

2. 3. 光と原子の相互作用の原理

相互作用ハミルトニアンを考慮しよう。簡単のために1次元問題としよう。

$$E_x(t) = E_0 \cos \omega t \quad H_{\text{int}} = -\mathbf{er} \cdot \mathbf{E} = -exE_0 \cos \omega t = -\mu E_0 \cos \omega t$$

これを代入すると、シュレーディンガ方程式は次になる。

$$i\hbar \frac{d\psi}{dt} = (H_0 - \mu E_0 \cos \omega t) \psi \quad (1)$$

これを解くのに一般解の展開係数 a_1 および a_2 を時間の関数としてみる。

$$\psi(x, t) = a_1(t) \exp\left(-i \frac{E_1}{\hbar} t\right) \phi_1(x) + a_2(t) \exp\left(-i \frac{E_2}{\hbar} t\right) \phi_2(x) \quad (2)$$

式(1)、(2) から $\mu_{12} = \iiint \phi_1^* \mu \phi_2 d\mathbf{r}$ を用いて、次が成り立つ。

$$i\hbar \frac{da_1}{dt} = -\frac{\mu_{12} E_0}{2} a_2 \left[\exp(i(\omega - \omega_0)t) + \exp(-i(\omega + \omega_0)t) \right] \quad (3)$$

演習 2-3

1 式(3)を導き出せ。

ヒント：まず式(2)を(1)に代入し、 $H_0 \phi_n(\mathbf{r}) = E_n \phi_n(\mathbf{r})$ ($n=1, 2$) を用いよ。

次ぎに両辺に ϕ_1^* をかけて全空間で体積積分せよ。そのとき波動関数の規格直交性

$$\iiint \phi_n^* \phi_m d\mathbf{r} = \delta_{nm} \text{ を用いよ。}$$

式(3)で[]内の第一項は二つの角周波数が近い場合に時間に対して緩やかに変化し、第二項はいつでも速く振動変化する。微分方程式を解く過程で時間積分を行うが、速く振動する項は時間積分値は小さい(プラスマイナスがうち消し合って積分結果が残らない)。そこで速く振動する項は最初から除外する(回転波近似)。すると次になる。

$$i\hbar \frac{da_1}{dt} = -\frac{\mu_{12} E_0}{2} a_2 \exp(i(\omega - \omega_0)t)$$

同様にして、
$$i\hbar \frac{da_2}{dt} = -\frac{\mu_{12} E_0}{2} a_1 \exp(-i(\omega - \omega_0)t)$$

この連立微分方程式を解くと、 $\Omega = \sqrt{(\omega - \omega_0)^2 + \left(\frac{\mu_{12}E_0}{\hbar}\right)^2}$ として次になる。

$$\begin{aligned} a_1 &= -\frac{2i\hbar}{\mu_{12}E_0} \exp\left(i\frac{\omega - \omega_0}{2}t\right) \left(\left(\frac{\Omega}{2}S - i\frac{\omega - \omega_0}{2}C\right) \cos\left(\frac{\Omega}{2}t\right) + \left(-\frac{\Omega}{2}C - i\frac{\omega - \omega_0}{2}S\right) \sin\left(\frac{\Omega}{2}t\right) \right) \\ a_2 &= \exp\left(-i\left(\frac{\omega - \omega_0}{2}\right)t\right) \left(C \cos\left(\frac{\Omega}{2}t\right) + S \sin\left(\frac{\Omega}{2}t\right) \right) \end{aligned} \quad (4)$$

演習 2 - 3

2 式 (4) を導き出せ。

時刻 0 で低エネルギー固有状態にある原子に電磁波が作用し始めたとする。初期条件として、 $a_1(0) = \exp(i\phi)$ 、 $a_2(0) = 0$ とすると、 $C=0$ であり $S = i\frac{\mu_{12}E_0}{\hbar\Omega}\exp(i\phi)$ である。

$$\begin{aligned} a_1 &= \left(\cos\left(\frac{\Omega}{2}t\right) - i\left(\frac{\omega - \omega_0}{\Omega}\right) \sin\left(\frac{\Omega}{2}t\right) \right) \exp\left(i\left(\frac{\omega - \omega_0}{2}\right)t + i\phi\right) \\ a_2 &= i\frac{\mu_{12}E_0}{\hbar\Omega} \sin\left(\frac{\Omega}{2}t\right) \exp\left(-i\left(\frac{\omega - \omega_0}{2}\right)t + i\phi\right) \end{aligned}$$

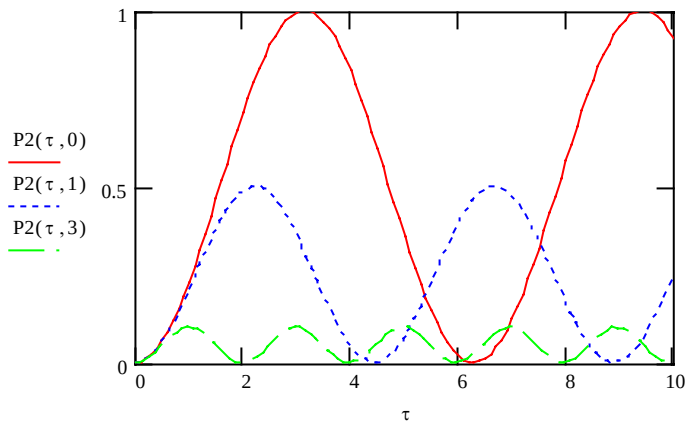
原子が励起状態に見いだされる確率 P_2 は次となる。

$$P_2 = |a_2|^2 = \left(\frac{\mu_{12}E_0}{\hbar\Omega}\right)^2 \sin^2\left(\frac{\Omega}{2}t\right) = \frac{1}{\left(\frac{\hbar(\omega - \omega_0)}{\mu_{12}E_0}\right)^2 + 1} \sin^2\left(\frac{\sqrt{\left(\frac{\hbar(\omega - \omega_0)}{\mu_{12}E_0}\right)^2 + 1}}{2} \left(\frac{\mu_{12}E_0}{\hbar}\right)t\right)$$

図示すると以下の通りである。

$$P2(\tau, d\omega) := \frac{1}{d\omega^2 + 1} \cdot \left(\sin\left(\frac{\sqrt{d\omega^2 + 1}}{2} \cdot \tau\right) \right)^2$$

$\tau := 0, 0.1.. 10$



横軸は規格化した時間である。電磁波のエネルギーを原子が吸収することにより励起状態に見いだされる確率が徐々に増加する。コヒーレントに相互作用する場合には励起状態に見いだされる確率は最大値をとった後再び減少する。すなわち、原子は励起され、再び基底状態に戻り、また励起され、…を繰り返し、電磁波と原子との間で周期的にエネルギーのやりとりが行われる。しかし、実際にはこのように長くコヒーレントな相互作用が続くことは希で散乱などにより中断される。コヒーレント相互作用を観測するには電磁波の強度を極めて強くする必要がある。

励起状態に見出される確率の最大値は比 $\frac{\hbar(\omega - \omega_0)}{\mu_{12}E_0}$ で決まり、最大値に到達するまでの時間

間は $\sqrt{(\omega - \omega_0)^2 + \left(\frac{\mu_{12}E_0}{\hbar}\right)^2}$ で決まる。電磁波の角周波数 ω が原子双極子の振動角周波数 ω_0

に一致すると確率は 1 まで上昇し、最大値に到達するまでの時間は $\frac{\pi\hbar}{\mu_{12}E_0}$ である。電磁波の電界強度 E_0 が強い程速く到達する。

演習 2 - 3

- 3 A 君は $|a_2|^2$ は「励起状態 2 に電子が見いだされる確率」だと考えた。A 君の量子力学は今度は正しいか。
- 4 B 君は上の図に現れた振動について「電子の状態が二つの準位の間を行ったり来たりしているのだ」と考えた。彼は今度は正しいか。