

粗視化描像による量子カオス制御*

分子科学研究所 高見 利也 (Toshiya Takami)
Institute for Molecular Science
ボストン大学 藤崎 弘士 (Hiroshi Fujisaki)
Boston University
東京理科大 宮寺 隆之 (Takayuki Miyadera)
Tokyo University of Science

1 Introduction

量子系の制御問題は、レーザーによる原子・分子の制御の分野 [1] において、二準位間に遷移を起こす π パルス制御、三準位以上の系に対する STIRAP 制御、二つ以上の電子状態を持つ系に対するパルスタイミング制御 (pulse-timing control)、二つ以上の反応経路がある場合に量子干渉を利用する制御 (coherent control) などさまざまな手法がある [2, 3]。これらの方法は、実際に原子・分子の系に適用されてその効果が確かめられているが、多準位間に複雑な相互作用があるような系に対しては、必ずしも効果的とは言えない。一方、量子系の制御可能性に関する一般論の研究では、孤立スペクトルを持つ系は、完全制御可能であるという結果 (complete controllability) が得られている [4] が、この定理は制御に使う外場の存在を保証するのみにとどまっている。

制御のための最適外場を構成する方法は、最適制御理論 (optimal control theory (OCT)) を使う方法 [5] などが提案されているが、最適制御理論で現れる方程式は一般に非線形であるため、何らかの数値最適化による解法を利用する必要がある。しかし、数値的に求められた外場からは、どのような物理的な過程が生じたのかを解析することが困難であることが多い。さらに、原子や分子の高励起状態は量子カオスの性質を示すことが知られているが [7]、このような系では多準位間相互作用の影響 [8] が避けられないため、量子カオス系まで含めて量子制御の問題を考える場合には、多準位間の制御という複雑な問題を解析することとなる。また、多自由度の現実系に応用するためには数値計算のコストが莫大になるという問題もあり、何らかの解析的方法を導入することが望まれる。

この論文では、まず最初に第 2 章で、多準位間の制御の様子を調べるために、量子カオス系 (random matrix system, kicked rotor) における最適制御

*ここで紹介する内容は、Advances in Chemical Physics (John Wiley & Sons, Inc.) に掲載される予定の論文 “Coarse-Grained Picture for Controlling Quantum Chaos” (T. Takami, H. Fujisaki, and T. Miyadera) を要約したものである。

の数値計算を実行する。この結果を受けて、第3章では、粗視化描像により Coarse-Grained (CG) Rabi 状態を導入して制御ダイナミクスを解析した後、第4章では、この描像のもとで求められた解析的な制御外場の有効性を示す。

2 Optimal Control of Quantum Chaos

量子カオス系に対する最適制御理論の数値計算を行なう。ここでの制御の目的は、ある量子カオス系の $t=0$ での初期状態 $|\varphi_i\rangle$ を時刻 $t=T$ で終状態 $|\varphi_f\rangle$ に来る限り近付ける最適外場 $\varepsilon(t)$ を求めることである。このような方法の一つが最適制御理論 (optimal control theory (OCT)) で、原子や分子の制御外場の設計にも使われている [1]。

通常、OCT は拘束条件のある変分問題の形で定式化される。ここでは、Zhu-Botina-Rabitz により導入された汎関数 [5]

$$J = J_0 - \alpha \int_0^T [\varepsilon(t)]^2 dt - 2\text{Re} \left[\langle \phi(T) | \varphi_f \rangle \int_0^T \langle \chi(t) | \frac{\partial}{\partial t} - \frac{H[\varepsilon(t)]}{i\hbar} | \phi(t) \rangle dt \right] \quad (1)$$

を利用する。右辺第一項は最終的な重なり $J_0 = |\langle \phi(T) | \varphi_f \rangle|^2$ であり、第二項は外場 $\varepsilon(t)$ の振幅に対するペナルティ。最終項の係数 $\langle \phi(T) | \varphi_f \rangle$ は、Schrödinger 方程式を満たす量子状態 $|\phi(t)\rangle$ と $|\chi(t)\rangle$ に対する条件 $|\phi(0)\rangle = |\varphi_i\rangle$ および $|\chi(T)\rangle = |\varphi_f\rangle$ を分離するために導入されている [1, 5]。 $\varepsilon(t)$ に関する変分により、最適外場は

$$\varepsilon(t) = \frac{1}{\alpha\hbar} \text{Im} \left[\langle \phi(t) | \chi(t) \rangle \langle \chi(t) | \frac{\partial H[\varepsilon(t)]}{\partial \varepsilon(t)} | \phi(t) \rangle \right] \quad (2)$$

という形で表される。以下では、Zhu-Botina-Rabitz [5] の方法により、ランダム行列系と kicked rotor 系における多準位間遷移の制御の結果を示す。

2.1 Controlled Random Matrix System

外場 $\varepsilon(t)$ が加えられたランダム行列系を考える。これは、電磁場中に置かれた高励起状態の原子や分子のモデルである。ハミルトニアンは

$$H[\varepsilon(t)] = H_0 + \varepsilon(t)V \quad (3)$$

と書かれる。ここで、 H_0 と V は $N \times N$ ランダム行列で、Gaussian Orthogonal Ensemble (GOE) に従うものとする。 H_0 の平均固有値間隔と V の非対角要素の分散は、ともに 1 に規格化されているものとする。

初期状態 $|\varphi_i\rangle$ と終状態 $|\varphi_f\rangle$ を決めて制御時間 T とペナルティファクター α が与えられれば、数値的手法により最適外場 $\varepsilon(t)$ は求められる。ここでは、 $|\varphi_i\rangle$ と $|\varphi_f\rangle$ としてガウシアンランダムベクトル (Gaussian random vectors)¹ $|\varphi\rangle$ を採用する。

¹ガウシアンランダムベクトルを、ある規格直交基底 $|\phi_j\rangle$ を使って、 $|\varphi\rangle = \sum_j c_j |\phi_j\rangle$ と表すと、 c_j はガウス分布 $P(c_j) \propto \exp(-|c_j|^2)$ に従う複素数となる。

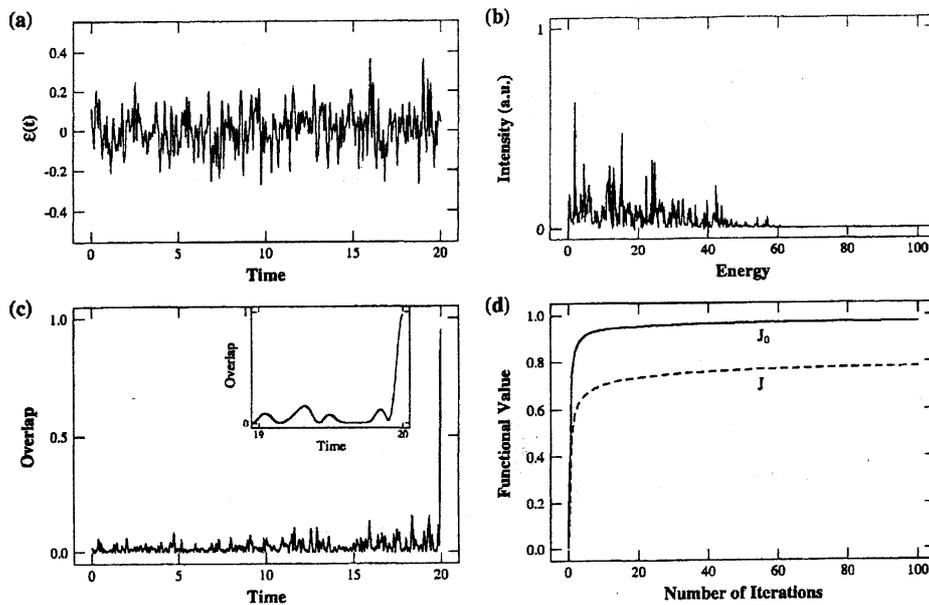


Figure 1: Zhu-Botina-Rabitz の方法による 64×64 ランダム行列系のガウシアンランダムベクトル間の最適制御 ($T = 20$, $\alpha = 1$): (a) 最適外場、(b) そのパワースペクトル、(c) $|\langle \phi(t) | \varphi_f \rangle|^2$ の時間発展 (挿入図は、 T 付近の拡大図)、(d) 最終的な重なり J_0 (solid) と汎関数の値 J (dashed) の収束の様子。

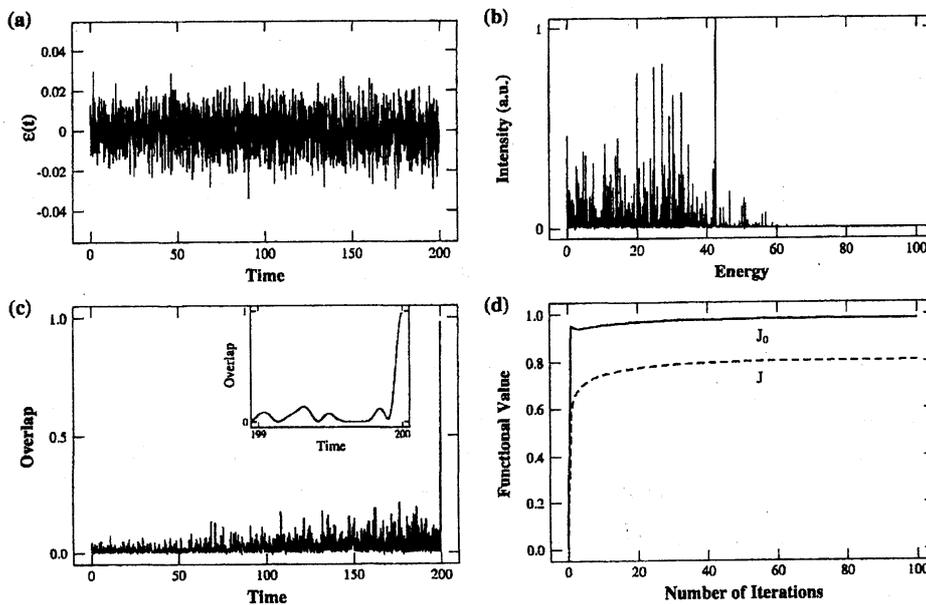


Figure 2: Zhu-Botina-Rabitz の方法による 64×64 ランダム行列系のガウシアンランダムベクトル間の最適制御 ($T = 200$, $\alpha = 10$): (a) 最適外場、(b) そのパワースペクトル、(c) $|\langle \phi(t) | \varphi_f \rangle|^2$ の時間発展 (挿入図は、 T 付近の拡大図)、(d) 最終的な重なり J_0 (solid) と汎関数の値 J (dashed) の収束の様子。

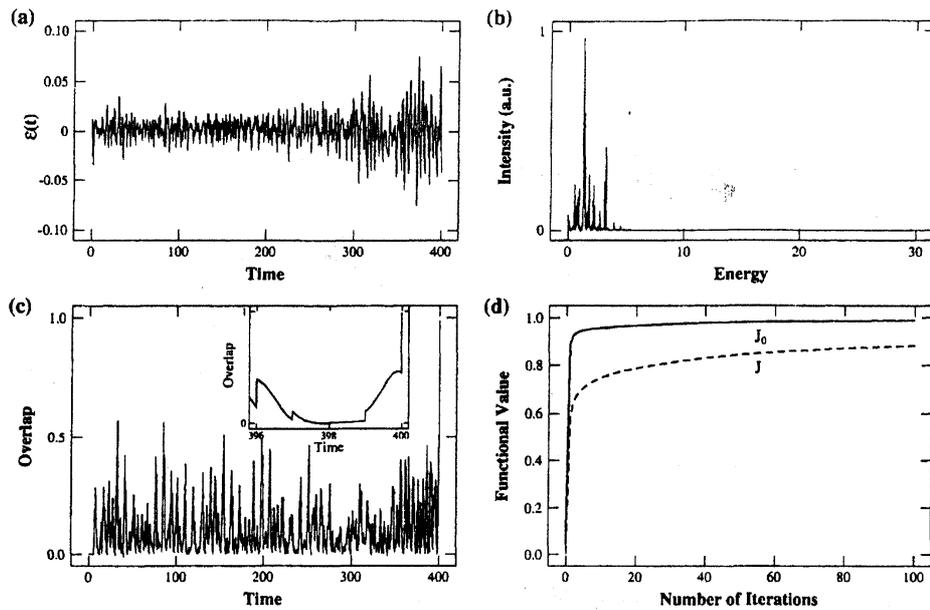


Figure 3: Zhu-Botina-Rabitz の方法による Kicked rotor の最適制御 ($K = 1$, $\hbar = 0.3436$, $T = 400$, $\alpha = 1$): (a) 最適外場、(b) そのパワースペクトル、(c) $|\langle \phi(t) | \varphi_f \rangle|^2$ の時間発展 (挿入図は T 付近の拡大図)、(d) 最終的な重なり J_0 (solid) と汎関数の値 J (dashed) の収束の様子。

64 × 64 ランダム行列系の数値結果を示す。比較的短い時間 $T = 20$ ($\alpha = 1$) の場合の結果が図 1、長い時間 $T = 200$ ($\alpha = 10$) の場合の結果が図 2 である。いずれの結果も、Zhu-Botina-Rabitz (ZBR) の方法 [5] を 100 回繰り返した後の外場を最適外場 $\varepsilon(t)$ とした。ただし、初期外場は $\varepsilon(t) = 0$ とした。最終的な重なりは、それぞれ $J_0 = 0.971$ と 0.982 である。

これらの結果から、ZBR の方法はランダム行列系の最適制御に十分効果的であることがわかる。しかし、図 1(b)、2(b) より、多くの周波数成分を含んでいることから、ダイナミクスを詳細に解析することは難しい。

2.2 Controlled Quantum Kicked Rotor

Kicked rotor (standard map, 標準写像) は、カオス力学系のモデルとしてさまざまな状況で研究されてきた [7]。その特徴の一つは運動量方向への拡散であるが、量子系では、運動量表示の固有関数が局在していることによって、この拡散が抑圧されることが良く知られている [7]。

ハミルトニアンは、

$$H_{KR}(t) = \frac{p^2}{2} + \frac{K}{\tau} \cos \theta \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(t - n\tau) \quad (4)$$

ここで、 θ は回転子の角度 (2π 周期)、 p は運動量、 K はキックの強さ (kick strength)、 τ はキックの時間間隔である。外場 $\varepsilon(t)$ は相互作用ハミルトニア

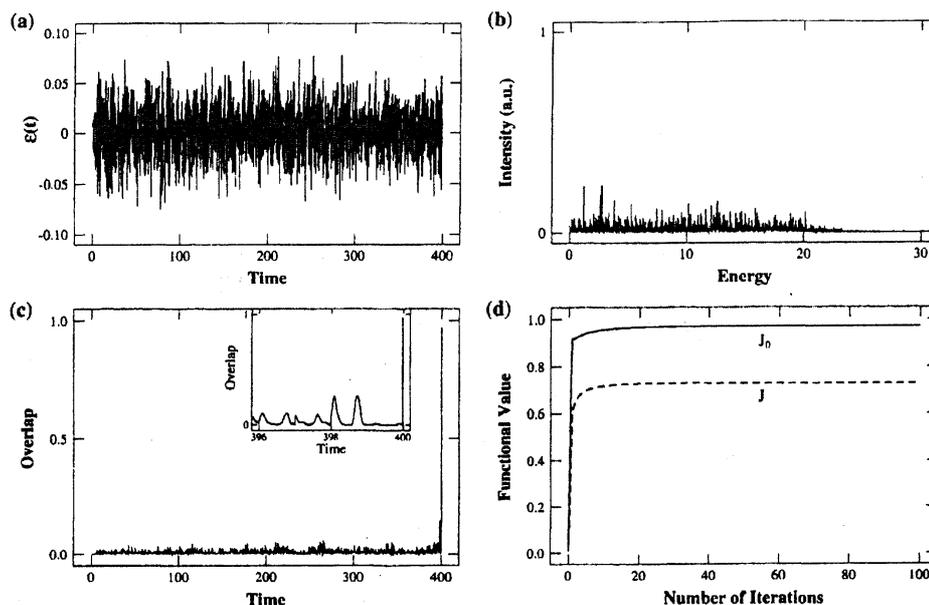


Figure 4: Zhu-Botina-Rabitz の方法による Kicked rotor の最適制御 ($K = 7$ 、 $\hbar = 0.3436$ 、 $T = 400$ 、 $\alpha = 1$): (a) 最適外場、(b) そのパワースペクトル、(c) $|\langle \phi(t) | \varphi_f \rangle|^2$ の時間発展 (挿入図は T 付近の拡大図)、(d) 最終的な重なり J_0 (solid) と汎関数の値 J (dashed) の収束の様子。

ン $H_I[\varepsilon(t)] = \varepsilon(t) \cos(\theta + \delta\theta_0)$ を介して加えられる。 $\delta\theta_0$ は対称性を崩すために入れてある (この論文中の数値計算では、 $\delta\theta_0 = \pi/3$)。全ハミルトニアンは、 $H[\varepsilon(t)] = H_{KR}(t) + H_I[\varepsilon(t)]$ で与えられる。

数値計算を容易にするため、 θ 方向だけでなく運動量方向にも周期境界を導入し、二次元トーラス位相空間でのダイナミクスを考える [9]。この場合、プランク定数は $\hbar = 2\pi M/\tau N$ となる (数値計算では $\tau = 1$ とした)。ただし、 $p = \pm M\pi/\tau$ は運動量空間の周期境界、 N は量子状態を θ または p の空間で表す場合の離散点の数である。

通常、kicked rotor のダイナミクスは、周期的キックの直前や直後などの離散時間で考えることが多いが、ここでは、外場 $\varepsilon(t)$ が連続時間で表されているため、量子状態も連続時刻で表す。この場合、Zhu-Botina-Rabitz の方法が通常と同様に適用できて、OCT による外場 (2) は、

$$\varepsilon(t) = \frac{1}{\alpha\hbar} \text{Im} [\langle \phi(t) | \chi(t) \rangle \langle \chi(t) | \cos(\theta + \delta\theta_0) | \phi(t) \rangle] \quad (5)$$

で与えられる。 $\cos(\theta + \delta\theta_0)$ はキックによる時間発展のユニタリー演算子 $e^{-iK \cos\theta/\hbar}$ と可換であるから、 $\varepsilon(t)$ はキックの前後でも連続である。

系のダイナミクスが regular の場合 (図 3) と、カオス的な場合 (図 4) の数値計算結果を示す²。いずれの場合も、 $T = 400$ 、 $\alpha = 1$ とした。100 回の繰

² $N = 128$ 、 $M = 7$ とした計算。すなわち、128 の離散点で量子状態が表され、運動量空間の範囲は $-\pi$ から π となる。この場合、プランク定数は $\hbar = 2\pi M/N = 0.3436$ 。

り返しの後に求められた最適外場は、regular な場合 (図 3(a)) はカオス的な場合 (図 4(a)) よりもかなり単純に見える (図 3(b) と 4(b) も参照)。

次に、伏見表示 [10] を使って位相空間中の波束動力学の様子を調べる。初期状態 $|\varphi_i\rangle$ と終状態 $|\varphi_f\rangle$ は、それぞれ (θ_i, p_i) と (θ_f, p_f) に中心を持つ最小不確定波束とした。図 5(a) は、図 3 に対応する regular な場合の結果で、 $J_0 = 0.989$ となった³。図 5(b) は、図 4 に対応するカオス的な場合の結果である。系がカオス的であるため、波束は時間とともに位相空間全体に広がるが、時刻 T に向けて再び終状態へと集まってきて、最終的な重なりは $J_0 = 0.969$ となった。

3 Coarse-Grained Picture

共鳴外場を二準位系に加えた場合の Rabi 振動では、量子状態は

$$|\phi(t)\rangle = e^{E_1 t / i\hbar} |\phi_1\rangle \cos |\Omega| t - i e^{-i\theta} e^{E_2 t / i\hbar} |\phi_2\rangle \sin |\Omega| t \quad (6)$$

と表される。ただし、 $|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle$ (E_1, E_2) は固有状態 (固有エネルギー)、 $|\Omega| \equiv |\varepsilon_0 \mu_{12}| / \hbar$ は Rabi 振動数、 $\mu_{12} \equiv \langle \phi_1 | \hat{\mu} | \phi_2 \rangle$ は双極子演算子 $\hat{\mu}$ の行列要素、 ε_0 は外場の振幅、 θ は位相である。

ここでは、多数の固有準位がある系 (3) において、通常良く使われる回転波近似 (rotating-wave approximation (RWA)) [2] と同様に、高振動成分を無視するというある種の「粗視化」を行なうことで、初期状態 $|\varphi_i\rangle$ から終状態 $|\varphi_f\rangle$ への制御ダイナミクスを考える。ただし、 $|\varphi_i\rangle$ と $|\varphi_f\rangle$ は多数の固有状態を含むと仮定する。

3.1 Coarse-Grained Rabi State and Frequency

第 2.1 章で示したように、多準位系の場合は、制御ダイナミクスにおける最終的な重なりは激しく振動する。この複雑な動きを解析するために、時間に依存する状態

$$|\phi_0(t)\rangle = \hat{U}_0(t, 0) |\varphi_i\rangle, \quad |\chi_0(t)\rangle = \hat{U}_0(t, T) |\varphi_f\rangle \quad (7)$$

を導入する。ここで、 $\hat{U}_0(t_2, t_1) = e^{-iH_0(t_2-t_1)/\hbar}$ は H_0 による $t = t_1$ から t_2 までの時間発展演算子、 T は制御時間。これらは、通常の Rabi 状態 (6) における固有状態の analogy であり、以下では、制御ダイナミクスを $|\phi_0(t)\rangle$ から $|\chi_0(t)\rangle$ への遷移として解析する。

規格化条件 $|c(t)|^2 + |s(t)|^2 = 1$ を満たす関数 $c(t)$ と $s(t)$ で表される

$$|\phi(t)\rangle = |\phi_0(t)\rangle c(t) + |\chi_0(t)\rangle s(t) \quad (8)$$

³ここでは、位相空間の狭い範囲に閉じ込められた波束の運動を、その範囲内で制御した。しかし、 p 方向に離れた場所に制御することは難しい。これは、もともとのダイナミクスの局在範囲を越えて外に出ることは非常に困難だからである。

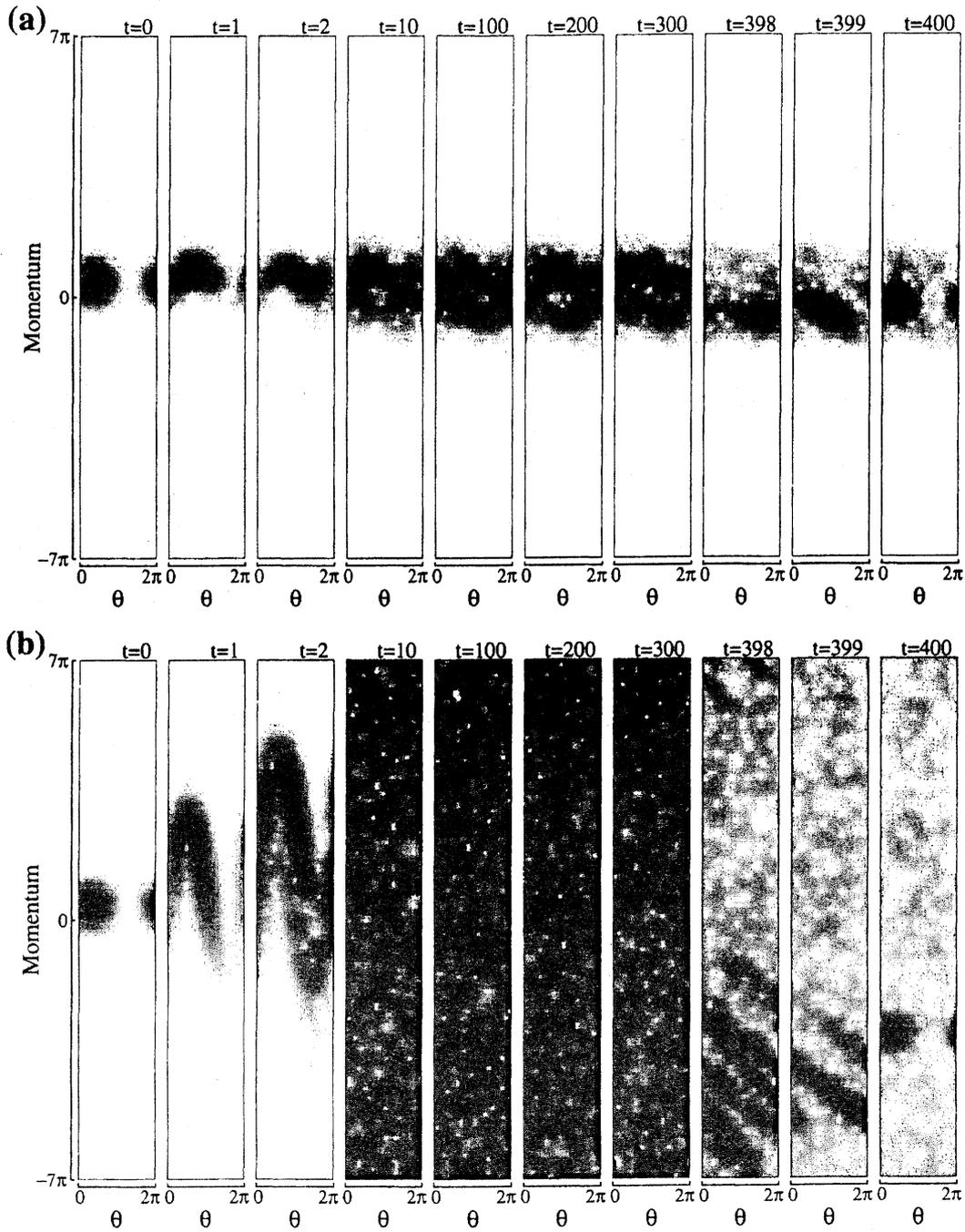


Figure 5: 量子 kicked rotor の伏見表示 ($\hbar = 0.3436$, $\alpha = 1$, $T = 400$)。最適外場は Zhu-Botina-Rabitz 法による (100 回繰り返し)。左から $t = 0, 1, 2, 10, 100, 200, 300, 398, 399, 400$ のキック直後の状態。(a) $K = 1$ (regular)、 $(\theta_i, p_i) = (1.0, 1.0)$ 、 $(\theta_f, p_f) = (1.0, -1.0)$; (b) $K = 7$ (カオスの)、 $(\theta_i, p_i) = (1.0, 1.0)$ 、 $(\theta_f, p_f) = (1.0, -10.0)$ 。

が Schrödinger 方程式を満たすと仮定すると、

$$i\hbar \left[|\phi_0(t)\rangle \frac{d}{dt} c(t) + |\chi_0(t)\rangle \frac{d}{dt} s(t) \right] = \varepsilon(t) V [|\phi_0(t)\rangle c(t) + |\chi_0(t)\rangle s(t)] \quad (9)$$

が得られ、左から $\langle \phi_0(t)|$ と $\langle \chi_0(t)|$ をかけると、 $c(t)$ と $s(t)$ に対する方程式、

$$i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} c(t) \\ s(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle \phi_0(t)|\varepsilon(t)V|\phi_0(t)\rangle & \langle \phi_0(t)|\varepsilon(t)V|\chi_0(t)\rangle \\ \langle \chi_0(t)|\varepsilon(t)V|\phi_0(t)\rangle & \langle \chi_0(t)|\varepsilon(t)V|\chi_0(t)\rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c(t) \\ s(t) \end{pmatrix} \quad (10)$$

が得られる。ここで、条件 $|\langle \phi_0(t)|\chi_0(t)\rangle| \ll 1$ を仮定したが、これは、 $|\varphi_i\rangle$ と $|\varphi_f\rangle$ が多数の要素からなるランダムベクトルである場合に満たされる。

ここでは、方程式 (10) を正確に解くことが目的ではなく、粗視化された (coarse-grained (CG)) 解を考える。外場 $\varepsilon(t)$ が最適であれば、 $T \rightarrow \infty$ で

$$|\langle \phi_0(t)|\varepsilon(t)V|\phi_0(t)\rangle|, |\langle \chi_0(t)|\varepsilon(t)V|\chi_0(t)\rangle| \ll |\langle \phi_0(t)|\varepsilon(t)V|\chi_0(t)\rangle|, \quad (11)$$

が満たされることが期待される。この条件については、第 3.2 章であらためて考える。この時、簡単な方程式

$$i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} c(t) \\ s(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \hbar\Omega \\ \hbar\Omega^* & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c(t) \\ s(t) \end{pmatrix} \quad (12)$$

が得られ、速い振動成分を無視することで定義される振動数、

$$\Omega \equiv \left\langle \frac{\langle \phi_0(t)|\varepsilon(t)V|\chi_0(t)\rangle}{\hbar} \right\rangle_{\text{CG}} \quad (13)$$

は時間に独立な定数となる。この時、境界条件 $c(0) = 1$ 、 $s(0) = 0$ により、 $c(t) = \cos |\Omega|t$ 、 $s(t) = -ie^{-i\theta} \sin |\Omega|t$ が得られ (ただし、 $e^{i\theta} = \Omega/|\Omega|$)、制御された状態は最終的に

$$|\phi(t)\rangle = |\phi_0(t)\rangle \cos |\Omega|t - ie^{-i\theta} |\chi_0(t)\rangle \sin |\Omega|t \quad (14)$$

となる。この状態は $|\phi_0(t)\rangle$ から $|\chi_0(t)\rangle$ (あるいは $|\varphi_i\rangle$ から $|\varphi_f\rangle$) への遷移を表す。通常の Rabi 状態 (6) との対比から、この状態 (14) を「CG Rabi 状態」、振動数 (13) を「CG Rabi 振動数」と呼ぶ。

3.2 Actual Coarse-Graining Procedure

CG Rabi 振動数 Ω の定義 (13) のために導入した粗視化 (coarse-graining (CG)) という手続きは、実際には次のような平均操作である。

$$\langle A(t) \rangle_{\text{CG}} \equiv \frac{1}{t_2 - t_1} \int_{t_1}^{t_2} A(t') dt' \quad (15)$$

これは、一般には t_1 、 t_2 の選び方に依存するが、ここで考えている最適制御の問題では、制御時間 T を十分大きくとれば、平均化の時間間隔を全ダイナ

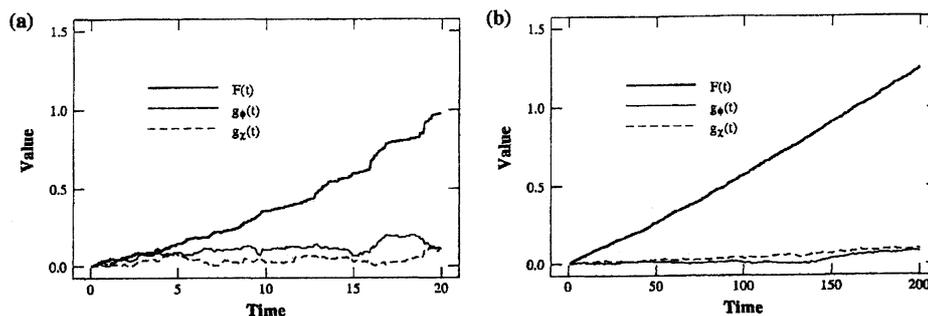


Figure 6: 積分 $F(t)$ 、 $g_\phi(t)$ 、 $g_\chi(t)$ の絶対値: (a) $T = 20$ 、 $\alpha = 1$; (b) $T = 200$ 、 $\alpha = 10$ 。制御外場は図 1(a) と 2(a) に示したものと同一。

ミクスの時間間隔、すなわち $t_1 = 0$ 、 $t_2 = T$ と置き換えることができるということを、以下で示す。

どのような場合に条件 (11) が満たされるか、また、CG Rabi 振動数 Ω (13) を定数で近似できるかを見るために、積分

$$F(t) = \int_0^t \langle \phi_0(t') | \varepsilon(t') V | \chi_0(t') \rangle dt' \quad (16)$$

$$g_\phi(t) = \int_0^t \langle \phi_0(t') | \varepsilon(t') V | \phi_0(t') \rangle dt' \quad (17)$$

$$g_\chi(t) = \int_0^t \langle \chi_0(t') | \varepsilon(t') V | \chi_0(t') \rangle dt' \quad (18)$$

を導入する。これらは速く振動しているが、もし $F(t)$ に対して、一定の滑らかさが認められれば、粗視化の操作は適切であったことになる。なぜなら、もし CG Rabi 振動数 Ω が定数ならば、 $F(t)$ は時間 t に関する線形関数になるからである。

図 6 に、 $|F(t)|$ 、 $|g_\phi(t)|$ 、 $|g_\chi(t)|$ の値を示す。これらは、第 2.1 章の数値計算で得られたものである。 $T = 20$ の場合 (図 6(a))、 $g_\phi(t)$ と $g_\chi(t)$ の値は $F(t)$ に比べて小さいが、 $F(t)$ は t の線形関数とは言えない。この場合には粗視化が適切でなかったと言える。一方、 $T = 200$ の場合 (図 6(b))、条件 (11) が満たされ、 $F(t)$ が t の線形関数と見なされることがわかる。ゆえに、ランダム行列系に対する粗視化は、制御時間 T が大きい場合に正当化され、この時、CG Rabi 振動数は定数となる。

3.3 Smooth Transition between Random Vectors

図 7(a) に重なり $|\langle \phi_0(t) | \phi(t) \rangle|^2$ と $|\langle \chi_0(t) | \phi(t) \rangle|^2$ を示す。これらは図 1(a) に示された場合であるが、曲線はスムーズとは言えず、定数の Ω を使って表すことは難しい。一方、図 7(b) では、 $|\phi_0(t)\rangle$ から $|\chi_0(t)\rangle$ への滑らかな遷移が見られる。これは、図 2(a) に示された最適外場による遷移である。この場合、定数の Ω を使った CG Rabi 状態が系のダイナミクスを良く記述すると考えられる。

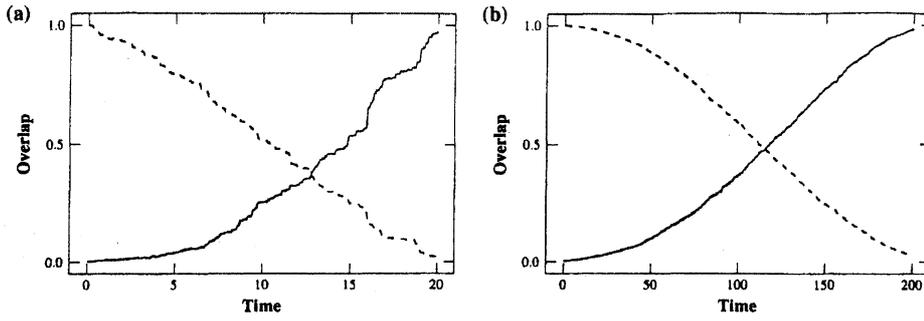


Figure 7: 重なり $|\langle\phi_0(t)|\phi(t)\rangle|^2$ と $|\langle\chi_0(t)|\phi(t)\rangle|^2$: (a) $T = 20$, $\alpha = 1$; (b) $T = 200$, $\alpha = 10$. 制御外場は図 1(a) と 2(a) に示したものと同一。

4 Analytic Expression for the Optimal Field

4.1 Coarse-Grained Transition Element

最適に制御された量子状態は CG Rabi 状態で表されるという仮定により

$$|\phi(t)\rangle = |\phi_0(t)\rangle \cos |\Omega|t - ie^{-i\theta} |\chi_0(t)\rangle \sin |\Omega|t \quad (19)$$

$$|\chi(t)\rangle = -ie^{i\theta} |\phi_0(t)\rangle \sin |\Omega|(t-T) + |\chi_0(t)\rangle \cos |\Omega|(t-T) \quad (20)$$

とおく。式 (19) と (20) を最適外場の式 (2) に代入して計算すると、

$$\varepsilon(t) = \frac{\sin 2|\Omega|T}{2\alpha\hbar} \text{Re} \left[e^{-i\theta} \langle\phi_0(t)|V|\chi_0(t)\rangle \right] \quad (21)$$

が得られる。ただし、 $|\langle\phi_0(t)|\chi_0(t)\rangle| \ll 1$ とした。この段階では、CG Rabi 振動数 Ω と位相 θ は決定されていないが、式 (21) は、粗視化の仮定のもとでの最適外場を与える。

CG Rabi 振動数の定義 (13) に、式 (21) を代入して $\Omega = e^{i\theta} |\Omega|$ を使うと、

$$|\Omega| = \frac{\bar{V}^2 \sin 2|\Omega|T}{4\alpha\hbar^2} \quad (22)$$

が得られる。ただし、

$$\bar{V}^2 \equiv \left\langle \left| \langle\phi_0(t)|V|\chi_0(t)\rangle \right|^2 + \left[e^{-i\theta} \langle\phi_0(t)|V|\chi_0(t)\rangle \right]^2 \right\rangle_{\text{CG}} \quad (23)$$

は、CG 遷移要素である。 α と T が与えられれば、方程式 (22) により Ω が決まる。 T が大きい場合には、 \bar{V}^2 の右辺第二項は無視できる。例えば、初期状態と終状態を H_0 の固有関数 $|\phi_k\rangle$ で $|\varphi_i\rangle = \sum_j c_j |\phi_j\rangle$ 、 $|\varphi_f\rangle = \sum_k d_k |\phi_k\rangle$ と表す時 (係数 c_j と d_j は複素数)、振動する項を無視すれば、

$$\left| \langle\phi_0(t)|V|\chi_0(t)\rangle \right|^2 = \sum_{j,k} |c_j|^2 |V_{jk}|^2 |d_k|^2 + |R(T)|^2 \quad (24)$$

$$\left[\langle\phi_0(t)|V|\chi_0(t)\rangle \right]^2 = (R(T))^2 \quad (25)$$

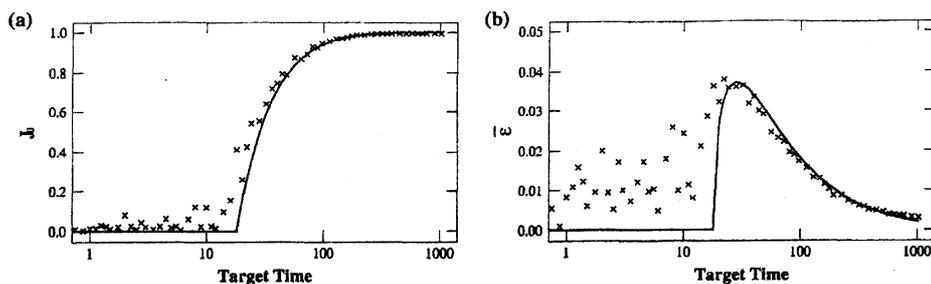


Figure 8: (a) $J_0 = |\langle \phi(T) | \varphi_f \rangle|^2$ と (b) 外場の振幅 $\bar{\varepsilon}$ を、 64×64 ランダム行列系に対して求め、制御時間 T の関数としてプロットした。グラフ中の \times 印は Zhu-Botina-Rabitz 法による数値計算の結果。実線は CG Rabi 状態の仮定のもとでの解析的な予想値。

が得られる。ただし、 $R(T) \equiv \sum_j c_j^* V_{jj} d_j e^{-E_j T / i\hbar}$ は、 $|\varphi_i\rangle$ と $|\varphi_f\rangle$ がランダムベクトルの場合、 $N \rightarrow \infty$ では無視することが出来る。この時、遷移要素 (23) は、 $\bar{V}^2 \approx \sum_{j,k} |c_j|^2 |V_{jk}|^2 |d_k|^2$ となる。さて、条件、

$$\frac{\bar{V}^2 T}{2\alpha\hbar^2} > 1, \quad (26)$$

が満たされる時、方程式 (22) から少なくとも一つの $|\Omega|$ ($\Omega \neq 0$) が得られ、これを使うと、最終的な重なり J_0 は、

$$J_0 = \sin^2 |\Omega| T \quad (27)$$

となる。また、最適外場 (21) の平均振幅 $\bar{\varepsilon}$ は、次のようになる。

$$\bar{\varepsilon} \equiv \sqrt{\frac{1}{T} \int_0^T |\varepsilon(t)|^2 dt} \approx \frac{\sqrt{2\hbar} |\Omega|}{\bar{V}} \quad (28)$$

図 8 で、方程式 (27) と (28) で予想された値 (実線) と、ランダム行列系での数値計算の結果 (\times 印) を比較する。特に大きな T で良く一致しているが、粗視化描像は制御時間 T が大きい場合に正当化されるということである⁴。

4.2 Analytic Solution for Perfect Control

ZBR の方法では、 α を十分小さい値に設定しなければ、最終的な重なりを大きくできない。式 (22) において極限 $\alpha \rightarrow 0$ を考えると、

$$|\Omega| = \frac{(2k-1)\pi}{2T} \quad (k = 1, 2, \dots) \quad (29)$$

⁴最小制御時間の限界 $T_c \equiv 2\alpha\hbar^2/\bar{V}^2$ が条件 (26) から求められる。もし、制御時間 T を T_c より小さく選ぶと、CG Rabi 状態で表されるスムーズな遷移を起こす外場が存在しない。しかし、数値計算では、この場合でも結果が得られる場合がある。

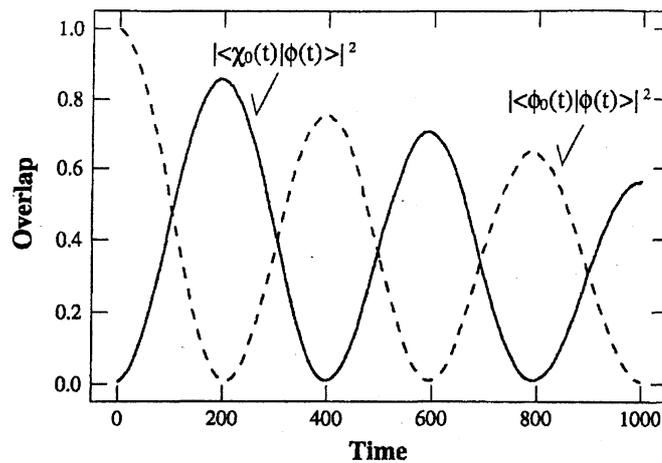


Figure 9: 解析外場 (30) による CG Rabi 振動 ($k = 3$)。実線は $|\langle \chi_0(t) | \phi(t) \rangle|^2$ 、破線は $|\langle \phi_0(t) | \phi(t) \rangle|^2$ 。初期状態、終状態はともにランダムベクトル。ハミルトニアンは 256×256 の GOE ランダム行列。

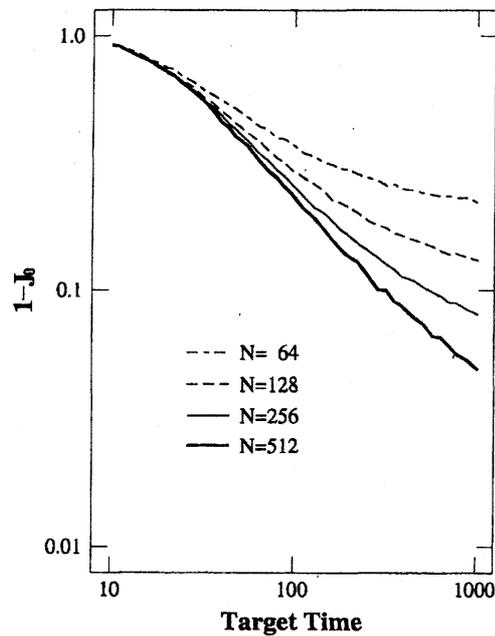


Figure 10: 解析外場 ($k = 1$ の場合) による最終的な重なり J_0 の制御時間依存性。完全制御 ($J_0 = 1$) からの残差 $1 - J_0$ を、GOE ランダム行列の次数 N を変えて表示した。初期状態、終状態はともにランダムベクトル。

となり、この時 $J_0 = 1$ となることがわかる。方程式 (21) と (22) より、この完全制御に対応した外場は

$$\varepsilon(t) = \frac{(2k-1)\pi\hbar}{\sqrt{V}^2 T} \operatorname{Re} \left[e^{-i\theta} \langle \phi_0(t) | V | \chi_0(t) \rangle \right] \quad (30)$$

となる。ここで θ は、例えば規格化条件 $e^{2i\theta} = \langle \phi_0(T) | \varphi_f \rangle / \langle \varphi_f | \phi_0(T) \rangle$ などから決定される。この結果 (30) は α を含まないので、[11] で議論されているような他の解析的な最適外場とは異なるものであることに注意する。

実際にランダム行列系 (256×256 の GOE) で、この最適外場 (30) が CG Rabi 振動を引き起こすことを図 9 に示す ($k = 3$ の場合)。 $|\langle \phi_0(t) | \phi(t) \rangle|^2$ と $|\langle \chi_0(t) | \phi(t) \rangle|^2$ の滑らかな振動が観測されている。初期状態と終状態は 256 要素のランダムベクトルである。

最後に図 10 で、この解析外場 (30) による制御の最終的な効率を見る。ここでは、ランダム行列の次数と制御時間 T を変えて、最終的な重なり J_0 の 1 からのずれを示した。この結果、制御時間 T と行列の次数 N がともに大きい時、最終的な重なり J_0 が 1 に近付くことがわかった。

5 Summary and Discussion

量子カオス系の例としてランダム行列系と量子 kicked rotor 系の最適制御を調べた。ZBR-OCT の方法により、数値的に上記の系はほぼ完全に制御されることがわかった。これらのダイナミクスを解析するために、粗視化された量 (CG Rabi 状態、CG Rabi 振動数) を導入し、最適制御理論の結果を利用することにより、最適外場の解析的表現 (30) が得られた。これが、ランダム行列系において、制御時間と行列の次数がともに大きい場合には実際に最適外場として働くことを示した。

最後に、この研究の将来の方向性について、考えられることをいくつか列挙する。(a) ここでは強いカオスの極限について考えたが、次の問題はバンドランダム行列で表されるような、カオスが弱い場合を研究することである。量子 kicked rotor では、 K が小さい場合がその良い例となろう [12]。(b) ここで、量子カオス系は制御可能であることを示したが、半古典極限 ($\hbar \rightarrow 0$) での振舞は不明である。一方、古典カオス制御に関する研究は多くあり [13]、特に targeting の問題では位相空間の stochasticity を利用する場合がある。この意味においても、カオス制御を半古典的な視点から研究することが望まれる [14]。(c) 量子情報の分野との関連では、量子カオス系における制御ダイナミクスと entanglement [15] は、また別の興味深い問題を提起することとなろう。

References

- [1] S. A. Rice and M. Zhao, *Optical Control of Molecular Dynamics* (John Wiley & Sons, New York, 2000).
- [2] L. Allen and J. H. Eberly, *Optical Resonance and Two-level Atoms* (Dover, New York, 1987).

- [3] K. Bergmann, H. Theuer, and B. W. Shore, *Rev. Mod. Phys.* **70**, 1003 (1998); D. J. Tannor and S. A. Rice, *J. Chem. Phys.* **83**, 5013 (1985); M. Shapiro and P. Brumer, *J. Chem. Phys.* **84**, 4103 (1986); M. Shapiro and P. Brumer, *Principles of the Quantum Control of Molecular Processes* (John Wiley & Sons, New York, 2003).
- [4] G. M. Huang, T. J. Tarn, and J. W. Clark, *J. Math. Phys.* **24**, 2608 (1983); A. P. Peirce, M. A. Dahleh, and H. Rabitz, *Phys. Rev. A* **37**, 4950 (1988).
- [5] W. Zhu, J. Botina, and H. Rabitz, *J. Chem. Phys.* **108**, 1953 (1998).
- [6] R. S. Judson and H. Rabitz, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 1500 (1992).
- [7] M. C. Gutzwiller, *Chaos in Classical and Quantum Mechanics* (Springer-Verlag, New York, 1990); F. Haake, *Quantum Signatures of Chaos*, 2nd Edition (Springer-Verlag, Heidelberg, 2001).
- [8] P. Gaspard, S. A. Rice, H. J. Mikeska, and K. Nakamura, *Phys. Rev. A* **42**, 4015 (1990); T. Takami, *J. Phys. Soc. Jpn.* **60**, 2489 (1991); T. Takami and H. Hasegawa, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 419 (1992); J. Zakrzewski and D. Delande, *Phys. Rev. E* **47**, 1650 (1993); T. Takami, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 3371 (1992); T. Takami, *Phys. Rev. E* **52**, 2434 (1995).
- [9] F. M. Izrailev, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 541 (1986); S.-J. Chang and K.-J. Shi, *Phys. Rev. A* **34**, 7 (1986).
- [10] K. Takahashi, *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **98**, 109 (1989).
- [11] W. Zhu and H. Rabitz, *J. Chem. Phys.* **110**, 7142 (1999).
- [12] J. Gong and P. Brumer, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 1741 (2001); *J. Chem. Phys.* **115**, 3590 (2001).
- [13] E. Ott, *Chaos in Dynamical Systems*, 2nd Edition (Cambridge University Press, Cambridge, 2002); T. Shinbrot, E. Ott, C. Grebogi, and J. A. Yorke, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 3215 (1990); C. D. Schwieters and H. Rabitz, *Phys. Rev. A* **44**, 5224 (1991); J. Botina, H. Rabitz, and N. Rahman, *Phys. Rev. A* **51**, 923 (1995).
- [14] V. S. Batista and P. Brumer, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 143201 (2002); H. Fujisaki, Y. Teranishi, A. Kondorskiy, and H. Nakamura, e-print quant-ph/0302025.
- [15] A. Tanaka, H. Fujisaki, and T. Miyadera, *Phys. Rev. E* **66**, 045201(R) (2002); H. Fujisaki, T. Miyadera, and A. Tanaka, *Phys. Rev. E* **67**, 066201 (2003).