

「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

情報通信総合研究機構・客員研究員

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) 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
- (2) 波形整形した超短パルス赤外レーザーの開発
- (3) 光の位相制御などの新しい光量子技術開発
- (4) アト秒位相変調器を用いた論理ゲートの開発
- (5) 分子の振動回転準位の量子もつれ状態の生成法の理論的解明
- (6) 最適制御シミュレーションによる分子の配向・整列制御に関する理論的検討
- (7) パラ水素中の分子の動力学計算
- (8) 基本量子ゲートの実現に向けた理論的解析

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。本年度の具体的な成果は以下の通りである。

(1)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、活用する準位間の光学遷移モーメントが大きいことと、各状態の寿命が最低 1 マイクロ秒あることが望まれる。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分光計測を引き続き行った。パラ水素結晶に内包した分子 qubit のデコヒーレンスの要因を解明するために、CO 分子の振動・回転状態の高分解能スペクトル観測し、スペクトル線のシフト、線形、線幅の温度依存性を調べた。その結果、分子の回転軸が結晶の c 軸に対して平行と垂直の場合ではスペクトルの線幅、およびその温度依存性が異なることを見出し、デコヒーレンスのメカニズムを解明する重要な手がかりを得た。

(2)波形整形した超短パルス赤外レーザーの開発

分子の振動回転状態を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て分子振動回転波束の直接制御を行う方法である。これまでに、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。我々は $2\text{--}10\ \mu\text{m}$ 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み、本年度までに、中赤外のパルス波形を $5\ \text{cm}^{-1}$ 及び $150\ \text{fs}$ のエネルギー及び周波数分解能で光位相を含めて制御可能な技術を確認した。これは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。

(3)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 の緻密な量子演算操作に不可欠となる赤外領域の連続光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CW発振するOPOレーザーを用い、その励起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に位相安定化することで、3ミクロン帯で発振するアイドラー光の周波数揺らぎを 10kHz にまで抑えることを達成した。また、量子演算のために必要となる複数の位相同期光源として、2台の半導体レーザーを光コムの異なるモードにロックし、相対位相を自由に変えることのできる技術を開発した。この2本の半導体レーザー光源を用いてRb原子の超微細構造準位を用いた2重共鳴実験をおこない、光源の持つ位相情報を原子の系に書き込むとともに、その量子位相を直接位相敏感検出する手法を開発した。

(4)アト秒位相変調器を用いた論理ゲートの開発

これまでに、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成功している。さらに、この技術を用いて、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成功している。次の段階として論理ゲートの開発を行った。具体的には、ヨウ素分子の進行波束の時間発展を利用して、2ビットおよび3ビットのフーリエ変換を試み、これに成功した。このフーリエ変換は、サブピコ秒の極短時間で完了する超高速フーリエ変換であるためデコヒーレンスの影響を無視すること

ができ、1ステップの操作で完了する簡易性を兼ね備えている。

(5)分子の振動回転準位の量子もつれ状態の生成法の理論的解明

分子量子計算機の実現のためには、ベル状態などのエンタングルメントや任意の線形結合を生成する方法を明らかにする必要がある。そのための、解析的あるいは数値的な理論的解明を行った。まず、回転波近似に基づいて、非局所的相互作用の分類を、bipartite システムの一般的な相互作用に対して行った。システムとレーザーとの相互作用は、局所的相互作用であるが、非局所的相互作用は、3つの場合を個別に扱えることを見出した。また、ベルの状態が生成できる分子の制御方法を提唱した。また、ランダウゼーナー遷移理論を用いて、HF、LiH 分子の振動、回転状態とレーザーとの相互作用を数値的に解析した。その結果、ベル状態や任意の状態が生成できることを見出した。特に、非局所的相互作用は、遷移モーメントの振動パラメータと回転角の積の形をしていることで実現できることを示した。一方、閉殻系の $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ 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チージョサ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。その結果、フィデリティは 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、信頼性が高い。以上の結果から、振動回転モードを用いた量子演算は有望であることを明らかにした。

(6)最適制御シミュレーションによる分子の配向・整列制御に関する理論的検討

分子の内部状態を量子情報処理に用いるとき、電子的に非共鳴なレーザーを使って振動・回転状態を操作することが必要になることがしばしばある。その際、誘起双極子(電場に関して非線形)を通した相互作用がしばしば重要になる。そのための、誘起双極子も取り込んだ最適制御シミュレーションアルゴリズムの開発に成功した。このアルゴリズムを使い、誘起双極子を通した共鳴多光子遷移により、高い精度(～95%以上)で分子を配向・整列制御できることを示した。

(7)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、経路積分分子動力学シミュレーションコードを完成させた。このプログラムにより量子凝縮相における実験データの解析およびシミュレーションデータを提供できる体制が整った。まず、パラ水素 53 個からなるクラスタ中でのフッ化水素分子の回転スペクトル計算を行った。その結果、例えばフッ化水素はクラスタ中でも単一の振動数で回転(回転の量子数が保たれる)していることが示された。

(8)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岐に渡っているため、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。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最適化したところ、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も、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。実験的に実現可能な波形整形で98%以上の fidelity で分子量子ゲート操作が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。

3. 研究実施体制

(1) 百瀬(情通研)研究グループ

- ① 研究者名: 百瀬 孝昌(情報通信研究機構)
- 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(ブリティッシュコロンビア大学)
- 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)
- 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)
- 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(東大)グループ

- ① 研究者名: 山下 晃一(東京大学)
- 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

(6) 大槻(東北大)研究グループ

- ① 研究者名: 大槻 幸義(東北大学)
- 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)

- 1 Masaaki Tsubouchi and Takamasa Momose, "Femtosecond pulse shaping in the mid infrared by difference frequency generation", J. Opt. Soc. Am. B. **24**(8), 1886–1900 (2007).
2. 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 (13 pages) (2007).
3. 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).
4. K. Shioya, K. Mishima, and K. Yamashita, "Quantum computing using molecular vibrational and rotational modes", Mol. Phys. **105**, 1283 (2007).
5. Y. Ohtsuki, and Y. Fujimura, "Optimal control of multi-photon isotope separation using ultra-short intense laser pulses: Density operator theory", Chem. Phys. **338**, 285–290 (2007).
6. 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)
7. 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).
8. 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).