

エネルギー非共鳴過程の作用積分

～ 間接遷移型半導体の発光と触媒反応 ～

坂野 齋

山梨大学工学部 *

(Dated: June 28, 2023)

非相対論系の電子と電磁場の相互作用には、ベクトルポテンシャル (VP) の二乗と電子密度の結合項という非相対論的效果があります。これの起源は、物性物理学や分子化学において、原子核の平均位置が静止してみえる慣性系を選び、ローレンツ変換不変性を捨てた見方をすることです。そこでは電磁ポテンシャルの4元ベクトルの空間成分であるVPの2乗がスカラーとなり、また、4元ベクトルの源泉の時間成分である電荷密度がスカラーとなり、両者の結合が可能になります。

電磁応答の観点では、この非相対論的效果はエネルギー非共鳴の非線形応答で、VPのみが関わります。ちなみに、エネルギー非共鳴の線形応答は、ロンドンの構成方程式をもたらします。超伝導体を除く物質や分子を対象として電磁応答を調べる場合、線形、非線形のエネルギー非共鳴の応答＝非相対論的效果のVPの効果は、摂動エネルギーとして小さいことを理由に無視されるのが通常です。VPが登場しても外来光（オンシェルVP）への光学応答を摂動的に扱う場面であり、内在VPの効果は議論されません¹。

内在VPの関わるエネルギー非共鳴過程を無視する判断は、内在VPが不可視であることが原因である他、実験し易く、実用に供し易いエネルギー共鳴の現象を科学や工学で多く取り扱ってきたこと、量子論の物質化学への適用が原子からはじまりハミルトニアンを頼って束縛状態間のエネルギー共鳴遷移を多く取り扱ってきたことの習い性のように思います。

ここで、冒頭で述べた非相対論的效果には、VPの自己相関が含まれ、その波数、角周波数が0の成分が必ず存在する特徴があります。結合の相手である電子密度にも波数、角周波数が0の成分が必ず存在するので、両者の結合項を時空間積分した摂動の作用は有限の値（負定値）をもたらします。摂動の作用は、プランク定数 \hbar を越えることが有意性の普遍的な基準になります。無視されてきたこの非相対論的效果の摂動の作用が空間積分、または、時間積分により有意の大きさになる可能性があります。

*Electronic address: banno@yamanashi.ac.jp

¹ 実際、スカラーポテンシャルは電荷密度間相互作用に書き直されて非摂動論的に正確に扱われるのに、VPは電流密度間相互作用に書き直されて非摂動論的にあつかわれることはありません。[1]

そのような非相対論的効果の現れのひとつがフォトンブリーディング [2–4] という手法で間接遷移型半導体から作製された LED の発光や巨大磁気光学効果ではないかと考えています。発光効率がよいことは大きなコヒーレント長を持つ電子系の存在を、また、強い磁氣的応答があることは内在ベクトルポテンシャルの関与を示唆し、冒頭の非相対論的効果の作用の空間積分による有意化の考えと整合します [5, 6]。

非相対論的効果の現れのもうひとつが触媒反応ではないかと考えています [7]。そう考える理由は、触媒に磁性を担う遷移金属が多用されること、室温で到達しえない活性化エネルギーがあるのに反応が進むことがエネルギー非共鳴過程の関わりを示唆することです。ナノ構造近傍で触媒反応が進みやすいことから局所的であり、非相対論的効果の作用の（空間積分ではなく）時間積分による有意化として扱えるのではないかと考えています。

上記の間接遷移型半導体の発光や触媒反応は、不可視の内在電磁場：ドレスト光子とそれが関わる非相対論的効果をうまく取り扱えれば指導原理を把握できると期待して研究を続けています。

-
- [1] 坂野 齋. ローレンツ対称性の破れとドレスト光子, 2020. <https://rodrep.or.jp/img/series/Banno/VH3%20Banno.pdf>.
- [2] Minh Anh Tran, Tadashi Kawazoe, and Motoichi Ohtsu. Fabrication of a bulk silicon p-n homojunction-structured light-emitting diode showing visible electroluminescence at room temperature. *Appl. Phys. A*, 115:105–111, 2014. DOI 10.1007/s00339-013-7907-9.
- [3] T. Kawazoe, M. A. Mueed, and M. Ohtsu. Highly efficient and broadband Si homojunction structured near-infrared light emitting diodes based on the phonon-assisted optical near-field process. *Appl. Phys. B*, 104:747–754, 2011.
- [4] M. Ohtsu. *Silicon Light-Emitting Diodes and Lasers*. Springer International Publishing, Switzerland, 2016.
- [5] 坂野 齋. ドレスト光子が関わる量子的散逸構造, 2022. <https://rodrep.or.jp/img/series/Banno/VH5%20Banno.pdf>.
- [6] 坂野 齋. 流れを考慮した最小作用の原理による量子的散逸構造の探索, 2022. <https://rodrep.or.jp/img/series/Banno/VH6%20Banno.pdf>.
- [7] 坂野 齋. 化学反応とドレスト光子, 2019. <https://rodrep.or.jp/img/series/Banno/VH2%20Banno.pdf>.