

固体中のスピン量子ビットのコヒーレンスに対する一般化スケーリング

金井 駿 (東北大学電気通信研究所 skanai@tohoku.ac.jp)

色中心のスピンは固体中で外場から孤立した安定な量子ビットを構成する。中でも傑出したスピンコヒーレンス特性を持つダイヤモンド中の窒素-空孔複合体中心(ダイヤモンドNV中心)は、量子ビットの最も確立された材料系であり、量子計算、量子テレポーテーション、量子暗号通信、量子センシングなど、多彩な量子機能性を実現してきた。

近年、ダイヤモンドNV中心と類似の磁氣的、光学的性質を持つSiC中の空孔-空孔複合体中心(VV中心)が、新たな固体中のスピン中心として理論的に提案され、実験実証された。SiCはダイヤモンドと比較して安価であり、また成熟した基板作製技術やドーピング制御技術が利用可能であることから、高度な電氣的制御と検出をはじめとした新しい応用が期待されている。これまでに主に注目されてきた材料系とは異なる特長を持つ材料による、新たな量子機能を模索する機運が高まった。

電子スピンの量子ビット応用の可能性を決める性質の中で、量子情報を保持することが可能な時間は、忠実度を決める最も重要な特徴の一つである。特に、電子スピンのコヒーレンス時間(T_2)はスピン中心と外場、すなわち母体材料との熱的、磁氣的、電氣的相互作用により決定され、材料の量子情報の保持時間の上限を決定する。ダイヤモンドやSiCのような単結晶のワイドギャップ材料においては、 T_2 は電子スピン-核スピンの磁氣的相互作用に支配される。磁氣的相互作用を加味した T_2 は、密度行列の時間発展により計算され、ごく簡単な系に対する厳密解が半世紀前には既に報告されていた。一方、スピンダイナミクスに数千の核スピンが関連する実材料に対しては、莫大な計算コストにより T_2 の計算は不可能であると考えられてきた。

最近、計算規模を大幅に低減するクラスター相関展開(CCE)近似を適用することで、数日~数分で数値計算された T_2 が実験結果を精度良く再現することが明らかになった。CCE近似による T_2 計算を量子材料探索に適用することで、優れた T_2 が得られる量子ビット材料を同定することが可能である。

T_2 は有限の磁気モーメントを持つ核スピンの濃度に反比例(指数-1.0でスケール)することが理論と実験両面から知られている。我々は、CCE近似に基づく T_2 計算から、この濃度に対する T_2 のスケーリング関係を確認し、この関係が量子ビット向けの材料では結晶構造に依存しないことを明らかにした。さらに、 T_2 のスケーリング関係を核スピンのスピン量子数、核スピンの g 因子、電子スピンの g 因子に拡張し、それぞれに対するスケーリング関係が独立であることを明らかにした。母体材料の磁氣的相互作用はこれらの核スピン物理量により一意に決まるため、単体材料に対する T_2 の代数表現を得ることに成功した。また、単体材料の T_2 から精度良く化合物材料の T_2 を導く手法を明らかにし、最終的に一般の化合物材料に対する T_2 の代数表現を得た。

本表現により T_2 を瞬時に予測可能である。結晶構造データベース上の12,000種のワイドギャップ材料について T_2 を予測し、ミリ秒~数十ミリ秒の優れた T_2 が予測される天然材料を約800種明らかにした。このうち、ミリ秒のコヒーレンスが予測される材料は、SiC以外はすべて酸化物およびカルコゲナイドであることがわかった。最近の固体中のスピン中心を用いた新しい量子情報研究の機運が高まることが期待される。

用語解説

色中心、ダイヤモンドNV中心:

発光中心ダイヤモンドを構成する炭素原子の一つが窒素(N)で置換され、窒素に隣接する一つの炭素原子位置に空孔(V)が存在する複合体欠陥中心。特にNV中心に電荷が一つ束縛されたNV⁻中心は、スピン1の基底状態を形成し、項間交差を介して無偏極光によるスピン状態の初期化や検出が可能である。

スピンコヒーレンス、コヒーレンス時間(T_2):

量子的性質の一つである重ね合わせの可能性をコヒーレンス、それを保持可能な時間をコヒーレンス時間 T_2 と呼ぶ。

忠実度:

ある量子操作を物理系で実行した際に、意図した量子状態が取り出される確率。大雑把には、 T_2 とビット操作や通信にかかる時間の比が計算や情報伝達の忠実度を決める。

クラスター相関展開近似(Cluster correlation expansion 近似, CCE 近似):

系全体の自由エネルギーを、系を構成する比較的小さなクラスターに展開し、クラスター内の自由エネルギーとその相互作用により系を再度記述する近似方法。例えば、ダイヤモンド中のNV中心のコヒーレンスを決める電子スピンと数千個の核スピンの多体相互作用を、電子スピン-2つの核スピンの三体相互作用に分離し、その組み合わせを変えて効果を合成する近似手法。