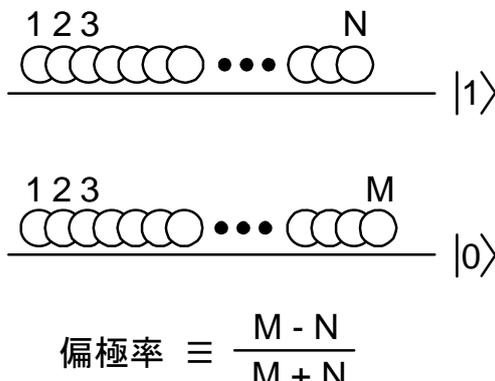


ディビジョン番号	1
ディビジョン名	物理化学

大項目	1. 分子分光学および分子集合体の構造
中項目	1-4. 磁気共鳴
小項目	1-4-2. NMRと量子計算

概要（200字以内）	
<p>最近数年間で、磁場中に置かれた物質中の原子核スピンを利用して量子ゲート操作を行うNMR量子計算のデモンストレーション実験が多数報告されてきた。しかし、非古典的な特徴が発現する真のNMR量子計算実験を行うためには、核スピンの量子ビットとして機能しうる物質において、通常の条件下よりも4～5桁高い核スピン偏極率を達成した上で、量子計算実験を行うことが必要である。</p>	 <p style="text-align: center;">偏極率 $\equiv \frac{M - N}{M + N}$</p>
現状と最前線	
<p>量子計算とは、量子力学の原理に基づいた、これまでにない全く新しいやりかたで行う情報処理の手続きである。量子計算は研究分野としてはその誕生からまだ20年弱しか経っておらず、新たな科学的知見が次々と発表されている。また、実用的な量子計算機の開発に成功すれば、ある種の問題に対しては現存あるいは現行技術の延長上にあるいかなるコンピュータをもはるかに凌駕する速度で計算を遂行できることが理論的に示されている。これらの魅力的な理由により、多岐の分野にわたる数多くの研究者が量子計算の研究あるいは量子計算機の開発に参入している。</p> <p>一方NMRでは、分子の構造や運動に関する情報を抽出するために長年にわたって、原子核スピンの状態や、原子核スピんに働く相互作用を人為的に制御する手法が数多く開発されてきた。したがって、量子力学的系を操作するという量子計算の鍵となる技法がNMRの分野では既に盛んに研究されていたことになる。そのために最近10年間、NMRは量子ゲート操作や量子アルゴリズムをデモンストレーションする格好のプラットフォームとなり、幾多の研究報告がなされてきた。</p> <p>上記の意味でNMRは、これまでに量子計算に意義ある役割を果たしてきた。しかし、量子計算という視点に立てばNMRは、光子・イオントラップ・超伝導等と並ぶひとつの手段にすぎない。NMRが単なるデモンストレーションの域を越え、さらに量子計算に貢献を続ける</p>	

ために挙げられている最優先の課題は、高偏極状態の核スピン系を初期状態として準備することである。NMR実験が行われている典型的な静磁場強度や温度において、ゼーマン分裂したエネルギーレベルへの分布の差は非常に小さい。たとえば数テスラオーダーの磁場中に置かれたスピン1/2の核スピンの場合、常温で熱平衡時の偏極率は約 10^{-5} となる。これは核スピン状態が静磁場に対して平行になる確率が50.001%、反平行になる確率が49.999%であることに相当する。一方、量子計算の手続きにおいて非古典的な特徴を発現させるためには、純粋状態(偏極率1)に近い初期状態を準備する必要がある。その程度は扱う問題に依存するが、最も単純な例として、2キュービットを用いる超高密度符号(superdense coding)アルゴリズムの場合、最低でも $\sqrt{2}-1 \sim 0.41$ の初期偏極率を必要とする[1]。

したがってNMR量子計算の最前線のロードマップは、(i)核スピンを量子ビットとして用いることが出来、かつ、(ii)高偏極を得ることが出来る核スピン系を実現する方向を向いている。非古典的特長の発現に必要な高偏極核スピン量子ビット系を実現させた現時点における唯一の報告例では、パラ水素を利用して超偏極プロトンスピンを得て、直後に化学反応を起こして分子を合成し、2つの超偏極プロトンスピンをキュービットとして利用可能な状態にシフトさせている[2]。

さらに多数の量子ビットを用いたNMR量子計算実験を実現するために、動的核偏極や光ポンピングによって固体中の核スピンを高偏極させて量子計算に利用する試みが進行しているものの、現時点においては、高偏極率の達成と核スピンの量子ビットとしての利用という2要請を両立できていない。

[1] R. Rahimi et al., J. Phys. A: Math. Gen. **39** (2006) 2151.

[2] M.S. Anwar et al., Phys. Rev. A **70** (2004) 032324.

将来予測と方向性

- ・ 5年後までに解決・実現が望まれる課題

核スピンを高く偏極させ、かつ2を超える量子ビット数を確保してNMR量子ゲート操作実験を行うこと。

- ・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題

高い偏極率を持つ8量子ビット核スピン系を実現して、因数分解アルゴリズムやデータ圧縮アルゴリズムを実行すること。

キーワード

NMR、量子計算、量子ビット (キュービット)、偏極率

(執筆者: 武田 和行)