

平成 21 年 7 月 14 日現在

研究種目：基盤研究（C）

研究期間：2006 - 2009

課題番号：18510092

研究課題名（和文） 微視的非局所光学応答理論の新しい展開

研究課題名（英文） New aspects of microscopic nonlocal optical response theory

研究代表者 張 紀久夫 (KIKUO CHO)

財団法人 豊田理化学研究所・フェロー

研究者番号： 60013489

研究分野：複合新領域

科研費の分科・細目：ナノ・マイクロ科学 ・ナノ構造科学

キーワード：巨視的マクスウェル方程式，微視的非局所応答，長波長近似，旋光性，非共鳴分極，電磁場グリーン関数

1. 研究計画の概要

微視的非局所応答理論を基礎にして，(1)非共鳴誘起分極を繰りこんだ電磁場による共鳴光学応答の記述と，(2)キャピティポラリトンにおける非弾性過程の記述を確立する。

2. 研究の進捗状況

(1)すべての誘起分極を電磁場に繰り込めば，それは巨視的応答理論になることから，「微視的非局所応答理論に長波長近似を加えて巨視的マクスウェル方程式を導出する」という論理的・数学的に明瞭な新しい方法を考案・実行し，従来形よりもっと一般性のある巨視的マクスウェル方程式を導出した。その線形感受率は1つだけで電気・磁気分極とその干渉効果を全て表す。これによって微視的理論と巨視的理論の論理的対応関係が明瞭になり，従来形では疑問であった「何故感受率が2つ（以上）必要なのか」「何故透磁率を計算する一般論はないのか」などに対する答が与えられた。またキラル対称の場合を含む一般論が与えられており，従来現象論として用いられてきた Drude-Born-Fedorov 方程式の不十分さも明瞭になった。これは長い歴史の中で完成していると思われる従来形に対する挑戦というだけでなく，メタマテリアルなど今日的な問題へ大きく影響するという観点から，一般論の確立に向けた詳細にわたる理論の詰め（例えば，巨視的境界条件をどのように設定するか，旋光性を含む感受率の疑義ない定義はどうするか，新旧形式を判別する実験の候補の検討等々）を行っている。(2)また，一部の分極を繰り込んで残る共鳴過程を非局所的に扱うキャピティ

グリーン関数の方法については，任意形状の物質をメッシュに分けてグリーン関数を効率的に求める方法と，表面音響波による半無限バルクポラリトンの散乱問題を定式化し反射スペクトルを計算するプログラムを開発し，それに基づいた数値計算を行っている。

3. 現在までの達成度

(1)非共鳴誘起分極を繰り込む問題はさまざまな場面に存在するが，その中でも最も一般的で波及効果の大きい問題が「新しい形の巨視的マクスウェル方程式の導出」である。これは提案の段階ではあまり表に表れていなかったが研究着手と共にその重要性が認識され，（従来形式の信奉者と戦いつつ）この新しい巨視化理論の定式化に最大の努力を傾けてきた。その骨格の部分は完成されて J. Phys. Condens. Matter 誌に出版され，新しい巨視的マクスウェル方程式として陽の目を見ている。この理論の従来形に対する優位性と論理的正当性を示すためには，電磁気学の多様な問題を処理する新しい処方箋の詳細を作り上げなければならない。その意味では8割程度の達成度と考えている。

(2)キャピティグリーン関数の絡む問題については定式化はできているが，数値計算がまだ不十分なので達成度としてはやや遅れている。

4. 今後の研究の推進方策

問題の大きさや影響の及ぶ範囲の広さから言って「新しい巨視的マクスウェル方程式導出論」の完成が最重要課題であることは間違いないので，それを第一優先度にして推進

する。骨格部分の論文は出版済みであるが、全体を記述する書物の刊行も重要と考え、その単名での執筆も今年中には脱稿する予定で順調に進んでいる。

数値計算の必要な他の問題は基本的な困難は予想されないので一步一步着実に実行する。

5. 代表的な研究成果

(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 7 件)

K. Cho, J. Phys. Condens. Matter **20** (2008) 175202 (8pp), "A single susceptibility scheme of macroscopic Maxwell equations: Beyond the 'E, B, D, H' approach", 有

[学会発表] (計 22 件)

K. Cho, Int. Conf. on Excitonic Processes in Condensed Matter, Kyoto, 2008 June 25, "General form of Maxwell equations for metamaterials study" (Invited)

[図書] (計 1 件)

執筆中 (ドイツ Springer 社と「2010 年出版予定, 150 ページ程度」の条件で契約済み)

K. Cho, "Reconstruction of macroscopic Maxwell equations: Single susceptibility scheme beyond ϵ and μ "