$$\frac{d\vec{X}}{dt} = \sum_i \dot{\vec{x}}_i \qquad \leftarrow N=1 \quad \text{برای}$$

از طرفی

$$\frac{d\vec{X}}{dt} = \sum_i \frac{d\vec{x}_i}{dt} = \sum_i \frac{\vec{P}_i}{m} = \frac{\vec{P}}{m} = \frac{i}{\hbar}\left[H_0, \vec{X}\right]$$

$$H_0 |n\rangle = E_n |n\rangle \qquad \llcorner\!\!\to\; = \vec{J}_0$$

$$\Longrightarrow \boxed{\vec{J}_0 = \frac{i}{\hbar}\left[H_0, \vec{X}\right]}$$

برگردیم به سهم جمله اول در $\left(\frac{dP_\lambda}{d\Omega}\right)$

$$\left(\frac{dP_\lambda}{d\Omega}\right)_{E_1} = \frac{e^2 \omega_{nm}^2}{2\pi c^3} \left|\langle n | \vec{J}_0 \cdot \vec{\epsilon}^{\,*}_{\vec{k},\lambda} | m\rangle\right|^2$$

$$= \frac{\omega_{nm}^2}{2\pi c^3} \left|\frac{ie}{\hbar} \langle n | \left[H_0, \vec{X}\right] \cdot \vec{\epsilon}^{\,*}_{\vec{k},\lambda} | m\rangle\right|^2$$

$$= \frac{\omega_{nm}^2}{2\pi c^3} \frac{e^2}{\hbar^2} \left|\langle n | H_0 \vec{X} \cdot \vec{\epsilon}^{\,*}_{\vec{k},\lambda} | m\rangle - \langle n | \vec{X} \cdot \vec{\epsilon}^{\,*}_{\vec{k},\lambda} H_0 | m\rangle\right|^2$$

$$= \frac{\omega_{nm}^2 e^2}{2\pi c^3 \cancel{\hbar^2}} \underbrace{\left(E_n - E_m\right)^2}_{\omega_{nm}^2 \cancel{\hbar^2}} \left|\langle n | \vec{X} \cdot \vec{\epsilon}^{\,*}_{\vec{k},\lambda} | m\rangle\right|^2$$

$$\longrightarrow \boxed{\left(\frac{dP_\lambda}{d\Omega}\right)_{E_1} = \frac{\omega_{nm}^4 e^2}{2\pi c^3} \left|\langle n | \vec{X} \cdot \vec{\epsilon}^{\,*}_{\vec{k},\lambda} | m\rangle\right|^2}$$

Using $\langle n | \vec{X} | m\rangle \equiv \vec{d}_{nm}$ with $e\vec{d}_{nm}$ = Electric dipole moment

$$\longrightarrow \boxed{\left(\frac{dP_\lambda}{d\Omega}\right)_{E1} = \frac{\omega_{nm}^4 e^2}{2\pi c^3} \left|\vec{d}_{nm} \cdot \vec{\epsilon}^{\,*}_{\vec{k},\lambda}\right|^2}$$

✓ توان نور (فوتون) گسیل شده متناسب است با ω_{nm}^4 که در آن $\omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar}$

✓ دامنه نور گسیل شده متناسب است با تصویر $\vec{d}_{nm}$ بر روی بردار $\vec{\epsilon}^{\,*}_{k,\lambda}$ (جهت پلاریزاسیون)

✓ شدت نور گسیل شده متناسب است مربع تصویر $\vec{d}_{nm}$ بر روی $\vec{\epsilon}^{\,*}_{\vec{k},\lambda}$.

طول عمر گذارهای دوقطبی الکتریکی E1 :

فرض کنید سیستم در حالت برانگیخته است:

احتمال گذار و گسیل فوتون در عنصر فضائی $d\Omega$

$$d\omega_\lambda \equiv \sum_{\vec{k}\in d\Omega} \Gamma_{i\to f;\vec{k},\lambda}$$

مجدداً استفاده می‌کنیم از

$$1)\quad \sum_{\vec{k}\in d\Omega} = \int \frac{k^2 dk}{(2\pi)^3}\, V\, d\Omega$$

$$\Gamma_{i\to f;\vec{k},\lambda} = \frac{(2\pi)^2 e^2}{kcV}\,\delta\big(E_m - E_n - \hbar\underbrace{\omega_{\vec{k}}}_{\omega_{\vec{k}}=kc}\big)\,\left|\langle n|\vec{J}_{\vec{k}}\cdot\vec{\epsilon}^{\,*}_{\vec{k},\lambda}|m\rangle\right|^2$$

$$\Rightarrow d\omega_\lambda = d\Omega\,\frac{e^2(2\pi)^2}{\cancel{V}c}\int\frac{\cancel{V}k^{\cancel{2}}dk}{(2\pi)^3\cancel{k}}\,\frac{1}{\hbar c}\,\delta\left(\frac{\omega_{mn}}{c}-k\right)\left|\langle n|\vec{J}_{\vec{k}}\cdot\vec{\epsilon}^{\,*}_{\vec{k},\lambda}|m\rangle\right|^2$$

$$= d\Omega\,\frac{e^2}{2\pi\hbar c^2}\int k\,dk\,\delta\left(\frac{\omega_{mn}}{c}-k\right)\left|\langle n|\vec{J}_{\vec{k}}\cdot\vec{\epsilon}^{\,*}_{\vec{k},\lambda}|m\rangle\right|^2$$

$$d\omega_\lambda = d\Omega\,\frac{e^2}{2\pi\hbar c^2}\left(\frac{\omega_{mn}}{c}\right)\left|\langle n|\vec{J}_{\vec{k}}\cdot\vec{\epsilon}^{\,*}_{\vec{k},\lambda}|m\rangle\right|^2$$

$$\vec{J}_{\vec{k}} = \vec{J}_0 - i\int d^3x\,\vec{J}(\vec{x})(\vec{k}\cdot\vec{x}) + \dots$$ تقریب دوقطبی

$$\vec{J}_{\vec{k}} \approx \vec{J}_0$$ در این تقریب رتبه صفر

$$d\omega_\lambda = d\Omega\,\frac{e^2\omega_{mn}}{2\pi\hbar c^3}\left|\langle n|\vec{J}_0\cdot\vec{\epsilon}^{\,*}_{\vec{k},\lambda}|m\rangle\right|^2$$

مجدداً
$$\vec{J}_0 = \frac{\vec{P}}{m} = \frac{i}{\hbar}[H_0,\vec{X}]$$

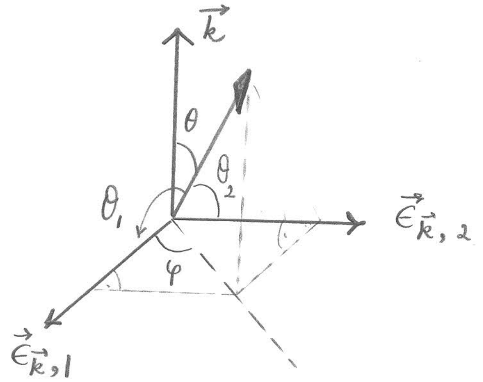
$$\Rightarrow d\omega_\lambda = d\Omega\,\frac{e^2\omega_{mn}}{2\pi\hbar c^3}\left|\left(\frac{i}{\hbar}\right)\langle n|H_0\vec{X}\cdot\vec{\epsilon}^{\,*}_{\vec{k},\lambda} - \vec{X}\cdot\vec{\epsilon}^{\,*}_{\vec{k},\lambda}H_0|m\rangle\right|^2$$

$$= d\Omega\,\frac{e^2\omega_{mn}}{2\pi\hbar^3c^3}\,\underbrace{(E_n-E_m)^2}_{=\hbar^2\omega_{nm}^2=\hbar^2\omega_{mn}^2}\,\left|\underbrace{\langle n|\vec{X}|m\rangle}_{\vec{d}_{nm}}\cdot\vec{\epsilon}^{\,*}_{\vec{k},\lambda}\right|^2$$

$$\boxed{d\omega_\lambda = d\Omega\,\frac{e^2\omega_{mn}^3}{2\pi\hbar c^3}\left|\vec{d}_{nm}\cdot\vec{\epsilon}^{\,*}_{\vec{k},\lambda}\right|^2}$$

$$\Rightarrow \boxed{\sum_{\lambda=1,2}\int d\omega_\lambda = \sum_{\lambda=1,2}\int d\Omega\,\frac{e^2\omega_{mn}^3}{2\pi\hbar c^3}\left|\vec{d}_{nm}\cdot\vec{\epsilon}^{\,*}_{\vec{k},\lambda}\right|^2}$$

$E_m > E_n$



$$\theta_\lambda = \measuredangle \left(\vec{d}_{nm}, \vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}\right)$$

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

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

$$\vec{d}_{nm} \cdot \vec{\epsilon}^{\,*}_{\vec{k},\lambda} = |\vec{d}_{nm}| \cos\theta_\lambda$$

$$\sum_{\lambda=1,2} |\vec{d}_{nm} \cdot \vec{\epsilon}^{\,*}_{\vec{k},\lambda}|^2 = |\vec{d}_{nm}|^2 \left(\cos^2\theta_1 + \cos^2\theta_2\right)$$

$$\cos^2\theta_1 + \cos^2\theta_2 = \sin^2\theta \left(\cos^2\varphi + \sin^2\varphi\right) = \sin^2\theta = 1 - \cos^2\theta$$

$$d\Omega = d\varphi \; d(\cos\theta)$$

$$\sum_{\lambda=1,2} \int dw_\lambda = \sum_{\lambda=1,2} \underbrace{\int d\Omega \; \cos^2\theta_\lambda} \; \frac{e^2 \omega_{mn}^3}{2\pi\hbar c^3} \; |\vec{d}_{nm}|^2$$

$$\int d\Omega \cos^2\theta_\lambda = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^{1} d\cos\theta \; (1 - \cos^2\theta) = 2\pi \, \frac{4}{3} = \frac{8\pi}{3}$$

$$\boxed{\sum_{\lambda=1,2} \int dw_\lambda = \frac{8\pi}{3} \left(\frac{e^2 \omega_{mn}^3}{2\pi\hbar c^3}\right) |\vec{d}_{nm}|^2 = \frac{4\omega_{mn}^3 e^2}{3\hbar c^3} |\vec{d}_{nm}|^2 \equiv W_{nm}}$$

احتمال گذار کل در واحد زمان از حالت m به n است.

$$\tau = \frac{1}{\sum_n W_{nm}}$$

جمع روی همه حالتهای مجاز

$$\tau(2p \to 1s) = 1.6 \times 10^{-9} \text{ sec}$$

نتیجه متناسب است با $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$ ثابت ساختار ریز

قواعد گزینش برای دوقطبی الکتریکی :

ما به دنبال همه قواعدی هستیم که عنصر ماتریسی $\vec{d}_{nm}$ صفر می‌شود (یا نمی‌شود)

نکته اول اینکه اگر دوقطبی الکتریکی وجود نداشته باشد $e\vec{d}_{nm}=\vec{0}$ ، طبیعتاً گذاری رخ نمی‌دهد. زیرا دیدیم که

توان تابشی گذار دوقطبی الکتریکی $\left(\frac{dP_\lambda}{d\Omega}\right)_{E1} = \frac{\omega_{nm}{}^4 e^2}{2\pi c^3} \left|\vec{d}_{nm}\cdot \vec{\epsilon}^{\,*}_{\vec{k},\lambda}\right|$

برای پیدا کردن قواعد گذار از روابط زیر استفاده می‌کنیم :

$$[L_z , X\pm iY] = \pm\hbar\,(X\pm iY)$$

$$[L_z , Z] = 0$$

$$\vec{L} = \sum_i \vec{L}_i = \sum_i \vec{x}_i \times \vec{p}_i$$

فرض می‌کنیم که حالت ابتدایی $|n\rangle$ و انتهایی $|m\rangle$ هر دو ویژه‌حالت هامیلتونی مختل نشده هستند مربوط به اتم هیدروژن که با L_z و $\vec{L}^2$ جابجا می‌شود ← در نتیجه با هم ویژه‌حالت‌های مشترک دارند.

$$|i\rangle = |n\ell, m\rangle$$

$$|f\rangle = |n, \ell', m'\rangle$$

ادعا :

(a) قواعد گزینش برای m_ℓ :

اگر بخواهیم شرط مربوط به ناصفر شدن عنصر ماتریسی $\langle \ell' m_{\ell'}|\vec{d}\,|\ell m_\ell\rangle$ را برای هامیلتونی H_0 اتم هیدروژن بدست آوریم، می‌توان نشان داد که

$$\Delta m_\ell = \pm 1 \iff \langle \ell' m_{\ell'}|\, X\pm iY \,|\ell\, m_\ell\rangle \neq 0$$

$$\Delta m_\ell = 0 \iff \langle \ell' m_{\ell'}|\, Z \,|\ell\, m_\ell\rangle \neq 0$$

بنابراین ترتیب گذار دوقطبی الکتریکی فقط وقتی ممکن است که $0, \pm 1 = \Delta m_\ell$

(b) همچنین می‌توان نشان داد که قواعد گزینش برای ℓ عبارت خواهد بود از : $\Delta \ell = \pm 1$

اثبات :

(a) $[L_z, Z] = 0$

$$\langle \ell' m_{\ell'}|[L_z, Z]|\ell, m_\ell\rangle = \langle \ell' m_{\ell'}|\, L_z Z - Z L_z \,|\ell m_\ell\rangle$$

$$\hbar\,(m_{\ell'} - m_\ell)\ \langle \ell' m_{\ell'}|\, Z \,|\ell\, m_\ell\rangle = 0$$

$\rightarrow$ اگر $m_{\ell'} = m_\ell \Rightarrow \Delta m_\ell = 0$

در آن صورت عنصر ماتریسی لزوماً صفر نیست.

$$[L_z, X \pm iY] = \pm \hbar (X \pm iY)$$

$$\langle \ell' m_{\ell'} | [L_z, X \pm iY] | \ell m_\ell \rangle = \langle \ell' m_{\ell'} | L_z (X \pm iY) | \ell m_\ell \rangle - \langle \ell' m_{\ell'} | (X \pm iY) L_z | \ell m_\ell \rangle$$

$$= \hbar (m_{\ell'} - m_\ell) \langle \ell' m_{\ell'} | (X \pm iY) | \ell m_\ell \rangle$$

$$= \langle \ell' m_{\ell'} | \pm \hbar (X \pm iY) | \ell m_\ell \rangle$$

$$\Longrightarrow \quad \hbar (m_{\ell'} - m_\ell \mp 1) \langle \ell' m_{\ell'} | (X \pm iY) | \ell, m_\ell \rangle = 0$$

به این ترتیب اگر $\Delta m_\ell = \pm 1$ بشود آنگاه عنصر ماتریسی $\langle \ell' m_{\ell'} | X \pm iY | \ell m_\ell \rangle$ لزوماً صفر نیست.

(b) قواعد مربوط به ℓ: استفاده می‌کنیم از

$$[\vec{L}^2, [\vec{L}^2, \vec{X}]] = 2\hbar^2 \{\vec{X}, \vec{L}^2\}$$

$$\langle \ell' m_{\ell'} | [\vec{L}^2, [\vec{L}^2, \vec{X}]] | \ell m_\ell \rangle = 2\hbar^2 \langle \ell' m_{\ell'} | \{\vec{X}, \vec{L}^2\} | \ell m_\ell \rangle$$

طرف راست:

$$2\hbar^2 \langle \ell' m_{\ell'} | \{\vec{X}, \vec{L}^2\} | \ell m_\ell \rangle = 2\hbar^4 \big(\ell(\ell+1) + \ell'(\ell'+1) \big) \times \langle \ell' m_{\ell'} | \vec{X} | \ell m_\ell \rangle$$

طرف چپ:

$$\langle \ell' m_{\ell'} | [\vec{L}^2, [\vec{L}^2, \vec{X}]] | \ell m_\ell \rangle = \hbar^4 \left\{ \ell'^2(\ell'+1)^2 + \ell^2(\ell+1)^2 - 2\ell\ell'(\ell+1)(\ell'+1) \right\} \times \langle \ell' m_{\ell'} | \vec{X} | \ell m_\ell \rangle$$

از مقایسه طرف راست و طرف چپ بدست می‌آید:

$$\boxed{\langle \ell' m_{\ell'} | \vec{X} | \ell m_\ell \rangle (\ell + \ell')(\ell' + \ell + 2)\left((\ell - \ell')^2 - 1 \right) = 0}$$

در اینجا ℓ و ℓ' هر دو مثبت هستند، فقط اگر $\ell = \ell' = 0$ باشد مقدار $\ell + \ell' = 0$ می‌شود

ولی شرط ℓ و ℓ' را نمی‌توانیم داشته باشیم زیرا انتقال‌های $\ell = \ell' = 0$ صحت دارند و همین باعث می‌شود که عنصر ماتریسی $\langle \ell' m_{\ell'} | \vec{X} | \ell m_\ell \rangle \big|_{\ell=\ell'=0,\ m_\ell = m_{\ell'} = 0} = 0$ می‌شود و چون ما می‌خواهیم قوانینی را پیدا کنیم که این اتفاق برای آن نمی‌افتد

بر شرط $\ell = \ell' = 0$ غیر قابل قبول است.

به این ترتیب $\longleftarrow$ $\ell - \ell' = \pm 1$ یا $\ell' = \ell \pm 1$

or $\Delta \ell = \pm 1$

نکته: ادعا کردیم که $\langle 0|\vec{X}|0\rangle = 0$ است. برای اثبات توجه می‌کنیم که حالت $|0\rangle$ تحت تبدیل پاریته زوج است یعنی

$$P|0\rangle = |0\rangle$$

$$\langle 0|\vec{X}|0\rangle = \langle 0|P\vec{X}P|0\rangle \underset{[P,\vec{X}]=-\vec{X}}{=} -\langle 0|\vec{X}P^2|0\rangle$$

$$= -\langle 0|\vec{X}|0\rangle$$

$$\longrightarrow \quad \boxed{\langle 0|\vec{X}|0\rangle = 0}$$