

1. 光と物質の相互作用

色付きガラスを透過した光のスペクトル変化や、金属表面における高い反射率といった現象は、光（電磁波）が物質中を伝播する際に、物質構成要素である原子や電子と相互作用することによって生じる。本章では、物質中の電子が光電場に応答する基本的なメカニズムをモデル化することから始め、光の吸収や分散といった光学現象がどのように説明されるかを段階的に解説する。学術的な記述を基本とし、基礎から体系的に理解を深めることを目的とする。

2. 電子の応答モデル：古典的振動子モデル

物質を構成する原子において、電子は原子核からのクーロン引力により束縛されている。この束縛状態にある電子の挙動を考察するため、一つの単純化されたモデルを導入する。電子を、質量 m 、電荷 $-e$ を持つ粒子とし、これがばね定数 $k = m\omega_0^2$ で表される調和ポテンシャルによって平衡点周りに束縛されていると見なす。この ω_0 は、束縛電子の固有角振動数に相当する。

この系に、角振動数 ω を持つ光（電磁波）が入射すると、電子はその電場成分 $\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}_0 \exp(-i\omega t)$ から力を受ける。電場が時間的に振動するため、電子は強制振動をすることになる。電子の変位を x とすると、運動方程式を記述するために考慮すべき力は以下の通りである。

- 復元力:** 平衡点からの変位 x に比例し、平衡点に戻そうとする力。 $-kx = -m\omega_0^2 x$ と表される。
- 電場からの力:** 電荷 $-e$ の電子が電場 E から受ける力。 $-eE(t)$ である。
- 減衰力:** 物質中において電子は散乱過程などを通じてエネルギーを失う。この効果を速度 dx/dt に比例する抵抗力 $-m\gamma(dx/dt)$ として導入する。 γ は減衰係数である。

これらの力をニュートンの第二法則に適用すると、電子の運動方程式は次のように記述される。

$$m \frac{d^2x}{dt^2} + m\gamma \frac{dx}{dt} + m\omega_0^2 x = -e E(t) = -e E_0 \exp(-i\omega t)$$

これが**古典的振動子モデル**における、電場と束縛電子の相互作用を記述する基本方程式である。この方程式は、減衰を伴う強制振動子の運動を表している。

この振動系のエネルギーは、電子の運動エネルギー $\frac{1}{2} m (\frac{dx}{dt})^2$ と、ばねによるポテンシャルエネルギー $\frac{1}{2} m\omega_0^2 x^2$ の和で与えられる。

$$E_{\text{total}} = \frac{1}{2} m \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2} m\omega_0^2 x^2$$

ただし、減衰項 $m\gamma(dx/dt)$ の存在により、このエネルギーは保存せず、時間とともに散逸する。光吸収現象は、このエネルギー散逸機構と密接に関連している。

3. 光吸収と分散：ローレンツモデル

上記運動方程式の定常解を求めると、電子の変位 $x(t)$ の周波数依存性が得られる。その結果、電子は外部電場と同じ角振動数 ω で振動するが、その振幅および位相は、 ω 、 ω_0 、 γ に依存することが示される。

電子の変位は、原子スケールでの電気双極子モーメントを誘起する。単位体積あたり N 個の同一な振動子が存在すると仮定すると、物質のマクロな電気分極 \mathbf{P} が生じる。この電気分極 \mathbf{P} は、印加された電場 \mathbf{E} に比例すると考えられ、その比例係数として**電気感受率** χ が定義される。

$$\mathbf{P} = \epsilon_0 \chi \mathbf{E}$$

ここで ϵ_0 は真空の誘電率である。古典的振動子モデル（減衰項を含む）に基づいて χ を計算すると、 χ は角振動数 ω の関数となり、一般に**複素数**として得られる。

$$\chi(\omega) = \chi'(\omega) + i \chi''(\omega)$$

複素感受率を用いることで、外部電場に対する応答の位相遅れとエネルギー散逸（吸収）を同時に表現することが可能となる。具体的な計算により、 $\chi(\omega)$ は以下の**ローレンツモデル**の形で与えられる。

$$\chi(\omega) = \frac{N e^2}{\epsilon_0 m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i \gamma \omega}$$

この複素感受率の実部 χ' と虚部 χ'' は、光の伝播に対して異なる物理的意味を持つ。

- **実部 $\chi'(\omega)$:** 物質中における光の位相速度の変化、すなわち屈折率の実部と関連する。屈折率 n は近似的に $n \approx \sqrt{1 + \chi'}$ で与えられる（非磁性体の場合）。 χ' が周波数 ω に依存するため、屈折率も周波数依存性を示す。これが分散現象の起源であり、 **χ' は位相変化に関係する**。
- **虚部 $\chi''(\omega)$:** 物質による光エネルギーの吸収の度合いを表す。 χ'' が正の値を持つ場合、電磁波エネルギーが媒質に吸収されることを意味する。 **χ'' は吸収（振幅の減衰）に関係する**。

この複素感受率を持つ媒質中を z 方向に伝播する平面電磁波を考える。波動方程式から導かれる波数 k は、 $k^2 = \omega^2 \mu \epsilon = \omega^2 \mu \epsilon_0 (1 + \chi)$ の関係を満たすため、複素数となる。 $k = k_r + i k_i$ と置くと、電場 $E(z, t)$ は次のように表される。

$$E(z, t) = E_0 \exp[i(kz - \omega t)] = E_0 \exp[i((k_r + i k_i)z - \omega t)] = E_0 \exp(-k_i z) \exp[i(k_r z - \omega t)]$$

この式は、電磁波が媒質中を伝播する際に、位相が $k_r z$ に従って変化し、振幅が $\exp(-k_i z)$ という因子に従って指数関数的に減衰することを示す。したがって、 k_i が振幅減衰、すなわち吸収の度合いを定量化する。

この振幅減衰係数 k_i は、感受率の虚部 χ'' と直接関係する。**吸収係数**を $\alpha = k_i$ と定義すると（文献により強度吸収係数 $2k_i$ を α と定義する場合もある）、 α は χ'' を用いて次のように近似的に表される（ n を屈折率の実部とする）。

$$\alpha \approx \frac{\omega \chi''}{2 n^2 c} \quad (\text{c は真空中の光速})$$

吸収係数 α （すなわち χ'' ）の周波数依存性を見ると、 χ'' の表式から、 ω が固有角振動数 ω_0 に近づく領域で顕著なピークを示すことがわかる。この共鳴吸収におけるスペクトル形状は、 ω_0 を中心とする特徴的な分布を示し、**ローレンツ型**と呼ばれる。多くの物質における光吸収スペクトルは、このローレンツ型の重ね合わせとして理解されることが多い。

4. 金属中の自由電子：ドルーデモデル

前節までは原子核に束縛された電子を対象とした。一方、金属内には特定の原子核に強く束縛されず、結晶格子内を比較的自由に運動できる電子が存在する。これらは**自由電子**と呼ばれる。

自由電子は特定の平衡点を持たないため、束縛力を表す復元項（ばね項）は無視できる。すなわち、固有角振動数 $\omega_0 = 0$ と見なすことが妥当である。これは、ローレンツモデルにおいて $\omega_0 = 0$ と置いた場合に相当する。この場合の電子の運動方程式は、

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} + m \gamma \frac{dx}{dt} = -e E(t) = -e E_0 \exp(-i \omega t)$$

となる。ここで γ は、自由電子がイオン格子との衝突などによって運動量を失う頻度（緩和時間 τ の逆数 $1/\tau$ に相当）を表す。これが**ドルーデモデル**の基礎方程式である。

ローレンツモデルと同様の手順により、自由電子に対する電気感受率 $\chi(\omega)$ および複素誘電率 $\epsilon(\omega) = \epsilon_0(1 + \chi(\omega))$ を導出できる。特に、電子散乱の効果を無視する理想的な極限（ $\gamma = 0$ ）では、誘電率は以下のように表される。

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_0 \left(1 - \frac{N e^2}{\epsilon_0 m \omega^2} \right)$$

ここで N は自由電子の数密度である。この式中の $\frac{N e^2}{\epsilon_0 m}$ は、金属における重要な物理量であり、**プラズマ振動数** ω_p の二乗（ ω_p^2 ）と定義される。

$$\omega_p^2 = \frac{N e^2}{\epsilon_0 m}$$

これを用いると、

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_0 \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \right)$$

と記述される。これが減衰を無視した**ドルーデモデル**における誘電率の表式である。このモデルは、金属が低周波数領域で高い反射率を示すことや、プラズマ振動数 ω_p 以下の周波数の電磁波を遮蔽する特性などを説明する上で基本的な枠組みを提供する。

5. 結論：各モデルの関係性

本章で解説した各モデルの関係性を整理すると以下のようになる。

- **古典的振動子モデル**は、光と束縛電子の相互作用を調和振動子として捉える最も基本的な枠組みである。
- **ローレンツモデル**は、古典的振動子モデルに減衰項を導入し、物質の吸収（ χ'' ）と分散（ χ' ）を統一的に記述する。吸収スペクトルの基本的な形状であるローレンツ型を導出する。
- **ドルーデモデル**は、金属中の自由電子（束縛力がない、 $\omega_0=0$ ）を記述するモデルであり、ローレンツモデルにおいて $\omega_0=0$ とした特別な場合に相当する。金属の光学特性を説明する上で重要である。