

4P113

光格子中に捕捉された KCs 分子量子ビットを操作するマイクロ波パルスの数値設計
(東北大院理) ○新井 健太、大槻 幸義、河野 裕彦

Numerical Synthesis of Microwave Pulses for Manipulating KCs Molecular Qubits Trapped in an Optical Lattice

(Tohoku Univ.) ○K. Arai, Y. Ohtsuki, and H. Kono

【序】量子コンピュータが実現すれば、量子重ね合わせを利用する超並列計算により現在のコンピュータ技術の延長では取り扱うことのできない問題を解くことができる。現在までに光子や核スピン(NMR)などを用いた数ビットの量子演算については実証実験が報告されている。しかし、実用的な問題を解くことができるサイズの量子コンピュータを実現するには多くの課題が残っている。このような中、光格子中に捕捉された冷却 KCs 分子を用いれば 10^4 個程度の量子ビットへ拡張できるのではないかとこの予測が近年報告された[1]。

このモデルでは 1 次元に配列された各量子ビット(qubit)を区別するために不均一な静電場を印加する。そのため分子の固有状態は単純な回転状態ではなく球面調和関数の重ね合わせであるペンデュラー状態で表される[2]。そこにマイクロ波パルスを照射し各量子ビットを選択的に操作する。すべての量子アルゴリズムは基本的な 1 および 2 量子ビット演算で表されることが知られている。そこで本研究では 1 量子ビット演算に着目し、最適制御法[3]を用いて高精度かつ短時間で演算するパルスを数値設計しそのスペックを提示する。

【理論】剛体回転子でモデル化した冷却 KCs 分子を考える。捕捉レーザーパルスとの分極相互作用部分を除いて表せば、光格子中の分子のハミルトニアンは

$$H = B\mathbf{J}^2 - \boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{E}_{dc} - \boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(t) \quad (1)$$

で与えられる。 B は回転定数、 \mathbf{J} は角運動量演算子、 $\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{E}_{dc}$ は静電場との相互作用項、 $\boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(t)$ は演算マイクロ波パルスとの相互作用項である。静電場との相互作用によって回転状態が混ざり合いペンデュラー状態となる。このモデルでは偏光条件により $M=0$ の球面調和関数の重ね合わせで表された各ペンデュラー状態

$$|0\rangle = \sum_j a_j Y_{j,0}(\theta, \phi), \quad |1\rangle = \sum_j b_j Y_{j,0}(\theta, \phi). \quad (2)$$

を量子ビットの論理基底として用いる。本研究では最適制御法に基づく以下の手順で演算パルスを数値設計する。目的の演算子を W 、演算パルス $\boldsymbol{\varepsilon}(t)$ の下での時間発展演算子を $U(t_f, 0, \boldsymbol{\varepsilon}(t))$ とし、(3)式を用いて演算パルスを評価する。($|n\rangle$ は量子ビットの基底)

$$F[\boldsymbol{\varepsilon}(t)] = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} |W |n\rangle - U(t_f, 0, \boldsymbol{\varepsilon}(t)) |n\rangle|^2 + \int dt \frac{|\boldsymbol{\varepsilon}(t)|^2}{\hbar A(t)} \quad (3)$$

右辺第 1 項はパルスの精度を評価する項、第 2 項はパルスのエネルギーを最小化するために導入したペナルティ項である。最適制御法ではシュレーディンガー方程式を拘束条件とし、変分法を用いることで F の最小化条件から演算パルスの設計方程式を導く。演算パルスの設計方程式は

$$\varepsilon(t) = -A(t) \sum_{n=0}^{N-1} \text{Im} \langle n | W^\dagger U(t_f, t, \varepsilon(t)) \mu U(t, 0, \varepsilon(t)) | n \rangle \quad (4)$$

と導出できる。(4)式をシュレーディンガー方程式と連立して解くことで最適な演算パルスを求める。なお解法には単調収束保証の繰り返しアルゴリズムを用いる [3]。

【結果】今回は量子情報処理において重要な1量子ビット演算の一つであるアダマール変換

$$W_H |0\rangle = (|0\rangle + |1\rangle) / \sqrt{2} \quad W_H |1\rangle = (|0\rangle - |1\rangle) / \sqrt{2} \quad (5)$$

を実行する演算パルスを設計した。はじめに1量子ビット系に対してアダマール変換を実行するパルスを設計した。(3)式の右辺第一項を用いてこのパルスの精度を評価すると99.999%であった。

次に図1に示すような3量子ビットシステムを仮定し、中央の量子ビットのみを選択的にアダマール変換することを考える。まず先に設計したパルスをこの3量子ビット系に照射すると精度は99.937%であった。なお、両端の量子ビットは分布の変化のみを精度評価に考慮している。1量子ビット系の場合より精度が低下してしまったのは、静電場による遷移周波数の分離が不十分であり両端の量子ビットの遷移が誘起されてしまったためであると考えられる。量子ビット間の静電場強度の差を大きくする、あるいは演算時間を長くすれば演算精度は改善するが、多量子ビット系への拡張および演算時間の短縮という観点からは望ましくない。

そこでこの3量子ビット系でパルスの再設計を行った。その結果、同じ静電場強度、演算時間でも演算精度を99.999%と大きく改善することができた。図2(a)に設計した演算パルス、図2(b)にそのパルスの下での各量子ビットの分布の時間変化を示す。最適パルスの下では中央のビットの演算精度を保ったまま、両端の量子ビットの分布がほぼ完全に元に戻っていることが確認できた。このように最適制御法で整形された演算パルスを用いれば短時間で高精度な演算が可能になる。

【参考文献】

- [1] D. DeMille, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 067901 (2002).
- [2] Qi Wei *et al.*, *J. Chem. Phys.* **134**, 124107 (2011).
- [3] Y. Ohtsuki, *New J. Phys.* **12**, 045002 (2010).

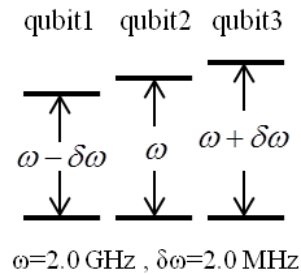


図1：3量子ビット系の概略図

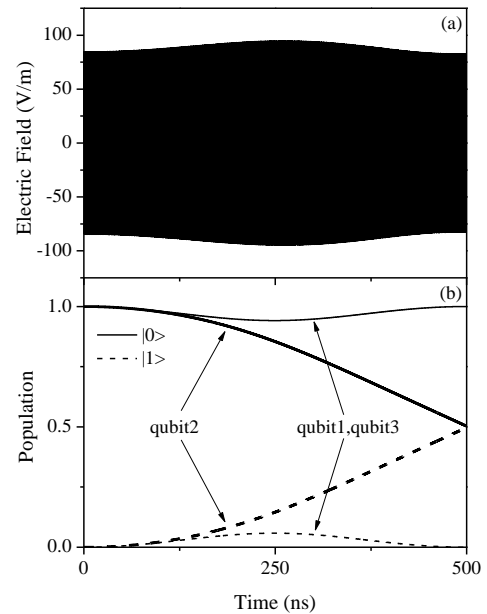


図2：選択的なアダマール変換

(a)：最適パルス

(b)：各量子ビット基底の分布の時間変化