

「量子情報処理システムの実現を目指した新技術の創出」

平成 16 年度採択研究代表者

百瀬 孝昌

(東京工業大学大学院理工学研究科 客員教授)

「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」

1. 研究実施の概要

本プロジェクトでは、分子を量子演算素子と位置づけ、その電子振動回転の量子状態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行っている。具体的には、分子の電子固有状態とともに、分子のみが有する自然寿命が 10^{-3} 秒から 10^4 秒と極めて長い振動・回転の固有状態 (v, J) を量子情報を担う資源とみなし、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を演算オペレータとして、固有状態間の重ね合わせ状態を制御する技術を開発することで、分子の量子状態を用いた新しい量子情報処理基盤技術の確立を目指している。本年度は主として以下の成果を得た。

- (1) アト秒位相変調器を用いた量子リップルの可視化とその技術を用いた分子メモリーの開発
- (2) 演算素子として利用できる分子系の開発
- (3) 光の位相制御などの新しい光量子技術開発
- (4) 最適制御理論を用いた基本的なゲート操作の数値計算
- (5) デコヒーレンスの理論解析
- (6) 分子振動状態を用いた量子演算の新しい提案
- (7) 分子振動状態を用いた量子アルゴリズムのシミュレーション

今後はさらに引き続き現在の研究を進め、分子の量子状態を用いた新しい量子情報処理基盤技術の実証をする予定である。

2. 研究実施内容

我々の目的は分子の多様な電子、振動、回転状態のそれぞれのモードを qubit と見立て、位相制御したレーザー光によってそれらのモード間のエンタングルメントを生成・制御できることを示すことで、分子の量子状態を用いた新しい量子情報処理基盤技術の確立をすることである。量子固体中に捕捉した分子は、空間位置を完全に制御できるとともに、その内部励起状態の寿命が系によっては1マイクロ秒以上あると期待されるので、分子内部状態を用いた量子ビットの候補として有力である。そこで、様々な分子を量子固体内に捕捉・分光することで、演算素子として利用できる分子系の開拓と実証を行っている。一方、分子の多様な電子、振動、回転状態のそれぞれのモー

ドを制御するためには、光の位相制御などの新しい光量子技術開発が必要である。そのために、気相の原子分子を用いた光量子基盤技術開発も平行して行っている。またその技術を応用した具体的な分子メモリーの開発も行っている。一方、理論的には、最適制御理論、遺伝アルゴリズム、解析的な数式導出などによる、分子の内部状態のエンタングルメント生成のための最適制御したゲートパルスの理論設計、エンタングルメントのデコヒーレンスなどの解析、分子の内部状態を用いた量子演算の新しい提案などもおこなっている。具体的な成果は以下の通りである。

(1) アト秒位相変調器を用いた量子リップルの可視化とその技術を用いた分子メモリーの開発

量子位相をアト秒精度で制御する「アト秒位相変調器 (APM)」と呼ばれる装置を分子振動波束に適用することによって、かつてない超高精度の量子干渉を実現することにこれまでに成功している。今年度は、このような波束干渉によって発生する量子リップルを、1 ピコメーターの空間分解能と 100 フェムト秒の時間分解能で可視化する技術を開発した。ごく最近では、このように可視化された時空間模様(量子ファブリック)を自在に書き換えることにも成功している。また、これらの基盤技術を用いた分子メモリーの開発にも成功した。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、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。さらに、この分子メモリーを量子情報処理に活用するために、分子の内部量子状態を用いた量子ゲートと量子アルゴリズムの開発を行った。

(2) 演算素子として利用できる分子系の開発

分子の回転量子状態を量子演算素子として用いるための基礎研究として、 $T=1\text{K}$ の基板上的 $p\text{-H}_2$ 薄膜結晶中に分子を取り込み、ミリ波・サブミリ波帯のマイクロ波で純回転遷移を検出する実験装置を試作し、マイクロ波分光計測を開始した。また、赤外領域の高分解能分光により、振動回転状態で量子ビットに応用できる分子系の探索を行った。特に、分子クラスターの励起状態の寿命が単離されている分子より一桁以上長いことを明らかにした。

(3) 光の位相制御などの新しい光量子技術開発

量子演算操作に不可欠となる2本のレーザー光の位相同期基盤技術の開発を行った。オクターブ発振する光コム異なる2つのモードに2台のレーザーをそれぞれ位相安定化することで、任意の差周波数とする技術確立した。その際のレーザー線幅は1Hz 程度までに狭窄化することに成功した。この光源を用いて Rb 原子の2重共鳴分光を行い、原子の量子状態を表す波動関数の位相を位相敏感検出することによって直接測定した。

一方、フェムト秒パルスを用いたゲート操作を行うために、フェムト秒赤外パルス光の整形技術を開発した。赤外パルス光の整形には整形した近赤外光を用いた差周波発生を使っているため、元々の光と発生した赤外光の周波数、パルス幅、位相などの相関の解析を行った。

(4) 最適制御理論を用いた基本的なゲート操作の数値計算

最適制御理論を用いて、アンモニア分子の2振動モードを qubit に見立てて、Hadamard gate、CNOT gate など、基本的な gate operation の実現可能性について数値計算を行った。その結果、これらの基本的な操作は、最適制御理論を用いた複雑なレーザーパルスを用いれば、実現可能

であることを示した。特に、エンタングルメントは、分子の振動状態を qubit に用いれば容易に生成することができることがわかった。そのメカニズムは、振動モード間の非調和性によるものであることが明らかになった。

一方、この複雑なレーザーパルスは、分子の複雑な振動モード間の非調和性によるものであることが判明したので、複雑なエンタングリングマトリックスを持つ、2レベル、2qubit 系のエンタングルメント制御について、数式を用いて解析した。目的は、簡単なエンタングルメント操作が行えるような分子を多様な分子の中から見つけ出すことである。解析的な手法は、回転波近似である。その結果、2qubit のエネルギーレベルの一致が最も重要であることがわかった。分子系としては、H₂O、SiH₄ などが有力候補として考えられる。

(5) デコヒーレンスの理論解析

分子は本来、多レベルの系なので、量子ビットに用いている2レベルからの decoherence を考慮しなければならない。その理論解析を行った。回転波近似を用いた結果、qubit から外れたレベルの固有エネルギーが十分離れていれば、decoherence の影響は抑えることができることがわかった。また、密度関数を用いて、熱浴によるエンタングルメントの decoherence の影響を、解析的に考察した。その結果、decoherence に及ぼす最も重要な decoherence matrix element を同定した。

(6) 分子振動状態を用いた量子演算の新しい提案

量子ビットを分子振動状態の重ね合わせ状態で表せば、レーザーパルスによるゲート操作を必要としないで量子演算ができる。初期入力状態の生成、ゲート操作、結果読み出しの3ステップとも、現在の分子分光技術を応用すれば高精度で実現可能であることを理論提案した。ヨウ素分子の振動波束を量子ビットと見立てた場合、3ビットの量子フーリエ変換などが99%以上の高確率で実行できることを数値的に示した。

(7) 分子振動状態を用いた量子アルゴリズムのシミュレーション

最適設計されたゲートパルスを繰り返し照射することによって、量子アルゴリズム(グローバールアルゴリズム)が分子振動状態を使って実現できることもシミュレーションにより明らかにした。量子ビットの全分布でシグナルを規格化すると、個々のゲート操作精度の低下、デコヒーレンスの存在、ゲート操作のタイミングのズレなどに対してロバストな結果が得られることを明らかにした。また、緩和の定量的な解析には、非マルコフ効果の取入れが不可欠であることを示した。

一方、円錐交差により生じる分子内振動モードの強結合の制御可能性についても研究を行った。整形フェムト秒レーザーを使い、電子状態間の多重回遷移を通して波束整形を行えば、高確率で制御できることを最適制御シミュレーションで明らかにした。

3. 研究実施体制

「百瀬」グループ

- ①研究分担グループ長：百瀬 孝昌（東京工業大学大学院理工学研究科、客員教授）
- 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

「金森」グループ

- ①研究分担グループ長：金森 英人（東京工業大学大学院理工学研究科、助教授）
- 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

「大森」グループ

- ①研究分担グループ長：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）
- 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

「山下」グループ

- ①研究分担グループ長：山下 晃一（東京大学、教授）
- ②研究項目：
 - 1) アンモニア分子の振動状態を用いた量子ゲート実現性の検証
 - 2) 複雑なエンタングリング相互作用行列をもつ系におけるベル状態の生成の方法
 - 3) 分子振動、回転自由度間のエンタングルメントの量子ダイナミックス
 - 4) 複数の分子間における、回転自由度のエンタングルメントの量子ダイナミックス

「東北大（大槻）」グループ

- ①研究分担グループ長：大槻 幸義（東北大学、講師）
- 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. 主な研究成果の発表

(1) 論文（原著論文）発表

- 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) 805-810 (2005).
- Takamasa Momose, and Takeshi Oka, " High-Resolution Stimulated Raman Gain Spectroscopy of Parahydrogen Crystals" , *J. Low Temp. Phys.*, 139 (5-6) 515-522 (2005).
- Katsunari Enomoto and Takamasa Momose, "Microwave Stark decelerator for polar molecules", *Phys. Rev. A* 72 (4), 061403 (R) (2005).
- H. Katsuki, H. Chiba, B. Girard, C. Meier, and K. Ohmori, "Visualizing Picometric Quantum Ripples of Ultrafast Wave-Packet Interference", *Science* 311, 1589 (2006).
- 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).
- 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, 114110 (2006).
- 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 (2006).

- 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), and also the October 15, 2005 issue of Virtual Journal of Biological Physics Research, and the November 2005 issue of Virtual Journal of Ultrafast Science.
- 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).