

## CASE 1

CO<sub>2</sub> 量子コンピューターによる  
振動エネルギーの計算

量子コンピューターは量子2準位系である量子ビット(qubits)によって構成される。

$N$ 量子ビットからなる量子コンピューターを用いれば、 $2^N$ の状態の重ね合わせ状態を記述することができる。

そのため、量子コンピューターの分子の電子状態計算への応用に関心が寄せられてきた。

一方、分子の量子状態を記述する際には、分子の振動状態を記述することも必要となる。

我々は二酸化炭素分子(CO<sub>2</sub>)の振動準位(図(a))のエネルギーと振動波動関数の計算を

量子計算機*ibm\_kawasaki*<sup>1)</sup>を用いて行い、量子計算によって振動波動関数と振動準位のエネルギーを求めた<sup>2,3)</sup>。

我々は、温室効果ガスとしても知られている三原子分子CO<sub>2</sub>の振動準位エネルギーを計算するために、変分量子固有ソルバー (variational quantum eigensolver: VQE) 法<sup>4)</sup>を採用した。VQEでは、変分パラメーターに依存する波動関数を量子コンピューター上で記述し、古典コンピューターを用いた最適化アルゴリズムによって変分パラメーターを最適化させ、エネルギーが最小値となるようにエネルギーの近似値を得る。すなわち、量子コンピューターと古典コンピューターの両方を使うハイブリッド方式によって最適エネルギーを求めた。

図 (b,c) に量子計算によって得られたCO<sub>2</sub>のFermi二重項のうちのエネルギーの低い方の準位のエネルギーを示す。これは、VQE法を改良した縮小多準位縮約変分量子固有ソルバー (reduced multistate contracted variational quantum eigensolver: RMC-VQE) と呼ばれる方法<sup>3)</sup>によって得られたものである。このRMC-VQEでは、必要となる行列要素のみを量子コンピューターによって求め、それ以外の行列要素を古典コンピューターで求めている。このような方式をとるのは、現時点で利用可能な量子コンピューターを用いる場合、さまざまな種類のノイズのために量子演算の結果にエラーが含まれてしまうため、そのエラーの影響を軽減するためである。そして、量子コン

ピューターを用いて評価された行列要素の値についてはエラーを適切に補正する必要がある。

図 (b,c) に示したヒストグラムは、Hamiltonian行列を100回計算し、その都度、対角化して得られた結果を示したものである。行列要素の計算においては、それぞれの量子回路を8192回実行し、その平均値を求めている。この図に示されているように、RMC-VQE法によって得られた準位エネルギーの平均値は、エラー補正の前でも、古典コンピューターで求めたエラーの影響を含まない計算値からの隔たりは約0.2 cm<sup>-1</sup>と小さく、エラー補正後は、隔たりはさらに小さく約0.05 cm<sup>-1</sup>となっている。このことは、RMC-VQE法を用いた上でエラー補正を適切に行えば、量子コンピューターによって、CO<sub>2</sub>分子の振動準位のエネルギーを高い精度で求められることを示している。

本研究では、分子の電子状態の計算<sup>5)</sup>だけでなく、分子の振動状態の計算においても、量子計算が将来役立つ手法となることを示している。今後、よりサイズの大きな多原子分子の振動準位の計算に、量子コンピューターが活用されていくと期待される。

本研究はErik Lötstedt *et al.*, *AVS Quantum Science* 4, 036801 (2022) に掲載された。

(2022年7月14日プレスリリース)

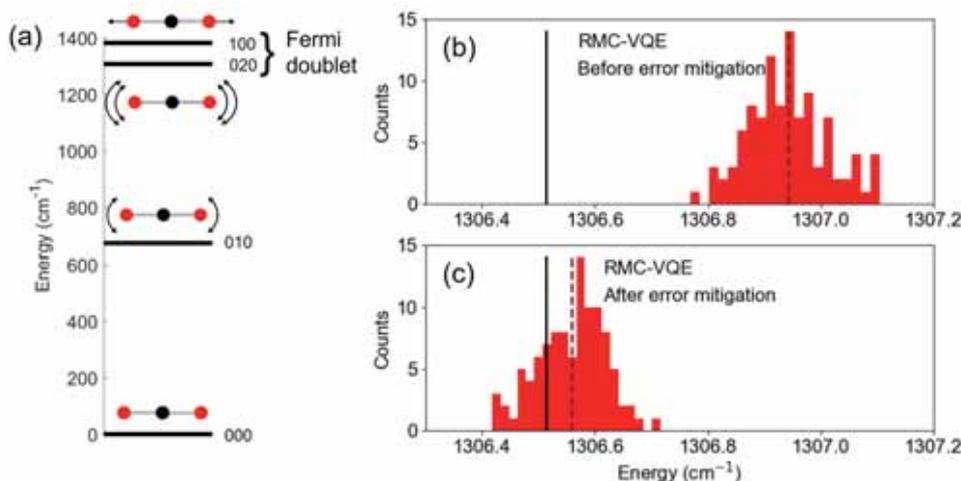


図:(a) CO<sub>2</sub>の振動エネルギー準位。(b,c) Fermi二重項のうちの低い方の準位のエネルギーのヒストグラム。RMC-VQE法によって得られたエラー補正無しの場合(b)と有りの場合(c)を比較している。垂直の実線は、古典コンピューターを用いて得られた準位エネルギーの厳密解を表す。垂直の破線は、RMC-VQE法によって得られた準位エネルギーの平均値を表す

## CASE 2

# 革命的スピントロニクス 幻の粒子が創る

ディラック方程式の質量ゼロの解, ワイル粒子。

一度はニュートリノを記述するかと思われたが幻に終わった。しかし, このワイル粒子が近年, 磁性体の中で見つか, 物性物理やスピントロニクスの世界で大きな注目を浴びている。

その理由はワイル粒子を電流で制御できるだけでなく, それが次世代の超高速・超低消費電力なメモリとして有用であることを室温で実証したからだ。その磁性体は反強磁性体と呼ばれ, 磁石として知られる強磁性体より2桁以上も高速で動作する可能性を秘める。

東京大学のチームは世界で初めてこの「ワイル反強磁性体」の電流による完全制御に成功した。



イギリスの物理学者ポール・ディラックが量子論を相対論へ拡張するためにディラック方程式を考案したのは1928年。その翌年に, ドイツの数学者ヘルマン・ワイルは質量を持たないディラック粒子の解を見出した。これはワイル粒子とも呼ばれ, 長らくニュートリノを記述する素粒子解として研究されてきた。しかし, 東京大学の研究チームによるスーパーカミオカンデでの実験を機にニュートリノは質量を持つことが発見され, ワイル粒子は実際には存在しない, 「幻の粒子」と思われてきた。そのワイル粒子が, 近年, やはり東京大学のチームによって磁性体の中で発見された。その磁性体の名前は「反強磁性体」。これは磁石として馴染み深い強磁性体とは全く異なる性質を持つ。例えば, 強磁性体は周りに磁力線を出すように磁化を持っているが, 反強磁性体は磁化を持たない。

強磁性体は紀元前から羅針盤として利用されてきた。また, 電磁誘導を利用したモータや発電に欠かせない物質である。最近では, スマートフォンのバッテリーを長持ちさせるための待機電力のいらない(不揮発性)メモリにも使われるようになってきている。一方で, 反強磁性体は磁化を持たないので, 誰もその存在に長らく気づかず, 人類が初めてその存在を確認したのは約70年前。しかし, 今, この反強磁性体が強磁性体よりも優秀なメモリ材料であるとして, 全世界の科学者の熱い視線を集めている。周りに漏れ磁場を出さないで, メモリの細密化にベストなだけでなく, その動作速度も強磁性体のメモリより2桁も早くなるという。

上述の磁性体で発見されたワイル粒子のおかげで, この磁化を持たない反強磁性状態は簡単に検出できるようになる。ワイル粒子は電子の持つ量子力学的位相の効果を巨視的に増強する性質を持ち, これが検出信号を通常よりも100倍から1000倍以上に大きくする。たとえば, 強磁性体でしか見られなかった異常ホール効果が最近, 反強磁性体でも検出できることが発見された。これはワイル粒子のおかげであるが, 19世紀の後半にホール効果が発見されて以来, 実に1世紀を経ての快挙である。

このワイル粒子を持つ反強磁性体「ワイル反強磁性体」をメモリに使うためには, 磁場でなく電流によって, 反強磁性状態が示す0と1の二値の信号を完全に制御可能にする必要がある。これを世界で初めて, かつ, 室温で実現したのが今回の成果である。電流で反強磁性状態の0と1の状態を完全に制御できることを示した本成果は, 将来, 10ピコ秒程度でワイル粒子を制御し, 情報演算を行うことが可能になることを意味している。

このように素粒子や宇宙分野の概念が物性物理で活躍し, 新しい物性分野を切り拓こうとしている。さらに, それは, 未来の応用技術の構築にもつながっている。

本研究成果は, T. Higo *et al.*, *Nature* 607, 474 (2022) に掲載された

(2022年7月21日プレスリリース)

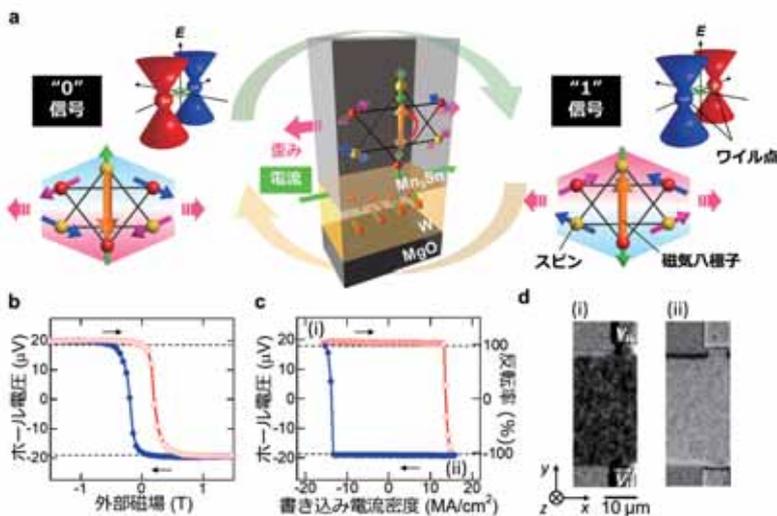


図: ワイル反強磁性体  $Mn_3Sn$  素子での電氣的書き込み実験の概要図

(a) ワイル反強磁性体  $Mn_3Sn$  と重金属  $W$  からなる反転素子における電流でのワイル粒子対の分布とその電流制御の概要図。書き込み電流の向きを変えることで,  $W$  中で発生するスピンの向きも変わり,  $Mn_3Sn$  の反強磁性秩序とそれに対応したワイル粒子の対の向きが制御できる。その結果, ワイル粒子の作る0と1の情報に対応する検出信号を用いた書き込み・読み出しができる。(b)  $W/Mn_3Sn$  素子におけるホール電圧の磁場依存性。磁場依存性では外部磁場は膜面直方向に印加している。(c)  $W/Mn_3Sn$  素子におけるホール電圧の書き込み電流依存性。右側の縦軸が示す様に100%の反転率を示している。(d)  $W/Mn_3Sn$  素子の反転実験時の磁気光学カー効果顕微鏡像。 $x$ 方向に書き込み電流を流すことで磁気八極子偏極に対応して素子の全域が黒からグレーへと反転している。 $V_H$ はホール電圧の読み出し端子。(i)と(ii)は図(c)中の(i)と(ii)での素子の観察像に対応

# 研究最前線

## CASE 3

### エピゲノムの書き込み様式 機械学習で紐解く

生命の設計図としてはたらくゲノムには  
ところどころ付箋のように多様な化学修飾が  
付加されており、エピゲノム修飾と呼ばれる。  
このエピゲノム修飾は、細胞の分裂にともなって  
ゲノムが複製される過程や、  
生育環境の変化に応じて  
絶えず書き込まれたり消去されたりする。  
ゲノム中のどこにどのエピゲノム情報が  
書き込まれるかを決定している仕組みは  
よくわかっていない。  
われわれは、植物を使った実験と  
機械学習を用いた解析により  
その仕組みの一端を明らかにした。

あらゆる生物の設計図であるゲノムは DNA の 4 種類の塩基の並び順で記述されている。ゲノムは、その生物を構成するすべてのタンパク質の構造を網羅した辞書のようなものだ。多くの生物において、DNA の 4 塩基で書かれた辞書には、付箋や蛍光マーカーのような、エピゲノムと呼ばれる情報が付加されている。エピゲノムの分子的実体は DNA 自体のメチル化や、DNA と結合しているタンパク質のメチル化、アセチル化等の多様な化学修飾である。ゲノムは長大で、必ずしも必要な情報ばかりではないので、必要な部分や不必要な部分にエピゲノムの付箋をつけることで、効率的にゲノム情報にアクセスできるというのがエピゲノムの役割の一つである。エピゲノムはゲノムと同様に細胞の分裂や個体が子孫を残すさいに引き継がれることもあるが、生育環境などの状況に応じて逐次貼り替えられることもある。エピゲノムは個体の発生に重要なだけでなく、ゲノム中の有害な遺伝子の働きを封じ込めたり、がんなどの病気に深く関わったりすることが知られているため、エピゲノムのはたらく仕組みや制御メカニズムの研究が盛んに行われている。

エピゲノムの研究分野における重要な課題として、どこにどのエピゲノム情報を書き込んだり消去したりするかがどのように決まっているのか？という疑問がある。つまり付箋が適切なところに付けられる仕組みというわけである。



私たちはこの仕組みを明らかにするために、動物植物を含む多くの生物に共通して存在するエピゲノム修飾を題材として研究をおこなった。修飾を書き込む酵素タンパク質は書き込み時には目的領域に接近するはずなので、それがゲノム中のどの領域に存在するかを調べれば、書き込みのルールが分かると予想された。そこで、書き込み酵素の存在パターンを実験的に調べ、その存在パターンがどのように決まっているかを、機械学習を用いて探索するというアプローチで研究を行った。その結果、同じエピゲノム修飾を書き込む酵素の中にも、別々のルールで書き込み場所が決まっているものが存在することが明らかになった。ある酵素は、遺伝子情報が読み取られる（転写される）さいにエピゲノムの書き込みをおこなっており、別の酵素は他のエピゲノム情報や DNA 配列情報を手がかりとして働いていることが示唆された。つまりある酵素は遺伝子転写の「記録」としてエピゲノムを書き込んでおり、別の酵素はゲノムや他のエピゲノム情報を「解読」してエピゲノムを書き込んでいると考えられる（図）。またこの大別すると 2 つのエピゲノム書き込み様式は植物と動物という進化的に遠く離れた生物に共通して見られることも明らかになった。本研究で行われたように実験と解析を繰り返していくことによって、複雑なエピゲノム制御機構が紐解かれていくことが期待される。

本研究成果は S. Oya *et al.*, *Nature Communications* 13, 4521 (2022) に掲載された。

(2022 年 8 月 11 日プレスリリース)

大矢 恵代  
(生物科学専攻 博士課程 (研究当時))

角谷 徹仁  
(生物科学専攻 教授)

稲垣 宗一  
(生物科学専攻 准教授)

図：本研究で注目したエピゲノム修飾（H3K4 メチル化）を書き込む酵素は「記録型」と「解読型」に大別される。記録型酵素（SET1 タイプ酵素）は遺伝子の転写装置（RNA ポリメラーゼ複合体）とともに働き、この領域が転写されたことの記録として修飾を書き込む。解読型酵素（Trx/Trr タイプ酵素）はエピゲノム修飾の一種である DNA が巻かれているヒストンタンパク質の修飾や、特徴的 DNA 配列を解読して、修飾を書き込む。特定の DNA 配列に結合する転写因子タンパク質が解読を仲介していると考えられる。黒線は DNA を表し、灰色の丸は DNA を巻くヒストンタンパク質を表す。ヒストンタンパク質の化学修飾は主要なエピゲノム修飾の一つ