2.4 横波,縦波および表面波

　真空中の光

$$-\boldsymbol{\mu_0\varepsilon_0}\ddot{\boldsymbol{E}} = \nabla\times(\nabla\times\boldsymbol{E}) = \nabla(\nabla\cdot\boldsymbol{E}) - \nabla^2\boldsymbol{E} \tag{2.9}$$

の解は

$$\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E}_0\exp[i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \omega t)] \qquad (2.19)'$$

の横波電磁波である。これは物質中の光においても同様である。ただし、今では(2.9)式は

$$\boldsymbol{D} = \varepsilon(1+\chi)\boldsymbol{E} = \varepsilon\varepsilon_0\boldsymbol{E} \tag{2.27}$$

より

$$\nabla\cdot\boldsymbol{D} = \nabla\varepsilon_0\varepsilon(\omega)\boldsymbol{E} = 0 \tag{2.43}$$

の形式を使っている。

　上記の$\boldsymbol{E}\perp\boldsymbol{k}$における横波の解とは別に、真空中（$\varepsilon_{\mathrm{vac}}\equiv 1$）に存在しない場合、すなわち

$$\varepsilon(\omega) = 0 \tag{2.44a}$$

の解がある。これは、$\varepsilon(\omega)$が消えたときの周波数において、縦波の解が分かることを意味する。このときの周波数をω_Lと置き

$$\varepsilon(\omega_L) = 0 \quad (\boldsymbol{E}\parallel\boldsymbol{k}) \tag{2.44b}$$

ということに留意する。

　今、物質中の縦波について考える。(2.44)式から縦波のモードは

$$\boldsymbol{D} = 0 \;\;,\;\; \boldsymbol{E} = -\frac{1}{\varepsilon_0}\,\boldsymbol{P} \tag{2.45}$$

を持つことが分かる。物質中ではマクスウェル方程式 $\nabla\times\boldsymbol{E} = -\dot{\boldsymbol{B}}$ が有効であるので、非磁性体物質中の平面波

$$\boldsymbol{H}_0 = (\omega\mu_0)^{-1}\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{E}_0 \tag{2.46}$$

が導かれる。縦波は(2.44)式から

$$\boldsymbol{H} = 0 \;\;,\;\; \boldsymbol{B} = \mu_0\boldsymbol{H} = 0 \tag{2.47}$$

となる。物質中で見られる縦波は電磁波ではなく、$\boldsymbol{D},\boldsymbol{B}$ および $\boldsymbol{H}$が消えて、互いに反対の$\boldsymbol{E}$と$\boldsymbol{P}$の純粋な分極モードであることを意味する。

　今まで物質のバルクにおける光の性質を考慮していた。物質のバルクの境界条件は、例えば真空中と半導体との間の界面のように、いくつかの特別な配慮が必要である。この境界条件は光の反射において重要であるので、これについては Sects.3.1.1-3.1.4；5.4.2；5.6 を参照すること。

ここで言いたいことは、境界条件は表面モードに従うということである。すなわち、界面に沿って伝播し、電場の振幅が両側で指数関数的に減少する波である。これらの波は表面ポラリトンとして知られている。詳細は Sect.5.6 に示す。

2.5 光子,量子力学および分散関係のいくつかの側面

マクスウェル方程式は、ローレンツ力とともに光の古典論の基礎である。それらは、ホイヘンスの原理やフーリエ光学などの枠組みにおいて、光の伝播やスリット,回折格子などにおける回折のような問題を説明することができる。

物質と光の相互作用において、量子性は明白に現れる。例えば、周波数ωの光は物質と量子数$\hbar\omega$のエネルギーを交換する光電効果である。したがって光の適切な説明は、量子力学や量子電気力学の観点で行なう。しかし、ここではこれらの理論の詳細や光源のコヒーレント,インコヒーレントの量子統計学の側面については説明しない。

電磁場は、ベクトルポテンシャル$\boldsymbol{A}$と静電ポテンシャル$\boldsymbol{\phi}$を用いて

$$\boldsymbol{E} = -\mathrm{grad}\phi - \dot{\boldsymbol{A}} \quad ; \quad \boldsymbol{B} = \nabla \times \boldsymbol{A} \tag{2.48}$$

と表される。$\nabla \cdot (\nabla \times \boldsymbol{A}) \equiv 0$より、 (2.48)式は$\nabla \cdot \boldsymbol{B} = 0$を満たしている。ベクトルポテンシャルは、正確には(2.48)式による定義ではなく、スカラー場での勾配が加えられた,いわゆるクーロンゲージを用いて

$$\nabla \cdot \boldsymbol{A} = 0 \tag{2.49}$$

と定義される。また、静電ポテンシャルϕはポアソン方程式

$$\nabla^2 \phi = -\frac{\rho}{\varepsilon_0 \varepsilon(\omega)} \tag{2.50}$$

に従う。

真空中において$\rho = 0$とし、物質中における光学特性を説明する。今、簡単のために平面波に対して第二量子化の手続きを行なう。

まず、古典論でのハミルトニアンHを記述する。ハミルトンの正準方程式は、正準共役変数$p_{\boldsymbol{k},s}$ および$q_{\boldsymbol{k},s}$を用いて

$$\frac{\partial H}{\partial q_{\boldsymbol{k},s}} = -\dot{p}_{\boldsymbol{k},s} \quad , \quad \frac{\partial H}{\partial p_{\boldsymbol{k},s}} = \dot{q}_{\boldsymbol{k},s} \tag{2.51}$$

となる。ここでの$\boldsymbol{k}$は平面電磁場または$\boldsymbol{A}$の波の波数ベクトルで、sは 2 つの横波偏光である。ハミルトン関数にこれらの変数を組み込むと

$$H = \sum_{\boldsymbol{k},s} \left(\frac{p_{\boldsymbol{k},s}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_k^2 q_{\boldsymbol{k},s}^2 \right) \tag{2.52}$$

となる。この形式は、調和振動子において一般的である。相関関係は

$$p_{\boldsymbol{k},s} q_{\boldsymbol{k},s} - q_{\boldsymbol{k},s} p_{\boldsymbol{k},s} = \frac{\hbar}{i} \tag{2.53}$$

である。すべての$\boldsymbol{k}$および$s = 1, 2$に対して、既知の調和振動子の結果が得られる。任意の$\boldsymbol{k}$および分極sにおける電磁放射場は

$$E_{\boldsymbol{k}} = \left(n_{\boldsymbol{k}} + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_{\boldsymbol{k}} \qquad [n_{\boldsymbol{k}} = 0, 1, 2 \dots] \tag{2.54}$$

のエネルギー準位を持つ。これは、他の系と$\hbar\omega$分のエネルギーを交換することを意味する。

これらのエネルギー単位または量子を光子と呼ぶ。(2.54)式中の$\hbar\omega/2$は、電磁場のすべての状態におけるゼロ点エネルギーである。

波動と粒子の二重性、すなわち回折や干渉光は波のように伝播し、粒子状の量子を介して物質と相互作用するということは、光は電磁場であるという単純な図で解釈できる。振幅は飛び飛びの値のみ持つので、波のエネルギーは(2.54)式を満たしている。上記で導入した量$p_{\boldsymbol{k},s}$および$q_{\boldsymbol{k},s}$から、以下の性質を持つ線形結合演算子$a_{\boldsymbol{k},s}^{\dagger}$および$a_{\boldsymbol{k},s}$、すなわち

$$a_{\boldsymbol{k},s} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(q_{\boldsymbol{k},s} + \frac{i}{m\omega}p_{\boldsymbol{k},s}\right)$$

$$a_{\boldsymbol{k},s}^{\dagger} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(q_{\boldsymbol{k},s} - \frac{i}{m\omega}p_{\boldsymbol{k},s}\right)$$

が与えられる。$a_{\boldsymbol{k},s}$が運動量$\boldsymbol{k}$と分極sの量子数$n_{\boldsymbol{k},s}$を含む状態に作用すると、$n_{\boldsymbol{k},s}-1$の量の新しい状態を作り出す。それに対して、$a_{\boldsymbol{k},s}^{\dagger}$は$n_{\boldsymbol{k},s}$を 1 だけ増やす。したがって、$a_{\boldsymbol{k},s}^{\dagger}$および$a_{\boldsymbol{k},s}$をそれぞれ生成・消滅演算子と呼ぶ。演算子$a_{\boldsymbol{k},s}^{\dagger}$および$a_{\boldsymbol{k},s}$はボゾンであるので、それらの関係は

$$a_{\boldsymbol{k},s}a_{\boldsymbol{k},s}^{\dagger} - a_{\boldsymbol{k},s}^{\dagger}a_{\boldsymbol{k},s} = 1 \tag{2.55a}$$

となる。ただし、これは$\boldsymbol{k} = s$のときに成り立つ。それ以外の場合、交換子の差は 0 である。光子の状態に作用している演算子$a_{\boldsymbol{k},s}^{\dagger}$および$a_{\boldsymbol{k},s}$の積$a_{\boldsymbol{k},s}^{\dagger}a_{\boldsymbol{k},s}$は、光子の数$n_{\boldsymbol{k},s}$を表すため、数演算子と呼ばれている。波数ベクトル$\boldsymbol{k}$および偏光状態$s$における合計は、最終的にハミルトニアン演算子で

$$H = \sum_{\boldsymbol{k},s} \hbar\omega_{\boldsymbol{k}s}(a_{\boldsymbol{k},s}^{\dagger}a_{\boldsymbol{k},s} + \frac{1}{2}) \tag{2.55b}$$

となる。ここで強調したいことは、真空中の電磁放射場は調和振動子に類似した式で表すことができ、量子力学はすべての調和振動子に対して(2.54)式のように離散的なエネルギーを持つということである。調和振動子は物理学において研究され、そして非常に詳細に理解されている基本的な体系の 1 つである。理論物理学では、調和振動子の形で書き直すことができる場合、問題は「解決された」と見なせる。

ここにいくつかの結果を示す。1 つの光子は伝搬方向$s_z = \pm\hbar$にスピン成分を運ぶ。したがって、光子の電磁場における 1 つの量子の基本偏光には、左回りと右回りの偏光σ^-, σ^+がある。直線偏光は、等しい周波数,振幅および波数ベクトル$\boldsymbol{k}$を有する左回り,右回りの円偏光のコヒーレントな重ね合わせと見なすことができる。コヒーレントとは、2 つの光が互いに対して固定の位相関係を持つことを意味する。波数ベクトル$\boldsymbol{k}$に平行な量子化軸の方向に

おける角運動量sの成分は、上記で述べたように光子については

$$s_{\mathrm{z}} = s_{\parallel} = \pm\hbar \tag{2.56}$$

これは、光子が整数スピンを持ち、ボゾンであることを意味する。縦波の電磁波は少なくとも真空中は存在しないため、1 粒子のスピンに対して$s_{\parallel} = 0$は禁じられている。

熱力学的平衡状態にある光子は、ボーズ統計により記述される。周波数ωの状態の占有率f_{BE}は、絶対温度T,ボルツマン定数k_{B}を用いて

$$f_{\mathrm{BE}} = \left[\exp\left(\frac{\hbar\omega - \mu}{k_{\mathrm{B}}T}\right) - 1\right]^{-1} \tag{2.57}$$

で与えられる。化学ポテンシャルμは熱平衡において光子の数が保存されないため、(2.57)式中では 0 である。また、波数ベクトルを持つ光子の運動量$\boldsymbol{p}$は、調和波のすべての量子に対して

$$\boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k} \tag{2.58}$$

で与えられる。ここで、$\boldsymbol{k}$は波数ベクトルの実部で、平面波の伝播面を表す。

まとめると、光子は波動方程式に従って伝播するスピン$\pm\hbar$, エネルギー$\hbar\omega$, 運動量$\hbar\boldsymbol{k}$,のボゾンであると言える。量子力学における粒子の重要な性質は、それらの分散関係である。これは、エネルギーEおよび周波数ωは波数ベクトル$\boldsymbol{k}$に対する依存性があることを意味する。すなわち、$E(\boldsymbol{k})$または$\omega(\boldsymbol{k})$の関係性を意味する。真空中の光子については

$$\frac{\omega}{k} = \left(\frac{1}{\mu_0\varepsilon_0}\right)^{\frac{1}{2}} = c \quad , \quad k = |\boldsymbol{k}| = \frac{2\pi}{\lambda_{\mathrm{V}}} \tag{2.13}$$

で与えられている古典的な関係式から

$$E = \hbar\omega = \hbar ck \tag{2.59}$$

したがって、真空中の光子の分散関係は図 2.2 に示すように、傾き$\hbar c$の線形関数になる。

$$v_{\mathrm{ph}} = \frac{\omega}{k} \quad ; \quad \boldsymbol{v}_{\mathrm{g}} = \frac{\partial\omega}{\partial k} = \mathrm{grad}_{\boldsymbol{k}}\omega \tag{2.15}$$

を使って位相速度と群速度を求めると

$$v_{\mathrm{ph}} = v_{\mathrm{g}} = c \tag{2.60}$$

となる。

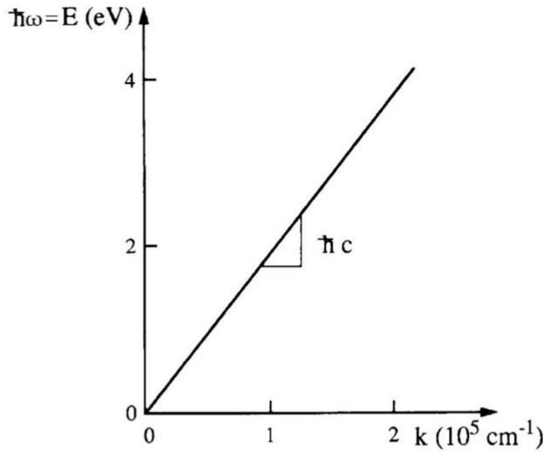

図 2.2 真空中の光子の分散関係

以下では、エネルギー単位について説明する。SI 単位系では、エネルギーの単位は $1\ \mathrm{Nm} = 1\ \mathrm{kg\ m^2/\ s^2}$ で、次の恒等式に従う。

$$1\ \mathrm{N\ m} = 1\ \mathrm{m\ kg\ s^{-2}} = 1\ \mathrm{V\ A\ s} = 1\ \mathrm{W\ s} = 1\ \mathrm{J} \tag{2.61a}$$

光学分光法における量子のエネルギーははるかに小さいので、よく 1 eV の単位を使う。これは、電子が真空中で 1 V の電位差を通過する場合に得られるエネルギーで、

$$1\ \mathrm{eV} = 1.60217733 \times 10^{-19}\ \mathrm{J} \approx 1.6 \times 10^{-19}\ \mathrm{J} \tag{2.61b}$$

である。分光法では、エネルギーの別の尺度として波数がよく使われる。定義は次のとおりである。(準) 粒子のエネルギーと同じエネルギーを持つ真空中の光子 1 cm あたりの波長の数で表す。つまり

$$1\ \mathrm{eV} \mathrel{\hat{=}} 8065.4\ \mathrm{cm^{-1}} \text{または}\ 10^4\ \mathrm{cm^{-1}} \mathrel{\hat{=}} 1.23986\ \mathrm{eV} \tag{2.61c}$$

エネルギーを与え、スカラー量である波数と混同される別の量は、波数ベクトル（Sect.2.2 参照）で 1/長さの次元を持つ。波数ベクトル（の実部）の量は、$k = 2\pi/\lambda$で与えられる。ここで、λは対応する量子または粒子（電子、フォトン、フォノンなど）の波長である。$\boldsymbol{k}$の方向は伝搬の方向である。すなわち、真空中の場合または$\boldsymbol{D} \times \boldsymbol{B}$に対して垂直な場合、$\boldsymbol{k}$は波面に対して垂直である。$\boldsymbol{k}$の量は

$$p = \hbar \boldsymbol{k} \tag{2.58}$$

から、(準) 粒子$\boldsymbol{p}$の（準）運動量に密接に関係している。(準) 粒子の分散関係は$E(\boldsymbol{k})$で与えられる。

第一ブリルアンゾーン(Sect.7.2 参照)の境界は$10^8\ \mathrm{cm^{-1}}$のオーダーであるのに対して、光の波数ベクトルは真空中で可視域にあり、$10^4\ \mathrm{cm^{-1}}$の数倍の範囲にある。このことから、波数ベクトルのような量が明確に定義されておらず、存在しないということは明らかである。