

**非線形・非共鳴相互作用を取り入れた
量子最適制御シミュレーション法の開発**
(東北大院理, JST-CREST) 大槻幸義

【序】 現在, 量子力学の直接的な工学的応用に向けた基盤研究が盛んに行われている. 例えば, 量子プロトコルを使った盗聴不能な通信や, 量子重ね合わせ状態を利用した超並列計算(量子コンピュータ)などである. 量子最適制御シミュレーションは化学反応制御から量子情報処理まで, 量子系の制御に関して普遍的に適用できる理論手法である[1-3].

通常の動力学法は与えられた外場の下での時間発展を計算する. 一方, 量子最適制御シミュレーションでは分子ハミルトニアンだけを使い, 目的実現のために最適な外場を設計しつつ時間発展を計算する. 但し, この第一原理シミュレーションを行うためには, 初期条件と終時刻条件の両方が与えられた2点境界値問題を解く必要がある. 解を求めるには繰り返し計算が必要であり, 計算量の増大は不可避である. そのため高速・高精度の数値計算アルゴリズム開発が重要である.

外場と分子の相互作用が外場に対して線形ならば, 高速・高精度の数値計算アルゴリズムは既に報告されている[4, 5]. この一般解法では, 終時刻だけでなく中間時刻でのターゲット指定や, 複数目的の同時指定が可能である[4]. また, 系はシュレーディンガー方程式, (非マルコフ) マスター方程式いずれに従う場合にも適用可能である[5]. 今回はこれらを拡張し, 非線形・非共鳴相互作用を取り入れるための新規アルゴリズムを開発したので報告する. 特に, 非共鳴遷移を含む最適解については初めての報告である.

【最適制御理論】 以前我々は, 物理・化学的に興味ある問題は, 次の形をした目的汎関数(評価関数)により制御目的を記述できることを報告した[4]. 即ち, 目的時刻でベクトル $|X\rangle$ または演算子 X で表される状態へ遷移させるとともに, 途中, ベクトル $|Y(t)\rangle$ または演算子 $Y(t)$ で表される中間状態を経由するように問題設定する. ここでは操作量として電場 $E(t)$ を考え, パルスエネルギーを低く抑えるためのペナルティも加えておく. 期待値とペナルティの評価バランスは, 時間に依存する重みパラメータ $A(t)$ により決められる. なお, 状態ベクトル $|u(t)\rangle$ は波動関数, 密度演算子(または高次の直積状態)などを表す.

$$J_I = 2 \operatorname{Re} \langle X | u(t_f) \rangle + 2 \operatorname{Re} \int_0^{t_f} dt \langle Y(t) | u(t) \rangle - \int_0^{t_f} \frac{dt}{A(t)} [E(t)]^2 \quad (1)$$

$$J_{II} = \langle u(t_f) | X | u(t_f) \rangle + \int_0^{t_f} dt \langle u(t) | Y(t) | u(t) \rangle - \int_0^{t_f} \frac{dt}{A(t)} [E(t)]^2 \quad (2)$$

ここではこれらの基本形をタイプ I および II とよぶことにする. 制御問題は目的汎関数を最大(極大)にする電場 $E(t)$ を求める問題に帰着できる. 変分法を適用することで, 最適な電場が従う方程式(パルス設計方程式)が得られる.

今回の報告ではタイプ II の目的汎関数を使う. 系はシュレーディンガー方程式に従い時間発展すると仮定する. 非共鳴遷移を取り入れた最適解の例では, 分子は電気双極子相互作用を通してレーザー場と相互作用する. 拘束条件を加えることで非共鳴過程を経て目的状態に遷移させる.

【結果】 例として, 図1に示す2準位モデルを考える.

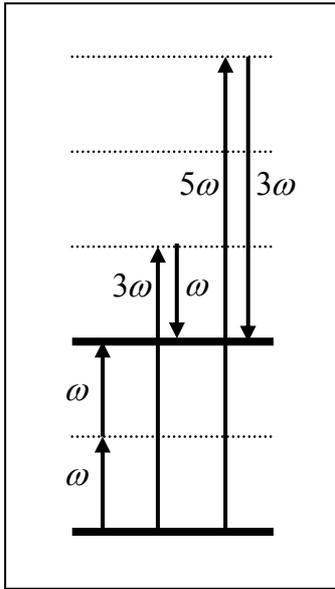


図1 2準位モデル
および多光子遷移最適パルス
から導かれた制御機構(概念図)

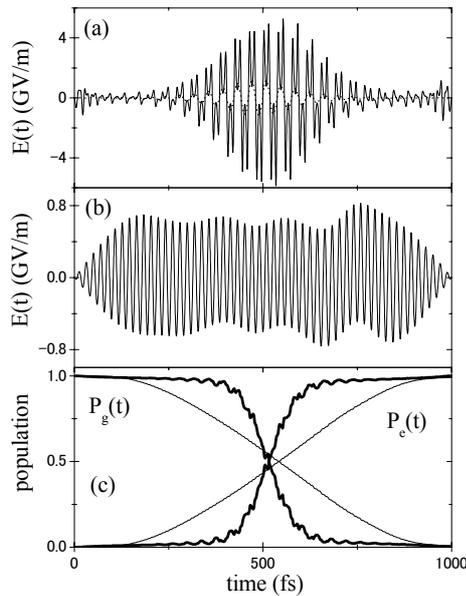


図2 (a) 多光子遷移最適パルス
(b) 通常の最適パルス (c) 分布の時間発展
(太線:パルス(a), 細線:パルス(b)に対応)

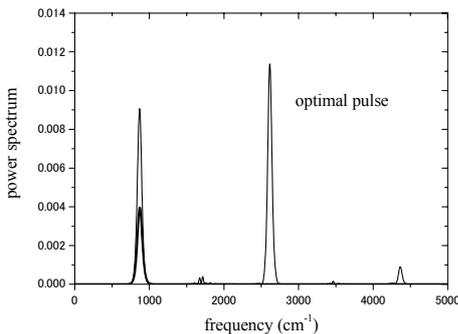


図3 最適パルスの強度スペクトル

図2に多光子遷移を利用した最適パルスの計算結果を示す. 通常の最適パルス(b)と比較すると, 非共鳴遷移に対応した多数の振動数成分を含むことが分かる. なお, 図2(c)より, 最適パルスはいずれもほぼ100%の確率で分布反転を起こしている. 図3には図2(a)の最適パルスの強度スペクトルを示す. なお, 太線は繰り返し計算における初期入力パルスのスペクトルを表す.

2光子吸収過程および2つの1光子吸収・1光子放出過程から構成されている. 図1に制御機構の概念図を示す. これらの複数の遷移経路がお互い強めあう干渉を起こし分布反転を実現している.

[参考文献]

- [1] Y. Ohtsuki, *Chem. Phys. Lett.* **404**, 126 (2005).
- [2] M. Abe et al., *J. Chem. Phys.* **124**, 224316 (2006).
- [3] Y. Ohtsuki, Y. Fujimura, *Chem. Phys. in press* (2007).
- [4] Y. Ohtsuki et al., *Phys. Rev.* **A75**, 033407(2007); Y. Ohtsuki et al., *J. Chem. Phys.* **114**, 8867(2001); Y. Ohtsuki, H. Rabitz, *CRM Proceedings and Lecture Notes*, **33** 163 (2003); Y. Ohtsuki, G. Turinici, and H. Rabitz, *J. Chem. Phys.* **120**, 5509 (2004).
- [5] Y. Ohtsuki, *J. Chem. Phys.* **119**, 661 (2003); Y. Ohtsuki et al., *Chem. Phys.* **287**, 197 (2003).