

## 量子ビット間の相互作用推定手法

田中宗

東京大学理学系研究科 化学専攻

量子情報処理を実現するためには、量子ビット間の相互作用を高精度に推定する必要がある。我々は、NMR 量子コンピュータやダイヤモンド中の格子欠陥と窒素サイトとの間の電子状態を量子ビットとみなす系 (NV 中心) を具体例とし、量子ビット間の相互作用を推定する手法を二通り紹介する。

### NMR 量子コンピュータを念頭に置いた系の相互作用推定問題

核磁気共鳴 (Nuclear Magnetic Resonance: NMR) はもともと化学物質の分析・同定的手段として用いられてきた。またスピンを選択的に回転させることができることから、量子コンピュータとして利用することも期待され、量子状態の操作や量子アルゴリズムのデモンストレーションをするためによく用いられる方法の1つである。この系は横磁場イジングモデルで記述することができる。すなわちハミルトニアンは

$$\mathcal{H}_{\text{NMR}} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^z - \sum_i h_i^x \hat{\sigma}_i^x \quad (1)$$

ただしここで、 $\hat{\sigma}_i^\alpha$  は、サイト  $i$  におけるパウリ行列の  $\alpha$  成分である：

$$\hat{\sigma}^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2)$$

我々は以下の条件のもと、全ての相互作用を推定する方法を考案した。片端の相互作用のみがわかっており、また端のスピンのみ測定・操作をすることが可能であるとする。また各々のサイトにかかっている磁場  $h_i^x$  が全て未知であるとする。我々は端のスピンダイナミクスを追跡することにより、すべての相互作用を推定することができることを見出した [1]。本研究は中原幹夫氏 (近畿大)、近藤康氏 (近畿大)、Mohammad Ali Fasihi 氏 (近畿大) との共同研究である。

### NV 中心を例とした相互作用推定問題

先程の例では横磁場イジングモデルについて考察した。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。例えばダイヤモンド中の空孔と窒素とで形成される電子状態を量子ビットとみなした時、それらの相互作用は双極子・双極子相互作用で記述される。そのような場合についても相互作用推定を行うことができる方法を検討した。我々は2スピンからなる、最も一般的な相互作用について考察した。

$$\mathcal{H}_{\text{NV}} = \sum_{\mu, \nu \in \{x, y, z\}} g_{\mu\nu} (\hat{\sigma}_1^\mu \otimes \hat{\sigma}_2^\nu), \quad (3)$$

$$[g_{\mu\nu}] = \begin{pmatrix} g_{xx} & g_{xy} & g_{xz} \\ g_{yx} & g_{yy} & g_{yz} \\ g_{zx} & g_{zy} & g_{zz} \end{pmatrix} \quad (4)$$

我々は片方のスピン状態を観測することによって、上の  $g_{\mu\nu}$  を全て求めることの出来る方法を考案した [2,3,4]。本研究は鹿野豊氏（分子研）、細谷暁夫氏（東工大）、各務惣太氏（東工大）との共同研究である。

両者の方法とも、1つのスピンの状態を観測することにより、全ての相互作用の形を推定するというものである。このように量子力学的ダイナミクスの情報をベースにハミルトニアンの中のパラメータを推定する、いわゆる逆問題となっている。今回取り扱った問題は極めて簡単な場合である。そのため、より現実的に複雑で難しい系を扱う場合の一般的枠組みは、物理学の知見からの正面突破のみでは太刀打ち出来ず、情報科学の分野で蓄積されてきた推定問題に対する手法の助けが不可欠になってくると考えている。本講演ではそのような観点からの今後の展望についても述べる予定である。

- [1] M. A. Fasihi, S. Tanaka, M. Nakahara, and Y. Kondo, J. Phys. Soc. Jpn. **80**, 044002 (2011).
- [2] Y. Shikano and S. Tanaka, Europhys. Lett. **96**, 40002 (2011).
- [3] Y. Shikano, S. Kagami, S. Tanaka, and A. Hosoya, AIP Conf. Proc. **1363**, 177 (2011).
- [4] 田中宗、鹿野豊、素粒子論研究 **119** (2012).