

## 4P131 中赤外フェムト秒レーザー光による振動回転波束制御： 遺伝的アルゴリズムを用いた波形整形

(UBC Canada<sup>1</sup>、CREST<sup>2</sup>) ○坪内雅明<sup>1,2</sup>、A. Khramov<sup>1</sup>、百瀬孝昌<sup>1,2</sup>

【序】 Brumer と Shapiro によるレーザーパルス対を用いた反応制御実験の提唱以来[1]、位相制御されたパルス対、波形整形されたレーザー光などを用いて、電子励起状態における反応（波束）制御実験が行われてきた。一方、電子基底状態は長いデコヒーレンス時間を有するため波束制御実験を行う場として適しているにも関わらず、現在まで殆ど研究例が無い。これは、電子基底状態の振動回転遷移を直接誘起する中赤外超短パルスの発生・制御、及び電子基底状態上で発展する波束の観測が容易では無い事がその大きな要因である。

これまで我々は、波形整形された中赤外フェムト秒レーザーを開発し[2]、分子振動回転波束の直接制御の研究を行ってきた。振動波束制御は量子計算基盤技術として応用可能であることが示唆されている[3]。そこで本研究では特に、我々が実際に発生できる中赤外レーザー波形を用いた分子量子ビット操作の可能性を、数値計算から明らかにすることを目的とした。

分子の各固有振動状態を量子ビットと見立てた場合、以下のような利点が挙げられる。

1. N 原子分子は  $3N-6$  個の固有振動状態を有するため、単一分子で  $3N-6$  個もの量子ビットが確保でき、量子計算機の大型化が実現可能。
2. 固有振動状態間の相互作用により、量子ビット間の相関が実現可能。
3. 電子基底状態における振動励起状態の長いデコヒーレンス時間(>100 ms)により、現実的な計算時間の確保が可能。

複数の振動回転状態をコヒーレントに制御するためには周波数幅の広いフェムト秒パルスが必要となるが、分子の振動回転遷移は狭い周波数領域に多岐に渡っているため、精密な波形設計が必須となる。本講演では、基本的な量子ゲートを実現するパルス波形の遺伝的アルゴリズムを用いた最適化を示し、さらに電子基底状態での量子ゲート（振動回転波束）の観測手法を議論する。

【計算手法①：波束計算】多量子ビットの確保には多原子分子への応用が必要となるが、本研究では量子計算の基本となる一及び二量子ビット操作を対象を絞り、使用する分子も簡単のため一重項二原子分子 CO とした。波束計算は、下記の Schrödinger 方程式、

$$i\hbar \frac{d\Psi(t)}{dt} = H(t)\Psi(t) = \left[ H_0 - \vec{\mu} \cdot \vec{\epsilon}(t) - \frac{1}{2} \vec{\epsilon}(t) \cdot \vec{\alpha} \cdot \vec{\epsilon}(t) \right] \Psi(t)$$

を数値的に解く事で行った。計算では、周波数幅の広いフェムト秒レーザーの非共鳴成分の効果をより正確に取り込むために、右辺第三項に示した分極相互作用も考慮した。また  $H_0$  としては、実測の CO の振動回転準位を正確に再現するものを用いた。

【計算手法②：量子ゲートへのパルスの最適化】量子計算の基礎となる一ビット演算、

$$\left. \begin{array}{l} |0\rangle \leftrightarrow (|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2} \\ |1\rangle \leftrightarrow (|0\rangle - |1\rangle)/\sqrt{2} \end{array} \right\} \text{Hadamard gate}, \quad \begin{array}{l} |0\rangle \leftrightarrow |1\rangle \text{ NOT gate} \\ |0\rangle \leftrightarrow |0\rangle, |1\rangle \leftrightarrow -|1\rangle \text{ Z gate} \end{array}$$

を実現するパルス波形の計算を行った。CO の電子基底状態( $^1\Sigma^+$ )では  $\Delta J = \pm 1$  の振動回転遷移のみ許容となるため、ビット演算の二準位系として  $R(0)$  遷移  $|v=1, J=1\rangle \leftrightarrow |v=0, J=0\rangle$  を採用した。量子計算の精度を上げるためには、二準位系以外への系の発散、即ち高振動励起

状態への "Ladder climbing" や P(2)遷移等による他の回転準位への遷移を抑制する必要がある。そこで、遺伝アルゴリズムを用いた波形最適化を行った。

周波数幅  $100 \text{ cm}^{-1}$  のフーリエ極限パルス波形整形器に入射した場合を考え、その透過率及び位相変調を変数として  $10 \text{ cm}^{-1}$  の波数分解能でパルスを最適化した。また本計算では、量子計算で要求される時間反転性及び各量子状態の相対位相の安定性を考慮した。即ち Hadamard ゲートの場合、含まれる 4 つの遷移がその相対位相を保ちながら同一のパルスで達成可能であることを確認した。

**【結果と考察】** 図 1 に、パルス対との相互作用による振動(回転)波束の時間発展の計算結果を示す。振動のみを考慮した結果(b)では、5 %程度の高振動状態への散逸は見られるが、ほぼ Hadamard ゲートの挙動  $|0\rangle \leftrightarrow (|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$  を示している。一方回転状態まで厳密に考慮した場合(c)、対象とする二準位以外への系の散逸が激しくゲート操作は全く達成されなかった。図 1 で示されたように、分子の回転状態は量子ゲートを構築する際無視することが出来ないが、これまで行われた波束最適化の計算[3]では分子の回転運動が考慮されておらず、その計算結果の信頼性は疑わざるを得ない。

図 2 に、遺伝アルゴリズムで Hadamard ゲートに最適化されたパルスと、そのパルスを用いて計算された波束の時間発展を示す。Hadamard ゲートに含まれる 4 つの経路が、相対位相を含めて 95 %の精度で同時に達成された。この時波形整形器に入射する強度は  $30 \mu\text{J}$  必要であり、入射時 150 fs のパルス幅は約 6 ps にまで広げる必要があることが分かった。これは、単位時間あたりの強度の強いパルスでは "Ladder climbing" で高振動状態へ励起してしまうため、

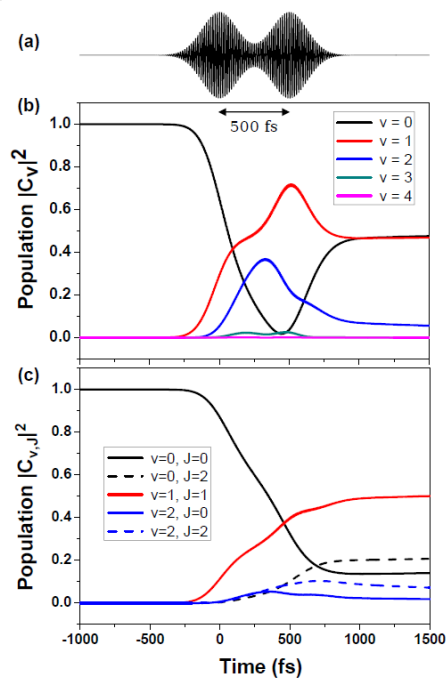
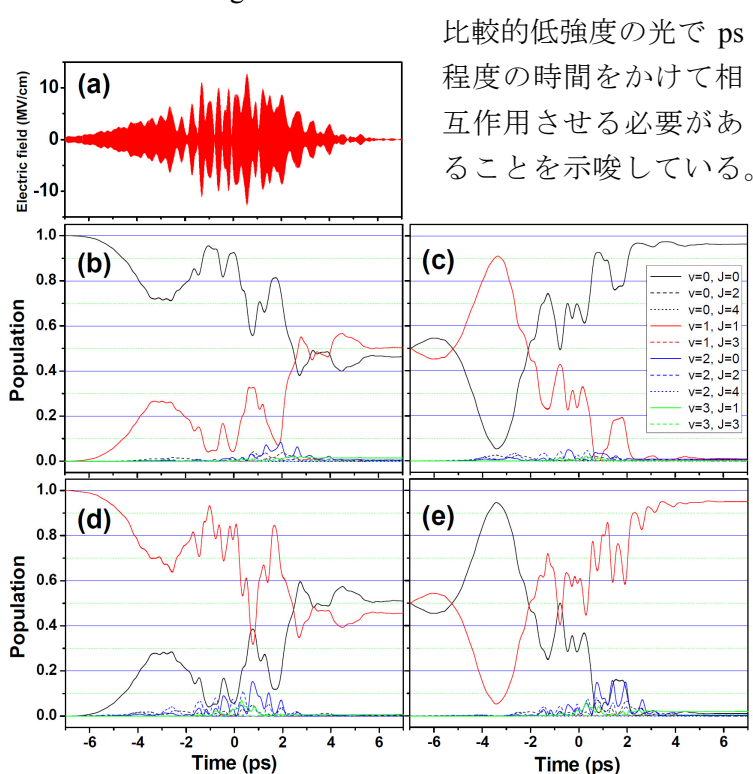


図 1: パルス対(a)を用いた波束計算。  $2.5 \mu\text{J/pulse}$  のレーザー光を  $50 \mu\text{m}$  に集光したと仮定。(b) 回転状態を無視した場合。(c) 振動回転状態を正確に考慮した場合。



比較的低強度の光で ps 程度の時間をかけて相互作用させる必要があることを示唆している。

図 2: (a) Hadamard ゲートに最適化されたパルス形。(b)–(e)ゲートの四経路にそれぞれ対応した波束の時間発展。

**【参照】** [1] P. Brumer and M. Shapiro, *Accounts Chem. Res.* **22**, 407 (1989)  
 [2] M. Tsubouchi and T. Momose, *J. Opt. Soc. Am. B* **24**, 1886 (2007), 本討論会 4C13.  
 [3] C. Gollub, U. Troppmann, and R. de Vivie-Riedle, *New J. Phys.* **8**, 48 (2006).