

ドレスト光子シミュレーションにおけるナノ物質系のモデル化手法の検討

Consideration of Nano-Matter Modelling for a Dressed Photon Simulation

榊リコー¹, 長浜バイオ大², ドレスト光子研究起点³ ○三宮 俊¹, 西郷 甲矢人², 大津 元一³Ricoh Co., Ltd.¹, Nagahama Inst. Bio-Sci. Tech.², Res. Origin Dressed Photon³°Suguru Sangu¹, Hayato Saigo², Motoichi Ohtsu³

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

1. はじめに

ナノ領域の光を媒介した特異な物理現象が報告されている(例えば、シリコン発光デバイス[1]や、近接場光エッチングによる表面平滑化[2]など)。これらの現象を解明するために、光とナノ物質の合成系、すなわちドレスト光子の理論検討が進められている。

著者らは、ナノ物質を、ドレスト光子を生成・消滅する格子点としてモデル化し、密度行列を用いてエネルギー移動を算出するシミュレーションを提案し、近接場光の特徴的な振舞いである構造端部への局在現象や、局在状態の形状依存性といった性質を定性的に表現できることを示した[3]。この「ドレスト光子シミュレーション」の原理は、量子ウォークと呼ばれる概念と等価であることが数学的に示されている[4]。このシミュレーションでは格子点数 n の増加とともに解くべき微分方程式が n^2 本に増加するため、本来解析したいサブ波長スケールの構造や、ミクロからマクロへの接続の問題へそのまま適用することが困難である。

本発表では、ドレスト光子シミュレーションにおけるナノ物質の粗視化(計算量の削減)に向けたアプローチについて議論を行う。

2. ナノ物質のモデリング手法

検討するシミュレーションでは、物質系を、ナノ構造端部を詳細に描き、やや大きなスケールの構造は粗視化した構造として捉える。Fig.1 は一次元格子(8 サイト)を用いた粗視化のイメージを示している。Fig.1(a)は従来のドレスト光子サイト間のエネルギー移動を表しており、これを Fig.1(b)に矢印で示した内部エネルギー状態をもつブロック(一体構造)の集合として見直す。その上で、寄与の小さな成分を省いていくことで基底の数を低減する。Fig.2 は、Fig.1(b)におけるマクロ側ブロックの赤色矢印で示す状態を無視した際のポピュレーション(密度行列の対角成分)定常状態の算出結果であり、粗視化前の結果とおおよその一

致が確認できる。これは、低周波成分が(遠方場への)エネルギー散逸と関係しているという直感的描像に基づいている。より精度を高めるためには、複数格子点による影響をくりこんだ有効相互作用を近似的に導出する必要があり、現在検討を進めている。講演では、より具体的なナノ物質形状の効果についても言及する予定である。

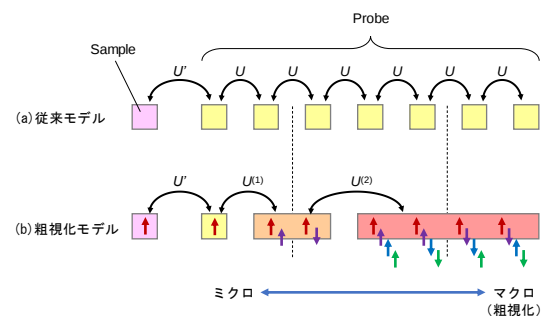


Fig. 1: ナノ物質のモデリング方法

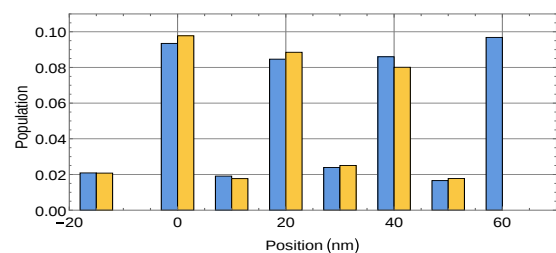


Fig. 2: 格子点におけるポピュレーション (青: 従来モデル、橙: 粗視化モデル)

参考文献

- [1] 川添・他, 光学 43 巻 8 号 (2014) 366.
- [2] 八井, OPTRONICS 35(413) (2016) 204.
- [3] 三宮・他, 第 79 回応用物理学会秋季学術講演会 19a-437-7 (2018).
- [4] H. Saigo, et.al., arXiv:1802.01837 [math-ph] (2018).