

第9章 光の量子化

これまでは光を古典的電磁波として扱い、原子を量子力学システムとして与え、電磁波と原子に束縛された電子との相互作用ポテンシャルを演算子で表現した。この表現の中で電磁波の電場はあくまでも古典的パラメータとして振舞う。ここでは、この電磁波も量子力学的システム；電場と磁場をエルミート演算子で与える、として表現する。その結果、電磁波のエネルギー密度や運動量密度なども演算子として表せれる。更に、原子が光と相互作用している状況を、電磁場のエネルギー密度、原子のエネルギー、および原子と光との相互作用によるエネルギーを加えた全エネルギーをハミルトニアン演算子として与え、これを用いたシュレーディンガー方程式を立てて、固有値と固有ベクトルを求める。ここで、固有ベクトルとは、光と原子の状態を同時に記述する状態ベクトルであり、固有値とは光と原子を一つの閉じた系と考えた場合の全エネルギーである。

9.1 電磁波の量子化

ここでは、長さ L の共振器に閉じこめられている電磁波を考える。この電磁波は定在波となり、その電場は電磁場のマックスウエル方程式に基づく波動方程式を満たし、電場が x 成分だけを持つならば、

$$E_z(x,t) = A_j q_j(t) \sin(k_j x) \quad (9.1)$$

として与えることが出来る。ここに、 k_j は波数ベクトルであり、 A_j は定数である。 $q_j(t)$ は長さのディメンジョンを持ち振幅に対応する。共振器内の定在波では、波数は規定されて、

$$k_j = \frac{\pi j}{L} \quad j=1,2,3,\dots \quad (9.2)$$

である。更に、

$$A_j = \sqrt{\frac{2\omega_j^2 m_j}{V \epsilon_0}} \quad (9.3)$$

ここで $V = LS$ 、 S は共振器断面積、とする。このように与えることで、後述のハミルトニアンを質量が m_j の調和振動子のハミルトニアンと同じ形にできることが示される。更に、

$\omega_j = \frac{\pi c}{L} j$ 、 $j=1,2,3,\dots$ であり、電場は角振動数 ω_j で調和振動する。電磁波の磁場はマックス

ウエル方程式 $\text{rot}\mathbf{H} = \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}$ を満たすことから、 y 成分であることが要求され、

$$H_y(x,t) = A_j \left(\frac{\dot{q}_j(t) \epsilon_0}{k_j} \right) \cos(k_j x) \quad (9.4)$$

で与えられる。

電磁場のエネルギー密度は $\frac{1}{2}(\epsilon_0 E_x^2 + \mu_0 H_y^2)$ であるので、体積が V の空間に含まれる電磁場エネルギーは $\frac{1}{2} \int_V (\epsilon_0 E_x^2 + \mu_0 H_y^2) dV$ で与えられる。従って、これをこの体積での電磁場のハミルトニアンと考え、

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \int_V (\epsilon_0 E_x^2 + \mu_0 H_y^2) dV \quad (9.5)$$

とする。これに電場と磁場の表現式 (9.1) 式～ (9.4) 式を代入して体積 V で積分すると、

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} (m_j \omega_j^2 q_j^2 + m_j \dot{q}_j^2) = \frac{1}{2} \left(m_j \omega_j^2 q_j^2 + \frac{p_j^2}{m_j} \right) \quad (9.6)$$

となる。ここに、 $p_j = m_j \dot{q}_j$ は正準運動量である。このように、 A_j を上述のように決めること

とで、電磁場のハミルトニアンを形式的に質量が m_j の調和振動子のハミルトニアンと同じ

形にできる。ここで導入した q_j と p_j は正準座標と正準運動量の関係を有することは、次の

ようにして分かる。まず、(9.6)式から、 $\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_j} = m_j \omega_j^2 q_j$ 、および $\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_j} = \frac{p_j}{m_j}$ が得られる。

ところで、 $p_j = m_j \dot{q}_j$ としたのだから、 $\frac{p_j}{m_j} = \dot{q}_j$ であり、 $\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_j} = \dot{q}_j$ が得られる。さらに、

$\dot{p} = \frac{d}{dt} m_j \dot{q}_j = \frac{d}{dt} (i\omega_j m_j q_j) = -m_j \omega_j^2 q_j$ なので、 $\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_j} = -\dot{p}_j$ であり、 q_j と p_j は互いに正準共役

な座標と運動量といえる。ただし、これらは質点の力学で出てくる座標と運動量ではない。ハミルトニアンがこれ等の変数で与えられ、互いにハミルトン方程式を満たす、ということと正準共役な関係にある変数ということである。この性質は量子力学へ移行する時に重要な役を演じる。

光が多数のモードの重ね合わせなら、電磁場のハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = \sum_j \frac{1}{2} \left(m_j q_j^2 \omega_j^2 + \frac{p_j^2}{m_j} \right) \quad (9.7)$$

と様々な質量 m_j の調和振動子の集合の全ハミルトニアンと同じ形式で表現できる。電場お

よび磁場の振幅は時間的に振動数が ω_j で変化するので、 q_j および p_j も同じ振動数で変化す

る。ここで、正準共役な物理量の交換関係 $[q_j, p_{j'}] = i\hbar\delta_{jj'}$ および $[q_j, q_{j'}] = [p_j, p_{j'}] = 0$

が成り立つことを利用して、 q_j および $p_{j'}$ を別の正準演算子へ次のように変換する。

$$a_j e^{-i\omega_j t} = \frac{1}{\sqrt{2m_j \hbar \omega_j}} (m_j \omega_j q_j + i p_j) \quad (\text{消滅演算子}) \quad (9.8)$$

$$a_j^\dagger e^{i\omega_j t} = \frac{1}{\sqrt{2m_j \hbar \omega_j}} (m_j \omega_j q_j - i p_j) \quad (\text{生成演算子}) \quad (9.9)$$

これ等の演算子をそれぞれ消滅演算子と生成演算子と呼ぶ。その意味は後ほど明らかになる。消滅演算子と生成演算子の間に次の交換関係があることが示される。

$$[a_j, a_{j'}^\dagger] = \delta_{jj'} \quad \text{および} \quad [a_j, a_{j'}] = [a_j^\dagger, a_{j'}^\dagger] = 0 \quad (9.10)$$

これ等の交換関係を使えば、ハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = \hbar\omega_j \left(a_j^\dagger a_j + \frac{1}{2} \right) \quad (9.11)$$

と表すことができる。この結果は調和振動子のハミルトニアンを上昇演算子と下降演算子とで表した形式と全く同じである。

ここで、状態ベクトル $|n\rangle$ をハミルトニアンの固有値（エネルギー固有値）を E_n とする固有状態とする。つまり、

$$\mathcal{H}|n\rangle = \hbar\omega_j \left(a_j^\dagger a_j + \frac{1}{2} \right) |n\rangle = E_n |n\rangle \quad (9.12)$$

が成り立っているとする。これの両辺の左から a_j を掛け、交換関係 $[a_j, a_j^\dagger] = 1$ を用いると、

$$a_j \mathcal{H}|n\rangle = \hbar\omega_j a_j \left(a_j^\dagger a_j + \frac{1}{2} \right) |n\rangle = E_n a_j |n\rangle, \quad \text{つまり、} \quad \hbar\omega_j \left(a_j a_j^\dagger a_j + \frac{1}{2} a_j \right) |n\rangle = E_n a_j |n\rangle, \quad \text{さらに、}$$

$$\hbar\omega_j \left(a_j a_j^\dagger a_j + \frac{1}{2} a_j \right) |n\rangle = \hbar\omega_j \left(a_j a_j^\dagger + \frac{1}{2} \right) a_j |n\rangle = \hbar\omega_j \left(a_j^\dagger a_j + \frac{3}{2} \right) a_j |n\rangle \quad \text{なので、}$$

$$E_n a_j |n\rangle = \hbar\omega_j \left(a_j^\dagger a_j + \frac{3}{2} \right) a_j |n\rangle = \hbar\omega_j \left\{ \left(a_j^\dagger a_j + \frac{1}{2} \right) + 1 \right\} a_j |n\rangle \quad \text{となり、}$$

$$\hbar\omega_j \left(a_j^\dagger a_j + \frac{1}{2} \right) a_j |n\rangle = (E_n - \hbar\omega_j) a_j |n\rangle \quad \text{と変形できる。この結果より、}$$

$$\mathcal{H} a_j |n\rangle = (E_n - \hbar\omega_j) a_j |n\rangle \quad (9.13)$$

が結論される。この結果は、 $a_j |n\rangle$ がハミルトニアン \mathcal{H} の固有ベクトルであり、対応す

る固有値は $(E_n - \hbar\omega_j)$ であることを物語る。つまり、 $a_j|n\rangle$ はエネルギーが $\hbar\omega_j$ だけ減った状態であり、フォトンが 1 個減少した状態 $|n-1\rangle$ といえる。この状態を定数 α_n を用いて、 $\alpha_n|n-1\rangle$ と書く。つまり、

$$a|n\rangle = \alpha_n|n-1\rangle \quad (9.14)$$

であり、書き換えて、

$$|n-1\rangle = \frac{a}{\alpha_n}|n\rangle \quad (9.15)$$

となる。この結果を見ると、演算子 a_j はフォトンが 1 個減少させ、フォトン数が n の状態 $|n\rangle$ からフォトン数が $n-1$ の状態 $|n-1\rangle$ へ変換する演算子であると結論される。こ

こで、フォトン数がゼロの状態でも電磁場のエネルギーが $\frac{\hbar\omega_j}{2}$ だけあるので、この状態での

のハミルトニアン固有値は $\frac{\hbar\omega_j}{2}$ である。つまり、 $\mathcal{H}|0\rangle = \frac{\hbar\omega_j}{2}|0\rangle$ である。さらに、フォ

トン数を $n=-1$ とすると、その状態 $|-1\rangle$ でのハミルトニアンの固有値は (つまり電磁場のエ

ネルギー) $\frac{\hbar\omega_j}{2} - \hbar\omega_j = -\frac{\hbar\omega_j}{2}$ のように負のエネルギー状態となる。電磁場として負のエネ

ルギーを考えないものとし、 $\alpha|0\rangle = |-1\rangle = 0$ とする。つまり電磁場の状態として最小のエネ

ルギーを持つ状態は $|0\rangle$ であり、この状態でのエネルギー、つまり最小エネルギーは $\frac{\hbar\omega_j}{2}$ で

あると考える。これまでの議論から、電磁場のエネルギーは $\hbar\omega_j$ ずつ増えることになり、フ

ォトン数がゼロの最小エネルギーからフォトン数が n の状態におけるエネルギーまで

$$E_n = E_{n-1} + \hbar\omega_j \quad (9.16)$$

のように増えていく。したがって、状態 $|n\rangle$ のエネルギー固有値は、

$$E_n = \hbar\omega_j \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (9.17)$$

で与えられる。次に、状態ベクトルの表式を求める。 $n-1$ 状態の固有ベクトルを規格化す

ると、
$$\langle n-1|n-1\rangle = \langle n| \frac{a^\dagger a}{\alpha_n^* \alpha_n} |n\rangle = \frac{n}{|\alpha_n|^2} \langle n|n\rangle = \frac{n}{|\alpha_n|^2} = 1 \quad (9.18)$$

つまり、 $\alpha_n = \sqrt{n}$ であることが分かる。ただし、この定数の位相をゼロとした。この結果よ

り、
$$a_j|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad (9.19)$$

となる。

したがって、演算子 a_j は光子数が n の状態に作用して光子数が $n-1$ の状態を作る演算子で、消滅演算子 (Destruction (Annihilation) Operator) と呼ばれる。

次に、状態 $|n\rangle$ にハミルトニアンを作用させると、 $\mathcal{H} = \hbar\omega_j \left(a_j^\dagger a_j + \frac{1}{2} \right)$ であることを使って、

$\mathcal{H}|n\rangle = \hbar\omega_j \left(a_j^\dagger a_j + \frac{1}{2} \right) |n\rangle = E_n |n\rangle$ となるが、光子数が n であるときの電磁場のエネルギー

は $E_n = \hbar\omega_j \left(n + \frac{1}{2} \right)$ であるから、 $\hbar\omega_j \left(a_j^\dagger a_j + \frac{1}{2} \right) |n\rangle = \hbar\omega_j \left(n + \frac{1}{2} \right) |n\rangle$ となる。この結果から、

$$a_j^\dagger a_j |n\rangle = n |n\rangle \quad (9.20)$$

の関係が得られる。この結果は $a_j^\dagger a_j$ が演算子であり、 $|n\rangle$ が固有ベクトルであり、固有値は光子数 n そのものであることを示す。この結果を使えば、

$n |n\rangle = a_j^\dagger a_j |n\rangle = a_j^\dagger (a_j |n\rangle) = a_j^\dagger \sqrt{n} |n-1\rangle = \sqrt{n} a_j^\dagger |n-1\rangle$ つまり、 $\sqrt{n} a_j^\dagger |n-1\rangle = n |n\rangle$ であり、書

き直して、 $a_j^\dagger |n-1\rangle = \sqrt{n} |n\rangle$ あるいは、

$$a_j^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle \quad (9.21)$$

が得られる。この結果は、 a_j^\dagger を光子数が n である状態 $|n\rangle$ に作用させると、光子数が 1 個増えた状態 $|n+1\rangle$ へ移ることを物語る。この演算子を生成演算子 (Creation Operator) と呼ぶ。生成演算子を用いると、任意の光子数状態 $|n\rangle$ の具体的な表現を得ることが出来る：

まず、真空状態に対し、 $\frac{(a_j^\dagger)}{\sqrt{1}} |0\rangle = |1\rangle$ であり、更に $\frac{(a_j^\dagger)}{\sqrt{2}} |1\rangle = |2\rangle$ などから、一般に

$$|n\rangle = \frac{(a_j^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle \quad (9.22)$$

が得られる。状態 $|n\rangle$ はエネルギーの固有状態であるが、更に個数状態 ; number state、あるいは Fock state と呼ばれる。図 9.1 に電磁場を量子化したシステム (光子場) のエネルギー準位を示す。エネルギー準位は等間隔に積みあがり、準位間の遷移は生成・消滅演算子により引き起こされる。

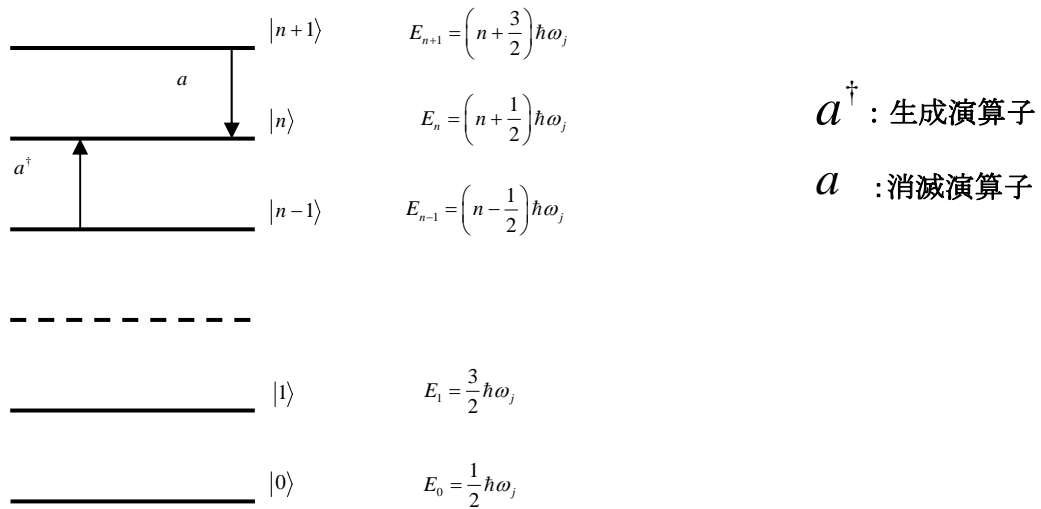


図9.1 光の場のエネルギー順位と状態

9.2 電場・磁場の量子化

今までは、電磁場のエネルギー固有値と固有ベクトルを求めた。エネルギーは物理量であるのでエルミート演算子として与えられる。同様に、電磁波の電場と磁場もエルミート演算子として定式化される。ここではその概要を述べる。電場および磁場は、

$$E_z(x,t) = A_j q_j(t) \sin(k_j x) \text{ および } H_y(x,t) = A_j \left(\frac{\dot{q}_j(t) \varepsilon_0}{k_j} \right) \cos(k_j x) \text{ と表されるが、演算子 } q_j(t)$$

を生成・消滅演算子 a_j^\dagger と a_j で表すことで、

$$E_z(x,t) = E_j \left(a_j e^{-i\omega_j t} + a_j^\dagger e^{i\omega_j t} \right) \sin(k_j x) \tag{9.23}$$

$$H_y(x,t) = -i\varepsilon_0 c E_j \left(a_j e^{-i\omega_j t} - a_j^\dagger e^{i\omega_j t} \right) \cos(k_j x) \tag{9.24}$$

のように生成・消滅演算子で表すことができる。ただし、

$$E_j = \sqrt{\frac{\hbar \omega_j}{\varepsilon_0 V}} \tag{9.25}$$

である。これ等の表式で与えられる電場と磁場は $E_z(x,t)^\dagger = E_z(x,t)$ 、および

$H_y(x,t)^\dagger = H_y(x,t)$ の関係を満たすのでエルミート演算子であることが確認できる。

ここで、フォトン個数状態 ; Fock State、での電場の期待値を求めてみると、

$$\langle n | E_x | n \rangle = \langle n | E_j (a_j e^{-i\omega_j t} + a_j^\dagger e^{i\omega_j t}) \sin(k_j x) | n \rangle = E_j (\langle n | a_j | n \rangle e^{-i\omega_j t} + \langle n | a_j^\dagger | n \rangle e^{i\omega_j t}) \sin(k_j x) = 0 \quad (9.26)$$

となり、期待値はゼロである。これは、電場はゼロを中心に振動しているからである。それでは **(電場)²** の期待値を求めると、

$$\begin{aligned} \langle n | E_x^2 | n \rangle &= \langle n | E_j^* (a_j^\dagger e^{i\omega_j t} + a_j e^{-i\omega_j t}) E_j (a_j e^{-i\omega_j t} + a_j^\dagger e^{i\omega_j t}) \sin^2(k_j x) | n \rangle \\ &= E_j^* E_j (\langle n | a_j^\dagger a_j | n \rangle + \langle n | a_j^\dagger a_j^\dagger | n \rangle e^{2i\omega_j t} + \langle n | a_j a_j | n \rangle e^{-2i\omega_j t} + \langle n | a_j a_j^\dagger | n \rangle) \sin^2(k_j x) \\ &= |E_j|^2 (n + n + 1) = 2|E_j|^2 \left(n + \frac{1}{2} \right) \sin^2(k_j x) \quad (9.27) \end{aligned}$$

となり、位置に対する依存性を除けば前述のエネルギーの期待値と同様な表現式に至る。 x について共振器長 L の距離で積分し、断面積 S を掛ければ、エネルギー (9.17) 式を与える。これは、電磁場のエネルギーは **(電場)²** に比例することに起因する。この結果によれば、 $n=0$ の真空状態でも(電場)²はゼロではない。しかしながら、期待値はゼロである。

9.3 光の吸収と放出

原子、光の場、および光と電子との相互作用を与えるトータルのハミルトニアンを演算子で表現することで、原子と光が相互作用し、光の吸収と放出が行われるプロセスを明らかにすることが出来る。この全ハミルトニアンを

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_A + \mathcal{H}_F - \mathbf{er} \cdot \mathbf{E} \quad (9.28)$$

と書くことにする。ここで、

$$\mathcal{H}_F = \hbar\omega_j \left(a_j^\dagger a_j + \frac{1}{2} \right) \quad (9.29)$$

は電磁場、あるいは輻射場のハミルトニアンであり、また、 \mathcal{H}_A は原子のハミルトニアンであり、 $\mathcal{H}_A |m\rangle = E_m |m\rangle$ をみたす。したがって、両辺の右からブラベクトルを掛けて、

$$\mathcal{H}_A |m\rangle \langle m| = E_m |m\rangle \langle m| \text{ となる。ここで、} |m\rangle \langle m| \text{ は射影演算子であり、} \sum_m |m\rangle \langle m| = I \text{ を満たすことを用いて、}$$

$$\sum_m \mathcal{H}_A |m\rangle \langle m| = \mathcal{H}_A \sum_m |m\rangle \langle m| = \mathcal{H}_A = \sum_m E_m |m\rangle \langle m| = \sum_m E_m \sigma_{mm} \quad (9.30)$$

ここで、 m は全ての準位に渉る。 $\mathbf{er} \cdot \mathbf{E}$ は原子に束縛されている電子と光（電磁波）との相互作用エネルギーであり、つぎのように書き表せる。

$$\mathbf{er} = \sum_{mn} e |m\rangle \langle m| \mathbf{r} |n\rangle \langle n| = \sum_{mn} e \langle m| \mathbf{r} |n\rangle |m\rangle \langle n| = \sum_{mn} \hat{p}_{mn} \sigma_{mn} \quad (9.31)$$

ここで、 $\hat{p}_{mn} = e \langle m| \mathbf{r} |n\rangle$ は双極子モーメント \mathbf{er} の行列要素で、 \mathbf{r} は電子の位置ベクトルであ

る。場の観測点を空間に固定して考えると、 $E_z(x,t) = E_j(a_j + a_j^\dagger) \sin(k_j x) \Rightarrow E_j(a_j + a_j^\dagger)$ とすることができる。そうすれば、場を含むトータルハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = \hbar \nu_j \left(a_j^\dagger a_j + \frac{1}{2} \right) + \sum_m E_m \sigma_{mm} + \hbar \sum_{mn} g_j^{mn} \sigma_{mn} (a_j + a_j^\dagger) \quad (9.32)$$

と表せる。ここで、 $g_j^{mn} = -\frac{\mathcal{P}_{mn} E_j}{\hbar}$ と置いた。ここで、2 順位 a, b のみを考え、 \mathcal{P}_{mn} が実数と

仮定すると、 $\mathcal{P}_{ab} = \mathcal{P}_{ba}$ なので、 $g_j^{ab} = g_j^{ba} = g_j$ と置ける。そうすると、

$$\mathcal{H} = \hbar \omega_j \left(a_j^\dagger a_j + \frac{1}{2} \right) + (E_a \sigma_{aa} + E_b \sigma_{bb}) + \hbar g_j (\sigma_{ab} + \sigma_{ba}) (a_j + a_j^\dagger) \quad (9.33)$$

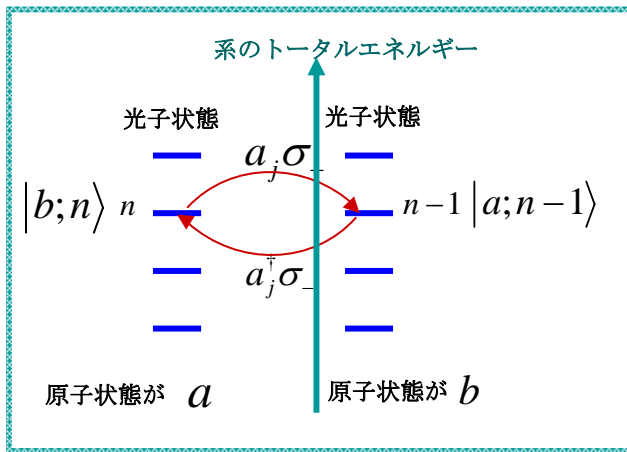
となるが、 $E_a - E_b = \hbar \omega$ 、および $\sigma_{aa} + \sigma_{bb} = 1$ なので、第二項が

$$E_a \sigma_{aa} + E_b \sigma_{bb} = \frac{1}{2} \hbar \omega (\sigma_{aa} - \sigma_{bb}) + \frac{1}{2} (E_a + E_b) \quad (9.34)$$

と変形でき、 $\sigma_z = \sigma_{aa} - \sigma_{bb}$ 、 $\sigma_+ = \sigma_{ba}$ 、および $\sigma_- = \sigma_{ab}$ などと置いて、

$$\mathcal{H} = \hbar \omega_j a_j^\dagger a_j + \frac{1}{2} \hbar \omega \sigma_z + \hbar g_j (\sigma_+ + \sigma_-) (a_j + a_j^\dagger) \quad (9.35)$$

と表すことができる。ただし、定数項 $(E_a + E_b)/2$ と $1/2$ は落とした。ここで、 σ_+ は原子が $a \rightarrow b$ と励起され、 σ_- は原子が $b \rightarrow a$ と脱励起されることに対応する演算子である。



$a_j \sigma_+$ は原子が $a \rightarrow b$ と励起され、
フォトンが1個吸収消滅する過程。

$a_j^\dagger \sigma_-$ は原子が $b \rightarrow a$ と落ちて
フォトンが1個放出する過程。

図9.2 系のエネルギー

このハミルトニアンの表式の括弧を展開し、 $a_j^\dagger \sigma_+$ は原子が励起され光子も増える状態を生成し、 $a_j \sigma_-$ は原子が失活し光子も減る状態を生成し、全エネルギー保存と矛盾するので、展開された式からこれ等を落とす。その結果、全ハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = \hbar\omega_j a_j^\dagger a_j + \frac{1}{2}\hbar\omega\sigma_z + \hbar g_j (\sigma_+ a_j + \sigma_- a_j^\dagger) \quad (9.36)$$

と表される。ここで、相互作用項 $\hbar g_j (\sigma_+ a_j + \sigma_- a_j^\dagger)$ がゼロではない行列要素は

$$\mathcal{P}_{ab} E_j \langle a, n+1 | \sigma_- a_j^\dagger | b, n \rangle = \mathcal{P}_{ab} E_j \sqrt{n+1} \langle a | a \rangle \langle b | b \rangle = \mathcal{P}_{ab} E_j \sqrt{n+1} \quad (9.37)$$

$$\mathcal{P}_{ba} E_j \langle b, n-1 | \sigma_+ a_j | a, n \rangle = \mathcal{P}_{ab} E_j \sqrt{n} \langle b | b \rangle \langle a | a \rangle = \mathcal{P}_{ab} E_j \sqrt{n} \quad (9.38)$$

である。行列要素 (9.37)式 は原子が $b \rightarrow a$ と失活し、光子状態が励起される、つまり光

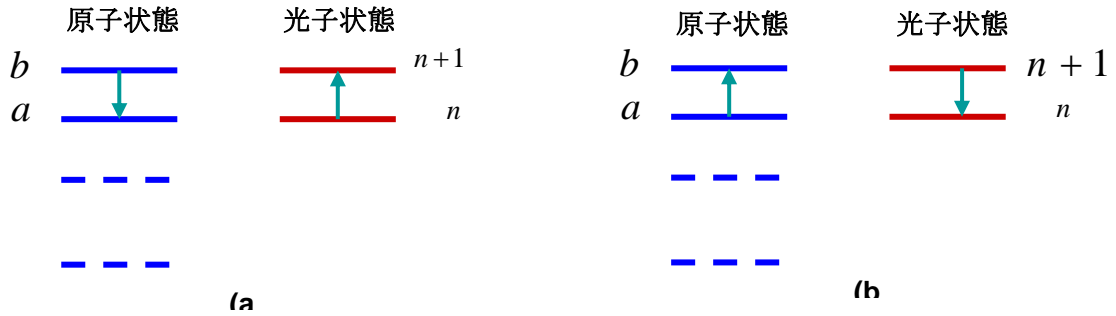


図9.3 原子と光子のエネルギー状態

子 1 個を放出した状態を与える (図 9.3 a)。しかしここでは $E_b - E_a$ と $\hbar\omega_j$ が等しいというエネルギー保存則が成り立っていることは前提していない。他方、行列要素 (9.38)式 は原子が $a \rightarrow b$ と励起され、光子が 1 個減少している状態を生成する。(図 9.3 b)。ここで $n=0$ 、つまり光子が無い状態で原子が自発的に励起されることは無いということも分かる。

上述の行列要素(9.37)式と(9.38)式は光と原子が相互作用することで光子を放出して原子が失活する、あるいは光子を吸収して原子が励起される確率を与える。

始めにフォトンがない状態からの遷移確率は

$$\begin{aligned} \frac{2\pi}{\hbar} |\mathcal{P}_{ab} E_j \langle a, 1 | \sigma_- a_j^\dagger | b, 0 \rangle|^2 \delta(E_b - E_a - \hbar\omega_j) / 2 &= \frac{\pi}{\hbar} |\mathcal{P}_{ab} E_j \langle a | a \rangle \langle b | b \rangle|^2 \delta(E_b - E_a - \hbar\omega_j) \\ &= \frac{\pi}{\hbar} |\mathcal{P}_{ab} E_j|^2 \delta(E_b - E_a - \hbar\omega_j) \end{aligned} \quad (9.39)$$

で与えられる。ここで、デルタ関数を入れたのは、Fermi の黄金律

$$E_b - E_a = \hbar\omega_j \quad (9.40)$$

を考慮したためである。また、最初の式を 2 で割ったのは、フォトンが 1 個あるという状態が互いに正反対へ進む光波の両方を含み (縮退している)、一方の方向へ進む光を放出する確率を得るためである。原子が下準位へ遷移することに伴って放出されるフォトン

方向であるので、(9.39)式を全方向への k ベクトルと 2 つの偏光方向について加えることで、

$$\begin{aligned}
\sum_{j\lambda} \frac{\pi}{\hbar} |\mathcal{P}_{ab} E_j|^2 \delta(E_b - E_a - \hbar\omega_j) &= \sum_{\lambda} \int \frac{\pi e^2 \hbar \omega_k}{\hbar^2 V \epsilon_0} |\mathbf{r}_{ab} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{k\lambda}|^2 \delta(\omega_{ab} - \omega_k) \frac{V d^3 \mathbf{k}}{8\pi^3} \\
&= \sum_{\lambda} \int \frac{\pi e^2 \omega_k}{\epsilon_0 \hbar} |\mathbf{r}_{ab} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{k\lambda}|^2 \delta(\omega_{ab} - \omega_k) \frac{k^2 \sin \theta dk d\theta d\varphi}{8\pi^3} \\
&= \sum_{\lambda} \int \frac{\pi e^2 \omega_k}{\epsilon_0 c^3 \hbar} |\mathbf{r}_{ab} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{k\lambda}|^2 \delta(\omega_{ab} - \omega_k) \frac{\omega_k^2 \sin \theta d\omega_k d\theta d\varphi}{8\pi^3} \\
&= \frac{e^2 \omega_{ab}^3}{8\pi^2 \epsilon_0 c^3 \hbar} \sum_{\lambda} \int |\mathbf{r}_{ab} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{k\lambda}|^2 \sin \theta d\theta d\varphi \\
&= \frac{e^2 \omega_{ab}^3 |\mathbf{r}_{ab}|^2}{8\pi^2 \epsilon_0 c^3 \hbar} \sum_{\lambda} \int \sin^3 \theta d\theta d\varphi \\
&= \frac{e^2 \omega_{ab}^3 |\mathbf{r}_{ab}|^2}{8\pi^2 \epsilon_0 c^3 \hbar} \frac{8\pi}{3} \\
&= e^2 \omega_0^3 |\mathbf{r}_{ab}|^2 / 3\pi \epsilon_0 \hbar c^3 = A_{21} = \frac{1}{\tau_{spont}} \quad (9.41)
\end{aligned}$$

が得られる。ただし、 k 空間におけるモード間隔が $\Delta k_{x,y,z} = \frac{2\pi}{L}$ であり、モード密度が

$\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 = \frac{V}{8\pi^3}$ であること、および $d^3 \mathbf{k} = k^2 \sin \theta dk d\theta d\varphi$ 、更に、 $k = \frac{\omega}{c}$ の関係から k による積分が ω による積分に変換され、 $\delta(\omega_{ab} - \omega_k)$ により $\omega_k = \omega_{ab}$ が選択されることを用いた。また、 $d\theta d\varphi$ による積分では、 \mathbf{r}_{ab} を z 軸方向に取り、一方の偏光方向 $\hat{\mathbf{e}}_{k1}$ を z 軸と k ベクトルを含む面内にとり、他方の偏光方向 $\hat{\mathbf{e}}_{k2}$ はこの面と垂直なので、一方の偏光だけが利いてきて、

$|\mathbf{r}_{ab} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{k1}|^2 = |\mathbf{r}_{ab}|^2 \sin^2 \theta$ と書け、 $\sin^3 \theta$ の積分が $4/3$ を与えることを用いた。(9.41)式はアインシュタインの A 係数と呼ばれ、前章の (6.16) 式でも紹介された。ただ、そのときは現象論的に、原子に束縛されている電子を減衰振動する単振り子としてモデル化し、その減衰係数 γ で与えた。ここでは、電磁場を量子化することで自然遷移係数が必然的に現れることを示した。

ところで、最初に光子数が n で原子が励起状態 b であり、原子が失活して a 状態に落ちる確率、つまり、 $|b; n\rangle \rightarrow |a; n+1\rangle$ の確率を求めると、

$$\frac{\pi}{\hbar} |\mathcal{P}_{ab} E_j \sqrt{n+1}|^2 \delta(E_b - E_a - \hbar\omega_j) = \frac{\pi \omega_j \mathcal{P}_{ab}^2}{\epsilon_0 V} (n+1) \delta(E_b - E_a - \hbar\omega_j)$$

となる。この場合も光子数が 1 増える。

右辺の $(n+1)$ が意味すること： n は初にあった光子数なので、この遷移の確率は初の光子数に比例する、つまり、光が強ければそれに比例して遷移確率が増大する、ことを物語る。

この現象を誘導遷移とよぶ。もし、 $n=0$ であっても、つまり最初光が無くても”1”があるために遷移確率はゼロではない。したがって、”1”は自然遷移、つまり原子が自然に失活することを意味する。

誘導遷移の確率は、次の計算で求められる。

$\delta(E_b - E_a - \hbar\omega_j)d\omega_j = \delta(\omega_b - \omega_a - \omega_j)d\omega_j/\hbar$ の変換を用いて、

$$W_{ind} = \int \frac{2\pi^2\nu_j \mathcal{P}_{ab}^2}{\varepsilon_0 V \hbar} n \delta(\nu_b - \nu_a - \nu_j) d\nu_j = \int \frac{\pi\omega_j \mathcal{P}_{ab}^2}{\varepsilon_0} \frac{\delta(\omega_b - \omega_a - \omega_j)d\omega_j}{\hbar} \times \frac{\rho(\omega_j)}{\hbar\omega_j}$$

$$= \frac{\pi \mathcal{P}_{ab}^2}{\varepsilon_0 \hbar^2} \rho(\omega_{ab})$$

ここで、光子場のエネルギー密度 $\rho(\nu) = \hbar\omega_j \frac{n}{V}$ を用いた。また、最初のフォトン状態

の偏光方向が z 方向とすると、 $\mathcal{P}_{ab} = -ez$ については $|ez_{ab}|^2 = |er_{ab}|^2/3$ の関係を用いて、

$$\mathcal{P}_{ab}^2 = \frac{e^2 |r_{ab}|^2}{3} = \frac{\pi\varepsilon_0 \hbar c^3 A_{21}}{\omega_0^3}$$

と書ける。これを用いれば、 B_{ba} 係数は、

$$B_{ba} = \frac{\pi \mathcal{P}_{ab}^2}{\varepsilon_0 \hbar^2} = \frac{\pi}{\varepsilon_0 \hbar^2} \times \frac{\pi\varepsilon_0 \hbar c^3 A_{21}}{\omega_0^3} = \frac{\pi^2 c^3 A_{21}}{\hbar \omega_0^3}$$

という、有名なアインシュタインの関係が導かれる。