４．光と物質の緩和を考慮した相互作用

電磁波（古典的）

原子に対する外力　　　　　　　　　分極による増幅

（密度行列法）　　　　　　　　　（マクスウエル方程式）

活性媒質（多粒子系・量子力学的）

４．１．分極による電磁波励振

マクスウエルの方程式は次の式である。

$$\nabla\times\mathbf{H}=\frac{\partial\mathbf{D}}{\partial t},\quad \nabla\times\mathbf{E}=-\frac{\partial\mathbf{B}}{\partial t}\quad \mathbf{B}=\mu\mathbf{H},\quad \mathbf{D}=\varepsilon_0\mathbf{E}+\mathbf{P}$$

P は分極を表す。これらを代入すると次となる。

$$\nabla\times\nabla\times\mathbf{E}=-\mu\varepsilon_0\frac{\partial^2\mathbf{E}}{\partial t^2}-\mu\frac{\partial^2\mathbf{P}}{\partial t^2}$$

ベクトル公式およびガウスの法則より次が成り立つ。

$$\nabla\times\nabla\times\mathbf{E}=\nabla\nabla\cdot\mathbf{E}-\nabla^2\mathbf{E},\quad \nabla\cdot\mathbf{E}=\frac{\rho}{\varepsilon_0}=0$$

ここで微視的にはプラス電荷とマイナス電荷が空間的に分かれて存在しているが、電磁波（光）の波長、1μｍオーダー、の尺度で観測すると電気的中性が成り立ち、$\rho=0$ とする。電荷の位置ずれは巨視的な分極となる。上の式より、次が成り立つ。

$$\nabla^2\mathbf{E}-\mu\varepsilon_0\frac{\partial^2\mathbf{E}}{\partial t^2}=\mu\frac{\partial^2\mathbf{P}}{\partial t^2}$$

この式は分極の振動により電磁波が励起されることを描写している。分極は電荷の変位であり、巨視的分極は、$\boldsymbol{n}$ を電子の密度、$\boldsymbol{r}$ を電子の変位ベクトルとして次で表される。

$$\mathbf{P}=en\mathbf{r}=n\boldsymbol{\mu}$$

４．２．密度演算子で表した分極

媒質中で、電磁波の波長より小さく、かつその中に多数の原子が含まれているような微小体積を考えると、その中では電界は空間的に一様と見なしてよく、さらに原子の描写には古典的統計が適用される。このとき３．３．で導いたことから　$\mathbf{P} = n\,\mathrm{Tr}(\rho\boldsymbol{\mu})$　である。

ここに ρ は密度演算子であり、その運動方程式は次で与えられる（３．４）。

$$i\hbar\frac{d\rho}{dt} = -\left[\rho, H_0 + H_{\mathrm{int}} + H_{random}\right]$$

ここに、全ハミルトニアンを構成するのは、電子エネルギH_0、電界と電子との相互作用エネルギ（２．１．参照），　$\mathrm{H}_{\mathrm{int}} = -\boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{E}$、そして衝突などのランダム項$H_{\mathrm{random}}$である。

４．３．電界中での密度演算子

まず衝突現象が無い場合を調べよう。密度演算子の運動方程式は次である。

$$i\hbar\frac{d\rho}{dt} = -\rho H_0 + H_0\rho + \left(\rho\boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\mu}\rho\right)\cdot\mathbf{E}$$

エネルギ固有状態による表示を用い　$\omega_{nm} = \dfrac{E_n - E_m}{\hbar}$ とすると次式になる。

$$i\hbar\frac{d\rho_{nm}}{dt} = \hbar\omega_{nm}\rho_{nm} + \sum_k\left(\rho_{nk}\boldsymbol{\mu}_{km} - \boldsymbol{\mu}_{nk}\rho_{km}\right)\cdot\mathbf{E}$$

演習４．３．

上の式を導出せよ。ヒント：$\left(H\rho\right)_{nm} = \sum_l H_{nl}\rho_{lm}$ などを用いよ。

今、二準位系を考える。基底準位aと励起準位bがあり、上で、nはaまたはb，mもaまたはbである。ダイポールモーメントオペレータの行列要素は、$\mu_{aa}=\mu_{bb}=0$（以前に説明)、μ_{ab}は波動関数の位相の取り方を選んで実数にすることができる。これをμと表す。すると、各行列要素の運動方程式は次のようになる。

$$\frac{d\rho_{aa}}{dt}=-i\left(\rho_{ab}-\rho_{ba}\right)\frac{\boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{E}}{\hbar}\qquad\frac{d\rho_{bb}}{dt}=-i\left(\rho_{ba}-\rho_{ab}\right)\frac{\boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{E}}{\hbar}$$

$$\frac{d\rho_{ab}}{dt}=-i\omega_{ab}\rho_{ab}-i\left(\rho_{aa}-\rho_{bb}\right)\frac{\boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{E}}{\hbar}$$

今、ある時間だけ電磁波と電子とが相互作用したのち、電磁波が零になったとすると、上の式は次のようになる。

$$\frac{d\rho_{aa}}{dt}=\frac{d\rho_{bb}}{dt}=0,\quad\frac{d\rho_{ab}}{dt}=-i\omega_{ab}\rho_{ab}$$

$$\therefore\qquad\rho_{aa}=const.,\quad\rho_{bb}=const.,\quad\rho_{ab}=const.\exp(-i\omega_{ab}t)$$

二つの準位に見いだされる確率は一定であり、ρ_{ab}はいつまでも振動し続ける。しかし、実際には電子は励起状態には有限時間しか止まらないで基底状態に遷移する。また対角要素ρ_{ab}の振動は減衰していく。この原因は、自然放出、他の粒子との相互作用などがある。これらはいずれも不規則であり、総称して緩和と呼ぶ。

４．４．不規則擾乱による密度演算子緩和

不規則な擾乱を受けると密度演算子の運動に制動が加わる（導出に興味がある者は旧テキスト付録参照)。その結果、不規則擾乱の効果による密度行列要素の時間変化は

$$\frac{d\rho_{kl}}{dt}=-i\omega_{kl}\rho_{kl}-\gamma_{kl}\rho_{kl}\qquad\frac{d\rho_{kk}}{dt}=-\gamma_{k}\,\rho_{kk}+\sum_{m}\gamma_{km}\,\rho_{mm}$$

となり、制動項が導入される。γは緩和係数である。非対角要素の緩和係数と対角要素の緩和係数とは異なる値をもつ。

演習４．４
上の式から、非対角項の時間変化において、緩和が無い時と比較すると何が変化しているか答えよ。