

## ノイズ環境下での分子量子データベース検索

(東北大院・理) 大槻幸義

**【序】** 分子には多数の内部状態が存在する。それらを利用した(量子)情報処理の可能性が注目されている。例えば、ヨウ素分子の振動波束を使った離散フーリエ変換では、現在最速のコンピュータより3桁速い演算が可能であることが報告されている [1]。この演算は波動関数を積極的に利用しているため、ナノ技術で問題になる量子トンネリングに伴うエラーは生じない。したがって、各段に高い集積化も期待できる。一方、今後、取り扱うビット数を増やしかつ素子化することなどを考えると、波動関数の量子干渉を壊すデコヒーレンスへの対処法の開発は重要である。

デコヒーレンスによる(量子)誤りの発生確率が低い場合、誤りを訂正するアルゴリズムが有効である [2]。したがって、フィード・フォワード制御によりデコヒーレンスを最小限に抑制し、量子誤り訂正コードを効率よく活用することが期待されている。量子ビットのコヒーレンスを維持する方法として、NMR のスピンエコー  $\pi$  パルスを組み合わせた動的デカップリング法が提案されている。特に、ある種の雑音スペクトルに対しては、パルス間隔を調整した Uhrig の方法 [3]の有効性が実験的にも明らかにされた[4]。しかし、 $\pi$  パルスはしばしば強度が高く、演算エラーを引き起こしてしまう。そこで本研究では、デコヒーレンスに強い最適な演算機構そのものを解析する。ここでは、量子データベース検索 (Grover) アルゴリズムを具体例に、デコヒーレンス存在下でのゲートパルスを最適制御シミュレーションにより設計する。シミュレーションにはオリジナル開発したアルゴリズムを用いる [5]。

**【理論】** 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、全ハミルトニアンは  $H^t = H_0 - \mu E(t)$  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仮定する。リウヴィル空間表示を用いると、(密度演算子で表される)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。

本研究では、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に着目する。実在系において、演算子は系の時間発展演算子(演算子パルス)を通して実現される。式 (1) で表されるデコヒーレンスの存在下において、演算子  $X$  で表されるゲート操作の実現を考える。ゲートパルスは  $\Gamma$  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ゲートパルスを設計する必要がある。本研究では、文献 [5] に報告した以下の制御指標(目的汎関数)の最大化問題として定式化し、シミュレーションを行う。

$$J = \|X_{\otimes} + G(t_f, 0)\|^2 - \int_0^{t_f} \frac{dt}{\hbar A(t)} [E(t)]^2 \quad (2)$$

なお、 $X_{\otimes}$ は対応する演算子の直積(リウヴィル空間表示)を表す。第2項は電場エネルギーによるペナルティであり、正の関数  $A(t)$  はその評価の重みを決める(入力)関数である。

**【理論】** 準備評価として2準位モデル系(状態  $|1\rangle$  と  $|2\rangle$ ) に対するアダマール変換  $\mathbf{H}$  パルスの計算結果を示す。なお、以下では物理量をすべて無次元量で表す。デコヒーレンスは結合パラメータ  $\gamma = 0.3$  と記憶時間  $\tau = 1.1$  でモデル化している。

$$\Gamma(t-t') = \gamma \exp\left(-\frac{|t-t'|}{\tau}\right) (|12\rangle\rangle\langle\langle 12| + |21\rangle\rangle\langle\langle 21|) \quad (3)$$

図1にペナルティ重み関数  $A(t)$  を種々に変えた場合のアダマール変換パルスを示す。(a)から(c)に向かって、より強度の高いパルスを許す条件で電場設計を行った。ゲート操作がユニタリであることに対応し、レーザー電場は対称な形になっている。

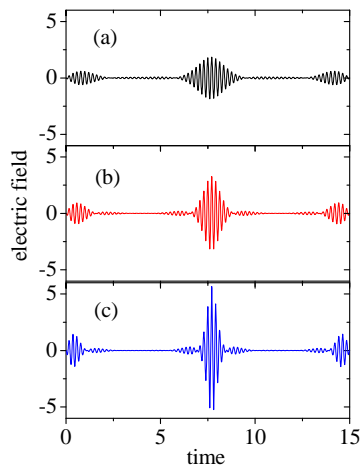


図1 アダマール変換パルス

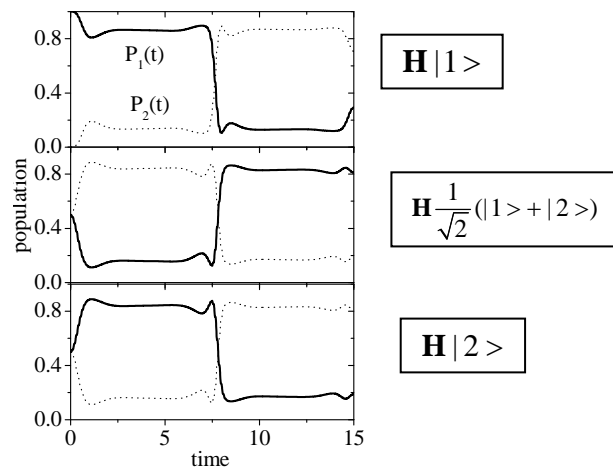


図2 アダマール変換パルス照射下での基底の分布の時間変化

図2には、アダマール変換パルス(図1(c))の照射下で、種々の初期条件に対する時間発展を示している。ゲートパルスは、(任意の)初期状態をまず、デコヒーレンスの影響を受けない固有状態に遷移させる。分布反転パルス後、アダマール変換された状態へ遷移させている。すなわち、デコヒーレンスをできるだけ避けるようにゲート操作を行う。

- [1] K. Hosaka *et al.*, Phys. Rev. Lett. **104**, 180501 (2010).
- [2] 例えば, P. W. Shor, Phys. Rev. A **52**, 2493 (1995).
- [3] G Uhrig, Phys. Rev. Lett. **98**, 100504 (2007).
- [4] M. J. Biercuk *et al.*, Nature **458**, 996 (2009).
- [5] Y. Ohtsuki, New J. Phys. **12**, 045002 (2010) and references therein.