

非放射場と放射場を対等に扱う単一感受率による光学の理論

坂野 齋 *

山梨大学大学院医学工学総合研究部

(Dated: May 17, 2016)

2013 年から 2015 年にかけて JSPS 科学研究費 25610071 (挑戦的萌芽研究) の助成によって行った研究「非放射場と放射場を対等に扱う単一感受率による光学の理論」のまとめをご報告します。この研究は、近接場光学を記述するに相応しい誘電率・透磁率の代替物として非放射場と放射場を対等に扱う単一感受率を微視的・現象論的につくることを目指したものです。

取り組んだ問題

通常の光学系の設計や実験結果解析でよく使われる誘電率・透磁率は、原因としての電場・磁場（合わせて 6 成分）と物質の応答の結果としての電気分極・磁気分極（合わせて 6 成分）の因果関係を記述するものです。しかし、電場・磁場より根本的な電磁場の自由度はスカラーポテンシャル・ベクトルポテンシャル（ゲージ自由度を考慮して実質 3 成分）であり、電気分極・磁気分極より根本的な物質の自由度は電荷密度・電流密度（電荷保存則を考慮して実質 3 成分）ですので、誘電率・透磁率をつかった 6 つの関係は条件過多となっています。実際、対称性の低い系では誘電率・透磁率による記述ができないことが示されており、ナノ構造という一般に低い対称性をもつ構造がある近接場光学系では、本質的な自由度の間；スカラーポテンシャル・ベクトルポテンシャルと電荷密度・電流密度の間の因果関係である単一感受率を用いるのが相応しい記述です。

ところで、近接場光学を通常の光学と隔てているものは、非放射場の存在で、非放射場の本質的な自由度はスカラーポテンシャルです。通常の光学で物質（電子系）の応答を考えると、スカラーポテンシャルは電子間の相互作用に書き直され消去されてしまいます。この操作によって摂動計算の始状態などに多電子系の束縛状態が用意できます。いったん、スカラーポテンシャルが消去されると、電子間の相互作用さえきちんと考えればすべてのスカラーポテンシャルの効果は完全に考慮されます。このやり方は通常の光学に相応しいもので

*Electronic address: banno@yamanashi.ac.jp

す；そこでは光源が遠方にあるので光源のスカラーポテンシャルを物質が浴びることがなく、物質の応答の原因はベクトルポテンシャルのみと考えるのが相応しいからです。

近接場光学系ではスカラーポテンシャルを消去する記述は不都合をもたらします：ナノ構造近くの電子系は、光源としてのナノ構造からスカラーポテンシャル・ベクトルポテンシャルを同時に浴びています。たとえ、電子間相互作用を完璧に考慮しても、電子間にもともとあるスカラーポテンシャルの効果か、ナノ構造が関係したスカラーポテンシャルの効果かの区別ができず、近接場光学特有の物理現象の原因を特定することは困難になります。一方、多電子問題と近接場光学が本来的な関わりがあることを認識せず、電子間相互作用を無視してしまうこともあります。

近接場光学系を記述するには、スカラーポテンシャルを消去せず、物質（電子系）の応答の原因としてスカラーポテンシャルとベクトルポテンシャルを対等にあつかうのが相応しいことです。

この研究は、近接場光学に相応しい、スカラーポテンシャル（非放射場）とベクトルポテンシャル（放射場）を対等にあつかう単一感受率を微視的にもとめ、それをもとに誘電率・透磁率の代替となる現象論的な単一感受率をもとめることを目指したものです。

研究期間にわかったこと

1. スカラーポテンシャル・ベクトルポテンシャルを原因、電荷密度・電流密度を結果とする因果関係を記述する線型・非線型単一感受率を量子力学的演算子として導出しました。この線型・非線型感受率演算子は、作用積分のスカラーポテンシャル・ベクトルポテンシャルの1階・2階以上の汎関数微分で表せ、電荷保存則、ゲージ変換不変性を保証することを明らかにしました。[1]-[7]
2. 実際の感受率は上記の感受率演算子の非摂動状態の期待値です。密度汎関数法により束縛状態として、相応しい非摂動状態が得られることを示しました。[8]
3. スカラーポテンシャルとベクトルポテンシャルに対する応答に違いがあることを示しました。[9] スカラーポテンシャルとベクトルポテンシャルを同時に浴びる1電子2準位系の一般的な考察により、2つの原因は座標と運動量に関係した2つの双極子遷移をもたらす、電荷・電流密度を誘導します。これらの2種の遷移は質的に異なり、それらの誘導する電荷・電流密度には座標と運動量のあいだの不確定性と関係したトレードオフがあります。スカラーポテンシャルとベクトルポテンシャルが共存する近接場

光学系を単純な誘電率で記述することは相応しくありません．[10]

未完成のこと，将来の展望

研究期間内に誘電率・透磁率の代替物としての現象論的単一感受率をつくれませんでしたので今後研究を継続します．また，本研究でわかったこと 1-3 についての論文投稿を行います．

この研究では電子系だけを扱いましたが，格子系についても考察を行い，将来，ナノ構造近傍での化学反応の記述の方法論をつくりたいと考えています．

謝辞

単一感受率について議論をして下さった張紀久夫大阪大学名誉教授，東京大学大津 研究室の皆さまに感謝いたします．本研究は JSPS 科研費 25610071 (挑戦的萌芽研究) の助成を受けています．

-
- [1] 非放射場と放射場を対等に扱う単一感受率による光学の理論 IV(第 62 回応用物理学会春季学術講演会) (2015 年)
 - [2] 非放射場と放射場を対等に扱う単一感受率による光学の理論 III(第 75 回応用物理学会秋季学術講演会) (2014 年)
 - [3] 非放射場と放射場を対等に扱う単一感受率の理論 (第 13 回近接場光学，ナノフォトニクス，関連する技術に関する国際会議) (2014 年)
 - [4] 非放射場と放射場を対等に扱う単一感受率による光学の理論 II (第 61 回応用物理学会春季学術講演会) (2014 年)
 - [5] 非放射場と放射場を対等に扱う単一感受率による光学の理論; 非放射場の効果 (日本光学会年会 Optics & Photonics Japan 2013) (2013 年)
 - [6] 非放射場と放射場を対等に扱う単一感受率による光学の理論 I (第 74 回応用物理学会秋季学術講演会) (2013 年)
 - [7] [関連した発表] ナノ構造と非放射場の理論 (30 分) (第 74 回応用物理学会秋季学術講演会) (2013 年)

- [8] 非放射場と放射場を対等に扱う単一感受率による光学の理論 V (第 63 回応用物理学会春季学術講演会) (2016 年)
- [9] ナノ構造物質近傍の非放射場, 放射場による電子状態遷移の比較 (日本物理学会 2013 年秋季大会) (2013 年)
- [10] スカラーポテンシャルとベクトルポテンシャルへの応答の違いについてはよりシンプルな形で論じられる．2016 年度に発表予定．