量子情報科学　０５年　期末提出問題　その１—知識を問う問題

提出者氏名：＿＿＿＿＿＿＿＿　識別情報：＿＿＿＿＿＿＿＿

回答方法：
・人名は慣例（あるいは講義メモ）にならった表記をせよ。アルファベットで記す場合、イニシャルを入れよ。
・年代は西洋暦、あるいは世紀、あるいは世紀の始め、中頃、終わり頃などで答えよ。
・インターネットを活用せよ。
・すべの回答は回答箇所のスペースにおさまる程度の簡潔にせよ。
・＊＊＊のある問題は参考問題。時間があれば試みよ。

Ｉ．思惟の方法論と情報と計算
1．講義で思惟の「基本パターン」と呼んだ、帰納、演繹、発想（Abduction）は、いつ頃から知られていたか？　（ヒント：アリストテレスによって分類されていた。）
年代：紀元前４世紀、アリストテレス（384-322BC）.

２．こうした思考の基本パターンに対応した現代の数学、情報学、統計学、計算機工学などの技法を書け？
帰納：統計学、データ解析、データマイニング、パターン認識
演繹：演繹的推論システム、人工知能、エキスパートシステム、知識工学
発想：まだないが、グラッフィス、帰納的学習などがそれに近い。

３．講義でいう思惟の基本パターンとしての計画が、数学的に定式化されたのはいつ頃か？（ヒント：数理計画法の事例は、サイバネティクス、線形計画法、動的計画法など）
答え。およそ、1940-60 年頃

４．今日の計算機は 1，0 の論理を使っている。こうした論理演算を最初に提唱した人は誰か、またいつ頃か？（ヒント：彼の名前で呼ばれる論理は古典論理とも呼ばれる）
答え。G.ブール（1815-1864），Laws of Thought の出版（1854）．ブール論理

５．（１）オッカムのカミソリとはどのような思考法をさすか。（２）このオッカムはいつ頃の人か？
答え（１）：簡単な法則が正しい。複数法則があれば簡単な方をとる。
答え（２）年代：１４世紀、W. Ockham（1280/5-1347/9）

６．１９世紀から２０世紀の始め頃、数学の基礎になる思考を厳密に見つめなおす運動が起きた。

（１） こうした分野は現在なんと呼ばれているか：数学基礎論

（２） この流れの中で、「人間の理性の限界」といわれる、数学の証明に関する基本定理が発見された。発見者の名前がついたこの定理のなんと呼ばれているか？その発見はいつか？

定理の名前：ゲーデル K. Gödel の不完全性定理；　　発表年：1935 年

７．計算の概念をつきつめ、計算機のモデルとなる仮想的な機械を考え、その万能性を明らかにした数学者は誰か。また彼の名を冠した計算機のモデルは何と呼ばれているか。

数学者の名前：チューリング A. Turing

仮想的な機械の名称：チューリング･マシン、Turing Machine

８．世界最初の電子計算機は米国と英国でほぼ同じ頃開発された。それぞれの計算機の名称、いつ頃、どこの研究機関で開発されたか？

答え。

米国：名称、ENIAC；開発機関：ペンシルバニア大学；年代：1946 年

英国：名称、EDVAC；開発機関：ケンブリッジ大学；年代：1949 年

注）プログラム内蔵式を意味する電子計算機の最初は、EDSAC。プログラム内蔵式そ最初に提唱したノイマンらの EDSAC の完成は 1952 年まで遅れる。

＊＊＊９．今日、生物医学では「仮説検定」という概念が欠かせない。こうした統計学的な方法論は、いつ頃、誰たち（１名あげよ）によって、つくられたか？

答え。現代統計学は、20 世紀始め（1920-30 年代）に英国で体系化された。とくに、フィッシャー R.A. Fisher (1890-1962) の貢献が大きい。他に、J. Neyman (1894-1981), E. Pearson (1895-1980)ら。

＊＊＊１０．第２次世界大戦中、連合国は数学者や科学者を動因して、戦闘や作戦の数学的なモデルをつくり、合理的な戦法を研究させた。戦後、このような研究は、独立した研究領域となった。この分野は何と呼ばれているか？

答え。オペレーションズ･リサーチ Operations Research、OR

１１．図書館、マイクロフィルム、投影機から今日の WWW を 1930 年代に予見していた H.G. Wells（ＳＦ小説タイム・マシンの作者）は、技術の進歩に較べて、学校や学会が遅れていると指摘している。かれは、巨大図書館とそこに蓄えられた知識を低コストに世界中に配信できる仕組みを Global Brain と呼び、これによって世界をよくしようと構想した。次の質問に答えよ。

（１）WWW 技術の開発者は誰か？　（ヒント：CERN にいた物理学者）

答え。Tim Berners-Lee（http://www.w3.org/People/Berners-Lee/）。

＊＊＊（２）今日のような図書館で大規模なものはいつ頃、どこで建設されているか？

答え。古代エジプトのアレキサンドリア図書館（紀元前３世紀）。メソポタミアの神殿内にあった図書館が世界最古という説もある。

＊＊＊（３）西洋の大学はいつ頃、どこで建設されたか？

答え。12 世紀、イタリアのボローニアで建設された、ボローニア大学。イスラム圏のアズハル大学が世界最古という説もある。

（４）IT 革命の進行に較べて、知識を生み出し、それを活用する学校、研究所、学会、研究開発のやり方など、遅れているところはなにか、どのような Innovation が考えうるかを考察せよ。

１２．選択課題：以下のいずれかの課題を選択せよ。

（１）米国の Department of Energy は、Genome to Life と呼ぶ、生物学研究への学際的な研究計画を推進している。ここでは、Computational Biology も重要な課題になっている。Internet でこの計画をしらべ、この計画の目標、到達手段、個別の研究課題を分析し、計算化学の役割を考察せよ。

（２）現在の世界最速のコンピュータ（地球シミュレータ）の千倍早いコンピュータ、１００万倍早いコンピュータの出現時期を予測せよ。こうしたコンピュータは計算化学や生命科学にどのようなインパクトを与えうるか考察せよ。(参考情報：Internet により、IBM 社が開発中の Blue Gene や Grid Computing 計画をしらべよ)。

（３）米国では、National Science Foundation（NSF）や Department of Commerce が 2001

年末に、Nanotechnolgy, Biotechnology, Information Technlogy, Cognitive Science を結集して、ヒトの能力開発をめざそうという Workshop を開催し、その結果を、Converging Technologies for Improving Human Performance という報告書にまとめた。これは Internet で読むことができる。この報告書を読み、その意義を分析せよ。

（４）米国では、2004 年に NSF（National Science Foundation）が、生物学における理論的な方法論の重要さに関する検討会議を開き、報告書をまとめている。
The Role of Theory in Biological Physics and Materials: A report to the National Science Foundation (http://biophysics.asu.edu/workshop)
この報告書では、どのような研究領域が重要であるかが紹介されている。どのような課題あるいは研究領域が、重要と考えられているか。３－５つ程度あげ、理由とともに、簡単に説明せよ。

選択した問題番号：　　　　　。この頁の以下の余白内（400-800 字程度）で答えよ。

II. 物理学と情報計算の概念

１．古典的なガリレオーニュートンの力学が完成されたのはいつと考えられているか。また、その理由を述べよ。

完成時期：1687 年

そう考える理由：ニュートンの「プリンキピア」が出版された。

２．熱力学にエントロピーを導入したとされるクラウジウスの不等式を、各熱源の温度をT_i、そこから供給される熱をQ_iとして書け。

答え。熱源$T_1, T_2, T_3, \ldots$、機関本体の作業物質への熱の出入りが$Q_1, Q_2, Q_3, \ldots$であるように運転されていている時、

$$\frac{Q_1}{T_1} + \frac{Q_2}{T_2} + \frac{Q_3}{T_3} + \ldots \quad \leq \quad 0 \quad , \quad (\text{等号は可逆過程のみ})$$

が成り立つ。左辺をエントロピー（変化の量）と定義した。

３．熱力学の第２法則を述べよ。いくつかの等価の表現のうちの２つを書け。答え。

（１）最終結果が、同じ温度に保たれている熱源から仕事をさせられる熱（work heat）を取り出して、それをすべて仕事に変換するだけで、それ以外の変化は起こさないような過程は不可能である（Lord Kelvin)。これと同等な表現は、

（２）その過程の最後の結果が、ある温度にある物体から熱を取り出し、それより高い温度の物体に受け渡すだけであるような過程は不可能である。(Clausius)。

（３）孤立系におけるいかなる変化（過程）においても、最終状態のエントロピーentropyは、最初の状態のそれより減少することはない。

（４）孤立系において entropy が最大の状態は最も安定な状態である。

４．今日、「ボルツマンの原理」という名で呼ばれている式を書け。記号も簡単に説明せよ。

答え。　$S = k \log W$　(S はエントロピー、Wは微視的な状態数)

***(Option)５．ボルツマンが批判された一つの原因は、原子・分子の実在性が認知されていなかったことにある。ブラウン運動の研究からこの分子の実在が証明されるきっかけになったのはアインシュタインのブラウン運動であると言われている。

（１）アインシュタインの仕事は何年に発表されたか。答え。年代：１９０５年

（２）分子の実在と関係した式はどのようなものか、記号の意味とともに書け。

アボガドロ数N_Aが求められる根拠としてアインシュタインが導いた式（今日のアインシュタイン関係式と呼ばれている）は、

$$D=\frac{RT}{N_A}\frac{1}{6\pi\eta a}$$、a: 粒子半径、η:水の粘性、　R:気体定数、T: 絶対温度

である。これからアボガドロ数N_Aは、

$$N_A=\frac{RT}{6\pi\eta aD}、$$

となる。

一方、ブランウン粒子の動きを表すパラメーターである変位σ（粒子の運動の原点からの距離の平均に対応する）を導入すれば、$\sigma^2=2Dt$（tは時間）となり、

$$N_A=t\frac{RT}{\sigma^2}\frac{1}{3\pi\eta a}、$$

となる。もし、時間がtだけ経過した時の平均２乗変位σ^2が計測できれば、アインシュタインの式から拡散係数Dが求まり、これよりアボガドロ数が求められることになる。

（３）これを利用してアボガドロ数を精密に計測した実験家は誰か。
答え。フランスの Jean Perrin。彼の実験により 1908 年以後、分子の実在は、広く受け入れられるようになった。

注）アインシュタインのブラウン運動の論文とペランによる実験は、原子分子の実在を証明した科学史上の重要な仕事であると認識されている。
・米沢冨美子、ブランウン運動、共立出版、1986 年
の解説が丁寧で分かりやすい。

６．マックスウエルのデモン問題を考察し、情報の概念を物理学の持ち込んだとされる物理学者は誰か。この学者が原爆開発に果たした役割を述べよ。
物理学者の名前：シラード、Leo Szilard
原爆開発における役割：アインシュタインを説得して、原爆開発を勧告するルーズベルト大統領宛の手紙を書かせた。

７．マックスウエルのデモン解決に関係したアイデアとして、情報を入手することではなく、記憶を消すためにエネルギーが必要だという考えを提唱したのは誰か。それはどのような「原理」と呼ばれているか。
人名：ランダウアーRolf Landauer,　　原理の名称：ランダウアーの原理

８．水素原子の古典的な模型は、正電荷をもった核（陽子）の周りを負電荷をもった電子が回っているというものである。この模型は、ある重い星（例えば地球）の周りを回っている惑星（例えば月）の運動に較べられる。クーロン力と重力の違いはあるが、双方とも半径の２乗に反比例した力が同じように中心に向けて働いている。しかし電子は安定的に回る（同じ半径で円運動する）ことはできない。なぜか？（正確に言うと、重力に束縛された場合も重力波を放出して軌道は小さくなっていくと考えられている。）
答え。加速されている電子は、放射光を放出し、エネルギーを失うから。

９．量子化学の到来を予想した量子力学の創設者の一人は誰か？
物理学者の名前：デイラック、P.M.A. Dirac

10. 物理学における次のＡ群の項目の後に、関係の深いＢ群の項目の番号を入れよ。
Ａ群
（１）ラプラスのデモン：(2)
（２）マックスウエルのデモン：(4)
（３）ＥＰＲ：(3), (5)
（４）シュレディンガーの猫：(1)
B 群
（１）エベレットの多世界解釈
（２）宇宙の条件を知ることができれば未来を予測できる
（３）量子 Entanglement
（４）熱的な平衡状態にある気体を、平均して温度の高い部分と低い部分にわける
（５）量子テレポーテーション

１1．Entanglement に関する問題

（１）Entanglement とはどのようなことを意味するのか。波動関数あるいは統計作用素で系が記述されている時、Entanglement を判定する方法を述べよ。

答え。量子力学の複合系の状態が、その部分系の状態の（直）積で表現できない、分離不可能 nonseparable な場合。

（２）ベルの不等式とその実験検証の意義を述べよ。

答え。EPR 対を多数用意し、ある点から２つの粒子の対を反対の方向に走らせ、その先の A、B で複合系の一方粒子の S_z ないし S_x を繰り返し観測する。A，Ｂでの２つのスピン成分の測定を $Q=\pm1, R=\pm1$、および $S=\pm1, T=\pm1$、それらの期待値をを $E(QS)$ などとすれば、通常の確率論的には、$E(QS)+E(RS)+E(RT)-E(QT)\le 2$、これを Bell の不等式という。

III. 生物学に関係した問題

１．次の生物学上の仕事のなされた年代を括弧に記入せよ。

（１）ダーウィンの「種の起源」: 1859

（２）メンデルの遺伝法則：1865/66

（３）エィブリーらの遺伝物質が DNA であることの発見：1944

（４）シュレディンガーの What is Life? の出版: 1944

（５）ワトソンとクリックの DNA の 2 重ラセン構造の発見：1953

（６）ケンドリューとペルツによるミオグロビン/ヘモグロビンの構造解析：1959/60

（７）ジャコブとモノーによる遺伝子制御のスィッチ機構の発見：1960

（８）遺伝コードの発見：1961

（９）コーヘンとボイヤーによる制限酵素を用いた DNA の切り貼り：1971

（１０）ヒト・ゲノム解読計画の完了宣言：2003

２．分子生物学の誕生に大きく寄与した英国の物理学の研究所と方法論をあげよ。（ヒント：J. Maxwell やA. Rutherford が所長だった研究所）

研究所名：キャベンディシュ研究所 Cavendish Laboratory、X線結晶解析

（http://www.phy.cam.ac.uk/cavendish/history/）

３．量子力学およびその研究者は生命科学にどんなインパクトを与えたか、簡単に述べよ。

答え。分子生物学の誕生に寄与した。

４．生物の自己増殖の機能をもつ機械を考察した数学者は誰か、彼の仕事がなされたのは、いつ頃か、それはＤＮＡの複製機構が解明された前か後か？
数学者名：フォン･ノイマン, J. von Neumann,　　　　前後:　前

５．生物の形態形成の有名な数学的なモデルをつくったのは誰か。その後、ロシアの二人の科学者が、このモデル似た濃度パターンが交代であらわれる化学反応をつくってみせた。二人の名前で呼ばれるこの反応は、なんと呼ばれるか。現在、こうした研究はどのような分野になっているか？
数学者名：チューリングA. Turing　　　反応の名称：Belousov-Zhabotinski reaction
研究分野：複雑系, Complex System

６．次の言葉を簡単に説明せよ。
（１）分子生物学のセントラルドグマ: 遺伝情報は、DNA, mRNA, タンパク質（合成）へと流れ、その逆にはならない。

（２）Epigenesis:　ゲノムの遺伝子の働きではない（後生的な）制御機構。

（３）Omics Technology: Transcript(mRNA), タンパク質、２次代謝物などの網羅的な解析技術。

（４）Pathway/Network: 代謝マップ、細胞信号伝達系、遺伝子制御など細胞内の分子レベルの相互作用の経路網。

（５）(複雑系などで言われる) EmergentあるいはEmergence: 自然界のあるレベルの法則から、そのレベルでは理解できないような高次の構造が出現すること。

7. 以下は、専門家でも意見の分かれる問題である。いずれかを選んで自分の考えを述べよ。
（１）ゲノムの塩基配列を「生命の設計図」と呼ぶことは正しいか？
（２）生物学を現代の物理学や化学で理解することはなぜ難しいか。難しさの根源はどこにあるか？
（３）生物には分子機械が沢山含まれている。人間のつくる機械とどこが違うか？
選択した課題番号：
考え：

量子情報科学　計算問題

提出者氏名：________________　識別情報：________________

***記号のある問題は、時間があれば挑戦してみる参考問題。

1.　覚えておくと便利な数字。

（１）次の数を小数点３桁まで書け。　$\ln 2 \equiv \log_e 2 = 0.693(14\cdots)$

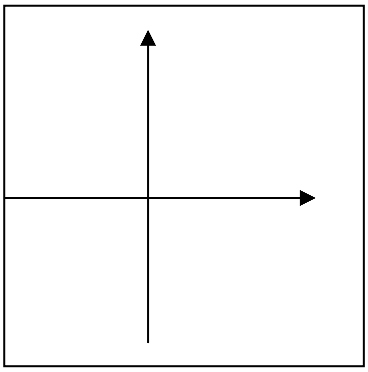
（２）計算せよ。

$2^8 = 256$，　$2^{10} = 1024$　，　$2^{30} \cong 10^{\mathrm{m}}$とした時、$\mathrm{m} = 9$　.

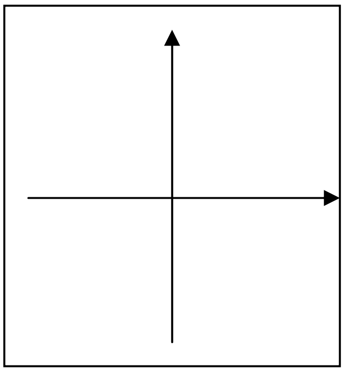
２．関数　x, y を実数として、$y = \log_e x$ のグラフを書け。

３．関数　x, y を実数として、$y = e^x$ のグラフを書け

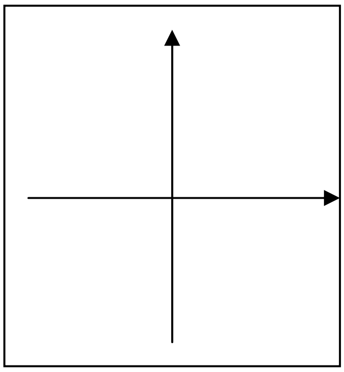
４．関数、$y = -x\log x$ とする。対数の底を 10 として、この関数のグラフを領域 $0 \le x \le 1$ で描け。



問題２.



問題３.



問題４.教室配布資料４月２５日３頁参照。

５．$\lim_{x\to 0} -x\log x = 0$ を証明せよ。（ヒント：$x = 10^{-n}$、n を正の整数として大きくしていった時の $-x\log x$ を n によってあらわせ。）

答え。底を１０とした対数を考える。（ただし、実は底のとり方に関係しない）

$$-x\log x = -\frac{-n}{10^n} = \frac{n}{10^n} \to 0,\ n \to \infty$$

６．コインを投げて表の出る確率をｐとする。表裏の出る確率事象の組の情報エントロピーをｐの関数、$H(p)$ であらわせ。このエントロピーを最大にするｐの値を求めよ。

（ヒント：$dH/dp=0$ にするｐを求めればよい。）

答。

$H(p)=-p\log p-(1-p)\log(1-p)$

$dH/dp=-\log p+\log(1-p)=\log\dfrac{1-p}{p}$、　　これより、$\dfrac{1-p}{p}=1$、$p=\dfrac{1}{2}$。

７．２変数の微分形式、$X(x,y)dx+Y(x,y)dy$、に関して、$\dfrac{\partial X}{\partial y}=\dfrac{\partial Y}{\partial x}$

が成り立つ時、この形式は完全微分 Exact differential 形式であるという。

（１）次の微分形式は完全微分か？　完全微分なものの番号（a, b, c）を丸で囲め。

(a) $3x^2ydx+2x^3dy$、○（ｂ）$2y$ を (a) に掛けた式、○（ｃ）$y(2x+y)dx+x(x+2y)dy$

（２）熱力学の変数、熱量の微分 dQ は、完全微分ではない。

(a)　どの様な熱力学変数で割れば dQ を完全微分にできるか。変数 温度　。

(b)　上記で得られた関数をなんと呼ぶか。関数の名称　エントロピー。

(c）この関数をある閉曲線に沿って（１サイクル）積分した値はどうなるか。答えゼロ

。

8. 内部エネルギーU に関する全微分と、自由エネルギーに関する偏微係数の間に成り立つ関係から、下記の熱力学の状態方程式を導け。

$$\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T=T\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T-p=T\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V-p$$

（ヒント）　$du=Tds-pdv$、および $\left(\dfrac{\partial S}{\partial V}\right)_T=\left(\dfrac{\partial p}{\partial T}\right)_V$。

答え。(U, V と小文字の u, v は同一視する)

$du=Tds-pdv$　より、$\left(\dfrac{\partial U}{\partial V}\right)_T=T\left(\dfrac{\partial S}{\partial V}\right)_T-p$

ヒントの第２式から状態方程式の最右辺が導かれるのは明らか。

９．　高温の熱源温度が 100 度Ｃ，低温のそれが０度Ｃで働く理想的な熱機関（カルノー・エンジン）の効率はどれだけか。

ヒント：温度が定められた２つの熱源によって可逆的に働く熱機関の効率は、２つの熱源の温度だけで決まり、次の式で与えられる。ただしT_H, T_Lはそれぞれ絶対温度で計った高温、低温の熱源温度。

$$\eta = \frac{T_H - T_L}{T_H} = 1 - \frac{T_L}{T_H} = 1 - \frac{273}{373}.$$

答え（％で答える）。26.8%.

１０．熱量計：銅でできた重さ 750gの熱量計に 200gの水が入っていて、平衡状態にあり、この温度は 20 度Ｃである。この熱量計に、重さ 30gの氷を入れ、熱量計を断熱壁で覆い、外部に熱が逃げないようにする。水の比熱は、4.18$Jg^{-1}deg^{-1}$、銅のそれを 0,418$Jg^{-1}deg^{-1}$、氷の溶解熱を 333Jg^{-1}とする。氷の溶解熱は、０度Ｃで、氷を水へと溶かす時必要な熱量である。

　ここで、

（１）　十分時間が経過して、全部氷が解け水になってすべてが平衡状態に達したとすると、温度はいくらか？

（２）　この平衡状態に達するまでの全体の系のエントロピーの変化はどれだけか？　単位を J/deg として求めよ。

（３）　上記（１）の状態から、全部の水を再び最初の温度、20 度Ｃに上げるには、どれだけの仕事（Ｊ単位）が必要か？

答え：（１）12.6 度Ｃ，（２）、12.8J/deg、（３）9.4x10J

(Berkeley 統計物理（下）、p.244、問題 5.17)

１１．気体の不可逆的な膨張過程の問題：ある直方体で体積が２V の容器がある。この容器の真ん中に仕切り（壁）をつくり、容器をまったく同じ体積 V の同じ条件の小部屋に分けたとする。いま部屋周囲から熱が移動しない（断熱）条件をつくり、一方の小部屋に理想気体を入れて熱的平衡状態になるまで待ってから、仕切りを一気に取り払って気体を２倍の体積に自由に膨張させ, 熱的平衡状態なるまで待ったとする。この時のエントロピーの変化を求めよ。また、結果に関して情報エントロピーの視点からの考察を簡単に述べよ。ただし、体積をV，温度をT，分子の個数をNとした時、この気体のエントロピーは、

$$S = Nk\,\{\log\,(\frac{V}{N}T^{3/2}) + (T,V\text{に依存しない項}\}$$

で与えられると仮定し、以下の問いに答えよ。

（１）　この膨張過程の結果としてのエントロピーの変化を求めよ。

$$S_2 - S_1 = Nk\,\log 2$$

（２）この変化を情報エントロピー的視点から解釈せよ。

分子の可能な配置が倍になった。

（３）この実験が、気体の量が１モル、温度が絶対温度 300 度で行われたとする。エントロピーの変化量を求めよ。答え。（１）の$N = A\,(mol)$、ただしAはアボガドロ数だから、気体定数$R = Ak = 8.31JK^{-1}mol^{-1}$をもちいれば、$S_2 - S_1 = Nk\,\log 2 = 5.82\,JK^{-1}$となる。

（４）上記の実験と同じ２つの部屋に、異なる種類の気体をそれぞれN_1, N_2個分子入れ、仕切りを急に取り払って、しばらく待ったとする。エントロピーの変化を求めよ。ただし、気体分子同士の相互作用は影響しないと仮定せよ。

答え。　$S_2 - S_1 = (N_1 + N_2)k\,\log 2$

（５）ある直方体で体積が２V の容器に理想気体が入っていて熱的平衡状態にある（これは、上記（１）の実験の最終状態に対応する）。この容器のある壁が平行に移動させられるピストンになっているとする。このピストンを（可逆的になるように）ゆっくり動かして気体を圧縮しながら、真ん中で止め、（気体の）体積をちょうど（最初の半分の）V になるようにした。この過程では、温度 T を一定に保った。一般に、自由エネルギーを F、内部エネルギーを U、エントロピーを S,温度を T とすると、F = U –TS　の関係にあるが、速度に依存する気体の内部エネルギーは、温度一定条件下では変化がない。

(a) この圧縮過程で系（気体）の自由エネルギー変化を求めよ（増加か減少かも記せ）。

$\Delta F = NkT\,\log 2$　（増加）

(b) エントロピーの変化を求めよ（増加か減少かも記述せよ、ボルツマン定数はkと表せ）。

$\Delta S = -Nk\,\log 2$　（減少）

上記の問題の解説。

この問題（１）は、不可逆過程と可逆過程の違いを考えさせる典型的な問題であり、エントロピー変化は、最後の状態に可逆過程で到達したと仮定して計算する。この種の計算は、マックスウエルのデモンに関連してシラードが導入したデモン、計算過程のエネルギー消費などに関する議論にも登場する。この問題に使われる気体は「理想気体」であるという条件がついている。そこで、理想気体の性質を確認しておく。

一般に気体の（内部）エネルギーは、状態量であり、温度と体積という２つの変数の関数である。しかし理想気体の（内部）エネルギーは温度だけの関数、

$$E = E(T)\text{、（実は} E = \frac{3}{2}NkT\text{）}$$

である。また、状態方程式は、

$$PV = NkT$$

ただし、N は分子数であり、

$k = R/N_0 = 1.38\times10^{-16}\ erg/K$ ：ボルツマン定数

$N_0 = 6.02\times10^{23} molecules/mol$ ；アボガドロ数

$R = 8.31\times10^{7}\ erg/mol\,K$ ：気体定数

である。（マンチェスター統計物理学Ⅰ19/20、Ⅱ14/15）

理想気体の（内部）エネルギーが温度だけの関数であることの実験的な証明は、Joule によってなされた。彼は、A, B という外部から遮断された２つの容器を用意し、その一方に気体を満たし、他方を真空としておき、次に２つの容器の仕切りを取り除き（バルブを開け）、気体が拡散して平衡状態に達してから、温度を計測したが、温度の変化はほとんど無視できるほどであった。

理想気体のエントロピーは、

$$S_{tr} = Nk\ \{\log\ (\frac{V}{N}T^{3/2}) + \log\ (\frac{km}{2\pi\hbar^2})^{3/2} + \frac{5}{2}\}$$

これは、サックロール・テトロードの公式と呼ばれる。温度が一定で、体積はV_1からV_2に変化した場合、

$$S_2 - S_1 = Nk(\log\frac{V_2}{N} - \log\frac{V_1}{N}) = Nk\ (\log\frac{V_2}{V_1})$$

したがって体積が２倍になる場合、エントロピーの増加は、

$$S_2 - S_1 = Nk\ \log 2$$

となる。

次の問題の基礎となるボルツマン分布について

平衡状態にある（N個からなる）多粒子の系ある。それらは、離散的なエネルギー値、

$$E_1, E_2, E_3, ..., E_i, ...$$

をとるとする。ある状態における系は、上記のいずれかのエネルギー値をとるから、これを確率事象とみなすことができる。この時、系がエネルギーE_iをとる確率$P(E_i)$が、

$$P(E_i) = \frac{e^{-E_i/kT}}{Z}, \qquad Z = \sum_i e^{-E_i/kT}$$

で与えられる場合、この系のエネルギー値に関する分布をボルツマン分布という。ここで、k、Tはそれぞれ、ボルツマン定数と温度である。

ここで、もちろん、

$$\sum_i P(E_i) = 1$$

が満足されているとする。このZを状態和あるいは分配関数と呼ぶ。

12. ２状態系に関する問題

エネルギーがE_1とE_2という２つの状態のみをとりうる、ボルツマン分布にしたがう系がある。各状態を占める確率P_1とP_2を、エネルギーの差$E_2 - E_1 = DE$の関数で表せ。

答え。確率の比、P_1 / P_2をもとめることにより、次の結果をうる。

$$P_1 = \frac{1}{1 + e^{-DE/kT}}、\qquad P_2 = \frac{1}{1 + e^{+DE/kT}}$$

１３．１次元の自由度をもった粒子が N 個からなる仮想的な集団を考える。それぞれの粒子は、＋（up），または、—（down）の状態をとり、－状態のエネルギーが高く＋μB、＋状態は－μB とする。ただしμは、各粒子に固有な物理量、B は外部の物理量とする。(これはスピンによる磁気能率μをもった電子のような粒子が外部磁場 B の中にある場合に相当する)。各粒子の間の相互作用はないと仮定する。ここで＋状態にある粒子の個数を n、－状態にある粒子の個数を n’とする。もちろん、N = n + n’ である。次の問いに答えよ。

（１） このN粒子系の状態はnで決まる。あるnに対して同等な状態の数はいくつあるか。

答え。 $${}_N C_n = \binom{N}{n} = \frac{N!}{n!(N-n)!} = \frac{N!}{n!n'!}$$

（２） このN粒子系がとりうる可能な状態の数は、どれだけか。答え。 2^N 。

（３）N, n, n’ が大きいと仮定し、この２状態系の集団が熱的平衡にあるとすると、ある粒子が＋（up）状態にある確率は n/N に等しくなるが、これはボルツマン分布から、

$$P_+ = \frac{n}{N} = Ce^{-(-\mu B)/kT}$$

で与えられる。ただし、Cは、規格化によって定まる定数である。この式は、—（down）

状態に関してはどうなるか。P_+ に対応する確率を P_- として、対応する式を書け。

$$P_- = \frac{n'}{N} = Ce^{-\mu B/kT}$$

（4）規格の条件、$P_+ + P_- = 1$ から、C を求めよ。答え C $= \dfrac{1}{e^{\mu B/kT} + e^{-\mu B/kT}}$

（5）この温度における磁気能率の平均、$\overline{\mu} = \mu(\frac{n}{N} - \frac{n'}{N}) = \mu\frac{(n-n')}{N}$ を求めよ。ここで最後の結果は、正弦双曲線関数、

$$\tanh x \equiv \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}}$$

をもちいて表せ。答え。$\overline{\mu} = \mu \tanh(\frac{\mu B}{kT})$ 。

（6）粒子の平均エネルギーを求めよ。$\overline{E} = \mu B \tanh(\frac{\mu B}{kT})$

（7）温度が（絶対温度で）ゼロの時、n と n’ はどうなるか。n = 0, n’= N.

（8）温度が無限大の時、n と n’ はどうなるか。n=n’=N/2.

（9）温度が無限大の時、1 粒子がそれぞれ、＋および－の状態にある確率を求め、情報エントロピーを求め、これにボルツマン定数 k を乗じて 1 粒子当たりの物理的なエントロピーを求めよ。答え。 $S(\infty) = k \ln 2$ 。

次の問題の基礎：マックスウエル分布 Maxwell Distribution

理想気体が、体積 V の容器に入れられた、（絶対）温度 T で熱平衡状態にある時の構成要素である各気体分子を考える。簡単のためにこれらは、同一の質量 m の、古典的な粒子とする。1 個の分子の運動エネルギーは、

$$\varepsilon = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}\frac{p^2}{m}、$$

となる。ただし、ここで、 v、 p はベクトルである。気体が薄く、他の粒子とポテンシャル・エネルギーが無視できるとすれば、ボルツマン分布のエネルギーを運動エネルギーだけとした分配関数が求められる。これより、位置 r と速度 v を変数とした相空間を考えると、分子の速度の絶対値が、v と v+dv である確率 $f(v)d^3v$ は、

$$f(v)d^3v = 4\pi v^2 (\frac{m}{2\pi kT})^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{1}{2}\frac{mv^2}{kT}} dv、 \quad （体積要素は、d^3v = 4\pi v^2 dv）$$

で与えられる。この分布による最も確からしい早さは$(\frac{2kT}{m})^{\frac{1}{2}}$である。なお、速度の各成分の分布は、正負対称のガウス分布（正規分布）となり、その平均はもちろんゼロである。この速度分布は、成分が複数ある理想気体にも適用できる。

１４．室温（300 度 K）で平衡状態にある（１）窒素気体の分子の速さはどれだけか、同じ状態にある（２）酸素分子の速さはどれだけか。

（１） の答え。窒素の分子量は 28、これとアボガドロ数から、分子の質量は約 $4.6\mathrm{x}10^{-23}$g. これから、確からしい速さは、約 420m/secとなる。(Berkeley, 下、p.263)

（２）の答え。約 390m/sec/。(速さは質量の平方根に逆比例するから、窒素分子と酸素分子の質量比(28/32)の平方根を求め(0.935) 、これに 420m/sec を掛ける。)

１５．下記の問題は、情報の消去がエネルギーの散逸を伴うという有名な Landauer の論文の中の仮想的なコンピュータを題材にしている。

仮想的な計算機の説明。
３つのバイナリー要素、p,q,r をもつ簡単な論理演算装置がある。この装置のサイクルは、ｐをｒ、ｑをｒ、ｒをp・q で置き換えるように動作する。この最初の可能な状態は、３変数の可能な組合わせにより８つあるが、熱平衡状態において等確率で出現するとする。この装置の終状態は、表の右のようであり、可能性の数は減少し、それぞれの出現確率は、表の出現頻度に対応しているとする。

Before cycle　　After cycle

p	q	r		p_1	q_1	r_1	Final state
1	1	1	→	1	1	1	A
1	1	0	→	0	0	1	B
1	0	1	→	1	1	0	C
1	0	0	→	0	0	0	D
0	1	1	→	1	1	0	C
0	1	0	→	0	0	0	D
0	0	1	→	1	1	0	C
0	0	0	→	0	0	0	D

次の質問に答えよ。対数は自然対数とする。数値計算では、 $\log_e 2 = 0.7, \log_e 3 =1.1$と近似せよ。

（１）上記の表の空白部分（１２欄）を埋めよ。

（２）この計算機系の最初の(情報)エントロピーS_iを求めよ。

答え、$S_i = -\sum \frac{1}{8}\ln\frac{1}{8} = \ln 8 = 3\ln 2$

（３）この計算機系の最後の(情報)エントロピーS_fを求めよ。

答え、$S_f = -(\frac{1}{8}\ln\frac{1}{8} + \frac{1}{8}\ln\frac{1}{8} + \frac{3}{8}\ln\frac{3}{8} + \frac{3}{8}\ln\frac{3}{8}) = \frac{2}{8}\ln 8 + \frac{6}{8}\ln 8 - \frac{6}{8}\ln 3 = \ln 8 - \frac{6}{8}\ln 3$

（４）このエントロピーの差（$S_i - S_f$）に kT を乗じた（掛けた）ものが、最小のエネルギー消費である（k はボルツマン定数、T は温度)。この量を求めよ。

答え、kT（$S_i - S_f$）＝$0.75\ln 3\ kT = 0.825\ kT$

（５）（絶対）温度が 300 度Kとして、（４）の値をJ（ジュール）で求めよ。ただし、ボルツマン定数は、1.3806x10^{-23} J・K^{-1}（J = kg m^2 s^{-2}）とする。
答え、 $0.825 \times 300 \times 1.38 \times 10^{-23}\ J = 3.4 \times 10^{-21}\ J$。

１５．前期量子論の問題
（１）光速の１０分の１の速さで飛んでいる電子のドゥ・ブロイ波長を求めよ（m/s 単位)。
答え。24.3 ピコメートル(pm).

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m_e v} = \frac{h}{m_e c/10} = \frac{6.626 \times 10^{-34}\ J \cdot \sec}{(9.109 \times 10^{-31} kg)(2.998 \times 10^{8}\ m/\sec) \times 10^{-1}} = 2.43 \times 10^{-11}\ m = 24.3\ pm$$

（２）光速の 2 万分の 1 で飛び出したフラーレンC_{60}分子のドゥ・ブロイ波長を求めよ。
（この問題では、電子の質量は陽子の 1/2000（実際は 1/1837)、炭素分子の質量は、陽子の 12 倍として計算せよ。)
答え。34 フェムトメートル。（フラーレンの質量は、電子の約 2000 x 12 x 60 = 1.44 x 10^6.

$\lambda =$（上記の電子の波長）$\lambda_{electron}\ 2000/1.44 \times 10^{6} = 3.4 \times 10^{-14}\ m = 34 \times 10^{-15}\ m = 34$ fm）

16. パウリ Pauli 行列の問題:以下の２行２列の行列のうち最初の３つをパウリ行列という。

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

（1）任意の２行 2 列の行列は、単位行列とパウリ行列の線型結合（1 次結合）で表せる。それを証明するには、ある要素が１で他の 3 要素が０である４つの行列が単位行列とパウリ行列の線型結合表されることを示せばよい。例にならって、こうした結合をすべて書け。

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}(\sigma_0 + \sigma_z), \qquad \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}(\sigma_x + i\sigma_y),$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}(\sigma_x - i\sigma_y), \qquad \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}(\sigma_0 - \sigma_z)$$

（2）パウリのスピン行列の間には、通常の２行２列の行列と同じ規則の積が定義できる。

これに関して、交換関係、反交換関係、$\sigma_x\sigma_y - \sigma_y\sigma_x = A,\ \ \sigma_x\sigma_y + \sigma_x\sigma_y = B,$

$\sigma_x\sigma_x - \sigma_x\sigma_x = C,$ の $A,\ B,\ C$ を求めよ。$A = 2i\sigma_z$ 、 $B = 0$（または $0\sigma_0$ ），$C = 2$（または $2\sigma_0$ ）。

17. 密度行列の問題。

電子のようなスピン 1/2 系を考える。スピンの z 方向の成分 S_z が＋である完全に分極した状態に対応する密度行列は以下で与えられる。

$$\rho = |+\rangle\langle+| \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}(1\ \ 0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

この表記法によって、次の質問に答えよ。

（1）上の表記にならって、S_z がーである完全に分極した状態の密度行列を書け。

$$\rho = |-\rangle\langle-| \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}(0\ \ 1) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

（2）スピンの x 方向の成分 S_x が $\pm$ （＋またはー）と完全に分極した状態に対応する密度行列は、射影演算子表現で、

$$\rho = |S_x;\pm\rangle\langle S_x;\pm| = (\frac{1}{\sqrt{2}})(|+\rangle \pm |-\rangle)\ \ (\frac{1}{\sqrt{2}})(\langle+| \pm \langle-|)$$

となる。これを２行２列の行列表現であらわせ。

$$\rho = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \pm\frac{1}{2} \\ \pm\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

（３）スピンの z 方向の成分 S_z が、半分は＋半分は－という（分極していない）場合の密度行列の行列表現を求めよ。上と同様にブラケットを使った作用素と行列の両方で書け。

$$\rho = (\frac{1}{2})|+\rangle\langle+| + (\frac{1}{2})|-\rangle\langle-| \equiv \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} + \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

（４）スピンの z 方向の成分 S_z が＋である状態が 75 パーセント、スピンの x 方向の成分 S_x が＋である状態が 25 パーセントに分極している状態を表す密度行列で表せ。上と同様にブラケットと行列の両方で書け。

$$\rho = (\frac{3}{4})|+\rangle\langle+| + (\frac{1}{4})(\frac{1}{\sqrt{2}})(|+\rangle + |-\rangle)(\frac{1}{\sqrt{2}})(\langle+| + \langle-|) = \frac{3}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{4}\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{7}{8} & \frac{1}{8} \\ \frac{1}{8} & \frac{1}{8} \end{pmatrix}$$

（５）一般に量子力学の系が密度行列 ρ で表される状態にある時、演算子 A に対応する物理量の観測を行えば、その期待値（アンサンブルの平均値）は、$\langle A\rangle = Tr\{\rho A\}$ で与えられる。これをもちいて、上の問題（４）の状態における S_Z の期待値を求めよ。

答え。パウリ行列を用いると、$S_Z = \frac{1}{2}\hbar\sigma_Z$

$$Tr\{\rho S_Z\} = \frac{1}{2}\hbar Tr\{\rho\sigma_Z\} = \frac{1}{2}\hbar\frac{1}{8}Tr\begin{pmatrix} 7 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{16}\hbar Tr\begin{pmatrix} 7 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{16}\hbar\times 6 = \frac{3}{8}\hbar = \frac{3}{4}\cdot\frac{\hbar}{2}$$

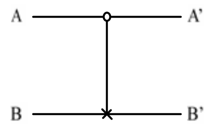
(6) 純粋状態 (pure state) に対応する密度行列は、$\rho^2 = \rho$ を満たす。上記の（１）、（２）、（３）の密度行列のうち、純粋状態に対応するものはどれか。答え(番号)、(1)と（２）。

１8. 量子演算と量子回路

・量子計算における演算とは、ユニタリ変換に伴う量子状態遷移を意味する。ユニタリ変換（作用素）は、その定義（ユニタリ性、$AA^{+} = A^{+}A = I$ ）からベクトルの内積（長さ）を変えない。

・量子演算は、量子回路Quantum gateによって実行される。量子回路はユニタリ作用素に対応するが、定理、「任意の２^{n}次元ヒルベルト空間上のユニタリ作用素は２入力の位相回転回路とコントロールNOTの組み合わせで表現可能である」によって、位相回転回路とコントロールNOTだけで、実行可能である。もっとも簡単な位相回転回路はアダマールHadamard変換である。アダマール変換と２入力のコントロールNOT行列表現は、

$$U_H = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}、\qquad U_{CN} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}。$$



次の質問に答えよ。

（１） アダマール変換の行列をパウリ行列（および必要なら単位行列、問題 16 参照）によって表せ。最も簡単な表現を使え。

$$U_H = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sigma_x + \sigma_z\right)$$

（２）いま、量子ビットの行列表現で、$|0\rangle \to \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ 、 $|1\rangle \to \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ を採用し、

アダマール変換を $|0\rangle$ および $|1\rangle$ に作用させた結果をケットベクトルで書け。

$$U_H\ |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle + |1\rangle\right),\qquad U_H\ |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle - |1\rangle\right),$$

(3) ２次元ヒルベルト空間のユニタリ変換、X, Y, Z, I を行列表現で、

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

と定義した時、これらの演算子を$|0\rangle$および$|1\rangle$に作用させた結果を例にならってすべて書き出せ（これらはパウリ行列と同じであるが、量子情報、量子計算ではこの記法をもちいる)。

$\mathrm{I}|0\rangle = |0\rangle$,　　$\mathrm{X}|0\rangle = |1\rangle$,　　$\mathrm{Y}|0\rangle = i|1\rangle$,　　$\mathrm{Z}|0\rangle = |0\rangle$
$\mathrm{I}|1\rangle = |1\rangle$,　　$\mathrm{X}|1\rangle = |0\rangle$,　　$\mathrm{Y}|1\rangle = -i|0\rangle$,　　$\mathrm{Z}|1\rangle = -|1\rangle$

（４）２量子ビット，　$|\psi\rangle = \dfrac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}}$　の「最初の」量子ビットにユニタリ変換をほどこして、以下のような（ベル状態と呼ばれる）新しい２量子ビットを４種類つくりたい。

$$|\psi_1\rangle = \frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}}、|\psi_2\rangle = \frac{|00\rangle - |11\rangle}{\sqrt{2}}、|\psi_3\rangle = \frac{|10\rangle + |01\rangle}{\sqrt{2}}、|\psi_4\rangle = \frac{|01\rangle - |10\rangle}{\sqrt{2}}$$

どのようなユニタリ変換を使ったらよいかを、上記の２量子ビットの波動関数の番号（添え字）に対応させて書け。上記の X, Y, Z, I のいずれかを含む最も簡単な表現とせよ。
（ヒント：例えば、２番目の２量子ビットをつくりたければ、$|00\rangle \equiv |0\rangle_1 |0\rangle_2$ の最初の量子ビット $|0\rangle_1$ はそのままにして（すなわち、$|0\rangle_1 \to |0\rangle_1$ という恒等変換を施して）、$|11\rangle \equiv |1\rangle_1 |1\rangle_2$ の最初の $|1\rangle_1$ に対して、$|1\rangle_1 \to -|1\rangle_1$ という変換を施せばよい。）
答え、１．I　　２．Z　　３．X　　４．iY　。

（5）４つのベル状態は互いに直交し、また規格化されており、２量子ビットの基底になりうる。例えば、$|\psi_2\rangle$ と $|\psi_3\rangle$ が直交していることを示せ。

$$\begin{aligned}\langle\psi_2|\psi_3\rangle &= \frac{\langle 00| - \langle 11|}{\sqrt{2}}\frac{|10\rangle + |01\rangle}{\sqrt{2}} \\ &= \frac{1}{2}(\langle 00|10\rangle - \langle 00|01\rangle - \langle 11|10\rangle + \langle 11|01\rangle) \\ &= \frac{1}{2}(0) = 0.\end{aligned}$$

注）例えば、$\langle 00|01\rangle = \langle 0|0\rangle\langle 0|1\rangle = 1\cdot 0 = 0$ となる。

（６）量子テレポーテーションでは、こうしたベルの状態を観測する。例えば、4 番目のベル状態、$|\psi_4\rangle$ を観測するための射影演算子を２量子ビット表現であらわせ。

$$\begin{aligned}|\psi_4\rangle\langle\psi_4| &= \frac{|01\rangle - |10\rangle}{\sqrt{2}}\frac{\langle 01| - \langle 10|}{\sqrt{2}} \\ &= \frac{1}{2}(|01\rangle\langle 01| - |01\rangle\langle 10| - |10\rangle\langle 01| + |10\rangle\langle 10|)\end{aligned}$$

（７）下記で表現される量子テレポーテーション（６月１３日の講義資料参照）過程を考える。

$$|\phi\rangle_A|\xi\rangle_{AB}=(\alpha|0\rangle_A+\beta|1\rangle_A)\frac{|0\rangle_A|0\rangle_B+|1\rangle_A|1\rangle_B}{\sqrt{2}}$$

$$=\frac{1}{2}\{|\psi_1\rangle_A(\alpha|0\rangle_B+\beta|1\rangle_B)+|\psi_2\rangle_A(\alpha|0\rangle_B-\beta|1\rangle_B)+|\psi_3\rangle_A(\alpha|1\rangle_B+\beta|0\rangle_B)+|\psi_4\rangle_A(\alpha|1\rangle_B-\beta|0\rangle_B)\}$$

情報送信者の行った観測結果が、$|\psi_1\rangle$ 、$|\psi_2\rangle$ 、$|\psi_3\rangle$ 、$|\psi_4\rangle$ のいずれかであった場合、受信者は上記（３）のいずれかのユニタリ変換、あるいはそれを組み合わせ操作により、受け取るべき量子状態 $\alpha|0\rangle+\beta|1\rangle$ を出現させる。それぞれの場合に対応する変換を上記（４）の記号で書け。
答え。

$|\psi_1\rangle$ ：I 、$|\psi_2\rangle$ ：Z 、$|\psi_3\rangle$ ：X 、$|\psi_4\rangle$ ： Z・X 。

19. シュミットの定理に関する問題。
（シュミットの定理の簡易版）ある実数を要素とするｍ行ｎ列の行列 K がある。K の転置行列 K^+ とすると、これから２つの対称行列、$G=K^+K$ と $H=KK^+$ をつくることができる。G と H は、縮退も含めて、(ゼロを除いて）負でない同じ実数の固有値をもつ。それらを大きさの順にならべ、$\lambda_1\geq\lambda_1\geq\lambda_1\geq\cdots\geq 0$ とする。また、g^i と h^i をそれぞれ G と H の固有値 λ_i に属する規格化された固有ベクトルとすれば、

$$g^i=(1/\lambda_i)^{1/2}K^+h^i,\qquad h^i=(1/\lambda_i)^{1/2}Kg^i,$$

という関係がある。さらに、

$$K=\sum_{i=1}^{\max\{m,n\}}(\lambda_i)^{1/2}g^i\otimes h^i$$

と展開できる。これに関し以下の問題（１）あるいは（２）のいずれかを回答せよ。

問題（１）: 行列 K が

$$K=\frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix}2 & 2\\ 1 & -4\end{pmatrix},$$

である時、以下の質問に答えよ。

（１）転置行列 K^+ を求めよ。

$$K^+ = \frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 2 & -4 \end{pmatrix},$$

（２）行列$G = K^+K$ を作れ。

$$G = K^+K = \frac{1}{5}\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 2 & -4 \end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 1 & -4 \end{pmatrix} = \frac{1}{5}\begin{pmatrix} 5 & 0 \\ 0 & 20 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 4 \end{pmatrix}$$

（３）行列$H = KK^+$ を作れ。

$$H = KK^+ = \frac{1}{5}\begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 1 & -4 \end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 2 & -4 \end{pmatrix} = \frac{1}{5}\begin{pmatrix} 8 & -6 \\ -6 & 17 \end{pmatrix}$$

（４）行列$G = K^+K$ の固有値と（規格化された）固有ベクトルを求めよ。

上の（２）から、ただちに行列G の固有値は、１または４．この２つの固有値に対応する固有ベクトルは、それぞれの固有値を代入して規格化して求める、$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$、$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$。

（５）行列$H = KK^+$ の固有値と（規格化された）固有ベクトルを求めよ。

上の（３）から、最後の項の行列部分（1/5 を除いたカッコ内）の固有値は 5 と 20。これより、行列H の固有値も、１または４。

$$h^i = (1/\lambda_i)^{1/2} K g^i = \frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 1 & -4 \end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{2}{\sqrt{5}} \\ \frac{1}{\sqrt{5}} \end{pmatrix} \; or = \sqrt{\frac{1}{4}}\cdot\frac{1}{\sqrt{5}}\cdot\begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 1 & -4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{5}} \\ -\frac{2}{\sqrt{5}} \end{pmatrix}$$

***Option:（６）行列K を行列G と行列H の固有ベクトルをもちいて展開せよ。

$$K = \sum_{i=1}^{\max\{m,n\}} (\lambda_i)^{1/2} g^i \otimes h^i = \sqrt{1}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}\otimes\begin{pmatrix} \frac{2}{\sqrt{5}} \\ \frac{1}{\sqrt{5}} \end{pmatrix} + \sqrt{4}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}\otimes\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{5}} \\ -\frac{2}{\sqrt{5}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{2}{\sqrt{5}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{5}} & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \frac{2}{\sqrt{5}} \\ 0 & -\frac{4}{\sqrt{5}} \end{pmatrix}$$

問題（2）: 行列 K を

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

とする時、（1）転置行列 K^{+} を求めよ。（2）また４行４列の行列 $K^{+}K$ と（3）KK^{+}を作れ。（4）$K^{+}K$ の固有値を求めよ。(ヒント、シュミットの定理により、これは $K\,K^{+}$ の固有値に等しい)。

答え。

（1）

$$K^{+}=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & -1\\ 1 & 0\\ -1 & 1\end{pmatrix}$$

（2）

$$K^{+}K=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & -1\\ 1 & 0\\ -1 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & 1 & 1 & -1\\ 1 & -1 & 0 & 1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & -1 & 0 & 1\\ -1 & 2 & 1 & -2\\ 0 & 1 & 1 & -1\\ 1 & -2 & -1 & 2\end{pmatrix}$$

（3）

$$KK^{+}=\begin{pmatrix}0 & 1 & 1 & -1\\ 1 & -1 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & -1\\ 1 & 0\\ -1 & 1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}3 & -2\\ -2 & 3\end{pmatrix}$$

（4）固有値： $\lambda = 1\,or\,5$

***Option（5）行列 K の特異値分解を求めよ。

K は、２次および４次の適当なユニタリ変換により、$\begin{pmatrix}5 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0 & 0\end{pmatrix}$に変換される。

20. 生体分子に関する基本事項

（１）DNAとRNAの糖の構造（リボース）上の違いは何か。

答え。RNAは、2’にOHがあり、DNAはそのOがなく（ゆえにdeoxy-ribose）Hのみ。（Essential Cell Biology, 66頁参照）

（２）ヒトのゲノム（全DNA）は、約30億（$3x10^9$）の塩基対から構成されている。塩基間の平均距離を0.34nm（ナノメートル）とすれば、DNAの全長はどのくらいになるか？（体細胞はこれを２本もっている。）

答え。2.04 m

（３）ヒトを構成する細胞は約６０兆個と見積もられている。(a) 体重を６０キログラムとした時、１個の細胞の重さを推定せよ。(b) 細胞を立方体あるいは球と近似した時、その大きさを推定せよ。(c) これらの細胞がすべて（２）のようなDNAをもっているとしたら、それらすべてのDNAを一本につなぎ合わせたら、どのくらいの距離になるか。（注）実際には核のない赤血球の割合が大きい。）

答え。（a）60 kg/$60 \times 10^{12} = 10^{-12}$ kg = = 1ng,

（b）大雑把に、１個の細胞の重さは、同じ体積の水の重さと同じとして、10^{-9} g は、（水1g) $1cm^3$の10^{-9}の大きさ。これよりその一辺は10^{-3} cmすなわち、10μ mとなる。

（c）$60 \times 10^{12} x2.04$ m = 1.2×10^{11} km

（４）DNAの（A, G, C,Tからなる）塩基は、１つの位置あたり２ビットの情報をもっている。英文は（アルファベット26文字とスペースを１文字として）27文字であり、１文字あたりの情報量は、約4.75（$\log_2 27$）ビットである。ヒトの受精卵は両親から受け継いだ各30億塩基対からなるDNA（ゲノム）を含んでいる。(a) ヒトの受精卵の含んでいる情報量を英文に換算すると何文字に相当するか。(b) 大英百科辞典の1956年版は、２３巻あり、全巻の文字総数は、約２億文字とすれば、ヒトの受精卵の情報量はその何セット分に相当するか。(c) 生命が誕生して３５億年とし、その間平均して情報量が増えて現在のヒトに到ったとしたら、１年間に獲得した情報量はおよそどれだけか。

答え。

（a） $3\times10^9\times\dfrac{2}{4.75}=1.26\times10^9$ (12億６千)文字、（b）6.3 セット、（3）1.7 ビット。

***（５）核酸（DNAやRNA）の１単位、あるいはアミノ酸の１単位（残基）の平均分子量を見積もってみよ。（タンパク質の残基数と分子量のおよその関係が理解できる。）

答え。塩基は、330-340、アミノ酸は110-130。

誤り訂正

P.19: 問題 17 ⑵

$$\rho = |S_x;\pm\rangle\langle S_x;\pm| = (\frac{1}{\sqrt{2}})(|+\rangle \pm \frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle)\ (\frac{1}{\sqrt{2}})(\langle+| \pm \frac{1}{\sqrt{2}}\langle-|)$$

は、

$$\rho = |S_x;\pm\rangle\langle S_x;\pm| = (\frac{1}{\sqrt{2}})(|+\rangle \pm |-\rangle)\ (\frac{1}{\sqrt{2}})(\langle+| \pm \langle-|)$$ 。

p.22: 問題 18 の（4）

$|\psi_4\rangle = \dfrac{|01\rangle - |11\rangle}{\sqrt{2}}$　は、$|\psi_4\rangle = \dfrac{|01\rangle - |10\rangle}{\sqrt{2}}$。

p.26: 問題　20 の（4）,上から３行目の最後、

「ヒトの受精卵は両親から受け継いだ各 30 塩基対からなる DNA（ゲノム）を含んでいる。」は、

「ヒトの受精卵は両親から受け継いだ各 30 億塩基対からなる DNA（ゲノム）を含んでいる。」

p.25:問題（２）

「問題（２）行列 K を

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

とする時、（１）転置行列 K^+ を求めよ。（２）また４行４列の行列 KK^+ と（３） K^+K を作れ。」は、

「問題（２）: 行列 K を

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

とする時、（１）転置行列 K^+ を求めよ。（２）また４行４列の行列 K^+K と（３） KK^+ を作れ。」となる。