論 文 審 査 結 果 の 要 旨

本論文は，近年凝縮系物理学の分野で注目を集め続けている光学格子上の冷却原子系を対象に選び，理論的な研究を行ったものである。特に，近い将来，実験が行われると期待される超低密度粒子数の系への応用を念頭に，1格子点当たり，原子がゼロ個または1個の存在しか許されないハードコアボソンの場合について解析を行っている。予想される相構造や臨界指数などが計算されていて，実験に対する大局的でかつ半定量的な予言を与えるもので大変興味深い研究であるといえる。

研究ではハードコアボソン系の第2量子化による数学的記述から出発し，偽スピン表示，複素射影演算子表示，などの技術的部分を丹念に展開することで，最終的に数値シミュレーションが可能な経路積分表示を得ることに成功した。

さらにこの表示に基づいて丹念で広範囲なモンテカルロシミュレーションを行い，内部エネルギー，比熱，相関関数，臨界指数，等の物理量を近似なしに計算したことは評価される。またそれらに対する物理的考察も十分である。

計算物理学的観点からすると，エネルギーが2パラメータを含む場合へのマルチカノニカル法の適用，強いヒステリシスがある1次転移に対して収束を早める更新候補の選択法の提案，等の有効で実用的な工夫がみられる。

以上からこの論文の研究内容・結果は博士の学位に十分値するものと判断する。

氏　　名	Mohammad Ali Fasihi Aghbolagh（もはまんど　あり　ふぁしひ　あぐぶらぐ）
学位の種類	博　　士（理学）
学位記番号	理 第 6 9 号
学位授与の日付	平 成 24 年 3 月 22 日
学位授与の要件	学位規程第5条第1項該当
学位論文題目	Study of Hamiltonians in Quantum Information Theory （量子情報理論におけるハミルトニアンのの研究）

論文審査委員	（主　査）	教 授	中 原 幹 夫
	（副主査）	教 授	堂 寺 知 成
	（副主査）	准教授	近 藤 　 康

論 文 内 容 の 要 旨

この学位論文は，純粋状態における3スピン系ハミルトニアンの推定の研究 [1] と，Lewis-Riesendfeld 不変量を用いた量子制御 [2] の研究の２つの論文の成果をまとめたものである．

第１章では本研究のモチベーションが紹介されている．量子情報処理や量子計算の実現にはいくつか方法があるが，本研究では量子回路モデルと断熱量子計算 (AQC=Adiabatic Quantum Computation) を扱う．実用的な量子コンピュータを実現するには克服すべき障害が沢山ある．その中でも，量子系が環境と相互作用して量子状態が劣化するデコヒーレンスは最も憂慮すべき障害である．量子系を制御しようとして制御系が量子系に接触すると，それを通して外界との接触が起こりデコヒーレンスが生じる．AQC に対してはさらなる困難がある．量子系を断熱的に変化させようとすると，系はたとえば常に時間に依存するハミルトニアンの基底状態にある．一般に，このような変化は長時間がかかり，デコヒーレンスがより重大な影響を与える．本学位論文は，これらの問題ンスの問題を

（１）系をできるだけ外界から隔離する（第２章）：デコヒーレンスの原因を減らす

（２）量子演算を出来るだけ高速に行う（第３章）：デコーヒレンスが起こる前に演算を終える

ことによって、解決するための足がかりを与えるものである。

第２章では，量子系の大部分が外界から隔離された状況で，系の一部を制御し，測定することにより系全体のハミルトニアンを推定する．上に述べたように，系の大部分を隔離することにより，この系はデコヒーレンスに耐性を持つと期待される．モデルとして，３スピンからなる横磁場 Ising 鎖のハミルトニアンのパラメタを推定した．この場合，上に述べた系の一部は端のスピンである．そのハミルトニアンは

$$\mathcal{H}(h_i, J_i) = -\sum_{i=1}^{3} h_i \sigma_i^x + \sum_{i=1}^{2} J_i \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \tag{1}$$

で与えられる．ここに σ_i^k は i 番目のスピンの Pauli 行列の k 成分である．ハミルトニアンのゲージ対称性を用いると，一般性を失うことなしに横磁場は各スピンの x 方向を向いているようにとることができる．まず，このハミルトニアンを対角化してエネルギー固有値を h_i, J_i の関数として厳密に求めた．固有値の組は正負にたいして，また $h_1 \leftrightarrow -h_1$ の鏡映にたいして対称であることは固有値の式からただちに導かれる．この固有値を元にハミルトニアンの推定を行う．

まず，$h_1 \neq 0$ の場合を考えよう．このとき $t=0$ における初期状態を $|\uparrow\uparrow\uparrow\rangle$ としよう．この状況で，スピン１の x 成分の期待値 $\langle\sigma_1^x(t)\rangle$ を求める．我々の課した制限からスピン２，３の測定はできない．ハミルトニアンのスペクトル分解から，時間発展演算子 $U(t)=e^{-iHt}$ は容易に求められるので，期待値

$$\langle\sigma_1^x(t)\rangle = \langle\uparrow\uparrow\uparrow|U(t)^\dagger\sigma_1^x U(t)|\uparrow\uparrow\uparrow\rangle$$

も厳密に求められる．次に $\langle\sigma_1^x(t)\rangle$ のフーリエ変換を行う．ハミルトニアンの固有値の集合を $\{\epsilon_n\}$ とすると $\langle\sigma_1^x(t)\rangle$ は $\cos(\epsilon_m+\epsilon_n)t$ や $\cos(\epsilon_m-\epsilon_n)t$ という時間依存性を持っており，そのフーリエ変換は $\epsilon_m \pm \epsilon_n$ にデルタ関数的ピークを持っている．ただしすべての (m,n) の組み合わせが現れるわけではない．一般にどのピークがどの $\epsilon_m \pm \epsilon_n$ に対応するかを決めることは困難であるが，h_1 がゼロの付近や，他の h_i, J_i に比べ非常に大きいときには簡単に同定される．$h_1=0$ の場合は $|\uparrow\uparrow\uparrow\rangle$ に対する期待値 $\langle\sigma_1^x(t)\rangle$ は恒等的にゼロとなるので，別に扱わなければならない．このときは，まずスピン１を y 軸周りに $\pi/2$ 回転し，その状態を $|+\rangle=(|\uparrow\rangle+|\downarrow\rangle)/\sqrt{2}$ としておく．初期状態を $|+\uparrow\uparrow\rangle$ にとると，期待値 $\langle\sigma_1^x(t)\rangle$ は有限の値を持ち，そのフーリエ変換も求められる．したがって $h_1=0$ におけるデータもハミルトニアンの推定に用いることが出来る．

エネルギー固有値は $|J_i|$ にしか依存しないので，スペクトルのピークの位置からは $h_i, |J_i|$ しか決まらない．J_i の符号を決めるには，t が小さいときの $\langle\sigma_1^x(t)\rangle$ を数値的に求めればよいことを示した．

第３章では Lewis-Risenfeld 不変量 (Lewis-Risenfeld Invariant=LRI) を利用して断熱変化を超える高速な量子制御を実現した．時間に依存するハミルトニアン $\mathcal{H}(t)$ が与えられたとしよう．このとき式

$$\frac{\partial I(t)}{\partial t} + i[\mathcal{H}(t), I(t)] = 0$$

を満たすエルミート演算子 $I(t)$ を LRI という．このとき $d\langle I(t)\rangle/dt=0$ が成り立つ．$I(t)$ の固有値は時間に依存せず，固有ベクトル $|\phi_n\rangle$ の時間発展は $|\phi_n(t)\rangle=\mathcal{U}(t)|\phi_n(0)\rangle$ で表される．ここに $\mathcal{U}(t)=\mathcal{T}e^{-iHt}$ は時間推進演算子，$\mathcal{T}$ は時間順序演算子である．したがって，$t=0$ で系の初期状態を $|\phi_n(0)\rangle$ に設定すれば，後の任意の時刻 $t>0$ における状態は $|\phi_n(t)\rangle$ で表される．ここで注意すべきは，この関係が時間発展の断熱性とは無関係に成り立つことである．

さて $\mathcal{H}(t)$ が与えられた時，$I(t)$ を定義する式 $\partial I(t)/\partial t + i[\mathcal{H}(t), I(t)]=0$ は，逆に $I(t)$ が与えられて，その $I(t)$ を LRI とするハミルトニアン $\mathcal{H}(t)$ を決める式と見ることも出来る．この見方をすると，まず LRI $I(t)$ の形を決め，それからハミルトニアン $\mathcal{H}(t)$ を決める可能性が示唆される．初期状態 $|\phi_n(0)\rangle$ と終状態 $|\phi_n(t_f)\rangle$ は，もともとの断熱変化に対応する初期状態と終状態と一致するようにとる．これがハミルトニアンの逆問題 (inversely-engineered control = IEC) である．本研究では IEC を２準位系の混合状態の分布の反転に適用した．純粋状態への応用はすでに行われているが，本研究はその拡張になっている．以下にその処方箋をまとめる．

(1) まずハミルトニアン $\mathcal{H}(t)$ の形を仮定する．

(2) このハミルトニアンに対応する $I(t)$ の一般形を書き下す．

(3) $\mathcal{H}(t)$ と $I(t)$ を $\partial I(t)/\partial t + i[\mathcal{H}(t), I(t)]=0$ に代入し，$\mathcal{H}(t)$ や $I(t)$ の中のパラメタが満たす微分方程式を書き下す．

(4) 与えられた初期状態や終状態を与えるパラメタの境界条件を $I(t)$ に代入する．
(5) これらの境界条件を補間するように $I(t)$ の中のパラメタを決める．この決め方は一意的ではない．
(6) 最後に (3) で求めた微分方程式に (5) のパラメタを代入し，ハミルトニアンの中のパラメタを決定する微分方程式を解く．

本研究ではこのようにして得られた微分方程式を数値的に解いた．その結果，これらの解の中には断熱過程よりもはるかに短い時間で，目的とする終状態に達するものがあることが示された．

第 4 章では本学位論文の要旨と得られた主要な結果，および残された課題がまとめられている．

参考文献

[1] Mohammad Ali Fasihi, Shu Tanaka, Mikio Nakahara and Yasushi Kondo, Journal of Physical Society of Japan, 80 (2011) 044002.

[2] Mohammad Ali Fasihi, Yidun Wan, and Mikio Nakahara, accepted for publication, Journal of Physical Society of Japan.

論文審査結果の要旨

ナノテクノロジーの進歩とともに，集積回路の集積度は指数関数的に高まっている．米インテル社の創業者の一人，Gordon Moore によると集積回路上のトランジスタ数は18ヶ月ごとに倍になるという経験則が成り立つ (Moore の法則)．したがって，現在の集積度の増加が続けば，やがて 2020 年を超えた時点でトランジスタのサイズは原子数個にまで小さくなる．この時点で情報の単位ビットに量子性が現れることが期待される．

物理的な系を使って計算が出来ることは広く知られている．たとえば振り子の長さを $l = g/4 \simeq 2.45$ m にとり，小振幅の振り子運動をさせてその周期を測れば $\pi = 3.14$ s が求められる．量子コンピュータは量子力学の原理を使って情報を蓄えたり処理したりする，新しいタイプのコンピュータである．Moore が予測した限界が近づくと，ビットは古典的な性格を失い，量子力学的な「量子ビット」となる．かつては量子性は，その確率的な性格から計算の正確さを損なうデメリットであると思われていた．しかし 1980 年代にファインマンは量子性を利用すれば，古典情報処理，古典コンピュータをはるかに超える強力な情報処理，計算が実行できる可能性を指摘した．現在までにさまざまな物理系が量子コンピュータの候補として提案されてきた．小規模の量子コンピュータも実現しているが，いずれも古典コンピュータを凌駕する能力をもった量子コンピュータの実現には程遠い．本研究では，そのための障壁を乗り越える提案を行っている．

本学位論文では，第 1 章で研究のモチベーションが紹介された後，第 2 章では 3 スピン系におけるハミルトニアンの推定を考察した．量子コンピュータに使われる量子系は，つねに外界からの脅威にさらされている．量子系の状態は外界からの擾乱でその量子状態の「劣化」が生じる．この現象を総称的にデコヒーレンスという．デコヒーレンスを抑制するには，系を外界から遮断すればよい．一方，量子系が量子コンピュータとして機能するためには，各量子ビットが意のままに制御できなければならない．そのためには外界から外場を加えて系を操作しなければならないが，すると外界との結合が生じてデコヒーレンスが発生する．この相反する制約を解決する方法として，量子系の大部分は外界から遮断されており，その一部を通してのみ外界と相互作用するスキームが提案されてきた．しかしながら，あるハミルトニアンをもつ系をデザインしようとしても，実際のハミルトニアンにはエラーがつきものである．一方，量子計算を正しく実行するには精度の高いゲートの実装が不可欠となる．また量子誤り訂正を実装するには各ゲートが $0.99 \sim 0.999$ 程度の忠実度をもっていなければならない．そのためには量子系を作成した後，ハミルトニアンを正確に推定することが不可欠である．本研究は量子系の大部分を外界から遮断した状況で端のスピンだけを制御，測定することにより系全体のハミルトニアンを推定するプロトコルを開発し，それを 3 スピン系で実際に実証した．これは今後信頼性の高い量子コンピュータを作成する上で欠くことのできないテクニックであり，その重要性は強調されるべきである．

第 3 章では Lewis-Risenfeld 不変量 (Lewis-Risenfeld Invariant=LRI) を用

いた量子制御を考察した．デコヒーレンスに打ち勝つには量子コンピュータは出来るだけ早く計算を終える必要がある．デコヒーレンス時間は物理系によって異なるが，短いものでは数マイクロ秒以下の系もある．この短い時間に数億～数兆のゲート操作を行うには，各ゲートはできるだけ短い時間で実装しなければならない．ハミルトニアンを短い時間で制御しようとすると，本来量子系があるべき状態から他の状態への遷移（非断熱遷位）が起こる．非断熱遷移による量子状態のリークが起これば，これは量子計算上のエラーとなる．本研究の成果は，LRIを利用してハミルトニアンは非断熱変化をするにもかかわらず，指定された初期状態から指定された終状態，たとえばハミルトニアンの特定の固有状態，への時間発展を保障する．それにより，時間発展の途中では非断熱遷移が生じるものの，最終的には量子状態のリークを起こさずに断熱変化の壁を越えることが出来るようになった．従来純粋状態に対しては，同様の研究があったが，本研究ではそれを密度行列で記述される混合状態に拡張し，その適用範囲を飛躍的に拡大した．さらに本研究では，開発された手法を2準位系の混合状態における分布の反転に適用し，数値的に求めた解は断熱過程よりもはるかに短い時間で目的とする終状態に達するものがあることを示した．この手法は量子コンピュータのゲートの実装時間の短縮に欠くことのできないものであり，今後のゲートデザインにおいて重要な役割を果たすと期待される．

以上，提出された論文の研究成果に対し，慎重に審査を行った結果，本研究で得られた知見は学術的にきわめて有意義であり，博士（理学）の学位論文として十分に価値があるものと認めた．

氏名	Elham（えるはむ） Hosseini（ほせいに） Lapasar（らぱさる）
学位の種類	博士（理学）
学位記番号	理第70号
学位授与の日付	平成24年3月22日
学位授与の要件	学位規程第5条第1項該当
学位論文題目	Estimation and Control of Quantum Systems; Neutral Atom Quantum Computer and Three-Spin Chain at Finite Temperature （量子系の推定と制御；中性原子量子コンピュータと有限温度における3スピン鎖）

論文審査委員	（主査）	教授	中原幹夫
	（副主査）	教授	堂寺知成
	（副主査）	准教授	近藤康