

〈総説〉

複雑量子系の最適制御理論

高見利也* 藤崎弘士**

Optimal Control Theory for Complex Quantum Systems

Toshiya TAKAMI and Hiroshi FUJISAKI

1. はじめに

量子力学 (quantum mechanics)^{1),2)} は、その誕生から既に 80 年以上が過ぎ、大学や研究所内での精密実験にとどまらず、先端医療機器から日常的に使われる身近な電子機器類まで、広く応用されている³⁾。これらの技術は、量子力学を通してミクロの世界の論理を理解することで実現したものであり、今後もさまざまな分野に応用されて行くことになるであろう。徐々に理解と応用が進んできた量子系であるが、オングストローム (10^{-10} メートル) 程度のミクロスケールの運動を直接制御するという点に関しては、現状ではまだ自由自在というわけではない。

本稿は、制御という観点からミクロ世界とマクロ世界の論理^{4),5)}を眺めることを目的としている。具体的には、量子力学で記述される運動の制御について、化学反応制御の分野でのこれまでの研究を概観するとともに、モデル系を使った数値実験の結果を通して、量子状態制御の現状について述べる。

まず最初に第2章では、物体の運動を制御するとはどういうことを考え、最

* 九州大学・情報基盤研究開発センター Research Institute for Information Technology, Kyushu University

** 日本医科大学・物理学教室 Department of Physics, Nippon Medical School

適制御理論の考え方を導入する。次に第3章で、ミクロな世界の例として化学反応制御の研究を紹介し、量子系への最適制御理論の応用について述べる。さらに第4章と第5章では、一般化された量子系へ拡張することによって解析的な最適外場が導かれることを示し、モデル系の制御に関するわれわれの研究成果と、今後の現実系への応用に対する見通しについて議論する。なお、このレビューは一般的なものを目指したつもりだが、後半は著者達の仕事に偏っており、異なる立場からのレビューとしては、⁽⁶⁾⁻⁹⁾などを参照してほしい。

2. 通常の物体の運動制御

われわれは、日常生活の中で様々なものを巧みに制御しながら動かしている。しかし、長年の経験から自分の身の回りの物に関する何層にもわたるフィードバック制御の仕組みを確立しているため、ほとんどの人は、自分が何かの運動を制御しているということを意識していない。例えば、さまざまな制御技術の結晶として初めて二足歩行ロボットが実現したことを見ればわかるように、歩くという動作の背後には、実は、運動の予測と制御を組み合わせた高度な処理が必要であるにも関わらず、人間はこれを、ほとんど無意識のうちに実行している。この章では、物体の運動を制御するとはどういうことかを考え、化学反応などのミクロ系の制御にも使われる最適制御理論について説明する。

2.1. フィードバック制御

制御対象の状態が時々刻々把握でき、かつ、実施する操作に対する応答が予測できる場合には、物体の制御は比較的簡単である。例えば、車を運転している場合を考えてみるとわかりやすい。練習を通じて、ハンドル操作による進行方向の操作とアクセルやブレーキの踏み具合によるスピード操作に習熟した運転者は、車の運動状態と周囲の状態を視覚や聴覚などから知覚しながら適切に車を制御することができる。このような制御はフィードバック制御 (**feedback control**) と呼ばれ、マクロ系の運動をセンサーなどで把握しながら制御する場合はほとんどこの例となる (図1)。

ただし、運動状態をリアルタイムに把握し、すぐさま制御に反映することがいっつでも可能であるとは限らない。例えば、惑星探査のために打ち上げられた宇宙船を地上から制御する場合は、信号の伝達に分単位の長い時間がかかるために、フィードバックの時間が非常に長くなってしまう。もっとも、基本的に慣性飛行

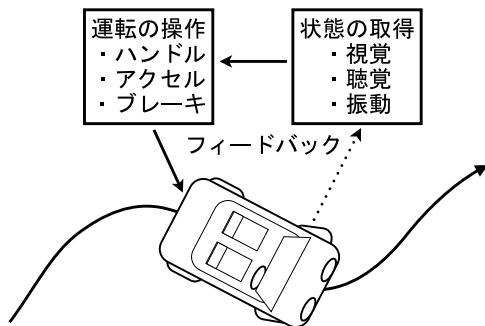


図1：運動のフィードバック制御

の状態が継続する宇宙空間では外部からの擾乱が少ないことと、マクロな物体である宇宙船は制御操作に対する応答が古典力学を使ってかなりの精度で予測できるため、フィードバックの間隔が長くなっても制御を行うことが可能である。もちろん、信号伝達のタイムスケールより短い時間間隔で予測外の事態が起きる可能性のある場合には対処することは難しくなる。例えば、2010年に小惑星イトカワからの帰還を果たしたはやぶさでは、光学的に目標天体を把握して位置制御をする「光学航法技術」が、地球からの電波を使って位置制御をする「電波航法技術」と組み合わせて利用されたそうである¹⁰⁾。いずれにしても、これらの方法は、なんらかの観測結果を解析して、運動状態にフィードバックする形で制御が行われている。

2.2. カオス制御

物体の運動というものは厄介なもので、いわゆる軌道不安定性やカオス¹²⁾の存在に注意しなければならない。一般に古典力学で表される物理系は、運動の恒量が十分な数だけ存在する可積分系と、それ以外の非可積分系（カオス系）に分けられる。すべての力学変数が恒量と関連づけて記述できるのであれば、その運動の軌道には不安定性はなく、すべての時刻にわたって運動を予測することが可能になるが、非可積分系では、外部からの小さな擾乱に対して敏感に軌道が影響を受ける。つまり、系の性質によっては、制御しようと情報をフィードバックしても、軌道が予測不可能なほどに不安定なために、制御が難しくなってしまう場合がある。このような、不安定な力学系に対して、運動状態を制御するため

の枠組みは、Ott、Grebogi, Yorke によって提案されており、一般にカオス制御 (**chaos control**) と呼ばれる^{11),12)}。

この制御法は不安定周期軌道の構造安定性というカオス系の特徴¹²⁾を利用したものとなっている。軌道不安定性はカオス系の特徴の一つであるが、これは同時に、特定の運動軌道の近傍にいつでも周期軌道が見つけられることを意味している。OGY 制御は、無数にあるこの周期軌道を利用することで、一見、不安定性のために困難に思われるカオス系の運動制御が実現可能であることを示したのである。カオス系の不安定性を逆手に取るような形の制御で、一般の力学系の運動制御にも、広くこの手法は応用されている。

2.3. 最適制御理論

物体の運動を制御しようとする時、操作に対する応答が予測できなかったり、様々な制約条件が絡み合って問題が複雑になっている場合には、フィードバック制御が難しくなる。このような場合に利用可能な制御の枠組みの一つが、**最適制御理論 (optimal control theory)** である^{13),14)}。最適制御理論では、なんらかの評価関数を設定し、その評価関数が最小（あるいは、最大）になるような制御パラメータを求めるための方法を与える。通常、外部からなんらかの制御操作を加えると、これに呼応して内部状態の時間発展が影響を受けるが、さまざまな制約条件の下での目的の達成度合いを定式化するような形で評価関数は与えられる。対象系の動力学に対する制御操作を $u(t)$ とするとき、汎関数 $f[u(t)]$ の値を最適化するように $u(t)$ を決めるもので、広い範囲の制御問題に応用されている。対象系が従うべき運動方程式や制御 $u(t)$ に関する制約条件の多くは汎関数の中に未定乗数とともに表現することができ、対象とする系や条件に応じてさまざまな汎関数が利用されている。

原子や分子などのミクロ系では動力学のタイムスケールが短く、観測した運動状態をリアルタイムで制御信号に反映させることが難しい。このため、フィードバック制御が出来ないだけでなく、その空間スケールに対応した操作方法を構築すること自体が難しい。マクロな操作を使って制御する場合、その操作の応答に関係するミクロ自由度がどうしても大きくなってしまい、応答が予測可能な単純な操作に分解して実施するということがほとんど不可能なのである。そのため、ミクロな系の動力学に対しても最適制御理論が適用されている。この詳細に関しては、化学反応制御という流れの中で解説する。

3. 化学反応の制御

ミクロの世界の動力学は量子力学で記述されることが知られているが、われわれ人間が原子や分子の時間・空間スケールの動力学に対して直接影響を与えるのは簡単ではない。通常の化学反応は、せいぜい温度や圧力などといったマクロな環境を変えることで操作されている場合がほとんどで、統計力学や熱力学を通じて間接的にミクロ系を制御するという手法がとられている。量子力学的な動力学に直接働きかけて化学反応を思いのままに制御し、必要な物質を必要なだけ作り出すことが出来れば、まさに現代の錬金術と言える夢のような技術となるが、残念ながら、現実にはそのような制御はほんの一部に限られた化学反応に対して可能になっているに過ぎない。原子や分子の直接制御が難しいのはいくつかの理由が考えられるが、ミクロの世界の動力学に関する論理をわれわれがまだ十分に理解していないという点と、量子系を直接操作するための技術が未熟であるという点があげられる。

前者は、基礎的な量子力学の論理はわかっている、多数の分子や原子が関与する化学反応の「複雑さ」が十分に解明されていないという問題である。「すべての動力学は Schrödinger 方程式を解けばわかる」などというナイーブな還元論的論理は、現実の問題を解く場合には役に立たない¹。後者の技術的な部分に関しては、そもそも量子力学的な状態を直接操作するには、対象系のスケールに応じた微細な物体や相互作用を利用する必要があるが、空間スケールに関しては STM に使われる針の先端や光ピンセット技術、時間スケールに関しては極超短パルスレーザーなどの光学技術など、ごく限られたものしか存在しない。

このような状況でミクロ系を制御するためにわれわれが取りうる方法は、限られた道具でも操作できるような、ミクロ系の特別な性質を見つけることである。以下では、そのうち、複数のポテンシャル面を利用した方法と、量子力学の干渉効果を利用した方法の二つを例としてあげる^{6),7)}。その後で、最適制御理論を利用した化学反応制御に関して、われわれの仕事を含めた最近の研究動向について述べる。

1 ただし、数原子分子の動力学やレーザー制御の問題に関しては、ここ 20 年ほどで大いに進展があった。たとえば、参考文献 2) を参照。

3.1. 二準位系の量子力学

ミクロな原子や分子の動力学を記述するのは、Schrödinger 方程式である^{1),2)}。

$$i\hbar \frac{d}{dt} \psi(r, t) = H \psi(r, t) \quad (1)$$

ここで、 $\psi(r)$ は位置座標 r の複素数関数で波動関数と呼ばれ、 $|\psi(r)|^2 d^3r$ は微小体積要素 d^3r での存在確率を表す。これは線形の偏微分方程式であるから、真空中に孤立した原子や分子を記述する場合、 r としてすべての粒子の座標を含め、基本的な相互作用をハミルトニアン H の中に記述すれば、原理的には解くことができる。もし、 H を対角的に表現できるような基底関数系 $\{\varphi_j(r)\}$ が求められれば²⁾、 $\psi(r)$ は

$$\psi(r, t) = \sum_j c_j \varphi_j(r) \exp \left[\frac{E_j t}{i\hbar} \right] \quad (3)$$

という形で表され、そのダイナミクスは単なる位相因子の回転だけとなる。しかし、原子核と電子の位置座標とスピンの自由度をすべて含めた多粒子系の量子力学は、有効な近似を導入しない限り現実的には解くことは不可能である³⁾。また、制御ダイナミクスを考える場合には、外部系との相互作用を考慮する必要があるため、単純な固有値問題にはならない。とにかく、何らかの近似の導入は必須である。断熱近似などの導入によって実際の化学反応制御を記述するのは次の節からとし、ここでは最も単純化した二準位モデルでの運動を例として考える^{15),16)}。

孤立系に対して、 E_+ と E_- というエネルギーで表される二つの状態だけが重要になる状況を考える。この時、 $\psi(r, t)$ は直交する二つの成分の和

$$\psi(r, t) = a(t)e^{E_+ t/i\hbar} \varphi_+(r) + b(t)e^{E_- t/i\hbar} \varphi_-(r) \quad (4)$$

となる。このエネルギー差 $\Delta E = E_+ - E_-$ をプランク定数で割った周波数（共鳴周波数）に近い振動成分をもった外場とこの系が相互作用すると、二状態間に遷

2 それは以下のような方程式を満たす。

$$H \varphi_j(r) = E_j \varphi_j(r) \quad (2)$$

H は通常、行列で表示されることが多いので、これは固有値問題を解くことに相当する。

3 量子ダイナミクスの近似解法や半古典近似に関しては²⁾ を見よ。

移が頻繁に起こるようになる。この振動運動は **Rabi 振動 (Rabi oscillation)** と呼ばれ、量子力学のダイナミクスとしてはもっとも基本的なものの一つである。

実験で観測できるのは、それぞれの状態の存在確率で、係数の絶対値の自乗 $|a(t)|^2$ と $|b(t)|^2$ で表される。共鳴に近い周波数を持つ古典外場を加えた場合、実際に Schrödinger 方程式を解いて時間発展を計算すると、系の周波数と外場の周波数の差に相当する振動と、二周波数の和に相当する振動が生ずることがわかる。この和周波数の運動は差周波数の運動に比べてきわめて速い運動であるため、この周波数部分を無視するという近似は、外場の振幅が小さい場合には有効に働くことがわかっている。この近似は **回転波近似 (rotating wave approximation)**^{15),16)} と呼ばれ、共鳴ダイナミクスがゆっくりした運動として記述される座標系では、非共鳴運動は速い時間スケールの運動として無視できることから広く使われている近似で、一種の断熱近似である。共鳴した振動数を持つ弱い外場での遷移を考えると、この近似のもとでは、各状態間の振動の速さは加えられる共鳴外場の振幅に比例する。二状態をそれと数学的に等価な上向き・下向きのスピン・ベクトルを使って記述すると、ゆっくりした遷移運動は、このスピンの向きの回転に相当していることが分かる^{15),16)}。その際に、ちょうど反対向きになったスピン間の角度が π になることから、状態間を完全に遷移するために必要な外場は π パルス (π pulse) と呼ばれる¹⁵⁾。このような考え方は、量子力学の黎明期から、量子力学を精緻化された技術として使っている今日にいたるまで、様々な物理過程を記述するために用いられている。

3.2. 複数のポテンシャル面 — ポンプダンブ制御 —

分子を構成する電子と原子核の質量は 3 桁以上も異なっているため、断熱近似的な手続きにより、電子と原子核の運動を分離して解くことができる¹⁷⁾。原子核の運動は電子に比べて十分ゆっくりであるため、電子の運動を解く時に、原子核が静止しているという近似を導入するのである。原子核の位置を固定した中で量子化学的な計算を行うと電子状態エネルギーを求めることができるが、静止させた原子核の位置を少しずつ変えて同様の計算をすれば、連続的に変化するポテンシャル面⁴⁾が得られる。静止しているとして求めたポテンシャル面上で原子核の運動（分子内の振動や回転運動）を考えるとというのが、断熱近似の考え方による分子の運動の記述方法である。

このような見方はミクロ系の描像を単に与えるだけでなく、この系の運動を制

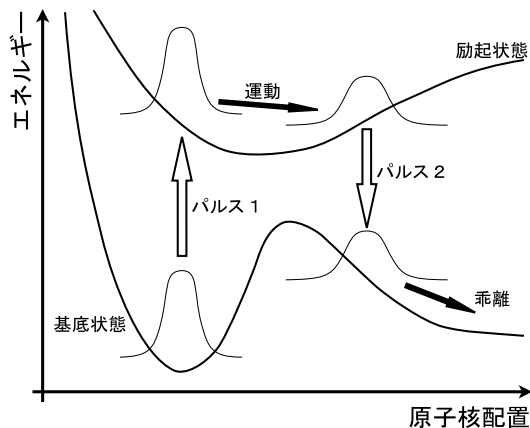


図 2： 励起状態ポテンシャル面を利用すると、分子の運動制御を行うことができる。

御するための方法をも与える。光による電子状態の励起は広く行われている実験の一つで、基底状態のポテンシャル面上で運動している状態に、電子状態間のエネルギーに一致する波長の光を与えると、一つ上の電子状態に励起することができる。一般に、励起状態のポテンシャル面の形状は基底状態とは異なるため、電子の基底状態ポテンシャル上で安定な原子核の運動は、励起状態ポテンシャルでは安定な状態ではない。通常は、電子が瞬間的に光励起される時、振動・回転を表す波動関数の形は変わらないとして扱う（Frank-Condon 状態）が、この波動関数は、励起状態ポテンシャル面では安定な状態ではないため、原子核の運動状態を変えることができる。つまり、電子状態ポテンシャルが基底状態と励起状態で異なるという性質を使って、分子の運動を操作するのである。

もし、基底状態と励起状態のポテンシャル面が詳細にわかっていたら、電子状態を励起した後の原子核の運動を予測することが可能であるが、制御するという

-
- 4 分子は複数の電子と原子核からできているが、電子に比べて原子核のほうが重いので、原子核を止めて、電子についてのシュレーディンガー方程式を解くということが正当化される（Born-Oppenheimer 近似と呼ばれる）。その結果、原子核が感じる有効ポテンシャルが導出されるが、化学の分野では、これを単にポテンシャル（エネルギー）面と呼ぶ。

目的のためには必ずしも完全にわかっている必要はない。例えば次のような状況を考えてみよう。基底状態ポテンシャルのある部分に分子が乖離する方向が存在するとして、何らかの方法でこの部分に原子核を移動したいとする。通常は図 2 のようにポテンシャル障壁があるために、そのままの状態では分子の乖離反応を起こすことは出来ない。原子核の運動を変化させるために、電子状態を励起する光パルスと励起状態から基底状態へと緩和させる光パルスを用意する。この二つのパルスの間隔は励起状態に滞在する時間に直結しているため、それによって、基底状態に降りた時の運動状態を制御することが可能になる。この場合、基底状態の形と励起状態の形がだまかにわかっているならば、パルスの時間間隔という一つのパラメータを変化させることで、化学反応を制御できるのである。これは実際の実験では、励起するためのポンプ光、脱励起するためのダンプ光を使うことから、**ポンプダンプ制御 (pump-damp control)** と呼ばれる。

この節で扱ってきたような単位間の遷移ダイナミクスを考えると、非断熱遷移という現象も重要である^{18),19)}。一般に量子力学的な固有値は、外部パラメータの変化などによってハミルトニアンが連続的に変化するとき、特徴的な**疑似交差 (pseudo-crossing、あるいは、avoided-crossing)** と呼ばれる構造を作る^{20),21)}。古くは Landau や Zener などによる研究 (1932 年) で、この構造を紹介した遷移の確率が求められているが、この現象を分子の運動の制御に応用することができる¹⁸⁾。断熱近似の電子状態では、原子核が静止している時は、異なる電子状態に属する固有状態は完全に直交しているが、原子核がなんらかの運動をしている時、この運動の速さに比例する非断熱結合により電子状態間に遷移が生ずる。このような遷移を積極的に利用して、制御に利用しようということである。

3.3. 量子干渉の利用 — コヒーレント制御 —

複数のポテンシャル面という特別な構造がなくても、量子系の干渉という基本的な性質を利用すると、ミクロな系を制御することが可能になる。一般に分子や原子の系は、量子力学に従う化学反応素過程に分解されることが多い。これらのうちのどこかで、量子力学的な干渉を操作できる部分があれば、化学反応制御に応用することが可能になる。これを**コヒーレント制御 (coherent control)** と呼ぶ⁷⁾。

よく知られているように、系が近接したエネルギーの固有状態を持つ場合には、エネルギー差に相当するビート周波数が観測できるが、このような固有状態

間の干渉を利用することや、思考実験でよく扱われる二重スリットの実験のように空間的に異なる反応経路がある場合には、再度合流した時の干渉を利用することもできる。異なる経路に分かれるという大まかな性質がわかっているならば、片方の経路になんらかの操作を加えるだけで実験的に干渉効果を確認することが可能で、場合によっては化学反応に影響を与えることもできる。

3.2 節で考えたポンプダンプ制御は、分子のポテンシャル面が持つ特定の性質をうまく利用して化学反応制御に応用しようとするものであった。しかし、干渉性は量子系が持つ一般的な性質であるため、非常に広く応用可能である。実際、コヒーレント制御は単原子反応（光解離）、分子衝突反応、プロトン移動、分子内エネルギー移動などの制御に応用されており、いくつかは実験的な検証もなされている⁷⁾。

Gong と Brumer は古典極限でカオスになる系、いわゆる量子カオス系のコヒーレント制御の問題を調べた（量子カオス系の具体例については 5.1 節を見よ）。これは 2.2 節のカオス制御を量子化したものと考えられることができるが、彼らの状況設定は古典系のカオス制御とは異なり、カオス性をなくさないようなパラメータ領域で制御の問題を考えている。彼らは量子カオス系の例として 5.1 節の kicked rotor を考え、そのコヒーレント制御の問題として、初期状態を「重ね合わせ状態」にしたときに系の発展がどうなるかということを調べた²²⁾。たとえば、式 (4) は典型的な重ね合わせ状態である。このときに、 $a(t)$ に対する $b(t)$ の位相を変える ($a = b$ としたり、 $a = -b$ としたりする) ことで、運動量方向の拡散が非常に異なることが数値的に見出された。重ね合わせ状態は一般に、「非古典的」な状態になっていることが多いので、この結果はその非古典性が現れたとみなすこともできるが、この現象の半古典的な理解はまだなされていない。また、彼らはキックの大きさを M キックごとにすることで古典系のカオスの性質を変え、その結果として異常拡散 (anomalous diffusion) が起こるような領域を見出した。その場合は、面白いことに量子ダイナミクスは古典ダイナミクスよりも速くなる²³⁾。

3.4. 遺伝的アルゴリズム

これまでのアルゴリズムは系の特徴や量子性を使った制御であったが、実際は系が複雑であったり、量子性をきちんと考えることが難しいこともあるため、動力学的の詳細に依存しない制御法が求められることがある。特に実験や工学的な応

用を考える際には、そういった practical な考えが重要となる。そこでよく用いられるのは**遺伝的アルゴリズム (genetic algorithm)**²⁴⁾である。

遺伝的アルゴリズムとは、生命の進化を模した最適化のアルゴリズムであり、非常に汎用性があるためにさまざまな分野で用いられている。その基本的な原理は DNA の複製過程とほぼ同じである。まず「遺伝子 (gene)」を複数用意する。ここで言う遺伝子とは最適化したい、ある状態空間の一点を指す。つまり、 $f(x)$ という関数を最適化したい場合、 x が遺伝子ということになる。その複数の遺伝子から以下の手順で「次世代」の遺伝子を作る。

- (1) 2 個の遺伝子を選び、それらを適当に切ってつなぎ合わせ、別の遺伝子を 2 個作る。
- (2) 1 個の遺伝子を選び、その一部を突然変異させる。
- (3) こうして得られた次世代の遺伝子で $f(x)$ を計算し、結果のよいものを次世代に残す。
- (4) 遺伝子の個数が減った場合は適当にコピーして個体数を増やす。

この手順を繰り返すことで、遺伝子レベルの自然淘汰が起こり、「最適な」ものが最後に残されるという仕組みである。このアルゴリズムはあらゆる最適化問題に応用可能であり、具体例としては巡回サラリーマン問題、タンパク質の折り畳み問題、プログラミングやネットワークの進化の問題などがある。

さて、本稿の主題である、分子系のレーザー制御も最適化問題の一つであるので、このアルゴリズムを適用することができる²⁵⁾。その場合は、時間の関数としてのレーザー電場 $E(t)$ を遺伝子と読み替えればよい。実験でレーザー場の最適化をするときには、電場を一回、周波数成分に分けてから調節するので、周波数空間での電場 $E(\omega)$ を遺伝子と思ってもよい。この手法は比較的大きな有機分子²⁶⁾や生体分子²⁷⁾に使われ、有効であることが示された。

この方法の利点は、どんな系であってもターゲットを一回定めれば適用できること（いくら複雑で巨大な系でも構わない）、また実験の制約内であれば、どんなレーザー外場でも生み出せる（弱レーザー場である必要などがない）ということがある。また、結果得られるレーザー場から、どのような分子プロセスが起こっているか推測することも可能である。しかし、一般的な方法である半面、非

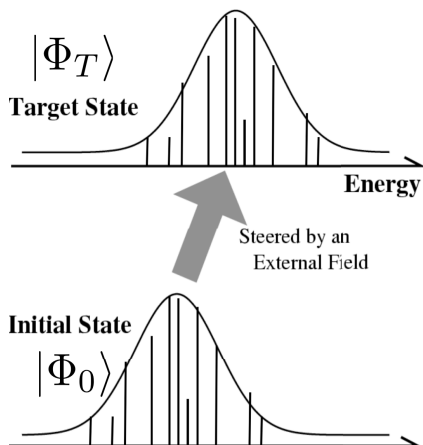


図3：最適制御理論は、初期状態と目的状態が与えられた時に、さまざまな制約条件の下で制御外場を設計するための枠組みを与える。通常は、時間に依存した制御外場を、適切な汎関数を最適にするように求める。

常にブラックボックス的な手法でもあり、完全な制御を達成することは難しい場合が多い。そこで、もっと理論的に整備されている最適制御理論（2.3 節）を量子系に適用することを以下考える。

3.5. 量子系に対する最適制御理論

分子や原子の系のような量子力学に従うミクロ系を制御するとき、現時点ではレーザーなどのコヒーレントな光を利用するのがもっとも効果的である。20 世紀の分光学は、量子力学の黎明期に重要な役割を演じた後、**量子光学 (quantum optics)**^{16), 28)} という新しい分野を形成して更なる発展を遂げ、科学実験においても精密な測定はレーザーなくしては考えられないと言ってよい。現在でも、量子系の状態を調べ制御するためにはレーザーはほとんど唯一と言っていい実験手段である。しかし、可視光までのレーザーが発する光の波長は、原子や分子の空間スケールより長く、残念ながら「直接」⁵量子系に影響を与えるものではない。

5 この「直接」というニュアンスは古典系のときのように目にみえるような形で制御することができないということである。というのも制御の対象がもはややした波動関数だからである。

つまり、レーザーによる制御の場合も分子に比べると非常に波長の長い古典的な電磁場を使った制御となる場合がほとんどであるため、化学反応に与える影響は量子系と古典波動との相互作用を介したものとなり、制御過程を直接的に設計することが難しいのである。そこで、ここでも最適制御理論が応用されることになる。

量子系を対象とした最適制御理論は、1980年代の後半から、制御可能性の観点から議論がされはじめ、1990年代を通じていくつかの重要な仕事が行なわれている。最適制御理論を使った量子状態制御の問題設定と、提案された汎関数は、以下のようなものである^{2),6)}。まず、図3のように、目的状態 $|\Phi_T\rangle$ が与えられており、 $t=0$ における初期状態 $|\Phi_0\rangle$ から時間発展を始めた量子状態が、時刻 $t=T$ において目的状態と一致するような時間依存の制御外場 $\varepsilon(t)$ を設計する。そのために、制御外場 $\varepsilon(t)$ といくつかの未定乗数（関数）を引数とする汎関数を以下のように導入する（これは一義的ではない）²⁹⁾：

$$J = |\langle\phi_\varepsilon(T)|\Phi_T\rangle|^2 - 2\text{Re} \left[\langle\phi_\varepsilon(T)|\Phi_T\rangle \int_0^T \langle\chi_\varepsilon(t)| \frac{\partial}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} H_\varepsilon |\phi_\varepsilon(t)\rangle dt \right] - \alpha_0 \int_0^T |\varepsilon(t)|^2 dt \quad (5)$$

右辺第一項は、時刻 $t=T$ での状態 $|\phi_\varepsilon(T)\rangle$ と目的状態 $|\Phi_T\rangle$ との重なりであり、これが大きければ大きいほどよい（最大値は1）。右辺第二項は量子状態 $|\phi_\varepsilon(t)\rangle$ と $|\chi_\varepsilon(t)\rangle$ が Schrödinger 方程式 (1) を満たすための条件であり、これらの関数で J を変分することで、Schrödinger 方程式が導かれる。また、これらの状態は $|\phi_\varepsilon(0)\rangle = \Phi_0, |\phi_\varepsilon(T)\rangle = \Phi_T$ という条件を満たすものとする。第三項は外場 $\varepsilon(t)$ に対する条件を表しており、これは電場の電力が小さいほどいいということを表している²⁹⁾（それを α_0 という定数で制御する）。 J の $\varepsilon(t)$ に関する変分から、

$$\varepsilon(t) = \frac{1}{\alpha_0 \hbar} \text{Im} \left[\langle\phi_\varepsilon(t)|\chi_\varepsilon(t)\rangle \langle\chi_\varepsilon(t)| \frac{\partial H_\varepsilon}{\partial \varepsilon} |\phi_\varepsilon(t)\rangle \right] \quad (6)$$

という重要な関係式が得られる。これは、汎関数 (5) に従う最適制御状態 $|\phi_\varepsilon(t)\rangle$ 、 $|\chi_\varepsilon(t)\rangle$ と最適外場 $\varepsilon(t)$ との関係を与える。

通常、最適制御問題の汎関数を最適にする解を求めるためには、非常に自由度の大きい最適化問題を解かなければならないが、汎関数 (5) を使えば、式 (6) を Schrödinger 方程式に代入して、量子ダイナミクスを繰り返し計算することによって最適解に到達できることがわかっている³⁰⁾。しかし、この量子ダイナミク

スの計算コストは自由度の数が増えると指数関数的に増えるという問題があり、この繰り返し計算をできれば避けたい。そこで、われわれがこの問題にどのように取り組んだかということを以下述べていこう。

4. ランダムベクトルに対する制御

量子系の制御を考える際には、その簡単さのために、数準位系を対象とすることが多い。そして、ある 1 準位から出発し、別の準位に π パルス、もしくは断熱掃引 (adiabatic passage)⁶ によってほぼ 100 パーセント遷移させるというのが分かりやすい方法である。これは一準位一準位間の遷移 (**one-level-to-one-level transition**) の制御と呼んでいいだろう。このような状況は、1 原子や数原子分子を低温にして、その基底状態からの制御を考えている場合におこる。しかし、多原子分子を制御する場合、一般的には図 3 にあるように、制御の対象として、初期状態と目的状態が多くの準位を含む場合もありうる。そこでこのような多準位多準位間の遷移 (**multi-level-to-multi-level transition**) の制御を考えることが重要になる。まず、そのような多準位を含む状態ベクトルとして何をとるのがよいだろうか。非常に一般的なものとしては、ヒルベルト空間上のランダムベクトル (**random vector**) が考えられる³¹⁾。しかし、数値計算を実施する上で無限次元の空間は扱いにくいいため、 N 個の規格直交基底 $\{|\varphi_j\rangle\}$ で表される有限次元空間を考える。このとき、これらの基底による線形結合

$$|\psi\rangle = \sum_{j=1}^N c_j |\varphi_j\rangle \quad (\text{ただし、規格化条件 } \sum_{j=1}^N |c_j|^2 = 1 \text{ を満たす。}) \quad (7)$$

で表される量子状態は、 $2N$ 次元ユークリッド空間中にある、半径 1 の球殻上の点となる。

もし、目的状態 $|\Phi_T\rangle$ と初期状態 $|\Phi_0\rangle$ として異なるランダムベクトルを設定

6 系のパラメータを変えたときに、avoided crossing^{20),21)} を越えると状態が入れ替わる。断熱掃引とは、この原理を使って、そのパラメータをゆっくり動かすことで状態遷移を起こさせる方法である。もし、その変化が十分ゆっくりでないと、非断熱遷移のために完全な遷移は起こらない。

した場合、外場が全くない状態 ($\varepsilon(t) = 0$) の量子状態の重なりは小さく、

$$|\langle \phi_0(T) | \chi_0(T) \rangle|^2 = \left| \sum_j \tilde{c}_j^* \tilde{d}_j \right|^2 \sim O(N^{-1}) \quad (8)$$

である。つまり、量子状態 $|\phi_0(t)\rangle$ と $|\chi_0(t)\rangle$ は、ほとんど直交しているといえることができる。

この章で考える量子状態の制御問題では、初期状態と目的状態としてほとんど直交しているランダムベクトルを対象とし、汎関数 (5) を最適にする外場 $\varepsilon(t)$ を求めた上で、これにより、どのようなダイナミクスが誘起されているのかを考える。

4.1. 長時間極限での最適制御状態

低温技術などの進歩により長時間にわたってコヒーレントな量子状態を作り出すことが可能になりつつあることから、最適制御理論において、十分に長い時間をかけて制御する場合の極限では、どのようなダイナミクスが現れるのかを考えてみる。ここで考える最適制御のための汎関数 (5) には制御外場の振幅に関するペナルティ項が入っているため、制御のための時間が非常に長い場合、可能な限り振幅の小さな外場が選ばれることになると考えられる。制御ダイナミクスの中で量子状態間に何らかの遷移が誘導されるとすると、一般に、状態間の遷移による確率密度の移動は、外場の振幅に比例するので、小さい振幅によるダイナミクスは十分に滑らかな遷移となることが予想される。そこで、量子状態間を最も滑らかに遷移するコヒーレントなダイナミクスの典型例である Rabi 振動

$$|\psi(t)\rangle = |\phi_0(t)\rangle \cos(|\Omega|t) - ie^{-i\theta} |\chi_0(t)\rangle \sin(|\Omega|t) \quad (9)$$

が実現できる可能性を検討しよう。ここで $|\phi_0(t)\rangle$ と $|\chi_0(t)\rangle$ は $\varepsilon(t) = 0$ として Schrödinger 方程式を解いて得られる状態である。位相 $e^{i\theta}$ は、 $\langle \phi_0(T) | \chi_0(T) \rangle = 0$ が厳密に成立する場合は任意に選べる。

$|\phi_0(t)\rangle$ と $|\chi_0(t)\rangle$ は、Rabi 振動の場合の固有状態に相当するもので、外場のない孤立系の Schrödinger 方程式に従い時間発展する状態である。この一般化された **Rabi 振動** (9) は、時間に依存する基底 $|\phi_0(t)\rangle$ と $|\chi_0(t)\rangle$ で張られた平面内の回転運動を表す (図 4)。ただし、この平面は、 $\varepsilon(t) = 0$ の場合の時間発展法則に従って、時間とともに高速に向きを変えている。つまり、式 (9) の状態は、

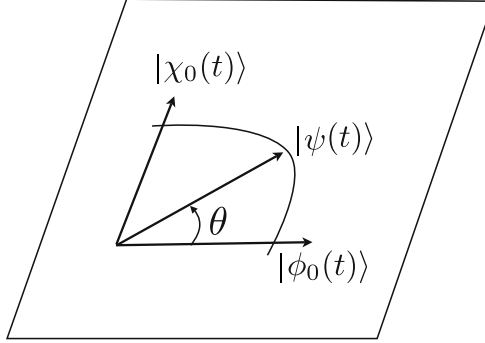


図 4：高速に運動する平面内でのゆっくりとした回転運動。

一般的な多準位系のダイナミクスの中から、制御によるゆっくりとしたタイムスケールの遷移だけを分離した形になっている。しかし、まだこの段階では、現実にはこのようなダイナミクスが誘起されるかどうかはわからない。次のようにして最適制御理論の助けを借り、実際にこのような遷移が生じることを確認しよう。

もし、一般化 Rabi 振動 (9) を作り出す最適制御外場があるとしたら、それはどのような形をしているのだろうか。そのために、この時間発展 (9) を最適外場の関係式 (6) に代入し、様々な条件を考慮しながら $\alpha \rightarrow 0$ の極限を取ると、最終的に

$$\varepsilon(t) = \frac{2\hbar\Omega_m}{V^2} \text{Re} \left[e^{i\theta} \langle \chi_0(t) | \frac{\partial H_\varepsilon}{\partial \varepsilon} | \phi_0(t) \rangle \right] \quad (10)$$

という形式の外場が得られる。ただし、

$$\Omega_m = \frac{\pi}{T} \left(\frac{1}{2} + m \right) \quad (11)$$

は一般化された π -パルスを与える共鳴角速度であり、

$$\bar{V}^2 = \frac{1}{T} \int_0^T \left| \langle \chi_0(t) | \frac{\partial H_\varepsilon}{\partial \varepsilon} | \phi_0(t) \rangle \right|^2 dt \quad (12)$$

は二状態間の遷移要素の平均である。この最適外場は、解析的な表現 (10) が与えられているため、初期状態と目的状態で定義される量子状態 $|\phi_0(t)\rangle$ と $|\chi_0(t)\rangle$ から、最適化計算なしで求められる。つまり、量子ダイナミクス計算を繰り返す行う必要がなく、量子系に対する最適制御理論の問題点 (の一つ) を解消しているわけである。

4.2. ランダム行列と決定論的動力学

実際に、前の節で求めた解析的な外場の式 (10) が二つのランダムベクトルの間の回転運動を与えるかどうかは、数値計算により検証することができる。まず、この量子系のダイナミクスと外場との相互作用を決定するために、 $N \times N$ 行列としてランダム行列 (**random matrix**) H_0 と V を決め、外場 $\varepsilon(t)$ によって制御された時間発展は、ハミルトニアン

$$H_\varepsilon = H_0 + \varepsilon(t)V \quad (13)$$

で表されることとする。ここで導入したランダム行列は、表示基底の変換によって分布の性質が変わらないことを要求することで得られるもので、ガウシアン直交集団、ガウシアンユニタリ集団などいくつかの種類がある^{37),39)}。これらは系が属する対称性に依存して行列要素の分布が異なっているが、このために固有値などの分布の仕方が、それぞれ特徴的な性質を持っている。これらの行列で表されるハミルトニアンを使うということは、ここで考えるダイナミクスは、系の対称性を除いて特別な性質を持たない、ということを仮定している。

次に N 自由度の量子系のランダムベクトルを二つ選び、片方を初期ベクトル $|\Phi_0\rangle$ 、もう片方を目的ベクトル $|\Phi_T\rangle$ とする。制御時間 T を設定すれば、 Ω_m や $\bar{V}^2$ などの量を計算することができるため、実際に Schrödinger 方程式に従った数値計算を実施し、時刻 $t = T$ での量子状態 $|\phi_\varepsilon(T)\rangle$ と $|\Phi_T\rangle$ との重なり の値を求めれば良い。図 5 は、ガウシアン直交集団の場合の結果で、制御完了までの時間を横軸に取り、制御による成果を表示したものである。対称性により詳細は異なるが、ランダム行列系に対して一般的に、制御にかける時間 T が長いほど、また行列の大きさ N が大きいほど、得られる結果が良くなることがわかった^{34),35)}。

ここでは一般的な状態間の遷移を考えるために、ランダムな量子状態とランダム行列による相互作用を導入して解析した。そこで、ランダム行列で扱われる相互作用、あるいは、ハミルトニアンが、物理系の運動状態としてどのようなものをモデル化したものであるのか、についてコメントをしておく。そもそもランダム行列やランダムベクトルは、原子核のハミルトニアンなど詳細がわからない系を表現するための数学的モデルとして導入されてきたものであるが、その後の研究で、運動の非可積分性と関連があることがわかってきた。つまり、当初、情報がないためにランダムなモデルを導入したが、実は非可積分系のダイナミクスと

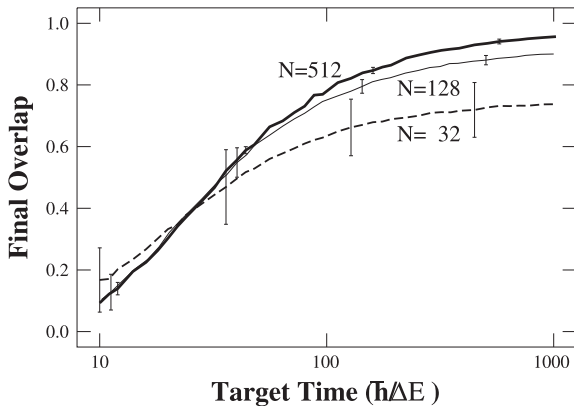


図5：制御する時間 T が大きくなれば、もしくはランダム行列の大きさ N が大きくなれば、十分な制御が可能となる（制御された状態と目的状態との重なりが1に近くなる）。

密接に関連することがわかったのである。

ここで得られた制御外場を使った検証は、量子的な位相まで含めた完全な決定論的ダイナミクスを仮定した上でのものであり、いわゆるコヒーレントな時間発展であることが必要である。一方、ハミルトニアンは基底表現に要素分布の性質が依存しないランダム行列として与えられているため、系の動力学の内在的な非線形性が仮定されている。一見、コヒーレンスと非線形性は両立しないように思われるが、量子系に関しては、これらを同時に満たすことが可能である。

古典的に非可積分である系の量子力学は、1980年代以降、量子カオス系として、量子古典対応などの観点から盛んに研究されてきた^{1),2),12),36),37)}。対応する古典力学が軌道不安定性を持つため、これらの系は、内在的な非線形性を持つと考えられる。その一例として、十分に強い量子カオス系では、ハミルトニアンの固有状態が空間全体にランダムに広がった形のものになっており、局在した波動関数を表現するためにも、多くの状態の重ね合わせを使う必要があることが知られている。これは、当初局所的であった波動関数が時間とともに急速に広がることを表し、波束の運動に関して系が非線形性を持つことを示している。しかし、量子系の時間発展は、あくまでユニタリーであるため、位相のコヒーレンスは保たれる。

十分に強いカオス系を仮定することでランダム行列の統計的性質が使えるた

め、系の対称性や固有エネルギー分布などの観測できる情報から、最適外場を解析的に構成するためのパラメータを推定することが可能である。例えば、十分に強いカオスを示すハミルトニアン (13) では、外場との相互作用演算子 V の行列要素の分布は特定の基底に依存しないものになるため、ランダム行列の固有値分布と要素分布の関係を利用することが可能である⁷。

十分に強いカオス系の量子ダイナミクスが、化学反応系などのモデルとして利用可能であれば良いのだが、実験室などで観測される量子系では、必ずしも十分に強いカオスとは言えない場合もある。そのような場合にどのような扱いが必要になるかは、後の節で検討する。

4.3. 制御外場の安定性

最適制御理論によって設計された外場を使って量子状態を制御する場合、実際には当初のもくろみ通りうまく行く場合ばかりではない。本稿で考えている量子系の制御は、完全にコヒーレントな時間発展が実現できている場合を考えているために、当然のことながら、何らかの擾乱により量子的な位相の連続性が破れてしまう（つまり、位相緩和がおこっている）と、有効でない可能性がある。また、完全にコヒーレントな時間発展をしているという前提の中でも、様々な誤差などによる影響を考える必要がある。ここでは、何らかの誤差によって当初の設計通りの外場が作れなかった場合に、制御の効率がどのように変更されるかを、次のような手順で調べることにする。

まず、最適制御理論を使って十分に大きな効率で制御が可能になるような最適外場を設計しておく。その外場に、白色雑音的な異なる周波数成分を加えると、雑音の大きさに応じて当初の制御効率より低下することが予想される。これは、制御外場の**堅牢性 (robustness)** のチェックをしていると見なすことができる⁸。

7 しかし、 H_0 と V という演算子の間に関連があるような特別な場合には、 H_0 の固有状態で表示した場合の要素分布に一般性がなくなり、行列要素の分布を予測することが難しくなってしまう。

8 別の見方をすると、最適制御された系の fidelity を調べていると考えることもできる。fidelity とは Peres によって導入された量であり¹⁾、あるハミルトニアンのもとでの波動関数の時間発展と、そのハミルトニアンから微少にずれたハミルトニアンのもとでの波動関数の時間発展の内積をとったものである。fidelity の振る舞いは系の古典的な不安定性を反映することが知られている³⁸⁾。

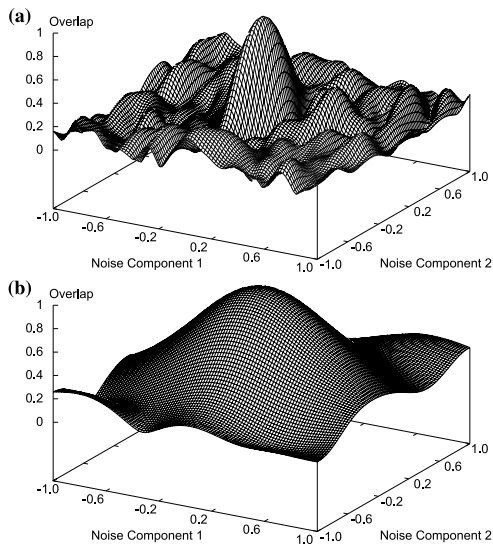


図 6：最適制御理論による外場の安定性。制御時間が短い場合 (a) は加えられた摂動に対して敏感に変化するが、制御時間が長い場合 (b) には比較的大きな摂動を加えても制御の効果は変化しにくい。

ランダム行列系の制御に対する雑音の効果を調べると、顕著に差が出る要素の一つとして制御時間が挙げられることがわかった。最適制御理論では、初期状態から目的状態への遷移に必要な時間をあらかじめ設定した上で、最適外場を求めることになるが、この時間 T が短い場合と長い場合を比較すると、長い場合の方が外場の変化に対してロバストなダイナミクスになっているのである。時間の単位 Δt を平均固有値間隔 ΔE の逆数を使って $\Delta t \equiv \hbar/\Delta E$ と定義する時、図 6 に示した結果は、(a) $T = 10\Delta t$ 、(b) $T = 50\Delta t$ の場合である。二つの異なる成分の雑音を加えた時にどれだけ効率が低下するかを示している。 x 軸、 y 軸に相当する部分が加える雑音成分の振幅で、 z 軸に相当する部分が目的状態との重なり、つまり、制御の効率を表す。明らかに (b) の方が雑音による影響が小さいことがわかる。この結果を一般化された Rabi 振動 (9) や解析的な電場 (10) を用いて理解することは今後の課題である。

4.4. 現実系に近い場合

ここでは別の観点から現実的かどうかの検証を行うために、理想的にランダムなハミルトニアンではなく、もうすこし現実的な多原子分子の運動を考えてみよう。特別な光などとの相互作用がない場合を考えると、有限の温度においても電子状態は基底状態にあると考えられるが、基底状態ポテンシャル面の上での多数の原子核は、非常に複雑な相互作用ポテンシャルを感じながら、振動や回転の運動をしていると考えられる。つまり、分子の振動・回転運動を量子力学的に扱う場合には、内在的に非線形性を持っているということができるのである。すでに何年にもわたって、分子内振動運動などの非線形性を考慮して、エネルギー移動などの非平衡な現象が研究されている⁴⁰⁾。

運動の制御においても、このような非線形性を積極的に利用すると、最適制御理論による外場設計や、一般化された π パルスによる制御外場が利用できる可能性が高い。しかし、残念ながら現実の系の非線形性は強いカオスの極限とは異なるために、完全にランダムな場合に考えたような解析的な手法をそのまま適用することは難しく、現実の系に応じた修正を加える必要が生じる。現実の系が理想的なランダム系と異なる点の一つは、相互作用演算子 V の行列要素が、表示の基底系によっては有限の幅を持つランダム分布、すなわちバンドランダム行列 (**banded-random matrix**) になるということである。

相互作用演算子 V がバンドランダム行列であっても、長時間極限での最適外場 (10) を適切に修正すれば、制御効率を十分に大きくすることができる³⁵⁾。現実の多原子分子系に対しても、その相互作用ハミルトニアンをバンドランダム行列に落としこむことができれば、同様の手法で制御可能である。

5. 量子カオス系から生体分子へ

この章では、数学的なランダム行列系ではなく、実際のダイナミクスが理解しやすいモデル系を使って、量子力学と古典力学の両方の観点から制御の問題を考えてみることにする。そのために、 q を空間座標とする一次元の量子系を考える。ただし $0 \leq q < 2\pi$ とし、系は周期境界条件: $\phi(0) = \phi(2\pi)$ を満たすものとする。この系は、 q を角度変数と考えれば、分子などのミクロな物体の、ある軸の周りの回転運動だけを取り出したものと見ることができる。(ミクロな物体であるため、角度方向に幅を持った波束の形で状態を指定することになる。) このとき、ある運動状態にある波束を、別の運動状態の波束に変化させることを考えよう。

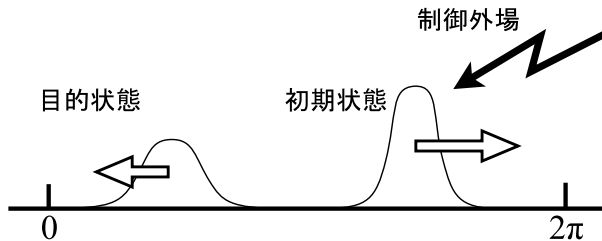


図 7：1 次元空間での波束の運動の制御。

5.1. 量子カオス系の制御

初期状態を右向きに運動している波束とし、目的状態を別の場所で反対向きに運動している波束とすると、図 7 に示すような制御を考えることになる。前節では、制御のための外場（電場）との相互作用演算子 V としてランダム行列（もしくはバンドランダム行列）を仮定した。しかし、ここでは現実的なハミルトン系の場合にどうなるかということに注目するので、そのような仮定は置かない。

まず、系を少し「複雑」にするために、撃力が一定周期で加えられるような相互作用を導入しよう。時間発展を表すハミルトニアンを

$$H_{\text{KR}}(t) = \frac{p^2}{2} + K \cos(q) \sum_n \delta(t - n) \quad (14)$$

と定義する。ここで t は時刻を表し、 K は周期的外力の強さを表す。定期的に加えられる周期外力は、角度 q （周期 2π ）に応じた向きと大きさを持つ。これは **kicked rotor**（もしくは**標準写像**）と呼ばれ、非線形力学系を調べるために使われるモデル系のうち、最も単純なものの一つである^{36),37)}。

この系に対して、まず最適制御理論を適用して制御外場を設計すると、その結果は図 8 のようになる³³⁾。これを見ると、非線形性の強さによるダイナミクスの違いが明らかにわかる。非線形性が弱い場合には、運動量方向（ y 方向）への拡散がないため、トーラスと呼ばれる局在した状態の付近に比較的長く滞在しているが、非線形性が強くなると、急速に位相空間全体に広がってしまうことがわかる。どちらの場合も、設計された制御外場によって目的状態への制御が可能である⁹⁾。

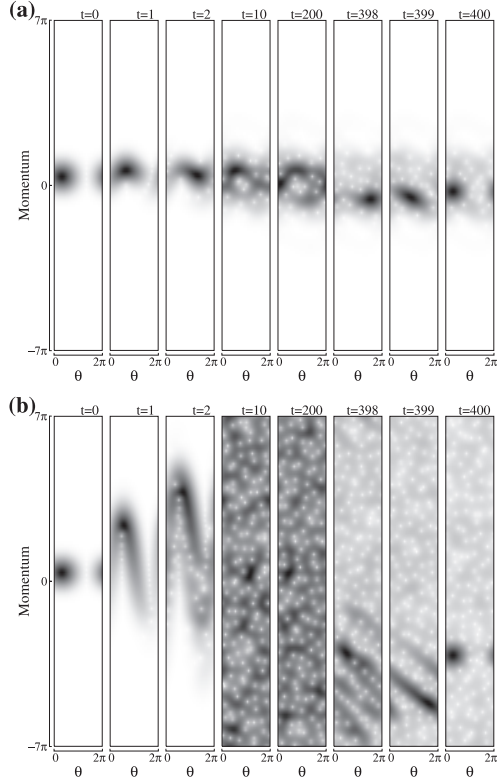


図 8: Kicked rotor 系の制御ダイナミクス。非線形性の弱い場合 (a) に比べて強い場合 (b) には、位相空間全体に広がった後に、目的状態へ収束する。

この場合に利用した外場との相互作用演算子は、

$$V = \cos\left(q + \frac{\pi}{3}\right) \quad (15)$$

である。これは q 表示で対角的な演算子であるが、古典系におけるポテンシャルの非線形性のために、 V を行列表示するとそれはランダム（もしくはバンドラン

9 一般に、最適制御理論で制御できない対象は（制御時間が極端に短いということでもない限り）殆どない。

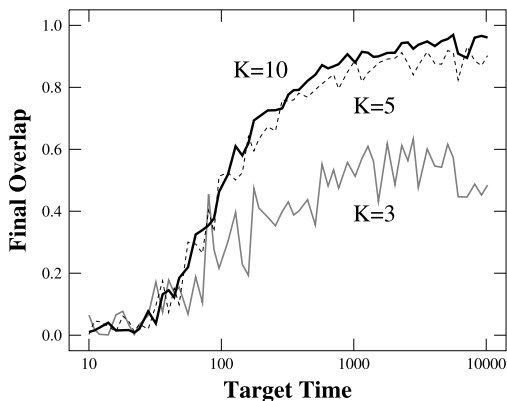


図9：Kicked rotor 系に解析的な外場を適用した場合。

ダム) 行列に近くなることが予想される。それを確かめるために一般化された π パルス (10) を利用して制御することを考えてみよう。その結果は図9のようになり、非線形性が十分に強い場合 ($K \gg 1$) には、長時間極限の制御外場を使って制御することが可能である。つまり、系の非線形性が強い量子力学系では、制御ダイナミクスにおいてもランダム行列で表される系と同様の性質を示すことが分かった。このような系では、制御外場を設計するために量子ダイナミクスの繰り返し計算をする必要がなく、解析的に与えられる外場 (10) を使って、「任意の」¹⁰量子状態から「任意の」量子状態への遷移を引き起こすことが可能になる。

5.2. 半古典極限での最適制御

一般に量子系の表現には、プランク定数を 2π で割った $\hbar = h/2\pi = 1.05 \times 10^{-34}$ (J·s) が含まれるが、これは、その系の量子性を表すパラメータである。この $\hbar$ は、解析力学に出てくるポアソン括弧式と量子系の交換子との間の差として現れる⁴¹⁾ことから、これは演算子の非可換性の程度を表す。一方、 $\hbar$ がエネルギーと時間の積の次元を持つこと、あるいは、運動量と座標の積の次元を持つこと

10 ただし、ここの「任意」の状態というのは、ある程度の多準位を含む状態ということであり、1 準位しか含まない場合は難しい。しかし、その場合は π パルスや断熱掃引を使えばいいわけである。

と、量子系の解析的な表現に $\exp(Et/i\hbar)$ や $\exp(pq/i\hbar)$ などの位相因子として現れることなどから、時間と空間における波動関数表現の「詳細さ」に関する限界値と考えることもできる。いずれにしても、 $\hbar$ が十分小さい値であると見なせるようなスケールの現象は、古典力学的であると考えられており、このようなスケールでの量子力学を半古典量子力学、あるいは、このようなスケールの極限を半古典極限 (semiclassical limit) と呼び、半古典極限を $\hbar \rightarrow 0$ の極限と書くことがある。

量子系の制御の問題でも、半古典極限での振る舞いがどのようなになるかに興味がもたれる。これは単純に理論的な興味にとどまらず、量子系を制御する手法の適用範囲と関連するためである。また、系が大きくなると、量子ダイナミクスの計算は半古典近似をしないと計算できず^{(8), (42)}、またそのような状況では半古典近似がよく成り立つという事情もある。ここでは、この章で扱ってきた kicked rotor 系の状態制御においては、半古典極限がどのような性質を持つかを調べてみよう。ここで採用している離散化表現の方法では、空間方向、あるいは、運動量方向の離散化数 N の逆数に比例する形で $\hbar$ の値が与えられるため、比較的小さい N に対する結果と、大きい N に対する結果を比較することで、半古典極限での制御ダイナミクスの性質を考えることができる。図 10 は、二つの $\hbar$ の値で、長時間極限で適用できる制御外場による制御効率が、どのように異なるかを比較したもので、kick の間隔を 1 とし、 $T = 10000$ での結果である。横軸はカオスの強さで縦軸に目的状態との内積の値を表示している。

これによると、 $\hbar$ の値が比較的大きい時は、kick の強さ K の変化にそれほど敏感ではないが、 $\hbar$ が小さい場合には、 K の値が一定値を越えると急に制御の効率が上がることがわかる。実は、kicked rotor 系の固有状態は局在する性質があって、その局在幅は K と $\hbar$ に依存することがわかっており、さらにこの性質は、外場との相互作用演算子 V の行列要素の分布と関連している。半古典的な ($\hbar$ が小さい) 場合は、ある値以上の K では、ほとんどランダム行列とみなせるが、量子的な ($\hbar$ が大きい) 場合には、かなり大きな K に設定しないと完全にランダム行列とは言えない。結局、この図における制御効率の差は、4.4 節で検討したように、 V がバンドランダム的になっているか、フルランダム的になっているかという違いを反映しているように見える。

半古典極限での制御可能性を、局在距離だけの議論で判定できるかどうかは、まだわかっていない。他にも制御に必要な時間 T の議論が必要で、 $\hbar$ が小さくな

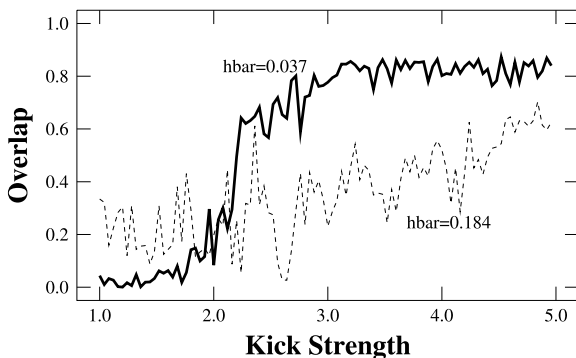


図 10： Kicked Rotor 系における、 $\hbar$ の制御効率への影響。

ると、必然的に固有値間隔が小さくなるために、逆に長い時間のスケールの運動が生ずる可能性があり、制御完了までの時間も伸びるのではないかという予想が立てられる。 $\hbar \rightarrow 0$ の極限と $T \rightarrow \infty$ の極限は、制御可能性に関しては、極限を取る順番によって結果が異なる可能性があるため、問題は単純ではない。また、そもそもこの kicked rotor 系を古典極限で制御できるかという問題もあり、量子制御の半古典的な問題を調べることは今後の課題である。

5.3. 生体系の量子制御

さて、現実の分子系へのレーザー制御の応用に関しては 3.4 節で若干触れているが、そこでは遺伝的アルゴリズムとの関連において説明しただけであり、ここではもっと広い観点から論じておこう。

本稿では複雑な量子系の制御ということで、ランダム行列系や、kicked rotor 系のような量子カオス系を取り上げて説明してきた。もともとこれらは分子の高励起状態をモデル化したものである。比較的単純な分子の高励起状態として現れる性質のうちいくつかは、複雑な（つまり、自由度の大きい）系であれば、たとえ第一励起状態であっても持ちうるものとなり、それは量子カオス系としてモデル化することが妥当となる。つまり、量子カオス系は、生体分子のような複雑な量子系のモデルと考えることもできるのである。このことを踏まえた上で、いま実験的に生体系に対してどのような量子制御が行われているかを survey しておく⁴³⁾。

Motzkus のグループは、光合成細菌 (LH2 system) におけるエネルギー移動の制御を考えた⁴⁴⁾。2.1 節のフィードバック制御を使ってレーザー電場を設計し、最初に励起されるカロテノイドから周りにあるバクテリオクロロフィルへのエネルギー移動を制御した。その結果、30%ほどのエネルギー移動のクエンチが可能であることが分かった。また、制御のためのレーザー電場を調べることで、 160 cm^{-1} ほどの振動数をもつ、カロテノイドの torsional bending mode を励起することが重要であることが分かった。

一方、Miller のグループはバクテリオロドプシン内に存在するレチナールの光異性化の制御を考えた²⁷⁾。彼らは 3.4 節の遺伝的アルゴリズムを用い、光異性化の効率を自然の状態である 65%から $\pm 20\%$ 変化させることが可能であることを示した。この場合も、レーザー電場を調べてみると、 200 cm^{-1} ほどのレチナールの torsional mode を励起していることが分かった。

また、直接制御しているわけではないが、生体分子をレーザーで励起し、その後の時間発展を分光的に調べているものとして、Hamm のグループと Mizutani のグループによる一連の研究がある。Hamm のグループは、ペプチドに「取っ手」としてアゾベンゼンをつけ、それを一旦励起して脱励起し、その際に出る余剰エネルギーをペプチドに流すことを考えた。彼らは、時間分解分光の技術と同位体ラベリングを組み合わせることによって、そのエネルギーの流れを原子スケールの分解能、ピコ秒の時間スケールで観測することができた⁴⁵⁾。一方、Mizutani のグループは、タンパク質チトクロム c の内部に存在するヘム分子を励起し、そこからタンパク内部へのエネルギーの流れを残基単位の分解能で観測できる装置を開発した⁴⁶⁾。これらの研究においては、通常のレーザーパルスが用いられているが、そのパルスを最適制御理論や遺伝的アルゴリズムなどで設計すれば、これらの分子内プロセスをより詳細に理解したり、また生体分子内での量子効果はどのような状況で持続するか、もしくは崩壊するかということを分子レベルで調べることが可能となる。

6. 展望

本稿では、量子状態の制御について、ランダム行列系・量子カオス系の最適制御理論というモデル系での研究から化学反応制御での応用と生体系の制御の現状までを説明した。4 節で導入された長時間極限での解析的制御外場が、生体系などの制御に応用できるかという点に関しては、まだ今後の研究を待たなくてはな

らない。これらの系の制御ダイナミクスでは、量子系のコヒーレントな時間発展に見られる線形性と、対応する古典力学系に内在する非線形性の両方が重要な役割を演じている。一見矛盾するような線形性と非線形性の両面が必要とされることは、カオス系における量子系と古典系の二面性が現れているように思われる。

いわゆる量子・古典対応の研究は量子力学の黎明期から広く行われており、一次元系や可積分系においては対応関係が成立するが、カオス系の半古典極限については非常に複雑な問題であることが分かっている⁴¹⁾。量子力学に関しては、新しい理論として成立した時期、新しい技術としての応用が始まった時期を経て、現在は、さらなる精密化によって、これまで無視してきたような微妙な問題が顕在化してくる時期と言えるかもしれない。量子力学に関連した精密化の結果、多粒子系の極限や空間・時間スケールの違いを利用して、ある意味、近似的に成立している統計力学など他の物理学分野に対しても、同様の精密化を要求する可能性もある。

多数の基礎的な研究がなされながら、まだ実用化には遠いと思われる量子コンピュータ^{47),48)}については、本稿で扱った制御ダイナミクス、コヒーレンスと非線形性、量子・古典対応など、理論的にも技術的にも解決されなくてはならない問題が、数多く残されている¹¹⁾。これらを解決して量子コンピュータが実現する未来が来るのか、困難な問題解決を避けた結果、最終的に別の方向の技術として発展するのかは、今の段階では分からない。制御ダイナミクスを通して、量子力学と古典力学の論理、あるいは、線形と非線形の論理を探っているわれわれのアプローチが、少しでも新しい精密科学の応用に寄与できることを願いつつ、この文章を終わることにする。

謝辞 ここで紹介した研究の一部は科学研究費補助金・基盤研究 (C) 22540421 (生体分子の量子ダイナミクス——その理論的解明と制御) の支援を受けている。また、戸田幹人准教授 (奈良女子大学)、渡辺浩教授 (明治大学)、菊地浩人准教授 (日本医科大学) には原稿を読んでいただき、有用なコメントを頂いた。ここ

11 たとえば、多自由度の量子カオス系における量子絡み合い⁴⁹⁾の制御の問題を考えることもできる。また、多自由度系だと古典系ではアーノルド拡散⁵⁰⁾という特異的な拡散現象が起こるので、それと対応する量子系をどのように制御するのか、というのにも興味深い。

に感謝いたします。

参考文献

- 1) A. ペレス、ペレス量子論の概念と手法—先端研究へのアプローチ、大場 一郎, 中里 弘道, 山中 由也 (共訳) (丸善, 2001).
- 2) David J. Tannor, *Introduction to Quantum Mechanics: A Time-Dependent Perspective* (Univ Science Books, 2006).
- 3) 計量研究所 編、超精密計測がひらく世界、(講談社ブルーバックス、1998 年).
- 4) R. ペンローズ、心は量子で語れるか、中村和幸 (訳) (講談社、1999 年).
- 5) 佐藤文隆、量子力学のイデオロギー (青土社、1997 年)、「量子力学は世界を記述できるか」(青土社、2011 年).
- 6) S. A. Rice and M. Zhao, *Optical Control of Molecular Dynamics* (Wiley, 2000).
- 7) M. Shapiro and P. Brumer, *Quantum Control of Molecular Processes* (Wiley-VCH, 2012).
- 8) A. Kondorskiy, S. Nanbu, Y. Teranishi, and H. Nakamura, J. Phys. Chem. A **114**, 6171-6187 (2010).
- 9) C. Brif, R. Chakrabarti, and H. Rabitz, Adv. Chem. Phys. **148**, 1-76 (2012).
- 10) 川口淳一郎 監修、小惑星探査機『はやぶさ』の超技術、(講談社、2011 年).
- 11) E. Ott, C. Grebogi and J. A. Yorke, Phys. Rev. Lett. **64**, 1196 (1990).
- 12) E. Ott, *Chaos in Dynamical Systems* (2nd Ed.), (Cambridge, 2002).
- 13) 志水清孝、最適制御の理論と計算法、(コロナ社、1994 年).
- 14) W. H. Schmidt, K. Heier, L. Bittner and R. Bulirsch, Ed., *Variational Calculus, Optimal Control and Applications* (Birkhäuser, 1998).
- 15) L. Allen and J. H. Eberly, *Optical Resonance and Two-level Atoms* (Dover, 1987).
- 16) P. L. Knight and L. Allen, *Concepts of Quantum Optics* (Pergamon Press, 1983), 量子光学の考え方、氏原紀公雄 (訳) (内田老鶴圃、1989 年).
- 17) S. Takahashi and K. Takatsuka, J. Chem. Phys. **124**, 144101 (2006).
- 18) H. Nakamura, *Nonadiabatic Transition* (World Scientific, 2002); 中村宏樹、化学反応動力学、朝倉書店 (2004).
- 19) T. Yonehara, K. Hanasaki, and K. Takatsuka, Chem. Rev. **112**, 499 (2012).
- 20) T. Takami, Phys. Rev. Lett. **68**, 3371 (1992).
- 21) T. Takami, Phys. Rev. E **52**, 2434 (1995).
- 22) J. Gong and P. Brumer, Phys. Rev. Lett. **86**, 1741 (2001); J. Chem. Phys. **115**, 3590 (2001).
- 23) J. Gong, H. J. Wornor, P. Brumer, Phys. Rev. E **68**, 026209 (2003); Phys. Rev. E **68**, 056202 (2003).
- 24) M. Mitchell, *An Introduction to Genetic Algorithms* (The MIT Press, 1996).

- 25) R. S. Judson and H. Rabitz, Phys. Rev. Lett. **68**, 1500 (1992).
- 26) R. J. Levis, G. M. Menkir, and H. Rabitz, Science **292**, 709 (2001).
- 27) V. I. Prokhorenko, A. M. Nagy, S. A. Waschuk, L. S. Brown, R. R. Birge, and R. J. D. Miller, Science **313**, 1257 (2006).
- 28) D.F. Walls and G.J. Milburn, *Quantum Optics* (2nd Ed.), (Springer, 2008).
- 29) W. Zhu, J. Botina, and H. Rabitz, J. Chem. Phys. **108**, 1953 (1998).
- 30) H.A. Rabitz, M.M. Hsieh, and C.M. Rosenthal, Science **303**, 1998 (2004).
- 31) T. Iitaka and T. Ebisuzaki, Phys. Rev. E **69**, 057701 (2004).
- 32) T. Takami and H. Fujisaki, J. Phys. Soc. Jpn. **73**, 3215 (2004).
- 33) T. Takami, H. Fujisaki, and T. Miyadera, Adv. Chem. Phys. **130** (Part A), 435 (2005).
- 34) T. Takami and H. Fujisaki, Phys. Rev. E **75**, 036219 (2007).
- 35) T. Takami and H. Fujisaki, J. Mod. Opt. **56**, 822 (2009).
- 36) M. C. Gutzwiller, *Chaos in Classical and Quantum Mechanics* (Springer, 1990).
- 37) F. Haake, *Quantum Signatures of Chaos* (2nd Ed.), (Springer, 2000).
- 38) T. Gorin, T. Prosen, T.H. Seligman, and M. Znidaric, Phys. Rep. **435**, 33 (2006).
- 39) 永尾 太郎、ランダム行列の基礎、(東京大学出版会, 2005)。
- 40) H. Fujisaki, Y. Zhang, and J.E. Straub, Adv. Chem. Phys. **145**, 1 (2011).
- 41) 首藤 啓、古典と量子の間、(岩波書店、2011 年)。
- 42) H. Fujisaki, Y. Teranishi, A. Kondorskiy, and H. Nakamura, “Semiclassical approaches to controlling chemical reaction dynamics,” quant-ph/0302025.
- 43) A. Nagy, V. Prokhorenko, and R. J. D. Miller, Curr. Opin. Struct. Biol. **16**, 654 (2006).
- 44) J. L. Herek, W. Wohlleben, R. J. Cogdell, D. Zeidler, and M. Motzkus, Nature **417**, 533 (2002).
- 45) V. Botan, E. Backus, R. Pfister, A. Moretto, M. Crisma, C. Toniolo, P. H. Nguyen, G. Stock, and P. Hamm, PNAS **104**, 12749 (2007).
- 46) N. Fujii, M. Mizuno, and Y. Mizutani, J. Phys. Chem. B **115**, 13057 (2011).
- 47) M. A. Nielsen and I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information* (Cambridge, 2000).
- 48) N. D. マーミン、量子コンピュータ科学の基礎、木村 元 (訳) (丸善、2007 年)。
- 49) H. Fujisaki, T. Miyadera, and A. Tanaka, Phys. Rev. E **67**, 066201 (2003); H. Fujisaki, Phys. Rev. A **70**, 012313 (2004).
- 50) C. Martens, M. Davis, and G. Ezra, Chem. Phys. Lett. **142**, 519 (1987); A. Shojiguchi, C.-B. Li, T. Komatsuzaki, and M. Toda, Phys. Rev. E **76**, 056205 (2007).

(受付日 平成 24 年 2 月 28 日)

(受理日 平成 24 年 3 月 29 日)