|\downarrow\rangle = |\psi_2\rangle$ がそれぞれ統計的な確率 p_1, p_2 で混合したようなものを考える。このような混合状態に対し、実験で観測される物理量 O (例えばスピンの z 成分など) の期待値を考えたい。純粋状態 $|\psi\rangle$ に対する期待値は $\langle\psi|O|\psi\rangle$ であるが、これをのちの便宜を図るため、完全系 $\{|m\rangle\}$ を挿入して $\langle\psi|O|\psi\rangle = \sum_{mn} \langle\psi|m\rangle \langle m|O|n\rangle \langle n|\psi\rangle = \sum_{mn} \langle n|\psi\rangle \langle\psi|m\rangle \langle m|O|n\rangle = \text{Tr} [|\psi\rangle \langle\psi|O]$ とトレースを用いた形に変形できることを示しておく。さて、混合状態に対する期待値は、統計的に混合される各純粋状態に対する期待値を用いて

$$\langle O \rangle = p_1 \langle\psi_1|O|\psi_1\rangle + p_2 \langle\psi_2|O|\psi_2\rangle = \sum_i p_i \langle\psi_i|O|\psi_i\rangle \quad (1.10.1)$$

と書ける。これを純粋状態の時同様トレースを用いた形に変形していくと、

$$\langle O \rangle = \sum_i p_i \langle\psi_i|O|\psi_i\rangle \quad (1.10.2)$$

$$= \sum_{mn} \sum_i p_i \langle\psi_i|m\rangle \langle m|O|n\rangle \langle n|\psi_i\rangle \quad (1.10.3)$$

$$= \sum_{mn} \sum_i p_i \langle n|\psi_i\rangle \langle\psi_i|m\rangle \langle m|O|n\rangle \quad (1.10.4)$$

$$= \text{Tr} \left[\sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle\psi_i|O \right] \quad (1.10.5)$$

となる。つまり、純粋状態における物理量の計算に現れた $|\psi\rangle \langle\psi|$ が、混合状態では $\sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle\psi_i|$ に置き換わる。もっと言えば、ある p_i のみ 1 でほかがすべて 0 の場合

として、混合状態における結果は純粋状態のものを含む形にできている。この量 $\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$ はその意味で量子状態の記述の自然な拡張になっており、密度行列あるいは密度演算子という名前が与えられている。ここで出てくる統計的な混合の重み $p_i \geq 0$ は、重ね合わせ状態の各係数のような量子的な確率（振幅）とは本質的に異なるものであることに十分注意したい。

1.10.1 混合状態の例

先ほどの熱電子のスピン状態の例でいえば、これは上向きスピンと下向きスピンの量子状態が統計的に等確率で混合されたものであるから、その密度演算子は $\rho = (|\uparrow\rangle \langle \uparrow| + |\downarrow\rangle \langle \downarrow|)/2$ と書ける。電子スピンに関しては $|\uparrow\rangle$ と $|\downarrow\rangle$ で完全系をなすから $\rho = I/2$ となる。これは単一のスピン 1/2 系に関する完全混合状態と呼ばれるものである。

もうひとつの例として調和振動子の熱的状态というものもある。調和振動子のはちに解説するように量子化された振動が“何個”あるかによって量子状態を指定できるのだが、熱的状态はその個数状態 $|n\rangle$ が Boltzmann 分布に従って統計的に混合されている。具体的に書き下せば、熱的状态の調和振動子の密度演算子 ρ_{th} は

$$\rho_{\text{th}} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\hbar\omega/k_B T} (1 - e^{-\hbar\omega/k_B T}) |n\rangle \langle n| \quad (1.10.6)$$

と書ける。上式に出てきた \hbar 、 ω 、 k_B 、 T はそれぞれ Planck 定数を 2π で除したものの、調和振動子の固有角周波数、Boltzmann 定数、熱的状态の温度である。

1.10.2 密度演算子の一般的性質

ここでは密度演算子 ρ の一般的な性質をみていこう。まず、密度演算子のトレースは常に 1 である： $\text{Tr}[\rho] = 1$ 。これは統計的な混合確率に関して $\sum_i p_i = 1$ が成り立つことから直ちに導かれる。また、これより密度演算子が Hermite 演算子であることも言える。密度演算子は半正定値、つまり任意の $|\phi\rangle$ に対して $\langle \phi | \rho | \phi \rangle \geq 0$ が成立する。これは $p_i \geq 0$ よりいえることであり、さらにこれより密度演算子の固有値が非負値であることがわかる。特に純粋状態については、ある基底で密度演算子を行列表現したときの対角成分は、対応する量子状態の占有確率に一致する。また、純粋状態に対しては $\rho^2 = \rho$ が成立する。一般の密度演算子に対しては $\text{Tr}[\rho^2] \leq 1$ であるのだが、純粋状態のときのみ $\text{Tr}[\rho^2] = \text{Tr}[\rho] = 1$ となるため、 $\text{Tr}[\rho^2]$ を purity といって純粋状態と混合状態を見分ける量と見なすことができる。また、前節で計算したようにある物理量 O の期待値は $\text{Tr}[\rho O]$ により与えられる。

1.10.3 合成系の密度演算子とその縮約

独立に用意した二つの量子系があり、その密度演算子が ρ_1 、 ρ_2 と書けるとしよう。これら二つの量子系の合成系の密度演算子 ρ は、分離可能な純粋状態であれば ket ベクト

ルのテンソル積によって定義することができた。一般に混合状態まで考えるとしてもテンソル積を bra ベクトルと ket ベクトル両方について考え、統計的な重みをつけて足すだけで結局分離可能状態であれば $\rho = \rho_1 \otimes \rho_2$ と書くことができる。

このようにして用意した合成系を Hamiltonian に従って発展させ、その後の各量子系の最終的な状態を知りたいとしよう。ただし、 ρ_2 が多自由度系、すなわち多数のスピンや調和振動子の集まりからなる系の密度演算子で、全体の密度演算子の測定による再構成が極めて困難である場合を考える。このようなときには興味のある量子系のみを考えるほかない。では、 ρ_2 の情報がないまま注目している系に関する情報を得ようとするのはどういった操作に対応するだろうか。密度演算子 ρ_1 、 ρ_2 の系を記述する完全系をそれぞれ $\{|k_1\rangle; k_1 = 0, 1, 2, 3, \dots, K_1\}$ 、 $\{|k_2\rangle; k_2 = 0, 1, 2, 3, \dots, K_2\}$ としよう。時間発展後の合成系の密度演算子 ρ' で注目している系の物理量 O の期待値を評価すると

$$\begin{aligned}
 \langle O \rangle &= \text{Tr}_{12}[\rho' O] \\
 &= \sum_{k_1, k_2} \langle k_1 | \otimes \langle k_2 | \rho' O | k_1 \rangle \otimes | k_2 \rangle \\
 &= \sum_{k_1} \langle k_1 | \left(\sum_{k_2} \langle k_2 | \rho' | k_2 \rangle \right) O | k_1 \rangle \\
 &= \text{Tr}_1 \left[\left(\sum_{k_2} \langle k_2 | \rho' | k_2 \rangle \right) O \right] \\
 &= \text{Tr}_1 [(\text{Tr}_2 \rho') O] \\
 &= \text{Tr}_1 [\rho'_1 O]
 \end{aligned} \tag{1.10.7}$$

である。ここで添え字付きのトレース操作は ρ_1 と ρ_2 の系のどちらかあるいはどちらについてもトレースを取ることを意味している。片方の系のみについてのトレース操作を部分トレースともいう。最終的な表式を見ると、 $\rho'_1 = \text{Tr}_2 \rho'$ という情報を得られない系に関してのみトレースをとった縮約密度演算子が時間発展後の ρ_1 系の密度演算子であることにすれば、これによって演算子 O の期待値を評価した形になっている。このように、合成系の部分系のみ物理量を測定するときには、縮約密度演算子が用いられる。

ここでひとつ注意しておかねばならないのは、時間発展後の密度演算子 ρ' が必ずしも $\rho' = \text{Tr}_2 \rho' \otimes \text{Tr}_1 \rho'$ のようには書けないという点である。逆に言えばそのように書くことができるのは ρ' が分離可能状態であるときだけであり、合成系の各部分系の間量子もつれが生じている場合には、片方の系に関する部分トレース操作はもう片方の系に関する情報の喪失を招く。例えば ρ_1 系が量子ビット、 ρ_2 系が調和振動子の集まりであり量子ビット系が調和振動子の集団と相互作用しているような場合には、時間発展後には量子ビット系と調和振動子の集団のあいだに極めて複雑な量子もつれ状態が形成され、量子ビットの状態がコヒーレンスを失ってしまう。

1.11 交換子と反交換子

量子力学では複数の演算子が可換性が重要となってくるが、演算子の交換子と反交換子は各々

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (1.11.1)$$

$$\{\hat{A}, \hat{B}\} \equiv \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} \quad (1.11.2)$$

と定義される。交換子は特に量子力学では重要となってくるが、 $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ ($\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$) のとき \hat{A} と \hat{B} は可換であり、 $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$ ($\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$) のとき \hat{A} と \hat{B} は非可換であるという。1つの重要な帰結として物理量 A 、 B の演算子が可換なとき、

1.11.1 Heisenberg の不確定性原理

上記の交換関係を用いて、一般化された不確定性原理を導くことが出来る。ある物理量 A があるとき、古典的な A の平均 $\langle A \rangle$ 、不確かさ ΔA 、分散 σ_A はそれぞれ、

$$\langle A \rangle = \frac{1}{n} \sum_i^n A_i \quad (1.11.3)$$

$$\Delta A = A - \langle A \rangle \quad (1.11.4)$$

$$\sigma_A^2 = \langle (\Delta A)^2 \rangle = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle \quad (1.11.5)$$

と定義される。同様に量子系ではそれぞれ

$$\langle A \rangle = \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle \quad (1.11.6)$$

$$\Delta A = \hat{A} - \langle A \rangle \quad (1.11.7)$$

$$\begin{aligned} \sigma_A^2 &= \langle \Psi | (\hat{A} - \langle A \rangle)^2 | \Psi \rangle \\ &= \langle (\hat{A} - \langle A \rangle) \Psi | (\hat{A} - \langle A \rangle) \Psi \rangle \end{aligned} \quad (1.11.8)$$

と与えられる。最後の行では全ての物理量が Hermite 演算子で表されることを用いた。2つの物理量 A 、 B があるとき、

$$|a\rangle \equiv (\hat{A} - \langle A \rangle) | \Psi \rangle \quad (1.11.9)$$

$$|b\rangle \equiv (\hat{B} - \langle B \rangle) | \Psi \rangle \quad (1.11.10)$$

と定義すると

$$\sigma_A^2 = \langle a | a \rangle \quad (1.11.11)$$

$$\sigma_B^2 = \langle b | b \rangle \quad (1.11.12)$$

であり、シュワルツの不等式を用いて

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 = \langle a|a \rangle \langle b|b \rangle \geq |\langle a|b \rangle|^2 \quad (1.11.13)$$

と書ける。さらに $\langle a|b \rangle = \alpha + i\beta$ と実部と虚部に分けると、

$$|\langle a|b \rangle|^2 = \alpha^2 + \beta^2 \geq \beta^2 = \left(\frac{\langle a|b \rangle - \langle a|b \rangle^*}{2i} \right)^2 \quad (1.11.14)$$

が導かれる。ここで

$$\begin{aligned} \langle a|b \rangle &= \langle \Psi | (\hat{A} - \langle A \rangle)(\hat{B} - \langle B \rangle) | \Psi \rangle \\ &= \langle \Psi | (\hat{A}\hat{B} - \langle A \rangle \hat{B} - \langle B \rangle \hat{A} + \langle A \rangle \langle B \rangle) | \Psi \rangle \\ &= \langle AB \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle \end{aligned} \quad (1.11.15)$$

となり、同様に

$$\langle b|a \rangle = \langle BA \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle \quad (1.11.16)$$

となるので、

$$\langle a|b \rangle - \langle b|a \rangle = \langle AB \rangle - \langle BA \rangle = \left\langle [\hat{A}, \hat{B}] \right\rangle \quad (1.11.17)$$

がえられる。最後に式 (1.11.13-1.11.1) をまとめると、

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \left(\frac{1}{2i} \left\langle [\hat{A}, \hat{B}] \right\rangle \right)^2 \quad (1.11.18)$$

となる。これは一般化された Heisenberg の不確定性原理を物理量の演算子 \hat{A} と \hat{B} の交換子で記述したものである。よく知られている交換関係 $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ を用いると有名な位置と運動量の不確定性原理

$$\sigma_x^2 \sigma_p^2 \geq \left(\frac{\hbar}{2} \right)^2 \quad (1.11.19)$$

$$\boxed{\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}} \quad (1.11.20)$$

が導かれる。

他の例としてスピンの交換関係を考えてみる。スピン-1/2 のスピン演算子 \hat{S}_i は Pauli 演算子 $\hat{\sigma}_i$ を用いて

$$\hat{S}_i = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_i \quad (1.11.21)$$

と書かれ、交換関係は

$$[S_i, S_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} S_k \quad (1.11.22)$$

である、このとき ϵ_{ijk} は Levi-Civita 記号とよばれ

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} 0 & \text{for } i=j, j=k, \text{ or } k=i \\ +1 & \text{for } (i,j,k) \text{ in } (1,2,3), (2,3,1), (3,1,2) \\ -1 & \text{for } (i,j,k) \text{ in } (1,3,2), (3,2,1), (2,1,3) \end{cases} \quad (1.11.23)$$

の値を取る。 $i = x, j = y, k = z$ のとき、

$$\hat{S}_x \hat{S}_y \geq i\hbar \hat{S}_z \quad (1.11.24)$$

$$\sigma_{S_x} \sigma_{S_y} \geq \frac{\hbar}{2} \langle \hat{S}_z \rangle \quad (1.11.25)$$

となる。

量子ビットは $|0\rangle$ と $|1\rangle$ の2次元の自由度を持つが、これはスピン-1/2の $|\uparrow\rangle$ と $|\downarrow\rangle$ と基本的には同じため量子ビットは“擬スピン”ともよばれる。後に詳細を述べるが、Bloch球を使うと量子ビットの状態を原点から直径1の球面上に向かう矢印で示すことが出来る。詳しくは節を参照していただきたい。

第2章 量子力学の基礎

2.1 時間発展

2.1.1 時間に依存しない Schrödinger 方程式

Schrödinger 方程式は通常

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x, t) \quad (2.1.1)$$

と書かれるが、ポテンシャル $V(x)$ は時間に依存しないときが多い。このとき変数分離を用いて、波動関数を時間と空間の関数に分けて $\Psi(x, t) = \psi(x)\varphi(t)$ と記述できる。このとき、各々の波動関数の満たす Schrödinger 方程式は空間と時間の式、

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + V\psi(x, t) = E\psi \quad (2.1.2)$$

$$\frac{d\varphi}{dt} = -\frac{iE}{\hbar}\varphi \quad (2.1.3)$$

に分けられる。式 (2.1.3) より、

$$\varphi(t) = e^{-iEt/\hbar} \quad (2.1.4)$$

が導け波動関数 $\Psi(x, t)$ は、

$$\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar} \quad (2.1.5)$$

となる。系の Hamiltonian がエネルギー固有状態 $\psi_n(x)$ と対応するエネルギー固有値 E_n を持つとき、系の任意の状態は

$$\Psi(x, t) = \sum_n c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} \quad (2.1.6)$$

となり、その時間発展は各々の固有状態の位相が回る形となる。

量子ビットはエネルギー固有状態を用いられる場合が多くあり、基底状態 $|0\rangle$ と励起状態 $|1\rangle$ が各々対応するエネルギー $E_0 = 0$ 、 $E_1 = \hbar\omega$ をもつとき、量子ビットの時間発展は

$$|\Psi(t)\rangle = c_0 |0\rangle + c_1 e^{-i\hbar\omega t/\hbar} |1\rangle \quad (2.1.7)$$

と記述され、基底状態に対し励起状態の位相が状態間のエネルギー差 ω に比例して回転する。

2.1.2 ユニタリー演算子を用いた時間発展

量子状態 $|\Psi\rangle$ の時間発展は Schrödinger 方程式によって,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = \hat{H} |\Psi\rangle \quad (2.1.8)$$

のように記述され、この方程式を満たす $|\Psi\rangle$ を解くことで波動関数を導くことが出来る。ここでは別の方法、時間発展をユニタリーな時間発展演算子として記述することで任意の時間 t における波動関数を求める。我々は古典情報処理で離散的なデジタル論理ゲート (AND, XOR など) を逐次実行する事により計算を進めていく方法を知っているが、時間発展演算子自体を1つのゲートとしても考えることができ、量子情報の枠組みでは非常に便利である。

初期時刻 $t = 0$ における波動関数 $|\psi_0\rangle$ が、時間発展演算子 $\hat{U}(t)$ により $|\psi(t)\rangle$ に時間発展したとする。

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t) |\psi_0\rangle \quad (2.1.9)$$

この時間発展演算子 $\hat{U}(t)$ 自体の時間変化は

$$i\hbar \frac{\partial \hat{U}(t)}{\partial t} = \hat{H} \hat{U}(t) \quad (2.1.10)$$

なので、積分すると時間発展演算子 $\hat{U}(t)$ は

$$\begin{aligned} \hat{U}(t) &= U_0 e^{-i\hat{H}t/\hbar} \\ &= e^{-i\hat{H}t/\hbar} \end{aligned} \quad (2.1.11)$$

と求めることができるが、このとき \hat{H} は時間に依らないものとした。一般的に時間に依存する Hamiltonian $\hat{H} = \hat{H}(t)$ でもこの方法は少し変化した形で扱えるが、ここでは簡単のために時間変化のない Hamiltonian を取り扱う。最後の行では基準となる $t = 0$ のときにはまだ時間変化が無いので $U_0 = I$ とした。この時間発展演算子 $\hat{U}(t)$ を用いて波動関数 $|\psi(t)\rangle$ の、任意の時間 t_1 から t_2 への時間発展は、

$$|\psi(t_2)\rangle = \hat{U}(t_2 - t_1) |\psi(t_1)\rangle = e^{-i\hat{H}(t_2 - t_1)/\hbar} |\psi(t_1)\rangle \quad (2.1.12)$$

と記述することができる。

後に Bloch 球という量子ビットの状態空間を扱うが、ここで Bloch 球上の量子状態は回転行列 $\hat{R}_x(\theta) = e^{-i\frac{\theta}{2}\hat{X}}$ (これは X 軸に対して θ の回転) などを用いて Bloch 球上での回転操作を行うことができることを示す。実験的には上記の $\hat{U}(t)$ を見ると、系の Hamiltonian \hat{H} に \hat{X} , \hat{Y} , \hat{Z} などの行列が入っていると、例えば $\hat{H} = \hbar\alpha\hat{X}$ であれば、 $\hat{U}(t) = e^{-i\alpha\hat{X}t}$ となり時間発展により量子ビットを X 軸に対して任意の角度 $\theta = 2\alpha t$ 回転させられることがわかる。

2.1.3 3つの描像

時間発展を記述するユニタリー演算子 $\hat{U}(t)$ を用いて量子状態の時間変化を見てきたが、通常我々が実験で測定できるものは波動関数自体ではなく何らかの物理量である。波動関数が時間に対して変化するとともに、物理量 A の期待値も

$$\begin{aligned}\langle A(t) \rangle &= \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle \\ &= \langle \psi_0 | e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{A} e^{-i\hat{H}t/\hbar} | \psi_0 \rangle\end{aligned}\quad (2.1.13)$$

と変化する。上記の物理量の時間変化を状態や演算子の変化として考えるが、主に3つの描像（もしくは立場）が存在する。以下では Schrödinger 描像、Heisenberg 描像、Dirac 描像の3つの描像を紹介するが、表記が複雑になりやすいため

$$\begin{aligned}|\psi_0\rangle & \text{ 時間に依存しない初期状態} \\ \hat{A}_0 & \text{ 時間に依存しない初期演算子}\end{aligned}$$

と

$$\begin{aligned}\hat{A}_S \quad |\psi\rangle_S & \text{ Schrödinger 描像の演算子と状態} \\ \hat{A}_H \quad |\psi\rangle_H & \text{ Heisenberg 描像の演算子と状態} \\ \hat{A}_I \quad |\psi\rangle_I & \text{ Dirac 描像の演算子と状態}\end{aligned}$$

を用いて表記する。

Schrödinger 描像

これまでの説明では、初期波動関数 ψ_0 が時間的に変化し物理量の演算子 \hat{A} は時間に依らないという立場で考えてきた。波動関数は

$$\frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (2.1.14)$$

の形で時間発展する。この描像のことを Schrödinger 描像とよび、状態と演算子はそれぞれ

$$|\psi\rangle_S = |\psi(t)\rangle_S = e^{-i\hat{H}t/\hbar} |\psi_0\rangle \quad (2.1.15)$$

$$\hat{A}_S = \hat{A}_0 \quad (2.1.16)$$

という形をとり波動関数だけが時間発展する。

Heisenberg 描像

Heisenberg 描像では式 (2.1.13) を

$$\begin{aligned}\langle A(t) \rangle &= \langle \psi_0 | e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{A} e^{-i\hat{H}t/\hbar} | \psi_0 \rangle \\ &= \langle \psi_0 | \hat{A}(t) | \psi_0 \rangle\end{aligned}\quad (2.1.17)$$

のように、状態 ψ_0 は変化せず、演算子が時間変化するという立場を取る。このとき

$$\hat{A}(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{A} e^{-i\hat{H}t/\hbar} \quad (2.1.18)$$

である。Heisenberg 描像で状態と演算子の時間発展をまとめると

$$|\psi\rangle_H = |\psi_0\rangle \quad (2.1.19)$$

$$\hat{A}_H = \hat{A}_H(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{A}_0 e^{-i\hat{H}t/\hbar} \quad (2.1.20)$$

という形をとり演算子だけが時間発展する。

ここで感の良い読者は、「演算子が時間により変化するのであれば、Hamiltonian 自体も時間変化を起こすので Hamiltonian を含む式 (2.1.20) はもっと複雑になるはずだ」という指摘が出るかもしれない。実際 Hamiltonian の時間発展は、

$$\hat{H}_H = e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{H} e^{-i\hat{H}t/\hbar} \quad (2.1.21)$$

と記述され時間変化があるように思えるが、式 (1.9.36)

$$e^{\hat{A}} \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat{A}^n}{n!} = I + \hat{A} + \frac{\hat{A}^2}{2!} + \frac{\hat{A}^3}{3!} \dots$$

でみたように、 $e^{i\hat{H}t/\hbar}$ は \hat{H} の多項式で表せるため \hat{H} と可換であり、

$$\hat{H}_H = e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{H} e^{-i\hat{H}t/\hbar} = \hat{H} \quad (2.1.22)$$

となるため Hamiltonian は時間変化しない。

Dirac 描像

Dirac 描像は相互作用描像とも言われるが、Schrödinger 描像と Heisenberg 描像の合わせ技のような描像になっている。この描像では定常的な Hamiltonian \hat{H}_0 にさらなる Hamiltonian \hat{V} が加わった

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \quad (2.1.23)$$

のような Hamiltonian を考える。

これは物理系の操作を考える時に特に重要である。例えば水素原子の電子状態を外部から電場を加えて操作するとしよう。水素原子の核は外場0の状態でも電子に影響を与えているので定常的であり、水素原子のHamiltonianが \hat{H}_0 となって、そこに加える電場のHamiltonianが \hat{V} で書けるようになる。つまり、常に影響を与えているHamiltonianを \hat{H}_0 に、我々の操作で用いる部分だけを V に押し込めて記述できるので便利である。

式(2.1.13)は

$$\begin{aligned}
 \langle A(t) \rangle &= \langle \psi_0 | e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{A} e^{-i\hat{H}t/\hbar} | \psi_0 \rangle \\
 &= \langle \psi_0 | e^{i(\hat{H}_0+\hat{V})t/\hbar} \hat{A} e^{-i(\hat{H}_0+\hat{V})t/\hbar} | \psi_0 \rangle \\
 &= \langle \psi_0 | e^{i\hat{V}t/\hbar} \cdot e^{i\hat{H}_0t/\hbar} \hat{A} e^{-i\hat{H}_0t/\hbar} \cdot e^{-i\hat{V}t/\hbar} | \psi_0 \rangle \\
 &= \langle \psi(t) | \hat{A}(t) | \psi(t) \rangle
 \end{aligned} \tag{2.1.24}$$

となり、状態も演算子もともに時間変化するという立場を取る。このとき時間変化の形が状態と演算子で異なり、各々 \hat{V} と \hat{H}_0 に対する時間変化

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{V}t/\hbar} |\psi_0\rangle \tag{2.1.25}$$

$$\hat{A}(t) = e^{i\hat{H}_0t/\hbar} \hat{A} e^{-i\hat{H}_0t/\hbar} \tag{2.1.26}$$

として記述されることに注意する。

Dirac 描像で状態と演算子の時間発展をまとめると

$$\begin{aligned}
 |\psi\rangle_I &= |\psi(t)\rangle_I = e^{-i\hat{V}t/\hbar} |\psi_0\rangle = e^{i\hat{H}_0t/\hbar} e^{-i(\hat{H}_0+\hat{V})t/\hbar} |\psi_0\rangle \\
 &= e^{i\hat{H}_0t/\hbar} |\psi\rangle_S
 \end{aligned} \tag{2.1.27}$$

$$\hat{A}_I = \hat{A}_I(t) = e^{i\hat{H}_0t/\hbar} \hat{A} e^{-i\hat{H}_0t/\hbar} \tag{2.1.28}$$

という形をとり状態も演算子もともに時間発展する。状態の記述では式(2.1.15)の $|\psi\rangle_S = e^{-i\hat{H}t/\hbar} |\psi_0\rangle$ を用いた。下付きの I は相互作用 (Interaction) に由来する。

Dirac 描像では演算子も時間発展するので先程のようにHamiltonian $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ の時間発展を確認しておこう。

$$\hat{H}_{0I} = e^{i\hat{H}_0t/\hbar} \hat{H}_0 e^{-i\hat{H}_0t/\hbar} = \hat{H}_0 \tag{2.1.29}$$

$$\hat{V}_I = e^{i\hat{H}_0t/\hbar} \hat{V} e^{-i\hat{H}_0t/\hbar} \tag{2.1.30}$$

定常的なHamiltonian \hat{H}_0 は時間変化が無いままだが、 \hat{V}_I はHamiltonian \hat{H}_0 の影響を受けて時間変化する。

ここでDirac 描像で書かれた状態の時間発展を考える。 $|\psi\rangle_S = e^{-i\hat{H}t/\hbar} |\psi_0\rangle$ ならびに $|\psi\rangle_I = e^{i\hat{H}_0t/\hbar} |\psi\rangle_S$ をもちいると、

$$\begin{aligned}
 \frac{d|\psi\rangle_I}{dt} &= \frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 |\psi\rangle_I + e^{i\hat{H}_0t/\hbar} \frac{d|\psi\rangle_S}{dt} \\
 &= \frac{i}{\hbar} e^{i\hat{H}_0t/\hbar} \hat{H}_0 e^{-i\hat{H}_0t/\hbar} |\psi\rangle_I - \frac{i}{\hbar} e^{i\hat{H}_0t/\hbar} \hat{H} e^{-i\hat{H}_0t/\hbar} |\psi\rangle_I \\
 &= -\frac{i}{\hbar} e^{i\hat{H}_0t/\hbar} \hat{V} e^{-i\hat{H}_0t/\hbar} = -\frac{i}{\hbar} \hat{V}_I |\psi\rangle_I
 \end{aligned} \tag{2.1.31}$$

すなわち

$$\boxed{\frac{d|\psi\rangle_I}{dt} = -\frac{i}{\hbar}\hat{V}_I|\psi\rangle_I} \quad (2.1.32)$$

と書ける。

2.1.4 Heisenberg の運動方程式

Heisenberg 描像では、

$$\hat{A}_H = \hat{A}_H(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{A}_0e^{-i\hat{H}t/\hbar} \quad (2.1.33)$$

となり演算子が時間発展していくがこれを具体的に記述すると

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{A}_H(t)}{dt} &= \frac{i\hat{H}}{\hbar}\hat{H}e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{A}_0e^{-i\hat{H}t/\hbar} - e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{A}_0\frac{i\hat{H}}{\hbar}e^{-i\hat{H}t/\hbar} + \frac{\partial\hat{A}}{\partial t} \\ &= \frac{i}{\hbar}\hat{H}e^{i\hat{H}t/\hbar}[\hat{H}, \hat{A}]e^{-i\hat{H}t/\hbar} + \frac{\partial\hat{A}}{\partial t} \end{aligned} \quad (2.1.34)$$

となり

$$\boxed{\frac{d\hat{A}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{A}(t)] + \frac{\partial\hat{A}(t)}{\partial t}} \quad (2.1.35)$$

が得られる。この式を Heisenberg の運動方程式とよび、Schrödinger 方程式が波動関数の時間発展、つまり系の発展を表すように、Heisenberg 描像では系の発展が演算子の時間発展で記述される。ここで $\frac{\partial\hat{A}(t)}{\partial t}$ は \hat{A} が明示的に時間に依存する時だけ入る項である。

2.2 回転系へのユニタリ変換

量子系のダイナミクスを、ある周波数で回転する系で解析するのが望ましい場面がたいへん頻繁にある。駆動周波数 ω_d で回転する回転系へのユニタリ変換は、相互作用のない系の Hamiltonian \mathcal{H} を用いたユニタリ演算子 $U(t) = \exp[i(\mathcal{H}(\omega_d)/\hbar)t]$ により定まるが、このとき状態ベクトル $|\psi\rangle$ は $|\phi\rangle = U(t)|\psi\rangle$ という変換を受ける。これによって Schrödinger 方程式は

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{d|\phi\rangle}{dt} &= i\hbar\frac{dU}{dt}|\psi\rangle + i\hbar U\frac{d|\psi\rangle}{dt} \\ &= i\hbar\dot{U}|\psi\rangle + U\mathcal{H}|\psi\rangle \\ &= i\hbar\dot{U}U^\dagger|\phi\rangle + U\mathcal{H}U^\dagger|\phi\rangle \\ &= (U\mathcal{H}U^\dagger - i\hbar U\dot{U}^\dagger)|\phi\rangle \end{aligned} \quad (2.2.1)$$

と書き直される。ただし式変形に $0 = d(UU^\dagger)/dt = \dot{U}U^\dagger + U\dot{U}^\dagger$ を用いた。 \mathcal{H} は変換前の Hamiltonian であり、上式の変形により、回転系に変換された Hamiltonian は

$$\mathcal{H}' = U\mathcal{H}U^\dagger - i\hbar U\dot{U}^\dagger \quad (2.2.2)$$

となることがわかる。基本的にはこのユニタリ変換にしたがって量子系の解析に都合の良い周波数の回転系に乗り、時間発展や定常状態を調べていくことが多い。調和振動子や量子ビット系についての例を付録（付録 B）に示してある。

第3章 摂動論

3.1 時間に依存しない摂動論

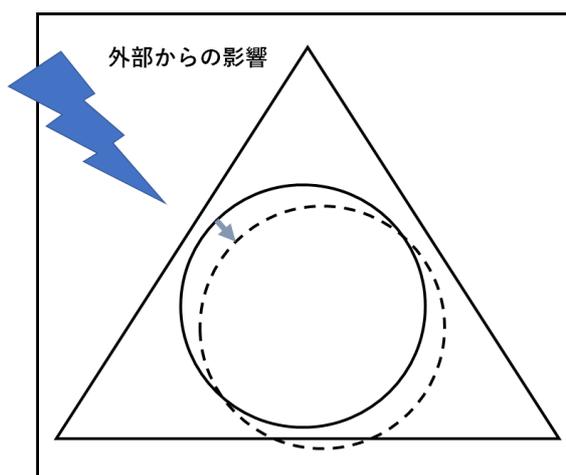


図 3.1: 摂動論のイメージ図

摂動論は外部からの影響による量子系の変化を定量的に求めるために使われる量子力学の重要なツールの1つである。摂動論のイメージを図3.1に示す。実線で描かれた円、三角、四角は何も影響を受けていないときの“素の量子状態”とし、ここでは円の状態に注目する。この量子系が外部から何らかの影響を受けると、その影響により円は少し押され元の円と異なる位置に移動する（点線の円）。この新しい円は概ね元の円であるが、円の外部の三角や四角の成分がわずかながらに加えられる。もちろん状態の変化に伴い、状態のエネルギーも変化する。この変化を定量的に計算できるのが摂動論である。

実験的にこの“ずれ”は様々な形で現れる。気づいていない電場や磁場ノイズの影響、また実験用にプローブとして自分が入れた光によって系がシフトすることも考えられ、実験家には悩みの種となりうることも多い。しかし、逆に考えると能動的に外場を導入することで、様々なシフトをキャンセルする道具のようにも使える。ここでは摂動論と幾つかの応用を紹介する。

外部の影響が入る前の系の Hamiltonian を \hat{H}^0 、エネルギー固有状態を $|\psi_n^0\rangle$ 、そして対応するエネルギーを E_n^0 とするとこれらは、

$$\hat{H}^0 |\psi_n^0\rangle = E_n^0 |\psi_n^0\rangle \quad (3.1.1)$$

を満たす。ここに外部からの影響が入り、

$$\hat{H}^0 \rightarrow \hat{H} = \hat{H}^0 + \lambda \hat{V} \quad (3.1.2)$$

と変化したとする、このとき \hat{V} は外部から導入された擾乱、そして λ は \hat{V} の大きさを表すパラメータで $\lambda \ll 1$ と考えて良い。この新しい Hamiltonian \hat{H} の固有状態 $|\psi_n\rangle$ とそれに対応した固有エネルギー E_n は

$$\hat{H} |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle \quad (3.1.3)$$

を満たす。この新たな固有状態 $|\psi_n\rangle$ と固有エネルギー E_n を、元の固有状態 $|\psi_n^0\rangle$ ならびに E_n^0 で記述することがゴールである。

パラメーター λ を使い、システムの状態とエネルギーを λ のべき級数で展開すると

$$|\psi_n\rangle = |\psi_n^0\rangle + \lambda |\psi_n^1\rangle + \lambda^2 |\psi_n^2\rangle + \dots \quad (3.1.4)$$

$$E_n = E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots \quad (3.1.5)$$

となる。このとき、 E と ψ の上付きの数字は補正の次数、つまり $|\psi_n^1\rangle$, E_n^1 は1次補正、 $|\psi_n^2\rangle$, E_n^2 は2次補正をあらわす。これら状態の補正 $|\psi_n^1\rangle, |\psi_n^2\rangle, \dots$ 、エネルギーの補正 E_n^1, E_n^2, \dots を各々 $|\psi_n^0\rangle$ と E_n^0 で記述していく。

式 (3.1.4, 3.1.5) を式 (3.1.3) に代入すると、

$$\begin{aligned} & (\hat{H}^0 + \lambda \hat{V}) \{ |\psi_n^0\rangle + \lambda |\psi_n^1\rangle + \lambda^2 |\psi_n^2\rangle + \dots \} \\ & = (E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots) \{ |\psi_n^0\rangle + \lambda |\psi_n^1\rangle + \lambda^2 |\psi_n^2\rangle + \dots \} \end{aligned} \quad (3.1.6)$$

となり、 λ の次数が同じ項だけを取り出すと、

$$\lambda^0 : \hat{H}^0 |\psi_n^0\rangle = E_n^0 |\psi_n^0\rangle \quad (3.1.7)$$

$$\lambda^1 : \hat{H}^0 |\psi_n^1\rangle + \hat{V} |\psi_n^0\rangle = E_n^0 |\psi_n^1\rangle + E_n^1 |\psi_n^0\rangle \quad (3.1.8)$$

$$\lambda^2 : \hat{H}^0 |\psi_n^2\rangle + \hat{V} |\psi_n^1\rangle = E_n^1 |\psi_n^2\rangle + E_n^2 |\psi_n^0\rangle \quad (3.1.9)$$

が得られるが、 λ^0 の項は元々の系の状態を表しているのがわかる。式 (3.1.8) を $\langle \psi_n^0 |$ で内積をとると、

$$\langle \psi_n^0 | \hat{H}^0 |\psi_n^1\rangle + \langle \psi_n^0 | \hat{V} |\psi_n^0\rangle = E_n^0 \langle \psi_n^0 | \psi_n^1\rangle + E_n^1 \langle \psi_n^0 | \psi_n^0\rangle \quad (3.1.10)$$

となり、 \hat{H}^0 が Hermite 演算子であることを用いると、

$$\langle \psi_n^0 | \hat{H}^0 |\psi_n^1\rangle = \langle \hat{H}^0 \psi_n^0 | \psi_n^1\rangle = E_n^0 \langle \psi_n^0 | \psi_n^1\rangle \quad (3.1.11)$$

なので、エネルギーの1次補正 E_n^1 は、

$$E_n^1 = \langle \psi_n^0 | \hat{V} | \psi_n^0 \rangle \quad (3.1.12)$$

となる。次に波動関数の1次補正 $|\psi_n^1\rangle$ を考える。 $|\psi_n^1\rangle$ を元の波動関数 ψ_m^0 で展開した

$$|\psi_n^1\rangle = \sum_{m \neq n} c_m |\psi_m^0\rangle \quad (3.1.13)$$

を同様に式 (3.1.8) に代入し、 $\langle \psi_k^0 |$ で内積を取ると、

$$\begin{aligned} \sum_{m \neq n} c_m \langle \psi_k^0 | \hat{H}^0 | \psi_m^0 \rangle + \langle \psi_k^0 | \hat{V} | \psi_n^0 \rangle &= \sum_{m \neq n} c_m E_n^0 \langle \psi_k^0 | \psi_m^0 \rangle + E_n^1 \langle \psi_k^0 | \psi_n^0 \rangle \\ c_k E_k^0 + \langle \psi_k^0 | \hat{V} | \psi_n^0 \rangle &= c_k E_n^0 \end{aligned} \quad (3.1.14)$$

となり、

$$c_k = \frac{\langle \psi_k^0 | \hat{V} | \psi_n^0 \rangle}{E_n^0 - E_k^0} \quad (3.1.15)$$

を得る。式 (3.1.13) に代入すると波動関数の1次補正

$$|\psi_n^1\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_m^0 | \hat{V} | \psi_n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0} |\psi_m^0\rangle \quad (3.1.16)$$

が導かれる。結果だけを紹介するとエネルギーの2次補正は

$$E_n^2 = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \psi_m^0 | \hat{V} | \psi_n^1 \rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0} \quad (3.1.17)$$

となる。同様の手続きを通すと2次やさらに高次のエネルギー及び波動関数の補正も計算できるが、補正の精度も悪くなっていくので一般的には1次もしくは2次までの補正を使う場合が多い。

上記の摂動論では縮退があったケースを省いた。1次のエネルギー補正の式 (3.1.12) を見ると分母に異なる状態のエネルギー差 $E_n^0 - E_m^0$ があるが、縮退している2つの状態間ではこの項が0になり、エネルギーシフトが破綻するように思える。 \hat{H}_0 と \hat{V} が同時対角化可能な基底を使うとこの問題が回避できることが多くの量子力学の教科書で詳細まで記述されているのでここでは割愛する。必要な読者は他の教科書を参考にしたい。

3.1.1 Zeeman 効果

時間に依存しない摂動の例を見てみよう。Zeeman 効果は軌道角運動量 L とスピン角運動量 S をもった電子に対して

$$\hat{H}_Z = \frac{e}{2m}(\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) \cdot \mathbf{B}_{\text{ext}} \quad (3.1.18)$$

で表される Hamiltonian である。このとき \mathbf{L} 、 \mathbf{S} はそれぞれ電子の軌道角運動量とスピン角運動量の演算子、 e と m は電気素量と電子の質量、 \mathbf{B}_{ext} は外部から与えられた磁場である。Zeeman 効果は原子や固体中の電子などと外部磁場との相互作用なので様々な物理系で現れる効果であるため重要である。角運動量とスピンを持った電子は各々から実効的な磁場 \mathbf{B}_{int} を発生するので、内部の磁場 (\mathbf{L} 、 \mathbf{S} 由来) と外部の磁場との相互作用、もっと平たく言うと外場を作っている磁石に電子系が作る“磁石”が反応していると考えて良い。

$\mathbf{B}_{\text{int}} \gg \mathbf{B}_{\text{ext}}$ のとき、この効果は小さな摂動と考えることが出来る。エネルギーの1次補正は式 (3.1.12) を用いて

$$E_Z^1 = \langle nljm_j | \hat{H}_Z | nljm_j \rangle = \frac{e}{2m} \langle \mathbf{L} + 2\mathbf{S} \rangle \cdot \mathbf{B}_{\text{ext}} \quad (3.1.19)$$

となる、このとき電子の状態は $|\psi\rangle = |nljm_j\rangle$ と主量子数 n 、軌道角運動量量子数 l 、主全角運動量量子数 j と第二全角運動量量子数 m_j からなる状態にある。Lande の g 因子¹(g_J) を用いて $\langle \mathbf{L} + 2\mathbf{S} \rangle$ を記述すると

$$\langle \mathbf{L} + 2\mathbf{S} \rangle = g_J \langle \mathbf{J} \rangle \quad (3.1.20)$$

となり

$$E_Z^1 = \mu_B g_J B_{\text{ext}} m_j \quad (3.1.21)$$

が導かれる。 $\mu_B \equiv \frac{e\hbar}{2m} = 5.79 \times 10^{-5} \text{ eV/T}$ はボーア磁子とよばれる定数である。 $j = 1/2$ の状態は第二全角運動量量子数 $m_j = \pm 1/2$ をもつので、この2つの $m_j = 1/2$ 、 $m_j = -1/2$ の状態は磁場によって各々エネルギー E_Z^1 上と下にシフトする。

実験では外部からの磁場によって、ある程度量子のエネルギーを調整出来るのがわかると思う。イオントラップでは並べられたイオンに勾配のある磁場(強いところと弱い所がある)をかけることで、一つ一つのイオンが異なるエネルギーをもつような操作に用いられる。Zeeman 効果は時に両刃の剣ともなりえ、エネルギー状態が外場によって変わってほしくない実験では磁気シールドなどを用いて外場を抑制する必要がある。また磁場による感度が高い(エネルギーシフトが大きい)ものは、量子のエネルギーシフトを測定することによって磁場の動きが間接的に観測できる磁場センサーとしても応用できるなど様々な利用方法がある。

3.2 時間に依存する摂動論

時間に依存する摂動論では系に時間に依存した擾乱が入り、

$$\hat{H}^0 \rightarrow \hat{H} = \hat{H}^0 + \lambda \hat{V}(t) \quad (3.2.1)$$

¹Lande の g 因子は $g_J = 1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + 3/4}{2j(j+1)}$ と j と l を用いて計算できる。

と変化したときの系の時間発展を記述する方法である。例に習って λ は擾乱 \hat{V} の大きさを表すパラメータだが、ひとまず $\lambda = 1$ つまり $\lambda\hat{V} \rightarrow \hat{V}$ とおく。

このとき元の Hamiltonian \hat{H}^0 は時間に依存せず、その固有状態 $|\psi_n^0\rangle$ および固有値 E_n^0 は

$$\hat{H}^0 |\psi_n^0\rangle = E_n^0 |\psi_n^0\rangle \quad (3.2.2)$$

を満たす。

ここでは先述した Dirac 描像を使うと見通しが良くなる。Schrödinger 描像における波動関数の時間発展は

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle_S}{dt} = \hat{H} |\psi(t)\rangle_S \quad (3.2.3)$$

で表される。Dirac 描像における波動関数 $|\psi(t)\rangle_I$ は状態 $|\psi\rangle_S$ を用いて

$$|\psi(t)\rangle_I = e^{i\hat{H}^0 t/\hbar} |\psi(t)\rangle_S \quad (3.2.4)$$

と書けるので、 $|\psi(t)\rangle_I$ の時間発展は、

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle_I}{dt} &= i\hbar \left(e^{i\hat{H}^0 t/\hbar} \frac{d|\psi\rangle_S}{dt} + \frac{i\hat{H}^0}{\hbar} e^{i\hat{H}^0 t/\hbar} |\psi\rangle_S \right) \\ &= e^{i\hat{H}^0 t/\hbar} (\hat{H} - \hat{H}^0) |\psi\rangle_S \\ &= e^{i\hat{H}^0 t/\hbar} V(t) e^{-i\hat{H}^0 t/\hbar} e^{i\hat{H}^0 t/\hbar} |\psi\rangle_S \\ &= e^{i\hat{H}^0 t/\hbar} V(t) e^{-i\hat{H}^0 t/\hbar} |\psi(t)\rangle_I \\ &= V_I(t) |\psi(t)\rangle_I \end{aligned} \quad (3.2.5)$$

となる。最後の行では、 $\hat{V}_I(t) = e^{i\hat{H}^0 t/\hbar} V(t) e^{-i\hat{H}^0 t/\hbar}$ を用いた。

次に $|\psi(t)\rangle_I$ を時間依存しない Hamiltonian \hat{H}^0 の固有状態 $|\psi_n^0\rangle$ を用いて展開した

$$|\psi(t)\rangle_I = \sum_n c_n(t) |\psi_n^0\rangle \quad (3.2.6)$$

を式 (3.2.5) に代入すると

$$\begin{aligned} i\hbar \sum_n \frac{dc_n(t)}{dt} |\psi_n^0\rangle &= \sum_n c_n(t) \lambda V_I(t) |\psi_n^0\rangle \\ &= \sum_n c_n(t) \lambda e^{i\hat{H}^0 t/\hbar} V(t) e^{-i\hat{H}^0 t/\hbar} |\psi_n^0\rangle \\ &= \sum_n c_n(t) \lambda e^{i\hat{H}^0 t/\hbar} V(t) e^{-iE_n^0 t/\hbar} |\psi_n^0\rangle \end{aligned} \quad (3.2.7)$$

となる。

この式を $\langle \psi_m^0 |$ で内積を取ると、

$$\begin{aligned} i\hbar \sum_n \dot{c}_n(t) \langle \psi_m^0 | \psi_n^0 \rangle &= \sum_n c_n(t) \langle \psi_m^0 | e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} V(t) e^{-iE_n^0 t/\hbar} | \psi_n^0 \rangle \\ &= \sum_n c_n(t) \langle \psi_m^0 | V(t) | \psi_n^0 \rangle e^{i(E_m^0 - E_n^0)t/\hbar} \end{aligned} \quad (3.2.8)$$

が導ける。 $\langle \psi_m^0 | \psi_n^0 \rangle = \delta_{mn}$ を用いると

$$i\hbar \dot{c}_m(t) = \sum_n c_n(t) \langle \psi_m^0 | V(t) | \psi_n^0 \rangle e^{i(E_m^0 - E_n^0)t/\hbar} \quad (3.2.9)$$

が得られる。

二準位系の時間発展

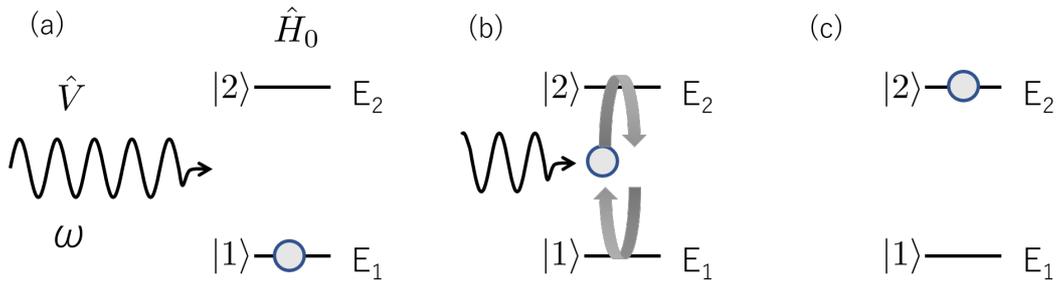


図 3.2: 二準位系の時間発展：(a) エネルギー E_1 、 E_2 を持つ二準位系 \hat{H}_0 に周波数 ω で振動する外場 \hat{V} が印加された様子。初期状態は状態 1 にあるとする。(b) 外場の影響を受けた二準位系の占有数は状態 1 と 2 の間を Rabi 振動する。(c) 外場が切られた後は、切られた瞬間の占有数で系が静止する。

ここまでは摂動論は用いていないが、上記の結果を踏まえて外場（擾乱）を加えたときの量子系の時間発展の具体的な例を見てみよう。原子の下二状態、もしくは量子ビットなどは2つのエネルギー準位からなる二準位系を考える。図 3.2(a) のように、この二準位系に周波数 ω で振動する外場を加えたとき、二準位系のもとの Hamiltonian \hat{H}_0 と外乱 $V(t)$ は、

$$\hat{H}^0 = \begin{pmatrix} E_1^0 & 0 \\ 0 & E_2^0 \end{pmatrix} \quad (3.2.10)$$

$$\hat{V}(t) = \begin{pmatrix} 0 & \alpha e^{i\omega t} \\ \alpha e^{-i\omega t} & 0 \end{pmatrix} \quad (3.2.11)$$

の形で記述できる。 α は擾乱の実効的な振幅と考えてよい。

式 3.2.9 は、 $c(t) = \begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \end{pmatrix}$ を用いて

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 0 & \alpha e^{i(\omega - \omega_{21})t} \\ \alpha e^{-i(\omega - \omega_{21})t} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \alpha e^{i(\omega - \omega_{21})t} c_2(t) \\ \alpha e^{-i(\omega - \omega_{21})t} c_1(t) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.2.12)$$

となる、このとき $\omega_{21} = \frac{E_2^0 - E_1^0}{\hbar}$ である。この式を $c_2(t)$ だけの形に変形すると

$$\ddot{c}_2(t) + i(\omega - \omega_{21})\dot{c}_2(t) + \left(\frac{\alpha}{\hbar}\right)^2 c_2(t) = 0 \quad (3.2.13)$$

となり、解として

$$c_2(t) = A e^{-i(\omega - \omega_{21})t/2} \sin \Omega t \quad (3.2.14)$$

が求まる。このとき $\Omega = \left[\left(\frac{\omega - \omega_{21}}{2}\right)^2 + \left(\frac{\alpha}{\hbar}\right)^2 \right]^{1/2}$ は (一般化) Rabi 周波数とよばれるパラメータである。初期条件 $c_1(t=0) = 1$ 、 $c_2(t=0) = 0$ を用いると係数 A が

$$A = \left[\frac{\left(\frac{\alpha}{\hbar}\right)^2}{\left(\frac{\alpha}{\hbar}\right)^2 + \left(\frac{\omega - \omega_{21}}{2}\right)^2} \right]^{1/2} \quad (3.2.15)$$

と求まる。

上記より状態 1 および 2 の占有数は

$$|c_1|^2 = 1 - |c_2|^2 \quad (3.2.16)$$

$$|c_2|^2 = \frac{\left(\frac{\alpha}{\hbar}\right)^2}{\left(\frac{\alpha}{\hbar}\right)^2 + \left(\frac{\omega - \omega_{21}}{2}\right)^2} \sin^2 \Omega t \quad (3.2.17)$$

と求まる。初期状態は状態 1 からスタートするが、外場の影響により状態 1 から状態 2 への遷移が起こり、周波数 $\Omega/2$ で占有数は振動する (図 3.2(b))。この占有数の振動のことを Rabi 振動とよび、量子状態操作で最も頻繁に使われる方法である。

外場の周波数 ω が、二準位のエネルギー差を Dirac 係数で割った周波数 ω_{21} に等しいとき、状態 2 の占有数は 0 から 1 までを振動する。 ω_{21} をこの二準位系の共鳴周波数とよび、外場の周波数をこの共鳴周波数に合わせることで、二状態間の占有数を 0 から 1 まで操作することが可能となる。逆に言うと外場の周波数 ω が共振周波数 ω_{21} と異なる場合、きれいな状態転送 ($|1\rangle \rightarrow |2\rangle$) が行えない。外場が入り続けている限り、占有数はこの二状態間を振動するが、外場を切った時点でその動きは止まり、その時の占有数のまま保持される (図 3.2(c))。ここまで説明してきた二状態を、状態 1 $\equiv |0\rangle$ 、状態 2 $\equiv |1\rangle$ とおくことで量子ビットとして用いることができる。なお、Rabi 振動の Bloch 方程式を用いた導出、Bloch 球を用いた視覚化については後に詳細を述べる。

3.2.1 時間依存した摂動展開

二準位系の例では外場がきれいな振動 (ω) で記述され、系の運動を簡単に追えた。しかし、一般的に時間依存した擾乱 $\hat{V}(t)$ では系の Hamiltonian $\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{V}(t)$ を満たす解析的な解は存在しないため計算が困難となる。ここでは外場の時間依存を摂動展開して計算できる近似方法について述べる。

先述のように、外部からの影響を受ける前の系の固有状態 $|\psi_n^0\rangle$ および固有エネルギー E_n^0 は

$$\hat{H}^0 |\psi_n^0\rangle = E_n^0 |\psi_n^0\rangle \quad (3.2.18)$$

を満たす。ここに外部からの影響が入り、

$$\hat{H}^0 \rightarrow \hat{H} = \hat{H}^0 + \lambda \hat{V} \quad (3.2.19)$$

と変化したとする。Dirac 描像を用いた波動関数の時間発展は一般的に

$$|\psi(t)\rangle_I = \sum_n c_n(t) |\psi_n^0\rangle \quad (3.2.20)$$

と記述される、このとき

$$c_n(t) = c_n^0(t) + c_n^1(t) + c_n^2(t) + \dots \quad (3.2.21)$$

であり、 c_n^i の上付き添字 i はパラメータ λ のべき級数で展開される補正の次数である。この係数 c_n^i を $\hat{V}(t)$ および $|\psi_n^0\rangle$ を用いて記述することがゴールである。

まず、Dirac 描像において時間 t_0 における初期状態 $|\psi(t_0)\rangle_I \equiv |i\rangle$ からの時間発展を時間発展演算子 $\hat{U}_I(t, t_0)$ を用いて記述すると、

$$|\psi(t)\rangle_I = \hat{U}_I(t, t_0) |i\rangle \quad (3.2.22)$$

となる。これを Dirac 描像の Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle_I}{dt} = \lambda \hat{V}_I(t) |\psi(t)\rangle_I \quad (3.2.23)$$

に代入すると、

$$i\hbar \frac{d\hat{U}_I(t, t_0)}{dt} |i\rangle = \lambda \hat{V}_I(t) \hat{U}_I(t, t_0) |i\rangle \quad (3.2.24)$$

となるが、この式は任意の初期状態 $|i\rangle$ について満たされるので、

$$\boxed{i\hbar \frac{d\hat{U}_I(t, t_0)}{dt} = \lambda \hat{V}_I(t) \hat{U}_I(t, t_0)} \quad (3.2.25)$$

のように演算子の運動方程式に置き換わる。ここで $\hat{V}_I = e^{i\hat{H}^0 t/\hbar} \hat{V} e^{-i\hat{H}^0 t/\hbar}$ である。 $\hat{U}_I(t, t_0)$ は時間発展の演算子を表すが、もちろん初期時間 t_0 から時間経過しない $\hat{U}(t_0, t_0) = \hat{I}$ である。この演算子の運動方程式を積分すると左辺は

$$\begin{aligned} i\hbar \int_{t_0}^t dt' \frac{d\hat{U}_I(t', t_0)}{dt'} &= i\hbar [\hat{U}_I(t, t_0) - \hat{U}_I(t_0, t_0)] \\ &= i\hbar [\hat{U}_I(t, t_0) - \hat{I}] \end{aligned} \quad (3.2.26)$$

となるので

$$\hat{U}_I(t, t_0) = \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \lambda \hat{V}_I(t') \hat{U}_I(t', t_0) \quad (3.2.27)$$

が導かれる。この式は $\hat{U}_I(t, t_0)$ にたいして入れ子になっているので

$$\begin{aligned} \hat{U}_I(t, t_0) &= \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \lambda \hat{V}_I(t') \hat{U}_I(t', t_0) \\ &= \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \lambda \hat{V}_I(t') + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \lambda^2 \hat{V}_I(t') \hat{V}_I(t'') \hat{U}_I(t'', t_0) \\ &= \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \lambda \hat{V}_I(t') + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \lambda^2 \hat{V}_I(t') \hat{V}_I(t'') + \dots \end{aligned} \quad (3.2.28)$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \lambda^n \hat{V}_I(t_1) \hat{V}_I(t_2) \dots \hat{V}_I(t_n) \quad (3.2.29)$$

と展開できる。最後の行では、和の $n = 0$ の項は \hat{I} であり、時間変数は $t' \rightarrow t_1, t'' \rightarrow t_2, \dots \rightarrow t_n$ と略した。

具体的な時間発展演算子 $\hat{U}_I(t, t_0)$ の形が求められたので、式 3.2.22 にある初期状態 $|i\rangle$ からの時間発展を考える。外部からの影響を受ける前の系の固有状態 $|n\rangle \equiv |\psi_n^0\rangle$ を用いて展開すると

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle_I = \hat{U}_I(t, t_0) |i\rangle &= \sum_n |n\rangle \langle n| \hat{U}_I(t, t_0) |i\rangle \\ &= \sum_n \langle n| \hat{U}_I(t, t_0) |i\rangle |n\rangle \end{aligned} \quad (3.2.30)$$

$$\begin{aligned} &= \sum_n \left[\langle n| \hat{I} |i\rangle + \lambda \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \int_{t_0}^t dt' \langle n| \hat{V}_I(t') |i\rangle \right. \\ &\quad \left. + \lambda^2 \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \langle n| \hat{V}_I(t') \hat{V}_I(t'') |i\rangle + \dots \right] |n\rangle \end{aligned} \quad (3.2.31)$$

となる。また式 3.2.20 と 3.2.21 の

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle_I &= \sum_n c_n(t) |n\rangle \\ &= \sum_n (c_n^0(t) + c_n^1(t) + c_n^2(t) + \dots) |n\rangle \end{aligned} \quad (3.2.32)$$

と対応付けると、

$$c_n^0(t) = \langle n | \hat{I} | i \rangle = \delta_{ni} \quad (3.2.33)$$

$$\begin{aligned} c_n^1(t) &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \langle n | \hat{V}_I(t') | i \rangle \\ &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \langle n | \hat{V}(t') | i \rangle e^{i\omega_{ni}t'} \end{aligned} \quad (3.2.34)$$

$$\begin{aligned} c_n^2(t) &= -\frac{1}{\hbar^2} \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \langle n | \hat{V}_I(t') \hat{V}_I(t'') | i \rangle \\ &= -\frac{1}{\hbar^2} \sum_m \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \langle n | \hat{V}_I(t') | m \rangle \langle m | \hat{V}_I(t'') | i \rangle \\ &= -\frac{1}{\hbar^2} \sum_m \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \langle n | \hat{V}(t') | m \rangle \langle m | \hat{V}(t'') | i \rangle e^{i\omega_{nm}t' + i\omega_{mi}t''} \end{aligned} \quad (3.2.35)$$

が導かれる。途中で $\hat{V}_I = e^{i\hat{H}^0 t/\hbar} \hat{V} e^{-i\hat{H}^0 t/\hbar}$ であることを用いて

$$\langle n | \hat{V}_I(t) | i \rangle = \langle n | e^{i\hat{H}^0 t/\hbar} \hat{V} e^{-i\hat{H}^0 t/\hbar} | i \rangle \quad (3.2.36)$$

$$= \langle n | \hat{V}(t) | i \rangle e^{i\omega_{ni}t} \quad (3.2.37)$$

を使った、このとき $\omega_{ni} = \omega_n - \omega_i$ である。

時間に依存した摂動論は、状態がある初期状態 $|i\rangle$ から状態 $|n\rangle$ 遷移確率を計算するのに頻りに用いられる。着目する終状態 $|n\rangle$ が初期状態と異なるとき、 $c_n^0(t) = 0$ となり 1 次近似 $c_n^1(t)$ が重要となる。ある時間 t における状態 $|n\rangle$ への遷移確率 $P_{i \rightarrow n}$ はこの 1 次近似を用いて、

$$P_{i \rightarrow n} = \left| \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' \langle n | \hat{V}(t') | i \rangle e^{i\omega_{ni}t'} \right|^2 \quad (3.2.38)$$

で表される。

第II部

第4章 二準位系と電磁波

4.1 二準位系、スピン、および Bloch 球

量子系の操作の対象として、量子ビット (quantum bit) というものを考えよう。量子ビットは二つの直交した量子状態 $|g\rangle$ と $|e\rangle$ からなるものであり、 $\langle g|g\rangle = \langle e|e\rangle = 1$ と $\langle g|e\rangle = 0$ を満たす。ベクトル表記では $\{|g\rangle = (0, 1)^t, |e\rangle = (1, 0)^t\}$ と定義されるこの量子状態の組は二準位系とも呼ばれる。スピン 1/2 の系のように自然と二準位系になっているものもあるが、ある個別量子系がもつ多数の量子状態から、電磁波による操作性、コヒーレンスといった量子操作に関わるメリットを勘案して二つの量子状態が選ばれることが多い。量子情報はこの $\{|g\rangle, |e\rangle\}$ で構成される量子ビットに記録される。一般にはこの量子ビットは多数個を扱うことになるが、まずは一つの量子ビットの Hamiltonian を基底状態 (ground state) のエネルギー $\hbar\omega_g$ と励起状態 (excited state) のエネルギー $\hbar\omega_e$ に射影演算子 $|g\rangle\langle g|$ と $|e\rangle\langle e|$ をそれぞれつけて

$$\mathcal{H} = \hbar\omega_g |g\rangle\langle g| + \hbar\omega_e |e\rangle\langle e|. \quad (4.1.1)$$

と書こう。当然この Hamiltonian を $|g\rangle$ や $|e\rangle$ で挟んで期待値を計算すれば、それぞれ基底状態と励起状態のエネルギーが得られる。ここでこの Hamiltonian を次の Pauli 演算子

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = |e\rangle\langle g| + |g\rangle\langle e| \quad (4.1.2)$$

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = -i|e\rangle\langle g| + i|g\rangle\langle e| \quad (4.1.3)$$

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = -|g\rangle\langle g| + |e\rangle\langle e| \quad (4.1.4)$$

を用いて書き直したい。なお本書ではこれ以降、特に混乱がない限り演算子を表すのによく用いられるハット記号を省略する。これらを用いると、

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \frac{\hbar(\omega_e - \omega_g)}{2} \sigma_z + \frac{\hbar(\omega_e + \omega_g)}{2} I \\ &= \frac{\hbar\omega_q}{2} \sigma_z \end{aligned} \quad (4.1.5)$$

となるが、ここで右辺第二項は単位行列に比例し、系全体のエネルギーのオフセットとなるのみであるから無視する。 $\omega_q = \omega_e - \omega_g$ は量子ビットの遷移周波数であり、後の節

で見るように量子ビットの状態を変化させるために印加されるべき電磁波の周波数を与える。

ここで一旦 Pauli 演算子 (4.1.2)-(4.1.4) の性質を見ておこう。まず Pauli 演算子は Hermite 演算子である、すなわち $\sigma_\xi^\dagger = \sigma_\xi$ ($\xi = x, y, z$) が成立する。したがって、Pauli 演算子は可観測量となり、なんらかの物理量に対応するものと解釈できる。もう一つの性質はもう少し込み入ったものだが重要である。それは演算子の交換子 $[A, B] = AB - BA$ に関して、Pauli 演算子が

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z, \quad [\sigma_y, \sigma_z] = 2i\sigma_x, \quad [\sigma_z, \sigma_x] = 2i\sigma_y \quad (4.1.6)$$

という関係を満たすことである。上記の関係式は次のようにまとめることができる：

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k. \quad (4.1.7)$$

ただし、 $(i, j, k) = (1, 2, 3), (2, 3, 1), (3, 1, 2)$ でありそれ以外の場合には $\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = I$ となっている。また、 ϵ_{ijk} は Levi-Civita 記号である。Pauli 演算子は実は特殊ユニタリー群 $SU(2)$ の生成子になっており、スピン 1/2 系を良く記述する。すなわち、量子ビットはスピン 1/2 系とみなすことができるのである。この対応によって、実は Pauli 演算子の期待値 σ_ξ はいまや ξ 軸のスピン成分と読み替えることができるようになり、量子ビットの状態を Bloch 球 (図 4.1) 上の一点で表現することが可能になる。Bloch 球上では $\{|g\rangle + |e\rangle\}/\sqrt{2}, \{|g\rangle - |e\rangle\}/\sqrt{2}, \{|g\rangle - i|e\rangle\}/\sqrt{2}, \{|g\rangle + i|e\rangle\}/\sqrt{2}$ and $\{|e\rangle, |g\rangle\}$ がそれぞれ x, y, z 軸となる¹。もし量子ビットが純粋状態 $|\psi\rangle$ にあれば、パラメータ θ と ϕ を用いて $|\psi\rangle = \cos(\theta/2)|e\rangle + e^{i\phi}\sin(\theta/2)|g\rangle$ 、あるいは Bloch 球上の $(\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta)$ で表される。

かくして Bloch 球上の点として量子状態を表現することができ、量子ビットの量子状態の可視化ができたわけであるが、ここで不確定性関係について注意しておきたい。(4.1.6)、(4.1.7) 式にあるように σ_ξ は非可換であるため、そのうち二つの Pauli 演算子を同時に測定した際には不確定性関係に表されているような量子ゆらぎが存在するはずである。図 4.1 の矢印の先の点が少しぼやけた点になっているのはこの「気持ち」を表している。

4.2 電磁波

量子系を操るうえで、量子ビットの状態 $|g\rangle$ と $|e\rangle$ の間を自由に行き来し、かつその重ね合わせ状態などを作る必要がある。量子ビットが物質の電子状態やスピンにより構成される場合、基底状態 $|g\rangle$ と励起状態 $|e\rangle$ は一般に縮退しておらず、そのエネルギー差を $\hbar\omega_q$ とする。このエネルギーに対応する (角) 周波数、すなわち遷移周波数 ω_q の電磁波を照射することにより量子ビットの状態を操ることができるのである。

このとき、やはり量子系を操るという観点では電磁場を量子的に扱う必要がしばしばある。電磁場の量子論 (quantum electrodynamics) はそれ自体非常に示唆に富み、非

¹これらの基底ベクトルが $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ の固有ベクトルとなっている

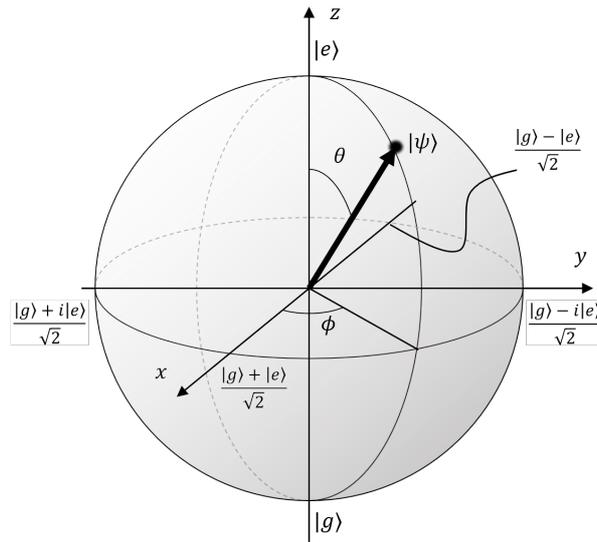


図 4.1: Bloch 球による量子ビットの表示

常に学びがいのあるトピックである。しかしながら電磁場の量子論の包括的な記述は本書の趣旨から逸れるため、詳細は文献 [1] を参照してもらうなどして、ここではそのさわりを述べるにとどめる。

ここでは有限の体積を持つ光モード、つまり Fabry-Perot 共振器などのもつ光共振器 (optical resonator, optical cavity) モードについて考えよう。状況を簡単にするために単一の共振モードのみを考えると、そのエネルギーは

$$\begin{aligned} \mathcal{E} &= \frac{1}{2} \int_{\text{cavity}} \left(\epsilon_0 E^2 + \frac{1}{\mu_0} B^2 \right) dV \\ &= 2\epsilon_0 V_{\text{cavity}} \omega_c^2 A \cdot A^* \end{aligned} \tag{4.2.1}$$

と書ける。ここで E, B, A はそれぞれ共振モードの電場、磁場、ベクトルポテンシャルである。²さらに ϵ_0 と μ_0 は真空の誘電率と透磁率であり、 V_{cavity} および ω_c は共振モードのモード体積 (mode volume) と共振 (角) 周波数である。正準変数 q, p と偏光ベクトル ϵ によって $A = \sqrt{1/4\epsilon_0 V_{\text{cavity}} \omega_c^2} (\omega_c q + ip)\epsilon$ と書き直すことにより

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2} (p^2 + \omega_c^2 q^2) \tag{4.2.2}$$

と書けるが、これは調和振動子 (harmonic oscillator) のエネルギーである。正準変数が演算子に置き換わることで上式は量子力学的な Hamiltonian となる。古典力学における調和振動子は位相空間上において点 (q, p) が円を描くことはご存じだろう。量子力学的には位相空間上のある分布が円を描くように運動する。 q を in-phase、 p を quadrature と

²ベクトルポテンシャルが $Ae^{-i\omega_c t + ik \cdot r} + A^* e^{i\omega_c t - ik \cdot r}$ の形にかけることを仮定している。 $E = -\partial A / \partial t$ と $B = \nabla \times A$ の関係式も用いた。

呼ぶこともある。通常の手続きに従って、消滅演算子 a を用いて $A = \sqrt{\hbar/2\varepsilon_0 V_{\text{cavity}}\omega_c} a \varepsilon$ としよう。こうすれば

$$\mathcal{E} = \hbar\omega_c \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \quad (4.2.3)$$

と書いて、量子力学的な調和振動子の Hamiltonian としてよく見る形になる。ゼロ点エネルギー $\hbar\omega_c/2$ は以後無視し $\mathcal{E} = \hbar\omega_c a^\dagger a$ とするが、これは $n = a^\dagger a$ が共振モード中の光子の数を表すことから、共振モードにある振動量子の総エネルギーの演算子となっていることが明らかである。このように生成・消滅演算子を用いた書き方にすると、電場と磁場は次のようになる：

$$E = i\sqrt{\frac{\hbar\omega_c}{2\varepsilon_0 V_{\text{cavity}}}} \varepsilon (a e^{-i\omega_c t + ik \cdot r} - a^\dagger e^{i\omega_c t - ik \cdot r}) \quad (4.2.4)$$

$$B = i\sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 V_{\text{cavity}}\omega_c}} k \times \varepsilon (a e^{-i\omega_c t + ik \cdot r} - a^\dagger e^{i\omega_c t - ik \cdot r}). \quad (4.2.5)$$

これを回転系に乗らずに、かつ位相を適切に選んで書くと

$$E = E_{\text{zpf}}(a + a^\dagger)\varepsilon \quad (4.2.6)$$

$$B = B_{\text{zpf}}(a + a^\dagger)k \times \varepsilon. \quad (4.2.7)$$

というシンプルな形になる。ここで $E_{\text{zpf}} = \sqrt{\hbar\omega_c/2\varepsilon_0 V_{\text{cavity}}}$ と $B_{\text{zpf}} = \sqrt{\hbar/2\varepsilon_0 V_{\text{cavity}}\omega_c}$ は共振器場の真空ゆらぎ (vacuum fluctuation、または zero-point fluctuation) であり、モード体積が小さければ小さいほど真空ゆらぎが大きくなることは覚えておいて損はない。

4.2.1 調和振動子の昇降演算子

ここで、さきほど出てきた調和振動子の生成・消滅演算子 a 、 a^\dagger について性質をみておこうと思う。まず交換関係 $[a, a^\dagger] = 1$ より $[n, a] = -a$ 、 $[n, a^\dagger] = a^\dagger$ がすぐに導ける。いま、 $n = a^\dagger a$ の固有状態 $|\lambda\rangle$ を考えよう。固有値 λ は調和振動子の振動量子の数になっており、 $n|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$ とまとめてかける。この固有状態 $|\lambda\rangle$ に上の交換関係を作作用させてみる。例えば

$$\begin{aligned} (na - an)|\lambda\rangle &= (na - \lambda a)|\lambda\rangle = -a|\lambda\rangle \\ (na^\dagger - a^\dagger n)|\lambda\rangle &= (na^\dagger - \lambda a^\dagger)|\lambda\rangle = a^\dagger|\lambda\rangle \end{aligned}$$

と固有値 $n|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$ を用いて書き直せるが、これは

$$n(a|\lambda\rangle) = (\lambda - 1)(a|\lambda\rangle) \quad (4.2.8)$$

$$n(a^\dagger|\lambda\rangle) = (\lambda + 1)(a^\dagger|\lambda\rangle) \quad (4.2.9)$$

と整理できる。これらの式の意味するところは明快で、振動量子の数が λ 個の量子状態 $|\lambda\rangle$ に生成・消滅演算子 a^\dagger 、 a が作用した状態 $a^\dagger|\lambda\rangle$ および $a|\lambda\rangle$ は、振動量子の数を数える演算子 $a^\dagger a$ の固有値 $\lambda + 1$ あるいは $\lambda - 1$ の固有状態である。言い換えると、生成演算子は振動量子の数を一つ増やし、消滅演算子は振動量子の数を一つ減らすような演算子であることがわかる。すなわちこれらは量子ビットにおける昇降演算子に対応した、調和振動子の昇降演算子であるといえる。

4.3 二準位系と電磁波の相互作用

4.3.1 Jaynes-Cummings 相互作用

量子ビットを構成する量子状態は、理想的には互いに直交するようなものである。そして $|g\rangle$ からある状態、例えば $|e\rangle$ や $(|g\rangle + |e\rangle)/\sqrt{2}$ といった所望の状態にするためには、何らかの方法で $|g\rangle$ と $|e\rangle$ を“混ぜ合わせる”ことが不可欠である。量子ビットを構成する量子状態は非調和振動子の基底状態と第一励起状態であったり、スピンの“上向き”と“下向き”であったりと様々だが、遷移双極子モーメント (transition dipole moment) でつながる二つの量子状態³が選ばれ、量子状態間の遷移が電磁場により引き起こされるといことは共通している。⁴遷移双極子モーメント d は、直観的には例えば電場や磁場によって誘起される古典的な電気双極子モーメント er や磁気双極子モーメント μ と思えばよい。この量子力学的な演算子の導出は文献 [2] に譲り、具体的な形を書き下そう：

$$\begin{aligned} d &= \mu(|e\rangle\langle g| + |g\rangle\langle e|) \\ &= \mu(\sigma_+ + \sigma_-). \end{aligned} \quad (4.3.1)$$

この表式では次の演算子を新たに定義している：

$$\sigma_+ = |e\rangle\langle g| = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\sigma_x + i\sigma_y}{2} \quad (4.3.2)$$

$$\sigma_- = |g\rangle\langle e| = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\sigma_x - i\sigma_y}{2}. \quad (4.3.3)$$

これらの演算子は見ても通り、量子ビット系に対して昇降演算子として作用する。すなわちその双極子モーメントを外場で誘起することによって量子ビットの操作を行うことができる。

³四重極モーメント (quadrupole moment) でつながる二準位により量子ビットが構成されることもある。

⁴光子の偏光のようなエネルギー的に縮退した状況もあれば、中間準位 $|r\rangle$ を経由して $|g\rangle$ と $|e\rangle$ を電磁波で遷移させる場合もあり、後者のような場合の取り扱いはい録 C に記載してある。

電場で誘起されるような双極子モーメントに対して平行な電場を持つ電磁波⁵が、量子ビット系に印加されたとしよう。このとき Hamiltonian には相互作用項が追加されるが、これは一般の多重極モーメントを考慮すると電場の多項式となる。ところが今は双極子モーメントのみを考えているため、電場の1次のみで $d \cdot E$ となる。演算子の表現 [2] $d = \mu(\sigma_+ + \sigma_-)$ と $E = E_{\text{zpf}}(a + a^\dagger)$ を用いると、相互作用 Hamiltonian は

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = \mu E_{\text{zpf}}(\sigma_+ + \sigma_-)(a + a^\dagger) \quad (4.3.4)$$

と書くことができる。さらに電磁波の周波数 ω_c と量子ビットの遷移周波数 ω_q が近い値であることを仮定しよう。すると、 $\sigma_+ a^\dagger$ のような項は周波数 $\omega_q + \omega_c$ で“速く振動する”項であり、無視することができる。これを回転波近似 (rotating-wave approximation) という。これにより相互作用 Hamiltonian は

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{int}} &= \mu E_{\text{zpf}}(\sigma_+ a + \sigma_- a^\dagger) \\ &= \hbar g(\sigma_+ a + \sigma_- a^\dagger) \end{aligned} \quad (4.3.5)$$

という形になる。これを Jaynes-Cummings 相互作用 [3] といい、結合定数 (coupling constant) が $g = \mu E_{\text{zpf}}/\hbar$ で与えられる⁶。この相互作用項の物理的な意味は単純で、電磁波の量子、つまり光子が一つ吸収 (放出) され、同時に量子ビットが励起される (脱励起する) ような過程を表している。

特殊な状況では、anti-Jaynes-Cummings 相互作用も扱うことがあるので紹介しておこう。これは

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = \hbar g'(\sigma_+ a^\dagger + \sigma_- a). \quad (4.3.6)$$

という形をしており、ちょうど Jaynes-Cummings 相互作用を得た際に残した項と無視した項が入れ替わった形である。例えば系を周波数 $\omega_q + \omega_c$ で駆動するような場合には、量子ビットの励起と光子の生成が同時に起こり、anti-Jaynes-Cummings 相互作用でよく記述される状況となる。また、原子イオン系に対して二つのレーザー光を照射し、イオンの振動を調和振動子とした Jaynes-Cummings 相互作用と anti-Jaynes-Cummings 相互作用を同時に引き起こすことで Mølmer-Sørensen ゲート [4] と呼ばれる、現時点で最も高精度な二量子ビット操作が実現されている [5]。

4.4 二準位系と電磁波の例

核磁気共鳴における二準位系

核磁気共鳴は物質科学における分光法として頻繁に用いられるほか、MRI (magnetic resonance imaging) という医療機器に用いられる技術としても馴染み深い。核磁気共

⁵ここでは簡単のため単一のモードを考える。

⁶用語の解説を少ししておく。通常 (anti-)Jaynes-Cummings 相互作用は量子ビットと調和振動子の結合に用いられる用語である。二つの調和振動子 (消滅演算子が a と b) の場合、 $\hbar g(a^\dagger b + ab^\dagger)$ や $\hbar g(a^\dagger b^\dagger + ab)$ で書かれる相互作用はそれぞれビームスプリッター相互作用、パラメトリックゲイン相互作用などと呼ばれる。量子ビットどうしの相互作用については $\sigma_x \otimes \sigma_x$ や $\sigma_x \otimes \sigma_y$ のようなものがあるが、これらはそのまま XX 相互作用や XY 相互作用などと呼ばれる。

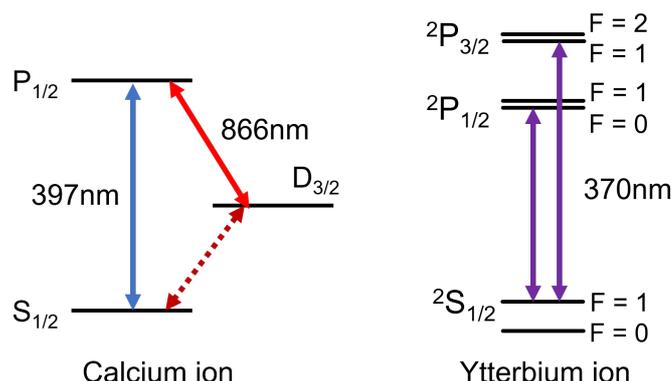


図 4.2: カルシウムイオンとイッテルビウムイオンのエネルギー準位の一部

鳴においては、磁場下で Zeeman 分裂した核スピンの二つの状態 $|↑\rangle$ と $|↓\rangle$ が二準位系となる。核スピンといってもそれ単体であるわけではなく、なんらかの分子の中のリン原子や水素原子なりの原子核（水素原子の場合は単に陽子）の核スピンを扱うことが多い。分子が溶け込んだ溶液に対して 1 T 程度の磁場を印可し、数十 MHz ほどの Zeeman 分裂をした核スピン自由度に対して対応する周波数の RF 磁場を印可することで二準位系と電磁波の相互作用が実装される。使用する分子によって核スピンの数やコヒーレンス時間は変化するが、コヒーレンス時間に関しては測定が困難なほど長いものもある。これは核スピンというものが物質の中でも非常によく外界から隔離されたものであることを意味している。

原子における二準位系

中性原子気体あるいは原子イオンを用いた系は、その内部構造の豊富さから多様な二準位系の構成が可能である。ここでは特に原子イオン系でよく用いられる光領域で動作するものとマイクロ波領域で動作するものについて紹介しよう。なお、以下の説明で超微細構造というものが出てくるが、こちらに関しては付録 D を参照してほしい。

まず光領域で動作する二準位系の説明のために、例としてカルシウム (Ca) 原子 (一価) イオンのエネルギー準位を図 4.2 に示す。アルカリ土類金属原子である Ca イオンは最外殻電子が一つであり、中性アルカリ金属原子と同様に基底状態が S 状態であり、寿命が数ナノ秒程度の励起状態である P 状態への電気双極子による光遷移を有する。そのほかに D 状態もあり、これは寿命が 1 秒程度と長いため、準安定状態とみなされる。D 状態から P 状態への光学遷移も許容されているが、S 状態と D 状態のあいだの光学遷移は電気四重極子遷移と呼ばれ、双極子遷移により許容されていないため非常に弱い遷移で、かつ特殊な光の照射の仕方をしなければならない。しかしながらこの光学遷移を用いる事で S 状態を基底状態 $|g\rangle$ 、D 状態を励起状態 $|e\rangle$ として扱うことができる。

マイクロ波領域で動作する二準位系の説明には、イッテルビウム (Yb) 原子 (一価)

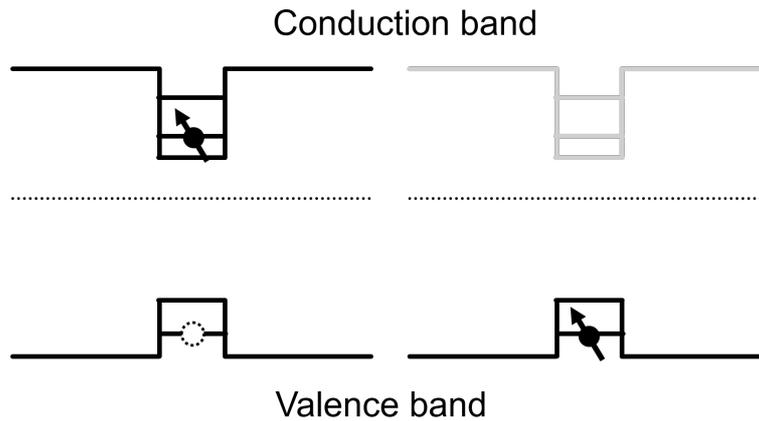


図 4.3: 量子ドットの励起子（左）と量子ドットに閉じ込められた電子（右）。破線は Fermi エネルギーを模式的に書いたもの。

イオンが適切だろう。Yb イオンの基底状態は S 状態であり、かつ核スピンの $1/2$ である。これより、基底状態の超微細構造は $F = 0$ と $F = 1$ の二つであり、微細構造分裂は周波数にして 12.6 GHz 程度となっている。 $F = 0$ の状態は $m_F = 0$ という一つの状態しかなく、 $F = 1$ の状態は $m_F = -1, 0, 1$ の三つとなっており、 $F = 0$ の状態を基底状態 $|g\rangle$ 、 $F = 1$ の状態のひとつを励起状態 $|e\rangle$ とし、12.6 GHz のマイクロ波を照射する、あるいは光の Raman 遷移を用いる事によって二つの状態間を遷移させることができる。この超微細構造を用いた二準位系の場合にはどちらの状態も基底状態であるから、寿命はほとんど無限と違ってよいほどの長さになる⁷。

原子あるいは原子イオンを用いると非常に寿命の長く、かつ全く性質の同じ二準位系を多数用意できるという点が利点として挙げられる。ただし原子が周囲の気体と衝突するとよくないので超高真空 (10^{-10} Pa 程度) にする必要があり、かつ集積性や系の安定性に関して課題を抱えている。

固体量子欠陥における二準位系

金属でない個体中の原子が一つ抜けているような欠陥は、量子欠陥と呼ばれ、バルクの個体とは異なる光学遷移を有することが知られている。この光学遷移がバンドギャップ内にあるためにこれをコヒーレントに駆動することが可能であるため、量子技術に有用な二準位系を作ることができるものとして着目される。

光学的に制御される半導体量子ドットにおける二準位系

半導体の結晶成長技術は原子一層ずつの積層すら可能にし、この成膜技術を駆使することによりバンドギャップの小さい物質（例えば InAs）のナノメートルサイズの領域を、バンドギャップの大きな物質中（InAs に対して GaAs など）に作製することが可能である。このバンドギャップの小さい物質のナノメートルサイズの領域を量子ドットと呼び、そこには単一あるいは二つの電子が捕獲されることからこの電子の光学遷移およびスピン状態の量子レベルでの制御が着目されている。

量子ドットを1次元的に概念図にしたものが図 4.3 である。量子ドット中の電子は十数ナノメートルの空間に局在し、たいていの場合単一の電子のみが量子ドット中に存在することになる。量子ドットの“伝導帯”にも電子の存在できるエネルギー準位（寿命は数百ピコ秒）があり、この“価電子帯”= $|g\rangle$ から“伝導帯”= $|e\rangle$ へ電子が遷移することによる素励起を励起子という。この光学遷移が量子ドットの主たる光学遷移、およびそれに対応する二準位系になる。

また、価電子帯で閉じ込められた電子自身のスピン自由度も二準位系として用いる事ができる（図 4.3 右）。数 T の磁場のもとでスピンのコヒーレンス時間が数マイクロ秒程度あるため、誘導 Raman 遷移などの光学的な手法によってこのスピン状態を量子的に操作することが可能である。

とくに半導体はバンドギャップの制御によってこの量子ドットの光学遷移の波長が紫外域から近赤外光まで幅広く変化させることができる点が魅力的である。また、半導体の微細加工技術を活用すると量子ドットをフォトニック結晶共振器中に配置し強く結合させることも可能である。

超伝導回路における二準位系

詳細は 9.2 節で述べるが、超伝導体でキャパシタと Josephson 接合（量子トンネル効果が顕著となるくらい微細なキャパシタ構造）の並列回路を作ると、この回路は非線形 LC 共振器としてふるまう。非線形な LC 共振器の基底状態から第一励起状態までと第一励起状態から第二励起状態までの遷移エネルギーが異なることを利用して、この回路の基底状態を $|g\rangle$ 、第一励起状態を $|e\rangle$ とする二準位系を構成することが可能である。この遷移エネルギーは設計にもよるが、数 GHz から 20 GHz 程度まで多様である。また、超伝導回路は設計次第で電磁波と量子ビットの結合強度を非常に強くすることができ、強分散領域という結合領域にも容易に到達できるという利点もある。

4.4.1 自然放出と誘導放出

二準位系に電磁波が関与する過程として、ここでは自然放出と誘導吸収・誘導放出という二つの過程を紹介しておこう。まず自然放出（spontaneous emission）は、二準位

⁷一応磁気双極子遷移であるとして寿命を見積もることはできるが、何万年とか何億年とかの寿命が算出される。

系を励起状態に用意した際に、何もしなくても励起状態から基底状態に遷移してしまい、その時に遷移周波数に対応する電磁波を放出するという現象である。電子が原子核からの復元力をうけて振動しているというような古典的な原子の描像でいうと、電子の振動が電磁場の振動、つまり電磁波を発生させてエネルギーを失っていくようなイメージである。もちろん、この状況で電子はどんどんエネルギーを失って原子核に“落ちて”行ってしまうがそうならないというのが古典力学の不十分さと量子論の必要性を浮き彫りにしている。量子論ひいては量子力学では原子のなかで離散的なエネルギーの状態しか取れないため、量子的な描像では励起状態にある原子が基底状態に遷移し、そのときに対応するエネルギーの光子が一個飛び出ることになる。この時に放出される電磁波の位相は完全にランダムであり、このランダムさがのちに導入する位相緩和に自然放出が寄与を持つ理由である。また、自然放出が起こる理由は、二準位系の遷移周波数に対応する周波数の電磁波の真空ゆらぎが二準位系の遷移に作用し、この直後に述べる誘導放出を引き起こすためと考えてもよい。

自然放出と対照的なのが誘導吸収 (induced absorption) と誘導放出 (induced emission) である。これらは電磁波が二準位系に照射された時に光子が基底状態の二準位系に吸収される過程と、励起状態の二準位系が光子を照射された電磁波の位相に従って放出する過程である。誘導吸収と誘導放出は逆過程であるため、同じ頻度で起こる。したがって、連続的な電磁波をいくら強く当てても二準位系の占有確率が励起状態のみになるということではなく、定常状態ではせいぜい基底状態と励起状態の占有確率が半々になる程度である。自然放出もあわせると定常状態での励起状態の占有確率は0.5以下になることがわかる。のちに Rabi 振動や Ramsey 干渉といった現象で見ると、誘導放出と誘導吸収は照射された電磁波の位相と二準位系の量子状態がきれいに対応するような過程 (コヒーレントな過程) である。

第5章 二準位系のダイナミクスと緩和

5.1 Bloch 方程式と緩和

5.1.1 Bloch 方程式

前節では量子ビットがスピン 1/2 系と等価であることを見た。スピンの基本的なダイナミクスは、量子技術の観点では、電磁波との相互作用により引き起こされる。あるいは、周囲の環境との相互作用による量子ビットの緩和もまた考えなければならない。1946 年には Felix Bloch が印加磁場まわりのスピン (より正確には磁化) の歳差運動を記述する方程式を見出した。この Bloch 方程式は基本的に核磁気共鳴や電子スピン共鳴のような実際のスピン系におけるダイナミクスを記述するものである。しかしながら 1957 年、Richard P. Feynman は、仮想的なスピン 1/2 系である量子ビットのダイナミクスに関してもこの Bloch 方程式が適用可能であることを見出した。本節ではまず量子ビットに対する密度演算子を導入し、そのスピン 1/2 系との対応、そして密度演算子のダイナミクスを与えるマスター方程式について述べる。さらに具体的なケースとして、量子ビットに関する Bloch 方程式を導出しよう。

密度演算子 ρ は、単一の量子状態 $|\psi\rangle$ で表される純粋状態 $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ だけでなく、いくつかの量子状態 $|\psi_i\rangle$ を確率 p_i で取るような混合状態 $\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ をも表現することができる点で、ket ベクトルよりも一般的な量子状態を記述できる。ここでは $|\psi\rangle = c_g|g\rangle + c_e|e\rangle$ の密度演算子

$$\begin{aligned}\rho &= |\psi\rangle\langle\psi| \\ &= \rho_{gg}|g\rangle\langle g| + \rho_{ge}|g\rangle\langle e| + \rho_{eg}|e\rangle\langle g| + \rho_{ee}|e\rangle\langle e| \\ &= \begin{pmatrix} |c_e|^2 & c_g^*c_e \\ c_gc_e^* & |c_g|^2 \end{pmatrix}\end{aligned}\quad (5.1.1)$$

を主に考えていこう。この密度演算子のダイナミクスはどのようなものであろうか？これを見るために、Schrödinger 表示の状態ベクトル $|\psi(t)\rangle = e^{-i(\mathcal{H}/\hbar)t}|\psi\rangle = U_t|\psi\rangle$ が系の Hamiltonian \mathcal{H} に従って時間発展するとしよう。すると密度演算子 $\rho(t) = U_t\rho U_t^\dagger$ の時間微分は

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = \frac{dU_t}{dt}\rho U_t^\dagger + U_t\rho \frac{dU_t^\dagger}{dt} = -\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}\rho(t) + \frac{i}{\hbar}\rho(t)\mathcal{H} = \frac{1}{i\hbar}[\mathcal{H}, \rho(t)]\quad (5.1.2)$$

と計算され、Liouville-von Neumann 方程式

$$i\hbar\frac{d\rho}{dt} = [\mathcal{H}, \rho].\quad (5.1.3)$$

を得る。ここで、密度演算子に対する Liouville-von Neumann 方程式 (5.1.3) と、演算子 A に対する Heisenberg 方程式 $i\hbar\partial A/\partial t = [A, \mathcal{H}]$ の違いに注意したい。

次に量子ビットが電磁波（とくに断らない限り電気双極子遷移を用いた量子ビットをイメージすればよい）で駆動（よく drive という）されているような状況を、当面は後に導入する緩和を抜きに考える。駆動された量子ビットの Hamiltonian は、付録 C にもあるような方法で次のように与えられる：

$$\mathcal{H} = \frac{\hbar\omega_q}{2}\sigma_z + \frac{\hbar\Omega}{2}(\sigma_+e^{-i\omega_d t} + \sigma_-e^{i\omega_d t}). \quad (5.1.4)$$

ここで電場の振幅 E_d を用いて $\Omega = \mu E_d$ というパラメータを導入した。Schrödinger 表示では Hamiltonian は指数関数の肩に乗って量子状態を時間発展させるので、このパラメータは量子ビットの状態遷移のタイムスケールに関与するであろう。回転系への変換（付録 B 参照）をユニタリ行列 $U = \exp[i(\omega_d/2)\sigma_z t]$ によって施すと、

$$\mathcal{H} = \frac{\hbar\Delta_q}{2}\sigma_z + \frac{\hbar\Omega}{2}(\sigma_+ + \sigma_-), \quad (5.1.5)$$

となる。ここで離調 (detuning) $\Delta_q = \omega_q - \omega_d$ を定義した。これを Liouville-von Neumann 方程式 (5.1.3) に代入し、 $|g\rangle$ や $|e\rangle$ で挟んで $\rho_{ij} = \langle i|\rho|j\rangle$ を評価することで次の式を得る：

$$\frac{d\rho_{ee}}{dt} = i\frac{\Omega}{2}(\rho_{eg} - \rho_{ge}), \quad (5.1.6)$$

$$\frac{d\rho_{gg}}{dt} = -i\frac{\Omega}{2}(\rho_{eg} - \rho_{ge}), \quad (5.1.7)$$

$$\frac{d\rho_{eg}}{dt} = -i\Delta_q\rho_{eg} - i\frac{\Omega}{2}(\rho_{gg} - \rho_{ee}), \quad (5.1.8)$$

$$\frac{d\rho_{ge}}{dt} = i\Delta_q\rho_{ge} + i\frac{\Omega}{2}(\rho_{gg} - \rho_{ee}). \quad (5.1.9)$$

ここで、

$$s_x = \rho_{ge} + \rho_{eg}, \quad s_y = -i(\rho_{ge} - \rho_{eg}), \quad s_z = \rho_{ee} - \rho_{gg}.$$

によって仮想的なスピン成分に対応する量を定義しよう。なぜこれがスピン成分と思えるかということ、密度演算子が

$$\begin{aligned} \rho &= \rho_{gg}|g\rangle\langle g| + \rho_{ge}|g\rangle\langle e| + \rho_{eg}|e\rangle\langle g| + \rho_{ee}|e\rangle\langle e| \\ &= \frac{1}{2}(I + s_x\sigma_x + s_y\sigma_y + s_z\sigma_z). \end{aligned} \quad (5.1.10)$$

と書けるからである。これらの量を用いる事で上記の微分方程式の組が次のようにまと

められる：

$$\begin{aligned} \frac{ds_x}{dt} &= -\Delta_q s_y \\ \frac{ds_y}{dt} &= \Delta_q s_x - \Omega s_z \\ \frac{ds_z}{dt} &= \Omega s_y \\ \Leftrightarrow \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} s_x \\ s_y \\ s_z \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \Omega \\ 0 \\ \Delta_q \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} s_x \\ s_y \\ s_z \end{pmatrix} \Leftrightarrow \frac{ds}{dt} = B \times s. \end{aligned}$$

これが Feynman の見出した、緩和なしの量子ビットに対する Bloch 方程式であり、たしかに最後の式は“磁場” $B = (\Omega, 0, \Delta_q)$ の周りを“スピン” s が歳差運動するような形となっている。

5.1.2 緩和がある場合の Bloch 方程式

マスター方程式 (master equation、導出については付録 E 参照) は、Liouville-von Neumann 方程式に緩和 (relaxation) を取り込む点でもう少し一般的なプロセスを記述できる。緩和のダイナミクスは、緩和を表す演算子 Λ およびそれをういた Lindbladian あるいは Lindblad superoperator

$$\mathcal{L}(\Lambda)\rho = 2\Lambda\rho\Lambda^\dagger - \Lambda^\dagger\Lambda\rho - \rho\Lambda^\dagger\Lambda \quad (5.1.11)$$

を Liouville-von Neumann 方程式に導入することで表される。緩和に関して自然放出 (spontaneous emission) など環境の温度によらないレートを Γ 、熱浴 (thermal bath あるいは単に bath) の温度に依存するレートを Γ' とすると、一般的なマスター方程式は次のようなものである：

$$\frac{d\rho}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [H, \rho] + \frac{1}{2}\mathcal{L}(\sqrt{\Gamma + \Gamma'}\Lambda)\rho + \frac{1}{2}\mathcal{L}(\sqrt{\Gamma'}\Lambda)\rho. \quad (5.1.12)$$

環境の温度によって決まるレート Γ' だが、大抵の場合は量子ビットの遷移エネルギー $\hbar\omega_q$ に対して十分小さなエネルギースケールまで量子ビットの置かれる環境の温度 T を冷却する ($k_B T \ll \hbar\omega_q$) ため、 Γ に対して十分小さくなり無視できる。環境温度によらない緩和として、ここでは二つの緩和を考える。ひとつは自然放出あるいは縦緩和 (longitudinal relaxation) と呼ばれる。これは励起状態 $|e\rangle$ の寿命が有限であることに起因し、 $\mathcal{L}(\sqrt{\Gamma_1}\sigma_-)$ という Lindbladian で表される。もうひとつは位相緩和 (dephasing) あるいは横緩和 (transverse relaxation) と呼ばれ、その原因は電磁場環境のゆらぎなど多岐にわたる。位相緩和は $\mathcal{L}(\sqrt{2\Gamma_2}\sigma_z/2)$ という Lindbladian によって表現される。これらの緩和を考慮に入れると、量子系を取り扱ううえで最も基本的なマスター方程式が得られる：

$$\frac{d\rho}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [H, \rho] + \frac{1}{2}\mathcal{L}(\sqrt{\Gamma_1}\sigma_-)\rho + \frac{1}{2}\mathcal{L}(\sqrt{\Gamma_2}\sigma_z)\rho. \quad (5.1.13)$$

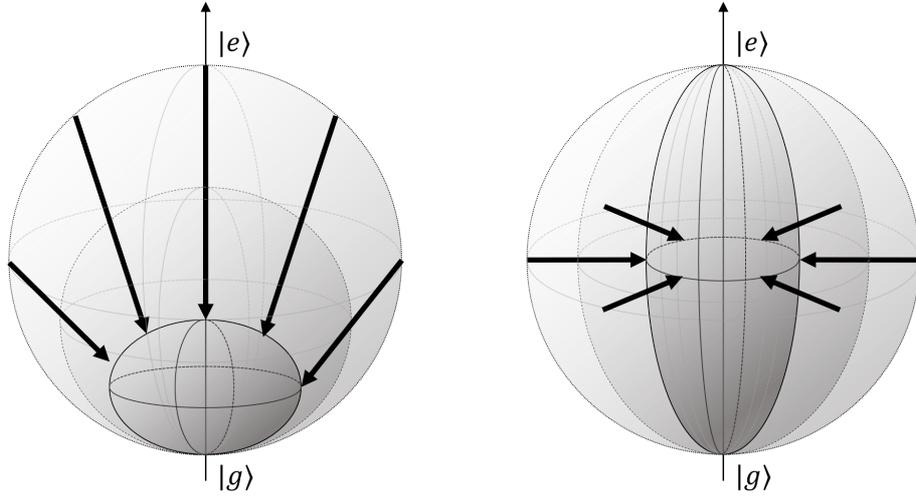


図 5.1: 縦緩和あるいは自然放出による Bloch 球の変化 (左) と、横緩和あるいは位相緩和によるもの (右)

Bloch 方程式を導いた時と同様に、密度演算子の成分ごとの方程式に書き直して s_x, s_y, s_z としてまとめることで、緩和を含んだ Bloch 方程式が得られる：

$$\frac{ds_x}{dt} = -\Delta_q s_y - \frac{\Gamma_1 + 2\Gamma_2}{2} s_x \quad (5.1.14)$$

$$\frac{ds_y}{dt} = \Delta_q s_x - \Omega s_z - \frac{\Gamma_1 + 2\Gamma_2}{2} s_y \quad (5.1.15)$$

$$\frac{ds_z}{dt} = \Omega s_y - \Gamma_1 (s_z + 1) \quad (5.1.16)$$

$$\Leftrightarrow \frac{ds}{dt} = B \times s - \begin{pmatrix} \frac{\Gamma_1 + 2\Gamma_2}{2} s_x \\ \frac{\Gamma_1 + 2\Gamma_2}{2} s_y \\ \Gamma_1 (s_z + 1) \end{pmatrix}. \quad (5.1.17)$$

とくに今の場合には Γ' の効果を見逃している。この近似は光周波数（波長 $1 \mu\text{m}$ ならばおよそ 300 THz ）領域の量子ビットが室温環境（ $k_B \times 300 \text{ K} \simeq h \times 6 \text{ THz}$ ）で扱われる場合に特によく成り立つことから、光学的 Bloch 方程式 (optical Bloch equation) とも呼ばれる。上の方程式から見て取れるように、 Γ_1 は励起状態 $|e\rangle$ から基底状態 $|g\rangle$ への遷移のレートを表している¹この過程は自然放出と呼ばれるが、これは照射された電磁波による誘導放出ではなく、真空場による誘導放出と考えることができる。余談だが、二準位系の緩和レート Γ が純粋に真空場による誘導放出によるもの、すなわち自然放出過程によるものとみなせる場合、二準位系の遷移双極子モーメント μ と次の関係式

¹ $\Gamma_2 = 0, s_z(t=0) = 1$ に関して Bloch 方程式を解いてみよ。励起状態の占有確率の指数関数的な減衰がみられるはずである。

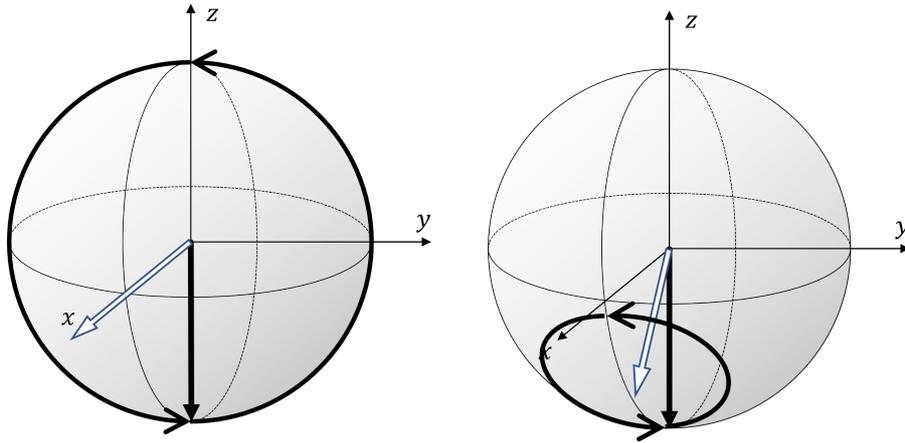


図 5.2: 離調がない場合 (左) とある場合 (右) の Rabi 振動

が成り立つ：

$$\Gamma = \frac{\mu^2 \omega_q^3}{3\pi \hbar \epsilon_0 c^3} \iff \mu = \sqrt{\frac{3\pi \hbar \epsilon_0 c^3 \Gamma}{\omega_q^3}}. \quad (5.1.18)$$

Γ_2 で表される緩和は占有確率の変化を引き起こさないが、Bloch ベクトル (s_x, s_y, s_z) のうち s_x と s_y を“縮める”効果を持つ (図 5.1)。これは結果として量子ビットが重ね合わせ状態などに関する位相の情報を失っていくことを意味しており、それゆえに位相緩和と呼ばれる。自然放出による位相緩和も含めた $\Gamma_1 + 2\Gamma_2$ がトータルの位相緩和レートとなるため、 Γ_2 はとくに純位相緩和レート (pure dephasing rate) と呼ばれることもある。

5.2 Rabi 振動

さて、電磁波による駆動と緩和のもとでの量子ビットのダイナミクスを記述する方程式が得られたため、実際にどのような振る舞いになるかを見てみよう。といっても Bloch 方程式を解析的に解くのは特殊な場合を除いて簡単ではないため、まず理想的な場合として離調がなく ($\Delta_q = 0$)、緩和もない ($\Gamma_1 = \Gamma_2 = 0$) 状況を見てみよう。この時の Bloch 方程式は

$$\frac{ds_x}{dt} = 0, \quad \frac{ds_y}{dt} = -\Omega s_z, \quad \frac{ds_z}{dt} = \Omega s_y$$

となり、初めに量子ビットが基底状態にある ($s_z(t=0) = -1$) という初期条件のもとで $s_x = 0$ 、 $s_z = -\cos(\Omega t)$ 、 $s_y = \sin(\Omega t)$ という解が得られる。この解は、はじめ $|g\rangle$ にあった Bloch ベクトルが $(\Omega, 0, 0)$ 、つまり Bloch 球でいうと図 5.2 の左側のように x 軸まわりに回転することを意味している。 Ω は Rabi 周波数 (Rabi frequency) と呼ば

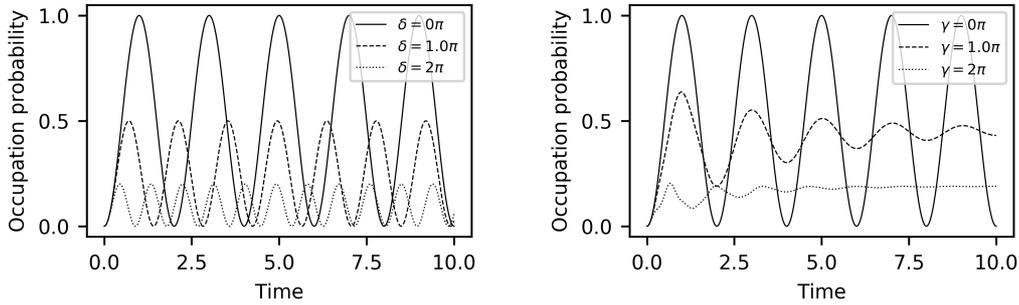


図 5.3: Rabi 振動における $|e\rangle$ の占有確率。左: 自然放出がないとしたときの様々な離調 δ に対する振る舞い。右: 離調がないとしたときの様々な自然放出レートに対する振る舞い。数値計算には QuTiP [6] を用いた。

れるが、見ての通り Bloch ベクトルが回転する周波数になっている。Rabi 周波数には駆動電場と $\Omega = \mu E_d / 2\hbar$ という関係があるので、駆動電場をオンにしている時間と強度によって回転角が決まる。

つぎにもう少し複雑な状況を考えるべく、離調がゼロでない $\Delta_q \neq 0$ 場合を見てみよう。このときには Bloch ベクトルが $(\Omega, 0, \Delta_q)$ という、 x 軸から角度 $\theta = \arctan(\Delta_q / \Omega)$ だけ傾いたベクトルの周りに回転することになる (図 5.2 の右側)。つまり、 $|e\rangle$ の占有確率は離調がゼロの時のように 1 には至らず、かつベクトル $(\Omega, 0, \Delta_q)$ の長さ $\Omega' = \sqrt{\Omega^2 + \Delta_q^2}$ で占有確率が振動する (図 5.3 左)。この Ω' を一般化 Rabi 周波数 (generalized Rabi frequency) ともいう。

最後に、 Γ_1 と Γ_2 がゼロでない場合、つまり緩和がある場合を考えよう。このときには Rabi 振動は緩和によって振幅を失っていき、 s_z はある値に収束する。この値は駆動の強さと緩和の強さがバランスすることによって決まり、定常状態を解析することで得られる。ダイナミクス自体は通常 QuTiP [6] などの数値計算パッケージを用いて図 5.3 右のように解析することができる。

5.3 Ramsey 干渉

もうひとつ、量子ビットのダイナミクスを利用した量子力学的現象に Ramsey 干渉 (Ramsey interference) というものがある。Ramsey 干渉においては量子ビットはまず $|g\rangle$ と $|e\rangle$ の重ね合わせ状態にされ、ある時間ののちに異なる位相を獲得した $|g\rangle$ と $|e\rangle$ が再び干渉し、“干渉縞 (interference fringe)” が現れる。Ramsey 干渉は量子ビットの位相 (s_x, s_y 成分) の時間発展を知りたい場合に便利な現象であり、これを Bloch 球と Bloch ベクトルを用いて理解することが本節の目標である。

初めに、Rabi 振動において回転角が $\pi/2$ となるよう、パルス幅 $\Delta t = \pi/2\Omega$ の共鳴電磁波を照射する。これを $\pi/2$ パルスと呼ぶ。これによってはじめ $|g\rangle$ にあった Bloch ベ

クトルは $(|g\rangle - i|e\rangle)/\sqrt{2}$ に移される (図 5.4 左)。その後ある一定時間 τ 、我々は何もせず量子ビットは自由に時間発展をする。環境に何もノイズがなければ、Bloch ベクトルはこの間にも変化を受けないが、現実には様々な環境由来のノイズによって Bloch ベクトルが時間発展をする (図 5.4 中央)。そして最後に、再び $\pi/2$ パルスを照射すると、 xy 平面内の時間発展が xz 平面に移される (図 5.4 右)。ここに至り、量子ビットの位相の時間発展を s_z 、すなわち量子ビットの基底状態あるいは励起状態の占有確率に転写することができた。もし一切の緩和や位相のドリフトがなければ最後の $\pi/2$ パルスによって $s_z = 1$ が得られるが、位相緩和がある場合には τ が長くなるにつれて s_z が (量子ビットの遷移周波数の回転系では) 指数関数的に減衰しゼロへ収束し、駆動電磁波の強度ゆらぎなどによる位相ドリフトがある場合には、 τ に対し位相ドリフトに特徴的な時間スケールで s_z が変動する。

5.4 スピンエコー法

スピンエコー法 (spin-echo) とは、ある一定の条件下で上記のような位相ドリフトの効果を打ち消すような量子ビットの制御シーケンスのことである。基本的なアイデアはシンプルである。位相ドリフトは Bloch 球上での z 軸まわりの回転とみることができるが、もし位相ドリフトが十分ゆっくりであれば、Rabi 振動で回転角がちょうど π となる π パルスを量子ビットに作用させることで、位相ドリフトを「巻き戻す」ことができる。例えば精密な π パルスを作用させたいときに、少量の z 軸まわりの回転が入り込んでしまうと、それが π パルスの精密さに限界を与えてしまう。スピンエコー法は、このような場合に z 軸まわりの回転の影響をキャンセルするのに有用である。

このために、スピンエコー法では本来 π パルスであるべき制御シーケンスを、時間 τ だけ間隔をあけた二つの $\pi/2$ パルスに分割し、二つのパルスのちょうど中間、 $\tau/2$ だけ経過したタイミングに π パルスを挿入する。はじめ量子ビットが $|g\rangle$ にあるとすると、初めの $\pi/2$ パルスで $|-i\rangle$ 状態に遷移し、その後 $\tau/2$ だけ位相ドリフトが生じる (図 5.5、上段左・中央)。次の π パルスによって y 軸まわりに Bloch ベクトルが回転し

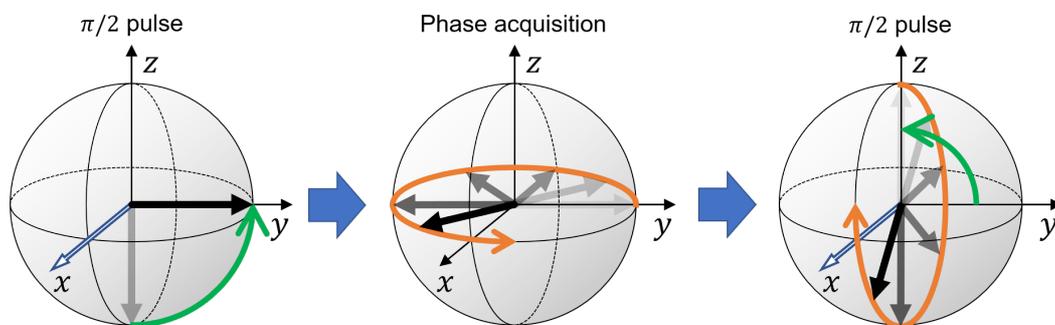


図 5.4: Ramsey 干渉の概略

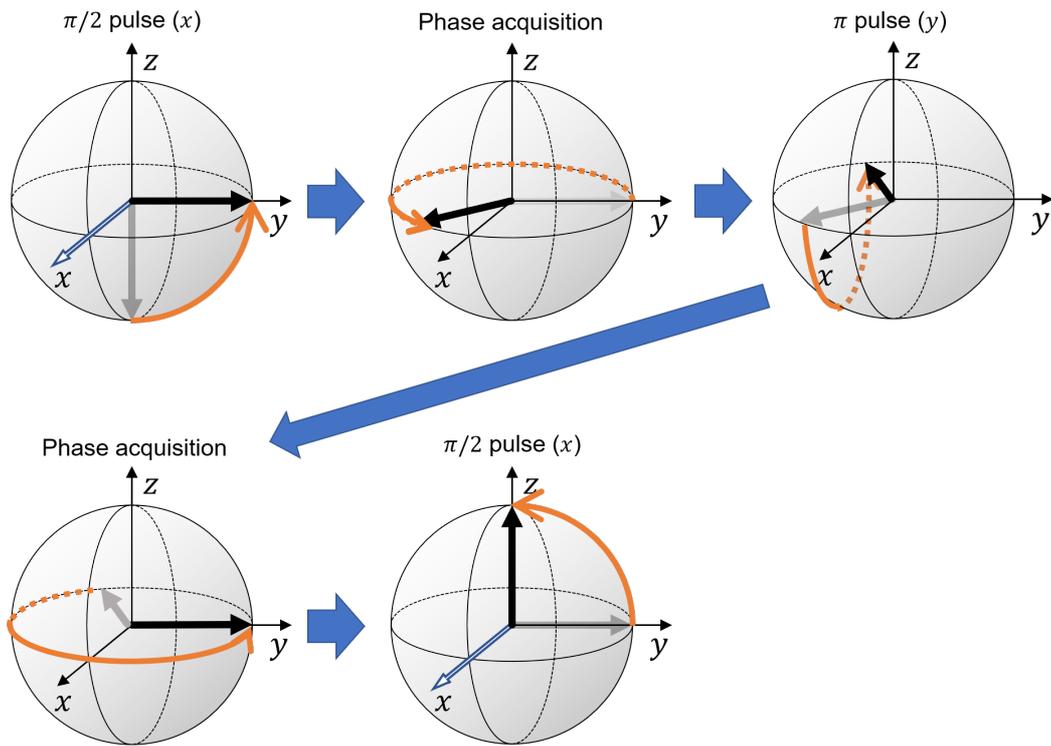


図 5.5: スピンエコー法の概略

た後、再度 $\pi/2$ だけ位相ドリフトが起こると、シーケンス全体としての位相ドリフトがキャンセルされて $| -i \rangle$ 状態に戻っていることがわかる (図 5.5、上段右・下段左)。最後に $\pi/2$ パルスを作用させることで当初の目的であった $| e \rangle$ への精密な π パルスを実現できるということになる (図 5.5、下段中央)。上記の説明では、 π パルスなどが有限の時間かかることによる追加の位相ドリフトに関して簡単のため無視したが、実際の実験ではパルス幅の調整により位相ドリフトが全体でキャンセルされるようにキャリブレーションを行うというのが実情であろう。

第6章 調和振動子

6.1 Fock 状態

光・音・モノの振動など、我々が日常で見る波は、物理の言葉では様々な媒体の調和振動 (harmonic oscillation) として理解されている。調和振動はしばしば正準変数 q と p により Hamiltonian

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2.$$

によって記述される¹。ここで m は質量、 ω は調和振動の固有 (角) 周波数である。量子力学的な描像に移るために、 $q \rightarrow \hat{q}$ 、 $p \rightarrow \hat{p} = (\hbar/i)d/dq$ と演算子に置き換える。ハット記号は混乱がない限り省略する。

消滅演算子を $a = \sqrt{m\omega/2\hbar}[q + (i/m\omega)p]$ と定義すれば、上記の Hamiltonian は

$$\mathcal{H} = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \quad (6.1.1)$$

と書きかえられ、この Hamiltonian の固有状態 $\{|n\rangle; n = 0, 1, 2, \dots\}$ は Fock 状態と呼ばれる。 $|n\rangle$ の n は調和振動の振動量子が何個あるかを表すため、Fock 状態は数状態と呼ばれることもある。

Fock 状態は完全正規直交系をなす。さらに $|n\rangle$ は平均の量子の数が n 個、量子の数のゆらぎがゼロの状態である。こういった性質と物理的なわかりやすさから、Fock 状態は様々な量子状態を展開する基底としても重要な役割を果たす。

6.2 コヒーレント状態

Fock 状態は調和振動子の Hamiltonian の固有状態であるが、現実世界で Fock 状態を目の当たりにすることは容易ではない。日常で目にする調和振動といえば、振り子のように単一の振動数での正弦波で書かれる現象を想像するだろう。では、どのような量子状態がもっともこの正弦波的な (言い換えると「古典 (力学) 的な」) 振動に近いものだろうか? 古典力学的な振動は通常外力による駆動、つまり強制振動によって誘起されるので、量子力学的な強制振動を考え、その結果として生成される量子状態が求めるものに近いであろうと期待される。

¹光は質量をもたずこの Hamiltonian では記述できないが、調和振動として記述できることには変わらない。

調和振動子の外力による駆動は、ビームスプリッタ (beam splitter) 相互作用 $\mathcal{H}_d = i\hbar\Omega(ba^\dagger - b^\dagger a)$ により調和振動子にエネルギーを供給することで可能となる。ここで a は先ほどもあった駆動したい調和振動子の消滅演算子、 b は駆動のための場の消滅演算子であり、 b も a と同様調和振動子として書かれる。駆動場はふつう非常に強いもの考えるので、これを演算子ではなく古典的な振幅を表すただの数 β で置き換えよう²。駆動の時間を τ とし、 $\alpha = \Omega\beta\tau$ と定義すると、相互作用自体は $\mathcal{H}_d = i\hbar [(\alpha/\tau)a^\dagger - (\alpha^*/\tau)a]$ となり、これによる時間発展演算子は次のようになる：

$$D(\alpha) = e^{-i\frac{\mathcal{H}_d}{\hbar}\tau} = e^{\alpha a^\dagger - \alpha^* a}.$$

このユニタリー演算子 $D(\alpha)$ は変位演算子 (displacement operator) と呼ばれる。これがなぜ変位演算子と呼ばれるかを明らかにするため、まず $D(\alpha)$ のいくつかの重要な性質を見よう。

まず、真空 $|0\rangle$ が強制振動により $|\alpha\rangle \stackrel{\text{def}}{=} D(\alpha)|0\rangle$ という状態になったとしよう。するところの $|\alpha\rangle$ は古典力学的な振動の量子版となっていることが期待される。天下り的ではあるが、 a を $|\alpha\rangle$ に作用させてみよう：

$$\begin{aligned} a|\alpha\rangle &= ae^{\alpha a^\dagger - \alpha^* a}|0\rangle \\ &= ae^{\alpha a^\dagger}e^{-\alpha^* a}e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}}|0\rangle \\ &= \alpha e^{\alpha a^\dagger}e^{-\alpha^* a}e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}}|0\rangle \\ &= \alpha e^{\alpha a^\dagger - \alpha^* a}|0\rangle \\ &= \alpha|\alpha\rangle. \end{aligned} \tag{6.2.1}$$

2行目と4行目では、Baker-Campbell-Hausdorffの公式 $e^A e^B = e^{A+B+[A,B]/2}$ を用いた。3行目では $ae^{\alpha a^\dagger}$ の指数関数部分を Taylor 展開して交換関係 $[a, a^\dagger] = 1$ を繰り返し使い、 $e^{\alpha a^\dagger}a + \alpha e^{\alpha a^\dagger}$ となることを用いた。これら二つの項のうち、第一項は $|0\rangle$ に作用するとゼロとなることにも注意したい。こうして、量子状態 $|\alpha\rangle$ は消滅演算子 a の固有状態でかつ固有値が α であることがわかる。

これによって、 $q = \sqrt{2\hbar/m\omega}(a + a^\dagger)/2$ と $p = \sqrt{2m\hbar\omega}(a - a^\dagger)/2i$ の期待値の計算が容易にできるようになった。実際、 $a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$ と $\langle\alpha|a^\dagger = \langle\alpha|\alpha^*$ を用いると

$$\langle q \rangle = \langle\alpha|q|\alpha\rangle = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \frac{\alpha + \alpha^*}{2} = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \text{Re}[\alpha], \tag{6.2.2}$$

$$\langle p \rangle = \langle\alpha|p|\alpha\rangle = \sqrt{2m\hbar\omega} \frac{\alpha - \alpha^*}{2i} = \sqrt{2m\hbar\omega} \text{Im}[\alpha] \tag{6.2.3}$$

となる。さらに q と p の分散も計算したいが、 $\langle\alpha|aa|\alpha\rangle = \alpha^2$ 、 $\langle\alpha|a^\dagger a|\alpha\rangle = |\alpha|^2$ 、そ

²ここで勘のいい読者はこれは循環論法になっていることに気が付くと思う。論理的にきっちりやるのであれば例えばコヒーレント状態を消滅演算子の固有状態と定義してしまうのが常道だが、著者はあえて物理的な意味の分かりやすい説明をしたいと思う。

して $\langle \alpha | a a^\dagger | \alpha \rangle = |\alpha|^2 + 1$ に留意すると次の表式を得る：

$$\begin{aligned} \Delta q &\stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\langle q^2 \rangle - \langle q \rangle^2} \\ &= \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega} \frac{\alpha^2 + \alpha^{*2} + 2|\alpha|^2 + 1 - \alpha^2 - 2|\alpha|^2 - \alpha^{*2}}{4}} \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}, \end{aligned} \quad (6.2.4)$$

$$\begin{aligned} \Delta p &\stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} \\ &= \sqrt{2m\hbar\omega \frac{-\alpha^2 - \alpha^{*2} + 2|\alpha|^2 + 1 + \alpha^2 + \alpha^{*2} - 2|\alpha|^2}{4}} \\ &= \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}. \end{aligned} \quad (6.2.5)$$

さて、位相空間 (qp 平面) を考えると、 $|\alpha\rangle$ が点 $(\sqrt{(2\hbar/m\omega)}\text{Re}[\alpha], \sqrt{2m\hbar\omega}\text{Im}[\alpha])$ を中心に q 方向に $\sqrt{(\hbar/2m\omega)}$ 、 p 方向に $\sqrt{(m\hbar\omega/2)}$ の分散を持った分布となっていることがわかる。ちなみに、後の Wigner 関数の節でみるようにこの分布は Gauss 分布となっており、 $\Delta q \Delta p = \hbar/2$ 、つまり $|\alpha\rangle$ は最小不確定状態となっている。古典力学的な振動は回転座標系では位相空間上の一点であったことを思い出すと、たしかに $|\alpha\rangle$ は古典力学的な、正弦波的振動の量子版であるといえるだろう。 $|\alpha\rangle$ は位相空間上での偏角も有限の期待値を持つような状態であり、それゆえにコヒーレント状態 (coherent state) と呼ばれる³。

$|\alpha\rangle$ を Fock 状態で展開した係数 A_n について考えてみよう： $|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} A_n |n\rangle$ 。 $a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$ からただちに $A_{n+1} = \alpha A_n / \sqrt{n+1}$ という漸化式が得られ、これより $A_n = \alpha^n A_0 / \sqrt{n!}$ と求まる。これで $|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} (\alpha^n / \sqrt{n!}) A_0 |n\rangle$ と書けるのだが、残った A_0 については規格化条件 $\langle \alpha | \alpha \rangle = 1$ から $A_0 = e^{-|\alpha|^2/2}$ と決まる。すなわち最終的に

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-|\alpha|^2/2} |n\rangle. \quad (6.2.6)$$

を得る。各係数の二乗はコヒーレント状態の数分布であり

$$P_n = \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} e^{-|\alpha|^2}. \quad (6.2.7)$$

数分布の分散は

$$\Delta n \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\langle (a^\dagger a)^2 \rangle - \langle a^\dagger a \rangle^2} = |\alpha| \quad (6.2.8)$$

となり、 P_n と併せてコヒーレント状態の数分布が Poisson 分布になっていることがわかる。

³“coherent”という単語は“co-here”、つまり「一貫した、まとまった」という意味を持つ。つまり専門用語ではないので日常会話で coherent という単語が出てきても「おっ、物理専攻かな？」とそわそわしてはいけない。

6.3 スクイズド状態

光と物質の相互作用はとても多様で、線形な応答を示す現象だけでなく非線形な光学効果が種々存在する。頻繁に目にする非線形性は、例えば二次の非線形光学効果のもととなる $\chi^{(2)}$ 非線形性で、Hamiltonian には $i\hbar g(aa^\dagger - a^\dagger a^\dagger a)$ のように演算子の3次の項が入る。また、三次の非線形光学効果に寄与する $\chi^{(3)}$ 非線形性は、Hamiltonian に演算子の4次の項が現れる。こういった非線形な項に対して、ちょうど前節の冒頭でやったように一つあるいは二つの演算子をコヒーレントに駆動したただの数に置き換えると、いわゆるスクイズング (squeezing) Hamiltonian

$$\mathcal{H}_s = i\hbar \frac{r}{2\tau} (e^{i\phi} a^2 - e^{-i\phi} a^{\dagger 2}). \quad (6.3.1)$$

およびこの Hamiltonian による時間発展を表すスクイズング演算子 (squeezing operator)

$$S(r) = e^{-i\frac{\mathcal{H}_s}{\hbar}\tau} = e^{\frac{r}{2}(e^{i\phi} a^2 - e^{-i\phi} a^{\dagger 2})}. \quad (6.3.2)$$

が得られる。

任意の量子状態に対するスクイズング演算子の作用を計算するのは難しいが、コヒーレント状態に対しての作用は比較的容易に計算でき、かつスクイズング演算子の性質を垣間見ることができる。これを見るために、 $S^\dagger(r)aS(r)$ という量を計算してみよう。Baker-Campbell-Hausdorff の公式と $\tilde{S} = (\tilde{r}a^2 - \tilde{r}^*a^{\dagger 2})$ (ただし $\tilde{r} = re^{i\phi}/2$) を用いることで、 $S^\dagger(r)aS(r)$ は次のように計算される：

$$\begin{aligned} S^\dagger(r)aS(r) &= e^{-\tilde{S}} a e^{\tilde{S}} \\ &= a - [\tilde{S}, a] + \frac{1}{2!} [\tilde{S}, [\tilde{S}, a]] - \frac{1}{3!} [\tilde{S}, [\tilde{S}, [\tilde{S}, a]]] + \dots \\ &= a + \frac{1}{2!} 2^2 |\tilde{r}|^2 a + \frac{1}{4!} 2^4 |\tilde{r}|^4 a + \dots \\ &\quad - 2\tilde{r}^* a^\dagger - \frac{1}{3!} 2^3 \tilde{r}^* |\tilde{r}|^2 a^\dagger - \frac{1}{5!} 2^5 \tilde{r}^* |\tilde{r}|^4 a^\dagger - \dots \\ &= a \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|2\tilde{r}|^{2n}}{(2n)!} - a^\dagger \frac{\tilde{r}^*}{|\tilde{r}|} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|2\tilde{r}|^{2n+1}}{(2n+1)!} \\ &= a \cosh r - a^\dagger e^{-i\phi} \sinh r. \end{aligned} \quad (6.3.3)$$

これによって $|r, \alpha\rangle \stackrel{\text{def}}{=} S(r)|\alpha\rangle$ で q と p の期待値を計算することができ、

$$\begin{aligned} \langle q \rangle &\stackrel{\text{def}}{=} \langle r, \alpha | q | r, \alpha \rangle \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle \alpha | S^\dagger(r)(a + a^\dagger)S(r) | \alpha \rangle \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\alpha \cosh r - \alpha^* e^{-i\phi} \sinh r + \alpha^* \cosh r - \alpha e^{i\phi} \sinh r) \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} [(\alpha + \alpha^*) \cosh r - (\alpha e^{i\phi} + \alpha^* e^{-i\phi}) \sinh r] \end{aligned} \quad (6.3.4)$$

および

$$\begin{aligned}\langle p \rangle &\stackrel{\text{def}}{=} \langle r, \alpha | p | r, \alpha \rangle \\ &= \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} [(\alpha - \alpha^*) \cosh r + (\alpha e^{i\phi} - \alpha^* e^{-i\phi}) \sinh r].\end{aligned}\quad (6.3.5)$$

が得られる。さらに、分散を計算するために $\langle q^2 \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \langle r, \alpha | q^2 | r, \alpha \rangle = \langle \alpha | S^\dagger(r) q^2 S(r) | \alpha \rangle$ と $\langle p^2 \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \langle r, \alpha | p^2 | r, \alpha \rangle = \langle \alpha | S^\dagger(r) p^2 S(r) | \alpha \rangle$ を評価しよう。 $S^\dagger(r) q^2 S(r)$ はたとえば $S^\dagger(r) a a S(r)$ のような項を含むが、 $S(r) S^\dagger(r) = 1$ を適切に挟むことによって $S^\dagger(r) a a S(r) = S^\dagger(r) a S(r) S^\dagger(r) a S(r) = (a \cosh r - a^\dagger e^{-i\phi} \sinh r)^2$ のように計算が簡単になる。このようにして、

$$\begin{aligned}\Delta q &= \sqrt{\langle q^2 \rangle - \langle q \rangle^2} \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega} (\cosh 2r - \cos \phi \sinh 2r)}, \\ \Delta p &= \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} \\ &= \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2} (\cosh 2r + \cos \phi \sinh 2r)}.\end{aligned}\quad (6.3.6)$$

という最終的な分散の表式にたどり着く。これらの結果から分散の積を計算すると、 $\Delta q \Delta p = (\hbar/2) \sqrt{\cosh^2 2r - \cos^2 \phi \sinh^2 2r}$ であり $\phi = 0$ または $r = 0$ のときに最小値 $\hbar/2$ をとる。

$\phi = 0$ のとき、 $\Delta q = \sqrt{\hbar/2m\omega} e^{-r}$ と書けるが、これはもとのコヒーレント状態の q 方向の分散よりも e^{-r} だけ小さくなっており、一方で $\Delta p = \sqrt{m\hbar\omega/2} e^r$ はもとのコヒーレント状態の p 方向の分散の e^r 倍になる。つまり、状態 $|r, \alpha\rangle$ は位相空間上でコヒーレント状態 $|\alpha\rangle$ が q 方向につぶれ p 方向に伸びるように“絞られた”ように見える。

特に $|r, 0\rangle = S(r) |0\rangle \stackrel{\text{def}}{=} |r\rangle$ はスクイーズド真空状態 (squeezed vacuum state) と呼ばれるが、これについて Fock 状態で書き直してみよう。準備として

$$S(r) a S^\dagger(r) = a \cosh r + a^\dagger e^{-i\phi} \sinh r. \quad (6.3.7)$$

が成立することを式 (6.3.3) と同様に確かめておくとよい。この左辺はスクイーズド真空状態に作用したときにゼロとなる： $S(r) a S^\dagger(r) S(r) |0\rangle = S(r) a |0\rangle = 0$ 。これより、スクイーズド真空状態は演算子 $a \cosh r + a^\dagger e^{-i\phi} \sinh r \stackrel{\text{def}}{=} \mu a + \nu a^\dagger$ の固有値ゼロの固有状態とみることができる。 $|r\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} C_n |n\rangle$ と書いて $\mu a + \nu a^\dagger$ を作用させれば、漸化式

$$\mu \sqrt{n+2} C_{n+2} + \nu \sqrt{n} C_n = 0 \quad (6.3.8)$$

が導かれる。ここで C_0 と C_1 を求める必要があるが、 $(\mu a + \nu a^\dagger) C_1 |1\rangle = C_1 \mu |0\rangle + \sqrt{2} \nu C_2 |2\rangle$ であるから $C_1 = 0$ 、したがって $C_{2n+1} = 0$ となる。 $C_0 = 1/\sqrt{\cosh r}$ は再び

規格化条件から決まり、

$$|r\rangle = \frac{1}{\sqrt{\cosh r}} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n e^{-in\phi} (\tanh r)^n \frac{\sqrt{(2n)!}}{2^n n!} |2n\rangle \quad (6.3.9)$$

という表式を得る。

6.4 熱的状态

熱的状态 (thermal state) は純粋状態ではなく、Fock 状態 $|n\rangle$ にある確率が次のように Boltzmann 分布で表される混合状態である：

$$p_n = \frac{e^{-n\beta\hbar\omega}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\beta\hbar\omega}} = e^{-n\beta\hbar\omega} (1 - e^{-\beta\hbar\omega}). \quad (6.4.1)$$

ここで $\beta = 1/k_B T$ は逆温度、 k_B は Boltzmann 定数で T は系の温度である。一つの調和振動子の温度というと違和感はあるが、これが温度 T の熱浴と平衡状態にあるときにはこのような熱的状态が実現される。この熱的状态は密度演算子によって

$$\rho_{\text{th}} = \sum_{n=0}^{\infty} p_n |n\rangle \langle n| \quad (6.4.2)$$

と書かれる。統計力学でもおなじみの計算により、数状態についてその平均値 $\langle n \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} p_n \langle n | a^\dagger a | n \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} n p_n$ 、分散 $\Delta n = \sqrt{\langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2}$ は容易に求まる。実際、 $\sum_{n=0}^{\infty} n e^{-n\beta\hbar\omega} = \sum_{n=0}^{\infty} (-1/\hbar\omega) (\partial/\partial\beta) e^{-n\beta\hbar\omega} = (-1/\hbar\omega) (\partial/\partial\beta) (1 - e^{-\beta\hbar\omega})$ という関係を用いることで

$$\langle n \rangle = \frac{e^{-\beta\hbar\omega}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}, \quad (6.4.3)$$

$$\Delta n = \sqrt{\langle n \rangle^2 + \langle n \rangle} \quad (6.4.4)$$

となり、熱的状态では数分布の分散はその平均値と同程度であることがわかる。

6.5 光子相関

調和振動子について、何が古典力学的で何が量子的なのだろうか？ 実現されたある状態は、そのくらいコヒーレントなのだろうか？ これに対するある程度の答えは、本節で導入する二つの相関関数 (correlation function) が与えてくれる。

6.5.1 振幅相関 / 一次のコヒーレンス

例えば電磁波の電場のような振幅に関する自己相関の量子版は、次の一次の相関関数 (first-order correlation function) $g^{(1)}$ によって定められる：

$$g^{(1)}(\tau) = \frac{\langle a^\dagger(t)a(t+\tau) \rangle}{\sqrt{\langle a^\dagger(t)a(t) \rangle \langle a^\dagger(t+\tau)a(t+\tau) \rangle}}. \quad (6.5.1)$$

コヒーレント状態に関しては、Heisenberg 描像で $a(t) = ae^{-i\omega t}$ であるから

$$g^{(1)}(\tau) = \frac{\langle a^\dagger a \rangle e^{-i\omega\tau}}{\langle a^\dagger a \rangle} = e^{-i\omega\tau} \quad (6.5.2)$$

となり、きれいな単色波が自己相関関数として出てくる。別の例を考えよう。二つのモード a_1 と a_2 があると、その振幅の交差相関関数 (cross correlation function)

$$g_{12}^{(1)}(\tau) = \frac{\langle a_1^\dagger(t)a_2(t+\tau) \rangle}{\sqrt{\langle a_1^\dagger(t)a_1(t) \rangle \langle a_2^\dagger(t+\tau)a_2(t+\tau) \rangle}} \quad (6.5.3)$$

を見てみよう。二つのモードがともにコヒーレント状態であれば、 $g_{12}^{(1)}(\tau) = e^{-i\omega\tau}$ が再び得られる。しかしながら、Fock 状態 $|n_1, n_2\rangle$ に関しては $g_{12}^{(1)}(\tau) = 0$ となってしまうことが容易にわかる。振幅の相関関数は波動としての干渉効果を表すものであるから、 $|g^{(1)}| = 1$ のときに波動としての干渉性が最大になり、 $g^{(1)} = 0$ のときには波動としての可干渉性が全くないと言い換えることができる。前者の場合はコヒーレント、後者はインコヒーレントともいわれ、 $0 < g^{(1)} < 1$ のときには部分的にコヒーレントなどといわれる。

6.5.2 強度相関 / 二次のコヒーレンス

強度に関する自己相関の量子版は、次の二次の相関関数 (second-order correlation function) $g^{(2)}$ によって定められる：

$$g^{(2)}(\tau) = \frac{\langle a^\dagger(t)a^\dagger(t+\tau)a(t)a(t+\tau) \rangle}{\sqrt{\langle a^\dagger(t)a(t) \rangle \langle a^\dagger(t+\tau)a(t+\tau) \rangle}}. \quad (6.5.4)$$

単色光においては $\langle a^\dagger(t)a^\dagger(t+\tau)a(t)a(t+\tau) \rangle = \langle a^\dagger a^\dagger a a \rangle = \langle a^\dagger (a a^\dagger - 1) a \rangle = \langle n^2 \rangle - \langle n \rangle$ であるから、二次の相関関数は次のように書かれる：

$$g^{(2)}(\tau) = \frac{\langle n^2 \rangle - \langle n \rangle}{\langle n \rangle^2} = 1 + \left(\frac{\Delta n}{\langle n \rangle} \right)^2 - \frac{1}{\langle n \rangle}. \quad (6.5.5)$$

したがって、コヒーレント状態については $\Delta n = \sqrt{\langle n \rangle}$ より $g^{(2)}(\tau) = 1$ となる。熱的状態に関しては $\Delta n = \sqrt{\langle n \rangle^2 + \langle n \rangle}$ であり、 $\tau = 0$ においては上式が成立するから $g^{(2)}$ (

$0) = 2$ である。一般論としては古典理論で記述可能な状態に対しては $g^{(2)}(\tau) \geq 1$ となることが知られている。古典理論で記述できない状態として Fock 状態を考えてみよう。Fock 状態 $|n\rangle$ は分散がゼロであるから、 $g^{(2)}(\tau) = 1 - 1/n < 1$ となる、つまり Fock 状態は確かに古典的な対応物がなく、純粋に量子的な状態であることが二次の相関関数からわかる。このように、二次の相関関数はある状態がいかに量子的であるかの尺度になっている。

6.6 Wigner 関数

6.6.1 導入

密度演算子は量子状態のすべての情報を含むが、本節ではこれを位相空間上で表現したい。そこで密度演算子を Weyl 変換する：

$$W(q, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipq'} \left\langle q + \frac{q'}{2} \left| \rho \right| q - \frac{q'}{2} \right\rangle dq'. \quad (6.6.1)$$

$W(q, p)$ は Wigner 関数として知られているものである。Wigner 関数が実関数であることはただちにわかるが、必ずしも非負値を取らなくてもよい点でこれは確率密度分布にはなっていない。

二つの変数のうち片方について $2\pi\delta(q) = \int_{-\infty}^{\infty} dp e^{-ipq}$ を用いて積分することで、周辺分布 (marginal distribution) が得られる：

$$\begin{aligned} W(q) &= \int_{-\infty}^{\infty} W(q, p) dp \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dp \int_{-\infty}^{\infty} dq' e^{-ipq'} \left\langle q + \frac{q'}{2} \left| \rho \right| q - \frac{q'}{2} \right\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dq' \delta q' \left\langle q + \frac{q'}{2} \left| \rho \right| q - \frac{q'}{2} \right\rangle \\ &= \langle q | \rho | q \rangle. \end{aligned} \quad (6.6.2)$$

$W(q)$ は明らかに非負である⁴。純粋状態に対しては $W(q)$ が q 表現の波動関数を二乗したものであるとみることができる。 $W(p) = \int_{-\infty}^{\infty} W(q, p) dq$ はどうだろうか。少し技巧的だが、 $\int_{-\infty}^{\infty} |p\rangle \langle p| dp = 1$ を二回挿入し $\langle q | p \rangle = e^{ipq/\hbar} / \sqrt{2\pi\hbar}$ を用いると、

$$W(p) = \langle p | \rho | p \rangle. \quad (6.6.3)$$

であることがわかる。つまりこちらの周辺分布 $W(p)$ も p 表現の波動関数を二乗したものであるとみてよい。結局周辺分布はどちらも波動関数の二乗の確率密度関数であり、

$$\int_{-\infty}^{\infty} W(q) dq = \int_{-\infty}^{\infty} W(p) dp = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} W(q, p) dq dp = 1$$

⁴ $\rho = \sum |c_i|^2 |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$, $\sum |c_i|^2 = 1$ に対して確かめてみよ。

を満たす。

重複するが Wigner 関数は負の値を取りうるため確率密度関数ではないが、規格化（二つの変数について積分すると 1 を得る）はされているために擬確率密度関数（pseudo-probability density）とも呼ばれる。だからといって Wigner 関数それ自体の重要性は見逃してはいけない。なぜなら、古典対応物の存在する量子状態の Wigner 関数は負の値を取らないことが知られているからだ。言い換えれば、Wigner 関数の負値は非古典性（nonclassicality）の傍証となるのである。

6.6.2 Wigner 関数の例

本節ではいくつかの純粋状態に関して Wigner 関数を計算してみる。純粋状態 $|\psi\rangle$ に対して、Wigner 関数は次のように書かれる：

$$W(q, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipq'} \psi \left(q + \frac{q'}{2} \right) \rho \psi^* \left(q - \frac{q'}{2} \right) dq'.$$

6.6.3 コヒーレント状態

最初の例はコヒーレント状態である。まず初めに、コヒーレント状態の q 表示 $\langle q | \alpha \rangle$ を求めておくべきであろう。

$$\begin{aligned} \langle q | \alpha \rangle &= \langle x | \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} |n\rangle \\ &= \langle x | \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} a^{\dagger n} |0\rangle \\ &= \langle x | e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} e^{\alpha a^{\dagger}} |0\rangle \\ &= e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \langle x | e^{\alpha \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} (\hat{q} - i \frac{\hat{p}}{m\omega})} |0\rangle \\ &= e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} e^{-\frac{\alpha^2}{4}} \langle x | e^{\alpha \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{q}} e^{-i\alpha \frac{\hat{p}}{\sqrt{2m\hbar\omega}}} |0\rangle \\ &= e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} e^{-\frac{\alpha^2}{4}} e^{\alpha \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} q} e^{\frac{-i\alpha}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dq}} \langle x | 0 \rangle \\ &= e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} e^{-\frac{\alpha^2}{4}} e^{\alpha \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} q} \left\langle x - \alpha \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} | 0 \right\rangle \\ &= A e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} e^{-\frac{\alpha^2}{4}} e^{\alpha \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} q} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} \left(q - \alpha \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \right)^2} \\ &= A e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} \left(q - \alpha \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \right)^2} \end{aligned} \tag{6.6.4}$$

この計算では $e^{\gamma(d/dq)} f(q) = f(x + \gamma)$ と $\langle x | 0 \rangle = A e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} q^2}$ を用いた。最後の行では簡単のため α は実数とした。

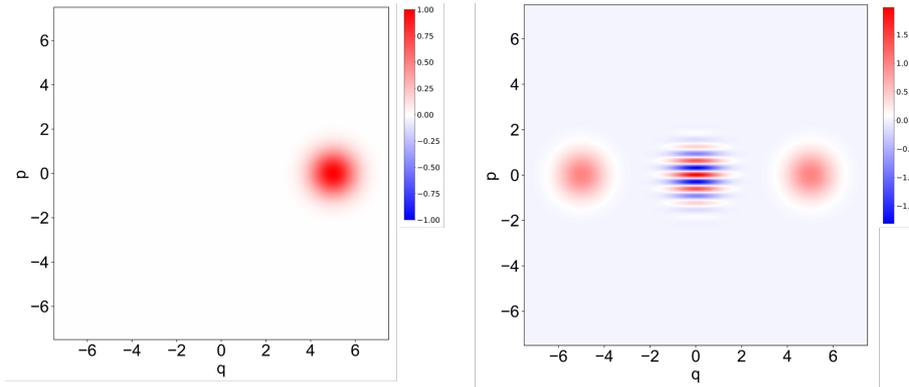


図 6.1: コヒーレント状態 $|\alpha\rangle$ (左) とその重ね合わせ状態 $(|\alpha\rangle + |-\alpha\rangle)/2$ (右) の Wigner 関数。各軸は真空ゆらぎで規格化してある。

さて、Wigner 関数を評価するにあたり、Gauss 積分 $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-a(x+b)^2} dx = \sqrt{\pi/a}$ (a は実数、 b は複素数) に注意すると

$$W_{\alpha}(q, p) = \frac{\sqrt{2}A^2}{\sqrt{\pi m \hbar \omega}} e^{-\frac{m\omega}{\hbar} \left(q - \alpha \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \right)^2} e^{-\frac{p^2}{m\hbar\omega}} \quad (6.6.5)$$

と計算できる。これは中心が $\alpha\sqrt{2\hbar/m\omega}$ 、 q 方向の分散が $\sqrt{\hbar/m\omega}$ 、 p 方向の分散が $\sqrt{1/2m\hbar\omega}$ の Gauss 分布となっていることがわかるだろう。コヒーレント状態の Wigner 関数を図 6.1 の左に例示した。

コヒーレント状態の重ね合わせ状態

次に、 $|\alpha\rangle + e^{i\theta} |-\alpha\rangle$ という重ね合わせ状態の Wigner 関数を計算してみよう。この計算は先ほどよりも少し長くなるが、基本的にはただの Gauss 積分になり最終的には

$$W(q, p) = W_{\alpha}(q, p) + W_{-\alpha}(q, p) + \tilde{A} e^{-\frac{m\omega}{\hbar} q^2} e^{-\frac{p^2}{m\hbar\omega}} \cos \left(2p \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \alpha + \theta \right) \quad (6.6.6)$$

となる。ただし \tilde{A} は積分の結果出てくる定数である。もともと重ね合わされた二つのコヒーレント状態の Wigner 関数 W_{α} と $W_{-\alpha}$ に、二つのコヒーレント状態の干渉項とでもいべき第三項が加わっている。この干渉項は図 6.1 の右のように、各コヒーレント状態の Wigner 関数を結ぶ直線に直交する方向の縞構造として現れる。この縞の数はコヒーレント状態の振幅 α に比例して増えていく。

Fock 状態

Fock 状態の波動関数を求めるには特殊関数の知識が必要であるが、これに関しては初等的な量子力学の成書を参照されたい。Fock 状態の波動関数は Hermite 多項式を

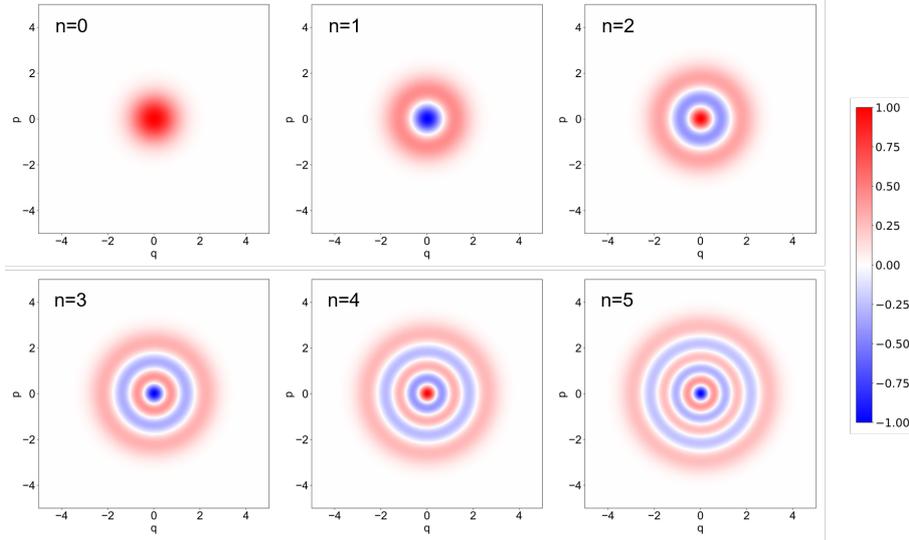


図 6.2: Fock 状態 $|n\rangle$ の Wigner 関数

$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2/2} (\partial^n / \partial x^n) e^{-x^2/2}$ として次のようなものである。

$$|\psi_n(q)|^2 = \frac{1}{2^n n!} \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{m\omega q^2}{\hbar}} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} q\right) \quad (6.6.7)$$

$$|\psi_n(p)|^2 = \frac{1}{2^n n!} \sqrt{\frac{1}{\pi m\hbar\omega}} e^{-\frac{p^2}{m\hbar\omega}} H_n\left(\sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}} p\right) \quad (6.6.8)$$

周辺分布としてこれらを生成する Wigner 関数は、天下りの的ではあるが Laguerre 多項式 $L_n(x) = \sum_{j=0}^n {}_n C_j (-x)^j / j!$ を用いて次のように与えられる：

$$W(q, p) = \frac{(-1)^n}{\pi\hbar} e^{-\frac{1}{\hbar}\left(m\omega q^2 + \frac{p^2}{m\omega}\right)} L_n\left(\frac{2}{\hbar}\left(m\omega q^2 + \frac{p^2}{m\omega}\right)\right). \quad (6.6.9)$$

第7章 共振器量子電磁力学 (cavity QED)

7.1 Jaynes-Cummings モデル

共振器量子電磁力学系 (cavity quantum electrodynamics, cavity QED)¹は、電磁場の共振器内部に二準位系を配置した系 (図 ??) であり、共振器光子の量子的振る舞いの研究、あるいは共振器内部にある二準位系の制御が可能となる。二準位系と単一の共振モードが相互作用するこのような状況は Jaynes-Cummings モデルにより記述される。Jaynes-Cummings Hamiltonian は

$$\mathcal{H}_{\text{JC}} = \frac{\hbar\omega_q}{2}\sigma_z + \hbar\omega_c a^\dagger a + \hbar g(\sigma_+ a + a^\dagger \sigma_-). \quad (7.1.1)$$

である。このモデルを用いて、共振器量子電磁力学系という量子系を操る単純だが強力な舞台を見ていこう。

はじめに二準位系にも共振器にも緩和がない場合の Jaynes-Cummings Hamiltonian の固有エネルギーを調べよう。共振器光子が n 個、量子ビットが $|\xi\rangle$ ($\xi = g, e$) のときの合成系の量子状態を $|\xi, n\rangle$ と書こう。Hamiltonian の行列要素 $\langle \xi', m | \mathcal{H}_{\text{JC}} | \xi, n \rangle$ を調べると、この Hamiltonian はブロック対角であることがわかる。というのも、非対角要素を与える $\sigma_+ a + a^\dagger \sigma_-$ という相互作用 (係数は省略してある) が $|g, n\rangle$ と $|e, n-1\rangle$ のみを繋ぐようなものだからである。そのブロック行列 $\mathcal{H}_{\text{JC}}^{(n)}$ をあらわに書くと、

$$\mathcal{H}_{\text{JC}}^{(n)} = \begin{pmatrix} -\frac{\hbar\omega_q}{2} + \hbar\omega_c n & \hbar g\sqrt{n} \\ \hbar g\sqrt{n} & \frac{\hbar\omega_q}{2} + \hbar\omega_c(n-1) \end{pmatrix} \quad (7.1.2)$$

となる。ここで一番目と二番目の行/列はそれぞれ $|g, n\rangle$ と $|e, n-1\rangle$ の要素を表している。 $n \geq 1$ にも注意。このブロック行列は固有値 $\lambda_{\pm} = \hbar\omega_c(n-1/2) \pm (\hbar/2)\sqrt{(\omega_c - \omega_q)^2 + 4g^2n}$ を有し、量子ビットと共振器が共鳴している $\omega_c = \omega_q = \omega_0$ の場合には

$$\lambda_{\pm} = \hbar\omega_0 \pm \hbar g\sqrt{n}. \quad (7.1.3)$$

と書ける。このように、 $|g, n\rangle$ と $|e, n-1\rangle$ の結合によってできる n 番目の (励起) 状態は $2\hbar g\sqrt{n}$ だけエネルギー間隔のあいた二つの量子状態であり、二準位系と共振器の結合系である Jaynes-Cummings モデルのエネルギースペクトルは等間隔ではない。このエネルギースペクトルを Jaynes-Cummings ladder ともいう。

¹量子技術においては共振器全般を cavity と呼ぶことが多いが、別の業界では cavity といえば虫歯である。

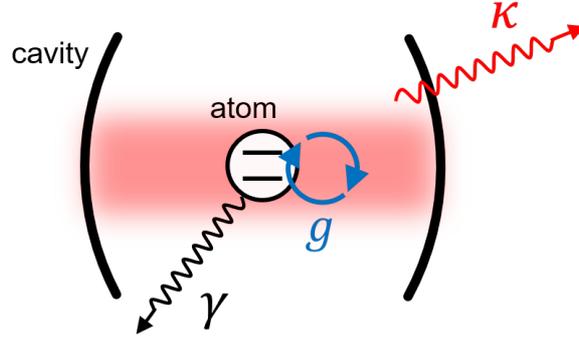


図 7.1: 緩和があるときの Jaynes-Cummings モデルの概念図

7.2 弱結合・強結合領域

今度は Jaynes-Cummings モデルに緩和を取り込んだ系 (図 7.1) について調べよう。量子ビットの自然放出レートを γ 、共振器から光が失われるレート (単にロスレートともいう) を κ とする。ユニタリ演算子 $U = \exp[i\omega a^\dagger a t + i(\omega/2)\sigma_z t]$ を用いて Jaynes-Cummings モデルの Hamiltonian を回転系でみると²

$$\mathcal{H}_{\text{JC}} = \frac{\hbar\Delta_q}{2}\sigma_z + \hbar\Delta_c a^\dagger a + \hbar g(\sigma_+ a + a^\dagger \sigma_-). \quad (7.2.1)$$

ここで離調 $\Delta_q = \omega_q - \omega$ 、 $\Delta_c = \omega_c - \omega$ を定義した。この Hamiltonian を用いて a と σ_- についての Heisenberg 方程式を書き下そう。

$$\frac{da}{dt} = -i\Delta_c a - \frac{\kappa}{2}a - ig\sigma_-, \quad (7.2.2)$$

$$\frac{d\sigma_-}{dt} = -i\frac{\Delta_q}{2}\sigma_- - \frac{\gamma}{2}\sigma_- - ig\sigma_z a. \quad (7.2.3)$$

この方程式において、量子ビットが強い励起を受けていない、すなわちほとんど基底状態 $|g\rangle$ にあるという近似をすると、 σ_z をその期待値 -1 で置き換えることができる。これによって $-g\sigma_z a$ という厄介な項は $+ga$ となり扱いやすくなる。また、量子ビットがほとんど励起されていないため、共振器内部の光子数も小さいであろう。したがって光子数が 0 と 1 の状態のみを考えることにする。こういった近似のもと、Heisenberg 方程式を行列で書き直すと

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} a \\ \sigma_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -(i\Delta_c + \frac{\kappa}{2}) & -ig \\ ig & -(i\frac{\Delta_q}{2} + \frac{\gamma}{2}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ \sigma_- \end{pmatrix}. \quad (7.2.4)$$

この方程式全体を $|e, 1\rangle$ に作用させる、あるいは Hermite 共役をとって状態 $|g, 0\rangle$ に作用させるなどすると、状態の時間発展を表す Schrödinger 方程式と類似していることが

²相互作用項 $\hbar g(\sigma_+ a + a^\dagger \sigma_-)$ は場合によっては $-i\hbar g(\sigma_+ a - a^\dagger \sigma_-)$ という形で現れるが、 $U = \exp[i(\pi/2)a^\dagger a]$ あるいは $U = \exp[i(\pi/2)\sigma_z]$ というユニタリ変換のもとで等価である。

わかる。したがって右辺の行列の固有値は量子ビット-共振器結合系の固有エネルギーと考えて差し支えない。対角化によりその固有値 E_{\pm} は

$$\frac{E_{\pm}}{i\hbar} = -\frac{1}{2} \left[\left(i\Delta_c + \frac{\kappa}{2} \right) + \left(i\Delta_q + \frac{\gamma}{2} \right) \right] \pm \sqrt{\left[\frac{1}{2} \left(i\Delta_c + \frac{\kappa}{2} \right) - \frac{1}{2} \left(i\Delta_q + \frac{\gamma}{2} \right) \right]^2 - g^2} \quad (7.2.5)$$

と求まり、対応する固有ベクトルは

$$|\psi_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{A_{\pm}}} \left\{ \left[\frac{1}{2} \left[\left(i\Delta_c + \frac{\kappa}{2} \right) - \left(i\Delta_q + \frac{\gamma}{2} \right) \right] \pm \sqrt{\left[\frac{1}{2} \left(i\Delta_c + \frac{\kappa}{2} \right) - \frac{1}{2} \left(i\Delta_q + \frac{\gamma}{2} \right) \right]^2 - g^2} \right] |g, 1\rangle - g |e, 0\rangle \right\} \quad (7.2.6)$$

である。ただし $1/\sqrt{A_{\pm}}$ は規格化のための係数である。これらからわかるように、緩和を考慮することによって、固有エネルギー E_{\pm} は一般に複素数となり、その実部はエネルギーを、虚部は損失を表す。これは固有状態の時間発展が $e^{-i(E_{\pm}/\hbar)t}$ で与えられることから妥当であろう。

ここまでくれば共振器量子電磁力学系の弱結合領域・強結合領域について議論することができる。これらは E_{\pm} の実部が同じ値となるか否かによって分けられるのだが、簡単のため $\Delta_c = \Delta_q = 0$ 、つまり量子ビットと共振器がピッタリ共鳴の場合を考えよう。結合定数 g が $|\kappa/4 - \gamma/4|$ よりも小さいとき、系は弱結合領域 (weak coupling regime) にあるといわれる。 E_{\pm} の表式のうち平方根の中身は正であるため、固有エネルギーは縮退している。言い換えれば量子ビットと共振器はエネルギースペクトル上で同じ位置にあり、線幅のみが異なる。緩和に対して結合定数が小さいため、一切のエネルギーシフトが起こらないのである。代わりにというべきか、量子ビットと共振器の緩和レートはもともとの各々のレートから変化する。共振器の緩和レートの方が大きい状況 $\kappa/4 \gg \gamma/4 \gg g$ を考え、 E_{\pm} の表式に出てくる平方根を近似的に展開すると

$$\begin{aligned} \frac{E_{\pm}}{i\hbar} &= -\frac{1}{2} \left(\frac{\kappa}{2} + \frac{\gamma}{2} \right) \pm \frac{1}{2} \left(\frac{\kappa}{2} - \frac{\gamma}{2} \right) \left[1 - \frac{1}{2} \frac{g^2}{\left(\frac{\kappa-\gamma}{4} \right)^2} \right] \\ &= -\frac{\kappa \mp \kappa}{4} - \frac{\gamma \pm \gamma}{4} \mp \frac{1}{2} \frac{g^2}{\frac{\kappa-\gamma}{4}} \end{aligned} \quad (7.2.7)$$

と書ける。ここで $\Gamma_+ = E_+/i\hbar$ 、 $\Gamma_- = E_-/i\hbar$ と分けて書こう：

$$\Gamma_+ = -\frac{\gamma}{2} \left(1 + \frac{g^2}{\frac{\gamma}{2} \frac{\kappa-\gamma}{2}} \right) \simeq -\frac{\gamma}{2} \left(1 + \frac{4g^2}{\kappa\gamma} \right), \quad (7.2.8)$$

$$\Gamma_- = -\frac{\kappa}{2} \left(1 - \frac{g^2}{\frac{\kappa}{2} \frac{\kappa-\gamma}{2}} \right) \simeq -\frac{\kappa}{2} \left(1 - \frac{4g^2}{\kappa^2} \right). \quad (7.2.9)$$

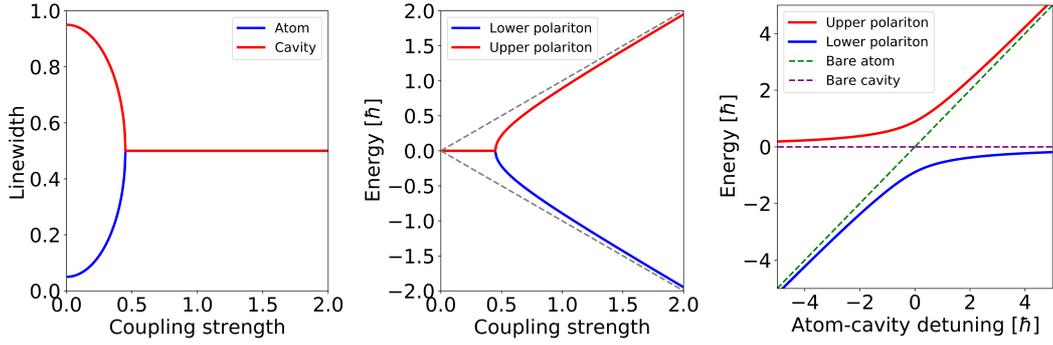


図 7.2: 結合定数に対するロスレートあるいは線幅 (左) とエネルギー (右) の依存性、およびエネルギーの離調に対する依存性 (右)

まず言えることは、 g をゼロとした時の値から Γ_+ と Γ_- がそれぞれ量子ビットと共振器の緩和レートに対応することである。そして結合定数 g が有限の値をとるとき、例えば量子ビットの緩和レートは $\mathcal{F}_p = 4g^2/\kappa\gamma$ のぶんだけ増加するのである。この緩和レートの増強因子 \mathcal{F}_p を Purcell 因子、あるいは文脈によっては協働係数 (cooperativity) と呼ぶ。

次に、結合定数 g が $|\kappa/4 - \gamma/4|$ よりも大きいときを考えよう。この場合には E_{\pm} の表式の平方根の中身が負になり、 E_+ と E_- の実部はもはや同じ値ではなくなる。これは量子ビットと共振器が結合した新たなモードが二個あることを意味しており、簡単のため $\Delta_c = \Delta_q = 0$ とすると

$$E_{\pm} = \mp \hbar \sqrt{g^2 - \left(\frac{\kappa - \gamma}{4}\right)^2} - i \frac{\hbar}{2} \left(\frac{\kappa}{2} + \frac{\gamma}{2}\right) \quad (7.2.10)$$

となる。これより直ちにわかるのは、量子ビットと共振器が結合してできた二つの新たな量子状態の緩和レートは量子ビットと共振器の緩和レートの平均値となることである。これは新たにできた量子状態が「半分量子ビット、半分共振器」の励起状態であることから当然ともいえる。そしてエネルギーシフト $\Delta E_{\pm} = \mp \hbar \Omega_0 = \mp \hbar \sqrt{g^2 - [(\kappa - \gamma)/4]^2}$ によって二つの量子状態は $2\hbar\Omega_0$ だけエネルギー的に分裂することになるが、このエネルギー分裂を真空 Rabi 分裂 (vacuum Rabi splitting) と呼ぶ。このように真空 Rabi 分裂が起こるほど結合定数が大きなパラメータ領域を強結合領域 (strong coupling regime) といい、図 7.2 には緩和レート (スペクトル線幅) やエネルギーの、結合強度や離調に対する振る舞いを示した。

7.3 分散領域

前節では、Jaynes-Cummings モデルを量子ビットと共振器がほとんど共鳴的な状況で調べ、強/弱結合領域という興味深い状況が現れることが分かった。この節では、量

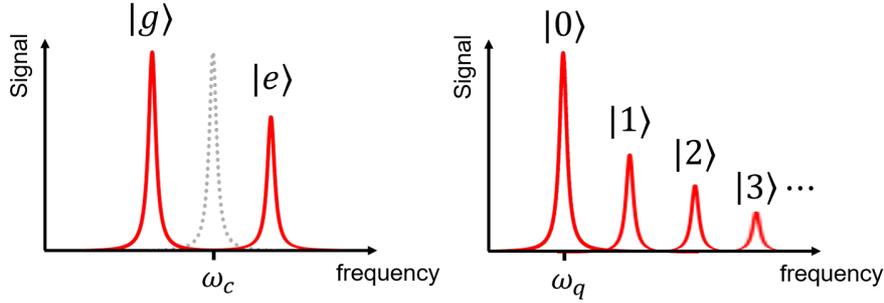


図 7.3: 分散領域における Jaynes-Cummings モデルのスペクトル特性

子ビットと共振器の間の離調が各々の線幅よりも十分大きい、結合定数も大きいために分散的 (dispersive) に結合するような場合に実現されるもう一つの興味深い結合領域をみてみよう。

再び Jaynes-Cummings モデルから出発しよう：

$$\mathcal{H} = \frac{\hbar\omega_q}{2}\sigma_z + \hbar\omega_c a^\dagger a + \hbar g(\sigma_+ a + \sigma_- a^\dagger). \quad (7.3.1)$$

ユニタリ演算子 $U = \exp[i\omega_c a^\dagger a t + i(\omega_c/2)\sigma_z t]$ によるユニタリ変換により ω_c でまわる回転系では、 $\Delta = \omega_q - \omega_c$ として Hamiltonian が $\mathcal{H}' = (\hbar\Delta/2)\sigma_z + \hbar g(\sigma_+ a + \sigma_- a^\dagger)$ となる。ここで、Schrieffer-Wolff 変換 (付録 F を参照) によりこの Hamiltonian を近似的に対角化したい。ユニタリ演算子 $e^S = \exp[(g/\Delta)(\sigma_+ a - \sigma_- a^\dagger)]$ によるユニタリ変換を施し、 $|g/\Delta| \ll 1$ のもとでその摂動展開を途中までで切ると $\mathcal{H}'' = (\hbar\Delta/2)\sigma_z + \hbar(g^2/\Delta)(a^\dagger a + 1/2)\sigma_z$ となり、回転系からもとの系に戻ると

$$\mathcal{H}''' = \frac{\hbar\omega_q}{2}\sigma_z + \hbar\omega_c a^\dagger a + \frac{\hbar g^2}{\Delta} \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \sigma_z. \quad (7.3.2)$$

これがしばしば分散 Hamiltonian (dispersive Hamiltonian) と呼ばれるもので、当初の目論見通り σ_z と $a^\dagger a$ のみによってあらわされている、つまり対角化されたものとなっている。これは次の二通りに解釈が可能である。

まずはじめに次のように書こう：

$$\mathcal{H}''' = \frac{\hbar}{2} \left(\omega_q + \frac{g^2}{\Delta} \right) \sigma_z + \hbar \left[\omega_c + \frac{g^2}{\Delta} \sigma_z \right] a^\dagger a. \quad (7.3.3)$$

ここには二種類の周波数シフトが見て取れる。ひとつは量子ビットの g^2/Δ だけの周波数シフトであり、これは共振器の真空場と量子ビットの結合による Lamb シフトである。一方で、共振器のほうにも $(g^2/\Delta)\sigma_z$ で書かれる周波数シフトがある。これは量子ビットの状態に依存して光共振器に符号の異なる周波数シフトが起こることを意味しており、分散シフト (dispersive shift) と呼ばれる。たとえば共振器からもれる光子の量

を周波数軸上で測定すると、量子ビットの基底状態と励起状態の占有確率を反映した量の光子が周波数軸上で二つのピークを形成することになる (図 7.3 左)。これらのピークは $2g^2/\Delta > \gamma$ であればはっきり分かれたスペクトルを示す。

次に、同じ Hamiltonian を次のように書く。

$$\mathcal{H}''' = \hbar \left[\omega_q + \frac{g^2}{\Delta} \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \right] \sigma_z + \hbar \omega_c a^\dagger a. \quad (7.3.4)$$

この形に書けば今度は Lamb シフトのほかに、共振器内の光子数に応じて量子ビットの周波数が複数のピークに分裂する (図 7.3 右) ことを意味している。これらのピークは $g^2/\Delta > \kappa$ であるときに分解して見え、これを用いた光子数分布の測定の実験が行われている [8]。

第8章 電磁波共振器と入出力理論

単一の量子系を操るだけであれば、強いレーザーやマイクロ波などの電磁波を照射するだけで良い（光子そのものを除く）。しかしながら単一の量子系の量子状態を光子に決定論的に、すなわち確実に光子に変換することが必要な場合にはその限りではない。電磁波の共振器はこのような場面において単一量子系と単一光子の相互作用の増強に用いられるため、量子技術全体においても特に重要な構成要素である。本節ではこの電磁波共振器の諸性質と、その測定的一般論を述べよう。具体的な概念としては共振器のQ値と共振器光子の寿命、Fabry-Perot共振器におけるフィネス、共振器の内部ロスと外部結合、およびその入出力理論による取扱いについて解説する。

8.1 共振器の性質

電磁波共振器 (electromagnetic resonator/cavity あるいは単に cavity) はその共振(角)周波数 ω_c と共振器光子の寿命 (lifetime) τ_c で特徴づけられると考えてよい。共振器光子の寿命とはいっても実際に寿命 τ_c が何秒であるという風に評価することはほとんどなく、寿命 τ_c というよりはその逆数をとった共振器光子のロスレート $\kappa_c = 2\pi/\tau_c$ で考えることが多い。電場 E_c で考えると、角周波数 ω_c で振動しレート $\kappa_c/2$ で減衰する。光子数のロスレートが光子数自体によらないという仮定が入っているが、これは光子同士の相互作用が弱いためほとんどの状況において良いモデル化となっている。上記のような性質を持つ光共振モードの周波数スペクトル $S_c(\omega)$ は、指数関数の Fourier 変換が Lorentz 関数であることから

$$S_c(\omega) \propto \frac{1}{(\omega - \omega_c)^2 + (\kappa_c/2)^2} \quad (8.1.1)$$

という形になることが期待される。これを見ると、ロスレート κ_c はこの Lorentzian スペクトルの半値全幅となっていることがわかる (図 8.1)。

共振器といえば通常電磁波をある領域に閉じ込めておくものであり、その共振モードの性能を示す指標としてはいかに長時間閉じ込めておけるかというものが挙げられる。これについてはQ値 (quality factor) とフィネス (finesse) という量があり、定義の仕方は異なるが本質的には共振器内の光子の寿命あるいはロスレートに関係した量である。Q値とフィネスの使い分けは簡単であるもののあまり意識されないものであるため、後で詳述することにしよう。もう一つの指標としてはいかに小さな体積に電磁波を閉じ込められるかという指標であるモード体積 V がある。4.2節で取り上げたように、

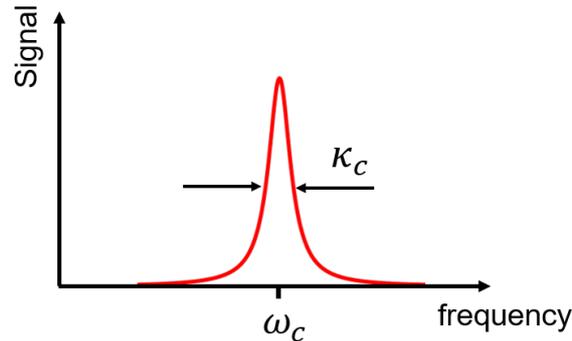


図 8.1: 電磁波共振器の周波数特性

共振モードの真空ゆらぎは $1/\sqrt{V}$ に比例するから、物質との相互作用を増強するためにはモード体積を非常に小さくすることが望ましい。

モード体積については共振器の形状によって決まる量であるが、Q 値とフィネスについては場合に応じて時間領域 (time-domain) 測定か周波数領域 (frequency-domain) 測定が行われる。この評価方法については後で述べるとして、Q 値とフィネスについて説明しよう。

8.1.1 Q 値

Q 値とは、共振モードが示す Lorentzian スペクトルの中心周波数とロスレートの比 $Q = \omega_c/\kappa_c$ で与えられる量である。その物理的意味は、電磁波の振動周期 $\tau_c = 2\pi/\omega_c$ とロスの時定数 $\tau_{\text{loss}} = 2\pi/\kappa_c$ で書き直して $Q = \tau_{\text{loss}}/\tau_c$ と書けば少しわかりやすくなるだろうか。これはロスの時定数の間に電磁波が何回振動できるかを表す量である。これは、暗に共振器内の電磁波が常にロスにさらされ続けることを念頭においている。Fabry-Perot 共振器などの共振器を除いて、ほとんどの場合に Q 値がよい性能指標になると考えてよい。

Q 値はロスがなければ無限大になるものだが、実際には様々なロスがあるため有限の値になる。このとき、各種のロスのレートを $\kappa_i = \omega_c/Q_i$ と書いた時にはこれらを合計した共振器のロスレートは $\sum_i \kappa_i$ となる。では Q 値 Q_{tot} の方はどうなるかということ、 $Q = \omega_c/\kappa_c$ で ω_c は共通だから

$$Q_{\text{tot}} = \left(\sum_i \frac{1}{Q_i} \right)^{-1} \quad (8.1.2)$$

となる。例えば後に入出力理論でやるような共振器の内部ロスと導波路への外部結合を考慮して実験系を設計するときなどは、Q 値よりもロスレートの方で考えたほうが計算がやりやすいし物理的な状況もわかりやすい。

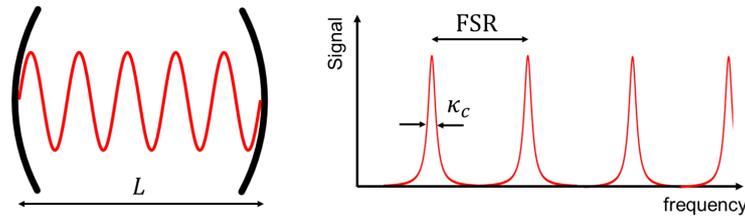


図 8.2: Fabry-Perot 共振器とその共振スペクトル

8.1.2 フィネス (Finesse)

おそらく最も簡単な光共振器は、図 8.2 のように合わせ鏡にして光を閉じ込める Fabry-Perot 共振器であろう。この共振器では電磁波がミラーの間を往復して戻ってくるときに電磁波の振動の位相が 2π の整数倍進んでいる時に電磁場が強め合って共振する。それ以外のときは、多数回往復したすべての電場の重ね合わせはゼロになってしまうため共振器の内部に電場が存在することができなくなる。共振条件は上記の条件を「共振器一周ぶんの光路長が電磁波の波長 λ の整数倍である」と読み替えて、

$$2nL = \lambda N \quad \Leftrightarrow \quad \nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{c}{2nL} N \quad (8.1.3)$$

と書ける。ただし N は自然数である。したがって、周波数軸上で見ると共振モードは $c/2nL$ で等間隔に並んでいる。この周波数間隔を FSR (Free spectral range) という。共振モードがロスを持つ場合にはこの周波数軸上の楕状のスペクトル一本一本が Lorentz 型になる。この半値全幅 κ_c が共振モードのロスレートである。

ところで、Fabry-Perot 共振器のロスの原因は何であろうか。電磁波がミラーの間を往復して飛んでいる時、通常用いられる波長の電磁波では空気はほとんどロスの原因にならない。ロスの主な原因になるのは、ミラーにおける共振器外への望まぬ散乱と、ミラーの反射率の不完全さである。つまり、Fabry-Perot 共振器のロスレートは一秒間に何回ミラーによる反射が起きるかに比例する。とすると、共振器長が長くなればなるほどロスレートが減り、Q 値は大きくなっていく。このような状況では Q 値はロスレートを表す量ではあるものの、Fabry-Perot 共振器の特性を表した量としてはあまり好ましくない。このように光子の寿命ではなくて「共振器内を光子が何往復できるか」で測るべきだろうというときに用いられるのがフィネス \mathcal{F} である。これは共振器の FSR を用いて

$$\mathcal{F} = \frac{\text{FSR}}{\kappa_c/2\pi} \quad (8.1.4)$$

と書かれる量である。 $1/\text{FSR} = 2nL/c$ は共振器を一周するのにかかる時間、 $2\pi/\kappa_c$ は電磁波のロスの時定数であるから、光子が共振器からいなくなるまでに共振器を何周できるかを表す量であることがわかるだろう。

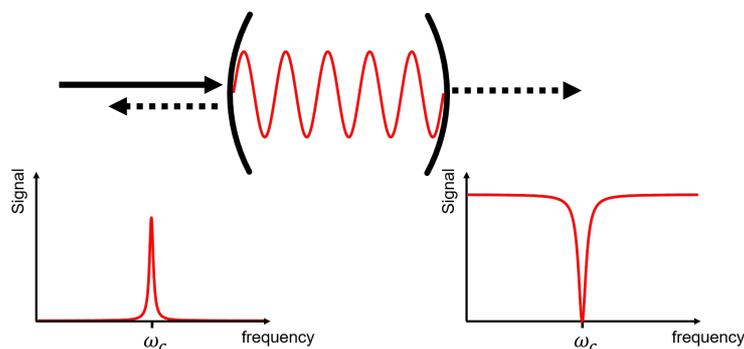


図 8.3: 反射測定と透過測定の様式図

8.2 共振器の測定

量子系の実験において頻繁に登場する共振器であるが、その測定の仕方は物理系によってさまざまである。しかしながら、電磁波を共振器に入射して何らかの応答を見るという点では本質的にはどの共振器でも同じである。この事実は次節で導入する入出力理論を用いるとより鮮明になるのだが、その準備として本節では共振器の主要な測定方法についてみていこう。

8.2.1 反射測定と透過測定

一般に共振器というものは電磁波を閉じ込める構造になっているのだから、共振器外部から入射する電磁波は逆にはじき返される。しかしながら入射した電磁波のうち一定の割合は共振器の中に入ることになる。共振器から跳ね返ってくる電磁波、つまり電磁波の反射量を測定すると、共振器の共鳴周波数においては反射量が減少する。これを測定するのが反射測定である。一方、共振器から漏れ出てくる電磁波を測定することもできる。これを測定するのが透過測定である。イメージをつかむためには図 ?? の Fabry-Perot 共振器の例がわかりやすいだろう。

スペクトル測定

共振器を測定するもっとも一般的な手法は、その電磁波応答を周波数軸上で測定することである。より具体的に言うと共振器の反射なり透過なりの信号を入射する電磁波の角周波数 ω を変えながら測定するのである。前述の図 ?? にある信号をイメージしてもらえればよい。

この手法は、共振器の線幅が入射する電磁波のスペクトル線幅よりも太い場合に有効であり、ほとんどの実験的な状況ではそのような状況になる。しかしながら電磁波のスペクトル線幅が共振器の線幅よりも大きい場合にはスペクトルをとっても電磁波のスペクトルが現れるだけである（逆にこのような状況を利用すれば電磁波のスペクトルを測定できる）。そのような場合には次のリングダウン測定と呼ばれる時間領域での測定が用いられる。

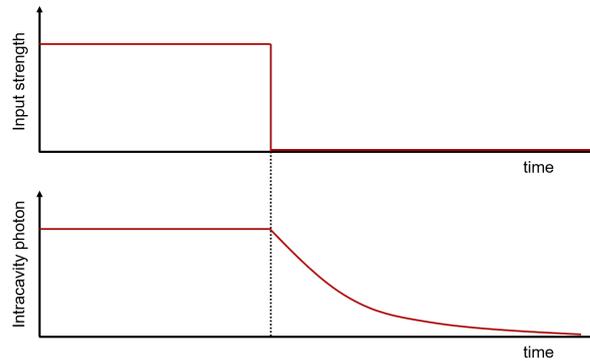


図 8.4: リングダウン測定における入射電磁波強度（上）と観測される信号（下）

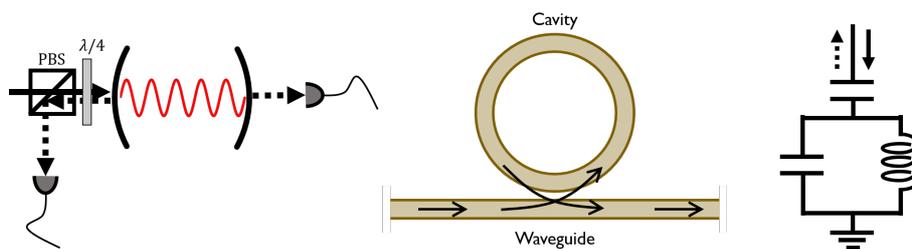


図 8.5: 実際の測定系の Fabry-Perot 共振器（左）、リング共振維（中央）、LC 共振器（右）に関する模式図

リングダウン測定

共振器に共鳴する電磁波を入射し続けた状態では、定常状態として一定数の光子が共振器中に蓄積されている状態になる。この状態で突然光を遮る、あるいは光の周波数を非共鳴にすると、共振器内に蓄積された光子が少しずつ漏れていくことになる。この漏れの時間変化は、共振器の周波数スペクトルが Lorentzian であることから、共振時に得られていた信号の指数関数的な減衰となって現れる。これはちょうどベルをコーンと叩いてその音の減衰を調べる様子と似ていることからリングダウン測定（ring-down measurement）と呼ばれる（図 8.4）。

リングダウン測定は、時間領域で共振器への電磁波を素早く変調しなければならない。したがって、線幅の太い、すなわち減衰の時定数が非常に速い共振器を測定するのは難しい。逆に、線幅の細い、減衰の時定数がとても長い共振器の測定はリングダウン測定によって測定しやすく、前節の周波数スペクトルの測定では周波数分解能の問題で測定できないような場合に有用な手法となる。

8.2.2 実際の測定系

まず光共振器の主な測定方法について概観してみよう。代表的なものとして、Fabry-Perot 共振器とリング共振器を取り上げる。Fabry-Perot 共振器では図 8.5 左のように、二枚のミラーの片方に共振器から漏れ出る光の伝播モードと同じ方向、同じビーム径でレーザー光を入射する。一枚目のミラーで反射される光を偏光の調節により取り出しディテクタで受け取ることで反射測定が実現される。また、二枚目のミラーから漏れ出てくる光をディテクタで受け取れば透過測定が可能になる。このときの光共振器へ光子が入り出すレートは、光共振モードの自由空間への漏れと入射レーザーの空間分布の重なるの良さと、光共振器のミラーの反射率依存する。空間的な重なりが良ければ良いほど光共振器への入出力レートは高くなり、またミラーの反射率が低ければ低いほど入出力レートが高くなる。

リング共振器（図 8.5 中央）については、Fabry-Perot 共振器でやったような自由空間からのアクセスは難しい。この場合には、リング共振器の共振モードの染み出し光（エバネッセント光、evanescent wave）に着目して、光導波路のエバネッセント光をリング共振器に近づけることでリング共振器に光を導入する。このときには光導波路を通る光が共振器に共鳴しているときだけ光導波路の透過光強度が下がるような信号が得られる。

次に電気回路の共振器について紹介しよう。まず図 8.5 右にあるような LC 共振器回路を考える。この一部にキャパシタで結合する配線を追加すると、その配線から電磁波を入射して共振器の反射測定を行うことができる。さらに似たようなポートをもう一つ作れば、片方の配線から電磁波を入射しもう一つの配線へ漏れ出る信号をみるという透過測定が可能になる。この LC 共振器への電磁波の導入というのはキャパシタで行う場合もあればインダクタで行う場合もある。これは LC 共振器の電磁波の電場と磁場のどちらにアクセスするかという違いでしかなく、その有利不利は共振器の電磁場のプロファイルと設計上の都合を勘案して決められる。コプレーナ共振器、空洞共振器やループギャップ共振器といった様々な電気回路共振器でも事情はほとんど同じである。

8.3 入出力理論 [17]

8.3.1 伝播モードと入出力関係

この節では、先に述べた反射測定や透過測定において見えるべき信号がどのようなものか、そして見える信号から共振器や入射ポートから共振器への光子の導入のレート（外部結合レート）の情報がどこまで得られるかといったものを計算したい。しかしこれまで本書で述べてきた物理系の扱いは共振器や静止した量子ビットといった空間的に局在した系であった。本節では空間を伝播する電磁波を扱わねばならず、共振器と伝播モード（propagating mode）が出会う境界で成立する条件を有効活用して系を解析しなければならない。この方法を与える入出力理論（input-output theory）とその枠組みで伝播モードと共振モードの境での境界条件を与える入出力関係（input-output

relation) の導出の仕方を見、いくつかの応用例から実際に共振器測定の理屈を学ぶことがここでの目的である。

ここでは一次元的な伝搬モードの光子の消滅演算子を $c(\omega)$ 、生成演算子を $c(\omega)^\dagger$ と書いて $[c(\omega), c^\dagger(\omega')] = 2\pi\delta(\omega - \omega')$ を要請する。生成消滅演算子が周波数に依存した形になっているのは、伝播モードである以上周波数の選択性はなく、連続的な周波数のモードが存在してもいいからである。このモードとの結合により共振器の測定をモデル化してみよう：

$$\mathcal{H}_{\text{tot}} = \hbar\omega_c a^\dagger a + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \hbar\omega c^\dagger(\omega)c(\omega) - i\hbar\sqrt{\kappa} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} [a^\dagger c(\omega) - c^\dagger(\omega)a]. \quad (8.3.1)$$

第二項と第三項はそれぞれ伝搬モードのエネルギーと、共振器と伝搬モードの結合を表し、外部結合レート (external coupling rate) と呼ばれる。この結合レートを κ と書く。

伝搬モードに関する Heisenberg 方程式を求めよう：

$$\begin{aligned} \frac{dc(\omega)}{dt} &= \frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}_{\text{tot}}, c(\omega, t)] = \frac{i}{\hbar} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \hbar\omega' c^\dagger(\omega')c(\omega'), c(\omega) \right] \\ &\quad + \frac{i}{\hbar} \left[-i\hbar\sqrt{\kappa} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} [a^\dagger c(\omega') - c^\dagger(\omega')a], c(\omega) \right] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} i\omega' [c^\dagger(\omega')c(\omega'), c(\omega)] + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \sqrt{\kappa} [a^\dagger c(\omega') - c^\dagger(\omega')a, c(\omega)] \\ &= - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} i\omega' (2\pi)\delta(\omega - \omega')c(\omega') + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \sqrt{\kappa}(2\pi)\delta(\omega - \omega')a \\ &= -i\omega c(\omega) + \sqrt{\kappa}a. \end{aligned} \quad (8.3.2)$$

一方で共振器に関する Heisenberg 方程式は

$$\frac{da}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}_s, a] - \sqrt{\kappa} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} c(\omega) \quad (8.3.3)$$

ここで伝搬モードの Heisenberg 方程式を形式的に解くのだが、過去の時間 $t_0 < t$ を参照する解 c_{in} と未来の時間 $t_1 > t$ を参照する解 c_{out} の二つがあり得る。すなわち

$$c_{\text{in}}(\omega, t) = e^{i\omega(t-t_0)}c(\omega, t_0) + \sqrt{\kappa} \int_{t_0}^t d\tau e^{-i\omega(t-\tau)}a(\tau), \quad (8.3.4)$$

$$c_{\text{out}}(\omega, t) = e^{-i\omega(t-t_1)}c(\omega, t_1) - \sqrt{\kappa} \int_t^{t_1} d\tau e^{-i\omega(t-\tau)}a(\tau). \quad (8.3.5)$$

これらを共振器の演算子の Heisenberg 方程式に代入すると、

$$\frac{da}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}_s, a] - \frac{\kappa}{2}a - \sqrt{\kappa}c_{\text{in}}e^{-i\Omega t}, \quad (8.3.6)$$

$$\frac{da}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}_s, a] + \frac{\kappa}{2}a - \sqrt{\kappa}c_{\text{out}}e^{-i\Omega t}. \quad (8.3.7)$$

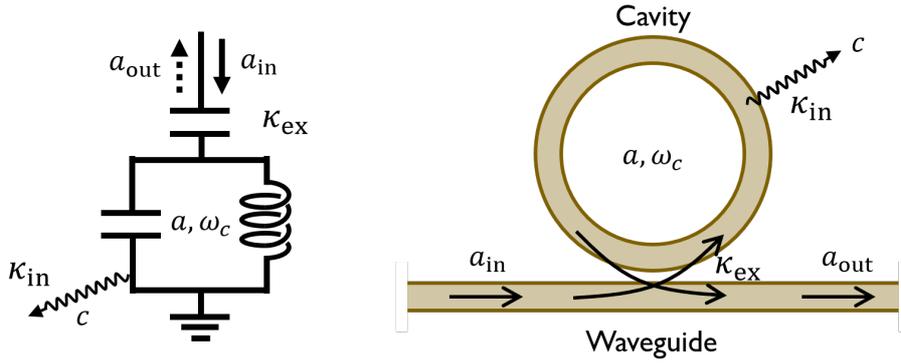


図 8.6: 1 ポート測定 of 概略図

が得られる。ここで Markov 近似によって伝搬モードに関する m 重 ($m \geq 2$) 積分を無視することができ、

$$c_{in} e^{-i\Omega t} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega(t-t_0)} c(\omega, t_0), \quad (8.3.8)$$

$$c_{out} e^{i\Omega t} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega(t-t_1)} c(\omega, t_1). \quad (8.3.9)$$

とおいた。ここで注意しておきたいことがある。 c_{in} と c_{out} はいまや周波数で積分された量であるから、 $[\sqrt{\text{Hz}}]$ という単位を持つ。したがって演算子 $n_{in/out} = c_{in/out}^\dagger c_{in/out}$ は $[\text{Hz}]$ の単位を持つ量であり、光子の流束 (flux) になる。そして上記の二つの微分方程式を組み合わせると、次の入出力関係が得られる：

$$c_{out} = c_{in} + \sqrt{\kappa} a e^{i\Omega t}. \quad (8.3.10)$$

この入出力関係と Heisenberg 方程式のセットによって、吸収・発光スペクトル (absorption/emission spectrum) など実験的に観測される様々な量を計算することができる。しばしば回転系にのって $c_{out} = c_{in} + \sqrt{\kappa} a$ という入出力関係が用いられる。

8.3.2 1 ポートの測定

簡単かつ頻出する状況の計算例として、1 ポートの共振器測定を考えよう。これはリング共振器が一本の光導波路に結合しているような状況や、電気回路の共振器に一本だけ電磁波導入用の配線がある場合などに対応する。Hamiltonian としては共振器のもの $\mathcal{H} = \hbar \Delta_c a^\dagger a$ を使い、伝搬モードの Hamiltonian はあらわに考えなくともよい。もし Heisenberg 方程式にどのように緩和や結合が入るかがわからなくなったら、前節の議論に沿って改めて計算することで正しい表式を得ることができる。共振器自体の緩和レートを κ_{in} 、共振器と導波路の結合レートを κ_{ex} とすれば (図 8.6)、共振器の演算子

に対する Heisenberg 方程式は

$$\frac{da}{dt} = -i\Delta_c a - \frac{\kappa_{in}}{2}a - \frac{\kappa_{ex}}{2}a - \sqrt{\kappa_{ex}}a_{in} \quad (8.3.11)$$

であり、入出力関係は $a_{out} = a_{in} + \sqrt{\kappa_{ex}}a$ になる。定常状態では $da/dt = 0$ から

$$a = -\frac{\sqrt{\kappa_{ex}}}{i\Delta_c + \frac{\kappa_{in} + \kappa_{ex}}{2}}a_{in} \quad (8.3.12)$$

とすることができる。これとこの Hermite 共役から、共振器内部の光子数 $n_{cav} = a^\dagger a$ と入力光子の流束 $n_{in} = a_{in}^\dagger a_{in}$ の関係式を得る：

$$n_{cav} = \frac{\kappa_{ex}}{\Delta_c^2 + [(\kappa_{in} + \kappa_{ex})/2]^2}n_{in} \quad (8.3.13)$$

つまり駆動周波数が共振器に共鳴していて共振器自体の緩和が小さいとき、共振器内光子数はざっくり入力光子の流束を共振器の緩和レートで除したものになる。

さらに a の表式を入出力関係に代入すると、

$$\begin{aligned} a_{out} &= \left(1 - \frac{\kappa_{ex}}{i\Delta_c + \frac{\kappa_{in} + \kappa_{ex}}{2}}\right)a_{in} \\ &= \frac{i\Delta_c + \frac{\kappa_{in} - \kappa_{ex}}{2}}{i\Delta_c + \frac{\kappa_{in} + \kappa_{ex}}{2}}a_{in}. \end{aligned} \quad (8.3.14)$$

となる。導波路の透過率 T は出力光子数（あるいは流束）と入力光子数（あるいは流束）の比を取ることで計算できるから、 $\langle n_{out} \rangle / \langle n_{in} \rangle = \langle a_{out}^\dagger a_{out} \rangle / \langle a_{in}^\dagger a_{in} \rangle$ をもちいて

$$T = \frac{\Delta_c^2 + \left(\frac{\kappa_{in} - \kappa_{ex}}{2}\right)^2}{\Delta_c^2 + \left(\frac{\kappa_{in} + \kappa_{ex}}{2}\right)^2} = 1 - \frac{\kappa_{in}\kappa_{ex}}{\Delta_c^2 + \left(\frac{\kappa_{in} + \kappa_{ex}}{2}\right)^2} \quad (8.3.15)$$

である。この式からただちにわかるように透過スペクトルには共振器が Lorentz 関数のディップとして現れる（図 8.8）。このスペクトルに関連して、共振器と導波路の結合には三つのパラメータ領域があることに言及しておきたい。まず導波路との結合（一般に外部結合と呼ばれる） κ_{ex} が共振器の緩和（内部ロス、intrinsic/internal loss と呼ばれる） κ_{in} より小さく $\kappa_{ex} < \kappa_{in}$ であるとき、共振器と導波路の結合はアンダーカップリング（undercoupling）であるといわれる。

$$a_{out} = \left(1 - \frac{\kappa_{ex}}{i\Delta_c + \frac{\kappa_{in} + \kappa_{ex}}{2}}\right)a_{in} \quad (8.3.16)$$

から式 $\langle a_{out} \rangle / \langle a_{in} \rangle$ を複素平面（位相空間とみても良い）上にプロットしたものが図 8.8 の左のものである。共鳴時にくると位相空間上で円を描く様子がわかるが、アンダーカップリングのときには位相空間上で原点に至ることはなく、位相変化も π を上回ることはない。これよりアンダーカップリングのときは透過率がゼロまで下がることはなく、これは外部結合が小さく共振器に入ることなく通り抜ける光子が多数あるからであ

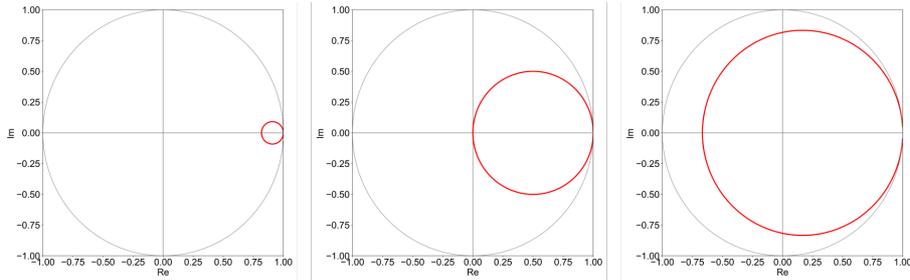


図 8.7: アンダー（左）、クリティカル（中央）、オーバー（右）カップリング時の位相空間での信号

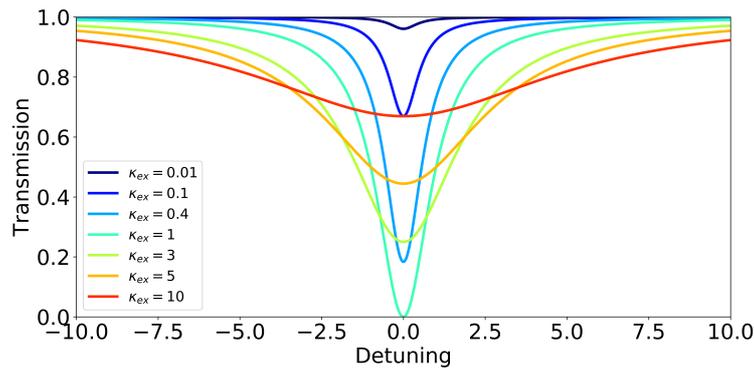


図 8.8: $\kappa_{in} = 1$ のもとでのさまざまな κ_{ex} に対する分光信号

ると解釈できる。 $\kappa_{ex} = \kappa_{in}$ になるときをクリティカルカップリング (critical coupling) というが、このとき位相空間上でちょうど原点を通るようになり、したがって透過率が共鳴のときにゼロになる (図 8.8 の中央)。これは導波路から注入した光がすべて共振器によって消費されて消失していることを意味する。共振器のスペクトル幅は $\kappa_{in} + \kappa_{ex}$ になるが、クリティカルカップリングのときにはこれが $2\kappa_{in}$ となる。最後に $\kappa_{ex} > \kappa_{in}$ のときをオーバーカップリング (overcoupling) という。この時には図 8.8 の右のように位相空間上の円は原点を囲むようになり、透過率がゼロにならない、位相が 2π 回る、線幅が太くなる等の特徴がある。この状況は、共振器に対して強い外部結合がありガバガバと共振器に光子が入っていくが、そのぶんガバガバと共振器から導波路に戻ってきってしまうために共振器で消費されることがないというふうに理解できる。様々な結合領域のときの共振器の透過測定信号を図 8.7 に示した。

8.3.3 2 ポートの測定

次の例として、Fabry-Perot 共振器や配線が 2 本ついた LC 共振器のような状況を考えよう。この場合の入出力関係はどうなるかという、2 つの電磁波入出力ポートでのそれぞれの境界条件として入出力関係を考えれば十分である。電磁波を入射するポート

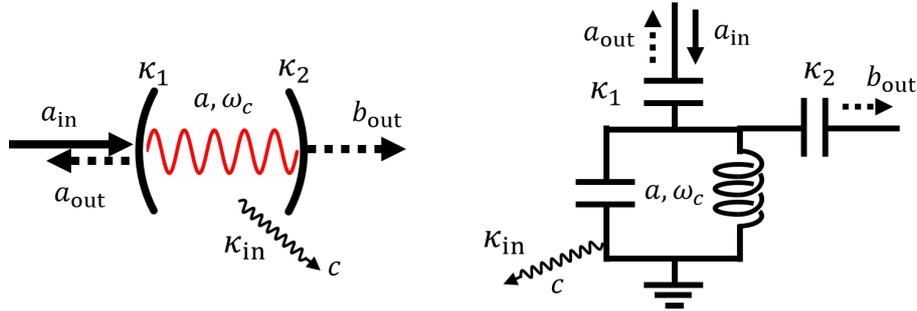


図 8.9: 2 ポート測定の実験系の概略

と等価を測定するポートの外部結合レートをそれぞれ κ_1, κ_2 として、消滅演算子を入射電磁波について a_{in} 、反射電磁波について a_{out} 、透過電磁波に対して b_{out} としよう。Heisenberg 方程式は先ほどと同じく

$$\frac{da}{dt} = -i\Delta_c a - \frac{\kappa}{2}a - \sqrt{\kappa_1}a_{in} \quad (8.3.17)$$

となる。ただしここで $\kappa = \kappa_{in} + \kappa_1 + \kappa_2$ である。これは共振器光子のロスレートがもともとはあるロスレートに加えて二つのポートへの漏れも含んでいる形となっている。入出力関係は、入射ポートと等価ポートそれぞれに関して

$$a_{out} = a_{in} + \sqrt{\kappa_1}a, \quad b_{out} = \sqrt{\kappa_2}a \quad (8.3.18)$$

となる。これらもまたきちんと計算すれば出てくるのであるが、各ポートでの光子の収支を考えると至極妥当であろう。これらを $\frac{da}{dt} = 0$ の定常状態について解くことで反射率 $R = \langle a_{out}^\dagger a_{out} \rangle / \langle a_{in}^\dagger a_{in} \rangle$ と透過率 $T = \langle b_{out}^\dagger b_{out} \rangle / \langle a_{in}^\dagger a_{in} \rangle$ が

$$R = 1 - \frac{\kappa_1(\kappa_{in} + \kappa_2)}{\Delta_c^2 + (\kappa/2)^2}, \quad (8.3.19)$$

$$T = \frac{\kappa_1\kappa_2}{\Delta_c^2 + (\kappa/2)^2} \quad (8.3.20)$$

と得られる。 $R + T = 1 - \kappa_{in}\kappa_1/(\Delta_c^2 + (\kappa/2)^2)$ で 1 とならないのは、共振器から二つのポート以外へ光子がロスする過程があるためである。 $\kappa_1 = \kappa_{in} + \kappa_2$ のときに反射率は共鳴時にゼロとなる。

8.3.4 二準位系の自然放出

上記の議論のちょっとしたバリエーションを、二準位系の自然放出に適用してみよう。Hamiltonian は $\mathcal{H}_q = \hbar\Delta_q\sigma_z$ で、伝搬モードがシングルモードであるという仮定をして、全体の Hamiltonian を

$$\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_q + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \hbar\omega b^\dagger(\omega)b(\omega) - i\hbar\sqrt{\gamma} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} [\sigma_+ b(\omega) - b^\dagger(\omega)\sigma_-]. \quad (8.3.21)$$

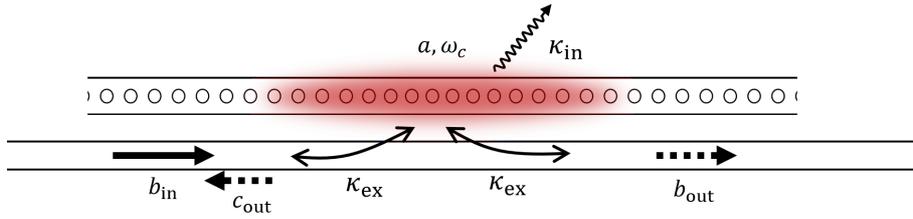


図 8.10: 導波路結合した量子ビット-共振器結合系

共振器の場合と全く同じ計算過程をたどることによって

$$\dot{\sigma}_- = -i\Delta_q\sigma_- - \frac{\gamma}{2}\sigma_- + \sqrt{\gamma}\sigma_z b_{in} \quad (8.3.22)$$

という Heisenberg 方程式を得る。ここで駆動項に σ_z の因子が付いていることに注意しよう。これは原子が基底状態にいるときには期待値 -1 をとるが、駆動が強くなるにつれて σ_z の期待値はゼロになっていき、駆動に対する反応が小さくなり原子が飽和する状況を再現している。強い電磁波の照射により原子が飽和すると、光の透過率は共鳴時でも 1 となってしまふ。これで定性的な振る舞いはわかるが、正しい原子スペクトルの表式はマスター方程式および Bloch 方程式を用いた解析をすべきである。

8.3.5 導波路結合した量子ビット-共振器結合系

最後の例として、図 8.10 のように量子ビット-共振器結合系が導波路結合しているような系を考え、導波路の透過測定によって量子ビット-共振器結合系がどのように観測されるかをみてみよう。ここで共振器はフォトニック結晶共振器にエバネッセント光によって結合しているような場合を考える。Hamiltonian は単純な Jaynes-Cummings モデルであり

$$\mathcal{H} = \frac{\hbar\omega_q}{2}\sigma_z + \hbar a^\dagger a - i\hbar g(\sigma_+ a - \sigma_- a^\dagger) \quad (8.3.23)$$

とする。ここでは $\kappa = \kappa_{in} + 2\kappa_{ex}$ である。導波路の左側から電磁波を入射するとして、入射モードを b_{in} 、透過するものを b_{out} 、反射するものを c_{out} としよう。駆動周波数 ω の回転系に乗って、Heisenberg 方程式

$$\frac{da}{dt} = -i\Delta_c a - \frac{\kappa}{2}a - g\sigma_- - \sqrt{\kappa_{ex}}b_{in}, \quad (8.3.24)$$

$$\frac{d\sigma_-}{dt} = -i\frac{\Delta_q}{2}\sigma_- - \frac{\gamma}{2}\sigma_- - g\sigma_z a, \quad (8.3.25)$$

$$\frac{d\sigma_z}{dt} = 2g(\sigma_+ a + \sigma_- a^\dagger) \quad (8.3.26)$$

および入出力関係

$$b_{out} = b_{in} + \sqrt{\kappa_{ex}}a, \quad c_{out} = \sqrt{\kappa_{ex}}a \quad (8.3.27)$$

から透過率と反射率を計算したい。しかしながら量子ビットが非線形であることに由来してこの方程式には非線形項があり、単純には解けなくなっている。さらに言えば、Jaynes-Cummings モデルを解析した際に行ったような量子ビットが非常に弱くしか励起されないという近似は用いないことにしよう。つまり、量子ビットの駆動が強い場合も考えたい。そこでコヒーレントな電磁波である b_{in} 、 b_{out} 、 c_{out} およびコヒーレントに駆動されている Pauli 演算子 σ_z と σ_- をすべて演算子ではなく普通の数 b_{in} 、 b_{out} 、 c_{out} 、 s_z 、 s に置き換えて、定常状態での振る舞いを調べることにする。すると少し込み入った計算の後、

$$c_{\text{out}} = -r(\Delta_c, \Delta_q)b_{\text{in}}, \quad (8.3.28)$$

$$b_{\text{out}} = [1 - r(\Delta_c, \Delta_q)]b_{\text{in}}, \quad (8.3.29)$$

$$s_z = -\frac{1}{1 + X}, \quad (8.3.30)$$

$$s = -\sqrt{\frac{1}{\eta}} \frac{1}{1 + X} \frac{2\eta r_0(\Delta_c)}{2\eta r_0(\Delta_c) + 2(i\Delta_q + \gamma/2)} b_{\text{in}} \quad (8.3.31)$$

という表式が得られる。ただし、

$$\eta = \frac{g^2}{\kappa_{\text{ex}}}, \quad (8.3.32)$$

$$r_0(\Delta_c) = \frac{\kappa_{\text{ex}}}{i\Delta_c + \kappa/2}, \quad (8.3.33)$$

$$r(\Delta_c, \Delta_q) = \left[1 - \frac{2\eta r_0(\Delta_c)}{2\eta r_0(\Delta_c) + 2(i\Delta_q + \gamma/2)} \frac{1}{1 + X} \right] r_0(\Delta_c), \quad (8.3.34)$$

$$X = \frac{|b_{\text{in}}|^2}{P_s}, \quad (8.3.35)$$

$$P_s = \frac{1}{8\eta\kappa_{\text{ex}}^2} \left\{ \left[\Delta_q^2 + \left(\frac{\gamma}{2} \right)^2 \right] \left[\Delta_c^2 + \left(\frac{\kappa}{2} \right)^2 \right] + \eta^2 \kappa_{\text{ex}}^2 - 2\eta\kappa_{\text{ex}}\Delta_q\Delta_c + \frac{\gamma\eta\kappa_{\text{ex}}\kappa}{2} \right\} \quad (8.3.36)$$

というパラメータを導入してある。 $r(\Delta_c, \Delta_q)$ は量子ビット-共振器結合系の反射率を表しており、 $r_0(\Delta_c)$ は量子ビットがない時の共振器のみの反射率である。 P_s は量子ビットが飽和する光子の流束、 X はこれで規格化された入力光子の流束になっている。

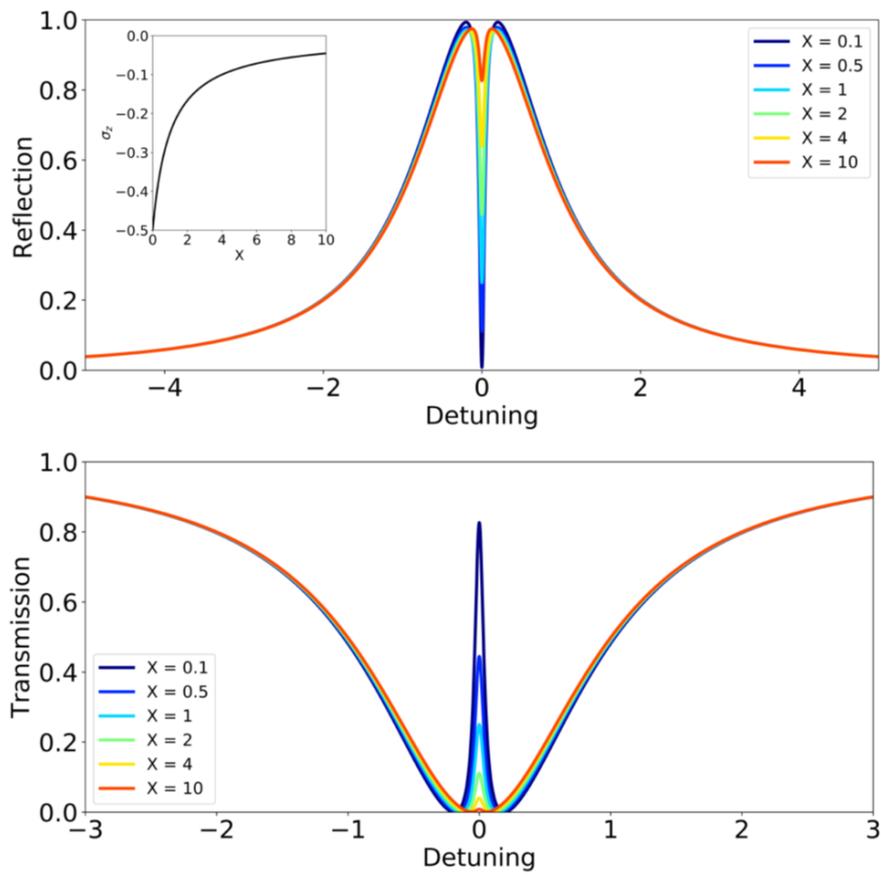


図 8.11: 上段はさまざまな入射光強度に対する透過スペクトルと σ_z の期待値 (インセット)、下段はさまざまな入射光強度に対する透過スペクトル

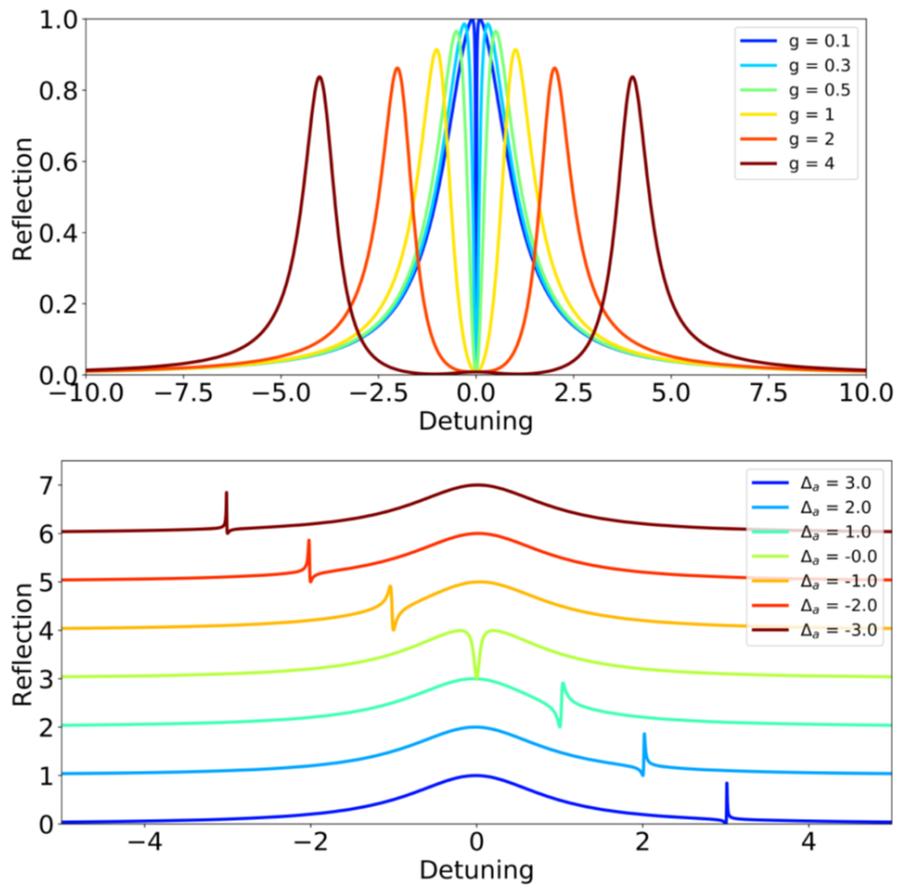


図 8.12: さまざまな結合強度（上段）と離調（下段）に対する透過スペクトル

第9章 量子実験系における種々の結合

この節では、いくつかの量子系を例にとって量子技術に出てくる様々な相互作用を概観し、実際に相互作用の大きさ、つまり結合定数を求めてみよう。基本的な方針としては、古典的な相互作用の表式を考え、それを量子化して Hamiltonian に入る相互作用項の形を求め、結合定数を相互作用している物理系の真空ゆらぎの積として得るというものになる。

9.1 原子イオンの例

原子あるいは原子イオンの系は、固体光共振器などを用いる特殊な場合でない限りには解析的に種々の結合が計算できる。

9.1.1 原子 - 光相互作用

これは 4.3 節の繰り返しになるが、電場の 1 次のみで双極子遷移 $d \cdot E$ を考えるとき、 $d = \mu(\sigma_+ + \sigma_-)$ と $E = E_{\text{zpf}}(a + a^\dagger)$ を用いて相互作用 Hamiltonian が

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = \mu E_{\text{zpf}}(\sigma_+ + \sigma_-)(a + a^\dagger) \quad (9.1.1)$$

と書けるのであった。さらに電磁波の周波数 ω_c と量子ビットの遷移周波数 ω_q が近い値であれば回転波近似により相互作用 Hamiltonian は

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{int}} &= \mu E_{\text{zpf}}(\sigma_+ a + \sigma_- a^\dagger) \\ &= \hbar g(\sigma_+ a + \sigma_- a^\dagger) \end{aligned} \quad (9.1.2)$$

という形になる。この Jaynes-Cummings 相互作用の結合定数が $g = \mu E_{\text{zpf}}/\hbar$ で与えられる。これは遷移双極子モーメントと共振器光の電場の真空ゆらぎの積となっている。

二準位系の遷移双極子モーメント μ は、実験的に観測される遷移の自然幅 Γ との間に

$$\Gamma = \frac{\mu^2 \omega_q^3}{3\pi \hbar \epsilon_0 c^3} \iff \mu = \sqrt{\frac{3\pi \hbar \epsilon_0 c^3 \Gamma}{\omega_q^3}} \quad (9.1.3)$$

という関係式が成り立つことから計算できる。参考までに、ストロンチウムイオンの波長 422 nm の遷移の自然幅が約 23 MHz であり、上式から計算される遷移双極子モーメントは 1.39×10^{-29} C·m である。

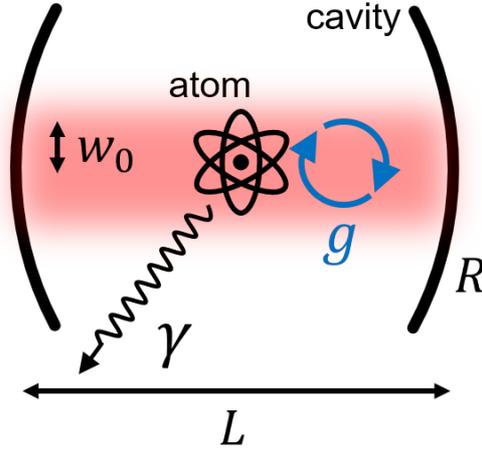


図 9.1: Fabry-Perot 共振器の内部に原子が配置された系の概念図

次に光共振器として図に示すような Fabry-Perot 共振器（共振器長が L 、ミラーの曲率半径が R 、ビーム半径が w_0 ）を考えよう。高フィネスの Fabry-Perot 共振器に用いられるミラーは通常誘電体多層膜ミラーであり、厳密には共振器長は誘電体多層膜ミラーへの“しみこみ”を考慮した実効的な長さとなるが、このしみこみはせいぜい光の波長程度のものであるので無視しよう。この共振器における光の電場は、共振器長とミラーの曲率半径が波長より十分大きいという条件のもとで

$$E(r) = \sin \frac{2\pi x}{\lambda} \exp \left[-\frac{y^2 + z^2}{w_0^2} \right] \quad (9.1.4)$$

と書ける。この共振モードのモード体積を、電場の二乗の積分で定義する。上記のようにかけている場合には計算が簡単で、

$$V = \int_0^L dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz E(r)^2 = \frac{\pi w_0^2}{4} L \quad (9.1.5)$$

となる。ビーム径は

$$w_0 = \sqrt{\frac{L\lambda}{2\pi}} \left(\frac{2R - L}{L} \right)^{\frac{1}{4}} \quad (9.1.6)$$

と書ける [?] から、モード体積は

$$V = \frac{\lambda}{8} \sqrt{L^3(2R - L)} \quad (9.1.7)$$

となる。波長 422 nm、共振器長 200 μm 、曲率半径 1 mm のミラーを用いる場合には $V = 6.3 \times 10^6 \mu\text{m}^3$ となる。モード体積を用いて共振器光の電場の真空ゆらぎは $E_{z\text{pf}} = \sqrt{\hbar\omega_c/2\epsilon_0 V}$ と書かれることはすでに述べた。

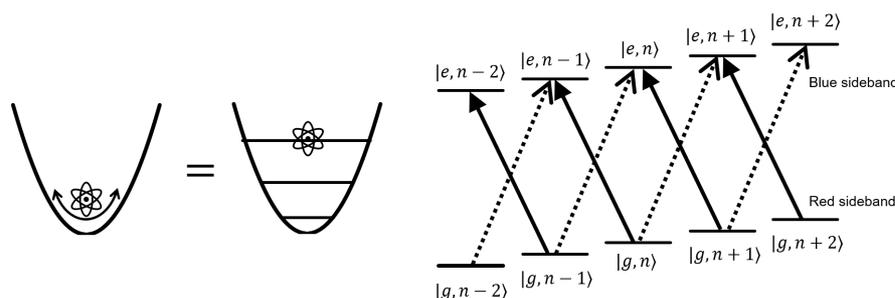


図 9.2: イオンの量子化された振動 (左) とサイドバンド遷移 (右)

以上より、原子と光の結合定数は $g/2\pi = 0.96$ MHzと求められる。自然幅が $2\pi \times 23$ MHzであるから、これは光共振器の線幅に関わらず弱結合領域である。より大きな原子と光の相互作用を実現するためにはいくつかの改善をしなければならない。ひとつには自然幅 Γ のより細い遷移を使うということである。単純に考えると Γ の減少は遷移双極子モーメントの減少、すなわち結合定数の減少を招くように思えるが、式 9.1.3 をみると Γ が小さくなくても ω_q が小さく、すなわち波長が長くなっていけば Γ の減少を補って余りある可能性がある。結合強度が変わらずに自然幅、すなわち強結合領域のためのハードルが下がるのである。もうひとつは、共振器のモード体積を小さくして電場の真空ゆらぎを、そして結合強度自体を大きくするという方法がある。共振器長を短くするのはもちろん、ミラーの曲率半径を小さくしてビーム径を小さくするのも効果的である。

9.1.2 サイドバンド遷移

振動電場によって生成した荷電粒子に対する調和ポテンシャルに原子イオン（以後混乱のない限り単にイオンと記す）を捕獲するのがイオントラップのなかでも Paul トラップと呼ばれる技術である。このとき、イオンはトラップ中で調和振動をすることになり、この振動量子を便宜上フォノン (phonon) と呼び、単一イオンのフォノンは空間三方向あわせて三つ存在する。これを考慮すると、原子の位置はフォノンによって振動することになる。これはレーザー冷却によってイオンがフォノンの基底状態にあっても、フォノンの真空ゆらぎにより位置が揺らいでいることを意味する。

レーザー光がイオンに照射されている時、前節では原子が静止していることを暗に仮定していたが、今度は原子の位置 x も含めて考えよう。これは原子に当たる電場を $E(x) = E_{zpf} e^{ikx} (a + a^\dagger)$ と、空間依存する位相因子を含めて書くことで可能になる。ただし $k = 2\pi/\lambda$ は光の波数である。これによる双極子遷移はフォノンの生成演算子を b ,

真空ゆらぎを x_{zpf} として

$$\begin{aligned}
 & \hbar g e^{ikx} (\sigma_+ + \sigma_-) (a + a^\dagger) \\
 &= \hbar g e^{ikx_{\text{zpf}}(b+b^\dagger)} (\sigma_+ + \sigma_-) (a + a^\dagger) \\
 &\simeq \hbar g [1 + ikx_{\text{zpf}}(b+b^\dagger)] (\sigma_+ + \sigma_-) (a + a^\dagger) \\
 &= \hbar g (\sigma_+ + \sigma_-) (a + a^\dagger) \\
 &\quad + \hbar \eta g (b + b^\dagger) (\sigma_+ + \sigma_-) (a + a^\dagger). \tag{9.1.8}
 \end{aligned}$$

ここで無次元のパラメータ $\eta = kx_{\text{zpf}}$ は Lamb-Dicke パラメータと呼ばれる。第一項は前節でも扱ったような相互作用である（サイドバンド相互作用を考えるとときには carrier 遷移とも呼ばれる）から今はフォノンも関わるような遷移である第二項に着目しよう。簡単化するために光がコヒーレント振幅 α で置き換えられる（すなわち強いレーザー光を照射する）状況を考える。このとき、光の周波数がイオンの周波数 ω_q からフォノンの周波数 ω_m だけ小さな周波数 $\omega_q - \omega_m$ を持つとき、回転波近似を行うことによって上記の相互作用の第二項は

$$\hbar \eta g \alpha (\sigma_+ b + \sigma_- b^\dagger) \tag{9.1.9}$$

と書かれる。これはイオンの量子ビットとフォノンで構成された Jaynes-Cummings 相互作用であり、イオンの遷移の共鳴から赤方離調されたレーザーにより駆動されるためレッドサイドバンド（red sideband）遷移という。

逆に光の周波数がイオンの周波数からフォノンの周波数だけ大きな周波数 $\omega_q + \omega_m$ を持つとき、回転波近似で残る相互作用は

$$\hbar \eta g \alpha (\sigma_+ b^\dagger + \sigma_- b) \tag{9.1.10}$$

である。これは anti-Jaynes-Cummings 相互作用であり、イオンの遷移の共鳴から青方離調されたレーザーにより駆動されるためブルーサイドバンド（blue sideband）遷移という。もしも周波数 $\omega_q - \omega_m$ と $\omega_q + \omega_m$ の二本のレーザーが同時に照射された時には、上記の二つの相互作用が同時に駆動されると考えればよい。

9.1.3 フォノン-フォノン相互作用

ふたつのイオン（ともに一価イオンとする）が同一の調和ポテンシャル中で Coulomb 相互作用しているとき、フォノン同士の相互作用が生じる。この相互作用 Hamiltonian と強さを簡単な計算から求めてみよう。状況としては図のように距離 Z だけ離れた二つのイオンがあるとし、その各々の平衡位置からの変位を $r_1 = (x_1, y_1, z_1), r_2 = (x_2, y_2, z_2)$

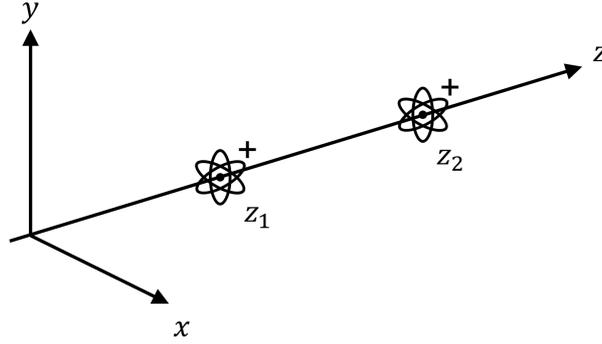


図 9.3: $Z = z_2 - z_1$ だけ離れた二つのイオンが調和振動をおこない、その調和振動同士が相互作用をする

とする。Coulomb 相互作用のエネルギーを変形していこう

$$\begin{aligned}
 E_{\text{ph-ph}} &= \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|r_1 - r_2|} \\
 &= \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \frac{1}{\sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 + (Z + z_1 - z_2)^2}} \\
 &= \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 Z} \left[1 + \frac{2(z_1 - z_2)}{Z} + \frac{(z_1 - z_2)^2}{Z^2} + \frac{(x_1 - x_2)^2}{Z^2} + \frac{(y_1 - y_2)^2}{Z^2} \right]^{-\frac{1}{2}} \\
 &\simeq \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 Z} \left[1 - \frac{z_1 - z_2}{Z} - \frac{1}{2} \frac{(z_1 - z_2)^2}{Z^2} - \frac{1}{2} \frac{(x_1 - x_2)^2}{Z^2} - \frac{1}{2} \frac{(y_1 - y_2)^2}{Z^2} \right] \quad (9.1.11)
 \end{aligned}$$

今回は z 方向のフォノンのみを考えることにして、 $x_1 = x_2 = y_1 = y_2 = 0$ としておこう。すると上記のエネルギーは

$$E_{\text{ph-ph}} = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 Z} \left[1 - \frac{z_1 - z_2}{Z} - \frac{1}{2} \frac{(z_1 - z_2)^2}{Z^2} \right] \quad (9.1.12)$$

となる。ここで変位 z_i をフォノンの位置演算子 $z_i = z_{zpf}^i (a_i^\dagger + a_i)$ で置き換える。フォノン-フォノン相互作用は上式の第三項から出てくるのでそれに着目すると、

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}_{\text{ph-ph}} &= \frac{e^2}{16\pi\epsilon_0 Z} \frac{(z_1 - z_2)^2}{Z^2} \\
 &= \frac{e^2 z_{zpf}^1 z_{zpf}^2}{16\pi\epsilon_0 Z^3} \left[a_1^{\dagger 2} + a_1^2 + a_2^{\dagger 2} + a_2^2 + (2a_1^\dagger a_1 + 1) + (2a_2^\dagger a_2 + 1) \right. \\
 &\quad \left. - 2(a_1^\dagger a_2^\dagger + a_1 a_2) - 2(a_1^\dagger a_2 + a_1 a_2^\dagger) \right] \quad (9.1.13)
 \end{aligned}$$

このうち、二つのフォノンモードの周波数が同じ ω_m とすると回転波近似によって残る項は

$$\mathcal{H}_{\text{ph-ph}} = \frac{e^2 z_{zpf}^1 z_{zpf}^2}{8\pi\epsilon_0 Z^3} \left[a_1^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_2 - a_1^\dagger a_2 - a_1 a_2^\dagger \right] \quad (9.1.14)$$

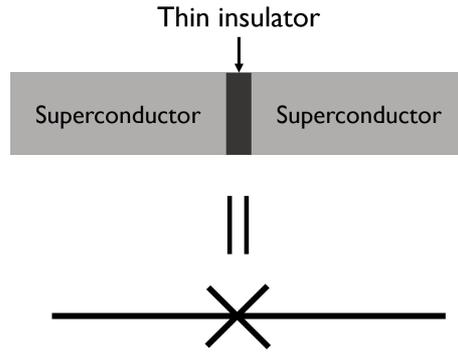


図 9.4: Josephson 接合とその回路記号

となる。初めの二つの項はフォノンのエネルギーシフトになるのみであるから無視して、結局相互作用 Hamiltonian は

$$\mathcal{H}_{\text{ph-ph}} = -\hbar g_{\text{ph-ph}} (a_1^\dagger a_2 + a_1 a_2^\dagger), \quad (9.1.15)$$

すなわちビームスプリッタ型の Hamiltonian になる。フォノンが片方のイオンからもう片方に移るような過程を考えると物理的にも妥当であることがわかる。 $g_{\text{ph-ph}} = e^2 z_{zpf}^1 z_{zpf}^2 / 8\hbar\pi\epsilon_0 Z^3$ が結合定数の表式である。これを見積もるためにはフォノンの真空ゆらぎを知る必要がある。これはゼロ点エネルギーが調和振動子のポテンシャルエネルギーに等しい、すなわち $\hbar\omega_m/2 = m\omega_m^2 (z_{zpf}^i)^2/2$ という等式から、 $z_{zpf}^i = \sqrt{\hbar/m\omega_m}$ という形になることがわかる。したがって

$$g_{\text{ph-ph}} = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 m\omega_m Z^3} \quad (9.1.16)$$

と表すことができる。これは二つのイオンの質量などが同じ場合のものだが、真空ゆらぎの表式を変えるだけで一般的な場合に拡張できる。

さて、実際のパラメータを入れて結合定数を評価してみよう。典型的なイオンの間隔として $Z = 10 \mu\text{m}$ 、カルシウムを想定して $m = 40 \times m_p$ (m_p は陽子の質量)、フォノンの周波数が 100 kHz であるとする、相互作用の大きさは $g/2\pi = 440 \text{ kHz}$ 程度となる。

9.2 超伝導量子回路

BCS (Bardeen-Cooper-Schrieffer) 理論が適用できる超伝導体においては、電子—フォノン相互作用を介し波数空間で引力相互作用をする電子のペアが Cooper 対を形成する。Cooper 対はひとまとまりの超伝導体全体にわたる巨視的な波動関数を共有し、干渉などの量子効果を発現する。超伝導体において電気抵抗がゼロになるということは、常伝導体において Joule 熱という損失により制限されていた LC 共振器の Q 値が飛躍的

に向上するということを意味しており、Haroche らによる Rydberg 原子の量子状態制御にも用いられた。また、超伝導体にナノメートルオーダーの絶縁体薄膜が挟まれている Josephson 接合 (Josephson junction) と呼ばれる構造において、その絶縁体薄膜を Cooper 対が量子トンネル効果により“通過”し有限の伝導率を示す Josephson 効果が表れる。とくに交流 Josephson 効果においては電流が $I(t) = I_0 \sin(2\pi\Phi_J/\Phi_0)$ というように回路を貫く磁束 Φ_J に対し振動する。ここで $\Phi_0 = h/2e$ で、 $e (< 0)$ は素電荷である。Josephson 効果の平易な導出に関しては文献 [7] を参照していただきたい。通常のインダクタ (インダクタンス L) については電流は L に比例するため、Josephson 接合が非線形インダクタとして働くことがわかる。さらに LC 共振器の L を Josephson 接合で置き換えることで非調和振動子が実現され、この最低エネルギー状態と第一励起状態を量子ビットとして用いる事ができる。本節では LC 共振器の量子的な取り扱いと、上記の非線形振動子として表現できるトランズモンと呼ばれる超伝導量子ビット、そして共振器と超伝導量子ビット (superconducting qubit) の間の結合についてみていこう。

9.2.1 LC 共振器の量子化

図のように、インダクタ L とキャパシタ C が並列に繋がった LC 共振器を考えよう。もちろん共振周波数は $1/2\pi\sqrt{LC}$ で与えられるが、ここではこの LC 共振器の Hamiltonian を求め、量子化することが目的である。キャパシタの電荷を Q 、共振回路を貫く磁束を Φ とすると、これらは電圧 V 、電流 I を用いて

$$Q = CV, \quad \Phi = LI \quad (9.2.1)$$

と書くことができる。また、電流と電圧はそれぞれ電荷と磁束の変化率として

$$I = -\frac{dQ}{dt}, \quad V = \frac{d\Phi}{dt} \quad (9.2.2)$$

と書けるから、これらから Q に関する微分方程式が

$$\frac{d^2Q}{dt^2} = -\frac{Q}{LC} \quad (9.2.3)$$

と求まる。これは確かに共振周波数 $1/\pi\sqrt{LC}$ で振動する解を与える。同様に Φ についても

$$\frac{d^2\Phi}{dt^2} = -\frac{\Phi}{LC} \quad (9.2.4)$$

という微分方程式が得られる。さて、これらを Euler-Lagrange 方程式として与える Lagrangian \mathcal{L} はどのようなものになるかというと、

$$\mathcal{L} = \frac{Q^2}{2C} - \frac{L}{2} \left(\frac{dQ}{dt} \right)^2 \quad (9.2.5)$$

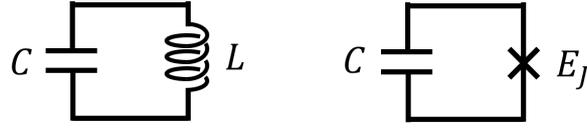


図 9.5: LC 共振器 (左) と本章で扱う超伝導量子ビット (右)

というものになる。 Q の共役となる正準変数は Φ となることはすぐにわかるので、Hamiltonian \mathcal{H}_{LC} は

$$\mathcal{H}_{LC} = \frac{Q^2}{2C} + \frac{\Phi^2}{2L} \quad (9.2.6)$$

となることがわかる。第1項がキャパシタのエネルギー、第2項がインダクタのエネルギーになっていることがわかるだろう。

期待通り Q と Φ を正準変数とする調和振動子の形にかけたので、これらを演算子とみなし、交換関係 $[Q, \Phi] = i\hbar$ を要請することで量子化の手続きが完了する。共振器光子の生成・消滅演算子を

$$a = \frac{1}{2\hbar} \sqrt{\frac{L}{C}} Q + \frac{i}{2\hbar} \sqrt{\frac{C}{L}} \Phi \quad (9.2.7)$$

$$a^\dagger = \frac{1}{2\hbar} \sqrt{\frac{L}{C}} Q - \frac{i}{2\hbar} \sqrt{\frac{C}{L}} \Phi \quad (9.2.8)$$

とすることで、交換関係は $[a, a^\dagger] = 1$ となり Hamiltonian は

$$\mathcal{H}_{LC} = \hbar\omega_{LC} \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \quad (9.2.9)$$

となる。

9.2.2 超伝導量子ビット

次に、LC 共振器のインダクタを Josephson 接合で置き換えた図のような回路を考えよう。Josephson 効果において、絶縁体を挟んだ超伝導体間の位相差を θ 、Josephson 接合をまたぐ電流と電圧を I, V として

$$I = I_0 \sin \theta, \quad V = \frac{\hbar}{2e} \frac{d\theta}{dt} \quad (9.2.10)$$

が成立する。ここで磁束量子 $\Phi_0 = h/2e$ を用い、磁束を $\Phi_J = (\theta/2\pi)\Phi_0$ と定義すれば

$$I(t) = I_0 \sin \left(2\pi \frac{\Phi_J}{\Phi_0} \right), \quad V = \frac{d\Phi_J}{dt} \quad (9.2.11)$$

と書き直すことができる。電荷の時間微分が電流であるから

$$\frac{dQ}{dt} = C \frac{dV}{dt} = -I_0 \sin \left(2\pi \frac{\Phi_J}{\Phi_0} \right) \quad (9.2.12)$$

となり、 $V = d\Phi_J/dt$ と併せて Φ_J に関する微分方程式

$$C \frac{d^2\Phi_J}{dt^2} = -I_0 \sin \left(2\pi \frac{\Phi_J}{\Phi_0} \right) \quad (9.2.13)$$

を得る。これを Lagrange 方程式として持つ Lagrangian \mathcal{L}_q は

$$\mathcal{L}_q = \frac{C}{2} \left(\frac{d\Phi_J}{dt} \right)^2 + \frac{I_0\Phi_0}{2\pi} \cos \left(2\pi \frac{\Phi_J}{\Phi_0} \right) \quad (9.2.14)$$

である。第1項はキャパシタのエネルギー $Q^2/2C$ の形にそのまま書き直せて、第2項は Josephson 接合をトンネルする Cooper 対によるエネルギーであるとみることができ、第2項の係数を $E_J = I_0\Phi_0/2\pi$ と書き、Josephson エネルギーと呼ぶ。さらに電荷エネルギーを $E_C = e^2/2C$ とし、Cooper 対の個数を表す $n_C = Q/2e$ も定義すると、上記の Lagrangian を Legendre 変換して得られる Hamiltonian \mathcal{H}_q は

$$\mathcal{H}_q = 4E_C n_C^2 + E_J \cos \theta \quad (9.2.15)$$

と書き表される。ここで再び \cos 関数の引数を θ に書き直した。 $\cos \theta = 1 - \theta^2/2! + \theta^4/4! - \dots$ と展開して考えると、もしも θ^2 の項まで取って高次の項を無視するならば、これは単なる調和振動子になることがわかる。

ここでひとつ仮定をしよう。Josephson エネルギーは電荷エネルギーよりも十分大きい ($E_J/E_C \ll 50$) とするのである。本来 Josephson 接合によって非線形なインダクタが導入され非調和振動子となったこの回路だが、非調和性が小さい、すなわち物理量が調和振動子のようふるまうとしてもそこまで悪い近似ではないという仮定でもある。LC 共振器の量子化の手順に倣い $[Q, \Phi_J] = i\hbar$ を要請しよう。こうすると $[n_C, \theta] = i$ という交換関係も導かれる。そして生成・消滅演算子を次のように定義する：

$$n_C = \left(\frac{E_J}{8E_C} \right)^{\frac{1}{4}} \frac{a + a^\dagger}{\sqrt{2}}, \quad (9.2.16)$$

$$\theta = \left(\frac{8E_C}{E_J} \right)^{\frac{1}{4}} \frac{a - a^\dagger}{i\sqrt{2}}. \quad (9.2.17)$$

非線形性が小さいという仮定から $\cos \theta \simeq 1 - \theta^2/2! + \theta^4/4!$ と非線形性の現れる最低次の項までを残し、上記の生成・消滅演算子での n_C と θ の表記を Hamiltonian に代入することで、最終的に

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_q &= (\sqrt{8E_C E_J} - E_C) a^\dagger a - \frac{E_C}{2} a^\dagger a^\dagger a a \\ &= \hbar\omega_q a^\dagger a + \frac{\hbar\alpha_q}{2} a^\dagger a^\dagger a a \end{aligned} \quad (9.2.18)$$

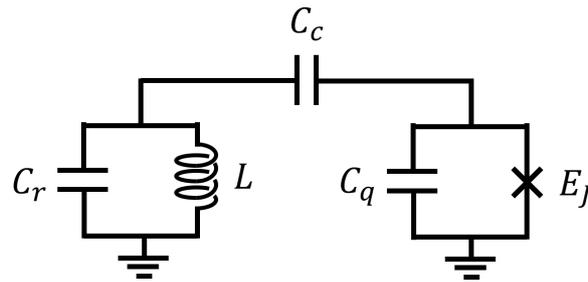


図 9.6: LC 共振器とトランズモンの結合系

という Hamiltonian を得る。ここで量子ビットの周波数は $\hbar\omega_q = \sqrt{8E_C E_J} - E_C$ であり、非調和性を表す $\alpha_q = -E_C/\hbar$ を導入した。典型的なパラメータとしては、 $\omega_q \simeq 10$ GHz、 $E_J/E_C \geq 50$ 、 $\alpha_q \sim -200$ MHz ほどである。

一見すると Josephson エネルギー E_J が電荷エネルギー E_C よりも大きいという仮定は、Josephson 接合が非線形インダクタとして働くということから非線形性が大きいことを意味するようにも思えるが、実は θ の係数にも E_J/E_C の因子があるように、非線形性が小さくなることを意味することが分かる。これは n_C の真空ゆらぎ $\delta n_C = (E_J/8E_C)^{1/4}$ を考えるとより直観的になる。 E_J/E_C が小さいときには δn_C は小さく、Cooper 対が 0 個から 1 個になるか 1 個から 2 個になるかで Cooper 対間の相互作用による遷移エネルギーの違いが出る、すなわち非線形性がある。しかし $E_J/E_C \gg 1$ のときには δn_C が非常に大きい。すなわちもはやこの領域での固有状態は数状態ではうまく書けないものになるのだが、あえて Cooper 対の個数でいうならば 1 個増えようがそこからさらにもう 1 個増えようが、数状態の分布が少しシフトするだけで遷移エネルギーにおける違いがほとんどないような状況になる、すなわち非線形性が小さくなるのである。今回考えたような超伝導回路で大きな E_J/E_C を持つものをトランズモン (transmon) と呼ぶ。逆に E_J/E_C が小さくなると非線形性が大きくなるが、こういった超伝導回路を Cooper pair box と呼ぶ。

9.2.3 共振器とトランズモンの結合

最後に、超伝導量子ビットと共振器が図のようにキャパシタを介して接続されているような回路を考えよう。電圧、キャパシタの電荷、磁束その他のパラメータは図中に示してあるのでそちらを参照してほしい。結合キャパシタ (coupling capacitor) C_c の扱いが肝だが、キャパシタンスが C_q 、 C_r に比べ小さいとし、超伝導量子ビット、共振器、結合キャパシタのエネルギーを足し上げたものとして Hamiltonian を求めてみることにする。結合キャパシタにかかる電圧は $V_c = V_r - V_q = Q_r/C_r - Q_q/C_q$ であり、これ

を結合キャパシタのもつエネルギー $C_c V_c^2/2$ に代入したものを含めた Hamiltonian は

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= \frac{Q_r^2}{2C_r} \left(1 + \frac{C_c}{C_r}\right) + \frac{\Phi_r^2}{2L} + \frac{Q_q^2}{2C_q} \left(1 + \frac{C_c}{C_q}\right) + E_J \cos \theta - C_c V_r V_q \\ &= \frac{Q_r^2}{2C'_r} + \frac{\Phi_r^2}{2L} + \frac{Q_q^2}{2C'_q} + E_J \cos \theta - C_c V_r V_q\end{aligned}\quad (9.2.19)$$

となる。ここで $C'_\xi = C_\xi C_c / (C_\xi + C_c)$ ($\xi = r, c$) としてあり、最後の項はあえて電圧に表現を戻してある。この Hamiltonian における演算子を共振器の生成・消滅演算子 c^\dagger, c と超伝導量子ビットの生成・消滅演算子 a^\dagger, a 、すなわち

$$Q_r = \hbar \sqrt{\frac{C'_r}{L}} (c + c^\dagger), \quad \Phi_r = \frac{\hbar}{i} \sqrt{\frac{L}{C'_r}} (c - c^\dagger), \quad (9.2.20)$$

$$Q_q = \left(\frac{E_J}{8E_C}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{a + a^\dagger}{\sqrt{2}}, \quad \theta = \left(\frac{8E_C}{E_J}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{a - a^\dagger}{i\sqrt{2}} \quad (9.2.21)$$

で書き直そう。定数項を無視すればこれは次のようになる：

$$\mathcal{H} = \hbar \omega_{LC} c^\dagger c + \hbar \omega_q a^\dagger a + \frac{\hbar \alpha_q}{2} a^\dagger a^\dagger a a - \hbar g (c + c^\dagger)(a + a^\dagger). \quad (9.2.22)$$

結合定数 g はここでは

$$g = \frac{C_c}{\hbar} \left(\frac{\hbar}{C'_r} \sqrt{\frac{C'_r}{L}}\right) \left[\frac{2e}{C'_q} \left(\frac{E_J}{8E_C}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2}}\right] \quad (9.2.23)$$

であり、結合キャパシタのキャパシタンス C_c 、共振器の電場の真空ゆらぎ、超伝導量子ビットの電場の真空ゆらぎの積の形になっている。ここから回転波近似を行うことで Jaynes-Cummings 相互作用が導かれる。

実際の超伝導量子ビットの設計の際には微小なキャパシタや Josephson 接合などの素子を経験的な値と数値計算によってシミュレートする必要がある。これは例えばキャパシタ以外の配線部がもつ微小なキャパシタンスやインダクタンスが無視できないためである。また、上記のような結合キャパシタンスが小さいという状況にも必ずしもならず、超伝導量子ビット、特にトランズモンを扱う際には数値計算による結合の見積もりは結局必須である。

9.3 共振器オプトメカニクス

9.3.1 導入

巨大なミラーによって数キロメートルにわたる驚くほど長大な Michelson 干渉計を構成する重力波干渉計 (gravitational wave interferometer) によって、重力波による極微な時空のひずみが捕らえられた。ミラーは超高フィネスの連成光共振器の部品で

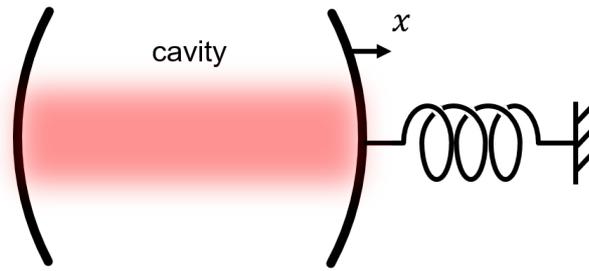


図 9.7: 共振器オプトメカニクス系の概念図

あり、これが極微の信号をとらえるための検出感度向上の要である。その検出感度は我々の想像を超えており、光共振器の長さがミラーを構成する物質の格子定数よりもはるかに小さな量だけ変化しても、それを検出することが可能である。これは逆に、ミラーの機械振動 (mechanical oscillation/vibration、この量子は固体中の格子振動と同じくフォノンとよばれる) が重力波検出器に致命的なノイズとなることをも意味している。このようなノイズを避けるべく、干渉計は真空中に入れられ、低温に冷やされ、ワイヤーでミラーをつるして制振を図るなどさまざまな工夫がなされている。周囲の環境から孤立したこのような系ではミラーの機械振動は極めて高い Q 値を持つようになる。このような機械振動モードによる光への影響が、特に機械振動の量子限界測定 (quantum-noise-limited measurement) の観点から Braginsky によって調べられた。

このような一連の研究の中で共振器オプトメカニクス (cavity optomechanics) は産声を上げた。共振器オプトメカニクスにおいては共振器の光子と機械振動のフォノンの相互作用が扱われ、光子によるフォノンの、あるいはフォノンによる光子の制御が期待され研究がすすめられた。フォノンは共振器光子の非弾性散乱を生み、それが光のサイドバンドとなって検出される。フォノンの周波数が共振器のスペクトル幅よりも十分大きい時にはこのサイドバンドがスペクトル上で分離して観測される、フォノンの周波数が高ければ熱励起の影響を受けにくくなるなどの理由から、共振器オプトメカニクスでは高周波フォノンが希求されてきた。高周波フォノンのもう一つの良い点として、フォノンモードのレーザー冷却の限界温度が、共振器のスペクトルとサイドバンドが分離できないときに比べて低くなることが挙げられる (より詳しくは付録 H 参照)。このようにフォノンをレーザー冷却などで量子的な領域にまで冷却し、機械振動という巨視的な対象の量子的な振る舞いの研究や制御を試みる動きも盛んである。

この節では共振器オプトメカニクスにおけるオプトメカニカル相互作用 (optomechanical interaction) を概説する。

9.3.2 オプトメカニカル相互作用

初めに、共振器光子のエネルギー $\hbar\omega_c a^\dagger a$ とフォノンのエネルギー $\hbar\omega_m b^\dagger b$ を含む基本的な Hamiltonian を書き下そう。これは単純に二つの和で

$$\mathcal{H} = \hbar\omega_c(x)a^\dagger a + \hbar\omega_m b^\dagger b \quad (9.3.1)$$

と書けるが、共振器の共鳴周波数 $\omega_c(x)$ が、フォノンの“変位” x に依存しているとした。これは光共振器の共振器長が機械振動により振動的に変化するなどの状況に対応している。例えば Fabry-Perot 共振器のミラーの機械振動を扱う場合などである (図 9.7)。ここで、フォノンの変位が微小であることから $\omega_c(x) = \omega_c - Gx + \dots$ と共振周波数を展開しよう。 G は光共振器の構造などに依存する係数である。こうすることで摂動をうけた Hamiltonian を

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \hbar(\omega_c - Gx)a^\dagger a + \hbar\omega_m b^\dagger b \\ &= \hbar\omega_c a^\dagger a + \hbar\omega_m b^\dagger b - \hbar G a^\dagger a x \\ &= \hbar\omega_c a^\dagger a + \hbar\omega_m b^\dagger b - \hbar g_0 a^\dagger a (b + b^\dagger) \end{aligned} \quad (9.3.2)$$

と線形の範疇で $\omega_c(x)$ を展開して書き下すことができる。ここでフォノンの変位が $x = x_{zpf}(b + b^\dagger)$ と書けることを用いており、 $x_{zpf} = \sqrt{\hbar/2m\omega_m}$ はフォノンの真空ゆらぎを表す。 m は機械振動子の真空ゆらぎである。これより、相互作用の結合定数は $g_0 = x_{zpf}G$ であることがわかる。この Hamiltonian は共振器オプトメカニクスの系に対して広く適用可能なものになっており、例えばばねに片方のミラーが繋がれた Fabry-Perot 共振器であったり、Fabry-Perot 共振器の中に透明薄膜機械振動子があるような系であったり、フォトニック-フォノン結晶共振器 (photonic-phononic crystal cavity) や、果ては LC 共振器のキャパシタ電極が機械振動子になっているようなエレクトロメカニクス (electromechanics) 系においても通用する。

オプトメカニカル相互作用 $\mathcal{H}_{\text{int}} = \hbar g_0 a^\dagger a (b + b^\dagger)$ についてみてみよう。これは光子の数に応じた力が機械振動子にかかっている時のエネルギーとみることにもできる。オプトメカニカル相互作用の静的な作用は輻射圧 (radiation pressure)、あるいは光ばね効果 (optical spring effect) と呼ばれる。これは光子による機械振動子への運動量の受け渡し (光子がキックする、とも言われる) による圧力で機械振動子が少し平衡位置から変位する効果であると解釈される。動的な現象としては、 $\mathcal{H}_{\text{int}} = \hbar g_0 (a^\dagger a b + a^\dagger a b^\dagger)$ の各項の表す過程を考えればおのずと物理的な状況がみえてくる。 $a^\dagger a b$ という項は光子とフォノンが消滅し、光子が生成される Raman 過程である。エネルギー保存則から生成される光子のエネルギーはもとの消滅した光子よりもフォノンのエネルギー分だけ多きくならなければならない、anti-Stokes 散乱となっていることがわかる。 $a^\dagger a b^\dagger$ という項は第一項の Hermite 共役すなわち逆過程であり、光子が消滅し、光子とフォノンが生成される Raman 過程である。これまたエネルギー保存則より、この過程が Stokes 散乱、つまり生成される光子のエネルギーが消滅した光子のものよりも小さくなる過程であることがわかる。これらの非弾性散乱は共振器の共鳴周波数から正負にフォノンの周

波数分だけずれたところにサイドバンドを生むが、これを共振器に対する離調に応じてレッドサイドバンド、ブルーサイドバンドなどという。共振器オプトメカニクスにおけるフォノンモードのレーザー冷却は、このレッドサイドバンドとブルーサイドバンドの比を著しく偏らせることが肝となっている。

9.3.3 オプトメカニカル相互作用の線形化

オプトメカニカル相互作用を線形化したものもよく目にするため紹介しておこう。状況としては系を周波数 ω_l のレーザーで駆動するようなものを考える。共振器のみこの駆動周波数の回転系に乗ると、Hamiltonian の第一項は $\hbar(\omega_c - \omega_l)a^\dagger a = \hbar\Delta_c a^\dagger a$ となりほかの二つの項は変わらない。そして駆動レーザーが共振器光子をコヒーレントに注入するとして、 a を $\alpha + \delta a$ で置き換える。本文中や付録のあちこちにも出てきているが、複素数 α はコヒーレント状態の振幅である。 δa は量子ノイズあるいは量子ゆらぎを担う演算子になっている。こうすることで、

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{\text{int}} &= -\hbar g_0 \left(|\alpha|^2 + \alpha^* \delta a + \alpha \delta a^\dagger + \delta a^\dagger \delta a \right) (b + b^\dagger) \\ &= -\hbar g_0 n_{\text{cav}} (b + b^\dagger) - \hbar g_0 \sqrt{n_{\text{cav}}} (\delta a + \delta a^\dagger) (b + b^\dagger)\end{aligned}\quad (9.3.3)$$

を得る。ただし $n_{\text{cav}} = |\alpha|^2$ とし、量子ゆらぎの二次の項は無視した。第一項は静的な輻射圧をあらわしており、以降では無視しよう。線形化されたオプトメカニカル相互作用の結合定数は駆動レーザーの振幅を含めて $g = g_0 \sqrt{n_{\text{cav}}}$ と書かれるため、強く駆動するほど結合が大きくなる。また、 a を Δ_c の回転系に、 b を ω_m の回転系に乗せて時間依存性をあらわにすると、駆動周波数に応じて次の二つの場合に分けられることがわかる：

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{\text{int}} &= -\hbar g (\delta a e^{-i\Delta_c t} + \delta a^\dagger e^{i\Delta_c t}) (b e^{-i\omega_m t} + b^\dagger e^{i\omega_m t}) \\ &= \begin{cases} -\hbar g (\delta a b^\dagger + \delta a^\dagger b) & \text{when } \Delta_c = \omega_m \Rightarrow \omega = \omega_c - \omega_m \\ -\hbar g (\delta a^\dagger b^\dagger + \delta a b) & \text{when } \Delta_c = -\omega_m \Rightarrow \omega = \omega_c + \omega_m. \end{cases}\end{aligned}\quad (9.3.4)$$

これらはそれぞれビームスプリッタ型の相互作用とパラメトリックゲイン型の相互作用になっている。これらで起こっていることは非常に直観的でもある。 $\omega_l = \omega_c - \omega_m$ で駆動周波数がレッドサイドバンド遷移を引き起こすときには $\omega_c - \omega_m$ の光子が消滅し、 ω_c の光子が共鳴における増強によって生成され、そしてフォノンが光子にエネルギーを渡して消滅するのである（図 9.8(a) 参照）。この過程の逆過程は駆動周波数が共振器に共鳴しているときに起こる。このようにして駆動周波数が $\omega_l = \omega_c - \omega_m$ のときには Stokes 散乱と anti-Stokes 散乱の非対称性が共振器の存在により生じ、フォノンが消滅する過程が生成される過程よりも優勢になるようにすることができる。これがフォノンのレーザー冷却、あるいはサイドバンド冷却と呼ばれるものの基本的な機序である。さて一方で $\omega_l = \omega_c + \omega_m$ のとき、つまり駆動周波数がブルーサイドバンド遷移を引き起こすようなときにはどうなるかという、 ω_c の光子とフォノンが同時に生成されるか、

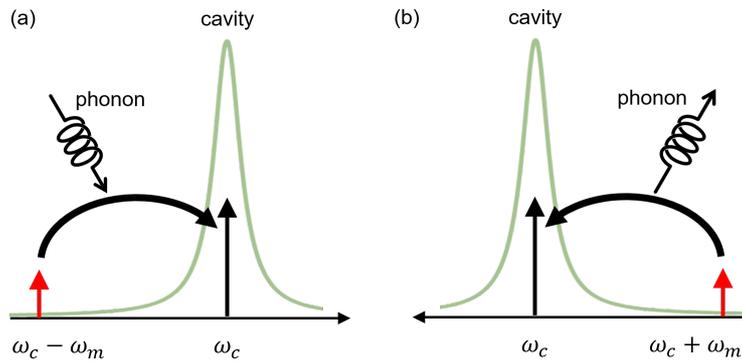


図 9.8: 共振器オプトメカニクス系における (a) ビームスプリッタ型と (b) パラメトリックゲイン型の相互作用

同時に消滅するかという過程が引き起こされる (図 9.8(b))。このような場合、とくに $\omega_l = \omega_c + \omega_m$ ではフォノンモードへとエネルギーが付き込まれていき、フォノン数が大きくなっていく。フォノン数が大きくなるにつれて $b^\dagger b^\dagger b b$ のようなフォノンの非線形項、つまりフォノンどうしの相互作用が無視できなくなり、最終的にはフォノンどうしが互いの位相を揃えて発振するフォノンレーザーが実現される。付録 H にサイドバンド冷却について詳述したので、興味のある方はそちらもご参照頂きたい。

第III部

第10章 量子ゲート

Rabi 振動を利用すると、電磁波のパルス面積（パルス強度とパルス時間の積）によって量子ビットの状態を Bloch 球上で好きな角度で“まわす”ことができる。しかしながら、量子技術の応用に向けて必要な量子操作はこれに留まらない。量子技術では、任意の単一量子ビットの量子状態はもちろん、エンタングルド状態などを含む任意の多量子ビット状態を作る必要がある。幸いにも、いくつかの量子操作（量子ゲートと呼ばれる）があればその組み合わせによって任意の量子状態を生成することが可能であることが知られている。このように任意の量子状態を実現できる量子ゲートの組をユニバーサルな量子ゲートの組（universal gate set）という。例えば、一量子ビットゲートと CNOT ゲートの組はユニバーサルである。しかしながら、ユニバーサルな量子ゲートの組み合わせは一意的ではない。この節では、よく用いられる一量子ビットゲートと二量子ビットゲートを紹介しよう。さらにこの節では、実際の Hamiltonian の時間発展からこれらの量子ゲートをどのように構成するかを見ていく。

本題に進む前に、一つだけ注意点を述べる。我々は基底状態と励起状態を $\{|g\rangle = (0, 1)^t, |e\rangle = (1, 0)^t\}$ と定義した。ところが量子情報処理の文脈では、 $\{|g\rangle = (1, 0)^t, |e\rangle = (0, 1)^t\}$ と逆に書くのである。これに従って密度演算子の書き方も一行目、一列目が基底状態の要素になって、

$$\rho = \begin{pmatrix} |c_g|^2 & c_e^* c_g \\ c_e c_g^* & |c_e|^2 \end{pmatrix}, \quad (10.0.1)$$

となるのである。量子ゲートは通常この表記で書かれるため、本節ではこの慣習に従おう。

この慣習を採用すると Bloch 球の上下が入れ替わるほか、Pauli 演算子の行列表現に関しても行と列の順番が逆になってしまうのだが、実は行列表現は例えば $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ と書かれ、本書でいままで使用してきたものと変わらない。つまり Hamiltonian が $(\hbar\omega_q/2)\sigma_z$ であるならば励起状態の方がエネルギーが低くなってしまい、たいへん気持ち悪い。現実と consistent にするならば Hamiltonian を $-(\hbar\omega_q/2)\sigma_z$ としなければならぬところである。このように、本節以降で採用する記法は現実の物理系との対応がややこしいが、もし誤り耐性量子ゲートを行うところまで量子ビットが抽象的な対象となったらもう Hamiltonian をはじめ現実の物理系を気にする必要がなくなり、純粋に情報理論的な対象となっていると思えばよい。

10.1 一量子ビットゲート

一量子ビットの量子状態は Bloch 球上の点で表されるため、任意の一量子ビットゲート (single-qubit gate) は全体に係る位相因子を除いて Bloch 球上のある点をほかの点に移す回転行列で表すことができる。この回転行列はベクトル $n = (n_x, n_y, n_z)$ を用いて

$$\begin{aligned} R_n(\theta) &= e^{-i\frac{\theta}{2}(n_x\sigma_x + n_y\sigma_y + n_z\sigma_z)} = I \cos \frac{\theta}{2} - i(n_x\sigma_x + n_y\sigma_y + n_z\sigma_z) \sin \frac{\theta}{2} \\ &= \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} + in_z \sin \frac{\theta}{2} & -(n_y + in_x) \sin \frac{\theta}{2} \\ (n_y - in_x) \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} - in_z \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (10.1.1)$$

と表される。ここではベクトル n の周りに Bloch ベクトルが θ だけ回転するようなかたちになっている¹。この一般的な回転のうち、 x 軸まわりや z 軸まわりの回転がよく用いられるため、これらを見てみよう。²

10.1.1 X ゲート

初めにみる一量子ビットゲートは X ゲート

$$R_x(\pi) = -iX = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ -i & 0 \end{pmatrix} = -i|e\rangle\langle g| - i|g\rangle\langle e| \quad (10.1.2)$$

であり、基本的には $|g\rangle$ と $|e\rangle$ を入れ替えるような働きをする。 X ゲート自体は $X = iR_x(\pi)$ を指すが、実際の実験においては、上式のように x 軸まわりの角度 π の回転は $-iX$ となる。そしてパルス時間が $\Delta t = \pi/\Omega$ の Rabi 振動がこのゲート操作と等価である。このパルスを π パルスとも呼ぶ。

10.1.2 Z ゲート

次は Z ゲート

$$R_z(\pi) = -iZ = -i \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = -i(|g\rangle\langle g| - |e\rangle\langle e|). \quad (10.1.3)$$

である。このゲート操作は $|e\rangle$ 状態に π の位相シフトを与え、 $|g\rangle$ には何も位相シフトを及ぼさない。この量子ゲートは z 軸まわりの角度 π の回転となっており、 $Z = iR_z(\pi)$ が Z ゲートと呼ばれる。ではこれほどの方法によって実現されるだろうか？ 思い返せば、Bloch 球上の Bloch ベクトルが静止しているようにかけるのは回転系で見ているからであり、回転系でなければ Bloch ベクトルは量子ビットの周波数 ω_q で z 軸まわりに回転しているのであった。すなわち、 π/ω_q の時間だけただ待てば何もしなくて

¹じつは n は密度演算子を Pauli 演算子で分解した係数をまとめたスピンの s と同一のものである。

² $Y = R_z(\frac{\pi}{2})XR_z(-\frac{\pi}{2})$.

も Z ゲートが実行できる。とはいえ、数十 MHz の量子ビットならともかく光遷移を持つような場合にはこのような高速制御は現状では到底現実的でない。もうひとつあり得る方法は、制御機器側の位相の基準を π ずらすという方法である。これは簡単だが、依然として光に関しては位相の安定的な制御自体が課題である。最後に紹介する方法としては、離調の非常に大きなレーザーにより Rabi 振動を引き起こすことである。Rabi 振動は $(\Omega, 0, \Delta_q)$ というベクトルを軸に Bloch ベクトルを回転させるため、 $\Omega \ll \Delta_q$ の条件で π/Δ_q の時間だけ時間発展させると π の位相がつく。ただし、 Ω/Δ_q 程度の割合で X ゲートあるいは Y ゲートが混ざりこんでしまい、ゲートにエラーが生じることは避けられない。

10.1.3 Hadamard ゲート H 、位相ゲート S 、 $\pi/8$ ゲート T

これまでに出てきたゲートを応用したものとして、あと 3 つ一量子ビットゲートを紹介しよう。一つ目は Hadamard ゲート

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \frac{X+Z}{\sqrt{2}}. \quad (10.1.4)$$

であり、 $|g\rangle \rightarrow (|g\rangle + |e\rangle)/\sqrt{2}$ 、 $|e\rangle \rightarrow (|g\rangle - |e\rangle)/\sqrt{2}$ という変換を引き起こす。これらはどちらも $n_h = (1/\sqrt{2}, 0, 1/\sqrt{2})$ まわりの π 回転である。Hadamard ゲートは明らかに $H^\dagger = H$ であり、かつ X と Z を相互に変換する作用がある： $HXH = Z$ 、 $HZH = X$ 。

残り二つは Z ゲートとよく似ており、

$$S = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} = e^{i\frac{\pi}{4}} R_z \left(\frac{\pi}{2} \right) \quad (10.1.5)$$

$$T = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\pi}{4}} \end{pmatrix} = e^{i\frac{\pi}{8}} R_z \left(\frac{\pi}{4} \right) \quad (10.1.6)$$

である。実際、 $S^2 = Z$ 、 $T^2 = S$ が成立する。 S ゲートを用いると $Y = SXS$ となる。

10.2 二量子ビットゲート

二量子ビットゲート (two-qubit gate) は二量子ビット系に作用する量子ゲートである。簡単な例としては、 X_i を $i = 1, 2$ 番目に作用する X ゲートとしたときに $X_1 \otimes X_2$ のようなものである。この例は一量子ビットゲートが単にそれぞれに作用するだけであるが、制御量子ゲートのように、片方の量子ビットの状態に応じてもう片方にかかる量子操作が変わるようなものもある。本節ではこれらについてみていこう。

10.2.1 制御 NOT (Controlled-NOT, CNOT) ゲート

制御 NOT ゲート (Controlled-NOT, CNOT, CX ゲートなどと呼ばれる) は制御量子ビット (2 番目の量子ビットとしよう) が $|e\rangle$ のときに標的量子ビット (1 番目の量子ビット) に X ゲートが作用し、制御量子ビットが $|g\rangle$ のときに標的量子ビットには何もしないようなゲート操作である。行列の形で書くと、 $2^2 \times 2^2$ の行列で

$$\text{CNOT} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = |g\rangle\langle g| \otimes I + |e\rangle\langle e| \otimes X, \quad (10.2.1)$$

と書かれ、 $|gg\rangle \rightarrow |gg\rangle$ 、 $|ge\rangle \rightarrow |ge\rangle$ 、 $|eg\rangle \rightarrow |ee\rangle$ 、 $|ee\rangle \rightarrow |eg\rangle$ という変換を引き起こすものである。

10.2.2 制御 Z (CZ) ゲート

制御 Z (CZ) ゲートは制御量子ビットが $|e\rangle$ のときに標的量子ビットに Z ゲートが作用し、制御量子ビットが $|g\rangle$ のときに標的量子ビットには何もしないようなゲート操作であり、行列の形は次のようになる：

$$\text{CZ} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = |g\rangle\langle g| \otimes I + |e\rangle\langle e| \otimes Z. \quad (10.2.2)$$

10.2.3 i SWAP ゲートと SWAP ゲート

i SWAP ゲートと SWAP ゲートは次のようなものである：

$$i\text{SWAP} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (10.2.3)$$

$$\text{SWAP} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (10.2.4)$$

上式から直ちに見て取れるように、SWAP ゲートは二つの量子ビットの状態を入れ替える作用があり、 i SWAP ゲートはこれに加えて i の因子が付加されるというようなものである。

10.2.4 XX ゲートと ZZ ゲート

XX ゲートと ZZ ゲートは

$$XX(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & 0 & 0 & -i \sin \frac{\theta}{2} \\ 0 & \cos \frac{\theta}{2} & -i \sin \frac{\theta}{2} & 0 \\ 0 & -i \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} & 0 \\ -i \sin \frac{\theta}{2} & 0 & 0 & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} = I \otimes I \cos \frac{\theta}{2} - iX \otimes X \sin \frac{\theta}{2}, \quad (10.2.5)$$

$$ZZ(\theta) = \begin{pmatrix} e^{i\frac{\theta}{2}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\theta}{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-i\frac{\theta}{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{i\frac{\theta}{2}} \end{pmatrix} = I \otimes I \cos \frac{\theta}{2} - iZ \otimes Z \sin \frac{\theta}{2}. \quad (10.2.6)$$

と定義される。これらは物性物理における Ising 相互作用との関連から Ising 結合ゲートと呼ばれることもある。

10.2.5 Hamiltonian から二量子ビットゲートの導出

量子ビット系を実現する物理系は様々であり、量子ビット間の相互作用もさまざまである。では、相互作用 Hamiltonian \mathcal{H}_{int} が与えられたときにどのようなゲート操作が可能になるだろうか？これを明らかにするために、量子系の時間発展はマスター方程式、あるいは緩和を無視すると Schrödinger 方程式によって記述されることを思い出そう。相互作用表示での Schrödinger 方程式 (Tomonaga-Schwinger 方程式ともいう) $i\hbar(\partial/\partial t)|\psi\rangle = \mathcal{H}_{\text{int}}|\psi\rangle$ を形式的に解くと $|\psi(t)\rangle = \exp[-i(\mathcal{H}_{\text{int}}/\hbar)t]|\psi(0)\rangle$ となる。したがって我々のすべきことは極めてシンプルで、相互作用 Hamiltonian \mathcal{H}_{int} を指数関数の方に乗せ、量子系に対する演算子 $\exp[-i(\mathcal{H}_{\text{int}}/\hbar)t]$ の作用を明らかにすればよい。

初めに、調和振動子の場合におけるビームスプリッタ相互作用のような量子ビット間相互作用

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = \hbar g(\sigma_+\sigma_- + \sigma_-\sigma_+) = \frac{\hbar g}{2}(\sigma_x\sigma_x + \sigma_y\sigma_y). \quad (10.2.7)$$

を考える。ここで $\sigma_+\sigma_-$ や $\sigma_x\sigma_x$ のような項は本来一番目の演算子が一番目の量子ビットに作用する、というような意味合いを明らかにするために $\sigma_+ \otimes \sigma_-$ や $\sigma_x \otimes \sigma_x$ と書くべきものであるが、混乱が生じない限りにおいては \otimes を省く。そしてこの最初の例に関しては量子ゲートの形にたどり着くまでの計算を追うことにしよう。まず $(\sigma_x\sigma_x + \sigma_y\sigma_y)/2$

をあらわに書き下そう：

$$\begin{aligned} \frac{\sigma_x\sigma_x + \sigma_y\sigma_y}{2} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} O & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & O \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} O & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & O \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} O & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & O \end{pmatrix} \equiv A \end{aligned} \quad (10.2.8)$$

$A^2 = \text{diag}(0, 1, 1, 0)$ 、 $A^3 = A$ はただちに確かめられるので、 $\exp[-i(\mathcal{H}_{\text{int}}/\hbar)t] = \exp[-igtA]$ は

$$\begin{aligned} e^{-igtA} &= 1 - igtA - \frac{(gt)^2}{2!}A^2 + i\frac{(gt)^3}{3!}A^3 + \frac{(gt)^4}{4!}A^4 + \dots \\ &= 1 - igtA - \frac{(gt)^2}{2!}A^2 + i\frac{(gt)^3}{3!}A + \frac{(gt)^4}{4!}A^2 + \dots \\ &= \text{diag}(1, 0, 0, 1) + \left(1 - \frac{(gt)^2}{2!} + \frac{(gt)^4}{4!} - \dots\right) \text{diag}(0, 1, 1, 0) \\ &\quad - i \left((gt) - \frac{(gt)^3}{3!} + \frac{(gt)^5}{5!} - \dots\right) A \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos gt & -i \sin gt & 0 \\ 0 & -i \sin gt & \cos gt & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (10.2.9)$$

と計算できる。この時間発展は $|gg\rangle$ と $|ee\rangle$ に何も影響を及ぼさないが $|ge\rangle$ と $|eg\rangle$ の間に Rabi 振動のような占有確率の振動を引き起こす。とくに $t = 3\pi/2g$ のとき、 i SWAP になる：

$$e^{-i\frac{3\pi}{2}A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (10.2.10)$$

次に、パラメトリックゲイン相互作用のような、次の相互作用を考えよう。

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = \hbar g(\sigma_+\sigma_+ + \sigma_-\sigma_-) = \frac{\hbar g}{2}(\sigma_x\sigma_x - \sigma_y\sigma_y). \quad (10.2.11)$$

これもほぼ同じ計算によって

$$e^{-ig\frac{(\sigma_x\sigma_x - \sigma_y\sigma_y)}{2}t} = \begin{pmatrix} \cos gt & 0 & 0 & -i \sin gt \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -i \sin gt & 0 & 0 & \cos gt \end{pmatrix} \quad (10.2.12)$$

となる。今度は $\{|gg\rangle, |ee\rangle\}$ で張られる部分系での “Rabi 振動” になる。 $t = 3\pi/2g$ のときは特別に bSWAP ゲートと呼ぶ。

今度は上記の二つの相互作用を同じ結合強度で同時に働かせてみよう。Hamiltonian は

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = \hbar g(\sigma_+\sigma_- + \sigma_-\sigma_+) + \hbar g(\sigma_+\sigma_+ + \sigma_-\sigma_-) = \hbar g\sigma_x\sigma_x. \quad (10.2.13)$$

であり、見るからに XX ゲートを与えそうに思われるが、あえて一般的な式 $\exp[-i\sigma_\xi\sigma_\xi\alpha] = \cos\alpha I \otimes I - i\sin\alpha\sigma_\xi \otimes \sigma_\xi$ (証明は容易である) から計算すると

$$e^{-ig\sigma_x\sigma_x t} = \begin{pmatrix} \cos gt & 0 & 0 & -i\sin gt \\ 0 & \cos gt & -i\sin gt & 0 \\ 0 & -i\sin gt & \cos gt & 0 \\ -i\sin gt & 0 & 0 & \cos gt \end{pmatrix} \quad (10.2.14)$$

となり、実際に XX ゲートとなることがわかる。同様に ZZ ゲートは $\sigma_z\sigma_z$ という相互作用項から生じる。

最後に Heisenberg 相互作用

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = \hbar g \frac{\sigma_x\sigma_x + \sigma_y\sigma_y + \sigma_z\sigma_z}{2}. \quad (10.2.15)$$

を考えよう。これは上記のケースよりも少し複雑な計算が必要になるが、詳細は付録 (G 節) に譲り結果を述べると

$$e^{-ig \frac{\sigma_x\sigma_x + \sigma_y\sigma_y + \sigma_z\sigma_z}{2} t} = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{g}{2}t} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{e^{-i\frac{g}{2}t} + e^{3i\frac{g}{2}t}}{2} & \frac{e^{-i\frac{g}{2}t} - e^{3i\frac{g}{2}t}}{2} & 0 \\ 0 & \frac{e^{-i\frac{g}{2}t} - e^{3i\frac{g}{2}t}}{2} & \frac{e^{-i\frac{g}{2}t} + e^{3i\frac{g}{2}t}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i\frac{g}{2}t} \end{pmatrix} \quad (10.2.16)$$

となり、 $t = \pi/2g$ で全体の位相因子を除き SWAP ゲートを与える：

$$e^{-ig \frac{\sigma_x\sigma_x + \sigma_y\sigma_y + \sigma_z\sigma_z}{2} t} = e^{-i\frac{\pi}{4}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (10.2.17)$$

ここまでみて、CNOT ゲートや CZ ゲートのような制御量子ゲートが、物理学で頻繁に目にする “自然な” 相互作用からは直接導かれないことに気づく。制御量子ゲートは通常、SWAP ゲートなどの二量子ビットゲートと一量子ビットゲートを組み合わせで実現される。

10.3 Clifford ゲートと non-Clifford ゲート

本節では量子ゲートのもう少し一般的な側面について言及しておこう。手始めに n 量子ビットの Pauli 群を導入する。群とは単位元と逆元を含み、ある演算に関して閉じて

いるようなものの集合であり、詳細は成書に譲る。 n 量子ビット Pauli 群 \mathcal{P}_n は

$$\mathcal{P}_n = \{ e^{i\frac{\pi}{2}\Theta} \Xi_1 \otimes \cdots \otimes \Xi_n \mid \Theta = 0, 1, 2, 3; \Xi_i = I_i, X_i, Y_i, Z_i \} \quad (10.3.1)$$

で定義され、添え字の i は i 番目の量子ビットに作用することを意味する。 \mathcal{P}_n の元は全体にかかる因子 $1, -1, i, -i$ を除けば一量子ビットゲートのテンソル積で書ける。Pauli 群の元を Pauli 群の元に移すようなユニタリ変換の集合を考えるとこれは群をなし、Clifford 群 \mathcal{C}_n として知られているものとなる。 n 量子ビットに対するユニタリ変換の集合を U_n と書くと、きちんと定義を書けば

$$\mathcal{C}_n = \{ V \in U_n \mid V\mathcal{P}_nV^\dagger = \mathcal{P}_n \}. \quad (10.3.2)$$

である。Clifford 群の元を Clifford ゲートというが、例えば $HXH = Z$ 、 $HZH = X$ 、 $SXS = Y$ などから Hadamard ゲート H と S ゲートは一量子ビットの Clifford ゲートであることがわかる。一量子ビットの Clifford 群の位数、すなわち元の数はいくつになるだろうか。一量子ビットの Pauli 群の元はある軸周りの回転に対応するため、Clifford ゲートは x, y, z 軸を（右手系を保ったまま）入れ替える操作に対応する。すなわち正負の向きも含めて x 軸を決めるのに 6 通り、それに直交するように y 軸を決めるのに 4 通りあり、これらが決まれば自然と z 軸が決まるため、 $6 \times 4 = 24$ 通りとなる。二量子ビットゲートに関してはどうだろうか？例えば $\text{CNOT}(X \otimes I)\text{CNOT} = X \otimes X$ や $\text{CNOT}(I \otimes Z)\text{CNOT} = Z \otimes Z$ などから CNOT ゲートが二量子ビット Clifford ゲートとなる [9] ことはわかる。では \mathcal{C}_2 の位数はいくつあるかということ、11 520 個である。一般には \mathcal{C}_n の位数は $2^{n^2+2n} \prod_{j=1}^n (4^j - 1)$ であることが知られている。

残念なことに、かの Gottesman-Knill の定理によれば Pauli 演算子の固有状態が初期状態で、これに Clifford ゲートのみを作用させて実行される量子計算は“確率的古典コンピュータ”によって効率的に（多項式時間で）シミュレート可能であることが知られている。さらに、Clifford ゲートのみでは任意の量子状態を生成することができないことも知られている。したがって、ユニバーサルな量子操作を達成し古典コンピュータでは効率的に実行できない計算タスクを遂行するためには、non-Clifford ゲート、即ち Clifford 群にない量子ゲートが不可欠である³。そして喜ばしいことに、 T ゲートは non-Clifford ゲートである。これが任意の量子状態を生成できることは、Hadamard ゲートとの組み合わせで $THTH$ という演算の回転角が $\theta_{THTH} = 2 \arccos[\cos^2(\pi/8)]$ と π の無理数倍になることからわかる。そして Solovay-Kitaev の定理のいうところによれば、十分な精度で任意の量子状態を近似するには、多項式時間あればよい。これらのトピックについての詳細は Ref. [[9]] を参照されたい。

³魔法状態 (magic state) $|\psi_m\rangle = \cos \frac{\theta}{8} |g\rangle + \sin \frac{\theta}{8} |e\rangle$ を用いれば Clifford ゲートのみでも任意の量子状態を生成可能である。non-Clifford ゲートの難しさを魔法状態の準備に押し付けているだけとも言える。

第 11 章 量子状態の測定とエラーの評価

11.1 射影測定と一般化測定

一般に、量子状態に対する測定は、測定される量子状態を大きく変えてしまう。これが量子測定 (quantum measurement) についてここで一節を割く理由であるが、きちんとした量子測定の定式化によって、測定後の量子状態が記述でき、量子エラー訂正などで役に立つという理由もある [9]。

$|\psi\rangle = \sum_i c_i |\varphi_i\rangle$ という量子状態を測定するとしよう。実際の実験においては測りたい対象である量子系 T と測定のための量子系 P を用意し、それらの間の何らかの相互作用で量子系 T の状態と量子系 P の測定で得られる物理量の対応が付くようにすることが多い。射影測定 (projective measurement) とは、状態 $|\varphi_i\rangle$ の占有確率 $p_i = |c_i|^2$ を抽出し、測定後の状態が $|\varphi_i\rangle$ に“射影”されるようなものである。射影演算子 $P_i = |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$ を用いると、射影測定によって (ひとまず規格化を無視して) $|\psi\rangle \rightarrow P_i|\psi\rangle = c_i|\varphi_i\rangle$ と状態が変化する。これを密度演算子で記述し、かつ規格化条件も考慮すると

$$|\psi\rangle \rightarrow \frac{P_i|\psi\rangle}{\sqrt{p_i}} \quad (11.1.1)$$

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| \rightarrow \frac{P_i|\psi\rangle\langle\psi|P_i}{p_i}. \quad (11.1.2)$$

という状態の変化が射影測定によって生じる。上記は純粋状態に対する表式であるから、混合状態ふくむ一般の量子状態 ρ について、かつ射影測定のみならず一般的な測定についても有用な測定の定式化を紹介しよう。このために、Kraus 演算子を導入しよう。Kraus 演算子は、量子測定においては測定による状態変化を表すものと考えてよい。すなわち射影測定の場合には射影演算子 $M_g = |g\rangle\langle g|$ と $M_e = |e\rangle\langle e|$ が Kraus 演算子となるし、蛍光測定 (photoluminescence measurement) のように基底状態が測定されると基底状態のままだが励起状態が測定される場合に量子状態が基底状態へと変わるようなものでは $M_g = |g\rangle\langle g|$ と $M_e = |g\rangle\langle e|$ が Kraus 演算子となる。量子ビットの場合には測定に係る量子状態が二つであるから Kraus 演算子は二つで、これらを M_i ($i = g, e$) と書く。添え字は測定の結果そうであったと判明した状態を表し、 i の状態が測定された時には密度演算子は $M_i\rho M_i^\dagger$ のように変化を受ける。これを状態 i に見出す確率 p_i を用いて規格化すると、測定後の状態は、測定に誤差がない場合に一般に

$$\rho \rightarrow \frac{M_i\rho M_i^\dagger}{p_i} \quad (11.1.3)$$

と書ける。もう一つ重要な概念として positive operator-valued measure (POVM) について述べておく¹。これは Kraus 演算子に対し $E_i = M_i^\dagger M_i$ で定義される量で、各状態に見出される確率の合計が 1 であるという条件と等価な $\sum_i E_i = I$ が成立する。これを用いると状態 i に見出す確率 p_i は $p_i = \text{Tr} [M_i \rho M_i^\dagger] = \text{Tr} [M_i^\dagger M_i \rho] = \text{Tr} [E_i \rho]$ と書ける。POVM は蛍光測定のような場合にも射影演算子と一致するが、このような測定を射影測定と区別して誤差のない測定と呼ぶ。これよりも一般的な誤差のある測定について、詳細は成書を参照していただくとして、射影測定を例に触れておこう。射影測定で生じるエラーとして、(i) 検出器のノイズなどにより本来信号を検出しない量子状態の測定であるのに信号を検出してしまった、ならびに (ii) 検出器の量子効率が 1 でないために本来信号を検出すべき量子状態の測定で信号を検出できなかった、という二つの場合を考え、どちらも確率が ϵ で起こるとする。このときの Kraus 演算子は $M_g = \sqrt{1-\epsilon}|g\rangle\langle g| + \sqrt{\epsilon}|e\rangle\langle e|$ と $M_e = \sqrt{\epsilon}|g\rangle\langle g| + \sqrt{1-\epsilon}|e\rangle\langle e|$ となる。このような誤差のある測定の場合には、Kraus 演算子も POVM も射影演算子と一致しない。

もうひとつ重要な概念として量子非破壊測定 (quantum non-demolition measurement, QND measurement) について述べておく。量子非破壊測定は、射影測定、すなわち測定の結果判明した量子状態に射影される測定の中でもさらに次の条件が付く。それは、同じ量子状態に対する測定を複数回行ったときに、測定後の量子状態のアンサンブル平均の状態が測定前の量子状態と同じ占有確率を与えるという条件である。測りたい対象である量子系 T と測定のための量子系 P があるという設定を思い出そう。量子非破壊測定は、量子系 T と量子系 P の間の相互作用と、量子系 T の測定される物理量が可換であるような測定と言い換えることもできる。量子ビット系に関しては σ_z を測定することになるが、この文脈における量子非破壊測定は ZZ 相互作用や ZX 相互作用のように、興味のある量子ビットに対して σ_z の作用をする相互作用を用いたものであるとよい。さらに砕けた言い方をすると、量子非破壊測定とは、測定したい量子ビットに対する測定の“反作用”を量子ビットの位相変化に押し付けられるような測定である。

11.2 量子状態の評価 – 量子状態トモグラフィ

量子ビットのある状態から出発して量子ゲートによりなんらかの目的の状態を生成したいとする。このとき、初期状態・量子ゲート・測定のエラーといったさまざまな要因により最終的な量子状態は目的の量子状態とは異なるものになってしまい得る。したがって、手持ちの量子状態がどんなものであるかを評価しなければならない。ここでは未知の量子状態がどのような状態であるかを明らかにするための量子状態トモグラフィという手法について説明する。

一量子ビット系の密度演算子は $\rho = (1/2)(I + s_x \sigma_x + s_y \sigma_y + s_z \sigma_z)$ と表されることはすでに述べた。この量子状態を知るためには、スピン成分である係数 s_x 、 s_y 、 s_z を決定すればよいだろう。Pauli 演算子 σ_ξ とその積 $\sigma_\xi \sigma_\zeta$ ($\xi \neq \zeta$) はトレースがゼロであることに注意すると、スピン成分は $s_\xi = \text{Tr} [\rho \sigma_\xi]$ によって求まることがわかる。では、この

¹ややこしいが、POVM の measure は測度の意味

量を実際にはどうやって測定すればよいだろうか。量子実験においては、ほとんどの場合量子状態に関して得られる信号は量子状態の占有確率、すなわち s_z に関するものである。逆に言えば s_x や s_y 分の情報を通常の測定から得ることはできない。そのため、Bloch ベクトルを回転させて Bloch ベクトルの x 成分や y 成分を z 軸にそろえ、 s_x や s_y を s_z の測定に焼きなおす必要がある。例えば s_x の測定では、 $R_y(\pi/2)$ という量子ゲートにより $|+\rangle = (|g\rangle + |e\rangle)/\sqrt{2} \rightarrow |g\rangle$ 、 $|-\rangle = (|g\rangle - |e\rangle)/\sqrt{2} \rightarrow |e\rangle$ という変換（回転）が起こる。つまり Bloch ベクトルの x 成分である s_x が量子ゲートの後には z 成分に変わっており、 z 成分の測定により s_x がわかるようになるのである。同様に $R_x(\pi/2)$ という量子ゲートによって $|+i\rangle = (|g\rangle + i|e\rangle)/\sqrt{2} \rightarrow |g\rangle$ 、 $|-i\rangle = (|g\rangle - i|e\rangle)/\sqrt{2} \rightarrow |e\rangle$ という変換がされ、 s_x の測定が可能になる。このようにして $s = (s_x, s_y, s_z)$ が多数回の測定によりわかれば、測定者は密度演算子 ρ の係数を明らかにすることができ、量子状態のすべての情報を得ることができる。この一連の測定を量子状態トモグラフィ (quantum state tomography) という。

11.3 フィデリティ

量子状態の同定が済めば、次にそれが所望の量子状態にどの程度近いかを表す指標を用いて評価する必要がある。この指標としてよく用いられるのがフィデリティ (fidelity) である。フィデリティは量子状態の間の距離の数学的な定義は満たさないが、量子状態が直交しているときに 0、同じ時に 1 となり、かつ直感的な指標として広く用いられている。

一般の密度演算子で表された量子状態 ρ と σ に対してフィデリティ F の定義を

$$F = \text{Tr}[\rho\sigma] \quad (11.3.1)$$

とする。これは二つの量子状態が同じ場合には $F = \text{Tr}[\rho^2] = 1$ である。二つの量子状態が直交する場合には、直交できる二つの量子状態はどちらも純粋状態でなければならず、 $F = 0$ となる²。

ρ が未知の状態、 σ は既知の純粋状態で $\sigma = |\psi\rangle\langle\psi|$ であるとする、フィデリティは

$$F = \text{Tr}[\rho|\psi\rangle\langle\psi|] = \text{Tr}[\langle\psi|\rho|\psi\rangle] = \langle\psi|\rho|\psi\rangle \quad (11.3.2)$$

となる。実際に生成した未知の量子状態が既知の量子状態とどれだけ近い、という評価にはこの形がもっともよく用いられる。さらに単純化して ρ も純粋状態で $\rho = |\phi\rangle\langle\phi|$ だとすると、 $F = |\langle\psi|\phi\rangle|^2$ 、つまり単に二つの量子状態の内積の二乗となる。

余談として、完全混合状態どうしのフィデリティについて述べておこう。一量子ビットの完全混合状態の密度演算子は $I/2$ であるから、フィデリティはトレースに注意して $F = 1/2$ となる。完全混合状態は量子ビットが一切のコヒーレンスを失った状態であるから最も量子制御と縁遠いものであるが、それでも（一量子ビットにおいては）0.5 というフィデリティの値が出てしまう。むしろフィデリティがゼロのときには必ず量子状

²この逆、つまり $F = 0$ となるのは二つの量子状態が直交するときのみであることも示すことができる。

態が直交するということなので、その意味では信頼性が高い状態準備ができているともいえる。多量子ビット系になると完全混合状態の密度演算子は $I^{\otimes n}/2^n$ となり、二つの完全混合状態の間のフィデリティは $2^n(1/2^n)(1/2^n) = 1/2^n$ となるので、結局フィデリティは高い方が良いという指標になる。

最後に、フィデリティのもう一つの定義を紹介する。上記では密度演算子の積のトレースによりフィデリティを定義したが、密度演算子の積の平方根のトレースで定義することもある：

$$f = \text{Tr} \left[\sqrt{\sqrt{\rho}\sigma\sqrt{\rho}} \right]. \quad (11.3.3)$$

これについて ρ が未知の状態、 σ は既知の純粋状態 $\sigma = |\psi\rangle\langle\psi|$ であるとする、フィデリティはトレースの巡回性から $f = \text{Tr} \left[\sqrt{\sqrt{\rho}|\psi\rangle\langle\psi|\sqrt{\rho}} \right] = \sqrt{\langle\psi|\rho|\psi\rangle} \text{Tr} [|\psi\rangle\langle\psi|] = \sqrt{\langle\psi|\rho|\psi\rangle}$ となる。さらに ρ も純粋状態 $\rho = |\phi\rangle\langle\phi|$ と書ければ、 $f = |\langle\psi|\phi\rangle|$ となる。

11.4 量子ゲートエラーの評価

一量子ビットなどの量子ゲートはパルス面積を決めて電磁波を量子ビットに照射することで実現される。しかしながら、実験的あるいは原理的な様々な理由によって実行したい量子ゲートの理想的な操作からはずれてしまうものだ。いくつかその原因の例を挙げると、パルス時間の制御機器の時間領域における精度が十分でないとか、照射する電磁波に強度の変調がかかってしまっているだとか、照射電磁波の位相がドリフトしてしまい x ゲートを実行したつもりが Y ゲートも少し混ざってしまうとか、そういったものである。であるから、前節の量子状態トモグラフィと併せて、量子ゲートの精度を測定するための手法と、その評価のためにある量子状態が別の量子状態とどれだけ近いかを表す指標が必要である。本節ではノイズに関する短い導入の後、これらについてみていこう。

11.5 ノイズ演算子

純粋状態の場合、量子系の発展は量子状態 $|\psi\rangle$ に何かしらの演算子が作用するというふうに記述される。もし混合状態も含めた一般的な量子仮定の記述をしたければ、密度演算子に関する作用を考えなければならない。これは Kraus 演算子 A_i を用いて次のように書かれる：

$$\mathcal{E}(\rho) = \sum_i A_i \rho A_i^\dagger \quad (11.5.1)$$

当然、Kraus 演算子から構成される POVM は確率の総和が 1 になるという条件を満たさねばならない。例えば、 $\mathcal{E}(\rho) = X\rho X$ は量子ビットが確率 1 でフリップする ($|g\rangle$ と $|e\rangle$ が入れ替わる) 過程を表す。純粋状態については $X\rho X = X|\psi\rangle\langle\psi|X^\dagger$ と単に $X|\psi\rangle$ の密度演算子となることから納得はできるであろう。この完璧な操作に対し、実際に

行われる操作は環境のノイズが混ざった不完全なものである。このノイズにより確率的に引き起こされる過程を Λ と書くと、これは英語では superoperator と呼ばれる密度演算子（密度演算子）に対する演算子となる。もしノイズが p の確率で量子ビットをフリップさせるようなものなら、このビットフリップエラー（bit-flip error）の演算子 Λ_x は

$$\Lambda_x \rho = (1-p)\rho + pX\rho X \quad (11.5.2)$$

と書かれる。もうひとつ例を挙げると、もしノイズにより確率 p で位相がフリップする（ π 回転する）ならば、この位相フリップエラー（phase-flip error）に対応するノイズ演算子 Λ_z は

$$\Lambda_z \rho = (1-p)\rho + pZ\rho Z. \quad (11.5.3)$$

これらは x 軸と z 軸まわりの量子ビットのフリップが確率的に起こる過程を表している。 y 軸まわりのものはビット-位相フリップエラー（bit-phase-flip error）と呼ばれ、

$$\Lambda_y \rho = (1-p)\rho + pY\rho Y \quad (11.5.4)$$

である。もうひとつ、上記のすべてが等確率で起こるものとして脱分極（depolarizing）エラー

$$\Lambda_d \rho = (1-p)\rho + \frac{p}{3}(X\rho X + Y\rho Y + Z\rho Z) \quad (11.5.5)$$

がある。しかしながらこの過程は実際には非現実的で、その対称性による理論的な取り扱いやすさから導入されたものと思われる。

さてノイズ演算子（noise superoperator）について例を挙げつつ説明したが、実は現実にかかるエラーとして最も重要なのは、次の自然放出に起因するエラーである。これは amplitude damping ともいわれ、

$$\Lambda_{\text{amp}} \rho = A_0 \rho A_0^\dagger + A_1 \rho A_1^\dagger \quad (11.5.6)$$

と書かれる。Kraus 演算子は

$$A_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{1-p} \end{pmatrix}, \quad A_1 = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{p} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (11.5.7)$$

と書かれる。ひとつめの Kraus 演算子 A_0 は $|e\rangle$ の占有確率が減少する過程を表しており、ふたつめの Kraus 演算子 A_1 はその過程が $|e\rangle$ から $|g\rangle$ への遷移に起因することを示している。そして励起状態の占有確率の減少と $|e\rangle$ から $|g\rangle$ への遷移の二つは同時に確率 p で起こる。自然放出は真空場による誘導放出と解釈できるため、ノイズ源はなんと真空場であり、不可避である。

11.6 量子プロセストモグラフィ

量子プロセストモグラフィ (quantum process tomography) は、量子状態トモグラフィのように量子過程を完全に同定するための手法である。量子プロセストモグラフィをする目的としては、実験的に実装された量子ゲートが理想的な量子ゲートにどれだけ近いかを量的に評価することである。

ある量子状態 ρ に、どれだけ理想的なゲートからずれているかわからない“未知の”量子ゲートを作用させるとしよう。種々のノイズの結果として、この量子ゲートによる作用は $\mathcal{E}(\rho) = \sum_i A_i \rho A_i^\dagger$ と書けるであろう。 n 量子ビット系の量子状態は $d = 2^n$ 次元の Hilbert 空間となるが、これに対する Kraus 演算子は常に n 量子ビット系に d 個ある直交する演算子を用いて $A_i = \sum_m a_{im} E_m$, $m = 1, 2, \dots, d$ と表現することができる。これを $\mathcal{E}(\rho)$ に代入すると、

$$\mathcal{E}(\rho) = \sum_{m,n} \chi_{mn} E_m \rho E_n^\dagger \quad (11.6.1)$$

と書き直すことができる。ここで χ 行列 $\chi_{mn} = \sum_i a_{im} a_{in}^*$ を導入した。これは Pauli 行列と恒等演算子という非常に扱いやすい演算子のセットで未知の量子状態を特徴づけるものとなる。

実験においては、量子ビット系を d^2 個ある線形独立な状態の中からひとつの状態 ρ_j に用意し、量子ゲートを作用させる。そして量子ビットの状態を量子状態トモグラフィにより同定する。この一連の工程によって最終的な状態は $\mathcal{E}(\rho_j) = \sum_k c_{jk} \rho_k$ と書ける。 $\{\rho_j\}$ が線形独立であることから $E_m \rho_j E_n^\dagger = \sum_k \beta_{mnjk} \rho_k$ という展開も可能であるから、

$$\sum_k c_{jk} \rho_k = \sum_{m,n} \sum_k \chi_{mn} \beta_{mnjk} \rho_k \Leftrightarrow c_{jk} = \sum_{m,n} \chi_{mn} \beta_{mnjk}. \quad (11.6.2)$$

したがって β_{mnjk} の逆行列を用いると次を得る：

$$\chi_{mn} = \sum_{j,k} \beta_{mnjk}^{-1} c_{jk}. \quad (11.6.3)$$

右辺では c_{jk} が量子状態トモグラフィによって実験的に明らかにできるパラメータであり、 β_{mnjk} は ρ_k が理想的な場合の $E_m \rho_k E_n^\dagger = \sum_k \beta_{mnjk} \rho_k$ から計算により求めることができる。したがって、 χ 行列は d^2 個の ρ_k に対して上記のような工程を行い、評価することができるのである。演算子の組 $\{E_i\}$ は一量子ビット系では $\{I, X, Y, Z\}$ 、二量子ビット系では $\{II, IX, \dots, YZ, ZZ\}$ であり、 χ 行列は一量子ビット系では 4×4 、二量子ビット系では 16×16 の行列となる。

ここでひとつ、量子プロセストモグラフィについて注意しておきたいことがある。量子技術においては量子系の初期状態の準備、量子ゲートによる操作、そして測定が行われ、測定結果はさらにそのあと作用する量子ゲートへとフィードバックされたりする。こういった工程のなかで、量子プロセストモグラフィが検出するのは一連の工程で生じたすべてのエラーを含んだものである。すなわち、量子状態準備と量子測定のエラー

(state preparation and measurement で SPaM エラーと略される) は分離できないのである。また、量子プロセストモグラフィは量子ビットの数が増えると指数関数的に実験時間が増え、かつ扱う行列のサイズも指数関数的に大きくなるため、大規模化した量子系での量子プロセストモグラフィは現実的ではない。

11.6.1 ゲートフィデリティ

量子プロセストモグラフィを現実に行うかどうかはともかく、量子ゲートが特徴づけられてしまえば、量子状態のフィデリティのように理想的な量子ゲート U と現実に行われた操作がどれだけ近いかを表す指標が必要であろう。ここでゲートフィデリティ (gate fidelity) を、理想的な場合に生成されるべき量子状態 $U\rho U^\dagger$ と現実の操作で生成された状態 $\mathcal{E}(\rho)$ のフィデリティ

$$F'_g = \text{Tr} \left[U\rho U^\dagger \mathcal{E}(\rho) \right]$$

として定義したいところである。これは、次のように書きなおすことができる：

$$\begin{aligned} F'_g &= \text{Tr} \left[U\rho U^\dagger \mathcal{E}(\rho) \right] = \text{Tr} \left[U\rho U^\dagger \sum_m \chi_m E_m \rho E_m^\dagger \right] \\ &= \text{Tr} \left[U\rho \sum_m \chi_{mm} U^\dagger E_m \rho E_m^\dagger U U^\dagger \right] \\ &= \text{Tr} \left[\rho \sum_m \chi_{mm} U^\dagger E_m \rho E_m^\dagger U U^\dagger U \right] \\ &= \text{Tr} \left[\rho \sum_m \chi_{mm} U^\dagger E_m \rho E_m^\dagger U \right] \\ &= \text{Tr} [\rho \Lambda] \end{aligned} \tag{11.6.4}$$

ここで、ノイズ演算子 λ を $\Lambda = \sum_m \chi_{mm} L_m \rho L_m^\dagger$ with $L_m = U^\dagger E_m$ で定義している。もしも実行された量子ゲートが完璧であり $\mathcal{E}(\rho) = U\rho U^\dagger$ となるのであれば、当然ゲートフィデリティは同じ量子状態の間のフィデリティと等価になって、 $F_g = \text{Tr} [\rho^2] = 1$ となる。実際には種々のエラーが量子操作に紛れ込み、初期状態として用意した純粋状態が混合状態へと劣化してしまう。このときには、 $F'_g < 1$ に低下する。

ところが、ゲートフィデリティは密度演算子 ρ によって値が変わってしまうことに注意しよう。例として、ビットフリップゲート X が所望の量子ゲートであるとし、確率 p で Z になってしまう、すなわち位相フリップエラーが起こるとしよう。このとき、 $\rho = |g\rangle\langle g|$ あるいは $\rho = |e\rangle\langle e|$ のときには位相フリップエラーの影響があらわには出ず、これではエラーを検知できずに F'_g が 1 になってしまう。これを避けるために、ゲートフィデリティ F_g は任意の純粋状態 $|\psi\rangle$ に対して F'_g を計算したなかの最小値であると定義しよう：

$$F_g = \min_{|\psi\rangle} \text{Tr} \left[U|\psi\rangle\langle\psi| U^\dagger \mathcal{E}(|\psi\rangle\langle\psi|) \right]. \tag{11.6.5}$$

これによって、量子ゲートのエラーを過小評価することはなくなった。ためしに先ほどの例、すなわちビットフリップゲート X が所望の量子ゲートであり、確率 p で Z になってしまう場合について計算してみよう。

$$\begin{aligned}
 F_g &= \min_{|\psi\rangle} \text{Tr} [X |\psi\rangle \langle\psi| X \mathcal{E}(|\psi\rangle \langle\psi|)] \\
 &= \min_{|\psi\rangle} \text{Tr} [\langle\psi| X [(1-p)X |\psi\rangle \langle\psi| X + pZ |\psi\rangle \langle\psi| Z] X |\psi\rangle] \\
 &= (1-p) + p \min_{|\psi\rangle} \text{Tr} [\langle\psi| Y |\psi\rangle \langle\psi| Y |\psi\rangle] \\
 &= (1-p) + p \min_{|\psi\rangle} (\langle\psi| Y |\psi\rangle)^2 \\
 &= 1-p
 \end{aligned} \tag{11.6.6}$$

から、この量子ゲートのゲートフィデリティは $1-p$ であるといえる。量子プロセストモグラフィを用いて量子ゲートの素性を明らかにした場合には、その結果を $\mathcal{E}(|\psi\rangle \langle\psi|)$ として代入し、同様の計算をすることになる。

11.7 Randomized benchmarking

量子プロセストモグラフィは、SPaM エラーとゲートのエラーを区別できないこと以上に、多量子ビット系になるにつれてゲートの評価自体に用いる χ 行列の次元が指数関数的な増大を見せることから現実的でないと思われる。この問題から、実際の実験では randomized benchmarking という量子ゲートの評価手法が広く用いられている。Randomized benchmarking は、いくつかの仮定の下に量子ゲートのゲートフィデリティを見積もる方法であり、それらの仮定が実際の状況に即しているかは慎重に見極めなければならない。それを差し引いても、この手法はゲートエラー SPaM エラーを分離して測定できる、かつ量子プロセストモグラフィよりも圧倒的にゲートエラーの評価が容易であるというメリットからしばしば用いられる。

Randomized benchmarking の実際の手順を箇条書きで述べよう：

- 量子ビット系を $|\psi_i\rangle$ に初期化する
- ランダムに選ばれた $l \in N$ 個の Clifford ゲートを作用させる
- 上記の Clifford ゲート列の全体の逆元を作用させる
- 最終的な状態 ρ_f が $|\psi_i\rangle \langle\psi_i|$ と同じであるかどうか確かめる
- l を増加させたときの ρ_f と $|\psi_i\rangle \langle\psi_i|$ の間のフィデリティの減衰からゲートフィデリティを見積もる

Clifford ゲートの数 l が増加するにしたがって ρ_f と $|\psi_i\rangle \langle\psi_i|$ の間のフィデリティは指数関数的に減衰する。この指数関数的減衰をフィッティングして、ゲートフィデリティ

を得るとというのが randomized benchmarking である。そしてゲートの数に対するフィデリティの減衰を評価する手法であるから、SPaM エラーとゲートエラーを別々に評価できるということも明らかであろう。実験で行う解析を二量子ビット系で考えてみよう。量子プロセストモグラフィでは 16×16 の行列とその逆行列を扱うことになり、randomized benchmarking では 11 520 個の Clifford ゲートがまんべんなく登場するようにシーケンスを整えることになる。どちらも一長一短に思えるうえ、randomized benchmarking では Clifford ゲート全体のゲートフィデリティの平均値が求まるのみという点はあるものの、自動的にゲートを乱数で生成するプログラムがあればよく、直観的でもあり、SPaM エラーとの分離も可能で、interleaved randomized benchmarking と呼ばれる方法で個別のゲートフィデリティの評価も可能な randomized benchmarking が用いられることは多い。

Randomized benchmarking はこのように便利に思えるが、上記のようにゲートフィデリティを得るうえで仮定されていることがいくつかある。これらの中には現実的でないものも含まれるが、ひとまず列挙してみよう。

- すべてのノイズ演算子があらゆる Clifford 演算子に等しく含まれる
- 平均のゲートフィデリティは、ノイズがあたかも脱分極エラーであったかのように計算される
- ノイズはマルコフ過程的である、すなわちノイズに時間相関はない

これらの仮定は、特に一つめと二つめについては実験的な観点では到底現実的ではない。例えば一つめに関しては、量子系ごとに量子ゲートの得意不得意があり、すべての量子ゲートが等しくすべてのノイズ演算子を持つというのは考えにくい。二つめについて、脱分極エラーがそもそも現実には即していないというケチが付く。むしろ自然放出と位相緩和が主な実験的エラーであることがほとんどだ。三つめに関してはノイズが Markov 過程的であるという根拠はないが、実験的にはノイズを Markov 過程でモデルすると物理現象をうまく説明できることが多く、実験的には妥当であろうと思われる。このような事情にもかかわらず randomized benchmarking はその簡便さから頻繁に用いられる。余談であるが、自然放出によるエラーは状態空間を非一様に覆うように作用してしまうため、randomized benchmarking の仮定が崩れてしまう。これに対処するためにトワリング (twirling) [10] という、Bloch ベクトルをわざとぐるぐる回転させてこの効果を打ち消す方法がある。

第12章 量子エラー訂正の基礎

従来のコンピュータで用いられるようなビットでもそうであるように、量子ビットも常にノイズにさらされ、エラーが発生する。現実的な量子技術は 10^6 回以上の量子状態準備、量子ゲート、量子測定量子操作が必要となるといわれている。このような大きな数の操作と立て続けに行うと、例えばゲートフィデリティが 0.9999 という精度を持っていても 1000 回で 0.9、100 000 回で 10^{-5} まで全体の量子操作のゲートフィデリティが低下してしまう。したがって量子ゲートのエラーは、従来のコンピュータでも行うようにエラー訂正をしなければ使い物にならない。量子ビットに対するこのようなエラー訂正を量子エラー訂正 (quantum error correction) とよぶ。

従来のコンピュータで行うエラー訂正は、多数決の方法をとっている。すなわち、ビットのコピーを複数用意しておき、エラーが発生するレートが低いという仮定の下で複数のコピーの中で多数である方を正しい結果として採用する。一方で、量子エラー訂正は従来のエラー訂正のように簡単ではない。これは、次のような事情があるためである：

- (i) エラーは Bloch 球上で連続的に発生する
- (ii) 複製禁止定理によって量子状態のコピーを作ることができない (付録 J)
- (iii) 測定は量子状態を “破壊” する

これらの条件のもとでのエラー訂正は一筋縄ではなく、いままでに考案されてきた量子エラー訂正のコード (量子エラー訂正ができるように複数の量子ビットから一つの量子ビットを構成する方法) は上記の問題を巧みに回避している。つまり、量子エラー訂正を実行するために量子状態は壊すことなく、量子ビットに起こるエラーを “デジタル” に検出するのである。量子エラー訂正ができるようになることによる代償もある。それは、従来のビットに対する多数決の方法のように、量子ビットを数多く使用して冗長性を確保しなければならないことである。さらに、量子エラー訂正が動作するためのエラー閾値というものがあるが、これが非常に厳しい要求となっている。言い換えると、量子操作全般に対するフィデリティが、現状の最先端技術を駆使しても達成困難なほど高くなければならないのである。本節ではこのような状況を概観するために、量子エラー訂正の基本的な考え方をみていく。本節で網羅できない詳細については成書 [9, 11] をあたってほしい。

12.1 スタビライザーによる定式化

量子エラー訂正の話に進む前に、スタビライザー (stabilizer) による定式化について少し述べておくのちに便利である。スタビライザー群 \mathcal{S} は、 n 量子ビット Pauli 群 \mathcal{P}_n の可換な部分群であり、次の条件をみたすものである：

$$\mathcal{S} = \{ S_i \mid -I \notin \mathcal{S}, [S_i, S_j] = 0 \text{ for all } S_i, S_j \in \mathcal{S} \} \leq \mathcal{P}_n \quad (12.1.1)$$

ここで群に対する不等号は、部分群であることを意味する。 n 量子ビット Pauli 群 \mathcal{P}_n の部分群であり、かつスタビライザー群の元であるスタビライザー演算子 $S \in \mathcal{S}$ は固有値 ± 1 をもつ。また、スタビライザー群のすべての元が可換であることから、スタビライザー群のすべての元に共通の固有状態があることもわかる。ところで群は生成子という、その積によって元の群が作られるような部分集合により特徴づけられる。スタビライザー群の生成子 S_g の集合をスタビライザー生成子と呼ぶ。スタビライザー生成子のある元がほかの元の積によって書かれないように、最小限の元だけで構成される。

スタビライザー群はスタビライザー生成子から生成される ($\mathcal{S} = \langle S_g \rangle$ とかく) が、そのスタビライザー生成子の数は $|\mathcal{S}|$ をスタビライザー群の位数 (元の数) として高々 $\log |\mathcal{S}|$ 個であることが知られている。ここに、スタビライザー群を用いた量子系の記述に関するメリットのひとつが浮き彫りになる。すなわち、量子系が拡大していくにつれて指数関数的に状態の数が増えていくものの、スタビライザーによる定式化を用いれば高々量子ビット数に比例する程度でしか増えないスタビライザー生成子で量子状態を指定することが可能になるのである。

スタビライザー演算子は可換であるから、すべてのスタビライザー演算子の同時固有状態が存在することはすでに述べた。この固有状態のうち、任意の $S_i \in \mathcal{S}$ に対して固有値が 1、すなわち $S_i |\psi\rangle = |\psi\rangle$ となるものが存在する。この固有状態 $|\psi\rangle$ をスタビライザー状態といい、スタビライザー状態により張られる固有空間 $V_{\mathcal{S}}$ を \mathcal{S} のスタビライザー部分空間ともいう。のちの便宜を図るため、スタビライザー演算子について固有値が -1 の固有空間を $V'_{\mathcal{S}}$ と書くことにする。

$\mathcal{S} = \langle \{Z_1 \cdots Z_n, X_1 \cdots X_n\} \rangle$ (n : 偶数) というスタビライザー群を例にとると、このスタビライザー部分空間は、

$$|\psi\rangle = \frac{|g \cdots g\rangle + |e \cdots e\rangle}{\sqrt{2}}.$$

である。ただし $|\xi_1\rangle \otimes |\xi_2\rangle \otimes \cdots \otimes |\xi_n\rangle$ を $|\xi_1 \xi_2 \cdots \xi_n\rangle$ と表記している。もう一つの例として、 $X_1 \cdots X_n$ を除いて $\mathcal{S} = \langle Z_1 \cdots Z_n \rangle$ というスタビライザー群を考えると、スタビライザー部分空間は $\{|g \cdots g\rangle, |e \cdots e\rangle\}$ となる。もしもこのスタビライザー部分空間に対して一つの量子ビットがフリップするような過程が起こると、その量子状態は $\{|eg \cdots g\rangle, |ge \cdots g\rangle, \dots, |gg \cdots e\rangle\}$ で張られるような部分空間に入ってしまう。これらは実は演算子 $Z_1 \cdots Z_n$ に対しては固有値が -1 となるような状態になっている。言い換えると、このビットフリップエラーによってもともと $V_{\mathcal{S}}$ にあった量子状態が $V'_{\mathcal{S}}$ へと移ってしまうのである。これを用いると、 $Z_1 \cdots Z_n$ の測定によりビットフリップエラー

が検出できることになる。しかしながら、この測定によってその量子ビットがフリップしたかは判別できない。量子エラー訂正をするためには、もういくつかの工夫をしなければならぬ。しかしながら、きちんとした量子エラー訂正の符号 (quantum error correction code)、すなわち複数の物理的な量子ビット (physical qubit) によりひとつの論理量子ビット (logical qubit) を構成するやり方が与えられれば、その記述がスタビライザーによる定式化により整理され、スタビライザー部分空間に量子ビットがエンコードされ、スタビライザー生成子の測定によりエラーが検出され、そしてエラーの訂正が行われるというふうに系統的に量子エラー訂正を理解することができる。

12.2 三量子ビット反復符号

完全な量子エラー訂正の符号に入る前に、三量子ビット反復符号 (three-qubit repetition code) というビットフリップエラーを検出し訂正することが可能な符号についてみておこう。三量子ビット反復符号のスタビライザー群は $S = \{Z_1Z_2, Z_2Z_3\}$ であり、スタビライザー部分空間は $V_s = \{|ggg\rangle, |eee\rangle\}$ となる。このスタビライザー部分空間に論理量子ビット $\{|0_L\rangle, |1_L\rangle\}$ をエンコードするが、そのやり方はいたって単純で $|0_L\rangle = |ggg\rangle$ 、 $|1_L\rangle = |eee\rangle$ とすればよい。このときに論理量子ビットに対する論理 Pauli 演算子が $X_L = X_1X_2X_3$ と $Z_L = Z_1Z_2Z_3$ であることはほとんど自明だろう。このもとの、スタビライザー生成子の測定によって何がわかるかをみてみよう。まず Z_1Z_2 と Z_2Z_3 は、 $Z|g\rangle = |g\rangle$ 、 $Z|e\rangle = -|e\rangle$ から常にスタビライザー状態に対して +1 という固有値を持つことがわかる。これは上記のスタビライザー生成子が偶数個の Z の積であるためである。これは V_s の定義から明らかであろう。

では、ビットフリップエラーが起こるとどうなるであろうか。ここでは一番目の量子ビットにビットフリップエラーが発生し、 $a|ggg\rangle + b|eee\rangle$ というスタビライザー状態が $a|egg\rangle + b|gee\rangle$ となってしまったとしよう。すると Z_1Z_2 の測定は -1 という値を返し、 Z_2Z_3 は $+1$ という値を返すこととなる。と、ここまで説明すれば Z_iZ_j の測定値が i 番目と j 番目の量子ビットが同じ状態 (+1) か異なる状態 (-1) かを判別するものになっていることに気が付く。このような測定をパリティ測定 (parity measurement) という。逆に Z_1Z_2 と Z_2Z_3 のふたつのパリティ測定の結果から、1 番目と 2 番目の量子ビットは異なる状態だが 2 番目と 3 番目の量子ビットは同じ状態にあるということを知ることができる。エラーの発生確率が十分低く二つ以上の量子ビットがいつにフリップするようなことは起こらないという仮定のもとで、この情報は 1 番目の量子ビットにエラーが発生していることを示している。パリティ測定によってどの量子ビットにエラーが起こっているかを判別する一連の測定をシンδροーム測定 (syndrome measurement) という。

シンδροーム測定のために、測定のための補助 (ancillary は差別的な表現であるとして最近では auxiliary がよく用いられる) 量子ビットをスタビライザー生成子ひとつにつき 1 個つけておこう。 Z_1Z_2 の測定のための補助量子ビットを添え字 a であらわすと、初め $|0_L\rangle|g_a\rangle$ であったとし、エラーによって $|egg\rangle|g_a\rangle$ になってしまったと

しよう。このときに 1 番目と 2 番目の量子ビットをそれぞれ制御量子ビットとする CNOT ゲート CNOT_{1a} 、 CNOT_{1b} を補助量子ビットに作用させると、 $|egg\rangle|g_a\rangle \xrightarrow{\text{CNOT}_{1a}} |egg\rangle|e_a\rangle \xrightarrow{\text{CNOT}_{2a}} |egg\rangle|e_a\rangle$ というように補助量子ビットの量子状態が変化し、補助量子ビットの σ_z の測定値、すなわち 1 番目と 2 番目の量子ビットに関するパリティ測定の結果が -1 となる。2 番目と 3 番目の量子ビットについても同様に補助量子ビットを用意してパリティ測定を行うと補助量子ビットの状態は変わらず、パリティ測定の結果として $+1$ を得る。このようにして得られた測定結果に応じてエラーのある量子ビットに X ゲートをかけるようなシステムを構築すれば、ビットフリップエラーに対する量子エラー訂正ができることになる。エラーが訂正されれば、当然量子状態はスタビライザー部分空間 V_S に戻る。

ここで、上記の量子エラー訂正によって正しい量子状態が保たれる確率がどうなるかを議論しよう。論理量子ビットを構成する三つの量子ビットにエラーが全く起きない確率は、一つの量子ビットにエラーが起きる確率を p として $(1-p)^3$ である。これはそのままでは p に比例する項があるのだが、もしエラー訂正が可能となり一つの量子ビットがフリップしても正しい状態に戻すことができる、となればこの確率は $(1-p)^3 + 3(1-p)^2p = 1 - 3p^2 + 2p^3$ となり、 p に比例する項が消え、 p が十分小さい場合には量子エラー訂正後の正しい状態を得る確率は量子エラー訂正なしの場合よりも高くなる。

ここで述べた三量子ビット反復符号はビットフリップエラーを検出し訂正できるものである。もしスタビライザー群が $S = \{X_1X_2, X_2X_3\}$ であればスタビライザー部分空間は $\{|+++ \rangle, |---\rangle\}$ になり、本節の議論を少し変更するだけでこれが位相フリップエラーを訂正できる三量子ビット反復符号になっていることがわかるだろう。同様にビット-位相フリップエラーについても三量子ビット反復符号によって量子エラー訂正が可能である。しかしながら、これらはそれぞれ 1 種類のエラーしか訂正できない。現実の量子ビットはこれらのすべてのエラーにさらされるのだから、三つのエラーを検出し、訂正できるような量子エラー訂正の符号が必要である。

12.3 Shor 符号

前節で紹介した三量子ビット反復符号はビットフリップエラー、位相フリップエラービット-位相フリップエラーのどれか一つだけについて量子エラー訂正が可能となる符号であった。本節では量子ビットに対するエラーを完全に訂正できる符号化の方法として、Peter Shor が導入した（九量子ビット）Shor 符号（nine-qubit Shor code）を紹介しよう。この符号化によってアナログな（連続的な）エラーにさらされる量子コンピュータがエラー耐性を獲得しうることが示された点で、歴史的に非常に重要なマイルストーンである。Shor 符号において、論理量子ビットは 9 つの量子ビットを用いて次

のようにエンコードされる：

$$|0_L\rangle = \frac{(|ggg\rangle + |eee\rangle)(|ggg\rangle + |eee\rangle)(|ggg\rangle + |eee\rangle)}{2\sqrt{2}}, \quad (12.3.1)$$

$$|1_L\rangle = \frac{(|ggg\rangle - |eee\rangle)(|ggg\rangle - |eee\rangle)(|ggg\rangle - |eee\rangle)}{2\sqrt{2}}. \quad (12.3.2)$$

これらは次のスタビライザー群のスタビライザー状態であることはすぐわかる。

$$S = \langle \{Z_1Z_2, Z_2Z_3, Z_4Z_5, Z_5Z_6, Z_7Z_8, Z_8Z_9, \quad (12.3.3)$$

$$X_1X_2X_3X_4X_5X_6, X_4X_5X_6X_7X_8X_9\} \rangle. \quad (12.3.4)$$

そして論理量子ビットに対する論理 Pauli 演算子は

$$Z_L = X_1X_2X_3X_4X_5X_6X_7X_8X_9, \quad (12.3.5)$$

$$X_L = Z_1Z_2Z_3Z_4Z_5Z_6Z_7Z_8Z_9. \quad (12.3.6)$$

である。Shor 符号は小さなまとまりとしてビットフリップエラーに対する反復符号があり、その論理量子ビットからさらに位相フリップコードを構成したような形になっていることに気が付くであろう。このような入れ子（英語では nested がこの意味に近いが、concatenatedの方がよくつかわれる）の符号化は論理量子ビットのエラー耐性を増強するうえで今や定番の手法となっている。シンδροーム測定のうち $Z^{\otimes 2}$ の形のスタビライザー生成子は一番小さな三量子ビットのまとまりの中でビットフリップエラーを検出でき、 $X^{\otimes 6}$ の形のスタビライザー生成子によって論理量子ビットの各括弧をひとまとまりと見た時に、その位相フリップエラーを検出できるようになっている。この符号化の際には、シンδροーム測定のために補助量子ビットを最低 8 個つけておかねばならない。 $X^{\otimes 6}$ の測定のために 1 つの補助量子ビットを 6 つの量子ビットと相互作用させるのは一般に簡単ではないから、実際にはより多くの補助量子ビットが必要になるだろう。

さて、このコードによってエラーが訂正されるための大前提は 9 個のうち 2 個以上の量子ビットに同時にエラーが起こる確率が非常に小さいことであり、三量子ビットの反復符号よりも厳しい条件ではあるものの、そこまでエラー訂正のための条件が厳しいようには一見思えない。実際、三量子ビット反復符号のときのような確率の計算をすれば現在の最も精度の高い量子ゲートならば十分であるということになるかもしれない。しかしながらここではもう少し現実的な状況を考える。すなわち、いままではエラーが一度発生したらそれを検出するための測定や量子ゲート、測定結果に応じたエラー訂正用の量子ゲートにはエラーは入らないと仮定していたのだが、これらすべてにエラーが入ると考えるのである。最終的に量子エラー訂正が可能となった場合には量子ゲートと量子測定がすべてエラー耐性のある (fault-tolerant な) ものとなっているべきで、エラーが確率 p で発生する際にそのエラーが別の量子操作にそのまま p で伝播するのではなく、 p^2 になって伝播するようにエラーを抑制しなければならない (error mitigation といわれる)。文献 [9] にあるようにきちんと解析すると、ある量子エラー訂正の符号

化に対してエラー耐性のある量子計算を行うためにどのくらいのエラー発生確率であれば許容できるかというエラー閾値 (error threshold) が計算される。単純な Shor 符号の場合にはエラー閾値が 10^{-7} のオーダーであることが知られており、これは現存するどんな技術においても達成されていないエラー発生確率である。

12.4 発展的な量子ビットの符号化

Shor 符号はその単純さから比較的理解しやすいものだが、 10^{-7} 程度というエラー閾値が実装に対する厳しい制約となっている。現状で最も精度の良い一量子ビットゲートのエラー率が $\sim 10^{-6}$ 、そして二量子ビットゲートについては $\sim 10^{-4}$ であり、近い将来における Shor 符号の実装は絶望的である。このような状況においてよりエラー閾値の高い、あるいはエラー率を抑制できる量子ビットの符号化に興味をもたれ、いくつかの重要な発展をもたらした。代表的なものとして、表面符号と Gottesman-Kitaev-Preskill (GKP) 符号がある。

表面符号 (surface code) はトポロジカル符号 (topological code)、トーリック符号 (toric code) とも呼ばれるもので、非常に大きな数の量子ビットの 2 次元配列を用意し、それによって論理量子ビットを構成するものである。表面符号が特徴的なのは、エラー閾値がコヒーレントエラーなしの場合に 0.01、コヒーレントエラーを含めても 10^{-4} 程度と現在知られている量子エラー訂正符号のなかで最も高いエラー率を許容する点である。また、表面符号と物性物理学理論の関連も、量子情報科学と物性物理学の橋渡しとなる興味深いトピックである。欠点としては、表面符号の構成に 1000 量子ビット以上のかかると多数の系に大規模化しないといけない点で、大規模化に伴ってどの程度エラー率が悪化するか、あるいは悪化しないで大規模化を達成できるか、そして多数の量子ビットを制御するための電気/光配線や制御系が現実的に可能かどうか、現在の量子系大規模化の潮流の中で盛んに調べられている。

ふたつめの GKP 符号 [13] は、調和振動子の量子状態、つまり Fock 空間のなかで量子ビットを構成する方法として注目を集めている。もう少し具体的には、位相空間上で二次元グリッド状に並んだ点としてあらわされる量子状態を生成し、これとグリッドの周期の半分だけ位相空間上でずれた状態のふたつの状態を論理量子ビットとするものである。論理量子ビットを GKP 量子ビットともいう。実際に位相空間上の点を実現するのは ∞ dB のスクイーミングに対応し現実的でないため、実際には有限の幅を持つグリッド状に並んだ分布で近似的に直交する二つの量子状態を構成することになり、現在のところ原子イオンの振動自由度を使ったもの [14] と超伝導量子ビットとマイクロ波共振器の結合系 [15] における実証実験が行われている。GKP 符号の特徴としては、表面符号で多数の量子ビットを用いて確保していた大きな Hilbert 空間を無限次元の Hilbert 空間である調和振動子によって代替していることである。エラー耐性を持たせるために多数の GKP 量子ビットを用いて構成した表面符号を構成すると、エラー閾値が 10^{-4} となることが知られている。これが実用的かどうかは甚だ疑問だが、調和振動子の量子技術の一例として非常に興味深いものである。

第13章 個別量子系に関する DiVincenzo の基準

原子、光子、固体中の点欠陥、超伝導量子回路など、ある個別量子系があったときにそれが量子技術への応用にどのくらい堪えるものかを見積もるための基準が DiVincenzo によって提示された [20]。これを以下に列挙しよう：

(i) 拡張性があり、特性の良くわかった量子ビットを内包すること

個別量子系は他の量子状態のなかで主として量子ビットに用いられる二つの量子状態に占有確率を持つこと。さらに、実際の応用に向けてこの多数の量子ビット系を一ヵ所に集積することができること。雑な見積もりではあるが、Shor のアルゴリズムによって 1000 桁の数の因数分解をエラー耐性量子計算により行いたい場合には、1000 量子ビットにより 1 個の論理量子ビットを構成するとして、1000 論理量子ビット、すなわち 10^6 個の量子ビットが必要になる。

(ii) 量子ビットの初期化ができること

精度の高い量子ゲートが必要であるように、量子ビットをある基準となる状態（ふつうは基底状態といって語弊はない）に初期化できるということも非常に重要である。量子ビットが正しく初期化されない場合、初期化されていることがわかる信号をもとに条件付きで量子情報処理をはじめめることはできる。しかし一量子ビットでさえ確率的となると、多数量子ビットでは通常指数関数的に初期化される確率が減少していく。

(iii) 十分長いコヒーレンス時間¹を持つこと

個別量子系の操作の実験は、周囲の環境や実験装置自体のノイズによる様々なデコヒーレンスとの戦いである。このデコヒーレンスは基本的に量子系を望ましい状態に用意したとしても徐々に量子状態が望まぬもの、特に混合状態へと変わっていつてしまう。この時定数がコヒーレンス時間である。したがって量子ゲート、あるいは量子計算全体はコヒーレンス時間よりも十分速く行われなければならない。ざっくりした計算になるが、量子ゲートのパルス時間が τ_g で、コヒーレンス時間が τ_c であるときにエラー率は τ_g/τ_c 程度になり、ゲートフィデリティは $1 - \tau_g/\tau_c$ 程度になるというのがそれなりに実験とも合致する経験則である。

(iv) ユニバーサルな量子ゲート操作が可能であること

ユニバーサルな量子ゲート操作は少なくとも一つの non-Clifford ゲートを含む一

¹デコヒーレンス時間ということもある。同じものを指している。

量子ビットゲートと二量子ビットゲートのセットで実現できる。一量子ビットゲートは量子ビットと電磁波の相互作用などを用いて実現され、二量子ビットゲートは量子ビット間の相互作用を誘起することで実装される。

(v) **量子ビットに応じた量子状態の測定ができること**

量子ビットは一般的な量子測定で記述される何らかの方法で量子測定が可能でなければならない。それは射影測定であるかもしれないし、蛍光測定のような単なる誤差のない測定であるかもしれない。正確には、あらゆる測定はノイズによって誤差のある測定となっている。ともかくこの量子測定によって量子状態トモグラフィなどが行われる。

(vi) **局在した量子ビットと伝搬量子ビットの間の信頼性のある相互変換が可能であること**

ふつう DiVincenzo の基準という上りの 5 つまでをいうことが多いが、このこの 6 番目の基準を抜きに語られることもほとんどないので一緒くたにしてしまう。この基準は上野 5 つとは違って量子ネットワーク [16] を意識した内容になっている。局在した量子ビットとしては原子イオンや超伝導量子回路などの量子ビットを、伝搬量子ビットとしては光子を思い浮かべればわかりやすい。要するに、共振器量子電磁力学系 (cavity QED 系) を用いて量子ビットの量子状態を光子の量子状態に高いフィデリティで転写することが可能であること。

第14章 量子技術の概要

この章では、これまで述べてきた量子技術によって実現される応用例を紹介する。

14.1 量子計算

量子系を巧みに利用することで、ある種の計算を高速に実行することができる場合がある。このような計算を量子計算と呼ぶ。量子計算では、量子ビットを情報の担い手として用いる。これまで見てきたように、量子ビットは射影測定によって離散的な結果を出力するが、測定されるまでは重ね合わせ状態をとれる。つまり、量子ビットは重ね合わせ状態の複素数係数という本質的にアナログ的な情報を持つ。この意味において、量子計算は従来の計算とは大きく性質が異なる。

量子ビットがアナログ的な性質を持つために、操作の不完全性や量子状態の寿命によるエラーの問題が生じる。エラーは操作ごとに蓄積していき、最終的な出力を信頼できないものになってしまう。巨大な量子干渉計である大規模な量子計算では、ごくわずかなエラーのために結果が変化してしまう。この問題を解決するため、現行のデジタル計算が有限のエラーの元で動作しているように、「閾値動作」する量子計算が考えられている。これを誤り耐性（デジタル）量子計算と呼ぶ。これは量子ビットの状態や各操作のエラーを量子誤り訂正によって訂正することによって実現する。各種の量子操作がある閾値よりも小さいエラーに抑えられているとき、量子操作の不完全性の影響を受けることなく、巨大な量子干渉計である量子アルゴリズムを実行することができる。

一方で、蓄積するエラーの下で計算を行うアナログ量子計算についても研究が進められている。量子アニーリングやNISQ (Noisy Intermediate-Scale Quantum Computer) といったアナログ量子計算では、サンプリング問題や基底状態の特徴を評価するという問題を扱うことによって、巨大な量子干渉計を構成することなしに計算結果を出力する。

14.1.1 Grover のアルゴリズム

量子アルゴリズムの例として、Grover の量子探索アルゴリズムを紹介する。4つの値をとる変数 i に対して、

$$f(x) = \begin{cases} 1 & x = x_0 \\ 0 & x \neq x_0 \end{cases} \quad (14.1.1)$$

となる関数 f について、未知の x_0 を決定する問題を考える。 f の構造を調べることなしに x_0 を決定するには、 $x = 0, 1, 2, 3$ を順番に f に代入し、出力を見るのが分かりやすい方法である。この決定方法は、平均して 2 回、最悪の場合 3 回、 f への代入を必要とする。

一方で、この値を 1 回の f への作用で決定する量子アルゴリズムがある。以下の演算子 \hat{U}, \hat{W} を導入する。

$$\hat{U}|x\rangle = \exp(ief(x)\pi)|x\rangle = \begin{cases} -|x\rangle & x = x_0 \\ |x\rangle & x \neq x_0 \end{cases} \quad (14.1.2)$$

$$\hat{W}|x\rangle = \begin{cases} -|0\rangle & x = 0 \\ |x\rangle & x \neq 0 \end{cases} \quad (14.1.3)$$

この二つの演算子を初期状態 $|+, +\rangle$ にある 2 量子ビットに順番に作用させる。

$$\hat{H}^{\otimes 2} \hat{W} \hat{H}^{\otimes 2} \hat{U} |+, +\rangle = |x_0\rangle \quad (14.1.4)$$

となる。出力の量子状態を測定することにより、 f を含む演算子 \hat{U} を一度作用させるだけで、 x_0 を決定することができる。¹

14.2 量子鍵配送

量子ビットは射影測定によって、0 か 1 の離散的な出力をする。また、測定後の状態は初期状態に依らず、これら出力に対応する状態に射影され、初期状態の痕跡が消える。このことを、暗号通信のための秘密鍵共有に利用する技術を量子鍵配送と呼ぶ。また、量子鍵を利用した暗号を量子暗号と呼ぶこともある。

量子鍵配送プロトコルは 1984 年に Charles Bennett と Gilles Brassard によって初めて提案された。このプロトコルは彼らの頭文字をとって BB84 と呼ばれている。

14.2.1 BB84

BB84 では、鍵配送に光子の偏光状態を利用する。偏光と情報を対応つける方法として表 14.1 のような 2 種類の方法を考える。

送信者は方法 A と B をランダムに選び、情報を受信者に送る。一方で受信者は、送られてきた光子をランダムに方法 A ないしは方法 B で検出する。

$$|H\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+45\rangle + |-45\rangle) \quad (14.2.1)$$

などの関係から、異なった方法でエンコードされた情報は、受信者側では完全にランダムな出力として観測される。一方で、送信者と受信者で同じ方法でエンコードしていた

¹ $\hat{H}^{\otimes 2}$ は二つの量子ビット両方に Hadamard ゲートを作用させることを意味する。

	状態 0	状態 1
A. 水平・鉛直	水平	垂直
B. 斜め	斜め+45 度	斜め-45 度

表 14.1: BB84 の偏光状態

場合は、送信側と受信側で結果は完全に相関するはずである。盗聴者の有無を調べるために、受信者は、測定された結果のうちいくつかをランダムにピックアップして、その結果とそのときの方法を通常回線を送信者に送る。もし盗聴者が光子の情報を盗み見た場合、その測定結果に応じて光子の状態は変化し、送信者と受信者の間の相関が壊されるため、送信者は盗聴者の存在に気付くことができる。送信者は、このように盗聴者の存在を確認しながら、受信側と通信することが可能になる。

14.3 量子センシング

量子系を使って対象を精密に測る手法を量子センシングという。量子センシングでは、量子状態制御技術や量子系の観測技術を用いてセンサーを構成する。代表的な例として

- ダイヤモンド中の色中心 (NV center)
- 超伝導量子干渉素子 (SQUID)
- 原子ガス
- 共振器オプトメカニクス

などを用いたものが挙げられる。量子センシングでは多くの場合、量子系のエネルギー変化を精密に測定することにより、外場の大きさを測定する。量子コヒーレンスを利用してエネルギー変化を精密に測る手法として広く用いられるものの一つが Ramsey 干渉と呼ばれる手法である。

14.3.1 Ramsey 干渉

Ramsey 干渉では、2 回の X 軸回りの $\pi/2$ 回転 ($R_x(\pi/2)$) を時間差 t をつけて作用させる。量子ビットのエネルギーが ΔE だけ変化するとき、

$$\exp\left(\frac{\Delta E t}{2h} \sigma_z\right) \tag{14.3.1}$$

という Z 軸回りの回転が量子ビットに作用する。そのため、Ramsey 干渉の結果、0 を出力する確率は

$$|\langle 0 | R_x(\pi/2) \exp\left(\frac{\Delta E t}{2h} \sigma_z\right) R_x(\pi/2) | 0 \rangle|^2 \quad (14.3.2)$$

$$= \sin^2 \frac{\Delta E t}{2h} \quad (14.3.3)$$

となる。この関係から、逆に量子ビットの測定からエネルギー変化をセンシングすることができる。とくに、 $\Delta E t / 2h = \pi/4$ のとき、確率は ΔE の変化に最も敏感になる。

14.3.2 エンタングルメントによる量子センシング

量子効果をより積極的に利用し、エンタングルメントを用いることでセンシングの感度を向上することができる。前節の Ramsey 干渉の測定精度について考える。式 (14.3.3) より、エネルギーの測定精度 δE は、確率の測定精度 δP を用いて

$$\delta E / h \sim \delta P / t \quad (14.3.4)$$

と書ける。量子ビットの測定結果は 2 項分布するため、独立な測定を N 回行う場合、 δP は

$$\delta P = \frac{1}{2\sqrt{N}} \quad (14.3.5)$$

となる。つまり、測定回数 N について $1/\sqrt{N}$ に比例して測定精度はあがる。

一方で、 N 量子ビットからなる量子もつれ状態として、

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|111\dots 1\rangle + |000\dots 0\rangle) \quad (14.3.6)$$

という状態を考える。 N 量子ビットに同様にエネルギー変化が起こるとして、エネルギー変化

$$\Delta E_{\text{tot}} = \sum_i^N \Delta E \sigma_z^{(i)} \quad (14.3.7)$$

の元での時間発展の結果、初期状態との忠実度は

$$\langle \psi | \exp(\Delta E_{\text{tot}} t / h) | \psi \rangle \quad (14.3.8)$$

$$= \cos^2\left(\frac{N \Delta E t}{2h}\right) \quad (14.3.9)$$

となる。この関係から測定精度 δE_{en} を見積もると

$$\delta E_{\text{en}} \propto 1/N \quad (14.3.10)$$

となり、量子ビット数の-1乗に比例して感度が上がる。これは、大きな N に対して、独立な量子ビット N 個を使ったセンサーよりも高感度な量子センシングが可能であることを示している。

14.4 量子シミュレーション

重ね合わせ状態が許される量子系においては、粒子数が増えると系の複雑さが指数関数的に増大する。その計算時間のため、多くの場合では粒子数が多い系に対しては第一原理的な計算は難しくなる。そこで、計算の難しい複雑な振る舞いをシミュレートするために、系をモデル化する理想的な量子系を用意し、実際の系の代わりにそのモデル系の振る舞いを調べることで、実際の系をシミュレートする。このような計算手法を量子シミュレーションと呼ぶ。Hubbard モデルやスピンの Heisenberg モデルなど、いくつかのモデルのシミュレーションやその量子相転移の観測などが実験的に報告されている。このように、対応する量子系を実際に作る量子シミュレーションだけでなく、量子回路上で物理モデルの下での時間発展やエネルギー固有状態を計算する量子シミュレーションも多く存在する。量子化学計算などに代表されるこうしたアルゴリズムは NISQ の応用として近年盛んに研究されている。

14.5 量子インターネット

いまや我々の生活にとって、直接的もしくは間接的に、インターネットの存在はなくてはならないものになっている。量子コンピュータ・量子センサや量子鍵配送といった各種量子技術を組み合わせたネットワークを考えると、通信路として量子状態のやり取りを許した量子ネットワークの実現が重要になる。こうした量子ネットワーク全体からなるシステムを量子インターネットと呼ぶ。量子インターネットでは、クラウド型量子計算、量子秘匿計算、量子超高密度通信、また量子センサーの感度向上など、より強力な量子機能が現れる。量子インターネットでは、光子からスピン、スピンからマイクロ波などといった各種の量子メディア変換や量子誤り訂正・量子中継技術など究極的な量子技術が必要になる。これらは現在原理検証レベルに留まっており、テストベッドの実現や、大きく異なる個々の量子系の時間スケールや動作環境などの個性を受容する高性能なインターフェイスの実現が必要となる。

付録 A 位置表示と運動量表示

ブラケット記法をもちいる Dirac 表示では、量子状態は（純粋状態であれば）ket ベクトル $|\Psi\rangle$ であらわされた。これは実は $\Psi(q)$ のような波動関数よりも一段抽象的な量子状態の扱い方である。というのも、「位置表示”すると $\Psi(q)$ が得られる」というものを $|\Psi\rangle$ と定義するし、さらには $|\Psi\rangle$ を “運動量表示”することによって運動量 p の関数としての波動関数 $\Psi(p)$ も得られるためである。この付録ではこの位置表示と運動量表示について、メモ書き程度ではあるがおさらいしよう。

まず位置演算子 \hat{q} の固有状態 $|q\rangle$ を定義しよう。これは固有値が q であり

$$\hat{q}|q\rangle = q|q\rangle \quad (\text{A.0.1})$$

を満たす。同様に運動量演算子 \hat{p} の固有状態 $|p\rangle$ を

$$\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle \quad (\text{A.0.2})$$

によって定義する。量子状態 $|\Psi\rangle$ の位置表示と運動量表示はそれぞれ

$$\Psi(q) = \langle q|\Psi\rangle, \quad \Psi(p) = \langle p|\Psi\rangle \quad (\text{A.0.3})$$

と書かれ、これらが位置や運動量の関数としての波動関数である。 $|q\rangle$ や $|p\rangle$ は連続無限個の基底となって、離散的な基底に対して成立した完全性の関係 $\sum_i |i\rangle \langle i| = \hat{1}$ は、 $|q\rangle$ と $|p\rangle$ に対しては

$$\int dq |q\rangle \langle q| = \hat{1}, \quad \int dp |p\rangle \langle p| = \hat{1} \quad (\text{A.0.4})$$

となる。

さて、 $\Psi(p)$ と $\Psi(q)$ は互いに Fourier 変換でうつることができ、

$$\langle q|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp e^{ipq/\hbar} \langle p|\Psi\rangle \quad (\text{A.0.5})$$

が成り立つ。一方で $\int dp |p\rangle \langle p| = \hat{1}$ を $\langle q|$ と $|\Psi\rangle$ で挟むと

$$\langle q|\Psi\rangle = \int dp \langle q|p\rangle \langle p|\Psi\rangle \quad (\text{A.0.6})$$

となるから、式 (A.0.5) と見比べて

$$\langle q|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipq/\hbar} \quad (\text{A.0.7})$$

がいえる。これは $|p\rangle$ を位置表示すると平面波、つまり運動量が確定した状態が得られるというごく当たり前の結果であるが、6.6 の計算のようにひょんなところで役に立つ関係式である。

付録B 回転系へのユニタリ変換の例

最初の例として、単一モードの調和振動子の Hamiltonian $\mathcal{H} = \hbar\omega_c a^\dagger a$ を、ユニタリ変換 $U(t) = \exp[i\omega a^\dagger a t]$ によって ω でまわる回転系に乗ってみよう。 $U(t)$ は Taylor 展開により定義されるようなものであるが、指数関数の肩にある演算子は Hamiltonian と可換であるから、 $U(t)$ も Hamiltonian と可換になる。これによってユニタリ変換 (2.2.2) は非常に簡単に計算できて、 $U\mathcal{H}U^\dagger = UU^\dagger\mathcal{H} = \mathcal{H}$ から

$$\begin{aligned}\mathcal{H}' &= \mathcal{H} - i\hbar U\dot{U}^\dagger = \hbar\omega_c a^\dagger a - i\hbar U(-i\omega a^\dagger a)U^\dagger \\ &= \hbar(\omega_c - \omega)a^\dagger a \\ &= \hbar\Delta_c a^\dagger a.\end{aligned}\tag{B.0.1}$$

となる。これを見るとわかる通り、回転系に乗った後の Hamiltonian には調和振動子の周波数 ω_c と回転系の周波数 ω の差 $\Delta_c = \omega_c - \omega$ が現れる。これを離調という。

全く持って似たような議論を、スピン 1/2 系の Hamiltonian $\mathcal{H} = \hbar\omega_a \sigma_z/2$ の $U(t) = \exp[i\omega(\sigma_z/2)t]$ によるユニタリ変換に対しても適用することができ、回転系での Hamiltonian は $\mathcal{H}' = \hbar\Delta_a \sigma_z/2$ と計算される。ここで再び離調 $\Delta_a = \omega_a - \omega$ が登場する。

もう少し発展的な例として、Jaynes-Cummings Hamiltonian

$$\mathcal{H}_{\text{JC}} = \frac{\hbar\omega_a}{2}\sigma_z + \hbar\omega_c a^\dagger a - i\hbar g(\sigma_+ a - a^\dagger \sigma_-).\tag{B.0.2}$$

を考えよう。この Hamiltonian をユニタリ変換 $U(t) = e^{i\omega\sigma_z t/2 + i\omega a^\dagger a t} = U_1(t)U_2(t)$ によって変換する。ただし便宜上 $U_1(t) = \exp[i\omega\sigma_z t/2]$ と $U_2(t) = \exp[i\omega a^\dagger a t]$ に分けて書いた。これは量子ビットも電磁波共振器の光子も、駆動周波数 ω を基準に眺めることを意味している。調和振動子の生成・消滅演算子と量子ビットの Pauli 演算子は可換であるから、Jaynes-Cummings Hamiltonian の最初の二項は先ほどまでの例と同様に $\hbar\Delta_a \sigma_z/2 + \hbar\Delta_c a^\dagger a$ というふうに変換される。ところが相互作用項は Hamiltonian と可換でないため、それほど単純には計算できない。この計算を進めるためには Baker-Campbell-Hausdorff の公式

$$e^{-S} H e^S = H + [H, S] + \frac{1}{2!} [[H, S], S] + \frac{1}{3!} [[[H, S], S], S] + \dots\tag{B.0.3}$$

が有用である。さらに、有用な関係式として交換関係 $[a^\dagger a, a] = -a$ 、 $[a^\dagger a, a^\dagger] = a^\dagger$ 、 $[\sigma_z, \sigma_\pm] = \pm 2\sigma_\pm$ を挙げておこう。これらを用いて相互作用項をまず $U_2(t)$ でユニタリ

変換してみよう：

$$\begin{aligned}
& U_2(t)(\sigma_+a - a^\dagger\sigma_-)U_2^\dagger(t) \\
&= e^{i\omega a^\dagger at}(\sigma_+a - a^\dagger\sigma_-)e^{-i\omega a^\dagger at} \\
&= (\sigma_+a - a^\dagger\sigma_-) + [(\sigma_+a - a^\dagger\sigma_-), -i\omega a^\dagger at] \\
&\quad + \frac{1}{2!} [[(\sigma_+a - a^\dagger\sigma_-), -i\omega a^\dagger at], -i\omega a^\dagger at] + \dots \\
&= (\sigma_+a - a^\dagger\sigma_-) + (-i\omega t)(\sigma_+a + a^\dagger\sigma_-) \\
&\quad + \frac{(-i\omega t)^2}{2!}(\sigma_+a - a^\dagger\sigma_-) + \frac{(-i\omega t)^3}{3!}(\sigma_+a + a^\dagger\sigma_-) + \dots \\
&= \left[1 + (-i\omega t) + \frac{(-i\omega t)^2}{2!} + \frac{(-i\omega t)^3}{3!} + \dots \right] \sigma_+a \\
&\quad - \left[1 - (-i\omega t) + \frac{(-i\omega t)^2}{2!} - \frac{(-i\omega t)^3}{3!} + \dots \right] a^\dagger\sigma_- \\
&= e^{-i\omega t} \sigma_+a - e^{i\omega t} a^\dagger\sigma_-. \tag{B.0.4}
\end{aligned}$$

この $U_2(t)$ による変換の後の Hamiltonian をさらに $U_1(t)$ によって変換すると、結局

$$\begin{aligned}
& U_1(t)(e^{-i\omega t} \sigma_+a - e^{i\omega t} a^\dagger\sigma_-)U_1^\dagger(t) \\
&= e^{i\omega\sigma_z t/2}(e^{-i\omega t} \sigma_+a - e^{i\omega t} a^\dagger\sigma_-)e^{-i\omega\sigma_z t/2} \\
&= e^{-i\omega t} a \left(e^{i\omega\sigma_z t/2} \sigma_+ e^{-i\omega\sigma_z t/2} \right) - e^{i\omega t} a^\dagger \left(e^{i\omega\sigma_z t/2} \sigma_- e^{-i\omega\sigma_z t/2} \right) \tag{B.0.5}
\end{aligned}$$

という計算に

$$\begin{aligned}
e^{i\omega\sigma_z t/2} \sigma_\pm e^{-i\omega\sigma_z t/2} &= \sigma_\pm + \left[\sigma_\pm, -i\frac{\omega\sigma_z t}{2} \right] + \frac{1}{2!} \left[\left[\sigma_\pm, -i\frac{\omega\sigma_z t}{2} \right], -i\frac{\omega\sigma_z t}{2} \right] \\
&\quad + \frac{1}{3!} \left[\left[\left[\sigma_\pm, -i\frac{\omega\sigma_z t}{2} \right], -i\frac{\omega\sigma_z t}{2} \right], -i\frac{\omega\sigma_z t}{2} \right] + \dots \\
&= \sigma_\pm \mp (-i\omega t) \sigma_\pm + \frac{1}{2!} (-i\omega t)^2 \sigma_\pm \mp \frac{1}{3!} (-i\omega t)^3 \sigma_\pm + \dots \\
&= e^{\pm i\omega t} \sigma_\pm \tag{B.0.6}
\end{aligned}$$

であることを適用して、回転系での Jaynes-Cummings 相互作用

$$\begin{aligned}
& U_1(t)U_2(t)(-i\hbar g)(\sigma_+a - a^\dagger\sigma_-)U_2^\dagger(t)U_1^\dagger(t) \\
&= U_1(t)(-i\hbar g)(e^{-i\omega t} \sigma_+a - e^{i\omega t} a^\dagger\sigma_-)U_1^\dagger(t) \\
&= -i\hbar g(\sigma_+a - a^\dagger\sigma_-) \tag{B.0.7}
\end{aligned}$$

が導かれる。これは回転系へのユニタリ変換前と同じ形になっている。以上より、回転系での Jaynes-Cummings Hamiltonian の最終的な形は

$$\mathcal{H}'_{\text{JC}} = \frac{\hbar\Delta_a}{2} \sigma_z + \hbar\Delta_c a^\dagger a - i\hbar g(\sigma_+a - a^\dagger\sigma_-). \tag{B.0.8}$$

と求まる。

付録C 三準位系からの二準位系の抽出

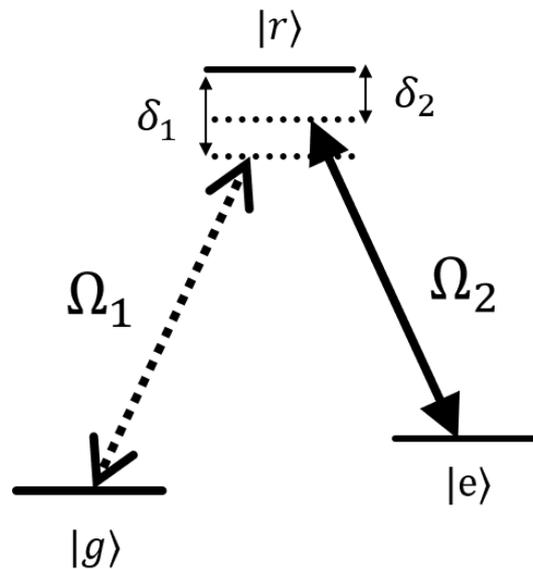


図 C.1: Λ 型の三準位系

三つの量子状態 $\{|g\rangle, |e\rangle, |r\rangle\}$ からなる三準位系で、 $|g\rangle \leftrightarrow |r\rangle$ と $|e\rangle \leftrightarrow |r\rangle$ の遷移を考えよう。この系の Hamiltonian は次のようになる：

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \hbar\omega_g |g\rangle \langle g| + \hbar\omega_e |e\rangle \langle e| + \hbar\omega_r |r\rangle \langle r| \\ & + \hbar g_1 (|r\rangle \langle g| a_1 + |g\rangle \langle r| a_1^\dagger) + \hbar g_2 (|r\rangle \langle e| a_2 + |e\rangle \langle r| a_2^\dagger). \end{aligned} \quad (\text{C.0.1})$$

そしてコヒーレントな駆動により $a_1 \rightarrow \alpha_1 e^{-i(\omega_r - \omega_g + \delta_1)t}$ 、 $a_2 \rightarrow \alpha_2 e^{-i(\omega_r - \omega_e + \delta_2)t}$ と置きかえよう。この置きかえはより厳密には量子ゆらぎ δa が付随して $a_1 \rightarrow (\alpha_1 + \delta a_1) e^{-i(\omega_r - \omega_g + \delta_1)t}$ となるべきではあるが、 δa が小さいとしてここでは無視する。 $|g\rangle \langle g|$ は $\omega_r - \omega_g + \delta_1$ 、 $|e\rangle \langle e|$ は $\omega_r - \omega_e + \delta_2$ で回転系に移るユニタリ変換を施し、さらに $g_i \alpha_i$ を Ω_i ($i = 1, 2$) とおくと、式 (B) を用いて

$$\mathcal{H}' = \hbar\delta_1 |g\rangle \langle g| + \hbar\delta_2 |e\rangle \langle e| + \hbar\Omega_1 (|r\rangle \langle g| + |g\rangle \langle r|) + \hbar\Omega_2 (|r\rangle \langle e| + |e\rangle \langle r|) \quad (\text{C.0.2})$$

と変換される。ただし $\hbar\omega_r I$ という項が出てくるが全体のエネルギーシフトとなるのみなので無視している。本節で我々が行いたいのは、電子的な励起状態 $|r\rangle$ を断熱的に消

去し、ふたつの基底状態 $|g\rangle$ と $|e\rangle$ の二準位系を構成することである。これらの準位は基底状態であれば寿命はほとんど無限大に近いほど長い、裏を返すとこれらの間の電磁波の遷移は少なくとも双極子モーメントが極めて小さく、通常の方法では制御に望ましい Rabi 周波数が得られないということである。 $|g\rangle \leftrightarrow |r\rangle$ と $|e\rangle \leftrightarrow |r\rangle$ の遷移を駆動しているのは、遷移が禁じられている二つの量子状態を Raman 遷移によってつなぐためである。

このような目的のもと、Schrieffer-Wolff 変換をしよう。Schrieffer-Wolff 変換の詳細は付録 F を参照してほしい。変換のための演算子 S は $S = -(\Omega_1/\delta_1)(|r\rangle\langle g| - |g\rangle\langle r|) - (\Omega_2/\delta_2)(|r\rangle\langle e| - |e\rangle\langle r|)$ ととるが、ここで離調 δ_1 と δ_2 がそれぞれの遷移の Rabi 周波数よりも十分大きいことを仮定している。ともかく Schrieffer-Wolff 変換によって Hamiltonian は近似的に対角化されて、 Ω_i/δ_i の一次まで残すと

$$\begin{aligned} \mathcal{H}'_{eff} = & \hbar \left(\delta_1 + \frac{\Omega_1^2}{\delta_1} \right) |g\rangle\langle g| + \hbar \left(\delta_2 + \frac{\Omega_2^2}{\delta_2} \right) |e\rangle\langle e| \\ & + \hbar \left(\frac{\Omega_1\Omega_2}{2\delta_1} + \frac{\Omega_1\Omega_2}{2\delta_2} \right) (|e\rangle\langle g| + |g\rangle\langle e|). \end{aligned} \quad (\text{C.0.3})$$

ただし先ほど述べたように $\Omega_1/\delta_1, \Omega_2/\delta_2 \ll 1$ を仮定している。 $|r\rangle$ の AC Stark シフト $-\hbar(\Omega_1^2/\delta_1 + \Omega_2^2/\delta_2)|r\rangle\langle r|$ も出てくるのだが、 $|r\rangle$ に実励起はほとんど起こらず、 $\{|g\rangle, |e\rangle\}$ で閉じる系のダイナミクスに寄与しないため無視してよい。ただし $|r\rangle$ のロスやデコヒーレンスの効果が (ほんの少しの実励起を通して) 無視できないときには、量子ゲートのフィデリティが低下するなどの影響が出る。ここでパラメータを定義しなおそう。

$$\delta'_1 = \delta_1 + \frac{\Omega_1^2}{\delta_1}, \quad \delta'_2 = \delta_2 + \frac{\Omega_2^2}{\delta_2}, \quad \Omega' = \frac{\Omega_1\Omega_2}{2\delta_1} + \frac{\Omega_1\Omega_2}{2\delta_2},$$

このようにして係数をすっきりさせると、初めに三準位系であったものが二準位系に落とし込まれたことがわかる：

$$\mathcal{H}'_{eff} = \hbar\delta'_1 |g\rangle\langle g| + \hbar\delta'_2 |e\rangle\langle e| + \hbar\Omega' (|e\rangle\langle g| + |g\rangle\langle e|). \quad (\text{C.0.4})$$

ここで本節の目的は達成されたわけだが、もう少しこの系の様子を知るために $|r\rangle$ も含めた系の Hamiltonian の固有状態を調べてみよう。Hamiltonian (317) を行列の形式に書くと、三準位系なので 3×3 の行列で書いて

$$\mathcal{H}' = \hbar \begin{pmatrix} \delta_1 & \Omega_1 & 0 \\ \Omega_1 & 0 & \Omega_2 \\ 0 & \Omega_2 & \delta_2 \end{pmatrix} \quad (\text{C.0.5})$$

となり、固有値 λ は固有方程式 $\lambda(\lambda - \delta_1)(\lambda - \delta_2) - \Omega_2^2(\lambda - \delta_1) - \Omega_1^2(\lambda - \delta_2) = 0$ を解くことで得られる。簡単のため二光子離調 $\delta_1 - \delta_2$ がゼロ、すなわち $\delta_1 = \delta_2 = \delta$ となるような場合を扱うことにすると、固有値は $\lambda = \delta \equiv \lambda_0$ と $\lambda = (\delta/2) \pm \sqrt{(\delta/2)^2 + \Omega_1^2 + \Omega_2^2} \equiv \lambda_{\pm}$ になる。ここで固有値 λ_0 に対応する固有状態が、 $|g\rangle$ と $|e\rangle$ のみを含み $|r\rangle$ を含まないことがわかる。電子的な励起状態を含まないこの固有状態は、自然放出によって光らず、

それゆえに緩和が起こらないもので、暗状態と呼ばれる。一方で λ_{\pm} に対応する固有状態は電子の励起状態 $|r\rangle$ を含むため自然放出により緩和してしまう。このような状態を暗状態と対比して明状態と呼ぶ。

付録D 原子の量子状態

Rutherfordの実験以来、原子は原子核の周りを電子がまわっているというようなモデルでとらえられるようになったが、加速度運動をする電子は電磁波を出しながら原子核に向かって落ちていくはずだという古典力学的な推論と原子は実際に安定に存在できるという事実の板挟みの解消には、量子論の登場を待たねばならなかった。ここでは最も簡単な構造を持つ原子である水素原子の Bohr モデルを取り上げ、更に微細構造や超微細構造などの原子の量子状態について簡単な計算をもとに考えてみよう。

D.1 Bohr モデル

Bohr モデルは、電子の波動性を仮定しながらも電子が陽子の周りを回るという描像で系の性質を考察する。電子が陽子の周りを一周する時に物質波としての電子の位相が 2π の整数倍だけ進むという風に考えるが、これは電子の回る速さ、すなわち軌道角運動量が離散化されているという風に考え直して電子の質量を m 、速さを v 、軌道半径を r として

$$mvr = \hbar n \quad (\text{D.1.1})$$

という関係式 (n は自然数) を要請するのが Bohr モデルの特徴である。あくまで電子が古典的な軌道運動をするというイメージのもと、電子が静止しているような系では遠心力がクーロン力と釣り合っていると考えていいように思われるので、

$$m \frac{v^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} \quad (\text{D.1.2})$$

を用いることにすると、上の二つの式から v を消去して

$$r = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2} n^2 \quad (\text{D.1.3})$$

を得る。すなわち、電子の軌道半径は上式に従って離散的な値を取らねばならない。これを用いて、水素原子のエネルギー E を計算する：

$$E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \quad (\text{D.1.4})$$

$$= -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{2r} \quad (\text{D.1.5})$$

$$= -\frac{me^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2}. \quad (\text{D.1.6})$$

このように、Bohr モデルを用いると水素原子のエネルギーが離散的な値しか取れないこともわかる。そして $n = 1$ のときと $n = \infty$ のときのエネルギーの差からイオン化エネルギーが 13.6 eV とともまり、これが実験値と非常によく一致することや、Rydberg による原子スペクトルの経験的な式を再現することが Bohr モデルの信憑性を高める決め手となった。

水素原子の量子力学的な取り扱い成書 [18, ?] を参照してほしいが、そのさわりだけ述べよう。まず Bohr モデルによる水素原子のエネルギーの式は特殊相対性理論の効果を取り込まない範囲においては量子力学的な解に一致することが知られている。この取り扱いの範囲では水素原子の量子状態は (n, l, m) という三つの整数の組でよくあらわされ、主量子数 n は自然数であり、方位量子数あるいは軌道角運動量 l は 0 から $n - 1$ までの値を、磁気量子数 m は $-l$ から l までの整数値を取る。Bohr モデルでは $n = 1$ の状態、つまり水素原子の基底状態は電子が回っている状態であったが、きちんと Schrödinger 方程式を解いて出てくる水素原子の基底状態は $l = 0$ 、つまり電子は回っていないどころか、動径方向の波動関数をみると原子核の位置をピークとした球対称な分布をもつということに注意したい。

さらに原子のなかの電子の速度は非常に大きく、特殊相対性理論的な効果は無視できない。この効果を取り込むには相対論的量子力学に基づいて Dirac 方程式を解く必要があり、そこから電子スピン、微細構造、そして超微細構造といった重要な概念が出現することになる。しかしながら相対論的量子力学を本書に納めるのは極めて困難であるため、以下では電子や原子核の持つスピン自由度を認めたくえて、簡単なモデルを使って微細構造と超微細構造がどのようなものであるかをみてみよう。

D.2 微細構造

ここでは再び電子が原子核の周りをまわっているという立場で考えよう。これを電子の静止系で見ると、原子核が電子の周りをまわっているように見えるだろう。原子核（水素原子の場合には陽子）の電荷が $+e$ であるとする、この原子核による円電流 $I = ev/2\pi r$ が電子の位置に作る磁場の大きさは

$$B = \frac{\mu_0 I}{2r} = \frac{\mu_0 ev}{4\pi r^2} = \frac{\mu_0 eL}{4\pi m r^3} \quad (\text{D.2.1})$$

であり、ここで $L = mvr$ は軌道角運動量の大きさである。この磁場によって電子スピンの Zeeman 効果をうけると考えると、そのエネルギーシフトは

$$-\boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{B} = \frac{g\mu_B}{\hbar} \boldsymbol{S} \cdot \frac{\mu_0 e}{4\pi m^2 r^3} \boldsymbol{L} = -\frac{g\mu_B e^2}{8\pi m^2 r^3} \boldsymbol{S} \cdot \boldsymbol{L} \quad (\text{D.2.2})$$

と書かれる。ここで $g \sim 2$ は Lande の g 因子、 $\mu_B = e\hbar/2m$ は Bohr 磁子と呼ばれる。これをもとの電子が回っている系に戻ってみると、電子の軌道運動による磁気モーメントと電子スピンの相互作用しているような項として解釈することができる。これをスピン-軌道相互作用と呼ぶ。この相互作用は、電子スピンと軌道角運動量が同じ向き

を向いている状態ではエネルギーが上がり、反並行のときにはエネルギーが下がるようなものとなっている。このような時には $J = S + L$ が量子状態を特徴づける良い量子数となっており、例えば s 軌道（方位量子数 $l = 0$ ）の場合にはスピン-軌道相互作用はゼロとなるが、 p 軌道（方位量子数 $l = 1$ ）の場合には角運動量の合成のルールに従って $|J| = 1/2, 3/2$ の二つの値を取り、この二つに対応したエネルギー固有状態にスペクトルが分裂する。このスピン-軌道相互作用によって分裂したような構造を微細構造分裂という。この分裂の大きさは、原子種にもよるが、例えばアルカリ金属の S - P 遷移で言うならばだいたい遷移波長の $1/100$ 程度の影響となって現れる。上式にあるような微細構造定数の見積もりは実は特殊相対論的效果（Thomas precession）を無視しており、正しい大きさは g を $g - 1$ としたものになる。

D.3 超微細構造

前節では電子の軌道運動による磁気モーメントと電子スピンの相互作用を考えたが、本節ではさらに核スピンと電子のつくる磁場の相互作用を考えよう。基底状態が s 軌道であるような場合には、原子核の位置にも電子の存在確率が有限となって、その場所での電子の存在確率 $|\psi(0)|^2$ に比例した電子スピン（軌道角運動量がある場合にはその効果も入る）による磁場を原子核が感じるだろう。電子が作る磁場は、一様に磁化した球の磁束密度 $B = (2/3)\mu_0 M$ に対して $M = -(2/3)\mu_0 \mu_B g |\psi(0)|^2 J$ を代入したものと考える。この磁場を感じて核スピン $\mu_N I$ が Zeeman シフトを受けると、

$$-\mu_N \cdot B = \frac{2}{3} \mu_N \mu_0 \mu_B g |\psi(0)|^2 I \cdot J \equiv AI \cdot J \quad (\text{D.3.1})$$

という相互作用項が得られる¹。微細構造分裂のときと同じく、このような状況で系のエネルギーを特徴づける良い量子数は $F = J + I = S + L + I$ となっており、 $I \cdot J$ の値に依存してエネルギー分裂が生じる。これを超微細構造分裂という。また、超微細構造分裂は核磁気モーメント μ_N が電子の磁気モーメント μ_B のだいたい $1/1000$ 以下と小さく、超微細構造分裂は周波数にして数 GHz のオーダーのものになる。

¹この相互作用は磁気双極子相互作用のもののみであり、実際の原子スペクトル測定では磁気四重極子相互作用の寄与も双極子レベルのものと同じくらいの影響を持つことが知られている。詳細は文献 [?] を参照。

付録E 量子マスター方程式

本節では密度演算子のダイナミクスを記述する方程式として、まず緩和がない場合の Liouville-von Neumann 方程式を導入し、さらに緩和を取り込むことができる量子マスター方程式へと進んでいこう。その後量子マスター方程式からレート方程式や (光) Bloch 方程式が導出されることをみる。

E.1 Liouville-von Neumann 方程式

ひとまず緩和を考えずに密度演算子のダイナミクスを考えるために、まず Schrödinger 表示の状態ベクトルの時間発展 $|\psi_k(t)\rangle = e^{-i(H/\hbar)t} |\psi_k\rangle = U_t |\psi_k\rangle$ を思い出そう。ここで H は系の Hamiltonian である。すると、密度演算子の時間発展は $\rho(t) = U_t \rho U_t^\dagger$ となる。これは純粋状態 $|\psi_k(t)\rangle \langle \psi_k(t)|$ の時間発展が $U_t |\psi_k(t)\rangle \langle \psi_k(t)| U_t^\dagger$ で書けることから類推できる。それでは $\rho(t) = U_t \rho U_t^\dagger$ の時間微分を計算してみよう：

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = \frac{dU_t}{dt} \rho U_t^\dagger + U_t \rho \frac{dU_t^\dagger}{dt} = -\frac{i}{\hbar} H \rho(t) + \frac{i}{\hbar} \rho(t) H = \frac{1}{i\hbar} [H, \rho(t)]. \quad (\text{E.1.1})$$

これより、Liouville-von Neumann 方程式

$$i\hbar \frac{d\rho}{dt} = [H, \rho] \quad (\text{E.1.2})$$

が得られる。これは Heisenberg 方程式と似ているが右辺の符号が異なるので注意。状態に対する Liouville-von Neumann 方程式は $i\hbar \frac{d\rho}{dt} = [H, \rho]$ で、演算子 A に対する Heisenberg 方程式は $i\hbar dA/dt = [A, H]$ となる。

トレースの性質に関するメモ

ここで少し、後の便宜を図るためにトレース操作の簡単な性質をおさらいしよう。ここで述べる性質は直接的な成分の計算によって証明が可能であるから、証明は各自に任せて結果を羅列することにする。

まず、トレース操作は線形性を持つ：

$$\text{Tr}[A + B] = \text{Tr}[A] + \text{Tr}[B], \quad (\text{E.1.3})$$

$$\text{Tr}[cA] = c\text{Tr}[A]. \quad (\text{E.1.4})$$

また、トレース演算は巡回性を持つ：

$$\mathrm{Tr}[AB] = \mathrm{Tr}[BA], \quad (\text{E.1.5})$$

$$\mathrm{Tr}[ABC] = \mathrm{Tr}[CAB] = \mathrm{Tr}[BCA], \quad (\text{E.1.6})$$

$$\dots, \quad (\text{E.1.7})$$

行列のテンソル積のトレースは、行列のトレースの積となる：

$$\mathrm{Tr}[A \otimes B] = \mathrm{Tr}[A] \mathrm{Tr}[B]. \quad (\text{E.1.8})$$

E.2 系と熱浴との相互作用

いよいよ量子系と熱浴の相互作用に関して、密度演算子を用いてみていこう。出発点は入出力理論（付録 8.3 参照）で用いた Hamiltonian と同じである。全体の Hamiltonian は $H_{tot} = H_s + H_b + H_i$ と書かれ、系の持つエネルギー H_s 、熱浴のエネルギー H_b および系と熱浴の相互作用 H_i である。調和振動子を興味のある系として、具体的な形に書き下すと

$$H_s = \hbar\omega_c a^\dagger a, \quad (\text{E.2.1})$$

$$H_b = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \hbar\omega c^\dagger(\omega)c(\omega), \quad (\text{E.2.2})$$

$$H_i = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \left[f(\omega) a^\dagger c(\omega) - f^*(\omega) c^\dagger(\omega) a \right] \quad (\text{E.2.3})$$

となる。ここで系と熱浴の結合定数は一般的に周波数に依存する形で $f(\omega)$ としてあるが、大抵の状況においては $\sqrt{\kappa}$ と定数で書かれる。さらに次の演算子を定義しよう：

$$R^- = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} f(\omega) c(\omega), \quad (\text{E.2.4})$$

$$R^+ = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} f^*(\omega) c^\dagger(\omega). \quad (\text{E.2.5})$$

これによって相互作用 Hamiltonian は

$$H_i = -i\hbar \left(a^\dagger R^- - a R^+ \right) \quad (\text{E.2.6})$$

と見やすい形になる。

ここで、相互作用表示での量子状態と演算子の時間発展について触れておく。証明は省略して結果のみを述べるが、これらの時間発展を記述する方程式は

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = H_i |\psi(t)\rangle, \quad (\text{E.2.7})$$

$$i\hbar \frac{d\rho(t)}{dt} = [H_i, \rho(t)], \quad (\text{E.2.8})$$

$$i\hbar \frac{dA(t)}{dt} = [A(t), H_s + H_b] \quad (\text{E.2.9})$$

であり、一つめは Tomonaga-Schwinger 方程式、二つめは Liouville-von Neumann 方程式、三つめは Heisenberg 方程式と呼ばれる。これらの方程式を眺めればわかることだが、相互作用表示においては状態は相互作用 Hamiltonian H_i によって時間発展し、演算子は“非摂動” Hamiltonian $H_s + H_b$ により時間発展する形である。もともとこの表示は量子電気力学における摂動展開において発明されたものである。

以降では Schrödinger 表示から相互作用表示に切り替えよう。密度演算子と Hamiltonian の相互作用表示への変換は

$$\tilde{\rho}(t) = e^{i\frac{H_s+H_b}{\hbar}t} \rho(t) e^{-i\frac{H_s+H_b}{\hbar}t}, \quad (\text{E.2.10})$$

$$\begin{aligned} \tilde{H}_i &= e^{i\frac{H_s+H_b}{\hbar}t} H_i e^{-i\frac{H_s+H_b}{\hbar}t} \\ &= -i\hbar \left(a^\dagger e^{i\omega ct} \tilde{R}^- - a e^{-i\omega ct} \tilde{R}^+ \right) \end{aligned} \quad (\text{E.2.11})$$

により行われるが、ここでは以下の量を定義した。

$$\tilde{R}^- = e^{i\frac{H_s+H_b}{\hbar}t} R^- e^{-i\frac{H_s+H_b}{\hbar}t} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} f(\omega) c(\omega) e^{-i\omega t}, \quad (\text{E.2.12})$$

$$\tilde{R}^+ = e^{i\frac{H_s+H_b}{\hbar}t} R^+ e^{-i\frac{H_s+H_b}{\hbar}t} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} f^*(\omega) c^\dagger(\omega) e^{i\omega t}. \quad (\text{E.2.13})$$

したがって相互作用表示での Liouville-von Neumann 方程式は、再掲となるが

$$i\hbar \frac{d\tilde{\rho}(t)}{dt} = \left[\tilde{H}_i(t), \tilde{\rho}(t) \right]. \quad (\text{E.2.14})$$

である。相互作用表示での議論が主となるため、以下では相互作用表示を表すチルダを省略する。

系と熱浴の相互作用のもとでの密度演算子のダイナミクスをより詳細に調べるために、Liouville-von Neumann 方程式を用いて密度演算子を微小時間 Δt だけ時間発展させてみる。密度演算子の微小変化 $\Delta\rho(t)$ は、

$$\begin{aligned} \Delta\rho(t) &= \rho(t + \Delta t) - \rho(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_t^{t+\Delta t} dt' [H_i(t'), \rho(t')] \\ &= \frac{1}{i\hbar} \int_t^{t+\Delta t} dt' [H_i(t'), \rho(t)] \\ &\quad + \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^2 \int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t'} dt'' [H_i(t'), [H_i(t''), \rho(t)]] \end{aligned} \quad (\text{E.2.15})$$

と、逐次展開の二次まで残す形で書ける。

ここでは系の部分のダイナミクスのみに興味があるから、興味のない部分は密度演算子でトレースを取ることで系についての縮約密度演算子 $\sigma(t) = \text{Tr}_b[\rho(t)]$ ならびに熱浴の縮約密度演算子 $\sigma_b(t) = \text{Tr}_s[\rho(t)]$ を考えよう。ここで大きな仮定として、全体の密度

演算子はこれらの二つの縮約密度演算子のテンソル積で書ける、すなわち系と熱浴は分離可能であるとしよう：

$$\rho(t) = \sigma(t) \otimes \sigma_b(t). \quad (\text{E.2.16})$$

これは系と熱浴の密度演算子に時間相関が存在しないことも表している。さらに、熱浴は定常的であること、すなわち $\sigma_b(t) = \sigma_b(0) = \sigma_b$ を要請する。これによって σ_b は熱浴の Hamiltonian H_b と可換になる。それでは $\Delta\rho(t)$ を熱浴についてトレースを取り、熱浴の自由度を消して系のダイナミクスを調べるとしよう。

$$\begin{aligned} \text{Tr}_b [\Delta\rho(t)] &= \frac{1}{i\hbar} \int_t^{t+\Delta t} dt' \text{Tr}_b [[H_i(t'), \rho(t)]] \\ &\quad + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t'} dt'' \text{Tr}_b [[H_i(t'), [H_i(t''), \rho(t)]]]. \end{aligned} \quad (\text{E.2.17})$$

ここで、右辺の第一項はゼロになる。実際、

$$\begin{aligned} \text{Tr}_b [[H_i(t'), \rho(t)]] &= \text{Tr}_b [[H_i(t'), \sigma(t) \otimes \sigma_b(t)]] \\ &= -i\hbar \left\{ a^\dagger e^{i\omega_c t'} \text{Tr}_b [R^-(t')\sigma_b] - a e^{-i\omega_c t'} \text{Tr}_b [R^+(t')\sigma_b] \right\} \sigma(t) \\ &\quad + i\hbar \sigma(t) \left\{ a^\dagger e^{i\omega_c t'} \text{Tr}_b [R^-(t')\sigma_b] - a e^{-i\omega_c t'} \text{Tr}_b [R^+(t')\sigma_b] \right\} \\ &= -i\hbar \left\{ a^\dagger e^{i\omega_c t'} \langle R^-(t') \rangle_b - a e^{-i\omega_c t'} \langle R^+(t') \rangle_b \right\} \sigma(t) \\ &\quad + i\hbar \sigma(t) \left\{ a^\dagger e^{i\omega_c t'} \langle R^-(t') \rangle_b - a e^{-i\omega_c t'} \langle R^+(t') \rangle_b \right\} \\ &= 0. \end{aligned} \quad (\text{E.2.18})$$

上記の計算では $\langle c(\omega) \rangle_b = \langle c^\dagger(\omega) \rangle_b = 0$ を用いている。 $\langle \cdot \rangle_b$ は熱浴の自由度に関する期待値を表しており、以降では下付き添え字 b を省略する。

すると、ゼロにならない右辺第二項を計算せねばならない。トレースの中の交換子を展開すると非常に雑多な項が現れるが、トレースを取ることによって8つの項のみがゼロとならず残る：

$$\begin{aligned} \frac{\text{Tr}_b [[H_i(t'), [H_i(t''), \rho(t)]]]}{(-i\hbar)^2} &= \\ &- \langle R^-(t')R^+(t'') \rangle a^\dagger(t')a(t'')\sigma(t) - \langle R^+(t')R^-(t'') \rangle a(t')a^\dagger(t'')\sigma(t) \\ &+ \langle R^-(t'')R^+(t') \rangle a(t')\sigma(t)a^\dagger(t'') + \langle R^+(t'')R^-(t') \rangle a^\dagger(t')\sigma(t)a(t'') \\ &+ \langle R^-(t')R^+(t'') \rangle a(t'')\sigma(t)a^\dagger(t') + \langle R^+(t')R^-(t'') \rangle a^\dagger(t'')\sigma(t)a(t') \\ &- \langle R^-(t'')R^+(t') \rangle \sigma(t)a^\dagger(t'')a(t') - \langle R^+(t'')R^-(t') \rangle \sigma(t)a(t'')a^\dagger(t'). \end{aligned} \quad (\text{E.2.19})$$

上式では調和振動子の演算子の時間依存する指数関数部分は演算子自身に含めて書いている： $a(t) = ae^{-i\omega_c t}$ および $a^\dagger(t) = a^\dagger e^{i\omega_c t}$ である。

上式から熱浴の演算子をなくすために、時間相関関数 $\langle R^-(t')R^+(t'') \rangle$ および $\langle R^+(t'')R^-(t') \rangle$ を評価しよう。これらは

$$\begin{aligned}
\langle R^-(t')R^+(t'') \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} f(\omega) f^*(\omega') \langle c(\omega) c^\dagger(\omega') \rangle e^{-i\omega t'} e^{i\omega' t''} \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} f(\omega) f^*(\omega') [\langle n(\omega) \rangle + 1] 2\pi \delta(\omega - \omega') e^{-i\omega t'} e^{i\omega' t''} \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} |f(\omega)|^2 [\langle n(\omega) \rangle + 1] e^{-i\omega(t'-t'')}, \\
\langle R^+(t'')R^-(t') \rangle &= \dots = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} |f(\omega)|^2 \langle n(\omega) \rangle e^{-i\omega(t'-t'')} \tag{E.2.20}
\end{aligned}$$

と計算される。これを t' と t'' について積分するが、 $\tau = t' - t''$ として

$$\int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t'} dt'' = \int_t^{t+\Delta t} dt' \int_0^{t'-t} d\tau = \int_0^{\Delta t} d\tau \int_{t+\tau}^{t+\Delta t} dt' \tag{E.2.21}$$

というように積分区間を変換する。さらに $\langle R^-(t')R^+(t'-\tau) \rangle$ と $\langle R^+(t'-\tau)R^-(t') \rangle$ が $\tau \ll \Delta t$ のときのみ非零の寄与を持つ、つまり熱浴の演算子の時間発展が乱雑でほとんどデルタ関数的な時間発展を持つとすると積分範囲を

$$\int_0^{\Delta t} d\tau \int_{t+\tau}^{t+\Delta t} dt' = \int_0^{\infty} d\tau \int_{t+\tau}^{t+\Delta t} dt' \simeq \int_0^{\infty} d\tau \int_t^{t+\Delta t} dt' \tag{E.2.22}$$

と広げられる。ここで注意したいのは、 $\Delta t \rightarrow +0$ がのちにとられるので、上記の仮定は Markov 近似、すなわち熱浴のダイナミクスは乱雑で時間相関がないという近似によって正当化される。これらの近似を用いることで次のように計算を進めることができる：

$$\begin{aligned}
\int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t'} dt'' [\langle R^-(t')R^+(t'') \rangle e^{i\omega_c(t'-t'')}] &= \Delta t \int_0^{\infty} d\tau \langle R^-(\tau)R^+(0) \rangle e^{i\omega_c \tau} \\
&= \Delta t \int_0^{\infty} d\tau \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} |f(\omega)|^2 [\langle n(\omega) \rangle + 1] e^{-i(\omega-\omega_c)\tau} e^{-\epsilon\tau}, \\
\int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t'} dt'' [\langle R^+(t'')R^-(t') \rangle e^{i\omega_c(t'-t'')}] &= \Delta t \int_0^{\infty} d\tau \langle R^+(0)R^-(\tau) \rangle e^{i\omega_c \tau} \\
&= \Delta t \int_0^{\infty} d\tau \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} |f(\omega)|^2 \langle n(\omega) \rangle e^{-i(\omega-\omega_c)\tau} e^{-\epsilon\tau}. \tag{E.2.23}
\end{aligned}$$

ここで収束因子 $e^{-\epsilon\tau}$ は $\omega = \omega_c$ で被積分関数が発散しないようにしている。これらの積

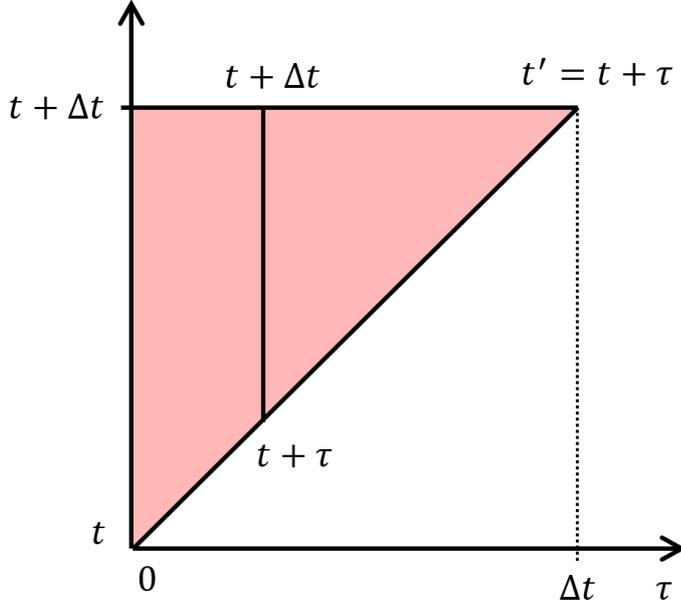


図 E.1: 積分の変数変換

分はさらに計算を進められて、

$$\begin{aligned}
 & \Delta t \int_0^\infty d\tau \int_{-\infty}^\infty \frac{d\omega}{2\pi} |f(\omega)|^2 [\langle n(\omega) \rangle + 1] e^{-i(\omega - \omega_c)\tau} e^{-\epsilon\tau} \\
 &= i \int_{-\infty}^\infty \frac{d\omega}{2\pi} |f(\omega)|^2 [\langle n(\omega) \rangle + 1] \left[-i \int_0^\infty d\tau e^{-i(\omega - \omega_c)\tau} e^{-\epsilon\tau} \right] \Delta t \\
 &= i \int_{-\infty}^\infty \frac{d\omega}{2\pi} |f(\omega)|^2 [\langle n(\omega) \rangle + 1] \frac{\Delta t}{(\omega_c - \omega) + i\epsilon} \\
 &\xrightarrow{\epsilon \rightarrow +0} \left[i\mathcal{P} \int_{-\infty}^\infty \frac{d\omega}{2\pi} \frac{|f(\omega)|^2 [\langle n(\omega) \rangle + 1]}{\omega_c - \omega} + \frac{1}{2} \int_{-\infty}^\infty d\omega |f(\omega)|^2 [\langle n(\omega) \rangle + 1] \delta(\omega_c - \omega) \right] \Delta t \\
 &= i(\Delta + \Delta') + \frac{\Gamma + \Gamma'}{2} \tag{E.2.24}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \Delta t \int_0^\infty d\tau \int_{-\infty}^\infty \frac{d\omega}{2\pi} |f(\omega)|^2 \langle n(\omega) \rangle e^{-i(\omega - \omega_c)\tau} e^{-\epsilon\tau} \\
 &= i \int_{-\infty}^\infty \frac{d\omega}{2\pi} |f(\omega)|^2 \langle n(\omega) \rangle \left[-i \int_0^\infty d\tau e^{-i(\omega - \omega_c)\tau} e^{-\epsilon\tau} \right] \Delta t \\
 &= i \int_{-\infty}^\infty \frac{d\omega}{2\pi} |f(\omega)|^2 \langle n(\omega) \rangle \frac{\Delta t}{(\omega_c - \omega) + i\epsilon} \\
 &\xrightarrow{\epsilon \rightarrow +0} \left[i\mathcal{P} \int_{-\infty}^\infty \frac{d\omega}{2\pi} \frac{|f(\omega)|^2 \langle n(\omega) \rangle}{\omega_c - \omega} + \frac{1}{2} \int_{-\infty}^\infty d\omega |f(\omega)|^2 \langle n(\omega) \rangle \delta(\omega_c - \omega) \right] \Delta t \\
 &= \left[i\Delta' + \frac{\Gamma'}{2} \right] \Delta t \tag{E.2.25}
 \end{aligned}$$

となる。ここで Dirac の恒等式 $\lim_{\epsilon \rightarrow +0} 1/[(\omega_c - \omega) + i\epsilon] = \mathcal{P}/(\omega_c - \omega) - i\pi\delta(\omega_c - \omega)$ を用いている。パラメータ Δ と Δ' は

$$\Delta = \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega |f(\omega)|^2}{2\pi \omega_c - \omega}, \quad (\text{E.2.26})$$

$$\Delta' = \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega |f(\omega)|^2 \langle n(\omega) \rangle}{2\pi \omega_c - \omega} \quad (\text{E.2.27})$$

で定義されるものであり、どちらも系と熱浴の結合による周波数シフトを表している。一方で Γ と Γ' は

$$\Gamma = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega |f(\omega)|^2 \delta(\omega_c - \omega) = |f(\omega_c)|^2, \quad (\text{E.2.28})$$

$$\Gamma' = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega |f(\omega)|^2 \langle n(\omega) \rangle \delta(\omega_c - \omega) = \langle n(\omega_c) \rangle \Gamma \quad (\text{E.2.29})$$

と書かれる量であり、 Γ は自然放出、つまり真空場による誘導放出に対応し、 Γ' は熱浴の熱分布に起因する誘導放出を表している。

ここまでに得られた結果を用いることで、 $d\sigma(t)/dt = \lim_{\Delta t \rightarrow +0} \text{Tr}_b [\Delta\rho(t)] / \Delta t$ という系の密度演算子の時間発展を表す量は

$$\begin{aligned} \frac{\partial\sigma(t)}{\partial t} = & -\frac{i}{\hbar} \left[\hbar\Delta a^\dagger a, \sigma(t) \right] + \frac{\Gamma + \Gamma'}{2} \left[2a\sigma(t)a^\dagger - a^\dagger a\sigma(t) - \sigma(t)a^\dagger a \right] \\ & + \frac{\Gamma'}{2} \left[2a^\dagger\sigma(t)a - aa^\dagger\sigma(t) - \sigma(t)aa^\dagger \right] \end{aligned} \quad (\text{E.2.30})$$

であり、Schrödinger 表示に戻すと次のようなものになることがわかる：

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma(t)}{dt} = & -\frac{i}{\hbar} \left[\hbar(\omega_c + \Delta)a^\dagger a, \sigma(t) \right] + \frac{\Gamma + \Gamma'}{2} \left[2a\sigma(t)a^\dagger - a^\dagger a\sigma(t) - \sigma(t)a^\dagger a \right] \\ & + \frac{\Gamma'}{2} \left[2a^\dagger\sigma(t)a - aa^\dagger\sigma(t) - \sigma(t)aa^\dagger \right]. \end{aligned} \quad (\text{E.2.31})$$

これが本節で目標としていた（量子）マスター方程式である。Lindblad 演算子

$$\mathcal{L}[A]\sigma(t) = 2A\sigma(t)A^\dagger - A^\dagger A\sigma(t) - \sigma(t)A^\dagger A \quad (\text{E.2.32})$$

を用いると、マスター方程式は

$$\frac{d\sigma(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \left[\hbar(\omega_c + \Delta)a^\dagger a, \sigma(t) \right] + \frac{1}{2}\mathcal{L} \left[\sqrt{\Gamma + \Gamma'}a \right] \sigma(t) + \frac{1}{2}\mathcal{L} \left[\sqrt{\Gamma'}a^\dagger \right] \sigma(t) \quad (\text{E.2.33})$$

とシンプルに書かれる。第一項は系自体のコヒーレントなダイナミクスを記述する。第二項と第三項は、非常に粗っぽい言い方をすれば熱浴への緩和と熱浴からの熱流入をそれぞれ表している。

E.3 レート方程式

マスター方程式を再掲する：

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma(t)}{dt} = & -\frac{i}{\hbar} \left[\hbar(\omega_c + \Delta)a^\dagger a, \sigma(t) \right] + \frac{\Gamma + \Gamma'}{2} \left[2a\sigma(t)a^\dagger - a^\dagger a\sigma(t) - \sigma(t)a^\dagger a \right] \\ & + \frac{\Gamma'}{2} \left[2a^\dagger\sigma(t)a - aa^\dagger\sigma(t) - \sigma(t)aa^\dagger \right]. \end{aligned} \quad (\text{E.3.1})$$

これはこのままでなんとなく演算子だらけで抽象的だが、状況に応じて様々な基底で演算子の成分を書き下す（状態ベクトルでサンドイッチする）ことでより具体的な系の時間発展の記述となる。ここではマスター方程式を Fock 基底 $\{|N\rangle\}$ で評価して、レート方程式と呼ばれるものを導出しよう。 $|N\rangle$ でマスター方程式をサンドイッチすれば、 $\Gamma_\uparrow = \Gamma'$ と $\Gamma_\downarrow = \Gamma + \Gamma'$ を用いて

$$\begin{aligned} \frac{dP(N)}{dt} = & (\Gamma + \Gamma') [(N+1)P(N+1) - NP(N)] + \Gamma' [NP(N-1) - (N+1)P(N)] \\ = & \Gamma_\downarrow [(N+1)P(N+1) - NP(N)] + \Gamma_\uparrow [NP(N-1) - (N+1)P(N)] \end{aligned} \quad (\text{E.3.2})$$

となり、レート方程式

$$\begin{aligned} \frac{d\langle N \rangle}{dt} = & \frac{d}{dt} \sum_N NP(N) \\ = & \sum_N N [(N+1)P(N+1)\Gamma_\downarrow + NP(N-1)\Gamma_\uparrow - (N+1)P(N)\Gamma_\uparrow - NP(N)\Gamma_\downarrow] \\ = & \Gamma_\uparrow \sum_N (N+1)P(N) - \Gamma_\downarrow \sum_N NP(N) \\ = & \Gamma_\uparrow \langle N+1 \rangle - \Gamma_\downarrow \langle N \rangle \\ = & -\Gamma \langle N \rangle + \Gamma' \\ = & -\Gamma \langle N \rangle + \Gamma \langle n(\omega_c) \rangle. \end{aligned} \quad (\text{E.3.3})$$

を得る。ここで、3行目の式変形に $\sum_{N=0}^{\infty} N^2 P(N) = \sum_{N=0}^{\infty} (N+1)^2 P(N+1)$ と $\sum_{N=0}^{\infty} N(N+1)P(N+1) = \sum_{N=0}^{\infty} (N-1)NP(N)$ を用いた。これは調和振動子の数分布のうち個数が N の状態について、第一項が $N+1$ の状態から N の状態へ Γ のレートで緩和してくる過程、第二項が熱浴から流入して過程を表している。

E.4 光 Bloch 方程式

次に、二準位系を考えてマスター方程式を $|g\rangle$ と $|e\rangle$ で評価しよう。二準位系の密度演算子 $\rho(t)$ に対するマスター方程式は次のように書かれる：

$$\begin{aligned} \frac{d\rho(t)}{dt} = & -\frac{i}{\hbar} [H_s, \rho(t)] + \frac{\Gamma + \Gamma'}{2} [2\sigma_- \rho(t) \sigma_+ - \sigma_+ \sigma_- \rho(t) - \rho(t) \sigma_+ \sigma_-] \\ & + \frac{\Gamma'}{2} [2\sigma_+ \rho(t) \sigma_- - \sigma_- \sigma_+ \rho(t) - \rho(t) \sigma_- \sigma_+]. \end{aligned} \quad (\text{E.4.1})$$

ここで系の Hamiltonian は $H_s = \hbar(\Delta_q/2)\sigma_z + \hbar(\Omega/2)(\sigma_+ + \sigma_-)$ としており、第二項は二準位系の電磁波による駆動を表している（付録 C も参照）。この両辺を $|g\rangle$ と $|e\rangle$ でサンドイッチして密度演算子の成分 $\rho_{ij} = \langle i | \rho | j \rangle$ に書き直すと、

$$\frac{d\rho_{ee}}{dt} = -(\Gamma + \Gamma')\rho_{ee} + \Gamma'\rho_{gg} + i\frac{\Omega}{2}(\rho_{eg} - \rho_{ge}), \quad (\text{E.4.2})$$

$$\frac{d\rho_{gg}}{dt} = (\Gamma + \Gamma')\rho_{ee} - \Gamma'\rho_{gg} - i\frac{\Omega}{2}(\rho_{eg} - \rho_{ge}), \quad (\text{E.4.3})$$

$$\frac{d\rho_{eg}}{dt} = \left(-i\frac{\Delta_q}{2} - \frac{\Gamma + 2\Gamma'}{2}\right)\rho_{eg} - i\frac{\Omega}{2}(\rho_{gg} - \rho_{ee}), \quad (\text{E.4.4})$$

$$\frac{d\rho_{ge}}{dt} = \left(i\frac{\Delta_q}{2} - \frac{\Gamma + 2\Gamma'}{2}\right)\rho_{ge} + i\frac{\Omega}{2}(\rho_{gg} - \rho_{ee}) \quad (\text{E.4.5})$$

となる。

これが得られれば目的の方程式はもうすぐそこである。ここではさらに二準位系の遷移周波数が光の領域 ($\hbar\omega_c \sim k_B \times 10\,000\text{ K}$) にあるとしよう。このとき熱浴 ($k_B \times 300\text{ K} = h \times 7\text{ THz}$) には光はほとんど“熱励起”されていない、つまりマスター方程式にあった緩和項に関して言うと $\langle n(\omega_c) \rangle = 1/(e^{\hbar\omega_c/k_B T} - 1) \simeq 0$ であるから $\Gamma' = 0$ となる。したがって上記の方程式の組は

$$\frac{d\rho_{ee}}{dt} = -\Gamma\rho_{ee} + i\frac{\Omega}{2}(\rho_{eg} - \rho_{ge}), \quad (\text{E.4.6})$$

$$\frac{d\rho_{gg}}{dt} = \Gamma\rho_{ee} - i\frac{\Omega}{2}(\rho_{eg} - \rho_{ge}), \quad (\text{E.4.7})$$

$$\frac{d\rho_{eg}}{dt} = \left(-i\Delta_q - \frac{\Gamma}{2}\right)\rho_{eg} - i\frac{\Omega}{2}(\rho_{gg} - \rho_{ee}), \quad (\text{E.4.8})$$

$$\frac{d\rho_{ge}}{dt} = \left(i\Delta_q - \frac{\Gamma}{2}\right)\rho_{ge} + i\frac{\Omega}{2}(\rho_{gg} - \rho_{ee}) \quad (\text{E.4.9})$$

と書かれる。これを光 Bloch 方程式という。 $w = \rho_{gg} - \rho_{ee}$ と置くことによって光 Bloch 方程式と $\rho_{gg} + \rho_{ee} = 1$ から導かれる $2\Gamma\rho_{ee} = \Gamma\rho_{ee} + \Gamma(1 - \rho_{gg}) = -\Gamma w + \Gamma$ から w 、すなわち二準位系の状態占有確率の差に関する方程式

$$\frac{dw}{dt} = -\Gamma w - i\Omega(\rho_{eg} - \rho_{eg}^*) + \Gamma, \quad (\text{E.4.10})$$

$$\frac{d\rho_{eg}}{dt} = \left(-i\Delta_q - \frac{\Gamma}{2}\right)\rho_{eg} - i\frac{\Omega}{2}w \quad (\text{E.4.11})$$

が得られる。この定常解を左辺をゼロと置いて求めると、 w と ρ_{ee} はそれぞれ

$$w = \frac{1}{1+s}, \quad (\text{E.4.12})$$

$$\rho_{ee} = \frac{1}{2} \frac{s}{1+s} = \frac{(\Omega/2)^2}{(\Delta_q)^2 + (\tilde{\Gamma}/2)^2} \quad (\text{E.4.13})$$

と書かれる。ただし

$$s = \frac{s_0}{1 + (2\Delta_q/\Gamma)^2}, \quad (\text{E.4.14})$$

$$s_0 = \frac{2\Omega^2}{\Gamma^2}, \quad (\text{E.4.15})$$

$$\tilde{\Gamma} = \Gamma\sqrt{1+s_0} \quad (\text{E.4.16})$$

と定義した。この表式からわかる重要な点はふたつある。ひとつは駆動電磁波が強くなるにつれて、基底状態と励起状態の占有確率はどちらも $1/2$ に漸近する。これは駆動による誘導吸収と誘導放出、そして自然放出が均衡した結果である。駆動電磁波が十分に強い場合には誘導吸収も誘導放出も自然放出よりもずっと大きなレートで起こり、誘導吸収と誘導放出のみの均衡になると思えば占有確率が $1/2$ に近づいていく理由も納得できるだろう。ふたつめのポイントは、実効的な電磁波の遷移の線幅が $\tilde{\Gamma}$ で与えられるわけだが、この線幅が駆動電磁波が強くなるにつれて広がっていくことである。これを遷移スペクトルのパワー広がりという。

付録F Schrieffer-Wolff変換

いろいろな粒子がそれぞれ孤立して存在している系では、系のエネルギーはそれぞれの粒子のエネルギーの和となる。例えば電磁波モード ($\mathcal{H}_{\text{EM}} = \hbar\omega_c a^\dagger a$) と二準位系 ($\mathcal{H}_{\text{TLS}} = \hbar\omega_q \sigma_z/2$) が相互作用していないようなときには、全体のエネルギーはそれぞれの和になり、Hamiltonian は $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{EM}} + \mathcal{H}_{\text{TLS}} = \hbar\omega_c a^\dagger a + \hbar\omega_q \sigma_z/2$ となる。しかしながら、これではつまらない。我々は常に相互作用する粒子を考えるし、相互作用する粒子はそれが単独で存在する場合とは異なる固有状態・固有エネルギーを持っているものだ。この固有エネルギーを求める作業は、相互作用を含めた Hamiltonian を行列として対角化することに対応している。相互作用があまりに強いと、解析的に固有エネルギーが求まる場合以外には大変難しい問題となる。しかしながら相互作用が“十分に”弱いときには摂動展開によって近似的に対角化された Hamiltonian を求めることができる。本節ではその方法として Schrieffer-Wolff 変換という手法を紹介する。

F.1 一般的な手順

もともとの Hamiltonian が $H = H_0 + \lambda V$ というように非摂動部分 H_0 と摂動（相互作用）部分 λV に分けて書かれているとしよう。 λ は摂動の次数がわかりやすいようにつけた係数で、最後に $\lambda = 1$ とすればよい。通常非摂動部分 H_0 は対角化されているものとし、非摂動項 λV は非対角要素を含むようなものになっている。 S を何らかの演算子として、Hamiltonian を $e^{\lambda S}$ でユニタリ変換しよう：

$$e^{\lambda S} H e^{-\lambda S} = H_0 + \lambda V + \lambda [S, H_0] + \lambda^2 [S, V] + \frac{\lambda^2}{2!} [S, [S, H_0]] + \frac{\lambda^3}{2!} [S, [S, V]] + \dots \quad (\text{F.1.1})$$

ここで e^S がユニタリ演算子であるためには S が反 Hermite すなわち $S^\dagger = -S$ でなければならない。 λ の一次の項が消えるようにするためには

$$[H_0, S] = V \quad (\text{F.1.2})$$

となるように反 Hermite 演算子 S を決める必要がある。このもとの Hamiltonian は一次までは対角化されて

$$H_{\text{eff}} = e^{\lambda S} H e^{-\lambda S} = H_0 + \frac{\lambda^2}{2!} [S, V] + \mathcal{O}(\lambda^3). \quad (\text{F.1.3})$$

という有効 Hamiltonian が得られる。反 Hermite 演算子 S の決め方は“経験と勘”によるところが大きく、以下で実例を見ることでその雰囲気を感じてもらいたい。

F.2 頻出する例

F.2.1 駆動されたスピン系

例として駆動されたスピン系を表す Hamiltonian

$$H = \omega s_z + g(s_+ + s_-) \quad (\text{F.2.1})$$

をみる。ここで $\hbar = 1$ とし、さらにスピン演算子 s_z, s_+ および s_- は交換関係 $[s_z, s_\pm] = \pm s_\pm$, $[s_+, s_-] = 2s_z$ を満たすものとする。反 Hermite 演算子 S としては $S = \alpha(s_+ - s_-)$ を用い、計算の最後に Hamiltonian が対角化されるような α を決めることとしよう。では実際に $U = \exp[\alpha(s_+ - s_-)]$ によって Schrieffer-Wolff 変換を施してみる：

$$\begin{aligned} UHU^\dagger &= \omega s_z + g(s_+ + s_-) + [\alpha(s_+ - s_-), \omega s_z] + [\alpha(s_+ - s_-), g(s_+ + s_-)] \\ &\quad + \frac{1}{2!} [\alpha(s_+ - s_-), [\alpha(s_+ - s_-), \omega s_z]] + \frac{1}{2!} [\alpha(s_+ - s_-), [\alpha(s_+ - s_-), g(s_+ + s_-)]] + \dots \\ &= \omega s_z + g(s_+ + s_-) - \alpha [\omega(s_+ + s_-) - 4gs_z] - \frac{1}{2!} \alpha^2 [4\omega s_z + 4g(s_+ + s_-)] \\ &\quad + \frac{1}{3!} \alpha^3 [4\omega(s_+ + s_-) - 16gs_z] + \dots \\ &= s_z \left[\omega \left(1 - \frac{(2\alpha)^2}{2!} + \dots \right) + 2g \left(2\alpha - \frac{(2\alpha)^3}{3!} + \dots \right) \right] \\ &\quad + (s_+ + s_-) \left[g \left(1 - \frac{(2\alpha)^2}{2!} + \dots \right) - \frac{\omega}{2} \left(2\alpha - \frac{(2\alpha)^3}{3!} + \dots \right) \right] \\ &= [\omega \cos 2\alpha + 2g \sin 2\alpha] s_z + \left[g \cos 2\alpha - \frac{\omega}{2} \sin 2\alpha \right] (s_+ + s_-) \quad (\text{F.2.2}) \end{aligned}$$

さて、ここまで計算したところで、非対角項を消すという目的を思い出そう。このためには

$$\tan 2\alpha = \frac{2g}{\omega} \quad (\text{F.2.3})$$

とすれば任意の次数の摂動において非対角項が消えることになる。これより

$$\cos 2\alpha = \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{4g^2}{\omega^2}}}, \quad \sin 2\alpha = \frac{\frac{2g}{\omega}}{\sqrt{1 + \frac{4g^2}{\omega^2}}} \quad (\text{F.2.4})$$

であるから、対角化された Hamiltonian は次のように求まる：

$$H_{eff} = \omega s_z \sqrt{1 + \frac{4g^2}{\omega^2}}. \quad (\text{F.2.5})$$

この Hamiltonian から、スピンを駆動する強さを強くしていくにしたがってスピンの基底状態と励起状態のエネルギー差が大きくなっていくことがわかる。これは共鳴条件での AC Stark シフトとみることができる。

F.2.2 駆動されたスピン系の一般化

ここでは、次の形にかけるような、駆動されたスピン系が一般化されたものを考えよう：

$$H = \Delta X_z + g(X_+ + X_-) \quad (\text{F.2.6})$$

ただし演算子は $[X_z, X_\pm] = \pm X_\pm$ と $[X_+, X_-] = P(X_z)$ を満たすものとする。 $P(X_z)$ は X_z の多項式である。上記の Hamiltonian の第二項が摂動として扱われるが、これを摂動として扱える条件として $g/\Delta \ll 1$ を要請しよう。実際の例としては $X_+ = a\sigma_+/2$ 、 $X_- = a^\dagger\sigma_-/2$ 、 $X_z = \sigma_z/2$ として Jaynes-Cummings Hamiltonian の分散領域を調べるときなどがある。ともあれ、上記の Hamiltonian を近似的に対角化するユニタリ変換として $U = \exp[(g/\Delta)(X_+ - X_-)]$ を用いることができる。変換後の有効 Hamiltonian は、摂動の二次まで取ると

$$H_{eff} = \Delta X_z + \frac{g^2}{\Delta} P(X_z). \quad (\text{F.2.7})$$

であり、対角化されていることがわかる。

付録G Heisenberg Hamiltonianから SWAPゲートの導出

出発点は Heisenberg 相互作用

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = \hbar g \frac{\sigma_x \sigma_x + \sigma_y \sigma_y + \sigma_z \sigma_z}{2}. \quad (\text{G.0.1})$$

である。これを指数関数の肩に乗せる前に、 $D = \sigma_x \sigma_x + \sigma_y \sigma_y + \sigma_z \sigma_z$ の標識をあらわに求め、さらにその累乗 D^n を計算しておこう。まずは D の具体的な形だが、

$$\begin{aligned} D &= \sigma_x \sigma_x + \sigma_y \sigma_y + \sigma_z \sigma_z \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{G.0.2})$$

となる。 D はブロック対角行列の形になっているから、ブロック行列を対角化すればよい。すると、

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} -1 & 2 \\ 2 & -1 \end{pmatrix}^n &= \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -3 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \right]^n \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & (-3)^n \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \frac{1+(-3)^n}{2} & \frac{1-(-3)^n}{2} \\ \frac{1-(-3)^n}{2} & \frac{1+(-3)^n}{2} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{G.0.3})$$

のように D^n が計算できる。次に $e^{-iD\alpha}$ を計算しよう。これは定義より $\sum_{n=0}^{\infty} (-iD\alpha)^n/n!$ と展開できるので、

$$e^{-iD\alpha} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n \alpha^n}{n!} D^n$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n \alpha^n}{n!} \left[\text{diag}(1, 0, 0, 1) + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1+(-3)^n}{2} & \frac{1-(-3)^n}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1-(-3)^n}{2} & \frac{1+(-3)^n}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right] \quad (\text{G.0.4})$$

$$= \text{diag}(e^{-i\alpha}, 0, 0, e^{-i\alpha}) + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{e^{-i\alpha} + e^{3i\alpha}}{2} & \frac{e^{-i\alpha} - e^{3i\alpha}}{2} & 0 \\ 0 & \frac{e^{-i\alpha} - e^{3i\alpha}}{2} & \frac{e^{-i\alpha} + e^{3i\alpha}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} e^{-i\alpha} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{e^{-i\alpha} + e^{3i\alpha}}{2} & \frac{e^{-i\alpha} - e^{3i\alpha}}{2} & 0 \\ 0 & \frac{e^{-i\alpha} - e^{3i\alpha}}{2} & \frac{e^{-i\alpha} + e^{3i\alpha}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i\alpha} \end{pmatrix} \quad (\text{G.0.5})$$

である。したがって、最終的に

$$e^{-ig \frac{\sigma_x \sigma_x + \sigma_y \sigma_y + \sigma_z \sigma_z}{2} t} = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{g}{2}t} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{e^{-i\frac{g}{2}t} + e^{3i\frac{g}{2}t}}{2} & \frac{e^{-i\frac{g}{2}t} - e^{3i\frac{g}{2}t}}{2} & 0 \\ 0 & \frac{e^{-i\frac{g}{2}t} - e^{3i\frac{g}{2}t}}{2} & \frac{e^{-i\frac{g}{2}t} + e^{3i\frac{g}{2}t}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i\frac{g}{2}t} \end{pmatrix}. \quad (\text{G.0.6})$$

という結果を得る。

付録H オプトメカニクスと共振器冷却

H.1 機械振動モードのサイドバンド冷却

H.1.1 量子ノイズスペクトルとレート方程式

共振器オプトメカニクス系のハイライトであるフォノンのサイドバンド冷却について、本節では定量的に述べていこう。前節で述べたように、このサイドバンド冷却はレッドサイドバンド遷移を駆動して達成される。なお、イオントラップにおけるサイドバンド冷却と（ほとんど同じだが）区別して共振器冷却と呼ぶことも多い。

何が起こるか、そしてどのくらいまで冷却することができるかを定量的に見るために、量子ノイズを用いたアプローチを試みよう。量子力学における物理量のノイズスペクトルは

$$S_{cc}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i\omega\tau} \langle c(\tau)c(0) \rangle \quad (\text{H.1.1})$$

と古典的な量と同様に定義される。ここで $\langle \cdot \rangle$ は期待位置を取ることを表している。 $c(t)$ が演算子とその期待値の差であるならば、 S_{cc} はまさしくノイズスペクトルとなる。ここでは機械振動との結合がある状況における光のノイズスペクトルに興味があり、そのノイズスペクトルから何がわかるかを見ていきたい。

相互作用部分における光のノイズは次のように書かれる：

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = \hbar g_0 \left(a^\dagger a - \langle a^\dagger a \rangle \right) (b + b^\dagger) = \hbar g_0 \nu(t) (b + b^\dagger). \quad (\text{H.1.2})$$

ここで相互作用部分の位相を回して符号を正に変えてある。このオプトメカニカル相互作用は摂動としてはたらくため、相互作用表示に移ることで見通しが良くなることが期待される。Schrödinger 表示でのフォノンの Fock 状態を $|N\rangle$ ($b^\dagger b|N\rangle = N|N\rangle$ をみたす) とすると相互作用表示では $|N, t\rangle = U_I(t)|N\rangle$ と書けて、ユニタリ演算子 $U_I(t)$ は

$$i\hbar \frac{\partial U_I(t)}{\partial t} = \mathcal{H}_{\text{int}}^I(t) U_I(t) \quad (\text{H.1.3})$$

に従って時間発展する。ここで

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{int}}^I(t) &= e^{i\frac{\mathcal{H}_0}{\hbar}t} \mathcal{H}_{\text{int}} e^{-i\frac{\mathcal{H}_0}{\hbar}t} \\ &= \hbar g_0 \nu(t) (b e^{-i\omega_m t} + b^\dagger e^{i\omega_m t}) \end{aligned} \quad (\text{H.1.4})$$

である。この方程式の形式的な解を展開していくと、

$$\begin{aligned}
U_I(t) &= 1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \mathcal{H}_{\text{int}}^I(\tau) U_I(\tau) \\
&= 1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \mathcal{H}_{\text{int}}^I(\tau) \left[1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau' \mathcal{H}_{\text{int}}^I(\tau') (1 + \dots) \right] \\
&\simeq 1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \mathcal{H}_{\text{int}}^I(\tau)
\end{aligned} \tag{H.1.5}$$

と一次までで書ける。次に相互作用を時間 t だけ経験した後に $|N, t\rangle$ が $|N \pm 1\rangle$ へと変化するような事象の確率振幅 $\alpha_{N \rightarrow N \pm 1}$ を求めたい。

$$\begin{aligned}
\alpha_{N \rightarrow N+1} &= \langle N+1 | N, t \rangle \\
&= \langle N+1 | N \rangle - ig_0 \int_0^t d\tau \nu(\tau) \langle N+1 | b e^{-i\omega_m \tau} + b^\dagger e^{i\omega_m \tau} | N \rangle \\
&= -ig_0 \int_0^t d\tau \nu(\tau) \left[\langle N+1 | b | N \rangle e^{-i\omega_m \tau} + \langle N+1 | b^\dagger | N \rangle e^{i\omega_m \tau} \right] \\
&= -ig\sqrt{N+1} \int_0^t d\tau \nu(\tau) e^{i\omega_m \tau}, \\
\alpha_{N \rightarrow N-1} &= \dots \\
&= -ig\sqrt{N} \int_0^t d\tau \nu(\tau) e^{-i\omega_m \tau}
\end{aligned} \tag{H.1.6}$$

と計算を進められるから、 α の二乗を取ることで時間発展後に $|N \pm 1\rangle$ に系を見出す確率を得ることができる：

$$\begin{aligned}
P_{N \rightarrow N+1} &= \langle \alpha_{N \rightarrow N+1}^* \alpha_{N \rightarrow N+1} \rangle = g_0^2 (N+1) \int_0^t d\tau \int_0^t d\tau' \langle \nu(\tau) \nu(\tau') \rangle e^{-i\omega_m(\tau-\tau')} \\
&= g_0^2 (N+1) \int_0^t d\tau S_{\nu\nu}(-\omega_m) \\
&= g_0^2 (N+1) t S_{\nu\nu}(-\omega_m),
\end{aligned} \tag{H.1.7}$$

$$\begin{aligned}
P_{N \rightarrow N-1} &= \langle \alpha_{N \rightarrow N-1}^* \alpha_{N \rightarrow N-1} \rangle = \dots \\
&= g_0^2 N t S_{\nu\nu}(\omega_m).
\end{aligned} \tag{H.1.8}$$

ここで相関関数の Fourier 変換がスペクトルを与えるという Wiener-Khinchin の定理を用いるために、上式一行目のノイズの相関関数が $\tau = \tau'$ 付近のみで有限の値をもつとし、積分範囲を無限大まで拡張するなどしている。これらの式から、上記の二つの過程の遷移レートは

$$\Gamma_{N \rightarrow N+1} = \frac{dP_{N \rightarrow N+1}}{dt} = g_0^2 (N+1) S_{\nu\nu}(-\omega_m) = (N+1) \Gamma_{\uparrow}, \tag{H.1.9}$$

$$\Gamma_{N \rightarrow N-1} = \frac{dP_{N \rightarrow N-1}}{dt} = g_0^2 N S_{\nu\nu}(\omega_m) = N \Gamma_{\downarrow} \tag{H.1.10}$$

と求まる。ここまでくれば、量子ノイズスペクトルが遷移レートと密接なかかわりを持っており、共振器オプトメカニクスにおいて重要な役割を果たすことがわかるであろう。ここで遷移レート

$$\Gamma_{\uparrow} = g_0^2 S_{\nu\nu}(-\omega_m) \quad (\text{H.1.11})$$

$$\Gamma_{\downarrow} = g_0^2 S_{\nu\nu}(\omega_m) \quad (\text{H.1.12})$$

は、それぞれフォノンが一つ増える過程と一つ減る過程に対応している。

$S_{\nu\nu}(\omega)$ の具体的な形を求める前に、フォノン数状態のダイナミクスに関してもう一步踏み込んで調べておこう。ここで調べたいのは、フォノン数の期待値 $\langle N \rangle = \sum_N NP(N)$ の時間変化である。これは次のように変形していくことができる：

$$\begin{aligned} \frac{d\langle N \rangle}{dt} &= \frac{d}{dt} \sum_N NP(N) \\ &= \sum_N N [(N+1)P(N+1)\Gamma_{\downarrow} + NP(N-1)\Gamma_{\uparrow} - (N+1)P(N)\Gamma_{\uparrow} - NP(N)\Gamma_{\downarrow}] \\ &= \Gamma_{\uparrow} \sum_N (N+1)P(N) - \sum_N \Gamma_{\downarrow} NP(N) \\ &= \Gamma_{\uparrow} \langle N+1 \rangle - \Gamma_{\downarrow} \langle N \rangle \\ &= -(\Gamma_{\downarrow} - \Gamma_{\uparrow}) \langle N \rangle + \Gamma_{\uparrow} \\ &= -\Gamma_{opt} \langle N \rangle + \Gamma_{\uparrow}. \end{aligned} \quad (\text{H.1.13})$$

ここで、式変形に $\sum_{N=0}^{\infty} N^2 P(N) = \sum_{N=0}^{\infty} (N+1)^2 P(N+1)$ と $\sum_{N=0}^{\infty} N(N+1)P(N+1) = \sum_{N=0}^{\infty} (N-1)NP(N)$ を用いた。これがフォノンが本来持つ緩和を考慮しない場合の機械振動子のフォノンのレート方程式である。 $\Gamma_{opt} = \Gamma_{\downarrow} - \Gamma_{\uparrow}$ は光による減衰効果を表しており、共振器冷却の本質を担う項である。フォノン自体の緩和レート Γ_m と、平均フォノン数 n_{th} の熱浴の影響を取り入れる場合、レート方程式は

$$\begin{aligned} \frac{d\langle N \rangle}{dt} &= \Gamma_{\uparrow} \langle N+1 \rangle - \Gamma_{\downarrow} \langle N \rangle + \langle N+1 \rangle \Gamma_{\uparrow}^{th} - \langle N \rangle \Gamma_{\downarrow}^{th} \\ &= -(\Gamma_{opt} + \Gamma_m) \langle N \rangle + \Gamma_{\uparrow} + n_{th} \Gamma_m \end{aligned} \quad (\text{H.1.14})$$

と修正を受ける。ここで $\Gamma_{\uparrow}^{th} = n_{th} \Gamma_m$ 、 $\Gamma_{\downarrow}^{th} = (n_{th} + 1) \Gamma_m$ である。共振器冷却の結果最終的に得られるフォノン数の期待値は

$$\langle N \rangle_{t \rightarrow \infty} = \frac{\Gamma_{\uparrow} + n_{th} \Gamma_m}{\Gamma_{opt} + \Gamma_m} \quad (\text{H.1.15})$$

となる。

H.1.2 共振器冷却の冷却限界

前節の最後に得た表式から共振器冷却によってどこまでフォノン数を減らせるかを知るためには、量子ノイズスペクトル

$$S_{\nu\nu}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i\omega\tau} \langle \nu(\tau)\nu(0) \rangle \quad (\text{H.1.16})$$

を評価する必要がある。ここで $\nu(t) = a^\dagger a - \langle a^\dagger a \rangle$ である。これを $\langle \nu(\tau)\nu(0) \rangle$ に代入し、

$$\begin{aligned} \langle \nu(\tau)\nu(0) \rangle &= \left\langle \left(a^\dagger(\tau)a(\tau) - \langle a^\dagger(\tau)a(\tau) \rangle \right) \left(a^\dagger(0)a(0) - \langle a^\dagger(0)a(0) \rangle \right) \right\rangle \\ &= \left\langle a^\dagger(\tau)a(\tau)a^\dagger(0)a(0) - a^\dagger(\tau)a(\tau) \langle a^\dagger(0)a(0) \rangle \right. \\ &\quad \left. - \langle a^\dagger(0)a(0) \langle a^\dagger(\tau)a(\tau) \rangle + \langle a^\dagger(\tau)a(\tau) \rangle \langle a^\dagger(0)a(0) \rangle \right\rangle \\ &= \left\langle a^\dagger(\tau)a(\tau)a^\dagger(0)a(0) \right\rangle - 2 \left\langle a^\dagger(0)a(0) \right\rangle^2 + \left\langle a^\dagger(0)a(0) \right\rangle^2 \\ &= \left\langle a^\dagger(\tau)a(\tau)a^\dagger(0)a(0) \right\rangle - n_{\text{cav}}^2. \end{aligned} \quad (\text{H.1.17})$$

と変形しよう。光子の演算子 a が $a(t) = [\alpha + d(t)] e^{-i\omega t}$ と書かれており、 α がコヒーレントな振幅、 $d(t)$ がそのゆらぎを表すものとしよう。 a が状態に作用するときには $d(t)|\psi(t)\rangle = \langle \psi(t)|d^\dagger(t) = 0$ として $a(t)|\psi(t)\rangle = \alpha e^{-i\omega t} |\psi(t)\rangle$ が成立する。 $\langle a^\dagger(\tau)a(\tau)a^\dagger(0)a(0) \rangle$ を計算するにあたり、ゼロにならないのは d が一番左に、 d^\dagger が一番右に来るようなものと演算子を全く含まないものになって、

$$\begin{aligned} \langle \nu(\tau)\nu(0) \rangle &= \left\langle a^\dagger(\tau)a(\tau)a^\dagger(0)a(0) \right\rangle - n_{\text{cav}}^2 \\ &= \alpha^* \alpha \alpha^* \alpha + \alpha^* \alpha \left\langle d(\tau)d^\dagger(0) \right\rangle - n_{\text{cav}}^2 \\ &= n_{\text{cav}} \left\langle d(\tau)d^\dagger(0) \right\rangle \end{aligned} \quad (\text{H.1.18})$$

となる。ここに至って $\langle d(\tau)d^\dagger(0) \rangle$ という項が出てきた。一見取っ付き難そうであるが、“quantum regression theorem” [22] (あえて日本語訳するなら量子回帰定理だろうか) によって $\langle d(\tau)d^\dagger(0) \rangle$ の時間発展を $d(t)$ の時間発展と同じ方程式で記述してよい。すなわち κ を共振器の緩和レートとして

$$\frac{d\langle d(\tau)d^\dagger(0) \rangle}{dt} = -i\Delta_c \langle d(\tau)d^\dagger(0) \rangle \mp \frac{\kappa}{2} \langle d(\tau)d^\dagger(0) \rangle \quad \text{for } t0, \quad (\text{H.1.19})$$

が成立するから、素直に解いて $\langle d(\tau)d^\dagger(0) \rangle = \exp[-i\Delta_c t - (\kappa/2)t]$ を得る。ただし $\Delta_c = \omega_c - \omega_l$ である。これにより、量子ノイズスペクトルがあらわに計算できるようになって

$$\begin{aligned} S_{\nu\nu}(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i\omega\tau} \exp\left[-i\Delta_c t - \frac{\kappa}{2}t\right] \\ &= \frac{\kappa n_{\text{cav}}}{(\Delta_c - \omega)^2 + (\kappa/2)^2} \end{aligned} \quad (\text{H.1.20})$$

という表式が得られる。レート方程式には $S_{\nu\nu}(\pm\omega_m)$ という形でノイズスペクトルが現れたが、これらは光に対して機械振動が引き起こした変調によるノイズ（あるいは信号）で有る登理解することができ、 $\pm\omega_m$ に Lorentz 関数のピークを呈する。

これまでの結果を用いれば Γ_{\uparrow} と Γ_{opt} もすぐに計算することができる：

$$\begin{aligned}\Gamma_{\uparrow} &= g_0^2 S_{\nu\nu}(-\omega_m) \\ &= g_0^2 \frac{\kappa}{(\Delta_c + \omega_m)^2 + (\kappa/2)^2} n_{cav}\end{aligned}\quad (\text{H.1.21})$$

$$\begin{aligned}\Gamma_{opt} &= g_0^2 [S_{\nu\nu}(\omega_m) - S_{\nu\nu}(-\omega_m)] \\ &= g_0^2 \left[\frac{\kappa}{(\Delta_c - \omega_m)^2 + (\kappa/2)^2} - \frac{\kappa}{(\Delta_c + \omega_m)^2 + (\kappa/2)^2} \right] n_{cav}.\end{aligned}\quad (\text{H.1.22})$$

それでは共振器冷却で到達可能な平均フォノン数の限界をもう一度見てみよう：

$$\langle N \rangle_{t \rightarrow \infty} = \frac{\Gamma_{\uparrow} + n_{th} \Gamma_m}{\Gamma_{opt} + \Gamma_m}.\quad (\text{H.1.23})$$

大抵の場合には共振器の線幅よりもフォノンの周波数の方が大きく、ノイズスペクトルが共振器のスペクトルと分離できる。これをサイドバンド分解領域 (resolved sideband regime) という。 Γ_{opt} が Γ_m よりも十分小さい場合には $\langle N \rangle_{t \rightarrow \infty} = n_{th}$ が自明に成立する、すなわちフォノンは熱浴と平衡状態にあって、同じ温度で熱分布している。光の駆動を強くして $\Gamma_{opt} \gg \Gamma_m$ を達成した場合、

$$\langle N \rangle_{t \rightarrow \infty} = \frac{\Gamma_{\uparrow}}{\Gamma_{opt}} = \frac{(\Delta_c - \omega_m)^2 + (\kappa/2)^2}{4\omega_m \Delta_c}\quad (\text{H.1.24})$$

となつて $\Delta_c = \omega_m$ 、つまり駆動レーザーがレッドサイドバンドにぴったり共鳴するとき最も良いフォノン数の冷却限界 $\kappa^2/16\omega_m^2$ が得られる。いま $\kappa \ll \omega_m$ であるから $\kappa^2/16\omega_m^2$ は 1 よりもずっと小さい、すなわち機械振動子のフォノンモードは量子基底状態に限りなく近いところまで冷却することが可能である。

付録I 量子もつれとその応用

この付録では量子もつれとその有名かつ有用な応用例としての量子テレポーテーションとエンタングルメントスワッピングについて述べる。

I.1 分離可能状態と量子もつれ状態

1と2でラベルがつけられた二つの量子系があったとしよう。この二つの量子系の合成系は例えば $|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \stackrel{\text{def}}{=} |\psi_1\psi_2\rangle$ のようにかける。これはふたつの量子系が別々に扱えるという点で我々の直感に合った合成系である。このように、合成系の量子状態がそれを構成する各量子系の量子状態の直積 \otimes で書けるような場合、その合成系の量子状態は分離可能 (separable) であるという。密度演算子で混合状態まで含めた一般的な場合について書くと、合成系の量子状態 ρ が分離可能であるとき、確率 p_i と各部分系の密度演算子 ρ_1^i と ρ_2^i を用いて $\rho = \sum_i p_i \rho_1^i \otimes \rho_2^i$ と書ける。

一方で、分離可能状態のように各部分系の状態の直積に分解できない状態も存在する。もっとも有名なのは Bell 状態 $|\Psi_{12}^{\pm}\rangle = (|e_1g_2\rangle \pm |g_1e_2\rangle)/\sqrt{2}$ と $|\Phi_{12}^{\pm}\rangle = (|e_1e_2\rangle \pm |g_1g_2\rangle)/\sqrt{2}$ だろう。4つの Bell 状態は二量子ビット系の完全正規直交系をなし、かつ分離可能状態のように部分系の直積の形に書くことが不可能であることが背理法により簡単に証明できる。ほかの例としては Schrödinger の猫状態 $(|g\rangle|\alpha\rangle + |e\rangle|-\alpha\rangle)/\sqrt{2}$ ($|\pm\alpha\rangle$ は調和振動子のコヒーレント状態)、Greenberger-Horne-Zeilinger (GHZ) 状態 $(|g\cdots g\rangle + |e\cdots e\rangle)/\sqrt{2}$ 、ふたつの調和振動子からなる N00N (“noon” とよむ) 状態 $(|N\rangle|0\rangle + |0\rangle|N\rangle)/\sqrt{2}$ といったものがある。これらのように分離可能状態でないものを量子もつれ状態あるいはエンタングルド状態という。

I.2 量子もつれの尺度

ここではある量子状態にどのくらい量子もつれがあるかを計る尺度について述べよう。この尺度としてはいろいろなものがあり、一般の量子状態に対して満足のいく尺度となる量はまだわかっていない。しかしながら2量子ビット系に対しては量子もつれの存在とその度合いを表すよい尺度が存在する。純粋状態に対して良い尺度となるエンタングルメントエントロピーと、混合状態に対しても良い尺度となるネガティビティについて述べよう。

I.2.1 エンタングルメントエントロピー

合成系のうちある部分系のみに着目した密度演算子を縮約密度演算子というが、量子もつれの存在はこの縮約密度演算子に影響を及ぼすことを以下にみる。そしてこの縮約密度演算子に対する von Neumann エントロピーがエンタングルメントエントロピーと呼ばれる量である。

1 と 2 でラベルがつけられた二つの量子系の合成系を考えると、縮約密度演算子 $\tilde{\rho}_1$ あるいは $\tilde{\rho}_2$ は合成系の密度演算子 ρ_{12} を片方の部分系についてトレースを取ったものである。きちんとかくと $\tilde{\rho}_1 = \text{Tr}_2 \rho_{12}$ あるいは $\tilde{\rho}_2 = \text{Tr}_1 \rho_{12}$ である。分離可能状態 $|\Psi_0\rangle = |g_1\rangle(|g_2\rangle + |e_2\rangle)/\sqrt{2}$ と Bell 状態 $|\Phi^+\rangle = (|g_1, g_2\rangle + |e_1, e_2\rangle)/\sqrt{2}$ の二つの例について考えてみよう。分離可能状態 $|\Psi_0\rangle$ の縮約密度演算子は極めて簡単に計算できて、 $\tilde{\rho}_1 = |g_1\rangle\langle g_1|$ と $\tilde{\rho}_2 = (|g_2\rangle + |e_2\rangle)(\langle g_2| + \langle e_2|)/2$ でどちらももとの密度演算子を構成する各部分系の純粋状態を保っている。一方で、Bell 状態 $|\Phi^+\rangle$ の縮約密度演算子は、トレースを計算すると $\tilde{\rho}_1 = I/2$ と $\tilde{\rho}_2 = I/2$ になり、どちらも完全混合状態になってしまうのである。つまり、量子もつれ状態は片方の量子系のみに着目すると量子状態が完全に壊れてしまうという、不思議な性質を持っている。量子もつれ状態はもつれているすべての部分系を一緒に扱わないといけないということでもある。

情報理論の Shannon エントロピーに倣って密度演算子 ρ でかかれる量子状態の von Neumann エントロピーを $-\text{Tr}[\rho \log \rho]$ で定義する。純粋状態 $|\psi\rangle$ に対しては、その密度演算子の固有値を λ_k とすると $-\text{Tr}[\rho \log \rho] = -\sum_k \lambda_k \log \lambda_k = 0$ という計算から von Neumann エントロピーがゼロとなることがわかる。なぜかという、純粋状態については適切な基底を選べば固有値がひとつは 1 でほかは 0 になるようにできるからである。具体的には $|\psi\rangle$ から始めて Schmidt 分解によって直交基底を構成する。 $1 \log 1 = 0$ はいいだろうが、 $0 \log 0$ については $\lim_{x \rightarrow +0} x \log x = 0$ を用いた。純粋状態はエントロピーが最も小さい状態だというのは理解できるだろう。完全混合状態 $I/2$ については、 $-\text{Tr}[(I/2) \log (I/2)] = -(1/2) \log (1/2) - (1/2) \log (1/2) = \log 2$ である。完全混合状態が最もエントロピーが大きいというのも納得できるだろう。

準備は整ったので、量子もつれを計る尺度の一つであるエンタングルメントエントロピーを導入しよう。エンタングルメントエントロピーは、縮約密度演算子の von Neumann エントロピーとして

$$S_1 = -\text{Tr}[\rho_1 \log \rho_1], \quad S_2 = -\text{Tr}[\rho_2 \log \rho_2] \quad (\text{I.2.1})$$

で定義される量である。前述の合成系の量子状態 $|\Psi_0\rangle$ については、縮約密度演算子がどちらも純粋状態であったから $S_1 = S_2 = 0$ である。この例に限らず、分離可能状態であればエンタングルメントエントロピーはゼロになる。Bell 状態 $|\Phi^+\rangle$ はどちらの部分系の縮約密度演算子も完全混合状態であるから、エンタングルメントエントロピーは $\log 2$ になる。このように、エンタングルメントエントロピーは縮約密度演算子を取ることによって量子状態がいかに壊れるかを計る量であるように思える。しかしながらこれが通用するのは純粋状態のときのみである。例えば $\rho_{12} = I \otimes I/4$ のような完全混合状態（分離可能状態でもある）でエンタングルメントエントロピーを計算すると、縮約

密度演算子も完全混合状態になってエンタングルメントエントロピーは $\log 2$ という値を出してしまう。次節で導入するネガティビティは、このような混合状態でも量子もつれの尺度を与える。

I.2.2 ネガティビティ

前節の最後では縮約密度演算子を扱うと量子もつれ状態と完全混合状態が同じエンタングルメントエントロピーの値をもつことをみた。ここでは量子ビット A と B からなる合成系の密度演算子 ρ に立ち戻り、混合状態でも通用する量子もつれの尺度を考えるとしよう。

密度演算子は $\rho^\dagger = (\rho^T)^* = \rho$ を満たす、すなわち Hermite 行列であるから実数の固有値を持つ。さらにその対角成分は状態の占有確率を表すため非負であることから、物理的状态を記述する密度演算子の固有値は非負でなければならないことがわかる。これを踏まえて、密度演算子 ρ の部分転置を取った ρ^{TA} について考えよう。部分転置の定義だが、密度演算子を一般に

$$\rho = \sum_{\xi_A, \eta_A, \xi_B, \eta_B} p_{\xi_A \eta_A \xi_B \eta_B} |\xi_A\rangle \langle \eta_A| \otimes |\xi_B\rangle \langle \eta_B| \quad (\text{I.2.2})$$

と $|\xi_A\rangle, |\eta_A\rangle \in \{|g_A\rangle, |e_A\rangle\}$ および $|\xi_B\rangle, |\eta_B\rangle \in \{|g_B\rangle, |e_B\rangle\}$ を用いて展開するとき、

$$\rho^{TA} = \sum_{\xi_A, \eta_A, \xi_B, \eta_B} p_{\xi_A \eta_A \xi_B \eta_B} |\eta_A\rangle \langle \xi_A| \otimes |\xi_B\rangle \langle \eta_B|. \quad (\text{I.2.3})$$

によって部分転置された密度演算子を定義する。部分転置された密度演算子はやはり Hermite 行列である。しかしながら、その固有値は非負である必要がなくなっている。例外的に、分離可能状態であるときには部分系に関する行列の転置がもう一方の部分系に対して何も影響を及ぼさないため、部分転置された密度演算子は元の密度演算子と同じ固有値、すなわち非負の固有値のみをもつ。Peres-Horodecki [23] によれば、 ρ が分離可能状態であるならば、 ρ^{TA} のすべての固有値は非負である。この対偶として ρ^{TA} の負の固有値の存在が量子もつれの存在を意味していることがわかる。さらに言えば、二量子ビット系においては上記の逆も成立する。すなわち ρ が分離可能状態であることと ρ^{TA} の固有値がすべて非負であることが二量子ビット系では等価になる。

これが本節で導入するもうひとつの量子もつれの尺度であるネガティビティの基本的な考えである。ネガティビティ $\mathcal{N}(\rho)$ は、 ρ^{TA} の負の固有値の絶対値の和として

$$\mathcal{N}(\rho) = \sum_{\lambda_n < 0} |\lambda_n| \quad (\text{I.2.4})$$

と定義される。ここで λ_n は ρ^{TA} の固有値である。 ρ^{TA} は単なる ρ の部分転置であるからトレースは保存されていて、 $\text{Tr}[\rho] = \text{Tr}[\rho^{TA}] = 1$ である。したがって $1 = \sum_n \lambda_n = \sum_{\lambda_n > 0} \lambda_n - \sum_{\lambda_n < 0} |\lambda_n|$ という等式が成り立つ。さらにトレースノルム $\|\rho^{TA}\|_1 \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{\lambda_n > 0} \lambda_n + \sum_{\lambda_n < 0} |\lambda_n|$

$\text{Tr} \left[\sqrt{(\rho^{TA})^\dagger \rho^{TA}} \right]$ を導入しよう。これは定義からして ρ^{TA} の固有値の絶対値を足し上げるものなので、 $\|\rho^{TA}\|_1 = \sum_n |\lambda_n| = 2 \sum_{\lambda_n < 0} |\lambda_n| + 1$ と書き直せる。これにより、トレースノルムを用いたネガティビティの表式

$$\mathcal{N}(\rho) = \frac{\|\rho^{TA}\|_1 - 1}{2} \quad (\text{I.2.5})$$

が得られる。Peres-Horodecki の結果は混合状態にも適用可能であるから、純粋状態でのみ良い指標となったエンタングルメントエントロピーよりも適用範囲の広い量子もつれの尺度であるといえる。ネガティビティは二つの量子系の分離可能な合成系に対してエンタングルメントエントロピーのような加法性がないため、かわりに対数ネガティビティ $L(\rho) \stackrel{\text{def}}{=} \log 2\mathcal{N}(\rho) + 1$ を考えることがある。これについては $L(\rho_1 \otimes \rho_2) = L(\rho_1) + L(\rho_2)$ となり加法性が満たされる。

ネガティビティの計算例をいくつか挙げておこう。分離可能状態に対してはネガティビティはゼロであることが明らかであるから、まず Bell 状態 $|\Phi^+\rangle$ についてみる。密度演算子 ρ_{Φ^+} は

$$\rho_{\Phi^+} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{I.2.6})$$

となり、この部分転置行列は

$$\rho_{\Phi^+}^{TA} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{I.2.7})$$

である。この部分転置行列の固有値は $1/2$ が 3 個と $-1/2$ が 1 個である。したがってネガティビティは $1/2$ であり、対数ネガティビティは $\log 2$ となる、

より興味深い例として Werner 状態

$$\begin{aligned} \rho_W &= p |\Phi^+\rangle \langle \Phi^+| + (1-p) \frac{I \otimes I}{4} \\ &= \frac{p}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{1-p}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \frac{1+p}{4} & 0 & 0 & \frac{p}{2} \\ 0 & \frac{1-p}{4} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1-p}{4} & 0 \\ \frac{p}{2} & 0 & 0 & \frac{1+p}{4} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{I.2.8})$$

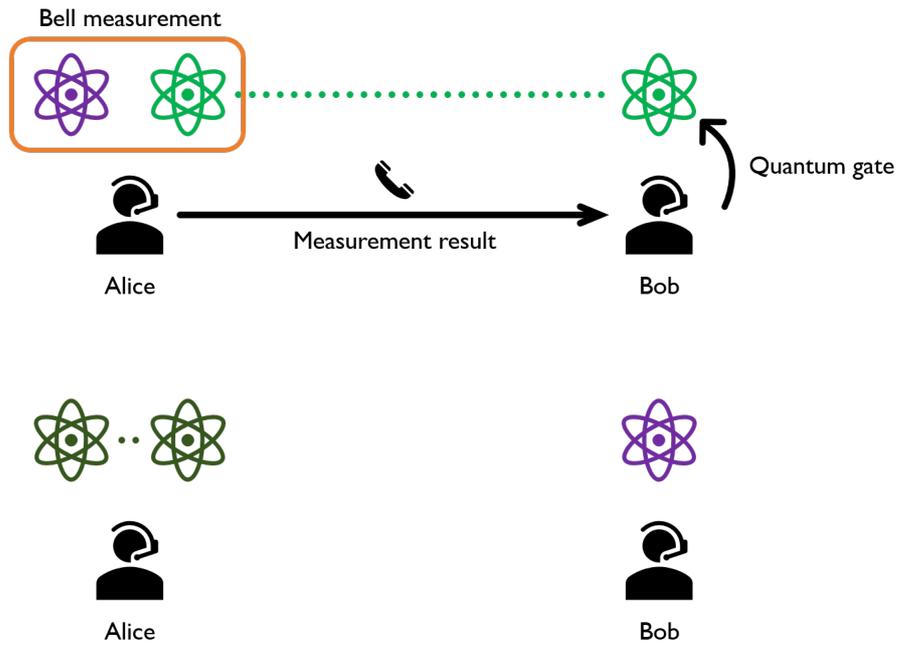


図 I.1: 量子テレポーテーションの概略

を考えよう。これは $p \in [0, 1]$ の値によって完全混合状態か量子もつれ状態かがきまる。ネガティビティを用いるとどのくらいの p から量子もつれがあるといえるかがわかるのでこれを明らかにしていこう。まず部分転置行列は

$$\rho_W^{TA} = \begin{pmatrix} \frac{1+p}{4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1-p}{4} & \frac{p}{2} & 0 \\ 0 & \frac{p}{2} & \frac{1-p}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1+p}{4} \end{pmatrix}, \quad (\text{I.2.9})$$

とかけるが、この固有値は $(1+p)/4$ が 3 個と $(1-3p)/4$ が 1 個である。固有値 $(1-3p)/4$ のみ $1/3 < p \leq 1$ のもとで負となるため、ネガティビティが有限の値をとる。言い換えれば、 $1/3 < p \leq 1$ のときに Werner 状態は量子もつれ状態であり、 $0 \leq p \leq 1/3$ のときには分離可能状態となることが上記の計算により明らかになるのである。これは次のことも示唆している： $1/3 < p \leq 1$ の Werner 状態は、本節の最後で説明する LOCC (local operation and classical communication) によって生成することができないが、 $0 \leq p \leq 1/3$ の Werner 状態であれば LOCC でつくれてしまうのである。

I.3 量子テレポーテーション

いよいよ量子もつれ状態の応用としても量子力学の世界の不思議な現象としても重要な量子テレポーテーションについて説明する。量子テレポーテーションの目的として

は、送信者である Alice がある未知の状態 $|\psi\rangle = c_g |g_\psi\rangle + c_e |e_\psi\rangle$ を受信者である Bob に送るというものである。以下、添え字の ψ はこの未知の量子状態 $|\psi\rangle$ に関するものとする。量子状態 $|\psi\rangle$ は測定すると壊れてしまう・複製ができないという性質があるため、我々が今日用いる通信（古典通信）のようにはいかないのが量子通信の肝である。このような制約の下では、未知の量子状態を送るためには量子もつれ状態の不思議な性質を全面的に活用したトリックが必要になる。

量子テレポーテーションにおいてまずやるべきことは、Alice と Bob が量子もつれ状態にある光子のペア、例えば Bell 状態のひとつである $|\Psi_{ab}^-\rangle = (|e_a\rangle |g_b\rangle + |g_a\rangle |e_b\rangle)/\sqrt{2}$ の片割れを 1 個ずつ持つことである。添え字の a と b はこの Alice と Bob がもつ量子もつれ状態の片割れの光子をさす。未知の量子状態 $|\psi\rangle$ と併せた全体の量子状態は $|\psi\rangle |\Psi_{ab}^-\rangle$ と書ける。この量子状態を、Alice の量子もつれペアの片割れと未知の量子状態 $|\psi\rangle$ にある量子ビット ψ との Bell 状態で書き直してみよう。 $\langle \Psi_{\psi a}^\pm | (|\psi\rangle |\Psi_{ab}^-\rangle) = (\pm c_g |g_b\rangle - c_e |e_b\rangle)/2\sqrt{2}$ や $\langle \Phi_{\psi a}^\pm | (|\psi\rangle |\Psi_{ab}^-\rangle) = (c_e |g_b\rangle \mp c_g |e_b\rangle)/2\sqrt{2}$ を用いることで、

$$\begin{aligned} |\psi\rangle |\Psi_{ab}^-\rangle &= \frac{c_g |g_\psi\rangle + c_e |e_\psi\rangle}{\sqrt{2}} \frac{|e_a\rangle |g_b\rangle + |g_a\rangle |e_b\rangle}{\sqrt{2}} \\ &= \frac{|\Psi_{\psi a}^+\rangle}{2} (c_g |g_b\rangle - c_e |e_b\rangle) - \frac{|\Psi_{\psi a}^-\rangle}{2} (c_g |g_b\rangle + c_e |e_b\rangle) \\ &\quad + \frac{|\Phi_{\psi a}^+\rangle}{2} (c_e |g_b\rangle - c_g |e_b\rangle) + \frac{|\Phi_{\psi a}^-\rangle}{2} (c_e |g_b\rangle + c_g |e_b\rangle) \end{aligned} \quad (\text{I.3.1})$$

と計算することができる。これを念頭において、Alice は手持ちの量子もつれペアの片割れに X ゲート X_a を作用させ、続いて Alice の量子ビットを制御量子ビットとする量子ビット ψ への CNOT ゲートを作用させる。すると $|\Psi_{\psi a}^\pm\rangle \rightarrow \text{CNOT} \cdot X_a |\Psi_{\psi a}^\pm\rangle = |g_\psi\rangle (\pm |g_a\rangle + |e_a\rangle)/\sqrt{2}$ や $|\Phi_{\psi a}^\pm\rangle \rightarrow \text{CNOT} \cdot X_a |\Phi_{\psi a}^\pm\rangle = |e_\psi\rangle (|g_a\rangle \pm |e_a\rangle)/\sqrt{2}$ という作用が ψ と a の合成系 (ψa 系と略記する) に起こり、最終的に Hadamard ゲート H_a を Alice の量子ビットに施すことで

$$\begin{aligned} |\Psi_{\psi a}^+\rangle (c_g |g_b\rangle - c_e |e_b\rangle) &\rightarrow H_a \cdot \text{CNOT} \cdot X_a |\Psi_{\psi a}^+\rangle (c_g |g_b\rangle - c_e |e_b\rangle) \\ &= |g_\psi\rangle |g_a\rangle (c_g |g_b\rangle - c_e |e_b\rangle), \\ |\Psi_{\psi a}^-\rangle (c_g |g_b\rangle + c_e |e_b\rangle) &\rightarrow H_a \cdot \text{CNOT} \cdot X_a |\Psi_{\psi a}^-\rangle (c_g |g_b\rangle + c_e |e_b\rangle) \\ &= |g_\psi\rangle |e_a\rangle (c_g |g_b\rangle + c_e |e_b\rangle), \\ |\Phi_{\psi a}^+\rangle (c_e |g_b\rangle - c_g |e_b\rangle) &\rightarrow H_a \cdot \text{CNOT} \cdot X_a |\Phi_{\psi a}^+\rangle (c_e |g_b\rangle - c_g |e_b\rangle) \\ &= |e_\psi\rangle |g_a\rangle (c_e |g_b\rangle - c_g |e_b\rangle), \\ |\Phi_{\psi a}^-\rangle (c_e |g_b\rangle + c_g |e_b\rangle) &\rightarrow H_a \cdot \text{CNOT} \cdot X_a |\Phi_{\psi a}^-\rangle (c_e |g_b\rangle + c_g |e_b\rangle) \\ &= -|e_\psi\rangle |e_a\rangle (c_e |g_b\rangle + c_g |e_b\rangle), \end{aligned} \quad (\text{I.3.2})$$

という状態になる。ここで ψa 系を測定しよう。 ψa 系が $|g_\psi\rangle |g_a\rangle$ 、 $|g_\psi\rangle |e_a\rangle$ 、 $|e_\psi\rangle |g_a\rangle$ 、

$|e_\psi\rangle|e_a\rangle$ のどれであるかを明らかにすることは ψ_a 系がどの Bell 状態にあったかを明らかにすることに対応しており、この測定を Bell 測定ともいう。Alice の Bell 測定で $|g_\psi\rangle|g_a\rangle$ という結果が得られれば、Bob は Z ゲート Z_b を手持ちの量子ビットに作用させれば $c_g|g_b\rangle + c_e|e_b\rangle$ が手元に得られる。測定結果が $|e_\psi\rangle|g_a\rangle$ のときには Bob は Z_b ゲートのあとに X ゲート X_b を作用させればよい。 $|e_\psi\rangle|e_a\rangle$ という結果のときには X_b ゲートのみで十分である。測定により $|g_\psi\rangle|e_a\rangle$ であったと分かった場合には Bob は何もしなくてよい。このように Alice の Bell 測定の結果を (古典) 通信で Bob に知らせ、Bob はその結果に応じて手持ちの量子ビットに量子ゲートを作用させれば、最終的に Bob の手元にはまさに Alice が送りたかった未知の量子状態 $c_g|g_b\rangle + c_e|e_b\rangle$ が残っているのである。

もともと未知の量子状態だった ψ 系はどうなったかという、Bell 測定によって壊れている。したがってこれは量子状態の複製を行ったことにもなっていない。もう一点注意しておきたいだが、よく SF 小説などで量子テレポーテーションで瞬時に情報が転送されるなどという設定がされているが、これは間違いである¹。Bob は最後に正しい量子状態を得るために Alice から Bell 測定の結果を電話なりメールなりで聞かねばならない。Alice から Bob への情報伝達速度は光速を超えることがないため、量子テレポーテーションによる情報の転送も光速を超えることはない。

I.4 エンタングルメントスワッピング

量子テレポーテーションの親戚のような手法にエンタングルメントスワッピングというものがあり、量子通信でよく用いられる。状況は次のようなものである: Alice と Bob は既知の量子もつれ光子ペア $|\Phi_A^+\rangle = (|g_1g_2\rangle + |e_1e_2\rangle)/\sqrt{2}$ と $|\Phi_B^+\rangle = (|g_3g_4\rangle + |e_3e_4\rangle)/\sqrt{2}$ をそれぞれ持っているが、このときに Alice と Bob は何とかしてこれらの Bell 状態を用いて Alice と Bob にまたがる量子もつれペアを生成したい、というような問題である。このために用いられる手法がエンタングルメントスワッピングであり、端的に言えば Alice と Bob のもつ量子もつれペアの片割れを 1 個ずつとってきて Bell 測定をし、その結果に応じて Alice または Bob の残りの量子もつれペアに量子ゲートを作用させることで達成される。以下、これについて詳しく見ていこう。

Alice と Bob の量子系の全体系 $|\Psi\rangle$ 書き下すと、

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= |\Phi_A^+\rangle \otimes |\Phi_B^+\rangle \\ &= \frac{|g_1g_2g_3g_4\rangle + |g_1g_2e_3e_4\rangle + |e_1e_2g_3g_4\rangle + |e_1e_2e_3e_4\rangle}{2}. \end{aligned} \quad (\text{I.4.1})$$

となる。ここで 1 と 4 (2 と 3) の添え字のついた系をまとめて部分系とみなし、Bell 状態 $|\Psi_{14}^\pm\rangle$ と $|\Phi_{14}^\pm\rangle$ ($|\Psi_{23}^\pm\rangle$ と $|\Phi_{23}^\pm\rangle$) を定義しよう。これにより $|\Psi\rangle$ を前節のように書き

¹ 著者の好きな SF 小説にもこの手の記述があり、この話題が小説で出てくるたびに気が散って仕方がなかった。

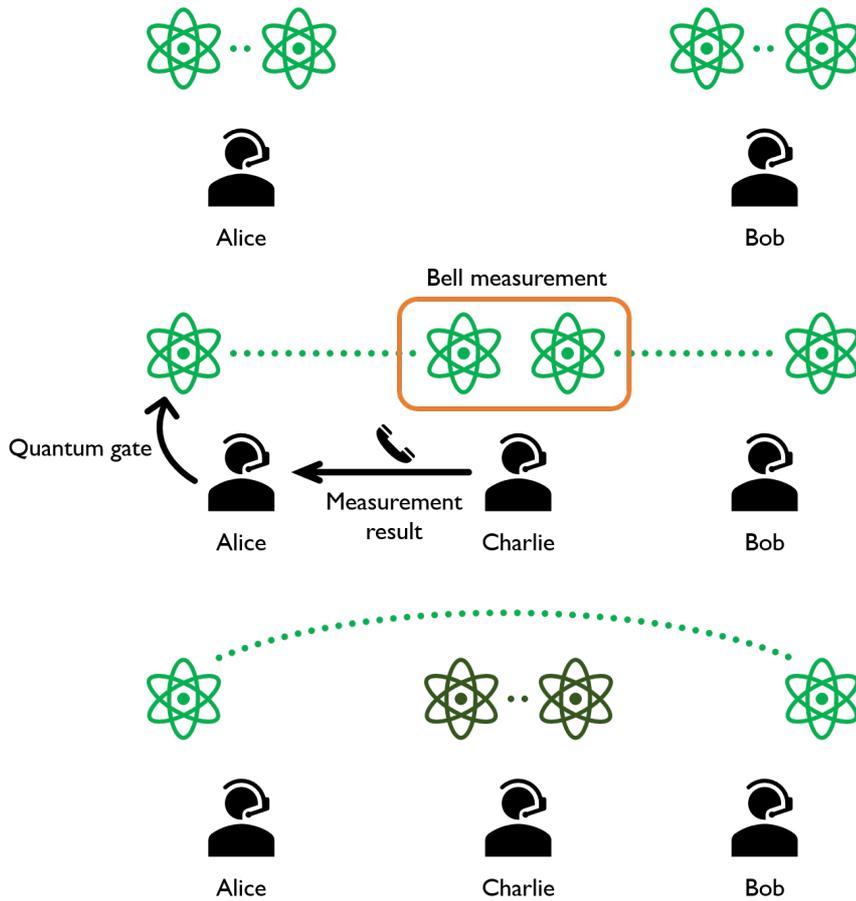


図 I.2: エンタングルメントスワッピングの概略

直すと、

$$|\Psi\rangle = \frac{|\Phi_{14}^+\rangle|\Phi_{23}^+\rangle + |\Phi_{14}^-\rangle|\Phi_{23}^-\rangle + |\Psi_{14}^+\rangle|\Psi_{23}^+\rangle + |\Psi_{14}^-\rangle|\Psi_{23}^-\rangle}{2}. \quad (\text{I.4.2})$$

という表式が導かれる。では添え字 2 と 3 からなる部分系について Bell 測定を行おう。もし Bell 測定で 2 と 3 からなる部分系が $|\Phi_{23}^+\rangle$ にあるという結果が得られれば、残りの系は $|\Phi_{14}^+\rangle$ にあることになる。もし $|\Phi_{23}^-\rangle$ にあれば、1 の量子ビットに Z ゲート Z_1 を作用させると $|\Phi_{14}^-\rangle$ は $|\Phi_{14}^+\rangle$ に変換される。 $|\Psi_{23}^+\rangle$ に測定された場合には 1 の量子ビットに X ゲート X_1 を作用させることで $X_1|\Psi_{14}^+\rangle = |\Phi_{14}^+\rangle$ を得る。最後に $|\Psi_{23}^-\rangle$ という結果が得られた場合には、 Z_1X_1 を作用させることで $|\Phi_{14}^+\rangle$ を得ることができる。このように、Alice と Bob のもつ量子もつれペアの片割れを Bell 測定した結果に応じて Alice が量子もつれペアの残りに量子ゲートを行うことで、最終的に Alice と Bob にまたがる量子もつれ状態 $|\Phi_{14}^+\rangle$ が得られる。これはもともとのローカルな量子もつれ状態が Alice と Bob にまたがる量子もつれ状態に入れ替わっているようにも見えることが、エンタングルメントスワッピングという名前の由来である。

I.5 Local operation and classical communication (LOCC)

量子テレポーテーションやエンタングルメントスワッピングで行った操作は次のように纏められる：(i) 量子ビットの測定 (Kraus 演算子を M_A とする)、(ii) 測定結果の古典通信、(iii) 量子ゲート操作 U_B 。通信にかかる時間を乱暴にも無視してしまうと、LOCC の後の密度演算子は $\sum_r U_B(r)M_A(r)\rho M_A^\dagger(r)U_B^\dagger(r)$ となっている (r は測定結果に対応する添え字)。ここで強調したいのは、量子操作はすべて Alice なり Bob なりの内部で完結することと、古典通信のみを用いて情報交換をしていることである。言い換えると、Alice と Bob にまたがる二量子ビットゲートや測定、光子の量子状態そのものによる伝達といった“無茶”はしていない、現実的に無理のない手法だといえる。このような古典通信とローカルな量子操作のみで構成される操作を LOCC (local operation and classical communication) と呼ぶ。詳細な議論は成書 [9] に譲るが、ここでは LOCC のいくつかの重要な性質について言及しておく：

- LOCC は確率 1 で量子もつれの尺度を増大させることはできない。
- LOCC は分離可能状態を量子もつれ状態にすることはできない。
- LOCC によって確率的にであれば量子もつれの尺度を増加させることはできる。具体的にはエンタングルメント蒸留などの手法が開発されている。

付録J 量子複製禁止定理

古典情報では許され、量子情報では出来ない操作の重要なものが状態のコピー（複製）をすることである。例えば通常 x が与えられていて $y = x^2 + x$ を計算したければ、 x をコピーし元の x に 1 を足してコピーした x をかければ

$$y = x^2 + x = x(x + 1) \quad (\text{J.0.1})$$

が計算できるが、量子情報では「量子複製禁止定理」というものにより未知の量子状態のコピーが許されておらず、同様の計算が出来ない。これは量子計算に取って非常に大きなハンディキャップに見える、しかし、コピーが出来なくても様々な方法で有用な量子計算が出来ることが知られているので心配はいらない。以下では簡単に、この量子複製禁止定理を証明する。

仮に任意の量子状態 $|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$ ともう一つの量子状態 $|i\rangle$ があり、ユニタリーな操作 \hat{U} を用いて $|i\rangle \rightarrow |\psi\rangle$ とコピーができる、つまり

$$U|\psi\rangle|i\rangle = |\psi\rangle|\psi\rangle \quad (\text{J.0.2})$$

という 2 量子ビットゲートが存在するとしよう。同様に異なる量子状態 $|\phi\rangle$ も \hat{U} はコピーできる、つまり

$$U|\phi\rangle|i\rangle = |\phi\rangle|\phi\rangle \quad (\text{J.0.3})$$

も成り立つとすると、

$$\begin{aligned} \langle\phi|\langle i|U^\dagger U|\psi\rangle|i\rangle &= \langle\phi|\langle i|\psi\rangle|i\rangle \\ &= \langle\phi|\psi\rangle\langle i|i\rangle \\ &= \langle\phi|\psi\rangle \end{aligned} \quad (\text{J.0.4})$$

同様に

$$\begin{aligned} \langle\phi|\langle i|U^\dagger U|\psi\rangle|i\rangle &= \langle\phi|\langle\phi|\psi\rangle|\psi\rangle \\ &= \langle\phi|\psi\rangle^2 \end{aligned} \quad (\text{J.0.5})$$

となり $\langle\phi|\psi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle^2$ を満たさねばならないが、これは $\langle\phi|\psi\rangle = 0$ もしくは $\langle\phi|\psi\rangle = 1$ が成り立つということである。後者は $|\phi\rangle = |\psi\rangle$ という場合の自明なときなので無視す

ると、前者は直交した2つの状態ならコピーできるが任意の量子状態のコピーが不可能なことを証明している。

もう少し具体的な例で見てみよう、例えば \hat{U} は $|0\rangle$ 、 $|1\rangle$ を各々コピーできるとする。

$$\hat{U}|0\rangle|i\rangle = |0\rangle|0\rangle \quad (\text{J.0.6})$$

$$\hat{U}|1\rangle|i\rangle = |1\rangle|1\rangle \quad (\text{J.0.7})$$

この時 $|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$ をコピーしたいとしよう。量子情報では、測定するとその状態が変わるのでこのような重ね合わせの任意の状態が何かわからないままコピーできなければならない。 $|\psi\rangle$ を同じ方法でコピーすると

$$\begin{aligned} \hat{U}|\psi\rangle|i\rangle &= \hat{U}(a|0\rangle + b|1\rangle)|i\rangle = a\hat{U}|0\rangle|i\rangle + b\hat{U}|1\rangle|i\rangle \\ &= a|0\rangle|0\rangle + b|1\rangle|1\rangle \end{aligned} \quad (\text{J.0.8})$$

となる。一見うまく行ったように見えるかもしれないが、コピーしようと思っていた状態は $|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$ なのでコピーが出来ているとすると

$$\begin{aligned} |\psi\rangle|\psi\rangle &= (a|0\rangle + b|1\rangle)(a|0\rangle + b|1\rangle) \\ &= a^2|00\rangle + b^2|11\rangle + ab(|01\rangle + |10\rangle) \end{aligned} \quad (\text{J.0.9})$$

になるはずなので、コピーは全然出来ていない。つまり既知の直交した状態においてコピーが可能だとしても、任意の（未知の）量子状態をコピーすることは出来無い。

関連図書

- [1] R. Loudon, *The Quantum Theory of Light* (3rd edition, Oxford University Press, 2000)
- [2] D. DeMill, *Atomic physics* (3rd edition, Oxford University Press, 2000)
- [3] R. Jaynes, A. Cummings *J. Phys. B: Mol. Opt. Phys.* **38**(9), S551 (2005).
- [4] Klaus Molmer and Anders Sorensen “Multiparticle Entanglement of Hot Trapped Ions” *Phys. Rev. Lett.* **82**, 1835 (1999).
- [5] J. P. Gaebler, T. R. Tan, Y. Lin, Y. Wan, R. Bowler, A. C. Keith, S. Glancy, K. Coakley, E. Knill, D. Leibfried, and D. J. Wineland, “High-Fidelity Universal Gate Set for ${}^9\text{Be}^+$ Ion Qubits” *Phys. Rev. Lett.* **117**, 060505 (2016).
- [6] J. R. Johansson, P. D. Nation and Franco Nori, “QuTiP 2: A Python framework for the dynamics of open quantum systems” *Comp. Phys. Comm.* **184**, 1234-1240 (2013).
- [7] R. P. Feynmann, R. B. Leighton and M. Sands, “The Feynman Lectures on Physics” Vol. 3, Chapter 21 (Basic Books) ; https://www.feynmanlectures.caltech.edu/III_21.html
- [8] D. I. Schuster, A. A. Houck, J. A. Schreier, A. Wallraff, J. M. Gambetta, A. Blais, L. Frunzio, B. Johnson, M. H. Devoret, S. M. Girvin, and R. J. Schoelkopf, “Resolving photon number states in a superconducting circuit” *Nature* **445**, S15 (2007).
- [9] M. Nielsen and I. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information* (Cambridge University Press, 10th anniversary ed. 2010)
- [10] Joseph Emerson, Robert Alicki and Karol Zyczkowski, “Scalable noise estimation with random unitary operators” *J. Opt. B: Quantum Semiclass. Opt.* **7**, S347 (2005).
- [11] K. Fujii, *Quantum Computation with Topological Codes* (Springer, 2015)

- [12] Kosuke Fukui, Akihisa Tomita, Atsushi Okamoto, and Keisuke Fujii, “High-Threshold Fault-Tolerant Quantum Computation with Analog Quantum Error Correction” *Phys. Rev. X* **8**, 021054 (2018).
- [13] D. Gottesman, A. Kitaev, and J. Preskill, “Encoding a qubit in an oscillator” *Phys. Rev. A* **64**, 012310 (2001).
- [14] C. Fluhmann, T. L. Nguyen, M. Marinelli, V. Negnevitsky, K. Mehta and J. P. Home, “Encoding a qubit in a trapped-ion mechanical oscillator” *Nature* **566**, 513 (2019).
- [15] P. Campagne-Ibarcq, A. Eickbusch, S. Touzard, E. Zalys-Geller, N. E. Frattini, V. V. Sivak, P. Reinhold, S. Puri, S. Shankar, R. J. Schoelkopf, L. Frunzio, M. Mirrahimi and M. H. Devoret, “Quantum error correction of a qubit encoded in grid states of an oscillator” *Nature* **584**, 368 (2020).
- [16] D. I. Schuster, A. A. Houck, J. A. Schreier, A. Wallraff, J. M. Gambetta, A. Blais, L. Frunzio, B. Johnson, M. H. Devoret, S. M. Girvin, and R. J. Schoelkopf, “Resolving photon number states in a superconducting circuit” *Nature* **445**, S15 (2007).
- [17] http://www.qc.rcast.u-tokyo.ac.jp/lecture_en.html
- [18] K. Igi and H. Kawai, *Quantum Mechanics II* (Kodansha, 1994)
- [19] A. Auffeves-Garnier, C. Simon, J.-M. Gerard, and J.-P. Poizat, *Phys. Rev. A* **75**, 053823 (2007).
- [20] D. P. DiVincenzo, *Fortschr. Phys.* **48**, 771 (2000).
- [21] M. Aspelmeyer, T. J. Kippenberg, and F. Marquardt, *Rev. Mod. Phys.* **86**, 1391 (2014).
- [22] A. A. Clerk, M. H. Devoret, S. M. Girvin, F. Marquardt, and R. J. Schoelkopf, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 1155 (2010).
- [23] A. Peres, “Separability Criterion for Density Matrices,” *Phys. Rev. Lett.* **77**, 1413 (1996); M. Horodecki, P. Horodecki, and R. Horodecki, “Separability of mixed states: necessary and sufficient conditions,” *Physics Letters A* **223** 1–8 (1996).