3P107

光格子中の冷却 KCs 分子とマイクロ波パルスによるスケーラブルな量子計算の数値的検討

（東北大院理）　○新井 健太、大槻 幸義、河野 裕彦

Numerical study on scalable quantum computing by using cold KCs molecules trapped in an optical lattice and micro-wave pulses

(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との提案が報告された[1]。

この提案では 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、それらの基本演算をビット選択的に実行するパルスを、最適制御法[2]により数値設計しスペックを提示する。また、終時刻を適切に選択することで、部分的なビット列に対して設計した最適パルスが、より多くの量子ビットを含む系に対してスケーラブルに適用できるか検討する。

【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，系のハミルトニアンは

$$H = \sum_i H_i + \sum_{i,j} V_{i,j}^{dd} \qquad (1)$$

$$H_i = B\mathbf{J}^2 - \boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{E}_i^{dc} - \boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}(t) \qquad (2)$$

$$V_{i,j}^{dd} = \Omega_{i,j}\cos\theta_i\cos\theta_j \qquad (3)$$

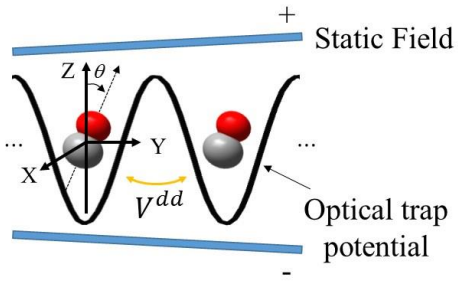

図 1. KCs 分子量子コンピュータの模式図

で与えられる。添え字 i は量子ビットを表す分子に対応する。B は回転定数、$\boldsymbol{J}$ は角運動量演算子、$\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{E}_i^{dc}$ 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り、用いる電場の偏光はすべて Z 軸方向(図 1)であるとする。また、$V_{i,j}^{dd}$ は方位角で平均をとった双極子-双極子相互作用を表している($\Omega_{i,j} = \mu^2 / r_{i,j}^3$)。静電場との相互作用 $-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{E}_i^{dc}$ により、回転状態は $M=0$ 状態が混ざり合った状態（ペンデュラー状態とよばれる）となる[3]。ここではこれら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 $\varepsilon(t)$ の下での時間発展演算子を $U(t_f, 0, \varepsilon(t))$ とし、(3)式を用いて演算パルスを評価する。($|n>$ は量子ビットの基底)

$$F[\varepsilon(t)] = \frac{1}{N^2}\left|\sum_{n=0}^{N-1} < n\,|\,W^{\dagger}U(t_f,0,\varepsilon(t))\,|\,n > \right|^2 - \int dt \frac{|\varepsilon(t)|^2}{\hbar A(t)} \qquad (4)$$

右辺第 1 項はパルスの精度を評価する項[4]、第 2 項はパルスエネルギー最小化のための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 の最大化条件から演算パルスの設計方程式を導く。得られた設計方程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[2]。

【結果】今回は図 2 に示す 3 量子ビット系を仮定し、量子情報処理において重要な 1 ビット演算の 1 つであるアダマールゲート

$$W_H\,|0> = (|0> + |1>)/\sqrt{2} \qquad W_H\,|1> = (|0> - |1>)/\sqrt{2} \qquad (5)$$

および、2 ビット演算である制御位相シフトゲート

$$W_{CP}\,|i\,j> = (-1)^{i\,j}\,|i\,j> \qquad (6)$$

さらにこれらを組み合わせて制御 NOT(CNOT)ゲート

$$\begin{aligned} W_{CNOT}\,|0i> &= |0i> \\ W_{CNOT}\,|10> &= |11> \\ W_{CNOT}\,|11> &= |10> \end{aligned} \qquad (7)$$

を設計した。

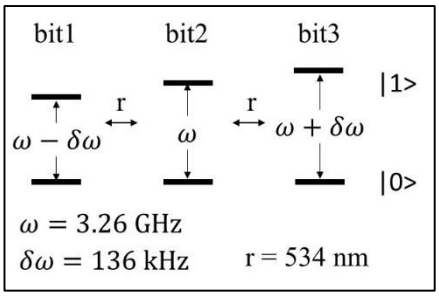

図 2. 3 量子ビット系の概略図とパラメータ

図 3(a)には bit2 に対するアダマールゲートと bit1,2 に対する制御位相シフトゲートによる、ビット選択的な CNOT ゲート(bit1=制御ビット、bit2=標的ビット)を示す。アダマールゲート、制御位相シフトゲート、CNOT ゲートの精度はそれぞれ 0.996、0.997、0.992 であった。図 2(b)および(c)より、bit1,3 の状態を保ったまま bit2 の操作が行われていることがわかる。

これらの最適パルスのスケーラブルな適用可能性については当日発表する。

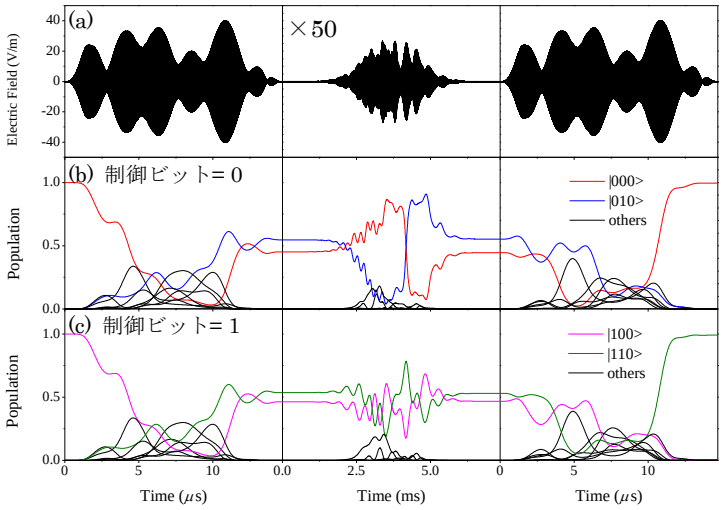

図 3. 選択的な CNOT ゲート(a)及び分布の時間変化(b)(c)
左から、アダマールゲート、制御位相ゲート、アダマールゲートの順に作用している

【参考文献】

[1] D. DeMille, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 067901 (2002).
[2] Y. Ohtsuki *et al.*, *J. Chem. Phys.* **110**, 9825 (1999).
[3] Q. Wei *et al.*, *J. Chem. Phys.* **134**, 124107 (2011).
[4] J. P. Palao and R. Kosloff, *Phys. Rev. A* **68**, 062308 (2003).