　現代レーザー分光学特論
「電磁場の量子化と原子と光の相互作用」（森永）
　講義の資料の置き場：
http://m.ils.uec.ac.jp/qem/

1　量子力学の復習

　粒子は波の性質（波動性）を併せ持つ。波を表す（複素数値の）関数つまり波動関数は一般に時間的空間的に振動している。その振動の様子は複雑であり得るが単純な振動の場合周期性を持つ：

空間的振動周期　波長 λ

時間的振動周期　T

- 波数 $k \equiv 2\pi/\lambda$
- 周波数 $\nu \equiv 1/T$
- 角振動数（角周波数）$\omega \equiv 2\pi\nu = 2\pi/T$

量子力学において純粋な波数 k を持つ波は

$$\varphi(x) \sim \exp(ikx) \tag{1}$$

であり、同様に角振動数 ω を持つ波は

$$\phi(t) \sim \exp(-i\omega t) \tag{2}$$

で、組み合わせると波数 k を持ちかつ角振動数 ω を持つ波は

$$\psi(x,t) = \varphi(x)\phi(t) \sim \exp(ikx - i\omega t) \tag{3}$$

と書ける（平面波）（1 次元の場合）。これが基本の波でありなじみのある $\cos(ikx - i\omega t)$ などは

$$\cos(ikx - i\omega t) = \frac{1}{2}(e^{ikx - i\omega t} + e^{-ikx + i\omega t})$$

のように 2 つの波数／角振動数の成分の重ね合わせであると考える。
　量子論において波数 $\boldsymbol{k}$ を持つ波で表される粒子は運動量 $p = \hbar k$ を持ち、角振動数 ω を持つ波で表される粒子はエネルギー $E = \hbar\omega$ を持つ。すなわち大きな運動量を持つ粒子の波動関数は空間的に激しく振動しており、大きなエネルギーを持つ粒子の波動関数は時間的に激しく振動している。

1.1　シュレーディンガー方程式

　ポテンシャル $V(x)$ 中を運動する質量 m の粒子がもつ全エネルギー E は古典論で

$$E = H = T + V = \frac{1}{2m}p^2 + V(x) \tag{4}$$

である（全エネルギーを（座標 x と速度 v ではなく）x と運動量 $p = mv$ で表したものをハミルトニアン H と呼ぶ)。

式 (1)-(3) の形から波動関数から運動量を引き出すには波動関数に $-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ を作用させればよいことが推察される：

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t) = \hbar k\,\psi(x,t) = p\,\psi(x,t) \tag{5}$$

同様にエネルギーを引き出すには波動関数に $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ を作用させればよい：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = \hbar\omega\,\psi(x,t) = E\,\psi(x,t) \tag{6}$$

そこで式 (4) の右側から波動関数 $\psi(x,t)$ を掛けた式

$$E\psi(x,t) = \frac{1}{2m}p^2\psi(x,t) + V(x)\psi(x,t) \tag{7}$$

において置き換え $E \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$、$p \to -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ を行ったものが一般に $V(x) \neq 0$ の場合にも成り立つと考えたのが（時間に依存する）シュレーディンガー方程式である：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial^2 x}\psi(x,t) + V(x)\psi(x,t) \tag{8}$$

粒子が特定のエネルギー E を持つ場合、つまり波動関数 $\psi(x,t)$ が特定の角振動数 $\omega = E/\hbar$ を持つ場合、従って $\psi(x,t)$ が (2) の $\phi(t)$ と座標 x についての一般の関数 $\varphi(x)$ の積 $\psi(x,t) = \phi(t)\varphi(x) = \exp(-i\omega t)\varphi(x)$ で書ける場合、これを時間に依存するシュレーディンガー方程式 (8) に代入したときに得られる $\varphi(x)$ についての微分方程式

$$E\varphi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\varphi''(x) + V(x)\varphi(x) \tag{9}$$

は時間に依存しないシュレーディンガー方程式と呼ばれる。

1.2　交換関係、交換子

量子力学では物理量には演算子が対応する。演算子とは（波動）関数に別の関数を対応させる。演算子 A：

$$A:\ \varphi \mapsto A\varphi$$

この対応を波動関数 φ に演算子 A を作用させるという。
量子力学では基本的に線形な演算子を扱う。すなわち

$$A(\alpha\varphi_1 + \beta\varphi_2) = \alpha A\varphi_1 + \beta A\varphi_2$$

が成り立つ（線形でない例：$\varphi \mapsto \varphi^2$ など)。
（例）運動量演算子 p：

$$p:\ \varphi(x) \mapsto -i\hbar\varphi'(x)$$

（例）位置演算子 x：

$$x:\ \varphi(x) \mapsto x\varphi(x)$$

演算子において作用させる順序は重要である。例えば

$$xp\varphi(x) = -i\hbar x\varphi'(x)$$

$$px\varphi(x) = -i\hbar\frac{d}{dx}\{x\varphi(x)\} = -i\hbar\{\varphi(x) + x\varphi'(x)\} \neq xp\varphi(x)$$

演算子 A、B に対して $[A,B] \equiv AB - BA$ のことを A、B の交換子という。上の例から

$$[x,p] = i\hbar$$

1.3 内積、期待値、エルミート共役、エルミート演算子

波動関数 φ と ψ に対して内積と呼ばれる複素数 (φ,ψ) が定義される。1 次元の場合

$$(\varphi,\psi) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi^*(x)\psi(x)\,dx$$

で（一般に）$(\psi,\varphi) = (\varphi,\psi)^*$、$(\varphi,\alpha\psi_1+\beta\psi_2) = \alpha(\varphi,\psi_1)+\beta(\varphi,\psi_2)$、$(\alpha\varphi_1+\beta\varphi_2,\psi) = \alpha^*(\varphi_1,\psi)+\beta^*(\varphi_2,\psi)$ が成り立つ。また $(\varphi,\varphi) \geq 0$ であり $|\varphi| \equiv \sqrt{(\varphi,\varphi)}$ は波動関数 φ のノルムと呼ばれ $|\varphi| = 0$ ならば $\varphi = 0$ である。

演算子 A に対して $(A^\dagger\varphi,\psi) = (\varphi,A\psi)$ が任意の φ、ψ について成り立つ演算子 $A^\dagger$ が（一つだけ）存在することが知られており $A^\dagger$ は A にエルミート共役な演算子と呼ばれる。$A^{\dagger\dagger} = A$。$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$（$((AB)^\dagger\varphi,\psi) = (\varphi,AB\psi) = (A^\dagger\varphi,B\psi) = (B^\dagger A^\dagger\varphi,AB\psi)$）。

$A^\dagger = A$ な演算子 A はエルミート演算子と呼ばれる。位置演算子 x や運動量演算子 p（また一般に実数値を取る物理量に対応する演算子）はエルミート演算子である（運動量 p についての証明は部分積分（と境界条件）を適用）。

演算子 A と状態（波動関数）$\varphi \neq 0$ に対して

$$\langle A\rangle = (\varphi,A\varphi)/|\varphi|^2$$

は A の（$\varphi \neq 0$ に対しての）期待値と呼ぶ。エルミート演算子の期待値は実数である（$\langle A\rangle^* = (A\varphi,\varphi)/|\varphi|^2 = (A^\dagger\varphi,\varphi)/|\varphi|^2 = (\varphi,A\varphi)/|\varphi|^2 = \langle A\rangle$）。

$A\varphi = \alpha\varphi$ のとき φ は A の固有値 α の固有関数と呼ばれる。エルミート演算子の固有値は実数である（$\alpha = \langle A\rangle$ なので）。

1.4 解析力学の復習

（後々の都合上以下では座標の記号として x の代わりに q を用いる）

- ラグランジアン $L(q,\dot{q})$ は座標 q とその時間微分 $\dot{q}$ の関数
- 運動方程式は $\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial\dot{q}} = \frac{\partial L}{\partial q}$ より導かれる
- 運動量の定義：$p \equiv \frac{\partial L}{\partial\dot{q}}$
- ハミルトニアンの定義：$H(q,p)$ は $H(q,p) \equiv p\dot{q} - L(q,\dot{q})$

1.4.1　例

ポテンシャル $V(q)$ 中を運動する質量 m 粒子（q は粒子の座標）のラグランジアン L は

$$L(q,\dot{q}) = \frac{1}{2}m\dot{q}^2 - V(q)$$

- $\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = m\dot{q}$、$\frac{\partial L}{\partial q} = V'(q)$ だから $\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = \frac{\partial L}{\partial q}$ は運動方程式 $m\ddot{q} = -V'(q)$ を与える
- $p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = m\dot{q}$
- $H(p,q) = p\dot{q} - \frac{1}{2}m\dot{q}^2 + V(q) = \frac{p^2}{2m} + V(q)$

1.5　量子化の手順

- ラグランジアン $L(q,\dot{q})$ を用意
- 運動量を計算：$p \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}$
- 「座標 q」と「運動量 p」に交換関係 $[q,p] = i\hbar$ を課する
- ハミルトニアンを計算：$H(q,p) \equiv p\dot{q} - L(q,\dot{q})$
- シュレーディンガー方程式が完成：$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = H\psi$

1.6　調和振動子

バネ定数 k のバネにつながれた質量 m のラグランジアンは

$$L = \frac{1}{2}m\dot{q}^2 - \frac{1}{2}kq^2 = \frac{1}{2}m\dot{q}^2 - \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 \tag{10}$$

ハミルトニアンは

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kq^2 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 \tag{11}$$

である（ここで $\omega \equiv \sqrt{k/m}$）。位置座標 q と運動量 p の線型結合 $a = \alpha q + i\beta p$（α と β は正の実数とする）を考える。

$$[a, a^\dagger] = 2\alpha\beta\hbar \tag{12}$$

$$\frac{1}{2}\left(a^\dagger a + aa^\dagger\right) = \alpha^2 q^2 + \beta^2 p^2 \tag{13}$$

となるから

$$[a, a^\dagger] = 1 \tag{14}$$

$$H = \frac{\gamma}{2}\left(a^\dagger a + aa^\dagger\right) = \gamma\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right) \tag{15}$$

となるような α、β、γ を求めると (11) と (13) の q^2 と p^2 の係数の比から $\alpha/\beta = m\omega$、これと (12)、(14) から $2m\hbar\omega\beta^2 = 1$ を得るので

$$\begin{cases} \alpha = & \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \\ \beta = & \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \end{cases} \tag{16}$$

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}q + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}p \tag{17}$$

(15) と (11) の q^2 と p^2 の係数の積から

$$\gamma\alpha\beta = \frac{\omega}{2} \tag{18}$$

だからこれと (12)、(14) から結局

$$H = \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right) \tag{19}$$

を得る。

1.6.1 調和振動子の標準形

座標を $q \to q/\sqrt{m}$ （従って $p \to \sqrt{m}p$）とスケール変換するとラグランジアンは

$$L = \frac{\dot{q}^2}{2} - \frac{1}{2}\omega^2 q^2 \tag{20}$$

ハミルトニアンは

$$H = \frac{p^2}{2} + \frac{1}{2}kq^2 = \frac{p^2}{2} + \frac{1}{2}\omega^2 q^2 \tag{21}$$

となる。これらを調和振動子の（ラグランジアン、ハミルトニアンの）標準形と呼ぶことにしよう。この変換で a は不変なので (19) はそのまま成り立つ。

$$a = \sqrt{\frac{\omega}{2\hbar}}q + \frac{i}{\sqrt{2\hbar\omega}}p \tag{22}$$

運動量 p は元々$p = m\dot{q}$ であったがこの変換後は $p = \dot{q}$ となることに注意。

以下ではこの標準形を使う（元に戻すには q を $\sqrt{m}q$ で置き換えればよい)。

$$q = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}}(a + a^\dagger) \tag{23}$$

$$p(= \dot{q}) = -i\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}}(a - a^\dagger) \tag{24}$$

$$\dot{a} = -i\omega a \tag{25}$$

1.6.2 調和振動子のエネルギー固有状態

$a^\dagger a$ の固有値、固有関数を考える。$a^\dagger a\,\varphi_\alpha = \alpha\,\varphi_\alpha$、$|\varphi_\alpha| = 1$ とする。$[a^\dagger a, a] = [a^\dagger, a]a = -a$ から $a^\dagger a\,a\varphi_\alpha = a\,a^\dagger a\,\varphi_\alpha - a\varphi_\alpha = (\alpha - 1)a\varphi_\alpha$、$0 \le |a\varphi_\alpha|^2 = (a\varphi_\alpha, a\varphi_\alpha) = (\varphi_\alpha, a^\dagger a\varphi_\alpha) = \alpha$ だから $a^\dagger a$ の固有値は非負の実数であり $\alpha \neq 0$ であれば φ_α に a を作用させることにより固有値が $\alpha - 1$ の固有関数が得られる。a を繰り返し作用させることにより負の固有値をもつ状態ができてしまわないためには固有値 α は非負の整数に限られることがわかる。

$a\varphi_0 = 0$ となる状態を求めよう。

$$a = \sqrt{\frac{\omega}{2\hbar}}q + \frac{i}{\sqrt{2\hbar\omega}}p = \sqrt{\frac{\omega}{2\hbar}}q + \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}}\frac{d}{dq} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}}\left(\frac{d}{dq} + \alpha q\right) \tag{26}$$

（ただし $\alpha = \omega/\hbar$）だから

$$\varphi_0(q) = \left(\frac{\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{\omega}{2\hbar}q^2\right) \tag{27}$$

とすればよい。もちろん $a^\dagger a\,\varphi_0 = 0$ だから φ_0 は $a^\dagger a$ の固有値 0 の固有状態である。

$[a^\dagger a, a^\dagger] = a^\dagger[a, a^\dagger] = a^\dagger$ から $a^\dagger a\, a^\dagger \varphi_\alpha = a^\dagger\, a^\dagger a\, \varphi_\alpha + a^\dagger \varphi_\alpha = (\alpha+1) a^\dagger \varphi_\alpha$、$|a^\dagger \varphi_\alpha|^2 = (a^\dagger \varphi_\alpha, a^\dagger \varphi_\alpha) = (\varphi_\alpha, a a^\dagger \varphi_\alpha) = (\varphi_\alpha, (a^\dagger a + 1)\varphi_\alpha) = \alpha + 1$ だから $\frac{1}{\sqrt{\alpha+1}} a^\dagger \varphi_\alpha$ は $a^\dagger a$ の固有値 $\alpha + 1$ の規格化された固有状態である。

これを繰り返すと

$$\varphi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} a^{\dagger n} \varphi_0 \tag{28}$$

は $a^\dagger a$ の固有値 $n+1$ の規格化された固有状態であり $a^\dagger a$ の固有状態はこれで尽くされる。

$H = \hbar\omega(a^\dagger a + 1/2)$ だから φ_n は n 番目の励起状態を与えエネルギー $E_n = (n+1/2)\hbar\omega$ を持つ。

2 電磁場の量子化

光は電磁波である。電磁波は文字通り波であるがこの節で行なう量子化により粒々化される。光の粒（量子）は特に光子と呼ばれる。

2.1 Maxwell 方程式

$$\begin{cases} \nabla \times \boldsymbol{E} + \frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t} &= 0 \\ \nabla \times \boldsymbol{H} - \frac{\partial \boldsymbol{D}}{\partial t} &= \boldsymbol{i} \\ \nabla \cdot \boldsymbol{D} &= \rho \\ \nabla \cdot \boldsymbol{B} &= 0 \end{cases} \tag{29}$$

$\boldsymbol{D} = \epsilon \boldsymbol{E}$、$\boldsymbol{B} = \mu \boldsymbol{H}$。

2.2 電磁場のフーリエ展開

物質が存在しない空間で考える。つまり $\rho = 0$、$\boldsymbol{i}$=0、$\boldsymbol{D} = \epsilon_0 \boldsymbol{E}$、$\boldsymbol{B} = \mu_0 \boldsymbol{H}$。

$$\begin{cases} \nabla \times \boldsymbol{E} + \frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t} &= 0 \\ \nabla \times \boldsymbol{B} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial \boldsymbol{E}}{\partial t} &= 0 \\ \nabla \cdot \boldsymbol{E} &= 0 \\ \nabla \cdot \boldsymbol{B} &= 0 \end{cases} \tag{30}$$

また電磁波は一辺の長さが L の立方体 V の中に閉じ込められているとし、周期境界条件を満たすとする。電磁場を平面波で展開する：

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{x}, t) = \sqrt{\frac{2}{L^3}} \sum_{\boldsymbol{k}} \{\boldsymbol{E}_{\boldsymbol{k}\,e}(t) \cos \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x} + \boldsymbol{E}_{\boldsymbol{k}\,o}(t) \sin \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}\} \tag{31}$$

$$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{x}, t) = \sqrt{\frac{2}{L^3}} \sum_{\boldsymbol{k}} \{\boldsymbol{B}_{\boldsymbol{k}\,e}(t) \sin \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x} - \boldsymbol{B}_{\boldsymbol{k}\,o}(t) \cos \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}\} \tag{32}$$

$$\boldsymbol{k} = (k_x, k_y, k_z) = \left(\frac{2n_x\pi}{L}, \frac{2n_y\pi}{L}, \frac{2n_z\pi}{L}\right) \tag{33}$$

n_{xyz} は整数で (31) と (32) で和を取るときは $\boldsymbol{k}$ と $-\boldsymbol{k}$ は同一視する（片方しか和を取らない）[1]。

[1] しかし後のために $\boldsymbol{E}_{\boldsymbol{k}\,e}(t)$ は $\boldsymbol{k}$ と $-\boldsymbol{k}$ 両方について定義しておく。つまり $\boldsymbol{E}_{-\boldsymbol{k}\,e}(t) = \boldsymbol{E}_{\boldsymbol{k}\,e}(t)$、$\boldsymbol{E}_{-\boldsymbol{k}\,o}(t) = -\boldsymbol{E}_{\boldsymbol{k}\,o}(t)$、$\boldsymbol{B}_{-\boldsymbol{k}\,e}(t) = -\boldsymbol{B}_{\boldsymbol{k}\,e}(t)$、$\boldsymbol{B}_{-\boldsymbol{k}\,o}(t) = \boldsymbol{B}_{\boldsymbol{k}\,o}(t)$。

$\nabla \times \boldsymbol{E} = -\frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t}$ から

$$\boldsymbol{k} \times \boldsymbol{E}_{\boldsymbol{k}\,p}(t) = \dot{\boldsymbol{B}}_{\boldsymbol{k}\,p}(t) \tag{34}$$

$(p = e, o)$。

$\nabla \cdot \boldsymbol{E} = 0$、$\nabla \cdot \boldsymbol{B} = 0$ より $\boldsymbol{E}_{\boldsymbol{k}\,p}(t) \perp \boldsymbol{k}$、$\boldsymbol{B}_{\boldsymbol{k}\,p}(t) \perp \boldsymbol{k}$。$\boldsymbol{k}$ 方向の単位ベクトルを $\hat{\boldsymbol{k}}$ とする ($\hat{\boldsymbol{k}} = \frac{1}{|\boldsymbol{k}|}\boldsymbol{k}$)。$\boldsymbol{k}$ に垂直な単位実ベクトル $\boldsymbol{i}_{\boldsymbol{k}1}$、$\boldsymbol{i}_{\boldsymbol{k}2}$ を $\boldsymbol{i}_{\boldsymbol{k}1} \perp \boldsymbol{i}_{\boldsymbol{k}2}$ となるようにとり[2] $\boldsymbol{E}_{\boldsymbol{k}\,p}(t)$、$\boldsymbol{B}_{\boldsymbol{k}\,p}(t)$ をそれぞれの方向へ分解する：

$$\boldsymbol{E}_{\boldsymbol{k}\,p}(t) = E_{\boldsymbol{k}\,p1}(t)\,\boldsymbol{i}_{\boldsymbol{k}1} + E_{\boldsymbol{k}\,p2}(t)\,\boldsymbol{i}_{\boldsymbol{k}2}{}^{3} \tag{35}$$

$$\boldsymbol{B}_{\boldsymbol{k}\,p}(t) = B_{\boldsymbol{k}\,p1}(t)\,\hat{\boldsymbol{k}} \times \boldsymbol{i}_{\boldsymbol{k}1} + B_{\boldsymbol{k}\,p2}(t)\,\hat{\boldsymbol{k}} \times \boldsymbol{i}_{\boldsymbol{k}2}{}^{4} \tag{36}$$

(34) より $E_{\boldsymbol{k}pl}(t) = \frac{c}{\omega_{\boldsymbol{k}}}\dot{B}_{\boldsymbol{k}pl}(t)$ （$\omega_{\boldsymbol{k}} = c|\boldsymbol{k}|$）。

$$\int_V |\boldsymbol{E}(\boldsymbol{x},t)|^2 d\boldsymbol{x} = \sum_{\boldsymbol{k},p} |\boldsymbol{E}_{\boldsymbol{k}\,p}(t)|^2 = \sum_{\boldsymbol{k},p,l} E_{\boldsymbol{k}\,pl}(t)^2 = \frac{c^2}{\omega_{\boldsymbol{k}}^2}\sum_{\boldsymbol{k},p,l} \dot{B}_{\boldsymbol{k}\,pl}(t)^2 \tag{37}$$

$$\int_V |\boldsymbol{B}(\boldsymbol{x},t)|^2 d\boldsymbol{x} = \sum_{\boldsymbol{k},p} |\boldsymbol{B}_{\boldsymbol{k}\,p}(t)|^2 = \sum_{\boldsymbol{k},p,l} B_{\boldsymbol{k}\,pl}(t)^2 \tag{38}$$

電磁場のラグランジアン L は

$$L = \frac{1}{2}\int_V \left\{\epsilon_0 |\boldsymbol{E}(\boldsymbol{x},t)|^2 - \frac{1}{\mu_0}|\boldsymbol{B}(\boldsymbol{x},t)|^2\right\} d\boldsymbol{x} = \frac{1}{2\mu_0}\sum_{\boldsymbol{k},p,l}\left\{\frac{1}{\omega_{\boldsymbol{k}}^2}\dot{B}_{\boldsymbol{k}\,pl}(t)^2 - B_{\boldsymbol{k}\,pl}(t)^2\right\} \tag{39}$$

$q_{\boldsymbol{k}\,pl} = \frac{1}{\sqrt{\mu_0}\omega_{\boldsymbol{k}}}B_{\boldsymbol{k}\,pl}(t)$ と変数変換すると $\dot{q}_{\boldsymbol{k}\,pl} = \sqrt{\epsilon_0}E_{\boldsymbol{k}\,pl}(t)$、

$$L = \frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{k},p,l}(\dot{q}_{\boldsymbol{k}\,pl}^2 - \omega_{\boldsymbol{k}}^2 q_{\boldsymbol{k}\,pl}^2) \tag{40}$$

「運動量」$p_{\boldsymbol{k}\,pl}$ は

$$p_{\boldsymbol{k}\,pl} = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_{\boldsymbol{k}\,pl}} = \dot{q}_{\boldsymbol{k}\,pl}$$

交換関係

$$[p_{\boldsymbol{k}\,pl}, q_{\boldsymbol{k}'\,p'l'}] = i\hbar\delta_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}\delta_{pp'}\delta_{ll'}$$

ハミルトニアン H は

$$H = \sum_{\boldsymbol{k},p,l} p_{\boldsymbol{k}\,pl}\dot{q}_{\boldsymbol{k}\,pl} - L = \sum_{\boldsymbol{k},p,l}(p_{\boldsymbol{k}\,pl}^2 + \omega_{\boldsymbol{k}}^2 q_{\boldsymbol{k}\,pl}^2) = \frac{1}{2}\int_V \left\{\epsilon_0|\boldsymbol{E}(\boldsymbol{x},t)|^2 + \frac{1}{\mu_0}|\boldsymbol{B}(\boldsymbol{x},t)|^2\right\} d\boldsymbol{x} \tag{41}$$

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{E}(\boldsymbol{x},t) &= \sqrt{\tfrac{2}{L^3}}\textstyle\sum_{\boldsymbol{k}}\left\{\boldsymbol{E}_{\boldsymbol{k}\,e}(t)\cos\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x} + \boldsymbol{E}_{\boldsymbol{k}\,o}(t)\sin\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}\right\}\\
&= \sqrt{\tfrac{2}{L^3}}\textstyle\sum_{\boldsymbol{k}l}\left\{E_{\boldsymbol{k}\,el}(t)\cos\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x} + E_{\boldsymbol{k}\,ol}(t)\sin\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}\right\}\boldsymbol{i}_{\boldsymbol{k}l}\\
&= \sqrt{\tfrac{2}{\epsilon_0 L^3}}\textstyle\sum_{\boldsymbol{k}l}\left\{\dot{q}_{\boldsymbol{k}\,el}(t)\cos\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x} + \dot{q}_{\boldsymbol{k}\,ol}(t)\sin\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}\right\}\boldsymbol{i}_{\boldsymbol{k}l}\\
&= -i\sqrt{\tfrac{1}{\epsilon_0 L^3}}\textstyle\sum_{\boldsymbol{k}l}\sqrt{\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}}\left\{\left[a_{\boldsymbol{k}\,el} - a_{\boldsymbol{k}\,el}^\dagger\right]\cos\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x} + \left[a_{\boldsymbol{k}\,ol} - a_{\boldsymbol{k}\,ol}^\dagger\right]\sin\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}\right\}\boldsymbol{i}_{\boldsymbol{k}l}
\end{aligned} \tag{42}$$

---

[2]同様に後のため $\boldsymbol{i}_{-\boldsymbol{k}\,j} = \boldsymbol{i}_{\boldsymbol{k}\,j}$ となるように取っておく。
[3]$E_{-\boldsymbol{k}\,ej}(t) = E_{\boldsymbol{k}\,ej}(t)$、$E_{-\boldsymbol{k}\,oj}(t) = -E_{\boldsymbol{k}\,oj}(t)$ となる。
[4]$B_{-\boldsymbol{k}\,ej}(t) = B_{\boldsymbol{k}\,ej}(t)$、$B_{-\boldsymbol{k}\,oj}(t) = -B_{\boldsymbol{k}\,oj}(t)$ となる。

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{B}(\boldsymbol{x},t) &= \sqrt{\tfrac{2\mu_0}{L^3}}\sum_{\boldsymbol{k}l}\omega_{\boldsymbol{k}}\left\{q_{\boldsymbol{k}\,el}(t)\sin\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x} - q_{\boldsymbol{k}\,ol}(t)\cos\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}\right\}\hat{\boldsymbol{k}}\times\boldsymbol{i}_{\boldsymbol{k}l} \\
&= \sqrt{\tfrac{\mu_0}{L^3}}\sum_{\boldsymbol{k}l}\sqrt{\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}}\left\{\left[a_{\boldsymbol{k}\,el}+a^\dagger_{\boldsymbol{k}\,el}\right]\sin\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x} - \left[a_{\boldsymbol{k}\,ol}+a^\dagger_{\boldsymbol{k}\,ol}\right]\cos\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}\right\}\hat{\boldsymbol{k}}\times\boldsymbol{i}_{\boldsymbol{k}l}
\end{aligned}
\tag{43}
$$

ただし

$$
a_{\boldsymbol{k}\,pl} = \sqrt{\frac{\omega_{\boldsymbol{k}}}{2\hbar}}q_{\boldsymbol{k}\,pl} + \frac{i}{\sqrt{2\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}}}p_{\boldsymbol{k}\,pl} \tag{44}
$$

$a_{\boldsymbol{k}l} = \frac{1}{\sqrt{2}}(ia_{\boldsymbol{k}\,el} + a_{\boldsymbol{k}\,ol})$（形式上 $a_{-\boldsymbol{k}l} = \frac{1}{\sqrt{2}}(ia_{-\boldsymbol{k}\,el} + a_{-\boldsymbol{k}\,ol}) = \frac{1}{\sqrt{2}}(ia_{\boldsymbol{k}\,el} - a_{\boldsymbol{k}\,ol})$）とおくと

$$
\boldsymbol{E}(\boldsymbol{x},t) = \sqrt{\frac{1}{2\epsilon_0 L^3}}\sum_{\boldsymbol{k}l}\sqrt{\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}}\left\{a_{\boldsymbol{k}\,l}\exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}) + a^\dagger_{\boldsymbol{k}\,l}\exp(-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x})\right\}\boldsymbol{i}_{\boldsymbol{k}l} \tag{45}
$$

$$
\boldsymbol{B}(\boldsymbol{x},t) = \sqrt{\frac{\mu_0}{2L^3}}\sum_{\boldsymbol{k}l}\sqrt{\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}}\left\{a_{\boldsymbol{k}\,l}\exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}) + a^\dagger_{\boldsymbol{k}\,l}\exp(-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x})\right\}\hat{\boldsymbol{k}}\times\boldsymbol{i}_{\boldsymbol{k}l} \tag{46}
$$

を得る。ただし今回は $\boldsymbol{k}$ と $-\boldsymbol{k}$ の同一視は行わないのですべての $\boldsymbol{k}$ について和を取る。生成消滅演算子を使った表記ではハミルトニアン H は

$$
H = \sum_{\boldsymbol{k}l}\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}\left(a^\dagger_{\boldsymbol{k}\,l}a_{\boldsymbol{k}\,l} + \frac{1}{2}\right) \tag{47}
$$

運動量 $\boldsymbol{P}$ は

$$
\boldsymbol{P} = \int\frac{1}{c^2\mu_0}\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{B}\,dV = \sum_{\boldsymbol{k}l}\frac{\hbar\boldsymbol{k}}{2}\left(a^\dagger_{\boldsymbol{k}\,l}a_{\boldsymbol{k}\,l} + a_{\boldsymbol{k}\,l}a^\dagger_{\boldsymbol{k}\,l}\right) = \sum_{\boldsymbol{k}l}\hbar\boldsymbol{k}\,a^\dagger_{\boldsymbol{k}\,l}a_{\boldsymbol{k}\,l} \tag{48}
$$

3　光と原子の相互作用

原子と光が相互作用していないときのハミルトニアン（原子と光のそれぞれのハミルトニアンの和）を H_0、それらの間の相互作用を表すハミルトニアンを H_{int} とする[5]。シュレーディンガー方程式

$$
\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{x},t) = -\frac{i}{\hbar}(H_0 + H_{int})\psi(\boldsymbol{x},t) \tag{49}
$$

から

$$
\psi(\boldsymbol{x},t_0+\Delta t) - \psi(\boldsymbol{x},t_0) \sim -\frac{i}{\hbar}H_0\psi(\boldsymbol{x},t_0)\Delta t - \frac{i}{\hbar}H_{int}\psi(\boldsymbol{x},t_0)\Delta t \tag{50}
$$

3.1　相互作用表示

(49) の右辺第１項は系が $t = t_0$ においてエネルギー固有状態（H_0 の固有状態）にあった場合には位相発展を与えるのみの役割しか持たないが、第２項と比べて通常大きさが圧倒的に大きく (50) の近似が有効な Δt の大きさを制限してしまう（そしてそれは非常に小さい←原子ー光系の場合１光周期程度以下)。そこで右辺第１項を消すために変換

$$
\psi_I(t) = e^{-i\frac{t}{\hbar}H_0}\psi(t) \tag{51}
$$

を行なう。$\psi(t) = e^{i\frac{t}{\hbar}H_0}\psi_I(t)$ をシュレーディンガー方程式 (49) に代入すると

$$
e^{i\frac{t}{\hbar}H_0}\,i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_I(t) = H_{int}e^{i\frac{t}{\hbar}H_0}\psi_I(t) \tag{52}
$$

[5] H_{int} は対角項を持たないとする（対角項は H_0 に繰り込んでおけばよい。

そこで一般に演算子 A に対して変換を

$$A_I(t) = e^{-i\frac{t}{\hbar}H_0} A e^{i\frac{t}{\hbar}H_0} \tag{53}$$

で定義すると (52) は

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_I(t) = H_{int\,I}(t)\psi_I(t) \tag{54}$$

となる。シュレーディンガー表示の波動関数 $\psi(t)$ や演算子 A に対して (51)、(52) で与えられる波動関数 $\psi_I(t)$ や演算子 A_I は相互作用表示と呼ばれる。普通時刻 t に依存しない A に対して $A_I(t)$ は時刻に依存することに注意。φ_α、φ_β が H_0 の固有状態で $H_0\varphi_\alpha = E_\alpha\varphi_\alpha$、$H_0\varphi_\beta = E_\beta\varphi_\beta$ とすると

$$\langle\varphi_\beta, A_I(t)\varphi_\alpha\rangle = e^{i\frac{t}{\hbar}(E_\alpha - E_\beta)}\langle\varphi_\beta, A\varphi_\alpha\rangle \tag{55}$$

この記号を使い初期条件として $\psi(0) = \varphi_\alpha$ とし H_{int} が適度に小さく $\psi_I(t) \sim \psi(0) = \varphi_\alpha$ が常に成り立つとすると（または成り立つ範囲の t では）

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi_I(t) = -\frac{i}{\hbar}H_{int\,I}(t)\psi_I(t) \tag{56}$$

から

$$\begin{aligned}\psi_I(t) \quad &\sim \psi(0) - \tfrac{i}{\hbar}\textstyle\int_0^t H_{int\,I}(\tau)\varphi_\alpha\, d\tau \\ &= \varphi_\alpha - \tfrac{i}{\hbar}\textstyle\sum_\beta \int_0^t \langle\varphi_\beta, H_{int\,I}(\tau)\varphi_\alpha\rangle\varphi_\beta\, d\tau \\ &= \varphi_\alpha - \tfrac{e^{i\frac{t}{\hbar}(E_\alpha - E_\beta)} - 1}{E_\alpha - E_\beta}\langle\varphi_\beta, H_{int}\,\varphi_\alpha\rangle\varphi_\beta\end{aligned} \tag{57}$$

を得る。ただし β についての和は H_0 の規格化された固有状態 φ_β について取るものとする。時刻 t において系が α から β に遷移している確率は

$$\begin{aligned}|\langle\varphi_\beta, \psi_I(t)\rangle|^2 \quad &\sim \left|\tfrac{e^{i\frac{t}{\hbar}(E_\alpha - E_\beta)} - 1}{E_\alpha - E_\beta}\langle\varphi_\beta, H_{int}\,\varphi_\alpha\rangle\right|^2 \\ &= \tfrac{4\sin^2\frac{t}{2\hbar}(E_\alpha - E_\beta)}{(E_\alpha - E_\beta)^2}\,|\langle\varphi_\beta, H_{int}\,\varphi_\alpha\rangle|^2\end{aligned} \tag{58}$$

となる（Rabi 振動）。遷移確率の最大値は

$$|\langle\varphi_\beta, \psi_I(t)\rangle|^2_{max} = \frac{4\,|\langle\varphi_\beta, H_{int}\,\varphi_\alpha\rangle|^2}{(E_\alpha - E_\beta)^2} \tag{59}$$

なので遷移確率が大きくなる条件は H_{int} の行列要素がそこそこ大きく始状態と終状態のエネルギー差がそれと同程度に小さいことである。

3.2 摂動論

ハミルトニアン H は

$$H = H^{(0)} + \lambda H^{(1)} + \lambda^2 H^{(2)} + ... \tag{60}$$

のように級数展開できるとする。また H^0 に対する（規格化された）エネルギー固有状態 $\varphi_n^{(0)}$ とその固有値 $E^{(0)}$ は知られているとする：

$$E_n^{(0)}\varphi_n^{(0)} = H^{(0)}\varphi_n^{(0)} \tag{61}$$

H のエネルギー固有状態 φ_n とその固有値 E_n、すなわち

$$E\varphi_n = H\varphi_n \tag{62}$$

をそれぞれ λ で級数展開する：

$$E_n = E_n^{(1)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + ... \tag{63}$$

$$\varphi_n = \varphi_n^{(1)} + \lambda\varphi_n^{(1)} + \lambda^2\varphi_n^{(2)} + ... \tag{64}$$

(60)、(63)、(64) を (62) に代入し λ について 1 乗の項を取り出すと

$$E_n^{(0)}\varphi_n^{(1)} + E_n^{(1)}\varphi_n^{(0)} = H_n^{(0)}\varphi_n^{(1)} + H_n^{(1)}\varphi_n^{(0)} \tag{65}$$

を得る。$\varphi_n^{(0)}$ と (65) との内積を取ると

$$E_n^{(1)} = (\varphi_n^{(0)}, E^{(1)}\varphi_n^0) = (\varphi_n^{(0)}, H^{(1)}\varphi_n^0) \tag{66}$$

ただしここで $(\varphi_n^{(0)}, \varphi_n^{(1)}) = 0$ を仮定した[6]。次に $\varphi_m^{(0)}$ $(m \neq n)$ と (65) との内積を取ると

$$E_n^{(0)}(\varphi_m^{(0)}, \varphi_n^{(1)}) = E_m^{(0)}(\varphi_m^{(0)}, \varphi_n^{(1)}) + (\varphi_m^{(0)}, H^{(1)}\varphi_n^{(0)}) \tag{67}$$

から

$$(\varphi_m^{(0)}, \varphi_n^{(1)}) = \frac{(\varphi_m^{(0)}, H^{(1)}\varphi_n^{(0)})}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \tag{68}$$

つまり

$$\varphi_n = \varphi_n^{(0)} + \lambda \sum_{m\neq n} \frac{(\varphi_m^{(0)}, H^{(1)}\varphi_n^{(0)})}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}\varphi_m^{(0)} + ... \tag{69}$$

を得る。

3.3 電磁場と荷電粒子の相互作用

スカラーポテンシャル ϕ、ベクトルポテンシャル $\boldsymbol{A}$

$$\boldsymbol{E} = -\nabla\phi - \frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t},\ \boldsymbol{B} = \nabla \times \boldsymbol{A}$$

ラグランジアン L

$$L_0 = \frac{1}{2}m\dot{\boldsymbol{x}}^2 - V(\boldsymbol{x}) + L_{EM}$$

$$L = \frac{1}{2}m\dot{\boldsymbol{x}}^2 - e\phi + \frac{e}{c}\dot{\boldsymbol{x}} \cdot \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}) - V(\boldsymbol{x}) + L_{EM}$$

運動方程式

$$m\ddot{\boldsymbol{x}} = e\left(\boldsymbol{E} + \frac{1}{c}\dot{\boldsymbol{x}} \times \boldsymbol{B}\right) - \nabla V(\boldsymbol{x})$$

運動量

$$\boldsymbol{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\boldsymbol{x}}} = m\dot{\boldsymbol{x}} + \frac{e}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})$$

ハミルトニアン $H = \boldsymbol{p} \cdot \dot{\boldsymbol{x}} - L$

$$H_0 = \frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2 + V(\boldsymbol{x}) + H_{EM}$$

$$H = \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}^2 - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\right)^2 + e\phi(\boldsymbol{x}) + V(\boldsymbol{x}) + H_{EM} = H_0 + e\phi(\boldsymbol{x}) - \frac{e}{mc}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}) \cdot \boldsymbol{p} + \frac{e^2}{c^2}|\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})|^2$$

（ただし $\nabla \cdot \boldsymbol{A} = 0$ にとった）

[6] もし $(\varphi_n^{(0)}, \varphi_n^{(1)}) = \epsilon \neq 0$ ならば φ_n を $\varphi_n/(1+\lambda\epsilon)$ で置き換えればよい。

3.4　電気双極子相互作用

電荷 $+Q$ の原子核を持ちその周りを電荷 $-Q$ の' 電子' が回っている原子を考える。電子の相対位置を $\boldsymbol{r}$ とするとこの原子が持つ双極子モーメントは $\boldsymbol{d}=-Q\boldsymbol{r}$ である。いま静電場が印加されているとする。原子の位置（原子核の位置）を $\boldsymbol{x}$ とすると電場によるポテンシャルは

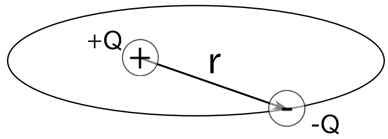

図 1: 双極子

$$H_{int}=V(\boldsymbol{x})=Q\phi(\boldsymbol{x})-Q\phi(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{r})\sim -Q\,\boldsymbol{r}\cdot\nabla\phi(\boldsymbol{x})=-\boldsymbol{d}\cdot\boldsymbol{E}(\boldsymbol{x}) \tag{70}$$

ここで ϕ はスカラーポテンシャル、$\boldsymbol{E}=-\nabla\phi$ は電場である。光のように時間変化する電磁場の場合双極子相互作用の導出はやや複雑でかつあまりスッキリしたものではないが結果は (70) と同じになる。

3.5　光子の吸収放出による運動量・角運動量の変化

原子の位置座標を $\boldsymbol{x}$ で表すとする。系（原子と光）の初期状態 α（終状態 β）として原子は運動量 $\boldsymbol{p}$（$\boldsymbol{p}'$）で運動していて内部状態は n 番目（n' 番目）の励起状態（$n=0$ ならば基底状態)、光は波数 $\boldsymbol{k}$ で $\boldsymbol{i}_{\boldsymbol{k}1}$ 方向の直線偏光の光子が m 個（m' 個）ある状態とする。

$$\langle\varphi_\beta|H_{int}\,\varphi_\alpha\rangle=\langle\varphi_{n'}|\boldsymbol{d}\,\varphi_n\rangle\cdot\langle\boldsymbol{p}'|\langle m'|\boldsymbol{E}(\boldsymbol{x})|m\rangle|\boldsymbol{p}\rangle \tag{71}$$

$a_{\boldsymbol{k}1}|m\rangle=\sqrt{m}|m-1\rangle$、$a^\dagger_{\boldsymbol{k}1}|m\rangle=\sqrt{m+1}|m+1\rangle$ だから

$$\langle\boldsymbol{p}'|\langle m'|\boldsymbol{E}(\boldsymbol{x})|m\rangle|\boldsymbol{p}\rangle=\epsilon\,\boldsymbol{i}_{\boldsymbol{k}1}\langle\boldsymbol{p}'|(\delta_{m'\,m-1}\sqrt{m}\,e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}+\delta_{m'\,m+1}\sqrt{m+1}\,e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}})|\boldsymbol{p}\rangle \tag{72}$$

運動量 $\boldsymbol{p}$ を持つ原子の波動関数は

$$e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}} \tag{73}$$

だから $e^{\pm i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}|\boldsymbol{p}\rangle=|\boldsymbol{p}\pm\hbar\boldsymbol{k}\rangle$ なので

$$\langle\boldsymbol{p}'|\langle m'|\boldsymbol{E}(\boldsymbol{x})|m\rangle|\boldsymbol{p}\rangle=\epsilon\,\boldsymbol{i}_{\boldsymbol{k}1}(\delta_{m'\,m-1}\delta_{\boldsymbol{p}'\,\boldsymbol{p}+\hbar\boldsymbol{k}}\sqrt{m}+\delta_{m'\,m+1}\delta_{\boldsymbol{p}'\,\boldsymbol{p}+\hbar\boldsymbol{k}}\sqrt{m+1}) \tag{74}$$

例えば $\boldsymbol{i}_{\boldsymbol{k}1}$ が x 軸方向の単位ベクトルとすると $\boldsymbol{d}\cdot\boldsymbol{i}_{\boldsymbol{k}1}=d_x$ だから

$$\langle\varphi_\beta|H_{int}\,\varphi_\alpha\rangle=\epsilon(\delta_{m'\,m-1}\delta_{\boldsymbol{p}'\,\boldsymbol{p}+\hbar\boldsymbol{k}}\sqrt{m}+\delta_{m'\,m+1}\delta_{\boldsymbol{p}'\,\boldsymbol{p}+\hbar\boldsymbol{k}}\sqrt{m+1})\langle\varphi_{n'}|d_x\,\varphi_n\rangle \tag{75}$$

3.6　光子の吸収放出による角運動量の変化

この節では光の進行方向（波数ベクトル $\boldsymbol{k}$ の向き）は z 軸方向とする。電子の原子核に対する相対座標を $\boldsymbol{r}=(x,y,z)$ とすると $\boldsymbol{d}=-Q\boldsymbol{r}$ だから $\langle\varphi_{n'}|\boldsymbol{d}|\varphi_n\rangle=-Q\langle\varphi_{n'}|\boldsymbol{r}|\varphi_n\rangle$ である。$\boldsymbol{i}_{\boldsymbol{k}1}$ と $\boldsymbol{i}_{\boldsymbol{k}2}$ はそれぞれ $\boldsymbol{i}_{\boldsymbol{k}1}=\hat{\boldsymbol{x}}$ と $\boldsymbol{i}_{\boldsymbol{k}2}=\hat{\boldsymbol{y}}$ と取ってよく $\boldsymbol{i}_{\boldsymbol{k}j}\cdot\langle\varphi_{n'}|\boldsymbol{d}|\varphi_n\rangle$ の評価は $\langle\varphi_{n'}|x|\varphi_n\rangle$ と $\langle\varphi_{n'}|y|\varphi_n\rangle$ の評価に帰着する。

3.6.1 L_z

角運動量演算子 $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$ の z 成分 L_z は

$$L_z = xp_y - yp_x \tag{76}$$

だから

$$[L_z, x\pm iy] = -y[p_x, x] \pm ix[p_y, y] = \hbar(\pm x + iy) = \pm\hbar(x\pm iy) \tag{77}$$

である。$L_z\varphi = l_z\varphi$ とすると $L_z(x\pm iy)\varphi = \{(x\pm iy)L_z \pm \hbar(x\pm iy)\}\varphi = (l_z\pm\hbar)(x\pm iy)\varphi$ となる。$x=\frac{1}{2}\{(x+iy)+(x-iy)\}$、$y=\frac{1}{2i}\{(x+iy)-(x-iy)\}$（斜め方向についても同様に $x+iy$ と $x-iy$ の線型結合で書ける）なので直線偏光の光を原子に当てたときに z 方向の角運動量が l_z の始状態に対して終状態として遷移可能な状態の z 方向の角運動量は l_z+1 と l_z-1 に限られる[7]。

3.6.2 $\boldsymbol{L}^2$

$L_{x_i}^2 x_j = \hbar^2 x_j$（$i\neq j$）、$L_{x_i}^2 x_i = 0$ だから $\boldsymbol{L}^2 x_i = 2\hbar^2 = 1(1+1)\hbar^2$ なので座標 x, y, z やその線型結合は” 波動関数として見たときに” いずれも角運動量の大きさは $l_p=1$ である（光子の” 角運動量” は 1）。φ の角運動量大きさが l のとき（つまり $\boldsymbol{L}^2\varphi = l(l+1)\hbar^2$）角運動量の合成則から $x\varphi$ 等が持つ角運動量の大きさは $l+1,...,|l-1|$ に限られ[8]従って遷移可能な終状態もそれらの範囲に限られる。

3.6.3 円偏光

$a_{\boldsymbol{k}1}$ は x 方向の直線偏光、$a_{\boldsymbol{k}2}$ は y 方向の直線偏光の光子の消滅演算子である。これまでこの 2 つを「基底」に取ってきたが、代わりに $a_{\boldsymbol{k}\sigma_\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_{\boldsymbol{k}1}\pm ia_{\boldsymbol{k}2})$ を基底に取ることもできる。これらは $\boldsymbol{i}_{\boldsymbol{k}1}=\hat{\boldsymbol{x}}$ と $\boldsymbol{i}_{\boldsymbol{k}2}=\hat{\boldsymbol{y}}$ の代わりに $\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\boldsymbol{x}}\pm i\hat{\boldsymbol{y}})$ とすることに相当し、従って上で見たように l_z が $m_z\to m_z\pm\hbar$ の遷移を引き起こす。

3.7 Zeeman 効果

磁場中の原子

$$H_I = -\frac{e}{mc}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\cdot\boldsymbol{p}$$

定磁場の場合 $\boldsymbol{A}=\frac{1}{2}\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{x}$ ととることができる。$\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p}=\frac{1}{2}\boldsymbol{B}\cdot(\boldsymbol{x}\times\boldsymbol{p})=\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{L}$ だから $H_I=-\mu_B\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{L}$（$\mu_B=\frac{e\hbar}{2m_e}$ はボーア磁子）。スピン $\boldsymbol{S}$ もある場合は

$$H_I = -\mu_B\boldsymbol{B}\cdot(\boldsymbol{L}+2\boldsymbol{S})$$

弱磁場ではエネルギー準位は $g\mu_B\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{J}$ に従って分裂する。g はランデの因子と呼ばれ 1〜2 の間の値をとる：

$$g = 1+\frac{J(J+1)-L(L+1)+S(S+1)}{2J(J+1)}$$

[7]光の波数の向きが xy 面内にある場合は z 方向の直線偏光があり得るが $[L_z, z]=0$ だからこの場合 z 方向の角運動量は変化しない。

[8]$l\geq 1$ ならば $l+1$ と l と $l-1$ の 3 つ、$l=1/2$ のときは 3/2 と 1/2 の 2 つ、$l=0$ のときは 1 のみ。