（複習） 周期的な摂動による遷移

$$V(t) = \hat{H} e^{\pm i\omega t}$$

↓ 単位時間当りの遷移確率：

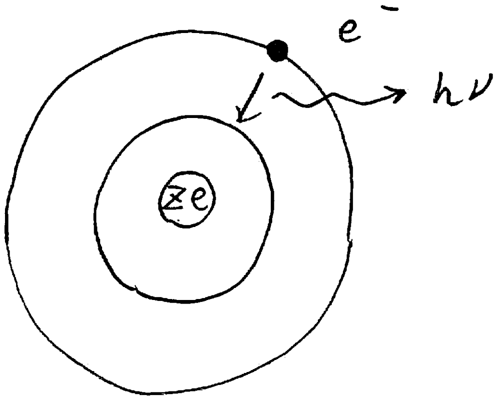
$$W_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f|\hat{H}|i\rangle|^2 \cdot \underbrace{\sum_f \delta(E_f - E_i \pm \hbar\omega)}_{= \rho(E_f = E_i \mp \hbar\omega)}$$

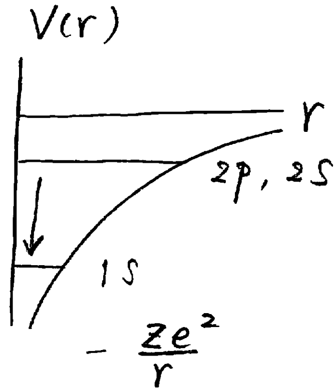
$E = E_f$ を持つ終状態を全て足す

"Fermi の Golden Rule（黄金則）"

2.5 電磁遷移

原子と電磁場の相互作用





$$H = \frac{\mathbb{P}^2}{2m} + V(r)$$

$$\longrightarrow \frac{1}{2m}\left(\mathbb{P} + \frac{e}{c}A(\mathbb{r},t)\right)^2 + V(r) - e\phi(r,t)$$

と変更すると電子と電磁場の相互作用を記述できる。

(note) 古典的運動方程式

$$m\ddot{\mathbb{r}} = -e\left[\mathbb{E}(\mathbb{r},t) + \frac{1}{c}\mathbb{v}\times\mathbb{B}(\mathbb{r},t)\right]$$

が導びかれる。

$$\begin{cases} \mathbb{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}A \\ \mathbb{B} = \nabla\times A \end{cases}$$

$$H = \frac{1}{2m}\mathbb{P}^2 + V(r) + \frac{e}{2mc}(\mathbb{P}\cdot A + A\cdot\mathbb{P}) + \underbrace{\frac{e^2}{2mc^2}A^2}_{= O(e^2) \to \text{ムシ}} - e\phi$$

↓ クーロン・ゲージ $\nabla\cdot A = 0,\ \phi = 0$ をとる

$$H = \frac{1}{2m}\mathbb{P}^2 + V(r) + \frac{e}{mc}A\cdot\mathbb{P}$$

$$H = \underbrace{\frac{\mathbb{P}^2}{2m} + V(r)}_{\substack{\parallel \\ H_0}} + \underbrace{\frac{e}{mc}\mathbb{A}\cdot\mathbb{P}}_{\substack{\parallel \\ 摂動}}$$

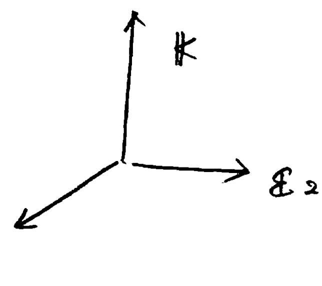
(準備) マクスウェル方程式： $\left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2\right)\mathbb{A}(\mathbb{r}, t) = 0$

解： $\mathbb{A}(\mathbb{r}, t) = \mathbb{A}_0\, e^{i(\mathbb{k}\cdot\mathbb{r} - \omega t)} + c.c.$

$(\omega = ck)$

クーロン・ゲージ $\nabla\cdot\mathbb{A} = 0$

$\rightarrow \quad \mathbb{k}\cdot\mathbb{A}_0 = 0$ （横波条件）



2つの独立解

$\mathbb{A}_0 = A_0\cdot\varepsilon_\alpha$

$(\alpha = 1, 2)$

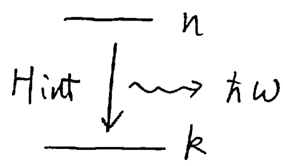
偏極ベクトル

$$A_0 = \sqrt{\frac{2\pi c^2\hbar}{\omega}}\;\underset{\sim}{a_{\mathbb{k}\alpha}} \quad (\leftarrow 量子電気力学)$$

フォトン消滅演算子

○電磁波の放出

$$H_{int} = \frac{e}{mc} A_0^* \,\varepsilon_\alpha \cdot \mathbb{p}\, e^{-i(\mathbb{k}\cdot\mathbb{r} - \omega t)}$$



始状態 $|\phi_n\rangle$

終状態 $|\phi_k\rangle \quad (+\ \text{フォトン}\ |\mathbb{k}\,\underset{\substack{\uparrow \\ \text{偏極}}}{\alpha}\rangle\ )$

$$W_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \sum_\alpha \delta(E_k - E_n + \hbar\omega)$$

$$\times \left| \langle \phi_k | \frac{e}{mc} A_0^* \,\varepsilon_\alpha \cdot \mathbb{p}\, e^{-i\mathbb{k}\cdot\mathbb{r}} | \phi_n \rangle \right|^2$$

(note) $d^3k = k^2 dk\, d\Omega_k = k^2 \cdot \dfrac{d\overset{\omega}{(ck)}}{c} d\Omega_k$

$$= \frac{k^2}{\hbar c} d(\hbar\omega)\, d\Omega_k$$

↓

$$W_{fi} = \sum_\alpha \int \underbrace{d\Omega_k}_{\text{フォトンの放射方向}} \frac{1}{2\pi} \cdot \frac{e^2}{\hbar c} \cdot \frac{E_n - E_k}{\hbar}$$

$$\times \left| \frac{1}{mc} \langle \phi_k | e^{-i\mathbb{k}\cdot\mathbb{r}} \,\varepsilon_\alpha \cdot \mathbb{p} | \phi_n \rangle \right|^2$$

$$\frac{dW_{fi}}{d\Omega_k} = \sum_\alpha \frac{1}{2\pi} \cdot \frac{e^2}{\hbar c} \frac{E_n - E_k}{\hbar} \left| \frac{1}{mc} \langle \phi_k | \cdots | \phi_n \rangle \right|^2$$

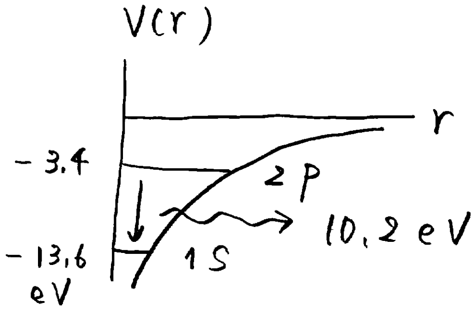
• 双極子近似

$$e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \sim 1 \qquad (\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} \ll 1)$$

$$k \ll \frac{1}{r} \qquad (\text{長波長近似})$$

水素原子 : $E_n = -\frac{1}{2} mc^2 \cdot \frac{\alpha^2}{n^2} \qquad (\alpha = \frac{1}{137})$

$$\downarrow \quad E_2 - E_1 \sim 10.2\,\mathrm{eV}$$



$$\hbar\omega \sim 10\ \mathrm{eV}$$

$$k = \frac{\omega}{c} = \frac{\hbar\omega}{\hbar c} \sim \frac{10\ \mathrm{eV}}{2000\ \mathrm{eV}\cdot\mathrm{\mathring{A}}} = \frac{1}{200}\ \mathrm{\mathring{A}}^{-1}$$

$$r \sim O(\mathrm{\mathring{A}})$$

$$\Downarrow$$

$$k \ll \frac{1}{r}.$$

10^{-15} m

॥

(note) $\hbar c = 197.3\ \mathrm{MeV}\cdot\mathrm{fm}$

$= 1973\ \mathrm{eV}\cdot\mathrm{\mathring{A}}$

↓

$$\langle \phi_k | e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \boldsymbol{\varepsilon}_\alpha \cdot \mathbf{p} | \phi_n \rangle \sim \boldsymbol{\varepsilon}_\alpha \cdot \langle \phi_k | \mathbf{p} | \phi_n \rangle$$

(note)

$$[\mathbf{p}^2, \mathbf{r}] = -[\mathbf{r}, \mathbf{p}^2] = -[i\hbar \nabla_{\mathbf{p}}, \mathbf{p}^2]$$
$$= -2i\hbar\, \mathbf{p}$$

↕

$$\langle \phi_k | \mathbf{p} | \phi_n \rangle = \langle \phi_k | \frac{1}{-2i\hbar} [\mathbf{p}^2, \mathbf{r}] | \phi_n \rangle$$

$$= \langle \phi_k | \frac{2m}{-2i\hbar} [\underbrace{\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(r)}_{= H_0}, \mathbf{r}] | \phi_n \rangle$$

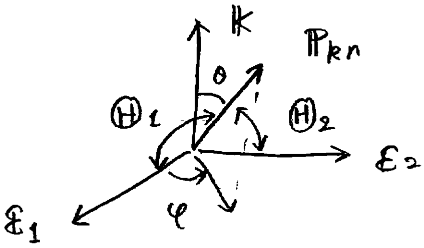
$$= \frac{im}{\hbar} \langle \phi_k | H_0 \mathbf{r} - \mathbf{r} H_0 | \phi_n \rangle$$

$$= \frac{im}{\hbar} (E_k - E_n) \langle \phi_k | \mathbf{r} | \phi_n \rangle$$

E1 遷移

Department of Physics
Tohoku University
Sendai, Japan

(参考)



$$\cos\Theta_1 = \sin\theta\cos\varphi$$
$$\cos\Theta_2 = \sin\theta\sin\varphi$$

$\downarrow$

$$\sum_{\alpha=1,2}\int d\Omega_k \;\left|\langle\phi_k|\,\mathcal{E}_\alpha\cdot\mathbb{P}\,|\phi_n\rangle\right|^2$$

$$= \sum_{\alpha=1,2}\int d\Omega_k \;\left|\langle\phi_k|\,\mathbb{P}\,|\phi_n\rangle\right|^2 \cos^2\Theta_\alpha$$

$$= \int d\Omega_k \;|\mathbb{P}_{kn}|^2\sin^2\theta$$

$$= |\mathbb{P}_{kn}|^2 \underbrace{\int_0^{\pi}\sin\theta\,d\theta\int_0^{2\pi}d\varphi\,\sin^2\theta}$$

$$= 2\pi\int_0^{\pi}\sin\theta d\theta\,\sin^2\theta = 2\pi\int_{-1}^{1}d(\cos\theta) \times (1-\cos^2\theta)$$

$$= 2\pi\left[\,x-\frac{x^3}{3}\,\right]_{-1}^{1} = \frac{8\pi}{3}$$

$$= \frac{8\pi}{3}\;\left|\langle\phi_k|\,\mathbb{P}\,|\phi_n\rangle\right|^2.$$

Department of Physics
Tohoku University
Sendai Japan

● 選択則

$$V_{fi} \propto \langle \psi_f | \mathbf{r} | \psi_i \rangle$$

$$\psi_i(\mathbf{r}) = R_i(r)\, Y_{l_i m_i}(\hat{\mathbf{r}})$$
$$\psi_f(\mathbf{r}) = R_f(r)\, Y_{l_f m_f}(\hat{\mathbf{r}})$$

遷移オペレーター $\mathbf{r}$ は角運動量 1 をもつ：

$$z = r\cos\theta = r\cdot\sqrt{\tfrac{4\pi}{3}}\, Y_{10}(\theta)$$
$$x = r\cdot\tfrac{1}{2}\sqrt{\tfrac{8\pi}{3}}\left(-Y_{11}(\theta,\varphi) + Y_{1-1}(\theta,\varphi)\right)$$
$$y = r\cdot\tfrac{i}{2}\sqrt{\tfrac{8\pi}{3}}\left(Y_{11}(\theta,\varphi) + Y_{1-1}(\theta,\varphi)\right)$$

↓

$|\tilde{\psi}_i\rangle = \mathbf{r}\,|\psi_i\rangle$ は角運動量 1 と l_i が合成された状態

$\longrightarrow \tilde{l}_i = |l_i - 1|,\ l_i,\ l_i + 1.$

また，パリティは変化する（$\mathbf{r} \to -\mathbf{r}$）

↓

終状態として $l_f = |l_i - 1|,\ l_i + 1$ のみが許される。← 角運動量の変化 $\Delta l = 1$，パリティ変化あり

（Y_{lm} の状態のパリティは $(-1)^l$ ）.

$2p \longrightarrow 1s$ の遷移

$(1^- \rightarrow 0^+)$

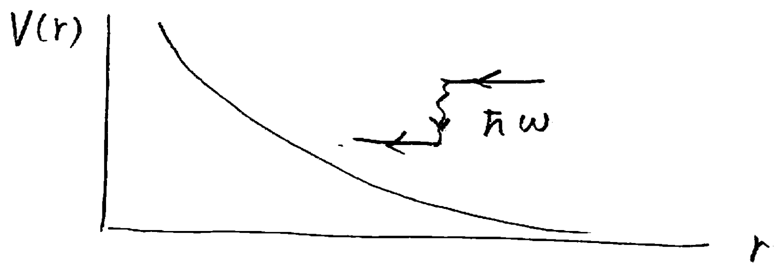
(参考) 制動輻射 (bremsstrahlung)

$$[H_0, \mathbb{P}] = [V(r), \mathbb{P}] = i\hbar\,(\nabla V)$$

$$\langle \phi_k | \mathbb{P} | \phi_n \rangle = \frac{1}{E_k - E_n} \langle \phi_k | \underbrace{E_k \mathbb{P} - \mathbb{P} E_n}_{=[H_0, \mathbb{P}]} | \phi_n \rangle$$

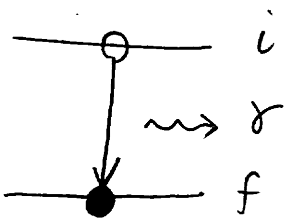
$$= \frac{i\hbar}{E_k - E_n} \langle \phi_k | \underbrace{\nabla V}_{-m\ddot{r}} | \phi_n \rangle$$

→ 加速度運動する荷電粒子はフォトンを自発的に放出する(制動輻射)



崩壊幅

$$W_{fi} = \frac{dP}{dt} = \frac{\Gamma}{\hbar} \quad \text{とする}$$



↓ Δt の時間の間に $i \to f$ へ遷移しない確率：$1 - \frac{\Gamma}{\hbar}\Delta t$

↓ $t=0$ で状態 i にあったときに時刻 t で同じ状態にある確率は

$$P_{sur}(t) = \left(1 - \frac{\Gamma}{\hbar}\Delta t\right)\left(1 - \frac{\Gamma}{\hbar}\Delta t\right) \times \cdots$$

$$\sim e^{-\frac{\Gamma}{\hbar}t}$$

$\tau = \frac{\hbar}{\Gamma}$ で生き残り確率は e^{-1} になる（寿命）。

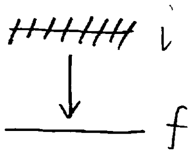
Γ：崩壊幅.

解釈：初期状態が $E = E_i - i\frac{\Gamma}{2}$ という複素エネルギーを持っているとすると

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar}|\psi(0)\rangle$$
$$= e^{-iE_i t/\hbar} e^{-\Gamma t/2\hbar} |\psi(0)\rangle$$

↓

$$P_{sur}(t) = |\langle\psi(0)|\psi(t)\rangle|^2 = e^{-\Gamma t/\hbar}.$$



状態 i のエネルギーが不確定性のために Γ の幅をもつ。

$E = E_i \pm \frac{\Gamma}{2}$