

第5章 屈折率の正体と複素屈折率

原子に光を当てると、原子に束縛されている電子が光の電磁場と相互作用する。その結果、電子の軌道（正確には電子の状態）が変化し、光との相互作用の仕方が変わる。例えば、光を粒子の流れと考え（フォトン）、フォトン1個のエネルギーがちょうど電子状態の変化に伴うエネルギーの変化量に一致すると（共鳴すると）、光を受けた電子はこの新しい状態へ遷移する。また、フォトンのエネルギーが電子状態の遷移と共鳴しなくても、電子は光から影響を受けてもとの状態から変化する。ただし、この場合は電子の固有の安定状態へは遷移できないので、光を止めるとすぐにもとに戻る。通常、光を当てるのは原子1個というわけではなく、多数の原子がら成るガス、固体、あるいは液体に当てるのである。このとき、“物質”の屈折率、あるいはもっと本質的な誘電率が登場し、光と物質との相互作用を鮮やかに表現する。この現象は本質的に量子力学的現象なので、以下ではスタンダードな量子論の方法で、光と原子集団との相互作用、および屈折率と誘電率の正体を明らかにする。

5.1 時間的に変化するハミルトニアンと摂動

原子が光を吸収あるいは放出する過程は、原子に束縛されている電子の状態が電磁波の影響を受けて変化することで表現される。この現象は、光を古典的な電磁波として扱い、原子を離散的なエネルギーとそれに付随する状態関数（状態ベクトル）、つまり量子力学的システムとして考えることで記述できる。更に踏み込んだ議論としては、光も離散エネルギーを持つ状態ベクトルで扱い、光と原子を一つの量子システムとして扱う方法もあるが、それは後で触れる。

さて、原子は無数のエネルギー状態を持つが、このエネルギー順位に対応する状態関数を

$$\psi_i = u_i(\mathbf{r}) e^{-\frac{E_i t}{\hbar}} = u_i(\mathbf{r}) e^{-i\omega_i t}, \quad \text{ここに } i=1,2,\dots \quad \text{および } \omega_i = \frac{E_i}{\hbar} \quad (5.1)$$

と書けば、この関数はシュレーディンガー方程式の解である。

$$i\hbar \frac{\partial \psi_0}{\partial t} = H_0 \psi_0 \quad (5.2)$$

ここに H_0 は光が当たっていないときの原子のハミルトニアンであり、例えば水素原子なら、

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}, \quad p \text{ は電子の運動量} \quad (5.3)$$

などである。(5.1)式を(5.2)式に代入することで、状態関数の空間座標に依存する部分 $u_i(\mathbf{r})$ は、時間を含まないシュレーディンガー方程式

$$H_0 u_i(\mathbf{r}) = E_i u_i(\mathbf{r}) \quad (5.4)$$

を満たすものとして定まる。

ここで、原子が光にさらされていると、電子は電磁波の電場や磁場から力を受け、追加のエネルギーを持つことになる。電磁波の電場や磁場は時間的に変化しているので、この追加のエネルギーも時間変化し、したがって、ハミルトニアンは時間をあからさまに含む。その結果、(5.2)式のハミルトニアンとは異なるものとなり、その解も(5.1)式のように書けない。追加エネルギーの具体的な姿は後で紹介するとして、これを「弱い」時間変化するポテンシャル $V(t)$ で与えると、シュレーディンガー

方程式は

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi = (H_0 + V(t))\psi \quad (5.5)$$

と書ける。この微分方程式は通常は解けないのである種の（伝統的な）近似法を用いて解かれるが、それはそれで、物理的なイメージを沸かせる。以下に、摂動という方法を紹介する。考え方の根底にあるのは、追加的なポテンシャル $V(t)$ がハミルトニアンの中の他の部分に比べて小さいということである。これを摂動ポテンシャルと言う。その小ささを示す指標としてパラメータ λ を導入する。これは簡単に言うと小ささ（あるいは大きさ）を与えるケタとでも考えれば良い。そこで、(5.5)式のシュレーディンガー方程式を

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi = (H_0 + \lambda V)\psi \quad (5.6)$$

と書き直す。ここで、 λ はラベルだと思って欲しい。

次に、(5.6)式の解はそもそも(5.2)式の解である(5.1)式から変化したものとする。その変化した分は λ の1次、2次、3次、などのように λ のべき乗の項を並べて表現できるとする。

$$\psi = \psi_i + \lambda \psi^{(1)} + \lambda^2 \psi^{(2)} + \lambda^3 \psi^{(3)} + \dots \quad (5.7)$$

ここで、 $\psi^{(1)} \cdot \dots$ などは位置と時間の関数である。 λ の次数が大きいくほど寄与が小さな項となる。この関数をシュレーディンガー方程式、(5.6)式に代入すると、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\psi_i + \lambda \psi^{(1)} + \lambda^2 \psi^{(2)} + \lambda^3 \psi^{(3)} + \dots) = (H_0 + \lambda V) (\psi_i + \lambda \psi^{(1)} + \lambda^2 \psi^{(2)} + \lambda^3 \psi^{(3)} + \dots) \quad (5.8)$$

となるが、ここで、 λ の桁ごとにイコールで結ぶ。つまり、同程度の大きさ同士の項を比較するのである。

$$\begin{aligned} \lambda^0: \quad i\hbar \frac{\partial \psi_0}{\partial t} &= H_0 \psi_0, & \lambda^1: \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\psi^{(1)}) &= H_0 \psi^{(1)} + V \psi_0, & \lambda^2: \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\psi^{(2)}) &= H_0 \psi^{(2)} + V \psi^{(1)} \\ \lambda^n: \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\psi^{(n)}) &= H_0 \psi^{(n)} + V \psi^{(n-1)} \end{aligned} \quad (5.9)$$

ここで、各桁の方程式を個別に解くことになるが、ゼロ次の方程式はすでに満たされている。

更に、 n 次摂動の波動関数 $\psi^{(n)}$ を

$$\psi^{(n)} = \sum_{\ell} a_{\ell}^{(n)}(t) u_{\ell}(\mathbf{r}) e^{-i\omega_{\ell} t} \quad (5.10)$$

のように、(5.4)式の解 u_{ℓ} で展開する。(5.10)式を各次数の式、たとえば(5.9)式の n 次摂動の式に代入すると、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(\sum_{\ell} a_{\ell}^{(n)}(t) u_{\ell}(\mathbf{r}) e^{-i\omega_{\ell} t} \right) = H_0 \sum_{\ell} a_{\ell}^{(n)}(t) u_{\ell}(\mathbf{r}) e^{-i\omega_{\ell} t} + V \sum_{\ell} a_{\ell}^{(n-1)}(t) u_{\ell}(\mathbf{r}) e^{-i\omega_{\ell} t} \quad (5.11)$$

となるが、ここで $\frac{\partial}{\partial t}$ と H_0 を演算して、

$$\sum_{\ell} \left(\dot{a}_{\ell}^{(n)}(t) u_{\ell}(\mathbf{r}) e^{-i\omega_{\ell} t} - i\omega_{\ell} a_{\ell}^{(n)}(t) u_{\ell}(\mathbf{r}) e^{-i\omega_{\ell} t} \right) = - \sum_{\ell} i\omega_{\ell} a_{\ell}^{(n)}(t) u_{\ell}(\mathbf{r}) e^{-i\omega_{\ell} t} - \frac{iV}{\hbar} \sum_{\ell} a_{\ell}^{(n-1)}(t) u_{\ell}(\mathbf{r}) e^{-i\omega_{\ell} t} \quad (5.12)$$

を得る。ここに、 $H_0 u_{\ell} = E_{\ell} u_{\ell}$ および、 $\omega_{\ell} = \frac{E_{\ell}}{\hbar}$ を用いた。

ここで、 k 番目の係数 $a_k(t)$ を得るために、 $u_k^*(\mathbf{r}) e^{i\omega_k t}$ を両辺の左から掛けて空間で積分する。さらに

$$\int u_k^*(\mathbf{r}) u_m(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \delta_{km} \quad (5.13)$$

および

$$V_{k\ell} = \int u_k^*(\mathbf{r}) V u_{\ell}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (5.14)$$

と書かれることを使うと、

$$\dot{a}_k^{(n)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \sum_{\ell} a_{\ell}^{(n-1)}(t) V_{k\ell} e^{i(\omega_k - \omega_{\ell})t} = -\frac{i}{\hbar} \sum_{\ell} a_{\ell}^{(n-1)}(t) V_{k\ell} e^{i\omega_k t} \quad (5.15)$$

が得られる。これを積分して、

$$a_k^{(n)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \sum_{\ell} a_{\ell}^{(n-1)}(t') V_{k\ell} e^{i\omega_k t'} dt' \quad (5.16)$$

が求まる。

さて、原子に摂動が加わっていないとき原子は状態 i にいたとすれば、ゼロ次摂動項の $a_i^{(0)} = 1$ が要求され、それ以外の $k \neq i$ では $a_k^{(0)} = 0$ でなければならない。これから、1次および2次摂動項は(5.16)式より、

$$a_k^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \sum_{\ell} a_{\ell}^{(0)}(t') V_{k\ell} e^{i\omega_k t'} dt' = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t V_{ki}(t') e^{i\omega_k t'} dt' \quad (5.17)$$

$$\begin{aligned} a_f^{(2)}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \sum_{\ell} \int_{t_0}^t a_{\ell}^{(1)}(t'') V_{f\ell} e^{i\omega_f t''} dt'' = \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^2 \sum_{\ell} \int_{t_0}^t V_{f\ell}(t'') e^{i\omega_f t''} dt'' \int_{t_0}^{t''} V_{\ell i}(t') e^{i\omega_{\ell} t'} dt' \\ &= \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^2 \sum_{\ell} \int_{t_0}^t dt'' \int_{t_0}^{t''} dt' V_{f\ell}(t'') e^{i\omega_f t''} V_{\ell i}(t') e^{i\omega_{\ell} t'} \end{aligned} \quad (5.18)$$

となる。

ただし、 $t_0 < t'' < t$ でなければならない。ここで、(5.7)式へ戻って、 λ 記号をはずし、各オーダーでの摂動波動関数を u_{ℓ} を用いて展開した結果 (5.10) 式を使えば、状態ベクトルは次のように表される。

$$\begin{aligned} \psi &= \psi_i^{(0)} + \psi^{(1)} + \psi^{(2)} + \dots = \sum_{\ell} a_{\ell}^{(0)}(t) u_{\ell}(\mathbf{r}) e^{-i\omega_{\ell} t} + \sum_{\ell} a_{\ell}^{(1)}(t) u_{\ell}(\mathbf{r}) e^{-i\omega_{\ell} t} + \sum_{\ell} a_{\ell}^{(2)}(t) u_{\ell}(\mathbf{r}) e^{-i\omega_{\ell} t} + \dots \\ &= a_i^{(0)}(t) u_i(\mathbf{r}) e^{-i\omega_i t} + \sum_{\ell} a_{\ell}^{(1)}(t) u_{\ell}(\mathbf{r}) e^{-i\omega_{\ell} t} + \sum_{\ell} a_{\ell}^{(2)}(t) u_{\ell}(\mathbf{r}) e^{-i\omega_{\ell} t} + \dots \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \left(a_i^{(0)} + a_i^{(1)} + a_i^{(2)} + \dots \right) u_i(\mathbf{r}) e^{-i\omega_i t} + \sum_{\ell \neq i} \left(a_\ell^{(1)} + a_\ell^{(2)} + \dots \right) u_\ell(\mathbf{r}) e^{-i\omega_\ell t} \\
&= \left(1 + a_i^{(1)} + a_i^{(2)} + \dots \right) u_i(\mathbf{r}) e^{-i\omega_i t} + \sum_{\ell \neq i} \left(a_\ell^{(1)} + a_\ell^{(2)} + \dots \right) u_\ell(\mathbf{r}) e^{-i\omega_\ell t} \tag{5.19}
\end{aligned}$$

状態ベクトル $u_\ell(\mathbf{r})$ は関数であると同時に、ベクトルとしての性質を持つ。特に、正規直交ベクトル空間を形成する。ベクトルの長さはノルムと言われ、これ等の関数ではノルムは 1 である。これを規格化されているという。更に、 $u_\ell(\mathbf{r})$ と $u_j(\mathbf{r})$ (ℓ と j は違う場合) は直交している。この規格化されていて、互いに直交していることを表すのが(5.13)式の関係である。 $u_\ell(\mathbf{r})$ を基底ベクトルというが、これ等の全体を現すものとして $\{u_\ell\}$ という表記が用いられる。(5.19)式は、状態ベクトルが基底ベクトル $\{u_\ell\}$ を用いて、各基底ベクトルで展開されて表現されていることを表す。この式で、 $(a_\ell^{(1)} + a_\ell^{(2)} + \dots)e^{-i\omega_\ell t}$ などは基底ベクトル u_ℓ の「成分」と言える。ちょうど、3次元空間を移動する物体の位置ベクトルを $\mathbf{R} = x\mathbf{i} + y\mathbf{j} + z\mathbf{k}$ と書くとき、 \mathbf{i} 、 \mathbf{j} 、および \mathbf{k} は長さが 1 で互いに直交する基底ベクトルであり、 x 、 y 、 z は各基底ベクトルへの成分であることと対応する。ベクトルの長さとスカラー積の定義を拡張したものである。

さて、状態ベクトルが時間と共に変化する有様を図 5.1 に示す。

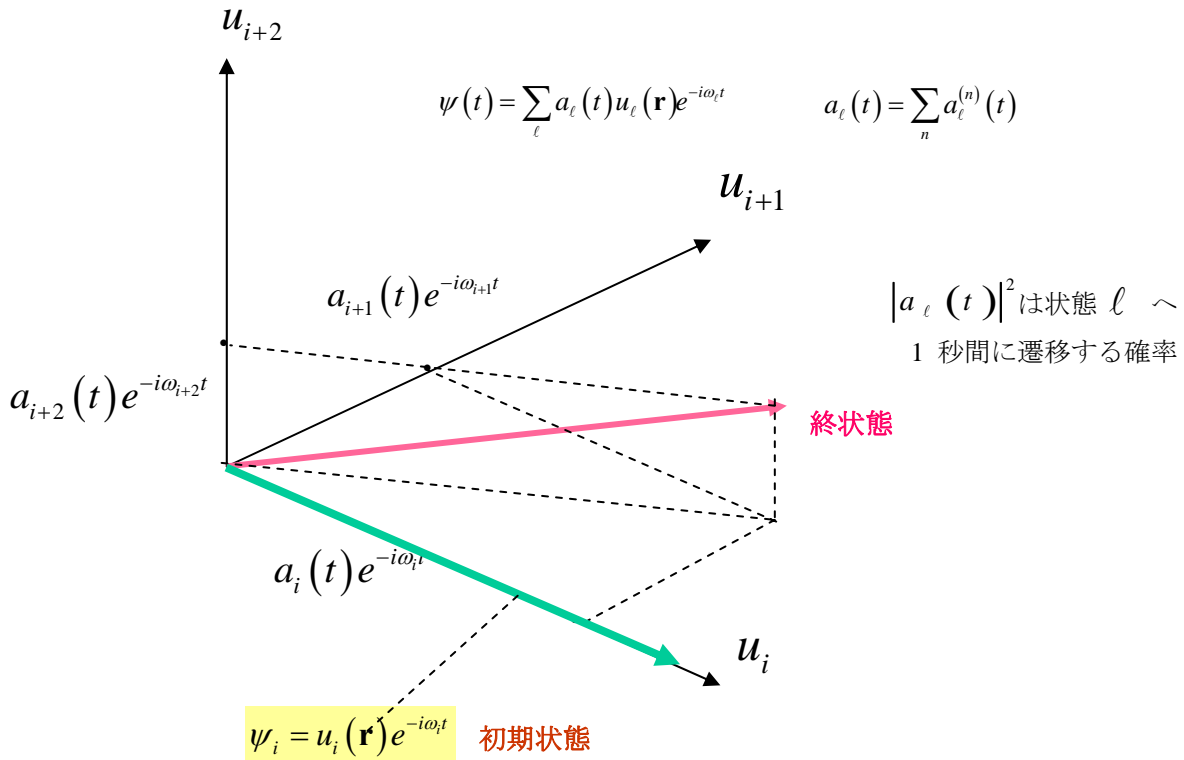


図 5.1 状態ベクトルの推移

5.2 電場と双極子モーメントとの相互作用

今、原子の状態が2つだけと考える。さらに $i=1$ を基底状態、 $i=2$ を励起状態とする (図 5.2)。すなわち $E_1 < E_2$ である。原子に束縛されている電子と電磁波との相互作用で最も効果的なメカニズムは、電気的雙極子モーメントと電場との相互作用である。電磁波の電場により、原子内に雙極子モーメントが誘起され、その雙極子モーメントが電場と相互作用して新たにポテンシャルエネルギーを発生させる。電磁波を原子に当てることにより、電子の状態ベクトル (関数) を電場で変形させることになる。これは、定常状態における状態ベクトル (エネルギー固有関数) をいくつか重ね合わせることで表現されるが、その結果として得られる状態ベクトルは電磁波の振動数で変調される分布を持つ。その結果、電子の位置の期待値が電磁波と同じ振動数で振動することになり、原子一個ずつに振動する雙極子モーメントを持つことになる。その結果として、振動雙極子モーメントが電磁波を放出する。この全ての原子からの電磁波を重ね合わせることで、物質内部で伝播する光を与えることになる。

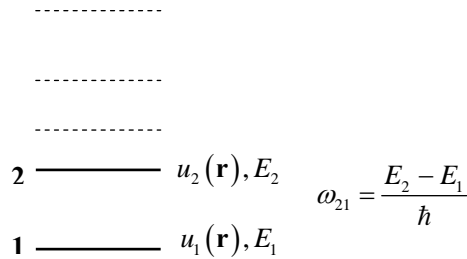


図 5.2 エネルギー準位

さて、原子1個の雙極子モーメントの期待値は雙極子モーメントを演算子と考えて、時刻 t における状態ベクトルで挟んで全空間で積分することで与えられる。雙極子モーメント演算子は

$$\boldsymbol{\mu} = -e\mathbf{r} \quad (5.20)$$

で与えられる。ここで、 \mathbf{r} は電子の位置ベクトルであるが、ここでは演算子である。また、原子が1個の電子を持っている場合について考えている。もし、原子が多数の電子を持つ場合は、それぞれの電子についての位置ベクトルを考え、ベクトル和を作る。光 (電磁波) の電気ベクトルを

$$\mathbf{E}_0 \cos \omega t = \frac{\mathbf{E}_0}{2} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) \quad (5.21)$$

として与える。ただし、電磁波の空間座標への依存性は無視した。これは原子の大きさが光の波長に比べてはるかに小さいので、電磁波の空間的な変化は雙極子との相互作用に影響を与えないことによる。このとき、雙極子モーメントと電場との相互作用によるエネルギーが新たに発生する。それは、

$$V = -\frac{\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{E}_0}{2} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) \quad (5.22)$$

と書ける。これが(5.5)式のハミルトニアンに付加される摂動エネルギー項となる。これを(5.17)式の

第 1 摂動項に代入するわけであるが、今は準位が二つだけの場合を考えているので、もともとの式である、(5.15)式を順位 1 と 2 について書き下すと、

$$\dot{a}_1^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} a_1^{(0)}(t) V_{11} e^{i(\omega_1 - \omega_1)t} - \frac{i}{\hbar} a_2^{(0)}(t) V_{12} e^{i(\omega_1 - \omega_2)t} = -\frac{i}{\hbar} a_1^{(0)}(t) V_{11} - \frac{i}{\hbar} a_2^{(0)}(t) V_{12} e^{i\omega_{21}t} \quad (5.23)$$

$$\dot{a}_2^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} a_1^{(0)}(t) V_{21} e^{i(\omega_2 - \omega_1)t} - \frac{i}{\hbar} a_2^{(0)}(t) V_{22} e^{i(\omega_2 - \omega_2)t} = -\frac{i}{\hbar} a_1^{(0)}(t) V_{21} e^{i\omega_{21}t} - \frac{i}{\hbar} a_2^{(0)}(t) V_{22} \quad (5.24)$$

が得られる。ここで、そもそも摂動をゼロとしたとき、つまり(5.7)式で $\lambda \rightarrow 0$ としたときは摂動が無い定常状態であった。その場合には原子は状態 u_1 にいたことになり、 $\psi = \psi_i + \lambda \psi^{(1)} \rightarrow u_1$ でなければならない。したがって、ゼロ次摂動項では $a_1^{(0)}(t) = 1$ および $a_2^{(0)}(t) = 0$ である。この条件を入れると

(5.23)式と(5.24)式は

$$\dot{a}_1^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} V_{11} = 0 \quad (5.25)$$

$$\dot{a}_2^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} V_{21} e^{i\omega_{21}t} \quad (5.26)$$

となる。ここで、電気的雙極子モーメントの $u_1(\mathbf{r})$ と $u_2(\mathbf{r})$ を基底とした行列の対角成分はゼロになることを用いた。これは、

$$\begin{aligned} V_{11} &= -\int u_1^*(x, y, z) \frac{\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{E}_0}{2} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) u_1(x, y, z) dx dy dz = -\frac{e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}}{2} \left(\int u_1^* \boldsymbol{\mu} u_1 dx dy dz \right) \cdot \mathbf{E}_0 \\ &= -\frac{e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}}{2} \left(E_{0x} \int u_1^* e x u_1 dx dy dz + E_{0y} \int u_1^* e y u_1 dx dy dz + E_{0z} \int u_1^* e z u_1 dx dy dz \right) = 0 \end{aligned}$$

であるからである。この計算で、 x, y, z はそれぞれ奇関数であり、 $u_1(\mathbf{r})$ が遇関数でも奇関数でも被積関数は奇関数になるため、全空間で積分するとゼロになるからである。 $V_{22} = 0$ も同様に導かれる。関数が遇関数である場合、パリティが遇 (even)、奇関数の場合パリティが奇 (odd) という。

ここで、更に(5.26)式を吟味する。この式によると、もし原子に光が当たっていなければ $\dot{a}_2^{(1)}(t) = 0$ と

なり、 $a_2^{(1)}$ は定数で時間的に変化しないことになる。 $a_2^{(0)} + a_2^{(1)} = a_2^{(1)}$ の絶対値の 2 乗 $|a_2^{(1)}|^2$ は上順位 2 に存在する確立を与えるものなので、励起された原子はいつまでも励起されっぱなしになる。これはしかし自然現象を説明しない。自然現象はこの上順位にある原子が時間と共に下順位へ遷移することを物語る。したがって、(5.26)式を次のように書き直す。

$$\dot{a}_2^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} V_{21} e^{i\omega_{21}t} - \gamma_2 a_2^{(1)} = \frac{i \boldsymbol{\mu}_{21} \cdot \mathbf{E}_0}{2\hbar} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) e^{i\omega_{21}t} - \gamma_2 a_2^{(1)} \quad (5.27)$$

この微分方程式で光が当たっていなければ、 $\mathbf{E}_0 = 0$ であり、微分方程式の解は時間的に減衰するもの、つまり $a_2^{(1)} = c e^{-\gamma_2 t}$ 、となる。ここでは現象論的に減衰係数 γ_2 が導入されたが、減衰係数 γ_2 の存在は光と原子を同時に量子化することで (第二量子化) 自然に導かれることが後に示される。さて、この微

分方程式の特解は定数変化法などにより容易に解けて、特解は、

$$a_2^{(1)}(t) = \frac{1}{2\hbar} \left[\frac{\boldsymbol{\mu}_{21} \cdot \mathbf{E} e^{i(\omega_{21} + \omega)t}}{\omega_{21} + \omega - i\gamma} + \frac{\boldsymbol{\mu}_{21} \cdot \mathbf{E} e^{i(\omega_{21} - \omega)t}}{\omega_{21} - \omega - i\gamma} \right] \quad (5.28)$$

として与えられる。(5.27)式の一般解は、同次方程式の減衰項を含む一般解と非同次方程式の特解である(5.28)式(時間的に減衰する項を含まない)との和なるが、原子に光が当たっている定常状態を考えると、ここでは時間的に減衰する項を含まない(5.28)式で与えられる定常解を用いる。なぜなら、光が当たりっぱなしの状況を考えているので減衰項は減衰して消滅、あとには特解だけが残るからである。

また、(5.24)式の解は $a_1^{(1)}(t) = \text{const.}$ となるが、 $t=0$ で電子の状態は「1」だったので、 $a_1^{(1)}(0) = 0$ であ

り、従って任意の時刻でも $a_1^{(1)}(t) = 0$ でなければならない。つまり、順位 1 の状態ベクトルの成分(係数)に対する 1 次摂動は常時ゼロである。時刻ゼロにおいて電子は準位 1 の状態にあったのに、時刻が経過しても準位 1 の状態ベクトルの成分がほとんど変化しない。これは奇妙に感じられるかも知れないが、2 次摂動以上の高次摂動項でゼロ以外の値が現れ、近似の精度を上げると準位 1 の状態成分も変化していく。

したがって、1 次摂動まで取り入れた状態ベクトルは、任意の時刻 t において(5.19)式から、

$$\begin{aligned} \psi &= \psi_1 + \psi^{(1)} = \left(a_1^{(0)}(t) + a_1^{(1)}(t) \right) u_1(\mathbf{r}) e^{-i\omega_1 t} + \left(a_2^{(0)}(t) + a_2^{(1)}(t) \right) u_2(\mathbf{r}) e^{-i\omega_2 t} = u_1(\mathbf{r}) e^{-i\omega_1 t} + a_2^{(1)}(t) u_2(\mathbf{r}) e^{-i\omega_2 t} \\ &= u_1(\mathbf{r}) e^{-i\omega_1 t} + u_2(\mathbf{r}) e^{-i\omega_2 t} \frac{1}{2\hbar} \left[\frac{\boldsymbol{\mu}_{21} \cdot \mathbf{E} e^{i(\omega_{21} + \omega)t}}{\omega_{21} + \omega - i\gamma} + \frac{\boldsymbol{\mu}_{21} \cdot \mathbf{E} e^{i(\omega_{21} - \omega)t}}{\omega_{21} - \omega - i\gamma} \right] \\ &= u_1(\mathbf{r}) e^{-i\omega_1 t} + u_2(\mathbf{r}) \frac{1}{2\hbar} \left[\frac{\boldsymbol{\mu}_{21} \cdot \mathbf{E} e^{i(-\omega_1 + \omega)t}}{\omega_{21} + \omega - i\gamma} + \frac{\boldsymbol{\mu}_{21} \cdot \mathbf{E} e^{i(-\omega_1 - \omega)t}}{\omega_{21} - \omega - i\gamma} \right] \end{aligned} \quad (5.29)$$

として与えられる。ただし、 $a_2^{(0)}(t) = 0$ であることを使った。

5.3 分散理論 (2 準位系)

状態ベクトルが求まったところで、今度は双極子モーメントの期待値を求める。電磁波と原子が相互作用を行っているとき(正確には原子に束縛されている電子との相互作用)、原子系の集団としての物質の応答は分極という量を求めることで議論される。始めに原子 1 個の分極を求め、それをマクロな量へと持っていくことで物質の分極を表現する。

まずは双極子モーメントの期待値を求める。期待値とは原子 1 個について、物理量の観測値を与えるものである。双極子モーメントの期待値は 1 次摂動まで取り入れた状態関数(状態ベクトル)(5.29)式を用いて、次のようにして求める。

$$\begin{aligned}
\langle \boldsymbol{\mu} \rangle &= \int \psi^* \boldsymbol{\mu} \psi dV \\
&= \int \left\{ u_1^*(\mathbf{r}) e^{i\omega_1 t} + u_2^*(\mathbf{r}) \frac{1}{2\hbar} \left[\frac{\boldsymbol{\mu}_{21}^* \cdot \mathbf{E} e^{i(\omega_1 - \omega)t}}{\omega_{21} + \omega + i\gamma} + \frac{\boldsymbol{\mu}_{21}^* \cdot \mathbf{E} e^{i(\omega_1 + \omega)t}}{\omega_{21} - \omega + i\gamma} \right] \right\} \boldsymbol{\mu} \\
&\quad \times \left\{ u_1(\mathbf{r}) e^{-i\omega_1 t} + u_2(\mathbf{r}) \frac{1}{2\hbar} \left[\frac{\boldsymbol{\mu}_{21} \cdot \mathbf{E} e^{i(-\omega_1 + \omega)t}}{\omega_{21} + \omega - i\gamma} + \frac{\boldsymbol{\mu}_{21} \cdot \mathbf{E} e^{i(-\omega_1 - \omega)t}}{\omega_{21} - \omega - i\gamma} \right] \right\} dV \\
&= \frac{1}{2\hbar} \left[\frac{\boldsymbol{\mu}_{21} \cdot \mathbf{E} e^{i\omega t}}{\omega_{21} + \omega - i\gamma} + \frac{\boldsymbol{\mu}_{21} \cdot \mathbf{E} e^{-i\omega t}}{\omega_{21} - \omega - i\gamma} \right] \int u_1^*(\mathbf{r}) \boldsymbol{\mu} u_2(\mathbf{r}) dV + \frac{1}{2\hbar} \left[\frac{\boldsymbol{\mu}_{21}^* \cdot \mathbf{E} e^{-i\omega t}}{\omega_{21} + \omega + i\gamma} + \frac{\boldsymbol{\mu}_{21}^* \cdot \mathbf{E} e^{i\omega t}}{\omega_{21} - \omega + i\gamma} \right] \int u_2^*(\mathbf{r}) \boldsymbol{\mu} u_1(\mathbf{r}) dV \\
&= \frac{1}{2\hbar} \left[\frac{\boldsymbol{\mu}_{21} \cdot \mathbf{E} e^{i\omega t}}{\omega_{21} + \omega - i\gamma} + \frac{\boldsymbol{\mu}_{21} \cdot \mathbf{E} e^{-i\omega t}}{\omega_{21} - \omega - i\gamma} \right] \boldsymbol{\mu}_{12} + \frac{1}{2\hbar} \left[\frac{\boldsymbol{\mu}_{21}^* \cdot \mathbf{E} e^{-i\omega t}}{\omega_{21} + \omega + i\gamma} + \frac{\boldsymbol{\mu}_{21}^* \cdot \mathbf{E} e^{i\omega t}}{\omega_{21} - \omega + i\gamma} \right] \boldsymbol{\mu}_{21} \\
&= \frac{1}{2\hbar} \left[\frac{(\boldsymbol{\mu}_{21} \cdot \mathbf{E}_0 e^{i\omega t}) \boldsymbol{\mu}_{12}}{\omega_{21} + \omega - i\gamma} + \frac{(\boldsymbol{\mu}_{21}^* \cdot \mathbf{E}_0 e^{i\omega t}) \boldsymbol{\mu}_{21}}{\omega_{21} - \omega + i\gamma} \right] + \frac{1}{2\hbar} \left[\frac{(\boldsymbol{\mu}_{21}^* \cdot \mathbf{E}_0 e^{-i\omega t}) \boldsymbol{\mu}_{21}}{\omega_{21} + \omega + i\gamma} + \frac{(\boldsymbol{\mu}_{21} \cdot \mathbf{E}_0 e^{-i\omega t}) \boldsymbol{\mu}_{12}}{\omega_{21} - \omega - i\gamma} \right] \\
&= \frac{1}{2\hbar} \left[\frac{(\boldsymbol{\mu}_{21} \cdot \mathbf{E}_0) \boldsymbol{\mu}_{12}}{\omega_{21} + \omega - i\gamma} + \frac{(\boldsymbol{\mu}_{21}^* \cdot \mathbf{E}_0) \boldsymbol{\mu}_{21}}{\omega_{21} - \omega + i\gamma} \right] e^{i\omega t} + \frac{1}{2\hbar} \left[\frac{(\boldsymbol{\mu}_{21}^* \cdot \mathbf{E}_0) \boldsymbol{\mu}_{21}}{\omega_{21} + \omega + i\gamma} + \frac{(\boldsymbol{\mu}_{21} \cdot \mathbf{E}_0) \boldsymbol{\mu}_{12}}{\omega_{21} - \omega - i\gamma} \right] e^{-i\omega t} \tag{5.30}
\end{aligned}$$

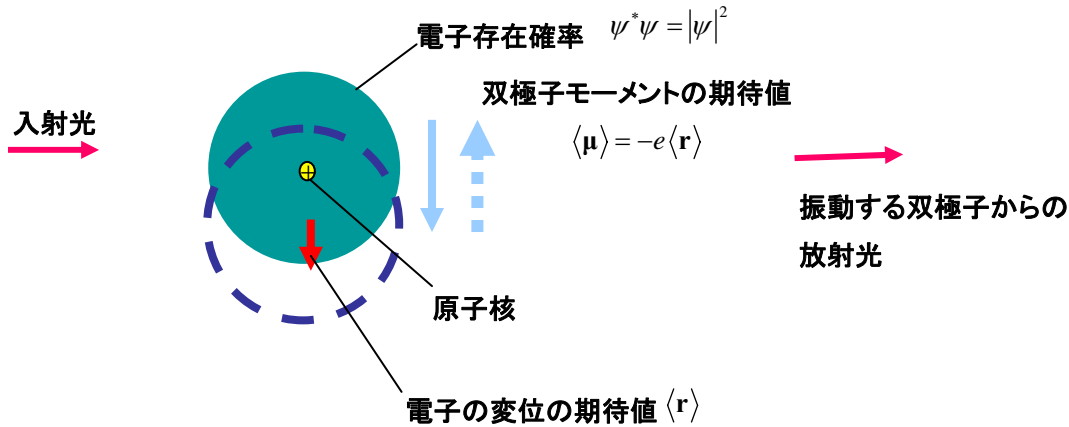


図 7.3 入射光による振動双極子モーメントの励起と放射される光

ここで、原子が孤立している場合、つまり気体を構成する場合について考える。この場合、原子内の電子は電場に引っ張られることになり、電子の変位方向は電場ベクトルと同じ方向（マイナスの電荷なので逆方向）となる。光の電場方向（偏光方向）を x 軸方向にとると、電子の変位も x 成分だけとなり、双極子モーメントは $\boldsymbol{\mu} = -e\mathbf{r} = e(-x, 0, 0)$ あるいは双極子モーメント成分として $\mu = -ex$ を使

うことになる。このとき(5.30)式は、

$$\begin{aligned}
\langle \mu_x \rangle &= \frac{e^2}{2\hbar} \left[\frac{(x_{21} E_0) x_{12}}{\omega_{21} + \omega - \frac{i\gamma}{2}} + \frac{(x_{21}^* E_0) x_{21}}{\omega_{21} - \omega + \frac{i\gamma}{2}} \right] e^{i\omega t} + \frac{1}{2\hbar} \left[\frac{(x_{21}^* E_0) x_{21}}{\omega_{21} + \omega + \frac{i\gamma}{2}} + \frac{(x_{21} E_0) x_{12}}{\omega_{21} - \omega - \frac{i\gamma}{2}} \right] e^{-i\omega t} \\
&= \frac{e^2 |x_{12}|^2}{2\hbar} \left[\frac{1}{\omega_{21} + \omega - \frac{i\gamma}{2}} + \frac{1}{\omega_{21} - \omega + \frac{i\gamma}{2}} \right] E_0 e^{i\omega t} + \frac{e^2 |x_{12}|^2}{2\hbar} \left[\frac{1}{\omega_{21} + \omega + \frac{i\gamma}{2}} + \frac{1}{\omega_{21} - \omega - \frac{i\gamma}{2}} \right] E_0 e^{-i\omega t} \\
&= \frac{e^2 |x_{12}|^2}{2\hbar} \left(\frac{2\omega_{21}}{\omega_{21}^2 - \omega^2 + \frac{\gamma^2}{4} + i\gamma\omega} \right) E_0 e^{i\omega t} + \frac{e^2 |x_{12}|^2}{2\hbar} \left(\frac{2\omega_{21}}{\omega_{21}^2 - \omega^2 + \frac{\gamma^2}{4} - i\gamma\omega} \right) E_0 e^{-i\omega t} \quad (5.31)
\end{aligned}$$

となる。

原子の数密度を N とすると、物質の分極は近似的に $N\langle \mu_x \rangle$ で与えられる。ここに、「近似的」というのは、原子に誘起された双極子モーメント（原子分極）が近くの原子に誘起される双極子モーメントと相関を持つ場合では、単純に $\langle \mu_x \rangle$ の N 倍というわけには行かない。ここでは単純に考えて個々の原子は独立と考える。

$$P = N\langle \mu_x \rangle = \frac{Ne^2 |x_{12}|^2}{2\hbar} \left(\frac{2\omega_{21}}{\omega_{21}^2 - \omega^2 + \frac{\gamma^2}{4} + i\gamma\omega} \right) E_0 e^{i\omega t} + \frac{Ne^2 |x_{12}|^2}{2\hbar} \left(\frac{2\omega_{21}}{\omega_{21}^2 - \omega^2 + \frac{\gamma^2}{4} - i\gamma\omega} \right) E_0 e^{-i\omega t} \quad (5.32)$$

$$= \frac{Ne^2 |x_{12}|^2}{2\hbar} \left(\frac{2\omega_{21}}{\omega_{21}^2 - \omega^2 + \frac{\gamma^2}{4} + i\gamma\omega} \right) E_0 (\cos \omega t + i \sin \omega t) + \frac{Ne^2 |x_{12}|^2}{2\hbar} \left(\frac{2\omega_{21}}{\omega_{21}^2 - \omega^2 + \frac{\gamma^2}{4} - i\gamma\omega} \right) E_0 (\cos \omega t - i \sin \omega t)$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{e^2 N |x_{12}|^2}{\hbar} \left\{ \left(\frac{\omega_{21}}{\omega_{21}^2 - \omega^2 + \frac{\gamma^2}{4} + i\gamma\omega} + \frac{\omega_{21}}{\omega_{21}^2 - \omega^2 + \frac{\gamma^2}{4} - i\gamma\omega} \right) E_0 \cos \omega t \right. \\
&\quad \left. + i \left(\frac{\omega_{21}}{\omega_{21}^2 - \omega^2 + \frac{\gamma^2}{4} + i\gamma\omega} - \frac{\omega_{21}}{\omega_{21}^2 - \omega^2 + \frac{\gamma^2}{4} - i\gamma\omega} \right) E_0 \sin \omega t \right\}
\end{aligned}$$

$$= \frac{2e^2 N |x_{12}|^2}{\hbar} \left(\frac{\omega_{21} \left(\omega_{21}^2 - \omega^2 + \frac{\gamma^2}{4} \right)}{\left(\omega_{21}^2 - \omega^2 + \frac{\gamma^2}{4} \right)^2 + \gamma^2 \omega^2} E_0 \cos \omega t + \frac{\omega_{21} \gamma \omega}{\left(\omega_{21}^2 - \omega^2 + \frac{\gamma^2}{4} \right)^2 + \gamma^2 \omega^2} E_0 \sin \omega t \right) \quad (5.33)$$

電子と相互作用している光が赤外光以上の周波数であれば、 $\omega > 10^{13}$ [s⁻¹]で $\gamma \approx 10^9$ [s⁻¹]に比べるとはるかに大きい。従って、(5.33)式で $\gamma^2/4$ を省く。その結果、分極は、

$$P = \frac{Ne^2 f_{12}}{m} \left(\frac{(\omega_{21}^2 - \omega^2) E_0 \cos \omega t}{(\omega_{21}^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2 \omega^2} + \frac{\gamma \omega E_0 \sin \omega t}{(\omega_{21}^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2 \omega^2} \right) \quad (5.34)$$

$$= \varepsilon_0 \chi' E_0 \cos \omega t + \varepsilon_0 \chi'' E_0 \sin \omega t = A \cos(\omega t - \varphi) \quad (5.35)$$

と表される。ただし、 $A = \varepsilon_0 E_0 \sqrt{\chi'^2 + \chi''^2}$ 、 $\tan \varphi = \frac{\chi''}{\chi'}$ (5.36)

および $f_{12} = \frac{2m\omega_{21} |x_{12}|^2}{\hbar} = \frac{2m\omega_{21} |x_{21}|^2}{\hbar}$ 、 (5.37)

であり、 χ' および χ'' は複素電気感受率 χ の実部と虚部である（後述）。また、 f_{12} を振動子強度（Oscillator Strength）と呼び、遷移の強さを示す。また、 $\omega_{21} = -\omega_{12}$ であるので、振動子強度の定義式から $f_{12} = -f_{21}$ である。

このように、マクロ的な分極は原子に照射される電磁波と同じ角周波数 ω で、しかし位相が φ 遅れて振動することになる。位相の遅れは光の吸収による減衰と光速の遅れを意味する。この振動する双極子モーメントが入射波と同じ振動数の光を放射し、隣の原子を振動させ、減衰と位相の遅れを起こしながら物質中を伝播する光を与える。ところで、分極 $\langle \mu_x \rangle = -e \langle x \rangle$ は電子の位置の期待値 $\langle x \rangle$ に電荷 $-e$ を掛けたものなので、分極を与える(5.34)式を $-e$ で割って $\langle x \rangle$ を求めれば、 $\langle x \rangle$ は次の微分方程式を満たすことが確かめられる。

$$m \frac{d^2 \langle x \rangle}{dt^2} + m\gamma \frac{d \langle x \rangle}{dt} + m\omega_{21}^2 \langle x \rangle = -f_{12} e E_0 \cos \omega t \quad (5.38)$$

$\langle x \rangle$ は電子の位置（ x 座標の期待値）の観測値なので、この微分方程式は、質量が m で電荷が $-e$ の電子がバネ定数 $k = m\omega_{21}^2$ のバネに束縛され、減衰係数 γ で減衰振動しているところへ、電場による外力 $-f_{12} e E_0 \cos \omega t$ が加わっている状況を与える。このときの振動解（特解）が(5.34)式であり、外力と同じ振動数で振動する。振動する電荷は、その振動数の電磁波を放射する。光（電磁波）の物質中での伝播を議論する際に電子は減衰振動子で表現できるとして、いきなり(5.38)式が出てくることが多い。ここでは、原子レベルでの現象に基づいて、実は電子の平均的な動きは(5.35)式で記述されるとの結論を得たことになる。

さて、途中で現れた、

$$\chi' = \frac{2e^2 N |x_{12}|^2}{\epsilon_0 \hbar} \frac{\omega_{21} (\omega_{21}^2 - \omega^2)}{(\omega_{21}^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2 \omega^2} = \frac{e^2 N f_{12}}{\epsilon_0 m} \frac{(\omega_{21}^2 - \omega^2)}{(\omega_{21}^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2 \omega^2}, \quad (5.39)$$

$$\chi'' = \frac{2e^2 N |x_{12}|^2}{\epsilon_0 \hbar} \frac{\omega_{21} \gamma \omega}{(\omega_{21}^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2 \omega^2} = \frac{e^2 N f_{12}}{\epsilon_0 m} \frac{\gamma \omega}{(\omega_{21}^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2 \omega^2} \quad (5.40)$$

は複素電気感受率

$$\chi = \frac{2e^2 N |x_{12}|^2}{\epsilon_0 \hbar} \frac{\omega_{21}}{\omega_{21}^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} = \frac{e^2 N f_{12}}{\epsilon_0 m} \frac{(\omega_{21}^2 - \omega^2) + i\gamma\omega}{(\omega_{21}^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2 \omega^2} = \chi' + i\chi'' \quad (5.41)$$

の実部と虚部として与えられる。

ここで、複素電気感受率の意味を考えてみる。電磁気学で学んだことを思い出して欲しい。もし、原子に印加される電場が時間的に変化しない静電場 \mathbf{E} であれば、原子に束縛される電子の平均位置が変位する。これを \mathbf{r} と書けば、誘起される双極子モーメントは $\boldsymbol{\mu} = -e\mathbf{r}$ である。 \mathbf{r} は \mathbf{E} に比例すると考えられるので $\boldsymbol{\mu} = \alpha\mathbf{E}$ と書き表せる。ここで α は分極率である。もし、物質が単位体積あたり N 個の原子で構成されるならば、この物質に誘起される分極は $\mathbf{P} = N\boldsymbol{\mu} = N\alpha\mathbf{E}$ である。これを

$$\mathbf{P} = \epsilon_0 \chi \mathbf{E} \quad (5.42)$$

と書いて電気感受率 χ が導入される。このとき、電束密度は $\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} = \epsilon_0 (1 + \chi) \mathbf{E} = \epsilon \mathbf{E}$ と表せる。ここで、

$$\epsilon = \epsilon_0 (1 + \chi) \quad (5.43)$$

は物質の誘電率である。ところが、電磁波の電場は交流電場であり、これによって引き起こされる振動する分極の位相が電場の位相からずれることを見た。(5.42)式において電場に電気感受率をかけて位相と振幅を同時に変えて分極を与えたとしたら、電場と電気感受率を共に複素数で表すと都合がよい。電場を $\mathbf{E}_0 \exp(i\mathbf{k}x - i\omega t)$ のように複素数で与えると、この表式は x 軸に沿って進行する波動を与え、その実部を取ると、実際の物理量である電場を与える。この場合は原子を原点に置くと、電子が感じる電場を $\mathbf{E}_0 \exp(-i\omega t)$ と現せる。ここで、原子の分極を(5.42)式で与えると、 χ を複素数で表現すれば、分極の位相を電場から変化したものとして与えることができる。つまり、

$$\mathbf{P}(\omega) = \epsilon_0 \chi(\omega) \mathbf{E}(\omega) \quad (5.44)$$

と書いて $\chi(\omega)$ を複素数とする。実際、電子を駆動する電場を $\mathbf{E}_0 \exp(-i\omega t)$ とすれば、電子の運動方程式(5.38)式は

$$m \frac{d^2 \langle x \rangle}{dt^2} + m\gamma \frac{d \langle x \rangle}{dt} + m\omega_{21}^2 \langle x \rangle = -f_{12} e E_0 \exp(-i\omega t) \quad (5.45)$$

となり、この方程式の特解は

$$\langle x \rangle = \left(\frac{2e |x_{12}|^2}{\hbar} \frac{\omega_{21}}{\omega_{21}^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} \right) E_0 \exp(-i\omega t) \quad (5.46)$$

である。したがって、 $\mathbf{P} = Ne\langle x \rangle = \varepsilon_0 \chi \mathbf{E}$ であることと、(5.46) 式とを比べると、

$$\chi = \frac{2e^2 N |x_{12}|^2}{\varepsilon_0 \hbar} \frac{\omega_{21}}{\omega_{21}^2 - \omega^2 - i\gamma\omega}$$

であることが分かり、(5.41)式が得られる。

ところで、電場を(5.21)式で与えると、つまり実数として与えると、分極は(5.32)式で与えられた。したがって、電気感受率を(5.41)式で与えれば、分極は

$$\mathbf{P} = \frac{\varepsilon_0 \mathbf{E}_0}{2} \{ \chi(\omega) \exp(-i\omega t) + \chi(-\omega) \exp(i\omega t) \} \quad (5.47)$$

と表される。ところで、

$$\chi(-\omega) = \chi(\omega)^* \quad (5.48)$$

の関係があるので、(5.47)式で与える分極 \mathbf{P} は実数である。

次に、電場を $\mathbf{E}_0 \exp(-i\omega t)$ で与え、 $\mathbf{P}(\omega) = \varepsilon_0 \chi(\omega) \mathbf{E}(\omega)$ と $\mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} = \varepsilon_0 (1 + \chi) \mathbf{E} = \varepsilon \mathbf{E}$ の関係から交流電場に対しては、複素電気感受率を用い、

$$\varepsilon = \varepsilon_0 (1 + \chi) = \varepsilon_0 (1 + \chi' + i\chi'') \quad (5.49)$$

と表される。このことは、誘電率が複素数であることを意味する。

$$\varepsilon \equiv \varepsilon' + i\varepsilon'' \quad (5.50)$$

誘電率の実部 ε' と虚部 ε'' はそれぞれ、

$$\varepsilon' = \varepsilon_0 (1 + \chi') = \varepsilon_0 + \frac{e^2 N f_{12}}{m} \frac{(\omega_{21}^2 - \omega^2)}{(\omega_{21}^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2 \omega^2} \quad (5.51)$$

$$\varepsilon'' = \varepsilon_0 \chi'' = \frac{e^2 N f_{12}}{m} \frac{\gamma \omega}{(\omega_{21}^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2 \omega^2} \quad (5.52)$$

として与えられる。電気感受率を物質の外部電場に対する**応答関数**とも呼ぶ。

ここでは、原子を2準位系と考えて議論してきたが、原子には沢山のエネルギー状態があり、これ等を全て考慮して電気感受率や誘電率を求めることが実用上必要とされる。光と相互作用する多準位系についての議論は「資料」に譲る。

5.4 自由電子集団の誘電率

今までは、光と相互作用する電子が原子核に束縛されて飛び飛びのエネルギー準位とそれらに対応する状態ベクトルで記述されてきた。電子が原子核の束縛を離れて自由に運動する場合の誘電率も(5.51)式を基にして導くことができる。自由電子が電場から受ける力は $-eE_0 \exp(-i\omega t)$ なので $f_{12} = 1$ とし、自由電子には束縛が無いので $\omega_{21} = 0$ として、運動方程式(5.45)は

$$m \frac{d^2 \langle x \rangle}{dt^2} + m\gamma \frac{d \langle x \rangle}{dt} = -eE_0 \exp(-i\omega t) \quad (5.53)$$

である。ここから、誘電率の実部と虚部は (5.51) 式、および (5.52) 式において $f_{12}=1$ および $\omega_{21}=0$ として、

$$\varepsilon' = \varepsilon_0(1 + \chi') = \varepsilon_0 - \frac{e^2 N}{m} \frac{1}{\omega^2 + \gamma^2} \quad (5.54)$$

$$\varepsilon'' = \varepsilon_0 \chi'' = \frac{e^2 N}{m} \frac{\gamma}{\omega(\omega^2 + \gamma^2)} \quad (5.55)$$

が得られる。ここで、

$$\omega_p = \sqrt{\frac{e^2 N}{m}} \quad (5.56)$$

をプラズマ周波数という。これは自由電子群が**プラズマ振動**を起こす周波数である。

自由電子群に電波を入射させると、ここで示したような誘電率により、電波は吸収と屈折を受ける。電波の反射率や透過率などもこれ等の誘電率で求められる。計算に際しては複素屈折率を用いるが、その議論は後述される。固体でも金属には自由電子が沢山あり、金属表面に光を当てると、ここで求めた誘電率により、光の吸収や反射率などが求められる。金属内の自由電子は本質的に量子力学的システムであるが、電荷の運動という古典的な表現でも十分に現象を説明できる。これをドルーデモデル (Drude Model) と呼ぶ。量子力学が発案される遙か前に Drude によって提案されたモデルで、今日でも広く用いられる。ところで、半導体では光の反射と吸収については自由電子と束縛電子が寄与する。このように自由電子と束縛電子が光によって励起される場合は、誘電率は両者からの寄与の和になる。

$$\varepsilon' = \varepsilon'_f + \varepsilon'_b \quad (5.57) \qquad \varepsilon'' = \varepsilon''_f + \varepsilon''_b \quad (5.58)$$

これに対して、屈折率は両者の単純な和ではない。

5.5 電気感受率から誘電率、屈折率まで

ここで、電気感受率の実部と虚部の意味を考える。第 2 章で電気伝導度が無視できる媒質中では波数、角周波数、誘電率、および磁気透磁率との間に、平面波の波数ベクトルについて $k^2 = \varepsilon\mu\omega^2$ の関係があることが示された。この場合、光の吸収は無いとして議論が進められた。ところで、伝導電子の無い誘電体でも原子のエネルギー準位間の遷移に相当する光子エネルギーを有する光に対しては吸収を示す。このように、吸収を示す媒質では原子論の観点から誘電率 $\varepsilon = \varepsilon_0(1 + \chi)$ は複素数になることが示された。誘電率を $\varepsilon = \varepsilon' + i\varepsilon''$ と実部と虚部で表せば、これらは、 $\varepsilon' = \varepsilon_0(1 + \chi')$ および $\varepsilon'' = \varepsilon_0\chi''$ で与えられる。第 2 章、3 章で議論された光の伝播、反射、および透過についての結論、つまり屈折率、反射率、および透過率などの表式で誘電率を複素誘電率で置き換えればそのまま使える。ただし、これ等は複素数になる。

光の伝播を議論する場合、屈折率を用いると都合が良い。吸収性媒質では屈折率は

$$\hat{n} = \sqrt{\frac{\varepsilon\mu}{\varepsilon_0\mu_0}} \approx \sqrt{\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0}} = \sqrt{\frac{\varepsilon_0(1 + \chi)}{\varepsilon_0}} = \sqrt{1 + \chi} = \sqrt{1 + \chi' + i\chi''} \quad (5.59)$$

と複素数になる。導体での光の伝播を思い出して欲しい。導体中では複素屈折率を用いて光の屈折や

吸収を議論したが、この場合でも同じ議論が適用できる。 $\hat{n} = n + i\kappa$ として複素屈折率を導入し、この両辺を2乗して(5.59)式の2乗とイコールで結び、実部と虚部どうしを比較すると、

$$\hat{n}^2 = (n + i\kappa)^2 = n^2 + 2in\kappa - \kappa^2 = 1 + \chi' + i\chi''$$

より、

$$n^2 - \kappa^2 = 1 + \chi' = \frac{\varepsilon'}{\varepsilon_0} \quad (5.60)$$

$$2n\kappa = \chi'' = \frac{\varepsilon''}{\varepsilon_0} \quad (5.61)$$

の関係が得られる。電場は $\mathbf{E}_0 \exp i(kx - \omega t)$ として伝播していくが、

$$k = \sqrt{\varepsilon\mu}\omega = \frac{\hat{n}}{c}\omega = \frac{n\omega}{c} + i\frac{\kappa\omega}{c} = k' + ik'' \quad (5.62)$$

と書けるので、電場は

$$\mathbf{E}_0 e^{-k''x} \exp i(k'x - \omega t) \quad (5.63)$$

として伝わっていく。この結果は光が進行するとき、振幅が $e^{-k''x}$ として減衰することを示す。つまり、

k'' は吸収係数としての意味を持ち、 $k'' = \frac{\kappa\omega}{c}$ であるので複素屈折率の虚部 κ は吸収係数に寄与する。磁

場も電場と同じ振動数を持つが、 $\text{rot}\mathbf{E} = -\mu \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}$ より $-ikE_z = -i\omega\mu H_y$ なので、電場と磁場の成分同士の関係として、

$$H_y = \frac{kE_z}{\omega\mu} = \frac{\hat{n}}{c\mu} E_z = \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}} (n + i\kappa) E_z \quad (5.64)$$

が得られる。ただし、 $\mu \approx \mu_0$ を用いた。複素数 $n + i\kappa$ の位相角は正なので、この結果は磁場は電場に対して位相が進んでいることを示す。電場と磁場は互いに直行していて、進行方向に対して垂直方向へ振動することは真空中での伝播と同様である。ところで、ほとんど透明な媒質では $n \gg \kappa$ であるので、

$n \approx \sqrt{1 + \chi'}$ である。また、 $\kappa = \frac{\chi''}{2n} = \frac{\chi''}{2\sqrt{1 + \chi'}}$ であることから、**電気感受率の実部は屈折率を、また虚部**

は実部と共に吸収係数を与えることが分かる。 $n \gg \kappa$ の条件を課さない一般の場合で(5.60)式と(5.61)式から屈折率と減衰係数を誘電率の実部と虚部で表すことが出来る。その関係式を示しておく。これは光などの電磁波を用いて物質の特性を研究することでよく用いられる。

$$n = \sqrt{\frac{1}{2\varepsilon_0} \left(\sqrt{\varepsilon'^2 + \varepsilon''^2} + \varepsilon' \right)} \quad (5.65)$$

$$\kappa = \sqrt{\frac{1}{2\varepsilon_0} \left(\sqrt{\varepsilon'^2 + \varepsilon''^2} - \varepsilon' \right)} \quad (5.66)$$

ここまでの議論は、光が通る物質が気体であるとか液体であるとかは語っていない。つまり、互いに相関の無い原子集団を相手にしているということを確認しておく。これ等の結果を液体や固体などの媒質に適用する場合、媒質の境界面での反射や屈折などの現象が生じる。光がこれ等の媒質に入射す

ると、まず Snell の法則により、屈折する。さらに、媒質内部へ進むと減衰係数 κ の効果で光は減衰していく。他方、境界面では光の反射が生ずる。吸収性媒質として第 3 章では金属などの導体を扱った。吸収性媒質表面での反射率は複素屈折率の実部と虚部を用いて、導体表面での反射率の議論がそのまま使える。

図 5.3(a)(b)(c)(d)(e)には χ' 、 χ'' 、 n 、 κ 、および垂直入射での反射率 R を示した。反射率は(3.60)式を用いて求めた。この計算で使用したパラメータは、 $N = 2 \times 10^{28} m^{-3}$ 、 $e = 1.062 \times 10^{-19} C$ 、 $m = 9.108 \times 10^{-31} kg$ 、 $\omega_{21} = 6.28 \times 10^{15} rad / s$ 、 $\gamma = 5 \times 10^{13} s^{-1}$ 、 $f_{12} = 0.5$ 、 $\epsilon_0 = 8.854 \times 10^{-12} F / m$ である。 ω_{21} は波長 $300nm$ に対する角周波数であり、この媒質の吸収波長である。また、表示されている角周波数は波長では $200nm \sim 400nm$ である。これ等のパラメータに近い値を持つ物質として結晶シリコンなどが上げられる。シリコン原子単体の場合では γ の値が 4 桁以上小さくなり、図に示される様々なピークの幅がはるかに狭くなり、鋭いピークを示す。

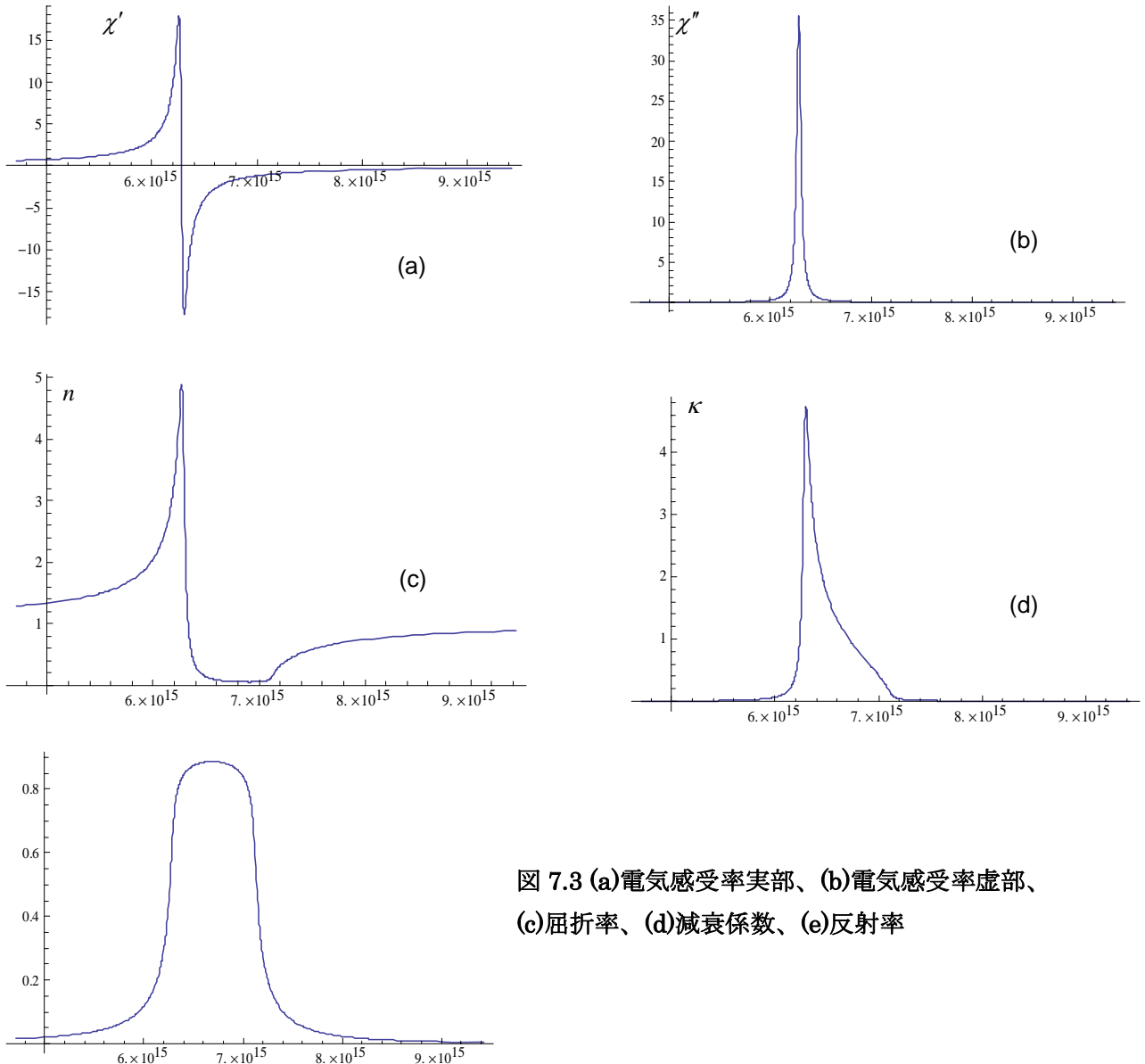


図 7.3 (a)電気感受率実部、(b)電気感受率虚部、(c)屈折率、(d)減衰係数、(e)反射率

今までは、原子は 2 つのエネルギー準位を持つとした場合について、議論してきた。原子は多数のエネルギー準位を持ち、その場合の電気感受率はやや複雑な表現になる。この一般的な場合での詳細は「資料」を参照していただきたい。

5.6 電気感受率テンソルと誘電率テンソル

固体などでは双極子モーメントは入射電場と異なった方向へ誘起される場合が多い。それは、固体を構成する原子の束縛電子が変位しやすい方向があるからである。一般的には分極は次のように表される。詳細は「資料」を参照のこと。

$$\begin{aligned} \mathbf{P} = N \langle \boldsymbol{\mu} \rangle &= \begin{pmatrix} \langle \boldsymbol{\mu} \rangle_x \\ \langle \boldsymbol{\mu} \rangle_y \\ \langle \boldsymbol{\mu} \rangle_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \chi_{xx}^* & \chi_{xy}^* & \chi_{xz}^* \\ \chi_{yx}^* & \chi_{yy}^* & \chi_{yz}^* \\ \chi_{zx}^* & \chi_{zy}^* & \chi_{zz}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{0x} \\ E_{0y} \\ E_{0z} \end{pmatrix} e^{i\omega t} + \begin{pmatrix} \chi_{xx} & \chi_{xy} & \chi_{xz} \\ \chi_{yx} & \chi_{yy} & \chi_{yz} \\ \chi_{zx} & \chi_{zy} & \chi_{zz} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{0x} \\ E_{0y} \\ E_{0z} \end{pmatrix} e^{-i\omega t} \\ &= \boldsymbol{\chi}^* \mathbf{E}_0 e^{i\omega t} + \boldsymbol{\chi} \mathbf{E}_0 e^{-i\omega t} \end{aligned} \quad (5.67)$$

ここで、行列 $\boldsymbol{\chi}$ は電気感受率テンソルと呼ばれる量で、その成分は、たとえば

$$\chi_{xy} = N \sum_j \left(\frac{y_{ij} x_{ji}}{\omega_{ji} + \omega + \frac{i\gamma_j}{2}} + \frac{y_{ji} x_{ij}}{\omega_{ji} - \omega - \frac{i\gamma_j}{2}} \right) \quad (5.68)$$

などである。また、

$$\chi_{xy} = \chi_{yx} \quad (5.69)$$

という対称性を持つ。

このように、一般的には分極は印加電場と異なる方向を向くが、原子などが外部静電場や静磁場中に置かれていない場合あるいは結晶などを形成していない場合などの、物理系が空間的に等方的な場合には分極は入射光の電場（つまり偏光方向）と同じ方向を向く。このときは、テンソルの対角成分だけが存在し、 $\chi_{xx} = \chi_{yy} = \chi_{zz}$ であり、残りはゼロとなる。他方、外部電場や磁場に置かれたり、結晶などのように特定の方向へ規則性を持つような場合では、入射光の偏光方向と異なる方向へ分極する。これらが**複屈折率**などの原因となる。これらの性質を**光学的異方性**と言う。このような現象の簡単なイメージを得るためには、前述の電子の平均的な位置が入射光の電場で強制振動させられることを思い浮かべればよい。電子が変位しやすい方向があるならば、光の電場で引っ張られる方向とは異なる方向へ変位するはずであり、それが物質の応答に異方性をもたらす。

物質の光に対する応答関数として、誘電率テンソルがよく用いられる。誘電率は $\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}_0 (1 + \boldsymbol{\chi})$ で与えられるが、テンソル成分は電気感受率テンソルを用いて、

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix} \quad \text{ここに、} \quad \varepsilon_{xy} = \varepsilon_0 (1 + \chi_{xy}) \quad (5.70)$$

これにより、電束密度ベクトルは、

$$\mathbf{D} = \boldsymbol{\varepsilon}\mathbf{E} : \begin{pmatrix} D_x \\ D_y \\ D_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix} \quad (5.71)$$

で与えられ、電場と同じ方向を向くとは限らない。