

自己評価報告書

平成 23 年 3 月 31 日現在

機関番号：32612

研究種目：基盤研究（C）

研究期間：2008～2011

課題番号：20550021

研究課題名（和文） 強レーザー場による空間分割を利用した量子制御理論の構築

研究課題名（英文） Theoretical study on quantum control based on effective decomposition by intense CW-laser fields

研究代表者

菅原 道彦（SUGAWARA MICHHIKO）

慶應義塾大学・理工学部・講師

研究者番号：40276415

研究分野：化学

科研費の分科・細目：基礎化学・物理化学

キーワード：化学物理、量子制御、レーザー、空間分割

1. 研究計画の概要

近年のレーザー技術の進歩を背景に、従来レーザーを、目的の量子状態へ遷移させるための道具として活用する「量子制御」の概念が広く受け入れられるようになってきた。しかし、コヒーレンスの破壊を伴う緩和現象は、分子系の量子制御における大きな障害として認識されている。そこで、本研究では強レーザー場を用いた空間分割による緩和過程の排除と動力学時定数の制御の可能性を理論的に示すとともに、実際にその制御描像を具体的分子に適用しその有用性を確認する。

2. 研究の進捗状況

第1段階の理論的定式化については、強レーザー場と分子系との相互作用をドレスト描像を用いて記述し、シュレディンガー方程式をラプラス変換して得られるグリーン関数表示の方程式に射影演算子法を適用することにより定式化を行った。グリーン関数の表式の中のレーザーパラメーター依存性を詳細に検討し、制御対象空間を孤立化させるために必要なレーザー照射条件を明らかにした。また、孤立化された制御空間の動力学を規定する有効ハミルトニアンを導出に成功した。このハミルトニアンを解析した結果、強レーザー場による空間分割により、中間準位の緩和過程が抑制されると同時に、目標としていた制御空間内の動力学の時定数の調整が可能であることが明らかになった。上記の手法を、枝分かれ型、梯子型4準位系などのモデル系に適用し、その有用性を確認した。さらに、緩和モデル系として中間準位が等間隔に分布するバックグラウンド準位と均等に結合する Bixon-Jortner モデルを採用し、

中間準位と補助準位を強レーザー場で結合させることにより中間準位を制御対象空間から分離することを試みた。数値計算の結果、この空間分離によってインコヒーレントな準位分布の流出を抑制でき、始状態から終状態へのほぼ 100%分布移動が可能であることが示された。さらに、実際の分子として多くの振動モードが非線形相互作用によって結合している SCCl_2 分子について本手法を適用し、特定の CS 伸縮運動モードの選択励起が可能であるかを FORTRAN による数値計算シミュレーションによって検証した。この結果、中間状態と始・終状態間を直接レーザーによって結合させた場合は、50%程度の分布の損失（多モードへのエネルギー散逸）が生じるのに対し、補助準位を導入し空間分割を実現した場合は緩和過程が抑制され 98%程度の割合で選択的励起が実現されている。

3. 現在までの達成度

おおむね順調に進展している。

（理由）

理論的な定式化について、摂動展開に伴う数式変形に困難が伴うと予想されていたが記号処理言語を効果的に使用することによって、手作業では厳しい変形作業を正確に遂行することが出来た。また、数値計算の部分に関しては、空間分割が成功すれば、数値計算の負担が小さいという予想されていたが、その部分に関しては想定通りで、計画通り研究を遂行することが出来た。

4. 今後の研究の推進方策

最終段階である実在の分子である SCCl_2

分子に対する本理論の適用を推し進め、実験室での量子制御の可能性について詳細な検討を行う。このため、実際の数値計算の結果が、実験的な観点から有用な情報であることを確認するために必要とされる定常レーザー場の強度の数値を明確にし、モデル計算において考慮していない多光子遷移による解離反応やイオン化などの副反応・副過程の影響の有無を確認したい。一方で、夏期には計画停電の実施が予想されるため多大な電力を消費しかつ長時間の稼働が要求される数値計算の実行が困難となる状況が想定される。そこで、本研究テーマの延長として記号処理言語を用いて比較的低負荷の計算で実行可能である、パルスシーケンスによる分子内振動緩和過程の抑制法の開発を予定している。ここでは、分子内振動緩和の初期過程が主に位相緩和であることを考慮し、NMR（核磁気共鳴）におけるパルス設計手法を参考にして、パルスシーケンスによる制御の可能性を検討する。

5. 代表的な研究成果

〔雑誌論文〕(計3件)

M. Sugawara, “Laser control of a multilevel quantum system as static parameter optimization with the help of effective decomposition”, *Physical Review A*, **81**, 013410, (2010), 査読有

M. Sugawara, “A new quantum control scheme for multilevel systems based on effective decomposition by intense laser fields”, *Journal of Chemical Physics*, **130**, 094103, (2009), 査読有

〔学会発表〕(計10件)

菅原道彦, コヒーレントレーザーによる分子内振動緩和過程の制御と抑制, 分子科学討論会, 2010年9月16日, 大阪・阪大

M. Sugawara, “A new control scheme for multi-level quantum system based on effective decomposition by intense CW-laser fields.”, *The 69th Okazaki Conference on “New Frontier in Quantum Chemical Dynamics*. 2010年2月22日, 岡崎・岡崎カンファレンスセンター

菅原道彦, 強レーザー場による空間分割を利用した分子内振動緩和過程の抑制と振動ダイナミクスの量子制御, 分子科学討論会, 2009年9月23日, 名古屋・名大

〔図書〕(計0件)

〔産業財産権〕
出願状況(計0件)

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
出願年月日：
国内外の別：

取得状況(計0件)

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
取得年月日：
国内外の別：

〔その他〕