前期量子論における自然放出と輻射力の問題

今 野 宏 之

多重周期系で自然放出の過程をどのように説明しようとしたかを分析することが，この小論の目的である。すでに筆者は別の論文[1]で，自然放出の確率をKramersの分散式の振幅に導入するさいに，対応原理の適用限界を補完して仮想振動子モデルが一定の役割を果たしたことを論じている。本稿はその補足的議論である。

〈遷移過程の導入〉

1913年のBohrの原子構造論[2]に導入された仮定の一つは，不連続な輻射の放出・吸収を行なう遷移過程であった。しかし，遷移過程がどのように起こるかは説明されなかった。1916年になるとEinsteinは[3]，離散的エネルギーをもった分子と黒体輻射との間の熱平衡にBoltzmannの原理を用いて，確率的にではあったが遷移過程を支配する法則を与えた。Einsteinの議論はおよそつぎのようなものである。

二つの定常状態mとnを考え，温度Tにおいて，それぞれの状態にN_m，N_n個の分子が存在するとすれば，統計力学から

$$\frac{N_m}{N_n}=\frac{p_m\exp\ (-E_m/\,kT)}{p_n\exp\ (-E_n/\,kT)} \tag{1}$$

が成り立つ。ここでkはBoltzmann定数，p_m，p_nは統計的重み（あるいはアプリオリ確率）である。外場がないときの自然放出の確率係数および外場による誘導放出と吸収の確率係数をそれぞれA_{mn}，B_{mn}，B_{nm}とすると，単位時間内に状態mからnへ遷移することによって放出されるエネルギーは

$$\Delta E_{mn}=h\nu_{mn}N_m\ [A_{mn}+B_{mn}\rho(\nu_{mn})] \tag{2}$$

と表わされる。$\rho(\nu_{mn})$は振動数ν_{mn}の外場のエネルギー密度で，hはPlanck定数である。逆に状態nからmに遷移することによって吸収されるエネルギーは

$$\Delta E_{nm}=h\nu_{nm}N_nB_{nm}\rho(\nu_{nm}) \tag{3}$$

である。ここで統計的平衡が成り立つならば$\Delta E_{mn}=\Delta E_{nm}$であり，確率係数の間には

$$B_{nm}=\ (p_m/p_n)B_{mn}, \tag{4 a}$$

$$A_{mn}=\ (8\pi h\nu^3/c^3)B_{mn} \tag{4 b}$$

という関係が導かれる。

こうしてスペクトル線の強度は，外場のエネルギー密度，遷移の始状態にある原子の数，遷移確率の三つの要因によって決定されることがわかった。原子の数は(1)式から求められるが，統計的重みは別に決定しなければならない。しかし，非縮退系に限定すれば$p_m/p_n=1$と考えてよい。問題は遷移確率をどうやって求めるかである。確率係数A，Bをてがかりにすれば，遷移過程を論じる道が拓かれる。しかし，EinsteinはAとBの相対的な関係を与えたにすぎない。そこでAやBの

絶対的な値を求めることが新たな課題になる。A，Bの両方を独立に求められる理論をつくることが一番望ましいのだが，それが早急には無理であれば，AかBのどちらか一方を求めれば，(4 b)の関係式からもう一方が求められる。

ではAなりBなりを求める方法は何かということになる。新しい理論をつくるには従来の理論をてがかりにするしかないだろう。そこで古典電気力学にたよることになる。量子論の離散性は電気力学とは相容れない性質であったが，だからといって電気力学の理論体系そのものを拒否するのは賢明ではない。拒否するのではなく，近似にたよりながら新しい理論を構築していく——それが歴史的にとられた実際の経緯であり，その方法論的指導原理になったのが，Bohr の対応原理であった[(4)]。そして Kramers が[(5)]Aを求める方向づけをしたのだった。

〈振動子系による放出〉

遷移の問題を考えるとき，外場が存在しない場合 ($\rho=0$) が一番簡単であろう。自然放出しか存在しないので，まずはAだけを考えればよいわけだ。そうすると(2)より，単位時間当たりの自然放出のエネルギーは

$$E_{mn}=h\nu_{mn}N_m A_{mn} \tag{5}$$

と表わされる。

Einstein は離散的エネルギーをもった振動子モデルで論じた。そして電荷をもった振動子は，外場の存在とは無関係に，その振動により輻射を放出することになぞらえて，自然放出の概念を導入した。したがって，Aの算出もこの線で考えられたのは当然のことといえよう。

電子論によると一次元調和振動子

$$x=x_0\cos 2\pi\omega t \tag{6}$$

（x_0は振幅）の振動によって、単位時間内に一個の振動子から放出されるエネルギーは

$$\Delta E_{cl}=\frac{2e^2}{3c^3}\ddot{x}^2=\frac{16\pi^4e^2}{3c^3}\nu^4x_0^2 \tag{7}$$

である。ただし，ここでは$\nu=\omega$という関係を使っている。

つぎにこれを量子的振動子で論じよう。基本振動数ωには倍振動がないので量子数は$\Delta n=\pm 1$しか変化しない。そこで量子状態$n\to(n-1)$の遷移による放出を考えよう。量子数がnの状態にある質量mの振動子

$$x=x_n\cos 2\pi\omega_n t \tag{8}$$

のもつ力学的エネルギーW_nは

$$W_n=2\pi^2\omega_n^2mx_n^2 \tag{9}$$

であり，この振動子は量子論では

$$E_n=nh\omega_n \tag{10}$$

という不連続なエネルギーをもつ。(9)，(10)式から振幅について

$$x_n^2=\frac{nh}{2\pi^2\omega_n^2m} \tag{11a}$$

を得る。同様に$(n-1)$の状態にある振動子$x=x_{n-1}\cos 2\pi\omega_{n-1}t$については

$$x_{n-1}{}^2=\frac{(n-1)h}{2\pi^2\omega_{n-1}{}^2 m} \tag{11b}$$

となる。ここで問題になるのは振動数と振幅についてである。古典的振動子であれば(6)のように，x 座標で振動して(7)のエネルギーを放出する。しかし，量子的振動子はそれぞれ定常状態 n と $(n-1)$ に所属する。そして遷移過程で放出するのであって，定常状態に存在するときではない。また，放出される輻射の振動は ω_n でも ω_{n-1} でもなく，遷移振動数 $\nu_{n(n-1)}=E_n-E_{n-1}/h$ である。しかし，振動数の場合，量子数の大きな領域では対応原理によって ω_n, $\omega_{n-1}\sim\nu_{n(n-1)}$ となる。それにたいして，振幅の場合は対応原理で一義的に決定することはできない(6)。そこで n と $(n-1)$ 状態のそれぞれの振幅を平均した振幅 $\overline{X_{n(n-1)}{}^2}$ を考える。こうして量子数大の領域では，(7)に対応する量子的振動子の放射エネルギー $\Delta E_{n(n-1)}$ は

$$\Delta E_{n(n-1)}=\frac{16\pi^4 e^2}{3c^3}\nu_{n(n-1)}{}^4\overline{X_{n(n-1)}{}^2} \tag{12}$$

となる。また(5)より，一個の量子的振動子が単位時間当たり放出するエネルギーは $\Delta E_{n(n-1)}=h\nu_{n(n-1)}\cdot A_{n(n-1)}$ であるから

$$A_{n(n-1)}=\frac{16\pi^4 e^2}{3c^3 h}\nu_{n(n-1)}{}^3\overline{X_{n(n-1)}{}^2} \tag{13}$$

という漸近的関係が得られる。

しかし，（古典論であれ量子論であれ）調和振動子は多重 Fourier 級数の一つの調和成分でしかない。電子論は振動子の運動を微分方程式で表わし，これを解くことによって論じられていたが，1918年の Bohr の原子構造論では原子を多重周期系で論じていた。したがって，より一般的には多重周期系で放出エネルギーを書き表さなければならない。

〈多重周期系の放出過程〉

定常状態は，量子条件 $J_k=n_k h$（n_k は量子数，$k=1, 2, \cdots, s$）が適用される量子化された軌道であるが，電子はこの定常軌道上での運動のみが許され，その x 座標は

$$x=\Sigma_\tau X_\tau \cos\left[2\pi(\tau_1\omega_1+\cdots+\tau_s\omega_s)\ t+\gamma_\tau\right] \tag{14}$$

という自由度 s の多重 Fourier 級数に展開することができる（y, z についても同様）。ここで ω_1, $\cdots$, ω_s は電子の基本振動数である。Σ_τ は正負にわたるすべての整数 $\tau\equiv\tau_1, \cdots, \tau_s$ について，$\tau_1\omega_1+\cdots+\tau_s\omega_s\equiv\omega_\tau>0$ という制限で総和を取ることを意味する。振幅 X_τ は軌道定数 J_k のみに依存し，その値は Fourier 係数を求めるやり方で決定される。また γ_τ は位相角を表わす定数である。

電子が，量子数 n'（n_1', $\cdots$, n_s'）の定常軌道から，n''（n_1'', $\cdots$, n_s''）の軌道へ遷移する場合を考えよう。定常軌道 n' を周回している電子は，加速度運動をしているにもかかわらず，量子論の要請によって，エネルギーを放出しない。古典論の放出は量子論では遷移過程のほうに対応させる。周回電子は軌道 n' を離れ"許されない軌道"を経て，より低いエネルギーの軌道 n'' へ落ち込む。"許されない軌道"とは定常状態間に存在する，振動数条件では許されない軌道だが，力学的には可能な軌道のことである。振幅は始状態 n' の軌道の振幅 $X_{n'}$ に始まり減衰しながら終状態 n'' の軌道で定められる振幅 $X_{n''}$ で終る。そのとき放出される輻射の振動数は $\tau_1\omega_1+\cdots+\tau_s\omega_s$ のあらゆる可能な組み合わせの結合倍音が一度に放出される。しかし，量子論では $\nu_{n'n''}$ という単色の輻射しか放出され

ない。そこで量子数の高い領域で $\omega_\tau \sim \nu_{n'n''}$ という対応関係を使う。問題は振幅の場合である。振幅にたいしては量子的振動子のときと同じく，始状態から“許されない軌道”を経て終状態にいたる振幅の何か平均のようなものを考える。こうして多重周期系についても(13)と同様な漸近的関係

$$A_{n'n''} = \frac{16\pi^4 e^2}{3c^3 h} \nu_{n'n''}{}^3 \overline{X_{n'n''}{}^2} \tag{15}$$

を得る。

〈仮想振動子と振幅〉

Kramers は，量子論的分散式の振幅を $\overline{X_{n'n''}{}^2}$ というような各軌道に所属する振幅の平均と考えず，これを $X_q{}^2$ という，二つの状態 n'，n'' にまたがる振幅 X_q の2乗と読み直して，この振幅を担う仮想振動子を仮設したのだった。したがって，量子的振動子イコール仮想振動子ではない。また仮想振動子のもつ振動数と振幅は二つの定常状態にまたがる物理量であるにもかかわらず，それぞれの定常状態に所属することにこだわったため，さらに仮想輻射場を想定し，それが二つの定常状態に存在する仮想振動子同士をつなぐ機能をもたせることになる。そして連続的な電磁場と不連続的な原子のエネルギー変化を折り合わせるために，この仮想輻射場は，仮想振動子同士を統計的に結びつける役割をもつことになった(7)。

〈輻射力の摂動論〉

遷移過程を減衰輻射と対応させながら，それにともなう輻射力が量子論でどのように取り扱うべきかは棚上げにされていた。これを論じた一人が Van Vleck であった(8)。彼は，輻射力を多重周期系に作用する摂動とみなして解くことによって，古典の放出過程を輻射力と関連づけたのだった。彼の論点はつぎのようなものである。

輻射エネルギーの放出は，外場が存在しない，つまり自然放出という特殊な場合についてのみ研究されてきた。しかし放出だけを論じるのでは不十分だから，同じようにして多重周期系における吸収の計算も行なおう，というのが Van Vleck の目的だった。自然放出の場合と異なり，吸収を取り扱う場合は，外場を想定しなければならないので，必然的に摂動法を適用しなければならない。そして，電気力学による外の輻射場からのエネルギーの吸収と，量子論における正の吸収および負の吸収(誘導放出)との間の対応原理的関係を論じた。まず，ある与えられた軌道 s (n_1，…，n_s) を基準にして，それより上方の軌道 r ($n_1+\tau_1$，…，$n_s+\tau_s$) への遷移と下方の軌道 t ($n_1-\tau_1$，…，$n_s-\tau_s$) への遷移の二つの振動数の比を考えたとき，大きな量子数ではこの比は一定になる。つまり $(W_r-W_s)/(W_s-W_t)=\nu_{rs}/\nu_{st}\rightarrow 1$ に近づくような準位 r と t が存在する。そこで，上方への遷移 $s\rightarrow r$ による正の吸収が，対応する下方への遷移 $s\rightarrow t$ に対する負の吸収を上回る過剰分（一般に定常状態間 $s\rightarrow r$ と $s\rightarrow t$ のエネルギー差は等しくない）を微分吸収と定義する。つまり，式(2)の B_{mn} の項から(3)を差し引いたもので，Van Vleck の表記では

$$\Delta F = [h\,\nu_{rs}\rho(\nu_{rs})\ B_{s\rightarrow r} - h\,\nu_{st}\rho(\nu_{st})\ B_{s\rightarrow t}]\,N\,\Delta t$$

となる。これは N 個の原子によって近似的な振動数 ω_τ の光が Δt 時間に吸収されるときの微分吸収を表わす。大きな量子数のところでは，吸収対放出の比に対する古典論的値は，微分吸収対自然放出の比に対する量子論的値に漸近的に近づく，すなわち

$$\begin{pmatrix} \langle\text{古典論}\rangle \\ \dfrac{\text{吸収}}{\text{放出}} \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{量子数大}} \begin{pmatrix} \langle\text{量子論}\rangle \\ \dfrac{\text{微分吸収}}{\text{自然放出}} \end{pmatrix}$$

となるので，古典論の放出が量子論の自然放出に数値的に一致すれば，必然的に，古典論の吸収が量子論の微分吸収に漸近的に一致することが示される。

Van Vleck は，電子が輻射を放出することによって生じる反作用，つまり全輻射力$F=(2e^2/3c^3)\dddot{x}$を多重 Fourier 展開したなかで，遷移振動数に対応するτ_1，…，τ_sの組み合わせの項のみを残し，これを“省略輻射力”とよび，摂動項とみなして論じた。彼は計算を容易にするためにxについては(14)の代りに指数関数の表記を用いている。したがって省略輻射力のx成分は

$$F_x=(-16\pi^3 i e^2/3c^3)\Sigma_\tau\{\omega_\tau{}^3X_\tau \exp[2\pi i(\omega_\tau t+\gamma_\tau)]\} \tag{16}$$

となる。ただし，この形の力は輻射の減衰が小さい時間内で成り立つ。デカルト座標系から作用–角変数（J，w）の座標系へ接触変換を行ない，Jの摂動項ΔJを求めるのだが，そのため彼は，すでに論じていた吸収の摂動の方法をこれに応用した。そして$\mathrm{d}J_k/\mathrm{d}t$を求め，その時間平均を積分することによって

$$\Delta J_k=t(-16\pi^4e^2/3c^3)\Sigma_\tau\{\tau_k\omega_\tau{}^3C_\tau{}^2\} \tag{17}$$

を得た。ただし$C_\tau{}^2=X_\tau{}^2+Y_\tau{}^2+Z_\tau{}^2$である。省略輻射力では

$$\Delta J_1:\Delta J_2:\cdots:\Delta J_s=\tau_1:\tau_2:\cdots:\tau_s$$

であり，平均の輻射率は系のエネルギーWの変化率にマイナスをつけたものである。(17)および$\partial H/\partial J_k=\omega_k$より

$$-\frac{\mathrm{d}W}{\mathrm{d}t}=\sum_{l=1}^{s}\frac{\partial H}{\partial J_l}\frac{\mathrm{d}J_l}{\mathrm{d}t}=\frac{16\pi^4e^2}{3c^3}\Sigma_\tau\,\omega_\tau{}^4C_\tau{}^2 \tag{18}$$

となる。これが(7)に対応する。

電子論では減衰項を加えた運動方程式を解くことによって(7)が得られる。多重周期系の放出エネルギーとして論じる場合，従来は(7)のxを単に多重周期系の座標に置き換えるだけだったが，Van Vleck が証明したように，多重周期系に摂動論を用いて，省略輻射力を摂動項とすればその対応関係が間違いでなかったことがわかった。

文献と注

(1) “自然放出の概念と仮想振動子モデル”『科学史研究』171号（1989），152–160.

(2) N. Bohr, “On the Constitution of Atoms and Molecules,” Part I, *Phil. Mag.*, **26** (1913), 1–25；邦訳『原子構造論』物理学古典論文叢書（以下，古典叢書とする）10，東海大学出版会1969年，pp. 163–186（後藤鉄男訳）；Part II, *ibid.*, 476–502；Part III, *ibid.*, 857–875.

(3) A. Einstein, (a) “Strahlungs-Emission und -Absorption nach der Quantentheorie,” *Verh. Deutsch. Phys. Ges.*, **18** (1916), 318–323；邦訳『光量子論』古典叢書 2，1969年, pp. 93–98.（上川友好訳）；(b) “Zur Quantentheorie der Strahlung,” *Phys. Zs.*, **18** (1917), 121–128；邦訳，前掲書，pp. 101–115に所収.

(4) N. Bohr, “On the Quantum Theory of Line-Spectra,” Part I, *Kgl. Danske Vid. Selsk. Skrifter*, 8. *Raekke* IV. 1 (1918), 1–36；邦訳『前期量子論』古典叢書 3，1970年，pp. 189–232.（荒牧正也訳）

(5) H. A. Kramers, “Intensities of Spectral Lines,” *Kgl. Danske Vid. Selsk. Skrifter*, 8. *Raekke*, III. 3 (1919), 1–103.

(6) 詳しくは拙稿，注(1)を参看されたい。

(7) N. Bohr, H. A. Kramers, and J. C. Slater, "The Quantum Theory of Radiation," *Phil. Mag.*, **47** (1924), 785–822. また，分散理論における仮想振動子モデルについては H. A. Kramers, "The Law of Dispersion and Bohr's Theory of Spectra," *Nature*, **113** (1924), 673–647.

(8) J. H. Van Vleck, "The Absorption of Radiation by Multiply Periodic Orbits, and its Relation to the Correspondence Principle and the Rayleigh-Jeans Law," *Phy. Rev.*, **24** (1924), Part I. 330–346 ; Part II. 347–365 ; 邦訳『前期量子論』古典叢書 3，pp. 307–348.（後藤順子訳）

A Corresponding Relation between the Spontaneous Emission and the Radiation Force in the Old Quantum Theory

Hiroyuki KONNO

In the stage of the old quantum theory, the probability coefficient of the spontaneous emission was first determined by the asymptotic relation (15) (in the text). The spontaneous emission was assumed to correspond to the classical radiation process, whereas the radiation force accompanied by the emission was left untouched. By regarding the damping force due to the electron's own radiation as a perturbation, J. H. Van Vleck showed that the perturbation theory of the "abridged" radiation force (obtained by retaining only a term of the combination overtone $\tau_1\omega_1+\cdots+\tau_s\omega_s$) led to the same relation (18) as the classical Eq. (7).

—平成元年 9 月30日受理—

（本学助教授・科学史）