

국소장이 원자계에 미치는 영향에 대한 이론 II : 이준위 원자계에서의 거시 양자 Langevin 방정식의 유도

안성혁[†]

아주대학교 물리학과

Ⓣ 442-749 경기도 수원시 팔당구 원천동 산 5번지

(2002년 9월 9일 받음, 2002년 12월 30일 수정본 받음)

쌍극자들로 이루어진 이준위계의 해밀토니안이 주어질 때 이 계가 만족시키는 미시적인 양자 Langevin 방정식을 유도하고, 이 방정식을 거시적인 구간 내에서 평균 함으로써 거시 양자 Langevin 방정식을 유도하고 국소장 효과가 양자적으로 어떻게 표현되는 지를 살펴본다.

주제어 : local field, langevin equation, two-level system.

I. 서 론

광 물리(optical physics)에서 근본적인 문제중의 하나는 감수율(susceptibility)과 굴절률과 같은 물질계의 거시적인 성질을 원자(혹은 분자)의 편극율(polarizability)과 같은 미시적인 성질로 연결시키는 것이다. 물질계의 각 원자들은 다른 원자들과 상호작용을 하고, 물질의 거시적인 성질을 기술하고자 하던 이 모든 상호작용을 고려하여야 하기 때문에 이 문제를 정확히 취급하는 것은 매우 어렵다. 이러한 상호작용을 고려하는 한가지 표준적이면서도 근사적인 방법은 국소장(local field) E_{loc} 의 개념을 도입하는 것이다. 국소장은 외부 소스 및 물질계를 구성하는 모든 원자들에 의한 일종의 효과장(effective field)으로 간주될 수 있다. 국소장은 미시장(microscopic field)이나 미시장을 평균하여 정의된 거시장(macroscopic field)과 구별되어야만 한다. Lorentz^[1]는 등방성 물질내의 국소장과 거시장 E 는

$$E_{loc} = E + (4\pi/3) P \quad (1)$$

로 연결됨을 보였으며, 식 (1)의 원인에 대해서는 정전기장의 경우에는 매우 잘 알려져 있다.^[2] 여기서 P 는 물질계의 편극(polarization)을 나타내며 N 을 원자의 밀도, α 를 원자의 편극률이라고 할 때 $P = N\alpha E_{loc}$ 로 쓸 수 있다. 물질이 선형반응을 보이는 경우 $E + 4\pi P = \epsilon E$ 이므로 식 (1)을 유전상수 ϵ 을 이용하여 표현하면 $\epsilon = 1 + 4\pi LN\alpha$ 로 쓸 수 있고, 여기서 $L = (\epsilon + 2)/3$ 는 국소장에 의한 보정상수를 나타낸다. 따라서 원자밀도가 작으면(즉, $N \approx 0$) 국소장 효과는 거의 나타나지 않고(즉, $L \approx 1$) 국소장 효과가 나타나기 위해서는 원자밀도가 충분히 커야함을 알 수 있으며, Maki 등은 원자의 밀도를 변화시키면서 나타나는 국소장의 효과를 직접 실험을 통하여 보여주었다.^[3]

국소장 개념의 등장 이후 많은 사람들이 식 (1)을 시간에 따

라 변화하는 전파장의 경우로 직접 일반화 시켰다. 즉, 식 (1)을 이 준위(two-level) 원자계의 Bloch 방정식에 직접 적용하여 이 방정식을 일반화시키고 그 결과 나타나는 새로운 물리 현상들에 대해 이론적으로 논하였다.^[4-8] 식 (1)의 관계식이 성립하는 영역 내에서 물질계를 고전적 혹은 준고전적으로 취급하고자 할 때는 식 (1)로 대부분의 물리적 현상들이 충분히 설명되지만 이 물질계를 양자적으로 취급하고자 하면 식 (1)의 전기장과 편극 벡터는 연산자(operator)로 취급되어야만 한다. 따라서 식 (1)을 직접 Bloch 방정식에 적용하는 것보다는 좀더 근본적인 방법이 요구된다.

저자는 이전 논문[9]에서 많은 전기 쌍극자들로 이루어진 물질계에 외부 전기장이 걸리면 이 각각의 쌍극자들이 만들어 내는 국소장의 크기를 무시할 수 없으며, 따라서 이 국소장 효과를 포함시킬 때 계의 상호작용 해밀토니안은 $H = -\mu \cdot E$ 의 합이 아닌

$$H = -\mu \cdot D \quad (2)$$

의 합으로 기술되어야 함을 보였다. 여기서 μ 는 전기 쌍극자 모멘트이고 미시장 $D = E + 4\pi P$ 이다. 이 논문에서는 위 해밀토니안 (2)를 이 준위(two-level) 원자계에 적용하여 미시적인 양자 Langevin 방정식을 유도하고 이 방정식을 거시적인 구간 내에서 평균함으로써 국소장 효과가 거시적인 양자 Langevin 방정식에 어떻게 포함되는지를 보인다.

II. 쌍극자 장

쌍극자들로 이루어진 물질계에서 쌍극자를 구성하는 전하들의 비섭동(unperturbed) 해밀토니안과 전하들간의 상호작용 해밀토니안을 무시하면, 쌍극자 근사를 이용할 때 쌍극자계의 총 해밀토니안은

$$H = H_R + \sum_a H^a \quad (3)$$

[†]E-mail: shan@ajou.ac.kr

와 같이 쓸 수 있으며, 여기서 H_R 은 장 해밀토니안으로서

$$H_R = \frac{1}{8\pi} \int [D(r) \cdot D(r) + B(r) \cdot B(r)] dr$$

로 주어지고,^[9] 벡터 포텐셜, 전기장, 자기장 벡터를

$$A(r) = \sum_{\lambda} \frac{c}{\omega_{\lambda}} K_{\lambda} \hat{e}_{\lambda} [a_{\lambda} e^{ik \cdot r} + a_{\lambda}^{\dagger} e^{-ik \cdot r}]$$

$$D(r) = i \sum_{\lambda} K_{\lambda} \hat{e}_{\lambda} [a_{\lambda} e^{ik \cdot r} - a_{\lambda}^{\dagger} e^{-ik \cdot r}]$$

$$B(r) = i \sum_{\lambda} K_{\lambda} (\mathbf{k} \times \hat{e}_{\lambda}) [a_{\lambda} e^{ik \cdot r} - a_{\lambda}^{\dagger} e^{-ik \cdot r}]$$

와 같이 정의하면 장 해밀토니안 H_R 은

$$H_R = \sum_{\lambda} \hbar \omega_{\lambda} \left(a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda} + \frac{1}{2} \right) \quad (4)$$

로 쓸 수 있다.^[9] H^a 는 공간을 단순구조로 이루어진 격자들로 나누었을 때 격자 a 안에 있는 쌍극자와 장(field)간의 상호작용 해밀토니안으로서 $D(r)$ 이 격자 a 내에서 거의 변하지 않는다는 쌍극자 근사를 가정할 때

$$H^a = -\mu^a \cdot D(R^a) \quad (5)$$

로 쓸 수 있음을 보았다 (R^a 는 격자 a 의 위치 벡터이다).^[9] 해밀토니안 (3)에 의하여 장 연산자 a_{λ} 에 대한 하이젠버그 운동방정식은

$$\dot{a}_{\lambda} = -i\omega_{\lambda} a_{\lambda} - i\hbar^{-1} \left[\sum_b \mu^b \cdot D(R^b), a_{\lambda} \right] \quad (6)$$

이고, 식 (5)의 $D(R)$ 은

$$D(R) = i \sum_{\lambda} K_{\lambda} \hat{e}_{\lambda} [a_{\lambda} e^{ik \cdot R} - a_{\lambda}^{\dagger} e^{-ik \cdot R}] \quad (7)$$

와 같이 쓸 수 있으며 따라서 식 (7)을 식 (6)에 대입하면

$$a_{\lambda}(t) = a_{\lambda}^0 e^{-i\omega_{\lambda} t} + \frac{1}{\hbar} \sum_b K_{\lambda} e^{-ik \cdot R_b} \int_{-\infty}^t e^{-i\omega_{\lambda}(t-t')} e_{\lambda}^{-i\omega_{\lambda}(t-t')} \hat{e}_{\lambda} \cdot \mu^b(t') dt' \quad (8)$$

을 얻는다. 식 (8)를 식 (7)에 다시 대입하면

$$D(R, t) = D^0(R, t) + D^p(R, t) \quad (9)$$

와 같이 두 항으로 분류하여 쓸 수 있으며, 여기서 $D^0(R, t)$ 는 진공요동(vacuum fluctuation)을 나타내는 소음 연산자(noise operator)로서

$$D^0(R, t) = i \sum_b K_{\lambda} \hat{e}_{\lambda} a_{\lambda}^0 e^{ik \cdot R} e^{-i\omega_{\lambda} t} + adj \quad (10)$$

이고, $D^p(R, t)$ 는 쌍극자 모멘트들에 의해 유도된 전기장으로서

$$D^p(R, t) = \sum_b \int_{-\infty}^{\infty} dt' G(R - R^b; t - t') \cdot \mu^b(t') \quad (11)$$

이다. 여기서 $G(R; t)$ 는 Green 함수 텐서로서 (\mathbf{k}, ω) 공간으로

Fourier 변환을 하면

$$G(\mathbf{k}; \omega) = \frac{-4\pi c^2 k^2 (1 - \hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{k}})}{(\omega + i\epsilon)^2 - c^2 k^2} \quad (12)$$

으로 표현된다.

III. 이준위계(Two-level system)의 양자 Langevin 방정식

물질과 장의 상호작용 해밀토니안이 식 (5)로 주어질 때 이 준위계의 총 해밀토니안은

$$H^a = \frac{1}{2} \hbar \omega \sigma_z - \mu \cdot d(R, t) \quad (13)$$

으로 주어진다. 여기서 μ 는 격자 a 에서의 쌍극자 모멘트를 의미하고 식 (5)의 D 는 d 로 표기한다. (지금부터는 편의상 미시장들은 소문자로, 거시장들은 대문자로 표기하기로 한다.) σ_z 는 Pauli 스핀 연산자로서

$$\sigma_z = |a\rangle\langle a| - |b\rangle\langle b| \quad (14)$$

으로 정의되고 $|a\rangle$ 는 원자의 높은 에너지 고유상태(eigenstate), $|b\rangle$ 는 낮은 에너지 고유상태이다. $d(R, t)$ 는 미시적인 장으로서

$$d(R, t) = d^0(R, t) + d^p(R, t) + e^i(R, t) \quad (15)$$

와 같이 쓸 수 있으며 여기서 $d^0(R, t)$ 와 $d^p(R, t)$ 는 식 (9)에서 정의되었으며 $e^i(R, t)$ 는 외부에서 걸어준 입사 전 장으로서 고전적으로 취급되는 장이다. 파울리 스핀 연산자

$$\sigma_{\pm} = |a\rangle\langle b|, \sigma_{\mp} = |b\rangle\langle a| \quad (16)$$

를 사용하면 쌍극자 모멘트 연산자 μ 는

$$\mu = \rho \hat{n} (\sigma_{+} + \sigma_{-}) \quad (17)$$

로 쓸 수 있으며 여기서 ρ 는 이준위계의 전기 쌍극자 행렬 성분으로서 실수값이라고 가정한다. $\hat{n} \cdot d(R, t) = d(R, t)$ 라고 쓰면 식 (13)은

$$H^a = \frac{1}{2} \hbar \omega \sigma_z - \rho (\sigma_{+} + \sigma_{-}) d(R, t) \quad (18)$$

와 같이 쓸 수 있다. 스핀 연산자들은

$$[\sigma_z, \sigma_{\pm}] = \pm 2\sigma_{\pm}, [\sigma_{+}, \sigma_{-}] = \sigma_z \quad (19)$$

의 관계식을 만족시키고, 식 (18)에 의하여 다음과 같은 하이젠버그 방정식을 얻는다:

$$\dot{\sigma}_{+} = i\omega \sigma_{+} + i\rho \hbar^{-1} \sigma_z d(R, t) = (\dot{\sigma}_{-})^{\dagger} \quad (20)$$

$$\dot{\sigma}_z = 2i\rho \hbar^{-1} (\sigma_{+} - \sigma_{-}) d(R, t) \quad (21)$$

식 (20)과 (21)을 외부에서 걸어준 입사장 주파수 ν_2 로 회전하는 틀(frame)로 변환하여 천천히 변하는 항들만 취하고(slowly varying approximation) 또한 감쇠(decay)항들을 첨가하면 다음과 같은 미시적인 운동 방정식을 얻는다:

$$\dot{s}_+ = -(\gamma - i\delta_2)s_+(t) + 2is_ze_-'(R, t) + f_+(t) \quad (22)$$

$$\dot{s}_z = -\Gamma(s - s_0) + is_-(t)e_+'(R, t) - is_+(t)e_-'(R, t) + f_z(t) \quad (23)$$

$$\dot{s}_- = -(\gamma + i\delta_2)s_-(t) - 2is_ze_+'(R, t) + f_-(t) \quad (24)$$

여기서

$$s_z = \frac{1}{2}\sigma_z, s_{\pm} = \sigma_{\pm} e^{\mp iv_2 t} \quad (25)$$

이고

$$e'(R, t) \equiv e^i(R, t) + d^p(R, t) \\ = \frac{\hbar}{\rho} [e_+'(R, t)e^{-iv_2 t} + e_-'(R, t)e^{iv_2 t}] \quad (26)$$

로 정의된다. γ 는 쌍극자 감쇠상수($\equiv 1/T_2$), $d_2 = \omega - \nu_2$ 는 펄프장의 detuning 주파수, 그리고 $\Gamma (= 1/T_1)$ 는 밀도차(population difference) 감쇠상수이다. $f_z(t)$ 와 $f_{\pm}(t)$ 는 $d^p(R, t)$ 를 포함하는 소음 연산자로서

$$\langle f_{\pm}(t) \rangle = \langle f_z(t) \rangle = 0 \quad (27)$$

을 만족시킨다.

IV. 거시 양자 Langevin 방정식의 유도

거시 양자 Langevin 방정식을 구하기 위하여

$$\int \Delta(R) dR = 1 \quad (28)$$

로 규격화되는 함수 $\Delta(R)$ 를 이용하여 식 (13)-(15)를 $a \ll R \ll \lambda$ 의 구간에서 평균한다. 여기서 a 는 격자의 크기이고 λ 는 입시장의 파장이다. 미시 전기장 $e(R, t)$ 와 스핀 연산자 s_j 에 해당하는 거시 전기장 $E(R, t)$ 와 스핀 연산자 S_j 는

$$E(R, t) = \int \Delta(R - R') e(R', t) dR' \quad (29)$$

$$S_j(R, t) = \int \Delta(R - R') s_j(R', t) dR' \\ = \sum_a \Delta(R - R^a) s_j^a(t) \quad (30)$$

로 정의된다. 식 (26)의 장 $e'(R, t)$ 는 $a \ll R \ll \lambda$ 를 만족시키므로 참고문헌 [10]에 의하여

$$e'(R, \omega) = E^C(R, \omega) + \int dR' T^C(R - R') \cdot p(R', \omega) \quad (31)$$

로 쓸 수 있다. 여기서 국소장 E^C 는

$$E^C(R, \omega) = E(R, \omega) + \frac{4\pi}{3} P(R, \omega) \quad (32)$$

와 같이 정의되고 텐서 T^C 는

$$T^C(R) = \frac{3\hat{r}\hat{r} - 1}{R^3} c(R) \quad (33)$$

로 주어지며, 여기서 $\hat{r} = R/R$ 이고 $c(R)$ 은 $R=0$ 에서 1이고 $R=\infty$ 에서 0이 되는 차단(cut-off) 함수이다.^[10] 따라서

$$e'(R, t) = E^C(R, t) + \int dR' T^C(R - R') \cdot p(R', t) \\ = E^C(R, t) + \sum_b T^C(R - R^b) \cdot \mu^b(t) \quad (34)$$

로 쓸 수 있고 $e'(R, t) = \hat{n} e'(R, t)$, $T^C(R) = \hat{n} \cdot T^C(R) \cdot \hat{n}$ 라고 표기하면 식 (26)에서 정의된 $e_+'(R, t)$ 는

$$e_+'(R, t) = E_+^C(R, t) + \sum_b T^C(R - R^b) \mu_+^b(t) \quad (35)$$

와 같이 쓸 수 있고 $E_+^C(R, t)$ 와 $\mu_+(t)$ 는 식 (26)에서와 같이 정의된다.

미시 방정식 (22)-(24)를 평균하기 위해서는

$$\langle s_i e_+'(R, t) \rangle_{space} = \sum_a \Delta(R - R^a) s_i^a e_+'(R, t) \quad (36)$$

을 먼저 계산하여야 하며, 식 (35)를 식 (36)에 대입하면

$$\langle s_i e_+'(R, t) \rangle_{space} = \sum_a \Delta(R - R^a) s_i^a \left[E_+^C(R, t) + \sum_a T^C(R - R^a) \mu_+^b(t) \right] \quad (37)$$

이 된다. 위 식에서 $E_+^C(R, t)$ 은 이미 평균된 것이므로 \sum_a 밖으로 나가고, 쌍극자 모멘트 $\mu_+^b(t)$ 는 평균을 취하는 반경 R 내에서 거의 변하지 않으므로 \sum_b 밖으로 나가며, 한편 $T^C(R)$ 의 성질에 의하여 $\sum_b T^C(R^a - R^b) = 0$ 이므로 식 (37)은

$$\langle s_i e_+'(R, t) \rangle_{space} = S_i E_+^C(R, t) \quad (38)$$

와 같이 된다. 따라서 식 (22)-(24)를 평균한 거시 양자 Langevin 방정식은

$$\dot{S}_+ = -(\gamma - i\delta_2)S_+ + 2iS_z E_+^C + F_+(t) \quad (39)$$

$$\dot{S}_z = -\Gamma(S_z - S_0) + iS_- E_+^C - iS_+ E_-^C + F_z(t) \quad (40)$$

$$\dot{S}_- = -(\gamma + i\delta_2)S_- - 2iS_z E_+^C + F_-(t) \quad (41)$$

와 같이 된다. 여기서 입사 펄프장의 진폭을 ϵ_2 라고 할 때

$$E_+^C = \frac{\rho}{\hbar} \left(\epsilon_2 + \frac{4\pi}{3} P_+ \right) \quad (42)$$

로 주어지며 $F_i(t)$ 는 $\langle F_i(t) \rangle = 0$, $\langle F_i^\dagger(t) F_j(t') \rangle \propto \delta(t - t')$ 를 만족시키는 새로운 소음 연산자이다($i = z, +, -$). 물질의 편극은 식 (17)을 평균함으로써, 즉,

$$P(R, t) = N \rho S e^{-iv_2 t} + c.c. \quad (43)$$

와 같이 쓸 수 있고 여기서 N 은 단위 체적당 격자의 수이다. $P_{\pm}(R, t)$ 는 입사 파장 내에서 거의 변하지 않으므로 따라서

$$P^+(R, t) = N \rho S_- \quad (44)$$

이 된다. 따라서 식 (42)는

$$E_+^C = \frac{\rho \epsilon_2}{\hbar} + iS_- \quad (45)$$

의 형태로 쓸 수 있으며 여기서 $\rho \epsilon_2$ 는 고전적인 펌프장과 쌍극자간의 상호작용 에너지이고 국소장 효과를 나타내는 보정상수 l 은

$$l = \frac{4\pi}{3} \left(\frac{\rho^2}{\hbar} \right) N \quad (46)$$

으로 주어지며 국소장 효과를 무시할 수 있는 경우는 $l=0$ 에 해당한다. 식 (45)는 방정식 (39)-(41)과 함께 (S_z, S_+, S_-) 연산자들로 결합된 닫힌 방정식 세트를 이루고, 참고문헌 [8]에서는 이준위계에서 이 방정식의 형태를 가정하여 l 값이 변함에 따라 달라지는 현상에 대하여 논하였다.

V. 결론 및 토의

쌍극자들로 이루어진 이준위계의 해밀토니안이 식 (13)으로 주어질 때 이 계가 만족시키는 미시적인 양자 Langevin 방정식을 유도하고 이 방정식을 거시적인 구간 내에서 평균 함으로써 국소장 효과를 포함한 거시 양자 Langevin 방정식을 유도하였으며, 결과적으로 양자적인 국소장의 효과는 고전적인 식 (1)과 같은 형태가 되지만 식 (1)의 편극 P 가 연산자가 되어야함을 보였다. 국소장의 효과는 쌍극자의 세기와 밀도에 따라 달라지고 따라서 각 원자계의 성질에 따라서 국소장의 효과가 다르게 나타날 것으로 보이며 이 논문에서는 국소장 효

과가 나타나기 위한 각 상수의 구체적인 값들에 대해서는 논하지 않기로 한다.

참고문헌

- [1] H. A. Lorentz, "The theory of electrons," 2nd ed., Dover, New York (1952), Secs. 117-136.
- [2] J. D. Jackson, "Classical electrodynamics," 2nd ed., Wiley, New York (1964), chap. 4.
- [3] J. J. Maki, M. S. Malcuit, J. E. Sipe, and R. W. Boyd, *Phys. Rev. Lett.* 67, 972 (1991).
- [4] F. A. Hopf, C. M. Bowden, and W. H. Louisell, *Phys. Rev. A* 29, 2591 (1984).
- [5] R. Friedberg, S. R. Hartmann, and J. T. Manassah, *Phys. Rev. A* 39, 3444 (1989).
- [6] R. Friedberg, S. R. Hartmann, and J. T. Manassah, *Phys. Rev. A* 40, 2446 (1989).
- [7] C. M. Bowden, A. S. Manka, and J. D. Dowling, "Coherence and quantum optics VII," Plenum Press, New York (1996), p271.
- [8] S. An and B. K. Rhee, *J. of the Opt. Soc. of Korea*, Vol.1, 94 (1997).
- [9] 안성혁, 한국광학회지, 제 11권, 1(2000).
- [10] J. E. Sipe, *Canadian Journal of Physics*, vol. 56, 199 (1978).

Effect of local field on atomic systems II : Derivation of macroscopic quantum Langevin equations in two-level systems

Sunghyuck An[†]

Department of Physics, Ajou University, Suwon 442-749, KOREA

[†]E-mail: shan@ajou.ac.kr

(Received September 9, 2002, Revised manuscript December 30, 2002)

The microscopic quantum Langevin equations for two-level atom electric dipole systems are derived, starting from the microscopic interaction Hamiltonian of the systems. By averaging those microscopic equations over a macroscopic region, the macroscopic quantum Langevin equations are derived and the effect of local-field corrections on the two-level systems is investigated.

Classification code : QO.010.