数理解析研究所講究録
第 1576 巻 2008 年 47-52

有限量子系の超双曲型構造と変形ベッセル関数について

by

横浜市立大学・数理科学科 藤井一幸 (FUJII Kazuyuki)
Department of Mathematical Sciences, Yokohama City University

はじめに

横浜市立大学の量子コンピュータ・グループでは原子の energy levels を用いた量子計算を研究してきた [1], [2]。量子計算では、通常 two energy levels を用いて取り扱う (qubit theory) [3]。しかし原子は一般に many energy levels をもち、これを利用する量子計算を qudit theory と言う、例えば [4], [5]。

原子の有限個の energy levels system を有限量子系と呼ぼう。このシステムにある種の双曲型構造が入り、それを超双曲型構造 (super hyperbolic structure) と呼ぶことにする。これが変形ベッセル関数の母関数と関係し、面白い(関数)関係を得ることが出来る [6]。この構造が qudit theory の問題(難問)を解決できるか否かは今後の研究課題である。

有限量子系でうまい極限をとると、それが大貫と北門による円周上の量子力学になる [7]。そのとき変形ベッセル関数の母関数の "正体" が明らかになる。

数学的準備

まず 2 準位系の復習をしよう。$\{\sigma_1, \sigma_3\}$ をパウリ (Pauli) 行列で、$\mathbf{1}_2$ を単位行列とする。

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{1}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{1}$$

σ_1 and σ_3 の良く知られた性質をリストすると

$$\sigma_1^2 = \sigma_3^2 = \mathbf{1}_2, \quad \sigma_1^\dagger = \sigma_1, \quad \sigma_3^\dagger = \sigma_3, \quad \sigma_3\sigma_1 = -\sigma_1\sigma_3 = \mathrm{e}^{\pi i}\sigma_1\sigma_3. \tag{2}$$

更に $\sigma_1 = W\sigma_3 W^{-1}$ の関係がある。ここに W は Walsh–Hadamard matrix で、

$$W = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = W^{-1} \tag{3}$$

で与えられる。これは非常に重要な行列で Discrete Fourier Transform の特別な場合である [3]。

hyperbolic functions $\{\cosh x, \sinh x\}$ は

$$\cosh x \equiv \frac{\mathrm{e}^x + \mathrm{e}^{-x}}{2} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^{2k}}{(2k)!}, \quad \sinh x \equiv \frac{\mathrm{e}^x - \mathrm{e}^{-x}}{2} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^{2k+1}}{(2k+1)!} \tag{4}$$

で定義され、以下の性質をもつ。

$$\cosh^2 x - \sinh^2 x = 1, \tag{5}$$

$$\begin{aligned}\cosh(x+y) &= \cosh(x)\cosh(y) + \sinh(x)\sinh(y),\\ \sinh(x+y) &= \sinh(x)\cosh(y) + \cosh(x)\sinh(y).\end{aligned} \tag{6}$$

簡単のため以下では $c_0(x) \equiv \cosh(x)$, $c_1(x) \equiv \sinh(x)$ とおく。そのとき $\mathrm{e}^{x\sigma_1}$ を考えると

$$\mathrm{e}^{x\sigma_1} = c_0(x)\mathbf{1}_2 + c_1(x)\sigma_1 = \begin{pmatrix} c_0(x) & c_1(x) \\ c_1(x) & c_0(x) \end{pmatrix} \tag{7}$$

で、(5) と (6) は簡単に

$$\det(\mathrm{e}^{x\sigma_1}) = 1, \quad \mathrm{e}^{(x+y)\sigma_1} = \mathrm{e}^{x\sigma_1}\mathrm{e}^{y\sigma_1} \tag{8}$$

と表される。

The modified Bessel functions of integer order $\{I_k(x) \mid k \in \mathbf{Z}\}$ は、母関数 (generating function)

$$\mathrm{e}^{\frac{x}{2}(w+\frac{1}{w})} = \sum_{k\in\mathbf{Z}} I_k(x)w^k. \tag{9}$$

によって与えられ、例えば

$$\begin{aligned} 1 &= I_0(x) + 2\sum_{k=1}^{\infty}(-1)^k I_{2k}(x), \\ \cosh(x) &= I_0(x) + 2\sum_{k=1}^{\infty} I_{2k}(x), \quad \sinh(x) = 2\sum_{k=1}^{\infty} I_{2k-1}(x) \end{aligned} \tag{10}$$

などの重要な性質をもつ [8]。(9) の母関数に代入 $w \longrightarrow w\sigma_1$ をおこなうと

$$\mathrm{e}^{\frac{x}{2}\left(w\sigma_1 + \frac{1}{w}\sigma_1^{-1}\right)} = \mathrm{e}^{\frac{x}{2}(w+\frac{1}{w})\sigma_1} = \cosh\left(\frac{x}{2}\left(w + \frac{1}{w}\right)\right)\mathbf{1}_2 + \sinh\left(\frac{x}{2}\left(w + \frac{1}{w}\right)\right)\sigma_1 \tag{11}$$

を得る。これより (10) は簡単にわかる。

<u>有限量子系と超双曲型構造</u>

パウリ行列 $\{\sigma_1, \sigma_3\}$ の一般化は、generalized Pauli matrices $\{\Sigma_1, \Sigma_3\}$

$$\Sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & & & & & 1 \\ 1 & 0 & & & & \\ & 1 & 0 & & & \\ & & \ddots & \ddots & & \\ & & & 1 & 0 & \\ & & & & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \Sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & \sigma & & & & \\ & & \sigma^2 & & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & \sigma^{n-2} & \\ & & & & & \sigma^{n-1} \end{pmatrix} \tag{12}$$

で与えられる。ここに σ は $\sigma=\exp(\frac{2\pi i}{n})$ である。$\{\Sigma_1,\Sigma_3\}$ の間には (2) の一般化で

$$\Sigma_1^n=\Sigma_3^n=\mathbf{1}_n,\quad \Sigma_1^\dagger=\Sigma_1^{n-1},\quad \Sigma_3^\dagger=\Sigma_3^{n-1},\quad \Sigma_3\Sigma_1=\sigma\Sigma_1\Sigma_3. \tag{13}$$

の関係がある。更に $\Sigma_1 = W\Sigma_3W^{-1}$ が成り立つ。ここに W は generalized Walsh–Hadamard matrix で

$$W=\frac{1}{\sqrt{n}}\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 & 1 \\ 1 & \sigma^{n-1} & \sigma^{2(n-1)} & \cdots & \sigma^{(n-2)(n-1)} & \sigma^{(n-1)^2} \\ 1 & \sigma^{n-2} & \sigma^{2(n-2)} & \cdots & \sigma^{(n-2)^2} & \sigma^{(n-1)(n-2)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 1 & \sigma^2 & \sigma^4 & \cdots & \sigma^{2(n-2)} & \sigma^{2(n-1)} \\ 1 & \sigma & \sigma^2 & \cdots & \sigma^{n-2} & \sigma^{n-1} \end{pmatrix} \tag{14}$$

で与えられる (確かに $n=2$ のときは (3) になる)。W はまさに Discrete Fourier Transform そのものである。[9] にこれの面白い応用 (計算) がある。

(7) の $e^{x\sigma_1}$ の拡張として $e^{x\Sigma_1}$ を考えよう。

$$\begin{aligned} e^{x\Sigma_1} &= c_0(x)\mathbf{1}_n+c_1(x)\Sigma_1+c_2(x)\Sigma_1^2+\cdots+c_{n-2}(x)\Sigma_1^{n-2}+c_{n-1}(x)\Sigma_1^{n-1} \\ &= \begin{pmatrix} c_0(x) & c_{n-1}(x) & & \cdots & c_2(x) & c_1(x) \\ c_1(x) & c_0(x) & c_{n-1}(x) & \cdots & & c_2(x) \\ & c_1(x) & c_0(x) & c_{n-1}(x) & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ c_{n-2}(x) & & \cdots & c_1(x) & c_0(x) & c_{n-1}(x) \\ c_{n-1}(x) & c_{n-2}(x) & \cdots & c_2(x) & c_1(x) & c_0(x) \end{pmatrix}, \end{aligned} \tag{15}$$

ここに $c_j(x)$ は

$$c_j(x)=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{x^{kn+j}}{(kn+j)!}\implies e^x=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{x^k}{k!}=\sum_{j=0}^{n-1}c_j(x) \tag{16}$$

となる。(8) に対応するものとして

$$\det(e^{x\Sigma_1})=1,\quad e^{(x+y)\Sigma_1}=e^{x\Sigma_1}e^{y\Sigma_1} \tag{17}$$

があり、これらから基本関係式 (5) 及び 加法公式 (6) の拡張が出てくる。論文 [6] でこのシステム

$$\{c_0(x),c_1(x),\cdots,c_{n-1}(x)\} \tag{18}$$

を 超双曲型構造 (super hyperbolic structure) と呼んだ (評判はすこぶる悪い)。

(11) の一般化として

$$e^{\frac{x}{2}\left(w\Sigma_1+\frac{1}{w}\Sigma_1^\dagger\right)}=\sum_{k\in\mathbf{Z}}I_k(x)w^k\Sigma_1^k \tag{19}$$

を取るのは自然であり、これより多くの面白い結果を得る。例えば、

$$\frac{1}{n}\mathrm{tr}\left\{e^{\frac{x}{2}\left(w\Sigma_1+\frac{1}{w}\Sigma_1^\dagger\right)}\Sigma_1^j\right\}=\sum_{k\in\mathbf{Z}}I_{nk-j}(x)w^{nk-j}\quad\text{for}\quad 0\le j\le n-1 \tag{20}$$

を得る（$j=0$ の場合は知られている [10]）。

円周上の量子力学への移行

(12) のままで $n\longrightarrow\infty$ をとるのは不可能である。そこで少し工夫をする。$n=2N+1$ として

$$\widetilde{\Sigma}_1=\Sigma_1,\quad \widetilde{\Sigma}_3=\begin{pmatrix}\sigma^{-N}&&&&&&\\&\ddots&&&&&\\&&\sigma^{-1}&&&&\\&&&1&&&\\&&&&\sigma&&\\&&&&&\ddots&\\&&&&&&\sigma^N\end{pmatrix} \tag{21}$$

とおく。更に $\widetilde{\Sigma}_3$ を

$$\widetilde{\Sigma}_3=\exp\left(\frac{2\pi i}{2N+1}\widetilde{G}\right)\quad\text{where}\quad\widetilde{G}=\begin{pmatrix}-N&&&&&&\\&\ddots&&&&&\\&&-1&&&&\\&&&0&&&\\&&&&1&&\\&&&&&\ddots&\\&&&&&&N\end{pmatrix} \tag{22}$$

と書き直す。このとき (finite dimensional) Hilbert space を

$$\mathbf{C}^{2N+1}=\mathrm{Vect}_{\mathbf{C}}\{|-N\rangle,\cdots,|-1\rangle,|0\rangle,|1\rangle,\cdots,|N\rangle\}$$

と書いておくほうがベターである。何故なら $\widetilde{G}|n\rangle=n|n\rangle$ となるからである。

以上のもとで基本的作用素が $\{\widetilde{\Sigma}_3,\widetilde{\Sigma}_1\}$ から $\{\widetilde{G},\widetilde{\Sigma}_1\}$ へと変わり、これらの交換関係は

$$[\widetilde{G},\widetilde{\Sigma}_1]=\widetilde{\Sigma}_1\quad(\mathrm{mod}\ 2N+1) \tag{23}$$

となる。この段階で躊躇なく $N\longrightarrow\infty$ $(n\longrightarrow\infty)$ を取ることが出来る。即ち、大貫・北門の基本関係式

$$\widetilde{G}\longrightarrow G,\quad \widetilde{\Sigma}_1\longrightarrow W;\quad [G,W]=W \tag{24}$$

を得る[1]。ここに

$$G=\begin{pmatrix}\ddots &&&&&\\ &-2&&&&\\ &&-1&&&\\ &&&0&&\\ &&&&1&\\ &&&&&2\\ &&&&&&\ddots\end{pmatrix},\quad W=\begin{pmatrix}\ddots &&&&&\\ \ddots&0&&&&\\ &1&0&&&\\ &&1&0&&\\ &&&1&0&\\ &&&&1&0\\ &&&&&\ddots&\ddots\end{pmatrix} \tag{25}$$

で、G 及び W は (infinite dimensional) Hilbert space

$$\mathcal{L}^2(\mathbf{Z})=\left\{\sum_{n\in\mathbf{Z}}c_n|n\rangle \mid \sum_{n\in\mathbf{Z}}|c_n|^2<\infty\right\};\quad W|n\rangle=|n+1\rangle,\quad G|n\rangle=n|n\rangle \tag{26}$$

上の hermitian operator 及び unitary operator である。

(24) から円周上の量子力学が構築される [7]。これからいろいろな問題が提起される。例えば、(19) の更なる一般化である **generating operator**

$$e^{\frac{x}{2}\left(wW+\frac{1}{w}W^{\dagger}\right)}=\sum_{k\in\mathbf{Z}}I_k(x)w^kW^k \tag{27}$$

を考えることが出来る。後は読者にまかせよう。

参考文献

[1] K. Fujii, K. Higashida, R. Kato and Y. Wada : Cavity QED and Quantum Computation in the Weak Coupling Regime, J. Opt. B: Quantum and Semiclass. Opt, **6** (2004) 502, quant-ph/0407014.

[2] K. Fujii, K. Higashida, R. Kato and Y. Wada : Cavity QED and Quantum Computation in the Weak Coupling Regime II : Complete Construction of the Controlled–Controlled NOT Gate, Trends in Quantum Computing Research, Susan Shannon (Ed.), **Chapter 8**, Nova Science Publishers, 2006 and Computer Science and Quantum Computing, James E. Stones (Ed.), **Chapter 1**, Nova Science Publishers, 2007, quant-ph/0501046.

[3] 細谷 暁夫 : 量子コンピュータの基礎, SGC ライブラリ 4, サイエンス社, 1999.

[1]この記号は大貫・北門 [7] にあわせており、(14) の W とは異なることに注意せよ

[4] K. Fujii, K. Funahashi and T. Kobayashi : Jarlskog's Parametrization of Unitary Matrices and Qudit Theory, Int. J. Geom. Meth. Mod. Phys. **3** (2006), 269, quant-ph/0508006.

[5] K. Funahashi : Explicit construction of controlled–U gates and unitary operators in two–qudit, Yokohama Mathematical Journal, **52** (2005), 11, quant-ph/0304078.

[6] K. Fujii : A New Algebraic Structure of Finite Quantum Systems and the Modified Bessel Functions, to appear in International Journal of Geometric Methods in Modern Physics, (vol.4, no.7), 2007, arXiv : 0704.1844 (quant-ph).

[7] Y. Ohnuki and S. Kitakado : Fundamental Algebra for Quantum Mechanics on S^D and Gauge Potentials, J. Math. Phys. **34**(1993), 2827.

[8] E. T. Whittaker and G. N. Watson : A Course of MODERN ANALYSIS, Cambridge University Press, 1990.

[9] K. Fujii and T. Suzuki : Flow Representation of the Bose–Hubbard Hamiltonian : General Case, arXiv : 0707.0902 (quant-ph).

[10] S. Cojocaru : Green's function of a finite chain and the discrete Fourier transform, Int. J. Mod. Phys. **20**(2006), 593, arXiv : 0704.2898 (math-ph).