

3P103

ヨウ素分子振電状態でのゲートパルス設計における緩和効果

(東北大院・理) ○今井甫、大槻幸義

【序】 Feynman と Deutsch の先駆的な研究から始まる量子情報処理は、古典コンピュータでは解けない大規模なデータベース検索や素因数分解を短時間で計算できるので、大きな興味を持たれている。従来の情報処理の最小単位であるビットに対応して、量子情報処理の最小単位は量子ビットとよばれ量子力学的な重ね合わせ状態をとることができる。量子情報処理は、量子ビットと論理演算を行うゲート操作から構成される。ゲート操作には、近年のレーザー技術の発展により可能になった整形レーザーパルスの利用が考えられている(以下、ゲートパルスとよぶ)。しかし、デコヒーレンスと呼ばれる重ね合わせ状態の破壊が起こるために、ゲート操作の実行の際にエラーが発生するという問題がある。

分子には多数の量子状態があるので、量子ビットの有力な候補になっている。ゲートパルスの複雑な波形は最適制御理論を用いることで設計できる。いくつかの最適化アルゴリズムの定式化が考えられていて、ゲート操作の信頼度を評価する値であるフィデリティの定義が異なる。多ターゲット最適制御理論^[1]は複数の初期状態 $\phi_k(t=0)$ とターゲット状態 ϕ_{kf} との間の時刻 $t=T$ における遷移確率の平均 $\sum_{k=1}^N |\langle \phi_{fk} | \phi_k(T) \rangle|^2 / N$ の値をゲートのフィデリティとする。ここで、 $\phi_k(0); k=1,2,\dots,N$ の張る空間は量子状態全体の中で量子ビットがとり得る部分である。Kosloff等の方法^[2]では着目するゲート操作 Ω と時間発展演算子 $U(T,0)$ とがユニタリ演算子であることを用いる。それらが一致したときに最大となる、 $\text{ReTr}(\Omega^\dagger U(T,0)P_N)/N$ (P_N は量子ビット状態への射影演算子)の値をゲートのフィデリティとする。

従来のゲートパルス設計アルゴリズムはデコヒーレンスによる重ね合わせ状態の破壊を考慮していない。本研究ではマスター方程式によるデコヒーレンスの存在する時間発展の定式化を用いて、ゲートパルス設計の新たな手法^[3]を用いた。

【理論】 デコヒーレンスを含む時間発展はリウビル空間マスター方程式

$$i\hbar \frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = \mathcal{L}(t)\rho(t) - \Gamma\rho(t) \quad (1)$$

によって表現される。ここで ρ は密度行列であり、 Γ は緩和効果演算子、 $\mathcal{L}(t)$ は時間依存リウビルアン $\mathcal{L}(t)\rho(t) = [H(t), \rho(t)]$ を表す。

着目するゲート操作によるユニタリ変換とパルス照射下での実際の時間発展との比較法に注目すると、従来法^[2]は両者の差を最小にすることに相当する。本研究では、リウビル空間における両者の和の2乗を用いたフィデリティ F を

$$F = \frac{1}{4N^2} \sum_{m,n=1}^N |G(T,0)|mn\rangle + \Omega_{\otimes}|mn\rangle|^2 \quad (2)$$

とすることで、最適化したパルスを評価する^[3]。ここで $|mn\rangle; m,n=1,2,\dots,N$ は線形結合で任意の演算子を表し、密度行列は $\rho = \sum_{mn} r_{mn}|mn\rangle$ で表せる。 $G(t,0)$ は密度行列の時間発展演算子

$\rho(t) = G(t, 0)\rho(0)$ 、 Ω_{\otimes} はリウビル空間のユニタリ演算子 $\Omega_{\otimes}\rho = \Omega\rho\Omega^\dagger$ である。このフィデリティを最大化するために開発されたアルゴリズムは単調収束性をもつことが証明されている^[3]。

【応用】量子ビットとしてヨウ素分子を用いた量子情報処理のモデルを考えた。ゲート操作として離散フーリエ変換に着目した。ヨウ素分子の4つの振動状態 $\nu_B = 28, 29, 30, 31$ (図1)に2量子ビットの2進法表記00, 01, 10, 11を割り当てた。これらの振動状態は基底状態 $\nu_X = 0$ からのFrank-Condon因子が比較的大きい。2つの電子状態の間の遷移を引き起こす共鳴レーザーパルス電場を、離散フーリエ変換を達成するように最適化した (図2 (a))。また、環境との相互作用として電子位相緩和 γ_{el} を考えた。例えば気相中の自然放出では、実際の電子位相緩和は数 ns 程度である。シミュレーションの制約から、1 ps の終時刻までに効果が十分に現れるように数 cm^{-1} 程度の大きな値を仮定して最適化を行った (図2(b))。

【結果】

図2(a),(b)のパルスをそれぞれ異なる電子位相緩和の条件下で時間発展させた場合のゲート操作のフィデリティへの影響を調べた。(a)のパルスは緩和がない系に適用された場合 (表1. (a)-0 cm^{-1}) に99.6%の高いフィデリティであるが、5 cm^{-1} の緩和をもつ系 ((a)-5 cm^{-1})では77%まで低下した。一方、(b)のパルスは緩和のない場合((b)-0 cm^{-1})でのフィデリティが97%と、若干の減少がみられたが、5 cm^{-1} の緩和をもつ系((b)-5 cm^{-1})に対しては81%までの回復が見られた。この回復は、密度行列の純粋度 $\text{Tr}(\rho^2)$ の減少の抑制が主な原因である (表1. (a)-5 cm^{-1} , (b)-5 cm^{-1})。

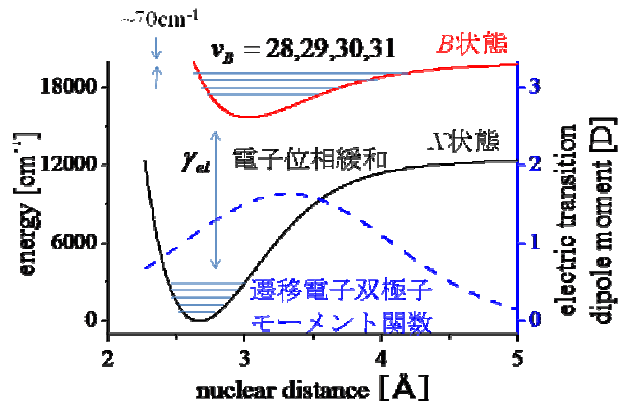


図1. I₂の2電子状態モデルと相互作用

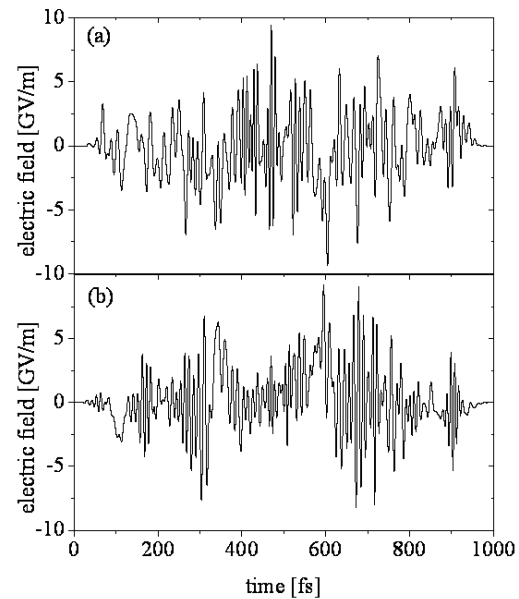


図2. (a)0 cm^{-1} 、(b)5 cm^{-1} の緩和で設計した電場

表1. 電場(a)と(b)に2通りの緩和パラメータを与えて時間発展した時のフィデリティと純粋度

電場	緩和	フィデリティ	純粋度
(a)	0 cm^{-1}	0.996	1
	5 cm^{-1}	0.77	0.58
(b)	0 cm^{-1}	0.97	1
	5 cm^{-1}	0.81	0.70

[1] C. M. Tesch, L. Kurtz and R. de Vivie-Riedle, Chem. Phys. Lett. **343**, 633 (2001).

[2] J. P. Palao and R. Kosloff, Phys. Rev. Lett. **89**, 188301 (2002).

[3] Y. Ohtsuki, New J. Phys. **12**, 045002 (2010).