



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

Hamiltonian

NMR量子コンピュータと 量子計測応用（2）



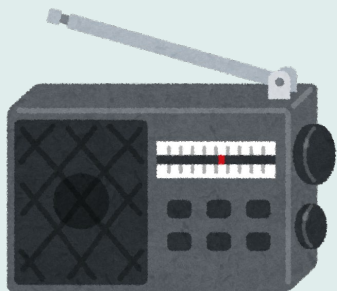
大阪大学
量子情報・量子生命研究センター
根来 誠

$|0\rangle + |1\rangle$

1. 前回のおさらい

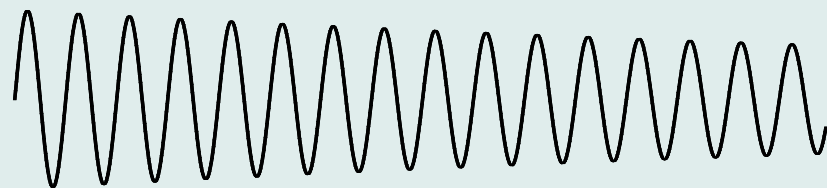
- 核スピン量子ビットの特徴：低エネルギー($< \text{GHz}$)

① ラジオ波パルスで制御



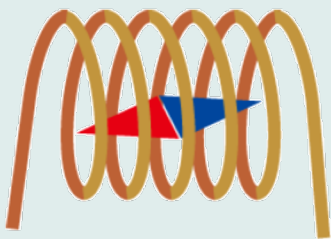
◎ 波形整形
が容易で制御
技術が発展

② コヒーレンス時間が長い



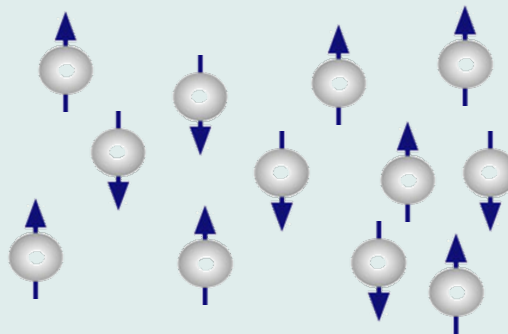
◎ 高忠実度操作・深い回
路が可能

③ 信号が弱い



測定技術が
発展

④ スピンの向きがばらばら



初期化
技術が
発展

2. 量子計測・センシングとは？

- 量子センシングの定義 [Rev. Mod. Phys. **89**, 035002 (2017)]

Degan-Reinhard-Cappellaroの定義(どれかを満たす)

[I] Qubit, qutrit, ..., qudit,
..., qunat(無限次元)を
用いて物理量を測定する。

$|2\rangle$ _____

$|1\rangle$ _____

$|0\rangle$ _____

[II] 量子コヒーレンスを用い
て物理量を測定する

$$|0\rangle + |1\rangle \rightarrow |0\rangle + e^{i\varphi}|1\rangle$$

[III] 量子もつれを用いて計測

$$|00\rangle + |11\rangle \rightarrow |00\rangle + e^{i2\varphi}|11\rangle$$

の感度や精度を、出来れば古典の限界を超えて向上する

2. 量子計測・センシングとは？

- 量子コンピュータのcriteria

DiVincenzoの認定基準 [Fortschr. Phys. **48**, 771 (2000)]

1. 性質が理解されたqubit系でスケーラブルに構成されている。
2. 初期化できること
3. コヒーレンス時間の方が量子ゲートより十分長いこと
4. 量子ゲートのユニバーサルセットが可能なこと
5. Qubitごとに状態測定できること

※計算能力の向上率よりもqubit数を増やすことによる労力(リソース)が上回らない時スケーラブルと言う。

例:NMRの疑似初期化はスケーラブルではない。

2. 量子計測・センシングとは？

- 量子センサのcriteria

Degan-Reinhard-Cappellaro [Rev. Mod. Phys. **89**, 035002 (2017)]

1. 性質が理解されたqubit (qutritなども可)系で構成されていること
2. Qubit系の初期化と状態測定ができること
3. Qubit系がコヒーレントに制御できること

↓量子センサ特有のcriteria

4. Qubit系が測りたい物理量 $V(t)$ と相互作用していること。その相互作用の係数が $\gamma = \partial^q E / \partial V^q$ の関数。

$$\text{Sensitivity} \propto \frac{1}{\gamma \sqrt{T_x}} \quad \swarrow \text{緩和時間}$$

↓量子もつれセンサ特有のcriteria (根来追記)

5. 量子もつれによる感度の向上率よりもqubit数を増やすことによる労力(リソース)が上回らないこと

3. 量子センシングデバイス

従来センサデバイス	センシング対象	量子センサデバイス
ホール素子、SQUID、 電気光学変調	電場・磁場	超伝導、NV
光干渉計	距離	量子性の高い光
気圧センサ	高度	原子気体qubit
ジャイロ스코ープ	慣性	原子気体qubit イオントラップqubit
ガラス電極pHセンサ	pH	ナノダイヤモンドNV アンサンブル分子NMR
グルコースセンサ	血糖値	アンサンブル分子NMR
パルスオキシメーター	生体内酸素	アンサンブル分子NMR

4. 量子センシングプロトコル

- 1qubit DCセンシングプロトコル

- 1qubit ACセンシングプロトコル

$$|0\rangle + |1\rangle \rightarrow |0\rangle + e^{i\varphi}|1\rangle$$

- T1 relaxometry, T2 relaxometry

$$|00\rangle + |11\rangle \rightarrow |00\rangle + e^{i2\varphi}|11\rangle$$

- 多qubitもつれセンシングプロトコル

N00N状態、スピンスクイズド状態

- 多qubitもつれrelaxometry: $|01\rangle - |10\rangle$ DFS

$$\frac{1}{T_1} \propto J_{11}(\omega_0) + J_{21}(\omega_0) + 4J_{22}(2\omega_0)$$

$$\frac{1}{T_2} \propto J_{10}(0) + J_{11}(\omega_0) + 3J_{20}(0) + 5J_{21}(\omega_0) + 2J_{22}(2\omega_0)$$

5. アンサンブル分子の超偏極MRI

- 対象はpH、生体分子、酸素
- 超偏極(初期化)核スピン状態をセンサ
- NMR量子コンピュータの特徴である制御性の良さとコヒーレンス時間の長さが武器
- 測定はラジオ波による電磁誘導検出を用いるので人体深部のイメージングが可能
- 代謝によるエネルギーシフト、分子間(リガンド-レセプタ)相互作用による環境変化に起因する緩和時間(もつれ状態含む)の変化
- 初期化技術とセンサのデリバリー技術が重要

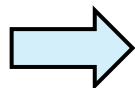
5. 溶解DNP技術

“Increase in signal-to-noise ratio of $> 10,000$ times in liquid-state NMR”

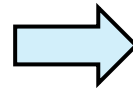
PNAS 100, 10158 (2003)

“Molecular imaging with endogenous substances” PNAS 100, 10435 (2003)

DNP (固体状态)
@ 3.4 T, 1.1 K



溶解
→ 室温



注入
@ 室温

10% (1万倍高感度)

0–5 s ($T_1 = 20$ s)

✓ 医療診断

preclinical [Nature Med. **13**, 1382 (2007)]

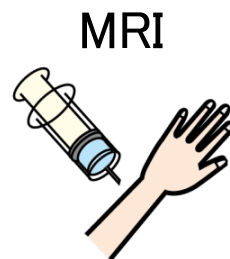
clinical [Sci. Trans. Med. **5**, 198 (2013)]

✓ 創薬

[Angew. Chem. Intl. **51**, 5179 (2014)]

✓ 材料分析

[J. Am. Chem. Soc. **135**, 4636 (2013)]



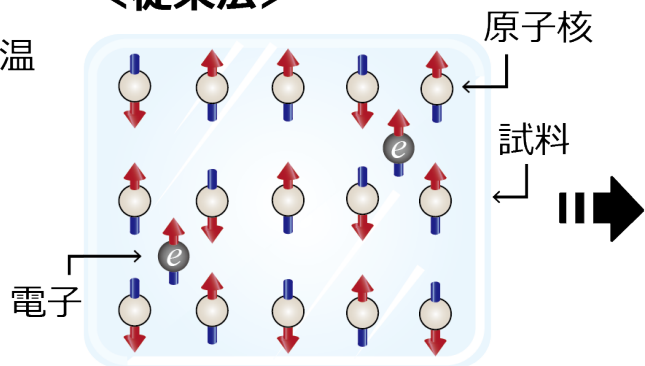
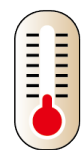
NMR



6. 光励起三重項電子を用いたDNP

<従来法>

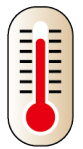
極低温



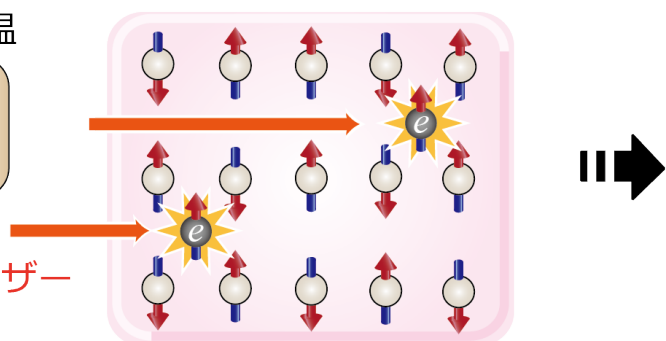
電子スピンの向きを揃える

<本方法>

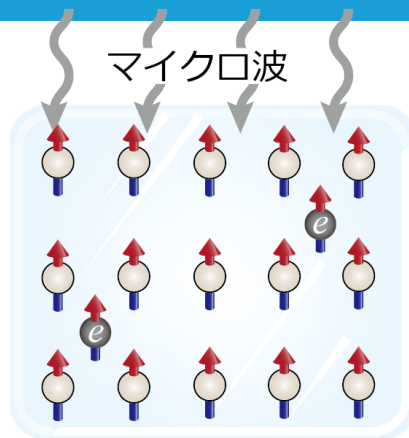
室温



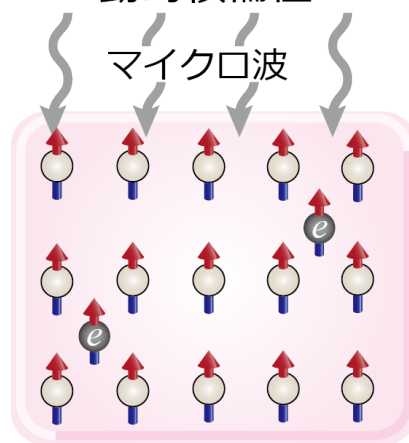
レーザー



マイクロ波



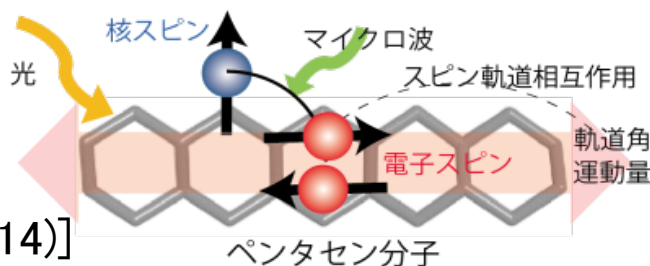
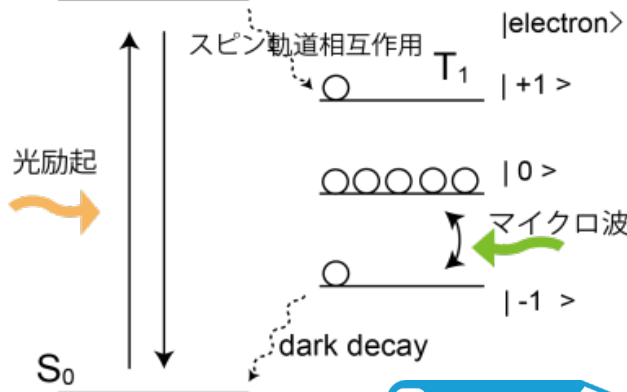
動的核偏極



極低温DNP法の偏極源：
熱平衡電子

トリプレットDNP法の偏極源：
光励起三重項電子

量子過程によって**温度と
磁場に依らず**高偏極状態
→低価格・省スペース化で
爆発的普及が期待

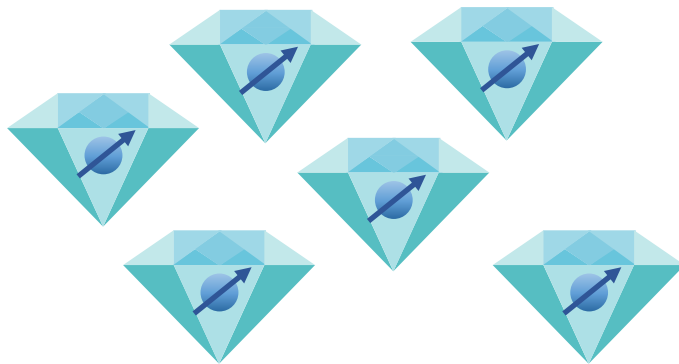
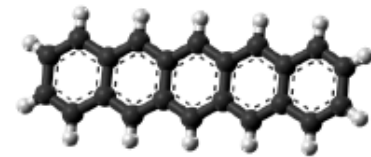
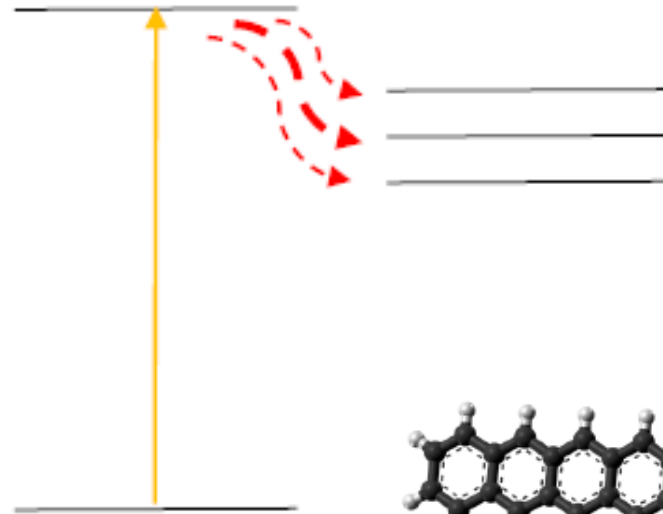
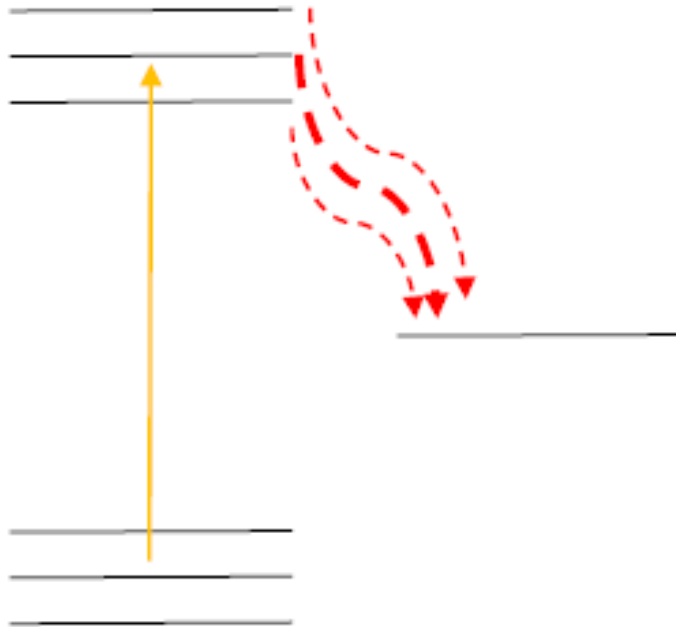


34%

[PNAS 111, 7527 (2014)]

7. NVとペンタセンの室温超偏極

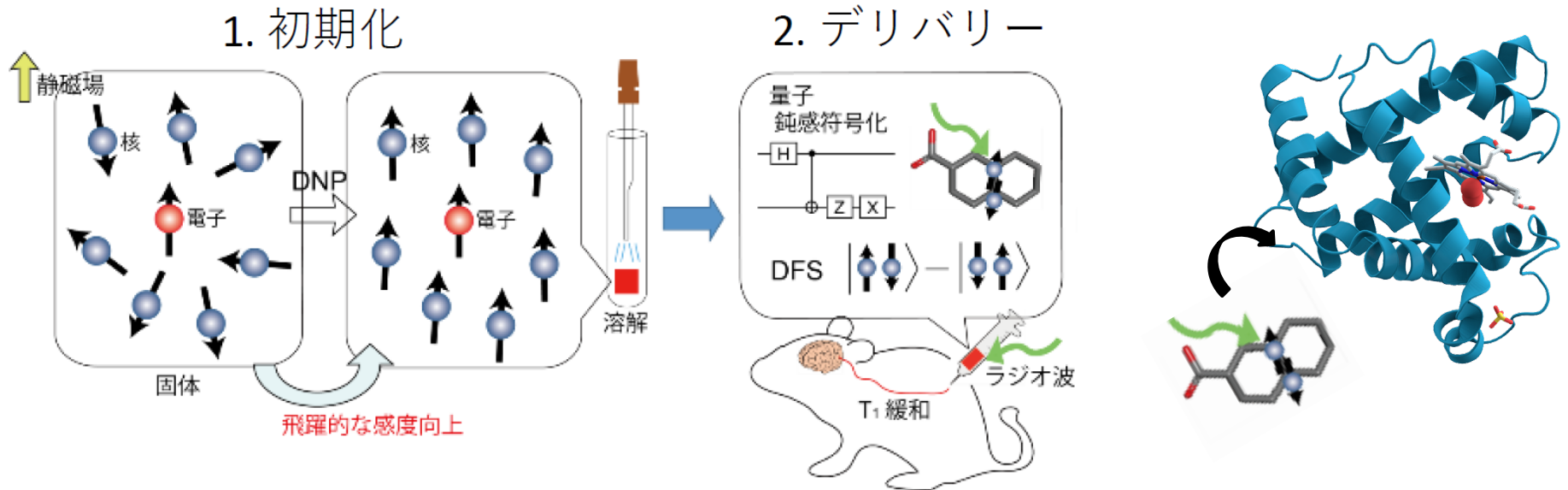
<https://doi.org/10.5194/mr-2020-36>



ペンタセンの場合分子レベルで混ざる。

NVセンターの場合ナノ構造で接触させる

8. 量子もつれ状態とRelaxometry



- 送達時の緩和を抑制するためDFSを用いる[PRL **92**, 153003 (2004)]
 - ・NMR量子コンピュータで実装[Science **293**, 2059 (2001)]
 - ・量子情報での提案[Proc. Royal Soc. A **452**, 1946 (1996)]
- Relaxometryとしてリガンドレセプタ相互作用を高コントラストに計測 [Quant. Sci. Tech. **5**, 052303 (2020)]

9. 応用およびその課題

- 薬剤スクリーニング
- pH、血糖値、酸素イメージング
- 抗がん剤治療効果判定



- 量子もつれ状態のRelaxometryは未開拓の分野
 - **ごく一部の分子**しか室温超偏極できていない
 - 室温超偏極溶解DNPの感度向上をさらに**10倍に**
- 量子情報・計測、化学、生物、薬学、医学の学際

10. より深く勉強したい方向けの文献

- 「量子計測と量子制御」(電子書籍)

執筆: 沙川貴大、上田正仁、出版社: サイエンス社(2015)

- “Quantum Sensing”

C. L. Degan, F. Reinhard, P. Cappellaro, Rev. Mod. Phys. **89**, 035002 (2017)

「量子センシングハンドブック」で
検索 NTS出版2月発刊予定

馬場、波多野、香取、八巻、大島、
水落、寺地、清水、枝松、中川、柴
田、根来、五十嵐、武田、湯川（敬
称略）ら執筆

