NMRによる量子コンピュータ実験

ークロロホルム分子を用いた量子コンピュータ実験ー

鄭 実生・水野 陽一*・萬本 義徳・澤江 隆一**

財部 健一***

岡山理科大学工学部電子工学科 *岡山理科大学大学院工学研究科電子工学専攻 **岡山理科大学理学部応用数学科 ***岡山理科大学理学部基礎理学科 (2002年11月1日 受理)

我々は、これまでに位数発見問題の量子計算^{1,2,3)}と分割表上の量子ランダムウォークのシミュレーション⁴⁾を行ってきたが、これと平行してNMR量子計算実験の研究を開始した。まず手始めとして、グローバーのファイル検索アルゴリズムを2キュービットの量子コンピュータ上で実行した。この量子コンピュータは、クロロホルム分子で構成されており、この分子中の水素原子と¹³C炭素原子の2つの核スピンがキュービットの役割をしている。これらのキュービットの初期化、演算、読み出しの操作は、核磁気共鳴法を用いて実行される。

1. はじめに

NMRによる量子コンピュータの実験的研究は、有名なShorの因数分解量子アルゴリズム⁵⁾が発見された4 年後に、IBMのChuangらのグループ^{6,7)}によって、世界に先駆けて行われた。その後Jonesらのグループ^{8,9)} も実験に成功し、現在では2000年にChuangらが行った5キュービットの実験¹⁰⁾が最高と思われる。今後、5 キュービットを大きく超える実験が期待されるが、我々は手始めとして、クロロホルム分子を用いた2キュ ービットのNMR量子コンピュータ上でグローバーのファイル検索量子アルゴリズムを実行したので報告する。

2. 実験

2-1 NMR 量子コンピュータ

クロロホルム分子中の¹ H核スピンと¹³C核スピンは、双極子相互作用、および電子スピンと核スピン間のフェルミ接触相互作用による、J結合と呼ばれる弱い相互作用をしている。2軸方向に磁場をかけた場合、溶液中では、この相互作用のxy成分は分子運動のために消えるため、磁場中でのハミルトニアンは近似的に、

$$H = -\hbar\omega_H I_z - \hbar\omega_C S_z + 2\pi\hbar J I_z S$$

(1)

と書くことができる。ここで、 I_z は¹H核スピン演算子のz成分、 S_z は¹³C核スピン演算子のz成分、 ω_H は ¹H核スピンの共鳴角周波数、 ω_c は¹³C核スピンの共鳴角周波数、 \hbar はプランク定数 \hbar を2 π で割ったもの、Jは ¹Hを¹³Cとの核スピン間の相互作用定数とし、磁場はz軸の正方向にかけられているものとする。¹H核スピン および¹³C核スピンはスピン1/2で、 I_z および S_z の固有値は±1/2の2種類の値をとる。この2つの状態に対応 して、それぞれの核スピンが1キュービットを表し、+1/2のときの状態を $|0\rangle$ 、-1/2のときの状態を $|1\rangle$ とする。任意の状態 $|x\rangle$ はベクトルを用いて、

$$|x\rangle = x_0|0\rangle + x_1|1\rangle = \begin{bmatrix} x_0\\ x_1 \end{bmatrix}$$
(2)

と表すことができる。このとき、 $I_z \ge S_z$ はパウリ行列を用いて、

$$I_z, S_z = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0\\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$
(3)

と表すことができる。¹³C核スピンを下位キュービット、¹H核スピンを上位キュービットとすると、(1) 式は、2行2列の単位行列 *e*を用いて、

$$H = -\hbar\omega_H I_Z \otimes e - \hbar\omega_C e \otimes S_Z + 2\pi\hbar J I_Z \otimes S_Z \tag{4}$$

と表すことができる。これを行列で表すと、

$$=\frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} -\omega_{H} - \omega_{C} + \pi J & 0 & 0 & 0\\ 0 & -\omega_{H} + \omega_{C} - \pi J & 0 & 0\\ 0 & 0 & \omega_{H} - \omega_{C} - \pi J & 0\\ 0 & 0 & 0 & \omega_{H} + \omega_{C} + \pi J \end{bmatrix}$$

となる。この対角成分は、それぞれ次の状態、

$$\psi_{0} = |00\rangle = \begin{bmatrix} 1\\0\\0\\0 \end{bmatrix}, \psi_{1} = |01\rangle = \begin{bmatrix} 0\\1\\0\\0 \end{bmatrix}, \psi_{2} = |10\rangle = \begin{bmatrix} 0\\0\\1\\0 \end{bmatrix}, \psi_{3} = |11\rangle = \begin{bmatrix} 0\\0\\0\\1 \end{bmatrix}$$
(5)

の固有エネルギーに対応している。

2-2 NMR量子コンピュータの演算

量子コンピュータにおける演算は2種類の基本ゲートと制御ノットで実行可能であるが、NMR量子コン ピュータにおいては、固有エネルギーの差に対応するそれぞれの共鳴周波数の交流パルス磁場、およびJ結 合を利用して行われる。共鳴周波数で回転する座標系において x軸方向にパルス磁場をかけたときのハミル トニアン Hは、共鳴する核スピンに注目すると、

(6)

$$H = -\hbar\omega_1 I_x$$

と書くことができる。このときの状態を表す波動関数φ(t)の時間変化はシュレーディンガー方程式、

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi(t)}{\partial t} = H\psi(t) \tag{7}$$

に従うので、 t 秒後の波動関数 $\phi(t)$ は、

$$\psi(t) = e^{i\omega_1 t_x} \psi(0) = X(\theta) \psi(0) \tag{8}$$

と書くことができる。ここで、 $\theta = \omega_1 t$ である。 I_x は行列であらわすと、

$$I_X = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1\\ 1 & 0 \end{bmatrix} \tag{9}$$

であり、パウリ行列のユニタリー性に注意して X(θ) をテイラー展開すると、

$$X(\theta) = \cos(\frac{\theta}{2}) + 2i\sin(\frac{\theta}{2})I_{X} = \begin{bmatrix} \cos(\frac{\theta}{2}) & i\sin(\frac{\theta}{2}) \\ i\sin(\frac{\theta}{2}) & \cos(\frac{\theta}{2}) \end{bmatrix}$$
(10)

が得られる。したがって、 $J \ll \omega_1$ とすると、¹H核スピンの共鳴角周波数 ω_1 のパルス磁場を加えた場合の波動関数の変化は演算子、

$$X_{H}(\theta) = X(\theta) \otimes e$$

で与えられる。また、¹³C核スピンの共鳴角周波数ω_cのパルス磁場を加えた場合は、

$$X_{c}(\theta) = e \otimes X(\theta)$$

である。同様にして、回転系のy軸方向にパルス磁場をかけたときの波動関数の変化はユニタリー演算子、

$$Y(\theta) = \cos(\frac{\theta}{2}) + 2i\sin(\frac{\theta}{2})I_{Y} = \begin{bmatrix} \cos(\frac{\theta}{2}) & \sin(\frac{\theta}{2}) \\ -\sin(\frac{\theta}{2}) & \cos(\frac{\theta}{2}) \end{bmatrix}$$
(11)

で与えられる。それぞれの核スピンに注目して、 ω_H および ω_c で回転する2重回転系において、パルス磁場 がかけられていないときのハミルトニアン*H*は、

 $H = 2\pi \hbar J I_z S_z$

と書くことができる。したがって、このときの波動関数の時間変化は、

$$\psi(t) = e^{i2\pi \hbar I_z S_z} \psi(0) = T(\theta) \psi(0)$$

と表すことができ、同様に $T(\theta)$ を展開すると、

$$T(\theta) = \begin{vmatrix} \cos\frac{\theta}{4} + i\sin\frac{\theta}{4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\frac{\theta}{4} - i\sin\frac{\theta}{4} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos\frac{\theta}{4} - i\sin\frac{\theta}{4} & 0 \\ 0 & 0 & \cos\frac{\theta}{4} - i\sin\frac{\theta}{4} & 0 \\ 0 & 0 & \cos\frac{\theta}{4} + i\sin\frac{\theta}{4} \end{vmatrix}$$
(12)

が得られる。これら3つのユニタリー変換、 $X(\theta)$ 、 $Y(\theta)$ 、 $T(\theta)$ の組み合わせによって演算が実行され る。表1に量子コンピュータで用いられる代表的なユニタリー変換と対応するパルス系列および量子コンピ ュータダイアグラムを示す。表で示した、制御ノットのパルスシーケンスはJeener-Broekaertシーケンス¹¹⁾ と原理的には同じものである。表中の演算とパルスシーケンスは位相因子の違いが存在するが、結果には影 響しないため無視するものとする。また、表で示したパルス系列と、それに含まれる全てのパルスの位相を 同じだけ変えたものは等価である。例えば、 $\{X(\theta) \rightarrow Y(\theta), Y(\theta) \rightarrow X(-\theta)\}$ の置換は演算を変えない。 この操作は、演算を多数実行する際にパルス系列を短縮化するのに大いに役立つ。

表1 基本変換とパルス系列

変換	パルス系列	<u> 量子コンピュータダイアグラム</u>
否定	Χ(π)	$ x\rangle$ σ $ x\rangle$
ウォルシュ・ アダマール	Χ(π) Υ(-π/2)	$ \mathbf{x}\rangle$ W \mathbf{w}
制御ノット	$Y_{\rm H}(\pi/2)T(\pi)X_{\rm H}(\pi/2)$	x⟩ x⟩
		y⟩(σ) x⊗ y⟩
選択的半回転	$Y_{c}(\pi/2) X_{c}(\pi/2) Y_{c}(-\pi/2)$	$ \mathbf{x}\rangle \longrightarrow \mathbf{x}\rangle$
(R ₃)	$Y_{H}(\pi/2) X_{H}(\pi/2) Y_{H}(-\pi/2) T(\pi)$	$ y\rangle \qquad \qquad$
スワップ	$Y_{H}(\pi/2) T(\pi) X_{H}(\pi/2)$	$ \mathbf{x}\rangle \longrightarrow \mathbf{y}\rangle$
	$Y_{c}(\pi/2) T(\pi) X_{c}(\pi/2)$ $Y_{H}(\pi/2) T(\pi) X_{H}(\pi/2)$	$ y\rangle \longrightarrow \sigma \longrightarrow x\rangle$

2-3 NMR 量子コンピュータの状態

クロロホルム1分子のスピン状態の波動関数↓は(5)式で与えれれる状態の和で、次式で表される。

 $\psi = \sum_{i=0}^{3} w_i |i\rangle$

しかしながら、NMR量子コンピュータではアボガドロ数程度の分子を一度に取り扱うため(13)式のような純 粋状態を直接取り扱うことはできない。そのため統計的な混合状態を取り扱う必要がある。そこで、次式で 定義される、

$$\rho_{nm} = w_n w_m^*$$

(14)

(13)

密度行列 ρ を導入する。ここで、(14)式中のバーはアンサンブル平均を取ることを意味する。また、熱平衡状態において、状態を占める確率はボルツマン分布に従うと仮定し、高温近似を用いると、状態を占める確率の差は、状態のエネルギーに比例する。したがって、熱平衡状態における密度行列 ρ_0 は、NMRにおいては成分の差の相対値のみ有効であるので、単位行列に比例する項は取り除くことができ、 $\omega_{\rm H}$: $\omega_{\rm C}$ = 4.0: 1.0および $\omega_{\rm H}$ 、 $\omega_{\rm C}$ > Jであるため、(1)式より、

	1.0	0	0	0]
	0	0.6	0	0
$\rho_0 =$	0	0	-0.6	0
	0	0	0	-1.0

と便宜的に書くことができる。ここで、非対角成分が0であるのは、それぞれの分子の波動関数の位相因子 がランダムのためである。

2-4 状態の読み出し

状態は密度行列の4つの成分 ρ_{00} 、 ρ_{11} 、 ρ_{22} 、 ρ_{33} の相対値を知れば十分であるが、NMRでは、 $X_c(\pi/2)$ 、 $X_H(\pi/2)$ などの90度パルスを加えることにより、 $\omega_c/2\pi - J/2$ の周波数の位置に $\rho_{00} - \rho_{11}$ 、 $\omega_c/2\pi + J/2$ に $\rho_{22} - \rho_{33}$ 、および $\omega_H/2\pi - J/2$ に $\rho_{00} - \rho_{22}$ 、 $\omega_H/2\pi + J/2$ に $\rho_{11} - \rho_{33}$ に比例した強度の信号を観測でき、4つの成分を調べることができる。ただし、今回用いた実験装置では、¹Hを観測しながら¹³Cにパルスを照射することができないため、スワップ演算を用いて、¹³Cの信号を観測することにより、間接的に¹Hの信号を観測し、上位キュービットの情報を得ることにした。熱平衡状態の¹³Cの信号およびスワップ演算後の信号をそれぞれ図1と図2に示す。横軸の周波数は100.533220MHzからの値である。



得られたデータに次式で定義されるフィッティング関数F(v)

$$F(v) = a \left(\frac{d \cos \theta}{d^2 - (v - v_c)^2} + \frac{(x - v_c) \sin \theta}{d^2 - (v - v_c)^2} \right)$$
(16)

を用いて得られた値を表2に示す。この結果から、*J*=212.3 Hz、 *T*₂*=1.3 s であることがわかる。

表2 熱平衡状態の¹³C信号のフィッティング結果

	f 1	f 2	f ₁ (スワップ)	f , (スワップ)
信号強度(面積)	350.5	351.0	881.9	827.4
位相 (deg)	-0.3	-0.5	20.3	-13.2
中心周波数(Hz)	-35.80	176.52	-35.72	176.56
線幅 (Hz)	0.765	0.772	0.780	0.743

2-5 状態の初期化

量子コンピュータの入力として基点となる純粋状態を作る必要があるが、先ほども述べたように、NMR量子コンピュータではアボガドロ数程度の分子を取り扱うため純粋状態を直接取り扱うことができない。その代わりとして有効純粋状態と呼ばれる状態を用意する。この有効純粋状態は、密度行列の対角成分のうち1つの成分の値のみが違い、他の成分が等しい状態である。例えば、 $\rho_{00} \neq 0$ で、それ以外の成分は全て0の状態である。この密度行列がさす混合状態は、純粋状態|00> = [1,0,0,0]'と等価な状態として取り扱うことができる。なぜならば、この純粋状態が作る密度行列と等価なためである。(純粋状態[1,1,1,1]'が作る密度行列は対角成分が1で非対角成分が0の密度行列と等価でないことに注意。)この有効純粋状態はユニタリー変換では作れないため、何らかの緩和過程またはユニタリー変換の和をとることによって作られる。今回の実験ではテンポラル法¹²)と呼ばれるユニタリー変換の和をとる方法で有効純粋状態を作ることにした。この方法は、熱平衡状態に置換 P₁= { $|10\rangle$ * $|11\rangle$ * $|01\rangle$ } および P₂= { $|11\rangle$ * $|01\rangle$ * $|10\rangle$ * $|11\rangle$ } を施すことにより、密度行列の要素 ρ_{11} 、 ρ_{22} 、 ρ_{33} 、を入れ替え、それらの3つの状態の和をとり、有効純粋状態を作る方法である。つまり、

$$\rho_{in} = \rho_0 + P_1 \rho_0 P_1^{-1} + P_2 \rho_0 P_2^{-1}$$

(17)

を意味する。密度行列の単位行列に比例する項は、ユニタリー変換では変化しないためNMRでは無視できるので、 ρ_{in} の状態は純粋状態 $\phi_0 = |00\rangle$ と実効的に等価として取り扱うことができる。このときの¹³Cの信号およびスワップ演算後の¹³C信号をそれぞれ図3と図4に示す。また、関数 $F(\nu)$ でフィッティングして得られた結果を表3に示す。



	f 1	f 2	f ₁ (スワップ)	f 2 (スワップ)
信号強度(面積)	2422.0	-112.0	1885	-359.9
 位相(deg)	8.2	46.1	14.7	-13.1
中心周波数(Hz)	-35. 78	176.29	-35.67	176. 51
線幅 (Hz)	0.771	0.743	0. 788	0.703

表3 初期状態の¹³C信号のフィッティング結果

2-6 グローバーの量子検索アルゴリズムの実行

集合 {0, 1, …, n-1}の要素 x について x=zのときf(x)=1でx ≠ zのときはf(x)=0となるオラクル関数f(x)を考える。古典的にはこのオラクル関数を使ってzを発見するにはO(n)回の試行が必要である。ところが、グローバーの量子アルゴリズム¹³⁾を用いるとO(√n)回の試行で発見することができる。量子アルゴリズムでは、f(x)の代わりにx, y成分にR_z(x, y)=(-1)^{f(x)} δ_{xy} を持つ選択的回転変換R_zを考える。すると平均に関する反転変換をD=-W R₀Wとすると、ユニタリー変換D_z=DR_zをすべての状態が等しい確率をもつ状態 ϕ_0 =W ϕ_0 に、およそ $\pi\sqrt{n}/4$ 回施すことによって解を見つけることができる。特に、2キュービットの場合は一回の試行で見つけることができる。2キュービットのz=3のときの量子コンピュータダイアグラムを図5に示す。



図5 z=3の場合のグローバーの量子コンピュータ

ただし、

$$A_0 = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, A_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$
(18)

である。図に示した演算U₃Wを(17)式で示される状態に施した後の¹³Cの信号およびスワップ演算後の¹³C 信号をそれぞれ図6と図7に示す。図からわかるように、状態 $\phi_3 = |11\rangle$ が観測されており、一度の演算で 解z=3が見つけられている。観測データを関数F(v)でフィッティングして得られた値を表4に示す。



	f 1	f 2	f ₁ (スワップ)	f 2 (スワップ)
信号強度(面積)	372.5	-1944.6	-650.8	-2556.7
位相(deg)	-9.4	-8.2	13.4	-18.5
中心周波数(Hz)	-35.68	176.59	-35.96	176.48
線幅 (Hz)	0. 567	0.789	0.641	0.707

表4 演算U₃W後の¹³C信号のフィッティング結果

3. ディスカッション

実験結果から、一応2キュービットのNMR量子コンピュータ上でグローバーの量子アルゴリズムを実行する 実験は成功したといってよい。しかし、表2から逆算して得られる熱平衡状態の密度行列 ρ_{ex} は、およそ

$\rho_{ex} =$	[1.0	0	0	0
	0	0.3	0	0
	0	0	-0.3	0
	0	0	0	-1.0

(19)

である。(15)式と比べるとかなりの実験誤差がある。これはスワップ演算後の信号強度が理論値に比べて3 ~4割程度小さいためである。この原因は、おもにパルス磁場の不均一によるものと考えられるが、他の演 算に比べて誤差が大きく、パルスの組み合わせや、演算後のスピン温度が熱平衡状態から大きくずれている ことも影響していると思われる。

今後、5キュービットを越える実験が期待されるが、最も障害になると思われるのは、キュービット数が増 えるにしたがって分子が大きくなり、スピン間の距離が増大し、J結合が弱くなることである。J結合の強度 は、1原子離れるごとに数分の1から10分の1程度に減少する。これは、直接的なキュービット間の演算は、直 線的な分子では3~5キュービットが限界であることを示している。隣接間の相互作用のみで量子コンピュ ータを構成する方法も考案されているようで、高キュービットNMR量子コンピュータを実現するには、この方 向の検討が必要ではなかろうか。

参考文献

1)R. Sawae, T. Sakata, Y. Matuda, K. Fukuda, M. Tei and K. Takarabe : "Quantaum random walks on the set of contingency tables", The fourth Quantum Information Technology Symposium, Tokyo, Japan (2000)

2)R. Sawae, T. Sakata, Y. Matuda, K. Fukuda, M. Tei and K. Takarabe: "Optimal Probabilistic Guess of Quantum Order-Finding Computation by Linear Programming Theory", in Proceeding of the first International Conference on Experimental Implementation of Quantum Computation, Sydney, Australia, to be appeared (2000)

3)R. Sawae, K Takarabe, T. Sakata, M. Tei, K. Fukuda and Y. Matuda : "Quantum order-finding by linear programming theory", Technical Report of IEICE. p49-54 (2001)

4)R. Sawae, T. Sakata, K. Takarabe and M. Tei : "Quantum random walks on the set of three way contingency tables", The 5th Quantum Information Technology Symposium, Atugi, Japan (2001)

5)P.W. Shor: "Polynominal-time Algolithms for Prime Factoriztion and Discrete Logarithms on a Quantum Computer, SIAM Journal on Computing, **26**, pp1484-1509 (1997)

6)I.L. Chuang, N. Gershenfeld and M. Kubinec : "Experimental Implementaion of Fast Quantum Searching", Phys. Rev. Lett. 80, pp.3408-3411 (1998)

7)I.L. Chuang, L.M.K. Vandersypen, X. Zhou, D.W. Leung and S. Lloyd: "Experimental realization of a quantum algorithm", Nature **393**, pp.143-146

8)J.A. Jones, M. Mosca and R.H. Hansen: "Implementation of a quantum search algorithm on a quantum computer", Nature **393**, pp. 344-346

9) J. A. Jones and M. Mosca: "Implementation of a quantum algorithm on a nuclear magnetic resonance quantum computer", J. Chem. Phys. 109, pp.1648-1653

10)L.M.K Vandersypen, M. Steffen, G. Breyta, C.S. Yannoi, R. Cleve and I.L. Chuang: "Experimental realization of order-finding with a quantum computer", Phys. Rev. Lett. **85**, pp. 5452-5455 (2000)

11) J. Jeener, P. Broekaert: "Nuclear Magnetic Resonance in Solids: Thermodynamic Effects of a Pair of rf Pulses", Phys. Rev. 157, p232 (1967)

12)E. Knill, I. Chuang, and R. Laflamme : "Effective pure states for buld quantum computer", Rhys. Rev. A 57, p3348 (1998)

13)L.K. Grover : "Quantum Mechanics Helps in Searching for a Needle in a Haystack", Phys. Rev. Lett. 79, p325 (1997)

NMR Quantum Computer Experiment

-Quantum computer experiment with a solution of

chloroform molecules-

Minaru Tei, Yoichi Mizuno*, Yoshinori Manmoto, Ryuichi Sawae**,

Kenichi Takarabe***

Department of Electronic Engineering, Faculty of Engineering, *Graduate School of Engineering, **Department of Applied Mathematics, Faculty of Science, ***Department of Applied Science, Faculty of Science, Okayama University of Science Ridai-cho 1-1, Okayama 700-0005, Japan (Received November 1, 2002)

NMR Quantum Computer Experiment was performed using a Carbon-13 labeled solution of chloroform molecules. In this quantum computer, the Carbon-13 nuclear spin and the Proton nuclear spin in a chloroform molecule play role of one qubit respectively. The qubit correspond to the bit of classical computer. In this experiment, the initialization and the Grover's quantum search algorithm were implemented on this 2-qubit quantum computer.