

4E05

Maxwell-Schrödinger 連立方程式に基づく新規最適制御パルス設計法の提案：

疑 1 次元単一電子量子ドットの最適制御

(日本大学理工学部*) ○竹内嵩*, 大貫進一郎*, 佐甲徳栄*

A novel scheme for designing light-control pulse by coupled Maxwell-Schrödinger equations:

Optimal control for a quasi-one-dimensional single-electron quantum dot

(College of Science and Technology, Nihon University)*

○Takashi Takeuchi*, Shinichiro Ohnuki*, Tokuei Sako*

【序】 光による電子状態操作を行う「最適制御パルス」の設計は、実験・理論計算の両面で活発に研究がなされている[1,2]. これまでに提案された最適制御パルス設計法は、光により励起された電子が生成する局所的な電磁場(近接場)の効果を無視してきた. この近接場の効果を適切に取り扱うためには、電子系から電磁場へのフィードバックを取り入れた理論モデルおよび計算方法を用いる必要があり、近年著者らが開発した Maxwell-Schrödinger 方程式混合数値解析法[3,4]はこの要請を満たす. 本稿では Maxwell-Schrödinger 方程式混合数値解析法を用いて、最適制御パルスの設計における近接場の影響を明らかにし、近接場による入射光パルスの局所的修正を顧慮した新規最適制御パルス設計法を提案する.

【理論モデル】 Maxwell-Schrödinger 方程式混合数値解析法[3,4]では、光を Maxwell 方程式、電子を Schrödinger 方程式で記述し、時間依存量子波束から求めた分極電流密度を Maxwell 方程式の電流項に代入することによって、近接場による入射光パルスの局所的修正を反映させる. 本研究では、連立方程式：

$$\nabla \times \mathbf{H} = \varepsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \mathbf{J}, \quad \nabla \times \mathbf{E} = -\mu_0 \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}, \quad (1)$$

$$\mathbf{E} = -\nabla \varphi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \quad \nabla \cdot \mathbf{A} + \mu_0 \varepsilon_0 \frac{\partial \varphi}{\partial t} = 0, \quad (2)$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{2m} (-i\hbar \nabla - q\mathbf{A})^2 \psi + q\varphi \psi + V\psi, \quad (3)$$

$$\mathbf{J} = q \left\{ \frac{\hbar}{2im} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) - \frac{q}{m} |\psi|^2 \mathbf{A} \right\}, \quad (4)$$

に対し時間領域有限差分(FDTD)法[3,4]を用いて、図 1 に示すアルゴリズムに則って逐次計算を行った. なお、ここでは Lorentz ゲージを採用している.

近接場の影響を考慮しない従来の設計方法[2]では、次の 2 式を用いて制御パルスの設計を行う：

$$E_z^{(ic)} = -2 \frac{E_0}{m} \text{Im} \langle \tilde{\psi} | Wqz | \tilde{\psi} \rangle, \quad (5)$$

$$i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \tilde{\psi} + V\tilde{\psi} - qE_z^{(ic)} z \tilde{\psi}. \quad (6)$$

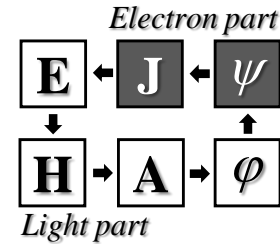
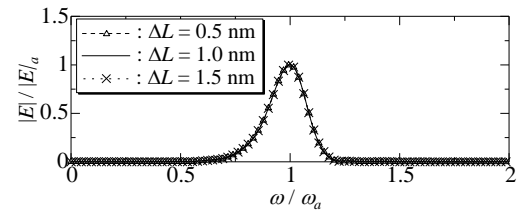
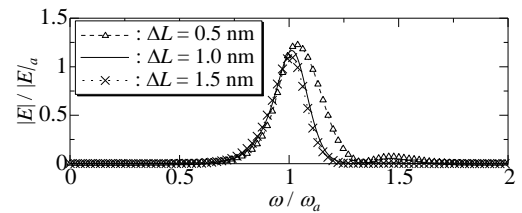


図 1. Maxwell-Schrödinger 方程式混合数値解析法のアルゴリズム.



(a) 従来法による設計



(b) 提案法による設計

図 2. 制御パルスのスペクトル分布.

ここで、 $\tilde{\psi}$ は長さゲージを用いて表した波動関数である。著者らの提案する新規設計手法[3]では、この従来法と Maxwell-Schrödinger 方程式混合数値解析法を組み合わせ、制御パルス設計を行う。

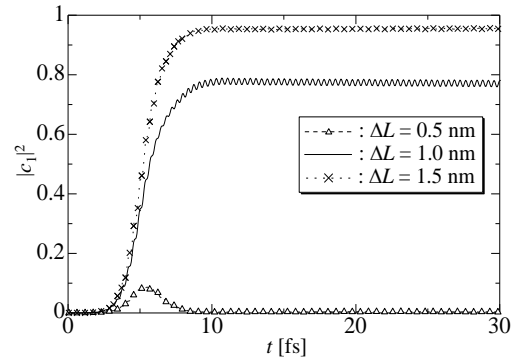
【計算結果と考察】モデル系として、ナノスケールの細管内に拘束された z 軸方向にのみ自由度を持つ擬1次元単一電子を考える。ここで、細管の x, y, z 軸方向に対する各辺の長さ L_x, L_y, L_z をそれぞれ $L_x = L_y = \Delta L, L_z = 2.0$ nm とし、波動関数は次の規格化条件を満たすよう設定した：

$$\Delta L^2 \int_{-1\text{nm}}^{1\text{nm}} |\psi|^2 dz = 1. \quad (7)$$

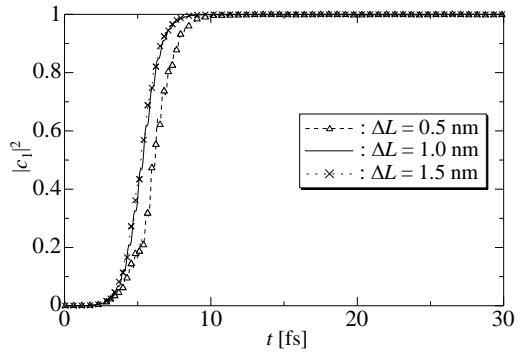
基底状態から第1励起状態への遷移を制御対象として、 $\Delta L = 0.5, 1.0, 1.5$ nm の3パターンについて、それぞれ制御パルス設計および制御効率を検討した。

図 2(a)に、従来の手法にて設計した制御パルスのスペクトル分布を示す。ここで、図中における ω_a ならびに E_a は、制御系の共鳴角周波数および $\Delta L = 1.0$ nm の場合について設計したパルスの最大値振幅を表す。この図より、従来の設計法では、 ΔL の変化、すなわち電子密度の変化に対して、同一の制御パルスを与えることが分かる。一方、図 2(b)は著者らの提案した設計手法を用いて得られた制御パルスのスペクトル分布である。ここでは ΔL の変化に応じ、異なったスペクトル分布が得られていることが分かる。これは、波動関数の規格化条件が変わることによって電子密度が変化し、それによって、近接場による局所的修正の効果が変化したことがスペクトルに現れている。

従来法および新規法で設計したパルスの制御性能を検証するため、Maxwell-Schrödinger 方程式混合数値解析を用いて、目的状態確率密度の時間応答解析を行った。図 3(a)は、従来のパルスを単一電子に照射した際の結果である。この図より、各解析の最終的な制御精度は、 $\Delta L = 1.5$ nm では約 95%、 $\Delta L = 1.0$ nm では約 80%、 $\Delta L = 0.5$ nm ではほぼ 0% となり、 ΔL が小さくなるにつれ制御精度が著しく悪化する傾向が示された。制御精度の悪化は近接場の影響が増大したことに起因しており、この傾向は単一電子の電荷密度が $q|\psi|^2$ として表せることと定性的に一致する。図 3(b)に、我々の手法を用いて設計した制御パルスの目的状態確率密度を示す。ここでは $\Delta L = 0.5, 1.0, 1.5$ nm の全ての場合に対して、ほぼ 100% の制御精度が達成されていることが確認出来る。この結果は、提案手法を用いて設計したパルスが近接場の影響に応じて適切に変化したことを示している。



(a) 従来法による制御パルスを照射



(b) 提案法による制御パルスを照射

図 3. 目的状態確率密度の時間応答。

[1] D. Meshulach and Y. Silberberg, Nature **396**, 239 (1998).
 [2] Y. Ohtsuki, H. Kono, and Y. Fujimura, J. Chem. Phys. **109**, 9318 (1998).
 [3] T. Takeuchi, S. Ohnuki, and T. Sako, Phys. Rev. A **91**, 033401 (2015).
 [4] T. Takeuchi, S. Ohnuki, and T. Sako, IEEE J. Quantum Electron. **50**, 334 (2014).