



展TENBO望

¹²C 濃縮ダイヤモンド中の単一欠陥による 室温・量子エラー訂正



磯谷 順一
Isoya Junichi
(筑波大学名誉教授)

1 はじめに

通常のビットは1か0のどちらかの状態しかとらないのに対して、量子ビットは $|0\rangle$ と $|1\rangle$ という2つの状態の任意の重ね合わせ状態 $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ をとることができる^{*1}。4量子ビットは、 $2^4=16$ 個の状態の任意の重ね合わせ状態 $a_0|0000\rangle + a_1|0001\rangle + a_2|0010\rangle + \dots + a_{15}|1111\rangle$ をとることができる。4量子ビットの量子レジスタの計算では、ひとつの重ね合わせ状態から別の重ね合わせ状態へと変換すると、16個の状態を同時に処理することになる。100量子ビットでは $2^{100} \sim 10^{30}$ 個(千兆×千兆)の状態を同時に処理できることになり、量子ビット数が増えると、とてつもない超並列計算能力を発揮する。量子力学に特有の重ね合わせやその特別の場合であるエンタングルメント(量子もつれ)が量子コンピュータの特別な計算能力のもとになっている。ところが、重ね合わせ状態は環境からのノイズに対して脆弱であるという難題がある。計算の途中でノイズによって重ね合わせ状態が壊れてしまうとエラーとなり、計算は台無しになる。量子エラー訂正がなければ、エラー発生前に終わられる計

算に限られてしまう。そのため、量子コンピューティングは実用的な計算のレベルの多量子ビット化は絶望的と考えられていた。未知の量子ビットを複製することはできない(非クローン定理)という難関を回避して量子エラー訂正が可能であることを示したのがP.W. Shor(1995年)とA. Steane(1996年)によるエンタングルメントを利用するアルゴリズムである。

超伝導量子回路、量子ドット、イオントラップ、シリコンの燐ドナーなど量子コンピューティングの基本原理解の実証の実験が進んでいる多くの系では低温を必要とする。ここでは、核スピンをもたない¹²C同位体を99.8%濃縮した高純度CVDダイヤモンド結晶中に電子線照射を用いて作製したNV(nitrogen-vacancy)センターの単一欠陥(単一分子に相当)を用いて、電子スピン1個と核スピン3個からなるハイブリッド量子レジスタを作製した。これを用いて、室温動作の固体素子では世界で初めて、量子エラー訂正のプロトコルの実証に成功した¹⁾。共有結合の強いダイヤモンドはフォノン(格子振動)の周波数が高く、室温で励起されるフォノンが少ないことに加えて、核スピン($I=1/2$)をもつ¹³C同位体濃度(天然存在比1.1%)が低い。¹³C核スピン同士のいわゆるフリップ・フロップによる磁場の揺らぎというノイズを抑えるために、¹³C濃度をさらに下げた¹²C濃縮・高純度ダイヤモンド結晶格子はNVセンターの電子スピンの、低温・真空中の原子・分子に相当する環境を室温でもたらしと言える。¹²C99.998%濃縮の例が報告されているが²⁾、ここでは、量子ビットに利用する¹³C核スピンを探し出せる濃縮度を用いた。ハイブリッド量子レジスタ

^{*1} α, β は複素数で $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ 。 α, β のとり得る値の組み合わせは無限となりうる。量子ビットのうち $I=1/2$ の核スピンは磁場中で上向き($|0\rangle$)と下向き($|1\rangle$)の2つの状態をとる。初期化(状態 $|0\rangle$ にする)後に加えるRFパルスのパルス幅・位相により、任意の重ね合わせ状態 $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ を生成できる。ところが、未知の量子ビットに対しては、中味を知るために測定すると、 $|0\rangle$ か $|1\rangle$ のどちらかの状態になってしまう($|\alpha|^2$ の確率で $|0\rangle$ 、 $|\beta|^2$ の確率で $|1\rangle$)ので、複製することができない。

では、電子スピンは核スピンを操る裏方となり、核スピンの初期化・読み出しに加えて、3個の核スピンを結合して3量子ビット量子レジスタとして機能させるとともに、その高速操作を実現する。

2 裏方役の単一電子スピン

NV センター（炭素を置換した窒素と原子空孔とのペアで電荷 -1 をもつ）の基底状態はスピン $S=1$ で $M_S=0$ と $M_S=\pm 1$ との間には 2.88 GHzのゼロ磁場分裂をもつ。緑色レーザー励起後、 $M_S=0$ は赤色蛍光を放出して $M_S=0$ に戻るが、 $M_S=\pm 1$ には $S=0$ の中間状態を経て、無輻射的に $M_S=0$ に戻る過程も存在する。その結果、 $M_S=0$ と $M_S=\pm 1$ では蛍光強度が異なることに加えて、レーザー光を用いて $M_S=0$ の単位にそろえることができる。

NV センターは明るい発光センターなので、 ~ 0.01 ppb以下の低濃度に作製できれば、共焦点蛍光顕微鏡を用いて単一欠陥（単一分子に相当）を検出し、その位置を特定できる。マイクロ波による遷移を蛍光強度の変化として検出するODMR（光検出磁気共鳴）を共焦点蛍光顕微鏡と組み合わせると、単一電子スピン検出に相当する単一欠陥のESR（電子スピン共鳴）測定ができる。単一NVセンターの電子スピンは、(1) 光によって初期化できる (2) 光によってスピンを読み出せる、(3) マイクロ波パルスを用いてスピン操作ができる、(4) 長いコヒーレンス時間 (T_2) が得られる (^{12}C 99.99%濃縮した高純度CVD結晶中に 10 MeV窒素イオン注入で作製したNVで 2 ms^3)のすべてを室温で達成できる点で、きわめて優れた量子ビットである^{*2}。スピン操作の典型的な例は、初期化（状態 $|0\rangle$ にする）したあと、 90° パルスを用いて、 $(|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$ という重ね合わせ状態の生成である。重ね合わせ状態を保つ時間が T_2 である。この単一電子スピンに対して様々のパルスESR技術を適用できる。ラビ振動、自由誘導減衰 (T_2^* の測定)、2パルス・ハーンエコー減衰 (T_2 の測定) などに加えて、ナノ分解能・高感度磁気センサーへの応用ではCPMG-N系

^{*2} 磁場をかけて $M_S=\pm 1$ の単位を分裂させると、 $M_S=0$ を $|0\rangle$ 、 $M_S=-1$ を $|1\rangle$ とする2準位系として扱うことができる。

列、XY8-N系列が用いられている。多数のスピンの集団を相手にする通常のESRは共振器を用いる制約があるが、単一電子スピンを相手にするので、コプラナー導波路（またはワイヤー）から周波数、位相、パルス幅を変えたマイクロ波パルスを思うままに加えることができる。

3 ハイブリッド量子レジスタの作製

量子計算はゲート操作を積み重ねていくので、コヒーレンス時間/ゲート操作時間の比を高くすることが重要である。室温でもコヒーレンス時間が非常に長く、電子スピンよりもはるかに長く量子情報を保持できる核スピン3個を用い、これらを結びつけて3量子ビットの量子レジスタを作製することを考える。異なる量子ビットの状態の間に特別な相関をもつエンタングルメントの生成には2量子ビットゲートが必要である。RFパルスを用いる1量子ビット回転ゲートは高磁場にするとNMR周波数が高くなり速くできる。ところが核スピン同士の相互作用は極めて弱いので、2量子ビット以上のゲート操作は絶望的に遅い。そこで、NVセンターの特異的な性質をもつ電子スピンに着目し、超微細相互作用で電子スピンと結合した3個の核スピンとして、NVセンターのもつ核スピン ^{14}N ($I=1$, 天然存在比99.63%)に加えて、近傍の2個の ^{13}C 核スピン ($^{13}\text{C}_1$, $^{13}\text{C}_2$)を選び出す(図1)。

NVセンターは低線量の 2 MeV電子線照射と熱処理 (800°C)によって作製した。電子線で生成した原子空孔が微量の不純物窒素に捕獲されてNVセンターとなるが、共焦点顕微鏡の $100\ \mu\text{m} \times 100\ \mu\text{m}$ のスキャン（深さ方向は $\sim 1\ \mu\text{m}$ 幅の領域）に ~ 50 個の単一NVセンターが見つかった。核スピン状態を選び出して電子スピンを用いて操作するためには、ODMRスペクトルの $M_S=0 \leftrightarrow M_S=-1$ のESR遷移が12本に分裂 [^{14}N で3本に分裂し、その各々が $^{13}\text{C}_1$ で2本に分裂し、さらにその各々が $^{13}\text{C}_2$ で2本に分裂] することが必要である。12本の超微細相互作用線は核スピンの方向 (m_1)を保ったままの電子スピン遷移、 $|M_S=0, m_1(^{14}\text{N}), m_1(^{13}\text{C}_1), m_1(^{13}\text{C}_2)\rangle \leftrightarrow |M_S=-1, m_1(^{14}\text{N}), m_1(^{13}\text{C}_1), m_1(^{13}\text{C}_2)\rangle$ であり、12通りの組み合わせ ($m_1(^{14}\text{N}) = +1, 0, -1, m_1(^{13}\text{C}_1) = \pm 1/2, m_1(^{13}\text{C}_2) = \pm 1/2$)に対応している

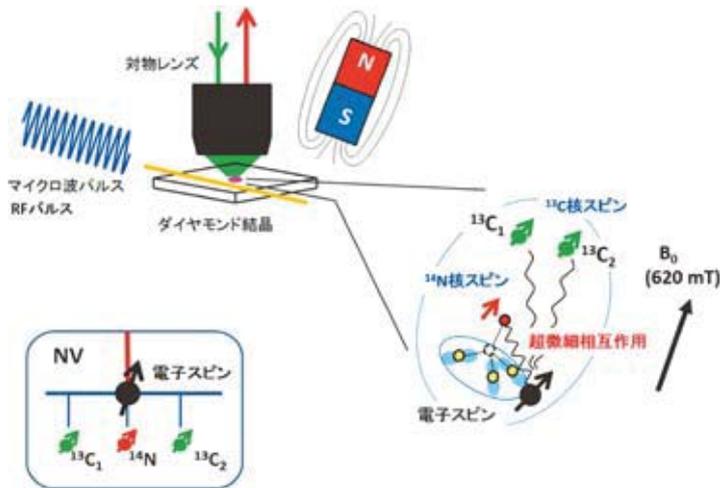


図1 ハイブリッド量子レジスタ

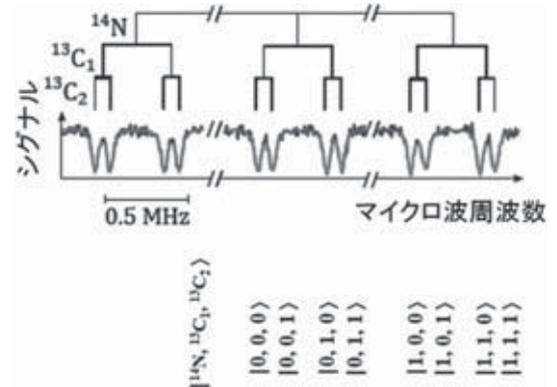


図2 3つの核スピンの ^{14}N , $^{13}\text{C}_1$, $^{13}\text{C}_2$ との超微細相互作用により12本に分裂したESR遷移

(図2)。ODMRシグナルの線幅が小さいこと(超微細相互作用 $>1/T_2^*$)も ^{12}C 濃縮試料を用いる理由のひとつである。濃度0.2%の ^{13}C は平均距離1.4 nmで分布するが、量子レジスタとして機能するのに適した ^{13}C 核スピン2個を近傍にもつものを探し出した^{*3}。3,300個までの単一NVセンターから選び出すことによって得られたハイブリッド量子レジスタの3個の核スピン ^{14}N , $^{13}\text{C}_1$, $^{13}\text{C}_2$ の超微細分裂は2.16 MHz, 413 kHz, 89 kHzであった。 ^{14}N , $^{13}\text{C}_1$, $^{13}\text{C}_2$ からなるハイブリッド量子レジスタは ^{12}C ダイヤモンド結晶格子中に埋め込まれた~1 nmの大きさの欠陥分子と言える。高性能で動作する欠陥分子が1個見つければ、それを使い続けられればよい。通常のパルスNMRやパルスESRが 10^{12} という多くのスピン集団を扱うのに対して、単一欠陥分子の単一電子スピン、単一核スピン3個に対してスピン操作を行い、個々の核スピンを読み出す。

電子スピンには 360° 回転してももとにもどらず、もとにもどるには 720° 回転を要するという性質がある^{*4}。 ^{14}N の $m_1=0$, $m_1=-1$ を $|0\rangle$, $|1\rangle$, $^{13}\text{C}_1$ の $m_1=\pm 1/2$ を $|0\rangle$, $|1\rangle$ とする核スピン2量子ビット系 $|^{14}\text{N}, ^{13}\text{C}_1\rangle$ で、 $|M_s=0, m_1(^{14}\text{N})=-1, m_1(^{13}\text{C}_1)=-1/2\rangle \leftrightarrow |M_s=-1, m_1(^{14}\text{N})=-1,$

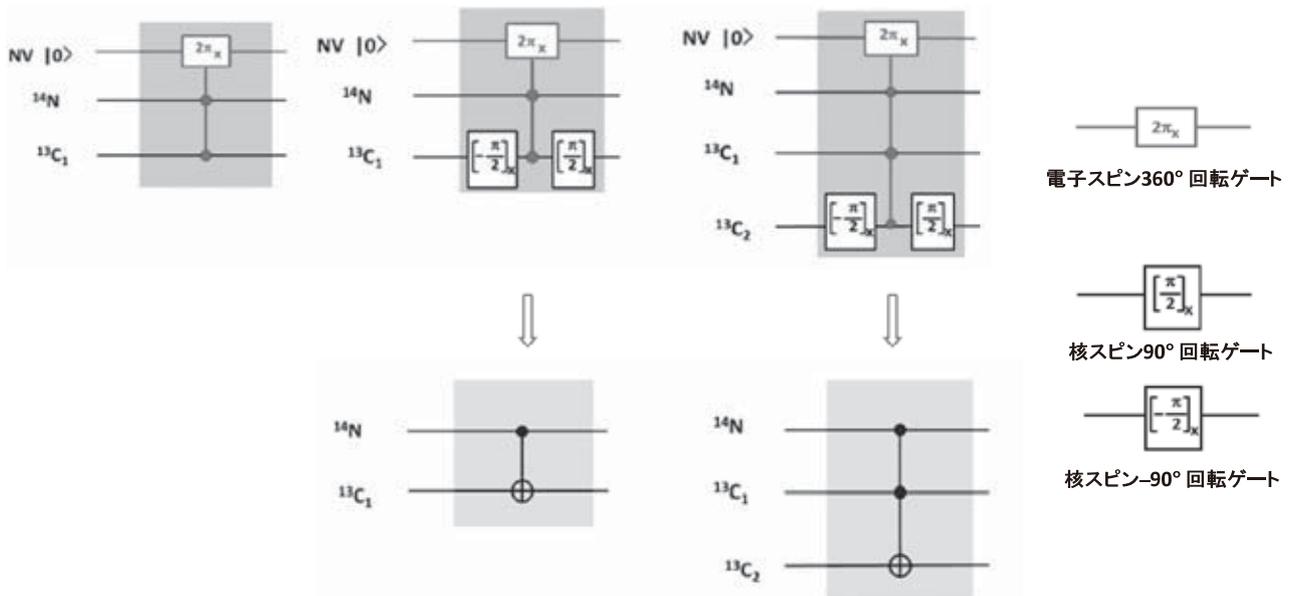
$m_1(^{13}\text{C}_1)=-1/2\rangle$ の遷移を選んで、電子スピンの 360° 回転操作をすると、 $|00\rangle$, $|01\rangle$, $|10\rangle$ はそのままであるが、 $|11\rangle$ のみが位相を変えて $-|11\rangle$ となる。この制御位相ゲートに核スピンを 90° 回転するゲートを組み合わせると、核スピン2個に対する高速な制御NOTゲート(制御ビット $^{14}\text{N}=|1\rangle$ の場合のみ、標的ビット $^{13}\text{C}_1$ が反転、制御ビットはそのまま出力)が得られる(図3)。 $^{13}\text{C}_2$ の2つの準位を加えて、 $|M_s=0, -1, -1/2, -1/2\rangle \leftrightarrow |M_s=-1, -1, -1/2, -1/2\rangle$ の超微細相互作用線に電子スピン 360° 回転の操作をすると、 $|^{14}\text{N}, ^{13}\text{C}_1, ^{13}\text{C}_2\rangle$ のうち、 $|111\rangle$ のみが $-|111\rangle$ となる。これに $^{13}\text{C}_2$ の回転ゲートを組み合わせると核スピン3個に対する高速な制御・制御NOTゲート($^{14}\text{N}=|1\rangle$, $^{13}\text{C}_1=|1\rangle$ の場合のみ、標的ビット $^{13}\text{C}_2$ が反転)を構成できる(図3)。1量子ビット回転ゲートと合わせたこれらのゲートは万能ゲートと呼ばれ、3量子ビットのいかなる量子アルゴリズムに対する量子回路をも構成できる部品が整ったことを意味する。

4 量子エラー訂正

ここでは量子エラー訂正を用いて量子情報 $\alpha|0\rangle$

^{*3} 光によって初期化した電子スピンの偏極を核スピんに移して核スピンを初期化するが、シングル・ショット量子非破壊測定で初期化を確認できるという条件、 ^{14}N と同等以上に長いコヒーレンス時間をもつ条件を満たすものを探した。

^{*4} マイクロ波パルスに最適制御(optimal control)という技術を用いると、超微細構造線の一つ、あるいは周波数の異なる複数に対して同時に、電子スピン 360° 回転操作を精確に行える。



制御位相ゲート

$^{14}\text{N} |1\rangle, ^{13}\text{C}_1 |1\rangle$ の場合にのみ電子スピンを 360° 回転, $|11\rangle \rightarrow -|11\rangle$

制御NOTゲート

$^{14}\text{N} |1\rangle$ の場合にのみ $^{13}\text{C}_1 |0\rangle \rightarrow |1\rangle, |1\rangle \rightarrow |0\rangle$

制御・制御NOTゲート

$^{14}\text{N} |1\rangle, ^{13}\text{C}_1 |1\rangle$ の場合にのみ $^{13}\text{C}_2 |0\rangle \rightarrow |1\rangle, |1\rangle \rightarrow |0\rangle$

図3 制御 NOT ゲートおよび制御・制御 NOT ゲート

電子スピンの 360° 回転を用いた制御位相ゲート (ゲート時間 $32 \mu\text{s}$) と核スピンの回転ゲート [ゲート時間 $37 \mu\text{s}$ (^{14}N), $9 \mu\text{s}$ (^{13}C)] を用いて, 核スピンの 2 量子ビットゲート, 3 量子ビットゲートの高速化が達成される

$+\beta|1\rangle$ を, 中味を知ることなく, コヒーレンス時間に制約されずに長時間保持することを考える。3つの核スピン量子ビットに対する実効的な量子エラー訂正の量子回路を図4(b)に示した^{*5}。発生しやすい位相フリップエラー ($|0\rangle \rightarrow |0\rangle, |1\rangle \rightarrow -|1\rangle$) に対する有効性を実証したために基底変換しているが, ビットフリップエラー ($|0\rangle \leftrightarrow |1\rangle$) として扱える。守りたい量子ビット ($^{13}\text{C}_2$) の量子情報 $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ を, 2個の補助ビット $^{14}\text{N}, ^{13}\text{C}_1$ を加えた3量子ビットのエンタングルメント状態 $\alpha|000\rangle + \beta|111\rangle$ を生成して保持する。この符号化には, 2個の補助ビットを初期化したのち, 2つの制御 NOT ゲートを用いてエンタングルメント状態を作成する。3つのビットのうち高々1個のビットにエラーが発生する時間内に, 復号化・エラー訂正をする。主量子ビットにエラーがあれば $\alpha|001\rangle + \beta|110\rangle$ となる。復号化では, 2つの制御 NOT

ゲートを主量子ビットと補助ビットに使い, 主量子ビットはそのまま出力し, 比較の結果 (等しい: 0, 等しくない: 1) を補助ビットに出力する。 $^{13}\text{C}_2$ と ^{14}N の比較の結果を ^{14}N に, $^{13}\text{C}_2$ と $^{13}\text{C}_1$ の比較の結果を $^{13}\text{C}_1$ に出力する。主量子ビットにエラーが起きた場合には, $^{14}\text{N}, ^{13}\text{C}_1$ は $|11\rangle$, エラーがない場合には $|00\rangle$ となる。なお, ^{14}N にエラーがあれば $|10\rangle$, $^{13}\text{C}_1$ にエラーがあれば $|01\rangle$ となる。エンタングルメント状態を作成したおかげにより, 守りたいビット $^{13}\text{C}_2$ の中味を知るという操作なしに, $^{14}\text{N}, ^{13}\text{C}_1$ からどのビットにエラーがおきたかがわかる。制御・制御 NOT ゲートを用いることにより, 主量子ビット $^{13}\text{C}_2$ にエラーが検出された $|11\rangle$ の場合のみ, エラー訂正 ($^{13}\text{C}_2$ を反転) する。補助量子ビットをリセット (再初期化) し, 繰り返すことで守りたいビットの量子情報を望むかぎり長く保持できる^{*6}。

図4(a)は, 電子スピンの助けを借りて高速な2

^{*5} この図4(b)は異なる物理系の量子ビットにも適用できる汎用的なもので, 個々のゲート操作を具体的にどのようを実現するかが物理系によって異なる。

^{*6} 3量子ビットコードは位相フリップエラーのみ, あるいはビットフリップエラーのみの場合に有効である。

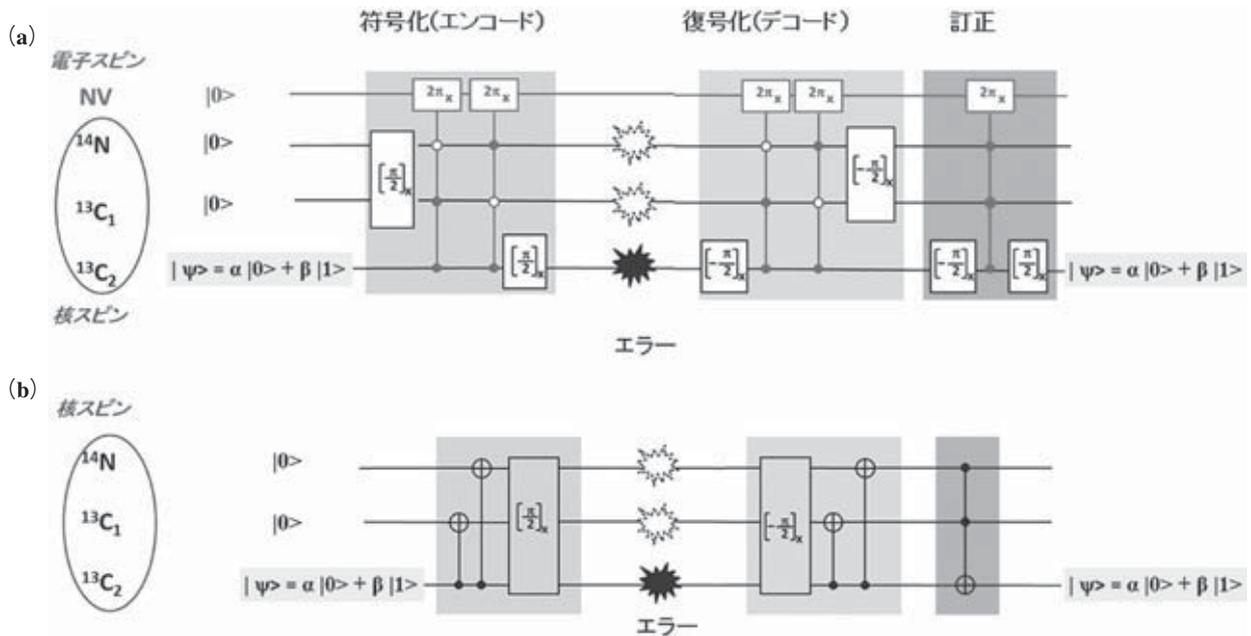


図4 3量子ビット量子エラー訂正
 (a) 電子スピンと3つの核スピンとのハイブリッド量子レジスタの量子回路
 (b) 3つの核スピン量子ビットに対する実効的なゲート操作

量子ビットゲート，3量子ビットゲートを核スピン同士に実現して，3量子ビットコード・量子エラー訂正プロトコルを実証した際に用いた具体的なゲート操作である。図4 (b) の制御 NOT ゲート，および制御・制御 NOT ゲートが，図4 (a) では超微細相互線 (図2) の周波数のマイクロ波パルスを用いて特定の核スピン状態に作用する電子スピンの 360° 回転ゲート ($2\pi_x$) と，特定の核スピンの NMR 周波数の RF パルスを用いる核スピンの 90° (あるいは -90°) 回転ゲート ($[\pi/2]_x$, $[-\pi/2]_x$) との組み合わせで構成されている。ゲート操作を精確に行うパルス技術を用いることにより，高性能のエラー訂正が達成されている。量子回路と呼んでも配線はなく，外から周波数，位相を変えたマイクロ波パルス，RF パルスを順次加えることで一連のゲート操作からなるアルゴリズムの実行が達成される。なお，電子スピンを用いた核スピンの初期化，読出しにはレーザーパルスも用いる。

量子コンピューティングの実用化に不可欠な量子エラー訂正の量子回路を室温動作の固体素子で実装することに成功した。量子エラー訂正および万能ゲートに属する制御 NOT ゲート，制御・制御 NOT ゲートの高速化は，多量子ビット化の基本的ツールがそろったことを意味する。ハイブリッド量子レジ

スタの方式では ~ 10 量子ビットまでの拡張が可能と考えられ，小規模の量子レジスタを結合して大規模化する方式や量子ネットワークへの発展への道を開いたと言える。論文¹⁾発表時には固体素子の3量子ビットエラー訂正は低温の超伝導量子回路に例があるだけであったが⁴⁾，超伝導量子回路では最近9量子ビットコード・エラー訂正アルゴリズムの実証が報告されている⁵⁾。

【謝辞】

本研究はシュツットガルト大学 Jörg Wrachtrup 教授のグループ，日本原子力研究開発機構 (現在は量子科学技術研究開発機構) 大島武博士のグループとの共同研究であり，特に Gerald Waldherr と Philipp Neumann 博士に感謝する。ダイヤモンドの NV センターを用いる量子コンピューティングの研究は JST-DFG 日独共同研究から科研費 (No.26246001) に引き継いで行っている。

参考文献

- 1) G. Waldherr, *et al.*, *Nature* **506**, 204-207 (2014)
- 2) T. Yamamoto, *et al.*, *Phys. Rev. B* **88**, 201201 (R) (2013)
- 3) T. Yamamoto, *et al.*, *Phys. Rev. B* **88**, 075206 (2013)
- 4) M.D. Reed, *et al.*, *Nature* **482**, 382-385 (2012)
- 5) J. Kelly, *et al.*, *Nature* **519**, 66-69 (2015)