

断熱的量子計算におけるフィデリティ研究  
 (阪市大院理) ○山本 悟, 中澤 重顕, 杉崎 研司, 佐藤 和信,  
 豊田 和男, 塩見 大輔, 工位 武治

A Fidelity Study in Adiabatic Quantum Computers for ESR systems

(Graduate School of Science, Osaka City University)

○Satoru Yamamoto, Shigeaki Nakazawa, Kenji Sugisaki, Kazunobu Sato,  
 Kazuo Toyota, Daisuke Shiomi, and Takeji Takui

【序】我々は、パルス電子スピン共鳴 (ESR) 法により分子内の電子スピンを量子ビットとして操作する分子スピン量子コンピュータの研究を行っている。量子コンピュータの種類には、断熱定理に基づきハミルトニアンをゆっくりと変化させて基底状態により演算するものがあり、断熱的量子コンピュータとして知られている。近年我々は、この断熱的量子演算の例として、21 の素因数分解アルゴリズムを分子スピン量子コンピュータに適用してきた。

21 の素因数分解において問題のハミルトニアンは、式(1)で定義される[1]。

$$H_p = (21 - \hat{x} \cdot \hat{y})^2 \quad \text{式(1)}$$

スピン 1/2 系によってこのアルゴリズムを実行するためには、3 量子ビット必要であり、本研究では  $\hat{x} = 2 \cdot (I - \sigma_z^1)/2 + I$ ,  $\hat{y} = 2^2 \cdot (I - \sigma_z^2)/2 + 2 \cdot (I - \sigma_z^3)/2 + I$  と 2 進数で定めた。式(1)の基底状態は  $(\hat{x}, \hat{y})$  が (3, 7) に対応する時であり、量子ビットを測定することで 21 の素因数分解の解が分かる。このため、 $H_p$  に向けて量子系のハミルトニアンをゆっくりと操作することで、素因数分解を達成できる。これまでの研究では、断熱的量子操作に対応する時間発展演算子を 2 次の Trotter 分解により分割することでパルス配列を示してきた[1, 2]。

$$U_n \approx \exp(-i(1 - g_n)H_{ini}\Delta t/2) \exp(-ig_n H_p \Delta t) \exp(-i(1 - g_n)H_{ini}\Delta t/2) \quad \text{式(2)}$$

ここで  $U_n$  は時間間隔  $\Delta t$  により分割された時間発展演算子、 $H_{ini}$  は系の初期状態におけるハミルトニアンであり、 $g_n$  は時間発展に伴い 0 から 1 まで変化する変数である。本フィデリティ研究では、以前の研究と同様に、3 電子スピン系としてフタロシアニン系、1 電子 2 核スピン系としてグルタコン酸ラジカル系を想定した (図 1) [2]。

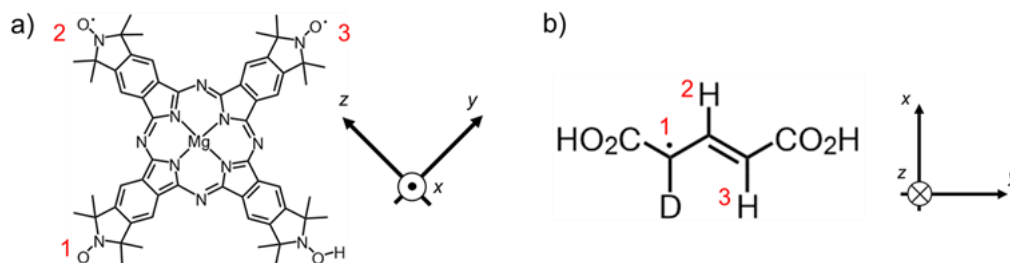


図 1 : AQC における分子系。z 軸方向からの磁場を想定した。

a) フタロシアニン系、b) グルタコン酸ラジカル系

一般的に NMR 量子コンピュータと分子スピン量子コンピュータの最大の相違点は、スピン間相互作用の強度である。そのため先行研究のパルス配列中には、分子スピン系の強い相互作用に基づく短い時間発展項 ( $\sim 0.1$  ns) が含まれていた。このような項は、パルス ESR 実験的に実現が難しく、実験的なフィデリティの低下を招くと考えられる。この問題に対して、我々は Trotter 分解 (式 (2)) の改善により対処した[3]。

【理論】断熱的量子計算を分子スピン量子コンピュータにより実行する際、短い時間発展は  $H_p$  を含む式 (2) の第二項に現れる。高次または余分な指数関数項を加えた Trotter 分解は、任意のパラメータ  $\gamma$  を持ち、時間発展を変化させることが可能である。

$$e^{A+B} = [e^{(1-\gamma)A/N} \cdot e^{B/2\gamma N} \cdot e^{\gamma A/N} \cdot e^{(1-1/2\gamma)B/N}]^N + O(N^{-2}) \quad \text{式 (3)}$$

$$e^{(A+B)} = \left[ e^{(1-\gamma)A/N} \cdot e^{(\frac{4}{3}-\gamma\pm\Gamma)B/2\gamma(\gamma\pm\Gamma)N} \cdot e^{(\gamma\pm\Gamma)A/2N} \cdot e^{(3-4\gamma)B/2(2-3\gamma)N} \cdot e^{(\gamma\mp\Gamma)A/2N} \cdot e^{\left(1-\frac{3\gamma-\frac{4}{3}\mp\Gamma}{2\gamma(\gamma\mp\Gamma)}\right)B/N} \right]^N + O(N^{-3}) \quad \text{式 (4)}$$

ここで、 $\Gamma$  は  $\gamma$  に対して従属であり、式 (3)・式 (4) はそれぞれ 2 次・3 次の Trotter 分解の例である[3]。 $N$  は Trotter 分解における分割のパラメータである。本研究では上記の Trotter 分解を用いて断熱的量子計算を行った際、得られる理論的フィデリティ (量子計算の成功確率) を Matlab ソフトウェア上でシミュレーションした。

【結果と考察】  $A \propto H_p, B \propto H_{ini}$  条件下で、式 (3) を用いて計算されたフィデリティは図 2 に示した。数値計算の結果、 $\gamma = 0$  付近にフィデリティの低い領域が見つかり、これは  $A \propto H_{ini}, B \propto H_p$  条件下でも同様の傾向を示した。一方で、 $|\gamma|$  が大きい領域では Trotter 分解のフィデリティは 0.95 以上を保った。これは上記の条件下で、時間発展項を大きくすることが可能である。

$N = 1, \gamma = 100$  の場合、Trotter 分解の第一項目・第三項目の係数はそれぞれ -99 倍・100 倍される。即ち ESR における時間発展項は、少なくとも 10 ns 程度の大きさを持つことになる。これは広く利用されている X-band (9.5 GHz) 分光計においても、永年近似が成り立つ大きさであり、断熱的量子計算の実現性が高まったと考えられる。その他の断熱的量子計算のパラメータとフィデリティの関係、高次の Trotter 分解における数値計算の結果は当日述べる。

[1] X. Peng, et al., *Phys. Rev. Lett.* **2008**, *101*, 220405. [2] S. Yamamoto, et al., *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2015**, *17*, 2742-2749. [3] W. Janke, T. Sauer, *Phys. Lett. A.*, **1992**, *165*, 199-205.

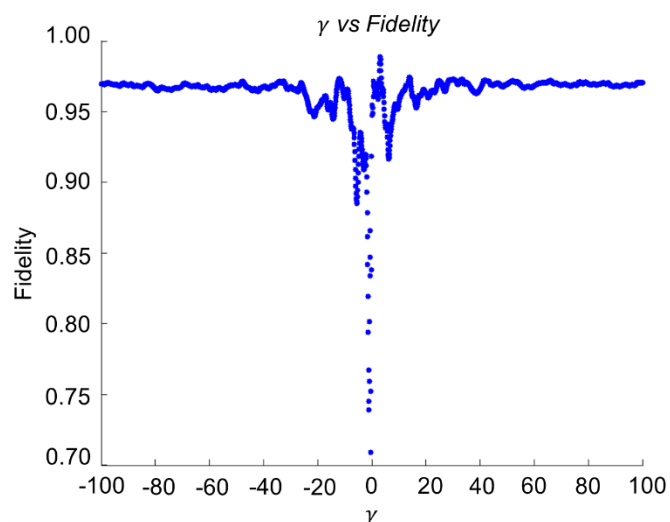


図 2: Trotter 分解 (式 (2)) におけるパラメータとフィデリティ ( $N=1$ )。