

戦略的創造研究推進事業 CREST  
研究領域  
「量子情報処理システムの実現を目指した新技術の創出」  
研究課題  
「分子の電子・振動・回転状態を用いた  
量子演算基盤技術の開発」

研究終了報告書

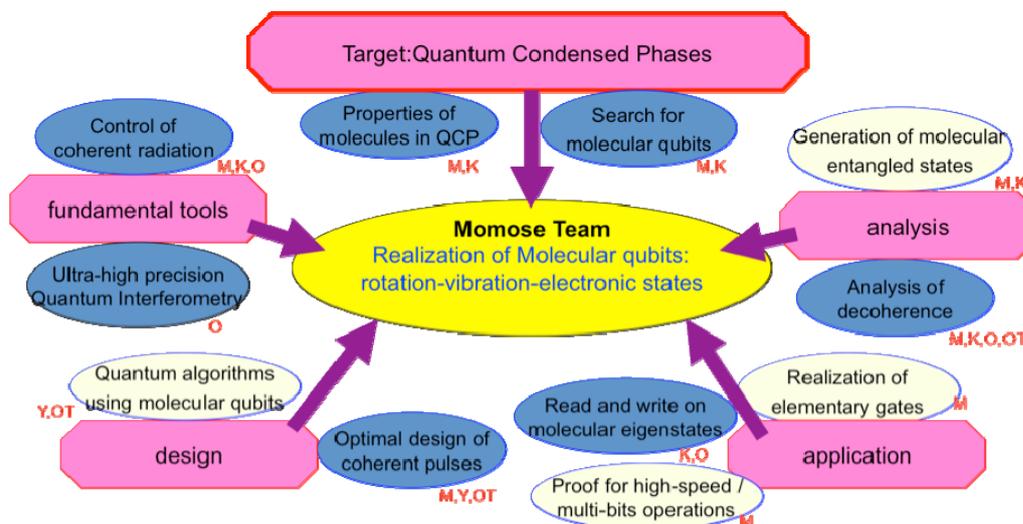
研究期間 平成16年10月～平成22年3月

研究代表者：百瀬 孝昌  
(情報通信総合研究機構、客員研究員/  
ブリティッシュコロンビア大学、教授)

## § 1 研究実施の概要

本プロジェクトでは、分子固有の電子および振動回転の内部自由度を活用した新しい量子情報処理技術の実験的提案とその基盤技術の開発を世界に先駆けて確立するために、**百瀬(京大・東工大・情報通信研究機構・ブリティッシュコロンビア大学)**、**金森(東工大)**、**大森(分子科学研究所)**の実験3グループと、**山下(東大)**、**大槻(東北大)**の理論2グループが共同して研究に取り組んだ。分子には  $10^{-3}$  秒から  $10^4$  秒と極めて長い自然寿命を持つ振動・回転の固有状態 ( $v, J$ ) が多数存在することから、分子の電子および振動回転の内部自由度を量子情報処理技術の資源として活用することで、原子系のような2準位系では実現不可能な多ビット論理演算をはじめとする様々な量子情報処理の可能性が広がると期待されている。このような提案は以前からあるが、具体的に実験的に取り組んだ例は世界的に見ても(本プロジェクト発足時には)ほとんどなく、他の手法に比べて、その開発がきわめて遅れている状況であった。その最大の理由は、分子の内部状態を制御するために必要不可欠な周囲との相互作用を抑制した環境下での分子の空間捕捉が未だ実現されていないことにある。

我々は、量子凝縮相、特に固体パラ水素に単離捕捉した分子が、極低温の環境に空間捕捉され、かつ周囲との相互作用がほとんどなく、励起状態の緩和時間が一般の凝縮相より3桁以上長い、という希有な特徴を持つ事を活用することで、分子を量子演算素子として用いる時に障害となっている空間捕捉及び冷却の問題を回避でき、分子の内部量子状態を用いた新しい量子情報処理基盤技術の世界に先駆けて確立できると考えた。そこで量子凝縮相中に捕捉した分子の電子・振動・回転状態の量子もつれ状態の生成やデコヒーレンス等に関する実験およびその理論的解析をプロジェクトとして遂行した。そのために、緻密に位相制御された高輝度のコヒーレント光源およびアト秒精度で制御された超短パルス光源など固有状態間の重ね合わせ状態を制御する実験技術を開発するとともに、分子固有の新しい量子情報処理基盤技術の確立に向けた理論解析を行った。本プロジェクトが既存の他のプロジェクトと大きく異なる点は、量子情報処理を実現するために必要な、対象とする系の探索(target)、基礎実験技術(fundamental tools)、理論解析(design & analysis)、応用(application)等すべての点において、活用できるこれまでに資産がさほど多くはない(研究への取り組みが世界的に大幅に遅れている)という点である。そのため、これまで、量子凝縮相の分光、量子光学技術開発、量子計算(シミュレーション)の各分野で世界的な研究を行ってきた5グループが共同して本プロジェクトに取り組むことが不可欠であった。以下の図は、チームとしての取り組みの概念図と、5グループのそれぞれの役割を示す。赤枠で示した5つが研究の大枠、青枠がさらにこまかい取り組みである。こまかい取り組みのうち青地で示したものは、過去5年間でチームとしての成果の上がっている項目であり、それぞれの枠の右下の赤字アルファベットが成果を上げているグループ名 (M: 百瀬, K: 金森, O: 大森, Y: 山下, OT: 大槻) を示す。黄地は現在挑戦中の課題である。



## § 2 研究計画に対する成果

### (1) 当初の研究構想

本プロジェクトでは、分子自身の本質的な量子性を 100%活用した新しい量子情報処理の基盤技術開発を行うことを目的とした。そのために、分子量子演算素子の実現に必要な分子の内部状態の量子もつれ状態の生成および観測に関する基礎的な実験を行うとともに、分子の内部状態の特徴を生かした量子演算のアルゴリズムに関する理論研究や、量子計算を実行するための演算光パルスの最適化設計、あるいは計算エラーを誘起するデコヒーレンスの基礎的な検証と制御法の開拓も進める必要があった。プロジェクト発足当初に計画した具体的実施事項は以下の通りであった。

#### 1. 演算素子として利用できる分子系の実証と開拓

今までの分光学的研究成果に基づくと、量子凝縮相中あるいは分子線で冷却した分子 qubit として次の5つの系が特に有望である。① 固体水素中の  $H_2$  自身の振動回転遷移、② 固体水素中の  $D_2$  の振動回転遷移、③  $CH_4$ 、 $CD_4$  の振動回転遷移、④  $^{13}CO$  や  $NH_3$  の純回転遷移、⑤  $I_2$  の電子遷移。これら5つの系および他の可能性のあるについて、電子・振動・回転・超微細準位構造・結晶場分裂およびトンネリング分裂の超高分解能分光計測および超高速時間分解分光計測をおこない、その準位構造の解明と遷移強度を詳細に実測することで、実際に qubit として最適な系を設計する。また、高輝度のコヒーレント光源を用いてこれら分子の励起状態の飽和および Rabi 振動を実現・観測すること、およびアト秒レベルで位相を制御した超短パルス光を用いて分子のエネルギー固有状態への位相振幅情報の書出しおよび読み込みを実現することで、分子の量子状態が量子演算素子として活用できることを実証する。

#### 2. 分子の電子振動回転状態のエンタングルメント状態の実現と検出およびその理論解析

例えば、固体パラ水素中の重水素は固体パラ水素に微量に存在する  $J=1$  オルト水素とペアを伴うことにより、赤外遷移が許容となる。図 1 はこの遷移が関係する重水素およびオルト水素のエネルギー準位である。図 1 の4準位間は、(1)十分な強度の赤外およびマイクロ波を照射して Rabi 振動を起こさせること、あるいは(2) Chirp 整形した超短パルス光を照射することで、これらの準位がエンタングルメントした状態を作ることができるはずである。このような分子の内部量子状態の量子もつれ状態は、それ自身が基礎科学的に未解明の部分が多く重要な現象であることから、その性質を分光学的に詳細に明らかにすることが、まず重要である。特に異なる分子間に量子もつれ状態を作ったときの分子間相互作用などへの影響を明らかにすることは、今後の展開に重要な情報を与える。そこで、上記1で開拓した分子系の量子もつれ状態の実現と検出を行う。そのために必要な超短パルス光整形技術の開発、高輝度コヒーレント光源の連続照射技術などの開発を行う。一方、高精度量子化学計算を用いた分子の量子もつれ状態の理論解析も行う。

#### 3. 量子演算作用素としてのコヒーレント光パルスの最適設計

精密理論化学計算および波束ダイナミクスの理論計算により、分子の複数の電子・振動・回転励起状態に対し、量子もつれ状態の生成に最適なコヒーレント光パルスおよび Chirp 整形パルスを理論設計する。またコヒーレント励起・断熱通過などを用いて、任意の電子・振動・回転多準位分布状態を異なる分布状態へ完全分布移動できる位相変調および強度変調パルスを理論設計する。更に、共通なゲート群をひとつの量子演算操作として実現するために必要な高度なパルスを、量子最適制御シミュレーションにより解析・提案する。

#### 4. CNOT、Hadamard 変換などの基本量子ゲートの実現

分子の特性として、量子状態が一つでも異なると、それぞれに対応する振動共鳴周波数がわずかに異なる。このことを利用すると、例えば図1に示した固体パラ水素中の重水素の振動回転遷移の回転量子状態を制御ビット、振動量子状態を標的ビットとした制御 NOT ゲートは、どちらかの振遷移に対応する狭線幅の  $\pi$  パルス赤外光( $2986.97\text{cm}^{-1}$ または $2986.86\text{cm}^{-1}$ )を照射することで達成可能である。そこで、このようないくつかの系について実際に基本量子ゲートを実現・観測する。そのために必

要な、複数の高輝度コヒーレント光源の同時位相安定化技術開発を行う。一方、複数の qubit を同時に操作するための基盤技術として、アト秒レベルで位相を制御したフェムト秒レーザーパルスを用いた波束干渉の実験を行い、波束の量子位相を制御して生成した分子内の固有状態の重ね合わせを用いた量子情報処理技術開発にも取り組む。

#### 5. デコヒーレンスの理論解析およびその実験的検証と制御法の開拓

分子の内部状態を量子演算素子として応用するためには、現実の系における励起状態のデコヒーレンスの制御が重要になる。そのためにはまず、デコヒーレンス過程がどのような状態で起きるかを様々な環境のもとで詳細に検討する必要がある。そこで密度行列法などを用いて、生成した量子もつれ状態の量子ダイナミクスを追跡する一般手法を開発し、量子もつれ状態のデコヒーレンスが分子パラメータや各量子状態にどのように依存するか明らかにする。さらに、量子凝縮相などまわりとの相互作用がデコヒーレンスに及ぼす影響を解析する手法を開発し、デコヒーレンスを制御するために必要な条件を理論的に解析する。一方、高速時間分解分光の手法を用いたデコヒーレンス過程の実験的検証およびその制御法の開発を行う。

#### 6. 分子の内部状態の特徴を生かした量子演算のアルゴリズム開発

分子の内部状態を利用した量子演算を実現するために、対称性をはじめとして分子の特質を生かした新しい量子演算アルゴリズムの開発、量子計算の実装法の提案をおこなう。そのために、基本ゲートパルスの設計シミュレーションや量子アルゴリズムの検算シミュレーションを通して分子内準位の量子ビットとしての特性を調べる。これを基に、分子内準位を量子ビット(qubit)から qudit として統一的に扱う方法や、電子・核コヒーレンスの同時利用など、分子特性を生かした量子計算の基本実装法を提案する。一方、環境体により誘起される計算エラーを非マルコフマスター方程式を使って系統的に解析し、量子エラーの出現特性を明らかにする。更に、最適化したパルス列照射を使った、デコヒーレンス抑制の有効性および分子量子計算への適用可能性を示す。また、量子エラー訂正アルゴリズムの実装シミュレーションも試みる。

#### 7. 高速演算可能性および多ビット化の可能性の実証

例えば、固体パラ水素中の重水素の遷移の遷移モーメントはおよそ  $2.5 \times 10^{-3}$  debye である。これは 1W の光を 0.1mm の径に集光することで励起状態の寿命  $10^{-6}$  s の間に 100 回 Rabi 振動を起こすことができる。このような系の量子もつれ現象を観測・制御することで、複数回の演算が実際に可能であることを実証する。一方、分子の量子状態を用いた qubit の多ビット化には、同一分子内の複数量子状態を用いる方法と、複数の相互作用する不純物を用いる方法、Cirac-Zoller 型の方法らなどいくつか考えられる。これらの現実性・拡張性をそれぞれ検証し、実際に複数ビットの演算を試みることで、本方法が多ビット化拡張可能であることを示す。

#### (2) 新たに追加・修正など変更した研究構想

分子の振動回転状態の制御をおこなうために、申請当初は波形整形による振動回転波束制御とともに、ナノ秒パルスレーザーによる Raman 過程を用いる STIRAP の手法の活用も視野に入れていた。しかしながらその後の検討で、STIRAP では特定の振動回転波束の生成には有効であるが、量子演算に必須の一般的なユニタリー変換が一つのパルス列だけではできないことが明らかとなり、パルスレーザーを用いた制御には波形整形にのみに絞って開発を進めるように方針変更をした。

赤外フェムト秒パルスの波形整形については、最初の2年で確立したレーザーシステムで実際に得られている周波数及び時間軸の分解能を元に量子演算に必要なパルス波形の理論予測を行ったところ、十分な fidelity で演算を行うためには、現在のシステムのパルス強度が足りないことが判明した。これまで開発してきた近赤外で波形整形をした後に差周波で中赤外を発生させる方法では、差周波の効率が波形によって大きく落ちることがあり、パルス強度が十分に得られないことが明らかとなった

ため、差周波で中赤外を発生させた後に中赤外で直接波形整形する手法開発に取り組み、成果を上げた。

量子演算のターゲットとなる分子については、計画当初固体パラ水素に捕捉した分子の振動回転励起状態のデコヒーレンスでは位相緩和が支配的であると予測し、例えば  $\text{CH}_4$  の振動遷移では 0.1K まで冷却することで、100kHz 以下の線幅(寿命  $10\mu$  秒)を予測していた。この程度の寿命を持つのであれば、現在発生できる CW 赤外レーザー光源を用いても量子もつれ状態を容易に生成できる。プロジェクト開始後に 0.3K まで冷却できるクライオスタットを用いて極低温下の緩和過程を詳細に調べたところ、確かに 4-2K の温度域では位相緩和が支配的であったが、1.5K 以下では温度に依存しない緩和(おそらく何らかのエネルギー緩和)が支配的となり、温度を 1K 以下まで下げても 100MHz 以下の線幅を得ることができないことが明らかになった。そのため、量子固体中に単離した分子の振動回転状態について計画発足当初は CW 光源による操作を考えていたが、Rabi 振動に要する時間が寿命を上回るために必要な赤外レーザー光強度 ( $> 10\text{W}$ ) が現段階で得られていないため、超短パルスレーザー光を用いた数ピコ秒の高速操作の実現に最優先で取り組んだ。

理論的研究においては、当初は、シミュレーション中心の研究を計画していたが、それと同時に、シミュレーションをほとんど用いず、エンタングルメントダイナミクスの特徴を一般的な解析的手法により解明した。その結果、エンタングルメントは時間に非常に敏感な量子過程であることを見出した。このことを発端として、量子系ではこれまで開発されていなかった、終端時刻拘束なしの最適制御理論を構築することに世界で初めて成功し、研究の幅が大いに広がった。そこでこの最適制御理論を、更に高分子に有用である TDDFT(time-dependent density functional theory)法に発展させ、分子内の電子エンタングルメントを制御するレーザーパルスを設計し、新しい理論の有用性を証明することを新たに始めた。

また、パラ水素量子凝縮相にドープされた CO 分子に関して、チームに基礎的な分光データを提供するために、経路積分分子動力学(PIMD)シミュレーションを行った。公開されている量子分子動力学計算プログラムは存在しないので、コードを独自開発し、追加予算で購入した並列計算機を使い、この追加課題を遂行した

### §3 研究実施体制

(○：研究代表者または主たる共同研究者)

#### (1)「百瀬(情報通)」研究グループ

##### ①研究参加者

	氏名	所属	役職	参加時期
○	百瀬 孝昌	情報通信研究機構・電磁波計測研究センター	客員研究員	H19.8～H22.3
	笠井 康子	情報通信研究機構・電磁波計測研究センター	主任研究員	H19.8～H22.3
	保科 宏道	理化学研究所フロンティア研究システムテラヘルツイメージング研究チーム	研究員	H19.8～H22.3
	加藤 吉康	東京理科大学赤外自由電子レーザー研究センター	研究員	H19.8～H22.3
	坪内 雅明	原子力研究機構関西光化学研究所	研究員	H21.4～H22.3
	宮本 祐樹	ブリティッシュコロンビア大学化学	研究員	H19.8～H21.4
	宮本 祐樹	環境研究所	研究員	H21.5～H22.3
	Eric Dupty	情報通信研究機構・電磁波計測研究センター	研究員	H20.8～H22.3
	安藤 大介	京都大学大学院理学研究科	D3	H19.8～H22.3
	西周 美佳	東京工業大学大学院理工学研究科	チーム事務員	H17.7～H22.3

##### ②研究項目

量子凝縮相中の分子の振動回転準位を用いた量子情報基盤技術の確立

#### (2)「百瀬(東工大)」研究グループ

##### ①研究参加者

	氏名	所属	役職	参加時期
○	百瀬 孝昌	東京工業大学大学院理工学研究科	客員教授	H17.8～H19.7
	森沢 勇介	京都大学大学院理学研究科	研究員	H17.8～H17.10
	久間 晋	東京工業大学大学院理工学研究科	研究補助員	H18.10～H19.3
	久間 晋	京都大学大学院理学研究科	D3	H17.8～H18.9
	宮本 祐樹	京都大学大学院理学研究科	D3	H17.8～H19.7
	安藤 大介	京都大学大学院理学研究科	D2	H17.8～H19.7
	森 哲也	京都大学大学院理学研究科	M2	H17.8～H18.3
	渡辺 詩織	京都大学大学院理学研究科	M2	H17.8～H17.9

	渡辺 義弘	京都大学大学院理学研究科	M2	H17.8～H18.3
	北野 健太	京都大学大学院理学研究科	M2	H17.8～H19.7
	後藤 悠	京都大学大学院理学研究科	M2	H17.8～H17.9
	阿見寺 美佳	東京工業大学大学院理工学 研究科	チーム事務員	H17.7～H19.7

②研究項目

分子の内部準位を用いた量子情報基盤技術に関する基礎研究

(3)「百瀬(京都大)」研究グループ

①研究参加者

	氏名	所属	役職	参加時期
○	百瀬 孝昌	京都大学大学院理学研究科	助教授	H16.11～H17.7
	加藤 吉康	京都大学大学院理学研究科	教務補佐員	H16.11～H17.3
	森沢 勇介	京都大学大学院理学研究科	研究員	H17.4～H17.7
	森沢 勇介	京都大学大学院理学研究科	D3	H16.11～H17.3
	久間 晋	京都大学大学院理学研究科	D2～3	H16.11～H17.7
	宮本 祐樹	京都大学大学院理学研究科	D2～3	H16.11～H17.7
	安藤 大介	京都大学大学院理学研究科	D1～2	H16.11～H17.7
	森 哲也	京都大学大学院理学研究科	M1～2	H16.11～H17.7
	渡辺 詩織	京都大学大学院理学研究科	M1～2	H16.11～H17.7
	渡辺 義弘	京都大学大学院理学研究科	M1～2	H16.11～H17.7
	北野 健太	京都大学大学院理学研究科	M1～2	H16.11～H17.7
	後藤 悠	京都大学大学院理学研究科	M1～2	H16.11～H17.7
	藤崎 真美	京都大学大学院理学研究科	チーム事務員	H16.11～H17.7

②研究項目

分子の内部準位を用いた量子情報基盤技術に関する基礎研究

(4)「百瀬(UBC)」研究グループ

①研究参加者

	氏名	所属	役職	参加時期
○	百瀬 孝昌	ブリティッシュコロンビア大学化 学・物理・天文	教授	H17.9～H22.3
	坪内 雅明	ブリティッシュコロンビア大学化学	研究員	H17.9～H22.3
	久間 晋	ブリティッシュコロンビア大学化学	研究員	H19.4～H22.3
	宮本 祐樹	ブリティッシュコロンビア大学化学	研究員	H17.9～H22.3
	安藤 大介	京都大学大学院理学研究科	M1～D3	H17.9～H22.3

	渡辺 詩織	ブリティッシュコロンビア大学化学	M1～D3	H17.9～H22.3
	後藤 悠	京都大学大学院理学研究科	M1～M2	H19.3～H22.3
	Eric Vyskocil	ブリティッシュコロンビア大学物理	M1～M2	H19.9～H22.3
	Hiroko Nakahara	ブリティッシュコロンビア大学物理	M1～M2	H19.9～H22.3

②研究項目

分子の内部準位を用いた量子情報基盤技術に関する基礎研究

(5)「金森(東工大)」研究グループ

①研究参加者

	氏名	所属	役職	参加時期
○	金森 英人	東京工業大学大学院理工学研究科	准教授	H16.11～H22.3
	溝口 麻雄	東京工業大学大学院理工学研究科	助教	H16.11～H22.3
	石橋 爾子	東京工業大学大学院理工学研究科	学振 PD	H16.11～H17.3
	戸田 直也	東京工業大学大学院理工学研究科	D2～6	H16.11～H20.3
	奥田 泰壮	東京工業大学大学院理工学研究科	M1～2	H16.11～H17.3
	関口 貴朗	東京工業大学大学院理工学研究科	M1～2	H16.11～H17.3
	辻 秀伸	東京工業大学大学院理工学研究科	M1～D3	H16.11～H21.3
	藤野 泰秀	東京工業大学大学院理工学研究科	M1～2	H17.4～H19.3
	斉藤 一哉	東京工業大学大学院理工学研究科	M1～2	H17.4～H19.3
	亀山 文孝	東京工業大学大学院理工学研究科	M1～2	H17.4～H19.3
	田地 和喜	東京工業大学大学院理工学研究科	M1～D2	H17.4～H20.3
	福田 浩司	東京工業大学大学院理工学研究科	M1～2	H18.4～H20.3
	渡辺 史徳	東京工業大学大学院理工学研究科	M1～2	H18.4～H20.3
	海津 東吾	東京工業大学大学院理工学研究科	M1～2	H19.4～H21.3
	名雪 正寿	東京工業大学大学院理工学研究科	M1～2	H19.4～H21.3
	酒井 俊明	東京工業大学大学院理工学研究科	M1～2	H19.4～H21.3

	笠井 啓晃	東京工業大学大学院理工学研究科	M1～2	H20.4～H22.3
	田原 由梨	東京工業大学大学院理工学研究科	M1～2	H20.4～H22.3
	松岡 雄樹	東京工業大学大学院理工学研究科	M1～2	H20.4～H22.3
	砂川 直紀	東京工業大学大学院理工学研究科	M1	H21.4～H22.3
	佐藤 知紘	東京工業大学大学院理工学研究科	M1	H21.4～H22.3
	船木 岳朗	東京工業大学大学院理工学研究科	M1	H21.4～H22.3
	和田 晃	東京工業大学大学院理工学研究科	特定有期雇用職員	H21.8～H22.3
	宮本 祐樹	京都大学大学院理学研究科	D3	H20.4～H20.5

## ②研究項目

量子凝縮相中の分子の回転状態の位相制御と量子演算素子への組み込み

## (6)「大森(分子研)」研究グループ

### ①研究参加者

	氏名	所属	役職	参加時期
○	大森 賢治	自然科学研究機構・分子科学研究所・電子構造研究系	教授	H16.11～H22.3
	香月 浩之	自然科学研究機構・分子科学研究所・電子構造研究系	助教	H16.11～H22.3
	武井 宣幸	自然科学研究機構・分子科学研究所・電子構造研究系	助教	H21.4～H22.3
	千葉 寿	自然科学研究機構・分子科学研究所・分子制御レーザー開発センター	技術職員	H16.11～H22.3
	穂坂 綱一	自然科学研究機構・分子科学研究所・電子構造研究系	IMS フェロー	H17.4～H19.8
	後藤 悠	総合研究大学院大学物理科学研究科	D3	H19.4～H22.3
	島田 紘行	自然科学研究機構・分子科学研究所・電子構造研究系	研究員	H18.4～H20.11
	Jean-Christophe Delagnes	自然科学研究機構・分子科学研究所・電子構造研究系	研究員	H18.4～H19.8
	穂坂 綱一	自然科学研究機構・分子科学研究所・電子構造研究系	研究員	H19.9～H20.3
	穂坂 綱一	日本原子力研究開発機構 関西光科学研究所 レーザー物質制御研究グループ	研究員	H20.4～H22.3

②研究項目

アト秒精度の量子位相操作に基づく分子内情報処理の検証

(7)「山下(東大)」研究グループ

①研究参加者

	氏名	所属	役職	参加時期
○	山下 晃一	東京大学大学院工学系研究科	教授	H16.11～H22.3
	三嶋 謙二	東京大学大学院工学系研究科	研究員	H16.11～H22.3
	鈴木 進吾	東京大学大学院工学系研究科	M1～2	H16.11～H17.3
	塩屋 厚作	東京大学大学院工学系研究科	M1～2	H17.4～H19.3
	石井 啓策	東京大学大学院工学系研究科	技術補佐員	H19.10～H21.3

②研究項目

量子凝縮相中にある分子振動状態の高精度量子化学計算と波束ダイナミクス，終端時刻拘束なしの量子最適制御理論の開拓と、凝縮相中における分子振動、回転状態のデコヒーレンスメカニズムの解明とその量子制御

(8)「大槻(東北大)」研究グループ

①研究参加者

	氏名	所属	役職	参加時期
○	大槻 幸義	東北大学大学院理学研究科	准教授	H16.11～H22.3
	Hyeonho Choi	東北大学大学院理学研究科	産学官連携研究員	H21.7～H22.3
	水本 義彦	東北大学大学院理学研究科	助教	H19.4～H21.3
	寺西 慶哲	東北大学大学院理学研究科	産学官連携研究員・助手	H17.1～H19.4
	中上 和幸	東北大学大学院理学研究科	D1～2	H19.10～H22.3
	阿部 弘哉	東北大学大学院理学研究科	M1	H21.4～H22.3

②研究項目

分子量子コンピュータの最適制御シミュレーション解析

## § 4 研究実施内容及び成果

### 4.1 百瀬(京大・東工大・情報通信研究機構・ブリティッシュコロンビア大学)グループ

#### (1)研究実施内容及び成果

百瀬グループはこれまで、固体パラ水素や超流動ヘリウム液滴、固体ヘリウムといった量子凝縮相に捕捉した分子の超高分解能分光を行い、(a) 電子・振動・回転準位の完全量子化、(b) 励起状態の長寿命化と超高分解能スペクトル特性、(c) 特異なエネルギー散逸およびデコヒーレンス特性、という特異な性質を明らかにしてきた。本プロジェクトではこれまでの経験を生かし、特に量子凝縮相に捕捉した分子の振動・回転状態を用いた新しい量子情報処理基盤技術を確立することを目指した。そのために、(1) 量子演算素子として利用できる分子系の実証と開拓、(2) 分子の電子振動回転状態のエンタングルメント状態の実現、(3) CNOT、Hadamard 変換などの基本量子ゲートの実現、(5) 多ビット化の可能性の実証、の各5項目の達成を目標に、そのための基礎実験技術開発及び理論解析などに取り組んだ。

本プロジェクトを成功させる上で、量子演算素子として利用可能な系の確立は必要不可欠である。そこで、これまでの経験を生かし、量子固体中に捕捉した分子の電子振動回転状態の超高分解能分光から、量子演算素子として利用可能な長寿命の系を探索した。また、量子固体中に捕捉した分子の振動回転状態の量子重ね合わせ状態の実現と制御、アダマール変換や CNOT ゲートの実証、他ビット化の可能性の検討などに取り組んだ。さらにこれらの実現のために、新しいクライオスタットの開発や、位相制御した赤外光の開発、パルス整形した超短赤外光の発生など、光源開発をてがけ、発生させた光を実際の分子系に照射することに取り組んだ。以下が過去5年間の成果である。

#### (1) 量子演算素子として利用できる分子系の実証と開拓

##### (a) 量子凝縮相中の分子の振動回転固有状態の観測とそのデコヒーレンス

量子演算素子として活用するためには、(1)活用する準位間の光学遷移モーメントが大きいこと、(2)各状態の寿命が最低 1 マイクロ秒あること、が最低望まれる。そのような系を見出すために、量子凝縮相に捕捉した様々な分子の振動回転遷移の超高分解能赤外分光計測を行った。

(i) 固体パラ水素中に単離した分子の振動回転状態の線幅は、系によって大きく異なる。現段階で得られているもっとも寿命の長い励起状態は  $\text{CH}_4$  の  $\nu_4$  振動モードで 0.8K で 100MHz の線幅(寿命 10 ナノ秒)をもつ(図 1)。この励起状態は位相緩和が支配的で、媒質の温度にたいして  $T^4 \sim T^5$  の温度

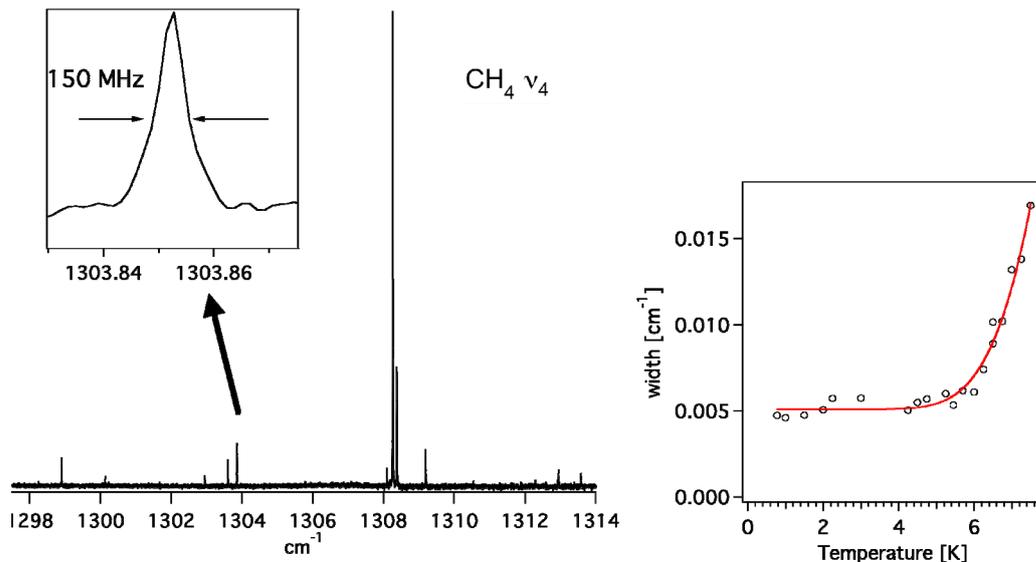


図 1 固体パラ水素中に単離した  $\text{CH}_4$  の  $\nu_4$  振動スペクトル(左)とその線幅の温度変化(右)

依存性を示す。その他の分子(CO, HCN, NO, HCN など)については1Kで500MHz~1GHz程度の線幅をもつが、いずれも位相緩和が支配的で、 $T^{-4} \sim T^{-5}$ という強い温度依存性を示す。従って、系をできる限り冷却することが量子演算への応用に不可欠である。COやHCNに関しては固体パラ水素中に捕捉された分子の振動回転状態について、完全に解析を行うことができたため、詳細な応用が可能である(J. Chem. Phys. **130**, 244508 (2009) 等に出版)。これらの振動回転状態の寿命はCW光を用いた制御にはまだ短いため、後述する長短パルス光を用いた量子ゲート制御が不可欠になる。

(ii) 複数の分子が凝集したクラスターの振動回転遷移は単離した遷移よりも、場合によって2桁以上狭い線幅を持つ。例えば、 $(CO)_n$ ,  $(NO)_n$ ,  $(HCN)_n$ ,  $(CH_4)_n$ , などは30MHzの線幅(寿命30ナノ秒)を示す。また、この線幅は温度にほとんど依存せず、デコヒーレンスのコントロールがより容易である。(投稿準備中)このクラスター系は、例えば $(CO)_3$ の場合、各分子の振動状態を qubit とみなすことで、3qubit システムとして応用が可能であり、固体パラ水素中の分子クラスターの振動回転状態の方が量子ビットの候補として有望である。クラスター内の分子数を多くした場合でも、個々の分子の振動回転遷移は明確に分離して観測されているが、その応用のために、量子状態の同定が必須であり、2重共鳴などの手法でその同定に取り組んでいる。

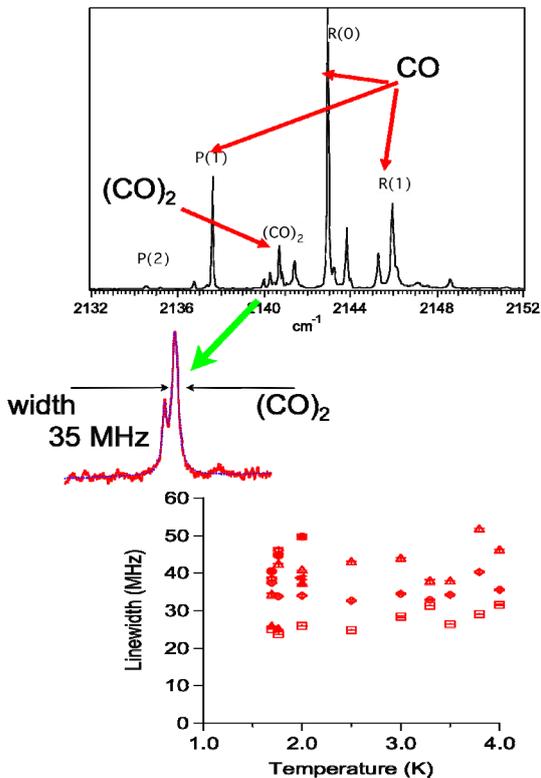


図2 固体パラ水素に捕捉されたCOおよびCOクラスターの赤外スペクトルとCOクラスターの線幅の温度依存性

ブレーション法が水素内にもっともきれいにイオンを生成できることが明らかになった。この系は、多ビット化へ拡張できる系として非常に価値が高い。

以上の研究から、(1)固体水素に単離されたCOおよびNO、(2)固体水素中のCOクラスター、(3)固体水素中の $D_2$ 、(4)固体水素のイオン誘起の水素の振動線、の4つを対象を絞り、以下の波形整形短パルスによる量子ゲート実現等に取り組んだ。

(b) 液体ヘリウムフリー光学クライオスタットの開発

本プロジェクトで対象としている量子凝縮相は極低温でのみ存在し、また、位相緩和を抑制するためには系をできる限り低温にする必要があることがこれまでの研究で明らかになった。そのような極低

(iii) 固体パラ水素中の $D_2$ の振動回転遷移は4Kで1MHzの線幅(寿命1マイクロ秒)であり、これまで観測されている系の中でもっとも長寿命である。この遷移は固体パラ水素中の不純物オルト水素の電場による誘起双極子モーメントの遷移であり、遷移モーメントが他の光学遷移に比べて一桁以上小さい。そのため、この振動遷移の操作にはより高輝度のレーザーが必要であるが、量子状態が完全に同定されているため、利用価値は高い。

(iv) 超流動ヘリウム液滴中に捕捉した分子および分子クラスターの高分解能赤外分光研究から、それらの振動回転励起状態の寿命が固体パラ水素に比べて短く、量子演算への応用としては利用価値があまり高くないことを明らかにした。(J. Phys. Chem. **110**, 10046 (2006) 等に出版)。

(v) 固体水素中に電荷を持つイオンを生成するとその強い電場により、周りの水素分子が分極され、赤外光を吸収するようになる。このイオン電場誘起の振動吸収線の線幅は50MHz以下であり、十分な長寿命である。さらに重要なことは、この相互作用はイオンと水素分子間の距離に依存するため、イオンから距離によって遷移周波数がわずかに異なるため、それぞれを異なるビットとして活用可能である点である。様々なイオン生成法を試みた結果、金属のレーザーア

温を達成するためには、液体ヘリウムクライオスタットを使うのが通常の手法であるが、運転コストや、長時間サンプルを保存する上で、問題が大きい。そこで、1.5K 近傍の温度を液体ヘリウムなしで長時間保持できる液体ヘリウムフリー光学クライオスタットの設計、製作を行った。閉回路電気冷凍機を用いてヘリウムガスの液化を行うとともに、ヘリウム槽の液化したヘリウムの減圧冷却が可能なシステムを構築し、実際に2K 以下の温度で固体水素サンプルの作成、及びその赤外可視紫外の光学測定ができるシステムの開発を行った。現在の百瀬グループの実験的研究は主としてこのクライオスタットを用いて行っている。また、通常の液体ヘリウムを用いて1K の温度を達成できる固体水素試料作成用の光学クライオスタットを新たに設計・製作し、金森・大森の実験グループに供給した。このクライオスタットも、固体試料を長期保存するために、1K の温度を保持したままで液体ヘリウムの供給ができるように工夫されている。

## (2) 分子の振動回転状態のエンタングルメント状態の実現

### (a) 波形整形した超短パルス赤外レーザーの開発

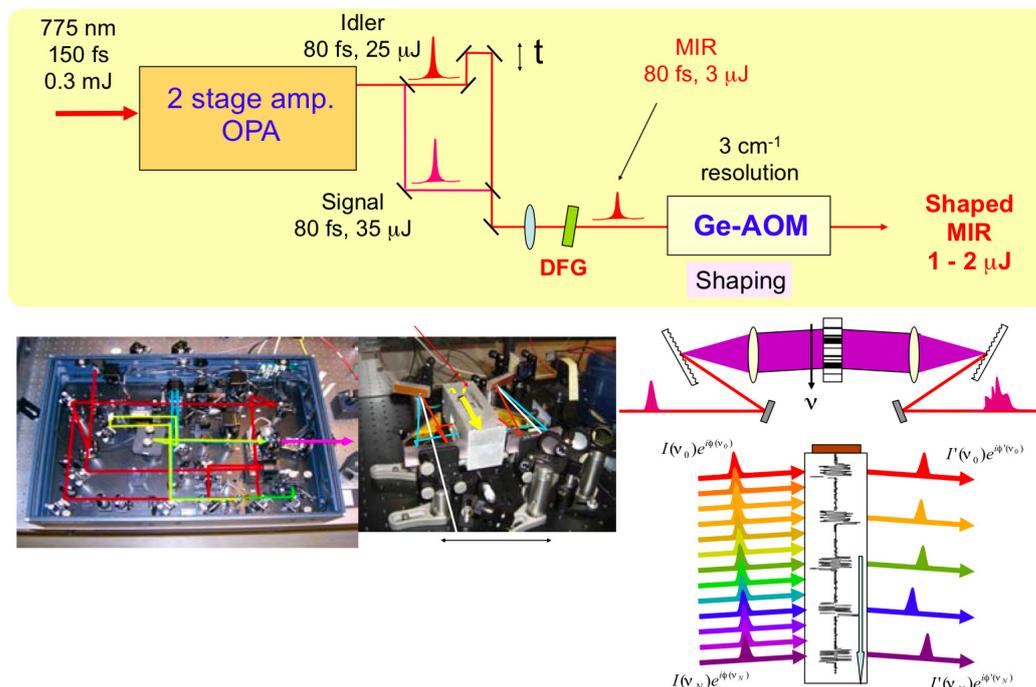


図3 中赤外フェムト秒パルスの波形整形法（上）、実際の装置の写真（下左）、およびAOM内のRFとAOM前後のパルスの関係

分子の振動回転状態を短時間で制御する有力な方法は、波形整形したフェムト秒赤外パルスを使った分子振動回転波束の直接制御である。プロジェクト開始当時、フェムト秒パルスの波形整形は、可視・近赤外では市販の波形整形器で容易にできるが、振動回転状態の制御に必要な中赤外の波形整形技術はまだ確立されていなかった。そこで、最初の2年間、我々は2-10 $\mu\text{m}$ の中赤外領域のフェムト秒赤外パルスの波形整形技術の開発に取り組んだ。750nmのフェムト秒再生増幅器の出力をOPO発振器に入力して得られる1.1-1.5 $\mu\text{m}$ のsignal光をAOMを用いて波形整形し、ついでOPOで同時に発生している2 $\mu\text{m}$ 付近のidler光との差周波をAgGaS<sub>2</sub>結晶でとることで3-10 $\mu\text{m}$ の中赤外超短パルスを得るシステムを構築した。実験を重ねるうちに、差周波を得る過程が非線形のため、signal光にかけた波形がそのまま中赤外光に転写されないことが明らかとなり、その補正のため実測位置と理論値との比較から中赤外光の波形を正確に制御する理論を確立した。その結果、理論予測値とほぼ正確に一致する整形波形が実測で得られるようになった。(J. Opt. Soc. Am. **B24**, 1886(2007)) しかしながら、この手法では、近赤外の光を最初に波形整形した後に、差周波で中赤

外を出しているが、波形整形のために近赤外光の単位時間あたりのエネルギーが弱くなり、その結果、中赤外を発生する差周波過程の変換効率が極端に落ちるといった難点が明らかとなった。以下(3)で述べる理論計算によって、フィデリティの高い量子ゲート演算を行うためには10–50 $\mu$ Jの中赤外強度が必要であることを明らかにしたが、これまでに開発した波形整形法では、このエネルギーのパルスを得ることが難しい。そこで、方針を転換し、まず差周波で中赤外パルスを出してから、直接中赤外の波形整形をする方法の開発を新たに行った。具体的には、差周波発生した中赤外パルスを Ge の AOM に透過させ、AOM をドライブする RF に波形整形を施すことで、波形を中赤外パルスに転写する手法の開発を行った。その結果、効率50%程度で中赤外パルスの波形整形を行うことができるようになった。(Opt. Comm. **282**, 3757(2009)) さらに、中赤外の波形整形パルスを評価するシステムを新たに開発し(Opt. Lett. **B24**, 1886(2007))、それを用いて生成パルスの精密な評価を行うことで、我々の開発した波形整形技術を用いると、2  $\text{cm}^{-1}$  及び 0.2 fs の 周波数および時間分解能で光位相を含めて中赤外光の波形の制御が可能であることを明らかにした。これは(3)で述べる理論計算に照らし合わせても量子演算に必要な振動回転波束の制御に十分な精度である。この精度で自在に中赤外の波形整形をするシステムの開発はこれが初めてである。

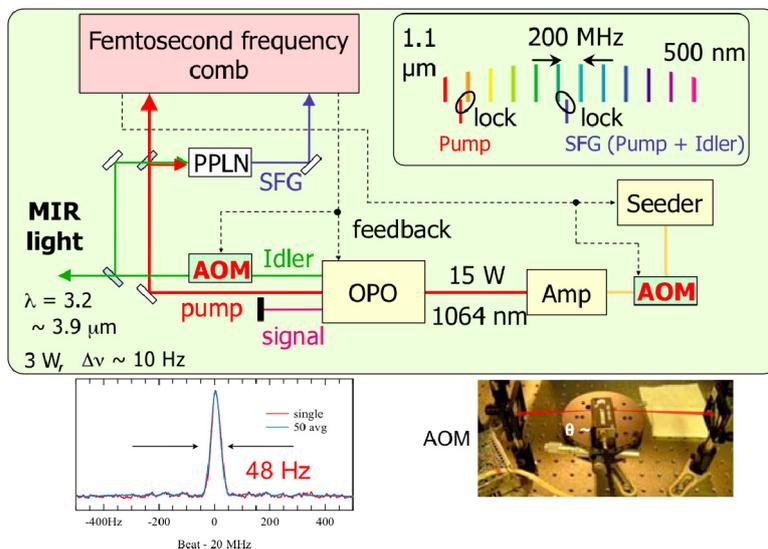


図4 中赤外 CW レーザー光の周波数安定化の概念図(上)、安定化された1 $\mu$ mの光の周波数幅

水素内で回転運動はしていないが、近接した異なる振動準位があるため、その準位をそれぞれのビットに使うことができると考えられる。C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>F分子については、フェムト秒のUV光励起による電子励起状態からの蛍光は十分な強度で観測ができた。しかし、Franck-Condonの影響で、基底状態からは振動励起された電子励起状態への励起しかできないが、固体内のナノ秒以下で起こる早い振動緩和で、蛍光はすべて電子励起状態の振動基底状態からのものしか観測されなかった。励起状態で振動緩和が起こると、波動関数の位相情報が完全に消失してしまうため、このような多原子分子でのLIFを用いた観測は難しいことが明らかになった。一方、NOについては、観測されたNOの発光はすべて固体水素中の(NO)<sub>2</sub>が励起光で乖離した後にできるNOのものであることが解析からわかり、なぜか固体水素に単離されたNOの発光は観測されなかった。以上のことは固体水素を用いた場合LIFが量子情報の読み出しにあまり有効でないことを示している。そこで、Kerr効果を用いた電子基底状態のみを用いた検出手法の開発に取り組んでいる。

(b)高輝度赤外コヒーレント光源の開発および、その光位相制御技術の開発

分子の振動回転 qubit の量子演算操作をおこなうもう一つの方法は、位相同期した赤外領域の連続レーザー光を複数用いることである。そのための、赤外光の位相同期、基盤技術の開発を行った。赤外のレーザー光源としては、1 ミクロンのファーバーレーザー単一周波数レーザー(25W)を励起光

一方、このようにして発生させた分子の振動回転状態のエンタングル状態等の検出手法の開発も手がけた。分子の検出には、イオン化法がもっとも感度がよいが、最終的に固体水素中の分子に応用することを考慮すると、この手法は使えない。そこで、まず固体水素中のNO分子およびC<sub>6</sub>H<sub>5</sub>F分子についてレーザー誘起蛍光法による観測を試みた。

C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>F分子は固体

2W の出力は現在ターゲットとしている振動回転遷移の Rabi 振動を 10 ナノ秒程度で起こさせるのに

源とするCW-OPOレーザーを用いた。何も制御しない状況では OPO の idler 出力として中赤外域 (3-5 $\mu\text{m}$ )で 10-20MHzの周波数安定度で約2W の出力が得られている。このレーザーの周波数及び光位相を安定化させるため、オクターブ発振する光コムに位相安定化する技術開発を行った。中赤外の idler 出力を光コムの発振帯域である近赤外-可視に持って行くため、中赤外と 1 ミクロンの励起光の和周波を PPLN 結晶でとり、発生した近赤外光を 光コムに位相安定化した。また、別途 1 ミクロンの励起光も光コムの別の周波数に位相安定化することで、idler 光の位相安定化を試みた。1 ミクロンの単一周波数レーザーについては、フィードバック信号のうち、遅い成分をキャビティーのピエゾへ、早い成分を AOM へ戻すことにより、線幅を 50Hz まで下げることができた。一方、OPO の idler 出力については、キャビティーのピエゾへのフィードバックにより、現在 50kHz まで押さえられている。光ノイズの解析を行うことで、最終的には 100Hz 以下の周波数安定度及び位相安定化を目指している。

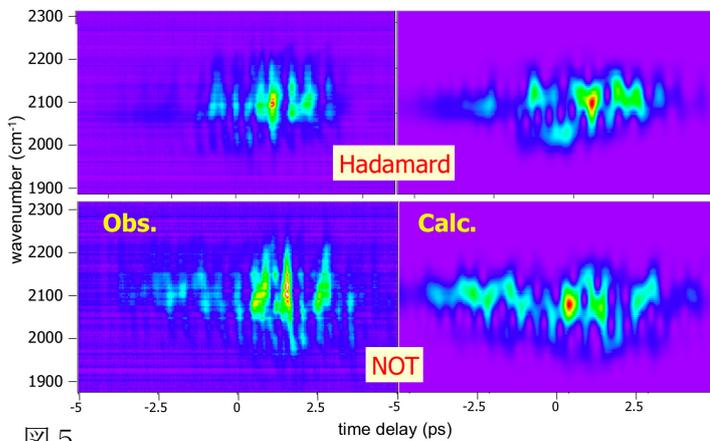


図 5

十分な強度であり、2色の中赤外光の位相安定化を行うことで、量子操作に不可欠の複数の振動回転準位の間へのゲート操作に応用する事が可能である。(投稿準備中)

### (3) CNOT, Hadamard 変換などの基本量子ゲートの実現

#### (a) 基本量子ゲートの実現に向けた理論的解析

分子量子計算機の実現のために、波形整形された中赤外フェムト秒レーザー光による分子振動回転波束制御について、数値計算による実現可能性の

検討と、実験技術の開発を行った。複数の振動回転状態をコヒーレントに制御するためには周波数幅の広いフェムト秒パルスが必要となるが、分子の振動回転遷移は狭い周波数領域に多枝に渡っているため、超短パルス照射下の振動回転状態の波束の発展が複雑になる、そのため、遺伝アルゴリズムを用いた精密な波形設計が必須であることが分かった。(Phys. Rev. **77**, 023405 (2008)) 単純な二原子分子を用いて一量子ゲート演算の基本である Hadamard ゲートについて超短パルス赤外レーザーによって実現可能なパルス波形を遺伝アルゴリズム

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle = U_H |\psi\rangle$$

$$U_H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

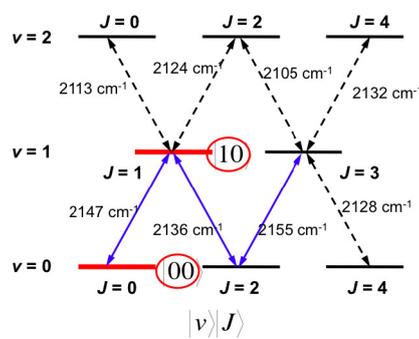
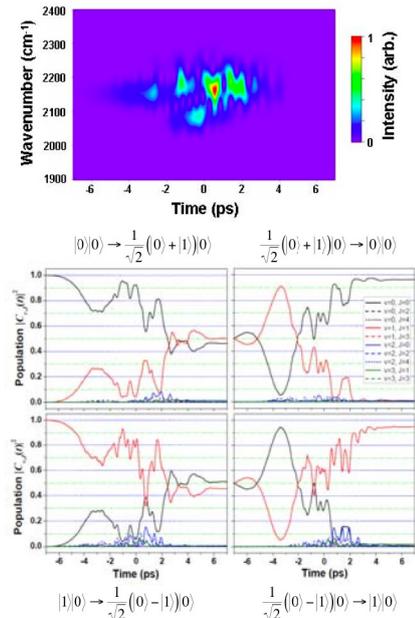


図 6



を用いて最適化したところ、98%以上の精度で実現可能であることが理論的に示された。図は例えばCOの $v=0, J=0$ と $v=1, J=1$ の2準位を用いてHadamard変換を達成するために必要な波形を示す。(Phys. Rev. A77, 052326 (2008))ここで重要なことは、この波形を求める上で、分子のHamiltonianとして実測で得られている分子定数をすべて使っているために、現実の系に則した波束発展が得られているという点と、これまでに我々が開発したレーザーで得られた周波数及び時間軸の分解能を計算条件に入れていることから、上記波形が我々のグループで実際に発生可能であるという点である。実験的に実現可能な波形整形を得た例は初めてであり、その結果98%以上のfidelityで実現可能であることを示したことは、分子の振動回転状態を用いた量子演算の実現可能性を明確に示しており、重要な成果である。

また生成した状態の位相を含めた読み込みには、LIF法が使えることを理論的に示した。ビットに使用した準位をフェムト秒の周波数帯域の広いパルスで同時に励起することで、蛍光の量子ビートに初期位相が乗ることを明らかにした。また、このフーリエ変換をとることで、占有数に関しても定量的な情報が得られることを明らかにした。現在、実際に固体水素中の分子についての観測を行っている。

### (5) 多ビット化の可能性の実証

分子の振動回転状態を量子演算の素子として用いたときに問題となるscalabilityを解消するために、いくつかのアイデアを検証した。分子には複数の振動回転状態があるため、それらを独立のビットと見なすことで、一つの分子を他の系に比べて

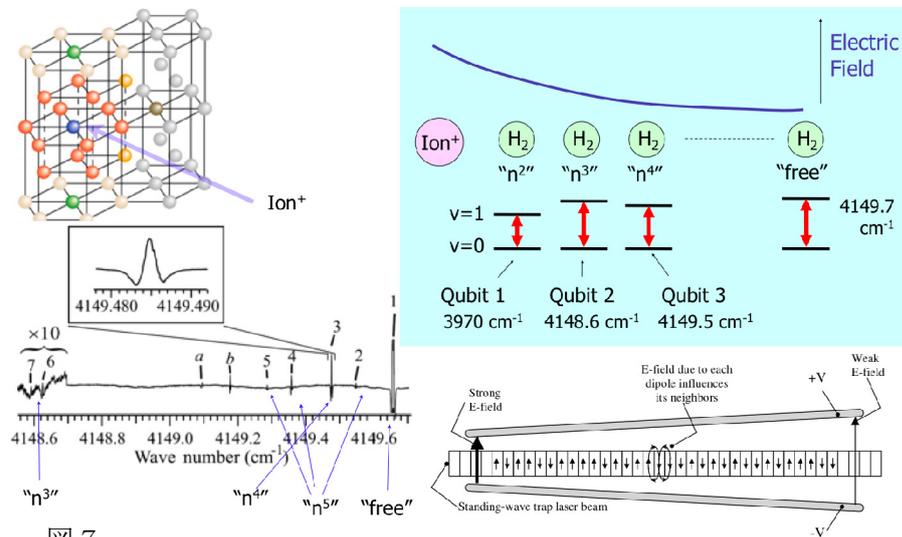


図 7

scalabilityを格段に向上させられる可能性があるが、現実にはすべての振動状態をカバーするために2–20 μmの波長範囲の多数のレーザー光を用意せねばならず、現実的ではない。scalabilityを向上するためには、複数の分子を用いねばならない。固体水素中に捕捉した(CH<sub>4</sub>)<sub>n</sub>、(CO)<sub>n</sub>、(NO)<sub>n</sub>等の多原子分子クラスターがもっとも簡単なモデル系となるが、異なる分子間の振動回転状態間の量子もつれ状態を生成するために量子状態の同定が必要であり、現在二重共鳴などで取り組んでいる。一方、異なる分子間の情報伝達を行うために、勾配を持つ外部電場を用いる方法が提案されている(DeMille, Phys. Rev. Lett. 88, 067901 (2002))。このモデルシステムとして、固体水素中に発生させたイオンの電場で誘起される水素分子の振動遷移が使えることを見いだした。固体水素中に電荷を持つイオンを生成するとその強い電場により、周りの水素分子が分極され、振動遷移が赤外光を吸収するようになる。この相互作用はイオンと水素分子間の距離に依存するため、イオンから距離によって遷移周波数がわずかに異なる。そのシフトはわずかではあるが、遷移線幅が50MHz以下と非常に細いことからすべて分離して観測される。従ってこのそれぞれを異なるビットとして活用可能で可。異なるビット間の情報伝達の証明のために二重共鳴の実験を行っている。

### (2) 研究成果の今後期待される効果

最近、P. Zollerらが分子の回転及びスピン状態を用いた量子情報処理技術の提案をしている。こ

これらのアイデアは、基本的には分子の回転量子状態を量子ビットとして活用するという点で、我々が当初提案していたものと同じである。Zoller らの扱いは、分子が光格子などに単離捕捉・配列されなければいけない、という点でその実現には、やはりまだかなりの時間がかかると考えられる。

我々は、量子固体に捕捉した分子という単離捕捉された分子系を実際に実現しており、本プロジェクトはこの捕捉された分子の量子状態を操作することで複数 qubit の操作を実験的に達成するという、ほかのグループにないユニークな手法を活用した研究であるといえる。量子固体中の分子を活用する最大の特徴は、固体中の異方的な相互作用のため、回転角運動量の空間方向の射影成分の縮退が解けている点である。すなわち空間配向が特定できているため、一つの遷移周波数に対応する光学遷移モーメントが確定しており、複数の分子を光励起しても、縮退が解けていない系(例えば気相分子)を用いるときに問題となる、配向(異なる M 状態)による光学遷移モーメントの違いが自然に回避できている点である。

我々がこれまでに取り組んできた、赤外超短パルスレーザーの波形整形については、Max Plank の Motzkus (App. Phys. B76, 467 (2003)), Princeton 大の Warren (Opt Express 11, 131 (2002)) によって、その原型となるアイデアは提案されていたが、実際に光を発生させてその光の詳細な性格まで明らかにした研究はこれまでに全くない。この技術は量子演算だけでなく、分子のコヒーレント操作などにもそのまま応用できる点で、今後様々な分野で活用される可能性がある。

## 4.2 金森(東工大)グループ

### (1)研究実施内容及び成果

#### [ I ] $p$ -H<sub>2</sub> 結晶に内包された分子の振動・回転 qubit のデコヒーレンス過程の解明

分子の振動および回転遷移は光学許容であるので大きなラビ振動数を実現できる一方、それぞ  
れの自然発光寿命は 0.01 秒、1000 秒と長いので十分なデコヒーレンス時間を確保できる。さらに永  
久電気双極子モーメントが存在し、これを用いた配向制御も可能となる。このような分子の本質的に  
優れた性質を量子演算素子として利用するために、量子固体として知られているパラ水素結晶に内  
包された分子の振動・回転スペクトル観測し、そのスペクトル線形や線幅から各量子状態の物理特性  
を調べ、qubit として最適な分子の準位を探索した。次表に調査対象として選んだ分子のリストを示す。  
電気双極子モーメントの大きな分子(HCN, CH<sub>3</sub>F)はパラ水素結晶格子との相互作用が大きくなるの  
で、デコヒーレンスが大きいと考えられる。一方、無極性分子(CH<sub>4</sub>, O<sub>2</sub>)は純回転遷移が禁制なので、  
回転 qubit としては不利である。CO 分子は永久電気双極子モーメントを有するものの、0.1Debye と小  
さく、結晶との相互作用が弱いことから、デコヒーレンス時間が長くなることを期待した。表の最後のカ  
ラムには、マイクロ波領域の qubit 候補となる準位とその検出法を記した。

パラ水素結晶中の分子の振動・回転分光測定

分子	電気双極子 モーメント	分子間 相互作用	赤外振動 遷移の観測	マイクロ波による探査
CO ( <sup>1</sup> Σ)	small (0.11 D)	weak	○ 線幅測定	pure rotation by source mod.
HCN ( <sup>1</sup> Σ)	large (2.98 D)	strong	○	pure rotation by source mod.
CH <sub>3</sub> F	large (1.85 D)	strong	○	not rotating
NO ( <sup>2</sup> Π)	small (0.16 D)	weak 不對電子	○	pure rotation by Zeeman mod.
CH <sub>4</sub>	zero (0 D)	weak	○	crystal field splitting by source mod.
O <sub>2</sub> ( <sup>3</sup> Σ)	zero (0 D)	weak 不對電子	—	fine structure by Zeeman mod.

#### 1)パラ水素結晶/試料分子の作成法の確立と分光測定

百瀬グループから提供された液体ヘリウム冷却1K クライオスタットを改良し、赤外光とマイクロ波の  
専用窓を取り付け、両者の同時吸収測定を可能とした。試料結晶は T=2K の BaF<sub>2</sub> 基板に気体のパラ  
水素と 10ppm 程度の試料分子を吹き付け、数ミリの薄膜試料を作成し、昇華がはじまる直前の温  
度 T=7K に 10 秒間保つアニーリングによって、結晶を hcp 構造に改質した。FTIR 分光器を用いて  
赤外振動スペクトルの測定をおこない、振動遷移が禁制の O<sub>2</sub>を除く分子についてはモノマーの赤外  
振動スペクトルを確認し、対象分子がパラ水素結晶中で均一に分布する結晶作成条件を確立した。  
回転励起状態はエネルギー的には振動励起状態の数百分の1でしかないので、そのスペクトル線幅  
も狭くなることを期待して、純回転遷移のマイクロ波観測探査を行ったが、CO、HCN 分子については  
検出することができなかった。その原因のひとつは液体ヘリウムクライオスタット内でのマイクロ波の干  
渉性雑音が吸収検出感度を著しく低下させていることにあった。そこで通常の光源変調法ではなく、  
分子変調法である Zeeman 変調が使える NO と O<sub>2</sub> 分子の検出を試みたが、変調周波数の深さに限  
界(<10MHz)があり、現在までに検出できていない。

#### 2)パラ水素結晶中のデコヒーレンス過程の解明

量子固体中の分子の振動・回転運動の物理的理解を深め、励起状態のデコヒーレンスを決める物  
理的要因を解明するために、CO 分子の振動遷移について、赤外半導体レーザーによる高分解能分

光計測をおこない、振動遷移のスペクトル線型と線幅について詳細に調べた。その結果、スペクトル線幅は Gaussian 成分と Lorentzian 成分のコンボリューションであることがわかった。それぞれの温度依存性をしらべたところ、図1にあるように Gaussian 成分は温度依存性を示さなかったが、Lorentzian 成分はアレニウス型の温度依存性を示した。

Gaussian 成分については、スペクトル線型に及ぼす格子欠陥の統計理論モデルに沿って、その起源を結晶の転位欠陥による**不均一広がり**と解釈した。この線幅は完全結晶の極限では0となるべきものである。

一方、Lorentzian 成分の温度依存性はフォノンによる位相緩和によるものであり、その要因はCO分子とp-H<sub>2</sub>の分子間力による局所的な振動モードを介して起きているし、活性化エネルギーの解析から、その振動をCOとp-H<sub>2</sub>間のファンデルワールス伸縮モード(20cm<sup>-1</sup>)と解釈した。

以上の事実はCO分子のスペクトルを通してパラ水素結晶の物性を引き出せることを示した例であるが、量子演算研究の観点から最も重要な事実は、図1にあるように Lorentzian 幅が T=2K 以下で 0.5GHz の一定値に収束することである。この線幅は T=0K 極限、かつ格子欠陥を除去した完全結晶の場合にも残存する**均一幅**であり、p-H<sub>2</sub> 結晶中の CO 分子の励起状態の固有のものである。観測した振動回転遷移の組み合わせから、その均一幅を決めている物理は CO 分子の振動運動ではなく回転運動であると結論づけた。このことはパラ水素結晶中の純回転スペクトルの線幅が 0.5GHz であることを予言し、我々がマイクロ波スペクトルの観測に成功していない理由と考えられる。さらに、この固有均一スペクトル線幅は分子の回転軸と結晶c軸との向きによって異なることを見だし、回転状態と結晶格子のカップリングには異方性があるという新しい知見を加えた。しかしながら、量子情報の観点からは、パラ水素結晶中の CO 分子の回転準位は分子本来の長い寿命特性を活かせず、qubit 寿命として高々数 ns しか得られないという結論に至った。

この結果は結晶格子内で回転の自由度を持つ分子に共通の特性と考えられる。しかしながら、結晶格子内で回転の自由度の無いような大きな分子や、分子クラスター分子では状況が異なると思われるので、今後はそのような分子系を調べるべきである。

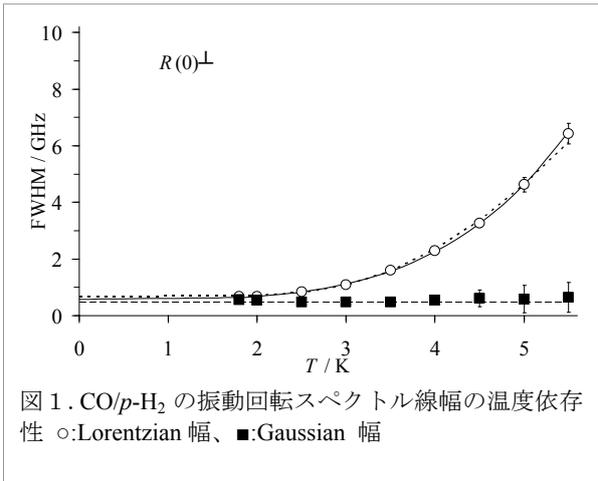


図1. CO/p-H<sub>2</sub> の振動回転スペクトル線幅の温度依存性 ○: Lorentzian 幅, ■: Gaussian 幅

## [II] 分子の振動・回転 qubit の量子演算操作のための位相同期光源の開発と気相分子を使った量子演算操作の実証

分子の振動・回転状態準位 qubit 系に対して、光学励起を使って量子演算操作を実現するためには、振動準位間及び回転準位間の複数の遷移を位相を含めて同時にコントロールすることが必須となる。そのための基本技術、すなわち、複数の赤外光とマイクロ波の位相を安定化する技術を開発した。さらに、光源の性能評価のために気相の原子・分子系 qubit を用いて、量子演算操作能力を検証した。

### 3) 複数の位相同期光源の開発

マイクロ波領域の光源としては RF シンセサイザ、通信発生器、Gunn 発振器および BWO 発振器を周波数チェーンで結び、1THzまでの位相安定化光源システムを構築した。可視・近赤

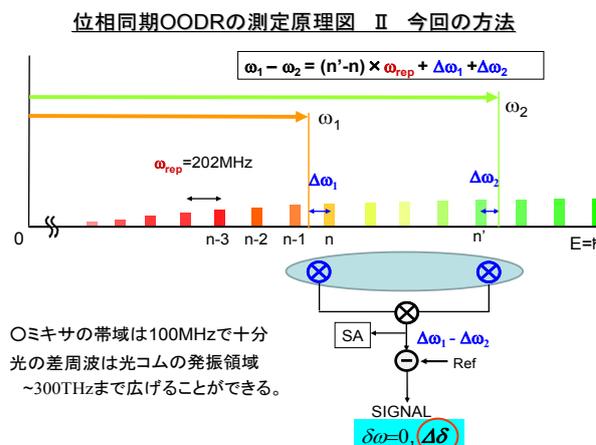


図2. 光コムを使った位相安定化光源の原理

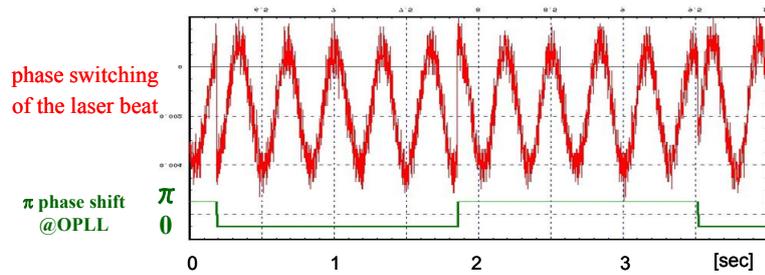


図3. 光コムに位相安定化した2台のLDの位相スイッチングの様子をビートで観察

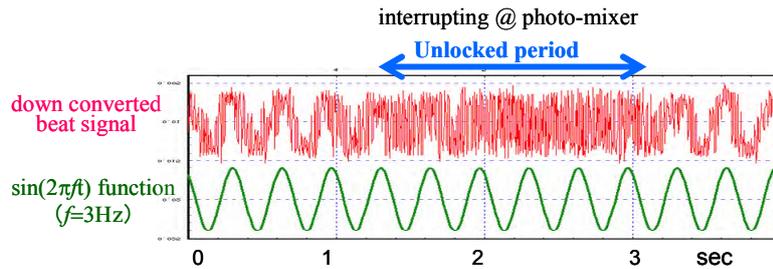


図4. 光コムに安定化した2台のLDのビート信号の位相再生

外・中赤外領域では図2に示すように、半導体レーザー、OPO レーザーを 300-600 THz の光コムに optical-PLL することによって、位相安定化を実現した。特に近赤外領域の外部共振器型半導体レーザーについては、2台のレーザーを光コム別のモードに位相同期安定化することによって、レーザー間のビートを 0.001Hz とすることができた。これは光周波数コムを介して異なる周波数で発振する2台の近赤外半導体レーザーの相対位相を 1000 秒以上に渡って一定に保つことを意味する。この方法は2台のレーザーの差周波を 300THzまで広げることができるので、実用・応用性は極めて高い。

図3では2台の半導体レーザーを 1GHz 離れた光コム別のモードに位相安定化した際のレーザー間ビート信号を3Hzまで周波数 down conversion し、オシロスコープで時間軸観測したものである。一方の半導体レーザーと光コムとの位相安定化回路の電気的位相を緑色のグラフのように3秒の周期で180度変えると、それにしたがって、光ビートの正弦波の位相が180度スイッチされている様子が分かる。さらに、図4では、時刻1秒と3秒の間、一方の半導体レーザーの PLL を光コムから外した時のビート信号の様子を示す。PLL の on/off/on 前後の光ビートの位相のずれ具合を見やすくするために緑色の3Hzの正弦波を書き込んであるが、光ビートは PLL を再現した後も、外す前の位相で再生することが分かる。これらの結果は  $10^{14}$ Hz で振動している光波に対して、任意の位相シフト量を任意のタイミングでスイッチングする制御技術を実現したことになる。

さらに、この位相安定化光源の波長を分子の電子遷移に適用できるように可視領域の半導体レーザーへ、また、振動遷移に適用するために中赤外領域の OPO レーザーや差周波レーザーに拡張した。以上のマイクロ領域と光領域の位相同期光源群は、GPS を周波数標準とする低残留 FM 雑音の標準発振器を共通のマスタークロックとすることによって、マイクロ波と光の任意の組み合わせの二重共鳴において、位相制御の実験を可能とした。

#### 4) 気相原子を用いた量子演算操作の実証

この光源を用いて、qubit の基本演算操作である Bloch 球上での経度方向の回転操作:量子位相の制御とモニター、および緯度方向の回転操作:ラビ振動の時間軸測定実験をおこなった。ラビ振動の実時間軸測定としては、マイクロ波を用いた Rb 原子の超微細構造 qubit で実証した。一方、量子位相制御の実験には Rb 原子の超微細準位 qubit に対して、2本の半導体レーザーを光源とするラマン型二重共鳴分光を用いて、あらかじめ光源に設定しておいた位相情報を原子 qubit に転写した。その書き込まれた量子位相情報を3次の非線形分極輻射を位相敏感検出することで読み出す手法を開発し、図5のように理論通りのスペクトル波形を観測することによって実証した。

### 5) 気相分子回転 qubit を使った量子演算操作の実証

超音速ジェット中の H<sub>2</sub>CO 分子を用いて、回転準位 qubit のラビ振動の直接観測に初めて成功した。図6は J=1-0 (73GHz) と J=2-1 (145GHz) の回転遷移を使った2重共鳴信号である。時刻t=0 で qubit に想定した J=1-0 遷移をステップ励起した際に、モニター中の J=2-1 遷移の吸収信号にラビ振動が現れた。これは超音速ジェットを用いることによって、分子間衝突が無くなり、デコヒーレンス過程が押さえることができたためである。振動構造が有限の時間で消失する理由は励起マイクロ波の空間強度分布が不均一なためである。

### 6) 原子 qubit と分子 qubit の比較

課題4)において測定した Rb 原子の超微細構造 qubit のラビ振動の大きさと励起マイクロ波パワーの関係は 2kHz/mW・cm<sup>2</sup> であった。一方、5)で測定した H<sub>2</sub>CO 分子の回転 qubit のそれは 400kHz/mW・cm<sup>2</sup> であった。このことは磁気双極遷移を使った原子の系より、電気双極遷移を用いた分子の系の方が電磁場の理論通り、微細構造定数(α=137)倍大きいことを示しており、分子回転準位 qubit の高速演算優位性を実証した。その他にも分子は本質的に qubit の有力なリソースであることを図7に示す。

### 7) 総括

実験目標[II]の量子演算操作の光源開発は当初の計画通り進んだ。また、それを用いて気相の原子分子 qubit で Bloch 球上のユニタリー変換を実現し、原子 qubit に比べて分子 qubit の優位性を実証した。しかしながら、並進運動を伴う気相分子の qubit では情報の空間保持ができないため、量子演算素子としては使えない。その欠点を解決するために qubit の空間保持を可能とするパラ水素結晶中の分子 qubit 探索を実験目標[I]としておこなったが、CO/p-H<sub>2</sub> 結晶中では回転状態と格子の相互作用が本質的に大きいことを実験的に見だし、qubit としては高々数ナノ秒の寿命しか持ち得ないことを示した。このことは結晶内で回転の自由度をもつ分子に共通の性質と考えられるので、分子 qubit の本質的な優位性を活かすためには、パラ水素結晶中にある回転運動の伴わない固有状態を利用する必要があることが分かった。

#### (2)研究成果の今後期待される効果

分子は他の qubit 候補にはない振動、回転の自由度に加えて、配向を制御することによって極性分子間の電気双極子相互作用を切り替えることができる。本研究では qubit としては回転準位のデ

$$I(\omega; \Delta\phi) \propto \chi_{re}^{(3)} \sin\Delta\phi + \chi_{im}^{(3)} \cos\Delta\phi$$

(Δφはレーザー間の位相差)

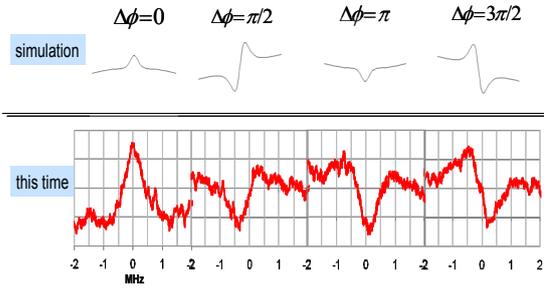


図5. 位相同期光-光2重共鳴法による Rb 原子の位相制御と量子位相モニター

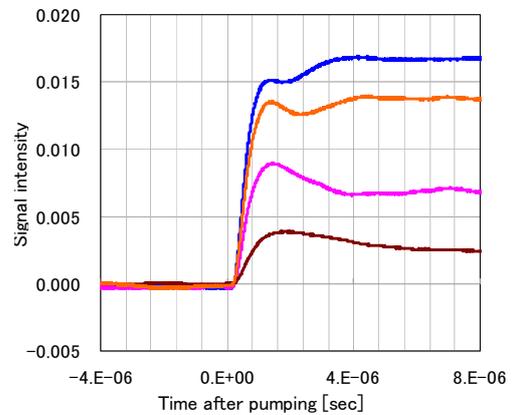


図6. H<sub>2</sub>CO 分子の J=1-0 回転 qubit のラビ振動

resource	qubit	Optical	IR	MW
Atom	electronic	B ⊙ A ×		
	fine hyperfine			B × A ⊙
Molecule	electronic	B ○ A ×		
	vibration		B △ A ○	
	rotation			B ○ A ○
J.J.	gap			B ○ A ?

図7. qubit リソースと光学的量子演算操作の優位性。A,B は Einstein の A,B 係数それぞれ、デコヒーレンスと演算速度の優劣に関係する。

コヒーレンス時間を長くすることは本質的に難しいことを示したが、同時に  $p$ -H<sub>2</sub> 結晶中の CO 分子において、赤外レーザーの偏光を使った選択励起によって、回転励起状態の回転軸を結晶  $c$  軸に対して平行、あるいは垂直とすることを見出している。分子の配向を利用した異方性相互作用の研究には、パラ水素結晶中の分子系が適しており、今後、極性分子集団を使った量子シミュレーターとする量子情報処理の研究が期待される。

オクターブ光コムを使った複数のレーザーを光位相安定化することによって、差周波（ビート）スペクトルを  $\text{mHz}$  以下の線幅とする光制御技術を確立した。これは原理的には可視領域の 2 本の光を使った差周波数  $300\text{THz}$  の分光計測を  $1\text{mHz}$  の分解能でおこなうことを可能とするもので、実に  $10^{17}$  の周波数測定精度を有している。すなわち、物理定数の時間普遍性やパリティ対称性の破れの検証等の現代物理の最先端研究テーマを対象とする光基盤技術として利用されることが期待される。

### 4.3 大森(分子研)グループ

#### (1)研究実施内容及び成果

我々が自ら開発し、独自の基盤装置として所有するアト秒位相変調器 (APM) は、光の位相を精密に操作する装置である。真空中でフェムト秒レーザーパルスを二つに分けて、一方を水素などのガスが入ったチューブに通しスピードを微妙に変化させることで、アト秒レベルの安定性と分解能で二つのパルスの位相差を調節することができる。我々は、この APM を気相中の孤立したヨウ素分子に適用することによって、分子内に発生させた2個の電子振動波束の干渉を精密に制御する事に成功した。また、このような波束干渉を可視化する検出手法の開発も行った。

これとは別に、APM の片方の光路上にパルスシェーパーを導入した新型の高安定干渉計 (APM2) を開発した。これを用いれば、パルスシェーパーによって任意の入力が可能になり、この入力に演算を施した結果を、別の光路を通ってきたフーリエ変換限界のパルスによって発生させた別の波束との干渉を用いてホログラフィックに読み出すことができる。これを気相中の孤立したヨウ素分子に適用し、任意入力手法を確立した。さらに、任意入力の離散フーリエ変換の開発とその動作確認を行った。

このような高精度量子干渉系は、デコヒーレンスの検証においても有効に機能し得る。すなわち、APM から出力されたパルス対の片方によって分子内に発生したコヒーレンスがどのように乱れていくのかを、他方のパルスによって発生させたコヒーレンスとの干渉によって追跡する事ができるはずである。我々はこの手法をビスマス結晶や固体パラ水素に応用し、凝縮系におけるデコヒーレンスの検証実験を行った。これは、固体中に補足された分子を用いた情報処理の可能性を追求するための基礎実験としても重要である。

また、これらの成果を量子情報処理へと発展させるために空間的に捕捉された分子を生成することを目指して、レーザー冷却された Rb 原子をコヒーレント制御の手法を用いて高効率で光会合させるための研究に着手した。

以下、具体的な各成果について説明する。

#### (1-1) 分子の振動固有様態を用いた READ and WRITE 法の開発

分子内に発生した2個の振動波束が互いに対向して往復運動を繰り返す場合、それらがポテンシャル曲線の中央付近で交差するたびに、過渡的な定在波が出現する。我々が対象とするヨウ素分子の B 電子状態の場合、この定在波 (量子さざ波) の寿命は 100 フェムト秒程度であり、隣り合う山と山の間隔はわずか 6 ピコメートル程に過ぎない。我々は、このような量子さざ波を、ピコメートルの空間分解能と 100 フェムト秒の時間分解能で可視化する技術を開発する事に成功した (Science 311, 1589 (2006)) (→図1)。さらに、このように可視化された時空間模様 (量子カーペット) を、APM によって自在に書き換えることにも成功している (Phys. Rev. Lett. 102, 103602 (2009)) (→図2)。また、これらの基盤技術を応用した分子メモリーの開発にも成功した (Phys. Rev. Lett. 96, 093002 (2006); Phys. Rev. A 76, 013403 (2007))。この分子メモリーは、振動固有状態をビットとして動作する量子メモリーで、ナノ秒レーザーパルスとフェムト秒レーザーパルスを組み合わせることによって、各ビットの振幅と位相の両方を書き込んで読み出すことができる。固有状態の重ね合わせ状態を用いれば量子ビットとして動作させることも可能である。

米国の P.H.Bucksbaum らは、セシウム原子の Rydberg 状態の重ね合わせに振幅位相情報を書き込み、これらを別のリファレンス波束と干渉させる事によって読み出す事に成功している (例えば、Nature 397, 233 (1999); Science 287, 463 (2000))。また、米国の I.A.Walmsley (現在、英国) らは、Na<sub>2</sub> 分子を対象として、振動波束の運動量と位置に関する情報を、時間と周波数の両方を分解した蛍光スペクトル測定によって決定している (例えば、Phys. Rev. Lett. 70, 3388 (1993); Phys. Rev. Lett. 74, 884 (1995))。この他に、関連性のある研究として、フランスの B.Girard らによる最近の研究が挙げられる (Phys. Rev. Lett. 96, 103002 (2006) )。彼らはチャープパルスを用いてルビジウム原子を電子励起状態に励起し、共鳴過程による励起経路と非共鳴過程による励起経路とを干渉させることによって、チャープパルス内の位相振幅情報を再構成した。

これらに対して、我々が確立した手法はポピュレーション測定とビート測定を組み合わせた独自かつ堅固なものであり、原理的にあらゆる量子重ね合わせ状態に適用できるという特徴を持っている。

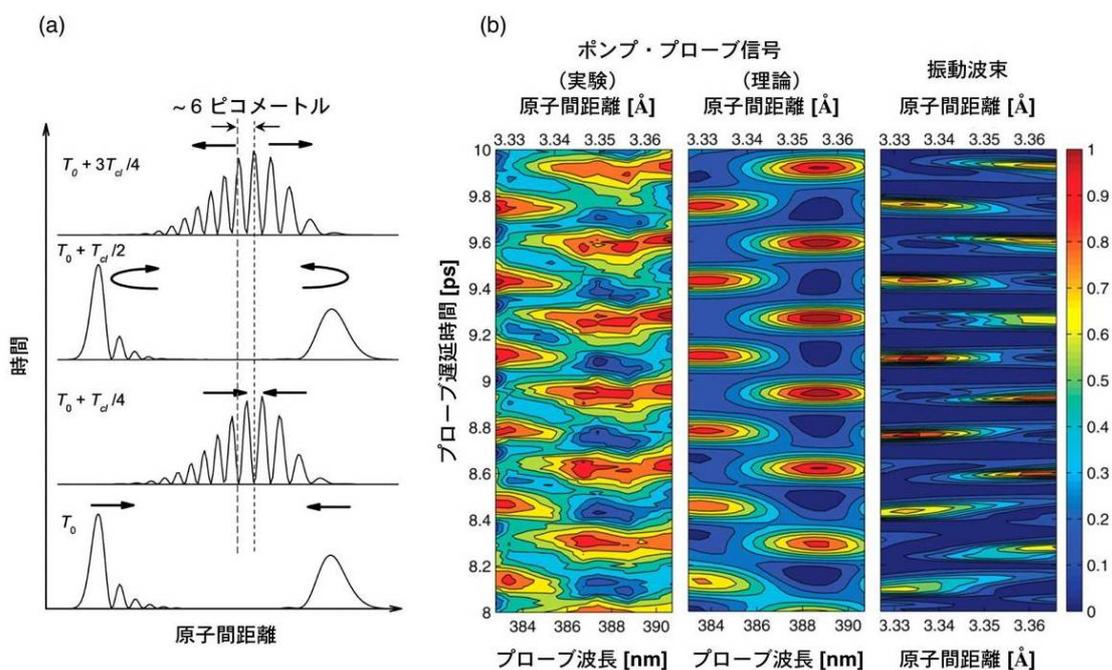


図1; 量子さざ波 (a) ヨウ素分子の中で互いに対向する2個の振動波束が干渉する様子。2個の波束が交差する一瞬(〜100 フェムト秒)の間だけ、ピコメートルスケールのさざ波が現れる。 $T_d$ は古典的な分子振動の周期で、この場合0.3ピコ秒程度。(b) 左から順に、実験的に可視化されたヨウ素分子中の量子さざ波; 実験信号の理論シミュレーション; 波束運動の理論シミュレーション。Science 311, 1589 (2006)より転載。

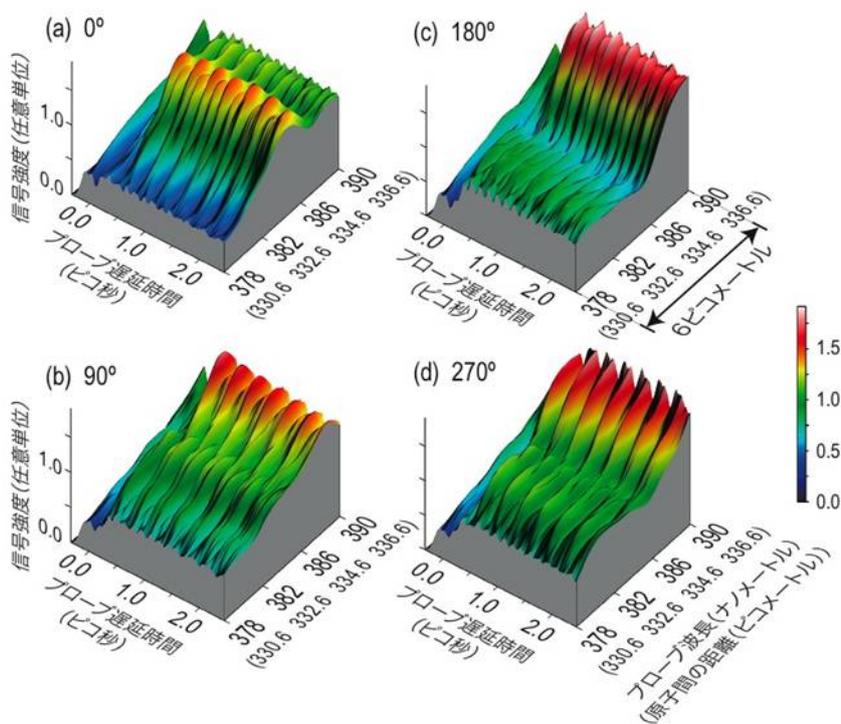


図2; 波動関数の極限的な精密加工 アト秒レベルで相対位相 $\theta_{p-c}$ を安定化したフェムト秒レーザーパルス対でヨウ素分子のB電子状態に2個の振動波束をつくる。パルスの時間間隔は古典的な分子振動周期の1.5倍付近に設定。(a)から(d)へと $\theta_{p-c}$ を $90^\circ$ ずつ変化させると、波束干渉が描く波動関数の時空間模様(量子カーペット)がピコメートルスケールで劇的に変化する。 $\theta_{p-c} = 0$ は任意。Phys. Rev. Lett. 102, 103602 (2009)より転載。

### (1-2) 分子の振動固有様態を用いた論理ゲートの開発

上述の分子メモリーを量子情報処理に活用するために、分子の振動固有状態の時間発展を用いた論理ゲートの可能性を理論シミュレーションによって検証した(J. Chem. Phys. 124, 114110 (2006))。ごく最近では、先述の APM2 をヨウ素分子に適用する事により、4 要素および 8 要素の任意入力 of 離散フーリエ変換(DFT)を試み、これが高いフィデリティで実行されている事を実験的に確認した(投稿中)。この際、入力と出力を振幅と位相の両方において確定するために、(1)で開発した高精度の READ and WRITE 法が不可欠であった。

波動関数を用いた DFT はすでに2つの物理系で実現されている。1 つは 2001 年に MIT の I. Chuang らにより NMR で行われた(Nature, 414, 883 (2001))。分子中の状態の異なる原子の核スピンを量子ビットとみなし、RF 磁気パルスによる 1 ビット操作、及び 2 ビット操作を組み合わせ、普遍性のある方法で DFT を実施している。しかし、ビット数が増えるほど 2 ビット操作に必要な時間が増加し、一回の演算に 100 ミリ秒程度の時間がかかる。もう1つは 2005 年に NIST の D. Wineland らによりイオントラップで行われた(Science, 308, 997 (2005))。Be<sup>+</sup>を 3 個、空間的に並べ、拡張性のある方法で DFT を実施している。しかし、位相情報を捨てることで操作を単純化しており、複素数の入力に対応できない。

これらに対し、我々の DFT は、実際に2<sup>N</sup>個の振動固有状態を用意する必要があり、拡張性は低い。また、演算ごとに異なる基底を用いるため普遍性も低い。しかし、全ての操作を1ステップで行うため、ビット数に依存せず 100 フェムト秒程度の時間で完了する。また、位相情報も保持し、複素数の入力にも対応している。さらに、入力と出力における振幅と位相の両方を確定することによって、動作状況を明確に確認しているところに特徴がある。

### (1-3) デコヒーレンスシミュレーターの開発(投稿準備中)

APM を用いたデコヒーレンスシミュレーターの開発を行った。具体的には、ヨウ素分子内の振動波束に赤外領域の高強度フェムト秒レーザーパルスを照射することによって誘起される振幅と位相の変化を、高精度の干渉測定等によって詳細に観察した。その結果、振幅と位相の変化量が、赤外パルスを照射するタイミングに依存することが明らかになった。赤外パルスによる分子ポテンシャルへの擾乱が、原子衝突や分子衝突の良いシミュレーションとなることが示された。また、同様の手法が、ポテンシャル曲線の非調和性に起因する振動波束内の位相緩和をリセットし得ることが実験的に確認された。

### (1-4) 固体量子ダイナミクスの光制御(投稿準備中)

固体中に補足された分子を用いた情報処理を目指して、固体のコヒーレント制御を試みた。その結果、APM によって発生させた位相ロックフェムト秒レーザーパルス対によってビスマス結晶の格子振動を制御することに成功している。一方、電子コヒーレンスはまだ観測されておらず、改めて凝縮系での激しいデコヒーレンス環境が明らかになった(投稿準備中)。同様の手法を固体パラ水素中の水素分子の振動コヒーレンスに適用し、この非局在したコヒーレンス(vibron)がほぼ 100%近いコントラストで干渉することを実証するとともに、ナノ秒以上の時間スケールで持続することを確認した。

### (1-5) 極低温分子の超高速コヒーレント制御

上記(1-1)および(1-2)で報告したような分子を用いた情報処理を量子情報処理に展開して行くためには、空間的に捕捉した1個1個の分子を個別に操作できることが望ましい。このような分子サンプルを準備することを目的に、上記のパラ水素中に捕捉する方法とは別に、レーザー冷却した Rb 原子を超高速コヒーレント制御法によって効率的に光会合させるための研究を開始した。現在、励起状態ポテンシャル上での光会合分子を生成することには成功しており、今後フェムト秒レーザーパルスを導入することによって、極低温分子中の振動波束のコヒーレント制御を試みる予定である。

## (2) 研究成果の今後期待される効果

我々は本研究を通じてアト秒ピコメートル精度の世界最高レベルの時空間コヒーレント制御法を開発した。また、このコヒーレント制御法を応用したデコヒーレンスの検証実験も独自のものである。さら

には、波動関数をフェムト秒ピコメートルレベルの時空間分解能で可視化する技術も開発した。これらは、今後、気相中の孤立分子だけでなく固体のコヒーレント制御を実現する上で、重要な基盤技術となることが期待される。

また、分子の振動波動関数を用いた情報処理技術は、量子情報処理のみならず、古典情報処理におけるボトムアップのナノ技術としてもその将来性が期待される。

最後に、コヒーレント制御法を応用した極低温分子の生成実験や固体パラ水素のコヒーレント制御実験は、低温物理と超高速化学を融合した新たな研究領域を開拓する可能性を有している。このような融合分野は、将来的に化学反応制御、基礎物理定数の検証、量子シミュレーター、量子情報処理等の広範囲の研究分野に大きな波及効果を与える可能性を秘めている。

## 4.4 山下(東大)グループ

### (1)研究実施内容及び成果

量子化学計算、量子波束計算、最適制御理論に基づく理論的手法により、現実的な分子の内部状態を用いた、量子演算、あるいは、エンタングルメントダイナミクスのシミュレーションを行い、実験家への理論的提案を目標とした。

第一の研究では、アンモニア分子の6つの振動状態内で、2つの振動モード(bending mode と asymmetric stretching mode)を2つの qubit と見なして、Hadamard ゲートと CNOT ゲートの基本的な量子ゲートレーザーパルス設計を行った。アンモニア分子を研究の対象とした理由は、先行研究(T. A. Murphy, Th. Pawlik, A. Weidinger, M. Höhne, R. Alcalá, J. M. Spaeth, Phys. Rev. Lett. 77, 1075 (1996), B. Goedde, M. Waiblinger, P. Jakes, N. Weiden, K. P. Dinse, A. Weidinger, Chem. Phys. Lett. 334, 12 (2001))において、アンモニア分子はフラーレン中に閉じ込め、内壁との相互作用がほとんどなく孤立させることができることが示されたこと、そして、アンモニア分子の bending mode は化学的に非常に興味のある振動モードであることによる。高精度量子化学計算によって、正確なポテンシャルエネルギーと遷移双極子モーメントを算出し、量子ゲートレーザーパルス設計には、従来の最適制御理論を用いた。その結果、各々のゲートにおける遷移効率 は 93%以上であることを見出した。また、分子の振動モード間のエンタングルメント相互作用は、モード間の非調和結合によるものであることを明らかにした。この研究結果(S. Suzuki, K. Mishima, and K. Yamashita, Chem. Phys. Lett. 410, 358 (2005))は、これまでの我々のグループで最も引用回数(31回(2009/09/06 現在))の多い注目すべき成果である。アンモニア分子の振動状態を qubit に用いることは、最近、M. Schröder and A. Brown, J. Chem. Phys. 131, 034101 (2009)において完全に6つの振動状態を考慮した研究に拡張され、我々の成果は先駆的な研究であり、アンモニア分子を用いた量子演算の研究は、将来的にも色々な方面へ展開されると期待される。

第二に、一般的に複雑なエンタングルメント結合をしている2つの量子系の間、分離可能状態から最もエンタングルメント度の大きいベル状態を生成する手法を、回転波近似(RWA)を仮定した解析的手法により提唱した(K. Mishima and K. Yamashita, Chem. Phys. 342, 141 (2007), K. Mishima and K. Yamashita, Chem. Phys. 352, 281 (2008))。RWA により、2つの量子系を表すシュレーディンガー方程式は非常に簡単になり、ベル状態が生成される時刻と、エンタングルメント生成相互作用強度との間の関係を、式で表現することに成功した。その結果、ベル状態が生成される時刻は、エンタングルメント生成相互作用強度と反比例の関係があることを見出した。このことは後に述べるが、最終的に重要な発見であることがわかった。また、分子は本質的に qudit であることから、3つの固有状態から成る2つの量子系において、最もエネルギーの高い状態への遷移を禁止するための方法の解析的研究へと拡張した。結果は非常に複雑であるが、最も単純な仮定(すなわち、2つの量子系が同じである)をすれば、qubit の基底状態と第一励起状態との間のエネルギーギャップが、第一励起状態と第二励起状態との間のエネルギーギャップに比べて2から3倍以上大きければ、qubit のヒルベルト空間内で、2つの量子系の間、ベル状態を生成することができることを見出した。このことは、エネルギーギャップが大きいほど、高エネルギー準位への遷移が抑えられることに起因する。この結果は、後に述べる、異なる分子の回転状態を qubit と見なした場合に相当し、重要な発見であることが、後に判明した。

第三に、原子と分子との回転角運動量のエンタングルメントについての解析的研究を行った(K. Mishima and K. Yamashita, Int. J. Quant. Chem. 108, 1352 (2008))。この研究では、原子間と分子間の回転角運動量エンタングルメント度と Clebsch-Gordan 係数との関連性について明らかにした。その数値的結果から、maximally entangled state を生成する指針を提唱した。原子の場合、周知のように、coupled representation によって、二原子個々の量子数  $j, m$  を持つ回転角運動固有状態の積の線形結合で書け、その線形結合係数が Clebsch-Gordan 係数である。その von Neumann entropy を Clebsch-Gordan 係数の性質を用いて解析的に計算した結果、全角運動量量子数が  $J = M = 0$  の状態は既にシュミット分解されており、更に、maximally entangled state であることを見出した。一方、二分子の場合は、それらの分子を結ぶ軸に相対的な分子軸の相対的方向が無視できなくなる。従って、新たに、軌道(相対)角運動量  $l$  を導入しなければならない。その影響を取り入れた分子系の coupled representation を書き下し、von Neumann entropy を計算した。分子の場合は解析的には求まらないが、

Clebsch-Gordan 係数を用いて計算した結果、 $j_1 = j_2 = 1 = 1$  の場合に限定すれば、 $j_{12} = j_1 + j_2$  の値によって maximally entangled state が可能である量子数の組み合わせを見出した。この研究成果は、スピネットワークにおける同様な  $3nj$  あるいは  $9jsymbol$  を用いた R. W. Anderson, V. Aquilanti, and C. da Silva Ferreira, *J. Chem. Phys.* 129, 161101 (2008) らの研究で紹介され、具体的な原子や分子の場合の参考文献として引用された。

第四に、高分子の振動状態の固有状態やエンタングルメントのデコヒーレンスに関する定性的、定量的研究を行った(K. Mishima and K. Yamashita, *Int. J. Quant. Chem. [Hirao Special Issue]* 109, 1827 (2009))。近年頻りに研究されている分子の振動状態を用いた量子演算では、我々も含めて、様々な分子、様々な基底の取り方(基準振動、ローカルモード)を採用している。また、分子の振動状態を用いた量子演算に与えるデコヒーレンスの影響も研究されている。特に、分子内での振動状態のデコヒーレンスは IVR(intramolecular vibrational redistribution)と命名されている。しかし、どのような分子、基底の取り方が量子演算やエンタングルメントに最適かを明らかにする研究は未だかつてなされておらず、統一した見解はない。我々は、過去に積み上げられてきた多数の IVR の研究に基づき、 $H_2O$  分子のように、ローカルモードで良く記述できる分子が IVR の影響を受けにくいことを定性的に示した。定性的な解釈によれば、ローカルモードの基底を取れば、各々の分子結合の振動固有状態間エネルギーギャップがそのエネルギーに対して非線形的に変化し、それぞれのモードの固有振動数は大きく異なること、そして、ローカルモードは分子内で非常に局在していることによって、IVR は起き難い。論文として発表はしていないが、我々は、注目しているシステムの固有状態と、デコヒーレンスを起こす環境の固有状態のエネルギーレベルが十分異なることは、注目しているシステムの、いわゆる、デコヒーレンスサブスペースを形成するための必要条件であることを解析的に見出した。この解析は、以上の定性的議論と一致する。以上の定性的な結論を現実的な計算によって定量的に示すために、 $H_2O$  分子の合計3つの振動モード内で、2つの OH 結合を2つの qubit と見なし、残りの bending mode は IVR を引き起こす振動モードと見なし、高分子の計算に有用である MCTDH 法 (multi-configuration time-dependent Hartree method)を用いて量子波束計算を行った。その結果、基準振動を採用すると、ベル状態は、symmetric stretching mode と anti-symmetric stretching mode との間で複雑なエネルギー交換を行うことにより、その状態を保持することができないが、ローカルモードでは、2つの OH 結合は、ほとんどエネルギー交換を行うことなく保持されることを見出した。また、残りの bending mode へのエネルギー移動もほとんど無く、デコヒーレンスの影響をほとんど受けないことを明らかにした。この成果は、まだ他の研究者によって掘り下げて研究されておらず、今後の実験的、あるいは、他の分子を用いた更なる検証が行われねばならないと考えられる。

第五に、分子の振動、回転状態を用いたエンタングルメント、ないしは、任意の線形結合状態を生成する方法についての研究を行った(K. Mishima, K. Shioya, and K. Yamashita, *Chem. Phys. Lett.* 442, 58 (2007))。まず、レーザーと分子の相互作用ハミルトニアンは、振動座標に依存する遷移双極子モーメントと、回転状態に関連する線形偏向したレーザーの回転軸に対して成す角度との積の形をしており、従って、分子の振動、回転状態を用いたエンタングルメントでは、レーザーによってエンタングルメント度を変化することができることを明らかにした。具体的には、レーザーを照射しなければエンタングルメント度は変化しないが、適切なレーザーを照射すればエンタングルメント度を自在に制御することが出来る。すなわち、振動モードのみを qubit に採用する場合は全く異なるエンタングルメント生成メカニズムであることがわかる。これは、分子以外には見出されない非常にユニークなメカニズムである。エンタングルメントを生成するスキームは種々考えられるが、我々は、マイクロ波と赤外波を組み合わせた非常に単純なスキームを提唱した。計算に用いる分子としては、大きな永久双極子を持つ HF 分子と LiH 分子を採用した。Shapiro ら(E. A. Shapiro, I. Khavkine, M. Spanner, and M. Yu. Ivanov, *Phys. Rev. A* 67, 013406 (2003))は、同様に、分子の振動、回転状態を2つの qubit と見なした量子ゲート操作を提唱したが、永久双極子を持たない ortho- $N_2$  と ortho- $D_2$  分子を用いたため、入射すべきレーザーパルス強度が非常に大きく(数  $106MWcm^{-2}$ )、分子を破壊する恐れがある。その点で、我々の qubit の定義と分子の取り方は、より現実的であると考えられる。実際に、このスキームが数値的に実現可能であることを示すために、ルンゲークッタ法によってレーザー場を含む時間依存シュレーディンガー方程式を数値的に解いた。レーザーの整形には、ランダウーゼーナー公式を使った。その結果、ベル状態のみでなく、任意の線形結合状態も生成することができることを具体的

に示した。また、実験的に実現する場合の注意点についても議論した。我々の発見したエンタングルメント生成機構の解明、具体的なエンタングルメント生成法の提唱は、世界に先駆けたものであり、将来的な量子演算、量子情報処理の礎となると期待される。

第六に、分子内部自由度(電子、振動、回転)のあらゆる自由度の2つの結合可能性を量子演算(ドイッチョサアルゴリズム)に適用し、それらの特徴と量子演算の効率性を数値的に解明した。計算手法は、共通して、高精度量子化学計算法によるポテンシャル曲面と遷移双極子モーメントの算出、あるいは、すでに文献で発表された信頼性の高い計算結果を用いて、既存の最適制御理論の基づく最適ゲートパルスの設計を行うことである。双極子—双極子相互作用をする異なる分子の回転状態を qubit と見なす場合、分子系としては、NaCl-NaBr 分子系、NaCl-NaCl 分子系、NaBr-NaBr 分子系を用いた(K. Mishima and K. Yamashita, Chem. Phys. 361, 106 (2009))。この研究においても、従来の最適制御理論を用いて、最適なレーザーパルスを設計した。しかし、個々の分子にそれぞれのレーザーパルスを照射する場合を想定して、従来の最適制御理論を、多レーザーパルス最適制御理論へと拡張した。分子間距離は、5nm、8.5nm、12nm と設定した。計算に必要なとされる分子のパラメーターとしては、高精度量子化学計算によって得られた結果を用いた。様々な設定での計算中で最も測定効率の良い結果(NaBr-NaBr 分子系)によれば、分子間距離が 5nm の場合、最低でも、97.95%の確率で、constant function と balanced function の識別が可能であることがわかった。これは、現在までに分子の内部状態を使って得られたドイッチョサアルゴリズムの効率性で世界最高のものである。しかし、ここでのシミュレーションには、二つの困難がある。第一に、5nm という分子間距離は、optical lattice などへの loading、個々のレーザーパルスの照射可能性という現実的な観点からして、あまりにも短いと考えられる。この困難を克服するには次のような可能性が考えられることを文献から引用することによって示唆した。DeMille (D. DeMille, Phys. Rev. Lett. 88, 067901 (2002))が提唱したように、個々の分子を一次元トラップし、電場勾配を用いてそれぞれの分子が感じる異なる外場によって制御することである。こうした設定下では、我々が計算した結果は、電場勾配下にある個々の分子の感じるゲートパルスに相当する。第二に、分子間の距離が増加すると、CNOT ゲートや ACNOT ゲートのような非局所的なゲートの効率が悪化することが問題である。このことを克服する方法の一つが、上記した第二の研究の成果から即座に提案できる。即ち、分子間の距離が増加して双極子—双極子相互作用が弱くなれば、照射するレーザーパルスの時間長を長くすればよいのである。一方、NOT ゲート、Hadamard ゲート、ID ゲートなどは局所的なゲートであるので、分子間の距離に関わらず、高効率でゲートパルスを設計できる。このことは実際の計算からも裏付けることができた。従って、将来的には、optical lattice(物質間距離約 300nm)などへ分子を loading する場合には、非局所的なゲートパルスは非常に長く、局所的なゲートパルスは短くすれば、効率の良い量子演算ができると結論される。Zoller らを始めとする研究者が、著名な論文に、分子の内部状態を用いた量子コンピュータを提唱しているが、具体的な計算はほとんどなされておらず、単に提唱に留まっており、実際に実験的に適用できるかは現段階では疑わしい。特に、de Vivie-Riedle らをはじめとする世界で幾つかの研究グループが、分子の振動状態を qubit と見なした具体的な計算に執着しているのが現状だが、我々は、振動状態の研究は既に終え、量子化学計算、最適制御理論を用いることによって、分子の電子、振動、回転状態、全ての組み合わせを用いた量子演算の比較を、実際のシミュレーションによって行い、その優劣と分子の特性による違いを明らかにした点で、非常にユニークである。

第七の研究として、量子系において初めて、シュレーディンガー方程式に従う場合とマスター方程式に従う場合の終端時刻拘束なしの最適制御理論を解析的に導出し、具体的な計算に応用できるアルゴリズムを構築した(K. Mishima and K. Yamashita, J. Chem. Phys. 130, 034108 (2009), K. Mishima and K. Yamashita, J. Chem. Phys. 131, 014109 (2009))。これは、上記の第二の研究の発想から、当初計画していなかった研究成果であることは上述した通りである。量子系の制御に対する、現在までに提唱され活用されてきた最適制御理論は、終端時刻拘束あり、終端状態拘束ありの範疇に属する特殊な場合である。従って、従来の最適制御理論は、一般性に欠ける。例えば、終端時刻拘束ありの最適制御理論を用いることは、エンタングルメントのような生成過程が時間に敏感なダイナミクスの制御には適切ではないと考えられる。何故なら、分子のような多固有状態から成る物質系では、単に、qubit と見なすことは出来ず、 $\pi$ パルスや  $\pi/2$ パルスのような単純な外場によってベル状態を生成することが直感的には想像できないからである。我々の目的は、量子系を、出来る限り高確率で、特定

された初期状態から特定された最終状態へ、特に、分離可能状態からベル状態を生成する外場を設計することであるので、終端時刻拘束あり、終端状態拘束ありの最適制御理論ではなく、終端時刻拘束なし、終端状態拘束ありの最適制御理論の構築が重要となる。後者の理論では、分子のような複雑な物質系において、最適な外場の終端時刻を正確に計算出来ることが特徴である。前者の理論では、終端時刻が拘束されているため、様々な終端時刻を予想して最適な終端時刻を試行錯誤しながら探し出さなければならない不便さがある。我々の構築した最適制御理論のフローチャートを図 1 に示す。計算例では、双極子—双極子結合をした NaCl 分子と NaBr 分子の回転状態を用いて、ベルの状態を生成することを目的とした。レーザーは直線偏光しており、両者の分子を同時に照射すると仮定し、分子間のエンタングルメントは、双極子—双極子相互作用によって生成される。T(0) = 500 ps と設定した場合、目的関数と終端時間がイテレーションごとに単調増加した。特に、終端時刻を固定しない場合は、収束性が早く、遷移確率も高いレーザーパルスが設計できることがわかった。最終的に、99.143%の遷移が可能であり、最適な終端時刻は T = 513.49 ps であった。一方、T(0) = 300 ps と設定した場合も、目的関数と終端時間がイテレーションごとに単調増加し、終端時刻を固定しない場合は、収束性が早く、遷移確率も高いレーザーパルスが設計できた。短い終端時間を予測値として計算した場合には、終端時刻拘束なしと終端時刻拘束ありの差は、より明らかである。この場合、最適な終端時刻は T = 322.16 ps であった(図 2 参照)。

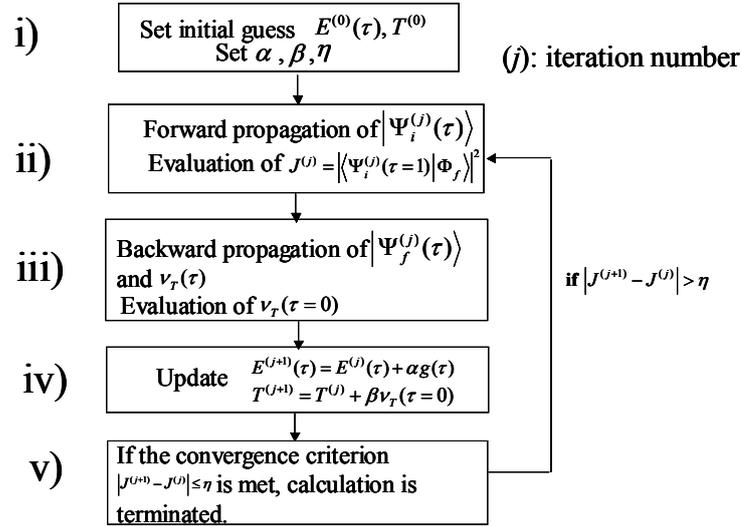


Figure 1: Flowchart of monotonically convergent Free-time Fixed-end Point Optimal Control Theory (OCT)

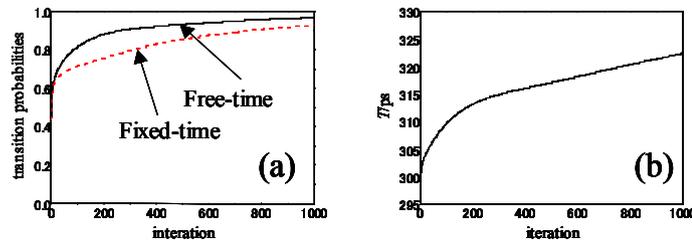


Figure 2: (a) Transition probability versus iteration number, and (b) temporal duration of the optimized laser pulse versus iteration number. The nominal  $T^{(0)}$  was set to be 300 ps. The qubit system is rotational states of NaCl-NaBr coupled by dipole-dipole interaction.

次に、散逸のある系の例として、Cu(100)面に吸着された CO 分子の振動状態を qubit と見なして、エンタングルメントダイナミクスの量子制御を行った。振動モードとしては、CO stretch、CO-surface stretch、frustrated translation を採用した。例として、ベル状態が散逸下でどのようなレーザーパルスによって保たれるかを調べた。そのメカニズムを数値的に調べることは重要であると考えられる。何故なら、将来的な目標である量子演算は、多 qubit から成り、他のヒルベルト空間でのユニタリー変換が行われている間に、ベル状態が保持されねばならない状況が起きうること、そして、エンタングルメントは散逸の影響に弱いことが指摘されていることなどによる。T(0) = 1000 fs、温度を 300K に設定した結果、初期予測時間 T(0)に比べて最適なレーザーの時間長が長くなった。遷移確率の時間発展を調べた結果、初期の 200fs の間に分離可能状態を生成し、最終時間でベル状態を再び生成することがわかった。レーザーパルスも、それらの時間領域で強度が大きくなった。前者のレーザーの成分は、単なるベル状態生成には存在しなかったしわ寄せとなるために、必要な時間長が長くなるという結果を得た(図 3 参照)。この予測は、終端時刻拘束ありの最適制御理論では不可能であったであろう。

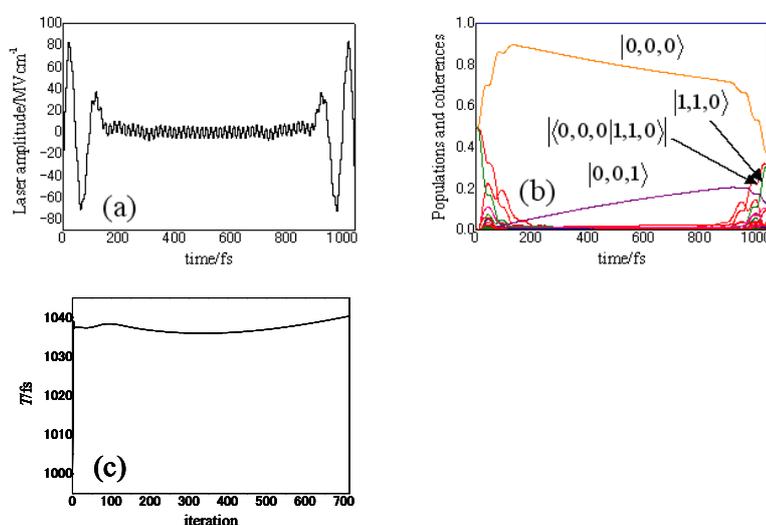


Figure 3:(a) Optimized laser pulse with  $\alpha$  and  $\beta$  being equal to  $-1.755 \times 10^9 \text{ Wcm}^{-2}$  and  $5.851 \times 10^2 \text{ fs}^2$ , respectively, (b) population transfer induced by the optimized laser pulse of panel (a), (c) temporal duration of the optimized laser pulse versus iteration number. The initial  $T^{(0)}$  was set to be 1000 fs. The temperature was 300 K. The target transition  $(|0,0,0\rangle + |1,1,0\rangle)/\sqrt{2} \rightarrow (|0,0,0\rangle + |1,1,0\rangle)/\sqrt{2}$  was optimized. The qubit system is CO/Cu(100).

何故なら、200fs 程度のしわ寄せは、初期予測時間長 1000fs からずれることに本質があり、終端時刻に拘束があれば、200fs 程度のしわ寄せは有り得ず、効率的なベル状態保持はわずかながら非効率的であったからである。最適終端時刻は 1040.56fs であり、遷移確率は 66.3430%であった。以上をまとめると、全ての研究者は、分子の内部状態を用いた量子演算のシミュレーションに、すでに確立した同じ終端時刻拘束ありの最適制御理論を用いているが、我々は、我々が世界に先駆けて構築した終端時刻拘束なしの最適制御理論を用いることによって、より効率の良いエンタングルメントダイナミクスや量子演算の制御を計算的にシミュレーションすることに成功した。これらの成果は、今後の量子演算やエンタングルメントダイナミクスなどのシミュレーションに留まらず、あらゆる分野における量子過程の制御に新たな指針を与えるものと期待される。また、新たな最適制御理論の構築自体も更に可能である。例えば、現在、量子演算に有用な、終端時刻拘束なしのマルチターゲット最適制御理論を構築し終わり、論文を投稿中である。また、シュレーディンガー方程式やマスター方程式などのような線形方程式とは異なる、非線形な TDDFT 法に発展させ、分子内の電子エンタングルメントを制御する最適レーザーパルスを設計する理論を構築し終え、プログラミング並びに計算中である。

## (2)研究成果の今後期待される効果

我々は、研究期間の過程で、制御という目標から、新たな終端時刻拘束なしの最適制御理論の構築に成功した。非常に単純なシュレーディンガー方程式、散逸の効果を取り入れた一般的なマスター方程式に従う系の理論から出発したが、量子系は、それらの方程式のみでなく、化学的にも興味のある TDDFT 方程式などで記述される場合も多数ある。従って、終端時刻拘束なしの最適制御理論は、それらの方程式へ発展させることも可能であり、新たな理論構築が可能であると見込まれる。我々が構築し、また、構築しつつある最適制御理論は、量子演算、エンタングルメントダイナミックスの制御に留まらず、一般的な物理的、化学的な現象の制御への展開も望まれ、様々な科学技術への貢献度は大きいと考えられる。

## 4.5 大槻(東北大)グループ

### (1)研究実施内容及び成果

分子内自由度と超短レーザーパルスとの相互作用を利用した量子演算をシミュレーション解析した. 具体的には, 量子最適制御・量子分子動力学法を使い, 分子の種々の自由度を利用した量子ビットに対し, ゲート操作精度, デコヒーレンス機構・抑制法を数値解析した. 以下, ①新規量子最適制御シミュレーション法の開発, ②最適制御シミュレーション法による分子量子演算の数値解析, ③論理演算の量子干渉実験への実装シミュレーション, ④パラ水素凝縮相にドープされた CO 分子の準自由回転運動の4つに分けて内容・成果を報告する.

#### ①新規最適制御シミュレーション法の開発

課題名にあるように, 被評価者の研究手法は量子最適制御シミュレーション法である. この CREST 課題を達成するために, 期間中に主に3つの新規開発・拡張を行った.

#### ①一般化最適制御シミュレーション法の開発

最適な動的デカップリング機構の解明に向けて, デコヒーレンス(非マルコフマスター方程式で記述)を陽にとりいれた一般化量子最適制御シミュレーション・アルゴリズムを開発した. 最適制御問題は, 与えられた運動方程式(すなわち拘束条件)の下, 制御目的を定量評価する目的汎関数を最大にする制御外場を設計する. ここでは, 系が非マルコフマスター方程式のような(非同次)微分・積分方程式に従う場合に, シミュレーションを拡張した. すなわち, この最適化問題において, 最適な外場を探索するための単調収束が保証されたアルゴリズムの存在を証明した. また, 数値的な有効性(精度・収束の早さなど)をモデル系を通して系統的に明らかにした.

#### ①デコヒーレンスに強いゲートパルス設計のための量子最適制御シミュレーション法の開発

レーザーパルスなどの外場でゲート操作を最適制御法に基づき数値設計することを考える. 従来は, ゲート操作を表す演算子と制御電場により実現される時間発展演算子に対し, 両者の(行列としての)重なり積分を最大にするように定式化されてきた. しかし, この定式化は, 時間発展演算子のユニタリ性を仮定しているために, デコヒーレンスが存在する場合は適用できない. ゲート操作を表す演算子と時間発展演算子の差の行列ノルムの最小化として定式化すれば可能だが, 有効な解法アルゴリズムが知られていなかった. 被評価者は, 行列ノルムの最大化として問題設定し直せば, 単調収束の保証されたシミュレーション・アルゴリズムが存在することを見出した. これにより, デコヒーレンスに強いゲートパルス設計を可能にした.

#### ①非共鳴最適制御シミュレーション法の開発

従来の最適制御シミュレーションはすべて共鳴遷移経路を選択するように定式化されていた. そのため, 2光子吸収やラマン遷移など非共鳴遷移を含んだ制御に関しては何も予測ができなかった. 被評価者は分極相互作用を通じた, 非線形な相互作用に着目し, 「人為的に対称に分割した電場」により問題を疑似線形化することで, 単調収束の保証された繰り返し計算アルゴリズムを見出した. 収束が達成されると「人為的に対称に分割した電場」は同一の電場に収束し, 「分割の人為性」は自動的に消滅する. 非共鳴量子最適制御シミュレーション法に関しては, フランスおよびドイツのグループとの開発競争になったが, 論文投稿日・受理日・発表日いずれにおいても, 被評価者が最初の報告を行うことができた(被評価者の論文掲載は Phys. Rev. A 誌に 2008 年 3 月, ドイツのグループは Phys. Rev. Lett. 誌に 2008 年 8 月, フランスのグループは Phys. Rev. A 誌に 2008 年 10 月). 更に, 定式化においても, 電場との相互作用が任意の多項式で表される場合を取り扱っており, アルゴリズムの一般性・汎用性は他グループより著しく高い.

このシミュレーション・アルゴリズムの解の探索精度は極めて高く, 8~9桁(最大値が1であるような最適化問題に対しては,  $10^{-8}$ ~ $10^{-9}$ の精度)に達することを HCN 分子の配向制御を通して報告した. 典型例として, 図1には, 繰り返しステップ数に対する目的関数の増加分(対数プロット)を示す. 図2には, (a) 得られた最適パルス, (b) その時の配向度(制御方向と分子軸のなす角  $\theta$  の余弦の期待値)の時間発展を示している. 制御目的時刻に高い配向度(0.94)を達成している. また, 最適パルス

は非対称な形をもつことが分かる. このようなパルスは倍波の重ね合わせで作ることができる.

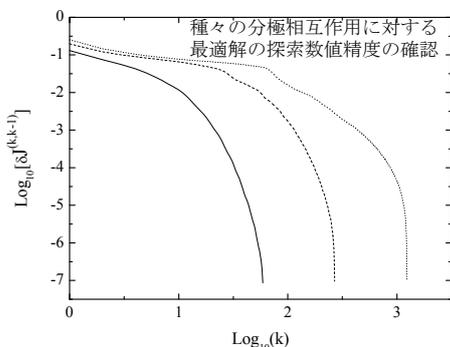


図 1

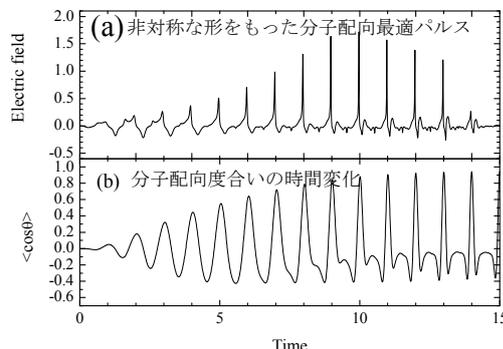


図 2

### ②最適制御シミュレーション法による分子量子演算の数値解析

分子内には時間スケールの異なる自由度があり, それらに由来する状態が多数存在する. まず, 量子ビット・量子ディットに割り当てた状態の選択的操作を目的に, ゲートパルスを最適制御シミュレーションで数値設計した. 着目したのは, 量子アルゴリズムの検算シミュレーションである. 「検算」とはいわゆるオラクル部分などを基本ゲートから構成せず, 単一操作パルスで実行する演算を意味する. 2~3量子ビット・量子ディットに対しデコヒーレンス(非マルコフマスター方程式で記述)有・無の条件下でシミュレーションを行った.

種々の目的を設定してシミュレーションを行った. シミュレーションには大森グループのターゲット分子であるヨウ素を用いている. ゲート操作には電子状態間遷移を利用している. 演算精度の評価には達成確率をそのまま用いた.

アルゴリズム名	自由度	量子ビット数	主目的
1. ドイチュ・ジョサ	振動	2	高精度の演算の可能性
2. グローバー	振動	2・3	量子ビット数依存性 デコヒーレンスの影響
3. ショア	振動・回転	3+ディット	異なった自由度の利用 ディットの導入

一例として2量子ビットを使ったグローバー・アルゴリズムの検算シミュレーションを図3(オラクル+反転パルス)および図4(ターゲット分布の時間発展)に示す. 2つの異なるターゲットいずれに対しても, 整形パルスにより高い確率でアルゴリズムが実行されていることが分かる.

それぞれのシミュレーションから得られた結果は以下の通りである.

- 99%以上の操作精度を達成すると10回程度の演算を行っても演算精度は損なわれない. ただし, 高精度の操作の実現のためには高度のパルス位相制御が必要である.
- 操作時間(パルス時間幅)を1ps一定にした場合, 量子ビット数増加(2→3)に伴い検算精度が大きく損なわれた. しかし, 操作時間(パルス時間幅)を3ps程度に長くすれば精度を回復することができる. 即ち, 量子ビットの増加に伴い, ゲートパルスにはより高いスペクトル選択性が要求される. デコヒーレンスが存在すると「量子ビットに見立てた準位以外への遷移」が誘起されるが, 振動量子ビットの波動関数の“形”自体のくずれは殆ど生じない.
- 振動量子ビットおよび回転量子ディットを使った演算は可能である. 運動周期の違いから, 両量子状態は殆ど独立に操作可能である. 但し, 回転状態を制御するためにはナノ秒パルスが必要である.

以上から, 「各運動の数周期程度の時間をかければ, 量子ビットだけを高精度に操作するゲートパルスが実現可能である」ことを数値的に明らかにできた. また, 「運動周期が大きく異なる自由度に

対しては同時・独立にゲート操作可能である」ことが分かった。ただし、総演算時間は最も遅い運動周期をもった自由度で決められてしまう。操作精度を保ったまま分子量子ビットの数を増やすと、一つ一つの演算時間が長くなる。

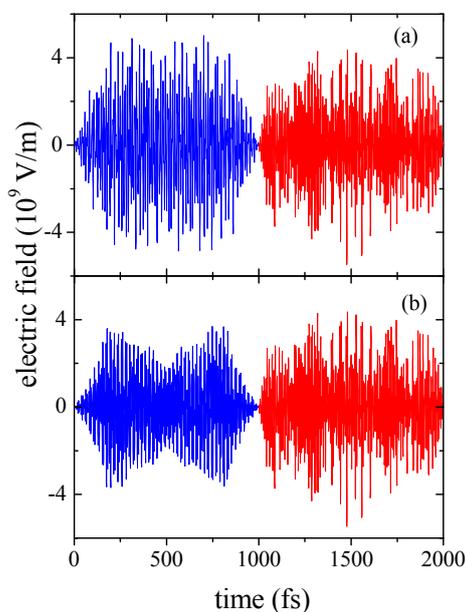


図 3

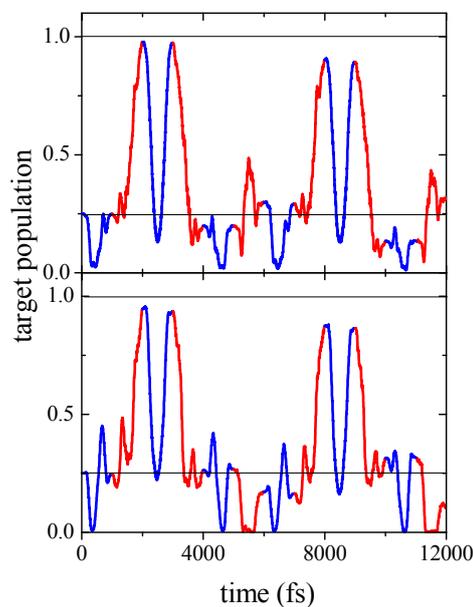


図 4

「総演算時間が最も遅い運動の数周期かかる」という問題の解決のため、新たに開発した非共鳴量子最適制御シミュレーション法(①⑦の方法)を適用した。その結果、分子の電子・振動・回転量子ビットを数ピコ秒以内のレーザーパルス(回転運動の1周期以内)で同時かつ高確率に制御できることを示すことができた(投稿準備中)。N<sub>2</sub>分子を使った整列制御の典型例を下に示す。興味深いのは、時間とともに偏光が変わる整形パルスを使うと制御が容易になる点である。レーザーパルスの伝搬方向をz軸とした場合の最適なx, y電場成分を図5に示す。図6にはその時の、(上)整列度合いの期待値、(下)ターゲットである振動重なり状態の時間変化をしめす。回転の(古典)1周期内で、両者とも高確率に制御されている。なお、偏光も含めた超短パルスの整形法は、Gerberグループの実験により既の実現・報告されている。

更に、分子整列のコヒーレントな保持機構を見出した。図7に(上)分子整列保持最適パルス、(中)整列度合いの期待値の時間変化、(下)主な回転状態の分布の時間発展を示す。最適パルスを見ると、静電場を矩形波で近似したようにも見える。もし静電場による誘起双極子相互作用であるならば、電場強度が大きいほど整列保持には有効である。図8にそのような例を示す。図8(上)では、図7のパルスよりもほぼ6倍振幅の大きい電場が使われている。しかし、下図からわかるように、整列は保たれず、激しい振動が誘起されていることが分かる。解析的なアプローチから、図7の最適パルスは、いわゆる「トンネリングのコヒーレント破壊」(トンネリングを抑制するコヒーレントな制御機構)と関連していることを見出している。本結果は、静電場による整列保持よりも1桁小さい電場強度で、整列が保持できることを示唆している。分子間双極子相互作用を利用したエンタングルメント生成への応用可能性も解析していく予定である。

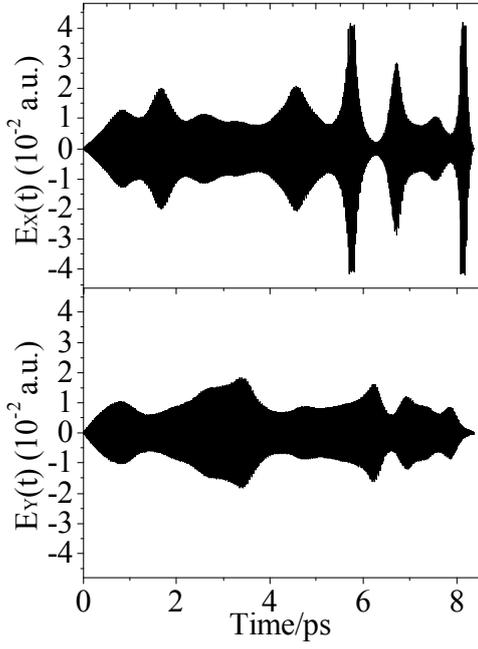


图 5

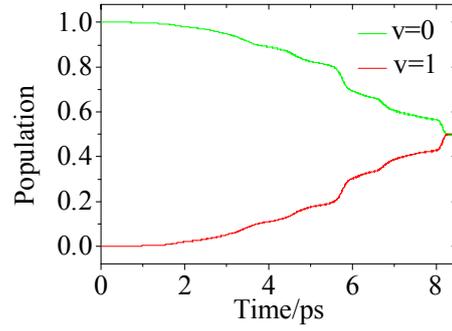
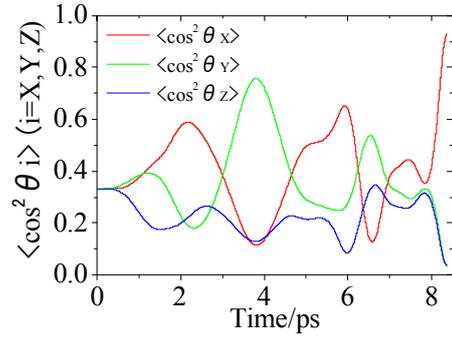


图 6

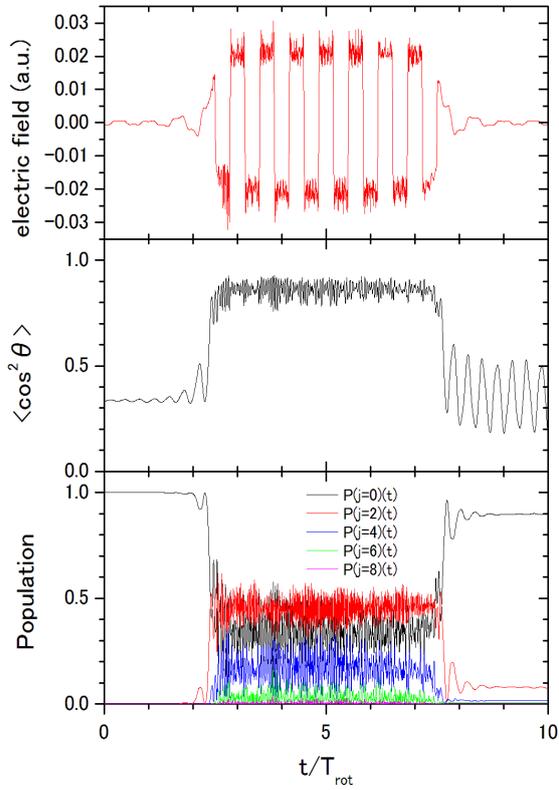


图 7

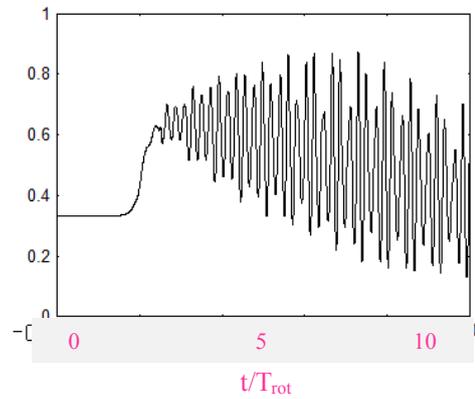
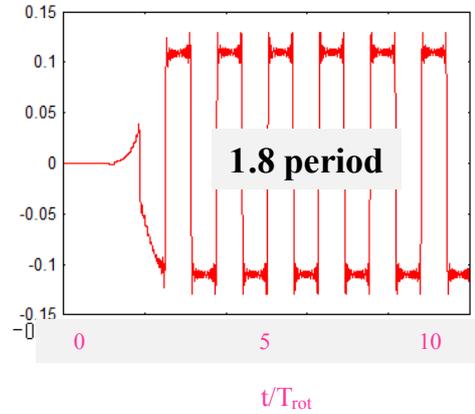


图 8

最適な動的デカップリング機構の解明に向けては、デコヒーレンス(非マルコフマスター方程式で記述)を陽にとりいれた一般化量子最適制御シミュレーションにより解析した(①⑦の方法). 有限のレーザー・エネルギー資源の下で、2つの制御達成を目的にシミュレーションを行った。1つ目はエントロピー増大の抑制(密度演算子の二乗の対角和の最大化)であり、時間とともに間隔幅を増していく $\pi$ 位相シフトパルス列が最適解であることを示すことができた(等間隔やランダム間隔ではない)。2つめは、自由時間発展の実現である。いかなる制御パルスも、位相シフトを導入してしまうため、最適解はゼロとなる。しかし、条件を緩めて、ある着目時間だけでのみ制御を達成すればよいことにすると、 $2\pi$ パルス列が最適解として求められた。系のデコヒーレンス時間、ゲート操作時間などの条件さえ合えば、分子系においても動的デカップリングパルスが有効に働く可能性を示している。

### ③論理演算の量子干渉実験への実装シミュレーション

分子の振動ポテンシャルの高い調和性に着目し、非定常基底による論理演算を解析し、量子干渉実験を通じた実装法をシミュレーションした。非定常状態を論理基底とみなすと、自由な時間発展を使って演算を実行できる。ただし、演算結果は非定常状態に書き込まれるため、入力書き込み、結果の読み出しに高度の分光技術が要求される。大森グループが開発したアト秒精度量子干渉計を使えばこの問題を克服できることに着目し、演算シグナルのシミュレーションを共同で行った。その結果、3ビットでの例(量子フーリエ変換, CNOT)では 98~99%以上の確率で演算を実行でき、かつ量子干渉測定により高感度検出で結果を読み出せることを示した。この演算は“サブルーチン”としての利用も期待される。

本提案は、分子固有状態を論理基底とみなす提案とは大きく異なる。すなわち、後者において実現できる量子演算は位相シフトのみであるため、整形パルス自身が演算を行っている。一方、我々の提案では、整形パルスが行うのは、入力の準備である。波束の自由時間発展は、その任意の入力に対してサブルーチンのように振る舞い(原理的に)任意の演算をおこなうことができる。

### ④パラ水素凝縮相にドープされた CO 分子の準自由回転運動

パラ水素量子凝縮相にドープされた CO 分子に関して、チームに基礎的な分光データを提供するため、経路積分分子動力学(PIMD)シミュレーションを行った。量子分子動力学計算には公開されたプログラムコードや商用プログラムがないため、独自開発を行った。パラ水素を質点とし、COを剛体と仮定する近似の下で、虚時間相関関数を数値計算し、それを解析接続することでCOの回転スペクトルを求めた。その結果、図9に示したポテンシャルの下で、COがパラ水素凝縮相中で準自由回転運動すること、COの回転定数が孤立分子の80%程度に低下することを明らかにした。この結果は、百瀬グループの分光測定データとほぼ一致しており、シグナルの帰属などに寄与することができた。

一方、回転定数が孤立分子の80%にも低下するのに、準自由回転を示す理由の解析を行った。最も可能性の高いのはCOとパラ水素のクラスター生成である。それを確かめるために、CO・パラ水素の重心間距離と角度の相関関数を計算した(座標の定義は図9中に示してある)。図10がその結果である。クラスターを生成しているならば、点またはある狭い領域内に集中した点で表されるはずである。ところが、角度には大きな広がりがみられ、少なくともクラスター生成が主因ではないことが分かる。機構を理解するために PIMD 法の次の点に着目する。虚時間経路積分では数学的に、パラ水素を空間的に広がった粒子群(ビーズ)の集合体として表す。この数学上の厳密な対応を、物理的な解釈にも適用できると考える。すると、パラ水素は粘性流体のように振る舞い、そのため CO がパラ水素凝縮相中を小さな回転定数で準自由回転運動すると理解できる。

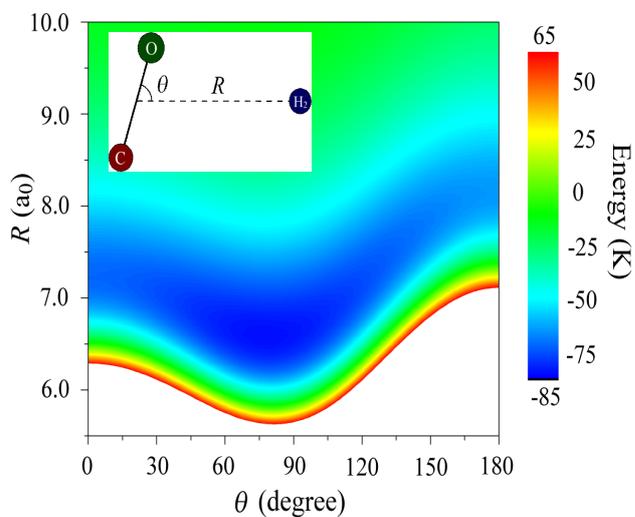


図 9

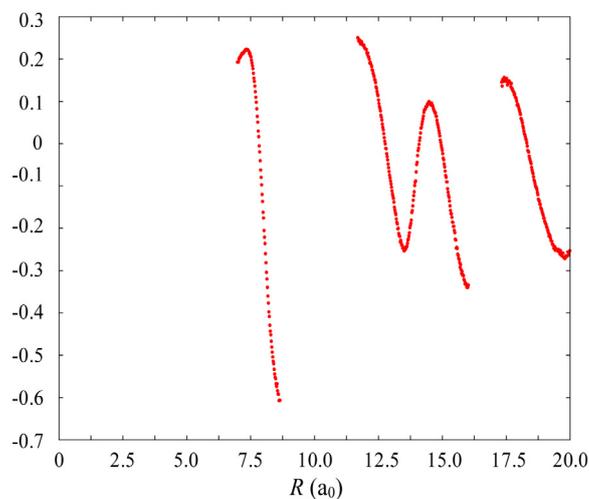


図 10

## (2)研究成果の今後期待される効果

量子最適制御シミュレーションは与えられたハミルトニアンの下で、波動関数の量子干渉を操作し、制御目的を達成するのに最適な外場を設計する第一原理法である。被評価者は CREST 研究課題を達成するために、量子最適制御シミュレーション法を大幅に拡張(非共鳴遷移の陽な取り込みなど)することに成功した。今後、種々の制御実験に対し、必要なスペックを半定量的に見積もる標準ツールとして、より一層利用されていくものと期待している。

## § 5 成果発表等

(1)原著論文発表 (国内(和文)誌 件、国際(欧文)誌 43 件)

- [1] T. Momose, and T.i Oka, " High-Resolution Stimulated Raman Gain Spectroscopy of Parahydrogen Crystals" , J. Low Temp. Phys., 139 (5-6) 515 (2005).
- [2] E.B. Gordon, T. Kumada, M. Ishiguro, Y. Aratono, T. Momose, N. Nakashima, " Doped Helium Crystals Growth and Study", J. Low Temp. Phys., 138 (3-4) 805 (2005).
- [3] S. Suzuki, K. Mishima, and K. Yamashita, "Ab initio study of optimal control of ammonia molecular vibrational wavepackets: towards molecular quantum computing", Chem. Phys. Lett. 410, 358 (2005).
- [4] Y. Ohtsuki, Simulating the Deutsch-Jozsa algorithm using vibrational states of I<sub>2</sub> excited by optimally designed gate pulse, Chem. Phys. Lett. 404, 126 (2005).
- [5] M. Abe, Y. Ohtsuki, Y. Fujimura, and W. Domcke, "Optimal control of ultrafast photoisomerization of retinal in rhodopsin via a conical intersection," J. Chem. Phys.123, 144508 (2005).
- [6] S. Kuma, M. N. Slipchenko, K. E. Kuyanov, T. Momose, and A. F. Vilesov, "Infrared spectra and intensities of the H<sub>2</sub>O and N<sub>2</sub> complexes in the range of the  $\nu_1$  and  $\nu_3$  bands of water" , J. Phys. Chem. 110 (33), 10046 (2006).
- [7] S. Kuma, M. N. Slipchenko, K. E. Kuyanov, T. Momose, and A. F. Vilesov, "Infrared spectra and intensities of the H<sub>2</sub>O and N<sub>2</sub> complexes in the range of the  $\nu_1$  and  $\nu_3$  bands of water" J. Phys. Chem. 110 (33), 10046 - 10052 (2006).
- [8] H. Katsuki, H. Chiba, B. Girard, C. Meier, and K. Ohmori, "Visualizing Picometric Quantum Ripples of Ultrafast Wave-Packet Interference", Science 311, 1589 (2006).
- [9] K. Ohmori, H. Katsuki, H. Chiba, M. Honda, Y. Hagihara, K. Fujiwara, Y. Sato and K. Ueda, "Real-Time Observation of Phase-Controlled Molecular Wave-Packet Interference", Phys. Rev. Lett. 96, 093002 (2006).
- [10] Y. Teranishi, Y. Ohtsuki, K. Hosaka, H. Chiba, H. Katsuki, and K. Ohmori, "Implementation of quantum gate operations in molecules with weak laser fields," J. Chem. Phys. 124, 11410 (9 pages) (2006).
- [11] M. Abe, Y. Ohtsuki, Y. Fujimura, Z. Lan, and W. Domcke, Geometric phase effects in the coherent control of the branching ration of photodissociation products of phenol, J. Chem. Phys. 124, 224316 (2006).
- [12] S. Beyvers, Y. Ohtsuki, and P. Saalfrank, Optimal control in a dissipative system: IR pulse excitation of CO/Cu(110), J. Chem. Phys. 124, 234706 (2006).
- [13] S. Kuma, M. N. Slipchenko, T. Momose, and A. F. Vilesov "Study of Complexes of Water and Ammonia Molecules in He Droplets", Chem. Phys. Lett. 439, 265-269 (2007).
- [14] M. Tsubouchi and T. Momose, " Femtosecond pulse shaping in the mid infrared by difference frequency generation" , J. Opt. Soc. Am. A. 24(8), 1886-1900 (2007).
- [15] H. Katsuki, K. Hosaka, H. Chiba and K. Ohmori, "READ and WRITE Amplitude and Phase Information by Using High-Precision Molecular Wave-Packet Interferometry", Phys. Rev. A 76,

- 013403 (2007).
- [16] K. Shioya, K. Mishima, and K. Yamashita, "Quantum computing using molecular vibrational and rotational modes", *Mol. Phys.* 105, 1283 (2007).
- [17] K. Mishima, K. Shioya, and K. Yamashita, "Generation and control of entanglement and arbitrary superposition states in molecular vibrational and rotational modes by using sequential chirped pulses", *Chem. Phys. Lett.* 442, 58 (2007).
- [18] Y. Ohtsuki, Y. Teranishi, P. Saalfrank, G. Tuninici, and H. Rabitz, Monotonically convergent algorithms for solving quantum optimal control problems described by an integro-differential equation of motion, *Phys. Rev. A.* 75, 033407 (2007).
- [19] Y. Ohtsuki, and Y. Fujimura, Optimal control of multi-photon isotope separation using ultra-short intense laser pulses: Density operator theory, *Chem. Phys.* 338, 285 (2007).
- [20] K. Mishima and K. Yamashita, "Partitioning of entangling interactions in terms of rotating wave approximation: An approach to the Bell state generation by laser fields", *Chem. Phys.* 342, 141 (2007)
- [21] Masaaki Tsubouchi and Takamasa Momose, "Simulation of Rovibrational Wave Packet Propagation Generated by Shaped Mid-Infrared Femtosecond Pulses." *Phys. Rev. A.* 77(2), 023405 (12 pages) (2008).
- [22] Yuki Miyamotoi, Mizuho Fushitani, Daisuke Ando and Takamasa Momose, "Nuclear Spin Conversion of Methane in Solid Parahydrogen." *J. Chem. Phys.* 128(11), 114502 (10 pages) (2008).
- [23] Masaaki Tsubouchi and Takamasa Momose, "Rovibrational Wave Packet Manipulation using Shaped Mid-Infrared Femtosecond Pulses Toward Quantum Computation 2: Optimization of Pulse Shape by Generic Algorithm." *Phys. Rev. A.* 77(5), 052326 (14 pages) (2008).
- [24] K. Mishima, K. Tokumo and K. Yamashita, "Quantum computing using molecular electronic and vibrational states", *Chem. Phys.* 343, 61 (2008).
- [25] K. Mishima and K. Yamashita, "Bell state generation of multi-level systems in the presence of complex entangling interactions", *Chem. Phys.* 352, 281 (2008).
- [26] K. Mishima and K. Yamashita, "Entanglement of angular momenta of atoms and molecules", *Int. J. Quantum Chem.* 108, 1352 (2008).
- [27] Masaaki Tsubouchi and Takamasa Momose, "Simulation of Rovibrational Wave Packet Propagation Generated by Shaped Mid-Infrared Femtosecond Pulses.", *Phys. Rev. A.* 77, 023405 (12 pages) (2008).
- [28] Y. Ohtsuki, and K. Nakagami, Monotonically convergent algorithms for solving quantum optimal control problems of a dynamical system nonlinearly interacting with a control, *Phys. Rev. A.* 77, 033414 (9 pages) (2008)
- [29] K. Nakagami, Y. Mizumoto, and Y. Ohtsuki, Optimal alignment control of a nonpolar molecule through nonresonant multiphoton transitions, *J. Chem. Phys.* 129, 194103 (9 pages) (2008).
- [30] H. Katsuki, H. Chiba, C. Meier, B. Girard, and K. Ohmori, "Actively Tailored Spatiotemporal Images of Quantum Interference on the Picometer and Femtosecond Scales," *Phys. Rev. Lett.* 102, 103602-1—103602-4 (2009).

- [31] Brian A. Tom, Siddhartha Bhasker, Yuki Miyamoto, Takamasa Momose, and Benjamin J. McCall, "Producing and Quantifying Enriched para-H<sub>2</sub>", Rev. Sci. Instru. 80(1), 016108 (3 pages) (2009).
- [32] Mario E. Fajardo and C. Michael Lindsay, and Takamasa Momose, "Crystal Field Theory Analysis of Rovibrational Spectra of Carbon Monoxide Monomers Isolated in Solid Parahydrogen", J. Chem. Phys. 130(24), 244508 (10 pages) (2009).
- [33] Masaaki Tsubouchi and Takamasa Momose, "Pulse-shaping and its characterization of mid-infrared femtosecond pulses: Toward coherent controls of molecules in the ground electronic states", Opt. Comm. 282(18), 3757-3764 (2009).
- [34] Masaaki Tsubouchi and Takamasa Momose, "A cross-correlation frequency-resolved optical gating for mid-infrared femtosecond laser pulses by a AgGaGeS<sub>4</sub> crystal", Opt. Lett. 34(16), 2447 - 2449 (2009).
- [35] K. Mishima and K. Yamashita, "Decoherence of intramolecular vibrational entanglement in polyatomic molecules", Int. J. Quant. Chem. [Hirao Special Issue] 109, 1827 (2009).
- [36] K. Mishima and K. Yamashita, "Quantum computing using rotational modes of two polar molecules", Chem. Phys. 361, 106 (2009).
- [37] K. Mishima and K. Yamashita, "Free-time and fixed end-point optimal control theory in quantum mechanics: application to entanglement generation", J. Chem. Phys. 130, 034108 (2009).
- [38] K. Mishima and K. Yamashita, "Free-time and fixed end-point optimal control theory in dissipative media: Application to entanglement generation and maintenance", J. Chem. Phys. 131, 014109 (2009).
- [39] H. Takahashi, K. Kato, H. Nakano, M. Kitajima, K. Ohmori, and K. G. Nakamura, "Optical control and mode selective excitation of coherent phonons in YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7- $\delta$</sub> ", Solid State Com. 149, 1955-1957 (2009).
- [40] Y. Ohtsuki, Simulating quantum search algorithm using vibronic states of I<sub>2</sub> manipulated by optimally designed gate pulses, New J. Phys. in press.
- [41] M. Tsubouchi, A. Khramov, and T. Momose, "Rovibrational wavepacket manipulation using shaped mid infrared femtosecond pulses", Phys. Rev. in press.
- [42] K. Mishima and K. Yamashita, "Quantum computing using vibrational and rotational modes of the open-shell <sup>14</sup>N<sup>16</sup>O molecule", Chem. Phys. (in press).
- [43] N. Toda, A. Mizoguchi and H. Kanamori, "Spectral line shape profile of rovibrational transitions of CO embedded in p-H<sub>2</sub> crystals studied by high-resolution IR diode laser spectroscopy". J. Chem. Phys. (submitted).

(2) その他の著作物(総説、書籍など)

- [1] K. Ohmori, "Development of ultrahigh-precision coherent control and its applications", Proceedings of the Japan Academy, Ser. B 84, 167-175 (2008).
- [2] 香月浩之, 大森賢治, "アト秒精度の波束干渉制御", レーザー研究 36, 31-36 (2008).
- [3] 大森賢治, "コヒーレンスの極限と制御ー量子のさざ波を光で制御するー", 化学と工業 61,

108-111 (2008).

- [4] K. Ohmori, "Wave-packet and coherent control dynamics", *Annu. Rev. Phys. Chem.* 60, 487-511 (2009).
- [5] 香月浩之, "アト秒精度の分子波束干渉制御", *応用物理* 2009年2月号 (accepted)
- [6] 三嶋謙二・山下晃一, 「分子内部状態を用いた量子演算とエンタングルメント生成ダイナミクス」、*光化学*, 40巻、1号、2009年4月.
- [7] 大森賢治, "アト秒精度で制御する - アト秒ピコメートル精度の時空間コヒーレント制御", *化学と工業* 7月号, 796-799 (2009)
- [8] 大森賢治, "量子のさざ波を光で制御する", *学術の動向* 3月号, 26-29 (2009)
- [9] 香月浩之, "アト秒精度の分子波束干渉制御", *応用物理* 78, 136-140 (2009)
- [10] K. Mishima and K. Yamashita, "Quantum Computing and Entanglement Generation using Intramolecular Degrees of Freedom" in *Advances of Multi-Photon Processes and Spectroscopy* (vol. 19), World Scientific, Singapore, (in press).

(3)国際学会発表及び主要な国内学会発表

① 招待講演 (国内会議 35 件、国際会議 69 件)

- [1] Takamasa Momose, "High-resolution spectroscopy of Cold Molecules", Oral Presentation, Invited, Symposium Kanazawa 2004, New Development in High-resolution Molecular Spectroscopic Studies, November 11- 13, (2004), Kanazawa, Japan.
- [2] Hideto Kanamori, "High-resolution spectroscopic studies of vibrational states in the triplet potential of acetylene", Oral Presentation, Invited, Symposium Kanazawa 2004, New Development in High-resolution Molecular Spectroscopic Studies, November 11- 13, (2004), Kanazawa, Japan.
- [3] Kenji Ohmori (Institute for Molecular Science, The Graduate University for Advanced Studies (SOKENDAI), JST CREST), "High-Precision Coherent Control of Molecules", The Fourth Asian Photochemistry Conference, Taipei (Taiwan), January 2005.
- [4] Kenji Ohmori (Institute for Molecular Science, The Graduate University for Advanced Studies (SOKENDAI), JST CREST), "Phase Sensitive Memory in Molecular Wave Packets; READ and WRITE", International Seminar on Atomic Processes in Intense Laser Fields and Related Many-Body Phenomena, Hayama (Japan), January 2005.
- [5] 大森賢治 (分子科学研究所, 総研大, 科学技術振興機構 CREST), 「分子の内部量子状態を用いた光位相敏感メモリー」, 強光子場科学懇談会, 浜松, 2005年1月.
- [6] Y. Ohtsuki (Tohoku Univ., JST-CREST) Molecular quantum computation using shaped intense laser pulses, International Symposium on Atoms, Molecules, and Clusters in Intense Laser Fields 2, Univ. Tokyo, Tokyo, Jan. 24-25, (2005).
- [7] 金森英人, 冷たい分子, 第12回原子衝突セミナー 3/28-30 2005
- [8] Kenji Ohmori (Institute for Molecular Science, The Graduate University for Advanced Studies (SOKENDAI), JST CREST), "Phase Sensitive Memory in Molecular Wave Packets; READ and

WRITE”, 11<sup>th</sup> Japan-Korea Joint Symposium on Frontiers in Molecular Science, Okazaki (Japan), March 2005.

- [9] 大森賢治(分子科学研究所, 総研大, 科学技術振興機構 CREST), 「分子の内部量子状態を用いた光位相敏感メモリー」, 理研・分子研合同シンポジウム「エクストリームフォトニクス研究」, 和光, 2005年4月.
- [10] Takamasa Momose, (UBC, Tokyo Institute of Technology, JST-CREST) "Relaxation Dynamics of Molecules in Quantum Crystals", CAP (The Canadian Association of Physicists) Congress, June 5-8 (2005), Vancouver, Canada.
- [11] Takamasa Momose, (UBC, Tokyo Institute of Technology, JST-CREST) "Relaxation Dynamics of Molecules in Quantum Crystals", MATRIX 2005, July 24-29 (2005), Madeira, Portugal.
- [12] Y. Ohtsuki (Tohoku Univ., JST-CREST) Quantum optimal control of molecular dynamics: From photochemical processes to quantum computation, Gordon Research Conference on Quantum Control of Light and Matter, Colby College, Maine USA, July 31-August 5 (2005).
- [13] 大森賢治(分子科学研究所, 総研大, 科学技術振興機構 CREST), 「分子振動波束の時間位置分解観測と精密量子制御のためのイメージング表示」, 自然科学研究機構連携研究プロジェクト「Imaging Science」第1回シンポジウム, 岡崎, 2005年8月.
- [14] 大槻幸義(東北大・JST-CREST) 量子最適制御シミュレーション: 生体光化学反応から量子コンピュータまで, 理研シンポジウム「生体分子と溶媒和ダイナミクス」, IPC生産性交流センター, 葉山町湘南村, 11月9日-11月10日(2005年).
- [15] Kenji Ohmori (Institute for Molecular Science, The Graduate University for Advanced Studies (SOKENDAI), JST CREST), “Visualizing Picometric Quantum Ripples of Ultrafast Wave-Packet Interference”, International Symposium on Ultrafast Intense Laser Science 4, Hawaii (USA), December 2005.
- [16] Kenji Ohmori (Institute for Molecular Science, The Graduate University for Advanced Studies (SOKENDAI), JST CREST), “Ultrahigh-Precision Coherent Control of Molecular Wave Packets”, Pacificchem 2005, Hawaii (USA), December 2005.
- [17] Hiroyuki Katsuki (Institute for Molecular Science, The Graduate University for Advanced Studies (SOKENDAI), JST CREST), “High-Precision Coherent Control of Molecular Wave-Packet Interference”, APS Satellite meeting “Ultrafast Chemistry and Physics 2006”, Philadelphia(USA), March 2006.
- [18] 大槻幸義(東北大・JST-CREST) 凝縮相における分子コヒーレントダイナミクスの最適制御シミュレーション, 分子科学研究所研究会「凝縮系のコヒーレント制御」, 3月2日-3月3日(2006年).
- [19] Y. Ohtsuki (Tohoku Univ., JST-CREST) Molecular quantum computation using ultrashort shaped laser pulses, Ultrafast Chemistry and Physics 2006 (American Physical Society Satellite Meeting), Temple University, Philadelphia USA, March 17 (2006).
- [20] Kenji Ohmori (Institute for Molecular Science, The Graduate University for Advanced Studies (SOKENDAI), JST CREST), “Observation and Control of Picometric Quantum Ripples in a Molecule”, 5th International Symposium for Ultrafast Surface Dynamics, Abashiri, Japan, May 2006.

- [21] 金森英人、クールな原子分子の科学:基底状態分子の冷却と捕捉 分子科学研究会シンポジウム 2006/6/2
- [22] 大槻幸義(東北大・JST-CREST)量子最適制御シミュレーション:生体内化学反応制御から分子量子コンピュータまで, 第3回京都大学福井センターセミナー, 福井謙一記念研究センター, 京都, 6月26日(2006年).
- [23] Takamasa Momose, "Spectroscopy and Dynamics of Molecules in Quantum Fluids and Solids ", Invited, The University of Alberta, June 29, 2006, Edmonton, Canada
- [24] Kenji Ohmori (Institute for Molecular Science, The Graduate University for Advanced Studies (SOKENDAI), JST CREST), "Visualizing and Controlling Picometric Quantum Ripples in Molecules", The 1st Canada-Japan SRO-COAST Symposium on Ultrafast Intense Laser Science, Tokyo, Japan, July 2006.
- [25] 大森賢治(分子科学研究所, 総研大, 科学技術振興機構 CREST), 「アト秒ピコメートル精度の時空間コヒーレント制御」, 分子分光学夏期セミナー, 九重, 2006年7月.
- [26] Y. Ohtsuki, M. Abe, Y. Fujimura, Z. Lan, W. Domcke, (Tohoku Univ., JST-CREST, T. U. Munich) Optimal control of nonadiabatic photochemical processes induced by conical intersections, CCP6 Workshop on coherent Control of Molecular Systems, Birmingham, UK, July 3-5 (2006) .
- [27] Takamasa Momose, "Chemical Reactions in quantum matrices. What can we learn?", Invited, International Conference on Low Temperature Chemistry, August 27 - September 1, 2006, Chernogolovka, Russia.
- [28] Kenji Ohmori (Institute for Molecular Science, The Graduate University for Advanced Studies (SOKENDAI), JST CREST), "Visualizing and Controlling Picometric Quantum Ripples in Molecules", 66th Okazaki Conference "Soft X-Ray Raman Spectroscopy and Related Phenomena", Okazaki, Japan, August 2006.
- [29] Takamasa Momose, "Spectroscopy of Hydrogen clusters : Non-rigidity of small parahydrogen clusters at 0.4 K", Invited, Cryo Crystals 2006, September 3 - 8, 2006, Kharkov, Ukraine.
- [30] 大森賢治(分子科学研究所, 総研大, 科学技術振興機構 CREST), 「量子のさざ波を光で制御する」, 立花隆+自然科学研究機構シンポジウム 爆発する光科学の世界—量子から生命体まで—, 東京, 2006年9月.
- [31] K. Mishima, K. Shioya, and K. Yamashita (The University of Tokyo, JST-CREST), "Optimal control of wavepackets dynamics of molecular internal degrees of freedom: Toward quantum computation", International Symposium on Interplay of Theory and Experiment in Molecular Spectroscopy and Dynamics, Prague, Czech Republic, 2006/9/15.
- [32] 金森英人、実験室での冷たい分子と超精密分光計測、 学術講演会「化学と惑星科学のあいだのクロス・トーク II」, 神戸大学, 2006年10月
- [33] Takamasa Momose, "Physics and Chemistry of Molecules in Quantum Solids and Fluids", Invited, 1st CLAMS Seminar, Center for Laser Atomic and Molecular Sciences, The University of New Brunswick, November 2, 2006, Fredericton, Canada

- [34] Hideto Kanamori, Cold molecules obtained by He buffer gas cooling and Stark velocity filter, UBC Physics & Astronomy AMO Seminars, UBC, Canada. 2006.Nov,
- [35] 香月浩之(分子科学研究所, 総研大, 科学技術振興機構CREST), 「アト秒精度のコヒーレント制御 ~孤立系から量子散逸系へ」, 第4回エクストリームフォトニクス研究シンポジウム, 蒲郡, 2006年11月.
- [36] 大槻幸義(東北大・JST-CREST) デコヒーレンス抑制に向けた数値シミュレーション解析, 第4回エクストリームフォトニクス研究会「エクストリームフォトニクス」, 蒲生市, 11月9日-10日(2006年).
- [37] 大森賢治(分子科学研究所, 総研大, 科学技術振興機構CREST), 「アト秒ピコメートル精度の時空間コヒーレント制御」, 第17回光物性研究会, 大阪, 2006年12月.
- [38] 大森賢治(分子科学研究所, 総研大, 科学技術振興機構CREST), 「アト秒ピコメートル精度の時空間コヒーレント制御」, 原子衝突研究協会設立30周年記念式典, 東京, 2006年12月.
- [39] Hiroyuki Katsuki (Institute for Molecular Science, The Graduate University for Advanced Studies (SOKENDAI), JST CREST), "Visualizing and Controlling Ultrafast Wave-Packet Interference in Diatomic Molecules", 7<sup>th</sup> Asian International Seminar on Atomic and Molecular Physics, Madras, India, December 2006.
- [40] Takamasa Momose, "Non-rigidity of Hydrogen Clusters at 0.4 K", Invited, 37th Winter Colloquium on The Physics of Quantum Electronics, January 2 - 6, 2007, Snowbird, Utah, USA
- [41] Takamasa Momose, " Spectroscopy and Dynamics of Molecules in Solid Parahydrogen Crystals and in He Droplets ", Invited, 2007 Western Spectroscopy Association, January 31 - February 2, 2007, Asilomar Conference Center, Pacific Grove, USA
- [42] Hiroyuki Katsuki (Institute for Molecular Science, The Graduate University for Advanced Studies (SOKENDAI), JST CREST), "Designing molecular wave-packets by attosecond precision interferometry", Canada-Japan Bilateral Meeting in Ultrafast Intense Laser Science, Québec, Canada, March 2007.
- [43] Hiroyuki Katsuki (Institute for Molecular Science, The Graduate University for Advanced Studies (SOKENDAI), JST CREST), "Weaving Picometric Quantum Carpets by Ultrafast Wave-Packet Interferometry", Atomic and Molecular Dynamics: Observation and Control, Toulouse, France, March 27, 2007.
- [44] Hiroyuki Katsuki (Institute for Molecular Science, The Graduate University for Advanced Studies (SOKENDAI), JST CREST), "Visualizing and Controlling Ultrafast Vibrational Wave-Packet Interference", 11<sup>th</sup> East Asian Workshop on Chemical Dynamics, Tokyo, Japan, May 8, 2007.
- [45] 金森英人、光コムに位相安定化した半導体レーザーを用いた新しい高分解能分子分光学、城西大学化学セミナー、埼玉、2007年5月12日
- [46] Kenji Ohmori (Institute for Molecular Science, The Graduate University for Advanced Studies (SOKENDAI), JST CREST), " Some applications of ultrahigh-precision coherent control", COAST One-day Symposium on Ultrafast Intense Laser Science 3, Tokyo, Japan , May 17, 2007.
- [47] Kenji Ohmori (Institute for Molecular Science, The Graduate University for Advanced Studies (SOKENDAI), JST CREST), "Visualizing and Controlling Picometric Quantum Ripples in Molecules", International Symposium on Molecular Science of Ultrafast Electronic Dynamics,

Sendai, Japan, May 18-19, 2007.

- [48] Takamasa Momose, " Spectroscopy of Hydrogen Clusters: Non-rigidity of Large Parahydrogen Clusters at Low Temperatures", APS/DAMOP2007, June 5-9 2007, Calgary, Canada
- [49] J.C. Delagnes, K. Hosaka, H. Katsuki, H. Chiba, K. Ohmori, K. Watanabe, Y. Matsumoto, K. Ishioka, M. Kitajima, K.G.Nakamura(Institute for Molecular Science, The Graduate University for Advanced Studies (SOKENDAI), JST CREST, National Institute for Materials Science, Tokyo Institute of Technology), "Coherent Optical Phonons Opticla control of phonon in bismuth", 3rd Asian Symposium on Intense Laser Science, Kuala Lumpur, Malaysia, July 5, 2007.
- [50] Hiroyuki Katsuki (Institute for Molecular Science, The Graduate University for Advanced Studies (SOKENDAI), JST CREST), "Visualizing and Controlling Quantum Interference in Molecules", 日韓分子科学合同シンポジウム「光分子科学の最前線と将来」, Jeju, Korea, July 6, 2007.
- [51] Hideto Kanamori, "Applications of phase-locked diode lasers with an optical frequency comb to ultra high-resolution spectroscopy and quantum computing of molecules. Internal Conference on Tunable Diode Laser Spectroscopy. L-2, Reims, France, 9-13. July, 2007.
- [52] Takamasa Momose, " High-resolution Matrix Isolation Spectroscopy of Molecules in Solid Parahydrogen", July 15 - 20,2007. Bates College, Maine, USA.
- [53] Kenji Ohmori (Institute for Molecular Science, The Graduate University for Advanced Studies (SOKENDAI), JST CREST), "Visualizing and Controlling Picometric Quantum Ripples in Molecules", XXV International Conference on the Physics of Electronic and Atomic Collisions (ICPEAC), Freiburg, Germany, July 25-31, 2007.
- [54] Kenji Ohmori (Institute for Molecular Science, The Graduate University for Advanced Studies (SOKENDAI), JST CREST), "Visualizing and Controlling Picometric Quantum Ripples in Molecules", Workshop on Coherent Control of Ultracold Molecular Processes, Vancouver, Canada, August 1-4, 2007.
- [55] Kenji Ohmori (Institute for Molecular Science, The Graduate University for Advanced Studies (SOKENDAI), JST CREST), "Visualizing and Controlling Picometric Quantum Ripples in Molecules", Gordon Research Conference on "Quantum Control of Light and Matter", Newport, USA, August 12-17, 2007.
- [56] Kenji Ohmori (Institute for Molecular Science, The Graduate University for Advanced Studies (SOKENDAI), JST CREST), "Visualizing and Controlling Picometric Quantum Ripples in Molecules", The Brijuni 2007 Conference on Laser Pulse Shaping and Coherent Control of Molecules, Brijuni, Croatia, August 26-31, 2007.
- [57] Hiroyuki Katsuki and Kenji Ohmori (Institute for Molecular Science, The Graduate University for Advanced Studies (SOKENDAI), JST CREST), "Visualizing and Controlling Picometric Quantum Ripples in Molecules", CLEO Pacific Rim, Seoul, Korea, August 27, 2007.
- [58] 金森英人、気相 mK 分子の生成、日本物理学会年次大会シンポジウム 22aRH-1、北海道大学 2007 年 9 月 22 日
- [59] Takamsa Momose, "An IR cavity decelerator and trap for cold molecules", Asian CORE Symposium on Advanced Laser Spectroscopy, September 24-27, 2007, Kobe, Japan
- [60] Hideto Kanamori, "Cold molecules obtained by He buffer gas cooling and Stark velocity filter".

JSPS Asian CORE program: Symposium on Advanced Laser Spectroscopy. L-12, Kobe Univ. Japan, 24-27 Sep.

- [61] Kouichi Hosaka (Institute for Molecular Science, JST CREST), "Quantum Fourier transform with high-precision molecular wave-packet interferometry", Asian CORE Symposium on Advanced Laser Spectroscopy, Kobe, Japan, September 26, 2007.
- [62] Takamasa Momose, "Spectroscopy and Dynamics of Molecules in Solid Parahydrogen," University of Southern California, October 8, 2007. Los Angeles, USA.
- [63] 香月浩之 (分子科学研究所, 総研大, 科学技術振興機構 CREST), 「アト秒精度の波束干渉を用いた振動波束の制御と観測」物性研短期研究会「短波長コヒーレント光と物質中のコヒーレンスの生成・消滅」, 東大物性研, 柏, 2007年11月27日
- [64] 香月浩之 (分子科学研究所, 総研大, 科学技術振興機構 CREST), 「アト秒精度の波束干渉を用いた振動波束の制御と観測」日本分光学会先端レーザー分光部会, 東京大学、本郷, 2007年12月7日
- [65] Kenji Ohmori (Institute for Molecular Science, The Graduate University for Advanced Studies (SOKENDAI), JST CREST), "Tailoring Picometric Quantum Carpets by Controlling Ultrafast Wave-Packet Interference", 38th Winter Colloquium on The Physics of Quantum Electronics, Snowbird, USA, January 8, 2008
- [66] Hiroyuki Katsuki (Institute for Molecular Science, The Graduate University for Advanced Studies (SOKENDAI), JST CREST), "Influence of Strong Laser Pulses on the Amplitudes and Phases of Vibrational Wave Packets; Model Study of Decoherence" 5th Asian Conference on Ultrafast Phenomena, National university of Singapore, January 8, 2008
- [67] Kenji Ohmori (Institute for Molecular Science, The Graduate University for Advanced Studies (SOKENDAI), JST CREST), "Quantum Coherence in Molecules; Observation and Control", COAST/CORAL Winter School on Advanced Laser Science, Echigo Yuzawa, Japan, January, 2008
- [68] Kenji Ohmori (Institute for Molecular Science, The Graduate University for Advanced Studies (SOKENDAI), JST CREST), "Visualizing and Controlling Picometric Quantum Ripples in Molecules", The 6th Asia Pacific Laser Symposium, Nagoya, Japan, January, 2008
- [69] 大森賢治 (分子科学研究所, 総研大, 科学技術振興機構 CREST), 「分子の中のピコメートルスケールの量子さざ波を可視化して制御する」, 物質・材料研究機構ナノ計測センター - 東京工業大学応用セラミックス研究所シンポジウム「凝縮系の超高速現象とコヒーレント制御」, 東京, 2008年2月.
- [70] 穂坂綱一 (分子科学研究所, 科学技術振興機構 CREST), 「分子振動波束の量子ホログラフィーと量子フーリエ変換への応用」, 物質・材料研究機構ナノ計測センター - 東京工業大学応用セラミックス研究所シンポジウム「凝縮系の超高速現象とコヒーレント制御」, 東京, 2008年2月.
- [71] 千葉 寿, 香月浩之, 穂坂綱一, Jean-Christophe Delagnes, Robert J. Levis, 大森賢治 (分子科学研究所, 総研大, 科学技術振興機構 CREST, Temple Univ.), 「分子波束を用いた量子フーリエ変換のための高安定光干渉計の開発」, 物質・材料研究機構ナノ計測センター & 東京工業大学応用セラミック研究所合同シンポジウム, 東京 2008年2月
- [72] Kenji Ohmori (Institute for Molecular Science, The Graduate University for Advanced Studies (SOKENDAI), JST CREST), "Visualizing and Controlling Picometric Quantum Ripples in

Molecules", Norman Hascoe Distinguished Lecture Series, University of Connecticut, Storrs, USA, March, 2008

- [73] Takamasa Momose, "Spectroscopy of large hydrogen clusters in He and H<sub>2</sub> droplets", APS March Meeting, March 10 - 14, 2008, New Orleans, Louisiana, USA
- [74] 大森賢治(分子科学研究所, 総研大, 科学技術振興機構 CREST), 「アト秒ピコメートル精度の時空間コヒーレント制御」, 第2回分子科学会シンポジウム, 大阪, 2008年5月23日.
- [75] 百瀬孝昌「冷却した分子の新しい物理と化学」, 招待、2008研究交歓会、山田科学技術振興財団、2008年5月24日、虎ノ門パストラルホテル、東京
- [76] 大森賢治(分子科学研究所, 総研大, 科学技術振興機構 CREST), 「量子さざ波: 量子の波を光で制御する」, 名古屋大学グローバル COE プログラム「分子性機能物質科学の国際教育研究拠点形成」化学系セミナー, 名古屋, 2008年6月10日.
- [77] 大森賢治(分子科学研究所, 総研大, 科学技術振興機構 CREST), 「アト秒ピコメートル精度の時空間コヒーレント制御」, ERATO 上田マクロ量子プロジェクト研究戦略セミナー, 東京, 2008年7月3日.
- [78] 大森賢治(分子科学研究所, 総研大, 科学技術振興機構 CREST), 「量子さざ波: 量子の波を光で制御する」, 池上研究会(先端科学セミナー), 名古屋, 2008年8月9日.
- [79] 大森賢治(分子科学研究所, 総研大, 科学技術振興機構 CREST), 「量子さざ波をアト秒精度で制御する」, 2008年秋季 第69回応用物理学会学術講演会, 春日井, 2008年9月3日.
- [80] 大森賢治(分子科学研究所, 総研大, 科学技術振興機構 CREST), "Visualizing and Controlling Picometric Quantum Ripples in Molecules," 第四回量子情報未来テーマ開拓研究会, 南城, 2008年9月5日.
- [81] Masaaki Tsubouchi and Takamasa Momose, "Rovibrational Wavepacket Manipulation by Shaped Femtosecond Pulses: Simulation and Experiments", Oral, The 24th Annual Symposium on Chemical Physics, November 7 - 9, 2008, Waterloo, ON, Croatia.
- [82] Kenji Ohmori (Institute for Molecular Science, The Graduate University for Advanced Studies (SOKENDAI), JST CREST), "Ultrafast Coherent Control of Picometric Quantum Ripples in Molecules," 8th Symposium on Extreme Photonics "Ultrafast Meets Ultracold," Gamagori, Japan, November 11, 2008
- [83] 大森賢治(分子科学研究所, 総研大, 科学技術振興機構 CREST), 「アト秒ピコメートル精度の時空間コヒーレント制御」, 平成20年度(社)日本分光学会年次講演会, 仙台, 2008年11月19日.
- [84] Takamasa Momose, " Spectroscopy and Dynamics of Molecules in Quantum Condensed Phases", Invited, National Chiao Tung University, Nov. 21, 2008,
- [85] Takamasa Momose, "Chemistry and Physics of Hydrogen and Related Compounds", Invited, Kyoto University, Nov 26, 2008, Kyoto, Japan
- [86] 百瀬孝昌、「超低温分子と分光学」集中講義、2008年12月1-2日、九州大学、博多
- [87] Takamasa Momose, "Physics and Chemistry of Ultracold Molecules, Present Status and Future

- Prospects", Invited, December 2nd, 2008, Kyushu Univ, Hakata, Japan.
- [88] Takamasa Momose, "Cold Molecules and Spectroscopy", Invited, December 3rd, 2008, Okayama Univ, Okayama, Japan.
- [89] Kenji Ohmori, "Quantum Ripples in Molecules; Observation and Control," Sokendai Asian Winter School "Molecular Sciences on Different Space-Time Scales," Okazaki, Japan, December 11, 2008
- [90] 大森賢治, 「アト秒ピコメートル精度の時空間コヒーレント制御」, 応用物理学会・量子エレクトロニクス研究会「アト秒・高強度レーザー科学の可能性を探る ー多方面への応用に向けてー」, 軽井沢, 2009年1月8~9日.
- [91] Takamasa Momose, "Control of rovibrational states of molecules by coherent light", Frontiers of Materials, Photo- and Theoretical Molecular Sciencesm, 3rd Winter School of Asian CORE program, January 16 - 18, 2009, IAMS, Taipei, Taiwan
- [92] Y. Ohtsuki, Monotonically convergent algorithms for solving quantum optimal control problems in chemistry and physics, IMA Workshop on Coherence, Control, and Dissipation, Institute for Mathematics and its Applications (IMA), Univ. Minnesota, Minneapolis, USA, Mar. 1-6 (2009).
- [93] 大森賢治, 「アト秒ピコメートル精度の時空間コヒーレント制御」, 物性研短期研究会「第2回極限コヒーレント光科学ワークショップ」, 柏, 2009年3月2-3日.
- [94] Takamasa Momose, "Quantum Condensed Phases as Matrices for High Resolution Spectroscopy", Invited, 4th Ringberg meeting on Molecular Physics 2009, March 18 - 21, 2009, Ringberg Castle, Germany
- [95] Takamasa Momose, "Spectroscopy of Large Hydrogen Clusters at Low Temperatures", Invited, Quantum Fluid Clusters (QFC-7), Max Planck Institute for the Physics of Complex Systems, May 24 - 27, 2009, Dresden, Germany.
- [96] Kenji Ohmori, "Spatiotemporal Coherent Control with Picometer and Attosecond Precisions," ACS 237th National Meeting, Salt Lake City, USA, March 25, 2009
- [97] Kenji Ohmori, "Spatiotemporal Coherent Control with Picometer and Attosecond Precision," MIT-Harvard Center for Ultracold Atoms Special Seminar, Harvard University, Cambridge, MA, USA, July 6, 2009.
- [98] Kenji Ohmori, "Spatiotemporal Coherent Control with Picometer and Attosecond Precisions," The Third International Conference on the Science and Technology for Advanced Ceramics (STAC-3), Yokohama, Japan, June 16-18, 2009.
- [99] Kenji Ohmori, "Spatiotemporal Coherent Control with Picometer and Attosecond Precisions," The Center for Advanced Photonics Research Laser Science Seminar Series, Temple University, Philadelphia, PA, USA, June 26, 2009.
- [100] Kenji Ohmori, "Spatiotemporal Coherent Control with Picometer and Attosecond Precision," Gordon Research Conference on "Atomic Physics," Tilton, MA, USA, June 28 - July 3, 2009.

- [101]大森賢治,「量子さざ波 - 量子の波を光で制御する -」,東京大学大学院理学系研究科理学部化学教室 第 1344 会雑誌会セミナー, 東京, 2009 年 7 月 23 日.
- [102]大森賢治,「原子のさざ波と不思議な量子の世界」,国立大学法人岩手大学技術部工学系技術室特別講演会, 盛岡, 2009 年 8 月 28 日.
- [103]Kenji Ohmori, “Spatiotemporal Coherent Control with Picometer and Attosecond Precision ~ from ultracold atoms to bulk solid,” Oregon Center for Optics Annual Retreat 2009, McMinnville, OR, USA, September 17-18, 2009.
- [104]Takamasa Momose, “Molecules at Very Low Temperature; What is interesting, and how we can make them.”, Invited, University of Richmond, Oct 16, 2009, VA, USA.

② 口頭発表 (国内会議 73 件、国際会議 15 件)

- [1] 香月浩之, 千葉寿, Bertrand Girard, Christoph Meier, 大森賢治(分子科学研究所, 総研大, 科学技術振興機構 CREST, Univ. Paul Sabatier), “位相ロックダブルパルスを用いた振動波束制御”, 春季 第 52 回応用物理学関係連合講演会, さいたま, 2005 年 3 月.
- [2] 金森英人, 奥田泰壮, 関口貴郎, 辻秀伸, シュタルク効果を用いた低速分子線装置の製作 日本物理学会 25aYA-5 千葉, 2005 3/23-6
- [3] 大槻幸義(東北大院理, JST-CREST)ドイチュ・ジョサアルゴリズムのレーザー最適制御シミュレーション, 日本物理学会第60回年次大会, 野田市, 3月24日-27日(2005年).
- [4] 大槻幸義, 寺西慶哲(東北大院理・JST-CREST)「最適制御法による分子への量子アルゴリズム実装シミュレーション」第9回理論化学討論会(京都)5月17日-19日(2005年).
- [5] 香月浩之, 千葉寿, Bertrand Girard, Christoph Meier, 大森賢治(分子科学研究所, 総研大, 科学技術振興機構 CREST, Univ. Paul Sabatier), “ヨウ素分子の振動波束干渉の時間位置分解観測”, 分子総合構造討論会, 東京, 2005 年 9 月
- [6] 香月浩之, 穂坂綱一, 千葉寿, Christoph Meier, Bertrand Girard, 大森賢治(分子科学研究所, 総研大, 科学技術振興機構 CREST, Univ. Paul Sabatier), “二原子分子の振動波束干渉を用いた位相振幅情報処理”, 分子構造総合討論会, 東京, 2005 年9月
- [7] 寺西慶哲, 大槻幸義(東北大院理・JST-CREST), 大森賢治(分子研・JST-CREST)「分子と弱い場を用いた量子フーリエ変換」平成17年度化学系学協会東北大会(東北大学川内キャンパス)9月23日-25日(2005年).
- [8] 寺西慶哲, 大槻幸義(東北大院理・JST-CREST), 大森賢治(分子研・JST-CREST)「分子と弱い場を用いた量子ゲート操作」分子構造総合討論会(タワーホール船堀, 東京都江戸川区)9月27日-30日(2005年).
- [9] 大槻幸義, 寺西慶哲(東北大院理・JST-CREST)「分子を使った量子演算の最適制御シミュレーション」第13回量子情報技術研究会(東北大学電気通信研究所)11月24日-25日(2005年).

- [10] Yuki Yoshi Ohtsuki, Yoshiaki Teranishi (Tohoku Univ. & JST-CREST) 「Simulating quantum algorithms using molecular qubits operated by optimally designed gate pulses」 Pacificchem 2005 (ハワイ, ホノルル) 12 月 15 日 - 20 日 (2005 年).
- [11] Takamasa Momose, Masaaki Tsubouchi, and Yuki Miyamoto, "Femtosecond pulse shaping in the mid infrared region using a Dazzler", oral, APS (American Physical Society) meeting, March 13-17 (2006) Baltimore, USA
- [12] Susumu Kuma, Mikhail N. Slipchenko, Kirill Kuyanov, Takamasa Momose and Andrey F. Vilesov "Infrared spectra and intensities of H<sub>2</sub>O-N<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O-O<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>O-Ar complexes in superfluid He droplets", oral, APS (American Physical Society) meeting, March 13-17 (2006) Baltimore, USA
- [13] Hiroyuki Katsuki, Kouichi Hosaka, Hisashi Chiba, Kenji Ohmori (Institute for Molecular Science, The Graduate University for Advanced Studies (SOKENDAI), JST CREST), "High-Precision Coherent Control of Molecular Wave Packets", APS March meeting, Baltimore(USA), March 2006.
- [14] Yuki Yoshi Ohtsuki (Tohoku Univ. & JST-CREST) 「Molecular quantum computation by using ultrashort intense laser pulses under the influence of non-Markovian dissipation」 APS March Meeting 2006 (Baltimore, MD) 3 月 13 日 - 17 日 (2006 年).
- [15] K. Mishima and K. Yamashita (The University of Tokyo, JST-CREST), "Bell state generation in the presence of complicated entangling interactions", 2006 APS March Meeting, Baltimore, 2006/3/15.
- [16] 寺西慶哲、大槻幸義(東北大院理・JST-CREST)「振動回転の自由度を利用した量子演算のためのパルス設計」日本化学会第 86 春季年会(日本大学理工学部船橋キャンパス)3 月 27 日 - 30 日 (2006 年).
- [17] 安部真由美(東北大院理), 大槻幸義(東北大院理, JST-CREST), 藤村勇一(東北大院理), Zhenggang Lan, Wolfgang Domcke(ミュンヘン工科大)「円錐交差を通じた光化学ダイナミクス の最適制御シミュレーション」日本化学会第 86 春季年会(日本大学理工学部船橋キャンパス)3 月 27 日 - 30 日 (2006 年).
- [18] 香月浩之, 穂坂綱一, 千葉寿, Christoph Meier, Bertrand Girard, 大森賢治(分子科学研究所, 総研大, Univ. Paul Sabatier, 科学技術振興機構CREST), 「位相ロックダブルパルスで制御された振動波束干渉の時空間イメージング」, 化学反応討論会2006, 岡崎, 2006年5月.
- [19] 福田浩司、金森英人 光コムに位相安定化したレーザー光による分極の位相測定、日本分光学会・分子分光研究会 2006/5/12-13
- [20] Y. Ohtsuki (Tohoku Univ., JST-CREST), Simulating quantum algorithms using molecular qubits, The ICQC 2006 Stellite Symposium in Sendai, Matsushima, May 16-19 (2006).
- [21] Susumu Kuma, Mikhail N. Slipchenko, Kirill E. Kuyanov, Takamasa Momose, and Andrey F. Vilesov, "Infrared Spectra and Intensities of Water Complexes with Nitrogen, Oxygen and Argon in Helium Droplets." Oral, 61st International Symposium on Molecular Spectroscopy June 19 - 23, 2006, Columbus Ohio.
- [22] Susumu Kuma, Mikhail N. Slipchenko, Kirill E. Kuyanov, Takamasa Momose, and Andrey F. Vilesov, "Infrared Spectra and Intensities of Water-Ammonia Complexes in Helium Droplets" Oral, 61st International Symposium on Molecular Spectroscopy June 19 - 23, 2006, Columbus

Ohio.

- [23] Susumu Kuma, Haruka Goto, Takamasa Momose, and Andrey F. Vilesov, "Spectroscopy of Large van der Waals Clusters in Helium Droplets" Oral, 61st International Symposium on Molecular Spectroscopy June 19 - 23, 2006, Columbus Ohio.
- [24] Y. Ohtsuki (Tohoku Univ., JST-CREST), Simulating quantum algorithms using molecular degrees of freedom manipulated by optimally designed laser pulses, Symposium on Quantum Technologies, Cambridge Univ., Cambridge, UK Aug. 29 - Sep. 2, (2006).
- [25] 香月浩之, 大森賢治(分子科学研究所, 総研大, 科学技術振興機構CREST), 「アト秒ピコメートル精度の時空間コヒーレント制御」, 特定領域研究「強レーザー光子場における分子制御」研究成果報告会, 東京, 2006年9月.
- [26] 香月浩之, 穂坂綱一, 千葉寿, Christoph Meier, Bertrand Girard, 大森賢治(分子科学研究所, 総研大, Univ. Paul Sabatier, 科学技術振興機構CREST), 「フェムト秒ピコメートル精度の波束干渉デザイン」, 分子構造総合討論会2006, 静岡, 2006年9月.
- [27] 穂坂 綱一, 島田 紘行, 千葉 寿, 香月 浩之, 寺西 慶哲, 大槻 幸義, 大森 賢治(分子科学研究所, 総研大, 東北大, 科学技術振興機構CREST), 「分子の振動固有状態を用いた量子ゲート操作」, 分子構造総合討論会2006, 静岡, 2006年9月.
- [28] Delagnes Jean-Christophe, 穂坂 綱一, 香月 浩之, 千葉 寿, 大森 賢治, 渡邊 一也, 松本 吉泰, 石岡 邦江, 北島 正弘, 中村 一隆(分子科学研究所, 総研大, 物材機構, 東工大, 科学技術振興機構CREST), 「Optical Control of Coherent Phonon in Bismuth」, 分子構造総合討論会2006, 静岡, 2006年9月.
- [29] 大槻幸義(東北大院理, JST-CREST), 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, 分子構造総合討論会, 静岡, 9月20日—24日(2006年).
- [30] 寺西慶哲, 大槻幸義(東北大院理, JST-CREST), 振動回転エンタングルメントを利用した量子演算, 分子構造総合討論会, 静岡, 9月20日—24日(2006年).
- [31] 大槻幸義, 寺西慶哲, P. Saalfrank, G. Turinici, H. Rabitz(東北大院理, JST-CREST, Potsdam Univ., Paris Univ., Princeton Univ.), 量子・古典最適制御問題に対する高精度数値計算アルゴリズムの開発, 日本物理学会, 千葉大学(千葉), 9月23日—26日(2006年).
- [32] 大槻幸義(東北大院理, JST-CREST), 最適パルスと分子振動状態を使った量子データベース検索シミュレーション, 日本物理学会, 千葉大学(千葉), 9月23日—26日(2006年).
- [33] 寺西慶哲, 大槻幸義(東北大院理, JST-CREST), 分子の振動回転エンタングルメントを利用した因数分解, 日本物理学会, 千葉大学(千葉), 9月23日—26日(2006年).
- [34] 寺西慶哲, 大槻幸義, 穂坂綱一, 千葉寿, 香月浩之, 大森賢治(東北大院理, JST-CREST, 分子研, 総研大), 分子波束の位相変化を用いた量子ゲート操作, 日本物理学会, 千葉大学(千葉), 9月23日—26日(2006年).
- [35] 大槻幸義(東北大院理, JST-CREST), デコヒーレンス抑制機構解析のための最適制御シミュレーション法の開発, QIT, 京都, 11月21日—22日(2006年).
- [36] 大森賢治(分子科学研究所, 総研大, 科学技術振興機構 CREST), "Spatiotemporal Coherent

Control with Attosecond and Picometer Precisions”, 2006 CREST 量子情報ワークショップ, 箱根, 2006年12月.

- [37] 田地和喜、金森英人、極低温分子の実現へ向けた He バッファガス冷却による低速分子源の開発、日本物理学会、鹿児島、2007年3月18-21日
- [38] 福田浩司、酒井俊明、金森英人「光コムに位相安定化した複数のレーザー光源の開発と量子演算への応用」、物理学会 19aXK-9、鹿児島大学、2007年 3月18-21日
- [39] 大槻幸義(東北大院理, JST-CREST), デコヒーレンス抑制パルスの最適設計シミュレーション, 日本物理学会, 鹿児島大学(鹿児島)3月18日—21日(2007年).
- [40] 寺西慶哲, 大槻幸義(東北大院理, JST-CREST), 経路積分セントロイド法を用いたパラ水素固体中の分子動力学シミュレーション, 日本物理学会, 鹿児島大学(鹿児島)3月18日—21日(2007年).
- [41] 大槻幸義, 坂井健太郎, 藤村勇一(東北大院理, JST-CREST), 同位体分離パルスの最適設計, 日本化学会第87回春季年会, 関西大学(大阪)3月25日—28日(2007年).
- [42] 寺西慶哲, 大槻幸義(東北大院理, JST-CREST), パラ水素固体に補足された原子・分子の量子ダイナミクス, 日本化学会第87回春季年会, 関西大学(大阪)3月25日—28日(2007年).
- [43] 塩屋厚作(東大院工)、三嶋謙二(東大院工、JST-CREST)、山下晃一(東大院工、JST-CREST) “分子の振動・回転量子ビットを用いた量子コンピューティング”, 日本化学会第87回春季年会、関西大学千里山キャンパス、2007/3/25-2007/3/28
- [44] 大槻幸義(東北大院理, JST-CREST), 最適制御シミュレーションを使ったデコヒーレンス抑制機構の解析, 第10回理論化学討論会(名古屋), 5月14日—16日(2007年).
- [45] 酒井俊明、福田浩司、金森英人、「分子を用いた量子演算に向けたマイクロ波二重共鳴分光の研究」日本分光学会高分解能分子分光シンポジウム、東京理科大、2007年5月25-26日
- [46] 福田浩司、斉藤一哉、金森英人、「光コムに位相安定化した複数のレーザー光源の開発と分子分光への応用」日本分光学会高分解能分子分光シンポジウム、東京理科大、2007年5月25-26日
- [47] Daisuke Ando, Susumu Kuma, Masaaki Tsubouchi, and Takamasa Momose, "Spectroscopy of Cold Molecules Produced by Velocity Filtering", 62nd International Symposium on Molecular Spectroscopy, June 18-22, 2007, Columbus Ohio.
- [48] Brian Tom, Siddhartha Bhasker, Yuki Miyamoto, Takamasa Momose, and Benjamin McCall, "The Index of Refraction of Solid Hydrogen", 62nd International Symposium on Molecular Spectroscopy, June 18-22, 2007, Columbus Ohio.
- [49] 坪内雅明、百瀬孝昌、中赤外フェムト秒レーザー光の波形整形とその振動回転波束制御への応用、第1回分子科学討論会、2007年9月17日—20日、東北大学、仙台
- [50] 大槻幸義(東北大院理, JST-CREST), 非線形・非共鳴相互作用を取り入れた量子最適制御シミュレーション法の開発, 第1回分子科学討論会, 東北大学(仙台), 9月17日—20日(2007年).

- [51] 穂坂綱一, 島田紘行, 千葉 寿, 香月浩之, 寺西慶哲, 大槻幸義, 大森賢治 (分子研, 総研大, 東北大院理, JST-CREST), ヨウ素分子の振動波束を用いた最適フーリエ変換実験, 9月17日-20日 (2007年) 第1回分子科学討論会, 東北大学 (仙台).
- [52] 穂坂綱一, 島田紘行, 千葉寿, 香月浩之, 寺西慶哲, 大槻幸義, 大森賢治 (分子科学研究所, 総研大, 科学技術振興機構 CREST, 東北大), 「ヨウ素分子の振動波束を用いた量子フーリエ変換実験」, 第1回分子科学討論会, 仙台, 2007年9月17日-20日
- [53] 安藤大介, 久間晋, 坪内雅明, 百瀬孝昌, 六重極電場を用いた低速分子線の発生とその分光, 第1回分子科学討論会, 口頭, 2007年9月17日-20日, 東北大学, 仙台
- [54] 坪内雅明, 百瀬孝昌, 中赤外フェムト秒レーザー光の波形整形とその振動回転波束制御への応用, 第1回分子科学討論会, 口頭, 2007年9月17日-20日, 東北大学, 仙台
- [55] 大槻幸義 (東北大院理, JST-CREST), デコヒーレンス抑制パルスの最適設計シミュレーション2, 物理学会第62回年次大会, 北海道大学 (札幌), 9月21日-24日 (2007年).
- [56] 水本義彦, 寺西慶哲, 大槻幸義 (東北大院理, JST-CREST), パラ水素クラスタに捕捉された分子の量子動力学シミュレーション, 物理学会第62回年次大会, 北海道大学 (札幌), 9月21日-24日 (2007年).
- [57] 久間晋, 安藤大介, 坪内雅明, 百瀬孝昌, 赤外定在波を用いた新しい分子冷却法, 日本物理学会第62回年次大会, 口頭, 2007年9月21日-24日, 北海道大学, 札幌
- [58] 坪内雅明, 百瀬孝昌, 中赤外フェムト秒レーザー光の波形制御に基づいた量子計算基盤技術の開発, 日本物理学会第62回年次大会, 口頭, 2007年9月21日-24日, 北海道大学, 札幌
- [59] 大森賢治 (分子科学研究所, 総研大, 科学技術振興機構 CREST), 「分子の振動固有状態を用いた情報処理」, 2007 CREST 量子情報ワークショップ, 熱海, 2007年12月.
- [60] 水本義彦, 寺西慶哲, 大槻幸義 (東北大院理, JST-CREST), パラ水素クラスタに捕捉されたフッ化水素分子の回転デコヒーレンスに現れる環境体の量子効果, 物理学会第63回年次大会, 近畿大学 (東大阪), 2008年3月22日-26日
- [61] 大槻幸義, 中上和幸 (東北大院理, JST-CREST), 非共鳴量子最適制御法の開発, 物理学会第63回年次大会, 近畿大学 (東大阪市) 3月22日-26日 (2008年).
- [62] 中上和幸, 水本義彦, 大槻幸義 (東北大院理, JST-CREST), 非共鳴レーザーを用いた無極性分子整列保持の最適制御シミュレーション, 物理学会第63回年次大会, 近畿大学 (東大阪市) 3月22日-26日 (2008年).
- [63] 大槻幸義, 中上和幸 (東北大院理, JST-CREST), 誘起双極子を取り込んだレーザー最適制御法の開発, 日本化学会第88回春季年会, 立教大学 (東京), 3月26日-30日 (2008年).
- [64] 水本義彦, 寺西慶哲, 大槻幸義 (東北大院理, JST-CREST), ドープされたフッ化水素分子の回転運動に現れるパラ水素クラスタの量子特性, 日本化学会第88回春季年会, 立教大学 (東京), 3月26日-30日 (2008年).

- [65] 中上和幸, 水本義彦, 大槻幸義(東北大院理, JST-CREST), 非共鳴レーザーを用いた N2 分子整列保持の最適制御シミュレーション, 日本化学会第 88 回春季年会, 立教大学(東京), 3 月 26 日—30 日(2008 年).
- [66] 福田浩司, 酒井俊明, 笠井啓晃, 金森英人(東工大院理工), 光コムを用いた広帯域  $\Lambda$  型二重共鳴による量子位相操作, 分子分光研究会 神戸 May 16-17 2008
- [67] 戸田直也, 溝口麻雄, 金森英人(東工大院理工), 固体パラ水素中に捕捉した CO の振動回転線の線幅と周波数シフトの温度依存性, 分子分光研究会 神戸 May 16-17 2008
- [68] 三嶋謙二(東大院工, JST-CREST), 山下晃一(東大院工, JST-CREST)「分子内部状態を用いたエンタングルメント生成と量子演算」, 第 11 回理論化学討論会, 慶應義塾大学理工学部矢上キャンパス, 2008/5/22 - 2008/5/24
- [69] 中上和幸, 水本義彦, 大槻幸義(東北大院理, JST-CREST), 非共鳴レーザーによる窒素分子整列の並列化最適制御シミュレーション, 第 11 回理論化学討論会, 慶應義塾大学(横浜), 5 月 22 日—24 日(2008 年).
- [70] 大槻幸義, 中上和幸(東北大院理, JST-CREST), 最適レーザーパルスを用いた分子整列制御における非マルコフ緩和効果, 日本物理学会 2008 年秋季大会, 岩手大学(盛岡), 9 月 20 日—23 日(2008 年).
- [71] 中上和幸, 水本義彦, 大槻幸義(東北大院理, JST-CREST), 並列化最適制御シミュレーションにより数値設計された振動・回転状態を利用する無極性分子整列パルス, 日本物理学会 2008 年秋季大会, 岩手大学(盛岡), 9 月 20 日—23 日(2008 年).
- [72] 水本義彦, 大槻幸義(東北大院理, JST-CREST), パラ水素クラスタにドープされた CO 分子の回転ダイナミクスの経路積分分子動力学シミュレーション, 日本物理学会 2008 年秋季大会, 岩手大学(盛岡), 9 月 20 日—23 日(2008 年).
- [73] 水本義彦, 大槻幸義(東北大院理, JST-CREST), パラ水素クラスタによる捕捉 CO 分子回転への影響の経路積分分子動力学シミュレーション, 第 2 回分子科学討論会, 福岡国際会議場(福岡), 9 月 24 日—27 日(2008 年).
- [74] 香月浩之, 後藤悠, J. Ch. Delagnes, 千葉寿, 大森賢治,(分子科学研究所, 総研大, 科学技術振興機構 CREST), “高強度近赤外フェムト秒パルスを用いた分子振動波束の振幅位相制御”, 第 2 回分子科学討論会, 福岡国際会議場, 福岡, 2008 年 9 月 25 日
- [75] Kenji Mishima and Koichi Yamashita (The University of Tokyo, JST-CREST), “Free-time and Fixed End-Point Optimal Control Theory in Quantum Mechanics: Application to Entanglement Generation”, 2009 APS March Meeting, Pittsburgh, 2009/3/18.
- [76] 大槻幸義(東北大院理, JST-CREST) デコヒーレンスに強い最適ゲートパルスの設計法, 日本化学会第 89 春季年会, 日本大学, 船橋市, 2009 年 3 月 27 日—30 日.
- [77] 水本義彦, 大槻幸義(東北大院理, JST-CREST) パラ水素クラスタに捕捉された CO 分子の準自由回転機構, 日本化学会第 89 春季年会, 日本大学, 船橋市, 2009 年 3 月 27 日—30 日.
- [78] 中上和幸, 大槻幸義(東北大院理, JST-CREST) 振動回転遷移を用いた最適分子整列制御に対する散逸効果, 日本化学会第 89 春季年会, 日本大学, 船橋市, 2009 年 3 月 27 日—30 日.

- [79] 阿部弘哉, 中上和幸, 大槻幸義, 河野裕彦(東北大理, 東北大院理, JST-CREST) 整形偏光パルスを用いた直線分子の最適整列制御, 日本化学会第89春季年会, 日本大学, 船橋市, 2009年3月27日-30日.
- [80] 香月浩之, 後藤愁, 千葉寿, 大森賢治(分子科学研究所, 総研大, 科学技術振興機構CREST), 「高強度赤外パルスを用いた波束干渉制御 ―デコヒーレンスのモデル研究」, 日本化学会年会, 日本大学船橋キャンパス, 2009年3月28日.
- [81] 三嶋謙二、山下晃一 (東大院工、JST-CREST), ”終端時刻拘束なしの最適制御理論:エンタングルメント生成への応用”, 第56回応用物理学関連連合講演会、筑波大学筑波キャンパス、2009/4/2.
- [82] Eric Vyskocil, Susumu KUma, and Takamasa Momose, ”Cold Pulsed Molecular Bemas of CaF and BaF”, Oral, APS/DAMOP, May 19 – 23, 2009, Cahrlottesville, USA
- [83] 三嶋謙二、山下晃一 (東大院工、JST-CREST), ”散逸系における終端時刻拘束なしの最適制御理論”, 第12回理論化学討論会、東京大学本郷キャンパス武田先端知ビル武田ホール、2009/5/30.
- [84] 坪内雅明、百瀬孝昌, “Experimental details of rovibrational wave packet manipulation and detection of molecules in para-hydrogen matrix”, 口頭、化学反応討論会、6月1日-3日、2009年、大宮ソニックシティ、埼玉
- [85] 大槻幸義(東北大院理, JST-CREST) 「量子最適制御シミュレーション法の開発と分子科学への応用」第38回制御理論シンポジウム, 大阪市, 2009年9月14日~16日
- [86] 後藤悠, 香月浩之, 千葉寿, 大槻幸義, 大森賢治(総合研究大学院大学, 分子科学研究所, 科学技術振興機構CREST, 岩手大学, 東北大学), 「高強度近赤外パルスを用いた分子振動波束操作」, 第3回分子科学討論会, 名古屋, 2009年9月24日.
- [87] 大槻幸義(東北大院理, JST-CREST) 「デコヒーレンスに強いゲートパルス設計法の開発と実装シミュレーション」日本物理学会2009年秋季大会, 熊本大学黒髪キャンパス(2009年9月25日~9月28日).
- [88] 阿部弘哉, 中上和幸, 大槻幸義(東北大院理, JST-CREST) 「分子の振動回転波束を制御する最適偏光パルス設計」日本物理学会2009年秋季大会, 熊本大学黒髪キャンパス(2009年9月25日~9月28日).

③ ポスター発表 (国内会議 72件、国際会議 31件)

- [1] Hiroyuki Katsuki, Hisashi Chiba, Christoph Meier, Bertrand Girard, and Kenji Ohmori (Institute for Molecular Science, The Graduate University for Advanced Studies (SOKENDAI), JST CREST, Univ. Paul Sabatier), "Time and Space Resolved Observation of Molecular Wave Packet Interference", International Symposium on Atoms, Molecules, and Clusters in Intense Laser Fields 2, Tokyo (Japan), January 2005.
- [2] K. Mishima and K. Yamashita (The University of Tokyo, JST-CREST), "Entanglement of vibrational and rotational states of molecules", Gordon conference on quantum information science, California, 2005/2/26.
- [3] Y. Ohtsuki (Tohoku Univ. JST-CREST) Simulating the Deutsch-Jozsa algorithm using vibronic

- states manipulated by optimally designed laser pulses, Gordon Research Conference on Quantum Information science, Ventura, CA USA, Feb. 27- Mar. 4 (2005).
- [4] K. Mishima and K. Yamashita (The University of Tokyo, JST-CREST), “Theoretical study on entanglement of molecular vibrational and rotational modes”, 第9回理論化学討論会、京都、2005/5/17.
- [5] 香月浩之, 千葉 寿, C. Meier, B. Girard, 大森 賢治(分子科学研究所, 総研大, 科学技術振興機構 CREST, Univ. Paul Sabatier), “ヨウ素分子の内部量子状態を用いた光位相敏感メモリー”, 化学反応討論会, 大阪, 2005年6月
- [6] 香月浩之, 千葉 寿, C. Meier, B. Girard, 大森 賢治(分子科学研究所, 総研大, 科学技術振興機構 CREST, Univ. Paul Sabatier), “ヨウ素分子の振動量子状態を用いた光位相敏感メモリー”, AMO 討論会, 和光, 2005年6月
- [7] 大槻幸義, 寺西慶哲(東北大院理・JST-CREST)「最適制御法による分子へのグローバルアルゴリズム実装シミュレーション」原子・分子・光科学(AMO)討論会(理研・和光)6月18日-19日(2005年).
- [8] Yoshiaki Teranishi, Yukiyooshi Ohtsuki (Tohoku Univ. & JST-CREST), Kenji Ohmori, and Hiroyuki Katsuki (IMS & JST-CREST) 「Quantum algorithms implemented with molecule and optimally designed laser pulses」第2回原子・分子・光科学(AMO)討論会(理研・和光)6月18日-19日(2005年).
- [9] K. Mishima and K. Yamashita (The University of Tokyo, JST-CREST), “Classification of entangling interactions in terms of rotating wave approximation”, Gordon conference on quantum control of light and matter, Boston, 2005/7/31.
- [10] Yoshiaki Teranishi, Yukiyooshi Ohtsuki (Tohoku Univ. & JST-CREST), Kenji Ohmori, and Hiroyuki Katsuki (IMS & JST-CREST) 「Quantum algorithms implemented with molecule and optimally designed laser pulses」高知量子情報サマースクール(高知工科大学)8月31日-9月10日(2005年).
- [11] 溝口麻雄, 戸田直也, 金森英人, 宮本祐樹, 安藤大介, 百瀬孝昌、固体パラ水素結晶中の分子のミリ波・サブミリ波分光、分子構造討論会 3P126 2005.9.27-30
- [12] 千葉寿, 香月 浩之, 穂坂 綱一, Robert J. Levis, 大森 賢治(分子科学研究所, 科学技術振興機構 CREST, 総研大, 米テンプル大学), “空間光変調器を用いたアト秒精度の光干渉計の開発”, 機器・分析技術研究会, 盛岡, 2005年9月
- [13] 千葉寿, 香月 浩之, 穂坂 綱一, Robert J. Levis, 大森 賢治(分子科学研究所, 科学技術振興機構 CREST, 総研大, 米テンプル大学), “空間光変調器を用いたアト秒精度の光干渉計の開発”, 分子構造総合討論会, 東京, 2005年9月
- [14] 穂坂 綱一, 千葉 寿, 香月 浩之, 寺西 慶哲, 大槻 幸義, 大森 賢治(分子科学研究所, 総研大, 東北大, 科学技術振興機構 CREST), “光電子検出による高速量子位相振幅モニターの開発”, 分子構造総合討論会, 東京, 2005年9月
- [15] K. Mishima and K. Yamashita (The University of Tokyo, JST-CREST), “Theoretical study on control of entanglement”, 分子構造総合討論会 2005、東京、2005/9/27.

- [16] 大槻幸義, 寺西慶哲(東北大院理, JST-CREST), Peter Saalfrank(ポツダム大), Gabriel Turinici(パリ大), Herschl Rabitz(プリンストン大)「量子・古典線形時変システムに対する最適制御方程式の数値解法アルゴリズム」分子構造総合討論会(タワーホール船堀, 東京都江戸川区)9月27日-30日(2005年).
- [17] 安部真由美(東北大院理), 大槻幸義(東北大院理, JST-CREST), 藤村勇一(東北大院理), Wolfnag Domcke(ミュンヘン工科大)「円錐交差を通じたレチナールの超高速シス・トランス光異性化の量子最適制御シミュレーション」分子構造総合討論会(タワーホール船堀, 東京都江戸川区)9月27日-30日(2005年).
- [18] 面 政也(東北大理), 寺西慶哲, 大槻幸義(東北大院理, JST-CREST), 藤村勇一(東北大院理)「最適設計されたゲートパルスによる量子データベース検索」分子構造総合討論会(タワーホール船堀, 東京都江戸川区)9月27日-30日(2005年).
- [19] 香月浩之, 千葉 寿, 穂坂綱一, C. Meier, B. Girard, 大森 賢治(分子科学研究所, 総研大, 科学技術振興機構 CREST, Univ. Paul Sabatier), “ヨウ素分子の振動波束干渉の時間位置分解観測”, エクストリームフォトニクス研究会, 蒲郡, 2005年11月
- [20] 穂坂 綱一, 千葉 寿, 香月 浩之, 寺西 慶哲, 大槻 幸義, 大森 賢治(分子科学研究所, 総研大, 東北大, 科学技術振興機構 CREST), “光電子検出による高速量子位相振幅モニターの開発”, エクストリームフォトニクス研究会, 蒲郡, 2005年11月
- [21] Yoshiaki Teranishi, Yukiyo Ohtsuki (Tohoku Univ. & JST-CREST), Kenji Ohmori, and Hiroyuki Katsuki (IMS & JST-CREST) 「Implementation of Quantum Gate Operation in Molecules with Weak laser Field」第13回量子情報技術研究会(東北大学電気通信研究所)11月24日-25日(2005年).
- [22] K. Mishima and K. Yamashita (The University of Tokyo, JST-CREST), “Theoretical study on entanglement of molecular vibrational and rotational states”, Pacificchem 2005, Honolulu, Hawaii, 2005/12/15.
- [23] K. Shioya, K. Mishima, and K. Yamashita (The University of Tokyo, JST-CREST), “Quantum computing using molecular vibrational and rotational quantum bits”, Pacificchem 2005, Honolulu, Hawaii, 2005/12/15.
- [24] Takamasa Momose, (UBC, Tokyo Institute of Technology, Kyoto Univ. JST-CREST) "Cold Molecular Researches at Kyoto Univ. and UBC", CIAR UltraCold Matter Workshop, February 24-26, 2006, Banff Alberta, Canada
- [25] Hisashi Chiba, Hiroyuki Katsuki, Koichi Hosaka, J. C. Delagnes, Robert J. Levis, and Kenji Ohmori (Institute for Molecular Science, JST CREST, The Graduate University for Advanced Studies (SOKENDAI), TEMPLE University), “Development of an optical interferometer coupled with a spatial light modulator”, APS Satellite meeting “Ultrafast Chemistry and Physics 2006”, Philadelphia(USA), March 2006.
- [26] Koichi Hosaka, Hisashi Chiba, Hiroyuki Katsuki, Yoshiaki Teranishi, Yukiyo Ohtsuki, and Kenji Ohmori (Institute for Molecular Science, JST CREST), “Phase and amplitude monitor of molecular wave packets with photoelectron detection”, APS Satellite meeting “Ultrafast Chemistry and Physics 2006”, Philadelphia(USA), March 2006.
- [27] 香月浩之, 穂坂綱一, 千葉寿, Christoph Meier, Bertrand Girard, 大森賢治(分子科学研究所, 総研大, Univ. Paul Sabatier, 科学技術振興機構 CREST), 「位相ロックダブルパルスによる振

動波束干渉の時空間二次元イメージング」第三回エクストリームフォトニクス研究シンポジウム、和光、2006年4月。

- [28] 穂坂 綱一, 島田 紘行, 千葉 寿, 香月 浩之, 大森 賢治(分子科学研究所, 総研大, 科学技術振興機構CREST), 「光電子分光法を用いた整形分子波束の位相振幅デコーディング」, 化学反応討論会2006, 岡崎, 2006年5月.
- [29] J. C. Delagnes・A. Monmayrant・P. Zahariev・V. Blanchet・B. Chatel・B. Girard・M. A. Bouchene (Univ. Paul Sabatier, LCAR UMR 5589 UPS CNRS), 「Propagation of femtosecond pulses in an optically dense medium : observation and control」, 化学反応討論会2006, 岡崎, 2006年5月.
- [30] Masaaki Tsubouchi, and Takamasa Momose, "Rovibrational Wave Packet Manipulation using Shaped Mid-Infrared Femtosecond Pulses toward Quantum Computing", Poster, APS/DAMOP2007, June 5-9 2007, Calgary, Canada
- [31] 辻秀伸、田地和喜、金森英人、mK 分子プロジェクト、AMO 討論会、東京、2006 6/16.20-23 日
- [32] 穂坂 綱一, 島田 紘行, 千葉 寿, 香月 浩之, 寺西 慶哲, 大槻 幸義, 大森 賢治(分子科学研究所, 総研大, 科学技術振興機構CREST), 「光電子分光を用いた整形分子波束の位相振幅デコーディング法の開発」, 第3回原子・分子・光科学(AMO)討論会, 東京, 2006年6月.
- [33] Delagnes Jean-Christophe, 穂坂 綱一, 香月 浩之, 千葉 寿, 大森 賢治, 渡邊 一也, 松本 吉泰, 石岡 邦江, 北島 正弘, 中村 一隆(分子科学研究所, 総研大, 物材機構, 東工大, 科学技術振興機構CREST), 「Optical Control of Coherent Phonon in Bismuth」, 第3回原子・分子・光科学(AMO)討論会, 東京, 2006年6月.
- [34] Masaaki Tsubouchi, and Takamasa Momose, "Rovibrational Wave Packet Manipulation using Shaped Mid-Infrared Femtosecond Pulses toward Quantum Computing", Poster, Coherent Control of Ultracold Molecular Processes, August 1 - 4, 2007, Vancouver, Canada.
- [35] 穂坂 綱一, 島田 紘行, 千葉 寿, 香月 浩之, 寺西 慶哲, 大槻 幸義, 大森 賢治(分子科学研究所, 総研大, 東北大, 科学技術振興機構CREST), 「分子の振動固有状態を用いた量子ゲート操作」, 原子衝突研究協会第31回研究会, 岡崎, 2006年8月.
- [36] 千葉寿, 島田紘行, 穂坂綱一, Delagnes Jean-Christophe, 香月浩之, Robert J. Levis, 大森賢治(分子科学研究所, 総研大, 科学技術振興機構CREST, Temple Univ.), 「空間光変調素子を用いたアト秒位相変調器の開発」, 機器・分析研究会, 東広島, 2006年9月.
- [37] 千葉寿, 香月浩之, 穂坂綱一, 島田紘行, Delagnes Jean-Christophe, Robert J. Levis, 大森賢治(分子科学研究所, 総研大, 科学技術振興機構CREST, Temple Univ.), 「空間光変調素子を用いたアト秒位相変調器の開発」, 分子構造総合討論会, 静岡, 2006年9月.
- [38] 穂坂 綱一, 島田 紘行, 千葉 寿, 香月 浩之, 寺西 慶哲, 大槻 幸義, 大森 賢治(分子科学研究所, 総研大, 東北大, 科学技術振興機構CREST), 「分子の振動固有状態を用いた量子ゲート操作」, 特定領域「強レーザー光子場における分子制御」成果報告会, 東京, 2006年9月.
- [39] 福田浩司、金森英人、位相制御した光による物質量子状態の位相操作、分子構造討論会、2006年9月20-23日、静岡
- [40] 戸田直也、溝口麻雄、金森英人、固体パラ水素媒質中の分子の高分解能分光、分子構造討論

会、静岡、2006年9月20-23日

- [41] K. Mishima and K. Yamashita (The University of Tokyo, JST-CREST), “Theoretical study on decoherence of molecular vibrational entanglement”, 分子構造総合討論会 2006、静岡、2006/9/20.
- [42] K. Shioya, K. Mishima, and K. Yamashita (The University of Tokyo, JST-CREST), “Optimal control of quantum gates using molecular vibrational and rotational states”, 分子構造総合討論会 2006、静岡、2006/9/20.
- [43] 安部真由美, 大槻幸義, 藤村勇一, Z. Lan, W. Domcke (東北大院理, JST-CREST, ミュンヘン工科大), フェノール光解離分岐比制御における幾何位相効果, 分子構造総合討論会, 静岡, 9月20日—24日(2006年).
- [44] 穂坂 綱一, 島田 紘行, 千葉 寿, 香月 浩之, 寺西 慶哲, 大槻 幸義, 大森 賢治(分子科学研究所, 総研大, 東北大, 科学技術振興機構CREST), 「分子の振動固有状態を用いた量子ゲート操作」, 第4回エクストリームフォトニクス研究シンポジウム, 蒲郡, 2006年11月.
- [45] Delagnes Jean-Christophe, 穂坂 綱一, 香月 浩之, 千葉 寿, 大森 賢治, 渡邊 一也, 松本吉泰, 石岡 邦江, 北島 正弘, 中村 一隆(分子科学研究所, 総研大, 物材機構, 東工大, 科学技術振興機構CREST), 「Optical Control of Coherent Phonon in Bismuth」, 第4回エクストリームフォトニクス研究シンポジウム, 蒲郡, 2006年11月.
- [46] 穂坂 綱一, 島田 紘行, 千葉 寿, 香月 浩之, 寺西 慶哲, 大槻 幸義, 大森 賢治(分子科学研究所, 総研大, 東北大, 科学技術振興機構CREST), 「分子の振動固有状態を用いた量子ゲート操作」, 2006 CREST量子情報ワークショップ, 箱根, 2006年12月.
- [47] Delagnes Jean-Christophe, 穂坂 綱一, 香月 浩之, 千葉 寿, 大森 賢治, 渡邊 一也, 松本吉泰, 石岡 邦江, 北島 正弘, 中村 一隆(分子科学研究所, 総研大, 物材機構, 東工大, 科学技術振興機構CREST), 「Optical Control of Coherent Phonon in Bismuth」, 2006 CREST量子情報ワークショップ, 箱根, 2006年12月.
- [48] H. Katsuki, H. Chiba, C. Meier, B. Girard, and K. Ohmori, (分子科学研究所, 総研大, Univ. Paul Sabatier, 科学技術振興機構CREST), 「Designing “Quantum Tapestry” with Picometer Precision」, 2006 CREST量子情報ワークショップ, 箱根, 2006年12月.
- [49] 千葉 寿, 香月 浩之, 穂坂 綱一, 島田 紘行, Delagnes Jean-Christophe, 寺西 慶哲, 大槻幸義, 大森 賢治(分子科学研究所, 総研大, 東北大, 科学技術振興機構CREST), 「空間光変調素子を用いたアト秒位相変調器の開発」, 2006 CREST量子情報ワークショップ, 箱根, 2006年12月.
- [50] K. Shioya, K. Mishima, and K. Yamashita (The University of Tokyo, JST-CREST), “Quantum computing using molecular vibrational and rotational quantum bits”, 日本化学会第 87 春季年会、大阪、2007/3/25.
- [51] Y. Ohtsuki (Tohoku Univ., JST-CREST), Optimal control simulation for suppressing decoherence, Gordon Research Conference on Quantum Information Science, Il Ciocco, Italy, Apr. 15-20 (2007).
- [52] J.C. Delagnes, K. Hosaka, H. Katsuki, H. Chiba, K. Ohmori, K. Watanabe, Y. Matsumoto, K. Ishioka, M. Kitajima, K.G.Nakamura (分子科学研究所, 総研大, 物材機構, 東工大, 科学

技術振興機構 CREST), “Optical control of coherent phonons in bismuth”, 第 5 回 理研・分子  
研合同シンポジウム エクストリームフォトニクス研究 和光 2007 年 4 月 17 日

- [53] K. Mishima and K. Yamashita (The University of Tokyo, JST-CREST), “Optimal control of quantum gates using the molecular electronic and vibrational states”, 第 10 回理論化学討論会、名古屋、2007/5/14.
- [54] Susumu Kuma, Daisuke Ando, Masaaki Tsubouchi, and Takamasa Momose, "A New Optical Decelerator To Make Ultracold Molecules", Poster, APS/DAMOP2007, June 5-9 2007, Calgary, Canada
- [55] Masaaki Tsubouchi, and Takamasa Momose, "Rovibrational Wave Packet Manipulation using Shaped Mid-Infrared Femtosecond Pulses toward Quantum Computing", Poster, APS/DAMOP2007, June 5-9 2007, Calgary, Canada
- [56] Masaaki Tsubouchi, and Takamasa Momose, "Rovibrational Wave Packet Manipulation using Shaped Mid-Infrared Femtosecond Pulses toward Quantum Computing", Poster, Coherent Control of Ultracold Molecular Processes, August 1 - 4, 2007, Vancouver, Canada.
- [57] Susumu Kuma, Daisuke Ando, Masaaki Tsubouchi, and Takamasa Momose, "A New Optical Decelerator To Make Ultracold Molecules", Poster, Coherent Control of Ultracold Molecular Processes, August 1 - 4, 2007, Vancouver, Canada.
- [58] Y. Ohtsuki (Tohoku Univ., JST-CREST), Suppressing decoherence by optimally designed laser pulses, Gordon Research Conference on Quantum Control of Light and Matter, New Port, USA, Aug. 12-17 (2007).
- [59] 千葉 寿, 香月浩之, 穂坂綱一, Jean-Christophe Delagnes<sup>1</sup>, Robert J. Levis, 大森賢治 (分子科学研究所, 総研大, 科学技術振興機構 CREST, Temple Univ.), “パルスシェーピング技術を応用した高安定光干渉計の開発“, 機器分析技術研究会 富山 2007 年 8 月 23 日
- [60] 溝口麻雄, 戸田直也, 金森英人 固体パラ水素結晶に内包された NO 分子の高分解能分光測定、分子科学会 1p106 東北大学 2007 年 9 月 17 日-20 日
- [61] 戸田直也、溝口麻雄、福田浩司、金森英人、パラ水素結晶中に捕捉した CO 分子の振動回転遷移の線幅測定、分子科学会 1p118、東北大学 2007 年 9 月 17 日-20 日
- [62] J.C. Delagnes, K. Hosaka, H. Katsuki, H. Chiba, K. Ohmori, K. Watanabe, Y. Matsumoto, K. Ishioka, M. Kitajima, K.G.Nakamura (分子科学研究所, 総研大, 物材機構, 東工大, 科学技術振興機構 CREST), “Optical control of coherent phonons bismuth”, 第 1 回分子科学討論会 仙台 2007 年 9 月 17 日
- [63] 香月 浩之, 後藤 悠, J.-Ch. Delagnes, 千葉 寿, 大森 賢治 (分子科学研究所, 総研大, 科学技術振興機構 CREST), “高強度フェムト秒レーザーパルスを用いた波束操作”, 第 1 回分子科学討論会 仙台 2007 年 9 月 17 日
- [64] 千葉 寿, 香月 浩之, 穂坂 綱一, Delagnes Jean-Christophe, Robert J. Levis, 大森 賢治 (分子科学研究所, 総研大, 科学技術振興機構 CREST, Temple Univ.), “分子波束を用いた量子フーリエ変換のための高安定光干渉計の開発”, 第 1 回分子科学討論会 仙台 2007 年 9 月 17 日
- [65] 坪内雅明, A. Khramov, 百瀬孝昌中, 赤外フェムト秒レーザー光による振動回転波束制御: 遺

伝的アルゴリズムを用いた波形整形、第1回分子科学討論会、ポスター、2007年9月17日－20日、東北大学、仙台

- [66] 水本義彦, 寺西慶哲, 大槻幸義(東北大院理, JST-CREST), 経路積分セントロイド法を用いたパラ水素クラスター中分子の量子動力学シミュレーション第1回分子科学討論会, 東北大学(仙台), 9月17日－20日(2007年).
- [67] H. Katsuki, H. Gotoh, J. C. Delagnes, H. Chiba, and K. Ohmori (Institute for Molecular Science, The Graduate University for Advanced Studies (SOKENDAI), JST CREST), “Influence of Strong Laser Pulses on the Amplitudes and Phases of Vibrational Wave Packets; Model Study of Decoherence”, 6<sup>th</sup> International Symposium on Ultrast Intense Laser Science, Pisa, Italy, September 27, 2007.
- [68] 穂坂 綱一, 島田 紘行, 千葉 寿, 香月 浩之, 寺西 慶哲, 大槻 幸義, 大森 賢治(分子科学研究所, 総研大, 東北大, 科学技術振興機構 CREST), 「分子振動波束の量子ホログラフィーを用いた精密 READ and WRITE 技術と量子フーリエ変換への応用」, 第6回エクストリームフォトニクス研究シンポジウム, 蒲郡, 2007年11月.
- [69] 千葉 寿, 香月浩之, 穂坂綱一, Jean-Christophe Delagnes, Robert J. Levis, 大森賢治(分子科学研究所, 総研大, 科学技術振興機構 CREST, Temple Univ.), 「分子波束の量子ホログラフィーを用いた READ and WRITE 技術のための高安定光干渉計の開発」, 第6回エクストリームフォトニクス研究シンポジウム, 蒲郡, 2007年11月.
- [70] 穂坂 綱一, 島田 紘行, 千葉 寿, 香月 浩之, 寺西 慶哲, 大槻 幸義, 大森 賢治(分子科学研究所, 総研大, 東北大, 科学技術振興機構 CREST), 「分子振動波束の量子ホログラフィーを用いた精密 READ and WRITE 技術と量子フーリエ変換への応用」, 2007 CREST 量子情報ワークショップ, 熱海, 2007年12月.
- [71] 千葉 寿, 香月浩之, 穂坂綱一, Jean-Christophe Delagnes, Robert J. Levis, 大森賢治(分子科学研究所, 総研大, 科学技術振興機構 CREST), 「分子波束の量子ホログラフィーを用いた READ and WRITE 技術のための高安定光干渉計の開発」, 2007 CREST 量子情報ワークショップ, 熱海, 2007年12月.
- [72] Koichi Hosaka, Hiroyuki Shimada, Hisashi Chiba, Hiroyuki Katsuki, Yoshiaki Teranishi, Yuki Yoshi Ohtsuki, and Kenji Ohmori (Institute for Molecular Science, , The Graduate University for Advanced Studies (SOKENDAI), JST CREST), “High-precision quantum-holography of molecular wave-packets applied to ultrafast quantum Fourier transform”, Winter School of Sokendai/Asian CORE Program, Okazaki, January 2008.
- [73] Hisashi Chiba, Hiroyuki Katsuki, Kouichi Hosaka, Jean-Christophe Delagnes, Robert J. Levis and Kenji Ohmori (Institute for Molecular Science, The Graduate University for Advanced Studies (SOKENDAI), JST CREST, Temple University), ”Development of a highly-stabilized interferometer to READ and WRITE with quantum-holography of molecular wave-packets.”, The Winter School of Sokendai/Asian CORE Program, Okazaki, JAPAN, January 2008.
- [74] 香月浩之, 後藤悠, J. Ch. Delagnes, 千葉寿, 大森賢治, (分子科学研究所, 総研大, 科学技術振興機構 CREST), “高強度近赤外レーザー光による振動波束のコヒーレンス制御”第7回エクストリームフォトニクス, Riken, Saitama, 2008年5月15日
- [75] 島田紘行, 穂坂綱一, 大森賢治(分子科学研究所, 科学技術振興機構 CREST, 総研大), 「冷却 Rb 原子の超高速コヒーレント制御に向けて」, 第7回エクストリームフォトニクス研究, 理化学研究所, 和光, 2008年5月15日

- [76] 大槻幸義, 中上和幸(東北大院理, JST-CREST)「対称分割アルゴリズムを用いた非共鳴最適制御シミュレーションとランドスケープ」第11回理論化学討論会, 慶応義塾大学理工学部, 横浜市, 2008年5月22日-24日.
- [77] 水本義彦, 寺西慶哲, 大槻幸義(東北大院理, JST-CREST)「パラ水素クラスターの量子効果が及ぼす捕捉分子の回転運動への影響」第11回理論化学討論会, 慶応義塾大学理工学部, 横浜市, 2008年5月22日-24日.
- [78] 戸田直也, 溝口麻雄, 金森英人(東工大院理工), 固体パラ水素媒質中の分子の高分解能分光、分子構造討論会、福岡、2008年9月
- [79] 大槻幸義, 中上和幸(東北大院理, JST-CREST)「凝縮相中での分子整列制御に対する最適制御シミュレーション」第2回分子科学討論会, 福岡国際会議場, 福岡, 2008年9月24日-27日.
- [80] 中上和幸, 水本義彦, 大槻幸義(東北大院理, JST-CREST)「振動回転遷移を用いるN<sub>2</sub>分子整列パルスの最適制御シミュレーションによる数値設計」第2回分子科学討論会, 福岡国際会議場, 福岡, 2008年9月24日-27日.
- [81] 三嶋謙二(東大院工, JST-CREST)、若槻彰(東大院工)、山下晃一(東大院工, JST-CREST)「多分子の回転状態を用いた量子演算」、第2回分子科学討論会、福岡国際会議場、2008/9/24 - 2008/9/27
- [82] 島田紘行, 千葉寿, 穂坂綱一, 大森賢治(分子科学研究所, 科学技術振興機構 CREST, 日本原子力研究開発機構, 総合研究大学院大学), 「冷却Rb原子の超高速コヒーレント制御に向けて」、第2回分子科学討論会, 福岡, 2008年9月24日
- [83] 千葉寿, 香月浩之, 大森賢治(分子科学研究所, 総研大, 科学技術振興機構 CREST, ), 「ピエゾ素子を用いて構築した超高精度光干渉計の開発」、平成20年度 機器・分析技術研究会, 松山 2008年9月26日.
- [84] 後藤悠, 香月浩之, 千葉寿, John Brady, Stanley Smith, Robert Levis, 大森賢治(総合研究大学院大学, 分子科学研究所, 科学技術振興機構 CREST, Temple Univ.)「高強度近赤外パルスの波形整形を用いた分子振動波束操作」、第2回分子科学討論会、福岡 2008年9月27日
- [85] H. Katsuki, H. Goto, H. Chiba, and K. Ohmori, (Institute for Molecular Science, The Graduate University for Advanced Studies (SOKENDAI), JST CREST), "Influence of Strong Laser Pulses on the Amplitudes and Phases of Vibrational Wave Packets; Model Study of Decoherence" 8th Extreme Photonics, Takeshima, Gamagori, Nov. 11, 2008
- [86] Hiroyuki Shimada, Nobuyuki Takei, Koichi Hosaka, Hisashi Chiba, and Kenji Ohmori (Institute for Molecular Science, JST CREST, The Graduate University for Advanced Studies (SOKENDAI), "Toward ultrafast coherent control of ultracold Rb atoms", The 8th Workshop on Extreme Photonics, Gamagori, Japan, Nov. 11, 2008
- [87] Takamasa Momose, Masaaki Tsubouchi, Susumu Kuma, and Yuki Miyamoto, "Quantum Computation with Molecules in Quantum Matrices", Poster, International Symposium on Physics of Quantum Technology, Nov 25 - 28, Nara, Japan.
- [88] Hiroshi Fukuda, Toshiaki Sakai, Hiroaki Kasai and Hideto Kanamori, Development of the CW

coherent source and application for fundamental quantum operation on atomic hyperfine, molecular rotation and vibration qubits. ISPQT Nara 2008 Nov.

- [89] Naoya Toda, Asao Mizoguchi and Hideto Kanamori (Tokyo Institute of Technology) Decoherence of the CO molecule trapped in the solid para-hydrogen ISPQT Nara 2008 Nov.
- [90] H. Katsuki, H. Goto, H. Chiba, and K. Ohmori, (Institute for Molecular Science, The Graduate University for Advanced Studies (SOKENDAI), JST CREST), "Influence of Strong Laser Pulses on the Amplitudes and Phases of Vibrational Wave Packets; Model Study of Decoherence" 2008 International Symposium on Physics of Quantum Technology, Nara, Nov. 25, 2008
- [91] Hiroyuki Shimada, Nobuyuki Takei, Koichi Hosaka, Hisashi Chiba, and Kenji Ohmori (Institute for Molecular Science, JST CREST, The Graduate University for Advanced Studies (SOKENDAI), "Ultrafast coherent control of laser cooled atoms towards the quantum information technology", 2008 International Symposium on Physics of Quantum Technology, Nara, Japan, Nov. 25, 2008
- [92] Y. Ohtsuki (Tohoku Univ. & JST-CREST) "Optimal alignment/orientation control of an ensemble of molecules under the influence of non-Markovian dissipation" 2008 International Symposium on Physics of Quantum Technology, Nara, Nov. 25 – Nov. 28 (2008).
- [93] Y. Mizumoto and Y. Ohtsuki (Tohoku Univ. & JST-CREST) "Path-integral molecular dynamics simulation of rotational motion of carbon monoxide doped in para-hydrogen cluster," 2008 International Symposium on Physics of Quantum Technology, Nara, Nov. 25 – Nov. 28 (2008).
- [94] Kenji Mishima and Koichi Yamashita (The University of Tokyo and JST-CREST), "Free-Time and Fixed End-Point Optimal Control Theory in Quantum Mechanics: Application to Entanglement Generation", The International Conference on "Simulations and Dynamics for Nanoscale and Biological Systems", Takeda Hall, The University of Tokyo, 2009/03/04~2009/03/06.
- [95] 後藤悠, 香月浩之, 千葉寿, 大槻幸義, 大森賢治 (分子科学研究所, 総合研究大学院大学, 科学技術振興機構 CRSET, 岩手大学, 東北大学), 「強レーザー場を用いた分子振動波束のデコヒーレンスシミュレーション」, エクストリームフォトニクスシンポジウム, 理研, 和光, 2009年5月22日.
- [96] 阿部弘哉, 中上和幸, 大槻幸義 (東北大院理, JST-CREST) 「最適偏光パルスレーザーを用いた分子回転波束の任意整形」第12回理論科学討論会, 東京大学本郷キャンパス (2009年5月28日-30日).
- [97] H. Katsuki, H. Chiba, and K. Ohmori (Institute for Molecular Science, SOKENDAI, JST CREST), "Wave packet interferometry in a bulk solid parahydrogen", Gordon Research Conference on Quantum Control of Light & Matter, Mount Holyoke college, MA, USA., August 3, 2009,
- [98] 笠井啓晃・金森英人 (東工大), 位相同期光-光二重共鳴を用いた量子位相の制御, 分子科学討論会, 名古屋, 2009年9月21-24日
- [99] 大槻幸義 (東北大院理, JST-CREST) 「デコヒーレンスに強い量子最適制御法の開発」第3回分子科学討論会, 名古屋大学東山キャンパス, 名古屋市 (2009年9月21日-24日).
- [100] 水本義彦, 大槻幸義 (東北大院理, JST-CREST) 「パラ水素クラスタに捕捉された CO 分子の経

路積分分子動力学シミュレーション」第3回分子科学討論会, 名古屋大学東山キャンパス, 名古屋市(2009年9月21日-24日).

[101]阿部弘哉, 中上和幸, 大槻幸義, 河野裕彦(東北大院理, JST-CREST)「最適偏光パルスによる分子の振動回転状態の任意制御」第3回分子科学討論会, 名古屋大学東山キャンパス, 名古屋市(2009年9月21日-24日).

[102]香月浩之, 千葉寿, 大森賢治(分子科学研究所, 総研大, 岩手大, 科学技術振興機構CREST), “固体パラ水素中での分子波束干渉制御”, 第3回分子科学討論会, 名古屋, 2009年9月21日.

[103]武井宣幸, Giorgi Veshapidze, 千葉寿, 大森賢治(分子科学研究所, 科学技術振興機構CREST, 岩手大, 総研大), 「冷却Rb原子の超高速コヒーレント制御」, 第3回分子科学討論会, 名古屋, 2009年9月23日.

(4)知財出願 なし

(5)受賞・報道等

①受賞

大森賢治 アメリカ物理学会フェロー表彰(2009)

大森賢治 日本学術振興会賞(2007)

大森賢治 日本学士院学術奨励賞(2007)

中上和幸, 第2回分子科学討論会優秀ポスター賞

(振動・回転遷移を用いるN<sub>2</sub>分子整列パルスの最適制御シミュレーションによる数値設計)

香月浩之 英国王立化学会 PCCP 賞(2009)

香月浩之 光科学技術研究振興財団研究表彰(2008)

②マスコミ(新聞・TV等)報道

(1) 量子のさざ波を世界最高精度で観測・制御

2006年3月22日 日刊工業新聞

2006年3月23日朝刊 中日新聞

2006年4月5日朝刊 毎日新聞

2006年4月17日朝刊 信濃毎日新聞

2006年4月19日朝刊 福井新聞

2006年4月22日夕刊 岩手日報

2006年4月24日夕刊 秋田さきがけ

2006年4月24日朝刊 高知新聞

2006年4月24日夕刊 熊本日新聞

2006年4月25日夕刊 北海道新聞

2006年4月25日 琉球新報

2006年5月5日 中部経済新聞

2006年6月5日 河北新報

(2) 大森賢治;日本学術振興会賞および日本学士院学術奨励賞受賞に関連して

2007年2月6日 中日新聞 朝刊(人物紹介)

2007年2月14日 毎日新聞 東京朝刊(日本学士院学術奨励賞決定について)

2007年3月15日 秋田さきがけ(人物紹介)

2007年3月15日 東奥日報(人物紹介)

2007年3月15日 神戸新聞(人物紹介)

2007年3月15日 愛媛新聞(人物紹介)

2007年3月15日 熊本日日新聞(人物紹介)

2007年3月16日 徳島新聞(人物紹介)

2007年3月18日 新潟新聞、高知新聞(人物紹介)

2007年3月19日 東京新聞(人物紹介)

2007年3月20日 岩手日報、山形新聞(人物紹介)

2007年3月22日 茨城新聞(人物紹介)

(3)上記 Phys. Rev. Lett. 102, 103602 (2009)の研究成果に関するプレスリリースを受けた報道

2009年2月25日 日刊工業新聞

2009年2月25日 財経新聞

2009年2月25日 化学工業

2009年2月26日 日経産業新聞

2009年2月26日 Laser Focus World Japan

2009年3月6日 科学新聞

### ③その他

(6)成果展開事例

#### ①実用化に向けての展開

なし

#### ②社会還元的な展開活動

なし

## § 6 研究期間中の主な活動（ワークショップ・シンポジウム等）

年月日	名称	場所	参加人数	概要
2005年2月18-19日	チーム内ミーティング	京都大学福井謙一記念研究センター	30人	グループリーダーによる研究進捗状況の報告および量子情報に関する勉強会
2005年10月14-15日	チーム内ミーティング	東京工業大学	20人	研究討論
2005年12月12日	チーム内ミーティング	東京工業大学	6人	グループリーダーによる研究進捗状況の報告および研究討論
2006年3月15日	APS March meeting; Focus Topic Symposium “Ultrafast and ultrahighfield chemistry”	Baltimore	50人程度	原子分子、表面界面等における超高速、超強光子場現象の解明と応用
2006年3月17日	APS March meeting satellite “Ultrafast chemistry and physics 2006”	Philadelphia	30人程度	原子分子等における超高速、超強光子場現象の解明と応用
2006年5月14-15日	百瀬チーム量子情報研究会	東京工業大学理学部第二会議室	28人程度	グループリーダーによる研究進捗状況の報告および研究討論
2006年8月8-9日	CREST/IRS workshop	東京工業大学百年記念館	35人程度	関連研究者を招いた発表会および研究討論
2006年12月10-11日	百瀬チーム量子情報研究会	東京工業大学応物会議室	28人程度	グループリーダーによる研究進捗状況の報告および研究討論
2008年11月24日	チーム内ミーティング	奈良・新公会堂会議室	20人	各グループの成果をポスター発表(総数15)し、今後の研究方向に関する打ち合わせ
2009年12月3-4日	CRESTの2研究領域での共同開催ワークショップ	東北大学理学部化学教室第4講義室	30人程度	量子コヒーレンス現象に関してまとまった講演会および新たな研究展開に向けた討論

## § 7 結び

元来、分子を用いた量子コンピュータは、他の物理系と比べて、まだあまり注目されているとは言い難く、研究者も研究結果も少ない。従って、我々の研究から得られた成果は、どれも新しい発想に基づくものであり、現在あるいは将来的に分子量子コンピュータの基礎的研究として、実験的にも理論的にも高く評価されていくと思う。その点で、我々の研究結果は意義深いと考えている。

分子の内部量子状態の制御については、まだ誰にも着手されていない多くの基礎的な研究課題が残されている。それらを地道に一つ一つ解決して行く中で、斬新な研究結果が得られるものと確信している。それらの基礎的な結果を基に、更に新しい発想が生まれ、実験的にも理論的にも応用される可能性は十分あり、今後の研究は、量子コンピュータの研究としてばかりでなく、様々な分野を越えた研究分野として展開して行くであろう。