


ディビジョン番号	1
ディビジョン名	物理化学ディビジョン

大項目	2. 化学反応ダイナミクス
中項目	2-1. 励起分子素過程と光電子移動ダイナミクス
小項目	2-1-2. コヒーレント最適制御理論

概要（200字以内）	
<p>コヒーレント制御ではレーザー光の可干渉性を利用して分子波動関数の量子干渉を操作する。干渉を制御する光子はあたかも「試薬」や「触媒」のように振る舞い、新しい反応経路を開き化学反応の効率を高める。最適制御理論はコヒーレント制御実験の背景にある反応機構の解明に力を発揮している。今後、制御機構のより定量的な解析に加え、量子超微量分析や量子情報処理など未踏分野においても幅広い応用・展開が予測される。</p>	 <p>レーザー場（光子触媒）がない場合のポテンシャルエネルギー面（PES）と反応経路（概念図）</p> <p>光子触媒により制御されたPESと新しく生じた反応経路</p>
現状と最前線	
<p>コヒーレント制御実験では、整形した入射レーザーパルスを使って分子波動関数の量子干渉を操作し目的のシグナルや生成物収量を最大にする。現在、高度なパルス整形技術と自己学習アルゴリズムとを組み合わせたフィードバック（最適制御）実験が標準的な方法として確立されつつある。この方法は分子系の情報を事前に知る必要がないため非常に汎用性が高い。しかし反面、反応機構など系の情報を直接には与えないという欠点がある。実験結果を理解するためには理論・数値シミュレーション解析が重要である。</p> <p>最適制御シミュレーションは、コヒーレント制御実験の背景にある反応機構の解明に力を発揮している。分子ハミルトニアンだけにに基づき目的実現に最適なパルスを設計する第一原理シミュレーション法である。しかし計算量が莫大であるために現在は低次元モデルを仮定した定性的な議論にとどまっている。今後、定量的な解析に向けてモデルの多次元化は避けられない。高速・高精度のシミュレーションアルゴリズムの開発が急務である。また、精度の高い近似法の開発も重要であり、時間依存密度汎関数法の利用などが既に提案されている。実験では不可避なデコヒーレンス・ノイズの影響については、マスター方程式や分子動力学計算と組み合わせたシミュレーションが報告されているものの十分には解明されていない。今後の重要課題の一つである。</p>	

化学反応制御を目標に発展してきたコヒーレント最適制御理論は新しい展開も見せ始めている。量子干渉を利用した超高感度の微量分析、生体分子の非破壊観測、量子情報処理などへの応用である。前二者は量子干渉が同種の化学種内でだけ生じることを利用し、異種化学種間のシグナル差を増幅する。後者は超高精度のコヒーレント制御を要求するチャレンジングなテーマである。実現できれば、量子非局所性に由来する現行シミュレーションの計算限界を克服できる。化学反応制御においてはより強くコヒーレンスを駆動しポテンシャル面の形状（分子内クーロン場）を直接制御することも提案されている。光子試薬・触媒を使った量子合成化学ともよべるような新分野開拓の可能性を秘めている。第一原理法である最適制御シミュレーションはこれら未踏分野において研究指針を与えるのに重要な役割を果たしていこう。レーザーパルスを自在に操る技術は化学者に光子という新しい試薬・触媒をもたらした。化学者の想像力と光子が結びつき、化学反応コヒーレント制御は実験・理論両面から新たなパラダイム構築に向け発展を続けている。

将来予測と方向性

・ 5年後までに解決・実現が望まれる課題

コヒーレント最適制御シミュレーションのための高精度・高速アルゴリズムの開発とプログラムパッケージ化による量子制御機構の定量解析ツールの実現。

分子量子情報処理・量子超微量分析法・量子合成化学など、量子技術を使った未踏分野における先行研究。

実験検証にむけたデコヒーレンス抑制スキームの開発。

コヒーレント制御実験結果から分子情報を直接求めるための逆問題・最適推定アルゴリズムの開発。

・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題

量子情報資源として分子を利用するためのコヒーレント制御法の開発。

キーワード

コヒーレント制御、最適制御、量子情報処理、量子分析、量子合成

(執筆者： 大槻幸義)