

ドレスト光子とナノ構造の「窓」

三宮 俊(株式会社リコー)

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

「ドレスト光子シミュレーション」なるものの実現を目指し、その基本原理の検討を進めている。今回のオフシェル科学フォーラムでは、ドレスト光子の基底状態と「窓関数」との関係について、最近の考察を述べたい。窓関数は、数値データの周波数解析において度々登場する馴染み深いツールである。例えば、音声などの時系列データの場合、フーリエ変換を用いてスペクトル情報を得るわけであるが、フーリエ変換の基底関数である三角関数は無限区間で定義されており、有限長である実測データのスペクトル情報は基底関数に窓関数を掛けたもののフーリエ変換として記述される。窓関数は、スペクトルの主要部分であるメインローブの帯域を狭く、ノイズ要因となるサイドローブの振幅を低くするように人為的にデザインされ、信号の種類や特性に合わせて数多くの窓関数が提案されている。

さて、ドレスト光子と窓関数の関係の前に、現在検討を進めているドレスト光子シミュレーションについて概説しておく。本シミュレーションでは、質量をまとったドレスト光子なるものが存在するという前提に立ち、質量を有する粒子(ドレスト光子)をある重心位置(ノード)に束縛された調和振動子と見なし、ナノ物質を形成する複数のノード間をドレスト光子がホッピング伝導する様子を量子密度演算子による量子マスター方程式として定めることでそのダイナミクスを記述している。(重心位置を正方格子の頂点に限定しないため、ノードという表現を用いている。) ナノ物質が複雑な三次元構造体である場合、ノードの個数がとてつもない数になり、本手法は計算量的に破綻してしまう。また、計算できたとしてもそこから物理的な解釈を得ることは難しい。そこで、モードの抽出、換言すると基底変換、という概念に行き着く。伝統的な光学で扱われるモードは、物質境界において Maxwell 方程式により要求される電磁場の境界条件を課す(ただし、光の伝搬方向は無限区間として扱う)ことにより、並進対称性をもつ平面波基底で記述され、波数とエネルギーの対応関係を表わす分散関係が一意に定まる。一方、ドレスト光子の場合、ナノ物質の先端部にドレスト光子が局在することからも、無限区間で定義される基底は本系を特徴づける状態ではない。したがって、従来の分散関係なるものの意味が曖昧になっている。そもそも意味を成していないのかもしれない。では、ドレスト光子の特徴を記述する基底状態とは如何なるものか? この問いの答えに少しでも近づくことが本稿の目的である。

最近、Hadamard 行列を用いてナノ物質を構成する複数のノードを任意の空間領域で括り出し、内部自由度をもつ一つのノードとして再定義する手法を提案した[1]。本手法の提案と平行して、量子ウォークの概念をドレスト光子現象に適用する研究も進んでおり、グラフ上の複数ノードを一つのノードに集約して記述する数学的手法を介して、ドレスト光子の定常状態における局在現象を再現できることが理論的に示されている[2]。量子密度演算子を用いた方法と量子ウォークの概念に基づく方法とは根底では同じことを述べているが、ここでその詳細には立ち入らないでおく。この

Hadamard 変換を光ファイバプローブ先端へ適用する場合、ナノ領域に形成されるドレスト光子の特徴的な空間分布に着目し、その空間分布を形成するノードを自由に(ただし Hadamard 行列の要請から 2 のべき乗の個数で)括り出すことで、見通しのよい基底状態に変換する。このノードの集合を括り出す操作は、冒頭で述べた窓関数を用いて有限区間を抽出する操作と同等に見える。抽出する空間のサイズが微小であるほど、波数空間に大きなサイドローブが現れることとなり、従来の光の分散関係から逸脱する現象がより鮮明に顔を出す、というシナリオである。この基底変換をもう少し詳しく見ると、有限区間の大きさを定めることはスケーリングと呼ばれる操作に対応し、有限区間の位置を同定することはシフトと呼ばれる操作に対応している。これはウェーブレット変換と等価な数学的操作である。これまでの説明を整理すると、ドレスト光子の特徴を表現する基底状態とは、与えられたナノ物質の形状や近接する異なるナノ物質またはナノサイズの測定系に依存して変容するものあり、計算機上でドレスト光子を走らせてみて、その集団運動的な振る舞いをスケーリングおよびシフト操作を介してできるだけ無駄なくまとめたものである、というのが現在の見解である。無駄なくまとめる過程として、量子ウォークなどの理想化、簡略化されたモデルを起点に特徴的な基底状態をあらかじめ選定し、上記シミュレーションを回しながら基底状態を補正していく、という手法も有効と考えている。

上記見解にしたがい主要な基底状態の抽出に成功したとして、「目立たない」基底成分も依然として存在している。これらの成分を、ドレスト光子ダイナミクスへの寄与が小さいとして完全に無視して(占有確率ゼロと見なして)しまうと、本来算出したい主要な基底成分の存在確率は正しく再現されなくなる。この目立たない基底成分は、おそらくは主要な基底状態間のダイナミクスに波風立てずに、コヒーレンスを低減させ、(非平衡)定常状態へ緩やかに導く役割を担っているのではないかと想像する。つまり、リザーバ(熱浴)として機能しているように思われる。もしくは、平均場と見なすほうがよいのかもしれない。いずれにしても、何かしらの粗視化手段を通じて、非主要成分の自由度を低減することが、ドレスト光子シミュレーションの実現に向けて次に考えるべきことである。

以上のように、ドレスト光子を特徴づける基底状態を探索する過程で窓関数という情報処理分野では一般的な概念との類似性に着目するに至った。適用する窓関数の形状ないし特性は、光ファイバプローブに代表されるナノ物質系の界面形状を通じて人為的に制御できるものである。つまり、実空間および波数空間に掛かるナノ構造の窓をデザインすることが、ドレスト光子を制御し、ドレスト光子介在の現象を促進する手段であると考えられる。「窓」は一般的に、内なる見えざる世界と外界とを繋ぐ役割を担っている。未だ認識されていない数多の現象を世に送り出す素敵な窓をデザインしたいものである。

参考文献

- [1] 三宮・他, 2019 年第 66 回応用物理学会春季学術講演会, 10p-W621-14 (2019); 2019 年第 80 回応用物理学会秋季学術講演会, 19p-E314-6 (2019).
- [2] 瀬川・他, 2019 年第 80 回応用物理学会秋季学術講演会, 19p-E314-5 (2019).