

最適制御シミュレーションによるデコヒーレンス抑制機構の解析

(東北大院理, JST-CREST) 大槻幸義

【序論】

量子力学は、物質の性質の理解に本質的な役割を果たすとともに、新しい機能を持った物質設計の指針を与えてきた。次のステップとして、現在、量子力学の直接的な工学的応用の可能性が着目されている。これが実現すると例えば、量子コンピュータ・量子通信など、従来技術の延長上では不可能な情報処理が可能になる。量子系を制御するには、波動関数の干渉を利用するために、レーザーパルスのような可干渉性のある外部操作が必要になる。近年の超短高強度レーザーパルス発生・整形技術の進歩に伴い、分子ダイナミクスに着目した量子制御理論・実験が盛んに研究されている。

一方、波動関数のもつ可干渉性は環境体からの影響により容易に壊れてしまう(デコヒーレンス)。したがって、デコヒーレンスを抑制できるか否かが、量子技術の成否の鍵となる。そのため、デコヒーレンス抑制は長い間(主に理論面から)研究されており、既に(ほぼ)確立されシナリオもいくつか知られている [1]。量子 Zeno 効果・動的デカップリング法(バンバン制御など)、強連続測定法、量子誤り訂正法などである。例えば、量子 Zeno 効果においては、観測により波動関数が収縮することを利用すれば、連続観測の極限において、着目している系をデコヒーレンスを受けない(Zeno 部分)空間に留められることが知られている。また、バンバン制御においては、系に繰り返し(適当な)ユニタリな外部操作を加えることで、系と環境体との相互作用を実効的に取り除けることが知られている。

本研究では、新しく開発したペナルティフリーの最適制御シミュレーションによりデコヒーレンス抑制機構を解析する。上記のようにデコヒーレンス抑制のシナリオはいくつも報告されている。しかし、実際にどのような外場をどういったタイミングで照射するか？など、具体的な外場設計法には答えていない。ここでは最適制御理論により、デコヒーレンスを抑制するレーザーパルスを実際に理論設計し、その解析からデコヒーレンス抑制機構(ユニタリな場合)を具体的に明らかにする。非ユニタリな制御によるデコヒーレンス抑制の機構も考察する予定である。

【最適制御理論】

以前我々は、物理・化学的に興味ある問題は、次の形をした目的汎関数(評価関数)により制御目的を記述できることを報告した[2, 3]。即ち、目的時刻でベクトル $|X\rangle$ または演算子 X で表される状態へ遷移させるとともに、途中、ベクトル $|Y\rangle$ または演算子 Y で表される中間状態を経由するように問題設定する。ここでは操作量として電場 $E(t)$ を考え、パルスエネルギーを低く抑えるためのペナルティも加えておく。期待値とペナルティの評価バランスは、時間に依存する重みパラメータ $A(t)$ により決められる。

$$J_I = 2\text{Re} \langle X | u(t_f) \rangle + 2\text{Re} \int_0^{t_f} dt \langle Y(t) | u(t) \rangle - \int_0^{t_f} \frac{dt}{A(t)} [E(t)]^2 \quad (1)$$

$$J_{II} = \langle u(t_f) | X | u(t_f) \rangle + \int_0^{t_f} dt \langle u(t) | Y(t) | u(t) \rangle - \int_0^{t_f} \frac{dt}{A(t)} [E(t)]^2 \quad (2)$$

ここではこれらの基本形をタイプ I および II とよぶことにする。制御問題は目的汎関数を最大(極大)

にする電場 $E(t)$ を求める問題に帰着できる。変分法を適用することで、最適な電場が従う方程式 (パルス設計方程式) が得られる。

今回の報告ではタイプ I の目的汎関数を使う。系の時間発展は (非) マルコフタイプのマスター方程式に従うと仮定する [4]。中間状態を指定することで、コヒーレンスを保持する制御、即ち、デコヒーレンスの抑制を試みる。数値解析には、ペナルティを除く新しい計算アルゴリズムを用いる [5]。

【結果】

例として、図1に示す3準位モデルを考える。エネルギーの高い2つの準位 (点線) は着目する系以外の準位を表す。図1には、各準位のエネルギーおよび緩和パラメータも示してある。準備評価として、最低準位の分布を $|3\rangle$ へ遷移させる制御を考える。

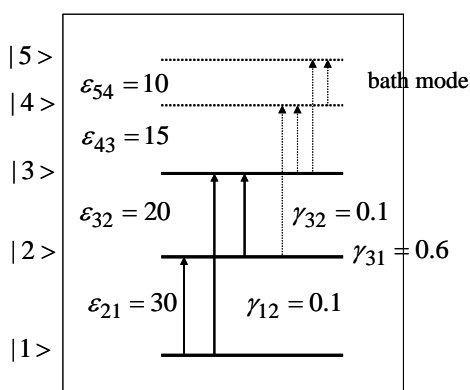


図1 モデルとパラメータ

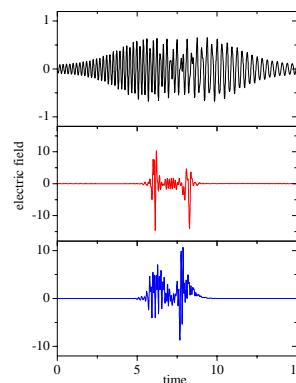


図2 最適パルス

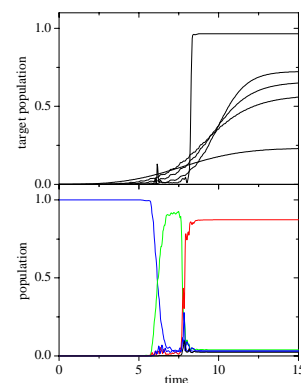


図3 分布の時間発展

図2には、(上)有限のペナルティを仮定した (従来の) 最適制御電場、(中)ペナルティフリーの最適電場: 3準位の場合、(下)ペナルティフリーの最適電場: 5準位の場合を示す。図3には、(上)種々のペナルティ条件下でのターゲット分布の時間変化、(下)ペナルティフリーの最適電場 (5準位) における各準位の分布の時間変化を示す。

図2・3から、ペナルティフリーの最適電場は、有限のペナルティを仮定した (従来の) 場合の場合とは大きく異なることが分かる。今回提案した最適化シミュレーションアルゴリズムが、デコヒーレンス制御解析に非常に有効であることが分かる。デコヒーレンス抑制には、できるだけ強いパルスを短時間に照射することが重要であるが、同時に選択励起に関する要請から、短パルス化には制限がある。ここでの数値計算例を見る限り、最適パルスは、時間幅からの見積もりよりも高いエネルギー分解を示すようである。理由として、動的シュタルクシフトの利用などを考えている。

【参考文献】

- [1] P. Facchi et al. Phys. Rev. A 71, 022302 (2005) and references therein.
- [2] Y. Ohtsuki and H. Rabitz, *CRM Proceedings and Lecture Notes*, **33** 163 (2003).
- [3] Y. Ohtsuki, G. Turinici, and H. Rabitz, *J. Chem. Phys.* **120**, 5509 (2004).
- [4] Y. Ohtsuki, *J. Chem. Phys.* **119**, 661 (2003); Y. Ohtsuki et al., *Chem. Phys.* **287**, 197 (2003).
- [5] Y. Ohtsuki, *in preparation*.