

目次

第 I 部 電子論シミュレーション概略	1
第 1 章 電子系シミュレーション概説	3
1.1 コースの概要	3
1.2 電子論レベルのシミュレーション科学	6
1.2.1 第一原理シミュレーションへ	6
1.2.2 一点計算	7
第 2 章 入力指定/分子系の規定	11
2.1 本章の主題	11
2.1.1 量子力学レベルでの問題構造	11
2.1.2 シミュレーションにおける入力の規定	13
2.1.3 シミュレーションの入出力関係の流れ	14
2.2 ベクトル解析/準備事項(数学)	14
2.2.1 ベクトル解析の概略	15
2.2.2 スカラ場の勾配	16
2.3 ポテンシャル場	19
2.3.1 力場	20
2.3.2 多体のポテンシャル	22
2.4 分子系の規定	23

第 3 章 支配方程式と其の取扱い	27
3.1 問題の定式化	27
3.1.1 支配方程式	27
3.2 微分方程式と固有値問題/準備事項 (数学)	28
3.2.1 微分方程式/解にアタリをつけるという事	28
3.2.2 境界値と固有値問題	30
3.2.3 偏微分方程式の変数分離/準備事項 (数学)	32
3.3 数値解法としての挑戦	33
3.3.1 問題の構造	33
3.3.2 問題の難しさ	34
3.3.3 変分原理	35
3.4 変分法による実装	36
3.4.1 変分法の復習	36
3.4.2 反対称試行波動関数と行列式	40
3.5 まとめ	43
3.5.1 その他、盛り込むべき話題	44
第 II 部 量子コンピューティング概略	45
第 4 章 準備事項	47
4.1 概説	47
4.2 振動と波動	48
4.2.1 テイラー展開	48
4.2.2 オイラーの公式	50
4.2.3 干渉の数理	50
4.2.4 反射や透過に伴う位相シフト	53
4.3 光に関する物理	57
4.3.1 光に関する物理学の紹介	57
4.3.2 干渉計	59
4.3.3 干渉計における光子	61

4.4	重ね合わせ状態と量子ビット	64
4.4.1	重ね合わせ状態と其の数理的記述	64
4.4.2	古典ビットと量子ビット	65
4.5	典型的な量子ゲート	66
4.5.1	アダマールゲート	67
4.5.2	位相ゲート	69
4.5.3	制御 NOT と普遍性定理	70
第 5 章	ドイチェ・ジョザの問題	73
5.1	量子アルゴリズム	73
5.2	ドイチェ・ジョザのアルゴリズム/概論	74
5.3	ドイチェの問題	79
5.3.1	制御オラクル動作の定式化	79
5.3.2	制御オラクルの働きの数理表現	80
5.3.3	ドイチェのアルゴリズム	82
第 6 章	グローバーのアルゴリズム	87
6.1	概略	87
6.1.1	問題設定	87
6.2	グローバーのアルゴリズム	89
6.3	グローバーのアルゴリズムにおける位相制御	92
第 7 章	さらに拡充予定	95
7.1	量子フーリエ変換	95
7.2	位相推定	95