

単一核スピンフリップデバイスによる NMR 量子コンピュータの提案に関する理論的研究

(東大院工) 多田朋史

【序】量子コンピュータとは、情報処理の基本ユニットであるビットとして $|0\rangle$ と $|1\rangle$ の2準位の重ね合わせ状態を利用するものであり (qubit)、複数の qubit におけるエンタングルメント (量子もつれあい) を利用することで、古典ビットを基盤とした通常のコンピュータでは現実的な時間内に解くことのできないような問題に有効なコンピュータとして注目を集めている。これまで、量子コンピュータの実現に向けた研究が世界的な規模で精力的に展開されており、qubit として核スピン、電子スピン、超伝導電荷ビット・磁束ビット等が提案されている。それぞれの qubit に関して量子演算における長所短所が存在するが、核スピンに関して言えば、環境との相互作用が大変小さいためビット情報を保持できる時間が他のビットに比べて長く、多くの量子演算を行えるという利点がある。実際、2001年に7個の qubit を有する分子を用いてショアのアルゴリズムによる因数分解に成功したとの報告がなされたが[1]、これは核スピンの核磁気共鳴 (NMR) 現象を利用したものであった。この因数分解に成功したシステムの qubit 数を増やすことができれば量子コンピュータとして大変有力な候補になり得るのであるが、システムとして液体状態を必要とし、観測している NMR 信号が膨大な数の分子からの平均値であるということに起因する諸問題により、液体 NMR システムにおいてこれ以上 qubit 数を増やすのは困難であることが分かっている。システムに含まれる qubit 数の拡張性に優れ (scalability)、個々の qubit に対し選択的に演算 (1-bit, 2-bit operations) ・読み出し (read out) が可能なシステムが量子コンピュータ実現の必須条件であり、qubit システムを固体状態で構築することがこの3つの要求を満たす一つの方法とされている。そこで本研究では、

これらの要求を満足し、かつ核スピンの情報保持能力の高さを利用するため、単一の核スピンを qubit の基本単位とし、それを集積化させた量子コンピュータのデバイス構造 (図1) を提案する。第一原理非平衡グリーン関数法を用いた理論計算をもとに、このデバイスでは qubit 情報の選択的読み出しには ON-resonance 状態での核スピンフリップを利用した非弾性電流計測が有効であり、選択的演算には OFF-resonance 状態にて核スピンの共鳴周波数変調が効果的であることを提案する[2]。

【方法】個々の核スピン状態の選択的読み出しの方法を以下に述べる。図1のように、それぞれの qubit には、スピン状態読み出しのための電極 (source, drain) が接続されている。読み出しを行いたい核スピンに接続されている電極に電圧をかけ、核-伝導電子の超微細相互作用による同時スピンフリップによる非弾性電流計測から核スピン情報を読み取るのが本研究が提案する単一核スピンフリップデバイスである。具体的には、スピンバルブを両電

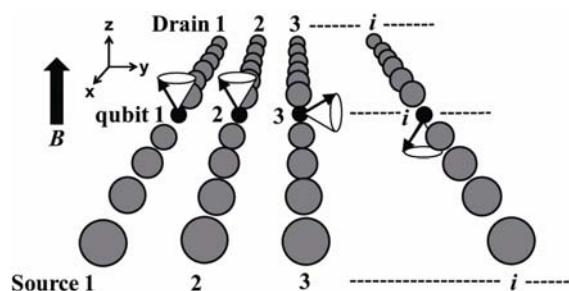


図1：単一核スピン集積型 NMR 量子コンピュータのモデル。各 qubit には、核スピン状態読み出しのための電極が接続されている。簡単のため、共鳴トンネリング制御用ゲート電極は表示していない。

極に設け、入射電子(source)はダウンスピンに分極されている状況を想定する。この場合、核スピンのアップ状態であれば（例えば、図1の qubit 1）スピンのゼーマンエネルギーが保存（spin conservation）される散乱過程として、核スピンのダウンに、伝導電子スピンのアップにそれぞれ反転する過程が許容であり、drain 電極ではアップスピンの非弾性電流が得られる（単一電子トンネリング）。一方、観測前にて核スピンのダウン状態であれば、ゼーマンエネルギーが保存される散乱過程として同時スピンフリップは起こらず、drain 電極ではダウンスピンのままの弾性電流が得られる。つまり、drain 電極で観測されるアップスピン伝導電子の有無により核スピン状態を決定することができる。以上が、スピンバルブを利用した非弾性電流計測による選択的核スピン状態の読み出しであるが、次に重要となることはこの同時スピンフリップの実現確率である。核スピンを持たない金属電極に 1/2 核スピンをもつ単一分子が架橋されている系を計算対象とし、GAUSSIAN03 に導入した非平衡グリーン関数法により電圧を印加した場合の核-伝導電子の超微細相互作用による核スピンの反転確率を見つめた（下式）。 H^{sc} , H^{di} は超微細相互作用の接触相互作用と双極子相互作用であり、反転確率 w の添字が起こりうるスピン反転の状態に対応する（伝導電子波動関数と核スピン関数の direct product を Ψ とした）。この反転確率の計算には、印加バイアス電圧領域におけるアップとダウンスピンの波動関数の情報が必要となるが、微弱電圧印加時にはスピン分極していない非平衡グリーン関数から計算することが出来る。

$$w_{(-+)\rightarrow(+)} = \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \Psi^{+-}(E) | \mathcal{H}^{sc} + \mathcal{H}^{di} | \Psi^{-+}(E') \rangle|^2 \delta(E - E') \times f_L(E) \{1 - f_R(E)\}$$

【結果】Pd 電極 - 水素分子 - Pd 電極において、H の基底関数として cc-pvdz, Pd の基底関数として Lanl2MB を用い、密度汎関数法の LDA によりプロトン核スピンの伝導電子による緩和時間 $T_1 (= 1/w)$ を 40mV の電圧印加時に計算した（図2）。系のフェルミレベルはゲート電圧を印加することで変調できるので、同図では緩和時間をフェルミレベルの関数としてプロットした。この結果から分かるように、フェルミレベルを負の方向にシフトした場合、スピン反転の時間は数秒程度であるのに対し、フェルミレベルを正の方向にシフトした場合、スピン反転が起こるには約 10^4 秒もかかることが分かる。フェルミレベルを負/正にシフトした状態は Pd 電極特有の共鳴トンネリングが ON/OFF になっている状態に対応しており、核スピン状態の読み出しには共鳴トンネリングが ON 状態（ON-resonance）になっていることが望ましいと言える[2]（具体的な理由については本講演で述べる）。一方、OFF-resonance はスピン反転が起こりにくい状態であり、これは言い換えると核スピンの状態が保存されやすいということになる。つまり、OFF-resonance は rf 磁場を利用した量子演算に適した状態となる。更に、図1のデバイス構造では OFF-resonance 時にて選択的 1-bit, 2-bit 演算が可能になることが、磁気遮蔽定数の計算から示すことが出来る[2]

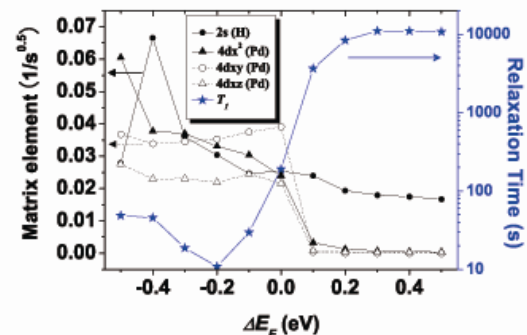


図2 : Pd-H₂-Pd 架橋系におけるプロトン核スピンの緩和時間（印加電圧 40mV）

（詳細は本講演にて）。それぞれの計算の詳細、また、単一核スピンフリップデバイスに要求される諸条件（設定温度等）についても本講演で述べる予定である。

[1] L. M. K. Vandersypen et al., *Nature* **414**, 883 (2001).

[2] T. Tada, submitted for publication.