

ディビジョン番号	3
ディビジョン名	理論化学・情報化学・計算化学

大項目	1. 理論化学
中項目	1-2. ダイナミクス
小項目	1-2-9. コヒーレント制御

概要（200字以内）	
<p>量子最適制御法は、分子波動関数の量子干渉を最適に操作するレーザーパルスを第一原理設計する。現在、演算子代数に基づいた量子最適制御理論の数学的基礎付けや、モデルポテンシャルによる制御機構のシミュレーション解析などが研究されている。今後、定量計算に向けた数値解法アルゴリズムの開発に加え、第一原理法の利点を生かし、量子情報処理・量子超微量分析など未踏技術分野への展開が予想される。</p>	<p style="text-align: center;">量子最適制御シミュレーションを使った制御機構の解析</p>

現状と最前線
<p>量子最適制御法は、分子波動関数の量子干渉を最適に操作するレーザーパルスを第一原理設計する。制御の達成度は評価関数（目的汎関数）として定量化され、評価関数に極値を与えるパルス（最適パルス）は局所探索により求められる。量子最適制御法の応用の一つに、シミュレーションによる制御機構の解析があげられる。モデルの単純化を通して基本ルールを見出そうとするアプローチから、定量化を目指した多次元シミュレーションまで種々の報告がある。定量計算に向けては、単調収束が保証された局所探索アルゴリズムの開発や高精度の近似法（例えば、時間依存密度汎関数法や半古典法）との組み合わせが重要である。一方、第一原理法の利点を生かし、未踏分野を開拓する試みも報告されている。例えば、量子情報処理への適用である。分子を使った量子超並列計算や量子メモリ・量子リピータ開発を目標に、量子情報資源としての分子特性の解析や実装方法が研究されている。また、量子干渉が同種化学種内だけで選択的に起こることを利用し、超高感度の微量分析や同位体分離の可能性も議論されている。</p> <p>近年、数学的な基礎研究でも大きな進展があった。制御問題は非線形であり可算無限個の局所解の存在が証明されている。従来はそのごく一部だけがよい制御達成度を導くと考えられていた。ところが、さまざまな系・現象を対象としたシミュレーションの結果、局所探索は殆ど例外なく非常に制御達成度の高い解を見つけることが分かった。ランドスケープ理論は数学的な予測と現実のシミュレーション結果とのズレの謎を解明した。即ち、ある初期状態から</p>

目的状態へと遷移させる制御の場合、最適解は遷移確率 1 または 0 のみであることを演算子代数 (Lie 代数) と可制御性条件だけを使い証明した。量子最適制御の大域的な性質の一部がようやくみえてきた。これは量子系の制御ルール解明に向けた大きな前進である。しかし、連続状態やノイズ・デコヒーレンスが考慮されていないなど未解決の課題も多い。今後、演算子代数に基づいた量子最適制御理論の数学的基礎付けは重要性を増していくであろう。

量子最適制御理論は化学反応制御を目的に理論化学分野で生まれ発展してきた。これと並行して、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最適制御実験も確立されつつある。量子最適制御法は理論と実験とが互いにフィードバックし合いながら、量子系の制御という壮大な未踏分野へ展開を続けている。

参考文献

[1] D. J. Tannor, Introduction to Quantum Mechanics: A Time-Dependent Perspective, University Science Books (2007).

[2] H. A. Rabitz, M. M. Hsieh, C. M. Rosenthal, Quantum optimally controlled transition landscapes, Science 303, 1998-2001 (2004).

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

量子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。

量子情報処理など、量子技術を使う未踏分野における先行研究。

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

量子最適制御, コヒーレント制御, 量子情報処理, 量子超微量分析, ランドスケープ理論

(執筆者: 大槻幸義)