

第6回 情報系学生のための量子力学と量子コンピュータ

情報通信コース 北川章夫, Microelectronics Research Lab. (MeRL)



今回の内容

- 1. ノイマン型以外のコンピュータモデル
- 2. 量子力学の概要(最低限、これだけは知っておこう)
- 3. 量子コンピュータの基本命令
- 4. 課題6



6-1 ノイマン型以外のコンピュータモデル



量子コンピュータ



D-Wave Advantage (量子アニー リング方式: 組み合わせ最適化、 分類問題等に特化したタイプ) 出典: D-Wave



Google Sycamore (Transmon superconducting qubits proposed in Yale University)





IBM Quantum System(量子ゲート方式: 汎用タイプ)、写真は冷却器を含む 出典: Stephen Shankland/CNET

QptQC(光量子コンピュータ) 出典: 日経XTECH

ソフトウエアAI(Neural Processing Unit)



ROCKCHIP社(中国) RK1808 製造:FD-SOI 22nm(米国Global) Foundries) 性能: 3TOPS (3兆-operations/s) MeRL @ Kanazawa Univ.



製造:CMOS 7nm+(台湾TSMC)

性能:6TOPS

HiSilicon社(中国) KIRIN990 5G 製造:CMOS 7nm+(台湾TSMC) 性能:8TOPS

出典: (株) テカナリエ

GPU

5

ハードウエアAI (Neuromorphic Chip)

チップ外観



NeuRRAM chip カリフォルニア大学

出典: Nature: https://www.nature.com/a rticles/s41586-022-04992-8 ニューロンのアレイ



Intel社 Loihi --ユー 製造: CMOS 14nm 6,000 ニューロン数: 130,000 Synaptic update 120pJ Neuron update 67pJ 出典: IEEE Micro, vol.38, No.1, 2018.

ニューロンのアレイ ニューロンの拡大写真



IBM社 TrueNorth 製造: CMOS 14nm ニューロン数: 1,000,000 6,000 frames per Watt 出典: PNAS, vol.113, No.41, 2016

MeRL @ Kanazawa Univ.

6





アーキテクチャ	計算モデル	プログラム	学習	処理方式	フォン・ノイマ ン・ボトルネック
ノイマン型	チューリング マシン	必要	不要	逐次処理	有
ニューラルネット ワーク	チューリング マシン	不要	必要	演算の並列処理 (注1)	無(注1)
量子コンピュータ	量子チューリ ングマシン	必要	不要	データの並列処 理(注 2)	緩和(注3)

 ニューラルネットワークは、ニューロン単位の並列処理が可能であるが、現状ではノイマン型コンピュータ上で、 ソフトウエアエミュレーションをしているため、逐次処理が必要となり、フォン・ノイマン・ボトルネックの制約を受ける

- 2. プログラムに従い動作する点では逐次処理方式だが、異なる入力データに対して同じ処理を繰り返す必要がない点では並列処理が可能
- 3. 量子コンピュータは、レジスタと演算器が同一であるため、ノイマンボトルネックが無いように見えるが、プログ ラムに従って逐次処理を行うため、処理ステップ数に比例する計算時間と結果の測定時間は必要(次々 頁参照)

ノイマン型コンピュータと量子コンピュータの命令の違い



量子コンピュータはノイマン型コンピュータより速いのか?





6-2 量子力学の概要

最低限必要な知識



運動状態を表す波動

スリットの実験



運動を表す波動の性質(多数の実験結果から求められた)

- ▶ 振幅(の2乗)が大きい場所で検出される
- ▶ 運動状態は、波動の角周波数と波数(または波長)で決まる
- ▶ 振幅が大きい箇所が複数あっても、1回の測定では1箇所でしか検出されない
- 何度も電子を飛ばして測定すると振幅の大きい箇所ほど検出される確率が高い



粒子と波動の対応関係(粒子と波動の翻訳方法)

Einstein - de Broglie の式(実験により求められた)



波動関数

運動状態に対応する波動は波動関数と呼ばれる。 エネルギーEと運動量pが一定の場合(スリットなど)は、ωとkが定数。 波動関数: $\psi(x,t) = Ce^{j(kx-\omega t)} = Ce^{j(\frac{p}{h}x - \frac{E}{h}t)}$ (波動を複素関数で表す理 由は、電気回路と異なる。 Appendix 1-1, 1-2を参照) 派長 $\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi\hbar}{p}$ 一定の運動量pで進む粒子を表す波動関数 (粒子の速度と波動の位相速度は異なるの で注意)

ただし、波動が広がっている空間内で、ある時刻にどの位置で検出されるかは予想できない。

波動関数 $\psi(x, t)$ は、何の波動か?

波動の振幅が大きい場所で粒子が検出される → 振幅が検出確率に対応するのか? 粒子が検出される確率密度(単位空間当たりの確率)を $P_D(x)$ とするとき、 $P_D(x) = |\psi|^2 = \psi^* \psi$ とすると実験事実を上手く説明できる(原子モデル、スリットなど)。

ただし、全空間の確率 = $\int_{-\infty}^{\infty} P_D(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi dx = 1$ となるように波動関数の振幅を 規格化しておく必要がある。



演算子と物理量の関係

波動関数に微分演算を行うと物理量を求めることができる。

 $\psi(x,t) = A e^{j(kx - \omega t)}$

$$\begin{cases} \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -j\omega\psi(x,t) = -j\frac{E}{\hbar}\psi(x,t) & \longrightarrow \left(j\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)\psi(x,t) = E\psi(x,t) \\ \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial x} = jk\psi(x,t) = j\frac{p}{\hbar}\psi(x,t) & \longrightarrow \left(-j\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x,t) = p\psi(x,t) \end{cases}$$

波動関数に演算子(カッコ内)を作用させると、それぞれエネルギーと運動量が求まる。同様にして、他の物理量に対応する演算子も求めることができる。 (Appendix 3-1)

まとめ 1

- ▶ 物理量の定義から波動関数に作用させる演算子を求めることができる
 - → 各物理量には対応する演算子がある
- 物理量を変数表記するとき、演算子なのか実数なのか見分けるために演算子にはハット記号(hat or caret)をつける(付けないこともある)

$$\hat{E} = j\hbar \frac{\partial}{\partial t} \qquad E = \pi \lambda \nu \vec{\tau} - d\hat{u}$$

$$\hat{p} = -j\hbar \frac{\partial}{\partial x} \qquad p = 運動量$$

$$\hat{x} = x (x \epsilon \# \tau \delta) \qquad x = d \epsilon (1 \ln \pi)$$

$$\hat{r} = r (r \epsilon \# \tau \delta) \qquad r = d \epsilon (3 \ln \pi)$$

他の物理量も、古典的な物理量をE, p, r等で表して演算子を導くことができる MeRL @ Kanazawa Univ.

ハミルトニアン(Hamiltonian)の演算子

運動エネルギーとポテンシャルエネルギーV(x)(位置エネルギー)の合計はハミルトニアンと呼ばれる。保存力のみが働く場合は、全エネルギー=ハミルトニアンとなる。ハミルトニアンの演算子を求めてみよう。

$$H = \frac{1}{2}mv^2 + V(x) = \frac{1}{2m}p^2 + V(x) \rightarrow \hat{H} = \frac{1}{2m}\left(-j\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\left(-j\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right) + V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

運動量pを演算子に置き換えるとハミルトニアンの演算子が得られる。ハミルトニアンの 演算子を波動関数に作用させると、ハミルトニアン(運動エネルギー+位置エネルギー) が求められる。(Appendix 2)

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right\}\psi(x,t) = H\psi(x,t)$$

固有值方程式

物理量の演算子を波動関数に作用させると、物理量(実数)が得られる。これらの関係式は 固有値方程式、物理量は固有値、波動関数は固有状態(固有関数)と呼ばれる。固有値が物 理量(実数)なので、物理量の演算子はエルミートである。(Appendix 5-1)

$$\hat{E}\psi(x,t) = \left(j\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)\psi(x,t) = E\psi(x,t)$$

$$\hat{p}\psi(x,t) = \left(-j\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x,t) = p\psi(x,t)$$

$$\hat{H}\psi(x,t) = \left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right\}\psi(x,t) = H\psi(x,t)$$
物理量の演算子
物理量の値(固有値)



- Hより大きいポテンシャルV(x)を登ることができないので、運動できる範囲が制限される。
 - ▶ V(x)の関数が与えられると、エネルギー保存の式(Eq.1)が与えられ、その条件下で実現できる運動状態(p(x), V(x)の関係)が決定される。
- 量子力学では、波動の空間分布が、運動範囲に限定され定在波が生じる(束縛 状態ともいう)。
 - ▶ V(x)の関数が与えられると、波動関数の波形が決定される(次ページ参照)。

ポテンシャルに束縛された波動関数

波動関数 $\psi(x,t) = \varphi(x)e^{-j\omega t}$ は(*E*は一定)、境界条件により波形が制限される。 各波動関数に対する*H*を求めると、*H*の値が離散化する。



(自由粒子はa→∞の場合と理解できる) MeRL @ Kanazawa Univ.

量子数

固有値方程式によりHを計算してみると(調和振動子の例)



量子力学の基礎方程式(Schrödinger equation) スライド20より、エネルギーE = ハミルトニアンHのとき、下記の方程式が成り立つ。この方程式は、保存力の場(摩擦力などがない)におけるエネルギー保存則を表しており。Schrödinger equationと呼ばれる。

$$j\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right)\psi(x,t)$$

粒子がエネルギー保存則を満たすためには、波動関数 $\psi(x,t)$ が、Schrödinger equationを満足する必要がある。

(注)運動量の固有値方程式は、運動量pとエネルギーEがxに依らず一定という条件で求めたが、Eが一定で、V(x)がxの関数であれば、運動量pはxの関数となり、前提条件を逸脱する。ただし、Schrödinger equationが一般的に成り立つことは、実験により確かめられている。

波動関数の重ね合わせ

Schrödinger equationでは、波動関数の重ね合わせができる。 (Schrödinger equationの両辺は線形演算なので重ね合わせが可能)

 ψ_1, ψ_2 が、 ハミルトニアンの固有関数(添字は量子数)であるとき、 $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ が、 固有値方程式とSchrödinger equationを満足するか?

$$\begin{pmatrix} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \end{pmatrix} (c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = H_1c_1\psi_1 + H_2c_2\psi_2 \longrightarrow H_1 = H_2$$
の場合以外、 ψは固
有値方程式の解ではない。
$$\neq X(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) \\ j\hbar\frac{\partial}{\partial t}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right)(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) \longrightarrow \text{ 固有関数の線形結合ψも解} \\ \text{である}.$$

ハミルトニアンの固有関数 ψ_1 , ψ_2 を線形結合してもSchrödinger equationの 解になる。さらに、他の物理量の固有関数を線形結合してもよい(次頁)。

固有関数を重ね合わせた波動関数は何を表しているのか?

$$\psi(x,t) = \sum_{n} c_{n} \psi_{n}(x,t) = \sum_{n} c_{n} \varphi_{n}(x) e^{-j\omega_{n}t}$$
 (固有関数の線形結合)

- A種物理量の固有値方程式から、測定される物理量(=固有値)と固有関数 ψ_n の セットを求めることができる。
- 固有関数 ψ_n の重ね合わせ(線形結合)により、その物理系に対するSchrödinger equationの波動関数 ψ が得られる。重ね合わせ状態は、複素数の係数 c_n (振幅と位 相)により決定される。
- ▶ 波動関数ψは、どの固有状態が、どれくらいの確率でで測定されるかという情報を表している。
 - ▶ 波動関数 = 固有関数の場合(重ね合わせていない場合)は、何度測定しても、一つの固有値 しか測定されない
 - ハミルトニアンを時間変化させたり、演算子が非可換な他の物理量(後述)を測定すると、波動 関数は固有関数ではなくなり、重ね合わせた波動関数に変化する。重ね合わせた波動関数では、 色々な固有値が測定される。

波動関数の内積

波動関数の振幅の2乗は確率密度なので、 $\psi_n(x,t) = \varphi_n(x) e^{-j\omega_n t}$ のとき、 全空間の確率 = $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(x,t)^* \psi_n(x,t) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n(x)^* \varphi_n(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\varphi_n(x)|^2 dx = 1$

さらに、固有関数 $\varphi_n(x), \varphi_m(x)$ に対して関数の内積を行うと、

 $\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_m(x)^* \varphi_n(x) \, dx = \delta_{mn} - \tau \nu = - k$ 演算子の固有関数は直交(Appendix 5-2)

 $\{\varphi_n\}$ は規格化完全直交系のベクトルと考えられる(Appendix 5-2~5-3)。 $\{\varphi_n\}$ を基底として、線形結合により任意の波動関数を表すことができる。

波動関数による期待値の計算

波動関数が、
$$\psi = \sum_{n} c_n \varphi_n e^{-j\omega_n t}, \quad \psi^* = \sum_{m} c_m^* \varphi_m^* e^{j\omega_n t}$$
のとき、

$$\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{A} \psi \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{A} \sum_n c_n \varphi_n e^{-j\omega_n t} \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \sum_n a_n c_n \varphi_n e^{-j\omega_n t} \, dx$$
$$= \int_{-\infty}^{\infty} \sum_m \sum_n a_n c_m^* c_n \varphi_m^* \varphi_n \delta_{mn} \, dx = \sum_n a_n |c_n|^2$$

上記の式(青色部分)は、固有値 a_n が測定される確率を $|c_n|^2$ として、期待値 $\langle A \rangle$ を求める式と解釈することができる。

波動関数による物理量の期待値の計算例

 $P(x)を確率密度と仮定すると、検出位置だけではなく系全体で測定される物理量の期待値が波動関数<math>\psi$ から求められる。

エネルギーの期待値〈E〉=
$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{E} \, \psi dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* j\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi dx$$

運動量の期待値 〈p〉= $\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{p} \, \psi dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left(-j\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \psi dx$
検出位置の期待値 〈x〉= $\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{x} \, \psi dx = \sum_n |c_n|^2 \int_{-\infty}^{\infty} x \varphi_n^*(x) \varphi_n(x) dx$
(参考)期待値の計算から、 $\frac{d\langle p \rangle}{dt} = \frac{dV(x)}{dx} = F$ (運動方程式)が求められる(Ehrenfest's theorem)
量子力学の期待値の時間変化が古典力学の法則に対応している。

まとめ2

- 物理量の演算子 \hat{A} に対する固有値方程式により、固有関数 $\{\psi_n\}$ と固有値 $\{a_n\}$ が得られる
 - ▶ 固有値は量子化され、固有値は整数の量子数nで表される
 - ▶ 固有値a_nのどれかが物理量として測定できる(固有値以外の値は測定されない)
 - ▶ 一般的な波動関数は、固有関数の重ね合わせ(複素係数の線形結合)で表される
 - ▶ 波動関数が固有関数の場合は、対応する固有値しか測定されない
 - ▶ 波動関数が重ね合わせの場合は、重ね合わされた固有関数に対応する固有値のどれかが測定される
 - ▶ 量子数*n*に対応する固有値が測定される確率は、重ね合わせの係数*c_n*より|*c_n*|²で求められる
 - (注意)1回の測定で固有値のどれかが測定されるが、測定により固有関数が確定することにより(この解釈は異論 があるかもしれない)、何度測定しても同じ固有値しか測定されない。同じ物理的条件の別の波動関数を測定すると、 別の固有値が確率|c_n|²に応じて測定されるが、一度測定すると、他の固有値は測定できない。
- ▶ 物理量Aの期待値(A)は波動関数と演算子を用いて下記のように求められる

$$\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{A} \psi \, dx$$

不確定性関係と演算子の交換関係

物理量の不確定性関係(不確定性原理)

- ▶ 時刻tと角周波数 ω は同時に求められない \Leftrightarrow 時刻tとエネルギーEの対応関係は決定できない
- ▶ 位置xと波数kは同時に求められない \Leftrightarrow 位置xと運動量pの対応関係は決定できない
- ▶ 同様に、他の物理量の間にも不確定性が現れる場合が多い

不確定性関係を持つ物理量

- 交換関係が非可換な物理量の測定において、不確定性 関係が生じることが証明できる(Appendix 4-1, 4-2)
- ▶ 非可換な交換関係 $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} \hat{B}\hat{A} \neq 0$

運動量と位置の交換関係の例



1周期以上の波形が無いと周波 数は求められない。→1周期の 時間より正確に時刻を決められ ない。(フーリエ変換の例)



(注)固有値aが物理量(実数)となるため、物理量の演算子はエルミート演算子である(Appendix 5-1)。 エルミート演算子の関数表記 $\int_{-\infty}^{\infty} (\hat{A}\psi)^* \phi dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* (\hat{A}\phi) dx$ エルミート演算子の行列表記 $\hat{A}x \cdot y = x \cdot \hat{A}y \ (\hat{A}^\dagger = \hat{A})$ (・は内積とする)

状態ベクトル表記

- 固有状態が2個だけ(量子数 n = 0, n = 1)の物理系を、1量子ビット(2次 元ベクトル)として利用する。(Appendix 3-1, 3-2参照)
 - 量子数 n = 0 と n = 1 を古典的なビットに対応させる。
 - 1回の測定により、n = 0, n = 1のどちらか片 方に対応する値が測定される。
- IqubitをN個並べて、N-qubitレジスタ(2^N 次元ベクトル)として使用する。
 - Hを時間変化させると確率振幅c₀, c₁を操作できる。
 - 各qubitの独立操作と任意の量子レジスタ間の 相互作用ができるように配置する必要がある。



量子ビットの実装方式

主な実装方式として、磁束量子、電子スピン、電子エネルギー、光量子偏光などが開発されている。新しい方式が次々提案されるため、動向を注視する必要がある。

量子ビットの種類	方式例	動作環境	高qbit化	特長
超伝導状態(共振 状態)	ジョセフソン接合- 超伝導リング	超低温	容易	エラー大
電子スピン	半導体2D電子	超低温	容易(?)	エラー大
電子スピン	ダイヤモンドNVセ ンタ	通常環境	難しい	エラー小と予想さ れる
電子エネルギー	イオントラップ	真空	難しい	エラー小
光量子偏波	光ファイバーループ	室温(暗室)	不要	エラー大
まとめ 3

- ▶ 物理量の演算子はエルミート演算子である(物理量固有値が実数となるための条件)
- ▶ 非可換な2つの物理量は同時固有関数を持たない
 - ▶ 非可換な物理量の片方を測定すると、測定された量子数の固有状態が確定し、もう一方の物理量の固有状態ではなくなり、重ね合わせの状態となる
 - ▶ 非可換な2つの物理量は不確定性関係を持つ
 - ▶ 非可換な2つの物理量の分散の積はゼロにならない(片方の分散をゼロにすると、もう一方が無限大になる)
 - 一方を測定すると、もう一方は重ね合わせ状態となり、複数の値が測定されるが、これは測定誤差ではなく、測定という操作の作用による(または人間の認識の限界?)
- 固有関数の線形結合で表された波動関数を、係数(確率振幅)のベクトルと考えることができる

$$|\psi\rangle = \sum_{n} c_{n} |n\rangle \equiv \begin{pmatrix} \vdots \\ c_{n} \\ \vdots \end{pmatrix} \qquad \begin{array}{l} |\psi\rangle |t| \\ |\psi\rangle |t| \\ |n\rangle |t| \\ |u\rangle |t| \\ |v\rangle |t| \\ |v\rangle$$

固有ベクトルは古典的ビットに対応し、状態ベクトルは、量子ビットに対応する

▶ 量子コンピュータは、状態ベクトル(量子ビット)を操作し、測定により固有ベクトル(古典ビット)を読み出す MeRL @ Kanazawa Univ.

(Appendix 1-1) 回路理論で複素数を使う理由

• 回路理論の場合

交流信号(実数)を扱う際に、オイラーの公式を用いて複素関数化して微分、積分の 計算を簡単化している。計算が終わった後、虚部だけ取り出して結果を得る。

sin 関数による 計算

 $v(t) = V_a \sin(\omega t + \theta) \longrightarrow i(t) = C \frac{dv(t)}{dt} = \omega C V_a \cos(\omega t + \theta)$ 複素関数による計算

sin関数による計算と同じ結果になる。

(Appendix 1-2) 量子力学で複素数を使う理由

• 量子力学の場合

sin関数の波動関数を運動量の固有値方程式に代入してみよう。

$$\psi(x,t) = C\sin(kx - \omega t) \longrightarrow \left(-j\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x,t) = -j\hbar kC\cos(kx - \omega t) \quad (固有関数では
 ない)$$

$$\left(-j\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\left(-j\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x,t) = \left(-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^x}\right)C\sin(kx - \omega t) = (\hbar k)^2C\sin(kx - \omega t) = p^2\psi(x,t)$$

 $C \sin(kx - \omega t) dp^2$ に対する固有関数である。しかし、大きさのみで方向が不明。

複素関数の波動関数を運動量の固有値方程式に代入してみよう。

(Appendix 2) Schrödinger equation

スライド18では、運動量p、位置xを演算子に置き換え、古典物理の物理量に対応する演算子 を求め、この演算子に対して固有値方程式を作成するという手続きでハミルトニアンの固有 値方程式を作成した。この手続きがいつも成り立つのか疑問を持った人のために、エネル ギー保存則とEinstein - de Broglie の式から所望の固有値方程式を求めてみよう。

$$\begin{split} \psi(x,t) &= Ae^{j(kx-\omega t)} \quad \mathcal{O} \not \xi \not \xi, \\ & \left[\begin{array}{c} \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = (-j\omega)\psi \longrightarrow \omega = j\frac{1}{\psi(x,t)}\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} \\ \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} = (jk)^2\psi \longrightarrow k^2 = -\frac{1}{\psi(x,t)}\frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} \\ & E = H\mathcal{O} \not \xi \not \xi, \quad E = \frac{1}{2}mv^2 + V(x) = \frac{1}{2m}p^2 + V(x) = H \longrightarrow \hbar\omega = \frac{1}{2m}(\hbar k)^2 + V(x) = H \\ & \omega, k^2 \not \xi$$

is by The set of the set o

(Appendix 3-1) 量子数の上限

ハミルトニアンの量子数($n \in \mathbb{Z}$)は無限個あるが、量子数に上限がある物理 量(角運動量、2次元調和振動子の方向、偏光など)もある。



- 角運動量は、大きさ|L|と方向で表される。大きさの量子化(量子数n)とは別に、回転軸の方向も連続的に変更できず、別の量子数mで量子化される。
- 量子数mが変わってもエネルギーは同じ (縮退, degenerateしているという)。
- 電子のように電荷を持つた粒子が回転 運動する場合、磁気モーメントが発生して、z方向に外部磁場を加えるとエネル ギーが、量子数mによって変化する(縮 退が解けたという)。

角運動量Lのz成分 L_z は、 $|L| \ge |L_z|$ に制限されるので、量子数も制限される。

(Appendix 3-2) 電子スピン

- 電子は電荷だけではなく、磁気能率を持っている。対応する古典的な物理量がないため、古典的物理量から演算子を求めることができない。
- 電子の磁気能率を生み出す仮想的な角運動量Sを 考え、演算子と波動関数を求める(電子スピンと呼ぶ)。
- 電子スピンの物理的状態は2個しかないことが、理論 と実験で確かめられている(量子ビットに対応可能)。
 - ▶ 電子スピン**S**の*z*成分の*S_z*は、角運動量のときと同様、2 個の*S_z*の値がれだけ離れて量子化され、*S_z* = ± $\frac{1}{2}$ れに限 定される。
 - 2個の S_zは 縮退しているが、z方向に直流磁場を加えると、 縮退が解け、量子ビットとして利用できる。

S_ スピン磁気量子数m。 <u>-</u>ħ, _m, = 1/2 $|S| = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar$ ħ m_s = -2/2

(Appendix 4-1) 交換関係と不確定性関係 演算子 A, Bの交換関係が $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0 \Leftrightarrow \hat{A}, \hat{B}$ は同時固有関数を持つ 証明 十分条件 $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$ のとき、 ψ_n が \hat{A} の固有関数、 a_n が \hat{A} の固有値であるとすると、 $\hat{A}\psi_n = a_n\psi_n \longrightarrow \hat{B}\hat{A}\psi_n = \hat{B}a_n\psi_n \longrightarrow \hat{A}(\hat{B}\psi_n) = a_n(\hat{B}\psi_n)$ $\psi_n \ge \hat{B}\psi_n$ は、どちらも \hat{A} の固有関数なので、 $\hat{B}\psi_n$ は ψ_n の定数倍となる。 $\therefore \hat{B}\psi_n = b_n\psi_n$ 必要条件

 $\therefore \left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$

一方、 $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$ の場合は、演算子 \hat{A}, \hat{B} は同時固有関数を持たないため、 \hat{A}, \hat{B} 両方の固有値を確率1で測定することができない。(不確定性関係が発生する)

運動量と位置の関係

振り子の振動を止めると、運動量と位置が同時に**0**になるため、 振り子は止められないことを意味している。

 $\begin{bmatrix} \hat{D}_A = \hat{A} - \langle A \rangle \\ \hat{D}_B = \hat{B} - \langle B \rangle \end{bmatrix}$ 測定値と期待値の差分を求める演算子を定義する。

 \hat{D}_A, \hat{D}_B の交換関係

 $\begin{bmatrix} \hat{D}_A, \hat{D}_B \end{bmatrix} = (\hat{A} - \langle A \rangle)(\hat{B} - \langle B \rangle) - (\hat{B} - \langle B \rangle)(\hat{A} - \langle A \rangle) = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = [\hat{A}, \hat{B}]$ 任意の実数に対して、下記の不等式(絶対値の積分は正)が成立する。

$$\int \left| \left(r \widehat{D}_A + j \widehat{D}_B \right) \psi \right|^2 dx \ge 0$$

$$\int \left| \left(r \widehat{D}_A + j \widehat{D}_B \right) \psi \right|^2 dx = \int \left\{ \left(r \widehat{D}_A + j \widehat{D}_B \right) \psi \right\}^* \left\{ \left(r \widehat{D}_A + j \widehat{D}_B \right) \psi \right\} dx$$

$$= \int \left\{ r^2 \left(\widehat{D}_A \psi \right)^* \left(\widehat{D}_A \psi \right) + j r \left(\widehat{D}_A \psi \right)^* \left(\widehat{D}_B \psi \right) - j r \left(\widehat{D}_B \psi \right)^* \left(\widehat{D}_A \psi \right) + \left(\widehat{D}_B \psi \right)^* \left(\widehat{D}_B \psi \right) \right\} dx$$

(参考) ロバートソンの不等式の導出 - 2

$$= r^{2} \int \psi^{*} \widehat{D}_{A}^{2} \psi dx + jr \int \psi^{*} [\widehat{D}_{A}, \widehat{D}_{B}] \psi dx + \int \psi^{*} \widehat{D}_{B}^{2} \psi dx \quad (:: \widehat{D}_{A}, \widehat{D}_{B} \stackrel{t}{\to} \stackrel{t}$$

rが実数であるためには、

$$(j\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle)^{2} - 4\Delta A^{2}\Delta B^{2} \leq 0$$

$$4\Delta A^{2}\Delta B^{2} \geq -\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle^{2} \quad ([A, B] \text{ ld 虚数であることを想定})$$

$$\therefore \Delta A^{2}\Delta B^{2} \geq \frac{1}{4} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|^{2} \quad \text{または} \quad \Delta A\Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|$$

(Appendix 5-1) エルミート演算子の性質 – 1

エルミート演算子の定義 $\int_{-\infty}^{\infty} (\hat{A}\psi)^* \phi dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* (\hat{A}\phi) dx \qquad \text{エルミート演算子の関数表記}$ $\hat{A}x \cdot y = x \cdot \hat{A}y \ (\hat{A}^{\dagger} = \hat{A}) \qquad \text{エルミート演算子の行列表記}$

エルミート演算子の固有値は実数である

$$\int_{-\infty}^{\infty} (\hat{A}\psi)^* \psi dx = \int_{-\infty}^{\infty} \{a\psi\}^* \psi dx = \int_{-\infty}^{\infty} a^* \psi^* \psi dx = a^*$$
$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{A}\psi dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* a\psi dx = a$$
$$\int_{-\infty}^{\infty} (\hat{A}\psi)^* \phi dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* (\hat{A}\phi) dx \quad \& \psi, \quad a^* = a \quad \& \text{tasteb}, \quad a \text{ tagtbar}, a \text{$$

(Appendix 5-2) エルミート演算子の性質 – 2

エルミート演算子の固有関数は直交する

 $\hat{A}\psi_i = a_i\psi_i$ の固有値方程式が成り立つとき、

$$\int_{-\infty}^{\infty} (\hat{A}\psi_n)^* \psi_m dx = \int_{-\infty}^{\infty} (a_n\psi_n)^* \psi_m dx = a_n^* \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \psi_m dx = a_n \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \psi_m dx \quad (a_n \bowtie \texttt{x}\texttt{y})$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} (\hat{A}\psi_n)^* \psi_m dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* (\hat{A}\psi_m) dx = a_m \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \psi_m dx \quad (\hat{A} \sqcup \bot \nu \ge - k \equiv p \ge 0)$$

(Appendix 5-3) エルミート演算子の性質-3

エルミート演算子の固有関数は完全性を持つ

 $\hat{A}\psi_{i} = a_{i}\psi_{i} \text{ 0} 固有値方程式が成り立つとき、{}\psi_{i}{}\}全てと直交する関数\psi_{o}を考える。$ $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{i}^{*}\psi_{o}dx = 0 \quad \forall b \quad (a_{i} - a_{o})\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{i}^{*}\psi_{o}dx = 0 \quad (a_{o} \neq a_{i}) \text{ 0} \text{$



6-3 量子コンピュータの基本命令

量子ビットを使った演算の考え方

ブラケット記法 1

$$|\psi\rangle = \sum_{i=0}^{N-1} c_i |i\rangle = \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_{N-1} \end{pmatrix}$$
 ケットベクトル
 $\langle \phi | = \sum_{j=0}^{N-1} b_j^* \langle j | = (b_0^* \ b_j^* \ \cdots b_{N-1}^*)$ ブラベクトル

ブラケット記法による内積の計算

$$\langle \phi | \psi \rangle = \begin{pmatrix} b_0^* & b_j^* & \cdots & b_{N-1}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_{N-1} \end{pmatrix} = \sum_{i=0}^{N-1} b_i^* c_i$$

ブラケット記法によるノルム||| ψ >||の計算

$$|||\psi\rangle||^{2} = \langle \psi|\psi\rangle = (c_{0}^{*} \quad c_{1}^{*} \quad \cdots \quad c_{N-1}^{*}) \begin{pmatrix} c_{0} \\ c_{1} \\ \vdots \\ c_{N-1} \end{pmatrix} = \sum_{i=0}^{N-1} c_{i}^{*}c_{i} = \sum_{i=0}^{N-1} |c_{i}|^{2}$$

ブラケット記法2

ブラケット記法による物理量の期待値の計算

物理量の演算子Aに対する固有値aが測定される期待値

$$\langle a \rangle = \sum_{i=0}^{N-1} a_i |c_i|^2 = (c_0^* \quad c_1^* \quad \cdots \quad c_{N-1}^*) \begin{pmatrix} a_0 c_0 \\ a_1 c_1 \\ \vdots \\ a_{N-1} c_{N-1} \end{pmatrix} = (c_0^* \quad c_1^* \quad \cdots \quad c_{N-1}^*) \hat{A} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_{N-1} \end{pmatrix} = \left\langle \psi | \hat{A} | \psi \right\rangle$$

量子ビット(qubit)

便宜的に、2つの固有ベクトル(固有関数)|0),|1)を基底として考える(電子スピンの2個の量子状態など)。

量子ビットのイメージ(このイメージは不正確→次頁参照)

1回の測定により、量子数0,1のどちらかの固有値が得られる。同じ状態の別の量子ビットを、多数測定することにより、確率 $|c_0|^2$, $|c_1|^2$ が得られる(測定した量子ビットを再測定してはダメ)。

ブロッホ球(Bloch sphere)

 c_0, c_1 が実数であれば、 $|\psi\rangle$ は単位円上のベクトルで表されるが(前スライド参照)、実際には、複素ベクトルなので、4パラメータで表す必要がある。ただし、全確率 $|c_0|^2 + |c_1|^2 = 1$ の制約があるため、3次元空間の球面上に向かうベクトルとして表すことができる。

練習問題1

1. 下記のブロッホ球のベクトルを基底|0),|1)で表わせ。

計算基底(状態ベクトルの操作に使用する基底)による量 子ビットの測定

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_n \\ \vdots \end{pmatrix}$$
の状態にある量子ビットを測定すると、量子数nの固有値 E_n が $|c_n|^2$ の確率で得られる。

(参考)通常は、量子数が異なると物理量の測定値(固有値)が異なるため、測定値と量子 数は等価と考えてもよい。

量子コンピュータの演算命令1

量子コンピュータの計算は、量子レジスタの $|\psi\rangle$ ベクトルの時間変化によって行われる。 \rightarrow 状態 $|\psi\rangle$ の時間発展と呼ばれる。

状態ベクトル|ψ)の時間応答は、初期状態に時間発展演算子を作用させて得られる。

時間発展演算子の求めかた

$$\widehat{U}(t) = e^{-j\frac{\widehat{H}}{\hbar}t} = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{i!} \left(-j\frac{\widehat{H}}{\hbar}t\right)^i = I + \frac{1}{1!} \left(-j\frac{\widehat{H}}{\hbar}t\right)^1 + \dots + \frac{1}{m!} \left(-j\frac{\widehat{H}}{\hbar}t\right)^m + \dots$$

(参考)ハミルトニアンがエルミート行列なら、これをn乗した時間発展行列はユニタリ行列。

量子コンピュータの演算命令2

前ページのスライドでは、 \hat{H} が時間変化しないとして、固有値方程式を使用 して時間発展演算を求めたので、量子コンピュータの計算を前ページのスラ イドで求めた $\hat{U}(t)$ で表せない(c_n は初期状態と同じ)。量子コンピュータの 計算は、ハミルトニアンを変化させることによって実行される。 \hat{H} の時間変 化に対して時間が十分短い時間($t = \Delta t$)毎に、新しいハミルトニアンで時間 発展させると近似的に次式で状態を変化させることができる。

$$|\psi(\Delta t)\rangle \approx e^{-j\frac{\widehat{H}(\Delta t)}{\hbar}\Delta t}|\psi(0)\rangle = \widehat{U}(\Delta t)|\psi(0)\rangle$$

(厳密な時間発展演算子は、 $\widehat{H} = \widehat{H}(t)$ としたシュレディンガー方程式から 得られるが、計算はやや面倒。)

ユニタリ行列

量子コンピュータの演算命令は、量子レジスタのベクトルをブロッホ 球面上で移動させる。

$$|\psi\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle$$

$$\langle \psi | \psi \rangle = |c_0|^2 + |c_0|^2 = 1$$

演算を行ってもノルムが1(確率の合計が1)と なるので、ノルムを保存するユニタリ行列 (Unitary matrix)で量子コンピュータの演算を表 すことができる(必要十分条件)。

 $\widehat{U}\widehat{U}^{\dagger} = \widehat{U}^{\dagger}\widehat{U} = \widehat{I}$

量子ゲート1

量子ビットの状態ベクトルにユニタリ行列を作用させる命令は量子ゲート (Quantum gate)と呼ばれる。

アダマール(Hadamard)ゲート

 H =
$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$
 x-z軸π回転
 シンボル
 対応する行列(ハミルトニア
 ンと間違えないように注意)
 状態ベクトルの操作
 状態ベクトルの操作

$$H|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle$$
$$H|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle$$

クイズ

1. アダマールゲートを2回実行すると状態ベクトルはどのように移動するか。

Note: 位相 $e^{j\frac{\varphi}{2}}$ を全体にかける操作を行っても、 c_0, c_1 の位相差は変わらないため、 行列から括りだされた位相操作を無視してよい。(逆に、 c_0, c_1 の片方だけが位 相変化する演算は無視できない。)

計算基底以外での測定

量子ビットの固有関数の基底(計算基底)で表された状態ベクトル $|\psi\rangle$ を、別の基底(別の物理 量)で測定することもできる。

$$\langle n|\psi\rangle = (0\ 0\ \cdots\ 1(n), 0, \cdots) \begin{pmatrix} c_0 \\ \vdots \\ c_n \\ \vdots \end{pmatrix} = c_n \quad 内積は基底 < f > h ~ o 投影値を表している。$$

$$\begin{bmatrix} 11 \\ |\psi\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle \\ |\psi\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle = \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix}$$

$$ptate |\psi\rangle = c_0'|\varphi_0\rangle + c_1'|\varphi_1\rangle$$

$$ptate = c_0'|\varphi_0\rangle + c_1'|\varphi_0\rangle$$

$$|\psi\rangle = c_0'|\varphi_0\rangle + c_1'|\varphi_1\rangle = \langle \varphi_0|\psi\rangle|\varphi_0\rangle + \langle \varphi_1|\psi\rangle|\varphi_1\rangle$$

量子ランダムアクセス符号

古典ランダムアクセス符号

量子ランダムアクセス符号

1bitの情報をBに与え、Aが持っている情報をBに予想させる問題。しかし、古典ランダムアク セス符号では、ランダムに1/0を出力することしかできない。このとき、正解率は50%となる。 一方、量子ランダムアクセス符号では、1 qubitの情報をBに与え85%の正解率となる。

量子ランダムアクセス符号の動作確認

1. 入力 $b_1b_2 = 010$ 場合について動作確認してみよう。 Aの動作: $|\psi(01)\rangle = \cos \frac{-\pi}{8}|0\rangle + \sin \frac{-\pi}{8}|1\rangle \quad 0 \neq \forall \forall = -\forall \notin \& d \in \mathbb{R}$ Bの動作: $j = 1 \rightarrow |0\rangle, |1\rangle \notin \mathbb{R}$ $|\langle 0|\psi(01)\rangle|^2 = \cos^2 \left(-\frac{\pi}{8}\right) \langle 0|0\rangle = \cos^2 \left(-\frac{\pi}{8}\right) \approx 0.8536$ $|\langle 1|\psi(01)\rangle|^2 = \sin^2 \left(-\frac{\pi}{8}\right) \langle 1|1\rangle = \sin^2 \left(-\frac{\pi}{8}\right) \approx 0.1464$ $j = 2 \rightarrow |+\rangle, |-\rangle \notin \mathbb{R}$ $\Rightarrow = 1 \rightarrow |0\rangle, |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle), |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$

(参考)類似の手法を使って、盗聴されないで秘密鍵を共有することが可能。

複数量子ビットの表し方

2qubitの状態は、ℂ⁴空間のベクトルで表されるが、量子ビット単位の操作を想定し、 ℂ²⊗ℂ²のテンソル積によって表す(他の表し方も考えられるが)。

テンソル積
$$\begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_0 \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \end{pmatrix} \\ a_1 \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_0 b_0 \\ a_0 b_1 \\ a_1 b_0 \\ a_1 b_1 \end{pmatrix}$$

2qubit基底ベクトルの各種表記

$$|00\rangle = |0\rangle \otimes |0\rangle = \begin{pmatrix} 1\\0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1\\0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1\\0\\0 \\0 \end{pmatrix} \qquad |01\rangle = |0\rangle \otimes |1\rangle = \begin{pmatrix} 1\\0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0\\1 \\0 \\0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0\\1\\0 \\0 \end{pmatrix}$$
$$|11\rangle = |1\rangle \otimes |1\rangle = \begin{pmatrix} 0\\1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0\\1 \\0 \\1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0\\0\\0 \\1 \\0 \end{pmatrix}$$

2 qubit 量子レジスタの状態ベクトル

エンタングルメント(Entanglement, 量子もつれ)

2qubitの量子レジスタの状態は、 $|\psi\rangle = c_{00}|00\rangle + c_{01}|01\rangle + c_{10}|10\rangle + c_{11}|11\rangle$ で表せる。

第1量子ビットと第2量子ビットの状態に正および負の相関がある場合

 $|\psi\rangle = c_{00}|00\rangle \pm c_{11}|11\rangle, |\psi\rangle = c_{01}|01\rangle \pm c_{10}|10\rangle$ の状態が実現できる。

1qubit目と2qubit目の状態に相関があるとき(1qubit目が2qubit目の状態に影響を与える) 量子状態は、エンタングルド(entangled)状態と呼ばれる。エンタングルド状態は、これま でに扱った1qubitを2個並べただけでは作れない(2qubitの量子相関が必要)。

(参考)EPRパラドックス(エンタングルド状態の 2光子が離れた場所で情報を共有する現象)は大変 興味深いので調べてみよう。
エンタングルド状態の性質

1. テンソルでエンタングルド状態は作れない。

$$\begin{split} |\psi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} |00\rangle \pm \frac{1}{\sqrt{2}} |11\rangle \quad \text{のようなエンタングルド状態(Bell状態)に対して,} \\ |\psi\rangle &= (c_{1,0}|0\rangle + c_{1,1}|1\rangle) \otimes (c_{2,0}|0\rangle + c_{2,1}|1\rangle) \quad \text{となる} c_{1,0}, c_{1,1}, c_{2,0}, c_{2,1} \quad \text{の組は無い}. \end{split}$$

- 3. 古典的操作(外部操作)により2量子ビットの状態を相関させた場合、2つの量子ビットの間の位相関係が不明(量子状態が失われる)。

クイズ

1. 前ページスライドの性質1を証明せよ。

複数量子ビットの演算

複数の量子ビットに対する演算は、1qubit演算子のテンソル積で表す。ただし、エンタン グルド状態は作れない。

$$A \otimes B = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} \begin{pmatrix} b_{11}b_0 \\ b_{21}b_1 \end{pmatrix} a_{12} \begin{pmatrix} b_{11}b_0 \\ b_{21}b_1 \end{pmatrix} a_{12} \begin{pmatrix} b_{11}b_1 \\ b_{21}b_{12} \end{pmatrix} a_{22} \begin{pmatrix} b_{11}b_{12} \\ b_{21}b_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11}b_{11} & a_{11}b_{12} & a_{12}b_{11} & a_{12}b_{12} \\ a_{11}b_{21} & a_{11}b_{22} & a_{12}b_{21} & a_{12}b_{22} \\ a_{21}b_{11} & a_{21}b_{12} & a_{22}b_{11} & a_{22}b_{12} \\ a_{21}b_{21} & a_{21}b_{22} & a_{22}b_{11} & a_{22}b_{22} \\ a_{21}b_{21} & a_{21}b_{22} & a_{22}b_{21} & a_{22}b_{22} \\ a_{22}b_{21} & a_{21}b_{22} & a_{22}b_{21} & a_{22}b_{22} \\ a_{21}b_{21} & a_{21}b_{22} & a_{22}b_{21} & a_{22}b_{22} \\ a_{21}b_{21} & a_{21}b_{22} & a_{22}b_{21} & a_{22}b_{22} \\ a_{21}b_{21} & a_{21}b_{22} & a_{22}b_{21} & a_{21}b_{22} \\ a_{21}b_{21} & a_{21}b_{22} & a_{22}b_{21} \\ a_{21}b_{21} & a_{21}b_{22} & a_{22}b_{21} \\ a_{21}b_{21} & a_{21}b_{22} & a_{22}b_{21} & a_{21}b_{22} \\ a_{21}b_{21} & a_{21}b_{22} & a_{22}b_{21} \\ a_{21}b_{21} & a_{21}b_{22} & a_{2}b_{21} \\ a_{21}b_{21} & a_{21}b_{22} & a_{2}b_{2} \\ a_{21}b_{21} & a_{21}b_{22}$$

2量子ビットの計算例



$$\begin{split} |\psi\rangle &= \frac{1}{2} |00\rangle - \frac{1}{2} |01\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |11\rangle \\ & \text{ind} \ \text{i$$

$$\begin{split} (I \otimes H) |\psi\rangle &= \frac{1}{2} I |0\rangle \otimes H |0\rangle - \frac{1}{2} I |0\rangle \otimes H |1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} I |1\rangle \otimes H |1\rangle \\ &= \frac{1}{2} |0\rangle \otimes \left(\frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle\right) - \frac{1}{2} |0\rangle \otimes \left(\frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle\right) + \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle \otimes \left(\frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle\right) \\ &= \frac{1}{2\sqrt{2}} |0\rangle \otimes |0\rangle + \frac{1}{2\sqrt{2}} |0\rangle \otimes |1\rangle - \frac{1}{2\sqrt{2}} |0\rangle \otimes |0\rangle + \frac{1}{2\sqrt{2}} |0\rangle \otimes |1\rangle + \frac{1}{2} |1\rangle \otimes |0\rangle - \frac{1}{2} |1\rangle \otimes |1\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle \otimes |1\rangle + \frac{1}{2} |1\rangle \otimes |0\rangle - \frac{1}{2} |1\rangle \otimes |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |01\rangle + \frac{1}{2} |10\rangle - \frac{1}{2} |11\rangle \end{split}$$

練習問題2

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1\\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

制御ビット(条件分岐)を含む演算の行列表現 $x_1 = 0$ のとき $x_1 = 1$ のとき $A \in \mathbb{R}$ 行 \downarrow $B \in \mathbb{R}$ 行 $CB = |0\rangle\langle 0|\otimes A + |1\rangle\langle 1|\otimes B$



CNOT(Controlled NOT)ゲート(EXORゲートとも呼ばれる)



⁵え方1(誤)
$$|x_1\rangle|a|0\rangle \geq |1\rangle$$
の確率が1/2なので、
EXORの真理値表より、 $|x_2'\rangle$ では $|0\rangle$
 $\geq |1\rangle$ の両方が同じ確率で起こる。
従って、
 $|x_2'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$

考え方2(正)
$$|x_1'\rangle = |x_1\rangle$$
の測定結果が0の場合、
 $|x_2'\rangle = |0\rangle$
 $|x_1'\rangle = |x_1\rangle$ の測定結果が1の場合、
 $|x_2'\rangle = |1\rangle$
従って、以上の場合を重ね合わせ、
 $|x_1'\rangle \otimes |x_2'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$





1. 入力
$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|00\rangle$$

に対する左図の量子ゲートの出力 $|\psi_2\rangle$ を求めよ。
2. 左図の量子ゲートの2qubit演算を表す4x4行
列を求めよ。(注)ゲートの並び順と行列
の並び順は逆になることに注意。

練習問題4



1. 入力
$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|100\rangle + |010\rangle - |111\rangle)$$

に対する左図の量子ゲートの出力を求めよ。

 左図の量子ゲートの3qubit演算を表す8x8行 列を求めよ。

CCNOTゲート(トフォリゲート, Toffoli gate)



$$(x_1 = 1, x_2 = 1 のときのみ、 x_3' = \overline{x_3})$$





全加算器の証明



MeRL @ Kanazawa Univ.



※ 通常ORで表されるが、EXORでも論理 的に等価になる(下記参照)。 $x_4'' = x_2' \cdot x_3' \oplus x_4' = (x_1 \oplus x_2) \cdot x_3 \oplus x_1 \cdot x_2 = x_1 \cdot x_2 \oplus x_2 \cdot x_3 \oplus x_3 \cdot x_1 = x_1 \cdot x_2 + x_2 \cdot x_3 + x_3 \cdot x_1$

練習問題5

1. 前スライドの全加算器について、下記の入力を行うとき、測定後に得られる出力(x₃, x₄)の値 (x₃, x₄は0または1)と各出力の測定確率を求めよ。

入力
$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0100\rangle + |1100\rangle)$$

A = $x_1 = 0/1$ (確率1/2で重ね合わせ)
B = $x_2 = 1$
C_{in} = $x_3 = 0$

次のステップ

- ▶ 代表的な量子計算アルゴリズムと量子通信プロとコルを読む
 - 🕨 Shorのアルゴリズム
 - ▶ Deutsch-Jozsaのアルゴリズム
 - **Grover**のアルゴリズム、Simonのアルゴリズムなど
- ▶ 量子コンピュータを実際に使ってみる(無料のクラウド量子コンピュータ)
 - IBM Quantum Platform <u>https://quantum-computing.ibm.com/</u>
 - Qiskit学習コース <u>https://qiskit.org/learn/</u>

課題5

- 「演算子 A, Bの交換関係が[A, B] = AB BA = 0 ⇔ A, Bは同時固有関数を 持つ」(Appendix 4-1参照)の必要条件を証明せよ。
- 2. 運動量の分散 Δp^2 、位置の分散 Δx^2 、エネルギーの分散 ΔE^2 、時間の分散 Δt^2 の間に、下記の不確定性関係(ハイゼンベルクの不確定性関係)が成り立つとき、 *X*, *Y*, *Z*の値を求めよ。ディラック定数 \hbar を用いて表すこと。

 $\Delta p^2 \Delta x^2 \ge X$ $\Delta E^2 \Delta t^2 \ge Y$

 $\Delta E^2 \Delta p^2 \ge Z$

3. 練習問題2~5の問題を実施せよ。