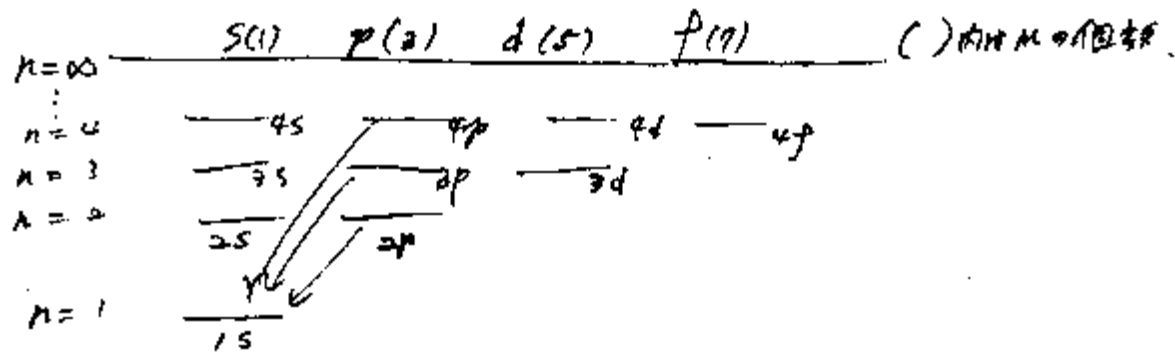


### 3. 量子遷移の選択律

非束縛の原子 - 準位の量子遷移は次の通り。  
 主量子数  $n$ , 軌道角運動量子数  $l (0, \dots, n-1)$  及び量子数  $m (-l \leq m \leq l)$  の軌道。



原子の準位の高エネルギー状態から低いエネルギー状態に移る (またはその逆) 遷移が起こる。その放出や吸収が起る軌道は  $\Delta l = \pm 1$  の場合のみである。これを 選択律 とする。

量子遷移は光が作用する。これは光の進む方向が一致 (または反対) である。

$\int d\tau \rho_{nlm}^* \rho_{n'l'm'}$  ( $\tau = x, y, z$ ) がゼロでない場合は遷移が起る。これは、 $\rho_{nlm}$  と  $\rho_{n'l'm'}$  の積がゼロでないことを示している。つまり、遷移は起る。

選択律は理論的に示される。実際は選択律に禁じられている遷移は、禁止能が現れることがある。

### 4. Pauli の原理

Pauli の原理 (Pauli の排他律) は、多電子原子の軌道に電子が同時に存在する。

多電子原子は  $\left\{ \begin{array}{l} n \text{ (主量子数, } n=1, 2, \dots) \\ l \text{ (軌道角運動量子数, } l=0, \dots, n-1) \\ m \text{ (磁気量子数, } -l \leq m \leq l) \end{array} \right.$  という 3 つの量子数の組み合わせで表される。

量子数が決まれば、その量子状態は決定される。

(1) 多電子原子の場合には  $2n^2$  の量子数が必要になる。

$s = \pm \frac{1}{2}$  というスピン量子数は、軌道の向きが 2 種類あるからである。つまり、軌道に 2 つの向きが存在する。つまり、 $\uparrow \downarrow$  という 2 つの向きが存在する。

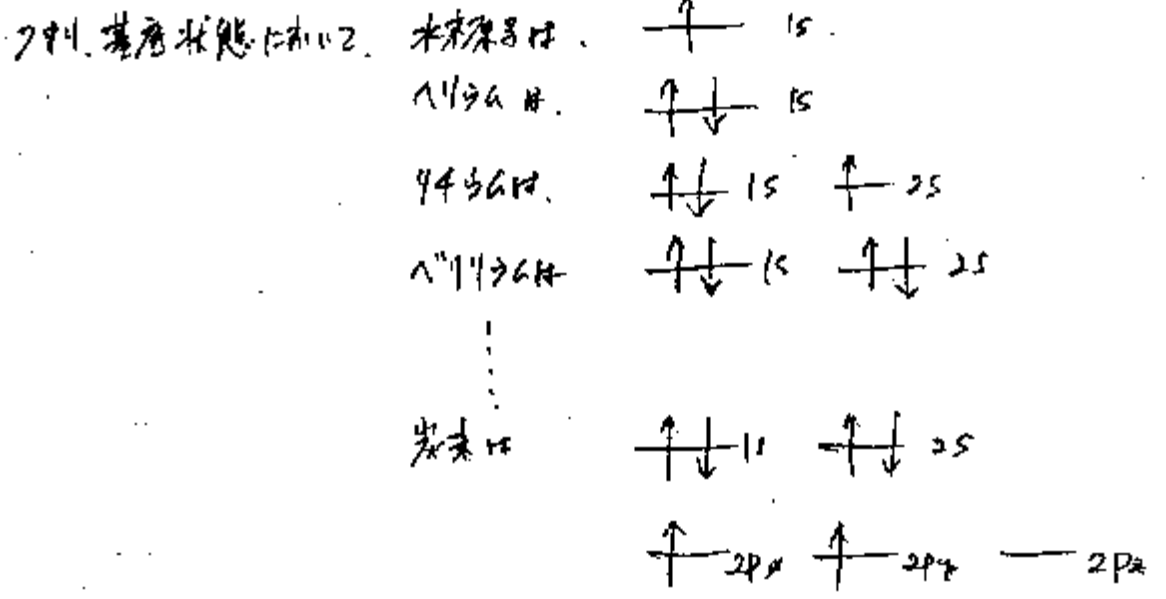
このスピン量子数が導入される際、Pauli の原理は依然として適用される。

これは、「2 つの電子が同じ量子状態には入れない」ということである。

軌道のエネルギー準位は、

$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d \dots$$

である。Pauli の原理により、このエネルギー準位の低い軌道に 2 つの電子が同時に存在することはできない。



と表すことができる。