

|              |   |
|--------------|---|
| Title        | 光励起三重項電子スピンを用いたNMR量子コンピュータの初期化に関する研究  |
| Author(s)    | 香川, 晃徳  |
| Citation     | 大阪大学, 2008, 博士論文  |
| Version Type | VoR   |
| URL          | <a href="https://hdl.handle.net/11094/66">https://hdl.handle.net/11094/66</a> |
| rights       |   |
| Note         |   |

*Osaka University Knowledge Archive : OUKA*

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

Osaka University

|            |   |
|------------|---|
| 氏名         | 香川 晃 徳  |
| 博士の専攻分野の名称 | 博士(理学)  |
| 学位記番号      | 第 22502 号   |
| 学位授与年月日    | 平成20年9月25日  |
| 学位授与の要件    | 学位規則第4条第1項該当<br>基礎工学研究科システム創成専攻                                       |
| 学位論文名      | 光励起三重項電子スピンを用いた NMR 量子コンピュータの初期化に関する研究                                |
| 論文審査委員     | (主査)<br>教授 北川 勝浩<br>(副査)<br>教授 占部 伸二 教授 糸崎 秀夫<br>京都大学大学院理学研究科講師 武田 和行 |

## 論文内容の要旨

現在まで固体 NMR 量子コンピュータでは核スピンの偏極率が低いため量子計算に必要なエンタングルメントをもった実験が行われていない。そこで本研究では、光励起三重項電子スピンを用いて核スピンを物理的に初期化し量子計算を実現する指針を与える。

初期化と量子計算の実験を両立できる分子を単結晶作製の観点から探索した結果、ナフタレンにベンタセンと $1-^{13}\text{C}$ ラベルナフタレンをドーブしたサンプルが最も本研究の目的達成に適していること見出した。さらに、これまで用いられていた低磁場での初期化実験装置に加えてサンプルシャトルシステムを作製し、高磁場で量子計算実験が行える実験系を構築した。高磁場側の NMR プローブは、強いラジオ波照射、ゴニオメータによる角度調整が行え固体中の核スピンを自在に操ることができ、量子計算を実現できる。高磁場で量子計算実験が行えることにより、同核種を用いた多 qubit 化への道を開いた。

また初期化実験時間の短縮、偏極率の向上を達成するため2つの研究を行った。まずナノ秒レーザーのパルス幅を光学的ディレイランを用いて5ns から60ns に伸ばし、光励起三重項電子スピンの生成効率を約2.5倍高めた。その結果、三重項電子スピンの量が増え初期化で得られる核スピンの偏極率も増大する。次に、室温で安定なp-テルフェニルをホスト分子として用いて初期化実験時間、偏極率のホスト分子の重水素化率依存性を調べた。その結果、90%程度に重水素化することで非重水素化サンプルに比べ短時間でより高偏極となることが明らかになった。その結果をホスト分子がナフタレンの場合に適用するれば初期化実験時間の短縮が可能となる。

ホスト分子を部分的に重水素化することで初期化実験時間を短縮でき、次の段階である高磁場での量子計算へ円滑に移行できる。また作製したNMRプローブは量子計算を実行するための要求を満たしている。この研究によってエンタングルメントをもった固体NMR量子計算の実現方法が明らかになった。

## 論文審査の結果の要旨

本論文は、分子の核スピンを量子ビットとし、核磁気共鳴 (NMR) で制御するNMR量子計算機の物理的初期化について論じており、光励起三重項電子スピンをを用いた動的核偏極法によって核スピンを高偏極化して量子演算を行う方法を提案し、その実験的研究を記述している。

熱平衡状態を使った溶液NMRでは核スピンの偏極率が $10^{-5}$ と低く、量子ビットは乱雑な混合状態にあり、エンタングルメントや指数的高速性といった量子計算機特有の性質を示さないという問題があった。これを解決して真の量子計算を実現するには、核スピンを物理的に数十%まで高偏極化し、なお残る初期状態の違いは情報理論的に圧縮する必要がある。

本論文は、その最初のブレイクスルーとして、ナフタレンまたはp-テルフェニル結晶にドーブしたベンタセン分子の三重項電子スピンからプロトン核スピンへのIntegrated Cross Polarization (ICP) による核スピン高偏極化と高磁場でのNMR量子演算を両立させる実験系を構築し、高偏極化した分子結晶と静磁場のなす角を制御した固体NMR実験を可能にしている。また、2量子ビットのエンタングルメント実験に適した分子系を見出している。さらに、短時間で高偏極を達成するために、ホスト結晶のプロトン濃度を系統的に変えた実験を行い、最適なプロトン濃度とその時のスピン拡散定数を見出している。また、三重項状態の生成効率を高めるために、光学遅延線によって実効的な光パルス幅を系統的に変えた実験を行い、パルス幅延長による高効率化を見出している。これらの系統的実験は室温で安定なp-テルフェニルをホストとしたため、必ずしも高偏極を達成してはいないが、得られた物理的知見は普遍性があり、将来の高偏極化に資するものと評価できる。また、本論文に詳述される高偏極化固体NMR実験系は量子計算機以外にも微粒子や薄膜など微量試料のNMR分光に新たな可能性を拓くものと評価できる。

以上のとおり、本論文は博士 (理学) の学位論文として価値のあるものと認める。