第 2 章 結晶中を伝播する光

この章においては、結晶を進む光の性質について勉強する。結晶は異方性を持つ為、その中では 2 つの直交する固有偏光を持つ光に分かれる。この結果光の偏り状態が変化する。これに関連した様々な現象が発生し、結晶の物性を研究するため簡便で基礎的な実験手段を提供する。また光の位相や強度を変調できるので光エレクトロニックなどの応用分野でも重要な技術となっている。光と結晶の相互作用を記述するためには、光をベクトル波として取り扱う。これにより結晶のような異方性を持った媒質中を光がどのように伝播するかが議論できる。ここで取り扱うのは主に線形光学であるが、非線形光学においてもこの性質を様々なところで利用する。

2. 1.　カルサイト（方解石）$CaCO_3$結晶の複屈折

通常のガラスを光が通過する場合を考えよう。入射した光は屈折することによって光路は曲がる、あるいは吸収によって通過した光の強度は小さくなるが、1 本の波が 2 本になったり、垂直入射した光が曲がったりはしない。

今紙の文字を書き、その上に方解石を置いてみよう。文字は二重に見えるであろう。この事は方解石に入射した光は 2 本に分かれることを意味している。すなわち方解石を通過した光は

（あ）2 本になる。

（い）そのうち 1 本の光は真っ直ぐ通過するが、他方の光は垂直入射に関わらず曲がってしまう。

（う）結晶を回転すると一方の光は動かない。しかし他方の光は動かない光の周りを回転する。

（え）更に通過した光を偏光板（ある特定方向に振動する光だけを通過する）＊と通して観測すると、偏光板がある特定の角度の時 1 つの光しか見えない。更に 90 度回転するともう 1 つの光のみが見えるようになる。

以上の事から、次のような結論が導かれる。

“ 方解石のような異方性媒質中を伝播する光は 2 つの光に分かれる。その屈折率の大きさは異なる。また光の振動方向は互いに垂直となる。”

この現象を複屈折とよぶ。これはマックスウェル方程式と誘電率の異方性を考慮すれば導かれる。まずこれを導いてみよう。

（＊）偏光板、直線偏光成分のみを取り出す光学素子であって、色々な原理による素子がある。最もポピュラーで安価なものは、高分子をある方向に引っ張ってその軸方向を揃えたもの＝偏光板。高分子の揃った方向に垂直成分が通過する。

問　一枚の偏光板の偏光方向を見つけるにはどうしたらよいか。

2. 2.　フレネルの式－結晶光学の基礎方程式－

MKS 単位系でマックスウェル方程式を書き表そう。

$$div\mathbf{E} = \frac{\rho}{\varepsilon} \tag{2.1}$$

$$div\mathbf{B} = 0 \tag{2.2}$$

$$rot\mathbf{E} = -\left(\frac{\delta \mathbf{B}}{\delta t}\right) \tag{2.3}$$

$$rot\mathbf{B} = \mu\mathbf{J} + \varepsilon\mu\left(\frac{\delta \mathbf{E}}{\delta t}\right) \tag{2.4}$$

ここで媒質中には電荷、電流は存在しない。又透磁率は 1 である（非磁性 $\mu = \mu_0$）とする。この時

$$div\mathbf{E} = 0 \tag{2.5}$$

$$div\mathbf{B} = 0 \tag{2.6}$$

$$rot\mathbf{E} = -\left(\frac{\delta \mathbf{B}}{\delta t}\right) \rightarrow -\mu_0\left(\frac{\delta \mathbf{H}}{\delta t}\right) \tag{2.7}$$

$$rot\mathbf{B} = \mu\mathbf{J} + \varepsilon\mu\left(\frac{\delta \mathbf{E}}{\delta t}\right)$$

$$\rightarrow rot\mathbf{H} = \frac{\delta \mathbf{D}}{\delta t} \tag{2.8}$$

今結晶に

$$\mathbf{E} = \mathbf{E_0} \exp\left\{i\left(\omega t - \mathbf{kr}\right)\right\} \tag{2.9}$$

で表される平面波が入射するとしよう。この平面波の方程式を

$$\mathbf{E} = \mathbf{E_0} \exp\left\{i\omega\left(t - \left(\frac{\mathbf{k}}{\omega}\right)\mathbf{r}\right)\right\}$$

$$= \mathbf{E_0} \exp\left\{ i\omega\left(t - \left(\frac{\mathbf{k}}{\omega} \right) \mathbf{lr} \right) \right\} \tag{2.10}$$

と書く。ここで$\mathbf{l}$は$\mathbf{k}$の単位ベクトルである。

$$\frac{\mathbf{k}}{\omega} = \frac{1}{v}$$

であるから

$$\mathbf{E} = \mathbf{E_0} \exp\left\{ i\omega\left(t - \frac{\mathbf{lr}}{v} \right) \right\} \tag{2.11}$$

この式が平面波を表すことは、この波の伝播方向$\mathbf{l}$に垂直な平面の位相は同じであることを証明すればよい。vは一定であるから同一位相面は$\mathbf{lr}$ ＝一定となる面である。$\mathbf{l}$に垂直な平面内に$\mathbf{r}$があれば、この条件は満たされる。従って上式は平面波を表す。(2.11) を(2.7) に代入する。

$$-\mu_0 \frac{\delta \mathbf{H}}{\delta t} = rot\mathbf{E_0} \exp\left\{ i\omega\left(t - \frac{\mathbf{lr}}{v} \right) \right\} \tag{2.12}$$

ここで

$$rot\phi\mathbf{A} = \phi rot\mathbf{A} + \left(grad\phi \right) \times \mathbf{A} \tag{2.13}$$

これを用いると(2. 12)式は

$$-\mu_0 \frac{\delta \mathbf{H}}{\delta t} = grad\left\{ \exp\left\{ i\omega\left(t - \frac{\mathbf{lr}}{v} \right) \right\} \right\} \times \mathbf{E_0} \tag{2.14}$$

ここで

$$grad\left\{ \exp\left\{ i\omega\left(t - \frac{\mathbf{lr}}{v} \right) \right\} \right\} = -i\frac{\omega}{v} grad\left(\mathbf{lr} \right)$$

$$= -i\left(\frac{\omega}{v}\right)\mathbf{l}$$

なぜなら

$$grad\left(\mathbf{lr}\right) = \frac{\partial\left(\ell_x x\right)}{\partial x}\mathbf{e}_x + \frac{\partial\left(\ell_y y\right)}{\partial y}\mathbf{e}_y \frac{\partial\left(\ell_z z\right)}{\partial z}\mathbf{e}_z$$

$$= \ell_x \mathbf{e}_x + \ell_y \mathbf{e}_y + \ell_z \mathbf{e}_z$$

$$= \mathbf{l}$$

結局(2.14)式は

$$-\mu_0 \frac{\delta \mathbf{H}}{\delta t} = -i\left(\frac{\omega}{v}\right)\left\{\exp\left\{i\omega\left(t - \frac{\mathbf{lr}}{v}\right)\right\}\right\}\left\{\mathbf{l} \times \mathbf{E_0}\right\}$$

両辺をtで積分すると

$$\mu_0 \mathbf{H} = i\left(\frac{\omega}{v}\right)\left(\frac{1}{i\omega}\right)\left\{\exp\left\{i\omega\left(t - \frac{\mathbf{lr}}{v}\right)\right\}\right\}\left\{\mathbf{l} \times \mathbf{E_0}\right\}$$

$$= \left(\frac{1}{v}\right)\left\{\mathbf{l} \times \mathbf{E}\right\} \qquad (2.15)$$

同様に結晶中を伝播する電磁波の磁場は

$$\mathbf{H} = \mathbf{H_0} \exp\left\{i\omega\left(t - \frac{\mathbf{lr}}{v}\right)\right\} \qquad (2.16)$$

と書け、これを(2.8)式に代入すると全く同様に（全式で$\mathbf{E}$を$\mathbf{H}$、$\mathbf{H}$を$\mathbf{D}$、μ_0を-1に置き換えればよい）

$$\mathbf{D} = -\left(\frac{1}{v}\right)\left\{\mathbf{l} \times \mathbf{H}\right\} \qquad (2.17)$$

を得る。

これらの式は$\mathbf{l}(\mathbf{k})$、$\mathbf{E}$、$\mathbf{D}$、$\mathbf{H}$の関係を表している。

すなわち、(2. 15)より$\mathbf{H}$は$\mathbf{l}$と$\mathbf{E}$に垂直で、$\mathbf{l}$から$\mathbf{E}$の方向に右ねじを回した時進む方向にある。
一方、$\mathbf{D}$は$\mathbf{l}$と$\mathbf{H}$に垂直で、$\mathbf{H}$から$\mathbf{l}$に右ねじを回した時にねじが進む方向にある。
これらの関係を図示すると（図 2.1）となる。
ここで注意すべきことは、$\mathbf{D}$と$\mathbf{E}$の方向は一般的に一致しない。$\mathbf{l}$の方向は波面の進む方向すなわち波数ベクトルの方向であり、これに垂直なのは$\mathbf{D}$の方向なのである。一方、エネルギーの伝播する方向はポインティングベクトル$\mathbf{S}$によって記述されるが、$\mathbf{S}=\mathbf{E}\times\mathbf{H}$であるので、$\mathbf{E}$と$\mathbf{H}$に垂直な方向はエネルギーの伝播する方向で、この方向は一般的に波面の進む方向とは一致しない。上式のvは波面が進む速度であることに注意しなくてはならない。このような速度を位相速度という。位相速度$v=\dfrac{c}{n}$で表される。X 線では屈折率は 1 よりも小さい。この場合には位相速度はcよりも大きくなってもよい。
(2.17) に(2.16)を代入すると

$$\mathbf{D}=-\left(\frac{1}{\mu_0 v^2}\right)\left\{\mathbf{l}\times(\mathbf{l}\times\mathbf{E})\right\} \tag{2.18}$$

ここでベクトルの 3 重積の定理

$$\mathbf{A}\times(\mathbf{B}\times\mathbf{C})=(\mathbf{AC})\mathbf{B}-(\mathbf{AB})\mathbf{C}$$

従って

$$\mathbf{D}=-\left(\frac{1}{\mu_0 v^2}\right)\left\{(\mathbf{lE})\mathbf{l}-\mathbf{E}\right\}$$

これを変形すると

$$\mu_0 v^2\mathbf{D}-\mathbf{E}+\mathbf{l}(\mathbf{lE})=0 \tag{2.19}$$

ここで**D**と**E**の関係に異方性を取り入れる。
異方性媒質では**D**と**E**の関係は行列で表せば

$$\mathbf{D}1$$
$$\mathbf{D}2 =$$
$$\mathbf{D}3$$

あるいは

$$D_i = \sum_j \varepsilon_{ij} E_i$$

とかける。すなわち等方性の媒質と異なり、**D**と**E**とは平行でない。これは異方性媒質において、ベクトル量の関係を表す一般的な特徴である。ベクトルとベクトルの関係を表す物理量を 2 階のテンソル量とよび、3×3 のマトリックスで表される。その成分を 2 つの添え字で表す。誘電率テンソルのように、対称テンソルの場合にはすなわち

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}$$

の時、2 階のテンソルは適当な座標変換を行うことによって対角成分のみにすることが可能である。これを主軸変換という。
今適当な座標に主軸変換すると

$$D_i = \varepsilon_{ii} E_i \left(i = 1 \sim 3 \right) \tag{2.20}$$

となる。このような座標で考える。この時(2.19)式は

$$\mu_0 v^2 D_1 - \frac{D_1}{\varepsilon_1} + \ell_1 \left(\mathbf{lE} \right) = 0 \tag{2.21}$$

これより

$$\left(\frac{1}{\varepsilon_1} - \mu_0 v^2 \right) D_1 = \ell_1 \left(\mathbf{lE} \right) \tag{2.22}$$

$$\left(\frac{1}{\varepsilon_1}-\mu_0 v^2\right)D_2=\ell_2(\mathbf{lE}) \tag{2.23}$$

$$\left(\frac{1}{\varepsilon_1}-\mu_0 v^2\right)D_3=\ell_3(\mathbf{lE}) \tag{2.24}$$

上の 3 式の両辺にそれぞれ

$$\left(\frac{1}{\varepsilon_2}-\mu_0 v^2\right)\left(\frac{1}{\varepsilon_3}-\mu_0 v^2\right)\ell_1$$

$$\left(\frac{1}{\varepsilon_3}-\mu_0 v^2\right)\left(\frac{1}{\varepsilon_1}-\mu_0 v^2\right)\ell_2$$

$$\left(\frac{1}{\varepsilon_1}-\mu_0 v^2\right)\left(\frac{1}{\varepsilon_2}-\mu_0 v^2\right)\ell_3$$

をかけ、足し合わせ $\mathbf{D}$ と $\mathbf{l}$ とは直交している。すなわち $\mathbf{Dl}=0$ を用いると

$$\begin{aligned}&\left(\frac{1}{\varepsilon_2}-\mu_0 v^2\right)\left(\frac{1}{\varepsilon_3}-\mu_0 v^2\right)\ell_1^2\\&+\left(\frac{1}{\varepsilon_3}-\mu_0 v^2\right)\left(\frac{1}{\varepsilon_1}-\mu_0 v^2\right)\ell_2^2\\&+\left(\frac{1}{\varepsilon_2}-\mu_0 v^2\right)\left(\frac{1}{\varepsilon_2}-\mu_0 v^2\right)\ell_3^2=0\end{aligned} \tag{2.25}$$

となる。この式は v^2 に関する 2 次方程式であり、伝播方向 $\mathbf{l}$ を与えれば 2 つの解を持つ。$\pm v$ は逆向きに伝播する電磁波を表している。
すなわち、これより異方性を持つ媒質を伝播する電磁波は 2 つあることが導かれた。

例えば $\mathbf{l}//(001)$ 方向に伝播する波を考えよう。この時波の位相速度 v は

$$v'^2 = \frac{1}{(\mu_0 \varepsilon_2)} = \frac{1}{(\mu_0 \varepsilon_0 \varepsilon_{r2})}\left(\frac{c}{n_2}\right)^2$$

$$v''^2 = \left(\frac{c}{n_3}\right)^2$$

となる。すなわち屈折率 n_2 と n_3 を持つ 2 つの電磁波が存在することがわかる。

上式で

$$v_{\mathrm{i}}^2 = \left(\frac{1}{\varepsilon_i \mu_0}\right)(i = 1 \sim 3)$$

とおくと v_i が 0 でない時は

$$\sum_i \left\{\frac{\ell_i^2}{(v_{\mathrm{i}}^2 - v^2)}\right\} = 0 \qquad (2.26)$$

この式をフレネル(Fresnel)の式という。
ここで Fresnel の式を満たす 2 つの波は互いに垂直に振動、すなわち $\mathbf{D}$ が互いに垂直であることを示そう。このためには $\mathbf{D}'\mathbf{D}'' = 0$ を示せばよい。
そこで

$$f(v) = \sum_i \left\{\frac{\ell_i^2}{(v_{\mathrm{i}}^2 - v^2)}\right\} \qquad (2.27)$$

とおく。ここで 2 つの波の位相速度を v'、v'' とすると

$$f(v') = f(v'') = 0 \qquad (2.28)$$

である。一方、(2.22)などより

$$D_i = \frac{\ell_i(\mathbf{lE})}{\left(\frac{1}{\varepsilon_2} - \mu_0 v^2\right)} \tag{2.29}$$

から D_i の方向余弦は

$$\frac{\ell_i}{\left(v_i^2 - v^2\right)}$$

に比例する。従って

$$\begin{aligned}
&\frac{\sum \ell'_i \ell''_i \sim \sum \ell_i^2}{\left\{\left(v_i^2 - v'^2\right)\left(v_i^2 - v''^2\right)\right\}} \\
&= \left\{\frac{1}{\left(v_i^2 - v''^2\right)}\right\} \sum_i \left\{\frac{1_i}{\left(v_i^2 - v'^2\right)} - \frac{1_i}{\left(v_i^2 - v''^2\right)}\right\} \\
&= \left\{\frac{1}{\left(v_i^2 - v''^2\right)}\right\} \left\{f(v') - f(v'')\right\} = 0
\end{aligned} \tag{2.30}$$

これより、確かに $\mathbf{D}'$ と $\mathbf{D}''$ は直交していることが証明された。

2. 3. 屈折率曲面

(1) 定義

第 1 章で、誘電率のような 2 階のテンソルは 2 次曲面で表示されることを示した。今

$$E_i = \left(\frac{1}{\varepsilon_0}\right) B_{ij} D_j \tag{2.31}$$

で表される逆誘電率テンソル B_{ij} を係数に持つ 2 次曲面を考える。すなわち

$$B_{ij}x_i x_j = 1 \tag{2.32}$$

$B_{ij} \geq 0$ なので、これは回転楕円体となる。

主軸変換した座標を用いると B_{ij} 成分は対角成分しか持たないので

$$B_{11}X_1^2 + B_{22}X_2^2 + B_{33}X_3^2 = 1 \tag{2.33}$$

$B_{ij} = \dfrac{1}{\varepsilon_i^r} = \dfrac{1}{n_1^2}$ であるから

$$\left(\frac{x_1}{n_1}\right)^2 + \left(\frac{x_2}{n_2}\right)^2 + \left(\frac{x_3}{n_3}\right)^2 = 1 \tag{2.34}$$

従って、この回転楕円体は（図 2.2）のように書ける。これを屈折率曲面あるいは屈折率楕円体（optical indicatrix）とよぶ。

（図 2.2）　屈折率楕円体

(2) 屈折率曲面を用いた結晶中の光の速度と振動方向の表現

結晶中をその波面が **k** 方向に進行する光を考える。**k** に垂直で原点を通る平面で屈折率曲面を切ると、その断面は一般的に楕円となる。この時楕円の長軸、短軸の長さが結晶中を伝播する 2 つの光の屈折率を表す。またこの 2 つの波の振動方向は、それぞれ長軸、短軸の方向である（図 2.3）。従って x_1 方向に伝播する光の屈折率は n_2 と n_3 であり、その振動方向（電気変位ベクトルの方向）は、x_2，x_3 である。これは次のように証明される。

（図 2.3）　屈折率楕円体を用いた結晶中を伝播する光の光学特性の求め方

　電気変位 $\mathbf{D}$、電場 $\mathbf{E}$、波面の進行する方向 $\mathbf{l}$ に関して次の関係があることを思い出して欲しい。

$$\mu_0 v^2 \mathbf{D} - \mathbf{E} + \mathbf{l}(\mathbf{lE}) = 0 \tag{2.19}$$

これより主軸の 1 成分については、$D_1 = \varepsilon_{11} E_1$ なので

$$\left\{ \mu_0 v^2 - \left(\frac{1}{\varepsilon_{11}} \right) \right\} D_1 + \ell_1 (\mathbf{l} \cdot \mathbf{E}) = 0$$

を得る。あるいは

$$\mu_0 v^2 = \mu_0 \left(\frac{c}{n} \right)^2 = \mu_0 \left(\frac{1}{\varepsilon_0 \mu_0 n^2} \right) = \left(\frac{1}{\varepsilon_0 n^2} \right)$$

であるので

$$\left\{ \left(\frac{1}{\varepsilon_0 n^2} \right) - \left(\frac{1}{\varepsilon_{11}} \right) \right\} D_1 + \ell_1 (\mathbf{l} \cdot \mathbf{E}) = 0$$

あるいは

$$\left\{ 1 - \left(\frac{\varepsilon_0 n^2}{\varepsilon_{11}} \right) \right\} D_1 + \left(\varepsilon_0 n^2 \right) \ell_1 (\mathbf{l} \cdot \mathbf{E}) = 0 \tag{2.35}$$

2、3 成分についても同様な式が得られる。さて $\mathbf{l}$ に垂直な平面で楕円体を切った切り口である楕円の長軸、短軸の長さは
平面の方程式

$$x_1\ell_1 + x_2\ell_2 + x_3\ell_3 = 0 \tag{2.36}$$

および(2.33)式

$$B_{11}X_1^2 + B_{22}X_2^2 + B_{33}X_3^2 = 1$$

あるいは B を誘電率 ε で書き直した式

$$\left(\frac{x_1^2}{\varepsilon_1}\right) + \left(\frac{x_2^2}{\varepsilon_2}\right) + \left(\frac{x_3^2}{\varepsilon_3}\right) = 1 \tag{2.37}$$

の条件のもとで

$$r^2 = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 \tag{2.38}$$

の極値を求める問題に帰着する。この問題は Lagrange の未定係数法により求められる。すなわち

$$F = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + 2\lambda_1\left(x_1\ell_1 + x_2\ell_2 + x_3\ell_3\right)$$

$$+\lambda_2\left\{\left(\frac{x_1^2}{\varepsilon_1}\right) + \left(\frac{x_2^2}{\varepsilon_2}\right) + \left(\frac{x_3^2}{\varepsilon_3}\right) - 1\right\} \tag{2.39}$$

なる F を x_1, x_2, x_3 に関して極値を与える $\left(x_1, x_2, x_3\right)$ の組み合わせが求められるものである。そこで

$$\frac{\delta F}{\delta x_1} = 2x_1 + 2\lambda_1\ell_1 + 2\lambda_2\left(\frac{x_1}{\varepsilon_1}\right) = 0 \tag{2.40}$$

$$\frac{\delta F}{\delta x_2} = \frac{\delta F}{\delta x_3} = 0 \tag{2.41}$$

から次式を得る。

$$\left\{1+\left(\frac{\lambda_2}{\varepsilon_1}\right)\right\}x_1+\lambda_1\ell_1=0,$$

$$\left\{1+\left(\frac{\lambda_2}{\varepsilon_2}\right)\right\}x_2+\lambda_1\ell_2=0, \tag{2.42}$$

$$\left\{1+\left(\frac{\lambda_2}{\varepsilon_1}\right)\right\}x_3+\lambda_1\ell_3=0.$$

両辺にそれぞれx_1, x_2, x_3をかけて加え合わせると

$$x_1^2+x_2^2+x_3^2+\lambda_2\left\{\left(\frac{x_1^2}{\varepsilon_1}\right)+\left(\frac{x_2^2}{\varepsilon_2}\right)+\left(\frac{x_3^2}{\varepsilon_3}\right)\right\}$$

$$+\lambda_1\left(x_1\ell_1+x_2\ell_2+x_3\ell_3\right)=0 \tag{2.43}$$

ここで第 2 項の括弧の中は 1、第 3 項の括弧の中は 0 なので

$$r^2+\lambda_2=0 \quad \text{あるいは、} \lambda_2=-r^2 \tag{2.44}$$

(2.42) 式にそれぞれℓ_1, ℓ_2, ℓ_3をかけて加え合わせると

$$\left(x_1\ell_1+x_2\ell_2+x_3\ell_3\right)+\lambda_2\left\{\left(\frac{\ell_1x_1}{\varepsilon_1}\right)+\left(\frac{\ell_2x_2}{\varepsilon_2}\right)+\left(\frac{\ell_3x_3}{\varepsilon_3}\right)\right\}$$

$$+\lambda_1\left(\ell_1^2+\ell_2^2+\ell_3^2\right)=0 \tag{2. 45}$$

第 1 項は 0、第 3 項の括弧の中は 1 であるので

$$\lambda_1+\lambda_2\left\{\left(\frac{\ell_1 x_1}{\varepsilon_1}\right)+\left(\frac{\ell_2 x_2}{\varepsilon_2}\right)+\left(\frac{\ell_3 x_3}{\varepsilon_3}\right)\right\}=0$$

あるいは

$$\lambda_1=-\lambda_2\left\{\left(\frac{\ell_1 x_1}{\varepsilon_1}\right)+\left(\frac{\ell_2 x_2}{\varepsilon_2}\right)+\left(\frac{\ell_3 x_3}{\varepsilon_3}\right)\right\}$$

$$=r^2\left\{\left(\frac{\ell_1 x_1}{\varepsilon_1}\right)+\left(\frac{\ell_2 x_2}{\varepsilon_2}\right)+\left(\frac{\ell_3 x_3}{\varepsilon_3}\right)\right\} \qquad (2.46)$$

(2.45)、(2.46)を(2.42)式に代入すると

$$\left\{1-\left(\frac{r^2}{\varepsilon_1}\right)\right\}x_1+\ell_1 r^2\left\{\left(\frac{\ell_1 x_1}{\varepsilon_1}\right)+\left(\frac{\ell_2 x_2}{\varepsilon_2}\right)+\left(\frac{\ell_3 x_3}{\varepsilon_3}\right)\right\}=0,$$

$$\left\{1-\left(\frac{r^2}{\varepsilon_2}\right)\right\}x_2+\ell_2 r^2\left\{\left(\frac{\ell_1 x_1}{\varepsilon_1}\right)+\left(\frac{\ell_2 x_2}{\varepsilon_2}\right)+\left(\frac{\ell_3 x_3}{\varepsilon_3}\right)\right\}=0,$$

$$\left\{1-\left(\frac{r^2}{\varepsilon_3}\right)\right\}x_3+\ell_3 r^2\left\{\left(\frac{\ell_1 x_1}{\varepsilon_1}\right)+\left(\frac{\ell_2 x_2}{\varepsilon_2}\right)+\left(\frac{\ell_3 x_3}{\varepsilon_3}\right)\right\}=0. \qquad (2.47)$$

これらの式と(2.35)式

$$\left\{1-\left(\frac{\varepsilon_0 n^2}{\varepsilon_{11}}\right)\right\}D_1+\left(\varepsilon_0 n^2\right)\ell_1\left(\mathbf{l}\cdot\mathbf{E}\right)=0$$

と比べると、$r^2=\varepsilon_0 n^2$, $x_i=D_i$ と置けば式は完全に対応することがわかる。すなわち断面の長軸、短軸方向が電気変位ベクトル（振動方向）を与え、その長さ **r** は屈折率に対応する。

（注意）主軸方向の屈折率を主屈折率というが、この時例えば n_1 は 1 方向に伝播する

波の屈折率を表しているのではない。1 方向に振動する波の屈折率を示しているのである。この点に注意せよ。

(3) 結晶の対称性と屈折率楕円体の形

屈折率曲面は、逆誘電率 **B** という 2 階テンソルを係数とするテンソル局面である。従って第 1 章 5 節で述べたように、屈折率曲面の形と主軸の方位は結晶の対称性、特に晶系によって次のように分類できる。

（あ）立方晶系（図 2.4）
この対称要素を含む回転楕円体は球である。球の切り口はどのように切っても円となる。従って立方晶系に属する結晶中を伝播する光は、唯一の屈折率あるいは位相速度を持つ波が伝播する。複屈折は生じない。この場合ガラスや空気、水などを伝播する光と同じである。従って立方晶系を等方性媒質という。屈折率楕円体は

$$\left(\frac{1}{n^2}\right)\left(x^2+y^2+z^2\right)=1 \tag{2.48}$$

と書ける。

（図 2.4）立方晶の屈折率楕円体

（い）六方晶系、三方晶系、正方晶系（図 2.5）
これらの対称要素を含む回転楕円体は、対称軸（3、4、6 回回転軸）に垂直な曲面が円となるスフェロイド（spheroid）である。この時対称軸方向に進む波には複屈折は生じない。この方向を光軸とよぶ。これらの晶系に属する結晶を“ 1 軸性 ”とよぶ。従って屈折楕円体の形は、

$$\left(\frac{1}{n_0^2}\right)\left(x^2+y^2\right)+\left(\frac{1}{n_e^2}\right)z^2=1 \tag{2.49}$$

この時任意の方向に進む波の屈折率は、ひとつは必ず n_0 であり、もうひとつは n_0 と n_e の間にある。n_0 の屈折率を持つ波の振動方向は、光軸と伝播方向に垂直である。また n_e の波の振動方向は、光軸と伝播方向のなす平面内にある。従ってこの平面に垂直方

向に振動する波の屈折率は、伝播方向に依存しない。あたかも等方性媒質のように振舞う。この為にこの屈折率 n_0 を正常光に対する屈折率とよぶ。一方 n_e を異常光に対する屈折率とよぶ。$n_0 < n_e$ の結晶を正結晶、一方、$n_0 > n_e$ を負結晶という。

（図 2.5）一軸性結晶の屈折率楕円体

（う）斜方晶系、単斜晶系、三斜晶系（図 2.6）
屈折率曲面は次式で与えられる。

$$\left(\frac{x}{n_1}\right)^2 + \left(\frac{y}{n_2}\right)^2 + \left(\frac{z}{n_3}\right)^2 = 1 \tag{2.50}$$

イ. 斜方晶系の場合、屈折率曲面の主軸は必ず 2 回回転軸と一致する。
ロ. 単斜晶系の場合、主軸の一つが 2 回回転軸と一致する。あとの 2 つの主軸は、結晶軸とは一致しない。
ハ. 主軸と結晶軸とは一致しない。

いずれの場合も、結晶中を伝播する波は全て異常光である。ただし、断面が円となる方向がある。例えば、n_1、n_2、n_3 の場合、(x, z) 平面の中に n_2 と等しくなる軸があり、それに垂直な方向に進む波は複屈折を持たない。この方向（光軸）は 2 つある為、これらの結晶は 2 軸性結晶とよばれている。

（図 2.6）2 軸性結晶の屈折率楕円体

(4) 結晶中を伝播する波の表示

結晶を伝播する光は、今見てきたような屈折率楕円体で表示されるが、別の表現も存在する。
（あ）単位時間に進む波面によって記述する方法
これは、結晶の中心に光源をおき、一定の時間に波面がどのように進むかを表示するものである。例えば、等方性結晶の場合にはどのような方向に光が進んでも位相速度は 1 つで、しかも同じであるので波面は球で表される。

ア. 1 軸性結晶の場合：正常光は方向依存性がないので球で表される。振動方向は波面の進む方向と光軸を含む面（紙面）に対して垂直である。一方、異常光は方向依存性があるので回転楕円体となる。異常光の振動方向は紙面の中にある。光軸方向ではこれら 2 つの光の速度は同じなので球と楕円体は接する（図 2.7）。

（図 2.7）1 軸性結晶中を伝播する波の波面表示

イ. 2 軸性の場合：2 つの異なる楕円体が波面を表す。しかし 2 つの光軸方向ではこの楕円体は交差する（図 2.8）。

（図 2.8）2 軸性結晶中を伝播する波の波面表示

（い）伝播方向の波数の大きさによる表示

この場合、$\mathbf{k}=\mathbf{k}_0 n$（ここで$\mathbf{k}_0$は真空中を進む波の波数）であるので、結局屈折率の方向依存性を示す。例えば 1 軸性結晶の場合、波面で表したものと球と楕円の相対的な大きさが逆転する。この利点は後で述べるように、非線形光学効果における位相整合関係を直接図示できる点にある。

（図 2.9）結晶中を伝播する波の **k** 空間表示

(5) カルサイト中の光の伝播

カルサイト（方解石$\mathrm{CaCO_3}$）結晶中では屈折率が異なり、振動方向が互いに垂直な 2 つの光が生成して伝播することを第 2 章第 1 節で見た。これらの現象は、フレネルの式、あるいは屈折率楕円体の考えで記述できることを前節で導いた。

カルサイト中を伝播する光をよく観察すると、光が結晶端面に垂直に入射しても 1 つの波は結晶中で曲がってしまうことがわかる。これはスネルの法則とは矛盾する。なぜならスネルの法則では

$$\sin\theta_i = n\sin\theta_r \tag{2.51}$$

となり、$\theta_i = 0$なら$\theta_r = 0$となるからである。この理由は、屈折率楕円体から次のように理解される。その為に、テンソル 2 次曲面の性質を思い出してみよう。

$$\mathbf{p} = [T]\mathbf{q} \tag{2.52}$$

の関係式で表される 2 つのベクトル$\mathbf{p}$、$\mathbf{q}$を結び付けているテンソルTを表す 2 次曲面では、$\mathbf{q}$というベクトルを加えて発生する$\mathbf{p}$ベクトルの方向は、図の P 点での接平面の法線方向であった。屈折率楕円体を記述する方程式は

$$B_{ij}x_i x_j = 1 \tag{2.53}$$

であり、このテンソルB_{ij}は

$$\mathbf{E}_i = B_{ij}\mathbf{D}_j \tag{2.54}$$

の関係を満たす。従って屈折率曲面が与えられた時、**D** ベクトルの方向（波の振動方向）が与えられれば、**E** の方向は求められる。従ってエネルギーの流れる方向であるポインティングベクトルの方向も求められるのである。実際目で見える光の進行方向は、ポインティングベクトルの方向であることに注意せよ。スネルの法則が成立するのは、このポインティングベクトルの方向ではなく、波面の伝播する方向（波数ベクトルの方向）である。等方性媒質では、この 2 つの方向は一致し、スネルの法則はエネルギーの伝播する方向を導くが、結晶のように異方性媒質の場合には異なる。

（図 2.10）カルサイト中を進行する波

さて、カルサイト結晶は三方晶系（$\bar{3}$m）に属する 1 軸性結晶である。従って屈折率楕円体は

$$\left(\frac{1}{n_0^2}\right)\left(x^2 + y^2\right) + \left(\frac{1}{n_e^2}\right)z^2 = 1 \tag{2.55}$$

とかける。ここで正常光屈折率はn_0=1.65、異常光屈折率はn_e=1.48 である（負結晶）。

カルサイト結晶では、光軸（3 回の回転軸）方向は（図 2.10）のように結晶の成長面（劈開面）からある角度を成している。この結晶に垂直に光が入射すると、結晶中の波面の伝播する方向**k** は、2 つの波どちらについてもスネルの法則から結晶表面に垂

直である。従って光の振動方向 **D** は、**k** に垂直な 2 つの方向となる。正常光は、光軸と **k** の方向に垂直（すなわち紙面に垂直）であり、異常光の **D** は紙面の中にある。この時正常光の **D** は、屈折率楕円体の主軸方向であるので、この光の **E** の方向は **D** と一致する。従ってポインティングベクトル $\mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H}$ は、**k** の方向、すなわち結晶面に垂直、すなわち光は結晶中を入射面に垂直に伝播する。従って結晶を回転してもその方向は変化しない。一方異常光では、**E** の方向は **D** が屈折率楕円体と交わる点で接線を引き、その法線から求められる。**S** の方向は、この接線の方向であり、光軸が入射面と一致しない為に入射面とは垂直にならない。この方向は、屈折率楕円体の形がわかり、かつ光軸の傾の角度がわかれば計算できる。