波長変換技術入門(3)

Chap.2　結晶光学と位相整合

2.1　結晶光学と屈折率楕円体

2.2　波面法線面と一軸性結晶

2026/1/2

・波長変換の実験には，選んだ結晶の位相整合角や実効非線形光学係数を知る必要があります．

・ **A. Smith**が**web**上で公開している計算ソフト**SNLO**や非線形結晶を扱う代理店の計算結果に頼ることも手っ取り早い方法です．

・しかし，それでは何故そうなるのか，全く理解できず応用力もつきません．ここでは，特別なアプリケーションソフトウエアを用いずに，自力で位相整合角や実効非線形光学係数の計算，さらに変換効率の計算ができることを目指します．

・第**2**章では，まず波長変換技術に必要な結晶光学の基本を解説し，次に位相整合計算に必要となるセルマイヤー方程式の由来などについても解説します．

Chap.2　結晶光学と位相整合

2.1　光学結晶と屈折率楕円体

・光波が等方的媒質を伝搬するとき，誘電率はスカラ量であるので，電束密度ベクトル と光波電界ベクトルの方向は一致しています.

$$\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E} \tag{2-1}$$

・一方，光波が異方性媒質を伝搬する場合には，電束密度と光電界との間には，次式の関係があります.

$$D_i = \sum_{i,j} \varepsilon_{ij} E_j \quad (i, j = x, y, z) \tag{2-2}$$

・この場合，誘電率は2階のテンソル量となります. このことは，電束密度ベクトルが電界ベクトルの３軸成分の線形結合で表されることを意味します.

・すなわち，$\mathbf{D}$ と $\mathbf{E}$ とは一般的には同一方向でないことを意味します.

・(2-2)を書き下すと次式となります.

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} D_x \\ D_y \\ D_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix} \qquad \textbf{(2-3)}$$

・上式のような一般式は，適当な座標変換により，必ず下記主軸座標系に書き直せることが知られていて，次式のように変換できます.

$$\begin{pmatrix} D_x \\ D_y \\ D_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon_x & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_y & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix} \qquad \textbf{(2-4)}$$

・ここで，誘電率と屈折率との間の関係式，

$$\varepsilon_i / \varepsilon_0 = n_i^2$$

を用いると(2-4)は，次式となる.

$$\begin{pmatrix} D_x \\ D_y \\ D_z \end{pmatrix} = \varepsilon_0 \begin{pmatrix} n_x^2 & 0 & 0 \\ 0 & n_y^2 & 0 \\ 0 & 0 & n_z^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix} \qquad \textbf{(2-5)}$$

$n_i \ (i = x, y, z)$ を主軸座標系における媒質の主屈折率と言います.

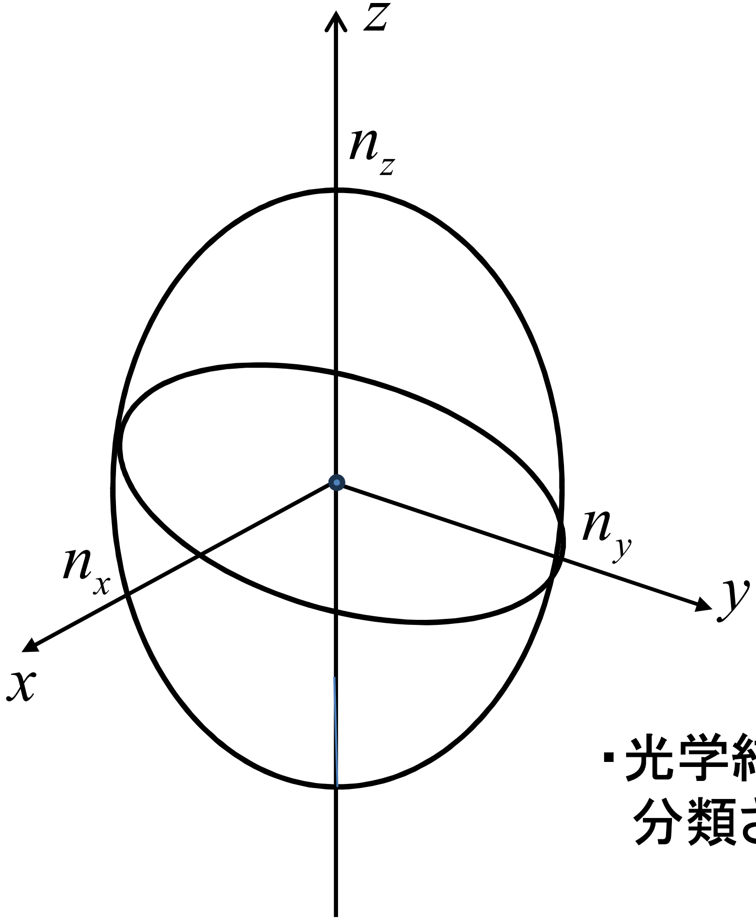
・(**2-5**)と電磁エネルギー保存則とにより，次式が得られます.（証明省略）*

$$\frac{1}{n_x^2} x^2 + \frac{1}{n_y^2} y^2 + \frac{1}{n_z^2} z^2 = 1 \qquad \textbf{(2-6)}$$

(**2-6**)を屈折率楕円体と言います.

***M.Born and E.Wolf; Principles of Optics 7th ed. Cambridge University Press(2002)790.**
沢新之輔他；光工学概論，朝倉書店(**1995)79**など多数の光学系著書に詳述されています.

・屈折率楕円体，式(2-6)は下図のように表されます.



$$\frac{1}{n_x^2}x^2 + \frac{1}{n_y^2}y^2 + \frac{1}{n_z^2}z^2 = 1$$

・ここで，直交座標 x, y, z に対応した屈折率を n_x, n_y, n_z とすると，一般的に，

$$n_x < n_y < n_z$$

であるように座標を決めます.

・光学結晶は，等方性，一軸性および二軸性結晶に分類されます.

・等方性結晶とは，　$n_x = n_y = n_z$ である結晶です.

・一軸性結晶とは2個の主屈折率が等しい結晶のことで，通常，

$$n_x = n_y \equiv n_o \qquad n_z \equiv n_e \tag{2-7}$$

常光線(ordinary ray)屈折率　　　　異常光線(extraordinary ray)屈折率

で表されます．

$n_e > n_o$ の場合を**正の一軸性結晶**

$n_e < n_o$ の場合を**負の一軸性結晶**

といいます．

・一軸性結晶の場合，**z軸を光学軸(optic axis)またはc軸**といい，**c**軸方向に進む光は任意の偏光方位を取ることができ，その屈折率は n_o となります．（詳細は後述）．

・一方，二軸性結晶とは3個の主屈折率がすべて異なる結晶のことで，c軸が2個あります（詳細は後述）．

・一軸性結晶および二軸性結晶は，異方性結晶ともよばれ，この性質が位相整合に利用されます．

・異方性結晶中を光波が伝搬するとき，光波の波数ベクトルの方向が決まると，その位相速度は2つの解を持つことが知られています．

・すなわち，異方性結晶中では，光波は2つの偏光に分離して伝搬することになります．

・これらの解析的詳細は後回しにし，まず屈折率楕円体の持つ意味について説明します*．

・波長変換実験時，偏光方位などを考える場合，屈折率楕円体の性質を思い出すと便利なことが多いからです．

---

*ロッシ(福田国弥他訳); 光学(下), 吉岡書店 (1967) 329，吉原邦夫;物理光学 , 共立出版 (1966)184，沢新之輔他;光工学概論，朝倉書店 (1995) 79 などを参照.

● 屈折率楕円体の意味

・一軸性結晶の屈折率楕円体は，以下に示す意味を持っています．

・図2.1は 一軸性正結晶における屈折率楕円体で，この楕円体の中心Oを通る光波の伝播を考えます．ここで光波とは振動分極波のことを意味しています．

・伝播方向と垂直で中心Oを含む断面は楕円となります．（O,A,Bを含む楕円），以下この楕円上で考えます．

・この楕円の短軸半径OAは，常光線屈折率の大きさを表し，短軸半径方位は常光線の振動方位（分極偏光方位）を表します．

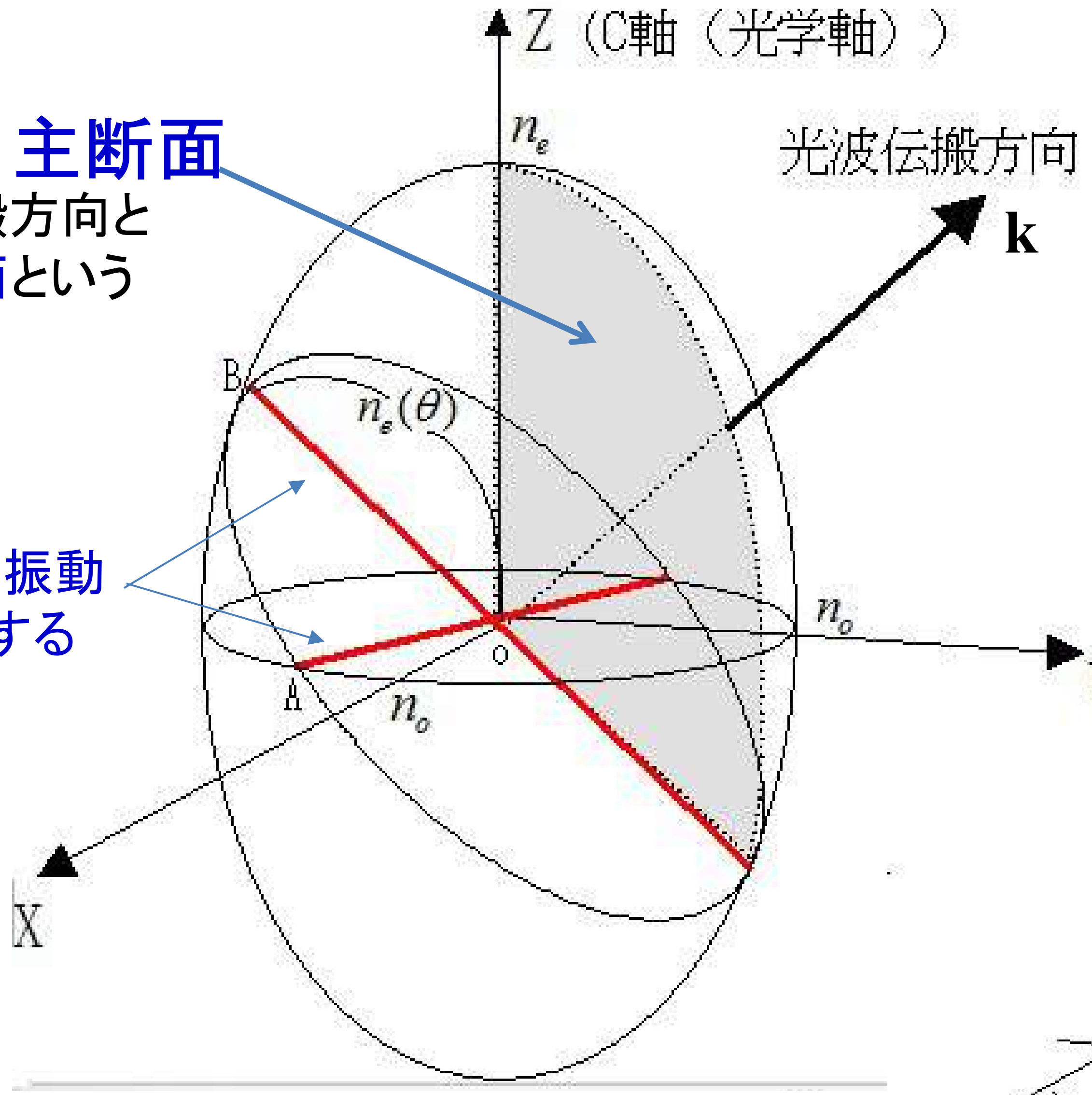
・なお，光波の伝搬方位（波数ベクトル方位）と光学軸とで作る平面を主断面といい（図2.1.グレー部），常光線は，主断面に垂直に振動する波のことです．

・一方，異常光線の屈折率の値は楕円の長軸半径OBの長さで与えられ，OB方位が異常光線の振動方位を与えます．従って異常光線は主断面に平行な偏光方位となります．

● 屈折率楕円体の意味

・光学軸と光波伝搬方向とで作る面を**主断面**という

・結晶内では2つの振動分極方位が存在する(赤線).



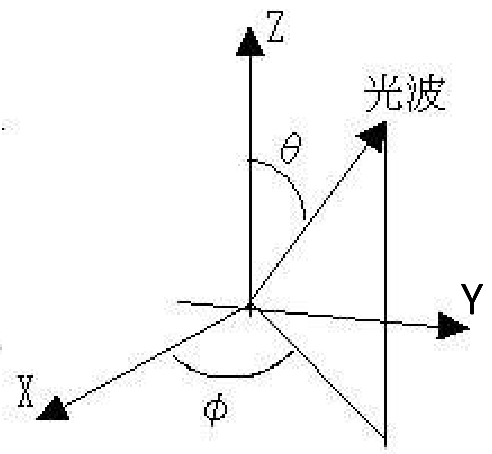


図2.1 一軸性正結晶における屈折率楕円体と振動分極方位.

・さらに，図2.1より，異常光線屈折率 $n_e(\theta)$ は，波数ベクトル $\mathbf{k}$ のz軸からの倒れ角θに依存することが直感的に理解できます．

・一方，常光線の振動方位は常にx-y平面内にあり，屈折率は，波数ベクトルがどの方位にあろうと不変で，常に主屈折率 n_o であることも図2.1から容易に理解できます．

・光波が例えば，y軸方向に伝搬する場合，伝播方向と垂直で中心Oを含む断面は図2.2(a)のグレー部分のようになり，$n_e(\theta)$ は最大値である主屈折率 n_e となります．

・光波がZ軸（光学軸）方向に伝搬する場合，主断面は消滅し，伝播方向と垂直で中心Oを含む断面は円となり長軸，短軸の区別はなくなります（図2.2(b)）．

・即ち，その断面内で任意の方向の振動が許され，その屈折率は n_o となり．等方性媒質を伝搬する場合と同様な振る舞いをします．

・Z軸は光学軸(optic axis)と呼ばれます．

● Y方向(a)およびZ方向(b)伝搬時の分極振動方位

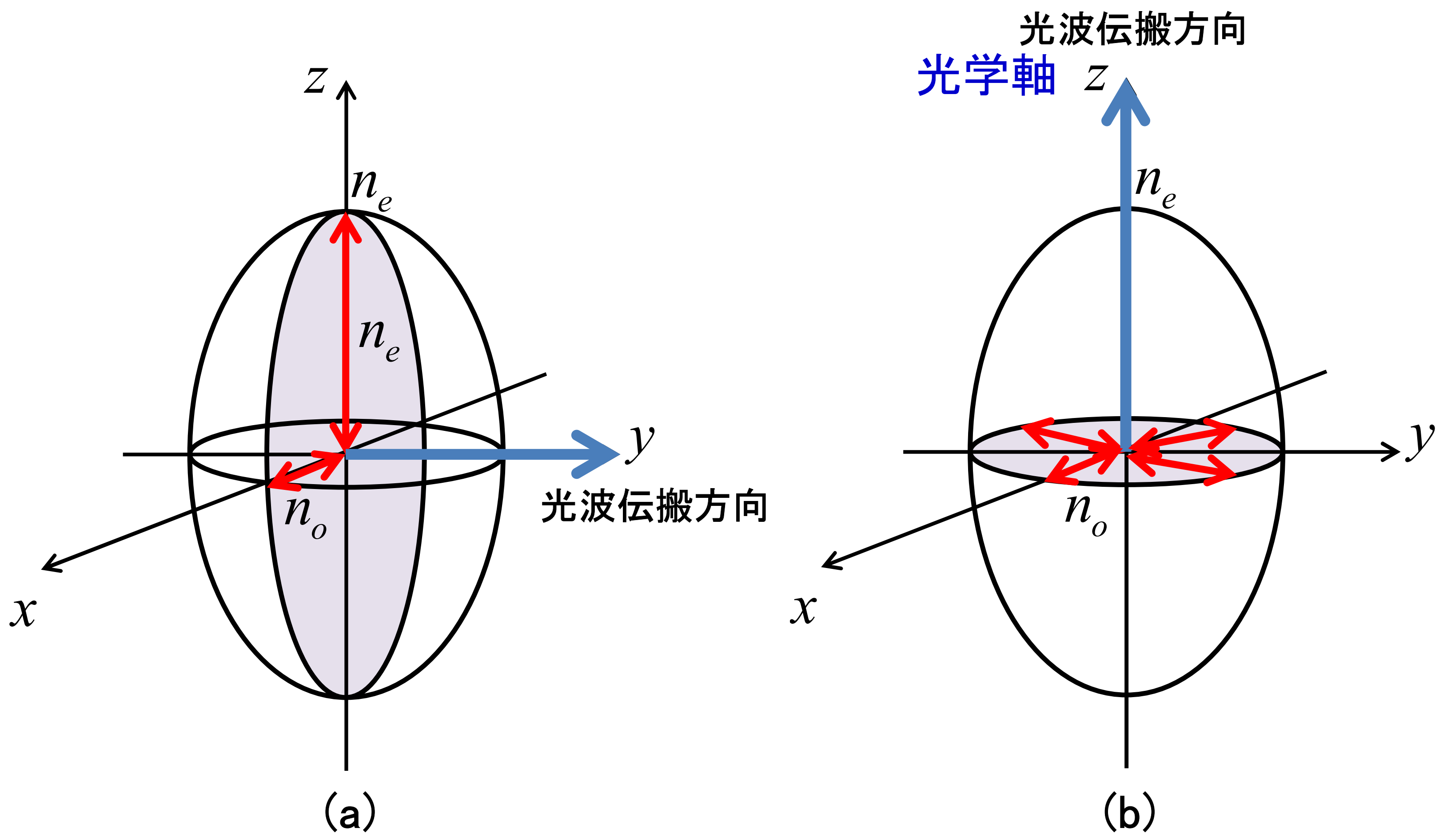


図2.2　(a)光波伝搬方向がy軸の場合，(b)光波伝搬方向がz軸（c軸）の場合

2.2 波面法線面と一軸性結晶

・異方性媒質中の光波の伝搬についてさらに詳しく見ていきます＊.
光波として単一周波数の平面波を考え，電界 $\mathbf{E}(r,t)$,磁界 $\mathbf{H}(r,t)$ は次式で与えられるとします.

$$\mathbf{E}(r,t) = \mathrm{Re}[\mathbf{E}_0 \exp[i(\omega t - \mathbf{k}\cdot\mathbf{r})]] \equiv \mathbf{E}_0 \cos(\omega t - \mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) \quad \textbf{(2.8)}$$

$$\mathbf{H}(r,t) = \mathrm{Re}[\mathbf{H}_0 \exp[i(\omega t - \mathbf{k}\cdot\mathbf{r})]] \equiv \mathbf{H}_0 \cos(\omega t - \mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) \quad \textbf{(2.9)}$$

ここで， $\mathbf{k} = \dfrac{\omega}{c}\cdot n\mathbf{s}$ **(2.10)** は波数ベクトルです.

n は光波の波面進行方向における媒質の屈折率.

$\mathbf{s}$ は光波伝搬方向の単位ベクトルです.

・光学結晶は非導電性，非磁性なのでマクスウェル方程式は，次式となります

＊本節では，主として**A. Yariv and P. Yeh; Optical Waves in Crystal, John Wiley & Sons (1984)**を参考にしています.

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\mu \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} \quad (\mu = \mu_0) \qquad \text{(2-11)}$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \qquad \text{(2-12)}$$

単色平面波の場合，$\nabla \Rightarrow -i\mathbf{k}$, $\partial / \partial t \Rightarrow i\omega$ と置き換えてよいので，

$$\nabla \times \mathbf{E} = -i\mathbf{k} \times \mathbf{E} = -\mu \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} \qquad \nabla \times \mathbf{H} = -i\mathbf{k} \times \mathbf{H} = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}$$

$$\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = i\omega \mathbf{H} \qquad \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = i\omega \mathbf{D}$$

と書き直すことができます．これらの式より，次式を得ます．

$$\mathbf{k} \times \mathbf{E} = \omega \mu \mathbf{H} \qquad \text{(2-13)}$$

H は **k** と **E** に垂直

$$\mathbf{k} \times \mathbf{H} = -\omega \mathbf{D} \qquad \text{(2-14)}$$

D は **k** と **H** に垂直

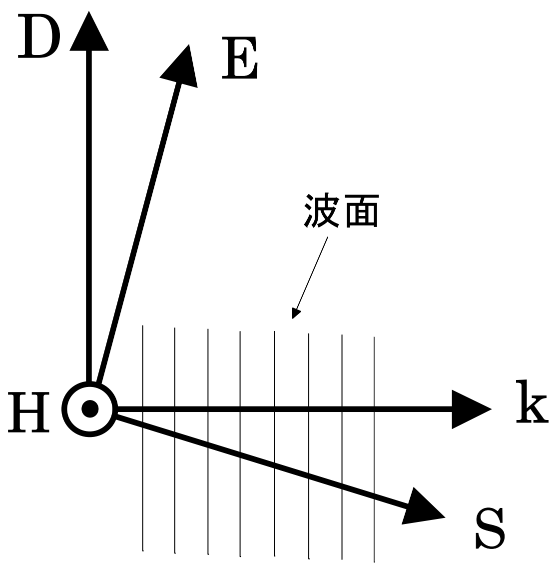
・従って，$\mathbf{D}, \mathbf{H}, \mathbf{k}$ および は $\mathbf{E}, \mathbf{H}, \mathbf{k}$ は直交系を構成し，$\mathbf{D}, \mathbf{E}$ は，同一平面内にあることになります．

・また光波エネルギーの流れを表すポインティングベクトル $\mathbf{S}$ は

$$\mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H}$$

で定義されるので，$\mathbf{S}, \mathbf{E}, \mathbf{H}$ も直交系を構成していることになります．

・一方，媒質の誘電率は通常テンソル量であり，$\mathbf{E}$ と $\mathbf{D}$ は必ずしも同一方向ではないので，光波エネルギーの流れの方向(光線方向)と波面法線方向(位相速度の進行方向)とは平行ではないことを意味します（下図）．



$$\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E}$$

$$D_i = \sum_{i,j} \varepsilon_{ij} E_j \qquad (i, j = x, y, z)$$

波面法線と光線方向との関係

(2-13),(2-14)および $\mathbf{D}=\varepsilon\mathbf{E}$ より，次式を得ます．

$$\mathbf{k}\times(\mathbf{k}\times\mathbf{E})=\omega\mu\mathbf{k}\times\mathbf{H}=-\omega^2\mu\mathbf{D}=-\omega^2\mu\varepsilon\mathbf{E}$$

$$\mathbf{k}\times(\mathbf{k}\times\mathbf{E})+\omega^2\mu\varepsilon\mathbf{E}=0 \qquad \textbf{(2-15)}$$

これは，ベクトル公式 $\mathbf{A}\times(\mathbf{B}\times\mathbf{C})=\mathbf{B}\cdot(\mathbf{A}\cdot\mathbf{C})-\mathbf{C}\cdot(\mathbf{A}\cdot\mathbf{B})$ を用いると，
次式のように変形できます．

$$\mathbf{k}(\mathbf{k}\cdot\mathbf{E})-\mathbf{E}(\mathbf{k}\cdot\mathbf{k})+\omega^2\mu\varepsilon\mathbf{E}=0 \qquad \textbf{(2-16)}$$

これを各成分ごとに書き直し行列表現すると，次式となります．

$$\begin{pmatrix} \omega^2\mu\varepsilon_x-k_y^2-k_z^2 & k_xk_y & k_xk_z \\ k_yk_x & \omega^2\mu\varepsilon_y-k_x^2-k_z^2 & k_yk_z \\ k_zk_x & k_zk_y & \omega^2\mu\varepsilon_z-k_x^2-k_y^2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix}=0 \qquad \textbf{(2-17)}$$

・たとえば，**x**成分について検証すると，**(2-16)**より，

$$(k_xE_x+k_yE_y+k_zE_z)\mathbf{k}-(k_x^2+k_y^2+k_z^2)\mathbf{E}+\omega^2\mu\varepsilon\mathbf{E}=0$$

さらに展開して，次式を得ます．

$$\cancel{k_x^2 E_x} + k_x k_y E_y + k_x k_z E_z - \cancel{k_x^2 E_x} - k_y^2 E_x - k_z^2 E_x + \omega^2 \mu \varepsilon_x E_x = 0$$

対角化されているとする

$$\therefore (\omega^2 \mu \varepsilon_x - k_y^2 - k_z^2) E_x + k_x k_y E_y + k_x k_z E_z = 0$$

よって，（**2-17**）行列の第１行を得ます．

・線形代数の教えるところによると，**(2-17)**が $E_i (i = x, y, z)$ に関し，有意な解，すなわち各成分同時にゼロにならない解を持つためには，次式が成り立たなければなりません．

$$\begin{vmatrix} \omega^2 \mu \varepsilon_x - k_y^2 - k_z^2 & k_x k_y & k_x k_z \\ k_y k_x & \omega^2 \mu \varepsilon_y - k_x^2 - k_z^2 & k_y k_z \\ k_z k_x & k_z k_y & \omega^2 \mu \varepsilon_z - k_x^2 - k_y^2 \end{vmatrix} = 0 \qquad \textbf{(2-18)}$$

・任意の光波伝搬方位に対する媒質の屈折率 n は，式**(2-18)**から求めることができます．式**(2-18)**を書き下すと，次式となります．

$$(\omega^2\mu\varepsilon_x - k_y^2 - k_z^2)(\omega^2\mu\varepsilon_y - k_x^2 - k_z^2)(\omega^2\mu\varepsilon_z - k_x^2 - k_y^2)$$
$$+k_xk_zk_yk_xk_zk_y + k_zk_xk_xk_yk_yk_z \ -k_xk_z(\omega^2\mu\varepsilon_y - k_x^2 - k_z^2)k_zk_x$$
$$-(\omega^2\mu\varepsilon_x - k_y^2 - k_z^2)k_yk_zk_zk_y \ -(\omega^2\mu\varepsilon_z - k_x^2 - k_y^2)k_xk_yk_yk_x = 0$$

・さらに，計算をすすめると，次式を得ます.

$$\omega^2\mu^2\varepsilon_x\varepsilon_y\varepsilon_z - \mu\{\varepsilon_x\varepsilon_y(k_x^2+k_y^2) + \varepsilon_x\varepsilon_z(k_x^2+k_z^2) + \varepsilon_y\varepsilon_z(k_y^2+k_z^2)\}$$
$$+\frac{n^2}{c^2}(\varepsilon_xk_x^2 + \varepsilon_yk_y^2 + \varepsilon_zk_z^2) = 0 \qquad \textbf{(2-19)}$$

・上式はある方位に伝播する光波の屈折率を求める基本の式となっています.

・一方，$k = \dfrac{2\pi n}{\lambda} = \dfrac{\omega n}{c}$ より，次式を得ます.

$$k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = \frac{\omega^2}{c^2}n^2\underbrace{(s_x^2 + s_y^2 + s_z^2)} = \frac{\omega^2}{c^2}n^2 \qquad \textbf{(2-20)}$$

s_i : 波数 $\mathbf{k}$ の方向余弦の各成分

・さらに，誘電率と屈折率との関係より，次式が成り立ちます．

$$\frac{\varepsilon_x}{\varepsilon_0} = \frac{\varepsilon_y}{\varepsilon_0} \equiv n_0^2 \qquad \textbf{(2-21)} \qquad\qquad \frac{\varepsilon_z}{\varepsilon_0} \equiv n_e^2 \qquad \textbf{(2-22)}$$

・これらを用い，**(2-19)**に $\varepsilon_0/(\varepsilon_x\varepsilon_y\varepsilon_z)$ 掛けて整理すると，次式を得ます．

$$\left(\frac{k^2}{n_o^2} - \frac{\omega^2}{c^2}\right)\left(\frac{k_x^2 + k_y^2}{n_e^2} + \frac{k_z^2}{n_o^2} - \frac{\omega^2}{c^2}\right) = 0 \qquad \textbf{(2-23)}$$

ここで，$k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = \left(\dfrac{\omega}{c}n\right)^2$ のことです．

・**(2-23)**左辺第１因子より，次式が得られます．

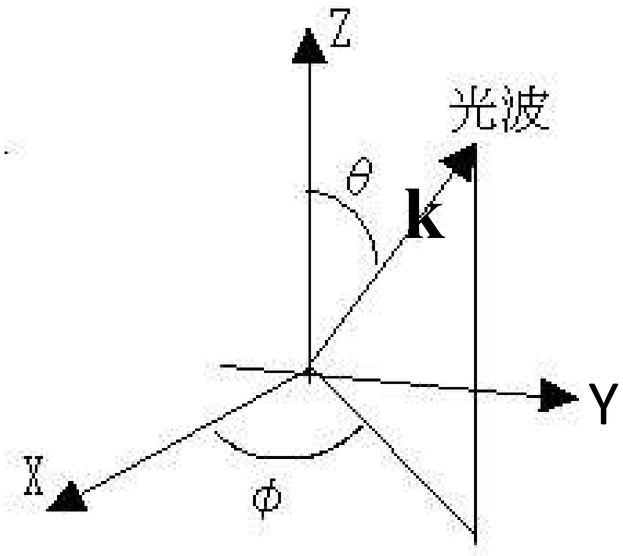
$$\frac{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}{n_o^2} = \frac{\omega^2}{c^2} \Rightarrow \frac{n^2}{n_o^2} = 1 \qquad\qquad n = n_o \qquad \textbf{(2-24)}$$

・この式はどの方位に伝播する光波の屈折率も同じ値，n_o となることを意味していて，常光線に対応する一つの球面を表しています．

・一方，(2-23)第２因子より，次式を得ます．

$$\frac{k_x^2 + k_y^2}{n_e^2} + \frac{k_z^2}{n_o^2} = \frac{\omega^2}{c^2} \qquad \text{(2-25)}$$

・この式は光波の伝播方位に依存して異なった屈折率を与えることを意味し，異常光線に対応する一つの曲面を表しています．極座標表示を(2-25)に適用すると次式を得ます．



$$k_x = \frac{\omega}{c} n \sin\theta \cos\phi$$

$$k_y = \frac{\omega}{c} n \sin\theta \sin\phi$$

$$k_z = \frac{\omega}{c} n \cos\theta$$

$$\left(\frac{\omega^2}{c^2}\right) n^2 \left[\frac{(\sin\theta\cos\phi)^2 + (\sin\theta\sin\phi)^2}{n_e^2} + \frac{\cos^2\theta}{n_o^2}\right] = \frac{\omega^2}{c^2}$$

・さらに計算をすすめると，次式を得ます．

$$n^2\left(\frac{\sin^2\theta}{n_e^2}+\frac{\cos^2\theta}{n_o^2}\right)=1 \quad \Longrightarrow \quad \frac{\sin^2\theta}{n_e^2}+\frac{\cos^2\theta}{n_o^2}=\frac{1}{n^2}$$

・上式中の n は，任意の方位における屈折率を意味しているので，新たに，

$$n \equiv n_e(\theta)$$

と置くと，次式となります．

$$\boxed{n_e(\theta)=\left(\frac{\cos^2\theta}{n_o^2}+\frac{\sin^2\theta}{n_e^2}\right)^{-1/2}} \qquad \textbf{(2-26)}$$

・上式は，z軸を回転軸とする回転楕円体であることがわかります．
式(2-24)で与えられる球面と式(2-26)で与えられる回転楕円体のどちらも
原点から面までの距離はその方位に伝播する波の屈折率になっています．

・例えば，一軸性正結晶（ $n_e > n_o$ ）で考えると，下図のようになります．

(2.26)で， $n_e(\theta = 0°) = (\frac{1}{n_o^2})^{-1/2} = n_o$ $\quad$ $n_e(\theta = 90°) = (\frac{1}{n_e^2})^{-1/2} = n_e$

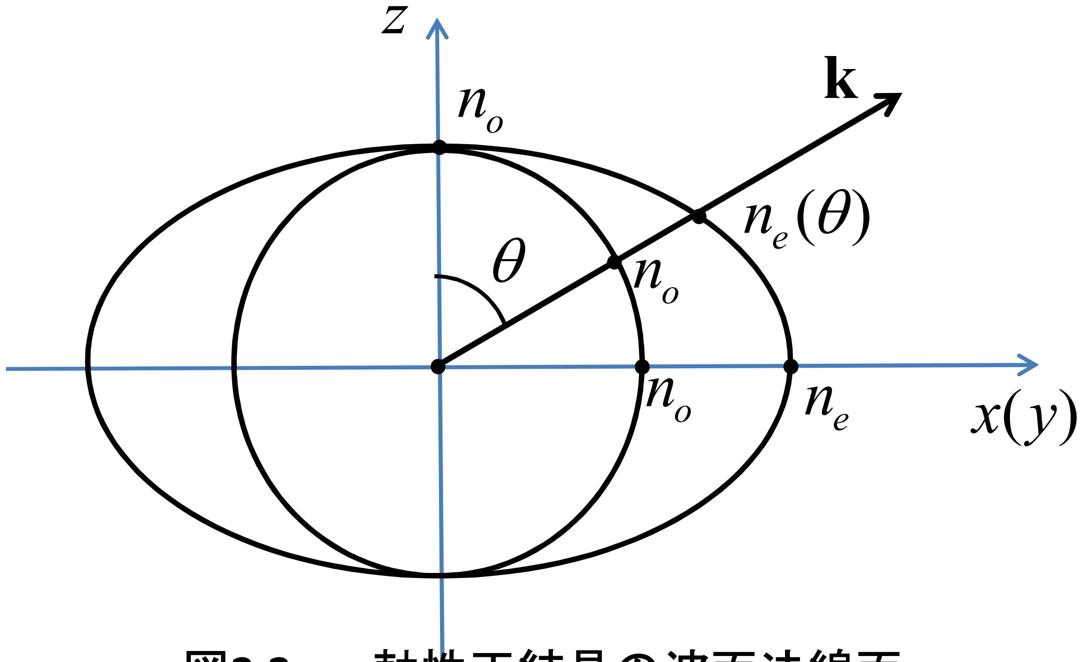


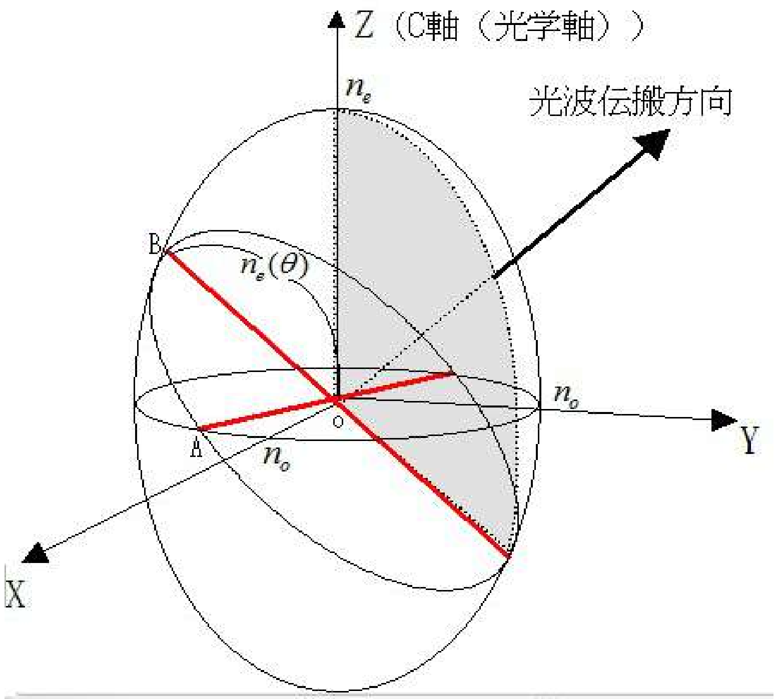
図2.2　一軸性正結晶の波面法線面

・**(2-24),(2-26)**で与えられる曲面を波面法線面**(wave normal surface)**といい，
光波伝播方位に許される2つの偏光**(**光電界**)**に対応する屈折率を与えます

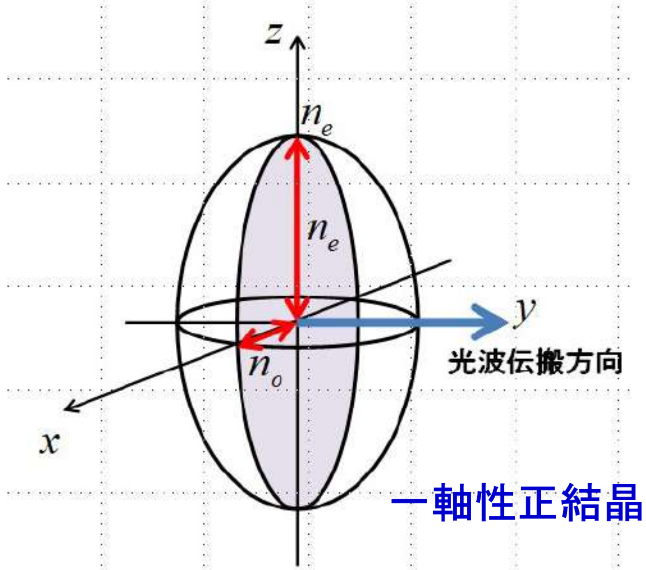
・なお，**x,y,z**軸上の屈折率を主屈折率といい，種々の結晶で測定されています．

●屈折率楕円体との相違

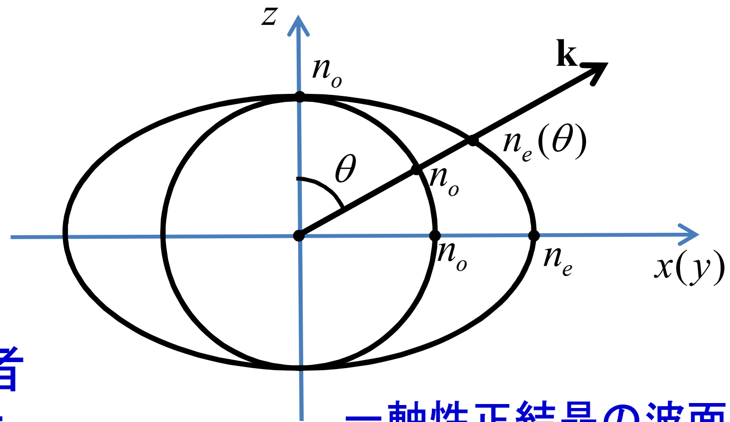
・たとえば，一軸性正結晶で考えると，屈折率楕円体の場合には，中心Oを通り楕円体を光波伝搬方向と垂直に切断してできる楕円で，主断面内にできる長軸の長さが n_e，主断面と垂直方向にできる短軸の長さが n_o でした.



一軸性正結晶の屈折率楕円体



一軸性正結晶の屈折率楕円体



一軸性正結晶の波面法線面

・異常光線に対する屈折率の与え方が両者で90度異なっている点に注意が必要です.