



O-LEAP 人材育成プログラム  
量子技術教育のためのオンラインコース・サマースクール開発プログラム

*Hamiltonian*

# NMR量子コンピュータと 量子計測応用 (1)



大阪大学

量子情報・量子生命研究センター

根来 誠

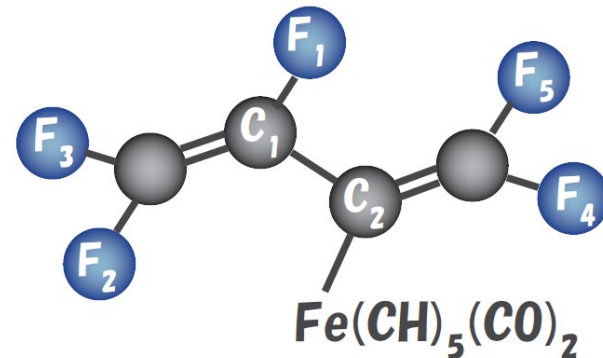
*$|0\rangle + |1\rangle$*

# 1. 導入

- 1948年：液体・固体の核磁気共鳴(NMR)



量子状態の制御技術が発展し  
物理、化学、生物学  
医療(MRI)と広範囲に応用

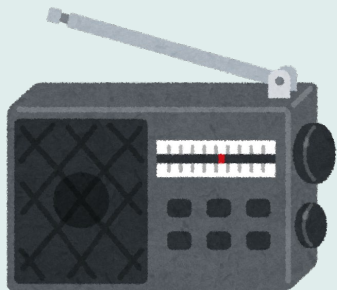


- 2001年：7qubit素因数分解アルゴリズム実装
- 量子計測としての応用(次の講義)

# 1. 導入

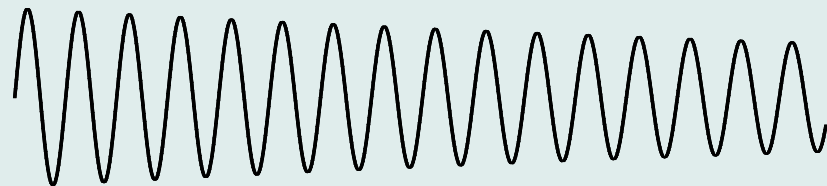
- 核スピン量子ビットの特徴: 低エネルギー (<GHz)

## ① ラジオ波パルスで制御



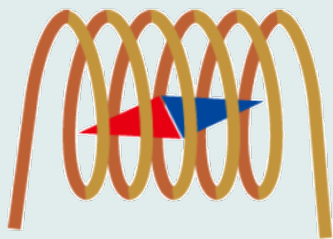
◎ 波形整形  
が容易で制御  
技術が発展

## ② コヒーレンス時間が長い



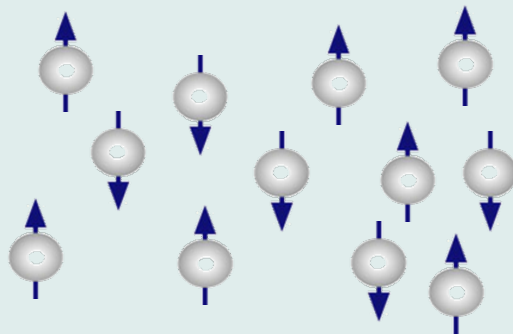
◎ 高忠実度操作・深い回  
路が可能

## ③ 信号が弱い



△ 射影測定  
が難しい

## ④ スピンの向きがばらばら



△ 初期化  
が難しい

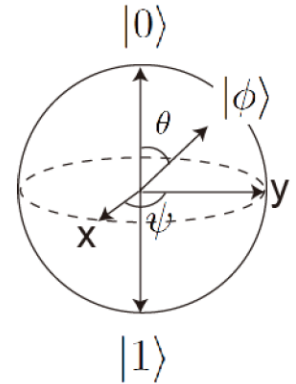
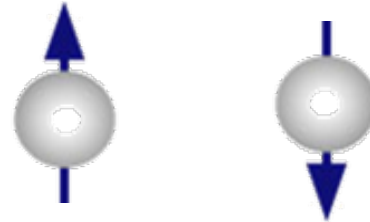
## 2. 量子ビット

- 核スピン量子ビット

$$\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$$

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_z &= -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}_0 \\ &= -\gamma\hbar B_0 I_z \\ &= -\hbar\omega_0 I_z\end{aligned}$$

$$\mathbf{B}_0 = (0, 0, B_0)$$

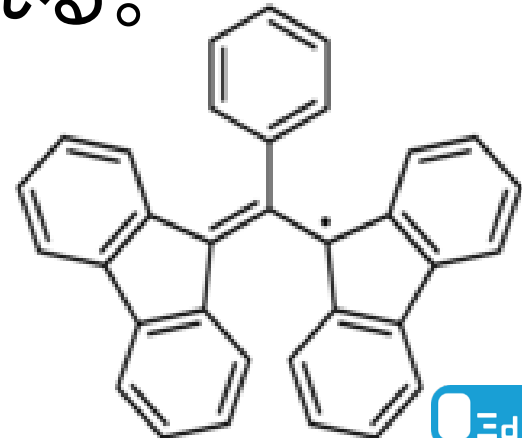


- $^1\text{H}$ 、 $^{13}\text{C}$ 、 $^{15}\text{N}$ 、 $^{19}\text{F}$ などが用いられる。

- 電子スピン量子ビット

[Applied Magnetic Resonance

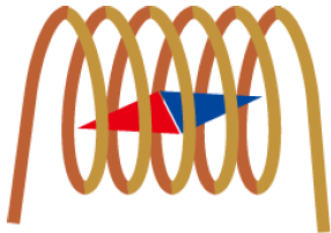
17, 141 (199)]



# 3. 制御方法

- 1量子ビットゲート: 振動磁場照射 1~100 kHz

静磁場  $B_0$   
↑



$$\mathcal{H}_{rf} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$$

$$= -\hbar\gamma B_1 [\cos(\omega_{rf}t + \phi)I_x - \sin(\omega_{rf}t + \phi)I_y]$$

回転座標系 (z軸周りに  $\omega_{rf}$  で回転している)

$$\mathcal{H}^{rot} = -\hbar(\omega_0 - \omega_{rf})I_z - \hbar\omega_1 [\cos \phi I_x - \sin \phi I_y]$$

$$\mathcal{H}^{rot} = -\hbar\omega_1 I_x$$

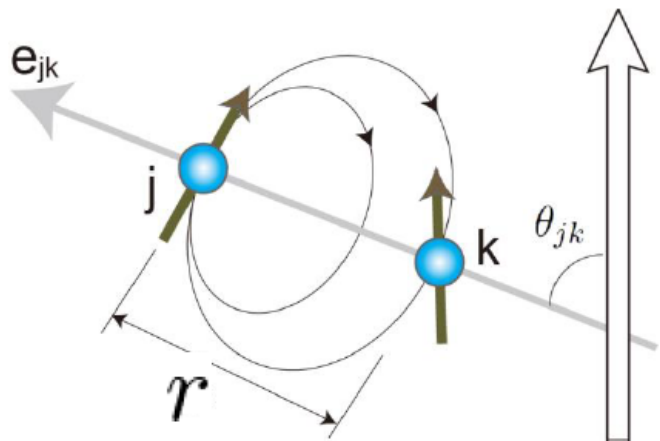
$$U = R_x(\theta = \omega_1 t) = \begin{matrix} & |0\rangle & |1\rangle \\ \begin{matrix} |0\rangle \\ |1\rangle \end{matrix} & \begin{pmatrix} \cos(\omega_1 t/2) & -i \sin(\omega_1 t/2) \\ -i \sin(\omega_1 t/2) & \cos(\omega_1 t/2) \end{pmatrix} \end{matrix}$$

### 3. 制御方法

- 2量子ビットゲート: スピン間相互作用

双極子相互作用 (固体) : 1~10 kHz

静磁場



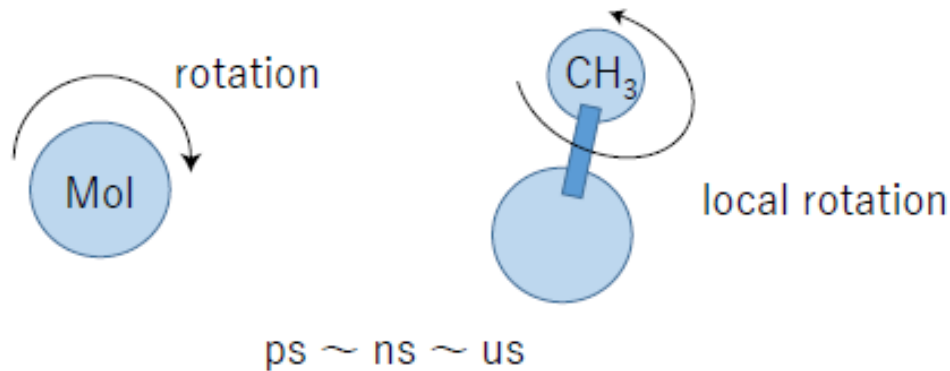
$$\mathcal{H}_{\text{int}} = D' (\mathbf{I}_j \cdot \mathbf{I}_k - 3I_{zj}I_{zk})$$

$$D' = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\gamma_j \gamma_k \hbar}{r^3} \frac{3 \cos^2 \theta_{jk} - 1}{2}$$

液体ではJ結合が支配的に、電子-核スピン間にはFermi接触相互作用が働く

# 4. コヒーレンス時間

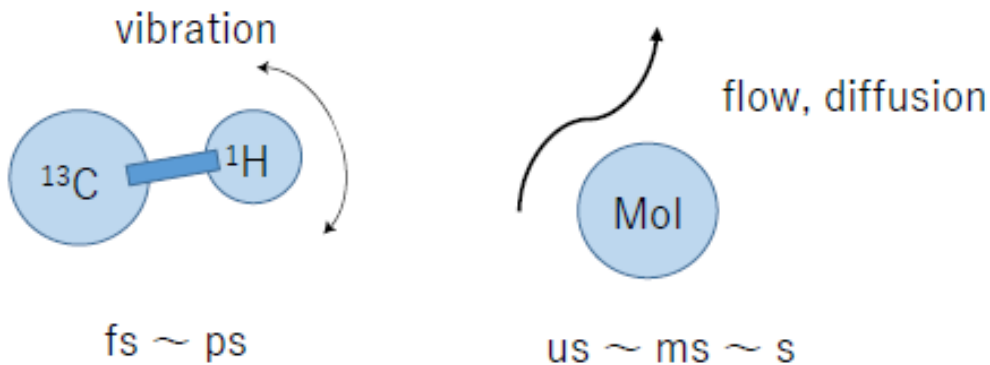
分子運動が $T_1$ 緩和の主因



液体 1~10s

固体 1~10,00s

分子内運動なし



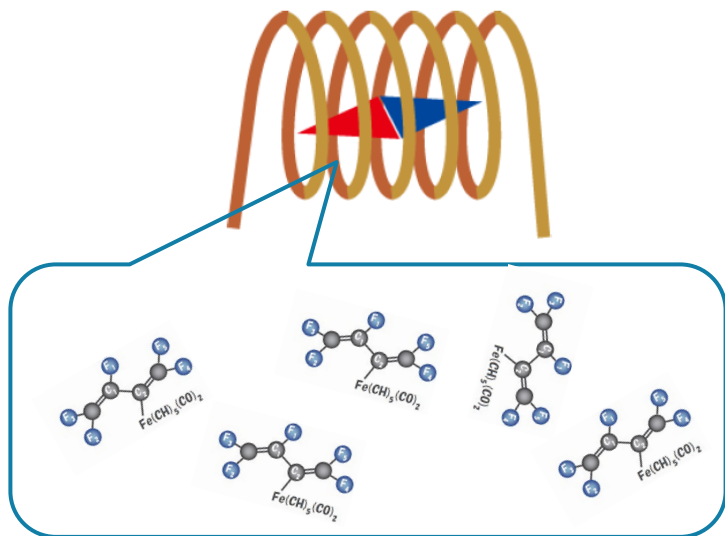
$T_2$ はデカップリングにより  
30s

[PRB 71, 014401 (2005)]

Cf.) ゲートタイム100us

# 5. 測定

## ● 電磁誘導検出



$$V = nQ \frac{d\Phi}{dt}$$

↑ コイル巻き数      ↑ 体積あたりのスピン数  
↑ コイル断面積

$$\Phi = \mu P N S \cos \omega_0 t$$

↑  $^1\text{H}$ 一個あたりの核磁気モーメント      ↑ 偏極率      ↑ Larmor周波数

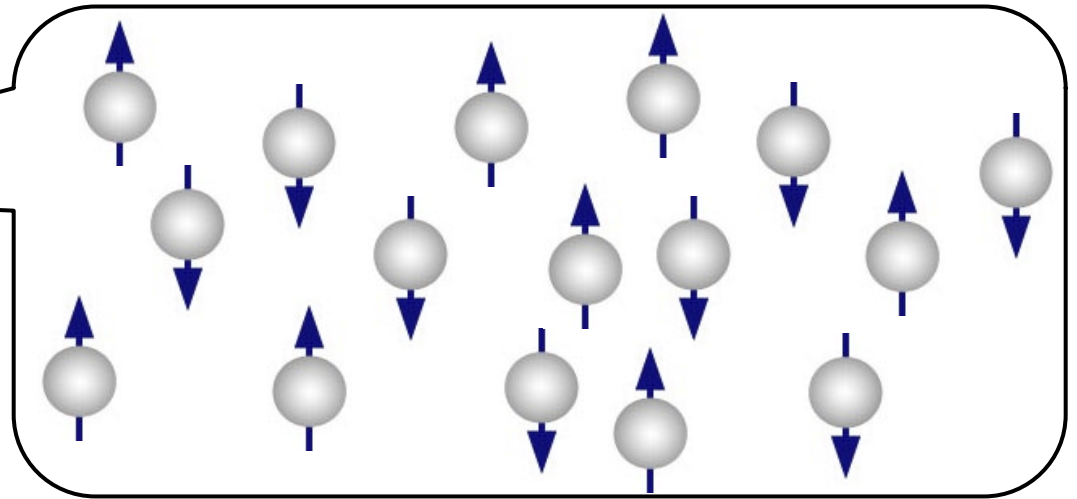
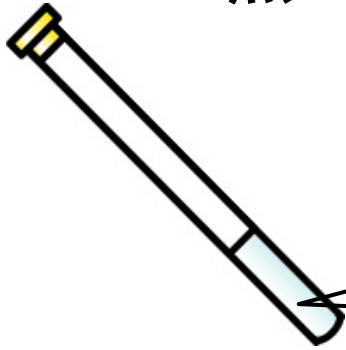
射影測定ができない  
アンサンブル量子コンピュータ

- 光検出磁気共鳴(ODMR) Pentacene [Nature 363, 242 (1993)]、NV [Science 276, 2012 (1997)]
- メカ: MRFM [Nature 430, 329 (2004)]  
EMO-NMR [Optica 5, 152 (2018)]

# 6. 初期化

磁場と同じ向きの方がエネルギーは安定になるが、熱エネルギーに負けて向きがバラバラ

→ほとんどが打ち消しあって信号を出さない。



$$\begin{aligned} & \uparrow \text{の数} - \downarrow \text{の数} \propto \text{エネルギー} \\ & \frac{\uparrow \text{の数} - \downarrow \text{の数}}{\text{核スピン総数}} \propto \text{磁場強度} \end{aligned}$$

信号強度  $\propto$  偏極率 =

$\propto$  逆温度

e.g.) 通常10 T, 室温  $P_H = 0.0033\%$

## 6. 初期化（超偏極）

- 疑似初期化（指数関数リソース）

- 動的核偏極(DNP)

= 電子スピン偏極を核スピンに移す

$\frac{E_e}{E_H} = 660$  : 向上効率の熱限界 → 極低温

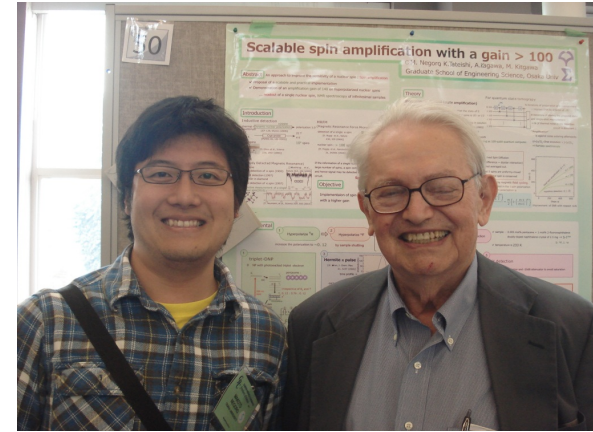
97% [J. Low Temp. Phys. **15**, 249 (1974)]

- 光励起三重項電子DNP（トリプレットDNP）

34% [PNAS **111**, 7527 (2014)]

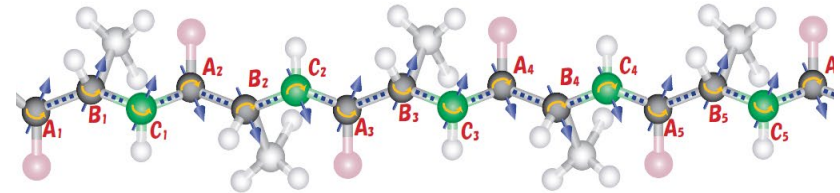
- パラ水素誘起偏極 >90% [PRL **93**, 040501 (2004)]

- アルゴリズム冷却 [Nature **428**, 470 (2005)]



# 7. 拡張性

- 高分子 [Science 261, 1569 (1993)]



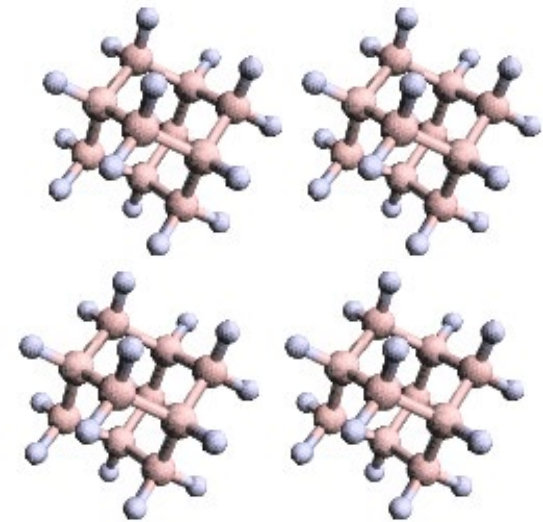
- 超分子 [Chemistry of Materials **29**, 1885 (2017)]

- 固体

相轉移 [Science 349, 846 (2015)]

OTOC [PRL 120, 070501 (2018)]

機械学習 25 spin [arXiv:1911.12021]

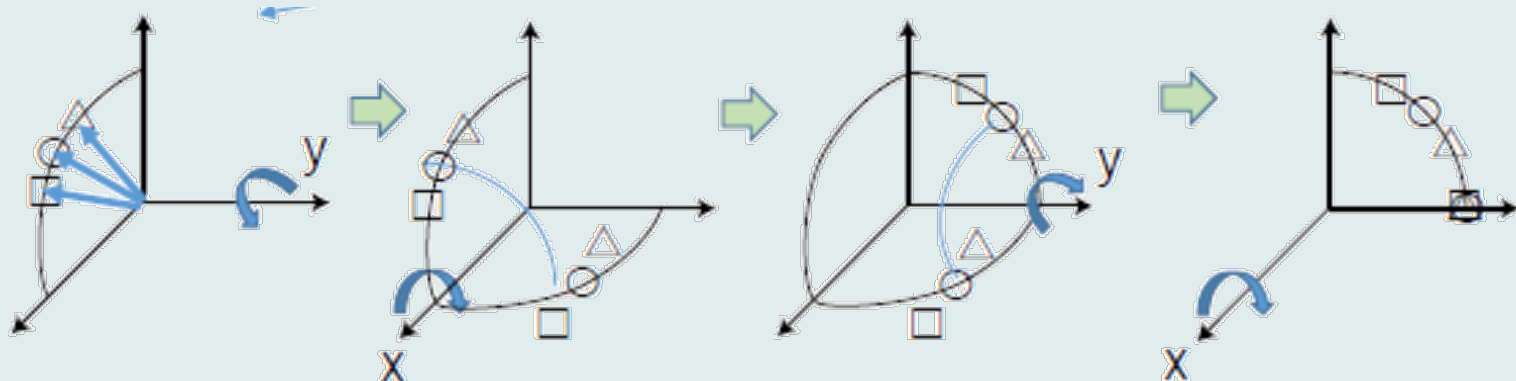


# 8. 課題と応用

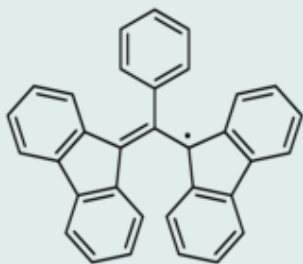
- 拡張性と選択制御
  - ⇔グローバル制御[PRL 99, 030501 (2007)]
- 射影測定への挑戦
  - 射影測定フリー誤り訂正[PRX 4, 041039 (2014)]
- 初期化: 室温偏極率99%
- 量子計測への応用
- 汎用的な制御体系・制御装置アーキテクチャ
- NISQや量子シミュレーション

# 9. 他の分野(デバイス)とのつながり

## ① 量子制御のテストベッド(冷却原子や超伝導に波及)

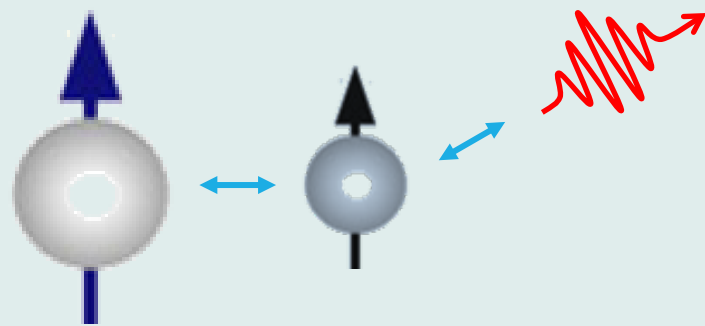


## ② 電子スピン(欠陥、量子ドット含む)



◎RFとMWの違い

## ③ ハイブリッド系(メカ、光)



# 10. より深く勉強したい方向けの文献

- NMRのスピンの制御を理解する教科書

M. H. Levitt “Spin Dynamics” (2008)

M. Mehring “Object-Oriented Magnetic Resonance” (2012)

エルンスト「二次元NMR」(1991)

R. Freeman「NMRハンドブック」(1992)

- NMR量子コンピュータで培われた量子制御技術

L. M. K. Vandersypen, *et al.*, Rev. Mod. Phys. **76**, 1037 (2005)

- 量子機械学習 (アンサンブルベース)

レザバー [PRAppl. 8, 024030 (2017)]

カーネル [arXiv:1911.12021]