

ドレスト光子の基底関数

三宮 俊(株式会社リコー)

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

「ドレスト光子を、その物理現象のイメージに即した基底関数で記述したい」というのは、筆者がドレスト光子の理論研究に着手した当初から思い悩み、未だ解決できていない課題である。最近の筆者らの研究において、基底関数に関する幾つかの考察を行っており、本稿では、その内容の背景にある思考や狙いについて触れてみたい。発展途上の内容につき、表現が直感的であり、正確性に欠ける点をご容赦いただきたい。

基底関数とは、ある関数(状態)をあらかじめ用意した別の関数群の線形結合として表す際の、その関数群のことを意味している。自由光子の場合には、場の空間並進対称性を前提に指数関数を用いた平面波基底として表され、伝搬モードとして解釈される。電子や励起子のような物質中の素励起も同じく(結晶を構成する原子の)空間並進対称性に基づく Bloch 基底や、そのフーリエ変換によってキャリアの局在性を表現した Wannier 基底などで表される[1]。そして、第二量子化の手順を経て、量子の生成・消滅という描像で光子や物質励起を取り扱うことができるようになる。基底関数はその重み係数の分布を局在させるように、換言すると、少数の基底関数で状態を記述できるように選ぶことで「見たい物理現象」を理解し易い書式に焼き直す役割を担っている。

ドレスト光子の基底関数をどのように考えるかであるが、その前に、十数年前に検討した理論を振り返っておきたい。その理論では、自由光子と無限に広がる物質系における励起子との混合状態として記述される励起子ポラリトンを考え(自由光子場の空間並進対称性を残し)、二つの物体間における仮想的な励起子ポラリトンを介したエネルギー移動(状態遷移)をドレスト光子現象と見なし[2]、幾つかの現象(例えば、光学禁制準位へのエネルギー移動など)の説明を行った[3]。このモデルは、量子ドットのような孤立した二準位系ないしは少数準位系間のエネルギー移動、例えば、時間分解分光計測における緩和時間の見積もりなどにおいては成功していたように思われる。しなしながら、ドレスト光子なるものを露わに記述しておらず、例えば、ドレスト光子のサイズ選択性(近接場光プローブのチップサイズに依存して取得される像が異なる現象)などは、基底関数という視点からはうまく表現できていない。

まず初めに、ドレスト光子に対する「見たい物理現象」を説明しておきたい。ドレスト光子研究起点での理論検討に参加するようになり、微細構造の端部におけるドレスト光子の局在現象と逆正弦法則として知られる確率分布との類似性から、ドレスト光子をモデル化するアイデアをいただいた[4]。調和振動子(すなわちドレスト光子)の高励起状態が逆正弦関数に漸近することと、ドレスト光子の存在確率が構造端部で増大することが同じメカニズムで説明できる、という理解である。逆正弦関数には定義域が存在し、定義域が狭いと局在部分が強調され、定義域が広い場合には確率が一様となる領域が支配的になる。この状況が、ドレスト光子がナノスケールの微細構造近傍に局在し、巨視的な領域では自由光子と同様に振る舞う(位置が不確定になる)という状況に対応し

ている。この描像にしたがうと、マイクロ系からマクロ系への接続が一貫して説明できるようになると思われる。これが、現時点で筆者が思い描くドレスト光子の基底関数のイメージである。

ここ数回の応物学会において、数値シミュレーションを拠り所に基底関数の選択方法に関わる議論をさせていただいた。本数値シミュレーションでは、テーパー構造を格子点の集合と見なし、各格子点におけるドレスト光子の量子密度行列の時間発展を算出している。ドレスト光子の空間分布に物理的な解釈を与える(見たい物理現象を抽出する)ために、二つの基底変換手法を考案した。一つは、Hadamard 変換という 1 と-1 で構成される基底関数を用いるものである。この Hadamard 変換を人為的に切り出したサイズの異なるブロックごとに割り当てることで、格子点で表される構造体ブロックを重心位置とサイズ(格子点数)で決まる内部構造(第一励起状態、第二励起状態、...)とで記述している[5]。このような基底変換を施すことにより、上述したような定義域の異なる逆正弦関数が連なった階層構造のようなものは表現できたが、マイクロ系からマクロ系へ向かう不可逆なエネルギー移動といった物理的イメージは再現できていない。人為的な構造分割では物理現象を十分に捉えきれず、何かしらの集約化の指針が必要となっている。

二つ目のアイデアは、定常(平衡)状態でドレスト光子の空間分布が静的であることに着目し、定常状態の量子密度行列に対する対角化行列を求め、その行列を用いて基底変換を行う方法である[6]。この検討は、基底関数の重み係数の分布を最小化することで、特徴的なエネルギー移動の経路が可視化できるのではないかと、という期待のもとに進めている。未だ試行錯誤の段階ではあるが、局在性を強く示す基底と、伝搬モードを示唆する空間分布をもつ基底を見出すことはできている。一方で、マイクロ系とマクロ系の特性が混在したような基底関数も存在し、こちらもイメージ通りの結果には到達できていない。もう一工夫、核心に迫る概念が必要と感じている。

このようにドレスト光子の描く物理現象に即した基底関数の探索は一進一退な状況にあるが、上記の二つの手法には共通して、有限系の幾何学的構造を反映した基底関数を準備するという基本方針が念頭にある。そしてドレスト光子が介在する興味深い物理現象の幾つかでは、ドレスト光子が物体構造を動的に変化させ(原子置換や化学反応を促し)、自律的に最適構造に落ち着く様子が実験的に示されている。ドレスト光子の居心地の良さが、基底関数の候補を探る一つの指標になるのではないかと想像を抱きながら、次のアプローチ方法を模索中である。

参考文献

- [1] 例えば、花村, 「非線形量子光学」(培風館, 1995)など.
- [2] K. Kobayashi, et al., Phys. Rev. A 63, 013806 (2000).
- [3] S. Sangu, et al., Phys. Rev. B 69, 115334 (2004).
- [4] H. Saigo, “Quantum Probability for Dressed Photons: The Arcsine Law in Nanophotonics” in Progress in Nanophotonics 5, T. Yatsui (ed.) (Springer, 2018).
- [5] 三宮・他, 第 80 回応用物理学会秋季学術講演会, 19p-E314-6 (2019).
- [6] 三宮・他, 第 67 回応用物理学会春季学術講演会, 14p-B309-15 (2020).