

NMR-Quantencomputer

Steffen J. Glaser*

Die Kernresonanzspektroskopie (NMR) ist eine der wichtigsten Methoden zur Identifizierung von Molekülen und zur Bestimmung ihrer Struktur und Dynamik. In den letzten Jahren gab es jedoch eine Reihe Aufsehen erregender Arbeiten,^[1, 2] in denen die Methoden der NMR-Spektroskopie auf sehr einfache, wohlbekannte Verbindungen angewendet wurden. Ziel dieser Arbeiten war es nicht, durch Messung von NMR-Parametern die Kenntnisse über die Struktur oder Dynamik dieser Verbindungen zu verfeinern, sondern das bis vor wenigen Jahren rein theoretische Konzept eines so genannten Quantencomputers experimentell zu realisieren. Die Idee, Quantenphänomene zur Berechnung komplexer Aufgaben zu nutzen, geht auf den Physiker Feynman zurück.^[3] Dieser schlug bereits 1982 vor, einen Computer zu konstruieren, der auf quantenmechanischen Prinzipien beruht.

Um zu verstehen, was einen Quantencomputer so interessant macht, ist es notwendig, die Informationsspeicherung eines klassischen Computers und eines Quantencomputers zu vergleichen. Ein Bit, die kleinste Informationseinheit für einen klassischen Computer, kann nur einen der beiden

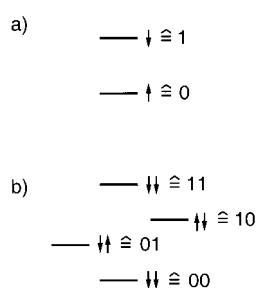


Abbildung 1. a) Quantenmechanisches Zwei-Niveau-System am Beispiel eines $\frac{1}{2}$ -Spins in einem äußeren Magnetfeld mit den Basiszuständen „Spin up“ und „Spin down“, die einem Qubit mit der Einstellung 0 bzw. 1 entsprechen. b) Zwei $\frac{1}{2}$ -Spins in einem äußeren Magnetfeld bilden ein Vier-Niveau-System. Die Basiszustände der Spins und die entsprechenden Einstellungen der beiden Qubits sind schematisch dargestellt. Im Gegensatz zu klassischen Bits sind in einem quantenmechanischen System auch Überlagerungen der Basiszustände möglich.

Zustände 0 oder 1 annehmen. Die kleinste Informationseinheit eines Quantenrechners ist ein so genanntes Quantenbit (Qubit). Es entspricht einem quantenmechanischen Zwei-Niveau-System, dessen Basis-Zustände mit $|0\rangle$ bzw. $|1\rangle$ bezeichnet werden. Beispielsweise kann ein solches Qubit durch ein Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}$ repräsentiert werden, dessen Spin-Ausrichtung (parallel bzw. antiparallel zu einem äußeren Magnetfeld) den Zuständen $|0\rangle$ bzw. $|1\rangle$ entspricht (Abbildung 1 a). Im Gegensatz zu seinem klassischen Analogon kann ein Qubit jedoch auch in einem quantenmechanischen Überlagerungszustand von $|0\rangle$ und $|1\rangle$ existieren und wird durch zwei komplexe Zahlen c_1 und c_2 , die Wahrscheinlichkeits-Amplituden für die beiden Basiszustände, charakterisiert: $|\psi\rangle = c_1|0\rangle + c_2|1\rangle$ mit der Normierungsbedingung $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$. Beispielsweise entsprechen in der NMR-Spek-

trokopie die Fälle $|\psi\rangle_x = 2^{-1/2}(|0\rangle + |1\rangle)$ und $|\psi\rangle_y = 2^{-1/2}(|0\rangle + i|1\rangle)$ transversaler x - bzw. y -Magnetisierung. Mit jedem zusätzlichen Qubit (z. B. Spin $\frac{1}{2}$ Teilchen) verdoppelt sich die Zahl der Basiszustände des quantenmechanischen Systems (Abbildung 1 b) und damit die Zahl der zu bestimmenden Wahrscheinlichkeits-Amplituden. Daher sind für die vollständige Beschreibung eines Registers aus N Qubits (z. B. N gekoppelte $\frac{1}{2}$ -Spins) 2^N komplexe Zahlen (Wahrscheinlichkeits-Amplituden) erforderlich, während ein Register mit N klassischen Bits definitionsgemäß durch N ganze Zahlen (0 oder 1) bereits vollständig beschrieben wird.

Durch die exponentielle Zunahme der Größe des quantenmechanischen Zustandsraums eröffnet sich die Möglichkeit, eine große Zahl unterschiedlicher Rechnungen in einem Quantencomputer gleichzeitig, d. h. parallel, auszuführen. Dies erfordert jedoch die Entwicklung geeigneter Rechenverfahren, so genannte Quantenalgorithmen, die den quantenmechanischen Besonderheiten Rechnung tragen.^[4-6]

Besonderes Aufsehen erregte ein von Shor entwickelter Quantenalgoritmus zur Primzahlzerlegung.^[5] Für klassische Rechenverfahren wächst die erforderliche Rechenzeit zur Faktorisierung einer gegebenen Zahl exponentiell mit der Anzahl ihrer Dezimalstellen an, die Schwierigkeit der Primzahlzerlegung wird von einer der wichtigsten Methoden der Kryptographie (dem so genannten RSA-Verfahren) genutzt.^[7] Die Rechenzeit für Shors Quantenalgoritmus steigt demgegenüber wesentlich langsamer mit der Größe der zu zerlegenden Zahl (nur als ein Polynom der Zahl ihrer Dezimalstellen), sodass dieser Quantenalgoritmus eine Gefahr für verschlüsselte Nachrichten bedeuten würde, falls es gelingen sollte, einen Quantenrechner mit der notwendigen Zahl von Qubits (etwa 100 bis 1000 Qubits) zu realisieren. Allerdings: „Bis ein Rechner mit der notwendigen Zahl von Qubits auf diesem Planeten private Schlüssel knackt, werden noch viele Jahre vergehen – ein Quantenrechner mit mehr als vier Qubits in diesem Jahrtausend wäre schon eine Sensation“.^[8]

Beispiele für gegenwärtige experimentelle Ansätze zur Realisierung von Quantencomputern sind Ionenfallen,^[9] Quantenpunkte,^[10] Josephson-Kontakte^[11] und die NMR-Spektroskopie,^[11] die bisher bei der praktischen Implementierung von Quantenalgorithmen am weitesten fortgeschritten ist. Die NMR-Spektroskopie bietet ausgereifte Methoden zur gezielten Manipulation von Kernspins, die sich aufgrund ihrer Isolation von der Umgebung besonders gut als Qubits eignen. Gegenüber anderen Verfahren hat die NMR-Spektroskopie die Besonderheit, dass nicht einzelne Quantensysteme manipuliert und detektiert werden, sondern dass in einer gelösten NMR-Probe ein Ensemble vieler identischer Spinsysteme vorliegt. Daher werden NMR-Quantencomputer zu Beginn einer Rechnung in der Regel nicht in einem reinen, sondern in einem so genannten pseudoreinen Zustand präpariert, und anstelle von Einzelmessungen einer Observablen werden Erwartungswerte gemessen.^[1] Die Rechenoperationen von

[*] Prof. Dr. S. J. Glaser

Institut für Organische Chemie und Biochemie II
Lichtenbergstraße 4, 85747 Garching (Deutschland)
Fax: (+49) 89-2891-3210
E-mail: glaser@ch.tum.de

Quantenalgorithmen werden durch Radiofrequenz-Pulssequenzen realisiert. Diese lassen sich immer in Spin-selektive Pulse und so genannte CNOT-Gatter (Abbildung 2) zwischen Spin-Paaren zerlegen. Die Zahl der Qubits wird vor allem durch die Verfügbarkeit von Verbindungen mit geeigneten Spinsystemen beschränkt. Zur effizienten Implementierung

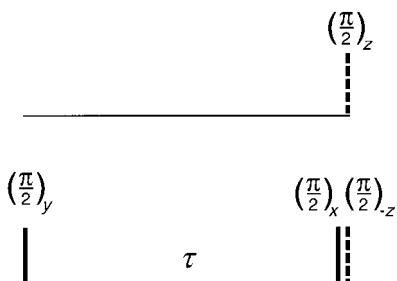


Abbildung 2. Schematische Darstellung einer möglichen NMR-Pulsequenz zur Realisierung eines logischen CNOT(I, S)-Gatters für ein heteronucleares I, S -Spinsystem mit der Kopplungskonstante $J_{I,S}$.^[14] Auf der oberen und unteren Linie sind die selektiv auf Spin I bzw. Spin S wirkenden Radiofrequenz-Pulse und z -Rotationen dargestellt. Die Periode τ entspricht $1/(2J_{I,S})$.

eines NMR-Quantencomputers mit N Qubits ist ein Molekül mit N gekoppelten $\frac{1}{2}$ -Spins erforderlich. Um möglichst viele elementare Rechenschritte (logische Quantengatter) durchführen zu können, muss die Zeit für ein solches Quantengatter deutlich kleiner als die Relaxationszeiten der Kernspins sein. Da für elementare Rechenschritte die selektive Manipulation einzelner Kernspins erforderlich ist, sollten die Kernspins möglichst unterschiedliche Resonanzfrequenzen haben. Daher eignen sich vor allem heteronukleare Spinsysteme und Kernspins, die einen großen Bereich chemischer Verschiebungen abdecken. Weiterhin sollen zwischen den Kernspins möglichst große Kopplungen bestehen, da die Implementierung direkter logischer Verknüpfungen zwischen zwei Qubits eine Zeitspanne beansprucht, die umgekehrt proportional zur Stärke der Kopplung zwischen den entsprechenden Kernspins ist. Allerdings ist es nicht erforderlich, dass alle Spins paarweise gekoppelt sind (Abbildung 3a), sondern es genügt, wenn die Spins ein zusammenhängendes Kopplungsnetzwerk bilden (Abbildung 3b).^[12]

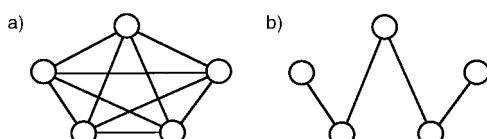
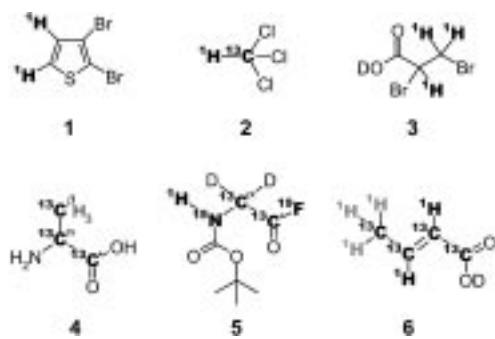


Abbildung 3. a) Schematische Darstellung eines Systems mit $N = 5$ jeweils paarweise gekoppelten Spins (Qubits). b) Ein lineares Kopplungsnetzwerk reicht aus, um alle denkbaren logischen Operationen zwischen beliebigen Spins (Qubits) eines N -Spinsystems zu realisieren.^[12]

Für die ersten NMR-Quantencomputer mit bis zu drei Qubits wurden leicht zugängliche Verbindungen wie 2,3-Dibromthiophen **1**,^[1a, 2f] $^{[13]}\text{C}$ Chloroform **2**,^[2a] 2,3-Dibrom-propansäure **3**,^[2e, 12] und $^{[13]}\text{C}_3$ Alanin **4**^[13] verwendet. Die Qubits wurden durch die Kernspins der in Schema 1 fett gedruckten Atome repräsentiert. Für die Realisierung des



Schema 1. Verbindungen, die als molekulare Basis für NMR-Quantencomputer mit bis zu 7 Qubits geeignet sind. Die Atome der jeweils als Qubit dienenden Kernspins wurden fett gedruckt. Die grau dargestellten Protonen der Methylgruppe von **6** entsprechen nur einem Qubit, falls nur der Spin- $\frac{1}{2}$ -Anteil ihres Gesamtspins genutzt wird.^[15]

ersten NMR-Quantencomputers mit mehr als vier Qubits wurde **5** synthetisiert.^[14] Bei Deuterium-Entkopplung bilden die Kernspins von $^1\text{H}^N$, ^{15}N , $^{13}\text{C}^a$, $^{13}\text{C}'$ ($=\text{CO}$) und ^{19}F ein gekoppeltes Spinsystem, das aus fünf $\frac{1}{2}$ -Spins besteht. Die 1J -Kopplungskonstanten variieren zwischen 13.5 Hz ($^1J_{\text{N},\text{C}^a}$) und 366 Hz ($^1J_{\text{C},\text{F}}$), und die Frequenzdifferenzen liegen bei einer Feldstärke von 9.4 T zwischen 12 kHz ($\nu_{\text{C}'} - \nu_{\text{C}^a}$) und 360 MHz ($\nu_{\text{H}} - \nu_{\text{N}}$). Kürzlich wurde $^{[13]}\text{C}_4$ Crotonsäure **6** als eine Verbindung vorgeschlagen,^[15] die sich möglicherweise als 7-Qubit-System eignet. Bei einem Feld von 9.4 T beträgt hier die kleinste Differenz der Frequenzen der ^1H -Spins jedoch lediglich 500 Hz. Die Resonanzen der ^{13}C -Spins sind aber wohlsepariert (minimale Frequenzdifferenz von 2.5 kHz bei 9.4 T).^[15]

Der Entwurf und die Synthese von Molekülen mit geeigneten Spinsystemen für 10–20 Qubits stellt eine nicht triviale Herausforderung dar. Falls die als Quantencomputer dienende Verbindung in einem flüssigkristallinen Medium gelöst wird, können außer J -Kopplungen auch relativ große dipolare Kopplungen genutzt werden, sodass die Zeit pro Rechenschritt verringert werden kann.^[16] Ein weiterer möglicher Ansatz für eine molekulare Architektur mit mehr als 10 Spins besteht in der Aneinanderreihung repetitiver Grundeinheiten aus mindestens drei Spins in einem Polymer.^[17]

Zusätzlich zu den molekülbautechnischen Anforderungen wachsen mit zunehmender Zahl von Qubits auch die Anforderungen an die NMR-Spektrometer und das Pulssequenz-Design, um experimentelle Schwierigkeiten (z.B. die Inhomogenität der Radiofrequenzfelder) unter Kontrolle zu halten. Außerdem wird es für eine zunehmende Zahl von Qubits immer ineffizienter, das Spinsystem in dem für die Anwendung eines Quantenalgorithmus erforderlichen reinen oder pseudoreinen Ausgangszustand zu präparieren.^[18] Damit sinkt die Empfindlichkeit der Experimente drastisch ab. Mögliche Auswege könnten sich durch die Nutzung der Hyperpolarisation von laserpolarisiertem ^3He - oder ^{129}Xe -Kernen,^[19] der Spinordnung von Parawasserstoff^[20] oder von Elektronenspins^[21] ergeben.

Es ist sehr unwahrscheinlich, dass es mit Hilfe der NMR-Spektroskopie in absehbarer Zeit gelingen wird, einen Quantencomputer zu realisieren, der groß und leistungsfähig genug ist, um klassischen Computern überlegen zu sein. Die

Methoden der NMR-Spektroskopie sind jedoch in fast idealer Weise dazu geeignet, bisher nur theoretisch ausgearbeitete Quantenalgorithmen mit kleinen Spinsystemen zu realisieren und experimentell zu erproben. Darüber hinaus stellt das Ausloten der Grenzen dieser Methoden einen spannenden Gegenstand aktueller Forschung dar.

- [1] a) D. G. Cory, A. F. Fahmy, T. F. Havel in *Proc. 4th Workshop on Physics and Computation* (Hrsg.: T. Toffoli, M. Biafore, J. Leão), New England Complex Systems Institute, Boston, MA, **1996**, pp. 87–91; b) D. G. Cory, A. F. Fahmy, T. F. Havel, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **1997**, *94*, 1634–1639; c) N. A. Gershenfeld, I. L. Chuang, *Science* **1997**, *275*, 350–356.
- [2] a) I. L. Chuang, L. M. K. Vandersypen, X. Zhou, D. W. Leung, S. Lloyd, *Nature* **1998**, *393*, 143–146; b) J. A. Jones, M. Mosca, *J. Chem. Phys.* **1998**, *109*, 1648–1653; c) I. L. Chuang, N. Gershenfeld, M. Kubinec, *Phys. Rev. Lett.* **1998**, *80*, 3408–3411; d) J. A. Jones, M. Mosca, R. H. Hansen, *Nature* **1998**, *393*, 344–346; e) N. Linden, H. Barjat, R. Freeman, *Chem. Phys. Lett.* **1998**, *296*, 61–67; f) D. G. Cory, M. D. Price, T. F. Havel, *Physica D* **1998**, *120*, 82–101.
- [3] R. Feynman, *Int. J. Theor. Phys.* **1982**, *21*, 467–488.
- [4] a) D. Deutsch, R. Jozsa, *Proc. R. Soc. London A* **1992**, *439*, 553–558; b) R. Cleve, A. Ekert, C. Macchiavello, M. Mosca, *Proc. R. Soc. A* **1998**, *454*, 339–354.
- [5] a) P. W. Shor in *Proc. 35th Annu. Symp. Foundations of Computer Science* (Hrsg.: S. Goldwasser), IEEE Computer Society Press, Los Alamitos, CA, **1994**, pp. 124–134; b) P. W. Shor, *SIAM J. Comput.* **1997**, *26*, 1484–1509.
- [6] a) L. Grover in *Proc. 28th Annu. ACM Symp. Theory of Computation*, ACM Press, New York, NY, **1996**, pp. 212–219; b) L. K. Grover, *Phys. Rev. Lett.* **1997**, *79*, 325–328.
- [7] J. Buchmann, *Spektrum Wiss.* **1996**, *9*, 80–88.
- [8] J. Rink, *c't Magazin Computertech.* **1998**, (16), 150–154.
- [9] a) J. I. Cirac, P. Zoller, *Phys. Rev. Lett.* **1995**, *74*, 4091–4094; b) C. Monroe, D. M. Meekhof, B. E. King, W. M. Itano, D. J. Wineland, *Phys. Rev. Lett.* **1995**, *75*, 4714–4715.
- [10] a) G. Schedelbeck, W. Wegscheider, M. Bichler, G. Abstreiter, *Science* **1997**, *278*, 1792–1795; b) D. Loss, D. P. DiVincenzo, *Phys. Rev. A* **1998**, *57*, 120–126.
- [11] a) Yu. Makhlis, G. Schön, A. Shnirman, *Nature* **1999**, *399*, 305–307; b) Y. Nakamura, Yu. Y. Pashkin, J. S. Tsai, *Nature* **1999**, *398*, 786–788.
- [12] Z. L. Mádi, R. Brüschweiler, R. R. Ernst, *J. Chem. Phys.* **1998**, *109*, 10603–10611.
- [13] D. G. Cory, W. Mass, M. Price, E. Knill, R. Laflamme, W. H. Zurek, T. F. Havel, S. S. Somaroo, *Phys. Rev. Lett.* **1998**, *81*, 2152–2155.
- [14] R. Marx, A. F. Fahmy, J. M. Myers, W. Bermel, S. J. Glaser, *Phys. Rev. A* **2000**, *62*, Beitrag 012310.
- [15] E. Knill, R. Laflamme, R. Martinez, C.-H. Tseng, *Nature* **2000**, *404*, 368–370.
- [16] C. S. Yannoni, M. H. Sherwood, D. C. Miller, I. L. Chuang, L. M. K. Vandersypen, M. G. Kubinec, *Appl. Phys. Lett.* **1999**, *75*, 3563–3565.
- [17] S. Lloyd, *Science* **1993**, *261*, 1569–1571.
- [18] W. S. Warren, *Science* **1997**, *277*, 1688–1689.
- [19] G. Navon, Y.-Q. Song, T. Röööm, S. Appelt, R. E. Taylor, A. Pines, *Science* **1996**, *271*, 1848–1851.
- [20] a) C. R. Bowers, D. P. Weitekamp, *Phys. Rev. Lett.* **1986**, *57*, 2645–2648; b) J. Natterer, J. Bargon, *J. Prog. Nucl. Magn. Reson. Spectrosc.* **1997**, *31*, 293–315; c) P. Hübler, J. Bargon, S. J. Glaser, *J. Chem. Phys.* **2000**, *113*, 2056–2059.
- [21] M. Mehring, *Appl. Magn. Reson.* **1999**, *17*, 141–172.