

第3回

| | |
|---------------------|----|
| 4. 屈折率 | 51 |
| 4.1 光と物質の相互作用 | 52 |
| 4.2 電気分極と誘電率 | 53 |
| 4.3 物質内の電場 | 54 |
| 4.4 ローレンツ場(局所場) | 55 |
| 4.5 屈折率と原子分極 | 58 |
| 4.6 屈折率の分散(ローレンツ模型) | 59 |

屈折率

光は媒質の影響を受ける。その影響の効果は、媒質の光学的性質を表す屈折率 n (広い意味で、減衰係数も含む) を通してである。これまで屈折率は与えられたものとして光の性質を扱ってきた。また、これ以後も屈折率を与えられたものとして取り扱うつもりである。そこで、話を先に進める前にここで屈折率について少し考察してみたい。もし、偏光現象のみに関心がある場合はこの章は飛ばしても差し支えない。

媒質を構成している物質は分子、原子、あるいは更に小さな粒子 (原子核と電子) の集まったものであるから、これらの粒子と光との相互作用によって媒質の屈折率は決まる。粒子と光との相互作用は電磁気学で記述されるので、電磁気学の基本的な事柄をまず整理し、次いで誘電率と構成物質との関係に言及する。

光吸収のない波長領域では屈折率と誘電率 ϵ は

$$n^2 = \epsilon / \epsilon_0 \quad (4.1)$$

の関係がある*)。ただし、 ϵ_0 は真空の誘電率である。それ故、物質の光学的性質は誘電率によって表されるといっても良い。誘電率は強誘電体とよばれる少数の物質を除けば、電場の大きさには寄らない定数である#)。

誘電率は電場の振動数により、また、温度によっても変わる。誘電率は一般にはテンソル量 (結晶光学ではこれが重要になる) であるが、方向性を持たない物質 (立方対称性を

*) 異方性媒質では誘電率はテンソル量となり、(4.1)式で定義される n は物質中の光速 c/n と関係付けられ、屈折の法則と直接的な関係はなくなる。これにもかかわらず、これまでの慣習で n を屈折率という。また、吸収がある場合屈折率を $n \rightarrow n - i\kappa$ 、誘電率を $\epsilon \rightarrow \epsilon_1 + i\epsilon_2$ と複素数に拡張すれば(4.1)式はそのまま成り立つ。ここで κ は減衰係数といい、光吸収係数 α と $\alpha = 2\pi\kappa/\lambda$ の関係がある。

#) 通常物質でも誘電率は電場 \mathbf{E} に依存する。 ϵ を \mathbf{E} で展開すると、 $\epsilon = \epsilon^{(0)} + \epsilon^{(1)}\mathbf{E} + \epsilon^{(2)}\mathbf{E}\mathbf{E} + \dots$ のように表されるが、電場が小さい通常の光では第1項で充分である。以下では $\epsilon^{(0)} = \epsilon$ としている。強力なレーザー光のように、電場強度の大きな光では第2, 3項も重要になる。これらの項が現れる現象を扱うのが非線形光学である。

持つ結晶、均一な液体、ガラス等)ではスカラー量である。この章ではスカラー量として取り扱う。

4.1 光と物質の相互作用

光が物質に入射すると、光の電場によって、物質を構成する原子あるいはイオンの正負の電荷を持った粒子はそれぞれ反対方向の力を受ける。このため電荷の分布に偏りが生じ、原子あるいは正負イオン対は分極を起こす(図 4.1)。図において、電場が無い状態では電子雲の中心と原子核は同じ位置にあるが、電場がかかると電子雲の中心は電場 E のマイナス方向に、原子核はプラスの方向に僅かにずれる。このために中性であった原子は分極する。この分極によって起こる電気双極子モーメント p は次のように定義される。

$$p = qd \quad (4.2)$$

ここで q は電荷量、 d はマイナス電荷の中心からプラス電荷の中心へ引いたベクトルである。NaCl 等のイオン結晶では各陽イオン、陰イオンが平衡位置からずれることから分極が起こるが、このときは平衡点からのずれの量が d となる。物質はこの様に光の電場の作用に対して電気双極子の集まりとして応答する。

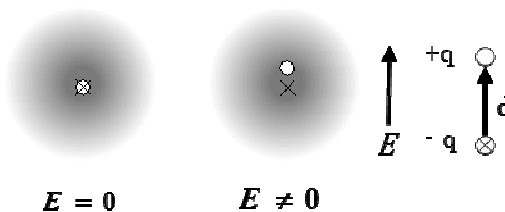


図4.1 原子は電場がかかると分極する

電場が時間的にプラス・マイナスと振動すると、軽い電子は核を中心として電場に追従して電場と同じ振動数で振動することになる。言い換えれば、原子或いは分子は電気双極子として振動する。よく知られているように、振動する電気双極子からは電磁波が発生するから、原子或いは分子の電気双極子は新たな電場(電磁波)の発生源になる。この事実を基に物質中の電磁波の伝播は次のように説明されている。

入射電磁波の電場が物質を構成する原子(あるいは分子)に作用し、その結果原子には電気双極子が誘起される。その電気双極子は入射電磁波と同じ振動数で振動するため、そこから新たな電磁波(2次波)が発振される。これにより、物質中の電磁波は真空中を進む光速 c をもつ電磁波と、物質を構成する原子の性質と原子数密度に依存する速度で伝播する電磁波の2つの電磁波からなっている。物質中の全原子から発振される電磁波を加えると、光速 c で進む電磁波は入射波を打ち消してしまい(消滅定理と呼ばれている)、結局、物質中を伝播する電磁波として残るのは、原子の性質と原子数密度に依存する速度をもつ電磁波のみとなる。すなわち、電磁波が媒質に入射すると、個々の電気双極子がそれに共鳴振動し、その結果双極子は光を放射するが、それらの光を重ね合わせると、一部は入射した光と干渉して入射波を完全に打ち消し、残った光は屈折の法則に従う、速度が c/n で伝播する光となるのである。このように、入射電磁波は、双極子から発生する電磁波と干渉することによって、媒質中の任意の場所で完全に打ち消されて消滅し、他の伝搬速度を持つ電磁波で置き換わるのです。

以下では物質をこの様な双極子の集合体と見なし、光に対する応答を双極子の応答として考えます。

4.2 電気分極と誘電率

単位体積あたりの電気双極子モーメントを \mathbf{P} で表わすと

$$\mathbf{P} = \sum_j N_j \mathbf{p}_j \quad (4.3)$$

N_j は j で区別される j タイプの原子(あるいは分子)の単位体積あたりの数、 \mathbf{p}_j は

その原子の電気双極子モーメントである。このように定義された \mathbf{P} を電気分極、あるいは単に分極という。話を簡単にするために、物質は1種類の原子からなっているとしよう。この場合(4.3)式は

$$\mathbf{P} = N\mathbf{p} \quad (4.4)$$

になる。この分極した状態を次のように考えてみる。原子の並んだ平板を切り出し、その平面をプラスの電荷を持ったシートとマイナスの電荷を持ったシートに分ける。外部からの電場がないとき、両シートは一致しているので至る所中性である。電場がかかるとプラスシートは電場方向に、マイナスシートは反対方向にずれる。このために電場方向のシート端にはプラス電荷が、電場と反対向きの端にはマイナス電荷が生じる。シートが重なっている部分はプラス、マイナスが打ち消しあって中性である。この様なシートが積み重なって立体の物質ができているから、物質表面に発生する電気量は次のようにして計算できる。原子(あるいは分子)は1種類とし、図4.1のような電気双極子が一様に分布しているとすると、プラスの電荷密度は Nq 、マイナスの電荷密度は $-Nq$ である。これが電場方向に互いに d だけずれたから、電場に垂直な単位平面あたり $P=Nqd=Np$ 、すなわち、分極 \mathbf{P} の電荷が物質表面に発生することになる。「物質に電場がかかると分極 \mathbf{P} が発生し、物質の表面には分極 \mathbf{P} に垂直な平面に $\pm P$ の電荷面密度が発生する。」

物質の表面が曲面の場合、曲面に垂直な単位ベクトルを \mathbf{s} とし、 \mathbf{s} と \mathbf{P} のなす角を θ とす

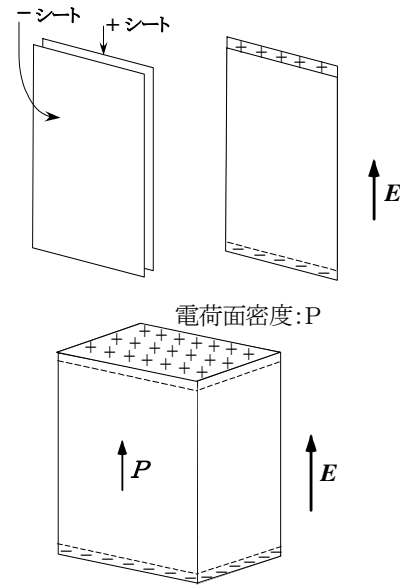


図 4.2 +シートと-シートが電場によってずれる。三次元では表面に分極 \mathbf{P} に相当する表面電荷が発生する。

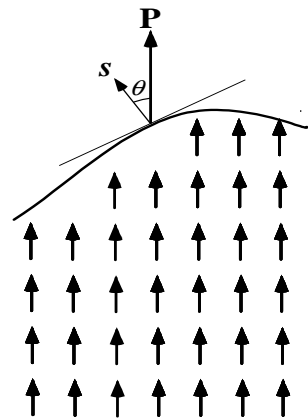


図 4.3 分極 \mathbf{P} に対して傾いた表面には電荷面密度 $P \cos \theta$ が発生する。

ると、その表面に発生する電荷面密度は、

$$\mathbf{s} \cdot \mathbf{P} = P \cos \theta \quad (4.5)$$

となる (図 4.3)。

4.3 物質内の電場

物質内の電場 \mathbf{E} 、電気変位(電束密度ともいう) \mathbf{D} 、電気分極 \mathbf{P} の3つの量の間には次のような関係がある。

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} \quad (4.6)$$

\mathbf{E} が小さいとき、電気双極子モーメントは電場に比例するので、分極 \mathbf{P} も電場に比例する。それゆえ、

$$\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E} \quad (4.7)$$

と書ける。比例定数 ϵ を誘電率という。物質のない真空中では ϵ は次のような値になる。

$$\epsilon_0 = 10^{11} / 4\pi c^2 = 8.854 \times 10^{-12} \text{ F/m}$$

ここで ϵ_0 は真空の誘電率である。

物質は一様な連続体ではなく、原子からなっている。原子は正の核と負の電子からなっているから微視的に見るとこれらの核と電子による電場は場所によって激しく変動している。それ故、原子に働いて分極を起こさせる電場は外からかけた電場であるかどうか定かではない。そこで、 \mathbf{D} 、 \mathbf{E} 、 \mathbf{P} の間の関係とその意味を平行平板コンデンサーを例に説明し、その後原子にかかる電場を考察しよう。

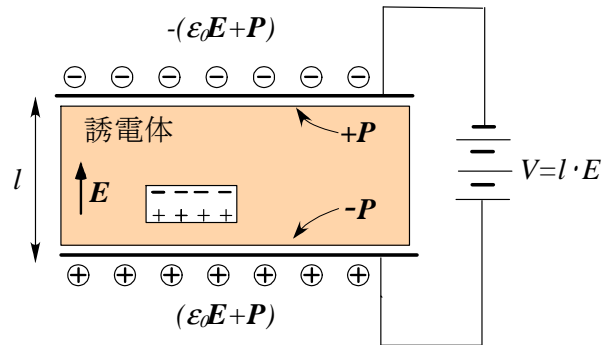


図 4.4 電位差 V をかけた平行平板コンデンサー

図 4.4 のように電極間に電位差 V をかけると両電極板上には電荷が溜まる。誘電体がない場合は電極板上の電荷密度は $\pm \epsilon_0 \mathbf{E}$ である^{#)}。

^{#)} ガウスの法則 $\int_S \mathbf{D} \cdot \mathbf{n} ds = q$ から得られる。ここで S は勝手に取った閉曲面で、この面について電束密度 \mathbf{D} を面積分すると、それは面内にある電荷 q に等しい [ガウスの法則]。ただし、 \mathbf{n} は面に垂直、外向きの単位ベクトル、 q は閉曲面内にある電荷量である。閉曲面 S として、極板を含み、かつ面が極板と平行である直方体をとると、コンデンサーの外では $\mathbf{D} = \mathbf{0}$ 、また、直方体の側面では \mathbf{D} は側面と平行になるので、 $\mathbf{D} \cdot \mathbf{n} = 0$ となり、左辺の積分は $\mathbf{D} \cdot \mathbf{n} dA$ 、ただし、 A は極板と平行な直方体面の面積である。一方、右辺はコンデンサーの極板上の電荷面密度を σ とすると $q = \sigma A$ であるから、 $\sigma = \mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E}$ が得られる。

\mathbf{E} はコンデンサー内の電場で、

$$l \cdot E = V \quad (4.8)$$

の関係がある。 l は電極間の距離である(図 4.4)。この式は次のように解釈できる。コンデンサー内の電場は E である。仮想電荷 Δq をコンデンサーの一極から+極に運ぶのに要する仕事量は、電場 E の中にある電荷 Δq に働く力は $\Delta q E$ で、その方向に l だけ動かすことになるので、 $\Delta q E l$ となる。すなわち、電荷 Δq を一極から+極まで運ぶのに必要な仕事量が $\Delta q \times$ 電位差、 $\Delta q V$ なのである。

平行平板電極上の電荷密度が σ のとき、すでに述べたようにコンデンサー内に発生する節で述べたように誘電体の上下表面に $\pm P$ の電荷面密度が発生する。この電荷のためにコンデンサー間の電位が下がるのでそれを保証するために電源から電荷が供給される。その量は誘電体上に発生した電荷量に等しいから、平板上には単位面積あたり $\pm(\epsilon_0 E + P)$ の電荷がたまることになる。

電場は $E = \frac{\sigma}{\epsilon_0}$ であることも注意されたい。

次いで平板間に誘電体を挿入する。この物質の誘電率は ϵ であるとする。外場がかかっているので誘電体は分極する。この分極の大きさは物質による。 P に分極したとすると、4.2

誘電体内の巨視的な、すなわち、ある微少な体積内で平均した電場を E とする(特に断らなかつたがこれまでもこの意味で使ってきた)。図 4.4 では外部電源によって電極板間の電位差 V が与えられているので、 $l \cdot E = V$ となり、物質中の巨視的電場は真空中のコンデンサー内の電場に等しい。図 4.4 に示したように電極には電荷密度 $(\epsilon_0 E + P)$ の電荷があり、そのすぐ下の誘電体の表面に電荷面密度 $(-P)$ の電荷がある。すなわち、電極に新たに加わった電荷 P と誘電体表面の電荷 $-P$ とが打ち消しあって コンデンサー内の電場は E に保たれているのである。

次に図のように電極板に平行に空間を開けると、中の上部に $-P$ 、下部に $+P$ の電荷面密度が発生し、この電荷による電場 $(\frac{P}{\epsilon_0})$ が加わるので、開けた空間内部の電場は

$$E + \frac{P}{\epsilon_0} = \frac{D}{\epsilon_0} \quad (4.9)$$

となる。この式は誘電体の上部に発生した電荷 $+P$ と切り取った空間の上部に発生した $-P$ の電荷による電場が相殺されるので、空間の電場は平行電極板の電荷密度 $\pm(\epsilon_0 E + P)$ によってできる電場と考えても良い。(4.9)式を書き換えて得られたのが(4.5)式である。

$$D = \epsilon_0 E + P = \epsilon E$$

物質中の電荷にはたらく電場は、外から与えられる E と、この電場によって周りの原子に誘起された電気双極子による電場の和である。次にこの効果について考察しよう。

4.4 ローレンツ場 (局所場)

物質中の電場は巨視的な立場から得た電場で、 $E = \frac{V}{l}$ である。しかし、物質の個々の原子に作用してこれを分極させる電場は必ずしもこの \mathbf{E} と同じではない。なぜなら、既に述べたように、原子を分極させる電場は外部電場ばかりではなく、近傍の同じように分極した原子からの寄与があるからである。原子に作用してこれを分極させる場をローレンツ場、あるいは局所場といい、ここではそれを \mathbf{E}_{loc} と書こう。ローレンツ (H.A.Lorentz) に従って、以下でこれを計算する。

\mathbf{E}_{loc} を次のように分けて考える。

$$\mathbf{E}_{loc} = \mathbf{E}_{ext} + \mathbf{E}_{int} + \mathbf{E}_1 + \mathbf{E}_2 \quad (4.10)$$

ここで、 \mathbf{E}_{ext} はコンデンサーの電極にある電荷によって生じる電場 ($\frac{\mathbf{D}}{\epsilon_0}$ 、(4.9)式参照)、 \mathbf{E}_{int} は物質の表面に発生した分極電荷 $\pm P$ による電場 ($-\frac{\mathbf{P}}{\epsilon_0}$) である。この和は既に述べたよ

うに、 $E = \frac{V}{l}$ として得られる電場で

$$\mathbf{E}_{ext} + \mathbf{E}_{int} = \mathbf{E} \quad (4.11)$$

となる。

\mathbf{E}_1 と \mathbf{E}_2 は次のような場である。いま考えている原子を中心としてかなり多数の原子を含む半径 R の球を考える。球の外の原子は連続体と見なせる程度に球の半径は充分大きく取る。この球を切り取ると、球が抜けた穴には内面に分極による電荷が発生する。そうするとその電荷によって中心原子の位置に電場が発生する。この電場が \mathbf{E}_1 である。 \mathbf{E}_2 は切り取った球の内部の分極原子による電場で、この電場は正確に計算して求める*)。すなわち、

$$\mathbf{E}_2 = \sum_i \frac{3(\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{r}_i) \mathbf{r}_i - r_i^2 \mathbf{p}_i}{4\pi\epsilon_0 r_i^5} \quad (4.12)$$

ここで添え字の i は i 番目の原子を意味し、 Σ の後の式は \mathbf{r}_i にある電気双極子 \mathbf{p}_i が原点につくる電場である。和は球内の全ての分極原子について行う。この和は原子の並び方、すなわち結晶構造による。もし、**原子が立方対称に配列、あるいはガラスのように均一に分布していればこの和はゼロになる**。これを示そう。いずれも原子は立方対称に分布しているから \mathbf{p} を z 方向に

なるように座標軸を取ると、 E_{2x}, E_{2y} は、(4.12) 式で $(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r})\mathbf{r}$ から出る pxz, pyz が残る。

しかし、この項は対称性のためにゼロになる。結局、 z 方向の電場だけが残る、 $p_i = p$ よ

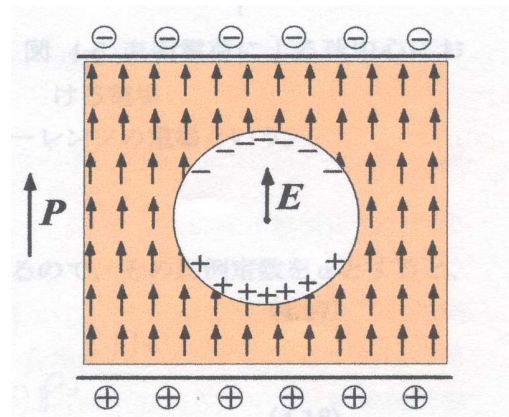


図 4-5 分極した誘電体中の球孔の表面に発生する電荷とそれによって中心に発生する電場

り、

$$E_{2z} = \sum_i \frac{3pz_i^2 - pr_i^2}{4\pi\epsilon_0 r_i^5} \quad (4.13)$$

立方対称性から $\sum \left(\frac{z_i^2}{r_i^5} \right) = \sum \left(\frac{y_i^2}{r_i^5} \right) = \sum \left(\frac{x_i^2}{r_i^5} \right)$ であり、 $\sum \left(\frac{r_i^2}{r_i^5} \right) = 3 \sum \left(\frac{z_i^2}{r_i^5} \right)$ と

*) 電気双極子モーメント \mathbf{p} が \mathbf{r} 離れたところにつくる電場は

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r^5} (3(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r})\mathbf{r} - r^2\mathbf{p})$$

である。 $\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}(-\mathbf{r})$ であるから \mathbf{r} にある \mathbf{p} が原点につくる電場も上式で与えられる。電場は距離の3乗に反比例して減少する。この式の導出は電磁気学の教科書に記載されている。例えば「電磁気学」砂川重信著 (岩波書店) 111 p

なるから、 E_{2z} もまたゼロとなり、結局

$$\mathbf{E}_2 = 0 \quad (4.14)$$

が得られる。

球の表面の分極電極による電場 \mathbf{E}_1 は以下のようにして計算できる。クーロンの法則によって \mathbf{r} 点にある電荷 ρ が原点につくる電場は $\mathbf{E} = \frac{-1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\rho}{r^2} \frac{\mathbf{r}}{r}$ であるから電場の z 成分は、

θ を z 軸から測った角とすると $E_z = \frac{-\rho}{4\pi\epsilon_0 r^2} \cos\theta$ となる。図 4.5 の分極と平行に z 軸を取

り、表面電荷密度は(4.5)式より $-P \cos\theta$ であるから、この電荷によって原点に生ずる電場の z 成分を考えると、図 4.6 を参照して

$$\int \frac{(P \cos\theta)(2\pi R \sin\theta)(R d\theta) \cdot \cos\theta}{4\pi\epsilon_0 R^2} d\theta = \frac{P}{3\epsilon_0}$$

(4.15)

となる。コンデンサー内の電場 \mathbf{E} と同じ向きであるので、結局、

$$\mathbf{E}_{loc} = \mathbf{E} + \frac{\mathbf{P}}{3\epsilon_0} \quad (4.16)$$

が得られる。これが原子に作用する電場で、これをローレンツの電場という。

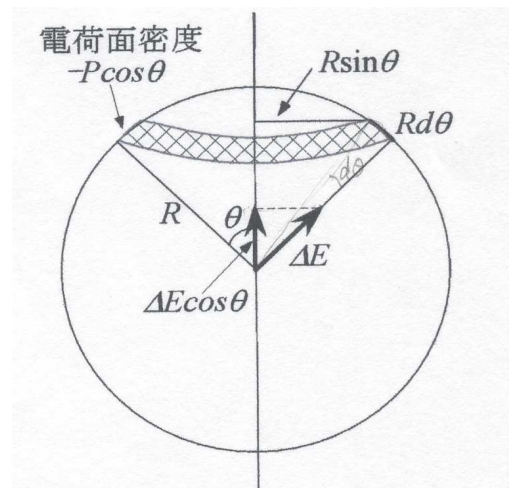


図 4-6 表面電荷による球中心における電場

4.5 屈折率と原子分極

原子に生じる電気双極子モーメントは電場に比例するので、その比例定数を α とすると、

$$\mathbf{p} = \alpha \mathbf{E}_{loc} \quad \alpha : \text{原子分極率} \quad (4.17)$$

(4.4)、(4.16)式より、

$$\mathbf{P} = N\mathbf{p} = N\alpha \left(\mathbf{E} + \frac{\mathbf{P}}{3\epsilon_0} \right) \quad (4.18)$$

これより \mathbf{P} を求めると、

$$\mathbf{P} = \frac{N\alpha}{(1 - N\alpha/3\epsilon_0)} \mathbf{E} \quad (4.19)$$

また、(4.6)、(4.7) 式より、 $\mathbf{P} = (\epsilon - \epsilon_0)\mathbf{E}$ であるから、両式を等しくおいて、 \mathbf{E} を消去すると、

$$\frac{\epsilon - \epsilon_0}{\epsilon + 2\epsilon_0} = \frac{N\alpha}{3\epsilon_0} \quad (4.20)$$

または、 $\epsilon = n^2 \epsilon_0$ の関係があるから(付録 F 及び第 5 章参照)、

$$\frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} = \frac{N\alpha}{3\epsilon_0} \quad (4.21)$$

この式から屈折率は原子分極率 α と原子密度 N によって次のように与えられる。

$$n^2 = \frac{1 + \frac{2N\alpha}{3\epsilon_0}}{1 - \frac{N\alpha}{3\epsilon_0}} \quad (4.22)$$

媒質が幾種類かの原子あるいは分子で構成されているときには、(4.3)式より $N\alpha$ を次のように置き換えればよい。

$$N\alpha \Rightarrow \sum_i N_i \alpha_i \quad (4.23)$$

物質を構成する分子あるいは原子の分極と屈折率との関係が得られた。(4.20)、(4.21)式を、独立に導いた 2 人の名をとって、**Lorentz-Lorenz の公式**という。この式によれば、**屈折率の分散** (屈折率が光の振動数によって変わること) は原子分極率の分散に結びついていることが分かる。なお、(4.16)式はコンデンサーを思考物体として定常電場について導いたもので、この公式が光のような振動電場についても成り立つかどうか定かではない。しかし、原子の大きさに比べて波長が充分大きく、考えている原子のまわりでは一様な外場がかかっていると考えられ、しかも電場の伝搬による遅れが無視できる場合は、この公式は適用できる。可視光領域では波長は原子の大きさに比べて充分大きいのでこの公式が使えると考えられる。

4.6 屈折率の分散（ローレンツ模型）

屈折率、あるいは誘電率が光の振動数（波長）によってその値が変わることを分散があるという。この分散の原因は原子分極の大きさが振動数に依存することによる。ここで分散について考えてみよう。

図 4.1 で示したように外部電場がかかると電子系の中心は正電荷の位置からずれる。原子をモデルとして考えれば、原子核は重いので動かないとすると平衡からずれるのは電子であり、そのずれをここでは \mathbf{r} で表すことにする。電場に対する原子の応答は $q\mathbf{r}$ の電気双極子で表される。 q は電子の電荷量である。原子を $q\mathbf{r}$ の電気双極子とみなすモデルであるので、このモデルを電気双極子モデルともいう。

質量 m 、電荷 q の粒子（電子）が平衡点から \mathbf{r} ずれたとき、もし外部電場がなければ平衡点に戻るはずであるから、平衡点からずれると平衡点に戻ろうとする力（復元力という）がはたらく。復元力はずれが小さいとき、ずれの大きさに比例するから、この力を $-m\omega_0^2 \mathbf{r}$

とする。復元力の比例定数を $m\omega_0^2$ とおいたのは計算に便利だからであるが、このように置くと電子が原子核を中心として固有振動数 ω_0 で振動していることを表している。運動方程式（質量×加速度＝物体にかかる力）から、電子のずれ \mathbf{r} に対して次式が成り立つ。

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = -m\omega_0^2 \mathbf{r} - m\Gamma \frac{d\mathbf{r}}{dt} + q\mathbf{E}_{loc} \quad (4.24)$$

ここで、右辺第 2 項は電子が周囲から受ける摩擦力で、それは電子の速度に比例するとした。 Γ は比例定数である。第 3 項は光の電場から電子が受ける力で、その電場は原子が受ける局所場 \mathbf{E}_{loc} なので前項で述べたように光の電場と原子が分極したことによって発生した電場との和である。

光の波長に比べて原子の大きさや格子間隔は小さい。例えば、可視光の波長 500nm（青緑）に対して原子の大きさは 0.1～1nm、格子間隔（格子定数）もせいぜい 1nm のオーダーである。この様な波長の光では、原子は場所に寄らない様な電場を受けているとして良い。振動数 ω で振動している外部電場による、原子にはたらく局所場は同じ振動数で振動するから

$$\mathbf{E}_{loc} = \mathbf{E}_0 e^{i\omega t} \quad (4.25)$$

荷電粒子はこの電場によって強制振動させられるから、

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_0 e^{i\omega t} \quad (4.26)$$

とおける（電場などの複素数表示については付録 B 参照）。荷電粒子はいろいろな振動数で運動するであろう。外部から印加した電場の振動数以外の振動数で振動する項は摩擦のために時間の経過と共に減衰してしまうので、結果として外部電場の振動数で振動する部分

だけが残る。それ故、電子の振動は(4.26)式のように置ける。(4.25)、(4.26)式を(4.24)式に代入して \mathbf{r} について解くと、

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_0 e^{i\omega t} = \frac{q\mathbf{E}_{loc}}{m(\omega_0^2 - \omega^2 + i\Gamma\omega)} \quad (4.27)$$

電場のために平衡点からずれた量が \mathbf{r} であるから $q\mathbf{r} = \mathbf{p}$ が電場によって誘起された原子分極となる。

原子分極率 α はこの電気双極子と \mathbf{E}_{loc} を結ぶ量で(4.17)式、すなわち、

$$\mathbf{p} = \alpha\mathbf{E}_{loc}$$

であるから、

$$\alpha = \frac{q^2}{m} \cdot \frac{1}{(\omega_0^2 - \omega^2 + i\Gamma\omega)} \quad (4.28)$$

固有振動数は一つしか存在しないとしてきたが、(4.3)式で指摘したように、一般には一つの原子、あるいは分子には多くの電子があり、それらは各々固有の固有振動数で振動している。その固有振動数を ω_k とすると、

$$\alpha = \frac{q^2}{m} \sum_k \frac{f_k}{\omega_k^2 - \omega^2 + i\Gamma_k\omega} \quad (4.29)$$

f_k は固有振動数 ω_k を持つ振動電子が原子分極に寄与する割合を示すもので、単位体積中に N 個の電子があるとすれば、 $N f_k$ は固有振動数 ω_k を持つ電子数と解釈される。 f_k は振動子強度とよばれ、定義から

$$\sum_k f_k = 1 \quad (4.30)$$

となるが、実際、この等式が成り立つことは量子論で証明されている。

量子論では固有振動数 ω_k は電子のエネルギー準位間のエネルギー差

$\omega_{ij} = (E_i - E_j)\hbar^{-1}$ に対応している。この遷移が光子の吸収で起こるとき、光の吸収率

は f_k 、ここでは f_{ij} と書くべきだが、に比例する。また、 ω_k は飛び飛びの値と考えて

きたが、半導体などのように電子のエネルギー準位が連続的に広がっている場合(バンド)には $\hbar\omega_k$ はバンド間遷移エネルギーに相当し、連続的な値をとる。光学材料になるような物質では電子の固有振動は可視や紫外領域にある。分子振動や結晶の格子振動の固有振動は赤外領域にあるが、この様な振動に対しても(4.29)式は適用できる。そのときは当然、 q, m は有効イオン電荷量やイオンの質量になるので、電子のそれとは違った値になる。しかし、分子振動や格子振動では、分子の質量が大きいので可視光のような速い振動にはついていけないので、可視光に対しては分子振動や格子振動の影響は無

視して良い。

以上のような読み替えを行えば、ここで扱っている古典的な電気双極子モデルの現象論で得られる結果は量子論で得られる結果と同じである。

分母の虚数項について：

この項は(4.24)式で指摘したように摩擦による項である。それは電磁波のエネルギーがジュール熱となって消滅する項で、光の吸収に相当する項である。(4.20)式、または(4.22)式より誘電率は複素数になる。誘電率の虚数部は光の吸収をあらわす項である²⁾。

吸収のない、透明領域に話を限るのであれば、この項は無視することができる。以下では $\Gamma = 0$ として透明領域に話を限るとする。

原子分極率 α と屈折率とはLorentz-Lorenzの公式(4.21)式によって関係づけられている。それに上で得た結果を代入すると、

$$\frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} = \frac{N\alpha}{3\varepsilon_0} = \frac{N}{3\varepsilon_0} \frac{q^2}{m} \sum_k \frac{f_k}{\omega_k^2 - \omega^2} \quad (4.31)$$

希薄な媒質で $n \approx 1$ のとき、

$$n^2 - 1 = \frac{N}{\varepsilon_0} \frac{q^2}{m} \sum_k \frac{f_k}{\omega_k^2 - \omega^2} \quad n \approx 1 \text{ の場合} \quad (4.32)$$

n が1に近似できない、密な物質でも以下のようにすれば似た式が得られる。(4.31)式の第1式と第2式から

$$n^2 - 1 = \frac{3N\alpha}{3\varepsilon_0 - N\alpha} \quad (4.33)$$

が得られる。ここで、 α が $(\omega_k^2 - \omega^2)^{-1}$ の形の項の和となっているので、 $(n^2 - 1)$ は

$(\bar{\omega}_k^2 - \omega^2)^{-1}$ の形に展開できるであろう。ただし、 $\bar{\omega}_k$ は ω_k に近い値である。

$$n^2 - 1 = \sum_k \frac{\rho_k}{\bar{\omega}_k^2 - \omega^2} \quad (4.34)$$

この式は $\omega = \bar{\omega}_k$ で発散するから、この値で(4.33)式の分母が0になるはずである。すなわち、 $\bar{\omega}_k$ を

$$3\varepsilon_0 - N\alpha = 3\varepsilon_0 - N \frac{q^2}{m} \sum_k \frac{f_k}{\omega_k^2 - \omega^2} = 0$$

の解にとれば、(4.34)式の展開がえられる。ただし、(4.32)式とは異なり、 $\bar{\omega}_k$ の物理的意味は薄れる。すぐ後で示すように、 $\rho_k, \bar{\omega}_k$ はパラメータとして扱われ、実験結果に合うように選ばれるのが普通である。

結論として、屈折率の分散は(4.31)、(4.32)式あるいは(4.34)式であらわされる。

(4.32)、(4.34)式について、もう少し使い易い近似式が幾つか提案されている。その一例

を示す。透明領域を考えているので $\omega_k > \omega$ である。 $\omega = \frac{2\pi c}{\lambda}$ であるから、(4.34)式で

$\rho_k (2\pi c)^{-2} = \rho_{k0}$ 、 $\bar{\omega}_k$ を ω_k と書けば、

$$\frac{\rho_k}{\omega_k^2 - \omega^2} = \frac{\lambda^2 \lambda_k^2 \rho_{k0}}{\lambda^2 - \lambda_k^2} = \lambda_k^2 \rho_{k0} \left(1 + \frac{\lambda_k^2}{\lambda^2 - \lambda_k^2} \right) \equiv a_k + \frac{b_k}{\lambda^2 - \lambda_k^2} \quad (4.36)$$

λ_k が紫外域にある場合で、可視光領域を主に問題にする場合には他の共鳴波長 λ_k の項をまとめて A とおくと

$$n^2 = A + \frac{B}{\lambda^2 - \lambda_0^2} \quad (4.37)$$

と近似できる。(4.37)式は **Sellmeir の分散式** とよばれている。A、B、 λ_0 はパラメータで、いくつかの波長で屈折率が求まっているとき、その他の波長での屈折率を推定するのに用いられる。なお、この他にも(4.34)式を元にいろいろな近似式が提案されている。

Sellmeir の分散式の例として、二酸化チタン (TiO₂、ルチル形) の透明領域(0.4~1.5 μ m)の屈折率を示す。結晶の c 軸に対して、 $E \perp c$ ($E // c$) 偏光の屈折率 n_{\perp} ($n_{//}$) は次式で表される。この式は ± 0.004 の範囲で実測値と一致している³⁾。

$$\begin{aligned} n_{\perp}^2 &= 5.913 + \frac{0.2441}{\lambda^2 - 0.2834^2} \\ n_{//}^2 &= 7.197 + \frac{0.3322}{\lambda^2 - 0.2904^2} \end{aligned} \quad (5.41)$$

波長 λ の単位は μ m である。この式では共鳴吸収は 280~290nm の紫外域にある。実際反射測定からは 300nm にピークを持つ吸収帯が得られている⁴⁾。

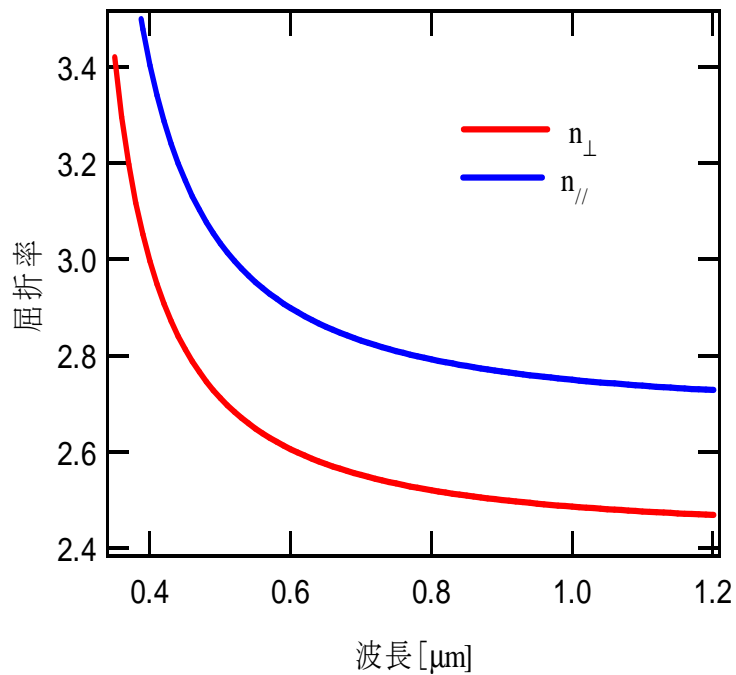


図 4.7 二酸化チタン (TiO₂ ルチル) の屈折率。Sellmeir の分散式で与えられる屈折率(図)は ± 0.004 の範囲で測定値と一致している(0.4~1.5 μm)。
 n_{\perp} (n_{\parallel}) は c 軸に垂直(平行)偏光に対する屈折率である。

- 1) 消滅定理については「光の原理」マックス・ボルン、エミル・ウォルフ著(東海大学出版)2.4 節参照
- 2) 付録B (B18)~(B23)式、または「連続体の電磁気学」ランダウ著 第 11 章 76 節参照
- 3) J. R. Devore, J. Opt. Soc. Am., **41**, 416 (1951)
- 4) K. Vos and H.J. Krusemeyer, J. Phys. C, **10**, 3893 (1977)