

あもんノート

ユークリッド幾何学、ニュートン力学から、相対論、宇宙論、量子論、場の量子論、素粒子論、そして超ひも理論まで、理論物理学を簡潔にかつ幅広く網羅したノートです。TOP へは下の URL をクリックして行けます。専用の画像掲示板で、ご意見、ご質問等も受け付けております。

<http://amonphys.web.fc2.com/>

目次

第 18 章	量子電磁気学の近似	3
18.1	ディラック方程式の非相対論的近似	3
18.2	クーロン相互作用の導出	5
18.3	ランダウ準位	5
18.4	ゼーマン効果	7
18.5	荷電粒子の光子放出	8
18.6	水素原子の軌道遷移	10

第18章 量子電磁気学の近似

量子電磁気学の非相対論的な近似理論についてここにまとめておきます。非相対論的な場の量子論で用いてきたクーロン相互作用の導出や、外部磁場がある場合の量子論として、ランダウ準位、ゼーマン効果、さらに光子放出が関与した水素原子における軌道電子の遷移確率について説明します。

18.1 ディラック方程式の非相対論的近似

ディラック場のラグランジアン密度は、

$$\mathcal{L}_D = \bar{\psi}(i\gamma^\mu D_\mu - m)\psi, \quad \bar{\psi} = \psi^\dagger \gamma^0, \quad D_\mu = \partial_\mu + iqA_\mu$$

でした。ここで q は電荷、 A_μ は電磁場の4元ポテンシャルです。ガンマ行列は、

$$\gamma^\mu = \begin{pmatrix} 0 & \bar{\sigma}^\mu \\ \sigma^\mu & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^\mu = (1, \boldsymbol{\sigma})_\mu, \quad \bar{\sigma}^\mu = (1, -\boldsymbol{\sigma})_\mu$$

で与えられ、ここで σ はパウリ行列です。

ラグランジアン密度 \mathcal{L}_D は、

$$\mathcal{L}_D = \psi^\dagger \begin{pmatrix} i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{D} & -m \\ -m & i\bar{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{D} \end{pmatrix} \psi$$

と表すこともできますが、ここで ψ_1, ψ_2 をそれぞれ2成分の場として、

$$\psi = \frac{e^{-imt}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$$

とおくと、 $i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{D} e^{-imt} = e^{-imt}(i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{D} + m)$ 、 $i\bar{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{D} e^{-imt} = e^{-imt}(i\bar{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{D} + m)$ に注意して、

$$\mathcal{L}_D = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}^\dagger \begin{pmatrix} i(\boldsymbol{\sigma} + \bar{\boldsymbol{\sigma}}) \cdot \mathbf{D} & i(\boldsymbol{\sigma} - \bar{\boldsymbol{\sigma}}) \cdot \mathbf{D} \\ i(\boldsymbol{\sigma} - \bar{\boldsymbol{\sigma}}) \cdot \mathbf{D} & i(\boldsymbol{\sigma} + \bar{\boldsymbol{\sigma}}) \cdot \mathbf{D} + 4m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}.$$

さらに、 $\frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma} + \bar{\boldsymbol{\sigma}})^\mu = (1, \mathbf{0})_\mu$ 、 $\frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma} - \bar{\boldsymbol{\sigma}})^\mu = (0, \boldsymbol{\sigma})_\mu$ に注意して、

$$\mathcal{L}_D = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}^\dagger \begin{pmatrix} iD_0 & i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{D} \\ i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{D} & iD_0 + 2m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$$

となります。

特に非相対論的領域では、場の振動数は質量 m に比べ十分小さいと考えられるので、 $iD_0 + 2m \rightarrow 2m$ と近似することができます。そうすると ψ_2^* に関する場の方程式は、

$$i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{D}\psi_1 + 2m\psi_2 = 0 \quad \therefore \psi_2 = -\frac{i}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{D}\psi_1$$

と解けてしまいます。質量 m は非常に大きい量と考えられるため、 ψ_1 を大きい成分と呼ぶのに対し、 ψ_2 は小さい成分と呼ばれます。

上式を \mathcal{L}_D の式に戻し、 ψ_2 を消去すると(*)、

$$\mathcal{L}_D = \psi_1^\dagger \left(iD_0 + \frac{1}{2m} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{D})^2 \right) \psi_1.$$

パウリ行列の性質 $\sigma^i \sigma^j = \delta_j^i + i\epsilon_{ijk} \sigma^k$ に注意すると、

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{D})^2 = |\mathbf{D}|^2 + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{D} \times \mathbf{D})$$

ですが、 $\mathbf{D} = \nabla - iq\mathbf{A}$ なので、

$$\mathbf{D} \times \mathbf{D} = -iq\nabla \times \mathbf{A} = -iq\mathbf{B}.$$

ここで $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ は磁場です。また、 $D_0 = \partial_t + iqA^0$ ですから、結局、ラグランジアン密度は、 ψ_1 を改めて ψ と書いて、

$$\mathcal{L}_D = \psi^\dagger \left(i\partial_t + \frac{1}{2m} |\nabla - iq\mathbf{A}|^2 - qA^0 + \frac{q}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \right) \psi$$

となります。場の粒子の磁気モーメントが $q\boldsymbol{\sigma}/(2m)$ であることが読み取れますが、実際に電子はこのような磁気モーメントを持っていることが実験で確かめられています。

2成分の場 ψ に関する場の方程式は、

$$\left(i\partial_t + \frac{1}{2m} |\nabla - iq\mathbf{A}|^2 - qA^0 + \frac{q}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \right) \psi(\mathbf{r}, t) = 0$$

となりますが、これをパウリ方程式といいます。一方、固有方程式、

$$\left(-\frac{1}{2m} |\nabla - iq\mathbf{A}|^2 + qA^0 - \frac{q}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \right) \phi_n(\mathbf{r}) = \epsilon_n \phi_n(\mathbf{r})$$

を電磁場を含むシュレーディンガー方程式といいます。これを満たす固有関数 $\phi_n(\mathbf{r})$ を用いると、パウリ方程式の一般解は、

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n c_n \phi_n(\mathbf{r}) e^{-i\epsilon_n t}$$

と書けます。量子論では c_n^* は軌道 n に粒子を生成する生成演算子になることはこれまでの章で見てきた通りです。

(*注) 非相対論的近似により ψ_2 の時間微分項がなくなったため、 ψ_2 は独立な力学的自由度を持たない補助場とみなされます。このため解をラグランジアン密度に戻して消去することが許されます。

18.2 クーロン相互作用の導出

電磁場のラグランジアン密度は、ファインマンゲージにおいて、

$$\mathcal{L}_{em} = -\frac{1}{2} \partial_\mu A_\nu \partial^\mu A^\nu$$

でした。非相対論的領域においては、ベクトルポテンシャル A 、および電磁場の時間微分項(運動項)を無視できると考えられるので、QED全体のラグランジアン密度 $\mathcal{L} = \mathcal{L}_D + \mathcal{L}_{em}$ は、

$$\mathcal{L} = \psi^\dagger \left(i\partial_t + \frac{1}{2m} \Delta - qA^0 \right) \psi + \frac{1}{2} \partial_i A^0 \partial_i A^0$$

と近似されることとなります。このときスカラーポテンシャル A^0 の場の方程式は、

$$\Delta A^0 = -J, \quad J = q\psi^\dagger \psi$$

であり、これは解けてしまいます：

$$A^0(\mathbf{r}) = \int d^3\mathbf{r}' \frac{J(\mathbf{r}')}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}.$$

これをラグランジアン密度に戻して、

$$\mathcal{L} = \psi^\dagger \left(i\partial_t + \frac{1}{2m} \Delta \right) \psi - \frac{1}{2} \int d^3\mathbf{r}' \frac{J(\mathbf{r})J(\mathbf{r}')}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + (\text{空間の全微分項})$$

を得るでしょう。これがクーロン相互作用する粒子系の非相対論的なラグランジアン密度で、シュレーディンガー場の量子論において用いてきた式です。

18.3 ランダウ準位

一様な磁場 B の中であって、光より十分遅い速度で運動する荷電粒子は、古典的に考えると、 $qv \times B$ の求心力を受けます。運動方程式が $qvB = mv\omega$ のように書けることに注意すると、荷電粒子は $\omega = qB/m$ の角振動数で円運動、もしくは一般にらせん運動することがわかります。これをサイクロトロン運動といいま

す。この現象を量子論で考えるとどうなるのか考えてみましょう。以下、デカルト座標を $\mathbf{r} = (x, y, z)$ とします。

電場はなく、また z 軸の正の方向に大きさ B の一様な磁場があるとし、4元ポテンシャルを、

$$A^0 = 0, \quad \mathbf{A} = (0, Bx, 0)$$

とします。電磁場を含むシュレーディンガー方程式は、

$$-\frac{1}{2m} \left(\partial_x^2 + (\partial_y - iqBx)^2 + \partial_z^2 + qB\sigma^3 \right) \phi(\mathbf{r}) = \epsilon \phi(\mathbf{r})$$

となります。これを解くために、

$$\phi(\mathbf{r}) = f(\chi) e^{ik_y y + ik_z z}, \quad \chi = x - \frac{k_y}{qB}$$

とおくと、

$$-\frac{1}{2m} f''(\chi) + \frac{(qB)^2}{2m} \chi^2 f(\chi) + \frac{k_z^2}{2m} f(\chi) - \frac{qB}{2m} \sigma^3 f(\chi) = \epsilon f(\chi)$$

を得ます。これは本質的に調和振動子系のシュレーディンガー方程式(*)と等価です。左辺第3項と第4項はエネルギーの底上げに他なりません。対応する調和振動子の角振動数は $|q|B/m$ であり、これは古典的なサイクロトロン運動の角振動数と一致します。

結果、エネルギー固有値は、

$$\epsilon = \frac{|q|B}{m} \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{k_z^2}{2m} - \frac{qBs}{m} \quad (n = 0, 1, 2, \dots, s = \pm 1/2)$$

となります。この式をランダウ準位といいます。対応する固有関数は、質量 m , 角振動数 ω の調和振動子系の規格化された固有関数を $h_n(m\omega; x)$ として、

$$\phi(\mathbf{r}) = \frac{\gamma_s}{2\pi} h_n \left(|q|B; x - \frac{k_y}{qB} \right) e^{ik_y y + ik_z z}, \quad (\gamma_s)_{s'} = \delta_{s'}^s$$

です。エネルギー固有値には量子数 k_y が含まれておらず、よって k_y に関して無限の縮退があります。一方、固有関数は x 方向にだけ特殊な形をしていますが、これら無限の縮退があることを考えれば、もともとの z 軸のまわりの回転対称性が回復可能なものであることがわかるでしょう。

(*注) 質量 m , 角振動数 ω の調和振動子系のシュレーディンガー方程式は、粒子の座標を x として、 $-\frac{1}{2m} \frac{d^2 \phi}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \phi = \epsilon \phi$ でした。

18.4 ゼーマン効果

もし任意の方向に一樣な磁場 B があるなら、対応するベクトルポテンシャルは、

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r}$$

で与えられます。実際このとき、

$$(\nabla \times \mathbf{A})_i = \epsilon_{ijk} \partial_j \left(\frac{1}{2} \epsilon_{klm} B^l x^m \right) = \frac{1}{2} (\delta_l^i \delta_m^j - \delta_m^i \delta_l^j) \delta_m^j B^l = \frac{1}{2} (3B^i - B^i) = B^i.$$

また、 $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ が確かめられ、このゲージ条件はクーロンゲージと呼ばれるものです。これらに注意すると、

$$|\nabla - iq\mathbf{A}|^2 = \Delta - 2iq\mathbf{A} \cdot \nabla - q^2 |\mathbf{A}|^2 = \Delta + q\mathbf{B} \cdot \mathbf{J} - \frac{q^2}{4} |\mathbf{B} \times \mathbf{r}|^2.$$

ここで、

$$\mathbf{J} = -i\mathbf{r} \times \nabla$$

は軌道角運動量演算子です。 q^2 を含む項は反磁性項と呼ばれ、これはスケールの意味で無視できる場合が多いのでここでは無視します。そうすると、電磁場を含むシュレーディンガー方程式は、

$$\left(-\frac{1}{2m} \Delta + qA^0 - \frac{q}{2m} \mathbf{B} \cdot (\mathbf{J} + \boldsymbol{\sigma}) \right) \phi(\mathbf{r}) = \epsilon \phi(\mathbf{r})$$

となります。左辺括弧内の第3項はゼーマンエネルギーと呼ばれます。

磁場が z 方向であるとすれば、

$$\left(-\frac{1}{2m} \Delta + qA^0 - \frac{qB}{2m} (J^3 + \sigma^3) \right) \phi(\mathbf{r}) = \epsilon \phi(\mathbf{r})$$

ですが、いま、通常のシュレーディンガー方程式、

$$\left(-\frac{1}{2m} \Delta + qA^0 \right) \phi_n(\mathbf{r}) = \bar{\epsilon}_n \phi_n(\mathbf{r})$$

は解けているものとし、さらに、固有関数 $\phi_n(\mathbf{r})$ は軌道角運動量やスピン角運動量の固有関数になっているものとします。すなわち、

$$J^3 \phi_n(\mathbf{r}) = m_n \phi_n(\mathbf{r}), \quad \frac{\sigma^3}{2} \phi_n(\mathbf{r}) = s_n \phi_n(\mathbf{r}) \quad \left(s_n = \pm \frac{1}{2} \right).$$

m_n は磁気量子数、 s_n はスピン量子数と呼ばれるものです。そうすると、ゼーマンエネルギーを含む方程式の固有関数も $\phi_n(\mathbf{r})$ であり、エネルギー固有値は、

$$\epsilon_n = \bar{\epsilon}_n - \frac{qB}{2m} (m_n + 2s_n)$$

となります。磁場の存在によりエネルギーが変化し、エネルギー準位が分岐するこの現象は、ゼーマン効果と呼ばれます。

例えば s 軌道 ($l_n = 0$) にある電子 ($q = -e$) を考えると、 $m_n = 0, s_n = \pm 1/2$ に注意して、 $m_n + 2s_n = \pm 1$ の 2 通りに分岐します。これはスピンの上下がエネルギーに寄与し、エネルギーの縮退が解けたことを意味します。また、 p 軌道 ($l_n = 1$) にある電子を考えるなら、 $m_n + 2s_n = \pm 2, \pm 1, 0$ の 5 通りに分岐することになります。この場合 $m_n + 2s_n = 0$ は、いまだ $(m_n, s_n) = (1, -1/2), (-1, +1/2)$ の 2 つの軌道を意味し、縮退は完全に解けていないことがわかります (図 18.1)。

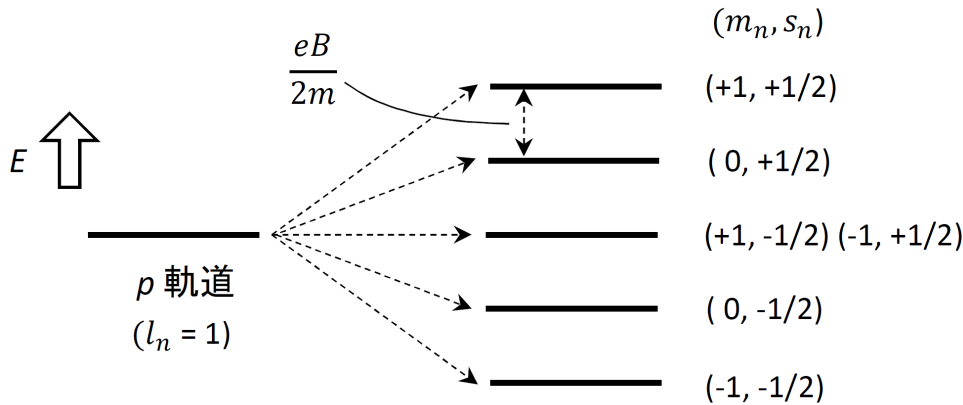


図 18.1: ゼーマン効果

全角運動量の z 成分は $m_n + s_n$ であることに注意。軌道角運動量とスピン角運動量では、磁気モーメントへの寄与が 2 倍だけ異なるのです。

(余談) 外部磁場を弱くしていくと相対論的な高次効果であるスピン軌道相互作用などが効いてきます。このため外部磁場を完全になくしても軌道の分岐が残ります。この現象を異常ゼーマン効果といいます。また、外部磁場を強くしたときに通常ゼーマン効果に漸近する現象はパッシェン・バック効果と呼ばれます。歴史的には異常ゼーマン効果 (スピン軌道相互作用の効果) がアルカリ金属の原子において発見されたことが、電子のスピン提唱のきっかけになりました。

18.5 荷電粒子の光子放出

ディラック場のラグランジアン密度は、非相対論的近似で、

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_D &= \psi^\dagger \left(i\partial_t + \frac{1}{2m} |\nabla - iq\mathbf{A}|^2 - qA^0 + \frac{q}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \right) \psi \\ &= \psi^\dagger \left(i\partial_t + \frac{1}{2m} \Delta - qA^0 \right) \psi + \mathcal{L}_I \end{aligned}$$

でした。ここで \mathcal{L}_I はベクトルポテンシャル \mathbf{A} を含む項で、

$$\mathcal{L}_I = -\frac{iq}{2m} \nabla \cdot \mathbf{A} \psi^\dagger \psi - \frac{iq}{m} \psi^\dagger \mathbf{A} \cdot \nabla \psi - \frac{q^2}{2m} |\mathbf{A}|^2 \psi^\dagger \psi + \frac{q}{2m} \psi^\dagger \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \psi.$$

これを相互作用ラグランジアン密度と考え、相互作用表示をとりましょう。そうすると、スカラーポテンシャル A^0 だけを外部ポテンシャルとした場合のシュレーディンガー方程式、

$$\left(-\frac{1}{2m}\Delta + qA^0\right)\phi_n(\mathbf{r}) = \epsilon_n\phi_n(\mathbf{r})$$

の固有関数 $\phi_n(\mathbf{r})$ を用いて、量子場 $\psi(x)$ は、

$$\psi(x) = \sum_n c_n \phi_n(\mathbf{r}) e^{-i\epsilon_n t}, \quad \{c_n, c_{n'}^*\} = \delta_{nn'}, \quad \{c_n, c_{n'}\} = 0$$

と表されることになります。

一方、ベクトルポテンシャルは、

$$\mathbf{A}(x) = \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3 2k^0} \sum_{\lambda=1,2} \boldsymbol{\varepsilon}_\lambda(\mathbf{k}) (a_\lambda(\mathbf{k}) e^{-ik \cdot x} + a_\lambda^*(\mathbf{k}) e^{ik \cdot x}),$$

$$k^0 = |\mathbf{k}|, \quad \boldsymbol{\varepsilon}_\lambda(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{k} = 0,$$

$$[a_\lambda(\mathbf{k}), a_{\lambda'}^*(\mathbf{k}')] = (2\pi)^3 2k^0 \delta_{\lambda\lambda'} \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{k}'), \quad [a_\lambda(\mathbf{k}), a_{\lambda'}(\mathbf{k}')] = 0$$

のように基準モード展開されるのでした。このとき $\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{k} = 0$ より、いわゆるクーロンゲージの条件、

$$\nabla \cdot \mathbf{A}(x) = 0$$

が成り立つことに注意。

いま、軌道 n にある荷電粒子が軌道 n' に遷移し、運動量 \mathbf{p} , 偏光モード λ の光子を1個放出する過程を考えると、そのS行列要素は、電荷 q の1次において、

$$\begin{aligned} \langle 0 | c_{n'} a_\lambda(\mathbf{p}) S c_n^* | 0 \rangle &= \langle 0 | c_{n'} a_\lambda(\mathbf{p}) T e^{i \int d^4x \mathcal{L}_I} c_n^* | 0 \rangle \\ &= \frac{q}{m} \int d^4x \langle 0 | c_{n'} a_\lambda(\mathbf{p}) \psi^\dagger \mathbf{A} \cdot \nabla \psi c_n^* | 0 \rangle \\ &\quad + \frac{iq}{2m} \int d^4x \langle 0 | c_{n'} a_\lambda(\mathbf{p}) \psi^\dagger \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \psi c_n^* | 0 \rangle \end{aligned}$$

ですが、 $\psi(x)$, $\mathbf{A}(x)$ の式を代入し整理すると、

$$\langle 0 | c_{n'} a_\lambda(\mathbf{p}) S c_n^* | 0 \rangle = 2\pi \delta(\epsilon_{n'} - \epsilon_n + p^0) \mathfrak{M}_{nn'}^\lambda(\mathbf{p}),$$

$$\mathfrak{M}_{nn'}^\lambda(\mathbf{p}) = \frac{q}{m} \left(\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda(\mathbf{p}) \cdot \mathbf{I}_{nn'}(\mathbf{p}) + \frac{1}{2} (\mathbf{p} \times \boldsymbol{\varepsilon}_\lambda(\mathbf{p})) \cdot \mathbf{J}_{nn'}(\mathbf{p}) \right),$$

$$\mathbf{I}_{nn'}(\mathbf{p}) = \int d^3\mathbf{r} e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} \phi_{n'}^\dagger(\mathbf{r}) \nabla \phi_n(\mathbf{r}), \quad \mathbf{J}_{nn'}(\mathbf{p}) = \int d^3\mathbf{r} e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} \phi_{n'}^\dagger(\mathbf{r}) \boldsymbol{\sigma} \phi_n(\mathbf{r})$$

を得ます。考えている遷移が起こる微小確率は、

$$d\Gamma = |\langle 0 | c_{n'} a_\lambda(\mathbf{p}) S c_n^* | 0 \rangle|^2 \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi)^3 2p^0}$$

ですが、上の $\langle 0 | c_{n'} a_\lambda(\mathbf{p}) S c_n^* | 0 \rangle$ の式を代入すると、

$$\frac{d\Gamma}{T d\Omega} = \frac{p^0}{8\pi^2} |\mathfrak{M}_{nn'}^\lambda(\mathbf{p})|^2 \Big|_{p^0 = \epsilon_n - \epsilon_{n'}}$$

を得ます。 $d\Omega$ は \mathbf{p} の微小立体角、 T は系の時間スケール ($\rightarrow \infty$) で、よって $d\Gamma/T$ は単位時間あたりにこのような遷移が起こる微小確率を意味することになります。

18.6 水素原子の軌道遷移

一例として、水素原子における電子の軌道遷移を考えてみましょう。

電子の質量を m_e 、素電荷を e としたとき、水素原子における軌道電子のエネルギーは、

$$\epsilon_n = -\frac{m_e e^4}{32\pi^2 n^2}$$

で与えられるので、放出される光子のエネルギーは、

$$p^0 = \epsilon_n - \epsilon_{n'} = \frac{m_e e^4}{32\pi^2} \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right).$$

また、軌道電子の波動関数の広がりスケールであるボーア半径は、

$$a = \frac{4\pi}{m_e e^2}$$

ですから、 $ap^0 \sim e^2/(8\pi) \sim 10^{-3}$ 。よって、 $I_{nn'}(\mathbf{p})$ および $J_{nn'}(\mathbf{p})$ の式において $e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}$ の因子を無視してもよいでしょう。そうすると固有関数の直交性から、 $J_{nn'}(\mathbf{p})$ は 0 と評価され、

$$I_{nn'} = \int d^3 \mathbf{r} \phi_{n'}^\dagger(\mathbf{r}) \nabla \phi_n(\mathbf{r})$$

だけを計算すれば良いこととなります。このとき、

$$\sum_{\lambda=1,2} |\mathfrak{M}_{nn'}^\lambda(\mathbf{p})|^2 = \frac{e^2}{m_e^2} \sum_{\lambda=1,2} \varepsilon_\lambda^i(\mathbf{p}) \varepsilon_\lambda^j(\mathbf{p}) I_{nn'}^i I_{nn'}^j$$

ですが、 $\varepsilon_3^i(\mathbf{p}) = p^i/p^0$ を定義すると、 $\varepsilon_\lambda^i(\mathbf{p})$ を回転の変換係数とみなせることに注意して、

$$\sum_{\lambda=1,2} \varepsilon_\lambda^i(\mathbf{p}) \varepsilon_\lambda^j(\mathbf{p}) = \sum_{\lambda=1,2,3} \varepsilon_\lambda^i(\mathbf{p}) \varepsilon_\lambda^j(\mathbf{p}) - \varepsilon_3^i(\mathbf{p}) \varepsilon_3^j(\mathbf{p}) = \delta_j^i - \frac{p^i p^j}{(p^0)^2}.$$

よって、

$$\sum_{\lambda=1,2} |\mathfrak{M}_{nn'}^\lambda(\mathbf{p})|^2 = \frac{e^2}{m_e^2} \left(|\mathbf{I}_{nn'}|^2 - \left(\frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{I}_{nn'}}{p^0} \right)^2 \right)$$

を得ます。そうすると単位時間あたりの遷移確率は、

$$\begin{aligned} \frac{\Gamma}{T} &= \frac{p^0}{8\pi^2} \int d\Omega \sum_{\lambda=1,2} |\mathfrak{M}_{nn'}^\lambda(\mathbf{p})|^2 \\ &= \frac{p^0}{8\pi^2} \cdot 2\pi \int_0^\pi d\theta \sin\theta \frac{e^2}{m_e^2} (1 - \cos^2\theta) |\mathbf{I}_{nn'}|^2 \\ &= \frac{e^2(\epsilon_n - \epsilon_{n'})}{3\pi m_e^2} |\mathbf{I}_{nn'}|^2 \end{aligned}$$

で与えられるになります。

水素原子の固有関数は、主量子数 n , 方位量子数 l , 磁気量子数 m , スピン量子数 σ のものを $\phi_{nlm\sigma}$ と書いたとき、

$$\begin{aligned} \phi_{1s0\sigma} &= \frac{\gamma_\sigma}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}, & \phi_{2s0\sigma} &= \frac{\gamma_\sigma}{\sqrt{8\pi a^3}} \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-r/2a}, \\ \phi_{2p0\sigma} &= \frac{\gamma_\sigma}{\sqrt{32\pi a^5}} r e^{-r/2a} \cos\theta, & \phi_{2p\pm\sigma} &= \mp \frac{\gamma_\sigma}{\sqrt{64\pi a^5}} r e^{-r/2a} \sin\theta e^{\pm i\phi}. \end{aligned}$$

また、ナブラについては、極座標表示で、

$$\begin{aligned} \partial_x &= \sin\theta \cos\phi \partial_r + (\partial_\theta, \partial_\phi \text{の項}), & \partial_y &= \sin\theta \sin\phi \partial_r + (\partial_\theta, \partial_\phi \text{の項}), \\ \partial_z &= \cos\theta \partial_r + (\partial_\theta \text{の項}) \end{aligned}$$

であったことに注意します。そうすると、 $2s \rightarrow 1s$ については $\mathbf{I}_{nn'}$ は 0 になります。また、 $2p0 \rightarrow 1s$ については、

$$\mathbf{I}_{nn'} = \left(0, 0, \frac{16\sqrt{2}}{81a} \right),$$

$2p\pm \rightarrow 1s$ については、

$$\mathbf{I}_{nn'} = \left(\frac{\mp 16}{81a}, \frac{-16i}{81a}, 0 \right)$$

と計算されます。よって、軌道遷移 $2p \rightarrow 1s$ が単位時間あたりに起こる確率は、 $2p0$ からにせよ $2p\pm$ からにせよ、

$$\frac{\Gamma}{T} = \frac{e^{10} m_e}{4 \cdot 3^8 \pi^5}$$

となり、よって一般に $2p$ の寿命は $T/\Gamma \sim 1.60 \times 10^{-9} \text{ sec}$ と見積もられ、これは実験値とピタリ合っています。一方、 $2s$ の寿命は実験値で 8.23 sec と非常に長く、これはより高次の効果による遷移と考えられます。

(余談) 原子の軌道電子が軌道を変え光を放出することは、高校生でも習って知っているわけですが、このことを定量的に計算できる人が、一体どれだけいるのでしょうか？ 光子という言葉をよく使うけれど、それをちゃんと記述でき、計算できる人が、一体どれだけいるのでしょうか？ 本当に一部の人達に限られるでしょう。このことは、理論物理学が度重なるパラダイムシフトにより高度すぎる概念と化し、好奇心と数学センスを持ち合わせた特定の人にしか理解できなくなっていることを、まさに象徴しているように思います。

索引

あ	
異常ゼーマン効果	8
大きい成分	4
か	
軌道遷移	10
クーロンゲージ	7
クーロン相互作用	5
光子放出	8
さ	
サイクロトロン運動	5
スピン軌道相互作用	8
ゼーマンエネルギー	7
ゼーマン効果	8
た	
小さい成分	4
電磁場を含むシュレーディンガー方程式 ...	4
は	
パウリ方程式	4
パッシェン・バック効果	8
反磁性項	7
ら	
ランダウ準位	6