数理解析研究所講究録
1013巻 1997年 203-206

経路積分による量子演算

大阪工業技術研究所 福見俊夫(Toshio Fukumi)
長尾秀実(Hidemi Nagao)
鎌田賢司(Kenji Kamada)
太田浩二(Koji Ohta)
高知大学情報科学科 松枝秀明(Hideaki Matsueda)

1．はじめに

量子演算はBenioff[1]やFeynman[2]によってハミルトニアン形式で定式化されてきた。しかし、この方法では、波動函数の干渉やエンタングルメントのレベルでしか量子並列性が出てこない。これに対して、本稿で述べる経路積分では並列性をより明確に認識できる。

2．ハミルトニアン

量子演算のハミルトニアンは

$$H=-\frac{\hbar}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x,t)$$

ととれ、相互作用項は

$$V(x,t)=(\sum F_{ij}+F_{if}^{\dagger},\sum F_{ij}+F_{if}^{\dagger})$$

と内積の形に表すことができる。ここで、$F_{ij}^{\dagger}$ 及びF_{ij} はMargolus[3]に従って

$$F_{ij}^{\dagger}=A_{ij}\alpha_{ij}^{\dagger}\alpha_{i+1j}^{\dagger}\alpha_{ij+1}^{\dagger}\alpha_{i+1j+1}^{\dagger}$$

$$F_{ij}=A_{ij}\alpha_{ij}\alpha_{i+1j}\alpha_{ij+1}\alpha_{i+1j+1}$$

ととる。ここで、$\alpha^{\dagger}$、αは生成、消滅演算子である。

3．ラグランジアン形式

経路積分はFeynman & Hibbs[4], Shulman[5] 及びWiegel[6]によって詳しく述べられている。以下Wiegelの記法に従う。
プロパゲータは次のように与えられる。

$$G(x,y)=C\sum_{s}\exp\left\{-\frac{i}{2\hbar}\int_{t_0}^{t}L[x_s(t')]dt'\right\}$$

オイラー・ラグランジェ方程式は

$$\frac{\partial L}{\partial x}-\frac{d}{dt}\frac{\partial}{\partial \dot{x}}=0$$

であるが、今の場合

$$L = \dot{x}^2 + 2\hbar V$$

となる。

4．量子並列演算

今の場合のプロパゲータは

$$G(x,t|x_0,t_0) = \int_{x_0,t_0}^{x,t} \exp\left\{ \frac{i}{2\hbar}\left\| \frac{dx}{dt} \right\|^2 - V(x,t') \right\} d[x(t')]$$

でここに

$$\int d[x(t)] = (2\pi i\hbar\varepsilon)^{(N+1)/2} \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dx_N$$

である。このようにすべての経路の寄与が重み付きで存在することが量子並列性の原因であることが読み取れる。

相互作用は２次形式であるので、WKB 近似が正確に成立するので

$$x(t) = x_c(t) + \delta(t)$$

と展開する。ここに x_c は古典的な軌道、$\delta(t)$ はゆらぎである。

この時プロパゲータは

$$G(x,t|x_0,t_0) = \int_{x_0,t_0}^{x,t} \exp\left\{ \frac{i}{2\hbar}\left\| \frac{dx_c}{dt'} \right\|^2 - V(x,t') \right\} d^t$$

$$-\frac{i}{\hbar}\int \left\{ \left\| \frac{d\delta}{dt'} \right\|^2 - \frac{1}{2}V_c^{"}(t')\delta^2(t') \right\} dt'$$

となるので

$$G(x,t) = F(x,t)\exp\left\{ \frac{i}{\hbar}\left\{ \left\| \frac{dx_c}{dt'} \right\|^2 - V(x_c,t') \right\} dt' \right\}$$

とおくと

$$F(x,t) = \lim(2\pi\varepsilon/\hbar)^{-(N+1)/2} \int_{-\infty}^{\infty} d\delta_1 \int_{-\infty}^{\infty} d\delta_2 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} d\delta_N$$

$$\times \exp\left\{ -\frac{\hbar}{2\varepsilon}\sum_{j=0}^{N}(\delta_{i+1} - \delta_i)^2 - \frac{1}{2}\varepsilon\sum_{j=1}^{N} V_j^{"}\delta_i^2 \right\}$$

と書き直すことができる。

よって

$$(2\hbar\varepsilon)^{-1}\sum_{k,l=1}^{N}\delta_k B_{k,l}\delta_l$$

ここに

$$B_{k,k} = 2 + \hbar^2\varepsilon^2 V_k^{"}$$

$$B_{k,k+1} = B_{k,k-1} = -1$$

と置く時、固有値をλ_jと書くと

$$F(x,t)=\lim(2\pi\varepsilon\hbar)^{-(N+1)/2}\prod_{j=1}^{N}(2\pi\varepsilon\hbar/\lambda_j)^{1/2}$$
$$=\lim(2\pi\varepsilon\hbar\det B_N)^{-1/2}$$

となる。
ここで

$$\det B_N=(2+\varepsilon^2\hbar V_N^{"})\det B_{N-1}-\det B_{N-2}$$

に対して

$$C_N=\frac{\det B_N}{N+1}$$

ととると

$$C_N-2C_{N-1}+C_{N-2}=\frac{-2}{N+1}(C_{N-1}-C_{N-2})+\varepsilon^2\hbar\frac{NV_N^{"}}{N+1}C_{N-1}$$

が成立する。ここで

$$\lim\quad N\to\infty,\varepsilon\to 0$$

の極限を

$$(N+1)\varepsilon=t-t_0$$

となるようにとると

$$\frac{d^2C}{dt^2}+\frac{2}{(t-t_0)}\frac{dC}{dt}=\hbar V^{"}(x_c(t))C$$

なる微分方程式を得る。これは初期条件

$$C=2,\quad \frac{dC}{dt}=0$$

のもとで

$$F(x,t)=\left\{2\pi\hbar(t-t_0)C(x,t)\right\}^{-1/2}$$
$$A\equiv(t-t_0)C(x,t)$$

とおくと

$$\frac{d^2A}{dt^2}=\hbar V^{"}(x_c(t))A$$

この微分方程式は境界条件

$$A=0,\quad \frac{dA}{dt}=2$$

のもとで

$$\frac{dx_c}{dt}=(2E+2\hbar V)^{1/2}$$

に注目すると

$$(2E+2\hbar V)A^{"}+\hbar V'A'=\hbar V^{"}A$$

となるので、初期条件

$$A = 0, \quad A' = (2E + 2\hbar V)^{-1/2}, \quad for\ x = x_0$$

$$\{(2E + 2\hbar V)A\}'' = \{3\hbar V'A'\}$$

のもとで,解

$$A(x_c) = (2E + 2\hbar V(x_0))^{1/2}(2E + 2\hbar V(x_c))^{1/2}$$
$$\times \int_{x_0}^{x} (2E + 2\hbar V(y))^{-3/2} dy, \ \text{in} \ x_c > x_0$$

を得る。従って、経路積分は

$$G(x,t) = \{2\pi\hbar(2E + 2tV(x_0))^{1/2}(2E + 2\hbar V(x))^{1/2}$$
$$\times \int_{x_0}^{x} (2E + 2\hbar V(y)^{-3/2} dy\}^{-1/2}$$
$$\times \exp\{-\frac{1}{2\hbar}\int_{t_0}^{t} \left\|\frac{dx_c}{dt'}\right\| dt' - \int_{t_0}^{t} V(x_c)dt'\}$$

となり、ゆらぎの項 $\int_{x_0}^{x} V(y)^{-3/2} dy$ によって、並列演算が進行していることがわかる。

5．おわりに

以上 WKB 近似での経路積分を見てきたが、実はこの半古典近似では量子並列性は顕著には見えてこない。逆に言うと量子性が並列演算を担っていることになる。この点に関しては、さらに検討を要する。

文献

1) P.Benioff, "New Techniques and Ideas in Quantum Measurement Theory", ed. D.M.Greenberger, NY Acad. Sci. (1988) p.475.
2) R.P.Feynman , Opt.News, 11, 11(1985).
3) N.Margolus, "New Techniques and Ideas in Ouantum Mesurement Theory", ed.D.M.Greenberger, NY Acad. Sci. (1988) p.487.
4) R.P.Feynman and A.R.Hibbs, "Quantum Mechanics and Path Integrals" (McGraw-Hill, NY, 1965).
5) L.S.Shulman, 'Techniques and Application of Path Integration" (Wiley, NY. 1981).
6) F.W.Wiegel, "Introduction to Path-Integral Methods in Physics and Polymer Science" (World Sci., Shingapore 1986).