1P086

マイクロ波パルスによる量子演算の実装のための縮約ダイナミクス最適制御

（東北大院・理）　新井健太，○大槻幸義

Reduced-dynamics optimal control for implementing quantum gates with microwave pulses

(Tohoku Univ.)　Kenta Arai，○Yukiyoshi Ohtsuki

【序】量子重ね合わせ状態を積極的に利用する量子技術は，量子シミュレータが製品化されるなど一段と重要性を増している。一方，究極のゴールの１つである量子コンピュータに関しては，様々な系が量子ビットの候補として提案され，精度やデコヒーレンスなど基本的な性質が研究されている。課題の１つに量子ビットの増加に伴うスペクトルの複雑化があげられる。すなわち，高精度でのユニタリ変換の実現に向けたチャレンジである。そのため実験に加え，実装シミュレーションによる演算の評価が重要になっている。特に，最適制御法は汎用的な手法であり，分子を利用した量子ビットを中心に種々の系に適用されている。

全量子ビットにおいて, 特定の量子ビットＳに対するユニタリ変換 W_S を実行するパルスを考える。なお，系Ｓ以外の周辺の量子ビットに関しては，パルス設計に影響を与える量子ビット（系Ｂとよぶ）だけを考えることにする。実際の演算は，パルス照射下でのユニタリな時間発展演算子で実現される。最適制御法では，時間発展演算子と目的の演算の差が最小になるようにパルス設計を行う。しかし，系Ｓと系Ｂは互いに相互作用しており，時間発展演算子は系Ｓと系Ｂの部分に分割することはできない。一方，演算 W_S は系Ｓにのみ作用する。両者が作用する空間の次元の違いを埋めるために，従来法では系Ｂに作用する演算 W_B も陽に導入する。結果として，全系に対する変換 $W= W^S \otimes W^B$（直積）を考慮することになり，量子ビット数の増加に伴い指数的に計算量が増加してしまう。すなわち，従来法にはスケーラビリティに問題があった。

本研究では，スケーラビリティの問題を解決するために，系ＳとＢの時間発展を縮約ダイナミクスで記述することを提案する。これにより部分系（系Ｓ）の空間内で，W_S のみに着目したパルス設計が可能になり，スケーラブルな実装シミュレーションができる[2]。具体例として，光格子中に捕捉された冷却 KC_S 分子（回転状態）[3]を用いるスケーラブルな量子コンピュータに適用する。実際の分子パラメータを用いたミリ秒シミュレーションにより，整形パルスにより高精度の演算が可能であることを示す。

【理論】説明を簡単にするために全量子ビットは系Ｓ＋Ｂからなるとする。縮約ダイナミクスを記述するために密度演算子形式を用いる。リウヴィル空間表示を用いて全系の時間発展演算子を $G(t,0)$ で表す。系Ｓ，系Ｂに対する演算を別々に取り扱うためには，着目する演算を直積 $W= W^S \otimes W^B$ ではなく和で表す必要がある。そのため全系の時間発展演算子において，系Ｂ（系Ｓ）の自由度に関するトレース（対角和）をとり，系Ｓ（系Ｂ）の縮約時間発展演算子 $G^S(t,0) = \langle\langle 1_B | G(t,0) | \rho_B^0 \rangle\rangle$ を求める（$|1_B\rangle\rangle$ はリウヴィル空間表示で表したトレース）。問題なのは，系Ｓの縮約時間発展演算子でも系Ｂの初期状態 $|\rho_B^0\rangle\rangle$ に依存してしまうことである。この依存性を除くために我々は，縮約時間発展演算子の組｛$G^S_{m_B}(t,0) = \langle\langle 1_B | G(t,0) | m_B\, m_B \rangle\rangle$｝を

用いることを提案する[2]。ただし，状態$|m_B\rangle$は系Ｂの量子ビットの論理基底を表す。同様に，系Ｂに関する縮約時間発展演算子の組｛$G^B_{m_S}(t,0)=\langle\langle 1_S|G(t,0)|m_S\, m_S\rangle\rangle$｝も導入できる。

系Ｓ，系Ｂそれぞれに対する時間発展の記述法が決まったので，それぞれの演算 W_S と W_B を実行するパルスを別々の最小化問題として設計できる。ただし，従来法とは異なり非ユニタリな時間発展を取り扱う必要があるので我々の開発したシミュレーションアルゴリズムを適用した [4]。

【結果】光格子中に捕捉された冷却 KC_S 分子（回転状態）[3]を例に報告する。KC_S 分子を剛体回転子でモデル化する。光格子中に捕捉された分子を個別に操作するため，不均一な静電場を印加する。静電場中での回転基底・最低励起状態を論理基底$|0\rangle$，$|1\rangle$とする。３量子ビットを考え，中央を系Ｓ両端の２量子ビットを系Ｂとみなす。本要旨では典型例として，系Ｓにはアダマール変換，系Ｂは自由時間発展（パルスの影響を積極的に除く）を紹介する。なお，静電場印加に伴う隣接量子ビット間のシュタルク・シフト差および隣接量子ビット間相互作用が～136 kHz および～1 k Hz になるよう光格子間距離を選んだ。

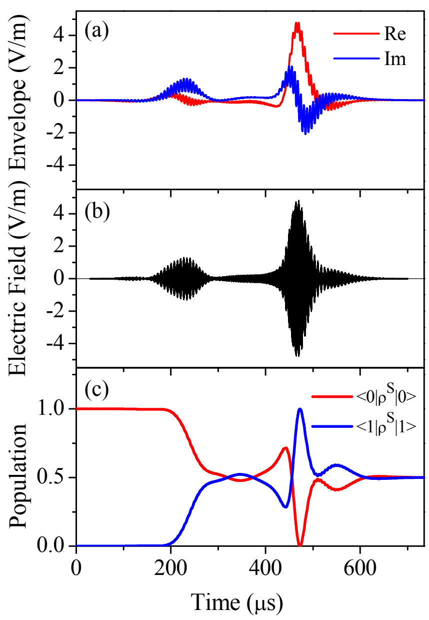

図 1：アダマール変換を実行する(a)最適パルスの包絡線，(b) (a)から求めた最適パルス，(c) 初期状態が論理基底$|0\rangle$の場合の分布の時間変化。

演算時間として 735 μs を仮定した。これは量子ビット間相互作用の逆数から見積られる時間に近い値である。このような長時間ダイナミクスをシミュレーションするためにパルスそのもではなく包絡線設計の方程式に変換してから最適制御問題を解いた。図１(a)に包絡線の実部・虚部を，(b)に包絡線から導かれるパルスを示した。非常に簡単な形のパルスが最適解として得られた。演算誤差を見積ると論理基底に依らず，いわゆる閾値である 10^{-4} 以下に抑えられている。また，系Ｂの分布もほぼ完全に自由時間発展に従っている（誤差は 5×10^{-5} 以下） 。

詳細は当日報告するが，演算時間をこの半分程度 350 μs にすると，非常に複雑なパルスが得られる。これは，量子ビット間相互作用により論理基底が隣接基底に非局在化しているためである。すなわち，局在した結果を得るには，複雑な重ね合わせ状態を生成する必要がある[2]。

【参考文献】
[1] J. P. Palao and Kosloff, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 188301 (2002).
[2] K. Arai and Y. Ohtsuki, *submitted*.
[3] D. DeMille, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 067901 (2002).
[4] Y. Ohtsuki, *New J. Phys.* **12**, 045002 (2010).