

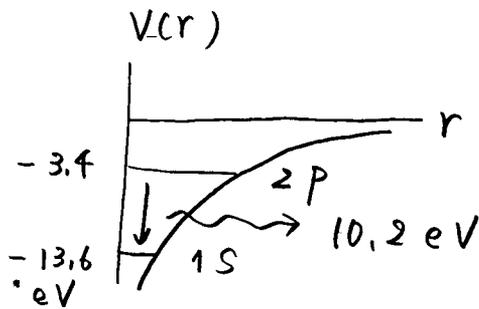
• 双極子近似

$$e^{-ik \cdot r} \sim 1 \quad (k \cdot r \ll 1)$$

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

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

$$\downarrow E_2 - E_1 \sim 10.2 \text{ eV}$$



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

$$k = \frac{\omega}{c} = \frac{\hbar \omega}{\hbar c} \sim \frac{10 \text{ eV}}{2000 \text{ eV} \cdot \text{\AA}} = \frac{1}{200} \text{\AA}^{-1}$$

$$r \sim 0 (\text{\AA})$$

\downarrow

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

(note) $\hbar c = 197.3 \text{ MeV} \cdot \text{fm}$
 $= 1973 \text{ eV} \cdot \text{\AA}$

10^{-15} m
 \parallel

↓

$$\langle \phi_k | e^{-ik \cdot r} \mathcal{E}_\alpha \cdot \mathbf{P} | \phi_n \rangle \sim \mathcal{E}_\alpha \cdot \langle \phi_k | \mathbf{P} | \phi_n \rangle$$

(note)

$$\begin{aligned} [\mathbf{P}^2, r] &= -[r, \mathbf{P}^2] = -[i\hbar \nabla_{\mathbf{P}}, \mathbf{P}^2] \\ &= -2i\hbar \mathbf{P} \end{aligned}$$

↑
[r, p] = iħ

↓

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

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

$$[V(r), r] = 0$$

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

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

E1 遷移
(電気双極子) 遷移

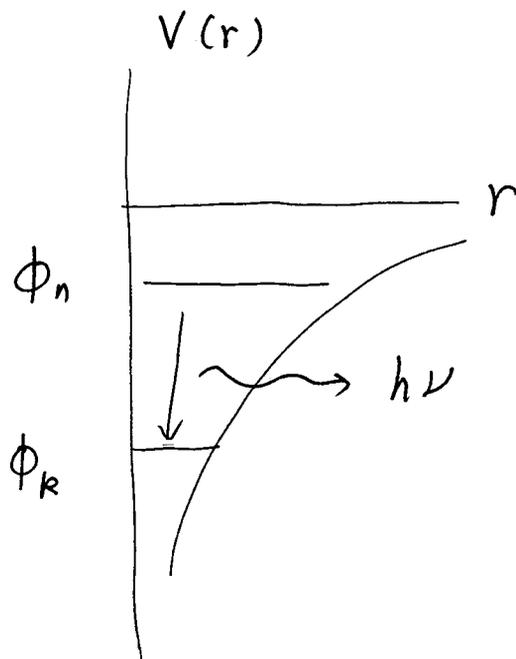
$$V(r, t) \sim \frac{e}{mc} A \cdot P \quad \sim \quad a_{k\alpha}^{\dagger} \epsilon_{\alpha} \cdot P e^{-i(k \cdot r - \omega t)}$$

$$\sim \underbrace{a_{k\alpha}^{\dagger} \epsilon_{\alpha} \cdot P}_{\text{}} e^{i\omega t}$$

$$\langle f | V | i \rangle = \langle \phi_k (k\alpha) | a_{k\alpha}^{\dagger} \epsilon_{\alpha} \cdot P | \phi_n(0) \rangle$$

$$= \underbrace{\langle k\alpha | a_{k\alpha}^{\dagger} | 0 \rangle}_{=1} \langle \phi_k | \epsilon_{\alpha} \cdot P | \phi_n \rangle$$

$$= \epsilon_{\alpha} \cdot \langle \phi_k | P | \phi_n \rangle$$

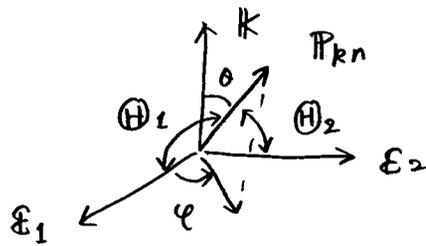


$$H = \underbrace{H_0}_{\parallel} + V(r, t)$$

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

$$\begin{cases} H_0 \phi_n = E_n \phi_n \\ H_0 \phi_k = E_k \phi_k \end{cases}$$

(参考)



$$\cos \theta_1 = \sin \theta \cos \varphi$$

$$\cos \theta_2 = \sin \theta \sin \varphi$$

↓

$$\sum_{\alpha=1,2} \int d\Omega_k |\langle \phi_k | \epsilon_\alpha \cdot P | \phi_n \rangle|^2$$

$$= \sum_{\alpha=1,2} \int d\Omega_k |\langle \phi_k | P | \phi_n \rangle|^2 \cos^2 \theta_\alpha$$

$$= \int d\Omega_k |P_{kn}|^2 \sin^2 \theta$$

$$= |P_{kn}|^2 \underbrace{\int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \sin^2 \theta}_{\text{''}}$$

$$2\pi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \sin^2 \theta = 2\pi \int_1^{-1} d(\cos \theta) \times (1 - \cos^2 \theta)$$

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

$$= \frac{8\pi}{3} |\langle \phi_k | P | \phi_n \rangle|^2$$

$$Y_{20}(\theta) = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \cdot \frac{1}{2} (3\cos^2\theta - 1)$$

● 選択則

$$V_{fi} \propto \langle \psi_f | \hat{V} | \psi_i \rangle$$

$$\psi_i(r) = R_i(r) Y_{l_i m_i}(\hat{r})$$

$$\psi_f(r) = R_f(r) Y_{l_f m_f}(\hat{r})$$

遷移が $\Delta l = 0, \pm 1$ r は角運動量 l を含む:

$$z = r \cos\theta = r \cdot \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_{10}(\theta)$$

$$x = r \cdot \frac{1}{2} \sqrt{\frac{8\pi}{3}} (-Y_{11}(\theta, \varphi) + Y_{1-1}(\theta, \varphi))$$

$$y = r \cdot \frac{i}{2} \sqrt{\frac{8\pi}{3}} (Y_{11}(\theta, \varphi) + Y_{1-1}(\theta, \varphi))$$

↓

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

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

また、ポリティイは変化する ($r \rightarrow -r$)

↓

終状態 $l_f = |l_i - 1|, l_i + 1$ のみが許される。← 角運動量の変化 $\Delta l = 1$, ポリティイ変化あり
(Y_{lm} の状態のポリティイは $(-1)^l$)

2p \rightarrow 1s の遷移
($1^- \rightarrow 0^+$)

cf. $\psi_i(r) = R_{2p}(r) Y_{10}(\hat{r}) = R_{2p}(r) \cdot \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} R_{2p}(r) \cdot \frac{z}{r}$

$$\begin{aligned} z \psi_i(r) &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} R_{2p}(r) \cdot \frac{z^2}{r} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} r R_{2p}(r) \cos^2\theta = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} r R_{2p}(r) \left(\frac{2}{3} \sqrt{\frac{4\pi}{5}} Y_{20} + \frac{\sqrt{4\pi}}{3} Y_{00} \right) \\ &= \frac{2}{3} \sqrt{\frac{4\pi}{5}} \cdot \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cdot \frac{1}{2} (3\cos^2\theta - 1) + \frac{\sqrt{4\pi}}{3} \cdot \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \end{aligned}$$

(参考) 制動輻射 (bremsstrahlung)

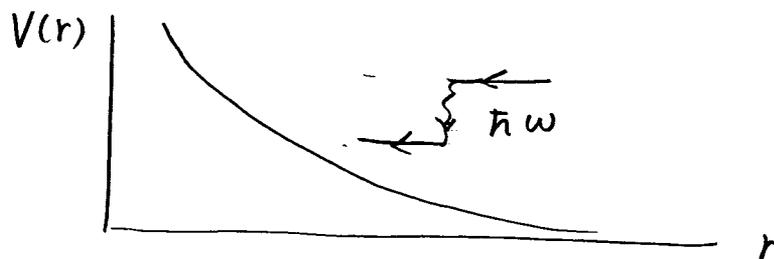
$$[H_0, P] = [V(r), P] = i\hbar (\nabla V)$$

↷

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

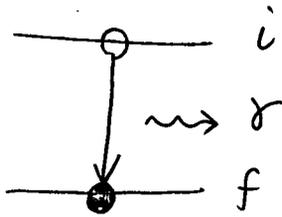
$$= \frac{i\hbar}{E_k - E_n} \langle \phi_k | \underbrace{\nabla V}_{-m\ddot{r}} | \phi_n \rangle$$

→ 加速度運動する荷電粒子は光子を自発的に放出する (制動輻射)



崩壊幅

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



自発的に光子を放出して崩壊

↓ Δt の時間の間に $i \rightarrow f$ 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

$$P_{sur}(t) = \left(1 - \frac{\Gamma}{\hbar} \Delta t\right) \left(1 - \frac{\Gamma}{\hbar} \Delta t\right) \dots \sim e^{-\frac{\Gamma}{\hbar} t}$$

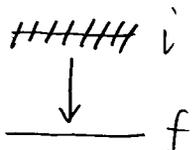
$\tau = \frac{\hbar}{\Gamma}$ で半減期確率は e^{-1} になる (寿命)。

Γ : 崩壊幅。

解説: 初期状態が $E = E_i - i\frac{\Gamma}{2}$ という複素エネルギーを持つとすると

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

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



状態 i のエネルギーが不確定性のために Γ の幅をもつ。
 $E = E_i \pm \frac{\Gamma}{2}$