

量子フロンティア研究室 Quantum Frontiers

強光子場分子科学・アト秒科学・量子コンピューティング

量子フロンティア研究室は、2023年3月までの量子化学研究室の活動を継ぐとともに、分子科学のフロンティアのさらなる拡大を目指して2023年4月に発足した。本研究室の山内特任教授は、文部科学省「光量子飛躍フラッグシップ」10年事業プログラムの一つとして、2017年に発足した「次世代レーザー領域(ATTO部門)」プロジェクトを部門長として推進し、日本国内におけるアト秒光源と先端計測技術の開発を通じてアト秒科学のフロンティアの開拓を目指して活動を進めている。

また、アト秒科学のフロンティアを開拓することを目指した国際的なユーザー利用施設である「アト秒レーザー科学研究施設」の設立をめざし、総長総括室の下に設置されたアト秒レーザー科学研究機構、および、理学系研究科附属アト秒レーザー科学研究センターと連携した活動を展開している。

本研究室では、超高速強光子場科学[1,2]およびアト秒科学[2,3]の推進とともに、量子アルゴリズムの構築とイオントラップ型量子計算機の実機の構築を目指し、CREST量子フロンティア領域「イオントラップqudit-boson型量子演算の実現」(2023年度採択)の下、量子コンピューティングに関する研究を、理化学研究所、東京科学大学、東京都立大学、DIC社、浜松ホトニクス社との連携体制の下に展開している。

強光子場分子科学

近年のレーザー技術の進歩に伴い、分子内の電場強度と同程度の大きさを持つ光子場 ($10^{15} - 10^{16}$ W/cm²) を生成することが可能となった。このような強光子場中では分子内の電子は、外場である光子場によって著しく擾乱を受け、分子の性質やダイナミクスは大きく変化する。そのような状況にある原子・分子系を研究することは、「光と物質の相互作用の本質」の理解を深めることになる(図1) [1, 2]。

本研究室では、これまで20年以上の期間、(1) 強光子場中においてクーロン爆発によって生成するフラグメントイオンの運動量ベクトル分布を画像化する「コインシデンス運動量画像法」を用いた炭化水素分子イオンにおける「超高速水素マイグレーション」、(2) 強レーザー場超高分解能フーリエ変換分光、(3) 強光子場中の原子および分子の動的振舞いを実時間で追跡するための「レーザーアシスト電子散乱法」および「レーザーアシスト電子回折法」の開発とフェムト秒領域の分子構造変化の実時間観測、(4) 数サイクルレーザーパルスの高次高調波発生とイオン・光電子計測を組み合わせたアト秒分光、(5) 気体媒質中に強レーザー光を集光して生成するレーザーフィラメント内で起こる励起素過程、(6) N₂レーズングのメカニズム、(7) 強光子場中の原子および分子とそのダイナミクスを記述する理論、(8) 量子コンピューターの分子科学への応用、(9) フェムト秒極端紫外光パルスをを用いた微細レーザー加工、などのテーマに取り組んで来た。

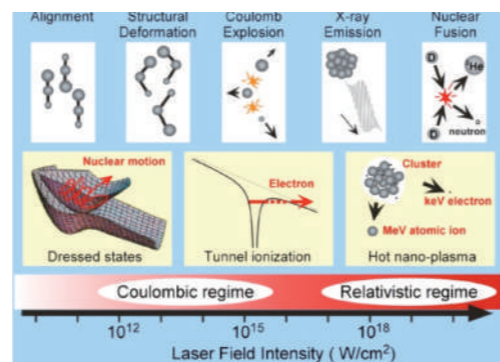


図1. 強光子場中における分子のダイナミクス [1,2]

超高速分子ダイナミクスの実時間計測と超高分解能SURF分光

分子に極端紫外光を照射すると、イオン化に伴い、分子イオンは電子基底状態だけでなく高電子励起状態にも生成する。分子イオンの高電子励起状態における振動および解離過程を実時間で追跡するために、数サイクル近赤外レーザーパルスとその高次高調波として発生させた極端紫外光をサンプルガスに照射できるポンププローブビームラインを構築するとともに、フラグメントイオンを位置敏感検出器によって捕捉する速度マップ画像分光器を開発した。この実験セットアップを用いて、O₂を試料としてポンププローブ計測を行い、O₂⁺の解離によって生じるO⁺イオンの運動エネルギー分布の遅延時間依存性を計測した(図2)。数値シミュレーションの結果、O₂⁺がa⁴Π_u状態において約40 fs周期で振動すること、そして、3²Π_g状態において数10フェムト秒かけて解離することを示した[4]。

数サイクル強レーザーパルスをを用いたメタノールのポンププローブコインシデンス計測の結果、H₃⁺の収量が周期的に変化する様子が観測され、そのフーリエ変換から得られた周期(約38 fs)がメタノールカチオンのC-O伸縮振動の周期に相当することが示された[5]。このフーリエ変換分光法の遅延時間の掃引幅を延ばすことによって、D₂⁺分子の振動数を10⁻⁴cm⁻¹の精度で決定した(図3)[6]。この強レーザー場超高分解能Fourier変換(strong-field ultra-high-resolution Fourier-transform: SURF) 分光における掃引時間を500 psまで延ばし、希ガス原子のスピ軌道準位の分裂エネルギーを10⁻⁷の精度で決定した[7]。さらに、新たに長尺干渉計を導入することによって、掃引時間を1.3 nsまで伸ばし、⁸³Kr⁺のスピ軌道準位の超微細構造を10⁻⁵cm⁻¹の精度で決定した[8]。

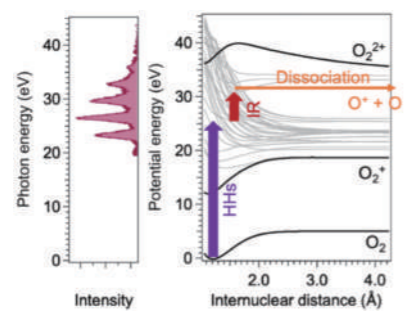


図2. ポンプ(極端紫外) - プローブ(近赤外)計測によるO₂⁺の高電子励起状態の超高速解離ダイナミクス [4]

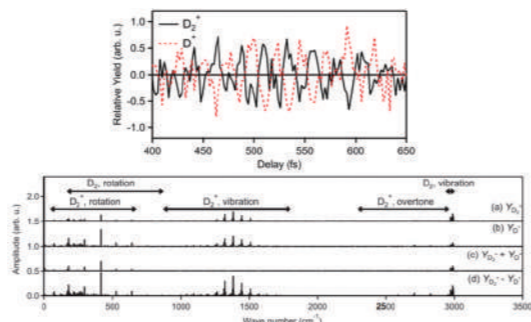


図3. SURF 分光計測によるDとD₂⁺の収量、およびそのフーリエ変換スペクトル[6]



特任教授 山内 薫
Kaoru Yamanouchi
1985年:東京大学大学院理学系研究科博士課程中退(理学博士)。
東京大学教養学部基礎科学科第一助手、同助教、東京大学大学院総合文化研究科広域科学専攻助教授を経て、
1997年:東京大学理学系研究科化学専攻教授
2023年:東京大学アト秒レーザー科学研究機構構長・特任教授
研究室:化学東館0230号室
E-MAIL:kaoru@chem.s.u-tokyo.ac.jp
TEL :03-5841-4334
FAX :03-5689-7347



准教授 加藤 毅
Tsuyoshi Kato
1996年:東北大学大学院理学研究科博士課程(博士(理学))。台湾原子分子科学研究所博士後研究員、科学技術特別研究員、東北大学反応化学研究所助手、分子科学研究所非常勤研究員、東北大学大学院理学研究科研究支援者を経て、
2006年より現職
研究室:化学東館0205号室
E-MAIL:tkato@chem.s.u-tokyo.ac.jp
TEL :03-5841-4336



准教授 Erik Lötstedt
2008年:ハイデルベルク大学物理学科博士課程(Ph.D)。ミズーリ科学技術大学博士研究員、東京大学大学院理学系研究科博士研究員、理化学研究所博士研究員、東京大学大学院理学系研究科助教を経て、2020年より現職。
研究室:化学東館0203号室
E-MAIL:lotstedt@chem.s.u-tokyo.ac.jp
TEL :03-5841-4417

助教 山田佳奈
Kana Yamada
研究室:化学東館0205号室
E-MAIL:k.yamada@chem.s.u-tokyo.ac.jp
TEL :03-5841-4336

EUVフェムト秒レーザー加工

希ガス媒質に高強度フェムト秒レーザーを集光すると、極端紫外領域の高次高調波が発生する。その極端紫外光パルスを表面精度が極めて高い集光ミラーで半導体や金属などの固体表面の微小スポットに集光し、サブミクロンサイズのレーザー加工を実現した(図4)[9, 10]。

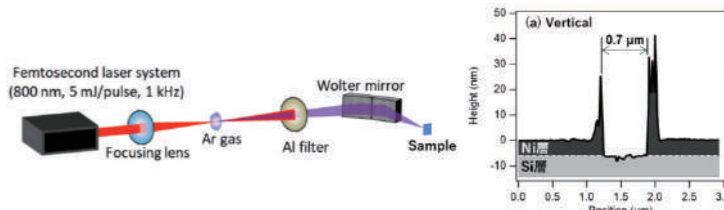


図4. 極端紫外フェムト秒レーザー加工のセットアップ(左)とNi薄膜コートされたSi基板に形成された加工痕(右)[10]

強光子場中分子動力学理論の開発

強光子場における原子や分子の多電子ダイナミクスを第一原理的に計算する方法論である時間依存多配置時間依存Hartree-Fock (multiconfiguration time-dependent Hartree-Fock:MCTDHF)法を拡張し、電子・プロトン波動関数の計算を行うことができる Extended MCTDHF法を開発した[11, 12]。分子に強レーザーパルスが照射されると、電子励起、振動励起、回転励起、イオン化等の過程が同時に進行する。そこで、Extended-MCTDHF法に基づいて、400 nmの数周期強レーザーパルスと相互作用するH₂⁺のシミュレーションを実行し、電子励起、振動励起、回転励起を適切に記述できることを明らかにした[13]。

量子コンピューターの分子科学への応用とイオントラップ型量子コンピューターの構築

近年、量子コンピューティングの分野では、ハードウェアとともにソフトウェアと量子アルゴリズムが目覚ましい勢いで進歩している。我々は、CO₂の振動波動関数 [14]、ヒュッケル分子軌道 [15]、スピン間相互作用 [16] の計算など、さまざまな問題に量子コンピューティングを適用してきた。そして、相互作用するスピン鎖ダイナミクスを現在利用可能な2つの方式の量子コンピューター、すなわち、IBM社の超伝導回路型量子計算機と Quantinuum 社のイオントラップ型量子計算機を用いてシミュレーションを行い、いずれの量子計算機の場合も、モデル量子系のダイナミクスを高い忠実度で計算できることを示した(図5)[17]。

また、強レーザー場と相互作用する3準位系の時間発展(図6)[18]や、光合成における電子エネルギー移動を表すspin-boson系のシミュレーション[19]を行い、適切なアルゴリズムと誤り抑制手法を選択することの重要性を示した。

一方、近年、イオントラップ型量子コンピューターの開発において、連続量型と呼ばれる方式は、高効率な量子エラー訂正を実行できるため注目されている。我々は連続量型におけるエンタングルメント制御法を、従来法に比べて高速かつ高精度で実行する手法を理論提案し、実験による実証を開始した [20]。

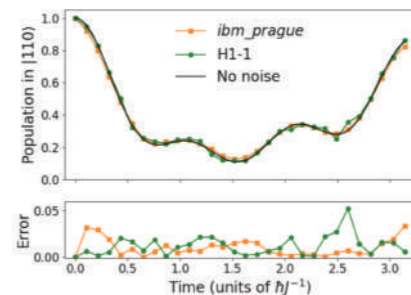


図5. 上のパネル: IBM社の量子コンピューター ibm_prague (ibm.com/quantum 参照)と Quantinuum 社の量子コンピューター H1-1 (quantinuum.com/ を参照)を用いて得られたスピ状態|110>の分布の時間依存性[17]。黒の実線は、理想的なノイズのない場合の結果。下のパネル: 理想的な場合の分布との差の絶対値。

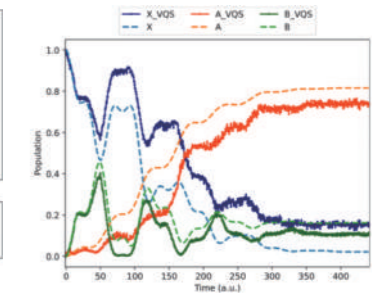


図6. NISO実機を用いたair-lasingのシミュレーション[18]

主な参考文献

1. K. Yamanouchi, *Science* **295**, 1659 (2002).
2. 山内 薫(編著)『強光子場分子科学』, 朝倉書店 (2022).
3. 山内 薫, じっさよう理科資料, 95, 1-5 (2024).
4. K. Yamada, T. Ando, A. Iwasaki, K. Yamanouchi, *to be submitted*.
5. T. Ando, A. Shimamoto, S. Miura, A. Iwasaki, N. Nakai, K. Yamanouchi, *Commun. Chem.* **1**, 7 (2018).
6. T. Ando, A. Iwasaki, and K. Yamanouchi, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 263002 (2018).
7. T. Ando, A. Liu, N. Negishi, A. Iwasaki, and K. Yamanouchi, *Phys. Rev. A* **104**, 033516 (2021).
8. T. Ando, K. Yamada, A. Iwasaki, K. Yamanouchi, *Phys. Rev. Lett.*, *submitted*.
9. H. Motoyama, A. Iwasaki, Y. Takei, T. Kume, S. Egawa, T. Sato, K. Yamanouchi, and H. Mimura, *Appl. Phys. Lett.* **114**, 241102 (2019).
10. H. Motoyama, A. Iwasaki, H. Mimura, K. Yamanouchi, *Appl. Phys. Express* **16**, 016503 (2023).
11. T. Kato and K. Yamanouchi, *J. Chem. Phys.* **131**, 164118 (2009).
12. T. Kato and K. Yamanouchi, *Phys. Rev. A* **85**, 034504 (2012).
13. E. Lötstedt, T. Kato, and K. Yamanouchi, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **57**, 235602 (2024).
14. E. Lötstedt, K. Yamanouchi, and Y. Tachikawa, *AVS Quantum Sci.* **4**, 036801 (2022).
15. R. Yoshida, E. Lötstedt, and K. Yamanouchi, *J. Chem. Phys.* **156**, 184117 (2022).
16. E. Lötstedt, L. Wang, R. Yoshida, Y. Zhang, and K. Yamanouchi, *Physica Scripta* **98**, 035111 (2023).
17. E. Lötstedt and K. Yamanouchi, *Chem. Phys. Lett.* **836**, 140975 (2024).
18. T. Nishi, E. Lötstedt, K. Yamanouchi, *AVS Quantum Sci.* **4**, 043801 (2022).
19. T. Nishi, K. Yamanouchi, *AVS Quantum Sci.* **6**, 023801 (2024).
20. T. Nishi, K. Yamanouchi, R. Saito, T. Mukaiyama, *Phys. Rev. A*, *in press*.