

## 分子スピン量子コンピュータの実現に向けて

( 阪市大院理・JST-CREST ) 工位 武治

【要旨】最近、単一及び集積系の電子スピンの量子位相に注目したスピンサイエンス・テクノロジーの端緒が開かれ、技術的には位相制御を不可欠とする量子コンピュータ(QC)や量子情報操作(QIP)への展開を視野に入れた、分子スピンの新たな応用を開拓することが可能になってきた。単一分子スピンでの技術的なブレークスルーはまだ達成されておらず、スピン制御技術としては揺籃期の段階であるが、分子スピン QC 演算の心臓部をなすハードウェアは分子そのものであり、QC/QIP の開拓は、分子科学は無論、有機化学、錯体化学及び関連部門が「量子と情報」をキーワードとして今後大きな役割を果たす領域となることが予想される。本講演では、分子スピン QC/QIP 実現に向けて行ってきた研究の一部を具体的に示し、spin-qubit QC 実現に向けて何が焦眉の課題であるかを紹介したい。

【序論】量子コンピュータは、Feynman や Deutsch による量子状態のユニタリー変換を用いた量子計算モデルの画期的な提案以来、量子物理・理論物理学や量子情報科学の分野で重要な領域となり、ごく最近ではナノテク・ナノサイエンスの一部とマージしつつある。Shor が大きな整数の素因数分解を多項式時間で解けるアルゴリズムを開発し、また Deutsch と Jozsa がどんな古典的なコンピュータよりも量子コンピュータによって高速に解ける問題を示して以来、量子計算・量子情報通信を含む量子情報科学の理論的側面が急速に発展し、量子コンピュータの概念・基礎理論・アルゴリズムが部分的ではあるが確立しつつある。Shor の量子アルゴリズムの提示は、今日の情報社会を支える暗号鍵体系の崩壊を示唆するものとして捉えられ、量子コンピュータ実現の重要性を社会的な側面から浮き彫りにした。

一方、最近、実験的にも量子コンピュータ(QC)を実現するためのさまざまな量子状態の活用(=物理的な系)が提案されてきている。既に量子状態を利用する量子アルゴリズムも開発され、等方的試料の核磁気共鳴法等によって量子アルゴリズムの有効性が示されたが、QC 実現において本質的に不可欠な量子エンタングルド状態の達成やアンサンブル系固有の問題である初期状態の高度な混合の除去方法など、実験的な側面から基礎理論を検証することが重要な課題となっている。これらの問題の一部を克服するアプローチの一つとして、Mehring のグループは量子計算や量子情報通信において重要な役割を担う量子エンタングルド状態を電子-核スピン系(2qubit アンサンブル系)で形成し、その検出に成功している[1,2]。さらに、電子-核スピン混在スピン系における量子高密度符号化(Super Dense Coding: SDC)などの初等量子アルゴリズムの実行も実証され[3]、ごく最近では、具体的な量子演算を実現するための多 qubit(量子ビット)として、電子スピンの活用が提案されている[4,5]。

講演では、QC の物理的な系として分子スピンを扱うが、本要旨では紙面の関係で、分子スピンのナノ機能開発の一環として、分子スピン QC のモデル系を構築し、実際に量子情報操作の核心をなす量子エンタングルド状態を新規なパルス電子-核磁気共鳴(ENDOR)のパルス系列を駆使して作り、Bell 状態間の相互変換・初等量子アルゴリズムを初めて実現したことを紹介する。ここでは、まず量子ビットとしては、分子スピンの電子スピン及び水素核スピンを利用した。スピンの量子位相操作を、分子量子スピンコンピュータの実現のためのスピントクノロジーとして開発できた意義は大きい。この課題を通じて、電子スピン(半整数スピン)が持つ固有の量子機能としてのスピノール性を顕な形として初めて実験的に証明し、電子スピン量子コンピュータ開発や量子情報処理においても、スピノール性が顕に現れる量子現象であることを示した。

【分子スピン量子コンピュータ - 分子スピンの量子情報処理への展開】

ここでは、最も単純な電子-核スピン混在スピン系として、マロン酸単結晶中に X 線照射により生成するマロニルラジカルを活用した例を示す。この系では、超微細相互作用で結合した 1 電子 1 核スピン client 系を扱うことになる。信号の S/N 比を考慮して、パルス ENDOR の実験は、30K 以下の比較的高い温度で行った。従って、この条件下では擬量子エンタング

ルド状態を扱うことになる。量子計算の過程には、量子ビットの初期化、量子演算処理、量子状態の観測が不可欠であるが、これら3つの過程をパルス ENDOR で実現する方法として、図1に示すパルス系列を用いた。この過程で形成した擬純粋状態に対してラジオ波及びマイクロ波パルスを用いることにより量子エンタングルド状態を形成した後、過程において核スピンのみを制御することにより量子高密度符号化(SDC)の実験的検証・初等量子アルゴリズムの実証をはじめて実現した[3]。

初期状態形成には、 $\theta = \cos^{-1}(1/3)$ に相当する  $109.7^\circ$  のマイクロ波パルスとラジオ波

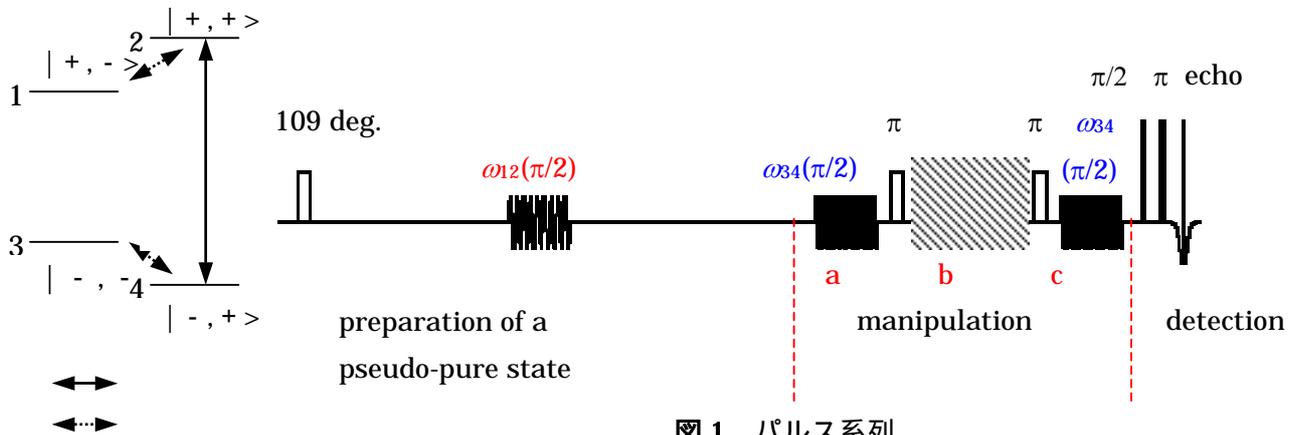


図1 パルス系列

$\pi/2$  パルスを用いることにより  $|-, ->$  状態のみが他の状態に比べて多く占有する擬純粋状態を用いた(図1)。量子高密度符号化による量子エンタングルド状態間の相互変換過程を実験的に検証するために、過程におけるユニタリ変換  $U_i$  として  $\omega_{34}$  の周波数をもつラジオ波パルスを照射し、パルス幅依存性をHahnエコーを検出することにより読み出した。エコー強度のパルス幅依存性には、核スピン ( $I = 1/2$ ) のスピノールに由来する  $4\pi$  周期性が観測され、エンタングルド状態の量子情報変換が行えることを実証した。核スピンのスピノール性の実証例は、実験の容易さ故に既に報告されてきたが、量子情報処理の過程でスピノール性が顕な形で出現することを理論的かつ実験的に示したのは本研究が最初である。さらに、本研究では、電子スピンの量子位相情報を顕に扱うことができるスピン操作技術及び量子情報処理のためのパルスプロトコルを通じて、電子スピン ( $S=1/2$ ) のスピノール性が出現することを予測し実験的に顕な形で初めて実証した[6]。

**謝辞** 本研究課題は、大阪市立大学大学院理学研究科物質分子系の佐藤和信教授、塩見大輔准教授、及び豊田和男講師に加えて、同大学院理学研究科の西田辰介博士研究員 (JSPS)、伊瀬智章博士研究員 (JST)、森 展之博士研究員 (阪市大・院・理/JST)、中澤重顕博士研究員 (阪市大・院・理/JST)、吉野共広氏(阪市大・院・理)、大阪大学大学院理学研究科化学専攻の森田 靖准教授、鈴木修一博士 (阪大・院・理：現阪市大・院・理、助教)、上田 顕氏 (阪大・院・理)、中筋一弘教授 (大阪大学名誉教授、現福井工大)、分子科学研究所の古川 貢助教、中村敏和准教授、大阪大学大学院基礎工学研究科システム創成専攻の Robabeh Rahimi 博士 (現近大・理工、PD) 北川勝浩教授、及び Bruker-Biospin(株)の原英夫博士、P. Carl 博士、P. Hoefler 博士との共同研究であることを記し、謝辞を表します。

【文献】

- (1) M. Mehring, J. Mende, and W. Scherer, *Phys.Rev. Lett.*, **90**, 153001 (2003).
- (2) M. Mehring, W. Scherer, and A. Weidinger, *Phys. Rev. Lett.*, **93**, 206603 (2004).
- (3) a. R. Rahimi, K. Sato, K. Furukawa, K. Toyota, D. Shiomi, T. Nakamura, M. Kitagawa, and T. Takui, *Int. J. Quantum Information* **3**, 197-204 (2005). b. R. Rahimi, K. Sato, D. Shiomi, and T. Takui, in *Handbook of Modern Magnetic Resonance*, ed. by Graham A. Webb, Springer, 643-650 (2006).
- (4) M. Mehring and J. Mende, *Phys. Rev. A*, **73**, 052303 (2006).
- (5) R. Rahimi, K. Sato, S. Nishida, K. Toyota, D. Shiomi, Y. Morita, A. Ueda, S. Suzuki, M. Kitagawa, K. Nakasuji, H. Hara, P. Carl, P. Hoefler, and T. Takui, *Science*, submitted.
- (6) K. Sato, R. Rahimi, N. Mori, S. Nishida, K. Toyota, D. Shiomi, Y. Morita, A. Ueda, S. Suzuki, K. Furukawa, T. Nakamura, M. Kitagawa, K. Nakasuji, M. Nakahara, H. Hara, P. Carl, P. Höfer, and T. Takui, *Physica E*, in press (2007).