

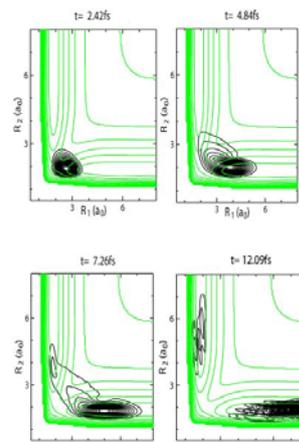
ディビジョン番号	1
ディビジョン名	物理化学

大項目	1. 分子分光学および分子集合体の構造
中項目	1-5. 強光子場分子科学
小項目	1-5-2. 化学反応の量子制御理論

### 概要（200字以内）

最近のレーザー技術の進歩には著しいものがあり、コヒーレンス、高強度、パルス整形、周波数チャープの設計等々その様々な特質を高い精度で制御出来る様になってきており、それら技術を活用して、化学反応を制御することも夢ではなくなってきた。理論的にも、計算手法の進歩等により、効率の良い制御法を設計することが出来る様になってきている。

図の説明：基底電子状態の波束に X-方向の運動量ベクトルを与え、それを 2 次チャープで励起することにより X-方向の分解効率 80 %を達成した計算例。水分子の 2 次元モデルで、電子励起状態ポテンシャルエネルギー曲面上の波束の動きを示している。



水素分子（2次元モデル）の選択的解離  
(X-方向の初期運動量ベクトルを与えしかも  
2次チャープで励起した場合)

### 現状と最前線

理論的に考えると、化学反応は基本的な二つの要素からなっている。それは、断熱ポテンシャルエネルギー曲面上の波束の動きと波束の電子遷移（断熱ポテンシャルエネルギー曲面間の乗り移り）である。これら二つの基本過程を自在に制御できれば、様々な化学過程を制御出来ることになる。レーザー場はパルスで表現され、強度  $\varepsilon(t)$  と周波数  $\omega(t)$  が共に時間の関数としてある分布を有している。これらを旨く整形、設計することによって、化学過程を制御出来る。様々な手法が提唱されているが、その際基本となるのが、強いレーザー場中に分子を置いたときに成り立つ「着衣状態」と言う概念である。分子のエネルギーが光子のエネルギー分だけ上げ下げされた状態（着衣状態）が出来、従って、ポテンシャルエネルギー曲面の交差が人工的に作り出される。この交差領域での非断熱遷移を、レーザーパラメーターを旨く設計することによって制御することが出来る。更に、波束の動きを制御するために、最適制御理論が構築・利用される。必要なレーザーの強度を出来るだけ小さくすると言う条件下で、望みの生成物を最大限生み出す「条件付最適制御問題」が数学的に定式化される。具体的な多次元系の化学過程に適用できるようにするために様々な工夫がなされている。

要約：

レーザーの様々な優れた特徴を活かして化学動力学現象を理論的に制御・設計することが可能となってきた。将来、現実の多次元多体系の効率的な制御が理論の立場から提唱され、実験との一体的な協力によって、「化学反応の自在制御」の夢の実現を目指した研究が促進されると期待される。

文献：

1. S.A. Rice and M. Zhao, "Optical Control of Molecular Dynamics" (Wiley, New York, 2000).
2. H. Nakamura, "Nonadiabatic Transition: Concepts, Basic Theories, and Applications" (World Scientific, Singapore, 2002).
3. 中村宏樹、「化学反応動力学」(朝倉書店、2005).

将来予測と方向性

様々な化学動力学現象の理論的・実験的解明の進歩と共に、制御理論にも大きな発展が期待される。現実の多次元の反応系に対して、効率の良いしかも実験的に実現可能な最適レーザー場を理論的に設計することが可能となり、メカニズムの考察を通じて制御概念が確立される様になるであろう。また、レーザー以外の外場（磁場や電場）の有効な特徴や触媒をも併用することによって制御可能な過程の範囲が大幅に拡大されるであろう。これらの総合的な発展によって、「化学反応の自在制御」の夢の実現を目指す努力が一層進められるであろう。

- ・ 多次元系制御の数値計算の実現
- ・ 反応の最適制御の概念化
- ・ レーザーパルス設計における実験家との交流・協力
- ・ レーザー場以外の外場及び触媒をも併用した化学反応制御の統一的理論の構築

キーワード

着衣状態、最適制御理論、非断熱遷移、コヒーレント制御、チャープ

(執筆者： 中村 宏樹 )