アウトライン

- I. はじめに
- II. 光と物質の相互作用
 - 物質の中の光
 1. 波動方程式, 複素屈折率と減衰率
 2. 因果律とクラマース・クローニツヒの関係式
 - 光に対する物質の応答
 3. 金属の光学応答: ドルーデモデル
 4. 金属以外の光学応答: ローレンツモデル
 5. 半古典的モデルによる物質の光学応答
 6. 半導体の光学応答
- III. 光の量子論の基礎
 7. 粒子性と波動性
 8. 電磁界の量子化, 光子数状態, コヒーレント状態
 - 9. 昇降演算子**
 10. 自然放出

複素電界を表す演算子(昇降演算子)

#142(10)で定義した複素電界 a を量子化表現する。

すなわち、#145(13)を用いて p を量子化し、

$$\hat{a} \equiv \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} (\hat{q} + i\hat{p}) = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left(q + \hbar \frac{\partial}{\partial q} \right) \quad (23)$$

$$\hat{a}^\dagger \equiv \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} (\hat{q} - i\hat{p}) = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left(q - \hbar \frac{\partial}{\partial q} \right) \quad (24)$$

と定義する。* 後から明らかになる理由により、 $\hat{a}$ と $\hat{a}^\dagger$ を昇降演算子と呼ぶ。

$\hat{q}$ と $\hat{p}$ は、#138(1),(2)より、それぞれ電界と磁界の振幅を表す演算子であるが、 $\hat{a}$ と $\hat{a}^\dagger$ を用いて、

$$\hat{q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) : \text{規格化された電界振幅} \quad (25)$$

$$\hat{p} = -i\sqrt{\frac{\hbar}{2}} (\hat{a} - \hat{a}^\dagger) : \text{規格化された磁界振幅} \quad (26)$$

と書ける。

* 定数 $1/\sqrt{2\hbar}$ は、後の結果がきれいになるように便宜上導入した。 q の演算子 $\hat{q}$ は、 $\hat{q} = q$ なので、「 $\hat{\quad}$ (ハット)」は必要ないが、演算子 $\hat{p}$ と表記を合わせるため、ハットを付けた。

昇降演算子の交換関係

(23), (24)より、

$$\hat{a}^\dagger \hat{a} = \frac{1}{2\hbar} \left(q - \hbar \frac{\partial}{\partial q} \right) \left(q + \hbar \frac{\partial}{\partial q} \right) = \frac{1}{2\hbar} \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial q^2} + q^2 \right) - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial q} q - q \frac{\partial}{\partial q} \right)$$

ここで、任意の q の関数 $f(q)$ に対して

$$\left(\frac{\partial}{\partial q} q - q \frac{\partial}{\partial q} \right) f(q) = \frac{\partial}{\partial q} (qf(q)) - qf'(q) = f(q) \quad (27)$$

なので、 $\frac{\partial}{\partial q}$ と q の交換関係 $\left[\frac{\partial}{\partial q}, q \right] \equiv \left(\frac{\partial}{\partial q} q - q \frac{\partial}{\partial q} \right) = \underline{\underline{1}}$

$$\therefore \hat{a}^\dagger \hat{a} = \frac{1}{2\hbar} \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial q^2} + q^2 \right) - \underline{\underline{\frac{1}{2}}} \quad (28)$$

同様に、

$$\hat{a} \hat{a}^\dagger = \frac{1}{2\hbar} \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial q^2} + q^2 \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial q} q - q \frac{\partial}{\partial q} \right) = \frac{1}{2\hbar} \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial q^2} + q^2 \right) + \underline{\underline{\frac{1}{2}}}$$

$$\therefore \boxed{\left[\hat{a}, \hat{a}^\dagger \right] \equiv \hat{a} \hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger \hat{a} = \underline{\underline{1}}} \quad (29)$$

※ (29) は、量子化 (#145(13)) の帰結である。 p を単なる数として扱う古典的な定義のままであれば、(29)の右辺は零になることが容易に確認できる。後述するように、(29)が非零であることで、自然放出など、様々な量子力学的な現象が生じる。

光子数の演算子

#146(14)より、電磁界のハミルトニアン $\hat{H} = \frac{\omega}{2} \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial q^2} + q^2 \right)$ なので、
(28)を用いて、

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \quad (30)$$

と書ける。

便宜上、#146-148で導入した光子数状態 ϕ_n を $|n\rangle$ と書くと、#146(16)、
#147(21)より、

$$\hat{H}|n\rangle = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) |n\rangle \quad (31)$$

(30)と(31)を見比べると、

$$\hat{a}^\dagger \hat{a} |n\rangle = n |n\rangle \quad (32)$$

つまり、 $\hat{a}^\dagger \hat{a} (\equiv \hat{n})$ は、光子数を表す演算子であることが分かる

昇降演算子の性質

いま、(32)の両辺に左から $\hat{a}$ を施すと、

$$\hat{a}(\hat{a}^\dagger \hat{a})|n\rangle = n\hat{a}|n\rangle$$

左辺の括弧を入れ替え、(29)を用いると、

$$(\hat{a}\hat{a}^\dagger)\hat{a}|n\rangle = (\underline{1 + \hat{a}^\dagger \hat{a}})\hat{a}|n\rangle = n\hat{a}|n\rangle$$

$$\therefore (\hat{a}^\dagger \hat{a})(\hat{a}|n\rangle) = (n - \underline{1})(\hat{a}|n\rangle)$$

(32)と見比べると、上式は、

$$\hat{a}|n\rangle = A_n|\underline{n - 1}\rangle \quad (A_n \text{ は定数}) \quad (33)$$

を意味する。同様にして、

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = B_{n+1}|\underline{n + 1}\rangle \quad (B_{n+1} \text{ は定数}) \quad (34)$$

が得られる。

つまり、

- $\hat{a}$ は、光子を一つ減らす作用（消滅演算子とも言う）
- $\hat{a}^\dagger$ は、光子を一つ増やす作用（生成演算子とも言う）

を与える。

昇降演算子の性質

係数 A_n と B_n を求める。

(33)の両辺に $\langle n-1|$ を施すと、※1

$$\langle n-1|\hat{a}|n\rangle = \langle n-1|A_n|n-1\rangle = A_n \quad (35)$$

一方、

$$\langle n-1|\hat{a} = [\hat{a}^\dagger|n-1\rangle]^\dagger = [B_n|n\rangle]^\dagger = B_n^*\langle n|$$

なので、

$$\langle n-1|\hat{a}|n\rangle = B_n^* \quad (36)$$

(35)と(36)を見比べて、 $A_n = B_n^*$

この関係を用いると、(33), (34)より、

$$\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = A_n\hat{a}^\dagger|n-1\rangle = A_nB_n^*|n\rangle = |A_n|^2|n\rangle$$

一方、(32)より、左辺 $= n|n\rangle \quad \therefore A_n = \sqrt{n} \quad \text{※2}$

以上より、次式が得られる。

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad (37)$$

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad (38)$$

※1 ブラケットの定義(#96)を思い出せば、 $\langle \rangle$ で両側を閉じたときに初めて、 $\int_{-\infty}^{\infty} dq$ の積分を行うという決まりである。
つまり「 $\langle n-1|$ を施す」とは、「左から $\phi_n^*(q)$ をかけて $\int_{-\infty}^{\infty} dq$ する」という意味になる。

※2 A_n は複素数でも良いので $A_n = \sqrt{n}e^{i\theta}$ と表されるべきだが、 θ に物理的意味はないので $\theta = 0$ としている。

昇降演算子による光子数状態の表現

#147-148の光子数状態 $\phi_n(\equiv |n\rangle)$ を、昇降演算子を用いて求めることもできる。

まず、 $n = 0$ の状態 ϕ_0 (真空場)は、(37)より

$$\hat{a}\phi_0 = 0$$

#156(23)を用いて微分方程式で表すと、

$$\frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(q + \hbar\frac{\partial}{\partial q}\right)\phi_0 = 0 \rightarrow \frac{1}{\phi_0}\frac{\partial\phi_0}{\partial q} = -\frac{q}{\hbar}$$

両辺を q で積分(変数分離)して、

$$\int \frac{1}{\phi_0} d\phi_0 = -\frac{1}{\hbar} \int q dq \rightarrow \ln \phi_0 = -\frac{q^2}{2\hbar} + const.$$

$$\therefore \phi_0(q) \propto \exp\left(-\frac{q^2}{2\hbar}\right) \quad (\equiv |0\rangle) \quad (39)$$

となり、#147(19)の $n = 0$ の解と一致する。

$n = 1, 2, 3, \dots$ の状態については、(38)より $(\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle = \sqrt{n!} |n\rangle$ なので、

$$\boxed{|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle} \quad (40)$$

と表される。(39)に#156(24)を施していけば、 $n = 1, 2, 3, \dots$ の状態が順に求まり、#147(19)と一致する。(確かめてみよ。#147(19)の右辺は規格化されておらず、その比例係数は n によって異なることに注意すること。(39)と(40)により比例係数も正しく求まる。)

アウトライン

- I. はじめに
- II. 光と物質の相互作用
 - 物質の中の光
 1. 波動方程式, 複素屈折率と減衰率
 2. 因果律とクラマース・クローニツヒの関係式
 - 光に対する物質の応答
 3. 金属の光学応答: ドルーデモデル
 4. 金属以外の光学応答: ローレンツモデル
 5. 半古典的モデルによる物質の光学応答
 6. 半導体の光学応答
- III. 光の量子論の基礎
 7. 粒子性と波動性
 8. 電磁界の量子化, 光子数状態, コヒーレント状態
 9. 昇降演算子
 - 10. 自然放出**

光と物質の相互作用

- 自然放出: 入射光強度に依存せずに自発的に発生する発光
- 物質(電子)と光を両方とも量子化することで初めて説明される

1. 吸収

2. 増幅(誘導放出)

3. 自然放出

(半)古典的現象

量子力学的現象

自然放出の説明

①真空場揺らぎが誘導放出により増幅された結果として説明

- #150より、光子がない($n=0$)状態でも、エネルギー $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ の「真空場」が存在する。
- 半古典モデルにより導出した誘導放出により、この「真空場」も増幅される。

②電磁場を表す昇降消滅演算子の交換関係より導出

- 光吸収、誘導放出、自然放出を統一的に説明できる

本講義では、②による自然放出の導出過程を簡単に説明する。

※ より正確には、電子系を“数表示”で記述し、“第二量子化”を行うことで、電子(フェルミ粒子)と光子(ボーズ粒子)の相互作用が解析でき、その結果、「電子1個の遷移により光子1個が吸収/放出される」ことが導出できる(例えば、Miller, Quantum Mechanics for Scientists and Engineers, Ch. 17, 2008)。ここでは簡単のため、半古典モデルの結果に最低限の修正を加えることで、自然放出を導出する。

半古典モデルに修正を加える①

#96(8)より、始状態(|1>とする)から終状態(|2>とする)への遷移確率 $|c_2|^2$ は、 $|c_1| \approx 1$, $|c_2| \approx 0$ と近似できる範囲で次式により求まる。

$$\frac{dc_2}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \langle 2 | \Delta V | 1 \rangle \quad (41)$$

#96(8)(半古典モデル)では、電子系のみを量子化したので、電子のエネルギー固有状態 $\varphi_j(x, t)$ ($j = 1, 2$) をそのまま $|j\rangle = \varphi_j(x, t) = \phi_j(x) \exp(-i\omega_j t)$ と表した。

しかし今回は、光も量子化しているので、光のエネルギー固有状態(つまり、#146(15), #147(21)の光子数状態 φ_n)も $|1, 2\rangle$ に加える必要がある。(#144-145の議論参照)

すなわち、

$$|j\rangle = \underbrace{|\phi_j\rangle \exp(-i\omega_j t)}_{\text{電子系}} \underbrace{\{|n_j\rangle \exp[-i(n_j + \frac{1}{2})\omega_0 t]\}}_{\text{光子系}} \quad (42)$$

と表される。ただし、 $j = 1$ (始状態), または, 2 (終状態)であり、

- $(\hbar\omega_j)$ は、それぞれ始状態と終状態の電子のエネルギー
- ω_0 は光の角周波数。 n_1 と n_2 は、それぞれ始状態と終状態の光子数

半古典モデルに修正を加える②

(41)の $\Delta V(t)$ は、#97(13)より、 $\Delta V = -\mu_x E$

半古典モデルでは、光電界 E を古典場として扱ったが、今回は、光電界の量子化表現を用いる。 #138(1), #156(25)より、

$$E(x, t) = q(t) D \sin(kz), \quad \hat{q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)$$

なので、

$$\Delta V \propto -\mu_x (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \quad (43)$$

∴ (41)に(42), (43)を代入して、

$$\begin{aligned} \frac{dc_2}{dt} &\propto \frac{i}{\hbar} \langle n_2 | \langle \phi_2 | \mu_x (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) | \phi_1 \rangle | n_1 \rangle \exp\{i[(\omega_2 - \omega_1) + (n_2 - n_1)\omega_0]t\} \\ &= \frac{i}{\hbar} \underbrace{\langle \phi_2 | \mu_x | \phi_1 \rangle}_{\text{電子系の項}} \underbrace{\langle n_2 | \hat{a} + \hat{a}^\dagger | n_1 \rangle}_{\text{光の項}} \underbrace{\exp\{i[\omega_{21} + (n_2 - n_1)\omega_0]t\}}_{\text{時間変化の項}} \quad (44) \end{aligned}$$

ただし、 $\omega_{21} \equiv \omega_2 - \omega_1$

フェルミの黄金律(エネルギー保存則)に対応

※ここでは、シュレディンガー表示を用い、波動関数が時間変化をしているとしている。一方、ハイゼンベルグ表示を用いる場合は、波動関数ではなく演算子 $\hat{a}$ と $\hat{a}^\dagger$ に時間の項が加わる。

光と電子の相互作用

新たに追加された光の量子論の項 $\langle n_2 | \hat{a} + \hat{a}^\dagger | n_1 \rangle$ の効果を考える。

$$\langle n_2 | \hat{a} + \hat{a}^\dagger | n_1 \rangle = \langle n_2 | \hat{a} | n_1 \rangle + \langle n_2 | \hat{a}^\dagger | n_1 \rangle$$

この項が非零になるのは、#160(37), (38)より、以下の2つの場合のみ

- ① $n_2 = n_1 - 1$ のとき: $|\langle n_1 - 1 | \hat{a} | n_1 \rangle|^2 = n_1$ (光子が一つ減る)
 ② $n_2 = n_1 + 1$ のとき: $|\langle n_1 + 1 | \hat{a}^\dagger | n_1 \rangle|^2 = n_1 + 1$ (光子が一つ増える)

①のとき (光吸収)

$$(44) \rightarrow \frac{dc_2}{dt} \propto \frac{i}{\hbar} \langle \phi_2 | \mu_x | \phi_1 \rangle \underline{n_1} \exp\{i(\omega_{21} - \omega_0)t\}$$

半古典モデルで
得た選択則と同じ

始状態の
光子数に
比例

フェルミの黄金律より
 $\omega_{21} - \omega_0 = 0$ が必要

$$\omega_2 - \omega_1 = \omega_0$$

光と電子の相互作用

- ① $n_2 = n_1 - 1$ のとき: $|\langle n_1 - 1 | \hat{a} | n_1 \rangle|^2 = n_1$ (光子が一つ減る)
- ② $n_2 = n_1 + 1$ のとき: $|\langle n_1 + 1 | \hat{a}^\dagger | n_1 \rangle|^2 = \underline{n_1 + 1}$ (光子が一つ増える)

②のとき (誘導放出・自然放出)

$$(44) \rightarrow \frac{dc_2}{dt} \propto \frac{i}{\hbar} \langle \phi_2 | \mu_x | \phi_1 \rangle (n_1 + 1) \exp\{i(\omega_{21} + \omega_o)t\}$$

始状態の光子数に比例
→ 誘導放出

始状態の光子数と
関係なく放出される
($n_1 = 0$ でも放出)
→ 自然放出

フェルミの黄金律より
 $\omega_{21} + \omega_o = 0$ が必要

$$\omega_1 - \omega_2 = \omega_o$$

これまで(7-10)のまとめ

- 真空場揺らぎ(量子雑音)や自然放出光などを導出するには、電子に加えて、光も量子論的に扱う必要がある
- まず、光の電界・磁界を空間モードとして記述し、その振幅を p, q を用いて表す(単なる式変形。ここまでは古典論。)
 - その結果、ハミルトニアン(エネルギー)が**一次元調和振動子**と同じ形になる
- p を演算子 $\hat{p} \equiv -i\hbar(\partial/\partial q)$ に置き換えることで、**光の量子化**を行う
 - その結果、プランクの**エネルギー量子仮説**が導かれる。すなわち、光のエネルギーはとびとびの値しか許されない。その単位は $\hbar\omega$ 。
 - 光のエネルギー固有状態を**光子数状態**と呼ぶ
 - **真空場揺らぎ**: 光子数=0でも、エネルギーが存在し、振幅の確率分布が非零
- レーザー光など、一般的な「正弦波状の光」は、**コヒーレント光状態**と呼ばれる
 - コヒーレント光状態は、複数の光子数状態の線形和で表される
 - 平均光子数の増加とともに、量子雑音が相対的に小さくなる
 - 平均光子数 $\rightarrow\infty$ の極限が、古典的な光

これまで(7-10)のまとめ

- 複素電界の演算子 $\hat{a}$, $\hat{a}^\dagger$ を用いると、よりエレガントに記述できる
 - $\hat{a}$ と $\hat{a}^\dagger$ の交換関係 $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$ が量子力学的性質の起源となる
 - $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ は光子数の演算子になる
- 一次摂動論において、光の量子状態をきちんと考慮することで、**自然放出**が導出される
 - 光電界による摂動を、古典場 E ではなく、きちんと演算子 $\hat{a}$, $\hat{a}^\dagger$ を用いて表す
 - 始状態と終状態に、電子に加えて光の量子状態も入れる
 - その結果、 $\hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$ の“1”の項により、自然放出光が発生する

期末試験

- 日時: 1/21(火) 13:00~15:00頃
- 場所: 電気系会議室4(12F)
- 持ち込み不可
- 試験範囲: 前半(小関先生) + 後半(種村)

※持ち込み不可ですが、後半に関しては、細かい記憶を問うような問題は出しません。