

4P096 分子振動波束のレーザー最適制御理論

(東大院工) 鈴木進吾、山下晃一

【序論】 赤外活性である振動状態制御を用いた量子コンピューティングが近年提唱されている [1]。それは、ある振動モードの励起状態をもってひとつの量子ビット、他方の振動モードの励起状態をもってもうひとつの量子ビットとみなし、各状態間を高い遷移確率で達成するようなレーザーパルスを、最適制御理論を用いて求め、それを量子論理ゲートとみなすものである。このためには量子ビットをなす各振動励起状態が、如何にデコヒーレンスなく安定であるか、などが問題となる。

我々は図 1 に示すアンモニア分子モデルを用いて、振動状態の最適制御シミュレーションを行い、2qubit の量子計算の可能性について議論する。

【理論及び計算手法】 最適制御理論 (Optimal Control Theory; OCT) を用いて、初期状態 $\psi_i(t=0) = \phi_i$ からターゲット状態 $\psi_f(t=T) = \phi_f$ へと、決められた時間 T において高い確率で遷移させる外場レーザー $\epsilon(t)$ を設計することを考える。遷移確率の向上と外場生成に際して消費するエネルギーの抑制を考慮したとき、 $\epsilon(t)$ に対する評価汎関数は次のようになる：

$$J = |\langle \psi_i(T) | \phi_f \rangle|^2 - \alpha_0 \int_0^T \frac{[\epsilon(t)]^2}{s(t)} dt - 2\text{Re} \left[\langle \psi_i(T) | \phi_f \rangle \int_0^T \left\langle \psi_f(t) \left| \frac{\partial}{\partial t} + i[H_0 + V + \mu\epsilon(t)] \right| \psi_i(t) \right\rangle dt \right].$$

ここで、 H_0 は運動量演算子、 V はポテンシャル、 μ は遷移双極子モーメントを表す。 α_0 は penalty factor と呼ぶ。 $s(t)$ はレーザーシェイプ関数であり、今回は $s(t) = \sin^2(\pi t/T)$ を用いる。また、系の記述には原子単位系 (atomic unit; a.u.) を用いている。

我々は、Rabitz らの再帰的アルゴリズム [2] をもとに、汎関数 J を収束させる数値計算を行なった。なお、ポテンシャルエネルギー表面 (PES) 及び双極子モーメントについては、Gaussian03 を使用し、ab initio 計算 (B3LYP/6-311G**) で 1024 点求めたものに、Loess 手法による補間を行い、時間発展計算で使用している 64×64 grid に展開したものをを用いた。時間発展手法には 2 次の split operator 法を使用した。また、固有エネルギー及び固有状態は、Miller らの DVR によって記述した Hamiltonian を対角化することで求めた。

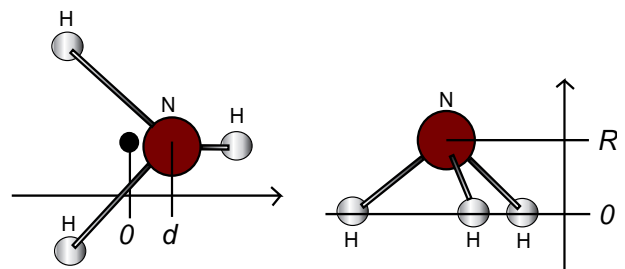


図 1: アンモニア分子の 2次元振動モデル。各水素の位置を固定し、図中に示すように窒素の変位を d , R ととる。 d 方向の変位は反対称伸縮モードを表し、 R 方向の変位は変角モードを表している。

PES は double well 構造になっており (図 2)、低い励起状態の固有状態は R 方向に対し対称なものと反対称なものがエネルギー的にほぼ縮重しており、それら準位間はデコヒーレンスが起りにくい。そこで R 方向に関する bit (zeroth bit) として対称を $|0\rangle$ 、反対称を $|1\rangle$ と置く。また、 d 方向に関する bit (first bit) としては基底状態を $|0\rangle$ 、第一励起状態を $|1\rangle$ と置く。この仮定の下、我々は、まず、first bit に関する Hadamard ゲートを為すレーザーパルスを求め、終状態の安定性や、レーザー照射中の状態遷移の様子、レーザー波形の周波数成分の時間的変化 (FROG 表現) などを調べた。

$|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle$ それぞれに対応する固有状態を図 3 に示す。

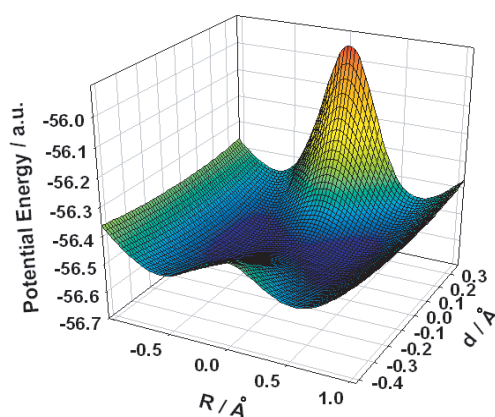


図 2: NH3 の PES。 R 方向に対称的であり、double well 構造になっている。

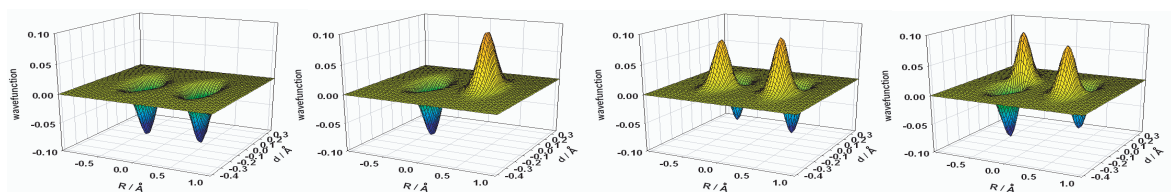


図 3: 左から、 $|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle$ を表す。

【結果】 $|00\rangle \rightarrow |00\rangle + |10\rangle$ の遷移を 99.5% 達成する最適レーザーパルスを求めた。レーザー照射時間は $T = 3.87\text{ps}$ 、penalty factor は $\alpha_0 = 0.5$ 、時間発展幅は $\Delta t = 8\text{a.u.} = 0.194\text{fs}$ を適用した。それを照射した場合の波束変化の様子を図 4 に示す。同じレーザーパルスを用いることで $|01\rangle \rightarrow |01\rangle + |11\rangle$ の遷移も可能である。その他、詳しくは当日発表する。

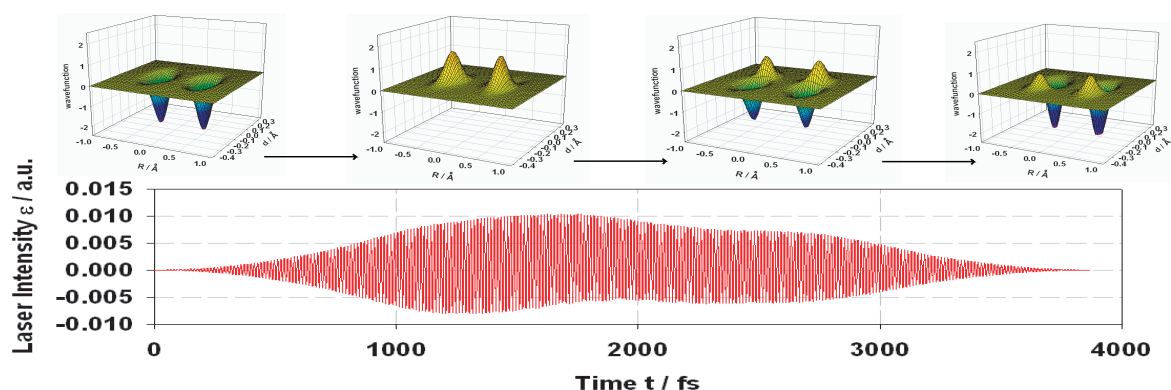


図 4: 上: $|00\rangle \rightarrow |00\rangle + |10\rangle$ の遷移における波束の時間的変化、下: 求めた最適レーザー

参考文献

- [1] C. M. Tesch and R. Vivie-Riedle, Phys. Rev. Lett. **89**, 157901 (2002)
- [2] W. Zhu, J. Botina, and H. Rabitz, J. Chem. Phys. **108**, 1953 (1997)