

# 量子光学 講義ノート

中西 秀

2023年7月19日

# 目次

第0章	はじめに	3
第1章	古典的原子と電磁場との相互作用	5
1.1	双極子相互作用近似	5
1.2	外場ゼロの場合	6
1.3	双極子放射と放射抵抗	6
1.4	減衰振動の放射スペクトル	8
1.5	外場中の古典原子の振動	8
1.6	原子気体中の電磁波伝播	10
1.6.1	媒質の分極	10
1.6.2	媒質中の Maxwell 方程式	10
1.6.3	平面波解	11
1.7	プラズマ振動	12
第2章	量子力学的原子と古典電磁場との相互作用	13
2.1	原子の波動関数	13
2.1.1	Hartree-Fock 近似	13
2.1.2	中心力場中の 1 電子状態	14
2.1.3	Na 原子の電子状態	14
2.2	量子力学の摂動論	15
2.3	原子と光の相互作用	16
2.3.1	双極子相互作用	16
2.3.2	パリティ対称性と選択則	16
2.3.3	共鳴準位と 2 準位原子モデル	17
第3章	2 準位原子の量子力学	19
3.1	密度演算子による状態の表示	19
3.2	純粋状態と混合状態	20
3.3	2 準位原子と光との相互作用	21
3.4	回転波近似	22
3.5	現象論的緩和	23
3.6	定常解 — 線形感受率と飽和	24
3.6.1	線形感受率	25
3.6.2	飽和	25
第4章	誘導遷移と自然放出	27
4.1	遷移確率	27
4.2	自然放出と誘導遷移	29

<b>第5章</b>	<b>スペクトル線の中と形</b>	<b>32</b>
5.1	自然巾 . . . . .	32
5.2	衝突幅 . . . . .	32
5.3	ドップラー巾 . . . . .	34
5.4	均一巾と不均一巾 . . . . .	35
<b>第6章</b>	<b>レーザーの理論</b>	<b>36</b>
6.1	媒質によるエネルギー吸収・放出 . . . . .	36
6.2	共振器中の電磁波 . . . . .	37
6.3	定常発振状態 . . . . .	38
6.3.1	発振条件 . . . . .	40
6.3.2	発振周波数 . . . . .	41
6.4	レーザー光の特徴 . . . . .	41
6.4.1	モードロック . . . . .	42
6.5	各種のレーザー . . . . .	43
<b>第7章</b>	<b>フォトンとコヒーレント状態</b>	<b>45</b>
7.1	電磁場の量子化 . . . . .	45
7.1.1	モード分解 . . . . .	45
7.1.2	量子化 . . . . .	47
7.1.3	数演算子と数状態 . . . . .	47
7.1.4	量子化された電磁場 . . . . .	48
7.2	光子数状態 . . . . .	49
7.3	コヒーレント状態 . . . . .	50
7.3.1	コヒーレント状態の性質 . . . . .	50
7.4	付録：電磁場の量子化：式(7.14)の導出 . . . . .	52

# 第0章 はじめに

量子光学とは、光と物質の相互作用や光そのものの性質を、量子力学を基礎に調べる学問です。

歴史的には、光と物質の相互作用の量子論は、黒体放射の問題や、原子スペクトルなど、量子力学の成立過程に深く関わっています。特に、Einstein が初めて定式化した量子力学的誘導放出をうまく用いたのが Laser で、1960 年のルビーレーザーの実現以来、量子光学の分野が大きく広がりました。今日では、レーザー冷却や量子暗号、量子コンピュータなど、量子力学が関わる基礎的な研究から、光通信や CD など日常生活のすみずみまで、レーザーや量子光学の成果が使われています。

この講義では、主に、光と物質の相互作用を中心に解説し、Laser の半古典論を学びます。最後に、光の量子論の触りとして、コヒーレント状態について少し触れます。

基礎となる科目は、電磁気学 I, II、量子力学 I, II, III、統計力学 I, II で、受講生はこれらの科目の内容を理解している必要があります。(量子力学 III は同時開講科目なので、併せて履修することが望ましい)

これは、量子光学の講義をする為に作った講義ノートです。講義中にノートをとる負担を軽減する為に配布します。しかし、量子光学を勉強するには、このノートだけでは十分ではありません。適当なテキストで勉強されることをお勧めします。

以下に、この講義ノートを作成するのに参考にした本をあげておきます。

- 裳華房テキストシリーズ - 物理学 「量子光学」 (松岡正浩 著、裳華房, 2000 年)

この講義ノートを作るのもっとも参考にした教科書。

幾何光学からとき起こし、物質と光の相互作用、レーザーの理論、非線形光学など、基本的なことが網羅されている。光の量子論や、量子力学の基礎に関わる実験、量子暗号など、最近の話題にも章をさいている。

- 朝倉現代物理学講座 8 「量子光学」 (櫛田孝司 著、朝倉書店, 1981 年)

最初のいくつかの章で、光と物質の相互作用に関する歴史的な記述が詳しい。

- 「量子光学入門」 (エバリー、アレン、高辻正基 著、東京図書, 1974 年)

少々古いが、私が量子光学を初めて学んだときに読んだ教科書。

非線形光学に重心がおかれている。最初に、2準位系の量子力学を幾何学的に理解するのに便利な光ブロッホ方程式を導入し、それを用いて非線形媒質中を伝播する光パルスの話が詳しく述べられている。

その他の参考書

- 「量子光学」 (松岡正浩 著、東京大学出版会、1996 年)

最初に上げた教科書と同じ著者による少しレベルの高い教科書。大学院向け。光の量子論の記述が詳しい。

- アドバンストエレクトロニクスシリーズ 「非線形量子光学」 (花村栄一 著、培風館、1995 年)

アドバンストエレクトロニクスシリーズ 「量子光学の基礎」 (山本喜久/渡部仁貴 著、培風館、1994 年) この 2 冊は、量子光学の応用面の記述が詳しい。

- 「量子光学」 (ウォールス/ミルバーン 著、霜田光一/張吉夫 訳、シュプリンガー・フェアラーク東京、2000 年)

光の量子論を中心とした、大学院向け教科書。

# 第1章 古典的原子と電磁場との相互作用

量子力学的な取り扱いをする前に、まず、“古典力学に従う原子”と電磁場との相互作用について考察する。あとで、ここで導かれたいくつかの物理量の表式が、量子力学的な取り扱いでどのようなになるかを見る。

## 1.1 双極子相互作用近似

古典力学にしたがう原子の模型として、原点に固定された電荷  $+e$  の原子核と、それにバネでつながれた電荷  $-e$  の電子の系を考える。電子の位置を  $r$ 、質量を  $m$ 、バネ定数を  $k$  とすると、電子の運動方程式は、

$$m\ddot{\mathbf{r}}(t) = -m\omega_0^2\mathbf{r}(t) + (-e)\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + (-e)\dot{\mathbf{r}}(t) \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$$

となる。ただし、 $\omega_0$  は電子の角振動数で  $\omega_0 \equiv \sqrt{k/m}$  である。

右辺の第2項は電気力で、第3項は磁場からのローレンツ力であるが、通常、ローレンツ力は電気力に対して無視できる。また、電磁場の波長に比べて原子のサイズが小さいと、

$$m\ddot{\mathbf{r}}(t) = -m\omega_0^2\mathbf{r}(t) + (-e)\mathbf{E}(0, t)$$

と近似できる。

右辺第2項の電気力は、原子の双極子モーメントを  $\mathbf{p}_a \equiv (-e)\mathbf{r}$  とすると、そのポテンシャルエネルギー  $-\mathbf{p}_a \cdot \mathbf{E}(0, t)$  から導かれるので、これを双極子相互作用近似とよぶ。

更に、 $\mathbf{r}$  および  $\mathbf{E}$  とともに  $x$  軸に平行とすると、運動方程式は

$$\ddot{x}(t) + \omega_0^2 x(t) = -\frac{e}{m} E(t) \quad (1.1)$$

と書ける。

**問題 1.1** 電場・磁場が電磁波から来るとき、ローレンツ力が電気力に比べて無視できる条件を求めよ。

**問題 1.2** 双極子ポテンシャル  $-\mathbf{p}_a \cdot \mathbf{E}$  から双極子相互作用が出ることを確かめよ。

## 1.2 外場ゼロの場合

まず、練習の為に外場ゼロ、 $\mathbf{E} = 0$  の場合を考える。

$$\ddot{x}(t) + \omega_0^2 x(t) = 0 \quad (1.2)$$

これはもちろん、一年生の最初にやった調和振動子の問題で、一般解は

$$x(t) = x_0 \cos(\omega_0 t + \theta)$$

とかける。 $x_0, \theta$  は積分定数である。

後の便宜の為に複素表示を導入する：

$$x(t) = \text{Re}[x_0 e^{-i(\omega_0 t + \theta)}] \equiv x^{(\omega_0)} e^{-i\omega_0 t} + x^{(-\omega_0)} e^{+i\omega_0 t}$$

ただし、

$$x^{(-\omega_0)} = x^{(\omega_0)*}, \quad |x^{(-\omega_0)}| = |x^{(\omega_0)}| = \frac{x_0}{2}$$

である。

“原子”の全力学エネルギー  $E_a$  は、

$$E_a = \frac{1}{2} m \dot{x}(t)^2 + \frac{1}{2} k x(t)^2 = \frac{1}{2} m \omega_0^2 x_0^2 \quad (1.3)$$

であるが、運動エネルギー  $K$  と位置エネルギー  $U$  の時間平均はそれぞれ

$$\overline{K} = \frac{1}{2} \overline{m \dot{x}(t)^2} = \frac{1}{4} m \omega_0^2 x_0^2, \quad \overline{U} = \frac{1}{2} \overline{k x(t)^2} = \frac{1}{4} m \omega_0^2 x_0^2 \quad (1.4)$$

で、それぞれ全エネルギーの半分となる。また、時間平均を用いると全エネルギーは

$$E_a = m \omega_0^2 \overline{x(t)^2}$$

と書くこともできる。

問題 1.3 時間平均が (1.4) で与えられることを確かめよ。

## 1.3 双極子放射と放射抵抗

前節では、原子を単に振動する調和振動子と考えたが、原子核と電子は電荷を持っているので、電荷が振動すると電磁場を放射し、その結果、振動は減衰する。

原子の振動する電気双極子モーメント

$$\mathbf{p}_a(t) \equiv (-e)\mathbf{r}(t) = \text{Re}[(-e)x_0 e^{-i\omega_0 t}] \hat{\mathbf{x}} \equiv \text{Re}[p_0 e^{-i\omega_0 t}] \hat{\mathbf{x}}$$

による双極子放射を考える。ここで、 $\hat{\mathbf{x}}$  は  $x$  軸に平行な単位ベクトルである。

古典電磁気学によると、その場合の単位時間あたりの放射エネルギー  $W_{\text{rad}}$  は、

$$W_{\text{rad}} = \frac{\omega_0^4}{12\pi\epsilon_0 c^3} p_0^2 = \frac{\omega_0^4}{12\pi\epsilon_0 c^3} e^2 x_0^2 \propto E_a \quad (1.5)$$

となり、原子のエネルギー  $E_a$  に比例する。

放射エネルギーの分だけ原子のエネルギーは減少するはずなので、原子エネルギーの減衰は

$$\dot{E}_a(t) = -W_{\text{rad}} \equiv -\frac{2}{\tau_0} E_a(t); \quad E_a(t) = E_0 e^{-(2/\tau_0)t} \quad (1.6)$$

と表されるだろう。ただし、双極子放射の式 (1.5) が正しい為には、

$$\frac{1}{\tau_0} \ll \omega_0 \quad (1.7)$$

すなわち、エネルギーの減衰率が原子の振動よりもずっとゆっくりしていなければならない。

その場合、元の方程式 (1.2) に減衰項を加えて、

$$\ddot{x}(t) + \frac{2}{\tau_0} \dot{x}(t) + \omega_0^2 x(t) = 0 \quad (1.8)$$

とすると、この方程式に従う系の力学エネルギーが、弱い減衰の条件 (1.7) の下で、(1.6) 式の形の減衰を与える。

(1.8) 式の第2項は、電磁波の放射の反作用とみなすことができる。これを放射抵抗という。

[(1.8) が (1.6) を与えること] : 方程式 (1.8) の解を、

$$x(t) = x_0(t) e^{-i\omega_0 t} \quad (1.9)$$

と書く。ここで、 $x_0(t)$  は、振動部分  $e^{-i\omega_0 t}$  と比べて、ゆっくりとした時間変化をする関数である。即ち、 $x_0(t)$  の時間変化は

$$\dot{x}_0(t) \ll \omega_0 x_0(t), \quad \ddot{x}_0(t) \ll \omega_0 \dot{x}_0(t) \ll \omega_0^2 x_0(t), \dots \quad (1.10)$$

の様な不等式を満たす。この解の形 (1.9) を方程式 (1.8) に代入すると、

$$\ddot{x}_0(t) - 2i\omega_0 \dot{x}_0(t) - \omega_0^2 x_0(t) + \frac{2}{\tau_0} (\dot{x}_0(t) - i\omega_0 x_0(t)) + \omega_0^2 x_0(t) = 0$$

となるが、 $x_0(t)$  がゆっくりと変化する条件より、

$$\dot{x}_0(t) \approx -\frac{1}{\tau_0} x_0(t); \quad x_0(t) \propto e^{-t/\tau_0}$$

を得る。これを用いると、全エネルギー  $E_a$  の表式 (1.3) より、

$$\dot{E}_a(t) = -\frac{2}{\tau_0} E_a(t)$$

を満たすことが分かる。 ■



## 1.4 減衰振動の放射スペクトル

前節で見たように、振動する電気双極子は、放射によってエネルギーを失い、減衰振動をする。この、減衰振動によって放射される電磁波のスペクトルを見てみよう。

方程式 (1.8) の解は、減衰が遅い時、

$$x(t) = x_0(t)e^{-i\omega_0 t} \propto e^{-t/\tau_0 - i\omega_0 t}$$

と近似できることが分かった。双極子放射による電場  $E(t)$  は、双極子モーメントに比例するので、

$$E(t) \propto x(t); \quad E(t) = E_0 \exp\left[-\frac{t}{\tau_0} - i\omega_0 t\right] \quad \text{for } (t > 0)$$

のように、同様の減衰振動をする。

この電場の Fourier 変換  $E(\omega)$  は、

$$E(\omega) = \int_0^\infty E(t)e^{i\omega t} dt = \frac{E_0}{i(\omega_0 - \omega) + 1/\tau_0}$$

なので、スペクトル強度  $I(\omega)$  は

$$I(\omega) = |E(\omega)|^2 \propto \frac{1}{(\omega_0 - \omega)^2 + (1/\tau_0)^2}$$

で与えられる。これは、中心  $\omega_0$ 、線巾  $2/\tau_0$  のローレンツ型のスペクトルである。

## 1.5 外場中の古典原子の振動

原子の固有振動  $\omega_0$  に近い振動数  $\omega$  で振動する電場中での、古典原子の振舞を調べる。

外場のない場合の方程式 (1.8) に外場の項を加えて、

$$\ddot{x}(t) + \frac{2}{\tau_0}\dot{x}(t) + \omega_0^2 x(t) = (-e)mE(t); \quad (1.11)$$

となる。ここで、電場は

$$E(t) = E^{(\omega)}e^{-i\omega t} + E^{(-\omega)}e^{+i\omega t}, \quad E^{(-\omega)} = E^{(+\omega)*}$$

と表され、外場と原子は共鳴に近い

$$|\omega - \omega_0| \ll \omega_0, \quad \omega \quad (1.12)$$

とする。方程式 (1.11) の定常解を

$$x(t) = x_0^{(\omega)}e^{-i\omega t} + x_0^{(-\omega)}e^{+i\omega t}$$

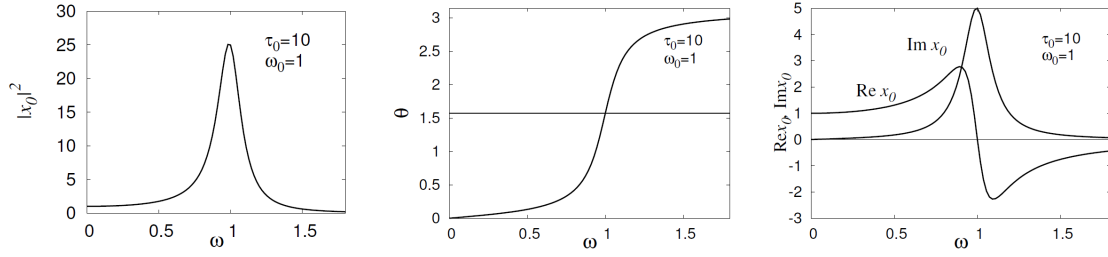


図 1.1:

とおくと、 $e^{-i\omega t}$  の係数が等しいという条件から

$$x_0^{(\omega)} = \frac{(-e/m)E^{(\omega)}}{(\omega_0^2 - \omega^2) - 2i\omega/\tau_0} \quad (1.13)$$

を得る。

ここで、 $E^{(\omega)}$  を正の実数とすると、 $E^{(-\omega)} = E^{(\omega)*} = E^{(\omega)}$  も実数で、電場は

$$E(t) = 2|E^{(\omega)}| \cos \omega t \quad (1.14)$$

となる。一方、

$$x_0^{(\omega)} \equiv |x_0^{(\omega)}| e^{i\theta} \equiv |x_0^{(\omega)}| (u + iv); \quad u = \cos \theta, \quad v = \sin \theta$$

とおくと、電子の変位  $x(t)$  は、

$$\begin{aligned} x(t) &= x_0^{(\omega)} e^{-i\omega t} + x_0^{(-\omega)} e^{+i\omega t} = 2\text{Re} \left[ x_0^{(\omega)} e^{-i\omega t} \right] \\ &= 2\text{Re} \left[ |x_0^{(\omega)}| e^{-i(\omega t - \theta)} \right] = 2|x_0^{(\omega)}| \cos(\omega t - \theta) \\ &= 2|x_0^{(\omega)}| (u \cos \omega t + v \sin \omega t) \end{aligned}$$

となるので、電場 (1.14) と比較すると、 $\theta$  は電子の運動の外場からの位相の遅れ、 $u$  は外場に同期した成分、 $v$  は 90 度位相がずれた成分を表すことが分かる。但し、 $\theta$  は  $x_0^{(\omega)}$  の位相で、 $u$  と  $v$  は実とする。

$|x_0^{(\omega)}|^2$ ,  $\theta$ ,  $u$ ,  $v$  の表式は、それぞれ

$$\begin{aligned} \left| \frac{x_0^{(\omega)}}{(-e/m)E^{(\omega)}} \right|^2 &= \frac{1}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + (2\omega/\tau_0)^2} \approx \left( \frac{1}{2\omega_0} \right)^2 \frac{1}{(\omega_0 - \omega)^2 + (1/\tau_0)^2}, \\ \tan \theta &= \frac{2\omega/\tau_0}{\omega_0^2 - \omega^2} \approx \frac{1/\tau_0}{\omega_0 - \omega}, \\ u = \cos \theta &= \frac{\omega_0^2 - \omega^2}{\sqrt{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + (2\omega/\tau_0)^2}} \approx \frac{\omega_0 - \omega}{\sqrt{(\omega_0 - \omega)^2 + (1/\tau_0)^2}}, \\ v = \sin \theta &= \frac{2\omega/\tau_0}{\sqrt{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + (2\omega/\tau_0)^2}} \approx \frac{1/\tau_0}{\sqrt{(\omega_0 - \omega)^2 + (1/\tau_0)^2}}, \end{aligned}$$

で与えられる。それぞれ右辺の最後の近似では、共鳴条件 (1.12) より

$$\begin{aligned} \omega_0^2 - \omega^2 &= (\omega_0 + \omega)(\omega_0 - \omega) \\ &\approx 2\omega_0(\omega_0 - \omega) \approx 2\omega(\omega_0 - \omega) \end{aligned} \quad (1.15)$$

を用いた。

問題 1.4 (1.13) を導出せよ。

## 1.6 原子気体中の電磁波伝播

さて、上で考えたような古典原子が多数分布している原子気体中を、電磁波がどのように伝播するかを考える<sup>1</sup>。この場合、振動する原子は、それぞれ双極子放射により電磁波を誘起し、その電磁波はまた外場として別の原子を振動させる、という連鎖が起こる。

### 1.6.1 媒質の分極

まず、一個の原子に誘起される双極子モーメント  $\mathbf{p}$  を

$$\mathbf{p} \equiv -e\mathbf{r}_a = \mathbf{p}^{(\omega)}e^{-i\omega t} + \mathbf{p}^{(-\omega)}e^{+i\omega t}$$

と表す。ここで、原子の位置  $\mathbf{r}$  と区別する為に、原子核の位置からの電子の変位を  $\mathbf{r}_a$  とした。前節の結果 (1.13) より、

$$\mathbf{p}^{(\omega)} = -e\mathbf{r}_a^{(\omega)} = \frac{e^2/m}{(\omega_0^2 - \omega^2) - 2i\omega/\tau_0} \mathbf{E}^{(\omega)}(t)$$

となる。これから、同じ原子が、単位体積あたり  $n$  個分布している場合には、分極密度  $\mathbf{P}(\mathbf{r}, t)$  の  $\omega$  振動成分は

$$\mathbf{P}^{(\omega)}(\mathbf{r}, t) = n \frac{e^2/m}{(\omega_0^2 - \omega^2) - 2i\omega/\tau_0} \mathbf{E}^{(\omega)}(\mathbf{r}, t) \equiv \epsilon_0 \chi(\omega) \mathbf{E}^{(\omega)}(\mathbf{r}, t) \quad (1.16)$$

となることがわかる。最後の表式は電気感受率  $\chi(\omega)$  を定義し、それは

$$\chi(\omega) = \frac{\omega_p^2}{(\omega_0^2 - \omega^2) - 2i\omega/\tau_0}; \quad \omega_p^2 \equiv \frac{ne^2}{\epsilon_0 m} \quad (1.17)$$

と表される。ここで、 $\omega_p$  はプラズマ振動数と呼ばれるもので、電子の集団振動の振動数である。電束密度  $\mathbf{D}$  は、 $\mathbf{D} \equiv \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}$  と定義されるので、電気感受率  $\chi(\omega)$  と誘電率  $\epsilon(\omega)$  は、

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_0(1 + \chi(\omega)) \quad (1.18)$$

の関係がある。即ち、原子が分布している空間は、(1.17) および (1.18) で与えられる誘電率  $\epsilon(\omega)$  をもつ媒質とみなせる。

### 1.6.2 媒質中の Maxwell 方程式

このような媒質中を伝播する電磁波を考える。媒質中の Maxwell の方程式は、

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho_t, \quad \nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad \nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad \nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{j} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}$$

<sup>1</sup>ただし、原子の運動は無視する。

であるが、今、真電荷や電流はないものとして、 $\rho_t = 0, \mathbf{j} = 0$  とする。  
また、磁化もないとして、

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}, \quad \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H}$$

とすると、Maxwell 方程式から電場  $\mathbf{E}$  について

$$-\nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) + \nabla^2 \mathbf{E} - \mu_0 \varepsilon_0 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{P}}{\partial t^2} \quad (1.19)$$

を得る。ただし、ベクトル演算の等式

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) - \nabla^2 \mathbf{E}$$

を用いた。

$\rho_t = \mathbf{j} = 0$  で  $\mathbf{P} \parallel \mathbf{E}$  の場合、Maxwell 方程式には、 $\mathbf{E}$  が  $x$  軸に平行、 $\mathbf{B}$  が  $y$  軸に平行で  $z$  軸方向に伝播する平面波解が存在する。その時、

$$\mathbf{E} = E(z, t) \hat{\mathbf{x}}, \quad \mathbf{P} = P(z, t) \hat{\mathbf{x}}$$

なので、(1.19) 式は、

$$\left( \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) E(z, t) = \frac{1}{\varepsilon_0 c^2} \frac{\partial^2 P(z, t)}{\partial t^2} \quad (1.20)$$

となる。ただし、 $c \equiv 1/\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}$  は真空での光の速度。

### 1.6.3 平面波解

平面波の振動数を  $\omega$ 、波数を  $K$  とし、解の形を

$$\begin{aligned} E(z, t) &= E^{(\omega)}(z, t) + E^{(-\omega)}(z, t) \\ &= \mathcal{E}^{(\omega)}(z) e^{i(Kz - \omega t)} + \mathcal{E}^{(-\omega)}(z) e^{-i(Kz - \omega t)} \end{aligned} \quad (1.21)$$

のように表す。ここで、一般に  $\mathcal{E}^{(-\omega)} = \mathcal{E}^{(\omega)*}$  であるが、時間の原点を適当にとることによりこれらを実数とすることができるので、 $\mathcal{E}^{(-\omega)} = \mathcal{E}^{(\omega)} \equiv \mathcal{E}$  (実数) とする。

電磁波は原子振動によって誘起されるので共鳴に近く、波長も真空中の波長に近いとしてよいだろう。すなわち、

$$\omega \approx \omega_0, \quad K \approx k \equiv \frac{\omega}{c} \approx \frac{\omega_0}{c}$$

とする。また、 $\mathcal{E}^{(\omega)}(z)$  は波数  $K$  の振動に比べて空間的にゆっくり変化し、(1.10) と同様の不等式、

$$\mathcal{E}'(z) \ll K \mathcal{E}(z), \quad \mathcal{E}''(z) \ll K \mathcal{E}'(z) \ll K^2 \mathcal{E}(z), \dots$$

を満たすとする。

(1.20) 式に、 $E(z, t)$  の表式 (1.21) と  $P(z, t)$  の同様の式を代入し、(1.16) 式を用いると、

$$-K^2 \mathcal{E}(z) + 2iK \mathcal{E}'(z) + \mathcal{E}''(z) + \frac{\omega^2}{c^2} \mathcal{E}(z) = -\frac{\omega^2}{c^2} \chi(\omega) \mathcal{E}(z)$$

となるが、ゆっくり変化する項を無視すると、

$$(K^2 - k^2) \mathcal{E}(z) - 2iK \mathcal{E}'(z) = k^2 \chi(\omega) \mathcal{E}(z)$$

を得る。この式の実部および虚部をとると、

$$K^2 - k^2 = k^2 \operatorname{Re}[\chi(\omega)] \approx \frac{k^2 \omega_p^2}{2\omega} \cdot \frac{\omega_0 - \omega}{(\omega_0 - \omega)^2 + 1/\tau_0^2},$$

$$-2K \mathcal{E}'(z) = k^2 \operatorname{Im}[\chi(\omega)] \mathcal{E}(z) \approx \frac{k^2 \omega_p^2}{2\omega} \cdot \frac{1/\tau_0}{(\omega_0 - \omega)^2 + 1/\tau_0^2},$$

となる。ただし、共鳴条件の近似 (1.15) を用いた。

$\omega_0, \tau_0, \omega_p$  などの原子気体の媒質のパラメタが与えられると、第 1 式から  $K$  と  $\omega$  の関係 (分散関係) が、第 2 式から  $\mathcal{E}(z)$  の空間変化が求められる。

## 1.7 プラズマ振動

(1.17) のプラズマ振動数  $\omega_p$  を、簡単な計算で求めてみる。電荷  $+e$  を持つ原子核と電荷  $-e$  の電子が、厚さ  $L$  の板状の空間に、プラズマ状態で一様に分布しているとする。原子核は重く電子に比べて動きが遅いので空間に固定されているとし、プラズマ状態なので原子核と電子は電磁力以外の相互作用はしないとする。

原子核の分布と電子の分布が重なりあっている時は、互いに電荷が打ち消し合うので力が働かない。いま、電子の分布全体が、板に垂直に  $x$  だけずれたとする。すると、板の一方の表面に面密度  $-nex$  の電荷が生じ、もう一方の表面に  $+nex$  の電荷が生じる。この面電荷の作る電場  $E$  は、 $E = nex/\epsilon_0$  で、電子を復元力  $F = -eE$  で逆向きに引き戻そうとする。即ち、個々の電子の運動方程式は、

$$m\ddot{x} = -\frac{ne^2}{\epsilon_0} x$$

となり、その振動数は

$$\omega_p^2 = \frac{ne^2}{\epsilon_0 m}$$

で与えられることが分かる。

この振動は、媒質が電気的中性を保とうとする復元力で生じ、クーロン力は  $1/r^2$  で減衰する長距離力の為にその振動数は波長  $L$  によらない。

## 第2章 量子力学的原子と古典電磁場との相互作用

これまで、原子が古典力学に従うとしてきたが、原子を量子力学的に取り扱おうとどうなるか議論する。電磁場はこれまで通り古典電磁気学に従うとする。

### 2.1 原子の波動関数

原子は、中心に正の電荷を帯びた小さくて重い原子核があり、その周りにいくつもの軽い電子が“まわっている”。原子核と電子、あるいは電子どうしは電磁気的な相互作用をしていると考えて良く、相互作用エネルギーはクーロンポテンシャルなどで表される。原子の波動関数は、そのような相互作用ポテンシャルの下で、原子核と複数の電子についてのシュレディンガー方程式から求めなければならない。

これは、相互作用する多粒子系の問題で、ほとんどの場合、厳密に解くことができない。そこで、以下のような簡単化と近似の下に一粒子波動関数を求め、その積の重ね合わせとして多粒子波動関数を表す。

#### 2.1.1 Hartree-Fock 近似

まず、原子核は重いので、原点に固定されているとして、原子核の座標変数を波動関数の変数から除く。

次に、多数の電子を同時に扱わずに、その中の一つの電子に注目する。その電子が感じている相互作用ポテンシャルには、原子核から来るものと、他の電子からのものがある。原子核は固定されているとしたので外場としてあつかえるが、他の電子からのものは相手の電子も動きまわるので、複雑になる。そこで、注目している電子の感じている相互作用を、その他多くの相手の電子の平均的なポテンシャルで近似して、その平均ポテンシャル中での1電子のシュレディンガー方程式の固有状態によって、原子の波動関数が表せるとしよう。

本来は相手の位置に応じて変化する相互作用を平均で近似する方法を、一般に平均場近似という。特に、量子力学系に用いて多粒子波動関数を構成する方法は、**Hartree-Fock** 近似と呼ばれている。

注目する電子が感じるクーロン相互作用は $1/r$  則で表されるが、多数の電子からの平均はそれとは異なる。しかし、原子には特定の方向がないので、ポテンシャルはやはり回転対称な中心力となり、原点からの距

離  $r$  のみの関数、 $V(r)$  で表されるだろう。その他に、電子スピンと軌道運動との相互作用 (**LS 結合**) や、原子核スピンとの相互作用 (超微細結合) などがあるが、ここでは無視する。すると、原子の 1 電子ハミルトニアンは

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + V(r) \quad (2.1)$$

と書ける。ただし、 $V(r)$  は平均ポテンシャルで、原子核と他の電子からの寄与を含んだものである。

### 2.1.2 中心力場中の 1 電子状態

このハミルトニアンの固有状態は、互いに可換な保存量、即ち、ハミルトニアンと可換でかつ互いに可換な物理量 (を表す演算子) の固有値によって分類できる。(2.1) 式で表されるハミルトニアンと交換する演算子には、軌道角運動量の大きさ  $L^2$  および  $z$  成分  $L_z$ 、スピン角運動量の大きさ  $s^2$  および  $z$  成分  $s_z$ 、パリティ変換 ( $\mathbf{r} \leftrightarrow -\mathbf{r}$ ) などがある。

このハミルトニアンの固有状態の軌道部分は、

$$\begin{aligned} n = 1, 2, 3, \dots & \quad \text{主量子数 (動径方向のノードの数 } +l + 1) \\ l = 0, 1, 2, \dots, n-1 & \quad \text{全軌道角運動量} \\ m = -l, -l+1, \dots, l & \quad \text{磁気量子数 (軌道角運動量の } z \text{ 成分)} \end{aligned}$$

で分類される。

固有エネルギー  $E$  は  $n$  と  $l$  のみに依存し  $m$  によらない。エネルギーが  $m$  に依存しないのは、空間は特定の方向がなく等方的であることの反映で、エネルギーは軌道角運動量の向きによらないと解釈できる。特にポテンシャル  $V$  が  $1/r$  の時には厳密解が求まり、エネルギーは  $l$  にもよらないことが知られている。一般的傾向として、固有エネルギー  $E$  は  $n$  につれて大きくなり、同じ値の  $n$  に対しては  $l$  とともに大きくなる。慣用的に、波動関数の  $l$  の値に対してアルファベットの名前がついており

$l$	0	1	2	3	4	...
状態名	$s$	$p$	$d$	$f$	$g$	...
$m$ の縮退数 ( $2l + 1$ )	1	3	5	7	9	...
スピンの縮退 (2)	2	2	2	2	2	...

のようになっている。

Hartree-Fock 近似では、このような 1 電子波動関数の積を反対称化したものによって多電子状態を構成する。これを **Slater 行列式** という。

### 2.1.3 Na 原子の電子状態

例として、Na 原子のエネルギー準位を考える。原子番号は 11 でその基底状態は、

$$1s^2 2s^2 2p^6 3s$$

と表される。11 個の電子のうち、 $2p$  電子までの 10 個が閉殻構造を作っており、最後の  $3s$  電子が価電子である。

第一励起状態は、価電子が  $3s$  状態から  $3p$  状態に励起された状態で、 $l = 1$  状態なので、 $m = -1, 0, 1$  の 3 重縮退があり、更にそれぞれにスピンの上向きと下向きの 2 状態がある。スピンと軌道の間相互作用 (LS 結合) を考えないとこれらの状態は縮退しているが、実際には LS 結合の為に、全角運動量  $\mathbf{J} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$  の絶対値  $J$  が  $3/2$  と  $1/2$  の状態が固有状態になり、それらがにわずかに異なるエネルギーを持つ。

この励起状態から基底状態への遷移の際に放出される光が Na の D 線と呼ばれ、炎色反応でも良く知られている黄色の光である。スペクトル計で見ると、LS 結合の為に 2 本に分かれているのが分かる。

## 2.2 量子力学の摂動論

さて、原子と光の相互作用を考える前に、その際に必要になる量子力学の摂動論を復習しておこう。系のハミルトニアン  $\hat{H}$  が、

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$$

のように、非摂動部分と摂動部分の 2 つの部分からなり、非摂動ハミルトニアン  $\hat{H}_0$  の固有値・固有ベクトル、

$$(W_n, |n\rangle); \quad \hat{H}_0 |n\rangle = W_n |n\rangle, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

が求められているとする。ここで、

系の状態  $|\psi\rangle$  が  $t = 0$  で  $|0\rangle$  にあったとして、 $\hat{H}'$  の影響が小さい場合、 $|\psi\rangle$  はどのように時間発展するか？

という問題を考える。

状態は、時間に依存するシュレディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle = (\hat{H}_0 + \hat{H}') |\psi\rangle$$

を満たす。時刻  $t$  での状態  $|\psi(t)\rangle$  を  $\hat{H}_0$  の固有状態で展開すると、

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t) |n\rangle$$

と書ける。ただし、 $a_n(t)$  は展開係数で時間に依存する。今、

$$a_n(t) \equiv b_n(t) e^{-iW_n t/\hbar}$$

とおき、時間に依存するシュレディンガー方程式から  $b_n(t)$  の従う方程式を求めると、

$$i\hbar \sum_n \dot{b}_n(t) e^{-iW_n t/\hbar} |n\rangle = \sum_n b_n(t) e^{-iW_n t/\hbar} \hat{H}' |n\rangle \quad (2.2)$$



となる。この両辺の左から  $\langle m |$  との内積を取ると、

$$i\hbar \dot{b}_m(t) = \sum_n \langle m | \hat{H}' | n \rangle e^{i(W_m - W_n)t/\hbar} b_n(t) \quad (2.3)$$

をうる。この方程式を

$$b_0 = 1, \quad b_n = 0 \quad (n \neq 0) \quad \text{for } t = 0$$

の初期条件で解けばよい。

**問題 2.1** (2.2) 式を導出せよ。

## 2.3 原子と光の相互作用

原子のハミルトニアンを  $\hat{H}_0$  として、それに電磁場との相互作用  $\hat{H}'$  が加わったとき、どうなるかを考察する。

### 2.3.1 双極子相互作用

全系のハミルトニアンを

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$$

とする。 $\hat{H}_0$  は原子のハミルトニアン、 $\hat{H}'$  は光（電磁波）と原子の相互作用を表し、 $\hat{H}'$  を摂動として扱う。

原子の大きさに比べて光の波長は長いので、 $\hat{H}'$  として双極子相互作用

$$\hat{H}' = -(-e\hat{\mathbf{r}}_a) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\hat{\boldsymbol{\mu}}_a \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$$

を用いることができる。ただし、 $\hat{\mathbf{r}}_a$  は原子核を原点とする電子の位置ベクトル演算子、 $\mathbf{r}$  は原子核の位置ベクトルとし、 $\hat{\boldsymbol{\mu}}_a \equiv (-e)\hat{\mathbf{r}}_a$  は原子の双極子モーメント演算子である。原子の位置を原点にとって、

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 \cos \omega t$$

とすることができ、結局、以下では摂動ハミルトニアンとして

$$\hat{H}' = e\hat{\mathbf{r}}_a \cdot \mathbf{E}_0 \cos \omega t = -\hat{\boldsymbol{\mu}}_a \cdot \mathbf{E}_0 \cos \omega t \quad (2.4)$$

を考える。

### 2.3.2 パリティ—対称性と選択則

一般に、原子は球対称で原子の非摂動ハミルトニアン  $\hat{H}_0$  は空間反転（パリティ—変換）に対して不変なので、 $\hat{H}_0$  の固有波動関数は空間反転  $\mathbf{r}_a \rightarrow -\mathbf{r}_a$  に対して対称（不変）か反対称（符号反転）とすることがで

きる。実際、原子の1電子波動関数は、軌道角運動量  $l$  が偶数のとき対称で、奇数のとき反対称である。

それに対して、(2.4) で与えられる摂動ハミルトニアンは、パリティ変換に対して反対称である。そのため、対称状態  $|\text{even}\rangle$ 、反対称状態を  $|\text{odd}\rangle$  とすると、

$$\langle \text{even} | \hat{H}' | \text{even} \rangle = \langle \text{odd} | \hat{H}' | \text{odd} \rangle = 0$$

となるので、 $\hat{H}'$  の行列要素のうちゼロとならないものは、

$$\langle \text{even} | \hat{H}' | \text{odd} \rangle, \quad \langle \text{odd} | \hat{H}' | \text{even} \rangle$$

だけである<sup>1</sup>。

前節で復習した摂動論からは、 $\langle m | \hat{H}' | n \rangle = 0$  のとき、状態  $|m\rangle$  と  $|n\rangle$  の間には一次摂動の範囲では遷移がおこらない。すなわち、双極子相互作用では、同じパリティの状態間の遷移は禁止されている。このように、摂動ハミルトニアンの行列要素の有無から判定する一次摂動の遷移(直接遷移)の有無を選択則という。

**問題 2.2** ハミルトニアンがパリティ変換対称な時、その縮退していない固有状態はパリティ変換に対して対称か反対称かどちらかであることを示せ。また、縮退している固有状態に対しては、それらの適当な一次結合をとることにより、固有状態として対称あるいは反対称なものを構成できることを示せ。

**問題 2.3** 中心力場中の定常状態(ハミルトニアンの固有状態)は、軌道角運動量  $l$  が偶数の状態はパリティ変換に対して対称、奇数の状態は反対称であることを確かめよ。

### 2.3.3 共鳴準位と2準位原子モデル

さて、光の振動数  $\omega$  が状態  $|0\rangle$  と  $|1\rangle$  のエネルギー差に共鳴していて、その他の状態間とは共鳴していない、すなわち、

$$\hbar\omega \approx W_1 - W_0, \quad \hbar\omega \not\approx W_n - W_m, \quad \text{for } (n, m) \neq (0, 1) \quad (2.5)$$

の場合を考える。いま、(2.4) の  $\hat{H}'$  の  $mn$  成分を

$$\langle m | \hat{H}' | n \rangle = H'_{mn} \cos \omega t$$

のように表すと、(2.3) は

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{b}_m(t) &= \sum_n H'_{mn} \cos \omega t e^{i(W_m - W_n)t/\hbar} b_n(t) \\ &\approx H'_{m0} \cos \omega t e^{i(W_m - W_0)t/\hbar} \end{aligned}$$

となる。ただし、 $t = 0$  で  $b_0(0) = 1$ ,  $b_n(0) = 0$  ( $n \neq 0$ ) なので、 $t \geq 0$  で右辺で  $b_0(t) \approx 1$ ,  $b_n(t) \approx 0$  ( $n \neq 0$ ) と近似した。

<sup>1</sup> これらも、別の事情でゼロとなることはある。

$m \neq 0$  に対して両辺を積分すると、

$$\begin{aligned}
 b_m(t) &= \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' H'_{m0} \cos \omega t' e^{i(W_m - W_0)t'/\hbar} \\
 &= \frac{1}{2i\hbar} H'_{m0} \left[ \frac{e^{i(\omega + (W_m - W_0)/\hbar)t} - 1}{i(\omega + (W_m - W_0)/\hbar)} - \frac{e^{-i(\omega - (W_m - W_0)/\hbar)t} - 1}{i(\omega - (W_m - W_0)/\hbar)} \right] \\
 &\approx -\frac{1}{2i\hbar} H'_{m0} \frac{e^{-i(\omega - (W_m - W_0)/\hbar)t} - 1}{i(\omega - (W_m - W_0)/\hbar)}
 \end{aligned}$$

となる。

最後の結果を見ると、(2.5)の共鳴条件より、 $b_m(t)$ は、 $m = 1$ のときには分母が非常に小さく分子の振動もゆっくりであるが、その他の場合には分母も大きく分子の時間振動も激しいことが分かる。即ち、初期状態との間で外場と共鳴している状態の振幅  $b_1(t)$  以外は大きくなる。すなわち、共鳴条件 (2.5) が成り立っているときには、初期状態  $|0\rangle$  とそれに共鳴している状態  $|1\rangle$  の2状態の振幅のみが大きくなるので、それらだけを考えれば良いことが分かる。外場と共鳴する2状態だけを考えた原子のモデルを2準位原子モデルという。

## 第3章 2準位原子の量子力学

ある2つの準位に共鳴した電磁場の下での原子の振舞を、2準位モデルを用いて調べよう。一つの原子ではなく原子の集団を扱いたいので、量子力学系の統計集団を扱うための密度演算子（密度行列）を導入する。

### 3.1 密度演算子による状態の表示

ハミルトニアン  $\hat{H}$  で時間発展が表される系の状態  $|\psi\rangle$  を考える。時間に依存するシュレディンガー方程式は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle \quad (3.1)$$

で与えられる。 $|\psi\rangle$  を状態ベクトルという。これは、適当な基底

$$|n\rangle; \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

を定めて、それを用いて

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$$

と展開できる。この展開は一意的なので、

$$|\psi\rangle \Leftrightarrow (c_0, c_1, c_2, \dots)$$

のように、状態ベクトルは数ベクトルと1対1に対応付けられる。

状態ベクトル  $|\psi\rangle$  に対して、

$$\hat{\rho} \equiv |\psi\rangle \langle \psi| \quad (3.2)$$

で定義される密度演算子を考える。実際、これにあるベクトル  $|A\rangle$  を右からかけると、

$$\hat{\rho} |A\rangle = |\psi\rangle \langle \psi | A \rangle$$

のように別のベクトルを与えるので、 $\hat{\rho}$  は演算子である。また、基底ベクトルで左右からはさんで得られる行列要素

$$\rho_{n,m} \equiv \langle n | \hat{\rho} | m \rangle = \langle n | \psi \rangle \langle \psi | m \rangle = c_n c_m^*$$

でも表され、それは密度行列と呼ばれる。

系の状態が  $|\psi\rangle$  にあるとき、演算子  $\hat{O}$  で表される物理量を測定したときの期待値  $\langle O \rangle$  は  $\langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle$  で与えられる。これは密度演算子を使うと、

$$\langle O \rangle = \text{Tr}[\hat{\rho} \hat{O}] \quad (3.3)$$

で与えられる。このことは、

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}[\hat{\rho}\hat{O}] &= \sum_n \langle n|\hat{\rho}\hat{O}|n\rangle = \sum_n \langle n|\psi\rangle \langle\psi|\hat{O}|n\rangle \\ &= \sum_n \langle\psi|\hat{O}|n\rangle \langle n|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{O}|\psi\rangle\end{aligned}$$

より、直ちに示される。

密度演算子の従う時間発展方程式は、

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{\rho} = [\hat{H}, \hat{\rho}] \quad (3.4)$$

で与えられることは、シュレディンガー方程式 (3.1) とそのエルミート共役を取ったものから直ちに示すことができる<sup>1</sup>。

**問題 3.1** 密度演算子の時間発展方程式 (3.4) を導き出せ。

## 3.2 純粋状態と混合状態

ある一つの量子状態  $|\psi\rangle$  で表される状態を純粋状態という。それに対して、例えば、系の状態に関する情報が不足していて、

$$\begin{array}{ll}\text{量子状態 } |\psi_1\rangle \text{ にある確率} & P_1 \\ \text{量子状態 } |\psi_2\rangle \text{ にある確率} & P_2 \\ \text{量子状態 } |\psi_3\rangle \text{ にある確率} & P_3 \\ \dots & \dots\end{array}$$

のように、各状態の確率しか知られていない場合には、系は混合状態にあるという。ここで、 $P_i (\geq 0)$  ( $i = 1, 2, 3, \dots$ ) は統計確率で、量子力学的な確率とは別のものである。以下の議論では、状態  $|\psi_i\rangle$  は必ずしも互いに直交している必要はない。

系が混合状態にある場合、密度演算子を

$$\hat{\rho} = \sum_j |\psi_j\rangle P_j \langle\psi_j|; \quad \sum_j P_j = 1 \quad (3.5)$$

と定義すると便利である。この場合にも密度演算子の時間発展は (3.4) で表され、物理量の期待値も (3.3) で与えられる：

$$\langle O \rangle = \sum_j P_j \langle\psi_j|\hat{O}|\psi_j\rangle = \mathrm{Tr}[\hat{\rho}\hat{O}].$$

密度演算子  $\hat{\rho}$  は、純粋状態でも混合状態でも規格化条件

$$\mathrm{Tr}[\hat{\rho}] = 1 \quad (3.6)$$

を満たす。一方、純粋状態 (3.2) の場合には等式

$$\hat{\rho}^2 = \hat{\rho} \quad (3.7)$$

が成り立つが、混合状態 (3.5) ではこの等式は満たされない。数学的には、(3.7) 式を満たす演算子を射影演算子という。

<sup>1</sup>(3.4) 式は物理量の従うハイゼンベルク方程式に似ているが、符号が異なることに注意。

問題 3.2 密度演算子の規格化 (3.6) を示せ。

問題 3.3 純粋状態の密度演算子が射影演算子の条件 (3.7) を満たし、混合状態の場合には満たさないことを示せ。

問題 3.4 混合状態と重ね合わせ状態の違いを説明せよ。

### 3.3 2準位原子と光との相互作用

光と相互作用している2準位原子を考える。ハミルトニアンは

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$$

で表される。第1項は2準位原子を表し、空間反転に対して対称な基底状態  $|a\rangle$  と、反対称な励起状態  $|b\rangle$  からなるとする：

$$\hat{H}_0 |a\rangle = W_a |a\rangle, \quad \hat{H}_0 |b\rangle = W_b |b\rangle; \quad W_b - W_a \equiv \hbar\omega_0.$$

第2項の  $\hat{H}'$  は双極子相互作用を表し、

$$\hat{H}' = -\hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, t); \quad \hat{\boldsymbol{\mu}} \equiv -e\hat{\mathbf{r}}_a$$

で与えられる。ただし、 $\mathbf{r}$  は原子の位置ベクトルで、 $\hat{\boldsymbol{\mu}}$  は原子の双極子演算子である。空間反転対称性より、

$$\langle a | \hat{H}' | a \rangle = \langle b | \hat{H}' | b \rangle = 0$$

なので、 $\hat{H}'$  の行列要素のうちゼロでないものを

$$\begin{aligned} \langle a | \hat{H}' | b \rangle &= -\langle a | \hat{\boldsymbol{\mu}} | b \rangle \cdot \mathbf{E}(t) \equiv -p_{ab} E(t) \\ &= \langle b | \hat{H}' | a \rangle^* \end{aligned}$$

と書くことにする。

時刻  $t$  での原子の状態  $|\psi(t)\rangle$  を

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

と表す。光との相互作用がなければ、

$$c_a(t) = e^{-iW_a t/\hbar} c_a(0), \quad c_b(t) = e^{-iW_b t/\hbar} c_b(0)$$

である。

いま、 $N$  個の原子からなる系を考える。 $i$  原子の状態を  $|\psi_i\rangle$  として、その統計的振る舞いを密度演算子

$$\hat{\rho} = \frac{1}{N} \sum_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$$

で記述しよう。 $\hat{\rho}$ の行列要素は

$$\rho_{aa} = \frac{1}{N} \sum_i c_{a,i} c_{a,i}^*, \quad \rho_{ab} = \frac{1}{N} \sum_i c_{a,i} c_{b,i}^*, \quad \text{etc.}$$

等で与えられる。ただし、

$$|\psi_i\rangle = c_{a,i}|a\rangle + c_{b,i}|b\rangle$$

とした。

密度演算子の時間発展は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho} = [\hat{H}, \hat{\rho}]$$

で記述される。両辺を  $\langle a|$  と  $|b\rangle$  ではさんで行列要素をとると、

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle a|\hat{\rho}|b\rangle &= \langle a|\hat{H}\hat{\rho}|b\rangle - \langle a|\hat{\rho}\hat{H}|b\rangle \\ &= H_{aa}\rho_{ab} + H_{ab}\rho_{bb} - \rho_{aa}H_{ab} - \rho_{ab}H_{bb} \\ &= (W_a - W_b)\rho_{ab} - p_{ab}E(t)\rho_{bb} + p_{ab}E(t)\rho_{aa} \end{aligned}$$

となるので、密度演算子の行列要素  $\rho_{ab}$  の時間発展は、

$$\dot{\rho}_{ab} = i\omega_0\rho_{ab} + i\frac{p_{ab}E(t)}{\hbar}(\rho_{bb} - \rho_{aa}) \quad (3.8)$$

$$\dot{\rho}_{ba} = \dot{\rho}_{ab}^* = -i\omega_0\rho_{ba} - i\frac{p_{ba}E(t)}{\hbar}(\rho_{bb} - \rho_{aa}) \quad (3.9)$$

で与えられる。同様に、対角要素についても、

$$\dot{\rho}_{aa} = i\frac{p_{ab}E(t)}{\hbar}\rho_{ba} - i\frac{p_{ba}E(t)}{\hbar}\rho_{ab} \quad (3.10)$$

$$\dot{\rho}_{bb} = i\frac{p_{ba}E(t)}{\hbar}\rho_{ab} - i\frac{p_{ab}E(t)}{\hbar}\rho_{ba} \quad (3.11)$$

となる。これらから、

$$\dot{\rho}_{aa} + \dot{\rho}_{bb} = 0 \quad (3.12)$$

$$\dot{\rho}_{aa} - \dot{\rho}_{bb} = 2i\frac{p_{ab}E(t)}{\hbar}\rho_{ba} - 2i\frac{p_{ba}E(t)}{\hbar}\rho_{ab} \quad (3.13)$$

を得る。第1式は密度演算子の規格化条件 (3.6) から当然満たされるべき式である。

以下では、これらを解いて  $\hat{\rho}$  を求め、古典原子の場合と同様に、外場  $E(t)$  によって誘起される電気分極を導き、電磁波が原子気体中をどのように伝播するかを調べよう。

### 3.4 回転波近似

$\rho_{ba}$  の振る舞いについて調べ、(3.8) あるいは (3.9) を解く際に有効な近似について説明する。まず、

$$\rho_{ba} = \langle b|\hat{\rho}|a\rangle = \overline{c_b(t)c_a(t)^*}$$

なので、外場がない場合には  $\rho_{ba}$  の時間変化は、

$$\rho_{ba} \sim e^{-iW_b t/\hbar} e^{+iW_a t/\hbar} \overline{c_b(0)c_a(0)^*} \propto e^{-i\omega_0 t}$$

と表される。外場との相互作用が弱い場合には、同様に  $\rho_{ba}$  はおよそ角振動数  $\omega_0$  で振動するだろう。

一方、外場  $E(t)$  が

$$E(t) = E^{(\omega)} e^{-i\omega t} + E^{(-\omega)} e^{+i\omega t}; \quad E^{(-\omega)} = E^{(\omega)*}$$

で与えられ、原子と共鳴していて  $\omega \approx \omega_0$  のとき、 $\dot{\rho}_{ab}$  の方程式 (3.9) は、

$$\dot{\rho}_{ba} = -i\omega_0 \rho_{ba} - i \frac{p_{ba}}{\hbar} \left( E^{(\omega)} e^{-i\omega t} + E^{(-\omega)} e^{+i\omega t} \right) (\rho_{bb} - \rho_{aa})$$

となる。 $E^{(-\omega)}$  の項以外はおおよそ  $\omega \approx \omega_0$  で振動するのに対して、 $E^{(-\omega)}$  の項は  $-\omega$  で振動するので、 $\rho_{ba}$  に小さな寄与しかしないと予想される。

このことを確かめるために、

$$\rho_{ba}(t) \equiv \rho_{ba}^{(\omega)} e^{-i\omega t}$$

とおいて考える。 $\rho_{ba}^{(\omega)}(t)$  は  $e^{-i\omega t}$  に比べてゆっくりと変化する因子である。これを上式に代入すると、

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_{ba}^{(\omega)}(t) &= -i(\omega_0 - \omega) \rho_{ba}^{(\omega)}(t) - i \frac{p_{ba}}{\hbar} \left( E^{(\omega)} + E^{(-\omega)} e^{+2i\omega t} \right) (\rho_{bb} - \rho_{aa}) \\ &\approx -i(\omega_0 - \omega) \rho_{ba}^{(\omega)}(t) - i \frac{p_{ba}}{\hbar} E^{(\omega)} (\rho_{bb} - \rho_{aa}) \end{aligned} \quad (3.14)$$

となる。2行目の表式では、 $E(t)$  の項のうち激しく振動する  $E^{(-\omega)}$  の成分を無視した。この項は時間で積分すると正負が打ち消し、 $\rho_{ba}^{(\omega)}$  への寄与としては無視できるからである。この近似を回転波近似という。

### 3.5 現象論的緩和

密度行列の非対角成分

$$\rho_{ba} = \frac{1}{N} \sum_j c_{b,j} c_{a,j}^* \quad (3.15)$$

は、係数  $c_{b,j}$ ,  $c_{a,j}$  の位相が原子ごとにランダムだと平均されてゼロになる。完全に同等で独立な原子の集団であれば、初期にゼロでない値をとればそれがそのままいつまでも残るが、実際の原子集団では原子同士の衝突などの相互作用によって波動関数の位相は乱され、(3.15) は次第にゼロに緩和してゆく。一方、密度行列の対角成分には状態の専有確率という意味があるが、やはり、原子同士の衝突など今考えているハミルトニアンには含まれていない効果によって、励起状態から基底状態への緩和が起こる。



これらの事情を取り入れるために、(3.14) 式に  $\gamma$ 、(3.10) および (3.11) 式に  $\Gamma$  で表される現象論的緩和定数を導入して、

$$\dot{\rho}_{ba}^{(\omega)}(t) = -\gamma\rho_{ba}^{(\omega)}(t) - i(\omega_0 - \omega)\rho_{ba}^{(\omega)}(t) - i\frac{p_{ba}}{\hbar}E^{(\omega)}(\rho_{bb} - \rho_{aa}) \quad (3.16)$$

$$\dot{\rho}_{aa}(t) = +\Gamma\rho_{bb} + i\frac{p_{ab}E^{(-\omega)}}{\hbar}\rho_{ba}^{(\omega)} - i\frac{p_{ba}E^{(\omega)}}{\hbar}\rho_{ab}^{(-\omega)} \quad (3.17)$$

$$\dot{\rho}_{bb}(t) = -\Gamma\rho_{bb} - i\frac{p_{ab}E^{(-\omega)}}{\hbar}\rho_{ba}^{(\omega)} + i\frac{p_{ba}E^{(\omega)}}{\hbar}\rho_{ab}^{(-\omega)} \quad (3.18)$$

を考える。(3.17) および (3.18) にも回転波近似を用いた。 $\gamma$  を横緩和率、 $\Gamma$  を縦緩和率という。

### 3.6 定常解 — 線形感受率と飽和

(3.16) の時間微分をゼロとおいて定常解を求めると、

$$\rho_{ba}^{(\omega)} = \frac{1}{(\omega_0 - \omega) - i\gamma} \frac{p_{ba}E^{(\omega)}}{\hbar} (\rho_{aa} - \rho_{bb}) \quad (3.19)$$

をえる。外場の効果が小さく原子はほぼ基底状態にある場合には、 $\rho_{aa} \approx 1$ 、 $\rho_{bb} \approx 0$  を代入すると、

$$\rho_{ba}^{(\omega)} \approx \frac{1}{(\omega_0 - \omega) - i\gamma} \frac{p_{ba}E^{(\omega)}}{\hbar}$$

となる。

原子気体の分極  $P$  は、原子の  $\hat{\mu}$  の電場方向の成分を  $\hat{p}$  とすると、

$$\begin{aligned} P &= \frac{N}{V} \text{Tr}[\hat{\rho}\hat{p}] = \frac{N}{V} [\rho_{ab}p_{ba} + \rho_{ba}p_{ab}] \\ &= \frac{N}{V} \left[ \rho_{ab}^{(-\omega)} p_{ba} e^{+i\omega t} + \rho_{ba}^{(\omega)} p_{ab} e^{-i\omega t} \right] \\ &\equiv P^{(-\omega)} e^{+i\omega t} + P^{(\omega)} e^{-i\omega t} \end{aligned}$$

と表される。ここで、 $P^{(\omega)} = P^{(-\omega)*}$  は、(3.19) より

$$P^{(\omega)} = \frac{N}{V} \frac{1}{(\omega_0 - \omega) - i\gamma} \frac{p_{ba}p_{ab}}{\hbar} (\rho_{aa} - \rho_{bb}) E^{(\omega)} \equiv \varepsilon_0 \chi(\omega) E^{(\omega)}$$

で与えられる。

$\chi(\omega)$  は電気感受率で、いま求めた表式から 2 準位原子気体に対しては、

$$\varepsilon_0 \chi(\omega) = \frac{N}{V} \frac{1}{(\omega_0 - \omega) - i\gamma} \frac{|p_{ba}|^2}{\hbar} (\rho_{aa} - \rho_{bb}) \quad (3.20)$$

で与えられる。これと、以前求めた古典原子気体に対する表式 (1.17)

$$\varepsilon_0 \chi_{cl}(\omega) = \frac{N}{V} \frac{e^2/m}{(\omega_0^2 - \omega^2) - 2i\omega/\tau_0} \approx \frac{N}{V} \frac{1}{(\omega_0 - \omega) - i/\tau_0} \frac{e^2}{2\omega_0 m}$$

とを比較すると、対応関係が見て取れる。

### 3.6.1 線形感受率

外場の影響が小さく原子がほとんど基底状態にある場合には  $\rho_{aa} - \rho_{bb} \approx 1$  (定数) なので、(3.20) は線形感受率を与える。その時、(3.20) の実部と虚部は

$$\begin{aligned}\chi(\omega) &\equiv \chi'(\omega) + i\chi''(\omega) \\ &= \frac{N}{V} \frac{\omega_0 - \omega}{(\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2} \frac{|p_{ba}|^2}{\varepsilon_0 \hbar} + i \frac{N}{V} \frac{\gamma}{(\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2} \frac{|p_{ba}|^2}{\varepsilon_0 \hbar}\end{aligned}$$

で与えられる。媒質の誘電率  $\varepsilon(\omega)$  は

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_0(1 + \chi(\omega))$$

で与えられるので、媒質中を伝播する電磁波の速さ  $c(\omega)$  は、

$$c(\omega) = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon(\omega)\mu}} \approx \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0\mu_0}} \frac{1}{\sqrt{1 + \chi(\omega)}} \equiv \frac{c_0}{n(\omega)}$$

と表される。ここで、 $c_0$  は真空中の光速、 $n(\omega)$  は屈折率である。

$\chi(\omega) \ll 1$  のときには、

$$n(\omega) = \sqrt{1 + \chi(\omega)} \approx 1 + \frac{1}{2}\chi'(\omega) + \frac{1}{2}i\chi''(\omega) \equiv n'(\omega) + i\kappa(\omega)$$

となる。ただし、 $n'$  は屈折率  $n$  の実部。このとき、媒質中を伝播する振動数  $\omega$  の電磁波は、

$$k = \frac{n(\omega)\omega}{c_0} = \frac{\omega}{c_0} (n'(\omega) + i\kappa(\omega))$$

より、

$$\mathbf{E}^{(\omega)} e^{i(kz - \omega t)} = \mathbf{E}^{(\omega)} \exp \left[ i \left( \frac{\omega}{c_0} n'(\omega) z - \omega t \right) \right] \exp \left[ -\kappa(\omega) \frac{\omega}{c_0} z \right]$$

となるので、分散関係は  $K(\omega) \equiv \frac{\omega}{c_0} n'(\omega)$  で与えられ、 $\kappa(\omega)$  は減衰を表すことが分かる。

### 3.6.2 飽和

電場の影響が強く  $\rho_{bb} \neq 0$  の場合にはどうなるであろうか？(3.16) と (3.18) の定常解および密度行列の規格化条件、

$$\begin{aligned}\rho_{ba}^{(\omega)} &= \frac{1}{(\omega_0 - \omega) - i\gamma} \frac{p_{ba} E^{(\omega)}}{\hbar} (\rho_{aa} - \rho_{bb}), \quad \rho_{ab}^{(-\omega)} = \rho_{ba}^{(\omega)*} \\ \rho_{bb} &= \frac{2}{\hbar\Gamma} \text{Im} \left[ p_{ab} E^{(-\omega)} \rho_{ba}^{(\omega)} \right] \\ 1 &= \rho_{aa} + \rho_{bb}\end{aligned}$$

より、

$$\rho_{aa} - \rho_{bb} = \frac{(\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2}{(\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2 + \frac{\gamma}{\Gamma} \left| \frac{2p_{ba}E^{(\omega)}}{\hbar} \right|^2} \quad (3.21)$$

$$\rho_{ba}^{(\omega)} = \frac{(\omega_0 - \omega) + i\gamma}{(\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2 + \frac{\gamma}{\Gamma} \left| \frac{2p_{ba}E^{(\omega)}}{\hbar} \right|^2} \frac{p_{ba}E^{(\omega)}}{\hbar} \quad (3.22)$$

が得られる。これより、分極の  $\omega$  振動成分は、

$$\begin{aligned} P^{(\omega)} &= \frac{N}{V} \rho_{ba}^{(\omega)} p_{ab} \\ &= \frac{N}{V} \frac{(\omega_0 - \omega) + i\gamma}{(\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2 + \frac{\gamma}{\Gamma} \left| \frac{2p_{ba}E^{(\omega)}}{\hbar} \right|^2} \frac{|p_{ba}|^2}{\hbar} E^{(\omega)} \end{aligned}$$

となり、電気感受率は、

$$\chi(\omega) = \frac{N}{V} \frac{(\omega_0 - \omega) + i\gamma}{(\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2 + \frac{\gamma}{\Gamma} \left| \frac{2p_{ba}E^{(\omega)}}{\hbar} \right|^2} \frac{|p_{ba}|^2}{\varepsilon_0 \hbar} \quad (3.23)$$

となる。

電場が強い場合、この2準位原子モデルによる電気感受率は電場に依存しており、分極は電場に比例しない。すなわち、 $\chi(\omega)$  の分母に  $E^{(\omega)}$  が入っているため、大きな電場に対しては感受率は減少する。このことを飽和という。これは、以前に求めた古典原子に対する表式 (1.17) との間違った違いである。

## 第4章 誘導遷移と自然放出

これまでは、外から加えた電磁場によって原子気体にどのような分極が誘起されるかということを見てきたが、この章では、外場によって原子の状態がどのように遷移するかということを見て行く。その結果、基底状態にある原子が、外場によって励起されるだけでなく、励起状態にある原子が基底状態へ遷移する過程も起こることが分かる。このことはアインシュタインによって初めて示されたが、それは量子力学が確立するずっと前であった。

### 4.1 遷移確率

以前と同様、外場と双極子相互作用している2準位原子模型を考える。系のハミルトニアンは

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'; \quad \hat{H}' = -\hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \mathbf{E}(t)$$

で与えられ、原子の基底状態1は空間反転対称、励起状態2は反対称で、

$$\hat{H}_0 |1\rangle = W_1 |1\rangle, \quad \hat{H}_0 |2\rangle = W_2 |2\rangle; \quad \hbar\omega_0 = W_2 - W_1$$

とする。系の状態を

$$|\psi\rangle = c_1(t) |1\rangle + c_2(t) |2\rangle$$

と表すと、時間に依存するシュレディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle$$

は、

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{c}_1(t) &= W_1 c_1(t) - \boldsymbol{\mu}_{12} \cdot \mathbf{E}(t) c_2(t) \\ i\hbar \dot{c}_2(t) &= -\boldsymbol{\mu}_{21} \cdot \mathbf{E}(t) c_1(t) + W_2 c_2(t) \end{aligned}$$

となる。ただし、 $\hat{H}'$ は対称性より対角要素がゼロとなることを用いた。また、 $\boldsymbol{\mu}_{12} \equiv \langle 1 | \hat{\boldsymbol{\mu}} | 2 \rangle$ である。

以前と同様、

$$c_i(t) = b_i(t) e^{-iW_i t/\hbar}; \quad i = 1, 2$$

とおくと、

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{b}_1(t) &= -\boldsymbol{\mu}_{12} \cdot \mathbf{E}(t) b_2(t) e^{-i\omega_0 t} \\ i\hbar \dot{b}_2(t) &= -\boldsymbol{\mu}_{21} \cdot \mathbf{E}(t) b_1(t) e^{+i\omega_0 t} \end{aligned}$$

となる。さらに、電場

$$\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}^{(\omega)} e^{-i\omega t} + \mathbf{E}^{(-\omega)} e^{+i\omega t}$$

が共鳴に近い

$$\Delta \equiv \omega_0 - \omega \ll \omega_0, \omega$$

として回転波近似を用いると、

$$\hbar \dot{b}_1(t) = i \frac{1}{\hbar} \boldsymbol{\mu}_{12} \cdot \mathbf{E}^{(-\omega)} e^{-i\Delta t} b_2(t) \equiv iX e^{-i\Delta t} b_2(t) \quad (4.1)$$

$$\hbar \dot{b}_2(t) = i \frac{1}{\hbar} \boldsymbol{\mu}_{21} \cdot \mathbf{E}^{(\omega)} e^{+i\Delta t} b_1(t) \equiv iX^* e^{+i\Delta t} b_1(t) \quad (4.2)$$

となる。

いま、 $t = 0$  で原子は基底状態にあったとして、初期条件  $b_1(0) = 1$ ,  $b_2(0) = 0$  とし、また、 $t > 0$  でも励起は弱く  $b_1(t) \approx 1$  として、この方程式を解く。(4.2) 式より、

$$b_2(t) \approx \int_0^t dt' iX^* e^{i\Delta t'} = 2iX^* e^{i\Delta t/2} \frac{\sin \frac{1}{2}\Delta t}{\Delta}$$

を得るので、時刻  $t$  に原子が励起状態 2 にある確率は、

$$|b_2(t)|^2 \approx 4|X|^2 \frac{\sin^2 \frac{1}{2}\Delta t}{\Delta^2} \quad (4.3)$$

となる。これは、 $\Delta = \omega_0 - \omega$  の関数としてプロットすると、 $\Delta = 0$  に非常に鋭いピークを持った関数になることが分かる。ピークの幅は時間が立つにつれて  $1/t$  に比例して狭くなり、ピークの高さは  $t^2$  に比例して高くなる。実際、

$$\delta(\omega_0 - \omega) = \frac{2}{\pi} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2 [(\omega_0 - \omega)t/2]}{(\omega_0 - \omega)^2 t} \quad (4.4)$$

となることが示される。

さて、原子にさまざまな振動数や偏光の電磁波を当てた場合を考える。ひとつひとつのモードの電磁波の影響が (4.3) 式で表され、全体の効果はその和で与えられるとしよう。

(4.3) 式の係数は、

$$|X|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |\boldsymbol{\mu}_{12} \cdot \mathbf{E}^{(\omega)}|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |\boldsymbol{\mu}_{12}|^2 |\mathbf{E}^{(\omega)}|^2 \cos^2 \theta \quad (4.5)$$

に比例し、一方、光のエネルギーの体積密度は、

$$\frac{1}{2} \varepsilon_0 \mathbf{E}^2(t) + \frac{1}{2} \mu_0 \mathbf{H}^2(t) = \varepsilon_0 \overline{\mathbf{E}^2(t)} = \varepsilon_0 (\mathbf{E}^{(\omega)} e^{-i\omega t} + \mathbf{E}^{(-\omega)} e^{+i\omega t})^2 = 2\varepsilon_0 |\mathbf{E}^{(\omega)}|^2$$

で与えられるので、(4.3) の係数にある  $|\mathbf{E}^{(\omega)}|^2$  は、振動数  $\omega$  のエネルギー密度  $U(\omega)d\omega$  を

$$2\varepsilon_0 |\mathbf{E}^{(\omega)}|^2 \iff U(\omega)d\omega$$

と対応付けることができる。また、(4.5)の右辺の  $\cos^2 \theta$  は、入射電磁波の入射方向および偏光面が等方的に分布しているとして、立体角の平均

$$\cos^2 \theta \implies \frac{1}{4\pi} \int d\Omega \cos^2 \theta = \frac{1}{3}$$

で置き換える。これらの対応から、様々な電磁波の影響のもとでの原子が励起状態にある確率は、

$$\begin{aligned} |b_2(t)|^2 &= \frac{2}{3} \frac{|\boldsymbol{\mu}_{12}|^2}{\varepsilon_0 \hbar^2} \int d\omega U(\omega) \frac{\sin^2 \frac{1}{2} \Delta t}{\Delta^2}; \quad \Delta = \omega_0 - \omega \\ &= \frac{\pi}{3} \frac{|\boldsymbol{\mu}_{12}|^2}{\varepsilon_0 \hbar^2} U(\omega_0) t \equiv \omega_{12} t \end{aligned}$$

と表される。ただし、ディラックのデルタ関数の表式(4.4)を用いた。ここで、 $\omega_{12}$  は状態1から状態2への単位時間あたりの遷移確率で、

$$\omega_{12} = \frac{\pi}{3} \frac{|\boldsymbol{\mu}_{12}|^2}{\varepsilon_0 \hbar^2} U(\omega_0) \quad (4.6)$$

で与えられ、電磁波のエネルギー密度  $U(\omega_0)$  に比例することが示された。

同様に、(4.1)を初期条件  $b_1 = 0, b_2 = 1$  のもとに解くことができ、状態2から状態1への遷移確率  $\omega_{21}$  が  $\omega_{12}$  に等しい、すなわち

$$\omega_{21} = \omega_{12}$$

が示される。このような、外場による状態遷移を誘導遷移という。

**問題 4.1** (4.4)式を示せ。また、有限の  $t$  に対して右辺を  $\omega$  の関数としてグラフに描け。

## 4.2 自然放出と誘導遷移

アインシュタインは、前節で議論した、外場のエネルギーに比例する誘導遷移の他に、外場がなくても励起状態から基底状態へ光を放出して遷移する、いわゆる自然放出が存在しなければならないことを示した。量子力学が確立するはるか以前の1917年のことである。この節では、アインシュタインの議論に従って自然放出の遷移確率を求める。

物質(原子)と放射(光)が温度  $T$  の熱平衡にある、空洞放射を考える。空洞の壁のある原子の2つのエネルギー固有状態(状態1および2)に注目しよう。簡単の為に、それらの状態は縮退がないとして、固有エネルギーを  $W_1$  および  $W_2$  ( $W_2 - W_1 \equiv \hbar\omega_0 > 0$ ) とする。壁には同じ種類の原子がたくさんあり、熱平衡状態で、そのうち  $N_1^e$  個が状態1、 $N_2^e$  個が状態2にあるとする。熱平衡ではその比はボルツマン分布で与えられ、

$$\frac{N_2^e}{N_1^e} = \exp \left[ -\frac{W_2 - W_1}{k_B T} \right] \quad (4.7)$$

となる。一方、放射場のエネルギー密度  $U_T(\omega)$  はプランクの放射公式

$$U_T(\omega) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2c^3} \frac{1}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} \quad (4.8)$$

で与えられる。

当時、原子の状態遷移に伴ってそのエネルギー差に対応する振動数の光子を放出したり吸収したりすることは知られていた。アインシュタインはこのプロセスに以下の2つの仮定を立てた：

1. 原子の状態間の遷移には、遷移確率が放射場のエネルギーに比例する誘導遷移（吸収および放出）と、放射場とは関係のない自然放出がある。
2. これらの遷移確率は、熱平衡で原子がボルツマン分布、放射場がプランクの公式で与えられることから決まる。

これらの仮定は、その後量子力学の確立とともに、正しいことが示されたが、当時としては全く慧眼としかいいようがない。

状態1から2への誘導遷移（吸収）の遷移確率を  $B_{12}U_T(\omega_0)$ 、状態2から1への誘導遷移（放出）の遷移確率を  $B_{21}U_T(\omega_0)$ 、状態2から1への自然放出の遷移確率を  $A_{21}$  とする。放射場がなくても起こる自然吸収は、もちろんエネルギー保存則から禁止されている。

熱平衡状態では1から2への遷移と2から1への遷移が釣り合っていないなければならないので、等式

$$N_1^e B_{12} U_T(\omega_0) = N_2^e B_{21} U_T(\omega_0) + N_2^e A_{21} \quad (4.9)$$

が成り立たなければならない。

温度無限大の極限  $T \rightarrow \infty$  では、(4.7) と (4.8) より

$$U_T(\omega_0) \rightarrow \infty, \quad N_1^e = N_2^e$$

なので、その場合でも等式 (4.9) が成り立つためには、

$$B_{12} = B_{21} \equiv B$$

でなければならない。これを (4.9) に代入すると、プランクの公式 (4.8) を用いて、

$$A \equiv A_{21} = \frac{\hbar\omega_0^3}{\pi^2c^3} B$$

を得る。 $B U_T(\omega_0)$  は前節で計算した (4.6) の  $\omega_{12}$  なので、

$$A = \frac{|\mu_{12}|^2}{3\pi\epsilon_0\hbar c^3} \omega_0^3, \quad B = \frac{\pi}{3} \frac{|\mu_{12}|^2}{\epsilon_0\hbar^2} \quad (4.10)$$

となる。これらの係数は、今日ではアインシュタインの A 係数、B 係数と呼ばれている。

自然放出の確率  $A$  は、(4.10) より  $\omega_0$  の 3 乗に比例する。そのため、準位間のエネルギー差が大きくなればなるほど、誘導放出に比べて自然放出の確率が大きくなる。

平衡状態での誘導放出と自然放出の比は、

$$\frac{BU_T(\omega_0)}{A} = \frac{1}{N_1^e/N_2^e - 1} = \frac{1}{e^{\hbar\omega_0/k_B T} - 1} = \bar{n}_{\omega_0}$$

となり、放出される光子のエネルギーの状態の熱平衡での光子の占有数に比例している。

この結果を用いると、光子の放出の確率は、自然放出と誘導放出合わせて単位時間あたり

$$A + BU_T(\omega_0) = A(1 + \bar{n}_{\omega_0})$$

なので、 $\bar{n}_{\omega_0} = 1$  のとき自然放出と誘導放出が等しくなる。可視光の場合、光のエネルギーは  $1\text{eV} \approx 1.16 \times 10^4\text{K}$  程度なので、常温では  $\bar{n}_{\omega_0} \ll 1$  となり、殆どが自然放出であることが分かる。



## 第5章 スペクトル線の巾と形

原子のスペクトル線は、いくつかの理由により有限の巾をもつ。

### 5.1 自然巾

基底状態以外のエネルギー準位  $W$  は、前章で議論したように自然放出の確率があるために、寿命が有限になる。有限の寿命  $\Delta t$  を持つ準位のエネルギーは、不確定関係

$$\Delta W \Delta t \gtrsim \hbar \quad (5.1)$$

のために、有限の巾  $\Delta W$  を持つ。

有限の遷移確率による励起状態の減少は、原子が放出する電場の指数関数的な減衰

$$E(t) = E_0 \exp \left[ -\omega_0 t - \frac{1}{2} \gamma t \right], \quad \text{for } t > 0$$

としてあらわれる。そのフーリエ変換

$$E(\omega) = \int_0^\infty E(t) e^{i\omega t} dt = E_0 \frac{1}{i(\omega - \omega_0) + \gamma/2}$$

より、光のスペクトル  $I(\omega)$  は

$$I(\omega) \propto |E(\omega)|^2 \propto \frac{1}{(\omega - \omega_0)^2 + (\gamma/2)^2}$$

となる。すなわち、自然放出による光のスペクトル線の形はローレンツ型になり、その半値巾は  $\gamma$  である。これをスペクトルの自然幅という。

**問題 5.1** 自然幅と不確定性関係 (5.1) との関係を議論せよ。

### 5.2 衝突幅

気体分子（原子）の量子状態は衝突によって激しい攪乱を受ける。その為、気体分子の放出する光の位相は、分子が衝突するたびにランダムに変調する。このランダムな位相変調がスペクトルにどのような影響を与えるか見てみよう。

まず、ある気体分子に注目した時、それが平均衝突時間間隔が  $\tau_c$  の一定頻度でランダムに衝突する時、引き続く衝突の間の時間間隔  $\tau$  の分布  $p(\tau)$  は

$$p(\tau) = \frac{1}{\tau_c} e^{-\tau/\tau_c} \quad (5.2)$$

となる。

[(5.2)の導出] : 衝突時間間隔が $\tau$ 以上である確率を $Q(\tau)$ とする。 $Q(\tau)$ は $p(\tau)$ を用いて、

$$Q(\tau) = \int_{\tau}^{\infty} p(\tau') d\tau' \quad \text{すなわち、} \quad Q'(\tau) = -p(\tau)$$

と表される。一方、単位時間あたりの衝突頻度を $\gamma_c$ とすると、時刻 $\tau$ と $\tau + \Delta\tau$ の間に衝突する確率は $\gamma_c \Delta\tau$ なので、

$$Q(\tau + \Delta\tau) - Q(\tau) = -\gamma_c \Delta\tau Q(\tau)$$

すなわち、 $\Delta\tau \rightarrow 0$ の極限を取ると、 $Q(\tau)$ は微分方程式

$$\frac{dQ(\tau)}{d\tau} = -\gamma_c Q(\tau)$$

に従うことが分かる。 $Q(0) = 1$ なので、これを解くと

$$Q(\tau) = e^{-\gamma_c \tau}$$

をえる。これより、

$$p(\tau) = -Q'(\tau) = \gamma_c e^{-\gamma_c \tau}$$

をえる。平均衝突時間 $\tau_c$ は

$$\tau_c = \langle \tau \rangle = \int_0^{\infty} \tau p(\tau) d\tau = \frac{1}{\gamma_c}$$

なので、(5.2)を得る。 ■

さて、 $j$ 番目の衝突が $t_j$ に起こり、その時分子の放出する電場の位相がランダムに変わるとする。すなわち、電場 $E(t)$ は

$$E(t) = E_0 \exp[-i\omega_0 t - i\theta_j] \quad \text{for } t_j < t < t_{j+1}$$

と表され、位相 $\theta_j$ は区間 $(-\pi, \pi]$ の一様乱数で与えられるとする。また、衝突間隔 $\tau_j \equiv t_{j+1} - t_j$ は(5.2)の分布に従うとしよう。

電場のフーリエ変換は

$$E(\omega) = \int E(t) e^{i\omega t} dt = \sum_j \left[ \int_{t_j}^{t_{j+1}} E_0 e^{-i(\omega_0 - \omega)t} dt \right] e^{-i\theta_j}$$

で与えられ、そのスペクトル強度は、

$$|E(\omega)|^2 = \sum_{j, j'} \left[ \int_{t_j}^{t_{j+1}} E_0 e^{-i(\omega_0 - \omega)t} dt \right] \left[ \int_{t_{j'}}^{t_{j'+1}} E_0 e^{-i(\omega_0 - \omega)t} dt \right]^* e^{-i\theta_j + i\theta_{j'}}$$

で与えられる。すべての位相 $\theta_j$ についての平均 $\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_j$ をとると、

$$\begin{aligned} \langle |E(\omega)|^2 \rangle_{\theta} &= \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\theta_1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\theta_2}{2\pi} \cdots \sum_{j, j'} \left[ \int_{t_j}^{t_{j+1}} E_0 e^{-i(\omega_0 - \omega)t} dt \right] \left[ \int_{t_{j'}}^{t_{j'+1}} E_0 e^{-i(\omega_0 - \omega)t} dt \right]^* e^{-i\theta_j + i\theta_{j'}} \\ &= \sum_{j, j'} \left[ \int_{t_j}^{t_{j+1}} E_0 e^{-i(\omega_0 - \omega)t} dt \right] \left[ \int_{t_{j'}}^{t_{j'+1}} E_0 e^{-i(\omega_0 - \omega)t} dt \right]^* \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\theta_1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\theta_2}{2\pi} \cdots e^{-i\theta_j + i\theta_{j'}} \\ &= \sum_{j, j'} \left[ \int_{t_j}^{t_{j+1}} E_0 e^{-i(\omega_0 - \omega)t} dt \right] \left[ \int_{t_{j'}}^{t_{j'+1}} E_0 e^{-i(\omega_0 - \omega)t} dt \right]^* \delta_{j, j'} = \sum_j \left| \int_{t_j}^{t_{j+1}} E_0 e^{-i(\omega_0 - \omega)t} dt \right|^2 \end{aligned}$$

となる。一方、

$$\boxed{j} = \int_{t_j}^{t_j + \tau_j} E_0 e^{-i(\omega_0 - \omega)t} dt = E_0 \frac{\sin((\omega_0 - \omega)\tau_j/2)}{(\omega_0 - \omega)/2} e^{-i(\omega_0 - \omega)(\tau_j/2 + t_j)}$$

なので、

$$\langle |E(\omega)|^2 \rangle_\theta = \sum_j E_0^2 \left[ \frac{\sin((\omega_0 - \omega)\tau_j/2)}{(\omega_0 - \omega)/2} \right]^2$$

となる。最後に、衝突時間間隔  $\tau_j$  の平均を取ると、

$$\begin{aligned} \langle |E(\omega)|^2 \rangle &\equiv \langle |E(\omega)|^2 \rangle_{\theta, \tau} \propto \int_0^\infty d\tau p(\tau) \left[ \frac{\sin((\omega_0 - \omega)\tau/2)}{(\omega_0 - \omega)/2} \right]^2 \\ &= \frac{1}{\tau_c(\omega_0 - \omega)^2/4} \int_0^\infty d\tau e^{-\tau/\tau_c} \sin^2\left((\omega_0 - \omega)\frac{\tau}{2}\right) \\ &= \frac{2}{(\omega_0 - \omega)^2 + 1/\tau_c^2} \end{aligned}$$

のように、やはり半値巾  $2/\tau_c$  のローレンツ型のスペクトルを得る。

このように衝突によって生じるスペクトル線巾を衝突巾あるいは圧力巾という。

**問題 5.2** 上式の最後の積分を確かめよ。

### 5.3 ドップラー巾

光を放出している分子は熱運動をしているので、静止している観測者からはドップラー効果によるスペクトル線巾が観測される。それをドップラー巾という。

速度  $v$  の原子が振動数  $\omega_0$  の光を放出している時、 $z = \infty$  で観測される振動数  $\omega$  は、 $(v/c)$  の一次近似で、

$$\omega \approx \frac{\omega_0}{1 - v_z/c} \approx \omega_0 \left( 1 + \frac{v_z}{c} \right) \quad (5.3)$$

となる。速度の  $z$  成分  $v_z$  はマックスウェル分布

$$P(v_z) = \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T}} \exp\left[-\frac{mv_z^2}{2k_B T}\right]$$

しているので、スペクトル  $I(\omega)$  は、(5.3) 式を  $v_z$  について解いた式を用いて、

$$I(\omega) \propto P(v_z(\omega)) \frac{dv_z}{d\omega} \propto \exp\left[-\frac{mc^2}{2k_B T} \frac{(\omega_0 - \omega)^2}{\omega_0^2}\right]$$

となる。すなわちドップラー効果によるスペクトル分布はガウス型になり、そのスペクトル巾は  $\sqrt{T}$  に比例する。

## 5.4 均一巾と不均一巾

自然巾と衝突巾では全ての原子からの光が同じ線巾のスペクトルを持つ。それに対して、ドップラー巾は、一つひとつの分子はより狭いスペクトル線の光を出しているのにも関わらず、分子ごとにその中心が異なる為に全体としては広いスペクトルが観測される。

前者のような場合を均一巾、後者のような場合を不均一巾という。この章では、均一巾を与えるメカニズムである自然放出と分子衝突はローレンツ型のスペクトルを与え、不均一巾を与えるメカニズムの一つであるドップラー効果はガウス型のスペクトルを与えるということを示した。

一般に、不均一巾を与えるメカニズムは、一つひとつの原子の環境が異なることから来るので、ガウス型の分布になることが多い。しかし、不均一巾に由来するスペクトルは必ずガウス型になるとは限らない。

## 第6章 レーザーの理論

レーザー (LASER) は、Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation の頭文字をとった造語で、誘導放出による増幅を利用した光の発振器である。誘導放出による電磁波の発振は、歴史的にはマイクロ波領域のアンモニア MASER (Tawnes et al, 1954) が最初である。その後、1960年に Maiman によって実現したルビーレーザーが、最初の可視光領域でのレーザーである。

レーザーの基本原理は、アインシュタインによって明らかにされた、誘導放出による光の増幅である。即ち、基底状態にある原子に共鳴する光を当てると光を吸収して原子は励起するが、励起状態にある原子に共鳴する光を当てると、原子は同じ光を放出して、基底状態に遷移するので、光は増幅される。

アインシュタインが示したように吸収と放出の遷移確率は同じなので、仮に基底状態の原子よりも励起状態の原子の方が多い、いわゆる負の温度状態を実現できれば、吸収よりも放出の方が多くなり、光は増幅される。これがレーザーである。実際には、基底状態と励起状態のエネルギー差が大きくなればなるほど、自然放出の確率が大きくなり励起状態の原子が緩和してしまうので、負の温度状態を作るのが難しくなる。このため、短波長になればなるほど LASER 発振が難しい。現在では紫外領域まで LASER 発振が実現している<sup>1</sup>。

以下では、これまで議論してきた2準位原子気体媒質と電磁波との相互作用の理論をもちいて、レーザー発振条件や発振周波数を議論しよう。

### 6.1 媒質によるエネルギー吸収・放出

媒質による単位時間あたりのエネルギー吸収率  $W$  は、

$$\begin{aligned} W &= \overline{\mathbf{E} \cdot \mathbf{j}} = \overline{\mathbf{E} \cdot \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t}} \\ &= \overline{\left( E^{(\omega)} e^{-i\omega t} + E^{(-\omega)} e^{i\omega t} \right) \left( -i\omega P^{(\omega)} e^{-i\omega t} + i\omega P^{(-\omega)} e^{i\omega t} \right)} \\ &= i\omega E^{(\omega)} P^{(-\omega)} - i\omega E^{(-\omega)} P^{(\omega)} = 2 \operatorname{Im} [\omega E^{(-\omega)} P^{(\omega)}] \end{aligned}$$

で与えられる。電気感受率を用いて  $P^{(\omega)} = \varepsilon_0 \chi(\omega) E^{(\omega)}$  を代入すると、

$$W = 2\varepsilon_0 \operatorname{Im} \left[ \omega \chi(\omega) |E^{(\omega)}|^2 \right] = 2\varepsilon_0 \omega \chi''(\omega) |E^{(\omega)}|^2$$

<sup>1</sup>“X線レーザー”と呼ばれているものもあるが、それは通常のレーザーのように原子の励起状態からの誘導放出によるものではない。

となる。すなわち、エネルギー吸収率  $W$  は電気感受率の虚部  $\chi''(\omega)$  に比例している。 $n$  を原子数密度とすると、 $\chi(\omega)$  は (3.20) より

$$\chi(\omega) = n \frac{|p_{ab}|^2}{\varepsilon_0 \hbar} \frac{(\omega_0 - \omega) + i\gamma}{(\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2} (\rho_{aa} - \rho_{bb})$$

なので、

$$\begin{aligned} \rho_{aa} > \rho_{bb} &\Rightarrow \chi'' > 0 \quad \text{吸収} \\ \rho_{aa} < \rho_{bb} &\Rightarrow \chi'' < 0 \quad \text{増幅} \end{aligned}$$

となることが分かる。

## 6.2 共振器中の電磁波

レーザーは、励起された媒質を共振器の中に置くことによって発振させる。一番単純な共振器は単に向かい合った2つの鏡でできており、光がその間を往復し励起媒質中を通るたびに増幅されるのである。

共振器内の電磁波の伝播を考察する。媒質中の Maxwell 方程式は、

$$\operatorname{div} \mathbf{D} = \rho, \quad \operatorname{rot} \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad \operatorname{div} \mathbf{B} = 0, \quad \operatorname{rot} \mathbf{H} = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \mathbf{j};$$

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}, \quad \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H} + \mathbf{M}$$

で与えられる。共振器内の媒質では、

$$\rho = \mathbf{M} = 0, \quad \mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}$$

とする。最後のオームの式は、共振器内の損失を表すために入れた。

共振器が  $z$  軸方向に置かれているとし、 $z$  軸に進む電磁波だけが増幅するとする。また  $xy$  面内の電磁波のモードの空間変化を無視する。即ち、 $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(z, t)$  とし、方程式中の  $x$  微分や  $y$  微分はゼロとする。以上の条件の下で、電場  $E$  は

$$\frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial z^2} + \frac{\sigma}{\varepsilon_0} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = -\frac{1}{\varepsilon_0} \frac{\partial^2 \mathbf{P}}{\partial t^2} \quad (6.1)$$

を満たす。ただし、 $c \equiv 1/\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}$  は真空中の光速である。

共振器の長さを  $L$  とすると、真空中での定在波のモードの波数  $k_m$ 、振動数  $\omega_m$  は

$$k_m = \frac{m\pi}{L}, \quad \omega_m = ck_m = \frac{m\pi}{L} c$$

となるので、電場などを

$$E(z, t) = \left[ E^{(\omega)}(t)e^{-i\omega t} + E^{(-\omega)}(t)e^{+i\omega t} \right] \sin k_m z \quad (6.2)$$

$$P(z, t) = \left[ P^{(\omega)}(t)e^{-i\omega t} + P^{(-\omega)}(t)e^{+i\omega t} \right] \sin k_m z \quad (6.3)$$

のように展開し、 $E^{(\omega)}$  等は因子  $e^{-i\omega t}$  に比べてゆっくり変化するとする。

これらを (6.1) に代入し、ゆっくりした変化の近似の下で、

$$\dot{E}^{(\omega)} + i[(\omega_m - \omega) - i\kappa]E^{(\omega)} = i\frac{\omega}{2\varepsilon_0}P^{(\omega)} \quad (6.4)$$

をえる。ただし、

$$\kappa \equiv \frac{\sigma}{2\varepsilon_0}$$

で、共振器の損失を表す。また、共鳴条件の近似  $(\omega_m^2 - \omega^2) \approx 2\omega(\omega_m - \omega)$  を用いた。

ここで、電場をその振幅と位相で表し、

$$E^{(\omega)}(t) = |E^{(\omega)}(t)|e^{i\phi(t)}$$

とすると、時間微分は

$$\dot{E}^{(\omega)}(t) = \left( \frac{d|E^{(\omega)}(t)|}{dt} + i\dot{\phi}(t)|E^{(\omega)}(t)| \right) e^{i\phi(t)}$$

となるので、

$$P^{(\omega)} = \varepsilon_0\chi(\omega)E^{(\omega)} = \varepsilon_0(\chi'(\omega) + i\chi''(\omega))E^{(\omega)}$$

を用いて、(6.4) 式は、

$$\begin{aligned} \frac{d|E^{(\omega)}(t)|}{dt} + i\dot{\phi}(t)|E^{(\omega)}(t)| + i[(\omega_m - \omega) - i\kappa]|E^{(\omega)}(t)| \\ = i\frac{\omega}{2}(\chi'(\omega) + i\chi''(\omega))|E^{(\omega)}(t)| \end{aligned}$$

となる。この式の実部と虚部を取ると、それぞれ、

$$\frac{d|E^{(\omega)}(t)|}{dt} + \left[ \kappa + \frac{\omega}{2}\chi''(\omega) \right] |E^{(\omega)}(t)| = 0 \quad (6.5)$$

$$\dot{\phi}(t) + (\omega_m - \omega) - \frac{\omega}{2}\chi'(\omega) = 0 \quad (6.6)$$

をうる。

$\chi'' < 0$ 、すなわち、共振器が反転分布した励起媒質で満たされているとき、電場は増幅する可能性があることが分かる。

**問題 6.1** (6.1) より (6.4) を導け。

### 6.3 定常発振状態

前節の最後に求めた (6.5) および (6.6) 式の定常解を議論する。それによって、レーザーの発振条件や発振周波数を求める。

定常解はそれぞれ

$$\kappa + \frac{\omega}{2}\chi''(\omega) = 0 \quad (6.7)$$

$$\omega + \frac{\omega}{2}\chi'(\omega) = \omega_m \quad (6.8)$$

を満たす。

感受率  $\chi$  は、以前に原子の状態を記述する密度演算子の方程式 (3.16)~(3.18) の定常解 (3.21) と (3.22) から求めていた。ここでは、レーザー発振の条件を調べるために外部からエネルギーを注入している状況で問題を解きたい。エネルギー注入を現象論的に取り入れるために、(3.17) と (3.18) を修正して、

$$\dot{\rho}_{ba}^{(\omega)}(t) = -\gamma\rho_{ba}^{(\omega)}(t) - i(\omega_0 - \omega)\rho_{ba}^{(\omega)}(t) - i\frac{p_{ba}}{\hbar}E^{(\omega)}(\rho_{bb} - \rho_{aa}) \quad (6.9)$$

$$\dot{\rho}_{aa}(t) = -\Gamma(\rho_{aa} - \rho_{aa}^0) + i\frac{p_{ab}E^{(-\omega)}}{\hbar}\rho_{ba}^{(\omega)} - i\frac{p_{ba}E^{(\omega)}}{\hbar}\rho_{ab}^{(-\omega)} \quad (6.10)$$

$$\dot{\rho}_{bb}(t) = -\Gamma(\rho_{bb} - \rho_{bb}^0) - i\frac{p_{ab}E^{(-\omega)}}{\hbar}\rho_{ba}^{(\omega)} + i\frac{p_{ba}E^{(\omega)}}{\hbar}\rho_{ab}^{(-\omega)} \quad (6.11)$$

とする。ここで、 $\rho_{aa}^0$  および  $\rho_{bb}^0$  は、ポンピング（エネルギー注入）のために電磁場の影響がなければ到達する原子の状態の定常占有確率である。この式は  $a$  と  $b$  の2つの状態では  $\hat{\rho}$  の規格化条件を満たさないが、後で見るように、通常、レーザー発振には発振準位以外の準位も関わっているので、これは問題ではない。

さて、これらの方程式の定常解を求めると、共振器のモード (6.2) を代入して、

$$\rho_{ba}^{(\omega)}(z) = \frac{-(\omega_0 - \omega + i\gamma)\frac{p_{ba}E^{(\omega)}}{\hbar}\sin k_m z}{(\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2 + \frac{\gamma}{\Gamma}\left|\frac{2p_{ba}E^{(\omega)}}{\hbar}\right|^2\sin^2 k_m z}(\rho_{bb}^0 - \rho_{aa}^0)$$

となる。分母の電場の非線形項のために、 $\sin k_m z$  のモードが  $\sin^2 k_m z$  の変調を受けて、異なるモードと混じり合うことが分かる。

分極  $P$  を

$$\begin{aligned} P &= n(p_{ab}\rho_{ba} + p_{ba}\rho_{ab}) = n\left(p_{ab}\rho_{ba}^{(\omega)}e^{-i\omega t} + p_{ba}\rho_{ab}^{(-\omega)}e^{+i\omega t}\right) \\ &\equiv \left[P^{(\omega)}(t)e^{-i\omega t} + P^{(-\omega)}(t)e^{+i\omega t}\right]\sin k_m z \end{aligned} \quad (6.12)$$

のように分解して、上の  $\rho_{ba}^{(\omega)}$  をもちいて  $P^{(\omega)}$  を求める。

非線形効果が大きくない場合には、 $\sin k_m z$  のモードの振幅を近似的に求めると、

$$P^{(\omega)} = n\frac{-(\omega_0 - \omega + i\gamma)\frac{|p_{ba}|^2}{\hbar}}{(\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2 + \frac{3}{4}\frac{\gamma}{\Gamma}\left|\frac{2p_{ba}E^{(\omega)}}{\hbar}\right|^2}(\rho_{bb}^0 - \rho_{aa}^0)E^{(\omega)} \quad (6.13)$$

となり、電気感受率は

$$\chi(\omega) = n\frac{-(\omega_0 - \omega + i\gamma)}{(\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2 + \frac{3}{4}\frac{\gamma}{\Gamma}\left|\frac{2p_{ba}E^{(\omega)}}{\hbar}\right|^2}\frac{|p_{ba}|^2}{\varepsilon_0\hbar}(\rho_{bb}^0 - \rho_{aa}^0) \quad (6.14)$$

となる。



[(6.13) の導出]:  $P$  の  $e^{-i\omega t} \sin k_m z$  の成分を求めるために、(6.12) の両辺に  $\sin k_m z$  をかけて 0 から  $L$  まで積分する:

$$np_{ab} \int_0^L dz \rho_{ba}^{(\omega)}(z) \sin k_m z = P^{(\omega)} \int_0^L dz \sin^2 k_m z.$$

右辺の積分は  $L/2$  を与える。左辺の積分は非線形性の小さい範囲で、以下のように近似できる:

$$\begin{aligned} \int_0^L dz \rho_{ab}^{(\omega)}(z) \sin k_m z &\equiv \int_0^L \frac{c \sin^2 k_m z}{a + b \sin^2 k_m z} dz \\ &\approx \frac{c}{a} \int_0^L dz \sin^2 k_m z \left( 1 - \frac{b}{a} \sin^2 k_m z \right) \\ &= \frac{c}{a} \left( \frac{L}{2} - \frac{b}{a} \frac{3}{8} L \right) = \frac{c}{a} \left( 1 - \frac{b}{a} \frac{3}{4} \right) \frac{L}{2} \\ &\approx \frac{c}{a} \frac{1}{1 + \frac{b}{a} \frac{3}{4}} \frac{L}{2} = \frac{c}{a + \frac{3}{4}b} \frac{L}{2} \end{aligned}$$

この  $a, b, c$  に適当な表式を代入すると (6.13) を得る。 ■

### 6.3.1 発振条件

さて、(6.7) 式に、いま求めた  $\chi$  の表式 (6.14) の虚部を入れる:

$$\kappa = \frac{\omega}{2} n \frac{\gamma}{(\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2 + \frac{3}{4} \frac{\gamma}{\Gamma} \left| \frac{2p_{ba} E^{(\omega)}}{\hbar} \right|^2} \frac{|p_{ba}|^2}{\varepsilon_0 \hbar} (\rho_{bb}^0 - \rho_{aa}^0). \quad (6.15)$$

この式は、左辺の共振器の損失と、右辺の媒質の増幅が釣り合うという式で、 $\rho_{bb}^0 - \rho_{aa}^0$  が十分大きい時、つまり、ポンピングによる反転分布が十分大きい時、電場が増幅し、この式が成り立つ振幅  $|E(\omega)|^2$  で定常に達することを表している。

では、どれくらいのポンピングをすればレーザー発振が起こるのであろうか? レーザー発振の強さは (6.15) 式の電場の強さ  $|E(\omega)|^2$  で与えられるが、それは正でなければならない。ポンピング ( $\rho_{bb}^0 - \rho_{aa}^0$ ) を小さくして行くと電場も小さくなり、あるところで電場はゼロになる。それ以下に ( $\rho_{bb}^0 - \rho_{aa}^0$ ) を小さくすると、 $|E(\omega)|^2$  は負になってしまうが、それは物理的に意味がなく、レーザー発振が起こらないということを意味している。つまり、 $|E(\omega)|^2$  がゼロになるポンピングの値がレーザー発振の閾値である。ポンピングの強さを、

$$\Delta N^0 \equiv n(\rho_{bb}^0 - \rho_{aa}^0)$$

であらわすと、レーザー発振の条件は、

$$\Delta N^0 \geq \Delta N_{\text{th}} \equiv \frac{(\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2}{\gamma} \frac{2}{\omega} \frac{\varepsilon_0 \hbar}{|p_{ba}|^2} \kappa \quad (6.16)$$

となることが(6.15)式より求められる。また、発振条件(6.16)を満たすとき、発振電場の強さは

$$|E^{(\omega)}|^2 = \frac{\Gamma \hbar \omega}{6\kappa \varepsilon_0} (\Delta N^0 - \Delta N_{\text{th}}) \quad (6.17)$$

となる。ここで、 $\Gamma$ は反転分布への緩和定数であった。

**問題 6.2** レーザー発振の条件(6.16)および発振の強さ(6.17)を、(6.15)式より導け。

### 6.3.2 発振周波数

レーザーが発振している時、その光の周波数はどのようにして決まっているのかを議論する。励起された媒質の原子の固有振動数は $\omega_0$ で、共振器がなければ原子は $\omega_0$ の光を放出する。一方、媒質の詰まっていない共振器の固有振動数は $\omega_m$ で、共振器は媒質がなければその周波数の光に共鳴する。 $\omega_0$ と $\omega_m$ が一致しない場合には、どのようにして発振周波数 $\omega$ が決まるのであろうか？

それは、定常発振状態の2番目の式(6.8)から得られる

$$\omega = \frac{\omega_m}{1 + \frac{1}{2}\chi'(\omega)}$$

で決まる。しかしこの式は、右辺にも $\omega$ が入っていて単純でない。しかし、(6.14)より、

$$\frac{\chi'}{\chi''} = \frac{\omega_0 - \omega}{\gamma}$$

となるので、(6.7)式と(6.8)式から $\chi$ を消去して、発振周波数の表式

$$\omega = \frac{\gamma\omega_m + \kappa\omega_0}{\gamma + \kappa} \quad (6.18)$$

を得る。

この式は非常に簡単な形をしている。即ち、

発振周波数 $\omega$ は、原子の振動数 $\omega_0$ と共振器の振動数 $\omega_m$ を、原子の減衰定数 $\gamma$ と共振器の減衰定数 $\kappa$ で内分した周波数で与えられる

ということである。つまり、減衰定数の小さい方に発振周波数が引き込まれる。通常は、 $\kappa \ll \gamma$ なので、 $\omega \approx \omega_m$ となる。

## 6.4 レーザー光の特徴

このように、誘導放出で増幅されたレーザー光は、(1)指向性が良く、(2)コヒーレンスが良いという、2つの特徴を持っている。

指向性が良いというのは、光の放射する向きが通常のランプのように放射状に広がっておらず一方向に向いているということで、それは、レーザー光は向かい合った鏡の間で往復する間に増幅されることによる。指向性が良いために、レンズによって集光し易く、エネルギー密度を高くすることができる。

コヒーレンスが良くというのとは、単純な正弦波のように電磁波の位相が乱されず、時間空間的に離れた2点でも、波としての干渉性が保たれているということである。コヒーレンスが良く光が得られる理由は、レーザーは、光自身が誘起した巨視的な分極によって増幅された光であるためである。位相のそろったレーザー光はさまざまな干渉実験に用いることができる。

### 6.4.1 モードロック

コヒーレンスが良くということと関連して、モードロック（モード同期）という現象を起こすことができる。

モードロックとは、共振器の多くのモードを同時に発振する多モード発振のレーザーにおいて、モード間の位相を一定に保って発振させることをいう。これによって、非常に短いパルス列を発生させることができる。最近では、一つのパルスの長さが fs(フェムト秒、 $10^{-15}$ s) 程度のもので実現している。パルスを短くすることによって、エネルギーを集中させることができるので、非常に強い強度の光を実現できたり、非常に短い時間分解能の測定ができるので、実験的には有用である。

モードロックによって短いパルス列が実現する理由は、以下のようにフーリエ級数の性質から簡単に理解できる。

共振器のモードが

$$k_m = \frac{2\pi}{L}m, \quad \omega_m = ck_m; \quad m: \text{整数}$$

と表されているとする。振動数  $\omega_0$  を中心に、 $N$  個（奇数）のモードが同時に発振しているとして、

$$\omega_\nu = \omega_0 + \Delta\omega\nu, \quad k_\nu = \frac{\omega_\nu}{c}; \quad \Delta\omega \equiv \frac{2\pi}{L}c, \quad \nu \in \left[ -\frac{N-1}{2}, \frac{N-1}{2} \right]$$

とすると、レーザー共振器中の電場は、

$$E(z, t) = \sum_{\nu=-(N-1)/2}^{(N-1)/2} E_\nu e^{-i(\omega_\nu t + \phi_\nu) + ik_\nu z}$$

と書ける。もし、モードロックされていて、全てのモードの位相が  $\phi_\nu = 0$  となっているとする。さらに、振幅も一定  $E_\nu = E_0$  とすると、 $z = 0$  での電場の時間変化は、

$$E(0, t) = \sum_{\nu=-(N-1)/2}^{(N-1)/2} E_0 e^{-i(\omega_0 + \Delta\omega\nu)t} = E_0 e^{-i\omega_0 t} \frac{\sin(\Delta\omega Nt/2)}{\sin(\Delta\omega t/2)}$$

となり、電場の強度は

$$|E(0, t)|^2 = E_0^2 \frac{\sin^2(\Delta\omega Nt/2)}{\sin^2(\Delta\omega t/2)} \quad (6.19)$$

と表される。これは、 $t=0$ の周りに巾  $\Delta t$  のピークを持つ周期  $T$  の周期関数で、 $\Delta t$  と  $T$  は

$$\Delta t = \frac{\pi}{N\Delta\omega}, \quad T = \frac{L}{c}$$

で与えられる。 $N\Delta\omega$  は発振スペクトルの巾なので、ピークの巾はスペクトルの巾の逆数となる。また、パルス列の  $T$  は共振器の長さをパルスが伝播する時間になっている。

共振器の長さを  $L \sim 10\text{cm}$  とすると、発振モードの数が  $N \approx 10^4 \sim 10^6$  で、パルス巾がピコ秒からフェムト秒の程度になることが分かる。

**問題 6.3** (6.19) から、パルス巾  $\Delta t$  およびパルス列の周期  $T$  を求めよ。

## 6.5 各種のレーザー

レーザー発振を起こす為には、外部から媒質にエネルギーを注入（ポンピング）して、誘導放出をする 2 つのエネルギー準位に反転分布（負の温度状態）を起こさなければならない。ポンピングの方式には、放電、フラッシュランプ、他のレーザー光、電流などが用いられる。誘導放出に用いる 2 準位だけでは反転分布を実現するのが難しく、通常、媒質の励起の為のエネルギー吸収には別の準位を用いるので、レーザー発振には 3 つ以上の準位が関わっている。

初めて実現したレーザーで有名なルビーレーザーは 3 準位レーザーと呼ばれる。ルビーは、サファイア ( $\text{Al}_2\text{O}_3$  の結晶) 中に不純物として  $\text{Cr}^{3+}$  イオンを含むものだが、レーザーを発振させる為には、共振器中に置いた棒状のルビーにキセノン放電ランプによって強力な白色光をフラッシュし、 $\text{Cr}^{3+}$  イオンを基底状態から吸収帯に励起する。そこから緩和した別の励起状態と基底状態の間で反転分布を生じさせ、真紅色の光 (波長 694.3nm) のレーザー発振を起こす。基底状態を発振の下の準位に用いているので、定常的に反転分布を励起状態との間に起こすことができない為、ミリ秒程度のパルス発振しか実現できない。

これに対して、ポンピング用の準位とは別の 2 つの励起準位をレーザー発振に用いるものを 4 準位レーザーとよぶ。代表的なものに Nd YAG レーザーがある。イットリウムアルミガーネット ( $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ ) 結晶中にドーブされた  $\text{Nd}^{3+}$  イオンを連続放電ランプで吸収帯へ励起し、そこから緩和した準位と、更にその下の励起準位との間でレーザー発振を起こす。下の準位から基底状態への緩和が速やかに起きるので、レーザー発振に用いる 2 状態間の反転分布が比較的容易に実現し、連続 (CW) 発振が可能である。

ルビーレーザーや Nd YAG レーザーは、励起媒質として固体を用いるので、固体レーザーと呼ばれている。

実験室などで良く見られる赤い色の He-Ne レーザーは、放電により He 原子を励起した後、分子間衝突によって励起エネルギーを Ne 原子に移行させて、Ne の 2 準位間でレーザー発振を起こしている。これは、レーザー媒質が気体の**気体レーザー**である。

強い吸収帯を持つ色素を溶媒に溶かし、別のレーザーで励起してレーザー発振させるものは、**色素レーザー**と呼ばれている。色素レーザーは多くの励起準位の間での広い発振周波数を持つので、共振器の共鳴周波数を調整することによりレーザーの発振周波数を自由に変えられる**可変波長レーザー**である。また、色素を変えることにより可視光の領域を全てカバーできる。

伝導帯に電子が分布している n 型半導体と、価電子帯に正孔が分布している p 型半導体を接合して、電流を p から n へ流す (電子を n から p へ流す) と、接合部で電子と正孔が互いに相手側に侵入して、電子が正孔に遷移する。その際、光を放出して誘導遷移を起こすと、レーザーを発振できる。このような原理のレーザーを**半導体レーザー**という。

# 第7章 フォトンとコヒーレント状態

これまでの議論は、原子は量子論的に取り扱ってきたが、電磁場は古典電磁気学に従うとした。いわゆる半古典論と呼ばれるものだ。この章では、電磁場を量子論的に取り扱って、コヒーレント状態がどのようなものか解説して、量子光学の講義を終りとする。

## 7.1 電磁場の量子化

場の量子論については、同時に開講されている「量子力学 III」で体系的に習っていると思うが、ここでは電磁場の量子化を、調和振動子の量子化の類推を用いて導入する。

真空中の古典電磁場は、Maxwell 方程式

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad \nabla \times \mathbf{H} = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \quad \nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad \nabla \cdot \mathbf{D} = 0;$$
$$\mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E}, \quad \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H}$$

に従う。この場合、スカラーポテンシャルはゼロとして、ベクトルポテンシャルだけで電場と磁場を

$$\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (7.1)$$

と表すことができる。ベクトルポテンシャルは

$$\nabla^2 \mathbf{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = 0, \quad \nabla \cdot \mathbf{A} = 0 \quad (7.2)$$

に従う。また、電磁場のエネルギー  $\mathcal{H}$  は

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \int (\varepsilon_0 \mathbf{E}^2 + \mu_0 \mathbf{H}^2) d\mathbf{r} \quad (7.3)$$

で与えられる。

### 7.1.1 モード分解

さて、ベクトルポテンシャルを

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0}} q(t) \mathbf{u}(\mathbf{r})$$

と変数分離すると<sup>1</sup>、(7.2) は、

$$q(t)\nabla^2\mathbf{u}(\mathbf{r}) - \frac{1}{c^2}\mathbf{u}(\mathbf{r})\frac{d^2q(t)}{dt^2} = 0, \quad q(t)\nabla\cdot\mathbf{u}(\mathbf{r}) = 0$$

となり、固有値方程式

$$\frac{d^2q_\ell(t)}{dt^2} = -\omega_\ell^2 q_\ell(t), \quad (7.4)$$

$$\nabla^2\mathbf{u}_\ell(\mathbf{r}) = -k_\ell^2\mathbf{u}_\ell(\mathbf{r}), \quad \nabla\cdot\mathbf{u}_\ell(\mathbf{r}) = 0; \quad k_\ell^2 := \frac{\omega_\ell^2}{c^2} \quad (7.5)$$

を得る。ただし、 $\ell$  はモードすなわち固有値・固有関数を指定する指標。

$q(t)$  の方程式 (7.4) は、調和振動子の方程式である。一方、 $\mathbf{u}(\mathbf{r})$  の方程式 (7.5) から、 $\mathbf{u}_\ell(\mathbf{r})$  が横波で、波数ベクトル  $\mathbf{k}$  に対して垂直方向の 2 つの成分を持つことが分かる：

$$\mathbf{u}_{(\mathbf{k},\sigma)}(\mathbf{r}) \parallel \hat{\mathbf{e}}_{(\mathbf{k},\sigma)}; \quad \hat{\mathbf{e}}_{(\mathbf{k},\sigma)} \perp \mathbf{k}, \quad \sigma = 1, 2; \quad \hat{\mathbf{e}}_{(\mathbf{k},1)} \perp \hat{\mathbf{e}}_{(\mathbf{k},2)}. \quad (7.6)$$

ただし、モードの指標  $\ell$  は波数ベクトル  $\mathbf{k}$  と、偏光ベクトル  $\hat{\mathbf{e}}_{(\mathbf{k},\sigma)}$  の指標  $\sigma$  で、 $\ell = (\mathbf{k}, \sigma)$  と与えられる。また、波数ベクトルは、周期境界条件の下、

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{L}\mathbf{n}; \quad \mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z); \quad n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots,$$

を満たす。モード関数  $\mathbf{u}_\ell(\mathbf{r})$  は、規格直交条件

$$\int \mathbf{u}_\ell(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{u}_{\ell'}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \delta_{\ell,\ell'}$$

を満たすように取ることができる。

これらを使うと、ベクトルポテンシャル、電場、磁場は、それぞれ

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0}} \sum_{\ell=(\mathbf{k},\sigma)} q_\ell(t)\mathbf{u}_\ell(\mathbf{r}) \quad (7.7)$$

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0}} \sum_{\ell=(\mathbf{k},\sigma)} \dot{q}_\ell(t)\mathbf{u}_\ell(\mathbf{r}) \quad (7.8)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0}} \sum_{\ell=(\mathbf{k},\sigma)} q_\ell(t) i\mathbf{k} \times \mathbf{u}_\ell(\mathbf{r}) \quad (7.9)$$

と表される。

また、電磁場のエネルギーは (7.3) より、 $q_\ell(t)$  を用いて

$$\mathcal{H} = \sum_{\ell=(\mathbf{k},\sigma)} \frac{1}{2} \left( \dot{q}_\ell^2 + \omega_\ell^2 q_\ell^2 \right) \quad (7.10)$$

と与えられる。

(7.4) および (7.10) から、真空中の電磁場は座標  $q_\ell(t)$  で表される調和振動子の集まりと見なせることが分かる。

<sup>1</sup>定数因子  $1/\sqrt{\varepsilon_0}$  は便宜的に入れた。

### 7.1.2 量子化

$q_\ell$  を座標変数とし、その正準運動量を  $p_\ell := \dot{q}_\ell$  とすると、この系のハミルトニアンは、

$$\mathcal{H} = \sum_{\ell} \mathcal{H}_{\ell}; \quad \mathcal{H}_{\ell} := \frac{1}{2} \left( p_{\ell}^2 + \omega_{\ell}^2 q_{\ell}^2 \right)$$

となり、系の時間発展は正準方程式で記述される。

この系に、通常の子準量子化の手続きをほどこす。すなわち、正準変数  $(q_{\ell}, p_{\ell})$  を演算子  $(\hat{q}_{\ell}, \hat{p}_{\ell})$  で置き換え、交換関係

$$[\hat{q}_{\ell}, \hat{p}_{\ell'}] = i\hbar\delta_{\ell,\ell'} \quad \text{すなわち、} \quad \hat{p}_{\ell} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_{\ell}}$$

を要請して、波動関数に対してハミルトニアン

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{\ell} \frac{1}{2} \left( \hat{p}_{\ell}^2 + \omega_{\ell}^2 \hat{q}_{\ell}^2 \right)$$

を用いたシュレディンガー方程式を書き下す。それらから、固有値・固有関数を求めて、エネルギー順位を計算する etc. という手続きを順に実行することができる。

さらに、生成・消滅演算子  $\hat{a}_{\ell}^{\dagger}$  および  $\hat{a}_{\ell}$  を

$$\begin{cases} \hat{a}_{\ell} := \sqrt{\frac{\omega_{\ell}}{2\hbar}} \hat{q}_{\ell} + i \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_{\ell}}} \hat{p}_{\ell} \\ \hat{a}_{\ell}^{\dagger} := \sqrt{\frac{\omega_{\ell}}{2\hbar}} \hat{q}_{\ell} - i \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_{\ell}}} \hat{p}_{\ell} \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} \hat{q}_{\ell} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\ell}}} (\hat{a}_{\ell}^{\dagger} + \hat{a}_{\ell}) \\ \hat{p}_{\ell} = i\sqrt{\frac{\hbar\omega_{\ell}}{2}} (\hat{a}_{\ell}^{\dagger} - \hat{a}_{\ell}) \end{cases} \quad (7.11)$$

を定義すると、それらは交換関係

$$[\hat{a}_{\ell}, \hat{a}_{\ell'}^{\dagger}] = \delta_{\ell,\ell'}, \quad [\hat{a}_{\ell}, \hat{a}_{\ell'}] = 0, \quad [\hat{a}_{\ell}^{\dagger}, \hat{a}_{\ell'}^{\dagger}] = 0 \quad (7.12)$$

を満たし、ハミルトニアンは

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{\ell} \hbar\omega_{\ell} \left( \hat{a}_{\ell}^{\dagger} \hat{a}_{\ell} + \frac{1}{2} \right) \quad (7.13)$$

と表される。

**問題 7.1** (7.12) および (7.13) を示せ。

### 7.1.3 数演算子と数状態

生成消滅演算子から定義される演算子

$$\hat{n} := \hat{a}^{\dagger} \hat{a}; \quad [\hat{a}, \hat{a}^{\dagger}] = 1$$

は、数演算子と呼ばれ、その固有値  $n$  と規格化された固有状態  $|n\rangle$  は、以下の性質を持つことが示される。



1.  $\hat{n}$  はエルミート
2.  $\hat{n}$  の固有値  $n$  は  $n \geq 0$
3.  $|n\rangle$  が  $\hat{n}$  の固有値  $n$  の固有ベクトルならば、 $\hat{a}|n\rangle$  は固有値  $n-1$  の固有ベクトル
4.  $\hat{n}$  の固有値  $n$  はゼロまたは正の整数
5.  $n$  が正の整数の時、 $\hat{a}^n|n\rangle$  は  $\hat{n}$  の固有値ゼロの固有ベクトル
6.  $|0\rangle$  を  $\hat{a}|0\rangle = 0$  となるベクトルと定義すると、 $\hat{a}^{\dagger n}|0\rangle$  は  $\hat{n}$  の固有ベクトルでその固有値は  $n$
7.  $\hat{a}^{\dagger}|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$ ,  $\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$

問題 7.2 上の各項目を順番に示せ。

### 7.1.4 量子化された電磁場

$\dot{q}_\ell = p_\ell$  に注意して (7.8) と (7.11) を用いると、量子化された電場の演算子の表式として、

$$\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}) = - \sum_{\ell} i \sqrt{\frac{\hbar\omega_{\ell}}{2\varepsilon_0}} (\hat{a}_{\ell}^{\dagger} - \hat{a}_{\ell}) \mathbf{u}_{\ell}(\mathbf{r})$$

を得る。

これまでの変形では固有関数  $\mathbf{u}(\mathbf{r})$  が実関数と仮定していた。しかし、 $\mathbf{u}_{\ell}(\mathbf{r})$  として実関数の定在波ではなく複素数値をとる進行波を取るほうが計算が便利な場合が多い。その場合には、電場の演算子の表式は

$$\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}) = - \sum_{\ell=(\mathbf{k},\sigma)} i \sqrt{\frac{\hbar\omega_{\ell}}{2\varepsilon_0}} \left( \hat{a}_{\ell}^{\dagger} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \hat{a}_{\ell} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{+i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right) \hat{\mathbf{e}}_{\ell} \quad (7.14)$$

と与えられる (7.4 節参照)。この表式は、シュレディンガー描像のもので、時間依存性は状態ベクトルにはいつている。

一方、場の理論ではハイゼンベルグ描像を用いた方が便利なが多い。その場合には、時間発展は  $\hat{a}$  や  $\hat{\mathbf{E}}$  などの演算子に含まれ、演算子はハイゼンベルグ方程式に従う。ハイゼンベルグ描像での生成演算子は  $\hat{a}_{\ell}(t)$  は、ハミルトニアンが (7.13) のとき、

$$i\hbar \frac{d\hat{a}_{\ell}^{\dagger}(t)}{dt} = [\hat{a}_{\ell}^{\dagger}(t), \mathcal{H}] = -\hbar\omega_{\ell} \hat{a}_{\ell}^{\dagger}(t) \quad \Rightarrow \quad \hat{a}_{\ell}^{\dagger}(t) = \hat{a}_{\ell}^{\dagger}(0) e^{i\omega_{\ell}t}$$

となる。ここで、 $\hat{a}_{\ell}^{\dagger}(0)$  は時刻ゼロでのハイゼンベルグ演算子で、シュレディンガー描像での演算子に一致するので、これを  $\hat{a}_{\ell}^{\dagger}$  と書くことにすると、

$$\hat{a}_{\ell}^{\dagger}(t) = \hat{a}_{\ell}^{\dagger} e^{i\omega_{\ell}t}, \quad \hat{a}_{\ell}(t) = \hat{a}_{\ell} e^{-i\omega_{\ell}t}$$

となる。すると、真空中での量子化された電場および磁場のハイゼンベルグ描像での演算子は、

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, t) &= -\sum_{\ell} i\sqrt{\frac{\hbar\omega_{\ell}}{2\varepsilon_0}} \left( \hat{a}_{\ell}^{\dagger} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i(\omega_{\ell}t - \mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} - \hat{a}_{\ell} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i(\omega_{\ell}t - \mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} \right) \hat{\mathbf{e}}_{\ell} \\ \hat{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, t) &= -\sum_{\ell} i\sqrt{\frac{\hbar\omega_{\ell}}{2\mu_0}} \left( \hat{a}_{\ell}^{\dagger} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i(\omega_{\ell}t - \mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} - \hat{a}_{\ell} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i(\omega_{\ell}t - \mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} \right) \frac{\mathbf{k}}{k} \times \hat{\mathbf{e}}_{\ell}\end{aligned}$$

となり、 $\mathcal{H}$  の固有値・固有状態は、モード  $\ell$  の量子数（フォトン数）を  $n_{\ell}$  として、

$$E = \sum_{\ell} \hbar\omega_{\ell} \left( n_{\ell} + \frac{1}{2} \right), \quad |\psi\rangle = |n_1, n_2, n_3, \dots\rangle \quad (7.15)$$

となる。

## 7.2 光子数状態

(7.15) で表されるハミルトニアン (7.13) の固有状態は、モード  $\ell$  の光子の数が  $n_{\ell}$  個と決まった数の状態なので、光子数状態と呼ばれる。この状態では電場はどのようなになっているか調べてみる。

簡単の為に以下では一つのモード  $\ell$  のみを考える。すると、電場の演算子のモード  $\ell$  成分は、

$$\hat{E}(\mathbf{r}, t) = i\mathcal{E}_{\ell} \hat{a}_{\ell} e^{-i(\omega_{\ell}t - \mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} - i\mathcal{E}_{\ell} \hat{a}_{\ell}^{\dagger} e^{i(\omega_{\ell}t - \mathbf{k}\cdot\mathbf{r})}; \quad \mathcal{E}_{\ell} := \sqrt{\frac{\hbar\omega_{\ell}}{2\varepsilon_0 V}} \quad (7.16)$$

と書ける。このモードに  $n$  個の光子がある状態  $|n\rangle$  での電場の期待値は

$$\langle \hat{E} \rangle := \langle n | \hat{E} | n \rangle = 0$$

となることが直ちに分かる。しかし、これは電場の値がゼロであるということの意味するわけではない。電場の揺らぎ、即ち、2乗平均を計算してみると、

$$\begin{aligned}\langle \hat{E}^2 \rangle &= \langle n | \left( i\mathcal{E}_{\ell} \hat{a}_{\ell} e^{-i(\omega_{\ell}t - \mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} - i\mathcal{E}_{\ell} \hat{a}_{\ell}^{\dagger} e^{i(\omega_{\ell}t - \mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} \right)^2 | n \rangle \\ &= \mathcal{E}_{\ell}^2 \langle n | \left( \hat{a}_{\ell} \hat{a}_{\ell}^{\dagger} + \hat{a}_{\ell}^{\dagger} \hat{a}_{\ell} \right) | n \rangle = \mathcal{E}_{\ell}^2 (2n + 1),\end{aligned}$$

電場の分散は

$$\sqrt{\langle \hat{E}^2 \rangle} = \mathcal{E}_{\ell} \sqrt{2n + 1}$$

となるので、電場はゼロを中心に揺らいでいて、振幅は光子の数  $n$  が  $n \gg 1$  ならその平方根に比例する。また、光子数がゼロでもゼロ点振動の為、電場の揺らぎはゼロではない。

## 7.3 コヒーレント状態

光子数状態は光子の数が定まった状態であるが、電場は、期待値はゼロで  $\cos(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$  のような位相のそろった波ではなく、いわば“ランダムに揺らいでいる”状態である。では、電場 (7.16) の期待値が

$$\langle \hat{E}(\mathbf{r}, t) \rangle = E^{(\omega)} e^{-i(\omega_\ell t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} + E^{(-\omega)} e^{i(\omega_\ell t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} \quad (7.17)$$

となるような量子状態はないのだろうか？

消滅演算子  $\hat{a}_\ell$  の固有状態

$$\hat{a}_\ell |\alpha\rangle = \alpha |\alpha\rangle \quad (7.18)$$

がそのような状態であることは、以下のようにしてすぐにわかる。(7.18) 式のエルミート共役をとると、

$$\langle \alpha | \hat{a}_\ell^\dagger = \langle \alpha | \alpha^*$$

となるので、この状態による電場演算子  $\hat{E}$  の期待値は

$$\begin{aligned} \langle \alpha | \hat{E}(\mathbf{r}, t) | \alpha \rangle &= \langle \alpha | \left( i \mathcal{E}_\ell \hat{a}_\ell e^{-i(\omega_\ell t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} - i \mathcal{E}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger e^{i(\omega_\ell t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} \right) | \alpha \rangle \\ &= i \mathcal{E}_\ell \alpha e^{-i(\omega_\ell t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} - i \mathcal{E}_\ell \alpha^* e^{i(\omega_\ell t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} \end{aligned}$$

なので、 $E^{(\omega)} = i \mathcal{E}_\ell \alpha$  とすると、これは (7.17) と一致する。すなわち  $|\alpha\rangle$  は位相の決まった可干渉な波を電場の期待値として与える。(7.18) で定義される状態  $|\alpha\rangle$  をコヒーレント状態という。

### 7.3.1 コヒーレント状態の性質

コヒーレント状態、即ち、消滅演算子  $\hat{a}$  の固有状態  $|\alpha\rangle$

$$\hat{a} |\alpha\rangle = \alpha |\alpha\rangle$$

の性質を調べる。まず、消滅演算子  $\hat{a}$  はエルミート演算子ではないので、その固有値  $\alpha$  は一般に複素数である。

数状態による展開

コヒーレント状態を数状態で展開して

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle$$

とする。この両辺に  $\hat{a}$  をかけ、 $|n\rangle$  の係数を比較することにより、

$$\alpha c_n = \sqrt{n+1} c_{n+1} \quad \Rightarrow \quad c_n = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} c_0$$

をえる。規格化条件を用いて  $c_0$  をきめると、結局、コヒーレント状態は

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \quad (7.19)$$

と展開できることが分かる。

この状態では光子数は決まっておらず、光子数を観測した時の確率分布  $P(n)$  は、

$$P(n) = |\langle n|\alpha\rangle|^2 = e^{-|\alpha|^2} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} := e^{-m} \frac{m^n}{n!}; \quad m := |\alpha|^2 \quad (7.20)$$

となる。これは平均  $m = |\alpha|^2$  のポアソン分布である。

**問題 7.3** (7.19) を用いて、コヒーレント状態は

$$|\alpha\rangle = \exp[\alpha \hat{a}^\dagger - \alpha^* \hat{a}] |0\rangle \quad (7.21)$$

と表されることを示せ。

### 光子数の揺らぎ

(7.20) がポアソン分布であることから、コヒーレント状態の光子数の統計的性質はポアソン分布に従う。すなわち、光子数の期待値は、

$$\langle \hat{n} \rangle = \langle \alpha | \hat{n} | \alpha \rangle = \langle \alpha | \hat{a}^\dagger \hat{a} | \alpha \rangle = |\alpha|^2,$$

2乗平均と分散は、それぞれ

$$\begin{aligned} \langle \hat{n}^2 \rangle &= \langle \alpha | \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a}^\dagger \hat{a} | \alpha \rangle = \langle \alpha | (\hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a} + \hat{a}^\dagger \hat{a}) | \alpha \rangle = |\alpha|^4 + |\alpha|^2, \\ \langle \Delta \hat{n}^2 \rangle &:= \langle (\hat{n} - \langle \hat{n} \rangle)^2 \rangle = \langle \hat{n}^2 \rangle - \langle \hat{n} \rangle^2 = |\alpha|^2 \end{aligned}$$

で与えられ、平均  $\langle \hat{n} \rangle$  と分散  $\langle \Delta \hat{n}^2 \rangle$  が等しい。その結果、相対揺らぎは

$$\frac{\sqrt{\langle \Delta \hat{n}^2 \rangle}}{\langle \hat{n} \rangle} = \frac{|\alpha|}{|\alpha|^2} = \frac{1}{|\alpha|}$$

となる。すなわち、 $|\alpha|$  が大きな状態では、位相も光子数も共にほぼ決まっているとみなせる。

### 最小波束

(7.11) より、コヒーレント状態での位置と運動量の不確定性を調べてみよう。

$$\hat{q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a}), \quad \hat{p} = i\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}} (\hat{a}^\dagger - \hat{a})$$

より、

$$\begin{aligned} \langle \hat{q} \rangle &= \langle \alpha | \hat{q} | \alpha \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}} (\alpha^* + \alpha), \\ \langle \hat{q}^2 \rangle &= \frac{\hbar}{2\omega} \langle \alpha | (\hat{a}^\dagger + \hat{a})^2 | \alpha \rangle = \frac{\hbar}{2\omega} (\alpha^{*2} + 2|\alpha|^2 + 1 + \alpha^2) \end{aligned}$$

を得るので、

$$\Delta q := \sqrt{\langle (\Delta \hat{q})^2 \rangle} = \sqrt{\langle \hat{q}^2 \rangle - \langle \hat{q} \rangle^2} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}}$$

となる。運動量についての同様の計算から、

$$\Delta p := \sqrt{\langle (\Delta \hat{p})^2 \rangle} = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}}$$

を得るので、

$$\Delta q \Delta p = \frac{\hbar}{2}$$

となる。すなわち、コヒーレント状態は位置と運動量の不確定性関係の最小値を与える。そのため、最小波束あるいは最小不確定状態とよばれる。

### 電場の揺らぎ

電場の揺らぎを見てみよう。電場の期待値および2乗平均は、それぞれ

$$\begin{aligned} \langle \hat{E} \rangle &= \langle \alpha | \hat{E} | \alpha \rangle = i \mathcal{E}_\ell \alpha e^{-i(\omega_\ell t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} - i \mathcal{E}_\ell \alpha^* e^{i(\omega_\ell t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} \\ \langle \hat{E}^2 \rangle &= \langle \alpha | \hat{E}^2 | \alpha \rangle = \langle \alpha | \left( i \mathcal{E}_\ell \hat{a}_\ell e^{-i(\omega_\ell t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} - i \mathcal{E}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger e^{i(\omega_\ell t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} \right)^2 | \alpha \rangle \\ &= \mathcal{E}_\ell^2 \left[ -\alpha^2 e^{-2i(\omega_\ell t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} + 2|\alpha|^2 + 1 - \alpha^{*2} e^{+2i(\omega_\ell t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} \right] \end{aligned}$$

で与えられ、これらから電場の分散は、

$$\langle (\Delta \hat{E})^2 \rangle = \langle \hat{E}^2 \rangle - \langle \hat{E} \rangle^2 = \mathcal{E}_\ell^2$$

となり、 $\alpha$ によらない。すなわち、

$$\sqrt{\langle (\Delta \hat{E})^2 \rangle} = \mathcal{E}_\ell, \quad \sqrt{\langle \hat{E}^2 \rangle} \sim \mathcal{E}_\ell |\alpha|$$

である。

## 7.4 付録：電磁場の量子化：式(7.14)の導出

式(7.5)のモード関数  $\mathbf{u}_\ell(\mathbf{r})$  を進行波に取った場合に(7.14)が得られることを示す。

モード分解 モード関数は、

$$\mathbf{u}_{(\mathbf{k}, \sigma)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}_{(\mathbf{k}, \sigma)}; \quad \sigma = 1, 2 \quad (7.22)$$

と与えられる。ただし、系に周期境界条件を課し、波数ベクトル  $\mathbf{k}$  は格子点上の値

$$\mathbf{k} := \frac{2\pi}{L} \mathbf{n}; \quad \mathbf{n} := (n_x, n_y, n_z); \quad n_x, n_y, n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

をとる。また、偏光ベクトル  $\hat{e}_{(\mathbf{k},\sigma)}$  は、

$$\hat{e}_{(\mathbf{k},1)} \perp \hat{e}_{(\mathbf{k},2)}, \quad \hat{e}_{(\mathbf{k},\sigma)} \perp \mathbf{k}; \quad \sigma = 1, 2$$

を満たす。また、波数ベクトル  $\mathbf{k}$  と  $-\mathbf{k}$  の偏光ベクトルは、

$$\hat{e}_{(-\mathbf{k},1)} = \hat{e}_{(\mathbf{k},2)}, \quad \hat{e}_{(-\mathbf{k},2)} = \hat{e}_{(\mathbf{k},1)}$$

と関係づけられているとして、モード  $q_{(\mathbf{k},\sigma)}$ ,  $\mathbf{u}_{(\mathbf{k},\sigma)}(\mathbf{r})$  に対して

$$\bar{q}_{(\mathbf{k},\sigma)} := q_{(-\mathbf{k},\bar{\sigma})}^*, \quad \bar{\mathbf{u}}_{(\mathbf{k},\sigma)}(\mathbf{r}) := \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \hat{e}_{(-\mathbf{k},\bar{\sigma})}; \quad \bar{\sigma} := 3 - \sigma \quad (7.23)$$

を定義する。ただし、 $V := L^3$  は系の体積で、 $c^*$  は複素数  $c$  の複素共役を表す。すると、モード関数  $\mathbf{u}_\ell(\mathbf{r})$  は、規格直交条件

$$\int \bar{\mathbf{u}}_\ell(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{u}_{\ell'}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \delta_{\ell,\ell'}$$

を満たしている。

(7.7) の  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  が実数であるということから、変数  $q_{(\mathbf{k},\sigma)}$  は複素数で、

$$\bar{q}_{(\mathbf{k},\sigma)} = q_{(\mathbf{k},\sigma)} \quad (7.24)$$

を満たさなければならない。そこで、上半格子点  $\mathbb{H}$  上の  $\mathbf{k}$  に対して、実変数

$$q'_{(\mathbf{k},\sigma)} := \frac{1}{\sqrt{2}}(q_{(\mathbf{k},\sigma)} + \bar{q}_{(\mathbf{k},\sigma)}), \quad q''_{(\mathbf{k},\sigma)} := \frac{1}{i\sqrt{2}}(q_{(\mathbf{k},\sigma)} - \bar{q}_{(\mathbf{k},\sigma)}) \quad (7.25)$$

を定義する<sup>2</sup>。これらの変数も (7.4) と同じ方程式

$$\frac{d^2 q'_{(\mathbf{k},\sigma)}(t)}{dt^2} = -\omega_k^2 q'_{(\mathbf{k},\sigma)}(t), \quad \frac{d^2 q''_{(\mathbf{k},\sigma)}(t)}{dt^2} = -\omega_k^2 q''_{(\mathbf{k},\sigma)}(t) \quad (7.26)$$

を満たす。エネルギーは (7.3) より

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \sum_{\ell=(\mathbf{k},\sigma)} \frac{1}{2} \left( \dot{\bar{q}}_\ell \dot{q}_\ell + \omega_\ell^2 \bar{q}_\ell q_\ell \right) \\ &= \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{H}} \sum_{\sigma} \left( \frac{1}{2} (\dot{q}'_{(\mathbf{k},\sigma)}{}^2 + \omega_k^2 q'_{(\mathbf{k},\sigma)}{}^2) + \frac{1}{2} (\dot{q}''_{(\mathbf{k},\sigma)}{}^2 + \omega_k^2 q''_{(\mathbf{k},\sigma)}{}^2) \right) \end{aligned} \quad (7.27)$$

となる。ただし、 $\sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{H}}$  は  $\mathbf{k}$  の上半格子点での和を表す。

(7.26) および (7.27) から、真空中の電磁場は座標  $q'_{(\mathbf{k},\sigma)}(t)$  および  $q''_{(\mathbf{k},\sigma)}(t)$  ( $\mathbf{k} \in \mathbb{H}$ ) で表される調和振動子の集まりと見なせることが分かる。

**問題 7.4** 関係式 (7.24) を導け。

<sup>2</sup>上半格子点の集合  $\mathbb{H}$  は、その元に 0 を含まず、 $\mathbf{k} \neq 0$  の任意の格子点  $\mathbf{k}$  に対して、 $\mathbf{k} \in \mathbb{H}$  ならば  $-\mathbf{k} \notin \mathbb{H}$ 、 $\mathbf{k} \notin \mathbb{H}$  ならば  $-\mathbf{k} \in \mathbb{H}$  を満たすとする。

量子化 以前と同様に、座標変数  $q'_{(\mathbf{k},\sigma)}(t)$  および  $q''_{(\mathbf{k},\sigma)}(t)$  に対する正準運動量を  $p'_{(\mathbf{k},\sigma)}$  および  $p''_{(\mathbf{k},\sigma)}$  ( $\mathbf{k} \in \mathbb{H}$ ) とし、それらを演算子  $\hat{q}'_{(\mathbf{k},\sigma)}(t)$ ,  $\hat{q}''_{(\mathbf{k},\sigma)}(t)$ ,  $\hat{p}'_{(\mathbf{k},\sigma)}$ ,  $\hat{p}''_{(\mathbf{k},\sigma)}$  として量子化する。更に、生成消滅演算子

$$\begin{cases} \hat{a}'_{(\mathbf{k},\sigma)} & := \sqrt{\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{2\hbar}} \hat{q}'_{(\mathbf{k},\sigma)} + i \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_{\mathbf{k}}}} \hat{p}'_{(\mathbf{k},\sigma)} \\ \hat{a}'_{(\mathbf{k},\sigma)}{}^\dagger & = \sqrt{\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{2\hbar}} \hat{q}'_{(\mathbf{k},\sigma)} - i \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_{\mathbf{k}}}} \hat{p}'_{(\mathbf{k},\sigma)} \end{cases} \quad (7.28)$$

$$\begin{cases} \hat{a}''_{(\mathbf{k},\sigma)} & := \sqrt{\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{2\hbar}} \hat{q}''_{(\mathbf{k},\sigma)} + i \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_{\mathbf{k}}}} \hat{p}''_{(\mathbf{k},\sigma)} \\ \hat{a}''_{(\mathbf{k},\sigma)}{}^\dagger & = \sqrt{\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{2\hbar}} \hat{q}''_{(\mathbf{k},\sigma)} - i \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_{\mathbf{k}}}} \hat{p}''_{(\mathbf{k},\sigma)} \end{cases} \quad (7.29)$$

を定義する。これらを用いて、新たな生成消滅演算子

$$\begin{cases} \hat{a}_{(\mathbf{k},\sigma)} & := \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a}'_{(\mathbf{k},\sigma)} + i\hat{a}''_{(\mathbf{k},\sigma)}) \\ \hat{a}_{(\mathbf{k},\sigma)}{}^\dagger & = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a}'_{(\mathbf{k},\sigma)}{}^\dagger - i\hat{a}''_{(\mathbf{k},\sigma)}{}^\dagger) \end{cases} \quad (7.30)$$

$$\begin{cases} \hat{a}_{(-\mathbf{k},\bar{\sigma})} & := \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a}'_{(\mathbf{k},\sigma)} - i\hat{a}''_{(\mathbf{k},\sigma)}) \\ \hat{a}_{(-\mathbf{k},\bar{\sigma})}{}^\dagger & = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a}'_{(\mathbf{k},\sigma)}{}^\dagger + i\hat{a}''_{(\mathbf{k},\sigma)}{}^\dagger) \end{cases} \quad (7.31)$$

を定義し、更に非エルミート演算子  $\hat{q}_{(\mathbf{k},\sigma)}$  および  $\hat{q}_{(-\mathbf{k},\bar{\sigma})}$  ( $\mathbf{k} \in \mathbb{H}$ ) を

$$\begin{aligned} \hat{q}_{(\mathbf{k},\sigma)} & := \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{q}'_{(\mathbf{k},\sigma)} + i\hat{q}''_{(\mathbf{k},\sigma)}) \\ & = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\mathbf{k}}}} \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a}'_{(\mathbf{k},\sigma)} + \hat{a}'_{(\mathbf{k},\sigma)}{}^\dagger + i\hat{a}''_{(\mathbf{k},\sigma)} + i\hat{a}''_{(\mathbf{k},\sigma)}{}^\dagger) \\ & = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\mathbf{k}}}} (\hat{a}_{(\mathbf{k},\sigma)} + \hat{a}_{(-\mathbf{k},\bar{\sigma})}{}^\dagger) \end{aligned} \quad (7.32)$$

$$\begin{aligned} \hat{q}_{(-\mathbf{k},\bar{\sigma})} & := \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{q}'_{(\mathbf{k},\sigma)} - i\hat{q}''_{(\mathbf{k},\sigma)}) \\ & = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\mathbf{k}}}} \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a}'_{(\mathbf{k},\sigma)} + \hat{a}'_{(\mathbf{k},\sigma)}{}^\dagger - i\hat{a}''_{(\mathbf{k},\sigma)} - i\hat{a}''_{(\mathbf{k},\sigma)}{}^\dagger) \\ & = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\mathbf{k}}}} (\hat{a}_{(-\mathbf{k},\bar{\sigma})} + \hat{a}_{(\mathbf{k},\sigma)}{}^\dagger) \end{aligned} \quad (7.33)$$

と定義する。これらを用いると、ベクトルポテンシャル演算子は

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0}} \sum_{\mathbf{k} \in \text{H}} \sum_{\sigma} \left( \hat{q}(\mathbf{k}, \sigma) \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}(\mathbf{k}, \sigma) + \hat{q}(-\mathbf{k}, \bar{\sigma}) \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}(-\mathbf{k}, \bar{\sigma}) \right) \\
&= \sum_{\mathbf{k} \in \text{H}} \sum_{\sigma} \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 \omega_{\mathbf{k}}}} \left( \left( \hat{a}(\mathbf{k}, \sigma) + \hat{a}_{(-\mathbf{k}, \bar{\sigma})}^{\dagger} \right) \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}(\mathbf{k}, \sigma) \right. \\
&\quad \left. + \left( \hat{a}(-\mathbf{k}, \bar{\sigma}) + \hat{a}_{(\mathbf{k}, \sigma)}^{\dagger} \right) \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}(-\mathbf{k}, \bar{\sigma}) \right) \\
&= \sum_{\mathbf{k} \in \text{H}} \sum_{\sigma} \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 \omega_{\mathbf{k}}}} \left( \hat{a}(\mathbf{k}, \sigma) \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}(\mathbf{k}, \sigma) + \hat{a}_{(\mathbf{k}, \sigma)}^{\dagger} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}(\mathbf{k}, \sigma) \right. \\
&\quad \left. + \hat{a}_{(-\mathbf{k}, \bar{\sigma})}^{\dagger} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}(-\mathbf{k}, \bar{\sigma}) + \hat{a}(-\mathbf{k}, \bar{\sigma}) \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}(-\mathbf{k}, \bar{\sigma}) \right) \\
&= \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \sum_{\sigma} \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 \omega_{\mathbf{k}}}} \left( \hat{a}_{(\mathbf{k}, \sigma)}^{\dagger} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + \hat{a}(\mathbf{k}, \sigma) \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \right) \hat{\mathbf{e}}(\mathbf{k}, \sigma)
\end{aligned}$$

となる。

同様に、電場演算子 (7.8) は

$$\begin{aligned}
\hat{p}(\mathbf{k}, \sigma) &:= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{p}'(\mathbf{k}, \sigma) + i\hat{p}''(\mathbf{k}, \sigma)) \\
&= i\sqrt{\frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{2}} \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \hat{a}_{(\mathbf{k}, \sigma)}^{\dagger} - \hat{a}'(\mathbf{k}, \sigma) + i\hat{a}''(\mathbf{k}, \sigma) - i\hat{a}''(\mathbf{k}, \sigma) \right) \\
&= i\sqrt{\frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{2}} \left( \hat{a}_{(-\mathbf{k}, \bar{\sigma})}^{\dagger} - \hat{a}(\mathbf{k}, \sigma) \right) \tag{7.34}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\hat{p}(-\mathbf{k}, \bar{\sigma}) &:= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{p}'(\mathbf{k}, \sigma) - i\hat{p}''(\mathbf{k}, \sigma)) \\
&= i\sqrt{\frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{2}} \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \hat{a}_{(\mathbf{k}, \sigma)}^{\dagger} - \hat{a}'(\mathbf{k}, \sigma) - i\hat{a}''(\mathbf{k}, \sigma) + i\hat{a}''(\mathbf{k}, \sigma) \right) \\
&= i\sqrt{\frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{2}} \left( \hat{a}_{(\mathbf{k}, \sigma)}^{\dagger} - \hat{a}(-\mathbf{k}, \bar{\sigma}) \right) \tag{7.35}
\end{aligned}$$

を用いて

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}) &= -\frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0}} \sum_{\mathbf{k} \in \text{H}} \sum_{\sigma} \left( \hat{p}(\mathbf{k}, \sigma) \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}(\mathbf{k}, \sigma) + \hat{p}(-\mathbf{k}, \bar{\sigma}) \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}(-\mathbf{k}, \bar{\sigma}) \right) \\
&= -\sum_{\mathbf{k} \in \text{H}} \sum_{\sigma} i\sqrt{\frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{2\varepsilon_0}} \left( \left( \hat{a}_{(-\mathbf{k}, \bar{\sigma})}^{\dagger} - \hat{a}(\mathbf{k}, \sigma) \right) \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}(\mathbf{k}, \sigma) \right. \\
&\quad \left. + \left( \hat{a}_{(\mathbf{k}, \sigma)}^{\dagger} - \hat{a}(-\mathbf{k}, \bar{\sigma}) \right) \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}(-\mathbf{k}, \bar{\sigma}) \right) \\
&= -\sum_{\mathbf{k} \in \text{H}} \sum_{\sigma} i\sqrt{\frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{2\varepsilon_0}} \left( \hat{a}_{(\mathbf{k}, \sigma)}^{\dagger} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}(\mathbf{k}, \sigma) - \hat{a}(\mathbf{k}, \sigma) \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}(\mathbf{k}, \sigma) \right. \\
&\quad \left. + \hat{a}_{(-\mathbf{k}, \bar{\sigma})}^{\dagger} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}(-\mathbf{k}, \bar{\sigma}) - \hat{a}(-\mathbf{k}, \bar{\sigma}) \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}(-\mathbf{k}, \bar{\sigma}) \right) \\
&= -\sum_{\mathbf{k} \neq 0} \sum_{\sigma} i\sqrt{\frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{2\varepsilon_0}} \left( \hat{a}_{(\mathbf{k}, \sigma)}^{\dagger} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} - \hat{a}(\mathbf{k}, \sigma) \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \right) \hat{\mathbf{e}}(\mathbf{k}, \sigma)
\end{aligned}$$



を得る。これは式 (7.14)。

問題 7.5 同様に  $\hat{B}(\boldsymbol{r})$  に対する表式を導け。