Fermi の黄金律

大谷聡
日本大学量子科学研究所

(Dated: September 2, 2016)

まとめ

- Fermi の黄金律は時間に依存した摂動論の摂動の 1 次の結果で，始状態 $|i\rangle$ から終状態 $|f\rangle$ への単位時間当たりの遷移確率 $\Gamma_{i\to f}$ を与える．
- 時間に依存した摂動ハミルトニアンが $H_{\mathsf{int}}(t) = V\mathrm{e}^{-i\omega t} + V^\dagger \mathrm{e}^{+i\omega t}$ の形を取る場合，Fermi の黄金律は次式で表される:

$$\begin{aligned}\Gamma_{i\to f} = &\frac{2\pi}{\hbar}|\langle f|V|i\rangle|^2\delta(E_f - E_i - \hbar\omega)\\ &+\frac{2\pi}{\hbar}|\langle f|V^\dagger|i\rangle|^2\delta(E_f - E_i + \hbar\omega).\end{aligned}$$

- 第 1 項目はエネルギー E_i の始状態 $|i\rangle$ が摂動によって $\hbar\omega$ のエネルギーを吸収し，エネルギー $E_f = E_i + \hbar\omega$ の終状態 $|f\rangle$ へ遷移する単位時間当たりの確率を表す．
- 第 2 項目はエネルギー E_i の始状態 $|i\rangle$ が摂動によって $\hbar\omega$ のエネルギーを放出し，エネルギー $E_f = E_i - \hbar\omega$ の終状態 $|f\rangle$ へ遷移する単位時間当たりの確率を表す．

1. 時間に依存した摂動論

次の形をした時間に依存したハミルトニアンを考えましょう:

$$H(t) = H_0 + H_{\mathsf{int}}(t). \tag{1.1}$$

ここで H_0 は時間に依存しないエルミートなハミルトニアンで，H_0 の固有値および固有ベクトルは完全に分かっているとします．$H_{\mathsf{int}}(t)$ は時間に依存した摂動項で，これもエルミート演算子とします．この時，時刻 t における系の状態 $|\Psi(t)\rangle$ は時間に依存した Schrödinger 方程式に従います:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = H(t)|\Psi(t)\rangle. \tag{1.2}$$

今からやりたいのは，この微分方程式を摂動論を用いて解いて，時刻 t での系の状態 $|\Psi(t)\rangle$ を摂動の 1 次で求めることです．

まず H_0 の固有値 E_n に属する固有ベクトルを $|n\rangle$ としましょう:

$$H_0|n\rangle = E_n|n\rangle. \tag{1.3}$$

H_0 はエルミート演算子なので，その固有ベクトルは規格直交完全系を張ります:

$$\text{規格直交性：}\quad \langle n|m\rangle = \delta_{nm}, \tag{1.4a}$$

$$\text{完全性：}\quad \sum_n |n\rangle\langle n| = 1. \tag{1.4b}$$

すると $|\Psi(t)\rangle$ はこの規格直交完全系 $\{|n\rangle\}$ で展開できます:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}|n\rangle. \tag{1.5}$$

ここで $c_n(t)\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$ は展開の係数で，後の計算の便利のために $c_n(t)$ と位相 $\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$ は分離しておきました.[1] 係数 $c_n(t)$ が分かれば，Schrödinger 方程式(1.2)は解けたことになります．以下，$c_n(t)$ を摂動の 1 次で計算して行きましょう．

まず，展開(1.5)を Schrödinger 方程式(1.2)に代入します:

$$\begin{aligned}
\text{(1.2)の左辺} &= i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\sum_n c_n(t)\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}|n\rangle \\
&= \sum_n \left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}c_n(t) + E_n c_n(t)\right]\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}|n\rangle, \qquad (1.6\mathrm{a})\\
\text{(1.2)の右辺} &= H(t)|\Psi(t)\rangle = (H_0 + H_{\mathsf{int}}(t))\sum_n c_n(t)\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}|n\rangle \\
&= \sum_n c_n(t)\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}H_0|n\rangle + \sum_n c_n(t)\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}H_{\mathsf{int}}(t)|n\rangle \\
&= \sum_n c_n(t)\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}E_n|n\rangle + \sum_n c_n(t)\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\left(\sum_{n'}|n'\rangle\langle n'|\right)H_{\mathsf{int}}(t)|n\rangle \\
&= \sum_n \left[E_n c_n(t) + \sum_{n'} c_{n'}(t)\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}(E_{n'}-E_n)t}\langle n|H_{\mathsf{int}}(t)|n'\rangle\right]\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}|n\rangle. \qquad (1.6\mathrm{b})
\end{aligned}$$

ここで，式(1.6b)の３行目第２項では恒等演算子 $1 = \sum_{n'}|n'\rangle\langle n'|$ を挿入して，４行目第２項では和を取るダミーのインデックス n と n' をそれぞれ n' と n に置き換えました．(1.6a)と(1.6b)より Schrödinger 方程式(1.2)は次の様になります:

$$\begin{aligned}
0 &= i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle - H(t)|\Psi(t)\rangle \\
&= \sum_n \left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}c_n(t) - \sum_{n'} c_{n'}(t)\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}(E_{n'}-E_n)t}\langle n|H_{\mathsf{int}}(t)|n'\rangle\right]\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}|n\rangle. \qquad (1.7)
\end{aligned}$$

固有ベクトル $\{|n\rangle\}$ は一次独立なので，式(1.7)が成り立つためには大括弧の中身がゼロにならなければなりません．従って係数 $c_n(t)$ は次の微分方程式を満たさなければなりません:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}c_n(t) = \sum_{n'} c_{n'}(t)\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}(E_{n'}-E_n)t}\langle n|H_{\mathsf{int}}(t)|n'\rangle. \tag{1.8}$$

さて，この微分方程式(1.8)の両辺を時刻 t_0 から t まで積分しましょう:

$$i\hbar\left[c_n(t) - c_n(t_0)\right] = \sum_{n'}\int_{t_0}^{t} dt'\, c_{n'}(t')\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}(E_{n'}-E_n)t'}\langle n|H_{\mathsf{int}}(t')|n'\rangle. \tag{1.9}$$

[1] 位相 $\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$ は摂動がないときの定常状態 $|n\rangle$ の時間発展依存性に他なりません: $|n(t)\rangle = \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}|n\rangle$.

少し整理して次の式を得ます:

$$c_n(t) = c_n(t_0) - \frac{i}{\hbar}\sum_{n'}\int_{t_0}^{t} dt'\, c_{n'}(t')\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}(E_{n'}-E_n)t'}\langle n|H_{\mathsf{int}}(t')|n'\rangle. \tag{1.10}$$

ここで，もともと求めたい係数 $c_n(t)$ が右辺の積分の中に入ってしまっていることに注意しましょう．実際，式(1.10)は微分方程式(1.8)を積分方程式に書き換えただけで，全然解いたことにはなりません．しかし，式(1.10)が良いのは逐次近似が使えるようになったことです．実際，２項目の積分の中の $c_{n'}(t')$ に式(1.10)を逐次的に代入していくと次の無限級数を得ます:

$$\begin{aligned} c_n(t) = c_n(t_0) &- \frac{i}{\hbar}\sum_{n'} c_{n'}(t_0)\int_{t_0}^{t} dt'\, \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}(E_{n'}-E_n)t'}\langle n|H_{\mathsf{int}}(t')|n'\rangle \\ &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_{n'}\sum_{n''} c_{n''}(t_0)\int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt''\, \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}(E_{n''}-E_{n'})t''-\frac{i}{\hbar}(E_{n'}-E_n)t'} \\ &\quad \times \langle n|H_{\mathsf{int}}(t')|n'\rangle\langle n'|H_{\mathsf{int}}(t'')|n''\rangle \\ &+ \cdots . \end{aligned} \tag{1.11}$$

従って摂動の１次の近似では係数 $c_n(t)$ は次のように求まります:

$$c_n(t) = c_n(t_0) - \frac{i}{\hbar}\sum_{n'} c_{n'}(t_0)\int_{t_0}^{t} dt'\, \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}(E_{n'}-E_n)t'}\langle n|H_{\mathsf{int}}(t')|n'\rangle. \tag{1.12}$$

初期条件　さて，Schrödinger 方程式は時間について１階の微分方程式なので，ある時刻での初期条件を課せば解は一意的に決まります．そこで時刻 t_0 での初期条件を課すことにしましょう．初期条件は考えている物理によって変わるのですが，特に重要なのは初め H_0 の固有状態であったものが摂動 H_{int} によって H_0 の別の固有状態へ移って行くという場合なので，時刻 t_0 で系の状態は H_0 の固有状態 $|i\rangle$ にあったとしましょう: $|\Psi(t_0)\rangle = |i\rangle$. 即ち，

$$c_n(t_0) = \delta_{ni} \tag{1.13}$$

とします．これを式(1.12)に代入すると次の表式を得ます:

$$c_n(t) = \delta_{ni} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}(E_i-E_n)t'}\langle n|H_{\mathsf{int}}(t')|i\rangle. \tag{1.14}$$

この初期条件の下で時刻 t に H_0 の固有状態 $|f\rangle$ $(f \neq i)$ を見出す確率は

$$P_{i\to f}(t) = |\langle f|\Psi(t)\rangle|^2 = |c_f(t)|^2 = \left|-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}(E_i-E_f)t'}\langle f|H_{\mathsf{int}}(t')|i\rangle\right|^2 \tag{1.15}$$

で与えられます．以下，摂動ハミルトニアン $H_{\mathsf{int}}(t)$ の時間依存性を更に仮定して Fermi の黄金律を導出していきましょう．

2. 単色摂動

摂動ハミルトニアンとして角振動数 $\omega(> 0)$ で振動する次のエルミート演算子を考えましょう:

$$H_{\mathsf{int}}(t) = V\mathrm{e}^{-i\omega t} + V^\dagger \mathrm{e}^{+i\omega t}. \tag{2.1}$$

ここで V は時間に依存しない演算子です．単一の振動数 $\nu = \omega/2\pi$ で振動しているので(2.1)の様な摂動を単色摂動 (monochromatic perturbation) といいます.[2] 式(2.1)を(1.14)に代入してインデックス n を f に置き換えると展開の係数 $c_f(t)$ は次式で与えられます:

$$c_f(t) = \delta_{fi} - \frac{i}{\hbar}\langle f|V|i\rangle \int_{t_0}^{t} dt'\, \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(E_f - E_i - \hbar\omega)t'} - \frac{i}{\hbar}\langle f|V^\dagger|i\rangle \int_{t_0}^{t} dt'\, \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(E_f - E_i + \hbar\omega)t'}. \tag{2.2}$$

積分は簡単に実行できます:

$$\int_{t_0}^{t} dt'\, \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(E_f - E_i \mp \hbar\omega)t'} = \frac{\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(E_f - E_i \mp \hbar\omega)t} - \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(E_f - E_i \mp \hbar\omega)t_0}}{\frac{i}{\hbar}(E_f - E_i \mp \hbar\omega)} = \frac{\sin\left(\frac{E_f - E_i \mp \hbar\omega}{2\hbar}(t - t_0)\right)}{\frac{E_f - E_i \mp \hbar\omega}{2\hbar}} \mathrm{e}^{i\frac{E_f - E_i \mp \hbar\omega}{2\hbar}(t + t_0)}. \tag{2.3}$$

多くの教科書ではこれを(2.2)に代入して，その後 $c_f(t)$ $(f \neq i)$ の絶対値２乗を計算し，最後に $t - t_0 \to \infty$ の場合を考えるのですが，ここでは最初から $t \to \infty$，$t_0 \to -\infty$ の極限を考えることにしましょう．$t \to \infty$, $t_0 \to -\infty$ とすると(2.2)の積分はデルタ関数になります:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt'\, \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(E_f - E_i \mp \hbar\omega)t'} = 2\pi\hbar\delta(E_f - E_i \mp \hbar\omega). \tag{2.4}$$

この極限の下では係数 $c_f(t)$ は次の様になります:

$$c_f(t) \to \delta_{fi} - \frac{i}{\hbar}\langle f|V|i\rangle \cdot 2\pi\hbar\delta(E_f - E_i - \hbar\omega) - \frac{i}{\hbar}\langle f|V^\dagger|i\rangle \cdot 2\pi\hbar\delta(E_f - E_i + \hbar\omega) \quad \text{as} \quad t \to \infty \;\&\; t_0 \to -\infty. \tag{2.5}$$

従って時刻 $t_0 = -\infty$ に H_0 の固有状態 $|i\rangle$ であったものが時刻 $t = \infty$ に H_0 の別の固有状態 $|f\rangle$ $(f \neq i)$ に遷移する確率は

$$\left| -\frac{i}{\hbar}\langle f|V|i\rangle \cdot 2\pi\hbar\delta(E_f - E_i - \hbar\omega) - \frac{i}{\hbar}\langle f|V^\dagger|i\rangle \cdot 2\pi\hbar\delta(E_f - E_i + \hbar\omega) \right|^2 = \frac{1}{\hbar^2}\left|\langle f|V|i\rangle\right|^2 (2\pi\hbar)^2\delta(0)\delta(E_f - E_i - \hbar\omega) + \frac{1}{\hbar^2}\left|\langle f|V^\dagger|i\rangle\right|^2 (2\pi\hbar)^2\delta(0)\delta(E_f - E_i + \hbar\omega) \tag{2.6}$$

[2] 単色摂動が現れる具体例として時間に依存した単色電磁場中の水素原子があります．この場合の全ハミルトニアンは,

$$H(t) = \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p} + \frac{e}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}, t)\right)^2 - \frac{e^2}{r}. \tag{a}$$

クーロンゲージ $\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}, t) = 0$ を取ると $(\boldsymbol{p} + (e/c)\boldsymbol{A})^2 = \boldsymbol{p}^2 + (2e/c)\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p} + (e/c)^2\boldsymbol{A}^2$ と展開されるので，H_0 と H_{int} は次の様に選べます:

$$H_0 = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} \quad \text{and} \quad H_{\mathsf{int}}(t) = \frac{e}{mc}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}, t)\cdot\boldsymbol{p} + \frac{e^2}{2mc^2}\boldsymbol{A}^2(\boldsymbol{x}, t). \tag{b}$$

但し，H_{int} の $\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p}$ の項は遷移確率に $\alpha = e^2/(\hbar c) \cong 1/137$ で効いてくるのに対し，$\boldsymbol{A}^2$ の項は遷移確率に α^2 で効いてくるので摂動の２次のオーダーとみなせることに注意しましょう．摂動の１次の計算では $\boldsymbol{A}^2$ の項は通常無視します．更にゲージ場 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}, t)$ は波数ベクトル $\boldsymbol{k}$，角振動数 $\omega = |\boldsymbol{k}|c$ の単色波

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}, t) = \boldsymbol{a}\mathrm{e}^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x} - \omega t)} + \boldsymbol{a}^*\mathrm{e}^{-i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x} - \omega t)}, \quad \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a} = 0, \tag{c}$$

だとすると，摂動ハミルトニアン H_{int} は $\boldsymbol{A}^2$ の項を無視して

$$H_{\mathsf{int}}(t) = V\mathrm{e}^{-i\omega t} + V^\dagger\mathrm{e}^{i\omega t}, \quad V := \frac{e}{mc}\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{p}, \tag{d}$$

となり式(2.1)の形になります．

となります．ここで２行目の等式に移るときに次の２つの等式を用いました:

$$\delta(E_f - E_i \mp \hbar\omega)\delta(E_f - E_i \mp \hbar\omega) = \delta(0)\delta(E_f - E_i \mp \hbar\omega), \tag{2.7a}$$
$$\delta(E_f - E_i - \hbar\omega)\delta(E_f - E_i + \hbar\omega) = 0. \tag{2.7b}$$

式(2.7b)は，$\delta(E_f - E_i - \hbar\omega)$ は $E_f = E_i + \hbar\omega$ となる時以外はゼロ，一方 $\delta(E_f - E_i + \hbar\omega)$ は $E_f = E_i - \hbar\omega$ となる時以外はゼロ，そして条件 $E_f = E_i + \hbar\omega$ と $E_f = E_i - \hbar\omega$ は ($\omega = 0$ を除いて) 両立し得ない，ということに注意すると理解できます．

　さて，遷移確率(2.6)には $\delta(0) = \infty$ が含まれていますが，これは初期時刻から終時刻までの間が無限大であることに起因します．実際，式(2.4)に注意すると $2\pi\hbar\delta(0)$ は $t_0 = -\infty$ から $t = \infty$ までの全時間に他なりません:

$$2\pi\hbar\delta(0) = \int_{-\infty}^{\infty} dt = (\text{初期時刻 } t_0 = -\infty \text{ から終時刻 } t = +\infty \text{ までの時間}). \tag{2.8}$$

そこで遷移確率(2.6)を全時間 $2\pi\hbar\delta(0)$ で割ることにすると，単位時間当たりの遷移確率 $\Gamma_{i\to f}$ が得られます:

$$\begin{aligned}\Gamma_{i\to f} = &\frac{2\pi}{\hbar}\left|\langle f|V|i\rangle\right|^2 \delta(E_f - E_i + \hbar\omega)\\ &+ \frac{2\pi}{\hbar}\left|\langle f|V^\dagger|i\rangle\right|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega).\end{aligned} \tag{2.9}$$

これが Fermi の黄金律で，時間に依存した摂動論で最も重要な結果の一つです．

3. 参考文献

Fermi の黄金律は Fermi の名前が冠されていますが，最初にその導出を与えたのは 1927 年の Paul A. M. Dirac の論文です:

P. A. M. Dirac, “The Quantum Theory of Emission and Absorption of Radiation,” *Proc. Roy. Soc. Lond.* **A114** (1927) 243-265 [INSPIRE]