

機械学習が予測するレーザー誘起分子整列の制御ランドスケープ図

(東北大院理) ○難波 知太郎・大槻 幸義

Machine-learning-predicted control landscape maps of laser-induced molecular alignment
(¹Graduate School of Science, Tohoku University) ○Tomotaro Namba, Yuki Yoshi Ohtsuki

Laser-induced three-dimensional alignment control of molecules is an essential technique to measure and manipulate molecular dynamics in a molecule-fixed frame. To avoid being affected by the alignment-control laser field during the measurement and manipulation, an ultrafast pulse train is usually adopted for the alignment control. When we use linearly laser pulses, the simplest control is the use of mutually orthogonal double pulses. To achieve high degrees of alignment, however, the control parameters such as intensity and a time delay should be suitably adjusted for each molecule. If we can construct a distribution map of the degrees of alignment as a function of the control parameters (called a control landscape map) for each molecule, we do not only determine the optimal control parameters but also provide the bird's-eye view of the control. However, even if we use only two control parameters, it costs heavy computational cost to construct the control landscape map. Through a case study of a SO₂ molecule, we showed that a machine learning model can predict the control landscape maps with high accuracy while considerably reducing the computational cost^[1]. In the present study, we add polarizabilities and rotational constants, which are important molecular parameters for the alignment control, to the inputs of the machine learning model. By doing this, we extend the machine learning model to predict the landscape maps for various asymmetric-top molecules.

Keywords : machine learning, molecular alignment, coherent control, asymmetric top

レーザー誘起の分子の3次元整列制御は、分子固定系でダイナミクスを測定、操作するための重要な技術である。測定、操作の際に整列制御レーザー場の影響を避けるため、整列制御には通常、超短レーザーパルス列が用いられる。直線偏光パルスを用いる場合、互いに直交する2つのレーザーパルスによる制御が最も容易である。しかし、高い整列度合いを実現するためには、強度や遅延時間などの制御パラメータを分子ごとに調整する必要がある。制御パラメータに対する整列度合いの分布図(制御ランドスケープ図とよぶ)を分子ごとに作成できれば、最適な制御パラメータを求められるだけでなく制御の様子を俯瞰的に表すことができる。しかし、制御パラメータを強度と遅延時間の2つに限っても、制御ランドスケープ図の作成には大きな計算コストを要する。我々はSO₂分子を例に、機械学習モデルが、計算コストを大幅に削減しながら高精度で制御ランドスケープ図を予測できることを示した^[1]。本発表では、整列制御に重要な分子パラメータである分極率と回転定数を機械学習の入力に加え、様々な非対称コマ分子に対して制御ランドスケープ図を予測できるように機械学習モデルを拡張する。

1) T. Namba, M. Yoshida, Y. Ohtsuki, *J. Chem. Phys.* **153**, 024120 (2020).