

量子系の数理と物質制御への展開

～量子ウォークを架け橋に～



会場 東北大学 情報科学研究科棟 大講義室 (2F)

日程 2014/09/17-09/18

主催

- ・ 東北大学重点戦略支援プログラム「数学をコアとするスマート・イノベーション融合研究共通基盤の構築と展開」
- ・ 統計数理研究所 数学協働プログラム(2014E01)

世話人：

瀬川 悦生 (東北大学)

松岡 雷士 (広島大学)

尾畑 伸明 (東北大学)

講演プログラム

09/17(水)

12:55

オープニング 尾畑 伸明 (東北大学)

13:00-13:50 今野 紀雄 (横浜国立大学)

「量子ウォークの定常性, 周期性」

量子ウォークの極限定理に関しては種々の結果が知られているが, それに対して, マルコフ連鎖の定常測度に対応するような結果は非常に限られている. 今回の講演では, それに関連する結果の紹介と未解決の問題について紹介したい.

14:00-14:50 横山 啓一 (日本原子力研究開発機構)

「放射性廃棄物の無害化技術と量子ウォーク」

中性子照射により放射性の核分裂生成物を安定核種に変換し放射能を消滅させる計画がある. 一部の核種は前処理として同位体分離が必要であるが, 技術的な見通しが立っていない. 分離技術のブレークスルーのため, 我々はテラヘルツレーザーを使った同位体選択的加熱の原理を提案した. これは連続時間量子ウォークを用いていることが判明した. さらに位相制御により離散時間量子ウォークにスイッチすると同位体選択性が完全になることを予測している.

15:00-15:50 川上 則雄 (京都大学)

「量子ウォークとトポロジカル量子現象」

量子ウォークは数理科学の研究対象としての興味だけでなく, 量子情報や物質科学への応用など幅広い分野において多くの関心を集めている. ここでは, 凝縮系物理 (物性物理) に関連した話題として, 量子ウォークを用いたトポロジカル量子現象の最近の研究について紹介する.

16:00-16:50 小栗栖 修 (金沢大学)

「離散シュレーディンガー方程式の共鳴散乱と位相について」

1次元シュレーディンガー方程式の散乱問題ではちょうど透過率が1のときに入射波と透過波の位相が円周率の整数倍ずれることは良く知られているが、今回はこの問題を1次元離散シュレーディンガー方程式で考えてみる.

17:00-17:30 森岡 悠 (芝浦工業大学)

「Spectral properties of Schrödinger operators on perturbed lattices」

平行移動周期性を持つ無限グラフ及びそれらを摂動したグラフ上の離散ラプラシアンのスเปクトル・散乱理論に関わる結果を紹介する. 特に, 連続スペクトルに埋蔵された固有値の存在・非存在に関する内容を報告したい.

17:40-18:10 和田 達明 (茨城大学)

「異常拡散を示す離散時間量子ウォークモデルとその拡張」

離散時間量子ウォーク (DTQW) のひとつの拡張として, 我々は隣接サイトの状態に依存する相互作用を取り入れたフィードフォワード量子コインを持つ DTQW モデルを提案した. 本モデルは異常に遅い拡散を示し, 長時間における確率分布の時間発展が多孔質媒質中の流体の輸送方程式である PME により記述される. また, 本モデルの更なる拡張モデルについて紹介する.

9/18(木)

09:00-09:30 市原 晃 (日本原子力研究開発機構)

「光による二原子分子の同位体選択的回転励起の理論計算」

二原子分子の回転状態は、一定の時間間隔で分子に入射する、規則的な光学パルス列を用いて励起させることが出来る。分子を剛体回転子とみなせる場合、この分子の励起過程は、連続時間量子ウォークにより表現できる。我々は、規則的な光学パルス列(光周波数櫛)を用いて二原子分子の回転状態を同位体選択的に励起させるためのパルス波形を、計算機シミュレーションを通して探っている。本発表では、先ず周波数櫛による分子の回転励起と量子ウォークとの関係、次に分子の遠心力歪みが回転励起に与える影響について触れる。そして現在取り組んでいる、逆周波数櫛を用いた分子の高回転励起の理論モデルとシミュレーション結果について報告する。

09:40-10:30 大槻 幸義 (東北大学)

「非線形相互作用下での量子最適化シミュレーション：アルゴリズム開発と分子レーザー制御への応用」

量子最適化シミュレーションは、系のハミルトニアンだけにに基づき、目的達成に最適なレーザー電場(一般に外場)を導く第一原理法である。分子ダイナミクスは複雑なので通常、電子・振動・回転運動を断熱的に分離し、近似ハミルトニアンでそれぞれを記述する。そのため電場に関して非線形な有効相互作用が現れる。本発表では最初に線形な相互作用下での双一次形式の最適化シミュレーションを紹介する。次に誘起双極子相互作用を通じた分子回転制御を例に、非線形相互作用へのアルゴリズムの拡張を説明する。分子レーザー制御の実験例を紹介し、それも踏まえてシミュレーション結果を議論する。

10:40-11:10 小布施 秀明 (北海道大学)

「量子ウォークにおけるトポロジカルな局在状態の制御」

コイン演算子が空間に依存するような量子ウォークでは、局在化と呼ばれる、ある場所における時間平均極限測度が正の有限値になる現象が知られており、その原因について数学的に盛んに研究されている。この局在化は、現在、物理学の分野で盛んに研究されているトポロジカル絶縁体、言い換えるとトポロジカル相、に起因する局在状態と関係することが最近の研究で分かってきた。本発表では、トポロジカル絶縁体に関する物理的な知見を用いることにより、量子ウォークにおける局在化・非局在化を制御する方法について紹介する。

11:20-11:50 鹿野 豊 (岡崎分子科学研究所)

「量子ウォークによる量子シミュレーション」

離散時間量子ウォークの応用例の一つとして、量子動力学シミュレーションがある。本講演では、これまでに実装されてきた離散時間量子ウォークをレビューし、どこまでの物理系が実装できるようになるとどんな量子動力学シミュレーションが出来るのかをお話する予定である。

11:55-12:15

ショートコミュニケーション

昼食

13:00-14:00

ポスターセッション

1. 蓑輪 祐人, 吉田 聖弥 (横浜国立大学)

「サイクル上のアダマールウォークの定常測度」

総頂点数が奇数のサイクル上のアダマールウォークの時間平均極限測度が一様測度になり、偶数の場合には一般に複雑な形になることは知られているが、その定常測度の詳細に関しては分かってはいない。例えば、一様測度が定常測度になることは確かめられるが、それ以外に存在するかなど、関連する結果について報告したい。

2. 松岡 雷士 (広島大学)

「周期的光パルス列中での分子回転ダイナミクスの理論研究」

周期的な光パルス列中での二原子分子の回転ポピュレーション分布のダイナミクスについて数理モデルと数値計算を組み合わせたアプローチを紹介する。回転分布の時間発展は最も理想的な状態で連続時間量子ウォークと一致することがわかっている。ここでは非理想的な場合として、分子の遠心力歪みや質量差による回転周期の不整合の影響が存在する場合にどこまで回転分布が発展しうるかを定量的に示すための単純なパラメーターの理論的導出と数値的検証について紹介する。また、実際に実験が行われている非共鳴パルス列中での連続的な回転ラマン過程への理論の拡張についても議論する。

3. **安食 徹, 新井 健太, 大槻 幸義, 河野 裕彦** (東北大学)

「量子デコヒーレンス抑制の最適制御シミュレーションと純粋度を用いたトラジェクトリ解析」

量子情報処理ではデコヒーレンスの抑制が必須であり, パルス列照射による種々の動的デカップリング機構が提案されている. 本研究では最適制御を用いて抑制法を系統的に解析する. また, 分布失活が無視できる場合, 1量子ビットのデコヒーレンスは密度演算子の非対角成分(2つのパラメータ)で記述できることに着目し純粋度に基づき2次元上のトラジェクトリで解析することを提案する.

4. **新井 健太, 大槻 幸義, 河野 裕彦** (東北大学)

「光格子中の冷却 KCs 分子を用いるスケーラブルな量子計算に関する実装シミュレーション」

DeMilleは光格子に捕捉された冷却 KCs 分子を量子ビットとして用いたスケーラブルな量子コンピュータのモデルを提唱した. ビット選択的な操作を実行するためには, 不均一な静電場によって誘起されたサイトごとに異なるわずかなシュタルクシフトの差を制御する. 本研究ではこの系において量子演算を行うマイクロ波パルスを実際に数値設計し, 実装に必要なスペックおよび課題などを具体的に議論する.

5. **吉田 将隆, 大槻 幸義, 河野 裕彦** (東北大学)

「最適な THz パルスとフェムト秒レーザーパルスを組み合わせた CO 分子の配向制御」
近年, THz 光源の進歩により分子整列・配向制御への応用が検討されている. しかし, THz パルス単独では十分なパルスエネルギーが得られないためレーザーパルスによる強電場との組み合わせが着目されている. ただし, 分子配向制御には空間的に非対称な相互作用が必要であり, 対称な相互作用しか実現できないレーザーパルスとの組み合わせに関する知見は十分とは言えない. そこで本研究では新規に開発したエネルギー固定の最適制御シミュレーションを用いて, 種々の THz パルス強度・レーザーパルスエネルギー下での最適な配向制御機構を明らかにする.

6. **小松 堯** (東北大学)

「2次元正方格子上の離散時間量子ウォークの極限分布」

多次元正方格子上の離散時間量子ウォークの研究は, 1次元上の量子ウォークに比べて, あまり知られていることが多くない. 2次元正方格子上の量子ウォークにおいては Watabe et al. (2008), Franco et al. (2011) が提案する具体的なモデルでは極限分布の形が明示的に与えられている. 本発表では, Franco et al. (2011)の拡張版に関する結果が得られたので, それを報告する.

14:00-14:50 楯 辰哉 (東北大学)

「ユニタリ推移作用素の固有値と局在化についての一考察」

本研究会の主題の一つである量子ウォークは、あるヒルベルト空間で定義される、ある種の有限伝搬性を持つユニタリ作用素として定義されている。ここで使っているユニタリ推移作用素という言葉は、このような性質を持つユニタリ作用素の総称であり、量子ウォークもその例である。本講演では、これらユニタリ推移作用素が固有値を持つ場合に、対応する推移確率の挙動について、特に局在化について的一般的かつ初等的な考察を行い、具体例において検証し議論したい。

15:00-15:30 行木 孝夫 (北海道大学)

「量子ウォークと力学系」

保測変換の誘導するユニタリ作用素を有限次元で近似するユニタリ行列の族を 2 例与え、これらから通常のランダムウォークを近似する量子ウォークを構成する。

15:40-16:10 松江 要 (統計数理研究所)

「単体複体上の量子ウォークの構築に向けて」

近年量子ウォークの諸性質に関して数理や応用の観点から様々に研究されているが、その中に幾何構造の抽出がある。グラフ上の離散時間量子ウォーク (Grover ウォークや Szegedy ウォーク) に対して、グラフのトポロジーと局在化などの量子ウォークの漸近挙動との関連が報告されている (Higuchi et. al., arXiv:1401.0154v1. 本節では量子ウォークの振る舞いと幾何構造の関係をより深く掘り下げるため、グラフの高次元化である単体複体上の量子ウォークの構築と、そのスペクトル解析を試みる。グラフ上の量子ウォークが自然な形で高次元化出来る事が期待される。

16:20-16:50 佐藤 巖 (小山高等専門学校)

「量子グラフから得られる量子ウォーク」

有限グラフの量子グラフの散乱行列と、有限グラフ上の離散時間量子ウォークの遷移行列の構造の類似性を下に、量子グラフの散乱行列の 4 つのタイプから、有限グラフ上の離散時間量子ウォークを 4 つ構成し、それらの関係を調べる。また、量子グラフの Gnutzmann-Smilansky 型散乱行列の特性多項式などについて述べる。