

分子と弱いレーザー場を用いた量子ゲート操作

(東北大院・理¹、JST - CREST²、分子研³)

寺西慶哲^{1,2}、大槻幸義^{1,2}、大森賢治^{1,3}

【序】 量子コンピュータは、既存のコンピュータよりもはるかに効率的な計算が可能であることが期待され注目を集めている。量子計算は、量子状態のユニタリ変換で表されるゲート操作の組み合わせと非ユニタリである観測によって実現される。本研究では、分子の振動状態の自由な時間発展によるゲート操作を提案する。さらに弱いモードロックレーザーと波形整形器を用いた、量子情報の入出力の方法についても議論する。また、ヨウ素分子を例に数値シミュレーションを行い、ゲート操作や入出力過程の精度について議論する。さらに、Deutsch-Jozsa 問題とフーリエ変換を利用した関数の周期を見つける問題に適用しその有用性を示す。

【量子コンピュータについて】 量子コンピュータでは、情報を $|0\rangle$ と $|1\rangle$ の重ね合わせで表現する。例えば2量子ビットの場合、 $|00\rangle$, $|01\rangle$, $|10\rangle$, $|11\rangle$ の4つの基底(計算基底)の線形結合で表される情報の操作を行う。初期状態に対してユニタリ変換(ゲート操作)や観測を行うことで、情報操作を行うことで演算を達成する。

【ゲート操作】 本研究では分子の自由な時間発展をゲート操作とみなす。計算基底を分子の振動固有状態の線形結合で表現するが、その表現方法は、行うゲート操作によって異なる。振動状態は、時間発展演算子(即ちハミルトニアン)の固有状態であるので、ゲート操作に対応するユニタリ演算子の対角表現から、そのゲート操作を行うための計算基底の表現方法が求まる。エネルギー固有値が等間隔に並んでいる調和振動子の場合、Hadamardゲート、制御NOTゲート、量子フーリエ変換などを行うことができる。

【量子情報の入出力】 本研究のモデルでは、ヨウ素分子のB状態上の振動状態の重ね合わせ(波束)によって量子情報をあらわす。初期状態としてX状態の振動基底状態に100%分布している分子を考え、波形整形されたフェムト秒パルスによってB状態上に波束を生成し入力状態とする(量子情報の書き込み)。

量子情報の読み出しは、各振動状態の存在確率と位相の両方の測定を必要とするが、これは量子干渉計^[1]によって行う。即ち、種となるレーザーパルスをビームスプリッターで2つに分割し光路差をつけて照射する。その際に最初に照射するパルスは途中で波形整形器を経由し変調され、入力状態生成に用いられる。分割されたもう一方のパルス(参照パルス)は、波形整形器を通さずにそのまま照射される。整形パルスによって生成された波束の位相情報は、参照パルスによって生成される波束との干渉効果

によって各準位の分布として読み取ることが可能となる。

【結果と考察】 本研究では、ヨウ素分子のX状態とB状態の断熱ポテンシャルと遷移双極子モーメントの実験データを用いて数値シミュレーションを行い、我々の量子ゲート操作の有用性について調べた。例として、2ビットの制御NOT (CNOT) ゲートと量子フーリエ変換 (QFT) ゲートの各入力状態に対する Fidelity を図1に示す。図から明らかなように、ポテンシャルに非調和性があるにも関わらず非常に精度の高いゲート操作が達成されている。

さらに、3量子ビットの量子フーリエ変換を例に実験機器の分解能や精度に対してゲート操作や入出力過程がどのような影響を受けるかについて詳細にシミュレーションを行った。その結果、摂動論的な弱い場と実現可能な時間分解能(数 fs)によって、ゲート操作と量子情報の入出力の両方が非常に高い精度で達成できることが示された。また、量子干渉を利用した量子情報の読み出しでは、数%の結果の誤差を明確に区別することができることがわかった。

さらに、Deutsch-Jozsa 問題と関数の周期を求める問題という応用例について議論したが、これらについても非常に高い精度で実現できるというシミュレーション結果を得た。

【まとめ】 量子コンピュータは、今までのコンピュータでは不可能とされていた計算が可能となるといった実利的な面のみならず、純粋に学術的な側面からも興味深い研究対象である。本研究では、摂動論的な弱い場と実現可能な実験装置(波形整形器など)を用いて、量子コンピュータの根幹を成す量子ゲート操作の原理検証実験の提案を行った。シミュレーションの結果によると、非常に高い精度で3量子ビットの演算が可能である。

【参考文献】

- [1] K. Ohmori et.al. Phys. Rev. Lett. **91**, 243003 (2003).

表1 . 2量子ビットのCNOTとQFTゲートのFidelity

Input	C-not	QFT
$ 00\rangle$	1	0.996633
$ 01\rangle$	1	0.999932
$ 10\rangle$	0.999738	0.996617
$ 11\rangle$	0.999738	0.999932
Average	0.999869	0.998278