

# 1P14

## 分子の電子状態と振動状態を用いた量子ゲートの最適制御

(東大院工<sup>1</sup>、JST-CREST<sup>2</sup>) 三嶋謙二<sup>1,2</sup>、山下晃一<sup>1,2</sup>

[erdao@tcl.t.u-tokyo.ac.jp](mailto:erdao@tcl.t.u-tokyo.ac.jp)

【序論】物理学の分野では、量子コンピュータや量子情報の理論的、実験的な研究が、前世紀末から、飛躍的な速さで推進されつつある。物質系としては、イオントラップ、NMR、量子ドット、超伝導素子、光子などが有望である。化学においては、分子が対象となる。分子の異なる2つの振動モードを2つの qubit と見なした理論的研究が2001年に初めて行われたが、分子の電子状態と1つの振動モードを qubit と見立てた研究はまだない。その際問題となるのは、2つの異なる電子状態 qubit が擁している振動状態が必ずしも正規直交系をなさないことである。量子コンピュータでは、qubit の2つの準位が正規直交系をなさなければ、効率的な演算はできない。しかし、振動状態が必ずしも正規直交系をなさないことが、量子演算において、有利であることがわかった。当研究では、最適制御理論(OCT)を用いて様々な量子ゲートの設計を数値的に行う。化学系としては、Na<sub>2</sub>分子とLi<sub>2</sub>分子をターゲットとし、それらの  $X^1\Sigma_g^+$  と  $A^1\Sigma_u^+$  電子状態を、電子状態 qubit の正規直交系をなす2準位とする。また、 $X^1\Sigma_g^+$  電子状態の擁する振動状態を、振動状態 qubit の正規直交系とし、 $A^1\Sigma_u^+$  電子状態の擁する振動状態をそれらの線形結合で表わすこととする。

【結果】我々は、予備的な数値計算により、振動状態が正規直交系をなさない電子基底、励起状態を用いれば、電子-振動状態の間に、レーザーを照射しただけで、量子演算の要であるエンタングルメント状態を生成することができることを確認した。このことは、多くの分子の電子-振動状態の間で、量子演算が可能であることを示唆している。次に、マルチターゲットを目的としたOCTによって、ユニバーサルな量子ゲートパルスを数値的に設計した。NOT、CNOT、Hadamard ゲートなどを設計したが、どのパルスでも、おおよそ、500fs から700fs のパルス長を持つものが、最大の平均遷移確率とフィデリティーを持つことがわかった(下図参照: NOT レーザーパルス)。それらは、おおよそ、最大0.9であった。その間に、波束は、2つの電子状態で2往復する。パルス長が短すぎると波束がポテンシャル上を十分 propagate することができず、目的の最終状態に達することができない。逆に、パルス長が長すぎると、波束がポテンシャルの非調和性のために形状を大いに崩してしまう。我々の研究結果は、電子と振動の自由度を用いても、Na<sub>2</sub>分子やLi<sub>2</sub>分子で、ある程度の効率で量子コンピュータの演算が可能であることを示唆している。詳細と数値的計算の結果は当日報告する。

