巨視的 Maxwell 方程式の再構築

張　紀久夫
豊田理化学研究所

Reconstruction of macroscopic Maxwell equations

Kikuo Cho
Toyota Physical and Chemical Research Institute

Abstract: A new derivation of macroscopic Maxwell eqs. is made via the long wavelength approximation of microscopic nonlocal response. The new macroscopic equation has the same form as the microscopic one, and needs only one susceptibility tensor relating current density and vector potential. This susceptibility contains all the contributions of electric and magnetic polarizations with their mutual interference. In the absence of chiral symmetry, this new scheme reduces to the conventional one with $\{\epsilon, \mu\}$. The Drude-Born-Fedorov constitutive equations for chiral substances is not consistent with the present result.

1 従来形式における問題点

Maxwell 方程式 (M-eqs) には微視的な形と巨視的な形の 2 つがある．微視的 M-eqs は電場 $\boldsymbol{E}$ と磁場（磁束密度 ） $\boldsymbol{B}$ を電荷密度 ρ と電流密度 $\boldsymbol{J}$ から定める方程式のセットで

$$\nabla \cdot \boldsymbol{E} = 4\pi\rho, \quad \nabla \cdot \boldsymbol{B} = 0, \quad \nabla \times \boldsymbol{B} = \frac{4\pi}{c}\boldsymbol{J} + \frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{E}}{\partial t}, \quad \nabla \times \boldsymbol{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t} \tag{1}$$

という形をしている． ρ と $\boldsymbol{J}$ は（電荷の保存則を表す）連続方程式

$$\nabla \cdot \boldsymbol{J} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \tag{2}$$

を満たす．一方，巨視的 M-eqs は電気分極 $\boldsymbol{P}$ と磁気分極 $\boldsymbol{M}$ を電場と磁場に繰り込んだ新しい変数 $\boldsymbol{D} = \boldsymbol{E} + 4\pi\boldsymbol{P}$ および $\boldsymbol{H} = \boldsymbol{B} - 4\pi\boldsymbol{M}$ を用いて

$$\nabla \cdot \boldsymbol{D} = 4\pi\rho_{\mathrm{t}}, \quad \nabla \cdot \boldsymbol{B} = 0, \quad \nabla \times \boldsymbol{H} = \frac{4\pi}{c}\boldsymbol{J}_{\mathrm{c}} + \frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{D}}{\partial t}, \quad \nabla \times \boldsymbol{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t} \tag{3}$$

という形に書かれる．ρ_{t} は真電荷密度，$\boldsymbol{J}_{\mathrm{c}}$ はその運動による電流密度である．

歴史的には量子力学も相対論も無い時代に巨視的な形が現象論として先に提案され，20 世紀になって物質の粒子像が確立されるとともに微視的な形が正しく導出されたという経緯がある [1]．微視的 M-eqs の論理的完全性は量子力学や相対論と組み合わされて，物理学の中でも最も精密な理論である量子電磁気学（Q E D）にまで高められた．その後，物質の見方としては粒子像の方が基本的と考える立場から，微視的な形を基にして巨視的な形を導出しようという多くの試みがなされてきた．その標準的な手続きは ρ と $\boldsymbol{J}$ を

$$\rho = \rho_{\mathrm{t}} + \rho_{\mathrm{p}} \ , \quad \rho_{\mathrm{p}} = -\nabla \cdot \boldsymbol{P} \ , \quad \boldsymbol{J} = \boldsymbol{J}_{\mathrm{c}} + c\ \nabla \times \boldsymbol{M} + \frac{\partial \boldsymbol{P}}{\partial t} \tag{4}$$

のように異なる成分の和に分けることである． ρ_{p} は分極電荷密度であり，全空間で積分すればゼロになるような（全体としては電気的に中性の）電荷密度である．真電荷密度 ρ_{t} は帯電している物質の場合にだけ存在する電荷密度である．また， $\partial \boldsymbol{P}/\partial t$ と $c\ \nabla \times \boldsymbol{M}$ はそれぞれ電気・磁気分

極によって誘起される電流密度である．$\boldsymbol{J}_{\mathrm{c}}$ と ρ_{t} は (2) と同様な連続方程式を満たす．このような置き換えをするもとになっている考えは，巨視的に平均化された物質を記述する基礎変数は電気・磁気分極であるという認識である．実際，(4) を微視的 M-eqs に代入して整理すれば巨視的 M-eqs になる．$\boldsymbol{P}$ は $\boldsymbol{E}$ により，$\boldsymbol{M}$ は $\boldsymbol{H}$ によって誘起されると考え，その関係を表す構成方程式から電気・磁気感受率が定義される．線形応答では $\boldsymbol{P}=\chi_{\mathrm{e}}\boldsymbol{E}$，$\boldsymbol{M}=\chi_{\mathrm{m}}\boldsymbol{H}$ より電気・磁気感受率 $\chi_{\mathrm{e}},\chi_{\mathrm{m}}$ が，更に $\epsilon=1+4\pi\chi_{\mathrm{e}}$，$\mu=1+4\pi\chi_{\mathrm{m}}$ より誘電率・透磁率が定義される．

巨視的 M-eqs は誘電率・透磁率を物質定数として扱うことにより，巨視的媒質の電磁応答を計算する確実な数学的手法を与えたことで，非常に大きな成功を収めてきた．物性物理的な世界の大部分が電子の電磁気学・量子力学・統計力学で成り立っていることを考えると，２０世紀におけるその大発展を支えた柱のひとつが巨視的 M-eqs であったことは明らかである．しかしながら，その長い成功の歴史にも拘わらず，巨視的 M-eqs を微視的 M-eqs から導出する過程は不完全にしか行われてこなかったと判断される「理論の一意性やつじつまに関する２種類の問題」がある．その第一は，(4) のような分割が一意的に行えるという保証がないことであり，その第二は，なぜ微視的 M-eqs と巨視的 M-eqs の間では必要な構成方程式の数が違うのかという疑問がある．これは微視的 M-eqs をベクトルポテンシャル ($\boldsymbol{A}$)，スカラーポテンシャル (ϕ) で書いてみればすぐ分かるように，微視的応答では電流密度と $\boldsymbol{A}$ の間の構成方程式が１つ決まれば十分であるのに対して，巨視的 M-eqs では $\boldsymbol{P}$ と $\boldsymbol{E}$ の関係および $\boldsymbol{M}$ と $\boldsymbol{H}$ の関係を決める必要があるのは何故かという問題である [2]．微視的 M-eqs から巨視的 M-eqs を導く際に用いる巨視的平均化という操作が同時に構成方程式の数の増加を必要とするかどうかは自明ではない．言い換えれば，微視的には $\boldsymbol{J}$ というベクトル場１つで済んでいる物質の基礎変数を巨視的には $\boldsymbol{P}$ と $\boldsymbol{M}$ という２つのベクトル変数に増やさなければならないのは何故か，という疑問である．この他にもスピンおよび軌道に関する磁気双極子遷移を統一的に含む μ の表式が知られていないという問題もある [3]．巨視的 M-eqs が今でも多くの研究分野（フォトニック結晶 [4], 左手系物質 [5], 近接場光学 [6] など）で主要な道具になっていることと，物理教育の基礎科目としての重要性を考えると，巨視的 M-eqs に論理的不完全性があるかもしれないということは，研究者，教師，学生にとって見過ごせないはずである．

2　微視的応答理論の長波長近似

微視的 M-eqs から巨視的 M-eqs を導く議論をしている電磁気学の教科書は [8, 9, 10] などたくさんあるが，上に述べた疑問について答えているものは筆者の知る限り存在しない．信頼できる答えを得るためにはミクロな応答理論に基づいたあいまいさの無い議論が必要である．そのために，ここでは物質（荷電粒子系）と電磁場の相互作用系に対する一般的なラグランジアンを用いる．

$$\mathcal{L}=\sum_{\ell}\{\frac{1}{2}m_{\ell}v_{\ell}^{2}-e_{\ell}\phi(\boldsymbol{r}_{\ell})+\frac{e_{\ell}}{c}\boldsymbol{v}_{\ell}\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}_{\ell})\}+\int\mathrm{d}\boldsymbol{r}\ \frac{1}{8\pi}\{(\frac{1}{c}\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial t}+\nabla\phi)^{2}-(\nabla\times\boldsymbol{A})^{2}\}\ , \qquad (5)$$

ここで，$e_{\ell},\boldsymbol{r}_{\ell}$ および $\boldsymbol{v}_{\ell}$ はそれぞれ ℓ 番目の粒子の電荷，座標，および速度である．このラグランジアンによる最小作用の原理から「微視的 M-eqs」と「ローレンツ力の下で運動する荷電粒子のニュートン運動方程式」が導かれることが知られており，議論の出発点として十分信頼できるものである．このラグランジアンから導かれる「電磁場中の荷電粒子系」のハミルトニアンは（クーロンゲージで）

$$H_{\mathrm{M}}=\sum_{\ell}\frac{1}{2m_{\ell}}\left\{\boldsymbol{p}_{\ell}-\frac{e_{\ell}}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}_{\ell})\right\}^{2}+\frac{1}{2}\sum\sum_{\ell\neq\ell'}\frac{e_{\ell}e_{\ell'}}{|\boldsymbol{r}_{\ell}-\boldsymbol{r}_{\ell'}|} \qquad (6)$$

である．荷電粒子間のクーロンポテンシャルはスカラーポテンシャル ϕ に関連する項（物質との相互作用＋縦の場の自己エネルギー）の総和として導かれる．このハミルトニアンに自由な電磁場のハミルトニアンを加えると，電磁場と物質の非相対論的なハミルトニアンとして完全に一般的なものになる．さらに必要ならば，スピン軌道相互作用，スピンゼーマン相互作用，質量速度の項，ダーウィン項などの相対論的補正項を加える．

感受率の計算に必要な電磁場と物質の相互作用は上記ハミルトニアンの２乗の項を展開したときの $\boldsymbol{A}$ に依存する項である．以下では線形応答を考えるのでそのうちの $\boldsymbol{A}$ 線形項をとれば

$$H'_{\rm int} = -\frac{1}{c} \int {\rm d}\boldsymbol{r}\ \boldsymbol{J}(\boldsymbol{r}) \cdot \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t) \tag{7}$$

となる．ここで $\boldsymbol{J}$ は電流密度の演算子 $\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r}) = \sum_\ell\ e_\ell\ \boldsymbol{v}_\ell\ \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_\ell)$ である．相対論的補正が必要なときには上記の $H'_{\rm int}$ にスピンゼーマン項を部分積分により変形した

$$H_{\rm sZ} = -\int {\rm d}\boldsymbol{r}\ \boldsymbol{M}_{\rm spin}(\boldsymbol{r}) \cdot \boldsymbol{B}(\boldsymbol{r}) = -\frac{1}{c}\int {\rm d}\boldsymbol{r}\ \boldsymbol{J}_{\rm spin}(\boldsymbol{r}) \cdot \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\ , \tag{8}$$

を加える ($\boldsymbol{B} = \nabla \times \boldsymbol{A}$)．ここで $\boldsymbol{M}_{\rm spin}(\boldsymbol{r})$ はスピン磁化密度

$$\boldsymbol{M}_{\rm spin}(\boldsymbol{r}) = \sum_\ell \beta_\ell \boldsymbol{s}_\ell\ \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_\ell) \tag{9}$$

（スピン $\boldsymbol{s}_\ell$ をもつ ℓ 番目の粒子の磁気能率が $\beta_\ell \boldsymbol{s}_\ell$ ）であり，それによって誘起される電流密度が

$$\boldsymbol{J}_{\rm spin}(\boldsymbol{r}) = c\nabla \times \boldsymbol{M}_{\rm spin}(\boldsymbol{r}) \tag{10}$$

である．スピンゼーマン項 (8) は (7) と同じ形をしているので，スピンの寄与も含めた物質全体の電流密度と電磁場の相互作用は，(7) において $\boldsymbol{J}$ を $\boldsymbol{I} = \boldsymbol{J} + \boldsymbol{J}_{\rm spin}$ で置き換えることにより一括して表される．この場合の物質のハミルトニアンは (6) で $\boldsymbol{A} = 0$ としたものに相対論的補正項の残りを加えたものである．このようにして，感受率を計算するための物質ハミルトニアンと相互作用項の一般形が用意されたことになる．

$H'_{\rm int}$ を相互作用とする摂動計算により，誘起電流密度 $\tilde{\boldsymbol{I}}(\boldsymbol{r},\omega)$ の $\boldsymbol{A}$ に線形な部分は（絶対０度の場合）$\tilde{\boldsymbol{I}}(\boldsymbol{r},\omega) = \int {\rm d}\boldsymbol{r}' \chi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega) \cdot \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}',\omega)$ のように与えられる [7]．ここで

$$\chi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';\omega) = \frac{1}{c}\sum_\nu \left[g_\nu(\omega)\boldsymbol{I}_{0\nu}(\boldsymbol{r})\boldsymbol{I}_{\nu 0}(\boldsymbol{r}') + h_\nu(\omega)\boldsymbol{I}_{0\nu}(\boldsymbol{r}')\boldsymbol{I}_{\nu 0}(\boldsymbol{r})\right]\ , \tag{11}$$

は微視的な感受率を表すが，因子 g, h は

$$g_\nu(\omega) = \frac{1}{E_{\nu 0} - \hbar\omega - i0^+} - \frac{1}{E_{\nu 0}}\ , \quad h_\nu(\omega) = \frac{1}{E_{\nu 0} + \hbar\omega + i0^+} - \frac{1}{E_{\nu 0}}\ , \tag{12}$$

のように与えられる．$\boldsymbol{I}_{\nu\mu}(\boldsymbol{r})$ は $\boldsymbol{I}$ の行列要素， $E_{\nu 0}$ は物質の励起エネルギーである．g_ν, h_ν の中の $1/E_{\nu 0}$ の項は誘起電流密度のうち基底状態の電荷密度に比例する部分を長波長近似で書き換えたものである [7].

誘起電流密度の表式を微視的 M-eqs に代入すると，微視的応答を決めるための微積分方程式が得られる．この際積分核の役割を持つ感受率 $\chi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';\omega)$ が一般に分離型であるため，この微積分方程式は連立線型方程式に書き換えられて扱いが極めて容易になる．このような理論は微視的非局所応答理論として詳しく研究され，非線形応答も含めたさまざまな応用例と共に [7] にまとめられている．ここではその新しい応用として，巨視的 M-eqs を導出するための確かな出発点として利用する．

電磁応答の巨視的な描像が成り立つ条件下では，電磁場・電流密度の応答は空間的に緩やかに変化するので， $\boldsymbol{A}$ や $\boldsymbol{I}$ を表すのに点 $\bar{\boldsymbol{r}}$ の周りでテイラー展開して初めの１，２項を取れば十分であろう．これを誘起電流密度の $(\boldsymbol{k},\omega)$ フーリエ成分に対して行うと $\bar{\boldsymbol{I}}(\boldsymbol{k},\omega)=\bar{\chi}_{\rm em}(\boldsymbol{k},\omega)\ \cdot\ \boldsymbol{A}(\boldsymbol{k},\omega)$ を得るが，ここに現れる巨視的感受率は

$$\begin{aligned}\bar{\chi}_{\rm em}(\boldsymbol{k},\omega) &= \sum_{\nu}\frac{N_\nu}{c}\ [g_\nu(\omega)(\bar{\boldsymbol{I}}_{0\nu}-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{Q}_{0\nu})(\bar{\boldsymbol{I}}_{\nu 0}+i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{Q}_{\nu 0}) \\ &+ h_\nu(\omega)(\bar{\boldsymbol{I}}_{\nu 0}-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{Q}_{\nu 0})(\bar{\boldsymbol{I}}_{0\nu}+i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{Q}_{0\nu})]\end{aligned} \tag{13}$$

のように与えられる．導出の詳細は [3] に示してある．この中の行列要素 $\bar{\boldsymbol{I}}_{\mu\nu}$ および $\boldsymbol{Q}_{\mu\nu}$ は $\bar{\boldsymbol{I}}_{\mu\nu}=\int {\rm d}\boldsymbol{r}\ \boldsymbol{I}_{\mu\nu}(\boldsymbol{r})$， $\boldsymbol{Q}_{\mu\nu}=\int {\rm d}\boldsymbol{r}\ (\boldsymbol{r}-\bar{\boldsymbol{r}})\ \boldsymbol{I}_{\mu\nu}(\boldsymbol{r})$ と定義されており，それぞれ各遷移の電気双極子および磁気双極子（＋電気４重極子）能率を表す．Taylor 展開の中心座標 $\bar{\boldsymbol{r}}$ はこれらの双極子能率や４重極子能率が物理的に適当な定義となるように各遷移ごとに（例えば各不純物原子の中心などに）選ぶ．N_ν は同種の遷移の空間濃度（例えば同種不純物原子の濃度）である．

ここで得られた巨視的感受率 $\bar{\chi}_{\rm em}(\boldsymbol{k},\omega)$ は電気分極（電気双極子）と磁気分極（磁気双極子) の寄与を同時に，分離し難い形で含んでいる．物質の対称性が低い場合を考えると，電気双極子遷移と磁気双極子遷移は混じり合うから，上記の感受率における $\boldsymbol{k}$ 線形項は生き残る．このような対称性は chiral symmetry と呼ばれ,(外因性・真因性の）時間反転・空間反転対称性の破れによって生じる．chiral 対称性がなければ電気・磁気双極子遷移は混じり合わないので，$\boldsymbol{k}$ 線形項は消える．この場合， ν の和を２つのグループに分けて $(c/\omega^2)\bar{\chi}_{\rm em}=\bar{\chi}_{\rm e}+\bar{\chi}_{\rm m}$， と書くことができる．ここで $\bar{\chi}_{\rm e}$ と $\bar{\chi}_{\rm m}$ はそれぞれ電気，磁気双極子活性な ν についての部分和

$$\bar{\chi}_{\rm e} = \sum_{\nu({\rm e})}\frac{N_\nu}{\omega^2}\ (g_\nu(\omega)+h_\nu(\omega))\ \ \bar{\boldsymbol{I}}_{0\nu}\bar{\boldsymbol{I}}_{\nu 0} \tag{14}$$

$$\bar{\chi}_{\rm m} = \sum_{\nu({\rm m})}\frac{N_\nu}{\omega^2}\ (g_\nu(\omega)+h_\nu(\omega))\ \ (\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{Q}_{0\nu})\ (\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{Q}_{\nu 0}) \tag{15}$$

である．これが電気・磁気感受率（誘電率・透磁率）を定義できる場合に相当するが，$\{\bar{\chi}_{\rm e}$ と $\bar{\chi}_{\rm m}\}$ がどのように $\{\chi_{\rm e}$ と $\chi_{\rm m}\}$ に関係付けられるかは次の分散関係の議論から示される．

3　平面波の分散関係

ここで求めた巨視的な構成方程式を用いると，平面波の分散関係として（chiral, achiral の両方の場合を含めて） $(ck/\omega)^2=1+(4\pi c/\omega^2)\ \bar{\chi}_{\rm em}$ を得る．これは従来の巨視的 M-eqs における分散関係 $(ck/\omega)^2=\epsilon\mu$ より一般的な場合を含んだ結果である．chiral 対称でない場合には，両者は一致すると期待されるが，電気・磁気分極の効果が和で現れるか積で現れるかという点で，違っているように見える．しかしこの見かけ上の違いは磁気感受率の定義に起因していることが以下のようにして示される．

重要なキーポイントは，透磁率 μ が $\boldsymbol{M}=\chi_{\rm B}\boldsymbol{B}$ で定義される磁気感受率 $\chi_{\rm B}$ によって $\mu=1/(1-4\pi\chi_{\rm B})$ と書かれることである．すでに第一原理的な立場から議論したように，物質と電磁場の相互作用は (7) で与えられているので，相互作用を記述している磁場変数は $\boldsymbol{H}$ ではなく $\boldsymbol{B}$ である．従って磁気励起のエネルギーを極に持つような線形応答係数は $\boldsymbol{M}=\chi_{\rm m}\boldsymbol{H}$ で定義される $\chi_{\rm m}$ ではなく $\chi_{\rm B}$ である．この点をきちんと示すには次のようにする．ラグランジアンに任意の関数の時間全微分を加えても最小作用の原理には影響が無いので，上で考えた電磁場と荷電粒子系のラグランジアンに次の時間全微分項を加える [11, 12, 13].

$$F(t)=-\frac{{\rm d}}{{\rm d}t}\frac{1}{c}\int{\rm d}\boldsymbol{r}\ \boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{A} \tag{16}$$

この項の新しいハミルトニアンへの寄与は $(1/c)\int \dot{\boldsymbol{P}}\cdot\boldsymbol{A}\mathrm{d}\boldsymbol{r}+(1/c)\int \boldsymbol{P}\cdot\dot{\boldsymbol{A}}\mathrm{d}\boldsymbol{r}$ であるが，これを相互作用項 (7) に加えると，

$$H_{\rm int} = -\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}\ \{\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{E}_{\rm T}+\boldsymbol{M}\cdot\boldsymbol{B}\} \tag{17}$$

という新しい相互作用項の形が得られるので，磁気的相互作用項は $\boldsymbol{B}$ で書かれていることがわかる．対称性が高くて電気・磁気双極子遷移が混じらないときには，$\boldsymbol{E}$ は $\boldsymbol{P}$ だけを，$\boldsymbol{B}$ は $\boldsymbol{M}$ だけを誘起するので，誘起磁化として $\boldsymbol{B}$ だけに比例するもの $\boldsymbol{M}=\chi_{\rm B}\boldsymbol{B}$ が定義できる．$\mu=1/(1-4\pi\chi_{\rm B})$ を分散関係 $(ck/\omega)^2=\epsilon\mu$ に代入し整理すると

$$(\frac{ck}{\omega})^2 = 1+4\pi\chi_{\rm e}+4\pi(\frac{ck}{\omega})^2\chi_{\rm B} \tag{18}$$

となるが，ここでは電気・磁気遷移の寄与が和で表されており，$(ck/\omega)^2=1+(4\pi c/\omega^2)\bar{\chi}_{\rm em}$ を簡単化した場合の $(c/\omega^2)\bar{\chi}_{\rm em}=\bar{\chi}_{\rm e}+\bar{\chi}_{\rm m}$ と同じであることがわかる．各感受率の間の関係は $\boldsymbol{J}=\partial\boldsymbol{P}/\partial t+c\nabla\times\boldsymbol{M}=-i\omega\chi_{\rm e}\boldsymbol{E}+ic\boldsymbol{k}\times\chi_{\rm B}\boldsymbol{B}$ から $\chi_{\rm e}=\bar{\chi}_{\rm e}$ および $\chi_{\rm B}=(\omega/ck)^2\bar{\chi}_{\rm m}$ のように求められる．($\chi_{\rm m}=\chi_{\rm B}/(1-4\pi\chi_{\rm B})$)

chiral 対称の物質を扱う現象論として，Drude-Born-Fedorov (DBF) 方程式 [14, 15] という構成方程式

$$\boldsymbol{D}=\epsilon(\boldsymbol{E}+\beta\nabla\times\boldsymbol{E}),\ \ \boldsymbol{B}=\mu(\boldsymbol{H}+\beta\nabla\times\boldsymbol{H})\ . \tag{19}$$

が知られている．β は chiral admittance と呼ばれる第３の感受率である．これは一様で等方的な場合の形であるが，この場合の分散関係は簡単に求められて

$$(\frac{ck}{\omega})^2=\epsilon\mu\ (1\pm\frac{\beta\omega}{c}\sqrt{\epsilon\mu})^{-2}\ . \tag{20}$$

という形になる．この結果は新しく得られた分散関係の一般式 $(ck/\omega)^2=1+(4\pi c/\omega^2)\bar{\chi}_{\rm em}$ とは右辺の ω 依存性が本質的に違っている．$\bar{\chi}_{\rm em}$ が１位の極の重ねあわせであるのに対して，(20) の右辺は高次の極を持つのと同時に物質励起エネルギーからずれた極も持つ形になっていて，線形応答の計算結果からは許容しがたい形になっている．その意味で，DBF 方程式は現象論に留まる理論で，第一原理から導出できるものではないことがわかる．

上の結果から，新しい方法で得た M-eqs は従来のものより一般性があることがわかる．要点をまとめると以下の通りである．

a) 上記の一般的な方法で得られる巨視的 Maxwell 方程式は ϵ および μ を用いる伝統的な $\{\boldsymbol{E}$, $\boldsymbol{B}$, $\boldsymbol{D}$, $\boldsymbol{H}\}$ 形式より一般性がある．電気・磁気双極子遷移が混じらない高い対称性の場合は両者が一致する．

b) 電磁場と電荷・電流密度の長波長成分を関係付ける巨視的方程式は微視的な方程式と同じ形 $(-\omega^2/c^2+k^2)\boldsymbol{A}(\boldsymbol{k},\omega)=(4\pi/c)\boldsymbol{I}_{\rm T}(\boldsymbol{k},\omega)$ で，違うのは構成方程式の形である．

c) 構成方程式は微視的 M-eqs の場合と同様に１つだけで，$\boldsymbol{I}(\boldsymbol{k},\omega)=\bar{\chi}_{\rm em}(\boldsymbol{k},\omega)\boldsymbol{A}(\boldsymbol{k},\omega)$ と書ける．感受率 $\bar{\chi}_{\rm em}$ は電気・磁気分極の寄与を干渉効果まで含めて表している．$\{\boldsymbol{E},\boldsymbol{D},\boldsymbol{B},\boldsymbol{H}\}$ 方式の場合に２つの構成方程式が必要なこととは対照的である．

d) 電流密度を電気・磁気分極により誘起される成分に分けないので，分ける際の一意性欠如という問題は生じない．

e) 平面波の分散関係は $(ck)^2/\omega^2=1+(4\pi c/\ \omega^2)\bar{\chi}_{\rm em}$ と与えられるが，対称性が高い系 (achiral 対称) では従来から知られた形 $(ck)^2/\omega^2=\epsilon\mu$ に帰着する．

f) achiral 対称の場合には電気・磁気感受率が定義できるが，その場合，磁気的励起に対する線形感受率は $\chi_{\rm B}$ であって $\chi_{\rm m}$ ではない（$\chi_{\rm m} = \chi_{\rm B}/(1 - 4\pi\chi_{\rm B})$）.

g) 上記の場合，電気・磁気感受率は独立な量ではない．この場合にだけきちんと定義できる $\chi_{\rm e}$ と $\chi_{\rm B}$ は微視的感受率を長波長近似でテイラー展開するときの第１項，第２項に対応している.

h) chiral 対称の物質を記述する DBF 方程式は現象論であって，第一原理から導出できる構成方程式ではない.

参考文献

[1] H. A. Lorentz, *The Theory of Electrons*, Teubner, Leipzig 1916

[2] K. Cho, *Proc. 28th Int. Conf. on Physics of Semiconductors*, Wien, July 2006, in print

[3] K. Cho, cond-mat/0611235

[4] K. Inoue and K. Ohtaka, *Photonic Crytals*, Springer Verlag, Heidelberg 2004

[5] V. G. Veselago, Soviet Phys. Uspekh **10** (1968) 509; S. A. Ramakrishna, Rep. Prog. Phys. **68** (2005) 449

[6] M. Ohtsu and H. Hori, *Near Field Nano-optics*, Springer Verlag, Heidelberg 1999

[7] K. Cho, *Optical Response of Nano-structures: Microscopic Nonlocal Theory*, (Springer Verlag, Heidelberg 2003); Errata, Web site of Springer Verlag for this book;
張紀久夫：ナノ構造物質の光学応答理論，シュプリンガー東京 2004 （上記の日本語版，英語版の誤植リストを含む）

[8] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Electromagnetics of Continuous Media*, Pergamon Press, Oxford, 1960

[9] J. H. van Vleck, Theory of Electric and Magnetic Susceptibilities, Oxford University Press, 1932

[10] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*, Third Ed., J. Wiley & Sons, New York 1999

[11] C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc, and G. Grynberg, *Photons and Atoms*, (Wiley Interscience, New York 1989), Sec. IV.C

[12] E. A. Power and S. Zienau, Philos. Trans. Roy. Soc. **A251** (1959) 427

[13] R. G. Woolley, Proc. Roy. Soc. Lond. **A321** (1971) 557

[14] P. Drude, *Lehrbuch der Optik*, Leipzig, 1900; M. Born, *Optik*, Heidelberg, 1972; F. I. Fedorov, Opt. Spectrosc. **6** (1959) 49; ibid. **6** (1959) 237

[15] e.g., Y. B. Band, *Light and Matter*, Wiley 2006, p. 142