［特別寄稿］　（2012 年 8 月ご執筆記事）

Landau-Lifshitz の単一感受率理論

張 紀久夫（阪大レーザー研）

私はこの新学術領域の研究グループには属していないのですが, メタマテリアルの研究組織作りのために幾度も行われた理研や国際高等研での研究会にはほぼいつも出席していたので, この研究グループに対しては外野と内野の境界線あたりに居て, いろいろな機会に講演をしたり議論に参加したりしています。７月の前半にメタマテリアル関連で Jena の大学を訪ねたのですが、その折の討論を材料にして後日私の頭の中でまとめた考えを萩行先生にお話ししたところ、領域メンバーで関心を持つ人もいるだろうからこのニュースレター欄に書いてみないかとお誘いを頂いた次第です。

その問題とは Landau-Lifshitz (LL) の「連続媒質の電気力学」の中で提唱されている巨視的マクスウェル方程式(M-eqs)の単一構成方程式理論 [1] の位置づけとそこに付け加えられるべき感受率の表式です。微視的 M-eqs は電流密度 $\boldsymbol{J}$ で書きますが、通常の巨視的 M-eqs は $\boldsymbol{P}$ と $\boldsymbol{M}$ を用いて書きます。これらの変数の関係を縦(L)横(T)成分に分けて書くと $\boldsymbol{J}^{(L)} = -i\omega \boldsymbol{P}^{(L)}$ ($\mathrm{div}\, \boldsymbol{J}^{(L)} = i\omega\rho$), $\boldsymbol{J}^{(T)} = -i\omega \boldsymbol{P}^{(T)} + i\, \mathrm{rot}\, \boldsymbol{M}$ となりますが、横成分の式における分け方は一意的でありません。$\boldsymbol{J}$ の縦成分 J(L) には $\boldsymbol{M}$ の寄与は無いので、この非一意性は $\boldsymbol{J}^{(T)}$ だけに関係します。この任意性を考慮すると、巨視的 M-eqs にはいろいろな形が可能になります。

そこで LL は M を変数としては用いず、$J^{(T)} = -i\omega \boldsymbol{P}_{LL}$ で定義される新変数 $\boldsymbol{P}_{LL}$ を用いて巨視的 M-eqs を書くことを提唱しました。この $\boldsymbol{P}_{LL}$ は電気分極だけでなく磁化も含む量で、$D = \varepsilon_0 E + P$, $H = B/\mu_0$ を用いて M-eqs が表現されます。構成方程式は $\boldsymbol{P}_{LL}$ と電磁場 E, H を関係づける１つのベクトル方程式になるはずです。ところが LL は（その後この考えを引き継いだ Keldysh ら[2], Agranovich ら[3]も含めて）この形式における感受率の表式は導いていません。感受率テンソルは１つのはずだから物質変数を１つだけにするという点は理解できるのですが、それが何故電流密度ではなく $\boldsymbol{P}_{LL}$ という奇妙な量なのかは理解に苦しむところです。Landau-Lifshitz の教科書シリーズは一般には評価が高く、そこに書いてあることを多くの人が気にかけているのですが、これから議論する問題についてはその意図や結果があまり読者を納得させるものではないため、改めて論じる必要があると思います。

Jena の F. Schiller 大学の Chipouline は Simovski, Tretyakov とともに(CST)上述の任意性を考慮して、$\boldsymbol{P}$ と $\boldsymbol{M}$ を用いる巨視的 M-eqs には次の３通りの形式

[A] Casimir form：

従来通りの分極 P と 磁化 M および $\boldsymbol{J}^{(T)} = -i\omega \boldsymbol{P}^{(T)} + i\, \mathrm{rot}\, \boldsymbol{M}$ の関係を用いて巨視的 M-eqs を書く。

[B] Landau-Lifshitz form：

M を変数としては用いず、$\boldsymbol{J}^{(T)} = -i\omega\boldsymbol{P}_{LL}$
で定義される新変数 $\boldsymbol{P}_{LL}$ を用いて巨視的 M-eqs を書く。この
$\boldsymbol{P}_{LL}$ は磁化成分も含む。

[C] Anapoleform：

$\boldsymbol{P}$ を変数としては用いず、 $\boldsymbol{J}^{(T)} = \mathrm{rot}\,\boldsymbol{M}_A$ で定義される新変数 $\boldsymbol{M}_A$ を用いて巨視的 M-eqs を書く。この $\boldsymbol{M}_A$ は電気分極成分も含む。

があるとして、その関係を論じています [4]。（ここでは私の判断で CST の議論に手を加えて、分類の指針を $\boldsymbol{J}$ から $\boldsymbol{J}^{(T)}$ に変更してあります。）彼らの議論はメタマテリアルへの応用を念頭にして行われていますが、議論自体は一般の巨視的 M-eqs にも当てはまるべきものです。

上の分類方式に従えば、私の単一感受率理論[5]は

[D] Natural form：

$\boldsymbol{P}, \boldsymbol{M}$ を変数としては用いず、$\boldsymbol{J}^{(T)}$ をそのまま物質変数として使用、

となります。つまり $\boldsymbol{J}^{(T)}$ の扱い方次第で [A], [B], [C], [D] という異なる形式になるわけです。

[A]は通常の巨視的 M-eqs を与えますが、 $\boldsymbol{P}, \boldsymbol{M}$ は独立な変数とみなされるのが普通なので、これは単一感受率理論ではありません。 [B], [C], [D] はどれも単一感受率理論ですが、その感受率の一般形が与えられているのは [D] だけです。[D] ではミクロな M-eqs を最少必要限の変数で書き、正確に定義された物質ハミルトニアンと相互作用から構成方程式を第一原理的に導出し、それに長波長近似を加えてマクロな M-eqs と構成方程式の形を決めます。そこでは $\boldsymbol{P}, \boldsymbol{M}$ を変数として用いないので、CST の言う非一意性は生じません。面白いことにその構成方程式を同値変形して、一見 4 つの感受率を含むような Casimir 形式に書きかえることができますが、それらは近似なしに元の単一感受率の構成方程式に戻すことができます。

単一感受率理論として[B], [C], [D] を考えるとき、(ω , k) Fourier 表示を用いると、それらの関係は案外簡単です。即ち、$\boldsymbol{P}_{LL}^{(T)} = (i/\omega)\,\boldsymbol{J}^{(T)}$, $\boldsymbol{M}_A = (-i/k^2)\,\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{J}^{(T)}$ となるので、$\boldsymbol{J}^{(T)}$ がわかれば $\boldsymbol{P}_{LL}$ も $\boldsymbol{M}_A$ も直ちに求められる量であることが分かります。即ち、$\boldsymbol{J}^{(T)}$ に対する構成方程式が与えられればそれに i/ω や $(-i/k^2)\,\boldsymbol{k}\times$ という因子を乗ずれば、[B], [C] の構成方程式になる、というわけです。それぞれの場合の構成方程式を考えるとき（縦成分には非一意性が無いため）横成分だけを対象にすればよいので、[A] では $\boldsymbol{P}_{LL}^{(T)}$ と $\boldsymbol{M}$、[B] では $\boldsymbol{P}_{LL}$、[C] では $\boldsymbol{M}_A$、 [D] では $\boldsymbol{J}^{(T)}$、 を電磁場でどのように表すかを問題にすればいいわけです。電磁分極の源となる電磁場はどの場合にも $\boldsymbol{E}, \boldsymbol{B}$ と考えればいいので、これを一つのベクトルで表すには [D] のように（クーロンゲージの）ベクトルポテンシャルと外部縦電場の和 $[\boldsymbol{A} + (1/i\omega)\,\boldsymbol{E}_{extL}]$ を源の電磁場とするのが素直な定義です。（内部電荷の作る縦電場を源の電場に含めないのは、それが内部電荷の間のクーロンポテンシャルとして物質ハミルトニアンの中に含め

てあるからです。）ミクロな構成方程式を導く段階にも、更にそれを長波長近似する段階にも $\boldsymbol{P}$ と $\boldsymbol{M}$ を用いる必要はないので、[D] の方法と結果をそのまま用いれば良いことが分かります。

このように考えると、各形式における構成方程式は、[D]の構成方程式

$$\boldsymbol{J}(k,\omega) = \chi_{em}(k,\omega)\,[\boldsymbol{A}(k,\omega) + (1/i\omega)\,\boldsymbol{E}_{extL}(k,\omega)]$$

に上述の因子, i/ω や $(-i/k^2)\ \boldsymbol{k}\times$, を乗じて左辺の量を $\boldsymbol{P}_{LL}$ や $\boldsymbol{M}_A$ に書きなおすだけでよいことが分かります。どの形式においても $\boldsymbol{P}^{(T)}$ や $\boldsymbol{M}$ を $\boldsymbol{J}^{(T)}$ で書きなおせば、
[D] と同じ M-eqs になり、$\boldsymbol{J}$ で書いた構成方程式はどれも [D] の場合と同じになるので、分散方程式は [D] で与えられた

$$\det|[k^2 - (\omega/c)^2]\,1 - \mu_0\ \chi_{em}^{(T)}(k,\ \omega)| = 0$$

と同じになります。

結局、これらの議論を通してわかることは、ミクロな議論にも、マクロな議論にも、M-eqs の表し方だけでなく、ハミルトニアンの定義や構成方程式の計算等のすべての局面で、[D] における変数の選択が最も簡単かつ物理的に意味があるものになっているということです。LL が $\boldsymbol{P}_{LL}$ という奇妙な量を（物理的意味の明らかな）電流密度の代りに用いたことの意味は何であったのか、歴史的に初めて現れた M-eqs が $\boldsymbol{J}$ ではなく $\boldsymbol{P}, \boldsymbol{M}$ で書かれていたためか、$\boldsymbol{J}$ より $\boldsymbol{P}$, $\boldsymbol{M}$ を基本的な物理量とする考え方が背景にあったためか、などと推測するしかありませんが、歴史的事情を御存じの方があったら教えてください。

CST のグループと接触するようになったのは Barcellona の Metamaterials 2011 で
彼らが Theoretical Foundations for Homogenization Theories という Discussion Forum を主催した時に私も参加して [D] の考え方を講演したのが始まりです。この業界にもこういった基礎的な問題に目を向けているグループがあることを知って心強く思い、
関係を強化しておく必要を感じています。(CST のプレプリントの最初の部分には日ごろ私が主張していることとよく似たことが書いてあります。）

ただ相違点もあって、（この新学術領域での議論でも感じることですが）メタマテリアルだけを念頭に置いている人たちは「量子力学は要らない」と思っているらしいということです。金属製のメタ原子だけをメタマテリアルと呼ぶ限定的定義ならばそれも許されるかも
しれませんが、一般にメタ原子は人工物質ならいいわけで、半導体の量子ワイヤーや量子ドットなども考えようとすると、その共鳴振動数を量子論なしに求めることはできないでしょう。メタマテリアル専用の巨視化理論（Homogenization）があるというならば、それがもっと一般の系に対する巨視化理論とどういう関係になっているかを示す必要があるはずで、それには物質の量子力学的取り扱いを回避する道は無いと思います。

References

[1] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Electrodynamics of Continuous Media,* (Pergamon Press, Oxford, 1960)

[2] Yu. A. Il'inskii and L. V. Keldysh, *Electromagnetic Response of Material Media* , (Plenum Press, New York, 1994)

[3] V. M. Agranovich and V. L. Ginzburg, *Crystal optics with Spatial Dispersion, and Excitons*,　(Springer Verlag, Berlin Heidelberg 1984, Sec.6)

[4] A. Chipouline, K. Simovski, and S. Tretyakov,　*Basics of averaging of the Maxwell equations for bulk materials*, arXiv 1205:2853

[5] K. Cho, *Reconstruction of Macroscopic Maxwell Equations：A single Susuceptibility Theory*, (Springer Verlag, Heidelberg, 2010)