

## 第 18 回 AMO 討論会ポスター発表 要旨 2022 年 6 月 10 日・11 日

### 1. 加速器実験における超流動ヘリウム中 Rb 原子励起用レーザーのスペクトル最適化

光安陸大<sup>A,B</sup>、高峰愛子<sup>B</sup>、今村慧<sup>B</sup>、秋元彩<sup>A,B</sup>、伊藤愛美<sup>A,B</sup>、螺良健太<sup>A,B</sup>、菊地快<sup>A,B</sup>、上野秀樹<sup>B</sup>、松尾由賀利<sup>A,B</sup> (法大理工<sup>A</sup>、理研仁科セ<sup>B</sup>)

我々は超流動ヘリウム(HeII)環境とレーザー分光法を組み合わせた不安定核原子の核構造研究を行っている。加速器を使用した実験で超流動ヘリウム中に停止させた  $^{84}\text{Rb}$  原子の微細構造間隔の測定を目指しており、レーザーで励起した原子が脱励起する際に放出する吸収波長より長波長のレーザー誘起蛍光を、分光器を通して観測する。HeII 中の原子は光吸収断面積が真空中より格段に低いために、テーパアンプでパワー増幅したレーザー光を使用しているが、その ASE のために散乱光の観測波長成分が強く観測されてしまう。これを低減する策として吸収波長帯のみを透過する干渉フィルターを使った試験を実施し、性能評価を行った。

### 2. 超流動ヘリウム中レーザー分光のための不安定核原子 $^{84}\text{Rb}$ の停止位置最適化

菊地快<sup>A,B</sup>、今村慧、高峰愛子、螺良健太<sup>A,B</sup>、秋元彩<sup>A,B</sup>、伊藤愛美<sup>A,B</sup>、光安陸大<sup>A,B</sup>、Aleksey Gladkov<sup>B</sup>、田島美典<sup>B</sup>、郷慎太郎<sup>B</sup>、向井もも<sup>B</sup>、土居三瑠<sup>A,B</sup>、西村昌輝<sup>A,B</sup>、山本匠<sup>A,B</sup>、遠藤宏紀<sup>A,B</sup>、長谷正司<sup>C</sup>、川田敬太<sup>D</sup>、西端洗希<sup>B,E</sup>、市川雄一<sup>B,E</sup>、上野秀樹<sup>B</sup>、松尾由賀利<sup>A,B</sup> (法大理工<sup>A</sup>、理研仁科セ<sup>B</sup>、NIMS<sup>C</sup>、東大 CNS<sup>D</sup>、九大理工<sup>E</sup>)

我々 OROCHI グループでは、加速器施設において原子核反応で生成された不安定核に対して、超流動ヘリウム(HeII)環境とレーザー・RF/MW 二重共鳴法を利用したレーザー核分光法を開発しており、HIMAC において $^{84}\text{Rb}$ の超微細構造間隔測定を現在目指している。我々の HeII クライオスタットに入射する $^{84}\text{Rb}$ は $10^3 \sim 10^4$ 個/秒と少ないため、レーザー分光に最適な位置にできる限り多く停止させる必要がある。

そこで本研究では、LISE++を用いて最適なビーム条件を選定し、実際の加速器実験に適用、観測されたレーザー誘起蛍光強度の結果と比較することで、 $^{84}\text{Rb}$ の停止位置の最適化を行った。

### 3. 超流動ヘリウム中 Rb 原子バブル緩和時間測定に向けたスペクトル解析

遠藤宏紀<sup>A,B</sup>、石井邦彦<sup>C</sup>、今村慧<sup>B</sup>、高峰愛子<sup>B</sup>、竹内由衣花<sup>A</sup>、田原太平<sup>C</sup>、上野秀樹<sup>B</sup>、松尾由賀利<sup>A,B</sup> (法大理工<sup>A</sup>、理研仁科セ<sup>B</sup>、理研田原分子分光<sup>C</sup>)

我々は超流動ヘリウム (He II) 環境中に導入した原子が示す特徴的な性質を利用したレーザー分光研究を行っている。He II 中では、導入原子と He 原子間の斥力により、原子周囲に原子バブルと呼ばれる空乏領域が形成される。またその影響で、励起・脱励起スペクトルの波長が変化することが知られている。これは内部原子の電子軌道の変化に追従したバブルの変形に起因するものと考えられているが、実時間分光観測により検証した例はない。現在本研究では、時間相関単一光子計数法を適用し HeII 中でピコ秒レーザー励起による Rb 原子由来の D1 線の蛍光が観測されている。今後、より短波長側の蛍光の時間変化を捉えることで、緩和時間の初観測を目指している。

### 4. Evaluation of vibrational energies and wave functions on a quantum computer

Erik Lötstedt<sup>1</sup>, Kaoru Yamanouchi<sup>1</sup>, Yutaka Tachikawa<sup>2</sup> (<sup>1</sup>Department of Chemistry, School of Science, The University of Tokyo, <sup>2</sup>DIC Corporation)

A variety of methods have been developed for the calculation of electronic energy levels of molecules using quantum computers, but the calculation of vibrational energies of polyatomic molecules has received much less attention. We have developed a method called the reduced multistate contracted variational quantum eigensolver (RMC-VQE) method, in which matrix elements of the Hamiltonian are evaluated using a quantum computer, and the eigenenergies are obtained by diagonalization of the Hamiltonian matrix using a classical computer. We apply the method to a two-mode model of CO<sub>2</sub> and execute the quantum circuits on the quantum computer *ibm\_kawasaki*. After applying an error mitigation method, in which the systematic error caused by the noise is estimated by comparing with reference results obtained using a classical computer, we find that the energy levels of the Fermi resonance states can be obtained with an uncertainty of less than 0.1 cm<sup>-1</sup>. We also show how vibrational wavefunctions can be calculated on *ibm\_kawasaki* by measuring the expansion coefficients of the harmonic oscillator basis functions.

## 5. シュミット分解による多原子分子の高振動励起状態：振動モードの遷移過程とエントロピー

野村絢也、佐甲徳栄（日大理工）

少数量子多体系における複雑な節構造をもつ波動関数を定量的に特徴づけることを目的として、多原子分子の高振動励起状態に着目し、シュミット分解に基づく解析を行った。典型的なノーマルモード分子である  $\text{SO}_2$  分子と、典型的なローカルモード分子である  $\text{H}_2\text{O}$  分子について、振動力場展開法によって得られた個々の波動関数を数値的にシュミット分解し、「波動関数の非分離性」を表すフォン・ノイマンエントロピーの計算を行った。波動関数の節構造の変化とフォン・ノイマンエントロピーの関係、特に振動形態の遷移過程で生じるエントロピー値の変動に着目して議論する。

## 6. 捕捉イオン電子回折測定を目指した $\text{SF}_5^+$ イオンの質量選択的捕捉

芋生郁也<sup>1</sup>、鈴木貴裕<sup>2</sup>、山内薫<sup>2</sup>、歸家令果<sup>1</sup>（<sup>1</sup>東京都立大学大学院理学研究科化学専攻、<sup>2</sup>東京大学大学院理学系研究科化学専攻）

最近、 $\text{CCl}_3^+$  に対する捕捉イオン電子回折（TIED）法が実現され、多原子分子イオンの構造測定が可能となった。本研究では、 $\text{SF}_5^+$  の電子回折測定によって TIED 法の汎用性を検証することを目的として、イオントラップによる質量選択的捕捉実験を行った。中性  $\text{SF}_6$  ガスをイオントラップ内で解離性多光子イオン化し、トラップ条件を調整して  $\text{SF}_5^+$  イオンのみを質量選択的に捕捉した後に、捕捉イオンを飛行時間型質量分析法で測定した。検出された  $\text{SF}_5^+$  イオン量から  $\text{SF}_5^+$  の電子回折信号の強度は  $\text{CCl}_3^+$  の場合の約 50% と見積もられ、 $\text{SF}_5^+$  の TIED 測定が十分に実現可能であることが確認された。

## 7. Population transfer in a laser-driven three-level system by a noisy quantum computer

Takanori Nishi, Erik Lötstedt, and Kaoru Yamanouchi (Department of Chemistry, School of Science, The University of Tokyo)

We simulate the temporal evolution of the population transfer in a laser-driven three-level system, representing  $\text{N}_2^+$  suddenly exposed to an intense laser field, using an IBM Quantum computer. The wave packet is expressed on a fixed-depth quantum circuit using variational parameters. In order to mitigate the error originating from the imperfect gate control and the qubit decoherence, we apply the

Clifford data regression and reproduce qualitatively the temporal evolution of the population transfer among the three levels.