C 遷移確率の計算

遷移確率の公式 時間に依存した摂動論の考え方によると，初期状態が $|a\rangle$ で摂動ハミルトニアン $\mathcal{H}'$ のとき，時刻 t における状態 $|b\rangle$ での確率振幅 $C_{ab}(t)$ は，

$$C_{ab}(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \langle b|\mathcal{H}'|a\rangle e^{i(E_b-E_a)\tau/\hbar} d\tau \tag{C.1}$$

で表される．摂動が時間依存性を持っていて，$\langle b|\mathcal{H}'|a\rangle = Ke^{-i\omega t}$ と表されるとき，

$$\begin{aligned} C_{ab}(t) &= \frac{K}{i\hbar}\int_0^t e^{i(E_b-E_a-\hbar\omega)\tau/\hbar} d\tau \\ &= \frac{K\{1-e^{i(E_b-E_a-\hbar\omega)\tau/\hbar}\}}{E_b-E_a-\hbar\omega} \end{aligned} \tag{C.2}$$

となるので，確率密度 $|C_{ab}(t)|^2$ は，

$$\begin{aligned} |C_{ab}(t)|^2 &= K^2\frac{t^2}{\hbar^2}\Big(\frac{\sin x}{x}\Big)^2 ; \quad x = \frac{E_b-E_a-\hbar\omega}{2\hbar}t \\ &\simeq K^2\frac{2\pi t}{\hbar}\delta(E_b-E_a-\hbar\omega) \end{aligned} \tag{C.3}$$

と表される．エネルギー保存則を満たす $E_b = E_a+\hbar\omega$ のときに遷移が起こることを示している．

C.1 Thomson 散乱

Thomson 散乱の起源となっているのは (1.12) の $\mathcal{H}_1'$ に含まれる $\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{A}$ である．

$$\begin{aligned} \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{A} = \sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}',\lambda,\lambda'} \frac{2\pi\hbar c^2}{V\sqrt{\omega\omega'}}\big\{&\boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{k}'\lambda'}a_{\boldsymbol{k}'\lambda'}e^{i(\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}-\omega' t)} + \boldsymbol{\varepsilon}^*_{\boldsymbol{k}'\lambda'}a^\dagger_{\boldsymbol{k}'\lambda'}e^{-i(\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}-\omega' t)}\big\} \\ &\cdot\big\{\boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{k}\lambda}a_{\boldsymbol{k}\lambda}e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)} + \boldsymbol{\varepsilon}^*_{\boldsymbol{k}\lambda}a^\dagger_{\boldsymbol{k}\lambda}e^{-i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)}\big\} \end{aligned} \tag{C.4}$$

これを展開すると，$a_{\boldsymbol{k}'\lambda'}a_{\boldsymbol{k}\lambda}$, $a^\dagger_{\boldsymbol{k}'\lambda'}a^\dagger_{\boldsymbol{k}\lambda}$, $a_{\boldsymbol{k}'\lambda'}a^\dagger_{\boldsymbol{k}\lambda}$, $a^\dagger_{\boldsymbol{k}'\lambda'}a_{\boldsymbol{k}\lambda}$ を含む 4 つの項が出てくるが，このうち散乱前後で photon 数が変わらないのは，$a_{\boldsymbol{k}'\lambda'}a^\dagger_{\boldsymbol{k}\lambda}$ または $a^\dagger_{\boldsymbol{k}'\lambda'}a_{\boldsymbol{k}\lambda}$ を含む，次の 2 つの項である．

$$\sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}',\lambda,\lambda'}\big\{(\boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{k}'\lambda'}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}^*_{\boldsymbol{k}\lambda})a_{\boldsymbol{k}'\lambda'}a^\dagger_{\boldsymbol{k}\lambda}e^{i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{r}}e^{-i(\omega'-\omega)t} + (\boldsymbol{\varepsilon}^*_{\boldsymbol{k}'\lambda'}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{k}\lambda})a^\dagger_{\boldsymbol{k}'\lambda'}a_{\boldsymbol{k}\lambda}e^{-i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{r}}e^{i(\omega'-\omega)t}\big\} \tag{C.5}$$

この photon 数が変わらない遷移について行列要素 $\langle a'|\mathcal{H}_1'|a\rangle$ を計算する．電子系の始状態を $|a\rangle$，終状態を $|a'\rangle$，散乱ベクトルを $\boldsymbol{\kappa} = \boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}$ とすると[*149]，

$$\begin{aligned} \langle a'|\mathcal{H}_1'|a\rangle = \frac{e^2}{2mc^2}\sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}',\lambda,\lambda'}\frac{2\pi\hbar c^2}{V\sqrt{\omega\omega'}}\sum_j\Big\{&\langle a';\boldsymbol{k}\lambda|e^{i\boldsymbol{\kappa}\cdot\boldsymbol{r}_j}a_{\boldsymbol{k}'\lambda'}a^\dagger_{\boldsymbol{k}\lambda}|a;\boldsymbol{k}'\lambda'\rangle(\boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{k}'\lambda'}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}^*_{\boldsymbol{k}\lambda})e^{-i(\omega'-\omega)t} \\ &+ \langle a';\boldsymbol{k}'\lambda'|e^{-i\boldsymbol{\kappa}\cdot\boldsymbol{r}_j}a^\dagger_{\boldsymbol{k}'\lambda'}a_{\boldsymbol{k}\lambda}|a;\boldsymbol{k}\lambda\rangle(\boldsymbol{\varepsilon}^*_{\boldsymbol{k}'\lambda'}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{k}\lambda})e^{i(\omega'-\omega)t}\Big\} \end{aligned} \tag{C.6}$$

(C.3) に当てはめて考えると，第 1 項の $e^{-i(\omega'-\omega)t}$ は $\delta(E_{a'}-E_a-\hbar\omega'+\hbar\omega)$，第 2 項の $e^{i(\omega'-\omega)t}$ は $\delta(E_{a'}-E_a+\hbar\omega'-\hbar\omega)$ と結びつく．第 1 項は $\boldsymbol{k}'\lambda'$ の photon が消滅して $\boldsymbol{k}\lambda$ の photon が生成される遷移過程（$E_a+\hbar\omega' = E_{a'}+\hbar\omega$），第 2 項は $\boldsymbol{k}\lambda$ の photon が消滅して $\boldsymbol{k}'\lambda'$ の photon が生成される遷移過程（$E_a+\hbar\omega = E_{a'}+\hbar\omega'$）に対応している[*150]．ここでは，$E_{a'} = E_a$，すなわち，$\omega = \omega'$（**弾性散乱**）を仮定する．第 1 項の $\boldsymbol{k}$ と $\boldsymbol{k}'$ を入れ換えても和をとると同じなので，結局，遷移の行列要素は $\boldsymbol{k}\lambda$ が消滅して $\boldsymbol{k}'\lambda'$ が生成される形をとって，

$$\langle a';\boldsymbol{k}'\lambda'|\mathcal{H}_1'|a;\boldsymbol{k}\lambda\rangle = \Big(\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega}\Big)\Big(\frac{e^2}{mc^2}\Big)\langle a'|\sum_j e^{-i\boldsymbol{\kappa}\cdot\boldsymbol{r}_j}|a\rangle(\boldsymbol{\varepsilon}^*_{\boldsymbol{k}'\lambda'}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{k}\lambda}) \tag{C.7}$$

と表される．

[*149] 電磁場のほうの初期状態と終状態はあらわには記されていないが，さまざまな波数ベクトルと偏光ベクトルの photon がたくさんある状態を考えておけばよい．そのうち 1 つ（あるいは複数であってもよい）が入射 X 線であり，その他多数が散乱 X 線である．生成消滅演算子で生まれたり消えたりする photon を明示したいときだけ，$\boldsymbol{k}\lambda$ や $\boldsymbol{k}'\lambda'$ として記述してある．

[*150] 第 2 項がふつうの散乱の感覚に合っているが，この段階では $\boldsymbol{k}$ と $\boldsymbol{k}'$ のどちらが入射でどちらが散乱とも決まっていないことに注意しよう．

C.2　磁気散乱

磁気散乱の起源となっているのは (1.12) の $\mathcal{H}_2'$ に含まれる $\boldsymbol{s}_i \cdot \left(\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} \times \boldsymbol{A}\right)$ である．

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t) = \sum_{\boldsymbol{k},\lambda} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega}} \left\{ \boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{k}\lambda} a_{\boldsymbol{k}\lambda} e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)} + \boldsymbol{\varepsilon}^*_{\boldsymbol{k}\lambda} a^\dagger_{\boldsymbol{k}\lambda} e^{-i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)} \right\}$$

$$\frac{\partial \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = \sum_{\boldsymbol{k},\lambda} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega}} \left\{ -i\omega \boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{k}\lambda} a_{\boldsymbol{k}\lambda} e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)} + i\omega \boldsymbol{\varepsilon}^*_{\boldsymbol{k}\lambda} a^\dagger_{\boldsymbol{k}\lambda} e^{-i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)} \right\}$$

より，散乱前後で photon 数が変わらない項だけを残すと，

$$\begin{aligned} \frac{\partial \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} \times \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t) = -\sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}',\lambda,\lambda'} \frac{2\pi\hbar c^2}{V\sqrt{\omega\omega'}} i\omega' \Big\{ & (\boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{k}'\lambda'} \times \boldsymbol{\varepsilon}^*_{\boldsymbol{k}\lambda}) a_{\boldsymbol{k}'\lambda'} a^\dagger_{\boldsymbol{k}\lambda} e^{i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{r}} e^{-i(\omega'-\omega)t} \\ & - (\boldsymbol{\varepsilon}^*_{\boldsymbol{k}'\lambda'} \times \boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{k}\lambda}) a^\dagger_{\boldsymbol{k}'\lambda'} a_{\boldsymbol{k}\lambda} e^{-i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{r}} e^{i(\omega'-\omega)t} \Big\} \end{aligned} \tag{C.8}$$

Thomson 散乱のときと同様，電子系の始状態を $|a\rangle$，終状態を $|a'\rangle$，散乱ベクトルを $\boldsymbol{\kappa} = \boldsymbol{k}' - \boldsymbol{k}$ とすると，

$$\begin{aligned} \langle a'|\mathcal{H}_2'|a\rangle = \frac{e^2\hbar}{2m^2c^4} \sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}',\lambda,\lambda'} \frac{2\pi\hbar c^2}{V\sqrt{\omega\omega'}} i\omega' \sum_j \Big\{ & \langle a';\boldsymbol{k}\lambda|\boldsymbol{s}_j e^{i\boldsymbol{\kappa}\cdot\boldsymbol{r}_j} a_{\boldsymbol{k}'\lambda'} a^\dagger_{\boldsymbol{k}\lambda}|a;\boldsymbol{k}'\lambda'\rangle \cdot (\boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{k}'\lambda'} \times \boldsymbol{\varepsilon}^*_{\boldsymbol{k}\lambda}) e^{-i(\omega'-\omega)t} \\ & - \langle a';\boldsymbol{k}'\lambda'|\boldsymbol{s}_j e^{-i\boldsymbol{\kappa}\cdot\boldsymbol{r}_j} a^\dagger_{\boldsymbol{k}'\lambda'} a_{\boldsymbol{k}\lambda}|a;\boldsymbol{k}\lambda\rangle \cdot (\boldsymbol{\varepsilon}^*_{\boldsymbol{k}'\lambda'} \times \boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{k}\lambda}) e^{i(\omega'-\omega)t} \Big\} \end{aligned} \tag{C.9}$$

以下，Thomson 散乱のときと同様であり，弾性散乱を仮定する．第 1 項の $\boldsymbol{k}$ と $\boldsymbol{k}'$ を入れ換えても和をとると同じであることから，結局，遷移の行列要素は $\boldsymbol{k}\lambda$ が消滅して $\boldsymbol{k}'\lambda'$ が生成される形をとって

$$\langle a';\boldsymbol{k}'\lambda'|\mathcal{H}_1'|a;\boldsymbol{k}\lambda\rangle = -i\Big(\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega}\Big)\Big(\frac{e^2}{mc^2}\Big)\Big(\frac{\hbar\omega}{mc^2}\Big)\langle a'|\sum_j \boldsymbol{s}_j e^{-i\boldsymbol{\kappa}\cdot\boldsymbol{r}_j}|a\rangle \cdot (\boldsymbol{\varepsilon}^*_{\boldsymbol{k}'\lambda'} \times \boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{k}\lambda}) \tag{C.10}$$

と表される．

C.3　共鳴散乱

共鳴散乱の起源となっているのは (1.12) の $\mathcal{H}_3' + \mathcal{H}_4'$ である．

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t) = \sum_{\boldsymbol{k},\lambda} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega}} \left\{ \boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{k}\lambda} a_{\boldsymbol{k}\lambda} e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)} + \boldsymbol{\varepsilon}^*_{\boldsymbol{k}\lambda} a^\dagger_{\boldsymbol{k}\lambda} e^{-i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)} \right\}$$

$$\nabla \times \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t) = i\boldsymbol{k} \times \sum_{\boldsymbol{k},\lambda} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega}} \left\{ \boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{k}\lambda} a_{\boldsymbol{k}\lambda} e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)} - \boldsymbol{\varepsilon}^*_{\boldsymbol{k}\lambda} a^\dagger_{\boldsymbol{k}\lambda} e^{-i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)} \right\}$$

より[*151)]，

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_3' + \mathcal{H}_4' = \sum_{\boldsymbol{k},\lambda} \frac{e}{mc} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega}} \Big\{ & \boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{k}\lambda} a_{\boldsymbol{k}\lambda} e^{-i\omega t} \cdot \sum_j e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_j} (\boldsymbol{p}_j - i\hbar\boldsymbol{k} \times \boldsymbol{s}_j) \\ & + \boldsymbol{\varepsilon}^*_{\boldsymbol{k}\lambda} a^\dagger_{\boldsymbol{k}\lambda} e^{i\omega t} \cdot \sum_j e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_j} (\boldsymbol{p}_j + i\hbar\boldsymbol{k} \times \boldsymbol{s}_j) \Big\} \end{aligned} \tag{C.11}$$

が得られる[*152)]．ここで，

$$\boldsymbol{J}(\boldsymbol{k}) = \sum_j e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_j} (\boldsymbol{p}_j - i\hbar\boldsymbol{k} \times \boldsymbol{s}_j) \tag{C.12}$$

---

*151) $\nabla \times \boldsymbol{\varepsilon} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} = i(k_y\varepsilon_z - k_z\varepsilon_y, k_z\varepsilon_x - k_x\varepsilon_z, k_x\varepsilon_y - k_y\varepsilon_x) e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} = i(\boldsymbol{k} \times \boldsymbol{\varepsilon}) e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$.

*152) $\boldsymbol{s} \cdot (\boldsymbol{k} \times \boldsymbol{\varepsilon}) = \boldsymbol{k} \cdot (\boldsymbol{\varepsilon} \times \boldsymbol{s}) = \boldsymbol{\varepsilon} \cdot (\boldsymbol{s} \times \boldsymbol{k}) = -\boldsymbol{\varepsilon} \cdot (\boldsymbol{k} \times \boldsymbol{s})$

と定義する（運動量密度演算子）．すると，$\mathcal{H}'_3 + \mathcal{H}'_4$ は次のように表される．

$$\mathcal{H}'_3 + \mathcal{H}'_4 = \sum_{\boldsymbol{k},\lambda} \frac{e}{mc}\sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega}}\left\{a_{\boldsymbol{k}\lambda}\boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{k}\lambda}\cdot\boldsymbol{J}(\boldsymbol{k})e^{-i\omega t} + a^\dagger_{\boldsymbol{k}\lambda}\boldsymbol{\varepsilon}^*_{\boldsymbol{k}\lambda}\cdot\boldsymbol{J}^\dagger(\boldsymbol{k})e^{i\omega t}\right\} \tag{C.13}$$

第 1 項が $\boldsymbol{k}\lambda$ の photon が消滅する遷移で，時間依存性が $e^{-i\omega t}$ なので，(C.3) の δ 関数は $\delta(E_b - E_a - \hbar\omega)$ の形になり，初期状態のエネルギーが $E_a + \hbar\omega$，終状態のエネルギーが E_b $(E_b > E_a)$ であるような遷移を表す．それに対して第 2 項は，$\boldsymbol{k}\lambda$ の photon が生成する遷移で，時間依存性が $e^{i\omega t}$ なので，(C.3) の δ 関数は $\delta(E_b - E_a + \hbar\omega)$ の形になり，初期状態のエネルギーが E_a，終状態のエネルギーが $E_b + \hbar\omega$ $(E_a > E_b)$ であるような遷移を表す．結局，行列要素 $\langle b|\mathcal{H}'_3 + \mathcal{H}'_4|a\rangle$ は次のようになる．

$$\langle b|\mathcal{H}'_3 + \mathcal{H}'_4|a\rangle = \frac{e}{mc}\sum_{\boldsymbol{k},\lambda}\sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega}}\Big\{\langle b|a_{\boldsymbol{k}\lambda}\boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{k}\lambda}\cdot\boldsymbol{J}(\boldsymbol{k})|a;\boldsymbol{k}\lambda\rangle e^{-i\omega t} + \langle b;\boldsymbol{k}\lambda|a^\dagger_{\boldsymbol{k}\lambda}\boldsymbol{\varepsilon}^*_{\boldsymbol{k}\lambda}\cdot\boldsymbol{J}^\dagger(\boldsymbol{k})|a\rangle e^{i\omega t}\Big\} \tag{C.14}$$

ただし，このままでは photon 数が 1 個増減してしまう．電子系が終状態 $|a'\rangle$ になり，photon 数が変わらない X 線の散乱を表す行列要素 $\langle a'|\mathcal{H}'_3 + \mathcal{H}'_4|a\rangle$ は 1 次では 0 であるが，2 次摂動で次のように与えられる．

$$\langle a'|\mathcal{H}'_3 + \mathcal{H}'_4|a\rangle = \sum_b \frac{\langle a'|\mathcal{H}'_3 + \mathcal{H}'_4|b\rangle\langle b|\mathcal{H}'_3 + \mathcal{H}'_4|a\rangle}{E_{a,\mathrm{tot}} - E_{b,\mathrm{tot}}} \tag{C.15}$$

ここで，$|a\rangle$ や $|b\rangle$ にはあらわには記されていないが，電磁場の状態も含まれているのであって，$E_{a,\mathrm{tot}}$ は初期状態での全エネルギー（電子系+電磁場），$E_{b,\mathrm{tot}}$ は中間状態での全エネルギーを表す．(C.14) の逆は

$$\langle a'|\mathcal{H}'_3 + \mathcal{H}'_4|b\rangle = \frac{e}{mc}\sum_{\boldsymbol{k},\lambda}\sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega'}}\Big\{\langle a'|a_{\boldsymbol{k}\lambda}\boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{k}\lambda}\cdot\boldsymbol{J}(\boldsymbol{k})|b;\boldsymbol{k}\lambda\rangle e^{-i\omega t} + \langle a';\boldsymbol{k}\lambda|a^\dagger_{\boldsymbol{k}\lambda}\boldsymbol{\varepsilon}^*_{\boldsymbol{k}\lambda}\cdot\boldsymbol{J}^\dagger(\boldsymbol{k})|b\rangle e^{i\omega t}\Big\} \tag{C.16}$$

となるので，散乱の行列要素は次のように表される[*153)]．

$$\begin{aligned}\langle a'|\mathcal{H}'_3 + \mathcal{H}'_4|a\rangle = \frac{e^2}{m^2c^2}\sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}',\lambda,\lambda'}\frac{2\pi\hbar c^2}{V\sqrt{\omega\omega'}}\sum_b\Big\{&\frac{\langle a';\boldsymbol{k}'\lambda'|a^\dagger_{\boldsymbol{k}'\lambda'}\boldsymbol{\varepsilon}^*_{\boldsymbol{k}'\lambda'}\cdot\boldsymbol{J}^\dagger(\boldsymbol{k}')|b\rangle\langle b|a_{\boldsymbol{k}\lambda}\boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{k}\lambda}\cdot\boldsymbol{J}(\boldsymbol{k})|a;\boldsymbol{k}\lambda\rangle}{E_a - E_b + \hbar\omega}\\ &+\frac{\langle a';\boldsymbol{k}'\lambda'|a_{\boldsymbol{k}\lambda}\boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{k}\lambda}\cdot\boldsymbol{J}(\boldsymbol{k})|b;\boldsymbol{k}\lambda,\boldsymbol{k}'\lambda'\rangle\langle b;\boldsymbol{k}\lambda,\boldsymbol{k}'\lambda'|a^\dagger_{\boldsymbol{k}'\lambda'}\boldsymbol{\varepsilon}^*_{\boldsymbol{k}'\lambda'}\cdot\boldsymbol{J}^\dagger(\boldsymbol{k}')|a;\boldsymbol{k}\lambda\rangle}{E_a - E_b - \hbar\omega'}\Big\}e^{i(\omega'-\omega)t}\end{aligned} \tag{C.17}$$

第 1 項は (C.14) の第 1 項と (C.16) の第 2 項の組み合わせから導かれ，$E_{a,\mathrm{tot}} = E_a + \hbar\omega$, $E_{b,\mathrm{tot}} = E_b$ である．$\boldsymbol{k}\lambda$ の photon が消滅して電子系が $|a\rangle$ から $|b\rangle$ へ励起された状態が中間状態になっている．つまり，$E_b > E_a$ である．終状態では $\boldsymbol{k}'\lambda'$ の photon が生成され，電子系が $|b\rangle$ から $|a'\rangle$ へ戻っている．一方，第 2 項は (C.14) の第 2 項と (C.16) の第 1 項の組み合わせから導かれており，$E_{a,\mathrm{tot}} = E_a + \hbar\omega$, $E_{b,\mathrm{tot}} = E_b + \hbar\omega + \hbar\omega'$ である．これはちょっと変わった遷移過程であり，中間状態では $\boldsymbol{k}'\lambda'$ の photon が生成され電子系が $|a\rangle$ から $|b\rangle$ へ変わっている．$\boldsymbol{k}\lambda$ の photon も存在しており，これは，$E_b < E_a$ であることを示している．そして終状態に遷移するとき，$\boldsymbol{k}\lambda$ の photon が消失し，電子系が $|b\rangle$ から $|a'\rangle$ へ戻る．

時間依存性 $e^{i(\omega'-\omega)t}$ は $\delta(E_{a'} - E_a + \hbar\omega' - \hbar\omega)$，つまり，始状態と終状態のエネルギーが等しいというエネルギー保存則（$E_a + \hbar\omega = E_{a'} + \hbar\omega'$）と結びつく．ここでは，$E_{a'} = E_a$，すなわち，$\omega = \omega'$（**弾性散乱**）を仮定しよう．最終的に，散乱の行列要素は次のように表される．

$$\begin{aligned}\langle a';\boldsymbol{k}'\lambda'|\mathcal{H}'_3 + \mathcal{H}'_4|a;\boldsymbol{k}\lambda\rangle = \Big(\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega}\Big)\Big(\frac{e^2}{mc^2}\Big)\frac{1}{m}\sum_b\Big\{&\frac{\langle a'|\boldsymbol{\varepsilon}^*_{\boldsymbol{k}'\lambda'}\cdot\boldsymbol{J}^\dagger(\boldsymbol{k}')|b\rangle\langle b|\boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{k}\lambda}\cdot\boldsymbol{J}(\boldsymbol{k})|a\rangle}{E_a - E_b + \hbar\omega}\\ &+\frac{\langle a'|\boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{k}\lambda}\cdot\boldsymbol{J}(\boldsymbol{k})|b\rangle\langle b|\boldsymbol{\varepsilon}^*_{\boldsymbol{k}'\lambda'}\cdot\boldsymbol{J}^\dagger(\boldsymbol{k}')|a\rangle}{E_a - E_b - \hbar\omega}\Big\}\end{aligned} \tag{C.18}$$

[*153)] $\boldsymbol{k}\lambda$ と $\boldsymbol{k}'\lambda'$ は和をとって変わらなければ適宜入れ換えて表式をみやすくする．