

J. NMR 量子コンピュータ研究

天野 力、小澤 宏、坂口 潮、福見俊夫、杉谷嘉則、西本右子、峯岸安津子、横山 宙、
渡部徳子

神奈川大学理学部、東京大学情報基盤センター、熊本学園大学、大阪工業技術研究所、
東京水産大学

1. 量子コンピュータ

コンピュータは有用である。そこで、もっと有用なコンピュータを作りたいと思うのは自然であろう。例えば、性能が低下しなければ、コンピュータのコンパクト化（小型化）は望ましい。その時に素子のマイクロ化に伴って量子揺らぎや量子状態が出現するだろう。また、並列計算は計算時間の短縮に有効である。量子状態には無限次元のベクトル状態（固有状態の重ね合わせ状態）があるので、その状態が使えれば超並列計算ができるという可能性があるだろう。これらの願望から量子コンピュータの概念が生み出された。量子コンピュータとは原子や分子を素子として超並列コンピュータを作ろうと言うことであると思われる。しかし、前途に暗雲もかいま見られる。量子状態は基底状態を除けば安定ではなく、有限の寿命で崩壊する。量子コンピュータはコンピュータとしては行き詰まるかも知れない。しかし、自然放出の寿命を延ばす実験も行われており、また崩壊する前に計算を終えてしまえばよいなどの議論もある。また誤差訂正の技術を使えば良いという議論もある。とにかくやれるところまでやってみようというところか。

一方、量子論には理解しがたい、納得しがたい面がある。例えば、その基礎となる本質的に確率的な構造はアインシュタインが量子力学を暫定的な理論と見なしたことに現れているように素直には受け入れがたいように思われる。粒子と波の二重性、観測における波束の非因果的収縮などもある。特に後者に関してはその量子論による記述と特に実験が行われることが望まれる。このような基礎的なことは量子コンピュータという応用があればやりやすくなるだろう。

NMR 量子コンピュータは NMR と量子とコンピュータからなる複合概念である。量子とは原子や分子などの微視的な対象が持つエネルギーや角運動量などの物理量で、対象の状態は状態ベクトルまたは波動関数で表現される。コンピュータは計算をするための自動機械であり、計算と言うことを一連の一意的な推論手続きというように広くとらえると多様なものがありえようが、ここでは通常のデジタル汎用（ユニバーサル）計算機としておく。従って、量子コンピュータは原子や分子を用いるデジタル計算機と考えよう。状態ベクトルの変化を基礎としたデジタル計算機であると言って良い。デバイスとして考えられる量子的な系としては高分子、量子点、空間に捕捉されたイオンなどいくつかの提案があったし、現在も新しい提案が続いている。量子的な系として核のスピンを用いるものが NMR 量子コンピュータである。核スピンは外界との結合が弱いため励起状態の寿命が長く、現在のところ最適な系と言えよう。

周知のようにコンピュータは数の 2 進表現に基礎を置いている。このため整数の演算を論理ゲートで組み立てることが出来る。ここで量子論理ゲートというものを考案する必要が出てくる。量子状態は離散的であるので数を対応させることは容易であるが、その変化は可逆的であるのに対し、AND ゲートは入力と出力に関して非可逆であるという対立がある。そこで、可逆論理ゲートというものが考案された。これは興味ある概念である。それは情報を捨てる非可逆的な変化では熱が発生するので、無発熱計算をしようという発想からもきている。情報を捨てると必ず熱が発生するか、また情報を捨てない可逆論理ゲートでは熱が発生しないのかという問題はむずかしく現在でも決着していない。ところで、ある情報を利用しないという立場をとれば量子系で AND ゲートが実現できることを注意しておく。この考えは NAND ゲートにより既に構成されている複雑な回路が利用できるという利点がある。

量子論理ゲート達を結合して論理回路が出来ることが、量子論理回路には一見して情報を伝達する結線（ワイヤー）が見当たらないことである。現用の論理回路のように情報が空間的に伝播していくのではなく、ある状態が次の状態への入力情報となり少数のゲートの状態が時間的に推移していくという形を取る。この変化は通常、状態のユニタリー変換というものである。最近、無配線コンピュータというものが研究されているが、量子コンピュータはその一例である。

ゲートが可逆であるにしろ非可逆であるにしろこのようなコンピュータの構成はコンパクト化にはなるにしても余り利点はないように思われる。もっと根本的な量子状態とその変化の特殊性、例えば高次元のベクトル性を利用するのが発展的であろう。量子超並列性と呼ばれるのがそれである。他の特徴としては複素性、状態の干渉性を利用することなどが考えられよう。

このような考え方の第 1 歩はアルゴリズムの方から出てきた。量子アルゴリズムというのがそれである。Shor はそれに基づいて大きな整数の素数分解の問題を解いたと主張している。その基本となる古典的アルゴリズムは確率アルゴリズムの中のラスベガスアルゴリズムである。量子論は確率概念に立脚しているので、確率アルゴリズムは考えやすいように見えるが、両者において確率の意味が同じものかどうかは分析する必要がある。量子アルゴリズムでは数は量子状態に対応し、アルゴリズムには状態のユニタリー変換の列に対応する。

2. NMR 量子コンピュータ

量子系としてスピン状態は有限次元ベクトルなので単純で扱いやすい。特にスピン 1/2 のスピンは固有状態 (z 成分の) が 2 つであるので、0 と 1 に直接に対応すること、さらにスピン状態に外部から磁場パルスによる操作を加えて別の状態に変化させることができることなどが NMR を量子コンピュータの装置として用いる理由であろう。孤立したスピンの対象となっているので液体の高分解能 NMR が適していよう。しかし、液体の NMR ではスピンの状態は混合状態であり、一般には状態ベクトルまたは波動関数では表せない状態である。その通常、密度行列で表される状態の空間は状態ベクトルで表される空間よりも広い。量子コンピュータが対象としている

のは状態ベクトルであるので、密度行列で表される状態の中から状態ベクトルで表されるものを取り出し、それを純粋状態と解釈することになる。これが有効純粋状態と呼ばれるものである。この状態を用いて、Deutsch の問題などの簡単な量子計算や観測問題などが試されている。しかし、有効純粋状態と真の純粋状態とは異なるものであることを心に止め置く必要がある。これに関して、興味ある考えは密度行列で表されるより広い状態を使って量子コンピュータを作ることである。この可能性は検討する価値があると思われる。

昨年度、我々は n スピン系で熱平衡状態から任意の有効純粋状態をつくる方法を提案した。

報文

1. Ushio Sakaguchi, Hiroshi Ozawa, Chikara Amano, Toshio Fukumi, and William S. Price, "Implementation of the Collins-Kim-Holton algorithm to solve the Deutsch's problem on one-, two-, and three-qubit NMR quantum computer." in Mathematics of Quantum Information and Quantum Chaos, RIMS Kokyuroku, in Press (Workshop held at Research Institute for Mathematical Sciences, Kyoto University, 17-19 February 1999).
2. Ushio Sakaguchi, Hiroshi Ozawa, and Toshio Fukumi "Method for effective pure states with any number of spins." Phys. Rev. A 61(4), 0429XX, April 2000. in press.