博士論文

自己相似構造における光パルスの伝搬

遠藤理平

平成23年

謝辞

本研究と博士論文の作成について，また博士課程の再入学から2年間指導してくださった齋藤理一郎教授に心からお礼の言葉を申し上げます．本研究の基礎となる，準結晶，準周期系の電子状態の初歩から多くを指導してくださった，以前の指導教員である新関駒二郎博士，並びに藤田伸尚博士に深く感謝いたします．日常的に議論をしてくださった大野誠吾博士に深く感謝いたします．本博士論文を審査してくださった吉澤雅幸教授, 石原照也教授, 倉本義夫教授, 川勝年洋教授に深く感謝いたします．煩雑な事務作業をしてくださった秘書の隅野節子様，若生洋子様，鹿野真澄様に深く感謝いたします．本研究を支援くださったグローバル COE に深く感謝いたします.

最後に，本研究を精神的，経済的に支えてくださった有限会社 FIELD AND NETWORK 並びに，特定非営利活動法人 natural science の皆様，そして，私の家族に感謝いたします.

概要

光パルスの伝搬速度を自在に制御することは，次世代の光通信や光集積回路などを開発する上で必要不可欠の技術である．光パルスの伝搬速度の制御は，屈折率の異なる媒質を周期的に配置したフォトニック結晶と呼ばれる構造によって実現できることが知られている．フォトニック結晶中の光は，半導体中の電子と同様，結晶内での波数と角振動数との関係をである分散関係を満たす．従って，特定の周波数帯の光が透過するフォトニックバンドと，光が減衰するフォトニックバンドギャップが存在する．また分散関係の微分で与えられる群速度は，光のエネルギーがフォトニックバンドの端に近いほど分散関係の傾きが小さくなるため小さくなる．特にバンド端では群速度は0となる．

しかしながら，実際に設計されるフォトニックバンド端の周波数の光を用いた光遅延素子は結晶サイズが有限であるため，光パルスはたとえフォトニックバンド端であっても有限の伝搬速度で伝わる．つまり，従来の群速度の概念だけでは，より精密な光回路の設計を行う際に正確な伝搬速度を定義することができない．驚くべきことに，有限サイズの結晶における伝搬速度を理論的に解析する研究が，重要であるにもかかわらず行われていなかった．

本研究ではまず有限系における伝搬速度の表式を得るため，光パルスが結晶サイズ L の結晶に入射されてから透過するまでの時間を横断時間 τ と定義した．この τ の L 依存性を転送行列法を用いて導いた．光の中心周波数として光パルスを減衰させずに最大の遅延効果が期待できる，フォトニックバンド端近傍に存在する共鳴状態（透過率 $T=1$）に対して，横断時間 τ の L 依存性を導出した．さらに，周期型よりも大きな遅延効果が期待できる自己相似型構造（フラクタル）をもつフォトニック結晶の光遅延素子としての有効性について考察した．その結果，次のことが明らかになった．

(1)$v_t \equiv L/\tau$ で定義できる光パルスの伝搬速度 v_t は，フォトニック結晶の構造にかかわらず，群速度 v_g と大小関係 $v_t \geq v_g$ を満たし，特に $T=1$（共鳴状態) のときに v_t の下限である等号（$v_t = v_g$）となることを示した．つまり，結晶サイズ L における光パルスの伝搬速度 v_t は，バンド端に最も近い共鳴状態であるとき最も遅くなることを意味し，光遅延素子としては都合が良いことを意味する．

(2) 周期型フォトニック結晶では，横断時間 τ と結晶サイズ L の関係が，結晶を構成する媒質の屈折率に依らず $\tau \propto L^3$ となることを解析的に示した．これは，結晶サイズを 10 倍にすると横断時間は 1000 倍（伝搬速度は 1/100 倍）となることを意味している．

(3) 自己相似型フォトニック結晶では，横断時間と結晶サイズの関係が $\tau \propto L^\beta$ $(\beta > 3)$ と

なり，このときべき β は多層膜を構成する屈折率に依存することを解析的に示した．この結果は階層性をもつ多重反射によって，自己相似的な多層膜は周期型よりも大きな遅延効果があることを意味する．さらに，べき β を屈折率によって変化させられるということは，屈折率を変えても $\beta = 3$ と変化しない周期型と比べて光遅延素子の設計をより柔軟にできる利点があると考えられる．

(4) さらに，β の値はフォトニック結晶の構造と入射波の波数で一意に決まる局所次元 α と呼ばれるパラメータを用いて，$\beta = \frac{3}{2\alpha}$ と表されることを導いた．この結果は周期型，自己相似型に依らない．つまり，結晶中の光パルスの伝搬において，結晶構造の情報は α の中にすべてあることを表している．この α の値は，転送行列法から導かれる非線形写像から解析的に得ることができ，周期型では屈折率に依らず $\alpha = 1/2$, 自己相似型では屈折率に依存して $\alpha < 1/2$ となる．さらに，α が小さくなる結晶構造を作ることができれば，より遅延効果の高い光学遅延素子が得られることを期待できる．

本研究成果は，光パルスの伝搬に限らず，人工超格子中の電子パルスや音波などでも成立すると考えられる．特に転送行列法が適用可能な系については，本研究成果を直接適用すること可能であるため，波動方程式がもつ一般論へと拡張できる．

目次

第 1 章

序論

1.1　本研究の目的

光パルスの伝搬速度を自在に制御することは，次世代の光通信や光集積回路などを開発する上で必要不可欠の技術である．光パルスの伝搬速度の制御は，屈折率の異なる媒質を周期的に配置したフォトニック結晶と呼ばれる構造によって実現できることが知られている（図 1.1）．フォトニック結晶中の光は，半導体中の電子と同様，結晶内での波数と角振動数との関係を表す分散関係を満たす．従って，特定の周波数帯の光が透過するフォトニックバンドと，光が減衰するフォトニックバンドギャップが存在する [1]．また分散関係の微分で与えられる群速度は，フォトニックバンドの端に近いほど分散関係の傾きが小さくなるため小さくなり，バンド端では 0 となる．従来，光パルスの伝搬速度と群速度はエネルギーの伝搬する速度として一致すると考えられていた．

しかしながら，実際に設計されるフォトニックバンド端を用いた光遅延素子は結晶サイズが有限であるため，例えフォトニックバンド端であっても光パルスは有限速度で伝搬する．つまり，従来の群速度の概念だけでは，より精密な光回路の設計が行われる際に正確な伝搬速度を与えることができない．驚くべきことに，有限サイズの結晶における伝搬速度を理論的に定義する研究が重要であるにもかかわらず行われていなかった．

本研究では正確な伝搬速度の表式を得るため，光パルスのピークが結晶サイズ L の結晶に入射されてから透過するまでの時間を横断時間 τ と定義し，τ の L 依存性を導出した．また，光パルスの伝搬速度 v_t を $v_t \equiv L/\tau$ と定義する．これまで我々は，周期系とも，ランダム系とも異なる特異な性質を豊富に有する自己相似構造*1（または自己相似格子*2）中の電子状態について研究し，その特異な性質を明らかにしてきた [2]．これまでの自己相似構造の研究成果を踏まえて，周期型フォトニック結晶，さらには，自己相似型構造（フラクタル）をもつフォトニック結晶（以後，自己相似フォトニック結晶）の光遅延素子として有効であることを示すことが本研究の目的である．

---

*1 自己相似構造とは、全体とそれを構成する部分とが相似である構造である．図 1.2 を参照．

*2 また自己相似格子とは，ポテンシャルの空間構造が自己相似的である格子を指す．

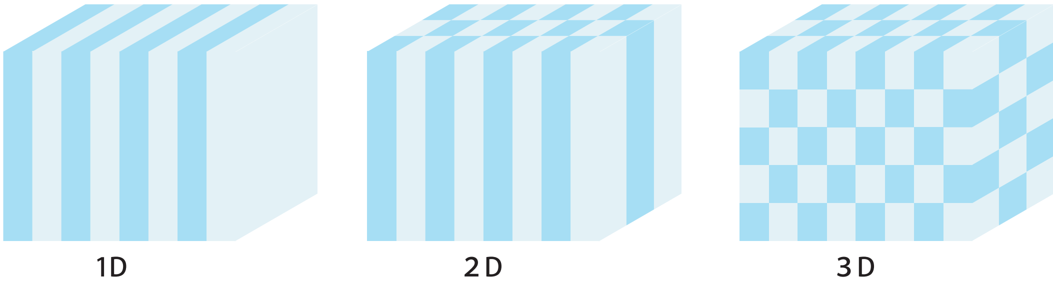

図 1.1　フォトニック結晶の模式図．その周期の次元性により 1 次元，2 次元，3 次元フォトニック結晶と分類される．

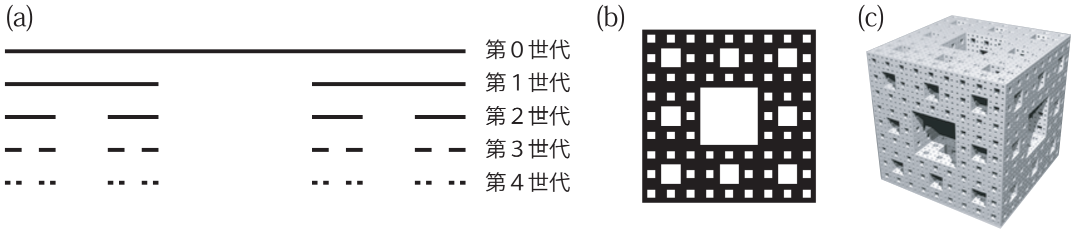

図 1.2　1 次元，2 次元，3 次元自己相似構造の例．(a) カントール集合，(b) シルピンスキーカーペット，(c) メンジャースポンジ．カントール集合は，線分を 3 等分し，得られた 3 つの線分の真ん中のものを取り除くという操作を帰納的に繰り返すことで作られる．また，操作の回数を自己相似構造の世代と呼ぶ（a の右）．カントール集合の 2 次元版として知られるシルピンスキーカーペット，3 次元版として知られるメンジャースポンジも，カントール集合と同様に，正方形，立方体から所定の操作を繰り返すことで得られる．

これまで，自己相似フォトニック結晶中における電磁波の性質について理論，実験の両面から研究が進められてきた．近年，カントール集合（図 1.2 a）の 3 次元版として知られている，メンジャースポンジ（図 1.2 c）と呼ばれる 3 次元自己相似構造を有したフォトニック結晶が実現され，特定の波長の光を入射した場合，光が自己相似構造の中心に閉じ込められ，最終的には結晶に吸収させられること明らかになった（図 1.3）．これは，特定の入射波長に対して，透過率と反射率がともに 1 よりも十分小さいことで分かる．しかしながら，自己相似構造の世代数（階層）が低いため[*3]，光の局在性や透過スペクトルに自己相似構造固有の性質は十分に見られていない．また，構造の複雑さゆえ，理論的にはコンピュータを用いた数値計算に，実験では経験則に頼らざるを得ないのが現状である．さらに，吸収が大きいため透過光パルスの遅延には利用することはできない．

図 1.1: fig/pc0.eps
図 1.2: fig/fractal.eps（ただし，(b)(c) の図は Wikipedia より転載）
[*3] 世代については，図 1.2 を参照．第 4 世代メンジャースポンジ型フォトニック結晶まで実現されている

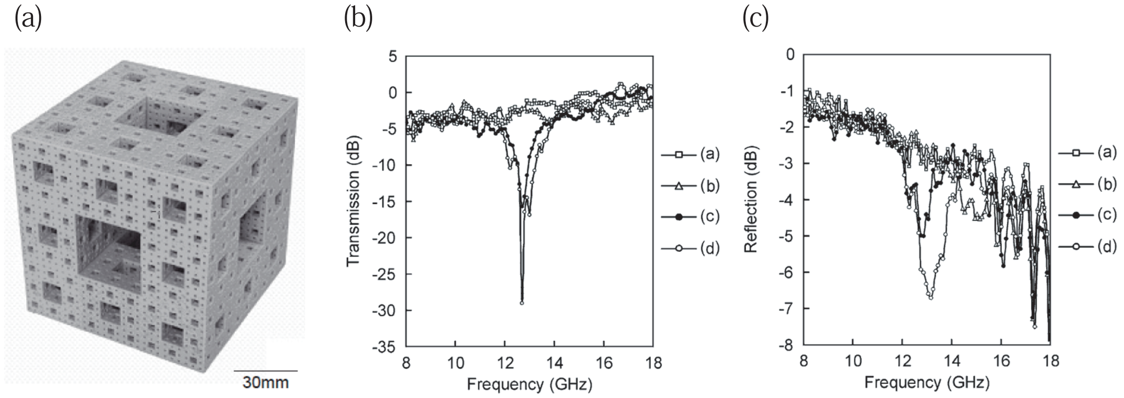

図 1.3　(a) メンジャースポンジと呼ばれる 3 次元フラクタル構造によるフォトニック結晶における，(b) 透過率スペクトルと，(c) 反射率スペクトル．特定の入射波で透過率と反射率がともに低くなり，特定の波長の光を入射した場合，光が自己相似構造の中心に閉じ込められ，吸収されることが明らかになった [3].

自己相似構造固有の性質を調べるためには，十分な自己相似構造の世代数が必要である（図 1.2(a) 参照）．しかしながら，カントール集合やメンジャースポンジの場合，単位となる長さや体積から与えられた規則に従ってくり抜いていくことで自己相似構造を作るため，世代数を上げていくに従って中の構造が等比級数的に小さくなり，試料の作成が困難である．

本研究ではこの困難を克服するために，生成規則と呼ばれるルールに従って 2 種類の誘電体層を積層することで作られる多層膜を，1 次元自己相似構造を持つフォトニック結晶（以後，１次元自己相似フォトニック結晶と呼ぶ）として考えていく．自己相似構造の世代数増加は，層数が増えるだけであり構造が微細化することはない．特に本論文では，Fibonacci 型と呼ばれる代表的な 1 次元自己相似構フォトニック結晶について研究した．生成規則により作られる自己相似フォトニック結晶の最大の利点は，積層数を増やすことで容易に自己相似の世代数を上げることが可能であることである．従って，自己相似フォトニック結晶を用いることで，自己相似的な多重反射による光パルスの遅延の効果が期待できる．

図 1.3: fig/Takeda2004.eps

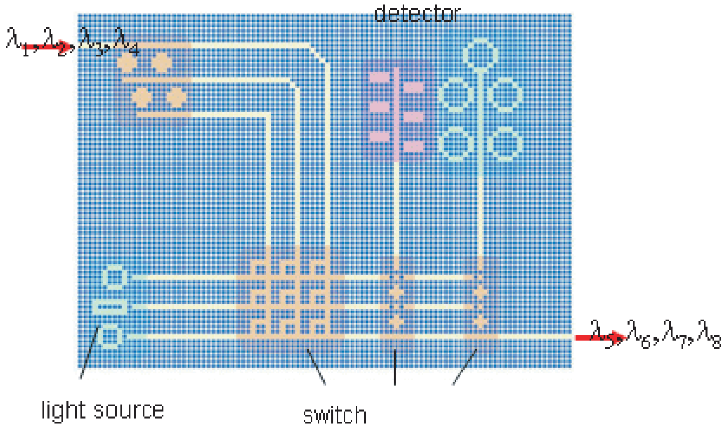

図 1.4　光集積回路の模式図．光集積回路は，シリコン基板に空孔を開けることによって，光導波路，光スイッチといった光学素子を作成し，同一基板上に配置することで実現することができると考えられている．

1.2　研究背景

以下の節では，本研究の背景となる先駆的研究を紹介する．

1.2.1　フォトニック結晶を用いた光集積回路

光集積回路とは，主に，光導波路，光フィルター，光スイッチ、光変調器，光遅延，光メモリ，光アイソレーターなどの光学素子を種々の操作を行う光学素子を同一基板上に載せた光回路である。電子を用いる演算処理を光だけで行うことを目的として研究，および開発が急がれている．従来の電子を用いた信号処理から，高速かつ低損失，さらには，光の量子性をも活用した「光だけによる信号処理」が可能になると期待されている．さらには，光ファイバーなどで行われている光通信とのシームレスな接続も期待されている．現在考えられている光集積回路の例は，図 1.4 のようなシリコン基板に空孔をあけることで各種光学素子を作成し，同一基板上に配置することで実現する 2 次元フォトニック結晶である [4]．現行の半導体基板生成技術で比較的容易に作成することができるため，様々な光学素子の開発が試されている．

しかしながら，光集積回路の実現にはまだ長い道のりがあると考えられている．すなわち現状では，前述の光学素子を作成する際に必要不可欠な要素である，光を微小空間に閉じ込めることができる光ナノ共振器の開発と，各光学素子の動作原理の開発までしか行われておらず，それらの素子を有機的に繋ぐところまでは至っていない．その大きな問題点の一つにあげられるのが，光共振器の透過率が非常に小さい（$T \sim 10^{-4}$）ことである．入射した光の大部分は，

図 1.4: fig/NTT.eps （図の参照元：NTT 物性科学基礎研究所フォトニックナノ構造研究グループ WEB ページ　http://www.brl.ntt.co.jp/group/shitsubi-g/index-j.html）

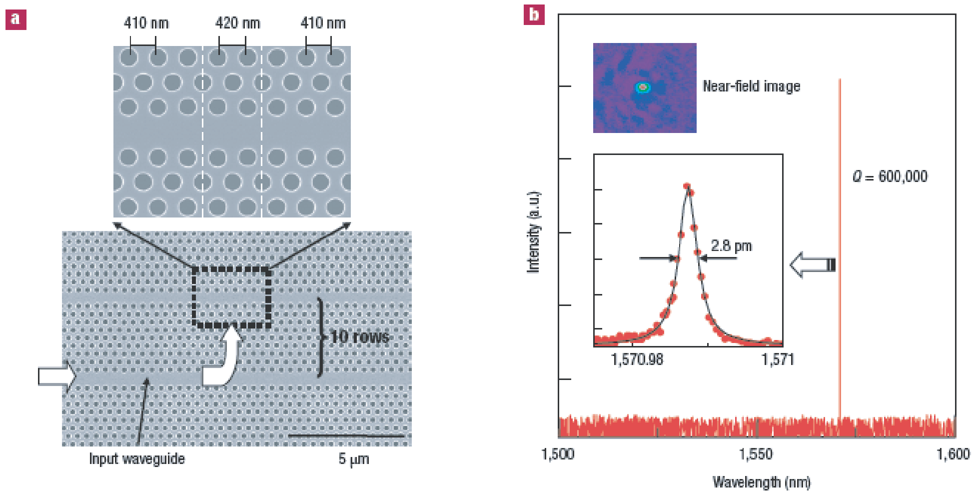

図 1.5 (a) 周期的に開いている三角格子状の空気穴の間隔をわずかにずらす（410[nm] から 420[nm]）ことで製作した光ナノ共振器の電子顕微鏡写真と，(b) 共鳴波長付近における透過スペクトルの実験結果．共鳴波長に対応する入射波長において透過スペクトルに鋭いピークが見られ，Q 値は 60 万程度と見積もられる [5].

反射あるいは吸収されてしまうため現状では回路として成立していない．また，精密な光集積回路の開発には光パルスの伝搬速度を正確に制御する必要があるが，現行の 2 次元フォトニック結晶中の光パルスに対する特定の遅延を与えるための理論的指針が無いのが現状である．このような現状を打開するため本研究では，積層型 1 次元フォトニック結晶を用いて，透過率が 1 かつ結晶中の伝搬速度の制御の指針を解析的に求めた．

次節では，現在開発されている光共振器について紹介する．

1.2.2 フォトニック結晶における光の閉じ込め

近年，光集積回路に用いる各種光学素子に必要不可欠な光ナノ共振器の開発が進められている．光ナノ共振器とは，サイズが光の波長の数倍程度のフォトニック結晶で，微小領域に光を長く強く閉じ込めることができるため，非線形効果などの物理現象を効率的に起こすことができる．この非線形効果によって本来相互作用しない光同士が，物質を介して相互作用させることができるため，光同士の信号処理に必要不可欠な光スイッチや光メモリなどの光学素子への応用が期待されている．

現在の光ナノ共振器に使われるフォトニック結晶の主流は，厚さ 200[nm] 程度の Si スラブ上に三角格子状の空気穴を周期的に開けることで作成される 2 次元フォトニック結晶で，既存のプレーナ型半導体製作技術を用いて精度の高い結晶を作ることができる（図 1.5,1.6）．このタイプのフォトニック結晶を用いて作られる光ナノ共振器は，フォトニック結晶の周期の一部に意図的な欠陥（周期を局所的にずらした欠陥）を導入することで作成可能であり，欠損

図 1.5: fig/Song2005.eps

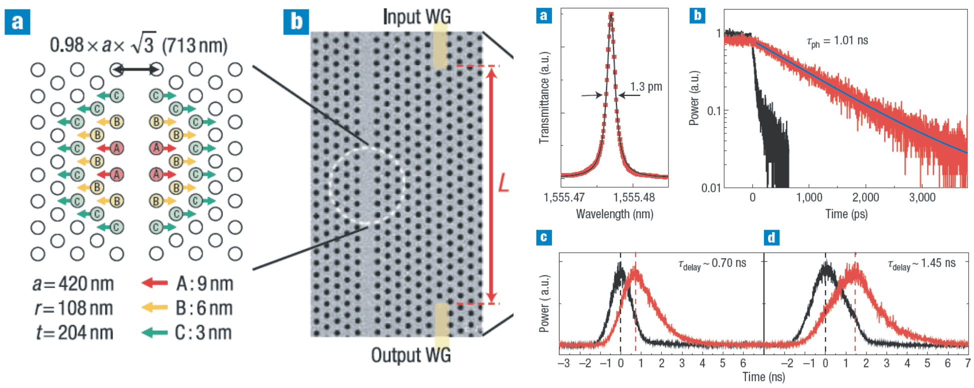

図 1.6　周期的に開いている三角格子状の空気穴の周期を段階的にずらすことで製作された光ナノ共振器の (左 a) 模式図と (左 b) 電子顕微鏡写真と，(右 a) 共鳴波長付近における透過スペクトル，(右 b) 共鳴状態における共振器の寿命測定，(右 c,d) 光パルス遅延時間の実験結果．Q 値は 120 万程度と見積もられ，さらに光パルスの遅延時間は (c)0.70[ns], (d)1.45[ns] を観測した [6].

の入れ方によって閉じ込め強度をコントロールすることができる [5–11]．その他にも，３次元フォトニック結晶の表面に欠損を入れることで，結晶表面に光をトラップするものや（図 1.7）[12]，線型 Si に空気穴を１列に並べるファブリー・ペロー型（図 1.8）[13,14] など様々なタイプが実現されている．

光ナノ共振器は構成するフォトニック結晶の構造により長所，短所があるが，光共振器による光を閉じ込めの性能を表す共通の指標に

$$Q = \frac{\omega_0 U}{P_{\mathrm{out}}} = \frac{\omega_0}{\Delta\omega} \tag{1.1}$$

で定義される Q 値と呼ばれる量がある．ここで，ω_0, U, $P_{\mathrm{out}}, \Delta\omega$ はそれぞれ，共鳴角振動数，共振器内部に閉じ込められているエネルギー，共振器から散逸するパワー，透過スペクトルの半値全幅を表す [15]．Q 値は共振器内部に蓄えられているエネルギーが高く，散逸するエネルギーが小さいほど，大きくなる．実験的には実験結果から透過スペクトルの半値全幅 $\Delta\omega$ を得ることで，Q 値を見積もることができる [16]．図 1.5，1.6，1.7，1.8 では，それぞれの Q 値が 60 万，120 万，58,000，5,000 と非常に大きな値になっている．

図 1.5，1.6 は，２次元フォトニック結晶の内部に電磁波を誘導し，欠損部分に光を閉じ込めるタイプの光ナノ共振器である．このタイプの共振器は，欠損の入れ方によって高い Q 値を持たせることが可能である．図 1.5 の型は，周期的に開いている三角格子状の空気穴の間隔をわずかに変えることで $Q \sim 600,000$ [5]，図 1.6 の型は，空気穴の間隔を段階的に変えることで $Q \sim 1,200,000$ を実現している [6]．現在では同様の型で $Q \sim 2,000,000$ の共振器が実現されている [11].

図 1.6: fig/Tanabe2007.eps

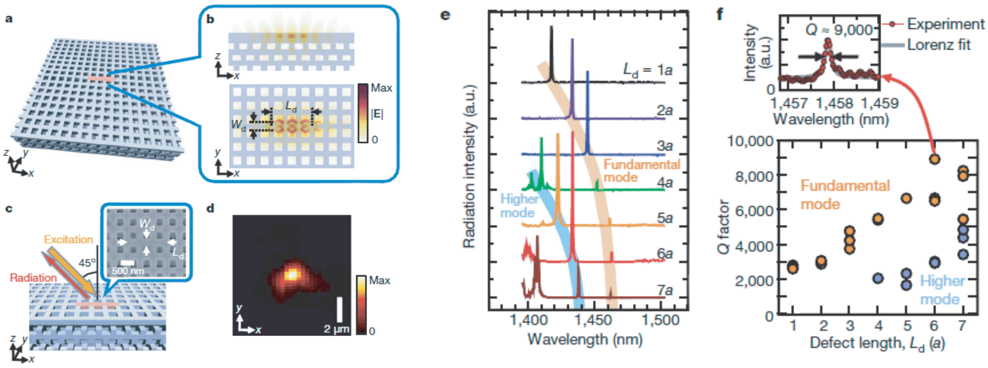

図 1.7　(a) 3 次元フォトニック結晶の表面に欠陥を導入することで製作した光共振器の模式図と (b) 同拡大図, (c) 電子顕微鏡写真, (d) 共鳴入射波長 1,446 [nm] における空間強度分布, (e) 共鳴波長付近における透過スペクトル, 並びに, (f) 欠損の大きさと Q 値の関係（右）. 表面における局在にもかかわらず, 9,000 程度の Q 値を観測した [12].

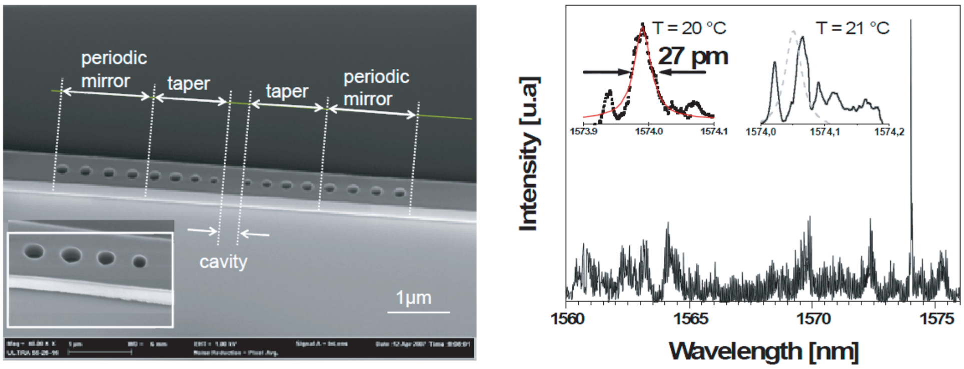

図 1.8　（左）線型ファブリー・ペロー共振器の電子顕微鏡写真と（右）共鳴波長付近における透過スペクトルの実験結果. シリコン導波路に数個の穴をあけるだけで, 58,000 程度の Q 値を観測した [13].

一方, 図 1.7 は, 光を閉じ込める部分がフォトニック結晶の奥深い所ではなく, 結晶表面に光を閉じ込めるタイプの光ナノ共振器である. このタイプの共振器は前者のように高い Q 値が期待できない（$Q \sim 9000$）代わりに外部と接触させることが可能となるため, 応用上非常に扱いやすいことが特徴である [12].

さらに図 1.8 の型は, 線型シリコン試料に数個の空気穴を非周期的に入れることで光を閉じ込めるタイプである. 単位体積あたりの Q 値（Q/V）を大きくすることを目的に開発された. 閉じ込められる光子の密度は Q/V に比例するため, 同じ Q 値でも体積が小さいほうが実効的な閉じ込め性能が高いことを意味する. 図 1.8 の型では $Q \sim 58000$ 程度であるが, $Q/V \sim 10^6$ 程度となることが実現できる [13].

図 1.7: fig/Ishizaki2009.eps
図 1.8: fig/Velha2007.eps

1.2.3　フォトニックバンドギャップ中の光パルスによる超光速現象

次に，光パルスの透過のモデルとしてトンネル効果における電子波の遅延を考える．

古典的には越えられないポテンシャル障壁を粒子が透過する現象は，量子力学的効果における最も衝撃的な効果の一つである．時間に関して定常なトンネル確率はこれまでに様々な系で計算され，実験的にも確認されているが，粒子のトンネル中の動的な振る舞いについては，定性的な議論と比較して少ない．

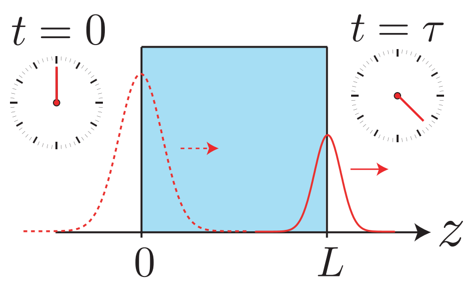

図 1.9　トンネル時間の模式図

動的トンネル現象に関する最初の理論的研究は，量子力学の初期の 1932 年にまで遡り，MacColl は「障壁を通過する波束の伝搬は感知できるほどの遅れはない」と考えた [17]．1962 年 Hartman は，ポテンシャル障壁を透過する量子粒子のトンネル時間 τ が，バリアの幅 L を大きくしても大きくならず，一定値へと収束するということが示した（図 1.9）[18]．Hartman 効果として知られているこの現象は，バリアの幅が大きいほど実効的なトンネル速度が大きくなり，場合によっては光速を超えうるということを意味する．この結果は，トンネル時間の定義に問題があり非物理的な結果と考えがちであるが，動的な振舞いを見ると不自然でないことがその後の実験でわかってきた．

1990 年代，測定が困難な電子系に代えて，光学系による光パルスのトンネル時間を計測することで Hartman 効果の検証が行われた．それら実験は概ね 3 つグループに分けられる（図 1.10）．

第 1 グループは，導波路と導波路の間に電磁波の伝搬解が存在しない幅の狭い導波路をつなぎ合わせた実験系（図 1.10a）[19–22]，第 2 グループは，Frastrated total internal refrection (FTIR) と呼ばれるダブルプリズムを用いて光のトンネル効果が起こす実験系（図 1.10b）[20,23–27] である．最後に第 3 グループは，特定の波長の電磁波が減衰するフォトニックバンドギャップを用いた実験系（図 1.10c）である [28–32]．

第 1 と第 2 のグループは，量子系におけるバリア幅は光学系におけるエバネッセント波が伝搬する波長の数倍程度の幅に対応する．また，第 3 グループは，光が減衰する多重反射がおこる結晶サイズ L がバリア幅となる．いずれのグループの場合も，量子系における電子のトンネル現象と同様，伝搬解の存在しない領域が存在するため入射波の大部分が反射し，ごく一部のみが透過するという現象である．このような光学的な実験結果と電子のトンネルとの関係性は，時間に依存しないポテンシャルによる Schrödinger 方程式と単色光の電磁波の伝播を記述する Helmholtz の波動方程式との形式的なアナロジーで 1 体 1 になることがわかっている [33, 34]．

図 1.9: fig/fig1.eps

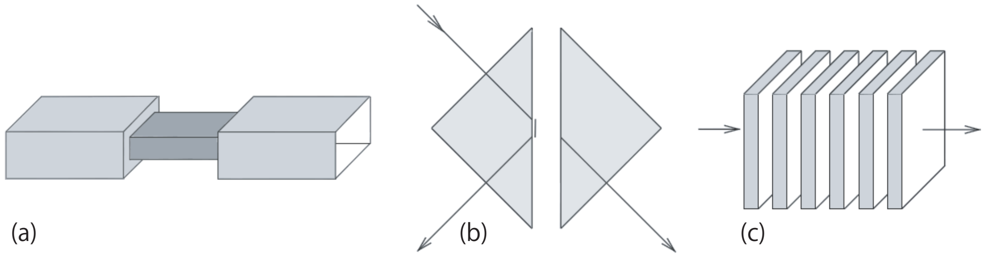

図 1.10　3 種類の光学的バリアの模式図 [35]．(a) 導波路と導波路の間に電磁波の伝搬解が存在しない幅の狭い導波路をつなぎ合わせた系．(b)Frastrated total internal refrection と呼ばれるダブルプリズムを用いた光のトンネル効果が起こる系．(c) 特定の波長の電磁波が透過不可能なフォトニックバンドギャップを用いた系．

一方，トンネル効果の理論では，パルスのピークが入射してから透過するまでの時間をトンネル時間と定義する，statinary phase 法（SP 法）が用いられた．この手法は原子核による散乱問題で Wigner によって用いられた手法であるが [36]，この SP 法でトンネル時間の表式の導出が行われた．2001 年，Esposito は SP 手法を上記の 3 つのグループに適用し収束値の計算を行い，バリア幅を大きくするに従ってトンネル時間が一定値へ収束することを示し，実験結果とよい一致を示した [37]．Esposito は第 1 と第 2 グループについては，その収束値の解析解を示した一方，第 3 グループにはついては，数値的に収束値を見積もったに過ぎない．その主たる原因は，SP 法の物理的な解釈が困難であるからである．フォトニックバンドギャップで光素子を設計するためには，その都度数値シミュレーションをしなければならない問題点があった．我々は，第 3 グループにおけるトンネル時間の収束値の解析解の導出を行った．第 4 章では導出までの手順を詳細に論じる．

トンネル時間がバリア幅を大きくするに従って一定値へ収束するという現象は，一見，因果律を破っているように見えるがそうではない．透過パルスは入射パルスのごく一部であるにすぎないため，表面的に光速よりも速く見えるに過ぎないためである．従ってこのような解析は，その他の波動現象に広く応用することが可能である．

また、相対論的粒子における系 [38]，音波を用いての実験でも同様の特異なトンネル時間が測定されている [39, 40]．つまりこのような現象は，波動の振る舞いとして一般的であることがわかっている．

1.2.4　自己相似構造中の電子状態

最後に，本論文で主に取り扱う自己相似構造の概念と本論文の理論的基礎となるその電子状態の研究について述べる．

20 年程前に準結晶が発見されて以来 [41]*4，非周期的かつ決定論的な構造についての関心が

図 1.10: fig/Nimtz2003.eps

*4 準結晶は，原子の配列が高次元周期配列からの断面で得られる結晶で，結晶ともアモルファスとも異なる，第

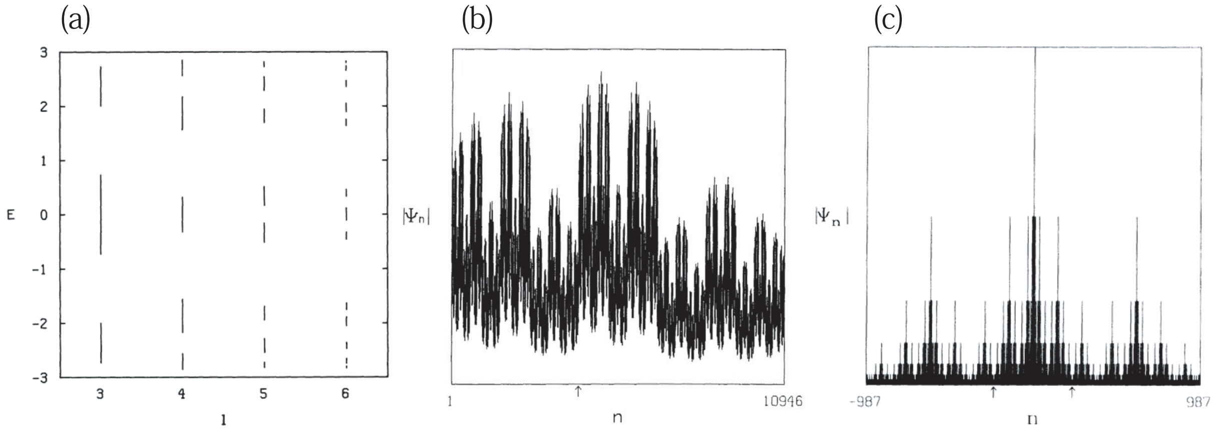

図 1.11　Fibonacci 格子の電子状態 [45]．(a)Cantor 集合に似たエネルギースペクトル，(b) エネルギースペクトルのエッジ（基底状態）の波動関数，(c) エネルギースペクトルの中心の波動関数

非常に高まった [42]．決定論的非周期系*5は周期系，ランダム系とも異なる第 3 の構造グループとして分類される（図 1.12）．一般に巨視的な物性はその構造に強く支配されるため，決定論的非周期系では，周期系やランダム系とは全く異なる新たな性質を示すことが期待される．決定論的非周期系の構造は非常に多様な構造を含んでいるが，その中では巨視的に一様に見える系が興味深い．Fibonacci 格子 [43] や 2 次元 Penrose 格子 [44] などは代表的な準結晶であり，高次元周期構造の断面として構造が理解できる．

自己相似構造は並進対称性を持たないために，この系の電子状態にはブロッホの定理が適用できない．しかし，自己相似構造は並進対称性の代わりにくりこみ群で記述される対称性を持つ．この分野のこれまでの研究は生成規則と呼ばれる規則で作られる 1 次元自己相似構造の場合に集中しており，その電子状態に関し詳細な結果が得られている．それによると，一電子エネルギースペクトルはカントール集合に似た マルチフラクタル構造を持つ*6（図 1.11 a)．また，ほとんどすべての固有状態は空間的にべき的に局在した臨界状態（critical state）であり（図 1.11 b,c)，拡がった状態（extended state）と指数関数的減衰を示す局在状態の中間的性質を持つことなどが知られている（図 1.11 b,c)．

これまで自己相似構造の電子状態の研究手法は，くりこみ群による対称性から導出される trace map と呼ばれる非線形 3 次元写像*7を用いた解析が主流である．trace map は自己相似

三の固体物質と言われる．並進対称性は持たないが原子配列に高い秩序性を有す．準結晶の電子線回折等の回折像は，通常の結晶では許されない 5 回，8 回，10 回，12 回を示す．

*5 決定論的非周期とは，広義には「何らかの規則によって作られる並びで周期的でないもの」であるが，本論文では生成規則によって作られる構造に絞る．

図 1.11: fig/Kohmoto1987-2.eps

*6 マルチフラクタル構造とは，1 つの構造において，局所的自己相似性の相似比が場所により異なるような自己相似構造の一種である．1.2 で示した自己相似構造はどこの位置でも同じ相似比を示すが，C で示した一般化カントール集合の場合，場所によって相似比が異なる．

*7 一般的に写像は相空間の体積が写像により保存されるか否かで，保存系もしくは非保存系と分類される．

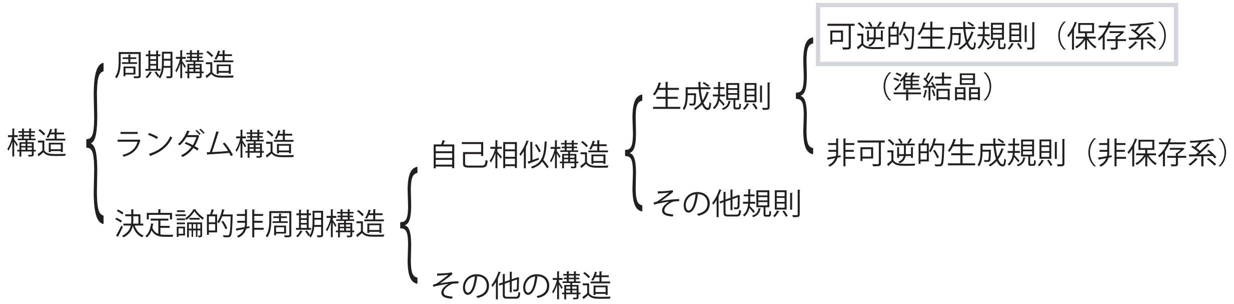

図 1.12　決定論的非周期系の分類．可逆的生成規則に対応する trace map は保存系，非可逆的生成規則に対応する trace map は非保存系であることを表している．

構造をつくる生成規則と 1 対 1 の関係にあり，生成規則の性質に直接反映する．生成規則は，生成規則を逆に解くことができるか否かで，可逆的生成規則と非可逆的生成規則とに分類される．この分類は trace map の保存性と対応がある．可逆的生成規則に対応する trace map は保存系をなし，他方，非可逆的な生成規則に対応すると trace map は非保存系となる（図 1.12）．

２元可逆的生成規則（trace map は保存系）によってつくられる 1 次元自己相似構造の一般的性質である．「２元」とは Fibonacci 列のように A,C ２種の要素から構造が作られることを意味し，生成規則を用いてつくられる最も単純な 1 次元自己相似構造のグループである．Fibonacci 格子はこのグループに属し，$(A \to C, C \to AC)$ の生成規則によって次の世代の構造を帰納的に作ることができる．一般的には n 種の要素からなる 1 次元自己相似構造を定義することもできるが，３元系以上の場合は保存系であっても解析は非常に複雑となる．

2000 年，３元保存系において，２元保存系では存在しない特異なスケーリングに従う固有状態の存在が Fujita らによって明らかにされた（図 1.13）．

固有状態は局在状態に近い臨界状態で，これまで知られている臨界状態とは異なるスケーリングに従うことが明らかになり，亜臨界状態（marginal critical state）と名付けられた．またエネルギースペクトルは拡大するにつれやせ細っていく構造となり，孤立スペクトルの集まりとなる[*8]．

３元以上の系は保存系であっても非常に複雑であるため，この Fujita 以外，ほとんど研究が進められていない．さらに，非可逆的な生成規則による系は，保存系に比べるとさらに複雑であるためこれまでほとんど研究が進められてこなかった．しかしながら，非可逆的な生成規則による trace map は非保存的であるため，保存系と比べて奥が深い多様な性質を持つことが予想される．

我々はほとんど手付かずであった２元非保存系による１次元自己相似構造中の電子状態につ

図 1.12: fig/bunrui.eps

*8 「局所次元」と呼ばれるフラクタル次元の一種が 0 になった状態．

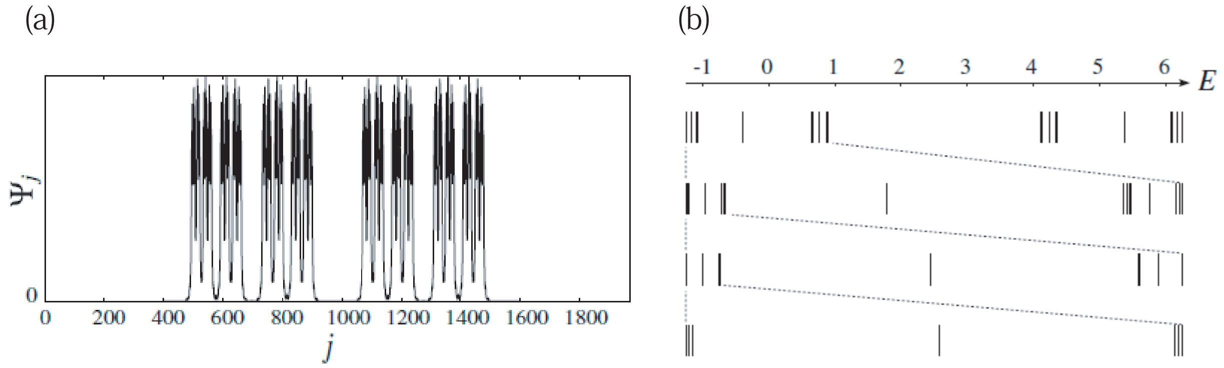

図 1.13　3 元保存系の電子状態 [46]．(a) 極めて局在状態に近い臨界状態 marginal critical state，エネルギースペクトル (b)．エネルギースペクトルは拡大するにつれやせ細っていく様子が確認できる．

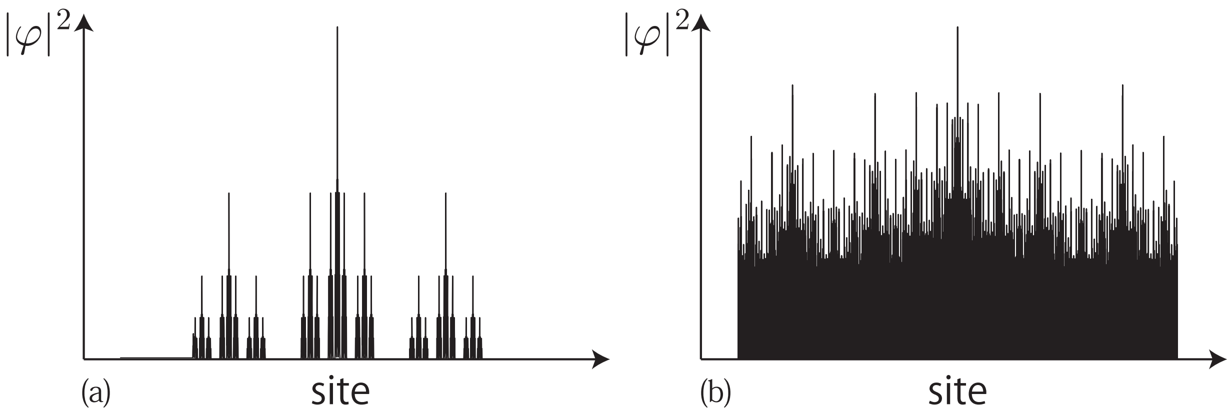

図 1.14　亜臨界状態の波動関数 [2]．(a) 局在状態に近い下限亜臨界状態と，(b) 広がった状態に近い上限臨界状態

いて研究を行った．その結果，2 元非保存系自己相似格子の一群において，波動関数が 2 つの異なるスケーリングを示す固有状態が一つの構造中に存在することを明らかにした [2]．

固有状態の 1 つは極めて局在状態に近い臨界状態であり，先の 3 元保存系で発見された亜臨界状態と同等である一方，別の固有状態は広がった状態に極めて近い臨界状態で，これまでに知られている臨界状態とは異なるスケーリングに従うことを見出した．これらの 2 つの固有状態は対極に位置するため，非常に局在性の強い臨海状態を下限亜臨界状態 (lower-marginal critical state)，広がった状態に近い臨界状態を上限臨界状態 (upper-marginal critical state) と命名した [2]（図 1.14）．このように自己相似構造に対する研究も進められているが，光パルスをこのすべての構造で解析するのは膨大な時間がかかる．

従って本研究では，保存系自己相似構造である Fibonacci 型フォトニック結晶における光パ

図 1.13: fig/Fujita2000.eps
図 1.14: fig/128.eps

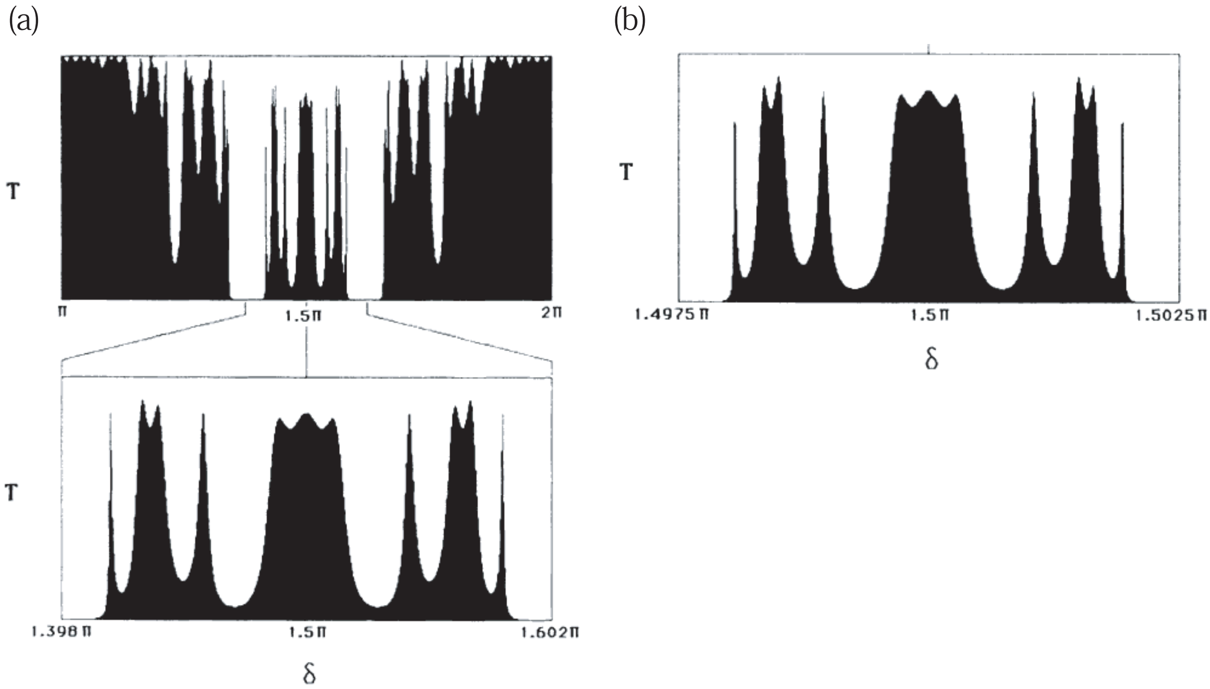

図 1.15　Fibonacci 型自己相似フォトニック結晶における透過率の波数依存性 [47]．(a) 第 9 世代（55 層），(b) 第 12 世代（233 層）． 屈折率が $n_A = 2, n_B = 3$ にて計算．特定の入射波数において透過スペクトルに自己相似性が見られる．

ルスの遅延について調べ，その結果解析解の導出に成功した（第 5 章）．保存系の光パルスの遅延は，系の大きさ L に対して L^{β} 的のようにべきで大きくなる．この結果は，可逆的生成規則（保存系）による自己相似フォトニック結晶全般で成り立つ．一方，非保存系の光パルスの遅延は，保存系の光パルスの遅延とは異なり，系の大きさ L に対して $\exp(L)$ 的に増大することが数値的にわかった．しかしながら非保存系における解析解は困難であり，導出までには至っていない．非可逆的生成規則（非保存系）の電子状態の結果は，私の博士課程の成果の一部であり，光パルスの将来の解析に必要な知識であるので，付録に記すことにする．

1.2.5　自己相似フォトニック結晶の研究

最後に，自己相似フォトニック結晶中の電磁波に関する先行研究の概要について述べる．

本論文では 2 種類の異なる屈折率をもつ誘電体を，生成規則によって作られる文字列に従って積層することで作られるフォトニック結晶を，1 次元自己相似フォトニック結晶と呼ぶ．自己相格子中の電子状態の研究で用いた解析手法である trace map を適用することで，1 次元自己相似フォトニック結晶中の電磁波の特異性が Kohmoto らによって示された [47]．Fibonacci 型自己相似フォトニック結晶における第 9 世代（55 層）と第 12 世代（233 層）の

図 1.15: fig/Kohmoto1987.eps

透過率スペクトルの数値計算結果を示したのが図 1.15 である．

以来２０年以上にわたって，多くの理論 [48–58]，実験 [3,59–63] の両面から研究が進められてきた．理論的には主に１次元の自己相似構造として知られるカントール型自己相似フォトニック結晶 [48–58]，実験では，試料の作成のしやすさから Fibonacci 型自己相似フォトニック結晶 [59,60] における電磁波の透過スペクトルについての研究が行われ，特定の入射波数付近における透過スペクトルに自己相似構造が見られた．これら静的光応答は，自己相似性に関する結果もくりこみ群による理論で説明することができる [58]．

一方，動的光応答は，Fibonacci 型自己相似フォトニック結晶の光パルス伝搬に関する研究が行われ [61–63]，フォトニックバンド端において光パルスの遅延が観測された．しかしながら，遅延時間に対して自己相似特有の性質を見出すまでには至っていないのが現状である．

本博士論文では，自己相似フォトニック結晶の光パルス伝搬の遅延時間の解析解を導出し，自己相似構造の特徴を表すフラクタル次元と光パルスの遅延時間との関係を明らかにすることができた．このことが，従来の研究では達成できなかったオリジナルな点である．

1.3 本論文の構成

自己相似フォトニック結晶における光パルスの遅延について考察するために，本論文では次の順番で議論を進める．

本研究ではそして，光パルスを減衰させずに最大の遅延効果が期待できる，フォトニックバンド端近傍に出現する共鳴状態（透過率 $T = 1$）における横断時間 τ の L 依存性を導出した．さらに，周期型よりも大きな遅延効果が期待できる自己相似型構造（フラクタル）をもつフォトニック結晶の光遅延素子としての有効性について考察した．この考察をおこなうために，幾つかの基礎的事項が 2 章以降にまとめられている．

1.3.1 フォトニック結晶中を伝搬する電磁波の定式化と伝搬速度の導出（第２章）

第２章では，異なる屈折率の媒質を周期的に配置した１次元フォトニック結晶中を伝搬する電磁波の定式化を行う．１次元フォトニック結晶における電磁波を記述する際に便利な転送行列を用いて，分散関係と群速度を導出する．また，有限系における伝搬速度の表式を得るため，光パルスが結晶サイズ L の結晶に入射されてから透過するまでの時間，横断時間 τ を導出する．

さらに，$v_t \equiv L/\tau$ で定義できる光パルスの伝搬速度 v_t が，群速度 v_g と大小関係 $v_t \geq v_g$ を満たし，共鳴状態（透過率 $T = 1$）のときに $v_t = v_g$ となることを示す．これは，結晶サイズ L における光パルスの伝搬速度 v_t が，バンド端に最も近い共鳴状態で最も遅くなることを意味し，光遅延素子としては都合が良いことを意味する．

1.3.2　フォトニック結晶中の光パルスの遅延と超光速現象（第３章）

第３章では，(1) フォトニックバンド端近傍の共鳴状態を利用した，光パルスの横断時間 τ の結晶サイズ L 依存性と，(2) フォトニックバンドギャップ中の超光速現象について考察する．

(1) フォトニックバンド端を用いた光パルスの遅延

周期型フォトニック結晶のフォトニックバンド端近傍の共鳴状態において，τ の L 依存性が結晶を構成する媒質の屈折率に依らず $\tau \propto L^{\beta}$（$\beta = 3$）となることを示す．さらに，β の値はフォトニック結晶の構造と入射波の波数で一意に決まる局所次元 α と呼ばれるパラメータを用いて，$\beta = \frac{3}{2\alpha}$ と表されることを示す．

(2) フォトニックバンドギャップ中心における光パルスの超光速現象

フォトニックバンドギャップに対応する光パルスを入射させた場合，大部分は反射する一方で，ほんの一部は透過する．その透過波の横断時間が，フォトニック結晶の幅が大きくなるにつれ一定値へ収束することが実験的に示された．この現象は量子粒子によるポテンシャルバリアのトンネル時間が，バリア幅が大きくなるにつれ一定値へ収束するという Hartman 効果 [18] の光学版として知られている．数値的収束することは Esposito によって示された [37] が，収束値の解析解はこれまで未解決であった．本論文では，収束値の解析解の導出の詳細を記し，その物理的意味を議論する．

1.3.3　Fibonacci 型自己相似フォトニック結晶中の電磁波（第４章）

M.Kohmoto らは，自らが開発した自己相似構造中の電子状態の研究で用いた解析手法を自己相似フォトニック結晶中の電磁波に適用し，透過スペクトルの導出を行なった [47]．第４章では，自己相似フォトニック結晶中の電磁波の性質と，解析するために必要な非線形写像とその固定点近傍の拡大率の定義について述べる．

1.3.4　Fibonacci 型自己相似フォトニック結晶中の光パルス遅延（第５章）

第３章で導出した光パルスの横断時間を，自己相似フォトニック結晶に適用しすることで遅延効果を検証する．自己相似型フォトニック結晶における，横断時間 τ の結晶サイズ L 依存性が周期型と同様に，局所次元 α を用いて $\tau \propto L^{\beta}$ （$\beta = \frac{3}{2\alpha}$）となることを示す．さらに，自己相似型フォトニック結晶では α が屈折率に依存して $\alpha < 1/2$ となることを示す．この結果は，α が小さくなる結晶構造を作ることができれば，より遅延効果の高い光学遅延素子が得られることが期待できることを意味する．

1.3.5 まとめ（第 6 章）

第 6 章では，本研究で得られた成果についてまとめる．

第 2 章

フォトニック結晶中を伝搬する電磁波の定式化と伝搬速度の導出

この章では，異なる屈折率の誘電体層を周期的に並べられた１次元フォトニック結晶中を伝搬する電磁波の定式化を行う．１次元フォトニック結晶における電磁波を記述する際に便利な転送行列を定義し，転送行列から分散関係と群速度といったフォトニック結晶中の電磁波の伝搬を議論する上で重要な量を導出する．また，フォトニック結晶における光パルスの遅延を考えるために，光パルスピークが入射されてから透過するまでの時間（横断時間）を導出する．

2.1 誘電体中の Maxwell 方程式

電場の強さ $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t)$[V/m]，磁場の強さ $\boldsymbol{H}(\boldsymbol{r},t)$[A/m^2]，電束密度 $\boldsymbol{D}(\boldsymbol{r},t)$[C/m^2]，磁束密度 $\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r},t)$[T]，電流密度 $\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t)$[A/m^2]，電荷密度 $\rho(\boldsymbol{r},t)$[A/m^2] は次の Maxwell 方程式を満たす：

$$\nabla \times \boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t) + \frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r},t) = 0 \tag{2.1}$$

$$\nabla \times \boldsymbol{H}(\boldsymbol{r},t) - \frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{D}(\boldsymbol{r},t) = \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t) \tag{2.2}$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{D}(\boldsymbol{r},t) = \rho(\boldsymbol{r},t) \tag{2.3}$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{B}(\boldsymbol{r},t) = 0\ . \tag{2.4}$$

電束密度 $\boldsymbol{D}$ と磁束密度 $\boldsymbol{B}$ は，それぞれ電場の強さ $\boldsymbol{B}$ と磁場の強さ $\boldsymbol{H}$ と以下の関係がある：

$$\boldsymbol{D}(\boldsymbol{r},t) = \epsilon_0\epsilon(\boldsymbol{r})\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t) \tag{2.5}$$

$$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r},t) = \mu_0\mu(\boldsymbol{r})\boldsymbol{H}(\boldsymbol{r},t)\ . \tag{2.6}$$

ただし，$\epsilon_0, \mu 0$ はそれぞれ真空中の誘電率と透磁率で、$\epsilon(\boldsymbol{r}), \mu(\boldsymbol{r})$ はそれぞれ媒質の比誘電率と比透磁率を表し，媒質の性質はこの ϵ, μ を通して Maxwell 方程式に取り込まれることになる．一様な媒質中を想定する場合は定数として扱うことができ，また真空中では $\epsilon, \mu = 1$ とな

る．また，本稿では，自由電荷や真電流が存在しない場合をもっぱら扱うので

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t)=0 \tag{2.7}$$
$$\rho(\boldsymbol{r},t)=0 \tag{2.8}$$

をである．つまり，

$$\nabla\times\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t)+\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r},t)=0 \tag{2.9}$$
$$\nabla\times\boldsymbol{H}(\boldsymbol{r},t)-\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{D}(\boldsymbol{r},t)=0 \tag{2.10}$$
$$\nabla\cdot\boldsymbol{D}(\boldsymbol{r},t)=0 \tag{2.11}$$
$$\nabla\cdot\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r},t)=0 \tag{2.12}$$

が本研究で扱う基本方程式となる．

2.1.1　分散性媒質における表式

電磁波のように電場や磁場が振動する振動場の場合，一般的な媒質において ϵ,μ は振動数 ω の関数である．このような物質の性質は**分散性**と呼ばれる．$\epsilon(\omega)$ や $\mu(\omega)$ の ω に関する具体的な表式を得るためには，物質を構成してい原子の性質から導く必要があるが，本論文では取り扱わない．$\epsilon(\omega),\mu(\omega)$ の具体的な表式にかかわらず，現象論的関係式 (2.5),(2.6) は修正が必要となる．つまり，各々の振動数 ω に対して

$$\boldsymbol{D}(\boldsymbol{r},\omega)=\epsilon_0\epsilon(\omega)\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},\omega)\ . \tag{2.13}$$
$$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r},\omega)=\mu_0\mu(\omega)\boldsymbol{H}(\boldsymbol{r},\omega) \tag{2.14}$$

が成り立つと考える必要がある．従って，式 (2.5), 式 (2.6) は

$$\boldsymbol{D}(\boldsymbol{r},t)=\int_{-\infty}^{\infty}\epsilon_0\epsilon(\omega)\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},\omega)e^{i\omega t}d\omega \tag{2.15}$$
$$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r},t)=\int_{-\infty}^{\infty}\mu_0\mu(\omega)\boldsymbol{H}(\boldsymbol{r},\omega)e^{i\omega t}d\omega \tag{2.16}$$

と書き換えられる．式 (2.15),(2.16) の関係式のおかげで，基本方程式に含まれる未知の関数は４つから２つへと減らせたことになる．未知の関数を $\boldsymbol{E}$ と $\boldsymbol{B}$ の２つとした場合，基本方程式 (2.9) 及び (2.12) は表式に変更はない．一方，式 (2.11)(2.10) は，(2.15) 及び (2.16) をそれぞれ代入し整理すると，

$$\int_{-\infty}^{\infty}d\omega e^{i\omega t}\epsilon(\omega)\nabla\cdot\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},\omega)=0 \tag{2.17}$$
$$\int_{-\infty}^{\infty}d\omega e^{i\omega t}\frac{1}{\mu_0\mu(\omega)}\left[\nabla\times\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r},\omega)-\frac{i\omega}{v^2(\omega)}\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},\omega)\right]=0 \tag{2.18}$$

となる．ただし，

$$v(\omega)=\frac{1}{\sqrt{\epsilon_0\mu_0\epsilon(\omega)\mu(\omega)}}\equiv\frac{c}{n(\omega)} \tag{2.19}$$

である．ここで $n(\omega)$ は物質の屈折率である．後に示される通り，$v(\omega)$ は媒質中を伝搬する電磁波の速度を表している．つまり，式 (2.9),(2.12),(2.17),(2.18) が分散性媒質中の電磁場の決定する基本方程式となっている．

2.1.2　電磁ポテンシャルとゲージ変換

分散性媒質中の基本方程式 (2.9)(2.12)(2.17)(2.18) は、未知の関数 $\boldsymbol{E}, \boldsymbol{B}$ に対して４つの方程式があるため多過ぎるように．さらに，$\boldsymbol{E}, \boldsymbol{B}$ が非常に複雑に絡み合っていて非常に見通しがたちにくい．しかしながら，ベクトルポテンシャル $\boldsymbol{A}$，スカラーポテンシャル ϕ によるゲージ変換を利用することで，それらをもっと見やすい形に書きなおすことができる．特に，自由電荷も真電流も存在しない場合，ベクトルポテンシャル $\boldsymbol{A}$ による Helmholtz 方程式が系を支配する方程式として導出することができる．式 (2.12) は,

$$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r},t) = \nabla \times \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t) \tag{2.20}$$

と置くと自動で満たされる．$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)$ は空間に関して微分可能な関数である．これを式 (2.9) に代入すると,

$$\nabla \times \left[\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t) + \frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)\right] = 0 \tag{2.21}$$

となる．この方程式は,

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t) + \frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t) = -\nabla\phi(\boldsymbol{r},t) \tag{2.22}$$

と置くと自動的に満たされる．$\boldsymbol{E}$ と $\boldsymbol{B}$ について解く

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t) = -\frac{\partial \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} - \nabla\phi(\boldsymbol{r},t) \tag{2.23}$$

$$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r},t) = \nabla \times \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)\ . \tag{2.24}$$

$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)$ および $\phi(\boldsymbol{r},t)$ は**電磁ポテンシャル**と呼ばれる関数である．これが元の Maxwell 方程式を満たすように $\boldsymbol{A}, \phi$ の条件を決めなければいけない．式 (2.23),(2.24) を時間変数に関して Fourier 変換した表式

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},\omega) = -i\omega\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},\omega) - \nabla\phi(\boldsymbol{r},\omega) \tag{2.25}$$

$$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r},\omega) = \nabla \times \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},\omega) \tag{2.26}$$

を，式 (2.17),(2.18) に代入することで $\boldsymbol{A}, \phi$ の関係式を導出する．式 (2.18) は

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\omega t}\frac{1}{\mu_0\mu(\omega)}\Bigg[&-\nabla^2\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},\omega) - \frac{\omega^2}{v^2(\omega)}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},\omega)\\ &+\nabla\left\{\nabla\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},\omega) + \frac{i\omega}{v^2(\omega)}\phi(\boldsymbol{r},\omega)\right\}\Bigg] = 0\end{aligned} \tag{2.27}$$

となる[*1]．また，式 (2.17) は

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\omega t}\epsilon(\omega)\left[-\nabla^2\phi(\boldsymbol{r},\omega)-i\omega\nabla\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},\omega)\right]=0 \tag{2.28}$$

となる．電磁ポテンシャル $\boldsymbol{A},\phi$ は，式 (2.27)(2.28) を満たしさえすれば任意に選択することができるので，式 (2.27) の $\nabla\{\sim\}$ の項がなくなるようにとる：

$$\nabla\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},\omega)+\frac{i\omega}{v^2(\omega)}\phi(\boldsymbol{r},\omega)=0\ . \tag{2.29}$$

上式は **Lorentz 条件**と呼ばれ，これを満たす $\boldsymbol{A},\phi$ は **Lorentz ゲージ**における電磁ポテンシャルとされる．式 (2.27)(2.28) を整理すると

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\omega t}\frac{1}{\mu_0\mu(\omega)}\left[\nabla^2\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},\omega)+\frac{\omega^2}{v^2(\omega)}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},\omega)\right]=0 \tag{2.30}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\omega t}\epsilon(\omega)\left[\nabla^2\phi(\boldsymbol{r},\omega)+\frac{\omega^2}{v^2(\omega)}\phi(\boldsymbol{r},\omega)\right]=0 \tag{2.31}$$

となる．すべての $\boldsymbol{r}$ で成り立つためには，被積分関数が恒等的に 0 となる必要があるため，

$$\nabla^2\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},\omega)+\frac{\omega^2}{v^2(\omega)}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},\omega)=0 \tag{2.32}$$

$$\nabla^2\phi(\boldsymbol{r},\omega)+\frac{\omega^2}{v^2(\omega)}\phi(\boldsymbol{r},\omega)=0 \tag{2.33}$$

が導かれる．$\boldsymbol{A}$ と ϕ の関係は Lorentz 条件で制約を受けるが，まだ任意性が含まれている．さらにスカラー関数 $\chi_0(\boldsymbol{r},\omega)$ を導入し，式 (2.25),(2.26) が不変に保たれる新たなゲージ変換を考える：

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},\omega)\rightarrow\boldsymbol{A}'(\boldsymbol{r},\omega)=\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},\omega)+\nabla\chi_0(\boldsymbol{r},\omega) \tag{2.34}$$

$$\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{r},\omega)\rightarrow\phi'(\boldsymbol{r},\omega)=\phi(\boldsymbol{r},\omega)-i\omega\chi_0(\boldsymbol{r},\omega)\ . \tag{2.35}$$

式 (2.34),(2.35) は**放射ゲージ**として知られている[*2]．

次に，放射ゲージ変換に際に導入した $\chi_0(\boldsymbol{r},\omega)$ の条件を導く．式 (2.34),(2.35) を Lorentz ゲージ条件式 (2.29) に代入すると，

$$\nabla^2\chi_0(\boldsymbol{r},\omega)+\frac{\omega^2}{v^2(\omega)}\chi_0(\boldsymbol{r},\omega)=0\ . \tag{2.36}$$

となり，$\chi_0(\boldsymbol{r},\omega)$ は式 (2.31) の被積分部分の $\phi(\boldsymbol{r},\omega)$ と同じ方程式を満たすことになる．つまり，$\chi_0(\boldsymbol{r},\omega)$ は $\phi(\boldsymbol{r},\omega)$ の定数倍となるはずである．そこで，

$$\chi_0(\boldsymbol{r},\omega)=i\omega\phi(\boldsymbol{r},\omega) \tag{2.37}$$

[*1] ベクトル解析の公式 $\nabla\times\nabla\times\boldsymbol{A}=\nabla(\nabla\cdot\boldsymbol{A})-\nabla^2\boldsymbol{A}$ を利用した．

[*2] 放射ゲージは，自由電荷が存在するが真電流は存在しない系で定義される，Coulomb ゲージの一種である．

とすることにより，$\phi'(\boldsymbol{r},\omega) = 0$ となる．よって，$\boldsymbol{A}' \to \boldsymbol{A}$ と置きなおすことによって，式 (2.25),(2.26),(2.32),(2.29) より，電荷密度 $\rho(\boldsymbol{r},t) = 0$ かつ電流密度 $\boldsymbol{i}(\boldsymbol{r},t) = 0$ の誘電体中の自由電磁波における，Maxwell 方程式と同等の方程式が導かれた．

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},\omega) = -i\omega\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},\omega) \tag{2.38}$$

$$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r},\omega) = \nabla\times\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},\omega) \tag{2.39}$$

$$\nabla^2\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},\omega) + \frac{\omega^2}{v^2(\omega)}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},\omega) = 0 \tag{2.40}$$

$$\nabla\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},\omega) = 0 \tag{2.41}$$

と与えられる．ただし，$v(\omega) = 1/\sqrt{\epsilon_0\mu_0\epsilon(\omega)\mu(\omega)}$ となる．式 (2.40) は **Helmholtz の方程式**として知られ，この方程式を適切な境界条件のもとで解き，式 (2.38)(2.39) に代入することで，任意の時刻 t，位置 $\boldsymbol{r}$ における電場 $\boldsymbol{E}$ と磁場 $\boldsymbol{B}$ を求めることができる．

2.2　一様媒質中の伝搬解

2.2.1　Maxwell 方程式と平面波解

前節で触れたとおり，電荷密度 $\rho(\boldsymbol{r},t) = 0$ と電流密度 $\boldsymbol{i}(\boldsymbol{r},t) = 0$ を満たす誘電体中の自由電磁波は式 (2.40) を解くことで求めることができる：

$$\nabla^2\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},\omega) + \frac{\omega^2}{v^2(\omega)}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},\omega) = 0\ . \tag{2.42}$$

式 (2.40) の最も単純な解は平面波解で,

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},\omega) = \boldsymbol{a_k}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \tag{2.43}$$

である．ただし，$\boldsymbol{k}$ は任意の値を取ることが許されず，媒質の性質により制限を受ける．$\boldsymbol{k}$ の条件は，式 (2.43) を式 (2.40) に代入することで得られる：

$$\left(-k^2 + \frac{\omega^2}{v(\omega)^2}\right)\boldsymbol{a_k}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} = 0\ . \tag{2.44}$$

ただし，$k = |\boldsymbol{k}|, v = |\boldsymbol{v}|$ とおいた．上式がすべての $\boldsymbol{r}$ で成り立つためには,

$$\omega = v(\omega)k = \frac{k}{\sqrt{\epsilon_0\mu_0\epsilon(\omega)\mu(\omega)}} \tag{2.45}$$

の条件を満たせば良い．角振動数 ω と波数 k との関係は**分散関係**と呼ばれる．$\epsilon(\omega)$ と $\mu(\omega)$ は媒質の媒質固有の性質から決まる物質定数であるため，分散関係は物質により異なる．また，一般に分散関係とは ω について解かれた,

$$\omega = \omega(k) \tag{2.46}$$

を指す場合が多い．上式は，ω の k 依存性を明示的に表現した表式である．

式 (2.44) の解として，平面波の式 (2.44) を仮定した場合，必ず分散関係として，式 (2.45) を満たす必要がある．式 (2.43) を ω に関して Fourier 変換することで，任意の時刻 t に対する $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t)$ を得ることができるが，その際，分散関係を満たす ω のみを選び出す必要がある．つまり，

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t) &= \int_{-\infty}^{-\infty} d\omega e^{-i\omega t} \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, \omega) \delta(\omega - \omega(k)) \\ &= \boldsymbol{a}_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - i\omega(k)t} \ . \end{aligned} \tag{2.47}$$

ただし，$\omega(k)$ は式 (2.45) を満たす．

平面波の位相速度

式 (2.47) は，任意の位置と場所における $\boldsymbol{A}$ を与えるので，平面波の同一位相面の進む速さを求めることもできる．時刻と位置を $t \to t + \Delta t$，$\boldsymbol{r} \to \boldsymbol{r} + \Delta \boldsymbol{r}$ のように少し変化させる：

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r} + \Delta\boldsymbol{r}, t + \Delta t) = \boldsymbol{a}_{\boldsymbol{k}} e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \omega(k)t) + i(\boldsymbol{k}\cdot\Delta\boldsymbol{r} - \omega(k)\Delta t)} \ . \tag{2.48}$$

位相部分が変化しないための条件から，同一位相面の移動速度，つまり位相速度 $\boldsymbol{v}_p$ は

$$\boldsymbol{v}_p = \frac{\Delta \boldsymbol{r}}{\Delta t} = \frac{\omega(k)}{k} = \boldsymbol{v}(\omega) \tag{2.49}$$

となる．ただし，式 (2.45) を用いた．位相速度 $\boldsymbol{v}_p$ は， Helmholtz の方程式 (2.44) の中で現れる $\boldsymbol{v}(\omega)$ と一致することが分かる．つまり，誘電体中を伝搬する電磁波の位相速度は,

$$\boldsymbol{v}_p = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0 \epsilon(\omega) \mu(\omega)}} = \frac{c}{n(\omega)} \tag{2.50}$$

で与えられる．c は真空中を伝搬する電磁波の位相速度で，誘電体中では電磁波は $n(\omega)$ の因子だけ遅くなることを表している．$n(\omega)$ は**屈折率**であり，一般に比誘電率，比透磁率を通して ω に依存する．つまり，異なる ω で構成される電磁波では位相速度が異なるために，電磁波の形がに分散する．

非分散性媒質の場合，もしくは単一の ω だけの電磁波の場合には，n は定数で扱うことができるので，位相速度は ω に依存しない．つまり，すべての ω で一定の速度 $\boldsymbol{v}_p = c/n$ で伝搬することになる．非分散性媒質の分散関係は

$$\omega = \frac{k}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0 \epsilon \mu}} = vk = \frac{c}{n} k \tag{2.51}$$

となる．本論文では，フォトニック結晶の構造による多重反射の効果を調べることが目的であるため，最も簡単な非分散性媒質に限定する．

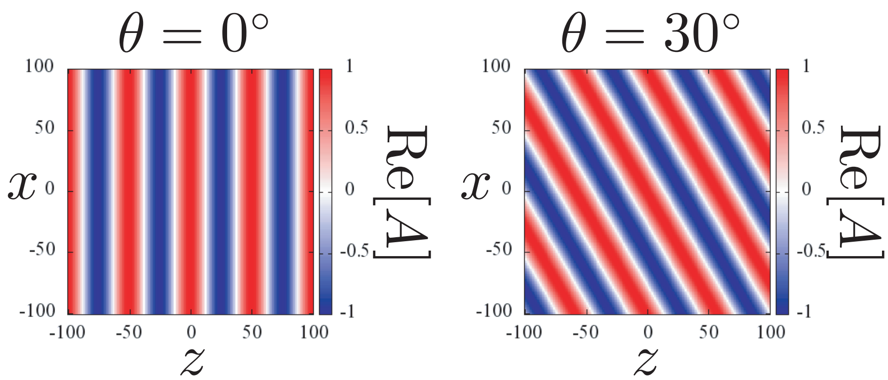

図 2.1　単一平面波におけるベクトルポテンシャルの空間強度分布．ただし，$k_0 = \frac{2\pi}{\lambda_0}$，$\lambda_0 = 500$[nm] として計算．赤と青色は振幅の正と負にそれぞれ対応する．

2.2.2　伝搬解の様々な形

一般的に，電磁波の伝搬解は平面波の重ねあわせで表現することができる．つまり，式 (2.45) で与えられる分散関係を満たしつつ，式 (2.43) の平面波を重ね合わせる：

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\boldsymbol{k}\ \boldsymbol{a}_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \delta(\omega - \omega(\boldsymbol{k}))\ . \tag{2.52}$$

ここで $\boldsymbol{a}_{\boldsymbol{k}}$ は波数 $\boldsymbol{k}$ の成分を与える．上式を，ω 関して Fourier 変換することで，任意の位置 $\boldsymbol{r}$ と時刻 t に関する振幅が得られる：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, \omega) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} \int_{-\infty}^{-\infty} d\boldsymbol{k}\ \boldsymbol{a}_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \delta(\omega - \omega(\boldsymbol{k})) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\boldsymbol{k}\ \boldsymbol{a}_{\boldsymbol{k}} e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \omega(k)t)}\ .\end{aligned} \tag{2.53}$$

$\boldsymbol{a}_{\boldsymbol{k}}$ を与えると $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t)$ が定まる．

単一波数の平面波の空間強度分布

式 (2.53) の $\boldsymbol{a}_{\boldsymbol{k}}$ を

$$\boldsymbol{a}_{\boldsymbol{k}} = \boldsymbol{a}_0 \delta(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}_0) \tag{2.54}$$

と与えると，波数ベクトルを $\boldsymbol{k}_0$ のみをもつ平面波となる:

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t) = e^{i(kz\cos\theta + kx\cos\theta) - i\omega t}\ . \tag{2.55}$$

図 2.1: fig/012.eps

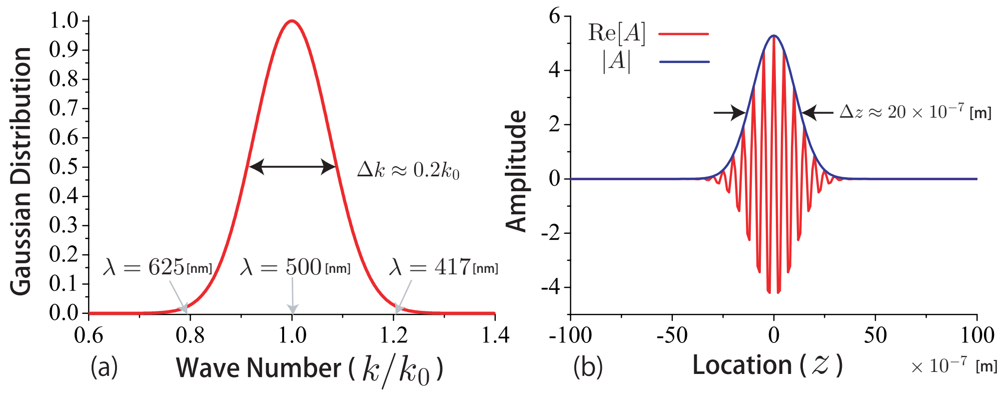

図 2.2　(a) 波数 k 空間のガウス分布と，(b) パルスの空間分布．ただし，$k_0 = \frac{2\pi}{\lambda_0}$，$\lambda_0 = 500$[nm], $\sigma = 0.1k_0$ として計算.

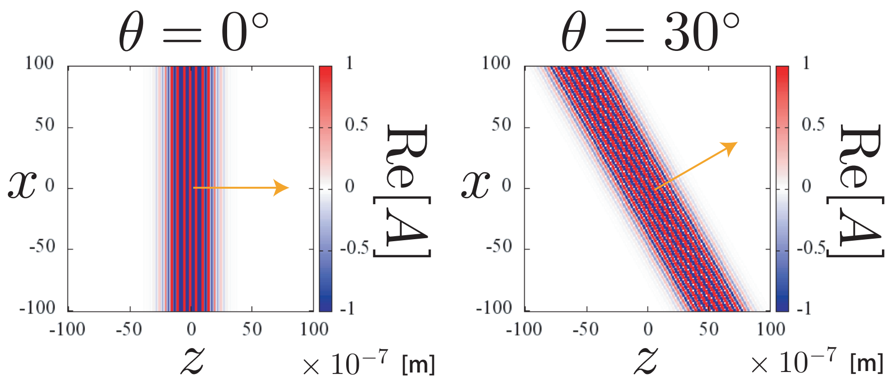

図 2.3　ガウシアンパルスによるベクトルポテンシャル $\boldsymbol{A}$ の空間強度分布．ただし，$k_0 = \frac{2\pi}{\lambda_0}$，$\lambda_0 = 500$[nm]，ガウス分布の幅は $\sigma = 0.1k_0$ として計算．進行方向を矢印で示した．

ただし，進行波は zx 平面を伝搬して，進行方向と z 軸となす角を θ とすると，波数ベクトルは $\boldsymbol{k}_0 = k_0(\sin\theta, 0, \cos\theta)$ となる．図 2.1 は波長が 500nm の平面波を描画した．赤と青色は振幅の正と負にそれぞれ対応する．

ガウシアンパルスの空間強度分布

次に，式 (2.53) の $\boldsymbol{a}_{\boldsymbol{k}}$ を

$$\boldsymbol{a}_{\boldsymbol{k}} = \boldsymbol{a}_0\, \delta(\boldsymbol{k} - (\boldsymbol{k}_0 + \boldsymbol{k}_{\parallel}))\, e^{-\left(\frac{\boldsymbol{k}_{\parallel}}{2\sigma n}\right)^2} \tag{2.56}$$

と与えると，進行方向と平行な 1 軸方向の波数がガウス分布するパルスとなる．σ が波数空間におけるガウス分布の幅はパルス幅を決めている．パルスの進行方向 $\boldsymbol{k}_0$ と平行成分 $k_{\parallel}$ が k_0

図 2.2: fig/014.eps
図 2.3: fig/013.eps

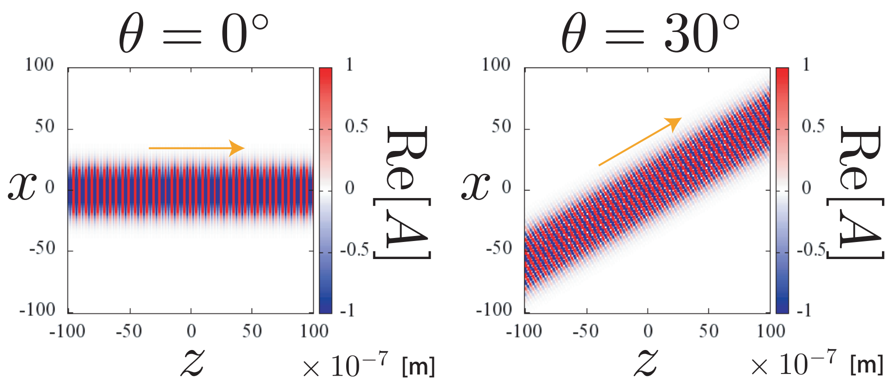

図 2.4　ガウシアンビームによるベクトルポテンシャルの空間強度分布．ただし，$k_0 = \frac{2\pi}{\lambda_0}$, $\lambda_0 = 500[\mathrm{nm}]$，ガウス分布の幅は $\sigma = 0.1k_0$ として計算．

を中心としてガウス分布している．ここではガウシアンパルスと呼ぶことにする:

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t) = \int_{-\infty}^{\infty} dk_\parallel \ \boldsymbol{a}_0 \ e^{i(\boldsymbol{k}_0+\boldsymbol{k}_\parallel)\cdot\boldsymbol{r}} \ e^{-i\omega t} \ e^{-\left(\frac{\boldsymbol{k}_\parallel}{2\sigma n}\right)^2} \tag{2.57}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dk_\parallel \ \boldsymbol{a}_0 \ e^{i\left\{(k_0+k_\parallel)z\cos\theta+(k_0+k_\parallel)x\cos\theta\right\}} \ e^{-i\omega t} \ e^{-\left(\frac{k_\parallel}{2\sigma n}\right)^2} . \tag{2.58}$$

ただし，$\boldsymbol{k}_\parallel = k_\parallel(\sin\theta, 0, \cos\theta)$ である．式 (2.58) は Gauss 積分を実行することで，具体的に計算することができる：

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t) &= \int_{-\infty}^{\infty} dk_\parallel \ \boldsymbol{a}_0 \ e^{i\left\{(k_0+k_\parallel)z\cos\theta+(k_0+k_\parallel)x\cos\theta\right\}} \ e^{-i\omega t} \ e^{-\left(\frac{k_\parallel}{2\sigma n}\right)^2} \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dk_\parallel \ \boldsymbol{a}_0 \ e^{-\frac{1}{4\sigma^2}\left[k^2-4\sigma^2 i\left\{z\cos\theta+x\cos\theta-\frac{c}{n}t\right\}k\right]} \ e^{ik_0(z\cos\theta+x\cos\theta)} \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dk_\parallel \ \boldsymbol{a}_0 \ e^{-\frac{1}{4\sigma^2}\left[k^2-2\sigma^2 i\left\{z\cos\theta+x\cos\theta-\frac{c}{n}t\right\}k\right]^2} \\
&\qquad\qquad \times e^{-4\sigma^4 n^2\left(z\cos\theta+x\cos\theta-\frac{c}{n}t\right)^2+ik_0(z\cos\theta+x\cos\theta)} \\
&= \boldsymbol{a}_0 \ 2\sigma\sqrt{\pi} \ e^{-\sigma^2 n^2\left(z\cos\theta+x\cos\theta-\frac{c}{n}t\right)^2+ik_0(z\cos\theta+x\cos\theta)} .
\end{aligned} \tag{2.59}$$

非分散性媒質の分散関係 $\omega = c/nk$ を適用している．式 (2.59) は，ガウシアンパルスの任意の時刻と位置におけるベクトルポテンシャルである．空間分布は図 2.3 で示す通り．

$\theta = 0$ の場合，

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t) = \boldsymbol{a}_0 \ 2\sigma\sqrt{\pi} \ e^{-\sigma^2 n^2\left(z-\frac{c}{n}t\right)^2+ik_0 z} \tag{2.60}$$

図 2.4: fig/016.eps

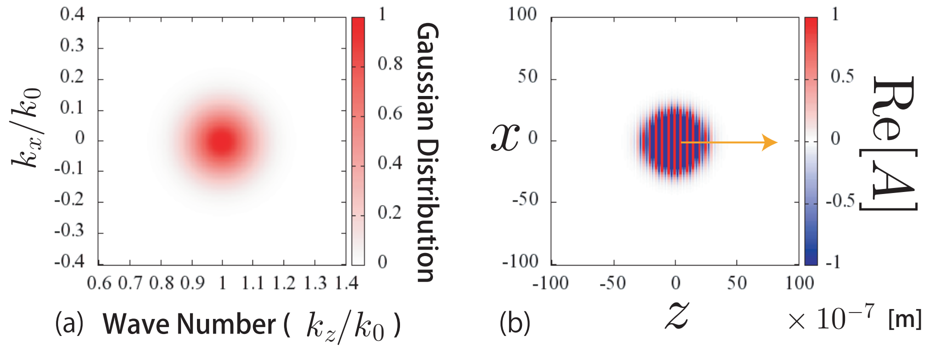

図 2.5　(a) 2 軸ガウシアンパルスにおけるガウス分布と，(b) ベクトルポテンシャルの空間強度分布．ただし，$k_0 = \frac{2\pi}{\lambda_0}$，$\lambda_0 = 500$[nm]，ガウス分布の幅は $\sigma = 0.1k_0$ として計算．進行方向を矢印で示した．

となり，z 方向に進行する波になる．式 (2.60) からパルス半値全幅 Δz とパルスの群速度 v_g が得られる：

$$\Delta z = \frac{1}{\sigma n}\sqrt{\log 2} \tag{2.61}$$
$$v_g = \frac{c}{n} \ . \tag{2.62}$$

屈折率 n が大きくなるにつれて実空間でのパルス幅は狭くなることを表している．非分散媒質中では，パルスの群速度 v_g と位相速度 v_p は一致する．$\sigma = 0.1k_0$ におけるガウス分布とガウスパルスの空間強度分布は図 2.2 に示した．

ガウシアンビームの空間強度分布

次に，式 (2.53) の $\boldsymbol{a_k}$ を

$$\boldsymbol{a_k} = \boldsymbol{a}_0\ \delta(\boldsymbol{k} - (\boldsymbol{k}_0 + \boldsymbol{k}_\perp))\ e^{-\left(\frac{\boldsymbol{k}_\perp}{2\sigma}\right)^2} \tag{2.63}$$

と与えると，進行方向と垂直な 1 軸に対して波数がガウス分布する電磁波となる．σ が波数空間におけるガウス分布の幅はビームの幅を決めている．パルスの進行方向 $\boldsymbol{k}_0$ と垂直成分 $k_\perp$ が k_0 を中心としてガウス分布している．ここではガウシアンビームと呼ぶ．

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t) = \int_{-\infty}^{-\infty} dk_\perp\ \boldsymbol{a}_0\ e^{i(\boldsymbol{k}_0 + \boldsymbol{k}_\perp)\cdot\boldsymbol{r}}\ e^{-i\omega t}\ e^{-\left(\frac{\boldsymbol{k}_\perp}{2\sigma}\right)^2} \tag{2.64}$$
$$= \int_{-\infty}^{-\infty} dk_\perp\ \boldsymbol{a}_0\ e^{i\{(k_0\cos\theta - k_\perp\sin\theta)z + (k_0\sin\theta + k_\perp\cos\theta)x\}}\ e^{-i\omega t}\ e^{-\left(\frac{k_\perp}{2\sigma}\right)^2} \tag{2.65}$$

ただし，$\boldsymbol{k}_\perp = k_\perp(-\cos\theta, 0, \sin\theta)$ である．$\sigma = 0.1k_0$ におけるガウシアンビームの空間強度分布は図 2.4 に示した．

図 2.5: fig/023.eps

２軸ガウシアンパルスの空間強度分布

最後に，式 (2.53) の $\boldsymbol{a}_{\boldsymbol{k}}$ を

$$\boldsymbol{a}_{\boldsymbol{k}} = \boldsymbol{a}_0\ \delta(\boldsymbol{k} - (\boldsymbol{k}_0 + \boldsymbol{k}_{|} + \boldsymbol{k}_{\perp}))\ e^{-\left(\frac{\boldsymbol{k}_{\parallel}+\boldsymbol{k}_{\perp}}{2\sigma}\right)^2} \tag{2.66}$$

と与えると，進行方向に対して平行軸と垂直軸に対して波数がガウス分布するパルスとなる．つまり，パルスの進行方向 $\boldsymbol{k}_0$ に対して，波数の z 成分 k_z と x 成分 k_x とが k_0 を中心としてガウス分布している場合を考える．ここでは２軸ガウシアンパルスと呼ぶことにする．

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t) &= \int_{-\infty}^{-\infty} dk_{\parallel} \int_{-\infty}^{-\infty} dk_{\perp}\ \boldsymbol{a}_0\ e^{i(\boldsymbol{k}_0+\boldsymbol{k}_{\parallel}+\boldsymbol{k}_{\perp})\cdot\boldsymbol{r}}\ e^{-i\omega t}\ e^{-\left(\frac{\boldsymbol{k}_{\parallel}+\boldsymbol{k}_{\perp}}{2\sigma}\right)^2} \\
&= \int_{-\infty}^{-\infty} dk_{\parallel} \int_{-\infty}^{-\infty} dk_{\perp}\ \boldsymbol{a}_0\ e^{i\left[\left\{(k_0+k_{\parallel})\cos\theta - k_{\perp}\sin\theta)\right\}z + \left\{(k_0+k_{\parallel})\sin\theta + k_{\perp}\cos\theta\right\}x\right]} \\
&\qquad \times e^{-i\omega t}\ e^{-\left(\frac{k_{\parallel}}{2\sigma}\right)^2 - \left(\frac{k_{\perp}}{2\sigma}\right)^2} \\
&= \int_{-\infty}^{-\infty} dk_z \int_{-\infty}^{-\infty} dk_x\ \boldsymbol{a}_0\ e^{i(k_z z + k_x x)}\ e^{-i\omega t}\ e^{-\left(\frac{k_z - k_0\cos\theta}{2\sigma}\right)^2 - \left(\frac{k_x - k_0\sin\theta}{2\sigma}\right)^2}
\end{aligned} \tag{2.67}$$

２軸ガウシアンパルスにおけるガウス分布とベクトルポテンシャルの空間強度分布は図 2.5 に示した．

2.3 電磁波の反射と屈折

一様な媒質中を伝搬してきた電磁波は，異なる媒質の境界面に差し掛かると，透過波と反射波とに分けられる．本節では，式 (2.38),(2.39),(2.40),(2.41) で与えられた Maxwell 方程式から境界面における境界条件を導出し，入射波，反射波，透過波の関係を表す透過係数，反射係数を導出する．

2.3.1 境界条件

誘電率 ϵ_1 と透磁率 μ_1 の媒質１と，誘電率 ϵ_2 と透磁率 μ_2 の媒質２の境界面における電磁波が満たすべき条件を導出する．各媒質内での電磁波は，式 (2.38),(2.39),(2.40),(2.41) で与えられた Maxwell 方程式

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}, \omega) = -i\omega \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, \omega) \tag{2.68}$$

$$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r}, \omega) = \nabla \times \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, \omega) \tag{2.69}$$

$$\nabla^2 \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, \omega) + \frac{\omega^2}{v^2(\omega)} \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, \omega) = 0 \tag{2.70}$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, \omega) = 0 \tag{2.71}$$

を満たす．ただし，$v(\omega) = c/\sqrt{\epsilon(\omega)\mu(\omega)}$ である．図 2.6 は，媒質 1,2 による境界面の模式図である．式 (2.71) より電磁波は進行方向に対して，直角の方向に電磁波の振幅を持つ．電磁

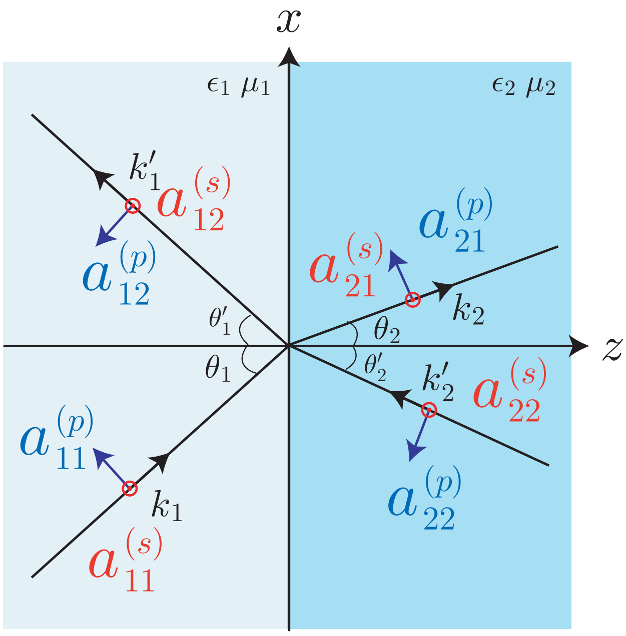

図 2.6 媒質 1,2 による境界面の模式図．媒質 1,2 の誘電率と透磁率はそれぞれ ϵ_1, ϵ_2 と μ_1, μ_2 とする．また，(s) は S 偏光，(p) 偏光を表す．

波の境界面付近での振舞いは，電磁波の境界面と並行な成分とその他の成分では異なるため，分けて考える必要がある．境界面と並行な成分は s 偏光と呼ばれ，一方，残りの成分は p 偏光と呼ばれる．

図 2.6 で図示したとおり，各媒質における電磁波を区別するために添字を多用する．媒質 1 中の進行波（z 軸方向に進行する波）の波数ベクトル $\boldsymbol{k}_1$，後進波（$-z$ 軸方向に進行する波）の波数ベクトル $\boldsymbol{k}'_1$ を

$$\boldsymbol{k}_1 = k_1(\sin\theta_1, 0, \cos\theta'_1) \tag{2.72}$$
$$\boldsymbol{k}'_1 = k'_1(\sin\theta_1, 0, -\cos\theta'_1) \tag{2.73}$$

と表した場合，媒質 1 の進行波 $\boldsymbol{A}_{11}$ と後進波 $\boldsymbol{A}_{12}$ は各偏光の振幅を用いて，

$$\boldsymbol{A}_{11} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(p)}\cos\theta_1 \\ a_{11}^{(s)} \\ -a_{11}^{(p)}\sin\theta_1 \end{pmatrix} e^{i\boldsymbol{k}_1\cdot\boldsymbol{r}} \quad , \quad \boldsymbol{A}_{12} = \begin{pmatrix} -a_{12}^{(p)}\cos\theta'_1 \\ a_{12}^{(s)} \\ -a_{12}^{(p)}\sin\theta'_1 \end{pmatrix} e^{i\boldsymbol{k}'_1\cdot\boldsymbol{r}} \tag{2.74}$$

と表すことができる．

同様に，媒質 2 中の進行波の波数ベクトル $\boldsymbol{k}_2$ と，反対向きに進行する波の波数ベクトル $\boldsymbol{k}'_2$ を

$$\boldsymbol{k}_2 = k_2(\sin\theta_2, 0, \cos\theta'_2) \tag{2.75}$$
$$\boldsymbol{k}'_2 = k'_2(\sin\theta_2, 0, -\cos\theta'_2) \tag{2.76}$$

図 2.6: fig/000-2.eps

と表した場合，媒質 2 の進行波 $\boldsymbol{A}_{11}$ と後進波 $\boldsymbol{A}_{12}$ は各偏光の振幅を用いて，

$$\boldsymbol{A}_{21}=\begin{pmatrix} a_{21}^{(p)}\cos\theta_2 \\ a_{21}^{(s)} \\ -a_{21}^{(p)}\sin\theta_2 \end{pmatrix} e^{i\boldsymbol{k}_2\cdot\boldsymbol{r}} \quad , \quad \boldsymbol{A}_{22}=\begin{pmatrix} -a_{22}^{(p)}\cos\theta_2' \\ a_{22}^{(s)} \\ -a_{22}^{(p)}\sin\theta_2' \end{pmatrix} e^{i\boldsymbol{k}_2'\cdot\boldsymbol{r}} \tag{2.77}$$

と表すことができる．また，各媒質における電磁波は，進行波と後進波の和で表される

$$\boldsymbol{A}_1=\boldsymbol{A}_{11}+\boldsymbol{A}_{12} \tag{2.78}$$

$$\boldsymbol{A}_2=\boldsymbol{A}_{21}+\boldsymbol{A}_{22}\ . \tag{2.79}$$

これらの表式から，境界面における電磁波の接続条件を導出することができる．

境界面ををまたぐ微小領域における，$\boldsymbol{E},\boldsymbol{H},\boldsymbol{D},\boldsymbol{B}$ の接続を考えると，境界面における接続条件は次のようにまとめられる．

- $\boldsymbol{E},\boldsymbol{H}$ の境界面と平行成分が連続
- $\boldsymbol{D},\boldsymbol{B}$ の境界面と垂直成分が連続

Maxwell 方程式 (2.68)，(2.69) に式 (2.79) を代入し，接続条件を課す．

初めに $\boldsymbol{E}$ の境界面における接続について考える．媒質 1 と 2 の電場は，

$$\begin{aligned}\boldsymbol{E}_1(\boldsymbol{r},\omega)&=-i\omega\boldsymbol{A}_1(\boldsymbol{r},\omega)\\&=-i\omega\begin{pmatrix} a_{11}^{(p)}\cos\theta_1 e^{i\boldsymbol{k}_1\cdot\boldsymbol{r}}-a_{12}^{(p)}\cos\theta_1' e^{i\boldsymbol{k}_1'\cdot\boldsymbol{r}} \\ a_{11}^{(s)}e^{i\boldsymbol{k}_1\cdot\boldsymbol{r}}+a_{12}^{(s)}e^{i\boldsymbol{k}_1'\cdot\boldsymbol{r}} \\ -a_{11}^{(p)}\sin\theta_1 e^{i\boldsymbol{k}_1\cdot\boldsymbol{r}}-a_{12}^{(p)}\sin\theta_1' e^{i\boldsymbol{k}_1'\cdot\boldsymbol{r}} \end{pmatrix}\end{aligned} \tag{2.80}$$

と

$$\begin{aligned}\boldsymbol{E}_2(\boldsymbol{r},\omega)&=-i\omega\boldsymbol{A}_2(\boldsymbol{r},\omega)\\&=-i\omega\begin{pmatrix} a_{21}^{(p)}\cos\theta_2 e^{i\boldsymbol{k}_1\cdot\boldsymbol{r}}-a_{22}^{(p)}\cos\theta_2' e^{i\boldsymbol{k}_2'\cdot\boldsymbol{r}} \\ a_{21}^{(s)}e^{i\boldsymbol{k}_2\cdot\boldsymbol{r}}+a_{22}^{(s)}e^{i\boldsymbol{k}_2'\cdot\boldsymbol{r}} \\ -a_{21}^{(p)}\sin\theta_2 e^{i\boldsymbol{k}_1\cdot\boldsymbol{r}}-a_{22}^{(p)}\sin\theta_2' e^{i\boldsymbol{k}_2'\cdot\boldsymbol{r}} \end{pmatrix}\end{aligned} \tag{2.81}$$

である．境界面上の任意の位置 $(x,y,0)$ で，境界面と並行成分が連続 $\boldsymbol{E}_{1\parallel}(x,y,z=0;t)=\boldsymbol{E}_{2\parallel}(x,y,z=0;t)$ である必要がある．先ず，y 成分が連続である条件から，

$$a_{11}^{(s)}e^{i\boldsymbol{k}_1\cdot\boldsymbol{r}}+a_{12}^{(s)}e^{i\boldsymbol{k}_1'\cdot\boldsymbol{r}}=a_{21}^{(s)}e^{i\boldsymbol{k}_1\cdot\boldsymbol{r}}+a_{22}^{(s)}e^{i\boldsymbol{k}_1'\cdot\boldsymbol{r}} \tag{2.82}$$

となるが，境界面上のすべての点 $(x,y,0)$ で成り立つためには，

$$a_{11}^{(s)}+a_{12}^{(s)}=a_{21}^{(s)}+a_{22}^{(s)} \tag{2.83}$$

$$k_1\sin\theta_1=k_2\sin\theta_2 \tag{2.84}$$

$$k_1=k_1' \quad , \quad k_2=k_2' \tag{2.85}$$

を満たす必要がある．ただし，$k_1=|\boldsymbol{k}_1|,k_2=|\boldsymbol{k}_2|$ である．式 (2.84) は，**スネルの法則**として知られている．次に，x 成分を比較すると

$$(a_{11}^{(p)}-a_{12}^{(p)})\cos\theta_1=(a_{21}^{(p)}-a_{22}^{(p)})\cos\theta_2 \tag{2.86}$$

が得られる．

次に $\boldsymbol{D}$ の境界面における接続を $\boldsymbol{D}=\epsilon_0\epsilon\boldsymbol{E}$ を考慮して考える．z 成分が境界面上のすべての点 $(x,y,0)$ で連続となるためには,

$$\epsilon_1(a_{11}^{(p)}+a_{12}^{(p)})\sin\theta_1=\epsilon_2(a_{21}^{(p)}+a_{22}^{(p)})\sin\theta_2 \tag{2.87}$$

$$\sqrt{\epsilon_1\mu_1}\sin\theta_1=\sqrt{\epsilon_2\mu_2}\sin\theta_2 \tag{2.88}$$

を満たす必要がある．式 (2.87), (2.88) より

$$\sqrt{\frac{\epsilon_1}{\mu_1}}(a_{11}^{(p)}+a_{12}^{(p)})=\sqrt{\frac{\epsilon_2}{\mu_2}}(a_{21}^{(p)}+a_{22}^{(p)}) \tag{2.89}$$

が得られる．

次に $\boldsymbol{B}$ の境界面における接続について考える．$\boldsymbol{B}$ は $\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}=i\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{A}$ の関係を用いて,

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{B}_1(\boldsymbol{r},\omega)&=i(\boldsymbol{k}_1\times\boldsymbol{A}_{11}(\boldsymbol{r},\omega)+\boldsymbol{k}'_1\times\boldsymbol{A}_{12}(\boldsymbol{r},\omega))\\
&=i\begin{pmatrix}-k_zA_{11y}-k'_zA_{12y}\\(k_zA_{11x}-k_xA_{11z})+(k'_zA_{12x}-k'_xA_{12z})\\(k_xA_{11y}-k'_xA_{12y})\end{pmatrix}\\
&=i\begin{pmatrix}(-a_{11}^{(s)}e^{i\boldsymbol{k}_1\cdot\boldsymbol{r}}+a_{12}^{(s)}e^{i\boldsymbol{k}'_1\cdot\boldsymbol{r}})k_1\cos\theta_1\\a_{11}^{(p)}k_1e^{i\boldsymbol{k}_1\cdot\boldsymbol{r}}+a_{12}^{(p)}k_2e^{i\boldsymbol{k}'_1\cdot\boldsymbol{r}}\\(a_{11}^{(s)}e^{i\boldsymbol{k}_1\cdot\boldsymbol{r}}+a_{12}^{(s)}e^{i\boldsymbol{k}'_1\cdot\boldsymbol{r}})k_1\sin\theta_1\end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{2.90}$$

と表すことができる．$\boldsymbol{B}$ の z 成分の接続条件から,

$$\begin{aligned}
k_1\sin\theta_1(a_{11}^{(s)}+a_{12}^{(s)})&=k_2\sin\theta_2(a_{21}^{(s)}+a_{22}^{(s)})\\
a_{11}^{(s)}+a_{12}^{(s)}&=a_{21}^{(s)}+a_{22}^{(s)}
\end{aligned} \tag{2.91}$$

が得られる．式 (2.84) のスネルの法則を考慮すると，式 (2.91) は式 (2.83) と同じになる．

最後に $\boldsymbol{H}$ の境界面における接続 $\boldsymbol{H}=1/\mu_0\mu\boldsymbol{D}$ を考慮して考える．境界面上の任意の位置（$(x,y,0)$）で，境界面と並行成分が連続 $\boldsymbol{H}_{1\parallel}(x,y,z=0;t)=\boldsymbol{H}_{2\parallel}(x,y,z=0;t)$ である必要がある．先ず，x 成分が連続である条件から,

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\mu_0\mu_1}\left\{k_1\cos\theta_1(-a_{11}^{(s)}+a_{12}^{(s)})\right\}&=\frac{1}{\mu_0\mu_2}\left\{k_2\cos\theta_2(-a_{21}^{(s)}+a_{22}^{(s)})\right\}\\
\sqrt{\frac{\epsilon_1}{\mu_1}}\cos\theta_1(-a_{11}^{(s)}+a_{12}^{(s)})&=\sqrt{\frac{\epsilon_2}{\mu_2}}\cos\theta_2(-a_{21}^{(s)}+a_{22}^{(s)})
\end{aligned} \tag{2.92}$$

ただし，１行目から２行目へは $k_1/k_2=\sqrt{\mu_1\epsilon_1}/\sqrt{\mu_2\epsilon_2}$ を用いた．次に，y 成分が連続である条件から,

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\mu_0\mu_1}\left\{k_1(a_{11}^{(p)}+a_{12}^{(p)})\right\}&=\frac{1}{\mu_0\mu_2}\left\{k_2(a_{21}^{(p)}+a_{22}^{(p)})\right\}\\
\sqrt{\frac{\epsilon_1}{\mu_1}}(a_{11}^{(p)}+a_{12}^{(p)})&=\sqrt{\frac{\epsilon_2}{\mu_2}}(a_{21}^{(p)}+a_{22}^{(p)})
\end{aligned} \tag{2.93}$$

が得られるが，これは式 (2.89) と同じである．

以上を整理すると，s 偏光に関しては

$$a_{11}^{(s)} + a_{12}^{(s)} = a_{21}^{(s)} + a_{22}^{(s)} \tag{2.94}$$

$$\sqrt{\frac{\epsilon_1}{\mu_1}} \cos\theta_1 (a_{11}^{(s)} - a_{12}^{(s)}) = \sqrt{\frac{\epsilon_2}{\mu_2}} \cos\theta_2 (a_{21}^{(s)} - a_{22}^{(s)}) \tag{2.95}$$

となる．式 (2.94) は，E_y, B_z の連続条件から，式 (2.95) は，H_x の連続条件から求められた．

また，p 偏光に関しては

$$\sqrt{\frac{\epsilon_1}{\mu_1}} (a_{11}^{(p)} + a_{12}^{(p)}) = \sqrt{\frac{\epsilon_2}{\mu_2}} (a_{21}^{(p)} + a_{22}^{(p)}) \tag{2.96}$$

$$(a_{11}^{(p)} - a_{12}^{(p)}) \cos\theta_1 = (a_{21}^{(p)} - a_{22}^{(p)}) \cos\theta_2 \tag{2.97}$$

となる．式 (2.96) は，E_x の連続条件から，式 (2.97) は，D_z, H_y の連続条件から求められた．

式 (2.94),(2.95),(2.96),(2.97) を見ると，物質定数 μ, ϵ は必ず $\sqrt{\epsilon/\mu}$ の形であらわれる．つまり，境界面での振舞いはインピーダンス $Z \equiv \sqrt{\mu/\epsilon}$ で定義される量が重要となる．媒質１, ２におけるインピーダンスは,

$$Z_1 \equiv \sqrt{\frac{\mu_1}{\epsilon_1}} Z_0 \quad , \quad Z_2 \equiv \sqrt{\frac{\mu_2}{\epsilon_2}} Z_0 \tag{2.98}$$

と表すことができ，式 (2.94),(2.95),(2.96),(2.97) は次のようにまとめることができる：

$$a_{11}^{(s)} + a_{12}^{(s)} = a_{21}^{(s)} + a_{22}^{(s)} \tag{2.99}$$

$$\frac{\cos\theta_1}{Z_1} (a_{11}^{(s)} - a_{12}^{(s)}) = \frac{\cos\theta_2}{Z_2} (a_{21}^{(s)} - a_{22}^{(s)}) \tag{2.100}$$

$$\frac{1}{Z_1} (a_{11}^{(p)} + a_{12}^{(p)}) = \frac{1}{Z_2} (a_{21}^{(p)} + a_{22}^{(p)}) \tag{2.101}$$

$$\cos\theta_1 (a_{11}^{(p)} - a_{12}^{(p)}) = \cos\theta_2 (a_{21}^{(p)} - a_{22}^{(p)}) \,. \tag{2.102}$$

通常の誘電体を考える場合，透磁率は $\mu \simeq 1$ であるため，$Z = 1/n$ の関係がある．

2.3.2　透過係数と反射係数

s 偏光における関係式 (2.99),(2.100) と p 偏光における関係式 (2.101),(2.102) はそれぞれ４つの未知の量に対して方程式が２つである．つまり，媒質２における振幅 a_{21}, a_{22} を媒質１における振幅 a_{11}, a_{12} で表すことができる．

s 偏光については，(2.99)+(2.99)$\times \cos\theta_2/Z_2$ より，

$$a_{21}^{(s)} = \frac{1}{2} \left[(1 + \frac{Z_2}{Z_1} \frac{\cos\theta_1}{\cos\theta_2}) a_{11}^{(s)} + (1 - \frac{Z_2}{Z_1} \frac{\cos\theta_1}{\cos\theta_2}) a_{12}^{(s)} \right] \tag{2.103}$$

$$\begin{aligned} a_{22}^{(s)} &= a_{11}^{(s)} + a_{12}^{(s)} - a_{21}^{(s)} \\ &= \frac{1}{2} \left[(1 - \frac{Z_2}{Z_1} \frac{\cos\theta_1}{\cos\theta_2}) a_{11}^{(s)} + (1 + \frac{Z_2}{Z_1} \frac{\cos\theta_1}{\cos\theta_2}) a_{12}^{(s)} \right] \end{aligned} \tag{2.104}$$

となる．

同様に，p 偏光については，(2.101)$\times\cos\theta_2$+(2.99)$/Z_2$ より，

$$a_{21}^{(p)} = \frac{1}{2}\left[(\frac{Z_2}{Z_1}+\frac{\cos\theta_1}{\cos\theta_2})a_{11}^{(p)}+(\frac{Z_2}{Z_1}-\frac{\cos\theta_1}{\cos\theta_2})a_{12}^{(p)}\right] \tag{2.105}$$

$$\begin{aligned} a_{22}^{(p)} &= \frac{Z_2}{Z_1}(a_{11}^{(p)}+a_{12}^{(p)})-a_{21}^{(p)} \\ &= \frac{1}{2}\left[(\frac{Z_2}{Z_1}-\frac{\cos\theta_1}{\cos\theta_2})a_{11}^{(p)}+(\frac{Z_2}{Z_1}+\frac{\cos\theta_1}{\cos\theta_2})a_{12}^{(p)}\right] \end{aligned} \tag{2.106}$$

となる．

また，これらの式から単一境界面における透過係数と反射係数を導出することができる．s 偏光による媒質 1 から媒質 2 への入射を考える．a_{11} を入射波とした場合，反射波と透過波はそれぞれ a_{12} と a_{21} であり，$a_{22}=0$ である．s 偏光の反射率と透過率をそれぞれ $r^{(s)}$，$t^{(s)}$ で表すと，

$$r^{(s)} = \frac{a_{12}^{(s)}}{a_{11}^{(s)}} = \frac{-Z_1\cos\theta_2+Z_2\cos\theta_1}{Z_1\cos\theta_2+Z_2\cos\theta_1} \tag{2.107}$$

$$t^{(s)} = \frac{a_{21}^{(s)}}{a_{11}^{(s)}} = \frac{2Z_2\cos\theta_1}{Z_1\cos\theta_2+Z_2\cos\theta_1} \tag{2.108}$$

となる．同様に，p 偏光の反射率と透過率をそれぞれ $r^{(p)}$，$t^{(p)}$ で表すと，

$$r^{(p)} = \frac{a_{12}^{(p)}}{a_{11}^{(p)}} = \frac{-Z_2\cos\theta_2+Z_1\cos\theta_1}{Z_1\cos\theta_1+Z_2\cos\theta_2} \tag{2.109}$$

$$t^{(p)} = \frac{a_{21}^{(p)}}{a_{11}^{(p)}} = \frac{2Z_2\cos\theta_1}{Z_1\cos\theta_1+Z_2\cos\theta_2} \tag{2.110}$$

となる．s 偏光，p 偏光の透過係数と反射係数の関係は，

$$t_{12}^{(s)} - r_{12}^{(s)} = 1 \tag{2.111}$$

$$\frac{Z_1}{Z_2}(t_{12}^{(p)} - r_{12}^{(p)}) = 1 \tag{2.112}$$

となる．

式 (2.107)(2.108)(2.109)(2.110) より境界面が 1 つの場合，透過係数 r 並びに反射係数 t は入射波の角度 θ_1 に依存する一方で，周波数 ω（波長 λ）には依存しない．しかしながら，偏光によってその振る舞いは異なる．さらに，インピーダンスの大きな媒質から小さな媒質への伝搬の際に起こる反射（外部反射）と，逆にインピーダンスの小さな媒質から大きな媒質への伝搬の際に起こる反射（内部反射）では，その振る舞いが大きく異なる．

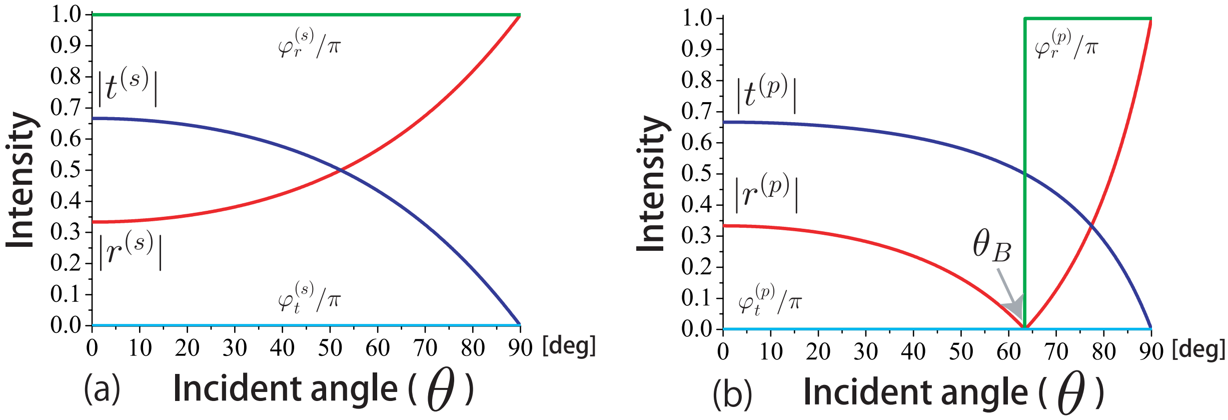

図 2.7　外部反射における透過係数・反射係数の入射角度依存性．(a)s 偏光の場合．(b)p 偏光の場合．$n_1 = 1.0, n_2 = 2.0$ にて計算．p 偏光では反射係数が 0 となるブリュースター角 θ_B が存在する．

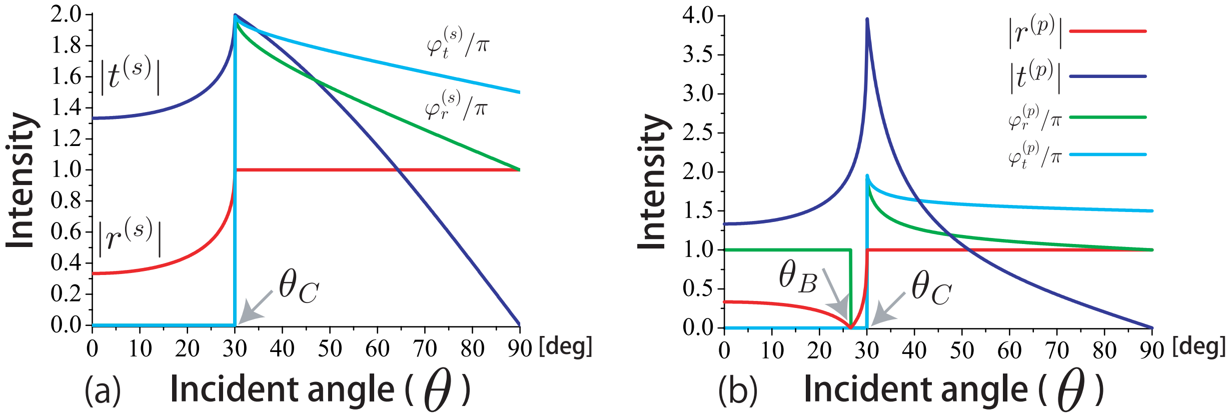

図 2.8　内部反射における透過係数・反射係数の入射角度依存性．(a)s 偏光の場合．(b)p 偏光の場合．$n_1 = 2.0, n_2 = 1.0$ にて計算．s 偏光,p 偏光ともに反射係数の振幅が 1 となる臨界角 θ_C が存在する．

s 偏光，p 偏光の透過係数と反射係数の入射角度依存性

次に，1 境界面における透過係数と反射係数の角度依存性を計算する．媒質は通常の誘電体（$\mu \simeq 1$）なので，$Z = 1/n$ である．　図 2.7 は外部反射（n の小さい領域から大きい領域への入射），図 2.8 は内部反射（n の大きい領域から小さい領域への入射）における透過係数と反射係数の角度依存性の計算結果である．ただし，偏角 φ_r,φ_t は，

$$r = |r|e^{i\varphi_r} \quad , \quad t = |t|e^{i\varphi_t} \tag{2.113}$$

と定義する．

図 2.7: fig/002-2.eps
図 2.8: fig/007-2.eps

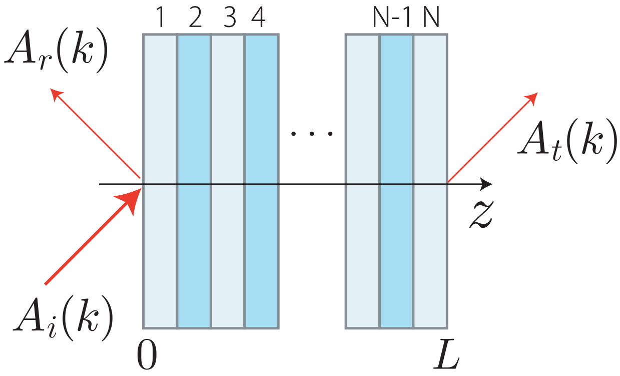

図 2.9　1 次元フォトニック結晶の模式図

外部反射の場合（図 2.7），s 偏光に対する反射係数と透過係数は，入射角 θ を変化に対して単調に振舞う一方，p 偏光では反射係数が 0 となる角度が存在する．この入射角度はブリュースター角 θ_B と呼ばれ，$r_{12}^{(p)} = 0$ から，

$$\theta_B = \arctan\left(\frac{n_2}{n_1}\right) \tag{2.114}$$

で得られる．また，ブリュースター角を境に反射波の位相が反転する．

内部反射の場合（図 2.8），s 偏光，p 偏光とも反射係数の振幅が 1 となる角度が存在する．この入射角度は臨界角 θ_C と呼ばれ，$\theta_2 = 90°$ から，

$$\theta_C = \arcsin\left(\frac{n_2}{n_1}\right) \tag{2.115}$$

で得られる．入射角が臨界角を超えた場合，θ_2 が純虚数となるため，媒質 2 の領域には伝搬解が存在しなくなる．しかしながら，境界面での接続条件から媒質 2 の領域の電磁波が急に 0 になるのではなく，境界面から指数関数的に減衰するエバネッセント波が存在する．

2.4　1 次元フォトニック結晶における転送行列法

2.4.1　転送行列の記述

転送行列法とは，電磁波の入射波 $A_i(k)$，反射波 $A_r(k)$，透過波 $A_t(k)$ の関係を行列を用いて表すのに非常に有用な手法として知られる．図 2.9 のような N 層から成る 1 次元フォトニック結晶の場合，

$$\begin{pmatrix} A_t^{(*)}(k) & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_i^{(*)}(k) & A_r^{(*)}(k) \end{pmatrix} M \tag{2.116}$$

と表すことができる．ただし，本論文では電磁波の振幅を表す行列が横行列にとっている．$(*)$ は s 偏光 (s) あるいは p 偏光 (p) を表わし，

$$M = M_{01}^{(*)} M_1 M_{12}^{(*)} M_2 \cdots M_N M_{N,N+1}^{(*)} \tag{2.117}$$

図 2.9: fig/007.eps

である．$M_{j,j+1}$ は j 番目と $j+1$ 番目の媒質間の関係を表す行列，M_j は j 番目の媒質の両端をつなぐ行列を意味する．具体的には,

$$M^{(s)}_{j,j+1} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1+\frac{Z_{j+1}}{Z_j}\frac{\cos\theta_j}{\cos\theta_{j+1}} & 1-\frac{Z_{j+1}}{Z_1}\frac{\cos\theta_j}{\cos\theta_{j+1}} \\ 1-\frac{Z_{j+1}}{Z_j}\frac{\cos\theta_j}{\cos\theta_{j+1}} & 1+\frac{Z_{j+1}}{Z_j}\frac{\cos\theta_j}{\cos\theta_{j+1}} \end{pmatrix} \tag{2.118}$$

$$M^{(p)}_{j,j+1} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \frac{Z_{j+1}}{Z_j}+\frac{\cos\theta_j}{\cos\theta_{j+1}} & \frac{Z_{j+1}}{Z_j}-\frac{\cos\theta_j}{\cos\theta_{j+1}} \\ \frac{Z_{j+1}}{Z_j}-\frac{\cos\theta_j}{\cos\theta_{j+1}} & \frac{Z_{j+1}}{Z_j}+\frac{\cos\theta_j}{\cos\theta_{j+1}} \end{pmatrix} \tag{2.119}$$

と,

$$M_j = \begin{pmatrix} e^{i\delta_j} & 0 \\ 0 & e^{-i\delta_j} \end{pmatrix} \tag{2.120}$$

となる．ただし，$\delta_j \equiv n_j d_j k$ は j 番目の層の両端における電磁波の位相差を表す．式 (2.118),(2.118) はそれぞれ，式 (2.103),(2.104),(2.105),(2.106) より導くことができる．また，$j=0$ は入射波と反射波を観測する媒質，$N+1$ は透過波を観測する媒質を表す.

2.4.2　転送行列の一般的性質

式 (2.116) の M は入射波，透過波，反射波の関係を表すので，M の行列要素 $\begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix}$ から透過係数 $t(k)$，反射係数 $r(k)$ が得られる：

$$t(k) \equiv \frac{A_t}{A_i} = \frac{\det M}{m_{22}} \quad , \quad r(k) \equiv \frac{A_r}{A_i} = -\frac{m_{12}}{m_{22}} \; . \tag{2.121}$$

一般的に $\det M = 1$ ではない．$\det M = 1$ を満たすための必要十分条件は,「$j=0$ の媒質と $j=N+1$ の媒質が同じ」ことである．つまり，フォトニック結晶外の媒質が入射側と透過側で同じということである．$\det M = 1$ を満たす場合，転送行列は M は $t(k)$ と $r(k)$ を用いて,

$$M = \begin{pmatrix} \dfrac{1}{t^*(k)} & -\dfrac{r}{t(k)} \\ -\dfrac{r^*(k)}{t^*(k)} & \dfrac{1}{t(k)} \end{pmatrix} \tag{2.122}$$

と表すことができる．これは M がユニタリー行列（$A^{-1} = A^*$）であることを表している．またさらに，$\det M = 1$ であるため固有値 $\lambda_\pm$ は M のトレース $\mathrm{Tr}M$ のみで表すことができる：

$$\lambda_\pm = x(k) \pm i\sqrt{1-x(k)^2} \tag{2.123}$$
$$\tag{2.124}$$

ただし，x は,

$$x \equiv \frac{1}{2}\mathrm{Tr}M(k) = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{t(k)} + \frac{1}{t^*(k)}\right) \; . \tag{2.125}$$

である．式 (2.125) が意味することは,

$$|x(k)| = 1 \tag{2.126}$$

を満たす入射波数 k では，転送行列の固有値が 1 もしくは -1 となる．固有値が 1 の場合，フォトニック結晶中の電磁波の空間分布は固有状態となり，$t = 1$ となる．固有値が -1 の場合，フォトニック結晶中の電磁波の空間分布は反対称であり，$t = 1$ となる．式 (2.126) は後の式 (2.143) で示すことになるが，フォトニックバンド端となるための条件となる．

また，転送行列のトレース $x(k)$ は，$t(k)$ を $T(k)e^{i\phi(k)}$ と振幅 T と ϕ に分けると，式 (2.125) より，

$$x(k) = \frac{1}{T}\cos\phi \tag{2.127}$$

と表すことができる．

式 (2.125) は，分散関係の導出や光パルスの横断時間を導出する際に重要である（2.5 節）．また，本論文の主テーマである自己相似フォトニック結晶中の電磁波を記述する際にも中心的な役割を果たす．また，本論文では $\det M = 1$ を満たす場合しか扱わないため，以後暗黙のうちに M のユニタリー性を利用する．

2.4.3　転送行列の具体的表式

転送行列は式 (2.118),(2.119) で与えられているとおり，境界面における各領域の Z と θ で決定される．本論文では 2 種類の媒質 A，C による層状構造である 1 次元フォトニック結晶のみを扱うため，転送行列は境界面における関係（C 層→ A 層，A 層→ C 層）と各層の両端の関係を表すものだけ分かれば良い．式 (2.118), 式 (2.118) より，具体的な表式は次のとおり表すことができる．

2.4.4　C 層→ A 層の転送行列

$$M_{CA}^{(s)} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1+\frac{Z_A}{Z_C}\frac{\cos\theta_C}{\cos\theta_A} & 1-\frac{Z_A}{Z_C}\frac{\cos\theta_C}{\cos\theta_A} \\ 1-\frac{Z_A}{Z_C}\frac{\cos\theta_C}{\cos\theta_A} & 1+\frac{Z_A}{Z_C}\frac{\cos\theta_C}{\cos\theta_A} \end{pmatrix} \tag{2.128}$$

$$M_{CA}^{(p)} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \frac{Z_A}{Z_C}+\frac{\cos\theta_C}{\cos\theta_A} & \frac{Z_A}{Z_C}-\frac{\cos\theta_C}{\cos\theta_A} \\ \frac{Z_A}{Z_C}-\frac{\cos\theta_C}{\cos\theta_A} & \frac{Z_A}{Z_C}+\frac{\cos\theta_C}{\cos\theta_A} \end{pmatrix}. \tag{2.129}$$

A 層→ C 層の転送行列

$$M_{AC}^{(s)} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1+\frac{Z_C}{Z_A}\frac{\cos\theta_A}{\cos\theta_C} & 1-\frac{Z_C}{Z_A}\frac{\cos\theta_A}{\cos\theta_C} \\ 1-\frac{Z_C}{Z_A}\frac{\cos\theta_A}{\cos\theta_C} & 1+\frac{Z_C}{Z_A}\frac{\cos\theta_A}{\cos\theta_C} \end{pmatrix} \tag{2.130}$$

$$M_{AC}^{(p)} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \frac{Z_C}{Z_A}+\frac{\cos\theta_A}{\cos\theta_C} & \frac{Z_C}{Z_A}-\frac{\cos\theta_A}{\cos\theta_C} \\ \frac{Z_C}{Z_A}-\frac{\cos\theta_A}{\cos\theta_C} & \frac{Z_C}{Z_A}+\frac{\cos\theta_A}{\cos\theta_C} \end{pmatrix} \tag{2.131}$$

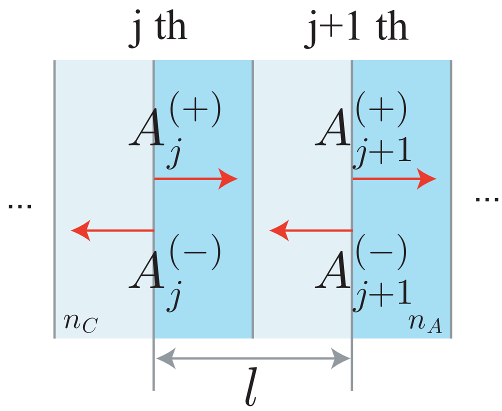

図 2.10　１次元フォトニック結晶内の単位胞の模式図．jth，$j+1$th は周期数を表し，(+)，(−) はそれぞれ右進行波，左進行波を意味する．

A 層,C 層の位相の変化分

$$M_A = \begin{pmatrix} e^{i\delta_A} & 0 \\ 0 & e^{-i\delta_A} \end{pmatrix} \ , \ M_C = \begin{pmatrix} e^{i\delta_C} & 0 \\ 0 & e^{-i\delta_C} \end{pmatrix} \tag{2.132}$$

ただし，位相は δ_A, δ_C は，

$$\begin{aligned} \delta_A &= n_A k_z d_A = n_A d_A k \cos\theta_A \\ \delta_C &= n_C k_z d_C = n_C d_C k \cos\theta_C \end{aligned} \tag{2.133}$$

で定義される．

2.5　１次元フォトニック結晶構造の分散関係

１次元フォトニック結晶構造における分散関係を導出する．フォトニック結晶の分散関係の導出は，平面波展開法を用いるのが一般的な手続きであるが，本論文では転送行列から導出する手続きを紹介する．

2.5.1　転送行列とブロッホの定理

簡単のために図 2.10 のような A 層と C 層が周期的に並んでいる構造に対して，光が垂直入射している場合を考える．垂直入射の場合には，s 偏光と p 偏光の違いは無い．j 層目の右進行波 $A_j^{(+)}$，左進行波 $A_j^{(-)}$ と，$j+1$ 層目の右進行波 $A_{j+1}^{(+)}$，左進行波 $A_{j+1}^{(-)}$ との間は，単位胞

図 2.10: fig/008.eps

の転送行列 M_{unit} でつなぐことができる：

$$\begin{pmatrix} A_{j+1}^{(+)} & A_{j+1}^{(-)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{j}^{(+)} & A_{j}^{(-)} \end{pmatrix} M_{\mathrm{unit}} \ . \tag{2.134}$$

ただし，

$$\begin{aligned} M_{\mathrm{unit}} &= M_{CA} T_A M_{AC} T_C \\ &= \begin{pmatrix} (\cos\delta_A + iK\sin\delta_A)e^{i\delta_C} & (i\bar{K}\sin\delta_A)e^{-i\delta_C} \\ (i\bar{K}\sin\delta_A)e^{i\delta_C} & (\cos\delta_A - iK\sin\delta_A)e^{-i\delta_C} \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{2.135}$$

である．ただし，δ_A, δ_C は式 (2.133) で，M_{CA}, M_{AC} は式 (2.128),(2.130) で，T_A, T_C は式 (2.132) で定義される．

また一方で，A 層と C 層が周期的に並んでいる構造に対して，周期構造中の電磁波はブロッホの定理を適用することができる．単位胞の周期を l，ブロッホ波数 q を用いて，

$$\begin{pmatrix} A_{j+1}^{(+)} & A_{j+1}^{(-)} \end{pmatrix} = e^{\pm iql} \begin{pmatrix} A_{j}^{(+)} & A_{j}^{(-)} \end{pmatrix} \ . \tag{2.136}$$

と表すことができる．式 (2.134) と (2.136) から，

$$\begin{pmatrix} A_{j}^{(+)} & A_{j}^{(-)} \end{pmatrix} M_{\mathrm{unit}} = e^{\pm iql} \begin{pmatrix} A_{j}^{(+)} & A_{j}^{(-)} \end{pmatrix} \ . \tag{2.137}$$

と，固有値方程式になっていることがわかる．$e^{\pm iql}$ は M_{unit} の固有値であることを表わしている．つまり，行列のトレースは固有値の和となるため，M_{unit} のトレースは $e^{iql} + e^{-iql} = 2\cos(ql)$ に一致するはずである．つまり，$x \equiv \frac{1}{2}\mathrm{Tr}M_{\mathrm{unit}}$ とした場合，式 (2.125) より，

$$x(k) = \cos(ql) \tag{2.138}$$

の関係式を得る．式 (2.135) は，波数 k（$\omega = ck$）の電磁波を入射すると，フォトニック結晶中に波数 q の定在波が現れることを意味する[*3]．一般的に振動数 $\omega (= ck)$ とブロッホ波数 q の関係を表わす関係式は，**分散関係**と呼ばれている．

2.5.2 ブロッホ波数と透過係数の関係

式 (2.125) から透過係数 $t(k) \equiv T(k)e^{i\phi(k)}$ とブロッホ波数 q との関係

$$\cos(ql) = \frac{1}{T(k)}\cos\phi(k) \tag{2.139}$$

も導出できる．もし $T(k) = 1$ である共鳴状態となる入射波の波数 k を入射した場合，

$$q = \frac{1}{l}\phi(k) \tag{2.140}$$

で得られるの波数 q の定在波が現れることを意味する．これは共鳴状態における電磁波の空間分布を議論する際（3.1.4）に重要となる．

[*3] 波数 q の定在波に対して，進行波の波数は k/n（n は屈折率）となる．

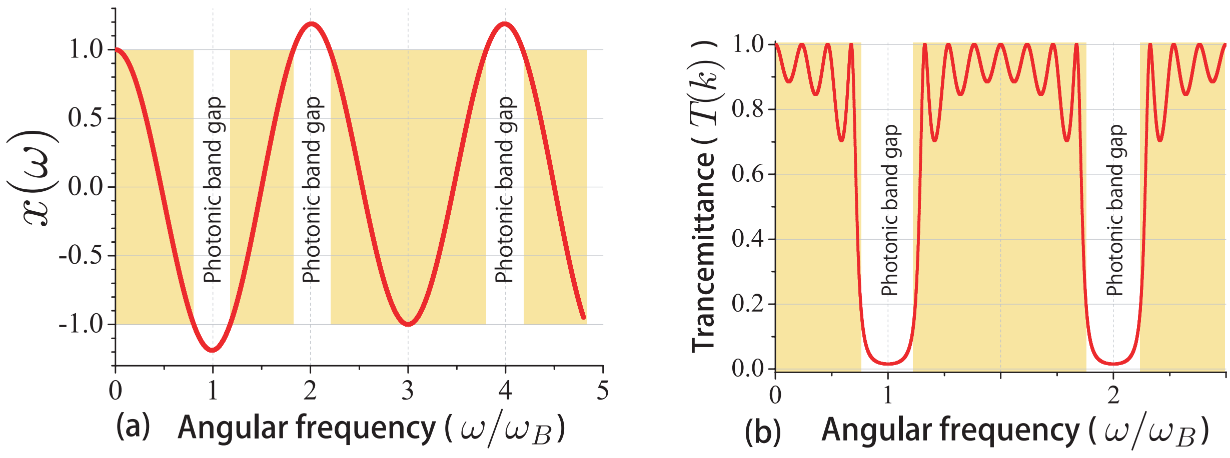

図 2.11　(a)2 種の媒質（屈折率 $n_A = 2.0$, $n_C = 1.0$）による周期構造に対して，垂直入射したときの $x(\omega)$．(b)8 層の場合における透過スペクトル．$d_A = d_C = 100$[nm] として計算．ただし，$\omega = ck$, ω_B は式 (2.144),(2.145),(2.146) を参照.

2.5.3　分散関係

$x(k)$ は式 (2.135) から具体的に得られる：

$$
\begin{aligned}
x(k) &\equiv \frac{1}{2}\mathrm{Tr}M_{\mathrm{unit}} && (2.141)\\
&= \cos(\delta_C)\cos(\delta_A) - K\sin(\delta_A)\sin(\delta_C)\ . && (2.142)
\end{aligned}
$$

ただし，$\omega = ck, \delta_A = n_A k d_A, \delta_C = n_C k d_C$．$x(k)$ は入射波の波数 k によって変化するが（図 (2.11)），$|x(k)| \leq 1$ を満たすか否かで性質が大きく異なる．$|x(k)| \leq 1$ を満たす場合，式 (2.135) からブロッホ波数 q が実数となるが，$|x(k)| > 1$ の場合には，ブロッホ波数 q は純虚数となる．これは $|x(k)| > 1$ を満たす入射波数 k の場合，伝搬解が存在しない．このような虚数の波数を与えるエネルギー帯をフォトニックバンドギャップと呼ぶ．つまり，

$$
|x(k)| \begin{cases} < 1 & \cdots \text{フォトニックバンドの条件} \\ = 1 & \cdots \text{バンド端の条件} \\ > 1 & \cdots \text{バンド中心の条件} \end{cases} \tag{2.143}
$$

となる．また，式 (2.140) で触れたとおり $x(k) = 1$ を満たす入射波数 k では，フォトニック結晶中の電磁波は固有状態となる．

フォトニックバンドギャップの中心となる角振動数をブラック角振動数と呼び，ω_B で表す．

図 2.11: fig/110-2.eps

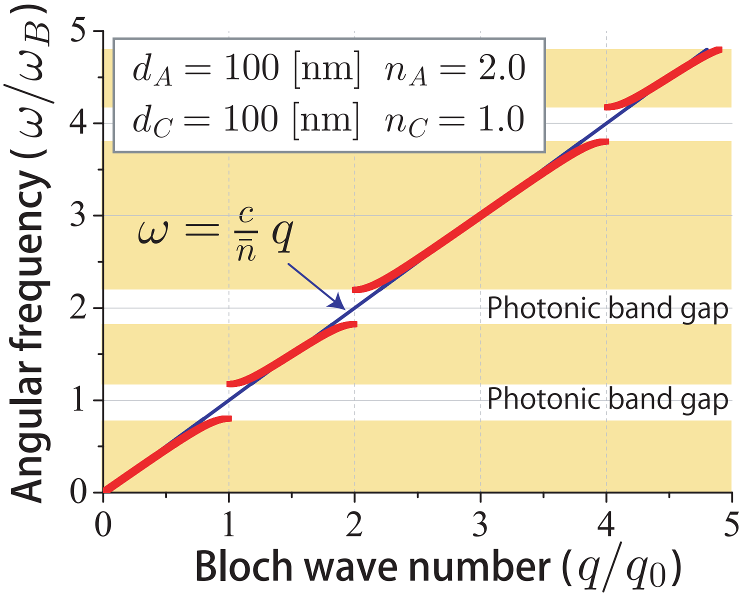

図 2.12　2 種の媒質（屈折率 $n_A = 2.0$, $n_C = 1.0$）による周期構造に対して，垂直入射したときの分散関係．屈折率は $n_A = 2.0$, $n_C = 1.0$, $d_A = d_C = 100$[nm] として計算．

周期 l，平均屈折率 $\bar{n}$，ブラック角振動数 ω_B はそれぞれ，

$$l = d_A + d_C \tag{2.144}$$

$$\bar{n} = \frac{n_A d_A + n_C d_C}{l} \tag{2.145}$$

$$\omega_B = \frac{c}{\bar{n}} \frac{\pi}{l} = \frac{c}{\bar{n}} q_0 \tag{2.146}$$

で与えられる．ただし，$q_0 = \pi/l$ である．

また，分散関係は一般的に振動数 ω とブロッホ波数 q の関係で表される．式 (2.138) からブロッホ波数 $q(\omega)$ は次のようになる：

$$\frac{q(\omega)}{q_0} = \frac{1}{\pi} \cos^{-1}(x(\omega)) \, . \tag{2.147}$$

式 (2.147) は入射波の波数 k(角振動数 $\omega = ck$) に対して，ブロッホ波数 q が一意に得られる．図 2.12 は，2 種の媒質（屈折率 $n_A = 2.0$, $n_C = 1.0$, 幅 $d_A = d_C = 100$[nm]）による分散関係である．図中の青い直線 $\omega = c/\bar{n}q$ は有効屈折率 $\bar{n}$ 中を伝搬する光の分散関係を表している．入射波の角振動数 ω がブラック振動数 ω_B に近づくと，多重反射の効果が大きくなり伝搬する光が存在しない状態となる．

2.5.4　透過係数と群速度の関係

分散関係からエネルギーが伝搬する速度である群速度も計算することができる．群速度 v_g は角振動数 ω をブロッホ波数 q で微分したもので定義されるので，式 (2.138) の両辺を q で微

図 2.12: fig/109.eps

分し整理すると，

$$v_g \equiv \frac{d\omega}{dq} = c\,\frac{l\sqrt{1-x^2(k)}}{x'(k)}\ . \tag{2.148}$$

を得る．

2.6　光パルスの横断時間の解析解

光パルスの遅延効果を検証するための最も直接的な方法は，フォトニック結晶に光パルスを入射してから透過するまでの時間を測定することである．本論文では，入射パルスのピークが入射されてから透過するまでの時間をパルス横断時間 τ と定義し，透過係数 $t(k)$ から横断時間 $\tau(k)$ の導出を行う．その後，導出した表式を用いて周期系のバンド端並びに，ファブリペロー型共振器における横断時間を導く．

さらに，第 3 章ではフォトニックバンドギャップ中の光パルスの超高速現象，第 5 章では自己相似フォトニック結晶中の光パルスの遅延について考察する．

2.6.1　光パルスの横断時間の定義と導出

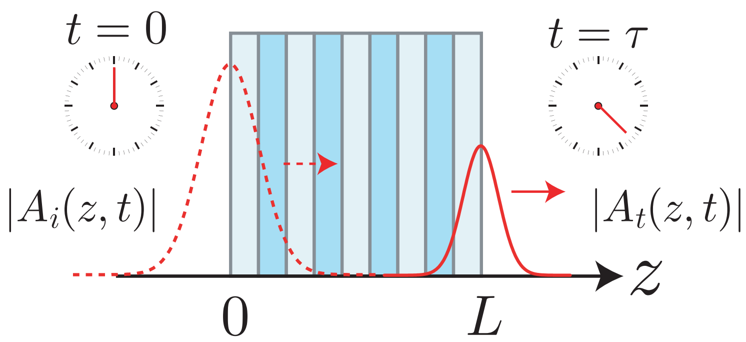

図 2.13　光パルスの横断時間の定義．入射パルスのピークが入射されてから透過するまでの時間をパルス横断時間 τ と定義する．$|A_i(z,t)|, |A_t(z,t)|$ はそれぞれ入射波と透過波の振幅を表す．

任意の透過係数 $t(k)$ とトンネル時間との関係式を導出し，入射パルスのピークが入射されてから透過するまでの時間をパルス横断時間 τ と定義する（図 2.13）．次に具体的な系においてトンネル時間を評価する．簡単のために，光学超格子にガウスパルスを垂直入射した場合を想定する．全長 L の光学超格子に波数 k の電磁波を入射した場合の透過係数を $t(k)$ と表した場合，透過パルスは $t(k)$ と平面波の重ね合わせで表すことができる．$t=0$ で入射パルスのピークが $z=0$ に到達したと定義すると，時刻 t 位置 z での透過パルスの振幅は，次のよう

図 2.13: fig/112.eps

に表すことができる：

$$A_i(z,t) = a_0 \int_{-\infty}^{\infty} dk\ e^{ikz-i\omega t} e^{-\left(\frac{k-k_0}{2\sigma}\right)^2} \tag{2.149}$$

$$A_r(z,t) = a_0 \int_{-\infty}^{\infty} dk\ r(k)\ e^{-ikz-i\omega t} e^{-\left(\frac{k-k_0}{2\sigma}\right)^2} \tag{2.150}$$

$$A_t(z,t) = a_0 \int_{-\infty}^{\infty} dk\ t(k)\ e^{ik(z-L)-i\omega t} e^{-\left(\frac{k-k_0}{2\sigma}\right)^2} \tag{2.151}$$

$A_t(z,t)$ は Maxwell 方程式から導出される Helmholtz 方程式を満たすベクトルポテンシャルで，波数空間において，波数 k_0 を中心に幅 σ 程度で分布する．ただし，a_0 はパルスピークの振幅である．$t(k)$ の表式が与えられれば，数値的に積分を計算することで透過パルスの振る舞いを正確に知ることができる．また，ガウシアンの幅を決定する σ が十分に小さい場合，もしくは，$t(k)$ が $k=k_0$ の周りで比較的ゆっくりと変化する場合であれば，透過パルスの近似的な表式を得ることができる．以下透過係数を再び，

$$t(k) = T(k)e^{i\phi(k)} \tag{2.152}$$

のように振幅 $T(k)$ と位相の変化分 $\phi(k)$ とに分離する．式 (2.151) からトンネル時間を導出するために，$T(k)$ と $\phi(k)$ を $k=k_0$ を中心としてべき展開し 2 次の項まで展開する．

$$t(k) \equiv T(k)\ e^{i\phi(k)} = e^{i\phi(k)+\ln T(k)} \tag{2.153}$$

$$\phi(k) = \phi(k_0) + \phi'(k_0)(k-k_0) + \frac{1}{2}\ \phi''(k_0)(k-k_0)^2 \tag{2.154}$$

$$\ln T(k) = \ln T(k_0) + [\ln T(k_0)]'(k-k_0) + \frac{1}{2}\ [\ln T(k_0)]''(k-k_0)^2 \tag{2.155}$$

式 (2.153)(2.154)(2.155) を式 (2.151) に代入し，k について整理する：

$$A_t(z,t) = a_0 t(k_0) e^{ik_0(z-L-ct)} e^{-\frac{\beta^2}{\alpha^2}} \int_C dk\ e^{-\frac{\alpha^2}{4}\left[(k-k_0)-\frac{2i\beta}{\alpha^2}\right]^2}\ . \tag{2.156}$$

ただし，

$$\alpha^2 = \frac{1}{\sigma^2} - 2[\ln T(k_0)]'' - 2i\phi''(k_0), \tag{2.157}$$

$$\beta = (z-L) - ct + \phi'(k_0) - i[\ln T(k_0)]'. \tag{2.158}$$

式 (2.156) の積分の評価は，α, β が一般的に複素数となるため鞍点法を用いる．積分経路 C を複素空間まで拡張し，複素数 k を $[(k-k_0)-2i\beta/\alpha^2] = \delta e^{i\theta}$ と変数変換する．l を実数とし，$\alpha^2\delta^2 e^{i2\theta_s} = l^2$ となるように積分経路を設定する．ただし，偏角 θ_s は

$$\arg[\alpha^2 e^{2i\theta_s}] = 0\ . \tag{2.159}$$

を満たす．以上を考慮して，式 (2.156) の積分を実行することで，透過パルスの表式

$$A_t(z,t) = A_{t0}\ e^{-\frac{\beta^2}{\alpha^2}} e^{ik_0(z-L-ct)}\ . \tag{2.160}$$

を得ることができる．ただし，

$$A_{t0} = 2a_0\sqrt{\pi}\, t(k_0)\, \frac{e^{i\theta_s}}{|\alpha|}\ , \tag{2.161}$$

A_{t0} は透過パルスの振幅，また $e^{ik_0(z-L-ct)}$ と $e^{-\frac{\beta^2}{\alpha^2}}$ の因子はそれぞれ，透過波の平面波と実空間における包絡関数である．包絡関数から任意の時刻におけるパルスピークの位置を得ることができる．α と β は複素数なので，それぞれ実数部 (α_r, β_r) と虚数部 (α_i, β_i) に明示的に分けて表すことで，包絡関数は

$$e^{-\frac{\beta^2}{\alpha^2}} = \exp\left[-\frac{\alpha_{\rm r}\beta_{\rm r} + \alpha_{\rm i}\beta_{\rm i}}{\alpha_{\rm r}^2 + \alpha_{\rm i}^2} - i\frac{\alpha_{\rm i}\beta_{\rm r} + \alpha_{\rm r}\beta_{\rm i}}{\alpha_{\rm r}^2 + \alpha_{\rm i}^2}\right] \tag{2.162}$$

と書くことができる．ただし，$\alpha^2 \equiv \alpha_{\rm r} + i\alpha_{\rm i}, \beta^2 \equiv \beta_{\rm r} + i\beta_{\rm i}$ で $\alpha_{\rm r}, \alpha_{\rm i}, \beta_{\rm r}, \beta_{\rm i}$ はすべて実数である．これらの関係式を用いると透過パルスの強度は

$$|A_t(z,t)|^2 = |A_{t0}|^2\, e^{-\frac{2(\alpha_{\rm r}\beta_{\rm r} + \alpha_{\rm i}\beta_{\rm i})}{\alpha_{\rm r}^2 + \alpha_{\rm i}^2}}\ . \tag{2.163}$$

となる．ここで注意すべきは，$|A_{t0}|$ ないし $\alpha_{\rm r}, \alpha_{\rm i}$ は，時刻 t，位置 z に対して定数となる点である．つまり，$\alpha_{\rm r}\beta_{\rm r}(z,t) + \alpha_{\rm i}\beta_{\rm i}(z,t) \equiv \Phi(z,t)$ を最小値をとる条件がパルスピークの位置 (z_p) を与える条件となる．$\left(\frac{\partial\Phi(z,t)}{\partial z}\right)_{z=z_p} = 0$ より，位置 (z_p) と時刻 (t) の関係

$$z_p(t) = L + ct - \phi'(k_0) - \frac{2\phi''(k_0)[\ln T(k_0)]'}{\frac{1}{\sigma^2} - 2[\ln T(k_0)]''}\ . \tag{2.164}$$

を得る．さらに，$z_p(\tau) = L$ により横断時間をすると（図 2.13 を参照），

トンネル時間は次のように得られる：

$$\tau = \frac{1}{c}\left(\phi'(k_0) + \frac{2\phi''(k_0)[\ln T(k_0)]'}{\frac{1}{\sigma^2} - 2[\ln T(k_0)]''}\right)\ . \tag{2.165}$$

このトンネル時間は，転送行列を定義できる系であれば任意の系で成り立つ表式である．さらに，ガウスパルスのピーク波数 k_0 が共鳴状態 $T(k_0) = 1$ で $T(k_0)$ の極値となるように合わせると，$[\ln T(k_0)]' = 0$ となるので式 (2.165) は

$$\tau = \frac{1}{c}\ \frac{d\phi(k_0)}{dk}\ . \tag{2.166}$$

となる．

式 (2.166) がパルスピークの横断時間を表すことは，1955 年，原子核の散乱問題において E. P. Wigner が指摘している [36]．式 (2.166) による横断時間の計算法は statinary phase 法（SP 法）と呼ばれ，後のポテンシャルバリアによるトンネル時間の導出を行った T. E. Hartman [18] や，後に示すフォトニックバンドギャップ中による光パルスの超光速現象の計算にも利用される．

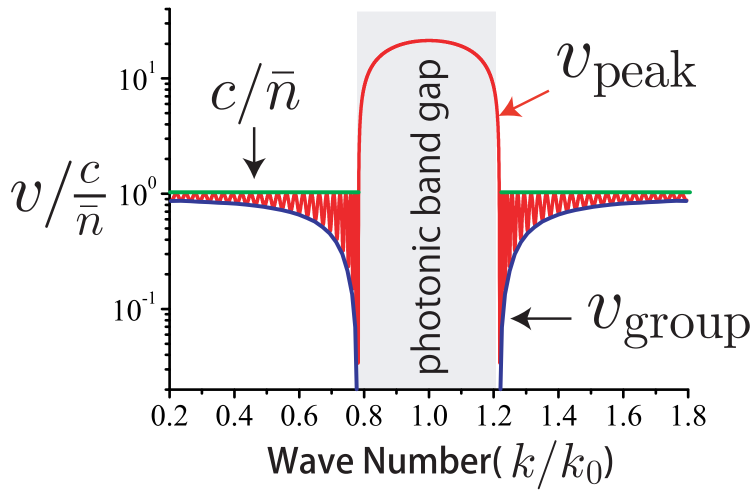

図 2.14　光パルスの伝搬速度 $v_{\rm peak}$ と群速度 $v_{\rm group}$ との関係．$v_{\rm peak}$ は $v_{\rm group}$ と平均速度 $c/\bar{n}$ の間の値をとることが分かる．ただし，$\bar{n}$ はフォトニック結晶の平均屈折率．

2.6.2　パルスピーク伝搬速度と群速度の関係

一般的にフォトニック結晶中の電磁波によるエネルギーや信号は群速度で伝搬する．式 (2.166) は光パルスピークの横断時間なので，この式から光パルスピークの伝搬速度を定義することができる．のこの伝搬速度はで群速度と異なっていることを示す．

群速度と明示的に比較するために，周期構造中を伝搬する光パルスが 1 周期分の距離 l の伝搬速度を $v_{\rm peak}(k) \equiv L/\tau(k)$ と定義する．群速度（式 (2.148)）とパルスピークは次のようになる：

$$v_{\rm group}(k) = \frac{d\omega}{dq} = c\,\frac{l\sqrt{1-x^2(k)}}{x'(k)} \tag{2.167}$$

$$v_{\rm peak}(k) = c\,\frac{l\sqrt{1-(T(k)x(k))^2}}{T'(k)x(k)+T(k)x'(k)}\,. \tag{2.168}$$

ただし，$x(k) = \frac{1}{2}{\rm Tr}M = \frac{1}{t(k)} + \frac{1}{t^*(k)}$ である．群速度と光パルスの伝搬速度は，透過係数 $t(k)$ が得られると，それぞれ式 (2.167) と式 (2.168) から計算することができることを意味している．また，式 (2.167),(2.168) より，光パルスの伝搬速度と群速度は一般的には一致しないことがわかる．

図 2.14 は，式 (2.167) と (2.168) を用いて，光パルスの伝搬速度 $v_{\rm peak}(k)$ と群速度 $v_{\rm group}(k)$ を数値計算した結果である．$v_{\rm peak}(k)$，$v_{\rm group}(k)$ と平均屈折率 $\bar{n}$ 中を伝搬する光速 $c/\bar{n}$ の関係は，

$$c/\bar{n} \;\;\geq\;\; v_{\rm peak}(k) \;\;\geq\;\; v_{\rm group}(k) \tag{2.169}$$

図 2.14: fig/141.eps

となることが分かる．つまり，光パルスの伝搬速度の最低値は，群速度 $v_{\rm group}(k)$ と一致し，式 (2.167),(2.168) から $v_{\rm peak}(k) = v_{\rm group}(k)$ となる必要十分条件は,

$$T(k) = 1 \ (T'(k) = 0) \tag{2.170}$$

であることがわかる． ここで $T(k) = 1$ は透過率の極大値だから $T'(k) = 0$ である．また，図 2.14 の数値計算を見てもわかるように $T(k) = 1$ は必要十分条件であることもわかる．つまり，減衰のない光遅延素子を設計する場合，フォトニックバンド端近では群速度は 0 となるため，フォトニックバンド端近傍の $T = 1$（共鳴状態）を用いれば最も遅い $v_{\rm peak}$ を得ることを表している．第 3 章では，周期型フォトニック結晶のバンド端近傍の共鳴状態を用いた伝搬速度の解析解を導出する．

次に特別な場合における，光パルスの伝搬速度と群速度の関係を調べる．

フォトニックバンド中心の場合

フォトニックバンドの中心となるための条件は式 (2.168) で得られたとおり $|x(k)| = 0$ である．式 (2.167) と式 (2.168) に代入することで光パルスの伝搬速度と群速度の関係は,

$$v_{\rm peak} = \frac{1}{T(k)} v_{\rm group}(k) \tag{2.171}$$

と得られる．つまり $T = 1$ の場合に光パルスの伝搬速度と群速度は一致し，それ以外では光パルスの伝搬速度のほうが速くなることがわかる．光パルスがフォトニック結晶中を伝播する場合，パルスの前部は反射波が存在しないためそのまま前進するが，パルスの後部は反射波の影響を受けて干渉する．その結果，パルスのピーク位置は相対的に前部に移動していくことになるため，群速度よりも速くなる．

フォトニックバンド端の場合

次にフォトニックバンド端の場合について考える．フォトニックバンド端となるための条件は式 (2.168) で得られたとおり $|x(k)| = 1$ である．式 (2.167) と式 (2.168) に代入することで光パルスの伝搬速度と群速度は,

$$v_{\rm group}(k) = 0 \tag{2.172}$$

$$v_{\rm peak}(k) = \frac{c\,l\sqrt{1 - T^2(k)}}{T'(k) + T(k)x'(k)} \ \neq \ 0 \tag{2.173}$$

となる．フォトニックバンド端は群速度は 0 になるが，光パルスの伝搬速度は有限の値をとることがわかる．さらに，フォトニックバンド端に限らずフォトニックバンドギャップ中でも，式 (2.166) により光パルスの伝搬速度を定義することができ，有限の値をとる．これは，たとえフォトニック結晶にバンド端に対応する波長の光パルスを照射しても，パルス速度は 0 とならない．これは，光パルスは減少しつつもフォトニック結晶中を伝搬していくことを意味する．

第 3 章

フォトニック結晶中の光パルスの遅延と超光速現象

本章では，第 2 で導出した，光パルスの横断時間（式 (2.166)）を用いて，フォトニックバンド端による光パルスの遅延と，フォトニックバンドギャップ中心における超光速現象について議論を行う．

3.1　１次元周期系における透過係数と横断時間

3.1.1　１次元周期系のモデル化と転送行列

1 次元フォトニック結晶とは，誘電率の異なる媒質を積層することで作られる光学薄膜の積層体である（第 2 章）．誘電体を積層した光学超格子は試料の作成が容易なだけでなく，Maxwell 方程式から導出される転送行列を用いることで厳密に取り扱うことが可能であるので広く研究されている [16].

本研究では, 2 種類の誘電体（層幅 d_A, d_C, 屈折率 n_A, n_C）で構成される 1 次元フォトニック結晶を考える (図 3.1(a))．転送行列を作る上で, 図 3.1(b) のように周期単位を取ることで行列要素を対称的にすることができる．各層における位相の変化分を $\delta_A = n_A k d_A, \delta_C = n_C k d_C$ と表した場合，単位周期の転送行列 M は次のように与えられる,

$$M = \begin{pmatrix} (\cos\delta_A + iK\sin\delta_A)e^{i\delta_C} & i\bar{K}\sin\delta_A \\ -i\bar{K}\sin\delta_A & (\cos\delta_A - iK\sin\delta_A)e^{-i\delta_C} \end{pmatrix} . \tag{3.1}$$

ただし，定数 $K, \bar{K}$ は

$$K = \frac{1}{2}(\frac{n_A}{n_C} + \frac{n_C}{n_A}) \ , \ \bar{K} = \frac{1}{2}(\frac{n_A}{n_C} - \frac{n_C}{n_A}) \tag{3.2}$$

図 3.1: fig/fig2.eps

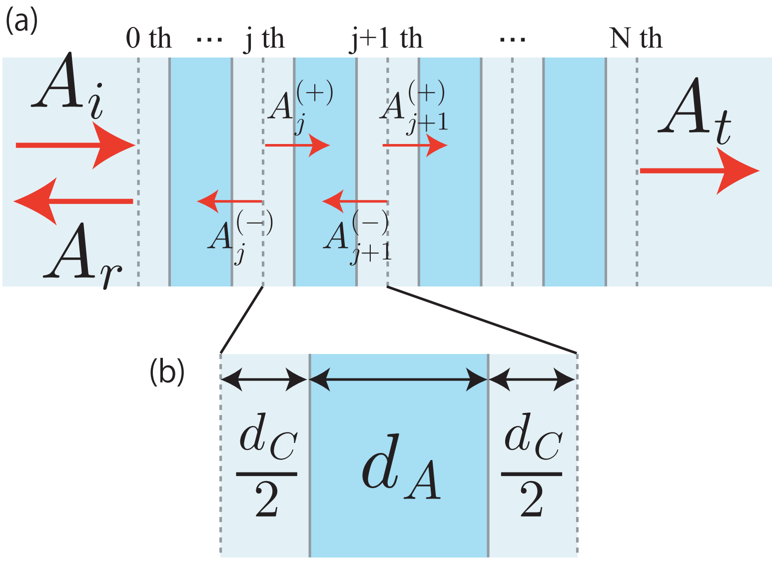

図 3.1　(a) 積層型光学超格子の模式図．(b) 各層における光路長をそれぞれ d_A, d_C としたときの周期単位．

で与えられる．N 層の場合の転送行列 M_N は，$M_N = M^N$ で求めることができる．この M_N の各要素は，入射波 A_i，反射波 A_r，及び透過波 A_t の振幅の関係

$$\begin{pmatrix} A_t & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_i & A_r \end{pmatrix} M_N \tag{3.3}$$

を表すので，行列成分を用いて反射係数と透過係数とはそれぞれ $r_N(k) = -M_{N12}/M_{N22}$，$t_N(k) = 1/M_{N22}$ となる．ここで，M_{N12} 等は M_N の $(1,2)$ 成分である．

3.1.2　1 次元周期系における透過係数

M が 2 次の正方行列である場合，ケーリー・ハミルトンの定理

$$M^2 = 2xM - \det(M)I \tag{3.4}$$

が有用である[*1]．ただし，$x = \mathrm{Tr}M/2$，I は単位行列である．式 (3.4) を用いると，M^N は M の 1 次と 0 次（単位行例）の線形結合で表すことができる．さらに，M がユニモジュラー（$\det(M) = 1$）の場合，次の関係式を満たすことが知られている [16]：

$$M^N = \Psi_N M - \Psi_{N-1} I \;, \tag{3.5}$$

$$\Psi_N \equiv \frac{\sin N\Phi}{\sin \Phi} \;, \tag{3.6}$$

$$\cos\Phi \equiv \frac{1}{2}\mathrm{Tr}M = x(k) = \cos\delta_A \cos\delta_C - K \sin\delta_A \sin\delta_C \;, \tag{3.7}$$

[*1] ケーリー・ハミルトンの定理の証明（2 行 2 列）

$$M = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad M^2 = 2(a+d)\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} - (ad - bc)I = 2xM - \det(M)I$$

で与えられる．δ_A, δ_C は入射波の波数 k で決まるため，Ψ_N, Φ は k の関数である．$\cos\Phi$ は k の値によって必ず実数となるが,$\sin\Phi$ は k の値によって実数または純虚数となる．$|\cos\Phi| \leq 1$ の場合，$\sin\Phi$ は実数で $\sin N\Phi$ も実数となり Ψ_N も実数となるが，$|\cos\Phi| > 1$ の場合，$\sin\Phi$ は純虚数だが $\sin N\Phi$ も純虚数となるため，Ψ_N は必ず実数となる．

式 (3.5) を用いて，１次元周期系（周期数 N）の転送行列は $M_N = M^N$ で得られ，透過係数 $t_N(k)$ は,

$$t_N(k) = \frac{1}{\Psi_N(k)(\cos\delta_A - iK\sin\delta_A)e^{-i\delta_C} - \Psi_{N-1}(k)} \tag{3.8}$$

と計算できる．また，上式から透過係数 $t_N(k)$ を $t_N(k) = T_N(k)e^{i\phi_N(k)}$（$T_N, \phi_N$ は実数）と表すとき,

$$\begin{aligned} T_N(k) = \big[&\Psi_N(k)^2(\cos^2\delta_A(k) + K^2\sin\delta_A(k)) \\ &-2\Psi_N(k)\Psi_{N-1}(k)\cos\Phi(k) + \Psi_{N-1}(k)^2\big]^{-\frac{1}{2}} \end{aligned} \tag{3.9}$$

$$e^{-i\phi_N(k)} = T_N(k)\left[\Psi_N(k)\left\{\cos\delta_A(k) - iK\sin\delta_A(k)\right\}e^{-i\delta_C(k)} - \Psi_{N-1}(k)\right]. \tag{3.10}$$

で与えられる．

3.1.3 １次元周期系における透過率スペクトル

透過率 $\mathcal{T}_N(k) = T_N(k)^2$ は，式 (3.8) から,

$$\mathcal{T}_N(k) = \frac{1}{\Psi_N^2(\cos^2\delta_A + K^2\sin^2\delta_A) - 2\Psi_N\Psi_{N-1}\cos\Phi + \Psi_{N-1}^2} \tag{3.11}$$

と表すことができる．図 (3.2) は，式 (3.11) を用いて，層数 N の場合の入射波の波数 k に対する透過率を数値計算した結果である．入射波長 $\lambda_0 = 500$[nm] に対して，各層の幅は $d_A = \lambda_0/(4n_A), d_C = \lambda_0/(4n_C)$ に設定する．この状況は，入射波長 $\lambda_0 = 500$[nm] に対して，各層の光路長 n_Ad_A, n_Cd_C が 1/4 波長のとなり，$\delta_A = \delta_C = \pi/2$ になる，反射率 r_N が最も大きい状態となることを用いる．層数が大きくなるにつれ，$k = k_0$ を中心としたフォトニックバンドギャップが現れ，また，バンドギャップ付近に透過率１の共鳴状態も見られる．

フォトニックバンド端は式 (2.143) の条件から得られる．各層における位相の変化分を $\delta \equiv \delta_A = \delta_C$ と表した場合,

$$\delta(k) = \sin^{-1}\left(\sqrt{\frac{2}{1+K}}\right) \quad \text{及び} \quad \delta(k) = \frac{\pi}{2}\left(\frac{k}{k_0}\right) \tag{3.12}$$

を満たす入射波の波数 k がフォトニックバント端となる．図 3.2 で与えたパラメタ $n_A = 2.0, n_C = 1.0 (K = 5/4)$ を用いると，バンド端となる入射波数は $k_{\mathrm{BandEdge}}/k_0 = 0.7836, 1.2164$ となる．

図 3.2: fig/122.eps

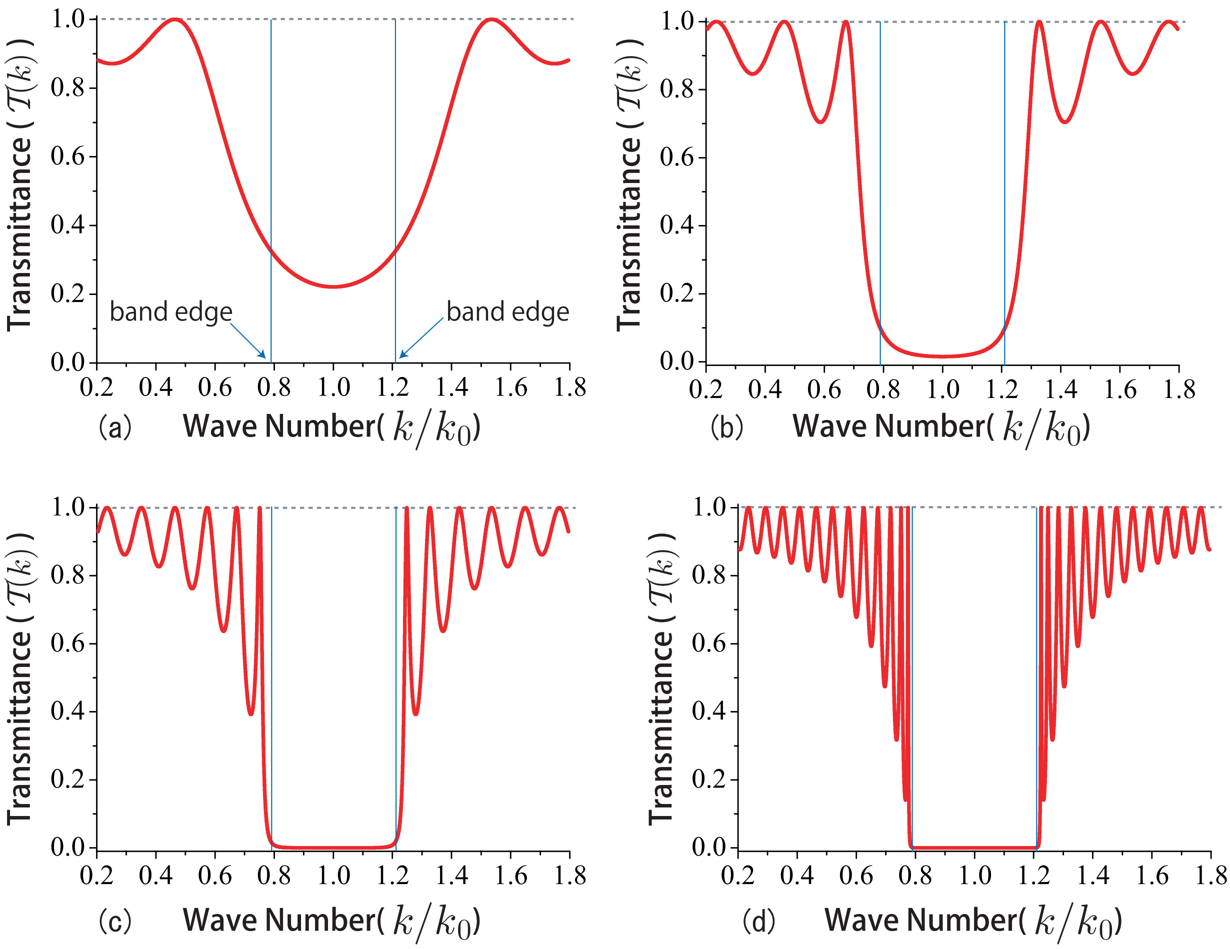

図 3.2　周期系の透過率（屈折率 $n_A = 2.0, n_C = 1.0$, 入射波の波長 $\lambda_0 = 500$[nm], 層幅 $d_A = \lambda_0/(4n_A), d_C = \lambda_0/(4n_C)$，$k_0 = 2\pi/\lambda_0$）. (a) 4 層, (b)8 層, (c)16 層, (d)32 層. バンド端は式 (3.12) より $k_{\rm BandEdge}/k_0 = 0.7836, 1.2164$ となる.

3.1.4　共鳴状態における電磁波の空間分布

図 3.3(a) は，256 層（厚さ $L = 240[\mu\mathrm{m}]$）におけるバンドギャップ付近の透過率スペクトル $\mathcal{T}(k)$ を示す．$T(k) = 1$ を満たす共鳴状態①，②，③に対応した電磁波の空間分布を図 3.3(b),(c),(d) に，それぞれ表した．共鳴状態はおける電磁波の空間分布がバンド端に近い方から順番に，半周期（1山)，1周期（2山)，1．5周期（3山）となっていることがわかる．これは $\mathcal{T}(k) = 1$ を満たす入射波数 $k = k_{\rm Resonance}$ において，電磁波の空間分布が転送行列の固有状態となっているためである．

共鳴状態の電磁波は，式 (2.139) で導出したブロッホ波数 q の定在波となる．対応するブロッホ波数は，位相 $\phi_N(k)$ で与えられ，

$$q = \frac{1}{L}\phi_N(k) \tag{3.13}$$

図 3.3: fig/127-2.eps

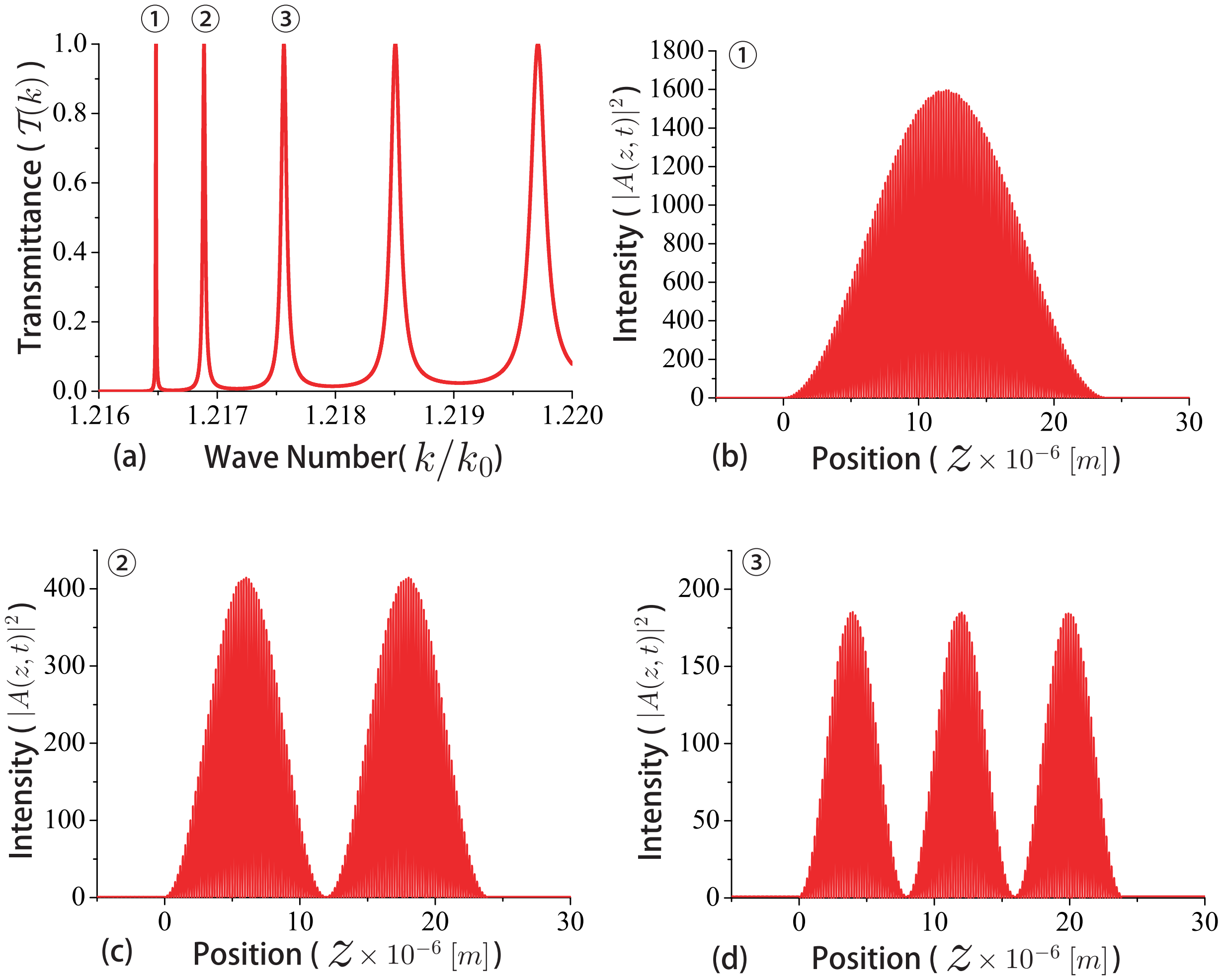

図 3.3　(a)256 層におけるバンドギャップ付近の透過率スペクトルと，(b)(c)(d) 共鳴波数に対応する電磁波の空間分布．対応する入射波数はそれぞれ (b) $k/k_0 = 1.216482$, (c) $k/k_0 = 1.216888$, (e) $k/k_0 = 1.217563$.

となる．図 3.4(a) はバンド端近傍の $\phi_N(k)/\pi$ を図示したグラフである．共鳴状態に対応する部分に○を付けた．ただし，$\phi(k)$ は区間 $[-1, 1]$ でプロットされているので，$\phi(k)/\pi = -1$ と $\phi(k)/\pi = 1$ は同値であることに注意が必要である．k をバンド端から大きくするにつれ $\phi(k)$ は大きくなり，共鳴状態①に対応する波数で $\phi(k) = \pi$ となる．さらに k 大きくするにつれ，共鳴状態②に対応する波数で $\phi(k) = 2\pi$，共鳴状態③に対応する波数で $\phi(k) = 3\pi$ と，共鳴状態となる波数 k では $\phi(k) = m\pi$（$m = 1, 2, 3 \cdots$）となる．つまり，共鳴状態のブロッホ波数は式 (3.13) から $q = \pi/L, 2\pi/L, 3\pi/L, \cdots$ となるので，図 3.3 にある共鳴状態における電磁波の空間強度分布は，対応するブロッホ波数の定在波となることがわかる．なお，以上の議論は周期構造中の電子状態でも同様である．

図 3.4: fig/130-2.eps

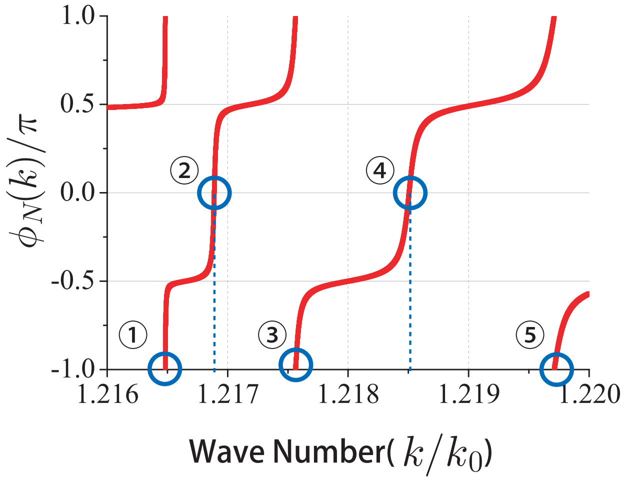

図 3.4　256 層バンドギャップ近傍における透過波の位相 $\phi_N(k)/\pi$ の波数依存性．①，②，③は図 3.3 の共鳴波数に対応する．

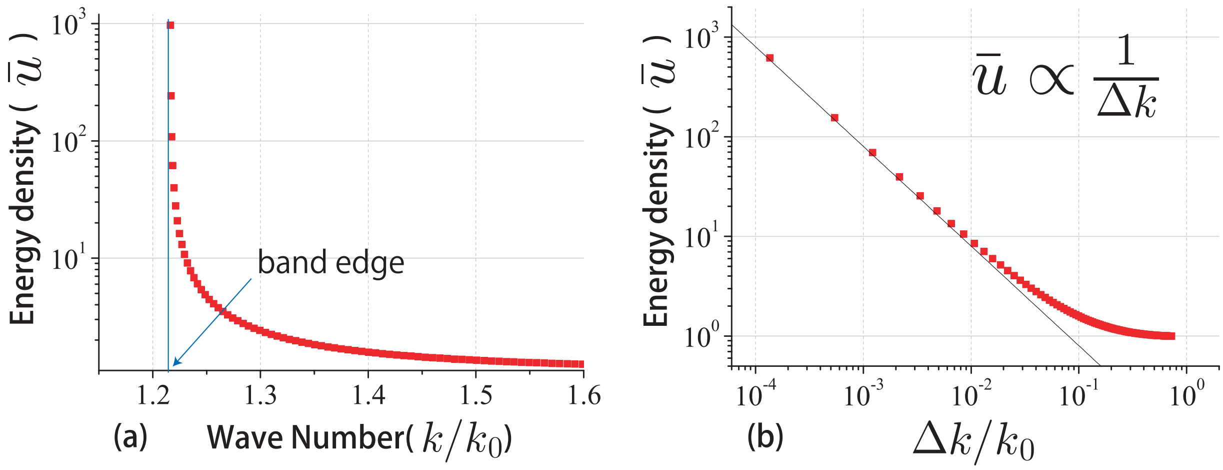

図 3.5　(a) 共鳴波数におけるエネルギー密度の空間平均値 $\bar{u}$（式 (3.14)）と，(b) フォトニックバンド端からの距離（$\Delta k \equiv k - k_{\mathrm{BandEdge}}$）とエネルギー密度の空間平均値 $\bar{u}$ の関係

3.1.5　共鳴状態における電磁波の局在性

次にバンド端近傍における電磁波の局在性を調べる．　図 3.5(a) は，共鳴波数におけるエネルギー密度の空間平均値

$$\bar{u} \equiv \frac{1}{L}\int_0^L n(z)|A(z)|^2 dz \tag{3.14}$$

を k の関数で表した．ここで，$n(z)$ は位置 z における屈折率を表す．$\bar{u}$ は，$|A(z)|^2$ が局在するほど大きくなる．フォトニックバンド端（$k_{\mathrm{BandEdge}}/k_0 = 1.2164$）に近づくほどエネルギ

図 3.5: fig/129.eps

ギー密度の空間平均値は発散する．バンド端からの差（$\Delta k \equiv k - k_{\mathrm{BandEdge}}$）とエネルギー密度の空間平均 $\bar{u}$ の関係を示したのが図 3.5(b) である．エネルギー密度の空間平均値 $\bar{u}$ とフォトニックバンド端からの差 Δk の関係は

$$\bar{u} \propto \frac{1}{\Delta k} \tag{3.15}$$

と，逆数の関係になっていることがわかる．

バンドギャップ付近の透過率スペクトルは，バンド端に近いほどスペクトルの変化が急峻となる．フォトニックバンド端から順番に電磁波の空間分布を見た場合，バンド端に近いほど局在性が強いことがわかる．

3.1.6　1次元周期系における横断時間の表式

次に 1 次元周期系における伝搬速度を計算する．伝搬速度は式 (2.165) で得られたとおり，透過係数から直接導出することができる．入射光パルスの波数空間における幅が，透過スペクトルの対応するピーク幅より狭い場合，横断時間は式 (2.166) となる：

$$\tau_N(k) = \frac{1}{c}\,\frac{d\phi_N(k)}{dk}\ . \tag{3.16}$$

ただし，$\tau_N(k), \phi_N(k)$ はそれぞれ周期数 N における横断時間と位相部分である（式 (2.152)）．横断時間は $d\phi(k)/dk$ を計算するだけでよい．式 (3.8) で得られた 1 次元フォトニック結晶における透過係数 $t_N(k)$ の位相部分は

$$e^{-i\phi(k)} = \frac{\Psi_N(\cos\delta_A - iK\sin\delta_A)e^{-i\delta_C} - \Psi_{N-1}}{\sqrt{\Psi_N^2(\cos^2\delta_A + K^2\sin^2\delta_A) - 2\Psi_N\Psi_{N-1}\cos\Phi + \Psi_{N-1}^2}}\ . \tag{3.17}$$

となる．式 (3.17) の両辺を k で微分することで $d\phi(k)/dk$ は得られる．

3.1.7　フォトニックバンド端を利用した光パルスの遅延時間

図 3.6 は，式 (3.17) を用いて横断時間 τ_N を数値計算した結果である．τ_C は同じ光路長を光速で伝搬した場合の時間を表し，τ_N/τ_C が大きいほど，遅延効果が高いことを意味する．層数 N を大きくするにつれ，フォトニックバンド端により近い位置に，図 3.2 の共鳴状態に対応する新しいピークが出現し，横断時間が大きくなることがわかる．

図 3.7 は，フォトニックバンド端（$k_{\mathrm{BandEdge}}/k_0 = 1.2164$）に最も近いピーク（共鳴波数）に対する横断時間の層数 N 依存性を計算した結果である．層数 N を大きくするにつれ，横断時間 τ/τ_c は，

$$\tau/\tau_c \propto L^2 \tag{3.18}$$

に漸近することがわかる．$\tau_c \propto L$ であるので，

$$\tau \propto L^3 \tag{3.19}$$

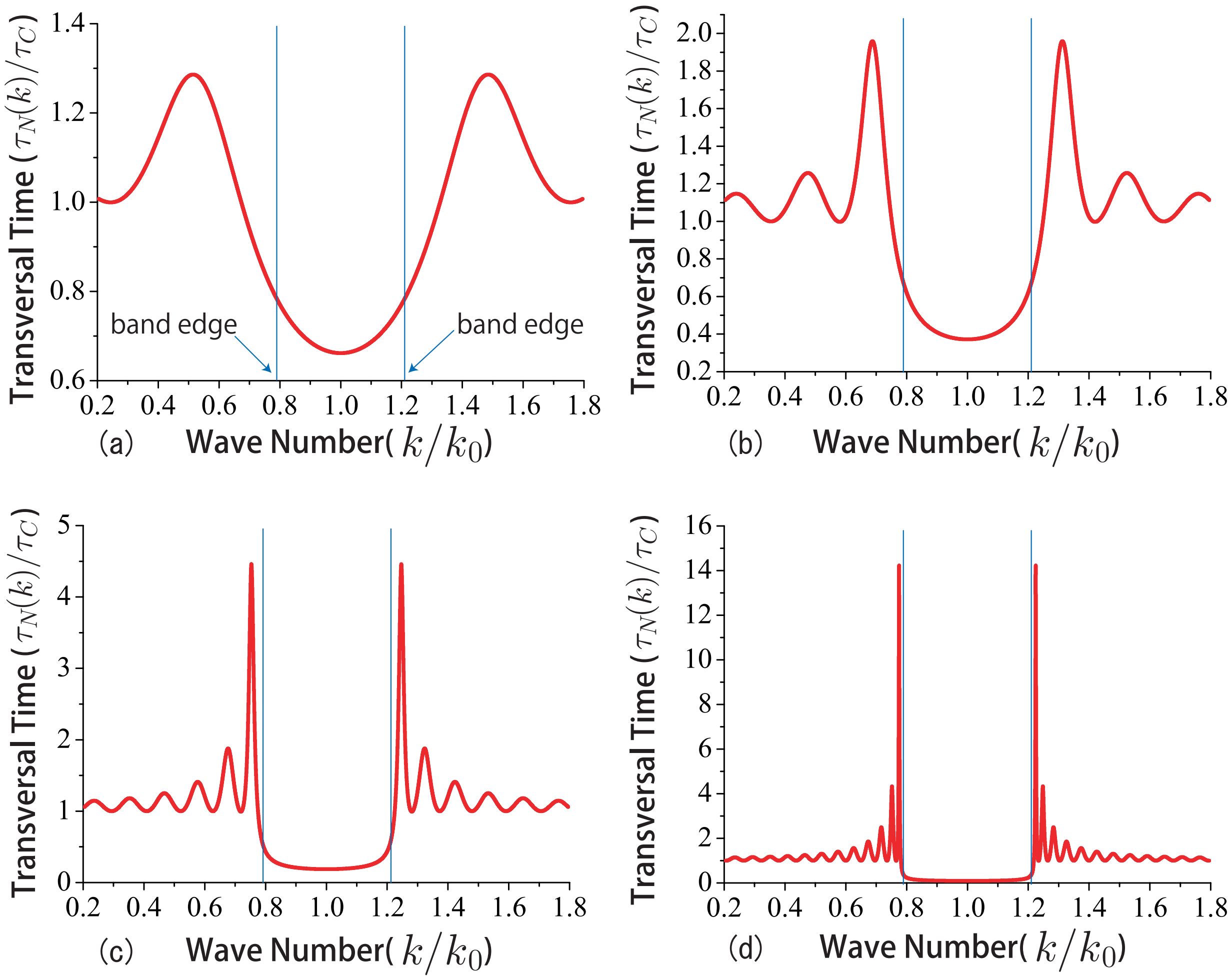

図 3.6　周期系における横断時間 τ 1 次元フォトニック結晶の透過率（屈折率 $n_A = 2.0, n_C = 1.0$, 層幅 $d_A = \lambda_0/(4n_A), d_C = \lambda_0/(4n_C)$, $k_0 = 2\pi/\lambda_0$）. (a) 4 層, (b)8 層, (c)16 層, (d)32 層．フォトニックバンド端は式 (3.12) より $k_{\mathrm{BandEdge}}/k_0 = 0.7836, 1.2164$ となる．

となる．これがフォトニックバンド端における遅延効果であると考えられる．これはフォトニックバンド端近傍の共鳴状態において，層数 N が大きいほど多くの電磁波エネルギーがフォトニック結晶内に蓄えられていることと一致する．この指数「3」の解析的導出は次節（3.2）で行う．

一方，フォトニックバンドギャップ内では逆に $\tau_N/\tau_C < 1$ となり，横断時間は光速を越えている．これは，横断時間をパルスピークの伝搬時間と定義しているためである．この状態に対する詳しい説明は，次々節（3.3）で行う．

図 3.6: fig/123.eps
図 3.7: fig/133.eps

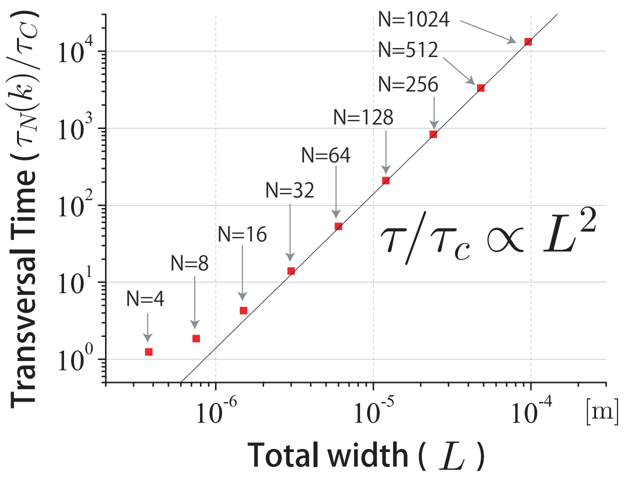

図 3.7 フォトニックバンド端近傍の共鳴状態における横断時間 τ の層数 N 依存性．$\tau_c \propto L$ であるので，τ は結晶サイズ L に対して $\tau \propto L^3$ となることが分かる．

3.2 フォトニックバンド端における光パルス遅延の解析解

周期型フォトニック結晶のフォトニックバンド端近傍に現れる共鳴状態における横断時間 τ が，結晶サイズ L に対して，$\tau \propto L^3$ となることは，図 (3.7) で数値的に示したとおりである．本節では，べき乗の指数が「3」となることを解析的に導出する．

3.2.1 横断時間 τ の変形

層数 N における横断時間 τ_N は式 (3.16) で示されたとおり，透過係数の位相部分 $\phi_N(k)$ の k 微分（$\phi'_N(k)$）を計算することで得られるが，$\phi_N(k)$ の具体的な表式は式 (3.17) のように複雑な形となっているため，$\phi_N(k)$ を k で微分して N（L）依存性を導くことは難しい．ここでは，その代わりに分散関係の導出（2.5.3 節）で用いた転送行列のトレース $x(k)$（式 2.141）の表式を利用する：

$$x_N(k) = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}M_N = \frac{1}{T_N(k)}\cos\phi_N(k)\,. \tag{3.20}$$

ただし，$T_N(k)$ は透過係数 $t_N(k)$ の振幅である（式 (2.152) 参照）．式 (3.16) における $\phi'_N(k)$ を変数変換することを考える．式 (3.20) の両辺を k で微分すると，

$$\frac{dx_N(k)}{dk} = -\frac{T'_N(k)\cos\phi_N(k)}{T_N(k)^2} - \frac{\sin\phi_N(k)}{T_N(k)}\frac{d\phi_N(k)}{dk} \tag{3.21}$$

となる．つまり，式 (3.21) を式 (3.16) に代入することで $\phi'_N(k)$ を他の変数に書き換えることができるわけだが，さらに，入射光パルスのピーク波数が共鳴状態（$T(k)=1$）などの極値の

場合には $T'_N(k) = 0$ となるため，結果として N 層の横断時間 τ_N は，

$$\tau_N(k) = \frac{dx_N(k)}{dk}\frac{T_N(k)}{\sin\phi_N(k)} \tag{3.22}$$

となり，$\phi_N(k)$ の k 微分から $x_N(k)$ の k 微分へ変形できた．横断時間が式 (3.22) となるのは，透過スペクトルが極値（$T'(k) = 0$）の場合だけであることに注意する必要がある．$\tau_N(k)$ の因子である $x'_N(k)$ と $T_N(k)/\sin\phi_N(k)$ をそれぞれ評価することで $\tau_N(k)$ を得る．次の手順で次節以降，$\tau_N(k)$ の導出を行う．この導出は以下の 6 つの手順を踏む．

1. N 層転送行列 $\rightarrow$ 転送行列の漸化式の導出
2. 転送行列の漸化式 $\rightarrow$ 非線形写像の導出
3. 非線形写像 $\rightarrow$ 写像の固定点と拡大率の導出
4. 写像の固定点と拡大率 $\rightarrow$ $x'_N(k)$ の導出
5. $T_N(k)/\sin\phi_N(k)$ の評価
6. τ の結晶サイズ L 依存性の導出

複雑な手順であるが，この手法は自己相似構造の場合でも応用できる．なお，$T(k) = 1$ の場合に限れば，$v_{\mathrm{peak}} = v_{\mathrm{group}}$ であるので，$\tau_N = \frac{L}{v_{\mathrm{group}}}$ で分散関係と有限系における離散的波数からも直接同じ結果を求めることができる．

3.2.2　**転送行列の漸化式と非線形写像**

層数 N を大きくするに従って，フォトニックバンド端のより近傍の波数に新しい共鳴状態（$T = 1$）が出現することは先に示した（図 3.2）．これは $N \to \infty$ でフォトニックバンド端と共鳴状態のピーク位置が一致することを示している．以下に示すように，フォトニックバンド端は $N \to \infty$ に対してある写像の固定点になっていて，バンド端近傍の横断時間の N（L）依存性はこの固定点の性質で決まる．

ここでスケーリングの考え方を取り入れ，層数を $N \equiv 2^n$（n は整数）で定義する．層数 $N = 2^n$ の転送行列を M_n と表した場合，n を 1 つ増やすごとに層数が 2 倍になるため，

$$M_n = M_{n-1}^2 \tag{3.23}$$

の漸化式を満たす．さらに，2 次の正方行列で成り立つケーリー・ハミルトンの定理式（式 (3.4)）を M_{n-1}^2 に適用すると

$$M_n = M_{n-1}^2 = (\mathrm{Tr}M_{n-1})M_{n-1} - I \tag{3.24}$$

となる．式 (2.122) で示したとおり，転送行列はユニタリーなので $\det M_{n-1} = 1$ であることを用いた．さらに，式 (3.20) と同様に，転送行列 M_n のトレースに 1/2 を掛けたものを

$$x_n = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}M_n \qquad \left(= \frac{\cos\phi_n}{T_n}\right) \tag{3.25}$$

と定義し，式 (3.24) の両辺のトレースに代入すると，

$$x_n = 2x_{n-1}^2 - 1 \tag{3.26}$$

となる．x_n に対する 1 次元非線形写像なる．つまり，1 次元フォトニック結晶における光伝搬の問題を写像力学[*2]の問題に帰着させることができた．写像力学の問題で重要なのは，写像の固定点とその近傍での振舞い（安定性解析）である．この場合，写像の固定点は $n \to \infty$ に対するフォトニックバンド端と一致し，固定点の近傍での振舞いは，フォトニックバンド端への x_n の近づき方（あるいは遠ざかり方、拡大率）を表している．

次節では、式 (3.26) の固定点と拡大率を求め，式 (3.22) で与えられる $\tau_n(k)$ の 1 つめの因子 $x'_n(k)$ を導出する．

3.2.3　写像の固定点と拡大率

1 次元非線形写像を $x_n = f(x_{n-1})$ と表した場合，固定点は $x_n = f(x_{n-1}) = x_{n-1}$ の方程式の解で与えられる．さらに，固定点からのずれを δx_n，拡大率を λ と表した場合，

$$\delta x_n = \lambda \delta x_{n-1} \quad \to \quad \lambda = \frac{\delta x_n}{\delta x_{n-1}} = \left.\frac{df(x_{n-1})}{dx_{n-1}}\right|_{x_{n-1}=x_{\text{fixed}}} \tag{3.27}$$

と表すことができる．ただし，x_{fixed} は固定点．拡大率 λ は固定点における写像 f の x 微分で与えられる．$|\lambda| > 1$ で写像の軌道は固定点から遠ざかり，$|\lambda| < 1$ では軌道は固定点に収束する[*3]．

1 次元フォトニック結晶における 1 次元非線形写像（式 (3.26)）の，固定点は 2 次方程式 $x = 2x^2 - 1$ の解

$$x = 1 \ \ , \ \ -\frac{1}{2} \tag{3.28}$$

となり，予想通り固定点の一つ $x = 1$ は式 (2.143) で示したフォトニックバンド端の条件と一致する．一方の固定点 $x = -1/2$ は，$|x| < 1$ なのでフォトニックバンド中であり，予想されるようにフォトニックバンドの中心である．また，拡大率 λ も式 (3.27) から得られて，それぞれ

$$\lambda = 4 \ \ , \ \ -2 \tag{3.29}$$

となる．どちらの固定点も $|\lambda| > 1$ となるため，固定点近傍の x_n の軌道は固定点には収束しない．これは，$n \to \infty$ の極限でフォトニックバンド端と共鳴状態のピーク位置が一致することを表している．

[*2] 写像力学とは，一定の規則に従って時間の経過とともに状態が変化するシステムを，微分方程式または差分方程式として記述する力学系のうち，後者をいう．

[*3] なお，$|\lambda| = 1$ の場合は，線形解析の範囲では中立であることを表し，固定点に収束するか否かは 2 次までを考える必要がある．また，λ が負の場合は，軌道が固定点を中心に反転することを表す．

以上の情報から，フォトニックバンド端近傍（固定点近傍）における $\tau_n(k)$ の 1 つめの因子 $x'_n(k)$ を計算することができる．$x'_n(k)$ の k 微分を変数変換し，関数微分の規則を連続的に適用する．さらに固定点の近傍では各微分値は式 (3.27) より拡大率 λ となるため，

$$\left.\frac{dx_n}{dk}\right|_{x=x_{\mathrm{fixed}}} = \frac{dx_n}{dx_{n-1}}\frac{dx_{n-1}}{dx_{n-2}}\frac{dx_{n-2}}{dx_{n-3}} \cdots \frac{dx_2}{dx_1}\frac{dx_1}{dk} \propto \lambda^n \tag{3.30}$$

となる[*4]．つまり，フォトニックバンド端近傍（固定点近傍）における $\tau_n(k)$ の 1 つめの因子 $x'_n(k)$ は固定点近傍の拡大率 λ だけで表されることが示された．

次に，$\tau_n(k)$ の 2 つめの因子 $T_n(k)/\sin\phi_n(k)$ を評価する．

3.2.4 横断時間と固定点近傍の拡大率との関係

次に，$\tau_n(k)$ の 2 つめの因子 $T_n(k)/\sin\phi_n(k)$ を考える．この因子はさらに $T_n(k)$ と $1/\sin\phi_n(k)$ に分解できるが，$T_n(k)$ は n に依らず $0 \le T_n(k) \le 1$ の値なので横断時間のスケーリング則には効いてこない．$1/\sin\phi_n(k)$ は $\phi_n(k) \to 2\pi$ に近づくならば，発散するのでスケーリング則に寄与することになる．実際，$n \to \infty$ の極限では共鳴状態 $(T_\infty = 1)$ がフォトニックバンド端（$x_\infty = 1$）と一致するので，式 (3.25) より，

$$x_\infty = \frac{\cos\phi_\infty}{T_\infty} \quad \to \quad \phi_\infty = 2\pi m \tag{3.31}$$

となる（m は整数）．つまり，n を大きくしたときの $\phi_n(k)$ の $2\pi m$ への近づき方がわかれば，$T_n(k)/\sin\phi_n(k)$ の評価ができる．ここで，$\phi_n(k)$ の $2\pi m$ への近づき方も 3.2.3 の写像の固定点とその振舞いから得られる．つまり，$\phi_n(k)$ の固定点（$2\pi m$）からのずれを $\delta\phi_n$ と表したときに，$\delta\phi_n$ の n 依存性が得られれば良い．固定点近傍での δx_n の振舞いは式 (3.27) と拡大率 λ からわかるので，$\delta\phi_n$ と δx_n を結びつけることをから $\delta\phi_n$ の n 依存性を考える．

式 (3.25) より δx_n と $\delta\phi_n$ 関係は,

$$\delta x_n = -\sin\phi_n \delta\phi_n \tag{3.32}$$

となる．ただし，共鳴状態を考えているため $\delta T_n = 0$ を用いた．式 (3.32) を式 (3.27) へ代入し x を消去すると,

$$\sin\phi_n \delta\phi_n = \lambda \sin\phi_{n-1}\delta\phi_{n-1} \tag{3.33}$$

となる．固定点近傍では $\phi_n = 2\pi m + \delta\phi_n$ $(\delta\phi_n \ll 1)$ なので，$\sin\phi_n \simeq \delta\phi_n$ と近似できる．式 (3.33) は,

$$\delta\phi_n = \lambda^{\frac{1}{2}}\delta\phi_{n-1} \quad \to \quad \delta\phi_n \propto \lambda^{\frac{n}{2}} \tag{3.34}$$

[*4] 正確には λ の指数は $n-1$ であるが（dx_1/dk は λ でないため），スケーリング則を考える場合，定数倍の違いは無視することができるので λ^n とする．

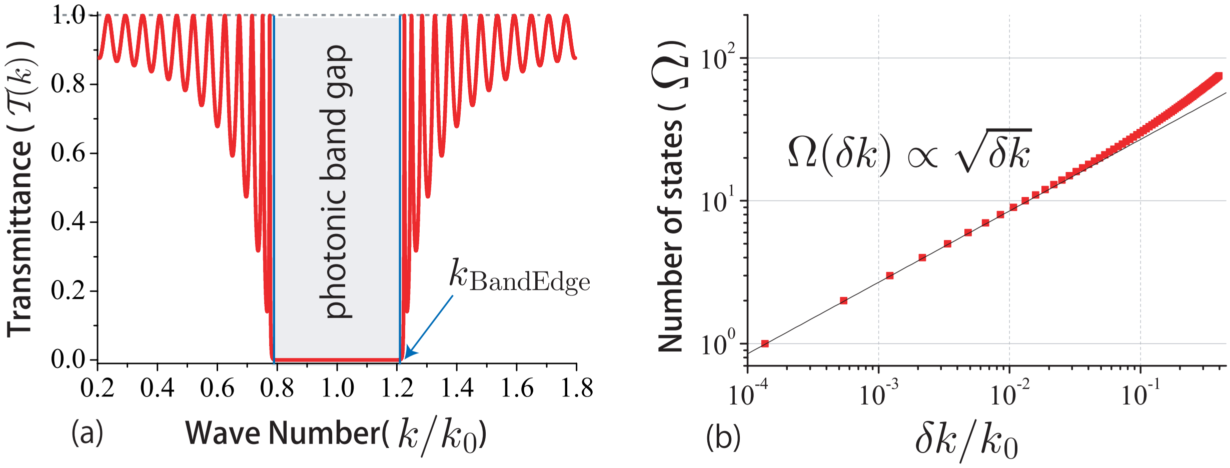

図 3.8　(a)32 層周期系の透過率スペクトル（再掲）と (b) フォトニックバンド端近傍の状態数 Ω と $\delta k \equiv k - k_{\mathrm{BandEdge}}$ の関係．ただし，$k_{\mathrm{BandEdge}}/k_0 = 1.2164$（$n_A = 2.0, n_C = 1.0$）．

となり，$\delta\phi_n$ の n 依存性が δx と同様に λ だけで表わされた．つまり，n を大きくするごとにフォトニックバンド端のより近傍に現れる共鳴状態に対する $\delta\phi_n$ は，

$$\delta\phi_n \propto \frac{1}{\lambda^{\frac{n}{2}}} \tag{3.35}$$

となる．よって，バンド端近傍に出現する共鳴状態に対する $\tau_n(k)$ の 2 つめの因子 $T_n(k)/\sin\phi_n(k)$ は，

$$\frac{T_n(k)}{\sin\phi_n(k)} \simeq \frac{T_n(k)}{\delta\phi_n(k)} \propto \lambda^{\frac{n}{2}} \tag{3.36}$$

が導かれる．ただし，フォトニックバンド中の共鳴状態では $\phi_\infty \neq 2\pi$ なので，$\tau_n(k)$ の 2 つめの因子 $T_n(k)/\sin\phi_n(k)$ は発散しないためスケーリング則には寄与しない．

式 (3.22),(3.30),(3.36) から，フォトニックバンド端とバンド中の共鳴状態に対して横断時間 τ は，

$$\tau_n = \frac{dx_n}{dk}\frac{T_n}{\sin\phi_n} \propto \begin{cases} \lambda^n \times \lambda^{\frac{n}{2}} & \cdots\text{フォトニックバンド端} \\ \lambda^n & \cdots\text{フォトニックバンド中心} \end{cases} \tag{3.37}$$

となり，非線形写像の固定点近傍の拡大率 λ だけで表わされた．横断時間 τ_n の結晶サイズ L 依存性を導出するには，λ と L の関係が得られれば良い．次に λ と L の関係を求める．

3.2.5　固定点近傍の拡大率と結晶サイズの関係

図 3.8: fig/142.eps

ここでは，Kohmoto が議論したフラクタル次元の一種である局所次元 α と呼ばれる非整数の量 [47] を用いて λ と L を関連付けられることを示す．

図 3.8(b) は，フォトニックバンド端（k_{BandEdge}）からの距離 $\delta k \equiv k - k_{\mathrm{BandEdge}}$ と共鳴状態の状態数 $\Omega(\delta k)$ の関係を表している．1 次元のバンド端近傍では $\Omega(\delta k) \propto \sqrt{\delta k}$ であることがわかるが，これは 1 次元電子状態の状態密度のファンホーブ特異性 $D(\epsilon) \propto 1/\sqrt{\epsilon}$ と状態数 $\Omega(\epsilon) \propto \sqrt{\epsilon}$ の関係でよく知られている．一般にあるエネルギー ϵ 付近の状態数 $\Omega(\epsilon)$ の関数形は，局所次元 α を用いて一般的に，

$$\Omega(\epsilon) \propto \epsilon^{\alpha(\epsilon)} \tag{3.38}$$

と表させる．逆に言えばこれが α の定義となり，α は ϵ の関数である．フォトニックバンド端近傍や，1 次元電子状態のエネルギーバンド端では $\alpha = 1/2$ である．α は対象とする系の構造の次元によって決めることができるが，Kohmoto らは非線形写像における固定点近傍の拡大率 λ と系のサイズが $L \propto \rho^n$（ρ は L をスケーリング則で表すときの基底）から，

$$\alpha = \frac{\ln \rho}{\ln |\lambda|} \tag{3.39}$$

となることを示した [47][*5]．この表式を用いると，周期型フォトニック結晶（式 (3.24) より $\rho = 2$）のフォトニックバンド端に相当する固定点では，$\lambda = 4$（式 (3.29)）なので，式 (3.39) より $\alpha = 1/2$ となり，図 3.8 の結果と一致する．一方もう一つの固定点（フォトニックバンド中）の場合，$\lambda = -2$（式 (3.29)）なので，$\alpha = 1$ となる．これは，共鳴状態数がエネルギーに比例することを表している．実際にフォトニックバンドの中心は $\epsilon \propto k$ なので $\Omega(\epsilon) \propto \epsilon$ になるから $\alpha = 1$ になる．

ここで，式 (3.39) を変形すると

$$|\lambda| \propto L^{\frac{1}{n\alpha}} \tag{3.40}$$

が得られる．すなわち λ と L が α とよって関連付けられるので，式 (3.37) に代入すると

$$\tau_n \propto \begin{cases} L^{\frac{1}{\alpha}} \times L^{\frac{1}{2\alpha}} & \cdots \text{フォトニックバンド端} \\ L^{\frac{1}{\alpha}} & \cdots \text{フォトニックバンド中心} \end{cases} \tag{3.41}$$

となる．つまり，横断時間 τ の結晶サイズ L 依存性は，局所次元 α によって決まることを意味している．周期型フォトニックバンド端近傍の $\alpha = 1/2$ を代入すると $\tau \propto L^3$ となり，式 (3.19) で示した数値計算の結果と一致すること示すことができた．もう一つのフォトニックバンド中心にある固定点は $\alpha = 1$ なので，$\tau \propto L$ となり，横断時間が結晶サイズに比例することを示している．フォトニックバンドの中心は $\epsilon \propto k$ なので，v_g は L に依らず一定なので，$\tau \propto L$ になる．

[*5] 式 (3.38) にて，$\epsilon = \delta k$ として $\Omega \propto L \propto \rho^n$，$\delta k \propto \lambda^n$ を代入すると一致する．

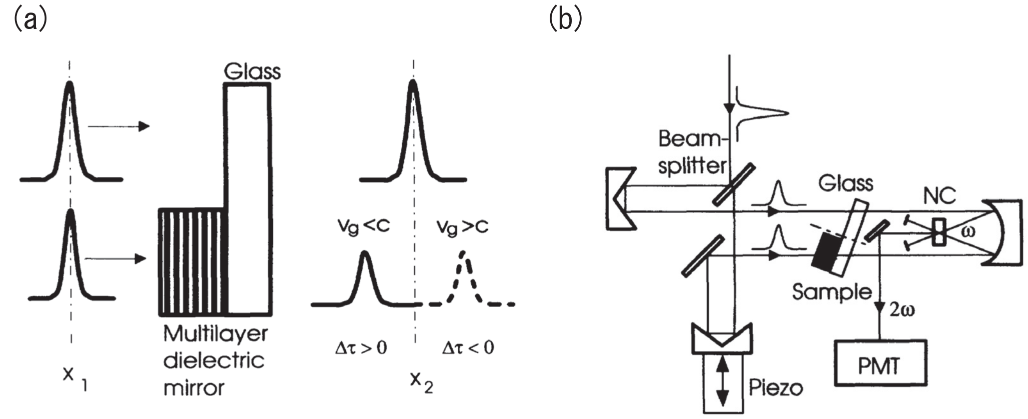

図 3.9　(a) 実験概念図 (b) 実験系概略図 [29]．各層幅の光路長を波長の 4 分の 1 とすることで，その波長の光による透過波は結晶幅に対して指数関数的に減少する．

式 (3.41) の結果は，対応する非線形写像とその固定点近傍での拡大率が得られさえすれば周期型あるいは非周期型フォトニック結晶にかかわらず成り立つと考えられる．第 5 では，自己相似フォトニック結晶における横断時間について，式 (3.41) と数値計算結果を比較することで，非周期型でも成立するかを検証する．

3.3　フォトニックバンドギャップにおける超光速現象

誘電率が異なる媒質を層状に積み重ねることで作成される 1 次元フォトニック結晶において，1990 年代以降の技術進歩により光パルスピークの横断時間の厳密な測定が可能となった．第 1 章 研究背景で紹介したフォトニックバンドギャップ中の光パルスの超光速現象は，量子粒子のトンネル時間による Hartman 効果の光学系による結果として注目された [28–32]．

フォトニックバンドギャップに対応する光パルスを入射させた場合，大部分は反射する一方で，ほんの一部は透過する．その透過波の横断時間が，フォトニック結晶の幅が大きくなるにつれ一定値へ収束することが Spielmann らによって実験的に示された（図 3.9）[29]．この現象は量子粒子によるポテンシャルバリアのトンネル時間が，バリア幅が大きくなるにつれ一定値へ収束するという Hartman 効果 [18] の光学版として知られている．数値的収束することは Esposito によって示された [37] が，収束値の解析解はこれまで未解決であった．本節では，式 (2.166) で得られた光パルスの横断時間を用いて，トンネル時間の収束値を解析的に導出し，その物理的意味を議論する．

図 3.9: fig/Spielmann1994.eps

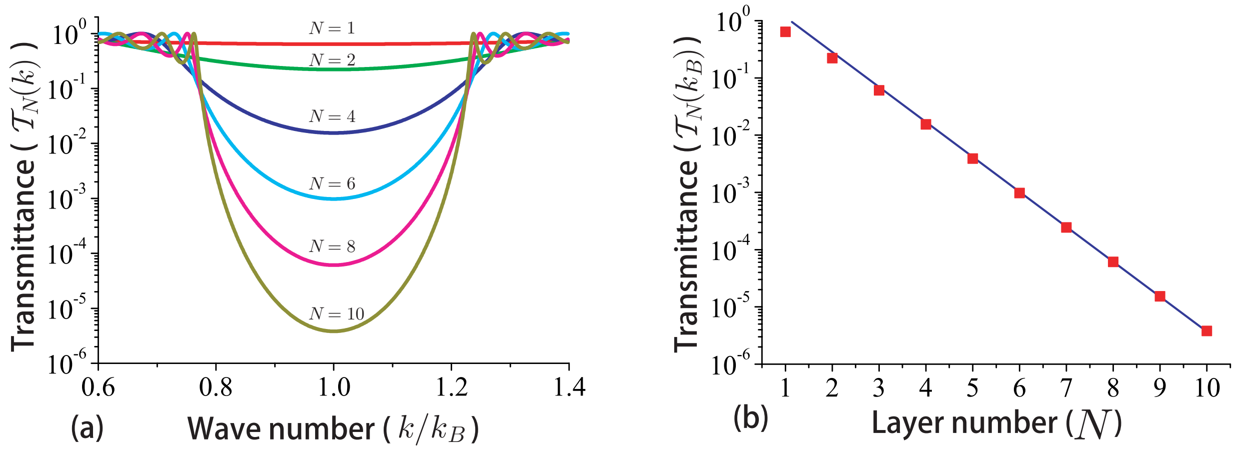

図 3.10 (a) フォトニックバンドギャップの中心 ($k = k_B$) 付近における，1 次元 N 層周期系の透過率 $\mathcal{T}_N(k)$ の波数依存性．(b) フォトニックバンドギャップ中心波数 ($k = k_B$) における透過率 $\mathcal{T}_N(k_B)$ の層数 N 依存性．バンドギャップの中心における透過率は層数 N が大きくなるにつれ指数関数的に小さくなっていることがわかる．$n_A d_A = n_C d_C = \lambda_0/4$, $n_A = 2.0, n_C = 1.0 (K = 5/4)$ として計算した場合，式 (3.47) より $\mathcal{T}_N(k) \propto 4^{-N}$ となる．

3.3.1 フォトニックバンドギャップにおける透過率

図 3.2 で示したとおり，各層幅の光路長を入射波長の 1/4 波長の場合（$n_A d_A = n_C d_C = \lambda_0/4$），つまり各層における位相の変化分が $\delta_A = \delta_C = \pi/2$ になり，この場合フォトニックバンドギャップの中心 $k = k_B$（$k_B = 2\pi/\lambda_0$）付近の透過率が著しく減少する．

図 3.10 では式 (3.11) を用いて，フォトニックバンドギャップの中心（$k = k_B$）付近における，1 次元周期数 N の透過率 $\mathcal{T}_N(k)$ の波数依存性と，フォトニックバンドギャップ中心波数（$k = k_B$）における透過率 $\mathcal{T}_N(k_B)$ の層数 N 依存性を図示した．バンドギャップの中心における透過率は層数 N が大きくなるにつれ指数関数的に小さくなり，$\mathcal{T}_N(k) \propto 4^{-N}$ に漸近していることがわかる．次節ではこの漸近解を導出する．

3.3.2 フォトニックバンドギャップ中心における透過率の漸近解

フォトニックバンドギャップ中心における透過率の漸近解は，式 (3.11) に $\delta_A = n_A d_A k_B = \pi/2, \delta_C = n_C d_C k_B = \pi/2$ を代入すると

$$\mathcal{T}_N(k_B) = \frac{1}{(K\Psi_N(k_B) + \Psi_{N-1}(k_B))^2} \tag{3.42}$$

となる．ただし Ψ_N は式 (3.6) で定義される．$k = k_B$ の場合，$\Psi_N(k_B)$ は具体的に $\Psi_0(k_B) = 0, \Psi_1(k_B) = 1$, $\Psi_2(k_B) = -2K$, $\Psi_3(k_B) = 4K^2 - 1$, $\Psi_5(k_B) = -8K^3 + 4K$, $\Psi_6(k_B) =$

図 3.10: fig/fig3.eps

$16K^4 - 12K^2 + 1, \cdots$ となる．$\Psi_N(k_B)$ は漸化式

$$\frac{\Psi_N(k_B)}{\Psi_{N-1}(k_B)} = -2K - \frac{1}{\dfrac{\Psi_{N-1}(k_B)}{\Psi_{N-2}(k_B)}} \, . \tag{3.43}$$

を満たす．これは式 (3.6) を変形することで得られる．$\Psi_N(k_0)/\Psi_{N-1}(k_0)$ は連分数となり，N が大きくなるにしたがって一定値へ収束する．$N \to \infty$ の漸近値は $\chi = -2K - \frac{1}{\chi}$ の解となるため，

$$\frac{\Psi_N(k_0)}{\Psi_{N-1}(k_0)} = -K - \sqrt{K^2 - 1} \quad , \quad (N \to \infty) \tag{3.44}$$

と得られる．ただし，式 (3.43) より $\Psi_N(k_0)/\Psi_{N-1}(k_0)$ は負なので，2 次方程式の解のうち負となる方を採用した．

式 (3.44) から，フォトニックバンドギャップ中心における透過率の比 $\mathcal{T}_N(k)/\mathcal{T}_{N-1}(k)$ は

$$\frac{\mathcal{T}_N(k_B)}{\mathcal{T}_{N-1}(k_B)} = \left| \frac{\Psi_{N-1}(k_B)}{\Psi_N(k_B)} \frac{K + \dfrac{\Psi_{N-2}(k_B)}{\Psi_{N-1}(k_B)}}{K + \dfrac{\Psi_{N-1}(k_B)}{\Psi_N(k_B)}} \right|^2 , \tag{3.45}$$

と表すことができるため，$\mathcal{T}_N(k)/\mathcal{T}_{N-1}(k)$ の漸近形は

$$\lim_{N \to \infty} \frac{\mathcal{T}_N(k_B)}{\mathcal{T}_{N-1}(k_B)} = \frac{1}{(K + \sqrt{K^2 - 1})^2} \, . \tag{3.46}$$

となる．つまり，フォトニックバンドギャップ中心における透過率 $\mathcal{T}_N(k_B)$ の漸近解は

$$\mathcal{T}_N(k_B) \propto (K + \sqrt{K^2 - 1})^{-2N} \tag{3.47}$$

となることが示せた．図 3.10(b) は，式 (3.11) を用いて $n_A = 2.0, n_C = 1.0 (K = 5/4)$ にてフォトニックバンドギャップ中心における透過率計算した結果を図示した結果である．この場合，$K + \sqrt{K^2 - 1} = 2$ であるから，$\mathcal{T}_N(k_B)$ は周期数 N が大きくなるにつれ，4^{-N} で指数関数的に減少し，式 (3.47) で解析的に導出した結果と一致した．

3.3.3 フォトニックバンドギャップ中心におけるトンネル時間の解析解

次に，フォトニックバンドギャップ中心におけるトンネル時間（＝横断時間）の解析解を導出する．トンネル時間は式 (2.166) で示したとおり，N 層における透過係数の位相部分 $\phi_N(k)$ の微分が得られれば良い．$\phi_N(k)$ の表式は，式 (3.10) で与えられている．$\phi'_N(k_B)$ を得るためには，$\Phi'(k_B)$, $\Psi'_N(k_B)$ など項数が多く複雑となるが，$\delta_A(k_B) = \delta_C(k_B) = \pi/2$ を用いると最終的に，

$$\tau_N(k_B) = \frac{\phi'(k_B)}{c} = \frac{\lambda_0}{4c} \frac{1 + K}{K + \dfrac{\Psi_{N-1}(k_B)}{\Psi_N(k_B)}} \tag{3.48}$$

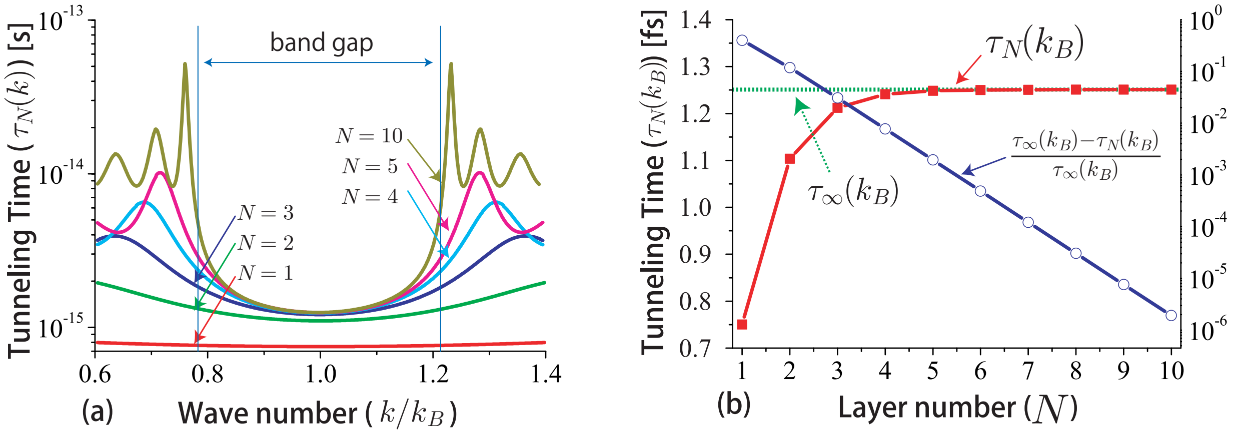

図 3.11　(a) フォトニックバンドギャップ中心付近の横断時間 $\tau_N(k)$ の波数依存性．$n_A = 2.0, n_C = 1.0(K = 5/4)$，層数 $N = 1, 2, 3, 4, 5, 10$ の場合における数値計算結果．(b) フォトニックバンドギャップ中心（$k = k_B$）におけるトンネル時間の層数 N 依存性．$\frac{\tau_\infty(k_B)-\tau_N(k_B)}{\tau_\infty(k_B)}$ は右軸をを参照．τ_∞ は式 (3.50) で得られた解析解で，解析値へ層数と共に指数関数的に収束していることを表している．

となる．ただし，K は式 (3.2) で与えられる．さらに，$\Psi_{N-1}(k_0)/\Psi_N(k_0)$ は，式 (3.43) の連分数を満たすことを示しているので，フォトニックバンドギャップ中心における透過率の導出と同様に，$N \to \infty$ の極限で，

$$\frac{\Psi_N(k_B)}{\Psi_{N-1}(k_B)} = -K - \sqrt{K^2 - 1} \tag{3.49}$$

となる．式 (3.49) を式 (3.48) に代入すると，

$$\tau_\infty(k_B) = \frac{\lambda_0(1+K)}{4c} \frac{K + \sqrt{K^2-1}}{K^2 + K\sqrt{K^2-1} - 1} \tag{3.50}$$

が得られる．式 (3.50) は，層数 N が増えるに従って，トンネル時間が一定値へ収束していくことを意味する．$K = 5/4$ の場合には，$\tau_\infty(k_B) = 1.25$[fs] になる．

3.3.4　トンネル時間の数値計算の結果との比較

図 3.11(a) は，式 (3.17) を用いてフォトニックバンドギャップ付近の横断時間を数値計算した結果である．横断時間はフォトニックバンドギャップの中心 $k = k_B$ 付近で最小となり，層数が大きくなるにつれトンネル時間が収束していくことがわかる．この時の収束値は 1.25[fs] になる．図 3.11(b) はフォトニックバンドギャップ中心（$k = k_B$）におけるトンネル時間の層数 N 依存性を数値計算した結果である．τ_∞ は式 (3.50) で得られた解析解で，解析値へ層数と共に指数関数的に収束していることを表している．

図 3.11: fig/fig4.eps

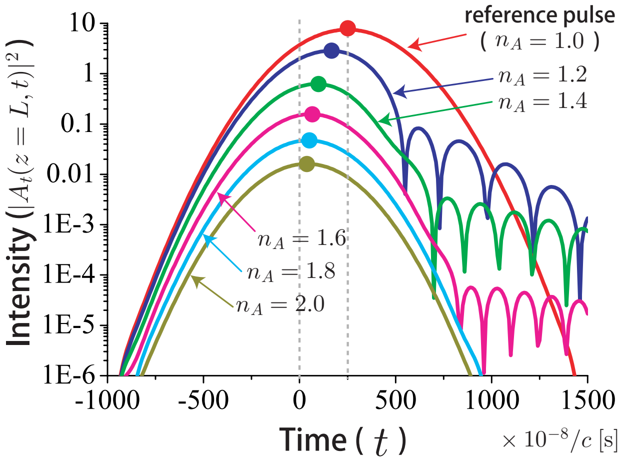

図 3.12　フォトニックバンドギャップ中心 ($k = k_B$) における透過波の時間発展．$n_A = 1.0$ ～2.0 において，式 (2.151) を直接計算することで得られる透過波 $A_t(z = L, t)$ の様子（層数 $N = 10$（$L = 937.5$[nm]），$n_C = 1.0$）．

図 3.12 は，式 (2.151) から透過波 $A_t(z = L, t)$ の時間発展を直接計算した結果である．層数 $N = 10$（$L = 937.5$[nm]）において，$n_A = 1.0$ を参照として，A 層の屈折率を $n_A = 1.2, 1.4, 1.6, 1.8, 2.0$ と変化させると，n_A が大きくなるにつれ，透過パルスのピークが到達するまでの時間は短くなっていることがわかる．しかしながら，n_A が大きくなるにつれ透過パルスの振幅は小さくなるため，エネルギーや信号を光速を超えて伝えていることはないことがわかる．

トンネル時間がバリア幅を大きくするに従って一定値へ収束するという，一見，相対論的な因果律を破っているように見えるがそうではない．透過パルスは入射パルスの前方部分の一部であるにすぎないため，表面的に光速よりも速く見えるに過ぎないためである．

図 3.12: fig/fig5-2.eps

第 4 章

自己相似フォトニック結晶中の電磁波

M.Kohmoto らは，自己相似構造中の電子状態の研究で用いた解析手法 [45] を，自己相似フォトニック結晶中の電磁波の問題に適用することで，透過スペクトルの自己相似性や，電磁波の特異な局在などを明らかにした [47]．第４章ではその概要を解説し，本研究の主題である自己相似フォトニック結晶における光パルスの遅延効果の検証（第 5 章）を行う為の基本事項を示す.

4.1 自己相似フォトニック結晶中の電磁波の性質

4.1.1 自己相似フォトニック結晶の構造について

本研究で対象とする自己相似構造は，**生成規則**で作られる１次元自己相似構造である．最もシンプルな生成規則は Fibonacci 列の生成規則として知られ,

$$\begin{cases} A \to C \\ C \to AC \end{cases} \tag{4.1}$$

で与えられる．この規則を繰り返すことで作られる並びは,

$$A \to C \to AC \to CAC \to ACCAC \to CACACCAC \to ACCACCACACCAC \to \\ \to CACACCACACCACCACACCAC \to \cdots$$

となる．この A と C の並びは Fibonacci 列と呼ばれ，それぞれ Fibonacci 列の第０世代，第１世代，$\cdots$，第 n 世代とする．この並びは，周期的でもランダムでもない入れ子的な並びである．

本研究で対象とする**自己相似フォトニック結晶**は，２種類の誘電体を生成規則で得られた並びに対応させて配置する１次元フォトニック結晶と定義する．図 4.1 は，Fibonacci 列の生成

図 4.1: fig/140.eps

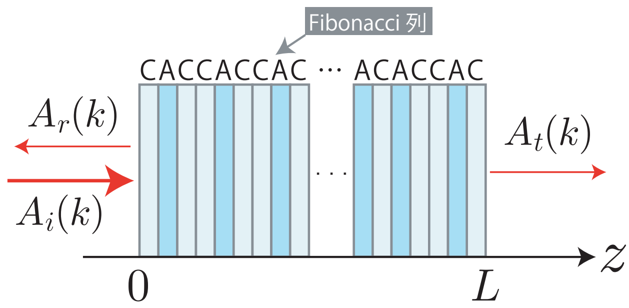

図 4.1　Fibonacci 自己相似フォトニック結晶の模式図

規則によって作られる，Fibonacci 型自己相似フォトニック結晶の模式図である．

一般的に，生成規則の A と C の並びは任意であるため，可算無限個の種類が存在する．生成規則は**可逆的**と**非可逆的**に分類することができ，性質は大きく異なることが知られている [64]．Fibonacci 列の生成規則は可逆的に分類される．しかしながら，本論文では Fibonacci 型自己相似フォトニック結晶しか扱わないため，生成規則の詳細については付録 A.2 を参照頂きたい．

4.1.2　自己相似フォトニック結晶の転送行列

第 n 世代の自己相似フォトニック結晶の転送行列 $M_A^{(n)}$ は，式 (2.129), (2.130),(2.132) で定義される行列 M_{AC}, M_{CA}, M_A, M_C を，A 層，C 層の並びに応，行列積を計算することで得られる[*1]．自己相似フォトニック結晶では，周期系のように並進対称性がないため，単位胞における転送行列の積で表すことができない．その代わりに，式 (4.1) で与えられる生成規則で記述される対称性がある．つまり，第 n 世代の転送行列 $M_A^{(n)}, M_B^{(n)}$ は，生成規則と相似な漸化式，

$$\begin{cases} M_A^{(n)} = M_C^{(n-1)} \\ M_C^{(n)} = M_A^{(n-1)} M_C^{(n-1)} \end{cases} \tag{4.2}$$

を満たす．これはくりこみ変換の一種であると考えられる．また，初期値 $M_A^{(0)}, M_C^{(0)}$ は，Fibonacci 列の場合，A 層は必ず C 層に挟まれるが，C 層は連続しうるので，

$$\begin{cases} M_A^{(0)} = M_{CA} M_A M_{AC} \\ M_C^{(0)} = M_C \end{cases} \tag{4.3}$$

と与える．また，$M_A^{(n)}, M_B^{(n)}$ は，$\det(M_A^{(0)}) = 1, \det(M_C^{(0)}) = 1$ を満たすため，任意の n でも $\det(M_A^{(n)}) = 1, \det(M_C^{(n)}) = 1$ を満たす．

一方，第 n 世代の自己相似フォトニック結晶における，入射波 A_i，透過波 A_t，反射波 A_r

*1 本研究では垂直入射の場合を考えるため，偏光の違いはない．

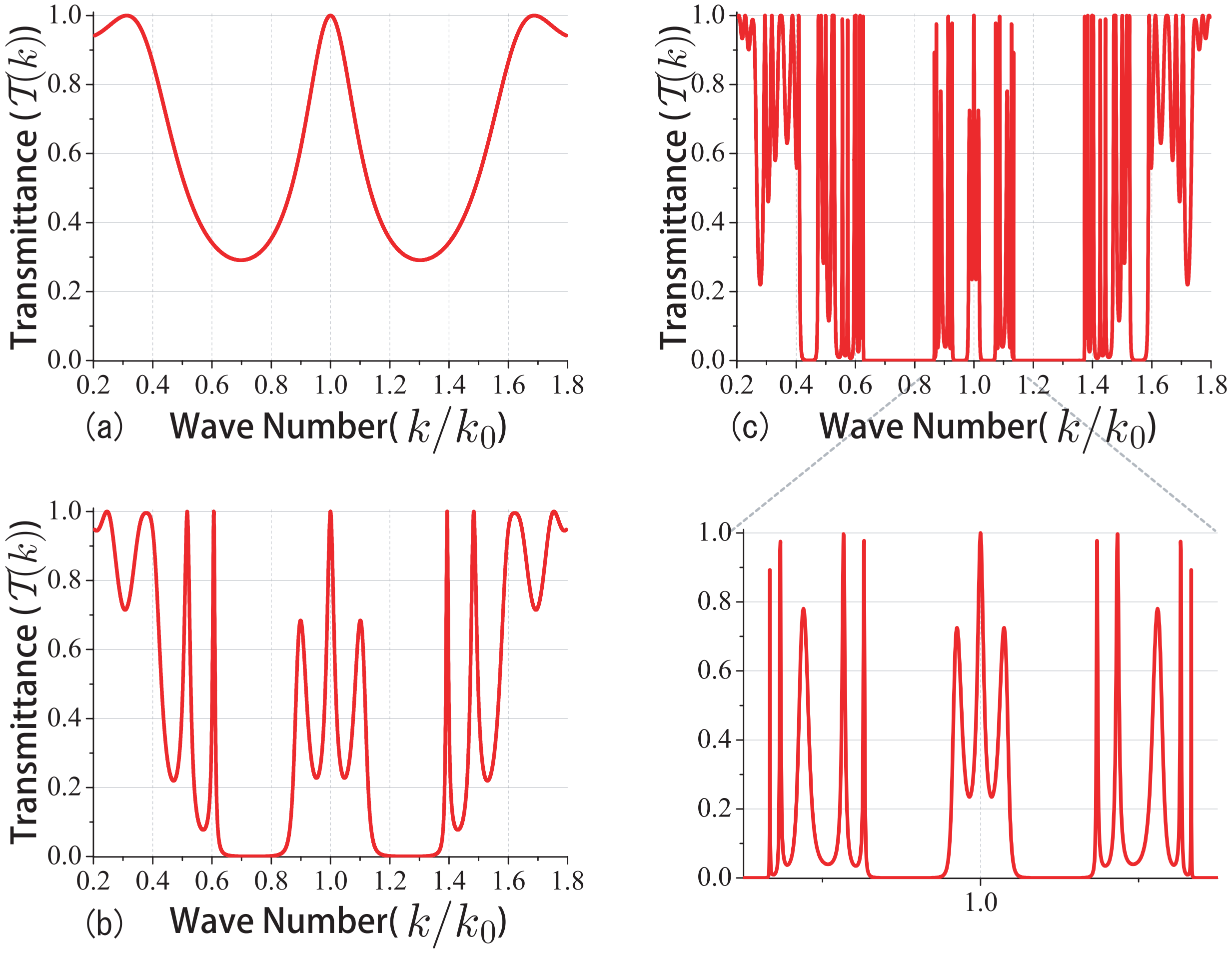

図 4.2　Fibonacci 型自己相似フォトニック結晶における透過率（$\mathcal{T}(k) = T(k)^2$）の入射波数依存性（$n_A = 2.0, n_C = 1.0$ にて計算）．(a)$n = 4(N = 5)$，(b)$n = 7(N = 21)$，(c)$n = 10(N = 89)$ の場合．(c) の $k = k_0$ 付近を拡大したときと (b) が相似となっていることが確認できる．(c) の $k = k_0$ 付近を拡大したときと (b) とが相似の関係になっていることが確認できる．

の振幅の関係は，

$$\begin{pmatrix} A_t & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_i & A_r \end{pmatrix} M_A^{(n)} \tag{4.4}$$

で表すことができるため，第 n 世代の自己相似フォトニック結晶における透過係数 $t_n(k)$ と反射係数 $r_n(k)$ は，$M_A^{(n)}$ の行列要素から得られる（参照：式 (2.121)）．

4.1.3　自己相似フォトニック結晶における透過スペクトルと電磁波の空間分布

図 4.2: fig/113.eps

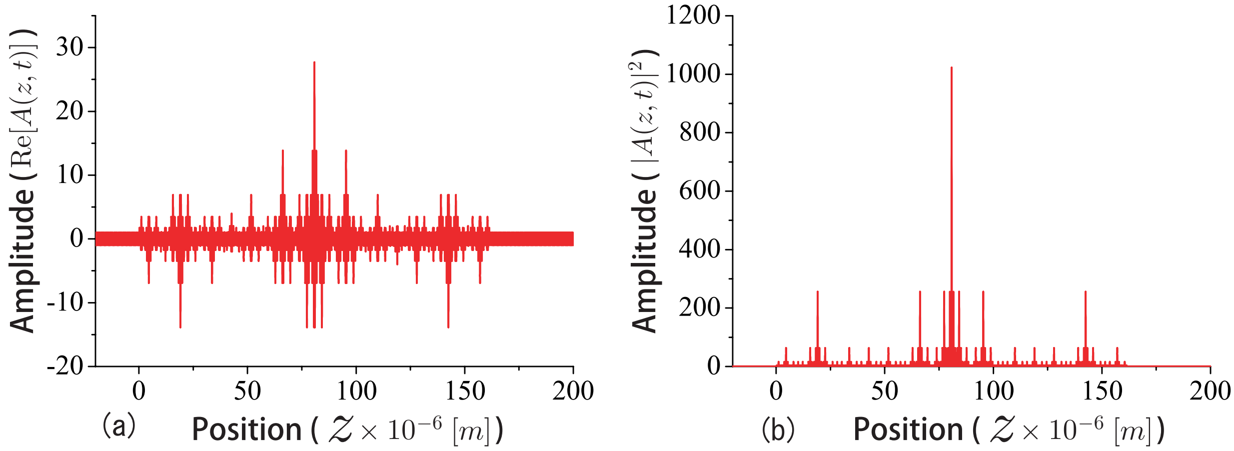

図 4.3　Fibonacci 型フォトニック結晶中の電磁波の空間強度分布 ($n = 13, N = 377, k = k_0$)．(a)Re$[A(z,t)]$, (b)$|A(z,t)|^2$.

周期系の場合，N 層の転送行列 M_N は式 (3.5) を用いることで１層の転送行列 M と単位行列 I で表すことができるため，透過係数 $t_N(k)$ も式 (3.8) と表すことができる．しかしながら，自己相似フォトニック結晶の場合，第 n 世代の転送行列 $M_A^{(n)}$ は式 (4.2) の漸化式から決まるため，第 n 世代の透過係数 t_n は単純に表すことができない．そのため，透過係数 $t_n(k)$ は，漸化式 (4.2) を数値計算することで得られる．

図 4.2(a),(b),(c) はそれぞれは，Fibonacci 型自己相似フォトニック結晶における，第４世代（層数 5），第７世代（層数 21），第１０世代（層数 89）の透過率 $\mathcal{T}(k)$ の入射波数 k 依存性を計算した結果である．ただし，入射波の波長 $\lambda_0 = 500$[nm]（$k_0 = 2\pi/\lambda$）を基準として各層の幅を $d_A = \lambda_0/(4n_A), d_C = \lambda_0/(4n_C)$ とした．図 4.2(c) の $k = k_0$ 付近を拡大した透過スペクトルと，図 4.2(b) の透過スペクトルとが同じ形をしていることが分かる．

また，自己相似の中心である $k = k_0$ の電磁波を入射した際の空間分布が図 4.3 である．電磁波の空間強度分布が自己相似的であることが確認できる．これは，$k = k_0$ に対応する入射波が，自己相似型フォトニック結晶による自己相似的な多重反射の結果であると考えられる．

透過率スペクトルが波数 $k = k_0$ 付近において自己相似構造を持ち，$k = k_0$ に対応する電磁波の空間強度分布も自己相似構造を持つことは，Kohmoto らが自己相似格子中の電子状態の研究で得られた研究成果 [45] を，Fibonacci 型自己相似フォトニック結晶中の電磁波に適用することで得られた [47]. 図 4.3 の電磁波の空間強度分布が，自己相似格子中の波動関数と似ていることも確認できる（付録図 A.6）.

図 4.3: fig/114.eps

4.1.4 自己相似フォトニック結晶におけるフォトニックバンドの自己相似構造

自己相似フォトニック結晶におけるフォトニックバンドに自己相似構造が見られことも Kohmoto らによって明らかにされた [47]．図 4.4 は，Fibonacci 型自己相似フォトニック結晶の第 19 世代における固有状態[*2]となる入射波数 k のスペクトルを図示した．フォトニックバンド中心 $k = k_0$ 付近を拡大すると，$k = k_0$ を中心において自己相似構造が見られる．また，フォトニックバンドは世代数を上げるごとにバンド中にギャップが入り込んでいく構造となっている．

図 4.5 は,

$$H(k) = \int_0^k D(k)\ dk \tag{4.5}$$

で定義される積分状態密度 $H(k)$ を計算した結果である．$H(k)$ が一定の部分はフォトニックバンドギャップに相当する．フォトニックバンドギャップとなる $H(k)$ の位置は, gap labeling theorem と呼ばれる理論で説明できることが示されている（付録 A.7.1）．

gap labeling theorem とは，Fibonacci 型の場合，黄金比 $\rho = (1 + sqrt5)/2$ を用いて，積分状態密度 $H(k)$ が,

$$H(k) = \{m + n\rho | m, n \in \mathbf{Z}\} \tag{4.6}$$

を満たすところに，バンドギャップ出現するという理論である [65]．具体的には,

$$\begin{cases} 1) \cdots (n,m) = (2,-1) \to H(E) = (3-\sqrt{5})/2 & = 0.381966\cdots \\ 2) \cdots (n,m) = (-1,1) \to H(E) = (\sqrt{5}-1)/2 & = 0.618033\cdots \\ 3) \cdots (n,m) = (-3,2) \to H(E) = \sqrt{5}-2 & = 0.236067\cdots \\ 4) \cdots (n,m) = (4,-2) \to H(E) = 3-\sqrt{5} & = 0.763932\cdots \end{cases} \tag{4.7}$$

である．図 4.5 のバンドギャップの位置と一致することがわかる[*3].

フォトニックバンドは世代数を上げるごとにバンド中にギャップが入り込んでいく構造を反映して，積分状態密度が非常に細かな階段状になっている状態で「悪魔の階段的[*4]」である．

ここまでが，Fibonacci 型自己相似フォトニック結晶における電磁波の状態に関する数値計算の結果である．

[*2] 式 (2.5.3) で示したとおり，$|x_n(k)| = 1$ を満たす入射波数 k は固有状態となる．

[*3] gap labeling theorem についてはー般論については，付録 A.6.7 を参照.

[*4] 悪魔の階段的とは，ほとんど至るところで微分係数が 0 かつ単調増加を示すことを意味する．

図 4.4: fig/136.eps

図 4.5: fig/137.eps

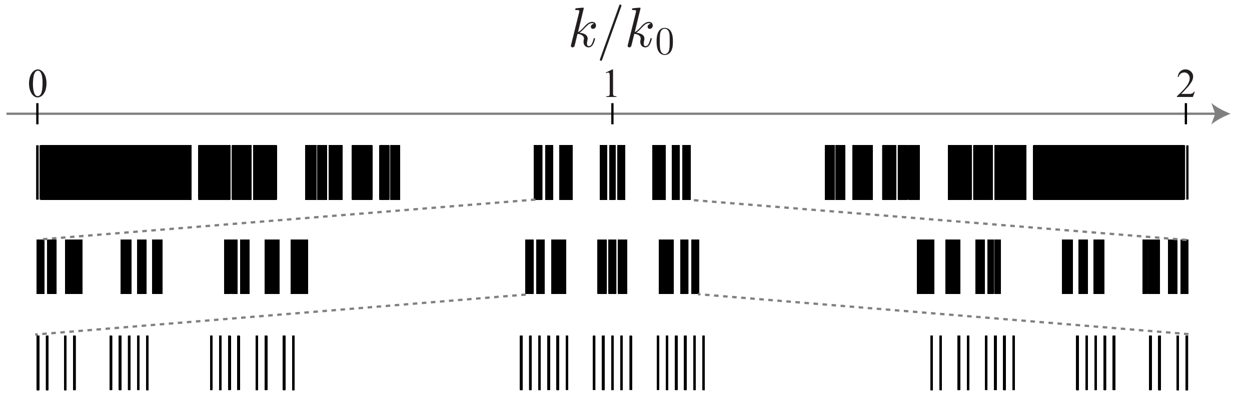

図 4.4　Fibonacci 型自己相似フォトニック結晶の第 19 世代における固有状態となる入射波数 k のスペクトル．式 (2.143) から計算．フォトニックバンド中心 $k=k_0$ 付近として拡大した様子.

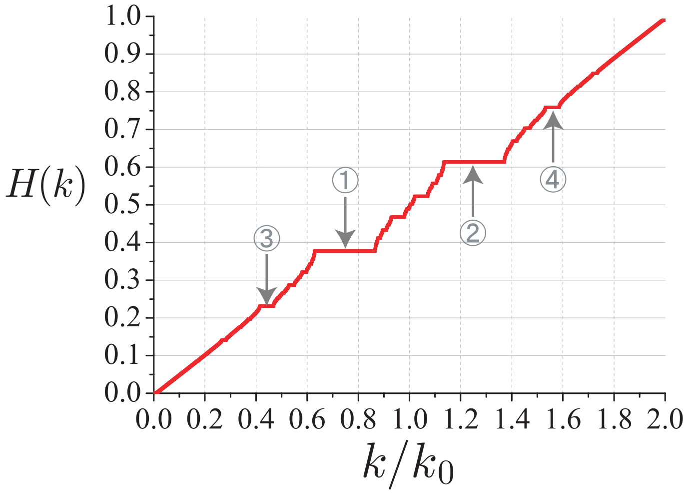

図 4.5　Fibonacci 型自己相似フォトニック結晶における積分状態密度 $H(k)$（式 (4.5)）. $H(k)=$ Const. の場所はフォトニックバンドギャップを表し，ギャップの位置も電子系と同様の gap labeling theorem（式 (4.6)）で示すことができる．①H=0.382，②H=0.618，③H=0.237，④H=0.764．電子系（図 A.7）と同様，「悪魔の階段的」である．

4.2　自己相似フォトニック結晶中の電磁波の解析手法

4.2.1　trace map

次に，自己相似フォトニック結晶中の電磁波における解析手法を紹介する [43, 45]. Kohmoto らは，解析的に扱いづらい転送行列の漸化式から写像を導いた．第 n 世代の転送行列 $M_A^{(n)}, M_B^{(n)}$ を用いて，

$$x_n \equiv \frac{1}{2}\mathrm{Tr}M_A^{(n)} \ , \ \ y_n \equiv \frac{1}{2}\mathrm{Tr}M_C^{(n)} \ , \ \ z_n \equiv \frac{1}{2}\mathrm{Tr}(M_A^{(n)}M_C^{(n)}) \ . \tag{4.8}$$

と定義し，転送行列の漸化式 (4.2) を式 (4.8) を代入することで，

$$\begin{cases} x_{n+1} = y_n \\ y_{n+1} = z_n \\ z_{n+1} = 2y_n z_n - x_n \end{cases} \tag{4.9}$$

を導いた．ただし，写像の初期値は式 (4.3) より，

$$\begin{cases} x_0 = \cos\delta_A \\ y_0 = \cos\delta_C \\ z_0 = \cos\delta_A\cos\delta_C - K\sin\delta_A\sin\delta_C \end{cases} . \tag{4.10}$$

と与えられる．ただし，K は式 (3.2)，δ_A, δ_C は式 (2.133) で定義される量である．式 (4.9) は３次元非線形写像で，**trace map** と名付けられた [43]．これは，自己相似フォトニック結晶中の電磁波の問題が，写像力学の問題に帰着させせることができたことを意味する．つまり，写像の固定点や周期点付近における振る舞いを調べることで，自己相似フォトニック結晶中の電磁波の性質が明らかになる．

一般の生成規則でも同様の手続きで trace map で導出することができる．一般的には，

$$\begin{cases} x_{n+1} = f(x_n, y_n, z_n) \\ y_{n+1} = g(x_n, y_n, z_n) \\ z_{n+1} = h(x_n, y_n, z_n) \end{cases} . \tag{4.11}$$

と表される．trace map の一般的性質も明らかにされている [43, 45][*5]．

1. １対１の写像であり，逆写像が存在する．
2. 写像のヤコビアンの絶対値が 1 となり，従って保存的である．
3. 式 (4.13) により定義される量 I_n が不変量となる．

項目 1 の逆写像とは，式 (4.11) を逆に解くことができることを意味する．

項目 2 のヤコビアンとは，

$$D \equiv \begin{pmatrix} \frac{\partial f(x,y,z)}{\partial x} & \frac{\partial f(x,y,z)}{\partial y} & \frac{\partial f(x,y,z)}{\partial z} \\ \frac{\partial g(x,y,z)}{\partial x} & \frac{\partial g(x,y,z)}{\partial y} & \frac{\partial g(x,y,z)}{\partial z} \\ \frac{\partial h(x,y,z)}{\partial x} & \frac{\partial h(x,y,z)}{\partial y} & \frac{\partial h(x,y,z)}{\partial z} \end{pmatrix} . \tag{4.12}$$

で定義されるヤコビ行列 D の行列式 $\det D$ であり，写像による位相空間における体積の変化率を表す．つまり，写像のヤコビアンの絶対値が 1 とは，どの地点 (x, y, z) における写像でも，体積は保存されることを意味する．

項目 3 の I_n は，

$$I_n \equiv x_n^2 + y_n^2 + z_n^2 - 2x_n y_n z_n - 1 \tag{4.13}$$

[*5] Fibonacci を含む可逆的な生成規則全般で成り立つ．非可逆的な生成規則ではどれも成り立たない．詳細は付録 A.8.1 を参照頂きたい．

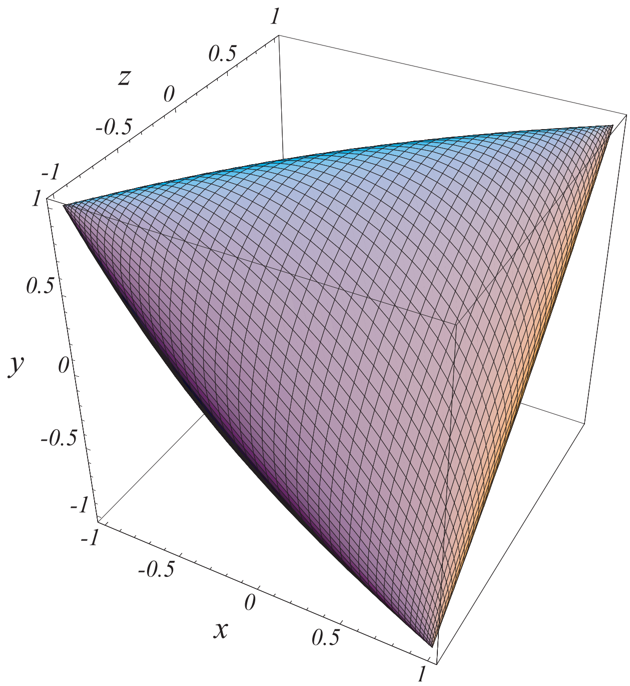

図 4.6　不変量 I がゼロの場合の trace map の不変曲面．この曲面は，5 個のパーツのうち中心を占めるものであり，4 個の点 $(1,1,1)$，$(1,-1,-1)$，$(-1,1,-1)$，$(-1,-1,1)$ を頂点とするカスプを持つ．

で定義される．この I_n が不変量ということは I_n が n に依存しないことを意味する．Fibonacci 型の場合，$I_{n+1} = I_n$ であることは，式 (4.11) を式 (4.13) に代入することで確かめることができる．I_n が n に依存しないということは，写像の軌道が式 (4.13) で記述される 3 次元空間内の曲面上となる（図 4.6）．　そのため不変量 I は，初期値の式 (4.10) で決まり，

$$I = K^2 - 1 \tag{4.14}$$

となる．ただし，K は式 (3.2) で与えられる．

つまり，trace map は，式 (4.10) で示したとおり，入射波数 k で決まる初期値から出発し，自己相似フォトニック結晶を構成する誘電体の屈折率 n_A, n_C だけで決まる不変量 I の曲面上を移動する写像になっている．trace map の固定点や周期点付近における振る舞いを調べることで，自己相似フォトニック結晶中の電磁波の性質が明らかになる．

4.2.2　trace map の周期点

Kohmoto らは，図 4.2 に示した透過スペクトルの自己相似性の中心となる入射波数 $k = k_0$ に対応する trace map が，6 周期点になることを明らかにした [47]．　図 4.7 は，$k = k_0$ に対応する trace map の軌道である．式 (4.10) で与えられる初期値から出発し，6 周期になって

図 4.6: fig/fig-I.eps
図 4.7: fig/118.eps

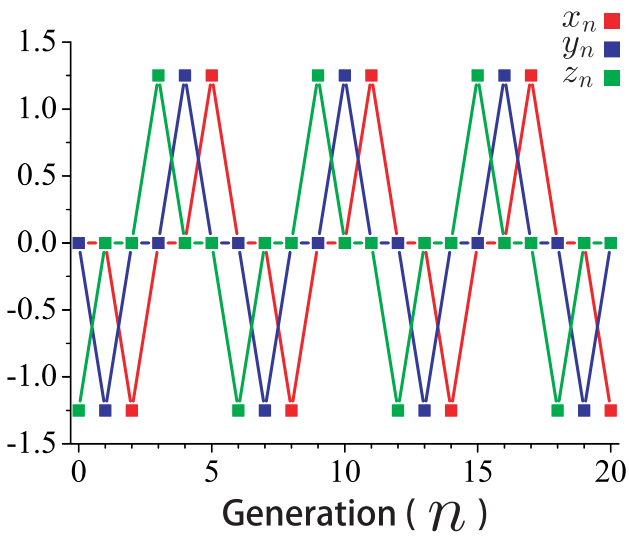

図 4.7　$k = k_0$ における trace map(式 (4.9)) の軌道．$n_A = 2.0, n_C = 1.0, (K = 5/4)$ にて計算．式 (4.16) のとおりの 6 周期が確認できる（$c = 1.25$）

いることが確認できる．つまり，6 周期点の解であるはずなので，

$$\begin{cases} x_{n+6} = y_n \\ y_{n+6} = z_n \\ z_{n+6} = 2y_n z_n - x_n \\ I = x_n^2 + y_n^2 + z_n^2 - 2x_n y_n z_n - 1 \end{cases} \tag{4.15}$$

を解くことで，周期解が得られるはずである．事実，式 (4.15) の解の 1 つと一致することを示した．具体的には，6 周期は

$$\begin{aligned} &\mathbf{r}_1 = (0,0,c) \;\Rightarrow\; \mathbf{r}_2 = (0,c,0) \;\Rightarrow\; \mathbf{r}_3 = (c,0,0) \;\Rightarrow \\ &\mathbf{r}_4 = (0,0,-c) \;\Rightarrow\; \mathbf{r}_5 = (0,-c,0) \;\Rightarrow\; \mathbf{r}_6 = (-c,0,0) \;\Rightarrow \end{aligned} \tag{4.16}$$

である．ただし，$c \equiv \sqrt{1+I} = K$ である．

つまり，$k = k_0$ に対応する電磁波は trace map の 6 周期の一つの解に対応していることを示した．

4.2.3　局所次元 α

次に，Kohmoto らは，図 4.4 自己相似構造的な波数スペクトルの解析を行い，局所次元 α の導出を行った [47]．局所次元 α とは，**マルチフラクタル構造**[*6]の解析で用いられ，容量次元，情報次元，相関次元といったフラクタル次元と関連のある量である[*7]．局所次元 α は，そ

[*6] マルチフラクタル構造とは，1 つの集合内において，部分集合ごとに異なるフラクタル次元をもつ自己相似構造をいう．付録 A.6.6 では，自己相似格子中の電子のエネルギースペクトルにおけるマルチフラクタル構造の詳細，付録 C では，マルチフラクタル構造の一般論を記す．

[*7] 詳細は付録 C を参照．

の他のフラクタル次元と同様非整数の量であり，1 次元上の分布に対しては，$\alpha = 0$ は離散的，$\alpha = 1$ は連続的であること意味する．

図 4.4 自己相似構造的な波数スペクトルを特徴付ける局所次元 α は，trace map の固定点や周期点付近における振る舞いを調べることで，計算することができることを Kohmoto らは示した．局所次元 α の定義は，

$$g(\varepsilon) \equiv H(k+\varepsilon) - H(k) \tag{4.17}$$

を用いて漸近的関係式

$$|g(\varepsilon)| \approx c|\varepsilon|^{\alpha(k)} \quad (\varepsilon \to 0) \tag{4.18}$$

により定義される．ただし，$H(k)$ は式 (4.5) で定義される積分状態密度．そして，α は，

$$\alpha = \frac{\log \rho^6}{\log \lambda_{\max}}. \tag{4.19}$$

で計算することができることが示された [66]．ここで，$\rho = (1+\sqrt{5})/2$（Fibonacci 型の場合），$\lambda_{\max}$ は，6 回写像のヤコビ行列 $D^{(6)}$

$$D^{(6)} \equiv \begin{pmatrix} \frac{\partial f^{(6)}}{\partial x} & \frac{\partial f^{(6)}}{\partial y} & \frac{\partial f^{(6)}}{\partial z} \\ \frac{\partial g^{(6)}}{\partial x} & \frac{\partial g^{(6)}}{\partial y} & \frac{\partial g^{(6)}}{\partial z} \\ \frac{\partial h^{(6)}}{\partial x} & \frac{\partial h^{(6)}}{\partial y} & \frac{\partial h^{(6)}}{\partial z} \end{pmatrix} \tag{4.20}$$

の最大固有値で，$k = k_0$ に対応する最大固有値は，

$$\lambda_{\max} = \left[\sqrt{1+4(1+I)^2} + 2(1+I)\right]^2 \tag{4.21}$$

となることを示した．ここで，I は式 (4.13) で定義された不変量である．

以上ここまでが，M.Kohmoto らによって明らかにされた [47]．明らかにされていない点は，このスペクトルがマルチフラクタルであるので，他の k の局所次元と解の周期性が系統的に求められていない．また，M.Kohmoto は連続光に対する透過率を計算したが，光パルスに関する遅延にまでは至っていない．

本論文では，式 (2.166) で導出した光パルスの横断時間を用いて，Fibonacci 型自己相似フォトニック結晶における遅延効果を検証する．

第 5 章

自己相似フォトニック結晶中の光パルスの遅延効果

第 4 章では，Kohmoto らによって行われた自己相似フォトニック結晶中の電磁波を特徴付ける局所次元 α の計算方法を示した．本章では，自己相似フォトニック結晶の横断時間が 3.2 節で導出した式 (3.41)

$$\tau_n \propto \begin{cases} L^{\frac{1}{\alpha}} \times L^{\frac{1}{2\alpha}} & \cdots \text{フォトニックバンド端} \\ L^{\frac{1}{\alpha}} & \cdots \text{フォトニックバンド中心} \end{cases} \tag{5.1}$$

の妥当性を検証する．

5.1 自己相似フォトニック結晶における横断時間の数値計算結果

第 n 世代の転送行列 $M_A^{(n)}, M_C^{(n)}$ は，生成規則と相似な漸化式 (4.2) から得られる．また，$M_A^{(n)}$ の行列要素から第 n 世代の透過係数 $t_n(k)$ が得られる．さらに，第 n 世代の自己相似フォトニック結晶における光パルスの横断時間 $\tau_n(k)$ は式 (2.166) から，

$$\tau_n(k) = \frac{1}{c}\frac{d\phi_n(k)}{dk} \tag{5.2}$$

で与えられる．位相である $\phi_n(k)$ は第 n 世代の透過係数 $t_n(k)$ から数値的に計算することは難しくない．Fibonacci 型自己相似フォトニック結晶の第 4 世代（層数 5）, 第 7 世代（層数 21）, 第 10 世代（層数 89）, 第 13 世代（層数 377）における横断時間の波数依存性を計算した結果を図 5.1 に示す．多重反射による遅延効果を調べるために，光速で結晶を通過する時間 τ_c を基準にして横断時間 $\tau_n(k)$ を計算した．つまり，図の縦軸 $\tau_n(k)/\tau_c$ が 1 より大きいほど遅延

図 5.1: fig/115.eps

図 5.2: fig/116.eps

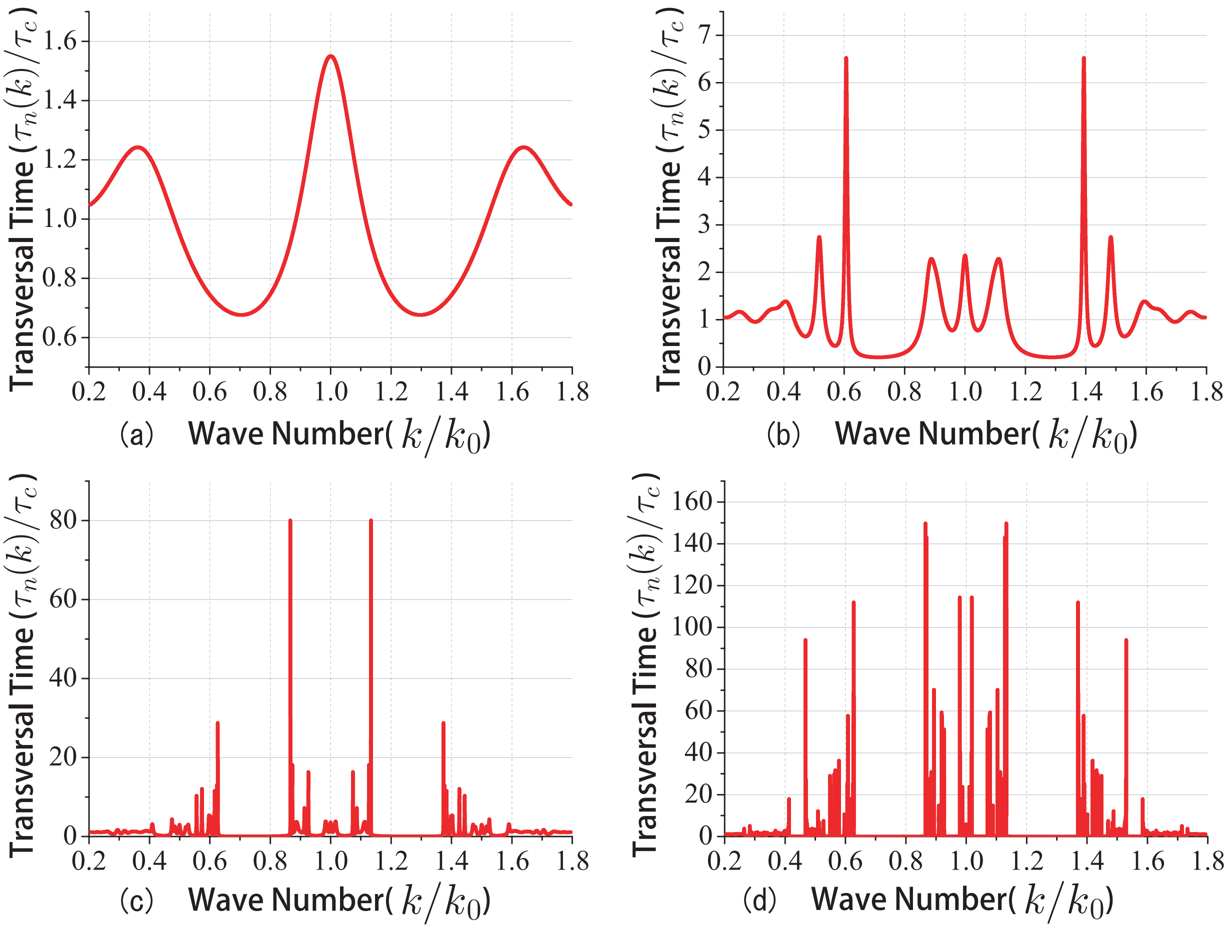

図 5.1　Fibonacci フォトニック結晶における横断時間の波数依存性（屈折率 $n_A = 2.0, n_C = 1.0$, 層幅 $d_A = \lambda_0/(4n_A), d_C = \lambda_0/(4n_C)$, $k_0 = 2\pi/\lambda_0$）. (a)$n = 4(N = 5)$, (b)$n = 7(N = 21)$, (c)$n = 10(N = 89)$, (d)$n = 13(N = 377)$ である．$k/k_0 = 0.86, 0.628$ などの大きなバンドギャップ近傍で，横断時間は大きな値をとる．

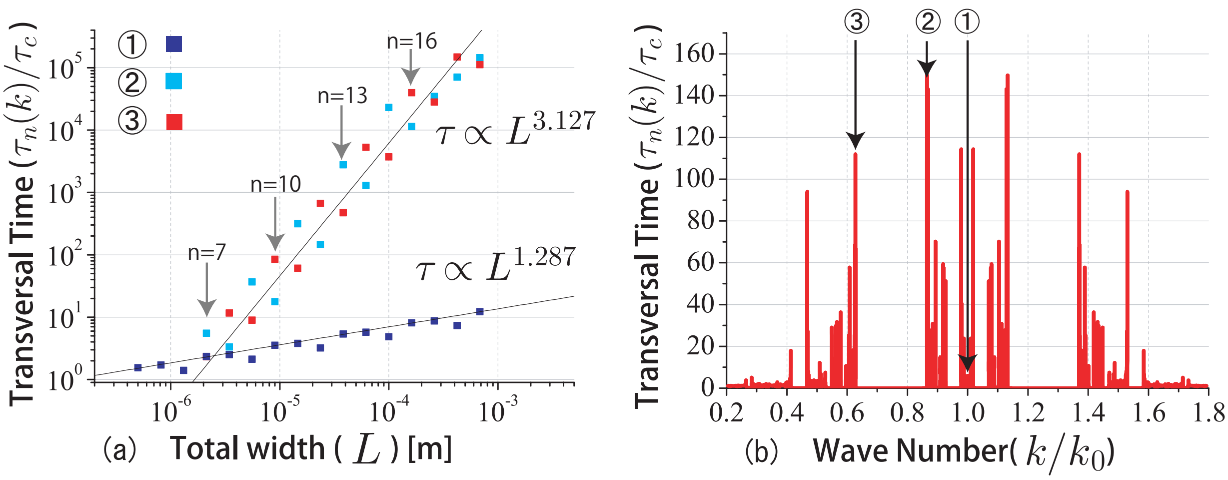

図 5.2　(a) 3 つのケース（①$k = k_0$, ②$k = 0.86k_0$, ③$k = 0.63k_0$ ）における横断時間 τ の世代 n 依存性．図中の数字は (b) の波数に対応する（$n = 13(N = 377)$）．横断時間がフォトニック結晶の総幅 L のべきに従う．

効果が高いことを意味する．また逆に，$\tau_n(k)/\tau_c < 1$ のとき，パルスピークの伝搬が光速より一見速いことを意味している．この領域では，光パルスの大部分が反射する一方で，パルスの前部のみが透過することにより，パルスピークが超光速的であることを意味している．この状態は，3.3 で議論したフォトニックバンドギャップにおける超光速現象に対応する．図 4.2 の透過スペクトルと比較してもわかるが，$\tau_n(k)/\tau_c < 1$ の領域はフォトニックバンドギャップに対応する．

着目すべき点は，フォトニックバンド端近傍（$k = 0.86k_0, 0.63k_0$ など）の横断時間 τ_n は，既知の自己相似構造の中心波数 $k = k_0$（4.1.3 節を参照）における横断時間 τ_n に比べて非常に大きいことである．フォトニックバンド端近傍における横断時間が大きくなることは，周期系でも同様の現象である（参考：図 (3.6)）．

次に，既知の $k = k_0$, フォトニックバンド端近傍の $k = 0.86k_0$, $k = 0.63k_0$ の横断時間の世代 n 依存性を数値計算した結果が図 5.2 である．横断時間はフォトニック結晶の総幅 L に対してべきで増加することがわかる．$k = k_0$ では $\tau \propto L^{1.287}$，フォトニックバンド端近傍の $k = 0.86k_0$, $k = 0.63k_0$ では $\tau \propto L^{3.121}$ となった．これは，図 3.7 で示した「周期系」フォトニックバンド端近傍の共鳴状態における横断時間 $\tau \propto L^2$ とは異なり，自己相似フォトニック結晶のフォトニックバンド端近傍の方が大きな遅延効果があることがわかる．

次にフォトニックバンド端近傍の $k = 0.86k_0$ に対応する電磁波の振幅と強度の空間分布を計算したのが図 5.3(a),(b) である．ただし，グラフの縦軸は入射波の振幅を 1 にとっている．比較のために，図 5.3(c),(d) にフォトニックバンド中心 $k = k_0$ における電磁波の振幅と強度の空間分布を表示した．図 5.3(b) の結果は，フォトニック結晶内に最大で 10^5 倍程度の電磁波が蓄えられていることを示し，$k = k_0$ による空間強度分布（図 5.3(d)）と比較しても，1000 倍程度大きな値をとることがわかる．

ここで，結晶内に蓄えられる単位長さあたりの電磁波エネルギー $\bar{u}$

$$\bar{u} \equiv \frac{1}{L}\int_0^L n(z)|A(z)|^2 dz \tag{5.3}$$

を定義し，フォトニックバンド中心 $k = k_0$, フォトニックバンド端近傍 $k = 0.86k_0$ の電磁波強度分布を比較する．図 5.4 は，$k = k_0$, フォトニックバンド端近傍 $k = 0.86k_0$ における $\bar{u}$ の世代 n 依存性の計算結果である．

フォトニックバンド中心 $k = k_0$ とフォトニックバンド端近傍 $k = 0.86k_0$ のいずれの場合も，$\bar{u}$ はフォトニック結晶の総幅 L のべきに従うことがわかる．$k = k_0$ では $\bar{u} \propto L^{0.287}$, $k = 0.86k_0$ では，$\bar{u} \propto L^{2.121}$ と，大きな開きがある．このような指数の差がどうしてできたのかが興味を持たれる．

次節，図 5.2,5.4 における指数を解析的に導出する．

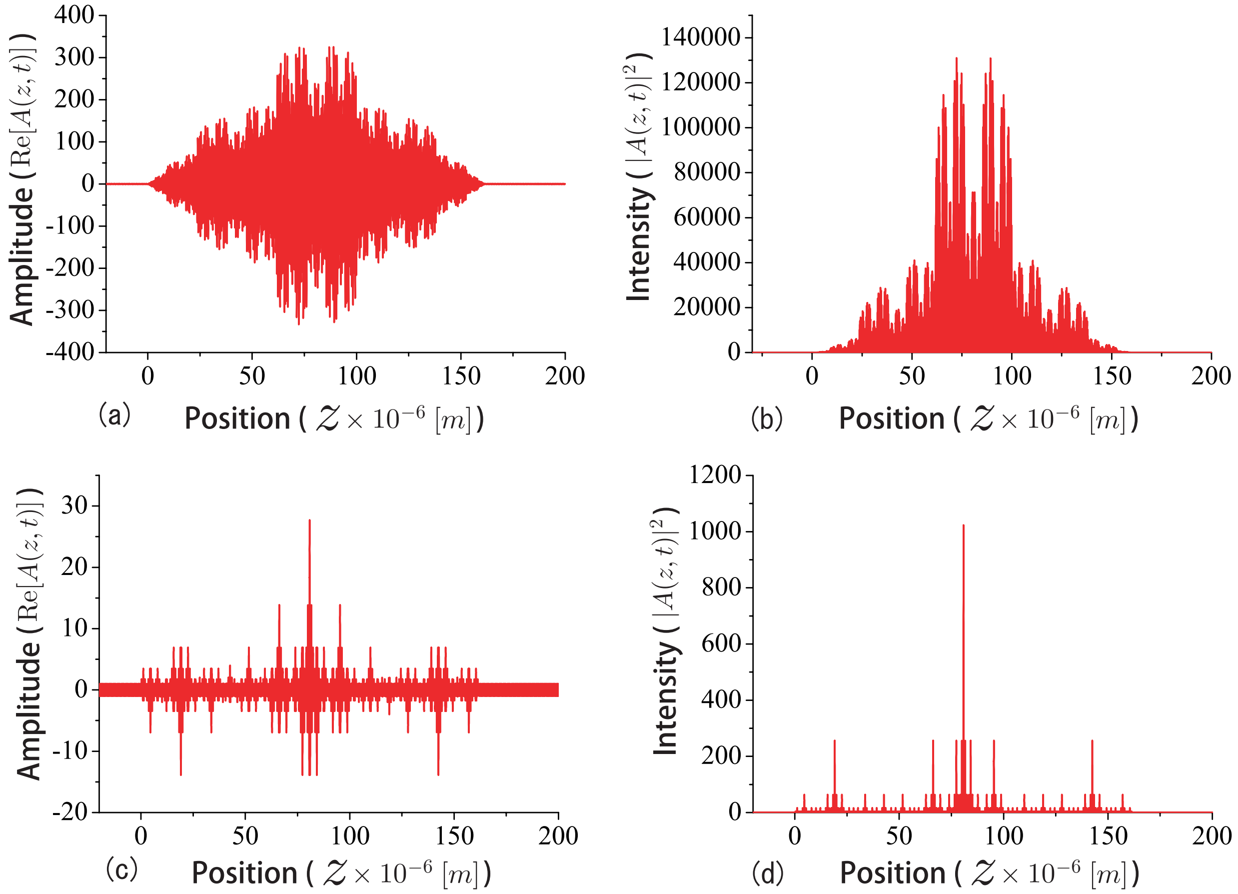

図 5.3　(a),(b) フォトニックバンド端近傍の $k = 0.86k_0$ に対応する電磁波の空間強度分布 $(n = 13, N = 377)$．(c),(d) 比較のために $k = k_0$ に対応する電磁波の空間強度分布を再掲（図 4.3）．なお，(a),(c) は $\mathrm{Re}[A(z,t)]$，(b),(d) は $|A(z,t)|^2$ をプロットし，グラフの縦軸は入射波の振幅を 1 にとっている．

5.2　横断時間の解析解の検証

Fibonacci 型自己相似フォトニック結晶の横断時間 τ において，図 5.2 で示した $k = k_0$ とフォトニックバンド端近傍 $k = 0.86k_0$ について，3.2 節で導出した，

$$\tau_n \propto \begin{cases} L^{\frac{1}{\alpha}} \times L^{\frac{1}{2\alpha}} & \cdots \text{フォトニックバンド端} \\ L^{\frac{1}{\alpha}} & \cdots \text{フォトニックバンド中心} \end{cases} \tag{5.4}$$

の妥当性を検証する．

図 5.3: fig/120.eps
図 5.4: fig/139.eps

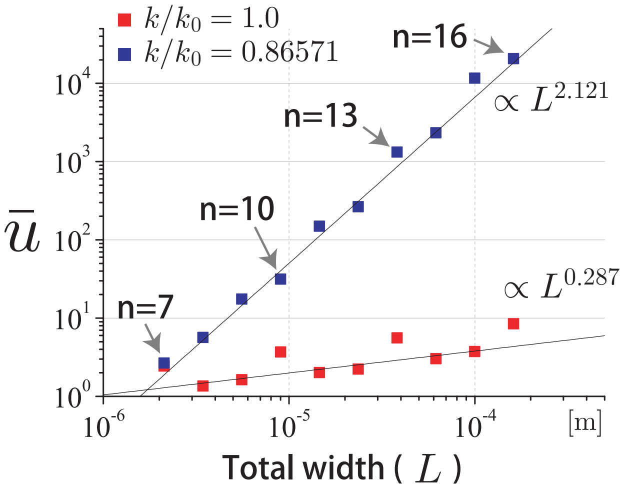

図 5.4　結晶内に蓄えられる単位長さあたりの電磁波エネルギー $\bar{u}$ の世代 n 依存性．$k = k_0$ とフォトニックバンド端近傍 $k = 0.86k_0$ の場合を計算．$\bar{u}$ はフォトニック結晶の総幅 L のべきに従う．

5.2.1　フォトニックバンド中心（$k = k_0$）の場合

はじめに，図 4.7 で示されるとおり，trace map が 6 周期を示す既知の入射波数 $k = k_0$ の場合を検証する．trace map は式 (4.16) で示されるとおりの 6 周期点となることが分かっている [47]．この周期点におけるヤコビ行列の最大固有値は式 (4.21) のとおり，

$$\lambda_{\max} = \left[\sqrt{1 + 4(1 + I)^2} + 2(1 + I)\right]^2 \tag{5.5}$$

である．ただし I は不変量を表し，自己相似フォトニック結晶の場合は式 (4.13) より $I = K^2 - 1$ となる．図 5.2 のパラメータ $n_A = 2, n_C = 1$（$K = 5/4$）の場合，式 (4.19) より，

$$\alpha(k_p) = 0.777 \tag{5.6}$$

となる．この局所次元を式 (3.41) で導出したフォトニックバンド中心における横断時間に代入すると，

$$\tau_n \propto L^{\frac{1}{0.777}} = L^{1.287} \tag{5.7}$$

となり，図 5.2 のべき乗則と一致する．

次に，フォトニックバンド端近傍 $k = 0.86k_0$ に対応する横断時間についても同様に検証する．

5.2.2　フォトニックバンド端近傍 $k = 0.86k_0$ における trace map と横断時間

図 5.5: fig/117.eps

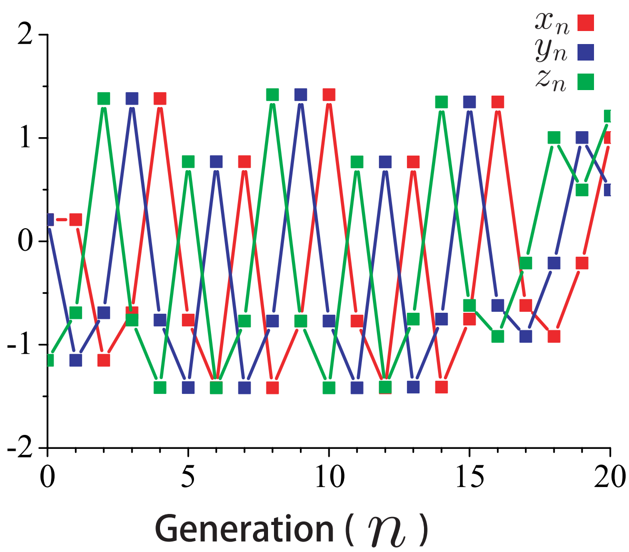

図 5.5 フォトニックバンド端近傍 $k = 0.86k_0$ を初期値とする trace map. 6 周期となることが確認できるが，式 (4.16) の $k = k_0$ の 6 周期とは異なる．

図 5.5 は，フォトニックバンド端近傍 $k = 0.86k_0$ を初期値とする trace map を計算した結果である．6 周期となることが確認できるが，式 (4.16) の $k = k_0$ の 6 周期とは異なることがわかる[*1]．これは，図 5.2 において，フォトニックバンド端近傍 $k = 0.86k_0$ に対応する横断時間 τ が結晶の総幅 L に対してべきで増加していることと関係があると考えられる．$k = 0.86k_0$ に対応する trace map の 6 周期点を決定するため，式 (4.15) で与えられる連立方程式を解く．

式 (4.15) の連立方程式の解は全部で 28 個ある．この 28 個の中には，純粋な 6 周期点ではない 2 周期点が 2 組計 4 個含まれている．2 組の 2 周期点は

$$\mathbf{r}_1 = (a, b, a) \quad \Rightarrow \quad \mathbf{r}_2 = (b, a, b) \quad \Rightarrow \mathbf{r}_1 \tag{5.8}$$

と

$$\mathbf{r}_1 = (c, d, c) \quad \Rightarrow \quad \mathbf{r}_2 = (d, c, d) \quad \Rightarrow \mathbf{r}_1 \tag{5.9}$$

である．ただし，

$$a = I' + \sqrt{I'^2 - I'} \quad , \quad b = I' - \sqrt{I'^2 - I'} \tag{5.10}$$

$$c = I'' + \sqrt{I''^2 - I''} \quad , \quad b = I'' + \sqrt{I''^2 - I''} \tag{5.11}$$

$$I' = \frac{3 + \sqrt{25 + 16I}}{8} \quad , \quad I'' = \frac{3 - \sqrt{25 + 16I}}{8} \; . \tag{5.12}$$

[*1] この周期性は数値的に得られたものであるが，この計算は数値計算における丸め誤差に十分注意しないと，6 周期性を見ることはできない．

残りは純粋な 6 周期点 4 組，計 24 個である．そのうち式 (4.16) で示した周期点が重解として存在し，2 組 12 個が既知の周期点である．残りの 2 組 12 個の解が未知の周期点である．2 組の周期点は，

$$\begin{aligned} &\mathbf{r}_1 = (a, -b, -a) \;\Rightarrow\; \mathbf{r}_2 = (-b, -a, b) \;\Rightarrow\; \mathbf{r}_3 = (-a, b, -a) \;\Rightarrow \mathbf{r}_1 \\ &\mathbf{r}_4 = (b, -a, -b) \;\Rightarrow\; \mathbf{r}_5 = (-a, -b, a) \;\Rightarrow\; \mathbf{r}_6 = (-b, a, -b) \;\Rightarrow \mathbf{r}_1 \end{aligned} \tag{5.13}$$

と

$$\begin{aligned} &\mathbf{r}_1 = (-c, d, -c) \;\Rightarrow\; \mathbf{r}_2 = (d, -c, -d) \;\Rightarrow\; \mathbf{r}_3 = (-c, -d, c) \;\Rightarrow \mathbf{r}_1 \\ &\mathbf{r}_4 = (-d, c, -d) \;\Rightarrow\; \mathbf{r}_5 = (c, -d, -c) \;\Rightarrow\; \mathbf{r}_6 = (-d, -c, d) \;\Rightarrow \mathbf{r}_1 \end{aligned} \tag{5.14}$$

となる．ただし，a, b, c, d は式 (5.10),(5.11),(5.12) で示したものと同じである．図 5.2 のパラメータ $n_A = 2, n_C = 1$（$K = 5/4$）の場合，$a = 1.442, b = 0.765$ となり，式 (5.13) で示した未知の 6 周期の 1 組が，図 5.5 の 6 周期と一致することがわかった．この周期点における局所次元 α は

$$\alpha = 0.471 \tag{5.15}$$

となる．この局所次元を式 (3.41) で導出したフォトニックバンド端における横断時間に代入すると，

$$\tau_n \propto L^{\frac{1}{0.471}} \times L^{\frac{1}{2\times 0.471}} = L^{3.127} \tag{5.16}$$

となり，図 5.2 のべき乗則と一致する．

5.3　自己相似フォトニック結晶における横断時間の考察

5.2 の結果をまとめると，自己相似フォトニック結晶における横断時間は，3.2 節で導出した式 (3.41)

$$\tau_n \propto \begin{cases} L^{\frac{1}{\alpha}} \times L^{\frac{1}{2\alpha}} & \cdots \text{フォトニックバンド端} \\ L^{\frac{1}{\alpha}} & \cdots \text{フォトニックバンド中心} \end{cases} \tag{5.17}$$

を満たし，局所次元 α だけで決まることが明らかになった．この結果は，自己相似フォトニック結晶の局所次元 α が小さいほど，パルス遅延効果が高いことを意味する．周期型フォトニック結晶の場合，α は構成する誘電体の屈折率（n_A, n_C）に依らず一定であるが，自己相似型の場合，α の値は 2 種の屈折率の比 $K = (n_A/n_C + n_C/n_A)/2$ を大きくすることで α の値を小さくすることができる（式 (4.19)）．つまり，光遅延素子を設計する場合，自己相似フォトニック結晶の方が柔軟であると考えられる．

また，上記の横断時間は任意の入射パルス幅で成り立つわけではないことに注意する必要がある．入射パルスの波数空間における幅 Δk が透過スペクトルのピーク幅よりも広いと，透過

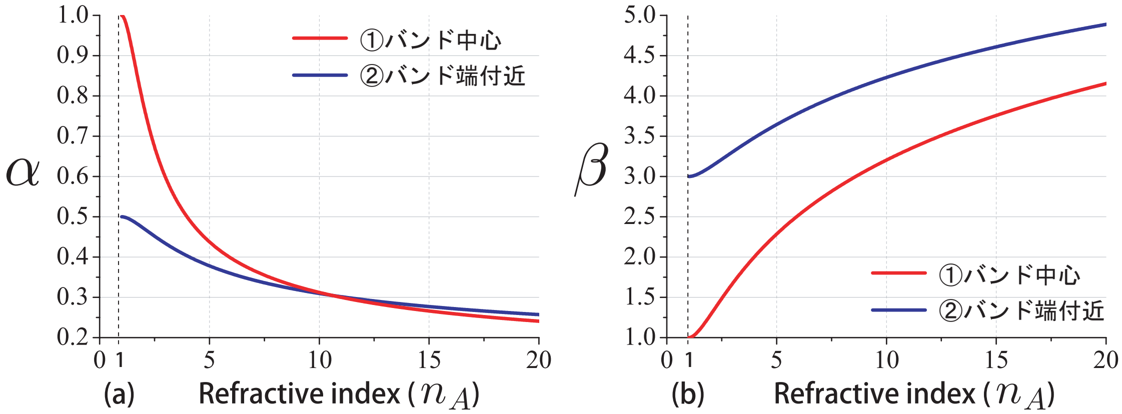

図 5.6　(a) 局所次元 α の屈折率 n_A 依存性と，(b) 横断時間 $\tau \propto L^\beta$ で定義される指数 β の屈折率 n_A 依存性（$n_C = 1.0$ にて計算）．ただし，指数 β はフォトニックバンド中心（$k = k_0$）で $\beta = 1/\alpha$，フォトニックバンド端近傍（$k = 0.86k_0$）で $\beta = 1 + 1/\alpha$ である．

パルスの波形は大きく崩れるためである．そのため，透過スペクトルピークの Δk から見積もられる，波数空間における幅の上限，あるいは時間隔 Δt の下限が存在する．ガウス型光パルスにおける波数空間の幅 Δk と時間幅 Δt の関係は，

$$\Delta t = \frac{8 \ln 2}{c \Delta k} \tag{5.18}$$

で与えられる．つまり，式 (2.166) で導出された光パルスの横断時間 τ が妥当である入射光パルスの幅の範囲を調べる．以上を踏まえて本節では，(1) α の屈折率依存性，(2) パルス幅の制限，(3) その他の構造における横断時間との比較について議論する．

5.3.1　α の屈折率依存性

図 5.6(a) は，自己相似フォトニック結晶のフォトニックバンド中心とフォトニックバンド端に対応する局所次元 α の屈折率 n_A 依存性，(b) は α から見積もられる横断時間 $\tau \propto L^\beta$ で定義される指数 β の屈折率 n_A 依存性である．ただし，$n_C = 1$ とする．また指数 β は，フォトニックバンド中心（$k = k_0$）で $\beta = 1/\alpha$，フォトニックバンド端近傍（$k = 0.86k_0$）で $\beta = 1 + 1/\alpha$ である．β は $n_A = 1$ で最小をとり，n_A とともに単調増加する（図 5.6(b)）．これは，α を決めるヤコビ行列の最大固有値（式 5.5）が n_A に対して単調増加し，それに伴って α（式 4.19）は単調減少するためである．$n_A = 1.0$ はフォトニック結晶が存在しないことを意味するので，$n_A \simeq 1$（$n_A > 1$）と考える．$n_A \simeq 1$ の場合，フォトニックバンドの中心では $\beta = 1$ であり，横断時間は L に比例することを表している．これは反射のない状況なので自明である．一方，フォトニックバンド端では $\beta = 3$ となり，横断時間は L^3 に比例することを表している．これは，式 (3.19) で示した周期系の横断時間の L^3 と一致する．通常の誘電体の屈

図 5.6: fig/143.eps

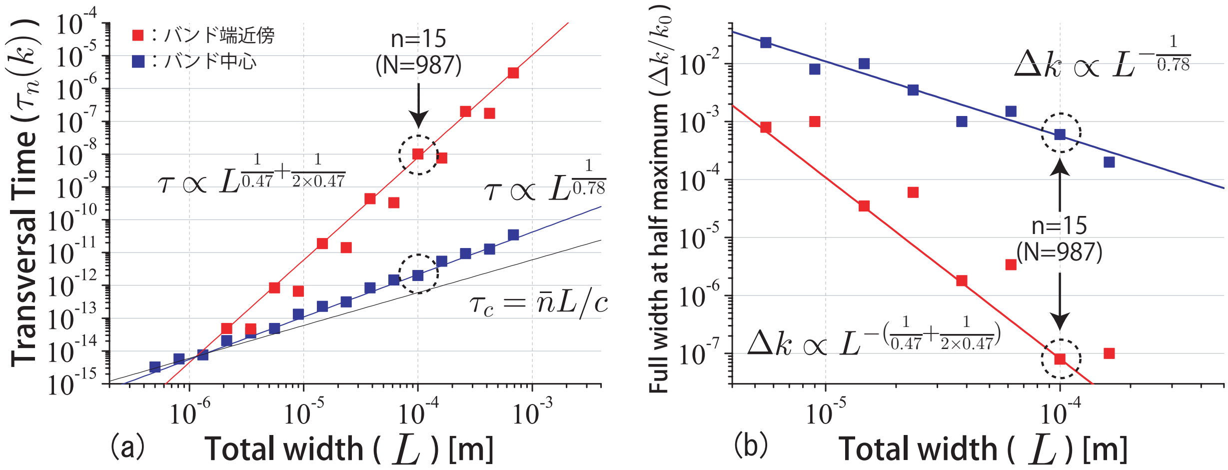

図 5.7　自己相似フォトニック結晶のフォトニックバンド中心 ($k = k_0$，青) とフォトニックバンド端近傍 ($k = 0.86k_0$，赤) における，(a) 横断時間 τ_n と (b) 透過スペクトルの半値全幅の結晶サイズ L 依存性．$n_A = 2.0, n_C = 1.0$ にて計算．

折率は $n_A = 1.5 \sim 2.5$ 程度であるので，指数 β はフォトニックバンド中心で $\beta = 1.1 \sim 1.5$，バンド端近傍で $\beta = 3.05 \sim 3.2$ となる．

5.3.2　横断時間と光パルスの時間幅の下限

図 5.7(a) は，自己相似フォトニック結晶のフォトニックバンド中心 ($k = k_0$，青) とフォトニックバンド端近傍 ($k = 0.86k_0$，赤) における，横断時間 τ_n の結晶サイズ L 依存性の計算結果である．第 15 世代（層数 $N = 987$）では，自己相似フォトニック結晶の結晶サイズは $L = 9.98 \times 10^{-5}$[m] である．フォトニックバンド中心とフォトニックバンド端近傍の横断時間は，それぞれ $\tau = 2.01 \times 10^{-12}$[s] と $\tau = 1.02 \times 10^{-8}$[s] である．これは $L = 9.98 \times 10^{-5}$[m] の自己相似フォトニック結晶の遅延時間 τ が，それぞれ真空中に進行する光の距離に換算すると 6.03×10^{-4}[m] と 3.06[m] である．特に後者は，真空中における光の伝搬と比べて約 30,800 倍の遅延となる．しかしながら，横断時間は任意のパルス幅で成り立つわけではなく，5.3 の初めで触れたように光パルスの時間幅には下限がある．次に，フォトニックバンド中心とフォトニックバンド端近傍の横断時間に対応する光パルスの時間幅の下限を調べる．

図 5.7(b) は，自己相似フォトニック結晶のフォトニックバンド中心 ($k = k_0$) とフォトニックバンド端近傍 ($k = 0.86k_0$) における，透過スペクトルの半値全幅 Δk の結晶サイズ L 依存性の計算結果である．第 15 世代（層数 $N = 987$）におけるフォトニックバンド中心とフォトニックバンド端近傍における透過スペクトルの半値全幅 Δk はそれぞれ，$\Delta k/k_0 = 5.98 \times 10^{-4}$ と $\Delta k/k_0 = 8.02 \times 10^{-8}$ である．透過パルスの波形を透過係数の分散関係によって大きく崩さな

図 5.7: fig/144.eps

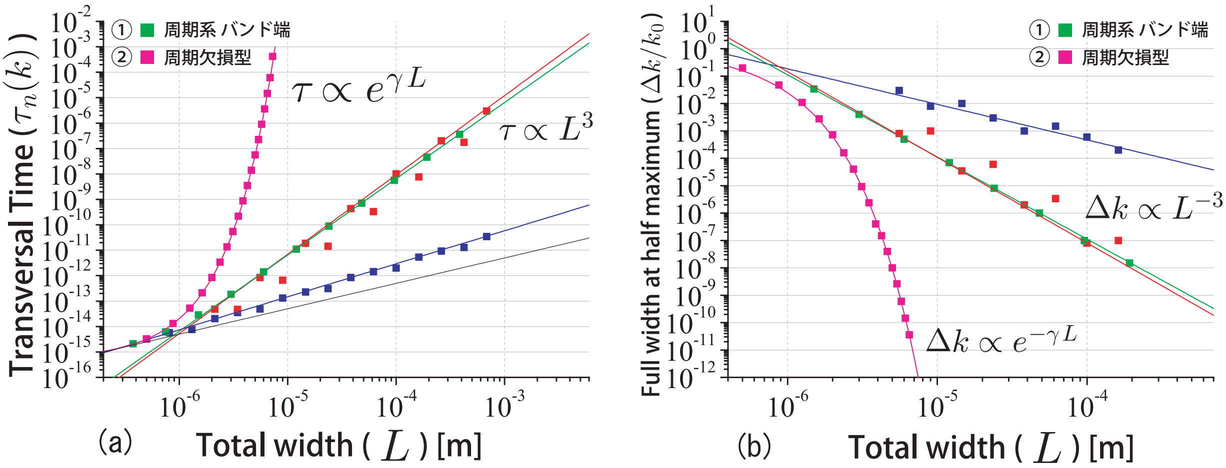

図 5.8　周期フォトニック結晶のフォトニックバンド端近傍の共鳴状態と周期欠損フォトニック結晶の共鳴状態における，(a) 横断時間 τ_n と (b) 透過スペクトルの半値全幅の結晶サイズ L 依存性を図 5.7 に追加．$n_A = 2.0, n_C = 1.0$ にて計算．(a),(b) にて $\gamma = 3.7 \times 10^6$ である．

いための，入射する光パルスの波数空間における幅の上限を透過スペクトルの半値全幅とすると，入射パルスの時間幅 Δt の下限を見積もることができる．フォトニックバンド中心とフォトニックバンド端近傍に対応する入射パルスの時間幅の下限はそれぞれ，$\Delta t = 2.45 \times 10^{-12}$[s] と 1.83×10^{-8}[s] となる．これよりも時間幅の狭いパルスを入射した場合には，透過パルスの波形は大きく乱れることになる．オン・オフによる入力信号に対しては，それぞれ振動数 $\nu = 2.04 \times 10^{11}$[Hz] と $\nu = 2.73 \times 10^{7}$[Hz] を上限とする信号まで，上記で計算した遅延時間が妥当であることを意味する．

また，自己相似フォトニック結晶における，横断時間 τ と透過スペクトルの半値全幅 Δk の関係は，

$$\tau \propto \frac{1}{\Delta k} \tag{5.19}$$

となることが数値的に確かめられる．式 (5.19) は，実は自己層構造でなく一般的に多重反射による干渉効果によって得られる結論ということができる．このことを確かめるために，次の節で他の構造との結果として比較する．

5.3.3　その他の構造による横断時間との比較

図 5.8 は，自己相似フォトニック結晶における横断時間と比較するために，周期フォトニック結晶のフォトニックバンド端近傍の共鳴状態と，周期欠損フォトニック結晶[*2]の共鳴

図 5.8: fig/145.eps

*2 図 3.1 の 2 種の誘電体（各層の光路長 $\lambda_0/4$）を積層させた周期フォトニック結晶のうち，中心層だけ光路長を $\lambda_0/2$ とし，周期を乱した構造．

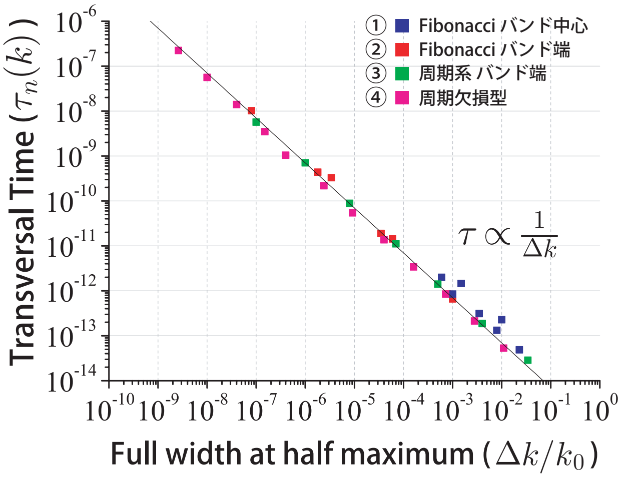

図 5.9　各状態（①自己相似フォトニック結晶のフォトニックバンドの中心，②同フォトニックバンド端近傍，③周期フォトニック結晶のフォトニックバンド端，④周期欠損フォトニック結晶の共鳴状態.）における横断時間 τ と透過スペクトルの幅 Δk の関係.

状態における，(a) 横断時間 τ と，(b) 透過スペクトルの半値全幅 Δk の結晶サイズ L 依存性を図 5.7 に加えた．具体的には，$L = 9.6 \times 10^{-5}$[m]（5.3.2 参照）における周期フォトニック結晶のバンド端近傍の共鳴状態による遅延時間 τ とスペクトルの半値全幅 Δk はそれぞれ，$\tau = 5.7 \times 10^{-9}$[s]，$\Delta k/k_0 = 1.0 \times 10^{-7}$ である．ただし，$k_0 = 2\pi/\lambda_0, \lambda_0 = 5.0 \times 10^7, n_A = 2.0, n_C = 1.0(K = 5/4)$ である．また，周期欠損フォトニック結晶における結果は $L = 4.6 \times 10^{-6}$[m] に対して，$\tau = 1.4 \times 10^{-8}$[s]，$\Delta k/k_0 = 4.0 \times 10^{-8}$ である．

周期フォトニック結晶のフォトニックバンド端近傍の共鳴状態における横断時間は式 (3.19) でも示したとおり $\tau \propto L^3$ となる一方，透過スペクトルの半値全幅 $\Delta k \propto L^{-3}$ となっていることがわかる．同様に，周期欠損フォトニック結晶の共鳴状態における横断時間は $\tau \propto e^{\gamma L}$ となる一方，透過スペクトルの半値全幅 $\Delta k \propto e^{-\gamma L}$ となっていることがわかる．つまり，周期フォトニック結晶のフォトニックバンド端近傍の共鳴状態にせよ，周期欠損フォトニック結晶の共鳴状態にせよ，式 (5.19) で示した自己相似フォトニック結晶と同様の関係があることがわかる．しかし，τ や Δk は異なる L 依存性を示すことから，応用の点から考えてそれぞれの特徴を生かした使い方を考えることができる．このことはこの節の最後に触れる．

図 5.9 は，各状態（①自己相似フォトニック結晶のフォトニックバンドの中心，②同フォトニックバンド端近傍，③周期フォトニック結晶のフォトニックバンド端，④周期欠損フォトニック結晶の共鳴状態.）における横断時間 τ と透過スペクトルの幅 Δk の関係である．いずれの場合も同一の直線に乗ることから，フォトニック結晶の構造の詳細にはよらず，横断時間 τ は透過スペクトルの半値全幅 Δk だけで決まるということが言える．図 5.9 からおよそ $\tau \simeq 2.52/(c\Delta k)$ となる．この遅延時間 τ は，ガウス型光パルスにおける波数空間の半値全幅

図 5.9: fig/146.eps

表 5.1　$L = 5.5 \times 10^{-6}$[m] 付近の様々な構造における横断時間の比較（図 5.8 より）.

構造	τ の L 依存性	Δk の L 依存性	光パルスの時間幅の下限 [s]	遅延効果
自己相似バンド中心	$L^{\frac{1}{\alpha}}$	$L^{-\frac{1}{\alpha}}$	5.8×10^{-14}	3 倍
自己相似バンド端	$L^{\frac{1}{\alpha}+\frac{1}{2\alpha}}$	$L^{-(\frac{1}{\alpha}+\frac{1}{2\alpha})}$	9.2×10^{-4}	46 倍
周期系バンド端	L^3	L^{-3}	2.1×10^{-12}	78 倍
周期欠損系	$e^{\gamma L}$	$e^{-\gamma L}$	2.3×10^{-7}	1.2×10^7 倍

Δk と時間幅 Δt との関係 $\Delta t = 8 \ln 2/(c\Delta k) = 5.55/(c\Delta k)$ と同程度である．つまり，ある有限の時間幅の光パルスを入射した際に得られる最大の横断時間は，フォトニック結晶の構造の詳細には依らず，入射パルスの時間幅と同程度であることを意味する．

以上から，自己相似フォトニック結晶を用いての光パルスの遅延を行う利点は，フォトニックバンドの中心（$k = k_0$）における遅延を考える場合，同じ遅延時間を得るために必要とする結晶サイズを大きく取ることができる点が挙げられる．これは，自己相似的な多重反射の結果，結晶全体に局在する電場の大きさを空間的にゆるく存在させることができるということである．

第 6 章

まとめ

本研究では，光パルスが結晶サイズ L の結晶に入射されてから透過するまでの時間を横断時間 τ と定義し，τ の L 依存性を導いた．光パルスを減衰させずに最大の遅延効果が期待できる，フォトニックバンド端近傍に存在する共鳴状態（透過率 $T=1$）と，フォトニックバンド中心の共鳴状態はそれぞれ，

$$\tau \propto \begin{cases} L^{\frac{1}{\alpha}} \times L^{\frac{1}{2\alpha}} & \cdots \text{フォトニックバンド端} \\ L^{\frac{1}{\alpha}} & \cdots \text{フォトニックバンド中心} \end{cases} \tag{6.1}$$

となることを示した．この結果はフォトニック結晶の構造にかかわらず成り立ち，α の中に結晶構造の情報がすべてに含まれている．また，光パルスの伝搬速度 v_t は $v_t \equiv L/\tau$ で定義できるため，これまで知られていなかった有限サイズのフォトニック結晶の伝搬速度を初めて明らかにすることができた.

伝搬速度と群速度の関係（第２章）

伝搬速度 v_{peak} と群速度は透過係数からそれぞれ得られることを示し，伝搬速度と群速度の関係を明らかにした．伝搬速度 v_{peak} は，フォトニック結晶の構造にかからわらず，群速度 v_{group} と大小関係 $v_{\mathrm{peak}} \geq v_{\mathrm{group}}$ を満たし，特に $T=1$（共鳴状態) のときに v_{peak} の下限である等号（$v_{\mathrm{peak}} = v_{\mathrm{group}}$）となることを示した．つまり，結晶サイズ L における光パルスの伝搬速度 v_{peak} は，バンド端に最も近い共鳴状態であるとき最も遅くなることを意味し，光遅延素子としては都合が良いことを意味する.

フォトニックバンド端の光パルスの伝搬（第３章）

周期型フォトニック結晶のフォトニックバンド端近傍の共鳴状態において，横断時間 τ と結晶サイズ L の関係が，結晶を構成する媒質の屈折率に依らず $\tau \propto L^3$ となることを，初め数値的に示した．これは，結晶サイズを 10 倍にすると横断時間は 1000 倍（伝搬速度は 1/100 倍）となることを意味している.

さらに，転送行列の漸化式→非線形写像→固定点近傍での拡大率から，式 (6.1) を導出した．周期型フォトニック結晶のバンド端では $\alpha = 1/2$ であることも示し，数値計算の結果と一致することを確かめた．

フォトニックバンドギャップによる光パルスのトンネル時間（第３章）

フォトニックバンドギャップ中のエネルギーをもつによる光パルスのトンネル時間は，フォトニック結晶の層幅の増加と共に一定値へ収束する．このことは，初め実験で明らかにされ，数値的も収束することは明らかにされていたが，収束値の解析解は過去に示されていなかった．

本論文では，転送行列を精密に扱うことにより，トンネル時間の解析解を導出することができた．その解の意味するところは，フォトニックバンドギャップ中のエネルギーの透過パルスは入射パルスのごく一部であるにすぎないということである．

自己相似フォトニック結晶における遅延効果（第５章）

自己相似型フォトニック結晶のフォトニックバンド端近傍の共鳴状態とバンド中心において，横断時間と結晶サイズの関係が式 (6.1) を満たすことを確かめた．

フォトニックバンド端近傍の共鳴状態において，$\tau \propto L^{\beta}$ （$\beta = \frac{3}{2\alpha}$）と表した場合，$\beta$ は多層膜を構成する屈折率に依存し，$\beta > 3$ となることを明らかにした．この結果は階層性をもつ多重反射によって，自己相似的な多層膜は周期型よりも大きな遅延効果があることを意味する．さらに，べき β を屈折率によって変化させられるということは，屈折率を変えても $\beta = 3$ と変化しない周期型と比べて光遅延素子の設計をより柔軟にできる利点があると考えられる．

また，α の値は，転送行列法から導かれる非線形写像から解析的に得ることができ，周期型では屈折率に依らず $\alpha = 1/2$, 自己相似型では屈折率に依存して $\alpha < 1/2$ となる．つまり，α が小さくなる結晶構造を作ることができれば，より遅延効果の高い光学遅延素子が得られることが期待できる．

本研究成果は，光パルスの伝搬に限らず，人工超格子中の電子パルスや音波などでも成立すると考えられる．特に転送行列法が適用可能な系については，本研究成果を直接適用すること可能であるため，波動方程式がもつ一般論へと拡張できる．

付録 A

自己相似構造と電子状態

本付録は，本研究の主題である自己相似フォトニック結晶における光パルスの遅延を研究する上で基礎となった，自己相似格子の電子状態のまとめである．本付録の内容は，本研究で明らかになった，自己相似フォトニック結晶の光パルスの遅延効果が，Fibonacci 列の生成規則による自己相似フォトニック結晶だけでなく，可逆的生成規則（保存系）全般で成り立つことの，理論的裏付けになっている．

また，非可逆的生成規則（非保存系）の電子状態の結果は，私の博士課程の成果の一部であり，光パルスの将来の解析に必要な知識であるので，本付録に記すことにする．

A.1 本章の構成

２種類のサイト A と B が，１次元の格子上に並んでいるという簡単な系について考える．A と B の並び方はにはいろいろあるが，すぐに思いつく並びには次のようなものがある：

$$\cdots ABABABABABABABAB\cdots, \qquad \cdots BABABBAAABABBABA\cdots.$$

左は周期的で，右はランダムである．２種類のサイトにおけるポテンシャルの値をそれぞれ V_A と V_B としたときの一電子状態を調べることは，もっとも単純な問題である．サイトに番号（$j = -\infty, \cdots, -1, 0, 1, 2, \cdots, +\infty$）をつけて j 番目のサイトにおける波動関数の振幅を ϕ_j とすると，次のような強結合近似における離散 Schrödinger 方程式を満たす：

$$-t\ \phi_{j+1} - t\ \phi_{j-1} + V_j\phi_j = E\phi_j.$$

t は transfer (hopping) integral，E はエネルギー固有値である．サイト j のポテンシャル V_j は V_A または V_B をとる．

上記のような周期的またはランダムな１次元格子上の一電子状態の問題は過去からよく研究されている．しかし，サイトの並びには周期的でもないがランダムでもない，第３の並びが存在する．それが決定論的かつ非周期的並びである．広義の決定論的非周期格子とは，「何等かの規則によって作られる A, B の無限並び全般」といったところであるが，本論文では「**生成規則 (inflation rule)** によって作られる格子」に絞って話を進める．

１次元格子上の２種類のサイト A, B の並びを，以下のように分類し，波動関数とエネルギースペクトルの特徴を記す.

1. 周期格子　　・・・ブロッホ波で記述される拡がった状態（extendend state）で，連続スペクトル.
2. ランダム格子　・・・指数関数的に振幅が減少する局在状態（アンダーソン局在).
3. 決定論的非周期格子

なお，ランダム格子の１格子点当たりのエントロピーはゼロでない有限値をとるが，何等かの規則によって作られる格子の１格子点当たりのエントロピーはゼロとなる.

一番簡単な生成規則は $A \to B$, $B \to AB$ と表され，**Fibonacci 格子**と呼ばれる非周期格子を生成する．すなわち，この生成規則を繰り返すと次のような２種類のサイト A, B の並びが生成される.

$$
\begin{aligned}
&B \to AB \to BAB \to ABBAB \to BABABBAB \to ABBABBABABBAB \to \cdots \\
&\quad \to ABBABBABABBABBABABBABABBABBABABBAB \to \cdots
\end{aligned}
$$

この並びを, それぞれ Fibonacci 並びの第 0 世代, 第 1 世代, $\cdots$, 第 n 世代とする．Fibonacci 格子とはこのような系列の極限としての無限世代の並びを指す．このような生成規則によって作られる格子は，周期的でもなくランダムでもないが，A と B の並びは入れ子構造となっている．生成規則は任意に作ることができるので無限種類ある．生成規則によって作られる入れ子構造をもつ格子を，以下の議論では自己相似格子と呼ぶことにする．また，サイト A, B を文字 A, B と呼ぶことがある.

1984 年の準結晶の発見以降 [41]，自己相似格子に対する関心が高まった．しかしながら，その直前（1983 年）に M.Kohmoto らの研究 [43] により，Fibonacci 格子の電子状態の主要な性質が明らかにされている．その結果は次のようにまとめられる [45], [67].

- エネルギースペクトルは**マルチフラクタル** 構造（図 A.4）となり，それを特徴付ける $f(\alpha)$–spectrum はポテンシャルの差 $\Delta \equiv V_A - V_B$ に依存する.
- 波動関数は振幅がべき的に減衰する**臨界状態 (critical state)** となる（図 A.5,A.6).

以上のことについては，A.6 で詳しく説明する．しかしながら上記の性質は，ある条件を満たす自己相似格子の特別なクラスの場合に成り立つ一般的性質であり，すべての自己相似格子の場合のそれではない．その特別な自己相似格子となるための条件は，その生成規則が**可逆的**であることである．本研究では，無限種類ある生成規則を可逆的なものと非可逆的なものの２種類に分類する（A.2 節）ことから始める．この分類は今まであまり重要視されてこなかったが，電子状態に決定的な違いが出てくることが本研究によって明らかになった.

後述するが，可逆的生成規則によって作られる格子を，**可逆的自己相似格子**と名づけ[*1]．非可逆的生成規則によって作られる格子を**非可逆的自己相似格子**と名づける．自己相似格子には

[*1] Fibonacci 格子は可逆的自己相似格子の最も簡単な例である.

入れ子構造があるため，その電子状態の研究には **trace map** と呼ばれるくりこみ群的手法が使用できる [43]．可逆的自己相似格子の場合にはこの写像が**保存的**[*2]となり，非可逆的自己相似格子の場合には**非保存的**となる．表題にある「非保存的」とはこのことである．

後に述べるように，可逆的自己相似格子については詳細に研究されている．一方，非可逆的自己相似格子の性質については，個々の格子で広がった波動関数が存在することなどが知られていたが[*3]，可逆的自己相似格子の研究のレベルには程遠い状態であった．本研究では，非可逆的自己相似格子の１つである **Period-Doubling 格子**[*4]（以下，PD 格子と略称）の電子状態を調べている最中に，非可逆的自己相似格子の電子状態には普遍的性質があることを発見することができた．これには trace map の非保存性が本質的に関係している．

A.2　生成規則の一般論

生成規則の分類の一般論については，参考文献 [70], [71], [72], [73] が有用である．

A.2.1　生成規則の等価性と随伴行列

異なった生成規則が同一の自己相似格子（位相のずれはあるが）を作り出す場合がある．そこで，それら同じ格子を作り出す生成規則をひとまとめにする．生成規則は一般的に $A \to A' = u(A,B)$, $B \to B' = v(A,B)$ と表すことができる．もし $u(A,B)$ と $v(A,B)$ の左端（右端）が同じものなら，両方とも右端（左端）にもってきた生成規則もまた同じ自己相似格子を作る（cyclic shift）．具体的には次の２つは等価である：

$$\begin{cases} A' = AB \\ B' = BABB \end{cases} \iff \begin{cases} A' = BA \\ B' = BBAB \end{cases}. \tag{A.1}$$

このような２つの生成規則は区別しないこととする．これを**生成規則の等価性**という [70].

生成規則 $A' = u(A,B), B' = v(A,B)$ は２種類の記号 A, B の有限または無限の並びを異なる同様な並びに変換する変換操作と見なすことができる．その操作を σ と表せば，$\sigma(A) = u(A,B), \sigma(B) = v(A,B)$ となる．σ は対 $(\sigma(A), \sigma(B))$ により指定できるので，この両者は同一視することができる：$\sigma \equiv (\sigma(A), \sigma(B)) = (u(A,B), v(A,B))$.

生成規則 $\sigma = (u(A,B), v(A,B))$ を，$u(A,B)$ と $v(A,B)$ のそれぞれに含まれる A と B の個数のみに注目して，次のように表す：

$$(A' \quad B') \sim A \quad B)M, \qquad M = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}. \tag{A.2}$$

ただし，$u(A,B)$（$v(A,B)$）に含まれる A，B の数をそれぞれ a，c（b，d）とした．行列 M は生成規則 σ の**随伴行列**と呼ばれる [71]．定義により，随伴行列のすべての成分は整数でしか

---

*2 写像のヤコビアンの絶対値が１となるもの．

*3 Period-Doubling 格子における周期的な固有状態の存在 [68] や，Copper-Mean 格子における広がった固有状態の存在 [69] など．

*4 生成規則は $A \to BB, B \to AB$ で，Fibonacci 格子と比べて B が１つ多い．

も負値をとらない．例えば，Fibonacci 格子の場合には $\sigma = (B, AB)$ なので，

$$M = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \tag{A.3}$$

となる．しかし随伴行列は u と v に含まれる A, B の個数のみを指定するだけで，その並び順までの情報は含まない．すなわち，生成規則と随伴行列は等価なものではなく，一般的には生成規則のほうで議論する必要がある．なお，随伴行列の成分に対しては，通常，条件 $(a+d)bc \neq 0$ を課す．この条件は，M^2 の行列成分がすべて正値となる条件–生成規則が primitive であること–と同じである．

A.2.2　分類 1：対称性

自己相似格子を作る生成規則がある条件を満たす場合，生成された格子はあるサイトを中心とする鏡映対称性を持つ．そのような条件としては明示的対称な場合と暗示的対称の場合の 2 つがある [73].

対称の条件（1）

生成規則 $\sigma = (u(A, B), v(A, B))$ の $u(A, B)$ と $v(A, B)$ が共に対称（回文となっている）．例えば次のような例である：

$$(B, ABBA), \quad (BB, BABAB). \tag{A.4}$$

これを**明示的対称**と呼ぶ.

対称の条件（2）

$u(A, B), v(A, B)$ の右端もしくは左端に共通部分な文字 A または B がある場合，その共通部分を除いた残りの部分がそれぞれ対称な場合である．つまり，R を A または B として，$u(A, B) = Ru'(A, B)$, $v(A, B) = Rv'(A, B)$ または，$u(A, B) = u'(A, B)R$, $v(A, B) = v'(A, B)R$ としたときに $u'(A, B), v'(A, B)$ が対称であればよい．例えば,

$$(B, ABAB), \quad (BA, BBAB), \quad (BABB, ABABAB). \tag{A.5}$$

この場合を，**暗示的対称**という．以後，明示的な場合と，暗示的な場合をあわせて単に**対称**であると言うことにする．今回は 対称性を持つ自己相似格子 に限って議論をする*5.

A.2.3　分類 2：可逆性

生成規則 $A' = u(A, B)$, $B' = v(A, B)$ を正則行列の間の関係と見なしたときに，それが A と B について逆に解ける（A', B'のみならず A'^{-1}, B'^{-1} の使用も許すとして）場合に，そ

*5 自己相似格子の対称性と電子状態との関連については A. Hopf らの研究を参照 [74].

れを**可逆的（invertible）**生成規則と呼ぶ [64]．例えば，Fibonacci 格子の場合には，

$$\begin{cases} A' = B \\ B' = AB \end{cases} \quad \Longrightarrow \quad \begin{cases} A = B'(A')^{-1} \\ B = A' \end{cases} \tag{A.6}$$

と逆に解けるから，Fibonacci 格子の生成規則は可逆的である．これに対して，例えば生成規則が $A' = BB, B' = AB$ である PD 格子は**非可逆的（non-invertible）**である．以下，生成規則が可逆的（非可逆的）な自己相似格子を，可逆的自己相似格子（非可逆的自己相似格子）と呼ぶ．一般に，生成規則が可逆的であるためには，随伴行列 M が unimodular（$\det M = \pm 1$）であることが必要である（ただし，十分ではない）．従って，可逆的自己相似格子は自己相似格子全体の中で圧倒的少数派である．なお，後述するように，可逆的自己相似格子は準周期格子（＝1次元準結晶）となる．

A.2.4　生成規則の合成

生成規則は合成することができる．2つの生成規則を $\sigma_1 = (u_1(A,B), v_1(A,B))$，$\sigma_2 = (u_2(A,B), v_2(A,B))$ とし，A と B の任意の並びに対して変換 σ_1 を行った後で変換 σ_2 を行うと，結果的に第3の変換 σ_3 を一回行ったのと同じになる．σ_3 を σ_1 と σ_2 の合成と呼び，$\sigma_3 = \sigma_2\sigma_1$ と表す [71]．$\sigma_3 = (\sigma_3(A), \sigma_3(B)) = (\sigma_2(\sigma_1(A)), \sigma_2(\sigma_1(B)))$ により，次式が導かれる：

$$\sigma_3 = (u_1(u_2(A,B), v_2(A,B)), v_1(u_2(A,B), v_2(A,B))). \tag{A.7}$$

また，関連する随伴行列の間には，関係式 $M_3 = M_2 M_1$ が成り立つ．もし，σ_1 と σ_2 が対称 (明示的または暗示的) であるならば，σ_3 も対称となる．同様に σ_1 と σ_2 が可逆であれば，σ_3 もまた可逆になる．

前段の M_3 ように，他の2つの随伴行列の積に分解できるような随伴行列は可約と呼ぶことができる．また，積として現れる随伴行列は元の随伴行列の因子と呼ぶ．2つの行列 $\mathbf{1} \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$，$J \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ は任意の随伴行列の因子となるので自明な因子と言える．随伴行列の可約性や既約性の議論ではこのような因子は除外する．可約な随伴行列の因子がまた可約であればそれはさらに分解できる．このような操作を続けてゆくと，可約な随伴行列は既約な随伴行列の積に「因数分解」することができる．ここで注意すべきは，整数の因数分解とは異なり，因子の順序を変えてはいけないことである．また，可約な随伴行列の「因数分解」が一意であるとは限らない．既約な随伴行列は，整数の因数分解の場合の素数に当たるが，後節で議論するように無限個存在する．特に，随伴行列 M が unimodular ならば，その既約因子としては

次の２種類のみが現れる[*6] [73]：

$$U = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \qquad S = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{A.8}$$

従って，unimodular な随伴行列は例えば，次のように因数分解できる：

$$M = US \cdots UUS. \qquad \text{（少なくとも１個の} U \text{を含む）} \tag{A.9}$$

正確に述べると，ここで述べたことは，条件 $a \leq b, c \leq d, a \leq c, b \leq d$ を課した場合にのみ正しい．この条件が満たされない場合には，生成規則において，A と B の役割を交換すれば，対応する随伴行列がその条件が満たす．

A.3　可逆的な生成規則

可逆的な生成規則の幾何学的意味は，M.Torikai らによって解明された [73]．ここでは，幾何学的なことには触れずに紹介する [72].

A.3.1　可逆的生成規則の性質１

式 (A.9) の再形の随伴行列の中でもっとも簡単な例としては次の３個がある：

$$M = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = U, \qquad M_{\mathrm{SM}} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} = US, \qquad M'_{\mathrm{SM}} = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = SU. \tag{A.10}$$

前者は Fibonacci 格子の生成規則の随伴行列であるが，M_{SM} は Silver-Mean 格子と呼ばれる自己相似格子の生成規則の随伴行列である．M_{SM} を随伴行列とする生成規則は次の３種類存在する：

$$(B, ABB), \quad (B, BAB), \quad (B, BBA). \tag{A.11}$$

これらの生成規則はすべて等価である．この場合には問題ないのだが，M'_{SM} を随伴行列とする生成規則は全部で６種類存在する：

$$\begin{array}{lll} 1.\ (AB, AAB), & 2.\ (AB, ABA), & 3.\ (AB, BAA) \\ 4.\ (BA, AAB), & 5.\ (BA, ABA), & 6.\ (BA, BAA). \end{array}$$

これらの中で，1，2，5，6 は等価であり，かつ対称の条件を満たしている．これに対して，3, 4 は共に非対称であり，しかも等価ではない．このように同じ随伴行列を持ちながら等価でない生成規則が存在する場合がある．というより，こうなるのが通常である．

[*6] S および $S^n = \begin{pmatrix} 1 & n \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ は随伴行列に対する条件 $(a+d)bc \neq 0$ を満たさないが，既約因子の中に U が少なくとも１個含まれれば，M はその条件を満たす.

この問題を解決するためには既約行列 U, S に対応する生成規則を一意に指定するだけでよい：

$$U = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad \Longrightarrow \quad \sigma_U = (B, AB), \tag{A.12}$$

$$S = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \Longrightarrow \quad \sigma_S = (A, AB). \tag{A.13}$$

これによって可逆的自己相似格子の生成規則は随伴行列から一意に決められる．具体的には，式 (A.9) の形の随伴行列を持つ生成規則を

$$\sigma = \sigma_U \sigma_S \cdots \sigma_U \sigma_U \sigma_S \tag{A.14}$$

により定義すればよい．ここで重要なことは，同じ随伴行列を持つ可逆的生成規則はこれ以外には存在しないことである．以上により，可逆的自己相似格子全体と unimodular な随伴行列全体とは一対一の関係がある．σ_U，σ_S は共に対称（暗示的対称）であるから，これらの合成として表される可逆的生成規則は必ず対称になる [73]．

前段で述べた理由により，M'_{SM} を随伴行列とする非対称生成規則 3，4 は非可逆的である．unimodular な随伴行列を持つ対称生成規則で非可逆的なものも存在する．実際，$\sigma_S \sigma_S \sigma_U = (ABA, ABABA)$ は可逆的であるが，同じ随伴行列を持つ $(ABA, BAAAB)$ は非可逆的である．後者は，生成規則としては既約であり，他の生成規則の合成として表すことはできない．

A.3.2　可逆的な生成規則の性質２：MLD 分類

幾何学的に一見異なった準結晶同士が，局所的な変換によって互いに移り変わる場合ある．このような準結晶をひとつのクラスにまとめるような準結晶の分類法を考えることができる．このような分類を **MLD（= Mutual Local Derivability）分類**と呼ぶ [75], [73]．本節では幾何学的なことには触れずに，可逆的な生成規則によって作られた自己相似格子を分類することを考える．可逆的自己相似格子全体を分類することと可逆的生成規則を分類するすることは同じである．

まず，式 (A.10) の後の 2 個の随伴行列の因子 U, S は互いに逆順となっている．これらを随伴行列とする可逆的生成規則は次のようになる：

$$\sigma_{\mathrm{SM}} = \sigma_U \sigma_S = (B, BAB), \qquad \sigma'_{\mathrm{SM}} = \sigma_S \sigma_U = (AB, AAB). \tag{A.15}$$

これらの生成規則によって作られる自己相似格子 $\Lambda_{SM}, \Lambda'_{SM}$ を見てみよう (図１)．　Silver-Mean 格子 (Λ_{SM}）の文字列が一番上である．図 1 のように $(A \to A, B \to AB)$ と変換すると真中の文字列となる．これは，Λ'_{SM} の文字列に他ならない．さらに真中の文字列の A, B

図 A.1: fig/fig1-3.eps

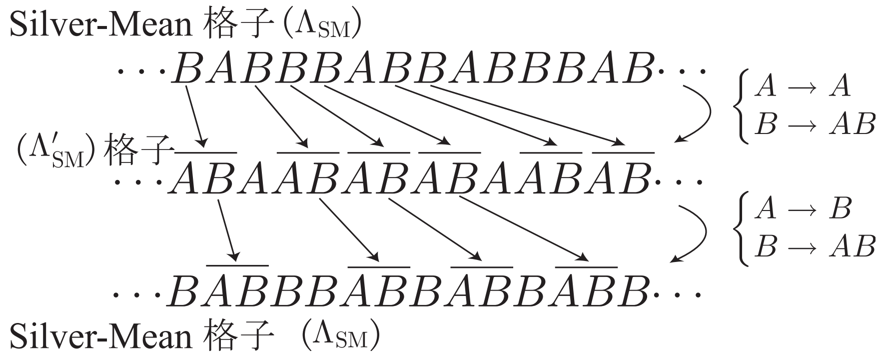

図 A.1　MLD の例

を $(A \to B, B \to AB)$ と変換するともとの Silver-Mean 格子に復帰する．このときの 2 つの格子 $\Lambda_{SM}, \Lambda'_{SM}$ を結ぶ規則を**置換規則（Substitution Rule）**と呼ぶ：

$$\Lambda_{SM} \quad \overset{\sigma_S}{\Longrightarrow} \quad \Lambda'_{SM} \quad \overset{\sigma_U}{\Longrightarrow} \quad \Lambda_{SM}. \tag{A.16}$$

Λ_{SM} と Λ'_{SM} は置換規則によって関係付けられていて，同じクラスに分類される．このようなクラスを MLD 類と呼ぶ.

Silver-Mean 格子に限らず，任意の可逆的生成規則が与えられた場合，それと同じ MLD 類に属する生成規則を求めることができる．随伴行列全体と可逆的生成規則全体は一対一の関係があるので随伴行列だけで議論を行う．$M_1 = USSUSU$ とすると

$$\begin{aligned} &M_2 = SSUSUU, \qquad M_3 = SUSUUS, \qquad M_4 = USUUSS, \\ &M_5 = SUUSSU, \qquad M_6 = UUSSUS \end{aligned}$$

はすべて同じ MLD に属す．この例からもわかるが，随伴行列 M を構成する S, U の並び順をサイクリックに変えることによって生ずる随伴行列によって指定できる自己相似格子はすべて同じ MLD 類に属していることがわかる．随伴行列の既約因子の数が n であれば，対応する MLD 類は n 個の自己相似格子を含む.

生成規則と 1 次元準結晶との繋がりについては参考文献 [73] を参照．また，2 次元以上の準結晶の MLD 分類については参考文献 [76] を参照.

A.4　非可逆な生成規則

非可逆的（非可逆）な場合も可逆的な場合と同様に MLD 分類が可能である．既約行列は可逆的生成規則のときの 2 つ U, S だけではなく，無限個 ある．非可逆的生成規則の場合に初めて登場する既約行列（因子）で最も単純なものは次のものである：

$$D = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{A.17}$$

対応する生成規則 $\sigma_D = (AA, B)$ は周期格子を生成するが，この生成規則を因子として含む生成規則は非可逆的になる．例えば，次に示す PD 格子と Copper-Mean 格子がその例である：

$$\sigma_{\rm CM} = \sigma_D\sigma_U = (B, AAB), \qquad \sigma_{\rm PD} = \sigma_U\sigma_D = (BB, AB). \tag{A.18}$$

この 2 つの格子は MLD の関係にある：

$$M_{\rm PD} = UD = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 2 & 1 \end{pmatrix} \iff M_{\rm CM} = DU = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}. \tag{A.19}$$

$\sigma_D = (AA, B)$ を含む 3 個の生成規則の合成として表される生成規則としては，例えば

$$\sigma_D\sigma_U\sigma_S = (B,\ BAAB), \qquad \sigma_U\sigma_D\sigma_U = (AB,\ ABBB) \tag{A.20}$$

などがある．それぞれが属する MLD 類は 3 個の生成規則（自己相似格子）から成る．ついでながら，上記の 2 つの生成規則の随伴行列は次のようになる：

$$DUS = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}, \qquad UDU = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}. \tag{A.21}$$

これらのように，U, S 以外に D を 1 個だけ既約因子として含む随伴行列の行列式は ± 2 となる．

既約行列としては，他にも

$$D_j = \begin{pmatrix} j & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \qquad \chi = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix} \quad , \cdots \tag{A.22}$$

など無限個存在する．ただし，j は素数とする．従って，生成規則の大多数は非可逆的なものであることがわかる．

ここまで議論してきた自己相似格子の分類をまとめる．生成規則は対称性によって分けられる．対称な生成規則はさらに，可逆的なものと非可逆的なものに分類することができる．また，生成規則が既約な生成規則の積に分解できる場合，合成の順序をサイクリックに変えることにより同じ MLD 類に属する異なる生成規則が得られる．

これまでの MLD 分類では，置換規則によって関係付けられている 2 種の自己相似格子を互いに MLD とした．この場合，置換規則については何の制限も課さなかった．置換規則を可逆的なものに制限したものを強い MLD 関係と定義すれば，新しい MLD 分類が定義される．2 種の自己相似格子が互いに強い意味で MLD 関係にあれば，それらはこれまでの意味でも MLD 関係にあるが，逆は必ずしも成り立たない．例えば，2 個の生成規則（または置換規則）σ_1，σ_2 の合成である 2 つの生成規則，$\sigma = \sigma_1\sigma_2$，$\sigma' = \sigma_2\sigma_1$ がある場合，σ_1 と σ_2 のどちらか一方が可逆的ならば，σ と σ' は互いに強い意味で MLD 関係にあるが，両方とも非可逆的ならば，強い意味での MLD 関係はない．σ_U，σ_S 以外に σ_D を 1 個だけ既約因子として含む生成規則の場合に限定すると，どちらの MLD 関係で考えても同じであるが，σ_D を 2 個以上含む生成規則の場合には事情が異なる．

A.5　自己相似格子の性質

A.5.1　自己相似格子の構造

生成規則を $\sigma = (u(A,B), v(A,B))$，随伴行列を $M = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ とする．また，第 0 世代の並びを $A_0 = A, B_0 = B$ とし，第 n 世代目の並びをそれぞれ A_n, B_n とする：$A_n = \sigma^n(A)$, $B_n = \sigma^n(B)$．今後の議論では，補助記号 C を $C = AB$ として導入し，その第 n 世代を C_n とする：$C_n = \sigma^n(C) = A_n B_n$．定義により，漸化式

$$A_{n+1} = u(A_n, B_n), \qquad B_{n+1} = v(A_n, B_n) \tag{A.23}$$

が成り立つ．第 n 世代の並び A_n, B_n, C_n のサイズ（構成している A と B の総数）をそれぞれ $L_n^{(A)}, L_n^{(B)}, L_n^{(C)}$ とする．定義により，$L_n^{(C)} = L_n^{(A)} + L_n^{(B)}$ が成り立つ．また，漸化式 $(L_{n+1}^{(A)} \quad L_{n+1}^{(B)}) = (L_n^{(A)} \quad L_n^{(B)})M$ が成り立つ．この式と，初期条件 $(L_0^{(A)} \quad L_0^{(B)}) = (1 \quad 1)$ から次式が導かれる：

$$(L_n^{(A)} \quad L_n^{(B)}) = (1 \quad 1)M^n. \tag{A.24}$$

次に，Fibonacci 格子（$\sigma = (B, AB)$）の場合を例にあげる[*7]：

$$\begin{cases} A_1 = B \\ B_1 = AB \end{cases} \quad \begin{cases} A_2 = AB \\ B_2 = BAB \end{cases} \quad \begin{cases} A_3 = BAB \\ B_3 = ABBAB \end{cases} \quad \begin{cases} A_3 = ABBAB \\ B_3 = BABABBAB \end{cases} \tag{A.25}$$

自己相似格子は A，B の無限並びであるが，それを適当にくくり直すと，任意の n に対して，第 n 世代の並び A_n と B_n の無限並びに変換できる．しかも，後者の並びは前者の並びと同じ規則に従っている．例えば，式 (A.1) に含まれる A と B をそれぞれ A_n と B_n で置き換えると，各並びは世代が n だけずれた並びに変換される．自己相似格子は周期的ではないが，ここで述べた事情により，周期格子に近い性質を持つと言える．また，周期格子に次いで構造的一様性が強い．この点で，確率的に任意の大きさの揺らぎが可能なランダム系とは異なっている．

A，B，C の中の任意のひとつを X とする．前段で述べた自己相似格子の性質のため，n を十分大きくとった場合，自己相似格子は X_n の無限並びとして表される周期格子により「近似」することができる．この周期格子を前者の近似格子と呼ぶ．この近似格子の周期は $L_n^{(X)}$ に等しい．このようにして，３種類の近似格子の系列が得られる．X_n に含まれる A と B の個数をそれぞれの $N_n^{(A)}$，$N_n^{(B)}$ と表すと，次式が成り立つ：

$$\begin{pmatrix} N_{n+1}^{(A)} \\ N_{n+1}^{(B)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N_n^{(A)} \\ N_n^{(B)} \end{pmatrix}. \tag{A.26}$$

[*7] Fibonacci 格子の場合，$A_n = B_{n-1} = C_{n-2}$ が成り立つ．

$r \equiv \mathrm{Tr}\, M$，$s \equiv \det M$ とおけば，随伴行列 M の特性多項式は $\det(xE - M) = x^2 - rx + s$ となる．この２次式の判別式 $D = r^2 - 4s$ は正整数である[*8]．また，M が unimodular であることと $s = \pm 1$ であることは等価である．随伴行列 M の固有値を τ, τ'（$|\tau| > |\tau'|$）とする．この固有値は２次方程式 $x^2 - rx + s = 0$ 根であるから，$\tau + \tau' = r$，$\tau\tau' = s$ が成り立つ．判別式 D が平方数ならば，τ, τ' は共に整数となり，さもなければ，τ，τ' は共に２次実無理数（τ' は τ の代数的共役）となる．このような τ で 3.5 を超えないものは１０個存在するが，それらを小さい順にリストする：$(1+\sqrt{5})/2$（黄金比），2，$1+\sqrt{2}$，$(1+\sqrt{13})/2$，$(3+\sqrt{5})/2$，$1+\sqrt{3}$，3，$(3+\sqrt{13})/2$，$2+\sqrt{2}$，$1+\sqrt{5}$.

M はケーリー・ハミルトンの関係式 $M^2 = rM - sI$ を満たすので，$L_n^{(A)}$，$L_n^{(B)}$ は次の漸化式（差分方程式）の解となる：

$$x_{n+1} = rx_n - sx_{n-1}. \tag{A.27}$$

この漸化式の解で，初期条件 $x_0 = 0, x_1 = 1$ を満たすものは整数列を表すが，この数列のメンバーは一般化 Fibonacci 数と呼ばれる[*9]．n 番目の一般化 Fibonacci 数を Φ_n と記すと，それは

$$\Phi_n \equiv \frac{1}{\sqrt{D}}(\tau^n - \tau'^n) \tag{A.28}$$

と表すことができる．これを用いると，$L_n^{(A)}$，$L_n^{(B)}$ は次のように表すことができる：

$$L_n^{(A)} = \Phi_{n+1} + (c-d)\Phi_n, \qquad L_n^{(B)} = \Phi_{n+1} + (b-a)\Phi_n. \tag{A.29}$$

自己相似格子の構造は τ の数論的性質に強く規定される．特に重要なのは，不等式 $0 < |\tau'| \leq 1$ が満される場合である．このような２次無理数 τ は Pisot 数と呼ばれる[*10]．関係式 $\tau\tau' = s\ (= \det M)$ により，特に M が unimodular ならば，$\underline{\tau \text{ は必ず Pisot 数となる}}$．例えば，前記のリスト中の８個の無理数のうち６個は Pisot 数であるが，その中で $s = \pm 1$ とならないのは，$1+\sqrt{3}$，$2+\sqrt{2}$ の２例のみである．この２例については，$|\tau\tau'| = 2$ が成り立つ．$\tau = 1+\sqrt{3}$ または $\tau = 2+\sqrt{2}$ となる生成規則としては，それぞれ式 (A.20) の左側および右側がある．本論文の議論は原則として，対称自己相似格子で τ が Pisot 数の場合に限定する．可逆的自己相似格子は必ず Pisot 自己相似格子となるが，その逆は必ずしも成り立たない．式 (A.20) の２つの生成規則により作られる２種の自己相似格子は，代表的な非可逆的 Pisot 自己相似格子である．

τ が２次無理数でかつ Pisot 数でもある場合，式 (A.28) の括弧の中の第２項は $n \to \infty$ の極限で消える．従って，式 (A.28)，(A.29) により，$L_n^{(A)}$，$L_n^{(B)}$ は，世代 n の関数として次

[*8] 自己相似格子の生成規則の中には判別式がゼロとなるものもあるが（例えば，Thue-Morse 格子の生成規則：(AB, BA)）これらは極めて特殊なので，本稿では無視する．

[*9] $r = 1$，$s = -1$ の場合が Fibonacci 数である：$x_{n+1} = x_n + x_{n-1}$.

[*10] $\tau' = \pm 1$ の場合，τ は整数となり Pisot 数ではない．しかしながら，このケースは Pisot 数の場合と同様の議論ができるためにいっしょに扱う．PD 格子と Copper-Mean 格子がその例で，この場合 $\tau = 2$ となる．

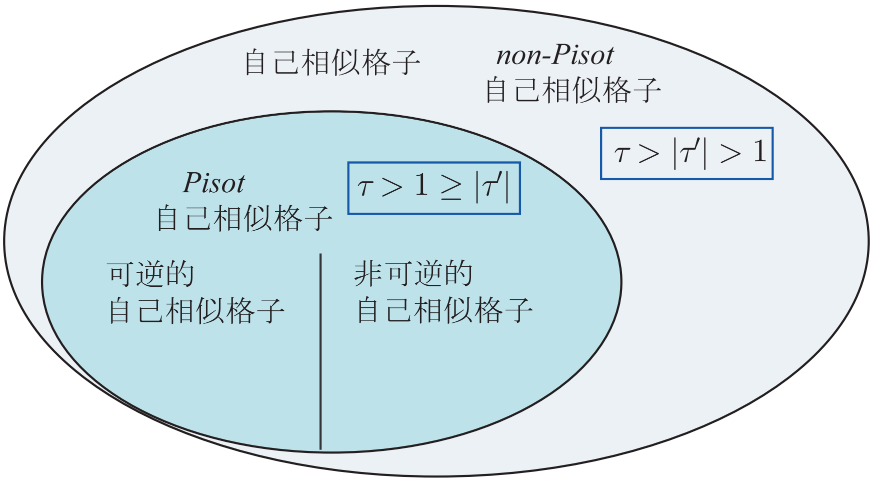

図 A.2　自己相似格子の分類

のような漸近的振る舞いを示す：

$$L_n^{(A)} \approx \frac{\rho}{\sqrt{D}}\tau^n, \qquad L_n^{(B)} \approx \frac{\rho'}{\sqrt{D}}\tau^n. \tag{A.30}$$

ただし，右辺の比例係数 $\rho = \tau + c - d$，$\rho' = \tau - a + b$ は正の数である．この漸近式の誤差は $n \to \infty$ の極限で消える．そのため，Pisot 自己相似格子は他の自己相似格子よりも構造的一様性が強いと言える [77]．

式 (A.30) により，$L_n^{(A)}$，$L_n^{(B)}$，$L_n^{(C)}$ の中の任意のひとつを L_n とした場合，L_{n+1}/L_n は $n \to \infty$ の極限で τ に収束し，従って，p を正整数とすれば，L_{n+p}/L_n は τ^p に収束する．いずれにせよ，生成規則により世代が 1 段上がることは，空間スケールが τ 倍だけ増加することに対応する．これらの結果は，式 (A.24) の帰結と言えるが，式 (A.26) を用いた同様な議論により，$N_{n+1}^{(A)}/N_n^{(A)}$，$N_{n+1}^{(B)}/N_n^{(B)}$ も $n \to \infty$ の極限で τ に収束することが言える．また，$N_n^{(B)}/N_n^{(A)}$ が同じ極限で $\omega \equiv (\tau - a)/b = c/(\tau - d)$ に収束することも言える[*11]．従って，ω は当該生成規則で作られた自己相似格子の A と B の個数の比と一致する．特に，ω が無理数である場合，このような格子は周期格子ではあり得ない．

[*11] ω は次式を満たす：

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ \omega \end{pmatrix} = \tau \begin{pmatrix} 1 \\ \omega \end{pmatrix}. \tag{A.31}$$

なお，$\rho'/\rho = b\omega/c$ が成り立つ．

図 A.2: fig/group.eps

A.5.2　構造因子

式 (A.30) の直後で述べたことの結果として，Pisot 自己相似格子の構造因子 $S(Q)$ *12 は Bragg peak だけから成ることが示される [77], [78]．$S(Q)$ の性質を述べるためには，２次の無理数 τ，ω に関連した２次体の数論に関するいくつかの用語が必要になる．これについては，付録**２次体の数論**を参照．Pisot 自己相似格子の構造因子 $S(Q)$ の peak 位置の波数は，この格子の逆格子ベクトルと言える．逆格子ベクトル全体 $\mathcal{M}$ は加群であり，Fourier module と呼ばれる．自己相似格子は非周期的なので，$\mathcal{M}$ は実数軸上密（dense）となる*13．以下，波数は有理化波数 $\kappa = Q/(2\pi)$ を用いて議論する．ただし，格子定数を１とした．κ が逆格子ベクトルであるための必要十分条件は，$n \to \infty$ の極限で $\kappa L_n^{(A)}$ と $\kappa L_n^{(B)}$ の小数部分*14が共にゼロに収束することである．この条件により，$\mathcal{M}$ は次のように決定される [77], [78]：

$$\mathcal{M} = \frac{1}{1+\omega}\mathbf{Z}\{\omega\}. \tag{A.32}$$

ただし，τ が unit ならば

$$\mathcal{M} = \frac{1}{1+\omega}\mathbf{Z}[\omega] \tag{A.33}$$

となる．$\mathcal{M}$ は $\mathbf{Z}$–module であるが，その生成元（基底）は前者の場合には無限個となるが，後者の場合には２個となる．従って，後者の場合には系は準周期的（quasiperiodic）である*15．これに対して，前者のような系は limit quasiperiodic system（極限準周期系）と呼ばれる．式 (A.20) の２つの生成規則により作られる２種の自己相似格子は limit quasiperiodic system である．n を任意の整数とした場合，$n + n\omega \in \mathbf{Z}\{\omega\}$ であるから，式 (A.32) により，n は逆格子ベクトルとなる．このことは，自己相似格子が格子定数１の周期格子に乗っているとしたことからの当然の帰結である．このことから，Fourier module $\mathcal{M}$ が，その半開き単位区間 $[0, 1)$ への制限 $\mathcal{M}_{[0,1)}$ *16を元にして，それを周期的にずらしたもの全体の合併として表されることが分かる*17．このことは，集合 $\mathcal{M}$ の並進対称性を表すが，この集合は原点（従って，すべての整数点）を中心とする反転対称性も持つ．これらの結果として，すべての半整数点を中心とする反転対称性も持つ．

---

*12　$\delta_A(j)$ をサイト j が A ならば 1，B ならば 0 をとる関数とした場合，構造因子は次式で定義される：

$$S(Q) \equiv \frac{1}{2N}\lim_{N\to\infty} \Big| \sum_{j=-N}^{N} \delta_A(j) \exp(-iQj) \Big|^2.$$

*13 周期格子の場合，その周期を a とすれば，$\mathcal{M} = \{ng \,|\, n \in \mathbf{Z}\}$，$g = 2\pi/a$ と表され，離散的である．

*14 任意の実数は，四捨五入による整数部分と残りの小数部分に一意に分解できる．

*15 基底となる２つの波数の一方は $g_1 = 1/(1+\omega)$ となり，他方は $g_2 = \omega g_1$ となる．従って，$\mathcal{M} = \{n_1 g_1 + n_2 g_2 \,|\, n_1, n_2 \in \mathbf{Z}\}$ となる．準周期性は ω が無理数であることによる．

*16 X を実数から成る集合とした場合，$X_{[0,1)} \equiv X \cap [0,1) = \{x \,|\, x \in X, 0 \le x < 1\}$ とする．

*17 記号的には，$\mathcal{M} = \cup_{n\in\mathbf{Z}}(n + \mathcal{M}_{[0,1)})$ と表すことができる．

他方，$\tau =$ (整数), $|\tau'| = 1$ である場合も同様の議論から，逆格子ベクトル全体 $\mathcal{M}$ は次のように決定される [77], [78]：

$$\begin{aligned}\mathcal{M} = \mathbf{Z}\{\tau\} &\equiv \mathbf{Z} \cup \frac{1}{\tau}\mathbf{Z} \cup \frac{1}{\tau^2}\mathbf{Z} \cup \cdots \\ &= \left\{ n_0 + \frac{n_1}{\tau} + \frac{n_2}{\tau^2} + \cdots \quad (\text{有限項で切れる}) \mid n_j \in \mathbf{Z} \right\}. \end{aligned} \tag{A.34}$$

この場合も $\mathcal{M}$ の生成元（基底）は無限個となる．このような系は limit periodic system（極限周期系）と呼ばれる．

以上により，Fourier module $\mathcal{M}$ は随伴行列 M から一意に決定される．従って，随伴行列が共通な自己相似格子が複数個存在する場合，それらは同一の Fourier module を持つ．なお，非 Pisot 格子の $S(Q)$ は特異連続（singular continuous）となる[*18]ことが知られている [77], [78].

A.6　電子状態の解析手法

自己相似格子の一電子状態を強結合近似を用いて調べる．Hamiltonian $\mathcal{H}$ の j 番目のサイトのポテンシャルを V_j とすれば,

$$\mathcal{H} = -\sum_j t\Big(\mid j\rangle\langle j+1 \mid + \mid j+1\rangle\langle j \mid\Big) + \sum_j \mid j\rangle V_j \langle j \mid \tag{A.35}$$

と与えられる．$t\ (>0)$ は transfer (hopping) integral の値で，V_j は j 番目のサイトが A か B かにより，V_A または V_B をとる．j 番目のサイトの振幅を ϕ_j とした場合，それらは次の 3 項間漸化式を満たす：

$$-t\phi_{j+1} - t\phi_{j-1} + V_j\phi_j = E\phi_j. \tag{A.36}$$

煩雑さを避けるため，以後 $t = 1$ ととる．

自己相似格子の 1 サイトあたりの状態密度 $D(E)$ は，後述するように，特異性の強い関数となる．そのため,

$$H(E) = \int_{-\infty}^{E} D(E)\, dE \tag{A.37}$$

で定義される積分状態密度 $H(E)$ の方がより扱いやすい関数となる．$H(E)$ は全体の状態数のうち，E を超えない状態の数の割合を表す．定義により，$H(E)$ は E の非減少関数で，全体のバンドの下端以下では $H(E) = 0$ となり，上端以上では $H(E) = 1$ となる．

[*18] フラクタル的関数のこと

A.6.1 transfer matrix

3 項漸化式 (A.36) により，j 番目と $j-1$ 番目 のサイトの振幅 ϕ_j, ϕ_{j-1} を決めれば，任意の整数 $m>0$ に対して，$j+m$ 番目と $j+m-1$ 番目 のサイトの振幅 ϕ_{j+m}, ϕ_{j+m-1} が ϕ_j, ϕ_{j-1} の線形変換（1 次結合）として与えられる．この線形変換を

$$(\phi_{j+m} \quad \phi_{j+m-1}) = (\phi_j \quad \phi_{j-1})\mathcal{T} \tag{A.38}$$

と表した場合，その変換行列 $\mathcal{T}$（2×2 行列）は transfer matrix と呼ばれる．式 (A.36) により，$m=1$ の場合は，$\mathcal{T}=\mathcal{T}_j$ はサイト j に依存し，

$$\mathcal{T}_j = \begin{pmatrix} V_j - E & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \tag{A.39}$$

となる．具体的には,

$$\mathcal{T}_A = \begin{pmatrix} V_A - E & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \mathcal{T}_B = \begin{pmatrix} V_B - E & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \tag{A.40}$$

とすれば，サイト j のタイプにより，$\mathcal{T}_j = \mathcal{T}_A$ または $\mathcal{T}_B$ となる．また，$\det \mathcal{T}_j = 1$ を満たす．一般の m の場合の $\mathcal{T}$ は，j 番目から $j+m-1$ 番目 のサイトまでの区間における A と B の並びだけできまり，その並びの出発点 j には依存しない．この並びを X とし，それが 2 つの並び Y，Z に分解できる（$X=YZ$）ならば，対応する 3 個の transfer matrix は関係式 $\mathcal{T}_X = \mathcal{T}_Y \mathcal{T}_Z$ により結ばれる．従って，X における A と B の並びから，それと同じ順番に $\mathcal{T}_A$と $\mathcal{T}_B$ の積を計算すれば $\mathcal{T}_X$ が求められる．このように A と B の任意の並びに対して，対応する transfer matrix が定まる．そのため，transfer matrix は常に unimodular である：$\det \mathcal{T} = 1$．第 n 世代の並び A_n，B_n，C_n に付随する transfer matrix を $\mathcal{T}_A^{(n)}$，$\mathcal{T}_B^{(n)}$，$\mathcal{T}_C^{(n)}$ とする．関係する生成規則を $\sigma = (u(A,B), v(A,B))$ とすれば，式 (A.23) により，次の漸化式が成り立つ：

$$\mathcal{T}_A^{(n+1)} = u\left(\mathcal{T}_A^{(n)}, \mathcal{T}_B^{(n)}\right), \qquad \mathcal{T}_B^{(n+1)} = v\left(\mathcal{T}_A^{(n)}, \mathcal{T}_B^{(n)}\right) \tag{A.41}$$

また，関係式 $\mathcal{T}_C^{(n)} = \mathcal{T}_A^{(n)}\mathcal{T}_B^{(n)}$ が成り立つ．例えば，Fibonacci 格子の場合，$\mathcal{T}_A^{(n+1)} = \mathcal{T}_B^{(n)}$，$\mathcal{T}_B^{(n+1)} = \mathcal{T}_A^{(n)}\mathcal{T}_B^{(n)}$ が成り立つ．$\mathcal{T}_A$ と $\mathcal{T}_B$ はエネルギー E の関数であるから，$\mathcal{T}_A^{(n)}$，$\mathcal{T}_B^{(n)}$，$\mathcal{T}_C^{(n)}$ もそうである．

特に，周期系（$V_A = V_B = 0$）の場合，$\mathcal{T}_A = \mathcal{T}_B\ (\equiv \mathcal{T}_0)$ となるから，並び X のサイズを L と表せば，$\mathcal{T}_X = \mathcal{T}_0^L$ が成り立つ.

A.6.2 近似格子の電子状態

近似格子は周期格子なので，その周期を L とすれば，エネルギースペクトルは L 個のエネルギーバンドから構成される．また，固有状態（波動関数）はブロッホの定理を満たす：

$\phi_{j+L} = e^{iQL}\phi_j$. ただし，$Q$ は波数を表す．このことから，１周期の transfer matrix を $\mathcal{T}$ とすると，次の関係式が成り立つことがわかる：

$$\begin{pmatrix}\phi_j & \phi_{j-1}\end{pmatrix}\mathcal{T} = \begin{pmatrix}\phi_{j+L} & \phi_{j+L-1}\end{pmatrix} \tag{A.42}$$
$$= e^{iQL}\begin{pmatrix}\phi_j & \phi_{j-1}\end{pmatrix}. \tag{A.43}$$

従って，$e^{\pm iQL}$ は $\mathcal{T}$ の固有値となる．よって，$\mathrm{Tr}\,\mathcal{T} = 2\cos QL$ が結論される．そこでエネルギー E の関数を

$$\zeta(E) \equiv \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\,\mathcal{T}(E) \tag{A.44}$$

により定義すれば，$\zeta(E)$ は E の L 次多項式となるから[*19]，方程式

$$\zeta(E) = \cos QL \tag{A.45}$$

の解として，L 個の分散関係式 $E = E_i(Q)$, $i = 1, 2, \cdots, L$ が得られる．これらの式から L 個のエネルギーバンドが得られる．$\zeta(E)$ は $\mathcal{T}(E)$ と同様，近似格子の１周期における A と B の並び X により決定される．例えば，$X = AB$ ならば，$\zeta(E) = (V_A - E)(V_B - E)/2 - 1$ となり，２個の分散関係式は２次方程式の解として求められる．３種類の近似格子の系列のどれかひとつの系列に対して，そのバンドが世代と共にどのように変化するかを調べれば自己相似格子のエネルギースペクトルが解明できる．

ここで，式 (A.44) で定義される変数 ζ が次の３変数の整数係数多項式となることを示す：

$$x \equiv \frac{1}{2}\mathrm{Tr}(\mathcal{T}_A), \qquad y \equiv \frac{1}{2}\mathrm{Tr}(\mathcal{T}_B), \qquad z \equiv \frac{1}{2}\mathrm{Tr}(\mathcal{T}_C) = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}(\mathcal{T}_A\mathcal{T}_B). \tag{A.46}$$

$\mathcal{T}_A$ は unimodular なので，ケーリー・ハミルトンの関係式は $(\mathcal{T}_A)^2 = 2x\mathcal{T}_A - \mathbf{1}$ と表される[*20]．$\mathcal{T}_B$ や $\mathcal{T}_C$ についても同様である．問題の証明は，この事実と trace の性質を用いて，並び X のサイズ L に関する帰納法により行う．必要な trace の性質は線形性（$\mathrm{Tr}\,(U+V) = \mathrm{Tr}\,U + \mathrm{Tr}\,V$）と循環性（$\mathrm{Tr}\,UV = \mathrm{Tr}\,VU$）である．$L = 1$ および $L = 2$ の場合は自明であるから，$L \geq 3$ の場合を考えればよい．ところで，並び X の中に A または B が連続して含まれている場合，$\mathcal{T}$ の対応する因子に対してケーリー・ハミルトンの関係式を用い，さらに trace の線形性を用いれば，サイズ L がより小さい場合に帰着する．また，X の最初と最後が共に A（または B）の場合には，trace の循環性を用いることにより，直前の場合に帰着する．残されたのは L が偶数で $X = AB\,AB \cdots AB$ となる場合だけである．この場合，X は $C = AB$ の連続並びとなっているので，$\mathcal{T}_C$ についてのケーリー・ハミルトンの関係式を必要な回数使用すると $L = 2$, $X = C\ (= AB)$ の場合に帰着する．以上で証明は完了した．

[*19] $\mathcal{T}(E)$ の行列成分 $T_{11}(E)$, $T_{12}(E)$, $T_{21}(E)$, $T_{22}(E)$ は E の多項式となり，その次数はそれぞれ L, $L-1$, $L-1$, $L-2$ となる．証明は L に関する帰納法を用いる．

[*20] 以下の議論では，$\mathcal{T}_A$ と $\mathcal{T}_B$ が unimodular であることだけが重要であり，これらが式 (A.40) の表示を持つことは使用されない．

具体的な例として，$X = ABBABA$ の場合について計算する：

$$
\begin{aligned}
\zeta(E) &= \frac{1}{2}\mathrm{Tr}[\mathcal{T}_A(\mathcal{T}_B)^2\mathcal{T}_A\mathcal{T}_B\mathcal{T}_A] = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}[(2x\mathcal{T}_A - \mathbf{1})(2y\mathcal{T}_B - \mathbf{1})\mathcal{T}_A\mathcal{T}_B] \\
&= 2xy\mathrm{Tr}[\mathcal{T}_A\mathcal{T}_B\mathcal{T}_A\mathcal{T}_B] - x\mathrm{Tr}[\mathcal{T}_A\mathcal{T}_A\mathcal{T}_B] - y\mathrm{Tr}[\mathcal{T}_B\mathcal{T}_A\mathcal{T}_B] + \frac{1}{2}\mathrm{Tr}[\mathcal{T}_A\mathcal{T}_B] \\
&= 2xy\mathrm{Tr}[(\mathcal{T}_C)^2] - x\,(2x\mathrm{Tr}[\mathcal{T}_C] - \mathrm{Tr}[\mathcal{T}_B]) - y\,(2y\mathrm{Tr}[\mathcal{T}_C] - \mathrm{Tr}[\mathcal{T}_A]) + \frac{1}{2}\mathrm{Tr}[\mathcal{T}_C] \\
&= z\left(8xyz - 4x^2 - 4y^2 + 1\right). \qquad \text{(A.47)}
\end{aligned}
$$

なお，後節における議論の都合上，いくつかの公式を記しておく．まず，$\mathcal{T}_A$ に対するケーリー・ハミルトンの関係式は $\mathcal{T}_A + (\mathcal{T}_A)^{-1} = 2x\mathbf{1}$ と書き換えられるが，この式から，$\mathrm{Tr}(\mathcal{T}_A) = \mathrm{Tr}[(\mathcal{T}_A)^{-1}]$ が導ける．この等式は 2 次元 unimodular 行列の一般的性質である．従って，例えば，$\mathrm{Tr}[\mathcal{T}_A(\mathcal{T}_B)^{-1}] = \mathrm{Tr}[\mathcal{T}_B(\mathcal{T}_A)^{-1}]$ も成り立つ．右辺に含まれる $(\mathcal{T}_A)^{-1}$ を上記の変形ケーリー・ハミルトンの関係式を用いて消去し，式 (A.46) を用いると，右辺は $4xy - 2z$ に等しいことがわかる．すなわち，次の公式が証明できた：

$$
\begin{aligned}
J(x,y,z) &\equiv 2xy - z \qquad \text{(A.48)} \\
&= \frac{1}{2}\mathrm{Tr}[\mathcal{T}_A(\mathcal{T}_B)^{-1}] = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}[\mathcal{T}_B(\mathcal{T}_A)^{-1}]. \qquad \text{(A.49)}
\end{aligned}
$$

同様にして，次の公式を証明することができる：

$$
\begin{aligned}
I(x,y,z) &\equiv x^2 + y^2 + z^2 - 2xyz - 1 \qquad \text{(A.50)} \\
&= \frac{1}{8}\mathrm{Tr}[\mathcal{T}_A, \mathcal{T}_B]^2 = \frac{1}{4}\mathrm{Tr}[\mathcal{T}_A\mathcal{T}_B(\mathcal{T}_A)^{-1}(\mathcal{T}_B)^{-1}] - \frac{1}{2}. \qquad \text{(A.51)}
\end{aligned}
$$

特に，$\mathcal{T}_A$，$\mathcal{T}_B$ が式 (A.40) により与えられる場合，$[\mathcal{T}_A, \mathcal{T}_B] = \Delta\left(\begin{smallmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{smallmatrix}\right)$，$\Delta = V_A - V_B$ が成り立つので，次式を得る：

$$
I = \left(\frac{\Delta}{2}\right)^2. \qquad \text{(A.52)}
$$

A.6.3 trace map

3 種類の近似格子の系列の第 n 世代の近似格子の場合には式 (A.44) により定義される量は次のようになる：

$$
x_n \equiv \frac{1}{2}\mathrm{Tr}(\mathcal{T}_A^{(n)}), \qquad y_n \equiv \frac{1}{2}\mathrm{Tr}(\mathcal{T}_B^{(n)}), \qquad z_n \equiv \frac{1}{2}\mathrm{Tr}(\mathcal{T}_C^{(n)}) = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}(\mathcal{T}_A^{(n)}\mathcal{T}_B^{(n)}). \qquad \text{(A.53)}
$$

ところで，関係する生成規則を $\sigma = (u(A,B), v(A,B))$ とすれば，$\mathcal{T}_A^{(n+1)} = u\Big(\mathcal{T}_A^{(n)}, \mathcal{T}_B^{(n)}\Big)$ が成り立つ（式 (A.41) 参照）．従って，前節の議論と同様な議論により，3 変数整数係数多項式 $f(x,y,z)$ が存在し，$x_{n+1} = f(x_n, y_n, z_n)$ と表すことができる．y_{n+1}，z_{n+1} についても同様である．これらをまとめると次のようになる：

$$
\begin{cases}
x_{n+1} = f(x_n, y_n, z_n) \\
y_{n+1} = g(x_n, y_n, z_n) \\
z_{n+1} = h(x_n, y_n, z_n)
\end{cases}. \qquad \text{(A.54)}
$$

すなわち，3次元写像 $T(x,y,z)=(f(x,y,z),g(x,y,z),h(x,y,z))$ が存在し，関係式 $\mathbf{r}_{n+1}=T(\mathbf{r}_n)$，$\mathbf{r}_n=(x_n,y_n,z_n)$ が成り立つ [71]．この写像は **trace map** と呼ばれている．例えば，式 (A.20) の右側の生成規則の場合の trace map は次のようになる：

$$T(x,y,z)=(z,(4y^2-1)z-2xy,8y^2z^2-4xyz-2y^2-2z^2+1). \tag{A.55}$$

trace map で重要なことは，それが E，V_A，V_B に明示的には依存しないことである．しかしながら，その軌道 $\{\mathbf{r}_n\}$ は trace map の初期値

$$\mathbf{r}_0=(x_0(E),y_0(E),z_0(E))=\frac{1}{2}(V_A-E,V_B-E,(V_A-E)(V_B-E)-2) \tag{A.56}$$

をとおして電子のエネルギー E に依存する．自己相似格子のエネルギースペクトルは，近似格子のエネルギースペクトルの周期 L を無限大にした極限であるから，それは trace map の性質により強く規定される．式 (A.54) は1種の繰り込み変換であるが，自己相似格子が入れ子構造となっているために，その電子状態に繰り込み群的構造が導入される．1回の繰り込み変換は自己相似格子の1回の変換（生成規則による）に対応するが，この変換では空間スケールが τ 倍になる．従って，繰り込み群で用いられるパラメタ b は τ と一致する．E を決めたときに，trace map の軌道 $\{\mathbf{r}_n(E)\}$ が T^p $(p\in\mathbf{N})$ の固定点に収束する場合，E は trace map の p–cycle と呼ばれる．

可逆的自己相似格子の場合の trace map は次のような著しい性質を持つ [64], [79]：

1. 1対1の写像であり，逆写像が存在する．
2. 写像のヤコビアンの絶対値が1となり，従って保存的である．
3. 式 (A.50) により定義される量 $I(x,y,z)$ が不変量となる．
4. 式 (A.52) により，不変量 $I(x,y,z)$ の値は正値で $\Delta=V_A-V_B$ に依存する．
5. 不変量の存在により，trace map は曲面 $I=\mathrm{const.}$ 上の実質2次元写像となる．
6. 2次元写像としての trace map は，第4項目のために普遍的な写像ではない．

可逆的自己相似格子の生成規則 σ は式 (A.14) のように，2種の生成規則 σ_U，σ_S の合成として表すことができる．そのため，対応する trace map T_σ は，対応する2種の trace map T_U，T_S の合成となる．ただし，trace map の合成は逆順となる．例えば，$T_{SU}=T_UT_S$．従って，上記の性質の1，2，3を示すためには，T_U，T_S がこれらの性質を持つことを示せばよい．簡単な計算により，

$$T_U=(y,z,2yz-x),\qquad T_S=(x,z,2xz-y) \tag{A.57}$$

を示すことができる．これらが，上記の性質の1，2，3を持つことを示すことは容易である[*21]．

*21 生成規則の可逆性により，式 (A.41) は $(\mathcal{T}_A^{(n)}$，$\mathcal{T}_B^{(n)})$ について「解く」ことができる．性質1はこのことからも示すことができる．

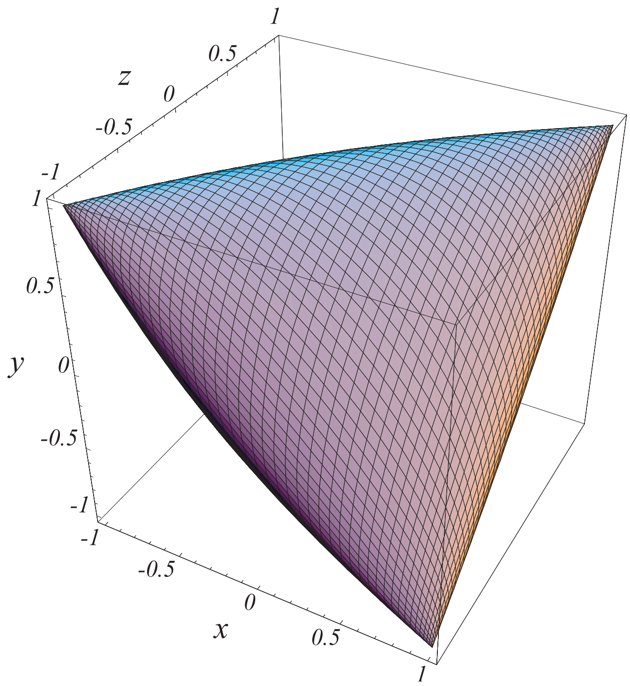

図 A.3　不変量 I がゼロの場合の trace map の不変曲面．この曲面は，５個のパーツのうち中心を占めるものであり，４個の点 $(1,1,1)$，$(1,-1,-1)$，$(-1,1,-1)$，$(-1,-1,1)$ を頂点とするカスプを持つ．

可逆的自己相似格子の場合の trace map の不変量 (A.50) は，３次の項 $-2xyz$ を除いて球対称である．そのため，trace map の不変曲面 $I(x,y,z) = \mathrm{const.}$ は正４面体的対称性を持つ．また，方程式 $xyz = 0$ から決まる３枚の平面は３次曲面 $I = \mathrm{const.}$ の漸近面となる．定数（const.）が負の場合，この３次曲面は５個の部分に分かれる．そのうちの１個は正４面体的に歪んだ球となり，その中心は原点にある．残りの４個は開いた曲面で，４個の点 $(1,1,1)$，$(1,-1,-1)$，$(-1,1,-1)$，$(-1,-1,1)$ を含む４個の象限の各々に含まれている*22．対称性により，これら４個の曲面は合同で向きだけが異なっている．定数（const.）を負の値からゼロに近づけると，５個の曲面はこれら４個の点方向に伸びてゆき，ゼロとなった時点でこれらの４個の点で接触する（図 A.3)．この時点では，互いに接触する２個の曲面はその接触点でカスプとなっている．これに対して，定数（const.）が正値の場合，５個の曲面が合体して，１枚の開いた曲面となる．定数（const.）が小さい場合には，上記の４個の点付近で漏斗状となっている．可逆的自己相似格子の trace map の軌道 $\{\mathbf{r}_n\} = \{\mathbf{r}_n(E)\}$ は Δ の値で決まる開いた曲面の上に乗っている．エネルギースペクトルはこの軌道が無限遠に発散しないようなエネルギーから構成される．

写像力学では写像が保存系であるか否かによって，写像の性質が大きく異なることが知られ

図 A.3: fig/fig-I.eps

*22 ３次元空間は直交座標系により，８個の象限に分割される．

ている．第３章第１節において生成規則を可逆的と非可逆的に分類したわけであるが，この分類こそが trace map の保存系，非保存系（散逸系）の分類に対応している．すなわち，生成規則が可逆的であれば trace map は保存系となり，非可逆的であれば非保存系になる．

σ_1 を可逆的生成規則（または置換規則）とし，σ_2 が非可逆的生成規則（または置換規則）とした場合，２つの非可逆的生成規則，$\sigma = \sigma_1\sigma_2$，$\sigma' = \sigma_2\sigma_1$ は互いに強い意味で MLD 関係にある．また，対応する２つの trace map は，$T_\sigma = T_{\sigma_2}T_{\sigma_1}$ および $T_{\sigma'} = T_{\sigma_1}T_{\sigma_2}$ と表される．仮定により，T_{σ_1} は１対１の写像であるから，２つの trace map T_σ，$T_{\sigma'}$ が定義する２種の非線形力学系は同値になる*23．以上の議論は，σ_1 と σ_2 が共に可逆的生成規則（または置換規則）の場合も基本的には成り立つ．この場合，σ と σ' は共に可逆的生成規則となる．ところが，可逆的生成規則の trace map は不変量を持ち，しかもその値は trace map の初期値に依存する．そのため，生成規則 σ，σ' により生成される２つの自己相似格子の間の MLD 関係がその電子状態に及ぼす効果は限られたものとなる．

trace map のより詳しい性質については，次節以下で議論する．

A.6.4　trace map **の軌道**

関係式

$$[\mathcal{T}_A^{(n+1)}, \mathcal{T}_B^{(n+1)}] = P(x_n, y_n, z_n)[\mathcal{T}_A^{(n)}, \mathcal{T}_B^{(n)}] \qquad \text{または} \tag{A.58}$$

$$[\mathcal{T}_A^{(n+1)}, \mathcal{T}_B^{(n+1)}] = P(x_n, y_n, z_n)[\mathcal{T}_A^{(n)}, \mathcal{T}_B^{(n)}]\mathcal{T}_R^{(n)} \tag{A.59}$$

を満たす整数係数多項式 $P(x, y, z)$ が存在することを証明することができる．ただし，前者は明示的に対称な場合で，後者は暗示的に対称な場合である．また，R は A または B を意味する．さらに，この多項式は，可逆的な場合には 1 または -1 となり，非可逆的な場合にはその次数が１以上になる．これらの結果は，対称な自己相似格子に特有な性質であり，非対称な場合には成り立たない．上の等式と公式 (A.51) を用いると，恒等式

$$I(T(x, y, z)) \equiv [P(x, y, z)]^2 I(x, y, z) \tag{A.60}$$

を導くことができる．可逆的自己相似格子の場合に $I(x, y, z)$ が trace map の不変量となることは，この式からも証明できる．非可逆的自己相似格子の場合でも，$I(x_n, y_n, z_n)$ の符号は n によらないので，$I(x, y, z)$ は半不変量と呼ばれる [71] *24．半不変量の初期値 $I(x_0, y_0, z_0)$ は，式 (A.52) により，正値なので，半不変量は負値をとらない．たとえば，非可逆的自己相似格子である PD 格子の場合，$P(x, y, z) = 2y$ となる．半不変量の場合，$I(x, y, z)$ の値は保存されないが，１度 $I = 0$ となった場合，以後常に $I = 0$ にとどまる．従って，非可逆的自己

*23 T_{σ_1} は１対１の可微分写像（＝滑らかな写像）であり，$T_\sigma = T_{\sigma_1}^{-1}T_{\sigma'}T_{\sigma_1}$ および $T_{\sigma'} = T_{\sigma_1}T_\sigma T_{\sigma_1}^{-1}$ が成り立つ．

*24 非対称な自己相似格子の場合でも，恒等式 $I(T(x, y, z)) \equiv R(x, y, z)I(x, y, z)$ を満たす整数係数多項式 $R(x, y, z)$ が存在する [71], [80]．しかしながら，$R(x, y, z) = [P(x, y, z)]^2$ とは表せないので，$I(x, y, z)$ は半不変量とはならない．

相似格子の場合，図 A.3 に示された曲面は trace map の不変曲面となる [81], [64]．特に，周期系の場合，$\Delta = 0$ が成り立つから，式 (A.52) により，$I(x, y, z) \equiv 0$ となる．このことは，周期系の場合，初期状態 (A.56) が次の関係式を満たすことからも言える：

$$x_0 = y_0, \quad z_0 = 2x_0^2 - 1. \tag{A.61}$$

このような状態を初期状態とする trace map の軌道は不変曲面上に制限される．この軌道については，後で詳しく解析する．

A と B の並びがランダムな場合にアンダーソン局在が起こる原因は，transfer matrix $\mathcal{T}_A$，$\mathcal{T}_B$ の間の非可換性に求められる [82]．逆に，エネルギー E を適当に選んだときに両者が交換可能であれば，そのエネルギーに限り周期系と似た状況になる [83]．すなわち，E がエネルギースペクトルに属するならば，対応する波動関数は拡がった状態となる．強結合近似の transfer matrix の場合にはそのようなエネルギーは存在しないが，条件 $P(x_n, y_n, z_n) = 0$ を満たすエネルギー E が存在すれば，第 $n+1$ 世代の transfer matrix $\mathcal{T}_A^{(n+1)}$，$\mathcal{T}_B^{(n+1)}$ は交換可能となる．従って，E がエネルギースペクトルに属するならば，対応する波動関数は拡がった状態となる．n を変えれば，異なった拡がった状態が得られる場合がある．多くの非可逆的自己相似格子が無限個の拡がった状態を持つのは，P の次数が 1 以上になるからである [84], [85]．なお，$P(x_n, y_n, z_n) = 0$ を満たすエネルギー E では，n を超えるすべての番号 m に対して $I(x_m, y_m, z_m) = 0$ となる．

特に，周期系（$V_A = V_B = 0$）の場合，$E = -2\cos Q$ とすれば，$\mathrm{Tr}\,\mathcal{T}_0 = 2\cos Q$ となるから（A.6.1 節の最後の議論参照)，サイズを L の並び X に対して $\mathrm{Tr}\,\mathcal{T}_X = \mathrm{Tr}\,\mathcal{T}_0^L = 2\cos QL$ が成り立つ[*25]．従って，$\mathbf{r}_n = (x_n, y_n, z_n)$ の 3 成分は次のようになる：

$$x_n = \cos[2\pi\kappa L_n^{(A)}], \qquad y_n = \cos[2\pi\kappa L_n^{(B)}], \qquad z_n = \cos[2\pi\kappa L_n^{(C)}]. \tag{A.62}$$

ただし，$Q = 2\pi\kappa$ とした．これが，周期系の trace map の軌道となることは容易に確かめることができる．この式において特に，$\kappa = 0$ とすることにより，点 $(1, 1, 1)$ が trace map (A.54) の固定点であることが分かる．式 (A.32) の導出の際に述べた事情により，trace map の軌道 (A.62) が固定点 $(1, 1, 1)$ に収束するための必要十分条件が κ が逆格子ベクトルであることであることが言える．

A.6.5 自己相似格子の電子状態

自己相似格子の電子状態の一般的性質については，次のことが知られている [74]．

- エネルギースペクトルは**マルチフラクタル** 構造（singular continuous）である（図 A.4)．これは，式 (A.37) で定義される積分状態密度 $H(E)$ が「悪魔の階段」的になっていることと同値である（図 A.7)．

[*25] $\mathcal{T}_0$ を対角化する表示を用いると，容易に証明することができる．

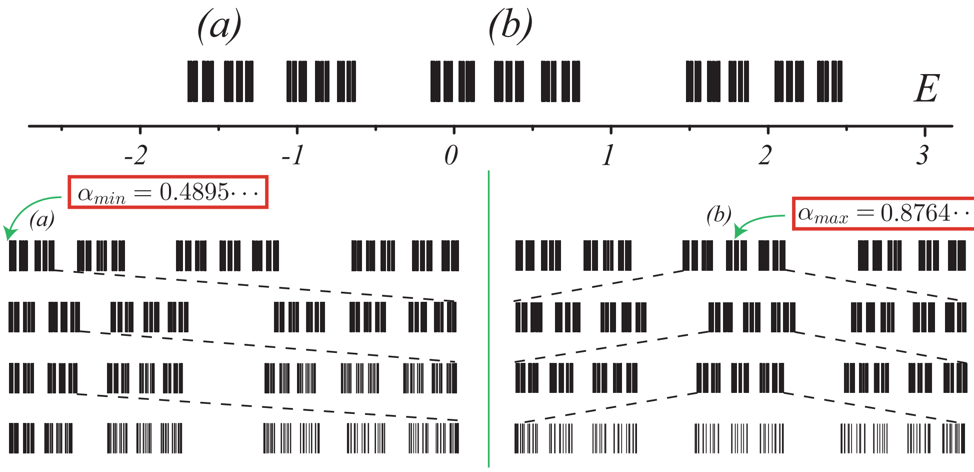

図 A.4　エネルギースペクトルの マルチフラクタル構造．上段は Fibonacci 格子のエネルギースペクトルである（$V_A = 1$，$V_B = 0$）．第 18 世代（B_{18}，$L_n = 2584$）の Fibonacci 格子を周期的境界条件を課して計算を行った結果である．下段は基底状態とバンド中心付近のエネルギースペクトルを拡大した図である．拡大を繰り返すとギャップが見えてくる．また拡大するごとに一定のパターンに収束していく．局所的自己相似性中心の代表は，$H(E) = 0$ および $H(E) = 1/2$ を満たす 2 つのエネルギーである．前者は全体のバンドの左端で，後者は「バンド中心」である．α の値は解析的に求めた値であり，それぞれ α の最大値と最小値に対応する．

- ほとんど全ての固有状態は**臨界状態**である（図 A.5，A.6）．

以上の 2 つの性質について以下でより詳しく説明する．

A.6.6　マルチフラクタル構造

フラクタル構造の場合，至る所に自己相似性が見られるが，マルチフラクタル とは，局所的自己相似性の相似比が場所により異なるような集合をいう．マルチフラクタル構造については付録**マルチフラクタル構造**で紹介するが，マルチフラクタル構造とは局所次元を表す α が単一の値ではなく図 C.1（付録を参照）のように分布している構造と言える．

自己相似格子のエネルギースペクトルは図 A.4 のような マルチフラクタル構造である．至る所にギャップが入り込んでいる．各ギャップの両端は周期系のエネルギースペクトルのバンド端に対応するので，以下ではバンド端と呼ぶことにする．エネルギースペクトルの全体の集合の下端と上端も当然バンド端である．

エネルギースペクトルを σ とする．σ は マルチフラクタル なので，その局所次元 α の値は σ の各点ごとに異なる．$E \in \sigma$ を固定して，積分状態密度 $H(E)$ を用いて

$$g(\varepsilon) \equiv H(E + \varepsilon) - H(E) \tag{A.63}$$

図 A.4: fig/fig2-1.eps

とした場合，局所次元 $\alpha = \alpha(E)$ は，漸近的関係式

$$|g(\varepsilon)| \approx c|\varepsilon|^{\alpha(E)} \quad (\varepsilon \to 0) \tag{A.64}$$

により定義される．もしも 2 つのパラメタ $\lambda = \lambda(E)$，$\mu = \mu(E)$ を含む関係式

$$g(\varepsilon) \approx \mu g(\varepsilon/\lambda) \quad (\varepsilon \to 0) \tag{A.65}$$

が成り立つならば，E は σ の局所的自己相似性の中心と呼ばれる（図 A.4 参照）．局所的自己相似性中心における α の値は，関連する scaling parameters λ，μ を用いると次式で表される [66]：

$$\alpha = \frac{\ln \mu}{\ln \lambda}. \tag{A.66}$$

σ の局所的自己相似性中心全体の集合 σ_{ls} と σ のバンド端全体の集合 σ_{G} は，σ を特徴付ける重要な対象となる．しかしながら，σ_{ls} あるいは σ_G 自体を調べるよりも，それれらに属するエネルギーにおける積分状態密度 $H(E)$ の値の分布のほうが扱い易いことが知られている．具体的には，$\underline{S \equiv \{H(E) \,|\, E \in \sigma_{\mathrm{ls}}\}}$，$\underline{G_\sigma \equiv \{H(E) \,|\, E \in \sigma_{\mathrm{G}}\}}$ により定義される 2 つの集合の性質が問題となる．積分状態密度の最小値はゼロで最大値は 1 だから，S と G_σ は区間 $[0, 1]$ に含まれる．

$E \in \sigma_{\mathrm{ls}}$ となるための必要十分条件は，E が trace map の cycle となることである．すなわち，trace map の cycle 全体の集合は σ_{ls} と一致する [45], [86], [87]．このとき，対応する T^p の固定点における T^p のヤコビ行列*26の固有値のうち絶対値が最大のものを $\lambda_{\max}$ とすれば，局所次元 $\alpha = \alpha(E)$ は式 (A.66）において，$\lambda = |\lambda_{\max}|$，$\mu = \tau^p$ とおくことにより求められる [66]．このようにして，すべての局所的自己相似性の中心のエネルギーで局所次元を求めることができる．

エネルギースペクトル σ における α の分布は，$f(\alpha)$–spectrum によって特徴づけることができる．$f(\alpha)$ の台（support）は，閉区間 $[\alpha_{\min}, \alpha_{\max}]$ となるが，それは単位区間 $I \equiv [0, 1]$ に含まれる

A.6.7 gap labeling theorem

自己相似格子のエネルギースペクトルが一般に**マルチフラクタル** 構造となる原因について考察する．自己相似格子の構造因子が Bragg peak だけから成ることは，電子に対するポテンシャル V_j が次のようなフーリエ展開を持つことを意味している：

$$V_j = \sum_{\kappa \in \mathcal{M}} A_\kappa \exp(2i\pi\kappa j). \tag{A.67}$$

従って，自由電子モデル（周期系）から出発し，上記ポテンシャルを摂動論的に扱えば，電子の有理化波数 k が $\kappa/2$ $(\kappa \in \mathcal{M})$ と一致するような電子のエネルギーのところにバンドギャップ

*26 ヤコビ行列とは T^p をその固定点付近での線形近似したときの変換行列である．

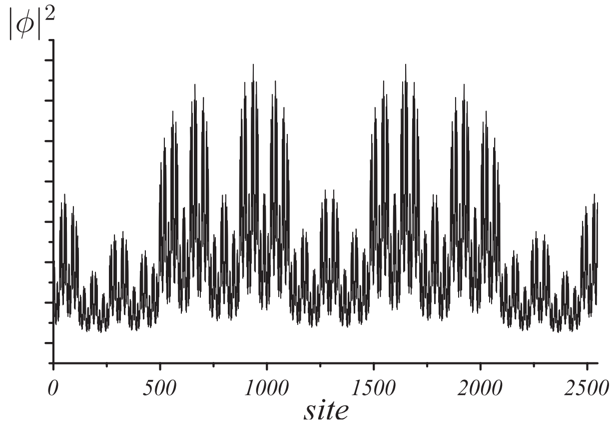

図 A.5　図 A.4 の $H(E) = 0$ の状態に対応する波動関数

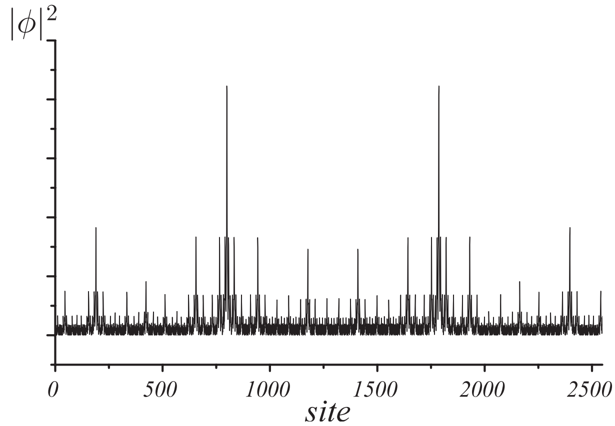

図 A.6　図 A.4 の $H(E) = 1/2$ の状態に対応する波動関数．きれいな自己相似構造であることがわかる．

が開くことになる．波数 k はブリルアンゾーン $[-1/2, 1/2]$ に含まれる．ところが，Fourier module $\mathcal{M}$ はこのブリルアンゾーンの中で密な集合であるから，至る所にバンドギャップが開くことになる．2 個の状態 $\pm k$ はエネルギー的に縮退しているから，バンドギャップが開くエネルギーにおける周期系の積分状態密度 $H(E)$ の値は $2k = \kappa$ となる．従って，次の定理が摂動論的に「証明」された：

gap labeling theorem [65]：
G_σ は区間 $[0, 1]$ に含まれる逆格子ベクトルとなる．つまり，$G_\sigma = \mathcal{M}_{[0,1]}$.

A.6.8　臨界状態

臨界状態（critical state）というのは，拡がった状態と指数関数的に減衰する局在状態の中間的状態で，べき的に減衰する状態である．後の議論のために，波動関数の局在性を次のように定義する[*27]．

$$X(L) \equiv \sum_{j=-L}^{L} |\phi_j|^2 \sim L^\gamma \qquad (L \to \infty) \tag{A.68}$$

$$\begin{cases} \gamma = 0 & \cdots \text{局在状態} \\ 0 < \gamma < 1 & \cdots \text{臨界状態} \\ \gamma = 1 & \cdots \text{拡がった状態} \end{cases}$$

エネルギースペクトルの局所的自己相似性中心となるエネルギーにおける波動関数は自己相似性をもつ（図 A.5，A.6 参照）．

[*27] 後に，$\gamma = 0$ となる臨界状態（marginal critical state）が存在することを示す．
図 A.5: fig/fig2-3.eps
図 A.6: fig/fig2-4.eps

A.7　可逆的自己相似格子の代表：Fibonacci 格子

可逆的自己相似格子の電子状態については，Kohmoto らの先駆的研究に引き続く研究によって詳しく調べられている [67]．ここでは，その代表である Fibonacci 格子の場合について紹介する．Fibonacci 格子の trace map は式 (A.57) として与えられているから，

$$\begin{cases} x_{n+1} = y_n \\ y_{n+1} = z_n \\ z_{n+1} = 2y_n z_n - x_n \end{cases} \tag{A.69}$$

となる．Fibonacci 格子の場合，エネルギースペクトル，波動関数および trace map は次のような性質を持つ．

1. trace map の cycle 全体の集合は σ_{ls} と一致する．
2. σ_{ls} は σ 上で密に分布する．また，σ_{G} は σ_{ls} に含まれる．
3. $\mathbf{Q}[\omega] \equiv \{x + y\omega | x, y \in \mathbf{Q}\}$ とすれば，$S = \mathbf{Q}_{[0,1]}[\omega]$ となる[*28]．
4. $f(\alpha)$–spectrum，従って，$\alpha_{\min}$，$\alpha_{\max}$ は Δ に依存する．また，不等式 $0 < \alpha_{\min} < \alpha_{\max} < 1$ を満たす．
5. 前項により，すべての波動関数はべき的減衰を示す．
6. σ_{ls} に属する波動関数は漸近的自己相似性を持つのに対して，それ以外の波動関数はカオス的である．
7. p–cycle の固定点における線形解析の際に登場する固有値 $\lambda_{\max}$ の値が不変量の値，従って，Δ に依存する．
8. 同じ線形解析の際に登場する第２固有値 $\lambda_{\min}$ は関係式 $|\lambda_{\max}\lambda_{\min}| = 1$ を満たすので，その絶対値は１より小さい．そのため，trace map の安定多様体に沿った流れが指数関数的に固定点に収束する．

上記の性質３が成り立つことは P.A.Kalugin らが証明した [87]．$\mathbf{Q}_{[0,1]}[\tau_G]$ に属する数 x は，τ_G–進展開（付録**２次体の数論**を参照）を行ったときに，始めの有限ステップを除いて循環する．図 A.4 で (b) の部分は $H(E) = \frac{1}{2} = 0.\overline{100}|_{\tau_G}$ となるエネルギー準位であり，局所的自己相似性の中心となっている．また σ_{g} は σ_{ls} に含まれているので，図 A.4 の (a) の部分である $H(E) = 0$ も局所的自己相似性の中心である．

上記の性質４は，trace map の軌道が乗る曲面が Δ に依るためである．また，上記の性質６に関しては図 A.5，A.6 参照.

以上の性質は，Fibonacci 格子に限らず可逆的自己相似格子の一般的性質であることが知られている．これらの性質および前節で議論したことについて，以下ではさらに詳しく調べてみる．

---

*28 一般的に書き表したが，Fibonacci 格子の場合 $\omega = \tau_G$ となる．

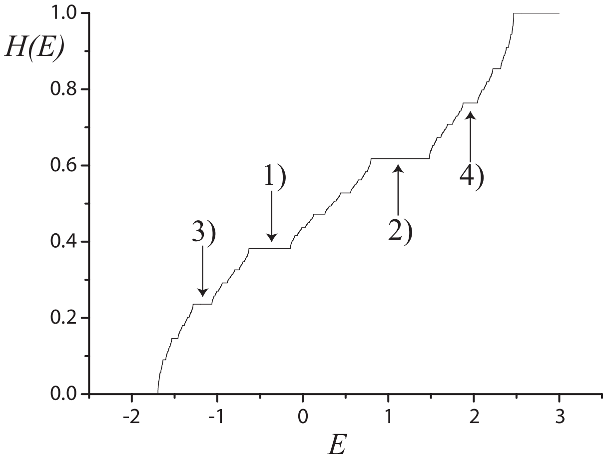

図 A.7　Fibonacci 格子の積分状態密度 $H(E)$．各バンドギャップ内では $H(E)=$ const. となる．

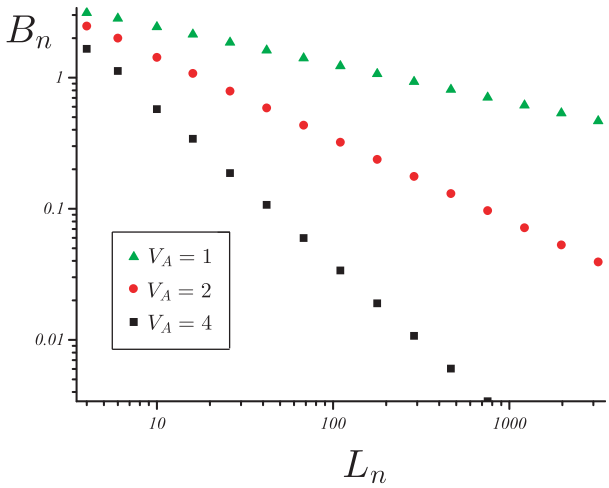

図 A.8　バンド幅 B とサイズ L_n の関係

A.7.1　gap labeling theorem について

gap labeling theorem がどのように成り立っているかを，Fibonacci 格子の積分状態密度 $H(E)$ について見てみる．

図 A.7 で水平部分がバンドギャップを表している．1) ∼ 4) で指し示しているステップの高さが集合 $\mathcal{M}_{[0,1]}$ に属することを具体的に確かめてみる．Fibonacci 格子の場合，随伴行列の固有値 τ は黄金比 $\tau_G \equiv (1+\sqrt{5})/2$ となる．この場合 $\omega = \tau_G$ となり，τ_G は unit でもある．また，$1+\omega = 1+\tau_G = \tau_G^2$ も unit になるので，$\mathcal{M} = \mathbf{Z}[\tau_G]$ が成り立つ．従って，$G_\sigma = \mathbf{Q}_{[0,1]}[\tau_G] = \{m + n\tau_G \,|\, m, n \in \mathbf{Z}, 0 \leq n + m\tau_G \leq 1\}$ となる．図 A.7 で番号 1) ∼ 4) によって指し示しているステップの高さは次のように与えられる：

$$\begin{cases} 1) \cdots (n,m) = (2,-1) \to H(E) = (3-\sqrt{5})/2 & = 0.381966\cdots \\ 2) \cdots (n,m) = (-1,1) \to H(E) = (\sqrt{5}-1)/2 & = 0.618033\cdots \\ 3) \cdots (n,m) = (-3,2) \to H(E) = \sqrt{5}-2 & = 0.236067\cdots \\ 4) \cdots (n,m) = (4,-2) \to H(E) = 3-\sqrt{5} & = 0.763932\cdots \end{cases} . \tag{A.70}$$

A.7.2　エネルギースペクトルの fractal 性について

図 A.8 は，第 n 世代の近似格子の L_n 個のエネルギーバンドのバンド幅 $B_n^{(i)}$，$i = 1, 2, \cdots, L_n$ をたし合わせた合計

$$B_n \equiv \sum_{i=1}^{L_n} B_n^{(i)} \tag{A.71}$$

図 A.7: fig/fig2-2.eps
図 A.8: fig/fig2-6.eps

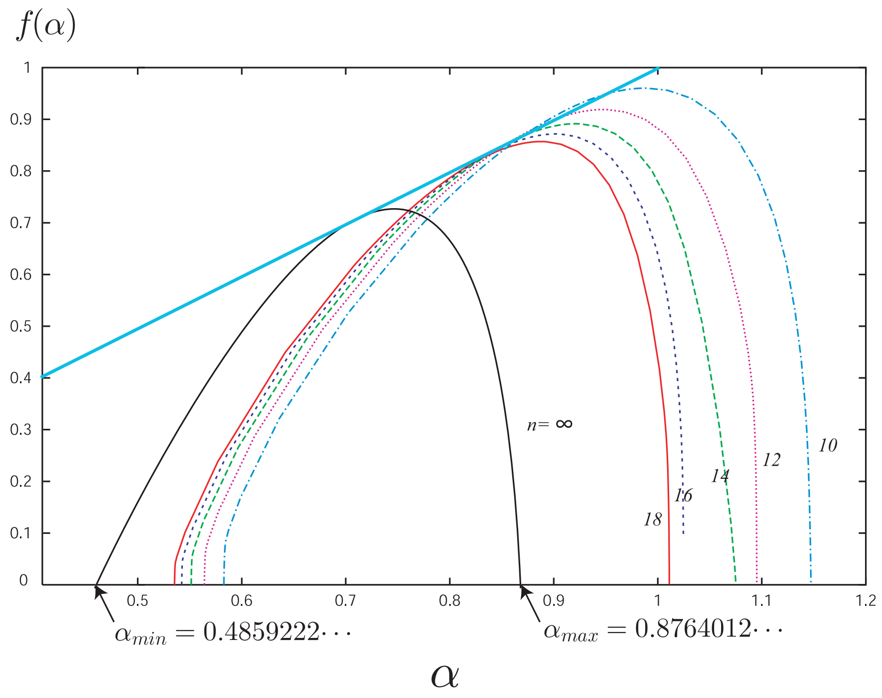

図 A.9　Fibonacci 格子の $f(\alpha)$–spectrum

と L_n の間の関係をプロットしたものである．エネルギースペクトルが fractal であるために，ベキ乗関係 $B_n \sim (L_n)^{-\beta}$（$\beta > 0$）が成り立つ．

A.7.3　局所次元 α について

trace map (A.69) の場合について，T^p ($p \in \mathbf{N}$) の固定点がいくつか求められている [66], [45]．$p = 1$ のときは，$\Delta = 0$（周期系）の場合の固定点になっているので考えない．$p = 2$ の場合の $\mathbf{r}_n$ を求めると：

$$\mathbf{r}_1 = (a, b, a) \quad \Longleftrightarrow \quad \mathbf{r}_2 = (b, a, b), \tag{A.72}$$
$$a = I' + \sqrt{I'^2 - I'}, \quad b = I' - \sqrt{I'^2 - I'}.$$

ただし，$I' = (3 + \sqrt{25 + 16I})/8$ とした．固定点におけるヤコビ行列の 2 つの固有値*29は，

$$\lambda_{\max} = \frac{1}{2}\left[8I' - 1 + \sqrt{(8I'-1)^2 - 4}\right], \tag{A.73}$$
$$\lambda_{\min} = \frac{1}{\lambda_{\max}} \tag{A.74}$$

図 A.9: fig/fig2-5.eps

*29 実際には 3 次元写像であるので，固有値は 3 個ある．しかし，実質的には曲面上のみ動くために，第 3 の固有値は必ず $\lambda = 1$ となる．

となる．$\lambda = |\lambda_{\max}|$ と $\mu = \tau_G^2$ を式 (A.66) に代入すると，局所次元 α は,

$$\alpha = \frac{\ln \tau_G^2}{\ln |\lambda_{\max}|} \tag{A.75}$$

と決まる．バンド端全体の集合 σ_{G} に属するエネルギー E を初期値とする trace map は，すべてこの 2 周期固定点に落ちる．さらにこの 2 周期に対応する局所次元は，局所次元のうちの最小値 $\alpha_{\min}$ を与えることが知られている．式 (A.75) は Δ に依存するから，$\alpha_{\min}$ も Δ に依存する．特に $\Delta = 1$ とすると $I = 1/4$ となり，従って $\alpha = 0.485922 \cdots$ となる．

次に示すのは trace map の 6 周期である：

$$\begin{aligned}
&\mathbf{r}_1 = (0, 0, c) \;\;\Rightarrow\;\; \mathbf{r}_2 = (0, c, 0) \;\;\Rightarrow\;\; \mathbf{r}_3 = (c, 0, 0) \;\;\Rightarrow \\
&\mathbf{r}_4 = (0, 0, -c) \;\;\Rightarrow\;\; \mathbf{r}_5 = (0, -c, 0) \;\;\Rightarrow\;\; \mathbf{r}_6 = (-c, 0, 0) \;\;\Rightarrow .
\end{aligned}$$

ただし，$c = \sqrt{1+I}$ とした．6 周期に対応するヤコビ行列の 2 つの固有値は次のように求まる：

$$\lambda_{\max} = \left[\sqrt{1 + 4(1+I)^2} + 2(1+I)\right]^2, \tag{A.76}$$

$$\lambda_{\min} = \frac{1}{\lambda_{\max}}. \tag{A.77}$$

局所次元 α は,

$$\alpha = \frac{\ln \tau_G^6}{\ln |\lambda_{\max}|} \tag{A.78}$$

と求められる．この α は $\alpha_{\max}$ を与える．$\alpha_{\max}$ も Δ に依存する．特に $\Delta = 1$ の場合には, $\alpha = 0.876401 \cdots$ となる．

Fibonacci 格子の場合の $f(\alpha)$–spectrum は図 A.9 のようになる．$\alpha_{\min}$ や $\alpha_{\max}$ がポテンシャルの強さ Δ に依存するから，$f(\alpha)$–spectrum も Δ に依存する．Fibonacci 格子の trace map が不変量 $I(x, y, z)$ を持ち，しかもこの不変量の値が Δ に依存するからである．このように，Fibonacci 格子のエネルギースペクトルの マルチフラクタル性を特徴付ける $f(\alpha)$–spectrum は普遍性を示さない [45].

A.8　非可逆的自己相似格子の代表：PD 格子

A.8.1　PD 格子の trace map

PD 格子の生成規則は $A \to BB$, $B \to AB$ である．この生成規則はカオス理論に由来する [88]．PD 格子の transfer matrix に対する漸化式は次のようになる：

$$\begin{cases}
\mathcal{T}_A^{(n+1)} = \mathcal{T}_B^{(n)} \mathcal{T}_B^{(n)} \\
\mathcal{T}_B^{(n+1)} = \mathcal{T}_A^{(n)} \mathcal{T}_B^{(n)}
\end{cases} \qquad (\mathcal{T}_A^{(0)} = \mathcal{T}_A, \qquad \mathcal{T}_B^{(0)} = \mathcal{T}_B). \tag{A.79}$$

従って，その trace map は次のようになる [71]：

$$\begin{cases} x_{n+1} = 2y_n^2 - 1 \\ y_{n+1} = z_n \\ z_{n+1} = 2y_n\,(2z_n y_n - x_n) - z_n \end{cases} .$$

この写像が非保存的であることは，そのヤコビアンの絶対値が 1 とならないことでわかる．PD 格子は非可逆的自己相似格子であるから，式 (A.50) は不変量とはならない．非可逆的自己相似格子の場合，一般には不変量を持たないが，PD 格子を含むある特殊な系列の場合に限り，式 (A.50) とは異なった不変量を持つ [89], [81], [64]．PD 格子の不変量は式 (A.48) で与えられる．なぜなら，この格子に対して関係式 $\mathrm{Tr}[\mathcal{T}_B^{(n+1)}(\mathcal{T}_A^{(n+1)})^{-1}] = \mathrm{Tr}[\mathcal{T}_A^{(n)}(\mathcal{T}_B^{(n)})^{-1}]$ が成り立つからである．この不変量の値を求めるには $n = 0$ の場合について計算すればよい．驚くべきことに，その値は 1 となり，$\underline{E, V_A, V_B\ \text{には一切依らない}}$．この点は，可逆的自己相似格子のときの不変量 (A.50) の場合と対照的である．この違いが，電子状態に決定的な違いをもたらすことが後の議論で明らかになる．なお，PD 格子と MLD の関係にある Copper-Mean 格子も PD 格子と類似の不変量を持つが，この不変量の値は E, V_A, V_B 依存することが知れらている [90].

不変量の存在により，PD 格子の trace map は曲面 $J(x, y, z) \equiv 2xy - z = 1$ 上に制限された 2 次元写像となる．この曲面は方程式 $z = 2xy - 1$ として表せるので，この 2 次元写像は xy–平面上の写像となる．具体的には次式で与えられる [89]：

$$\begin{cases} x_{n+1} = 2y_n^2 - 1 \\ y_{n+1} = 2x_n y_n - 1 \end{cases} . \tag{A.80}$$

この 2 次元写像が非保存的であることは，そのヤコビアンを計算することにより容易にわかる．この写像は 2 : 1 の写像であり，その逆写像は 2 価となる．

A.8.2 2 進展開

PD 格子の随伴行列の固有値は $\tau, \tau' = 2, -1$（整数）となる．すなわち，自己相似格子の構造因子 $S(Q)$ が Bragg peak だけからなる **limit periodic system** に分類される．PD 格子のエネルギースペクトルのギャップの集合は gap labelling theorem により，$G_\sigma = \mathcal{M}_{[0,1]} = \mathbf{Z}_{[0,1]}\{2\}$ となる（式 (A.34)）．すなわち，積分状態密度のステップの高さは分母が 2 のベキとなるような有理数によって指定される．図 A.10 で 1) ~ 4) で指し示してい

図 A.10: fig/fig2-7.eps
図 A.11: fig/fig2-8.eps

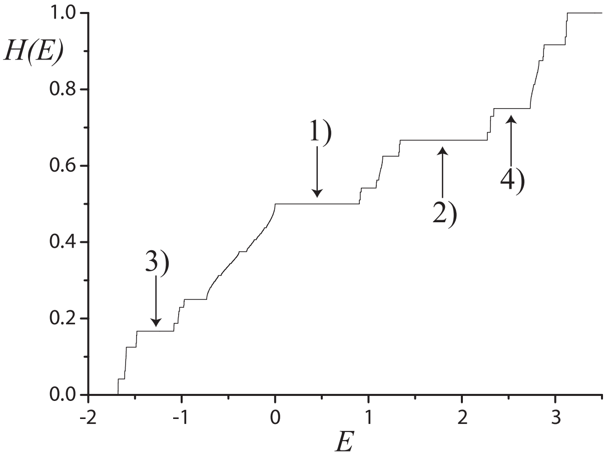

図 A.10　PD 格子の $H(E)=0$ の状態

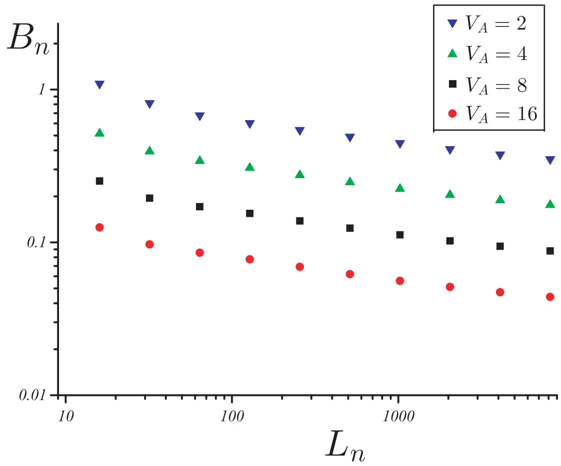

図 A.11　PD 格子の $H(E)=\frac{1}{2}$ の状態

るステップの高さの場合に具体的に示すと次のようになる：

$$H(E)=\begin{cases}1)\cdots & \frac{1}{2}\\ 2)\cdots & \frac{5}{8}\\ 3)\cdots & \frac{1}{4}\\ 4)\cdots & \frac{3}{4}\end{cases}.$$

図 A.11 は図 A.8 と同様にバンド幅の合計 B_n をサイズ L_n $(=2^n)$ に対してプロットしたものであるが，サイズ L_n に関してベキ的に減少する Fibonacci 格子のとは違い，減少幅がサイズ増加に伴って小さくなっている．また，Fibonacci 格子のとは違い，ポテンシャルを変えても，B_n と L_n との関係（両対数プロット）が単に平行移動するだけに見える．これら 2 つの原因は後の議論で明らかにする．

A.8.3　trace map の軌道の振る舞い

trace map (A.80) を T としたときに，T の性質は T^p（$p=1,2,3,\cdots$）の固定点の振る舞いにより支配される．T はパラメタ V_A，V_B，E のどれも含まないので，これらの固定点は**周期系**（$V_A=V_B=0$）の場合の固定点でもある．

周期系（$V_A=V_B=0$）の軌道

波数 κ で指定される周期系のエネルギー $E=-2\cos 2\pi\kappa$ の場合の trace map の軌道 $\{(x_n(E),y_n(E))\}$ は次のようになる（式 (A.62) 参照）：

$$x_n=y_n=\cos(2\pi\kappa L_n),\qquad L_n=2^n. \tag{A.81}$$

正弦（cos）は偶関数であるから，$0\le\kappa\le 1/2$ と仮定することができる．κ は実数値平面波（正弦波）の節の数を 1 サイト当たりに規格化したものである．周期系の積分状態密度 $H(E)$ が有理化波数 $\kappa=\kappa(E)$ と関係式 $\underline{H(E)=2\kappa(E)}$ により結ばれることは gap labelling theorem のところで注意したが，このことは次のような直接計算によっても示すことができる．周期系のエネルギー $E = -2\cos 2\pi\kappa$ の場合，状態密度と積分状態密度が

$$D(E) = \frac{1}{\pi\sqrt{4-E^2}} \qquad (|E| \le 2), \tag{A.82}$$

$$H(E) = \int_{-\infty}^{E} D(E')\, dE' = \frac{1}{\pi}\cos^{-1}(-\frac{E}{2}) \tag{A.83}$$

となるからである．従って，軌道 $\{(x_n(E), y_n(E))\}$ の漸近的振る舞いは積分状態密度 $H(E)$ により決定されることになる．この場合，$x_n = y_n = \cos 2\pi\theta_n, \theta_n = 2^n\kappa$ となるから，軌道 $\{(x_n, y_n)\}$ の振る舞いは数列 $\{\theta_n \bmod 1\}$ の振る舞いにより決定される：

- $H(E) \in \mathbf{Z}_{[0,1]}\{2\}$ （２進展開が有限桁で終わるとき） $\longrightarrow$ 軌道 $\{(x_n, y_n)\}$ は有限ステップの後に固定点 $(1,1)$ に落ちる．
- $H(E) \in \mathbf{Q}'_{[0,1]}[2]$ （２進展開が途中から循環する） $\longrightarrow$ $\{(x_n, y_n)\}$ は有限ステップの後にサイクルに落ちる*30．
- 一般の κ $\longrightarrow$ 軌道 $\{(x_n, y_n)\}$ は カオス的となる．

$\kappa \in \mathbf{Q}'[2]$ の場合，それは適当な奇数 d を用いて，$\kappa = a/d$, $a \in \mathbf{Z}\{2\}$ と表すことができる．このとき，軌道 $\{(x_n, y_n)\}$ のサイクルの周期 p は $\underline{\kappa(2^p \mp 1) \equiv 0 \pmod 1}$ を満たす最小の自然数として決定される*31．このことは，p が $2^p \mp 1$ が d で割り切れる最小の自然数と言うことと同じである．従って，1–cycle は $d = 3$ のときのみ，すなわち，$\underline{\kappa = 1/3}$ である場合である．2–cycle は $d = 5$ のときのみで，3–cycle は $d = 7$ と $d = 9$ の２つのケースがある．例えば，$d = 9$ の 3–cycle は θ の値の３つ組 (1/9, 2/9, 4/9) で特徴づけられる．

ここで注意しなければならないのは，前段で議論したグループ以外にもうひとつ 1–cycle に落ちるグループがあるということである．このグループは κ が $\mathbf{Z}\{2\}$ に属する場合で，その固定点は $(1,1)$ である．その固定点に向かう初期値を決める電子のエネルギーはバンド端となる．

以上，周期系のエネルギーを $E = -2\cos 2\pi\kappa$ とした場合の κ の値によって，軌道 $\{(x_n(E), y_n(E))\}$ の漸近的振る舞いが決まることを見てきた．

非周期系（$V_A \neq V_B$）への拡張

非周期系（$V_A \neq V_B$）の場合に上記の結果がどのように変更されるかについて調べる．周期系の場合でカオス的でない場合には，軌道 $\{(x_n, y_n)\}$ は途中で完全なサイクルに落ちる．非周期系の場合，一般にはこのようなことは期待できず，サイクルに落ちるとしても $\underline{n \to \infty \text{ の極限においてのみ}}$ となる．ここで注意すべきは，PD 格子の trace map のサイクルは上で分類したもの以外には存在しないことである．なぜなら，PD 格子の場合のサイクル

*30 非保存的な非線形力学系における極限サイクル（limit cycle）のこと．

*31 $\kappa(2^p + 1) \equiv 0 \pmod 1$ の場合，$\theta_{n+p} = -\theta_n \pmod 1$ となるが，正弦（cos）は偶関数であるから，軌道 $\{(x_n, y_n)\}$ の周期は p となる．

は必ず周期系のサイクルとなるからである．いずれにせよ，PD 格子の trace map がサイクルに落ちた場合，それは周期系と同じになる．従って，サイクルに対応するエネルギー E の局所次元 $\alpha=\alpha(E)$ は 1 となるはずである．ただし，E がバンド端の場合には，$\alpha=1/2$ となる．PD 格子のすべてのサイクルの局所次元が 1 となることについては，次節で検証する．

ここで，$\Delta \equiv V_A - V_B$ を断熱的にゼロから有限値に変化させた場合を考える．周期系の各準位は 2 重縮退している*32が，対称中心に関するパリティーで区別すれば，縮退はない．PD 格子は鏡映対称性を持つので，その対称中心に関するパリティーを考えれば，各エネルギー準位は連続的に変化する．また，κ は $\Delta \neq 0$ となっても 1 サイト当たりの節の数としての意味を保持し，従って，有効波数と呼ぶことができる．この場合，軌道 $\{(x_n(E), y_n(E))\}$ の漸近的振る舞いは，積分状態密度 $H=H(E)$ により決定されることになる．しかもその規則は，周期系について上に述べたものと同じになる．

以上のことから，PD 格子に対する gap labelling theorem は次のように表される：

- $G_\sigma \equiv \{H(E)\,|\,E \in \sigma_{\mathrm{G}}\} = \mathbf{Z}_{[0,1]}\{2\}$.

また，可逆的自己相似格子の一電子状態の一般的性質としてあげた 8 個の性質のうち，次の性質は PD 格子に対してでもそのまま成り立つ：

- $S \equiv \{H(E)\,|\,E \in \sigma_{\mathrm{ls}}\} = \mathbf{Q}'_{[0,1]}[2]$.

ここで重要なことは，$H \in G_\sigma$ の場合，対応するエネルギーがギャップを挟んで 2 個 E_+，E_-（$E_+ \neq E_-$）存在することである．PD 格子の場合には $P(x_n, y_n, z_n) = 2y_n$ となるが，この格子特有の性質から $y_n(E)=0$ を満たすエネルギーはすべて $E \in \sigma_{\mathrm{G}}$ を満たしている．そのため，PD 格子では 2 個のエネルギー E_+，E_- の一方は $\alpha(E)=1/2$ に対応する拡がった状態となる．この広がった状態は**完全周期的波動関数**（図 A.12）である [84]．驚くべきことに，もう一方は $\alpha(E)=0$ に対応する **marginal critical state** であることが判明した．
ここで，marginal critical state とは，図 A.13 に示したように，振幅が stretched exponential で減少する，極めて局在状態に近い臨界状態である [46], [91]．このことは，参考文献 [46] と同様な実空間くりこみ群の手法により解析的に証明することができる．marginal critical state のエネルギー固有値はエネルギースペクトルの局所的自己相似性の中心とはならず，特異な scaling を示す．この状態についてのこれ以上の詳しい解析は，本稿では割愛させていただく．なお，marginal critical state は 3 元保存系の場合の一電子状態の研究によって発見された [46]．

この問題を除けば，可逆的自己相似格子の一電子状態の一般的性質の第 2 項目

- σ_{ls} は σ 上で密に分布し，また，σ_{G} は σ_{ls} に含まれる．

*32 $\kappa=0$ と $\kappa=1/2$ の 2 つの場合は除く，

図 A.12: fig/fig2-9.eps

図 A.13: fig/fig2-10.eps

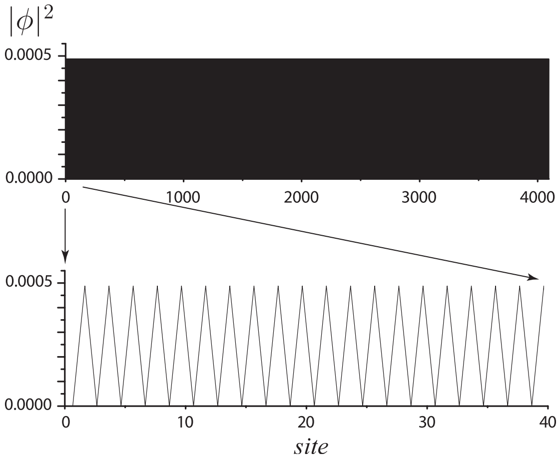

図 A.12 完全周期的波動関数

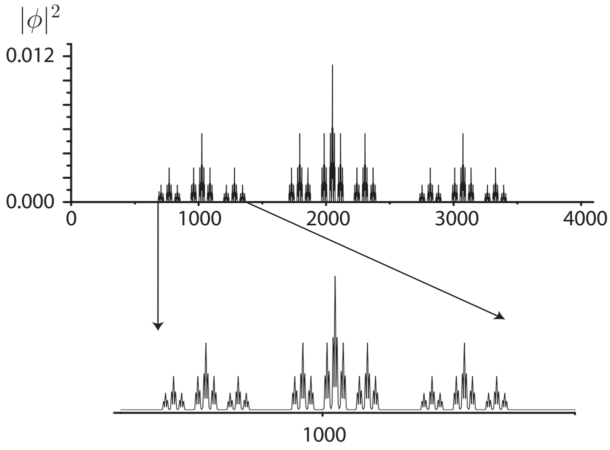

図 A.13 marginal critical state

も成り立つ．また，$\alpha_{\min}=0$，$\alpha_{\max}=1$ となるから，可逆的自己相似格子の一電子状態の一般的性質の第４項目,「すべての波動関数はべき的減衰を示す.」は成り立たない.

A.8.4 PD 格子の trace map の解析

PD 格子のすべてのサイクルに対して $\alpha=1$ となることを以下で検証する．この場合，$\tau=2$ となるので，1–cycle は有理化波数 κ が $\frac{1}{3}\mathbf{Z}_{[0,1]}[2]$ に属する場合と，$\kappa\in\mathbf{Z}_{[0,1]}\{2\}$ （2 進展開が有限桁で表されるとき）の２通り存在する．$\kappa=\frac{1}{3}$ の場合，$\cos(2\pi\kappa\times 2^n)=-\frac{1}{2}$ となるから，前者の固定点は $(x,y)=(-\frac{1}{2},-\frac{1}{2})$ となる．他方，$\kappa\in\mathbf{Z}_{[0,1]}\{2\}$ ならば，n を十分大きくとれば $\kappa\times 2^n$ は整数となるから，trace map の対応する固定点は $(1,1)$ となる．これら２つの点が実際に PD 格子の trace map (A.80) の固定点であることは容易に確かめることができる．trace map のこれら２つの固定点近傍における線形解析から対応するエネルギースペクトルの局所次元 α を求めると，それぞれ，1 および $\frac{1}{2}$ となり，一般的議論の結果と完全に一致する．

ここで，trace map の固定点 $(-\frac{1}{2},-\frac{1}{2})$ への近づき方を調べる．固定点におけるヤコビ行列の固有値は $\lambda=-2,1$ となり，$|\lambda_{\min}|<1$ の条件を満たさない．従って，可逆的自己相似格子のときのように固定点へ指数関数的には近づかない．$\lambda=1$ が marginal な固有値であるため，線形近似の範囲ではこの固定点に近づくのか否かは結論を出せない．固定点への近づきかたを調べるために，座標原点を固定点に移すような線形変換 ($x=-\frac{1}{2}\to\xi+\eta$, $y=-\frac{1}{2}\to\xi-2\eta$) を行うと次の写像が得られる：

$$
\begin{cases}
\xi_{n+1}=\xi_n+\frac{2}{3}\left(\eta_n-\xi_n\right)\xi_n \\
\eta_{n+1}=-2\eta_n+\frac{2}{3}\left(\xi_n^2-\eta_n^2\right)
\end{cases}
. \tag{A.84}
$$

図 A.14: fig/fig3-1.eps
図 A.15: fig/fig3-2.eps

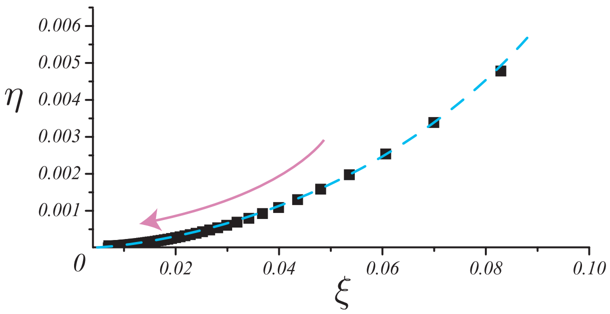

図 A.14　PD 格子の trace map の固定点 $(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2})$ への近づきかた 1

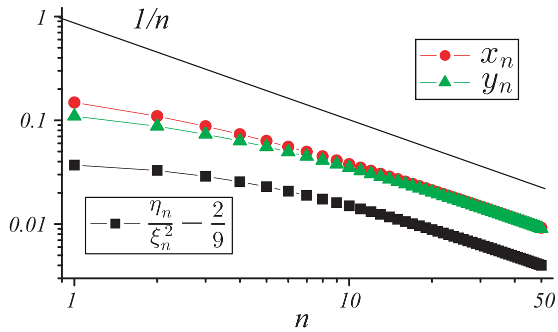

図 A.15　PD 格子の trace map の固定点 $(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2})$ への近づきかた 2

この写像の固定点 $(\xi, \eta) = (0, 0)$ への近づきかたは，図 A.14 により固定点付近では 2 次関数的（$\underline{\eta_n \simeq C\xi_n^2}$）であることがわかる．従ってこの関係式を仮定し，式 (A.84) に代入し，ξ の最低次のみを考えると $C = 2/9$ と求まる．$\eta_n \simeq \frac{2}{9}\xi_n^2$ が固定点付近では妥当であることは，比 η_n/ξ_n^2 が n と共に 2/9 に近づくことからわかる（図 A.15）．しかも，この近づきかたは関数 $1/n$ として表される．この関係から，原点を移動した $x_n + 1/2$ と $y_n + 1/2$ も $1/n$ で $(0, 0)$ に近づくことが分かる（図 A.15）．このように，$\alpha = 1$ に対応する固定点への収束の仕方は，指数関数的に収束する可逆的自己相似格子の場合とはまったく違い，極めて遅いことがわかった．このことが電子状態にどのような影響があるのかを次に考える．

A.8.5　特異な電子状態

エネルギースペクトル

図 A.16 の 1 段目は PD 格子のエネルギースペクトルである．2 段目以降は，基底状態 $H(E) = 0$（左）と $H(E) = \frac{1}{3}$（右）の状態を中心に拡大していったものを表す．基底状態 $H(E) = 0$ の部分は，本稿ではその議論を割愛した $\underline{\alpha = 0}$ であるエネルギースペクトルに相当し，対応する波動関数は図 A.13 に示した marginal critical state である．スペクトルを拡大していくに従ってギャップの幅が広がっていき，スペクトルは次第にやせ細っていく．一方，$H(E) = \frac{1}{3}$ の場所は $\alpha = 1$ の局所対称中心に相当している．一見自己相似構造があるように見えるが，エネルギーギャップの幅が次第に狭くなっていくことがわかる．拡大を繰り返してゆけばスペクトルは連続スペクトルに収束するであろう．これが，図 A.10 の B_n と L_n との関係（両対数プロット）の減少傾向が次第に小さくなることの理由である．対応する波動関数は次に示す．

以上により，PD 格子の $f(\alpha)$–spectrum の場合，可逆的自己相似格子のそれとは異なり，α が 0 から 1 まで 分布することが明らかになった．図 A.17 に PD 格子の $f(\alpha)$–spectrum を示す．図の 6 ～ 11 は第 6 ～ 11 世代の近似格子に対する数値計算の結果であり，実線は無限系での振る舞いを予想した曲線である．PD 格子の trace map がポテンシャルに依らないため

図 A.16: fig/fig3-3.eps

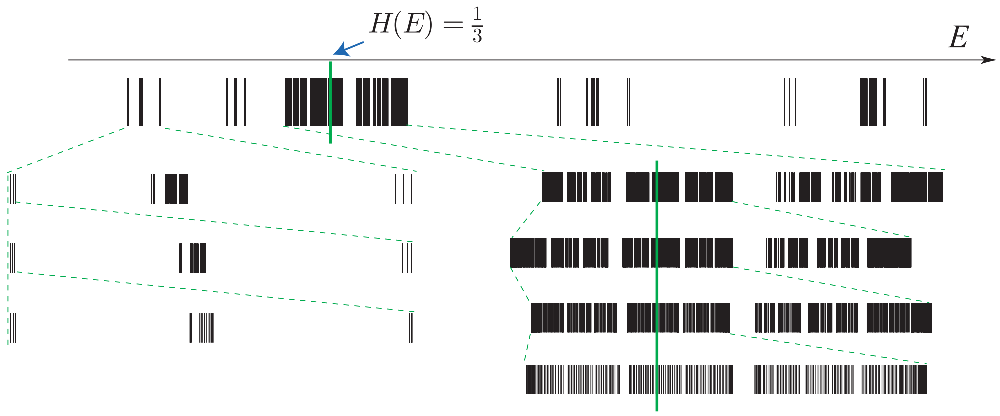

図 A.16 PD 格子のエネルギースペクトル．$H(E)=1/3$ の場合，エネルギースペクトルは 1 階拡大するごとに反転する．しかし図は，すべて向きをそろえて描いた．反転する理由はヤコビ行列の固有値の $\lambda_{\max}$ が負であるためである．

に $f(\alpha)$–spectrum は普遍的（universal）である．

波動関数

$H(E)$ が $S=\mathbf{Q}'_{[0,1]}[2]$ に属するようなエネルギー E を初期点とする trace map は $n\to\infty$ の極限でサイクルに収束する．しかもその固定点は周期的な場合のそれと同じであるために，エネルギースペクトルの局所次元 α は必ず 1 となる．周期系と同じ固定点に収束するのであれば，対応する波動関数も周期系の場合と同じ広がった状態ではないかと考えられるであろう．果たして，今までに知られている臨界状態なのか，それとも広がった状態なのか非常に興味がある．

PD 格子の $\kappa\in\mathbf{Q}'_{[0,1]}[2]$ となるエネルギーに対応する波動関数は図 A.18 のようになる．拡がった状態と臨界状態の違いは，式 (A.68) で定義される γ の値によって調べられる．この状態は，臨界状態よりもゆっくり減衰する $X(L)/L\sim(\log L)^{-\delta}$ のような振る舞いをすることが予想されるが，数値的には確かめられていない．可逆的自己相似格子の場合，臨界状態に対応する固定点への trace map の収束は指数関数的であるのだが，非可逆的自己相似格子の場合のそれは非常に遅く（$\sim 1/n$），有限系での数値計算で確かめることが難しいことが原因であると考えられる．

いずれにせよ，固定点付近での振る舞いが今まで知られている臨界状態とは異なっているために，新しい臨界状態である可能性がある．

図 A.17: fig/fig3-5.eps
図 A.18: fig/fig3-4.eps

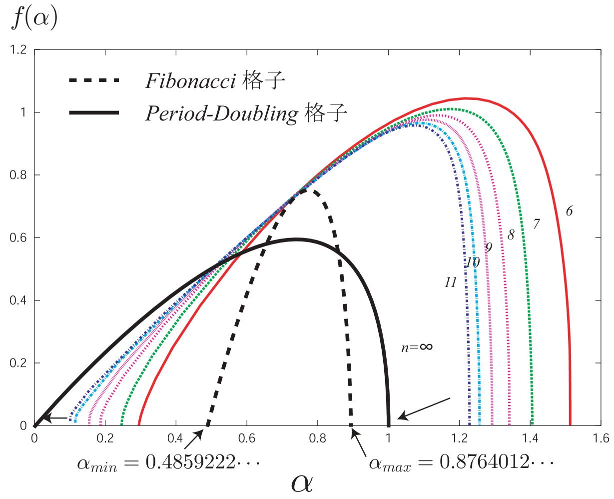

図 A.17　$f(\alpha)$–spectrum

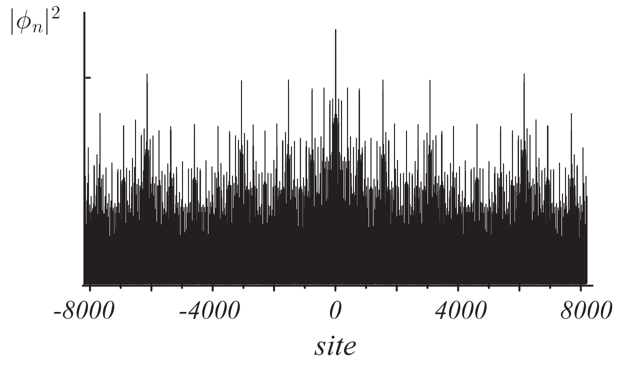

図 A.18　$\kappa \in \mathbf{Q}'_{[0,1]}[2]$ に対応する波動関数

A.8.6　Pisot 非可逆的自己相似格子の電子状態

これまでの議論から明らかなように，可逆的自己相似格子の trace map が universality を持たないのは，それが不変量 $I(x, y, z)$ を持ち，しかもその不変量の値が Δ に依存するからである．他方，PD 格子は別の不変量 $J(x, y, z)$ を持つが，この不変量 $J(x, y, z)$ は，たまたま E や Δ には依らない．PD 格子の trace map の性質が universal となったのはそのためである．これに対して，PD 格子と同種の不変量を持つ Copper-Mean 格子の場合，その不変量の値が E と Δ に依存している*33．この場合，可逆的自己相似格子の場合と同様 trace map の universality は破れる．

ところで，一般の Pisot 非可逆的自己相似格子の trace map は，非保存的でかつ不変量を持たない．従って，trace map により生成される軌道の初期条件が E と Δ に依存するのにも拘わらず，写像を繰り返すたびにその情報の多くが失われ，universal な attractor に吸収されることになる．この attractor こそ図 A.3 に示された曲面に他ならない．このことは式 (A.60) の後の議論からも理解することができる．従って，一般の Pisot 非可逆的自己相似格子の trace map も universal である．また，式 (A.60) の後で述べたように，周期系（$\Delta = 0$）trace map の軌道はこの attractor 上に制限される．ここで注意すべきは，写像の非保存性に起因する情報消失は全面的ではないことである．極限サイクル（limit cycle）に落ちる場合があるからである．明らかに，周期系の trace map の軌道のサイクルは非周期系（$\Delta \neq 0$）の trace map の軌道のサイクルでもある．このように，一般の Pisot 非可逆的自己相似格子の trace map は PD 格子の trace map といくつかの点で共通性を持つ．そのため，サイクルに対応するエネルギースペクトルの局所次元 α は 1 となる．以上により，PD 格子で発見された事実は，わずかに修正するだけで一般の Pisot 非可逆的自己相似格子にも適用ができる

*33 Pisot 非可逆的自己相似格子の中で，PD 格子や Copper-Mean 格子のように不変量を持つ格子は全体の内でごく少数である [89], [81], [64].

ことが分かる．特に，Pisot 非可逆的自己相似格子の $f(\alpha)$–spectrum は universal で α の分布は区間 $[0,1]$ 全体に拡がっている．$\alpha_{\rm min}=0$，$\alpha_{\rm max}=1$ となることは，$f(\alpha)$-spectrum が universal であること整合的である．なぜなら，universal な場合，$\alpha_{\rm min}$ や $\alpha_{\rm max}$ の値が半端になる理由が考えられないからである．

２つの非可逆的自己相似格子が互いに強い意味で MLD 関係にある場合，対応する２つの trace map が定義する２種の非線形力学系は同値になるから，エネルギースペクトルの $f(\alpha)$–spectrum が両者で共通になることが期待される．これを確認することは，今後に残された重要な課題の一つと言える．

A.9　まとめ

生成規則によって作られる格子，すなわち，自己相似格子の分類から議論した．分類基準としては次のようなものを採り上げた：

1. 生成規則は可逆的か.
2. 自己相似格子は対称か.
3. 生成規則の随伴行列の固有値は Pisot 性を持つか.

これらの分類基準は，分類の詳しさに関して順序づけることはできないが，互いに全く独立でもない．第１の基準を満たす格子，すなわち可逆的自己相似格子は，残りの２つの基準も満たし，自己相似格子の選良と言える．当然，自己相似格子全体の中では圧倒的少数派である．この格子は準周期的であり，１次元準結晶と言える．この格子については，構造的にもその電子状態についても，従来の研究により研究し尽くされていると言ってよい．構造的には，随伴行列 M が unimodular で，この性質を持つ各随伴行列に対して１種類存在する．また，随伴行列の「因数分解」により MLD 分類が可能である．

非可逆的自己相似格子は分類基準２，３によりさらに細かく分類できるが，この２つの分類基準は互いに独立である．第３の基準を満たす格子，すなわち Pisot 自己相似格子は，他の自己相似格子よりも構造的一様性が強い．そのため，Pisot 自己相似格子の構造因子 $S(Q)$ は Bragg peak だけから成る．自己相似格子が対称か否かは関連する trace map が半不変量（または不変量）を持つか否かと直結している．他方，自己相似格子が可逆的か否かは関連する trace map が可逆的か否かと直結しているのみならず，保存的か否かとも直結している．本稿では対称自己相似格子に絞って議論した．

可逆的自己相似格子の trace map は不変量 $I(x,y,z)$ を持ち，しかもこの不変量の値はポテンシャルの強さ Δ に依存する．そのために，エネルギースペクトルの multifractal 性を特徴付ける $f(\alpha)$–spectrum は普遍性を示さない．統計力学における相転移の臨界的性質の分類と比較した場合，このような結果はコスターリッツ・サウレス転移と類似の状況と言える [45].

非可逆的な Pisot 自己相似格子の格子の trace map は非保存的である．また，一部の例外を除いて不変量を持たない．そのために，$f(\alpha)$–spectrum は普遍性を持つ．相転移の臨界的性

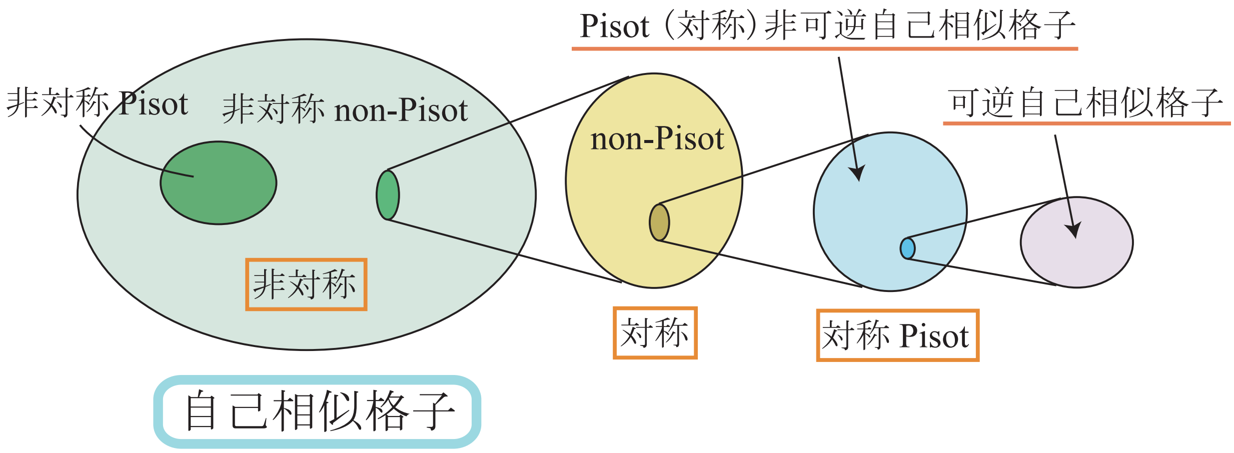

図 A.19　様々な種類の自己相似格子の間の相互関係

質の分類と比較した場合，この結果は通常の相転移に対応する．他方，trace map の attractor は不変曲面 $I(x, y, z) = 0$ と一致する．周期系（$\Delta = 0$）の trace map の軌道はこの不変曲面上に制限されている．その結果，Pisot 自己相似格子の trace map のサイクル（周期点）は周期系のそれと一致する．

自己相似格子全体の中における可逆的自己相似格子および Pisot 対称自己相似格子の位置づけは図 A.19 に示したとおりである．これらの自己相似格子は，量的には自己相似格子全体の極一部を占めているのに過ぎない．Pisot 対称自己相似格子の電子状態の性質に普遍性があることの発見は大きな成果と言えるが，その電子状態についてはいくつかの未解明の問題が残されている．他方，非対称自己相似格子や非 Pisot 自己相似格子の電子状態の性質については全く手つかずと言っても過言ではない．さらに，本稿でとりあげた 2 元自己相似格子は自己相似格子全体から見ると優等生的で，3 元以上の自己相似格子はその分類も電子状態の研究も極めて困難である [92]．自己相似格子の電子状態の全貌が明らかになるのはまだ遠い先のことに思われる．

本論文では強結合近似を仮定したが，1 次元 Schrödinger 方程式に対しても transfer matrix が使用できるので，本論文の結果は，人工超格子中の電子状態に対しても適用できる．さらに，層状物質中の超音波，電磁波（光），スピン波の伝搬に対しても基本的には適用できる [93]．例えば，marginal critical state は局在状態に極めて近い臨界状態であるが，この状態をチャンネルとした場合，光の速度が極端に低下することが予想できる．

図 A.19: fig/group2.eps

付録 B

2 次体の数論

B.1 いくつかの記号と定義

整数全体の集合を $\mathbf{Z}$ で表し，有理数全体の集合を $\mathbf{Q}$ で表す．以下の議論に登場する 2 次の無理数 τ, ω は本文で定義されたものを用いる． 2 次無理数の集合 $\mathbf{Q}[\tau] \equiv \{x+y\tau \,|\, x,y \in \mathbf{Q}\}$ [*1]は四則（加算，減算，積，商）で閉じており，体（field, Körper）と呼ばれる． 2 次体 $\mathbf{Q}[\tau]$ の部分集合 $\mathbf{Z}[\tau] \equiv \{x+y\tau \,|\, x,y \in \mathbf{Z}\}$ は 1 と τ を生成元とする加群（$\mathbf{Z}$–module）であり，加算，減算，積で閉じている．そこで，$\mathbf{Z}[\tau]$ の要素を整数と呼ぶことにする．整数 γ に対して，その逆数 $1/\gamma$ も整数ならば，γ は unit と呼ばれる．τ が unit となるための必要十分条件は，随伴行列 M が unimodular であること（従って，$|\tau\tau'| = 1$ となること）である．例えば，式 (A.29) の後のリスト中の 8 個の無理数のうち黄金比を含む 4 個は unit である．第 2 の 2 次無理数 ω を用いて加群 $\mathbf{Z}[\omega] \equiv \{x+y\omega \,|\, x,y \in \mathbf{Z}\}$ を定義する．特に，τ が unit ならば $\tau^{-1}\mathbf{Z}[\omega] = \mathbf{Z}[\omega]$ が成り立つ[*2]． 2 種の加群 $\mathbf{Z}[\omega]$，$\mathbf{Z}[\tau]$ の生成元（基底）は 2 個であるが，最後に，無限個の生成元を持つ加群を次式により定義する：

$$\begin{aligned}\mathbf{Z}\{\omega\} &\equiv \mathbf{Z}[\omega] \cup \tau^{-1}\mathbf{Z}[\omega] \cup \tau^{-2}\mathbf{Z}[\omega] \cup \cdots \\ &= \left\{\nu_0 + \frac{\nu_1}{\tau} + \frac{\nu_2}{\tau^2} + \cdots \quad (\text{有限項で切れる}) \,|\, \nu_j \in \mathbf{Z}[\omega]\right\}. \end{aligned} \tag{B.1}$$

Fibonacci 格子や Silver-Mean 格子など多くの自己相似格子の場合に $b = 1$ となるが，この場合，$\mathbf{Z}[\omega] = \mathbf{Z}[\tau]$ および $\mathbf{Z}\{\omega\} = \mathbf{Z}\{\tau\}$ が成り立つ.

B.1.1 β–進展開

実数の 10–進展開や 2–進展開については良く知られているが，それはより一般化することができる．β を 1 より大きな整数もしくは無理数とする．半開単位区間 $I = [0, 1)$ からその中への写像を

$$x \in I \quad \to x' = \beta x - [\beta x] \in I \tag{B.2}$$

[*1] 記号 { 数 | 条件 } は今後しばしば使用されるが，指定された条件を満たす数全体から成る集合を意味する．

[*2] $\tau^{-1}\mathbf{Z}[\omega]$ は $\mathbf{Z}[\omega]$ に属する数の各々を τ で割ったもの全体から成る集合を表す．

により定義することができる．ただし，$[*]$ はガウス記号である．初期値を $x \equiv x^{(1)}$ としてこの写像を繰り返すと軌道 $\{x^{(n)}\}$ が生成される：

$$x^{(n+1)} = \beta x^{(n)} - [\beta x^{(n)}]. \tag{B.3}$$

つまり，小数部分に β を掛けて，整数部分を抜きとる操作を行っている．数列 $\{x^{(n)}\}$ の各メンバーに対して，$d_n \equiv [\beta x^{(n)}]$ により整数を定義する．$\{d_n\}$ は整数の数列となり，かつ $0 \le d_n < \beta$ を満たしている．この整数列を用いると，x は

$$x = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{d_n}{\beta^n} \quad \rightarrow \quad 0.d_1 d_2 \cdots |_\beta \tag{B.4}$$

のように展開することができる．このような展開は，x が 1 より小さい場合に限ったものではない．x が 1 より大きい場合，不等式 $\beta^k < x$ を満たす最大の整数 k が決まるが，その場合，$\beta^{-k}x$ が上記のように展開することができる．従って，

$$x = \sum_{n=-k}^{\infty} \frac{d_n}{\beta^n} \quad \rightarrow \quad d_{-k} d_{-k+1} \cdots d_0.d_1 d_2 \cdots |_\beta \tag{B.5}$$

となる．正実数 x のこのような表示を x の β–**進展開**と呼ぶ．

β–進展開に登場する写像は最も簡単な非線形力学系を定義する．β–進展開には次の 3 個のケースがある：

1）有限ステップで切れる．

2）有限ステップでサイクルに落ちる（x が循環小数となる）．

3）残りのケース．

第 3 のケースはカオスと考えて良い（例外がないわけではないが）．

ここで注意すべきは，β が無理数の場合，条件 $0 \le d_n < \beta$ を満たす整数列 $\{d_n\}$ から式 (B.4) によって数 x を定義しても，それが単位区間 I に属することは保証されていないことである．すなわち，β–進展開に現れる整数列が全くランダムになることはない．例えば，β が黄金比 τ_G の場合には，$d_i = 0$ または 1 となるが，$d_i \times d_{i+1} = 0$ となる必要がある（1 は連続しない）．黄金比は関係式 $\tau_G^2 = 1 + \tau_G$ を満たすので，もし，$d_i = d_{i+1} = 1$ ならば，$\frac{1}{\tau_G^i} + \frac{1}{\tau_G^{i+1}} = \frac{1}{\tau_G^{i-1}}$ と繰り上がってしまうためである．

特に，β が 2 次無理数で Pisot 数となる場合が重要である．この場合，実数 x の β–進展開が有限ステップで切れるための必要十分条件は，x が次の集合に属することである：

$$\begin{aligned} \mathbf{Z}\{\beta\} &\equiv \mathbf{Z}[\beta] \cup \beta^{-1}\mathbf{Z}[\beta] \cup \beta^{-2}\mathbf{Z}[\beta] \cup \cdots |_\beta \\ &= \left\{ \nu_0 + \frac{\nu_1}{\beta} + \frac{\nu_2}{\beta^2} + \cdots \quad (\text{有限項で切れる}) \;|\; \nu_j \in \mathbf{Z}[\beta] \right\}. \end{aligned} \tag{B.6}$$

$\mathbf{Z}\{\beta\}$ は加法，減法，積の演算で閉じており，数学的には拡張された整数の集合となる．他方，実数 x の β–進展開が循環小数となるための必要条件は，x が $\mathbf{Q}[\beta] \equiv \{x + y\beta \,|\, x, y \in \mathbf{Q}\}$ に属することである．$\mathbf{Z}\{\beta\}$ は $\mathbf{Q}[\beta]$ の部分集合だから，前者に属する数は除外しなければなら

ない．従って，循環小数となる数全体から成る集合を $\mathbf{Q}'[\beta]$ と表せば，$\mathbf{Q}'[\beta]=\mathbf{Q}[\beta]-\mathbf{Z}\{\beta\}$ となる．

例えば x が周期 p の純循環小数となる場合,

$$
\begin{aligned}
0.d_1d_2\cdots d_pd_1d_2\cdots|_\beta &= 0.\overline{d_1d_2\cdots d_p}|_\beta && \text{(B.7)}\\
&= \frac{1}{1-\beta^{-p}}\left(\frac{d_1}{\beta}+\frac{d_2}{\beta^2}+\cdots+\frac{d_p}{\beta^p}\right) && \text{(B.8)}\\
&= \frac{\beta^{p-1}d_1+\beta^{p-2}d_2+\cdots+d_p}{\beta^p-1} && \text{(B.9)}
\end{aligned}
$$

と表すことができる．従って，x は確かに $\mathbf{Q}[\beta]$ に属する．周期 p は $x(\beta^p-1)\in\mathbf{Z}\{\beta\}$ を満たす最小の整数として決まる．なお，黄金比 τ_G による β–進展開の場合には $\frac{1}{2}$ は 3 周期の純循環小数に展開される．具体的には，$\frac{1}{2}=0.\overline{100}|_{\tau_G}$ となる．このことは黄金比が満たす関係式 $\tau_G^3=1+2\tau_G$ を用いて示すことができる．

以上の議論は，β が整数の場合にも基本的には成り立つ．この場合，$\mathbf{Z}\{\beta\}$ は整数および分母が β のあるベキの約数となるような有理数全体からなる．また，$\mathbf{Q}'[\beta]$ はそれ以外の有理数全体からなる．なお，β が整数の場合 $\mathbf{Q}[\beta]=\mathbf{Q}$ となるので，$\mathbf{Q}'[\beta]=\mathbf{Q}-\mathbf{Z}\{\beta\}$ となる．特に，$\beta=2$ の場合，$\mathbf{Q}'[\beta]$ は分母が奇数因子を含むような有理数全体からなる．

付録 C

マルチフラクタル構造

マルチフラクタル構造をもつ集合の代表として，図 C.1 のような Cantor set を考える．

この集合は $l_1 + l_2 < 1$ としたとき，1 の長さの線分からそれに含まれる部分をくり抜いて，l_1と l_2 の部分だけを残す場合を考える．これを n 回繰り返して得られる集合を，第 n 世代の Cantor set と呼ぶことにする．この集合は場所によって線分の長さが違っている．さらに第 n 世代の Cantor set 各区間 I_i（$i = 1, 2, \cdots N_n$，$N_n = 2^n$）に適当な規則により確率 p_i 付与する．定義により，$\sum_i p_i = 1$ となる．極限として得られるこのような集合を特徴付けるために，局所次元 α と $f(\alpha)$ という量を導入する．この解析方法は，1987 年に T. C. Halsey らによって考案され [94]，$f(\alpha)$–**spectrum** の方法として知られている．さらに M. Kohmoto によって，上記の量を熱力学関数と対応をつけて定式化された [95]．ここでは，集合全体の特徴を定量的に表す**一般化次元** D_q と，局所的な集合の特徴を表す**局所次元 (singularity)** α が $f(\alpha)$ という量で関係付けられることを簡単に示す．

始めに，$l_1 = l_2 = \cdots = l_{N_n} \equiv l^{(n)}$ である場合の一般化次元 D_q を次のように定義する：

$$D_q \equiv \lim_{n\to\infty} \frac{1}{q-1} \frac{\log \chi_n(q)}{\log l^{(n)}} \quad , \qquad \chi_n(q) = \sum_{i=1}^{N_n} p_i^q. \tag{C.1}$$

D_q は q の値によって，いろいろな種類の次元を包括している：

$$D_0 = -\lim_{n\to\infty} \frac{\log N_n}{\log l^{(n)}} \quad , \quad D_1 = \lim_{n\to\infty} D_q = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{\log l^{(n)}} \left(\sum_{i=1}^{N_n} p_i \log p_i \right)$$
$$D_2 = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{\log l^{(n)}} \left(\log \sum_{i=1}^{N_n} p_i^2 \right), \qquad \cdots. \tag{C.2}$$

容量次元 D_0，情報次元 D_1，相関次元 D_2，$\cdots$ と，D_q はよく知られた次元を q という量で統一的に表すことができる．

図 C.1: fig/figC-1.eps
図 C.2: fig/figC-2.eps

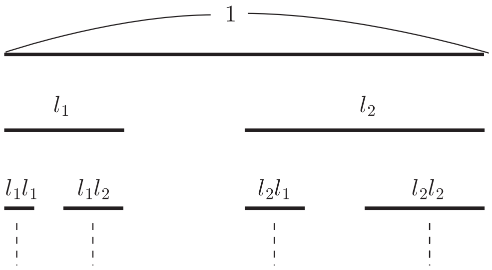

図 C.1　Cantor set

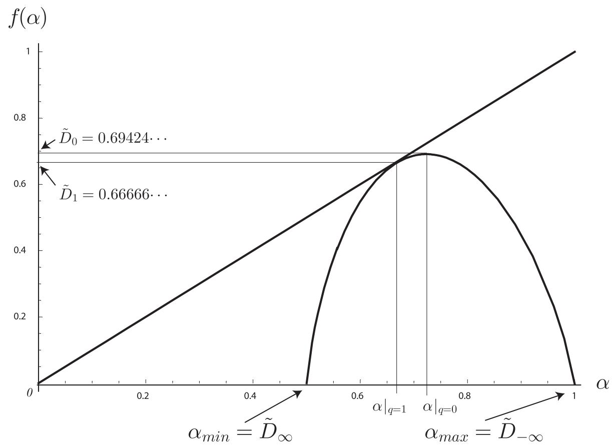

図 C.2　Cantor set の $f(\alpha)$–spectrum

しかし (C.1) 式では図 C.1 のような線分の長さが場所によって異なった集合には，このままでは適用ができない．そこでこれを拡張するために次の量を導入する：

$$\Gamma_n(q,\beta) = \sum_{i=1}^{N_n} p_i^q \, l_i^\beta. \tag{C.3}$$

q を決めて両辺 $n \to \infty$ の極限をとったときに，右辺は β がある値以下ではゼロに収束するが，その値を超えると発散する．その境界における β の値を $\beta(q)$ と記し，拡張一般化次元 $\tilde{D}_q$ を関係式 $\beta(q) = (1-q)\tilde{D}_q$ により定義する．一般に $\tilde{D}_q < D_q$ を満たしている．また，幾何学的な構造のみに着目する場合には $p_i = 1/N_n$（一定）とすればよい．詳しい計算は参考文献 [94], [95] にあるので，本稿では結果だけを記すことにする．

局所次元 α という量を確率測度 p_i に対して定義する：

$$p_i \equiv l_i^{\alpha_i}. \tag{C.4}$$

また，マルチフラクタル解析でもっとも大事な関数に $f(\alpha)$ という関数がある．この量はある集合のうち局所次元が α である部分集合の容量次元を表している．α と q の関係は

$$\alpha = \frac{\partial \ln \Gamma(q,\beta)}{\partial q} \left[\frac{\partial \ln \Gamma(q,\beta)}{\partial \beta} \right]^{-1} \tag{C.5}$$

で与えられる．ただし，右辺を計算した後で，$\beta = \beta(q)$ とおくものとする．さらに，$f(\alpha)$ は拡張一般化次元 $\tilde{D}_q$ とは次の関係式により結ばれる：

$$\tilde{D}_q = \frac{1}{1-q}\left[f(\alpha) - \alpha q\right]. \tag{C.6}$$

α と $f(\alpha)$ は q の関数として，自己相似構造をもつ集合（１次元）の各線分 l_i $(i = 1, 2, \cdots)$ が与えられたときに，q の値に対してそれぞれ定量的に求められる．逆に，α と $f(\alpha)$ に対して，対応する $\tilde{D}_q$ が決まる．図 C.1 の Cantor set で，$l_1 = \frac{1}{4}, l_2 = \frac{1}{2}$ として計算した結果が図 C.2 である．$f(\alpha)$ は $q = 0$ で最大値 $f(\alpha) = \tilde{D}_0$ をとり，$q \to \infty$ のときに $\alpha_{\min}$ で $f(\alpha) = 0$,

$q \to -\infty$ のときに $\alpha_{\max}$ で $f(\alpha) = 0$ である上に凸の関数となる．図 C.1 の Cantor set では，局所的に連続的である（$\alpha = 1$）部分から $\alpha = 0.5$ で表される部分まで，図 C.2 のように分布していることを表している．

参考文献

[1] E. Yablonovitch, Phys. Rev. Lett. **58**, 2059 (1987).

[2] R. Endou, K. Niizeki, and N. Fujita, J. Phys. A: Math. Gen. **37**, L1 (2004).

[3] M. W. Takeda, S. Kirihara, Y. Miyamoto, K. Sakoda, and K. Honda, Phys. Rev. Lett. **92**, 093902 (2004).

[4] M. Notomi, E. Kuramochi, and T. Tanabe, Nature Photonics **2**, 741 (2008).

[5] S. Song, S. Noda, T. Asano, and Y. Akahane, Nature Materials **4**, 207 (2005).

[6] T. Tanabe, M. Notomi, E. Kuramochi, A. Shinya, and H.Taniyama, Nature Photonics **1**, 49 (2006).

[7] H-Y. Ryu, M. Notomi, and Y-H. Lee, Appl. Phys. Lett. **83**, 4294 (2003).

[8] E. Kuramochi, M. Notomi, M. Mitsugi, A. Shinya, , and T. Tanabe, Appl. Phys. Lett. **88**, 041112 (2006).

[9] Y. Takahashi, H. Hagino, Y. Tanaka, B-S. Song, T. Asano, and S. Noda, Opt. Express **15**, 17206 (2007).

[10] T. Tanabe, A. Shinya, E. Kuramochi, S. Kondo, H. Taniyama, and M. Notomi, Appl. Phys. Lett. **91**, 021110 (2007).

[11] S. Noda, M. Fujita, and T. Asano, Nature Photonics **1**, 449 (2007).

[12] K. Ishizaki and S. Noda, Nature **460**, 367 (2009).

[13] P. Velha, E. Picard, T. Charvolin, E. Hadji, J. C. Rodier, P. Lalanne, and D. Peyrade, Opt. Express **15**, 16090 (2007).

[14] J. S. Foresi, P. R. Villeneuve, J. Ferrera, E. R. Thoen, G. Steinmeyer, S. Fan, J. D. Joannopoulos, L. C. Kimerling, Henry I. Smith, and E. P. Ippen, Nature **390**, 143 (1997).

[15] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics 2nd edn* (Wiley, New York, 1975).

[16] B. E. A. Saleh and M. C. Teich, *Fundamentals of Photonics* (Wiley, New York, 1991).

[17] L. A. MacColl, Phys. Rev. **40**, 621 (1932).

[18] T. E. Hartman, J. Appl. Phys. **33**, 3427 (1962).

[19] A. Ranfagni, D. Mugnai, P. Fabeni, and G. P. Pazzi, Appl. Phys. Lett. **58**, 774 (1991).

[20] A. A. Stahlhofen, Phys. Rev. A **62**, 012112 (2000).

[21] A. Haibel, G. Nimtz, and A. A. Stahlhofen, Phys. Rev. E **63**, 047601 (2001).

[22] L. Ragni, Phys. Rev. E **79**, 046609 (2009).

[23] A. M. Steinberg and R. Y. Chiao, Phys. Rev. A **49**, 3283 (1994).

[24] Ph. Balcou and L. Dutriaux, Phys. Rev. Lett. **78**, 851 (1997).

[25] D. Balcou, A. Ranfagni, and L. Ronchi, Phys. Lett. A **247**, 281 (1998).

[26] J. J. Carey, J. Zawadzka, D. A. Jaroszynski, and K. Wynne, Phys. Rev. Lett. **84**, 1431 (2000).

[27] I. R. Hooper, T.W. Preist, and J. R. Sambles, Phys. Rev. Lett. **97**, 053902 (2006).

[28] A. M. Steinberg, P. G. Kwiat, and R. Y. Chiao, Phys. Rev. Lett. **71**, 708 (1993).

[29] Ch. Spielmann, R. Szipočs, A. Stingl, and F. Krausz, Phys. Rev. Lett. **73**, 2308 (1994).

[30] M. Mojahedi, E. Schamiloglu, F. Hegeler, and K. J. Malloy, Phys. Rev. E **62**, 5758 (2000).

[31] S. Longhi, M. Marano, and P. Laporta, Phys. Rev. E **64**, 055602 (2001).

[32] A. Hache and L. Poirier, Appl. Phys. Lett. **80**, 518 (2002).

[33] R. Y. Chiao, P. G. Kwiat, and A. M. Steinberg, Physica **175B**, 257 (1991).

[34] Th. Martin and R. Landauer, Phys. Rev. A **45**, 2611 (1992).

[35] G. Nimtz, Quantum Electronics **27**, 417 (2003).

[36] E. P. Wigner, Phys. Rev. **98**, 145 (1955).

[37] S. Esposito, Phys. Rev. E **64**, 026609 (2001).

[38] H. Winful nad M. Ngom and N. M. Litchinitser, Phys. Rev. A **70**, 052112 (2004).

[39] S. Yang, J. H. Page, Z. Liu, M. L. Cowan, C. T. Chan, and P. Sheng, Phys. Rev. Lett. **88**, 104301 (2002).

[40] J. Ash W. M. Robertson and J. M. McGaugh, Am. J. Phys. **70**, 689 (2002).

[41] D.Shechtman, I.Blech, D.Gratias, and J.W.Cahn, Phys. Rev. Lett. **53**, 1951 (1984).

[42] Z. M. Stadnik, , 1999).

[43] M. Kohmoto, L. P. Kadanoff, and C. Tang, Phys. Rev. Lett. **50**, 1870 (1983).

[44] R. Penrose, Bull. Inst. Math. Appl. **10**, 266 (1974).

[45] B. Sutherland M. Kohmoto and C. Tang, Phys. Rev. B **35**, 1020 (1987).

[46] N. Fujita and K. Niizeki, Phys. Rev. Lett. **85**, 4924 (2000).

[47] M. Kohmoto, B. Sutherland, and K. Iguchi, Phys. Rev. Lett. **58**, 2436 (1987).

[48] V. V. Konotop, O. I. Yordanov, and I. V. Yurkevich, Europhys. Lett. **12**, 481 (1990).

[49] X. Sun and D. L. Jaggard, J. Appl. Phys. **70**, 2500 (1991).

[50] M. Bertolotti, P. Masciulli, and C. Sibilia, Opt. Lett. **19**, 777 (1994).

[51] M. Bertolotti, P. Masciulli, C. Sibilia, F. Wijnands, and H. Hoekstra, J. Opt. Soc. Am. B **13**, 628 (1996).

[52] A. V. Lavrinenko, S. V. Zhukovsky, K. S. Sandomirski, and S. V. Gaponenko, Phys. Rev. E **65**, 036621 (2002).

[53] F. Chiadini, V. Fiumara, I. M. Pinto, and A. Scaglione, Microwave Opt. Technol. Lett. **637**, 339 (2003).

[54] F. Chiadini, V. Fiumara, I. M. Pinto, and A. Scaglione, J. Phys. Soc. Jpn. **74**, 3093 (2005).

[55] U. Sangawa, IEICE Trans. Electron. **E88-C(10)**, 1981 (2005).

[56] S. Sengupta, A. Chakrabarti, and S. Chattopadhyay, Physica B **344**, 307 (2004).

[57] S. Sengupta, A. Chakrabarti, and S. Chattopadhyay, Phys. Rev. B **71**, 134204 (2005).

[58] K.Esaki, M Sato, and M. Kohmoto, Phys. Rev. E **79**, 056226 (2009).

[59] W. Gellermann, M. Kohmoto, B. Sutherland, and P. C. Taylor, Phys. Rev. Lett. **72**, 633 (1994).

[60] T. Hattori, N. Tsurumachi, S. Kawato, and H. Nakatsuka, Phys. Rev. B **50**, 4220 (1994).

[61] L. D. Negro, C. J. Oton, Z. Gaburro, L. Pavesi, P. Johnson, Ad Lagendijk, R. Righini, M. Colocci, and D. S. Wiersma, Phys. Rev. Lett. **90**, 055501 (2003).

[62] L. M. Ghulinyan, C. J. Oton, L. D. Negro, L. P., R. Sapienza, M. Colocci, and D. S. Wiersma, Phys. Rev. B **71**, 094204 (2005).

[63] L. N. Makarava, M. M. Nazarov, I. A. Ozheredov, A. P. Shkurinov, A. G. Smirnov, and S. V. Zhukovsky, Phys. Rev. E **75**, 036609 (2007).

[64] U. Grimm M. Baake and D. Joseph, Int. J. Mod. Phys. **B7**, 1527 (1993).

[65] M.J.Luck, Phys. Rev. B **39**, 5834 (1989).

[66] M. Kohmoto and Y. Oono, Phys. Lett. **102A**, 145 (1984).

[67] H. Hiramoto and M. Kohmoto, Int. J. Mod. Phys. **B6**, 281 (1992).

[68] M. Dulea M. Severin and R. Riklund, J. Phys. Condens. Matter **1**, 8851 (1989).

[69] S. N. Karmakar S. Sil and R. K. Moitra, Phys. Rev. B **48**, 4192 (1993).

[70] F. Wijnands, J. Phys. A: Math. Gen **22**, 3267 (1989).

[71] M. Kolář and M. K. Ali, Phys. Rev. A **42**, 7112 (1990).

[72] F. Wijnands Z. Y. Wen and J. S. W. Lamb, J. Phys. A **27**, 3689 (1994).

[73] K. Niizeki M. Torikai and T. Odagaki, J. Phys. Soc. Jpn. **70**, 2918 (2001).

[74] O. Knill A. Hopf and B. Simon, Commun. Math. Phys. **174**, 149 (1995).

[75] M. Schlottmann M. Baake and P. D. Jarvis, Int. J. Mod. Phys. **24**, 4637 (1991).

[76] K. Niizeki, J. Alloys. Comp. **342**, 213 (2002).

[77] A. Janner J. M. Luck, C. Godréche and T. Janssen, J. Phys. A: Math. Gen **26**, 1951 (1993).

[78] M. Kolář, Phys. Rev. B **47**, 5489 (1993).

[79] M. Baake and J. Roberts, J. Stat. Phys. **74**, 829 (1994).

[80] J. Periére, J. Stat. Phys. **62**, 411 (1991).

[81] T. Takemori M. Inoue and H. Miyazaki, J. Phys. Soc. Jpn. **60**, 3640 (1991).

[82] B. Kramer and A. Makinnon, Rep. Prog. Phys. **56**, 1469 (1993).

[83] K. Niizeki and E. Yagi, J. Phys. Soc. Jpn **66**, 1387 (1997).

[84] J. Q. You, J. R. Yan, T. Xie, X. Zeng, and J. X. Zhong, J. Phys. Condens Matter **3**, 7255 (1991).

[85] T. Takemori M. Inoue and H. Miyazaki, J. Phys. Soc. Jpn. **61**, 969 (1992).

[86] H. Hiramoto and M. Kohmoto, Phys. Rev. Lett. **62**, 2714 (1989).

[87] A. Yu Kitaev P. A. Kalugin and L. C. Levitov, Pis'ma. Zh. Eksp. Teor. Fiz **41**, 119 (1985).

[88] P. Collet and J. P. Eckmann, *Iterated Maps on the Interval as Dynamical Systems* (Birkhauser, Boston, 1980).

[89] G. Gumbs and M. K. Ali, Phys. Rev. Lett. **60**, 1081 (1988).

[90] M. Kolář and M. K. Ali, Phys. Rev. A **39**, 6358 (1988).

[91] N. Fujita and K. Niizeki, Phys. Rev. B **64**, 144207 (2001).

[92] K. Iguchi, Phys. Lett. B **216**, 37 (1996).

[93] E.L.Albuquerque and M.G.Cottam, Phys. Rep. **376**, 225 (2003).

[94] T. C. Halsey, M. H. Jensen, L. P. Kadanoff, I. Procaccia, and B. I. Shraiman, Phys. Rev. A **33**, 1141 (1986).

[95] M. Kohmoto, Phys. Rev. A **37**, 1345 (1988).

発表実績

発表論文

第一著者論文

1. R. Endou, K. Niizeki and N. Fujita, “Universalities in One-electron Properties of Limit Quasi-periodic Lattices”, J. Phys. A: Math. Gen. **37**, L1-L6 (2004).
2. R. Endo and R. Saito, “Tunneling time of optical pulse in photonic band gap”, J. Opt. Soc. Am. B, (in press).

第一著者での学会発表

口頭発表

1. 遠藤理平，齋藤理一郎，フォトニックバンドギャップ中を伝搬する光パルスのトンネル時間，日本物理学会 第 66 回年次大会（新潟大学, 2011.03.25-28）.
2. 遠藤理平，齋藤理一郎，自己相似構造媒質におけるガウスパルスの光学応答，日本物理学会 第 65 回年次大会（岡山大学, 2010.03.20-23）.
3. 遠藤理平，齋藤理一郎，光のトンネル効果 〜Frustrated total internal reflection〜，第３回 東北大学大学院理学研究科 ６専攻合同シンポジウム（2010.02.16）.
4. 遠藤理平，新関駒二郎，自己相似構造を持つ媒質中を伝播する電磁波，日本物理学会 第 60 回年次大会（東京理科大,2005.03.24-27）.
5. 遠藤理平，新関駒二郎，非保存的な決定論的非周期格子の一電子状態，日本物理学会 第 59 回年次大会（九州大学,2004.03.27-30）.
6. 遠藤理平，新関駒二郎，決定論的非周期格子「Period-doubling 格子」の 1 電子状態，日本物理学会 第 58 回年次大会（東北大学,2003.03.28-31）.
7. 遠藤理平，新関駒二郎，Period-Doubling 格子などの non-invertible な変換規則を持つ非周期格子の電子状態，日本物理学会秋季大会（中部大,2002.09.06-09）.

ポスター発表

1. R.Endo, R.Saito, Tunneling time of optical pulse in photonic band gap, The 3nd International GCOE symposium (2011.02.17-19).
2. 遠藤理平，齋藤理一郎，誘電体薄膜中を伝搬する 2 次元ガウシアンパルスのシミュレーション，第 3 回 東北大学光科学技術フォーラム （2010.06.16）.
3. R.Endo, R.Saito, Optical response of photonic crystal with multi-layered structure, The 2nd International GCOE symposium (2010.02.18-19).