

分子スピン量子ビットによる量子演算

(¹阪市大院理・²阪大院理・³阪大院基礎工・⁴福井工大・⁵ブルカーバイオスピン・⁶JST-CREST)

○中澤重顕^{1,6}、佐藤和信^{1,6}、吉野共広^{1,6}、伊瀬智章^{1,6}、西田辰介^{1,6}、森展之¹、R. D. Rahimi¹、森田靖^{2,6}、豊田和男^{1,6}、塩見大輔^{1,6}、北川勝浩^{3,6}、中筋一弘⁴、原英之⁵、P. Carl⁵、P. Hofer⁵、工位武治^{1,6}

[序]近年、量子コンピュータの実現を目指して様々な物理状態を量子ビットとした研究がなされており、光子、超伝導キャビティ、トラップイオン、半導体量子ドット、分子の振動回転状態、核スピンをもちいた研究が進行している。分子の核スピンを qubit として用いた研究では 7qubit による Shor のアルゴリズムの実行が報告されている[1]。しかし、核スピン qubit はスケーラビリティや初期化などの困難な課題が指摘されている。我々は量子コンピュータの現実化にとって大きな課題となっているスケーラビリティを展望して分子の電子スピンを qubit リソースとすることに着目してきた。分子電子スピンを qubit とする系では、パルス磁気共鳴法をもちいて qubit にアクセスするために molecular g-engineering という設計指針を提案し、スケーラブルな多 qubit 系を可能とする Lloyd 型の物質系を具体的に設計し、そのプロトタイプを初めて合成した[2]。また、適切な qubit を有機合成的に開発するという意味で新たに「合成 qubit (Synthetic Qubit)」という概念を提唱した[3]。本研究では量子計算の基本的な量子ゲートの 1 つである CNOT ゲートが分子電子スピン qubit で実行できることを証明するために、2 電子スピン qubit である安定な弱交換相互作用系ビラジカルを設計・合成し、磁氣的な希釈単結晶を育成した。Q バンド CW 及びパルス ESR 法をもちいてこの系の磁氣的パラメータを決定し、CNOT ゲートの実証を行った。

一方、核スピン qubit の課題である初期化やスケーラビリティなどの弱点を補う 1 つのアプローチとして電子スピンとのハイブリット型 (電子スピン bus qubit) が注目されている。これまでに、1 電子スピン-1 核スピン系であるマロニルラジカルを用いて、量子高密度符号化の実験的検証・初等アルゴリズムの実証をはじめて実現した[4]。また、電子スピンをもちいた量子情報処理の過程では、電子スピンのスピノール 4π 周期性が顕に出現することを示し、電子スピノールを初めて実証した[5]。より qubit 数の多い系として 1 電子スピン - 3 核スピン qubit 系とみなすことのできるアスパラギン酸ラジカルを用いて 3-qubit エンタングルメント状態の生成や量子テレポーテーションを実行するためのパルスプロトコルの検討を行った。

[結果]電子スピン qubit として化学的に安定な TEMPO ラジカルをもちいた 2 電子スピン qubit 系として図 1 に示す弱交換相互作用ビラジカルを分子設計・合成した。これは、量子ビットは $S=1/2$ が良い量子数になるように交換相互作用は小さくし、量子演算に使う磁気双極子相互作用が 10 MHz 程度、結晶中で 2 つのラジカル of g テンソルの主軸が異なるように g-engineering を施すという分子設計指針に基づいた分子である。qubit を個別に操作するためには遷移を選択的に励起しなければならないので単結晶をもちいた。結晶中で周辺のビラジカルとの磁氣的相互作用を小さくし、かつデ

コヒーレンス時間を長くするために、NOラジカルサイトをCO基に置換した反磁性分子を宿主分子とした希釈単結晶を育成した。宿主分子のX線結晶構造解析の結果、g-engineeringが成功していることが期待された。

ESR遷移の帰属のために単結晶CW-ESRスペクトルとパルスELDORの角度変化を測定・解析し、スピンハミルトニアンパラメータを決定した。得られた磁氣的テンソルを宿主分子の結晶構造解析と比較すると、ビラジカル分子は希釈単結晶中で宿主分子と同様の構造をもちg-engineeringは成功していることがわかった。それぞれのQubit部のgテンソルとAテンソルの主値は $g=(2.0095, 2.0061, 2.0021)$, $A=(-31.97, -21.47, -131.25)$ MHzであった。

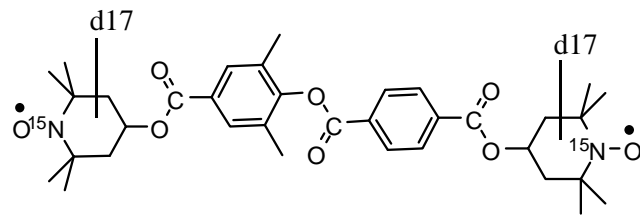


図1. 弱交換相互作用ビラジカル(2電子スピン qubit)

Qubit間の磁氣的相互作用の大きさを決定するために、4パルス系列によるElectron-Electron Double Resonance (ELDOR)測定を行った。ELDOR周波数の角度依存性の解析から、微細構造定数 D 、 E 値と交換相互作用 J を精度よく決定した。スピン双極子相互作用テンソル \mathbf{D} はトレースレスなので、相互作用テンソル \mathbf{W} の等方性項を交換相互作用 \mathbf{J} として抽出した。

$$\mathbf{W} = \mathbf{D} + \mathbf{J} \quad (1)$$

結果として、微細構造定数 $D = -12.3$ MHz, $E = +0.03$ MHz, $J = -0.09$ MHz であることが分かった。 D の符号は理論的に予想されるものである。これらの結果は弱交換相互作用ビラジカルの単結晶ELDORの初めての例である。 D 値から点双極子近似によるスピン間の平均距離を見積もると 18.53 \AA であった。この値は宿主分子の二つのCO基のCC間距離 19.8 \AA とよく整合している。この系にパルスESRを適用して、電子スピンqubitのCNOTゲートを実証した。詳細は当日発表する。

1電子スピン - 3核スピンQubit系であるアスパラギン酸ラジカルによる量子演算についても当日報告する。

[参考文献]

- [1] P.W. Shor, in Proceedings, 35th Annual symposium on foundations of computer science, IEEE Press, Los Alamitos, CA (1994).
- [2] Y. Morita, Y. Yakiyama, S. Nakazawa, T. Murata, T. Ise, D. Hashizume, D. Shiomi, K. Sato, M. Kitagawa, K. Nakasuji, T. Takui, *J. Am. Chem. Soc.*, **2010**, 132, 6944-6946.
- [3] K. Sato, S. Nakazawa, R. Rahimi, T. Ise, S. Nishida, T. Yoshino, N. Mori, K. Toyota, D. Shiomi, Y. Yakiyama, Y. Morita, M. Kitagawa, K. Nakasuji, M. Nakahara, H. Hara, P. Carl, P. Höfer, T. Takui *J. Mater. Chem.* **2009**, 19, 3739-3754.
- [4](a) R. Rahimi, K. Sato, K. Furukawa, K. Toyota, D. Shiomi, T. Nakamura, M. Kitagawa, 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).
- [5] 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, T. Takui, *Physica E*, **2007**, 40, 363-366.