

「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 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

核スピンネットワークによる真の量子計算の実現とその多qubit化のために、初期化、量子演算、物質材料、量子計算理論、および、相補的な関係にある光量子コンピュータの研究を行った。

分子の核スピンで真の量子情報処理を実現するために、初期化理論の研究、初期化回路の実験、核スピン偏極による物理的初期化と量子演算を両立させるための分子結晶およびプローブの開発、固体での量子演算法の研究、多qubit量子回路の基本ゲートの研究、および、NMR実験におけるエンタングルメントの研究を行った。

核スピンの物理的初期化の基礎技術を確立し、それを量子コンピュータに適用するための拡張を行うとともに、NMR分光の飛躍的感度増強による基礎科学への貢献をめざして、偏極とその拡散機構の解明を行った。さらに、偏極した固体を溶解して溶液分子を偏極する研究に着手した。

結晶量子コンピュータ用材料の開発とその物性的基礎研究、及び結晶量子コンピュータ用NMR技術の開発を行い、初期化原理の開発として光ポンピング法によりInPにおいて数百倍の初期化率向上を達成した。また、良好な量子相関に関する研究を行い、InPにおけるInとPのJ結合を実験的に初めて明らかにした。

光量子コンピュータによる量子アルゴリズムの実験的検証を目指して、2光子-2光子状態間もつれ合いの識別を提案・実現し、2光子間制御ノットゲートの検証実験のための特殊なビームスプリッターの設計・作製、ビーム状パラメトリック蛍光対による2光子対光源の製作を行った。

核スピンネットワーク量子コンピュータ及び光量子コンピュータの実験を理論的に基礎づけることを目的として、量子計算量理論、量子オラクルと通信型量子計算、量子計算における保存性と不確定性原理、量子ビットの最適符号化の研究を行った。

## 2. 研究実施内容

### 分子量子コンピュータ研究グループ

#### a) 初期化理論・初期化回路実験

数え上げ符号による効率的な初期化アルゴリズムに用いられる大小判定の量子回路を量子フーリエ変換を用いて3-qubitの分子で実現し、初めてその動作を実証した。SchulmanとVaziraniが提案していた3-qubitのバイアス増幅回路に基づく初期化では、シャノン限界に到達し得ないことをシミュレーションによって示し、その原因を理論的に解析した。

#### b) 核スピン偏極と量子演算の融合

核スピンの高偏極は固体でしか実現しておらず、核スピンによる自在な量子計算は溶液でしか実現していない。15年度当初計画では、固体で偏極し、溶解または融解して液体で演算というシナリオも並立させていたが、その可能性は核スピン偏極基礎研究グループで追求することとし、本グループは研究資源を固体での偏極・演算の融合に集中することとした。核スピン偏極と演算を両立し得る分子の探索・選択、分子の結晶成長と分子結晶用のNMRプローブの開発、および固体での量子演算方法の研究を行った。

#### c) 多qubit量子回路構成法

(ABC)<sub>n</sub>型の1次元高分子で量子回路を組むための基本量子ゲートの構成方法を研究し、ライン選択的パルスを用いた具体的なゲート実現法とその問題点を明らかにした。

#### d) 核スピンのエンタングルメント

これまでのNMR実験にはエンタングルメントが無く、従って真の量子情報処理実験はできないと考えられてきた。一方、NMR実験では、エンタングルメントの有無に関わらず定性的には同じ実験結果が観測される。これらの矛盾をどう理解すべきか疑問が残っていた。そこで、Super dence codingを例として、量子性を判定するには一分子当りの信号を定量的に評価する必要があり、それによってエンタングルメントの有無と量子情報処理への役割に関する理論と実験の矛盾が解消できることを示した。また、核スピンの偏極率を高めることによって、エンタングルメントのあるNMR量子情報処理実験が可能であることを示した。さらに、量子コンピュータ理論研究グループと共同で、NMR実験でエンタングルメントの存在を検出する新しい方法を考案した。

### 核スピン偏極基礎研究グループ

#### a) 光励起三重項状態による核スピン偏極

核スピン初期化とNMR感度の飛躍的増大をめざし、光マイクロ波誘導核偏極の偏極機構と核偏極のための最適実験条件を究明する実験的理論的研究を行った。偏極度の磁場掃引幅依存性をペンタセンをドーピングしたナフタレンの単結晶

で詳細に調べた結果、電子スピンによるプロトンの交差分極は光励起三重項状態にあるペンタセン分子内で起ることが分かった。この交差分極機構および偏極したペンタセンのプロトンからナフタレン単結晶全体に偏極が拡散していく様子をシミュレーションにより再現することに成功した。この結果は今後より効率的な偏極法を探る上で役立つものと思われる。さらに、今年度の新しい試みとして、この技術により核偏極された単結晶試料を溶液に溶かし、溶媒中の溶質分子を核偏極させる試みの検討及び準備を行った。

#### 結晶量子コンピュータ研究グループ

##### a) 初期化原理開発

固体 NMR 量子計算機を実現させるためには、「初期化」技術の確立が不可欠である。従来の NMR 技術では初期化は不十分で、天文学的な改善が必要である。当班ではこれを解決する基盤的要素技術として半導体中の核スピンに超偏極を引き起こす「光ポンピング法」に注目し原理開発を行った。半導体用の光ポンピング NMR 装置を開発し、これにより、化合物半導体 InP において、数十%の初期化に成功した。

##### b) 良好な量子相関に関する研究

緩和時間よりも長い量子相関を維持できることが量子計算には不可欠である。核双極子相互作用などの量子相関に不利な相互作用よりも強い核間相互作用を探索する必要がある。そのような相互作用の候補として InP における In 核と P 核の間に働く間接相互作用 (J 結合と呼ばれる) が有力である。J 結合は最近接スピン間でしか働かないため量子計算には有利である。しかし、無機物において J 結合を調べた研究例は非常に少なく、測定方法は有機物におけるほど技術的に確立していない。この手法の確立を目指すと共に、InP における J 結合を実測し、この量子相関の量子計算機への応用可能性を検討した。本研究では、高速魔法角回転と交差分極技術を融合させた手法を用いて、InP における In-P 間の J 結合を実験的に初めて明らかにした。その結果、In-P 間では双極子相互作用よりも J 結合の方が大きいことが分かった。これらの成果から InP において初期化と J 結合の 2 条件が揃った。現状では、P-P 間の双極子相互作用が強いためそのままでは量子計算に使えないが、P-P 間の双極子相互作用を小さくするための工夫や、InP 以外の候補物質の探索などへつなげていきたい。

#### 光量子コンピュータ研究グループ

##### a) 2 光子 - 2 光子状態間もつれ合いの識別

H15年度は、「2 光子 - 2 光子状態間もつれ合いの識別」を提案、それを実現することに成功した (Phys. Rev. Lett. に掲載)。2 光子 - 2 光子状態間もつれ合いを、その発生を同定しながら検証したのは知る限り世界で初めてで

ある。

この研究では、2つの光子が時空間的に同一モードに存在するかどうかをもつれ合いを通じて検証している。このように2光子が同一モードに存在する状態は、光子を用いた量子計算においても量子位相ゲートで必然的に存在する。本研究成果は、そのようなゲートにおけるエラー要因を定量的に議論する枠組みを与える物である。

#### b) 2光子間制御ノットゲートの検証実験

我々の提案している2光子間制御ノットゲートについて、その検証実験を目指している。今年度は、制御ノットゲートデバイス用の特殊なビームスプリッターを設計・作製を行った。また、我々独自の技術である、ビーム状パラメトリック蛍光対を用い、実験に必要な2光子対光源の製作も行った。

### 量子コンピュータ理論研究グループ

#### a) 量子計算量理論の研究

これまでの研究によって、一様量子回路族と量子チューリング機械の有界な誤差確率を許すアルゴリズムにおける計算量的同等性を示したが、本研究において、更に有限生成の一様量子回路族と量子チューリング機械が誤差を許さないアルゴリズムにおいても計算量的に同等であることを西村治道氏と共同で証明した。

#### b) 量子オラクルと通信型量子計算の研究

ミニマルオラクル $M_f$ がゼロ誤りで一様量子回路族によって実現できれば $f$ および $f^{-1}$ が正確に一様量子回路族によって計算できることを示した。これは通常のオラクルがもち得ないと思われる性質であり、それゆえミニマルオラクルと通常のオラクルの違いを異なる面から示唆している。2001年にBuhrmanらは量子同時型通信と古典同時型通信には $x = y$ かどうかを判定する関数EQに指数的なギャップがあることを示した。西村治道氏との共同研究で3者間プロトコルにおいて3者があらかじめ好きなだけBellペアやGHZ状態を持つような状況について解析し、いくつかの関数に対してエンタングルメントを持つ量子同時型通信の通信計算量に対する下限を与えた。

#### c) 量子計算における保存性と不確定性原理の研究

これまでの成果として、スピンの成分で計算基底を表現するような量子計算実現のための現行の標準モデルでは、角運動量保存法則によって引き起こされる量子計算素子実現の精度に一定の量子限界が存在し、 $n$ ビット以下の補助量子ビットをもつようなユニタリ作用素で物理的に制御否定素子を実現する場合に、少なくとも $1/(4n^2)$ 以上の誤り確率が発生することが導かれ、この手法を応用することにより、ToffoliゲートやFredkinゲートなどにもこれらの誤り確率が存在することを明らかにした。本研究では、これらの手法をより抽

象化することにより、Hadamard ゲートにおける不可避な誤り確率を求めることに成功した。すなわち、角運動量保存法則から、平均光子数 $\langle N \rangle$ のコヒーレント状態の外場で制御されるHadamard ゲートは $1/(16\langle N \rangle)$ の不可避な誤り確率を持つことが得られた。更に、制御系が $n$ 量子ビットのフェルミ系の場合、少なくとも $1/(4n^2)$ 以上の誤り確率が発生することが導かれ、制御系が分離状態の場合には、誤り確率が $1/(4n)$ 以上になることが理論的に示された。

#### d) 量子ビットの最適符号化の研究

初期化と読みとりの容易さから、論理的1量子ビットを一つの物理的2準位系（スピン1/2系）で表現することが、現在の量子計算素子実現の標準的方法となっているが、これまでの研究により、このような標準的符号化法によると、量子計算素子実現には保存法則に由来する不可避な誤差が存在することが導かれる。そのような誤差を回避する方法として、DiVincenzo たちによって提案されたハイゼンベルク交換相互作用による符号法を河野泰人氏と共同で研究した。これまで、この方法で1量子ビットの回転ゲートが正確に生成されることは知られていたが、CNOTについては、未解決であった。本研究では、グレブナー基底を計算する方法により、DiVincenzo らによって提案された方法にほぼ近い方法でCNOTゲートが正確に生成されることを示した。これによって、角運動量保存則から導かれる誤差を回避する一つの量子ビット符号化法が確立された。

### 3. 研究実施体制

#### 分子量子コンピュータ研究グループ

- ① 研究分担グループ長：北川 勝浩（大阪大学大学院基礎工学研究科、教授）
- ② 研究項目：
  - a) 初期化理論・初期化回路実験
  - b) 核スピン偏極と量子演算の融合
  - c) 多qubit量子回路構成法
  - d) 核スピンのエンタングルメント

#### 核スピン偏極基礎研究グループ

- ① 研究分担グループ長：寺尾武彦（京都大学大学院理学研究科、教授）
- ② 研究項目：
  - a) 光励起三重項状態による核スピン偏極

#### 結晶量子コンピュータ研究グループ

- ① 研究分担グループ長：清水 禎（物質・材料研究機構 強磁場研究センター、サブグループリーダー）
- ② 研究項目：
  - a) 原理開発

b) 良好な量子相関に関する研究

光量子コンピュータ研究グループ

① 研究分担グループ長：竹内繁樹（北海道大学電子科学研究所、助教授）

② 研究項目：

a) 2光子-2光子状態間もつれ合いの識別

b) 2光子間制御ノットゲートの検証実験

量子コンピュータ理論研究グループ

① 研究分担グループ長：小澤正直（東北大学大学院情報科学研究科、教授）

② 研究項目：

a) 量子計算理論の研究

b) 量子オラクルと通信型量子計算の研究

c) 量子計算における保存性と不確定性原理の研究

d) 量子ビットの最適符号化の研究

4. 主な研究成果の発表（論文発表および特許出願）

(1) 論文発表

- M. Ozawa, Universally valid reformulation of the Heisenberg uncertainty principle on noise and disturbance in measurement, Phys. Rev. A 67, 042105 (2003)
- M. Ozawa, Quantum limits of measurement and computing induced by conservation laws and uncertainty relations, in Proceedings of the Sixth International Conference on Quantum Communication, Measurement and Computing, edited by J. H. Shapiro and O. Hirota, pp. 175--180 (Rinton Press, Princeton, 2003)
- Masahiro Kitagawa, Akira Kataoka, Takahiro Nishimura, Initialization and Scalability of NMR Quantum Computers, Proceedings of the Sixth International Conference on Quantum Communication, Measurement and Computing, edited by J. H. Shapiro and O. Hirota, pp. 275--280 (Rinton Press, Princeton, 2003)
- Kenjiro Hashi, Atsushi Goto, Ryo Miyabe, Tadashi Shimizu, Giyuu Kido, Shinobu Ohki, and Susumu Machida, Optically pumped NMR in semiconductor InP, Physica B: Condensed Matter, Volumes 329-333, Part 2, May 2003, Pages 1235-1236, Proceedings of the 23rd International Conference on Low Temperature Physics
- Atsushi Goto, Tadashi Shimizu, Kenjiro Hashi, Hideaki Kitazawa, Shinobu Ohki and Sachie Eguchi, A decoupling-free solid-state NMR quantum computer, Physica B: Condensed Matter, Volumes 329-333, Part 2, May 2003, Pages

1621-1622, Proceedings of the 23rd International Conference on Low Temperature Physics

- A. Goto, K. Hashi, T. Shimizu, R. Miyabe, S. Ohiki, G. Kido, S. Machida, Optical pumping system for a qubit initializer in solid-state NMR quantum computer, Jpn. J. Appl. Phys. Vol. 42 (2003) Part 1, No. 5A, pp.2864-2866
- M. Ozawa, Quantum state reduction and the repeatability hypothesis, Annals of the Japan Association for Philosophy of Science vol.11, 107-121 (2003)
- Masahiro Kitagawa, Experimental Quantum Computation with Molecules, in Developments in Language Theory, edited by Masami Ito and Masafumi Toyama, Lecture Notes in Computer Science 2450, 21--27 (Springer, Berlin, 2003)
- Atsushi Goto, Kenjiro Hashi, Tadashi Shimizu, Shinobu Ohki, Takahiro Iijima and Giyu Kido, "Development of a nuclear spin polarizer with the optical pumping method", Superlattices and Microstructures 32, 303-307 (2003)
- Kenjiro Hashi, Hideaki Kitazawa, Tadashi Shimizu, Atsushi Goto, Sachie Eguchi and Shinobu Ohki, "Possible 6-qubit NMR quantum computer device material; simulator of the NMR line width", Superlattices and Microstructures 32, 309-312 (2003)
- Tadashi Shimizu, Atsushi Goto, Kenjiro Hashi, Shinobu Ohki, "An NMR quantum computer of the semiconductor CdTe", Superlattices and Microstructures 32, 313-316 (2003)
- Hideaki Kitazawa, Kenjiro Hashi, Sachie Eguchi, Tadashi Shimizu, Atsushi Goto and Giyu Kido, "NMR study of YP and YPO4 as 2-qubits quantum computers, "Superlattices and Microstructures 32, 317-322 (2003)
- M. Ozawa, Ozawa replies [to Comment on "Conservative Quantum Computing" ], Phys. Rev. Lett. 91, 089802 (2003)
- Takahiro Iijima, Kenjiro Hashi, Atsushi Goto, Tadashi Shimizu and Shinobu Ohki, Homonuclear and Heteronuclear Indirect Spin-Spin Couplings in InP Studied by  $^{31}\text{P}$  Cross Polarization NMR Spectra under Magic-Angle Spinning, Jpn. J. Appl. Phys. Vol. 42 (2003) Part 2, No. 12A, L1411-L1413
- M. Ozawa, Physical content of Heisenberg's uncertainty relation: limitation and reformulation, Phys. Lett. A 318, 21-29 (2003)
- M. Ozawa, Uncertainty principle for quantum instruments and computing, International Journal of Quantum Information vol.1 No.4, 569-588 (2003)
- M. Ozawa, Uncertainty relations for joint measurements of noncommuting observables, Phys. Lett. A 320, 367-374 (2003)
- A. Goto, K. Hashi, T. Shimizu, R. Miyabe, X. Wen, S. Ohiki, S. Machida, T.

Iijima and G. Kido, Optical pumping NMR in the compensated semiconductor InP:Fe, Physical Review B 69, 075215 (2004)

○ Kenji Tsujino, Holger F. Hofmann, Shigeki Takeuchi, and Keiji Sasaki, Distinguishing Genuine Entangled Two-Photon-Polarization States from Independently Generated Pairs of Entangled Photons, Phys. Rev. Lett. 92, 153602 (2004)

○ M. Ozawa, Quantum measurements, instruments, and uncertainty principle, Interdisciplinary Information Sciences 10, 69-81 (2004)

(2) 特許出願

H15年度特許出願件数：0件（CREST研究期間累積件数：2件）