四訂水谷研究室物理数学基礎知識例題

（第 11 回；補足）

1.フェルミの黄金律

単位時間あたりに状態｜i>が状態｜f>に変化する割合（遷移確率）Wは、

$$\begin{aligned} W &= \frac{2\pi}{\hbar}\left| \langle f|H'_0|i\rangle \right|^2 f(E_f=E_i+\hbar\omega) \\ &= \frac{2\pi}{\hbar}\,\omega_{fi}^2\left| \langle f|e\vec{r}\cdot\vec{A}_0|i\rangle \right|^2 f(E_f=E_i+\hbar\omega) \end{aligned} \qquad (1)$$

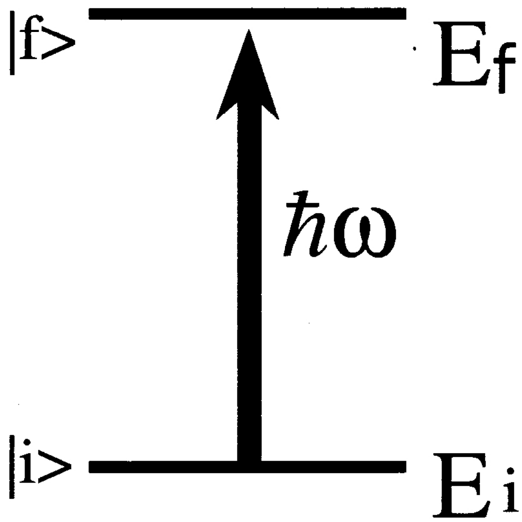
となる。これをフェルミの黄金律という。このフェルミの黄金律の物理的意味は、

1)状態｜i>が相互作用H'_0によって状態｜f>に遷移する単位時間あたりの確率は、相互作用H'_0を左右から<f｜と｜i>でかこってやった係数の二乗に比例する。

2)その確率は状態｜f>の密度$f(E_f)$に比例する。

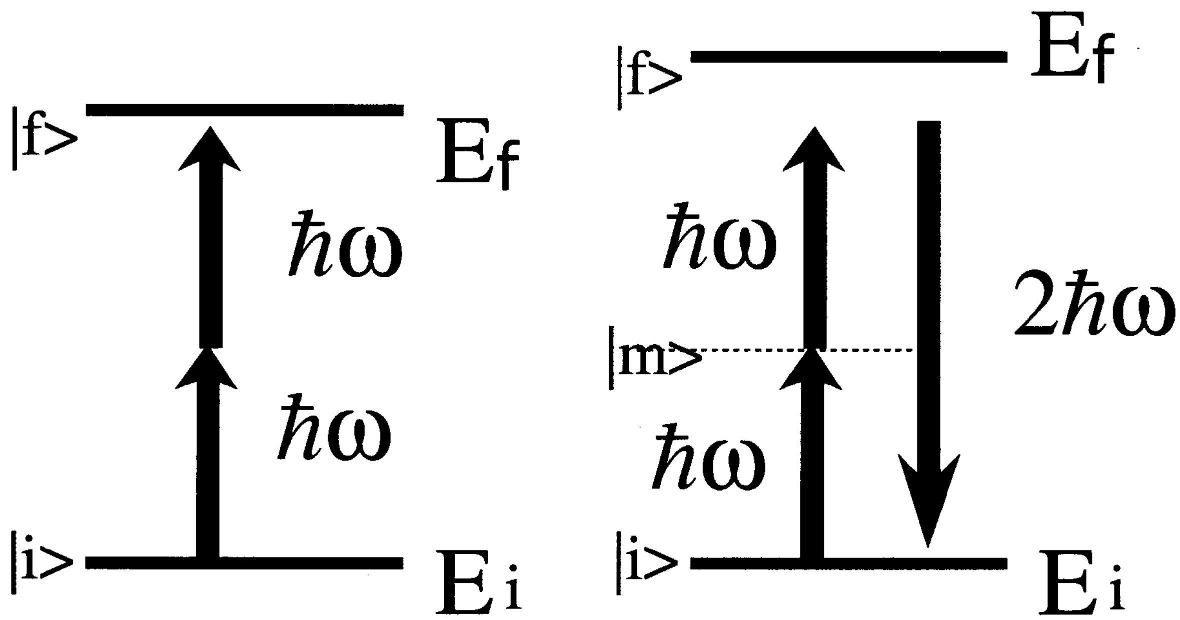
3)エネルギー保存則　　$E_f=E_i+\hbar\omega$　　が成り立つ。

この一光子の光遷移を絵で描くと



のように書かれる。ここで$\hbar\omega$は光のエネルギーである。図のようなエネルギー関係を満たす位置に実在の準位がないと光学遷移の効率は低い。また、|i>の状態が偶対称の波動関数（例えばs関数）であると、遷移双極子μ=erは奇対称であるから、|f>は偶×奇で奇対称の状態（例えばp関数）でないと遷移しない。なお、図のようなエネルギー関係を満たす位置に実在の準位がある場合$\hbar\omega$はこの準位と共鳴状態にあるといい、この$\hbar\omega$に対して媒

質の誘電率や屈折率は非常に大きくなる。
なお、二光子の遷移は図で表すと下図左のようになり、ＳＨＧ過程は下図右の様になる。



SHG分極は二次の摂動により下の様に求まる。

$$P_{NL} = -N \left(\frac{2\pi}{h}\right)^2 \frac{<i|e\vec{r}|f><f|e\vec{r}\cdot\vec{A}|m><m|e\vec{r}\cdot\vec{A}|i>}{(2\omega-\omega_f+i\Gamma_{fi})(\omega-\omega_m+i\Gamma_{mi})}$$

|m>は中間状態であり、非共鳴なエネルギーの準位であってもよい。Γ_{fi}は準位fとiの間の横緩和時間である。

さて、ＳＨＧ過程（上図右）において|i>が偶対称だと、|f>は偶×奇×奇で偶対称である。ところがこの|f>が光を放出するためには奇対称でなければならない。これが中心対称の媒質でＳＨＧが禁制である理由である。中心対称性の崩れた媒質では偶対称な状態と奇対称な状態とが交じり合うのでＳＨＧが許容となる。

2.クラマース・クローニッヒ関係式

正則な複素関数（例えば誘電率や反射率）$\alpha(\omega)$の実部$\alpha'(\omega)$と虚部$\alpha''(\omega)$との間には、

$$\alpha'(\omega) = \frac{2}{\pi} P\int_0^\infty \frac{s\alpha''(s)}{s^2-\omega^2} ds$$

$$\alpha''(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} P\int_0^\infty \frac{\alpha'(s)}{s^2-\omega^2} ds$$

の関係がなりたつ。ただしP∫は主値積分といって、分母が０になるところ以外すべて積分することをいう。これを用いて反射率スペクトルから吸収率スペクトルを求めたり、誘電率の虚部から実部を求めたりすることができる。非常によくつかわれる技術である。

3.共鳴分散

電子共鳴準位があるとその周辺のエネルギーで誘電率は下図のように変化する。