

## デコヒーレンスに強い量子最適制御法の開発

(東北大院理, JST-CREST) 大槻幸義

**【序】** 量子最適制御理論の応用の一つに最適制御シミュレーションがある。これは、波動関数の量子干渉を操作し、制御目的を達成するのに最適な外場を設計する第一原理法である[1]。非常に一般的な手法であり、化学反応・分子ダイナミクス制御から量子ゲート操作まで、広範囲に適用されている。本研究では、量子干渉を壊してしまうデコヒーレンスを積極的に抑制しつつ、制御目的を達成する演算子パルスの最適設計法を報告する。

最適制御シミュレーションにおいてはまず、着目する制御目的を記述する演算子(ターゲット演算子)を導入する。その期待値が最大(または最小)になる条件から、制御外場の従う方程式(設計方程式)が導かれる。この非線形連立方程式を解くことにより、最適な外場および制御された系の時間発展が得られる。我々は今まで、①化学的に興味深い問題が2つの基本的な問題にまとめられること[2]、②最適化の基本問題を数値的に解くための単調収束解法アルゴリズムを開発してきた[3]。この解法は、系が量子リウヴィル方程式(マルコフ・非マルコフ緩和)に従う場合[3]や分極を通した非線形相互作用が存在する場合[4]にも適用可能である。

近年、任意の入力(初期状態)に対して、演算子の働きをする制御パルスの設計が注目されている。例えば、量子情報処理におけるゲート操作を整形パルスで実現しようという試みである。量子情報処理においては高精度の制御が求められるため、最適化の手法は極めて重要である。物理系においては、演算子の働きは系の時間発展演算子を通して実現される。デコヒーレンスが存在せず、時間発展演算子がユニタリな場合に対しては既に報告されてる[5]。しかし、デコヒーレンスが存在する場合、デコヒーレンスそのものを積極的に抑制する演算子パルスの設計法は報告されていない。この問題は量子情報処理を初め、デコヒーレンス下での多くのコヒーレント制御で重要である。例えば、フィード・フォワード(開ループ)制御により、デコヒーレンスを抑制できれば、量子誤り訂正コードを効率よく活用することができる。本研究では新規の汎関数を導入することで、デコヒーレンスに強い演算子パルスの設計法を提案する。

**【理論】** ここでは制御外場としてレーザーパルスを考える。電気双極子近似のもとで、分子系のハミルトニアンは  $H^t = H_0 - \mu E(t)$  と表される。ここで、 $H_0$  はレーザー電場  $E(t)$  が存在しない場合の分子ハミルトニアン、 $\mu$  は電気双極子モーメント演算子である。デコヒーレンスは非マルコフマスター方程式により記述されるとする。リウヴィル空間表示を用いると、系の時間発展演算子  $G(t, 0)$  は以下の方程式に従う。

$$\frac{\partial}{\partial t} G(t, 0) = -\frac{i}{\hbar} L^t G(t, 0) - \int_0^t dt' \Gamma(t-t') G(t', 0) \quad (1)$$

$L^t$  は交換子  $[H^t, \dots]$  に対応するリウヴィリアン、 $\Gamma$  は熱浴相関関数の有限の記憶を含む緩和演算

子である。有限の記憶時間は、熱浴分布関数の有限のスペクトル幅に由来する。

このデコヒーレンス存在下において、終時刻において  $X$ ，中間状態において  $Y(t)$  で表されるゲート操作の実現を考える。制御レーザーパルスは  $\Gamma$  で記述されるデコヒーレンスを抑制しつつ目的を達成する必要がある。すなわち、デコヒーレンスに強い制御パルスを設計する必要がある。本研究の提案は、以下の制御指標（目的汎関数）を導入し、最大化問題として定式化することである [6]。

$$J = \|X_{\otimes} + G(t_f, 0)\|^2 + \int_0^{t_f} dt \|Y_{\otimes}(t) + G(t, 0)\|^2 \quad (2)$$

なお、 $X_{\otimes}$  と  $Y_{\otimes}(t)$  は対応する演算子の直積（リウヴィル空間表示）を表す。本要旨においては、簡単のために終時刻制御の場合、すなわち、 $J = \|X_{\otimes} + G(t_f, 0)\|^2$  を取り上げ、新規シミュレーション法を説明する。

**【結果】** 最適電場はリウヴィル空間表示の内積およびペナルティ重みを表す関数  $A(t)$  を用いて

$$E(t) = -A(t) \text{Im} \langle \Lambda(t, 0) | M | G(t, 0) \rangle \quad (3)$$

と表せる。 $\tilde{G}(t, 0) = G(t, 0) + X_{\otimes}$  を導入すると、 $k$  番目の繰り返し計算は以下ようになる。

$$\frac{\partial}{\partial t} \Lambda^{(k)}(t, 0) = -\frac{i}{\hbar} \bar{L}^{(k)} \Lambda^{(k)}(t, 0) + \int_{t_f}^t dt' \Gamma^{\dagger}(t'-t) \Lambda^{(k)}(t', 0) \quad (4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{G}^{(k)}(t, 0) = -\frac{i}{\hbar} L^{(k)} \tilde{G}^{(k)}(t, 0) + \frac{i}{\hbar} L^{(k)} X_{\otimes} - \int_0^t dt' \Gamma(t-t') G^{(k)}(t', 0) \quad (5)$$

ここで、 $L^{(k)}$  と  $\bar{L}^{(k)}$  は  $k$  番目の繰り返しステップの電場を含んだリウヴィリアンである。上記繰り返し計算アルゴリズムは単調収束を保証する。証明および実装シミュレーションは発表当日に報告する。

## 【文献】

- [1] D. J. Tannor, *Introduction to Quantum Mechanics* (University Science Book, 2007).
- [2] Y. Ohtsuki and H. Rabitz, CRM Proc. Lect. Notes **33**, 163 (2003).
- [3] Y. Ohtsuki *et al.*, J. Chem. Phys. **110**, 9825 (1999); *ibid.* **114**, 8867 (2001); *ibid.* **119**, 661 (2003); *ibid.* **120**, 5509 (2004); Phys. Rev. A **75**, 033407 (2007).
- [4] Y. Ohtsuki and K. Nakagami, Phys. Rev. A **77**, 033414 (2008); J. Chem. Phys. **129**, 194103 (2008).
- [5] J. P. Palao and R. Kosloff, Phys. Rev. Lett. **89**, 188301 (2002).
- [6] Y. Ohtsuki, *submitted to New J. Phys.*