

「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。本年度は以下のような成果を主として得た。

- (1) 光の位相制御などの新しい光量子技術開発
- (2) 位相安定化光源を用いた qubit 量子演算操作の基盤技術開発
- (3) アト秒位相変調器を用いた量子タペストリーのデザインと可視化
- (4) 固体ダイナミクスの光制御
- (5) 連続チャープパルスを用いた分子振動回転モードにおけるエンタングルメントと任意の重ね合わせ状態の生成と制御
- (6) 分子振動回転モードを用いた量子コンピューティング
- (7) 分子振動・回転のエンタングルメントを使った Shor アルゴリズムの検算シミュレーション
- (8) デコヒーレンス抑制のための数値解析
- (9) パラ水素中の分子の動力学計算

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)光の位相制御などの新しい光量子技術開発

分子の振動回転 qubit の量子演算操作に不可欠となる赤外領域のレーザー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CW発振するOPOレーザーを用い、励起光のYAGレーザー光、及びシグナル光の第2高調波を、オクターブ発振する光コム異なる2つのモードにそれぞれで位相安定化することで、3ミクロン帯で発振するアイトラー光の周波数安定化を行った。その結果、アイトラー光の周波数揺らぎを200kHz以下に抑えることができた。

一方、フェムト秒赤外パルスを使ってゲート操作を行うためのフェムト秒赤外パルス光の整形技術もこれまでにほぼ確立した。発生できた赤外整形パルスは 5cm^{-1} の周波数分解能で位相まで含めて完全に制御できており、分子の振動・回転状態のゲート操作を行うために十分なパルスであることを確認した。

(2)位相安定化光源を用いた qubit 量子演算操作の基盤技術開発

今回得られた位相安定化技術をさらに改良することによって、近赤外領域においては2台の半導体レーザー間の相対揺らぎ周波数を 0.1Hz までに抑えることができるようになった。この光源を用いて Rb 原子の基底状態の超微細構造準位を qubit と見立て、ブロッホ球上での経度方向の回転操作に相当するユニタリー変換を行ない、それをモニターする技術を確立した。さらに、緯度方向の回転操作を行うために、パルスのマイクロ波照射を行い、ラビ振動を実現した。

また同様の実験を分子の系でも実現するために、可視領域の2台の半導体レーザーを用いた I_2 分子の回転準位を qubit とする実験、及び2本のマイクロ波を用いた H_2CO 分子の回転準位を qubit とする実験を開始し、それぞれ狭窄化された2重共鳴信号を確認することができた。

(3)アト秒位相変調器を用いた量子タペストリーのデザインと可視化

フェムト秒レーザーパルス対の相対位相をアト秒レベルの精度で制御する「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、昨年度に引き続き、このような波束干渉によって分子内に発生する時空間模様 (量子タペストリー) を自在にデザインして可視化する技術に関する研究を進めた。特に、理論解析と組み合わせることによって、本技術のポテンシャルと改善

すべき問題点の詳細が明らかになりつつある。量子タペストリーをデザインし可視化するという行為は、振動波束(振動固有状態の重ね合わせ状態)に書き込む振幅位相情報を制御し、これを読み出すことに相当している。これに成功したことにより、分子の振動固有状態を用いた READ and WRITE の段階はクリアできたと考えている。現在、論文発表の準備を進めている。

(4) 固体ダイナミクスの光制御

固体のコヒーレント制御を目指して本研究を進めている。現時点までに、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半金属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。現在、論文発表の準備を進めている。

(5) 連続チャープパルスを用いた分子振動回転モードにおけるエンタングルメントと任意の重ね合わせ状態の生成と制御

Landau-Zener 遷移理論を用いて、解析的に入力パラメータを予想し、2原子分子の振動、回転状態とレーザーパルスの影響を含んだシュレーディンガー方程式を数値的に解いた。その結果、Bell state のみではなく、量子コンピュータの要請である、任意の状態を作ることでもできることがわかった。それは、様々な1ビット変換が、レーザーによって思い通りに実行可能であることによる。分子の特性と制御実現性についても議論した。

(6) 分子振動回転モードを用いた量子コンピューティング

$^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ 分子の電子基底状態にある振動回転モードを用いてドイッチョサアルゴリズムを行うための最適レーザーパルスの数値的設計を行った。各々のゲートフィデリティーは 90%以上であった。それらを組み合わせると、ドイッチョサアルゴリズムのフィデリティーは 96.11%以上であることを見出した。これは、振動状態を用いたもの(94.28%)に比べ、若干信頼性が高いことを示している。以上の結果から、振動回転モードを用いた量子コンピューティングは有望であることを明らかにした。

(7) 分子振動・回転のエンタングルメントを使った Shor アルゴリズムの検算シミュレーション

最適パルスで生成し操作された分子振動・回転のエンタングルメントを使って Shor アルゴリズムの検算シミュレーションを行った。Qudit の導入により多くの振動状態を有効に活用できること、また振動 qudit 操作は回転状態に影響を受けず高精度で制御可能であることが分かった。分子内状態は異なった階層からなる量子情報資源となることを数値的に明示した。振動ポテンシャルにおける円錐交差に着目し、核波束の通過経路制御(ベリー位相効果)により核波束の空間構造を制御できることを示した。この効果は、光解離生成物分布などにより容易に検出可能である。

(8) デコヒーレンス抑制のための数値解析

新規開発したアルゴリズムを使って、デコヒーレンスを抑制するための最適パルスを数値解析した。分子とパルス電場との相互作用を通して、デコヒーレンスが存在しない場合の時間発展を実現するのが制御目的である。デコヒーレンス抑制パルスを実際に理論設計することで、2準位系ではいわゆる量子バンパルスが最適解であることを見出した。現在、「多準位系における量子バンパルス」の有効性を解析中である。

(9) パラ水素中の分子の動力学計算

パラ水素固体中に分散捕捉された分子量子ビットの定量評価のため、分子動力学計算プログラム開発に着手した。基本コードを独自開発し、中性子散乱実験から見積もられている分布関数の再現に成功した。現在、分子ドープを目指してプログラムを拡張中である。

3. 研究実施体制

(1)「百瀬(東工大)研究」グループ

①研究者名

百瀬 孝昌(東京工業大学大学院理工学研究科 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

(2)「百瀬(UBC)研究」グループ

①研究者名

百瀬 孝昌(東京工業大学大学院理工学研究科 教授)

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)「金森(東工大)研究」グループ

①研究者名

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

(4)「大森(分子研)研究」グループ

①研究者名

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

(5)「山下」グループ

①研究者名

山下 晃一(東京大学 教授)

②研究項目

・連続チャープパルスを用いた分子振動回転モードにおけるエンタングルメントと任意の

重ね合わせ状態の生成と制御

- 分子振動回転モードを用いた量子コンピューティング
- 分子電子振動モードを用いた量子コンピューティング
- NO 分子の分子振動回転モードを用いた量子コンピューティング

(6)「東北大(大槻)」グループ

①研究者名

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. 研究成果の発表等

(1)論文発表(原著論文)

- 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).
- 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).
- 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).
- Susumu Kuma, Mikhail N. Slipchenko, Kirill E. Kuyanov, Takamasa Momose, and Andrey F. Vilesov, "Infrared spectra and intensities of the H₂O and N₂ complexes in the range of the ν_1 and ν_3 bands of water", J. Phys. Chem. **110** (33), 10046 - 10052 (2006).