

論文の内容の要旨

氏名：竹 内 嵩

博士の専攻分野の名称：博士（工学）

論文題名：A Study of Light-Matter Interaction in Mesoscopic Region by Maxwell-Schrödinger Hybrid Simulation(Maxwell-Schrödinger 方程式混合数値解析法によるメゾスコピック領域における光と物質の相互作用に関する研究)

1985年に日本電信電話公社が民営化され、通信市場に競争原理が導入されて以来、我が国の情報通信産業は大きな発展を迎えた。特に情報通信技術に関するエレクトロニクスの進展は目覚ましく、これまでにPCやスマートフォンやタブレットなどに代表される様々な機器が開発されてきた。そういった情報通信機器の仕組みにおいて根幹となる理論的背景は、低周波数の電磁気現象をも含んだ広義における光と物質の相互作用である。

近年では、この光と物質の相互作用を巧みに利用する技術として、プラズモニック素子や量子コンピュータが注目されている。プラズモニック素子とは、貴金属表面付近電子の光による集団励起（表面プラズモン）を利用する素子であり、これを用いることで、光の回折限界を超えたナノメートルオーダーの微小スポットに電磁エネルギーを集中させることが出来る。昨今ではプラズモニック素子を用いた高感度センサ、集積回路化、高密度磁気記録などが報告されている。一方、量子コンピュータとは、従来の0か1のみで動作する古典コンピュータと異なり、単一ないしは複数粒子の量子状態を演算として用いるシステムである。最大の特徴は量子状態の重ね合わせを用いることによる超高速演算であり、これまでに核磁気共鳴や超伝導を利用したものが提案されている。また、より顕著に光と物質の相互作用を用いた方法として、レーザ場による量子状態制御法が知られている。

これらプラズモニック素子や量子コンピュータ（特に光による制御を目的とした）は、古典論ないしは量子論のみで理論的に扱うことが困難である。一般的に、古典論で扱う問題はマクロスコピック、量子論で扱う問題はミクロスコピックとし、マクロとミクロの間は“メゾスコピック”として定義されている。本論文において、著者はこの定義を拡大解釈し、上述のような古典論あるいは量子論のみでは扱えない理論的困難さを伴う領域を“メゾスコピック領域”と表現している。

最近、このメゾスコピック領域における問題に対する様々なアプローチが活発に提案ならびに研究されており、著者の取り組む Maxwell-Schrödinger 方程式混合数値解析法はそのひとつである。Maxwell-Schrödinger 方程式混合数値解析法は、光と物質の支配方程式にそれぞれ Maxwell 方程式と Schrödinger 方程式を用い、古典的には Lorentz 力で表されるハミルトニアンにて光から物質への作用を与え、励起された物質が生成する分極電流密度を Maxwell 方程式に代入することで物質から光への作用を与える。このモデル化を用いることで、高効率かつ高精度に光と物質の相互作用を計算することが可能となる。著者の知る限り、Maxwell-Schrödinger 方程式混合数値解析法に関する最初の研究は、1998年の Christov らによる報告であり、そこではガス中を伝搬するアトセカンドパルスの非線形効果について調査が行われた。その後は Lorin らによる H₂+ガスと超短波パルスレーザとの相互作用や、Pierantoni らによるカーボンナノチューブトランジスタの数値シミュレーションなどの報告がなされている。

本論文では Maxwell-Schrödinger 方程式混合数値解析法を用い、メゾスコピックな領域における光と物質の相互作用の解明を目的として、以下のふたつの事柄について検討を行った。

(1) 電子数が多い場合

プラズモニック素子に対する従来の理論体系では、光と物質の双方を古典論のみでモデル化する手法(以下、Maxwell-Newton 法と表記)が広く用いられている。ここではポテンシャル構造の非調和性に焦点をあて、正確な Maxwell-Schrödinger 方程式混合数値解析法から得られた結果を規範解とし、Maxwell-Newton 法の適用限界を明らかにした。

(2) 単一電子の場合

量子状態制御を行う光パルス(以下、光制御パルスと表記)の数値設計を目的とした全ての先行研究では、制御対象が単一ないしは少数の粒子である場合、光により励起された粒子が生成する局所的な電磁場(：近接場)の効果を無視してきた。ここでは、Maxwell-Schrödinger 方程式混合数値解析法を用いて実際の近接場の影響を検証し、また、近接場の効果を含む新規光制御パルス設計法を開発した。

本論文は4章から構成されており、以下では各章の概要を説明している。

「第1章 Introduction (序論)」においては、研究の背景、研究の目的、本論文の章構成ならびに用いた記号について述べた。

「第2章 Light-matter interaction: many-electron systems (電子数が多い場合の光と物質の相互作用)」では、ポテンシャル構造の非調和性に焦点をあて、正確な Maxwell-Schrödinger 方程式混合数値解析法から得られた結果を規範解とし、Maxwell-Newton 法の適用限界を明らかにした。

本章では解析モデルとして、プラズモニック素子表面を模した薄膜を採用し、入射レーザ場にはガウシアンパルスを用いた。ここで、薄膜中には無数の電子が存在し、その光学的特性は代表のものひとつにて表される。また、全ての電子は入射レーザ場の偏光方向に沿ってポテンシャルに束縛されているとし、その構造には

1. 調和振動子 V_h
2. 局所的に非調和性を有するポテンシャル V_{la}
3. 全体的に非調和性を有するポテンシャル V_{ga}

の3パターンを用いた。

ポテンシャル構造が調和振動子である V_h の場合では、量子効果を考慮しない Maxwell-Newton 法でも、Maxwell-Schrödinger 方程式混合数値解析法と等価な結果が得られた。これは、Maxwell-Schrödinger 方程式混合数値解析法から求めた電子波束が、 V_h の場合では一切乱れず、初期波形を保ったまま古典軌道と同様の運動をするためである。一方、局所的に非調和性を有するポテンシャルである V_{la} に対しては、Maxwell-Newton 法は Maxwell-Schrödinger 方程式混合数値解析法から求めた結果と著しく異なる傾向を示した。著者の開発した Maxwell-Schrödinger 方程式混合数値解析法では、電子波束が非調和性を特徴づけるポテンシャル障壁に衝突する度にトンネル効果が生じて分裂し、そして分裂しあった波束間における干渉を示す。一方、量子効果を含まない Maxwell-Newton 法ではその再現が行えないため、最終的に両者の結果は異なる。最後に、全体的に非調和性を有するポテンシャルである V_{ga} の場合では、入射レーザ場が薄膜を通過する付近までは、両者の結果は概ね一致する。しかし、その後の時間発展と共に、Maxwell-Newton 法は Maxwell-Schrödinger 方程式混合数値解析法から求めた結果からずれていく。ここでは、Maxwell-Schrödinger 方程式混合数値解析法にて計算した電子波束は、波束の運動方向が変わるたびにその幅を広げていき、ディフュージング効果を起こしている。一方、Maxwell-Newton 法から求めた結果はその効果を含まないため、ずれが生じることを明らかにした。

「第3章 Light-matter interaction: single-electron systems (電子数が多い場合の光と物質の相互作用)」では、Maxwell-Schrödinger 方程式混合数値解析法を用いて実際の近接場の影響を検証し、また、近接場の効果を含むパルス設計法を新しく提案した。

本章では解析モデルとして、量子ドットを模した細管を採用し、入射レーザ場には光制御パルスを用いた。ここで、細管中には単一電子が拘束されており、その自由度は z 軸方向のみに与えている。

従来の近接場の影響を考慮しない設計法にて光制御パルスを設計した。そして、パルスを用いて Maxwell-Schrödinger 方程式混合数値解析法を実行し、近接場の影響を検証した。結果、例えば最小電荷である単一電子の場合でも、近接場の影響は非常に大きく、入射した光制御パルスは局所的に乱されることを確認した。また、この局所的な乱れの影響により、制御が不安定となった。更に、近接場の影響は波動関数の振幅に深く依存することを明らかにした。

Maxwell-Schrödinger 方程式混合数値解析法を応用し、近接場の影響を考慮した新規光制御パルス設計法を開発した。開発手法にて光制御パルスを設計し、その制御性能について検討を行った。結果、開発

手法にて設計したパルスは、近接場との干渉により安定した制御が可能であることを示した。更に、従来法は近接場の影響に対し不変の光制御パルスしか設計出来ないのに対し、新しく開発した手法は近接場の影響に応じてそれぞれ適切な光制御パルスを設計出来ることを示した。

「第4章 Conclusion (結言)」においては、本論文で得られた研究の成果を総括した。

第2章では、プラズモニク素子の解析などに用いられる Maxwell-Newton 法の妥当性について、ポテンシャル構造の観点から検討を行い、Maxwell-Schrödinger 方程式混合数値解析法と比較した。

結果、以下の事柄を明らかにした。

- (1) ポテンシャル構造が完全な調和振動子型であれば、古典論のみでモデル化した Maxwell-Newton 法でも Maxwell-Schrödinger 方程式混合数値解析法と等価な結果が得られる。
- (2) ポテンシャル構造が非調和性を有する場合、トンネル効果やディフェージング効果が生じ、Maxwell-Newton 法では信頼性の高い解析が出来ない。
- (3) Maxwell-Schrödinger 方程式混合数値解析法はポテンシャル構造が非調和性を有する場合でも、信頼性の高い解析が可能である。

第3章では、Maxwell-Schrödinger 方程式混合数値解析法を用いて単一電子における光制御時に、近接場がどれほど影響するのかを検証した。

結果、以下の事柄を明らかにした。

- (1) 従来の設計法から得られた近接場の影響を考慮していないパルスは、波動関数の振幅に依存して局所的修正の影響を受け、振幅値が高いとき、制御精度に深刻な低下が現れることを示した。
- (2) Maxwell-Schrödinger 方程式混合数値解析法を応用した新しい光制御パルス設計法を提案した。
- (3) 提案した新しい手法は近接場の影響に応じてそれぞれ適切なパルスを設計可能であり、安定した制御が行えることを示した。