

「電子・光子等の機能制御」  
平成11年度採択研究代表者

北川 勝浩

(大阪大学大学院 基礎工学研究科 助教授)

## 「核スピンネットワーク量子コンピュータ」

### 1. 研究実施の概要

量子コンピュータは、0と1の重ね合わせを許す量子ビット (qubit) の間で演算を行い、全ての可能性を並列に処理して、干渉によって正解を効率的に抽出する情報処理の新しいパラダイムである。その能力はqubitの数とともに指数的に増大するが、実験的にはまだ数qubitのものが誕生したばかりである。そこで、本研究では高分子や結晶の核スピンネットワークを用いた多qubit量子コンピュータの実現を目指して、以下の研究を行った。

#### I. 分子量子コンピュータ

比較的小規模の分子で量子回路を自在に構成することを目的として、ユニタリ行列を2-qubitゲートに分解する方法と、同核スピンを独立に制御する方法を開発した。また、量子回路のデバッグを目的として、直接結合のない2-qubitの量子状態トモグラフィの効率的な方法を開発した。今後は、多核による7-qubitの量子回路実現を目指して分子探索と実験を行うとともに、物理的初期化と高分子量子回路の研究も推進する。

#### II. 核スピン偏極の基礎研究

量子コンピュータの初期化とNMR分光の飛躍的感度増大のための核スピン偏極技術を確立することを目的として、主にペンタセンをドーピングしたナフタレンで基礎研究を行った。光励起三重項状態の電子スピンとの交差分極を用いた動的偏極法でナフタレンの単結晶中プロトンの69% (最高記録) の分極を得た。さらに、この方法が希薄スピンや多結晶試料にも適用できることを示した。また、低磁場で偏極させた核スピンを高磁場中に移動して観測する装置を製作したので、今後これを用いてペプチドなどの実験を行う予定である。

#### III. 結晶量子コンピュータ

結晶あるいは固体およびその表面などの核スピンをを用いた量子コンピュータの実現に必要な材料とNMR技術の研究・開発を行った。CePはNMR測定によって基本的な物性に課題があることが判明したので、新たな候補物質を探索し、BaLiF<sub>3</sub>とYliF<sub>4</sub>を見出した。さらに、BaLiF<sub>3</sub>が実効的に1次元核スピン系と見なせ

ることを見出した。

#### IV．光量子コンピュータ

線形光学素子量子計算の手法を、量子テレポーテーションを応用して、多光子とその相関をも取り扱えるように拡張し、単一事象の検出が本質的な量子誤り訂正などのアルゴリズムの検証実験を目指している。今年度は、光子数検出器の構築、フェムト秒レーザ励起による光子対生成の確認、高い忠実度をもつ量子テレポーテーション実験の条件解析を行った。今後は、実験条件のより詳細な検討を行い、それを満たすべくパラメトリック蛍光対発生条件の最適化と光子数検出器の性能評価・改良に取り組む。

#### V．量子コンピュータ理論

量子コンピュータ実験を理論的に基礎づけることを目的として、量子エンタングルメント理論、量子計算理論、量子測定理論の研究を行い、エンタングルメント測度に関する予想の否定的決着、量子Turing機械の局所遷移関数の特徴付け、縮退のない物理量の測定に伴う量子状態収縮の特徴付け、測定の擾乱と同時測定の結合確率分布の関係などの成果を得た。

### 2．研究実施内容

#### I．分子量子コンピュータ

1．1 量子回路構成法： 共鳴周波数の縮退が無い比較的小規模の分子で量子回路を自在に構成することを目的として、ユニタリ行列を2つの核スピン間のJ結合で直接的に実現可能な2-qubit条件付回転ゲートと1-qubitの回転ゲートに分解する方法を開発した。

1．2 パルス構成法： 周波数の近接した複数の同核スピンをqubitとして利用するために、ひとつのシェイプトパルスで、望ましくない非共鳴効果を補償して各qubitを独立に、かつ、同時に制御する方法を開発した。この方法を用いて、<sup>19</sup>F核3-qubitで、Groverのアルゴリズムを複数周期実行し、量子演算の精度が大幅に向上したことを確認した。

1．3 量子状態トモグラフィ： 量子回路のデバッグを目的として、直接J結合のない2-qubitの量子状態トモグラフィを効率的に行う方法を開発した。

1．4 今後は、多核による7-qubitの量子回路実現を目指して分子探索と多核のソフトウェア的初期化の研究、実験を行う。それと並行して、より多qubitを目指した物理的初期化の研究と共鳴周波数が縮退した高分子量子回路の研究、分子探索も推進する。

#### II．核スピン偏極の基礎研究

NMRはミクロな立場から豊富な情報をもたらす強力な分光法であるが、感度が低いという大きな欠点がある。そこで、本研究では光励起三重項状態の電子スピ

ンとの交差分極を用いた動的偏極法により大きな核偏極を作り、NMRの感度を飛躍的に増大させることを目的とする。この核偏極は同時に、NMR量子コンピュータに必要なスピン系の初期化を実現する。

実験は主としてペンタセンを0.015mol %ドープしたナフタレンを用いて行った。磁場は約3000 G、プロトンNMR周波数は13.6 MHz、ESR周波数は9.7 GHzである。レーザーパルス(5mJ)によりペンタセンを三重項状態に励起し、大きな電子偏極を得る。次に、マイクロ波を照射し、交差分極により電子偏極をプロトンに移す。この過程を繰り返し、大きなプロトン偏極を得た。実験パラメータを最適化して、単結晶ナフタレンを用いて100Kで実験を行った結果、熱平衡磁化の24万倍にあたる69%という巨大な偏極を得ることができた(図1(a))。これは従来の記録を2倍上回り、その大きさは電子偏極と一致し、理論限界に到達している。偏極増大の時定数は7890秒であった。

図1 a

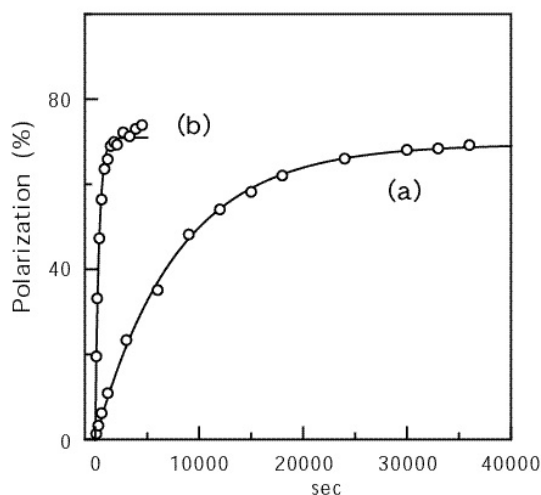


図1 核スピン偏極の蓄積過程(a)ナフタレン(b)重水素化ナフタレン。

さらに、99.2%重水素化した単結晶ナフタレンの残留プロトンを100 Kで偏極させる試みを行った結果、このような希薄なスピン系においてもやはり理論限界に達する71%の偏極を得ることができた(図1(b))。時定数は357秒であり、通常のナフタレンに比べてはるかに短時間で偏極することが分かった。これは、スピン系が希薄なため、熱容量が小さいためと考えられる。このことは本方法を炭素13核や窒素15核などの希薄スピンに適用する上できわめて好都合である。

### III . 結晶量子コンピュータ

今年度は量子計算機用材料の候補物質として別の化合物を探索した。特にBaLiF<sub>3</sub>, YLiF<sub>4</sub>についてはLiとFのNMRを行い、基本物性の評価を実験的に行った(図2)。線幅の原因は、測定した角度依存性を結晶構造を考慮して解析した結果、大部分が双極子相互作用であることが分かった。重要な成果として、BaLiF<sub>3</sub>のような立方晶ペロブスカイト構造では[111]方向が魔法角になるので線幅が非常に小さくなり、実効的に1次元核スピン系と見なせる擬似的状況が作れる。このことは核スピンネットワークを構築する上で有効な手法となりうる。

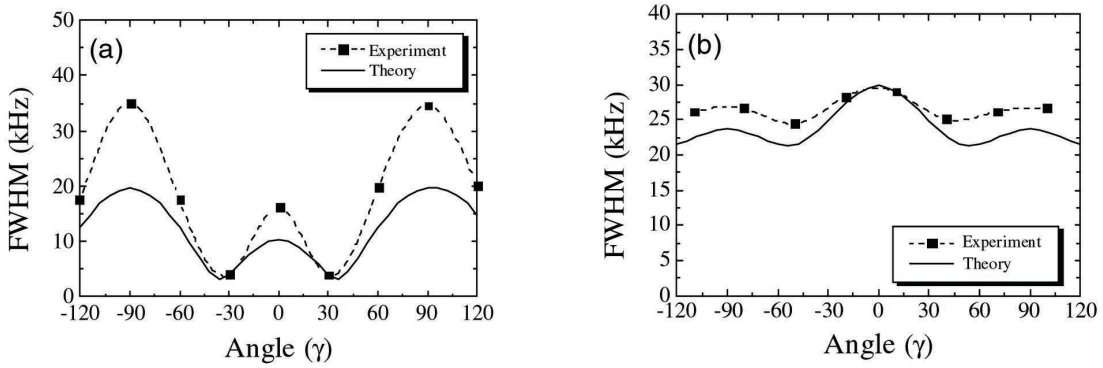


図2 BaLiF<sub>3</sub>のNMR線幅 (FWHM) の角度依存性(a)<sup>7</sup>Li(b)<sup>19</sup>F.

#### IV. 光子量子コンピュータ

4.1 光子数検出器の構築： 昨年度行った見直しと改良案に基づき、2台の光子数検出システムを構築した。また、それらの装置において赤外の背景フォトンが十分シールドされている(量子効率最大時にダークカウント10<sup>4</sup>程度)ことを確認した。

4.2 フェムト秒レーザー励起による光子対生成： フェムト秒レーザーをポンプ光源としてパラメトリック蛍光対の発生を確認した。また、結晶長の変化に対する蛍光対の性質について研究を行った。

4.2 量子テレポーテーション実験の忠実度の研究： 量子テレポーテーションの忠実度について、今回改良した光子数検出器 (VLPC) を用いた場合と従来の場合について計算を行った(図3)。その結果、VLPCを用いることで、従来に比較して1/5の時間で、量的にしか実現できない2/3以上の忠実度を達成できることが分かった。

#### V. 量子コンピュータ理論

5.1 量子エンタングルメント理論： 量子情報処理におけるエンタングルメントの資源を定量化するために、VedralとPlenioはエンタングルメント測度に対する一般的なアプローチを提案し、Hilbert-Schmidt 距離という状態間の

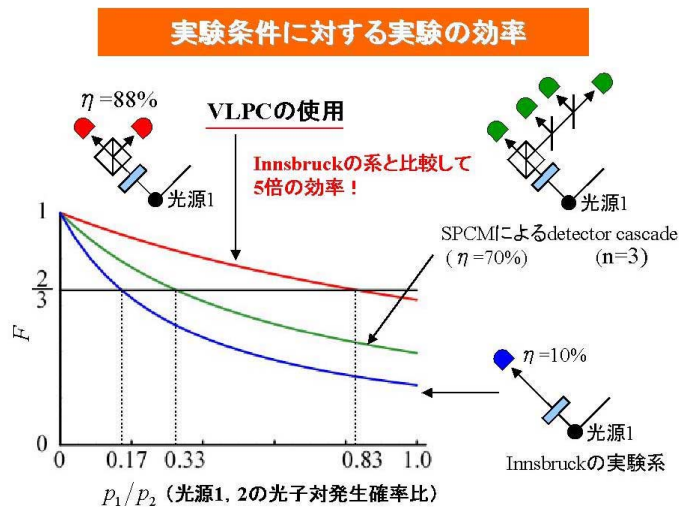


図3 光子数検出器 (VLPC) による量子テレポーテーション忠実度の改善

極めて扱いやすい距離がエンタングルメント測度を定義するためのある条件を満たすという予想を立てた。本研究では、反例を構成して彼らの予想に否定的な決着をつけた。

5.2 量子計算理論： 量子Turing機械は、Deutschによって導入された量子計算機のモデルであるが、Deutschは、その時間発展が局所遷移関数という関数によって局所的に決定されることを要請した。BernsteinとVaziraniは、2方向1テープ量子Turing機械に対してこの局所遷移関数を特徴づけたが、本研究ではそれを一般の場合に拡張した。このことにより、量子Turing機械を、量子力学の原理を仮定することなく、純粋に数学的条件だけで定義することが可能になり、特に、計算機科学の分野からのアプローチが容易になった。

5.3 量子測定理論： エンタングルメントのもつ量子相関がそれぞれの部分系における実験から得られる根拠として、射影仮説に基づく量子状態収縮が考えられるが、光子数測定のように射影仮説をみたまない実験については、これまで十分な理論的根拠が示されていない。そこで、測定における擾乱と二つの測定から得られる結合確率分布の関係を明らかにすることにより、任意の局所測定の対がエンタングルメントのもつ量子相関を示すことを証明した。観測理論では、従来から、射影仮説をみたまない測定がもっぱら研究対象となってきたが、量子コンピュータ実験などの量子情報処理においては、対象と量子デバイス間の極めて精密な制御が可能となるため、必ずしも射影仮説をみたまない測定が実験的に実現されることになる。従って、そのような一般的な測定の量子状態収縮の理論を構築することは、それらの実験を理論的にサポートするうえで重要な課題である。測定装置が間接測定のモデルを持つことと測定による条件付き状態変化が完全正超作用素値測度で表現されることは同等であるが、これを精密化して、縮退のない離散オブザーバブルの測定によって生じる可能な条件付き状態遷移を完全に特徴づけた。とりわけ、縮退のないオブザーバブルの測定後の状態は入力状態に依存しないこと、任意の状態族に対して、測定後の対象をその状態族に準備する測定装置が原理的に存在することを証明し、同一のオブザーバブルが極めて多様な方法で測定可能であることを示した。

### 3. 主な研究成果の発表（論文発表）

竹内繁樹、「量子計算と量子情報通信 - 何が可能になるのか - 」、電子情報通信学会誌 Vol. 84 No. 1(2001)17-25.

竹内繁樹、「光量子ビットを用いた量子計算機」、光学 Vol. 29 No. 12(2000)745-750.

竹内繁樹、「光子を用いた量子計算」、レーザー研究、第28巻第10号(2000)671-676.  
Shigeki Takeuchi, "Experimental demonstration of a three-qubit quantum

computation algorithm using a single photon and linear optics", Physical Review A, Vol. 62( 2000 )032301.

M. Ozawa, Entanglement measures and the Hilbert-Schmidt distance, Phys. Lett. A 268( 2000 )158-160.

M. Ozawa, Operational characterization of simultaneous measurements in quantum mechanics, Phys. Lett. A 275( 2000 ) 5-11.

M. Ozawa, Measurements of nondegenerate discrete observables, Phys. Rev. A 62( 2000 )062101( 1-13 )

M. Ozawa and H. Nishimura, Local transition functions of quantum Turing machines, Theoret. Informatics and Appl. 34( 2000 )379-402.

M. Ozawa, Operations, disturbance, and simultaneous measurability, Phys. Rev. A 63( 2001 )032109( 1-15 )