

平成 22 年 5 月 15 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 developments of microscopic nonlocal response theory

研究代表者

張 紀久夫 (Cho Kikuo)

財団法人豊田理化学研究所・フェロー

研究者番号：60013489

研究成果の概要 (和文)：微視的非局所応答理論の長波長近似によって巨視的マクスウェル方程式を導出するという新たな論理で従来形より一般性の高い結果を導いた。最大の特徴は単一の感受率で電気・磁気分極と (キラリティに依る) その干渉効果を全て表わせることで、「唯一性」と「微視的理論との論理的整合性」を欠いている従来形式の欠点から解放されている。磁気感受率の定義についても論理に基づく新しい提案をしている。原著論文も発表済だが、詳細な議論を含む英文単行書を書き上げ、本年 9 月に Springer 社から出版される。

研究成果の概要 (英文)：A new derivation of macroscopic Maxwell eqs. has been made with a more general form than the conventional ones via a new logic, i. e., the application of long wavelength approximation to the microscopic nonlocal response theory. The most significant aspect is its single susceptibility framework, which represents all the effects of electric and magnetic polarizations including their chirality induced interference effect. This theory is free from the problems of the conventional scheme, i. e., the lack of “uniqueness in the definition of electric and magnetic polarizations” and “the logical consistency with microscopic response theory”. A new definition is proposed about magnetic susceptibility from a logical ground. The result is summarized in the form of a book including all the theoretical details, to be published from Springer Verlag in September 2010.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2006 年度	1,500,000	0	1,500,000
2007 年度	700,000	210,000	910,000
2008 年度	700,000	210,000	910,000
2009 年度	700,000	210,000	910,000
年度			
総計	3,600,000	630,000	4,230,000

研究分野：複合新領域 (C)

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：微視的非局所応答, 巨視的局所応答, 長波長近似, 単一感受率理論, キラリティ対称, 巨視的マクスウェル方程式, 電気・磁気分極, Drude-Born-Fedorov 方程式

1. 研究開始当初の背景：代表者がこの研究の前に独自に開発していた「微視的非局所応答理論」はすでにナノ物質系へのさまざまな応用がなされていて、電磁応答の一般理論として量子電磁気学に次ぐ位置を確立していたが、その更なる応用展開が期待される段階にあった。その発展方向の一つが誘起分極を電磁場に繰りこむ形式の理論で、繰りこみ方に応じていくつかの異なる理論が予想された。

① 中でも最も一般性が高く重要な問題が「すべての分極を巨視的な電磁場に繰りこむ」巨視的マクスウェル方程式と巨視的構成方程式を導出することであった。この背景としては、「電荷密度を分極電荷と伝導電荷に分けるととき一意的な分割ができない」「電流密度を電気分極と磁気分極の寄与に分ける際にも一意性欠如の問題がある」「微視的理論では1つで済む感受率テンソルが巨視的理論になると2つ（以上）必要になるのは何故か」等、従来の巨視的マクスウェル方程式の不完全性に関する疑念があった。その解決に必要と思われたことは、モデルや既知の知識を用いない「物理的にも数学的にも明瞭な論理に基づく導出の手続き」であった。（多くの教科書にある導出の仕方は既存の巨視的マクスウェル方程式を微視的議論で追認する議論で、近似の成立条件等の検討などの甘いものであった。）

② 研究の初期段階では他の個別の問題（任意形状の巨視的媒質における電磁グリーン関数の数値的算出法、ラマン散乱等の非弾性過程を半古典論で記述する方法の探索）、中間段階では上記研究の応用問題（キラル対称性のある結晶の内殻共鳴 X 線回折、等）も挙げたが、上記の問題の重要性とその影響範囲の広さからその解決および著書の完成を優先させた。

2. 研究の目的：

① 物質の電磁応答諸理論は全体として階層構造をなしていて、巨視的マクスウェル方程式はその上位理論に一定の近似を加えて得られるはずである。代表者の構築してきた微視的非局所応答理論は非相対論の範囲で第一原理に基づいた一般性のある応答理論で、この上位理論として最適のものである。その基礎方程式（微視的マクスウェル方程式と微視的非局所構成方程式）に長波長近似を加えれば、論理的に疑念の無い巨視的応

答理論になるはずである。この単純ではあるが未だ試みられたことのない導出論理を、十分一般性のある物質・電磁場のハミルトニアンに対して実行し、従来の巨視的マクスウェル方程式に含まれる論理的欠点を回避できるような新しい結果が得られるかどうかを検証する。

② 「任意形状の巨視的媒質における電磁グリーン関数の数値的算出法」は形状に応じて変化するキャビティ効果を含む電磁グリーン関数を用意して、その電磁場と電子共鳴の相互作用として一般的な（キャビティ共鳴と電子共鳴が共存する）電磁応答の理論を構成する。

③ 「ラマン散乱等の非弾性過程を半古典論で記述する方法の探索」は弾性過程に対しては成功した半古典的な微視的応答理論を拡張して、フォトンの生成・消滅を伴う過程を半古典論的に扱う方法を与える。

④ 「キラル対称性のある結晶の内殻共鳴 X 線回折、等」は本研究の成果である新しい巨視的マクスウェル方程式の導出法を応用して、微視的応答と巨視的応答の中間的な問題を第一原理に忠実な方法で解く実例を与える。

3. 研究の方法：

① 非相対論の範囲で十分に一般性のある物質と電磁場のハミルトニアンを出発点とし、それから導かれる微視的非局所応答理論の基礎方程式に長波長近似をするという、簡明ではあるがいまだ誰も行ったことのない方法で巨視的応答理論を導き出す。問題の本質は線形応答に集中しているので、線形感受率を経験的要素のない摂動計算で計算し、従来形との比較、とりわけ「当初の背景」で述べた従来形のもつ不完全性がどのように払拭されているかの検討を行う。

② グリーン関数の満たす微分方程式においてデルタ関数を完全系展開することにより、方程式を多元連立線形方程式に変換できることを用いて、それを数値解析する。

③ 微視的非局所応答理論の基礎方程式において、フォトンの生成・消滅過程を伴う行列要素に量子論的な値を導入すれば、残りは半古典論のまま非弾性過程が記述され、それがBorn-Huangの導入した遷移感受率による記述になっていると考えられるので、その詳細を検討する。

④ 誘起分極のうち長波長近似できる成

分を下地分極率で表し，残る自由度を量子論的に非局所応答として記述する．問題に応じて量子論的に扱う自由度を選択する必要がある．

3. 研究成果：

- ① 新たに得られた巨視的マクスウェル方程式は一般論として（微視的応答理論と同様に）単一の感受率テンソルだけで書かれており，その単一の感受率が電気・磁気分極および両者の干渉（キラル対称効果）を全て表している．用いた力学変数は必要最小限度の「横電磁場を表すベクトルポテンシャルと外部縦電場」および「物質中の誘起電流密度」で，（定義の唯一性に問題のある）電気・磁気分極は用いない．この感受率の表式は物質系の固有エネルギーと電流密度行列要素で与えられていて，個々の物質系の対称性，サイズ，大きさ，形状などが量子力学的に反映する形になっている．スピンに対する依存性も相対論的補正の範囲であらわに取り込まれている．感受率は波数 k のべき展開で与えられていて，非キラル対称系では k の 0 次項が電気双極子遷移，2 次項が磁気双極子と電気 4 重極子遷移を与え，1 次項は存在しない．キラル対称系では 1 次項が現れ，同時に元の 0 次項と 2 次項の混合も起こる．これは，キラル対称性を扱う理論としても，従来用いられてきた Drude - Born - Fedorov 方程式という現象論とは異なる第一原理理論になっている．電気・磁気感受率について，電場および磁場で誘起された電気分極と磁気分極という 4 種類の感受率を新しく定義すれば，見かけ上 E, B, D, H を用いた従来形のマクスウェル方程式を再現することができる．これは構成方程式の数を増やしているように見えるが，それらの構成方程式は独立ではなく，必ず単一の構成方程式に書き戻すことができるという点で新しい結果である．また，磁気感受率に対しても新しい定義の必要性（磁化 M の磁場 H に対する比例係数ではなく， B に対する比例係数として定義すべきこと）を提起している．この議論は感受率の内容を定義する物質ハミルトニアンをどのように選ぶかという問題と繋がっていて，それを「荷電粒子系の運動エネルギーとクーロンポテンシャルの総和（+相対論的補正項）」という常識的な形に選ぶ限り， M/H ではなく， M/B で定義すべきという第一原理的な論理になっている．この定義は IUPAP, IUPAC の報告書で M/H という

古い定義が今でも公式なものになっていることを考えると重要な指摘になると考えられる．

- ②～④ それぞれの問題について，定式化を行った．それに基づく数値解析と結果の検討，および既存の議論との比較等については今後の問題として残った．

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 6 件)

1. K. Cho, "General form of Maxwell equations for metamaterials study" *phys. Stat. sol (b)*, 査読有, 245 (2008) 2692-2695,
2. K. Cho, "A single susceptibility scheme of macroscopic Maxwell equations: Beyond the "E, B, D, H" approach" *J. Phys. Condens. Matter*, 査読有, 20 (2008) 175202 (8pp)
3. L. Pilozzi, A. D'Andrea, and K. Cho, "Effect of lateral periodicity on the optical response of a quantum well in a distributed Bragg reflector cavity: A simplified description via the Green function of a cavity polariton", *Phys. Rev.* 査読有, B 76, (2007) 245312,
4. A. L. Ivanov, N. I. Nikolaev, and K. Cho, "SAW-driven optical microcavities for device applications" *IEE Proc. Optoelectronics*, 査読有, 153 (2006) 326-329,
5. M. Sakaue and K. Cho, "Pump-probe spectroscopy of CuCl exciton-biexciton system in a slab" *Proc. 28th Int. Conf. on Physics of Semiconductors*, (Wien, 2006), APS, eds. W. Jantsch and F. Schaffler, 査読有, p.967,
6. K. Cho, "Is the definition of left-handed materials ($\epsilon < 0, \mu < 0$) valid?" *Proc. 28th Int. Conf. on Physics of Semiconductors*, (Wien, 2006), APS, eds. W. Jantsch and F. Schaffler, 査読有, p.1155,

[学会発表] (計 20 件)

1. 張 紀久夫 日本物理学会, 岡山大学
"単一感受率による巨視的 Maxwell 方程式: 従来形との詳細な比較"
2010 年 3 月 21 日
2. 張 紀久夫 国際高等研研究会
"電磁応答理論の階層における巨視的 Maxwell eqs. の位置" 2010 年 1 月 8 日
3. K. Cho, 7th Asia-Pacific conf. on

- Near-field Optics, Jeju, “Nonlocal response of metamaterials” 2009年11月26日
4. K. Cho, Int. workshop on Complex phenomena in non-linear physics, Erice, “Exciton polaritons interacting with Surface Acoustic Waves” 2009年10月6日
 5. K. Cho, Seminar 7th Univ. Paris, “General form of Maxwell eqs. for metamaterials study” 2009年9月24日
 6. 張 紀久夫, 国際高等研研究会 「光と物質の相互作用によるナノ量子相」 ”光と物質の研究:原理追求 vs. シナリオ構築” 2009年6月19日
 7. K. Cho, Roma 複雑系研究所, セミナー “General form of Maxwell equations for metamaterials study” 2008年11月28日
 8. K. Cho, Pavia 大学, 理論セミナー “Optical Response theory: from microscopic to macroscopic” 2008年11月26日
 9. K. Cho, Int. Conf. on Luminescence and Optical Spectroscopy of condensed matter, Lyon, “New application of microscopic nonlocal response theory: Single susceptibility scheme of macroscopic Maxwell equations” 2008年7月8日
 10. K. Cho, Int. Conf. on Excitonic Processes in Condensed Matter, Kyoto, “General form of Maxwell equations for metamaterials study” 2008年6月24日
 11. 張 紀久夫, 上智大学物理学科セミナー, 「物質の光学応答理論: ミクロからマクロへ」 2008年4月23日
 12. K. Cho, Int. conf. on Laser, Light-wave and Microwave, Yokohama, “Rigorous logic and its consequence in deriving macroscopic Maxwell equations: Watershed between micro- and macroscopic response” 2008年4月17日
 13. 張 紀久夫, 光物性研究会 (大阪市大) 「巨視的マクスウェル方程式の再構築」 2007年12月14日
 14. K. Cho, Seminar, Cardiff University, “Reconstruction of macroscopic Maxwell equations” 2007年10月23日
 15. 張 紀久夫, 日本物理学会 (北大) 「微視的非局所応答から導かれる巨視的マクスウェル方程式: 旋光性を含む「単一の」感受率」 2007年9月22日
 16. K. Cho, Int. workshop on Complex Optics in Mesoscopic Materials (Erice), “New aspects of microscopic nonlocal

- theory: resonant process in a structured matrix and derivation of new macroscopic Maxwell equations beyond ϵ and μ description” 2007年7月25日
17. 張 紀久夫, 理研シンポジウム (和光市) 「 ϵ , μ より一般性のある巨視的感受率の導出」 2007年5月11日
 18. 張 紀久夫, J S T 領域会議 (博多), 「巨視的マクスウェル方程式の微視的導出と単一の電磁気感受率」 2007年4月13日
 19. 張 紀久夫, 日本応用物理学会シンポジウム (青山学院大) 「ナノ物質の光励起と電磁相互作用」 2007年3月28日
 20. K. Cho, Workshop on Challenges and Opportunities on Nano-Optics, Fudan Univ. (上海), “Macroscopic Maxwell equations derived from microscopic nonlocal response theory: Consequence in the quest of left-handed materials” 2007年1月5日

[図書] (計1件)

1. K. Cho, “Reconstruction of macroscopic Maxwell equations: A single susceptibility theory”, Springer Verlag, 2010年9月出版予定

[産業財産権]

○出願状況 (計0件)

○取得状況 (計0件)

[その他]

ホームページ等

<http://www.toyotariken.jp/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

張 紀久夫 (Cho Kikuo)

財団法人豊田理化学研究所・フェロー

研究者番号: 60013489

(2) 研究分担者 なし

(3) 連携研究者 なし