

氏名	山本 悟
学位の種類	博士 (理学)
学位記番号	第 6233 号
授与報告番号	甲第 3518 号
学位授与年月日	平成 28 年 3 月 22 日
学位授与の要件	学位規則第 4 条第 1 項該当者
学位論文名	<b>Theoretical Chemical Approaches for Molecular Spin Quantum Computers</b> <b>(分子スピン量子コンピュータに向けた理論化学的アプローチ)</b>
論文審査委員	主査 教授 佐藤 和信      副査 教授 八ッ橋 知幸 副査 教授 岡田 恵次      副査 講師 豊田 和男

### 論文内容の要旨

量子コンピュータは量子状態を量子ビットとして活用するコンピュータであり、近年、数学・物理・化学の広い分野で活発に研究されてきている。この量子計算における最大の特徴は、Shor の素因数分解に代表される量子アルゴリズムであり、市販の (古典) コンピュータが苦手とする問題を効率的に取り扱える点にある。現在、様々な量子系を用いた量子コンピュータが提案されているが、本研究では分子中の電子・核スピンを量子ビットとして用いる分子スピン量子コンピュータについて理論化学的視点から考察を行った。本博士論文は、5 章で構成されている。序論 (第 1 章) の研究背景に続き、第 2 章では DNA スピンラベル系の量子コンピュータに向けた応用研究を記した。ここでは、2 つのラジカル対が挿入された 22 塩基対の DNA の立体構造をパルス電子-電子二重共鳴 (ELDOR) 法および分子力学法により決定し、Lloyd モデルの量子コンピュータにおけるスピン鎖の配向制御を検討した。第 3 章では分子スピン量子コンピュータを用いた断熱的量子計算を目標に、理論的側面から実験手法の提案を行った。断熱的量子計算とは、実験系の Hamiltonian を操作し量子状態を目的の状態にゆっくりと変化させる量子計算モデルである。本章では、量子系の時間発展演算子を電子磁気共鳴 (ESR) 法によりシミュレートする方法で、断熱的量子計算をフタロシアニン誘導体 (3 電子系)・グルタコン酸ラジカル (1 電子 2 核系) 等の物質により実行可能であることを示した。第 4 章では、マイクロ波による核スピン状態の制御について、量子状態制御の観点から、適切なラジカル分子系や分子配向の検討を行った。第 5 章では、量子コンピュータによる量子化学計算の実行をテーマとし、配置状態関数を量子コンピュータに入力する量子アルゴリズムの研究を行った。この新規量子アルゴリズムが量子化学的に重要であることを示すと共に、理論的に分子スピン量子コンピュータのための少数量子ビットの実験を提示した。以上、本博士論文では、分子スピン量子コンピュータの実現に向けた化学系の知見・ESR 実験法の理論・新規量子アルゴリズムの発見に関する研究成果をまとめた。

### 論文審査の結果の要旨

量子コンピュータは量子状態を情報リソースとして活用する演算処理システムであり、近年、広い分野で活発に研究されている。量子演算における最大の特徴は、Shor の素因数分解に代表される量子アルゴリズムであり、現代の (古典) コンピュータが苦手とする問題を効率的に取り扱える点にある。様々な量子系を用いた量子コンピュータが提案されているが、本研究では分子中の電子・核スピンを量子ビットとして用いる分子スピン量子コンピュータについて理論化学的視点から考察を行っている。本論文は、5 章で構成されている。第 1 章の研究背景に続き、第 2 章では DNA スピンラベル系の量子コンピュータに向けた応用研究を記している。2 つのラジカル対が挿入された 22 塩基対の DNA の立体構造をパルス電子-電子二重共鳴 (ELDOR) 法および分子力学法により決定し、量子コンピュータにおける一次元 Lloyd モデルとしての課題を考察した。第 3 章では、分子スピン量子コンピュータを用いた断熱的量子計算を目的として、理論的側面から実験手法を提案した。量子系の時間発展演算子をパルス電子磁気共鳴 (ESR) 法によりシミュレートする形で、断熱的量子計算をフタロシアニン誘導体 (3 電子系)・グルタコン酸ラジカル (1 電子 2 核スピン系) 等の分子スピン系で実行可能であることを示した。第 4 章では、マイクロ波による核スピン状態制御について、適切なラジカル分子系や分子配向の検討を行った。第 5 章では、量子コンピュータによる量子化学計算を目的とし、配置状態関数を量子コンピュータに入力する量子アルゴリズムの研究を行った。

本博士論文は、分子スピン量子コンピュータの実現に向けた化学系知見・ESR 実験法の理論・新規量子アルゴリズムの開発に関して分子スピン系を対象とする量子情報科学に寄与するところが大きく、博士

(理学) の学位を授与するに値するものと審査した。