

量子ウォークの連続極限 Continuum Limit of Quantum Walk

○吉田洲¹, 糸井千岳²

*Shu Yoshida¹, Chigak Ito²

Abstract : A quantum walk is a quantum version of a random walk. This model is governed by a tight-binding Hamiltonian. In this study, we analyze the continuum limit of the quantum walk by taking the lattice spacing to zero. As a result, we obtain time evolution of a free particle in quantum mechanics and relativistic quantum mechanics.

1. はじめに

量子ウォークとは、格子上の粒子の状態がタイトバインディングハミルトニアンに従って、時間発展していくモデルである。このモデルは、量子シミュレータとしても注目されており、例えば結晶中の電子のふるまい^[2]などを観察することができる。

量子ウォークには連続時間と離散時間のものがある。離散時間と連続時間の関係はよく議論されるが、どちらかのモデルに注目し、その格子間隔をゼロにする極限をとることで位置を連続にする議論は少ない^[3]。そこで本研究では、連続時間量子ウォークの格子間隔の極限をとる連続極限を計算した。すると、ハミルトニアンの結合定数によって非相対論的量子力学の自由粒子のふるまいや、相対論的量子力学に近似されるふるまいをすることが分かった。特に、自由粒子のふるまいを作り出すには厳密な結合定数の調整が必要であることが分かった。

2. 量子ウォーク

量子ウォークは、よくランダムウォークの量子版といわれる。ランダムウォークは確率的に右や左へと粒子が移動するモデルである。その確率分布は初期位置を中心にしてガウス分布になる。

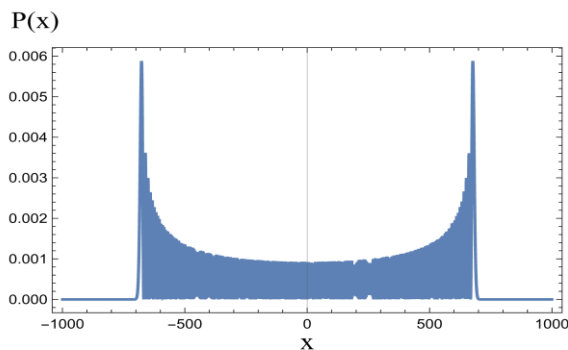


Figure 1. Quantum Walk Probability Distribution

これに対して量子ウォークは、確率分布がハミルトニアンで時間発展し、Figure 1のように、2つのピークが時間の経過とともに端に移動していく。量子ウォークのハミルトニアンは

$$H = \sum_n [\gamma_1 a_{n+1}^\dagger a_n + \gamma_0 a_n^\dagger a_n] + h.c. \quad (1)$$

であり、 γ_0, γ_1 は結合定数で n, m は整数。交換関係は、

$$[a_n, a_m^\dagger] = \delta_{n,m} \quad (2)$$

である。初期状態を1粒子状態とした $a_n^\dagger|0\rangle$ の時、時間発展は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t, n)\rangle = H|\psi(t, n)\rangle \quad (3)$$

より、計算すると $\langle m|\psi(t, n)\rangle$ は、

$$\int_{-\pi}^{\pi} \frac{dp'}{2\pi} \exp\left[\frac{t}{i\hbar} [\gamma_1 \cos p' + \gamma_0] + ip'(n-m)\right] \quad (4)$$

となる。これは Bessel 関数であり、この絶対値の2乗が量子ウォークの確率分布である。

3. 量子ウォークの連続極限

量子ウォークの連続極限を考える。格子間隔を s とし、離散的な位置と、波数を運動量に置き換える

$$x := sn, \quad y := sm, \quad p := \hbar p' / s. \quad (5)$$

s をゼロにする極限で位置 x, y は連続変数となり、運動量 p の大きさは上限がなくなる。

ここで、初期状態を $a_n^\dagger|0\rangle$ のままにしておくと、連続極限をとったとき、波動関数はデルタ関数になってしまい規格化できない。そこで、初期状態を、任意の重みで無限個の格子点にわたる重ね合わせ状態とし、規格化する。重みを $\varphi(x)$ とすると、

$$\langle y|\psi(t, \varphi)\rangle =$$

$$\lim_{s \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x) dx \int_{-\pi\hbar/s}^{\pi\hbar/s} \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp\left[\frac{t}{i\hbar} [\gamma_1 \cos s p/\hbar + \gamma_0] + ip(x-y)/\hbar\right] \quad (6)$$

となる. ここで結合定数の取り方に依存した波動関数の時間発展について調べる.

まず, 非相対論的な量子力学の自由粒子の解を得るため, $\gamma_1 = -\gamma_0$ と設定する. このまま連続極限をとると時間依存性がなくなってしまうため, $\gamma_0 = \gamma/s^2$ としてくりこみを行い, γ は観測量として有限な実数であるとする,

$$\langle y | \psi(t, \varphi) \rangle = \sqrt{\frac{i\hbar}{2\pi\gamma t}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \varphi(x) \exp\left[\frac{i\hbar}{2\gamma t}(x-y)^2\right] \quad (7)$$

となる. この解は, Schrodinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle y | \psi(t, \varphi) \rangle = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \langle y | \psi(t, \varphi) \rangle \quad (8)$$

を満たすので, これらの結合定数の精密な調整により, 量子ウォークの連続極限は非相対論的な自由粒子のふるまいをすることがわかる. ただし $\mu = \hbar^2/\gamma$ とした. 例として $\varphi(x)$ がガウス関数であるとき, 確率分布は Figure 2 のようになる.

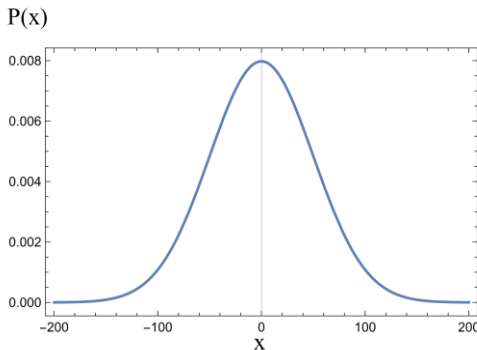


Figure.2 Probability distribution satisfying Schrodinger equation

次に, $\gamma_1 > |\gamma_0|$ のとき, 滑らかな確率密度関数が得られるようにくりこみを行う.

$$\langle y | \psi(t, \varphi) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[\frac{i^{(y-x)/s} \delta(x-y-vt)}{+i^{(x-y)/s} \delta(y-x+vt)} \right] \varphi(x) \quad (9)$$

となる. ただし, 簡単のため $|\gamma_0| = 0$ とし, $v = s\gamma_1/\hbar$ とした. ここで, 確率密度関数を求めると,

$$|\langle y | \psi(t, \varphi) \rangle|^2 =$$

$$|\varphi(y+vt)|^2 + |\varphi(y-vt)|^2 + (-1)^{vt/s} [\varphi(y+vt)^* \varphi(y-vt) + \text{c.c.}] \quad (10)$$

となる. このとき, 3項目は激しく振動しているが, 時間がたつにつれてその効果が弱まっていくことがわかる. $\varphi(x \pm vt)$ は, 相対論的な量子力学における Dirac 方程式の Weyl 表現

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} \pm v \frac{\partial}{\partial y}\right) \varphi(y \pm vt) = 0 \quad (11)$$

を満たす. 同じく, $\varphi(x)$ をガウス分布に取ったとき, 確率分布は Figure 2 のようになる. よって, 時間が十分たった時, この結合定数の組み合わせの量子ウォークの確率密度関数は滑らかな部分だけで近似でき, 相対論的な量子力学に従う自由粒子としてふるまう.

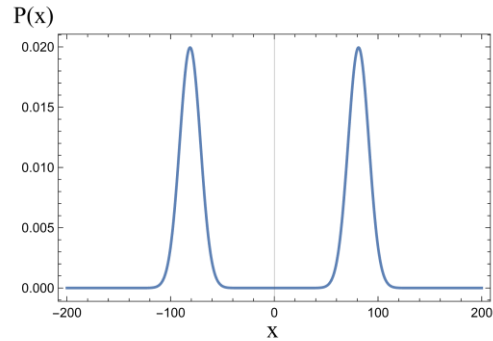


Figure.3 Probability distribution satisfying Dirac equation

4. 結論

量子ウォークの確率密度関数の滑らかな部分に対して連続極限をとると, その結合定数によって, Schrodinger 方程式や Dirac 方程式が正確に導かれることが分かった. 極限をとらない量子ウォークではどんな結合定数でも, 同じ Bessel 関数で書かれる時間発展をするが, 連続極限の取り方により異なるふるまいが得られる. 従来の研究では, 連続時間量子ウォークや離散時間量子ウォークから初期条件を連続的に変化させることで Schrodinger 方程式や Dirac 方程式が近似的に再現されることは知られていた^[4]. しかし, 離散空間上の連続時間量子ウォークから結合定数の選び方を変えて連続極限を取るだけで極端に異なる力学のみが導かれることは知られていなかった. さらに, ほとんどのパラメータで Dirac 方程式が得られるが, 特別なパラメータの時だけ Schrodinger 方程式が得られるというのも興味深い.

5. 参考文献

- [1] 今野紀雄: 「量子ウォーク」, (2014).
- [2] A. Block, C. Etrich, T. Limboeck, F. Bleckmann, E. Soergel, C. Rockstuhl, S. Linden: “Bloch oscillations in plasmonic waveguide arrays”, Nature Communications, Vol.5, No.3843, pp.1-7, (2014).
- [3] F. W. Strauch: “Connecting the discrete- and continuous-time quantum walks”, Physical Review A, Vol.74, 030301, (2006).
- [4] F.W. Strauch, “Relativistic quantum walks”, Physical Review A, Vol. 73, 054302 (2006).