

分子の振動・回転状態を用いた量子ゲートの最適制御

(東大院工^{*}, JST-CREST^{**}) 塩屋厚作^{*}, 三嶋謙二^{*,**}, 山下晃一^{*,**}

【序】Paul Benioff によって量子コンピュータという概念が誕生し、盛んに研究されるようになったのは約 25 年前、1980 年以降のことである^[1]。以来実現に向けて多くの理論や実験が考案されている。そんな中、分子による量子計算が Tesch らによって提唱された^[2]。本研究では量子計算に用いる量子ビットとして、内部状態が数多く存在し、状態遷移にかかる時間が短いなどの理由から、この分子系に着目している。同様な研究として分子の振動状態を量子ビットとし、制御を行った研究は数多く報告されているが、実際は回転状態も含めた計算を行わなければその効率は過大評価につながる可能性があることが示されている^[3]。

一方、制御にも様々な手法があるが、その 1 つが整形されたレーザーパルスを用いた制御である。代表的なパルス設計手法としては、最適制御理論 (Optimal Control Theory; OCT) が挙げられる。一般に、OCT により得られるパルスは複雑なものとなるが、近年のパルス整形技術の発達により、フェムト秒、アト秒のオーダーで複雑なパルスを整形することが可能となっている。そこで本研究では、2 原子分子の振動状態と回転状態を量子ビットとし、OCT を用いたゲート設計、特に基本量子ゲートの 1 つである制御否定 (CNOT) ゲートの理論的实现を行うこととする。すでに以前の研究において両状態間で絡み合い (エンタングルメント) 状態が生成できることが確認できている。絡み合い状態に加えて制御を効率良く行うことができれば、分子の振動・回転状態が量子ビットとして有望なものとなることが期待できる。

【理論】まず OCT に関しては Rabitz らの手法を参考にした^[4]。これによると、OCT は最終的に以下の 3 組の方程式に帰着できる。

$$i \frac{\partial \psi_i(t)}{\partial t} = [H_0 + V - \mu \cdot E(t)] \psi_i(t) \quad \text{B.C. } \psi_i(0) = \phi_i \quad (1)$$

$$i \frac{\partial \psi_f(t)}{\partial t} = [H_0 + V - \mu \cdot E(t)] \psi_f(t) \quad \text{B.C. } \psi_f(T) = \phi_f \quad (2)$$

$$\alpha_0 E(t) = -s(t) \text{Im} \left[\langle \psi_i(t) | \psi_f(t) \rangle \langle \psi_f(t) | \mu | \psi_i(t) \rangle \right] \quad (3)$$

(1) ~ (3) 式はそれぞれ初期波束 ϕ_i を境界条件とした時間の前方発展方程式、目的波束 ϕ_f を境界条件とした時間の後方発展の方程式、レーザーパルスの最適化に用いる方程式を表す。また μ 、 $E(t)$ 、 α_0 、 $s(t)$ はそれぞれ遷移双極子モーメント、レーザーパルス、ペナルティファクタ、パルスの形を決める係数である。(1)、(2) 式を交互に解きながら (3) 式を用いてレーザーパルスを最適化していく。

これらは解析的に解くことはできず、特に (1)、(2) 式の外場を含んだ時間依存 Schrödinger 方程式を解くのは容易ではない。これを計算方法として、Hermann らの Split-Operator 法を参考にした^[5]。これは (4) 式のように各演算子を分割、プロパゲータで記述し、波動関数に次々と乗じていく手法である。 L^2 は角運動量の演算子を表す。

$$\psi(t + \Delta t) = e^{i \left(\frac{1}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} \right) \Delta t} \cdot e^{-i \left(\frac{L^2}{4mr^2} - V \right) \Delta t} \cdot e^{-i \mu \cdot E(t) \Delta t} \cdot e^{-i \left(\frac{L^2}{4mr^2} - V \right) \Delta t} \cdot e^{i \left(\frac{1}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} \right) \Delta t} \cdot \psi(t) \quad (4)$$

効率化のため動径方向と角度方向のグリッドを設け、全波動関数をルジャンドル多項式で展開し、動径方向は高速フーリエ変換によって時間発展させ、角度方向に関してはガウス・ルジャンドル

積分を行う。本研究では動径方向については 128、角度方向については 8 のグリッドを設けて計算を行った。

【結果と考察】今回は Rabitz と同様、OH によるモデル計算を行った^[4]。ポテンシャルと遷移双極子モーメントは以下の式で与えた。

$$V(r) = D_0 [\exp\{-\beta(r-r_0)\}-1]^2, \quad \mu(r) = \mu_0 r \exp(-r/r^*) \quad (5)$$

パラメータは $D_0=0.1994$ 、 $\beta=1.189$ 、 $r_0=1.821$ 、 $\mu_0=3.088$ 、 $r^*=0.6$ (単位は全て a.u.) である。レーザー照射時間は $T=0.726$ ps、時間刻みは $\Delta t \sim 14.6$ fs、ペナルティファクタ $\alpha_0=0.24$ とし、 $|00\rangle$ の初期状態から出発して $(|00\rangle+|11\rangle)/\sqrt{2}$ の絡み合い状態を生成することを目的とした。結果を図 1～図 3 に示す。図 1 (上) の波束を与え、時間発展させると図 1 (下) の波束が得られ、図 2 (下) のレーザーパルスが得られた。しかし図 3 から、その遷移確率は 82%程度であり、まだ十分な効率が得られていない。これは α_0 や T の調整でさらに効率を上げることはできると考えられるが、今後の課題である。また、Rabitz らによると上記 OCT のアルゴリズムはほとんど初期レーザーパルスに依存しないということであったが、回転まで含めた今回の計算では初期レーザーパルスに依存することも確認された。今回のモデル計算から得られた知見をふまえ、アルゴリズムとパラメータの最適化を行い、最終的には CNOT ゲートの実現まで行う予定である。

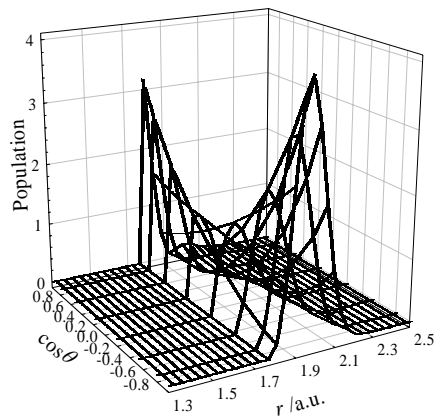
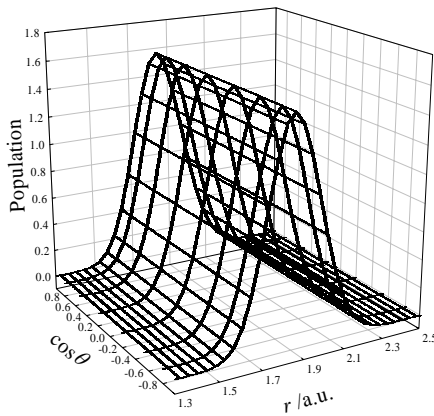


図 1 . 初期波束及び時間発展後の波束
(上) $|00\rangle$ 、(下) $(|00\rangle+|11\rangle)/\sqrt{2}$

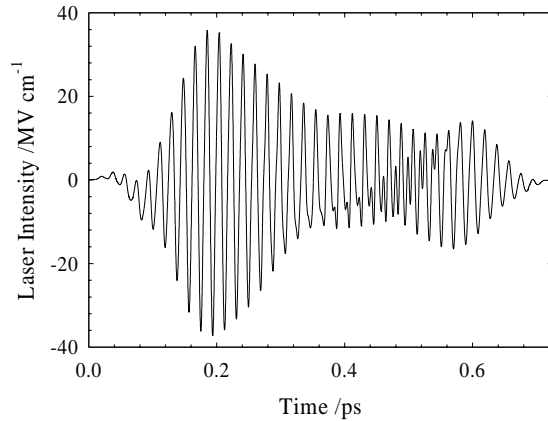


図 2 . 得られたレーザーパルス

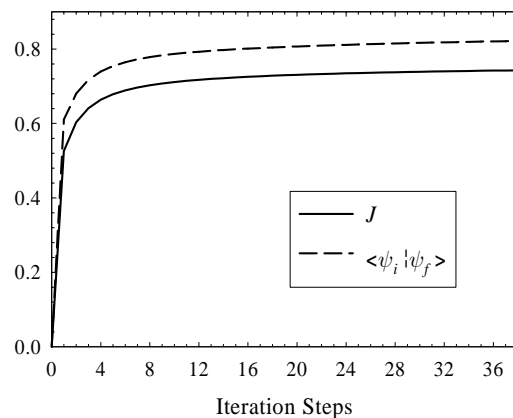


図 3 . 遷移確率及び評価関数

【参考文献】 [1] P. Benioff, *J. Stat. Phys.* **22**, 563-591 (1980) [2] C. M. Tesch, L. Kurtz, and R. de Vivie-Riedle, *Chem. Phys. Lett.* **343**, 633-641 (2001) [3] P. V. Leuven and M. Persico, *J. Chem. Phys.* **124**, 054319 (2006) [4] W. Zhu, J. Botina, and H. Rabitz, *J. Chem. Phys.* **108**, 1953-1963 (1997) [5] M. R. Harmann and J. A. Freck, Jr., *Phys. Rev. A* **38**, 6000-6013 (1988)