

## 研究課題別事後評価結果

### 1. 研究課題名 「核スピンネットワーク量子コンピュータ」

### 2. 研究代表者名及び主たる研究参加者名 (研究機関名・職名は研究参加期間終了時点)

研究代表者 北川 勝浩 (大阪大学 大学院基礎工学研究科 教授)

主たる共同研究者

寺尾 武彦 (京都大学 大学院理学研究科 教授)

武田 和行 (大阪大学 大学院基礎工学研究科 助手)

清水 禎 (物質・材料研究機構 強磁場研究センター 主幹研究員)

北澤 英明 (物質・材料研究機構 ナノマテリアル研究所 主席研究員)

竹内 繁樹 (北海道大学 電子科学研究所 助教授)

小澤 正直 (東北大学 大学院情報科学研究科 教授)

### 3. 研究内容及び成果

分子や結晶の核スピンを量子ビット(qubit)とし、それらの結合ネットワークから成る多 qubit 量子コンピュータの実現を目指して研究を行った。また、光子を用いた相補的な実験や量子計算理論の研究によって、量子コンピュータ実現に関するより一般的な知見獲得も目指した。

量子コンピュータの古典コンピュータに対する優位性は、qubit の数を増やしても計算に必要なリソースが指数爆発しないという本質的スケーラビリティにある。一方、実際にその優位性を発揮するには、問題の大きさに応じて qubit の数を増やすことができる数量的スケーラビリティが求められる。従来から分子の核スピン用いた数 qubit のいわゆる NMR 量子コンピュータは存在したが、初期状態に問題があり、初期化のステップ数や分子の数といったリソースが qubit の数とともに指数爆発するという意味で本質的スケーラビリティを有しておらず、真の量子計算を実現したものではなかった。そこで、本研究では、本質的スケーラビリティの獲得による真の量子計算の実現を目指して初期化の研究を重点的に行い、それと並行して数量的スケーラビリティの可能性についても研究を行った。

まず、分子の光励起三重項状態を用いた動的核偏極の偏極増大メカニズムを解明することによって、三重項電子スピンの偏極率で決まる究極の限界とほぼ等しい70%の高偏極を達成することに成功した。さらに、光パルスの延伸による三重項への励起効率の改善を実験的に検証した。また、半導体結晶の光ポンピングでは、偏波保存ファイバを用いた実験系の開発によって、原理的上限の7割に相当する35%の高偏極を実現することに成功した。これらの実験によって、分子や結晶の核スピンを高偏極化し、低エントロピーの初期状態を実現する物理的初期化に目処をつけた。

また、これらの低エントロピー状態に残留する初期状態のばらつきを一部の qubit に圧縮することによって残りの qubit を初期化するデータ圧縮による初期化法の研究を行った。従来、スケーラブルな NMR 量子計算として提案されていた初期化アルゴリズムを数値シミュレーションによって検証し、データ圧縮効率がエントロピー限界に漸近しないことを見出した。数え上げ符号に基づく量子データ圧縮アルゴリズムを初期化に使うために、量子フーリエ変換を用いた桁上げビット不要の量子加算回路の利用と、予備圧縮による作業領域の確保を考案し、情報理論的にも計算量論的にも効率的な初期化アルゴリズムの構成に初めて成功した。さらにこのアルゴリズムを予備圧縮に再帰的に適用することによって、計算量をエントロピーに依存しない量まで節約する方法を示した。最終的には、符号そのものを見直して、計算量と作業領域の積がこれまでの最小となる優れた量子データ圧縮アルゴリズムを考案し、さらに効率的な初期化を可能にした。

これらスピン偏極と効率的データ圧縮の2段階の初期化により、核スピン量子コンピュータの本質的スケーラビリティを回復し、リソースの指数爆発を起こさない真の量子コンピュータの実現に道を拓いた。

数量的スケーラビリティについては、以下の成果を得た。結晶における J 結合の測定法と双極子相互作用の汎用シミュレータを開発し、核スピンの結合ネットワーク構造の決定を可能にした。NMR 装置の21.6 T への強磁場化に成功し、qubit の周波数間隔の拡大を可能にした。1次元構造を

集積化して磁場勾配を印加するためのテンプレートとなり得る規則的なナノ・ポーラス構造の作製に成功した。また、1次元高分子構造(Lloydモデル)について、量子回路の実装効率を2倍にする方法を考案した。

光子を用いた線形光学量子コンピュータは、単一量子事象が検出可能という利点を持つが、単一光子を利用する限り光路数というリソースが指数的に爆発し、本質的スケーラビリティを持たないという問題があった。そこで、多光子とその相関をも取り扱えるように拡張することを目指して研究を行い、以下の成果を得た。線形光学素子を用いた簡便なCNOTゲートを提案し、モノリシック素子化を実現した。量子もつれ合いフィルタを提案した。2光子状態間もつれ合いの実験的検証に成功した。量子テレポーテーションの忠実度を実験的に評価した。これらの成果によって、複数光子を用いた本質的スケーラビリティのある光量子コンピュータ実現への道を開いた。

計算量理論と量子力学の両面から、量子コンピュータ実験を基礎付ける理論の研究を行った。計算量理論的アプローチでは、量子計算実験で用いられる量子回路の計算量理論を構築した。量子力学的アプローチでは、量子回路を構成する基本量子ゲートの誤差理論を構築した。特に、誤差と擾乱に関する不確定性原理の正しい定式化を導き、それを基礎にして、制御系と量子ビットの相互作用がみだす保存法則だけから定まる不可避な誤差の存在とその定量的制約を明らかにした。

#### 4. 事後評価結果

##### 4 - 1. 外部発表(論文、口頭発表等)、特許、研究を通じての新たな知見の取得等の研究成果の状況

論文発表は英文80件、和文21件、口頭発表(ポスター発表含む)は国際会議117、国内会議111件、そのうち招待されたものが夫々23件、27件、国際的評価の高い学会誌や国際会議に多くの優れた研究成果が発表されており、下記は其中でも特筆すべきもので、いずれも世界で初めて報告された独創的な成果である。

極めて基礎的な研究であるので特許出願は国内2件と余り多くはないが、研究テーマの性格上やむを得ない。

光ポンピングにより電子スピンを用いて核スピンの初期化の具体的な手法を開発したこと。この問題は雑音の多い量子系では重要な技術であり、評価できる。

事実ペンタセン分子で70%、InPで35%のスピンの偏極率を得たこと。これは初期状態を純化する上で極めて重要。

光子を用いた量子コンピュータの研究に具体的な進展があったこと。

不確定性原理によるシングル・スピン量子ビット系に関する物理的制約を理論的にあきらかにしたこと。

##### 4 - 2. 成果の戦略目標・科学技術への貢献

研究代表者の当初の分子に関する提案は液体利用型NMR量子計算機に係るものであった。しかし量子ビットの数を増し、初期化と集積化を可能にする為に固体NMR計算機に移っていったことは妥当な判断であったといえる。

本質的スケーラビリティの確立、光ポンピングにより電子スピンを用いて核スピンの初期化を効率よく行った実験的成果は量子計算機実現のための技術としてインパクトが大きい。複数の単一光子を用いた量子計算機の研究は量子計算機の一つの方向を示すもので科学・技術的価値が高い。不確定性原理による理論グループの研究成果はシングル・スピン量子ビット系に関する物理的制約を示すものとして科学的価値が大きい。

##### 4 - 3. その他の特記事項

真の量子計算へのブレークスルーが核スピンの初期化にあることを明らかにし、かつそれらが実現可能であることを実証したことは量子コンピュータ実現への大きな前進である。特に、核スピン偏極増大化技術、効率的データ圧縮初期化回路の開発はインパクトが大きい。

理論的なバックグラウンド、実験的な工夫・進展からみてこのグループほど高いレベルの成果は他に例が少なく、国内は勿論、外国の研究者と比較してもトップに位置する。