

### 3C13 分子量子コンピュータの最適制御シミュレーション解析

(東北大院理) 大槻幸義

Optimal control simulation of molecular quantum computer

(Tohoku Univ.) Yuki Yoshi Ohtsuki

**[序]** 量子コンピュータは、量子重ね合わせ状態を利用して多数の計算を同時に行うことができ(量子並列計算)、従来のコンピュータの延長では不可能な膨大な計算を瞬時に実行することができる。従来のコンピュータでは、 $|0\rangle$  または  $|1\rangle$  の値をとるビットが基本単位であったが、量子コンピュータにおいては、それらの重ね合わせ状態をとることができる量子ビットが基本単位になる。しかし、実際にどのような物理系で量子ビットを実現するかはまだ模索段階である。操作法についても種々提案されているものの、いずれも原理検証の閾をでない。

本研究では、分子と超短レーザーパルスとのコヒーレントな相互作用を利用した量子計算を、量子最適制御シミュレーションにより数値解析する。このような試みの例としては、振動自由度ごとに量子ビットを割り当てていく方法や[1]、ユニタリ演算子の最適設計[2]などが提案されている。しかし、いずれも基本操作パルス(位相シフタや制御 NOT ゲート)の設計までに留まっている。本研究では、量子ゲートパルスを組み合わせ、Deutsch-Jozsa アルゴリズムを例に量子計算そのものをシミュレーションし、分子を使った量子計算の可能性・有効性を解析する。なお、比較的簡単な Deutsch-Jozsa アルゴリズムに着目するのは、閉ループ実験を使ったパルス最適設計における適合度との関連を明らかにできるとの期待からである。

#### **[理論・計算]**

**最適化された Deutsch-Jozsa アルゴリズム:**  $n$ 量子ビットを考える。

初期状態  $|\psi_0\rangle = |0\rangle_n$  にアダマール変換を施し、 $|\psi_1\rangle_n = \mathbf{H}^{\otimes n} |0\rangle_n = \frac{1}{2^{n/2}} \sum_{0 \leq x \leq 2^n - 1} |x\rangle_n$  を生成。

関数  $f(x)$  を計算するユニタリ変換(オラクル)を作用。但し、 $U_f |x\rangle_n = (-1)^{f(x)} |x\rangle_n$

$$|\psi_2\rangle_n = U_f |\psi_1\rangle_n = \frac{1}{2^{n/2}} \sum_{0 \leq x \leq 2^n - 1} (-1)^{f(x)} |x\rangle_n$$

結果を取り出すために再度、アダマール変換を施す。

$$|\psi_3\rangle_n = \mathbf{H}^{\otimes n} |\psi_2\rangle_n = \frac{1}{2^n} \sum_{0 \leq x \leq 2^n - 1} \sum_{0 \leq y \leq 2^n - 1} (-1)^{f(x) + x \cdot y} |y\rangle_n \quad \text{但し、} x \cdot y \text{ は 2進数表示の内積。}$$

以上の操作の後、 $|0\rangle_n$  に系を見出す確率を計算すると、

constant (任意の  $x$  に対し、 $f(x) = 1$  または  $f(x) = 0$ ) の場合、確率は 1

balanced (半分の  $x$  に対し  $f(x) = 1$ 、他の半分の  $x$  に対し  $f(x) = 0$ ) の場合、確率は 0 となる。

#### **最適制御法によるゲートパルス設計:**

量子ビットを操作するためのパルス(ゲートパルス)を最適制御法を使ってシミュレーションする。種々の状態を異なる目的状態に遷移させる必要がある。密度演算子を使って、初期状態の組を  $\{\rho_j^0\}$ 、目的の状態をターゲット演算子の組  $\{W_j\}$  で表す。標準的な取り扱いに従い、目的汎関数(リウヴィル空間表示)

$$J = \sum_j \langle\langle W_j | G(t_f, 0) | \rho_j^0 \rangle\rangle - \frac{1}{\hbar A} \int_0^{t_f} dt [E(t)]^2$$
 を最大にするパルス電場  $E(t)$  を変分法

で求める。右辺第1項は、ターゲット演算子の期待値の和、第2項はパルス電場によるペナルティを表している。但し、パルス電場と分子との相互作用は、電気双極子近似により  $V^I = -\mu E(t)$  と仮定す

る。  $G(t_f, 0)$  は、リウヴィル空間における時間発展演算子である。系が運動方程式に従うという拘束条件は、時間発展演算子を通して考慮されている。パルス設計方程式は以下のようにまとめられる。

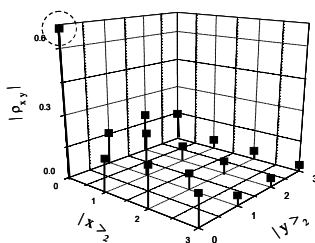
$$\text{最適制御電場は } E(t) = \frac{i}{2} A \sum_j \langle\langle \Xi_j(t) | M | \rho_j(t) \rangle\rangle$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\rho_j(t)\rangle\rangle = [L - M E(t)] |\rho_j(t)\rangle\rangle \quad |\rho_j(t=0)\rangle\rangle = |\rho_j^0\rangle\rangle$$

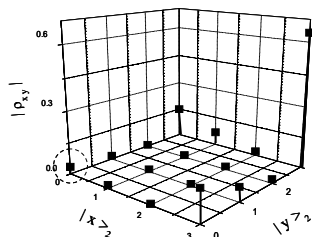
$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Xi_j(t)\rangle\rangle = [L^\dagger - M E(t)] |\Xi_j(t)\rangle\rangle \quad |\Xi_j(t=t_f)\rangle\rangle = |W_j\rangle\rangle$$

数値解法には我々が開発した単調収束アルゴリズムを用いる[3]。

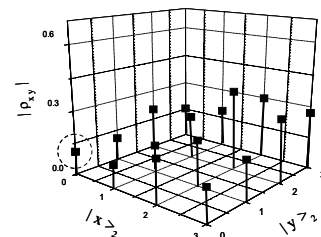
**【結果・考察】** ヨウ素分子の基底(X)・励起(B)状態を1次元モデルで近似する。制御シミュレーションを行う前にまず、何が妥当な1ステップなのかを考える。一般に、計算(オラクル)に関わる補助ビットは、計算後に入出力ビットとエンタングルメントを解くことができる。そこで、+ を実行する“オラクル”パルスに続いて、アダマール変換パルスを照射し、予想される計算結果が求められるかを調べる(ゲートパルスの詳細は発表当日に報告する)。2量子ビットの場合のシミュレーション結果を以下に示す。量子計算結果を、密度行列の実数部分の絶対値で表す。



constant の場合



balanced の場合



その他の場合

$|0\rangle_2 = |00\rangle$  の分布を比較すると、constant の場合が 69%、balanced の場合が 3%、その他の場合が 11%と得られた。このことから、分子の振動準位を使って Deutsch-Jozsa アルゴリズムを実行できることが分かる。ここでは環境体によるデコヒーレンスの影響を無視したシミュレーション結果だけを示している。デコヒーレンスによる計算エラーに関しては、非マルコフマスター方程式を使って系統的に解析する予定である[4]。

分子振動状態へのマッピングにより作成した量子ビットを利用すれば、量子計算が可能であることを最適制御シミュレーションにより明らかにした。高い精度で量子ゲートパルスを設計する必要があるが、近年の学習アルゴリズムに基づくパルス整形技術を適用すれば実現可能である。

## [参考文献]

- [1] C. M. Tesch, and R. de Vivie-Riedle, Phys. Rev. Lett. **89**, 157901 (2002).
- [2] J. P. Palao, and R. Kosloff, Phys. Rev. Lett. **89**, 188301 (2002).
- [3] Y. Ohtsuki et al., *J. Chem. Phys.* **120**, 5509 (2004); Y. Ohtsuki and H. Rabitz, *CRM Proceedings and Lecture Notes*, **33** 163 (2003).
- [4] Y. Ohtsuki, *J. Chem. Phys.* **119**, 661 (2003).