

2023.8 的一些组会内容

姓名 薄纪铮

August 29, 2023

Contents

1	Shell model 中的电磁性质 (一些和电磁跃迁有关的理论)	3
1.1	一些 General 的东西	3
1.2	电磁多极算符 (Electric and Magnetic Multipole Operators)	4
2	Nuclear Model 中的电磁性质	5
2.1	电磁场二次量子化	5
2.2	场的角动量好量子数本征态	7
2.3	辐射 (场) 和物质的相互作用	8
2.4	跃迁矩阵元的多极展开以及选择定则	10

1 Shell model 中的电磁性质 (一些和电磁跃迁有关的理论)

1.1 一些 General 的东西

在对原子核做出一些好的描述之后, 如好的 Hamiltonian(无论是平均场还是剩余两体相互作用) 下得到的波函数, 那么就可以算核的 gamma 衰变率以 check 这个波函数的描述对不对。这也是波函数的用途。

此外核的 gamma 衰变性质同时也是核的激发态的 spin and parity 的好的观测量。

所以该部分集中于跃迁 (概) 率。

首先给出单位时间跃迁率的概念:

$$T(L) = 8\pi ce^2 / \hbar c(L+1) / (L[(2L+1)!!]^2) k^{2L+1} B(L)$$

其中

$$k = \omega/c \ll 1/R$$

有: R 是核的半径, 它表示了长波长 (低能) 极限下跃迁率 (transition rate), 即激发能 $E_\gamma < 3MeV$ 。

然后 L 描述了多极性质, $B(L)$ 是所谓的约化跃迁率, 而且 $B(L)$ 是真正携带了核结构信息的量。

假设原子核的初态是 $|\alpha_i; J_i M_i\rangle$, 然后它在算符 $O(LM)$ 的作用下跃迁到了末态 $|\alpha_f; J_f M_f\rangle$ 。而所谓的约化跃迁率意味着对于一个给定的初态 $(J_i M_i)$, 对所有的末态 $(J_f M_f)$, 以及所有的跃迁算符 (L, M) 中间的量求和, 即:

$$B(J_i \rightarrow J_f; L) = \sum_{M, M_f} |\langle \alpha_f; J_f M_f | O(LM) | \alpha_i; J_i M_i \rangle|^2$$

可以通过 Wigner-Eckart theorem 将上式约化为

$$B(J_i \rightarrow J_f; L) = \frac{1}{2J_i + 1} |\langle \alpha_f J_f | O(L) | \alpha_i J_i \rangle|^2$$

上式的情况是: 初态的取向 $(J_i M_i)$ 没有特定的偏向 ('no particular orientation')

若初态有一个特定的 orientation, 即 M_i 有一个分布或者说是占据数 $p(M_i)$, 那么上式就需要修正了。

上式适用于纯态, 如果不是纯态, 核的初态和末态需要用一组 basis 展开:

$$|\alpha_i; J_i M_i\rangle = \sum_k a_k(J_i) |k_i; J_i M_i\rangle$$

$$|\alpha_f; J_f M_f\rangle = \sum_l b_l(J_f) |l_f; J_f M_f\rangle$$

所以能将约化的跃迁概率推广到:

$$B(J_i \rightarrow J_f; L) = \frac{1}{2J_i + 1} \left| \sum_{k,l} a_k(J_i) b_l(J_f) \langle l; J_f | O(L) | k; J_i \rangle \right|^2$$

显然, 后者的公式可以描述干涉效应 (interference effects), 或者说相干不太容易引起歧义。

1.2 电磁多极算符 (Electric and Magnetic Multipole Operators)

在长波近似 (或者说低能近似下), 电多极算符以一个连续的电荷密度分布 $\rho(\mathbf{r})$ 来进行定义, 其定义为:

$$O(\text{el.}, LM) = \frac{1}{e} \int \rho(\mathbf{r}) r^L Y_L^M(\theta, \phi) d\mathbf{r}$$

相似地, 磁多极算符以 convection current (这个看起来不知道怎么翻译, 我估计是粒子流, 反正下面有定义) 和磁化电流 (magnetization current) $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ 定义:

$$O(\text{mag.}, LM) = \frac{1}{L+1} \frac{1}{ec} \int \nabla [r^L Y_L^M(\theta, \phi)] \times \{ \mathbf{r} \times [\mathbf{j}(\mathbf{r}) + c \nabla \times \mathbf{m}(\mathbf{r})] \} d\mathbf{r}$$

2 Nuclear Model 中的电磁性质

2.1 电磁场二次量子化

在矢势的 Coulomb 规范下 ($\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$)

用 \mathbf{A} 表示出电场和磁场

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}, \mathbf{H} = \nabla \times \mathbf{A}$$

(他这里磁场用的 \mathbf{H} 表示, 但是正常这个公式左边好像应该是 \mathbf{B} , 反正不管了, 正常只差一个常数)

以及电磁场的能量密度

$$\epsilon_{em} = \frac{1}{8\pi} (|\mathbf{E}|^2 + |\mathbf{H}|^2)$$

其主要成分依旧是电场和磁场的模方组成的二次型, 注意一下系数为 $\frac{1}{8\pi}$ 然后将 \mathbf{A} 写成平面波

$$\mathbf{A}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}_0 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)$$

其中 $\omega = c|\mathbf{k}|$, 这是波动方程的一个自然的结果关系式。

此外根据 \mathbf{A} 给出其他场

$$\mathbf{E}_{\mathbf{k}} = -k \mathbf{A}_0 \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t), \mathbf{H}_{\mathbf{k}} = -\mathbf{k} \times \mathbf{A}_0 \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)$$

代入到前面能量密度里面给出具体一点的能量密度

$$\epsilon_{em} = \frac{1}{8\pi} k^2 |A_0|^2$$

再具体一点, 对于单个光子, 系统体积为 V 的情况, 这个能量密度直观地应该是 $\hbar\omega/V$, 从而得到 A_0

$$A_0 = \sqrt{\frac{8\pi\hbar\omega}{k^2 V}} = \sqrt{\frac{8\pi\hbar c^2}{\omega V}}$$

再给出等价的 complex 的表达式

$$\mathbf{A}_{em}(\mathbf{r}, t) = \epsilon \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega V}} (a_0 e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - i\omega t} + a_0^* e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} + i\omega t})$$

a_0 是一个模为 1 的复数, 描述了波的相位

前面的 ϵ 是描述极化的单位矢量, 由于电磁波的切向性质, 它有两个极化方向 $\epsilon_l, l = 1, 2$, 它们都满足 $\epsilon_l \cdot \mathbf{k} = 0$

前面给出了无相互作用的电磁场能量密度, 然后这里也给出了经典场论下相互作用的能量密度

$$\epsilon_{int} = -\frac{1}{c} \mathbf{j}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r})$$

\mathbf{j} 是电流密度分布, 具体说, 这个流描述了光子的释放和吸收。此外在原子核的初态 Ψ_i 和末态 Ψ_f 之间的跃迁矩阵元应写作

$$\int d^3r \langle \Psi_f, 1\text{photon} | -\frac{1}{c} \mathbf{j} \cdot \mathbf{A} | \Psi_i, 0\text{photon} \rangle$$

该矩阵元描述了释放单个光子, 而对应地, 对它取共轭则描述了吸收单个光子, 场算符则包括了上述两个部分, 即吸收和释放的部分。

然后是上述矩阵元的总的时间依赖的相位为

$$\frac{i}{\hbar}(E_f - E_i)t + i\phi$$

这里 ϕ 是一个未知的相位, 它是和辐射场的产生算符伴随在一起的。根据总能量守恒, 有 $E_f = E_i - \hbar\omega$, 用 ω 表示这个未知相位 ϕ : $\phi = \omega t$ 。

最终形式的辐射场算符表示为 (不推导了):

$$\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}\mu} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega V}} (\hat{\beta}_{\mathbf{k}\mu} \boldsymbol{\epsilon}_\mu^* e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-i\omega t} + \hat{\beta}_{\mathbf{k}\mu}^\dagger \boldsymbol{\epsilon}_\mu e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}+i\omega t})$$

将场变成场算符就相当于二次量子化了

这里面有不少指标, 我们查看各个指标的物理意义:

\mathbf{k} 是波矢, μ 是极化指标

这里对所有的波矢量 \mathbf{k} 和极化模式 μ 求和

$\boldsymbol{\epsilon}_\mu$ 及其共轭代表了角动量 (在某个特殊方向, 这里估计是 \mathbf{k} 所在方向) 的投影, 用 μ 表示, 而这个是和产生还是湮灭算符的选择一一对应的。

这里具体怎么选择, 即怎么对应? 我理解大概是:

当选定特殊方向 \mathbf{k} 方向时, 当产生角动量投影在这个方向上的一个光子时, 就对应着失去一个角动量投影在另一个反方向上的光子, 这两部分各占一半。

这也正如上式前面的系数取的是前面推导出来的 A_0 数值上的一半一样, 前后两项各一半。

上述场算符对空间积分后得到总的 Hamiltonian 和总的动量算符为:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}\mu} \hbar\omega_{\mathbf{k}} (\hat{\beta}_{\mathbf{k}\mu}^\dagger \hat{\beta}_{\mathbf{k}\mu} + \frac{1}{2})$$

$$\hat{P} = \sum_{k\mu} \hbar \mathbf{k} \hat{\beta}_{k\mu}^\dagger \hat{\beta}_{k\mu}$$

上述光子态是动量算符的本征态

但是为了处理与核的相互作用问题, 使用角动量本征态更方便, 所以下面要说明光子场的角动量本征态

2.2 场的角动量好量子数本征态

为了建立场的总角动量作为好量子数的一组本征态, 我们需要再拿出一个轨道角动量为好量子数的标量本征函数(态)(光子的) $\Phi_{\lambda\mu}(\mathbf{r})$, 然后将它和光子场本身的场算符(内部态)做耦合

所以场的总角动量作为好量子数的场算符为

$$\mathbf{A}_{lm}^\lambda(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mu\mu'} (\lambda 1 l | \mu\mu' m) \Phi_{\lambda\mu}(\mathbf{r}) \mathbf{e}_{\mu'} e^{-i\omega t}$$

上式中 λ 也是耦合场的好量子数

所以根据上式, 波动方程化简为标量 Helmholtz 方程

$$(\Delta + k^2)\Phi_{\lambda\mu}(\mathbf{r}) = 0$$

在渐近情况, 这个方程的解和我们熟悉的散射理论里面的说法相同, 其远处的边界条件为:

$$\Phi_{\lambda\mu}(\mathbf{r}) = j_\lambda(kr)Y_{\lambda\mu}(\Omega)$$

本来对上面的指标有疑问, 因为这本书他前面选的几个希腊字母指标不太属于平时的习惯使用情况, 但是看了下面的散射边界条件解可以大致看出来:

λ 是轨道角动量量子数, μ 是轨道角动量投影的量子数相当于 m_λ

然后 1 是自旋量子数为 1, μ' 是自旋投影的量子数, 相当于 m_s

最后 l 是轨道角动量量子数 l 和自旋量子数 1 耦合成的总角动量量子数, 他这里用了 l 表示.

因此 m 就是总角动量量子数 (这里用了 l 表示) 的投影 z 分量

[Helmholtz 方程的好的角动量量子数的矢量解:](#)

$$\mathbf{A}_{lm,\lambda}(\mathbf{r}) = \sum_{\mu\mu'} (\lambda 1 l | \mu\mu' m) j_\lambda(kr) Y_{\lambda\mu}(\Omega) \mathbf{e}_{\mu'}$$

因为上式是对 $\mu\mu'$ 求和, 所以将 trivial 的径向相关的 bessel 函数拿出去, 就剩下所谓的

矢量球谐函数'the vector spherical harmonics'

$$\mathbf{Y}_{lm,\lambda}(\Omega) = \sum_{\mu\mu'} (\lambda 1 l | \mu\mu' m) Y_{\lambda\mu}(\Omega) \mathbf{e}_{\mu'}$$

2.3 辐射 (场) 和物质的相互作用

首先需要列出 fermi's golden rule, 它描述了初态和末态之间的跃迁率, 如果给定微扰的 Hamiltonian, 那可以写出跃迁概率

$$\omega_{f \leftarrow i} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle f | \hat{H}_{int} | i \rangle \right|^2 \rho_f$$

ρ_f 是终态的态密度

我们设出一个核的初态和末态, 以及它和辐射场的相互作用:

$$|i\rangle = |\alpha(t), 0\rangle = |\alpha(t)\rangle |0\rangle \quad , \quad |f\rangle = |\beta(t), \mathbf{k}\mu\rangle = |\beta(t)\rangle |\mathbf{k}\mu\rangle$$

$$\hat{H}_{int} = -\frac{1}{c} \int d^3r \hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t)$$

其中 $|\alpha(t)\rangle, |\beta(t)\rangle$ 是核的态, $\hat{\mathbf{A}}$ 取前面 fock 空间中的场算符形式

里面的产生湮灭算符 $\hat{\beta}\hat{\beta}^\dagger$ 在单光子态和真空态之间的矩阵元等于 1, 从而写出 Hamiltonian 在初末态之间的跃迁矩阵元:

对于释放一个光子的情况有

$$\langle \beta(t), \mathbf{k}\mu | \hat{H}_{int} | \alpha(t), 0 \rangle = \int d^3r \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega V}} \epsilon_{\mathbf{k}\mu}^* e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}+i\omega t} \cdot \langle \beta(t) | \hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}) | \alpha(t) \rangle$$

而对于吸收一个光子的情况, 只需将上式取共轭即可

$$\langle \beta(t), \mathbf{k}\mu | \hat{H}_{int} | \alpha(t), 0 \rangle = \int d^3r \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega V}} \epsilon_{\mathbf{k}\mu} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-i\omega t} \cdot \langle \beta(t) | \hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}) | \alpha(t) \rangle$$

对于电流密度矩阵元项

$$\langle \beta(t) | \hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}) | \alpha(t) \rangle = \langle \beta | \hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}) | \alpha \rangle \exp(i(E_\beta - E_\alpha)t/\hbar)$$

对于含时的相位, fermi 黄金法则要求能量守恒, 所以总的含时相位需要再加上 $e^{-i\omega t}$ 的一

项, 使总的时间依赖为 0

然后这里利用一个特殊办法来化简跃迁矩阵元 (前面剩下来电流密度项还没化简)
那就是结合了电荷的连续性方程

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho}(\mathbf{r}, t) + \nabla \cdot \hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}, t) = 0$$

将所有的包含电流密度的散度项用电荷密度算符 ρ 表示

将跃迁概率分为吸收光子和释放光子两种情况分别写出

对于 absorption(原子核跃迁到一个孤立能级或者是一个窄共振态), 不管是跃迁到哪一种终态, 我们只关心对 line 或者 resonance 的所在能量范围的能量做积分后得到的总的跃迁概率, 而不管是离散能级还是 resonance 的情况, absorption 的总跃迁概率写作如下形式:

$$\int_{line} dE \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle f | \hat{H}_{int} | i \rangle \right|^2 \rho(E) \simeq \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle f | \hat{H}_{int} | i \rangle \right|_{avg}^2 \int dE \rho(E)$$

这里也顺带给出 absorption 情况下的截面:

$$\sigma_{absorption} = \frac{2\pi V}{\hbar c} \left| \langle f | \hat{H}_{int} | i \rangle \right|^2$$

此外然后是 emission 的情况, 也就是放出光子的跃迁概率情况, 对于 emission, 原子核的终态是离散态 (应该就是 bound 情况) 或者是窄的 resonance 态

这里面对光子场在每个自由度 (坐标方向) 上面都用了周期性边界条件, 我们最后把相关公式换成球坐标系下面写出

比如态密度 density of states

$$\rho(E) = \frac{d^3 n}{dE} = \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 \frac{k^2}{\hbar c} d\Omega_k$$

跃迁概率

$$\omega_{f \leftarrow i} = \frac{V}{(2\pi)^2} \frac{k^2}{\hbar^2 c} \left| \langle f | \hat{H}_{int} | i \rangle \right|^2 d\Omega_k \quad (1)$$

$$= \frac{k}{2\pi \hbar c^2} \left| \int d^3 r \langle \beta | \hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}) | \alpha \rangle \cdot \boldsymbol{\epsilon}_{k\mu} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \right|^2 d\Omega_k \quad (2)$$

2.4 跃迁矩阵元的多极展开以及选择定则

前面分别给出了 absorption 和 emission 的电磁跃迁矩阵元形式
这一节直接给出 'the crucial matrix element for both absorption and emission':

$$M_{\beta\alpha}(k\mu) = \int d^3r \langle \beta | \hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}) | \alpha \rangle \cdot \mathbf{e}_\mu e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

其中假设了波沿着 z 方向传播

此外两个极化方向在单位球面上的矢量 $\mathbf{e}_{\pm 1}$ 中给定

插入平面波的多极展开式 (好的角动量量子数)

$$\mathbf{e}_\mu e^{ikz} = -\mu\sqrt{2\pi} \sum_l \sqrt{2l+1} i^l (\mathbf{A}_{l\mu}(\mathbf{r}; M) + i\mu\mathbf{A}_{l\mu}(\mathbf{r}; E))$$

得到

$$\begin{aligned} M_{\beta\alpha}(k\mu) &= -\mu\sqrt{2\pi} \sum_l \sqrt{2l+1} i^l \\ &\times \int d^3r \langle \beta | \hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}) | \alpha \rangle \cdot (\mathbf{A}_{l\mu}(\mathbf{r}; M) + i\mu\mathbf{A}_{l\mu}(\mathbf{r}; E)) \end{aligned}$$

然后用上式讨论角动量和宇称的选择定则

首先是角动量的选择定则

要求: J_α, J_β, l 满足三角关系

$$|J_\alpha - l| \leq J_\beta \leq J_\alpha + l$$

这里 l 应该就是核的初末态之间转移的场的角动量量子数

然后是宇称的选择定则

要求: 场的总的宇称是正的 (+1), 不然如果是负 -1 的话, 来自 \mathbf{r} 和 $-\mathbf{r}$ 两个位置处的贡献会抵消为 0

已知: 对于多极场, 电场情况和磁场情况具有不同的宇称, 具体分别为 $(-1)^l$ 和 $(-1)^{l+1}$

因此矢量场在 $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$ 下的矩阵元 $\langle \beta | \hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}) | \alpha \rangle$ 应有宇称选择定则

$$\pi_\alpha \pi_\beta = \begin{cases} (-1)^l & \text{for electric transitions} \\ (-1)^{l+1} & \text{for magnetic transitions} \end{cases}$$

根据电磁跃迁的不同的选择定则我们可以将它们的贡献分开看

首先是电多极跃迁 (跃迁角动量为 l , 相当于转移了 l 的角动量), 满足宇称选择定则

$\pi_\alpha \pi_\beta = (-1)^l$, 其矩阵元为

$$M_{\beta\alpha}(k\mu; El) = -\sqrt{2\pi} i^{l+1} \sqrt{2l+1} \int d^3r \langle \beta | \hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}) | \alpha \rangle \cdot \mathbf{A}_{l\mu}(\mathbf{r}; E)$$

然后是磁多极跃迁 (同样跃迁角动量为 l), 满足宇称选择定则 $\pi_\alpha \pi_\beta = (-1)^{l+1}$, 其矩阵元为

$$M_{\beta\alpha}(k\mu; Ml) = -\mu\sqrt{2\pi}i^l\sqrt{2l+1} \int d^3r \langle\beta|\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r})|\alpha\rangle \cdot \mathbf{A}_{l\mu}(\mathbf{r}; M)$$