電気回路の量子力学 ver.3 by 松野哲也

量子化磁束動力学シミュレーション研究グループ 2023 秋のセミナー資料

1　はじめに

最近量子コンピュータに関する書籍が増えてきた．しかしそのほとんどが量子アルゴリズムの記述に重きが置かれておりハードウェア（量子ビットの物理や制御）に関して勉強したい場合は論文を頑張って読むしかない．

超伝導トランズモン量子ビットは現在最も実用化に近いタイプの量子ビットである．これに関する論文を読もうとするといきなり量子ビットのハミルトニアンが書いてある場合も多い．これは一体どのようにして求められているのだろうか．素朴に回路方程式を立てていけば良いと思うがどうせならば超伝導量子回路にマッチした手順は存在しないのだろうか．どうも存在するようである．

2　回路の量子化に関する解説

ここでは超伝導量子回路の振る舞いを理解するための第一歩として電気回路の量子化について紹介する．内容はほぼ以下の文献の内容紹介である．

1. Juan Jose Garcia Ripoll, "Quantum information & Quantum Optics with Superconducting Circuits," Cambridge Univ. Press. 2022. pp.34–58.
2. Devoret, M. H. 1995: Quantum fluctuations in electrical circuits. Les Houches, Session LXIII, 351-386.

3　電気回路の量子化の手順

1. **ラベリング：**回路の全ての節点に node flux ラベル ϕ_n を割り振る．
2. **木：**回路に spanning tree を設定する．
3. **Branch fluxes：**各々の節点に割り振られた node flux ϕ_n は，各々の枝に割り振られた branch flux Φ_b によって次のように表される．

$$\phi_n = \sum_b S_{nb}\Phi_b \tag{1}$$

ここで S_{nb} は接続の仕方や枝の向きに応じて $0, 1, -1$ の値をとる．逆に，branch flux は node flux によって次の様に表される．

$$\Phi_{b\in T} = \phi_{node:end} - \phi_{node:begin} \tag{2}$$
$$\Phi_{b\in C} = \phi_{node:end} - \phi_{node:begin} + \Phi_{loop(b)} \tag{3}$$

ここで T は spanning tree に属する枝の集合，C はそれ以外（closure branch）の集合を表す．また $\Phi_{loop(b)}$ は closure branch b によって閉じるループと鎖交する磁束である．なお，loop にキャパシタが含まれない場合 $\Phi_{loop(b)}$ はループにトラップされた量子化磁束を含むときがある．

4. **節点方程式：**各々の節点 i ごとにキルヒホフの電流保存則に対応する式を導く：

$$\sum_{b\in capacitor} s_i^b C_b \ddot{\Phi}_b + \sum_{b\in inductor} s_i^b \frac{1}{L_b}\Phi_b + \sum_{b\in junction} s_i^b I_b \sin\left(2\pi\frac{\Phi_b}{\Phi_0}\right) = 0 \tag{4}$$

ここで C_b, L_b, I_b はそれぞれキャパシタンス，インダクタンス，ジョセフソン接合に対応する回路定数である．符号因子 $s_i^b = \partial\Phi_b/\partial\phi_i$ は節点 i から見た枝の向きに応じて定まる．また $\Phi_0 := h/2e$ は磁束量子である（h はプランク定数，e は電子の素電荷)．

5. **Holonomic constraints：**回路はグランド，電圧源などにつながっている．例えば節点 k が電圧源 $V(t)$ につながっている時は $\dot{\phi}_k = V(t)$ である．

6. **ラグランジアン：**先に得た節点方程式をラグランジュ方程式

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\phi}_i} = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\phi_i}, \quad i \in Node \tag{5}$$

に書き直す．この方程式をもとにしてラグランジアンを求める．ラグランジアン $\mathcal{L}(\boldsymbol{\phi}, \dot{\boldsymbol{\phi}})$ は次のような形になるであろう．

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{\phi}, \dot{\boldsymbol{\phi}}) = \sum_{b\in capacitor} \frac{1}{2} C_b \dot{\Phi}_b^2 - \sum_{b\in inductor} \frac{\Phi_b^2}{2L_b} - \sum_{b\in junction} E_{Jb} \cos(2\pi\frac{\Phi_b}{\Phi_0}) \tag{6}$$

ここではラグランジアンの表記は branch flux Φ_b が用いられているがこれらは node flux ϕ_i によって書き直されることによりラグランジアンは node flux ϕ_i およびその時間微分 $\dot{\phi}_i$ の関数 $\mathcal{L}(\boldsymbol{\phi}, \dot{\boldsymbol{\phi}})$ とみなしていることに注意しておく．

7. **ラグランジアンからハミルトニアンへ：**ここで node flux ϕ_i に対してカノニカル共役な一般化運動量として node charge q_i を導入する．

$$q_i = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\phi}_i}, \quad i \in Node \tag{7}$$

ここでラグランジアンの独立変数の一つ $\dot{\boldsymbol{\phi}}$（node flux の時間微分）を node charge $\boldsymbol{q}$ に取り替える（「速度」を「運動量」に取り替える）．すなわちルジャンドル変換

$$\mathcal{H}(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{q}) = \sum_{i \in Node} q_i \dot{\phi}_i - \mathcal{L}(\boldsymbol{\phi}, \dot{\boldsymbol{\phi}}) \tag{8}$$

によりハミルトニアン $\mathcal{H}(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{q})$ を導入する．このハミルトニアンを用いて node flux および node charge の時間発展方程式 (ハミルトン方程式)

$$\frac{d\phi_i}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i}, \quad \frac{dq_i}{dt} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \phi_i}, \qquad i \in Node \tag{9}$$

を得ることができる．

8. **量子化：**カノニカル共役変数 (ϕ_i, q_i) を演算子 $(\hat{\phi}_i, \hat{q}_i)$ に置き換える．これら演算子は交換関係

$$[\hat{\phi}_i, \hat{q}_i] = i\hbar\delta_{ij}, \quad i, j \in Node \tag{10}$$

を満たす．ここで $\hbar = h/2\pi$，δ_{ij} は Dirac のデルタである．この置き換えに伴いハミルトニアン $\mathcal{H}$ は演算子 $\hat{\mathcal{H}}$ となる．

4　今回取り扱う例題

1. １つの LC 回路（共振器）
2. キャパシティブ結合した２つの共振器
3. インダクティブ結合した２つの共振器
4. 電源とキャパシティブに結合した１つの超伝導キュービット
5. キャパシティブ結合した２つの超伝導キュービット
6. キャパシティブ結合した２つの超伝導キュービットの一つに電源がキャパシティブに結合しているもの

5　例題 1

図 (a) に回路を示す．ここでは図 (b) の様に回路の各々の節点にラベルを付したものとする．節点 1 における節点方程式（電流保存則に対応する式）は

$$C(\ddot{\phi}_1 - \ddot{\phi}_0) + \frac{1}{L}(\phi_1 - \phi_0) = 0 \quad (11)$$

である．節点 0 はグランドであり $\phi_0 \equiv 0$ として良い．結局ここでは一つの節点方程式

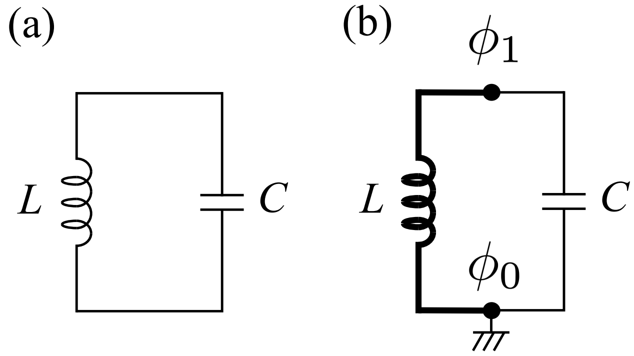

図 1　例題 1．(a) 回路．(b) ラベル付けと spanning tree.

$$C\ddot{\phi} + \frac{\phi}{L} = 0 \tag{12}$$

で回路の振る舞いが記述される．なお記述の簡便さのために $\phi := \phi_1$ とおいた．この方程式に対応するラグランジアンは node flux ϕ およびその時間微分の関数として次式で与えられる．

$$\mathcal{L}(\phi, \dot{\phi}) = \frac{C}{2}\dot{\phi}^2 - \frac{\phi^2}{L} \tag{13}$$

ここで共役運動量として noce charge

$$q = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} \tag{14}$$

を導入する．ルジャンドル変換により独立変数 $\dot{\phi}$ を node charge q に取り替える：

$$\mathcal{H}(\phi, q) = q\dot{\phi} - \mathcal{L}(\phi, \dot{\phi}) = \frac{q^2}{2C} + \frac{\phi^2}{2L} \tag{15}$$

したがって (ϕ, q) の時間発展を記述するハミルトン方程式

$$\dot{\phi} = \frac{\partial \mathcal{H}(\phi, q)}{\partial q} = \frac{q}{C}, \quad \dot{q} = -\frac{\partial \mathcal{H}(\phi, q)}{\partial \phi} = -\frac{\phi}{L} \tag{16}$$

が得られる．ここで (ϕ, q) を（「位置 x」，「運動量 p」）と対応させ，また錘の質量を C バネ定数を $1/L$ と対応させてみる．この時この運動方程式は（バネ定数 $1/L$ のバネに質量 C の錘が繋がれた系の単振動を記述するものと同じものである．

ここで (ϕ, q) に対応する演算子 $(\hat{\phi}, \hat{q})$ を導入する．これらは交換関係

$$[\hat{\phi}, \hat{q}] = i\hbar \tag{17}$$

を満たす．消滅演算子 $\hat{a}$ と生成演算子 $\hat{a}^\dagger$ を次の様に定義する：

$$\begin{pmatrix} \hat{a} \\ \hat{a}^\dagger \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega C}} \begin{pmatrix} \omega C & i \\ \omega C & -i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\phi} \\ \hat{q} \end{pmatrix} \tag{18}$$

ここで $\omega = 1/\sqrt{LC}$ とおいた．式 (17) と式 (18) より

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1 \tag{19}$$

が成り立つことが確認される．消滅演算子および生成演算子を用いればハミルトニアンは

$$\hat{\mathcal{H}}(\hat{\phi}, \hat{q}) = \frac{\hat{q}^2}{2C} + \frac{\hat{\phi}^2}{2L} = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \tag{20}$$

と書き表すことができることがわかる．また，

$$\hat{\phi} = \phi, \quad \hat{q} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \tag{21}$$

とおいてみると，これは交換関係式 (17) を満たすことがわかるが，この式 (21) によりハミルトニアン（式 (20)）は

$$\hat{\mathcal{H}} \left(\phi, -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \right) = -\frac{\hbar^2}{2C} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{\phi^2}{2L} \tag{22}$$

のように書き直されることがわかる．ここで回路の波動関数 $\psi(\phi, t)$ を導入する．この波動関数は回路のシュレディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\phi, t) = \hat{\mathcal{H}} \left(\phi, -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \psi(\phi, t) \tag{23}$$

に従う．

6 おわりに

電気回路を勉強してきた我々や電気電子系の学生さんたちにとって実は超伝導量子回路はとっつきやすい題材ではなかろうかと思う今日この頃である．また量子力学への橋渡しにもなりうる．