

Introduction to NMR Quantum Information Processing

Eisuke Abe (Keio University)

December 18, 2002

“Towards scalable quantum computation”
at RIEC, Tohoku University



参考文献

■ 量子計算全般

- Quantum Computation and Quantum Information, M. A. Nielsen and I. L. Chuang, Cambridge University Press (2000)

■ NMR量子計算 (<http://arxiv.org/>)

- quant-ph/0205193, Lieven M. K. Vandersypen
 - Ph.D Thesis (224 pages), Stanford University
- quant-ph/0207172, R. Laflamme *et. al.*
 - 44 pages

目次

- 復習
 - 量子計算のルール
- NMR量子計算の仕組み
 - 熱平衡状態の記述
 - 初期化の方法
 - 1-qubitの回転操作と制御NOTの実現
- 実験例
 - Deutsch-Jozsaのアルゴリズムの実験
 - 論理ラベルの実験

復習(1)

1-qubitのとり得る状態 基底の2状態とその重ね合わせ状態

1-qubitの状態の標準基底

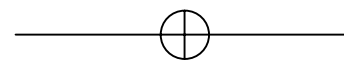
$$|0\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad |1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad |\psi\rangle = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \quad (\alpha, \beta \in \mathbf{C})$$

1-qubitの量子演算

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{matrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \text{がどこに行くか?} \\ \rightarrow \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \text{がどこに行くか?} \end{matrix}$$

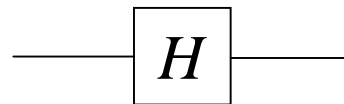
NOTゲート

$$\begin{matrix} |0\rangle & \rightarrow & |1\rangle \\ |1\rangle & \rightarrow & |0\rangle \end{matrix}$$



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

$$\begin{matrix} |0\rangle & \rightarrow & \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle \\ |1\rangle & \rightarrow & \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle \end{matrix}$$



2x2のユニタリ行列ならなんでもOK (古典回路ではNOTのみ)

$$|\psi\rangle \rightarrow \exp(-i \mathcal{H} t) |\psi\rangle = U |\psi\rangle$$

$$UU^\$ = \mathbf{1}$$

Sorry, not “dagger” but “dollar”!

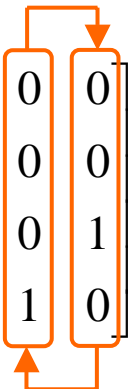
復習(2)

n-qubitの状態 テンソル積による 2^n 個の基底とその重ね合わせ

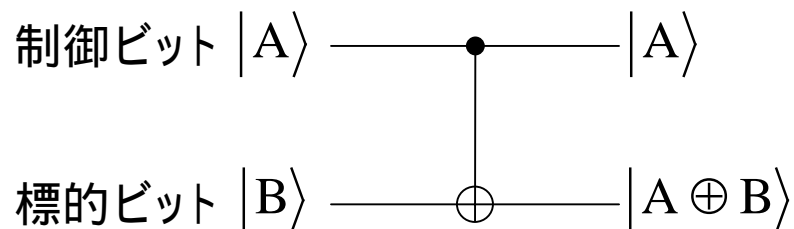
2-qubitの状態の標準基底

$$|00\rangle \equiv |0\rangle_A \otimes |0\rangle_B = \begin{bmatrix} 1 \times \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \\ 0 \times \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad |01\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad |10\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad |11\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

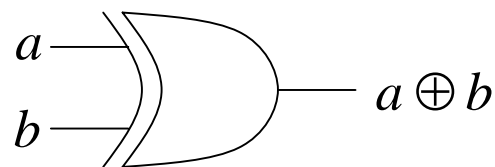
2-qubitの量子演算

$$C_{AB} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$


AB	
$ 00\rangle$	$\rightarrow 00\rangle$
$ 01\rangle$	$\rightarrow 01\rangle$
$ 10\rangle$	$\rightarrow 11\rangle$
$ 11\rangle$	$\rightarrow 10\rangle$



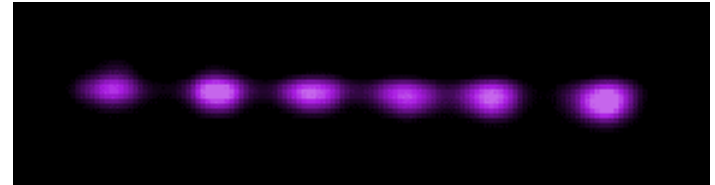
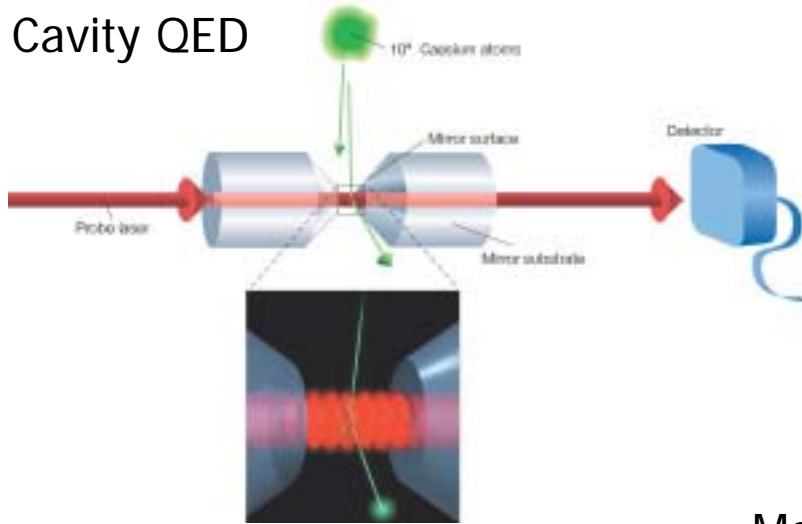
古典回路におけるXOR



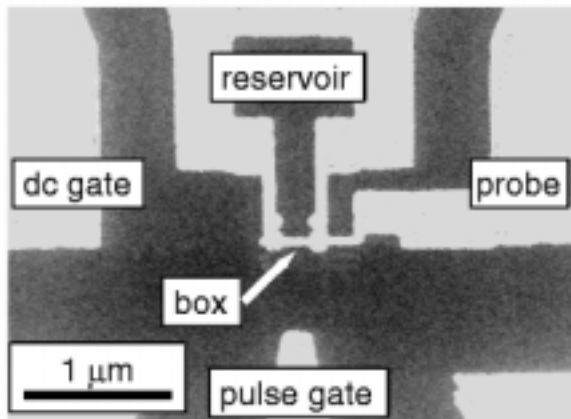
$2^n \times 2^n$ のユニタリ行列ならなんでもOK (可逆回路)

Physical Realization

Cavity QED

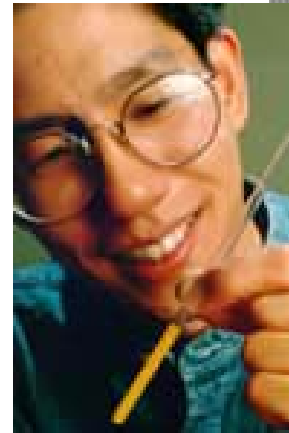


Ion trap



Superconductor

Magnetic resonance



DiVincenzo's Criteria

1. Well defined extensible qubit array
2. Preparable in the “000...” state
3. Long decoherence time
4. Universal set of gate operations
5. Single quantum measurements

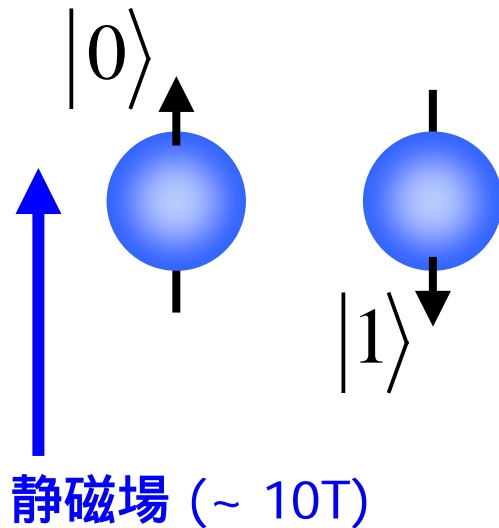


NMRでは...

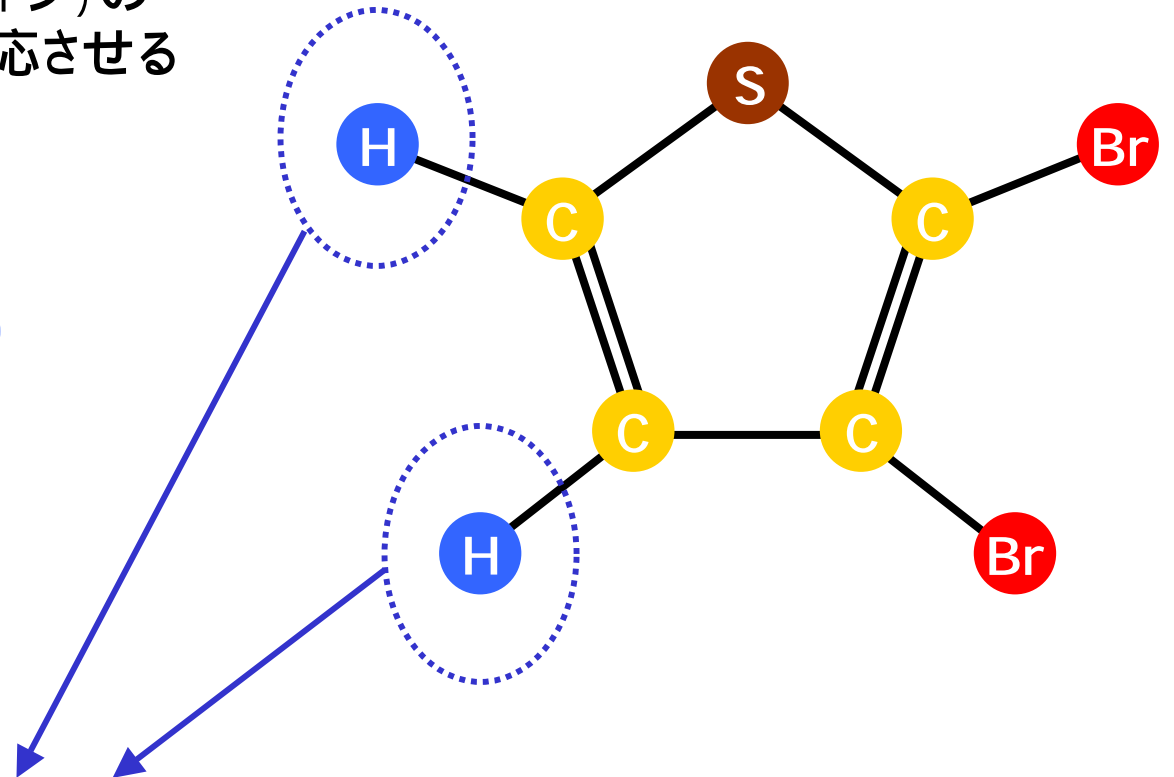
1. 分子内の核スピン $1/2$. qubitの数は分子の大きさで決まる
2. 室温下のため初期化は困難 . 実効的純粋状態をつくる
3. 長い . 数秒程度
4. 交流磁場による1-qubitの回転とJ-結合による2-qubitのゲート
5. 多数の分子からの平均の信号

核磁気共鳴におけるqubit

核スピン1/2(例えばプロトン)の上向き,下向きを $|0\rangle$, $|1\rangle$ に対応させる



2,3-dibromo-thiophene



化学シフトにより共鳴周波数がわずかに異なるため,個別にアクセス可能 → 2-qubit 量子計算機!!

“Bulk ensemble” 量子計算

1個の分子のハミルトニアン

$$\mathcal{H} = -\sum_i \omega_i \hat{I}_z^i + \sum_{i<j} 2\pi J_{ij} \hat{I}_z^i \hat{I}_z^j$$

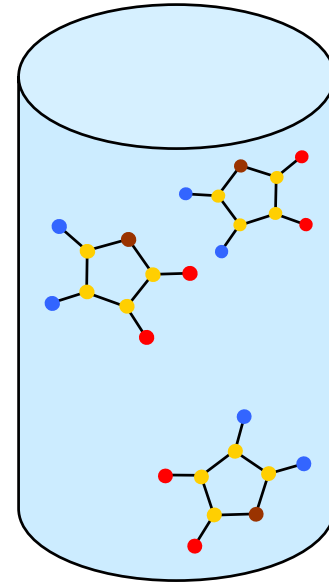
$$\hat{I}_z^i = \mathbf{1} \otimes \dots \otimes \frac{1}{2} \sigma_z^i \otimes \dots \otimes \mathbf{1} \quad \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

$$\hat{I}_z^i \hat{I}_z^j = \mathbf{1} \otimes \dots \otimes \frac{1}{2} \sigma_z^i \otimes \dots \otimes \frac{1}{2} \sigma_z^j \otimes \dots \otimes \mathbf{1}$$

実際には、一度に多数の分子の集団を扱う



密度行列による混合状態の記述が必要



溶液中では、溶媒分子は激しく動き回っているため分子間の相互作用は打ち消される

2スピン系のHamiltonian

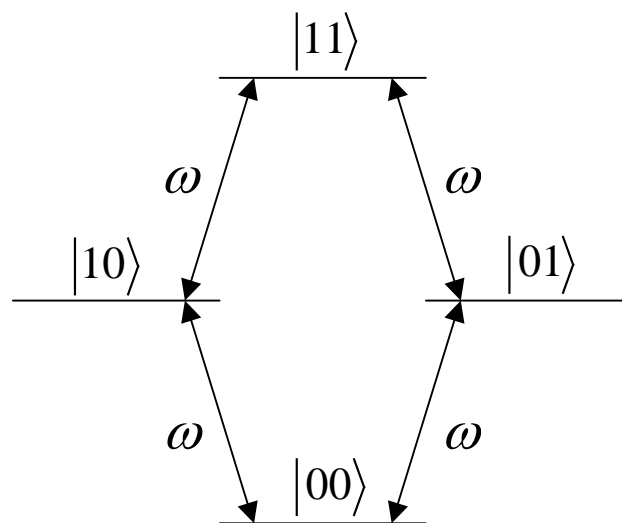
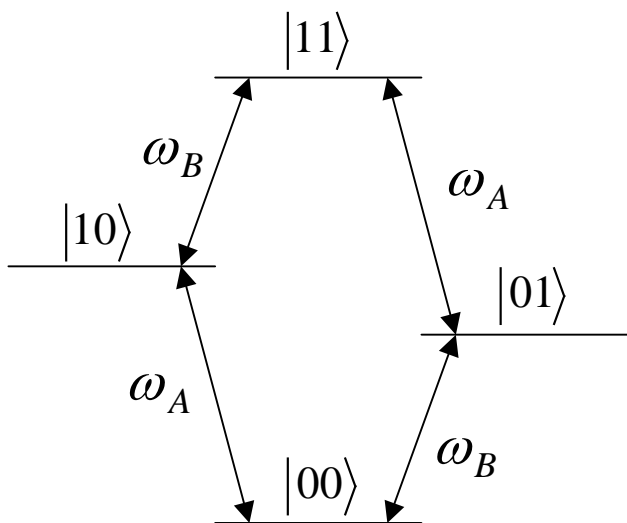
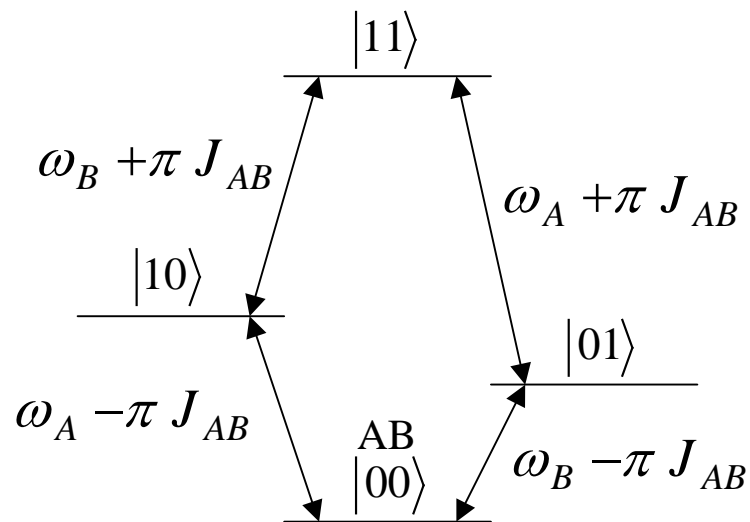
$$\mathcal{H} = -\omega_A \hat{I}_z^A - \omega_B \hat{I}_z^B + 2\pi J_{AB} \hat{I}_z^A \hat{I}_z^B$$

↓ J-結合無視

$$\mathcal{H} = -\omega_A \hat{I}_z^A - \omega_B \hat{I}_z^B$$

↓ 周波数の違い無視

$$\mathcal{H} = -\omega(\hat{I}_z^A + \hat{I}_z^B)$$



密度行列

例えば, $|\psi_1\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ と $|\psi_2\rangle = \gamma|0\rangle + \delta|1\rangle$ が,
統計的に, 30%と70%の割合で混ざりあった状態は
どのように記述すればよいのか?

$$??? \quad \frac{3}{10}|\psi_1\rangle + \frac{7}{10}|\psi_2\rangle = \frac{3\alpha + 7\gamma}{10}|0\rangle + \frac{3\beta + 7\delta}{10}|1\rangle \quad ???$$

これは, 別の重ね合わせ状態を表すに過ぎない

$$\rho \equiv \sum w_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$$



確率重み(非負実数) $\sum w_n = \text{Tr}(\rho) = 1$

$$[F] = \sum w_i \langle\psi_i|F|\psi_i\rangle = \text{Tr}(\rho F)$$

$$\rho \xrightarrow{U} U\rho U^\dagger$$

今の例では $\rho = \frac{3}{10}|\psi_1\rangle\langle\psi_1| + \frac{7}{10}|\psi_2\rangle\langle\psi_2|$ とすればよい

密度行列の例

全体の w_0 が0の状態に, w_1 が1の状態にあるときの密度行列と角運動量の z 成分

$$\rho = w_0|0\rangle\langle 0| + w_1|1\rangle\langle 1| = \begin{bmatrix} w_0 & 0 \\ 0 & w_1 \end{bmatrix} \quad [I_z] = \text{Tr}\left(\frac{1}{2}\rho\sigma_z\right) = \frac{w_0 - w_1}{2}$$

Case.1 $w_0 = w_1 = 0.5$ のとき

$$\rho = \frac{1}{2}\mathbf{1} \quad |1\rangle \text{ --- } \bullet\bullet$$

$$[I_z] = 0 \quad |0\rangle \text{ --- } \bullet\bullet$$

Case.2 $w_0 = 1, w_1 = 0$ のとき

$$\rho = |0\rangle\langle 0| \quad |1\rangle \text{ ---}$$

初期化された状態 $|0\rangle \text{ --- } \bullet\bullet\bullet$

Notice!!

$$\frac{1}{2}\mathbf{1} = \frac{1}{6}|0\rangle\langle 0| + \frac{1}{3}|1\rangle\langle 1| + \frac{1}{4}|\alpha\rangle\langle \alpha| + \frac{1}{4}|\beta\rangle\langle \beta| \quad \text{とも書ける}$$

$$\text{ここで } |\alpha\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}|0\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}}|1\rangle \quad |\beta\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}|0\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}}|1\rangle$$

**密度行列は一意に分解
(decompose)できない!!**

熱平衡状態における密度行列

$$\rho_{eq} = \frac{\exp(-\mathcal{H}/kT)}{Z} \approx \frac{1}{2^n} \left(\mathbf{1} - \frac{\mathcal{H}}{kT} \right) \approx \frac{1}{2^n} \left(\mathbf{1} + \frac{\omega}{kT} \sum_i \hat{I}_z^i \right)$$

$\omega \approx \omega_i, \quad \omega \gg |J_{ij}|$

$\varepsilon \approx 10^{-6}$

ρ_{Δ}

“deviation”密度行列

1-qubitのとき

$$\rho_{eq} = \frac{1}{2} \left(\mathbf{1} + \frac{\varepsilon}{2} \sigma_z \right) = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} + \frac{\varepsilon}{4} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

2-qubitのとき

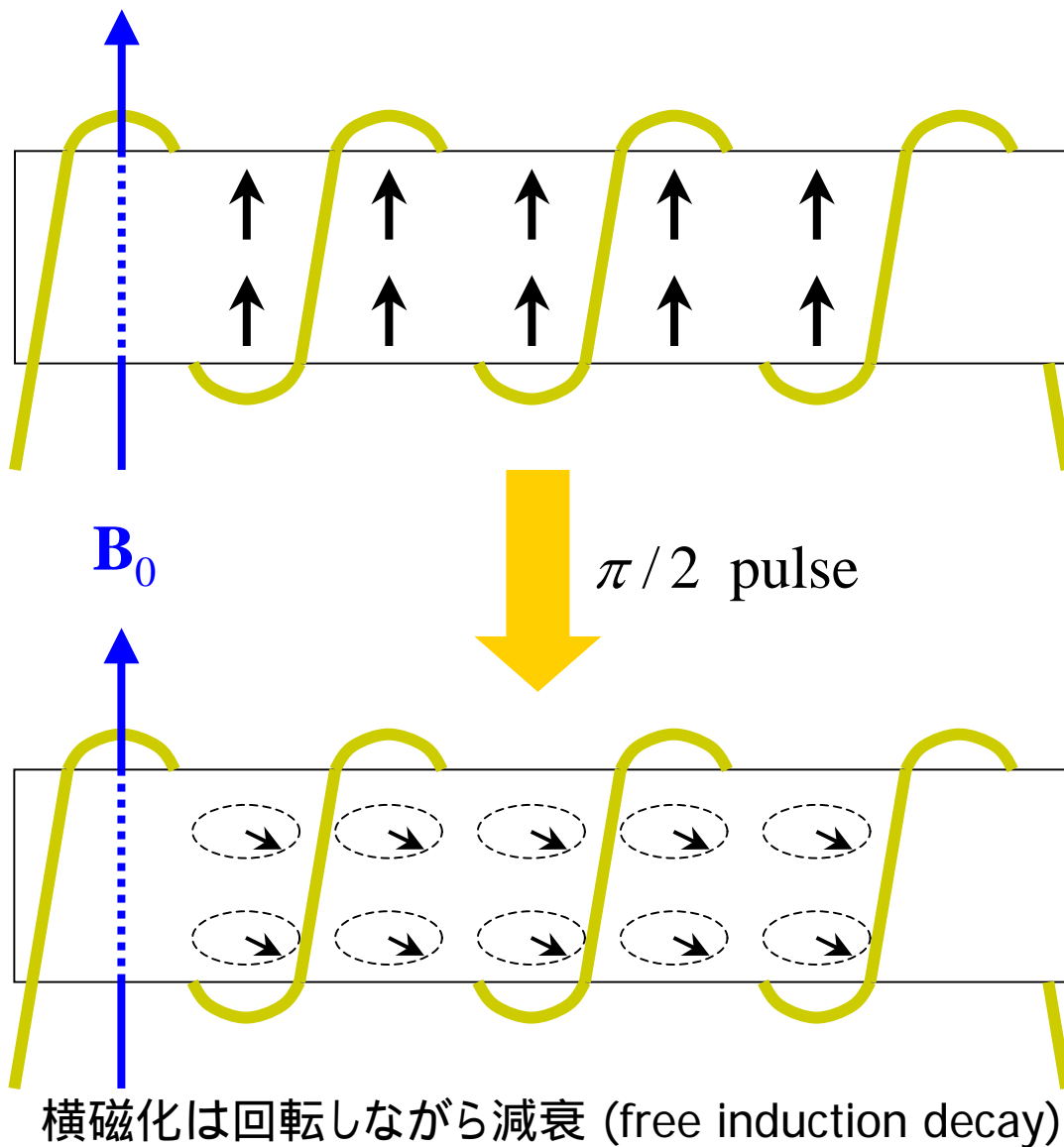
$$\rho_{\Delta} = \hat{I}_z^A + \hat{I}_z^B = \frac{1}{2} \sigma_z \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes \frac{1}{2} \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \equiv [[1 \quad 0 \quad 0 \quad -1]]$$

3-qubitのとき

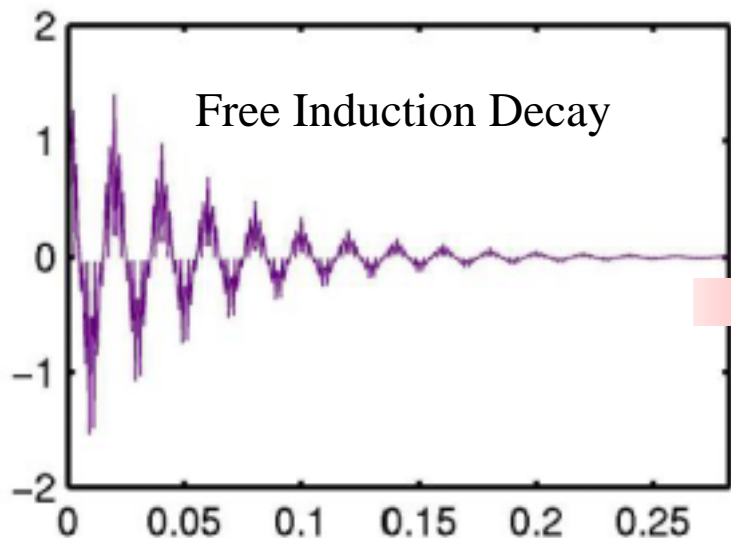
$$\rho_{\Delta} = \hat{I}_z^A + \hat{I}_z^B + \hat{I}_z^C = [[3 \quad 1 \quad 1 \quad -1 \quad 1 \quad -1 \quad -1 \quad -3]]$$

平均からの“ズレ”の目安

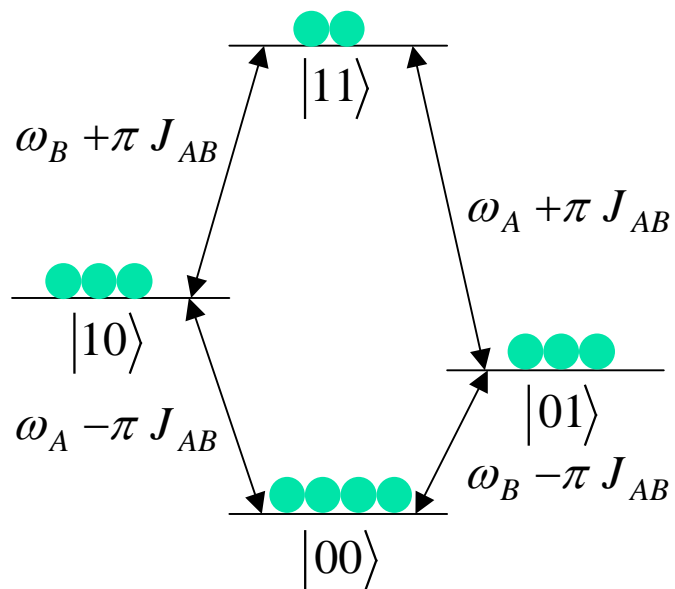
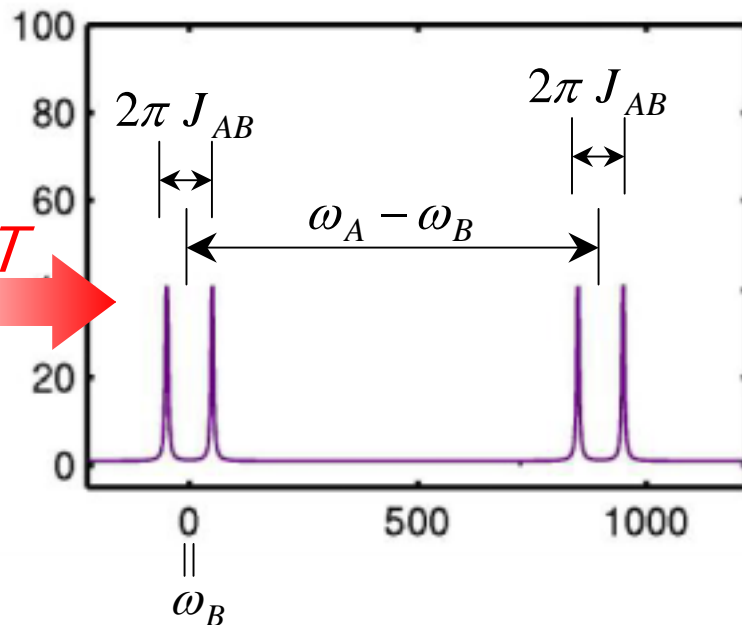
核磁気共鳴における測定



スペクトルの見方



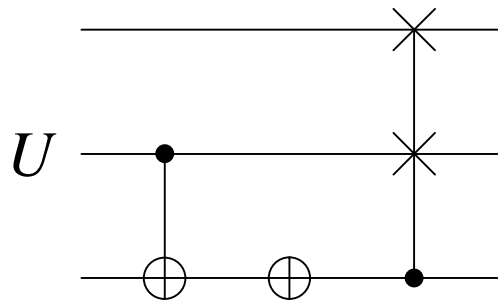
FFT



$$\rho_{\Delta} = \begin{bmatrix} & |00\rangle & |01\rangle & |10\rangle & |11\rangle \\ \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \end{bmatrix}$$

各ピーク位置に、遷移の起こる状態間の占有度の差に応じた強度のピークが観測される

スペクトルの例

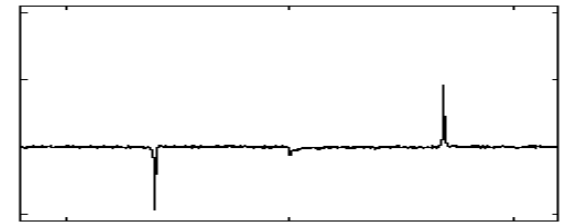
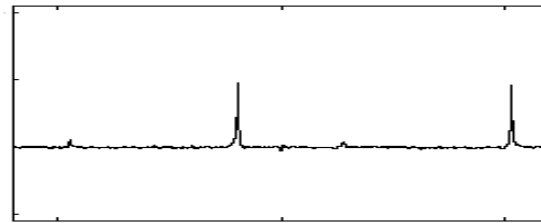
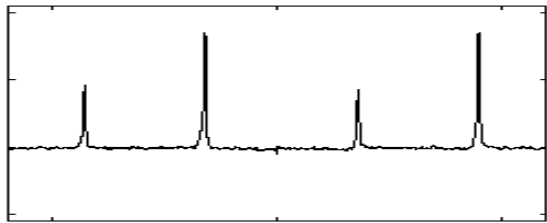
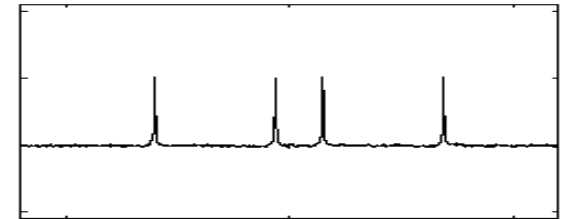
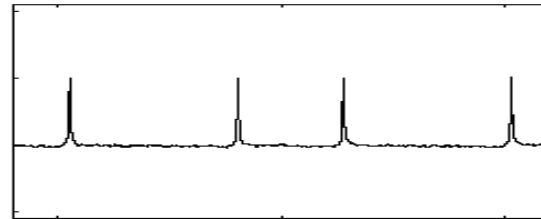
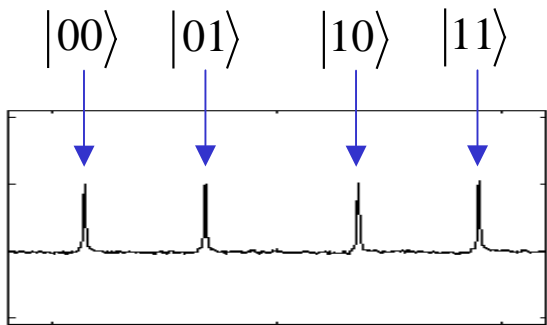


$$\begin{matrix} & & & & ABC \\ & & & & |000\rangle & |001\rangle & |010\rangle & |011\rangle & |100\rangle & |101\rangle & |110\rangle & |111\rangle \end{matrix}$$

$$\rho_{\Delta} = \begin{bmatrix} 3 & 1 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & -3 \end{bmatrix}$$

$$U\rho_{\Delta}U^{\dagger} = \begin{bmatrix} 1 & 3 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -3 \end{bmatrix}$$

左からスピンA,B,Cのスペクトル. 自分以外のスピンの状態によって4本に分裂 (上:熱平衡, 下:実行後)



$$(1+1):(3+1):(1+1):(1+3)$$

$$= 1:2:1:2$$

$$(1-1):(3-1):(-1+1):(-1+3)$$

$$= 0:1:0:1$$

$$(1-3):(1-1):(-1+1):(-1+3)$$

$$= -1:0:0:1$$

初期化の方法

2-qubitの純粋状態の密度行列

$$\rho_{pure} = |00\rangle\langle 00| = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

実効的に純粋とみなせる状態

$$\rho_{eff} = \frac{1-\alpha}{2^n} \mathbf{1} + \alpha |00\rangle\langle 00| \quad \because \text{Tr}(\rho_{eff} F) = \alpha \text{Tr}(\rho_{pure} F)$$

~~$\rho_{eq} \xrightarrow{U} \rho_{pure} \text{ or } \rho_{eff}$~~

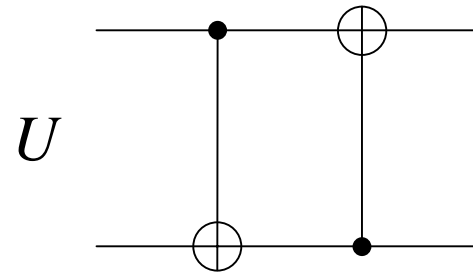
非ユニタリな過程を導入することで、実効的に純粋な状態をつくれぬか??

- 時間平均法 (Temporal averaging)
- 論理ラベル法 (Logical labeling)
- 空間平均法 (Spatial averaging)

時間平均法

複数回の実験結果を足し合わせて、実効的純粋状態をつくりだす

$$U = C_{AB}C_{BA} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$



$$\rho_1 = \rho_{eq} = \begin{bmatrix} a & & & \\ & b & & \\ & & c & \\ & & & d \end{bmatrix}$$

$$\rho_2 = U\rho_{eq}U^\dagger = \begin{bmatrix} a & & & \\ & d & & \\ & & b & \\ & & & c \end{bmatrix}$$

$$\rho_3 = U^2\rho_{eq}U^{\dagger 2} = \begin{bmatrix} a & & & \\ & c & & \\ & & d & \\ & & & b \end{bmatrix}$$

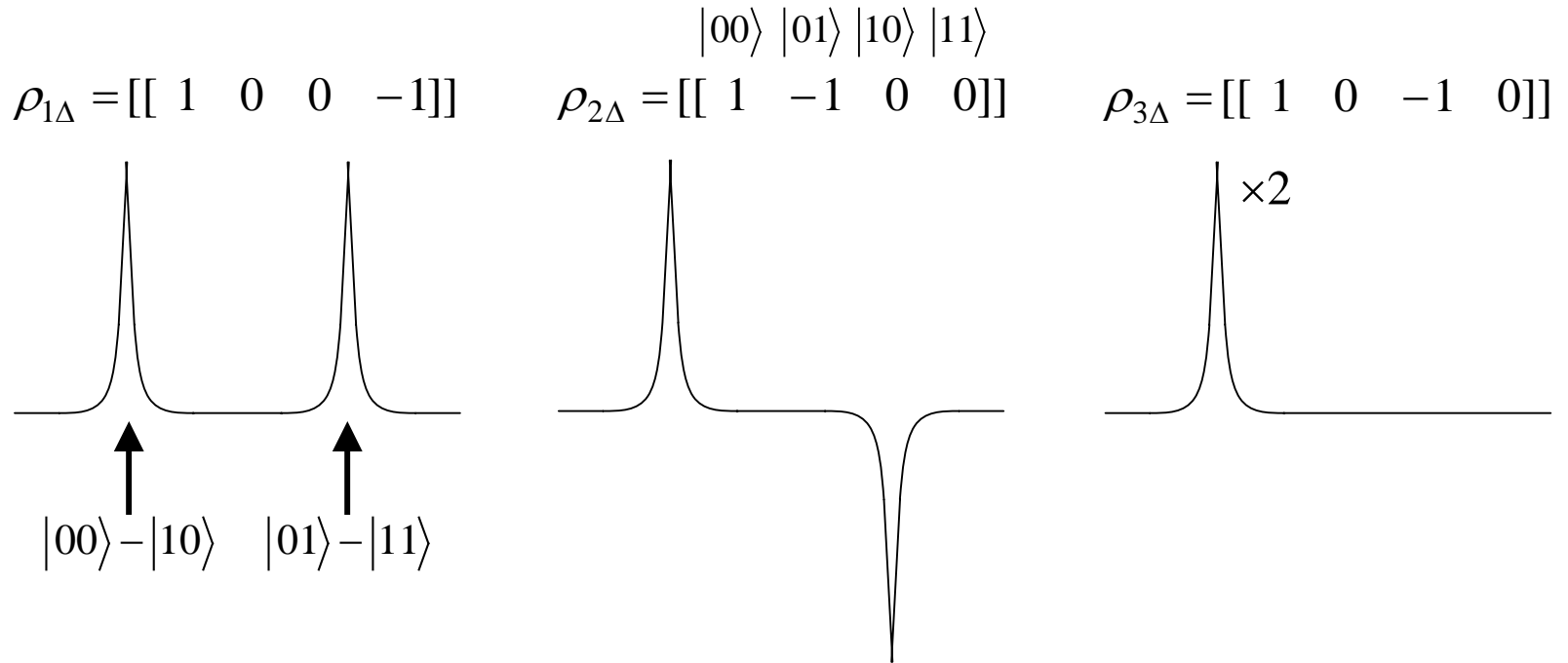
$$\rho_{eff} = \rho_1 + \rho_2 + \rho_3 = \begin{bmatrix} 3a & & & \\ & 1-a & & \\ & & 1-a & \\ & & & 1-a \end{bmatrix} = (1-a)\mathbf{1} + (4a-1)|00\rangle\langle 00|$$

観測されない 初期化された信号

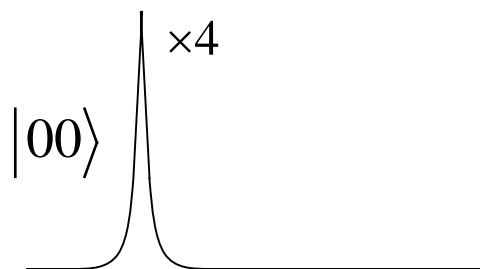
$\because a + b + c + d = 1$

時間平均法

スピンAのスペクトルを見ると...



全部足し合わせると...

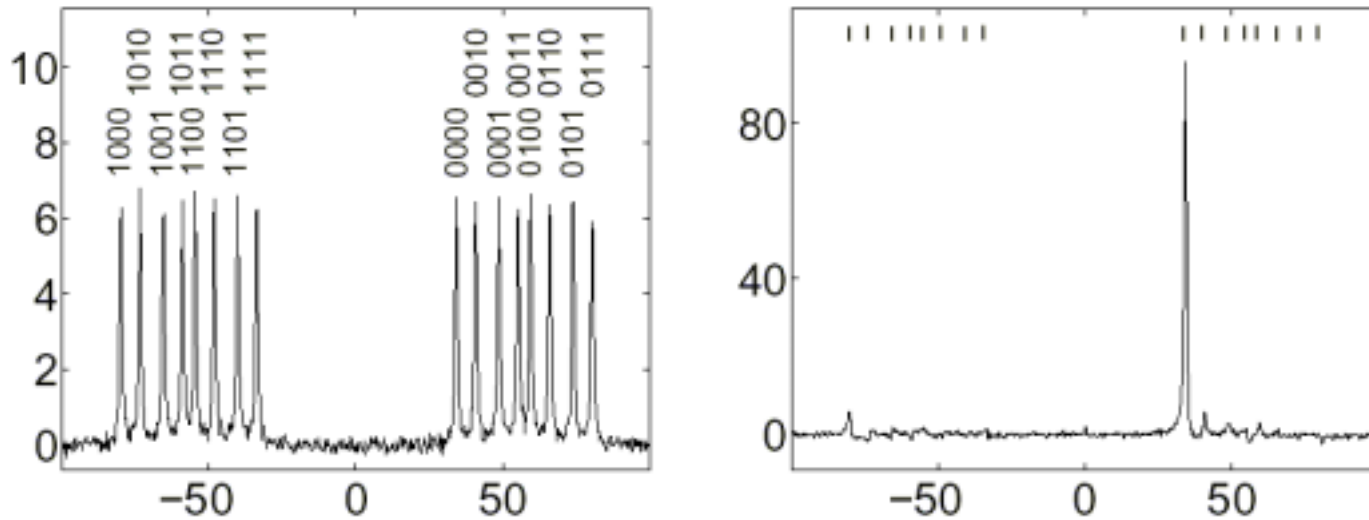


スピンBについても同様.

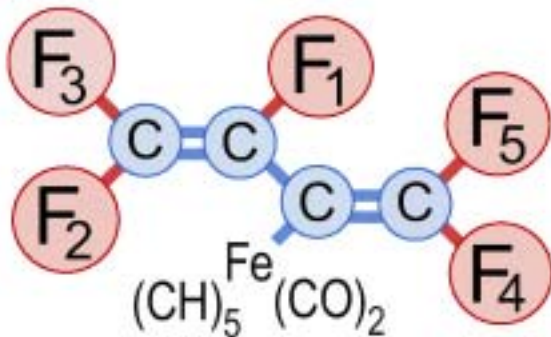
$\rho_{2\Delta}$ と $\rho_{3\Delta}$ のスペクトルが入れかわる

時間平均法の例

スピン1のスペクトル (左:熱平衡, 右:初期化後)



5-qubitの量子計算に用いられた分子

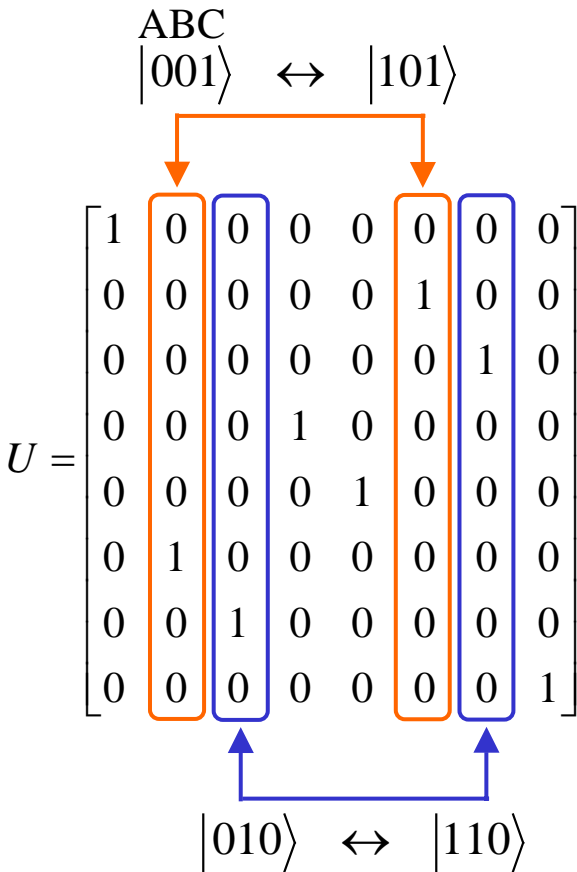


初期化に用いられたパルス列

$C_{51}C_{45}C_{24}NOT_3$	$C_{21}C_{52}C_{45}C_{34}$	$C_{14}C_{31}C_{53}NOT_2$
$C_{12}C_{15}C_{13}C_{41}$	$C_{32}C_{13}C_{25}NOT_4$	$C_{31}C_{43}C_{23}NOT_5$
$C_{53}C_{25}C_{12}NOT_4$	$C_{54}C_{51}NOT_2$	$C_{35}C_{23}NOT_1$

論理ラベル法

補助ビットを用いて, 残りのビットの実効的純粋状態をつくりだす



$$\rho_{\Delta} = \begin{bmatrix} |000\rangle & |001\rangle & |010\rangle & |011\rangle & |100\rangle & |101\rangle & |110\rangle & |111\rangle \\ \hline 3 & 1 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & -3 \end{bmatrix}$$

$$U\rho_{\Delta}U^{\dagger} = \begin{bmatrix} 3 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -3 \end{bmatrix}$$

A=0で“ラベル”された状態の集まり

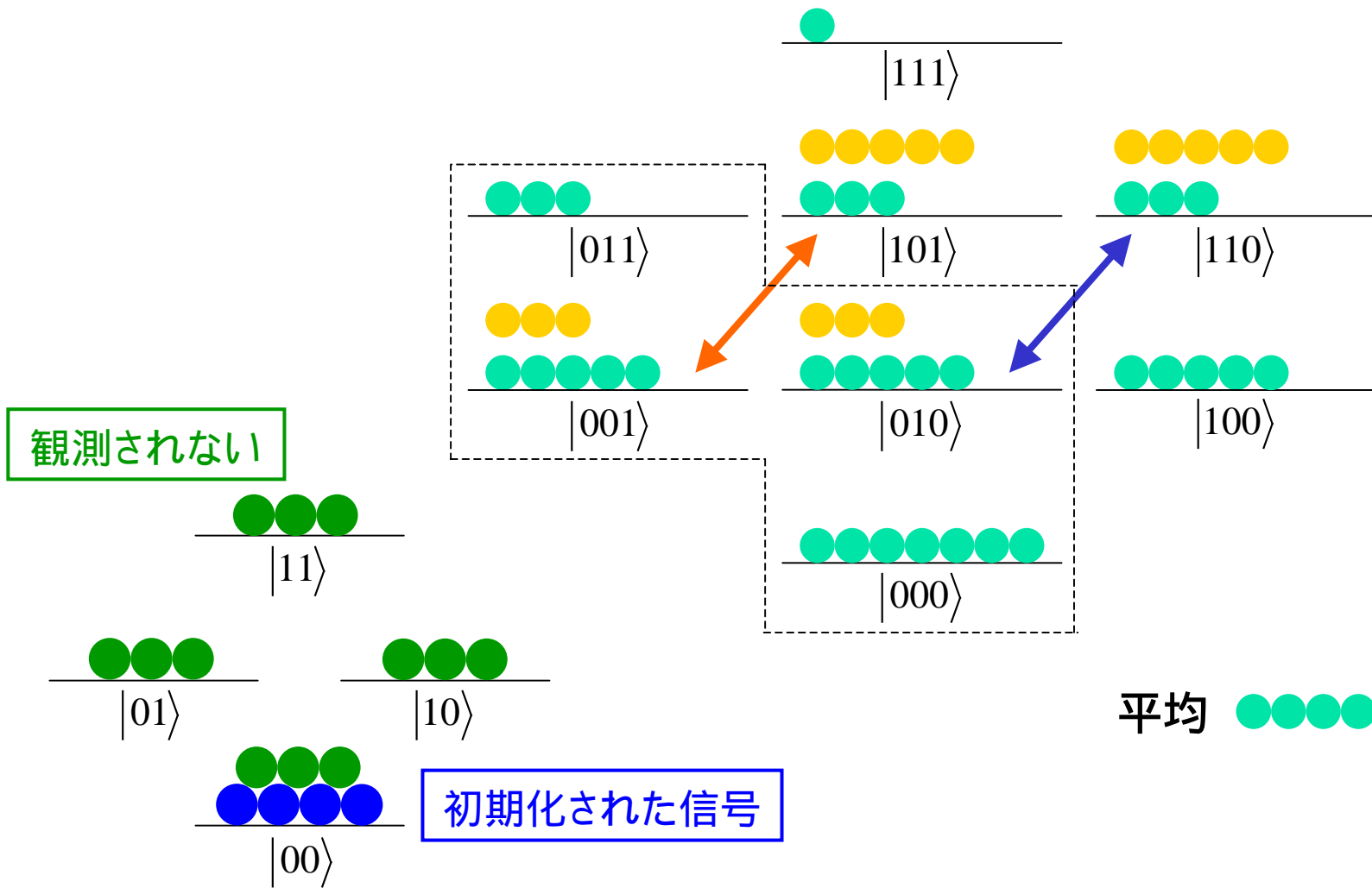
$$-\begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & & 1 \end{bmatrix} + 4\begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 0 & & \\ & & 0 & \\ & & & 0 \end{bmatrix}$$

観測されない

初期化された信号

論理ラベル法

各状態を占有するスピンの数の変化



論理ラベル法

U を実行する量子
論理ゲートは?

ABC	U
$ 001\rangle$	$\rightarrow 101\rangle$
$ 010\rangle$	$\rightarrow 110\rangle$
$ 101\rangle$	$\rightarrow 001\rangle$
$ 110\rangle$	$\rightarrow 010\rangle$

$ 011\rangle$	$\xrightarrow{C_{BA}}$	$ 111\rangle$	$\xrightarrow{C_{CA}}$	$ 011\rangle$
$ 111\rangle$	\rightarrow	$ 011\rangle$	\rightarrow	$ 111\rangle$

B or Cが制御ビット, Aが標的ビット
の制御NOTゲート

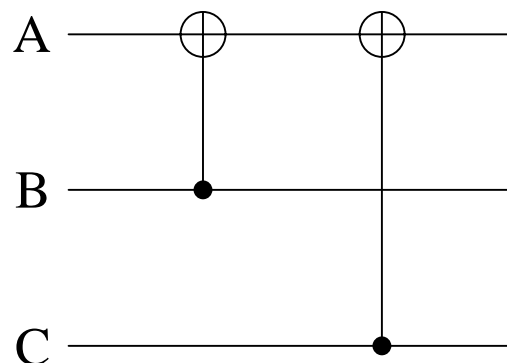
BCが10または01のときAをNOT



Bが1のときAをNOTし, Cが1のときAをNOT
(BCが11のときはAは2回NOTされて元に戻る)



$$U = C_{BA} C_{CA} = C_{CA} C_{BA}$$



Spin Hamiltonian

$$\mathcal{H} = -\sum_i \omega_i \hat{I}_z^i + \sum_{i < j} 2\pi J_{ij} \hat{I}_z^i \hat{I}_z^j$$

Zeeman分裂, Larmor歳差運動 J-結合, スピン間相互作用

$$\hat{I}_z^i = \mathbf{1} \otimes \cdots \otimes \frac{1}{2} \sigma_z^i \otimes \cdots \otimes \mathbf{1} \quad \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

$$\hat{I}_z^i \hat{I}_z^j = \mathbf{1} \otimes \cdots \otimes \frac{1}{2} \sigma_z^i \otimes \cdots \otimes \frac{1}{2} \sigma_z^j \otimes \cdots \otimes \mathbf{1}$$

2スピン系のハミルトニアン

$$\mathcal{H} = -\omega_A \hat{I}_z^A - \omega_B \hat{I}_z^B + 2\pi J_{AB} \hat{I}_z^A \hat{I}_z^B$$

$$= -\frac{1}{2} \begin{bmatrix} \omega_A + \omega_B & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \omega_A - \omega_B & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\omega_A + \omega_B & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\omega_A - \omega_B \end{bmatrix} + \frac{\pi J_{AB}}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Larmor歳差運動

磁気モーメント μ と角運動量 J は平行

$$\mu = \gamma J$$

磁気回転比

トルク方程式

$$\frac{dJ}{dt} = \mu \times B$$

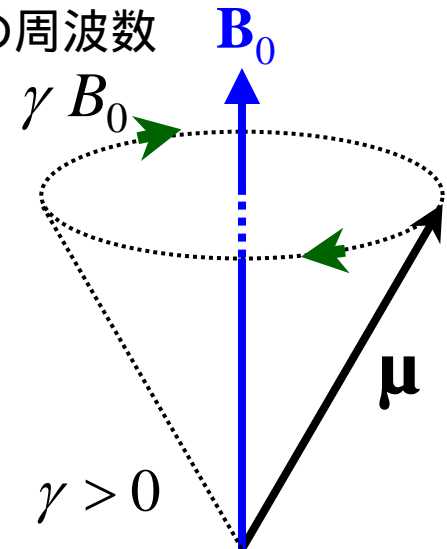
磁場 B が磁気モーメントに及ぼすトルク

$$\frac{d\mu}{dt} = \gamma \mu \times B$$

磁気回転比の値

	磁気回転比 (MHz/T)	天然存在比 (%)
^1H	42.58	99.99
^{13}C	10.71	1.07
^{19}F	40.05	100.00

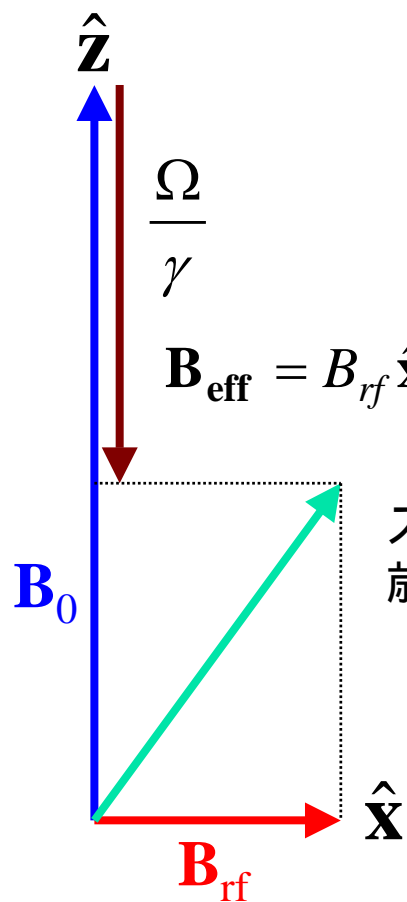
歳差運動の周波数



回転磁場の影響

xy平面を時計回りに回転する交流磁場

$$\mathbf{B}_L = B_{rf} (\hat{\mathbf{x}} \cos \Omega t - \hat{\mathbf{y}} \sin \Omega t)$$

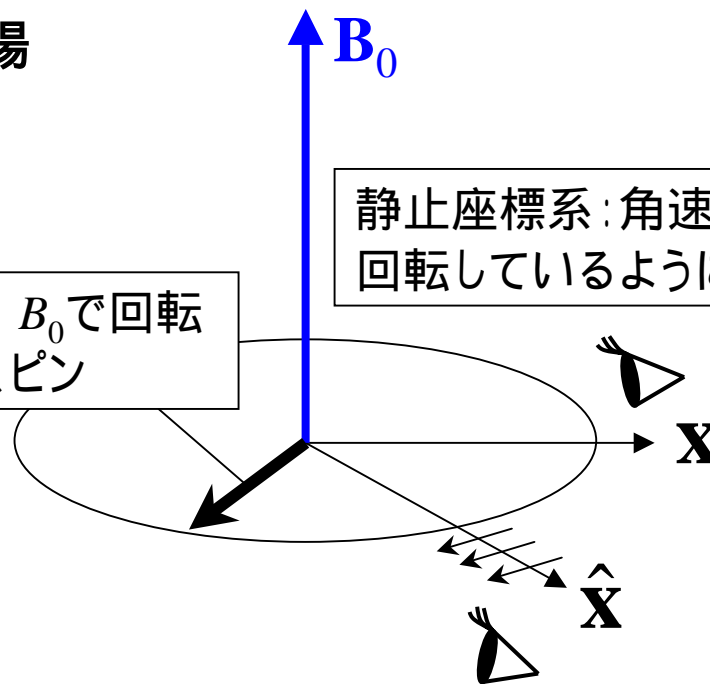


スピンは有効磁場に対して歳差運動をする

= B_0 では静磁場は消える

角速度 B_0 で回転する核スピン

静止座標系：角速度 B_0 で回転しているように見える

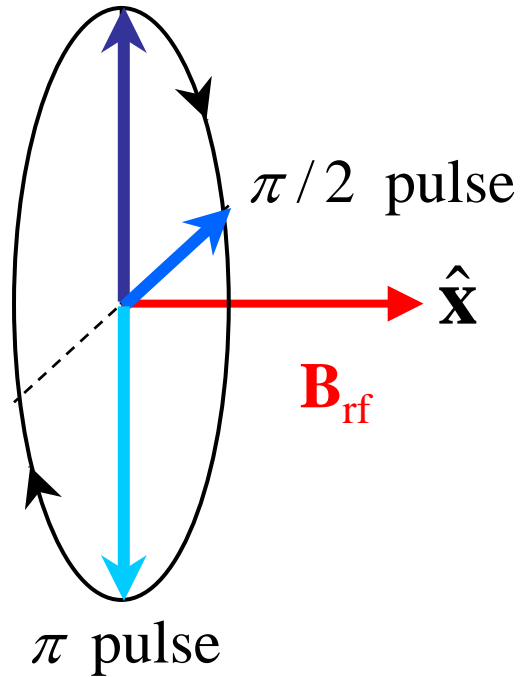


角速度 $\frac{\Omega}{\gamma}$ で回転する座標系：遅くって見える。なぜ??

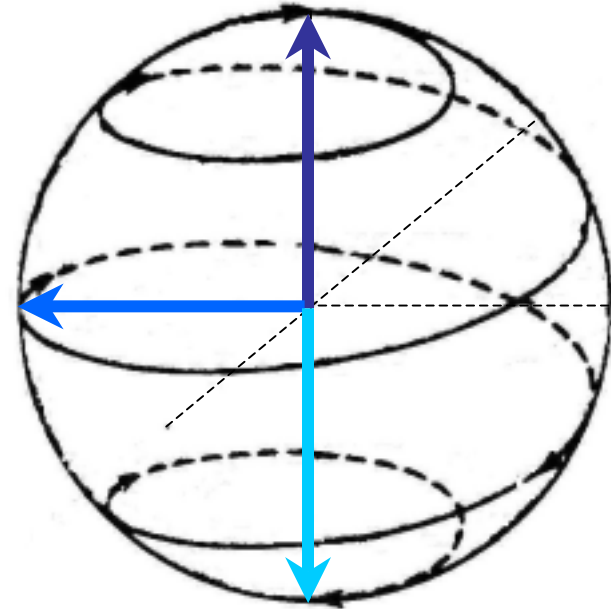
z方向の静磁場が弱くなったから

1-qubitの回転操作

= B_0 で回転する座標系



静止座標系



与える交流磁場の位相を調整すれば, $x, y, -x, -y$ 軸の全てについての回転が実現. それらを組み合わせると, z 軸の周りの回転も可能

回転の演算子

指数演算子

$$e^A \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{A^n}{n!} = \mathbf{1} + A + \frac{A^2}{2!} + \frac{A^3}{3!} + \dots$$

A がエルミート行列のとき $\exp(ixA) = \cos x \mathbf{1} + i \sin x A$

軸 (x, y, z) の周りの回転 (反時計回り!!)

$$R_{\alpha}(\theta) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{i\theta \hat{I}_{\alpha}}{n} \right)^n = \exp(-\theta \sigma_{\alpha} / 2) \quad \text{微小回転の繰り返し}$$

$$R_x(\theta) = \begin{bmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & -i \sin \frac{\theta}{2} \\ -i \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{bmatrix} \quad R_y(\theta) = \begin{bmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & -\sin \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{bmatrix} \quad R_z(\theta) = \begin{bmatrix} \exp(-i \frac{\theta}{2}) & 0 \\ 0 & \exp(i \frac{\theta}{2}) \end{bmatrix}$$

特に, $\theta = \pm\pi/2$ のとき

$$X = R_x(\pi/2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & -i \\ -i & 1 \end{bmatrix} \quad Y = R_y(\pi/2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \quad Z = R_z(\pi/2) = XY\bar{X} = \sqrt{-i} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{bmatrix}$$

$$\bar{X} = R_x(-\pi/2) \quad \bar{Y} = R_y(-\pi/2) \quad \bar{Z} = R_z(-\pi/2) = X\bar{Y}\bar{X}$$

J-結合

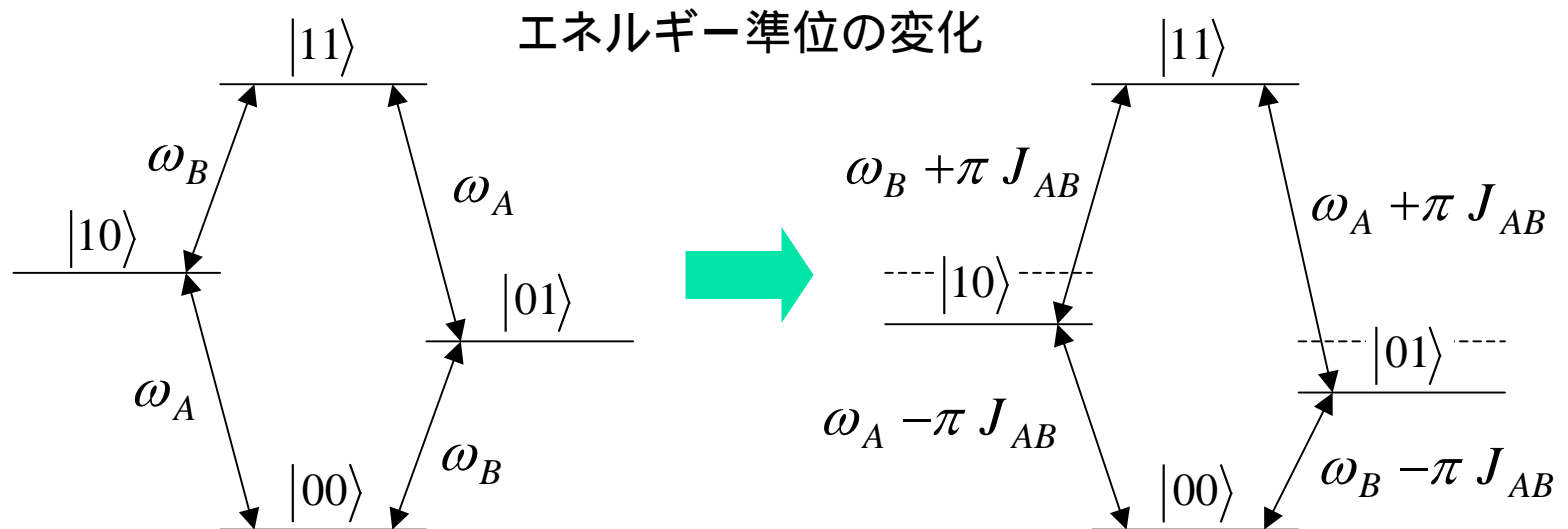
スピンAについてのハミルトニアン

$$\mathcal{H}_A = -\omega_A \hat{I}_z^A + 2\pi J_{AB} \hat{I}_z^A \hat{I}_z^B$$

$\hat{I}_z^B |0\rangle_B = \frac{1}{2} |0\rangle_B$ なので, スピンBが上向きであるときのスピンAのハミルトニアンは,

$$\mathcal{H}_A = -(\omega_A - \pi J_{AB}) \hat{I}_z^A$$

すなわち, スピンBが**上向き**のときは, スピンAの歳差周波数は**遅く**なる.
反対に, スピンBが**下向き**のときは, スピンAは**速く**なる



J-結合の時間発展

J-結合の時間発展

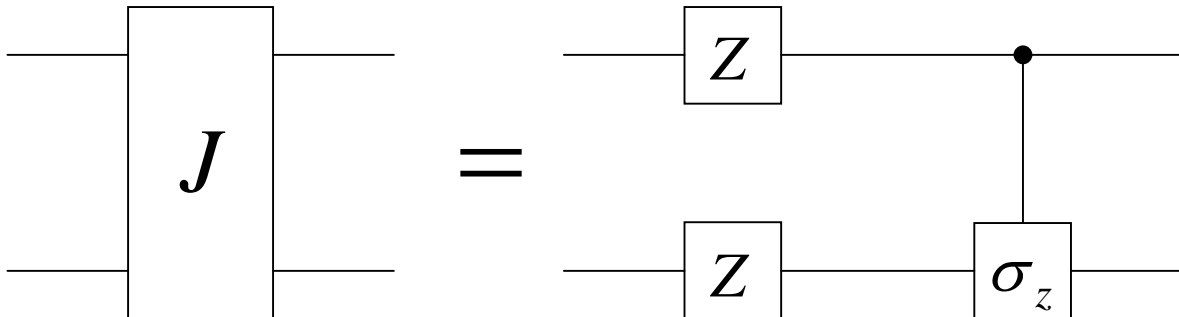
$$U_J(t) = \exp(-i2\pi Jt \hat{I}_z^A \hat{I}_z^B) = \begin{bmatrix} \exp(-i\pi Jt/2) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \exp(i\pi Jt/2) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \exp(i\pi Jt/2) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \exp(-i\pi Jt/2) \end{bmatrix}$$

特に, $t = \frac{1}{2J}$ のとき

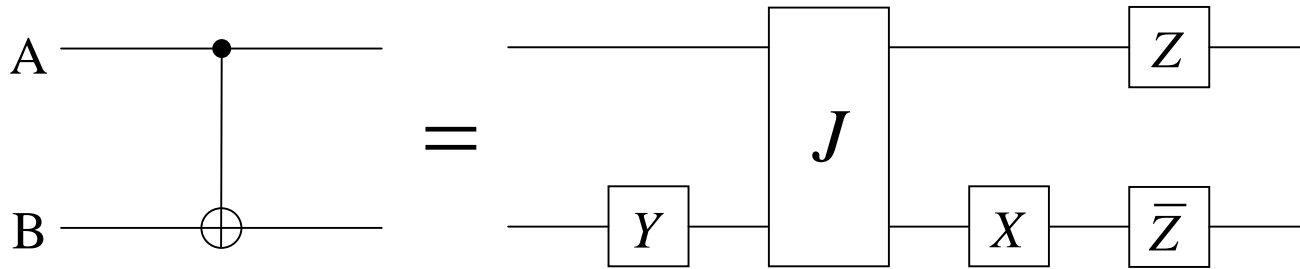
$$J = U_J(1/2J) = \sqrt{-i} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

スピンの向きが異なるとき,
位相を 変えるゲート

J の量子論理ゲートの等価回路



制御NOTゲート



$$C_{AB} = Z_A \bar{Z}_B X_B J Y_B$$

$$= \sqrt{-i} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$Y_B = \mathbf{1} \otimes Y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\bar{Z}_B = \mathbf{1} \otimes \bar{Z} = \sqrt{i} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \end{bmatrix}$$

$$X_B = \mathbf{1} \otimes X = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & -i & 0 & 0 \\ -i & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -i \\ 0 & 0 & -i & 1 \end{bmatrix}$$

$$Z_A = Z \otimes \mathbf{1} = \sqrt{-i} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \end{bmatrix}$$

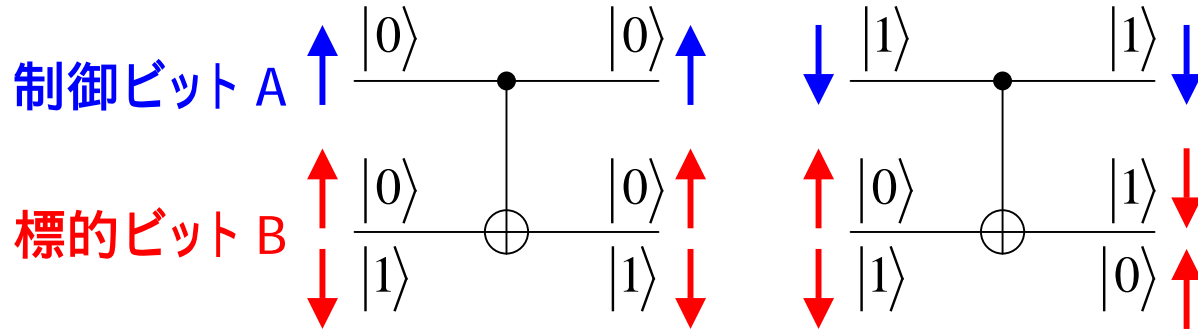
制御NOTもどき

$$\tilde{C}_{AB} = X_B J Y_B = \sqrt{-i} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

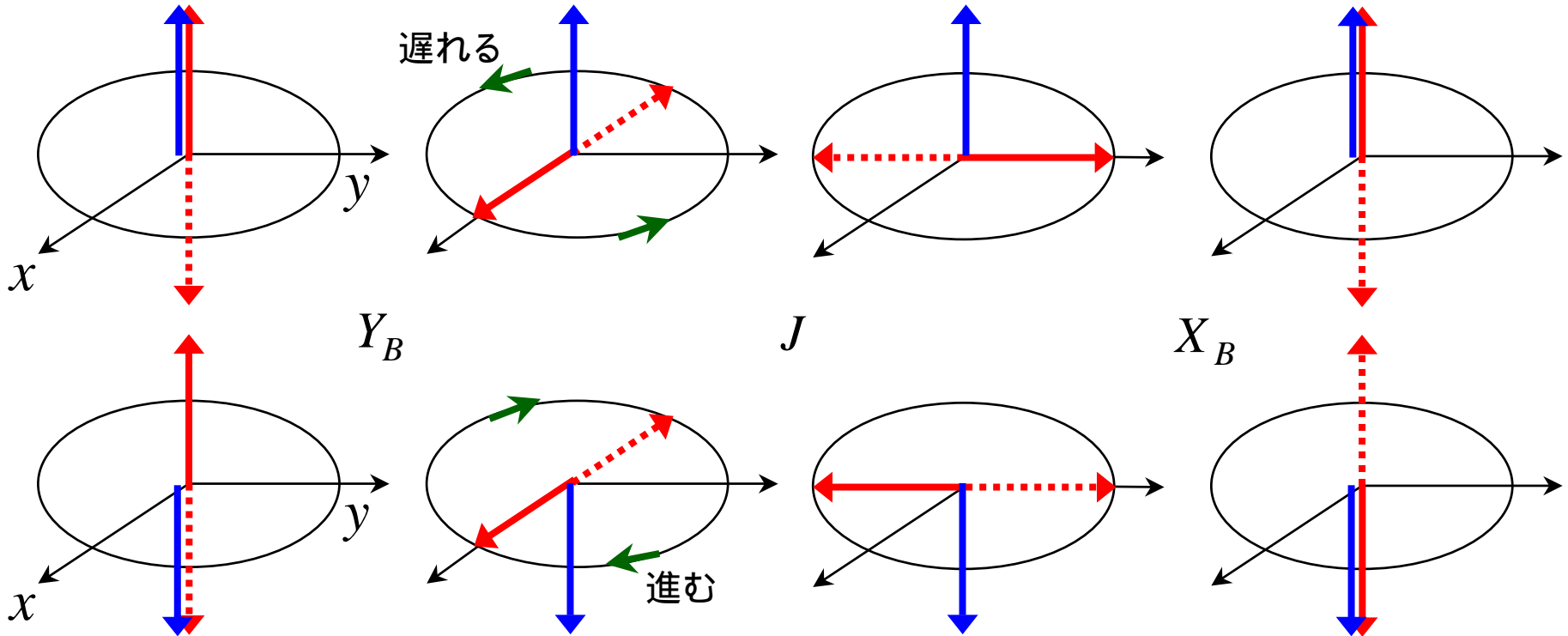
密度行列が対角的なときは制御NOTとして働く

$$\tilde{C}_{AB} [[a \ b \ c \ d]] \tilde{C}_{AB}^\dagger = [[a \ b \ d \ c]]$$

制御NOTゲート



周波数 ω_B で回転する座標系から見ると...

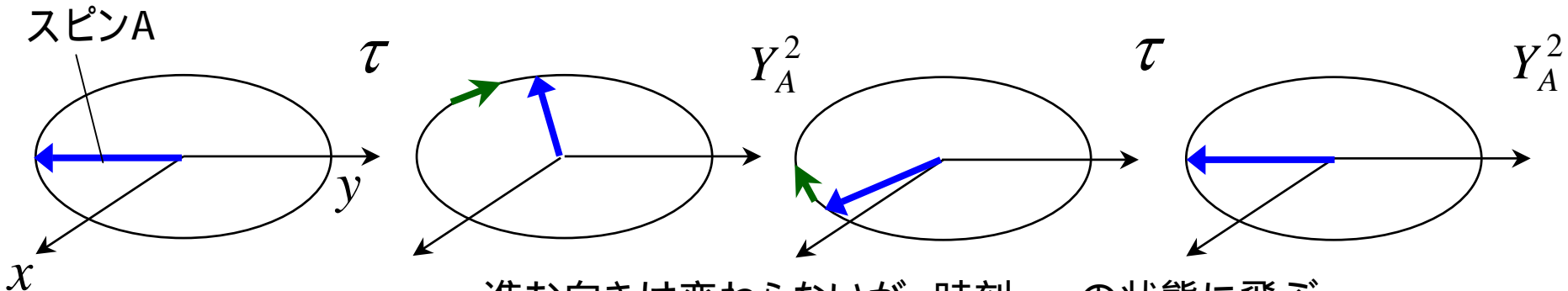


Refocusing

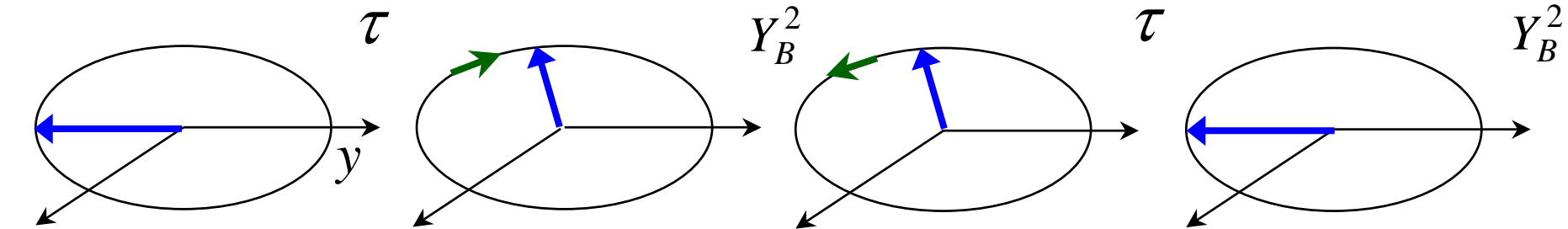
系の時間発展を制御する $Y_A^2 U_J(\tau) Y_A^2 U_J(\tau) = Y_B^2 U_J(\tau) Y_B^2 U_J(\tau) = \mathbf{1}$

\swarrow \searrow \swarrow \searrow
 π pulse 任意の時間 の間のJ結合

周波数 ω_A で回転する座標系から見ると...



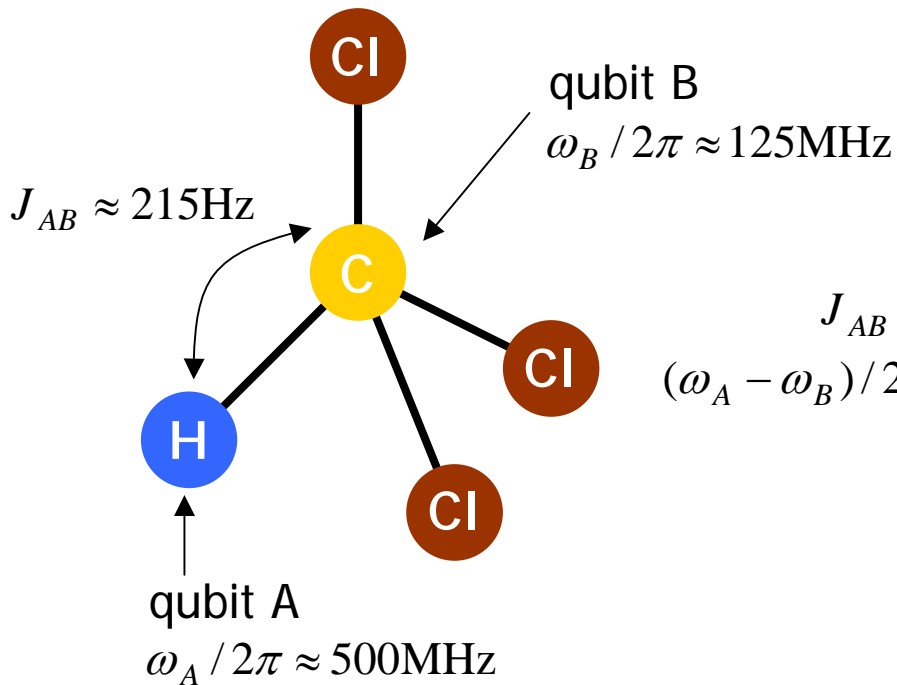
進む向きは変わらないが、時刻- の状態に飛ぶ



スピンBの向きが変わり、逆向きに進む

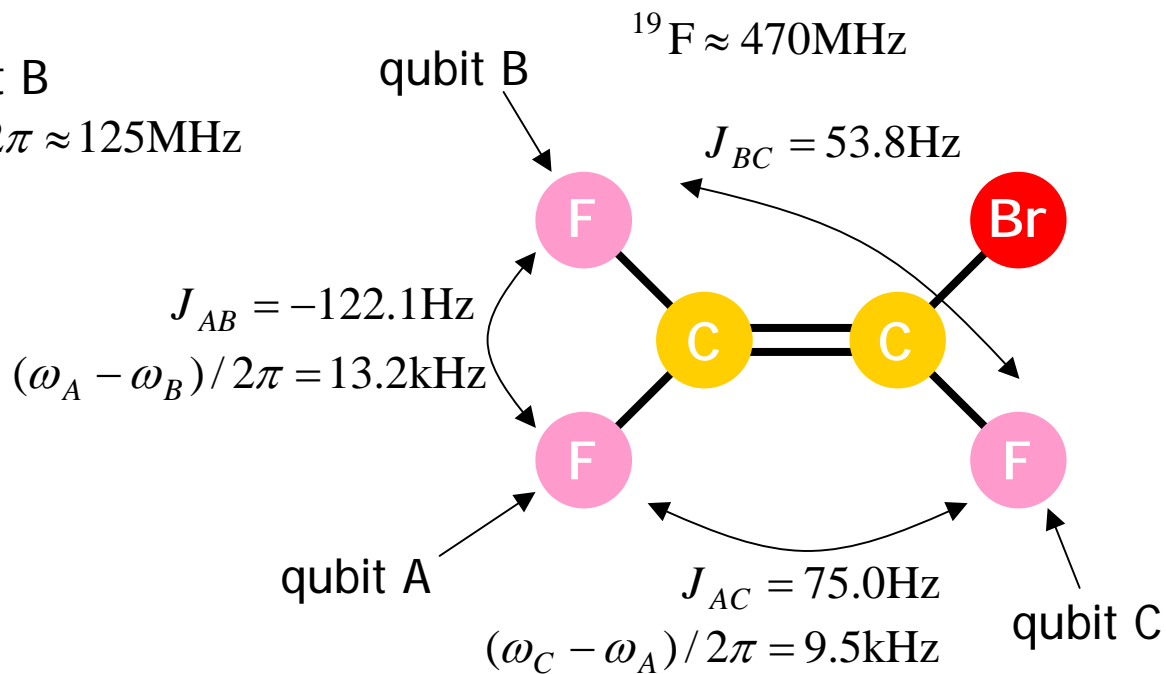
NMR量子計算の実験

Deutsch-Jozsaのアルゴリズム
の実験に用いられた分子



chloroform

論理ラベルの実験に
用いられた分子

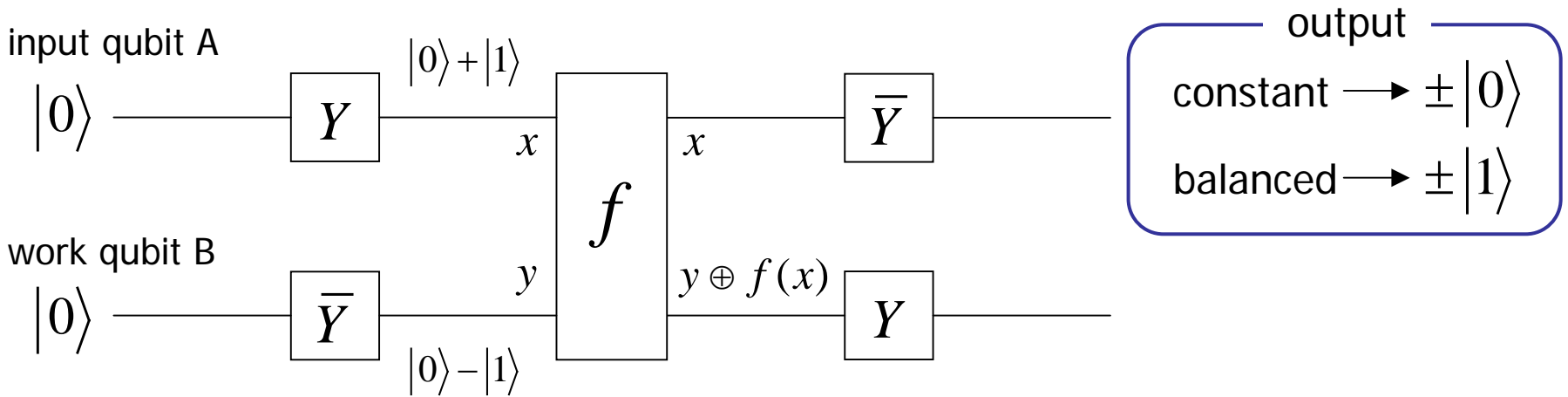


bromotrifluoroethylene

$$B_0 = 11.7\text{T}$$

Deutsch-Jozsaのアルゴリズム

2値関数 $f(x)$ が“constant”か“balanced”かを判定する



2 bitの $f(x)$

x	constant		balanced	
	f_1	f_2	f_3	f_4
0	0	1	0	1
1	0	1	1	0

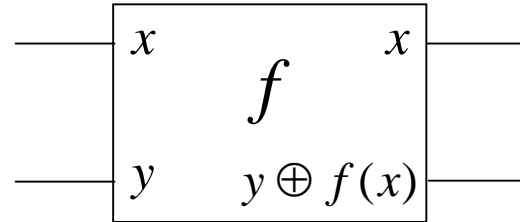
NMRにおいては00以外も入力してしまう

AB	C	B
00	00	10
01	01	
10	10	00
11	11	

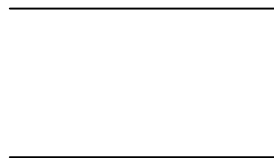
work bitが1のときはうまく動作しないが、スペクトルから区別がつくので問題なし。初期化不要

D-Jアルゴリズムの実験

f を実行する量子論理ゲートとパルス列は?

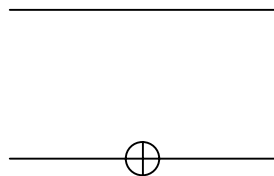


$$y \oplus f_1(x) = y \oplus 0 = y$$



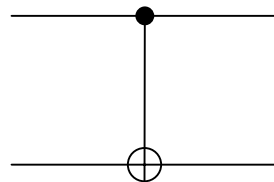
$$f_1 = X_B^2 U_J (1/4J) X_B^2 U_J (1/4J)$$

$$y \oplus f_2(x) = y \oplus 1 = \bar{y}$$



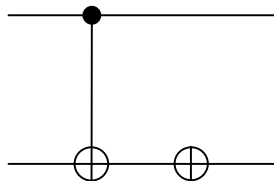
$$f_2 = \bar{X}_B^2 f_1 = U_J (1/4J) X_B^2 U_J (1/4J)$$

$$y \oplus f_3(x) = y \oplus x$$



$$\begin{aligned} f_3 &= (Y_A \bar{X}_A \bar{Y}_A) (X_B \bar{Y}_B \bar{X}_B) X_B J Y_B \\ &= Y_A \bar{X}_A \bar{Y}_A X_B \bar{Y}_B J Y_B \end{aligned}$$

$$y \oplus f_4(x) = y \oplus \bar{x}$$



$$f_4 = \bar{X}_B^2 f_3 = Y_A \bar{X}_A \bar{Y}_A \bar{X}_B \bar{Y}_B J Y_B$$

D-Jアルゴリズムの実験

アルゴリズムによる状態の変化

AB	C	B
00	00	10
01	01	
10	10	00
11	11	

アルゴリズム実行後のスピンAのスペクトルの予想



balancedのとき

$$\rho_{1\Delta} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

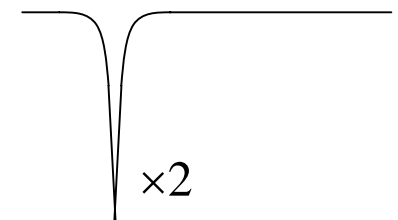
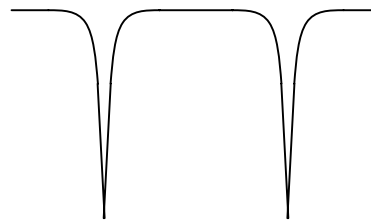
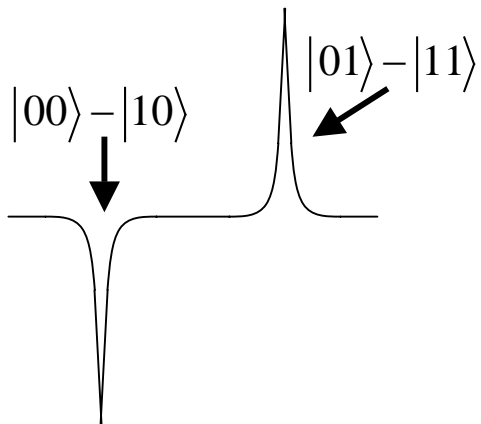
$$\rho_{2\Delta} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\rho_{3\Delta} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$U\rho_{1\Delta}U^\$ = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & -1 \end{bmatrix}$$

$$U\rho_{2\Delta}U^\$ = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

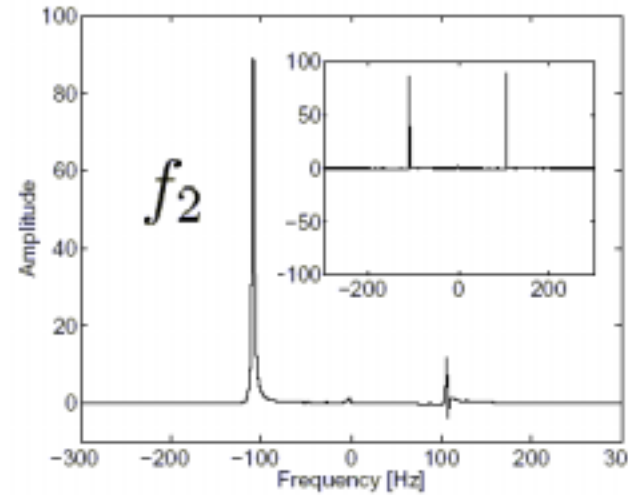
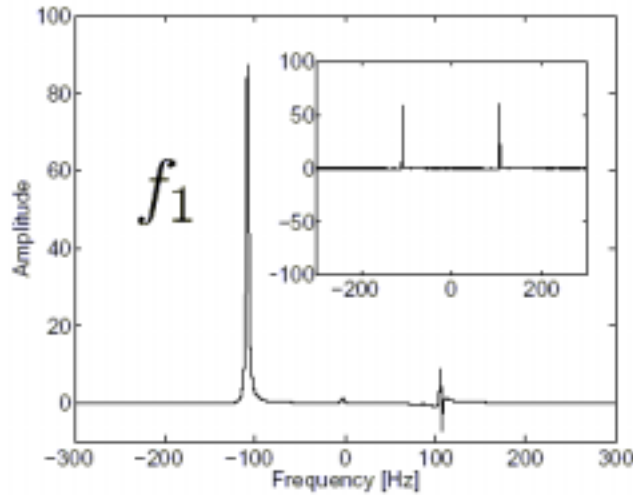
$$U\rho_{3\Delta}U^\$ = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$



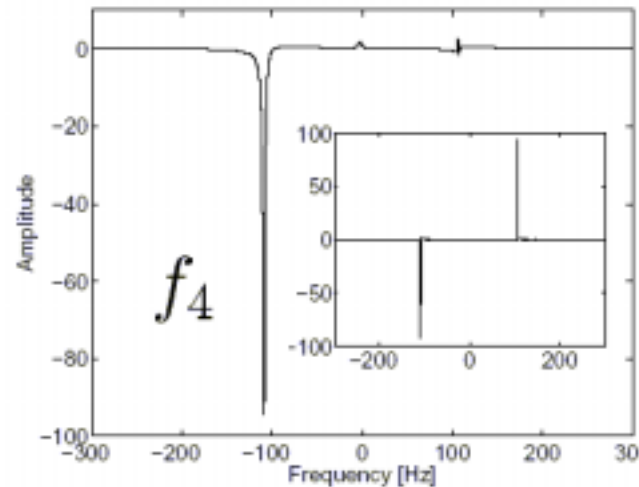
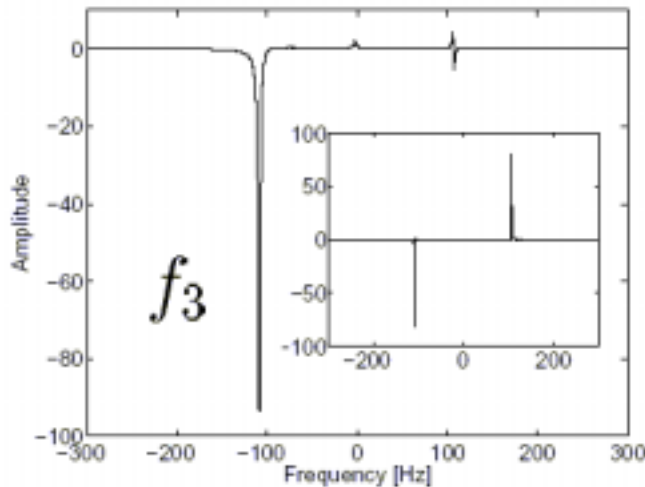
D-Jアルゴリズムの実験

スピンAのスペクトル (挿入図:熱平衡状態から実行したとき)

constant



balanced

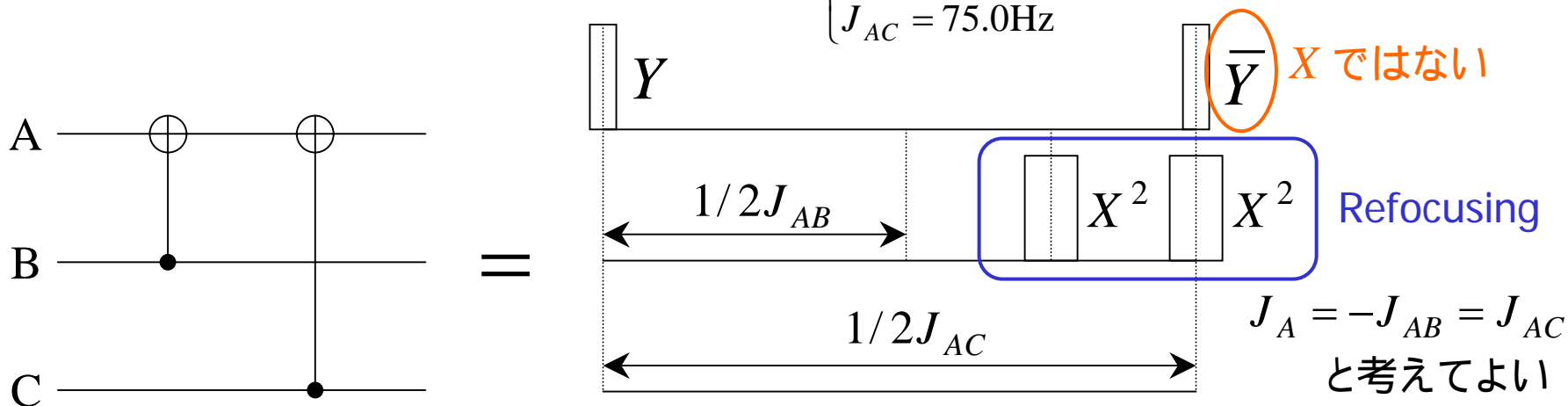


横軸は49.9755160MHzからのずれ

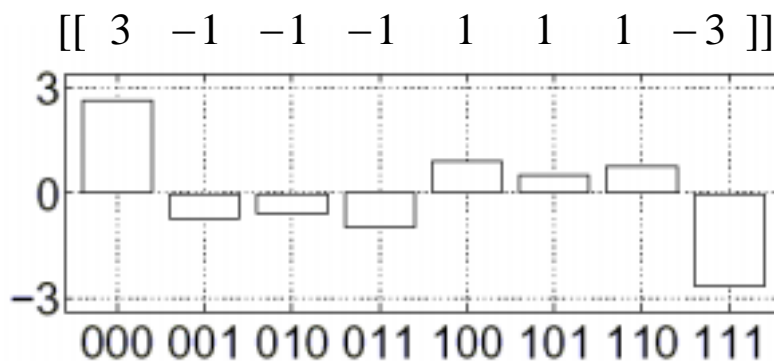
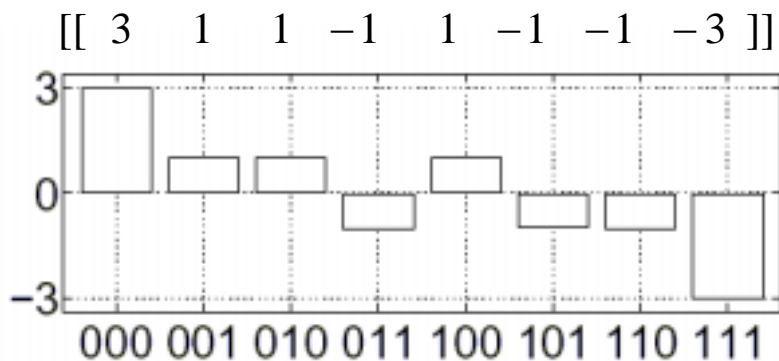
論理ラベルの実験

$$\mathcal{H} = -\omega_A \hat{I}_z^A - \omega_B \hat{I}_z^B - \omega_C \hat{I}_z^C + 2\pi J_{AB} \hat{I}_z^A \hat{I}_z^B + 2\pi J_{AC} \hat{I}_z^A \hat{I}_z^C + 2\pi J_{BC} \hat{I}_z^B \hat{I}_z^C$$

$$\begin{cases} J_{AB} = -122.1\text{Hz} \\ J_{AC} = 75.0\text{Hz} \end{cases}$$



密度行列の対角成分 (右:熱平衡, 左:実行後)



論理ラベルの実験

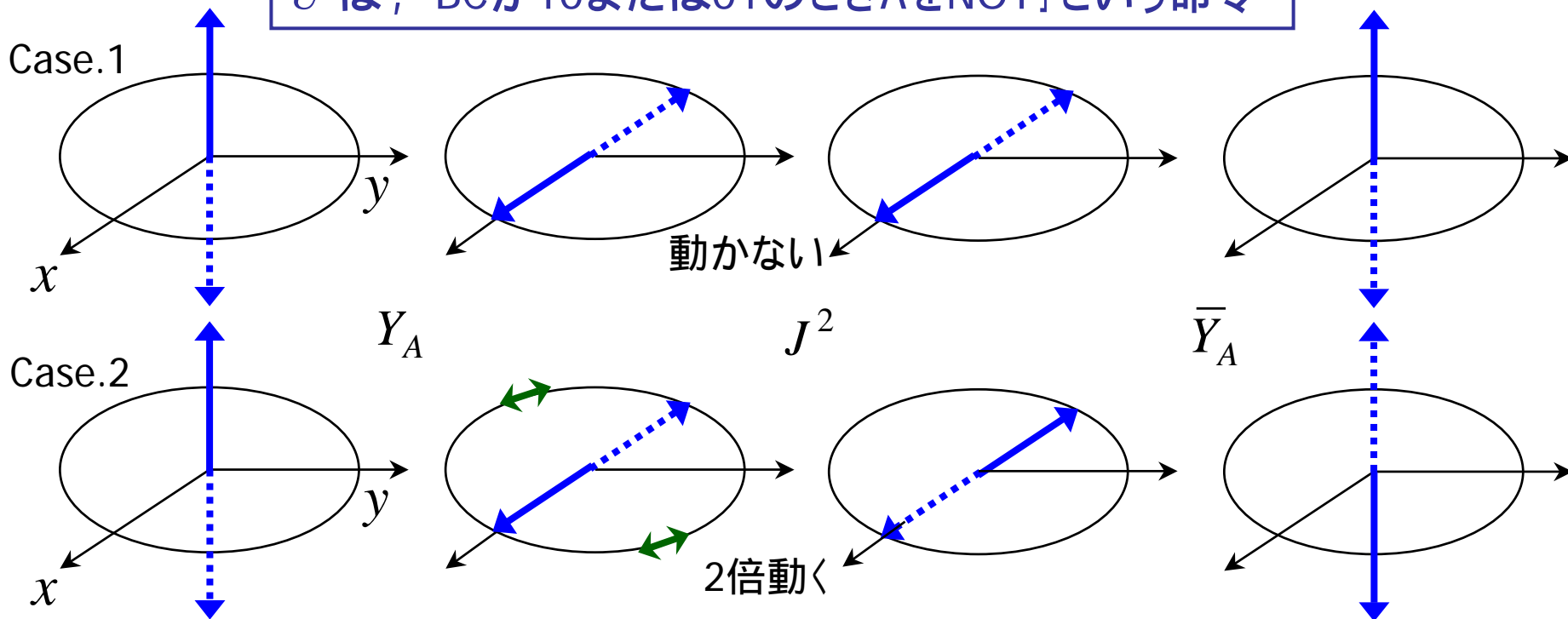
スピンAについてのハミルトニアン

$$\mathcal{H}_A = -\omega_A \hat{I}_z^A - 2\pi J_A \hat{I}_z^A \hat{I}_z^B + 2\pi J_A \hat{I}_z^A \hat{I}_z^C$$

Case.1: スピンBとCが同じ向きであるとき $\longrightarrow \mathcal{H}_A = -\omega_A \hat{I}_z^A$

Case.2: スピンBとCが互いに逆向きであるとき $\longrightarrow \mathcal{H}_A = -(\omega_A \hat{I}_z^A \pm 2\pi J_A) \hat{I}_z^A$

U は, 「BCが10または01のときAをNOT」という命令

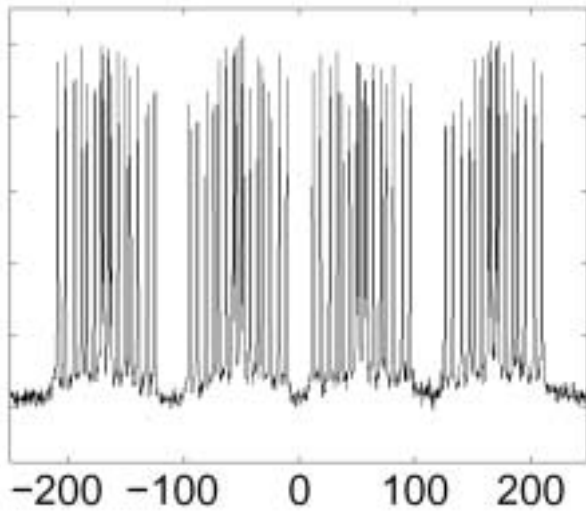


現在までの成果

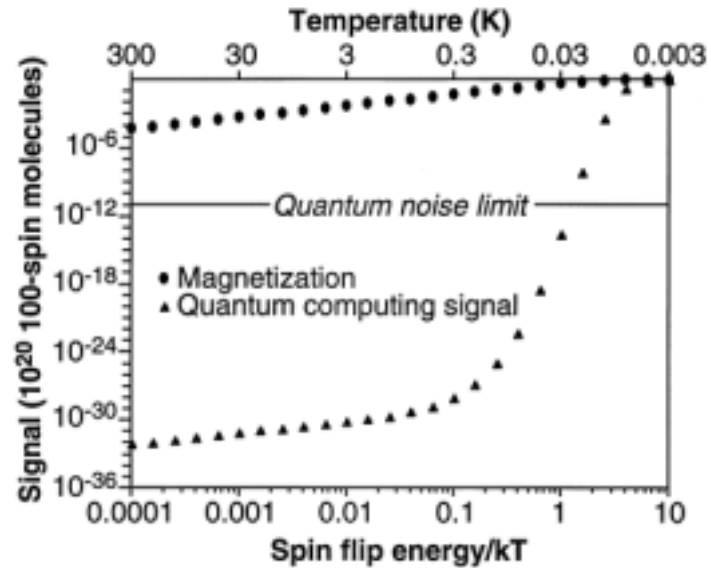
Qubits	Algorithms	Group (First Author)	Journal	Year
2	Grover	IBM (Chuang)	Phys. Rev. Lett.	1998
	Deutsch-Jozsa	IBM (Chuang)	Nature	1998
	Grover	Oxford (Jones)	Nature	1998
	Deutsch-Jozsa	Oxford (Jones)	J. Chem. Phys.	1998
3	Error Correction	MIT (Cory)	Phys. Rev. Lett.	1998
	Teleportation	LANL (Neilsen)	Nature	1998
	Logical Labeling	IBM (Vandersypen)	Phys. Rev. Lett.	1999
5	Order Finding	IBM (Vandersypen)	Phys. Rev. Lett.	2000
7	Shor (Factoring 15)	IBM (Vandersypen)	Nature	2001

“Scalable” ??

周波数資源の問題



信号の減少



W.S.Warren, Science 277, 1688(1997)

$$\rho = \frac{1}{2^n} (1 + \epsilon \rho_{\Delta})$$

各状態の占有率が指数的に減少

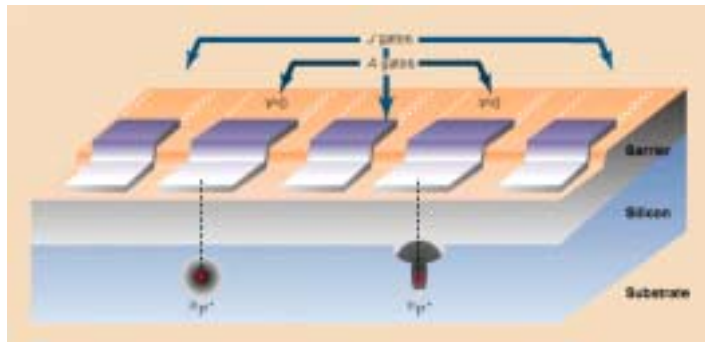
初期化の手間の増大

10-qubitの壁??

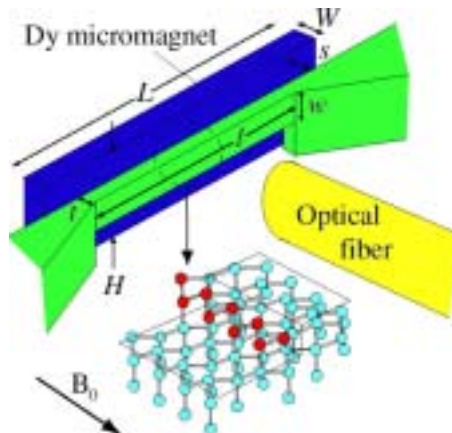
大規模量子コンピュータの実現に向けて

Nuclear Spin

B. E. Kane, Nature (1998)

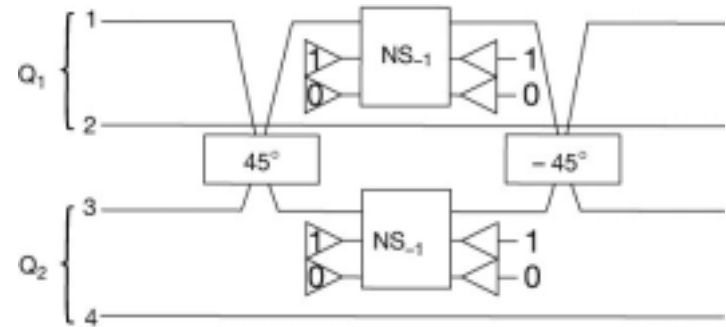


T. D. Ladd *et. al.*, PRL (2002)



Linear Optics

E. Knill *et. al.* (KLM), Nature (2001)



Josephson junction

J. Q. You *et. al.*, PRL (2002)

