

## ガラスにおけるテラヘルツ光の吸収スペクトルを再現可能な 新しい誘電関数を提案

一般に結晶やガラスなどの凝縮した物質は電磁波を吸収しますが、その際、電磁波の周波数に応じ、テラヘルツ帯を境として、低周波数側では音波の性質、高周波数側では光学的な性質を持つようになります。ガラス形成物質では、その境界において、格子振動（結晶中の原子の振動）に起因する、ポゾンピークと呼ばれる普遍的な集団原子振動が現れます。しかしながら、物質の光学特性を評価するための、従来の基礎的な誘電関数では、この特異なダイナミクスを説明することはできませんでした。

今回、本研究グループは、光（電磁波）と格子振動が相互作用した場合に形成される、フォノン-ポラリトンという準粒子の概念を用いて、ポゾンピークによるガラス特有の光吸収を表すことができる新しい誘電関数を提案しました。この提案では、ポゾンピークよりも低い周波数側では光の減衰が少なく、高い周波数側では散逸が大きいという事実に基づき、従来の誘電関数では説明できなかった、減衰の周波数依存性の表現を可能とし、一つの関数でポゾンピークの出現も表すことができます。この新しい誘電関数により、これまで困難だった、ガラスのテラヘルツ帯吸収スペクトルの定量的理解・解析を進めることが可能になります。さらに、この関数は、光が不規則的な格子振動中の伝搬を記述する理論的枠組みを応用しており、ガラスの格子振動のみならず、磁性など他の性質に起因する新しいポゾンピークの発見や、その理解に必要な基礎知見の構築にもつながることが期待されます。

### 研究代表者

筑波大学数理物質系物質工学域

森 龍也 助教

## 研究の背景

一般に、結晶やガラスなどの原子が凝縮した構造を持つ物質では、電磁波を吸収する際に、その周波数に関して、テラヘルツ帯を境として、低周波数側では音波の性質、高周波数側では光学的な性質が現れます。このような性質により、例えば、携帯電話などで使われるギガヘルツ帯の電磁波は、窓ガラスに対して良い透過性を示しますが、それより高周波側のテラヘルツ光<sup>注1)</sup>は強く吸収されてしまいます。ガラス形成物質では、このテラヘルツ帯の境目で、ボゾンピーク<sup>注2)</sup>と呼ばれる普遍的励起（原子のエネルギーが高い状態に移る現象）が現れます。これは「音波の終わり」に現れるもので、ガラスの物理における未解決問題の一つとして長年議論されてきました。このテラヘルツ帯に唯一現れるボゾンピークは、従来の基礎的な誘電関数<sup>注3)</sup>（減衰調和振動子モデル<sup>注4)</sup>、およびデバイ緩和モデル<sup>注5)</sup>で説明される物質の振る舞いから必ず外れてしまい、その定量評価を行う上で困難をもたらしていました（図1）。つまり、ガラスの普遍的かつ特異なテラヘルツ帯の吸収スペクトルを表現するための関数が存在しないため、実験データの理解が遅れてきたのです。これを理解し、さらに制御することは、基礎物理およびテラヘルツ帯域の通信技術の応用上も重要です。

## 研究内容と成果

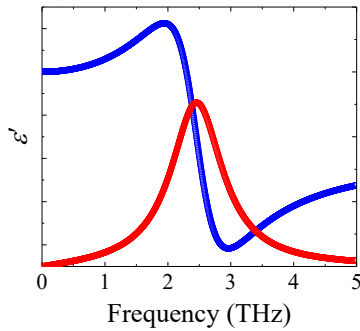
本研究グループは、光（電磁波）と格子振動（結晶中の原子の振動）が相互作用した場合に、物質中を光がどのように伝搬するかを記述するフォノン-ポラリトン<sup>注6)</sup>という準粒子<sup>注7)</sup>の概念を用い、ボゾンピークに起因する特異なテラヘルツスペクトルを表すことが可能な、新しい誘電関数を提案しました。

ガラスの格子振動は、テラヘルツ帯よりも低い周波数の音波の領域では減衰が少なく、高い周波数領域では、ナノスケールの不規則な分子構造によって大きな減衰を示すことが知られています。一方、物質中の電磁気学に基づけば、格子振動と光が相互作用した場合には、フォノン-ポラリトンという準粒子が形成されます。今回の提案では、誘電関数に、この準粒子に対して、ガラスの格子振動のナノスケール域の減衰の振る舞いを取り入れ、一つの関数で、テラヘルツスペクトルに現れるボゾンピークの振る舞いを再現することに初めて成功しました（図2）。これにより、実験データに現れるスペクトル形状や吸収の強さを、理論計算で得られるスペクトルと定量的に比較することができ、従来は困難であった、ガラスのテラヘルツ帯吸収スペクトルの定量的解析を進めることが可能となります。さらに、この関数は、ガラス以外の不規則系の準粒子におけるボゾンピークの現れ方を示すことができるため、格子振動のボゾンピークのみならず、磁性など他の性質に起因する新しいボゾンピークの発見や、その理解のために必要な基礎知見の構築にもつながると考えられます。

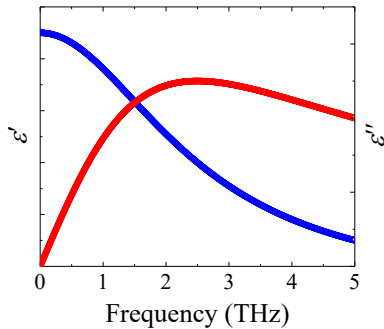
## 今後の展開

今回の研究で提案された誘電関数を様々なガラス形成物質に適用することで、テラヘルツ帯吸収のスペクトル形状や吸収の強さの定量的な理解を行うための基盤データ構築を行っていきます。このような基礎的な理解が進むことで、近い将来に必要となる、次世代通信技術におけるテラヘルツ帯窓材のデザインのための新指針提案などの応用研究の進展も期待されます。

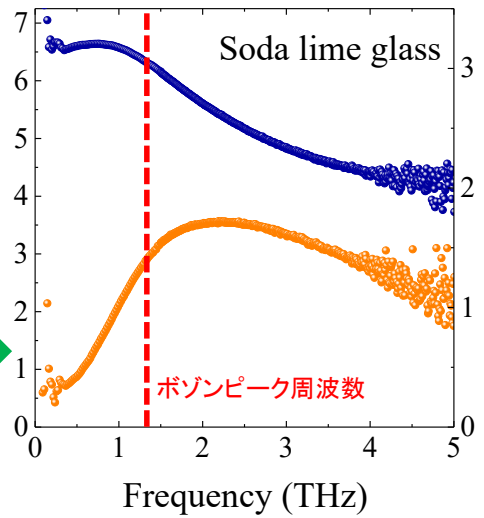
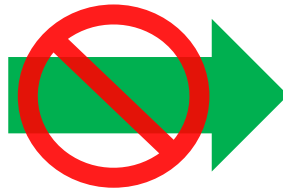
減衰調和振動子



デバイ緩和

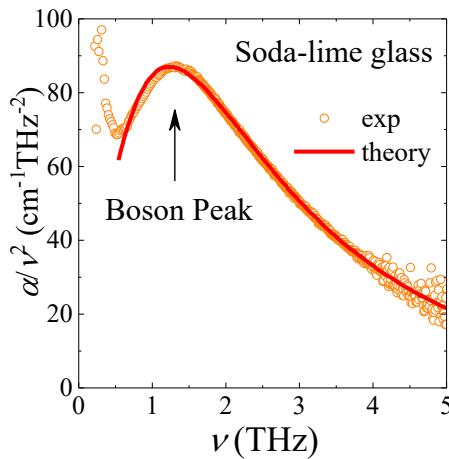


従来(左図)の関数では、ガラスの振る舞い(右)を再現できなかった。



ガラスは、ボゾンピーク周波数よりも低周波側では減衰調和振動子的な振る舞い、高周波側ではデバイ緩和的な振る舞いを示す。

図1 (左) 従来の基礎誘電関数と、(右) ガラスのテラヘルツ (THz) 帯誘電スペクトル。



従来の減衰調和振動子モデル

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_{\infty} - \frac{\omega_0^2(\epsilon_0 - \epsilon_{\infty})}{\omega^2 - \omega_0^2 + i\omega\Gamma}$$



今回の提案モデル

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_{\infty} - \frac{\omega_0^2(\epsilon_0 - \epsilon_{\infty})}{\omega^2 - \omega_0^2 + i\omega\Gamma(k)} \text{ New}$$

図2 (左) ガラスのボゾンピークの赤外スペクトルと提案モデルによるフィッティング (実線)。(右) 従来の減衰調和振動子モデルと、提案モデルの誘電関数の式の比較。

## 用語解説

### 注1) テラヘルツ光

10の12乗ヘルツの振動数を持つ電磁波のこと。波長はサブミリメートル領域であり、遠赤外線と同義。携帯電話などに用いられるギガヘルツ帯の電波と可視光の中間領域にあり、電波が物質を透過する性質と可視光の物体識別の性質を併せ持つ。近年、テラヘルツ光の発生・検出技術が確立しつつあり、空港のセキュリティ技術や建造物・美術品等の非破壊内部検査などへの応用が行われている。

### 注2) ボゾンピーク

ガラスにおいて、物質に依らずテラヘルツ帯に普遍的に現われる振動モード。音波の終わりの振動数領域に現れ、ナノスケールの複数の原子の集団的な振動の性質を示し、音波とは異なるガラス固有の振動である。実験的には、テラヘルツ分光などで検出される。ガラスの物理の未解決問題の一つとされ、これまで多くの実験・理論研究がなされている。

### 注3) 誘電関数

直流の誘電率は、分極のしやすさの指標であり、物質に電圧を与えた場合に蓄えられる電荷との関係を示す係数である。交流電圧（交流電場）を物質に与えた場合の誘電率は、一般に与えた電場の周波数に依存して変化するが、その周波数依存性を誘電関数という。

### 注4) 減衰調和振動子モデル

原子同士が共有結合などでつながっている場合、その原子振動は、最も簡単なモデルとしては、バネの単振動の振る舞いで記述できるが、実際は、振動するほど外的環境により振動振幅は減衰していく。これを表すのが減衰調和振動子モデルである。

### 注5) デバイ緩和モデル

原子(集団)を電場などの外場によって変位させた後に外場を切断すると、元の安定した状態に戻るが、その変位は指数関数的に緩和していく（バネモデルのように往復振動しない）ことが多い。その振る舞いを表すことができるのがデバイ緩和モデルである。

### 注6) フォノン-ポラリトン

一般に、光（電磁波）は、物質中では物質の分極との相互作用により真空中よりも遅くなる。相互作用の相手が格子振動（フォノン）の場合、この遅くなった光を新たな準粒子として捉え、フォノン-ポラリトンと呼ぶ。

### 注7) 準粒子

とある基本粒子が、周りの環境との相互作用によって、見かけ上基本粒子とは異なる振る舞いをする場合、その振る舞いを新たな粒子と見なして準粒子と呼ぶ。例えば、光は水中では屈折率が1よりも大きいため真空中よりも速度が遅く見えるが、これを準粒子の振る舞いと捉えることができる。

## 研究資金

本研究は、科学研究費補助金（JP17K14318, JP18H04476, JP17K18765, JP19K14670, JP16H02081）、及び、旭硝子財団・研究助成の支援を受けて実施されました。

## 掲載論文

【題名】 Physics of Phonon-Polaritons in Amorphous Materials.

（非晶質におけるフォノン-ポラリトンの物理）

【著者名】 Luigi Casella<sup>1)</sup>, Matteo Baggioli<sup>2)</sup>, Tatsuya Mori<sup>3)</sup>, Alessio Zaccone<sup>4)</sup>

1) University of Milan; 2) Universidad Autonoma de Madrid, Cantoblanco; 3) University of

Tsukuba; 4) University of Cambridge

【掲載誌】 Journal of Chemical Physics

【掲載日】 2020年1月4日

【DOI】 10.1063/5.0033371

問合わせ先

【研究に関すること】

森 龍也 (もり たつや)

筑波大学 数理物質系 物質工学域 助教

URL: [https://www.ims.tsukuba.ac.jp/~mori\\_lab/index.html](https://www.ims.tsukuba.ac.jp/~mori_lab/index.html)

【取材・報道に関すること】

筑波大学広報室

TEL: 029-853-2040

E-mail: [kohositu@un.tsukuba.ac.jp](mailto:kohositu@un.tsukuba.ac.jp)