光量子エレクトロニクス特論

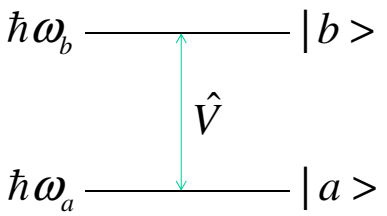
1. 電磁気学の復習
2. 量子力学の復習
3. 状態ベクトルとシュレディンガー方程式
4. 時間依存のシュレディンガー方程式
5. 密度行列法
6. 電子と光の相互作用-古典振動子モデル
7. 電子2準位系とブロッホ方程式
8. 電子2準位系におけるコヒーレント光非線形効果
9. 2原子分子のエネルギー準位
10. 固体のエネルギー準位
11. 光学遷移と次元性
12. 光学遷移におけるクーロン相互作用の効果
13. フラーレンの電子状態と光学遷移
14. ナノチューブの電子状態と光学遷移
15.まとめ

純粋状態の密度行列

$$|\psi(t)>=c_a(t)|a>+c_b(t)|b>$$

$$\frac{d}{dt}c_a=-i\omega_a c_a-\frac{i}{\hbar}V_{ab}c_b$$

$$\frac{d}{dt}c_b=-i\omega_b c_b-\frac{i}{\hbar}V_{ba}c_a$$



密度行列

$\rho_{aa}\equiv c_a c_a^*$:$|a>$にいる確率

$\rho_{ab}\equiv c_a c_b^*$:複素双極子モーメントに比例

$\rho_{ba}\equiv c_b c_a^*=\rho_{ab}^*$

$\rho_{bb}\equiv c_b c_b^*$:$|b>$にいる確率

純粋状態の密度行列

$$\rho=\begin{pmatrix}c_a c_a^* & c_a c_b^*\\ c_b c_a^* & c_b c_b^*\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\rho_{aa} & \rho_{ab}\\ \rho_{ba} & \rho_{bb}\end{pmatrix}$$

$$=|\psi><\psi|=\begin{pmatrix}c_a\\ c_b\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_a^* & c_b^*\end{pmatrix}$$

$$<O>=<\psi|O|\psi>$$

$$=\rho_{aa}O_{aa}+\rho_{ab}O_{ba}+\rho_{ba}O_{ab}+\rho_{bb}O_{bb}$$

示せ！

2準位系のダイポールモーメント

$$\mu=e\mathbf{r}=e\begin{pmatrix}0 & \mathbf{r}_{ab}\\ \mathbf{r}_{ba} & 0\end{pmatrix}$$

期待値

$$<e\mathbf{r}>=er_{ba}\rho_{ab}+er_{ab}\rho_{ba}$$

示せ！

$$<O>=<\psi|O|\psi>$$

$$=\rho_{aa}O_{aa}+\rho_{ab}O_{ba}+\rho_{ba}O_{ab}+\rho_{bb}O_{bb}$$

$$=\sum_i\left[\sum_j\rho_{ij}O_{ji}\right]=\sum_i(\rho O)_{ii}=\mathrm{Tr}(\rho O)$$

示せ！

$$<O>=\mathrm{Tr}(\rho O)$$

密度行列の運動方程式

先週の結果

$$\dot{\rho}_{aa} = \frac{d}{dt}(c_a c_a^*) = \dot{c}_a c_a^* + c_a \dot{c}_a^*$$

$$= \left(-i\omega_a c_a - \frac{i}{\hbar} V_{ab} c_b\right) c_a^* + c_a \left(-i\omega_a c_a - \frac{i}{\hbar} V_{ab} c_b\right)^*$$

$$= -\frac{i}{\hbar} V_{ab} c_b c_a^* + \text{c.c.} = -\frac{i}{\hbar} V_{ab} \rho_{ba} + \text{c.c.}$$

$$\dot{\rho}_{bb} = \frac{i}{\hbar} V_{ba} \rho_{ab} + \text{c.c.}$$

$$\dot{\rho}_{ab} = -i\omega_{ab} \rho_{ab} + \frac{i}{\hbar} V_{ab} (\rho_{aa} - \rho_{bb})$$

示せ！

混合状態の密度行列

複数の量子系の集団における密度行列

$$\rho = \sum_j P_j |\psi_j><\psi_j|$$

統計平均を取る。

j番目の系の状態 $|\psi_j>$

$$|\psi_j> = \sum_n c_{nj} |n>$$

$$\rho = \sum_j P_j \sum_n \sum_m c_{nj} c_{mj}^* |n><m| = \sum_j P_j \sum_n \sum_m \rho_{nmj} |n><m|$$

例：N個の2準位系

$$|\psi_j(t)> = c_{aj}(t)|a> + c_{bj}(t)|b>$$

$$\rho = \sum_j P_j |\psi_j><\psi_j| = \sum_j P_j \begin{pmatrix} |c_{aj}|^2 & c_{aj} c_{bj}^* \\ c_{bj} c_{aj}^* & |c_{bj}|^2 \end{pmatrix}$$

混合状態の密度行列

例：N個の2準位系→個々の系の位相がばらばらの場合

$$|\psi_j> = c_a|a> + \exp(i\phi_j) c_b |b>$$

$$\rho_{ab} = \sum_j P_j c_{aj} c_{bj}^* = c_a c_b^* \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} \exp(-i\phi_j) = 0$$

→ 混合状態では2準位間のコヒーレンスは消える

混合状態での演算子の期待値

$$<\bar{O}> = \sum_j P_j <\psi_j|O|\psi_j>$$

$$= \sum_j P_j \sum_k <\psi_j|O|k><k|\psi_j>$$

$$= \sum_k \sum_j P_j <k|\psi_j><\psi_j|O|k>$$

$$= \sum_k (\rho O)_{kk} = \text{Tr}(\rho O)$$

$$<\bar{O}> = \text{Tr}(\rho O)$$

密度行列の運動方程式

$$\rho = \sum_j P_j |\psi_j><\psi_j|$$

$$|\dot{\psi}_j> = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}|\psi_j>$$

$$\dot{\rho} = -\frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \rho]$$

示せ！

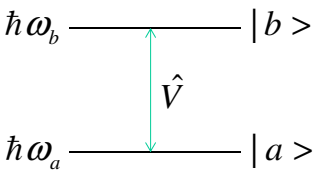
密度行列の運動方程式

$$\dot{\rho}_{ij} = -\frac{i}{\hbar}<i|[\hat{H}, \rho]|j> = -\frac{i}{\hbar}<i|\hat{H}\rho - \rho\hat{H}|j>$$

$$= -\frac{i}{\hbar}\sum_k \left\{<i|\hat{H}|k><k|\rho|j> - <i|\rho|k><k|\hat{H}|j>\right\}$$

$$= -\frac{i}{\hbar}\sum_k \left\{H_{ik}\rho_{kj} - \rho_{ik}H_{kj}\right\}$$

例：2準位系



$|a>=$, $|b>=$

$\hat{H}_0 =$, $\hat{V} = -\mu E =$

$\hat{H} =$

$\dot{\rho}_{aa} =$

$\dot{\rho}_{ab=}$