

Cartan 分解を用いた量子アルゴリズムの時間最適化：理論と実験<sup>1</sup>

中原 幹夫 (近畿大学工学部)

Mikio Nakahara

Department of Physics, Kinki University, Higashi-Osaka 577-8502, Japan

e-mail: nakahara@math.kindai.ac.jp

## 概要

量子コンピュータは古典コンピュータで事実上実行不可能な問題のいくつかを解けるものと期待されている。しかし量子コンピュータ実現の障壁の一つとなっているのは、デコヒーレンスという現象である。すなわち量子系と環境の相互作用のため、量子状態は壊れやすく、それまでにすべての計算ステップを終えなければならない。デコヒーレンスを克服する方法の一つとして量子アルゴリズムの加速が挙げられる。従来、量子回路は  $U(2)$  と CNOT ゲートの基本ゲートを用いて構成されてきた。しかし、より高速にアルゴリズムを実行するには、従来の基本ゲートにとらわれず実現したい量子アルゴリズム  $U_{\text{alg}} \in U(2^n)$  を一気に実現する方が計算リソースすなわち実行時間およびゲートの数の点で有利である。最近我々は 2 量子ビット Grover のアルゴリズムを  $SU(4)$  の Cartan 分解を利用して実行時間最適化を行い、それを NMR 量子コンピュータで実験的に検証したのでここで報告する。

## 1 量子コンピュータ

古典情報が 0 と 1 の値をとるビットをその基礎とするのに対し、量子情報では基底  $|0\rangle, |1\rangle$  の線形重ね合わせ (量子ビット)  $\mathbb{C}^2 = \{\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle | \alpha, \beta \in \mathbb{C}\}$  を基礎とする。以下

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

とおく。量子ビットを  $n$  個並べたものをレジスターとよび、その基底は  $|i_0\rangle \otimes |i_1\rangle \otimes \dots \otimes |i_{n-1}\rangle \equiv |i_0 i_1 \dots i_{n-1}\rangle$ ,  $i_k \in \{0, 1\}$  で与えられる。したがってレジスターはベクトル空間  $\mathcal{H} = \mathbb{C}^{2^n}$  に属する。量子計算はレジスターをある初期状態、たとえば  $|\text{in}\rangle = |00\dots 0\rangle$  にセットするところから始まる。次にレジスターに作用する量子アルゴリズムを導入しなければならない。量子アルゴリズムは  $\mathcal{H}$  に作用するユニタリ行列で表現される。初期状態  $|\text{in}\rangle$  に量子アルゴリズム  $U \in U(2^n)$  を作用させ最終状態  $|\text{out}\rangle = U|\text{in}\rangle$  を生成し、それを観測して必要なデータを取り出す。このレジスター、量子アルゴリズム、観測の三つ組みを量子コンピュータとよぶ [1, 2]。

量子コンピュータが一躍世界の注目を集めたのは Shor が素因数分解を効率的に実行するアルゴリズムを発見してからであろう [3]。現在、応用が期待される量子アルゴリズムは Shor のアルゴリズムと Grover のデータベースサーチアルゴリズムである [4, 5]。本論文では 2-qubit の Grover アルゴリズムを NMR 量子コンピュータで最小時間で実行する制御を  $SU(4)$  の Cartan 分解を用いて求め、それを実験的に確認する。

以下では Pauli 行列を次のように定義する。

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

<sup>1</sup>大阪市立大学の谷村省吾氏、近畿大学の近藤康氏、畑和也氏との共同研究に基づく。

## 2 Universality Theorem

任意の古典論理回路が NAND ゲートと NOR ゲートを用いて実装できるという点で、これらのゲートは universal である。量子アルゴリズムにおける universal なゲートの組は以下の定理で与えられる。

**定理 1** (Barenco *et. al.*) 任意の量子アルゴリズム  $U \in U(2^n)$  は 1 量子ビットゲート  $\in U(2)$  と CNOT を用いて実装できる [6] .

ここで CNOT は第 1 量子ビット (制御ビット) が 0 のときは第 2 量子ビット (ターゲットビット) は変化せず制御ビットが 1 のときはターゲットビットを反転する制御 NOT ゲートで

$$\text{CNOT} = |0\rangle\langle 0| \otimes I + |1\rangle\langle 1| \otimes \sigma_x$$

と表される。ここに  $I$  は 2 次の単位行列。

注意すべきは、この定理は、 $U(2)$  と CNOT ゲートを使えばどんな  $U$  でも構成されることを主張しているが、それが計算リソースの点で最適であることを主張してはいない。計算リソース、すなわち量子計算に用いるゲート数、量子ビット数、実行時間の節約は古典計算とは比べ物にならないほど切実な問題である。量子系は環境との相互作用を通して量子状態が崩壊していくデコヒーレンスという固有の現象を持っている。また現在 7 量子ビットの NMR 量子コンピュータが世界最大であることを考慮すると量子ビット数の節約がいかに重要か認識できる。またゲート操作が本質的にアナログ操作であり、それに伴うエラーを排除することができないので、ゲート数の節約も重要な課題である。我々は  $SU(4)$  の Cartan 分解を利用して 2 量子ビットアルゴリズムにおけるこれらの問題の最適化を行い、それを実験的に検証したので以下に報告する [7] .

## 3 NMR 量子コンピュータ

分子を  $z$  軸方向の強磁場の中に置き、 $xy$  面内に振動磁場を加える。基底として上向きスピン状態を  $|0\rangle$  下向きスピン状態を  $|1\rangle$  にとると、そのハミルトニアンは

$$\begin{aligned} H = & 2\pi J(\sigma_z \otimes \sigma_z/4) - \omega_{11}[\cos \phi_1(\sigma_x \otimes I/2) + \sin \phi_1(\sigma_y \otimes I/2)] \\ & - \omega_{12}[\cos \phi_2(I \otimes \sigma_x/2) + \sin \phi_2(I \otimes \sigma_y/2)] \end{aligned} \quad (1)$$

で与えられる。ただし各核スピンの回転系にゲージ変換し、振動磁場の周波数  $\omega_{\text{rf}}$  は  $z$  方向の磁場によるスピンのエネルギー差に等しいと置いた。  $\omega_{1k}$  は  $k$  番目の核に対する振動磁場の振幅、  $\phi_k$  は  $xy$  面内における振動磁場の方向を表し、これらは NMR 装置をプログラムすることにより、時間の関数として変化させることができる。以下 (1) の第 2,3 項を制御ハミルトニアンとよぶ。それに対し第 1 項は人間が制御することができず、ドリフトハミルトニアンとよぶ。ハミルトニアンの各項はリー代数  $\mathfrak{su}(4)$  の生成子であることに注意されたい。したがって、この  $H$  が生成する時間推進演算子

$$U(T) = \mathcal{T} \exp \left[ -i \int_0^T H(\gamma(t)) dt \right] \quad (2)$$

は  $U(4)$  ではなく  $SU(4)$  の元となる。量子力学では状態にかかる位相は意味がないのでこれは制限にはならない。(2) で  $\mathcal{T}$  は時間順序積で、ハミルトニアン中の時間に依存する制御パラメタをまとめて  $\gamma(t)$  と書いた。

NMR 量子コンピュータは室温で液体状態にある分子を量子計算に用いる。したがって、初期状態はさまざまなスピン状態の熱平衡状態になっている。したがって、あるアルゴリズム  $U$  を作用させたものも、様々な状態から得られる状態が混じったものになっている。このような状況で基底状態  $|00\rangle$  の寄与のみを取り出すにはいくつかの方法があるが、ここでは以下に述べる時間平均法を用いる [8]。

まず温度  $T$  の熱平衡状態を考えよう。その密度行列は

$$\begin{aligned} \rho_0 &= \exp(-H/k_B T) / Z(T) \\ &= \frac{1}{4} I_4 + \frac{1}{8k_B T} \begin{pmatrix} \hbar\omega_1 + \hbar\omega_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\hbar\omega_1 + \hbar\omega_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \hbar\omega_1 - \hbar\omega_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\hbar\omega_1 - \hbar\omega_2 \end{pmatrix} \\ &\equiv \text{diag}(a, b, c, d) \end{aligned} \quad (3)$$

で与えられる。  $a, b, c, d$  は最後の式で定義される実数であり、それぞれ  $1/4$  に非常に近い。  $a$  は熱平衡状態における  $|00\rangle$  の分布の割合を表す。次に熱平衡状態にあるゲート  $V$  を作用させ、系の密度行列を  $\rho_0 \rightarrow V\rho_0 V^\dagger$  に変化させる。  $V$  として  $U_{\text{cp}} = \text{CNOT}_{12} \text{CNOT}_{21}$  をとる。ただし  $\text{CNOT}_{ij}$  は  $i$  を制御ビット、  $j$  をターゲットビットとする CNOT ゲートである。具体的には  $\text{CNOT}_{12} = |0\rangle\langle 0| \otimes I + |1\rangle\langle 1| \otimes \sigma_x$ ,  $\text{CNOT}_{21} = I \otimes |0\rangle\langle 0| + \sigma_x \otimes |1\rangle\langle 1|$  で表される。これにより、密度行列は

$$\rho_1 = U_{\text{cp}} \rho_0 U_{\text{cp}}^\dagger = \text{diag}(a, d, b, c) \quad (4)$$

となる。同様に熱平衡状態に  $U_{\text{cp}}^2 = \text{CNOT}_{21} \text{CNOT}_{12}$  を作用させると密度行列は

$$\rho_2 = U_{\text{cp}}^2 \rho_1 U_{\text{cp}}^{2\dagger} = \text{diag}(a, c, d, b) \quad (5)$$

となる。これらの3種類の密度行列で記述される系において、独立にアルゴリズム  $U$  を実行させてその結果を平均すると、事実上密度行列

$$\rho_{\text{eff}} \equiv \frac{1}{3}(\rho_0 + \rho_1 + \rho_2) = \text{diag}(a, e, e, e) = eI_4 + (a - e)\text{diag}(1, 0, 0, 0) \quad (6)$$

の系で量子アルゴリズムを実行することと同等となる。ここに  $e \equiv (b + c + d)/3$  である。  $eI_4$  の部分はスペクトルには寄与せず、「上澄み」の  $a - e$  の部分が  $|00\rangle$  状態を初期状態とした寄与を与える。

## 4 $SU(4)$ の Cartan 分解

時刻  $t = 0$  のときの時間推進演算子  $U(0) = I$  から出発して、ある量子アルゴリズム  $U_{\text{alg}}$  を実現することを考える。通常はこれを  $U(2)$  の元や CNOT を使って実装することは §2 で述べたとおり

である。では最小時間で  $U_{\text{arg}}$  を実現するにはどのような制御を行えばよいのだろうか？言い換えると、逆問題

$$U_{\text{alg}} = \mathcal{T} \exp \left[ -i \int_0^T H(\gamma(t)) dt \right] \quad (7)$$

の解  $\gamma(t)$  の中で最小の時間  $T$  を与えるものは何だろうか？

NMR 量子コンピュータにおいては、制御ハミルトニアンは高速で制御することができる。たとえば 1 量子ビットを  $|0\rangle$  から  $|1\rangle$  に反転するのに必要な時間は  $\sim 10 \mu\text{s}$  程度である。一方、量子ビット間の相互作用を記述する  $J$  は周波数で 100 Hz 程度、時間になると  $1/J \sim 10 \text{ ms}$  程度となる。したがってアルゴリズムの実行時間のほとんどは量子ビット間の相互作用に費やされる。したがって、時間最適化を行うには  $J$  相互作用を含む時間発展を最短にすればよい。これを数学的に実現するのが Cartan 分解である [9, 10].

$G$  をリー群とし、 $\mathfrak{g}$  をそのリー代数とする。すると  $\mathfrak{g}$  は  $\mathfrak{g} = \mathfrak{k} \oplus \mathfrak{p}$ ,  $\mathfrak{p} = \mathfrak{k}^\perp$ , ただし

$$[\mathfrak{k}, \mathfrak{k}] \subset \mathfrak{k}, [\mathfrak{p}, \mathfrak{k}] \subset \mathfrak{p}, [\mathfrak{p}, \mathfrak{p}] \subset \mathfrak{k} \quad (8)$$

と分解される ( $\mathfrak{g}$  の Cartan 分解).  $K = \exp \mathfrak{k}$ ,  $P = \exp \mathfrak{p}$  としよう。すると任意の  $g \in G$  は  $g = kp$ ,  $k \in K$ ,  $p \in P$  と分解される。さらに  $\mathfrak{p}$  は  $\mathfrak{p}$  の中の極大可換な部分代数 (Cartan 部分代数) を  $\mathfrak{h}$ , 対応する Cartan 部分群を  $H \equiv \exp \mathfrak{h}$  とすると、 $h \in H$  と  $k_2 \in K$  を用いて  $p = k_1^\dagger h k_1$  と表される。このことから  $g$  の Cartan 分解

$$g = k_2 h k_1 \quad (9)$$

が得られる [11].

一般論から SU(4) に話を限ろう。NMR 量子計算に便利な  $\mathfrak{su}(4)$  の Cartan 分解は

$$\mathfrak{k} = \text{Span}(\sigma_k \otimes I_2, I_2 \otimes \sigma_k), \quad \mathfrak{p} = \text{Span}(\sigma_i \otimes \sigma_j), \quad \mathfrak{h} = \text{Span}(\sigma_i \otimes \sigma_i) \quad (10)$$

で与えられる。すると  $\mathfrak{k}$  は制御ハミルトニアンを使った 1 量子ビット操作に、 $\mathfrak{h}$  はドリフトハミルトニアンに対応してる。ハミルトニアンに含まれない生成子も存在するが、後で説明するように、これらはすべてハミルトニアンにある項から  $K$  に属する操作だけで書き下すことができる。

1 量子ビットの操作時間を無視することは  $I$  から  $U_{\text{alg}}$  への時間最適経路経路を考える代わりに、同値類  $[I] = \{kI | k \in K\} = K$  と  $[U_{\text{alg}}] = \{kU_{\text{alg}} | k \in K\}$  を結ぶ時間最適経路を考えることに等しい。したがって問題は SU(4) 上の時間最適経路よりは、むしろ SU(4)/SU(2)⊗SU(2) 上の時間最適経路を求めることに帰着する [9, 10].

一般に  $U \in \text{SU}(4)$  が与えられたとき、それを  $U = k_2 h k_1$  に分解する方法を与える [12, 13]. 準備として Bell 基底を定義しよう:

$$\begin{aligned} |\Psi_0\rangle &= (1/\sqrt{2})(|00\rangle + |11\rangle), & |\Psi_1\rangle &= (i/\sqrt{2})(|01\rangle + |10\rangle), \\ |\Psi_2\rangle &= (1/\sqrt{2})(|01\rangle - |10\rangle), & |\Psi_3\rangle &= (i/\sqrt{2})(|00\rangle - |11\rangle). \end{aligned} \quad (11)$$

行列  $U$  を通常の基底  $|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle$  おける表示から Bell 基底における表示  $U_B \equiv Q^\dagger U Q$  に変換する行列は

$$Q = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & i \\ 0 & i & 1 & 0 \\ 0 & i & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -i \end{pmatrix} \quad (12)$$

で与えられる。  $Q$  は以下の重要な性質を持つ：

- (1) 行列  $Q$  は  $K = \text{SU}(2) \otimes \text{SU}(2)$  と  $\text{SO}(4)$  の間の同型を定義する。すなわち  $k \in K$  にたいし  $Q^\dagger k Q \in \text{SO}(4)$ 。
- (2) 行列  $Q$  は Cartan 部分群を対角化する。すなわち  $h \in H$  にたいし

$$Q^\dagger h Q = \text{diag}(e^{i\theta_0}, e^{i\theta_1}, e^{i\theta_2}, e^{i\theta_3}).$$

これらは直接の計算で確かめられる。これから  $U = k_2 h k_1$ ,  $h \in H, k_i \in K$  と分解されると

$$U_B = Q^\dagger U Q = Q^\dagger k_2 Q \cdot Q^\dagger h Q \cdot Q^\dagger k_1 Q = O_2 h_D O_1,$$

ただし  $O_i \equiv Q^\dagger k_i Q \in \text{SO}(4)$  で  $h_D \equiv Q^\dagger h Q$  は対角行列。さらに  $U_B^T U_B = O_1^T h_D^2 O_1$  から  $O_1$  は  $U_B^T U_B$  を対角化し、その固有値は  $h_D^2$  の対角成分であることが分かる。最後に  $O_2 = U_B (h_D O_1)^{-1}$  より  $O_2$  が求められる。

最後に時間最適解の求め方を議論しよう。元  $h$  が

$$h = Q h_D Q^\dagger = \exp \left[ -i \sum_{j=x,y,z} \alpha_j (\sigma_j \otimes \sigma_j / 4) \right]$$

と表されたとしよう。ハミルトニアン (1) と比べると

$$\frac{1}{4} \sum_{j=x,y,z} |\alpha_j| = \frac{\pi}{2} J T \quad (13)$$

に対応していることが分かる。  $T$  はこの分解によるアルゴリズムの実行時間である。  $h_D^2$  から  $h_D$  を求めるときに分岐の取り方の不定性が生じるが、時間最適解では (13) の左辺が最小になる。

## 5 例：2量子ビット Grover のアルゴリズム

Cartan 分解による時間最適解の例として 2 量子ビットの Grover のアルゴリズムを考えよう [7]。これは図 1 の量子回路で与えられる。ここに  $H$  は Hadamard ゲート、  $f_{ab}$  は選択的回転ゲートで

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad \begin{array}{l} f_{ab}: |ab\rangle \mapsto -|ab\rangle \\ \quad : |cd\rangle \mapsto |cd\rangle \quad (cd) \neq (ab) \end{array}$$

で与えられる。例として Grover のアルゴリズムのうち  $|00\rangle$  を入力として、  $|10\rangle$  を出力とするゲート  $U_{10}$  を考える。前に述べたように、熱平衡分布から  $|00\rangle$  を初期状態とする寄与を取り出すには

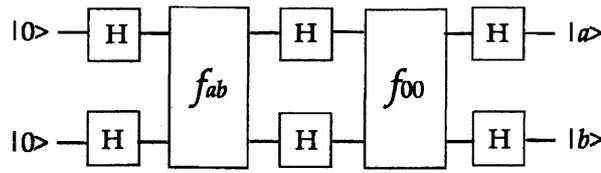


図 1: Grover のアルゴリズムを実装する量子回路.  $H$  は Hadamard ゲート,  $f_{ab}$  は選択的回転ゲートである.

$U_{10}$  以外に  $U_{10a} \equiv U_{10}U_{cp}$ ,  $U_{10b} \equiv U_{10}U_{cp}^{-1}$  を作用させ, 得られる 3 つのスペクトルを平均すればよい [8]. 結果は

$$U_{10} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, U_{10a} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, U_{10b} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

で与えられる.

前節の処方箋に従いこれらの行列の Cartan 分解を行う. 最適解の例は

- $U_{10}$ :  $k_1 = I$ ,  $h = e^{i(\pi/4)(\sigma_x \otimes \sigma_x - \sigma_y \otimes \sigma_y)}$ ,  $k_2 = e^{-i(\pi/4)\sigma_x} \otimes e^{i(\pi/2\sqrt{2})(\sigma_x + \sigma_y)}$ .
- $U_{10a}$ :  $k_1 = I_2 \otimes e^{-i(\pi/4)\sigma_x}$ ,  $h = e^{-i(\pi/4)\sigma_x \otimes \sigma_x}$ ,  $k_2 = e^{i(\pi/2)\sigma_y} \otimes e^{i(\pi/3\sqrt{3})(\sigma_x + \sigma_y + \sigma_z)}$ .
- $U_{10b}$ :  $k_1 = e^{-i(\pi/3\sqrt{3})(\sigma_x + \sigma_y + \sigma_z)} \otimes I_2$ ,  $h = e^{-i(\pi/4)\sigma_x \otimes \sigma_x}$ ,  $k_2 = e^{i(\pi/4)\sigma_x} \otimes I_2$

表 1 はこれらの結果を NMR のパルス列で表したものである. ここでハミルトニアン (1) に含まれない項は, たとえば

$$e^{i(\pi/4)(\sigma_x \otimes \sigma_x)} = [e^{i(\pi/4)\sigma_x} \otimes e^{-i(\pi/4)\sigma_y}] e^{i(\pi/4)(\sigma_x \otimes \sigma_x)} [e^{-i(\pi/4)\sigma_x} \otimes e^{i(\pi/4)\sigma_y}].$$

などを用いて手持ちの生成子で書き直した.

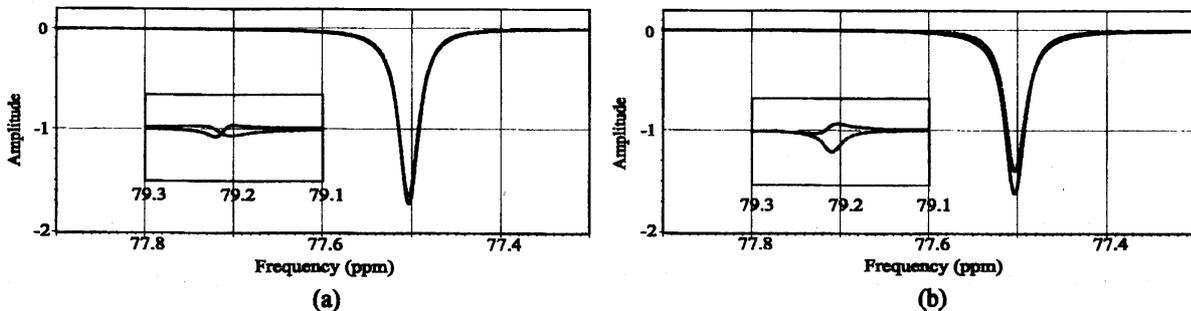


図 2:  $U_{10}$  を実行後に測定した  $|10\rangle$  状態を示すスペクトル. 破線は通常のパルス列 [8], 実線は時間的に最適化されたパルス列を用いた測定結果. (a) では 1 量子ビットを  $\pi/2$  回転させるのに 25 ms, (b) では 250 ms のパルス幅を用いた. 各図の中の小図は  $|11\rangle$  の位置のノイズを示す.

通常のパルス列			
ゲート	パルス列		実行時間
$U_{10}$	1:	$-Y -(1/2J)-Y_m-X_m-(1/2J)-Y_m-X_m-$	$1/J$
	2:	$-Y -(1/2J)-Y_m-X -(1/2J)-Y_m-X_m-$	
$U_{10}U_{cp}$	1:	$-X -(1/2J)-X -----Y -(1/2J)-Y_m-X_m-(1/2J)-Y_m-X_m-$	$2/J$
	2:	$-----X -(1/2J)-X -Y -(1/2J)-Y_m-X -(1/2J)-Y_m-X_m-$	
$U_{10}U_{cp}^2$	1:	$-----X -(1/2J)-X -Y -(1/2J)-Y_m-X_m-(1/2J)-Y_m-X_m-$	$2/J$
	2:	$-X -(1/2J)-X -----Y -(1/2J)-Y_m-X -(1/2J)-Y_m-X_m-$	
時間最適化されたパルス列			
ゲート	パルス列		実行時間
$U_{10}$	1:	$-X -(1/2J)-X_m-Y_m-(1/2J)-Y -\text{Pi}(45)-$	$1/J$
	2:	$-X -(1/2J)-X_m-Y -(1/2J)-X -Y_m -$	
$U_{10}U_{cp}$	1:	$-X -(1/2J)-X_m-Y_m-$	$1/2J$
	2:	$-Y_m-Y_m-$	
$U_{10}U_{cp}^2$	1:		$1/2J$
	2:	$-Y -X -(1/2J)-X_m-$	

表 1: Grover のアルゴリズムを実現するパルス列. 上の段は通常のパルス列 [8], 下の段は時間的に最適化されたパルス列. 1(2) は第 1(2) 量子ビットを表す.  $X (X_m)$  と  $Y (Y_m)$  は  $x (-x)$  軸, および  $y (-y)$  軸回りの  $\pi/2$  パルスを表す.  $\text{Pi}(45)$  は Bloch 球で  $(1, 1, 0)$  回りの  $\pi$  パルス. 通常のパルス列に比べ最適化されたパルス列では全パルス数が 38 から 18 に, 全実行時間が  $5/J$  から  $2/J$  に減少している.

実験では  $^{13}\text{C}$  で置換した chloroform の H と  $^{13}\text{C}$  を量子ビットとして用い, JEOL ECA-500 NMR 装置で核スピン制御を行った [14]. 図 2 は  $|00\rangle$  に  $U_{10}$  を作用させ  $|10\rangle$  の位置にある  $^{13}\text{C}$  のスペクトルを測定した結果である. ピークが負であることから  $^{13}\text{C}$  核は状態  $|1\rangle$  にあり, ピークの位置が 77.5 ppm にあることから H 核は  $|0\rangle$  状態にあることが分かる. 図の中には H 核が  $|1\rangle$  状態にあれば現れるスペクトル付近 (79.2 ppm) を測定したものである. (a) では 1 量子ビットの  $\pi/2$  回転に 25  $\mu\text{s}$  のパルス幅を用いた. (b) では故意にパルス幅を長く取り 250  $\mu\text{s}$  とした. 破線は [8] の通常のパルス列の結果を, 実線は我々の時間最適パルス列の結果を測定したものである. (a) では両者の差があまり明白ではないが, (b) では最適化されたパルス列のほうがよりシャープなピークを与え,  $|11\rangle$  におけるノイズも減少していることが分かる. 実際, 最適化によりパルス数は 38 から 18 に, 全実行時間は  $5/J$  から  $2/J$  に減少しており, その効果が見えていると思われる.

## 6 まとめと今後の課題

SU(4) の Cartan 分解を使って最小時間で 2 量子ビット Grover アルゴリズムを実行する制御パラメータを求め, NMR 量子コンピュータでそれを実証した. 短い実行時間と少ないパルス数のために, スペクトルは従来のパルス列にくらべよりシャープになり, ノイズも減少した. 現在, この手法をさらに多くの量子ビットをもつ分子に拡張することを実行中である. また量子ビット数が増えたとき, 最適化に必要な古典計算のステップ数がどのように増えるかも重要なテーマである.

最近,  $U_{\text{alg}}$  の後に余分なゲート  $W$  を加え, 実行時間をさらに減少させることに成功した [15]. 余分なゲートを加えながら実行時間が減少するのは直感に反するが, 単位元  $I$  から  $WU_{\text{alg}}$  までの最適実行時間が  $I$  から  $U_{\text{alg}}$  までの最適実行時間よりも短くなるように  $W$  を選べばこれは可能と

なる。このような「ワープ・ゲート」を効率よく求めるのも今後の課題である。

## 7 謝辞

近畿大学, 石船学氏にはサンプルの封入を, 峯松敏江氏には NMR の操作を助けていただいた。JEOL の朝倉克夫氏, 藤井直之氏には NMR パルスプログラミングの補助を感謝する。数値計算は筑波大学計算科学研究センター共同利用 (大規模数値シミュレーション・プロジェクト) を利用した。科学研究費 No. 13135215 と No. 14540346 による補助を感謝する。

## 参考文献

- [1] M. A. Nielsen, and I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information*, (Cambridge University Press, Cambridge, 2000).
- [2] 細谷暁夫, 量子コンピュータの基礎, サイエンス社 (1999).
- [3] P. Shor, in *Proceedings of the 35th Annual Symposium on Foundation of Computer Science*, IEEE Computer Society Press, Los Alamits, CA, 116 (1994).
- [4] L. Grover, in *Proceedings of the 28th Annual ACM Symposium on the Theory of Computation* (ACM Press, New York, 1996), 212,
- [5] L. K. Grover, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 325 (1997).
- [6] A. Barenco, C. H. Bennett, R. Cleve, D. P. DiVincenzo, N. Margolus, P. Shor, T. Sleator, J. A. Smolin, and H. Weinfurter, *Phys. Rev. A* **52**, 3457 (1995).
- [7] M. Nakahara, Y. Kondo, K. Hata, and S. Tanimura, *Phys. Rev. A* **70**, 052319 (2004).
- [8] I. L. Chuang, N. Gershenfeld, and M. Kubinec, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 3408 (1998).
- [9] N. Khaneja, R. Brockett, and S. J. Glaser, *Phys. Rev. A* **63**, 032308 (2001).
- [10] N. Khaneja, Harvard Thesis (2000).
- [11] A. W. Knap, *Lie Groups beyond an introduction* (2nd ed.) (Birkhäuser, Boston, 2002).
- [12] Y. Makhlin, *Quant. Info. Proc.* **1**, 243 (2002).
- [13] J. Zhang, J. Vala, S. Sastry, and K. B. Whaley, *Phys. Rev. A* **67**, 042313 (2003).
- [14] <http://www.jeol.com/nmr/nmr.html>
- [15] M. Nakahara, J. J. Vartiainen, Y. Kondo, S. Tanimura, and K. Hata, e-print quant-ph/0411153.