

講座《新連載》

量子コンピューティング〔全6回〕 開講にあたって

編集幹事 横山 徹

量子コンピュータが近年、大きな脚光をあびています。2019年にGoogleが「量子超越性を実証した」と発表して大きな話題となり、近年は、金融や交通、創薬、人工知能などさまざまな分野で実用化に向けた研究開発が広がり、新たな超高速コンピュータの到来を予感させます。

その一方で量子コンピュータの実用化には、まだまだ乗り越えるべきハードルが多いことも事実です。技術的な難しさも含めて量子コンピュータの現状を理解するには、量子状態を実現するためのハードウェアやその計算への使われ方など、コンピュータの実現技術の理解が必要です。そこで本講座では、量子力学にあまり馴染みがなくても、量子コンピュータの実体的な理解を深められることを趣旨としました。

本講座では、量子コンピュータの基礎からスタートし、そのハードウェア技術として超伝導方式、イオントラップ方式、シリコン量子ドット方式を解説します。その後、量子計算に不可欠な量子誤り訂正技術と、応用分野として期待の高い量子化学計算について解説します。いずれも一線で活躍されている専門家に解説をお願いしました。

1年間の講座となりますが、何卒宜しくお願いいたします。

予定目次

(第1回) 量子コンピュータの基礎	宇津木 健氏(日立)
(第2回) 超伝導量子コンピュータ	才田大輔氏(産業総合技術研究所)
(第3回) イオントラップ量子コンピュータ	高橋優樹氏(沖縄科学技術大学院大学)
(第4回) シリコン量子コンピュータ	米田 淳氏(東京工業大学)
(第5回) 量子誤り訂正・抑制	鈴木泰成氏(NTT)
(第6回) 量子アプリケーション	望月祐志氏(立教大学)、杉崎研司氏(大阪市立大学)

量子コンピュータの基礎

宇津木 健†

1. まえがき

2019年9月「Googleが量子超越性を遂に示した」と話題になりニュースにも大きく取り上げられた。当時Googleの研究チームは、超伝導回路を用いて53個の量子ビットを有する量子チップを開発し、当時最高性能のスーパーコンピュータ（スパコン）でも1万年かかるだろうと試算されたとあるタスクを、たった200秒で実行したと発表した¹⁾。「量子超越性」(Quantum Supremacy)とは、スパコンでも非常に長い時間のかかる何らかの計算タスクを、量子コンピュータが高速に実行できることを指す学術用語である²⁾。その後、中国のグループから光量子コンピュータによる量子優位性の実現³⁾や、上記スパコンの計算時間を数分に短縮したという研究成果⁴⁾（ゴードン・ベル賞⁵⁾を受賞）が報告されるなど、世界各国の量子技術開発が話題を集めている。本稿執筆時点ではIBMによる127量子ビットの超伝導方式量子コンピュータが発表され⁶⁾、ついに100量子ビットを超える量子コンピュータが誕生したことが話題となっている。

量子コンピュータの研究開発は未だ実験レベルであり、実用的なタスクを高速に解き、社会システムに組み込まれるには、さらに数十年の開発期間を要すると考える研究者も多い。しかし、上述のように国や大企業が莫大な研究開発投資を行い、着実に成果を積み上げ、量子コンピュータ実現に向け一歩一歩前進している事実は、新しいコンピューティングへの期待を一層膨らませてくれる。

本講座では、非専門家でも量子コンピュータの実体を理解できるよう、量子コンピュータを実現するためのハードウェア技術や、量子計算に不可欠な量子誤り訂正技術、シミュレーションへの応用事例について、一線活躍されている研究者に解説頂く。第一回目の本稿ではその準備として、量子コンピュータに関わる基本的な事項について紹介する。

2. 量子コンピュータとは何か

量子コンピュータとはなんだろうか。拙著⁷⁾の記述をもとにすると、「量子力学特有の物理状態を積極的に用いて高速計算を実現するコンピュータ」である。量子力学とは、微小なものや極低温のものの物理現象を記述する理論であり、われわれの普段の生活では見ることができないさまざまな不思議な物理現象を説明することができる。この量子力学で記述される純粋な量子状態を用いて「量子ビット」を作り、これによって従来のコンピュータでは困難な計算タスクを実行するコンピュータが量子コンピュータである。

「量子力学」は、原子や電子が数個程度の微小（ミクロ）な物の挙動を説明するために構築された理論で、この世界の現象は多くの場合、量子力学によって説明することができる。一方、われわれが普段目にする物は、原子や電子が 10^{23} 個（アボガドロ数）程度集まってできた大きな（マクロ）な物であり、こういった物の挙動は「古典力学（ニュートン力学）」によって説明できる。そして、古典力学は量子力学の理論の「近似」であることが知られている。

量子力学と古典力学の関係と同様の関係が、実は「計算」にも存在している。1982年にアメリカの物理学者リチャード・ファインマンが量子コンピュータの可能性について言及し、1985年にイギリスの物理学者デイヴィッド・ドイチュが量子コンピュータの定式化を行った⁸⁾。通常のコンピュータの計算が、実は古典力学に対応していることを明らかにし、「量子力学に対応する計算とは何か」と考えたところから量子コンピュータの歴史が始まった。

ここで、古典力学（古典物理学）に対応する計算を「古典計算」、古典計算を行う装置を「古典コンピュータ」と呼ぶ。通常のコンピュータも古典コンピュータと呼ばれる。そして、量子力学（量子物理学）に対応する計算を「量子計算」と呼び、量子計算を行う装置を「量子コンピュータ」と呼ぶ（図1）。古典力学が量子力学の近似であると同様に、古典計算は量子計算の特殊例と考えることができる。そのため、理想的な量子コンピュータは古典コンピュータの上位互換となり、古典コンピュータで行える計算は、理論上はすべて量子コンピュータで行えるという関係がある。ただ

† 株式会社日立製作所 研究開発グループ 基礎研究センター
"Quantum Computing (I): Introduction to Quantum Computer" by Takeru Utsugi (Center for Exploratory Research, Research & Development Group, Hitachi, Ltd., Tokyo)

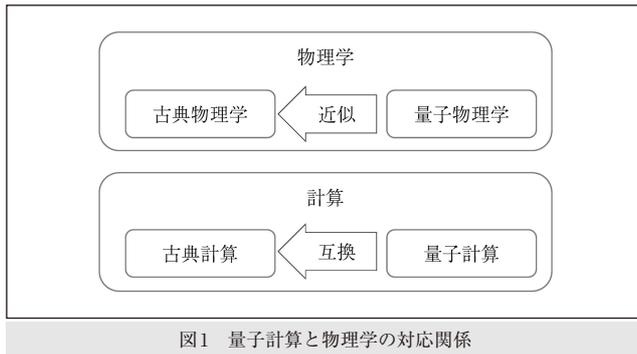


図1 量子計算と物理学の対応関係

し、将来古典コンピュータがすべて量子コンピュータに置き換わるかという点、そのようなことはなく、両者を用いた効率的なシステム構築が期待されている。

古典計算と量子計算の最も大きな違いは、扱う情報の最小単位にある。古典コンピュータでは、「0か1か、どちらの状態かを教えてくれる情報」である「ビット」を使って計算する。一方、量子コンピュータでは、量子力学によって説明される「0と1の重ね合わせ状態」である「量子ビット」を使って計算する。この違いによって、量子コンピュータは古典コンピュータの限界を突破し、特定の問題においてこれまで到達できなかった高速計算を実現できることがわかっている。このことは、アメリカの研究者ピーター・ショアが1994年に発見した「ショアのアルゴリズム」によって示された⁹⁾。

3. 量子ビットの実現方法

量子ビットは、量子力学的な性質（量子性）を保ったまま制御できる必要がある、それが可能な物理現象は現時点でそう多くはない。一方、古典コンピュータは、現在「トランジスタ」によって実装されているが、コンピュータの黎明期には「リレー」や「真空管」、「パラメトロン」などの素子を用いた計算機が作られていた。現在はまさに量子コンピュータの黎明期であり、量子ビット実現をめぐり、さまざまな方法が研究されている。代表的なものとして、超伝導回路、トラップイオン、冷却原子、半導体量子ドット、光学的量子計算、ダイヤモンドNVセンター、トポロジカルなどがある。

現在、IBM、Googleといった大企業でも開発されているのが、超伝導回路による量子ビットの実現方式である。極低温に冷却したある種の金属は、電気抵抗が0の超伝導状態になる。超伝導は量子力学的な現象のひとつであり、超伝導状態のアルミニウムやニオブといった金属によって作られた電子回路（超伝導回路）によりジョセフソン接合と呼ばれる特殊な層構造を作り込むことで、0と1の重ね合わせ状態である量子ビットを実現することができる。

世界で最初に超伝導回路による量子ビットを実現したのは、当時NECの中村泰信（現在東京大学）教授、蔡兆申

表1 量子ビットの実現方法

方式	概要
超伝導回路	希釈冷凍機により10 ⁻² K程度に冷却した超伝導の電子回路により量子ビットを実現。
トラップイオン	イオントラップとレーザー冷却により並べたイオンにより量子ビットを実現。
冷却原子	レーザー冷却により中性原子をトラップし量子ビットを実現。
半導体量子ドット	半導体ナノ構造である量子ドットを使い電子を閉じ込めることで量子ビットを実現。
光学的量子計算	非古典的な光の状態の操作と検出器による測定を組み合わせて量子計算を実現。
ダイヤモンドNVセンター	ダイヤモンド中の窒素空孔欠陥における電子スピンや核スピンを利用。
トポロジカル	トポロジカル超伝導体によりマヨラナ粒子を実現することで量子ビットを実現。

（ツァイ・ヅァオシェン）（現在東京理科大学）教授らである。彼らは、1999年に超伝導回路による量子ビットの動作を確認している。そこから、世界中で研究が進められ、当初数ナノ秒だったコヒーレンス時間（量子ビットの寿命）は、現在数十マイクロ秒程度（数万倍！）まで飛躍的に向上している。

その他の方式として有望なものにトラップイオン方式がある。現在すでにレーザー光と磁場を制御することで、イオン化した原子を真空中にトラップする技術が確立されている。これにより単一の原子を個別に直接操作することが可能となり、単一の原子のエネルギー準位等を量子ビットとして用いることができる。

また、長年培われてきたシリコンの半導体微細加工技術を用いて、単一電子の閉じ込め構造を作り量子ビットを実現する半導体量子ドット方式や、単一光子などの光の量子状態を用いて量子ビットを実現する光学的量子計算方式等が、世界中の大学や研究機関、大手企業やベンチャー企業によって研究開発されている（表1）。

4. 量子計算モデルについて

一般的な量子コンピュータの解説では、量子コンピュータとして、以下の2種類に分類されて説明されることが多い（図2）。

- ・量子回路モデル（量子ゲート方式）
- ・量子アニーリング

量子回路モデル（量子ゲート方式とも呼ばれる）の量子コンピュータは、“万能量子計算機”と呼ばれるモデルのひとつであり、汎用性の高い計算方式である。古典コンピュータにおける処理（古典計算）は、ANDゲートやNOTゲートのような「論理ゲート」を用いて記述できる。これに対応して、量子コンピュータにおける処理（量子計算）も「量子ゲート」を用いて記述できる。量子ゲートを組み合わせて「量子回路」を構築し、「量子アルゴリズム」を実行するのがこの量子回路モデルである。

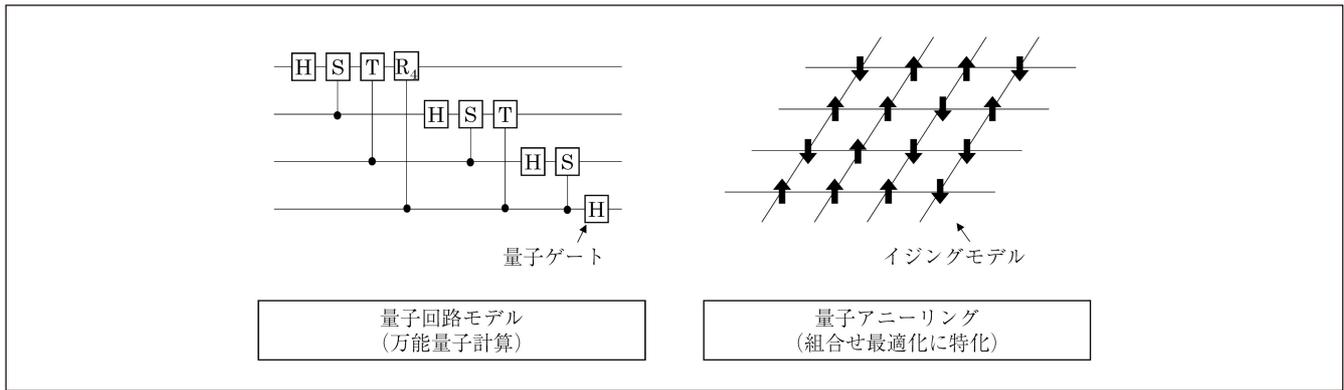


図2 量子コンピュータの計算方式

一方、量子アニーリングは「イジングモデル」と呼ばれるモデルに基づいて計算する。2011年にD-Wave Systems社というカナダのベンチャー企業が量子アニーリングマシンの商用化を行い、GoogleやNASAが研究に参加して一躍有名になった経緯がある。量子アニーリングは、1998年に東京工業大学の西森秀稔教授のグループによって理論的に提案された計算方法が発端となっている¹⁰⁾。量子回路モデルが万能量子計算と呼ばれて汎用性が高いのに対して、量子アニーリングは組み合わせ最適化問題などに特化した専用機という位置づけである。ここで、D-Wave Systems社の量子アニーリングマシンには、いまだ古典計算に対する優位な高速性の証拠はなく、研究段階であることに注意が必要である。

また、量子アニーリングに関係する技術として、特に日本では組み合わせ最適化問題に特化したアニーリング計算専用機の開発が活発化している。当社のCMOSアニーリング、富士通のデジタルアニーラ、東芝のシミュレーテッド分岐マシンなど各社がアニーリング専用機およびアプリケーションの開発を推進している。混同されがちだが、これらは上記の量子計算の実装ではなく、あくまで古典計算の領域である。また、光量子技術を活用したNTT等によるコヒーレントイジングマシンなどの新規コンピューティング技術も開発されている。

5. 開発の方向性

ここで簡単に、量子コンピュータの開発ロードマップについて、公的機関のまとめている最近の報告書^{11)~14)}をもとに紹介する(図3)。これらの報告書には、日本の量子技術全般にわたる動向だけでなく、海外の動向や今後の政策方針についても記載されている。

量子コンピュータ開発の現状は、量子回路モデルの量子コンピュータとして、ノイズのある中規模な量子コンピュータであるNISQ (Noisy Intermediate-Scale Quantum) マシンが開発されている。冒頭のGoogleのマシンも含め、ノイズが発生しても訂正することができないマシンである。また、

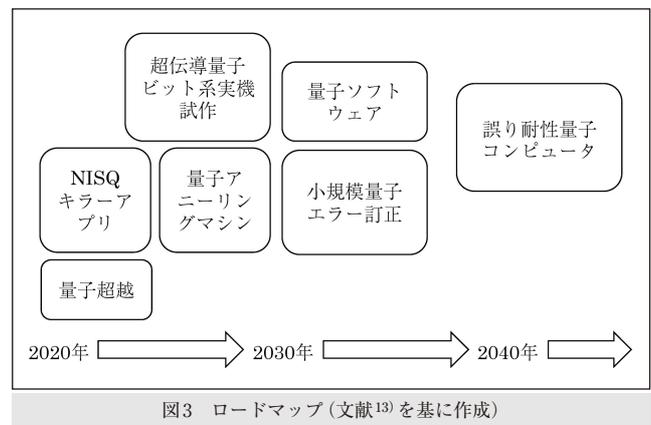


図3 ロードマップ(文献¹³⁾を基に作成)

特化型の量子アニーリングマシンの開発も進められている。今後10年程度で、このNISQマシンや量子アニーリングマシンの性能向上とともに、キラアアプリケーションを探索し、2030年までに実用的な問題を解いて社会に有用な量子コンピュータの実現をめざす。有望な適用先としては、情報通信、製造、金融、運輸、製薬、化学等の幅広い産業、社会分野であり、新たな価値が創出されると期待されている。

そして2050年までに、「経済・産業・安全保障を飛躍的に発展させる誤り耐性汎用量子コンピュータを実現すること」が、内閣府が主導する「ムーンショット型研究開発制度」の中の目標の一つとして掲げられている¹¹⁾。これにより、量子計算時のノイズによって発生した誤りを訂正する機能(誤り耐性)を有する量子コンピュータの実現をめざす。これまで提案されている有用な量子コンピュータアルゴリズムの多くは、この誤り耐性が前提となっている。例えば、従来よりも高速な素因数分解を行い、現在使われているRSA暗号を解読できるショアのアルゴリズムや、複雑な探索問題を高速に解くことができるグローバーのアルゴリズム、複雑な連立一次方程式を高速に解くことができるHHL (Harrow-Hassidim-Lloyd) アルゴリズムなどである。また、効率的な創薬や新規材料の創出が期待される量子化学計算の高速化や、AI(人工知能)の基盤技術となる機械学習を

高速化するという応用も期待されている。

6. 量子計算について

6.1 量子力学の性質

本項の最後に量子回路モデルの基本的な仕組みについて簡単に説明する。量子コンピュータの計算の基本単位である量子ビットは、電子や光などの量子力学的な性質を使って実現される。量子力学では、これらのミクロな物質は「波」と「粒子」の両方の性質を併せ持つと説明される。例えば、光は1800年代までは波だと思われており、一方電子は粒子だと思われていた。しかし1900年代になって量子力学が誕生するとともに、光には粒子の性質が、また電子には波の性質があることがわかってきた。光や電子は波と粒子の両方の性質を併せ持っており、量子コンピュータではこの不思議な性質をうまく利用して計算を行う。以下その方法について説明する。

6.2 量子ビットの性質

量子ビットは、① 波の性質である「連続的」な状態と、② 粒子の性質である「離散的」な状態を併せ持っている。①は0と1の重ね合わせ状態であり、0でも1でもないその中間的な状態を連続的にとることができる。これにより、 n 個の量子ビットがあれば、 2^n 個の状態を同時に生成することができる。一種の並列計算を実行することができる。また、②は量子ビットを「測定」することによって現れ、量子ビットの状態が測定により0か1の離散的な状態に確定する。「測定」とは、量子力学では特別な意味を持ち、量子ビットは測定されることにより①から②に、瞬時に変化する。これにより、0と1の重ね合わせ状態が解け、0か1の状態に確定するのである。そしてどちらに確定するかは、量子ビットの状態に応じて確率的に決定される。そのため、重ね合わせ状態の量子ビットを測定すると、必ずしも常に同じ計算結果が得られるとは限らない。一方で古典計算のビットは最初から0か1は確定しており、ビットの状態を測定してもその状態が変化することはないため、量子ビットとは本質的に異なることがわかる。

量子計算では、 2^n 個の状態を並列的に生成し、すべての状態を並列的に計算させることで、古典計算に対して指数関数的な高速化を実現できる可能性がある。ただし、結果を読み出す測定によって、確率的に一つの状態に確定してしまうと、単純な並列計算とはならない。そこで、①の重ね合わせ状態の量子ビットを操作して波の性質である「干渉」効果を利用することで、測定後に正解が得られる確率だけを高めるアルゴリズムを構築する必要がある。これにより、古典コンピュータに対して指数関数的な高速計算を実行することができる。

6.3 量子ビットの記述方法

量子ビットは $|0\rangle$ と $|1\rangle$ の二つの状態をとる。ここで、記号 $| \rangle$ は、「ブラケット記法」と呼ばれる記法のケット記

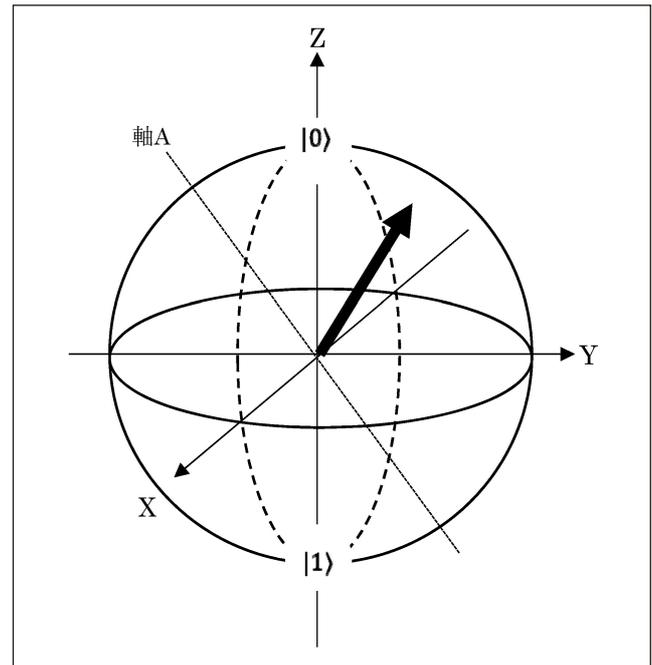


図4 量子ビットの状態を表すブロッホ球

号であり、それぞれ量子ビットの0の状態と1の状態を表す(これに対応して記号 $\langle |$ はブラ記号という)。任意の量子ビットの状態は、波の性質を表す複素数 α 、 β を用いて、 $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ と表される。 $|0\rangle$ と $|1\rangle$ が複素数 α と β の重みで重ね合わさっていることを意味する。また、複素数 α と β には、 $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ を満たすという条件があり、 $|\alpha|^2$ と $|\beta|^2$ はそれぞれ、0と1の状態を測定によって得る確率を表す。そのため、複素数 α と β は確率振幅と呼ばれる。

ここで、一つの量子ビットの状態を表現するブロッホ球を導入する(図4)。ブロッホ球は、量子状態を球表面の矢印の指し示す点として表す。球の北極が $|0\rangle$ 、南極が $|1\rangle$ を表し、複素数 α 、 β の値によってその間の球面上の重ね合わせ状態を指し示す。また測定はZ軸への射影によって扱える。詳細は量子計算の入門書を参照されたい⁷⁾。

6.4 量子ゲート操作

量子計算では量子ビットを操作することで計算を行う。量子回路モデルでは、量子ビットの状態を量子ゲートにより操作する。例えば、代表的な単一量子ビットに働く量子ゲート操作には、Xゲート、Yゲート、Zゲート、H(アダマール)ゲートなどがある。これらは、量子ビットの状態をそれぞれ、ブロッホ球(図4)のX軸、Y軸、Z軸、軸A回りに180度回転させる操作である。また、2量子ビットに働く量子ゲートには、CNOTゲート、SWAPゲート、 $\sqrt{\text{SWAP}}$ ゲートなどがある。それぞれの量子ゲートの働きはここでは立ち入らないが、このような量子ゲートと測定操作を複数組み合わせることで量子回路を構築し、計算を行うのが量子回路モデルの計算方法であり、また量子回路の構築方法が量子アルゴリズムとなる。そして、量子回路をうまく効果が

得られるように構築することが量子アルゴリズムの鍵となる。また、本稿では立ち入らないが、「量子もつれ(エンタングルメント)」という量子ビット同士の量子的な強い相関状態を生成することが、量子計算において重要な役割を果たす。

上記のような単一量子ビットの量子ゲート操作と2量子ビットの量子ゲート操作を組み合わせることで、万能な量子計算が実現できることが知られている。そのため、ハードウェアとしては、限られた種類の量子ゲート操作を実装しておけば量子計算の万能性を担保することができる。

7. むすび

本稿では、量子コンピュータの基本事項を紹介した。実用化のためには、量子ビット数の大規模化、低ノイズ化、集積化など、多くのブレークスルーがどの方式にも必要とされる。また、有用なアプリケーションの開発が不可欠であり、そのためのソフトウェア開発とアルゴリズム開発が必要である。さらに、2050年に向けた長期スパンの研究開発には人材育成も不可欠である。今後日本が量子コンピュータ産業創生を牽引し、世界をリードするためには、産学官の無駄のない連携による研究開発の加速が求められている。

(2021年11月26日受付)

〔文 献〕

- 1) F. Arute, et al.: "Quantum supremacy using a programmable superconducting processor", Nature 574.7779, pp.505-510 (2019)
- 2) Web記事 Qmedia: "Googleが量子超越を達成-新たな時代の幕開けへ", <https://www.qmedia.jp/google-supremacy-1/> (2021/11/23閲覧)
- 3) H.-S. Zhong, et al.: "Quantum computational advantage using photons", Science 370.6523, pp.1460-1463 (2020)
- 4) Y. Liu, et al.: "Closing the "quantum supremacy" gap: achieving real-time simulation of a random quantum circuit using a new Sunway supercomputer", Proceedings of the International Conference for

High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (2021)

- 5) 高性能計算 (HPC) 分野における実性能と計算科学の成果に対し授与される賞で「スパコン界のノーベル賞」と呼ばれる, <https://awards.acm.org/bell/>
- 6) <https://thequantuminsider.com/2021/11/15/ibms-eagle-127-qubit-quantum-processor-takes-flight-another-step-toward-frictionless-quantum-in-2025/> (2021/11/23閲覧)
- 7) 宇津木健(著), 徳永裕己(監修): "絵で見てわかる量子コンピュータの仕組み", 翔泳社 (2019)
- 8) J. Preskill: "Quantum computing 40 years later", arXiv preprint arXiv:2106.10522 (2021), および, 古田彩: "二人の悪魔と多数の宇宙:量子コンピュータの起源", 日本物理学誌, 59, 8 (2004) とそれらの引用文献を参照
- 9) P.W. Shor: "Algorithms for quantum computation: discrete logarithms and factoring", Proceedings 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science, IEEE Comput. Soc. Press, pp.124-134 (1994)
- 10) T. Kadowaki and H. Nishimori: "Quantum annealing in the transverse Ising model", Physical Review E 58.5, p.5355 (1998)
- 11) 統合イノベーション戦略推進会議: "量子技術イノベーション戦略(最終報告)", <https://www.kantei.go.jp/jp/singi/tougou-innovation/> (2021/11/23閲覧)
- 12) 科学技術振興機構研究開発戦略センター: "戦略プロポーザル「みんなの量子コンピュータ～情報・数理・電子工学と拓く新しい量子アプリ～」", CRDS-FY2018-SP-04 (2018), <https://www.jst.go.jp/crds/report/report01/CRDS-FY2018-SP-04.html> (2021/11/23閲覧)
- 13) 科学技術振興機構研究開発戦略センター: "戦略プロポーザル「量子2.0～量子化学技術が切り開く新たな地平～」", CRDS-FY2019-SP-03 (2020), <https://www.jst.go.jp/crds/pdf/2019/SP/CRDS-FY2019-SP-03.pdf> (2021/11/23閲覧)
- 14) 内閣府が主導する「ムーンショット型研究開発制度」Webサイト, <https://www.jst.go.jp/moonshot/> (2021/11/23閲覧)



うつぎ けん
宇津木 健 2013年, 東京工業大学大学院物理情報システム専攻卒業。(株)日立製作所入社。現在, 同社研究開発グループ基礎研究センタにて, 量子コンピュータの研究に従事。

超伝導量子コンピュータ

才田大輔[†]*

1. まえがき

近年、量子コンピュータ (Quantum Computer: QC) のニュースが新聞でも取り上げられるようになった。QCは国策としても強化すべき分野として注目されている¹⁾。インターネットを調べるとQCに関する各記事が見つかるだけでなく、IBMやカナダのD-Waveといった会社が提供する実際のシステムをクラウド経由で使うこともできる²⁾³⁾。この場合、私達は各社が提供するソフトウェアを用いてQCに触れることとなる。ソフトウェアを使って計算の解を求めるといった感覚は、私達が日常行っていること(例えば、Excelを使う)と近いように思われる。何がこれまでと違うのだろうか? QCについて調べると、「量子力学的な現象を情報処理に適用した計算機」というような表現が見つかる。すなわち、計算の仕組みが違うということとなり、計算方法が変わってくる。そうまでして使う理由は、従来の計算機(古典計算機)では容易に解くことのできない「ある特定の問題」についてもQCでは有限時間で解くことができるためである。「ある特定の問題」の中には、人類の生命や安全、企業活動の効率化に影響を与え得るものが含まれる。ここで、計算方法については、インターネット上でさまざまな解説記事を見つけることができ、各種企業が提供するソフトウェアを使って試してみることもできる。一方で、計算の仕組みについては、「量子ビットと呼ばれる回路の写真」や「量子の重ね合わせを利用しているという説明」以外は、一般的には見つけることができないのではないだろうか。本稿では「QCとは何か?」について、厳密性よりも理解のしやすさに重きを置き、QCの実態について解説を試みる。読後、回路の写真や量子重ね合わせの実現方法について、理解が進めば幸いである。

2. QCとは何か?

この問いについて考えるヒントを得るため、最初に古典計算機はどのような仕組みで計算や操作をしているのかを考えてみる。古典計算機では、0と1を組み合わせて演算が行われる。古典計算機を構成する一番小さい単位はメモリー^{*1}であり、メモリーの状態(0-stateと1-state)と計算が対応付けられている。すなわち、計算は「二つの状態を持つような系」を用いて行われている。この2状態はエネルギー的に異なるため、2準位系が利用されているともいえる。直感的な理解のしやすさからDRAM (Dynamic Random Access Memory) ^{*2}を例にすると、このメモリーはキャパシタに電荷が蓄積されているか否かを2状態に対応させている。この場合のエネルギーの2準位系は図1(a)の形に該当する。1-stateは0-stateよりもエネルギー的に高いため、有限時間で0-stateに緩和する。1-stateの情報を保つためには、有限時間内にリフレッシュと呼ばれる操作が必要となる。この例から、計算機を作るには、「エネルギー2準位系を持つ」メモリーを用意すればよいと考えられる。

古典計算機はメモリーを複数用いて構成されている。通常、私達が計算を行う時、メモリーの状態を意識すること

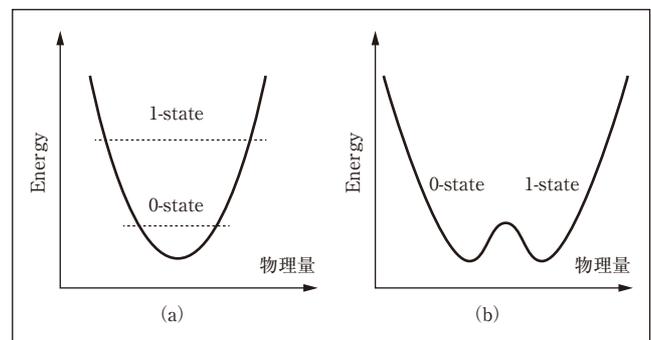


図1 (a) エネルギーが高い状態と低い状態で構成された2準位系と (b) 二つの基底準位を持ち物理量の変化によって状態を切り替える2準位系。

[†] 国立研究開発法人産業技術総合研究所

*現在、富士通株式会社

"Quantum Computing (2): Quantum Computing Utilizing the Superconducting Quantum Qubit" by Daisuke Saida (National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, Tokyo)

*1 フリップフロップ、レジスタ、SRAM等が該当するが、ここではメモリーと総括する。

*2 パソコンのメインメモリーに用いられている。

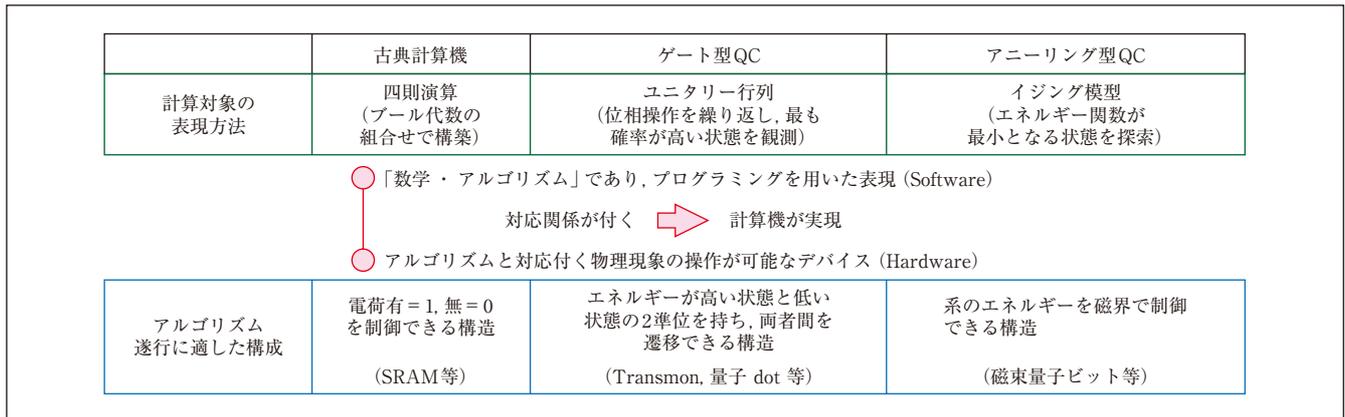


図2 古典計算機とQCの二つの方式について、コンピューティング(数学)とメモリーの関係を整理した関係

はない。それは、計算(数学)を行うシステム(メモリーとアーキテクチャ)が古典計算機では確立して、計算とメモリーの間で両者がアーキテクチャを介して対応付いているためである。そのため、メモリーで起きている2単位系での状態操作を意識することなく、PythonやC言語等で所望の計算を実行することができる。ここで重要なのは、メモリーにおける物理的な状態操作と計算が対応付いて、かつ、状態操作時に起きるエラーが補正されて正しく動く仕組みができていて、という点である。

では、QCとは何か？ 上述した仕組みを参考にすると、量子コンピューティング(数学)を行うシステム(量子ビットとアーキテクチャ)が存在して、両者を対応付ける仕組みができれば、プログラムを書くことで実行できることになる。すなわち、量子コンピューティング(数学)という考え方に対して、その方法と対応付くような物理的な状態と操作方法を有する量子ビット(メモリー)を用意して、量子ビットの動作に計算の流れをマッピングする仕組み(アーキテクチャ)を実現したものがQCということになる。先述したIBMやD-Waveはこの仕組みを構築しているため、私達はシステムの内部で起きている物理的な状態操作を意識することなく、量子コンピューティングを数学的な理解の下で試すことができる。このことは、量子ビットがデバイスとして実現される前の数学書に、「QCが必要とする量子力学の法則を規約の形に整理して公理として受け入れる立場をとるならば、量子コンピューティングは原則として物理学に関する知識を必要としない」という内容で記載されている⁴⁾。QCが必要とする規約を満たす物理現象は、1999年に超伝導量子回路で実現された⁵⁾。量子コンピューティングは、公理をアルゴリズムとして実装することで、simulator上でも実行することができる。一方、デバイスやシステムとしてのQCに関する研究開発は、規約を満たす努力をし続けている最中である。このQCを構成する最小単位が量子ビットである。古典計算機でのメモリーに相当することから、量子ビットは図1(a)や図1(b)のような2単位系のエネルギーを持てば良いと考えられる。このエネル

ギー2単位系を実現する物理的な方法には、超伝導回路を利用する以外にも、核磁気共鳴⁶⁾、光学パルス⁷⁾、トラップイオン⁸⁾、量子ドット⁹⁾等がある。

図2は、古典計算機とQCの二つの方式について、コンピューティング(数学)とメモリーの関係を整理したものである。各々、プログラム(数学)を実行するためには、そのアルゴリズムの実行に適したデバイスや物理現象を用意して、両者間に対応関係を作る必要がある。物理現象を利用する以上、各デバイスには得意不得意がある。特に、状態操作のエラー率と状態操作の速度の間には、トレードオフの関係がある。例えば、古典計算機で用いられるメモリーとして磁性体メモリーに着目すると、速い速度で状態を書き換えようとするとエラー率が高くなる¹⁰⁾。トラップイオンを用いるQCは、エラー率が低い報告がある。しかし、超伝導回路を用いる方法と比較すると、状態を操作する速度は桁で遅いことに注意が必要である。操作速度を上げると、エラー率は高くなる。メモリーには緩和時間があると先述したが、QCではコヒーレンス時間がそれに相当し、この時間内に何回ゲート操作を行うことができるかはQCの性能の一つの指標となる。方式が異なるQCを比較する場合、計算精度と並行して、ゲート操作が可能な回数と計算時間も同時に考えることが重要である。

3. QCの2種類の方式

この章では一旦メモリーの概念から離れて、QCをもう少し直感的に捉えてみる。古典計算機とQCの違いを考えると、前者は電気信号(電子)を使っている一方で、後者はスピンと同様に位相を持った情報^{*3}を使っているという点が挙げられる。ここで、電気回路を流れる電流の正体が電子の流れであったことに着目する。これは電子の粒子とし

*3 半導体の量子ドット方式のQCでは、スピンの概念が用いられている。超伝導方式のQCでは、電子が対になったクーパペアの集団が一つの波動関数で表現される巨視的量子効果を持つことを利用して、スピンと同様に位相の概念を持ち込むことができる。特に超伝導方式のアニーリング型QCでは、量子ビットの状態をスピンの見立てたイジング模型で表現される。

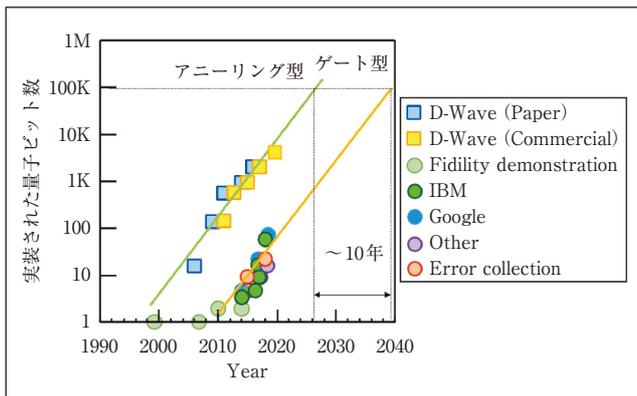


図3 超伝導方式の量子ビットの開発史

での振る舞いである。電子にはスピンという状態が伴う。スピンは波としての性質を有する。このことから、古典計算機は「粒子」を使った演算を行い、QCは「波」を使った演算を行うものと捉えることができる。「波」は正弦波のような時間軸上で振幅を持つ形で表現できる一方で、極座標上で振幅と位相で表現することもできる。QCの中で、ゲート型の量子コンピューティングを調べると、五線譜のようなもの上に、ゲート操作に対応するアイコンを並べていくユーザインタフェースが見つかる²⁾。これは時間軸上に「波」が進んでいくことに対応し、波の位相に演算結果を記憶させていると捉えることができる。しかし、量子状態を維持したまま演算を繰り返す必要があるため、実現には困難が伴う。一方、「波」は重なると強め合ったり、弱め合う性質がある。例えば、水面に大きさの違う石を異なる位置から落とすことを考えてみる。同時に波を立てて、波紋が安定する状態を見つけるイメージがアニーリング型のQCである。関係性が成立する平衡状態を求めるため、先のゲート型に対して実現しやすい。

ゲート型とアニーリング型のQCは、各々、汎用用途と組み合わせ最適化問題向けである、と分類されることがある。前者は量子状態を維持する必要があるという観点で実現の難しさがある。横軸に論文やプレスリリースがあった年、縦軸にその際に実装された量子ビット数をプロットしたグラフを作成すると、同程度の量子ビット数が実装される年は、アニーリング型のQCの方が10年ほど早い傾向が見られる(図3)。ゲート型で、操作中に起きるエラーを訂正できる実用的なQC(～1 Mbit)が実現する時期は、今後数十年かかりそうだという傾向もグラフに現れる。社会が抱える課題を早期にQCで解決できるようにしたいという観点に立つと、アニーリング型のQCで逸早く多量子ビット化して、そこで生じる課題を洗い出してQC全体で共有していくことは、一つの開発戦略となり得る。

4. 量子ビットの作り方

2章で計算機の仕組みを考察することで、QCではメモ

リーに相当する量子ビットとして、2準位系のエネルギーを持つ仕組みを作れば良いことがわかった。図1(a)か図1(b)の2通りが考えられ、実現する方法として各種物理現象があることを述べた。この中の一つである超伝導量子回路は、ゲート型とアニーリング型の双方が検討され、複数の量子ビットが実装されている。実用的なQCを実現する主力として超伝導量子回路が考えられている理由は幾つかある。第1は原理的な観点であり、ゲート型による計算で行われるシリアルな操作においても、個々のゲート操作時間が短いため、計算規模が拡大しても有限時間で計算することが期待できる点である。第2は実装的な観点であり、電気回路上の多数の電子集団の運動を制御することで、量子状態を操作することができることである。スピンを扱う際、電子1個の操作を厳密に行うことを求められると極めて難しい。超伝導回路では、電子集団がもたらす巨視的な波動関数を考えれば良いので、雑音に対する耐性が得られる。また、超伝導回路の加工の際、半導体のノウハウを活用できる点も強みとなる。このような利点の結果、ある程度の数の量子ビットが動作していて、今後の開発課題と対応策が明らかにされている点が第3の理由となる。

ここからはエネルギーの2準位系を作る仕組みについて考える。一般的に用いられる超伝導体のニオブ(Nb)とアルミニウム(Al)は、それぞれ9.2K(ケルビン)と1.2Kで超伝導状態となる。ここで、Nb線を用意して円形の輪のような閉ループを作ること考える。極低温環境(数mK)にNb線の閉ループを置き、ループを下から上に貫くような一様な磁場を印加すると、ループ内に磁束が入らないように遮蔽電流が流れる。磁場を上から下向きに印加する場合は異なる。これは二つの状態ができていくように思われる。デバイスとしては、Nb配線で閉じた回路を作り、その一部に対向する磁場印加用の配線を設けることで実現することができる。例えば、われわれが使用している超伝導回路の作製プロセスでは、Nb配線が4層用意されているので、この構造を作ることができる¹¹⁾。しかし、用意できた二つの状態には課題が存在する。これは線形なインダクタに遮蔽電流が流れているだけの状態であり、重ね合わせ状態を作ることができないという点である。そこで、この閉ループ中にジョセフソン接合を挿入する。ジョセフソン接合とは、超伝導電極で絶縁体を挟んだ構造である。超伝導回路のプロセスにおいて、超伝導材料でできた配線の間に絶縁層を形成することで、ジョセフソン接合を作ることができる。この接合を導入することで、巨視的な波動関数を制御できるようになる。また、その波は接合間で位相差(φ)を生じる。重要なのは、ジョセフソン接合部が非線形なインダクタンス(L)として作用するため、系がLとキャパシタンス(C)からなる等価回路で表現することができるという点である。LC回路は共振回路の一種であり、その動作を

考えると調和振動子のエネルギーポテンシャルが現れる。ジョセフソン接合の等価回路モデルにおいて、回路を流れる電流からエネルギーポテンシャルを導出すると、

$$U(\varphi) = -E_j \cos(\varphi) - E_j \left(\frac{I}{I_c} \right) \varphi \quad (1)$$

$$E_j \equiv \frac{\hbar}{2e} I_c$$

が得られる。ここで、 I_c はジョセフソン接合の臨界電流である。このエネルギーポテンシャルは図1(a)の2準位系の形をしていて、ゲート型の量子ビットに用いられている¹²⁾。この場合、0-stateと1-stateは、各々基底状態と第一励起状態に相当する。準位間のエネルギーに相当する電磁界を与えることによって、0-stateと1-stateの遷移を操作することができる。調和振動子では、準位間のエネルギー差が固有値エネルギーで決まり、一定となる。第二励起状態等、意図しない遷移が起きないためには、準位間のエネルギー差が異なるようなエネルギーポテンシャルにする必要がある。この時、ジョセフソン接合による非線形なインダクタンスは、準位間の間隔を均一ではなくす効果をもたらし、0-stateと1-stateの準位を選択的に利用することができるようにしている。ゲート型の量子ビットで広く用いられているトランズモンは、このようなエネルギーポテンシャルの形をしている¹³⁾。

もう一つの2準位系である図1(b)は、アニーリング型の量子ビットで一般的に用いられるエネルギーポテンシャルの形である。これはどのようにすれば実現することができるだろうか？先のNb線の閉ループ構造に立ち返り、ジョセフソン接合の代わりに超伝導量子干渉計(Superconducting Quantum Interference Device: SQUID)を挿入してみる(図4)¹⁴⁾。SQUIDは超伝導回路の閉ループ中にジョセフソン接合を含んだ構造である。SQUIDにおける磁束(フラクソイド)の量子化条件と回路のヘルムホルツエネルギーを考察すると、下記の関係が導出される。

$$U \propto \sum \Phi^2 + \sum \left(1 - \cos \left(\frac{2\pi}{\Phi_0} \Phi \right) \right) \quad (2)$$

ここで Φ_0 は磁束量子を表す。右辺は関数としてのわかりやすさを優先して簡略表現した。右辺の第1項はインダクタンスがもたらすエネルギーであり、第2項はジョセフソン接合がもたらすエネルギーである。磁束に対して、前者は2次関数的な挙動を、後者は余弦波の挙動を示し、両者が合わさることで図1(b)のような2準位系となる。すなわち、超伝導閉ループ中にSQUIDを用いると、磁束の印加で2状態を切り替えることができるエネルギーポテンシャルを作ることができる。これがアニーリング型における量子ビットである。この場合、各ポテンシャルの底が、量子ビットの基底状態となる。では、0-stateと1-stateの重ね合わせ状態は、どのようにすれば作ることができるだろうか？

ここで、SQUID部分へ選択的に磁束を印加する新しい磁場印加線を用意し、ゼロから Φ_0 相当まで時間変化する磁束を与えることを考えてみる。図5に示したように、ちょうど Φ_0 の半分に相当する磁束が印加された時、量子ビットのエネルギーポテンシャルは磁束で変調されて底が一つしかない状態となる。ポテンシャルの底が量子ビットのとり状態であるため、0-stateと1-stateが重なった状態が実現される。 Φ_0 の磁束が印加された後で量子ビットを観測すると、全量子ビットの関係性に応じた状態が得られることになる。このような構造がアニーリング型の量子ビットとして提案されて以来¹⁵⁾、超伝導量子回路として集積化され、現在は5000量子ビットからなるシステムを利用することができる³⁾。

5. QCの課題とわれわれの研究事例

実用的な量子コンピュータを実現するためには、どのような課題を解決していかなければならないだろうか？第1の課題は、計算における解の精度が低いという点である。ゲート型の量子ビットにおける状態操作時の忠実度は、従来の半導体メモリーのエラー率のworst caseから鑑みても2桁以上の改善が必要である。これが解決できない場合、膨大な余剰ビットによる補正が必要となる。アニーリング型では、問題の規模や用いられる量子ビット数にも依存するが、ハミルトニアンを計算した時の正答率が数%未満となる場合もある¹⁶⁾。第2に、実用的な問題を解くのに必要と見積られる量子ビット数に対して、現在回路に実装されている量子ビット数が大きく乖離している点が挙げられる。これは、実用的な数理モデルが検討されていないという課題とも関係している。第3は実装における拡張性の担保が挙げられる。量子ビット数に合わせて、状態操作のための信号源と信号経路(配線)も確保しなければならない。冷凍機内に配線を配置する空間を確保する問題だけでなく、数が増えるほど雑音源が増える問題や冷凍機の冷却能

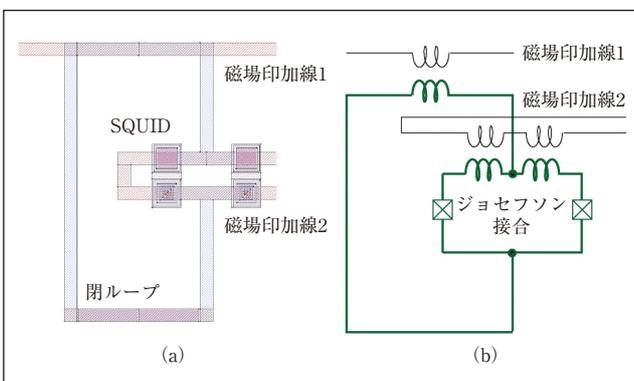


図4 (a) アニーリング型量子ビットのレイアウト図と (b) 回路表記した図。磁場印加線1は自己バイアス(縦磁場)を与えるために用いられ、磁場印加線2はアニーリング(横磁場)を行うために用いられる。

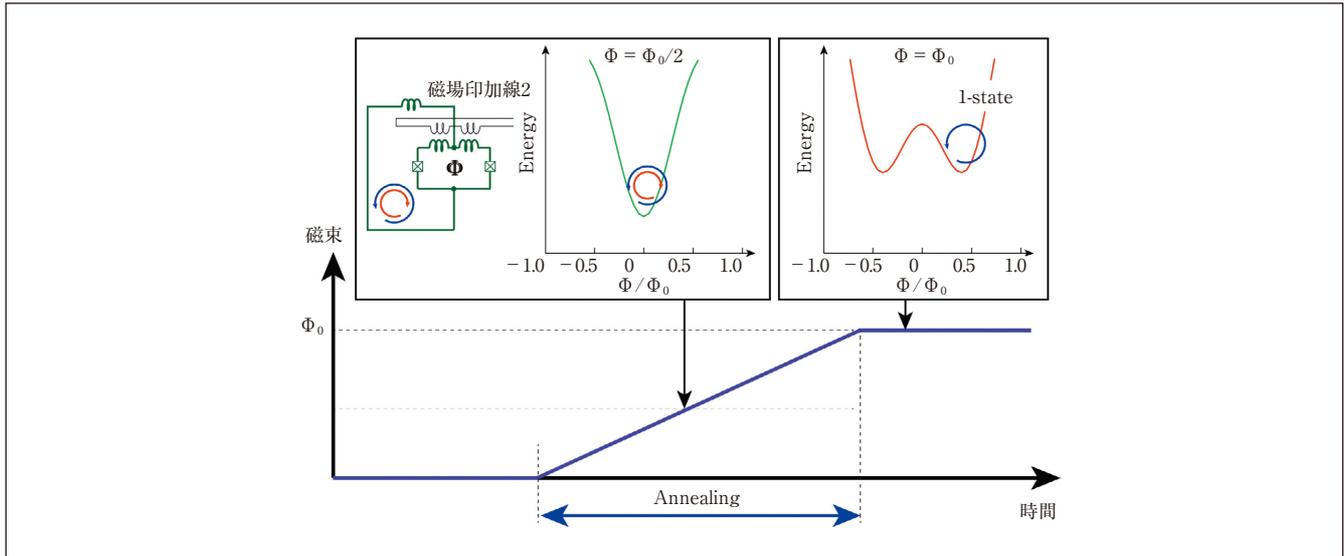


図5 アニーリング型量子ビットにおいて、磁場印加線2を用いてエネルギーポテンシャルの形状を変化させる様子(重ね合わせ状態を経て状態が確定するまで)。グラフは文献¹⁴⁾の数値計算結果に基づく。

力の問題を考えていかなければならない。第4は、コンピューティング効率を上げる改善策を考える必要性が挙げられる。古典計算機とQCを併用し、変分法により量子系を解析する方法が検討されているが、この方法はレイテンシーが性能を律速してしまう。

各種QCへ将来的に波及効果をもたらすことを目指して、われわれはアニーリング型QCでアプリケーションを伴った実験実証と、作製プロセスから周辺回路技術までの課題を洗い出す研究開発に取り組んできた。この取り組みでは、「高い計算精度の超伝導量子回路」の実現と、「実用的な数理モデル」の検討を軸に置いて、アプリケーションの階層からデバイス階層まで一貫して取り組むというアプローチをとっている。

アニーリング型QCの解の精度を改善するため、「解析対象に合わせた専用の超伝導量子回路」を作製し、9割以上の正答率が得られることを実験実証した¹⁷⁾。図6はNORの論理を実現する超伝導量子回路である。回路充足可能性問題の表現を用いてハミルトニアンを構成していく場合、図6の回路は基本単位格子となる。実用的な解析と量子ビット数の間に乖離がある課題を解決する試みとして、目的に特化することで量子ビット数を削減して量子回路へ実装する数理モデルを検討した。因数分解と蛋白質構造解析の二つのテーマについて、数理モデルと超伝導量子回路の双方を検討している^{17) 18)}。また、実装の課題に関して、百量子ビット程度まで評価可能な環境を構築し、状態操作の信号源のFPGA化や雑音低減策の検討を行っている。回路の占有面積を改善するため、異なる基板に形成した超伝導量子回路を貼り合わせる実装技術の開発にも取り組んでいる。アニーリング型量子ビットを作製するプロセスは、ゲート型量子ビットの状態操作で用いる信号源を基板上に形成する技術としても用いることができる。アニーリング型QC

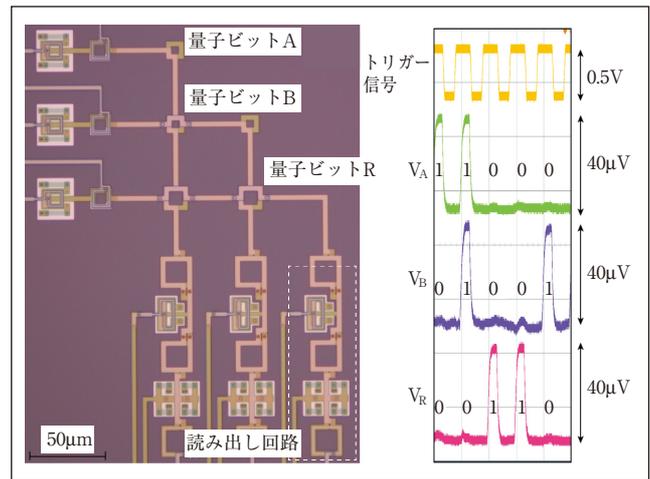


図6 NORの論理と対応付くハミルトニアンを直接実装したアニーリング型超伝導量子回路。3量子ビットで構成される。NORの論理をランダムに発生させた10 mKの温度環境下での実験結果を併記した¹⁷⁾。

の多量子ビット化のために開発してきた技術は、各種QCにも波及効果をもたらすことができると考えている。このようなアニーリング型QCの開発から得た知見をゲート型QCにもたらす開発施策は、2021年の国際会議(Qubits)でD-Waveからも発表されているため、各QC間で技術の交わりが今後進んでいくのではないかとと思われる。

現在、各方式のQCが研究開発されているが、将来はネットワークを介して繋がり、用途に応じて使い分けられるだろう¹⁹⁾。解くべき問題に応じてホストコンピュータからTaskが振り分けられるような、ドメイン固有アーキテクチャが実現できれば、QCのコンピューティング効率の向上が期待できる(図7)。そこで、基板内に異なる量子回路を作製し、Taskを振り分けて実行できることを実験的に確かめた¹⁷⁾。文献¹⁷⁾のSupplementaryに実行時の動画を掲載し

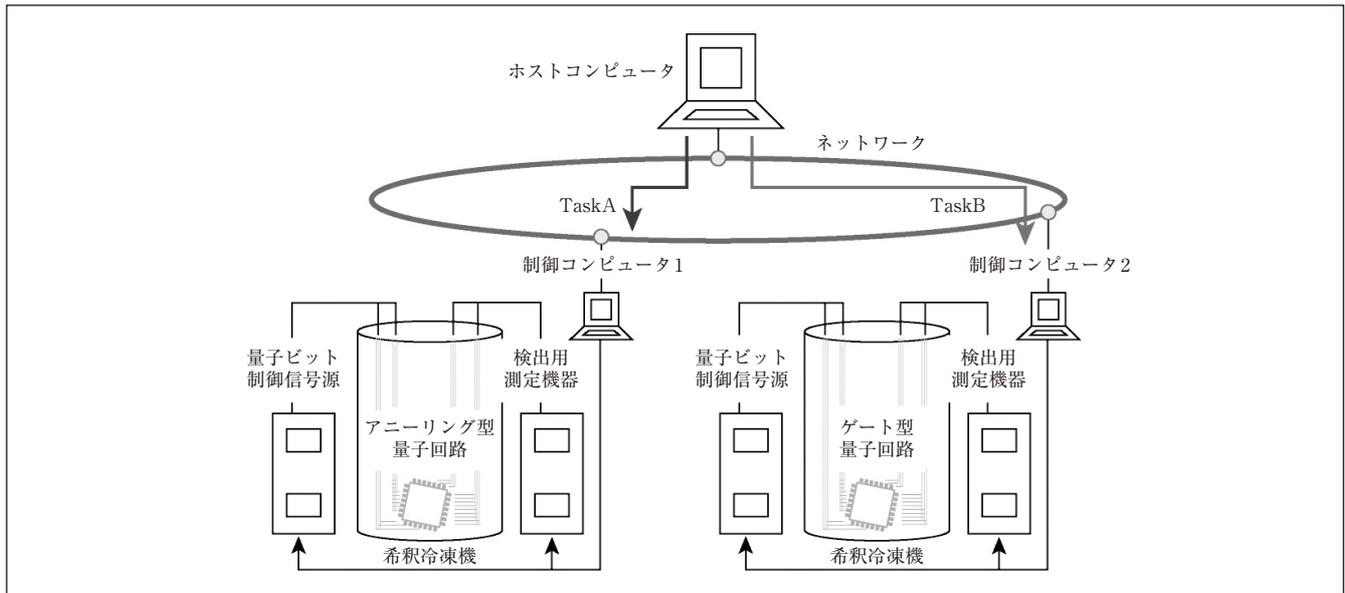


図7 各種QCがネットワークを介して繋がり、Taskに応じて使い分けられる概念図¹⁷⁾
ネットワークには、光方式や量子ドット方式等のQCが接続される他、量子inspired計算機も接続され得る。

ているが、このデモはQC版のドメイン固有アーキテクチャを動作実証した最初の事例であると考えている。

6. むすび

本稿では、エネルギーポテンシャルの形に着目し、超伝導方式での量子ビット構造について解説した。量子ビットは転移温度以下に冷却すれば超伝導状態となるが、量子効果の恩恵を利用するためには10 mK程度まで冷却する必要がある。これは熱が雑音源となるからであり、量子ビットの測定では雑音の抑制が必須となる。QCの性能を上げるために実装する量子ビット数を増やしていきたいが、「希釈冷凍機内の最低温度領域に量子回路を設置する」という制約がある。QCで利用できる量子ビット数は、「冷凍機内の設置面積の上限」と「冷凍機内に配置できる配線数」と「状態操作のための信号源の数」によって律速される。大規模な計算を行うことを目指すためには、上記の律速要因を踏まえて、計算規模から逆算してシステム全体を設計することも重要となる。また、量子ビット作製時において、絶縁層中に生じる欠陥や不純物の抑制、ジョセフソン接合径のバラツキの制御もQCの性能に影響を及ぼすファクターとなる。このようなシステム設計や素子作製技術は、半導体産業に関わる企業で蓄積されてきたノウハウが役立つ可能性があると思う。また、QCの実用化という観点を考えるなら、国内では基本特許が海外機関に確保されているという点にも注意をしていく必要がある。この観点でも企業の知恵は必要である。半導体技術を持つ企業間と、国研や大学間で、技術や知財、装置や人を横断的に共有・協力していくことができるようなコンソーシアムができていけば、QCの実装に向けて大きく前進していくことができるのではないかと考えている。

謝辞 この成果は、国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO) の委託業務 (JPNP16007) の結果得られたものである。
(2022年1月26日受付)

〔文献〕

- 1) 文部科学省研究振興局次世代計算基盤の検討に関する政府内の動向等について (令和2年5月)
- 2) <https://www.ibm.com/jp-ja/quantum-computing>
- 3) <https://dwavejapan.com/>
- 4) 上坂吉則, コロナ社, 量子コンピュータの基礎数理
- 5) Y. Nakamura et al., Nature 398, 786 (1999)
- 6) G. Cory et al., Phys. Rev. Lett. 81, 2152 (1998), L. Vandersypen et al., Nature 414, 883 (2001), C. Negrevergne et al., Phys. Rev. Lett., 96, 170501 (2006)
- 7) S. Takeuchi, Phys. Rev. A, 62, 032301 (2000), T. Pittman et al., Phys. Rev. A, 71, 052332 (2005)
- 8) J. Chiaverini et al., Nature 432, 602 (2004)
- 9) A. Noiri et al., Nature 601, 338 (2022)
- 10) D. Saida et al., IEEE Transactions on Electron Devices, 64, 427 (2017)
- 11) M. Hidaka et al., Proceedings in 14th Superconducting SFQ VLSI Workshop and 3rd Workshop on Quantum and Classical Cryogenic Devices, Circuits and Systems (2021)
- 12) Martinis et al., Phys. Rev. Lett., 89, 117901 (2002)
- 13) J. Koch et al., Phys. Rev. A, 76, 042319 (2007)
- 14) D. Saida et al., Jpn.J. Appl. Phys., 60, 060906 (2021)
- 15) M. Johnson et al., Nature 473, 194 (2011)
- 16) T. Babej et al., arXiv : 1811.00713v1 (2018)
- 17) D. Saida et al., IEEE Trans. Quant. Eng., 2, 3103508 (2021)
- 18) 才田大輔, 第47回日本臓器保存生物医学学会学術集会 (2021)
- 19) K. Bertels et al., IEEE Trans. Quantum Eng., 1, 4500717 (2020)



才田 大輔 2006年、東京大学大学院工学系研究科電子工学専攻修了。(株)東芝研究開発センターにて、磁性体メモリの研究に従事した後、2018年より、超伝導方式の量子ビットの研究開発に着手。現在、富士通(株)にて、同研究に従事。(国研)産業技術総合研究所の外来研究員を兼任、博士(工学)。

イオントラップ量子コンピュータ

高橋優樹[†]

1. まえがき

量子コンピュータは重ね合わせの原理などの量子力学固有の現象を利用するコンピュータである。このような量子力学的な現象は一般的に物質の大きさが大きくなるにつれ観測しづらくなると考えられている。事実、20世紀初頭に量子力学が発見されたのは、人類が原子や電子のようなミクロな構造を調べる技術をようやく手に入れたからであった。また、量子力学の標準的な教科書を開けば、量子力学の効果が顕著に表れる例としてまず水素原子が扱われる。超伝導回路や量子ドットなど量子コンピュータの研究に用いられる固体素子もしばしば「人工原子」と呼ばれる。このように原子は量子力学を考えるうえでの標準的なモデルを与えるといえる。それでは、そもそも原子そのものを使って量子コンピュータを作ればよいのではないかとイオントラップ量子コンピュータは大まかに言ってそのような考えを実現するものと言える。ここでは、まず最初に人工原子の方を先に紹介してしまっただが、話は逆でまずイオントラップを使った量子コンピュータの研究が先行して始まり固体デバイスの研究がそれを追いついたのであった。まずイオントラップの歴史を見てみよう。

2. 背景

イオントラップとはその名の通り「イオン」、もう少し一般化すれば「荷電粒子」を「捕獲(トラップ)」するための装置の総称である。ここで「捕獲する」というのは限られた空間に一定時間以上保持することを指す。通常はこれを超高真空チャンバー内のような周囲にはほぼ物質が存在しない環境で行い、限られた数の荷電粒子だけをイオントラップに導入して実験を行う。「荷電」粒子に限定されるのは、電荷を持っていればその粒子を電場や磁場で容易に制御し、堅牢なトラップを構築できるからである。時々、イオントラップではイオンの捕獲にレーザーが使われると間違っただ説明がされることがあるが、イオントラップでは捕獲自体に

レーザーは必要ない(ただしイオンを冷却したり励起したりするためにレーザーは必要となる)。イオントラップの動作原理については次章で扱う。

イオントラップを用いればイオン化された原子の集団を長時間同一箇所に保持できるため、量子コンピュータの概念が登場するはるか前からイオントラップは原子分光のための道具として使われていた。1960年代に発明されたレーザーは分光に革命をもたらしたが、1980年代初頭には同じくレーザーの輻射圧を使って原子の運動を減速させられることが発見された。これが、いわゆる「レーザー冷却」の発明¹⁾につながる。その結果、原子イオンの運動を絶対零度近くに冷却し、イオンをほぼ静止させた状況でその性質をつぶさに調べることが可能となった。さらに、単一の原子イオンのみを取り出してトラップできるようになったことで、量子跳躍の観測²⁾などに代表されるような原子の量子的な振る舞いが観測されるようになる。

そのような折、1994年にショア(P. Shor)のアルゴリズムが発表され、量子コンピュータが注目を集め始める。

当時開かれた原子物理に関する国際会議(第14回 International Conference on Atomic Physics)において、エカート(A. Ekert)が原子物理のコミュニティに量子コンピュータの概念を紹介したその講演の聴衆にいたのが、シラック(J.I. Cirac)とゾラー(P. Zoller)であったと言われている³⁾。その直後にシラックとゾラーは捕獲イオンを量子ビットとして制御ノットゲートを実装するいわゆるCirac-Zollerゲートの提案を行い⁴⁾、それに呼応する形で、ワインランドらのグループが即座に実証実験を報告している⁵⁾。このように、量子コンピュータに関する実証研究が始まった最初期において、実験的なテストベッドとして用いられたのがイオントラップ中のレーザー冷却されたイオンであった。

それから30年弱、イオントラップは超伝導量子回路と並び量子コンピュータを実現する最も有力な物理系としていまだに注目を集め、研究が行われている。この間、応用性の高い優れた二量子ビットゲートであるMølmer-Sørensenゲートの発明⁶⁾、多数のイオンのもつれ状態の生成⁷⁾、忠実度99%以上の二量子ビットゲートの実現⁸⁾⁹⁾、表面イオ

[†] 沖縄科学技術大学院大学
"Quantum Computing (3): Ion Trap Quantum Computer" by Hiroki Takahashi (Okinawa Institute of Science and Technology, Okinawa)

ントラップの開発¹⁰⁾など多くの技術革新が行われてきた。最近ではIonQやQuantinuum(前Honeywell)社などの民間企業も参入し、イオントラップ型量子コンピュータの開発は一層の活況を呈しているようにも見える。一方で、量子誤り訂正が可能となるような大規模な量子コンピュータの実現のためには克服しなければならない課題が累積していることも事実である。本稿では、イオントラップを用いた量子コンピュータを理解するために必要な基本的な概念・手法の説明から始めて、現在量子コンピュータを開発する上で課題となっている事項、それらを解決するための取り組みについても解説を試みる。

3. イオントラップの動作原理

図1のような一次元的な状況を考えて。正に帯電した荷電粒子が1Vの電圧をかけられた電極に両側から挟み込まれる形で閉じ込められている。荷電粒子がこのトラップから抜け出すために必要な熱エネルギーを概算してみる。この荷電粒子が素電荷 $e(=1.602 \times 10^{-19} \text{C})$ だけ帯電しているとすると、粒子がこのトラップから抜け出すために必要なエネルギーは 1eV (エレクトロンボルト)となるが、これを温度に換算すると $1 \text{eV}/k_B = 1.16 \times 10^4 \text{K}$ となる(k_B はボルツマン定数)。つまり、荷電粒子の熱エネルギーが約1万K相当以上でない限り、原理的にはわずか1Vのポテンシャル障壁でそれらを捕獲できることになる。レーザー冷却を用いればイオンの温度はmK以下に抑えることができるので、1V程度の「深さ」のトラップに一旦捕獲されたイオンは現実的にはトラップから抜け出すことなく半永久的に捕獲され続ける。このトラップの堅牢性が中性原子ではなくイオン化した原子をわざわざ使う理由の一つである(中性原子はレーザー光をつかった双極子トラップで捕獲できるものの、そのトラップの深さは典型的にはmKのオーダーである)。

上の説明では、一元的なモデルを考えた。実際に三次元空間の特定の箇所にイオンを閉じ込めるためには、図1にあるようなポテンシャル障壁がイオンの周りの四方八方、全方位から囲むように存在することが必要である。しかしながらこのようなポテンシャルは静電的には実現不可能で

あることが知られている。これはアンショウの定理と呼ばれ、三次元空間でのラプラス方程式の解が極値をとらないことから導かれる。仮に図1の例でその次元を拡張して考えてみると、ポテンシャルは紙面に垂直な方向に対しては「下り坂」になっており、荷電粒子はその方向に逃げ出せる。つまり、イオントラップを静電場で構成することは一般的に不可能である。では、どうするか？アンショウの定理は「静」電場での安定な閉じ込めを禁じるものの、電場が時間変化する場合はこの限りではない。(RF周波数で)時間的に変動する電気ポテンシャルを使うイオントラップはRFパウルトラップと呼ばれ、アンショウの定理を回避してイオンの安定な閉じ込めを実現する。その原理を以下で説明する。

まず二次元のパウルトラップについて考える。図2(a)のような状況を考えてみよう。図2(a)では、電場はトラップ中央にあるイオン(正電荷)に対してY方向の閉じ込めを与えるが、X方向に対しては逆に中心から遠ざけるような力を及ぼす。一方、図2(b)では、このXY方向に関する閉じ込めが逆になっている。すなわちこのどちらもイオンに対して安定なトラップ機構となっていないわけだが、パウルトラップでは、図2(a)と図2(b)の電圧配置を交互に高速に切り替えることで動的な閉じ込めを実現している。実際には正弦的に時間変化する電圧($\propto \sin(\Omega t)$)を使用し、X方向とY方向の電極で電圧の符号を逆にすればよい。RF周波数 Ω が充分高速な場合、時間平均してみればイオンは実効的に調和型の二次元ポテンシャルにトラップされることになる。このような動的な実効ポテンシャルは擬ポテンシャルと呼ばれる。イオンの運動エネルギーがゼロになる極限で、パウルトラップ中のイオンの運動の軌道はトラップの中心点に局在する。この点は、電場の大きさがゼロになる点でもあるので、よく冷却されたイオンはRF電場の擾乱がほぼないこの電場のゼロ点付近で捕獲されることになる。

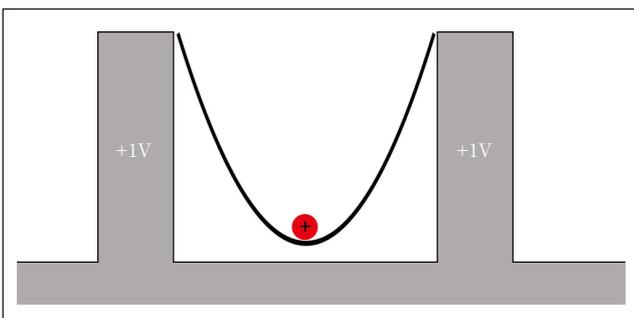


図1 一次元静電ポテンシャルに閉じ込められた荷電粒子
放物線は荷電粒子が感じる電気ポテンシャルを表す。

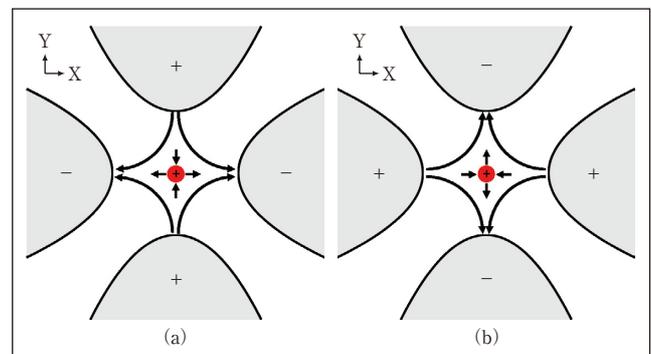


図2 二次元パウルトラップのための模式図
(a) 対向する電極(灰色)の組に対して、それぞれ「正(+)」と「負(-)」の電圧が印加されることで、図中の矢印のような四重極電場が生成される。

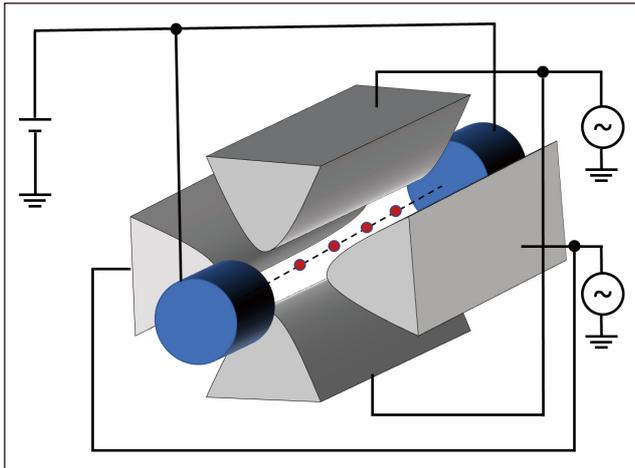


図3 線形パウルトラップの模式図

三次元空間でイオンをトラップするためには図3のような構成をとる。これは以下のように理解できる。図2の電極を断面としてそれをZ軸方向に掃引することにより生成される電極を考えよう。こうすることにより電場のゼロ点はZ軸方向に伸びた「線」となる。これをトラップ軸と呼ぶ。さらにトラップ軸の両端に直流電圧を印加したエンドキャップ電極を配置することによりZ軸方向にも閉じ込めを与える。このようにして、XY面内ではRF電場による擬ポテンシャルによって、Z軸方向ではエンドキャップによる静的な調和型ポテンシャルによってイオンはトラップ軸上の一点に捕獲される。さらに、複数のイオンをこのようなイオントラップに導入した場合、Z軸方向の閉じ込めとイオン間のクーロン斥力のつり合いにより、各イオンはトラップ軸上においてお互いに間隔をあけて捕獲されることになる。以上のような仕組みのイオントラップを線形パウルトラップと呼ぶ。線形パウルトラップは複数のイオンを一直線状に規則正しく並べて捕獲することができるため、量子コンピュータへの応用にとどまらず広く利用されている。

4. 量子ビットとしてのイオン

前章では、「捕獲装置」としてのイオントラップを説明した。本章では、その中でイオンがどのように量子ビットとして機能するのかをみる。

量子ビットとはよく定義された二つの量子状態の組のことである。初等量子力学で習う水素原子と同じく、イオン化された原子もそれぞれ特有のエネルギー固有状態を持っている。これらのエネルギーは最外殻電子の軌道の形、電子のスピンの方向、軌道とスピンの混成、電子スピンと核スピンの相互作用などによって決まる。1個のイオンあたりこれらエネルギー固有状態（以後これを内部状態と呼ぶ）は無数にあるが、適当な二つを選んでそれを量子ビットとし、各イオンが一つの量子ビットを司るのが一般的である。

同種原子の同一性から、これらの量子ビットは本質的に

均質であり、固体量子系で見られるような量子ビットの特性のばらつきが原理的に発生しない。また、超高真空中に捕獲された単一イオンは、電場のゼロ点に浮遊して保持されるため外界からの影響を受けにくく、その内部状態はよく保護されている。線形イオントラップ中に複数のイオンを捕獲しても、イオン同士の距離は通常数 μm あるため、異なるイオンの内部状態の間の相互作用はほぼ完全に無視できる。以上のような理由で、各イオンは良質な量子孤立系となっており、比較的簡単に高い量子コヒーレンスを得ることができる。例えば文献¹¹⁾では、量子ビットの量子コヒーレンスを決定する位相緩和時間が1時間以上という非常に長い値が得られている。このようにイオントラップにおける量子ビットのコヒーレンスはすでに充分高い水準に達しており、それが量子コンピュータのパフォーマンスを制限する要因とはなっていない。これは、量子ビットのコヒーレンス時間がまさに量子コンピュータのパフォーマンスに直結している固体系の実装（超伝導、量子ドットなど）と大きく異なっている点である。

5. 量子ビットの操作

汎用量子コンピュータの動作は、一量子ビット操作と二量子ビット操作を組み合わせることで構成される。一量子ビット操作は、量子ビットのエネルギーに共鳴するような輻射場（レーザーやマイクロ波）を各イオンに照射することで実現できる。そうすることによって図4に示すようなラビ振動と呼ばれる量子ビットの状態（ここでは $|\uparrow\rangle$ と $|\downarrow\rangle$ ）の間の振動を引き起こすことができる。振動の途中で照射を止めれば $|\uparrow\rangle$ と $|\downarrow\rangle$ の重ね合わせ状態を実現できる。文献¹²⁾では、マイクロ波を用いた一量子ビット操作で忠実度99.9999%を記録している。

二量子ビット操作はC-NOTやC-Phaseなど、量子ビット同士をもつれさせる操作を指す¹³⁾。これを実現するためには量子ビット間に何らかの相互作用が存在することが必要である。上述したように、イオントラップ中のイオンの内

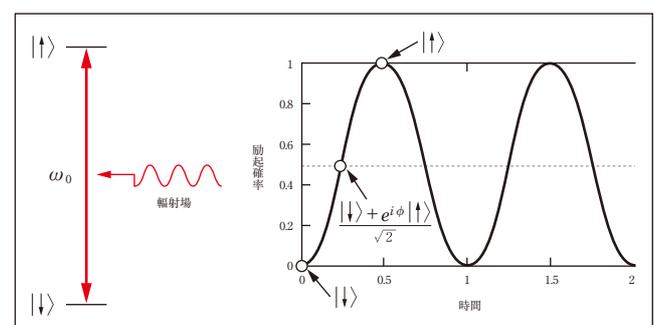


図4 量子ビットの操作

(左) 量子ビットを構成する状態 $|\uparrow\rangle$ と $|\downarrow\rangle$ の間のエネルギー差に対応する輻射場を照射する。(右) その結果、 $|\uparrow\rangle$ と $|\downarrow\rangle$ の間を状態が連続的に遷移するラビ振動が起こる。

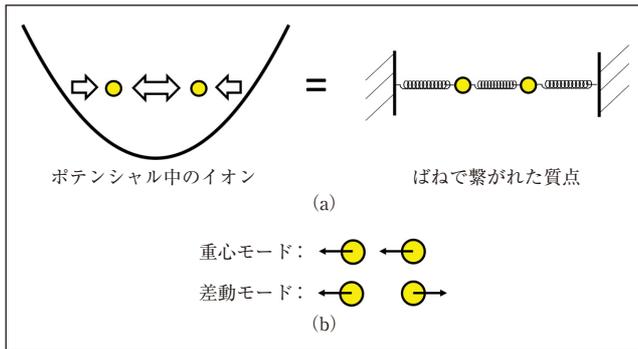


図5 (a) 調和ポテンシャル中のイオンはクーロン斥力とポテンシャルによる閉じ込めのつり合いによりばねで繋がれた質点と等価になる。(b) 二つの集団振動モードの模式図。

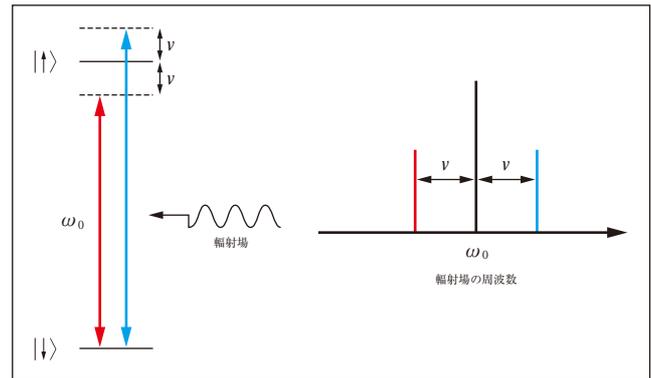


図6 サイドバンド遷移の模式図

部状態の間に相互作用はほとんどない。一方、イオンには内部状態以外に重心運動の自由度が存在し、トラップ内に複数のイオンがある場合、各イオンの重心運動はクーロン斥力を介して強く結合している。この状況はイオンの運動が図5のようなばねで繋がれた質点の運動と等価になることを意味する。このような質点の連成振動のモデルではよく知られているように、「集団振動モード」を考えることで全体の運動の記述を簡略化できる。図5の例で考えてみよう。

二つの質点の位置座標を z_1, z_2 とすると、集団振動モードは、 $z_a = (z_1 + z_2) / \sqrt{2}$ 、 $z_b = (z_1 - z_2) / \sqrt{2}$ という座標変換に対応する。 z_a と z_b はそれぞれ、二つのイオンが同じ方向に振動する重心モード、および逆方向に振動する差動モードに対応する(図5参照)。これらの集団振動モードをつかってイオンの運動を記述すると、それは z_a と z_b という相互作用していない独立な調和振動子の運動として記述できる(すなわち z_a と z_b によりハミルトニアンを対角化できる)。その際、これら集団振動モードの振動周波数は、もともとトラップにイオンが一つだけしかない場合の振動周波数を ν として、それぞれ ν (重心モード) および $\sqrt{3}\nu$ (差動モード) で与えられる。レーザー冷却によりイオンの運動が極低温に冷却された状況では、これら集団振動モードもエネルギーが量子化された独立な粒子として取り扱う必要がある。これは、結晶の中の格子振動が振動量子(フォノン)として量子化されることとよく似ている。そして、実はこの量子化された集団振動モードを使えば量子ビットの間の量子もつれ操作を実現できるのである。

図5の例のように集団振動モードは、各イオンの位置座標の線形重ね合わせとして与えられるため、特定のイオンに帰属しているのではなく、両方のイオンに共有されると考えられる。仮に、各イオンに束縛された量子ビットと集団振動モードの間に相互作用を設けることができれば、量子ビット1⇔集団振動モード⇔量子ビット2というように集団振動モードを介して量子ビット1と量子ビット2の間に間接的な相互作用を作り出すことができる。驚く

ことに、このような量子ビットと集団振動モードの間の相互作用は図4で示した量子ビットのラビ振動における輻射場の周波数を変更するだけで実現できる。

図4では、輻射場の周波数は量子ビットのエネルギーにちょうど共鳴するように設定された(量子ビットのエネルギーが $\hbar\omega_0$ なら ω_0)。これを重心モードの振動周波数 ν だけ下げて照射することを考える(つまり輻射場の周波数は $\omega_0 - \nu$)。このとき、量子ビットを $|\downarrow\rangle$ から $|\uparrow\rangle$ に励起するためには輻射場のエネルギーはちょうど $\hbar\nu$ だけ足りておらず、これを重心モードの振動エネルギーから「もらって」こななければならない。逆に、 $|\uparrow\rangle$ から $|\downarrow\rangle$ に遷移する場合は、輻射場への誘導放出がともなうが量子ビットのエネルギーは $\hbar\nu$ だけ大きすぎるため、この余分なエネルギーは重心モードに吸収されなければならない。というように、量子ビットの状態遷移に付随して重心モードのエネルギーも一単位(= $\hbar\nu$) ずつ変化する。輻射場の周波数を $\omega_0 + \nu$ にすると、ちょうど上の過程と逆のことが起こる。すなわち、 $|\downarrow\rangle \rightarrow |\uparrow\rangle$ のとき、重心モードは $\hbar\nu$ だけエネルギーを受け取り、 $|\uparrow\rangle \rightarrow |\downarrow\rangle$ のときエネルギーを提供する。どちらのケースにおいても、差動モードはそのエネルギーが $\sqrt{3}\hbar\nu$ と離れているため状態の遷移に関与しないことに注意したい。以上のような、イオンの内部状態と振動状態の両方を同時に変化させるような遷移をサイドバンド遷移と呼ぶ。これは、これらの遷移は輻射場の周波数で見ると、本来の共鳴周波数(= ω_0) から $\pm\nu$ だけ離れたサイドバンドとして現れるためである(図6)。

ここでは詳細には立ち入らないが、第1章で触れた Cirac-Zoller ゲートや Mølmer-Sørensen ゲートはサイドバンド遷移を巧みに使って量子ビット間の量子もつれ操作を実現する手法である。特に後者は、現在イオントラップにおける二量子ビットゲートのデファクトスタンダードとなっており、99.9%の忠実度が実現されている^{8) 9)}。

6. 多数個イオンへの拡張

前章でみたように、イオントラップでは汎用量子コン

コンピュータに必要な一量子ビット操作と二量子ビット操作が非常に高い忠実度ですでに実現されている。では、これらを基礎として、単純に捕獲するイオン数を増やすことで数百、数千、数万個の量子ビットを擁するような大規模な汎用量子コンピュータを作り出すことは可能であろうか？ 可能でないならば、なにがその実現を阻んでいるのだろうか？

前章でのサイドバンド遷移の議論は簡単のためイオン数が2個の場合を扱った。イオン数が2個以上になっても、量子ビットと集団振動モードの結合は同じように実現できる。多数のイオンの中で特定の二つのイオンの間に量子もつれゲートをかけたい場合は、それらのイオンにだけレーザー光などが当たるように照射すればよい。集団振動モードは複数のイオンにまたがって存在しているため、ゲートはイオン間の物理的な距離に依存しない。すなわち、隣接しているイオンを選ぼうが、イオンの配列の反対の一番端に位置しているイオンを選ぼうが、ほぼ同じように量子もつれゲートをかけることができる。イオントラップのこの性質を「全結合性」と呼ぶ。この性質により、イオントラップでは最近接相互作用のみが利用可能な物理系に比べ、量子計算におけるゲート数を圧縮できると考えられている。

一方で、全結合ならではの困難も存在する。全結合ゆえに捕獲するイオンを1個増やすことが全体の性質を変えてしまうのである。具体的には、捕獲するイオン数を増やすと、クーロン斥力によるエネルギーが増大し、あるところでイオン配列がジグザグ状に折りたたまれる現象が発生する。二量子ビットゲートはイオンの一次元配列における集団振動モードを利用しているため、ジグザク状になると高忠実度でゲートをかけることが困難になる。これを防ぐためには、イオン数の増大に伴いイオントラップの閉じ込めを順次弱めていく必要がある。その結果、集団振動モードの振動周波数は低下する。また、捕獲されるイオンの総数を N とすると集団振動モードは X , Y , Z 各方向に N 個ずつ計 $3N$ 個存在する。振動周波数が低下しつつ、振動モードの総数が増大することは、周波数空間において振動モードに対応するサイドバンド遷移の密度が増大していくことを意味する。その結果、輻射場の周波数を選択することで一つのサイドバンド遷移を取り出しても、近接する他のサイドバンドからの影響を無視できなくなり、ゲートの忠実度が低下していく。

上記のような困難を克服するために、複数の集団振動モードからの寄与を事前に折りこみMølmer-Sørensenゲートを拡張することが考案された¹⁴⁾。これにより、イオン数が10個以上の場合でも二量子ビットゲートの忠実度を高い水準に保てることが実験的に示された¹⁵⁾。商用のイオントラップ量子コンピュータの開発を先導するIonQ社は今までのところ、この方針に則り成功を収めている。同社の最新(2022年4月現在)モデルIonQ Ariaでは有効な量子ビット数が20に達するとされる。しかしながら、この手法でもイ

オン数が増えるに従い、制御しなければならない振動モードの数が増え、ある一定の忠実度を達成するための二量子ビットゲートの難易度が上がっていくことには変わりはない。その結果、量子ゲートあたりのエラー率はイオン数の増加とともに不可避免的に増大してしまう。そのため、この手法を延長しても量子ビット数は50程度が現実的な限界であると考えられている。

以上のような問題は、単一のイオントラップ内でイオン数を増大させようとしたために引き起こされたと考えることができる。これを克服するためには、イオントラップを複数用意し、それぞれのイオントラップに保持されるイオン数を制限することで二量子ビットゲートの忠実度を担保しつつ、何らかの方法で異なるトラップに属するイオンにまたがる量子操作を可能とする機構が必要となる。以下では、そのような機構の代表的な例として、量子Charge Coupled Device (CCD) と量子光接続を解説する。

7. 複数のイオントラップを繋ぐ技術

量子CCDは捕獲されたイオンを異なるトラップ間で輸送し、複数のイオントラップを相互につなぐ手法として考案された¹⁶⁾。図7に示すように、量子CCDを実現するデバイス内には、比較的小規模なイオントラップが空間的に離れて配置され、それらが連続したポテンシャルで結ばれている。各トラップに捕獲されるイオン数は比較的小規模(20~30)に制限されるため、前章で述べたような二量子ビットゲートの劣化は防がれている。その上で、異なるトラップに属するイオンの間に二量子ビットゲートを作用させる必要が生じた際には、それらのイオンを同一のトラップに属するように適宜移動させて、そこでゲートをかける。CCDという名前は、イオンが次々と空間的に輸送される様がCCDカメラなどで電荷が移動する様子に似ていることに由来する。イオンの輸送はイオントラップとそれらを繋ぐ経路の両脇に沿って配置された電極群に適当な電圧を印加し、変化させることで実現する。このような無数の電極群を作り込むには、線形パウルトラップの構造を微細加工によって平面に落とし込んだ平面型のイオントラップが適している。最近、Quantinuum社の研究者たちにより、量子ゲートや測定も含めた量子CCDの一連の機能を単一のデバイス上で実現した例が報告された¹⁷⁾。

一方で、いくつかの課題も挙げられる。特に、微細加工

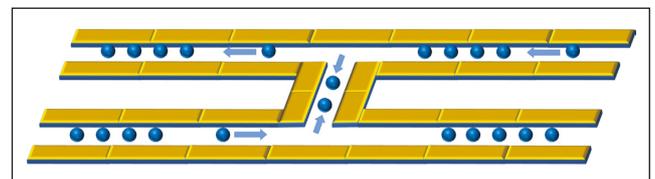


図7 量子CCDの模式図

によるイオントラップの小型化に伴い明らかになってきたのが、イオンの振動状態に対する加熱の問題である。イオントラップではイオンの振動状態を介して二量子ビットゲートを行うため、加熱によるイオンの振動状態のデコヒーレンスが量子ゲートのエラーを招いてしまう。特に加熱レートがイオンと電極の距離の約4乗に反比例する異常加熱と呼ばれる現象が観測され¹⁸⁾、イオントラップを小型化する際の障害となっている。近年の研究によりこの現象に対する理解は進展しているものの、その完全な解明には至っていない。またイオントラップ自体を冷却することにより加熱の影響を低減できることもわかっている。

イオンを直接物理的にトラップ間で運ぶことなく離れたイオンを量子的に接続する方法も存在する。量子光接続は光子を介して異なるイオントラップに属するイオンに量子もつれを作り出す。図8にその最も単純な場合である二つの異なるイオントラップに属するイオンを量子光接続する際の構成を載せる。それぞれのイオントラップにあるイオンは、イオンの内部状態と光子の偏光状態がもつれあった状態で蛍光を発することができる。このイオンともつれあった光子は集光されて光ファイバに結合し、中央にあるビームスプリッタと光検出器からなるセットアップに導かれる。ここで両方のトラップから来た光子は互いに干渉し、光の偏光のベル測定が行われる。50%の確率で光子は所望の状態に検出され、このとき蛍光を発したイオンは量子もつれ状態に射影される。量子もつれ状態の生成は確率的であるが、光子の検出パターンから生成成功の正否は確実にわかるようになっている。

この手法を、より多数個のイオントラップを含む場合に拡張するには図9のようにすればよい。各イオントラップ

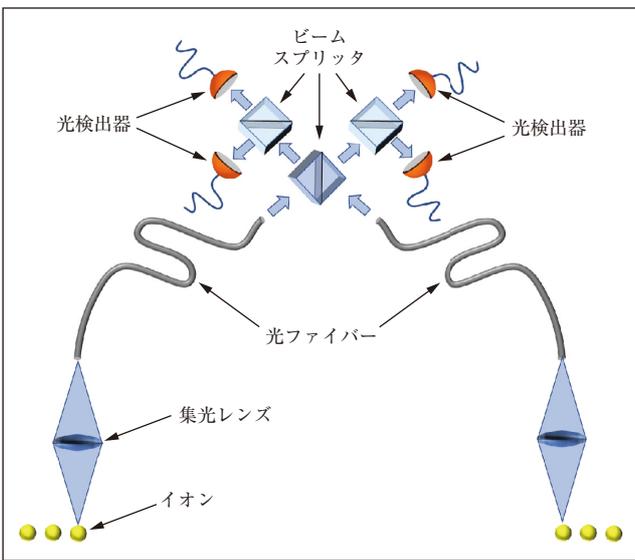


図8 二つの異なるイオントラップに属するイオンを量子光接続するための模式図

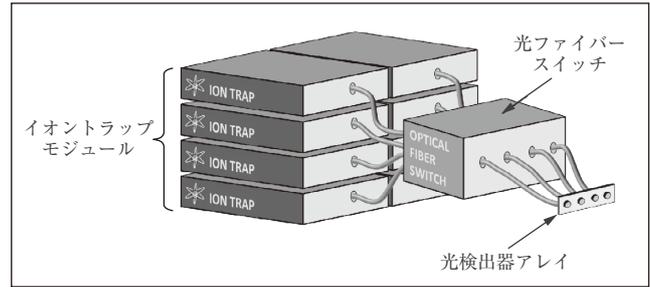


図9 多数のイオントラップモジュールを量子光接続する模式図

には、内部状態ともつれた蛍光を発するイオンが最低1個以上存在するとする。この蛍光は光ファイバに結合され、図9にあるような光ファイバスイッチまで導波される。光ファイバスイッチは、必要に応じて任意のファイバの組を動的に結合する役割を担う(そのようなデバイスは光クロスコネクタとして存在する)。ファイバで導波された光子が上述のようにビームスプリッタで干渉して検出されることで、任意に選択されたイオントラップの組に対して確率的に量子もつれを生成できる。

量子光接続方式の課題は、光子を介した量子もつれ生成の効率にある。実験的には、今までのところ図8のような二つのイオントラップの間で量子もつれを生成する実験が成功している^{19) 20)}。文献^{19) 20)}のどちらの実験でもイオンの自然放出による蛍光を高NAレンズで集光しているが、自然放出は全立体角に向けて放出されるため、高い効率で光子を集め光ファイバに結合させることは難しい(文献²⁰⁾の効率は8%)。そこで近年、共振器電気力学(CQED)の効果を用いてこの効率を向上させる方法が注目されている。

CQEDでは光共振器内にイオンを配置することで、単一の共振器モードに選択的にイオンを結合させることができる。また、共振器モードへの結合強度は、共振器の体積を減少させることで人為的に増強できる。特に強結合領域とよばれる共振器モードへの結合レートがその他の散逸過程のレートを上回る領域では、イオンからの発光を100%に近い効率で共振器モードへ制限することが可能である。最近、著者の一人を含むサセックス大学のチームが、単一イオンを用いた強結合領域に初めて到達した²¹⁾。これにより、量子もつれ生成レートを従来の自然放出を用いた手法にくらべ二桁以上改善できることが示唆されている。

8. むすび

冷却イオンの系は、イオントラップ中に捕獲するイオン数が大きくない(20個)限り、二量子ビットゲートを含むすべての量子操作を非常に高い忠実度で実行できる。そのため、量子コンピュータ研究の最初期から実験的テストベッドとして用いられてきた。しかしながら、イオントラップの持つ全結合性ゆえに、イオン数が増えるほど集団

振動モードの制御が困難になり、ゲートの忠実度が下がってしまう。その意味で単一のイオントラップのみを用いる手法は長い目で見て拡張性がない。イオントラップ量子コンピュータを大規模化するには複数のイオントラップを量子的に繋ぐ技術が必須となる。IonQ社やQuantinuum社も自社のロードマップに量子CCDと量子光接続の開発を取り入れることを明確にしている。将来的には、図9のように量子CCDの機能を備えたイオントラップモジュールを光接続する方式が大規模量子コンピュータ開発の主流となるであろう。一方で、特に量子光接続の技術ははまだ研究途上であり、ブレークスルーが待たれる。筆者らOISTのグループも独自の光共振器技術を駆使して、量子光接続の効率改善のための研究を続けている。(2022年5月1日受付)

〔文 献〕

- 1) D. Wineland and W.M. Itano: "Laser cooling of atoms", Phys. Rev. A **20**, 1521 (1979)
- 2) J.C. Bergquist et al.: "Observation of quantum jumps in a single atom", Phys. Rev. Lett. **57**, 1699 (1986)
- 3) D. Wineland: "Nobel Lecture: Superposition, entanglement and raising Schrödinger's cat" Rev. Mod. Phys. **85**, 1103 (2013)
- 4) J.I. Cirac and P. Zoller: "Quantum computations with cold trapped ions", Phys. Rev. Lett. **74**, 4091 (1995)
- 5) C. Monroe et al.: "Demonstration of a fundamental quantum logic gate", Phys. Rev. Lett. **75**, 4714 (1995)
- 6) K. Mølmer and A. Sørensen: "Multiparticle Entanglement of Hot Trapped Ions", Phys. Rev. Lett. **82**, 1835 (1999)
- 7) T. Monz et al.: "Creation and Coherence", Phys. Rev. Lett. **106**, 130506 (2011)
- 8) C.J. Balance et al.: "High-Fidelity Quantum Logic Gates Using Trapped-Ion Hyperfine Qubits", Phys. Rev. Lett. **117**, 060504 (2016)
- 9) J.P. Gaebler et al.: "High-Fidelity Universal Gate Set for ${}^9\text{Be}^+$ Ion Qubits", Phys. Rev. Lett. **117**, 060505 (2016)
- 10) S. Seidelin et al.: "Microfabricated Surface-Electrode Ion Trap for Scalable Quantum Information Processing", Phys. Rev. Lett. **96**, 253003 (2006)
- 11) P. Wang et al.: "Single ion qubit with estimated coherence time exceeding one hour", Nat. Commun. **12** (2021)
- 12) T.P. Harty et al.: "High-Fidelity Preparation, Gates, Memory and Readout of a Trapped-Ion Quantum Bit", Phys. Rev. Lett. **113**, 220501 (2014)
- 13) Michael A. Nielsen and Isaac Chuang: "Quantum computation and quantum information" (2002)
- 14) T. Choi et al.: "Optimal Quantum Control of Multimode Couplings between Trapped Ion Qubits for Scalable Entanglement", Phys. Rev. Lett. **112**, 190502 (2014)
- 15) K. Wright et al.: "Benchmarking an 11-qubit quantum computer", Nat. Commun. **10**, 1 (2019)
- 16) D. Kielpinski et al.: "Architecture for a large-scale ion-trap quantum computer", Nature **417**, 709 (2002)
- 17) J.M. Pino et al.: "Demonstration of the trapped-ion quantum CCD computer architecture", Nature **592**, 209 (2021)
- 18) M. Brownnutt et al.: "Ion-trap measurements of electric-field noise near surfaces", Rev. Mod. Phys. **87**, 1419 (2015)
- 19) D. Hucul et al.: "Modular entanglement of atomic qubits using photons and phonons", Nat. Phys. **11**, 37 (2015)
- 20) L.J. Stephenson et al.: "High-Rate, High-Fidelity Entanglement of Qubits Across an Elementary Quantum Network", Phys. Rev. Lett. **124**, 110501 (2020)
- 21) H. Takahashi et al.: "Strong Coupling of a Single Ion to an Optical Cavity", Phys. Rev. Lett. **124**, 013602 (2020)



たかほし ひろき
高橋 優樹 2009年、東京大学工学系研究科物理工学専攻博士課程修了。2009年～2018年、英国サセックス大学にて、イオントラップを使った共振器QEDの研究に従事。2010年～2014年、JST さきがけ専任研究員。2018年、東京大学先端科学技術研究センター特任助教。2019年、大阪大学特任准教授。2020年より、沖縄科学技術大学院大学准教授。現在、ムーンショット型研究開発課題6「イオントラップによる光接続型誤り耐性量子コンピュータ」プロジェクトマネージャを務める。専門はイオントラップ、量子光学など。

シリコン量子コンピュータ

米田 淳[†]

1. まえがき

従来型情報処理の能力向上に限界が見えつつある中で、革新的な次世代のコンピュータとして、量子コンピュータが注目を集めている。量子コンピュータと呼ばれるものの中にもいくつかの方式があるが、とくに実現した際の社会的なインパクトが大きいと注目されているのが、誤りに耐性をもつ万量子コンピュータである¹⁾。これは十分な精度(専門的には忠実度という指標で評価される)の量子ビット(量子論の法則に従う情報単位)を、大規模に集積することで実現すると考えられており、究極の量子コンピュータとも言える。デバイスの量子的な振る舞いを制御するだけでも高い技術が要求される中で、さらに「精度」と「規模」を両立させなくてはならず、挑戦性は極めて高い。しかしその実現がもたらす潜在的なインパクトの大きさから、世界的に研究開発競争が活発化している。

万量子コンピュータを実装するためのハードウェア技術にはいくつかの選択肢があり、並行して世界的に研究開発が進められている。本講座で取り上げられているハードウェア方式はいずれもその代表的なものであるが、とりわけ量子ビットを集積するという「規模」の面において、シリコン量子コンピュータは有力な候補であると考えられる。これには、長年の莫大な研究開発費のもとに蓄積された、シリコン集積回路技術のノウハウが応用できることへの期待が込められている。その最小構成単位となる単一のシリコン量子ビットや、少数のシリコン量子ビット系において、量子回路モデル(量子ゲート方式)の原理実証実験が急ピッチで進められており、とりわけ「精度」の面において、目覚ましい進展が報告されている^{2)~6)}。そしてこの原理実証に後押しされる形で、「規模」の面に関する研究が本格化してきている。

そこで本稿では、量子コンピュータのハードウェア技術

として、シリコン量子ドットを用いる量子ビット方式について紹介する。

2. シリコン量子ビット

量子コンピュータの最小構成単位である量子ビットは、重ね合わせや量子もつれといった量子論の法則に従う情報単位であり、情報を符号化するのに物理系の量子力学的な振る舞いを利用する。将来的な大規模集積化を念頭に、現代のエレクトロニクスにおける最重要半導体であるシリコンを使って量子ビットデバイスを実現する方法としては、大別して量子ドットと呼ばれる人工ナノ構造を用いる方法と、ドナーなどの不純物を用いる方法が存在する。さらに量子ビットを実装する物理系の選択肢として、単一電子スピン状態、単一正孔スピン状態、複数スピン状態、電荷状態およびそれらの各種混成状態などを挙げることができる⁷⁾⁸⁾。現在これらのさまざまな組み合わせが模索・研究されているが、本稿では、なかでも原理検証実験が最も進展している、量子ドットと単一電子スピン状態の組み合わせに絞って紹介したい。

量子ドットとは、半導体中のポテンシャルを人工的に制御し、単一の電荷(電子あるいは正孔)をナノメートルオーダーの大きさの領域に3次元的に閉じ込めることのできる人工ナノ構造である(図1)。クーロン反発等を利用して閉じ

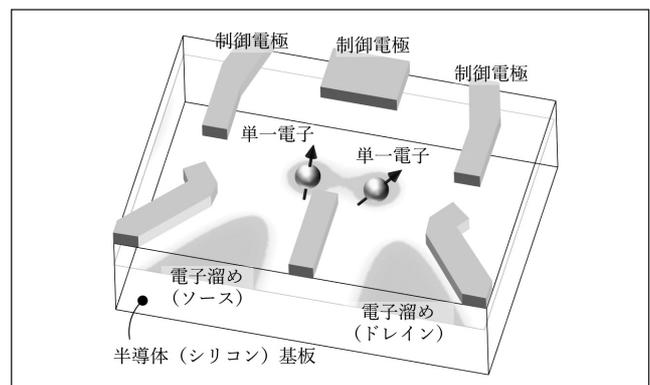


図1 シリコン量子ドットデバイスの構造模式図
制御電極に印加する電圧により、ドットのポテンシャルを制御できる。

[†]東京工業大学 超スマート社会卓越教育院
"Quantum Computing (4): Silicon Quantum Computers" by Jun Yoneda
(Tokyo Tech Academy for Super Smart Society, Tokyo Institute of Technology, Tokyo)

込められる電子1個1個を電氣的に制御でき、多彩な量子現象が発現するデバイスであり、人工原子と呼ばれることもある。このナノ構造をシリコン基板上に作製したシリコン量子ドットは、シリコントランジスタと構造が酷似しており、シリコン微細加工技術、集積回路技術の応用が期待できる。MOS (Metal Oxide Semiconductor) 型、Si/SiGe 量子井戸型、SOI (Silicon on Insulator) 型など、その詳細な構造にはさまざまな違いがあるが、いずれにおいても量子ビット動作が実現している⁷⁾⁸⁾。ただし、量子ドットを高精度な量子ビットデバイスとして動作させるには、高い電氣的安定性*1と制御性が要求される。さらに熱雑音や格子振動などの影響を低減するために、絶対零度近くの極低温環境下で動作させる必要がある。

この量子ドットに磁場を印加すると、閉じ込められた単一電子状態はスピン角運動量によりエネルギー分裂し(ゼーマン分裂と呼ばれる)、良好な量子二準位系を形成する(上向きスピン $|\uparrow\rangle$ と下向きスピン $|\downarrow\rangle$)。この電子スピン状態は固体デバイス中の自由度としては長い時間、量子力学的な振る舞いを見せるため、良い量子ビットと見なせる。この時間スケールのことをコヒーレンス時間と呼び、量子ビットが量子情報を保持することができる時間に相当する。単一電子スピンのコヒーレンス時間が長いのは、スピン角運動量が磁氣的な物理量で、固体デバイス中の電荷雑音からの影響を受けにくいからである(これとは対照的に、従来の情報処理において広く用いられている電荷自由度は、電荷雑音から直接的に影響を受けるために、コヒーレンス時間が短くなってしまう)。従来スピントロニクス*2との違いとして、量子情報処理では、上向き、下向きといったスピンの偏極成分はもちろん、上向きスピン状態と下向きスピン状態の量子力学的な重ね合わせの位相(図2)が重要になることに注意が必要である。

電子スピンを用いたシリコン量子ビットの、シリコン量子コンピュータ実現に向けた開発状況について整理するために、ここからはD.P. DiVincenzoが提唱した⁹⁾、量子コンピュータを構成するための量子ビットに求められる5条件を見ていきたい。その5条件とは、①多量子ビットへの「集積性」、②操作時間に比べて長い「コヒーレンス時間」、③量子ビットの「初期化」、④「読み出し」、⑤任意の量子演算実行を可能とする「ユニバーサルな量子操作」の5つである。

まず集積性(条件①)について、シリコン量子ビット素子自体の占有面積はおよそ100 nm四方と極めて小さく、高い集積率が期待される。さらに、量子ビットの制御信号配線等に、シリコン集積回路技術の活用が見込まれる。一方

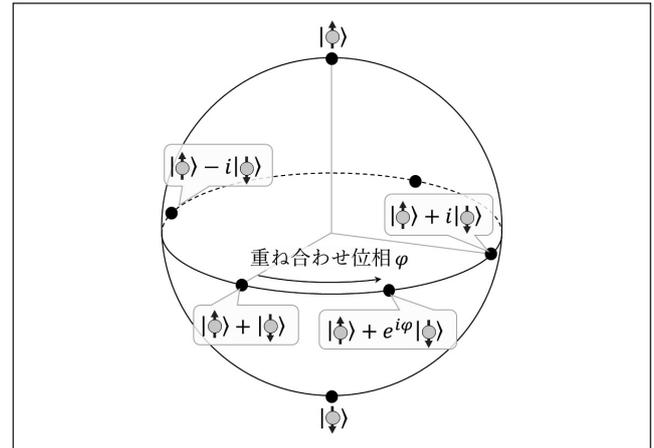


図2 単一スピンを用いて定義される量子ビットの状態を、ブロッホ球表示と呼ばれる表記法を用いて表現したもので、上向きスピンと下向きスピンを“北極”と“南極”にとっており、“緯度”が偏極度に相当する。量子ビットとしては、“経度”の情報も重要で、これが上向きスピンと下向きスピンの量子力学的な重ね合わせ位相に相当する。位相情報が失われると、スピン状態はブロッホ球の“地軸”に近づいていく。

で、誤りに耐性をもつ万能量子コンピュータで有用な計算を行うことを目指す場合、必要となる量子ビットの数は少なくとも百万個程度以上と現状では考えられている。量子ビット間の量子力学的な結合を保ったまま、この規模まで量子ビット系を集積する具体的な目途は、他の量子ビット系と同様、まだ立っていない。古典回路技術の活用など、さまざまな観点での研究開発が活発化してきている。この点については4章にて詳述する。

コヒーレンス時間(条件②)については、少数量子ビット系を用いた原理実証実験によって、その理解が進んできた。量子情報処理で重要となるスピンの位相成分は、(エネルギー保存則によって守られる偏極成分に比べてけた違いに)コヒーレンスが失われやすい。にもかかわらず最大でミリ秒を超える長いコヒーレンス時間(量子情報時間)*3が実証されるなどしている²⁾¹⁰⁾。これは実際の量子ビット操作時間(マイクロ秒程度)に比べて長く、高い精度(忠実度)の量子操作が可能となっている。電子スピンの位相成分に直接的に作用する磁氣的な雑音源は、天然存在比4.7%の同位体である29シリコンの核スピンの通常支配的であるが、同位体制御技術によって取り除くことが可能である¹¹⁾。核スピンを排除した同位体制御シリコンでは、電子スピンの間接的にしか作用しない $1/f$ 的な電氣雑音の影響が支配的となることがわかってきており²⁾、その微視的な発生機構について現在盛んに研究が行われている。

その他に量子コンピュータに要求される、シリコン量子ビットの初期化(条件③)と読み出し(条件④)およびユニバーサルな量子操作(条件⑤)については、次章にて詳述す

*1 高安定であるほど良いが、目安となる $1/f$ 電氣雑音の大きさは1Hzで数 $\mu\text{eV}/\text{Hz}$ 程度以下。

*2 従来のエレクトロニクスで利用されてきた電荷に加えて、スピンも情報の担い手として利用したエレクトロニクスのこと。

*3 雑音の影響を相殺する動的デカップリングを実行した時の値。

る。これらはいずれも高い精度(忠実度)で実現できていて、シリコン量子ビットはDiVincenzoの5条件を高い水準で満たす、量子コンピュータ実現を担う量子ビットの有力候補であると結論づけられる。

3. 初期化・読み出し・量子操作

本章では、シリコン量子ビットの原理検証となる、初期化、読み出し、量子操作に関する研究進展について紹介する*4。

量子ビットの読み出しでは、単発測定と量子非破壊測定が重要である。単発測定とは量子ビットの状態を単一試行で、すなわち事象平均を取ることなく測定することを指す。量子状態は原理的に複製することができない*5ため、量子ビットに誤りが生じた事象を検出し、訂正する際などに、単発測定かつ、量子ビットに量子論の原理で要求される以上の擾乱*6を与えない、量子非破壊測定が要求される。

単一電子スピンを直接読み出すのは、技術的に難しい。そこでスピン状態に依存したトンネル過程に着目し、電気的手法で読み出す方法が専ら用いられている。例えば、ソース・ドレインといった電子溜めに量子ドット中の電子がトンネルする過程が利用できる(図3(a))。極低温環境下で、大きな磁場を印加すると、ゼーマン分裂が温度揺らぎに比べて大きくなる。この状況で量子ドットの準位を上手く調整すると、励起状態のスピン(上向きスピン)を持つ電子のみがトンネルすることを許される状態を実現できる。このトンネル事象は電荷の移動を伴うため、近傍に電荷計として働く別の人工ナノ構造(例えば量子ドット)を配置し、その伝導度をモニタすることで、高速に検出することができる。図3(a)に、スピン読み出し結果が上向きと下向きそれぞれの場合に対して、典型的に観測される電荷計信号を示した。実際にこの方式を用いて、高いスピン操作忠実度と両立する形で、97%の忠実度の読み出し忠実度が報告されている⁵⁾。さらに、励起状態のスピンを持つ電子のみが電子溜めへとトンネルして抜け出る状況で(トンネル時間と比べて)十分に長時間待つことで、スピンを基底状態に初期化できる(図3(a))。

スピン状態に依存したトンネル過程として、隣接した量子ドット間のトンネル過程に着目した実験も数多く行われている。このトンネル確率のスピン状態依存性は、パウリの排他律に起因し、パウリスピン閉塞とも呼ばれる。この手法は、温度に対する要求が緩和される、電荷配置の変化

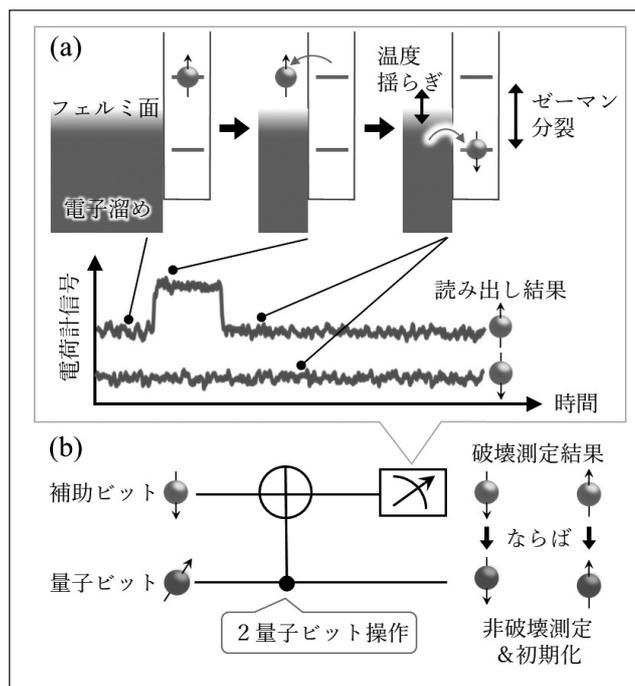


図3 シリコン量子ビットの単発測定と量子非破壊測定
(a) エネルギー的に上向きスピンのみに生じるトンネル事象を、電荷計信号で捉えることで、単一電子スピンを電気的手法で単発測定できる。(b) 補助量子ビットとの2量子ビット操作と、(a)の単発測定を組み合わせることで、補助量子ビットの観測結果に基づいた、量子ビットの量子非破壊測定と状態初期化が実装できる。

だけでなく容量変化による観測が可能になる等の利点がある一方で、読み出し信号の減衰が速いため、マイクロ秒オーダーの高速な読み出しを必要とする点に注意が必要である。電荷計信号の読み出し高速化には、インピーダンス整合回路と数100 MHz程度のラジオ波の反射測定を組み合わせ、高周波反射測定法が広く用いられる¹²⁾¹³⁾。さらに容量変化の観測は、制御電極の高周波反射率変化によって実現され、量子ビット近傍の電荷計が不要となるため、量子ビット配列を大規模集積化する上で有利と考えられている。

以上の単一電子スピン読み出しと、後述する2量子ビット操作を組み合わせることで、シリコン量子ビットの量子非破壊測定が実現できる(図3(b))。量子非破壊測定は、通常の単発測定とは異なり、単一スピンの状態を繰り返し読み出すことができるという特徴をもち、読み出し誤り率の指数関数的減少が見込まれる。さらに読み出し結果に基づく状態への初期化が可能である。これらの特徴はいずれも実際の実験で確認されている⁶⁾。

DiVincenzoの5条件の1つ、ユニバーサルな量子操作については、単一量子ビットの操作と2量子ビット操作を組み合わせる方式が広く想定されている。単一量子ビット操作には、電子スピン共鳴や電気双極子スピン共鳴の原理が用いられる。具体的には、電子スピンのゼーマン分裂と共鳴する周波数(典型的には数10 GHz程度)の交流電流(電子スピン共鳴の場合)あるいは高周波電場(電気双極子スピン

*4 以下ではこれらの精度を表すための専門用語である、忠実度という指標を用いる。忠実度の定義は用途、文脈等に依るため、ここではその詳細な説明は割愛するが、本稿においては、「理想的な出力が観測される確率の平均(期待値)」と考えて基本的に差し支えない。

*5 量子複製不可能定理により、未知の量子ビット状態が与えられたとき、これを完全に複製することはできない。

*6 量子論の原理から、量子ビット状態が0か1かについての読み出しを行うと、読み出し結果は状態に応じた確率分布をとり、読み出された量子ビットの状態は結果に応じて0か1かに不可逆に収縮する。

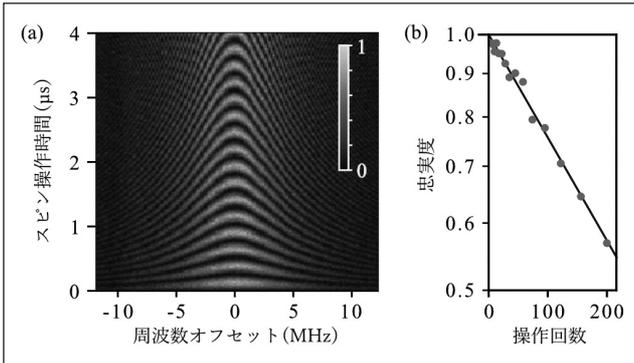


図4 99.9%の忠実度での単一電子スピン量子操作

(a) スピン反転確率の操作時間および周波数オフセット依存性。高精度な量子ビット操作では、このシェブロンと呼ばれるパターンが明瞭に観測される。(b) ランダム化ベンチマーク法という方法で測定された忠実度の操作回数依存性。忠実度の減衰速度から、操作1回あたりの誤り率が求められる。

共鳴の場合)を印加することで、電子スピンに作用する高周波磁場を発生させ、スピン回転操作を実現できる。電気双極子スピン共鳴の場合は、ジュール熱が抑制され、高速操作が実証されている(最大で数10 MHz程度)。量子ビットのコヒーレンスと操作性のトレードオフ関係を最適化した設計と、同位体制御技術で、高い忠実度(99.9%以上)の単一電子スピン量子操作²⁾が実現している(図4)。

2量子ビット操作には、隣接する量子ドットに閉じ込められた電子スピン同士に自然に働くスピン交換相互作用を用いる。スピン交換相互作用の大きさは、量子ドット間のトンネル結合に依存する。制御電極電圧で量子ドットの閉じ込めポテンシャルを操作し、電荷雑音の影響をできる限り抑制しながらトンネル結合を制御することが、忠実度が高い2量子ビット操作実現の鍵である。デバイスの作製技術、制御技術の進展で、こちらも高い忠実度(99%以上)での操作が報告されるようになってきている³⁾⁴⁾。

このように、シリコン量子ビットにおいて、DiVincenzoの5条件に挙げられた初期化・読み出し・量子操作の原理実証実験は完了しつつある。さらに3重量子ビット最大量子もつれ状態の生成と観測¹⁴⁾や、それを利用した量子誤り訂正回路¹⁵⁾など、少数量子ビット系の高度な制御が実現している。これらの進展を受けて、さらに高度な量子プロトコルの実装や、大規模化に向けた研究が本格化しつつある。

4. 大規模集積化に向けて

誤りに耐性をもつ万量子コンピュータを実現するには、前章でも説明した「精度」を実証する研究に加えて、「規模」に関する課題解決を見据えた研究が重要である。量子コンピュータは、従来のコンピュータと比べてビットに誤りが生じる頻度が格段に大きく、実用的な規模での計算を行うのに、量子誤り訂正符号と呼ばれる、量子ビットを用いた量子情報の冗長化が必要となるためである。量子誤

り訂正符号の実装では、冗長化に要する膨大な数の量子ビットに対して、ユニバーサルな量子操作や量子非破壊測定といった制御を行う。操作や測定は量子誤り訂正閾値を超える精度が必要であるため、各量子ビットに高い制御性が求められる。そのうえで、百万個を超える数の量子ビット間を量子的に結合することができるデバイス構造、アーキテクチャ、システムが必要である。

以上の要求を満たすために、さまざまなインタコネクタが重要となる。現状での量子ビットと制御装置の配線方式を説明するため、筆者が理化学研究所所属時代に使用していたセットアップの一例を図5に示す。シリコン量子ビットは100 nm程度の間隔でシリコンチップ上の中央に並べられ、そのそれぞれに施された高精度制御のための個別配線が、チップ周辺まで引き出されている(図5(a)中央)。引き出した配線を、評価用プリント基板等にワイヤーボンディングし(図5(a))、最終的にケーブルにコネクタ接続する(図5(b))。量子ビットデバイスを搭載したプリント基板は、絶対零度から0.1℃程度(すなわち0.1 K程度)まで冷却された希釈冷凍機の最低温部に設置される(図5(c))。一方で量子ビットの制御装置はほぼすべて室温部に設置してあるため、室温からの熱や雑音の流入を防ぐためのフィルタ、熱接触加工等を施しながら、各量子ビットの個別配線に繋がったケーブルを、希釈冷凍機の外まで引き出している。このような配線方式は原理実証実験を念頭に設計されたものであり、将来的な大規模化に適したものではない。シリコン量子ビットでは、それぞれのインタコネクタ部につい

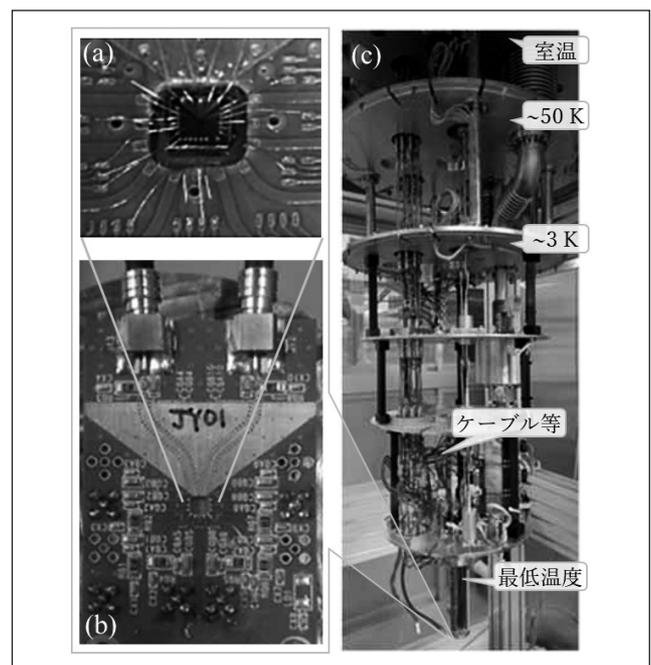


図5 シリコン少数量子ビット系の原理実証実験セットアップの一例 (a) 量子ビットチップへのワイヤーボンディング。(b) 量子ビットチップ評価用プリント基板。(c) シリコン量子ビット制御・測定用のセットアップが施された希釈冷凍機の内部。

てシリコン量子系ならではの改善が可能であると期待されており、そのための取り組みが本格化してきている¹⁶⁾¹⁷⁾。

まず、個別配線が必要なシリコン量子ビット間の平均的な間隔を増加させるべく、量子ビットが量子的に結合できる距離を伸ばすための研究が活発化している。とくに超伝導共振器を使った結合¹⁸⁾や、量子ビットをその量子情報を保ったままチップ上で移送するコヒーレント輸送(図6)な

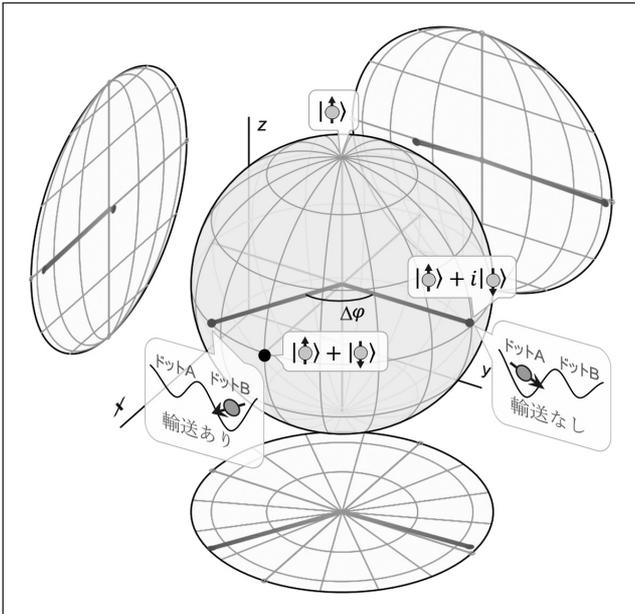


図6 シリコン量子ビットをシリコンチップ上で輸送した際の量子状態変化

左に示したものが輸送した後の電子スピン状態。ブロッホ球(図2)の表面に留まっていることから、量子情報を喪失することなく量子ビットを輸送できていることがわかる。

どで進展が見られている。後者では、99%を超える輸送精度が達成できている¹⁹⁾。シリコン量子ビットの結合性(量子的に結合できる量子ビットの組み合わせ)やアーキテクチャの設計自由度を改善する機構としても期待できる。

次に量子ビットチップ上での個別配線に関して、垂直ビアを含めた配線工程(BEOL)を取り入れる試みでは、高い制御性を犠牲にすることなく、配線取り回しの改善と量子ビット部分の高い設計自由度、高い電気的安定性が報告されている²⁰⁾。また、シリコン集積回路技術を直接的に量子ビット制御に利用する試みとして、CMOS回路を量子ビットチップ上に集積し、量子ドット配列を制御する実験²¹⁾が報告されている(図7)。

希釈冷凍機内で大量の配線が必要となるのは、量子ビットの制御装置がほぼすべて室温部に設置してあることが原因である。そこで、制御エレクトロニクスを極低温に設置する試みも活発化している。例えば、高周波信号生成回路等を搭載した制御回路チップを、希釈冷凍機内部の極低温ステージに搭載し、それをを用いて精度99.7%の量子ビット操作を実現したとの報告がされている²²⁾。ただし、この制御回路チップに実装されている機能はまだ一部であり、設置部分の温度も絶対零度から3℃(すなわち3K)と高い。これは、絶対零度に近づくにつれて、冷却能力が大きく制限されることに起因する。現在の希釈冷凍機では、量子ビット研究用の大型のものでも、0.1Kにおける冷却能力はmW程度である。一方で、上述の制御回路チップの消費電力(発熱)は数100mWと、3Kステージに用いられるW級のパルス管冷凍機の余剰冷却能力とようやく釣り合う程度となっている。

制御回路チップと量子ビットチップを同じ温度ステージに

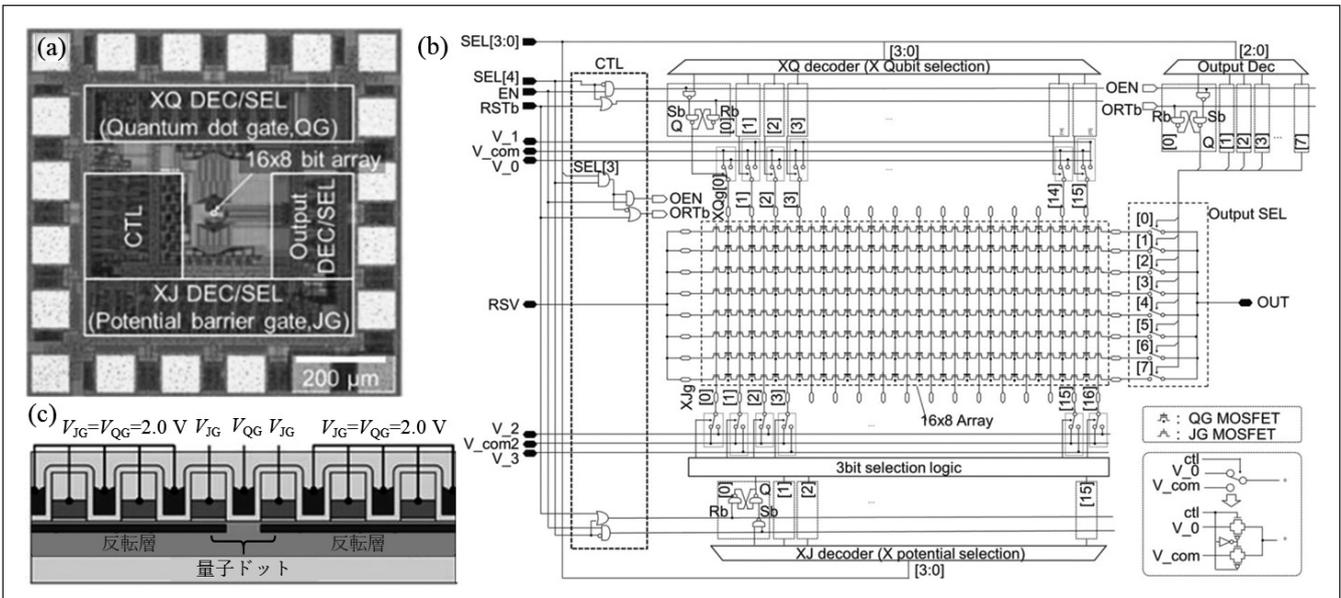


図7 量子ドット配列と制御用CMOS周辺回路の同一チップ集積の試み

(a) 量子ドット配列(中央部)と同一チップ上のCMOS周辺回路。(b) 対応する回路図。(c) 動作モードの一例。

設置できれば、制御エレクトロニクスと量子ビットチップ間の配線問題の根本的な解決策となりうる。そこで、量子ビットチップの動作温度上昇に向けた取り組みが本格化している。チップの設置温度が高くなれば、利用可能な冷却能力が向上し、消費電力に対する制限が劇的に改善するからである。幸運なことに、量子ドットに閉じ込められたスピン自由度に着目するシリコン量子ビットは、温度上昇に伴う雑音の増大に比較的強いことが期待され、実際に1K程度でも比較的高い精度で動作することが報告されている^{23) 24)}。今後、動作温度の上昇が量子ビットに与える影響を低減する研究が活発化することが見込まれる。

5. むすび

本稿では、誤りに耐性をもつ万能量子コンピュータの実現に向けた、シリコン量子ビット開発の進展と展望について、自身の研究紹介を交えつつ解説した。日本の研究者の活躍、貢献もあり、少数量子ビット系における原理実証は近年目覚ましい進展を見せた。ここから誤りに耐性をもつ万能量子コンピュータの開発へと繋げていくには、「精度」と「規模」の両面からのアプローチが必須である。材料、デバイス、回路などさまざまな技術領域の幅広い研究者が連携した研究開発が、我が国においても一層活発になることを期待している。加えて、これまでの研究で明らかになってきたデバイスの特性を踏まえたアーキテクチャ、システム、情報科学の観点からの研究など、さまざまな展開が考えられる。シリコン技術を活用した実用的な量子コンピュータ開発への挑戦から、今後も目が離せない。

謝辞 本研究で紹介した成果の一部は、JST さきがけ JPMJPR21BA, 科学研究費補助金(Grant Number 21K14485),

JST Moonshot R&D Grant Number JPMJMS2065 の支援を受けたものである。 (2022年6月13日受付)

〔文 献〕

- 1) <https://www8.cao.go.jp/cstp/moonshot/sub6.html> (2022年6月13日閲覧)
- 2) J. Yoneda et al., *Nature Nanotechnology* **13**, 102-106 (2018)
- 3) A. Noiri et al., *Nature* **601**, 338-342 (2022)
- 4) X. Xue et al., *Nature* **601**, 343-347 (2022)
- 5) A.R. Mills et al., *Science Advances* **8**, eabn5130 (2022)
- 6) J. Yoneda et al., *Nature Communications* **11**:1144 (2020)
- 7) 米田淳, 樽茶清悟: *固体物理*, **53**, 511 (2018)
- 8) G. Burkard et al., *arXiv:2112.08863* (2021)
- 9) D.P. DiVincenzo, *Fortschritte Der Physik* **48**, 771-783 (2000)
- 10) M. Veldhorst et al., *Nature Nanotechnology* **9**, 981-985 (2014)
- 11) K.M. Itoh & H. Watanabe, *MRS Commun.* **4**, 143-157 (2014)
- 12) A. Noiri et al., *Nano Letters* **20**, 947-952 (2020)
- 13) 米田淳, 溝口来成, 小寺哲夫: *固体物理*, **56**, 265 (2021)
- 14) K. Takeda et al., *Nature Nanotechnology* **16**, 965-969 (2021)
- 15) K. Takeda et al., *arXiv:2201.08581* (2022)
- 16) L.M. K. Vandersypen et al., *npj Quantum Information* **3**: 34 (2017)
- 17) M.F. Gonzalez-Zalba et al., *Nature Electronics* **4**, 872-884 (2021)
- 18) G. Burkard et al., *Nature Reviews Physics* **2**, 129-140 (2020)
- 19) J. Yoneda et al., *Nature Communications* **12**:4114 (2021)
- 20) W. Ha et al., *Nano Lett.* **22**, 1443-1448 (2022)
- 21) N. Lee et al., *Jap. J. Appl. Phys.* **61**, SC1040 (2022)
- 22) X. Xue et al., *Nature* **593**, 205-210 (2021)
- 23) C.H. Yang et al., *Nature* **580**, 350-354 (2020)
- 24) L. Petit et al., *Nature* **580**, 355-359 (2020)



よねだ じゅん
米田 淳 2014年、東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻博士課程修了。理化学研究所、ニューサウスウェールズ大学を経て、2020年より、東京工業大学特任准教授。量子ドット、電子スピン制御、スピン量子ビットの研究に従事。博士(工学)。

誤り耐性量子計算

鈴木泰成[†]

1. まえがき

量子的な状態にある物質は「重ね合わせ状態」という量子特有の状態を取ることができる。この重ね合わせ状態を壊れないようにうまく制御できるビットを「量子ビット」と呼び、量子ビットからなる計算機を量子計算機と呼ぶ。一方、古典力学に基づく通常の計算機を、量子計算の分野では古典計算と呼ぶ。量子計算機はいくつかの問題について古典計算機に比べ計算量的な加速が得られることから、現代でスパコンが必要になるような大規模な計算に適用できれば大幅な高速化が実現できると期待されている。量子計算機は理論上は実現が可能だが、現実的な制約の下で技術的に実現できるかは定かではない。特に問題となるのが、上述の重ね合わせ状態が通常のビットに比べ環境の揺らぎに脆弱なことに起因する高い確率で生じるエラーである。実用的な規模のアプリケーションに量子計算を適用するには、量子計算機の誤り率を今より10桁以上減らさなければならない。これを実現する方法として期待されているのが、通常の計算機での誤り訂正符号を量子計算機に適用可能な形に拡張した量子誤り訂正符号による誤り訂正である。本稿では、量子誤り訂正の仕組みと、実用的なレベルで量子誤り訂正を実現するうえでの課題について述べる。

2. 量子情報の基礎

量子情報や量子誤り訂正の話をするにあたり、量子計算の基本的なルールを導入する。より体系的な話については前回までの本講座や、量子計算分野の代表的な教科書¹⁾を参照してほしい。通常のビットは0,1の2パターンの状態を取る。 n をある正の整数とした時、 n 個の量子ビットの状態は000...から111...まで 2^n 種類のパターンがある。対して、量子ビットは0,1の状態と、その「重ね合わせ」と呼ばれる状態を取ることができる。量子ビットの状態を表すとき、0,1の状態はそれぞれ $|0\rangle, |1\rangle$ のようにケット記号 $|\cdot\rangle$ に入れて表現し、その重ね合わせ状態は $\alpha_0|0\rangle + \alpha_1|1\rangle$ のように複素係数 α_0, α_1

をつけてベクトルとして表現する。 n 個の量子ビットの状態は、 $|000\dots\rangle$ から $|111\dots\rangle$ までの 2^n パターンの計算基底と呼ばれる基底ベクトルの線形結合として表現される。例えば、 $n=3$ の場合なら $\alpha_{000}|000\rangle + \alpha_{001}|001\rangle + \dots + \alpha_{111}|111\rangle$ といった形になる。ただし、この時の係数の絶対値2乗の総和、すなわち、 $\sum_{x \in \{0,1\}^n} |\alpha_x|^2 = 1$ とならなければならない。

われわれは量子ビットに対して「ゲート操作」と「測定」を行いながら計算を進めていく。量子ビットに対する任意のゲート操作は「アダマールゲート、Tゲート、CNOTゲート」の3種類の組み合わせに分解できることが知られている。ここでは、後で登場するCNOTゲートがどのように作用するかを紹介する。CNOTゲートは制御ビットと対象ビットの二つを指定して作用する操作であり、計算基底 $|x_1x_2\rangle$ の1ビット目を制御、2ビット目を対象とすると、 $|x_1, x_2\rangle \mapsto |x_1, x_1 \oplus x_2\rangle$ というように、対象ビットに制御ビットの値を排他的論理和で足しこむ作用を持つ。この作用は重ね合わせ状態に対して線形に作用するため、例えば上記の操作は重ね合わせ状態に対して $\alpha|00\rangle + \beta|10\rangle \mapsto \alpha|00\rangle + \beta|11\rangle$ のように作用する。

量子状態は複数の複素ベクトルで記述されるが、われわれはその複素数を量子計算機から直接取り出すことはできない。代わりに、われわれは量子ビットに対して古典的なビットを情報として取り出す測定という操作を行うことができる。ここではパウリZ測定と呼ばれる種類の測定を扱う。量子状態の測定は一般に確率的な操作である。パウリZ測定は測定の結果として1ビットの情報 $m \in \{0,1\}$ を得るような操作で、 n 量子ビットの状態 $\sum_{x \in \{0,1\}^n} \alpha_x |x\rangle$ に対して、 $i \in [1..n]$ ビット目の測定を行うことにより、

$$p_m = \sum_{x \in \{0,1\}^n | x_i = m} |\alpha_x|^2$$

の確率で記号 $m \in \{0,1\}$ を得て、状態を

$$|\psi_m\rangle = \frac{1}{\sqrt{p_m}} \sum_{x \in \{0,1\}^n | x_i = m} \alpha_x |x\rangle$$

に移すような操作である。ただし、上記の式の右辺に出現する総和演算は、 i ビット目が m であるビット列全体に対する総和である。

量子ビットが通常のビットと大きく異なるのは、測定と

[†] NTT

"Quantum Computing (5): Fault-tolerant Quantum Computing" by Yasunari Suzuki (NTT, Tokyo)

いう操作が通常の演算の操作と可換ではないという点である。通常の計算機では途中でメモリーの状態を覗き見る操作を加えても、それがエラーを生じさせない操作であれば計算結果は変わらない。一方、量子ビットの場合は測定とは状態を変化させる不可逆な操作の一種である。例えば、 $\alpha|00\rangle + \beta|10\rangle$ の状態に対して、「2ビット目の測定」と「1ビット目を制御、2ビット目を対象とするCNOT」という二つの操作をこの順序で適用すると、100%の確率で $m=0$ の値を得た後、状態は $\alpha|00\rangle + \beta|11\rangle$ となるが、操作の順序を逆にした場合は0,1のどちらかの値 m を50%の確率で得て、量子ビットの状態は $|mm\rangle$ となる。このことが次の章での量子ビットの設計を困難にする主要な要因の一つとなっている。

3. 量子ビットの設計

量子計算機はいくつかの問題について計算量的な加速が得られることは早期から理論的に知られていたが、その実験的な実現はさまざまな技術的困難から夢物語と考えられてきた。その最大の理由が、量子的な性質を保ったビットである「量子ビット」で重ね合わせ状態が維持される寿命を長く保ちながら制御することが難しさにある。量子ビットの0,1の状態は物理的に何らかの異なる状態に対応している。例えば、コンデンサに電荷が「チャージされていない/されている」というのを0,1にしてもいいし、振り子を天井にぶら下げて「揺れていない/いる」を0,1としてもいい。前節で解説したように、量子ビットの状態が0,1のどちらであるかを知ることは、不可逆な「測定」という演算が計算過程に挿入されていることに相当する。ここで重要なのは、われわれが意図的に測定をしようと思わなくとも、「中身の状態が0,1のどちらであるか推定しようと思えば理論上可能な信号」が外部に漏れ出していたら、それは測定として扱われるという点である。具体的には、メモリーから振動、電磁放射、その他ありとあらゆる信号によって量子ビットの状態が推定可能な情報が漏れ出る事象はすべてがエラーとして扱われる。この事情のため、例えば通常の計算機で例えば行われているような「コンデンサへのチャージの有無を0,1として、定期的の中身を読み出して1であれば再充電する」といったリフレッシュに基づくアプローチは、量子ビットでは用いることができない。充分長い時間重ね合わせ状態が維持される量子ビットを構築するには、そのデバイスは環境から情報理論的に孤立した系にならなければならないのである。

量子ビットから量子計算機を構成するうえでのもう一つの要請として、量子ビットに対するゲート操作や測定をプログラマブルに行えるようにしなければならない。このためにはプログラムに基づく制御信号を投入するための入出力ポートが必要となる。このような入力ポートを作るのは明らかに情報が漏れ出る原因となるので、量子ビットを情報理論的に孤立させたいという要求と衝突してしまう。結

果的に、素早く正しい制御ができることと、量子ビットの寿命が長く保たれることはトレードオフの関係になっているのである。高性能な量子情報処理を実現するため、この二つを良いバランスで両立する物理系が長く探索されているが、いずれにせよ制御性と寿命のトレードオフからは免れることができない。この問題を符号理論の枠組みをもって解決しようとするのが量子誤り訂正符号の枠組みである。本稿では量子誤り訂正を用いた手法により、いかにしてこのトレードオフから逃れることができるのか、その恩恵と代償を紹介する。

4. ビット反転に耐性のある量子誤り訂正符号

まずは最も素朴な例として1ビットのビット反転誤りに耐性のある1論理ビットを構成する符号を考えよう。古典的なビットにおいて構成する最も素朴なビット反転に耐性のある符号は、0を000, 1を111に対応付けて構成する繰り返し符号である。この符号に対し、例えば左側のビットに誤ってビット反転エラーが生じたとすると、ビット列は0ならば100, 1ならば011となる。どちらの場合にせよ、三つの値を比較して多数決を取ることで、1ビットまでのビット反転エラーを正しく元に戻すことができる。上記は繰り返し回数が3回であるが、繰り返し回数を素朴に個まで増やせば、個未満のビット反転は検知でき、半数未満すなわち個までのビット反転が生じて、その位置を正しく推定し訂正することができる。このような値を考えている符号の符号距離と呼ぶ。

上記のような枠組みを用いて、量子ビットでも1個のビット反転誤りに耐性のある1論理量子ビットを構成できるだろうか？ 繰り返し符号を量子ビットで実現する素朴な方法は、1量子ビットの重ね合わせ状態を以下のように対応ける方法である。

$$\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \mapsto \alpha|000\rangle + \beta|111\rangle$$

この方式を採用して、古典ビットと同様に左のビットにビット反転エラーが生じてしまった場合を考えよう。この時、量子状態は以下のようにビット反転エラーが生じた状態の重ね合わせ状態へと変化してしまう。

$$\alpha|000\rangle + \beta|111\rangle \mapsto \alpha|100\rangle + \beta|011\rangle$$

この状態を何とかして元の状態に戻すことが誤り訂正の目的となる。古典ビットの場合と同様に多数決でエラーの位置を推定しようとする場合、それぞれのビットが0か1かを古典ビットの値として知る必要がある。ところが、そのために三つの量子ビットを測定してしまうと、量子状態は測定的作用で $|100\rangle$ または $|011\rangle$ に変化してしまう。われわれは複素数 α, β の値を知らないで、こうなってしまうとは元の状態を復元することはできそうにない。

この問題は、符号化した情報が0,1のどちらかわからないように、エラーの有無だけをパリティ検査で検出することで回避できる。再度古典ビットの誤り訂正の話に戻ると、

われわれは隣り合った2ビットの値を2を法として足し合わせた値のリストが分かればエラーの位置を推定できることがわかる。具体的には、得られる2ビットは下記の通りである。

エラーなし： 000,111 \mapsto 00
 左にエラー： 100,011 \mapsto 10
 中央にエラー： 010,101 \mapsto 11
 右にエラー： 001,110 \mapsto 01

上記からわかるように、この2ビットからビット反転が生じた位置を推定することができるだけでなく、得られた2ビットの値は符号化されている情報が0と1のどちらであるかの情報は一切与えないことがわかる。この仕組みを利用することで、重ね合わせ状態を破壊しないよう、エラーの位置だけを推定させることができる。

具体的には、エラー検査用の量子ビットを0状態に初期化して2ビット追加し、符号化されたデータの1, 2ビット目、および2, 3ビット目のパリティ値をCNOTゲートを用いて書き込む。この操作により、

$$\alpha|000\rangle + \beta|011\rangle \mapsto \alpha|10010\rangle + \beta|01110\rangle$$

と、右側に追加された2ビットに、1, 2ビット目および2, 3ビット目の和が書き込まれた状態となる。この追加された2ビットの情報は重ね合わせのどちらにおいても同じ値なので、測定して(1,0)という2ビットの情報を得ても量子状態の重ね合わせは壊れない。この2ビットより、左のビットにエラーが生じていることがわかるので、左のビットを再度ビット反転することで元の情報を復元することができる。

上記の方式は具体的な例だが、上記の仕組みは線形符号と呼ばれる古典ビットの符号全般についても以下のように一般化できる。すなわち、繰り返し符号のような線形符号と呼ばれる種類の符号には、「状態が符号語であること」と条件が対応する、「エラーがなければすべて0になるべきパリティ値の取り方の集合(パリティ検査行列)」があることが知られている。したがって、パリティ値の計算は追加の量子ビットとCNOTを用いて量子計算で行い、追加の量子ビットを測定して得たパリティ値からエラーの位置の推定は古典計算機で行うことで、符号化された情報を一切得ることなく、エラーの推定に必要な情報を得ることができる。

5. パリティ測定のエラーに対する耐性

前章での誤り訂正方式は「新たな量子ビットを追加し、そこでパリティ値を重ね合わせを保ったまま計算し、その値を読み出す」という追加の量子計算がエラーなしにできると暗黙に仮定していることに気づいたかもしれない。しかし、われわれは誤りの小さな量子計算を実現するために量子誤り訂正をしているのに、その中で誤りのない量子計算が道具として出てくるのは前提として奇妙である。実際に上記の方式を採用すると、パリティ値としては本来エ

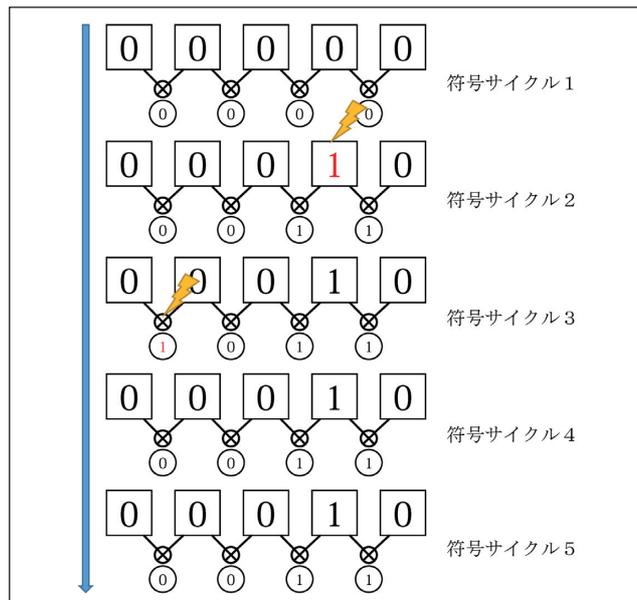


図1 d=5の符号でデータと測定の両方に誤りがある場合の、繰り返しパリティ測定の例

ラーがない状態を表す(0,0)が出るべきところで、パリティ測定用の追加の量子ビットにエラーが生じて(1,0)が出力されてしまうことがありうる。左の量子ビットにエラーが生じた場合も(1,0)が出力されるから、この二つは異なるエラーであるにもかかわらず区別ができない。

この問題を解決するには、図1のように何度も繰り返しパリティの測定を行えばよい。もし、一切のエラーがない場合に何度もパリティチェックをしたとすると、測定値は(0,0)が繰り返し出力されるはずである。仮に左の量子ビットにエラーが生じた場合、エラーが生じた地点から(1,0)が出力され続けるようになる。一方、1,2ビット目のパリティ測定の測定結果がビット反転エラーで反転してしまった場合、エラーが生じた瞬間だけは(1,0)が出力されるが、以降は続けてエラーが何度も生じない限りは(0,0)が再び出力されるようになる。続けてパリティ測定に失敗する確率は回数に応じて減衰していると期待されるので、例えばd回繰り返せば少なくともd個までの追加量子ビットを含めたエラーを検出できるようになる。

得られたパリティ測定の系列を説明する最も少ない回数のエラーの発生パターンを求める復号は、最小重み完全マッチング問題に帰着できることが知られており、幸いなことにエドモンドの花アルゴリズムと呼ばれる古典アルゴリズムの多項式時間解法が知られている。したがって、符号のサイズが大きくなっても高い確率で正しいエラーパターンを推定することができる。

6. ビットと位相反転の両方に耐性のある量子誤り訂正

これまでの記述ではかなりややこしい過程を経て、ビット反転に耐性のある符号を構築してきた。ところが、先ほど

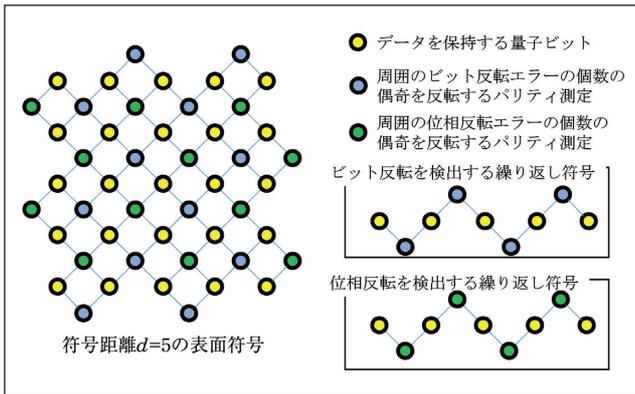


図2 表面符号の構成

の符号は「意図しない測定」によるエラーについては誤りに耐性がまったくないことがわかる。例えば、 $\alpha|000\rangle + \beta|111\rangle$ という状態で3個の量子ビットのうちどれか一つでも意図しない測定がなされてしまうと、状態は $|000\rangle$ または $|111\rangle$ となってしまう、元には戻せなくなってしまう。むしろ、ビットの数が増えているためにどれかが意図せず測定されてしまう確率は逆に増えているとも言える。この問題を解決するには以下のようにして、8パターンのビット列を、どのビットだけに着目しても0と1が出現する確率が半々になるようにして分割して作った符号を考えることができる。

$$|0\rangle \mapsto (|000\rangle + |011\rangle + |101\rangle + |110\rangle) / 2$$

$$|1\rangle \mapsto (|001\rangle + |010\rangle + |100\rangle + |111\rangle) / 2$$

上記の符号では、状態0,1のどちらにおいても、測定値として0,1が出る確率は半々である。したがって、「意図しない測定が1番目のビットに行われ、それが0であることが出力されてしまった」という状況においても0,1の値は50%の確率で得られ、そのどちらが得られたとしても符号化された情報についての知識を得ることはできない。紙面の都合上詳細は省略するが、アダマールゲートとCNOTゲートを用いることで、上記の符号は0,1のどちらかが識別されてしまうエラーを1量子ビットまで訂正することができる。

上記の符号の問題は、符号がビット反転のエラーに対応できていない点である。実際、0状態を符号化した論理状態のどのビットを反転しても1を符号化した状態となってしまうので、上記の符号ではビット反転のエラーが検出できないことがわかる。ビット反転にもビットの測定のエラーにも耐性がある量子ビットを符号化するには、このハイブリッドとなるような符号が必要となる。

現在、最も実験で実装が有望とされている「表面符号」と呼ばれる符号は(図2)、行方向にビット反転を訂正する符号を、列方向に上記のような0,1の重ね合わせが壊れてしまうようなエラーを訂正する符号を組み込んだ符号とみることができる²⁾。

7. 符号化された状態に対する演算

符号化された量子ビットは誤って操作したり測定したり

しても、その対象が少数である限りは誤りを訂正することができる。これは誤り訂正を行う上では望ましい性質だが、同時に符号化された量子状態の少数の量子ビットに対して操作を行ってもエラーとして訂正されてしまい演算にならないという問題を生じさせる。つまり、符号をエラーに耐性のあるものにすればするほど、符号化された量子ビットの操作は難しくなるのである。

この問題は、符号を動的に変形する符号変形、または格子手術という枠組みでという考え方で解決されている³⁾⁴⁾。この方式では、あるタイミングから誤り訂正の符号方式を変更し、これまでとは異なるパターンでパリティ検査を行うようにする。すると、元の符号方式での論理状態は新たな符号方式の下では一般に論理状態ではないから、エラー訂正の過程で測定のパックアクションを伴い、元の符号の論理状態は新たな符号の一般には別の論理状態に写像される。この符号方式の変更にともなうバックアクションをうまく具合に選択していくと、狙った演算を符号化された空間に対して起こせるようになる。

この符号の変形、すなわち、パリティ検査を行うパターンの変更はゆっくりと行わねばならない。なぜなら、大きく異なる符号方式にいきなり変更すると、新しい符号にとって元の符号の論理状態は大量のエラーが生じた状態に見えるため、エラー訂正の結果どのような状態に行くかをうまく指定できなくなってしまうからである。また、パリティ検査自体に誤りが含まれるかもしれない点も忘れてはいけな。パリティ値の変化がデータに対するエラーなのか、パリティ測定のエラーなのかを識別するには、何度か同じパリティ測定のパターンを繰り返さなければならない。このことから、誤り耐性量子計算では一部の例外を除いて、符号方式を変形したら変形後の符号でパリティ検査を符号距離の回数、つまり d 回だけ繰り返す必要がある。こうした事情から、誤り耐性量子計算における論理命令とは、符号方式を徐々に変更していく系列として表現される。量子アルゴリズムを実行するプログラムがコンパイルされる先も、どの個所の符号方式をどのタイミングでどのように変更するかを表す記述の系列となる。

なお、論理操作の中でも非クリフォード操作と呼ばれる種類の操作は、上記の枠組みだけではうまく扱えないことが知られている。このため、非クリフォード操作は魔法状態と呼ばれる状態を低確率で成功する手法でうまく作り、これを消費することで演算を実行する。今回紹介したゲートの中ではTゲートと呼ばれるゲート操作が非クリフォード操作にあたり、具体的な詳細は今回は紹介しないが、特に実行に時間のかかる操作として知られている。

8. 誤り耐性量子計算の速度

表面符号における誤り耐性量子計算の計算を符号の切り替えによって行う場合、計算の基本単位は符号方式を変更

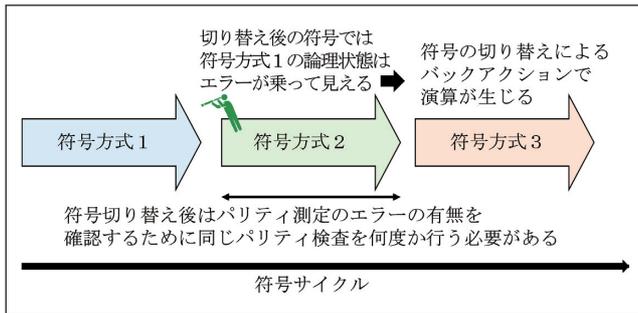


図3 符号方式の変形によって量子計算を実施する枠組み

可能なタイミング、つまり、パリティ検査を行う周期となる。この周期のことを符号サイクルと呼ぶ(図3)。この符号サイクルは早すぎても遅すぎても量子計算機を作ることができない。まず、われわれは符号サイクルの中でパリティ検査を行うために、追加の量子ビットにCNOTでパリティ値を集め測定をする必要がある。符号サイクルは少なくともこの操作にかかる時間よりも長くはならない。また、測定されたパリティ値からエラーの位置を推定するには最小重み完全マッチング問題を解かねばならないのだった。これは多項式時間で計算を行うことはできるが、エラー推定を行う古典計算機が速度が有限である以上、符号の規模が大きくなるとエラー推定を行う時間が符号サイクルの下限を決める主要因となる。超伝導量子ビットの場合、上記二つの制約から少なくとも符号サイクルは1 μ sよりは長い時間でないといけないとされている。

では、符号サイクルをいくらかでも長くできるかというところもいれない。量子ビットは有限の時間で徐々に外に情報が漏れだしてしまうから、エラー訂正が不可能になるほど多くの量子ビットにエラーが生じてしまうより十分に早くパリティ測定を行わなければならない。現状の超伝導量子ビットでは各量子ビットごとに平均的に100 μ sから1ms程度の時間で1回のエラーが生じてしまうため、この時間よりも符号サイクルは十分に短い必要がある。また、符号上の論理操作で符号を切り替えるたびに符号距離の回数だけパリティ検査をしなければいけないことを思い出すと、そもそも符号サイクルが長い量子計算機は論理命令の周期が遅い量子計算機ということになる。ただでさえ誤り訂正のために遅くなっている量子計算の速度がさらに遅くなると、スパコンなどに速度で勝つのがより困難になってしまう。

上記のトレードオフから、符号サイクルは量子計算機を早くするという観点では短いほど良いが、符号サイクルはエラーの位置を推定する古典計算機がしっかり動作する程度には遅くしなければならないということになる。したがって、量子計算機が古典計算機に速度で追い抜こうとすると、量子計算にとっては競争相手となるスパコンには遅くあって欲しいが、同時に量子計算機を動かすリアルタイム制御の古典演算には早くあって欲しい、というように、量子計算と古典計算なんとも奇妙な関係にあるのだ。

9. 実用化に必要な誤り耐性量子計算の規模

量子計算機はいくつかの得意とする計算タスクにおいて、実行に必要な基本命令数を古典計算機の場合に比べて指数関数的に減らすことができる。量子計算機で低オーバーヘッドに実装することができ、早期の応用が期待されている応用としては、物理や化学の分野においてハミルトニアンと呼ばれる行列の固有値を指定の精度で所定の確率重みでサンプリングするというタスクがある。ハミルトニアンの行列のサイズは扱う物理系のサイズ n に対して 2^n で増えていくため、通常の計算機で解こうとすると必要な計算時間は指数関数的に増えていき、現代のスパコンでも n が数百に達するあたりからは固有値に関する解析を行うことが難しくなるとされている。一方、量子コンピュータでは、物理系のサイズ n に対して多項式的な数の論理量子ビットや論理命令数で固有値のサンプリングを行うことができるため、少なくとも n が充分大きくなった領域では量子計算の方が空間と時間の両方の観点で古典計算機より実装が容易になると予想されている。

符号サイクルを誤り耐性量子計算機の動作周波数だと思おうとするなら、誤り耐性量子計算機の速度はどれほど早くとも1 MHzから10 MHz程度となる。さらに、論理演算、すなわち、符号方式の変更は行うたびに符号距離に比例する符号サイクルだけパリティ検査を繰り返さないといけないから、論理命令を実行するのに必要なレイテンシはこれに符号距離に比例する符号サイクルとなる。典型的な量子ビットのエラー率から換算すると実用的な規模の問題を解くには符号距離は11から31の間程度となるため、一つの論理ビットに1秒間に行える命令はおおよそ数万個程度となる。量子計算の基本演算がビット演算であるのに対して通常の計算機は多量のビットを扱う整数や実数の演算を扱うため単純な比較にはならないかもしれないが、現代のスパコンがエクサスケールに届こうとしている中、この速度は到底無視することができないビハインドとなる。

上記のビハインドの結果として、量子計算機が計算量的な加速が定数倍の低速化に対して優位になるには、問題のサイズがかなり大きくなってからになると試算されており、そのためにはおよそ1メガから10メガ量子ビットが必要とされている。この数字は到底無理な数字とは言えないが、量子ビット数が100程度である現代の技術からは途方もなく大きな数字である。誤り耐性量子計算機の実現に向けて、われわれは適切なアルゴリズムの選択とコンパイル最適化、そして、論理命令の選択、すなわち符号変換方式の洗練によって、量子計算機が通常の計算機に勝るラインを手元に手繰り寄せる必要がある。同時に、小さなエラー率を維持したままハードウェアの集積度を向上する取り組みを並行して行い、この二つが交わったとき、始めて速度面で有用な誤り耐性量子計算機が完成する。

10. 量子誤り訂正の課題

これまで述べたように、量子誤り訂正は「測定すると壊れる」という厳しいルールを抜け道をかいくぐって構築されている理論である。こうした理論は美しくはあるが、現実の実装するにあたっては技術的な事情で容易に前提が崩壊しかねない砂上の楼閣でもある。このため、量子誤り訂正は理想的な仮定のもとでは実現は可能であっても、現実的な前提の下で実現可能かという点については研究者の中でも賛否あり、実用的な誤り耐性量子計算機がいつ頃実現するかという時期についてはさらに不透明なのが実情である。ここでは、著者が考える誤り訂正で現在解決されていない障害について考え、現段階での解決方策を述べる。

(1) 誤り率の低減の限界

誤り訂正前の量子ビットが持つ誤り率はある程度小さくないと、エラーを検出するための量子計算で生じるエラーが誤り訂正で軽減できる度合いを超えてしまい、そもそも量子誤り訂正が機能しなくなってしまう。量子誤り訂正が機能するためには基本操作あたりの誤り率がおよそ1%程度より充分小さくならなければならないが、現状の量子ビットの誤り率は丁度この近辺にあるため、実用的な量子計算のためにはさらに誤り率を低減しなければならない。また、実際の誤りは独立ではなく相関を持って生じるため、こうした誤りを効率的に除去できる符号や、相関を持ったエラーが生じづらいようなデバイスや制御が現在検討されている。

(2) 古典計算機の速度の限界

量子誤り訂正を実装するには量子計算機の速度に追従してエラー個所の推定が可能な古典計算機が必要となる。古典計算機の速度が一定であるとする、符号距離が大きくなるにつれどこかのタイミングでエラーの推定速度が追いつかなくなり、量子誤り訂正は破綻する。特に超伝導量子ビットなど極低温での制御が必要な量子ビットで、エラーの推定を低温環境で行う場合、古典計算の消費電力に厳しい制約が課されるため課題が解決できるかはより非自明となる。古典計算機の速度が追いつかなくなるより先に、実用的なレベルに誤り率を削減できるかは今後のデバイスの改善度合いに依存するが、単純な解決が不可能な場合は符号を接続するなど別の手段で問題を回避する必要がある。ただし、こうした処理を行うとアプリケーションからみた命令スループットはさらに遅くなるので、現代の計算機に速度で勝るのはより難しくなる。

(3) 集積化の限界

現在の多くの量子ビットでは誤り率が誤り訂正できる値の周辺となっているため、エラー率を犠牲にした微細化を行うことが難しい。現実的に一つのチップやトラップで集

積できる量子ビットの数は限られており、この数が実用化の数に足りない場合は、複数のチップやトラップを繋ぐ通信のインターフェースが必要となる。こうした通信を含め、必要な数の量子ビットを技術的に用意できるかは現状わかっていない。また、現状は一つの量子ビットにつき一つの制御装置を配置しているが、これは電力の観点でも配線の観点でもスケールするかは不透明である。数の拡大の観点で誤り訂正が現実的に行えない場合は、今まで量子ビットとして使っていたデバイスの0,1以外の状態も利用し、単体の量子ビットをより効率的に符号化するなどの方法が考えられる。このような方法で事前に符号化された量子ビットはエラーの偏りなどもあることから、エラーの特性を考慮した符号を用いることで、より効率的な符号化が可能だと期待されている。

11. むすび

本稿では量子誤り訂正の基礎的な背景と、これに基づく誤りに耐性のある量子計算の仕組みについて俯瞰した。量子誤り訂正は今のところ理論上実現が不可能であることを示す致命的な課題はないが、一方で多くの理論的な仮定を実験に課しているため、実用的な規模まで拡張できるかは技術的に不透明である。実用的な規模の量子誤り訂正を実現するうえで潜在的に障害となりうる要素は無数にあるが、現実にとどのような要素が支配的に量子誤り訂正を阻害するかは実際に量子計算機を作ってみないとわからない。このため実際に量子計算機を構築するには、現実にもれわれが構築可能なデバイスの特性や要請を符号の設計にフィードバックし、より安定的に構築可能な誤り耐性量子計算機のアーキテクチャを提案していく必要がある。本稿がこうした量子誤り訂正の理論や量子計算機の開発に興味を持つきっかけになれば幸いである。(2022年8月2日受付)

〔文 献〕

- 1) M.A. Nielsen and I. Chuang: "Quantum computation and quantum information" (2002)
- 2) A.G. Fowler, M. Mariantoni, J.M. Martinis and A.N. Cleland: "Surface codes: Towards practical large-scale quantum computation", Physical Review A 86, 032324 (2012)
- 3) C. Horsman, A.G. Fowler, S. Devitt and R. Van Meter: "Surface code quantum computing by lattice surgery", New Journal of Physics 14, 123011 (2012)
- 4) A.G. Fowler and C. Lidar: "Low overhead quantum computation using lattice surgery", arXiv preprint, arXiv:1808.06709 (2018)



すずき やすなり
鈴木 泰成 2018年、東京大学工学系研究科物理工学専攻卒業。NTT入社。現在、同社NTTコンピュータ&データサイエンス研究所にて、誤り耐性量子計算機の開発に従事。

量子アプリケーション

杉崎研司[†], 望月祐志^{††}

1. まえがき

量子コンピュータに関する研究開発は日進月歩で、複数のベンダーが2029年までに100万量子ビットを搭載した量子プロセッサを開発するというロードマップを発表している。量子コンピュータは量子重ね合わせ状態、量子絡み合い状態、測定による量子状態の射影など、従来のコンピュータ(以後、古典コンピュータと記す)とは本質的に異なった計算リソースを活用することで、特定の問題を古典コンピュータよりも良い計算コストスケーリングで解くことを可能にする。

量子コンピュータによる実時間で計算加速は2019年にGoogleの研究グループが53量子ビットを有する超伝導量子チップを用いて実証実験を報告したが¹⁾、この実験で用いられた問題は、量子コンピュータの動作を古典コンピュータでシミュレートするランダム量子回路サンプリングというものであり、実社会で有用な問題を解くものではなかった。また、テンソルネットワークやマルチCPU/GPUによる並列計算など、古典コンピュータ上での量子回路数値シミュレーション技法の進展により、当初スパコンを用いても解くのに2万年かかると予想されたランダム量子回路サンプリングは古典コンピュータ上でも量子コンピュータと同程度の時間で解けることが中国の研究者により示され、この研究にはスパコン界のノーベル賞とも称されるゴードン・ベル賞が2021年に贈られた²⁾。

それでは、量子コンピュータは実社会で有用な問題を古典コンピュータより高速に解くことができるだろうか？そもそも量子計算に適した問題とはどのようなもので、どのようにして量子コンピュータで問題を解くのだろうか？本

稿では化学に関する問題に注目し、量子アプリケーション開発の現状について紹介する。

2. 化学と量子コンピュータ

2.1 化学と理論計算

実験室に入ると、実験台の上にはカラフルな液体が入ったビーカーや試験管が並べられ、ガスバーナーの上で熱せられた三角フラスコからはもくもくと白煙があがっている。創作の世界では化学の研究室といえばこのような風景が描かれがちである。しかし、なかには試薬や実験器具を一切使わない理論化学・計算化学の研究も存在する。分子を構成する原子核や電子は非常に小さく、古典力学ではなく量子力学原理にしたがって運動する。そこで量子力学の基礎方程式であるSchrödinger方程式に基づき原子・分子を理論的に取り扱おうというのが理論化学の研究である。

時間に依存しないSchrödinger方程式は $H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$ と書ける。ここで H は電子・原子核の運動および粒子間に働く相互作用を記述するハミルトニアン、 $|\Psi\rangle$ は波動関数、 E はエネルギーである。Schrödinger方程式は固有関数的な非常にシンプルな形をしているにも関わらず、これを正確に解くことは容易ではない。これは量子多体系に本質的な難しさであり、量子力学の発展に多大な貢献をしたDiracも1929年に発表した原著論文のなかで、「化学の数学的理論に必要な基礎的物理法則はすべて明らかになっている。しかしこれらの法則を正確に適用しようとするとき得られる方程式は複雑すぎて手に負えないものになってしまう」と述べている³⁾。実際のところ、Schrödinger方程式の解析解が得られる系は1電子1原子核系である水素原子および水素様原子のように非常に限られている。

より複雑で解析的に解くことが困難な系については、コンピュータを用いた数値計算(量子化学計算と呼ばれる)が一般に用いられる。特に最近はコンピュータの性能向上や量子化学計算ソフトウェア、計算結果可視化ソフトウェアの普及もあり、理論化学者だけでなく実験系の研究者も日常的に量子化学計算を行うようになってきた。また、量子化学計算だけでなく、分子を構成する原子間に働く力を経験的な相互作用ポテンシャルで記述し、おもりとバネのモ

[†]大阪公立大学 大学院理学研究科/科学技術振興機構/CQuERE TCG CREST

^{††}立教大学 理学部 化学科/東京大学 生産技術研究所
"Quantum Computing (final study): Quantum Applications" by Kenji Sugisaki (Graduate School of Science, Osaka Metropolitan University, Osaka/Japan Science and Technology Agency, Saitama/Centre for Quantum Engineering, Research and Education, TCG Centres for Research and Education in Science and Technology) and Yuji Mochizuki (Department of Chemistry, Rikkyo University, Tokyo/Institute for Industrial Science, the University of Tokyo, Tokyo)

デルを用いて分子構造や分子ダイナミクスを取り扱う分子力学法や分子動力学法も化学研究に頻りに利用されている。今や、コンピュータは化学研究になくはならないものとなっている。

量子コンピュータは量子力学原理に従って動作し、量子力学系を効率的にシミュレートできるのだから、原子核や電子のダイナミクスは量子コンピュータを用いて効率的に計算できると予想される。したがって、量子コンピュータの計算対象として化学問題がしばしば採り上げられるのも当然といえよう。

2.2 量子位相推定

量子位相推定による量子化学計算手法は、量子逆フーリエ変換と測定による量子状態の射影を利用したアルゴリズムであり、2005年に Aspuru-Guzik らにより提案された⁴⁾。量子位相推定自体は1999年に提案された量子アルゴリズムであり、ユニタリー演算子の固有関数および固有値を求めるといふ数学問題を古典コンピュータよりも指数関数的に少ない計算コストで解くことができる⁵⁾。Aspuru-Guzik らは、波動関数が時間とともにどう変化するかを記述する時間発展演算子がユニタリー演算子であり、その固有値にエネルギーの情報が含まれることを利用し、波動関数の時間発展量子シミュレーションと量子位相推定を組み合わせることで量子化学計算が可能であることを示した。2010年には光量子デバイスおよびNMR量子コンピュータを用いて水素分子の量子化学計算実証実験が報告されている⁶⁾⁷⁾。

量子位相推定は、例えば近似波動関数を入力として用いたとしても、エネルギー読み出し用の補助量子ビットを測定したときにハミルトニアン固有関数へと量子状態が射影され、対応する固有値が得られるという特徴を持つ。ただし、測定でどの固有関数に射影されるかという確率は測定前の量子状態と固有関数の重なり二乗に比例するため、もしも計算に用いた近似波動関数と求めたい固有関数の重なりが指数関数的に小さければ、指数関数回の量子位相推定を行わないと求めたい電子状態が得られず、量子位相推定アルゴリズムの持つ指数加速のメリットは完全に失われてしまう。量子位相推定による量子化学計算という量子アプリケーションを有用なものにするには高精度な近似波動関数を簡便に準備するという別の量子アプリケーションが必要となり、次に述べるVQEのほか、波動関数の虚時間発展法⁸⁾や断熱量子アルゴリズムを用いる手法⁴⁾⁷⁾⁹⁾などが検討・開発されている。

2.3 変分量子アルゴリズム

前節で紹介した量子位相推定は非常に有望な量子アプリケーションであるにも関わらず、量子コンピュータ実機での実証実験の数は少ない^{6)7)10)~12)}。これは、波動関数の時間発展量子シミュレーションには膨大な数の量子ゲートが必要となり、ノイズの影響が大きな現状の量子デバイスでは意味のある計算結果を得ることが難しいためである。

そこで、量子コンピュータが得意な計算のみを量子コンピュータ上で行い、その他の計算は古典コンピュータ上で実行するハイブリッド型量子アプリケーションが近年注目されている。量子-古典ハイブリッドアルゴリズムとしては2014年に提案されたVQE (Variational Quantum Eigensolver)¹³⁾に代表される変分量子アルゴリズムが有名である。VQEは「アンサツ (ansatz)」で定義される変分パラメータを含む量子回路を用いた近似波動関数の生成と、それに続く量子状態の測定を繰り返し実行してハミルトニアン期待値を統計的に求め、変分パラメータの最適化は古典コンピュータで行う。VQEは量子コンピュータを計算アクセラレーターとして用いたアルゴリズムと解釈することもでき、GPUを用いた数値計算の高速化と似たところがある。VQEによる量子化学計算精度向上はいかにして良いアンサツを構築するかにかかっており、膨大な数の理論研究が報告されている。VQEの研究は限られた誌面では紹介しきれないので、詳細を知りたい方は総説^{14)~18)}を参照していただきたい。

VQEでは測定を繰り返し実行してエネルギー期待値を統計的に求めるが、ハミルトニアンには非可換な演算子が非常に多く含まれており、これら非可換な演算子の期待値は個別に求める必要がある。波動関数を保持するために必要な量子ビット数を N 個とすると、ハミルトニアンには $O(N^4)$ 個の項が含まれ、期待値を同時に計算できる演算子についてグループ分けをすると、1回のエネルギー期待値計算に必要な測定回数は $O(N^3)$ 程度のスケーリングとなる¹⁹⁾。このため、波動関数保持に多数の量子ビットを必要とする分子にVQEを適用すると測定回数の多さがネックとなる可能性が指摘されており、例えば、水分子の波動関数保持に104個の量子ビットを用いた場合、1回のエネルギー期待値計算に39億回の測定が必要で、計算に2.3日かかるとの試算が報告されている²⁰⁾。また、計算に用いるアンサツによっては量子ビット数が増えたときにパラメータ空間の大半でエネルギー期待値の勾配がほぼ0となり、変分最適化が困難になる「バレンプラトー (barren plateaus)」に陥る可能性も指摘されている²¹⁾。特に量子ビット数が多くなり変分パラメータが膨大になった時にいかにして変分最適化を効率的に行うか、あるいはいかにして波動関数の精度を保持しつつ変分パラメータ数を削減するかといった工夫はVQEに基づく量子アプリケーションの実用化に必須である。幸いにも伝統的な量子化学計算で使われてきた計算量削減テクニックはVQEにも応用できることがあり、対象の分子を分割して計算を進める分割統治法^{22)~24)}や、電子非占有軌道への励起の効果を取り込んだ有効ハミルトニアンを事前に構築するダウンフォールディング法²⁵⁾など、さまざまな手法が検討されている。

量子-古典ハイブリッドアルゴリズムはVQEだけではない。変分法を用いて組み合わせ最適化を実行するQAOA

(Quantum Approximate Optimization Algorithm)²⁶⁾も知られており、化学応用ではアミノ酸の一次元配列からタンパク質の三次元構造を予測するタンパク質折り畳み問題などに適用されている²⁷⁾。

2.4 量子アニーリングと化学応用

ここまでは量子ビットに対して量子ゲートを作用させることで演算を進めるゲート型量子コンピュータの化学応用について紹介してきたが、量子デバイスのハミルトニアンを基底状態が簡単に準備できるシンプルなものから解きたい問題のハミルトニアンへと徐々に変化させることで計算を進める量子アニーリングを化学問題に応用する試みも報告されている。量子アニーリングの実機はD-Wave社が開発したものが知られており²⁸⁾、イジングハミルトニアンの基底状態探索を行うことができる。また、量子アニーリングマシンではないが量子インスパイアード技術である擬似量子アニーリング、デジタルアニーラなども開発されている。

量子アニーリングマシンで量子化学計算を行うには電子ハミルトニアンをイジングハミルトニアンに変換しなければならない。このような変換は補助量子ビットを導入し摂動ガジェットと呼ばれる手法を適用することで可能であり²⁹⁾、実機を用いた実証実験も報告されている³⁰⁾。この手法では、一つの電子配置を N 個の量子ビットで表せるとすると、 $r \times N$ 個の量子ビットを用いて r 個の「レプリカ」を準備して計算を行うが、波動関数の精度がレプリカ数に強く依存し、正確な量子化学計算には多数の量子ビットが必要となることが知られている^{29) 30)}。また、波動関数展開に現れる電子配置の展開係数を K 個の量子ビットを用いて K 桁の二進数で表現し、波動関数が規格化されているという拘束条件のもとでエネルギー期待値を最小化するQAE (Quantum Annealer Eigensolver)も提案されている^{31) 32)}。しかしどちらの手法も波動関数の精度向上には非常に多くの量子ビットが必要となり、これらの手法で量子コンピュータによる優位性がみられるかどうかは明らかでない。

イジングハミルトニアンの基底状態探索は組み合わせ最適化と相性が良く、量子アニーリングは組み合わせ最適化問題への応用が広く研究されている。例えば、北京市街地から空港までのタクシーの移動経路を量子アニーリングを用いて最適化して渋滞を解消する試みなどが有名である³³⁾。化学応用でも前節で簡単に紹介したタンパク質折り畳み問題への量子アニーリングの応用が2008年頃から検討されている^{34) 35)}。タンパク質折り畳み問題では一般に、二次元あるいは三次元格子の各格子点上にアミノ酸が位置するような粗視化したモデルを用いる。そして化学結合で繋がったアミノ酸は隣り合う格子点上に並ぶ、個々の格子点の一つのアミノ酸しか占有できないという拘束条件を課し、化学結合で繋がっていないアミノ酸が隣り合ったときにはアミノ酸間の相互作用によりエネルギーが変化するようなモデ

ルに対応するイジングハミルトニアンの基底状態探索を行う。この手法は粗視化モデルでの安定構造探索を行うため、計算で得られた構造と実験的な構造を比較するためには分子構造のリファインが必須となる。量子アプリケーションとしては、より高精度な計算による安定構造探索の前段階としてエネルギーが低そうな初期構造を探索する目的で使われると予想される。

3. 化学と量子アプリケーション開発

3.1 応用が期待される問題の例

量子コンピュータは原理的に古典コンピュータを凌駕しうるのだから、古典コンピュータでは問題サイズなどの観点から取り扱いが困難な系において特に量子アプリケーションの需要が見込まれる。ここまでは量子アルゴリズムの観点から化学向け量子アプリケーション開発について述べてきたが、ここでは視点を変えて、化学研究の立場から、どのような問題を解けるようになることが量子コンピュータに望まれているかについて実例を挙げて紹介する。無論であるが、ここで紹介する応用はあくまでも一例であり、このほかにもさまざまな応用が期待されている。

(1) 酵素反応メカニズムの解明

生体内のさまざまな酵素は常温・常圧条件下で化学反応が進行するような触媒作用を示すが、工業スケールで同様の化学反応を行うには高温・高圧や高価なレアメタル触媒が必要となることがある。代表例が大気中に存在する窒素分子をアンモニアや硝酸塩などに変換する窒素固定であり、工業的に使われているハーバー・ボッシュ法は全人類が消費するエネルギーの1%を、全二酸化炭素排出量の1.4%を占めている³⁶⁾。根粒菌などが持つニトロゲナーゼの酵素反応メカニズムの理論的解明は窒素固定触媒開発に重要な知見を与えるが、ニトロゲナーゼの活性中心FeMocoには鉄原子が7個、モリブデン原子が1個含まれ³⁷⁾、伝統的な量子化学計算でその電子状態を正確に記述することは非常に難しい。もしも量子コンピュータを用いて酵素の活性中心の高精度計算が可能になれば非常に有用だろう^{38) 39)}。

(2) 電池材料・分子材料設計

スマートフォンやノートパソコン、ワイヤレスイヤホンなど、われわれの生活に二次電池はなくてはならないものとなっている。より高速に充電でき大容量かつ劣化の少ない電池材料開発には大きな需要がある。また、有機発光ダイオード材料となる遷移金属錯体など、分子材料の理論設計も非常に重要な研究領域である。これら材料開発における候補分子は多種多様であり、量子コンピュータを用いることで理論計算による材料探索を効率化できればその恩恵は計り知れない^{40)~43)}。

(3) 創薬

われわれの生活を一変させてしまった新型コロナウイルス感染症 (COVID-19) の予防薬・治療薬の開発が望まれて

いるが、創薬には感染メカニズムの解明が欠かせない。COVID-19はウイルスが持つスパイクタンパク質が細胞表面のアンジオテンシン変換酵素2に結合することが引き金となる。その結合様式や結合生成によるエネルギー安定化機構の解明には実験的手法のほかに分子動力学計算⁴⁴⁾や量子化学計算⁴⁵⁾が用いられているが、計算対象の大きさをゆえにこれらの計算にはスパコンが用いられている。もしも量子コンピュータを用いて計算の高速化や必要なメモリーの削減ができれば創薬分野にも大きな貢献が見込まれる。

3.2 ハードウェアから眺めた現状

量子アプリケーションは量子コンピュータ上で実行するのだから、量子アプリケーションとハードウェアは切り離せない関係にある。本稿執筆時点で発表されている量子デバイスは量子ビット数が数個～数百個程度でノイズの影響が大きい中規模のもので、Noisy Intermediate-Scale Quantumの頭文字をとりNISQデバイスと呼ばれている。NISQデバイスでは量子ゲート実行時や測定時のエラー、デコヒーレンスなどさまざまな要因により、長い量子回路を実行したときに意味のある結果を得ることが難しい。複数の物理量子ビットで一つの論理量子ビットの量子状態を保存し、物理量子ビットに生じたエラーを検出・訂正できる量子誤り訂正符号が提案されているが⁴⁶⁾、NISQデバイスでは量子誤り訂正符号を実装し、複数の論理量子ビットを準備することが困難なため、エラーの影響を取り除くには、敢えてエラーの大きな計算を行い、外挿によりエラーなしの演算結果を推定するなどの量子誤り低減法(Quantum Error Mitigation)が使われている⁴⁷⁾。また、量子アルゴリズムは基本となる1量子ビットゲート、2量子ビットゲートから成る量子回路で実装されるが、例えば、超伝導量子ビットではカップラーで連結された量子ビット間でしか2量子ビットゲートを実行できないという制約がかかるため、物理的に隣り合わない二つの量子ビット間の2量子ビットゲートを減らすことが重要となる。

量子デバイスの進展はいくつかの方向性が考えられるが、多数の論理量子ビットを搭載した誤り耐性量子計算機が登場するまでは、ノイズの影響が残るNISQデバイスで量子ビット数を増やすという流れと、論理量子ビット数は少ないが量子誤り訂正を実装するという二つの流れが主流となると予想される。量子アプリケーション開発もこれらの流れを踏まえたうえで進めることが重要だろう。

3.3 量子計算ソフトウェアの現状

量子アプリケーション開発において、開発した量子アルゴリズムが正しく動作するかを実機を用いて検証することは現状難しい。NISQデバイスでは予想と異なる結果が得られたときに、量子アルゴリズム自体に問題があるのか、量子デバイスのノイズ・エラーの影響なのか判断できない場合があるからである。そこで、量子アプリケーション開発では現状、古典コンピュータ上で動作するエミュレー

タを使った数値シミュレーションが用いられる。エミュレータはIBMが開発したqiskit⁴⁸⁾やGoogleが開発したcirq⁴⁹⁾のほか、国内で開発されたblueqat⁵⁰⁾やqulacs⁵¹⁾などが知られている。これらエミュレータの歴史は5年程度と浅く、それ以前の量子アルゴリズム開発論文では数式を示すだけというものも少なくなかった。なかには任意の入力 x に対して出力 $f(x)$ を返す「ブラックボックス」を仮定しており、実装にはブラックボックスを具体的な量子回路の形に書き直す必要があるが、その量子回路の構築法が明らかでないものもある。一方、現在の量子アルゴリズム開発は数値シミュレーション結果を示さなければ論文化・発表が難しくなっている。これは量子アプリケーション開発のハードルが上がったように見えるが、実用化により近づいたという点で評価されるべきであろう。

エミュレータは量子状態をベクトル(一次元配列)で、量子ゲートは行列(二次元配列)で表現し、行列演算により計算を進める。エミュレータによる量子回路シミュレーションの計算コストは量子ビット数に対して指数関数的に増加するが、計算の中身は単純な行列演算であるので、さまざまな数値計算高速化テクニックが利用可能である。一例として、NVIDIAはGPU上で量子回路シミュレーションを実行できるライブラリーであるcuQuantumを2022年5月に発表している⁵²⁾。著者がcuQuantumを用いた数値シミュレーションを波動関数の時間発展に適用したところ、CPUのみを用いた場合と比較して9量子ビットで約3.3倍、19量子ビットで約32倍の高速化がみられ、特に量子ビット数が多いときの加速の効果が顕著であった。また、2021年ごろからテンソルネットワーク技術を用いることで計算を細分化し、量子状態ベクトルに基づくシミュレーション手法よりも多数の量子ビットを扱った数値シミュレーションが可能になってきた。テンソルネットワークに基づく手法は問題細分化のときに計算誤差が生じるほか、非常に長い量子回路のシミュレーションができないが、そもそもNISQデバイスでは実行できる量子回路が短いうえ、ノイズ・エラーの影響が避けられないので、テンソルネットワークによる数値シミュレーションはNISQアルゴリズムを扱うかぎり特に問題は起きないと考えられる。まえがきで紹介したゴードン・ベル賞を受賞した研究もこのような手法を用いている。

化学向けの量子アプリケーション開発という立場からは、任意の分子について、分子構造を入力すれば量子コンピュータで利用可能な量子ビットハミルトニアンが得られるようなインタフェースも重要である。先に述べたqiskitには量子化学計算向けのライブラリーが整備されているほか、オープンソースライブラリーであるOpenFermion⁵³⁾もよく利用されている。また、量子化学計算向けのクラウドサービス⁵⁴⁾や量子化学計算プラットフォーム⁵⁵⁾の整備も進められている。これらのライブラリーのほとんどは

pythonで書かれており、同じくpythonを使って開発された量子化学計算プログラムであるpyscf⁵⁶⁾やpsi4⁵⁷⁾とOpenFermionとのインタフェースも利用可能である。

3.4 化学に役立つ量子アプリケーション開発に向けて

3.1節では分子系に着目して、どのような化学問題を量子コンピュータで解けるようになることが望まれているかについて紹介した。ここでは量子アプリケーションの現状をふまえたうえで、量子計算の実用化にどのような機能の追加が望まれているかについて紹介する。

(1) 励起状態計算

量子化学計算では、入力された分子構造において最もエネルギーが低い状態(基底状態)の波動関数およびエネルギーを求めることが多いが、紫外可視光吸収スペクトルの理論計算や光反応経路探索には励起状態計算が必要となる。励起状態計算は量子位相推定では励起状態の近似波動関数を入力として用いることで可能となる⁵⁸⁾。VQEでは基底状態からエネルギーの低い順番に逐次的に励起状態を求める手法などが開発されている⁵⁹⁾。一般に、励起状態の波動関数は基底状態のものよりも複雑であり、励起状態を簡便かつ正確に求められる新規の量子アプリケーション開発は重要課題である。

(2) 強相関系

高校化学で習う化合物の多くは基底状態と励起状態がエネルギー的に離れており、基底状態の波動関数は単一の電子配置でよく近似できることが多い。しかし3.1節で紹介したニトロゲナーゼの活性中心のように分子が複雑になると基底状態と励起状態がエネルギー的に近接して、基底状態の波動関数を単一の電子配置で近似することができなくなる。強相関系と呼ばれるこのような系では、例えば定性的な計算結果が得たい場合であっても、より精密な量子化学計算が必要となる⁶⁰⁾。特に遷移金属錯体などではスピン状態が異なる電子状態がエネルギー的に近接することが多い一方で、分子物性はスピン状態に依存することから、正しいスピン状態について計算を進めることが必須となる⁶¹⁾。

(3) 分子構造最適化

量子化学計算は与えられた分子構造でのエネルギーを求めるが、計算前に分子構造が正確にわかっているという状況は少なく、分子構造を最適化する必要がある。分子構造最適化にはエネルギーの核座標微分が必要となる。VQEではアンサツとして波動関数の解析表現を持っているので、パラメータシフト則⁶²⁾を用いて解析微分を計算できる⁶³⁾⁶⁴⁾。一方、量子位相推定は測定による量子状態の射影を用いているため波動関数の解析表現が利用できず、数値微分に頼らざるを得ない⁶⁵⁾。エネルギーの核座標微分を効率的に計算する新規量子アプリケーションは実用計算になくてはならないものである⁶⁶⁾。

(4) 環境の効果の考慮

量子化学計算では通常、真空中、絶対零度を仮定した計

算を行う。しかし、例えば、タンパク質の生体内での機能を調べるにはタンパク質周囲に存在する水分子を無視するわけにはいかない。溶媒効果など、周辺の環境の効果を考慮した量子化学計算は量子アプリケーションという立場ではまだ発展途上であり⁶⁷⁾、さらなる進展が望まれる。

(5) 巨大分子の取り扱い

量子コンピュータによる計算高速化の恩恵として、より大きな分子系を露に扱えることが期待されているが、例えば量子コンピュータを用いて計算コストスケリングが改善されたとしても、やはり計算コストは分子サイズに依存する。より大きな分子系を量子コンピュータで扱うためには2.3節で紹介した分割統治法のほか、フラグメントMO法、ONIOM法など伝統的な量子化学計算で用いられてきた手法の活用が重要となるだろう。

実は、本当に役に立つ量子アプリケーションの開発にはこれら量子アプリケーションの適用範囲を広げるという観点だけでは不十分である。なぜならば、古典コンピュータで動作するアルゴリズムにも著しい進展がみられる場合があるからである。特に近年は深層学習など機械学習に基づく計算手法の進展が目覚ましく、数千原子から成る系の電子状態シミュレーションを秒単位で実行したり⁶⁸⁾、タンパク質の立体構造を高精度に予測したりすることが可能となってきている⁶⁹⁾。また、これまで開発されてきた量子アルゴリズムは、古典コンピュータで愚直に計算すると問題サイズに対して指数関数的なコストが必要となる問題について計算量スケリングの改善を示したものが多いが、実社会の問題ではそのような愚直な計算が必ずしも要求されるわけではないことにも注意がいるだろう。量子アプリケーション開発はこれらさまざまな背景をふまえたうえで進められるべきである。

4. 今後の展望

本稿では化学応用に焦点を当てて量子アプリケーションについて解説した。一般に、これら量子アプリケーションの実用化における最大のハードルはハードウェアの進展と思われがちであるが、実際には量子アルゴリズム側にもさまざまな課題があることがおわかりいただけたと思う。また、量子アプリケーション開発は量子コンピュータを用いた実用的な量子計算に必須であるとともに、量子コンピュータの応用先を実験に先駆けて理論的に示すことでハードウェア開発のモチベーションを上げるという二次的な効果も期待される。

量子コンピュータの化学応用はいつ頃実現するのだろうか。2020年末から2021年にかけて理論化学会が実施した「夢のテーマアンケート」⁷⁰⁾によると、「量子コンピュータによる大規模計算を利用した材料開発が可能になる」のは2039年、「量子コンピュータにおける化学反応の解析および予測が可能になり、工業スケールの反応シミュレ

ションを担うようになる」のは2043年、「理論計算において、量子コンピュータの利用者数が古典コンピュータの利用者数を超える」のは2050年と予測されている。もちろんこの予測通りに研究開発が進展する保証はないが、今年生まれた赤ちゃんが成人し、社会に羽ばたいていく頃には化学分野で量子アプリケーションが実用化されているかもしれない。この予想を実現するためにも、今後、なお一層の量子アプリケーション研究開発の進展が望まれる。

(2022年9月26日受付)

〔文 献〕

- 1) F. Arute et al., *Nature* **574**, 505-510 (2019)
- 2) Y. Liu et al., SC '21: Proceedings of the International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis, 3, 1-12 (2021)
- 3) P.A. M. Dirac, *Proc. R. Soc. London, Ser. A* **123**, 714-733 (1929)
- 4) A. Aspuru-Guzik et al., *Science* **309**, 1704-1707 (2005)
- 5) D.S. Abrams, S. Lloyd, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 5162-5165 (1999)
- 6) B.P. Lanyon et al., *Nat. Chem.* **2**, 106-111 (2010)
- 7) J. Du et al., *Phys. Rev. Lett.* **104**, 030502 (2010)
- 8) M. Motta et al., *Nat. Phys.* **16**, 205-210 (2020)
- 9) K. Sugisaki et al., *Comm. Chem.* **5**, 84 (2022)
- 10) Y. Wang et al., *ACS Nano* **9**, 7769-7774 (2015)
- 11) P.J. J. O'Malley et al., *Phys. Rev. X* **6**, 031007 (2016)
- 12) R. Santagati et al., *Sci. Adv.* **4**, eaap9646 (2018)
- 13) A. Peruzzo et al., *Nat. Comm.* **5**, 4213 (2014)
- 14) Y. Cao et al., *Chem. Rev.* **119**, 10856-10915 (2019)
- 15) M. Cerezo et al., *Nat. Rev. Phys.* **3**, 625-644 (2021)
- 16) K. Bharti et al., *Rev. Mod. Phys.* **94**, 015004 (2022)
- 17) M. Motta, J.E. Rice, *WIREs Comput. Mol. Sci.* **12**, e1580 (2022)
- 18) J. Tilly et al., *Phys. Rep.* **986**, 1-128 (2022)
- 19) P. Gokhale et al., *IEEE Trans. Quantum Eng.* **1**, 3102324 (2020)
- 20) J.F. Gonthier et al., *Phys. Rev. Res.* **4**, 033154 (2022)
- 21) J.R. McClean et al., *Nat. Comm.* **9**, 4812 (2018)
- 22) T. Yamazaki et al., *arXiv:1806.01305* (2018)
- 23) K. Fujii et al., *PRX Quantum* **3**, 010346 (2022)
- 24) T. Yoshikawa et al., *J. Chem. Theory Comput.* **18**, 5360-5373 (2022)
- 25) M. Metcalf et al., *J. Chem. Theory Comput.* **16**, 6165-6175 (2020)
- 26) E. Farhi et al., *arXiv:1411.4028* (2014)
- 27) S. Boulebnane et al., *arXiv:2204.01821* (2022)
- 28) <https://www.dwavesys.com/>
- 29) R. Xia et al., *J. Phys. Chem. B* **122**, 3384-3395 (2018)
- 30) M. Streif et al., in *Quantum Technology and Optimization Problems, QTOP2019, Lecture Notes I Computer Science* (S. Feld, C. Linnhoff-Popien, Eds.), Springer **11413**, 111-122 (2019)
- 31) A. Teplukhin et al., *Sci. Rep.* **10**, 20753 (2020)
- 32) A. Teplukhin et al., *Sci. Rep.* **11**, 18796 (2021)
- 33) F. Neukart et al., *Technol. Rep.* **4**, 29 (2017)
- 34) A. Perdomo et al., *Phys. Rev. A* **78**, 012320 (2008)
- 35) A. Perdomo-Ortiz et al., *Sci. Rep.* **2**, 571 (2012)
- 36) V. Kyriakou et al., *Joule* **4**, 142-158 (2020)
- 37) T. Spatzal et al., *Nat. Comm.* **7**, 10902 (2016)
- 38) M. Reiher et al., *PNAS* **114**, 7555-7560 (2017)
- 39) Z. Li et al., *J. Chem. Phys.* **150**, 024302 (2019)
- 40) Q. Gao et al., *J. Phys. Chem. A* **125**, 1827-1836 (2021)
- 41) S. Shirai et al., *ACS Omega* **7**, 10840-10853 (2022)
- 42) M. Motta et al., *arXiv:2208.02414* (2022)
- 43) S.N. Genin et al., *Angew. Chem. Int. Ed.* **61**, e202116175 (2022)
- 44) H.M. Dokainish et al., *eLife* **11**, e75720 (2022)
- 45) K. Akisawa et al., *RSC Adv.* **11**, 3272-3279 (2021)
- 46) D. Gottesman, *Phys. Rev. A* **57**, 127-137 (1998)
- 47) S. Endo et al., *J. Phys. Soc. Jpn.* **90**, 032001 (2021)
- 48) <https://qiskit.org/>
- 49) <https://quantumai.google/cirq>
- 50) <https://github.com/Blueqat/Blueqat>
- 51) Y. Suzuki et al., *Quantum* **5**, 559 (2021)
- 52) <https://developer.nvidia.com/cuquantum-sdk>
- 53) J.R. McClean et al., *Quantum Sci. Technol.* **5**, 034014 (2020)
- 54) <https://qunsys.com/services/qamuy/>
- 55) <https://www.quantinuum.com/products/inquantum>
- 56) Q. Sun et al., *WIREs Comput. Mol. Sci.* **8**, e1340 (2018)
- 57) J.M. Turney et al., *WIREs Comput. Mol. Sci.* **2**, 556-565 (2012)
- 58) N.P. Bauman et al., *J. Chem. Theory Comput.* **17**, 201-210 (2021)
- 59) O. Higgott et al., *Quantum* **3**, 156 (2019)
- 60) K. Sugisaki et al., *Phys. Chem. Chem. Phys.* **24**, 8439-8452 (2022)
- 61) K. Sugisaki et al., *Phys. Chem. Chem. Phys.* **22**, 20990-20994 (2020)
- 62) K. Mitarai et al., *Phys. Rev. A* **98**, 032309 (2018)
- 63) T.E. O'Brien et al., *npj Quantum Inf.* **5**, 113 (2019)
- 64) K. Mitarai et al., *Phys. Rev. Res.* **2**, 013129 (2020)
- 65) I. Kassal, A. Aspuru-Guzik, *J. Chem. Phys.* **131**, 224102 (2009)
- 66) T. Tamayo-Mendoza et al., *ACS Cent. Sci.* **4**, 559-566 (2018)
- 67) Y. Yoshida et al., *arXiv:2208.12487* (2022)
- 68) S. Takamoto et al., *Nat. Comm.* **13**, 2991 (2022)
- 69) J. Jumper et al., *Nature* **596**, 583-589 (2021)
- 70) 理論化学会将来構想委員会, 夢のテーマアンケート集計結果(2021年), <https://www.rkk-web.jp/future/>



杉崎 研司 2006年、大阪市立大学大学院理学研究科後期博士課程修了。同大学大学院理学研究科博士研究員、特任助教を経て、2016年より、特任講師。2019年より、さきがけ「革新的な量子情報処理技術基盤の創出」領域研究者。2022年より、さきがけ専任研究者。博士(理学)。



望月 祐志 1990年、北海道大学理学研究科博士後期課程修了。日本電気(株)、日本原子力研究所付き研究員、東京大学生産技術研究所プロジェクト研究員などを経て、2006年、立教大学助教授。2010年、立教大学教授。専門分野は量子化学・計算化学、フラグメントMO計算プログラム ABINIT-MPの取り纏め役。理学博士。