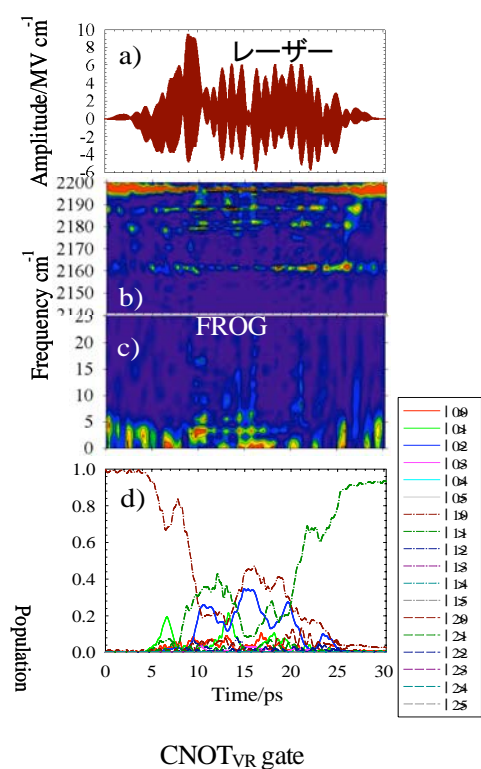


ディビジョン番号	3
ディビジョン名	理論化学・情報化学・計算化学

大項目	1. 理論化学
中項目	1-2. ダイナミクス
小項目	1-2-11. 分子量子コンピュータ

概要（200字以内）	
<p>分子の内部状態（電子、振動、回転）を用いて量子コンピュータを実現する研究は、まだ、今世紀に入ってから分子振動状態に対してのみ理論的に行われた。我々は、振動のみではなく、電子、回転を用いても量子コンピュータが実現可能であることを理論的に示した。将来的には、分子の可能な限りの内部状態を用いた効率的な量子コンピュータが理論的に示され、実験的にも検証されることが予測される。</p>	<p>分子振動状態を用いた量子コンピュータの理論的提唱(2001年)</p> <p style="text-align: center;">↓</p> <p style="text-align: center;">分子内部自由度 (電子、振動、回転)</p> <p style="text-align: center;">↓</p> <p style="text-align: center;">効率的な分子量子コンピュータの理論的検証</p> <p style="text-align: center;">↓</p> <p style="text-align: center;">分子量子コンピュータの実験的検証</p>
現状と最前線	
<p>物理学の分野では、量子コンピュータや量子情報の理論的、実験的な研究が、前世紀末から、飛躍的な速さで推進されつつある。量子コンピュータや量子情報は、現存する古典的なコンピュータや古典情報に基づく通信技術を、大幅に刷新するものと期待されている。従って、量子コンピュータや量子情報の研究は、科学における非常に重要な研究分野として位置付けられている。現状としては、大抵の実験的、理論的研究において、非常に単純な物質系あるいは単なる理論的な推定のもとで研究が行われている。物質系としては、イオントラップ、NMR、量子ドット、超伝導素子、光子などが有望である。化学の分野では、分子が対象となる。分子はこれらの物理系とは違って、様々な内部状態を持つのが特徴である。しかし、分子の内部状態（電子、振動、回転など）を用いて量子コンピュータを実現する研究は、まだ、今世紀に入ってから理論的に行われ始めた（2001年）。しかも、異なる振動の自由度を用いた研究のみが有望であると考えられているのが現状である。実験的な量子演算の検証は、まだ存在しない。我々は、主に、最適制御理論を用いた数値計算によって、レーザーによる基本的な量子ゲートの理論的構築を行ってきた。この最前線の理論的研究によれば、電子基底状態における¹²C¹⁶O分子の振動と回転の自由度を用いれば、異なる振動の自由度を用いた場合（アセチレン分子）より</p>	

も量子演算（ドイッチェジョサアルゴリズム）の効率が少しばかり高まることが示された（右図参照）。また、我々は、予備的な数値計算により、振動状態が正規直交系をなさない電子基底、励起状態を用いれば、電子—振動状態の間に、レーザーを照射しただけで、量子演算の要であるエンタングルメント状態を生成することができることを示した。このことは、ほとんど100%の分子の電子—振動状態の間に、量子演算が可能であることを示唆している。また、電子と振動の自由度を用いても、Na₂分子やLi₂分子で、ある程度の効率で量子コンピュータの演算が可能であることを示した。将来的には、分子の可能な限りの内部状態を用いた効率的な量子コンピュータが理論的に示され、実験的にも検証されることが予測される。実験的には、百瀬らは、気体分子を量子固体中に閉じ込める独特な手法により、分子の位置を固定し、固体デバイスとして扱えかつ十分長くコヒーレンスを保つことができることを示した。これは、D. P. DiVincenzo が提唱した、量子コンピュータ実現に対する要請を満たすものである。方向性としては、極低温におけるパラ水素中にトラップされた分子（CO, NO, CH₄ など）の内部状態を用いた実験的検証が行われることが予測される。



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
- 分子の内部状態を用いた量子演算の可能性の理論的検証
- デコヒーレンスが及ぼす量子演算への影響
- ・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題
- 分子の内部状態を用いた量子演算の可能性の実験的検証
- デコヒーレンスの実験的阻止方法の開発

キーワード

分子内部自由度、量子コンピュータ、量子情報

(執筆者：三嶋謙二、山下晃一)