

近接場光励起ダイナミクスの第一原理計算

First-Principles Calculations of Near-Field Excitation Dynamics

分子科学研究所 信定 克幸

Institute for Molecular Science, Katsuyuki Nobusada

E-mail: nobusada@ims.ac.jp

物質が関与する多くの科学・技術研究領域において、光と物質の相互作用は極めて重要な物理現象の一つであり、実際、個々の物質の性質やそれら物質が関与する光応答素過程の解明のための基礎理学的興味に留まらず、機能性デバイスの動作メカニズムの根幹を成し、様々な計測手段や加工技術の要となるものである。このような様々な研究領域において光と物質の相互作用を考える際、その殆どにおいて“双極子近似”と呼ばれる非常に簡便な近似を用いることが多い。双極子近似の下では、入射光の波長よりも対象とする物質系のサイズが十分に小さいとして、光は単なる外場として取り扱い、物質系（電子系）と光（電磁場）の露な相互作用は考えない。これまでの光応答の研究領域では、このような双極子近似が十分に機能しており、事実多くの現象が説明されてきた。しかしながら、近接場光励起ダイナミクスが関わる現象においては、もはや電子系と電磁場の露なカップリングを無視して議論することはできず、それ故にこのような現象を説明するためのより一般化された光と物質の相互作用の理論とその理論に基づく解析手法が必須となってくる。近接場光励起ダイナミクスを理解することによって、超局所空間分光、新規化学反応場形成、光学力による物質操作、ポラリトンを介した電磁場エネルギー伝播導波路設計等の新たな研究領域に踏み込むことができ、双極子近似に支配されていた従前の光応答現象から大きく超えた理学・工学の世界が広がる。

今回のシンポジウムにおいては、ナノ分子構造体における近接場光励起ダイナミクスを題材として、特に第一原理計算の観点からナノフォトニクス分野に如何なる寄与ができるのかを紹介する予定である。