

令和 6 年 5 月 28 日現在

機関番号：11301

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2020～2023

課題番号：20K05414

研究課題名(和文)強秩序系に対する超高速コヒーレント制御の最適化シミュレーション

研究課題名(英文)Optimal control simulation of ultrafast coherent dynamics of ferroic systems

研究代表者

大槻 幸義(Ohtsuki, Yuki Yoshi)

東北大学・理学研究科・准教授

研究者番号：40203848

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,400,000円

研究成果の概要(和文)：量子最適制御法を拡張し、パルスエネルギー拘束条件の取り込みおよび可変な中間時刻における制御目的の指定アルゴリズムを開発した。マルコフマスター方程式の下、新たに開発した最適制御シミュレーションにより、スピン系に対するデコヒーレンスの影響を系統的に調べ、系の純粋度を高い値に保つ制御機構を純粋度トラジェクトリ図による解析により明らかにした。一方、光学フォノンの相互作用モードを分子に模して、非共鳴レーザーパルスによる複素確率振幅の量子制御機構を最適制御シミュレーションにより明らかにした。特に、分布は変えずに相対位相を保つ非自明の制御法を見出した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

量子最適制御法はスピン系の制御を含む量子技術の開発に重要なシミュレーションツールであり、パルスエネルギー拘束条件や可変な中間時刻目的を扱えるようにアルゴリズムを拡張・開発できた意義は大きい。本手法は任意の量子系に適用可能であることから、基礎研究のみならず実用に向けた指針としても活用できる。デコヒーレンスの影響に関しては、純粋度トラジェクトリで表す新しい視点を提供した。量子系の制御にはしばしばレーザーパルスが用いられが、非共鳴レーザーパルスが共鳴パルスと同様に量子制御に有効であることを示すことで、今後の応用展開において光源選択の幅を大きく広げられたと考えている。

研究成果の概要(英文)：By extending the optimal control theory, we have developed the algorithms that explicitly specify the pulse-energy constraints and deal with the time variable intermediate targets. We have applied the newly developed optimal control simulation to the spin dynamics, which is described by the Markovian master equation, to systematically examine the decoherence effects. The important roles of the purity have been clarified with the help of the purity trajectory maps. We have modelled the interaction mode of the optical phonons with the molecular vibration and discussed the quantum control mechanisms with nonresonant laser pulses by using the optimal control simulation. We have found the nontrivial control scheme for solely adjusting the relative phases while avoiding the population redistribution.

研究分野：理論化学

キーワード：量子最適制御 量子制御 デコヒーレンス 量子計算 レーザーパルス

1. 研究開始当初の背景

レーザーパルスを使った高速の磁化(スピン)制御の最初の例として、強磁性体 Ni のフィルム試料に 60 fs のレーザーパルスを照射した超高速消磁がよく取り上げられる[1]。それ以降、レーザー誘起の超高速磁化制御はさまざまな観点から研究されている。例えば、フェリ磁性合金 GdFeCo の光磁気スイッチング実験では、レーザーパルスの円偏光の向きにより磁化の向きが制御できることが報告されている[2]。これは、超高速の磁気ビット記録への応用につながる研究である。そのよう背景の下、A. F. Bartelt 等は、Fe/Gd 多層膜におけるレーザー誘起の超高速消磁を実時間測定し、消磁の際のスピンと軌道角運動量の時間変化が一定割合で起こることを報告した[3]。翌年、G. P. Zhang 等は、この現象がスピンと軌道角運動量成分を含む 2 準位モデルを使ったコヒーレントダイナミクスにより説明できることを明らかにした[4]。これはレーザー誘起の磁化制御が単に超高速であるだけでなく、コヒーレントな過程の可能性を指摘している。実際、フェリ磁性体 (GdFeCo) ではあるが、レーザーパルスによるコヒーレントな磁化反転が報告された[5]。また、文献[6]では、Co および Fe の強磁性体の薄膜に対して、高強度の THz パルスを照射し、磁化ダイナミクスにおいてコヒーレントなスピン歳差運動と熱的なインコヒーレント効果の両方が寄与していると報告している。このように、本研究開始当初には、世界の多くの研究グループにより、コヒーレントな超高速磁化制御を目指した努力が進められていた。

一方、強誘電体においてはメモリへの応用を念頭に、集団(ソフトフォノン)モードを励起し電気双極子モーメントの向きすなわち分極の反転が試みられている。アイデアは集団運動を誘起し正・負電荷の相対位置をずらすというものである。例えば、THz パルスをを用いた直接のソフトフォノン光励起や、赤外レーザーパルスで励起した光学フォノンモードとの非調和カップリングを通じた間接励起法が報告されている[7]。量子技術への展開を踏まえ、本研究課題では最適制御理論に基づき、可能な限り最大のコヒーレント効果を利用した制御法の解明を目指し研究を開始した。

2. 研究の目的

強磁性体でのコヒーレントスピンダイナミクスに関して、デコヒーレンスを緩和演算子で表したマスター方程式で記述する。その上で、最小モデルの 1 スピン系(1 量子ビット)における詳細な制御法の検討を行い、複数スピン系へ拡張する。更に、近年の量子コンピュータ実機の登場を受け、ダイヤモンドの窒素空孔(NV)中心におけるスピン系の場合研究を通して量子アルゴリズムの実装をシミュレーションし、量子計算精度とデコヒーレンスの関係を明らかにする。

強誘電体の光学フォノンモードに関しては、固体物理学で使われる相互作用モードの考え方に基づき、有効 1 次元振動子で記述する。物理化学における高精度の分子分光法を積極的に活用するために、この有効振動子系を分子振動でモデル化する。量子制御の究極ゴールは確率振幅を操作し、制御目的を高確率で実現することである。これを踏まえ、複素確率振幅の絶対値のみ(分布) 複素確率振幅の相対位相のみ(分布は変えない) 分布と相対位相の同時制御に関して、モデル分子系の場合研究を通して系統的に明らかにする。なお、制御目的は、本研究課題で見出した新規の量子制御機構である。

3. 研究の方法

量子最適制御法は、運動方程式(ハミルトニアン)と制御目的の情報だけにに基づき制御に最適な外場(電場・磁場など)を設計するとともに、最適な制御外場の下でのダイナミクスを求める第一原理シミュレーションである。本研究全体を通して、研究代表者が開発してきた数値アルゴリズム、および本研究課題で新たに開発するシミュレーション手法を用いて課題を遂行する。なお本課題で着目する量子計算は、電子状態の Full CI 計算の量子アルゴリズムである反復的位相推定アルゴリズムである(成果 1-3)。この量子アルゴリズムに着目するのは、物理化学分野での電子状態計算の重要性に加え、デコヒーレンスの影響評価に利点があるためである。すなわち、反復的位相推定アルゴリズムが導く計算精度は、理想的には事前に設定した(2 進数で表された)有効桁で指定することができる。すなわち、計算精度(求められた有効桁)によりデコヒーレンスの影響を各桁ごとに具体的に評価できる。

4. 研究成果

(1-1) 単一量子ビットを用いた最適制御の準備評価計算

単一スピンモデルに対し、コヒーレント極限(シュレーディンガー方程式)、インコヒーレント極限(レート方程式)、その中間の非マルコフマスター方程式を仮定し、最適制御シミュレーションを適用した。表 1 に準備評価に用いた密度演算子を用いた方程式をまとめた。なお、相互作用には電磁波の磁場成分との双極子相互作用を仮定している。

コヒーレントな場合は、いわゆるパルスにより分布反転(磁化反転)誘起される。一方、インコヒーレントな場合に関しては、実際に最適制御理論に基づき終時刻などを変えて、さまざまな最適熱励起パルス $g(t)$ を数値的に求めた。図1に示すように、結果はパルス $g(t)$ の面積とレート方程式で完全に説明でき、基底・励起状態間の熱遷移レートが等しい場合は50%までの励起にとどまり分布反転は起きない。興味深いのは図2の非マルコフマスター方程式により近似した場合であり、単一スピンであっても最適パルスはパルス列となり高確率で分布反転が誘起されている。参考のため、最適パルスと同じ分布遷移を実現するガウスパルスを、直観的な探索で求め図示した。図2の結果は、非マルコフ緩和のパラメータを調整すれば、文献[6]の結果を説明できる可能性を示唆している。ただし、磁化の時間依存性は、ほぼTHzパルス形状と一致しておりコヒーレンスの寿命が極めて短いことを示している[6]。すなわち限りなく図1のインコヒーレントな場合に近い状況になっている。

表1 ダイナミクスを表す運動方程式

| ダイナミクス | 運動方程式 | |
|------------------------|---|--------------------------|
| コヒーレント | $\frac{\partial}{\partial t} \rho(t) = -\frac{i}{\hbar} [H(t), \rho(t)]$ | Zhang の解析 ^[4] |
| インコヒーレント ¹⁾ | $\frac{\partial}{\partial t} \rho(t) = -\frac{i}{\hbar} [H_0, \rho(t)] - \Gamma(t)\rho(t)$ | レート方程式 |
| 位相緩和 | $\frac{\partial}{\partial t} \rho(t) = -\frac{i}{\hbar} [H(t), \rho(t)] - \int_0^t d\tau \Gamma(t, \tau)\rho(\tau)$ | 非マルコフマスター方程式 |

1) $\dot{\rho}_{aa}(t) = \{-w_{ba}\rho_{aa}(t) + w_{ab}\rho_{bb}(t)\}g(t)$ ($a, b = 0, 1$) $g(t)$ 熱励起パルス
 w_{ab} 分布遷移レート

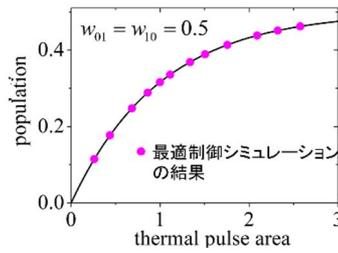


図1 インコヒーレントな場合の最適化とフィッティングの比較

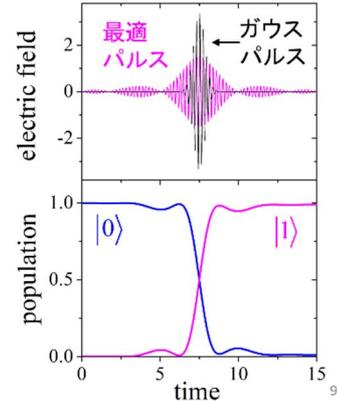


図2 非マルコフ近似下での最適磁場パルスと分布

(1-2) マルコフマスター方程式を用いたコヒーレンス生成・保持制御

強磁性体においてコヒーレントな磁化反転制御を実現するには、デコヒーレンスに打ち勝つ必要があるのは明らかである。そこでマルコフマスター方程式に従うモデル1スピン系を用いて、1:1 重ね合わせ状態の生成・保持制御をデコヒーレンスを系統的に変えつつ最適制御シミュレーションした。ただし、デコヒーレンス条件ごとに制御に用いるパルスフルエンスが変化してしまえば制御機構の解析が困難になる。そこで我々は、パルスフルエンス指定(新たな拘束条件を追加)の最適化アルゴリズムを開発した[8]。このアルゴリズムの大きな利点は、数値精度とほぼ同じ精度で、パルスフルエンスの拘束条件を数値的に実現できることである。更に、目的値に単調に収束することは数値的に示すだけでなく、数学的にも証明した。最適化問題として解くに当たり、問題の設定の仕方には任意性がある。そこで、制御目的を演算子の期待値で指定した場合と、期待値の2乗で指定した場合の比較検討も行った。その結果、コヒーレンス生成・保持の度合いがほぼ同様であるものの、形状の異なる最適磁場パルスが得られた。実験応用を考えた場合、パルス形状を決めるための新たな自由度が得られたと言え、応用の幅が広がる結果と考えている。

コヒーレンス生成・保持に関しては、系の純粋度が制御機構を決めるのに重要な役割を果たしていることを明らかにした。この観点から、純粋度トラジェクトリとして表示する解析法を提案した[8]。図3に最適磁場の下での純粋度トラジェクトリを等高線とともに表示した。図3では等時間間隔ごとのトラジェクトリの位置をマル印で示してある。できるだけ長い時間、純粋度を高い値に保つようにトラジェクトリが移動し、終時刻付近で急速に最小値である0.5に近づくことが分かる。

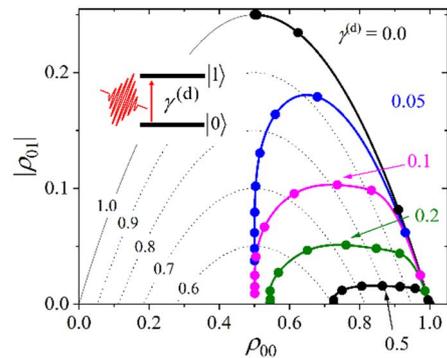


図3 系の純粋度トラジェクトリ
デコヒーレンス値は図中に示す[8]

(1-3) NV センターへの量子アルゴリズムの実装シミュレーション

本研究は量子技術における基礎的な知見の提供も目指している。現状、強磁性体を直接の応用は難しいこと、および固体デバイスを念頭に置いてダイヤモンドの窒素空孔中心のスピン系に着目した。この系は常温で動作する最小の量子計算機とみることでもできる。水素分子の電子状態の Full CI 計算を ST0-3G および 6-31G 基底関数を使い、量子計算を実装シミュレーションした。具体的には反復的量子位相推定

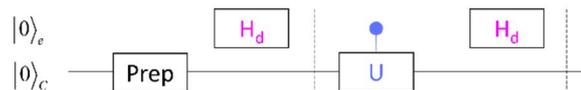
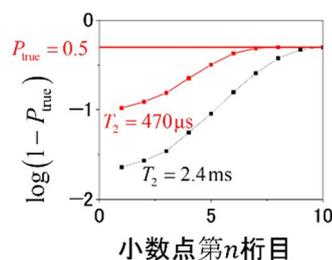


図4 ST0-3G での Full CI 計算の量子回路

(IQPE) アルゴリズム[9]を、初期化、アダマール変換、制御ユニタリ演算の3つの部分に分割し、各量子演算を実行する磁場パルス(演算子として働く)を最適制御理論で数値設計した。NV センターのスピン系に対するデコヒーレンスは、P1 欠陥(孤立したN2 欠陥)の濃度で調整できる。典型例として電子スピンのコヒーレンス寿命が470 μs [10]および2.4 ms [11]の場合の計算精度(2進数で表した小数点)を図5にまとめる。ST0-3G での Full CI 計算結果であり、縦軸の値が0.5は計算不能であることを意味している。なお、ここではデコヒーレンスの影響だけを見ており、デコヒーレンスの抑制制御は行っていない。長寿命のコヒーレンス時間(2.4 ms)を有するNV センター試料においても、量子エラー訂正が不可欠であることが分かる。図5 計算精度のまとめ



(2) 相互作用モードを模したモデル分子系に対する非共鳴パルスを使った量子制御

量子制御の究極ゴールは確率振幅を操作し、制御目的を高確率で実現することである。基本的な制御の要素は、複素確率振幅の絶対値のみ(分布)の制御、複素確率振幅の相対位相のみ(分布は変えない)の制御、分布と相対位相の同時制御である。~ の各制御目的に対し、最適制御シミュレーションを適用し最適パルスの形状および制御機構を明らかにした。なお以下に述べる利点から、ヨウ素分子をモデル系とする。電子励起 B 状態の振動波束を考えることで、初期状態を高精度で準備できる(整形ポンパルスの利用など)。また、電子励起状態を考えることで、分子であっても大きな分極相互作用を実現できる。以下に、, , の順番で、各制御に関する結果をまとめる。

選択的な分布遷移[14]

初期固有状態 $v=30$ から $v=31$ への選択的な分布遷移を目的とした。多準位系であるので、ラマン遷移による選択励起を考えた場合、遷移振動数の違いを周波数分解するには $\sim 33T$ の制御時間が必要である。なお、 $T = 482$ fs は2つの振動状態のエネルギー差から見積もった振動周期である。実際、上記よりも長い制御時間の下では、いわゆるラマン パルスが最適解として得られた。一方、最適制御シミュレーションからは短い制御時間でも、ほぼ100%の確率で分布遷移が可能であることを見出した。大きなラマン非共鳴を導入することで、弱め合う量子干渉を積極的に活用し、目的の状態以外への分布遷移を短時間でゼロにしていると解釈できる。一方、このラマン非共鳴は、目的の状態へ遷移するための強め合う量子干渉も弱めてしまう。このマイナスの効果を打ち消すため、最適パルスは パルスよりもずっと大きなパルス面積を有する。

分布と相対位相の同時制御(いわゆる波束整形制御)[14]

分布に関しては複数分布を同時励起するために、遷移振動数の違いを周波数分解できない短時間制御を積極活用する。一方、相対位相は主に、自由時間発展を通して調整されることを見出した。後者の制御機構は共鳴パルスを使った波束整形制御と同様のものである[15]。

複素確率振幅の相対位相のみ(分布は変えない)[12-14]

弱いポンパルスの下(1次摂動論が成り立つ)で、 $t=0$ における初期波束が定義できることを利用した。特に、系統的な知見を得るために、同一の振動状態を分布をもちつつ異なった初期相対位相をもつ初期波束をチャープパルスで生成し位相緩和抑制制御を試みた。ここで位相緩和抑制とは、振動波束が毎振動周期ごとに初期波束と同じ形状に戻る制御を意味する。図6には、17振動周期に渡って初期波束の形状を保つ制御を行った結果をチャープレートの関数として表している。制御が完全なときは定量指標 $\langle F \rangle = 1$ に対応する。チャープレートがゼロ付近では $\langle F \rangle = 1$ であるのに対し、それ以外では $\langle F \rangle$ の値の低下がみられる。すなわち、初期振動波束が空間的に局在化しているほど、より効果的に位相緩和を抑制できることが分かる。これは分極率相互作用が座標依存性を持つため、空間的に広がった波束全体を必ずしも完全に制御できないためと解釈している。

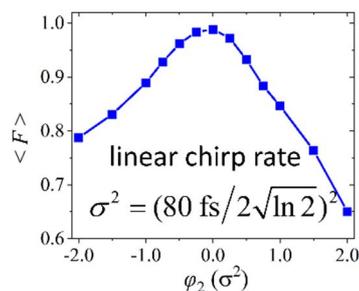


図6 位相緩和抑制度合い $\langle F \rangle$ のチャープレート依存性[14]

~ の結果は、非共鳴パルスであっても、共鳴パルスと同様に複素確率振幅を高確率で制御できることを示しており、制御光源の選択の幅を大きく広げることができる。

<引用文献>

- [1] E. Beaurepaire et al., *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4250 (1996).
- [2] C. D. Stanciu et al., *Phys. Rev. Lett.* **99**, 047601 (2007).
- [3] A. F. Bartelt et al., *Appl. Phys. Lett.* **90**, 162503 (2007).
- [4] G. P. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 187203 (2008).
- [5] I. Radu et al., *Nature* **472**, 205 (2011).
- [6] M. Shalaby et al., *Phys. Rev. B* **98**, 014405 (2018).
- [7] R. Mankowsky et al., *Phys. Rev. Lett.* **118**, 197601 (2017) [see also, *Phys. Rev. Lett.* **123**, 129701 (2019)].
- [8] Y. Ohtsuki et al., *J. Chin. Chem. Soc.* **63**, 87 (2022).

- [9] A. Aspuru-Guzik et al., *Science*, **309**, 1704 (2005).
- [10] E. Bauch et al., *Phys. Rev. B* **102**, 124210 (2020).
- [11] E. D. Herbschleb et al., *Nat. Commun.* **10**, 3766 (2019).
- [12] H. Katsuki et al., *Phys. Rev. Res.* **3**, 043021 (2021).
- [13] Y. Ohtsuki et al., *Phys. Rev. A* **104**, 033107 (2021).
- [14] R. Ishii et al., *Phys. Rev. A* **109**, 033112 (2024).
- [15] B. Kohler et al., *Phys. Rev. Lett.* **74**, 3360 (1995).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計6件（うち査読付論文 6件/うち国際共著 1件/うちオープンアクセス 0件）

| | |
|--|-----------------------|
| 1. 著者名 Y. Ohtsuki, S. Mikami, T. Ajiki, D. J. Tannor | 4. 巻 70 |
| 2. 論文標題 Optimal control for maximally creating and maintaining a superposition state of a two-level system under the influence of Markovian decoherence | 5. 発行年 2023年 |
| 3. 雑誌名 J. Chin. Chem. Soc. | 6. 最初と最後の頁 328 340 |
| 掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1002/jccs.202200451 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 該当する |
| 1. 著者名 Y. Kurosaki, K. Yokoyama, Y. Ohtsuki | 4. 巻 2611 |
| 2. 論文標題 Quantum control of isotope-selective molecular orientation | 5. 発行年 2022年 |
| 3. 雑誌名 AIP Conference Proceedings | 6. 最初と最後の頁 20010 |
| 掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1063/5.0119362 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |
| 1. 著者名 Y. Ohtsuki, T. Namba, H. Katsuki, K. Ohmori | 4. 巻 104 |
| 2. 論文標題 Optimal control for suppressing wave packet spreading with strong non-resonant laser pulses | 5. 発行年 2021年 |
| 3. 雑誌名 Physical Review A | 6. 最初と最後の頁 33107 |
| 掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevA.104.033107 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |
| 1. 著者名 H. Katsuki, Y. Ohtsuki, T. Ajiki, H. Goto, K. Ohmori | 4. 巻 3 |
| 2. 論文標題 Engineering quantum wave-packet dispersion with a strong non-resonant femtosecond laser pulse | 5. 発行年 2021年 |
| 3. 雑誌名 Physical Review Research | 6. 最初と最後の頁 43021 |
| 掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevResearch.3.043021 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |

| | |
|---|---------------------|
| 1. 著者名 T. Namba, M. Yoshida, Y. Ohtsuki | 4. 巻 153 |
| 2. 論文標題 Machine-learning approach for constructing control landscape maps of three-dimensional alignment of asymmetric-top molecules | 5. 発行年 2020年 |
| 3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics | 6. 最初と最後の頁 24120 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0012303 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |

| | |
|--|---------------------|
| 1. 著者名 R. Ishii, T. Namba, H. Katsuki, K. Ohmori, Y. Ohtsuki | 4. 巻 109 |
| 2. 論文標題 Optimal control for manipulating wave packets through polarizability interactions induced by nonresonant laser pulses | 5. 発行年 2024年 |
| 3. 雑誌名 Physical Review A | 6. 最初と最後の頁 33112 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevA.109.033112 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |

〔学会発表〕 計22件 (うち招待講演 0件 / うち国際学会 3件)

| |
|---|
| 1. 発表者名 三上翠帳, 大槻幸義 |
| 2. 発表標題 最適制御法を用いたNVセンター量子ビットによる電子状態計算のシミュレーション |
| 3. 学会等名 第17回分子科学討論会 |
| 4. 発表年 2023年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 石井玲音, 難波知太郎, 香月浩之, 大森賢治, 大槻幸義 |
| 2. 発表標題 非共鳴レーザーパルス誘起の双極子相互作用を使った振動波束の量子最適制御 |
| 3. 学会等名 第17回分子科学討論会 |
| 4. 発表年 2023年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 三上翠跳, 大槻幸義 |
| 2. 発表標題 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 |
| 3. 学会等名 第19回AMO討論会 |
| 4. 発表年 2023年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 三上翠跳, 大槻幸義 |
| 2. 発表標題 最適制御法を用いたNVセンターへの量子位相推定アルゴリズムの実装シミュレーション |
| 3. 学会等名 第24回理論化学討論会 |
| 4. 発表年 2022年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 難波知太郎, 大槻幸義 |
| 2. 発表標題 レーザー誘起の分子整列制御ランドスケープ図を予測する機械学習モデルの開発 |
| 3. 学会等名 第24回理論化学討論会 |
| 4. 発表年 2022年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 T. Namba, R. Ishii, S. Mikami, T. Nakajima, and Y. Ohtsuki |
| 2. 発表標題 Highly efficient photochemical reactions induced by optimal laser pulses: Applications to machine learning and quantum computation |
| 3. 学会等名 The 12th International Symposium of Advanced Energy Science (国際学会) |
| 4. 発表年 2022年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 石井玲音, 難波知太郎, 大槻幸義, 香月浩之, 大森賢治 |
| 2. 発表標題 非共鳴レーザーパルス誘起のラマン遷移を用いる振動波束制御法の開発 |
| 3. 学会等名 第16回分子科学討論会 |
| 4. 発表年 2022年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 三上翠跳, 大槻幸義 |
| 2. 発表標題 最適制御法によるNVセンタースピン量子ビットを用いた電子状態計算の実装シミュレーション: デコヒーレンスの影響 |
| 3. 学会等名 第16回分子科学討論会 |
| 4. 発表年 2022年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 難波知太郎, 大槻幸義 |
| 2. 発表標題 機械学習により予測するレーザー誘起の整列制御ランドスケープ図 |
| 3. 学会等名 第16回分子科学討論会 |
| 4. 発表年 2022年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 難波知太郎, 大槻幸義 |
| 2. 発表標題 機械学習が予測するレーザー誘起分子整列の制御ランドスケープ図 |
| 3. 学会等名 日本化学会 第103春季年会 |
| 4. 発表年 2023年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 T. Namba, R. Ishii, T. Nakajima, H. Katsuki, K. Ohmori, Y. Ohtsuki |
| 2. 発表標題 Highly efficient photochemical reactions induced by optimal laser pulses: Quantum optimal control with machine learning |
| 3. 学会等名 The 12th International Symposium of Advanced Energy Science (国際学会) |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 難波知太郎, 吉田将隆, 大槻幸義 |
| 2. 発表標題 機械学習によるレーザー誘起の分子3次元整列の制御ランドスケープ図の予測 |
| 3. 学会等名 第23回理論化学討論会 |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 石井玲音, 難波知太郎, 大槻幸義, 香月浩之, 大森賢治 |
| 2. 発表標題 非共鳴レーザーパルスを用いる新規の位相緩和抑制法の提案: 最適制御アプローチ |
| 3. 学会等名 第23回理論化学討論会 |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 難波知太郎, 大槻幸義 |
| 2. 発表標題 機械学習に基づく制御ランドスケープ図の予測: レーザー誘起分子3次元整列の温度依存性 |
| 3. 学会等名 第15回分子科学討論会 |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 石井玲音, 難波知太郎, 大槻幸義, 香月浩之, 大森賢治 |
| 2. 発表標題 非共鳴レーザーパルスを用いた位相緩和抑制の最適制御シミュレーション |
| 3. 学会等名 第15回分子科学討論会 |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 難波知太郎, 大槻幸義 |
| 2. 発表標題 機械学習が予測するレーザー誘起分子整列の制御ランドスケープ図 |
| 3. 学会等名 日本化学会 第102春季年会 |
| 4. 発表年 2022年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 石井玲音, 難波知太郎, 大槻幸義, 香月浩之, 大森賢治 |
| 2. 発表標題 最適制御シミュレーションによる非共鳴レーザーパルスを用いた振動波束制御法の開発 |
| 3. 学会等名 日本化学会 第102春季年会 |
| 4. 発表年 2022年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 T. Namba, M. Yoshida ¹ , T. Nakajima, and Y. Ohtsuki |
| 2. 発表標題 Highly Efficient Photochemical Reactions Induced by Optimal Laser Pulses: Machine-learning approach |
| 3. 学会等名 The 11th International Symposium of Advanced Energy Science (国際学会) |
| 4. 発表年 2020年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 難波知太郎, 吉田将隆, 大槻幸義 |
| 2. 発表標題 機械学習を用いた制御ランドスケープ図の作成: 非対称コマ分子の3次元整列 |
| 3. 学会等名 分子科学会 オンライン討論会 |
| 4. 発表年 2020年 |

| |
|------------------------------------|
| 1. 発表者名 難波知太郎, 吉田将隆, 大槻幸義 |
| 2. 発表標題 機械学習を用いた分子3次元整列の制御機構の予測 |
| 3. 学会等名 日本化学会大101春季年会 |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 T. Namba, M. Yoshida, and Y. Ohtsuki |
| 2. 発表標題 Application of machine learning to analyze laser-induced alignment control of asymmetric-top molecules |
| 3. 学会等名 令和2年度化学系学協会東北大会 |
| 4. 発表年 2020年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 M. Nishikata, T. Namba, and Y. Ohtsuki |
| 2. 発表標題 Optimal control of laser-induced ultrafast magnetization via spin-orbit coupling |
| 3. 学会等名 令和2年度化学系学協会東北大会 |
| 4. 発表年 2020年 |

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

| | 氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号) | 所属研究機関・部局・職 (機関番号) | 備考 |
|--|---------------------------|-----------------------|----|
|--|---------------------------|-----------------------|----|

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

| 共同研究相手国 | 相手方研究機関 |
|---------|---------|
|---------|---------|