



| | |
|--------------|---|
| Title | 平均ハミルトニアン理論と最適制御に基づくNMR パルス系列の設計法 |
| Author(s) | 根来, 誠; 香川, 晃徳; 北川, 勝浩 |
| Citation | 大阪大学低温センターだより. 2017, 167, p. 8-10 |
| Version Type | VoR |
| URL | https://hdl.handle.net/11094/62119 |
| rights | |
| Note | |

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

平均ハミルトニアン理論と最適制御理論に基づく NMRパルス系列の設計法

基礎工学研究科 根来 誠, 香川 晃徳, 北川 勝浩

E-mail: negoro@ee.es.osaka-u.ac.jp

1. はじめに

古典コンピューティングを凌駕する量子コンピューティングの実装には、ある閾値より高いフィデリティを持った量子ゲートを多数用いる必要がある [1]。しかしながら、量子ビット系が外界と相互作用していると量子ゲートのフィデリティは墮落してしまう。外界との相互作用は量子ビット系に外部から摂動を加えて、例えば、NMR 分光の世界で古くから用いられてきた CPMG パルス系列を与えることで動的にデカップリングすることができる [2]。このようなパルス下においては実効的に相互作用ハミルトニアンが平均化されている。動的デカップリングをおこないながら量子ゲートを実装することもでき、これによって大幅に量子ゲートのフィデリティを向上させることができる。

しかしこれまで考えられてきた多くの動的デカップリングパルス系列は、デルタ関数パルスを仮定して設計されており、実験系ではパルス強度に制限があるためどうしてもデカップリング効率は下がってしまう。また、パルスの強度や位相にはどうしても系統誤差が含まれてしまい、これらが蓄積することでもやはりフィデリティは墮落する。近年、最適制御理論に基づいて、数値計算を用いて量子ゲートパルスを設計する研究がいくつかなされている [3]。この数値的設計法では、実験系の制約で有限の強度と周波数帯域のパルス照射しかできない場合やパルスパラメータに系統誤差がある場合等における最適な解を見つけることができる。ただし、これまでの数値的設計法では、系の詳細な情報を基に時間発展を逐一計算して最適な変調パルスを求めるため、系の大きさにしたがって指数関数的に難しくなる。

私たちはこれらの設計アプローチの双方の利点を生かすことのできる統合的なパルス系列の新設計法を提案した [4,5]。そして、私たちは新設計法によって生成されたパルス系列が、従来から知られていたパルス系列よりも高性能なデカップリングが可能であることが示せたのでこれを報告する。

2. 平均ハミルトニアン理論と最適制御理論に基づく設計法

固体中の核スピン系を考える。ある核種のスピン A の周りに別核種のスピン B が大量に存在し、A と B、また、B と B は互いに双極子相互作用により結合しているような系を考える。系の時間発展は双極子相互作用による内部ハミルトニアンと RF パルスによる外部摂動ハミルトニアンで記述される。外部摂動は周期的（周期 t_c ）であるとする。系の時間発展を理解しやすくするためにトグリング座標系に移行する。トグリング座標系とは外部摂動のみしかない場合に時間発展が打ち消される座標系である。この座標系における時間発展は以下のようにあらわされる。

$$\begin{aligned}
U(t_c) &= \exp\{-i\bar{H}t_c\}, \quad \bar{H} = \bar{H}^{(0)} + \bar{H}^{(1)} + \dots \\
\bar{H}^{(0)} &= \frac{1}{t_c} \int_0^{t_c} dt_1 \tilde{H}(t_1) \\
\bar{H}^{(1)} &= \frac{-i}{2t_c} \int_0^{t_c} dt_2 \int_0^{t_2} dt_1 [\tilde{H}(t_2), \tilde{H}(t_1)],
\end{aligned}$$

\bar{H} が平均ハミルトニアンと呼ばれるものである [6]。外部摂動周期が内部相互作用より十分早い場合高次の項は収束していくので、低次項のみを考慮するだけで時間発展が記述可能である。トリング座標系でのハミルトニアンを正規直交する演算子の組 $\{\Theta_\beta\}$ を用いて、

$$\begin{aligned}
\tilde{H}(t) &= \sum_\alpha h_\alpha \sum_\beta c_{\beta\alpha}(t) \Theta_\beta \\
c_{\beta\alpha}(t) &= \text{Tr}[U_{\text{RF}}(t) \Theta_\alpha U_{\text{RF}}^{-1}(t) \Theta_\beta] / \text{Tr}[\Theta_\beta^2],
\end{aligned}$$

とあらわすと、平均ハミルトニアンは、

$$\begin{aligned}
\bar{H}^{(0)} &= \frac{1}{t_c} \sum_{\alpha,\beta} h_\alpha \left\{ \int_0^{t_c} dt_1 c_{\beta\alpha}(t_1) \right\} \Theta_\beta \\
\bar{H}^{(1)} &= \frac{-i}{2t_c} \sum_{\alpha,\alpha'} h_\alpha h_{\alpha'} \sum_{\beta < \beta'} \left\{ \int_0^{t_c} dt_2 \int_0^{t_2} dt_1 \right. \\
&\quad \left. \times (c_{\beta'\alpha'}(t_2) c_{\beta\alpha}(t_1) - c_{\beta'\alpha}(t_1) c_{\beta\alpha'}(t_2)) \right\} [\Theta_{\beta'}, \Theta_\beta]
\end{aligned}$$

となる。

上式中の波括弧で囲まれた係数部分は、1スピンのヒルベルト空間の計算で簡単に解くことができる。残したい演算子の係数の和を、残したくない演算子係数の和で割ったものを評価関数とし、外部摂動のフーリエ級数をパラメータとする非線形計画問題に帰着させる。そして、数値最適化によって望みのハミルトニアンを実現するパルス系列が設計できる。最適化には遺伝的アルゴリズムと最急勾配法を用いた。従来の数値最適化によるパルス設計法は、上式において結合定数やスピン演算子の形状も含めたものをコスト関数にしていることに対応しており、この場合は多スピンのヒルベルト空間の計算を解く必要がある。

3. 性能評価

B-B間の相互作用だけをデカップリングしてA-B間の相互作用は残す選択的デカップリングのためのパルス系列を数値的に設計した。波形を図1に示す。比較として、従来から選択的デカップリングに用いられてきた MREV8パルス [7] 波形も図1に示す。

CaF₂単結晶を用いた固体NMR実験でデカップリング性能を比較した。結果を図2に示す。CaF₂ではF間の同種核間相互作用によりコヒーレンスがただちに消失してしまうが、これをデカップリングすればコヒーレンスが長く維持される。数値最適化によって設計されたパルスの方が、MREV8パルスよりも長くコヒーレンスが維持されているのが分かる。また、残したいハミルトニアンの方がどれだけ残っているかを示すスケールリングファクターに関しては、数値最適化パルスが 0.499 で、MREV8 が 0.432 であり、これも数値最適化パルスの方が高性能であることが示された。

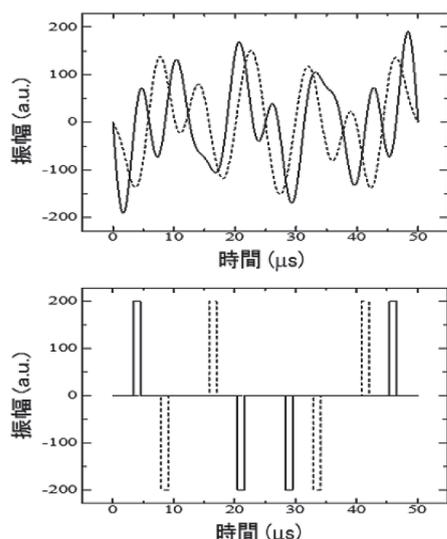


図1：選択的デカップリングパルス波形の一周期分。上が数値的に設計されたパルスで、下がMREV8。実線と点線はそれぞれパルスの同相成分と直交成分をあらわす。

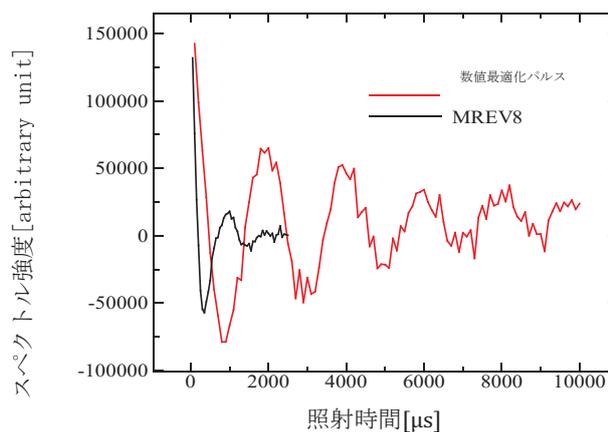


図2：選択的デカップリングパルス実験。

4. 今後の展望

本研究では選択的デカップリングパルスのデモンストレーションを行ったが、この手法ではスピнкаウンティングパルスなど従来からパルス系列が知られているものなら少なくとも適用可能であろうと期待される。また、今回は1次の平均ハミルトニアンまでしか考慮しなかったが、さらに高次項にも拡張することもできる。振動磁場強度の不均一性や較正誤差も考慮に入れて設計することも可能である。本方法はこれらを取り入れることで非常に高忠実度のハミルトニアンの生成を可能にし、量子情報処理実験の発展に寄与するものと期待される。

5. 謝辞

本研究は、当時大学院生であった田淵豊博士（現東京大学）とともに行われたものである。

参考文献

1. M. A. Nielsen and I. L. Chuang, Quantum computation and quantum information (Cambridge university press, Cambridge, 2000).
2. S. Meiboom and D. Gill, Rev. Sci. Instrum. **29**, 688 (1958).
3. N. Khaneja, et al., J. Magn. Reson. **172**, 296 (2005).
4. Y. Tabuchi and M. Kitagawa, arXiv:1208.5218.
5. Y. Tabuchi, *PhD. Thesis* (Osaka University, 2012).
6. R. R. Ernst, et al., “*Principles of Nuclear Magnetic Resonance in One and Two Dimensions*” (Oxford Univ. Press, 1990).
7. W. Rhim, et al., J. Chem. Phys. **58**, 1772 (1973).