

第 20 回 AMO 討論会ポスター発表 要旨 2024 年 6 月 7 日・8 日

1. Real-space quantum dynamics simulation on NISQ devices

Kazuki Tsuoka¹, Erik Lötstedt¹, Kaoru Yamanouchi^{1,2} (¹Department of Chemistry, School of Science, ²Institute for Attosecond Laser Facility, 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 the dynamical processes of quantum systems in real space [1, 2]. In order to perform a time propagation of a wave function of the system by 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 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 study, we propose an alternative approach to simulate quantum dynamics in real space on a NISQ device and demonstrate its performance for a one-dimensional one-particle system by simulating a quantum circuit with depolarizing noise.

- [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).

2. 希少 RI ビームのための高効率中性化装置開発に向けた六重極磁場中でのイオントラップシミュレーション

清水康熙^{AB}, Rosenbusch Marco^B, 高峰愛子^{BC}, 福澤悠亮^{BD}, 今村慧^{BE}, 郷慎太郎^B, 加藤大河^{BD}, 大野俊^{BD}, 小田島仁司^A, 上野秀樹^B (明大理工^A, 理研仁科セ^B, 九大理工^C, 法大理工^D, JASRI^E)

我々は広範な希少 RI ビームへの原子ビーム共鳴(ABR :Atomic Beam Resonance)法の適用を目指し、線形 Paul トラップと協調冷却を利用した中性化装置の開発を進めてきた。中性化した後に極力効率良く前方射出させるために、まずはトラップ軸方向へイオンを振動させ引き出す試験を行ったが、数 V の電圧が必要であることを見出し、そのままでは ABR 法への適用が難しくなる懸念がある。そこで、ABR 法で用いる六重極磁石内にイオントラップを設置し、その場で中性化する案を考えた。その一段階として、六重極磁場中でのイオントラップシミュレーションを行ったのでこれを報告する。

3. 超流動ヘリウム中 Rb 原子バブルの緩和実時間測定に向けたダイナミックストークスシフト中の蛍光測定

泉水飛輪^{1,2}、石井邦彦³、遠藤宏紀^{1,2}、高峰愛子^{2,4}、今村慧^{2,5}、善甫康成⁶、松尾由賀利^{1,2}、田原太平³、上野秀樹² (法大理工¹、理研仁科セ²、理研開拓本部³、九大理⁴、JASRI⁵、法大情報科⁶)

原子を超流動ヘリウム (He II) に導入すると原子バブルと呼ばれる空乏領域がその周囲に形成される。この状態で原子を励起すると、励起後に原子バブルの形状が電子軌道にあわせて変形 (緩和) することで蛍光放出の際に時間依存の放出波長の変化 (ダイナミックストークスシフト) が起こると考えられているが、He IIバルク環境でのこの測定研究例は現在までに存在しない。本研究では He IIバルク環境でのダイナミックストークスシフト中と考えられる蛍光の測定に初めて成功した。

また、我々は量子計算化学ソフトウェア Gaussian09W を用いた計算モデルの開発も行っており、現在使用している計算モデルの吟味を行った。

4. 超伝導転移端検出器を用いた中性粒子の運動エネルギー測定

高橋嶺^A、東俊行^B、D. A. Bennett^C、K. Chartkunchand^B、W. B. Doriese^C、J. W. Fowler^C、橋本直^B、原山朔弥^B、早川亮大^D、G. C. Hilton^C、一戸悠人^B、木村直樹^E、久間晋^B、中野祐司^F、野田博文^G、G. C. O'Neil^C、岡田信二^H、奥村拓馬^A、C. D. Reintsema^C、齋藤岳志^B、D. R. Schmidt^C、志岐成友^I、D. S. Swetz^B、竜野秀行^A、J. N. Ullom^C、山田真也^F (A 東京都立大学、B 理化学研究所、C NIST、D KEK、E 東京理科大学、F 立教大学、G 東北大学、H 中部大学、I 産業総合技術研究所)

化学反応で生成した分子の検出には主に質量分析法が用いられるが、イオン化に伴う分子解離により生成物の情報の一部が失われてしまう。粒子をイオン化せずに検出するために、我々は、宇宙 X 線観測用の超伝導転移端センサーマイクロカロリメーター (TES) を中性粒子検出器として用いることを提案する。TES は X 線吸収による温度上昇を高感度計測することでエネルギーを決定する検出器であり、運動エネルギーを熱に変換することで中性粒子の検出が可能である。本研究では TES により様々な原子の運動エネルギースペクトルを測定した。その結果、スペクトルのピーク形状は原子の質量数・運動エネルギーに依存して大きく変化することが分かった。

5. 超流動ヘリウム中 Rb 原子の超微細構造間隔測定に向けた励起用パルスレーザーの評価

大岩彩良^{A,B}、高峰愛子^{B,C}、遠藤宏紀^{A,B}、高橋翔輝^{A,B}、笹森慎也^{A,B}、泉水飛輪^{A,B}、上野秀樹^B、松尾由賀利^{A,B} (1 法大理工、2 理研仁科セ、3 JASRI)

我々は超流動ヘリウム環境に導入した原子のレーザー核分光研究を行っている。超流動ヘリウム中の原子に対し、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。本研究では超流動ヘリウムを用いた実験よりも安価かつ簡易的に状況を再現して行うことができる Rb 原子を封入したガスセルを用いた。そこで、励起用レーザーとしてパルスレーザーを用いて Rb ガスセル二重共鳴実験を行い、パルスレーザーの使用による二重共鳴信号への

影響を評価した。

6. 二時間グリーン関数のシュミット分解による時間モード選択的パラメトリック変換

野村絢也¹、佐甲徳栄² (¹ 東京都立大学、² 日本大学)

非線形結晶中の三波混合光パラメトリック周波数変換は、入力光パルス波形から特定のパルス波形を選択的に取り出す「量子パルスゲート」を実現する光学過程として、近年量子光学の分野で注目を集めている。量子パルスゲートは、信号検出時の背景雑音光と空間・時間的に重なった信号光を「時間モード」として抽出でき、信号検出技術への高い応用性を秘めている。本研究では、この変換過程を記述する三波共鳴相互作用方程式をシンプレクティック積分法によって数値積分し、入力光パルスから出力光パルスへの「二時間グリーン関数」の計算を行った。二時間グリーン関数をシュミット分解することで計算される「時間モード選択性」について議論する。

7. 高スピン偏極 RI ビーム生成に向けた原子ビーム共鳴装置開発

—Langmuir-Taylor 検出器の試験と六重極磁場中の原子の軌道計算—

加藤大河^{1,2}、郷慎太郎²、大野俊^{1,2}、伊藤由太³、高峰愛子^{2,4}、Rosenbusch Marco²、福澤悠亮^{1,2}、清水康熙^{2,5}、今村慧^{2,6}、松尾由賀利^{1,2}、上野秀樹² (¹ 法大理工、² 理研仁科セ、³ JAEA、⁴ 九大理、⁵ 明大理工、⁶ JASRI)

我々は、不安定核構造の解明や物性研究への応用を目的として、原子ビーム共鳴法 (Atomic Beam Resonance, ABR 法) を利用した高スピン偏極 RI ビーム生成手法の確立を目指している。

我々は現在、扱いが容易である安定核原子を使用して ABR 装置の開発・最適化を進めている。ABR 法には低エネルギーの原子ビームが望ましく、Rb ディスペンサーを使い、低エネルギー中性原子検出のためのワイヤー型検出器 (Langmuir-Taylor 検出器) のテストを行った。また、偏極ビームを生成するのに適した入射ビームの条件を知るために、ABR 装置 1 段目の原子スピン選択に使う六重極磁場中における原子の軌道を計算した。

8. 極低温イオン蓄積リングを用いた直線 3 原子分子イオン N_2O^+ のフェルミ共鳴準位を介する輻射振動冷却過程の測定

原山朔弥^{1,2}、木村直樹²、久間 晋²、Kiattichart Chartkunchand²、馬場正昭^{2,3}、村上龍大¹、高柳 敏幸¹、山口貴之¹、中野祐司^{2,4}、東 俊行² (¹ 埼玉大学、² 理研、³ 神戸大学、⁴ 立教大学)

直線 3 原子分子イオン N_2O^+ の振動状態には O-NN 伸縮振動、変角振動、ON-N 伸縮振動があり、振動状態を $(v_1 v_2 v_3)$ と表す。多原子分子では、異なる振動モード間のエネルギー準位が近く、振動波動関数の対称性が同じ場合に、それらの準位が結合してエネルギー準位が分裂する「フェルミ共鳴」が起こる。 N_2O^+ の基底電子状態はスピン-軌道相互作用によって $X^2\Pi_{1/2}$ と $X^2\Pi_{3/2}$ とに分裂しており、後者では (200) と (120) が結合する (図 1)。

本研究では、理化学研究所の極低温静電型イオン蓄積リング RICE を使い、 N_2O^+ におけるフェルミ共鳴の有無による輻射振動冷却過程の差異を測定した。

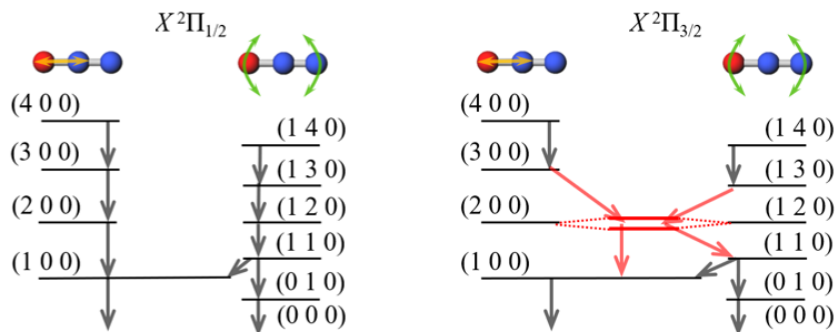


図 1 各基底電子配置における振動エネルギー準位と輻射冷却過程の模式図

9. 極低温ヘリウム液滴中のアニリン単分子イオン化過程の解明

久間 晋¹、井口有紗^{1,2}、Amandeep Singh³、田沼 肇²、東 俊行¹ (¹ 理研、² 都立大、³ USC)

ヘリウム液滴中に分子イオンを生成する手法として、中性分子を内包した液滴を電子衝突イオン化しその後の電荷移動を用いる方法が開発された。本研究ではアニリン分子を対象として極低温ヘリウム液滴内で進行する単分子イオン化反応を観測した[1]。生成イオン種の同定は、赤外振動スペクトルと量子化学計算との比較により行なった。その結果は芳香族の六員環が開き、五員環へと変化する反応経路の存在を示唆するものであった。さらに液滴中の光イオン化によるイオン生成過程との比較を行なった。

[1] A. Iguchi, A. Singh, S. Kuma, H. Tanuma and T. Azuma, *J. Mol. Spectrosc.* **401**, 111903 (2024).

10. 超流動ヘリウム中 Rb 不安定核原子のレーザー分光観測に向けたビーム診断真空チェンバー内における光電子増倍管の動作検証

望月真生^{A,B}、高峰愛子^{B,D}、菊地快^{A,B}、光安陸大^{A,B}、今村慧^{B,C}、大岩彩良^{A,B}、西村俊二^B、上野秀樹^B、松尾由賀利^{A,B} (A 法大理、B 理研仁科セ、C JASRI、D 九大理)

我々は原子核破砕反応で生成された不安定核原子に対して、超流動ヘリウム環境とレーザー分光を組み合わせた核分光法を開発している。これまでに、理研 RIPS ビームラインで 66 MeV/u のビームとして超流動ヘリウム中に導入された安定核原子である ^{87}Rb 原子からのレーザー誘起蛍光及び、レーザー・ラジオ波マイクロ波二重共鳴信号の取得に成功している。今後、理研 RIPS ビームラインで生成される約 50MeV/u の ^{84}Rb 入射ビームを用いた際に、エネルギーを極力減衰させずに観測領域に到達させるため、ビームが通過するチェンバーは付随する光電子増倍管を含めて真空化する必要がある。

本講演では、光電子増倍管を真空中で用いた場合の性能を評価し報告する。