

はじめに iii

0日目 実行環境を整えよ！ 1

- 0.1 Python のインストール 1
- 0.2 外部モジュールのインストール 4
- 0.3 テキストエディタ「Visual Studio Code」の準備 5
- 0.4 Python でグラフ描画 8
- 0.5 Python でグラフアニメーション描画 10
- 0.6 数値積分の実行方法 13

1日目 量子力学の「超」基礎を習得せよ！ 15

- 1.1 電子は「粒」と「波」の性質を併せ持つ量子粒子！ 15
- 1.2 シュレディンガー方程式 17
- 1.3 ポテンシャル項が時間に依存しない場合 21

2日目 自由空間中の電子の運動を計算せよ！ 25

- 2.1 自由空間中の波動関数 25
- 2.2 平面波の時間依存性 29
- 2.3 平面波の規格化 33

3日目 ディラックのデルタ関数を習得せよ！ 37

- 3.1 ディラックのデルタ関数の導入 37
- 3.2 ディラックのデルタ関数を用いた平面波の規格化 42

4日目 電子波束の運動を計算せよ！ 49

- 4.1 電子波束の作り方.....49
- 4.2 ガウス波束の運動シミュレーション.....52
- 4.3 波束の速度（群速度）の導出.....58

5日目 井戸型ポテンシャル中の電子の運動を計算せよ！ 61

- 5.1 無限に深い井戸型ポテンシャルに対する固有状態61
- 5.2 電子の固有状態の運動アニメーション64
- 5.3 エネルギー固有関数の直交性の確認.....67

6日目 量子井戸に静電場を加える方法を解説するぞ！ 73

- 6.1 静電場を加えたときのハミルトニアンと固有方程式73
- 6.2 展開係数が満たす連立方程式の導出.....78
- 6.3 行列の固有値と固有ベクトル.....83

7日目 静電場を加えたときの電子の運動を計算せよ！ 87

- 7.1 $\langle m|V|n\rangle$ の数値積分だ！87
- 7.2 行列の固有値問題の数値計算しよう！89
- 7.3 固有関数の空間依存性を調べよう！96
- 7.4 静電場強度依存性を確かめよう！99
- 7.5 空間分布の中心を計算しよう！ 102

8日目 量子井戸の形状を改良するぞ！ 107

- 8.1 量子井戸の固有状態と量子ビットの関係..... 107
- 8.2 ポテンシャル障壁あり量子井戸の固有状態..... 109
- 8.3 ポテンシャル障壁あり量子井戸に静電場を加えてみよう！ 111

9日目 量子井戸へ電磁波を加える方法を解説するぞ！ 115

- 9.1 マクスウェル方程式の復習だ！ 115
- 9.2 電磁場中の電子のハミルトニアン 122
- 9.3 計算アルゴリズムの導出 125
- 9.4 電磁波を入射するための方法 129

10日目 量子井戸に電磁波を入射せよ！ 133

- 10.1 一番簡単な系でルンゲ・クッタ法の動作確認！ 133
- 10.2 X_{nm} の計算確認 137
- 10.3 電磁波で状態遷移をシミュレーション！ 138
- 10.4 角振動数をずらしたときのラビ振動を確認..... 143
- 10.5 ラビ振動の解析解..... 145

11日目 1量子ビット量子ゲートを完成させるぞ！ 149

- 11.1 改良版量子井戸でラビ振動を確認せよ！ 149
- 11.2 1量子ビットの基本量子ゲートについて 153
- 11.3 量子ゲートと物理的操作の対応..... 157
- 11.4 1量子ビットの全ユニタリーゲートの完成！ 159

12日目 量子井戸を並べる方法を解説するぞ！ 161

- 12.1 2粒子に対するシュレディンガー方程式 161
- 12.2 2つの量子井戸のクーロン相互作用..... 165
- 12.3 クーロン相互作用を考慮したときの固有状態の計算法 168
- 12.4 量子井戸を改良したときの固有状態の計算法..... 170
- 12.5 独立した2電子の確率分布の計算法..... 171

13 日目 2 量子井戸の定常状態を計算せよ！ 175

- 13.1 $\langle l_1, l_2 | V_{12} | m_1, m_2 \rangle$ の計算 175
- 13.2 クーロン相互作用のみを考慮したときの固有状態の計算 178
- 13.3 改良量子井戸でクーロン相互作用のみを考慮したときの固有状態の計算 185
- 13.4 改良量子井戸でクーロン相互作用と静電場を考慮したときの固有状態の計算 188

14 日目 2 量子井戸のラビ振動を計算せよ！ 193

- 14.1 2 量子井戸へ電磁波を加える方法 194
- 14.2 $X_{nm} = \langle n | x_1 + x_2 | m \rangle$ を計算 196
- 14.3 2 量子井戸のラビ振動の計算結果 199
- 14.4 制御 NOT ゲートの定義 203
- 14.5 量子もつれ (量子エンタングルメント) の生成方法 205
- 14.6 $|10\rangle \rightarrow |01\rangle$ 間接遷移による量子もつれの生成 207

終わりに 210

索引 211