

多分子の回転状態を用いた量子演算

(東大院工¹、JST-CREST²) 三嶋謙二^{1,2}、若槻彰¹、山下晃一^{1,2}

erdao@tcl.t.u-tokyo.ac.jp

【序】物理学の分野では、量子コンピュータや量子情報の理論的、実験的な研究が、前世紀末から、飛躍的な速さで推進されつつある。物質系としては、イオントラップ、NMR、量子ドット、超伝導素子、光子などが有望である。化学的な見地からは、分子が対象となる。分子では、他の物質系と異なり、電子、振動、回転状態など様々な qubit を定義できる所が特徴である。

分子の振動、回転状態を qubit として用いる研究としては、2001 年に、アセチレン分子の 2 つの振動モードを 2 つの qubit と見なした量子演算の理論的研究が世界で初めて行われた [1]。その後、2 つの分子の回転状態を用いたエンタングルメントダイナミクス [2]、双極子-双極子相互作用をした異なる分子の回転状態を用いた quantum phase gate の実現方法が提唱された [3,4]。しかし、分子を、量子コンピュータや量子情報に適用する研究は、現時点では、まだ、初期段階にある。

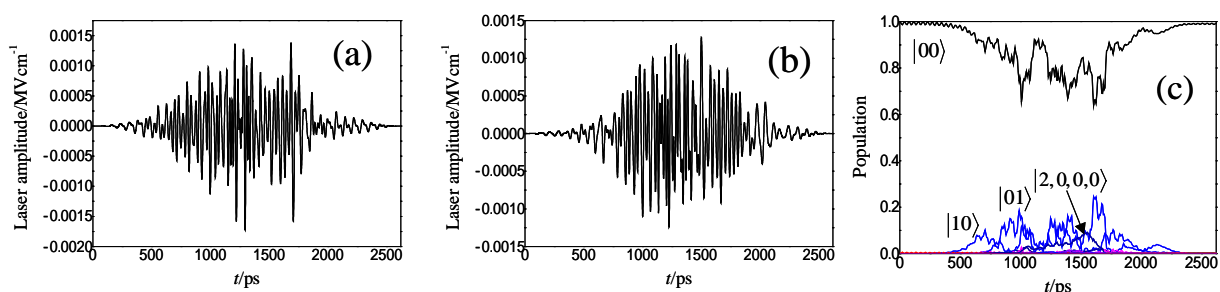
我々は、アンモニア分子の振動モードを用いた最適量子ゲートレーザーパルスの計算 [5]、分子の振動モードと回転モードを 2 つの qubit と見立てたエンタングルメント生成手法の提唱とそのメカニズムの解明 [6]、Deutsch-Jozsa アルゴリズムを実行するための最適レーザーパルスの数値的設計 [7]、分子の電子状態と振動モードを 2 つの qubit と見立てた時の、Deutsch-Jozsa アルゴリズムを実行するための最適レーザーパルスの数値的設計 [8]、双極子-双極子相互作用をした NaCl や NaBr 分子の回転状態を qubit と見立てた時の、Deutsch-Jozsa アルゴリズムを実行するための最適レーザーパルスの数値的設計 [9] などを行ってきた。特に、分子の物性や、分子内部状態の特徴の観点から、エンタングルメント生成や Deutsch-Jozsa アルゴリズムの優劣を明らかにしてきた。

本発表では、双極子-双極子相互作用をした NaCl や NaBr 分子の回転状態を qubit と見立てた時の、Deutsch-Jozsa アルゴリズムの数値計算の結果を報告する。また、金属表面にトラップされた分子の回転状態を用いた場合との比較を行う。

【計算方法】量子ゲートレーザーパルスが量子演算のダイナミクスに適用される時、どのような量子アルゴリズムにも適用可能である為には、目的としているユニタリ変換が、任意の入力状態と出力状態に対して実行可能でなければならない。その為に、多目的最適制御理論に基づき、monotonically convergent algorithm [10] を用いた数値計算によって、ユニバーサルな量子ゲートレーザーパルスを設計した。波動関数は、Runge-Kutta 法によって時間発展させた。また、従来の最適制御理論を、個々の分子に別々のレーザーパルスが照射された場合を想定した、多レーザーパルス最適制御理論に発展させた。

【結果と考察】第一に、分子が optical lattice などにトラップされた自由な回転運動が可能であると仮定した時の計算結果を紹介する。分子としては、分子間の dipole-dipole 相互作用の強

い NaCl 分子と NaBr 分子を用いた。qubit としては、各々の分子の回転基底状態($J=0$)と第一励起状態($J=1$)を採用した。計算の結果、2つの分子として NaBr 分子を用い、各々の分子に別々のレーザーパルスを照射する時に、最も Deutsch-Jozsa アルゴリズムの効率が高いことを見出した。すなわち、constant function と balanced function が、最低でも、97.95%で識別可能であることがわかった。これは、これまで論文に発表された分子量子演算のどの結果(振動状態や電子状態を qubit と見立てたもの)と比べても、最大のフィデリティーで量子演算が可能であることを示す結果である。よって、異なる分子の回転状態を用いた量子アルゴリズムは、最も、実現可能性が高いことを理論的に示唆した。また、分子間の距離を長くしても、CNOT ゲートなど、分子間の dipole-dipole 相互作用の強度に依存する量子ゲートを高いフィデリティーで可能にするメカニズムを提唱した。下図は、NaCl 分子を用いた場合の、CNOT ゲートに対する、(a):control pulse、(b):target pulse、(c):population の時間変化を表す。



第二に、金属表面にトラップされた分子の回転状態を用いた場合との比較を行う。金属表面にトラップさせるのは、量子コンピュータ素子として何らかの物質を利用する時、その物質は空間的に固定されていなければならないという要請によるものである。この場合、自由空間にある分子の固有回転状態である球面調和関数は、金属表面の影響により、合流型超幾何関数となる。その為、回転状態の遷移規則 $\Delta J = \pm 1$ は破れ、複雑な遷移が起こり、最適レーザーパルスも複雑になると予想される。詳しい計算結果は、当日報告する。

- [1] C. M. Tesch, L. Kurtz, and R. de Vivie-Riedle, Chem. Phys. Lett. **343** (2001) 633.
- [2] Y. Y. Liao, Y. N. Chen, and D. S. Chuu, Chem. Phys. Lett. **398** (2004) 418.
- [3] S. F. Yelin, K. Kirby, and R. Cote, Phys. Rev. A **74** (2006) 050301 (R).
- [4] E. Charron, P. Milman, A. Keller, and O. Atabek, Phys. Rev. A **75** (2007) 033414.
- [5] S. Suzuki, K. Mihsima, and K. Yamashita, Chem. Phys. Lett. **410** (2005) 358.
- [6] K. Mihsima, K. Shioya, and K. Yamashita, Chem. Phys. Lett. **442** (2007) 58.
- [7] K. Shioya, K. Mishima and K. Yamashita, Mol. Phys. **105** (2007) 1283.
- [8] K. Mishima, K. Tokumo, and K. Yamashita, Chem. Phys. **343** (2008) 61.
- [9] K. Mishima and K. Yamashita, (submitted).
- [10] W. Zhu, J. Botina, and H. Rabitz, J. Chem. Phys. **108**, 1953 (1998).