

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 28 年 6 月 15 日現在

機関番号：13501

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2013～2015

課題番号：25610071

研究課題名(和文)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

研究課題名(英文)Theory of the Single Susceptibility equally associated with Non-radiative and Radiative Fields in Optics

研究代表者

坂野 斎 (BANNO, Itsuki)

山梨大学・総合研究部・助教

研究者番号：30260566

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 1,200,000円

研究成果の概要(和文)：近接場光学(NFO)に相応しい微視的応答理論を構築した。NFOには：(1)ナノ構造の低対称性により電氣的・磁氣的応答が区別不可能で誘電率・透磁率が論理的に使えない、(2)スカラーポテンシャル(SP, 非放射場)とベクトルポテンシャル(VP, 放射場)が応答の原因として共存する、という特徴がある。これを考慮してSP・VPを原因、誘導電荷密度・電流密度を結果とする線型・非線型単一感受率を作用積分の汎関数微分から系統的に定義した。また、モデル系に適用しSP, VPに対する応答に質的違いがあることを明らかにした。最終目標である誘電率・透磁率の代替となる現象論的単一感受率は構築途上であり今後もこれを目指す。

研究成果の概要(英文)：We construct a response theory adequate for NFO, introducing single susceptibility (SS) relating the scalar and vector potentials (SP and VP, as the cause) to the induced charge and current densities (as the result). This scheme is motivated by two points specific in NFO: (1)the low symmetry of nanostructure mixes electric and magnetic responses, and the electric permittivity (EP) and magnetic permeability (MP) are not available, (2)the SP and VP (non-radiative and radiative fields) coexist as the cause of response. The Heisenberg operators of linear and nonlinear SS's are defined as the functional derivative of the action integral, and guarantee the charge conservation law and gauge invariance. The ground state of density functional theory is used to obtain the expectation value of the operators. This SS make clear the difference between the responses to the SP and VP in NFO. We are still on the half way to the final goal; a phenomenological SS as a substitution of the EP and MP.

研究分野：近接場光学

キーワード：光近接場 非放射場 単一感受率 ゲージ不変性 電荷保存則 応答理論 誘電率 透磁率

## 1. 研究開始当初の背景

(1) 光学系の解析で使われる誘電率・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。しかし、電磁場の根本自由度は電磁ポテンシャル（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）、物質の応答の根本自由度は誘導電荷密度・誘導電流密度（電荷保存則を考慮して実質3成分）なので、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る。また、ナノ構造の関わる近接場光学系など低対称の系では電氣的応答と磁氣的応答が区別できなくなり、誘電率・透磁率による記述が不合理であることが示されている。

(2) 近接場光学系にはナノ構造に集積した電荷密度がつくる非放射場（スカラーポテンシャル）と電流密度がつくる放射場（ベクトルポテンシャルの横成分）が共存している。通常の光学系にはない非放射場（スカラーポテンシャル）の存在が、近接場光学特有の効果の原因と考えられるが、非放射場を光学応答の原因とみる視点はなかった。それは、多電子系を扱うときに、スカラーポテンシャルを消去して荷電粒子（電子、原子核）間の内部エネルギーに転嫁したハミルトニアンを伝統的に使ってきたからと考えられる。この従前からある方法は放射場のみを応答の原因とみる通常の光学系には相応しいが、近接場光学系では対等な原因であるべき非放射場と放射場の扱いに不平等があるので相応しくない。特に、元々ある粒子の電荷の効果とナノ構造が原因となった電荷の効果とを区別することができない。

(3) 以上から、近接場光学の特徴を考慮した応答理論をつくること、基本的な考え方を展開することで、光近接場特有の物理現

象の理解・解析に寄与できる状況だった  
[ 口頭発表<sup>⑫</sup> ]。

## 2. 研究の目的

(1) 近接場光学に相応しい、スカラーポテンシャルとベクトルポテンシャル（非放射場と放射場）を原因、誘導電荷密度・誘導電流密度を結果とする単一感受率をつくる。この単一感受率には電荷保存則、ゲージ不変性を満たすことを要請する。

(2) 非相対論的な作用積分の表式において、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）に対する依存性が異なるので、これらへの応答は異なるはずである。この違いを明らかにする。次の目的(3)の準備でもある。

(3)(1)の微視的理論と整合し、従前の誘電率・透磁率の代替となる現象論的な単一感受率をつくる。近接場光学系に適用し、その特有の光学現象（スカラーポテンシャル＝非放射場が関わる光学現象）の一覧をつくる。

## 3. 研究の方法

(1) 原因を電磁ポテンシャル（スカラーポテンシャルとベクトルポテンシャル）、結果を線型・非線型の誘導電荷密度・誘導電流密度として、摂動論により線型・非線型の単一感受率を導出する。その際、電荷保存則、ゲージ不変性を明確に考慮するために、非相対論的な系ではあるが、スカラーポテンシャル・ベクトルポテンシャルと誘導電荷密度・誘導電流密度をそれぞれ4元ベクトル量として記述する。また、次の段階(3)の現象論的単一感受率の構築に備えて、古典論と対応が取れるハイゼンベルグ描像での摂動論を用いる。

(2) スカラーポテンシャルとベクトルポ

テンシャルが応答の原因として共存する簡単な近接場光学系に (1) でつくった微視的単一感受率を適用して、応答の違いを抽出する。

(3) 電荷保存則、ゲージ不変性によって単一感受率の関数系は限定される。これと

(1) の微視的表式との整合性を頼りに現象論的な単一感受率を考案する。スカラーポテンシャルに関する応答は、近接場光学特有の光学現象と考えられるので、その一覧をつくる。

#### 4. 研究成果

(1) 2. 研究目的の (1) は達成された。スカラーポテンシャル・ベクトルポテンシャルを原因、誘導電荷密度・誘導電流密度を結果とする関係を結ぶ線型・非線型の単一感受率をハイゼンベルグ演算子の形で定義できた。この単一感受率の定義は根本的、系統的なもので、線型の場合、作用積分を電磁ポテンシャルで2階汎関数微分したもの、非線型の場合、作用積分の電磁ポテンシャルによる3階以上の汎関数微分をしたものとして与えられた。この定義のおかげで、電荷保存則とゲージ不変性が相対の関係にあり、線型・非線型単一感受率とも電荷保存則、ゲージ不変性を自動的に満たしていることが簡単に証明できた [ 口頭発表, ⑦, ⑧, ⑨, ⑪, 論文投稿準備中 ]。

当初気づかず、連携研究者によって問題提起されたのは、単一感受率のハイゼンベルグ演算子の期待値をとる多電子系の非摂動状態をいかに用意するかだった。近接場光学を特徴付けるスカラーポテンシャルは、多電子問題と関係しているが、本理論ではスカラーポテンシャルを荷電粒子間の内部エネルギーに転嫁せずにそのままにしておくので、多電子系で束縛状態を導く通常の扱いを適用できない。時間を要したが、この非摂動束縛状態は密度汎関数法により用

意できることが原理的にわかった [ 口頭発表② ]。

(2) 2. 研究目的の (2) のスカラーポテンシャル、ベクトルポテンシャルへの応答の違いを明らかにすることは、いくつかの試み [ 口頭発表④, ⑩ ] の後、ひとつの簡単な系でなされた。(1) でつくった線型単一感受率を1電子2準位系のモデルに適用し、スカラーポテンシャルによる応答とベクトルポテンシャルによる応答に関わる行列要素がトレードオフの関係にあることを示した。これはスカラーポテンシャルが電子の位置、ベクトルポテンシャルが電子の運動量とそれぞれ結合していることと、位置と運動量には非可換性があることから導かれる量子の効果と考えられる。これにより、スカラーポテンシャル (非放射場, 縦電場) とベクトルポテンシャル (放射場, 横電場) が共存する近接場光学では、原理的に分極と電場が単純な比例関係にないことを原理的に示せた [ 口頭発表予定①, 論文投稿準備中 ]。今後、多電子系へ議論を拡張する。

(3) 2. 研究目的の (3) の現象論的単一感受率をつくること、近接場光学の現象の一覧をつくることは未完成である。いくつかの簡単なモデルで現象論の扱いを試み、[ 口頭発表③, ④, ⑤ ]、また、近接場の効果の一覧は前に行った微視的単一感受率との互換性が保証しない議論の範囲のものを整理するに止まった [ 口頭発表⑥ ]。非摂動状態の用意までふくめて微視的理論が整備されたので、これを足場に今後も現象論構築の研究を継続する。

(4) 当初の目的とは別に、連携研究者との議論により以下が明らかになった: ① スカラーポテンシャル (とベクトルポテンシャルの縦成分) を電荷密度間の内部

エネルギーに転嫁できるように、ベクトルポテンシャルの横成分を含む横電流密度（スピンによる磁化電流密度を含む）間の内部エネルギーに転嫁できる。②量子論と整合する古典論のニュートン方程式は電場・磁場によるローレンツ力ではなく、スカラーポテンシャルとベクトルポテンシャルの横成分で記述するのが相応しい。これらについては、理論的な価値を検討する。

3年間の研究によって、近接場光学の基礎的問題をこの分野の研究者に伝えることができた。ゲージを限定しない形式で、単一感受率に根本的・系統的な定義を与えることができたが、相対論で用いる4元ベクトルによる記述形式が、この微視的理論の枠組みの妥当性・普遍性の認知、波及を限定的にしている可能性があり、また、将来そのような可能性がある。今後、本研究の論文を投稿、わかりやすい応用例を見つけ発表、現象論的な感受率の構築の研究を継続し、時間をかけて伝えていく。

## 5. 主な発表論文等

（研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線）

〔雑誌論文〕（計 0件）

〔学会発表〕（計 12件）

- ① I. Banno, NFO-14(The 14th International Conference on Near-field Optics and Nanophotonics, and Related Techniques [国際会議, 受理], We-10-A5, Theory of the Single Susceptibility equally associated with Non-radiative and Radiative Fields in Near Field Optics, 2016年9月7日, アクトシティ浜松（静岡県・浜松市）（予定）
- ② 坂野 齋, 第 63 回応用物理学会春季学

術講演会, 19a-S622-13, 非放射場と放射場を対等に扱う単一感受率の理論 V, 2016年3月19日, 東京工業大学（東京都・目黒区）

③ I. Banno, APNFO-10(The 10th Memorial of Asia-Pacific Conference on Near-field Optics)[国際会議], P1-28, Theory of the Single Susceptibility for Near Field Optics, 2015年7月9日, 函館市国際水産・海洋総合研究センター（北海道・函館市）

④ 坂野 齋, 第 62 回応用物理学会春季学術講演会, 12a-A12-1, 非放射場と放射場を対等に扱う単一感受率の理論 IV, 2015年3月12日, 東海大学（神奈川県・平塚市）

⑤ 坂野 齋, 第 75 回応用物理学会秋季学術講演会, 18p-C1-1, 非放射場と放射場を対等に扱う単一感受率の理論 III, 2014年9月18日, 北海道大学（北海道・札幌市）

⑥ I. Banno, NFO-13(The 13th International Conference on Near-field Optics and Nanophotonics, and Related Techniques) [国際会議, 関連発表], P2.81, Theory of Nanostructure-induced Nonlinear Optical Effects with Non-radiative Nature, 2014年9月3日, ユタ州スノーバード（アメリカ合衆国）

⑦ I. Banno, 同上 [国際会議], P1.35, Theory of the Single Susceptibility equally associated with Non-radiative and Radiative Fields in Near Field Optics, 2014年9月1日, ユタ州スノーバード（アメリカ合衆国）

⑧ 坂野 齋, 第 61 回応用物理学会春季学術講演会, 17p-F6-5, 非放射場と放射場を対等に扱う単一感受率の理論 II, 2014年3月17日, 青山学院大学（神奈川県・相模原市）

⑨坂野 齋, Optics Japan 2013, 13aC1, 非放射場と放射場を対等に扱う単一感受率の理論; 非放射場の効果, 2013年11月13日, 奈良県新公会堂 (奈良県・奈良市)

⑩坂野 齋, 平沢駿, 中野恭輔, 藤間一美 物理学会講演会 26pBB-11, 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, 2013年9月26日, 徳島大学 (徳島県・徳島市)

⑪坂野 齋, 第74回応用物理学会秋季学術講演会, 18a-C13-1, 非放射場と放射場を対等に扱う単一感受率の理論 I, 2013年9月18日, 同志社大学 (京都府・京田辺市)

⑫坂野 齋, 同上 [招待講演], 17p-D2-2, ナノ構造と非放射場の理論, 2013年9月17日, 同志社大学 (京都府・京田辺市)

[その他]

ホームページ等

<http://www.ccn.yamanashi.ac.jp/~banno/>

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

坂野 齋 (BANNO, Itsuki)

山梨大学・大学院総合研究部・助教

研究者番号: 30260566

### (2) 研究分担者 なし

### (3) 連携研究者

張 紀久夫 (CHO, Kikuo)

大阪大学・名誉教授

研究者番号: 60013489