

## 第 19 回 AMO 討論会ポスター発表 要旨 2023 年 6 月 2 日・3 日

### 1. 経路積分分子動力学法を用いたミュオンニウム化キサンテンチオンの理論研究

桑畑 和明<sup>1</sup>、伊藤 繁和<sup>2</sup>、立川 仁典<sup>1</sup> (<sup>1</sup> 横浜市大生命ナノ、<sup>2</sup> 東工大物質理工)

本研究では、キサンテンチオン分子に吸着したミュオンの量子効果を経路積分分子動力学法を用いて調べた。その結果、量子効果によりミュオンと分子間の結合距離が伸びること、およびミュオンが分子面に垂直な構造を取りやすいことがわかった。このような量子効果はミュオンの分子からの中性乖離を促進、およびキサンテンチオン分子からの超共役結合を強めるため、量子効果はミュオンの超微細結合定数を増加する働きがあることを明らかにした。この結果は、実験結果と訂正的に一致した。

### 2. NV センターをデバイスとした電子状態エネルギー推定の量子アルゴリズムの実装シミュレーション

三上 翠跳、大槻 幸義 (東北大学院理)

量子コンピュータは重ね合わせ状態を用いることで、計算速度の劇的な向上を可能とする。電子状態計算は重要な応用例の一つであり、例えば、量子位相推定アルゴリズムを用いた full-CI 計算の方法が提案されている。一方で、現在、量子コンピュータのハードウェアは開発途上であり、多種多様な量子ビットの素子候補が提案・実装されてきた。本研究では、量子ビット素子として常温で長いコヒーレンス時間を持つダイヤモンド窒素-空孔中心のスピン量子ビットに分子のエネルギーを計算するアルゴリズムを実装するシミュレーションを行い、高い精度でエネルギー計算をすることが可能であることを示す。

### 3. 配列した多原子分子と電子の衝突立体ダイナミクス実験装置の開発 (II)

鈴木 優太<sup>1</sup>、鬼塚 侑樹<sup>1</sup>、大槻 幸義<sup>2</sup>、高橋 正彦<sup>1</sup> (<sup>1</sup> 東北大・多元研、<sup>2</sup> 東北大院・理)

電子と分子の衝突は、最も基本的な化学反応の一つであり、その物理化学的描像は衝突時の分子の向きにも依存する。しかし、気相分子はランダムに回転しているため、こうした電子散乱における分子配向依存性の理解は、従来直線分子のイオン化過程に制限されてきた。そこで我々は、電子・分子衝突の立体ダイナミクス研究のさらなる深化と展開に向けて、分子一般に適用可能であるレーザーによる分子配列・配向制御を取り込んだ電子散乱分光装置の開発を世界に先駆けて行なっている。講演では、分子配列シミュレーションの結果に基づき設計した装置の概要、および配列分子による電子散乱を達成する実験条件について議論する。

#### 4. 多原子分子の原子運動量分光の開発

金谷 諭<sup>1</sup>、鬼塚 侑樹<sup>1</sup>、渡邊 昇<sup>1</sup>、河野 裕彦<sup>2</sup>、高橋 正彦<sup>1</sup> (<sup>1</sup>東北大・多元研、<sup>2</sup>東北大院・理)

物質を構成する原子は例え絶対零度下でも運動し、様々な性質を発現している。そのような原子運動の観測のため、我々は、電子原子コンプトン散乱を利用することで分子中の原子の運動量を原子種ごとに観測する手法である原子運動量分光 (AMS) を開発している。そしてごく最近、気相二原子分子を対象とした実験・理論開発により AMS を新規分子分光法として確立した。これを受け、本研究では二原子分子に制限されていた AMS の理論の適用範囲を拡大するべく、多原子分子に適用可能な理論の開発・実証実験を行った。

#### 5. 低速・高偏極 RI ビーム生成に向けた中性化装置開発における $^{88}\text{Sr}^+$ イオンの冷却実験

福澤 悠亮<sup>1,2</sup>、今村 慧<sup>3</sup>、高峰 愛子<sup>2</sup>、Aleksey Gladkov<sup>2</sup>、加藤大河<sup>1,2</sup>、郷慎 太郎<sup>2</sup>、田島 美典<sup>3</sup>、松尾由賀利<sup>1,2</sup>、Rosenbusch Marco<sup>2</sup>、上野 秀樹<sup>2</sup> (<sup>1</sup>法大理工、<sup>2</sup>理研仁科セ、<sup>3</sup>JASRI)

現在我々は原子ビーム共鳴法 (ABR 法) を利用した低速・高スピン偏極 RI ビーム生成手法の開発を行っている。ABR 法とは、多重極磁石によるスピン選択と超微細構造遷移におけるスピントリップを組み合わせた手法で、安定線に近い不安定核の超微細構造間隔測定にも使われた実績があり、これを応用することで高いスピン偏極率の RI 原子ビーム生成が期待できる。ABR 法では、室温程度のエネルギーを持った原子ビームが必要であり、希少不安定核への適用は困難を極めてきた。そこで、線型 Paul トラップと協調冷却を利用した高効率中性化装置のオフライン開発を進めている。まず冷媒イオンとして使用する  $^{88}\text{Sr}^+$  のレーザー冷却実験を行ったのでこれを報告する。

#### 6. Real-space quantum dynamics simulation for NISQ devices

Kazuki Tsuoka<sup>1</sup>, Erik Lötstedt<sup>1</sup>, Kaoru Yamanouchi<sup>1</sup> (<sup>1</sup> Department of Chemistry, School of Science, The University of Tokyo)

One of the promising applications of quantum computing is a simulation of dynamical processes of quantum systems and several methods adopting quantum Fourier transform (QFT) have been proposed to simulate quantum dynamical processes in real space [1,2]. Because a time evolution operator cannot be implemented directly on a quantum computer, it needs to be split into operators for smaller time steps. In order to perform a time propagation of a wave function of the system by the QFT in which  $\Theta(n^2)$  CNOT gates are used, we need to introduce  $\Omega(n^2M)$  CNOT gates in the quantum circuit for the entire simulation, where  $n$  and  $M$  represent respectively the number of qubits and the number of time steps. Therefore, as long as currently available noisy intermediate-scale quantum (NISQ) devices are adopted, it is not realistic to set the time step sufficiently short so that

quantum dynamics can be simulated with a reasonable level of accuracy. In the present presentation, we propose another approach to the simulation of quantum dynamics in real space on a NISQ device and demonstrate its performance for a one-dimensional one-particle system using *ibm\_kawasaki* [3].

- [1] Kassal, S. P. Jordan, P. J. Love, M. Mohseni, and A. Aspuru-Guzik, *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **105**, 18681–18686 (2008).
- [2] G. Benenti and G. Strini, *Am. J. Phys.* **76**, 657–662 (2008).
- [3] IBM Quantum, *ibm\_kawasaki* falcon r5.11, 2021.

## 7. 超流動ヘリウム中 Ag 原子の超微細構造間隔測定に向けた DPSS レーザーのレーザーパワー最適化

高橋 翔輝<sup>1,2</sup>、今村 慧<sup>3</sup>、高峰 愛子<sup>2</sup>、遠藤 宏紀<sup>1</sup>、山本 匠<sup>1</sup>、上野 秀樹<sup>2</sup>、松尾由賀利<sup>1,2</sup> (<sup>1</sup>法大理工、<sup>2</sup>理研仁科セ、<sup>3</sup>JASRI)

我々は超流動ヘリウム(He II)環境に導入した原子の核分光研究を行っている。He II 中の原子に対し、光ポンピング法を用いてスピン偏極した原子のラジオ波/マイクロ波共鳴ピークを取得することで、ゼーマン準位間隔/超微細構造間隔を測定する。これまでに、He II 中での <sup>107,109</sup>Ag 原子に対する測定に成功している。しかし、光ポンピング法で用いている DPSS レーザーのパワー密度が高いと、原子の周りのヘリウムが超流動状態を保てない問題点が発生する。ポンピング用のレーザーの出力が高いほど、レーザー誘起蛍光が多く見えるため、DPSS レーザーの出力の最適化を行う必要がある。そこで、本研究では He II 中での Ag 原子のレーザー誘起蛍光の観測をし、DPSS レーザーの出力の最適化を行った。

## 8. レーザー誘起分子 3 次元整列の制御機構を予測する機械学習モデルの開発

難波知太郎、大槻 幸義 (東北大院・理)

レーザー誘起の 3 次元分子整列制御は分子固定系での分子のダイナミクスを測定・操作するために重要な技術の一つである。測定の際の外場の影響を小さくするため、超短レーザーパルスが用いられてきた。しかし、高い達成度が得られる外場のパラメータに関しては、分子ごとに設定する必要があった。そこで機械学習により任意の分子に対して制御機構を予測し、重要なパラメータを統一的に理解することを目指す。本研究では 0 K での整列制御を例に、入力に外場のパラメータと分子パラメータを持ち、整列度合いを出力する機械学習モデルを作成する。このモデルによって予測される制御のランドスケープ図をもとに、制御機構の変化について考察する。

## 9. 超流動ヘリウム中 Rb 原子の超微細構造異常測定に向けたマイクロ波掃引方法の検証

笹森 慎也<sup>1,2</sup>、高峰 愛子<sup>1</sup>、今村 慧<sup>1</sup>、遠藤 宏紀<sup>1,2</sup>、高橋 翔輝<sup>1,2</sup>、上野 秀樹<sup>1</sup>、土居 三瑠<sup>1,2</sup>、松尾由賀利<sup>1,2</sup> ( <sup>1</sup>理研・核構造研究部、<sup>2</sup>法政 大学)

我々の研究室では、超流動ヘリウム環境(He II)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。そこで、これまで He II 中の安定核原子 <sup>85,87</sup>Rb に対し有効数字 5 桁、<sup>133</sup>Cs に対し 6 桁の精度で超微細構造間隔が測定され、その値は真空中原子よりもわずかな増加が見られたため、He II は超微細構造異常まで議論できる環境下かを検証している。しかし、現在用いているマイクロ波発振器のアナログ周波数掃引では絶対値に多少のズレが起こりうる事を見出している。そこで、本研究において 6 桁の精度・確度で <sup>85,87</sup>Rb の超微細構造間隔測定を目的として、固定周波数マイクロ波を用いた測定を繰り返すスペクトル取得方法を考え、その精度・確度を検証した。

## 10. Quantum computing of orbital energies of $\pi$ -conjugated and hetero- $\pi$ -conjugated molecules

Ryuhei Yoshida<sup>1</sup>, Erik Lötstedt<sup>1</sup>, Kaoru Yamanouchi<sup>1</sup> ( <sup>1</sup> Department of Chemistry, School of Science, The University of Tokyo)

We have calculated the orbital energies of  $\pi$ -conjugated and hetero- $\pi$ -conjugated molecules such as benzene (C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>), cyclobutadiene (C<sub>4</sub>H<sub>4</sub>), and pyridine (C<sub>5</sub>H<sub>5</sub>N) by running quantum circuits on ibm\_kawasaki. By adopting two error mitigation methods, i.e., the spurious-state elimination method and the zero-noise extrapolation method (ZNE), we have shown that the orbital energies can be calculated with reasonably high accuracy.