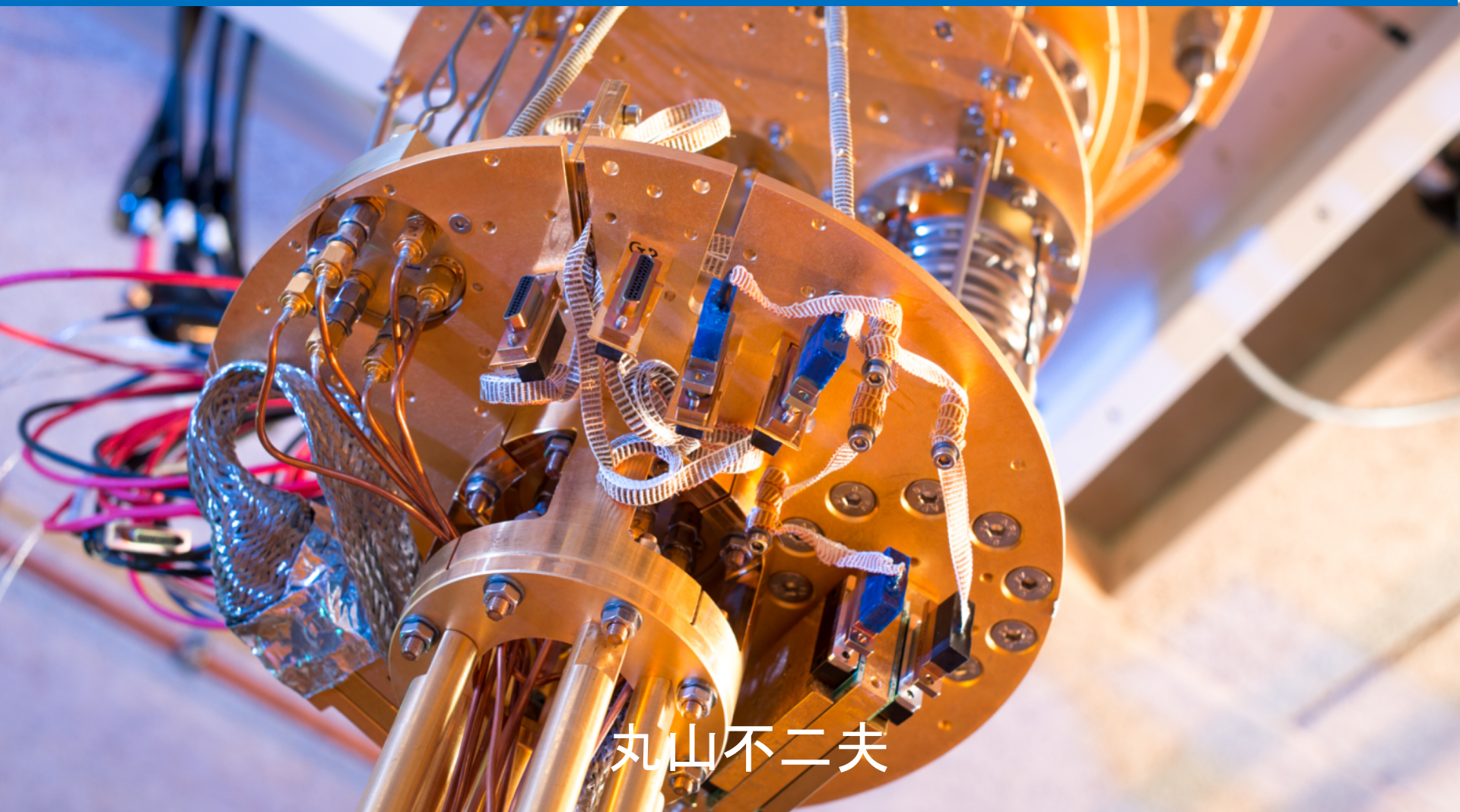


紙と鉛筆で学ぶ 量子コンピュータ入門



丸山不二夫

はじめに

- 本演習は、量子ゲート型量子コンピュータの基礎を演習形式で学ぶことを目的としたシリーズの第一回目である。対象を、量子論を初めて学ぶ人として、高校生程度の数学的知識を前提に、基本的なベクトル・行列計算の入門演習を含んでいる。
- 量子ゲート型量子コンピュータの入門としては、基本的な量子アルゴリズムや量子通信手法の紹介、量子情報理論の入門としては密度行列や量子情報とエントロピーの紹介等、重要な部分が欠けているのだが、それらについては、シリーズの次回以降で取り上げたいと考えている。
- また、ここで取り上げられている素材は、物理学的な量子論から見ると、大幅に簡略化されている。こうしたアプローチは、量子論の入門としては、むしろ望ましいことのように筆者は考えている。

はじめに

- こうした簡略化が可能なのは、物理学的量子論が、実在的な物質を対象とし、その運動法則の解明を目指すのに対して、少なくとも、量子ゲートの理論は、量子論をそのフレームにしつつ、その対象が抽象的・形式的なものであるところが大きいと考えている。（現時点での量子コンピュータの実装レベルでの達成と、その理論的展望との間には、大きな乖離がある。）
 - ただ、量子情報理論は、量子論から派生したそのサブセットでも、単なるその応用分野だというわけでもない。近年の物理学の大きな話題は、量子情報理論が、物理学そのものの基礎理論なのではないかという関心の高まりのように筆者は感じている。こうした関心が多くの人に共有されることを期待している。
-

Agenda

- 量子論の成立と発展
 - 量子論と量子情報理論
 - 補講: ベクトル・行列演算入門
 - 重ね合わせの記述とket記法
 - 観測とエルミート演算子
 - 量子の状態変化とユニタリ演算子
 - 量子ゲートを組み合わせて量子回路を構成する
-

Time Schedule

① 量子論の成立と発展		13:00
② 量子論と量子情報理論	② ③	14:30
③ 補講: ベクトル・行列演算入門	④	16:00
④ 重ね合わせの記述とket記法	⑤ ⑥	17:30
⑤ 観測とエルミート演算子	⑦	19:00
⑥ 量子の状態変化とユニタリ演算子		
⑦ 量子ゲートを組み合わせて量子回路を構成する		

量子論の成立と発展

量子の世界

実験で明らかになったこと

20世紀の初め、アインシュタインは、光を金属に当てると電子が飛び出すという光電効果の現象が、光を波と考えては説明できず、光を波長に比例したエネルギーをもつ粒子だと考えると説明できることを示す。

粒子である電子も、二重スリットで干渉縞を示し、粒子性と波動性の二つの性質を持つことが明らかになる。

二重スリットの実験

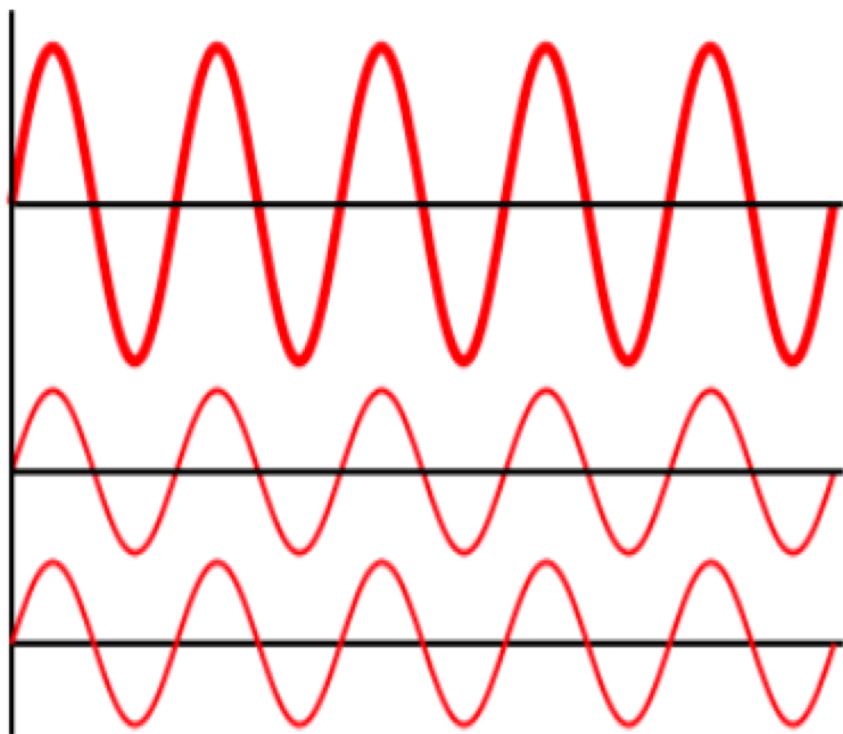
19世紀の初め、トーマス・ヤングは、二重スリットを通した光が干渉縞を示すことを示し、光が粒子なのか波なのかという古くからの問題に、**光は波であるという結論を与えた。**

波の重ね合わせ

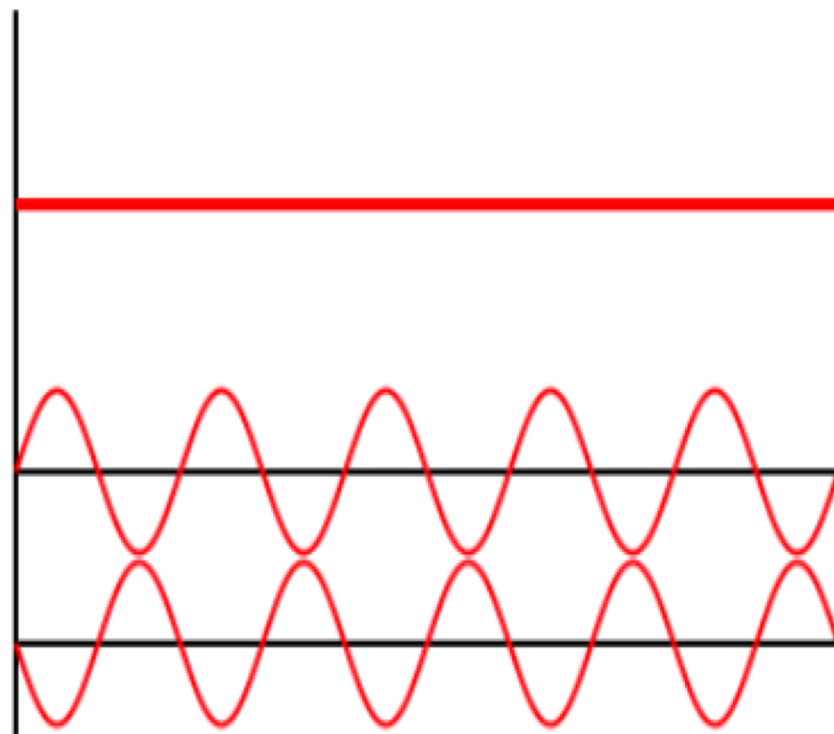


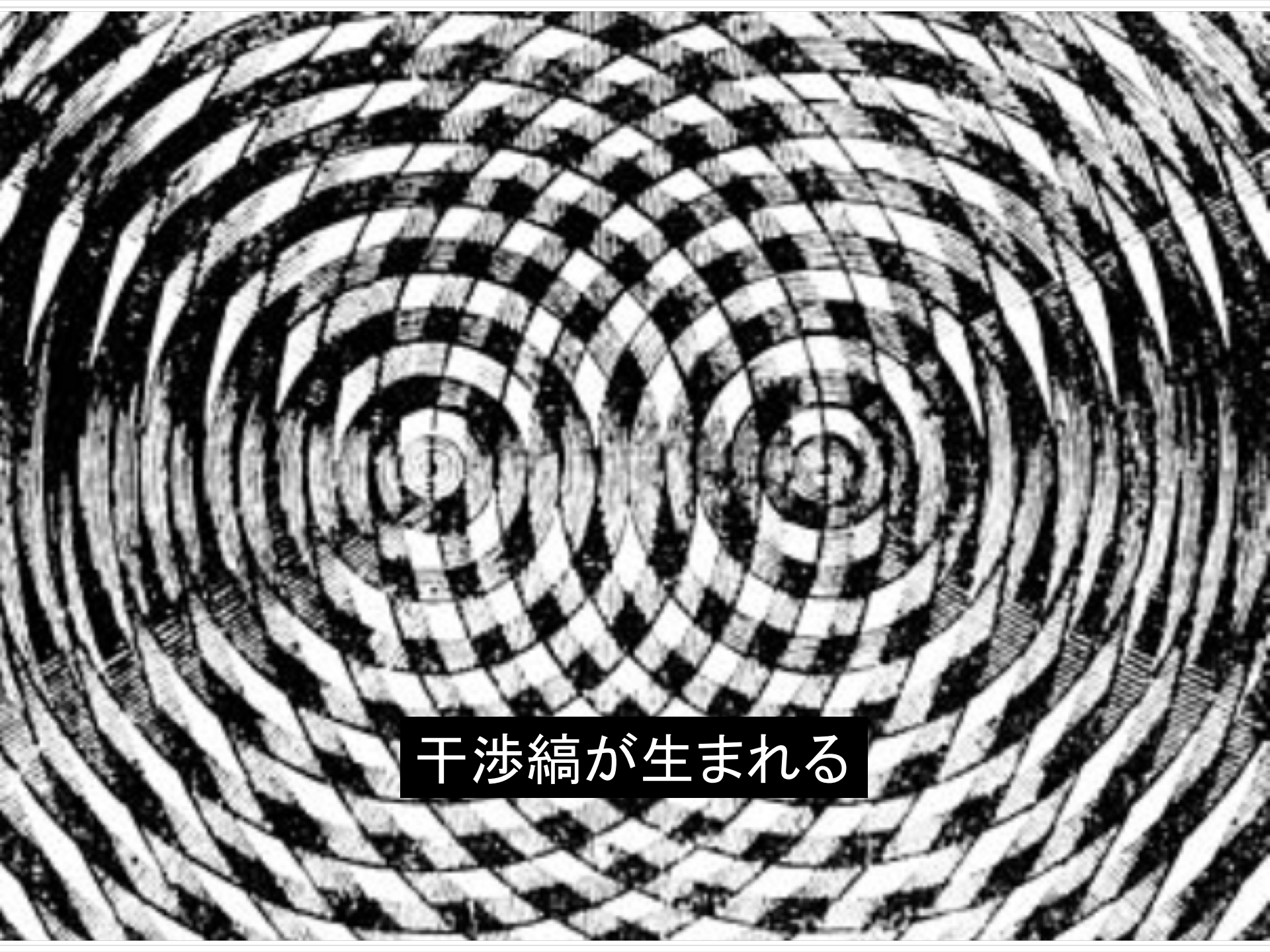
波の重ね合わせ

強めあう



打ち消しあう



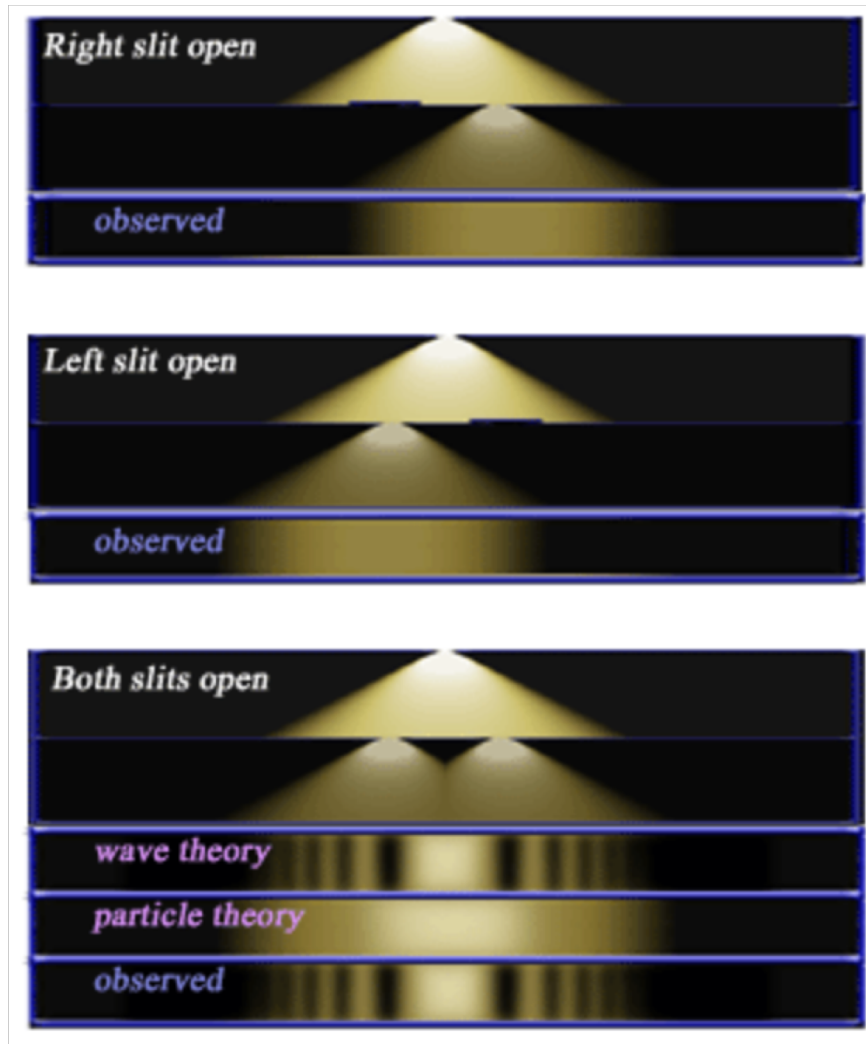


干渉縞が生まれる

光電効果

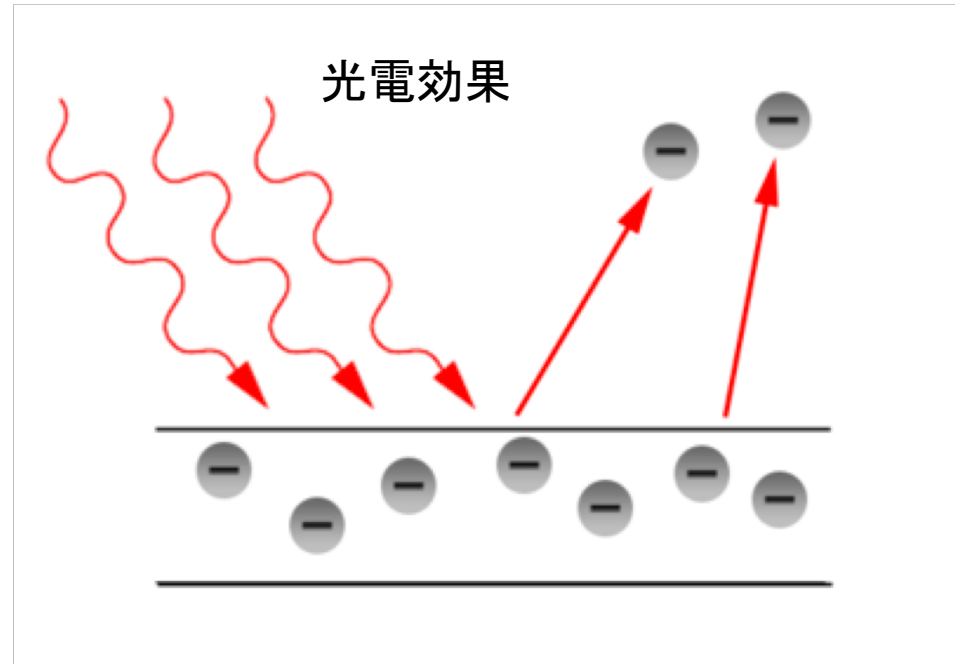
- 金属に短波長の(振動数の大きな)光を照射すると、電子が表面から飛び出す現象が発見される。
 - 電子の放出は、ある一定以上大きな振動数の光でなければ起こらず、それ以下の振動数の光をいくら当てても電子は飛び出してこない。
 - 振動数の大きい光を当てると光電子の運動エネルギーは変わるが飛び出す電子の数に変化はない
 - 強い光を当てるとたくさんの電子が飛び出すが、電子1個あたりの運動エネルギーに変化はない
-

光は波



1805年 ヤングの実験

光は粒子



「光子は振動数に比例する
エネルギーを持つ粒子である」

1905年 アインシュタイン 光子

Feynmann's Lectures on Physics

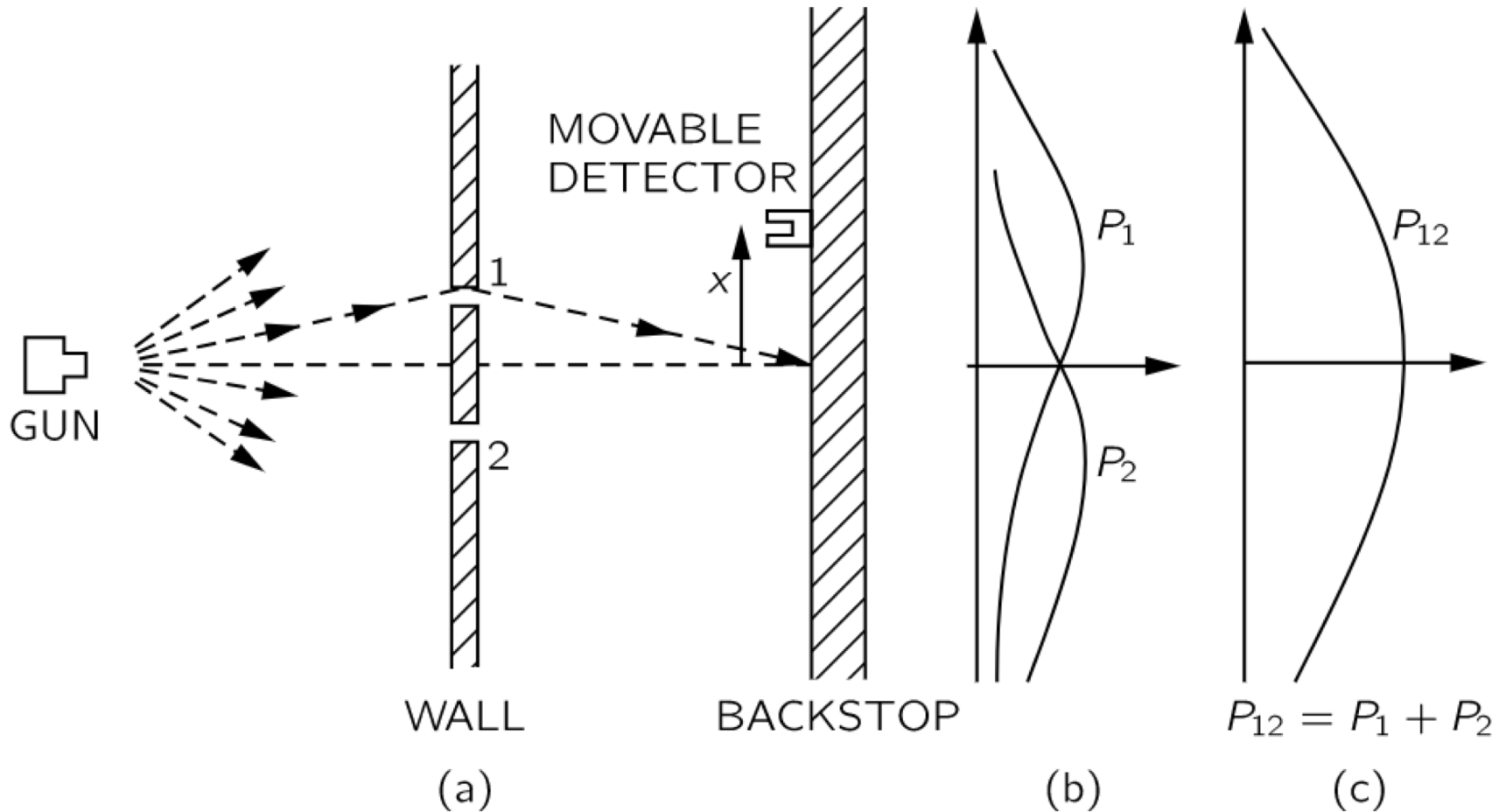


Fig. 1-1. Interference experiment with bullets.

Feynmann's Lectures on Physics

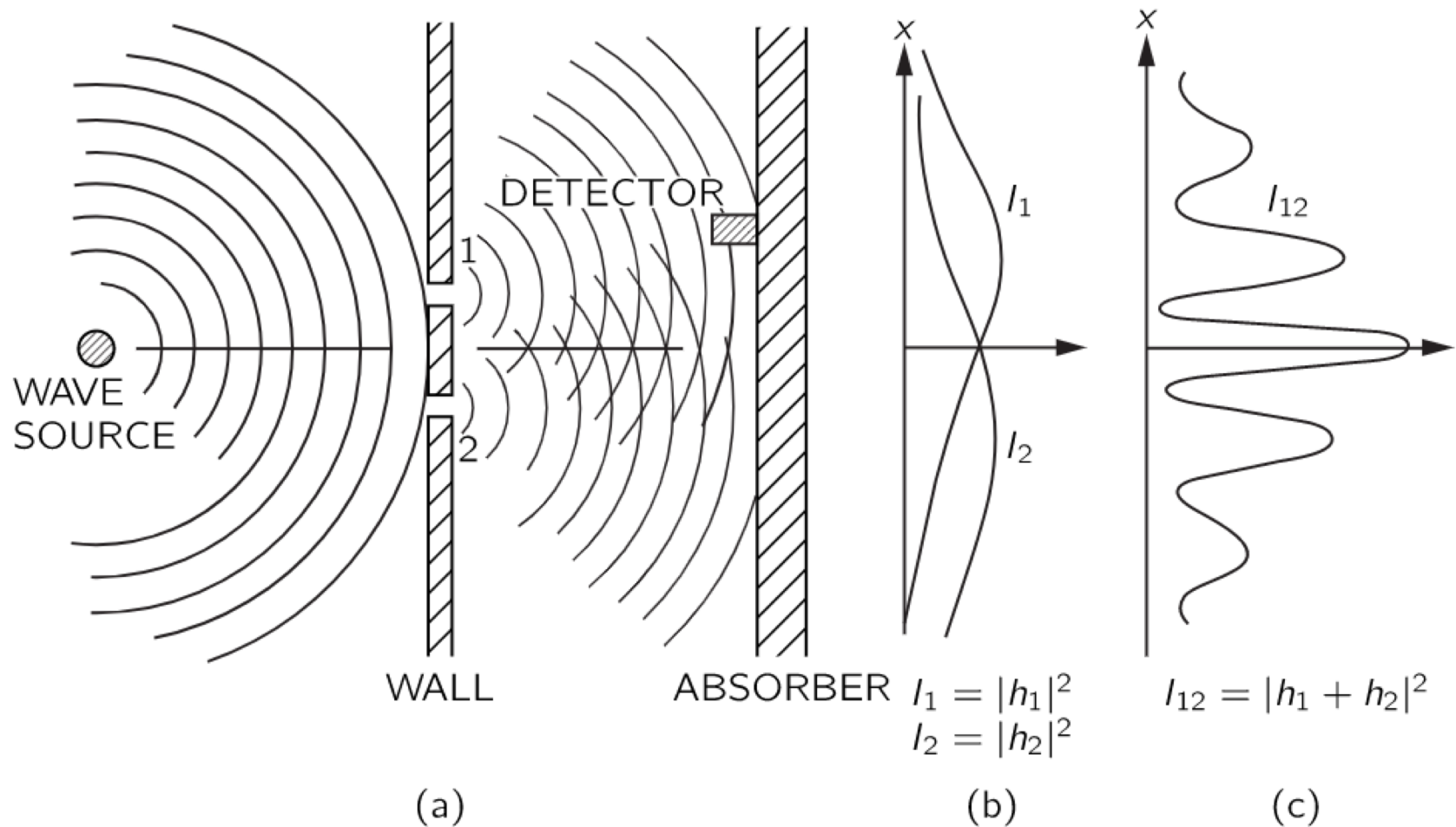


Fig. 1-2. Interference experiment with water waves.

Feynmann's Lectures on Physics

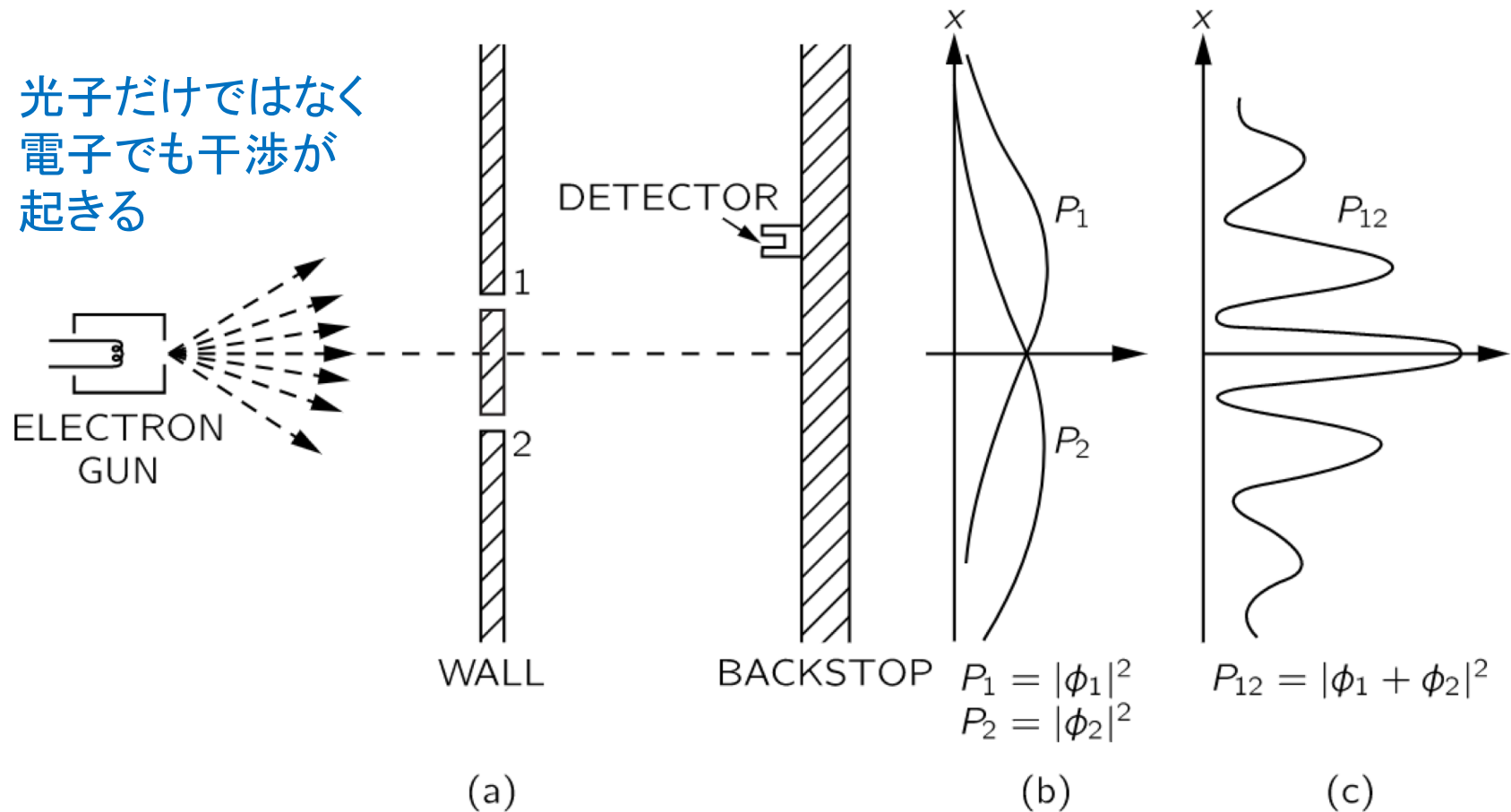


Fig. 1–3. Interference experiment with electrons.

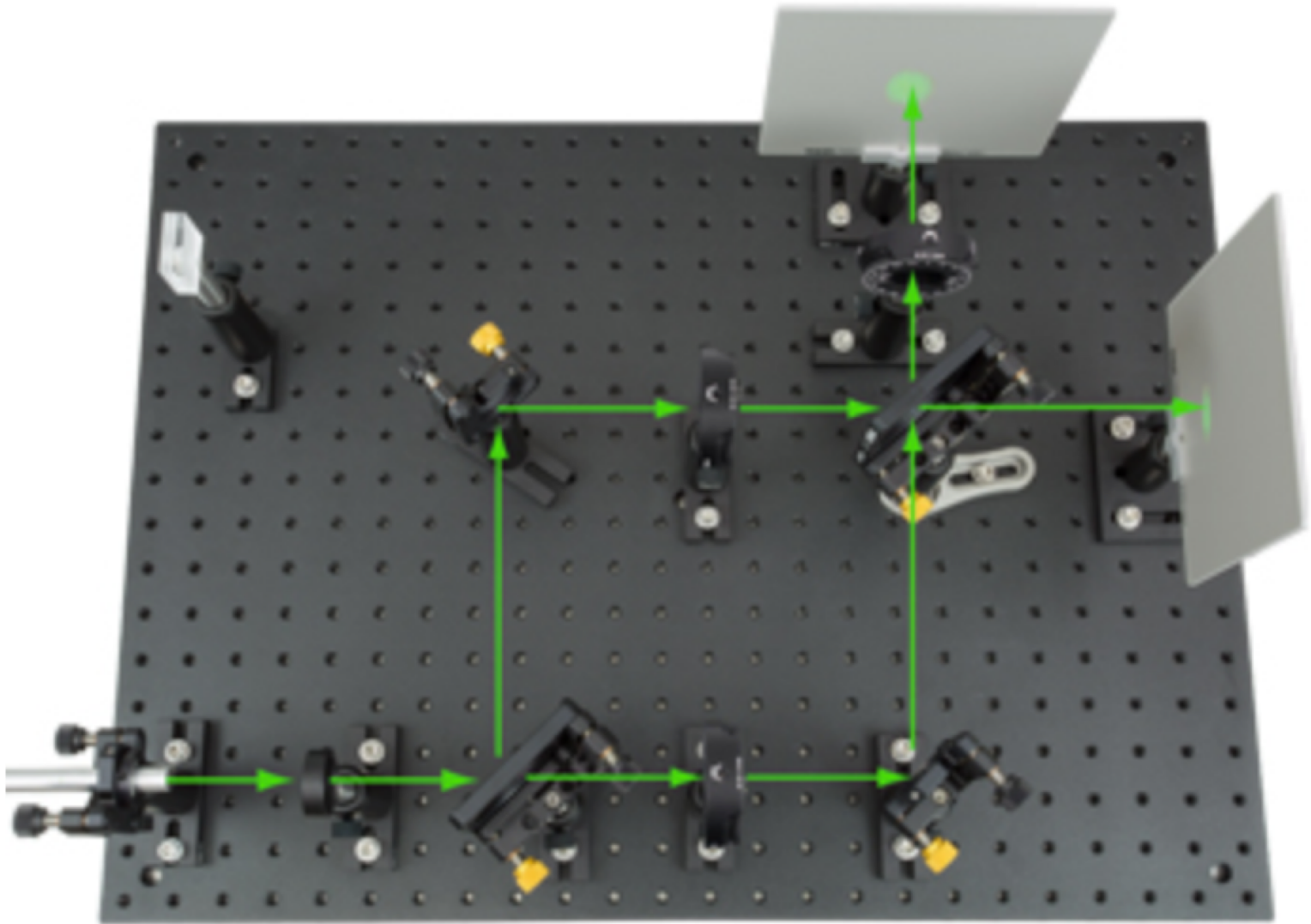


Dr. Quantum <https://goo.gl/CFJfjy>

Mach Zehnder 干渉計の実験

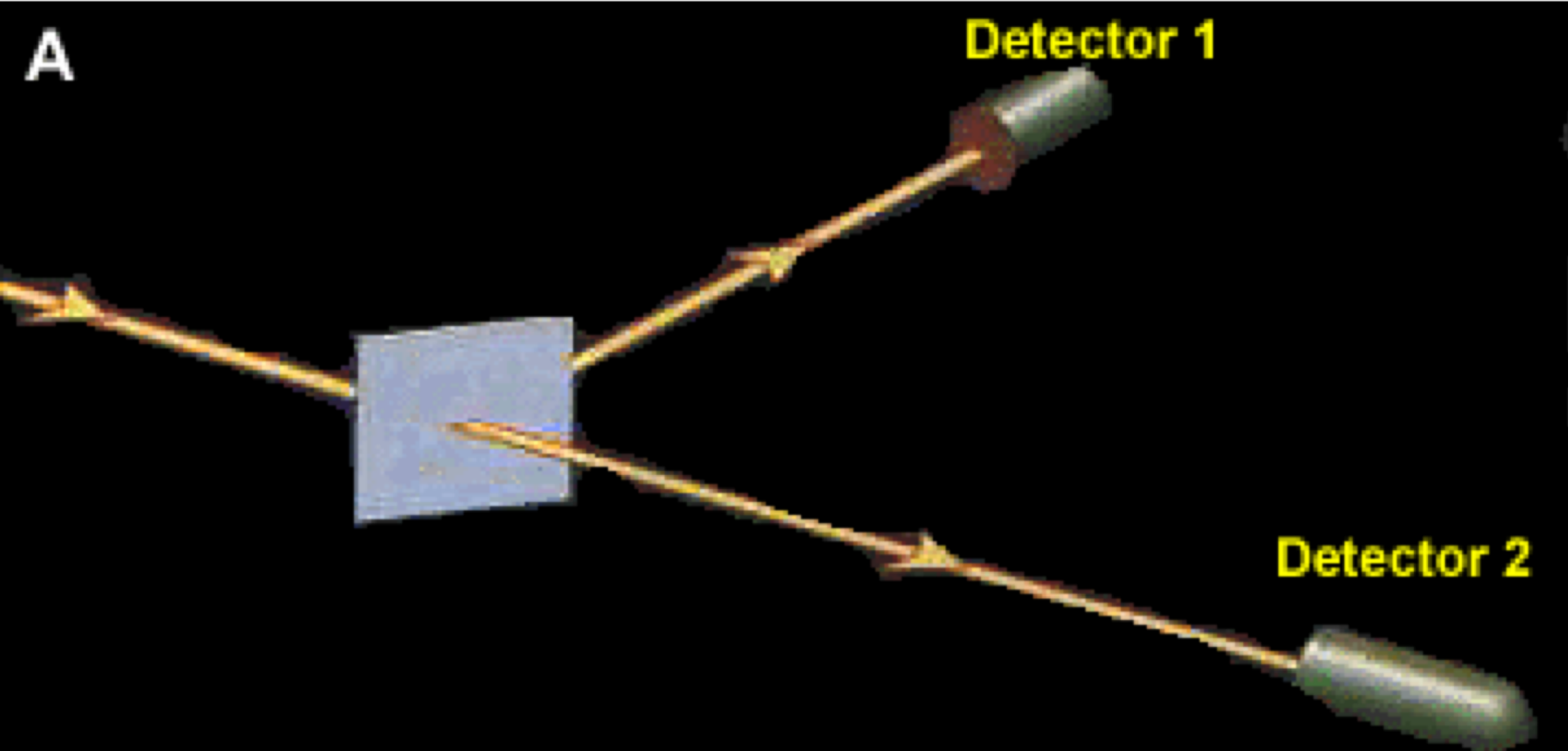
Mach-Zehnder干渉計の実験は、一つの光子であっても、それが、「同時に」、波でもあり粒子でもあることを示す。

Mach Zehnder 干渉計



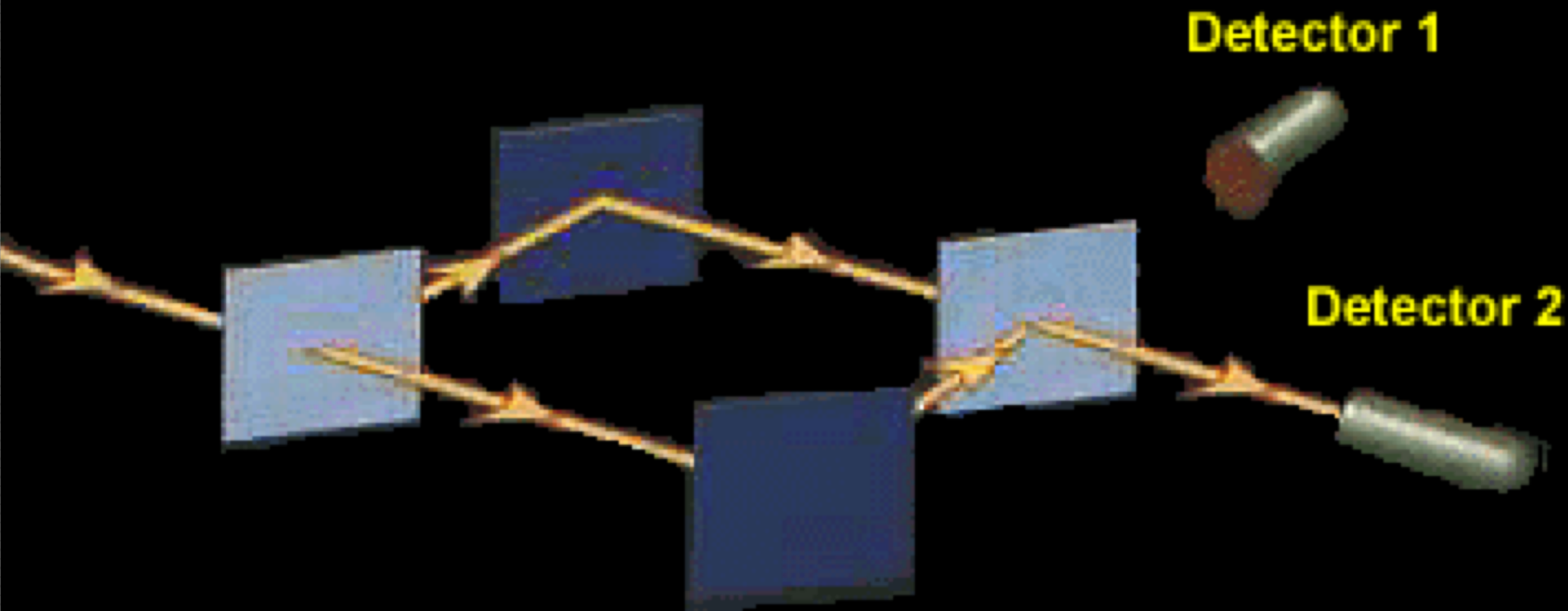
量子消しゴム(Quantum Eraser)実験キット
<https://goo.gl/BB4F5D>

A



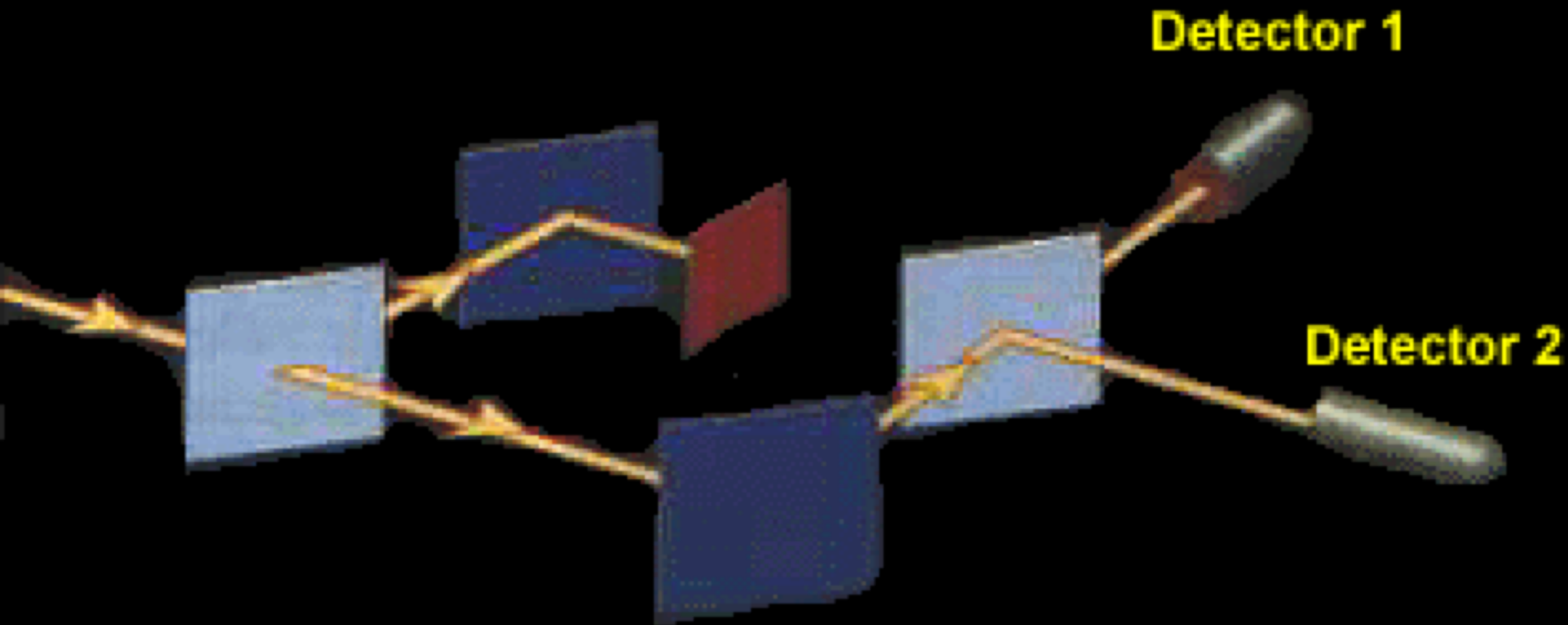
光を半分は通し半分は反射する、ハーフミラーを45度の角度で光の進路に置く。**光は、二つの検出器に届く。**光子一個で実験を繰り返すと、ある光子は検出器1に、ある光子は検出器2に届く。その確率は等しい。ここに不思議なことはない。

B



ハーフミラー二つと鏡二つを組み合わせて、上のような装置を作る。光は干渉をおこして、検出器の一方にしか届かなくなる。奇妙なことは、光子一個で実験しても、このことは変わらない。一個の光子は、二つの道を「同時」に通っている。

C



もっと奇妙なことは、**光路の一方を塞ぐと、光は両方の検出器に届くようになる。**光子一個で考えると、行く手を阻まれた光子は、そのことを、他方の光子に伝えて(どちらも自分自身なのだが)、その性質を変えているように見える。

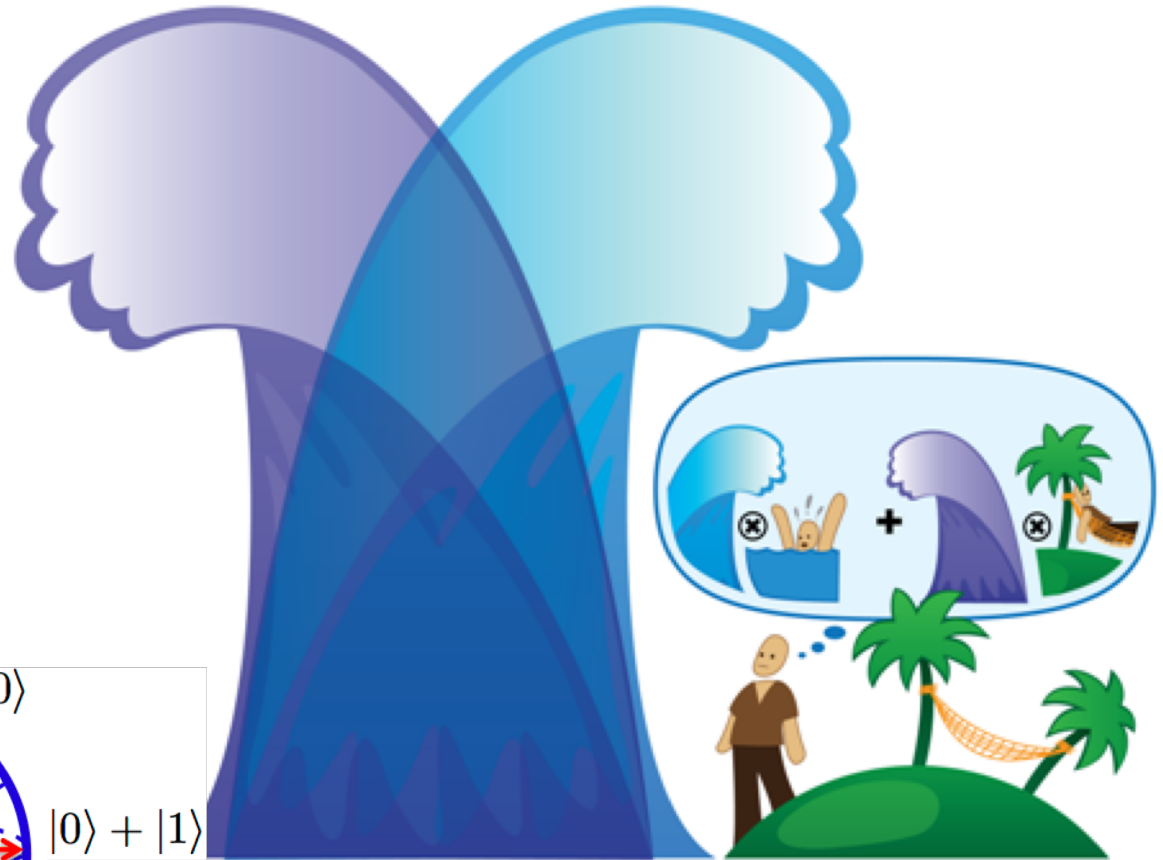
量子論の成立

重ね合わせと観測の確率解釈

20世紀の20年代、シュレジンガー、ハイゼンベルグ、ディラックらが、これらの実験結果を説明できる理論を提出し、量子論が成立する。その後、フォン・ノイマンが、その数学的・形式的な定式化を完成する。

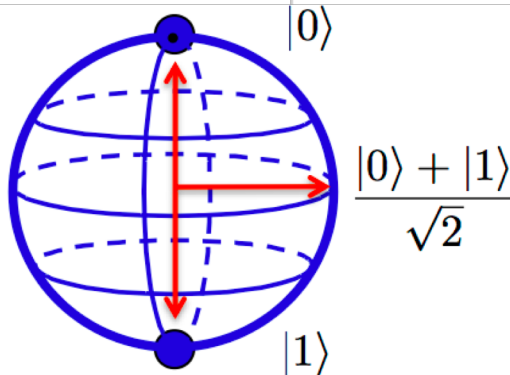
Superposition

量子は複数の状態の重ね合わせの状態を取る



● 0

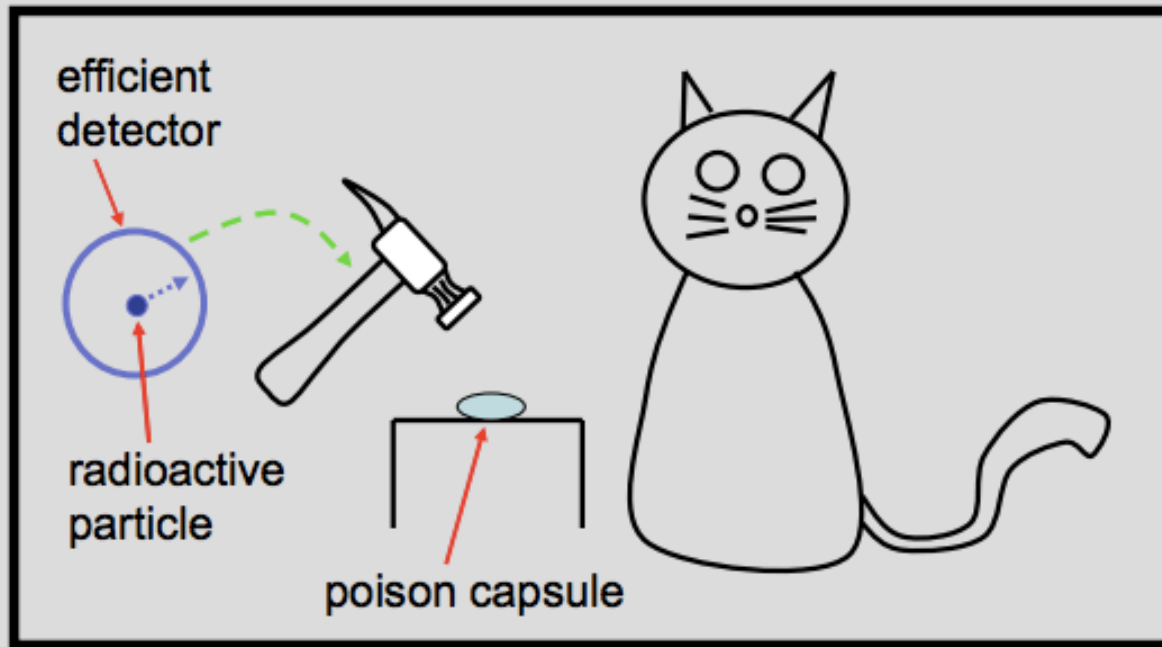
● 1



Classical Bit

Qubit

Erwin Schrödinger's Cat (1935)

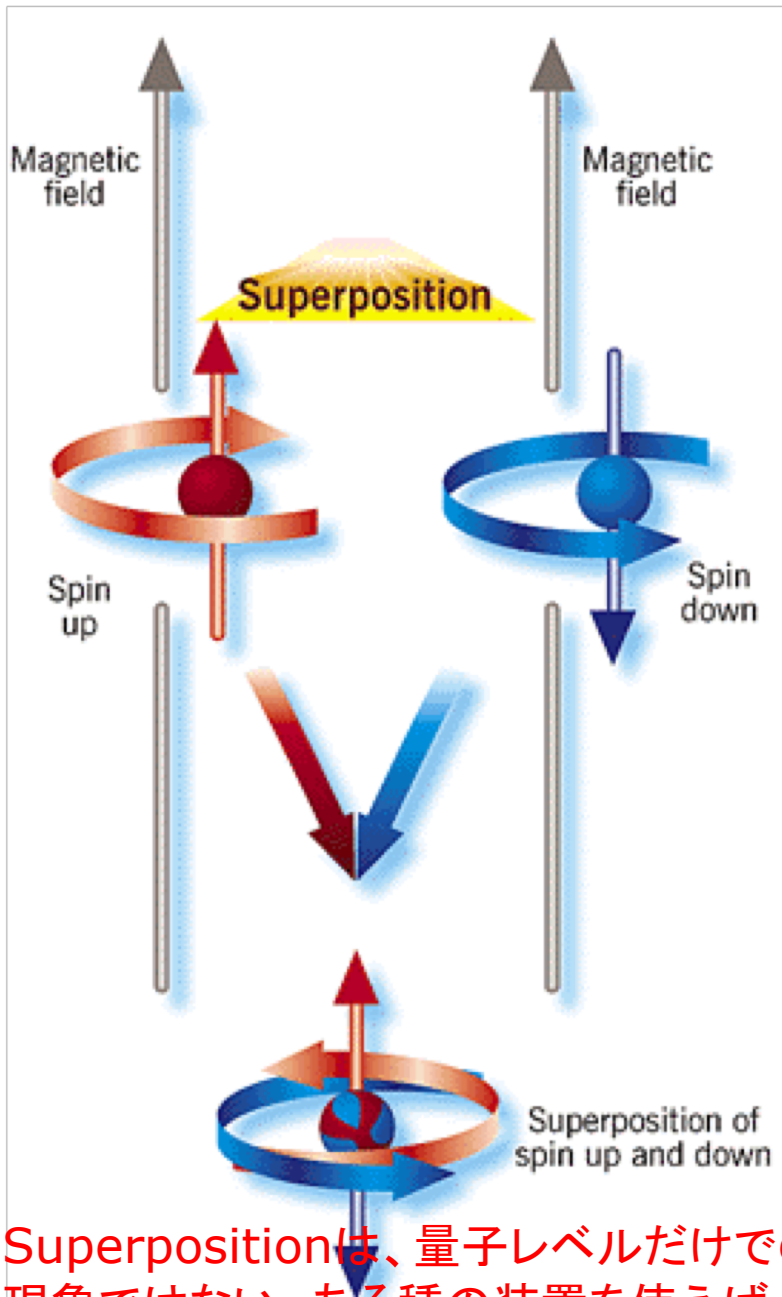


At “half-life of particle, quantum mechanics says
cat is simultaneously dead and alive!

“superposition” $\Psi = |\text{circle with dot}\rangle |\text{cat with one eye}\rangle + |\text{circle with dot and arrow}\rangle |\text{cat with two eyes}\rangle$

2012年 Winelandのノーベル賞記念講演から

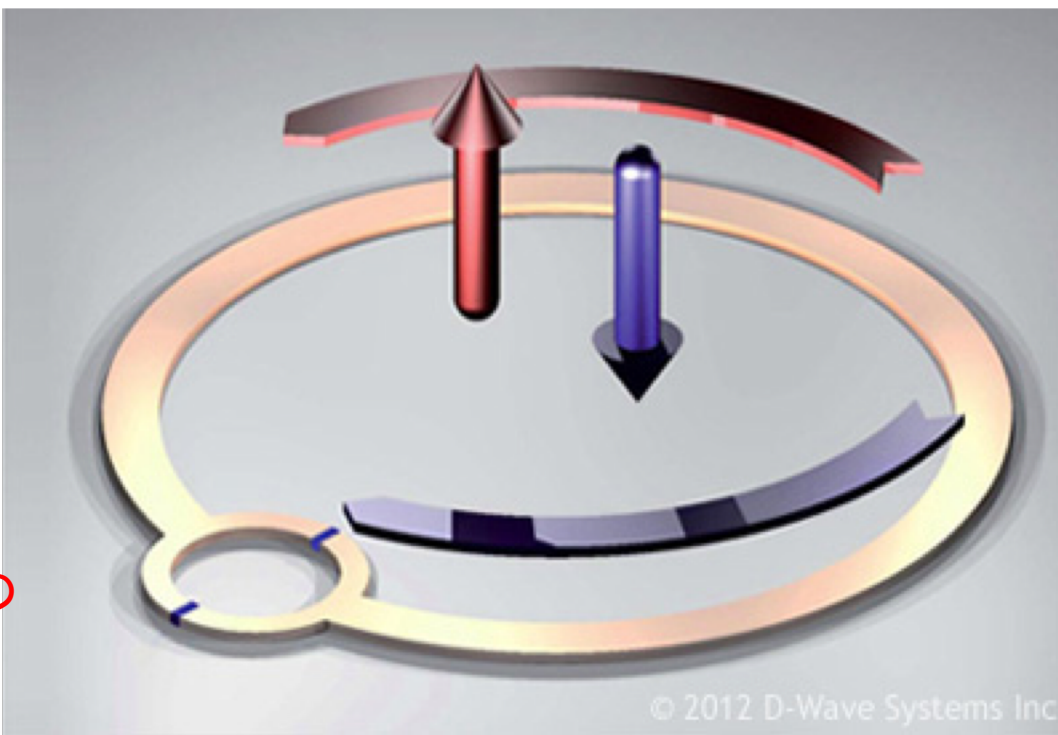
http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/2012/wineland-lecture_slides.pdf



Superpositionは、量子レベルだけの現象ではない。ある種の装置を使えば、それはマクロな現象として現れる。

SQUID

superconducting
quantum
interference
device



観測と確率解釈

量子の状態は、直接には、観測できない。

観測可能な量 (Observable) は、状態を表すベクトル空間に作用するエルミート演算子で表現される。

観測される値は、このエルミート行列の固有値である。

観測値が観測される確率は、正確に計算することができる。

また、観測によって、系の状態は、観測前とは異なる状態に変化する。(重ね合わせは失われる。)

Visualization of Quantum Physics

<https://goo.gl/rVHEL4>

今回のセミナーでは、シュレジンガー
方程式のスタイルは取らない

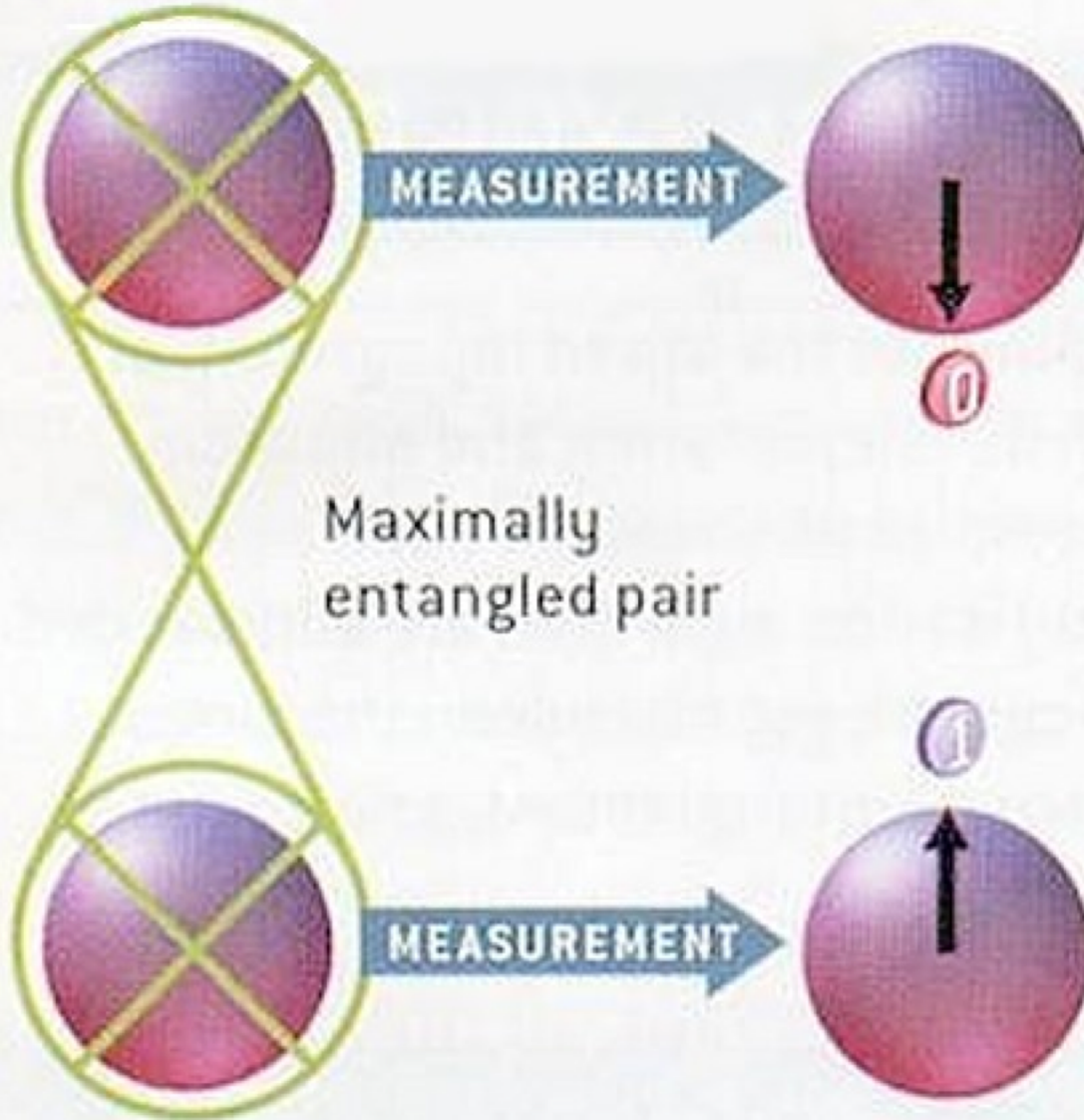
量子論の発展

量子もつれの発見

重力を一般相対性理論で時空の性質として説明することに成功したアインシュタインは、量子論に満足せず、1935年、量子の「もつれ合い」という奇妙な現象を発見する。

「量子もつれ」は、量子のあいだに特別の相関関係が生まれる現象である。アインシュタインは、量子論の矛盾を示すものとして、これに注目していた。

Alice



Maximally
entangled pair

Bob

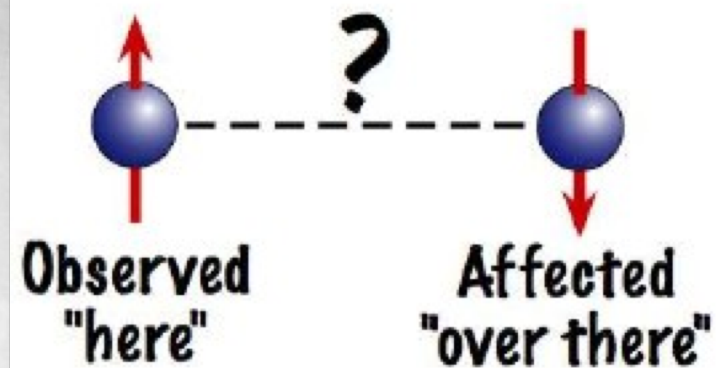
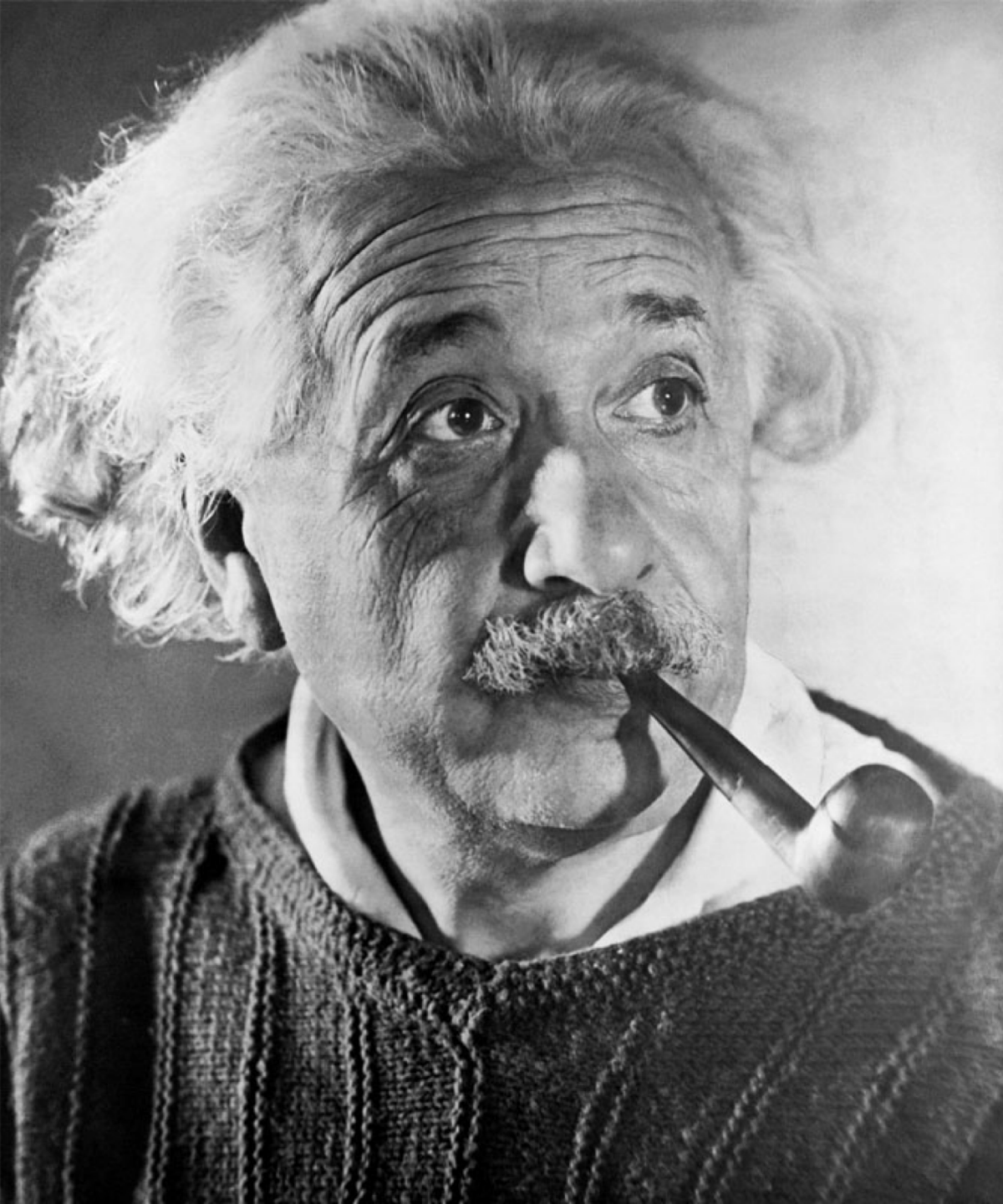
Entangleされた
この二つの量子が
どれだけ遠くに
話されたとしても
このもつれ合いは
解けることがない。

片方の量子の状態
を観測すると、もう
一方の量子の状態
は瞬時にわかる。

アインシュタインは、
これを、

「馬鹿げた遠隔作用」

と呼んだ。



1935年

EPRの逆理

Einstein,
Podolsky,
Rosen

1935年のアインシュタインのEPR論文 エンタングルメントの発見

□ 「神はサイコロを振らない」

アインシュタインが、量子論に懐疑的だったことは、よく知られていると思う。量子論の否定は、現在の我々の目から見れば、明らかに、アインシュタインの「誤り」と言っているものだ。

□ 1935年に、アインシュタインとポドルスキーとローゼンは、概略、次の論文を発表する。(三人の著者の頭文字をとって、EPR論文と呼ばれる。) **彼が、次の論文で量子論の中に見つけた「矛盾」は、当時の物理学者の誰も気がつかなかった深いものだった。**

□ "Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete ?" 「物理的な実在の量子力学の記述は、完全なものと考えることができるか？」 <https://goo.gl/qAWacP>

EPR論文を報ずる1935年のニューヨークタイムズ紙

EINSTEIN ATTACKS QUANTUM THEORY

**Scientist and Two Colleagues
Find It Is Not 'Complete'
Even Though 'Correct.'**

SEE FULLER ONE POSSIBLE

**Believe a Whole Description of
'the Physical Reality' Can Be
Provided Eventually.**

1935年のアインシュタインのEPR論文 エンタングルメントの発見

- アインシュタインが発見した、量子力学の「矛盾」を、「EPRパラドックス」という。これに「エンタングルメント」という名前をつけたのは、シュレディンガーらしい。
- 今日では、エンタングルメントは、パラドックスどころか、量子論の基礎を構成するもっとも基本的な前提となっている。
- ただ、このエンタングルメントという奇妙な現象を、誰よりも先に発見したのは、他ならぬアインシュタインであったことは、興味深いことである。

But in his final attack Einstein pointed to something so deep, so counterintuitive, so troubling, and yet so exciting, that at the beginning of the twenty-first century it has returned to fascinate theoretical physicists. Bohr's only answer to Einstein's last great discovery—the discovery of entanglement—was to ignore it.

Leonard Susskind

量子論の正しさの実証

1964年 Bellの定理 アインシュタインの「隠れた変数」の否定

ON THE EINSTEIN PODOLSKY ROSEN PARADOX*

J. S. BELL[†]

Department of Physics, University of Wisconsin, Madison, Wisconsin

(Received 4 November 1964)

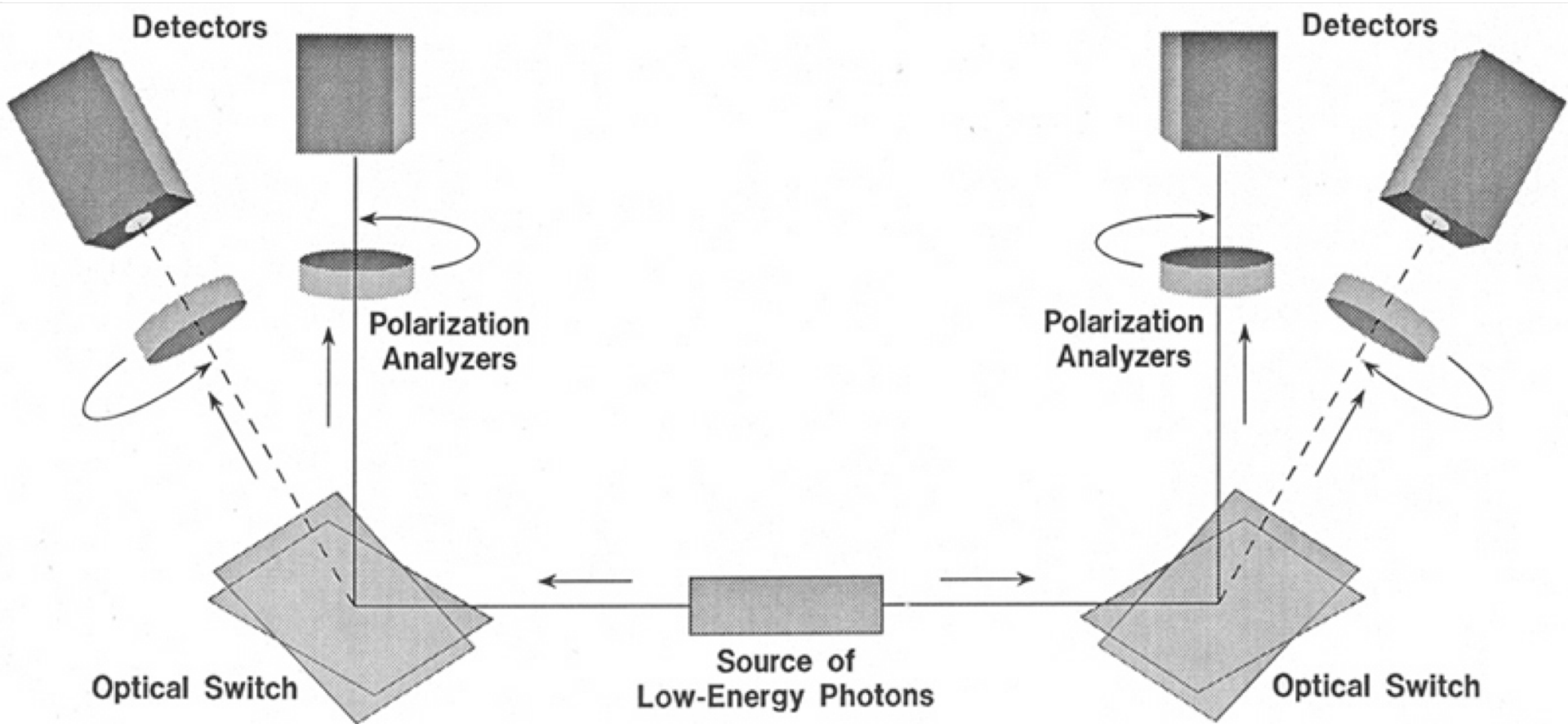
I. Introduction

THE paradox of Einstein, Podolsky and Rosen [1] was advanced as a theory which could not be a complete theory but should be supplemented by additional variables were to restore to the theory causality and locality [2]. In this paper it is mathematically and shown to be incompatible with the statistical predictions of the requirement of locality, or more precisely that the result of a measurement on a system by operations on a distant system with which it has interacted in the past is independent of the choice of such operations. There have been attempts [3] to show that even without such assumptions, but with the assumption no “hidden variable” interpretation of quantum mechanics is possible. This has been examined elsewhere [4] and found wanting. Moreover, a hidden variable quantum theory [5] has been explicitly constructed. That particular interpretation is not local in structure. This is characteristic, according to the result to be proved here, of any theory which reproduces exactly the quantum mechanical predictions.



<https://goo.gl/wyv7B>

1982年 Aspectの実験

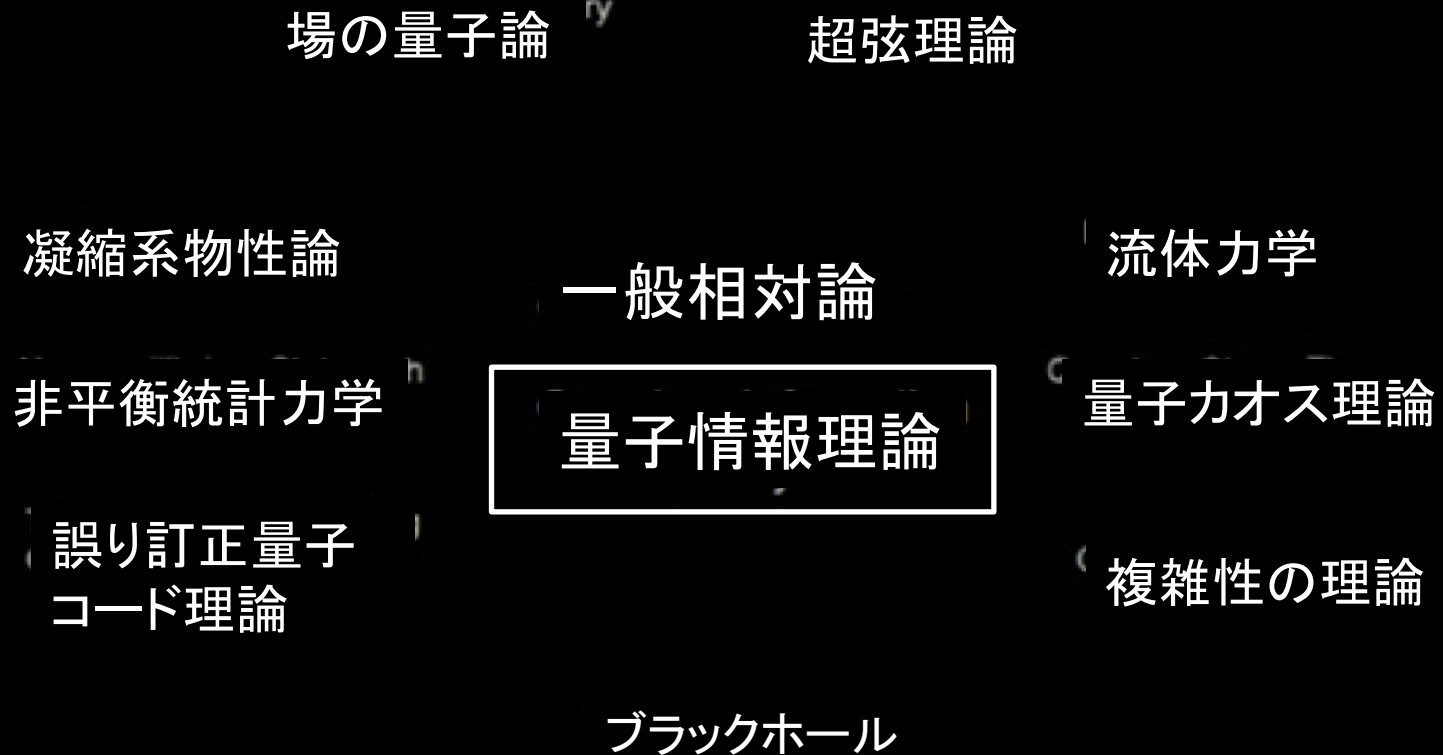


Bellの定理が成り立っていることの実験での確認

物理学の現在

量子コンピュータの話題とは別に、物理学の中で、量子情報理論に対する関心が高まっている。

現代物理学の俯瞰図 by Susskind



Susskind "Entanglement and Complexity: Gravity and Quantum Mechanics"
<https://goo.gl/J0wSkf>

量子多体系の物理
(場の理論、物性理論、統計力学, 可解系)

AdS/CFT
(ホログラフィー)



重力理論
(超弦理論)

量子エンタングルメント
テンソルネットワーク

量子情報理論
(情報幾何)



BH情報問題

高柳匡 「重力理論と量子エンタングルメント」
<https://goo.gl/kRPcNI>

量子論と量子情報理論

量子力学と量子情報理論

- ❑ 量子力学は、物理学の一分野である。それは、自然の実在的な物質を対象として、物質の運動法則の解明を目指す。
- ❑ 量子ゲート型の量子コンピュータの基礎理論に限るならば、それが主要な対象としているのは、二つの状態の重ね合わせであるqubitから構成される抽象的な系である。その理論構造は、比較的、単純なものである。小論が扱うのは、その範囲である。
- ❑ 量子情報理論は、量子論から派生したものである。ただ、量子情報理論の応用は、量子ゲート型の量子コンピュータの基礎に限られているわけではない。
- ❑ 近年の物理学では、ブラックホールの情報問題や、エンタングルメントのエントロピー論が、大きな関心を集めている。それは、量子情報理論を基礎理論として、物理学を再構成しようとする流れが生まれているように見える。

qubitを理解する三つの原理

ここでは、問題を大幅に単純化して、次の三つの原理で、量子コンピュータの基礎を述べて見ようと思う。

1. 重ね合わせの原理
2. 観測の原理
3. ユニタリー発展の原理

重ね合わせの原理

古典bitの状態は、0か1で表される。
量子bitの状態は、二つの複素数のペア、すなわち二次元のベクトルで表現される。これを「重ね合わせ」という

bitの状態 = 0か1



qubitの状態 = $\begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix}$ (= 二次元の複素ベクトル)

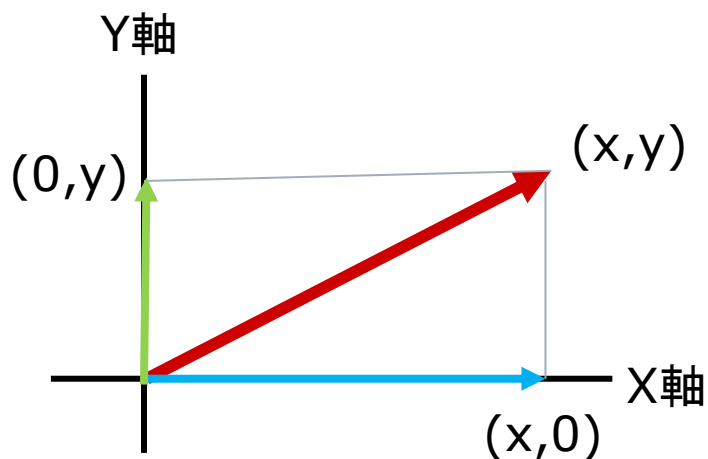
ただし、 c_0, c_1 は複素数で、 $|c_0|^2 + |c_1|^2 = 1$

一つのbitは、0か1の二つの状態しかとらないが、
一つのqubitは、無限に多くの状態を取りうる

重ね合わせ

qubitは、二つの状態の和として表される

$$\begin{aligned}\text{qubitの状態} &= \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_0 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ c_1 \end{pmatrix} \\ &= c_0 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + c_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}\end{aligned}$$



$$\begin{aligned}(x,y) &= \overset{\text{x軸方向の成分}}{\color{blue}(x,0)} + \overset{\text{y軸方向の成分}}{\color{green}(0,y)} \\ &= \underset{\text{x軸方向の単位成分}}{\color{blue}x}(1,0) + \underset{\text{y軸方向の単位成分}}{\color{green}y}(0,1)\end{aligned}$$

重ね合わせ

qubitは、二つの状態の和として表される

$$\text{qubitの状態} = \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix} = c_0 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + c_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$


ベクトル空間の「基底」

ここで、 $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ を $|0\rangle$, $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ を $|1\rangle$ で表すと

$$\text{qubitの状態} = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle$$

$$\text{ただし、}|c_0|^2 + |c_1|^2 = 1$$

と表現できる。

古典Bit

0か1

0



1

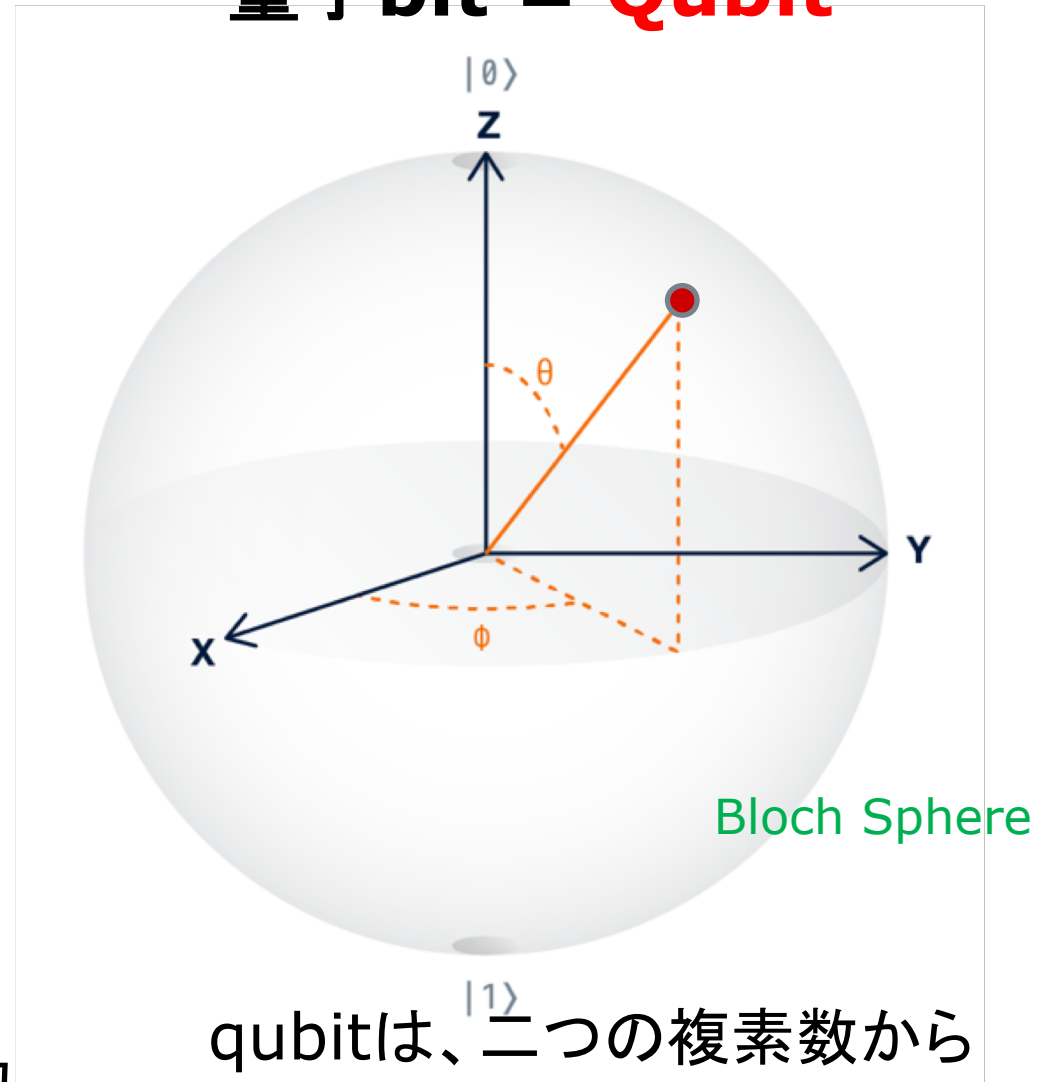


Bitは、0または1
どちらかの状態を取る

bitは、整数値を取り、離散的

qubitを決める複素数 c_0, c_1 は、それぞれ2つの実数からなるが、 $|c_0|^2 + |c_1|^2 = 1$ という条件があるので、自由度は一つ減って、qubitを決めるのは、3つの実数である。

量子bit = Qubit



qubitは、 $|0\rangle, |1\rangle$ の二つの複素数から
なり、連続的

もっと一般に、量子の状態は、
n次元の複素数ベクトルで表現される

$$\text{量子の状態} = \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_{n-1} \end{pmatrix}$$

ただし、 $c_0, c_1, \dots, c_{n-1}$ は複素数

こうした複素数ベクトル空間をヒルベルト空間という

もっと一般に、量子の状態は、
n個の状態の重ね合わせとして表現される

n次元複素ベクトル空間の基底を $|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, \dots, |n-1\rangle$
とすると、

$$\text{量子の状態} = \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_{n-1} \end{pmatrix} \text{ は、}$$

$$c_0|0\rangle + c_1|1\rangle + \dots + c_{n-1}|n-1\rangle$$

と表現される。ただし、 $|c_0|^2 + |c_1|^2 + \dots + |c_{n-1}|^2 = 1$

量子の状態を、 Σ を使って表す

総和の記号 Σ を使うと、量子の状態を見やすく表現できる。

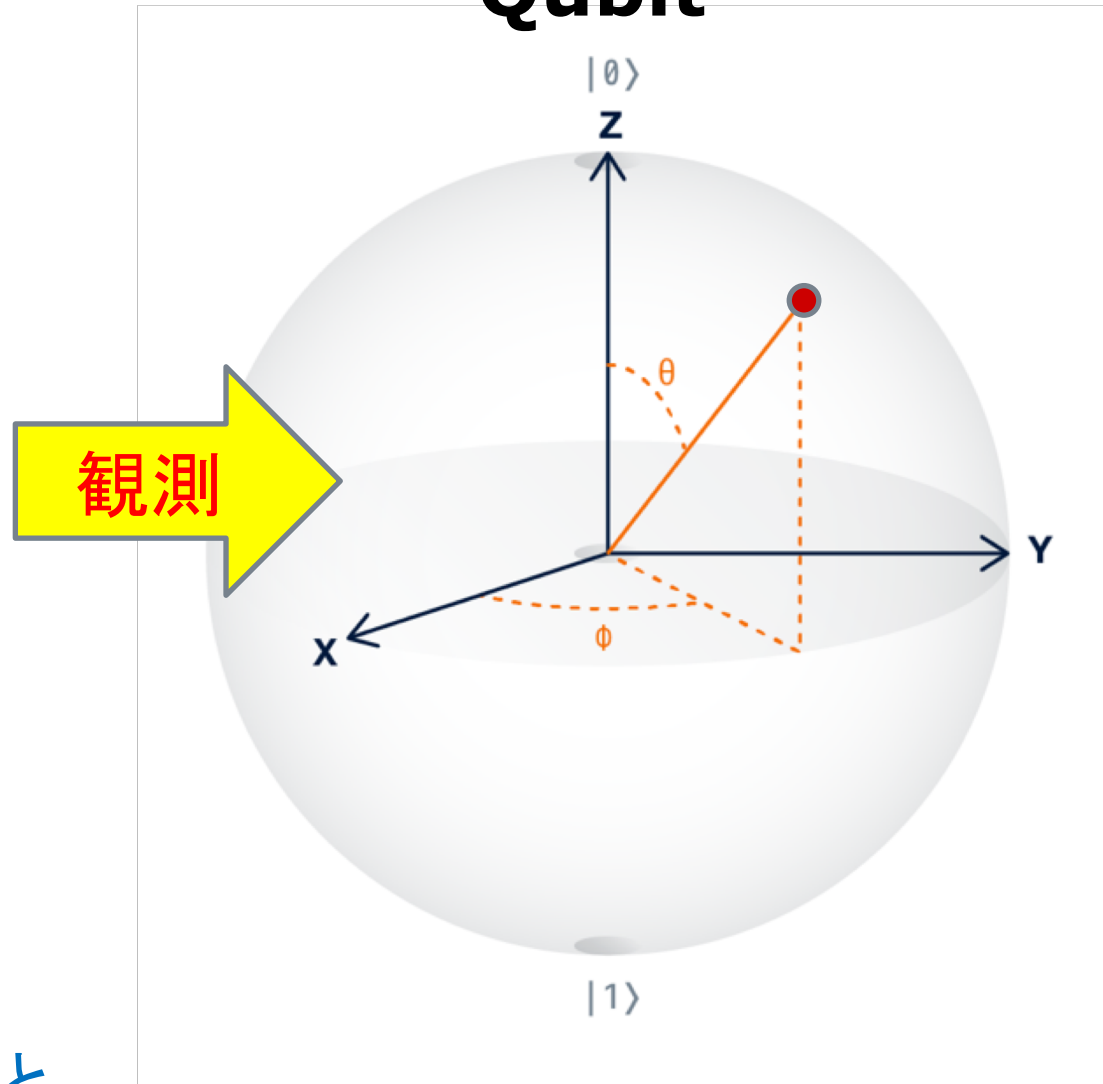
$$\text{量子の状態} = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle + \dots + c_{n-1}|n-1\rangle$$

$$= \sum_{k=0}^{n-1} c_k |k\rangle$$

$$\text{ただし、} \sum_{k=0}^{n-1} |c_k|^2 = 1$$

観測の原理

Qubit

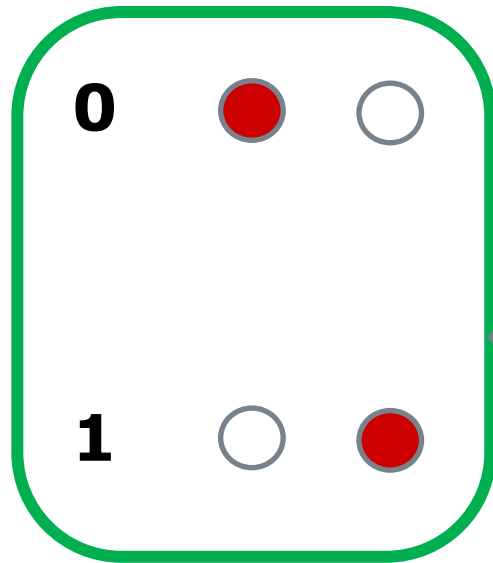


Qubitは、状態 $|0\rangle$ と
状態 $|1\rangle$ の重ね合わせ
の状態を取る

$$|\text{Qubit}\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$$

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 ; \alpha, \beta \in \mathbb{C}$$

観測を行うと、Qubitの
重ね合わせの状態は
失われ、0か1かの情報
が返る。



観測

観測値

Qubit

$\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$
の重ね合わせの
状態は、失われる

この時
0を得る確率は、 $|\alpha|^2$ で、
1を得る確率は、 $|\beta|^2$ で、
与えられる。

$$\alpha^* \alpha + \beta^* \beta = 1 ; \quad \alpha, \beta \in \mathbb{C}$$

観測と観測による状態の変化

- 量子の状態は、直接には、観測できない。
- また、観測によって、系の状態は、観測前とは異なる状態に変化する。(以前の重ね合わせは失われる。)
 - $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ の重ね合わせの状態は、観測によって $|0\rangle$ または $|1\rangle$ の新しい状態に変化する。「崩壊する」
- 新しい状態が観測される確率は、正確に計算することができる。
 - 0を得る確率は、 $|\alpha|^2$ で、
1を得る確率は、 $|\beta|^2$ で、与えられる。

qubitの観測

qubitの状態 $c_0|0\rangle + c_1|1\rangle$ を観測したとする。この時、

状態 $|0\rangle$ が観測される確率は、 $|c_0|^2$ で与えられる。

観測前の状態 $c_0|0\rangle + c_1|1\rangle$ は、新しい状態 $|0\rangle$ に変わる。

状態 $|1\rangle$ が観測される確率は、 $|c_1|^2$ で与えられる。

観測前の状態 $c_0|0\rangle + c_1|1\rangle$ は、新しい状態 $|1\rangle$ に変わる。

これをBornのルールと呼ぶ、

観測によって、重ね合わせの状態は破られる。

一般の量子状態の観測

一般の量子状態 $|\psi\rangle = \sum_{k=0}^{n-1} c_k |k\rangle$ が与えられた時、

状態 $|0\rangle$ が観測される確率は、 $|c_0|^2$ で与えられる。
観測前の状態 $|\psi\rangle$ は、新しい状態 $|0\rangle$ に変わる。

状態 $|1\rangle$ が観測される確率は、 $|c_1|^2$ で与えられる。
観測前の状態 $|\psi\rangle$ は、新しい状態 $|1\rangle$ に変わる。

...

状態 $|k\rangle$ が観測される確率は、 $|c_k|^2$ で与えられる。
観測前の状態 $|\psi\rangle$ は、新しい状態 $|k\rangle$ に変わる。

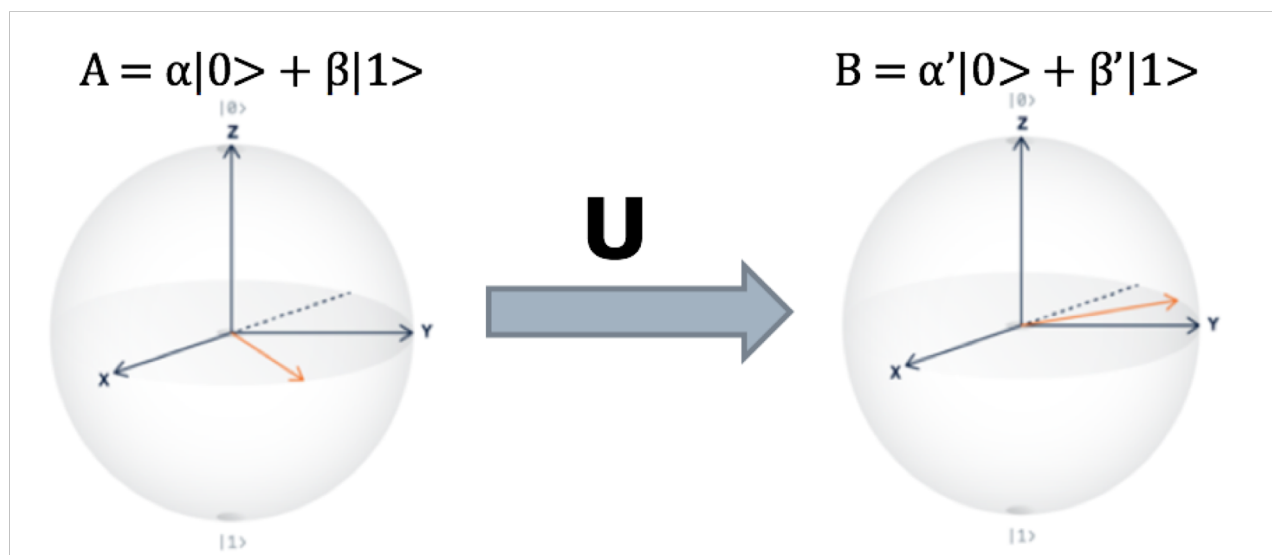
ユニタリ発展の原理

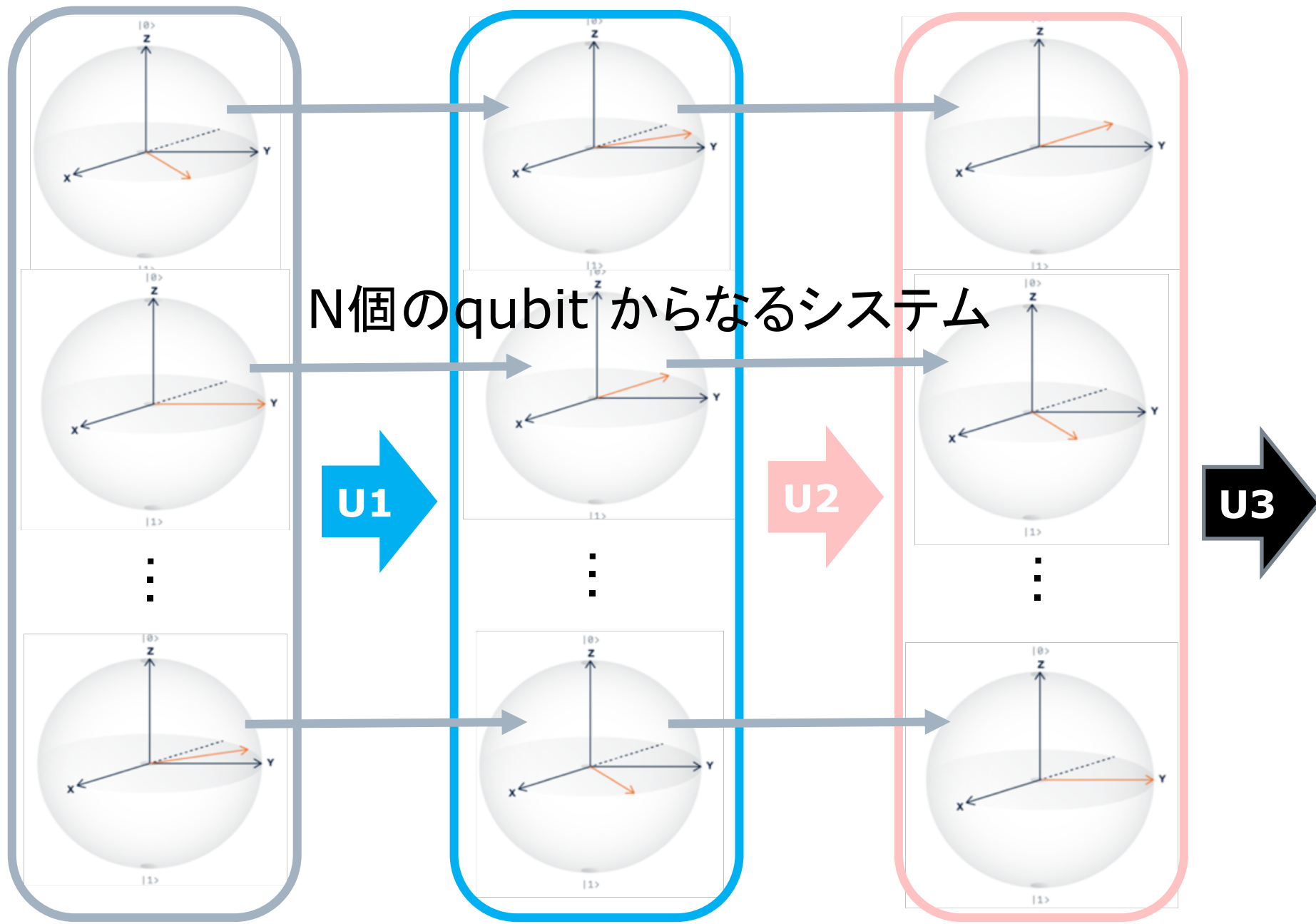
量子の状態の変化

ある量子の状態は、他の状態に変化することができる。
その変化は、「ユニタリ変換」という、ルールに従う。

量子の状態ベクトル $|A\rangle$ は、このユニタリ変換 U によって、他の状態 $|B\rangle$ に変換される。

$$U |A\rangle = |B\rangle$$





補講：ベクトル・行列演算入門

量子コンピュータを理解するのに、 なぜベクトルと行列の計算が必要なのか？

- 量子の状態は、ベクトルとして表現される。
- 量子の状態の変化は、ベクトルの変化として表現される。
- あるベクトルを他のベクトルに変化させる作用を持つものを「演算子」という。
- 演算子は、行列で表現される。

量子の状態Aが状態Bに変わったとしよう。それは、
量子の状態ベクトル $|A\rangle$ が状態ベクトル $|B\rangle$ に変わったということ。
この変化を引き起こした演算子をUとすると、

$$|B\rangle = U(|A\rangle) = U|A\rangle$$

と書くことができる。ここで、 $|A\rangle$, $|B\rangle$ はベクトルで、Uは行列である。

量子コンピュータを理解するのに、 なぜベクトルと行列の計算が必要なのか？

- 例えば、qubitの状態 $\begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix}$ が、 $\begin{pmatrix} c_1 \\ c_0 \end{pmatrix}$ に変わったとしよう。
この変化を起こす演算子(行列)が、 $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ であることは、
次の計算でわかる。

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix}$$

量子の状態の変化は、
行列とベクトルの積で
計算できる！

複素数とその共役

複素数 $z = x + iy$ (x, y は実数)に対して、複素数 $x - iy$ を、その「共役」な複素数といい、 z^* と表す。

この時、次の関係が成り立つ。

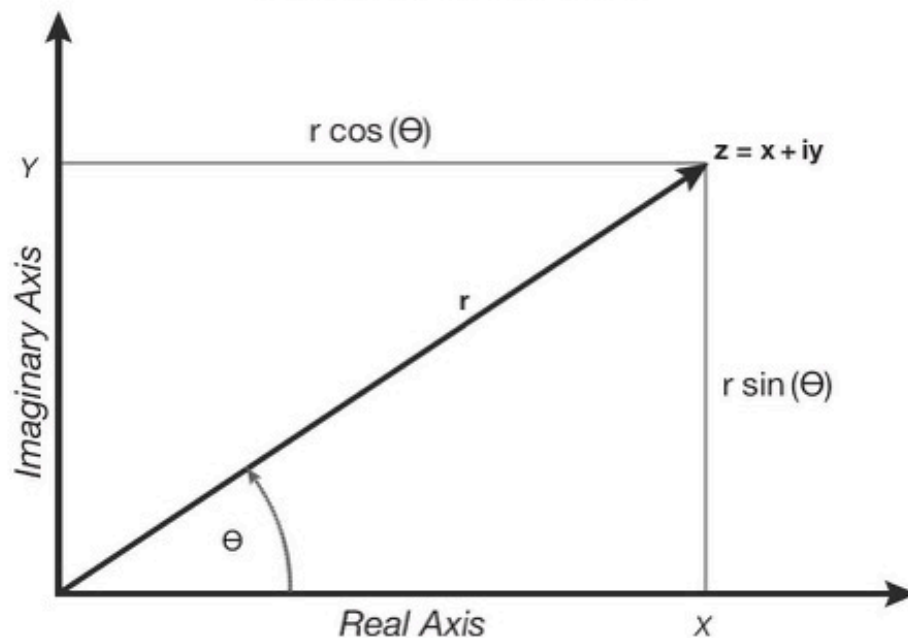
1. z が実数なら、 $z = z^*$
2. $(z_1 + z_2)^* = z_1^* + z_2^*$
3. $(z_1 \cdot z_2)^* = z_1^* \cdot z_2^*$
4. $(z_1/z_2)^* = z_1^*/z_2^*$
5. $z^*z = |z|^2$

複素平面(実数を成分とする)と極座標

$$z = x + iy,$$

$$z^* = x - iy$$

Complex Numbers



$$z = re^{i\theta} = r(\cos \theta + i \sin \theta).$$

$$z^* = re^{-i\theta}$$

複素数を成分とするベクトルの次元と 行ベクトルと列ベクトル

ベクトルの次元は、成分の個数に等しい。

Row = $(a_1 \ a_2 \ a_3 \ \dots \ a_n)$ の形のベクトルを、n次元の複素「行ベクトル」という。ただし、 $a_1, a_2, a_3, \dots, a_n$ は複素数。このことを、 $a_1, a_2, a_3, \dots, a_n \in \mathbb{C}$ で表す。

Column = $\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$ の形のベクトルをn次元の複素「列ベクトル」という。 $b_1, b_2, b_3, \dots, b_n \in \mathbb{C}$

以下では、特に断らない限り、数は、複素数とする。

行ベクトルと列ベクトルのスカラー倍と和

$$\square \quad m (a_1 \ a_2 \ a_3 \ \dots \ a_n) = (ma_1 \ ma_2 \ ma_3 \ \dots \ ma_n)$$

$$\square \quad m \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} mb_1 \\ mb_2 \\ mb_3 \\ \vdots \\ mb_n \end{pmatrix}$$

$$\square \quad (a_1 \ a_2 \ a_3 \ \dots \ a_n) + (b_1 \ b_2 \ b_3 \ \dots \ b_n) = (a_1+b_1 \ \dots \ a_n+b_n)$$

$$\square \quad \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 + b_1 \\ a_2 + b_2 \\ a_3 + b_3 \\ \vdots \\ a_n + b_n \end{pmatrix}$$

行ベクトルと列ベクトルの内積

- 行ベクトルと列ベクトルの次数が等しい時、その「内積」を、次の式で定義する。

- $\text{Row} \cdot \text{Column} = (a_1 \ a_2 \ a_3 \ \dots \ a_n) \cdot \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$

$$= a_1 b_1 + a_2 b_2 + a_3 b_3 + \dots + a_n b_n$$

$$= \sum_{i=1}^n a_i b_i$$

行列のスカラー倍

$$\lambda A = \lambda \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nm} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda a_{11} & \lambda a_{12} & \cdots & \lambda a_{1m} \\ \lambda a_{21} & \lambda a_{22} & \cdots & \lambda a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \lambda a_{n1} & \lambda a_{n2} & \cdots & \lambda a_{nm} \end{pmatrix}$$

行列の和

□ 二つの行列は、それが同じ型を持つならば互いに加えることができる。 m 行 n 列の行列同士の和は、成分ごとの和である。

□ 例

$$\begin{pmatrix} 5 & 6 \\ -7 & 8 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & -2 \\ 3 & -4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5+1 & 6+(-2) \\ -7+3 & 8+(-4) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 & 4 \\ -4 & 4 \end{pmatrix}$$

行列と列ベクトルの積

n行m列の行列と m次の列ベクトルの積は、n 次の列ベクトルになる。

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nm} \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix} \Rightarrow AB = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nm} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix}$$
$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nm} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix}$$

c_n は、行列Aのn行目とBとの内積: $a_{n1}b_1 + a_{n2}b_2 + \dots + a_{nm}b_m$

行列の積

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nm} \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1p} \\ b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{m1} & b_{m2} & \cdots & b_{mp} \end{pmatrix}$$

$$AB = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & \cdots & c_{1p} \\ c_{21} & c_{22} & \cdots & c_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{n1} & c_{n2} & \cdots & c_{np} \end{pmatrix}$$

c_{ij} は、行列Aの*i*行目 $(a_{i1} \ a_{i2} \ a_{i3} \ \dots \ a_{im})$ と
行列Bの*j*列目 $(b_{j1} \ b_{j2} \ b_{j3} \ \dots \ b_{jm})^T$ との内積:
 $c_{ij} = a_{i1}b_{1j} + a_{i2}b_{2j} + \dots + a_{im}b_{mj}$

行列の積

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nm} \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1p} \\ b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{m1} & b_{m2} & \cdots & b_{mp} \end{pmatrix}$$

$$AB = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & \cdots & c_{1p} \\ c_{21} & c_{22} & \cdots & c_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{n1} & c_{n2} & \cdots & c_{np} \end{pmatrix}$$

行列Aのi行目と行列Bのj列目との内積が、積ABの要素 c_{ij}

行列の積

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nm} \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1p} \\ b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{m1} & b_{m2} & \cdots & b_{mp} \end{pmatrix}$$

$$AB = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & \cdots & c_{1p} \\ c_{21} & c_{22} & \cdots & c_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{n1} & c_{n2} & \cdots & c_{np} \end{pmatrix}$$

行列Aのi行目と行列Bのj列目との内積が、積ABの要素 c_{ij}

行列の積

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nm} \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1p} \\ b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{m1} & b_{m2} & \cdots & b_{mp} \end{pmatrix}$$

$$AB = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & \cdots & c_{1p} \\ c_{21} & c_{22} & \cdots & c_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{n1} & c_{n2} & \cdots & c_{np} \end{pmatrix}$$

行列Aのi行目と行列Bのj列目との内積が、積ABの要素 c_{ij}

行列の積

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nm} \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1p} \\ b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{m1} & b_{m2} & \cdots & b_{mp} \end{pmatrix}$$

$$AB = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & \cdots & c_{1p} \\ c_{21} & c_{22} & \cdots & c_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{n1} & c_{n2} & \cdots & c_{np} \end{pmatrix}$$

行列Aのi行目と行列Bのj列目との内積が、積ABの要素 c_{ij}

行列の積

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nm} \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1p} \\ b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{m1} & b_{m2} & \cdots & b_{mp} \end{pmatrix}$$

$$AB = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & \cdots & c_{1p} \\ c_{21} & c_{22} & \cdots & c_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{n1} & c_{n2} & \cdots & c_{np} \end{pmatrix}$$

行列Aのi行目と行列Bのj列目との内積が、積ABの要素 c_{ij}

行列の積

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nm} \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1p} \\ b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{m1} & b_{m2} & \cdots & b_{mp} \end{pmatrix}$$

$$AB = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & \cdots & c_{1p} \\ c_{21} & c_{22} & \cdots & c_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{n1} & c_{n2} & \cdots & c_{np} \end{pmatrix}$$

行列Aのi行目と行列Bのj列目との内積が、積ABの要素 c_{ij}

行列の積

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nm} \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1p} \\ b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{m1} & b_{m2} & \cdots & b_{mp} \end{pmatrix}$$

$$AB = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & \cdots & c_{1p} \\ c_{21} & c_{22} & \cdots & c_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{n1} & c_{n2} & \cdots & c_{np} \end{pmatrix}$$

行列Aのi行目と行列Bのj列目との内積が、積ABの要素 c_{ij}

行列の積

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nm} \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1p} \\ b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{m1} & b_{m2} & \cdots & b_{mp} \end{pmatrix}$$

$$AB = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & \cdots & c_{1p} \\ c_{21} & c_{22} & \cdots & c_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{n1} & c_{n2} & \cdots & c_{np} \end{pmatrix}$$

行列Aのi行目と行列Bのj列目との内積が、積ABの要素 c_{ij}

行列の積

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nm} \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1p} \\ b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{m1} & b_{m2} & \cdots & b_{mp} \end{pmatrix}$$

$$AB = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & \cdots & c_{1p} \\ c_{21} & c_{22} & \cdots & c_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{n1} & c_{n2} & \cdots & c_{np} \end{pmatrix}$$

行列Aのi行目と行列Bのj列目との内積が、積ABの要素 c_{ij}

行列の転置 Transpose

$$A = \begin{pmatrix} \boxed{a_{11}} & \dots & \boxed{a_{1n}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \boxed{a_{m1}} & \dots & \boxed{a_{mn}} \end{pmatrix} \iff A^T = \begin{pmatrix} \boxed{a_{11}} & \dots & \boxed{a_{m1}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \boxed{a_{1n}} & \dots & \boxed{a_{mn}} \end{pmatrix}$$

$$A = \begin{pmatrix} \boxed{a_{11}} & \dots & \boxed{a_{1n}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \boxed{a_{m1}} & \dots & \boxed{a_{mn}} \end{pmatrix} \iff A^T = \begin{pmatrix} \boxed{a_{11}} & \dots & \boxed{a_{m1}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \boxed{a_{1n}} & \dots & \boxed{a_{mn}} \end{pmatrix}$$

行列の転置の例 Transpose

例えば、 $A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 7 & 8 & 9 \end{pmatrix}$ の時、

$$A^T = \begin{pmatrix} 1 & 4 & 7 \\ 2 & 5 & 8 \\ 3 & 6 & 9 \end{pmatrix} \text{ である。}$$

行列Aのすべての要素の、複素共役をとることを A^* で表す。

例えば、 $B = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3i \\ 4 & 5+i & 6 \\ -7i & 8 & 9 \end{pmatrix}$ の時、

$$B^* = \begin{pmatrix} 1 & 2 & -3i \\ 4 & 5-i & 6 \\ 7i & 8 & 9 \end{pmatrix} \text{ である。}$$

行列 M の複素共役 $M^\dagger$

行列 M の複素共役を、 M の転置行列 M^T の各要素の複素共役をとったものとし、 $M^\dagger$ で表す。

$$M^\dagger = [M^T]^* .$$

行列 M の複素共役 $M^\dagger$ の例

例えば、 $B = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3i \\ 4 & 5+i & 6 \\ -7i & 8 & 9 \end{pmatrix}$ の時、

$$B^T = \begin{pmatrix} 1 & 4 & -7i \\ 2 & 5+i & 8 \\ 3i & 6 & 9 \end{pmatrix}$$

$$B^\dagger = [B^T]^* = \begin{pmatrix} 1 & 4 & 7i \\ 2 & 5-i & 8 \\ -3i & 6 & 9 \end{pmatrix}$$

演習問題 1-1 複素共役

次の α の複素共役 α^* を求め、与えられた計算を行え。

1. $\alpha=1+2i$ の時、 $\alpha^* \alpha$ を計算せよ。
2. $\alpha=\sqrt{2}+3i$ の時、 $\alpha^* \alpha$ を計算せよ。
3. $\alpha=a+bi$ の時、 $\alpha^* \alpha$ を計算せよ。
4. $\alpha=\frac{2}{1+i}$ の時、 $\alpha^* \alpha$ を計算せよ。
5. $\alpha=\cos\theta+i\sin\theta$ の時、 $\alpha^* \alpha$ を計算せよ。
6. $\alpha=e^{i\theta}$ の時、 $\alpha^* \alpha$ を計算せよ。

演習問題 1-2 列ベクトルの和

次の計算を行え。

1. $\begin{pmatrix} 2 \\ 3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix}$

2. $2\begin{pmatrix} 2 \\ 3 \end{pmatrix} + 3\begin{pmatrix} 0 \\ -i \end{pmatrix}$

3. $a\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + b\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

4. $x\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + y\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + z\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

5. $u\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} + a\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + m\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + r\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$

演習問題 1-3 行列の和

次の計算を行え。

1. $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

2. $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$

3. $x \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + y \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + z \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

演習問題 1-4 ベクトルの内積

次の内積の計算を行え。

1. $(1 \ 0) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

2. $(1 \ 0) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$

3. $(1 \ 2 \ 3) \begin{pmatrix} 3 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$

4. $(0 \ 2+i \ \sqrt{2}) \begin{pmatrix} 3 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$

5. $(1-i \ 2 \ 3) \begin{pmatrix} 3 \\ i+1 \\ -1 \end{pmatrix}$

演習問題 1-5 行列とベクトルの積

次の計算を行え。

1. $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$

2. $\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$

3. $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$

4. $\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$

演習問題 1-6 行列の積 Pauli行列の性質

$[A, B] = AB - BA$ 、 $\{A, B\} = AB + BA$ とする。

$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $Y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$, $Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ のとき、次の計算を行え。

1. $[X, Y]$ を計算し、結果を Z で表せ。
2. $\{X, Y\}$ を計算せよ。
3. $[Y, Z]$ を計算し、結果を X で表せ。
4. $\{Y, Z\}$ を計算せよ。
5. $[Z, X]$ を計算し、結果を Y で表せ。
6. $\{Z, X\}$ を計算せよ。

演習問題 1-7 行列の複素共役

$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $Y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$, $Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ のとき、
次の計算を行え。

1. $X = X^+$ か？
2. XX^+ を計算せよ。
3. $Y = Y^+$ か？
4. YY^+ を計算せよ。
5. $Z = Z^+$ か？
6. ZZ^+ を計算せよ。

演習課題 1-8 Σ と添字の展開

1. $\sum_{i=0}^2 a_i$ を、シグマを使わず、明示的に和の形で表せ。
2. $\sum_{i=0}^3 a_i x_i$ を、シグマを使わず、明示的に和の形で表せ。
3. $\sum_{i=0}^4 \frac{1}{x^i}$ を、シグマを使わず、明示的に和の形で表せ。
4. $(\sum_{i=1}^3 c_i x_i)(\sum_{k=1}^2 d_k y_k)$ を、シグマを使わず、明示的に和の形で表せ。
5. $x_n = \sum_{k=0}^n x^k$ として、 n が、 $0, 1, 2, 3$ の値をとる時、 x_n を、4つの式 x_0, x_1, x_2, x_3 として、シグマを使わず、明示的に和の形で表せ。

演習課題 1-9 添字の展開

$$\sum_j m_{kj} \alpha_j = \beta_k$$

で、 j, k が、 $1, 2$ を動くとき、 β_1, β_2 を m_{kj}, α_j で表せ。

また、この結果を次の行列の計算と比較せよ。

$$\begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix}$$

同様に、 j, k が、 $1, 2, 3$ を動くとき、

$\beta_1, \beta_2, \beta_3$ を m_{kj}, α_j で表せ。

また、この結果を次の行列の計算と比較せよ。

$$\begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & m_{13} \\ m_{21} & m_{22} & m_{23} \\ m_{31} & m_{32} & m_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \beta_3 \end{pmatrix}$$

重ね合わせの記述とket記法

ここで学ぶこと

1. 量子の状態は、複素ベクトルの重ね合わせで表現される。
2. 量子の状態の記述には、ket記法が極めて有用である。
3. $\langle \text{bra} | \text{ket} \rangle$ で内積を、 $|\text{ket}\rangle \langle \text{bra}|$ で外積を表す。

重ね合わせの原理

- qubitの状態は、二つの状態ベクトルの重ね合わせとして、2次元の複素数ベクトルで表現される。
- 一般に、量子の状態は、 n 個の状態ベクトルの重ね合わせとして、 n 次元の複素数ベクトルで表現される。

列ベクトルのket記法 $|Ket\rangle$

□ 列ベクトルを、 $|ID\rangle$ で表す。ここで、IDは列ベクトルの名前で、任意の文字列を用いることができる。

例

$$\square |A\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}; |B\rangle = \begin{pmatrix} 3 \\ 0 \\ -i \end{pmatrix}; |\Psi\rangle = \begin{pmatrix} 1 - i\sqrt{2} \\ 2i \end{pmatrix}$$

$$\square |4次元\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{pmatrix}; |maru\rangle = \begin{pmatrix} 2 + 3i \\ 1 - 2i \\ 1 \end{pmatrix};$$

$$\square |0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}; |+\rangle = \begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ \sqrt{2} \end{pmatrix}; |-\rangle = \begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ -\sqrt{2} \end{pmatrix};$$

Ketベクトルの満たす性質

- 二つのketベクトルの和は、ketベクトルである。

$$|A\rangle + |B\rangle = |C\rangle$$

- ketベクトルの和は、可換である。

$$|A\rangle + |B\rangle = |B\rangle + |A\rangle$$

- ketベクトルの和は、結合律を満たす。

$$(|A\rangle + |B\rangle) + |C\rangle = |A\rangle + (|B\rangle + |C\rangle)$$

- 次のような 0 ベクトル、 $-|A\rangle$ ketベクトルが存在する。

$$|A\rangle + 0 = |A\rangle$$

$$|A\rangle + (-|A\rangle) = 0$$

- 任意の複素数 z, w に対して、

$$z|A\rangle = |zA\rangle = |B\rangle$$

$$z(|A\rangle + |B\rangle) = z|A\rangle + z|B\rangle$$

$$(z + w)|A\rangle = z|A\rangle + w|A\rangle$$

$x, y, z, \dots$ 等を含む式の計算と同じように、ketを変数記号とみて、普通に計算すればいいということである。

行ベクトルの bra 記法 $\langle \text{Bra} |$

□ 列ベクトル $|ID\rangle$ に対して、同じIDを持つ行ベクトル $\langle ID|$ を次のルールで対応させる。すなわち、行ベクトルを列ベクトルに変えて、各要素の複素共役をとる。

□ 例えば、

$$|A\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \alpha_4 \\ \alpha_5 \end{pmatrix} \quad \text{なら、} \quad \langle A| = \left(\alpha_1^* \quad \alpha_2^* \quad \alpha_3^* \quad \alpha_4^* \quad \alpha_5^* \right)$$

Ket と Bra の対応関係

$$\square |A\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} \longleftrightarrow \langle A| = (1 \ 2)$$

$$\square |B\rangle = \begin{pmatrix} 3 \\ 0 \\ -i \end{pmatrix} \longleftrightarrow \langle B| = (3 \ 0 \ i)$$

$$\square |\Psi\rangle = \begin{pmatrix} 1 - i\sqrt{2} \\ 2i \end{pmatrix} \longleftrightarrow \langle \Psi| = (1 + i\sqrt{2} \ -2i)$$

$$\square |\text{maru}\rangle = \begin{pmatrix} 2 + 3i \\ 1 - 2i \\ 1 \end{pmatrix} \longleftrightarrow \langle \text{maru}| = (2 - 3i \ 1 + 2i \ 1)$$

$$\square |0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \longleftrightarrow \langle 0| = (1 \ 0)$$

$$\square |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \longleftrightarrow \langle 1| = (0 \ 1)$$

内積の $\langle \text{bra} | \text{ket} \rangle$ での表現

内積 $\langle \text{Bra} | \text{Ket} \rangle$

- 行ベクトル $\langle \text{Bra} |$ と列ベクトル $|\text{Ket}\rangle$ の次元が同じ時、
 $\langle \text{Bra} |$ と $|\text{Ket}\rangle$ の内積を $\langle \text{Bra} | \text{Ket} \rangle$ で表す。二重の縦棒の一つを省略して、 $\langle \text{Bra} | \text{Ket} \rangle$ と書いても良い。例えば、

$$|A\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \alpha_4 \\ \alpha_5 \end{pmatrix} \text{ で、 } |B\rangle = \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \beta_3 \\ \beta_4 \\ \beta_5 \end{pmatrix} \text{ なら、}$$

$$\langle B|A \rangle = \begin{pmatrix} \beta_1^* & \beta_2^* & \beta_3^* & \beta_4^* & \beta_5^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \alpha_4 \\ \alpha_5 \end{pmatrix}$$

$$= \beta_1^* \alpha_1 + \beta_2^* \alpha_2 + \beta_3^* \alpha_3 + \beta_4^* \alpha_4 + \beta_5^* \alpha_5.$$

内積の性質

$$\square |A\rangle + |B\rangle \longleftrightarrow \langle A| + \langle B|$$

$$\square z|A\rangle \longleftrightarrow \langle A|z^*$$

$$\square \langle C| (|A\rangle + |B\rangle) = \langle C|A\rangle + \langle C|B\rangle$$

$$\square \langle B|A\rangle = \langle A|B\rangle^*$$

内積の計算例

$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $|1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ とする。

$\langle 0| = (1 \ 0)$, $\langle 1| = (0 \ 1)$ だから、
次のような計算が成り立つ。

1. $\langle 0|0\rangle = (1 \ 0) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 1 \cdot 1 + 0 \cdot 0 = 1$

2. $\langle 0|1\rangle = (1 \ 0) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 1 \cdot 0 + 0 \cdot 1 = 0$

3. $\langle 1|0\rangle = (0 \ 1) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0 \cdot 1 + 1 \cdot 0 = 0$

4. $\langle 1|1\rangle = (0 \ 1) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0 \cdot 0 + 1 \cdot 1 = 1$

正規直交基底 $\langle i | j \rangle = \delta_{ij}$

ベクトル空間の基底ベクトル

n 次元のベクトル空間 V_n の、任意のベクトル $|A\rangle$ が、特定の n 個のベクトル $|B_i\rangle$ ($0 \leq i < n$)で、次の形で一意に表現される時、 $|B_i\rangle$ は、 V_n の「基底ベクトル」と言われる。

$$|A\rangle = a_0|B_0\rangle + a_1|B_1\rangle + \dots + a_{n-1}|B_{n-1}\rangle$$

あるいは、

$$|A\rangle = \sum_{i=0}^{n-1} a_i |B_i\rangle$$

$|B_i\rangle = |i\rangle$ と表記すれば

$$|A\rangle = \sum_{i=0}^{n-1} a_i |i\rangle$$

ベクトル空間の基底の例

例) 2次元の複素ベクトル空間 V_2 の任意のベクトル $|A\rangle$ は、次の形をしている。

$$|A\rangle = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

この時、 $|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $|1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ とすれば、
任意の x, y について、

$$\begin{aligned} |A\rangle = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} &= x \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + y \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= x|0\rangle + y|1\rangle \text{ である。} \end{aligned}$$

よって、 $|0\rangle, |1\rangle$ は、 V_2 の基底 である。

ベクトル空間の基底の例

例) 3次元のベクトル空間 V_3 の任意のベクトル $|A\rangle$ は、次の形をしている。

$$|A\rangle = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

この時、 $|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$, $|1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $|2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ とすれば、

任意の x, y, z について、

$$|A\rangle = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = x \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + y \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + z \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$= x|0\rangle + y|1\rangle + z|2\rangle \text{ である。}$$

よって、 $|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle$ は、 V_3 の基底 である。

ベクトルの直交と正規性

$\langle B|A\rangle = 0$ の時、ベクトル $|A\rangle, |B\rangle$ は直交しているという。

$\langle B|A\rangle = 0$ なら、 $\langle A|B\rangle = 0$ である。なぜなら、両辺の複素共役をとって、 $\langle B|A\rangle^* = 0$ だから。

$\langle A|A\rangle = 1$ の時、ベクトル $|A\rangle$ は、正規化されているという。

$|A\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$ の時、 $\langle A|A\rangle = 1$ の条件は、

$$\langle A|A\rangle = (\alpha^* \ \beta^*) \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \alpha^* \alpha + \beta^* \beta = 1 \text{ に等しい。}$$

クロネッカーの記号 δ_{ij}

□ n 次元ベクトル空間の基底を、 $|0\rangle, |1\rangle, \dots, |n-1\rangle$ で表そう。この基底が直交正規基底である条件は、次のように書ける。

■ 直交性から、 $i \neq j$ の時、 $\langle i | j \rangle = 0$

■ 正規性から、 $\langle i | i \rangle = 1$

□ 次のクロネッカーの記号 $\delta_{ij} = \begin{cases} i \neq j \text{ の時} & 0 \\ i = j \text{ の時} & 1 \end{cases}$

を導入すると、基底が直交正規である条件は、次のようにかける。

$$\langle i | j \rangle = \delta_{ij}$$

状態の自分自身との内積

$$\begin{aligned}\langle\psi|\psi\rangle &= \left(\sum_j a_j^* \langle j|\right) \left(\sum_k a_k |k\rangle\right) \\ &= \sum_{j,k} a_j^* a_k \langle j|k\rangle \\ &= \sum_{j,k} a_j^* a_k \delta_{jk} \\ &= \sum_k |a_k|^2 = 1\end{aligned}$$

$$|\phi\rangle = \sum_k b_k |k\rangle.$$

$$\langle\psi|\phi\rangle = \sum_{j,k} a_j^* b_k \langle j|k\rangle = \sum_k a_k^* b_k$$

成分を取り出す

成分を計算する

- 正規直交の基底を $|0\rangle, |1\rangle, \dots, |n-1\rangle$ とすると、任意のベクトル $|A\rangle$ は、次の式で表現される。この時、 α_i を、基底 $|i\rangle$ の成分という。

$$|A\rangle = \sum_i \alpha_i |i\rangle.$$

- この表示から、次のようにして成分を取り出すことができる。両辺に、 $\langle j|$ をかけると、

$$\langle j|A\rangle = \langle j| \sum_i \alpha_i |i\rangle = \underbrace{\sum_i \alpha_i \langle j|i\rangle}_{\text{ここが、みそ。}} = \alpha_j$$

ここが、みそ。

$$\alpha_0 \langle j|0\rangle + \alpha_1 \langle j|1\rangle + \alpha_2 \langle j|2\rangle + \dots + \alpha_j \langle j|j\rangle + \dots + \alpha_{n-1} \langle j|n-1\rangle$$

成分の表示 $\alpha_i = \langle i | A \rangle$

$$\alpha_i = \langle i | A \rangle$$

これを改めて、

$$|A\rangle = \sum_i \alpha_i |i\rangle \quad \text{に代入すると、}$$

$$|A\rangle = \sum_i |i\rangle \langle i | A \rangle \quad \alpha_i$$

$$|A\rangle = \sum_i |i\rangle \langle i | A \rangle$$

$$\sum_i |i\rangle \langle i| = I$$

qubitの状態の表現と観測の確率

- 全ての可能なqubitの状態 $|A\rangle$ は、二次元のベクトル空間で表現される。

$$|A\rangle = \alpha_0 |0\rangle + \alpha_1 |1\rangle$$

- この時、 $|A\rangle$ の成分 α_0, α_1 は、次のように表される。

$$\alpha_0 = \langle 0|A\rangle ; \alpha_0^* = \langle 0|A\rangle^* = \langle A|0\rangle$$

$$\alpha_1 = \langle 1|A\rangle ; \alpha_1^* = \langle 1|A\rangle^* = \langle A|1\rangle$$

- $|A\rangle$ を観測した時、

$$0 \text{ が観測される確率は、 } P_0 = \alpha_0^* \alpha_0 = \langle A|0\rangle \langle 0|A\rangle$$

$$1 \text{ が観測される確率は、 } P_1 = \alpha_1^* \alpha_1 = \langle A|1\rangle \langle 1|A\rangle$$

$$\alpha_0^* \alpha_0 + \alpha_1^* \alpha_1 = |\alpha_0|^2 + |\alpha_1|^2 = 1$$

この条件は、 $\langle A|A\rangle = 1$ に、等しい。

$|\text{ket}\rangle\langle\text{bra}|$ 演算子

外積 $|i\rangle\langle j|$ 演算子の定義

$|i\rangle\langle j|$ は、ベクトル $|k\rangle$ に作用して、ベクトル $a|i\rangle$ (ただし、 a は、内積 $\langle j|k\rangle$ で定義されるスカラー値)を生み出す演算子である。これを、 $|i\rangle$ と $|j\rangle$ の外積という。

$$(|i\rangle\langle j|)(|k\rangle)$$

$$|i\rangle\langle j||k\rangle = |i\rangle (\langle j|k\rangle) = (\langle j|k\rangle) |i\rangle$$

$$\begin{aligned} (|0\rangle\langle 0|)(a|0\rangle+b|1\rangle) &= a|0\rangle\langle 0|0\rangle+b|1\rangle\langle 0|1\rangle \\ &= a|0\rangle\cdot 1+b|1\rangle\cdot 0 = a|0\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (|0\rangle\langle 1|)(a|0\rangle+b|1\rangle) &= a|0\rangle\langle 1|0\rangle+b|0\rangle\langle 1|1\rangle \\ &= a|0\rangle\cdot 0+b|1\rangle\cdot 1 = b|0\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (|1\rangle\langle 0|)(a|0\rangle+b|1\rangle) &= a|1\rangle\langle 0|0\rangle+b|1\rangle\langle 0|1\rangle \\ &= a|1\rangle\cdot 1+b|1\rangle\cdot 0 = a|1\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (|1\rangle\langle 1|)(a|0\rangle+b|1\rangle) &= a|1\rangle\langle 1|0\rangle+b|1\rangle\langle 1|1\rangle \\ &= a|0\rangle\cdot 0+b|1\rangle\cdot 1 = b|1\rangle \end{aligned}$$

$|\cdot\rangle\langle\cdot|$ 演算子

$$|0\rangle\langle 0|\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |0\rangle\langle 1|\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$|1\rangle\langle 0|\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ a \end{pmatrix}, \quad |1\rangle\langle 1|\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ b \end{pmatrix}$$

この時、演算子 $|i\rangle\langle j|$ に対応する行列は、次のものになることを確かめよ。

$$|0\rangle\langle 0| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad |0\rangle\langle 1| = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$|1\rangle\langle 0| = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle\langle 1| = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

|. > < .| 演算子

$$A_{00} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, A_{01} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$A_{10} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, A_{11} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \text{ としよう。}$$

この時、

$$\begin{aligned} A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & b \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ c & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & d \end{pmatrix} \\ &= a \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + b \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + c \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + d \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

だから Aは、次のように表すことができる。

$$A = aA_{00} + bA_{01} + cA_{10} + dA_{11}$$

|.><.| 演算子

$$A_{00} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, A_{01} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, A_{02} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$A_{10} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, A_{11} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, A_{12} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$A_{20} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, A_{21} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, A_{22} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

の時、行列 $A = \begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{pmatrix}$ は、次のように表すことができる。

$$\begin{aligned} A = & aA_{00} + bA_{01} + cA_{02} \\ & + dA_{10} + eA_{11} + fA_{12} \\ & + gA_{20} + hA_{21} + iA_{22} \end{aligned}$$

$|\cdot\rangle\langle\cdot|$ 演算子

i 行 j 列目の要素だけが 1 で、残りの要素が全て 0 である行列を、 A_{ij} とする。ある行列 A の、 i 行 j 列目の要素を a_{ij} としよう。この時、行列 A は、 A の要素 a_{ij} と、先の A_{ij} を使って、次のように表すことができる。

$$A = \sum_{i,j} a_{ij} A_{ij}$$

$A_{ij} = |i\rangle\langle j|$ とすると、

$$A = \sum_{i,j} a_{ij} |i\rangle\langle j|$$

単位行列 I は、次のように表される。

$$I = \sum_i |i\rangle\langle i|$$

$$A_{ij} = |i\rangle\langle j| \text{ と } a_{ij} = \langle i|A|j\rangle \text{ の関係}$$

$A:W \rightarrow V$ という演算子を考える。

W での単位行列を I_W 、 V での単位行列を I_V とする。

$$A = I_W A I_V$$

$$I = \sum_i |i\rangle\langle i| \text{ を使うと}$$

$$= \sum_{ij} \underbrace{|w_j\rangle\langle w_j|}_{I_W} A \underbrace{|v_i\rangle\langle v_i|}_{I_V}$$

$$= \sum_{ij} \underbrace{\langle w_j|A|v_i\rangle}_{a_{ij}} |w_j\rangle\langle v_i|,$$

$$= \sum_{i,j} a_{ij} |i\rangle\langle j|$$

演習問題 1A-1 Ket記法

$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $|1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ とする。

1. 列ベクトル $|Z\rangle = \begin{pmatrix} z_0 \\ z_1 \end{pmatrix}$ を $|0\rangle$, $|1\rangle$ を用いて表せ。
2. 行ベクトル $\langle 0|$, $\langle 1|$ を求めよ。
3. 行ベクトル $\langle Z|$ を $\langle 0|$, $\langle 1|$ を用いて表せ。
4. $\langle Z|Z\rangle$ を計算せよ。
ただし、 $|z_0|^2 + |z_1|^2 = 1$ であるとする。
(この条件は、 $z_0^* z_0 + z_1^* z_1 = 1$ に等しいことに注意)

演習問題 1A-2 Ket記法

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ とする。}$$

1. 列ベクトル $|Z\rangle = \begin{pmatrix} z_0 \\ z_1 \\ z_2 \end{pmatrix}$ を $|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle$ を用いて表せ。
2. 行ベクトル $\langle 0|, \langle 1|, \langle 2|$ を求めよ。
3. 行ベクトル $\langle Z|$ を $\langle 0|, \langle 1|, \langle 2|$ を用いて表せ。
4. $\langle Z|Z\rangle$ を計算せよ。
ただし、 $|z_0|^2 + |z_1|^2 + |z_2|^2 = 1$ であるとする。
(この条件は、 $z_0^* z_0 + z_1^* z_1 + z_2^* z_2 = 1$ に等しいことに注意)

演習問題 1A-3 Ket記法

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ とする。}$$

$$\text{列ベクトル } |Z\rangle = \begin{pmatrix} z_0 \\ z_1 \\ z_2 \\ z_3 \end{pmatrix} \text{ は、} |Z\rangle = z_0|0\rangle + z_1|1\rangle + z_2|2\rangle + z_3|3\rangle$$

と表される。この時、次の値を求めよ。

1. $\langle 0|Z\rangle$
2. $\langle 1|Z\rangle$
3. $\langle 2|Z\rangle$
4. $\langle 3|Z\rangle$

演習問題 2-1 直交正規基底

- 先に見た二次元のベクトル空間の二つの基底

$|B_0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $|B_1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ は、お互いに直交することを確認めよ。

- 先に見た三次元のベクトル空間の三つの基底

$|B_0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$, $|B_1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $|B_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ は、お互いに直交することを確認めよ。

演習課題 2-2 qubitの別の基底

1. $|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle$

$$|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle$$

とすると、 $|+\rangle, |-\rangle$ は、正規直交基底であることを示せ。

2. $|i\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}} |1\rangle$

$$|o\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle - \frac{i}{\sqrt{2}} |1\rangle$$

とすると、 $|i\rangle, |o\rangle$ は、正規直交基底であることを示せ。

3. $|v\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle, |v'\rangle = b^*|0\rangle - a^*|1\rangle$ とすれば、 $|v\rangle$ と $|v'\rangle$ は、直交することを示せ。

演習課題 2-3 基底の変換

1. $H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$ とすると、

$$H|0\rangle = |+\rangle$$

$$H|1\rangle = |-\rangle \text{ であることを確かめよ。}$$

2. $|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle)$ 、

$$|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle - |-\rangle) \text{ であることを確かめよ。}$$

3. $a|0\rangle + b|1\rangle$ の状態を、 $|+\rangle$ と $|-\rangle$ を基底として表せ。

演習課題 2-4 演算子の行列成分

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 3i & \frac{2}{1+i} \\ -3i & 2 & 0 \\ 1+i & 0 & 0 \end{pmatrix} \text{ とする時、次の値を求めよ。}$$

1. $\langle 0|A|1\rangle$
2. $\langle 1|A|0\rangle$
3. $\langle 0|A|2\rangle$
4. $A^\dagger = A$ か？
5. $A^\dagger A$ を計算せよ。

演習問題 2A-1 演算子

$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $Y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$, $Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$, $H = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$
として、次の計算を行い、結果を $|0\rangle$, $|1\rangle$ で表せ。

1. $X|0\rangle$
2. $X|1\rangle$
3. $Y|0\rangle$
4. $Y|1\rangle$
5. $Z|0\rangle$
6. $Z|1\rangle$
7. $H|0\rangle$
8. $H|1\rangle$

演習問題 2A-2 行列の成分

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, Y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, H = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

として、次の計算を行え。

1. $\langle 0|X|0\rangle$

2. $\langle 0|X|1\rangle$

3. $\langle 1|Y|0\rangle$

4. $\langle 1|Y|1\rangle$

5. $\langle 0|Z|0\rangle$

6. $\langle 0|Z|1\rangle$

7. $\langle 1|H|0\rangle$

8. $\langle 1|H|1\rangle$

演習問題 2A-3

$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $H = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$, $|A\rangle = a_0|0\rangle + a_1|1\rangle$,
 $|B\rangle = b_0|0\rangle + b_1|1\rangle$, として、次の計算を行え。

1. $\langle A|X|A\rangle$
2. $\langle A|X|B\rangle$
3. $\langle A|H|A\rangle$
4. $\langle A|H|B\rangle$

演習問題 2A-3 $|\cdot\rangle\langle\cdot|$ 演算子

$|a\rangle\langle b|c\rangle$ は、 $|a\rangle(\langle b|c\rangle)$ と考えれば、列ベクトル $|a\rangle$ に内積 $\langle b|c\rangle$ の値 k を掛けたものと考えることができる。

$|a\rangle\langle b|c\rangle = |a\rangle(\langle b|c\rangle) = (|a\rangle\langle b|)c\rangle$ と考えれば、 $|a\rangle\langle b|$ は、列ベクトル $|c\rangle$ に作用して、列ベクトル $k|a\rangle$ を返す作用を持つことになる。(これは、行列と同じ作用だ。)

1. $(|0\rangle\langle 0|)|0\rangle, (|0\rangle\langle 0|)|1\rangle$ を計算せよ。
2. $(|0\rangle\langle 1|)|0\rangle, (|0\rangle\langle 1|)|1\rangle$ を計算せよ。
3. $(|1\rangle\langle 0|)|0\rangle, (|1\rangle\langle 0|)|1\rangle$ を計算せよ。
4. $(|1\rangle\langle 1|)|0\rangle, (|1\rangle\langle 1|)|1\rangle$ を計算せよ。

演習問題 2A-4

$A_{00} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, A_{01} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$
 $A_{10} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, A_{11} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ として、
次の計算を行え。

1. $A_{00}|0\rangle, A_{00}|1\rangle$
2. $A_{01}|0\rangle, A_{01}|1\rangle$
3. $A_{10}|0\rangle, A_{10}|1\rangle$
4. $A_{11}|0\rangle, A_{11}|1\rangle$

演習問題 2A-5

$$A_{00} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, A_{01} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$A_{10} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, A_{11} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \text{ とすると、}$$

行列 $A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ は、

$$A = \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & b \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ c & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & d \end{pmatrix} \text{ だから、}$$

次のように表すことができる。

$$A = aA_{00} + bA_{01} + cA_{10} + dA_{11}$$

先の、 X, Y, Z, H を、 $A_{00}, A_{01}, A_{10}, A_{11}$ を用いて表せ。

演習問題 2A-6 $|\cdot\rangle\langle\cdot|$ 演算子

演習問題2A-3と2A-4の結果を比較して、次のことを確かめよ。

$$|0\rangle\langle 0| = A_{00} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad |0\rangle\langle 1| = A_{01} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$|1\rangle\langle 0| = A_{10} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle\langle 1| = A_{11} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

先の、 X, Y, Z, H を、この $|i\rangle\langle j|$ を用いて表せ。

演習問題 2A-7 $|\cdot\rangle\langle\cdot|$ 演算子

$P=|0\rangle\langle 0|$, $Q=|1\rangle\langle 1|$, $|\psi\rangle=a|0\rangle+b|1\rangle$ とする。

1. $P|\psi\rangle$ を計算せよ。
2. $Q|\psi\rangle$ を計算せよ。
3. $P^2=P$ を示せ。
4. $Q^2=Q$ を示せ。

ketのまとめ ベクトル

$ A\rangle$	列ベクトル
$\langle B $	行ベクトル
$\langle B A\rangle$	内積(数値)

$\langle B|A\rangle = 0$ A, B は、直交している

$\langle A|A\rangle = 1$ A は、正規化されている

$$|A\rangle^\dagger = \langle A|$$

$$\langle A|^\dagger = |A\rangle$$

ketのまとめ2

基底とket

基底 $|0\rangle, |1\rangle, \dots, |n-1\rangle$ について
重ね合わせの状態の表示

$$|A\rangle = a_0|0\rangle + a_1|1\rangle + \dots + a_{n-1}|n-1\rangle$$

$$\text{ただし、 } |a_0|^2 + |a_1|^2 + \dots + |a_{n-1}|^2 = 1$$

これは、 $a_0^* a_0 + a_1^* a_1 + \dots + a_{n-1}^* a_{n-1} = 1$ と同じ

基底 $|m\rangle, |n\rangle$ について

$$m \neq n \text{ なら } \langle m | n \rangle = 0$$

$$m = n \text{ なら } \langle m | n \rangle = 1$$

$$\text{まとめて } \langle m | n \rangle = \delta_{mn}$$

ketのまとめ3

基底と成分表示

状態 $|A\rangle$ が、次のように基底と成分で表示されている時、

$$|A\rangle = a_0|0\rangle + a_1|1\rangle + \dots + a_{n-1}|n-1\rangle$$

成分 a_k は、次の内積で求められる。

$$a_k = \langle k|A\rangle$$

$|A\rangle = a_0|0\rangle + a_1|1\rangle$ の時、

0が観測される確率は、 $P_0 = a_0^* a_0 = \langle A|0\rangle \langle 0|A\rangle$

1が観測される確率は、 $P_1 = a_1^* a_1 = \langle A|1\rangle \langle 1|A\rangle$

ここで、 $\langle B|A\rangle = \langle A|B\rangle^*$ を使っている

ketのまとめ4

ketと演算子

ketはベクトルで、演算子Mは行列で表現される。

$M|A\rangle$ は列ベクトル、 $\langle A|M$ は行ベクトルを返す。

$$M|A\rangle = |B\rangle \text{ なら、 } \langle A|M^\dagger = \langle B|$$

$$\langle A|M|B\rangle = (\langle A|M)|B\rangle = \langle A|(M|B\rangle) \\ = \text{数値}$$

$\langle A|M$ は行ベクトルを返すので、このベクトルと列ベクトル $|B\rangle$ との内積が、 $(\langle A|M)|B\rangle$ の値になる。

$M|B\rangle$ は、列ベクトルを返すので、このベクトルとベクトル $\langle A|$ との内積が、 $\langle A|(M|B\rangle)$ の値になる。

この二つの値は、等しい。

$$M|A\rangle = |B\rangle \text{ なら、 } \langle A|M^\dagger = \langle B|$$

$$M = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & \cdots & m_{1m} \\ m_{21} & m_{22} & \cdots & m_{2m} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ m_{n1} & m_{n2} & \cdots & m_{nm} \end{pmatrix} \quad |A\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_m \end{pmatrix} \quad |B\rangle = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

の時、

$$\langle A| = (a_1^* \quad a_2^* \quad \cdots \quad a_m^*) \quad M^\dagger = \begin{pmatrix} m_{11}^* & m_{21}^* & \cdots & m_{n1}^* \\ m_{12}^* & m_{22}^* & \cdots & m_{n2}^* \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ m_{1m}^* & m_{2m}^* & \cdots & m_{nm}^* \end{pmatrix}$$

$$\langle B| = (b_1^* \quad b_2^* \quad \cdots \quad b_n^*) \quad \text{である。}$$

$$M|A\rangle = |B\rangle \text{ より } b_i = \sum_{k=1}^m m_{ik} a_k \text{ だから、 } b_i^* = \sum_{k=1}^m m_{ik}^* a_k^*$$

これから、 $\langle A|M^\dagger = \langle B|$ がわかる。

$$\langle A|M|B \rangle = (\langle A|M)|B \rangle = \langle A|(M|B \rangle)$$

$$\langle A| = (a_1^* \quad a_2^* \quad \cdots \quad a_n^*) \quad M = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & \cdots & m_{1m} \\ m_{21} & m_{22} & \cdots & m_{2m} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ m_{n1} & m_{n2} & \cdots & m_{nm} \end{pmatrix} \quad |B \rangle = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix}$$

$$(\langle A|M)|B \rangle = \begin{pmatrix} a_1^* m_{11} + a_2^* m_{21} + \cdots + a_n^* m_{n1} \\ a_1^* m_{12} + a_2^* m_{22} + \cdots + a_n^* m_{n2} \\ \vdots \\ a_1^* m_{1m} + a_2^* m_{2m} + \cdots + a_n^* m_{nm} \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix}$$

$$\langle A|(M|B \rangle) = (a_1^* \quad a_2^* \quad \cdots \quad a_n^*) \begin{pmatrix} m_{11} b_1 + m_{12} b_2 + \cdots + m_{1m} b_m \\ m_{21} b_1 + m_{22} b_2 + \cdots + m_{2m} b_m \\ \vdots \\ m_{n1} b_1 + m_{n2} b_2 + \cdots + m_{nm} b_m \end{pmatrix}$$

ketのまとめ5 恒等演算子 I

恒等演算子 I について、次の式が成り立つ。

$$\langle A|I|B\rangle = \langle A|B\rangle$$

ketのまとめ6

演算子 $|i\rangle\langle j|$

$$(|i\rangle\langle j|)(|k\rangle)$$

$$|i\rangle\langle j||k\rangle = |i\rangle(\langle j|k\rangle) = (\langle j|k\rangle)|i\rangle$$

$|i\rangle\langle j|$ は、 i 行 j 列目の要素だけが 1 で、残りの要素が全て 0 である行列である。

$$I = \sum_i |i\rangle\langle i|$$

ある行列 A の、 i 行 j 列目の要素を a_{ij} とした時、 A は、次のように表現できる。

$$A = \sum_{i,j} a_{ij} |i\rangle\langle j|$$

観測とエルミート演算子

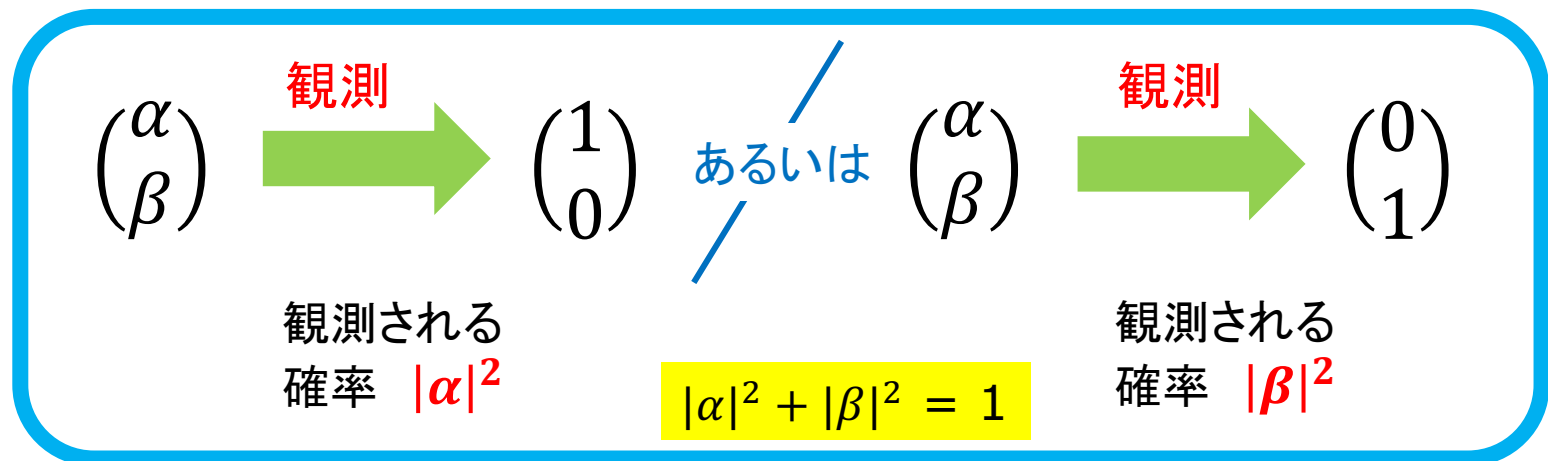
ここで学ぶこと

1. 線形演算子は、行列で表現される。
2. $H=H^\dagger$ である時、 H をエルミート行列という。
3. エルミート演算子の固有値は、実数である。
4. エルミート演算子の固有ベクトルは直交基底をなす。
5. 正規行列のスペクトル分解
6. 観測値の平均は、 $\langle A|L|A\rangle$ で与えられる。

qubitの観測

Qubitの観測

- Qubitは、状態 $|0\rangle$ と状態 $|1\rangle$ の重ね合わせの状態を取る。
 $|Qubit\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$
ただし、 $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$; $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$
- 観測を行うと、Qubitの重ね合わせの状態は失われ、0か1かの情報が返る。($|0\rangle$ または $|1\rangle$ が観測される。)
- この時0を得る確率は $|\alpha|^2$ で、1を得る確率は $|\beta|^2$ で、与えられる。



Qubitの観測の例

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle \text{ としよう。}$$

0 が観測される確率は、 $|\frac{1}{\sqrt{2}}|^2 = \frac{1}{2}$

1 が観測される確率は、 $|\frac{1}{\sqrt{2}}|^2 = \frac{1}{2}$

だから、0と1は、同じ確率で観測される。（「量子コイン」）

$$|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle \text{ としよう。}$$

0 が観測される確率は、 $|\frac{1}{\sqrt{2}}|^2 = \frac{1}{2}$

1 が観測される確率は、 $|\frac{1}{\sqrt{2}}|^2 = \frac{1}{2}$

ここでも、0と1は、同じ確率で観測される。

また、観測では、状態 $|+\rangle$ と状態 $|-\rangle$ との区別がつかないことがわかる。

線形演算子

線形演算子 Operator

- ベクトル $|A\rangle$ をベクトル $|B\rangle$ に変換する作用を持つ M を演算子と呼ぶ。

$$M|A\rangle = |B\rangle.$$

- この演算子 M が、次の性質を持つとき、 M は線形であるという。

$$Mz|A\rangle = z|B\rangle.$$

$$M\{|A\rangle + |B\rangle\} = M|A\rangle + M|B\rangle.$$

- ベクトル $|A\rangle$ の次元が n で、 M が m 行 n 列の行列なら、 $|A\rangle$ に左から行列 M をかける操作 $M|A\rangle$ は、 $|A\rangle$ を m 次元のベクトルに変換するので、行列 M は、演算子である。
(複素数 c は、ベクトル $|A\rangle$ をベクトル $c|A\rangle$ に変換するので、トリビアルであるが、演算子である。)

$$\mathbf{M}|A\rangle = |B\rangle \quad \text{とする}$$

$|A\rangle, |B\rangle$ を成分表示すると

$$|A\rangle = \sum_j \alpha_j |j\rangle, \quad |B\rangle = \sum_j \beta_j |j\rangle.$$

演算子 $\mathbf{M}$ の作用は、次のようになる

$$\sum_j \mathbf{M}|j\rangle \alpha_j = \sum_j \beta_j |j\rangle.$$

左から $\langle k|$ を両辺にかける

$$\sum_j \langle k|\mathbf{M}|j\rangle \alpha_j = \sum_j \beta_j \langle k|j\rangle.$$

$\langle k|\mathbf{M}|j\rangle$ は、
 $\langle k|$ と $\mathbf{M}|j\rangle$
の内積なので
数値である。

$$\sum_j \beta_j \langle k|j\rangle$$

$$\langle k|\mathbf{M}|j\rangle = m_{kj} \text{ とすると}$$

$$\sum_j m_{kj} \alpha_j = \beta_k$$

演算子は、行列で表現される

ketのまとめ7

演算子の行列成分

$|i\rangle, |j\rangle$ を基底とする時、演算子 M の行列成分を m_{ij} とすれば、次の式が成り立つ。

$$\langle i|M|j\rangle = m_{ij}$$

$M|j\rangle$ は、行列 M の j 列目のベクトル $|C_j\rangle$ を返す。

$|C_j\rangle = \sum m_{kj} |k\rangle$ だから、 $\langle i|C_j\rangle = m_{ij}$
よって、 $\langle i|M|j\rangle = m_{ij}$

$$\langle i|M|j\rangle = m_{ij}$$

$$M = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & \cdots & m_{1j} & \cdots & m_{1n} \\ m_{21} & m_{22} & \cdots & m_{2j} & \cdots & m_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \\ m_{i1} & m_{i2} & \cdots & m_{ij} & \cdots & m_{in} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ m_{n1} & m_{n2} & \cdots & m_{nj} & \cdots & m_{nn} \end{pmatrix}$$

$$|j\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{j 番目} \quad M|j\rangle = \begin{pmatrix} m_{1j} \\ m_{2j} \\ \vdots \\ m_{ij} \\ \vdots \\ m_{nj} \end{pmatrix}$$

$$\langle i| = (0 \quad 0 \quad \cdots \quad 1 \quad \cdots \quad 0 \quad 0)$$

i 番目

$$\langle i|M|j\rangle = m_{ij}$$

固有ベクトルと固有値

行列の固有ベクトルと固有値

行列Mに対して、あるベクトル $|v\rangle$ と、ある数字 m が存在して、

$$\begin{array}{c} \text{行列} \\ \mathbf{M} \end{array} \begin{array}{c} \text{ベクトル} \\ |v\rangle \end{array} = \begin{array}{c} \text{数字} \\ m \end{array} \begin{array}{c} \text{ベクトル} \\ |v\rangle \end{array}$$

となる時、 $|v\rangle$ をMの固有ベクトル、 m をその固有値と呼ぶ。
(ただし、 $|v\rangle$ は、0でないとする)

行列にベクトルをかけるとベクトルになるのだが、できたベクトルは様々な向きを向く。固有ベクトルの場合には、行列の作用を受けても、向きが変わらない(元のベクトルの数値倍だから)

一般に $n \times n$ の行列は、 n 個の固有ベクトルと、それに対応した n 個の固有値を持つ。

固有値を求める 2x2 行列で考える

2x2の行列Mについて、固有値mと固有ベクトル $|v\rangle$ を求めてみよう。定義から、 $M|v\rangle = m|v\rangle$ である。

$M = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$, $|v\rangle = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$ として成分で考える。

$$M|v\rangle = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ax + by \\ cx + dy \end{pmatrix} = m \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} mx \\ my \end{pmatrix}$$

$ax+by=mx$, $cx+dy=my$ から、

$(a-m)x+by=0$, $cx+(d-m)y=0$ $y \neq 0$ として

$$x/y = -(a-m)/b = -c/(d-m)$$

$\therefore (a-m)(d-m)=bc$ これを展開して、

$m^2 - (a+d)m - bc = 0$ この二次方程式を解けば、
Mの固有値が求まる。

固有値を求める

一般の場合で考えてみる。

$M|v\rangle = m|v\rangle$ は、単位行列を I とすれば、
 $M|v\rangle = mI|v\rangle$ だから、

$$(M - mI)|v\rangle = 0$$

これが 0 でない $|v\rangle$ について成り立つためには、
行列 $M - mI$ の行列式 $\det(M - mI)$ が 0 でなければならない。

$$\det(M - mI) = 0$$

これを行列 M の特性方程式 (固有多項式) という。

行列 M の固有値を求めるには、この M の特性方程式 (一般には、行列の成分についての n 次の方程式) を解けばいい。

ただし、大きな行列について、実際にこの方法で固有値を計算するのは難しい。

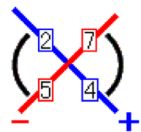
行列の固有ベクトルと固有値の例1

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \text{ とする。}$$

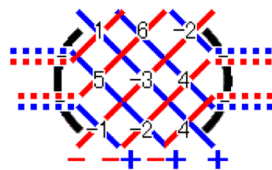
$$\det(X - mI) = 0 \text{ より}$$

$$\det \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} - m \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right] = \det \left[\begin{pmatrix} 0 - m & 1 \\ 1 & 0 - m \end{pmatrix} \right]$$
$$= m^2 - 1 = 0$$

だから、 X の固有値は、 ± 1 となる。



$$\det A = 2 \times 4 - 7 \times 5 = -27$$



$$\det A = 1 \cdot (-3) \cdot 4 + 6 \cdot 4 \cdot (-1) + (-2) \cdot 5 \cdot (-2) \\ - 1 \cdot 4 \cdot (-2) - 6 \cdot 5 \cdot 4 - (-2) \cdot (-3) \cdot (-1) \\ = -122$$

行列の固有ベクトルと固有値の例1

固有値がわかったので固有ベクトル $\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$ を求める。

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \pm 1 \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \text{ だから、 } \begin{pmatrix} v \\ u \end{pmatrix} = \pm 1 \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$$

これから、 $v=u$ または $v=-u$ がわかる。

固有ベクトルは、一つではない。

固有ベクトルの定数倍も、固有ベクトルである。

実際に、次の式が成り立つ。

$$X \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = +1 \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$X \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} = -1 \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

行列の固有ベクトルと固有値の例2

$$S = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} \text{ とする。}$$

$$\det(S - mI) = 0 \text{ より}$$

$$\begin{aligned} \det \left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} - m \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right] &= \det \left[\begin{pmatrix} 1-m & 0 \\ 0 & -i-m \end{pmatrix} \right] \\ &= (1-m)(-i-m) = 0 \end{aligned}$$

だから、 X の固有値は、1 と $-i$ になる。

行列の固有ベクトルと固有値の例2

固有値がわかったので固有ベクトル $\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$ を求める。

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = +1 \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \text{ または、 } \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = -i \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$$

これから、 $v=0$ または $u=0$ がわかる。

固有ベクトルは、一つではない。

固有ベクトルの定数倍も、固有ベクトルである。

実際に、次の式が成り立つ。

$$S \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = +1 \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$S \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -i \end{pmatrix} = -i \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

エルミート演算子

エルミート演算子 Hermitian Operator

Observable

- $H=H^\dagger$ である時、 H をエルミート行列という。
- c が複素数の時、 $c=c^*$ ($=c^\dagger$) は、 c が実数であることと同値である。 $H=H^\dagger$ は、 $c=c^*$ の行列バージョンと考えていい。
- 量子の世界では、量子の状態は直接観測できず、物理的に観測可能な量(Observable)は、実数に近い性質を持つエルミートな線形演算子として記述される。
- 実際に観測される量は、エルミート演算子の固有値である。
- エルミート演算子の固有値は、実数である。
- 列ベクトルは、1行 n 列の行列と考えることができるので、列ベクトル $|A\rangle$ に対して、 $|A\rangle^\dagger$ は、行ベクトル $\langle A|$ と等しい。

エルミート行列の固有値は、実数である

エルミート行列 L の固有ベクトルを $|\lambda\rangle$ 、固有値を λ とする。

$$\begin{array}{cc} \text{エルミート行列} & \text{固有値} \\ \mathbf{L}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle \end{array}$$

$\begin{array}{cc} \text{固有ベクトル} & \text{固有ベクトル} \end{array}$

この時、

$$\langle\lambda|\mathbf{L}^\dagger = \langle\lambda|\lambda^* \quad \text{である。}$$

最初の式に左から $\langle\lambda|$ 、二つ目の式に右から $|\lambda\rangle$ をかけて、

$$\begin{array}{l} \langle\lambda|\mathbf{L}|\lambda\rangle = \lambda \langle\lambda|\lambda\rangle \\ \langle\lambda|\mathbf{L}|\lambda\rangle = \lambda^* \langle\lambda|\lambda\rangle \end{array}$$

ここで、 $L^\dagger=L$ (L はエルミートだから)を使った。

これから、 $\lambda^*=\lambda$ 。すなわち、 λ は実数である。

エルミート行列の固有ベクトルは直交基底をなす

エルミート行列 L の異なる二つの固有ベクトルを $|\lambda_1\rangle$, $|\lambda_2\rangle$ 、その固有値を λ_1 , λ_2 とすると、

$$L|\lambda_1\rangle = \lambda_1|\lambda_1\rangle$$

$$L|\lambda_2\rangle = \lambda_2|\lambda_2\rangle$$

ここでは、固有値が実数であることを使っている。

$$\langle\lambda_1|L = \lambda_1\langle\lambda_1|$$

$$L|\lambda_2\rangle = \lambda_2|\lambda_2\rangle$$

$$\langle\lambda_1|L|\lambda_2\rangle = \lambda_1\langle\lambda_1|\lambda_2\rangle$$

$$\langle\lambda_1|L|\lambda_2\rangle = \lambda_2\langle\lambda_1|\lambda_2\rangle$$

エルミート行列の固有ベクトルは、直交基底をなす。

$$(\lambda_1 - \lambda_2)\langle\lambda_1|\lambda_2\rangle = 0.$$

固有値・固有ベクトルを用いた 行列の分解

対角行列を用いた分解

行列 A の固有ベクトルを e_i 、対応する固有値を λ_i とする。

$$A|e_i\rangle = \lambda_i|e_i\rangle$$

A の固有ベクトルを束ねた行列を P 、 A の固有値を対角成分とする行列を D とおく。

$$P = (|e_1\rangle, |e_2\rangle, |e_3\rangle, \dots, |e_n\rangle)$$

$$D = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \lambda_n \end{pmatrix}$$

対角行列を用いた分解

$$\begin{aligned} AP &= A (|e_1\rangle, |e_2\rangle, |e_3\rangle, \dots, |e_n\rangle) \\ &= (A|e_1\rangle, A|e_2\rangle, A|e_3\rangle, \dots, A|e_n\rangle) \\ &= (\lambda_1|e_1\rangle, \lambda_2|e_2\rangle, \lambda_3|e_3\rangle, \dots, \lambda_n|e_n\rangle) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} PD &= (|e_1\rangle, |e_2\rangle, |e_3\rangle, \dots, |e_n\rangle) D \\ &= (\lambda_1|e_1\rangle, \lambda_2|e_2\rangle, \lambda_3|e_3\rangle, \dots, \lambda_n|e_n\rangle) \end{aligned}$$

確かめてみよ

$$AP = PD$$

これから

$$A = PDP^{-1}$$

行列の分解

行列Aの固有ベクトルを e_i 、それに対応する固有値を λ_i とする時、Aは、基底 $|e_i\rangle$ を束ねた行列Pのもとで、次の形で表すことができる。

$$A = P \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & & & \\ & \lambda_2 & & & & \\ & & \lambda_3 & & & \\ & & & \lambda_4 & & \\ & 0 & & & \ddots & \\ & & & & & \lambda_{n-1} \\ & & & & & & \lambda_n \end{pmatrix} P^{-1}$$

ここで、対角成分の λ_i 以外は、すべて0である。

正規行列とスペクトル分解

正規行列

行列 N が、次の条件を満たす時、正規行列という。

$$NN^\dagger = N^\dagger N$$

もちろん、 $NN^\dagger = N^\dagger N = I$ の時、 N は正規行列である。
(これは、後で見るユニタリ行列の場合である)

エルミート行列は、正規行列である。

N がエルミートの時、 $N = N^\dagger$ だから

$$NN^\dagger = N^2 = (N^\dagger)^2 = N^\dagger N$$

正規行列のスペクトル分解

Nが正規である時、Nは次の形で表すことができる。

$$N = \sum_i \lambda_i |e_i\rangle \langle e_i|$$

ここで、 $|e_i\rangle$ は、Nの直交する固有ベクトルで、 λ_i は、対応する固有値である。

Nを、 $|e_i\rangle$ 基底で表した時、対角成分だけがゼロでない形にできる。この形を「対角形式」とよぶ。

対角行列は正規である

逆に、対角行列は正規であることが、次のようにしてわかる。
行列 O が対角行列であるなら、 O は、次のように表される。

$$O = \sum_i \lambda_i |e_i\rangle \langle e_i| ,$$

この時

$$\begin{aligned} OO^\dagger &= \sum_i \lambda_i |e_i\rangle \langle e_i| \sum_j \lambda_j^* |e_j\rangle \langle e_j| \\ &= \sum_i |\lambda_i|^2 |e_i\rangle \langle e_i| \\ &= O^\dagger O . \end{aligned}$$

対角行列の積は、対角成分
同士を掛けたものであるので、
直感的には、明らかである。

よって、 O は、正規である。

観測の期待値

観測値の期待値

一般に、値 λ_i が確率 $P(\lambda_i)$ で観測される時、その観測 L の期待値を $\langle L \rangle$ で表せば、 $\langle L \rangle$ は、次の式で与えられる。

$$\langle L \rangle = \sum_i \lambda_i P(\lambda_i)$$

ある量子系のシステムの状態を $|A\rangle$ とする。系の観測可能量は、あるエルミートな演算子 L で表現されるのだが、観測値は、この L の固有値 λ_i である。また、 L の固有ベクトル $|\lambda_i\rangle$ は、この系の基底である。だから、 $|A\rangle$ は、次のように表現できる。

$$|A\rangle = \sum_i \alpha_i |\lambda_i\rangle$$

左から、 L を作用させると、

$$L|A\rangle = \sum_i \alpha_i L|\lambda_i\rangle$$

LをAでサンドイッチする

λ_i は、 L の固有値なので、 $\mathbf{L}|\lambda_i\rangle = \lambda_i|\lambda_i\rangle$ 。これを使うと、先の式は、次のようになる。

$$\mathbf{L}|A\rangle = \sum_i \alpha_i \lambda_i |\lambda_i\rangle$$

今度は、この式に、左から $\langle A|$ をかける。

$$\langle A|\mathbf{L}|A\rangle = \sum_i (\alpha_i^* \alpha_i) \lambda_i$$

$(\alpha_i^* \alpha_i) = P(\lambda_i)$ なので、次の式が成り立つ。

$$\langle \mathbf{L} \rangle = \langle A|\mathbf{L}|A\rangle$$

$$|A\rangle = \sum_i \alpha_i |\lambda_i\rangle$$

だから

$$\langle A| = \sum_i \alpha_i^* \langle \lambda_i|$$

$$\langle A|\mathbf{L}|A\rangle =$$

$$(\sum_i \alpha_i^* \langle \lambda_i|)(\sum_i \alpha_i \lambda_i |\lambda_i\rangle)$$

ある状態 $|A\rangle$ をとる系の、Observable L の観測値の期待値は、 L を A でサンドイッチすれば、求まる。

ketのまとめ8

観測値の期待値

ある状態 $|A\rangle$ をとる系の、Observable L の観測値の期待値 $\langle L \rangle$ は、次の式で与えられる。

$$\langle L \rangle = \langle A | L | A \rangle$$

量子の状態変化とユニタリ演算子

ユニタリ演算子

ユニタリ変換の原理

ある量子の状態は、他の状態に変化することができる。
その変化は、「ユニタリ変換」という、ルールに従う。

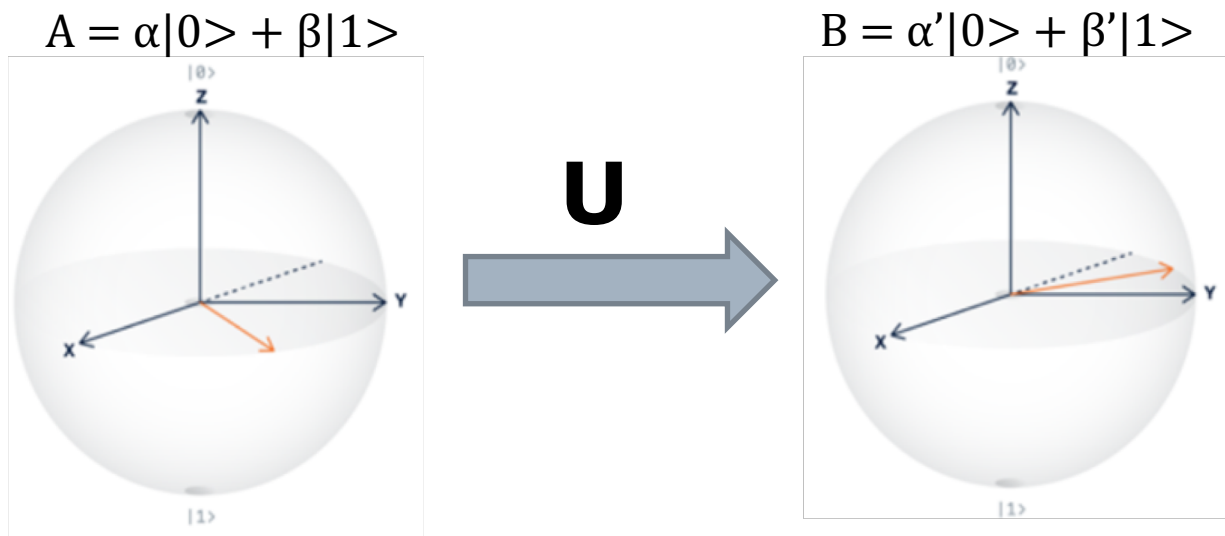
量子の状態ベクトル $|A\rangle$ は、このユニタリ変換 U によって、他の状態 $|B\rangle$ に変換される。

$$U |A\rangle = |B\rangle$$

ユニタリ演算子 Unitary Operator

- $UU^\dagger = U^\dagger U = I$ (単位行列)を満たす行列を、ユニタリ行列と呼ぶ。
- 量子の状態ベクトル $|A\rangle$ は、このユニタリ演算子によって、他の状態 $|B\rangle$ に変換される。

$$U |A\rangle = |B\rangle$$



ユニタリ変換の幾何的意味

ユニタリ変換 U は、幾何的には、ベクトルの長さを変えないベクトルの回転である。

U が、 $|0\rangle$ を $|u\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$ に、 $|1\rangle$ を $|v\rangle = c|0\rangle + d|1\rangle$ に写したとしよう。ここで、 $a^*a + b^*b = 1$, $c^*c + d^*d = 1$ である。

この U は、次のようにかける。 $(U|0\rangle, U|1\rangle$ で確かめよ)

$$U = \begin{pmatrix} a & c \\ b & d \end{pmatrix} \quad \text{で、} \quad U^\dagger = \begin{pmatrix} a^* & b^* \\ c^* & d^* \end{pmatrix}$$

$$\text{この時、} U^\dagger U = \begin{pmatrix} a^*a + b^*b & a^*c + b^*d \\ c^*a + d^*b & c^*c + d^*d \end{pmatrix}$$

ところで、 $|u\rangle$ と $|v\rangle$ は、直交するから、 $\langle u|v\rangle = \langle v|u\rangle = 0$

$$(\langle 0|a^* + \langle 1|b^*)(c|0\rangle + d|1\rangle) = a^*c + b^*d = 0$$

$$(\langle 0|c^* + \langle 1|d^*)(a|0\rangle + b|1\rangle) = c^*a + d^*b = 0$$

$$U^\dagger U = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = I;$$

演習問題に追加

ユニタリ変換は内積を保存する

- ユニタリ演算子 U が、 $|v\rangle, |w\rangle$ に作用して、 $U|v\rangle, U|w\rangle$ が得られたとする。 $U|v\rangle$ と $U|w\rangle$ の内積を考える。
$$(U|v\rangle, U|w\rangle) = \langle v|U^\dagger U|w\rangle = \langle v|w\rangle$$
- すなわち、ユニタリ演算子を適用しても、二つのベクトルの内積は変化しない。**ユニタリ演算子は、内積を保存する。**

ユニタリ行列の固有値

ユニタリ行列 U の固有値を λ とする。この時、

$$\begin{aligned}U|x\rangle &= \lambda|x\rangle \\ \langle x|U^\dagger &= \lambda^*\langle x| \\ \langle x|U^\dagger U|x\rangle &= \lambda^*\lambda \langle x|x\rangle \\ \langle x|x\rangle &= \lambda^*\lambda \langle x|x\rangle \\ \lambda^*\lambda &= 1 \\ \therefore |\lambda|^2 &= 1\end{aligned}$$

ユニタリ行列の固有値の絶対値は 1 である。

ユニタリ行列の固有値は、単位円周上にある。 $\lambda = e^{i\theta}$

スペクトル分解の応用

スペクトル分解定理の応用(1)

ユニタリ行列の固有値の絶対値は 1 であることは、次のように、スペクトル分解定理を応用しても導くことができる。

ユニタリ行列 U は、正規なので、次のように表現できる。

$$U = \sum_j \lambda_j |e_j\rangle\langle e_j|$$

$$\sum_j |e_j\rangle\langle e_j| = I$$

$$= UU^\dagger$$

$$= \sum_j |\lambda_j|^2 |e_j\rangle\langle e_j|$$

$$\therefore |\lambda|^2 = 1$$



$$U = \sum_j e^{-i\phi_j} |e_j\rangle\langle e_j|$$

$$U^\dagger = \sum_j e^{i\phi_j} |e_j\rangle\langle e_j|$$

スペクトル分解定理の応用(2)

スペクトル分解定理を使って、エルミート行列 H の固有値が実数であることも、次のように示すことができる。

エルミート行列は正規なので、

$$H = \sum_i \lambda_i |e_i\rangle \langle e_i|$$

共役をとって、

$$H^\dagger = \sum_i \lambda_i^* |e_i\rangle \langle e_i|$$

$$H = H^\dagger \quad \text{だから、} \lambda_i = \lambda_i^*$$

よって、 λ は実数である。

スペクトル分解定理の応用(3)

正規演算子 N について、 N^2 を計算してみよう。

$$\begin{aligned} N^2 &= N \times N \\ &= \left(\sum_i \lambda_i |e_i\rangle \langle e_i| \right) \left(\sum_j \lambda_j |e_j\rangle \langle e_j| \right) \\ &= \sum_i \lambda_i^2 |e_i\rangle \langle e_i|. \end{aligned}$$

一般に、

$$f(N) = \sum_i f(\lambda_i) |e_i\rangle \langle e_i|$$

時間発展の演算子

時間発展の演算子

時刻 t での量子の状態を、 $|\Psi(t)\rangle$ で表してみよう。

$t=0$ の時の状態を $|\Psi(0)\rangle$ とすると、ある時間発展を表現する演算子 $U(t)$ を使って、次の式が成り立つとする。

$$|\Psi(t)\rangle = U(t)|\Psi(0)\rangle$$

二つの状態が「区別」
できることは、それが
「直交」していることに
等しい

$t=0$ の時に、 $|\Psi(0)\rangle$ と $|\Phi(0)\rangle$ は、直交していたとする。

すなわち、 $\langle\Psi(0)|\Phi(0)\rangle = 0$ かつ $\langle\Psi(t)|\Phi(t)\rangle = 0$

$t=0$ での直交関係は、時間がたっても、直交したままで、変わらない。

この時、 $\langle\Psi(t)| = \langle\Psi(0)|U^\dagger(t)$ だから、

$$\langle\Psi(t)|\Phi(t)\rangle = \langle\Psi(0)|U^\dagger(t)U(t)|\Phi(0)\rangle = 0.$$

時間発展の演算子

Ψ 、 Φ の異なる直交基底 i, j をとると、先の式から、

$$\langle i | \mathbf{U}^\dagger(t) \mathbf{U}(t) | j \rangle = 0 \quad (i \neq j)$$

もし、 $i=j$ なら、 $\mathbf{U}(t) | i \rangle$ と $\mathbf{U}(t) | j \rangle$ の内積は、1である。

$$\langle i | \mathbf{U}^\dagger(t) \mathbf{U}(t) | j \rangle = \delta_{ij}$$

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

時間発展の演算子は、ユニタリである。

ハミルトニアン

微小な時間変化 ϵ を考える。

時間発展のユニタリ性から、 $U^\dagger(\epsilon)U(\epsilon) = I$

ϵ が、極めて小さいとすれば、この演算子の作用は、恒等作用 I とごく近いと考えて、 $U(\epsilon) = I - i\epsilon H$ とおく。

この時、 $U^\dagger(\epsilon) = I + i\epsilon H^\dagger$ である。

これを、先のユニタリ性の式に代入すると、

$$(I + i\epsilon H^\dagger)(I - i\epsilon H) = I$$

ϵ の二次の項を無視すると、 $H^\dagger - H = 0$

よって、この H は、エルミートである。

この H をハミルトニアンと呼ぶ。

ここでの $-i\epsilon H$
という設定は、
「天下り」のもの
である。

シュレジンガー方程式

$$U(\epsilon) = I - i\epsilon H$$

$|\Psi(\epsilon)\rangle = |\Psi(0)\rangle - i\epsilon H|\Psi(0)\rangle$ が成り立つので、

$$\frac{|\Psi(\epsilon)\rangle - |\Psi(0)\rangle}{\epsilon} = -iH|\Psi(0)\rangle$$

これから、

$$\frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} = -iH|\Psi\rangle$$

両辺が、エネルギー(例えば、
ジュール: $\text{kg}\cdot\text{m}^2/\text{s}^2$)を表す
ように、次元を揃える

これを、時間発展のシュレジンガー方程式と呼ぶ。

$$\hbar \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} = -iH|\Psi\rangle.$$

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.054571726 \cdots \times 10^{-34} \text{ kg m}^2/\text{s}^2$$

ここでは、学ばないこと 量子力学は、ここから始まるのだが

- ハミルトニアン H は、古典論でのエネルギーに相当する Observable である。
- 観測されるエネルギーの値は、 H の固有値 E_j である。

$$H|E_j\rangle = E_j|E_j\rangle$$

この式を、**時間に依存しないシュレジンガー方程式**と呼ぶ。

- 先の $\frac{\partial|\Psi\rangle}{\partial t} = -iH|\Psi\rangle$ は、

次の、よく知られたシュレジンガー方程式と同値である。

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x)}{\partial x^2} + U(x)\Psi(x)$$

ここでは、学ばないこと 量子力学は、ここから始まるのだが

- ある系 $\Psi(t)$ のオブザーバブル L の観測値の期待値 $\langle L \rangle$ は、 $\langle L \rangle = \langle \Psi(t) | L | \Psi(t) \rangle$ で与えられる。 t で微分すると、次の式が得られる。ドットは、時間微分を表す。

$$\frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | \mathbf{L} | \Psi(t) \rangle = \langle \dot{\Psi}(t) | \mathbf{L} | \Psi(t) \rangle + \langle \Psi(t) | \mathbf{L} | \dot{\Psi}(t) \rangle$$

- この時、

$$\frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | \mathbf{L} | \Psi(t) \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle \Psi(t) | \mathbf{H} \mathbf{L} | \Psi(t) \rangle - \frac{i}{\hbar} \langle \Psi(t) | \mathbf{L} \mathbf{H} | \Psi(t) \rangle$$

ここでは、 $\hbar \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} = -i \mathbf{H} |\Psi\rangle$ と、その複素共役を使った。

ここでは、学ばないこと 量子力学は、ここから始まるのだが

- 先の式を整理すると、

$$\frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | \mathbf{L} | \Psi(t) \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle \Psi(t) | [\mathbf{H}\mathbf{L} - \mathbf{L}\mathbf{H}] | \Psi(t) \rangle$$

- $\mathbf{H}\mathbf{L} - \mathbf{L}\mathbf{H} = [\mathbf{H}, \mathbf{L}]$ で表す (これを、 $\mathbf{H}$ と $\mathbf{L}$ の交換関係という) と、次の式が得られる。

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{L} \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\mathbf{H}, \mathbf{L}] \rangle$$

- $\mathbf{L} = \mathbf{H}$ とすると、 $[\mathbf{H}, \mathbf{H}] = 0$ だから、 $\mathbf{H}$ の期待値の時間微分は0であることがわかる。**これは、エネルギーの保存則**を表している。

ここでは、学ばないこと アニーリング型量子コンピュータ

- 小論では、ゲート型の量子コンピュータのみを取り上げた。アニーリング型の量子コンピュータについては、触れていない。
- ゲート型の量子コンピュータは、量子の状態変化がユニタリ演算子によって記述できることを原理とする。ゲートとは、ユニタリ演算子に他ならない。そこでは、回路のエネルギー(ハミルトニアン)は、問題にならない。
- 一方、アニーリング型の量子コンピュータでは、ある物理系が全体として、エネルギーを最小にする状態に向かうことを利用する。そこでは、個々の量子の、個別のユニタリな変化にはフォーカスしない。
- ただ、両者の関係について、近年、新しい知見が得られているように思う。

演習問題 3-1 エルミート行列

□ 次の行列は、エルミートか？（ $H=H^\dagger$ かをチェックする）

1.
$$\begin{pmatrix} 0 & 3 \\ 2+3i & i \end{pmatrix}$$

2.
$$\begin{pmatrix} 0 & 2-3i \\ 2+3i & 1 \end{pmatrix}$$

3.
$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & -i \\ 0 & i & 1 \\ i & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

4.
$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 1 \\ i & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

対角線上の要素が実数で、対角線を挟んで対称な要素が複素共役であればいい

演習問題 3-2 ユニタリ行列1

次の行列は、エルミートか？ また、ユニタリか？

1. $A = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}$

2. $A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \frac{2}{1+i} \\ 0 & 0 & 0 \\ 1+i & 0 & 0 \end{pmatrix}$ $\frac{2}{1+i} = \frac{2}{1+i} \frac{1-i}{1-i} = \frac{2(1-i)}{2} = 1-i$ と変形する

3. $R = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}$ は、ユニタリであるか？

4. $X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $Y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$, $Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ の時、
 X, Y, Z は、エルミートでユニタリであることを確かめよ。

演習問題 3-3 ユニタリ行列2

1. $H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$ が、ユニタリであることを確かめよ。
2. H の固有ベクトルの一つが、 $\begin{pmatrix} 1 \\ -1 + \sqrt{2} \end{pmatrix}$ であることを確かめよ。
3. $S = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}$ の時、 S はエルミートか？ ユニタリか？
4. $T = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \exp(i\pi/4) \end{pmatrix}$ の時、 S はユニタリか？
5. $T^2 = S$ を示せ。

量子ゲートを組み合わせて 量子回路を構成する

n-qubit システムとしての量子回路

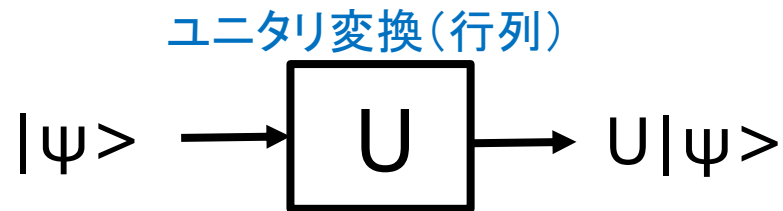
ここで学ぶこと

1. 量子の状態は、ユニタリ変換で変化する。
2. 量子ゲートとは、数学的なユニタリ変換を「物理化」したものである。
3. 直列に接続された量子ゲートの作用は、対応するユニタリ行列の積で表現できる。
4. 並列に接続された量子ゲートの作用は、対応するユニタリ行列のテンソル積で表現できる。
5. Bell State ゲートについて

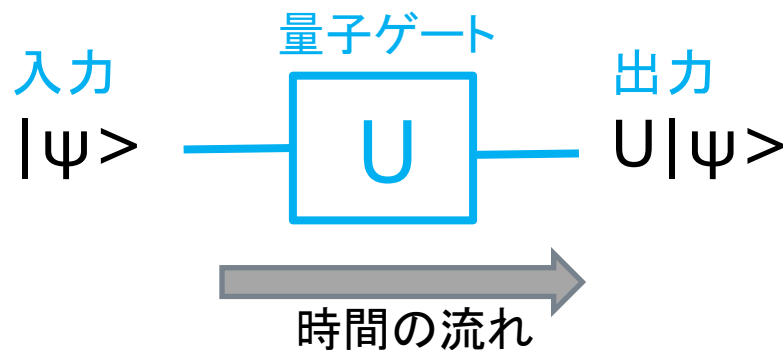
1-qubit ゲート

量子ゲートとユニタリ行列

- 量子の状態 $|\psi\rangle$ は、ユニタリ変換 U (ユニタリ行列) の作用を受けて、状態 $U|\psi\rangle$ に変化する。
- この変化 $|\psi\rangle \rightarrow U|\psi\rangle$ を、次のように表そう。



- この時、 U を、 $|\psi\rangle$ を入力、 $U|\psi\rangle$ を出力とする回路と考えることができる。これを、「量子ゲート」と呼ぶ。

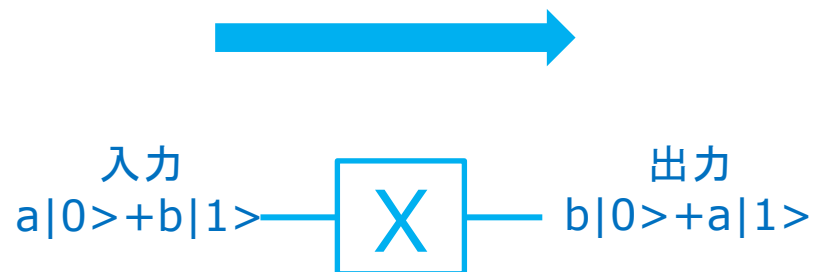


量子ゲートは
ユニタリ行列と
一対一に対応する

X, Z, H の行列と対応する量子ゲートの働き

$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ なので、

$$X \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix}$$



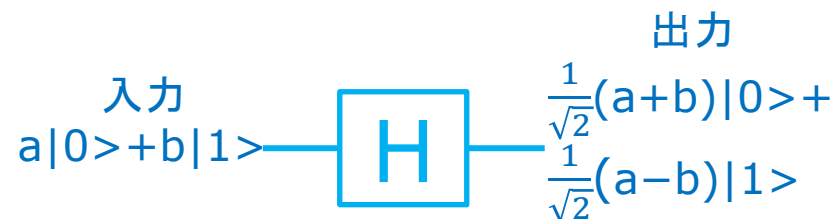
$Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ なので、

$$Z \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ -b \end{pmatrix}$$



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

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



代表的な1-qubitのゲート X, Z, H

入力  出力



Bit Flipper

$$a|0\rangle + b|1\rangle \rightarrow b|0\rangle + a|1\rangle$$



Phase Flipper

$$a|0\rangle + b|1\rangle \rightarrow a|0\rangle - b|1\rangle$$



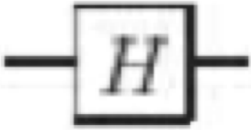
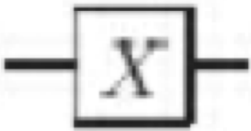
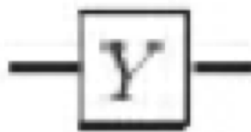
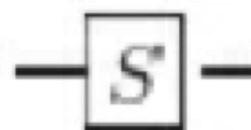
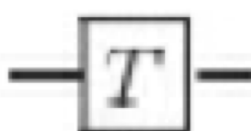
Hadamard

$$a|0\rangle + b|1\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(a+b)|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}(a-b)|1\rangle$$

演習課題 2-3

$|0\rangle, |1\rangle$ 基底から
 $|+\rangle, |-\rangle$ 基底への変換

1-qubitの量子ゲートの例とそれに対応する行列

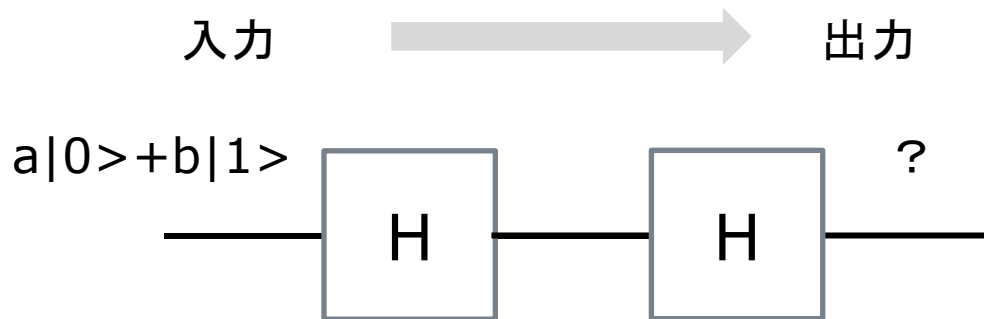
Hadamard		$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$
Pauli-X		$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$
Pauli-Y		$\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$
Pauli-Z		$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$
Phase		$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{bmatrix}$
$\pi/8$		$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\pi/4} \end{bmatrix}$

ゲートを直列に組み合わせる

ゲートを直列に組み合わせる

ゲートを直列に組み合わせた回路の働きは、直列の回路を構成するゲートの**行列の積**を計算することで、求めることができる。

二つのHゲートを直列につないだ、次のような回路を考えてみよう。

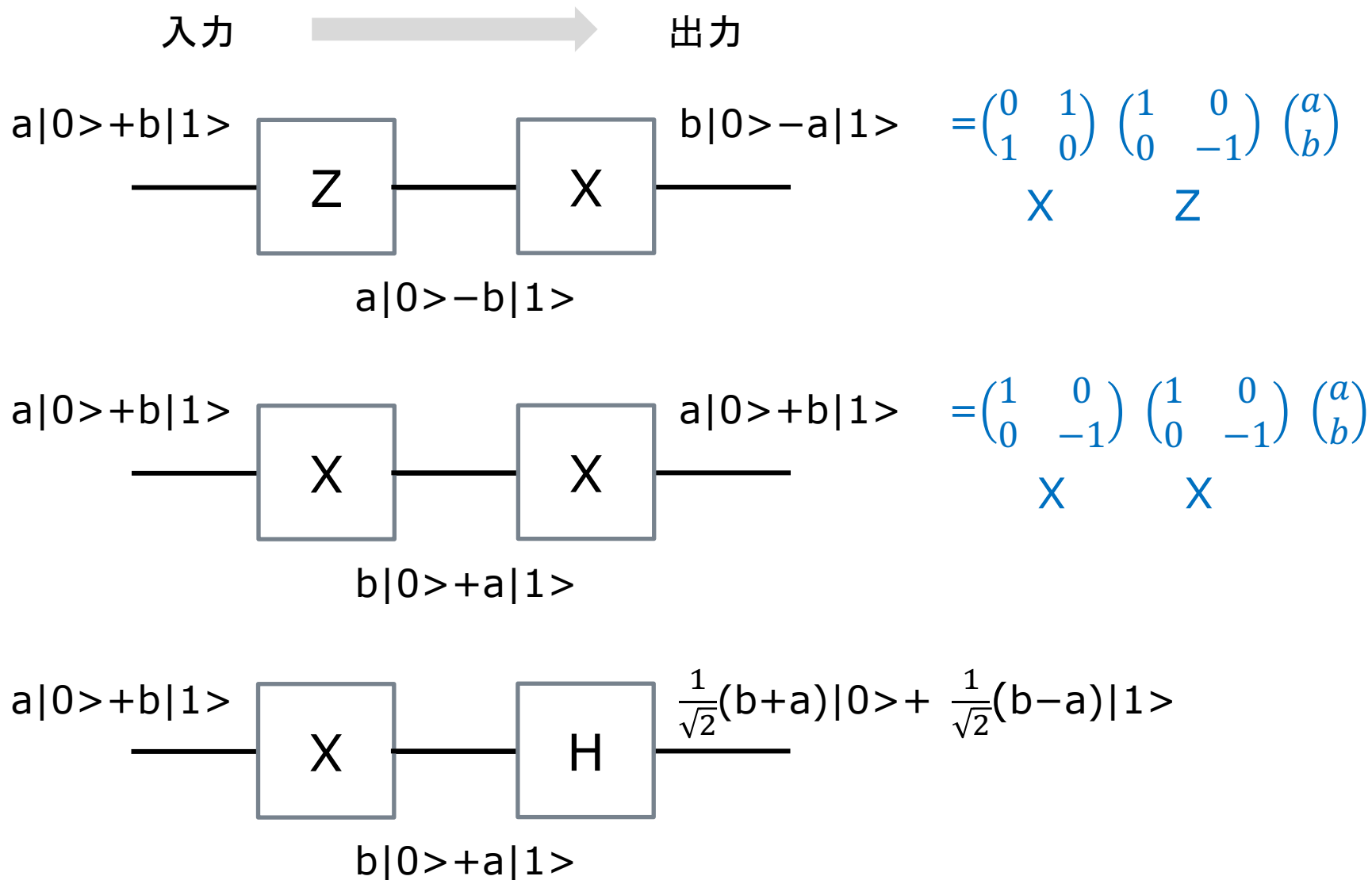


$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$ なので、行列の積 HH を計算する。

$$HH = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

これは単位行列なので、先の回路の出力は、 $a|0\rangle + b|1\rangle$

1-qubitのゲートを、直列に組み合わせる (1)



1-qubitのゲートを、直列に組み合わせる (2)

$$R_k = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{2\pi i/2^k} \end{pmatrix} \text{ とする。}$$

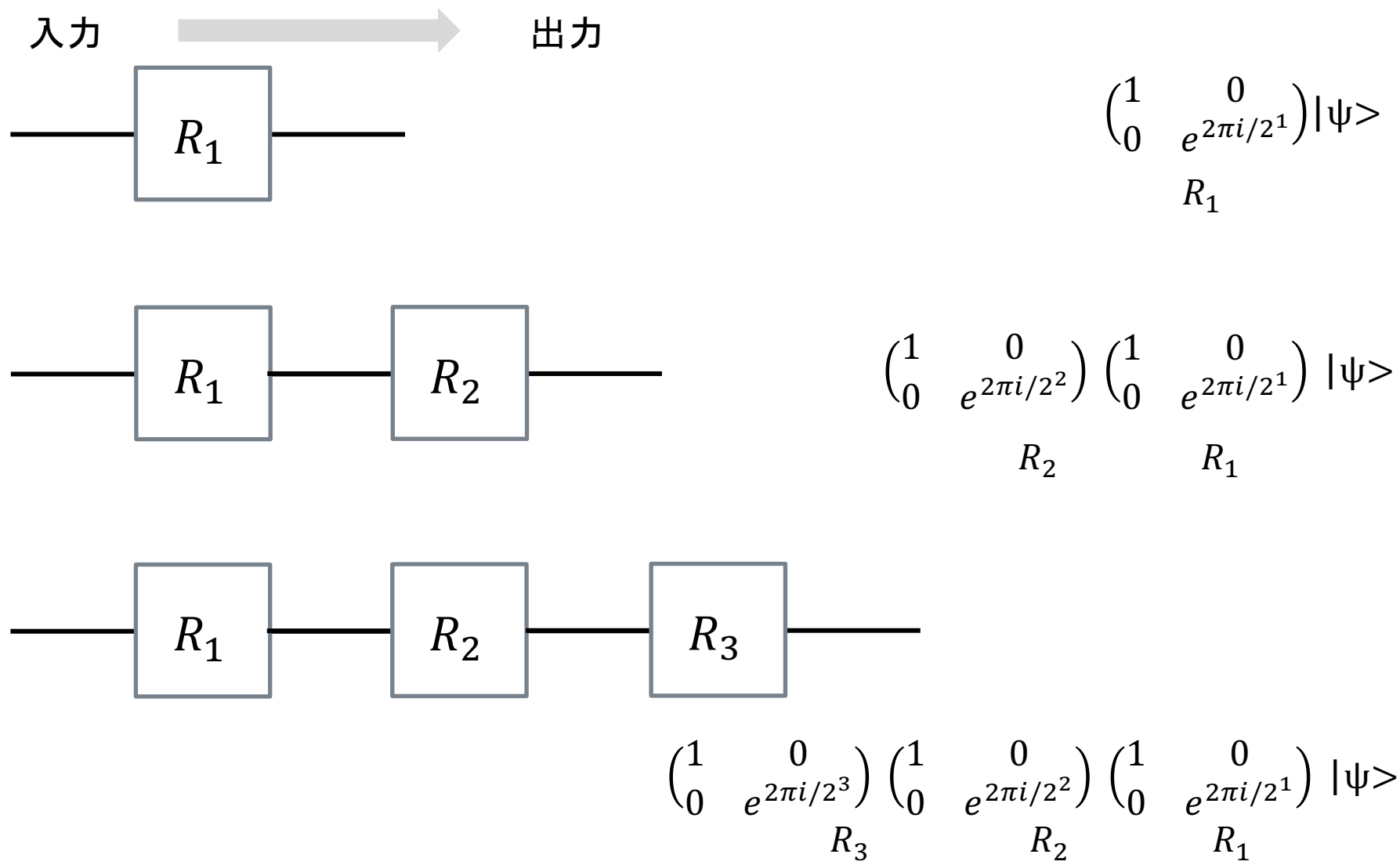
$$R_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{2\pi i/2^1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$R_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{2\pi i/2^2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}$$

$$R_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{2\pi i/2^3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{1}{\sqrt{2}} i \end{pmatrix}$$

$$R_4 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{2\pi i/2^4} \end{pmatrix} = \dots$$

1-qubitのゲートを、直列に組み合わせる (2)

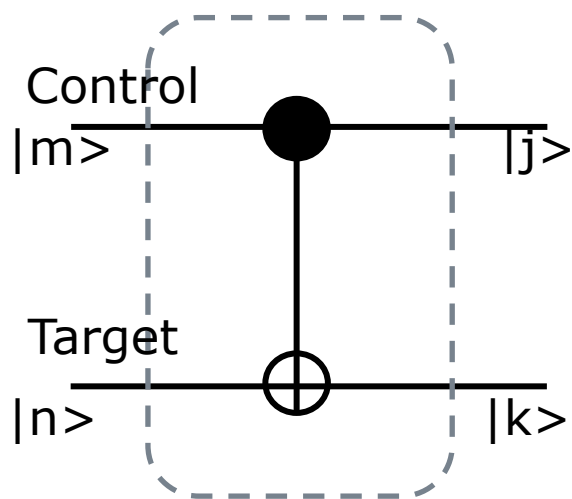


2-qubitのゲート

CNOTゲートとControl-Uゲート

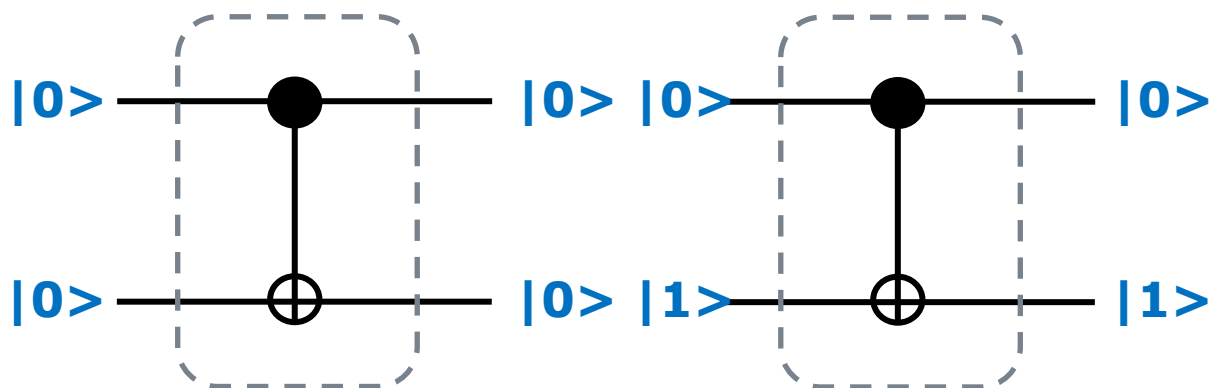
2-qubitのゲート CNOT (Control-NOT)

Control が $|1\rangle$ の時
Target のNOTをとる

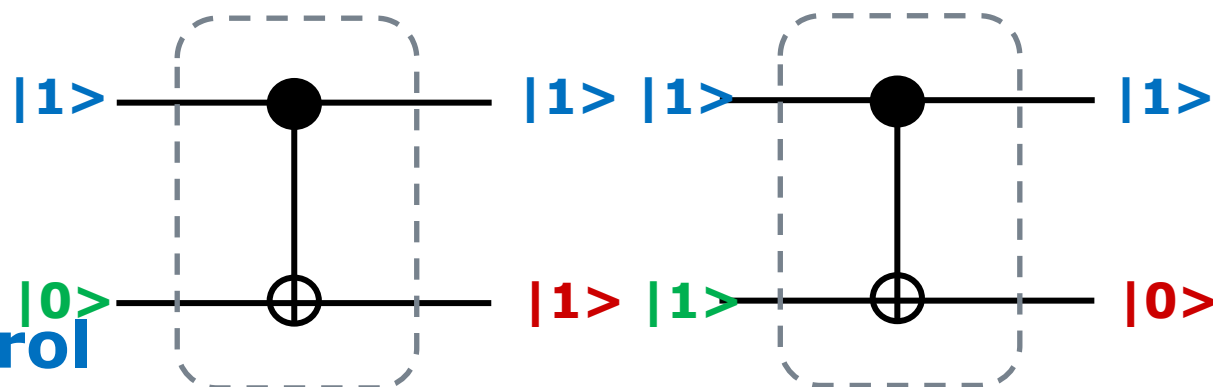


$|mn\rangle$ の
第一bit $|m\rangle$ がControl
第二bit $|n\rangle$ がTarget

Controlが $|0\rangle$ なら何もしない

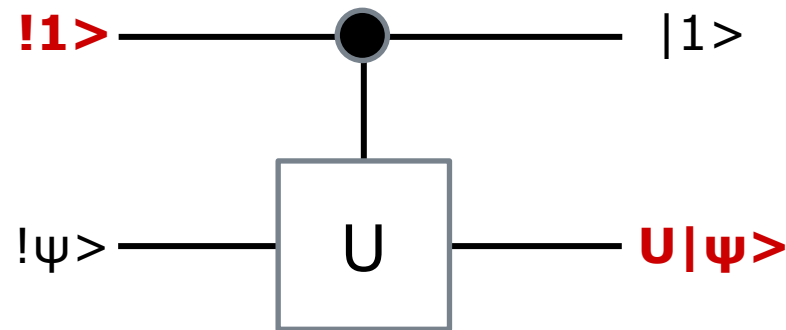
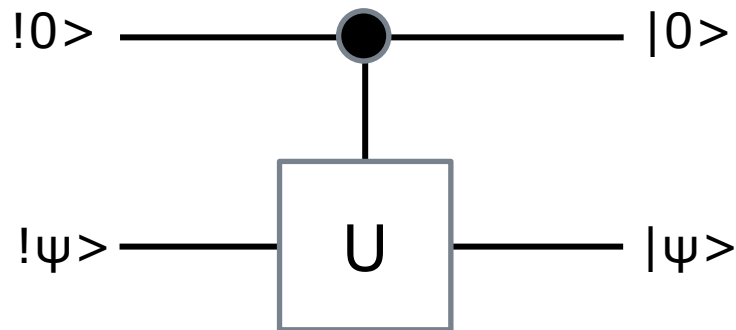


Controlが $|1\rangle$ ならNOT操作



2-qubitのゲート **Control-U**

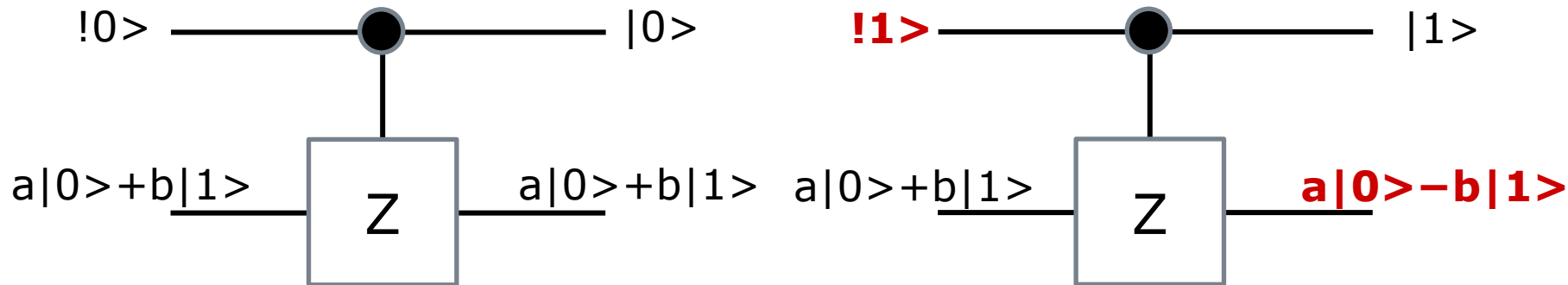
コントロール qubit が、 $|0\rangle$ の時には、何もせず、(左図)
コントロール qubit が、 $|1\rangle$ の時には、ターゲットのqubit
 $|\psi\rangle$ にユニタリ演算子 U を適用した $U|\psi\rangle$ を出力する(右図)
ゲートを、**Control-U** ゲートという。



2-qubitのゲート Control-U の例 (1)

Control-Z

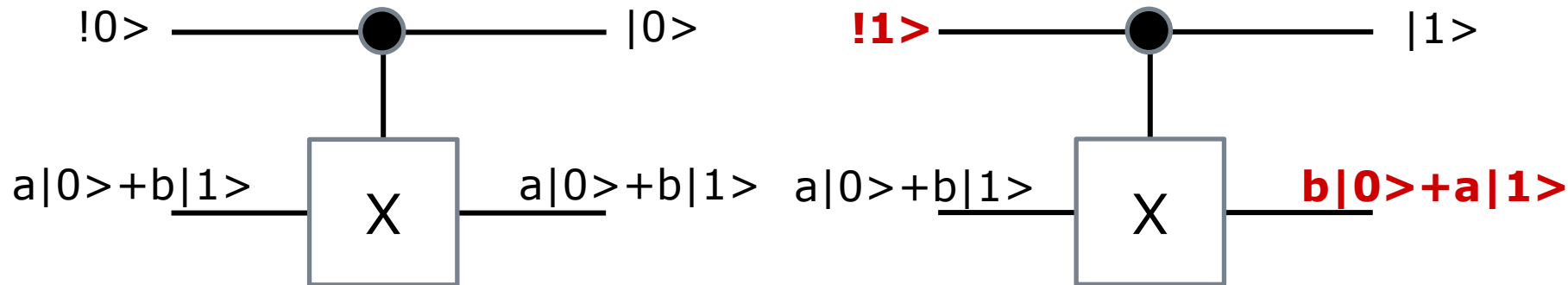
コントロール qubit が、 $|0\rangle$ の時には、何もせず、(左図)
コントロール qubit が、 $|1\rangle$ の時には、ターゲットのqubit
 $|\psi\rangle$ にユニタリ演算子 Z を適用した $Z|\psi\rangle$ を出力する(右図)



2-qubitのゲート Control-U の例 (2)

Control-X

コントロール qubit が、 $|0\rangle$ の時には、何もせず、(左図)
コントロール qubit が、 $|1\rangle$ の時には、ターゲットのqubit $|\psi\rangle$ にユニタリ演算子 X を適用した $X|\psi\rangle$ を出力する(右図)



Control-Xは、CNOTと等しいことを確かめよ

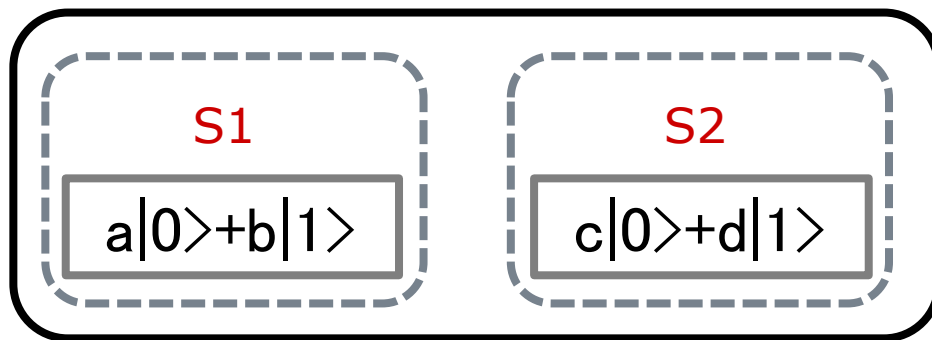
独立した二つのシステムを
一つのシステムと考える

テンソル積

2つのqubitからなるシステム（テンソル積）

qubit $a|0\rangle + b|1\rangle$ のみを含むシステムをS1、
qubit $c|0\rangle + d|1\rangle$ のみを含むシステムをS2とした時、
この二つを一緒にしたシステムSを テンソル積 $S1 \otimes S2$ で表す。

$$S = S1 \otimes S2$$

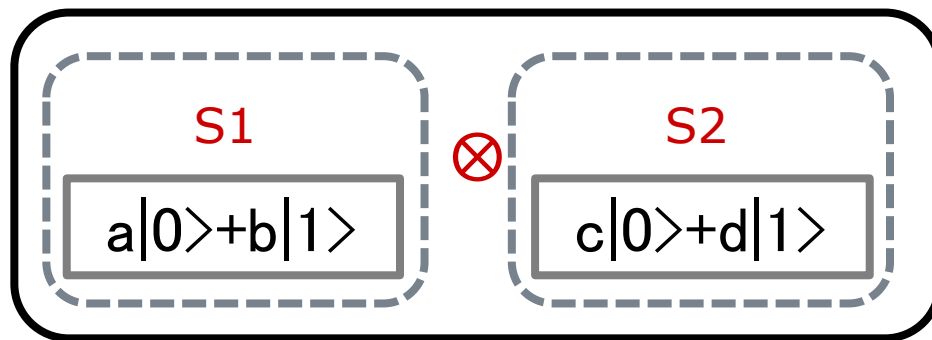


2つのqubitからなるシステム（テンソル積）

この時、次のような計算で、 S の状態を計算する。

$$\begin{aligned} S &= S1 \otimes S2 = (a|0\rangle + b|1\rangle) \otimes (c|0\rangle + d|1\rangle) \\ &= ac|0\rangle \otimes |0\rangle + ad|0\rangle \otimes |1\rangle + bc|1\rangle \otimes |0\rangle + bd|1\rangle \otimes |1\rangle \end{aligned}$$

$$S = S1 \otimes S2$$



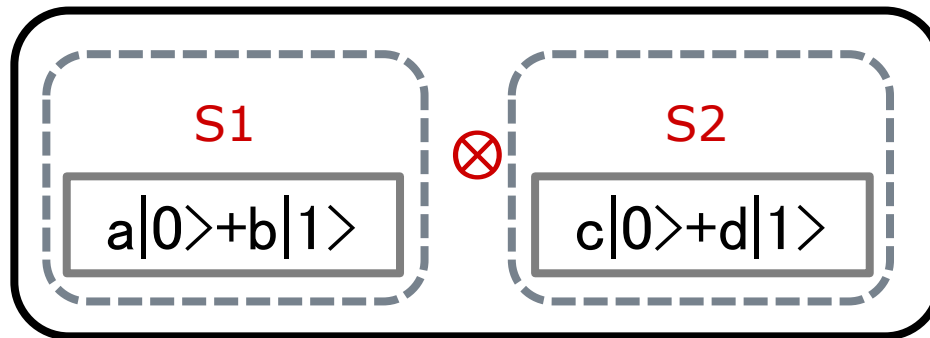
$$= ac|0\rangle \otimes |0\rangle + ad|0\rangle \otimes |1\rangle + bc|1\rangle \otimes |0\rangle + bd|1\rangle \otimes |1\rangle$$

2つのqubitからなるシステム（テンソル積）

$|x\rangle \otimes |y\rangle$ を $|xy\rangle$ と表すことにすると、

$$\begin{aligned} S &= S1 \otimes S2 = (a|0\rangle + b|1\rangle) \otimes (c|0\rangle + d|1\rangle) \\ &= ac|0\rangle \otimes |0\rangle + ad|0\rangle \otimes |1\rangle + bc|1\rangle \otimes |0\rangle + bd|1\rangle \otimes |1\rangle \\ &= ac|00\rangle + ad|01\rangle + bc|10\rangle + bd|11\rangle \end{aligned}$$

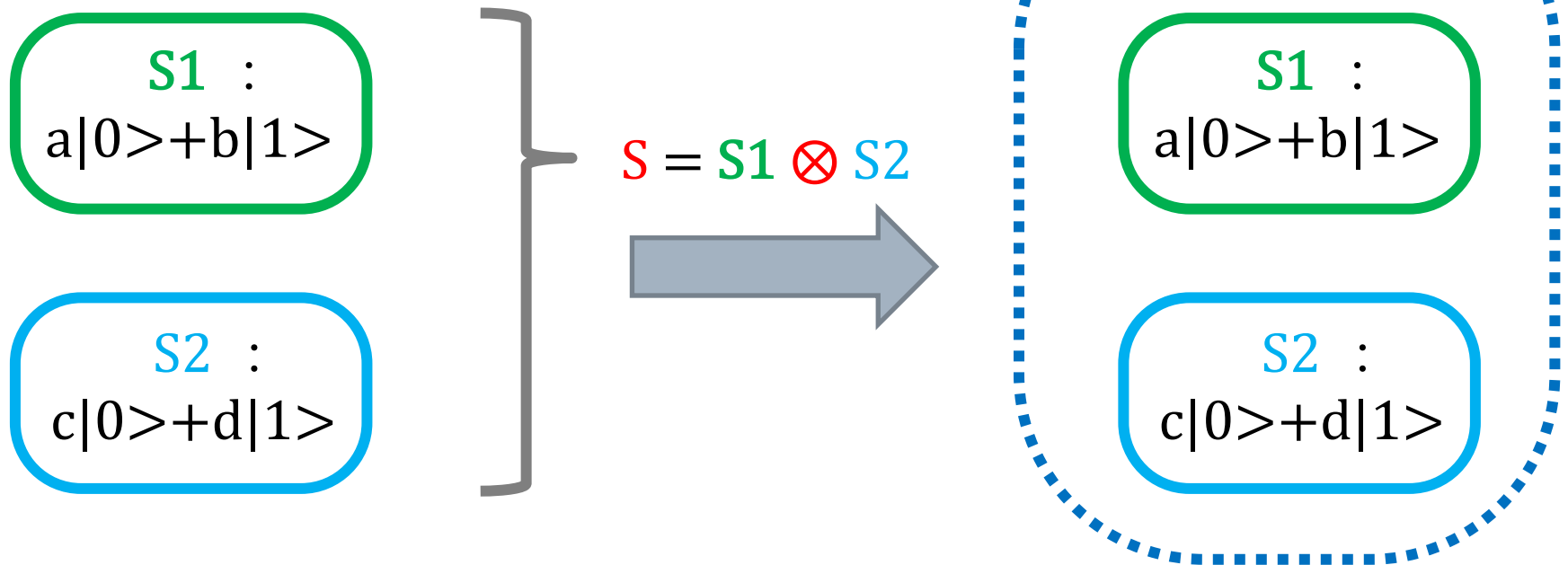
$S = S1 \otimes S2$



$$\begin{aligned} &= ac|0\rangle \otimes |0\rangle + ad|0\rangle \otimes |1\rangle + bc|1\rangle \otimes |0\rangle + bd|1\rangle \otimes |1\rangle \\ &= ac|00\rangle + ad|01\rangle + bc|10\rangle + bd|11\rangle \end{aligned}$$

もう一度、テンソル積(縦バージョン)

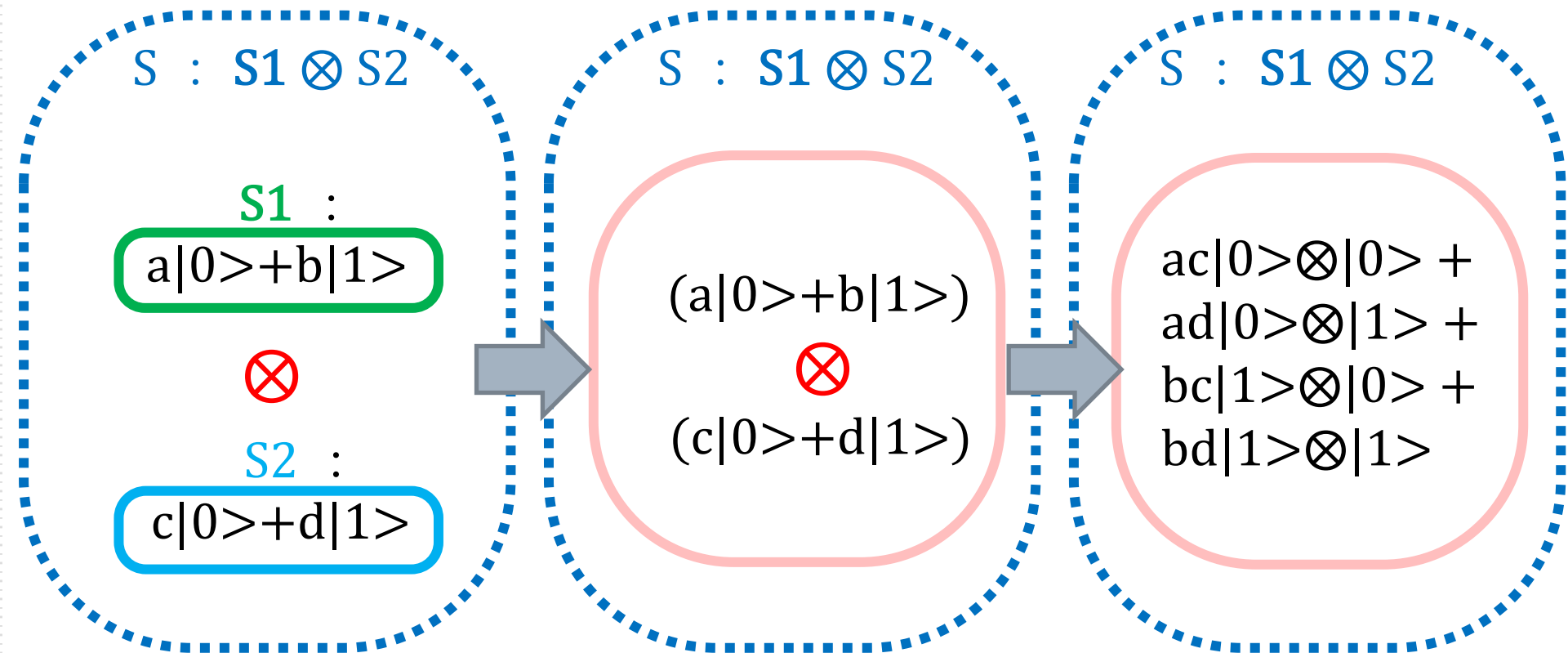
- qubit $a|0\rangle + b|1\rangle$ のみを含むシステム $S1$ 、
qubit $c|0\rangle + d|1\rangle$ のみを含むシステム $S2$
があるとして。
この二つを一緒にしたシステム S を
テンソル積 $S1 \otimes S2$ で表す。



もう一度、テンソル積(縦バージョン)

□ この時、次のような計算で、 S の状態を計算する。

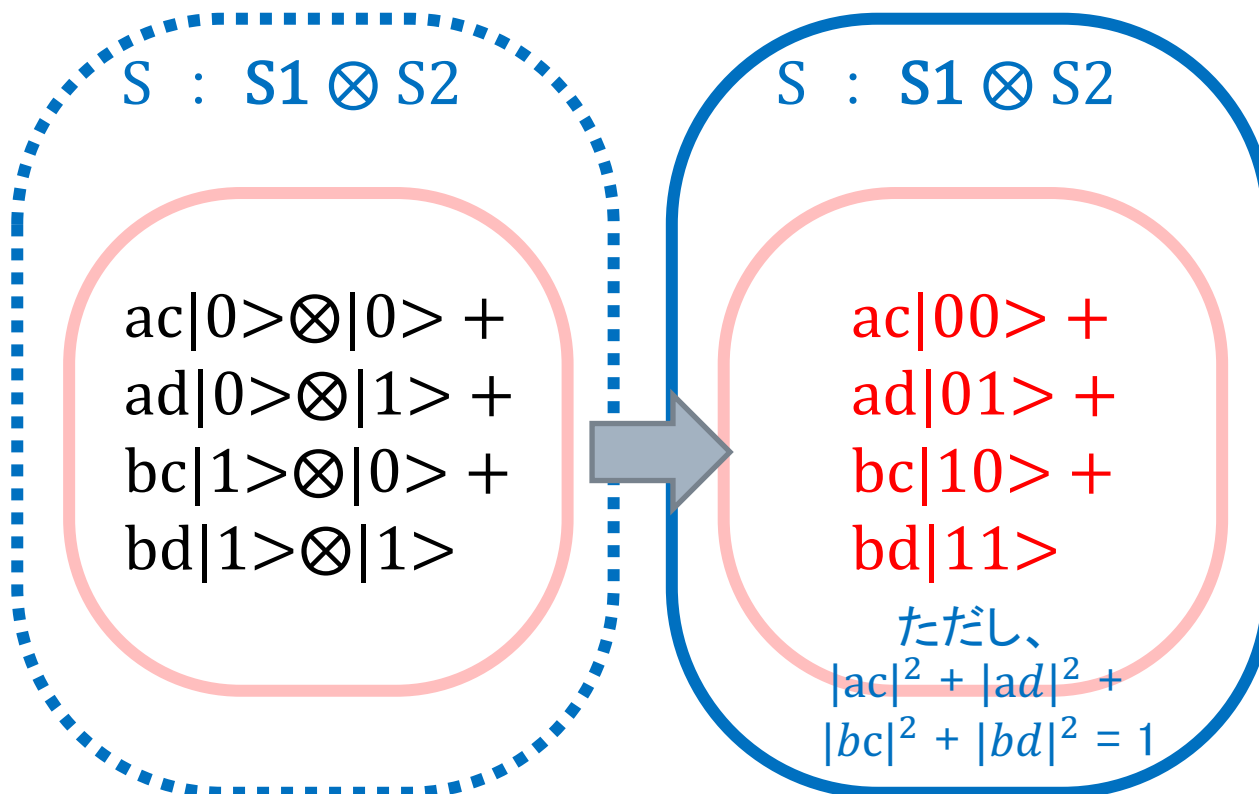
$$\begin{aligned} S &= S1 \otimes S2 = (a|0\rangle + b|1\rangle) \otimes (c|0\rangle + d|1\rangle) \\ &= ac|0\rangle \otimes |0\rangle + ad|0\rangle \otimes |1\rangle + bc|1\rangle \otimes |0\rangle + bd|1\rangle \otimes |1\rangle \end{aligned}$$



もう一度、テンソル積(縦バージョン)

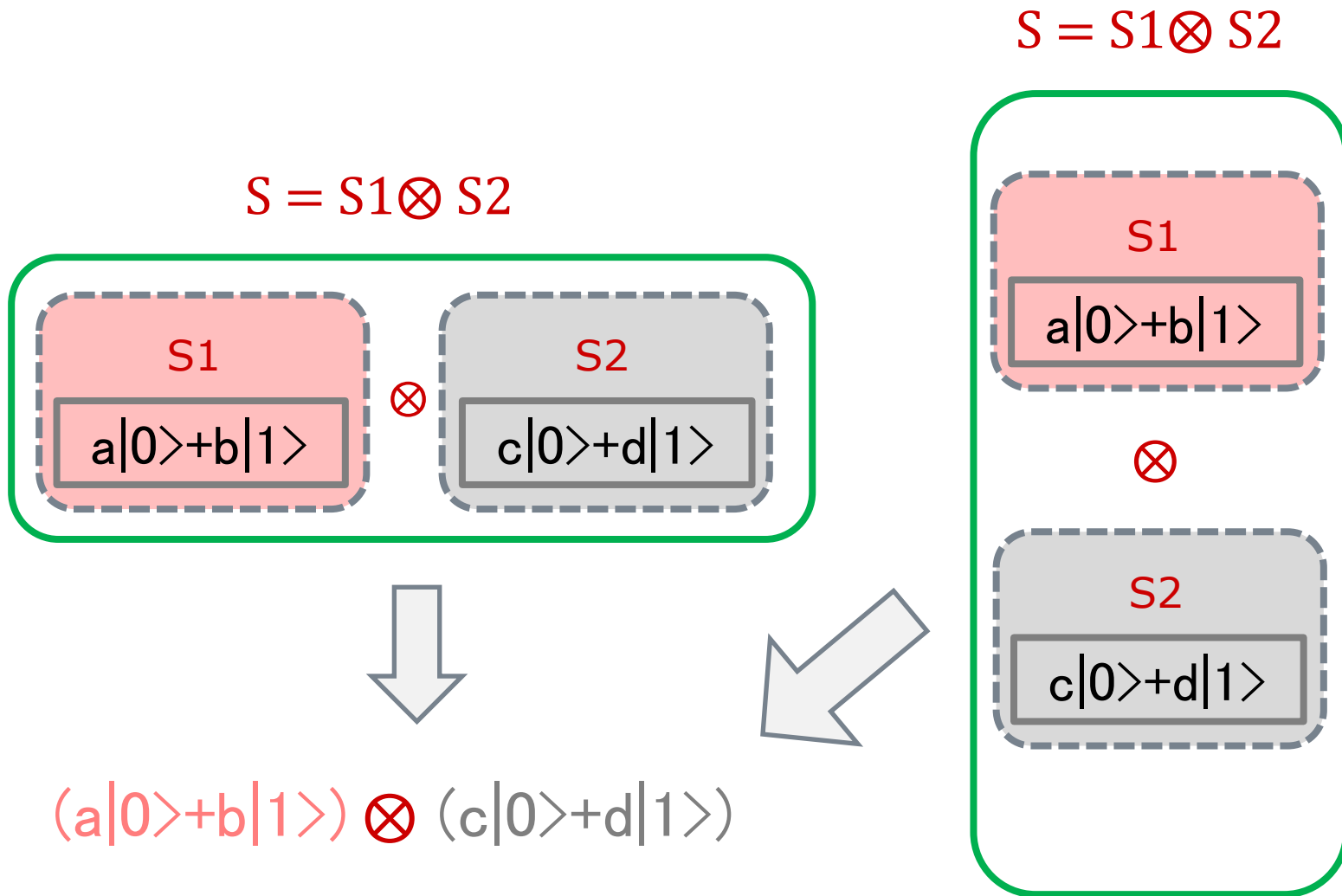
□ $|a\rangle \otimes |b\rangle$ を $|ab\rangle$ と表すことにする。

$$\begin{aligned} |0\rangle \otimes |0\rangle &\rightarrow |00\rangle, & |0\rangle \otimes |1\rangle &\rightarrow |01\rangle, \\ |1\rangle \otimes |0\rangle &\rightarrow |10\rangle, & |1\rangle \otimes |1\rangle &\rightarrow |11\rangle \end{aligned}$$



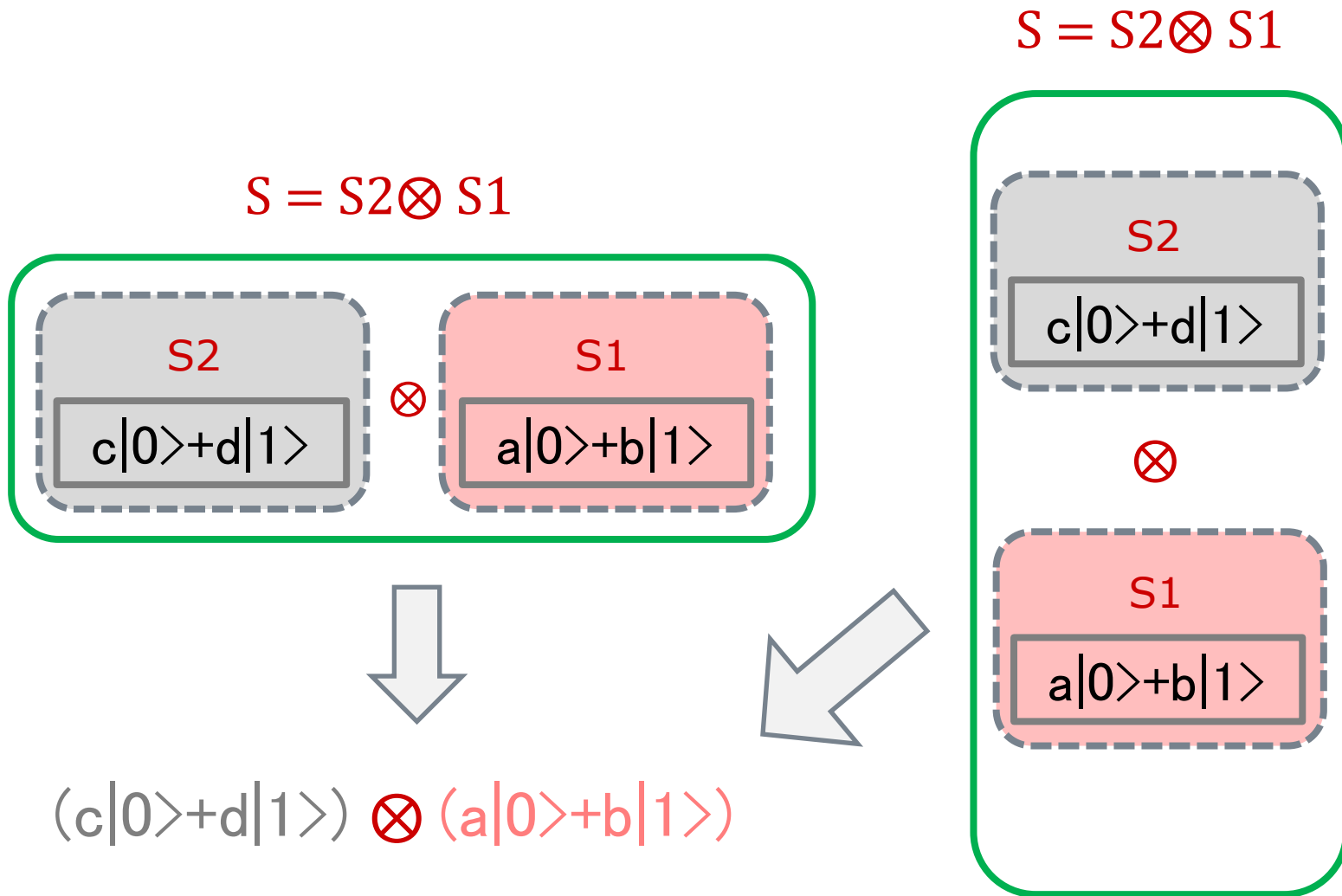
テンソル積 横と縦

この二つは、同じテンソル積 $S1 \otimes S2$ を表す



テンソル積 横と縦

この二つは、同じテンソル積 $S2 \otimes S1$ を表す



Two Qubitの計算例

- 第一のQubitが、 $3/5|0\rangle + 4/5|1\rangle$ で、
第二のQubitが、 $1/\sqrt{2}|0\rangle - 1/\sqrt{2}|1\rangle$ としよう。
- この二つのQubitが結合したシステムの状態は、
 $(3/5|0\rangle + 4/5|1\rangle) \otimes (1/\sqrt{2}|0\rangle - 1/\sqrt{2}|1\rangle)$
 $= 3/5\sqrt{2}|00\rangle - 3/5\sqrt{2}|01\rangle + 4/5\sqrt{2}|10\rangle - 4/5\sqrt{2}|11\rangle$
のように計算される。(⊗ を、普通の掛け算のように計算した。)
- ところで、全ての Two Qubitsの状態は、二つのQubitの状態の組み合わせに、分解できるだろうか？

Two Qubitsのシステム

- 二つのQubitのシステムは、 $|00\rangle$, $|01\rangle$, $|10\rangle$, $|11\rangle$ の四つの状態を持つので、次のように表現される。

$$|\psi\rangle = \alpha_{00} |00\rangle + \alpha_{01} |01\rangle + \alpha_{10} |10\rangle + \alpha_{11} |11\rangle$$

ここで、 $\alpha_{ij} \in \mathbb{C}$, $\sum_{ij} |\alpha_{ij}|^2 = 1$. である。

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_{00} \\ \alpha_{01} \\ \alpha_{10} \\ \alpha_{11} \end{pmatrix} \text{ である。}$$

- この時、 $|00\rangle$ が観測される確率は、 $|\alpha_{00}|^2$ で、観測後の状態は、 $|00\rangle$ に変わる。

3つのqubitからなるシステム

- 先のSに、もう一つqubit $e|0\rangle + f|1\rangle$ のみを含むシステムS3を追加して、3つのqubitからなるシステムを考えよう。改めて、これもSとすると

$$\begin{aligned} S &= S1 \otimes S2 \otimes S3 \\ &= (a|0\rangle + b|1\rangle) \otimes (c|0\rangle + d|1\rangle) \otimes (e|0\rangle + f|1\rangle) \\ &= \dots \\ &= A|000\rangle + B|001\rangle + C|010\rangle + D|011\rangle \\ &\quad + E|100\rangle + F|101\rangle + G|110\rangle + H|111\rangle \end{aligned}$$

という 8つの状態の重ね合わせの形になる。

ここで、 $|x\rangle \otimes |y\rangle \otimes |z\rangle$ を $|xyz\rangle$ と表している。

行列のテンソル積

行列のテンソル積

行列のテンソル積を次のように定義する。(2×2行列で例示)

$$A \otimes B = \begin{pmatrix} A_{11}B & A_{12}B \\ A_{21}B & A_{22}B \end{pmatrix}$$

Bの成分も書くと、

$$A \otimes B = \begin{pmatrix} \boxed{A_{11}B_{11} \quad A_{11}B_{12}} & \boxed{A_{12}B_{11} \quad A_{12}B_{12}} \\ \boxed{A_{11}B_{21} \quad A_{11}B_{22}} & \boxed{A_{12}B_{21} \quad A_{12}B_{22}} \\ \boxed{A_{21}B_{11} \quad A_{21}B_{12}} & \boxed{A_{22}B_{11} \quad A_{22}B_{12}} \\ \boxed{A_{21}B_{21} \quad A_{21}B_{22}} & \boxed{A_{22}B_{21} \quad A_{22}B_{22}} \end{pmatrix}$$

行列のテンソル積の例 (1)

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}, B = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix} \text{ としよう。}$$

$$A \otimes B = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{-1} \\ \mathbf{0} & \mathbf{2} \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{1} \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix} & \mathbf{-1} \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix} \\ \mathbf{0} \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix} & \mathbf{2} \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 2 & -1 & -2 \\ 3 & 4 & -3 & -4 \\ 0 & 0 & 2 & 4 \\ 0 & 0 & 6 & 8 \end{pmatrix}$$

行列のテンソル積の例 (2)

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}, B = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix} \text{ としよう。}$$

$$B \otimes A = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{2} \\ \mathbf{3} & \mathbf{4} \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{1} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} & \mathbf{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \\ \mathbf{3} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} & \mathbf{4} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & -1 & 2 & -2 \\ 0 & 2 & 0 & 4 \\ 3 & -3 & 4 & -4 \\ 0 & 6 & 0 & 8 \end{pmatrix}$$

テンソル積では、
 $A \otimes B \neq B \otimes A$
である

ベクトルのテンソル積

ベクトルは、 $n \times 1$ の行列であるから、

$$\begin{pmatrix} a_{11} \\ a_{21} \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} b_{11} \\ b_{21} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} \begin{pmatrix} b_{11} \\ b_{21} \end{pmatrix} \\ a_{21} \begin{pmatrix} b_{11} \\ b_{21} \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11}b_{11} \\ a_{11}b_{21} \\ a_{21}b_{11} \\ a_{21}b_{21} \end{pmatrix}$$

ベクトルのテンソル積の例 (1)

$$\begin{pmatrix} \textcolor{blue}{1} \\ \textcolor{blue}{2} \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \textcolor{blue}{1} \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix} \\ \textcolor{blue}{2} \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \\ 6 \\ 8 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \textcolor{blue}{3} \\ \textcolor{blue}{4} \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \textcolor{blue}{3} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} \\ \textcolor{blue}{4} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ 6 \\ 4 \\ 8 \end{pmatrix}$$

ベクトルのテンソル積の例 (2)

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

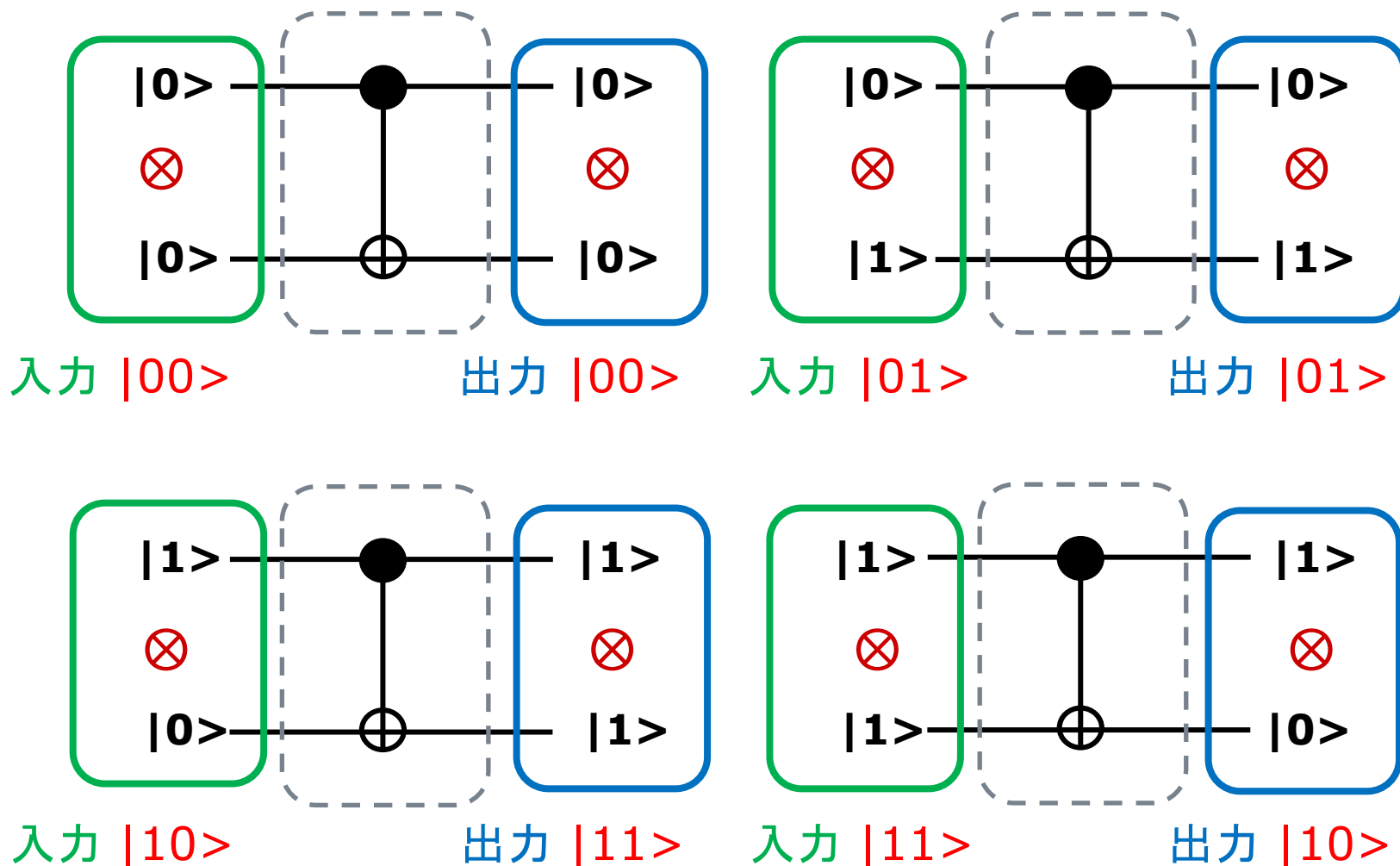
$$|01\rangle = |0\rangle \otimes |1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$|10\rangle = |1\rangle \otimes |0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

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

CNOTの入力と出力を
テンソル積で表示する

CNOT の入力と出力をテンソル積で表示する



CNOTの行列表示

$$|00\rangle \rightarrow |00\rangle \quad |01\rangle \rightarrow |01\rangle \quad |10\rangle \rightarrow |11\rangle \quad |11\rangle \rightarrow |10\rangle$$

$$\text{CNOT} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \text{CNOT} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \text{CNOT} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \text{CNOT} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

だから、CNOTを次のように表すことができる。

入力
 $|00\rangle$
の
出力
...
入力
 $|11\rangle$
の
出力

$$\text{CNOT} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

実際に、次が成り立つことを確かめよ。

$$\text{CNOT}|00\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = |00\rangle$$

$$\text{CNOT}|01\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = |01\rangle$$

$$\text{CNOT}|10\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |11\rangle$$

$$\text{CNOT}|11\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |10\rangle$$

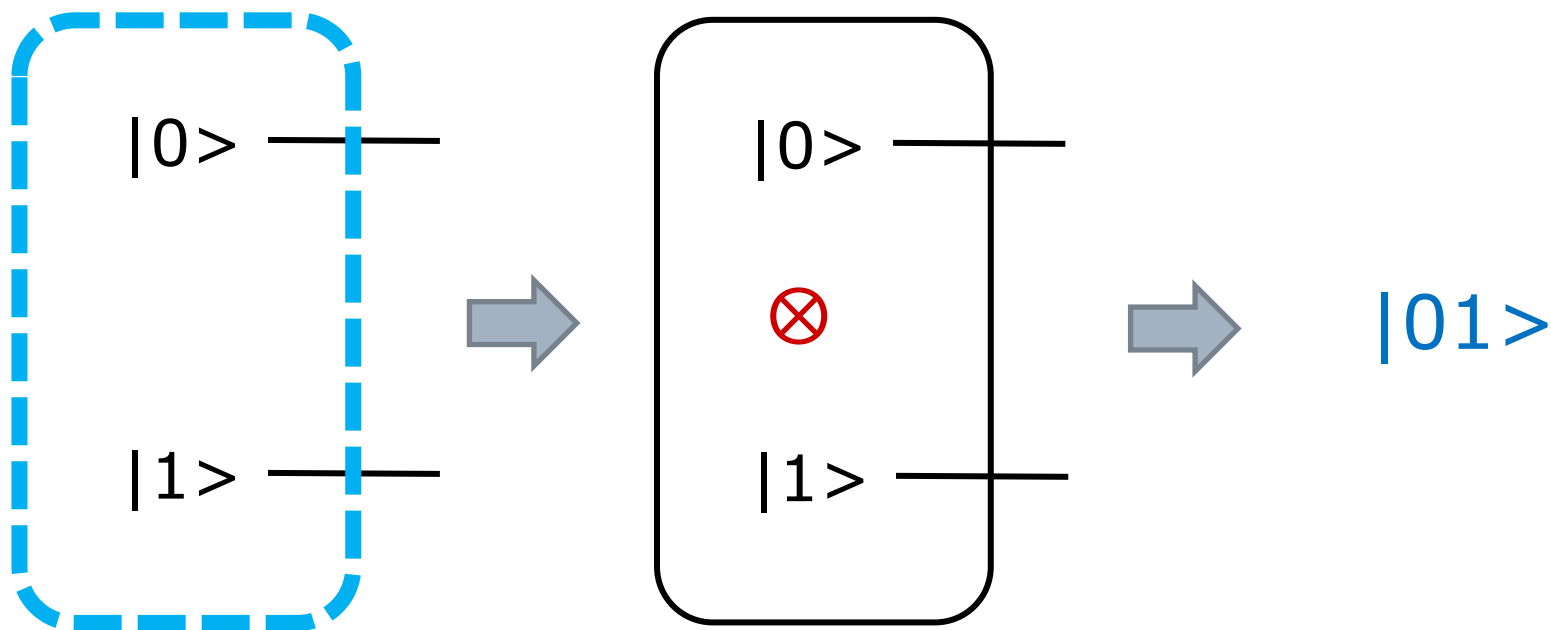
テンソル積での内積の定義

$$\left(\sum_i a_i |v_i\rangle \otimes |w_i\rangle, \sum_j b_j |v'_j\rangle \otimes |w'_j\rangle \right) \equiv \sum_{ij} a_i^* b_j \langle v_i | v'_j \rangle \langle w_i | w'_j \rangle.$$

ゲートを並列に組み合わせる

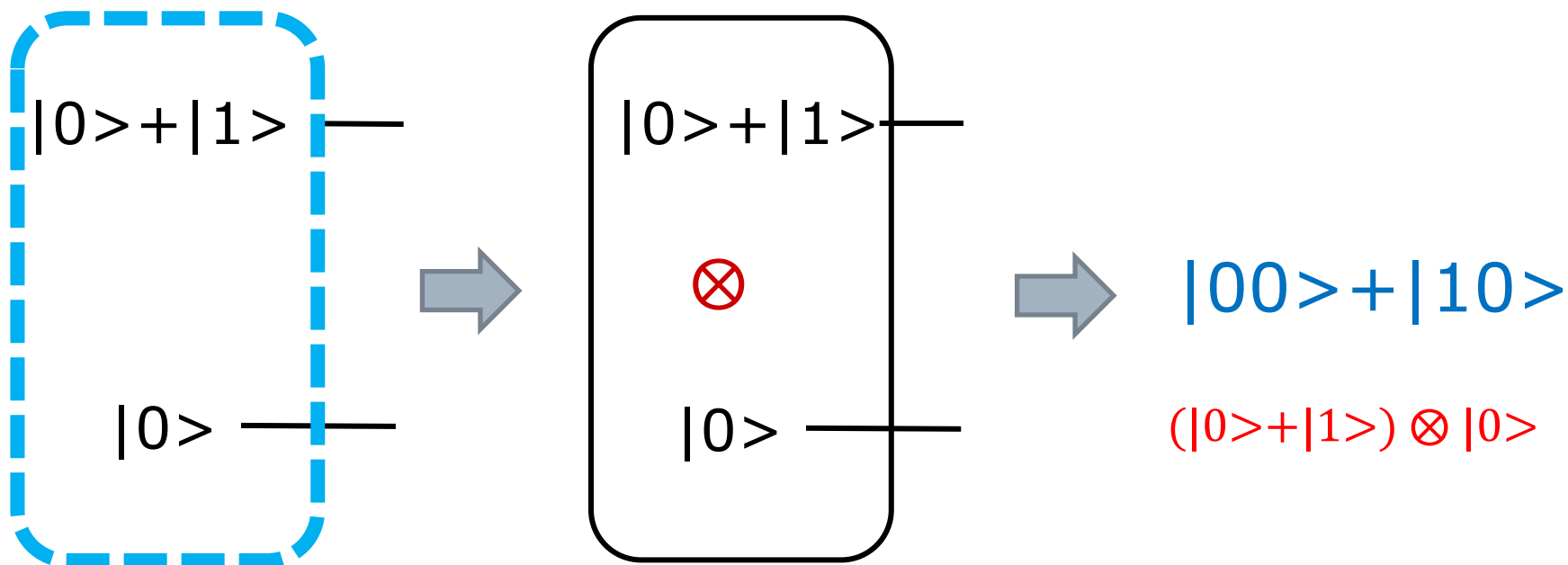
二つのqubitの状態を、並列に組み合わせる

二つの qubit がある時、それらを並列に組み合わせて、一つの状態とみなすことができる。この状態は、それぞれの状態の**テンソル積**である。



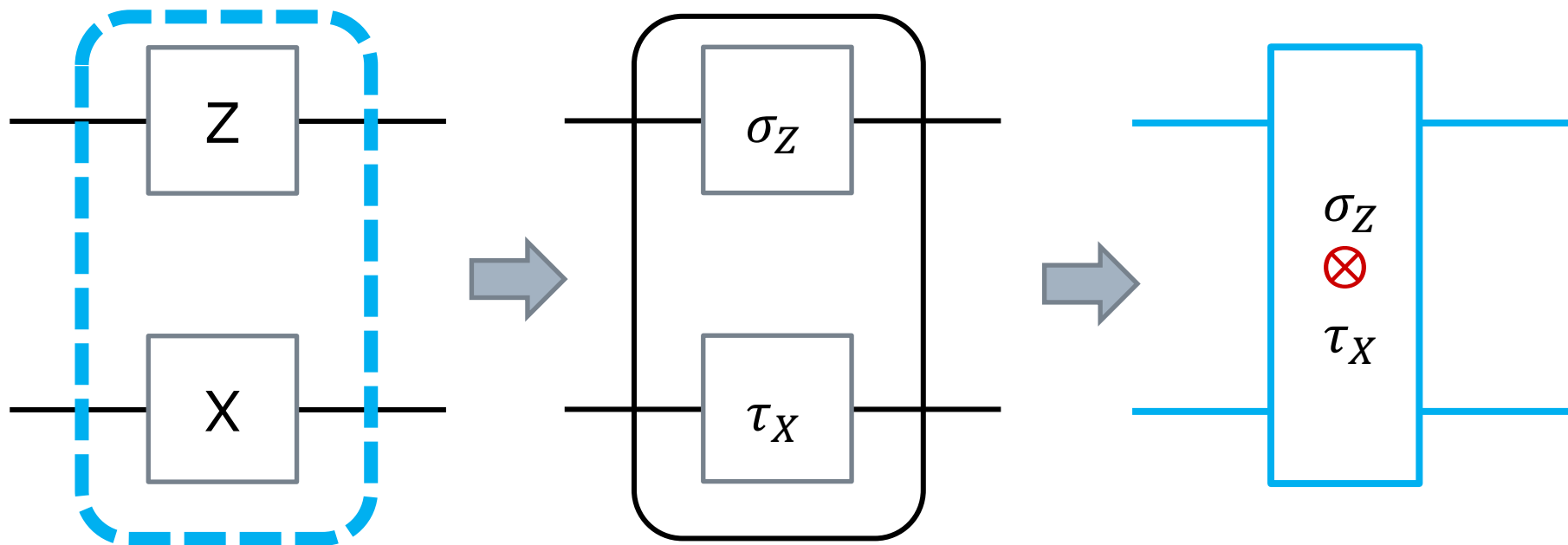
二つのqubitの状態を、並列に組み合わせる

二つの qubit がある時、それらを並列に組み合わせて、一つの状態とみなすことができる。この状態は、それぞれの状態の**テンソル積**である。



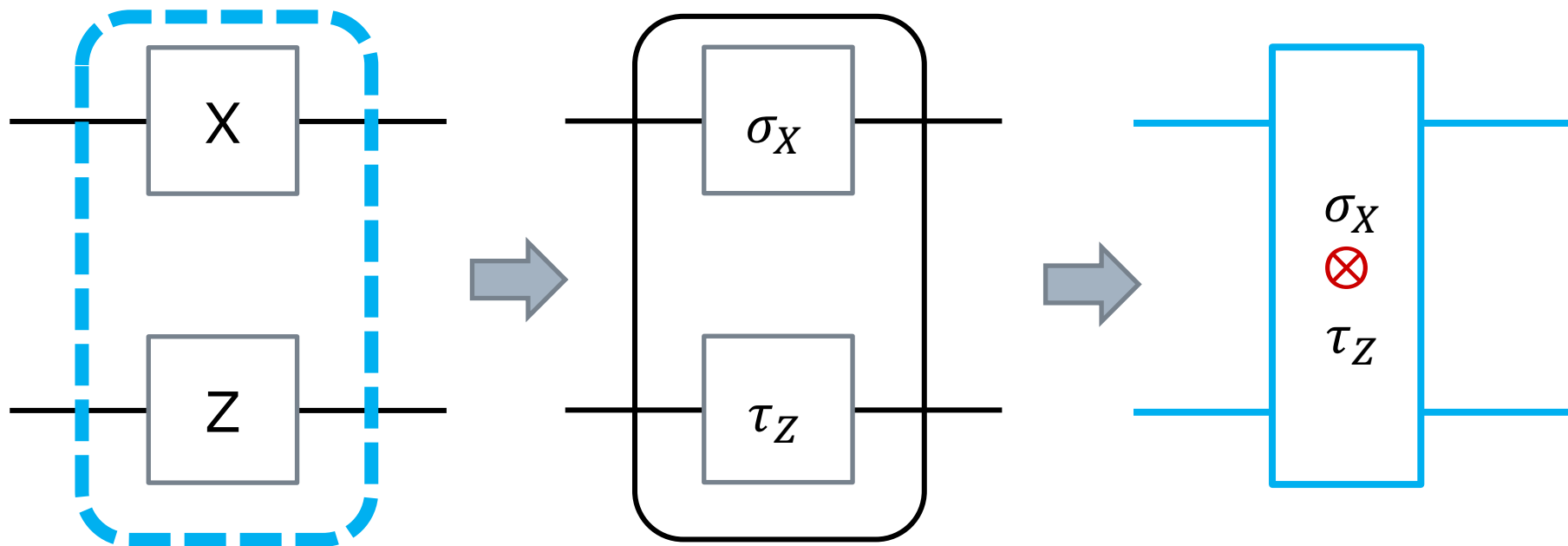
1-qubitのゲートを、並列に組み合わせる

二つの 1-qubit ゲートがある時、それらを並列に組み合わせて、2-qubitの量子ゲートを構成することができる。この量子ゲートは、それぞれの量子ゲートのユニタリ行列の**テンソル積**として作用する。



1-qubitのゲートを、並列に組み合わせる

二つの 1-qubit ゲートがある時、それらを並列に組み合わせて、2-qubitの量子ゲートを構成することができる。この量子ゲートは、それぞれの量子ゲートのユニタリ行列の**テンソル積**として作用する。



1-qubitのゲートを、並列に組み合わせる

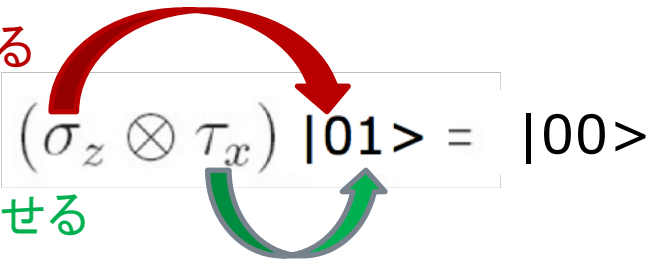
2-qubitのシステムで、最初のqubitに、演算子 X, Y, Z を適用する演算子を、 $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ とし、二つ目のqubitに、演算子 X, Y, Z を適用する演算子を、 τ_x, τ_y, τ_z とする。

$$\sigma_z \otimes \tau_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_x \otimes \tau_z = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

1-qubitのゲートを、並列に組み合わせる

最初のqubitにZを作用させる


$$(\sigma_z \otimes \tau_x) |01\rangle = |00\rangle$$

二つ目のqubitにZを作用させる

$$Z|0\rangle = |0\rangle, X|1\rangle = |0\rangle$$

$$\text{結果は } |0\rangle \otimes |0\rangle = |00\rangle$$

$$(\sigma_z \otimes \tau_x) |01\rangle = \begin{matrix} \sigma_z \otimes \tau_x & |01\rangle & |00\rangle \\ \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} & = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \end{matrix}$$

エンタングルメント

Entanglement もつれ合い

二つのqubitのテンソル積に分解できない状態

- ところで、全ての Two qubitsの状態は、二つのqubitの状態の組み合わせに、分解できるだろうか？
- 次のTwo qubitの状態を考えよう。
 $1/\sqrt{2} (|00\rangle + |11\rangle)$
ところが、この状態(Bell Stateと呼ばれる)は、二つのqubitのテンソル積では表現できないことが、次のようにしてわかる。
- $1/\sqrt{2} (|00\rangle + |11\rangle)$ が、 $(a|0\rangle + b|1\rangle) \otimes (c|0\rangle + d|1\rangle)$ と二つの状態のテンソル積に分解できたとしよう。
$$(a|0\rangle + b|1\rangle) \otimes (c|0\rangle + d|1\rangle)$$
$$= ac|00\rangle + ad|01\rangle + bc|10\rangle + bd|11\rangle$$
- 両辺の係数を比較すると、 $ad=bc=0$ となつて、
 $ac=bd=1/\sqrt{2}$ となる a, b, c, d が存在しないことがわかる。
こうした 2-qubitの状態を、「もつれ合い」と呼ぶ。

Two Qubits 部分的な観測

□ 先の $|\psi\rangle = \alpha_{00}|00\rangle + \alpha_{01}|01\rangle + \alpha_{10}|10\rangle + \alpha_{11}|11\rangle$ で、最初の1ビットのみを観測して、それが0である確率は、どうなるであろうか？

□ 次のように考える。

$$\Pr\{\text{1st bit} = 0\} = \Pr\{00\} + \Pr\{01\} = |\alpha_{00}|^2 + |\alpha_{01}|^2.$$

□ それでは、このとき、2-Qubitsのシステムの状態は、どういう状態になるのだろうか？ それは、この観測に矛盾する全ての項(最初のビットが1の項)を消して、残った項の重ね合わせの状態になる。ただし、それが、単位ベクトルになるように、正規化されねばならない。新しい状態は、次のようになる。

$$|\phi_{\text{new}}\rangle = \frac{\alpha_{00}|00\rangle + \alpha_{01}|01\rangle}{\sqrt{|\alpha_{00}|^2 + |\alpha_{01}|^2}}$$

もつれ合ったqubitのビットを観測する

Aliceが自分の持つEPRペア、 $1/\sqrt{2} (|00\rangle + |11\rangle)$ の最初のビットを観測したとしよう。それが1である確率は $1/2$ で、0である確率は $1/2$ である。

今、その結果が0であったとしよう。この観測の結果、新しい状態は、 $|00\rangle$ に変わる。それは、第二ビットの観測が、0である確率が1であることを意味する。100%の確率で、Bobの持つ第二ビットの状態が0であることがわかる。

すなわち、Aliceが自分のqubitで状態0を観測するとすぐに、遠く離れたBobの持つqubitの状態が0であることがわかることになる。

最初の観測結果が1であったとしても、今度は、新しい状態が、 $|11\rangle$ になるので、第二ビットの観察は、100%の確率で、1を返すことになる。

もつれ合ったqubitのビットを観測する

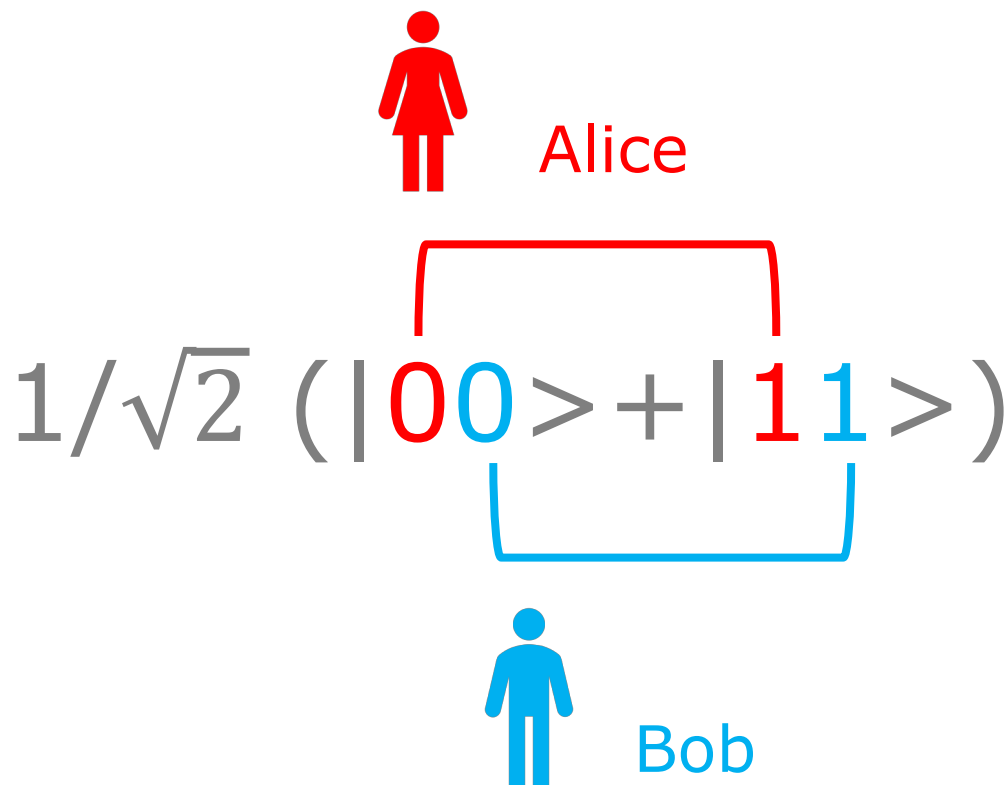
Aliceの最初の観測結果が1であったとしよう。今度は、新しい状態が、 $|11\rangle$ になるので、第二ビットの観察は、100%の確率で、1を返すことになる。

すなわち、Aliceが自分のqubitで状態1を観測するとすぐに、遠く離れたBobの持つqubitの状態が1であることがわかることになる。

Aliceの観測結果が、瞬時に、遠く離れたBobの観測結果に影響を与える？ これは、光のスピード以上で情報が伝わらないとする物理法則に矛盾しないか？

実際、アインシュタインは、こうした現象は「馬鹿げた遠隔作用」だと言った。

EPRペア: もつれ合った二つのqubit



$1/\sqrt{2} (|00\rangle + |11\rangle)$ で表される状態は、二つのqubitの状態である。一方のqubitをAliceが、他方のqubitをBobが持つことができる。こうした、もつれ合った二つのqubitを、EPRペアと呼ぶ。

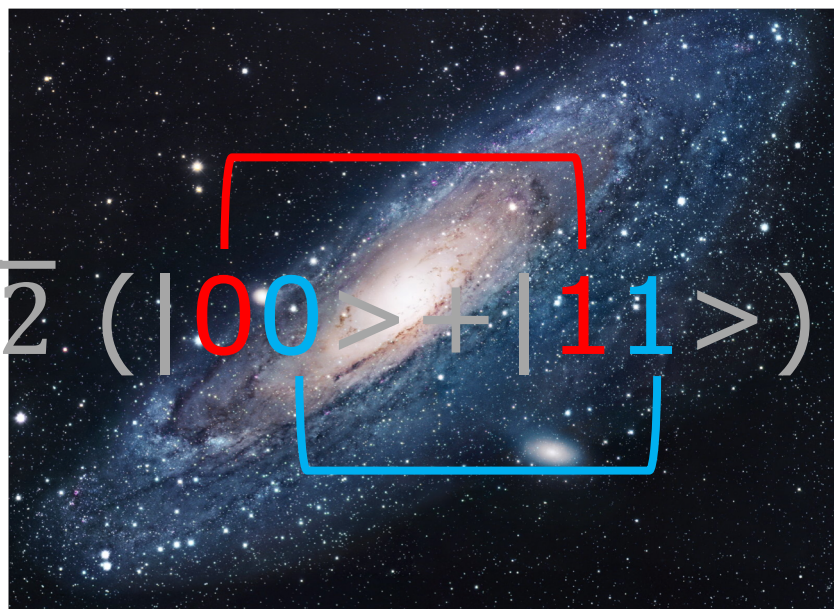
EPRペア: もつれ合った二つのqubit



Alice

$$1/\sqrt{2} (|00\rangle + |11\rangle)$$

$$1/\sqrt{2} (|00\rangle + |11\rangle)$$



Bob

Aliceが観察できるのは、 $|00\rangle + |11\rangle$ の第一bitで、
Bobが観察できるのは、 $|00\rangle + |11\rangle$ の第二bitである。
この関係は、両者がどんなに離れていても変わらない。

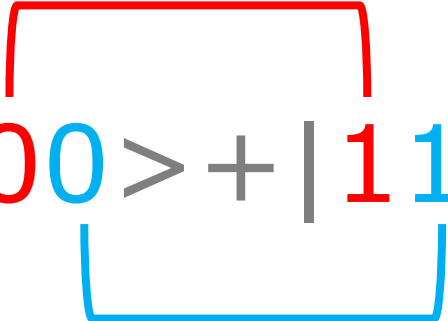
$$1/\sqrt{2} (|00\rangle + |11\rangle)$$

EPRペア: もつれ合った二つのqubit

Φ^+



Alice

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle + |11\rangle)$$
A red bracket connects the first '0' in the first ket to the first '1' in the second ket. A blue bracket connects the second '0' in the first ket to the second '1' in the second ket.



Bob

こうした性質を持つペアは、 $\frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle + |11\rangle)$ だけではない。

EPRペア: もつれ合った二つのqubit

Φ^-



Alice

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle - |11\rangle)$$

The equation is annotated with a red bracket above the first two qubits (00) and a blue bracket below the last two qubits (11), indicating the distribution of qubits to Alice and Bob respectively.



Bob

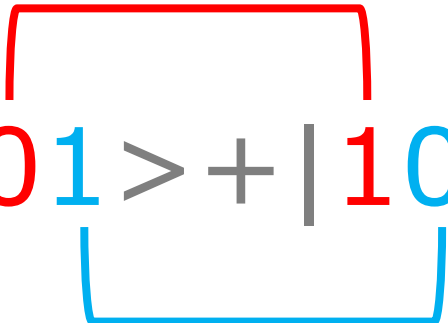
こうした性質を持つペアは、 $\frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle + |11\rangle)$ だけではない。

EPRペア: もつれ合った二つのqubit

Ψ^+



Alice

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|01\rangle + |10\rangle)$$
A red bracket connects the '0' in the first term and the '1' in the second term to Alice. A blue bracket connects the '1' in the first term and the '0' in the second term to Bob.



Bob

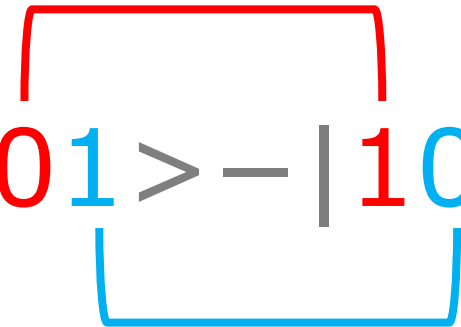
こうした性質を持つペアは、 $\frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle + |11\rangle)$ だけではない。

EPRペア: もつれ合った二つのqubit

Ψ^-



Alice

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|01\rangle - |10\rangle)$$
A red bracket connects the first qubit (0) of the first term to Alice, and a blue bracket connects the second qubit (1) of the first term to Bob. Similarly, a red bracket connects the first qubit (1) of the second term to Alice, and a blue bracket connects the second qubit (0) of the second term to Bob.



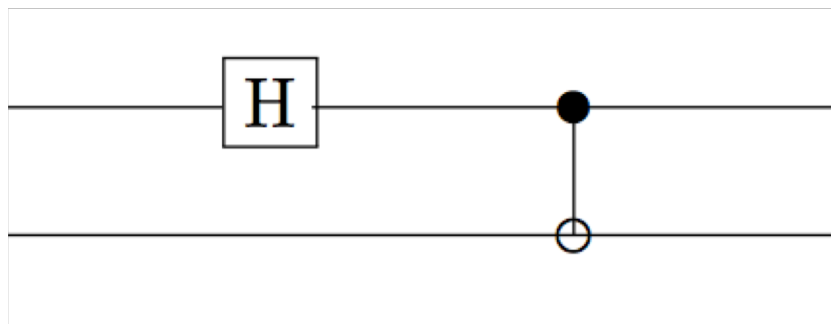
Bob

こうした性質を持つペアは、 $\frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle + |11\rangle)$ だけではない。

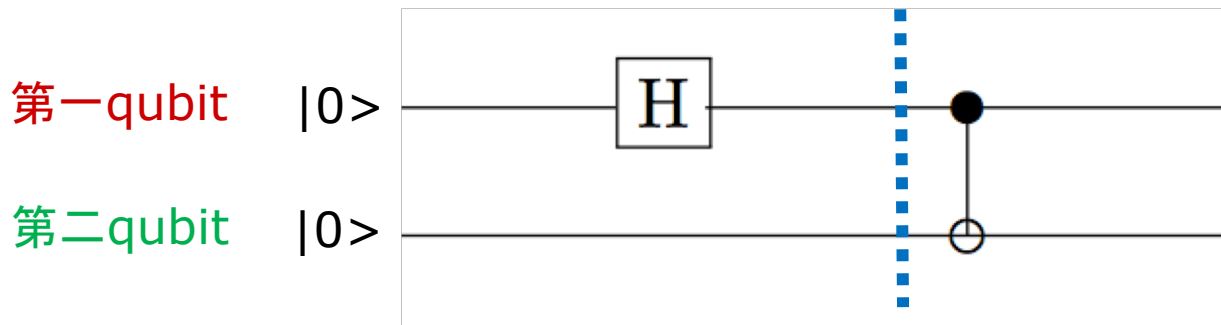
Bell State ゲート

Bell States ゲート

□ 次のような回路を考える。

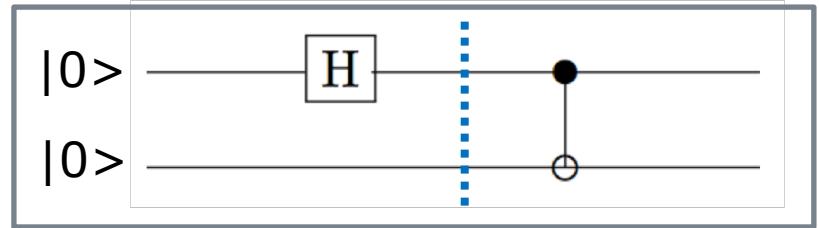


□ この回路に $|00\rangle$ を入力として与える。点線のところまで考える



$$|0\rangle \otimes |0\rangle = |00\rangle$$

Bell States ゲート 入力が $|00\rangle$ の場合

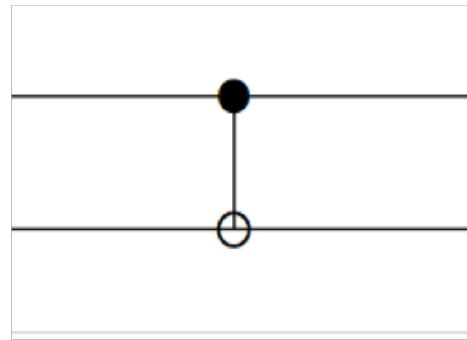


□ Hは、第一qubitの $|0\rangle$ を $1/\sqrt{2} (|0\rangle + |1\rangle)$ に変える。

第一qubit $1/\sqrt{2} (|0\rangle + |1\rangle)$

第二qubit

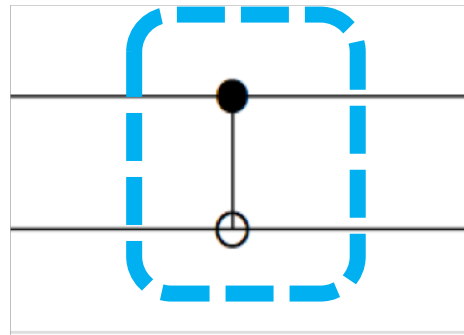
$|0\rangle$



$$(|0\rangle + |1\rangle) \otimes |0\rangle = |00\rangle + |10\rangle$$

CNOT

$$1/\sqrt{2} (|00\rangle + |10\rangle)$$



?

Bell States ゲート

入力が $|00\rangle$ の場合

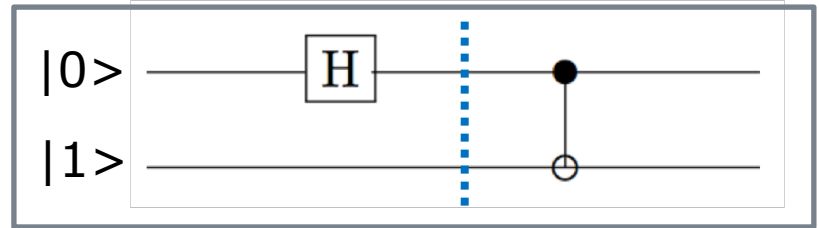
$$\text{Bell State Gate}(|00\rangle) = \text{CNOT}(|00\rangle + |10\rangle) =$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right\} =$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |00\rangle + |11\rangle$$

見やすくするため正規化因子 $\frac{1}{\sqrt{2}}$ を省略している

Bell States ゲート 入力が $|01\rangle$ の場合

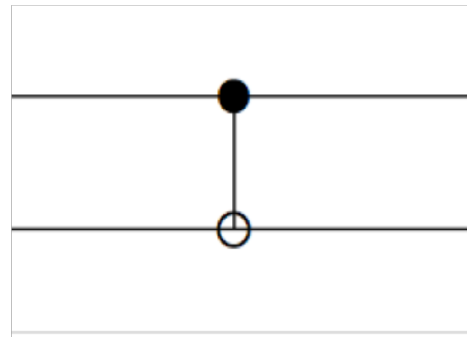


□ Hは、第一qubitの $|0\rangle$ を $1/\sqrt{2} (|0\rangle + |1\rangle)$ に変える。

第一qubit $1/\sqrt{2} (|0\rangle + |1\rangle)$

第二qubit

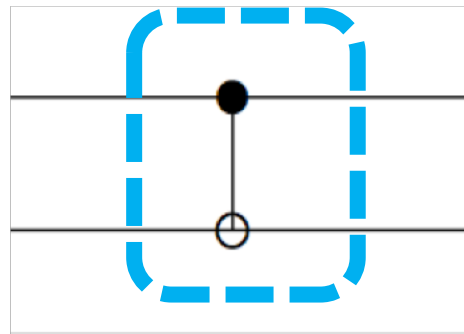
$|1\rangle$



$$(|0\rangle + |1\rangle) \otimes |1\rangle = |01\rangle + |11\rangle$$

CNOT

$$1/\sqrt{2} (|01\rangle + |11\rangle)$$



?

Bell States ゲート

入力が $|01\rangle$ の場合

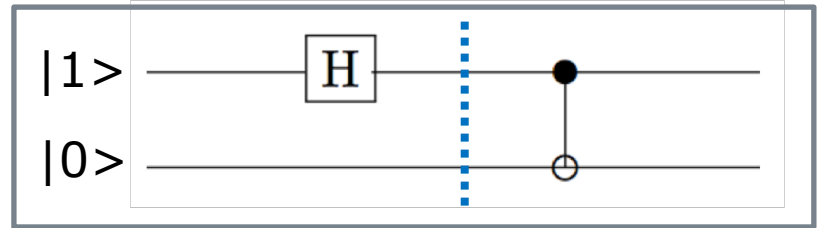
$$\text{Bell State Gate}(|01\rangle) = \text{CNOT}(|01\rangle + |11\rangle) =$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \left\{ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\} =$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |01\rangle + |10\rangle$$

見やすくするため正規化因子 $\frac{1}{\sqrt{2}}$ を省略している

Bell States ゲート 入力が $|10\rangle$ の場合

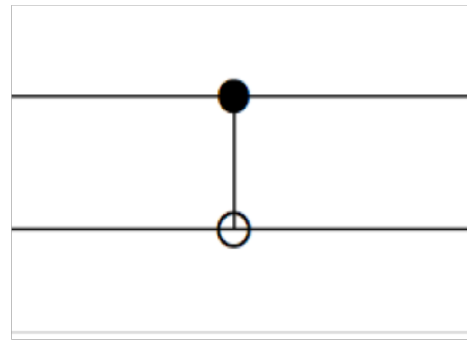


□ Hは、第一qubitの $|1\rangle$ を $1/\sqrt{2} (|0\rangle - |1\rangle)$ に変える。

第一qubit $1/\sqrt{2} (|0\rangle - |1\rangle)$

第二qubit

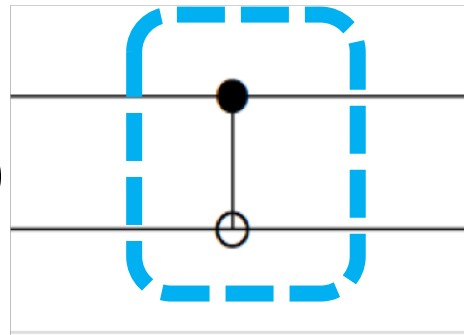
$|0\rangle$



$$(|0\rangle - |1\rangle) \otimes |0\rangle = |00\rangle - |10\rangle$$

CNOT

$$1/\sqrt{2} (|00\rangle - |10\rangle)$$



?

Bell States ゲート

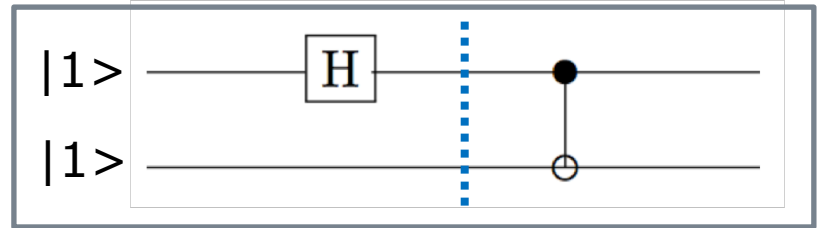
入力が $|10\rangle$ の場合

$$\mathbf{Bell\ State\ Gate}(|10\rangle) = \mathbf{CNOT}(|00\rangle - |10\rangle) =$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right\} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} = |00\rangle - |11\rangle$$

見やすくするため正規化因子 $\frac{1}{\sqrt{2}}$ を省略している

Bell States ゲート 入力が $|11\rangle$ の場合

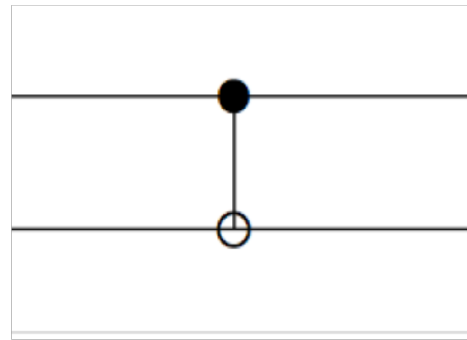


□ Hは、第一qubitの $|1\rangle$ を $1/\sqrt{2} (|0\rangle - |1\rangle)$ に変える。

第一qubit $1/\sqrt{2} (|0\rangle - |1\rangle)$

第二qubit

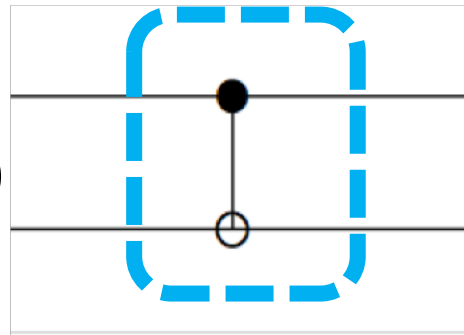
$|1\rangle$



$$(|0\rangle - |1\rangle) \otimes |1\rangle = |01\rangle - |11\rangle$$

CNOT

$$1/\sqrt{2} (|00\rangle - |10\rangle)$$



?

Bell States ゲート

入力が $|10\rangle$ の場合

$$\text{Bell State Gate}(|10\rangle) = \text{CNOT}(|01\rangle - |11\rangle) =$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \left\{ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\} =$$
$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} = |01\rangle - |10\rangle$$

見やすくするため正規化因子 $\frac{1}{\sqrt{2}}$ を省略している

Bell State Gateの行列表示

$|00\rangle$

$|01\rangle$

$|10\rangle$

$|11\rangle$

$$\text{BELL} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \text{BELL} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \text{BELL} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \text{BELL} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

だから、Bell State Gateを次のように表すことができる。

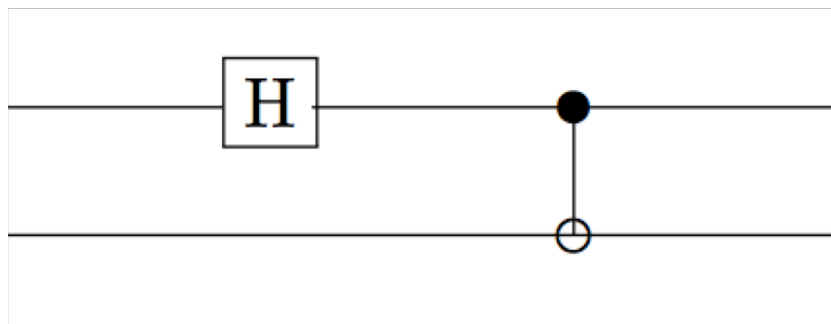
入力
 $|00\rangle$
の
出力
...
入力
 $|11\rangle$
の
出力

$$\text{Bell State Gate} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

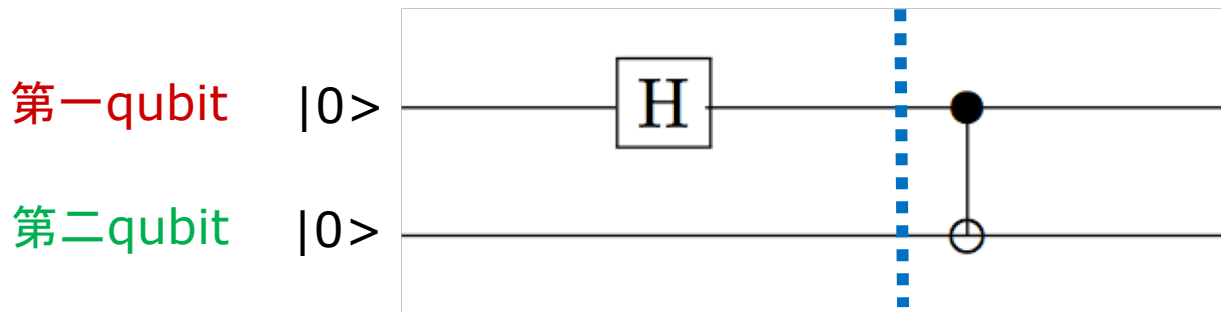
Bell State ゲートの働きを 暗算で計算する

Bell States ゲート

□ 次のような回路を考える。



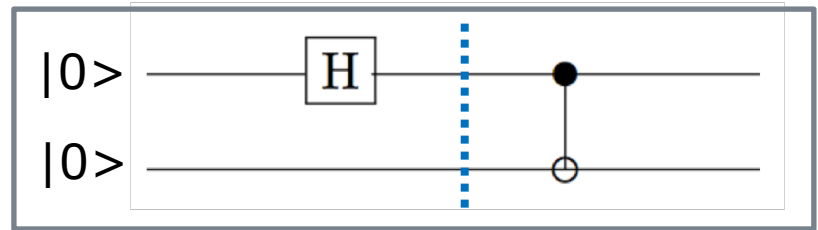
□ この回路に $|00\rangle$ を入力として与える。点線のところまで考える



$$|0\rangle \otimes |0\rangle = |00\rangle$$

入力が $|00\rangle$ ということは、第一qubitが $|0\rangle$ で第二qubitが $|0\rangle$ ということである。

Bell States ゲート 入力が $|00\rangle$ の場合

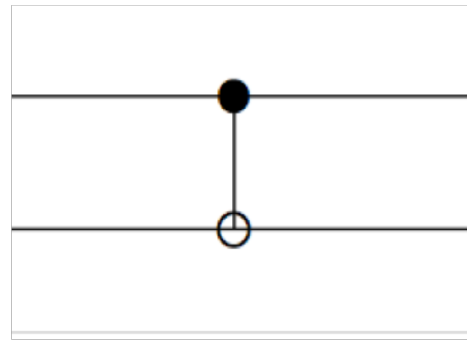


□ Hは、第一qubitの $|0\rangle$ を $1/\sqrt{2} (|0\rangle + |1\rangle)$ に変える。

第一qubit $1/\sqrt{2} (|0\rangle + |1\rangle)$

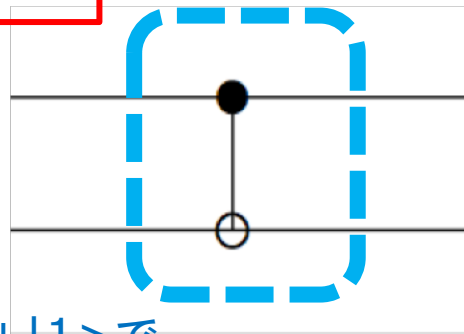
第二qubit

$|0\rangle$



$$(|0\rangle + |1\rangle) \otimes |0\rangle = |00\rangle + |10\rangle$$

$$1/\sqrt{2} (|00\rangle + |10\rangle)$$

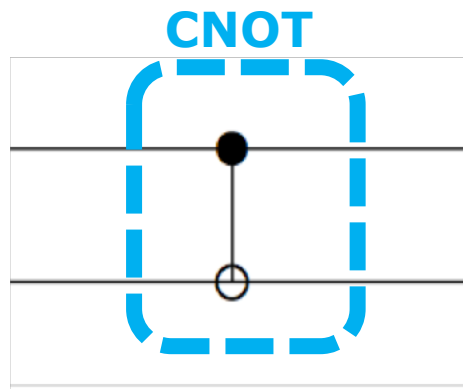


?

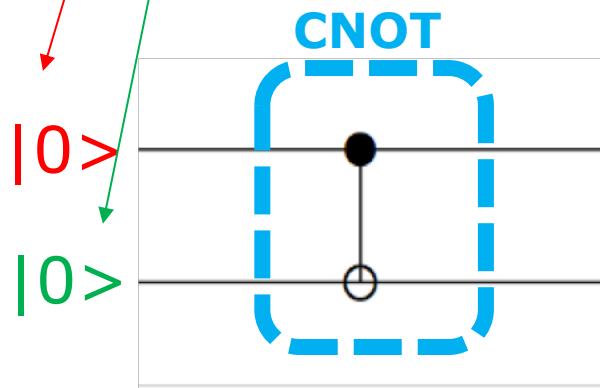
この状態は、第一qubitが $|0\rangle + |1\rangle$ で
第二qubitが $|0\rangle$ という状態のテンソル積である。

先には、この状態のCNOTの作用を行列で計算した。

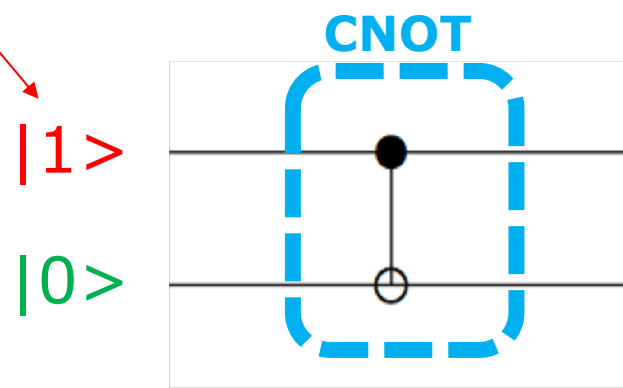
$$1/\sqrt{2} (|00\rangle + |10\rangle)$$



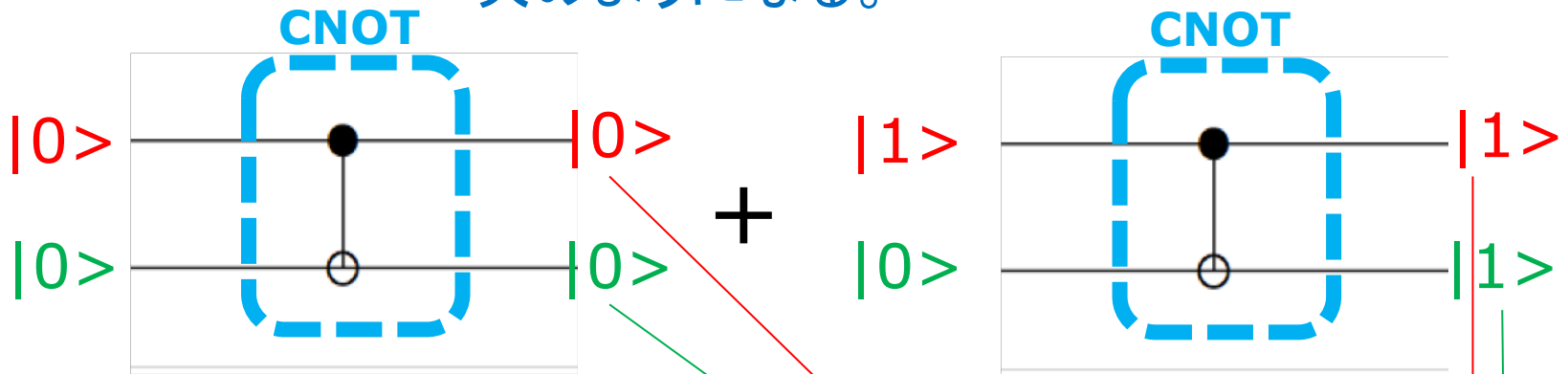
ただ、このシステムの状態は、次の二つの状態の重ね合わせである。



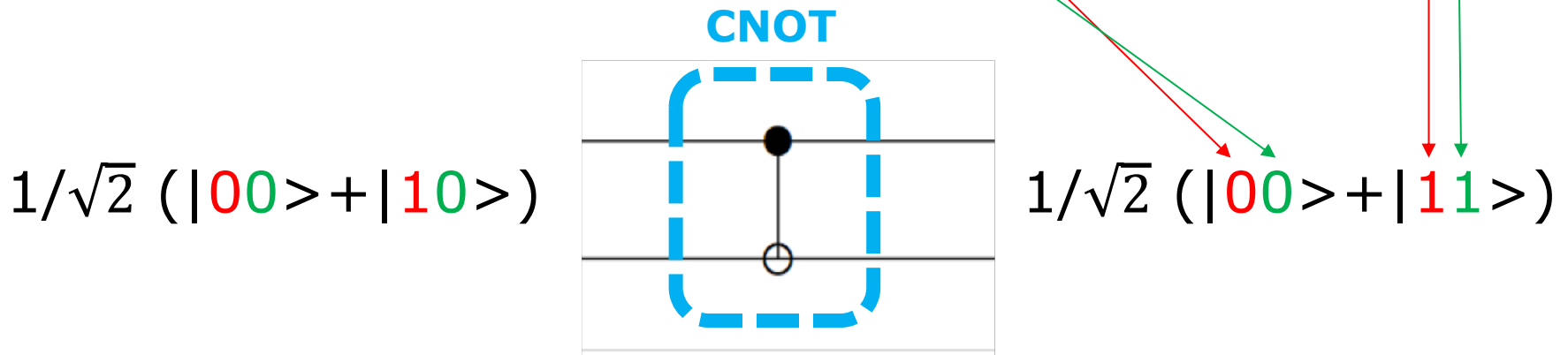
+



それぞれのCNOTの出力は、
次のようになる。



二つの出力を重ね合わせれば、
次の出力が得られる。

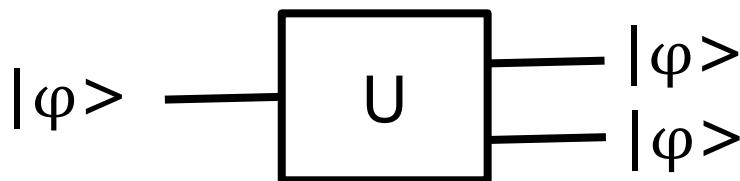


結局、第一qubitが $|1\rangle$ の項だけ、第二qubitを反転させればいい。

No Clone 定理

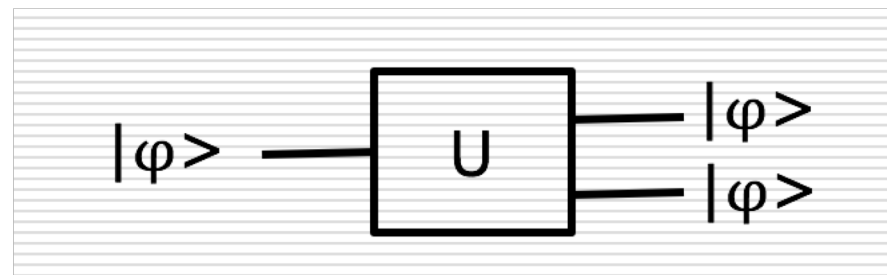
No Cloning 定理

- ある状態 $|\varphi\rangle = \alpha_0|0\rangle + \alpha_1|1\rangle$ に対して、 $|\varphi\rangle \otimes |\varphi\rangle$ すなわち自己のコピーをもう一つ生成する回路を考えよう。実は、量子ゲートの世界では、こうした基本的な操作ができないのだ。これを、No Cloning 定理と呼ぶ。以下、それを説明しよう。



こうした回路は存在しない！

No Cloning 定理の証明



- 先のような回路(ユニタリ変換 U)が存在したとする。
その回路は、一般の φ だけでなく、 $|0\rangle$, $|1\rangle$ に対しても働くので、

$$U|0\rangle = |00\rangle$$

$$U|1\rangle = |11\rangle$$

- $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ とすれば、

$$U|\psi\rangle = \alpha U|0\rangle + \beta U|1\rangle = \alpha|00\rangle + \beta|11\rangle$$

- U は、 $|\psi\rangle$ もコピーできるはずなので、

$$U(|\psi\rangle) = |\psi\rangle|\psi\rangle = \alpha^2|00\rangle + \alpha\beta|01\rangle + \alpha\beta|10\rangle + \beta^2|11\rangle$$

- しかし、この二つの条件を満たす α , β は、存在しない。

演習課題 4-1 1-qubit ゲート

- X, Y, Z は、 $a|0\rangle + b|1\rangle$ に対して、どのように作用するかを計算せよ。
- H, S, T は、 $a|0\rangle + b|1\rangle$ に対して、どのように作用するかを計算せよ。

演習課題 4-2 2-qubit システム

1. 第一のQubitが、 $Q1 = 3/5|0\rangle + 4/5i|1\rangle$ で、
第二のQubitが、 $Q2 = 1/\sqrt{2}i|0\rangle + 1/\sqrt{2}|1\rangle$ としよう。
この時、 $Q1 \otimes Q2$ のシステムの状態を計算せよ。
2. $(1/\sqrt{2}|0\rangle + 1/\sqrt{2}|0\rangle) \otimes (1/2|0\rangle + \sqrt{3}/2|1\rangle)$ を計算せよ。
3. $(1/\sqrt{2}|0\rangle + 1/\sqrt{2}|0\rangle) \otimes (1/2|0\rangle + \sqrt{3}/2|1\rangle) \otimes |1\rangle$ を計算せよ。
4. $|\psi\rangle = (1/2 + i/2)|00\rangle + 1/2|01\rangle + i/2|11\rangle$ とする。
この $|\psi\rangle$ の最初のビットが、0と観測される確率を求めよ。
この時、新しい状態は、どのようなになるか？
5. 先の $|\psi\rangle$ で、二つ目のビットが、1と観測される確率を求めよ。
この時、新しい状態は、どのようなになるか？

演習課題 4-3 2-qubit システムの演算子

1. $I \otimes \tau_x$ の行列表示を求めよ。
2. $I \otimes \tau_x$ $|00\rangle$ を計算せよ。
3. $I \otimes \tau_x$ $|10\rangle$ を計算せよ。
4. $\sigma_z \otimes \tau_x$ の行列表示を求めよ。

演習課題 4-4 Entanglement

□ 次のような、Two Qubitsの状態を考える。

$$|\Phi^+\rangle = 1/\sqrt{2}(|00\rangle + |11\rangle)$$

この $|\Phi^+\rangle$ は、二つのQubitの積の形には、分解されないことを示せ。こうした状態を、Entanglementという。

(ヒント)

$|\Phi^+\rangle = (a|0\rangle + b|1\rangle)(c|0\rangle + d|1\rangle)$ と分解されたとして、両辺の係数を比較すると、矛盾が起きることを示せばいい。

演習問題 4-5 Bell States ゲート

- 先の Bell States ゲートに対して、 $|01\rangle$, $|10\rangle$, $|11\rangle$ の入力に対する出力を求めよ。

$$\begin{aligned} |\Phi^{\pm}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle \pm |11\rangle) \\ |\Psi^{\pm}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|01\rangle \pm |10\rangle) \end{aligned}$$

演習課題 4-6 CNOT

1. 先の行列CNOTが、ユニタリであることを確かめよ。
2. $\text{CNOT}|01\rangle$ を計算せよ。
3. $\text{CNOT}|10\rangle$ を計算せよ。
4. $\text{CNOT}|11\rangle$ を計算せよ。