

NMRと量子コンピューターとラビ振動

九大・数理 廣島 文生*

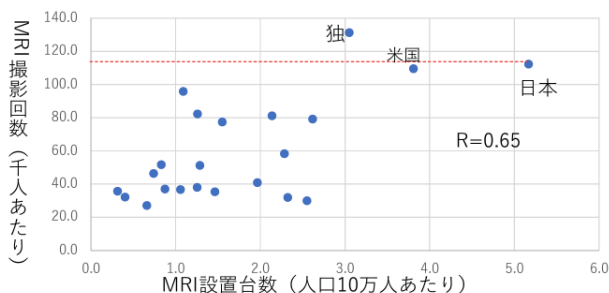
1 NMR

数学の医療への応用として真っ先に思い浮かぶのが、ラドン変換であろう。CT スキャンで得られた X 線による 1 次元データから、3 次元の物体内部の様子を再構成するためにラドン変換が応用される。それは、古典的なフーリエ変換の簡単な応用であるが人類への貢献は計り知れない。

	設置台数 (10万人あたり)	撮影回数 (1000人あたり)
Australia	1.5	35.3
Austria	2.0	40.8
Czech Republic	0.7	46.3
Finland	2.3	31.9
France	1.1	95.8
Germany	3.1	131.3
Greece	2.3	58.3
Hungary	0.3	35.6
Iceland	2.1	81.1
Israel	0.4	32.1
Italy	2.6	79.1
Japan	5.2	112.3
Korea	2.6	29.9
Latvia	1.3	37.9
Lithuania	1.1	36.6
Luxembourg	1.3	82.2
Netherlands	1.3	51.2
Poland	0.7	27.0
Slovak Republic	0.8	51.6
Slovenia	0.9	36.9
Spain	1.6	77.4
United States	3.8	109.5

データ出所：OECD Health Statistics（日本の撮影回数のデータが存在した2012年時にデータがあった22か国）

日本のMRI設置台数は、諸外国に比べて多いが、人口あたりの撮影回数はドイツより少なく、設置台数と比較して差は小さい



22か国の平均設置台数 = 1.8台
↓ **2.9倍**
日本の台数 = 5.2台

22か国の平均撮影回数 = 60.0回
↓ **1.9倍**
日本の回数 = 112.3回

図 1: MRI の普及状況 AMDD 医療技術政策研究所レポート 2019 年 4 月 15 日

CT スキャンと双璧をなす医療画像診断技術として NMR がある。現在は MRI と呼ばれているが、ここでは、NMR と呼ぶことにする。日本は世界で最も NMR が普及し

*謝辞 執筆にあたり廣川真男教授（九大）には、量子コンピューターに関して様々なことを大変親切にご教授していただきました。また、参考文献 [17] も紹介していただきました。ここに厚くお礼申し上げます。

ている国である。NMRは、人体や物体の内部の構造や機能を非破壊的に観察するために使用される診断技術で、その原理は、P. C. ラウターバー [11] によって1973年に発見された (Nature 242 (1973))。NMRは強力な磁場と電磁場を組み合わせることで物体の画像を生成する。このNMRの物理的な仕組みは、量子コンピューターの仕組みと全く同じなのである。そこで、NMRの仕組みを簡単に復習する。原子核は正電荷をもち、コマのように歳差運動をしている (図2)。この歳差運動の周波数をラーモア周波数という。言い換えると原子一つ一つは小さな磁石とみなすことができる。一般に原子核はランダムな方向に回転しているので、回転軸の向きは当然ばらばらである。そこで、外部から強力な磁場をかけると、そのうちの数パーセントは磁場に沿って並ぶ。向きは磁場方向と反対方向の2つに分かれる。エネルギーでみれば、磁場方向の原子は反対方向の原子よりエネルギーが低い2準位状態になっている。この状態で、外部から電磁場を照射する。驚くべきことに、ラーモア周波数と同じ周波数の電磁場の吸収が起きる。もう少し正確にいうと、2準位の原子間でエネルギーのやり取りが起こる。これを共鳴という。実際の共鳴は、ラーモア周波数ではなく、周りの環境に僅かに影響されたラーモア周波数 $+\varepsilon$ で起きる。この共鳴を観測するのがNMRの基本原理である。

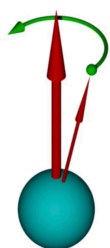


図2: 歳差運動

一方で、量子コンピューターは、大雑把にいうと、 $|0\rangle$ と $|1\rangle$ の2状態が存在して、 $|0\rangle$ に0、 $|1\rangle$ に1を対応させて、重ね合わせ

$$a|0\rangle + b|1\rangle \quad |a|^2 + |b|^2 = 1$$

が実現できるものから作られる。そうすると、この状態に線形演算 T を施すと

$$T(a|0\rangle + b|1\rangle) = aT|0\rangle + bT|1\rangle$$

となり、古典的には同時に計算できなかった $T|0\rangle$ と $T|1\rangle$ が同時に計算できるというのである。実は、NMRと同じ原理でこのようなものが実現できることを理論的に紹介するのが今回の目標である。キーワードはラビ振動。NMRの中に現れた「2準位間でエネルギーのやり取り」はまさにラビ振動といわれるものであり、量子コンピューターに現れた $a|0\rangle + b|1\rangle$ もまさにラビ振動である。

2 ヒルベルト空間

関数解析学において最も重要な概念のひとつがヒルベルト空間である。 d 次元ユークリッド空間 \mathbb{R}^d には内積

$$(x, y) = \sum_{j=1}^d x_j y_j$$

が定義できる。さらに、内積からノルム

$$\|x\| = \sqrt{\sum_{j=1}^d x_j^2}$$

が定義できる。これらを一般化したものが内積空間で、さらに、内積空間がノルム $\|\cdot\|$ で完備なときヒルベルト空間という。ヒルベルト空間は長さ $\|\cdot\|$ だけでなく、内積 (\cdot, \cdot) を通じて、2つの元 u, v の間の直交性などを議論することができる。そのため、空間の幾何学的な考察が可能になる。

定義 2.1 (内積) \mathcal{H} を \mathbb{C} 上の線形空間とする。 $(\cdot, \cdot) : \mathcal{H} \times \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$ が以下の (1) - (4) をみたすとき \mathcal{H} 上の内積という。 $f, g \in \mathcal{H}$, $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ とする。

1. $(f, \alpha g + \beta h) = \alpha(f, g) + \beta(f, h)$
2. $\overline{(f, g)} = (g, f)$ (複素共役)
3. $(f, f) \geq 0$
4. $(f, f) = 0$ ならば $f = 0$

定義 2.2 (ヒルベルト空間) 内積空間 $(\mathcal{H}, (\cdot, \cdot))$ がノルム $\|f\| = \sqrt{(f, f)}$ に関して完備なときヒルベルト空間という。ここで、完備とはコーシー列が収束列になること。つまり、 $\lim_{n, m \rightarrow \infty} \|u_n - u_m\| = 0 \implies \lim_{n \rightarrow \infty} u_n$ が存在する、ことである。

ヒルベルト空間の典型的な例をあげよう。

例 2.3 (\mathbb{C}^d) \mathbb{C}^d は $z = (z_1, \dots, z_d)$ と $w = (w_1, \dots, w_d)$ の内積を $(z, w) = \sum_{n=1}^d \bar{z}_n w_n$ としてヒルベルト空間になる。また、 \mathbb{R}^d は、内積を $(z, w) = \sum_{n=1}^d z_n w_n$ としてヒルベルト空間になる。

例 2.4 ($L^2(\mathbb{R})$) $L^2(\mathbb{R})$ は 2乗可積分な関数の空間である。

$$L^2(\mathbb{R}) = \{f \mid \int_{\mathbb{R}} |f(x)|^2 dx < \infty\}$$

これは線型空間になる。つまり、 $f, g \in L^2(\mathbb{R})$ ならば $\alpha f + \beta g \in L^2(\mathbb{R})$ になる。 f, g の内積を

$$(f, g)_2 = \int_{\mathbb{R}} \bar{f}(x) g(x) dx$$

とすると $L^2(\mathbb{R})$ はヒルベルト空間になる。ただし、注意が必要である。ここでの積分はリーマン積分ではなくルベーグ積分である。しかし、ここではこのことについて深入りしないことにする。 $L^2(\mathbb{R})$ が完備であることの証明は、1907年にハンガリーのリースとオーストリアのフィッシャーによって独立に与えられた。

定義 2.5 (自己共役作用素) \mathcal{H} はヒルベルト空間とする。線形作用素 $T : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ が $T^* = T$ となるとき、自己共役作用素という。

詳細は省かざるを得ないが、 T^* は T の共役作用素といわれるもので $(u, Tv) = (T^*u, v)$ をみたすものである。ただし、厳密な T^* の定義はかなりの紙数を要する。厳密な定義は数学の専門書 (例えば [16]) をご覧いただきたい。

3 ラビ振動

I.I. ラビが 1936 年 [13] にスピンと磁場の相互作用の理論的な研究を行なった。I.I. ラビの研究から構成されたラビ模型を紹介する。ラビ模型は例えば [10, 1] を参照。ラビ模型を定義するために、原子のハミルトニアン、電磁場のハミルトニアン、相互作用ハミルトニアンを順番に定義する。ただし、ここで、原子といっても、数学的に理想化されたものなので、実際の原子である必要はない。電磁場も同様である。物理及び数学では、

ハミルトニアン=ヒルベルト空間上の自己共役作用素

として定義される。ラビ模型のハミルトニアンはヒルベルト空間 $\mathbb{C}^2 \otimes L^2(\mathbb{R})$ 上に定義される。ここで、 $\mathbb{C}^2 \otimes L^2(\mathbb{R}) \ni v = \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix}$ と $\mathbb{C}^2 \otimes L^2(\mathbb{R}) \ni u = \begin{pmatrix} f' \\ g' \end{pmatrix}$ の内積 (u, v) は

$$(u, v) = (f, f')_2 + (g, g')_2$$

と定義される。

3.1 原子のハミルトニアン

設定を単純化して 2 準位原子を考える。つまり、基底状態と励起状態しか存在しない理想的な原子のこと。そのエネルギー差を ω_a とする。そこで、基底状態のエネルギーを $-\frac{1}{2}\omega_a$ とし、励起状態のエネルギーを $\frac{1}{2}\omega_a$ とする。このとき、2 準位原子のハミルトニアン: $\mathbb{C}^2 \rightarrow \mathbb{C}^2$ を次で定める。

$$H_{\text{原子}} = -\frac{1}{2}\omega_a \sigma_z$$

ここで、パウリ行列は 2×2 エルミート行列でトレースが 0 となるものである。

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $|\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ とする。 $|\uparrow\rangle$ はスピン上向きの状態, $|\downarrow\rangle$ はスピン下向きの状態を表す。そうすると

$$H_{\text{原子}}|\uparrow\rangle = -\frac{1}{2}\omega_a|\uparrow\rangle$$

$$H_{\text{原子}}|\downarrow\rangle = \frac{1}{2}\omega_a|\downarrow\rangle$$

となる。 $|\uparrow\rangle$ と $|\downarrow\rangle$ が, それぞれ $H_{\text{原子}}$ の固有ベクトルである。

3.2 電磁場のハミルトニアン

電磁場のハミルトニアン: $L^2(\mathbb{R}) \rightarrow L^2(\mathbb{R})$ を定める。生成消滅作用素を次で定める。

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(x + \frac{d}{dx}\right)$$

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(x - \frac{d}{dx}\right)$$

例えば, $af = \frac{1}{\sqrt{2}}(xf + f')$ となる。このとき $aa^\dagger - a^\dagger a = \mathbb{1}$ を満たす。光子一つのエネルギーを ω_f とする。電磁場のハミルトニアンを

$$H_{\text{電磁場}} = \omega_f \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right)$$

と定める。具体的に表せば

$$a^\dagger a + \frac{1}{2} = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} x^2$$

となる。 $H_{\text{電磁場}}$ に現れた $\frac{1}{2}$ はあまり気にしたいことにする。

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \underbrace{a^\dagger a^\dagger \cdots a^\dagger}_n e^{-|x|^2/2} / \pi^{1/4}$$

とすると $\| |n\rangle \|_2 = 1$ で

$$H_{\text{電磁場}} |n\rangle = \omega_f \left(n + \frac{1}{2} \right) |n\rangle \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

になる。 $|n\rangle$ は $H_{\text{電磁場}}$ の固有ベクトルである。 $a^\dagger a$ は調和振動子とよばれ, それが一つの光子を表すことを 100 年くらい前にディラックが指摘した。また, $|n\rangle \perp |m\rangle$ となる。

$$a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$$

$$a |n+1\rangle = \sqrt{n+1} |n\rangle$$

$$a |0\rangle = 0$$

となるから、 a^\dagger は光子を一つ生成し、 a は一つ消滅させると読める。そこで、 $\mathcal{F}_n = \{|n\rangle\}$ とすると、

$$L^2(\mathbb{R}) = \bigoplus_{n=0}^{\infty} \mathcal{F}_n$$

と書けて、

$$\begin{aligned} a^\dagger &: \mathcal{F}_n \rightarrow \mathcal{F}_{n+1} \\ a &: \mathcal{F}_n \rightarrow \mathcal{F}_{n-1} \end{aligned}$$

となっている。これが生成消滅の由来である。

3.3 相互作用ハミルトニアン

原子と電磁場の相互作用ハミルトニアン: $\mathbb{C}^2 \otimes L^2(\mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{C}^2 \otimes L^2(\mathbb{R})$ を定義する。 $a + a^\dagger = \sqrt{2}x$ に注意する。

$$H_I = g\sigma_x(a + a^\dagger)$$

とする。これは少しややこしい。わかりやすく書くと次のようになる。

$$H_I = g \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2}x \\ \sqrt{2}x & 0 \end{pmatrix}$$

ここで、 $g \in \mathbb{R}$ は結合定数である。 $\mathbb{C}^2 \otimes L^2(\mathbb{R}) \ni v = \begin{pmatrix} f \\ h \end{pmatrix}$ に対して

$$H_I \begin{pmatrix} f \\ h \end{pmatrix} = g \begin{pmatrix} \sqrt{2}xh \\ \sqrt{2}xf \end{pmatrix}$$

つまり、スピンの上下を入れ替えて、 $\sqrt{2}gx$ 倍するのが H_I の正体である。

3.4 ラビ振動

ラビ模型のハミルトニアンを定義しよう。

定義 3.1 (ラビ模型のハミルトニアン H_{Rabi}) H_{Rabi} は、 $\mathbb{C}^2 \otimes L^2(\mathbb{R})$ 上の自己共役作用素で、次のように定義する。

$$\begin{aligned} H_{Rabi} &= H_{\text{原子}} + H_I + H_{\text{電磁場}} \\ &= -\frac{1}{2}\omega_a\sigma_z + g\sigma_x(a + a^\dagger) + \omega_f(a^\dagger a + \frac{1}{2}) \\ &= -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} \omega_a & 0 \\ 0 & -\omega_a \end{pmatrix} + g \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2}x \\ \sqrt{2}x & 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{2}\omega_f \begin{pmatrix} -\frac{d^2}{dx^2} + x^2 & 0 \\ 0 & -\frac{d^2}{dx^2} + x^2 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

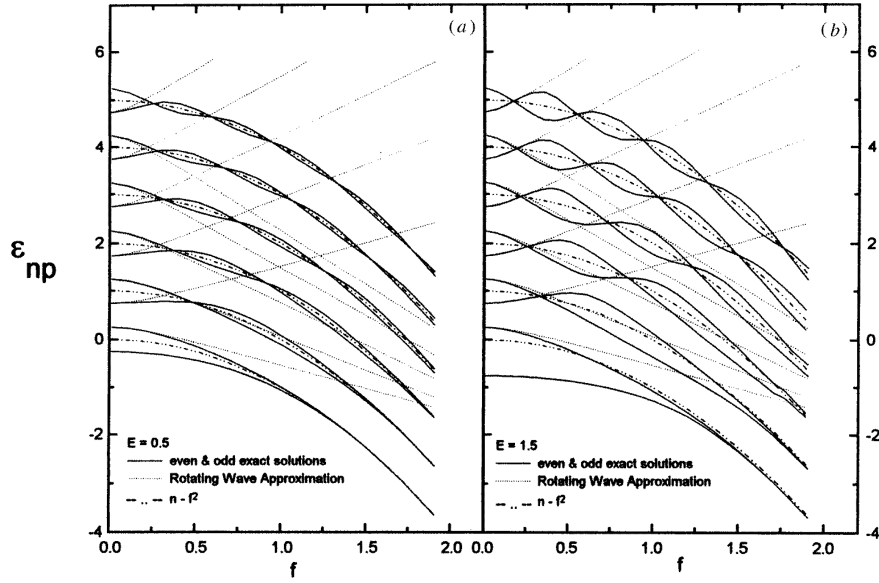


図 3: H_{Rabi} の固有値の挙動 [5]: 横軸が結合定数 g で縦軸が固有値を表す。

H_{Rabi} は自己共役作用素なので, $F(H_{Rabi})$ のような, H_{Rabi} の関数は H_{Rabi} を実数とみなして定義することができる。そのアイデアの概略は付録 A で述べる。

H_{Rabi} のスペクトル (固有値のこと) は非常によく調べられているが, 数学的に厳密な理論は多くはない。図 3 にスペクトルの数値シミュレーションを挙げておく。曲線の交わり具合に対称性があることがわかるだろう。この対称性の理論的な説明は数学の課題の一つである。

H_{Rabi} を近似する。これは JC 模型 [9] といわれることがある。

$$H = H_{\text{原子}} + g(\sigma_+ a + \sigma_- a^\dagger) + H_{\text{電磁場}}$$

相互作用項 H_I を $\sigma_- a^\dagger + \sigma_+ a$ に置き換えた。ここで

$$\sigma_- = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$|\uparrow, n\rangle = |\uparrow\rangle|n\rangle$, $|\downarrow, n\rangle = |\downarrow\rangle|n\rangle$ とおく。このとき

$$\sigma_- a^\dagger |\uparrow, n\rangle = \sqrt{n+1} |\downarrow, n+1\rangle$$

なので, スピンを下げて粒子数を一つ増やす。また,

$$\sigma_+ a |\downarrow, n+1\rangle = \sqrt{n+1} |\uparrow, n\rangle$$

なので、スピンを上げて粒子数を一つ減らす。\$H\$ もやはり自己共役作用素であることが示せる。

次の固有方程式を解く。

$$H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$$

これは、2次正方行列と2次方程式の解の公式を知っていれば解けるので、全く難しくない。例えば \$H|\downarrow, 0\rangle = \frac{1}{2}(\omega_f - \omega_a)|\downarrow, 0\rangle\$ となる。

$$|\Psi\rangle = \alpha_n|\uparrow, n\rangle + \beta_n|\downarrow, n+1\rangle \quad |\alpha_n|^2 + |\beta_n|^2 = 1 \quad (3.1)$$

とおく。この形を仮定する理由は、\$H\$ の定義で、\$H_{\text{電磁場}}\$ と \$H_{\text{原子}}\$ は光子数を不変にし、相互作用項 \$\sigma_+ a + \sigma_- a^\dagger\$ は光子数を一つだけ上げ下げするからである。固有ベクトルの形は存在すれば(3.1)のようになる。\$H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle\$ に代入して整理すると、

$$\begin{pmatrix} E - (\frac{1}{2}\omega_a + n\omega_f) & -g\sqrt{n+1} \\ -g\sqrt{n+1} & E + (\frac{1}{2}\omega_a - n\omega_f) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_n \\ \beta_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

となる。\$\begin{pmatrix} \alpha_n \\ \beta_n \end{pmatrix} \neq 0\$ なので、左辺の行列の行列式がゼロでなければならない。これを、\$E, \alpha_n, \beta_n\$ に関して解くと次の2つの解を得る。

$$|\Psi_{n+}\rangle = \frac{1}{\sqrt{1+a_n^2}}|\uparrow, n\rangle + \frac{a_n}{\sqrt{1+a_n^2}}|\downarrow, n+1\rangle$$

$$E_{n+} = \omega_f(n + \frac{1}{2}) + \sqrt{\varepsilon_n^2 + \Delta^2}$$

もう一つの解は

$$|\Psi_{n-}\rangle = \frac{1}{\sqrt{1+b_n^2}}|\uparrow, n\rangle + \frac{b_n}{\sqrt{1+b_n^2}}|\downarrow, n+1\rangle$$

$$E_{n-} = \omega_f(n + \frac{1}{2}) - \sqrt{\varepsilon_n^2 + \Delta^2}$$

ここで、

$$a_n = \frac{\Delta + \sqrt{\varepsilon_n^2 + \Delta^2}}{\varepsilon_n}$$

$$b_n = \frac{\Delta - \sqrt{\varepsilon_n^2 + \Delta^2}}{\varepsilon_n}$$

$$\Delta = \frac{\omega_f - \omega_a}{2}$$

$$\varepsilon_n = g\sqrt{n+1}$$

固有値問題が解けたので、次に、量子系の時間発展を支配するシュレディンガー方程式を考える。

$$\text{シュレディンガー方程式} \begin{cases} -i\frac{d}{dt}\Psi_n(t) = H\Psi_n(t) \\ \Psi_n(0) = |\uparrow, n\rangle \end{cases}$$

シュレディンガー方程式は 1926 年 [14] にシュレディンガーが、ド・ブロイ [2] の発見した電子の波動性をヒントに導いた方程式で、量子論の根幹をなす方程式である。まさに、ニュートンの運動方程式 $f = ma$ に匹敵する方程式である。ちなみに、量子論のエネルギーの式 $E = h\nu$ [12] と相対論のエネルギーの式 $E = mc^2$ [3] を矛盾なく両立させるために、ド・ブロイはがたどり着いたのが、電子の波動性であった。ボルンの確率解釈によれば、時刻 t で $\Psi_n(t)$ が Φ である確率は $|\langle \Phi, \Psi_n(t) \rangle|^2$ になる。シュレディンガー方程式の解は、 H が自己共役作用素なので

$$\Psi_n(t) = e^{itH} |\uparrow, n\rangle \quad t \in \mathbb{R} \quad (3.2)$$

と表せる。ここで、 e^{itH} はスペクトル分解を通して $e^{itH} = \int e^{it\lambda} dE_\lambda$ と定義される。(3.2) を求めよう。いま、2 準位状態のエネルギー差 ω_a と同じエネルギーの電磁波 ω_f が照射されたと仮定する。つまり、

$$\omega_f = \omega_a \quad (\text{ラビ振動のための条件}) \quad (3.3)$$

とする。この条件は、NMR でラーモア周波数と同じ電磁波を原子に向けて照射したことに対応している。NMR では共鳴が起きた。ラビ模型でも同じことが起きる。みてみよう。(3.3) のとき、

$$\Delta = 0, \quad a_n = 1, \quad b_n = -1$$

になる。このとき、注意深く観察すると

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2}}(|\Psi_{n+}\rangle + |\Psi_{n-}\rangle) &= |\uparrow, n\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|\Psi_{n+}\rangle - |\Psi_{n-}\rangle) &= |\downarrow, n+1\rangle \end{aligned}$$

になることがわかる。ゆえに、

$$\begin{aligned} e^{itH} |\uparrow, n\rangle &= e^{itH} \frac{1}{\sqrt{2}}(|\Psi_{n+}\rangle + |\Psi_{n-}\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{itE_{n+}} |\Psi_{n+}\rangle + e^{itE_{n-}} |\Psi_{n-}\rangle) \\ &= e^{-i(n+\frac{1}{2})\omega t} \{ \cos \varepsilon_n |\uparrow, n\rangle - i \sin \varepsilon_n |\downarrow, n-1\rangle \} \end{aligned}$$

まとめると以下のようなになる。

定理 3.2 (ラビ振動) $\omega_a = \omega_f$ とする。このとき、次が従う。

$$e^{itH} |\uparrow, n\rangle = a_t |\uparrow, n\rangle + b_t |\downarrow, n-1\rangle$$

ここで、
$$\begin{pmatrix} a_t \\ b_t \end{pmatrix} = e^{-i(n+\frac{1}{2})\omega t} \begin{pmatrix} \cos(gt\sqrt{n+1}) \\ -i \sin(gt\sqrt{n+1}) \end{pmatrix}$$

ここで

$$T = \frac{\pi}{g\sqrt{n+1}}$$

とする。定理 3.2 より、 $|\uparrow, n\rangle$ を入力として、右辺を出力とみなせば T 時間ごとに $|\uparrow, n\rangle$ と $|\downarrow, n-1\rangle$ が交互に出力されることになる。例えば、観測時間を T 間隔とすれば、常に

$$|\uparrow, n\rangle \rightarrow \begin{cases} |\uparrow, n\rangle \\ |\downarrow, n-1\rangle \end{cases}$$

という遷移が観測できる。まさに量子コンピューターのビットに対応するものである。

光子の吸収と放出の確率を計算しよう。ボルンの確率解釈によれば、時刻 t で $\Psi_n(t)$ が $|\uparrow, n\rangle$ である確率は

$$|(\langle\uparrow, n|, \Psi_n(t))|^2 = \frac{1}{2}(1 + \cos(2tg\sqrt{n+1}))$$

一方で、時刻 t で $\Psi_n(t)$ が $|\downarrow, n-1\rangle$ である確率は

$$|(\langle\downarrow, n-1|, \Psi_n(t))|^2 = \frac{1}{2}(1 - \cos(2tg\sqrt{n+1}))$$

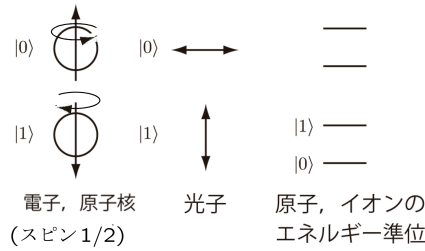
である。これは、振動数 $2g\sqrt{n+1}/\pi$ で、 $|(\langle\uparrow, n|, \Psi_n(t))|^2$ と $|(\langle\downarrow, n-1|, \Psi_n(t))|^2$ が交互に 1 になるといっているの、物理的には光子の吸収 ($n-1 \rightarrow n$) と放出 ($n \rightarrow n-1$) を繰り返すことをいっている。まさに、共鳴が起きている。

4 量子コンピューター

量子コンピューターは、量子力学の原理を利用して情報処理を行うコンピューターの種類である。古典的コンピューターでは、情報は「ビット」と呼ばれる 0 または 1 の状態で表現されるが、量子コンピューターでは「量子ビット」または「qubit」と呼ばれる特殊な量子状態を利用することはすでに述べた。NMR におけるラビ振動は、磁場と電磁波によって原子核に起きる現象であるが、ラビ振動による量子ビットの実現はもう少し人工的な設定で行われる。その結果、量子ビットの状態を制御し、情報処理や量子ゲート操作を実現することが可能になる。

量子コンピューターを作るためには 2 準位状態とそれと相互作用する電磁場が必要である。候補には、NMR で使った原子核、光子のスピン、電子のスピンなどがあるが、

物理系の候補:



日本物理学会2008年度公開講座

20

図 4: <http://www.osaka.jps.or.jp/2008koukai/record/nakahara.pdf>

現在では人工原子が使われている。イオンや光子などを量子力学の状態を壊さずに制御する画期的な手法を開発した業績に対して、2012年度のノーベル物理学賞がワインランドとアロッシュ[6]に授与された。また、人工原子は[17]に詳しい解説がある。

ジョセフソン接合は超伝導現象を利用した電子デバイス的一种で、超伝導体同士を非常に薄い絶縁体で隔てることによって形成される。図4を見よ。この接合において、電子対(クーパー対という)はトンネル効果を利用して超伝導体間を自由に移動することができる。これが原子のような振る舞いをするので人工原子と呼ばれている。そのスペクトルは複雑なのだが、下端に孤立した2つの固有値が現れる。それを2準位状態の原子とみなす。ここに電磁場を照射してラビ振動を起こして量子コンピューターを実現することが試みられている。ただし、想像できるように、この孤立した2つの固有状態は安定ではない。どれだけの時間安定に保つことができるのか?それが、量子コンピューター開発の最大の課題になっているようである。

4. 超伝導型量子コンピュータ概説

4-2. 超伝導型量子コンピュータ

- 超伝導回路による量子ビット(人工原子)の実現

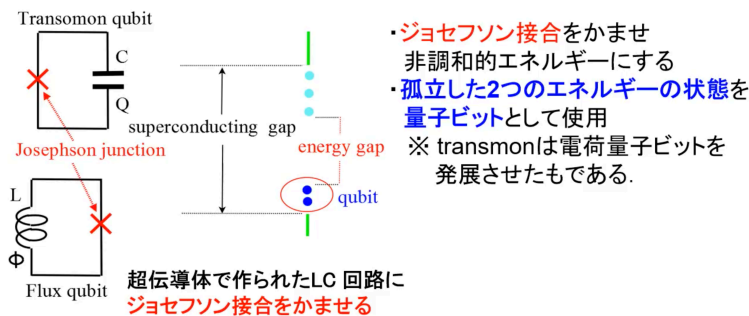


図 5: 廣川真男 九大・卓越共創概論 I より抜粋

5 最後に数学の話をし。。。

5.1 スペクトルゼータ関数とリーマンゼータ関数

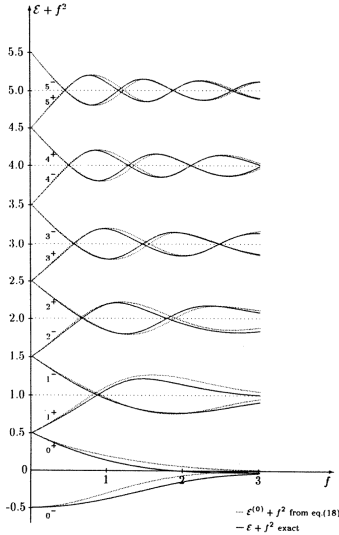


図 6: $H_{Rabi} + g^2$ の固有値 [5]

リーマンゼータ関数

$$\zeta_R(s) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^s}$$

は数学の世界で最も有名な関数である。リーマンゼータ関数のゼロ点 $\zeta(s) = 0$ の分布に関する予想はリーマン予想といわれ、150年以上解かれていない難問である、ミレニアム懸賞問題の一つにもなっている。

$h = a^\dagger a$ とおくと、その固有値は $\{0, 1, 2, \dots\}$ である。リーマンゼータ関数に現れる $\frac{1}{n^s}$ の $n (\neq 0)$ を h の固有値とみなすこともできる。

$$H_{Rabi} = \Delta \sigma_z + g \sigma_x (a + a^\dagger) + a^\dagger a$$

としよう。 $H_{Rabi} \Psi_n = E_n \Psi_n$ を考える。ここで、 $E_n = E_n(g)$ は n 番目 ($n = 0, 1, 2, \dots$) の H_{Rabi} の固有値を表す。さて、ラビ模型の固有値は h の固有値の変形とみなせる。

$$\zeta_g(s) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{E_n^s}$$

をスペクトルゼータ関数という。図6から想像できるように、 $g \rightarrow \infty$ では H_{Rabi} は何らかの意味で h に近づくことが予想される。実際、

$$\lim_{g \rightarrow \infty} (H_{Rabi} + g^2) = \begin{pmatrix} h & 0 \\ 0 & h \end{pmatrix}$$

がレゾルベントの意味で示せる。さらに次が示せる。

$$\lim_{g \rightarrow \infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(E_n + g^2)^s} = 2\zeta_R(s)$$

数学者にとって、この定理の証明はさほど困難ではないが、それなりの数学の訓練を受けていなければ解けない問題である。

$g \rightarrow \infty$ の挙動に関しては、純粋に数学的な興味だけではなく、物理的な考察もある。自発的超対称性の破れと $g \rightarrow \infty$ の挙動に関する興味深い研究が [7] にある。さらに、その実験的検証が [4] で報告されている。こういう話題を耳にすると、理論も実験も異常な速さで進んでいることが実感させられる。

5.2 経路積分

ユニタリ変換を $U = e^{(i\pi/4)\sigma_y}$ と定義する。このとき

$$\begin{aligned} UH_{Rabi}U^{-1} &= a^\dagger a + g\sigma_z(a + a^\dagger) - \Delta\sigma_x \\ &= \begin{pmatrix} a^\dagger a + g(a + a^\dagger) & -\Delta \\ -\Delta & a^\dagger a - g(a + a^\dagger) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

となる。さらに、 $\varphi_g = \pi^{-1/4}e^{-|x|^2/2}$ が正の関数なので、 $d\mu(x) = \varphi_g^2 dx$ とおいて、 $U_g : L^2(\mathbb{R}) \rightarrow L^2(\mathbb{R}, d\mu)$ を $U_g f = \varphi_g^{-1} f$ と定義する。そうすると

$$U_g UH_{Rabi}U^{-1}U_g^{-1} = \frac{1}{2} \left(-\frac{d^2}{dx^2} + x\frac{d}{dx} \right) + g\sigma_z\sqrt{2}x - \Delta\sigma_x \quad (5.1)$$

$\mathbb{Z}_2 = \{-1, +1\}$ とおく。ハミルトニアン (5.1) をスカラー関数に変換する。そのために、 $\mathbb{C}^2 \otimes L^2(\mathbb{R})$ を次と同一視する。

$$\mathbb{C}^2 \otimes L^2(\mathbb{R}) = L^2(\mathbb{R} \times \mathbb{Z}_2, d\mu) = \left\{ f = f(x, \sigma) \left| \sum_{\sigma \in \mathbb{Z}_2} \int |f(x, \sigma)|^2 d\mu(x) < \infty \right. \right\}$$

同一視の仕方は $\mathbb{C}^2 \otimes L^2(\mathbb{R}) \ni \begin{pmatrix} f_+(x) \\ f_-(x) \end{pmatrix} \mapsto f(x, \sigma) \in \mathbb{C}^2 \otimes L^2(\mathbb{R})$ である。そうすると

$$Hf(x, \sigma) = \left\{ \frac{1}{2} \left(-\frac{d^2}{dx^2} + x\frac{d}{dx} \right) + g\sqrt{2}\sigma x \right\} f(x, \sigma) - \Delta f(x, -\sigma), \quad \sigma \in \mathbb{Z}_2$$

となる。以下で、 H_{Rabi} の代わりに H を考える。 $h = \frac{1}{2} \left(-\frac{d^2}{dx^2} + x\frac{d}{dx} \right)$ とおく。 $(X_t)_{t \geq 0}$ は確率空間 $(\mathcal{X}, \mathcal{B}, P^x)$ 上のオーレンシュタイン-ウーレンベック (OU) 過程といわれるものである。

$$\int \mathbb{E}_{P^x} [X_t] d\mu(x) = 0, \quad \int \mathbb{E}_{P^x} [X_t X_s] d\mu(x) = \frac{e^{-|t-s|}}{2}.$$

ここで $\mathbb{E}_Q[\dots]$ は期待値を表す。次が成り立つ。

$$(f, e^{-th}g)_{\mathbb{C}^2 \otimes L^2(\mathbb{R})} = \int \mathbb{E}_{P^x} [\overline{f(X_0)}g(X_t)] d\mu(x).$$

また、 $(N_t)_{t \geq 0}$ を確率空間 $(\mathcal{X}', \mathcal{B}', \nu)$ 上のポアソン過程とする。このとき、次を満たす。

$$\mathbb{E}_\nu [\mathbf{1}_{N_t=n}] = \frac{t^n}{n!} e^{-t}, \quad n \geq 0.$$

$\{-1, 1\}$ に値をとる確率過程 σ_t を次で定める。

$$\sigma_t = (-1)^{N_t} \sigma \quad \sigma \in \mathbb{Z}_2$$

$\sum_{\sigma \in \mathbb{Z}_2} \int \mathbb{E}_{P^x} \mathbb{E}_\nu [\dots] d\mu(x) = \mathbb{E}[\dots]$ とする。

定理 5.1 (ラビハミルトニアンを経路積分表示 [8]) 次が成り立つ。

$$(f, e^{-tH} g)_{\mathcal{C}^2 \otimes L^2(\mathbb{R})} = e^t \mathbb{E} \left[\overline{f(X_0, \sigma_0)} g(X_t, \sigma_t) e^{-g\sqrt{2} \int_0^t \sigma_s X_s ds} \Delta^{N_t} \right]$$

本来の H は行列係数であったが、右辺の積分核がスカラーであることが非自明な特徴である。この定理により、 H の固有値の様子を調べることができる。

系 5.2 ([8]) 図 3 で一番エネルギーの低いスペクトル曲線は他のスペクトル曲線と交わらない。

この系により、例えば、人工原子で量子コンピュータを構成した場合、孤立した 2 つの準位状態は互いに縮退することなく安定であることがわかる。

A 自己共役作用素のスペクトル分解定理

A をエルミート行列とする。エルミート行列は自己共役作用素の有限次元版であることを注意しておく。 $U^*U = UU^* = E$ となる行列で

$$A = U \begin{pmatrix} \lambda_1 & \dots & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & \dots & \lambda_n \end{pmatrix} U^*$$

とできる。 A は次のように分解できる。

$$A = \sum_{j=1}^n \lambda_j E_j$$

ここで

$$E_j = U j \begin{pmatrix} & & j \\ 0 & \dots & 0 \\ \vdots & 1 & \vdots \\ 0 & \dots & 0 \end{pmatrix} U^*$$

これは $E_j^* = E_j$, $E_j E_i = \delta_{ij} E_j$ を満たす。

$$A^m = \sum_{j=1}^n \lambda_j^m E_j$$

$$\alpha A = \sum_{j=1}^n \alpha \lambda_j E_j$$

となるから、一般に $P(x) = a_n x^n + \dots + a_1 x + a_0$ とすれば

$$P(A) = \sum_{j=1}^n P(\lambda_j) E_j$$

がわかる。そこで関数 $f: \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$ に対して $f(A)$ を

$$f(A) = \sum_{j=1}^n f(\lambda_j) E_j$$

と定める。例えば $t \in \mathbb{R}$ として $e^{-itA} = \sum_{j=1}^n e^{-it\lambda_j} E_j$ と定義する。 $A = \sum_{j=1}^n \lambda_j E_j$ を積分の形で表してみよう。 $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n$ として

$$E(\lambda_j) = \sum_{i=1}^j E_i$$

と定める。これは $E(\lambda_j)^2 = E(\lambda_j)$ を満たす。さらに、次のように連続パラメター λ へ拡張する。

$$E_\lambda = \begin{cases} 0 & \lambda < \lambda_1 \\ E(\lambda_j) & \lambda_j \leq \lambda < \lambda_{j+1}, 1 \leq j \leq n \\ \mathbb{1} & \lambda > \lambda_n \end{cases}$$

同様に $E_\lambda^2 = E_\lambda$ も示せる。 $\lambda \uparrow$ のとき $E_\lambda \uparrow$ だから増大列ができたことになる。また、右連続性 $E_{\lambda+0} = E_\lambda$ も自明である。さらに $\lambda \leq \mu \implies E_\lambda E_\mu = E_\lambda$ が確かめられる。 λ_1 より λ が小さければ $E_\lambda = 0$ であり、 λ_n より大きければ $E_\lambda = \mathbb{1}$ になる。さらに E_λ が不連続的に飛躍する点は A の固有値であり、 E_λ が不変な区間は固有値が含まれない区間である。 $x, y \in \mathbb{C}^n$ として $\Delta_j = (x, E(\lambda_j)y) - (x, E(\lambda_{j-1})y)$ とすれば

$$(x, Ay) = \sum_{j=1}^n \lambda_j (x, E_j y) = \sum_{j=1}^n \lambda_j \Delta_j$$

と表せるから、形式的に $d(x, E_\lambda y)$ を用いて

$$(x, Ay) = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda d(x, E_\lambda y)$$

と表せるだろう。これを思い切って

$$A = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda dE_\lambda$$

と書き表して、 A のスペクトル分解という。 $(x, f(A)y) = \sum_{j=1}^n f(\lambda_j) \Delta_j$ だったから、形式的な積分の記号で

$$(x, f(A)y) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\lambda) d(x, E_\lambda y)$$

となる。ここまではエルミート行列の話だが、ヒルベルト空間上の自己共役作用素 T はいつでも

$$T = \int \lambda dE_\lambda$$

という表式をもつことが、1927年にフォン・ノイマン [15] によって示されている。この表式を使えば、 $f(T) = \int f(\lambda) dE_\lambda$ と定義できるのである。

参考文献

- [1] D. Braak. Integrability of Rabi model. *Phys. Rev. Lett.*, 107:100401,7pages, 2011.
- [2] L. de Broglie. Recherches sur la théorie des quanta. *Annals Phys.*, 2:22–128, 1925.
- [3] A. Einstein. Ist die Trägheit eines Körpers von seinem Energieinhalt abhängig? *Annalen der Physik*, 18:639–641, 1905.
- [4] M. L. Cai et al. Observation of supersymmetry and its spontaneous breaking in a trapped ion quantum simulator. *Nature Communications*, 13(3412):7pages, 2022.
- [5] I. D. Feranchuk, L. I. Komarov, and A. P. Ulyanenko. Two-level system in a one-mode quantum field: numerical solution on the basis of the operator method. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 29:4035–4047, 1996.
- [6] S. Haroche and J. M. Raimond. *Exploring Quantum. Atoms, Cavities, and Photons*. Oxford University Press, 2008.
- [7] M. Hirokawa. The rabi model gives off a flavor of spontaneous susy breaking. *Quantum.Stud.:Math.Found.*, 2:379–388, 2015.
- [8] M. Hirokawa and F. Hiroshima. Absence of energy level crossing for the ground state energy of the Rabi model. *Commun. Stochastic Anal.*, 8:551–560, 2014.
- [9] E.T. Jaynes and F.W. Cummings. On the process of space quantization. *Proceedings of the IEEE*, 51:89–109, 1963.
- [10] M. Kuś. On the spectrum of a two-level system. *J. Math.Phys.*, 26:2792–2795, 1985.
- [11] P.C.Lauterber. Image formulation by induced local interactions examples employing nuclear magnetic resonance. *Nature*, 242:190–191, 1973.
- [12] M. Planck. Zur Theorie des Gesetzes der Energieverteilung im Normalspectrum. *Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft*, 2:237–245, 1900.
- [13] I. I. Rabi. On the process of space quantization. *Phys. Rev.*, 49:324–328, 1936.
- [14] E. Schrödinger. Quantisierung als Eigenwertproblem. *Ann.der Phys.*, 79:361–376, 1926.
- [15] J. von Neumann. Mathematische Begründung der Quantenmechanik. *Nachrichten von der Gesellschaft der Wissenschaften zu Göttingen, Mathematisch-Physikalische Klasse*, 1:1–57, 1927.

[16] 黒田成俊. 関数解析. 共立出版, 2008.

[17] 祭兆伸 中村泰信. ジョセフソン接合用いた量子ビット. 応用物理, 11:1300–1304, 2000.