

## シミュレーションが語る、ドレスト光子のミッシングピース？

三宮 俊(株式会社リコー)

E-mail: suguru.sangu@jp.ricoh.com

「ドレスト光子」に係わり始めてから、(10 数年のブランクはあるが)かれこれ 20 年程が経過している。未だにわからないことだらけであるが、知識を継ぎ接ぎして、人前で紹介できる程度のお話にはなるかと思い本稿を執筆している。最近の興味は、ドレスト光子シミュレータなるものを創る／構想することである。筆者は企業の人間であり、何やら壮大なもの(ドレスト光子からオフシェル科学へ[1])に出しゃばって首を突っ込んでいるように感じている。とは言え、本研究分野から興味深い実験結果が頻出し、独特の(ある意味自然な?)解釈が展開される過程は純粹に面白い。野心的な目標は、ドレスト光子シミュレーションを用いて光るシリコンや新しい機能材料をデザインし、作製原理を示し、産業界につなげることである。

本稿では、筆者が最近着手し始めたドレスト光子シミュレーションの構築過程における勝手気ままな思考を紹介していきたい。なぜなら、この試行錯誤を異分野の、特に数理物理学に長けた本研究グループメンバーに当てることで、その思考が、知識習得が自己撞着的に進む現状をお伝えしたいからである。本稿の内容が、主観的であり、想像的であり、稚拙さをともなう点をご容赦いただきたい。何せ、基本方程式を仮定することすらモノの本質を隠しかねない、という意識にかられながら問題に取り組んでいるのだから。

さて、ドレスト光子といっても、いまのところ厳密な定義には至っていないと思われる。その状況下でシミュレータを構築するわけである。最初の拠り所を、ナノ物質近傍におけるドレスト光子の局在性とし、これを環境と相互作用することで質量を獲得した粒子(調和振動子)と見なす。相互作用の起源は、光子と物質励起によるポラリトンであってもよいし、ポラリトンとフォノンの混成場であってもよい。とにかく何らかの有限距離でドレスト光子を重心位置(局在点)に留めるものであればよい。次に考えるのはこのような局在点が 2 つある場合であり、両者間でドレスト光子のコヒーレントな授受が発動する。このダイナミクスの記述は各局在点におけるドレスト光子の有無を基底状態とした密度行列を用いた手法が扱いやすい。3 個以上も同様であるが、新たに幾何学的な配置が局在点間のドレスト光子結合強さに効いてくる。ここまでくると、局在点の集合はグラフの節点とみるのが自然に思われるが、実際の物質への割り当て方の指針がなく、取り敢えず  $N$  個の格子点により物質が構成されると考え、 $N$  次元の状態を得る。これはドレスト光子の有限距離をホッピングの強さと見立てた、物質境界をもつハバード模型である。ホッピングの強さが有限距離関数で与えられることから、量子ウォークという描像が垣間見える。(量子ウォークの勉強を始めなくては...) 格子点一つ飛ばしの相互作用などを考えると、ドレスト光子によるスクリーニングなども気になってくるが、ボソンと見なしでも良さそうなので、これは気にしないでおく。

ここから物質の境界形状を反映できるように格子点の数を増やしていくわけだが、先立って、この系にどうやってドレスト光子を励起したらよいか、何かしらの外場を与えねば、と思い立つ。量子

的にコヒーレントな現象であることは強調したいので、ドレスト光子の生成演算子と消滅演算子の和の形で外場を作用させる。(これは電気双極子励起と同じ表現だが、調和振動子だと思えば取り敢えずの矛盾はなさそう。) 外場を付与すると、今度は系の中にドレスト光子が飽和して都合が悪いので、エネルギーを散逸するリザーバを用意する。すると、光ファイバプローブなどのナノ物質の構造端部に局在する定常状態が、非平衡開放系の定常状態の問題として再認識される。非平衡開放系の勉強を始めてすぐに遭遇するのは自己組織化や秩序構造といったワードである。光ファイバプローブ先端におけるドレスト光子の局在現象は自己組織化の帰結であろうか。そのような視点から状況を再考すると、局在状態形成において散逸過程は非独立なものであるに違いない。参考文献[2]でお話しさせていただいた光ファイバプローブのテーパー形状(ただし2次元モデル)の微変形による局在状態(空間分布)の様相変化は、おそらく人為的に導入したリザーバの性質を反映するものである。ドレスト光子システムにおけるリザーバはどうモデル化されるべきか、と頭を悩ませてしまう。一つ、系全体に広がるドレスト光子の低周波数成分ほどエネルギー散逸への寄与が高いという直感的な見方がある。物質のある部分空間における(波長オーダーに広がる?)固有状態と選択的に結合するリザーバの導入が必要と思われ、「そのようなもの」の在り方を考え始めている。筆者の妄想が正しければ、ドレスト光子が質量の衣を脱ぎ捨て、マクスウェル方程式に漸近していく様相が数値的に表現されるのだが…。

さて、エンジニアリングへの立場へ視点を移し、上記のようなドレスト光子シミュレーションエンジンを準備でき、例えば光るシリコンデバイスをデザインしようと思いを巡らせると、ドーパントを配置すべき位置に頭を悩ませてしまう。フォトンブリーディング現象[1]として、ドーパント原子が自己組織的に配置されるデバイスの作製過程をシミュレーション上で再現し(すなわち、ハミルトニアンを書き換えながら)、所望する非平衡開放系の自己組織的な安定状態を探索する自律プロセスが欲しくなる。いや、安定状態ではなく相転移臨界状態なのかもしれない。

以上、ドレスト光子シミュレータを構築するという立場から、あることないことを妄想し、計算モデルに落とすというプロセスを進めてきた、その際の思考の一端を紹介した。ナノ領域の光学現象に目を向ける際、微視的な描像に目を奪われがちであるが、いざ実用的なデータを取得しようと手を動かしてみると、マイクロからマクロまで、そのミッシングピースが露わになる。計算機シミュレーションは一見すると、物理現象をブラックボックス化してしまい、真実を仮設で覆い隠してしまう可能性がある。一方、計算機パワーを借りた勝手気ままな試行(思考)実験場だと思えば、試せることは山積みである。何がミッシングピースであるかは未だわからないが、抱く疑問点の多くには先人たちの足跡がある。計算機シミュレーションは異分野間をつなぐ有効なコミュニケーションツールであり、段々と視界が開けてくるものと考えている。

## 参考文献

[1] T. Yatsui (ed.), *Progress in Nanophotonics 5* (Springer, Heidelberg, 2018).

[2] 三宮・他, 2018年第79回応用物理学会秋季学術講演会, 19a-437-7 (2018).