

4E10

分子スピン量子コンピュータのための量子制御： 超微細相互作用を利用した多量子ビットゲート操作の実行

(阪市大院理) ○柴田 大貴, 山本 悟, 中澤 重顕, Hosseini Elham, 杉崎 研司, 丸山 耕司,
豊田 和男, 塩見 大輔, 佐藤 和信, 工位 武治

Quantum control for molecular spin quantum computers: Indirect implementation of multi-qubit quantum gates via hyperfine interactions

(Graduate School of Science, Osaka City University) ○Taiki Shibata, Satoru Yamamoto,
Shigeaki Nakazawa, Elham Hosseini, Kenji Sugisaki, Koji Maruyama, Kazuo Toyota,
Daisuke Shiomi, Kazunobu Sato, Takeji Takui

【序論】近年、量子ビットのグローバル制御技術は、量子コンピュータ/量子情報処理技術(QC/QIP)の開発の領域で注目を集めている。量子ビットのグローバル制御は量子コンピュータの制御技術の重要な課題である。これまで我々は量子ビット系として分子スピン系に着目し、パルス電子スピン共鳴(ESR)技術を利用した量子制御の研究を進めてきた[1-7]。

本研究は、任意波形発生装置(AWG)を利用したパルス ESR 法による QC 実験として、実在する単結晶の開殻系分子を想定し、複数の核スピクライアント量子ビットを1つの電子スピンバス量子ビットで間接的に量子制御することを目的とする。今回は1電子スピン-2核スピン系分子を取り上げ、電子スピン量子ビットのみをパルス輻射場で操作して2つの核スピン量子ビット間の量子ゲートを確立するシミュレーション実験を行う。この量子制御に関して、最適な実在分子スピン系を探索する分子構造最適化の観点から、2つの核スピン量子ビット間の量子ゲート操作に必要なマイクロ波 GRAPE パルスを数値計算によって理論的に求めた。GRAPE とは GRadiant Ascent Pulse Engineering の略であり、時間とパルス強度を変数とした最適なパルス操作を可能にする。単結晶の1電子スピン-2核スピン系分子として¹³C 標識化されたマロニルラジカル(図 1)およびマレイン酸水素カリウム(KHM)ラジカル(図 2)を採用した。

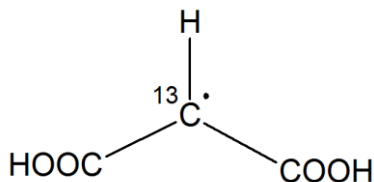


図 1. ¹³C 標識化されたマロニルラジカル

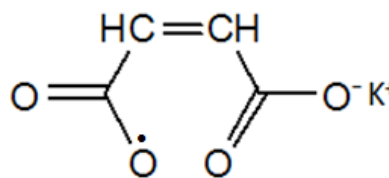


図 2. KHM ラジカル

【結果と考察】以下に示すハミルトニアンを想定し、実在系の1電子スピン・2核スピン系分子の磁気的テンソルを利用して、基本的な量子ゲートである制御 NOT ゲート操作を実行する GRAPE パルスを数値計算によって求めた。

$$H(t) = H_0 + \sum_m f_m(t)H_m \quad \text{式 1}$$

$$H_0 = (\omega_0 - \omega_{\text{MW}})S_z - \gamma_{n1}B_0I_z^1 - \gamma_{n2}B_0I_z^2 \\ + 2\pi(A_{zx}^1S_zI_x^1 + A_{zy}^1S_zI_y^1 + A_{zz}^1S_zI_z^1) + 2\pi(A_{zx}^2S_zI_x^2 + A_{zy}^2S_zI_y^2 + A_{zz}^2S_zI_z^2) \quad \text{式 2}$$

$$H_m = \omega_1S_x \quad \text{式 3}$$

ここで、 $(\omega_0 - \omega_{\text{MW}})$ はオフセット周波数、 ω_1 は輻射場の周波数、 B_0 は静磁場を示し、 γ は磁気回転比、 g と A はそれぞれ g テンソルと超微細構造テンソル、 S と I は電子スピン演算子と核スピン演算子を表している。

ゲート操作の精度とゲート確立に要する全計算時間の観点から、単結晶系分子スピンのスピン構造から最適な条件を得ることを目指し、単結晶に対する静磁場の適切な配向を探索した。また、ハミルトニアンを構成している諸々のパラメータの数値を変えることで、制御 NOT ゲート実行に適した実験条件を探索した。得られた数値結果およびマイクロ波 GRAPE パルスは量子操作実験の実現可能性の観点から評価した。図 3 は KHM ラジカルに対して、ある条件下において全計算時間が $0.5 \mu\text{s}$ でゲート操作の精度 0.99 を実現する GRAPE パルスを示す。講演では、1 電子スピンを介した 2 核量子ビットのグローバル制御に適した実験条件、およびそれらの物理的意味について報告する。

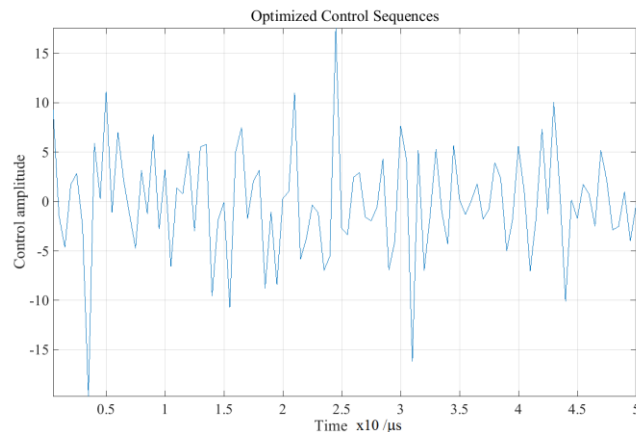


図 3. 計算されたマイクロ波 GRAPE パルス

【文献】

- [1] R. Rahimi, K. Sato, T. Takui et al., *Int. J. Quantum Inf.* **2005**, 3, 197-204.
- [2] K. Sato, R. Rahimi, T. Takui et al., *Physica E*, **2007**, 40, 363-366.
- [3] K. Sato, S. Nakazawa, Y. Morita, T. Takui et al., *J. Mater. Chem.* **2009**, 19, 3739-3754.
- [4] S. Nakazawa, K. Sato, T. Takui et al., *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2012**, 124, 9998-10002.
- [5] S. Yamamoto, S. Nakazawa, K. Sugisaki, K. Sato, T. Takui et al., *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2015**, 17, 2742-2749.
- [6] S. Nakazawa, K. Sato, E. Hosseini, T. Takui et al., “*Quantum Computing, Quantum Communication and Quantum Metrology*”, (eds., Y. Yamamoto and K. Semba), *Lecture Notes in Physics*, Springer, **2015**, in press.
- [7] D. Park, T. Shibata, K. Sato, T. Takui et al., *Quantum Inf. Process.* **2015**, 14, 2435-2461.