《연구논문》 Hankook Kwanghak Hoeji, Volume 11, Number 1, February 2000
(Journal of the Optical Society of Korea – Korean Edition)

국소장이 원자계에 미치는 영향에 대한 이론 I : 전기 쌍극자계에서의 상호작용 해밀토니안의 유도

안성혁
아주대학교 물리학과

(1999년 11월 16일 받음, 2000년 2월 2일 수정본 받음)

전기 쌍극자들로 이루어진 물질계의 총 해밀토니안을 쿨롱게이지내에서 정의하고, 유니타리 변환을 이용하여 쌍극자 근사를 가정할 때 각 쌍극자들에의한 편극이 궁극적으로 계의 상호작용 해밀토니안에 어떻게 영향을 미치는가를 살펴본다.

I. 서 론

광 물리(optical physics)에서 근본적인 문제중의 하나는 감수율(susceptibility)과 굴절율과 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 하면 이 모든 상호작용을 고려하여야 하기 때문에 이 문제를 정확히 취급하는 것은 매우 어렵다. 이러한 상호작용을 고려하는 한가지 표준적이면서도 근사적인 방법은 국소장(local field) $\boldsymbol{E}_{loc}$의 개념을 도입하는 것이다. 국소장은 외부 소스및 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 $\boldsymbol{E}$는

$$\boldsymbol{E}_{loc}=E+(4\pi/3)\boldsymbol{P} \tag{1}$$

로 연결됨을 보였으며, 식 (1)의 원인에 대해서는 정전기장의 경우에는 매우 잘 알려져 있다.[2] 여기서 $\boldsymbol{P}$는 물질계의 편극(polarization)을 나타낸다. 물질이 선형반응을 보이는 경우 식 (1)을 유전상수 ε을 이용하여 표현하면 $\varepsilon=1+4\pi LN\alpha$로 쓸 수 있으며 여기서 N은 원자의 밀도, α는 원자의 편극율, $L=(\varepsilon+2)/3$는 국소장에의한 보정상수를 나타낸다. 따라서 원자밀도가 작으면(i.e., $N\simeq 0$) 국소장 효과는 거의 나타나지 않으며 (i.e., $L\approx 1$), 국소장 효과가 나타나기 위해서는 원자밀도가 충분히 커야함을 알 수 있다. 최근 Maki등은 원자의 밀도를 변화시키면서 나타나는 국소장의 효과를 직접 실험을 통하여 보여주었다.[3]

국소장 개념의 등장이후 많은 사람들이 식 (1)을 시간에 따라 변화하는 전파장의 경우로 직접 일반화 시켰다. 즉, 식 (1)을 이 준위(two-level) 원자계의 블록(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 Bloch방정식에 적용하는 것보다는 좀더 근본적인 방법이 요구된다. 즉, 이 계의 상호작용 해밀토니안에서부터 시작하여 이 해밀토니안이 물질의 편극을 고려할 때 어떻게 기술되는지를 정확히 알아야만 한다. 한 전기 쌍극자에 외부 전기장 $\boldsymbol{E}$를 걸어줄 때 이 계의 상호작용 해밀토니안은

$$H=-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{E} \tag{2}$$

로 주어진다. 여기서 $\boldsymbol{\mu}$는 전기 쌍극자 모멘트이다. 많은 전기 쌍극자들로 이루어진 물질계에 외부 전기장이 걸리면 이 각각의 쌍극자들이 만들어 내는 국소장의 크기를 무시할 수 없으며, 따라서 이 국소장 효과를 포함시킬 때 식 (2)는 반드시 수정되어야만 한다. 이 논문에서는 물질계를 구성하는 각 쌍극자들에 의한 편극을 고려할 때 식 (2)가 어떻게 수정되어야 하는지를 보이고, 후속 논문에서는 수정된 해밀토니안을 이 준위(two-level) 원자계에 적용하여 국소장 효과가 블록방정식에 어떻게 포함되는지를 보인다.

II. 최소결합(Minimal Coupling) 해밀토니안(쿨롱 게이지)

이 절에서는 물질계의 기본 해밀토니안을 정의하고 이 해밀토니안으로부터 정확한 미시적 맥스웰 방정식이 유도됨을 보인다. 계의 해밀토니안은 장, 쿨롱, 입자 해밀토니안의 세 합으로 구성된다;

$$H=H_F+H_C+H_P. \tag{3}$$

여기서 장 해밀토니안 H_F는

$$H_F=\Sigma_\lambda\,\hbar\,\omega_\lambda\left(a_\lambda^{+}a_\lambda+\frac{1}{2}\right) \tag{4}$$

로 주어진다. a_λ는 모드 λ에 대한 소멸연산자(annihilation

operator)이고 λ는 편광성분 p = 1, 2와 파수벡터(wave vector) $\boldsymbol{k}$를 표시하며, 이 파수벡터는

$$\boldsymbol{k}=\frac{2\pi}{L}(n_x\hat{x}+n_y\hat{y}+n_z\hat{z}) \tag{5}$$

로 주어진다. 여기서 n_j는 정수이고 $L^3=V$는 규격화 체적(normalization volume)이다. 주파수 $\omega_\lambda=ck$이다. 연산자들은 다음과 같은 교환관계(commutation relations)를 만족시킨다;

$$[a_\lambda, a_{\lambda'}^\dagger]=\delta_{\lambda\lambda'},\ [a_\lambda, a_{\lambda'}]=[a_\lambda^\dagger, a_{\lambda'}^\dagger]=0. \tag{6}$$

벡터 포텐샬, 전기장, 자기장 벡터는 다음과 같이 정의한다;

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})=\sum_\lambda \frac{c}{\omega_\lambda}K_\lambda\,\hat{e}_\lambda[a_\lambda e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}+a_\lambda^\dagger e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}] \tag{7}$$

$$\boldsymbol{E}^t(\boldsymbol{r})=i\sum_\lambda K_\lambda\,\hat{e}_\lambda[a_\lambda e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}-a_\lambda^\dagger e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}] \tag{8}$$

$$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})=i\sum_\lambda K_\lambda\,(\boldsymbol{k}\times\hat{e}_\lambda)[a_\lambda e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}-a_\lambda^\dagger e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}]. \tag{9}$$

여기서 $\boldsymbol{E}=\boldsymbol{E}^t+\boldsymbol{E}^l$, $\boldsymbol{E}^t$는 전기장 $\boldsymbol{E}$의 가로(transverse) 성분($\nabla\cdot\boldsymbol{E}^t=0$), $\boldsymbol{E}^l$는 $\boldsymbol{E}$의 세로(longitudinal) 성분($\nabla\times\boldsymbol{E}^l=0$), $K_\lambda=(2\pi\hbar\,\omega_\lambda/V)^{1/2}$, $\hat{e}_\lambda$는 모드 λ에 대한 단위벡터이다. 표현을 간단히 하기 위해서 위 식에서 시간의존에 대한 표시는 생략하였다. 벡터장들은

$$\nabla\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})=\nabla\cdot\boldsymbol{E}^t(\boldsymbol{r})=\nabla\cdot\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})=0 \tag{10}$$

를 만족시킨다. 쿨롱 해밀토니안 H_C는

$$H_C=\frac{1}{2}\int d\boldsymbol{r}\rho(\boldsymbol{r})\phi(\boldsymbol{r}) \tag{11}$$

로 정의된다. 여기서 $\rho(\boldsymbol{r})$은 전하밀도, $\Phi(\boldsymbol{r})$은 전기 포텐샬이며 $\nabla^2\phi(\boldsymbol{r})=-4\pi\rho(\boldsymbol{r})$이다. 전하분포가 점전하들로 구성되어 있는 경우에 전하밀도 $\rho(\boldsymbol{r})$은

$$\rho(\boldsymbol{r})=\sum_\alpha e^\alpha\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{q}^\alpha) \tag{12}$$

로 주어지고 포텐샬은

$$\phi(\boldsymbol{r})=\sum_\alpha\frac{e^\alpha}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{q}^\alpha|} \tag{13}$$

이며 따라서 쿨롱 해밀토니안은

$$H_C=\frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta}\frac{e^\alpha e^\beta}{|\boldsymbol{q}^\alpha-\boldsymbol{q}^\beta|} \tag{14}$$

이 된다. 여기서 $\boldsymbol{q}^\alpha$는 전하 α의 위치벡터이다. 입자 해밀토니안은

$$H_P=\sum_\alpha\frac{1}{2m^\alpha}\left(\boldsymbol{p}^\alpha-\frac{e^\alpha}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{q}^\alpha)\right)^2 \tag{15}$$

로 주어진다.

위 벡터장 연산자들(7-9)이 맥스웰 방정식을 만족시킴을 보이기 위해서 우리는 a_λ 연산자의 시간에 대한 미분을 먼저 계산한다.

$$\dot{a}_\lambda=\frac{i}{\hbar}[H,a_\lambda]=-i\omega_\lambda a_\lambda+\frac{i}{\hbar}[H_P,a_\lambda]$$
$$=-i\omega_\lambda a_\lambda+\frac{iK_\lambda}{2\hbar\,\omega_\lambda}\sum_\alpha s_\lambda^\alpha, \tag{16}$$

여기서

$$s_\lambda^\alpha=e^\alpha[e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{q}^\alpha}(\hat{e}_\lambda\cdot\mathbf{v}^\alpha)+(\hat{e}_\lambda\cdot\mathbf{v}^\alpha)e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{q}^\alpha}] \tag{17}$$

이고 λ는 $\boldsymbol{k}p$의 조합을 의미한다. $\hat{e}_{kp}=\hat{e}_{-kp}$를 이용하면 $(s_\lambda^\alpha)^\dagger=s_{-kp}^\alpha$이 되고 따라서

$$\dot{a}_\lambda^\dagger=i\omega_\lambda a_\lambda^\dagger-\frac{iK_\lambda}{2\hbar\,\omega_\lambda}\sum_\alpha s_{-kp}^\alpha \tag{18}$$

이 된다. 식 (16)과 (18)을 이용하여 식 (7)을 시간에 대하여 미분하면

$$\dot{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{r})=\sum_\lambda\frac{\omega_\lambda}{c}K_\lambda\hat{e}_\lambda[-i\omega_\lambda a_\lambda e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}+i\omega_\lambda a_\lambda^\dagger e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}]$$
$$+\sum_{\alpha\lambda}\frac{ic}{2\hbar\,\omega_\lambda^2}K_\lambda^2\hat{e}_\lambda[s_{kp}^\alpha e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}-s_{kp}e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}] \tag{19}$$

이 되고 마지막 항에서 $\boldsymbol{k}$를 $-\boldsymbol{k}$로 바꾸면 $\Sigma_{\alpha\lambda}$항은 영이 되며, 따라서 식 (8)을 이용하면

$$\dot{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{r})=-c\boldsymbol{E}^t(\boldsymbol{r}) \tag{20}$$

이 된다. 마찬가지로 식 (16)과 (18)을 식 (9)의 시간 미분에 이용하면

$$\dot{\boldsymbol{B}}(\boldsymbol{r})=-c\nabla\times\boldsymbol{E}^\dagger(\boldsymbol{r}) \tag{21}$$

이 됨을 쉽게 보일 수 있다. 마지막으로 식 (16)과 (18)을 식 (8)의 시간 미분에 이용하면

$$\dot{\boldsymbol{E}}^t(\boldsymbol{r})=\sum_\lambda K_\lambda\omega_\lambda\hat{e}_\lambda[a_\lambda e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}+a_\lambda^\dagger e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}]$$
$$-\sum_{\alpha\lambda}\frac{K_\lambda^2\hat{e}_\lambda}{2\hbar\,\omega_\lambda^2}[s_{kp}^\alpha e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}+s_{-kp}^\alpha e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}]$$
$$=c\nabla\times\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})-\frac{4\pi}{V}\sum_\lambda\hat{e}_\lambda\,\hat{e}_\lambda\cdot\int e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}')d\boldsymbol{r}' \tag{22}$$

이 되고, 여기서 전류밀도 연산자 $\boldsymbol{j}$는

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}')=\frac{1}{2}\sum_\alpha e^\alpha[\delta(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{q}^\alpha)\mathbf{v}^\alpha+\mathbf{v}^\alpha\delta(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{q}^\alpha)] \tag{23}$$

로 정의된다.

$$\frac{1}{V}\sum_\lambda\hat{e}_\lambda\,\hat{e}_\lambda e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}=\sum_p\int\frac{d\boldsymbol{k}}{(2\pi)^3}\hat{e}_{kp}\hat{e}_{kp}e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}=\overleftrightarrow{\delta}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \tag{24}$$

를 이용하면 식 (A.31)은 마침내

$$\dot{\boldsymbol{E}}^t(\boldsymbol{r})=c\nabla\times\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})-4\pi\boldsymbol{j}^t(\boldsymbol{r}) \tag{25}$$

이 된다. 전자기장 (8)과 (9)가 장 해밀토니안 (4)를 만족시킴을 보이기 위해서 우리는 다음을 계산한다;

$$\int d\boldsymbol{r}\boldsymbol{E}^t(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{E}^t(\boldsymbol{r})=\sum_{kp}VK_\lambda^2[a_\lambda a_\lambda^\dagger-a_{kp}a_{-kp}+adj.].$$

마찬가지로

$$\int d\boldsymbol{r}\boldsymbol{B}^t(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{B}^t(\boldsymbol{r})=\sum_{kp}VK_\lambda^2[a_\lambda a_\lambda^\dagger+a_{kp}a_{-kp}+adj.]$$

이고 따라서

$$\frac{1}{8\pi}\int d\boldsymbol{r}[\boldsymbol{E}^t(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{B}^t(\boldsymbol{r})+\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})]=\sum_\lambda\hbar\,\omega_\lambda\left[a_\lambda^\dagger a_\lambda+\frac{1}{2}\right]=H_F \tag{26}$$

이며, 이것은 식 (4)와 일치한다. 따라서 해밀토니안 (3)과 벡터장 (7-9)은 장과 입자의 정확한 운동방정식을 만족시킨다.

III. 유니타리 변환(Unitary Transformation)과 새로운 변수들

이 절에서는 앞에서 정의한 연산자들을 유니타리 변환함으로서 해밀토니안 (3)을 다극자 팽창에 더욱 편리한 형태로 바꾼다. 일반적으로 한 계의 정준(canonical) 위치와 운동량이 Q_i와 P_i로 주어질 때 이들의 교환자는

$$[Q_i,\ P_j]=i\hbar\ \delta_{ij} \tag{27}$$

로 주어진다. 다음과 같이 정의되는 변환된 변수들을 고려해 보자.

$$\overline{Q}_i=UQ_iU^{-1} \tag{28}$$

$$\overline{P}_i=UP_iU^{-1}, \tag{29}$$

여기서 U는 주어진 유니타리 연산자이다. 그러면 Q_i와 P_i는 에르미티안(Hermitian)이고 따라서

$$[\overline{Q}_i,\ \overline{P}_j]=i\hbar\ \delta_{ij} \tag{30}$$

를 만족시킨다. 만일 해밀토니안이 원래 변수의 함수로 $F(Q_i, P_i)$의 형태로 정의된다면, 변환된 변수로는 새로운 함수 $\mathcal{F}(\overline{Q}_i, \overline{P}_i)$의 형태로 주어지며 F와 $\mathcal{F}$는

$$F(Q_i,P_i)=\mathcal{F}(\overline{Q}_i,\overline{P}_i)=\mathcal{F}(UQ_iU^{-1},\ UP_iU^{-1})=U\mathcal{F}(Q_i,P_i)U^{-1}$$

로 연결된다. 즉, 원래의 해밀토니안 함수 F가 주어질 때 새로운 함수 $\mathcal{F}$는

$$\mathcal{F}(Q_i,\ P_i)=U^{-1}\ F(Q_i,\ P_i)U \tag{31}$$

로 주어진다. 계산을 좀더 편리하게 하기 위하여 우리는 미시 편극장(microscopic polarization field) $\mathbf{P}(\mathbf{r})$의 개념을 도입한다. 계는 서로 중복되지 않는 "단위"들(원자나 분자 등)로 구성되어 있고, 각 단위내의 전하들의 합은 중성이라고 가정한다. 각각의 단위는 그 "위치"로 구별되어지고 전하 α가 속한 단위의 위치는 $\boldsymbol{R}^\alpha$로 표시한다. 그러면 미시 편극장은

$$\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r})=\sum_\alpha e^\alpha\ \boldsymbol{\sigma}^\alpha\int_0^1\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}^\alpha-\lambda\boldsymbol{\sigma}^\alpha)d\lambda \tag{32}$$

와 같이 정의할 수 있고, 여기서 $\boldsymbol{\sigma}^\alpha\equiv\boldsymbol{q}^\alpha-\boldsymbol{R}^\alpha$ 이다. 식 (32)은 편극장이 되기 위한 필요조건, 즉

$$\rho(\boldsymbol{r})=\sum_\alpha e^\alpha\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{q}^\alpha)=-\nabla\cdot\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r}) \tag{33}$$

을 만족시킴을 쉽게 확인할 수 있다. 우리가 이용하고자 하는 단위 변환은

$$U=\exp(iS)=\exp\left[\frac{i}{\hbar c}\int\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r}\right] \tag{34}$$

이다. 이 변환은 P_i와 B_i는 변화시키지 않지만 $\overline{E}_i^t(\boldsymbol{r})$ 는

$$\begin{aligned}\overline{E}_i^t(\boldsymbol{r})&=e^{iS}E_i^t(\boldsymbol{r})e^{-iS}=(1+iS+\ldots)E_i^t(\boldsymbol{r})(1-iS+\ldots)\\&=E_i^t(\boldsymbol{r})+i[S,E_i^t(\boldsymbol{r})]\end{aligned} \tag{35}$$

가 된다. $[S,\ E_i^t(\boldsymbol{r})]$는 S와 교환(commute)하기 때문에 이외의 다른 항들은 저절로 영이 된다. 또한

$$[S,E_i^t(\boldsymbol{r})]=\frac{1}{\hbar c}\int P_j(\boldsymbol{r}')[A_j(\boldsymbol{r}'),E_i^t(\boldsymbol{r}')]d\boldsymbol{r}'=-4\pi iP_i^t(\boldsymbol{r})$$

로 쓸 수 있기 때문에, 식 (35)는

$$\overline{E}_i^t(\boldsymbol{r})=E_i^t(\boldsymbol{r})+4\pi P_i^t(\boldsymbol{r}) \tag{36}$$

가 된다. 이것을 식 (26)에 사용하면 변환된 장 해밀토니안은

$$\begin{aligned}U^{-1}H_FU&=\frac{1}{8\pi}\int[(E^t(\boldsymbol{r})-4\pi P^t(\boldsymbol{r}))\cdot(E^t(\boldsymbol{r})-4\pi P^t(\boldsymbol{r}))+\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})]dr\\&=\frac{1}{8\pi}\int[E^t(\boldsymbol{r})\cdot E^t(\boldsymbol{r})+\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})]dr\\&\quad-\int P^t(\boldsymbol{r})\cdot E^t(\boldsymbol{r})dr+2\pi\int P^t(\boldsymbol{r})\cdot P^t(\boldsymbol{r})dr\end{aligned} \tag{37}$$

와 같이 쓸 수 있다. 식 (33)과 또한 쿨롱 게이지 내에서 $\boldsymbol{E}^l(\boldsymbol{r})=-\nabla\phi(\boldsymbol{r})=-4\pi\ \boldsymbol{P}^l(\boldsymbol{r})$임을 이용하면 쿨롱 해밀토니안 (11)은

$$\begin{aligned}H_C&=\frac{1}{2}\int d\boldsymbol{r}\rho(\boldsymbol{r})\phi(\boldsymbol{r})=-\frac{1}{2}\int d\boldsymbol{r}\nabla\cdot P(\boldsymbol{r})\phi(\boldsymbol{r})=\frac{1}{2}\int d\boldsymbol{r}\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r})\cdot\nabla\phi(\boldsymbol{r})\\&=-\frac{1}{2}\int d\boldsymbol{r}\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{E}^l(\boldsymbol{r})\\&=2\pi\int\boldsymbol{P}^l(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{P}^l(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r}\end{aligned} \tag{38}$$

와 같이 쓸 수 있다. 위 식의 마지막 단계에서 가로성분과 세로성분은 서로 중복되지 않는다는 것을 이용하였다. 따라서 $U^{-1}H_CU=H_C$가 되고 식 (37)과 함께

$$\begin{aligned}U^{-1}(H_F+H_C)U&=\frac{1}{8\pi}\int d\boldsymbol{r}[\boldsymbol{E}^t(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{E}^t(\boldsymbol{r})+\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})]\\&\quad-\int\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{E}^l(\boldsymbol{r})dr+2\pi\int\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r})dr\end{aligned} \tag{39}$$

가 된다.

다음으로 변환된 입자 해밀토니안을 구하기 위하여 우리는 먼저 변환된 운동량을 계산한다. 입자의 위치는 유니타리 변환 (34)에 의하여 변하지 않음을 주의하면 변환된 운동량은

$$\bar{\boldsymbol{p}}^{\alpha}=\boldsymbol{p}^{\alpha}+i[S,\boldsymbol{p}^{\alpha}]$$
$$=\boldsymbol{p}^{\alpha}-\frac{e^{\alpha}}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{q}^{\alpha})-\frac{e^{\alpha}}{c}\iint_0^1\lambda\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}^{\alpha}-\lambda\boldsymbol{\sigma}^{\alpha})\boldsymbol{\sigma}^{\alpha}\times\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})d\lambda d\boldsymbol{r} \tag{40}$$

로 주어지고 이것을 식 (15)에 이용하면 변환된 입자 해밀토니안은

$$U^{-1}H_PU=\sum_{\alpha}\frac{1}{2m_{\alpha}}\left(\boldsymbol{p}^{\alpha}+\frac{e^{\alpha}}{c}\iint_0^1\lambda\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}^{\alpha}-\lambda\boldsymbol{\sigma}^{\alpha})\boldsymbol{\sigma}^{\alpha}\times\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})d\lambda d\boldsymbol{r}\right)^2 \tag{41}$$

이다. 이것을 식 (39)와 합하면 변환된 해밀토니안은 변환된 변수로 다음과 같이 표현된다;

$$H=\sum_{\alpha}\frac{1}{2m_{\alpha}}\left(\bar{\boldsymbol{p}}^{\alpha}+\frac{e^{\alpha}}{c}\iint_0^1\lambda\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}^{\alpha}-\lambda\boldsymbol{\sigma}^{\alpha})\boldsymbol{\sigma}^{\alpha}\times\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})d\lambda d\boldsymbol{r}\right)^2$$
$$+\frac{1}{8\pi}\int d\boldsymbol{r}[\overline{\boldsymbol{E}^t}(\boldsymbol{r})\cdot\overline{\boldsymbol{E}^t}(\boldsymbol{r})+\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})]$$
$$-\int\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r})\cdot\overline{\boldsymbol{E}^t}(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r}+2\pi\int\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r}. \tag{42}$$

여기서 우리는 $\bar{P}(\boldsymbol{r})=P(\boldsymbol{r})$, $\bar{B}(\boldsymbol{r})=B(\boldsymbol{r})$, $\bar{\boldsymbol{q}}^{\alpha}=\boldsymbol{q}^{\alpha}$ 등을 사용하였다. 또한

$$\overline{\boldsymbol{E}^t}(\boldsymbol{r})=\boldsymbol{E}^t(\boldsymbol{r})+4\pi\boldsymbol{P}^t(\boldsymbol{r})=\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r})+4\pi\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r})\equiv\boldsymbol{D}(\boldsymbol{r}) \tag{43}$$

을 이용하면 식 (42)는

$$H=\frac{1}{8\pi}\int[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{D}(\boldsymbol{r})+\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})]d\boldsymbol{r}$$
$$+2\pi\int\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r}-\int\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{D}(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r}$$
$$+\sum_{\alpha}\frac{1}{2m_{\alpha}}\left(\boldsymbol{p}^{\alpha}+\frac{e^{\alpha}}{c}\iint_0^1\lambda\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}^{\alpha}-\lambda\boldsymbol{\sigma}^{\alpha})\boldsymbol{\sigma}^{\alpha}\times\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})d\lambda d\boldsymbol{r}\right)^2 \tag{44}$$

가 된다. 여기서 우리는 표현상의 혼잡을 피하기 위하여 $\bar{\boldsymbol{p}}^{\alpha}$ 대신 $\boldsymbol{p}^{\alpha}$로 표시하였다.

IV. 해밀토니안의 단위 성분들

식 (32)의 미시 편극장 $\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r})$은 서로 중복되지 않는 "단위"들(원자나 분자 등)에 의하여 표현된다. 따라서 이 편극장은 간단하게

$$\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r})=\sum_{a}\boldsymbol{P}^{a}(r) \tag{45}$$

와 같이 표현하는 것이 편리하다. 여기서 a는 서로 다른 단위들을 나타낸다. 각 단위의 위치는 $\boldsymbol{R}^a$이다. 가정에 의하여 각 단위들은 서로 중복되지 않기 때문에 a와 a'이 서로 다르면

$$\int\boldsymbol{P}^{a}(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{P}^{a'}(\boldsymbol{r})=0 \tag{46}$$

이다. 따라서 우리는 해밀토니안 (44)를

$$H=H_R+\Sigma_aH^a \tag{47}$$

와 같이 쓸 수 있으며, 여기서

$$H_R=\frac{1}{8}\int[\boldsymbol{D}(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{D}(\boldsymbol{r})+\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})]d\boldsymbol{r} \tag{48}$$

$$H_a=\sum_{\alpha}^{a}\frac{1}{2m_{\alpha}}\left(\boldsymbol{p}^{\alpha}+\frac{e^{\alpha}}{c}\iint_0^1\lambda\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}^{\alpha}-\lambda\boldsymbol{\sigma}^{\alpha})\boldsymbol{\sigma}^{\alpha}\times\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})d\lambda d\boldsymbol{r}\right)^2$$
$$+2\pi\int\boldsymbol{P}^{a}(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{P}^{a}(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r}-\int\boldsymbol{P}^{a}(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{D}(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r} \tag{49}$$

이다. 여기서 α는 단위 a 안에 있는 전하들의 표시이고 $\boldsymbol{\sigma}^{\alpha}=\boldsymbol{q}^{\alpha}-\boldsymbol{R}^{a}$이다. 우리는 식 (49)의 첫번째 항을 세로성분과 가로성분의 합으로 표현한다;

$$2\pi\int\boldsymbol{P}^{a}(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{P}^{a}(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r}=2\pi\int\boldsymbol{P}^{al}(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{P}^{al}(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r}+2\pi\int\boldsymbol{P}^{at}(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{P}^{at}(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r}.$$

위 식에서 세로부분은 단위 a안에 있는 전하들간의 쿨롱 에너지이다. 우리는 이것을 V^{al}이라고 하고 가로부분은 V^{at}이라고 한다. 그 둘의 합, 즉,

$$H_0^a=\sum_{\alpha}^{a}\frac{(\boldsymbol{p}^{\alpha})^2}{2m^{\alpha}}+V^{al} \tag{50}$$

은 단위 a 안에 있는 전하들에 대해 쓸 수 있는 보통의 비섭동된(unperturbed) 해밀토니안이다. 식 (49)의 제곱항을 펼치면 H_a는

$$H_a=H_0^a+V^{at}-\int\boldsymbol{P}^{a}(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{D}(r)d\boldsymbol{r}-\int\left[\boldsymbol{M}^{pa}(\boldsymbol{r})+\frac{1}{2}\boldsymbol{M}^{pa}(\boldsymbol{r})\right]\cdot\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r} \tag{51}$$

와 같이 쓸 수 있으며, 여기서 $\boldsymbol{M}^{pa}$는 단위 a의 상자성(paramagnetism) 항으로서

$$\boldsymbol{M}_k^{pa}(\boldsymbol{r})=\sum_{\alpha}^{a}\frac{e^{\alpha}}{2cm_{\alpha}}\int_0^1\lambda\varepsilon_{kji}[p_i^{\alpha}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}^{\alpha}-\lambda\boldsymbol{\sigma}^{\alpha})\sigma_j^{\alpha}$$
$$+\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}^{\alpha}-\lambda\boldsymbol{\sigma}^{\alpha})\sigma_j^{\alpha}p_i^{\alpha}]d\lambda \tag{52}$$

로 정의되고, $\boldsymbol{M}^{da}$는 단위 a의 반자성(diagmagnetizm) 항으로서

$$\boldsymbol{M}^{pa}(\boldsymbol{r})=\sum_{\alpha}^{a}\frac{(e^{\alpha})^2}{2cm_{\alpha}c^2}\iint_0^1\int_0^1\lambda\lambda' d\lambda d\lambda'\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}^{\alpha}-\lambda\boldsymbol{\sigma}^{\alpha})$$
$$\delta(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{R}^{\alpha}-\lambda'\boldsymbol{\sigma}^{\alpha})\boldsymbol{\sigma}^{\alpha}\times(\sigma^{\alpha}\times\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r}'))d\boldsymbol{r}' \tag{53}$$

로 정의된다.

$\boldsymbol{D}(\boldsymbol{r})$과 $\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})$이 단위 a내에서 거의 변하지 않는다는 쌍극자 근사를 가정할 때 우리는 이것들을 $\boldsymbol{r}=\boldsymbol{R}^a$에서 계산할 수 있으며, 따라서 이것들을 $\boldsymbol{r}$에 대한 적분 밖으로 보낼 수 있다. 이러한 쌍극자 근사아래 식 (51)은

$$H_a=H_0^a+V^{at}-\boldsymbol{\mu}^{a}\cdot\boldsymbol{D}(\boldsymbol{R}^{a})-\left(\boldsymbol{\nu}^{pa}+\frac{1}{2}\boldsymbol{\nu}^{da}\right)\cdot\boldsymbol{B}(\boldsymbol{R}^{a}) \tag{54}$$

와 같이 간단하게 쓸 수 있다. 여기서 $\boldsymbol{\mu}^a$는 보통의 전자 쌍극자 모멘트, 즉,

$$\boldsymbol{\mu}^a=\int \boldsymbol{P}^a(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r}=\sum_{\alpha}^{a} e^{\alpha}\boldsymbol{\sigma}^{\alpha}\int\int_0^1 \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}^{\alpha}-\lambda\boldsymbol{\sigma}^{\alpha})d\lambda d\boldsymbol{r}=\sum_{\alpha}^{a} e^{\alpha}\boldsymbol{\sigma}^{\alpha} \tag{55}$$

이고, $\boldsymbol{v}^{pa}$는 보통의 상자성 모멘트,

$$\boldsymbol{v}^{pa}=\int \boldsymbol{M}^{pa}(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r}=\sum_{\alpha}^{a}\frac{e^{\alpha}}{2m^{\alpha}c}(\boldsymbol{\sigma}^{\alpha}\times\boldsymbol{p}^{\alpha}) \tag{56}$$

이며, $\boldsymbol{v}^{da}$는 보통의 반자성 모멘트,

$$\boldsymbol{v}^{da}=\int \boldsymbol{M}^{da}(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r}=\sum_{\alpha}^{a}\frac{(e^{\alpha})^2}{2m^{\alpha}c^2}\boldsymbol{\sigma}^{\alpha}\times(\boldsymbol{\sigma}^{\alpha}\times\boldsymbol{B}(\boldsymbol{R}^{\alpha})) \tag{57}$$

이다. 현재의 우리의 목적에는 관계가 없는 상자성 모멘트와 반자성 모멘트를 무시하면 단위 해밀토니안은

$$H_a=H_0^a+V^{at}-\boldsymbol{\mu}^a\cdot\boldsymbol{D}(\boldsymbol{R}^a) \tag{58}$$

와 같이 쓸 수 있으며, 따라서 쌍극자 근사아래 쌍극자계의 상호작용 해밀토니안은

$$H=-\Sigma_a\boldsymbol{\mu}^a\cdot\boldsymbol{D}(\boldsymbol{R}^a) \tag{59}$$

이 됨을 볼 수 있다.

V. 결 론

많은 쌍극자들로 이루어진 쌍극자계에서 쌍극자들에의한 편극을 고려할 때 계의 상호작용 해밀토니안은 식 (2)가 아닌 식 (59)에 의하여 기술되어야함을 보였다. 따라서 국소장이 계에 미치는 영향을 양자적으로 기술하기 위해서는 고전적인 관계식 (1)을 식 (2)의 해밀토니안에서 파생된 거시적인 블록방정식에 직접 적용하여서는 안되며, 식 (59)을 직접 거시적으로 평균하고 그 결과를 보통의 블록방정식과 비교함으로서 식 (1)에 대응되는 양을 정의하여야 할 것이다. 후속 논문에서는 식 (59)의 해밀토니안을 이 준위(two-level) 원자계에 적용하여 국소장 효과가 블록방정식에 어떻게 포함되는지를 보인다.

감사의 글

본 연구는 저자가 연구년기간동안 KAIST 물리학과에 체류하면서 학과의 지원으로 수행되었읍니다. 연구 수행에 많은 도움을 주신 김병윤교수님에게 감사드립니다.

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), p. 271.
[8] S. An and B. K. Rhee, J. of the Opt. Soc. of Korea, **1**, 94 (1997).

Effect of local field on atomic systems I : Derivation of interaction hamiltonian in electric dipole systems

Sunghyuck An
Department of Physics, Ajou University, Suwon, 441-749, Korea

(Received November 16, 1999, Revised manuscript received February 2, 2000)

We define the basic minimal coupling Hamiltonian of the atomic systems in the Coulomb guage and show that this Hamiltonian yields the correct equations of motion for the operators of interest. Using the unitary transformation and making the dipole approximation, we calculate the effect of polarization of the dipoles on the interaction Hamiltonian of the system.