

1P076

分子振動エンタングルメント状態のデコヒーレンスに関する理論的研究

(東大工¹、JST-CREST²) 三嶋謙二^{1,2}、山下晃一^{1,2}

erdao@tcl.t.u-tokyo.ac.jp¹

【序】近年、物理の分野では、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脚光を浴びている。我々は、化学の立場から、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を理論的に行っている。特に、我々は最近、分子系におけるエンタングルメントの基礎的研究に興味を持っている。

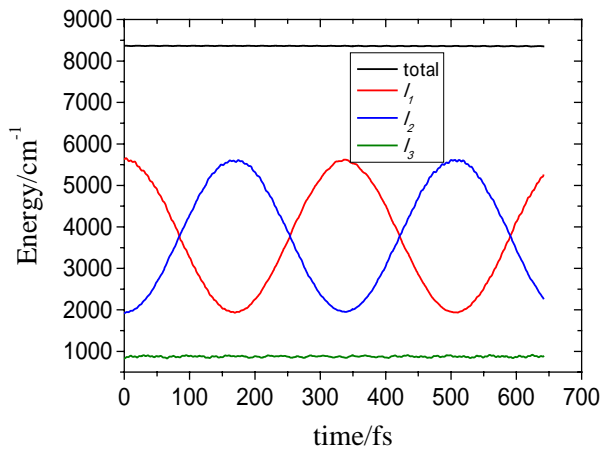
ところで、量子コンピュータの演算速度向上、量子テレポーテーションなどの要であるエンタングルメント(entangled state、entanglement)は、非常に重要な資源として近年盛んに研究が行われている。量子コンピュータの初期状態は通常分離可能状態にあるので、分子量子コンピュータを実現するには、まず第一に、レーザーなどの外場によってエンタングルメントが生成できることが肝心である。分子振動状態でも、エンタングルメントが比較的容易に生成できることが、我々のグループによって、最近、理論的に示された[1]。

しかし、量子状態、特に、エンタングルメントは、デコヒーレンスの影響を受けやすく、量子コンピュータ実現上、大きな問題となることは早くから認識されてきた。実際、最近の量子コンピュータ研究の多くは、デコヒーレンスに関するものである。

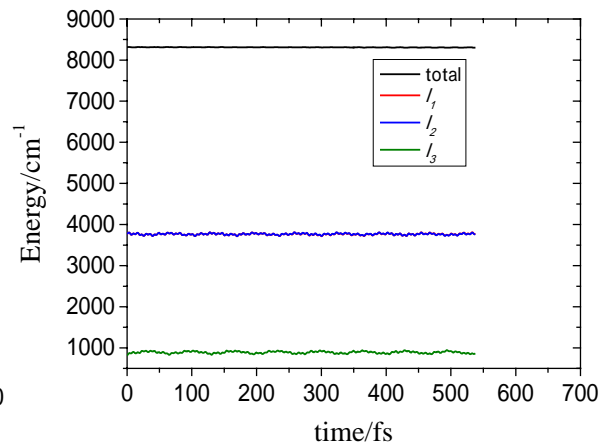
当然のことながら、これと同様な問題は、分子量子コンピュータにも存在する。例えば、単一分子の振動モードを qubit と見立てた場合、多ビット化を実現するには、多原子分子における振動モード間のデコヒーレンスが問題となる。これは、従来の IVR(intramolecular vibrational redistribution)に関連するものである。本研究では、最小の multipartite system と見なせる H₂O 分子を取り上げ、MCTDH (Multi-Configuration Time-Dependent Hartree)法を用いることにより、computational bases の振動緩和を時間的に追跡した。

【結果と考察】H₂O 分子の多モード状態は、zeroth order で、ローカルモードでよく記述できることがわかっている[2]。その事実に基づいて、幾つかの computational bases を初期状態として、MCTDH により、全振動状態を考慮に入れた波束の時間発展を追跡した。OH 伸縮振動の量子数を l_1 、 l_2 とし、変角振動の量子数を l_3 と表わした時、下に示した図は、それぞれ、 $|l_1, l_2, l_3\rangle = |100\rangle$ (分離可能状態) と $(|010\rangle + |100\rangle)/\sqrt{2}$ (エンタングルメント) の自由度のエネルギー移動の時間変化を表わしている。H₂O 分子では、OH 伸縮振動と変角振動とがよくデカップルしていることが知られているので、OH 伸縮振動と変角振動の間のエネルギー移動はどの場合も無視できるほど小さいこ

とがわかる。 $|l_1, l_2, l_3\rangle = |100\rangle$ の分離可能状態は、2つの OH 伸縮振動が同等なため、規則的なエネルギー移動を繰り返すが、デコヒーレンスは顕著には見出されない。一方、 $(|010\rangle + |100\rangle)/\sqrt{2}$ のエンタングルメントは、全ハミルトニアン固有状態であるため、時間にかかわらず、デコヒーレンスやエネルギー移動を起こさない特別な状態であることがわかる。ここには示さないが、 H_2O 分子の伸縮振動の Bell state $|\Psi_{\pm}\rangle = (|010\rangle \pm |100\rangle)/\sqrt{2}$ 、 $|\Phi_{\pm}\rangle = (|000\rangle \pm |110\rangle)/\sqrt{2}$ は、いずれも、デコヒーレンスを起こさない特別な状態である。以上の結果により、light-heavy-light 系の分子は一般にエンタングルメントがデコヒーレンスを起こさない特別な分子と見なせることが結論される。詳細と更に詳しい数値的計算の結果は当日報告する。



$$|l_1, l_2, l_3\rangle = |100\rangle$$



$$(|010\rangle + |100\rangle)/\sqrt{2}$$

[1] S. Suzuki, K. Mishima, and K. Yamashita, Chem. Phys. Lett. **410**, 358 (2005).

[2] M. L. Elert, P. R. Stannard, and W. M. Gelbart, J. Chem. Phys. **67**, 5395 (1977); J. S. Hutchinson, E. L. Sibert III, and J. T. Hynes, J. Chem. Phys. **81**, 1314 (1984).