1P116

量子ウォークによる時間依存シュレディンガー方程式の計算

(豊橋技術科学大学大学院[1]，理科学研究所[2])

川畑雅之[1]，関野秀男[1]，浜田信次[2]

Solution of time dependent Schrödinger equation by quantum walk

(Toyohashi University of Technology[1] , RIKEN[2])

Masayuki Kawahata[1], Hideo Sekino[1] , Shinji Hamada[2]

1P116

予稿

(豊橋技術科学大学大学院[1]，理科学研究所[2])
川畑雅之[1]，関野秀男[1]，浜田信次[2]

Abstract

(Toyohashi University of Technology[1] , RIKEN[2])
Masayuki Kawahata[1], Hideo Sekino[1] , Shinji Hamada[2]

【序】

量子力学の分野において、超微視的粒子の状態は波動関数と呼ばれる概念を用いて記述され、波動関数は量子力学の基本方程式である時間依存シュレディンガー方程式(Time Dependent Schrödinger Equation：TDSE)に従って時間発展する。ポテンシャルを考慮した計算や多体問題など、非常に難解で膨大な時間を要する計算量子力学において、基本方程式である TDSE をより効率的に解くことは量子力学分野全体において大きな利益となり得る。本研究では、TDSE 計算の高精度化・高速化を目的とし、TDSE の新たな解法である量子ウォーク(Quantum Walk：QW)による計算をシミュレーションし、解析する。

＜時間依存シュレディンガー方程式：TDSE＞

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(t)=\hat{H}\psi(t)$$

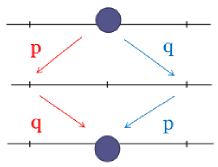
【原理】

量子ウォークは古典ランダムウォークの量子版といわれ、2000 年頃より量子コンピュータ関連の話題として本格的に研究され始めた。極限分布などのいくつかの定理が導出され、次第にその性質が明らかになってきている。

[QW の性質]

- 量子ウォークを粒子の運動だと考えるとき、その粒子は量子ビットを持ち、量子ビットは複数の複素数を内包する。
- 量子ウォークのダイナミクスはユニタリー行列 U で定義される。
- カイラリティが存在し、行列 U をカイラリティで分けた行列を定義する。

$\phi = a$

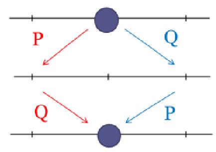


$\phi' = 2pqa$

$qp = pq$

可換

$\phi = [\alpha \;\; \beta]^T$



$\phi' = (PQ + QP)[\alpha \;\; \beta]^T$

$QP \neq PQ$

非可換

図 1-1.古典ランダムウォーク　　　　　　　　図 1-2.量子ウォーク

図 1.古典ランダムウォークと量子ランダムウォークのイメージ

【実験】

QW では、量子ビットに作用させるユニタリー行列を変化させることによってさまざまな発展を得ることが出来る。本研究では、QW 計算を行うプログラムを作成し、ユニタリー行列を変化させて得られる２つの QW について計算を行った。最も有名な QW であるアダマールウォーク(Hadamard Walk：HW)と、TDSE の解を与えるシュレディンガーウォーク(Schrödinger Walk：SW)の２つである。初期分布関数はデルタ関数またはガウシアンとした。

また、従来 TDSE の一般的な解法とされてきた差分法によるシミュレーションを行うプログラムも作成し、その計算結果を SW の計算結果と比較した。

すべての計算は一次元と二次元の格子で行った。

【結果と考察】

初期分布をデルタ関数とした場合、QW の計算結果はすべて振動した。それに対してガウシアンを初期分布とした場合、ガウシアンの形を保ちつつ、HW は移流方程式、SW は TDSE に相当する結果を与えた。

また、差分法による TDSE と QW による TDSE の比較では、1 次元 TDSE においての計算結果は高精度で一致した。2 次元 TDSE おいては、全く別の発展を行う結果が出たが、これは量子ウォークを 1 次元から 2 次元へと拡張する過程において、時間発展の振る舞いを左右するユニタリー行列の設定に任意性があるためだと考えられる。

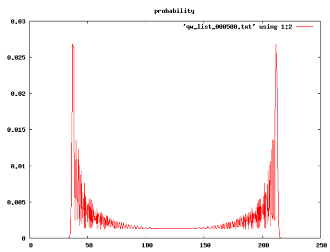


図 2. 1 次元 HW(delta)

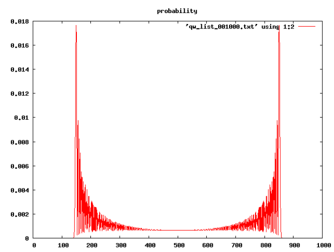


図 3. 1 次元 SW(delta)

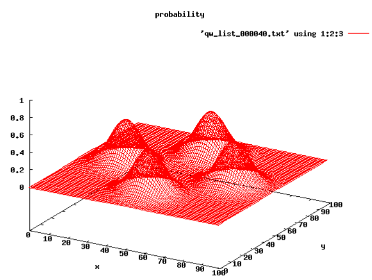


図 3. 2 次元 HW(gaussian)

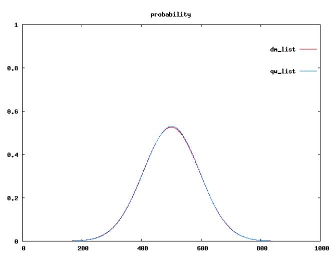


図 4. 1 次元 TDSE 比較

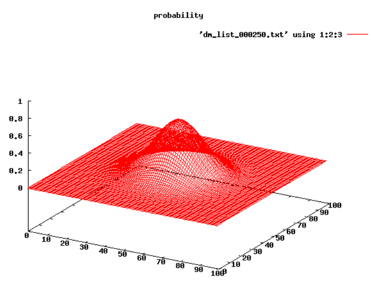


図 5.差分法による 2D-TDSE

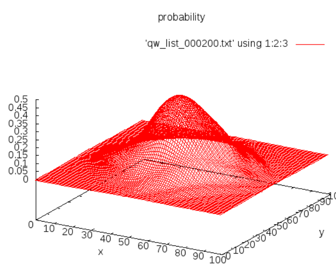


図 6.SW による 2D-TDSE