大阪大学 大学院基礎工学研究科 教授

北川 勝浩

「核スピンネットワーク 量子コンピュータ」

研究期間:平成11年11月1日~平成17年3月31日

1. 研究実施の概要	1
2. 研究構想	
2-1. チーム全体の基本構想	4
A. 提案当初の研究構想	4
B. 主要な変更とその後の展開	5
2-2. 分子量子コンピュータ研究グループ	6
2-3. 核スピン偏極基礎研究グループ	7
2-4.結晶量子コンピュータ研究グループ	8
2-5. 光量子コンピュータ研究グループ	9
2-6.量子コンピュータ理論研究グループ	11

目次

3. 研究成果

3-1. チーム全体の成果	13
3-2. 分子量子コンピュータ研究グループ	
(1)研究内容及び成果	14
A. 核スピンネットワーク量子コンピュータの概念的問題	15
B. 多 qubit 化(スケーラビリティ)の問題	18
C. 物理的初期化―光励起三重項状態を用いた動的核偏極	19
D. 論理的初期化—データ圧縮による初期化	21
E. まとめ	26
(2)研究成果の今後期待される効果	
A. NMR量子計算に対する再評価	26
B. 混合アンサンブル量子計算	27
C. 量子情報圧縮	27
3-3. 核スピン偏極基礎研究グループ	29
(1)研究内容及び成果	
A. プロトン偏極ビルドアップ効率の最適化	29
B. 重水素化試料中の残留希薄プロトンスピンの偏極	30
C. 偏極ビルドアップメカニズムの解明	31
D. 粉末試料における核スピン偏極	32
E. 炭素 13(¹³ C)核への偏極移動	33
F. 光の透過と三重項状態への光励起効率に関する理論の構築と実験的検証	33
(2)研究成果の今後期待される効果	
A. 応用:スピン拡散係数の実験的決定	33
B. 気体分子への偏極移動	34
C.液体分子への偏極移動	35
D. NMR 量子コンピュータへの応用をめざして	35

3-4. 結晶量子コンピュータ研究グループ

(1)研究内容及び成果
A. NMR 要素技術の開発:良好な量子相関の実現と初期化問題の解決
B. NMR 要素技術の開発: 強磁場 NMR による高感度・高分解能化
C. NMR 量子計算機の新タイプ提案41
D. 結晶量子コンピュータ材料探索(候補物質の探索、開発、設計)44
(2)研究成果の今後期待される効果53
3-5.光量子コンピュータ研究グループ
(1)研究内容及び成果55
A. 線形光学素子を用いた制御ノットゲート及び量子もつれ合いフィルタの
新規提案55
B. 線形光学素子を用いた制御ノットゲートの検証実験
C. 2光子状態間もつれ合いの検証方法を提案とその検証実験59
D. 量子テレポーテーションの忠実度の詳細な解析60
(2)研究成果の今後期待される効果
A. 線形光学素子を用いた量子回路(量子コンピュータ)の実現と応用61
B. 光子数状態のより深い理解と応用61
3-6. 量子コンピュータ理論研究グループ
(1)研究内容及び成果63
A. 計算量理論的アプローチ63
B. 量子力学的アプローチ64
(2)研究成果の今後期待される効果68
4. 研究実施体制
(1) 体制
(2) メンバー表
5.研究期間中の主な活動
(1)ワークショップ・シンポジウム等
(2)招聘した研究者等76
6. 主な研究成果物、発表等
(1)発表論文
(2) 口頭発表
①招待、口頭講演
②ポスター発表
(3)特許出願
(4) 新聞報道等101
7. 結び102

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)の間で量 子演算を行い、n個のqubitで2ⁿ通りの可能性を並列に処理し、量子干渉によって 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。その並列処理能力は qubit数nとともに指数的に増大するが、実験的には98年に小さな分子の核スピ ンを用いた2-qubitのNMR量子コンピュータが報告されたばかりで、理論的可能 性と実験的現実のギャップは非常に大きかった。

私達はこのギャップを埋めるために、高分子や結晶の規則的に配列して結合して いる大量の核スピンを用いて、多qubit化できないかと考えた。Qubitの数を増や す数量的スケーラビリティの確保には、

a) qubitが沢山存在すること

b) qubitが識別可能であること

c) qubit間の演算が可能であること

が必要であるが、高分子や結晶の核スピンは、a)を自然に満たしている。b)は核 磁気共鳴周波数によって識別するので、核種や化学シフトによる自然な周波数差を 利用するか、磁場勾配によって人工的に周波数差を作る必要がある。c)について は、J結合や双極子相互作用を用いて演算を行うので、物質によって決まる核スピ ンの結合ネットワークに依存する。

一方、室温のNMRでは、qubitの数とともに信号強度が減少し、10-qubit以 上の実験は困難とされていたので、何らかの方法で信号を増強するか検出感度を上 げる必要があった。そのために、私達は、

d) 核スピンを偏極すること

を考えた。また、核スピンは検出感度が極端に低く、射影測定ができないため、

e) 光子を用いて単一量子事象を観測すること

によって、その弱点を補おうと考えた。

このような基本構想の下に、分子量子コンピュータ研究グループ(大阪大学)、 結晶量子コンピュータ研究グループ(金属材料研究所(現NIMS)およびスタン フォード大学)、光量子コンピュータ研究グループ(北海道大学)の3グループで 11年11月に研究を開始した。その後、12年度から、d)の研究を強化するため に、核スピン偏極基礎研究グループ(京都大学)を加えた。また、

f) 量子コンピュータの実験を理論的に基礎づけること が必要と考えて、量子コンピュータ理論研究グループ(名古屋大学(現、東北大学) およびオックスフォード大学(現、ケンブリッジ大学))を加えた。

研究開始当初は、数量的スケーラビリティを確保するためのa)、b)、c)の研究に 主眼を置いていたが、NMR実験の量子性を否定する理論が相次いで発表されたた め、私達は研究の中心を、失われた量子性の回復に向けることにした。量子計算の 本質的スケーラビリティは、qubitの数nを増やしてもリソースが指数爆発しない ことであり、NMR実験の場合は、

g) 演算回数・実験回数が指数爆発しないこと

h) 分子の数が指数爆発しないこと

が、その要件となる。この問題を解決するには、d)の物理的初期化をしっかり行った上で、さらに部分系を初期化するために、

i) 初期状態の違いを効率的にその場で量子データ圧縮すること が必要であることが分かった。

d)の物理的初期化については、核スピン偏極基礎研究グループが、分子の光励起 三重項状態を用いた動的核偏極法の偏極増大メカニズムを解明して、三重項の電子 スピン偏極による上限である70%の高偏極を実現した。また、結晶量子コンピュ ータ研究グループが半導体結晶の光ポンピングによって原理的上限の7割に相当 する35%の高偏極を実現した。i)の論理的初期化については、分子量子コンピュ ータ研究グループが、予備圧縮による作業領域の確保と効率的な量子データ圧縮ア ルゴリズムを考案することによって解決した。これらの研究成果によって、分子で も結晶でも物理的初期化d)と論理的初期化i)によって、リソースの指数爆発を伴わ ない真の量子計算が可能であることが分かった。

私達はまだ物理的初期化d)と量子演算b)c)の融合を実現していないので、実際に d)とi)を連続して行うことは、今すぐにはできない。分子の場合には、実際に量子 計算を行う分子を偏極することと、高偏極が得られる固体で量子演算を行うことが 課題である。結晶の場合には、まず磁場勾配などによってb)を実現し、さらにデカ ップリングによってc)を実現することが課題である。これらの課題は、いずれも本 研究構想の一部として研究中であるが、まだ実現に至っていない。

数量的スケーラビリティa)b)c)については、あまり追求することができなかった。 このうちc)については、結晶量子コンピュータ研究グループが、結晶におけるJ結 合の測定法と双極子相互作用の汎用シミュレータを開発し、核スピンの結合ネット ワーク構造の決定が可能となった。また、b)については、1次元構造を集積化して 磁場勾配を印加するためのテンプレートとなり得る規則的なナノ・ポーラス構造を 作製した。また、NMRの21.6Tへの強磁場化によって、周波数間隔が拡大さ れ、b)の点で有利になった。a)を追求した場合に問題となるb)c)の困難を解決でき る可能性のある1次元高分子構造(Lloydモデル)について、量子回路実装の効率 化を分子量子コンピュータ研究グループが行った。当初の期待に反して、高分子や 結晶での量子計算実験には至らなかったが、多qubitの実験を行うには、まず初期 化の問題をクリアしなければならないので、止むを得ない面がある。

光子を用いた線形光学量子コンピュータは、e)の利点を持つものの、単一光子を 利用する限り光路数というリソースが指数的に爆発し、本質的スケーラビリティを 持たない。そこで、多光子とその相関をも取り扱えるように拡張することを目指し て研究を行い、以下の成果を得た。線形光学素子を用いた簡便なCNOTゲートの 提案とそのモノリシック素子化の実現。量子もつれ合いフィルタの提案。2光子状 態間もつれ合いの実験的検証。量子テレポーテーションの忠実度評価。当初目標と していたe)による量子誤り訂正の直接的な検証実験には至らなかったが、これらの 成果によって、複数光子を用いた本質的スケーラビリティのある光量子コンピュー タ実現への道を開いた。

量子コンピュータ理論研究グループは、計算量理論と量子力学の二つの異なるア プローチから、f)の量子コンピュータ実現の基礎となる理論を構築することを目標 とした。計算量理論的アプローチでは、量子計算実験で用いられる量子回路の計算 量理論を構築した。量子力学的アプローチでは、量子回路を構成する基本量子ゲー トの誤差理論を構築した。特に、誤差と擾乱に関する不確定性原理の正しい定式化 を導き、それを基礎にして、制御系と量子ビットの相互作用がみたす保存法則だけ から定まる不可避な誤差の存在とその定量的制約を明らかにした。

全体として、当初狙っていた数量的な多qubit化の実現には至らなかったが、本 質的スケーラビリティを回復して真の量子計算を可能にする初期化方法を見出し たことは、核スピン量子コンピュータの実現にとってより重要な意味を持つ大きな 前進であった。このユニークな貢献は、量子物理学と情報理論、理論と実験、研究 者間のもつれ合いによって初めて可能となったもので、このチームでなければおそ らく成し遂げられなかったであろう。

2. 研究構想

2-1 チーム全体の基本構想

A. 提案当初の研究構想

研究の背景

量子コンピュータは、論理値として0と1の重ね合わせを許す量子ビット(qub it)の間で量子演算を行い、n個のqubitで2ⁿ通りの可能性を並列に処理し、量子 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。その並 列処理能力はqubitの数とともに指数的に増大するので、現在のコンピュータでは 計算量の指数爆発のために歯がたたないような問題を、解けるのではないかと期待 されている。例えば、1994年にShorが発見した量子アルゴリズムを用いれば非常に 大きな数の素因数分解が可能となり、公開鍵暗号を破ることができる。しかし、実 際に使われている数百ビットの公開鍵暗号を破るには、その3倍程度の数のqubit が必要であり、さらにデコヒーレンス(量子位相の乱れ)などによるエラーを回避 するには、少なくともその数倍以上の冗長性を持たせて量子誤り訂正を行う必要が あると考えられている。

それに対し、実験的には分子の核スピンを使った2-quibitのNMR量子コンピ ュータが1998年にやっと誕生したばかりであり、しかも、この方法には10qubit程度に限界があるとされていた。このように、量子コンピュータの理論的可 能性と実験的現実の隔たりは非常に大きかった。そこで、私達はこの隔たりを埋め るために、高分子や結晶の規則的に配列して結合している大量の核スピンを用いて、 多qubit化ができないかと考えた。

2) 研究構想

分子や結晶の核スピンは、物質構造を反映したパーマネントな結合ネットワーク を形成しており、核スピン間の不要な結合をπパルスで実効的に消去(デカップリ ング)することによって、意図した量子演算を行なうことができる。この操作をプ ログラムに従って順次適用して行くと、量子回路が形成されて、量子コンピュータ として動作させることができる。しかし、量子回路の構成は、核スピンネットワー ク、すなわち、物質の構造に強く依存する。一般に、qubit数が増えてネットワー クが疎になると、直接演算できないqubitの割合が増えて効率が悪くなると考えら れる。その一方で、直接結合していない部分で別の演算を行う空間並列性の可能性 が生まれる。そこで、物質固有の核スピンネットワークを利用して量子回路を効率 的に形成する方法と、大規模な量子回路の形成に適した核スピンネットワークの構 造を研究し、そのような構造を持つ物質を開発する。開発した物質を用いて、NM Rによる量子回路形成や量子アルゴリズムの実験を行い、量子コンピュータとして の動作を実証する。さらに、この量子コンピュータを用いて、より大規模な量子コ ンピュータの実現に必要となる初期化や量子誤り訂正などの量子アルゴリズムの 実現方法を研究する。また、核スピンでは困難な単一量子事象の観測に基づく量子 アルゴリズムの実験的研究を、光子を用いて行う。この様に、量子回路形成法、物 質設計、物質開発、NMR実験、量子アルゴリズム開発を相互に密接に連携して進 めることによって、多qubit化を追求するという構想であった。

B. 主要な変更とその後の展開

私達の研究目的は、核スピン量子コンピュータの多qubit化、すなわち、スケー ラビリティを追求することである。そのため、当初の研究構想は、qubitの数を増 やすための量子回路構成法や物質設計・開発に主眼を置いていた。初期化について は、

① 室温のNMR実験ではqubitが10程度までしか増やせない という問題を克服し、多qubitの実験を行うための手段と位置づけていた。

NMR量子計算については、室温の実験であることや平均値測定しかできないこ となどから、その量子性への漠然とした疑問が当初から持たれていたが、私達の研 究提案と前後して、

② エンタングルメントが存在しない(1999年)

3 指数的高速化が存在しない(2001年)

という、量子性を否定する理論が相次いで発表された。量子計算の本質的スケーラ ビリティは、qubitが増えてもリソースが指数爆発しないことによるが、従来の方 法では室温に限らずこれが満足されず、いくら数量的スケーラビリティを追求して も、指数的高速性は実現しないことが分かった。そこで、リソースの指数爆発を伴 わない真の量子計算を実現することが本研究の新たな最重要課題となった。私達の 研究構想の中心は、量子回路構成法や物質設計による数量的スケーラビリティの追 求から、初期化問題の解決による本質的スケーラビリティの追求へと大きく変わる ことになる。

2-2 分子量子コンピュータ研究グループ

本グループは、分子の核スピンを用いた量子コンピュータの多 qubit 化を目的として 研究を行った。当初は、10-qubit 以上の高分子で量子演算を行うことを目標として、 量子回路構成法、分子探索、初期化の研究を行う構想であった。しかし、研究開始後、 初期化問題の本質的な重要性が認識されたため、これを解決して真の量子計算を実現す ることを新たな目標として、以下の研究を行った。

A. 量子演算・量子回路実験(溶液)

溶液NMRでは4-qubitの実験に成功し、5-qubitの実験中であるが、世界最高の7-qubitには及ばず、達成度は中程度である。

B. 初期化理論

物理的初期化と論理的初期化から成る枠組みで、真の量子計算を可能にする論 理的初期化の条件を明らかにした。その条件を満たす論理的初期化方法として、 予備圧縮による作業領域の確保と効率的な量子データ圧縮アルゴリズムを考案 した。真の量子計算を実現するための方法論と具体的なアルゴリズムを提示でき たので、達成度は極めて高い。

C. 論理的初期化実験

量子データ圧縮による初期化の予備的デモンストレーション実験を行った。さ らに、作業領域を削減する桁上げ不要の量子加算の実験的検証を行った。物理的 初期化と融合した本格的な実験がまだできないので、実験の達成度は中程度であ る。しかし、初期化理論への貢献度は大きい。

D. 物理的初期化実験

途中で、核スピン偏極基礎研究グループから光励起三重項状態を使った動的核 偏極法を技術移転し、光パルス延伸による三重項状態の励起効率改善と核スピン 偏極実験を行った。しかし、量子演算に使う分子の偏極は未達成であり、達成度 は中程度である。

E. 固体での量子演算

途中から、物理的初期化と演算の融合を固体で行うことに方針を変更し、固体 での量子演算の研究を開始したが、粉末での間接的な実験までしかできず、達成 度は低い。

F. 多 qubit 高分子量子回路

L1oyd型高分子モデルへの量子回路実装法を考案し、効率を2倍改善した。 また、ライン選択パルスよりも高速動作が可能なハードパルスによる動作を考案 した。しかし、入出力と初期化の実装の問題が残されており、具体的な分子の選 定や実験に至らなかったため、達成度は低い。

G. エンタングルメント理論 NMRによる Superdense coding の実験を理論的に検証し、エンタングルメン トが無くても多数の分子による古典的並列性によって実験が成功したように見 えること、信号強度が新たなエンタングルメント・ウィットネスとして定式化で きること(量子コンピュータ理論研究グループと共同)を見出した。NMR実験 におけるエンタングルメントの問題に決着をつけるという所期の目的は果たし たが、リソースとの定量的な関係に踏み込んでおらず、達成度は中程度である。

グループ全体としては、初期化問題を解決し、真の量子計算実現への道筋をつけた点 で達成度は高いが、溶液から固体への方針変更の影響もあって実験の達成度は中程度か らやや低め、数量的スケーラビリティは今後の課題として残された。

2-3 核スピン偏極基礎研究グループ

核磁気共鳴(NMR)には、核スピンの偏極が小さいために信号が微弱であるという 弱点がある。これまでに、NMR信号を飛躍的に増大させるために光励起三重項状態 の電子スピン偏極を動的核偏極(Dynamic Nuclear Polarization: DNP)により核ス ピンに移動させる試みがなされているが、この研究は極めて限られた系にしか適用 されていなかった。本グループは、様々な物質で核スピンの高偏極を実現すること で物理学、化学、生物学、量子情報科学など多岐にわたる分野で研究の新展開を促 すことを目的として、光励起三重項電子スピンを用いたDNPに関連する研究を行っ てきた。私達は、この目的を達成するために

- (a) 可能な限り高い核スピン偏極をめざす。
- (b) 核スピンの偏極が増大する現象を定量的に理解する。
- (c) 多様な核スピン系で偏極を増大させる。

という目標を掲げ、以下の具体的な課題に取り組んできた。

- A. プロトン偏極ビルドアップ効率の最適化
- B. 重水素化試料中の残留希薄プロトンスピンの偏極
- **C**. 偏極ビルドアップメカニズムの解明
- D. 粉末試料における核スピン偏極
- **E**. 炭素13への偏極移動
- F. 光の透過と三重項状態への光励起効率に関する理論の構築と実験的検証

上記AおよびBにおいて、核スピン偏極を達成可能な限界値にまで増大させること に成功したという点において、目標(a)の達成度は高い。また課題Cにおいて我々は 偏極増大メカニズムに関する基礎的な知見を得ることができた。一方で、この知見 に基づいて現象を定量的に説明する研究は現在なお進行中であるため、目標(b)は 現時点ではまだ部分的に達成されていない。目標(c)に関連して、課題DおよびEに おいて新たに2種のスピン系において核スピン偏極増大できたことは興味深い。し かし、研究開始時には多様な系において偏極増大を実現することを目指していたと いう点で、2例しか実現できていないという実情には満足しておらず、今後も適用 範囲の拡張を目指して研究を進めていく考えでいる。また、課題Fは偏極効率を高 めようとする試みの中で必然的に生じた新たなテーマであり、光励起三重項電子ス ピンを利用したDNP実験の技術的側面において重要な指針を与える仕事になっ たと考えている。

核スピン偏極の増大化は非常に広範な分野で望まれているために、私達は本プロ ジェクトの研究成果によって、量子情報科学に限らずに多岐の分野に恩恵をもたら すことを狙ってきた。また私達は、特定の応用分野に固執しないことで分野間の予 期せぬ関連性に出くわすチャンスを増やそうとしてきた。実際その結果、量子コン ピュータを含む、様々な応用への糸口を見出すことができたと考えている。

2-4 結晶量子コンピュータ研究グループ

本グループは、結晶あるいは固体およびその表面などの核スピンを用いた量子コ ンピュータを実現することを目標として、NMRの要素技術の課題を克服し、新規 NMR技術の開発を推進し、また同時に、適切な物質の探索・設計・提案・開発を行 った。

A. NMR要素技術の開発: 良好な量子相関の実現と初期化問題の解決

実用的な固体NMR量子計算機の実現のためには、「初期化」法の確立と制御性 の良い「量子相関」状態の実現が不可欠である。本グループではこれを解決す る基盤的要素技術として半導体中の核スピンの超偏極を可能にする「光ポンピ ング法」に着目し、そのためのシステム開発を行い、35%の偏極を達成した。 これは理論限界の7割に相当し、達成度は高い。

B. NMR要素技術の開発: 強磁場NMRによる高感度・高分解能化

「多ビット化」は「初期化」「量子相関」と共に固体NMR量子計算機の重要な 開発要素である。有力な解決策の一つとして強磁場化によるNMRの高感度化・ 高分解能化である。21.6T(水素核に対して920 MHz)の世界最高磁場を発生す ることができるNMR用超伝導磁石が物質・材料研究機構によって近年開発された。固体NMR量子コンピュータの実現に向け、NMRの高感度化・高分解能化をはかることを目的として、この超伝導磁石を用いた強磁場NMRの技術開発を行った。

C. NMR 量子計算機の新タイプ提案

固体NMR量子計算機の決定打がない状況では、まず数多くのモデルを提案し、 その実現性について検討を行うことが重要である。そこで、これまでの発表さ れていた提案とは概念的に異なる全く新しいモデルを提案し、検討を行った。

結晶量子コンピュータ材料探索(候補物質の探索、開発、設計)

D.

まず、本グループのメンバーである山口(スタンフォード大)が山本(スタ ンフォード大)と共に行ったCePの結晶を用いる先駆的な提案について、本グ ループの持つ高融点・高蒸気圧単結晶育成技術の経験を元に、原理的あるいは 技術的な問題点を検討した。また、NMR量子コンピュータに適した固体材料が 持つ必要条件としては、①大きい核磁気回転比、②天然存在比100%で核スピン 1/2を有する核種による構成、③大きな核スピン間のJ結合、等が要求される。 そこでまず、材料探索を助けるために、任意の結晶構造をもつ固体材料に対し て双極子幅をシミュレートできるソフトを開発した。さらに、量子演算に重要 なJ結合の大きさの評価法を確立するために、CP/MAS法のための装置を開発し、 実際の材料に適用した。以上の研究ツールを元に上記に条件に該当する材料を 探索し、量子計算機材料としての適性を検討した。

2-5 光量子コンピュータ研究グループ

光子を用いた量子コンピュータは、NMR量子コンピュータと比較して、単一の 量子ビットの状態を観測可能という特長を持つ。本プロジェクトを開始するにあた って、私達は「単一光子と線形光学素子を用いる方法」により、3量子ビットのド イチュジョサのアルゴリズムに成功していた。しかし、単一光子を利用する限り、 量子ビット数を増やすには経路を指数関数的に増大させなければならないという 本質的スケーラビリティの問題があった。

そこで、本プロジェクトでは、量子誤り訂正などの単一事象の検出が本質的な量 子アルゴリズムの直接的な検証実験を目指し、線形光学素子を利用した量子計算の 方法を、多光子とその相関をも取り扱えるように拡張することを目的とした。 以下に、年度順に具体的な研究項目と達成度等を記す。

- A. 光子数検出器(VLPC)の改良ならびにパラメトリック蛍光対源の立ち上げ 光子数検出器については、H10年度からその改良(動作安定性、ダーク カウント)に取り組み、H11年度では、最小のダークカウント(10⁴/s)を安 定的に得られることが確認できた。また、パラメトリック蛍光対源について は、ビーム状光子対発生方法を発案(0pt. Lett.掲載)するとともに、H11 年度にフェムト秒レーザを導入しH12年度にはフェムト秒レーザー励起 光子対源の評価を行った。
- B. 量子テレポーテーション忠実度の研究

フェムト秒レーザー励起光子対源からは、複数の光子対が発生する場合が ある。その量子テレポーテーション操作に与える影響を研究した。光子対が 混合状態にある場合についても取り扱い、90%程度の明暗比の光源を用い た場合においても十分に、量子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。

C. 線形光学素子を用いた量子位相ゲート等の理論研究

当初、私達は、もつれ合い光子対のリソースを用いそれを量子テレポーテ ーションプロトコルと組み合わせることでゲート操作をおこなうことを提 案していた。(99年にNatureに掲載された、Gottesman & Chuangらとは独立)。 しかし、2001年にKnill, Laflamme & Milburnらにより、線形光学素子と光 子源、光子数検出器のみを用い、もつれ合いのリソースを用いないゲート操 作が提案された。私達はこの提案の仕組みを研究した結果、独自に、反射率 1/3を持つ単一の半透鏡が2光子間量子位相ゲートとして動作することを発 見(Phys. Rev. A 掲載)、さらに同様の考え方から、100%の確率でもつれ合 った事を知ることが可能な量子フィルター(Phys. Rev. Lett. 掲載)を発案 した。

D. 線形光学素子による制御ノットゲートの実現

提案した量子位相ゲートの実現に取り組んだ。新たに高い確率で光子対を 発生する光子対源(P(1)~0.55)を作成、それを用いて実験を行った結果、最 近制御ノット操作の実現に成功した(投稿準備中)。実は、同様の仕組みは 同時期にクィーンズランド大学によって独立に提案され、彼らは2004年に制 御ノットの成功を報告している。しかし、彼らの方法に比べて私達の光学回 路は簡便でかつ安定性が高いため、今後の拡張性に優れているという利点が ある。 E. 2光子状態もつれ合いの検証実験に成功

「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。

以上の研究の流れの中で、前半取り組みつつあった「完全な量子テレポーテーションの検証実験」については、Cに述べたようにそれを不要とする新たな方法が出現、私達も発案したこと、ならびにほぼ同じ実験をウィーン大学のグループが遂行中で合ったことから計画を変更し、Eの研究につなげた物である。

2-6 量子コンピュータ理論研究グループ

A. 計算量理論的アプローチ

計算量理論的アプローチでは、主に量子回路の量子計算量理論を構築することを 目標とし、従来の量子Turing機械に基づく計算量の概念を量子回路について展開す るために、多項式サイズー様量子回路族の理論を構築する計画を立て、主に西村が 担当した。西村は平成14年3月まで小澤研究室所属の名古屋大学大学院生として、 平成14年4月から平成15年9月までオックスフォード大学研究員として研究 を分担した。多項式サイズー様量子回路族は量子フーリエ変換やショアのアルゴリ ズムを含む量子アルゴリズムのクラスであり、多項式時間量子Turing機械と有界誤 差を許して計算量的に同等であることを示した。しかし、一方で量子フーリエ変換 などを誤差なしに多項式時間量子Turing機械で模倣することはできないことをも 示して、両者の関係を明らかにした。この結果から、多項式時間量子Turing機械と 完全に同等な量子回路のクラスを明らかにする必要が生じたため、多項式サイズ有 限生成一様量子回路族の概念をあらたに導入し、このクラスが多項式時間量子Tur ing機械と誤差なしで互いに模倣できることを示し、両者の完全な同等性を証明し た。このことにより、量子Turing機械に基づく量子計算量理論を実験のモデルであ る量子回路に対して完全に展開することができるようになった。

B. 量子力学的アプローチ

量子力学的アプローチでは、量子計算素子の精度の量子限界の理論を構築するこ とを目標とし、測定の理論と量子回路の物理的実現の理論を結びつけることにより、 従来、Wigner-Araki-Yanase の定理として知られてきた保存則のもとでの測定精 度の量子限界を定量化し、CNOT ゲートなどの測定相互作用に対応する量子計算 素子の精度の限界を導く計画を立て、中間評価までにその成果を得た。その後その ときに展開した数学的手法を利用して、1927年に Heisenberg によって提唱され た測定精度と擾乱の関係としての不確定性原理の正しい定式化(普遍的不確定性原 理)を導くことに成功した。従来の Heisenberg の不確定性原理から Wigner-Ar aki-Yanse の定理を導くことはできないとされてきたが、このことにより、新しい 不確定性原理から論理的に導く可能性が生まれ、あらたな研究目標となった。この 課題は首尾よく解決することができ、普遍的不確定性原理の特別な場合である、無 擾乱測定に関する不確定性原理から、保存則のもとでの測定精度の限界を示すWig ner-Araki-Yanase の定理の定量化不等式を導き、この不等式から、Hadamard ゲートなどの量子計算素子の精度の量子限界を直接導くことができるようになっ た。量子計算のような新しい分野の研究でこのような古典的な定説を覆す根本的な 関係式を発見できたことは望外の成果であり、初期の計画では思いもかけない見事 な理論展開が達成された。

3. 研究成果

3-1 チーム全体の成果

分子量子コンピュータ研究グループが、核スピン量子コンピュータの本質的スケーラビリ ティを握る初期化問題を理論的に解明し、物理的初期化と論理的初期化から成る戦略を 立案した。

核スピン偏極基礎研究グループが光励起三重項状態を用いた動的核偏極法の偏極増 大機構を解明し、三重項電子スピンとほぼ同程度の70%という究極的な核スピン偏極を 達成し、分子量子コンピュータの物理的初期化の可能性を開いた。この成果は、J. Phys. Soc. Japan (IF=1.903)に報告されている。また、人事交流によって核スピン偏極基礎研 究グループから分子量子コンピュータ研究グループに光励起三重項状態を用いた動的核 偏極法を技術移転した。それを受けて、分子量子コンピュータ研究グループで、光パルス 延伸による三重項状態の励起効率の増大を確認し、J. Magn. Reson. (IF=2.084)に報告 した。

結晶量子コンピュータ研究グループは、半導体結晶で光ポンピング法によって35%という理論限界の7割に到達する高偏極を達成し、結晶量子コンピュータの物理的初期化の可能性を開いた。この成果はPhys. Rev. B (IF=2.962)に報告されている。

分子量子コンピュータ研究グループは、物理的初期化の後に行う論理的初期化のため のアルゴリズムを研究し、非常に効率的な量子データ圧縮アルゴリズムとそれを初期化に 利用するための予備圧縮の手法を考案した。データ圧縮アルゴリズムについては、IEEE Trans. Information Theory (IF=2.03)に論文投稿するとともに、特許出願を予定してい る。

これらの連携によって、分子および結晶を用いた核スピン量子コンピュータの初期化問題を解決する道筋をつけることができた。核スピン量子コンピュータの初期化問題に正面から取り組み、物理的初期化、論理的初期化の両面を総合的に研究しているところは他にはない。

光量子コンピュータ研究グループ、量子コンピュータ理論研究グループとの連携 は、核スピンに限らず量子コンピュータ全体の研究を推進するための相補的・補完 的なものを意図しており、上記の初期化問題のように直接的な効果を期待したもの ではなかった。それでも、量子コンピュータ理論研究グループが定式化してPhys. Rev. Lett. (IF=7.035) に発表した保存則による量子ゲートの不可避な誤り確率の 理論から、核スピンをラジオ波で制御する量子ゲートでは、ラジオ波の光子数が大 きいため、不可避な誤り確率は十分小さいことが確認されたことは、重要な知見で あった。また、分子量子コンピュータ研究グループと量子コンピュータ理論研究グ ループとの共同研究によって、NMR実験におけるエンタングルメント・ウィット ネスについて、新たな知見が得られた。しかし、連携の主要な効果は、議論による 量子コンピュータに関する問題意識の共有であったと考えている。例えば、核スピ ン量子コンピュータと光量子コンピュータの間で、本質的スケーラビリティの問題 を共有できたことは、お互いの研究を発展させる上で大いに効果があった。

3-2 分子量子コンピュータ研究グループ

(1)研究内容及び成果

本グループは、研究チームの中核として、核スピンネットワーク量子コンピュー タに共通する基本的な問題の解決と、分子の核スピンを用いた真の量子コンピュー タの実現を目指して研究を行った。

分子の核スピンをqubitとする、いわゆるNMR量子コンピュータは、1996 年にMITの2つのグループ(Cory, Fahmy, Havel [CFH97]とGershenfeld, Chua ng, Lloyd [GC97])から独立に提案された。図3.2.1に示すように核スピンは静磁 場中で歳差運動を行い、そのデコヒーレンス時間が溶液では秒程度と比較的長いた め、共鳴磁場による1-qubitの回転やJ結合を使った2-qubit間の制御演算が、 核磁気共鳴(NMR)技術によって可能であり、ユニバーサルな量子ゲートを組み 合わせて量子回路を組むことが比較的自由自在に行える。その一方で、「qubitの 数が10程度までしか増やせないのではないか?」というスケーラビリティへの不 安や、「本当に量子計算なのか?」という量子性に対する疑念が、提案当初から存 在していた。私達も例外ではなく、「この方法はユニタリーが自由自在に行えて魅 力的だが、限りなく古典系に近く、何か怪しい」と感じていたが、qubitを増やす 可能性を追求することによって、その本質を明らかにできると考えて、本研究構想 の提案に至った。



A. 核スピンネットワーク量子コンピュータの概念的問題

核スピンをqubitとし、NMR技術によってそれらを制御する、いわゆるNMR 量子コンピュータに関して、ちょうど私達の研究開始と前後して、その量子性をめ ぐる深刻な批判が行われた。それらの批判は、直接的には室温における核スピンの 熱平衡状態の乱雑さに関するものであったが、その背後には核スピン特有の測定の 問題が潜んでおり、どうすれば解決可能か不明であった。核スピンは射影測定が不 可能で、10¹⁴個以上程度の多数の分子(=量子コンピュータ)に対するアンサ ンブル和測定しかできない。そのため、通常考えられている量子コンピュータと大 きく異なる点がある。まず、測定によって量子コンピュータの状態を収縮させる単 純な初期化が使えない。また、射影測定を使った量子誤り訂正も使えない。そのた め、これらに代わる初期化や量子誤り訂正の方法を考える必要があった。

1) NMR実験におけるエンタングルメントの有無

数-qubitの小さな分子を使った室温溶液NMR実験は、核スピン間の適度なJ結 合によって、ユニタリーな量子演算を比較的自由自在に行うことができる。そのた め、量子テレポーテーション[NKL98]、Superdense coding、Shorの量子アルゴリズ ムによる素因数分解[VSB+01]など、エンタングルメントが必要と考えられるさまざ まな量子情報・量子計算の実験が行われている。一方、室温溶液の熱平衡状態では、 これらの分子のqubit間にはエンタングルメントが存在し得ないことが、数学的に 証明されている[BCJ+99]。この実験と理論の矛盾を解消し、決着をつけるために、 大学院生のRahimi等が、NMRによるSuperdense coding実験(図3.2.2)の理論的 検証を行った。その際、室温の実験で通常使われる擬似初期化は、概念的な問題と リソースの問題(次節参照)を避けるため、使用しないように注意した。その結果、 以下のことが分かった。



図3.2.2 NMRによるSuperdense codingの実験概念図

 エンタングルメントが存在しない領域でも、1-qubitに符号化された2-bitの古 典情報を正しく反映した極性の信号が観測されるが、信号強度は核スピンの初 期偏極に比例する。

- ② 個々の分子での2-bit伝達の成功確率は、室温ではほぼ25%であり、1-bitの 古典通信と1-bitのコイン投げが当たる確率で決まる古典上限50%よりも低 く、完全に古典的な領域にある。しかし、10¹⁴個以上の膨大な分子が並列に 働くことにより、全体としての成功確率は100%となっている。従って、こ の成功は、量子性(エンタングルメント)によるものではなく、古典的な並列 性によるものである。(逆に、このように単純な古典並列性と区別がつかない 量子効果は、NMRのように大きな古典並列性を持つ系での実験に適さない。)
- ③ エンタングルメントが存在するのは、初期偏極率 δ 、 ϵ が(1+ δ)(1+ ϵ)>2の 領域で、同核の場合は $\delta = \epsilon > 2^{1/2} - 1 = 0$. 4142...の領域である。 これは、②の1分子当たりの成功確率が古典上限50%を越す領域と一致する。
- ④ 信号強度を定量的に測定できれば、エンタングルメントの有無を判定することができ、それは新しいタイプのエンタングルメント・ウィットネスとして定式化することができる。

[R. Rahimi, K. Takeda, M. Ozawa, M. Kitagawa, quant-ph/0405175, 論文投稿 準備中]

この研究から、エンタングルメントを達成するには、初期偏極率を飛躍的に高める 必要があることが確認された。

2) NMR実験における指数的高速性の有無

NMR量子計算に対するさらに厳しい批判として、指数的高速化が達成できない という指摘がある。[LP01] これは、まさにNMR量子計算は量子計算ではないと いう深刻な指摘である。

室温でのNMR実験では、核スピンのゼーマンエネルギーが熱エネルギーよりは るかに小さいため、n-qubitの同核分子の熱平衡状態は、 | 00…0>から | 11 …1>まで2ⁿ個の全ての状態がほぼ等確率で混合した状態である。この様な乱雑 な初期状態を使った実験から純粋状態に対応する結果を得るために、擬似初期化と 呼ばれる巧妙な実験手法が考案され用いられてきた。[GC97, CFH97, KCL98] これは、 2ⁿ個の基底のうち1つの状態(例えば | 00…0>)からの信号だけを残して、 他の2ⁿ-1個の基底からの信号を何らかの方法で消去するものである。最もよく 使われている時間平均法(総当り平均法)[KCL98]では、残したい状態(例えば | 00…0>)以外の2ⁿ-1個の基底を巡回置換するユニタリー変換を熱平衡状態 に施して、異なる初期状態の実験を2ⁿ-1回行い、それらの実験結果を足し合わ せることによって行っている。この擬似初期化にはnに対して指数的な手間がかか るので、実行した量子アルゴリズムが古典より指数的に高速なものであったとして も、擬似初期化の手間と相殺されてしまい、指数高速性を実現することはできない。 NMRを使って行われたShorのアルゴリズムによる15=5x3の素因数分解の実験 [VSB+01]は、時間平均法を使っており、まさにこの例になっている。擬似初期化に は、時間平均法以外にも、空間平均法[CFH97]、論理ラベル法[GC97]などがあるが、 後で論理的初期化の項で明らかにするように、その方法や温度に依らずリソースの 指数的発散を避けるのは原理的に不可能であり、真の量子計算を実現することはで

きない。

リソースの指数爆発を伴わない真の量子計算にはエンタングルメントが不可欠 と考えられるが、エンタングルメントそのものは、低温で擬似初期化を行うことに よって生成できる場合もあるので、指数的高速化よりも緩やかな条件で達成できる。 ただし、擬似初期化のように指数的なリソースを使って達成したエンタングルメン トに、古典に対する何らかの優位性が残っているかどうかはまた別の問題であり、 大いに疑問がある。そのため、前項のエンタングルメントの問題では、擬似初期化 の使用を避けた。いずれにしても、私達は量子を使うことによって古典に対する明 確な優位性を期待しているので、最も厳しい目標であるリソースの指数爆発を伴わ ない真の量子計算の実現を目指して、従来の擬似初期化とは本質的に異なる新たな 初期化法を研究することとした。

3) NMRによる量子誤り訂正の可否

一般に、量子コンピュータ実現の最大の障害はデコヒーレンスであると考えられ ており、それを克服するために量子誤り訂正が考案された。量子誤り訂正は、誤り から守りたい量子状態は観測せずに、生じた誤りの種類(シンドローム)だけを観 測し、その誤りの逆操作を量子状態に施すことによって訂正を行うものである。量 子誤り訂正は、1-qubitを守るのに最低でも5-qubit必要で、未だ物理的に実現さ れていないが、量子コンピュータの実現に必須の基本技術と考えられている。しか し、核スピンの場合には、射影測定ができないので、シンドロームを確定すること ができず、量子誤り訂正が使えないという問題があった。この問題に対しては、シ ンドロームを観測せずに、そのまま制御qubitとして量子ゲートに入力し、誤りを 訂正するという解決策が、NMR量子コンピュータの提案当初からとりざたされて いた。これまでも、NMRを使った量子誤り訂正の実験は報告されているが、実際 には誤りを訂正しておらず、単にシンドロームを平均値測定しただけで、シンドロ ーム検出回路の動作確認に留まっていた。

そこで、私達は、観測を用いない量子誤り訂正[NC]の検証を目指して実験を行っている。研究終了時点では未だ成功していないが、この実験が成功すれば、核スピンでも量子誤り訂正が可能であることが実証され、量子誤り訂正の問題は補助qubitの初期化の問題に還元されると考えている。

B. 多 qubit 化 (スケーラビリティ)の問題

量子コンピュータの指数的高速性が実際的な意味を持つのは、qubit の数nが大きい場合で あるので、私達の研究構想は多 qubit 化可能なスケーラビリティのあるものを目指してい た。しかし、研究開始後、スケーラビリティには、qubit 数を物理的に増やせるという意味 の数量的スケーラビリティと、qubit 数とともに資源が指数爆発しないという意味の本質的 スケーラビリティという、性格の異なる複数の概念が含まれることが分かった。

1) 数量的スケーラビリティ: qubit 数を物理的に増やすことが可能

これは、qubit が沢山存在し、それらが識別可能、かつ、相互に演算可能であることである。 沢山の qubit を確保するために、高分子や結晶の核スピンを qubit として用いることを想 定していた。NMRの場合は共鳴周波数でしか qubit を識別できないので、異核、化学シ フト、あるいは磁場勾配によって、qubit 毎に異なる共鳴周波数を持たせる非縮退型がまず 考えられる。Qubit 間の演算に使える核スピン間の相互作用として、溶液ではJ結合、固体 ではJ結合と双極子相互作用がある。演算を行いたい qubit 間の相互作用だけを残して、 他の相互作用をデカップルすることによって、量子回路を組むことができる。

核スピンを沢山含む分子や結晶はいくらでもあるが、qubitを増やす際には次の2点が問題となる。

qubit に割り当てる周波数が枯渇し、周波数間隔が減少する

核スピン間の結合が疎になり、直接演算できない qubit の組が増える

この問題を解決する方法として、Lloydが1993年に提案した(ABC)ⁿ型の一方 向性周期構造[Lloyd93]がある。このモデルは、隣接する qubit 間にしか相互作用がない非 常に疎な1次元のネットワークであり、②のひとつの極限となっている。Qubit の種類はA, B, Cの3つしかなく、周波数が縮退しているので、共鳴周波数だけで qubit を識別する ことはできない。そこで、qubit に冗長性を持たせて、例えばCは演算を行うユニットを指 定する制御に用いることで、周期構造上の特定のAB間で演算を行うことを可能にする。 このモデルに関しては、Lloydの提案以降ほとんど発展していなかったが、私達は次 の研究を行った。

Lloydモデルへの量子回路実装の効率化:河野(NTT)、山下(奈良先端大)と北川の共同研究により、Lloydの方法の2倍に高速化できる方法を提案した。また、ユニットの大きさ(ABCの3が最小で、一般に3以上)と量子回路の実装効率との関係を明らかにした。[KYK05: Y. Kawano, S. Yamashita, M. Kitagawa, Phys. Rev. A, to be published]

LloydモデルのNMRによる実装方法の考案:大学院生の長嶋がLloydモデルを NMRで実現する方法を研究し、Lloydの提案したライン選択パルスを用いる方法よ りも高速なパルスシーケンスを考案した。[K. Nagashima, M. Kitagawa, 論文投稿準備中] Lloydモデルを実験に移すには、最低でも12-qubit程度は必要であるが、分子の選 択の問題とともに、データの入出力、初期化などまだ理論的に解明すべき課題がいくつか 残されている。 2) 本質的スケーラビリティ: qubit 数とともに資源が指数爆発しない

ここでの資源とは計算資源である演算回数と、物理資源である分子の個数である。Qub itの数nを増やしたときに、これらがいずれも指数爆発を起こさないことが、本質的ス ケーラビリティである。逆に、これらのいずれかが指数爆発すれば、古典計算に対する優 位性が消失するので、もはや量子計算とは呼べなくなってしまい、いくら沢山 qubit があ っても意味を成さない。従って、本質的スケーラビリティは、数量的スケーラビリティよ りも優先する。前節の指数的高速性の項で述べたように、従来使われてきた擬似初期化は、 本質的スケーラビリティを満たさないので、核スピン量子コンピュータでは、初期化の問 題を解決することが、スケーラビリティの最重要課題ということになる。

C. 物理的初期化-光励起三重項状態を用いた動的核偏極

1) 物理的初期化の必要性

量子計算の高速性の本質は、その成功確率の高さであり、それは初期状態に依存 する。室温における熱平衡状態の核スピンは、高分解NMR実験に使われる11~ 20T程度の高磁場でも、偏極率が $\delta \sim 10^{-5}$ と非常に小さく、エントロピーが H~1で、最大混合状態に近い非常に乱雑な状態である。これは、n-qubitの同核 分子では、図3.2.3(a)に示すような2ⁿ個の計算基底のポピュレーションがほぼ等 しい混合で、これら全ての状態からの量子干渉がほぼ相殺して、成功確率の増加に 必須の干渉が見えなくなっている状態である。

干渉を取り戻して成功確率を高めるには、初期状態を純粋状態に近づける必要が あり、それには何らかの方法で偏極率を高める必要がある。それは、単純に温度を 下げることによっても可能ではあるが、偏極率を数十%まで高めるには温度をmK まで下げる必要があり、NMR実験との両立が技術的に困難になってくる。そこで、 低温に頼らずに数十%の高偏極を得られる可能性のある方法として、図3.2.3(b) に示す光励起三重項状態を用いた動的核偏極法[ITS+00]に注目し、既にNMRの高 感度化のためにその研究に着手していた京都大学大学院理学研究科の寺尾武彦教 授のグループに基礎研究を依頼した。その研究の詳細は、同グループの章で報告さ れている。私達のグループは、その研究成果のうち分子量子コンピュータの物理的 初期化に応用可能な単結晶の高偏極化技術を、人事交流によって技術移転し、以下 の研究を行った。



図3.2.3 光三重項状態を用いた動的核偏極法による物理的初期化

2) 光パルス延伸による三重項励起の効率化

研究開始時点(1999年末)には、理想的なパルス幅(~µs)を持つ光源が 既に市販品としては入手不可能となっていたため、それよりもずっと短いパルス幅 (~ns)の光源(Nd:YAGレーザの3倍波で励起した光パラメトリック発振 器)を用いざるを得なかった。そのため、図3.2.4(a)に示すような光多重ディレイ ラインによって実効的にパルス幅を延伸して(図3.2.4(b))励起効率を改善する研 究を行い、大学院生の山村等がpentaceneを0.05 mol%ドープした*p*-terphenyl単結晶 のゼロ磁場ESR強度(図3.2.4(c))を測定した実験から、以下の結果を得た。

- 励起光の総エネルギーが同じでも、光多重ディレイラインで光パルスを分割して実効的なパルス幅を長くした方が、三重項状態への励起効率は高くなる。
- ② 複数のサンプル厚みについての実験から、三重項状態に励起される分子の割合は、実効的なパルス長が長いほど大きくなる。

[TYKK05: K. Takeda, T. Yamamura, A. Kagawa, M. Kitagawa, J. Magn. Reson. (to be published)]



3) 物理的初期化と量子演算の融合

研究開始当初は、既に実績のある溶液NMRでの量子演算の容易性を活かすため に、溶液分子の核スピン偏極を構想していたが、結晶のように数十%の高偏極を溶 液で実現する見込みが立たなかったので、偏極と演算をどちらも固体で行うことに 方針を変更した。固体では、核スピン間の双極子相互作用が支配的となるので、そ れを用いた量子演算の研究を行った。

 マジック角回転(MAS)による全消去と選択的リカップリングによる2-qubi t演算(実験):大学院生 烏頭尾

② フリップフロップハミルトニアンによる制御回転(理論):大学院生 犬飼
 ③ 固体演算用プローブなどハードウェアの開発:大学院生 山中、田邊

さらに、物理的初期化と量子演算を融合するには、量子演算に用いる分子を偏極す る必要がある。(偏極基礎研究グループの章を参照)

これらは、いずれも未だ研究途上にあり、物理的初期化と量子演算の融合の実現は 今後の最重要課題のひとつである。

D. 論理的初期化-データ圧縮による初期化

物理的初期化によって室温の熱平衡状態よりもはるかに低エントロピーの核ス ピンが得られても、まだ純粋状態からはほど遠く、量子計算の初期状態としては不 十分である。例えば、偏極率 $\delta = 0.7$ では、| 0 > 0確率はp = 0.85、| 1 > 0確 率はq = 0.15、エントロピーはH=0.6であるが、n = 8 qubitの分子では| 1 > 0q ubitが平均してn q = 1.2個存在することになる。そのため、図3.2.3(c)に示すよ うに、| 1 > 0qubitがどこにあるかによって、8 > 0異なる初期状態の分子が等 確率で(ほぼ同数ずつ)存在する。室温では図3.2.3(a)のように $2^{n} = 2^{8}$ 個の状 態がほぼ等確率であったことから考えると、高確率状態の数ははるかに少なくなっている。しかし、この状態から量子計算を行っても、8つの異なる計算結果が混ざ り合って、答えを得ることができない。そこで、このような混合状態から純粋状態 の量子計算に対応する結果を得るために、さらなる初期化が必要となる。

1) 部分集合擬似初期化と部分系初期化

ここで、状態の数が減ったからといって、室温で使われているのと同様の擬似初 期化を用いると、やはり指数的リソースを使ってしまうことになる。典型状態の数 は、2^{nH}個程度あるので、その中の1つの状態の分子からの信号だけを抽出する と、いかなる方法を使おうとも、信号は2^{nH}に反比例して小さくなり、それを補 うために分子の総数か実験回数を2^{nH}に比例して増やす必要があるからである。 従って、図3.2.5(a)のように、部分集合からの信号を抽出する方法は、真の量子計 算に結びつかない。

一方、状態の数は同じ2^{nH}個でも、図3.2.5(b)のように、それらの部分系が共通の状態にあれば、その部分系だけを量子計算に用いることで、純粋状態に対応する結果を得ることができる。この場合、ほぼ全ての分子が同じ結果を出すので、リソースの指数爆発は起こらない。それでは、図3.2.5(b)のような部分系初期化はどのようにすれば実現するのであろうか。



図3.2.5 低エントロピー状態の初期化: (a) 典型状態と部分集合擬似初期化 (赤枠)、(b) 圧縮状態と部分系初期化(赤枠)

私達は、部分集合擬似初期化の一種である論理ラベル法[GC97]を、任意の温度に 一般化する過程で、典型状態を信号を出さない背景状態として使う論理ラベル法の 裏返しとして、典型状態が信号状態となるような初期化方法を着想した。図3.2.5 (a)のような典型状態が共通の信号を出すためには、図3.2.5(b)のような状態に変 換すれば良い。この変換はデータ圧縮に他ならず、結果的にSchulmanとVazirani が1998年に提案したデータ圧縮による初期化[SV99]の再発見になった。[KKN0 2: M. Kitagawa, A. Kataoka, T. Nishimura, QCMC'02で発表]

ところが、彼らの初期化アルゴリズム[SV99]を数値計算によって詳細に検証した

結果、彼らの主張とは異なり理想的なデータ圧縮限界であるシャノン限界(量子で はフォンノイマン限界)に漸近しないことが分かった。[SK05: A. SaiToh, M. Ki tagawa, Phys. Rev. Aに発表] そのため、初期化のためのデータ圧縮アルゴリズ ムが重要な研究テーマとして残された。

2) 部分系初期化のためのデータ圧縮アルゴリズムに求められる条件

初期化のためのデータ圧縮アルゴリズムは、以下の条件を満足する必要がある。

- ① ユニタリーであること
- ② 計算量論的に効率的であること:計算量がnの多項式以下
- ③ 初期化された作業領域を必要としないこと:その場(in-place)圧縮
- ④ 情報理論的に効率的であること:シャノン(フォンノイマン)限界に漸近
- ⑤ 系統的な量子回路設計が可能であること

このうち、[SV99]は、④⑤を満足していない。①は、核スピンが射影測定できな いことからの要請であるが、無歪のデータ圧縮は基本的にn-qubitの計算基底間の 変換なので、①を満たしながら実現することに問題はない。②は、初期化で指数リ ソースを使わないためであり、真の量子計算の必要条件である。例えば、図3.2.5 (a)から(b)の変換を2^{nH}個の状態を個別にマップする馬鹿正直な方法によって実 現することもできるが、それは2^{nH}の多項式程度の計算量となり、効率的ではな い。③は、初期化のためのアルゴリズムなので、既に初期化された作業領域がある ことを前提にはできないということである。②と④の意味で効率的なデータ圧縮ア ルゴリズムは沢山存在するが、いずれも初期化された作業領域を必要とし、③を満 たさない。その意味で、これらの条件の中で③が最難関の未踏領域ということにな る。

3) 部分系初期化の実験的デモンストレーション

部分系初期化は、従来の部分集合擬似初期化と本質的に異なるため、予備的なデ モンストレーション実験を行った。この実験は、初期化アルゴリズムの本格的な研 究に先立って、部分系初期化の概念を確認するために室温溶液NMRを用いて大学 院生の西村等が行ったものであり、初期状態は物理的に初期化された状態ではなく 時間平均法によって用意された擬似的なものであり、初期化アルゴリズムは②の条 件を満たしていない。図3.2.6(a)の4-qubit分子を用いて、(b)の量子回路によって、 初期状態である $| 1 > \epsilon_1$ つ含んだ4つの状態の混合(c)から、(d)のように上位2 -qubitが | 0 0 >に初期化されることを示した。[KKN02] この量子回路は、4つの 状態を個別にマップする馬鹿正直な方法で、②を満たしていないため実際の初期化 には使えないが、作業領域を必要とせず③は満たしており、後に重要な発見へとつ ながる伏線となった。



図3.2.6 データ圧縮による部分系初期化の予備的な実験

4) 作業領域の問題の解決

データ圧縮アルゴリズムの作業領域を無くすことが最重要課題となり、確率の計 算やデータの並べ替えが不要で、整数の足し算だけで符号化できる数え上げ符号が 有望とにらんで研究を行った。当時知られていた代表的なCleveとDiVincenzoの量 子データ圧縮アルゴリズム[CD96]は、たまたま数え上げ符号に基づいていたが、n + l o g n (複雑な工夫を行って節約してもn^{1/2}+l o g n)の初期化された作 業領域を必要としており、これを削減することは非常に困難と思われた。しかし、 大学院生の片岡暁が、量子フーリエ変換(QFT)を用いた量子加算回路[Draper 00]を利用することによって、必要とされた作業領域のうち、加算の桁上げのため のn qubitを削減できることに気づき、解決の端緒を開いた。|1>の数を数える ための作業領域である残る1 og n qubitは、その指数、すなわちnの多項式の手 間で、北川が以前提案した方法[Kit99]か、logn/(1-H) qubitを予備圧 縮することによって、確保できることを片岡・北川が見出した。予備圧縮を馬鹿正 直な方法で行った場合の計算量はO($n^{cH/(1-H)}$)(cは1~2程度の定数)と なり、エントロピーHが比較的大きい場合には、多項式といっても高次となり、本 圧縮の計算量を上回ってしまう可能性がある。しかし、ひとたび多項式時間のその 場圧縮アルゴリズムさえできてしまえば、それを予備圧縮にも再帰的に適用するこ とによって、予備圧縮の計算量は必ず10gnの多項式に収まり、本圧縮の計算量 に比べて無視できることを北川が見出した。これら3つの結果、

- ① QFTを用いた桁上げビット不要の量子加算回路の利用
- ② 予備圧縮による l o g n qubitの初期化
- ③ 効率的圧縮アルゴリズムの予備圧縮への再帰的適用

により、[CD96]の量子データ圧縮アルゴリズムから計算量O(n^4)の初期化アル ゴリズムを生成することができた。[KKN02]①のQFTにO(n^2)の手間がかか るため、計算量が[CD96]のO(n^3)からO(n^4)へと増えており、その部分に さらなる改良の余地が残された。

5) QFTを用いた桁上げビット不要の量子加算回路の実験的検証

①の量子加算アルゴリズムは、実験的に未検証であったので、大学院生の鶴亀等 が図3.2.7(a)の3-qubit分子を用いて(b)の量子回路で実験的検証を行った。|1> と|3>の重ね合わせ状態(c)に対して1を加算し、|2>と|4>の重ね合わせ 状態(d)が得られることを確認した。同様にして、加算および減算、そのカスケード な実行、整数との大小比較などのデモンストレーションを行った。[論文投稿準備中]



図3.2.7 量子フーリエ変換を用いた桁上げ不要な量子加算の実験

6) 量子データ圧縮アルゴリズムのさらなる効率化

コストの高い①を使わずに、圧縮アルゴリズムそのものを改良することによって、 nビットの桁上げ作業領域を不要にし、さらに計算量もO(n³)より小さくする ことに、ごく最近成功した。考案したアルゴリズムは、計算量と作業領域の積が、 これまでに知られている量子データ圧縮の中で最小となるなど、非常に優れており、 本研究の最も重要な成果の一つであるが、古典的なデータ圧縮としても新規性があ り、特許出願手続き中のため、詳細は公表できないので割愛する。[M. Kitagawa, A. Kataoka, M. Ogawa, IEEE Trans. Information Theory, 論文投稿中] E. まとめ

私達の研究によって得られた核スピン量子コンピュータに関する基本的な知見 を簡潔にまとめると、以下のようになる。

1) 従来のNMR 量子計算実験は、量子計算ではない。

- 一見成功したように見える実験結果は、実験回数や分子の数というリソースの 指数爆発によって支えられている。
- ② 初期状態の混合のために、成功確率が低く、指数的高速化は達成されていない。
- ③ ユニタリー変換が意図したとおりに実行されていることを確認したにすぎない。
- 2) NMRによる真の量子計算は可能である。
- ① 初期状態の問題さえ解決すれば良い。
- ② 物理的初期化によって、エントロピーを下げる。
- ③ 効率的なその場データ圧縮によって、部分系を共通の状態に初期化する。
- 3) 計算量論的にも情報理論的にも効率的な初期化アルゴリズムは存在する。

(2)研究成果の今後期待される効果

A. NMR 量子計算に対する再評価

2~3-qubitの小さな分子の溶液NMRを用いた実験は、非常に簡単なため、19 98年頃から多くのグループが参入して、さまざまな実験を行ったが、現在は沈静 化している。これには、以下の理由が考えられる。

- ① 3-qubit程度でできることはほとんどやりつくされてしまったこと
- ② 5-qubit以上は、分子の選定やパルスシーケンスなどそれなりに難しいこと
- ③ 7-qubitのShorのアルゴリズムによる素因数分解[VSB+01]による達成感
- ④ NMR実験の量子性に対する否定的な見解が支配的になり、量子計算の実験として評価されなくなったこと

特に、④に関しては、具体的に何がどう問題なのかということよりも、ただNMR はもう駄目だという風潮が急速に広がったのを、論文のレフェリーコメントなどか らも感じた。しかし、私達の研究によって、従来のNMR量子計算実験のどこに問 題があり、どうすればそれが解決可能かという具体的な処方箋が明らかになったの で、④の認識は今後大きく変わり、NMR量子計算が再評価されることが期待され る。 私達の研究によって、低エントロピーの混合状態をその場でデータ圧縮して部分 系を初期化する効率的なアルゴリズムが見つかったので、核スピンに限らず、一般 に射影測定不可能な混合アンサンブルを用いても真の量子計算が可能であること が明らかになった。これは、量子コンピュータとマクロ世界とのインタフェースと して、NMRと同様に多数の量子コンピュータを並列に動作させて、そのアンサン ブル和しか見ないという戦略が成り立つことを意味する。個々の量子コンピュータ とマクロ世界との結合を疎にできるので、デコヒーレンスを大幅に軽減できる可能 性がある。

混合状態から情報理論的に効率の良いデータ圧縮によって部分系の初期化を行った場合、初期化された部分系は純粋状態に近く、圧縮された部分は完全混合状態 に近くなる。通常の量子計算アルゴリズムは、純粋状態を前提にしているので、初 期化された部分しか量子計算に使えず、圧縮された部分は捨てなければならないと 考えられてきた。しかし、ParkerとPlenioによって、Shorの素因数分解アルゴ リズムに使われる2つの量子レジスタのうち、量子フーリエ変換されない方の初期 状態は、最大混合状態でもかまわないことが示され[PP00]、圧縮された部分の有効 活用の道が開かれた。私達の考案した量子データ圧縮アルゴリズムは、混合状態の 持つ純粋性と混合性を分離して、量子計算に最適な方法で分配する仕組みとみなす ことができる。この方面の研究を発展させることによって、量子計算のどの部分に どの程度の混合性が許されるのか、また、量子計算と古典計算との境界はどこにあ るのかといった、量子計算の基本問題を解明する手掛りが得られるのではないかと 期待している。

C. 量子情報圧縮

量子情報の単位であるqubitは、そもそも量子情報圧縮(Schumacher圧縮)から 生まれた概念である。しかし、量子情報圧縮については、いくつかのアルゴリズム が提案されているだけで、研究者の数も驚くほど少ない。私達は、核スピン量子コ ンピュータの初期化というやや特殊な問題の研究を通して、図らずも全く専門外で あった量子情報圧縮アルゴリズムを研究することになった。初期化に使うために要 求される条件が非常に厳しかったため、結果的に、非常に良いアルゴリズムを考案 することができた。このアルゴリズムは、計算量と作業領域の積がこれまでに知ら れている最小であり、この分野に重要な貢献ができたと考えている。計算量につい ては、まだ改善の可能性があり、最小を目指して今後も研究を続ける予定である。

量子情報の分野で理論的に考えられている多くのプロトコルが、量子情報圧縮を 利用しており、私達の考案したコンパクトなアルゴリズムは、核スピン量子コンピ ュータの初期化以外にも、多くの量子情報処理に応用の可能性が期待される。

また、私達の圧縮アルゴリズムは、古典的にも新規性があり、量子情報以外の分 野にも応用可能であることから、特許出願予定である。

文 献

- [BCJ+99] S. L. Braunstein, C. M. Caves, R. Jozsa, N. Linden, S. Popescu, and R. Schack, Phys. Rev. Lett. 83, pp.1054-1057 (1999).
- [CD96] R. Cleve and D. P. DiVincenzo, Phys. Rev. A 54, pp. 2636-2650 (1996).
- [CFH97] D. G. Cory, A. F. Fahmy, T. F. Havel, Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 94, pp.1634-1639 (1997).
- [Draper00] T. G. Draper, quant-ph/0008033 (2000).
- [GC97] N. Gershenfeld and I. L. Chuang, Science 275, pp.350-356 (1997).
- [ITS+00] M. Iinuma, Y. Takahashi, I. Shak'e, M. Oda, A. Masaike, T. Yabuzaki, and H. M. Shimizu, Phys. Rev. Lett. 84, pp.171-174 (2000).
- [KCL98] E. Knill, I. Chuang and R. Laflamme, Phys. Rev. A, 57, pp. 3348-3363 (1998).
- [Kit99] M. Kitagawa, in Quantum Coherence and Decoherence (Proc. 6th ISQM Tokyo '98), pp.33-36, Elsevier, 1999.
- [KKN02] M. Kitagawa, A. Kataoka, T. Nishimura, in Proc. 6th Int. Conf. Quantum Communication, Measurement and Computinig (QCMC'02), pp.275-280, Rinton, 2003.
- [KYK05] Y. Kawano, S. Yamashita, M. Kitagawa, Phys. Rev. A (to be published)
- [Lloyd93] S. Lloyd, Science 261, pp. 1569-1571 (1993).
- [LP01] N. Linden and S. Popescu, Phys. Rev. Lett. 87, 047901 (2001).
- [NC] M. A. Nielsen, I. L. Chuang, Quantum Computation and Quantum Information, Cambridge University Press (2000).
- [NKL98] M. A. Nielsen, E. Knill, R. Laflamme, Nature 396, pp.52-55 (1998).
- [PP00] S. Parker, M. B. Plenio, Phys. Rev. Lett. 85, pp. 3049-3052 (2000).
- [SK05] A. SaiToh, M. Kitagawa, Phys. Rev. A71, 022303 (2005).
- [SV99] L. J. Schulman and U. Vazirani, in Proc. 31'st STOC, ACM Press, 1999.
- [TYKK05] K. Takeda, T. Yamamura, A. Kagawa, M. Kitagawa, J. Magn. Reson. (to be published)
- [VSB+01] L. M. K. Vandersypen, M. Steffen, G. Breyta, C. S. Yannoni, M. H. Sherwood and I. L. Chuang, Nature, 414, pp. 883-887 (2001).

3-3 核スピン偏極基礎研究グループ

はじめに

核磁気共鳴(NMR)には、核スピンの偏極が小さいために信号が微弱であるという弱点 がある。これまでに、NMR 信号を飛躍的に増大させるために光励起三重項状態の電子スピ ン偏極を動的核偏極(Dynamic Nuclear Polarization: DNP)により核スピンに移動させる 試みがなされているが、この研究は極めて限られた系にしか適用されていなかった。我々 は、様々な物質で核スピンの高偏極を実現することで物理学、化学、生物学、量子情報科 学など多岐にわたる分野で研究の新展開を促すことを目的として、光励起三重項電子スピ ンを用いた DNP に関連する研究を行ってきた。我々は、この目的を達成するために

- 可能な限り高い核スピン偏極をめざす。
- ・ 核スピンの偏極が増大する現象を定量的に理解する。

という目標を掲げて、以下A. ~F. の課題に挑んできた。

- A. プロトン偏極ビルドアップ効率の最適化
- B. 重水素化試料中の残留希薄プロトンスピンの偏極
- C. 偏極ビルドアップメカニズムの解明
- D. 粉末試料における核スピン偏極
- E. 炭素 13(¹³C) 核への偏極移動
- F. 光の透過と三重項状態への光励起効率に関する理論の構築と実験的検証

(1)研究内容及び成果

A. プロトン偏極ビルドアップ効率の最 適化

Henstra らによって開発された効率的 な DNP の手法(Henstra et al., Chem. Phys. Lett. 165 (1990) 6)を用いてプ ロトンのスピン偏極を増大させる実験を 行うために、我々は DNP 用プローブを 開発した。これにより、単結晶試料の配 向調節、レーザービーム照射、マイクロ 波照射、磁場掃引および NMR 測定が可 能となった。また開発したプローブを、 既存の装置(マイクロ波コンポーネント、 超伝導電磁石、フラッシュランプ励起色



図 3-3-1. ペンタセンをドープしたナフタレンの単結 晶試料における、プロトン偏極のビルドアップ実験結 果。

素レーザーおよび自作の NMR 分光計)と組み合わせて実験システムを構築した。

このシステムを利用して我々は、ペンタセンをドープしたナフタレンの単結晶試料を用 いて DNP を行い、温度 105K、磁場 0.3T の下でプロトンスピン偏極を 0.7 にまでビルドア ップすることに成功した。0.7 という到達偏極は、熱平衡時のプロトンスピン偏極の約 20 万倍に相当する。また達成偏極 0.7 は、ペンタセンの光励起三重項電子スピンがもつ偏極に 一致するため、この手法によって原理的に達成可能な最高のプロトンスピン偏極が得られ たことになる。ここで以前の報告例 (0.32 (Iinuma et al., Phys. Rev. Lett. 84 (2000) 171)) よりも高いプロトン偏極を達成できたのは、ペンタセン濃度、マイクロ波強度、結晶の角 度、スイープ時間、磁場スイープ幅、レーザー強度など数多くある実験パラメータを様々 に変えてプロトン偏極のビルドアップ効率を調べることで最適なパラメータの組み合わせ を探り当てたことによる。

B. 重水素化試料中の残留希薄プロトンスピンの偏極

光励起三重項電子スピンを用いた DNP の応用の可能性を広げるために、我々は多様な系 で核スピン偏極を飛躍的に増大させる試みを続けた。99.21%重水素化したナフタレンにペ ンタセンをドープした単結晶試料を用いて、0.79%の割合で残留している希薄なプロトンス ピン系において上(A. プロトン偏極ビルドアップ効率の最適化)と同様のプロトン偏極 ビルドアップ実験を行った。その結果残留プロトンの偏極を、同様に理論限界である 0.7 に まで増大させることに成功した。

希薄なプロトンスピン系は、プロトン間の双極子相互作用による結合が弱いために、豊 富に存在するプロトンスピン系とは全く異なった興味深い振る舞いを示す。例えばマルチ



図 3-3-2. ペンタセンをドープした 99.21%重水素化 ナフタレンの単結晶試料における、残留プロトン偏極 のビルドアップ実験結果。

プルパルス法を用いなくても高分解能 NMR 測定が可能であり、また NMR 測 定から原子間の長距離情報が得られる 例もある。ただし従来は、スピンが希薄 であるがゆえに低感度であるという問 題があった。この研究で示されたように、 希薄プロトンスピン系で偏極を飛躍的 に増大させることができれば、低感度の 問題は解決できることになる。

また、ここで行った希薄なプロトンス ピンの偏極ビルドアップの様子を、プロ トンが豊富に存在する系でのビルドア ップの様子と比較することで、我々はプ ロトン偏極が増大する過程の背後にあ

るスピンダイナミクスに関する知見を得ることができた。(以下**C. 偏極ビルドアップメカ** ニズムの解明)。

また、希薄なプロトンスピン系の NMR 共鳴線の線形を研究する中で、我々は以下の興味 深い結果を得た。

- (i) 高偏極スピンのスペクトルの非対称性
- (ii) 重水素化試料中において、残留プロトンの分布はランダムではなく、法則性がある。
 すなわち、分布の法則性は、水素が重水素に置換されるメカニズムに関する知見を
 もたらし得る。

(i)(ii)の結果は、光励起三重項電子スピンを用いた DNP によって NMR の感度を飛躍的に 向上させることで初めて検出可能となった。

C. 偏極ビルドアップメカニズムの解明

上記の実験(A. プロトン偏極ビルドアップ効率の最適化 および B. 重水素化試料 中の残留希薄プロトンスピンの偏極)を通して我々は、プロトン偏極のビルドアップには 以下の明確に区別すべき二種類の偏極移動過程が寄与していることを見出した。

(1) ペンタセンの光励起三重項電子スピンから近傍のプロトンスピン(主にペンタセン 分子自身がもつプロトンスピン)への偏極移動。

(2) 試料全体で起こる、プロトン間のスピン拡散による偏極の伝播

「(1)(2)の両者の寄与が絡み合って試料全体にわたってプロトンスピン偏極がビル ドアップしていく」というアイデアに基づいて、ビルドアップの様子をシミュレートし、 実験データと比較することによって、(1)(2)それぞれの偏極移動過程の効率を定量的

に検討することが可能 になった。電子スピンと プロトンスピンの相互 作用ハミルトニアンの うち、偏極移動に寄与す る項を抜き出し、DNP による偏極移動の効率 を理論的に導き出し、ビ ルドアップのシミュレ ーションの結果と照ら し合わせる作業は現在 なお進行中である。

さらに我々は、プロト ン偏極ビルドアップ実 験を、プロトン間のスピ ン拡散係数の決定に応 用することが可能であ ることを見出した((2) A.応用:スピン拡散係 数の実験的決定を参照)。



図 3-3-3. 99.21%重水素化ナフタレン中の残留プロトン偏極のビルド アップの様子のシミュレーション。ペンタセン分子の近傍から偏極が 「湧き出し」、スピン拡散によって広がっていく様子を視覚化した。

我々は単結晶試料だけではなく、試料中で分子がランダムに配向している粉末試料にお いても光励起三重項電子スピンを用いた DNP 実験によって核スピン偏極を飛躍的に増大 させることに成功した。ペンタセンをドープしたナフタレンの粉末試料においてペンタセ ンの光励起三重項電子スピンを用いて DNP を行うために、まず粉末における三重項電子ス ピンの ESR スペクトルをシミュレートした(図 3-3-4)。そこから最適な実験条件を予測し てプロトン偏極のビルドアップ実験を行い、磁場 0.32T、温度 105K においてプロトンスピ ン偏極を 3,200 倍増大させることに成功

した。

この成果は、分析対象としては興味深い が単結晶が得られないような系において も同様のアプローチで NMR 感度の飛躍 的増大が見込めることを意味する。またこ の研究において、たとえ肉眼では透き通っ て見えない粉末試料であっても、試料表面 からある深さまでは三重項状態への光励 起が可能であることを見出した。ここから、

「光照射の条件や電子状態の遷移速度定 数に応じて三重項状態への励起効率がど のように決まるか」という新たなテーマが 生まれた(F.光の透過と三重項状態への 光励起効率に関する理論の構築と実験的 検証)。



図 3-3-4. 外部磁場に対してランダムに配向した ペンタセンの三重光電子スピンの ESR スペクト ル (シミュレーション)。DNP 実験では、影をつ けた電子スピンパケットを利用することを狙って マイクロ波の照射と磁場スイープを行った。



図 3-3-5. ペンタセンをドープしたナフタレン の粉末試料におけるプロトン偏極のビルドア ップ実験結果。

E. 炭素 13 (¹³C) 核への偏極移動

光励起三重項電子スピンの偏極を直接的に炭素 13 (¹³C) 核に移動させる試みは失敗に終わった。その理由は、上述(C. 偏極ビルドアップメカニズムの解明)した偏極移動のメカニズムから説明できると我々は考えている。すなわち、DNP による ¹³C の直接偏極増大が不可能である原因は、以下の2点にある:

• 電子スピン偏極は、主に近傍のプロトンに移動し、¹³C には移動しにくい。 さらに、

• ¹³C は天然存在比がわずか 1%であり、また磁気回転比が小さいために、¹³C 間でスピン 拡散は起こらない。

一方、上記の飛躍的に増大させたプロトンスピン偏極を、交差分極(Cross Polarization: CP)法によってさらに炭素13核に移動させることで、間接的に(プロトンを経由して) ¹³C NMR の感度を飛躍的に向上させることに成功した。

F. 光の透過と三重項状態への光励起効率に関する理論の構築と実験的検証

光励起三重項電子スピンを用いた動的核偏極によってプロトンスピンの高偏極を達成す るためには、効率的に分子を三重項状態に光励起させることが重要である。そのために我々 は、単結晶および粉末試料における光の透過と三重項状態への光励起効率に関する理論を 構築した。また、この理論の妥当性を検証するために、光励起三重項電子スピンのゼロ磁 場 ESR 実験を行った。光励起の直後に測定される ESR 信号の強度は試料中に存在する三 重項電子スピンの数に比例するため、信号強度を様々な試料の厚みに対して測定すること で三重項状態に励起された分子の分布を実験的に得て、構築した理論に基づいて計算した 三重項電子スピンの分布を裏付けることが出来た。

この研究の結果として、三重項状態への光励起を効率的に行うために光源に課せられた 以下の2つの条件を見出した。

- (i) レーザービーム強度は、誘導放出が有効にならない範囲で大きいほうがよい。
- (ii) レーザーパルス幅は、(励起一重項状態から基底状態への)自然寿命と三重項状態の寿命の中間の値がよい。

(2)研究成果の今後期待される効果

我々の研究成果にもとづき、さらに以下の応用や発展が期待される。

A. 応用:スピン拡散係数の実験的決定

【どのような研究か】

我々は、光励起三重項電子スピンを用いた DNP においてプロトン偏極のビルドアップの 効率を決定するひとつの要素にスピン拡散があることを見出した((1) C. 偏極ビルドア ップメカニズムの解明)。ビルドアップがスピン拡散に依存することを逆手にとって、現在、
ビルドアップ実験からスピン拡散係数を決定する試みが進行中である。

【意義】

スピン拡散は NMR における最も重要な概念のひとつである。また、スピン拡散による磁 化の移動を利用して材料の構造や物性を評価する研究も数多く行われてきている。しかし スピン拡散は20世紀半ばに提案された古い概念であり、現在も盛んに利用されている現 象であるにも関わらず、これまでにスピン拡散係数が実験的に決定された例はごくわずか しかない。この研究によりスピン拡散係数が実験的に決定できる例がひとつ増えることで、 現状では理論が先行しているスピン拡散の研究に実験的裏づけを追加することができると 我々は考えている。

B. 気体分子への偏極移動

【どのような研究か】

我々はまた、三重項電子スピン偏極を、固体プロトンを経由して気体分子にまで移動さ せる試みを計画している。ペンタセンをドープしたナフタレンを、ゼノン(Xe)ガスとと もにガラス管に封入し、ペンタセンの光励起三重項電子スピンを利用して DNP を行い、ナ フタレンのプロトンを偏極させる。その狙いは、Xe 分子がナフタレン結晶の表面に衝突す ることで引き起こされる交差緩和を利用して、核オーバーハウザー効果による Xe 核の偏極 増大を引き起こすことにある。

【意義】

Xe NMR は高分子材料の物性研究や生体イメージングに威力を発揮しており、Xe 偏極を 高めて NMR の感度を向上させることが出来れば分析可能な対象が拡がることにつながる。



図 3-3-6. DNP により増大させたプロトンスピン偏極を気体状態の¹²⁹Xe 核に移動させる試み。Xe 原 子がナフタレンの結晶表面に衝突する際に引き起こされる緩和による核オーバーハウザー効果を狙 う。

Xe 偏極を飛躍的に増大させる既存の Optical pumping 法と比較して、実験の簡便性など、 何らかの点においてメリットを見出せるかどうかがこの研究の勝負どころとなる。 【どのような研究か】

光励起三重項電子スピンを用いた DNP によってプロトンが偏極したナフタレンを瞬時 に溶媒中に溶解させて溶液 NMR の感度を向上させる試み。あらかじめ溶媒には測定対象物 質をターゲット分子として溶解させておく。ここにプロトンが高く偏極したナフタレンを 加え、核オーバーハウザー効果によってターゲット分子の核スピンにナフタレンのプロト ン偏極を移動させることを狙う。



図 3-3-7. DNP により増大させたプロトンスピン偏極を溶液中の原子核へと移動させる試み。液体中では、分子の並進運動により変動する局所磁場によって緩和が促進される。このとき誘起される核オーバーハウザー効果によってナフタレンから所望の分子(ターゲット分子)へと核スピン偏極を移動させることを狙う。

【意義】

従来の国内外の研究において、核スピン偏極を飛躍的に増大することができた系は固体 と気体に限られている。この研究によって液体試料において高偏極を達成できれば NMR 分 析が可能な対象が大きくひろがることになる。

D. NMR 量子コンピュータへの応用をめざして

光励起三重項電子スピンを用いた DNP によって NMR 量子コンピュータの物理的初期化 を実現するためには、核スピンが量子ビットとして機能できるような物質において核スピン偏極の飛躍的増大化を行う必要がある。そのために試料に課せられる要請は以下の2点。

- ・ 量子ビットとして働く核スピンの間に相互作用があること。
- ただし、異なる分子に属する量子ビット間では相互作用が無視できるほど小さい必要がある。

今後、これらの条件を満たす系で量子ビット核スピンの偏極を飛躍的に増大させるため に取り得るアプローチは2通りあると我々は考えている。

(1) 100%重水素化したホスト単結晶に三重項分子をドープして、高偏極の源である三重 項分子そのものを量子コンピュータとして利用する。重水素デカップリングによりホスト の重水素スピンとの結合を絶つことができるため、三重項分子に属するプロトン、炭素1 3、窒素15などの核スピンは分子外の核スピンの影響を受けることなく、量子ビットと して働くことができると我々は考えている。

(2) 三重項分子をドープしたホスト結晶に、量子コンピュータとして働き得る第三の分子をドープする。この分子にまで偏極を運ぶにはプロトン間のスピン拡散を利用する。この場合プロトンは量子ビットとして働くことができないため(分子間で相互作用が存在するから)、プロトンの偏極は交差分極法によってさらに「第三の分子の」¹³C 核や¹⁵N 核へと移動させて、これらを量子ビットとして利用できると考えている。

上記(1)(2)の両方のアプローチを実践するのが今後の課題となる。

3-4 結晶量子コンピュータ研究グループ

(1)研究内容及び成果

A. NMR 要素技術の開発: 良好な量子相関の実現と初期化問題の解決

実用的な固体 NMR 量子計算機の実現のためには、「初期化」法の確立と制御性の良い 「量子相関」状態の実現が不可欠である。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の超偏極を可能にする「光ポンピング法」に着目した。

光ポンピングNMR法とは、円偏光光子の持つ角運動量を、電子スピンを介して核ス ピンに転写することで核スピンを超偏極させ、NMR 信号を増強させる手法である。本 研究では、まず、光ポンピング NMR 法に必要な装置の開発を行った。主な開発要素は、 低温・磁場環境下に円偏光励起光を導光するシステム、及び励起光と NMR 用の2つの ラジオ波を同時に試料に照射するプローブである。次に上記に示したシステムを利用し て化合物半導体における光ポンピング NMR を実現すると共に、その最適化を行った。 具体的には、リン化インジウムをターゲットとし、燐原子核(³¹P)からの NMR 信号 の大幅増強を実現した。また、温度、磁場、励起光子エネルギー依存性等、偏極機構の 解明に向けた基礎データを取得し、これから高偏極率実現のための指導原理を導出した。 以下にこれらの研究成果の概要を示す。

我々の開発した
光ポンピングNM
Rシステムの概要
を図 3-4-1に示す。
本システムは、(1)
NMR 分光器((株)
サムウェイ社製を
広幅二重共鳴用に
カスタマイズ)、
(2) 超伝導マグネ
ットとクライオス
タット(Oxford Inc.



図 3-4-1 光ポンピングNMRシステム

社製)、(3)除振台上のレーザーシステム(Spectra-physics社製)と光ファイバーへの導光器からなる「光学システム」、(4)2+1次元(2ラジオ波+1近赤外光)光ポンピング NMR プローブの4つからなっている。また、光学システムと NMR 分光計の同時 制御のため、PC上に LabVIEW を用いた「光ポンピング制御システム」を構築した。

本システムの特徴は、励起光の導光に偏光面保存ファイバーを採用している点にある。 この方法は、従来の光学窓を利用した方法に比べて、偏光励起光を容易に、再現性よく、 しかも測定者の安全性を確保しながら試料に照射できるという利点がある。これにより、 作業効率と実験精度が向上した。

本システムの励起光源は、半導体励起の Nd: YVO₄ 緑色レーザーをポンプ光とした Ti: Sapphire レーザーである。このレーザ ーで発生した直線偏光は、ミラーにより光 ファイバーへの導光器へと導かれる。導光 器の直前には半波長板が挿入されており、 これにより偏光面の切替えが可能である。 直線偏光は対物レンズで絞られ、光ファイ バーに導入された後、偏光面を維持しなが らクライオスタット内に置かれたプローブ の先端へと導かれる。光ファイバーの出口 には1/4波長板が取り付けられており、こ こで直線偏光は円偏光へと変換され、試料 に照射される。試料位置における照射光ス ポットの直径は約5mmであり、この領域に 光強度 0.5W の光照射が可能である。



図 3-4-2 InP における ³¹P NMR スペクトル

光ポンピング効果によって生成された超偏極状態は、NMR 分光装置によって検出される。本研究では、通常の一次元 NMR 測定に加えて、2 周波数の同時照射が可能な、2 + 1 次元(2 ラジオ波+1 近赤外光) NMR 測定プローブを開発した。また、このプローブの有効性を確認するために、InP の³¹P と¹¹⁵In 間の交差分極測定を行い、偏極の転写が可能であることを確認した。

次に、上で示した測定システムを化合物半導体 InP に適用し、³¹P 核スピンの光ポン ピング NMR の最適化を行った。図 3-4-2 に、左右両円偏光の照射時と非照射時におけ る ³¹P の NMR 信号スペクトルを示す(試料は InP:Fe)。励起光照射により、熱平衡時 (Dark)から信号強度の絶対値が増強している。光の到達範囲から見積もると、燐核 の偏極度が 35%まで増強したことがわかった。σ+偏光の照射の場合は、熱平衡時と比 して 180 度位相が変化(負の信号強度)している。これは光ポンピング効果の明確な 証拠であり、これにより本システムの有効性が確認された。

さらに、InPにおける光ポンピング NMR 効果の最適化を目的として、そのドーパン ト依存性を測定した。ドーパントは、キャリアの性質とその濃度、トラップサイトの性

質などを決める重要な 要素である。用いた試 料は、非ドープの試料 と、亜鉛、硫黄、鉄を それぞれドープされた InP ウェハーである。 製造元から提供された 基礎データと³¹P 核の 4.2 K でのスピンー格 子緩和時間 *T*i 及び光

(キャ	・リア	型と濃度	度は製造元	(昭和電工)	データ)	
-----	-----	------	-------	--------	------	--

ドーパント	キャリア	ρ (cm ⁻³)	T1 (秒)	OPNMR 効果
	型			
Zn	p-型	$5 x 10^{18}$	100	観測されず
S	n-型	$6 x 10^{18}$	130	観測されず
Undoped	n-型	$5 \mathrm{x} 10^{15}$	1300	弱い
Fe	半絶縁型	7 x10 ⁷	>104	強い

ポンピング NMR 効果について表 3-4-1 にまとめる。

この結果は以下のように説明できる。まず、p型のZnドープとn型のSドープ試料では光ポンピングNMR効果が観測されない。前者では、ホールの強いスピン軌道相互作用とホールー電子間の交換相互作用による短い電子スピン緩和時間が、また、後者では、比較的短いTiよるスピン漏洩効果がその原因と考えられる。一方、非ドープとFeドープ試料では、Tiが長く漏洩効果が小さいことから光ポンピングNMR効果が観測される。特に、Feドープ試料は補償型で、トラップサイトも多数存在するため、強い効果が観測される。本測定の結果、光ポンピングNMRにおいてドーピングは極めて重要な要素であること、また特にTiが重要な意味を持つことが判明した。

このように NMR の実験条件を損なわない低温・強磁場下で動作する円偏光レーザー 導光システムの開発に成功した。さらに本システムを用いて、量子計算機素子の有力候 補である InP 中の燐核の偏極実験を行い、燐核の偏極度を 35%まで増強することに成 功した。これにより「初期化」問題の克服にほぼ目処が立った。

B.NMR 要素技術の開発: 強磁場 NMR による高感度・高分解能化

「多ビット化」は「初期化」「量子相関」と共に固体 NMR 量子計算機の重要な開発要素である。有力な解決策の一つとして強磁場化による NMR の高感度化・高分解能化がある。21.6T(水素核に対して 920 MHz)という世界最高磁場を発生する NMR 用超伝導磁

石が物質・材料研究機構によって近 年開発された。当グループでは固体 NMR 量子コンピュータの実現に向け、 NMR の高感度化・高分解能化をはか ることを目的として、920MHz-NMR を行うため NMR システムの試作機 を(株)神戸製鋼所及び、(株)日本 電子との共同で製作し、エチルベン ゼンの¹H-NMR を行った。

超伝導マグネットの断面図を図 3-4-3 に示す。マグネットは Nb₃Sn および NbTi コイルで構成され加圧 超流動ヘリウムによって 1.6K で運 転されている。試料部は9チャンネ ルの超伝導シムコイルによって直径 10mm高さ20mmの範囲で磁場の均 一度が±0.1 ppm 以下になるよう



図 3-4-3 920MHz 超伝導マグネットの断面図

に調整されている。室温ボアの直径は 52mm である。NMR 分光計は 1GHz まで対応 する(株)サムウエイ社の位相コヒーレントパルス法の試作機を使用した。パワーアン プの出力は 50W、AD 変換器の分解能は 1.2Hz である。 また、NMR プローブの試作も行った。図 3-4-4 にプローブの概略図を示す。平行線 路 TL1 と TL2 のペアが送信および受信コイルの両方の役割を果たしている。またプロ ーブには19チャンネルのマトリックス室温シムを組み込み磁場分布の補正を行った。

NMR ロック、試料の回転などは行 わなかった。プローブの分解能は市 販の固体プローブと同等程度であ ると考えられる。

NMR 測定を行った試料は 100% の CDCl₃ で希釈した 20%のエチル ベンゼンである。これらの試料を直 径 5mm のガラス管に密閉して使用 した。測定周波数 920.2208MHz に おいて、積算、試料の回転などを行 わずにNMR スペクトルの測定を行 った。スペクトルは FID 信号をフ ーリエ変換することによって得た。



図 3-4-4 プローブの概略図と等価回路

図 3-4-5 に 920.2208MHz で測定

したエチルベンゼンの¹H-NMR スペクトルを示す。スペクトルは 50µs のシングルパル スによって得られた FID をサンプリングレート 5kHz で 4096 点にデジタル化し FFT をすることによって得た。スペクトルははっきりとした分裂を示し、ピークはそれぞれ

フェニル基、メチレン基、メチ ル基に対応させることが出来る。 メチレン基の4重項、メチル基 の3重項スペクトルはそれぞれ J結合によって微細構造を示し た。J結合の値は7±2Hz であ り、使用した AD 変換器の分解 能1.2Hz の範囲内で文献値と一 致している。フェニル基は複雑 な微細構造を示し、少なくとも 8本のピークが観測された。こ れは化学的非等価なサイトが基 の中に存在するためと考えられ、 800MHz のデータと同じ特徴を



図 3-4-5 エチルベンゼンの FT-NMR スペクトル

示している。また H₂O の ¹H-NMR 共鳴周波数からマグネットの安定性は-2.44± 0.22Hz/h であることが分かった。これらの結果、超伝導マグネットと超伝導シムは溶 液の高分解能 NMR 測定を行うために十分な性能を持つことが分かった。

今後、この超伝導磁石を用いた強磁場高分解能 NMR により、固体 NMR 量子コンピュータの研究が進んでいくことが期待される。

C. NMR量子計算機の新タイプ提案

2件の原理的に全く新しい量 子計算機を考案した(特許出願 済)。どちらにも、量子相関と初 期化の問題を解決する具体的な 技術が導入されている。一つは CdTe 中の強力なJ結合を量子ゲ ートに用いるモデルで、スピン量

Isotope	111Cd	113Cd	123Te	125Te
γ/2π (MHz/T)	9.028	9.445	11.160	13.454
Spin <i>I</i>	1/2	1/2	1/2	1/2
Abundance(%)	12.8	12.3	0.9	7.0

表 3-4-2 Cd と Te の NMR 原子核表

子数 1/2 を持つ4種類の安定同位体(Cd-111, 113 及び Te-123, 125) で超格子構造を 構築することで4ビットの量子計算機が実現する。もう一つは、量子多体効果を利用し て一次元反強磁性マグノンを媒介とする核スピン間結合を用いる方法で、マグノンの生 成・消滅をマイクロ波で制御することにより制御ノットゲートのオンオフ切り替えが可 能である。

①半導体 CdTe 同位体超格子構造を用いた固体 NMR 量子計算機の提案

我々は、4量子ビットの 固体 NMR 量子計算機の候 補として、CdTe の同位体 超格子構造を用いたモデル を提案した。CdTe は 1.6eV のバンドギャップを持つの で、標準的なレーザーによ



図 3-4-6 CdTe 同位体超格子の構造

り、光ポンピング法による核スピンの初期化が可能である。表 3-4-2 に示すように Cd と Te は共にスピン 1/2 の同位体を 2 つずつ持っている。これら 4 つの同位体の磁気回 転比はお互い十分に離れているので、それぞれの周波数をもつ高周波パルスにより、個 別に制御することができる。CdTe は化学的には 2 元素化合物であるが、同位体を使う ことにより、4 つの量子ビットを得ることができる。実際にそのような物質を作製する には、化学的なプロセスに加えて同位体工学の技術が必要であろう。同位体超格子の一 例を図 3-4-6 に示す。同位体の積層の順番については、この他にもいろいろな可能性が ある。また、必要であれば、¹¹²Cd や ¹²⁴Te など、スピンを持たない同位体の層を、ス ピンを持つ 2 つの層の分離に用いることも可能である。図 3-4-7 に示すように、CdTe の結晶構造は閃亜鉛鉱型である。同位体超格子は同位体濃縮した原料を用い、同種核の 層を[111]方向に決められた順番(例えば ¹¹¹Cd-¹²³Te-¹¹³Cd-¹²⁵Te など)でエピ成長させ ることにより作製される。これにより、同一層内にある全核スピンの状態を、光による 動的核偏極や高周波パルスによって同時に制御することが可能となる。

文献によると、Cd-Te 間の J 結合定数の実験値は 500 Hz である。層間の J・結合は核 スピン間相互作用を与えるので、これにより隣り合う層の間にエンタングル状態を作り 出すことができる。エンタングル状態を保つためには、デコヒーレンス時間が J 結合定 数の逆数よりも十分に長くなくてはならない。デコヒーレンスの主な原因は核双極子相 互作用であるが、これは以下の2つの方法により抑制することが可能である。(1)同 じ元素の異なる同位体を[111]方向に交互に積層させると、2つの層間の核双極子相互 作用は異種核間相互作用となるため、フリップーフロップ項を抑制することができる。 (2)双極子磁場の魔法角の方向に磁場を印加すると、双極子磁場を小さくすることが できる。CdTeの結晶構造の場合、魔法角の方向は[100]方向である。我々は同位体超格 子の場合について共鳴線の2次モーメントの計算を行い、この方向に磁場を印可するこ とで、双極子幅を 200 Hz にまで減少させることができることを見出した。これはJ 結 合の値、500 Hz よりも小さく、J 結合を量子ゲートに用いることができることを示し ている。

この提案の利点は、各量子ビットを区別するために磁場勾配を用いなくても良いと言 う点である。また、双極子相互作用ではなく、J結合を量子ゲートに用いることにより、 スピン状態の制御が容易となるというのも大きな利点である。なぜならば、長距離相互 作用である双極子相互作用を量子ゲートに用いる場合にはデカップリングが必要とな るが、デカップリング用のパルスシーケンスは、量子ビットを増やすとますます複雑と なり煩雑となるからである。

②マグノン媒介型固体NMR量子計算機の提案

低次元量子磁性体を用いた「マグノン媒介型固体NMR量子計算機」の特長・新規性 は、1)固体NMR量子計算機の量子ゲートに用いる原子核スピン間相互作用として、 これまで想定されてきた直接的な「双極子-双極子相互作用」の代わりに、電子スピン のマグノン励起を介した「スール・中村(SN)相互作用」を用いていること、2)量 子多体効果である「スピンギャップ」現象を利用して量子ゲートにスイッチング機能を 付加していること、の2点にある。SN相互作用の大きさは電子スピンの状態に大きく 依存するため、外部から電子スピン系を制御することによって必要な所に必要な強さの 核間相互作用を作り出すこと(即ちスイッチング)が可能である。このため、常に同じ 大きさで存在する双極子相互作用の場合には必要不可欠である核スピン間のデカップ リング操作が、この場合には不要となるという利点がある。また、双極子相互作用は相 互作用が短距離型なので、核スピン(量子ビット)間の距離を一格子点程度の距離に保 つ必要があり、これをNMRスペクトル上で区別する必要から1T/m以上の磁場勾配が 必要とされているが、長距離相互作用である SN 相互作用を用いると、核スピン間の距 離を長くとることができるため、磁場勾配の大きさに関する制限を大幅に緩和すること が可能である。

基本原理は以下の通りであ る (図 3-4-8 参照)。 基底状態 が一重項である量子スピン鎖 を磁場勾配下に置き、その鎖 上に等間隔に I=1/2 の原子核 スピンを配置する。各々の核 スピンは、この磁場勾配下に おけるNMR共鳴線の位置に よって互いに区別され、ラジ オ波により制御される。これ により、「NOT」ゲートが実現 可能である。電子スピンの三 重項励起状態と一重項基底状 態との間に有限な「スピンギ ャップ|が存在する場合、このギ ャップに対応する温度より十分 低温では電子スピンは一重項状 態となり消滅するので、核スピン 間に相互作用は発生しない。この 状態は量子ゲートが全てオフの 状態に対応する(図 3-4-8(a))。 ここで、電子の三重項励起状態を 「スピンギャップ」エネルギーに 相当する電子スピン共鳴(ES R)により局所的に発生させる。 磁場勾配下では「スピンギャッ プ」の大きさが鎖上の各点で異な るため、電子スピンを励起させる 場所はESRの照射周波数によ って指定できる(図 3-4-9)。 励起 された電子スピンにより隣り合 う核スピンの間にマグノンを介 したSN相互作用が発生するが、 これを「XOR」ゲートのオン状態 として利用する(図 3-4-8(b))。 このゲートの強度はESR照射 の強度によって制御される。必要 なゲート操作の終了後、ESR照 射を停止すると、三重項状態の電 子スピンは一重項状態へと速や



図 3-4-9 量子スピン系におけるエネルギーダイアグラム



Microwave irradiation for spin chains

図 3-4-10 集積型NMR量子計算機

かに緩和し、量子ゲートは再び遮断されるので、このESR照射を量子ゲートのスイッ チとして利用することができる。

このNMR量子計算機を、一本の量子スピン鎖で実現することは感度の点で困難であ る。この点を克服するため、本件では量子スピン鎖を多数集めて「集積型NMR量子計 算機」とし、さらなる感度向上のため、光ポンピングNMR法を援用するものとする。 その実現のための具体的な形として、量子スピン鎖でできたフィルムを半導体単結晶中 に挟み込んだ「多層化された量子スピン鎖NMR量子計算機」を考案した。これを図 3・4・10に示す。ここで、半導体中の電子スピンは、半導体ギャップに相当するエネルギ ーを持つ円偏光レーザー光の照射により偏極されるが、そのスピン偏極を、挟み込んで ある量子スピン鎖上の核スピンに転写することにより、偏極した核スピン系を生成させ る。この「増強された」核スピン量子計算機群によって量子計算が行われる。レーザー 光の照射は量子計算の開始前に終了させる。これにより、伝導帯に励起された電子は価 電子帯に速やかに緩和し、量子計算に悪影響を及ぼさない。

本件は、量子ビットとなる核スピンを電子スピンの励起状態(マグノン)で制御する という新しいタイプの量子計算機であり、量子ゲートに電子スピン励起を利用しないこ れまでのNMR量子計算機とは質的に異なるものである。

D. 結晶量子コンピュータ材料探索(候補物質の探索、開発、設計)

我々は、NMR量子コンピュータに適した固体材料としては、実際的には核磁気回転 比が大きく、天然存在比100%で核スピン1/2を有する核種から構成され、核スピン間の J結合の大きな物質が適していると考え、これまで材料探索及び開発を行ってきた。ま ずは、固体NMR信号線幅の主な原因である核スピン間に働く双極子場に起因する線幅 の広がりをパルス系列等によってデカップリングし、J結合している核スピンの向きに 応じたスペクトルの変化が観測できなくてはならない。そこで、任意の結晶構造をもつ 固体材料に対してこの双極子場に起因する線幅を評価できるシミュレータを開発した。 次に、山口・山本によって提案された結晶量子候補物質であるCePの高融点・高蒸気圧 単結晶育成技術を確立し、CeP単結晶及び関連物質のNMR線幅の評価を行った。さら に、具体的に2キュビット系の材料として、光学材料として知られているBaLiF3、YLiF3 単結晶における7Li核や¹⁹F核のNMRやYPO4粉末試料における³¹P核NMRの基礎データ の収集を試みた。さらに、Kaneの提案であるSi:Pにおける³¹P核や天然存在比100%で 単一の核スピン1/2のみ有する核種で構成されているナローギャップ半導体黒リンの ³¹P核のNMR研究を行った。また、一次元量子計算機材料のコピーをアルミナテンプレ ート法により大量に複製する手法に関する技術開発を行った。 ①双極子場シミュレータの開発 一般にNMR量子計算機において個々のqubitを表すNMR スペクトルは、他のqubitを表すスペクトルと独立なピークとして分離していなければならない。このことはNMR線幅がシフトより小さくなくてはならないと言い換えることが出来る。一般に固体におけるNMRの線幅は双極子相互作用のために、溶液の場合に比べて非常に広くなっている。しかし、固体における線幅は、結晶構造や格子定数、



図 3-4-11 LaP5の双極子による NMR 線幅の角度依存性。

結晶軸に対する磁場の向きなどにより変化するため、固体においても線幅の小さくなる ような、デバイス物質と結晶軸に対する磁場の向きがあると期待される。このようなこ とから与えられた物質における双極子相互作用によるNMR線幅を2次モーメントの 方法によってシミュレートするプログラムを開発した。このプログラムは市販の結晶構 造描画ソフトの結晶構造データを取り込み、任意の磁場方向に対するNMR線幅をシミ ュレートすることが出来る。例として図3・4・11にLaP5に対する適用結果を示す。LaP5 は複雑な結晶構造を持ち、qubitを担うと期待される³¹P核は結晶学的に6つの異なるサ イトに存在する。図はNMR線幅の磁場方向依存性を示しており、矢印の位置において 全ての³¹P核の線幅が最小になっている。このことから、この物質を用いる場合には矢 印の位置で示される方向に磁場をかけることが最も効果的であることが分かる。このよ うなことからこのシミュレーションプログラムによって実際の測定を行う前に候補物 質における最適条件を見つけることが出来るようになった。

②CeP及び関連物質 RP(R=Y, La)のNMR

CePは核スピンを持たない唯 ーの磁性原子Ceと、核スピン 1/2をもつ³¹Pによって構成され ており、かつ、NaCl型の単純な 結晶構造をとることからNMR 量子コンピュータ素子として 格好の化合物とされている。

Yamaguchi-Yamamoto (以 下Y-Y)の提案によると CeP を 用いた NMR 量子コンピュー タの実現には NMR 線幅は1 kHz 程度以下である必要があ



図 3-4-12 CeP における ³¹P 核の FT-NMR スペクトルの一例

るとされている。あいにく、これまで CeP の NMR 線幅に関する実験的な報告は行な われていない。このようなことから、本研究では CeP の NMR 線幅が量子コンピュー タ素子としての条件を満たしているかを評価するために、単結晶や粉末試料を合成し、 FT-NMR による ³¹P 核の線幅の測定を行った。CeP は融点が約 2,500℃以上で、蒸気圧 が高いために単結晶育成には、W るつぼに封入し、超高温炉で育成する必要があった。 我々は東北大学との共同研究のもと専用の高周波炉、W メッシュヒーター炉を用いた ブリッジマン法により高融点・高蒸気圧物質 CeP や関連物質の単結晶育成に成功した。

図 3-4-12 は 6.3 T での粉末試料 CeP に対する FT-NMR スペクトルを示す。このようなスペクトルを単結晶および粉末 CeP に対して測定することにより、NMR スペクト

ル線幅の外部磁場依存性を得た。ま た、非磁性参照物質である単結晶 LaP 及び、³¹P と⁸⁹Y の I=1/2 核スピ ンからなる 2 キュビット系 YP に対 しても同様の測定を行った。それら の結果を図 3-4-13 に示す。

核スピン双極子磁場による NMR 線幅はスペクトルの分散値(2次モ ーメント)として厳密に算出できる。 それによると CeP に対しては半値全 幅(FWHM)は1.4 kHz、LaP に対 しては3.0 kHz、YP に対しては1.6 kHz と見積もられる。CeP に対する 実験値はこれらの値より1 桁以上も



図 3-4-13 ³¹P 核 NMR スペクトルの半値全幅の 外部磁場依存性

大きく、その原因として磁性不純物や試料の不均一性が考えられる。現時点では、YP の線幅には磁場変化がほとんど観測されず、上記の2化合物に比べると結晶の品質は良 いと考えられる。YPにおける観測された線幅 5.7 kHz は、双極子磁場に比べて約 3.6 倍大きいことから、伝導電子による線幅の増大の可能性も考えられる。

また、線幅以外にも Y-Y の提案では以下の 2 点を過大評価しているために量子計算の 実際の動作には問題点があることを指摘した。(1) スピン格子緩和時間の見積もり、

(2) ESR による磁性スピンの個別励起。量子コン ピュータの実現にはこれらの問題点を解消する必要 がある。したがって、今後の NMR 量子コンピュー タの開発に向けて、試料の高純度化を進めるととも に、これらの問題点を解消した新たな提案が求めら れる。

③光学材料BaLiF₃、YLiF₄、YPO₄のNMR研究

量子計算機用材料の候補物質として光学材料であ る単結晶 BaLiF₃、単結晶 YLiF₄、多結晶 YPO₄ に関 して⁷Li (I = 3/2)、¹⁹F (I = 1/2)、³¹P (I = 1/2)の NMR



図 3-4-14 BaLiF₃の結晶構造

を行い、基本物性の評価を実験的に行った。ここでは立方晶系ペロブスカイト型構造 (Pm3m)をもつ BaLiF₃にのみ言及する(図 3-4-14 参照)。

図 3-4-15 に BaLiF₃の ⁷Li 核と ¹⁹F 核の NMR 線幅の角度依存性を示す。ここで、外 部磁場 H₀と結晶方位との関係は図 3-4-16 のようにとった。実験で得られた線幅の原因 の原因を探るために以下に示す核スピン間の双極子磁場による線幅を 2 次モーメント の手法で解析した。

$$(M_2)_{II} = \frac{3}{4} \gamma_I^4 \hbar^2 I(I+1) \sum_k \frac{(1-3\cos^2\theta_{jk})^2}{r_{jk}^6}$$
(3-5-1a)

$$(M_{2})_{IS} = \frac{1}{3} \gamma_{I}^{2} \gamma_{S}^{2} \hbar^{2} S(S+1) \sum_{k} \frac{(1-3\cos^{2}\theta_{jk})^{2}}{r_{jk}^{6}}, \qquad (3-5-1b)$$

$$FWHM = \frac{2}{2\pi} \sqrt{(M_{2})_{II} + (M_{2})_{IS}}. \qquad (3-5-2)$$

ここで γ_1 と γ_s はそれぞれ同種核(*I*)同士、異種核(*S*)同士の磁気回転比で、 r_{jk} と θ_k は i 番目と j 番目の核との間の距離と角度を示す。半値全幅を *FWHM* で示す。図 3-4-15 で示すように実験値(\blacksquare)と計算値(実線)の一致はほぼ良い。従って、観測された ⁷Li および ¹⁹F の NMR 線幅は、大部分が双極子相互作用で説明できることがわかった。



図 3-4-15 BaLiF₃における(a) ⁷Li NMR スペクトルおよび、(b) ¹⁹F NMR スペクトルの半値全幅の 角度依存性。α=90°、β=45°、*H*₀=6.34T、γ=-90°の場合は a 軸方向と平行を意味する。

特に重要な成果として、図 3-5-17 で示すように BaLiF₃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。すなわち、パルス系列等によってデカップリングや MAS による回転等に代表される高度な線幅の狭帯化技術を回避できることを示した点で非 常に有用である。

また、スピン格子緩和時間 *T*₁ は 室温で数10分あり、量子計算で重 要なスピン-スピン緩和時間 *T*₂ を 考慮しても量子計算に十分な長さ である。



図 3-4-16 外部磁場 H₀とオーラー角によって示された 結晶方位との関係。



図 3-4-17 BaLiF₃における(a) ⁷Li 核および、(b) ¹⁹F 核での双極子相互作用による NMR 半値全幅 FWHM の角度依存性。αは 45°に固定。

④半導体黒リンのNMR研究

本研究では、V族元素のリンの同素 体中最も安定である斜方晶系の黒リ ンを取り上げた。黒リンは、³¹P核の みから構成されている0.3eVのバン ドギャップをもつ単体の半導体とし て常圧下で安定に存在する。 puckered layerと呼ばれる原子二重 層内では最近接の3個のリン原子が 共有結合によって強く結ばれている のに対し、層間ではファン・デル・ワ ールス力で弱く結合した特徴を有し ている(図3-4-18参照)。QC材料とし て眺めた場合、黒リンに対する興味は 次の点が挙げられる。(1)層状半導



図 3-4-18 黒リンの結晶構造。 黒い実線で囲まれた立体は単位胞を示す。

体であることから、インターカレーションによってQCに有利な物質設計が期待される。 (2)同じ単体の半導体である同位体²⁹Si (核スピン1/2、天然存在比4.7%)を用いた QCとの比較が可能である。(3)半導体であるためOptical pumping法によるスピン偏 極の手法が使え、初期化に関しても有利と考えられる。(4)Si:Pを用いたQCの提案に もあるように量子計算に欠かせないJ結合の基礎的理解が必要とされている。黒リンに 関しては、これまで異方的な結晶構造や電子物性に関する研究がかなり進んでおり、理 解が進んでいたが、NMRを用いた研究はほとんど皆無であった。そこで、高圧合成法 によって作製された黒リン多結晶試料を用いて³¹P核のパルスフーリエ変換NMR測定 を行った。

NMR 実験に用いられた黒 リン多結晶試料は、城谷によ って高温・高圧法により合成 された。

³¹P-NMR実験はFT-NMR 分光器を用いて11.75Tのも とで行われた。NMRスペクト ルは、Free Induction Decay (FID)信号をフーリエ変換す ることにより得た。スピン-格子緩和時間Tiは、飽和パル スを与えた後のFID信号の回 復曲線から求められた。温度 可変型クライオスタットを用 いてヒーターと液体へリウム のフローにより、15Kから



図 3-4-19 黒リンにおける³¹P-NMR スペクトルの温度依存性

300Kの温度範囲を温度制御した。また、磁気双極子場による線幅を2次モーメントの 方法で計算し、実験で得られた線幅(FWHM)と比較を行った。

図 3-4-19 に、11.75 T を印加した 時の黒リンの³¹P核の FT-NMR スペ クトルの温度変化を示す。共鳴中心 周波数が 300K から *T**~110K に向 かって大きく温度変化しているが、 *T**以下ではほぼ一定となっている ことがわかる。また線幅は 8kHz 程 度であり、温度変化はほとんど見ら れない。実験で得られた線幅は、磁 気双極子相互作用による寄与 5kHz と同程度である。

図 3-4-20 に *T*iの温度変化を示す。 室温における *T*iは、420sec であり、



図 3-4-20 黒リンにおける ³¹P 核の T₁ の温度依存性

温度の下降とともに増加するが、室温から $T^* \sim 110$ K までは、指数関数的に増加し、 T^* 以下で直線的に増加する。中心周波数や T_1 の温度変化で異常が現れた T^* 付近では、 帯磁率には何ら異常が現れておらず、原因は電子的な要因と考えられる。NMR の線 幅は、8 kHz 程度で、双極子相互作用から見積もられた線幅 5kHz と同程度であるこ とがわかった。これまで研究してきた希土類リン化合物に比べると相対的な差は小さ く、試料は良質であると言える。 T_1 は、室温で 420sec であり、量子計算に要求され ている特性時間としては、程良いと思われる。また、 $T^* \sim 110$ K で中心周波数や T_1 の 温度変化に異常が現れたが、磁気的な異常は見あたらず、電子的な原因と考えられる が、詳しい原因については現在調査中である。今後は、様々なリン化合物に関して J 結合の大きさを評価するため、CP-MAS による系統的研究を進めていく予定である。

⑤一次元量子計算機材料の大量複製法の開発

我々は、結晶を使ったNMR量子計算機の問題点を解決する手段として、C.②の集 積型NMR量子計算機では、核スピンを超偏極させる部分、量子計算機を行わせる部分、

そしてお互いの界面で超偏極を転 写して初期化を実行する部分に分 けて材料を設計・開発することを提 案した。さらに、qubitの識別のた めには磁場勾配法が有用と考えら れるが、現在の分解能の低いNMR 技術の範囲内では、溶液NMRでも 使われているように多数の分子に よるqubitの複製を用意する技術開 発も必要と考えられる。そこで、任 意の量子計算材料を一次元的な磁 場勾配の中に配置する方法として、 ポーラスアルミナの規則配列を利 用した量子計算機材料の開発に取 り組んだ。

アルミニウムを陽極酸化させる ことにより作成されるポーラスア ルミナはナノサイズの細孔が規則 的に配列した構造をもつ。これは安 価なウェットプロセスで作成でき ることや、大面積のものも容易に作 成できる等の長所があるためにナ ノ材料の分野で興味がもたれてい る。

具体的な量子計算機の構造とし



図 3-4-21 ポーラスアルミナをナノテンプレートとした 一次元量子計算材料構造



図 3-4-22 アルミナ陽極酸化法によるナノホール
 構造体と Ni ナノワイヤーの SEM 写真。
 ナノホールの大きさは直径約 20nm。

ては、図3-4-21のような構造を提案した。面内に磁気モーメントが揃ったDyやCo等の 永久磁石の上に均一磁場勾配領域にアルミナナノホールテンプレートによって一次元 量子計算機材料を成長させる。周りのホスト材料には、光ポンピング法等によって核ス ピンの初期化の可能な半導体材料を想定している。また、具体的な量子演算を行う材料 としては、カーボンナノチューブや低次元有機物質材料などを想定している。既にアル ミナナノホール中にカーボンナノチューブを成長させた報告例があり、有望な手法であ る。

そこでまず、大面積にわたるアルミナナノホールの規則化条件の最適化を図り、ナノ ホール内に均一に材料を埋め込むための技術開発を行った。具体的には金属磁性Niナノ

ワイヤーを電気めっき法により作 成した。図3-4-22にアルミナナノホ ールが六角格子状に配置されてい る様子とナノホール内で電気めっ き法で作成されたNiナノワイヤー を示す。

次に Al 以外の任意の基盤上にナ ノホールのテンプレートを用いて ナノワイヤー或いはドットを成長 させる方法として、Cu 基板上に直 接 Ni ナノワイヤーを電気めっき法



図 3-4-23 ポーラスアルミナ中に電気メッキ法により 成長させた Ni ナノワイヤー。

により堆積させることを試みた。具体的には、ポーラスアルミナのバリア層を化学的に 除去し、ナノホールを貫通させ、Cuをポーラスアルミナの片側からスパッタ法により 薄膜を堆積させ、Cu基板を電極として Niを電気めっき法により堆積し、最後にテン プレートであるポーラスアルミナを化学処理によって除去した。この方法の採用により、 Cu基板上に規則正しく整列した Niのナノワイヤー、ナノドットを作成することに成 功した。図 3-4-23 に表面に Niナノワイヤーを成長させた Cu基板の断面図を示す。Cu 基板からポーラスアルミナ細孔中に直接 Niナノワイヤーが成長していることが見てと れる。また Cuの反対側の面には Niが普通にめっきされている。用いたポーラスアル ミナはシュウ酸中で陽極酸化したもので孔径は約 50nm であった。ワイヤーの長さはめ っき時間に比例するため、時間を調節することによりドットを含む任意の長さのワイヤ ーを作成することができる。またポーラスアルミナは酸により容易に溶かすことができ る。この方法で作成されたナノワイヤーは基板から直接成長しているため、ワイヤーは 倒れずに直立している。従って、この方法は電気めっきが可能な組み合わせであれば、 原理的には任意の基板上に任意の材料でナノワイヤー、ナノドットを作成できるため幅 広い応用が期待できる。

⑥CP/MAS NMR 法による化合物半導体における J 結合の研究

C. で述べたようにCdTeの同位体超格子構造によるQC実現の際、実際に量子演算に 必要な核スピン間のJ結合の大きさを知ることは結晶量子計算機材料探索のキーポイン トとなる。しかしながら、これまでの固体中の間接核スピン-スピン結合に関する研究 を振り返ると、半導体に関してはご く少数のIII-V 族半導体について固 体NMRスペクトルの測定から間接 核スピン-スピン結合が求められて きたに過ぎない。また、理論的な研 究もごく限られていた。我々は、光 ポンピングによる超偏極可能な半 導体をJ結合のデータベースを作成 することを念頭に既に実験例のあ るInPからJ結合の研究を開始した。 Tomaselliらは、undoped InP半導 体に対し³¹P CP /MAS NMR スペ クトルにより、最近接の^{113,115}In-³¹P 間の等方的間接核スピン-スピン結



図 3-4-24 InP の結晶構造。○は P、●は In 原子を示す。 ¹Jと ²Jはそれぞれ最近接、次近接間に働く 間接的核スピン結合定数を示す。

合を決定した。また、PbTe半導体における間接核スピン結合を計算し、結合定数や間 接核スピン結合に寄与する超微細相互作用の支配的な項は半導体の不純物の種類に依 存することを報告している。しかし、このことは実験により確かめられてはいない。そ こで、本研究ではInP半導体を試料とし、³¹P CP /MAS NMR法の開発及び、異種核間 の間接核スピン・スピン結合のキャリヤ濃度依存性を³¹P CP /MAS NMRスペクトルに より調べた。

III-V族半導体InPの結晶構造は、 図3-4-24に示すように、閃亜鉛鉱型 である。ここで、1Jと2Jは最近接、 次近接間に働く間接的核スピン結 合定数と定義しておく。本研究で 用いた試料はundoped ($n = 4.6 \times$ $10^{15} \text{ cm}^{-3}, \rho = 3.7 \times 10^{-1} \Omega \text{ cm})$ 及 \forall Fe-doped ($n = 7.1 \times 10^7 \text{ cm}^{-3}$, ρ = 3.2 × 10⁷ Ω cm) OInP \heartsuit b る。図3-4-25(a) にundoped 及び Fe-doped InP粉末試料における ³¹P MAS NMR スペクトルを示す。 ¹¹⁵In (S = 9/2, $N_{\rm A} = 95.8$ %) から ^{31}P (*I*= 1/2, *N*_A = 100 %) $\sim \mathcal{O}CP$ を用い、観測時のデカップリング は行っていない。NMRスペクトル はTecmag 社製APOLLO 分光器 を用い、11.75T の静磁場下で Varian Chemagnetics 4 mm MAS プローブにより測定した。共鳴周



図3-4-25 undoped InP(左)とFe-doped InP(右)粉末試料 の202.435-MHz ³¹P CP/MAS NMR スペクトル (MAS速 度は $\kappa = 10 \text{ kHz}$)。(a)の実線は、¹¹⁵In→³¹PへのCPによっ て得られたスペクトル (観測中デカップリングなし)を示 す。(a)の破線は、ガウスフィット曲線を示す。undoped InP とFe-doped InP試料に対する半値全幅 $\nu_{1/2}$ がそれぞれ3.19 kHz、3.20 kHzと見積もられた。(b)は¹¹³In→³¹PへのCPに よって得られたスペクトル (観測中¹¹⁵In核を ν_1 (¹¹⁵In) = 40 kHzでcwデカップリングを行う)を示す。

波数は $n(^{31}P) = 202.435 \text{ MHz}, n(^{115}In) = 109.683 \text{ MHz}$ であり、MAS 速度はn = 10kHz であった。得られたスペクトルは幅広で特徴がなく、undoped 及びFe-doped InP に対しそれぞれ半値全幅 n_{12} が3.19 ± 0.3 及び3.20 ± 0.3 kHz のガウシアンでフィ ッティングできた。スペクトルの n_{12} の値はMAS 速度n = 18 kHzまでほぼ同じ値であ り、スペクトルへの同種核間(³¹P-³¹P) 及び異種核間(¹¹⁵In-³¹P, ¹¹³In-³¹P) の直接及び間 接スピン-スピン結合の異方性部分はMAS により消去されていると考えられる。 ³¹P-³¹P は結合を少なくとも2つ含んでおり、また¹¹³In ($S = 9/2, N_A = 4.2$ %) は希薄で あるため、間接スピン-スピン結合の等方性部分について³¹P-³¹P 及び¹¹³In-³¹P からの 寄与は¹¹⁵In-³¹P からの寄与よりも小さいと考えられる。2 次モーメント(M_2)が、³¹P と最近接の4つの¹¹⁵In との間の等方的間接核スピン-スピン結合によると仮定すること により、結合定数|¹J(^{113,115}In,³¹P)| はundoped 及びFe-dopedInPについてそれぞれ240 ± 20 及び242 ± 20 Hzと見積もられた。

図3-4-25(b)に¹¹³In → ³¹PのCPを用いた³¹P MAS NMRスペクトルを示す。共鳴周波 数はu(¹¹³In) = 109.433 MHz であった。この場合においても直接及び間接核間相互作 用の異方性部分はMASにより消去されている。更に、¹¹⁵In-³¹P の間接核間相互作用の 等方性部分は観測時の¹¹⁵In デカップリングにより取り除かれている。従って等間隔の 10 本のピークは³¹P と最近接の¹¹³In の間の等方的間接核スピン-スピン結合に帰属で き、結合定数|¹J(^{113,115}In,³¹P)| はundoped 及びFedoped InP についてそれぞれ223 ± 4 及び225 ± 4 Hz と見積もられた。中央のピークは小さな結合定数をもつ第2 近接の 12 個の³¹P スピンとの等方的間接スピン結合によると考えられる。10 本のピーク強度 は、¹¹³In のスピン状態が±9/2 に対応する外側のピークから±1/2 の内側のピークに 向けて徐々に小さくなった。これは、より高いスピン状態ほどlifetime が長いためと考 えられる。

¹ $J(^{113,115}$ In,³¹P) 値は図3-4-25(b) で直接的に得られた値の方が図3-4-24(a) で間接的 に得られた値よりも正確であると考えられる。直接的に得られた値はundoped 及び Fe-doped InP に対して実験誤差範囲内で同一である。従って $|^{1}J(^{113,115}$ In,³¹P)| 値は、 undoped及びFe-doped InP の両方について224 ± 5 Hz と見積もられ、10⁷-10¹⁵ cm⁻³ の領域ではキャリヤ濃度依存性がないことが分かった。

(2)研究成果の今後期待される効果

結晶 NMR 量子計算機の実験的研究は、当グループのメンバーである山口(スタンフ オード大、現:慶応大)が山本(スタンフォード大)と共に行った CeP の結晶を用い る先駆的な提案(Appl. Phys. A 68 (1999) 1、以下YYと記述)が起源となっている。 当グループの研究は、この提案に対する検討から始まった。我々は、当グループの持つ 高融点・高蒸気圧単結晶育成技術の経験を元に、原理的あるいは技術的な問題点をいち 早く指摘(Appl. Phys. A 70 (2000) 359)した。現在、CeP のような高融点・高蒸気圧 単結晶育成技術を維持しているところは当グループ以外に無く、当グループのポテンシ ャルが問題点の明確化に大きく貢献した。

固体核スピン量子計算機では豪日で B. E. Kane による Si: P型モデルの開発が盛ん

である。一方、結晶の場合、始めから多ビット化されているという魅力があり、Kane 提案の alternative となり得る。この手法は、我々のグループとスタンフォード大学の 山本グループ以外にはほとんど着手されていない。当グループでは、結晶量子計算機の 決定打がない状況では、まず数多くのモデルをまず提案し、その実現性について検討を 行うことが重要であると考えた。そこで上記のような問題意識を元に、YYとは概念的 に異なる全く新しいモデルを複数提案し、検討を行った。これら新規提案に関しては2 件の特許出願(2002年)を行い、Phys. Rev. A 67 (2003) 022312 に発表した論文は、 米物理学会電子論文選集2誌(量子情報関連 V. J. Quant. Info. Vol. 3, Issue 3 (March 2003)とナノテク関連 V. J. Nanoscale Sci. & Tech. Vol. 7, Issue 11 (March 17, 2003)) に選定された。

NMR 量子計算機の多ビット化においては、「初期化」問題の克服が根本的に重要で ある。この問題に対しては、半導体において核スピンの超偏極をもたらす「光ポンピン グ技術」による実現を目指した。特に、技術開発として強調すべき点としては、偏光面 保存ファイバーを使用する方式を初めて導入し、偏光性を保持した高強度レーザ光を、 容易、安全、確実に(再現性良く)、低温・強磁場下へ導光する方法の開発に成功した ことである(JJAP 1, 42 (2003) 2864)。半導体における核スピンの初期化を目的に開 発を行っているのは、世界的にも我々とスタンフォード大のグループだけである。我々 は InP での実験でその効果を実証することに成功(Phys. Rev. B 69 (2004) 075215, 固体物理 39 2004. 8月 p.11.(解説)、日経先端技術 11 号 (2002): News フラッシュ 欄に掲載)した。

結晶NMR量子計算機の「読み出し」実現には、固体NMR法の高感度化が不可欠であ り、そのための技術として、世界最高磁場でのNMR測定技術を開発(J. Mag. Res. 156 (2002) 318、当論文は、磁気共鳴の権威ある専門誌J. Mag. Res.誌2002年7月号の表紙 を飾った。その他新聞発表数件)した。

結晶を用いた量子計算機については、これまで多くのモデルが提案されてきている。 今後はこれらの様々なモデルに対して、実験、計算などを元に実現性を検討し、淘汰を 行っていくことが重要である。制御ノットゲート実現に必要な核スピン間相互作用とし ては、双極子相互作用(直接)、J結合(間接)、スール中村(間接)などが提案されて いるが、それぞれの長所・短所を見極める必要がある。双極子相互作用に関しては、デ カップリングの手法開発が最も重要な開発要素である。J結合を用いる場合には、初期 化法(光ポンピング技術)が確立している化合物半導体が有望であるので、核スピン間 のJ結合を評価し、データベース化することが重要である。スール中村などその他の間 接相互作用の場合には、候補物質となる高純度単結晶試料の作製技術が鍵を握る。

初期化に関しては、「光ポンピング技術」が有望であることが示されたので、この高 性能化に取り組んでゆく必要がある。特に、課題である、「高温での初期化実現」「初期 化にかかる時間の短縮」「候補物質の多様化」について集中的に取り組み、初期化技術 を確立したい。

3-5 光量子コンピュータ研究グループ

(1)研究内容及び成果

光子を用いた量子コンピュータは、液体利用型NMR量子コンピュータと比較し て、単一の量子ビットの状態を観測可能という特長を持つ。本プロジェクトを開始 するにあたって、我々は「単一光子と線形光学素子を用いる方法」により、3量子 ビットのドイチュジョサのアルゴリズムに成功していた。しかし、単一光子を利用 する限り、量子ビット数を増やすには経路を指数関数的に増大させなければならな いという問題があった。

そこで、本プロジェクトでは、量子誤り訂正などの単一事象の検出が本質的な量 子アルゴリズムの直接的な検証実験を目指し、線形光学素子を利用した量子計算の 方法を、多光子とその相関をも取り扱えるように拡張することを目的とした。 その結果、次の様な成果を得た。

- A. 線形光学素子を用いた量子位相ゲート、および量子もつれ合いフィルタの新規提案。
- B. 提案した線形光学量子位相ゲートを、単一光学素子により実現に成功。
- C. 2光子状態間もつれ合いの検証方法を提案、その検証実験に成功。
- D. 量子テレポーテーションの忠実度を詳細な解析。

とくにAならびにBの実験は、今後、2光子だけでなく、複数光子を用いた量子回路の 実現に大きく路を開く成果となった。また、Cに関しても、初めて複数光子間のもつれ合 いをその光子数状態としての性質を確認しつつ検証した初めての物となった。以下、それ ぞれの項目について詳細に報告を行う。

A. 線形光学素子を用いた制御ノットゲート、および量子もつれ合いフィルタの新規提案

量子ビットとしては、光子の偏光およびモードを用いる。これらに対して、1ビ ットの回転ゲートは既存の光学素子を用いて容易に実現出来る。しかし、制御ノッ トゲートの実現は困難と考えられてきた。光子一つの状態でもう一つの光子の状態 を制御する為には、巨大な非線形性を必要とすると考えられたからである。1998 年に竹内らは、N個の量子ビットを構成するために2^N個のモードを用意することで 量子位相ゲートの困難さを回避し、線形光学素子を用いた量子計算の実験を行った。 しかし、この方法では量子ビットの数に対して必要とするモードの数が指数的に増 大してしまい、大規模な量子計算は実現出来ないという問題があった。

そのような状況の中で、Knill, Laflame, Milbur (KLM)らは、線形光学素 子と単一光子源、および入射する光子数を検出可能な検出器を用いた量子計算のア イデアを発表した。



図 3-5-1 量子制御ノットゲートの線形光学素子による回路

にした。また、ゲート動作の成功、不成功を出力を壊さずに検出し、ゲート動作が 成功した場合だけを量子テレポーテーションを用いて後段へと受け渡す方式を示 したことである。これにより、各ゲートでの成功確率は近次的に1にすることが可 能になった。KLMの方法は原理的には既存技術で実現可能である。しかし、KL Mの方法では単一の制御ノットゲートに対しても、単一光子源や光子数検出器を複 数含み、かつ非常に複雑な複合干渉計を構成しなくてはならないという問題があっ た。

我々は、KLMの方法によりなぜゲート操作が実行できるのかについて研究を進めた。その結果、反射率が1/3のビームスプリッター一つだけでも、量子位相ゲートとして動作することを見出した(Phys. Rev. A)。

その原理を、反射率が1/3にならなければならない理由と共に説明すると以下の 様になる。

反射率がRのビームスプリッター(BS)に光子が一つ入力すると、光子は反射 された状態と透過した状態の重ね合わせ状態になる。重ねあわせ状態の係数の自乗 が確率を表すため、反射と透過の間で生じる位相差を考慮すると、次のようになる。

$$U \mid 1,0 >= \sqrt{R} \mid 1,0 > -i\sqrt{(1-R)} \mid 0,1 > , \quad U \mid 0,1 >= \sqrt{R} \mid 0,1 > -i\sqrt{(1-R)} \mid 1,0 > (3)$$

ここで、|1,0>と|0,1>はそれぞれ光子がビームスプリッターの左側、および右 側のモードに存在する状態を、また U はビームスプリッターによるユニタリ変換 を表す。

今、入力と出力のモードのそれぞれで光子数が保存される場合だけを選び出す。 すると、式(3)の状態は次のようになる。

$$U | 1,0 >= \sqrt{R} | 1,0 > , \quad U | 0,1 >= \sqrt{R} | 0,1 >$$
(4)

では次に、このビームスプリッターの入力モードの両方に1つずつ光子が入射し て、再び出力モードの両方から1つずつ出射される場合を考えよう。この過程は、 光子の両方が反射される場合と、両方が透過する場合の2つからなる。それぞれの 振幅を足し合わせると、結果として

 $U | 1,1 \ge (1-2R) | 1,1 >$

(5)

となる。もし、R=1/3であれば、式4の右辺のケットにかかる係数はそれぞれ√(1/3)となる。このとき、これらのプロセスが2つの入力光子に対して(線形に)起こると、確率振幅(係数)はトータルで1/3になるはずだ。一方、式(5)の右辺のケットの係数は-1/3となり、ちょうどマイナス符号がついた形になる。つまり、πの位相シフトが生じたことになる。ちなみにR=1/2の場合は、式(5)の右辺の計数は0となり、|1,1>という状態は現れないことになる。これは、有名な光子のバンチングに対応している。このことからも、このオペレーションが光子のボソンとしての性質を利用していることが推察できる。

この原理を用いて構成したのが、図3-5-1に示す制御ノットゲートである。ビー ムスプリッターに

よって接続された 2つの偏光干渉計 という単純な構成 になっている。



図 3-5-2 量子もつれ合いフィルタの線形光学素子による回路

れるため、原理的には可能だ。もしそのような検出を加えれば、KLMのスキーム と同様に、このゲートを用いてスケーラブルな量子計算も可能になる。

また、同様の考察により、入力された2つの独立した単一光子を、もつれ合い状態にして出力する「量子もつれ合いフィルタ」も発明した。この発明により、確率 1で単一のもつれ合い状態を出力する「量子もつれ合い源」の構築が可能になる。 我々は提案した線形光学素子を用いた制御ノットゲートの検証実験に成功した。 図3-5-3に用いた光子対源を示す。CWアルゴンイオンレーザーを、適当なレン ズで絞った後、ツインビーム条件に設定したBBO結晶(結晶長5mm)に入射し、 パラメトリック蛍光対をビーム状に発生させた。発生したパラメトリック蛍光対の

双方を、対物レンズでシング ルモードファイバにカップ ルした。カップリング方法等 に検討を重ねた結果、シング ルモードファイバからの出 力部で、カップリング効率の 指標となるP(1)~0.55、また 100mWのポンプ光強度、バン ドパスフィルタのバンド幅4 nmにおいて、毎秒100万光子 対の発生が可能であった。

その光子対源から射出さ れた光子対を、図3-5-1に相



図 3-5-3 構築した 2 光子対源

当する光学回路に入射した結果得られた結果を図3-5-4に示す。左側が、理想的な 制御ノット動作、右側が実験結果である。以下、制御量子ビットを|a>、標的量子 ビットを|b>とし、それらを省略して|ab>と記載する。図3-5-4では、ある入力状態 が与えられた場合に、特定の状態が出力される確率を棒グラフの高さで示している。 理想的な制御ノットゲートは、入力が|00>および|01>の場合にはそのまま出力し、 入力が|10>および|11>の際には、標的ビットを反転、すなわちそれぞれに対し|11 >および|10>を出力する。図3-5-4の左側のグラフは、この理想的な場合を表してい る。図3-5-4の右側のグラフが、実験結果である。これから、制御ノット動作が確 認され、その一致度は85%であった。また、制御ビットとして|0>と|1>の重ね合 わせ状態、信号ビットとして|0>を入力した際、出力がもつれ合い状態になってい ることも確認された。



図 3-5-4 制御ノットゲートの実験結果

これまで発展してきた、単一光子と単一光子の間のもつれ合いの研究の発展の方向として、我々は「多光子状態-多光子状態間もつれ合い」について研究を行った。

光子数が1, すなわち単一光子の偏光状態は、たとえば垂直偏光(|V>)と水平 偏光(|H>)という、2つの直交する基底状態を用いて表すことができる。それに 対して、光子数が2の状態(2光子状態)は、2つの光子が両方とも垂直(|VV>)、 両方とも水平(|HH>)、ならびに一方が水平でもう一方が垂直(|HV>)の3つの基 底状態で記述することができる。これは、2つの光子が「区別できる」場合(|H> |H>, |H>|V>,

 $|V\rangle|H\rangle, |V\rangle$ |V>の4通り の基底が存 在)とは異な ることに注意 してほしい。 たとえば、2 光子状態と2 光子状態間の もつれ合いは、 これら3つの 偏光状態間で 相関が見られ ることになり、 「2つの独立 している、も



図 3-5-5 2光子2光子もつれ合い検証実験結果。一方の2光子状態が |HV>の状態で検出された場合について、他方の2光子状態の偏光を調べ ている。|RL>での検出確率は、|HV>の場合の半分以下になっており、単 なる「2つの、もつれ合い1光子対」ではもはや説明できず、2光子間も つれ合いの存在を実証している。

C. 2光子状態間もつれ合いの検証方法を提案とその検証実験

つれ合い光子対」とは本質的に異なる。

しかし、一般に用いられている、2個の光子検出器と半透鏡を組み合わせた検出 装置では、「2光子状態」と、「区別できる2つの光子」を見分けることはできな い。これまでにも、2光子状態間もつれ合いの生成に成功したとの報告は存在した が、それは「2つの独立している、もつれ合い光子対」によっても再現可能であっ た。

我々は、「2光子状態間もつれ合い状態」と、「2つの独立している、もつれ合い光子対」を見分ける方法を発案した。それは、(|HV>, |RL>, |PM>)という、さきほどのものとは別の偏光基底の組の間の相関を見る方法である。R(L)は右回り(左回り)円偏光、P(M)は+45度(-45度)の斜め直線偏光である。さらに、この検証実験を行った結果、「2光子状態間もつれ合い状態」の生成を検証することに初めて成功した。

D. 量子テレポーテーションの忠実度の詳細な解析

線形光学素子を用いた量子ゲートの成功確率をKLMの方法により増大させる には、高い忠実度での量子テレポーテーションの達成が欠かせない。

忠実度を下げる原因として重大な物が、パラメトリック蛍光対発生時における、 多光子対の同時発生の問題である。パルスレーザーで結晶を励起し、そのパルスエ ネルギーが十分小さい場合を考える。単に1つの蛍光対源に着目する場合、まれに 1対のパラメトリック蛍光対が発生し、同時に2つ以上の光子対が発生する確率は 十分小さいとして無視できる。しかし、量子テレポーテーションを行う際には、こ



する」確率と大差ないからである。

我々は、光源からの発生をモニターする方法として、我々の所有する光子数検出 器(VLPC)や、市販の光子検出器(SPCM)を、ビームスプリッターを介し ながら多段接続することで光子数分別能力をもたせたものを用いた場合について 解析をおこなった。また、その際に、光源から放出されるもつれ合い光子対につい て、平成12年度においては、完全に純粋にもつれ合った状態が得られる場合について 解析し、さらに平成13年度には得られる光子対が混合状態にある場合について研 究を進めた。

その結果、一般に実験で得られる90%程度の明暗比(Visibility)の光源を用いた場合においても十分に、量子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。

(2)研究成果の今後期待される効果

以上述べた研究成果によって、次のような研究展開が可能になると考えられる。

A. 線形光学素子を用いた量子回路(量子コンピュータ)の実現と応用

これまでにも、量子ゲートの実験は報告されていたが、単一のゲートに対しても 非常に複雑な光学回路や干渉計を使用していた。そのため、それらを複数個用いた 量子回路の実現は非常に困難と思われてきた。それに対して、<u>今回我々の実現した</u> 線形光学素子制御ノットゲートは、光学部品がわずか3個と非常に簡便な構成であ り、容易に拡張することができる。

これまでに報告された実験では、この成果をもとに、現在、<u>線形光学素子による</u> <u>複数個の光子量子ビットに対する小規模量子回路の実現</u>にむけた研究を計画中で ある。また、そのような量子回路が実現した場合、量子回路を挿入することにより <u>量子暗号や量子情報通信を、高機能化</u>できる可能性がある。その一方で、現在は量 子暗号に対する攻撃として量子回路を用いる「コヒーレントアタック」は実現可能 性が低い物としてしばしば検討が省略される場合があったが、その「コヒーレント アタック」の実現が可能になり、量子情報通信の安全性評価にもインパクトを与え ることになる。

B. 光子数状態のより深い理解と応用

これまでは、光子一つと光子一つの量子もつれ合いなどについての実験が主流で あり、複数光子状態の素性やその制御に関する研究はあまりおこなわれてこなかっ た。その事は、現在一般に行われている量子情報の理論研究にも反映されている。 しかし、本研究成果により明らかになったように、光子の数が2つに増えるだけ で、状況は非常に複雑になる。成果の部分で述べたように、「あるパルス内に同時 にある2つの光子」といっても、時空間的に同一のモードにコヒーレントに存在す る「2光子状態」と、時空間的に異なるモードに存在する「2つの単一光子状態」、 およびそれらの混合状態など、非常にさまざまな状態が実際にはある。本研究では、 「2光子状態間もつれ合い」と、「2つのもつれ合った光子対」を区別して検出す ることに世界で初めて成功した。しかし、多光子状態の物理と、多光子状態間の相 関はまだ十分理解されるに至っていない。

この意味で、本成果は、時空に偏在する多数の「複数光子状態」間の量子相関の 理解と制御、すなわち「光子のメゾスコピック物理」への扉を開く成果だと考えて いる。実際の量子回路中では、特にエラー等を考えるとき、まさにこのような複雑 な状態が出現することが予測され、非常に重要な課題への第一歩となったと考える。

終わりに

「光子を用いた量子計算」の課題を遂行した北大グループにあっては、博士研究員とし てホフマン・F・ホルガ博士(現広島大学先端研助教授)、博士課程学生であった辻野賢治 博士(現NICT研究員)、および現博士課程学生の岡本亮君の重大で不可欠な貢献があっ た。とくに、ホフマン・F・ホルガ博士は線形光学量子ゲートの理論および2光子状態間 もつれ合いの理論、辻野賢治博士は2光子状態間もつれ合いの実験、および、量子テレポ ーテーションのフィデリティの理論解析、VLPC光子数検出器の改良に、岡本亮君は線 形光学制御ノットゲートの実験ならびにそのための2光子対の開発、のそれぞれを中心に なって遂行していただいた。また、笹木敬司教授、堀田純一助手、藤原秀樹博士研究員、 大橋弘明博士研究員、ソージャエフ・アレクサンドル博士研究員、秘書の大塚真佐子様、 および、学生諸氏(特に川瀬大輔君、西村和哉君)の協力に深く感謝する。また、線形光 学量子位相ゲートに関しては、スタンフォード大学の山本喜久教授から貴重なコメントを いただいた。

3-6. 量子コンピュータ理論研究グループ

(1)研究内容及び成果

本研究の目的は、量子コンピュータ実現の基礎となる量子計算理論を構築するこ とであり、そのために計算量理論的アプローチと量子力学的アプローチの二つの方 法により、研究を進めた。計算量理論的アプローチでは、計算モデル間の計算量的 関係を明らかにし、物理実験の計算理論的解釈を明らかにすることを目標とし、量 子力学的アプローチでは、計算理論的効率の量子力学的制約を明らかにして、不確 定性原理や保存法則から計算の物理的制約を導くことを目標とした。

A. 計算量理論的アプローチ

計算量理論では、決定性Turing 機械を用いて入力の桁数の多項式ステップで解 決する計算量クラスをP(多項式時間計算量クラス)、確率的Turing 機械を用い て入力の多項式ステップで高い確率で正しい解答を出力し、それ以外の場合は無回 答である計算量クラスZPP(無誤り確率多項式時間計算量クラス)、確率的Turin g 機械を用いて入力の多項式ステップで高い確率で正しい解答を出力し、それ以外 の場合は誤解答か無回答である計算量クラスをBPP(有界誤り確率多項式時間計算 量クラス)と呼び、実効的に計算可能な問題の計算量クラスはBPPであると見なさ れてきた。素因数分解や離散対数のような問題では、現在このような実効的に計算 可能なアルゴリズムは知られていない。RSA 暗号などの公開鍵暗号では、公開鍵 を用いた送信者の暗号化および秘密鍵を用いた受信者の復号化の計算量が実効的 計算可能な計算量であるのに対して、秘密鍵を知らない盗聴者が公開鍵だけを用い て暗号文を解読する場合の計算量が多項式時間を越えて、一般には指数関数時間計 算量であることを根拠としている。

ところが、1994年に発見されたショアのアルゴリズムにより、量子計算機が実 現すれば、このような公開鍵暗号がたちどころに解読可能になるという、情報化社 会の基盤を揺るがすような成果が得られた。ショアのアルゴリズムは、量子回路と いう量子計算機の数理モデルにおいて素因数分解問題や離散対数問題を多項式時 間でほぼ確実に解決するアルゴリズムを与えると考えられており、このようにモデ ル化された量子計算機が果たして物理的に実現可能かという問題が重大な関心を 引きつけるようになった。

このような状況に対応して、1997年に Bernstein と Vazirani は P, ZPP, BP P に対応する量子 Turing 機械による計算量クラスとして、EQP(正確型多項式 時間量子 Turing 機械の量子計算量クラス),ZQP(無誤り多項式時間量子 Turin g 機械の計算量クラス),BQP(有界誤り確率多項式時間量子 Turing 機械の計 算量クラス)を定義した。一方、ショアのアルゴリズムなどの現在知られている主 な量子アルゴリズムは量子回路族と呼ばれる量子 Turing 機械と異なる計算モデ ルによって表現されているため、それらの異なる計算モデルの計算量の関係を明ら かにする必要があった。これに関して、1993年に Yao は多項式サイズの量子回路 で多項式時間量子 Turing 機械を模倣する方法を考案して、両者の同等性を示唆 した。しかし、量子回路族の計算量クラスを定式化するためには量子回路族の一様 性の概念を定式化する必要があり、量子回路族のどのような計算量クラスが量子 Turing 機械の計算量クラスと同等になるのかは未解決のまま残された。

本研究ではこの問題を解決するため、一様量子回路族の概念を定式化し、有界誤 差型一様多項式サイズ量子回路族の計算量クラスBUPQCを確立して、これが量子 Turing機械に基づく計算量クラスであるBQPと一致することを証明した。ショア のアルゴリズム及びその中心部分である量子フーリエ変換は明らかに有界誤差型 一様多項式サイズ量子回路族によって表現されているので、この結果からショアの アルゴリズムを模倣することにより、有界誤差型多項式時間量子Turing機械で素 因数分解や離散対数問題を解決することができることが示された。

しかし、一方でショアのアルゴリズムで使われる量子フーリエ変換には指数関数 的に精度が増大する制御回転ゲートが含まれているので、これをそのまま実現する のは実効的には不可能である。このことを数学的に示すために、本研究では量子フ ーリエ変換を多項式時間量子Turing 機械によって誤差なしで模倣することはで きないことを示した。このことから、一様多項式サイズ量子回路族は、一般に指数 関数的計算資源を持ち多項式時間量子 Turing 機械とは完全には同等の計算能力 を持つとはいえないことが示された。従って、それでは多項式時間量子 Turing 機械と完全に同等の計算能力を持つ量子回路族のクラスが何であるか特定する問 題が生まれた。

この問題を解決するために、本研究では有限生成一様多項式サイズ量子回路族の 概念を新たに導入して、これが多項式時間量子 Turing 機械と完全に同等の計算 能力を持つことを証明した。量子フーリエ変換は一様多項式サイズ量子回路族とし て誤差なしで実現可能だが,有限生成一様多項式サイズ量子回路族としては実現不 可能であることも示された。

このような基礎的な成果に基づいて、本研究では、更に有理数などに振幅を制限 した量子計算モデルの計算能力の研究や、量子オラクル付き計算モデルの基本性質 の解析などの研究を行い、計算機科学の国際会議やTheoretical Computer Scienc e などの専門誌において発表した。

B. 量子力学的アプローチ

量子計算量理論では、量子回路を構成する量子計算素子において単一の量子ビッ

ト又はいくつかの量子ビットの間で数学的に規定された完全なユニタリ変換が実 行されると仮定されている。このような仮定の下で、ショアのアルゴリズムが実効 的に計算可能なことの根拠が与えられたわけであるが、実際の物理系で量子ビット は自然的環境および量子計算素子の制御系と相互作用しているために、外部とのエ ンタングルメントが生まれ、デコヒーレンスが起こるため完全なユニタリ変換は阻 害されて、いわゆる開放系の時間発展である完全正値写像で記述される状態変化が 起こる。従って、実際の量子計算は量子計算量理論では扱えない誤差を含んでいて、 このような誤差を量子力学的に究明し評価する理論の構築が必要になる。量子力学 的アプローチでは、その基礎理論の構築を目的としている。

量子計算素子の誤差(最大誤り確率)は、回路として設計された設計上のユニタ リ変換と実際に実装される完全正値写像の状態変化の差の完全有界距離と呼ばれ る数学概念で合理的に定義することができる。スケーラブルな量子計算が可能であ るためには、アルゴリズムが計算量的に実効的計算可能であるだけでなく、このよ うに定義された各量子計算素子の実装の誤り確率が誤り耐性量子計算理論の閾値 定理で示される誤り確率の閾値をクリアすることが要請される。従って、スケーラ ブルな量子計算実現の理論的根拠を解明するためには、量子計算素子の実装におけ る誤り確率の物理的限界に関する研究が不可欠である。この研究は、本研究を含め 国際的に理論家の間でごく最近、研究が始められたところであるが、他の研究が主 にモデルに依存した評価であるのに対して、本研究では、不確定性原理や保存法則 などのモデルに依存しない究極的評価を目指した研究を行った。

1)新しい不確定性原理の定式化の研究

量子計算素子の誤差限界を量子力学の基本原理から導くためには不確定性原理 との関連を第一に調べる必要がある。しかし、従来の不確定原理の定式化では測定 精度の限界が正確に表現されていないことが、重力波検出などの 1980 年代にお ける精密測定の研究で明らかにされてきたことに留意しなければならない。1927 年に Heisenberg によって唱えられた不確定性原理によれば、質点の位置を高い 精度で測定すると、測定器とその質点の相互作用により必然的にその平均誤差に反 比例する大きさの運動量の擾乱がもたらされるとされる。しかし、従来、不確定性 原理として厳密に証明されてきたことは、ガンマ線顕微鏡で成立しているような位 置の測定精度と測定器がもたらす運動量の擾乱との関係ではなく、任意の状態にお ける位置の標準偏差と運動量の標準偏差の積が Planck 定数で定まるある一定値 以上であるということであった。この不等式に現れる標準偏差は、測定器に固有な 測定誤差や擾乱とは無関係な概念であるにもかかわらず、以来、この不等式がガン マ線顕微鏡の思考実験に顕著な測定精度と測定の擾乱の関係を表すとの誤解が広 く流布した。

本研究では、 任意の測定における測定精度と擾乱の関係を一般的測定の数学モ デルに即して研究し、任意の測定装置によって任意の物理量 A を測定するとき、 その誤差 ε(A) と他の物理量 B が受ける擾乱 η(B) の間に、

(1) ε (A) η (B)+ ε (A) σ (B)+ σ (A) η (B) \geq (1/2)|<[A,B]>|

という関係が成立することを導いた。 ここに、 $\sigma(A)$ 、 $\sigma(B)$ はそれぞれ測定の初 期状態における A、 B の標準偏差であり、|<[A,B]>|は交換子 [A,B]=AB-BAの測定の初期状態における期待値の絶対値である。この関係式は、従来、Heisenb erg 不確定性原理として唱えられてきた関係式

(2) ϵ (A) η (B) \geq (1/2) |<[A,B]>|

が普遍的に成立するわけではないことを明らかにし、それに代わる普遍的に正しい 不確定性原理の表現を与える画期的なものである。

2)保存法則に由来する測定精度の制約の研究

新しい関係式と従来の Heisenberg の関係式の大きな相違は、従来、非可換量 の間では、有限精度の下で擾乱のない測定や有限の擾乱の下で完全精度の測定が不 可能とされていたのに反して、それらが理論的に可能であることを明らかにした点 である。 つまり、完全精度の測定、すなわち、ε(A)=0 を満たす測定は、

(3) $\sigma(A) \eta(B) \ge (1/2) |<[A,B]>|$

という制約の下で可能であり、また、擾乱のない測定、すなわち、 η (B)=0 を満た す測定は、

(4) ϵ (A) σ (B) \geq (1/2) |<[A,B]>|

という制約の下で可能である。本研究では、これらの関係式の応用として、従来、 Wigner-Araki-Yanaseの定理として知られてきた保存則のもとでの測定精度の限 界を定量的に表す関係式が発見された。

Wigner-Araki-Yanase の定量化不等式は二つの相異なる関係式からなる。第一のものでは、対象と測定器の間の測定相互作用(時間発展) U が、対象の物理量 L₁、プローブの物理量 L₂、アンシラの物理量 L₃の和を保存すれば、物理量 A に関するこの測定の測定誤差と擾乱の二乗和は

(5) ϵ (A) $^{2}+\eta$ (A) $^{2}\geq |<[A,L_{1}]>|^{2}/2(2max\{\cdot L_{1}\cdot,\cdot L_{2}\cdot\}+\sigma[U^{\dagger}L_{3}U])^{2}$

で示される下限を持つことが示された。 第二のものは、対象と測定器の間の測定 相互作用が、対象の物理量 L₁ と測定器の物理量 L₂ の和を保存し、測定器のメー タが物理量 L₂ と可換であれば、この測定の測定誤差は

(6) ϵ (A) $^{2} \geq |<[A, L_{1}]>|^{2} / (4 \sigma (L_{1})^{2} + 4 \sigma (L_{2})^{2})$

で示される下限を持つことが示された。

Wigner-Araki-Yanase の定理は 1952 年にWigner によって最初に発見され た保存法則から導かれる測定の制約であるが、これと不確定性原理の関係を定量的 に解明することは長年の未解決問題となっていた.本研究により、Wigner-Araki-Yanase の定理は従来の限定された不確定性原理の定式化からは導かれないが、不 確定性原理の新しい普遍的定式化から容易に導かれることが示されたのは、大変興 味深い成果だと思われる。 3) 量子計算素子の精度の限界を与える理論の構築

量子計算における雑音は二つのクラスにわけられる。第一のものは、環境からの デコヒーレンスと呼ばれる静的な雑音であり、第二のものは、量子ビットと量子計 算素子の制御系との相互作用に由来する動的な雑音で、制御系からのデコヒーレン スとも呼ばれる。誤り耐性量子計算理論の最近の成果により、これらのデコヒーレ ンスに基づく誤り確率をある閾値以下にできるならば、量子誤り訂正によりそれら の誤差の蓄積を阻止することができ、原理的にスケーラブルに量子アルゴリズムを 実行させることができると結論されている。

量子状態制御一般において、制御系からのデコヒーレンスが不可避であろうと考 えられる理由として、自然界がもつ保存法則が考えられる。本研究では、保存法則 がどのように量子制御の障害因子になるかという研究の出発点として、Wigner-Ar aki-Yanse の定理を定量化することに成功したので、この成果に基づいて量子計算 素子の精度の限界を与える理論の構築に取りかかった。本研究の成果として、量子 ビットと制御系の間に加法的保存量が存在する場合、Hadamard ゲート、CNOT ゲート、Toffoli ゲート、Fredkin ゲートなどの物理的実装には、この保存量に由 来する不可避な雑音が存在し、その誤り確率は少なくとも制御系に含まれる保存量 の分散の4倍の逆数であることが明らかにされた。従って、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において、制御系が n ビット以下の補助量子ビットからなる実装では、角運動量保存法則により少なく とも1/(4n²) 以上の誤り確率が発生することが導かれる。また、Jaynes-Cumming s モデルのように制御系の光子数とスピン成分が保存される場合には、光子数の分 散に反比例する誤り確率が発生する。特に、コヒーレント光で制御される場合には 不可避な誤り確率は平均光子数に反比例することが導かれる。Banacloche らは J avnes-Cummings モデルに基づく Hadamard ゲートにおいて、位相の二乗揺ら ぎに比例する誤り確率が存在することを導いたが、Banacloche との最近の共同研 究でこれは本研究によるスピンと光子数の保存則に由来する誤り確率と同等のも のであることが示された。これらの研究成果は、Physical Review Letters 誌に 2本の論文として掲載されるなど、国際的に高く評価された。

以上のように、量子計算素子の物理的実現において物理学の基本原理に基づく不 可避な誤差が存在することを証明するなど、この分野で国際的に先端的な研究成果 を生み出し、当初の研究計画を上回る成果を得た。とりわけ、古典的な定説を覆す 根本的な関係式が発見できたことは望外の成果であり、初期の計画では思いもかけ ない見事な理論展開が達成された。また国内でも新聞や一般科学誌などで紹介され るなど高く評価された。

(2)研究成果の今後期待される効果

量子回路族の計算量理論に関する研究成果は、以下の2編の論文に発表された。 [1] H. Nishimura and M. Ozawa, Theoret. Comput. Sci. 276, 147 (2002). [2] H. Nishimura and M. Ozawa, Theoret. Comput. Sci. 332, 487 (2005).

Theoret. Comput. Sci. 誌は計算機科学の分野で、SIAM J. Comput. と並び、 国際的にトップクラスの高い評価を得ている。量子 Turing 機械及び一様量子回 路族の計算量理論は極めて困難な課題であり、Bernstein と Vazirani によって初 期の研究成果が得られて以来、それほど研究が進展していない分野であり、一様量 子回路族の計算量理論では、本研究グループが最先端の研究をリードしている。と りわけ、一様量子回路族の計算量理論は本研究グループによる研究の他、いくつか の研究グループによる研究が競合していたが、本研究グループの包括的研究が先に 発表されたため、類似研究の成果としてはいわゆる Solovay – Kitaev の定理の発 表にとどまった。国内では、ERATO のグループで量子計算理論の研究がなされた が、量子 Turing 機械及び量子回路族の計算量理論に関する包括的研究成果は発 表されていない。Coppersimth は、2の冪を位数とする量子フーリエ変換が一様多 項式サイズ量子回路族で実現できることを示し、Mosca と Zalka は、任意位数の 量子フーリエ変換が一様多項式サイズ量子回路族で実現できることを示したが、論 文[1]において、2の冪を位数とする量子フーリエ変換が有限生成一様多項式サイズ 量子回路族では実現できないことを示し、[2]において任意位数の量子フーリエ変 換が有限生成一様多項式サイズ量子回路族では実現できないことを示した。 量子回 路族の計算量理論は実験のモデルと直接結びついているので、極めて重要な理論で あるが、その困難さからこれまでは、有限オートマトンなどより単純な計算モデル の研究に目が向けられていた。今後、本研究の基礎研究を土台に量子回路族の基礎 研究が進展することが期待される。

Wigner-Araki-Yanase の定理の定量化関係式および保存則に基づく量子計算素
子の不可避な誤り確率に関する研究成果は、以下の2編の論文に発表された。
[3] M. Ozawa, Phys. Rev. Lett.88,050402 (2002).

[4] M. Ozawa, Phys. Rev. Lett.89,057902 (2002).

Phys. Rev. Lett. は、インパクト・ファクターが7を越え、物理学の専門誌と しては最も高い評価を得ている。本研究グループは完全正値写像の数学理論に基づ く量子測定理論の研究で過去20年間最先端の研究を展開してきた。現在、測定理 論だけでなく量子情報の分野でもこの測定理論が標準理論の地位を得ている。Wig ner-Aaki-Yanase の定理は定性的な no-go 定理として知られていたが、本研究に より、Wigner の発見から50年を経て初めて精密な定量的関係が明らかにされた。 Jaynes-Cummings モデルに基づく量子計算素子の不可避な誤り確率に関する研 究成果は、Enk, Kimble, Banacloche 等によって、本研究とほぼ同じ頃独立に得 らた。一方, Itano は Jaynes-Cummings モデルに基づく仮定が不適切であると のコメントを発表している。後に、Jaynes-Cummings モデルにおいては、Bana cloche 等によって見いだされた制御場の位相ゆらぎに比例する誤り確率と本研究 で発見された光子数とスピンの保存によって導かれる誤り確率が同等であること が示された。従って、本研究の一般的議論から、Itano の批判に反してモデルによ らずに結論の正しさが示されたことになる。さらに、Banacloche は論文[4]の観点 を進めることにより、保存法則が成り立たない場合でも,一般に量子計算素子の誤 り確率が所要エネルギーに反比例するという仮説を立て,様々なモデルで実証を試 みている。一方、Lidar は本研究で発見された保存則から導かれる障害を回避する 方法として,DiVincenzo, Whaley らが全く独立な目的で研究してきたデコヒーレ ンス・フリー部分空間による普遍符号化という方法が有効であることを指摘した。 また,デコヒーレンス・フリー部分空間による普遍符号化における計算基底が、保 存量と両立可能な物理量に対応することなどが本研究から得られることなどがそ のリプライ

[5]M. Ozawa, Phys. Rev. Lett.91, 089802(2003).

で明らかにされている。従来は、量子ビットと環境との相互作用による雑音が Ek ert, Palma, Zurek 等によって明らかにされたが、近年は、量子計算素子の制御 系との相互作用による雑音の研究が盛んになってきたが、本研究がその研究動向の 端緒を切ったといえるであろう。今後の研究の展開としては、量子計算素子の誤り 確率が所要エネルギーに反比例するという Banacloche の仮説がどこまで普遍的 に成立するかという問題が理論的問題として興味深い。また,これまでの量子計算 のパラダイムでは、初期化と読み取りの容易さからスピンの成分などの物理量が計 算基底として自然に選ばれてきたが、本研究の成果により、保存法則の影響を受け ない物理的普遍符号化法の優位さが明らかになり、それに関する研究の進展が見込 まれる。

測定理論及び普遍的不確定性原理については、一部が以下の論文に発表された。

[6] M. Ozawa, Phys. Rev. A 63, 032109 (2001).

[7] M. Ozawa, Phys. Rev. A 67, 042105 (2003).

[8] M. Hotta and M. Ozawa, Phys. Rev. A, 70, 022327 (2004).

Phys. Rev. A は、インパクト・ファクターが 2.5 を越え、量子力学、量子光 学、量子情報分野の専門誌として高い評価を得ている。Heisenberg の不確定性原 理は、1927 年に量子力学において測定の擾乱が基本的な役割を果たしていること を明らかにするために提唱され、測定精度と擾乱の積が一定の下限を持つと主張さ れてきた。従来は、思考実験で議論されるだけであったが、実験を前提にした精密 な定量的議論がなされるようになったのは、精密測定技術が確立してきた 1980 年代になってからである。1970年代の後半から、Braginsky や Caves らは Hei senberg の不確定性原理に基づいて、重力波検出装置に標準量子限界と呼ばれる精 度の限界があると主張した。この主張は後に、Yuen によって批判され、Caves との間で論争になったが、Ozawa の提案した測定の相互作用により標準量子限界 を打破する測定が物理的に実現可能であることが示され、不確定性原理の普遍性に 疑問がもたれるようになった。この成果は Nature 誌の News and Views でも
取り上げられたが、それでは不確定性原理の正しい定式化はどのような関係である かという問題はその後、未解決問題として残された。本研究では、測定精度と擾乱 の間の正しい関係(普遍的不確定性原理)を初めて発見し、厳密な測定理論に基づ いて数学的に正当性を証明することによってこの問題を解決したものである。従来 の量子力学の教科書では、非可換な物理量の標準偏差の相反関係によって、測定精 度と擾乱の相反関係が証明されたとする誤った記述が見られたが、普遍的不確定性 原理によって初めて測定精度と擾乱の正しい関係が明らかにされた。この成果は、 古典的な定説を覆す新発見として科学技術や社会への大きな影響を持つことが見 込まれ、新聞や一般科学誌などで広く紹介された。

4. 研究実施体制

(1)体制



(2) メンバー表

分子量子コンピュータ研究グループ

氏名	所属	役職	研究項目	参加時期
北川勝浩	大阪大学大学院 基礎工学研究科	教授	初期化理論、 量子回路構成	H11.11~H17.3
右手浩一	大阪大学大学院 基礎工学研究科	助教授	高分子探索・開発	H11.11~H17.3
藤原彰夫	大阪大学大学院 理学研究科	助教授	量子情報理論・量 子推定理論	H11.11~H17.3
Duger Ulam- Orgikh	大阪大学大学院 基礎工学研究科	博士課程	量子回路構成法	H11.11~H14.3
山階克久	大阪大学大学院 基礎工学研究科	修士課程	量子回路構成法、 分子探索、NMR 実 験	H11.11~H12.3
東條悟	大阪大学大学院 基礎工学研究科	修士課程	分子探索、NMR 実 験	H11.11~H12.3
日野知子	大阪大学大学院 基礎工学研究科	研究 補助員	チーム事務(主)、 化学薬品管理	H11.11~H12.9
長嶋健介	大阪大学大学院 基礎工学研究科	博士課程	多 qubit 量子回路 構成法	H12.4~H17.3
白根仁志	大阪大学大学院 基礎工学研究科	修士課程	パルス開発、NMR 実験	H12.4~H13.3
香川晃徳	大阪大学大学院 基礎工学研究科	博士課程	偏極・量子計算融 合実験	H12.4~H14.3 H15.4~H17.3
西村考弘	大阪大学大学院 基礎工学研究科	修士課程	パルス開発、NMR 実験	H12.4~H14.3
片岡暁	大阪大学大学院 基礎工学研究科	修士課程	NMR 実験、初期化 理論	H13.4~H15.3
小西まどか	大阪大学大学院 基礎工学研究科	研究 補助員	チーム事務	H13.9~H17.3
武田和行	大阪大学大学院 基礎工学研究科	助手	分子初期化	H14.4~H17.3

齋藤暁	大阪大学大学院 基礎工学研究科	博士課程	初期化・混合状態 量子計算シミュレ ーション	H14.4~H17.3
吉金丈典	大阪大学大学院 基礎工学研究科	修士課程	量子計算実験	H14.4~H16.3
Robabeh Rahimi Darabad	大阪大学大学院 基礎工学研究科	博士課程	エンタングルメン ト理論・実験	H15.4~H17.3
烏頭尾尚	大阪大学大学院 基礎工学研究科	修士課程	固体 NMR 量子計 算実験	H15.4~H17.3
鶴亀宜崇	大阪大学大学院 基礎工学研究科	修士課程	多 qubit 量子計算 実験	H15.4~H17.3
犬飼宗弘	大阪大学大学院 基礎工学研究科	修士課程	固体 NMR 量子計 算実験	H15.4~H17.3
山村猛	大阪大学大学院 基礎工学研究科	修士課程	光核偏極実験	H15.4~H17.3
Peng Weng Kung	大阪大学大学院 基礎工学研究科	修士課程	偏極・量子計算分 子材料	H15.10~H17.3
田邊広光	大阪大学大学院 基礎工学研究科	修士課程	固体 NMR 量子計 算実験	H16.4~H17.3
矢部憲太郎	大阪大学大学院 基礎工学研究科	修士課程	初期化理論	H16.4~H17.3
山中祥吾	大阪大学大学院 基礎工学研究科	修士課程	偏極・量子計算融 合実験	H16.4~H17.3
今井寛	大阪大学大学院 理学研究科	博士課程	量子推定理論	H16.4~H17.3
首藤滋	大阪大学大学院 理学研究科	博士課程	量子情報理論・量 子推定理論	H16.4~H17.3

核スピン偏極基礎研究グループ

氏名	所属	役職	研究項目	参加時期
寺尾武彦	京都大学大学院 理学研究科	教授	核スピン偏極	H12.4~H17.3
武田和行	京都大学大学院 理学研究科	研究員	分子初期化	H12.4~H14.3

結晶量子コンピュータ研究グループ

氏名	所属	役職	研究項目	参加時期
清水 禎	物質・材料研究 機構強磁場研究 センター	主幹研究員	NMR 新技術開発	H11.11~H17.3
北澤 英明	物質・材料研究 機構ナノマテリ アル研究所	主席研究員	結晶探索・開発	H11.11~H17.3
後藤教	物質・材料研究 機構強磁場研究 センター	主任研究員	NMR 新技術開発	H11.11~H17.3
山口 文子	スタンフォード 大学エドワード ギンツトン研究 所	研究員 (ICORP山 本量子もつ れプロジェ クト)	結晶探索、結晶物 性理論、デカップ リング、初期化	H11.11~H17.3
阿部 拓	科学技術庁金属 材料技術研究所 (現:物質・材 料研究機構)	CREST 技術員	量子コンピュータ のための NMR 技 術開発	H12.4~H13.3
江口 幸恵	物質・材料研究 機構ナノマテリ アル研究所	CREST 研究補助員	量子コンピュータ 物質探索	H12.4~H16.10
端 健二郎	物質・材料研究 機構強磁場研究 センター	主任研究員	NMR 新技術開発	H13.4~H17.3
大木 忍	物質・材料研究 機構強磁場研究 センター	CREST 技術員	量子コンピュータ のための NMR 技 術開発	H13.4~H17.3
飯島 隆広	物質・材料研究 機構強磁場研究 センター	研究員	結晶量子コンピュ ータ用 NMR 技術 開発	H14.7~H17.3
藤部 康弘	物質・材料研究 機構強磁場研究 センター	ジュニア研 究員(筑波大 学大学院D 1)	結晶量子コンピュ ータ用 NMR 技術 開発	H16.4~H17.3

光量子コンピュータ研究グループ

氏名	所属	役職	研究項目	参加時期
竹内繁樹	北海道大学電子 科学研究所	助教授	多光子間もつれ合 い	H11.11~H17.3
辻野 賢治	北海道大学工学 研究科	博士課程	多光子間もつれあ い	H12.4~H16.3
Holger F. Hofmann	北海道大学電子 科学研究所	CREST 研究員	量子光学理論	H13.6~H14.3
川瀬 大輔	北海道大学情報 科学研究科	修士課程	もつれ合い光源の 構築	H15.4~H17.3
西村 和哉	北海道大学工学 研究科	修士課程	もつれ合い光源の 構築	H15.4~H17.3
岡本 亮	北海道大学工学 研究科	博士課程	線形工学位相ゲー トの実験	H16.4~H17.3

量子コンピュータ理論研究グループ

氏名	所属	役職	研究項目	参加時期
小澤 正直	東北大学大学院 情報科学研究科	教授	量子情報理論	H12.6~H17.3
西村 治道	オックスフォー ド大学	研究員	量子計算理論	H12.6~H14.8
Artur Ekert	ケンブリッジ大 学	教授	量子情報理論	H13.6~H17.3
唐澤 時代	東北大学大学院 情報科学研究科	博士課程	量子誤り訂正符号 理論	H16.4~H17.3

5. 研究期間中の主な活動

(1) ワークショップ・シンポジウム等

- ・量子情報技術ワークショップ
 開催期間:平成12年6月14-15日
 開催場所:NTT開発研究センタ(神奈川県厚木市)
 参加人数:約30名
 共同開催:・科学技術振興事業団 CREST「電子・光子等の機能制御」
 核スピンネットワーク量子コンピュータ研究チーム
 - ・科学技術振興事業団 ICORP「量子もつれ」プロジェクト
 - ·NTT 物性科学基礎研究所

(2)招聘した研究者等

・Christopher Alan Fuchs (Computing Science Research Center, Bell Labs, Lucent Technologies、研究員)
滞在期間:平成14年2月16-27日
滞在先:東北大学大学院情報科学研究科
目的:共同研究者小澤正直氏(東北大教授)との研究打ち合わせ

・Charles H. Bennet (IBM、特別研究員)
滞在期間:平成14年9月9-10日
滞在先 :大阪大学大学院基礎工学研究科
目的 :共同研究者小澤正直氏(東北大教授)、竹内繁樹氏(北大助教授)との研究打ち合わせ

・Hoi-Kwong Lo (MagiQ Technology Institute、主席研究員、研究開発担当副社長)
滞在期間:平成14年9月9-10日
滞在先 :大阪大学大学院基礎工学研究科
目的 :共同研究者小澤正直氏(東北大教授)、竹内繁樹氏(北大助教授)との研究打ち合わせ

6. 主な研究成果物、発表等

(1) 論文発表 (和文 21 件、英文 80 件)

(英文:原著論文)

- 1. K. Hashi, T. Shimizu, A. Goto, G. Kido, T. Suzuki, Experimental aspects of an NMR quantum computer with CeP, Applied Physics A 70 (2000), 359-360
- 2. Shigeki Takeuchi, Analysis of errors in linear-optics quantum computation, Physical Review A 61, 052302 (2000)
- 3. M. Ozawa and H. Nishimura, Local transition functions of quantum Turing machines, Theoretical Informatics and Applications Vol. 34 No. 5, 379 (2000)
- 4. Masanao Ozawa, Operations, disturbance, and simultaneous measurability, Physical Review A 63, 032109 (2001)
- 5. A. Goto, R. Miyabe, T. Shimizu, H. Kitazawa, K. Hashi, H. Abe, G. Kido, K. Shimamura, T. Fukuda, Investigation for the possible crystal NMR quantum computing device with BaLiF₃, Physica B 298 (2001), 585-589
- Masanao Ozawa, Controlling quantum state reductions, Physics Letters A 282 (2001), 336-342
- 7. Shigeki Takeuchi, Beamlike twin-photon generation by use of type II parametric downconversion, Optics Letters 26 (2001), 843-845
- M. Ozawa, Quantum measurement, information, and completely positive maps, Proceedings of the Fifth International Conference on Quantum Communication, Measurement and Computing, edited by P. Tombesi and O. Hirota, pp.97-106 (Plenum Pub Corp., N.Y., 2001)
- D. Ulam-Orgikh and M. Kitagawa, Spin Squeesing and decoherence limit in ramsey spectroscopy - Even sub-optimal entanglement can achieve absolute improvement-, Proceedings of the Fifth International Conference on Quantum Communication, Measurement and Computing, edited by P. Tombesi and O. Hirota, pp. 453-456 (Plenum Pub Corp., N.Y., 2001)
- Kazuyuki Takeda, K. Takegoshi and Takehiko Terao, Dynamic nuclear polarization by photoexcited-triplet electron spins in polycrystalline samples, Chemical Physics Letters 345 (2001), Pages 166-170
- 11. Holger F. Hofmann, Toshiki Ide, Takayoshi Kobayashi, Akira Furusawa, Information losses in continuous-variable quantum teleportation, Physical Review A 64, 040301(R) (2001)
- 12. Akio Fujiwara, Quantum birthday problems: geometrical aspects of quantum random coding, IEEE Transactions on Information Theory 47, 2644-2649 (2001)
- 13. Duger Ulam-Orgikh and Masahiro Kitagawa, Spin squeezing and decoherence limit in Ramsey spectroscopy, Physical Review A 64, 052106 (2001)
- 14. Shigeki Takeuchi, A simple quantum computer: Experimental realization of quantum computation algorithms with linear optics, Electronics and Communications in Japan (Part III: Fundamental Electronic Science) Volume 84

Issue 11 (2001), p.52-60

- 15. Akio Fujiwara, Estimation of SU(2) operation and dense coding: An information geometric approach, Physical Review A 65, 012316 (2002)
- Toshiki Ide, Holger F. Hofmann, Takayoshi Kobayashi, and Akira Furusawa, Continuous-variable teleportation of single-photon states, Physical Review A 65, 012313 (2002)
- A. Goto, T. Shimizu, R. Miyabe, K. Hashi, H. Kitazawa, G. Kido, K. Shimamura, T. Fukuda, Investigation of nuclear-spin couplings in the lithium fluorides as possible candidates for crystal nuclear magnetic resonance quantum computing devices, Applied Physics A 74 (2002), 73-77
- Masanao Ozawa, Conservation Laws, Uncertainty Relations, and Quantum Limits of Measurements, Physical Review Letters 88, 050402 (2002)
- Kenjiro Hashi, Tadashi Shimizu, Atsushi Goto, Tsukasa Kiyoshi, Shinji Matsumoto, Hitoshi Wada, Teruaki Fujito, Ken-ichi Hasegawa, Masatoshi Yoshikawa, Takashi Miki, Satoshi Ito and Mamoru Hamada, Observation of a High Resolution Proton NMR with a 920 MHz Superconducting Magnet, Chemistry Letters, Vol. 31 No. 3 (2002), pp.370-371
- Holger F. Hofmann and Shigeki Takeuchi, Quantum Filter for Nonlocal Polarization Properties of Photonic Qubits, Physical Review Letters 88, 147901 (2002)
- Harumichi Nishimura and Masanao Ozawa, Computational complexity of uniform quantum circuit families and quantum Turing machines, Theoretical Computer Science, Volume 276, Issues 1-2 (2002), Pages 147-181
- 22. Toshiki Ide, Holger F. Hofmann, Takayoshi Kobayashi, and Akira Furusawa, Gain tuning and fidelity in continuous-variable quantum teleportation, Physical Review A 65, 062303 (2002)
- 23. Kenjiro Hashi, Tadashi Shimizu, Atsushi Goto, Tsukasa Kiyoshi, Shinji Matsumoto, Hitoshi Wada, Teruaki Fujito, Ken-ichi Hasegawa, Masatoshi Yoshikawa, Takashi Miki et al., Achievement of a 920MHz High Resolution NMR, Journal of Magnetic Resonance 156 (2002), 318-321
- 24. Masanao Ozawa, Position measuring interactions and the Heisenberg uncertainty principle, Physics Letters A 299 (2002), 1-7
- Masanao Ozawa, Conservative Quantum Computing, Physical Review Letter 89, 057902 (2002)
- 26. K. Takegoshi and Takehiko Terao, ¹³C nuclear Overhauser polarization nuclear magnetic resonance in rotating solids: Replacement of cross polarization in uniformly ¹³C labeled molecules with methyl groups, The Journal of Chemical Physics Volume 117 Issue 4 (2002), pp. 1700-1707
- 27. Harumichi Nishimura, On quantum computation with some restricted amplitudes, Lecture Notes in Computer Science 2285, 311-322 (2002)

- 28. Holger F. Hofmann and Shigeki Takeuchi, Quantum phase gate for photonic qubits using only beam splitters and postselection, Physical Review A 66, 024308 (2002)
- 29. Elham Kashefi, Harumichi Nishimura and Vlatko Vedral, A note on quantum one-way permutations, Quantum Information and Computation Vol.2 No.5 (2002), pp. 379-398
- 30. Kazuyuki Takeda, K. Takegoshi, and Takehiko Terao, Zero-field electron spin resonance and theoretical studies of light penetration into single crystal and polycrystalline material doped with molecules photoexcitable to the triplet state via intersystem crossing, The Journal of Chemical Physics, Volume 117, Issue 10 (2002), pp. 4940-4946
- 31. Atsushi Goto, Tadashi Shimizu and Kenjiro Hashi, Magnon-Mediated NMR Quantum Gates in a One-Dimensional Antiferromagnet, Journal of the Physical Society of Japan, Vol.71 No.9 (2002), pp.2125-2128
- 32. Holger F. Hofmann, Causality in quantum teleportation: Information extraction and noise effects in entanglement distribution, Physical Review A 66, 032317 (2002)
- M. Ozawa, Halting of quantum Turing machines, in Unconventional Models of Computation, edited by C. S. Calude, M. J. Dinneen, and F. Peper, Lecture Notes in Computer Science 2509, 58-65 (Springer, Berlin, 2002)
- 34. Kenji Tsujino, Shigeki Takeuchi, and Keiji Sasaki, Detailed analysis of the fidelity of quantum teleportation using photons: Considering real experimental parameters, Physical Review A 66, 042314 (2002)
- 35. D. Ulam-Orgikh and M. Kitagawa, Entanglement of an assembly of N identical two level atoms, Proceedings of the 7th International Symposium on Foundations of Quantum Mechanics in the Light of New Technology (ISQM-Tokyo'01), Edited by Y. A. Ono and K. Fujikawa, World Scientific Publishing, pp. 287-290 (2002)
- 36. A. Fujiwara, Statistical estimation of a quantum channel, Proceedings of the 7th International Symposium on Foundations of Quantum Mechanics in the Light of New Technology (ISQM-Tokyo'01), Edited by Y. A. Ono and K. Fujikawa, World Scientific Publishing, pp. 40-43 (2002)
- 37. S. Takeuchi, Twin Photon Beams for Single Photon Generation, Proceedings of the 7th International Symposium on Foundations of Quantum Mechanics in the Light of New Technology (ISQM-Tokyo'01), Edited by Y. A. Ono and K. Fujikawa, World Scientific Publishing, pp. 98-103 (2002)
- 38. Kenji Tsujino, Shigeki Takeuchi and Keiji Sasaki, A detailed analysis on the fidelity of quantum teleportation using photons, Proceedings of the 7th International Symposium on Foundations of Quantum Mechanics in the Light of New Technology (ISQM-Tokyo'01), Edited by Y. A. Ono and K. Fujikawa, World Scientific Publishing, pp. 76-79 (2002)
- 39. H. F. Hofmann, T. Ide, T. Kobayashi and A. Furusawa, Information extraction and quantum state distortions in continuous variable quantum teleportation,

Proceedings of the 7th International Symposium on Foundations of Quantum Mechanics in the Light of New Technology (ISQM-Tokyo'01), Edited by Y. A. Ono and K. Fujikawa, World Scientific Publishing, pp. 61-64 (2002)

- 40. Atsushi Goto, Tadashi Shimizu, Kenjiro Hashi, Hideaki Kitazawa, and Shinobu Ohki, Decoupling-free NMR quantum computer on a quantum spin chain, Physical Review A 67, 022312 (2003)
- Masahiro Kitagawa, Experimental Quantum Computation with Molecules, edited by Masami Ito and Masafumi Toyama, Lecture Notes in Computer Science 2450, 21-27 (Springer, Berlin, 2003)
- 42. M. Ozawa, Universally valid reformulation of the Heisenberg uncertainty principle on noise and disturbance in measurement, Phys. Rev. A 67, 042105 (2003)
- 43. M. Ozawa, Quantum state reduction and the repeatability hypothesis, Annals of the Japan Association for Philosophy of Science vol.11, 107-121 (2003)
- 44. Kenjiro Hashi, Atsushi Goto, Ryo Miyabe, Tadashi Shimizu, Giyuu Kido, Shinobu Ohki, and Susumu Machida, Optically pumped NMR in semiconductor InP, Proceedings of the 23rd International Conference on Low Temperature Physics, Physica B: Condensed Matter, Volumes 329-333 Part 2 (2003), Pages 1235-1236
- 45. Atsushi Goto, Tadashi Shimizu, Kenjiro Hashi, Hideaki Kitazawa, Shinobu Ohki and Sachie Eguchi, A decoupling-free solid-state NMR quantum computer, Proceedings of the 23rd International Conference on Low Temperature Physics, Physica B: Condensed Matter, Volumes 329-333 Part 2 (2003), Pages 1621-1622
- 46. 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. Shappiro and O. Hirota, pp. 275-280 (Rinton Press, Princeton, 2003)
- 47. M. Ozawa, Quantum limits of measurement and computing induced by conservation laws and uncertainty relations, Proceedings of the Sixth International Conference on Quantum Communication, Measurement and Computing, edited by J. H. Shappiro and O. Hirota, pp. 175-180 (Rinton Press, Princeton, 2003)
- A. Goto, K. Hashi, T. Shimizu, R. Miyabe, S. Ohiki, G. Kido, S. Machida, Optical pumping system for a qubit initializar in solid-state NMR quantum computer, Jpn. J. Appl. Phys. Vol. 42 (2003) Part 1, No. 5A, pp.2864-2866
- 49. Atsushi Goto, Kenjiro Hashi, Tadashi Shimizu, Shinobu Ohki, Takahiro Iijima and Giyuu Kido, Development of a nuclear spin polarizer with the optical pumping method, Papers from the 8th International Symposium of Advanced Physical Fields on Advanced Materials for Quantum Computing, Superlattices and Microstructures 32, 303-307 (2003)
- 50. 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, Papers from the 8th International Symposium of

Advanced Physical Fields on Advanced Materials for Quantum Computing, Superlattices and Microstructures 32, 309-312 (2003)

- 51. Tadashi Shimizu, Atsushi Goto, Kenjiro Hashi, Shinobu Ohki, An NMR quantum computer of the semiconductor CdTe, Papers from the 8th International Symposium of Advanced Physical Fields on Advanced Materials for Quantum Computing, Superlattices and Microstructures 32, 313-316 (2003)
- 52. Hideaki Kitazawa, Kenjiro Hashi, Sachie Eguchi, Tadashi Shimizu, Atsushi Goto and Giyuu Kido, NMR study of YP and YPO₄ as 2-qubits quantum computers, Papers from the 8th International Symposium of Advanced Physical Fields on Advanced Materials for Quantum Computing, Superlattices and Microstructures 32, 317-322 (2003)
- 53. M. Ozawa, Ozawa replies [to Comment on "Conservative Quantum Computing"], Phys. Rev. Lett. 91, 089802 (2003)
- 54. M. Ozawa, Physical content of Heisenberg's uncertainty relation: limitation and reformulation, Phys. Lett. A 318, 21-29 (2003)
- 55. M. Ozawa, Uncertainty principle for quantum instruments and computing, International Journal of Quantum Information vol.1 No.4, 569-588 (2003)
- 56. Takahiro Iijima, Kenjiro Hashi, Atsushi Goto, Tadashi Shimizu and Shinobu Ohki, Homonuclear and Heteronuclear Indirect Spin-Spin Couplings in InP Studied by ³¹P Cross Polarization NMR Spectra under Magic-Angle Spinning, Jpn. J. Appl. Phys. Vol. 42 (2003) Part 2, No. 12A, L1411-L1413
- 57. M. Ozawa, Uncertainty relations for joint measurements of noncommuting observables, Phys. Lett. A 320, 367-374 (2003)
- 58. 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)
- 59. M. Ozawa, Quantum measurements, instruments, and uncertainty principle, Interdisciplinary Information Sciences 10, 69-81 (2004)
- 60. 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)
- Takahiro Iijima, Kenjiro Hashi, Atsushi Goto, Tadashi Shimizu and Shinobu Ohki, Indirect Spin-Spin Coupling in InP Investigated by Triple-Resonance NMR under Magic-Angle Spinning, Journal of the Physical Society of Japan, Vol.73 No.4 (2004), pp.1045-1049
- 62. K. Hashi, A. Goto, T. Shimizu, T. Iijima and S. Ohki, High field NMR up to 23.5T with a resistive magnet, Physica B: Condensed Matter, Volumes 346-347 (2004), Proceedings of the 7th International Symposium on Research in High Magnetic Fields, Pages 531-533

- 63. Takahiro Iijima, Kenjiro Hashi, Atsushi Goto, Tadashi Shimizu and Shinobu Ohki, Indirect nuclear spin-spin coupling in InP studied by CP/MAS NMR, Physica B: Condensed Matter, Volumes 346-347 (2004), Proceedings of the 7th International Symposium on Research in High Magnetic Fields, Pages 476-478
- 64. Tadashi Shimizu, Kenjiro Hashi, Atsushi Goto, Masataka Tansyo, Tsukasa Kiyoshi, Shinji Matsumoto, Hitoshi Wada, Teruaki Fujito, Ken-ichi Hasegawa, Noriaki Kirihara, Hiroto Suematsu, Yoshiki Kida, Masatoshi Yoshikawa, Takashi Miki, Satoshi Ito, Mamoru Hamada, Seiji Hayashi, Overview of the development of high-resolution 920MHz NMR in NIMS, Physica B: Condensed Matter, Volumes 346-347 (2004), Proceedings of the 7th International Symposium on Research in High Magnetic Fields, Pages 528-530
- 65. Atsushi Goto, Kenjiro Hashi, Tadashi Shimizu, Xiaogang Wen, Shinobu Ohki, Takahiro Iijima and Giyuu Kido, Efficiency of the optical pumping qubit initializer for solid-state NMR quantum computers, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, Volumes 272-276 (2004), Supplement 1, Proceedings of the International Conference on Magnetism, Pages E1669-E1670
- 66. M. Ozawa, Uncertainty relations for noise and disturbance in generalized quantum measurements, Annals of Physics Volume 311, Issue 2, Pages 350-416 (2004)
- Kenjiro Hashi, Tadashi Shimizu, Atsushi Goto, Takahiro Iijima and Shinobu Ohki, NMR Measurements with a Hybrid Magnet, Japanese Journal of Applied Physics Vol. 43, No. 8A, 2004, pp.L1020-L1022
- Kazuyuki Takeda, K. Takegoshi and Takehiko Terao, Dynamic Nuclear Polarization by Electron Spins in the Photoexcited Triplet State: I. Attainment of Proton Polarization of 0.7 at 105 K in Naphthalene, Journal of the Physical Society of Japan Vol.73 No.8 (2004), pp.2313-2318
- Kazuyuki Takeda, K. Takegoshi and Takehiko Terao, Dynamic Nuclear Polarization by Electron Spins in the Photoexcited Triplet State: II. High Polarization of the Residual Protons in Deuterated Naphthalene, Journal of the Physical Society of Japan Vol.73 No.8 (2004), pp.2319-2322
- M. Hotta and M. Ozawa, Quantum estimation by local observables, Phys. Rev. A70, 022327 (2004)
- Tadashi Shimizu, Atsushi Goto, Kenjiro Hashi and Shinobu Ohki, Trial Measurement of NMR in a Bitter Magnet of NIMS, Chemistry Letters 33, pp.1502-1503 (2004)
- 72. Takahiro Iijima, Kenjiro Hashi, Atsushi Goto, Tadashi Shimizu and Shinobu Ohki, Shallow Donor Impurity States of InP Studied by ³¹P NMR Spectra under Magic-Angle Spinning, Japanese Journal of Applied Physics Vol. 43, No. 11A (2004), pp.L1387-L1389
- 73. Masanao Ozawa, Universal Uncertainty Principle and Quantum State Control under Conservation Laws, Quantum Communication, Measurement and

Computing: The Seventh International Conference on Quantum Communication, Measurement and Computing, AIP Conference Proceedings Vol. 734, American Institute of Physics, pp. 95-98 (2004)

- 74. Kazuyuki Takeda, Two-Qubit Gates Driven by Selectively Recovered Dipolar Interactions in Magic Angle Spinning Solid-State NMR, Quantum Communication, Measurement and Computing: The Seventh International Conference on Quantum Communication, Measurement and Computing, AIP Conference Proceedings Vol. 734, American Institute of Physics, pp. 183-186 (2004)
- 75. Masanao Ozawa, Perfect correlations between noncommuting observables, Physics Letters A Volume 335, Issue 1, Pages 11-19 (2004)
- 76. Akira SaiToh and Masahiro Kitagawa, Numerical analysis of boosting scheme for scalable NMR quantum computation, Physical Review A 71, 022303 (2005)
- Harumichi Nishimura and Masanao Ozawa, Uniformity of quantum circuit families for error-free algorithms, Theoretical Computer Science Volume 332, Issues 1-3, Pages 487-496 (2005)
- 78. Kazuyuki Takeda, Takeshi Yamamura, Akinori Kagawa, Masahiro Kitagawa, Enhancement of efficiency in photo-excitation to the triplet state by laser-pulse reshaping, Journal of Magnetic Resonance (accepted)
- 79. Y. Kawano, S. Yamashita, M. Kitagawa, Explicit implementation of quantum circuits on a quantum-cellular-automata-like architecture, Physical Review A (accepted)
- 80. Y. Kawano, K. Kimura, H. Sekigawa, M. Noro, K. Shirayanagi, M. Kitagawa, and M. Ozawa, Existence of the exact CNOT on a quantum computer with the exchange interaction, Quantum Information Processing (accepted)
- (和文)
- 北川勝浩,量子コンピュータへの挑戦・量子ソロバンから量子コンピュータへ・,生産と 技術 第52巻 第3号 (2000), p.67-69
- 2. 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), p.671-676
- 3. 竹内繁樹, 光量子ビットを用いた量子計算, 光学 第 29 巻 第 12 号 (2000), p.745-750
- 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 2001 年1月号,17-25
- 5. 北川勝浩, 分子で作る量子コンピュータ, 科学と工業 第 54 巻 第 4 号 (2001), p.459-462
- 6. 竹内繁樹, 量子計算ってなに?, システム/制御/情報 45 巻 6 号 (2001), p.351-352
- 7. 北川勝浩, NMR 量子コンピュータの近況, 数理科学 456 号 (2001), p.56-63
- 8. 竹内繁樹, 量子計算、量子情報通信の未来と展望, 数理科学 456 号 (2001), p.64-71
- 9. 竹内繁樹, 量子情報デバイスとナノテクノロジー, 機能材料 第22巻 第1号 (2002), p.44-51

- 10. 北川勝浩, NMR を用いる量子コンピュータのアーキテクスチャ, 分子ナノテクノロジ ー~分子の能力をデバイス開発に活かす, 化学同人, 187-197 (2002)
- 11. 藤原彰夫, 量子通信路符号化-Holevoの主題と変奏-, 電子情報通信学会誌 2002 年 8月号, 586-590
- 12. 竹内繁樹, 量子コンピューター研究の近況レポート, 応用物理 第 71 巻 11 号 (2002), pp.1367-1371
- 13. Shigeki Takeuchi, I wish to be a photon juggler, Japan Society of Applied Physics International No.7 (2003), pp.25-26
- 北川勝浩, NMR 量子コンピューティングの現状, Computer Today 《量子情報技術》 最前線からの展望, pp.10-15, サイエンス社, 2003
- 15. 北川勝浩, NMR 量子コンピュータの近況, 別冊・数理科学「量子情報科学とその展開-量子コンピュータ・暗号・情報通信-」, pp.111-120, サイエンス社, 2003
- 16. 竹内繁樹, 量子計算の実験, 別冊・数理科学「量子情報科学とその展開-量子コンピュー タ・暗号・情報通信-」, pp.57-63, サイエンス社, 2003
- 17. 竹内繁樹, 量子計算・量子情報通信の未来と展望, 別冊・数理科学「量子情報科学とその展開-量子コンピュータ・暗号・情報通信-」, pp.191-198, サイエンス社, 2003
- 18. 竹内繁樹, 量子コンピューター ・光の量子的な性質の究極の応用・, O plus E <特
 集:光技術の極限を探して> vol.26 No.1 (2004), pp.53-57
- 19. 小澤正直, 『不確定性原理・保存法則・量子計算』, 日本物理学会誌第 59 巻第 3 号, 157-165 (2004)
- 20. 竹内繁樹,線形光学素子を用いた量子コンピューティング,光学第 33 巻 5 号,284-290 (2004)
- 21. 後藤敦, 清水禎, 端健二郎, 光ポンピング NMR 法で見た化合物半導体の励起スペクト ル, 固体物理 vol.39 No.8 (2004), pp.11-21

(その他の著作物)

- 北川勝浩,量子コンピューター,物理がわかる,AERA Mook, pp. 74-75,2002年5月10 日,朝日新聞社
- 竹内繁樹,量子コンピュータ超並列計算のからくり,ブルーバックスシリーズ(講談社),2005年2月21日第1版発行
- (2) 口頭発表

①招待、口頭講演 (国内学会 77件、国際学会 62件)

- M. Kitagawa, K. Yamashina, S. Tojyo and D. Ulam-Orgikh, In Search for Molecules which Calculate Quantum Mechanically, the Third SANKEN International Symposium on Advanced Nanoelectronics: Devices, Materials and Computing, Osaka University, Osaka, Japan, March 14-15, 2000 [invited]
- Masanao Ozawa, Quantum Measurement, Information, and Completely Positive Maps, the 5th International Conference on Quantum Communication Measurement & Computing (QCM&CY2K), Capri, Italy, July 3-8, 2000 [invited]

- T. Terao, Dihedral angle determination and optical nuclear polarization, XIX International Conference on Magnetic Resonance in Biological Systems (the XIXth ICMRBS), Florence, Italy, August 20-25, 2000
- 4. A. Goto, R. Miyabe, T. Shimizu, H. Kitazawa, K. Hashi, H. Abe, G. Kido, K. Shimamura and T. Fukuda, Investigation for the possible crystal NMR quantum computing device with BaLiF₃, The 14th International Conference on High Magnetic Fields in Semiconductor Physics, Matsue, Japan, September 24-29, 2000
- 小澤正直,間接測定における状態変化と不確定性原理,日本物理学会第55回年次大会, 新潟大学(新潟県),2000年9月22-25日
- 北川勝浩,量子計算:その物理的実現 -NMR 量子コンピュータを中心として-,情報処理学会 第61回全国大会,愛媛大学,2000年10月3-5日 [招待講演]
- 7. 武田和行, 竹腰清乃理, 寺尾武彦, 光・マイクロ波誘導核偏極, 第39回NMR討論会, 東 京都, 2000 年 11 月 9 日
- 8. 北川勝浩, More Qubits for Molecular NMR Quantum Computation, 第4回量子情報 技術研究会 (QIT4), 東京工業大学, 2000 年 11 月 29-30 日
- 9. 竹内繁樹, 光子を用いた量子情報処理, 計測自動制御学会第7回センシングフォトニ クス部会講演会「新しい光応用技術 XV」,理化学研究所(埼玉県和光市),2000年11 月22日 [招待講演]
- 10. 北川勝浩, 量子コンピュータ開発の最前線・核スピン量子コンピュータの多ビット化・, 情報処理学会第7回MPSシンポジウム「新しい計算パラダイム~量子/分子コンピュ ータ最前線~」,東京,平成12年12月14-15日 [招待講演]
- T. Terao, Dynamic nuclear polarization by photo-excited electron spins, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, Pacifichem 2000, Honolulu, Hawaii, December 14 -19, 2000
- 12. 北川勝浩,核スピン量子コンピュータの多ビット化,応用電子物性分科会特別研究会
 21 世紀の幕開け ~量子コンピュータの実現にむけて~,東京工業大学(東京都),
 2001年1月18日 [招待講演]
- 13. 北川勝浩, NMR 量子コンピュータの現状と課題,応用物理学会量子エレクトロニクス 研究会「量子情報処理」,上智大学軽井沢セミナーハウス(長野県),2001年1月25-27
 日 [招待講演]
- 14. 竹内繁樹, 量子コンピュータと光技術, レーザー学会学術講演会第 21 回年次大会, 東京国際フォーラム(東京都), 2001年1月 30-31日 [招待講演]
- 15. 辻野賢治, 竹内繁樹, 光子数検出器を用いた量子テレポーテーション実験の検証, 日本 物理学会第 56 回年次大会, 中央大学(東京都), 2001 年 3 月 27-30 日
- 16. 小澤正直, 情報理論と量子力学:その融合と今後の仮題, 日本物理学会第56回年次大会, 中央大学(東京都), 2001 年 3 月 27-30 日
- Masanao Ozawa, Quantum Operations, Measurements, and Computing, Euro Workshop on Quantum Computer Theory: In Search of Viable Optimal Design, Turino, Italy, June 17-30, 2001
- 18. Takehiko Terao, Dynamic Nuclear Polarization by Photo-Excited Electron Spins,

2001 Gordon Research Conference on Magnetic Resonance, Roger Williams University, Bristol, Rhode Island, June 17-22, 2001

- M. Ozawa, Entropy changes in generalized quantum measurements and completely positive map valued measures, the Second ESF QIT Conference: Quantum Information Theory and Quantum Computing, Gdansk, Poland, July 10-18, 2001
- Shigeki Takeuchi, Quantum information technology using photons, CLEO Pacific Rim 2001, Makuhari Messe, Makuhari, July 15-19, 2001 [invited]
- 21. Masahiro Kitagawa, Challenges in bulk-ensemble NMR quantum computation, ERATO mini-symposium, JST SCIENCE CENTER, August 24, 2001
- 22. T. Terao, K. Takeda, and K. Takegoshi, Dynamic nuclear polarization by photo-excited electron spins, 14th conference–ISMAR (International Society of Magnetic Resonance) 2001, Rhodes, Greece, August 19-23, 2001
- 23. Shigeki Takeuchi, Twin photon Beams for Single photon Generation, the 7th International Symposium on Foundations Mechanics in the Light of New Technology (ISQM-Tokyo'01), Saitama, Japan, August 27-30, 2001 [invited]
- T. Terao, Studies on Dynamic Nuclear Polarization Induced by Laser and Microwave, 2nd Alpine Conference on Solid State NMR, Chamonix-Mont Blanc, France, September 9-13, 2001
- 25. Akio Fujiwara, Information geometry of dense coding, ERATO workshop on Information Science 2001 (EQIS'01), Tokyo, Japan, September 6-8, 2001
- 26. Shigeki Takeuchi, Quantum information technology using photons, ERATO workshop on Information Science 2001 (EQIS'01), Tokyo, Japan, September 6-8, 2001
- Harumichi Nishimura, On quantum computation with some restricted amplitudes, ERATO workshop on Information Science 2001 (EQIS'01), Tokyo, Japan, September 6-8, 2001
- Masanao Ozawa, Quantum measurements and information theory, ERATO workshop on Information Science 2001 (EQIS'01), Tokyo, Japan, September 6-8, 2001
- 29. 竹内繁樹, 岡本 亮, 笹木敬司, 蛍光光子対を用いた単一光子源の光子対分布, 日本物 理学会 2001 年秋季大会, 徳島文理大学(徳島県), 2001 年 9 月 17-20 日
- 30. 辻野賢治, 竹内繁樹, 笹木敬司, 混合状態にある光子対源を用いた量子テレポーテーションの忠実度解析, 日本物理学会 2001 年秋季大会, 徳島文理大学(徳島県), 2001 年9月 17-20 日
- H. F. Hofmann, 井出俊毅, 古沢明, 小林孝嘉, Transfer operator description for continuous variable quantum teleportation, 日本物理学会 2001 年秋季大会, 徳島文 理大学(徳島県), 2001 年 9 月 17-20 日
- 32. 清水禎, 核スピンデバイスと量子計算機, 東北大学通研研究会「大規模量子コンピュー タの実現に向けて」, 東北大学電気通信研究所(仙台市), 2001 年 9 月 27-28 日
- 33. 竹内繁樹, 光子を用いた量子計算, 東北大学通研研究会「大規模量子コンピュータの実

現に向けて」,東北大学電気通信研究所(仙台市),2001年9月27-28日 [invited]

- 34. 武田和行, 光励起三重項電子スピンを利用した動的核偏極, 第 30 回固体 NMR・材料研 究会(大阪府守口市), 2001 年 10 月 12 日
- 35. 古布村亮次, 武田和行, 阿部智彦, 竹腰清乃理, 寺尾武彦, 光・マイクロ波誘導偏極核ス ピンの高磁場観測, 第 40 回 NMR 討論会(京都市), 2001 年 11 月 14-16 日
- 36. T. Terao, Dynamic Nuclear Polarization Induced by Laser and Microwave, Japan-Taiwan NMR Symposium, Kyoto, Japan, November 13, 2001
- 37. Holger F. Hofmann, Kenji Tsujino, and Shigeki Takeuchi, Effects of noisy entangled state transmission on quantum teleportation, 第 5 回量子情報技術研究会 (QIT5), NTT 厚木研究開発センタ(神奈川県厚木市), 2001 年 11 月 12-13 日
- 38. Shigeki Takeuchi, Twin photon beams and high quantum efficiency multi-photon counters, Australasian Conference on Optics, Lasers and Spectroscopy 2001 (ACOLS2001), The University of Queensland Brisbane, Queensland, Australia, December 3-6, 2001
- 39. H. F. Hofmann, K. Tsujino, S. Takeuchi, Effects of transmission errors in entanglement distribution on a teleported quantum state, Australasian Conference on Optics, Lasers and Spectroscopy 2001 (ACOLS2001), The University of Queensland Brisbane, Queensland, Australia, December 3-6, 2001
- 40. 清水禎, 端健二郎, 後藤敦, 大木忍, 超 20T 強磁場 NMR の開発, 第6回固体 NMR 技術交流会, 東京工業大学(東京都), 2002 年 1 月 18 日 [招待講演]
- 41. 後藤敦,清水禎,端健二郎,NMR 量子計算機概論,千葉大学先端科学技術講演討論会, 千葉大学(千葉市),2002年2月14-15日 [招待講演]
- 42. A. Goto, T. Shimizu, K. Hashi, H. Kitazawa, S. Ohki, S. Eguchi, Magnon-mediated quantum gate in a nuclear spin quantum computer, NML International Symposium on "Quantum Computation and Communication with Nano Scale Materials", National Institute for Materials Science, Tsukuba, March 7-8, 2002 [invited]
- Masahiro Kitagawa, Initialization Problem of NMR Quantum Computers, the 10th JST International Symposium on Quantum Computing, Tokyo, Japan, March 12-14, 2002
- Harumichi Nishimura, On Quantum Computation with Some Restricted Amplitudes, 19th International Symposium on Theoretical Aspects of Computer Science, March 14-16, 2002
- 45. 竹内繁樹, 光子を用いた量子計算, 電子情報通信学会 電子デバイス・量子情報技術合 同研究会 2001 年度 3 月, 東京都, 2002 年 3 月 15 日 [招待講演]
- 46. 北川勝浩, 典型系列に基づく NMR 量子計算機の初期化, 日本物理学会第 57 回年次大 会, 立命館大学(滋賀県草津市), 2002 年 3 月 24-27 日
- 47. 後藤敦,清水禎,端健二郎,北澤英明,大木忍,電子媒介型NMR 量子ゲートの提案,日本物理学会第57回年次大会,立命館大学(滋賀県草津市),2002年3月24-27日
- 48. 清水禎, NMR 量子コンピュータの開発, 日本物理学会第 57 回年次大会, 立命館大学 (滋賀県草津市), 2002 年 3 月 24-27 日 [招待講演]

- 49. 北澤英明, 辻井直人, 江口幸恵, 木戸義勇, 幾何学的フラストレーション系 TbPdAl の 置換効果, 日本物理学会第 57回年次大会, 立命館大学(滋賀県草津市), 2002年3月 24-27日
- 50. 北川勝浩, NMR 量子計算, 2002 年春季第 49 回応用物理学関係連合講演会, 東海大学 (神奈川県平塚市), 2002 年 3 月 27-30 日 [招待講演]
- 51. 竹内繁樹, 光子を用いた量子計算, 2002 年春季第 49 回応用物理学関係連合講演会, 東海大学(神奈川県平塚市), 2002 年 3 月 27-30 日 [招待講演]
- 52. 竹内繁樹, ホフマン・F・ホルガ, 光子を用いた量子計算, 2002 年春季第 49 回応用物理 学関係連合講演会シンポジウム, 東海大学(神奈川県平塚市), 2002 年 3 月 27-30 日 [招 待講演]
- 53. T. Terao, Cross Polarization in Solid-State NMR: Replacement and Reinforcement, An International NMR Symposium, Tokyo, April 11-12, 2002
- 54. 北川勝浩, NMR 量子コンピュータの初期化問題, 第 6 回量子情報技術研究会 (QIT6), 京都大学(京都市), 2002 年 5 月 27-28 日 [招待講演]
- 55. 藤原彰夫, 量子通信路の数理, 第6回量子情報技術研究会 (QIT6), 京都大学 (京都市), 2002 年 5月 27-28 日
- 56. 清水禎,後藤敦,端健二郎,北澤英明,NMR 量子計算機の開発,第6回量子情報技術研 究会 (QIT6),京都大学(京都市), 2002 年 5 月 27-28 日
- 57. Holger F. Hofmann, Shigeki Takeuchi, Realization of quantum operations on photonic qubits by linear optics and post-selection, 第 6 回量子情報技術研究会 (QIT6), 京都大学(京都市), 2002 年 5 月 27-28 日
- 58. M. Kitagawa, Initialization and Scalability of NMR Quantum Computers, The Sixth International Conference on Quantum Communication, Measurement and Computing (QMC&C2002), Cambridge, Massachusetts USA, July 22-26, 2002 [invited]
- 59. M. Ozawa, Quantum limits of measurement and computing induced by conservation laws and uncertainty relations, The Sixth International Conference on Quantum Communication, Measurement and Computing (QCM&C2002), Cambridge, Massachusetts USA, July 22-26, 2002 [invited]
- 60. Atsushi Goto, Tadashi Shimizu, Kenjiro Hashi, Hideaki Kitazawa, Shinobu Ohki and Sachie Eguchi, Technical developments for solid-state NMR quantum computers, the 23rd International Conference on Low Temperature Physics, Hiroshima, Japan, August 20-27th, 2002
- 61. Kenjiro Hashi, Atsushi Goto, Ryo Miyabe, Tadashi Shimizu, Giyuu Kido, Shinobu Ohki, and Susumu Machida, Optical pumping NMR in InP, the 23rd International Conference on Low Temperature Physics, Hiroshima, Japan, August 20-28th, 2002
- 62. M. Ozawa, Halting problem for quantum Turing machines, First Feynman Festival, University of Maryland College Park, Maryland, U.S.A., August 23-28, 2002
- 63. T. Terao, New Approaches for Dipolar Recoupling and Nuclear Polarization, XX International Conference on Magnetic Resonance in Biological Systems (the XXth

ICMRBS), Tronto, Canada, August 25-30th, 2002

- 64. Masahiro Kitagawa, Akira Kataoka, Efficient initialization scheme for real quantum computatin using NMR, ERATO workshop on Quantum Information Science 2002 (EQIS'02), Tokyo, Japan, September 5-8, 2002
- 65. 竹内繁樹, ホフマン・F・ホルガ, Single entangled-photon pair generation using parametric down conversion and linear optics, 日本物理学会 2002 年秋季大会, 中部 大学 (愛知県春日井市), 2002 年 9 月 6-9 日
- 66. 小澤正直,情報処理の量子力学的制約,京都大学基礎物理学研究所短期研究会「量子カ オス:理論と実験の現状」,京都大学(京都市),2002年9月9-11日
- 67. M. Kitagawa, Experimental quantum computation with molecules, the 2nd International School on Contemporary Physics: Quantum and Nonlinear Physics, Nuclear Physics & Condensed Matter Physics, National University of Mongolia, Ulaanbaatar, Mongolia, September 9-19, 2002 [invited]
- Masahiro Kitagawa, Experimental Quantum Computation with Molecules, the 6th International Conference on Developments in Language Theory (DLT2002), Kyoto, Japan, September 18-21, 2002 [invited]
- M. Ozawa, Halting of quantum Turing machines: Can you Monitor Quantum Turing Machines?, the 3rd International Conference on Unconventional Models of Computation, Kobe, Japan, October 15-19, 2002
- 70. 清水禎, 端健二郎, 丹所正孝, 強磁場 NMR の開発, 第6回新磁気科学シンポジウム, 物 質・材料研究機構(茨城県つくば市), 2002 年 11 月 6-8 日 [招待講演]
- 71. 小澤正直,量子計算・保存法則・不確定性原理,第7回量子情報技術研究会,学習院大学(東京都),2002年11月11-12日
- 72. 竹内繁樹, 量子情報技術とナノサイエンス, 公開シンポジウム「光とナノサイエンス」, 大阪科学技術センター(大阪府), 2002年11月30日 [招待講演]
- 73. 清水禎,端健二郎(物質・材料研究機構),丹所正孝(物質研究所),NMR 技術開発の 最先端,第3回理研シンポジウム「分析・解析技術と科学の最先端」,理化学研究所(埼 玉県和光市),2002年12月6日[招待講演]
- 74. 清水禎,端健二郎(物質・材料研究機構),丹所正孝(物質研究所),NMR 技術開発の 最先端,第 55 回未踏科学技術協会・超伝導科学技術研究会ワークショップ「超強磁場 NMR 装置の開発と NMR 計測結果」,理研 NMR センター(神奈川県横浜市),2002 年 12 月 10 日 [招待講演]
- 75. Shigeki Takeuchi, Quantum Mechanics and Single Photon Technology, the 4th REIS-Hokudai Symposium, Keio Plaza Hotel Sapporo, Sapporo, Japan, December 11, 2002 [invited]
- 76. 小澤正直,不確定性原理と Wigner-Araki-Yanase の定理の論理的関係、及び量子コン ピュータへの応用,京都大学数理解析研究所研究集会「量子力学系の数理とその量子コ ンピュータへの応用」,京都大学(京都市),2002年12月24-26日
- 77. Tadashi Shimizu, An NMR Quantum Computer on the Semiconductor CdTe, the 8th International Symposium on Advanced Physical Fields "Advanced Materials for

Quantum Computing" (APF8), National Institute for Materials Science, Tsukuba, Japan, January 14-17, 2003

- 78. A. Goto, K. Hashi, T. Shimizu, S. Ohki, T. Iijima, Development of a nuclear polarizer with the optical pumping method, the 8th International Symposium on Advanced Physical Fields "Advanced Materials for Quantum Computing" (APF8), National Institute for Materials Science, Tsukuba, Japan, January 14-17, 2003 [invited]
- 79. Shigeki Takeuchi, Quantum Computation using Photons, the 8th International Symposium on Advanced Physical Fields "Advanced Materials for Quantum Computing" (APF8), National Institute for Materials Science, Tsukuba, Japan, January 14-17, 2003 [invited]
- 80. 竹内繁樹, 光子を用いた量子情報通信処理, レーザー学会学術講演会第23回年次大会, アクトシティ浜松コングレスセンター(静岡県浜松市), 2003年1月31日[招待講演]
- 81. Yasuhito Kawano, Yasuhihiro Takahashi, Shigeru Yamashita, Masahiro Kitagawa, Explicit Implementation of Quantum Computers on a Unidirectional Periodic Structure, Carrier Interactions and Spintronics in Nanostructures 2003, NTT Basic Research Laboratories, Atsugi, Japan, March 11, 2003
- 82. 齋藤暁,長嶋健介,北川勝浩,バイアス再配分に基づく NMR 量子計算初期化スキームの 数値的検証,日本物理学会第58回年次大会,東北大学(仙台市),2003年3月28-31日
- 83. 片岡暁, 北川勝浩, 典型系列に基づく NMR 量子コンピュータの効率的な初期化アルゴ リズム, 日本物理学会第58回年次大会, 東北大学(仙台市), 2003年3月28-31日
- 84. 後藤敦,端健二郎,清水禎,飯島隆広,大木忍,光ポンピング法による核スピン偏極器の開発,日本物理学会第58回年次大会,東北大学(仙台市),2003年3月28-31日
- 85. 清水禎,松本武彦,後藤敦,吉村一良,銅酸化物における超交換相互作用の結合角依存
 性,日本物理学会第58回年次大会,東北大学(仙台市),2003年3月28-31日
- 86. 辻野賢治,川瀬大輔,竹内繁樹,笹木敬司,3 つの偏光状態をもつ光子間の量子もつれ 合い,日本物理学会第58回年次大会,東北大学(仙台市),2003年3月28-31日
- 87. 西村和哉, 竹内繁樹, 笹木敬司, パラメトリック下方変換による新しいもつれ合い光子 対発生方法, 日本物理学会第58回年次大会, 東北大学(仙台市), 2003年3月28-31日
- 88. 小澤正直,ハイゼンベルク不確定性原理の再定式化と計算の量子限界,日本物理学会 第58回年次大会,東北大学(仙台市),2003年3月28-31日
- M. Ozawa, Uncertainty relations and the limits on quantum computation, Benasque session on Quantum Information 2003, Benasque Center for Science, Benasque, Spain, June 22 - July 11, 2003
- 90. Masahiro Kitagawa, Quantum Information Processing at Molecular Scale, Symposium on Molecular Structural Basis of Information Reception and Transfer, The Science Council of Japan, Tokyo, Japan, June 25-27th, 2003 [invited]
- 91. Kazuyuki Takeda, Masahiro Kitagawa, Studies on dynamic nuclear polarization by photo-excited triplet electron spins, 第8回量子情報技術研究会 (QIT8), 北海道大学 (札幌市), 2003年6月30日-7月1日

- 92. 北川勝浩, 片岡暁, NMR 量子計算機の効率的な初期化アルゴリズム, 第8回量子情報 技術研究会 (QIT8), 北海道大学(札幌市), 2003 年 6 月 30 日-7 月 1 日
- 93. 鶴亀宜崇,北川勝浩,NMR による量子フーリエ変換を用いたキャリービット無し加算
 回路実験,第8回量子情報技術研究会 (QIT8),北海道大学(札幌市),2003年6月30
 日-7月1日
- 94. 辻野賢治,ホフマン・ホルガ,竹内繁樹,笹木敬司,パラメトリック下方変換を用いた2 モード内4光子発生の検証実験,第8回量子情報技術研究会(QIT8),北海道大学(札 幌市),2003年6月30日-7月1日
- 95. Kazuyuki Takeda, Masahiro Kitagawa, Attainment of high nuclear spin polarization in molecular crystal and its applicability to NMR quantum computing, ERATO QUANTUM INFORMATION SCIENCE 2003 (EQIS'03), Niijima-kaikan, Kyoto, Japan, September 4-6, 2003
- 96. Shigeki Takeuchi, A high efficient single photon source and quantum phase gates for photonic qubits, ERATO QUANTUM INFORMATION SCIENCE 2003 (EQIS'03), Niijima-kaikan, Kyoto, Japan, September 4-6, 2003 [invited]
- 97. M. Ozawa, Uncertainty Principle for Quantum Instruments and Computing, ERATO QUANTUM INFORMATION SCIENCE 2003 (EQIS'03), Niijima-kaikan, Kyoto, Japan, September 4-6, 2003
- 98. M. Ozawa, Entanglement and Violations of Heisenberg's Noise-Disturbance Uncertainty Relation, A Satellite Workshop to EQIS'03, Nonlocality of Quantum Mechanics and Statistical Inference, Kyoto, Japan, September 9, 2003 [invited]
- 99. 西村和哉,竹内繁樹,笹木敬司,パラメトリック下方変換によるビーム状もつれ合い光 子対の評価,日本物理学会 2003 年秋季大会,岡山大学(岡山県),2003 年 9 月 20-23 日
- 100.M. Ozawa, Mathematical Theory of Quantum Measurements and Its Applications to Quantum Information and Computing, von Neumann Centennial Conference: Linear Operators and Foundations of Quantum Mechanics, Budapest, Hungary, October 16-20, 2003
- 101.M. Ozawa, New Formulation of Uncertainty Principle for Joint Measurements: Its Applications to Quantum Limit of Quantum Computing, International Conference on Quantum Information 2003 (ICQI 2003), Tokyo University of Science, Tokyo, November 1-3, 2003
- 102.Masahiro Kitagawa, Toward real quantum information processing with nuclear spins in molecules, International Symposium on Photonics and Spintronics in Semiconductor Nanostructures, Kyoto, Japan, November 2-3, 2003 [invited]
- 103.Masahiro Kitagawa, Toward real quantum computation with molecules, International Conference Quantum Information 2003 (ICQI2003), International Institute for Advanced Studies, Kyoto, Japan, November 5-7, 2003 [invited]
- 104.Kazuyuki Takeda, Studies on dynamic nuclear polarization using photo-excited triplet electron spins, 第 42 回 NMR 討論会,大阪大学コンベンションセンター(大阪 府吹田市),2003 年 11 月 26-28 日 [招待講演]

- 105.北川勝浩, 量子コンピュータの基礎, 超伝導分科会第 28 回研究会「進化するフラクソ ニクス」 ~磁束量子の物理、SFQ デジタルから量子コンピュータまで~, 機械振興会 館(東京), 2003 年 12 月 11 日 [招待講演]
- 106.竹内繁樹, 光子を用いた量子計算, レーザー学会創立 30 周年記念 レーザー学会学術 講演会第 24 回年次大会, 仙台国際センター(宮城県仙台市), 2004 年 1 月 29-30 日 [招 待講演]
- 107.Robabeh Rahimi, Kazuyuki Takeda, Masahiro Kitagawa, M. Ozawa, Detection of Entanglement in NMR Quantum Information Processing, International Symposium on Mesoscopic Superconductivity and Spintronics 2004 (MS+S2004), NTT R&D Center, Atsugi, Kanagawa, Japan, March 1-4, 2004
- 108.Shigeki Takeuchi, Distinguishing entangled two-photon states and a highiy efficient single photon source, The International Symposium on Quantum Info-Communications and Related Quantum Nanodevices, Tokyo, Japan, March 11-12, 2004 [invited]
- 109.飯島隆広,端健二郎,後藤敦,清水禎,大木忍,高速及び低速 MAS 下での CP NMR を 用いた InP の間接核スピン・スピン結合テンソルの研究,日本化学会第84春季年会,関 西学院大学(兵庫県西宮市),2004 年3月26-29日
- 110.長嶋健介,北川勝浩, (ABC) n型 NMR 量子コンピュータにおける選択的パルスを用いた controlled2-U ゲート,日本物理学会第 59 回年次大会,福岡市,2004 年 3 月 27-30 日
- 111.Robabeh Rahimi Darabad, 武田和行,北川勝浩, Entanglement in NMR Implementation of Superdense Coding,日本物理学会第59回年次大会,福岡市,2004 年3月27-30日
- 112.Takehiko Terao, Sensitivity Enhancements by Nuclear Overhauser Polarization and Dynamic Nuclear Polarization, AMPERE XII NMR SCHOOL, Zakopane, Poland, June 6-11, 2004 [invited]
- 113.北澤英明, 端健二郎, 江口幸恵, 後藤敦, 清水禎, 木戸義勇, 鬼頭聖, 城谷一民, 黒リンの NMR 研究, 第3回強磁場研究会, 物質・材料研究機構, つくば市, 2004 年 6 月 15 日
- 114.後藤敦,清水禎,端健二郎,大木忍,飯島隆広,木戸義勇,光ポンピングによる半導体 中核スピンの超偏極,第3回強磁場研究会,物質・材料研究機構,つくば市,2004年6 月15日
- 115.飯島隆広,端健二郎,後藤敦,清水禎,大木忍,固体高分解能 NMR による半導体の研究,高分子学会 NMR 研究会 2004-1,東京工業大学(横浜市),2004 年 6 月 25 日
- 116.M. Ozawa, Universal Uncertainty Principle and Quantum State Control Under Conservation Laws, The Seventh International Conference on Quantum Communication, Measurement and Computing (QCM&C2004), Glasgow, UK, July 24-29, 2004
- 117.S. Takeuchi, K. Tsujino, H. F. Hofmann and K. Sasaki, Distinguishing genuine entangled two-photon –polarization states from independently generated pairs of entangled photons, SPIE Annual Meeting 2004 Optical Science and Technology, Colorado Convention Center, Denver, Colorado, U.S.A., August 2-6, 2004 [invited]

- 118.竹内繁樹, 光量子ビット, 第42回茅コンファレンス「量子情報処理の物理と技術」, 宮 城蔵王ロイヤル(宮城県), 平成16年8月22-25日 [招待講演]
- 119.Shigeki Takeuchi, Quantum information technologies using photons, KIAS-KAIST 2004 Workshop on Quantum Information Science, KIAS International Conference Hall, Seoul, Korea, August 29-31, 2004 [invited]
- 120.Y. Kawano and M. Ozawa, Quantum Gates Generated by Rotationally Invariant Operators in a Decoherence-Free Subsystem, ERATO Conference on Quantum Information Science 2004 (EQIS'04), Tokyo, Japan, September 1-5, 2004
- 121.Kazuyuki Takeda, Takashi Uto, Masahiro Kitagawa, Abrupt switching of internuclear dipolar interactions in rotating solids, ERATO conference on Quantum Information Science 2004 (EQIS'04), Tokyo, Japan, September 1-5, 2004
- 122. Masahiro Kitagawa, Kazuyuki Takeda, Akinori Kagawa, Robabeh Rahimi D., Akira Saitoh, Akira Kataoka, Bringing Entanglement and Exponential Speedup in NMR Quantum Computation, ERATO conference on Quantum Information Science 2004 (EQIS'04), Tokyo, Japan, September 1-5, 2004 [invited]
- 123.北澤英明,端健二郎,江口幸恵,後藤敦,清水禎,木戸義勇,宮沢薫一,C_60 フラーレンナノウィスカーの NMR,2004 年秋季応用物理学会学術講演会,東北学院大学(仙台市),2004 年 9 月 1-4 日
- 124.後藤敦,清水禎,端健二郎,大木忍,飯島隆広,加藤誠一,北澤英明,木戸義勇,光ポン ピング法で見た化合物半導体の励起スペクトル,日本物理学会 2004 年秋季大会,青森 大学(青森市),2004 年 9 月 12-15 日
- 125.端健二郎,清水禎,後藤敦,飯島隆広,大木忍,ハイブリッド磁石を用いた強磁場NMR, 日本物理学会 2004 年秋季大会,青森大学(青森市),2004 年 9 月 12-15 日
- 126.岡本亮,竹内繁樹,笹木敬司,マンデルディップに見られた異常形状に関する考察,日本物理学会 2004 年秋季大会,青森大学(青森市),2004 年 9 月 12-15 日
- 127.川瀬大輔, 辻野賢治, 竹内繁樹, 笹木敬司, 和田篤, 大湊寛之, 宮本洋子, 武田光夫, 光子の軌道角運動量もつれ合い実験における測定基底の検証, 日本物理学会 2004 年秋季 大会, 青森大学(青森市), 2004 年 9 月 12-15 日
- 128.北川勝浩, 分子の核スピンによる量子計算の実現性, 量子通信・量子計算の可能性と情報セキュリティへのインパクト, 電子情報通信学会 2004 ソサイエティ大会, 徳島大学 (徳島市), 平成 16 年 9 月 23 日 [招待講演]
- 129.竹内繁樹, 光子を用いた量子情報技術, 電子情報通信学会 2004 ソサイエティ大会, 徳島大学(徳島市), 平成 16 年 9 月 23 日 [招待講演]
- 130.Masahiro Kitagawa and Akira Kataoka, Enumerative Coding for Efficient Initialization of Mixed Ensemble Quantum Computers, The 2004 International Symposium on Information Theory and its Applications (ISITA2004), Parma, Italy, Qctorber 10-13, 2004
- 131.Masanao Ozawa, Universal Uncertainty Principle, An Isaac Newton Institute Workshop Quantum Statistics - quantum measurements, estimation and related topics, UNIVERSITY OF CAMBRIDGE, UK, November 15-19, 2004 [invited]

- 132.竹内繁樹, 光子を用いた量子情報通信・処理, 国立大学附置研究所・センターシンポジ ウム「研究所・センターが開く未来の世界-宇宙環境から量子技術まで -」, 北海道大 学(札幌市), 平成 16 年 11 月 17 日 [招待講演]
- 133. Robabeh Rahimi, Kazunobu Sato, Kou Furukawa, Kazuo Toyata, Daisuke Shiomi, Toshihiro Nakamura, Masahiro Kitagawa, and Takeji Takui, Pulsed ENDOR-Based Quantum Information Processing, 1st Asia-Pacific Conference on Quantum Information Science, National Cheng Kung University, Taiwan, December 10-13th, 2004
- 134.Masahiro Kitagawa, Kazuyuki Takeda, Kensuke Nagashima, Akinori Kagawa, Robabeh Rahimi, Akira Saitoh, Real Quantum Computation with Nuclear Spins in Molecules, International Workshop on "Materials Science and Nano-Engineering", Osaka, Japan, December 11-14, 2004
- 135.飯島隆広, 強磁場固体 NMR による半導体及び無機材料の研究, 理論化学セミナー, 金 沢大学理学部化学科(金沢市), 2004 年 12 月 22 日
- 136.S. Takeuchi, Entanglement of the Optical Angular Momentum of Photons, The International Conference on "Topology in Orderd Phases" (TOP2005), Sapporo, Japan, March 7-10, 2005
- 137. 岡寿樹, 竹内繁樹, 笹木敬司, FDTD を用いた一次元原子の非線形光学応答の解析, 日本物理学会第 60 回年次大会, 東京理科大学(千葉県野田市), 2005 年 3 月 24-27 日
- 138.岡本亮, 竹内繁樹, 笹木敬司, パラメトリック蛍光対による2光子干渉を用いた新しい 位相分散測定法の提案, 日本物理学会第60回年次大会, 東京理科大学(千葉県野田市), 2005年3月24-27日
- 139.竹内繁樹,単一光子源の研究現状-パラメトリック蛍光対利用を中心に,第52回応用物 理関係連合講演会,2005年3月29-4月1日 [招待講演]

(②ポスター発表) (国内学会 34 件、国際学会 55 件)

- Duger Ulam-Orgikh and Masahiro Kitagawa, Spin squeezing and decoherence limit in Ramsey spectroscopy --Even sub-optimal entanglement can achieve absolute improvement--, the 5th International Conference on Quantum Communication Measurement & Computing (QCM&CY2K), Capri, Italy, July 3-8, 2000
- 端健二郎,清水禎,後藤敦,北澤英明,核双極子線幅シュミレーターの試作,第 39 回 NMR 討論会,東京都,2000年11月9日
- 清水禎,後藤敦,端健二郎,宮部亮,超 20T 大型磁石による NMR 開発,日本物理学会 第 56 回年次大会,中央大学(東京都),2001 年 3 月 27-30 日
- 北澤英明,端健二郎,清水禎,後藤敦,阿部英樹,辻井直人,木戸義勇,鈴木孝,1/2核ス ピン系 CeP の単結晶育成と磁気共鳴,日本物理学会第56回年次大会,中央大学(東京 都),2001年3月27-30日
- Duger Ulam-Orgikh and Masahiro Kitagawa, One-to-one correspondence of spin-squeesing and concurrence in the maximum multiplicity subspace, the 7th International Symposium on Foundations Mechanics in the Light of New Technology (ISQM-Tokyo'01), Saitama, Japan, August 27-30, 2001

- Akio Fujiwara, Statistical Estimation of a Quantum Channel, the 7th International Symposium on Foundations Mechanics in the Light of New Technology (ISQM-Tokyo'01), Saitama, Japan, August 27-30, 2001
- Holger F. Hofmann, Toshiki Ide, Takayoshi Kobayashi, Akira Furusawa, Information extraction and quamtum state distortions in continuous variable quamtum teleportation, the 7th International Symposium on Foundations Mechanics in the Light of New Technology (ISQM-Tokyo'01), Saitama, Japan, August 27-30, 2001
- K. Tsujino, S. Takeuchi and K. Sasaki, A detailed analysis on the Fidelity of Quantum Teleportation using Photons, the 7th International Symposium on Foundations Mechanics in the Light of New Technology (ISQM-Tokyo'01), Saitama, Japan, August 27-30, 2001
- Masahiro Kitagawa, Entanglement in bulk-ensemble NMR quantum computation, ERATO workshop on Information Science 2001 (EQIS'01), Tokyo, Japan, September 6-8, 2001
- Duger Ulam-Orgikh and Masahiro Kitagawa, Exact solution for two-axis twisting Hamiltonian, ERATO workshop on Information Science 2001 (EQIS'01), Tokyo, Japan, September 6-8, 2001
- Kensuke Nagashima, Takehiro Ogawa and Masahiro Kitagawa, Quantum circuit design for NMR quantum computers, ERATO workshop on Information Science 2001(EQIS'01), Tokyo, Japan, September 6-8, 2001
- Holger F. Hofmann, Analysis of entanglement by simultaneous finiteresolution measurements of non-commuting variables, ERATO workshop on Information Science 2001 (EQIS'01), Tokyo, Japan, September 6-8, 2001
- 13. 北澤英明, 徐明祥, 端健二郎, 清水禎, 希土類リン化合物の核磁気共鳴, 日本物理学会 2001 年秋季大会, 徳島文理大学(徳島県), 2001 年 9 月 17-20 日
- 宮部亮,端健二郎,清水禎,後藤敦,木戸義勇,大木忍,町田進,光ポンピング NMR 技術の開発,日本物理学会 2001 年秋季大会,徳島文理大学(徳島県),2001 年 9 月 17-20 日
- 端健二郎,清水禎,後藤敦,宮部亮,大木忍,強磁場 NMR の技術開発,日本物理学会 2001 年秋季大会,徳島文理大学(徳島県),2001 年 9 月 17-20 日
- 16. 清水禎, 端健二郎, 後藤敦, 宮部亮, 大木忍, InP による NMR 量子計算機の提案, 日本 物理学会 2001 年秋季大会, 徳島文理大学(徳島県), 2001 年 9 月 17-20 日
- 17. 端健二郎, 清水禎, 後藤敦, 宮部亮, 大木忍, 強磁場 NMR の技術開発, 第 40 回 NMR 討論会(京都市), 2001 年 11 月 14-16 日
- 18. 清水禎,端健二郎,後藤敦,宮部亮,大木忍,InPによるNMR 量子計算機の提案,第40回 NMR 討論会(京都市),2001 年 11 月 14-16 日
- H. Kitazawa, T. Shimizu, A. Goto, K. Hashi, N. Tsujii, R. Miyabe, S. Ohki, S. Eguchi, G. Kido, Development of advanced NMR technique and material research toward a NMR solid-state quantum computer, NML International Symposium on "Quantum Computation and Communication with Nano Scale Materials", National Institute

for Materials Science, Tsukuba, March 7-8, 2002

- 20. A. Kagawa, A. Kataoka, T. Nishimura, M. Kitagawa, NMR Experiment of Quantum Gates using Nonadiabatic Goemetric Phase, the 10th JST International Symposium on Quantum Computing, Tokyo, Japan, March 12-14, 2002
- 21. T. Nishimura, A. Kagawa, A. Kataoka, and M. Kitagawa, Initialization of NMR quantum computer at low temperature using data compression process, the 10th JST International Symposium on Quantum Computing, Tokyo, Japan, March 12-14, 2002
- 22. T. Shimizu, A. Goto, K. Hashi, H. Kitazawa, NMR Quantum Computer on Compound Semiconductor, the 10th JST International Symposium on Quantum Computing, Tokyo, Japan, March 12-14, 2002
- K. Hashi, T. Shimizu, A. Goto, H. Kitazawa, S. Eguchi, S. Ohki, 核双極子磁場による NMR 線幅のシュミレータ, the 10th JST International Symposium on Quantum Computing, Tokyo, Japan, March 12-14, 2002
- 24. A. Goto, T. Shimizu, K. Hashi, H. Kitazawa, S. Ohki, S. Eguchi, Magnon-mediated quantum logic gate in a solid-state NMR quantum computer, the 10th JST International Symposium on Quantum Computing, Tokyo, Japan, March 12-14, 2002
- 25. H. Kitazawa, K. Hashi, S. Eguchi, T. Shimizu, A. Goto, G. Kido, NMR Study of YP and YPO₄ as a 2-Qubits Quantum Computer, the 10th JST International Symposium on Quantum Computing, Tokyo, Japan, March 12-14, 2002
- 26. Shigeki Takeuchi, Ryo Okamoto, Kenji Tsujino and Keiji Sasaki, Quantum Information Technology using Photons, the 10th JST International Symposium on Quantum Computing, Tokyo, Japan, March 12-14, 2002
- 27. Holger F. Hofmann and Shigeki Takeuchi, Manupulation of photonic qubits by post-selected beam splitters, the 10th JST International Symposium on Quantum Computing, Tokyo, Japan, March 12-14, 2002
- Masanao Ozawa, Conservation Laws, Measuremants, and Quantum Computing, the 10th JST International Symposium on Quantum Computing, Tokyo, Japan, March 12-14, 2002
- 29. Elham Kashefi, Harumichi Nishimura and Vlatko Vedral, A note on quantum one-way permutations, the 10th JST International Symposium on Quantum Computing, Tokyo, Japan, March 12-14, 2002
- 30. Kazuyuki Takeda, K. Takegoshi and Takehiko Terao, NMR sensitivity enhancement by dynamic nuclear polarization using electron spins in the photoexcited triplet state, the 10th JST International Symposium on Quantum Computing, Tokyo, Japan, March 12-14, 2002
- 31. 宮部亮,端健二郎,清水禎,後藤敦,木戸義勇,大木忍,町田進,光ポンピング NMR 法の開発,日本物理学会第 57 回年次大会,立命館大学(草津市),2002 年 3 月 24-27 日
- 32. 端健二郎,清水禎,木吉司,後藤敦,松本真治,和田仁,長谷川憲一,藤戸輝昭,吉川政 敏,三木孝史,伊藤聡,強磁場 NMR の技術開発 II,日本物理学会第 57 回年次大会,立 命館大学(滋賀県草津市),2002 年 3 月 24-27 日

- 33. A. Goto, R. Miyabe, K. Hashi, T. Shimizu, S. Ohki and S. Machida, Optically pumpued NMR in semiconductors: application to the solid-state NMR quantum computers, The 43rd Experimental Nuclear Magnetic Resonance Conference (the 43th ENC), Asilomar, U.S.A., April 14-19, 2002
- 34. K. Hashi, T. Shimizu, A. Goto, T. Kiyoshi, S. Matsumoto and H. Wada, Development of a 920 MHz NMR System with Superconducting Magnet, The 43rd Experimental Nuclear Magnetic Resonance Conference (the 43th ENC), Asilomar, U.S.A., April 14-19, 2002
- 35. 齋藤暁, 量子計算を模倣する非周期的パルス列系, 第6回量子情報技術研究会 (QIT6), 京都大学(京都市), 2002 年5月 27-28 日
- 36. 片岡 暁, 香川晃徳, 西村孝弘, 北川勝浩, 非断熱的な幾何学的位相ゲートの NMR 実験, 第6回量子情報技術研究会 (QIT6), 京都大学(京都市), 2002 年 5 月 27-28 日
- 37. H. Kitazawa, K. Hashi, S. Eguchi, T. Shimizu, A. Goto, G. Kido, NMR Study of YP and YPO₄ as 2-Qubits Quantum Computers, 第6回量子情報技術研究会 (QIT6), 京 都大学(京都市), 2002 年 5 月 27-28 日
- 38. 辻野賢治, 竹内繁樹, 笹木敬司, 短パルス光励起もつれ合い蛍光対の量子状態解析: 複数対発生の影響, 第6回量子情報技術研究会 (QIT6), 京都大学, 2002 年 5 月 27-28 日
- 39. Kenji Tsujino, Shigeki Takeuchi, and Keiji Sasaki, A quantum state tomography of two entangled photon pairs within ultra short pulse duration, International Conference on Quantum Information, Oviedo, Spain, July 13-18th, 2002
- Akira Kataoka, Masahiro Kitagawa, Initialization algorithm of NMR quantum computers, ERATO workshop on Quantum Information Science 2002 (EQIS'02), Tokyo, Japan, September 5-8, 2002
- Shigeki Takeuchi, Ryo Okamoto and Keiji Sasaki, A single photon source using parametric down conversion, ERATO workshop on Quantum Information Science 2002 (EQIS'02), Tokyo, Japan, September 5-8, 2002
- 42. 清水禎,後藤敦,端健二郎,北澤英明,化合物半導体による NMR 量子計算機,日本物 理学会 2002 年秋季大会,中部大学(愛知県春日井市),2002 年 9 月 6-9 日
- 43. 端健二郎,後藤敦,清水禎,大木忍, InPの光ポンピング NMR,日本物理学会 2002 年
 秋季大会,中部大学(愛知県春日井市),2002 年 9 月 6-9 日
- 44. 北澤英明,端健二郎,辻井直人,江口幸恵,大木忍,後藤敦,清水禎,木戸義勇,城谷一 民,固体 NMR 量子計算機材料の探索,日本物理学会 2002 年秋季大会,中部大学(愛 知県春日井市),2002 年 9 月 6-9 日
- 45. 後藤敦, 清水禎, 端健二郎, 北澤英明, 固体 NMR 量子計算機の多ビット化と初期化の ための技術開発, 第 41 回 NMR 討論会,こまばエミナース(東京都), 2002 年 11 月 6-8 日
- 46. 端健二郎, 後藤敦, 清水禎, 大木忍, InP の光ポンピング NMR, 第 41 回 NMR 討論会, こまばエミナース(東京都), 2002 年 11 月 6-8 日
- 47. 清水禎,後藤敦,端健二郎,北澤英明,固体 NMR 量子コンピュータの開発:化合物半
 導体の同位体超格子,第41回 NMR 討論会,こまばエミナース(東京都),2002年11
 月 6-8 日

- 48. Kenjiro Hashi, Hideaki Kitazawa, Tadashi Shimizu, Atsushi Goto, Shinobu Ohki and Sachie Eguchi, Simulator of the NMR line width due to the nuclear dipole field, the 8th International Symposium on Advanced Physical Fields "Advanced Materials for Quantum Computing" (APF8), National Institute for Materials Science, Tsukuba, Japan, January 14-17, 2003
- 49. 犬飼宗弘,北川勝浩,武田和行, Flip-Flop Hamiltonian による量子ゲート構成法,第8 回量子情報技術研究会 (QIT8),北海道大学(札幌市),2003 年 6 月 30 日-7 月 1 日
- 50. 烏頭尾尚, 武田和行, 北川勝浩, 固体 NMR による制御演算:マジック角試料回転下に おける双極子相互作用復活現象の利用, 第8回量子情報技術研究会 (QIT8), 北海道大 学(札幌市), 2003 年6月 30 日-7月1日
- 51. 西村和哉, 竹内繁樹, 笹木敬司, パラメトリック下方変換によるもつれ合い光子対のビーム状発生方法, 第8回量子情報技術研究会 (QIT8), 北海道大学(札幌市), 2003年6月30日-7月1日
- 52. Kenji Tsujino, Holger F. Hofmann, Shigeki Takeuchi, and Keiji Sasaki, Generation of entanglement between a pair of two photon polarization states using TYPE-II parametric down-conversion, the 16th International Conference on Laser Spectroscopy, Tropical North Queensland, Australia, July 13-18, 2003
- 53. T. Iijima, K. Hashi, A. Goto, T. Shimizu, and S. Ohki, Indirect Nuclear Spin-Spin Coupling in InP Studied by CP/MAS NMR, the 7th International Symposium on Research in High Magnetic Fields (RHMF2003), Toulouse, France, July 20-23, 2003
- 54. K. Hashi, A. Goto, T. Shimizu, T. Iijima and S. Ohki, High field NMR up to 23.5 T with a resistive magnet, the 7th International Symposium on Research in High Magnetic Fields (RHMF2003), Toulouse, France, July 20-23, 2003
- 55. T. Shimizu, K. Hashi, A. Goto, M. Tansho, T. Kiyoshi, S. Matsumoto, H. Wada, Overview of the development of high resolution 920 MHz NMR in NIMS, the 7th International Symposium on Research in High Magnetic Fields (RHMF2003), Toulouse, France, July 20-23, 2003
- 56. A. Goto, K. Hashi, T. Shimizu, X. Wen, S. Ohki, and T. Iijima, Optical pumping NMR system for qubit initializations in solid-state NMR quantum computers, International Conference on Magnetism 2003 (ICM2003), Roma, Italy, July 27 -August 1, 2003
- 57. Munehiro Inukai, Kazuyuki Takeda, Masahiro Kitagawa, Quantum gate synthesis from flip-flop Hamiltonian, ERATO QUANTUM INFORMATION SCIENCE 2003 (EQIS'03), Niijima-kaikan, Kyoto, Japan, September 4-6, 2003
- 58. Akira Saitoh and Masahiro Kitagawa, Macroscopic Binary Entropy in the Initialization of NMR Computers, ERATO QUANTUM INFORMATION SCIENCE 2003 (EQIS'03), Niijima-kaikan, Kyoto, Japan, September 4-6, 2003
- R. D. Rahimi, K. Takeda and M. Kitagawa, NMR quantum information processing without pseudo-pure state, ERATO QUANTUM INFORMATION SCIENCE 2003 (EQIS'03), Niijima-kaikan, Kyoto, Japan, September 4-6, 2003

- 60. Takashi Uto, Kazuyuki Takeda, Masahiro Kitagawa, Controlled operations by solid-state NMR based on dipolar recoupling under magic anglespinning, ERATO QUANTUM INFORMATION SCIENCE 2003 (EQIS'03), Niijima-kaikan, Kyoto, Japan, September 4-6, 2003
- 61. Yoshitaka Tsurukame, Masahiro Kitagawa, NMR experiments on in-place addition circuits using quantum Fourier transformation, ERATO QUANTUM INFORMATION SCIENCE 2003 (EQIS'03), Niijima-kaikan, Kyoto, Japan, September 4-6, 2003
- 62. 後藤 敦,端健二郎,清水 禎,大木忍,飯島隆広,木戸義勇,光ポンピング法による核 スピン偏極器の開発 II,日本物理学会 2003 年秋季大会、岡山大学, 2003 年 9 月 20-23 日
- 63. 端健二郎,北澤英明,後藤敦,清水禎,大木忍,木戸義勇, TbXAl (X=Ni, Pd)の構造相 転移,日本物理学会 2003 年秋季大会、岡山大学(岡山県), 2003 年 9 月 20-23 日
- 64. Atsushi Goto, Tadashi Shimizu, Kenjiro Hashi, Shinobu Ohki, Takahiro Iijima and Giyuu Kido, Development of an optical pumping nuclear spin polarizer, 18th International Conference on Magnet Technology, Morioka, October 20-24, 2003
- 65. Tadashi Shimizu, Atsushi Goto, Kenjiro Hashi and Shinobu Ohki, NMR at 23.5 T by the Resistive Magnet in NIMS, 18th International Conference on Magnet Technology", Morioka, October 20-24, 2003
- 66. 飯島隆広,端健二郎,後藤敦,清水禎,大木忍,31P CP/MAS NMR による InP の間接核 スピン・スピン結合の研究,第42回 NMR 討論会,大阪大学コンベンションセンター(大 阪府吹田市),2003年11月26-28日
- Masahiro Kitagawa, NMR Quantum Information Processing with Entanglement, Conference on Quantum Information with Atoms, Ions, and Photons, La Thuile, Italy, March 6-12, 2004
- 68. Robabeh Rahimi, Kazuyuki Takeda, Masahiro Kitagawa, NMR Superdense Coding Experiment Reconsidered, The International Symposium on Quantum Info-Communications and Related Quantum Nanodevices, Tokyo, Japan, March 11-12, 2004
- 69. Saitoh Akira and Masahiro Kitagawa, Evaluation of Quantum Algorithms with Thermal Equilibrium Initial States Using an Interpretive Simulator, The International Symposium on Quantum Info-Communications and Related Quantum Nanodevices, Tokyo, Japan, March 11-12, 2004
- M. Ozawa, Quantum State Control Limit, The International Symposium on Quantum Info-Communications and Related Quantum Nanodevices, Tokyo, Japan, March 11-12, 2004
- M. Ozawa, Universal Formulation of Uncertainty Principle, The International Symposium on Quantum Info-Communications and Related Quantum Nanodevices, Tokyo, Japan, March 11-12, 2004
- 72. 北澤英明,端健二郎,江口幸恵,後藤敦,清水禎,木戸義勇,城谷一民,黒リンの NMR 研究 II,日本物理学会第59回年次大会,福岡市,2004年3月27-30日

- 73. K. Takeda, Two-qubit gates driven by selectively recovered dipolar interactions in magic angle spinning solid-state NMR, The Seventh International Conference on Quantum Communication, Measurement and Computing (QCM&C2004), Glasgow, U.K., July 25-29, 2004
- 74. Atsushi Goto, Tadashi Shimizu, Kenjiro Hashi, Shinobu Ohki, Takahiro Iijima, Giyuu Kido, Nuclear spin polarizer for solid-state NMR quantum computers, 27th International Conference on the Physics Semiconductors, Northern Arizona University, Flagstaff, Arizona, USA, July 26-30, 2004
- 75. 川瀬大輔, 辻野賢治, 竹内繁樹, 笹木敬司, 和田篤, 大湊寛之, 宮本洋子, 武田光夫, 光子の軌道角運動量もつれ合い実験における測定基底の検証, 第42回茅コンファレンス「量子情報処理の物理と技術」, 宮城蔵王ロイヤル(宮城県), 平成16年8月22-25日
- 76. Akinori Kagawa, Takeshi Yamamura, Shogo Yamanaka, Kazuyuki Takeda, Masahiro Kitagawa, Solid State NMR Quantum Computation with High Polarization, ERATO conference on Quantum Information Science 2004 (EQIS'04), Tokyo, Japan, September 1-5, 2004
- 77. Takahiro Iijima, Kenjiro Hashi, Atsushi Goto, Tadashi Shimizu, Shinobu Ohki, Anisotropic indirect nuclear spin-spin coupling in InP studied by ³¹P CP NMR spectra under slow MAS, 15th conference–ISMAR (International Society of Magnetic Resonance) 2004, Florida, U.S.A., October 24-28th, 2004
- 78. Kazuyuki Takeda, Palmtop-sized probes for solid-state NMR, 第43回NMR討論会, こまばエミナース(東京都), 2004年11月10-12日
- 79. 山村猛,香川晃徳,武田和行,北川勝浩,パルスレーザの整形による三重項状態への光励起の効率化,第43回NMR討論会,こまばエミナース(東京都),2004年11月10-12日
- 80. 飯島隆広,端健二郎,後藤敦,清水禎,大木忍,化合物半導体 InP の固体高分解 NMR, 第 43 回NMR討論会,こまばエミナース(東京都),2004 年 11 月 10-12 日
- 81. 清水禎,丹所正孝,後藤敦,端健二郎,飯島隆広,大木忍,藤部康弘,池田龍一,強磁場 化がもたらす NMRの新展開,第43回 NMR 討論会,こまばエミナース(東京都),2004 年 11 月 10-12 日
- 82. 端健二郎, 清水禎, 後藤敦, 飯島隆広, 大木忍, ハイブリッド磁石を用いた強磁場 NMR の開発, 第43回 NMR 討論会, こまばエミナース(東京都), 2004 年 11 月 10-12 日
- 83. A. Kagawa, T. Yamamura, S. Yamanaka, K. Takeda, M. Kitagawa, Solid State NMR Quantum Computation with high polarization, International Workshop on"Materials Science and Nano-Engineering", Osaka, Japan, December 11-14, 2004
- K. Nagashima, M. Kitagawa, Controlled2-U gate on (ABC)_n type NMR quantum computer, International Workshop on"Materials Science and Nano-Engineering", Osaka, Japan, December 11-14, 2004
- 85. A. SaiToh, M. Kitagawa, Numerical study on polarization transfer for many qubits, International Workshop on"Materials Science and Nano-Engineering", Osaka, Japan, December 11-14, 2004
- 86. R. Rahimi, K. Sato, K. Furukawa, K. Toyata, D. Shiomi, T. Nakamura, M. Kitagawa,

T. Takui, Realization of Quantum Computer with Pulsed Electron Nuclear Double Resonance, International Workshop on"Materials Science and Nano-Engineering", Osaka, Japan, December 11-14, 2004

- 87. Masahiro Kitagawa, Logarithmic-weight Enumerative Coding Algorithms for Efficient Quantum Compression, QIP2005, MIT, Cambridge MA US, January 13-17, 2005
- 88. R. Okamoto, S. Takeuchi and K. Sasaki, Quantum Computing using Linear Optics, The International Conference on "Topology in Orderd Phases" (TOP2005), Sapporo, Japan, March 7-10, 2005
- 89. D. Kawase, S. Takeuchi, K. Sasaki, A. Wada, Y. Miyamoto and M. Takeda, Verification of measurement basis in experiment of entanglement in orbital angular momentum of photons, The International Conference on "Topology in Orderd Phases" (TOP2005), Sapporo, Japan, March 7-10, 2005

(3)特許出願 (国内2件、海外0件)

1) 後藤敦,清水禎,端健二郎,北澤英明,「マグノン媒介型 NMR 量子計算機」, JST, 物 質·材料研究機構,特願 2002-26158(2002.2.1, A111P35),特開 2003-227085(03.8.15)

2) 清水禎,後藤敦,端健二郎,北澤英明,「同位体超格子構造を有する半導体結晶を用いた 固体 NMR 量子計算機」, JST, 物質·材料研究機構, 特願 2002-127092(2002.4.26, A111P36), 特開 2003-324192(2003.11.14),

(4) 新聞報道等

<u>分子量子コンピュータ研究グループ</u>

取材・報道

平成 14 年 1 月 26 日放送 NHK 教育テレビ『サイエンスアイ・スペシャル』 ~ネットワールドの Future Technology~第9回「ネクスト・テクノロジー」 <内容>スピン型量子系コンピュータについて研究内容を一部紹介

<u>結晶量子コンピュータ研究グループ</u> プレスリリース

平成 16 年 4 月 14 日発行 朝日新聞、日経産業新聞、日刊工業新聞 高分解能 NMR マグネットで世界最高磁場を達成

-930MHz 高分解能 NMR マグネットの稼働開始-

量子コンピュータ理論研究グループ

取材・報道

- 平成 16 年 1 月 15 日発行 日経産業新聞 特集記事『プロデュース JAPAN』 第7回 ~ 「知」の限界を覆す者~
- <内容>不確定性原理の新しい公式を発見した研究を紹介

7. 結び

私達は、高分子や結晶の核スピンを用いた量子コンピュータの多qubit化を目的とし て研究を開始したが、それ以前のより本質的な問題として、リソースの指数爆発を伴わ ない真の量子計算が未だ実現していないことが分かり、その解決に取り組むことになっ た。既に着手していた物理的初期化の実験と、情報理論的考察によって、真の量子計算 を可能にする初期化の条件が明らかになった。それには、作業領域を全く使わずに量子 データ圧縮を行う効率的なアルゴリズムが必要とされ、非常に困難に思えたが、1 og n の作業領域を生み出す予備圧縮のアイデアによって、辛くも切り抜けることができた。 作業領域を極端に節約する必要に迫られた結果、新しいデータ圧縮アルゴリズムを考案 することもできた。これらの発見によって、核スピンによる真の量子計算の可能性が示 された。今後は、この初期化法を混合アンサンブルによる量子計算の一般的方法として 発展させて、量子計算と古典計算の境界を探ることによって、量子計算の本質に迫りた い。

初期化問題に集中したため、当初期待した数量的スケーラビリティはあまり系統的に 追求することができず、結果的に多qubit化には至らなかった。しかし、得られた個別 の成果や未完成の研究の中には、将来多qubit化に貢献する可能性が高いものや興味深 いものも多く、今後の展開が期待される。

初期化について、思いがけない展望が開けたのは、私達が量子物理学と情報理論のま さに境界領域に身を置いていたことによるところが大きい。私自身は、この点に関して、 情報理論の講義を担当する機会を与えていただいた宮原総長に感謝しなければならな い。総長には、CREST採択時にオープンラボ制度を創設していただき、実験室を確保し ていただいたことについても、大いに感謝している。

私達の研究は、取り組むべき問題や条件が当初の構想と大きく変わったこともあって、 研究期間の後半から終了間際に得られた成果で論文投稿中や投稿準備中のものも多い。 出版の遅れは研究代表者の責任であるが、これらの成果についても、追跡調査の対象に 含めていただければ幸いである。

最後に、このような研究を行う貴重な機会を与えていただいた科学技術振興機構CREST、 菅野研究総括をはじめとする領域アドバイザーの先生方、全てのチームメンバーと共同 研究者の皆さん、研究をサポートしていただいた研究補助員の日野さんと小西さん、野 崎参事はじめ事務所の皆さんに、研究代表者として心より感謝します。