

エンタングルメントの制御に関する理論的研究

(JST-CREST¹、東大工²) 三嶋謙二¹、山下晃一^{1,2}erdao@tcl.t.u-tokyo.ac.jp¹

【序】近年、古典コンピュータの性能をはるかに凌ぐ量子力学の原理に基づいた量子コンピュータの研究が、物理の新しい研究分野として脚光を浴びている。それに伴い、量子情報理論という研究分野が物理学の一分野として重要な地位を占めていることも周知のことである。これらの新しい研究分野には、今や、様々な研究分野の研究者が参入している。では、化学的な見地から見たらどうであろうか？それは、未だほとんど何もわからないというのが現状である。そこで、我々は、分子の豊富な量子状態（電子、振動、回転など）を用いた分子量子コンピュータの可能性の追求、分子量子情報理論という新分野の構築、若しくは、量子情報理論に基づいた新しい化学現象を予言することを目指している。その第一歩として、我々は最近、分子系におけるエンタングルメントの研究を行っている。ところで、量子コンピュータの演算速度向上、量子テレポーテーションなどの要であるエンタングルメント(entangled state、entanglement)は、非常に重要な資源として近年盛んに研究が行われている。エンタングルメントがなければ、それらは不可能である。いくつかの物理系では、エンタングルメントの生成、制御が可能であることがわかってきているが、分子系はどうだろうか？分子系は、エンタングルメントの生成、制御には非常に理想的なシステムであることが我々の研究から明らかになった。それは、電子、原子核をそれぞれ一つの系を考えれば、それらは、非局所的相互作用の一種であるクーロン力によってお互いに相互に作用しあっているからである。従って、分子の初期状態は、色々な量子状態が既に複雑に絡まり合っている。そのことは、幾つかの数値計算によって明らかになったが、反面、分子の豊富な量子状態のために、制御はそれほど簡単ではないことも次第にわかってきている。分子系の制御には、通常、時間に依存するレーザーを使用する。しかし、様々な量子情報物理の研究においては、非時間依存型の波動関数を用いた研究はよく行われるが、時間依存性を含んだエンタングルメントの研究はその取り扱いが困難なため、いまだその性質は明らかではない。従って、分子系でのエンタングルメントの制御に関して系統的な研究を行うためには、分子系の非局所的相互作用を詳しく研究することが重要である。今回は、第一歩として、回転波近似(rotating-wave approximation)に基づいた非局所的相互作用の分類とベル状態生成の制御を、2レベルからなる two-mode システムの一般的な相互作用の分類と制御、3レベルから成る two-mode システムの制御、散逸系におけるベル状態の decoherence について理論的研究を行った。

【結果と考察】2レベルからなる two-mode システムのレーザーとの相互作用は、局所的相互作用であるが、一般的な絡み合い状態を生成する非局所的相互作用は、回転

波近似に基づくと、次の3つの場合を個別に扱わなければならないことがわかった。

$$\hat{V}_{12}^{(1)} = \begin{bmatrix} V_{1,1;1,1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & V_{2,1;2,1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & V_{1,2;1,2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & V_{2,2;2,2} \end{bmatrix}, \quad \hat{V}_{12}^{(2)} = \begin{bmatrix} 0 & V_{1,1;2,1} & V_{1,1;1,2} & 0 \\ V_{2,1;1,1} & 0 & 0 & V_{2,1;2,2} \\ V_{1,2;1,1} & 0 & 0 & V_{1,2;2,2} \\ 0 & V_{2,2;2,1} & V_{2,2;1,2} & 0 \end{bmatrix},$$

$$\hat{V}_{12}^{(3)} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & V_{1,1;2,2} \\ 0 & 0 & V_{2,1;1,2} & 0 \\ 0 & V_{1,2;2,1} & 0 & 0 \\ V_{2,2;1,1} & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}。$$

回転波近似が妥当である場合、 $\hat{V}_{12}^{(1)}$ は、絡み合い状態が生成できない局所的相互作用となるが、 $\hat{V}_{12}^{(2)}$ と $\hat{V}_{12}^{(3)}$ は、絡み合い状態が生成できる非局所的相互作用となり、その解析的研究が可能となる。それに基づいて、ベル状態生成の制御法の提案を行った。従って、この分類は、レーザーを用いた分子振動、回転の絡み合い状態の制御の研究に重要な手がかりを与えるものと思われる。

一方、3レベルから成る系の制御は上に述べた分類に基づいて行えることが示され、そのための分子系の条件が導出された。それは、エネルギーレベルの間のエネルギー差が鍵を握っていることがわかった。

散逸系におけるベル状態の decoherence の研究を行うために、Pauli master equation の導出を行った。そして、絡み合い相互作用の大きさと decoherence の度合いの関係を見出した。下図は、分子の集団において、ベル状態を見出す確率の時間変化をプロットしたものである。その結果、上記のベル状態生成の制御法に基づけば、relaxation coefficient の特定のものだけが、decoherence に大きな影響を与えることが見出された。

詳細と数値的計算の結果は当日報告する。

