

現代レーザー分光学特論
「電磁場の量子化」(森永)

2020年度 Google Classroom クラスコード : 5c3juh3

講義の資料の置き場 :

<http://m.ils.uec.ac.jp/qem/>

1 概要

古典電磁気学では光 (= 電磁場) は波であったが量子化を行なうことにより光は粒子性を取り戻す。講義の後半で扱うレーザー冷却法はレーザーで原子の運動状態を自在に制御する技術であるが、光の粒である光子が原子と運動量のやりとりをすることによりこれを達成する。

2 量子力学の復習・特に調和振動子

量子化によって光がどのような意味で「粒子」となるのかを理解するためには量子力学における調和振動子の知識が必要となるのでここでは量子力学の導入から調和振動子までを簡単に復習しておく。量子力学についての簡単な知識がある者はとりあえず2.7節までスキップして必要があれば適宜戻ってきてよい。

量子論において粒子は波の性質(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

$$\varphi(x) \sim \exp(ikx) \quad (1)$$

であり、同様に角振動数 ω を持つ波は

$$\phi(t) \sim \exp(-i\omega t) \quad (2)$$

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

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

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 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。

2.1 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

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

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:

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

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:

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

そこで式 (4) の右側から波動関数 $\psi(x, t)$ を掛けた式

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

において置き換え $E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ 、 $p \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ 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:

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

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

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

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。

2.2 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

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

2.3 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

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

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

関数 $\varphi \neq 0$ に対して $A\varphi = \alpha\varphi$ 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）。

2.4 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 (下の例参照)
- 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 $H(q, p) \equiv p\dot{q} - L(q, \dot{q})$

2.4.1 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
- $p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = m\dot{q}$
- $H(p, q) = p\dot{q} - \frac{1}{2}m\dot{q}^2 + V(q) = \frac{p^2}{2m} + V(q)$

2.5 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: $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = H\psi$

2.6 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

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

ハミルトニアンは

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

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。

$$[a, a^\dagger] = 2\alpha\beta\hbar \quad (12)$$

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

となるから

$$[a, a^\dagger] = 1 \quad (14)$$

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

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 $\alpha/\beta = m\omega$ 、(12)、(14) から $\alpha\beta = \frac{1}{2\hbar}$ 、組み合わせて $2m\hbar\omega\beta^2 = 1$ を得るので

$$\begin{cases} \alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \\ \beta = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \end{cases} \quad (16)$$

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

(15) と (11) の q^2 と p^2 の係数の積から

$$\gamma\alpha\beta = \frac{\omega}{2} \quad (18)$$

だから $\gamma = \hbar\omega$ なので

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

を得る。

2.6.1 調和振動子の標準形

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

$$L = \frac{\dot{q}^2}{2} - \frac{1}{2}\omega^2 q^2 \quad (20)$$

ハミルトニアンは

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

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。

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

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)。

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

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

$$\dot{a} = -i\omega a \quad (25)$$

2.6.2 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。 $a^\dagger a \varphi_\epsilon = \epsilon \varphi_\epsilon$ 、 $|\varphi_\epsilon| = 1$ とする。 $[a^\dagger a, a] = [a^\dagger, a]a = -a$ から $a^\dagger a a \varphi_\epsilon = a a^\dagger a \varphi_\epsilon - a \varphi_\epsilon = (\epsilon - 1)a \varphi_\epsilon$ 、 $0 \leq |a \varphi_\epsilon|^2 = (a \varphi_\epsilon, a \varphi_\epsilon) = (\varphi_\epsilon, a^\dagger a \varphi_\epsilon) = \epsilon$ だから $a^\dagger a$ の固有値は非負の実数であり $\epsilon \neq 0$ であれば φ_ϵ に a を作用させることにより固有値が $\epsilon - 1$ 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 ϵ 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。

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

だから

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

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

これを繰り返すと

$$\varphi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} a^{\dagger n} \varphi_0 \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (28)$$

は $a^\dagger a$ の固有値 n 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。

2.7 調和振動子の量子化の意味

古典力学において調和振動子（バネにつながれた質点）のエネルギー E （運動エネルギー + ポテンシャルエネルギー）は振動の振幅（半幅）を x_0 とすると $E = \frac{m\omega^2}{2} x_0^2$ なので非負の任意の連続的な値を取ることができ、また振幅が大きいほうが大きい。エネルギーが一番小さくなるのは質点が $x = 0$ で静止しているときで $E = 0$ になる。一方量子論では不確定性原理により位置が決まっていることと運動量が決まっていることは両立しないので従って「 $x = 0$ にある」ことと「静止している」ことは両立せず最低エネルギー状態である基底状態（ φ_0 ）でも有限のエネルギー $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$ を持つ。また他の状態のエネルギーも $\hbar\omega$ おきの飛び飛びの値しか取ることができない。

次章で見ると量子化された電磁場では（各モードに分解した）電場が調和振動子の運動量、磁場が位置に対応した振る舞いをするのが明らかになる。このため電場と磁場はお互いを制約する関係にあり、例えば電場と磁場が同時に 0 という状態が存在しない（必ず揺らぎが存在する）。また電磁場のエネルギーが等間隔の離散的な値しか取れないため、このエネルギー間隔に等しいエネルギーを持つ「光子」によって電磁場が構成されているとの解釈が可能となる。

3 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。光が粒から成り立っているという知識自体は様々な局面で重要になるが（例えば講義のあとで出てくるレーザー冷却など）

実際の計算に量子化された場の式を使う必要がある場面は極めて限られるので、あまり細かい計算には拘らないで読み進んで構わない。

電磁場は振動数、伝搬方向、偏光方向で指定されるモード成分に分解することができる。このように分解された各モードの動的振る舞いを規定する方程式は同じ振動数の調和振動子（バネにつながれた質点）と同一であることが示される。

古典電磁気学では「実体のある量」は電場と磁場であり、ベクトルポテンシャル/スカラーポテンシャルは計算を簡単にすることはあるが最後まで使わないで通すことが可能である。一方量子論では物質との相互作用を考える際にはベクトルポテンシャル/スカラーポテンシャルは避けて通ることができず半ば実体を伴った量に昇格する。このため電磁場の量子化ではベクトルポテンシャル/スカラーポテンシャルの導入から始めるのが通例であるがゲージの選択に付随して面倒が生じる。電磁場単体で扱う限りでは電場と磁場だけで量子化することができ簡単でもあるのでここではベクトルポテンシャル/スカラーポテンシャルの導入は物質との相互作用を考えるとときまで先延ばしする。

3.1 Maxwell 方程式

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \times \mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0 \\ \nabla \times \mathbf{H} - \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = \mathbf{i} \\ \nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \\ \nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \end{array} \right. \quad (29)$$

$$\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E}, \quad \mathbf{B} = \mu \mathbf{H}.$$

3.2 電磁場の空間でのフーリエ展開

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

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \times \mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0 \\ \nabla \times \mathbf{B} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = 0 \\ \nabla \cdot \mathbf{E} = 0 \\ \nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \end{array} \right. \quad (30)$$

なお、 $c = 1/\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}$ は光速である。

以下では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¹：

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

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

¹あとで調和振動子のラグランジアンと比較するために $E_{\mathbf{k}p}$ 等の係数を実数に保ちたいので進行波 ($e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}$) ではなく定在波 (\sin や \cos) で展開している。量子化ののち進行波に戻すので二度手間ではある。

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

n_{xyz} は整数で (31) と (32) で和を取るときは \mathbf{k} と $-\mathbf{k}$ は同一視する (片方しか和を取らない)。²

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

$$\mathbf{k} \times \mathbf{E}_{\mathbf{k}p}(t) = \dot{\mathbf{B}}_{\mathbf{k}p}(t) \quad (34)$$

($p = e, o$)

$\nabla \cdot \mathbf{E} = 0$ 、 $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ より $\mathbf{E}_{\mathbf{k}p}(t) \perp \mathbf{k}$ 、 $\mathbf{B}_{\mathbf{k}p}(t) \perp \mathbf{k}$ 。 \mathbf{k} 方向の単位ベクトルを $\hat{\mathbf{k}}$ とする ($\hat{\mathbf{k}} = \frac{1}{|\mathbf{k}|}\mathbf{k}$)。 \mathbf{k} に垂直な単位実ベクトル \mathbf{i}_{k1} 、 \mathbf{i}_{k2} を $\mathbf{i}_{k1} \perp \mathbf{i}_{k2}$ となるようにとり³ $\mathbf{E}_{\mathbf{k}p}(t)$ 、 $\mathbf{B}_{\mathbf{k}p}(t)$ をそれぞれの方向へ分解する：

$$\mathbf{E}_{\mathbf{k}p}(t) = E_{\mathbf{k}p1}(t)\mathbf{i}_{k1} + E_{\mathbf{k}p2}(t)\mathbf{i}_{k2} \quad (35)$$

$$\mathbf{B}_{\mathbf{k}p}(t) = B_{\mathbf{k}p1}(t)\hat{\mathbf{k}} \times \mathbf{i}_{k1} + B_{\mathbf{k}p2}(t)\hat{\mathbf{k}} \times \mathbf{i}_{k2} \quad (36)$$

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

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

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

電磁気学によると電磁場のラグランジアン L は

$$L = \frac{1}{2} \int_V \left\{ \epsilon_0 |\mathbf{E}(\mathbf{x}, t)|^2 - \frac{1}{\mu_0} |\mathbf{B}(\mathbf{x}, t)|^2 \right\} d\mathbf{x} \quad (39)$$

なので (37) と (38) を使うと

$$L = \frac{1}{2\mu_0} \sum_{\mathbf{k}, p, l} \left\{ \frac{1}{\omega_{\mathbf{k}}^2} \dot{B}_{\mathbf{k}pl}(t)^2 - B_{\mathbf{k}pl}(t)^2 \right\} \quad (40)$$

と書き直すことができる。

$$q_{\mathbf{k}pl} = \frac{1}{\sqrt{\mu_0\omega_{\mathbf{k}}}} B_{\mathbf{k}pl}(t) \quad (41)$$

と変数変換すると $\dot{q}_{\mathbf{k}pl} = \sqrt{\epsilon_0} E_{\mathbf{k}pl}(t)$ 、

$$L = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, p, l} (\dot{q}_{\mathbf{k}pl}^2 - \omega_{\mathbf{k}}^2 q_{\mathbf{k}pl}^2) \quad (42)$$

となり電磁場の時間発展を記述するラグランジアンは調和振動子のラグランジアンの足し合わせであることがわかる。「運動量」 $p_{\mathbf{k}pl}$ は

$$p_{\mathbf{k}pl} = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_{\mathbf{k}pl}} = \dot{q}_{\mathbf{k}pl} = \sqrt{\epsilon_0} E_{\mathbf{k}pl}(t) \quad (43)$$

(43) と (41) から (波数 \mathbf{k} 、偶奇性 p 、偏光 l で指定される) 各モードの電場と磁場成分は調和振動子のそれぞれ運動量と座標と同じように振る舞うことがわかる。

²しかし後のために $E_{\mathbf{k}e}(t)$ は \mathbf{k} と $-\mathbf{k}$ 両方について定義しておく。つまり $E_{-\mathbf{k}e}(t) = E_{\mathbf{k}e}(t)$ 、 $E_{-\mathbf{k}o}(t) = -E_{\mathbf{k}o}(t)$ 、 $B_{-\mathbf{k}e}(t) = -B_{\mathbf{k}e}(t)$ 、 $B_{-\mathbf{k}o}(t) = B_{\mathbf{k}o}(t)$ 。

³同様に後のため $\mathbf{i}_{-\mathbf{k}j} = \mathbf{i}_{\mathbf{k}j}$ となるように取っておく。

⁴ $E_{-\mathbf{k}ej}(t) = E_{\mathbf{k}ej}(t)$ 、 $E_{-\mathbf{k}oj}(t) = -E_{\mathbf{k}oj}(t)$ となる。

⁵ $B_{-\mathbf{k}ej}(t) = B_{\mathbf{k}ej}(t)$ 、 $B_{-\mathbf{k}oj}(t) = -B_{\mathbf{k}oj}(t)$ となる。

交換関係

$$[q_{\mathbf{k}'l'}, p_{\mathbf{k}l}] = i\hbar\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\delta_{ll'}$$

ハミルトニアン H は

$$H = \sum_{\mathbf{k}, p, l} p_{\mathbf{k}pl} \dot{q}_{\mathbf{k}pl} - L = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, p, l} (p_{\mathbf{k}pl}^2 + \omega_{\mathbf{k}}^2 q_{\mathbf{k}pl}^2) = \frac{1}{2} \int_V \left\{ \epsilon_0 |\mathbf{E}(\mathbf{x}, t)|^2 + \frac{1}{\mu_0} |\mathbf{B}(\mathbf{x}, t)|^2 \right\} d\mathbf{x} \quad (44)$$

以上で量子化自体は終わりだが、使いやすくするために進行波によるモード展開に直しておく。

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) &= \sqrt{\frac{2}{L^3}} \sum_{\mathbf{k}} \{ \mathbf{E}_{\mathbf{k}e}(t) \cos \mathbf{k} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{E}_{\mathbf{k}o}(t) \sin \mathbf{k} \cdot \mathbf{x} \} \\ &= \sqrt{\frac{2}{L^3}} \sum_{\mathbf{k}l} \{ E_{\mathbf{k}el}(t) \cos \mathbf{k} \cdot \mathbf{x} + E_{\mathbf{k}ol}(t) \sin \mathbf{k} \cdot \mathbf{x} \} \mathbf{i}_{kl} \\ &= \sqrt{\frac{2}{\epsilon_0 L^3}} \sum_{\mathbf{k}l} \{ \dot{q}_{\mathbf{k}el}(t) \cos \mathbf{k} \cdot \mathbf{x} + \dot{q}_{\mathbf{k}ol}(t) \sin \mathbf{k} \cdot \mathbf{x} \} \mathbf{i}_{kl} \\ &= -i \sqrt{\frac{1}{\epsilon_0 L^3}} \sum_{\mathbf{k}l} \sqrt{\hbar\omega_{\mathbf{k}}} \left\{ [a_{\mathbf{k}el} - a_{\mathbf{k}el}^\dagger] \cos \mathbf{k} \cdot \mathbf{x} + [a_{\mathbf{k}ol} - a_{\mathbf{k}ol}^\dagger] \sin \mathbf{k} \cdot \mathbf{x} \right\} \mathbf{i}_{kl} \\ &= \sqrt{\frac{1}{2\epsilon_0 L^3}} \sum_{\mathbf{k}l} \sqrt{\hbar\omega_{\mathbf{k}}} \left\{ [a_{\mathbf{k}el} - a_{\mathbf{k}el}^\dagger] (e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}) \right. \\ &\quad \left. + [a_{\mathbf{k}ol} - a_{\mathbf{k}ol}^\dagger] (-ie^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} + ie^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}) \right\} \mathbf{i}_{kl} \\ &= \sqrt{\frac{1}{2\epsilon_0 L^3}} \sum_{\mathbf{k}l} \sqrt{\hbar\omega_{\mathbf{k}}} \left\{ -\frac{1}{\sqrt{2}}(ia_{\mathbf{k}el} + a_{\mathbf{k}ol})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} - \frac{1}{\sqrt{2}}(-ia_{\mathbf{k}el}^\dagger + a_{\mathbf{k}ol}^\dagger)e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{\sqrt{2}}(ia_{\mathbf{k}el} - a_{\mathbf{k}ol})e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} - \frac{1}{\sqrt{2}}(-ia_{\mathbf{k}el}^\dagger - a_{\mathbf{k}ol}^\dagger)e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \right\} \mathbf{i}_{kl} \end{aligned} \quad (45)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) &= \sqrt{\frac{2\mu_0}{L^3}} \sum_{\mathbf{k}l} \omega_{\mathbf{k}} \{ q_{\mathbf{k}el}(t) \sin \mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - q_{\mathbf{k}ol}(t) \cos \mathbf{k} \cdot \mathbf{x} \} \hat{\mathbf{k}} \times \mathbf{i}_{kl} \\ &= \sqrt{\frac{\mu_0}{L^3}} \sum_{\mathbf{k}l} \sqrt{\hbar\omega_{\mathbf{k}}} \left\{ [a_{\mathbf{k}el} + a_{\mathbf{k}el}^\dagger] \sin \mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - [a_{\mathbf{k}ol} + a_{\mathbf{k}ol}^\dagger] \cos \mathbf{k} \cdot \mathbf{x} \right\} \hat{\mathbf{k}} \times \mathbf{i}_{kl} \\ &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\mu_0}{L^3}} \sum_{\mathbf{k}l} \sqrt{\hbar\omega_{\mathbf{k}}} \left\{ [a_{\mathbf{k}el} + a_{\mathbf{k}el}^\dagger] (-ie^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} + ie^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}) \right. \\ &\quad \left. - [a_{\mathbf{k}ol} + a_{\mathbf{k}ol}^\dagger] (e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}) \right\} \hat{\mathbf{k}} \times \mathbf{i}_{kl} \\ &= \sqrt{\frac{\mu_0}{2L^3}} \sum_{\mathbf{k}l} \sqrt{\hbar\omega_{\mathbf{k}}} \left\{ -\frac{1}{\sqrt{2}}(ia_{\mathbf{k}el} + a_{\mathbf{k}ol})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} - \frac{1}{\sqrt{2}}(-ia_{\mathbf{k}el}^\dagger + a_{\mathbf{k}ol}^\dagger)e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{\sqrt{2}}(ia_{\mathbf{k}el} - a_{\mathbf{k}ol})e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} + \frac{1}{\sqrt{2}}(-ia_{\mathbf{k}el}^\dagger - a_{\mathbf{k}ol}^\dagger)e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \right\} \hat{\mathbf{k}} \times \mathbf{i}_{kl} \end{aligned} \quad (46)$$

ただし

$$a_{\mathbf{k}pl} = \sqrt{\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{2\hbar}} q_{\mathbf{k}pl} + \frac{i}{\sqrt{2\hbar\omega_{\mathbf{k}}}} p_{\mathbf{k}pl} \quad (47)$$

$a_{\mathbf{k}l} = -\frac{1}{\sqrt{2}}(ia_{\mathbf{k}el} + a_{\mathbf{k}ol})$ (形式上 $a_{-\mathbf{k}l} = -\frac{1}{\sqrt{2}}(ia_{-\mathbf{k}el} + a_{-\mathbf{k}ol}) = -\frac{1}{\sqrt{2}}(ia_{\mathbf{k}el} - a_{\mathbf{k}ol})$) とおくと $[a_{\mathbf{k}l}, a_{\mathbf{k}'l'}^\dagger] = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\delta_{ll'}$ であり

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = \sqrt{\frac{1}{2\epsilon_0 L^3}} \sum_{\mathbf{k}l} \sqrt{\hbar\omega_{\mathbf{k}}} \left\{ a_{\mathbf{k}l} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) + a_{\mathbf{k}l}^\dagger \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \right\} \mathbf{i}_{kl} \quad (48)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{x}, t) = \sqrt{\frac{\mu_0}{2L^3}} \sum_{\mathbf{k}l} \sqrt{\hbar\omega_{\mathbf{k}}} \left\{ a_{\mathbf{k}l} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) + a_{\mathbf{k}l}^\dagger \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \right\} \hat{\mathbf{k}} \times \mathbf{i}_{kl} \quad (49)$$

を得る。ただし今回は k と $-k$ の同一視は行わないのですべての k について和を取る ($i_{-kl} = i_{kl}$ 、 $-\hat{\mathbf{k}} \times i_{-kl} = -\hat{\mathbf{k}} \times i_{kl}$ に注意) $a_{\mathbf{k}l}$ は波数 k と偏光 l で指定される進行波モードの光子を一つ消す消滅演算子である。生成消滅演算子を使った表記ではハミルトニアン H は

$$H = \sum_{\mathbf{k}l} \hbar\omega_{\mathbf{k}} \left(a_{\mathbf{k}l}^\dagger a_{\mathbf{k}l} + \frac{1}{2} \right) \quad (50)$$

運動量 P は

$$\mathbf{P} = \int \frac{1}{c^2\mu_0} \mathbf{E} \times \mathbf{B} dV = \sum_{\mathbf{k}l} \frac{\hbar\mathbf{k}}{2} \left(a_{\mathbf{k}l}^\dagger a_{\mathbf{k}l} + a_{\mathbf{k}l} a_{\mathbf{k}l}^\dagger \right) = \sum_{\mathbf{k}l} \hbar\mathbf{k} a_{\mathbf{k}l}^\dagger a_{\mathbf{k}l} \quad (51)$$