

量子ビット間の相互作用推定手法

東京大学 理学系研究科 化学専攻 田中 宗¹

2つのタイプの相互作用を例に取り、量子ビット間に働く相互作用を推定する手法を考案した。1番目は、核磁気共鳴 (Nuclear Magnetic Resonance: NMR) を用いた量子情報処理を念頭に置いた、サイトに依存する横磁場がかかったイジング的相互作用 [1–3] であり、2番目は2スピン系における一般の形の相互作用 [4–6] である²。

1 緒言

量子情報処理を実現するためには大きく分けて2つの課題を解決する必要がある。1つは「良質」な量子ビットを作成する技術を確立することである。ここで「良質」とは、コヒーレンス時間が長い、動作環境が極端な条件ではない (例: 室温近くで動作する)、量子ビットに対するアクセスが容易であることなどが挙げられる。実験技術の進展により、有機分子の核スピン・超伝導磁束・ナノ分子磁性体・固体中におけるスピンを量子ビットとして用いることができることが確認されており、いくつかの場合において、量子計算のデモンストレーションが行われている段階である。もう1つの課題は、量子ビット間に働く相互作用を精度良く推定する手法を考案することである。量子ビットを所望通りに操作するためには、量子ビット間の相互作用を知らなければならない。そのことを示すために、量子情報処理において典型的な操作である制御 NOT ゲート (Controlled NOT gate: CNOT) について考えよう。基底を $|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle$ とすると、制御 NOT ゲートは以下の行列で表現できる:

$$U_{\text{CNOT}} := \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = e^{i\pi\hat{\sigma}_1^z/2} e^{-i\pi\hat{\sigma}_2^z/2} e^{i\pi\hat{\sigma}_2^x/2} U_J(\pi/4J) e^{i\pi\hat{\sigma}_2^y/2}, \quad U_J(\tau) := e^{-iJ\hat{\sigma}_1^z\hat{\sigma}_2^z\tau} \quad (1)$$

相互作用の強さ J がわからないと U_J を作用させるべき時間 τ を知ることができず、制御 NOT ゲートを作ることはできない。このように、量子状態を制御するためには、量子ビット間に働く相互作用を知ることは必要不可欠である。

¹E-mail: shu-t@chem.s.u-tokyo.ac.jp

²前者は Mohammad Ali Fasihi 氏 (近畿大学)、近藤康氏 (近畿大学)、中原幹夫氏 (近畿大学) との共同研究であり、後者は鹿野豊氏 (分子研) との共同研究である。

2 相互作用推定手法

以下では2つのタイプの相互作用推定手法の概略を述べる。詳細については、論文 [1–6] を参照されたい。

2.1 NMR を用いた量子情報処理を念頭に置いた系の相互作用推定手法

NMR は、有機分子中の核スピンを選択的に回転させることができるため、量子コンピュータとしての利用が期待されている。NMR を用いた量子ビットは、サイトに依存する横磁場がかかったイジングモデルで表すことができる。すなわち、

$$\mathcal{H}_{\text{NMR}} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^z - \sum_i h_i^x \hat{\sigma}_i^x \quad (2)$$

と記述することができる³。ここで、

$$\hat{\sigma}^x := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}^y := \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}^z := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3)$$

である。問題設定は以下の通りである。

- 量子ビットは1次元鎖状に連なっているとする。
- 初期状態として擬純粋状態 $|\uparrow \cdots \uparrow\rangle$ を用意することができる。
- 端のスピンのみ操作・観測することが可能である。
- 操作・観測することのできるスピンにかかっている磁場は既知であり、変化させることができる。ただし、その他の各々の量子ビットにかかっている磁場 h_i^x は固定されており、未知であるとする。

我々が提案した、相互作用を推定する手法は以下の通りである。非自明だが、最も簡単な場合である3スピン系について述べる。

Step 1 状態 $|\uparrow\uparrow\uparrow\rangle$ を用意する。

Step 2 1番目のスピンのみを回転させ、初期状態を $\psi(0) = \alpha |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle + \beta |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle$ とする。

Step 3 1番目のスピンの x 方向の期待値の時間発展 $\langle \sigma_1^x(t) \rangle := \langle \psi(t) | \hat{\sigma}_1^x | \psi(t) \rangle$ を測定する。ただし、 $|\psi(t)\rangle := \exp(-i\mathcal{H}_{\text{NMR}}t) |\psi(0)\rangle$ である。

Step 4 Step 3 で得られたものをフーリエ変換し、 $\langle \hat{\sigma}_1^x(\omega) \rangle$ のピーク位置を得る。

Step 5 1番目のスピンにかかっている磁場 h_1^x を変化させ、Step 1 から Step 4 について、同様の操作を行い、Step 4 で得られる $\langle \hat{\sigma}_1^x(\omega) \rangle$ のピーク位置の変化を得る。そこから相互作用及び磁場の値を求めることができる。

³式の導出の詳細は文献 [7,8] などを参照されたい。

2.2 NV 中心を例とした相互作用推定手法

先程の例では量子ビット間の相互作用が横磁場イジングモデルでよく記述できる場合について、相互作用を推定する手法を考察した。ところが量子ビット間の相互作用はイジング的相互作用であるとは限らず、より複雑な場合が考えられる。例えば、固体中の量子情報処理素子として期待されている NV 中心と呼ばれる系が挙げられる。この系では、ダイヤモンド中の空孔と不純物である窒素とで形成される電子状態を量子ビットとみなすことができる。このとき、量子ビット間の相互作用は双極子・双極子相互作用で記述される。このように複雑な相互作用の場合にも相互作用を推定する手法を検討する必要がある。我々は 2 スピンから成る、最も一般的な相互作用について考察した：

$$\mathcal{H}_{\text{NV}} = \sum_{\mu, \nu \in \{x, y, z\}} g_{\mu\nu} (\hat{\sigma}_1^\mu \otimes \hat{\sigma}_2^\nu), \quad [g_{\mu\nu}] := \begin{pmatrix} g_{xx} & g_{xy} & g_{xz} \\ g_{yx} & g_{yy} & g_{yz} \\ g_{zx} & g_{zy} & g_{zz} \end{pmatrix}. \quad (4)$$

問題設定は以下の通りである。

- 1 体のハミルトニアンは既知であるとする。すなわち、各々の量子ビットの $|\uparrow\rangle$ と $|\downarrow\rangle$ のエネルギー差はわかっているものとする。
- 片方の量子ビットを操作することにより、もう片方の観測ができるとする。両者の量子ビットの直接的な観測は必ずしも必要ではない。情報を片方のスピンからもう片方のスピンの転送し、論文 [9] の方法で情報を取り出す。

我々の提案した手法は以下の通りである。

Step 1 初期状態として、 $\Psi(0) = \rho_1 \otimes \rho_2$ という状態を用意する。ここでそれぞれの密度行列は、 $\rho_1 = (I + \mathbf{r}_i \cdot \vec{\sigma}_1)/2$, $\rho_2 = (I + \mathbf{p} \cdot \vec{\sigma}_2)/2$ とする。ここで \mathbf{r}_i 及び \mathbf{p} はそれぞれ、1 番目・2 番目の量子ビットの量子状態をブロッホ球表示した時の状態を表すベクトルである。

Step 2 短い時間 δt だけ待つ。すなわち、 $\Psi(\delta t) = e^{-i\mathcal{H}_{\text{NV}}\delta t}\Psi(0)e^{i\mathcal{H}_{\text{NV}}\delta t}$ という状態が生成される。

Step 3 1 番目の状態を量子トモグラフィを行うことで決定する。

Step 4 測定軸を \mathbf{q} 方向とする。この方向で 2 番目のスピンを測定する。

Step 5 制御可能な 4 つのパラメータ ($\mathbf{r}_i, \mathbf{p}, \delta t, \mathbf{q}$) を変化させて、Step 1 から Step 4 を繰り返す。

Step 6 Step 4 で得られた期待値を下に相互作用を推定する。

この方法は、短時間のダイナミクスから相互作用の情報を引き出せることからデコヒーレンスに対してシビアではないという利点がある。また Bell 測定を必要としない、2 つの量子ビット間の相対位置を知らなくても良いという利点もある。

3 結論・今後の展望

本原稿では、2つのタイプの量子ビット間の相互作用推定手法について検討した。両者の方法とも、1つのスピンの状態の時間発展を観測することにより、全ての相互作用を推定するという、いわゆる逆問題となっている。我々が取り扱った問題はいずれも極めて簡単な場合である。量子情報処理を真に実現するためには、より多くの量子ビットが一般のネットワーク上にある場合について検討しなければならず、多くの変数を推定する必要があるため、非常に難しい問題である。情報科学においては、パラメータ推定の手法は数多く開発されてきている。そのため、今回取り上げた問題は、純粋物理学的知見のみならず、情報科学的知見を駆使した新しい情報統計力学の展開により、更に現実的な問題として取り扱われることになると考えられる。

謝辞

田村亮氏には本原稿を注意深く読んでいただき、有益なコメントを頂きました。本研究は、日本学術振興会科学研究費助成事業（研究活動スタート支援：21840021、及び特別研究員奨励費：23-7601）の支援を受けて実施されました。また、今回報告した研究の計算の一部は、東京大学物性研究所の共同利用スーパーコンピュータを利用しました。ここに感謝申し上げます。

参考文献

- [1] Mohammad Ali Fasihi, 田中宗, 中原幹夫, 近藤康, 素粒子論研究 **119-4A** (2011).
- [2] M. A. Fasihi, S. Tanaka, M. Nakahara, and Y. Kondo, J. Phys. Soc. Jpn. **80** (2011), 0444002.
- [3] M. A. Fasihi, S. Tanaka, M. Nakahara, and Y. Kondo, to appear in the proceedings of Kinki University Quantum Computing Series: “Symposium on Quantum Information and Quantum Computing (2011)”.
- [4] Y. Shikano, S. Kagami, S. Tanaka, and A. Hosoya, AIP Conf. Proc. **1363** (2011), 177.
- [5] Y. Shikano and S. Tanaka, Europhys. Lett. **96** (2011), 40002.
- [6] 田中宗, 鹿野豊, 素粒子論研究 **119-4A** (2011).
- [7] M. Nakahara and T. Ohmi, “Quantum Computing: From Linear Algebra To Physical Realizations”, CRC Press, (2008).
- [8] S. Tanaka and R. Tamura, to appear in Kinki University Series on Quantum Computing Series “Lectures on Quantum Computing, Thermodynamics and Statistical Physics”.
- [9] M. V. Gurudev Dutt, L. Childress, L. Jiang, E. Togan, J. Maze, F. Jelezko, A. S. Zibrov, P. R. Hemmer, and M. D. Lukin, Science **316** (2007), 1312.