

令和 6 年 5 月 28 日現在

機関番号：17102

研究種目：基盤研究(B)（一般）

研究期間：2021～2023

課題番号：21H01742

研究課題名（和文）量子コンピュータとトンネル電流計測による高速分子識別技術の研究開発

研究課題名（英文）Quantum computing for robust molecular identification by quantum tunneling

研究代表者

多田 朋史（Tada, Tomofumi）

九州大学・エネルギー研究教育機構・教授

研究者番号：40376512

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 13,400,000 円

研究成果の概要（和文）：本研究は、多田（代表者）と谷口（分担者）による基盤研究であり、多田が量子回路設計、量子コンピューティング、成果取りまとめを担当し、谷口が分子伝導計測を担当した。DNAの基本塩基分子である、アデニン、グアニン、チミン、シトシン、それぞれの電極とのナノコンタクト構造におけるトンネル伝導パターンを、伝導のための分子軌道ルールに基づいて量子回路を設計し、量子回路上でトンネル伝導という量子現象を再現することに成功した。量子回路に流れる情報はユニタリー変換に対応することに着目し、上述の量子回路を逆向きに構築することで、伝導パターンから分子を特定するという逆問題を量子計算で実行可能となる手法を構築した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

新型ウイルスの脅威と闘い続ける宿命をせおった我々によって、単分子レベルで分子識別する技術の構築は大きな希望となる。本研究は、単分子上を流れるトンネル伝導パターンからその分子を特定するという逆問題を量子計算で実行可能となる手法を構築したものである。量子コンピュータ開発はまだ完成の域には達していないが、量子コンピュータを利用することの有効性を示すアプリケーションの一つとしても本研究成果には大きい意義がある。

研究成果の概要（英文）：This is a fundamental research for single molecule identification proposed by Tada (Principal Investigator) and Taniguchi (Co-Principal Investigator), in which Tada was in charge of quantum circuit design, quantum computing, and compilation of results, and Taniguchi was in charge of molecular conduction measurements. The quantum circuit was designed based on the molecular orbital rule for tunneling conduction, and the quantum phenomenon of tunneling conduction was successfully reproduced on the quantum circuit. Since the information flowing in a quantum circuit corresponds to unitary transformation of quantum states, we constructed a method that makes it possible to perform the inverse problem of identifying molecules from conduction patterns by quantum computation, by constructing the quantum circuit for tunneling process in the reverse direction.

研究分野：量子化学

キーワード：量子コンピュータ トンネル伝導 単分子 分子軌道 逆問題

様式 C - 19、F - 19 - 1 (共通)

1. 研究開始当初の背景

科学技術の発展により、いまや人類は単原子や単分子を実験的に観測・操作する技術を手にするに至った。これは、自然界の現象のみならず我々の生活に関わる出来事を究極的に細分化した際、単原子や単分子レベルでその現象の原因を追跡できる可能性を手にしたことを意味する。新型コロナウイルスの脅威と闘い続けねばならない人類の宿命を考えた際、この可能性は人類にとって大きな希望である。しかし現状では、小さな母集団の中から単分子を識別する場合であっても数時間から数日を要し、この状況の打開が急務である。ウイルス等を含む微量な化学物質を高速に識別する新しい技術の必要性が重要視されている。微量かつ高速識別のためには、分子上を流れる電流を識別用シグナルとして分子識別する手法が高速識別法の候補の一つとして考えられており(Nat. Nanotech., 2010)、医学の最先端分野では基礎疾患における未解明問題に同手法を活用する取り組みが進められている。ただし、電流測定そのものは高速に行えるが、そのシグナルを分析し分子を決定するプロセスには膨大な数の候補分子を組み合わせて比較検証する必要があり、このプロセスに膨大な時間がかかっているのが現状である。このシグナル分析の問題は、一種の探索問題とも言い換えることができ、その観点で考えれば未来の計算機として期待されている量子コンピュータの利用が想起される。「量子コンピュータ」は、従来のコンピュータとは全く異なる新しい情報処理の仕組み(ビット情報の量子重ね合わせ)を用いるコンピュータであり、従来のコンピュータで解こうとすれば途方もない計算時間が必要な問題(それゆえ実質的には計算不能)を短時間で解くことのできる革新的なコンピュータとして期待されている。Google、IBMなどが、その先頭に立って開発を進めており、年々量子コンピュータ実現の可能性が現実味を帯びてきている(小規模の試作機 IBM-Q は既に利用可能である)。その一方で、実質的に量子コンピュータが古典コンピュータを凌駕するような計算機になるまでには膨大な量子ビットがノイズ耐性を保持した状態で制御することが必須となり、そのような量子コンピュータが実現できるまでにはまだ数十年以上も先になると考えられている。そこで近年は、小規模かつノイズを含んだ状態での試作型量子コンピュータ NISQ (Noisy Intermediate-scale Quantum) を用いた上で、量子の特徴を生かした有効なアプリケーションを探し、という方向性の研究も盛んになされている。ただ、決定的なものが未だ存在しないのも現状である。

2. 研究の目的

本研究代表者は電流が分子を流れる際、分子という小さなスケールにおけるトンネル電流は量子力学的現象であり、それゆえ分子固有の複数の電流経路を「量子重ね合わせ」として量子コンピュータ上で表現できることを見出した(特願 2019-230969)。これにより、伝導度の類似性を意識することなく、トンネル電流測定結果をインプットとし、電流経路の量子重ね合わせ表現(量子回路)を用いた量子コンピューティングにより、多様な電流シグナルが分子ごとの単純なシグナルに分離でき高速分子識別が可能になるという本研究構想に至った。つまり、本研究は単分子に流れる多様なトンネル電流を NISQ 量子コンピュータで高速分離することで分子識別時間を飛躍的に加速しうる新手法を確立することを目的としたものである。本技術の確立は、高速分子識別が NISQ 量子コンピュータの決定的アプリケーションともなり得ることを意味し、それは量子コンピュータ開発を更に加速することにも貢献し、結果として本格的量子コンピュータ時代の到来を大きく手繰り寄せることにもなり得る意義をもつものである。

3. 研究の方法

分子識別問題として DNA 塩基分子であるアデニン(A)、チミン(T)、グアニン(G)、シトシン(C)の四候補の中から、アデニンを本手法により識別することを考える。識別手順は、1) 単分子トンネル電流測定、2) 電流シグナルを量子ビット情報に変換(量子符号化)、そして3) 量子

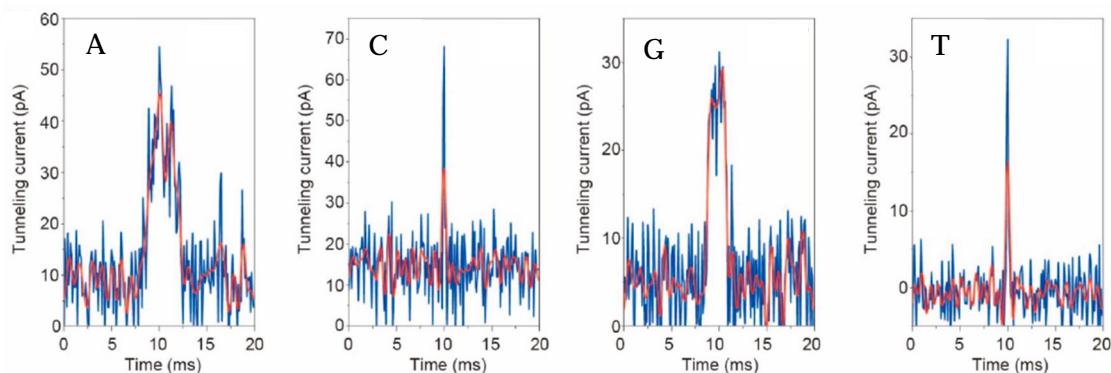


図1 : A, T, G, C の単分子トンネル伝導計測データ

コンピューティングによる電流シグナル分離、というシンプルなものである。手順1における各分子のトンネル電流計測データサンプルを図1に示した。一見、二つのグループに分けられそうではあるが(A&GとT&C)、AとGの区別はこの伝導データだけでは困難であることが分かる。手順2として、電流シグナルを量子ビット情報に変換することを考える。ここで、単分子伝導理論(図2)を用い、分子軌道法に基づいた伝導経路パターンの解析を行うことで、電流値を高/中/低の3領域に分離し、中伝導経路が高伝導経路と低伝導経路との量子重ね合わせで出現するという仮想モデルをもとに電流シグナルを量子ビット情報に変換した。これにより、高伝導経路と低伝導経路の重ね合わせ度合いの程度(数値)を量子回路に組み込むことが可能となり、トンネル伝導そのものを量子回路上に構築することが可能となった(図3、[1])。

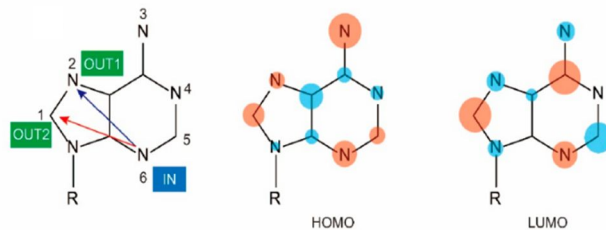


図2：アデニン(A)の分子軌道と、高伝導度/低伝導度を与える伝導経路パターン(左)

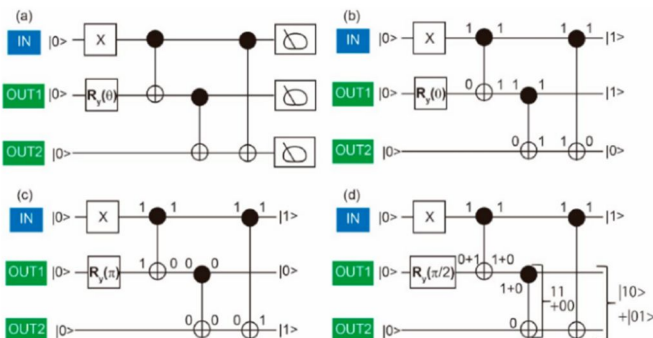


図3：(a)アデニンの伝導経路に対応する量子回路。(b)高伝導、(c)低伝導、(d)両者の重ね合わせ。

4. 研究成果

トンネル伝導現象を量子回路上で表現するという事は、同現象を時間が自然に経過するままにトンネル電子の流れを記述することに対応する。量子コンピュータが量子回路上で表現する情報処理はユニタリ変換であるため、そのトンネル電子の流れに対応する量子回路をそのまま逆向きに処理すれば、トンネル伝導現象を時間を遡って記述することに対応する。そこで、図3で得た量子回路を逆向きに配置し(図4のDiscriminator)、伝導度(数値)を量子回路にインプットする量子ゲートを組み込むことで(図4のEncoder)、検出された伝導データをインプットとし、そのデータがどの分子由来なのかを逆推定する量子回路を構築した(図4)。

IBM-Quantumの実機を量子シミュレーターを用いて、アデニン伝導計測データを識別した結果が図5である(青：実機、緑：量子シミュレーター)。識別強度は、アデニン(A)として識別されたものが実機、量子シミュレーターともに最も高く、他のC,G,Tと誤って識別されたものは明らかに低い値にとどまっている。この結果より、今回の一連の手法が分子識別に有効であることが実証できた[1]。

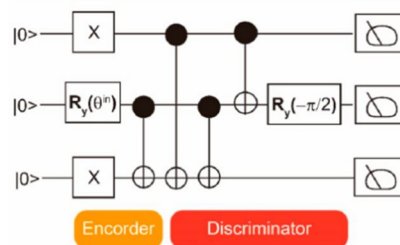


図4：量子逆推定用(アデニン用)量子回路

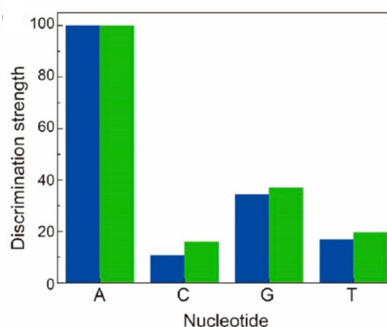


図5：アデニン量子識別結果

<引用文献>

[1] Single-Molecule Identification of Nucleotides Using a Quantum Computer, Masateru Taniguchi, Takahito Ohshiro, Tomofumi Tada, The Journal of Physical Chemistry B, 127, 6636-6642 (2023).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計4件（うち査読付論文 3件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Shu Kanno and Tomofumi Tada	4. 巻 6
2. 論文標題 Many-body calculations for periodic materials via restricted Boltzmann machine-based VQE	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Quantum Science and Technology	6. 最初と最後の頁 25015
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1088/2058-9565/abe139	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 多田朋史	4. 巻 6
2. 論文標題 分子を流れるトンネル電子が導く未来に想いを馳せる	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 化学と工業	6. 最初と最後の頁 391,391
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Kanno Shu, Endo Suguru, Utsumi Takeru, Tada Tomofumi	4. 巻 106
2. 論文標題 Resource estimations for the Hamiltonian simulation in correlated electron materials	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review A	6. 最初と最後の頁 012612-1,9
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevA.106.012612	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Taniguchi Masateru, Ohshiro Takahito, Tada Tomofumi	4. 巻 127
2. 論文標題 Single-Molecule Identification of Nucleotides Using a Quantum Computer	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 6636 ~ 6642
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1021/acs.jpcc.3c02918	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計3件（うち招待講演 2件 / うち国際学会 0件）

1. 発表者名 谷口正輝、大城敬人、多田朋史
2. 発表標題 量子コンピュータを用いた1分子識別法の開発
3. 学会等名 第83回応用物理学会秋季学術講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Tomofumi Tada
2. 発表標題 Frontiers of Computational Materials Exploration Based on First Principles Calculations
3. 学会等名 Mini-Symposium on Innovative Visualization for Materials Science (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 多田朋史
2. 発表標題 量子デバイス設計のための理論研究と量子アルゴリズム開発
3. 学会等名 量子ネイティブ育成研究シンポジウム（招待講演）
4. 発表年 2024年

〔図書〕 計0件

〔出願〕 計0件

〔取得〕 計1件

産業財産権の名称 量子コンピュータおよびその制御方法、量子もつれ検出装置および量子もつれ検出方法、並びに分子特定装置および分子特定方法	発明者 谷口正輝、多田朋史	権利者 同左
産業財産権の種類、番号 特許、特願2021-565700	取得年 2023年	国内・外国の別 国内

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究 分 担 者	谷口 正輝 (Taniguchi Masateru) (40362628)	大阪大学・産業科学研究所・教授 (14401)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関