

Оглавление

1. Обозначения	2
2. Формула для моментов.....	3
2.1. Дипольное приближение	4
2.1.1. Радиальные ВФ водорода	5
2.1.2. Нормировка	6
2.2. Вычисление момента.....	8
3. Формула для сечения.....	10

1. Обозначения

Гамильтониан системы протон+электрон+ТМ:

$$\hat{H} = \hat{H}_H + \hat{T}_\chi + \hat{U}(\vec{r}_p - \vec{r}_\chi)$$

Где \hat{H}_H – гамильтониан атома водорода, \hat{T}_χ – оператор кинетической энергии ТМ, $\hat{U}(\vec{r}_p - \vec{r}_\chi)$ – потенциал взаимодействия ядра и ТМ.

\vec{r}_p – положение ядра, \vec{r}_χ – ТМ.

\vec{k}, \vec{k}' – входной и выходной импульсы ТМ.

\vec{p}, \vec{p}' – входной и выходной импульсы атома водорода (система ядро + электрон)

\vec{p} – импульс, канонически сопряженный к координате \vec{R} центра масс системы протон+электрон.

$$\vec{R} = \frac{m_p \vec{r}_p + m_e \vec{r}_e}{m_p + m_e}$$

$\vec{r} = \vec{r}_e - \vec{r}_p$ – относительное положение электрона, канонический импульс к \vec{r} равен \vec{f} .

$$\vec{r}_p = \vec{R} - \frac{m_e}{m_p + m_e} \vec{r}$$

$$\vec{f} = \frac{m_p}{m_p + m_e} \vec{p}_e - \frac{m_e}{m_p + m_e} \vec{p}_p$$

$\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}'$ – переданный импульс

Гамильтониан без взаимодействия

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_H + \hat{T}_\chi$$

Начальное состояние

$$\Psi_0 = |E_{00}, k, p\rangle, \quad \hat{H}_0 \Psi_0 = \left(E_{00} + \frac{k^2}{2m_\chi} + \frac{p^2}{2M_H} \right) \Psi_0 = E \Psi_0$$

$$\Psi_0 = |E_{00}, k, p\rangle = \psi_0(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}_\chi} e^{i\vec{p}\vec{R}} \cdot S_\chi S_p$$

Конечное состояние

$$\Psi_1 = |E_{l1}, k', p'\rangle, \quad \hat{H}_0 \Psi_1 = \left(E_{l1} + \frac{k'^2}{2m_\chi} + \frac{p'^2}{2M_H} \right) \Psi_1 = E' \Psi_1$$

$$\Psi_1^+ = \langle E_{l1}, k', p' | = \psi_{E'}^*(\vec{r}) e^{-i\vec{k}'\vec{r}_\chi} e^{-i\vec{p}'\vec{R}} \cdot S'_\chi S'_p$$

2. Формула для моментов

По правилу ферми вероятность перехода равна

$$\frac{dP}{dt} = |\Psi_1^+ \hat{U} \Psi_0|^2 \cdot 2\pi \delta(E' - E)$$

$\psi_0(\vec{r})$ – В.Ф. водорода

S_χ, S_p – спины ТМ и протона

$\hat{U} = \hat{U}_S \cdot U_R(\vec{r}_p - \vec{r}_\chi)$ – произведение спин зависимой и независимой частей потенциала.

$$\begin{aligned} \Psi_1^+ \hat{U} \Psi_0 &= \langle S'_\chi S'_p | \hat{U}_S | S_\chi S_p \rangle \cdot \int d^3 \vec{R} d^3 \vec{r} d^3 \vec{r}_\chi \psi_{E'}^*(\vec{r}) e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{r}_\chi} e^{i(\vec{p}-\vec{p}')\vec{R}} \psi_0(\vec{r}) U_R \\ \Psi_1^+ \hat{U} \Psi_0 &= V_S \cdot V_R \end{aligned}$$

$$U_R(\vec{r}_\chi - \vec{r}_p) = \int \frac{d^3 \vec{q}}{(2\pi)^3} U(\vec{q}) e^{i\vec{q}(\vec{r}_p - \vec{r}_\chi)} = \int \frac{d^3 \vec{q}}{(2\pi)^3} U(\vec{q}) e^{i\vec{q}(-\vec{r}_\chi + \vec{R} - \vec{r} \cdot \frac{m_e}{m_p + m_e})}$$

$$V_R = \int \frac{d^3 \vec{q}}{(2\pi)^3} d^3 \vec{R} d^3 \vec{r} d^3 \vec{r}_\chi \psi_{E'}^* \psi_0 e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{r}_\chi} e^{i(\vec{p}-\vec{p}')\vec{R}} U(\vec{q}) e^{i\vec{q}(-\vec{r}_\chi + \vec{R} - \vec{r} \cdot \frac{m_e}{m_p + m_e})}$$

$$\int \frac{d^3 \vec{q}}{(2\pi)^3} d^3 \vec{r} \psi_{E'}^* \psi_0 (2\pi)^6 \delta^{(3)}(\vec{k} - \vec{k}' - \vec{q}) \delta^{(3)}(\vec{p} - \vec{p}' + \vec{q}) U(\vec{q}) e^{-i\vec{q}(\vec{r} \cdot \frac{m_e}{m_p + m_e})}$$

$$V_R = (2\pi)^3 \delta^{(3)}(\vec{k} - \vec{k}' - \vec{q}) \cdot \int d^3 \vec{r} \psi_{E'}^*(\vec{r}) \psi_0(\vec{r}) e^{-i\vec{q}\vec{r} \cdot \frac{m_e}{m_p + m_e}}$$

Если бы мы не учитывали ионизацию, то $V_R = (2\pi)^3 \delta^{(3)}(\vec{k} - \vec{k}' - \vec{q})$. Поэтому в выражении сечения добавится форм фактор

$$d\sigma_I = d\sigma_0 \cdot F(q, E') dN'$$

dN' – означает суммирование или интегрирование по энергетическим уровням системы протон+электрон (зависит от нормировки В.Ф.)

В случае перехода на уровень, когда $\langle \psi_{E_2 \lambda_2} | \psi_{E_1 \lambda_1} \rangle = \delta_{E_1 E_2} \delta_{\lambda_2 \lambda_1}$

$$\int ... dN' = \sum_{l,m,n} ...$$

Если происходит ионизация, а радиальные В.Ф. нормированы следующим образом (см. Ландавшиц)

$$\langle \psi_{f_1 \lambda_1} | \psi_{f_2 \lambda_2} \rangle = (2\pi) \delta(k_1 - k'_1) \delta_{\lambda_2 \lambda_1}$$

То

$$\int ... dN' = \sum_{l,m} \int \frac{df}{2\pi}$$

$$E' = \frac{f^2}{2\mu}, \quad \mu = m_e \cdot \frac{m_p}{m_p + m_e}$$

2.1. Дипольное приближение

Основная часть интегрирования, когда $r \lesssim r_B$ – Боровский радиус. Тогда множитель в экспоненте имеет порядок

$$qr \frac{m_e}{m_p + m_e} \sim \frac{m_\chi^3 v_\chi^2}{(m_p + m_\chi)^2} \frac{m_e}{m_p + m_e} \frac{1}{m_e \alpha} \sim 10^{-2} 10^{-6} 10^2 \ll 1$$

Можно применять дипольное приближение

$$A(q, E') = -i \int d^3 \vec{r} \psi_{E'}^*(\vec{r}) \psi_0(\vec{r}) \vec{q} \vec{r} \frac{m_e}{m_p + m_e}$$

ВФ начального и конечного состояния водорода имеют вид

$$\psi_0(\vec{r}) = R_0(r) \cdot Y_{00}(\theta, \varphi)$$

$$\psi_{E' l m}^*(\vec{r}) = R_{E' l}(r) \cdot Y_{l m'}(\theta, \varphi)$$

Выберем систему отсчета такую, что $\vec{q} \vec{r} = qr \cos \theta$. Тогда

$$A(q, E') = -i \frac{m_e}{m_p + m_e} \int r^2 dr R_{E' l}(r) R_0(r) qr \frac{\cos \theta P_l^m(\theta) P_0(\theta)}{\sqrt{\frac{4}{(2l+1)}}} e^{-im\varphi} \frac{d\varphi d \cos \theta}{4\pi}$$

$$A(q, E') = -iq \frac{m_e}{m_p + m_e} \frac{\delta_{m0}}{2} \int \frac{\cos \theta P_l(\theta) P_0(\theta)}{\sqrt{\frac{4}{(2l+1)}}} d \cos \theta \cdot \int r^3 dr R_{E'l}(r) R_0(r)$$

$$\sqrt{\frac{2l+1}{4}} \int \cos \theta P_l(\theta) P_0(\theta) d \cos \theta = \begin{cases} 0, & l \neq 1 \\ \frac{2}{\sqrt{3}}, & l = 1 \end{cases}$$

$$A(q, E') = -iq \frac{m_e}{m_p + m_e} \frac{\delta_{m0} \delta_{l1}}{\sqrt{3}} \int r^3 dr R_{E'1}(r) R_0(r)$$

Делаем нормировку на радиус бора и замену

$$r = r_B \rho, \quad s = q r_B \frac{m_e}{m_p + m_e}$$

$$A(s, E') = -is \frac{1}{\sqrt{3}} \int \rho^3 d\rho R_{E'1}(\rho) R_0(\rho) = \frac{-is}{\sqrt{3}} I(E')$$

2.1.1. Радиальные ВФ водорода

ВФ начального состояния равна:

$$R_0(\rho) = 2e^{-\rho}$$

ФВ конечного состояния ищется в виде

$$R_{E'l}(\rho) = \rho^l e^{i\phi\rho} v(\rho)$$

Где введен безразмерный импульс

$$E' = \frac{f^2}{2\mu} = \phi^2 E_e, \quad \phi = f r_B$$

В итоге приходим к следующему уравнению, делаем замену.

$$\rho v_{\rho\rho} + 2(l+1+i\phi\rho)v_{\rho} + 2(1+(l+1)i\phi)v = 0$$

$$v(\rho) = V(z), \quad z = -2i\phi\rho$$

$$zV_{zz} + (2l+2-z)V_z - \left(l+1-\frac{i}{\phi}\right)V = 0$$

$$zV_{zz} + (b-z)V_z - aV = 0 \quad (*)$$

$$V(z) = C \cdot F\left(l+1-\frac{i}{\phi}, 2l+2, z\right)$$

$$v = C \cdot F\left(l+1-\frac{i}{\phi}, 2l+2, -2i\phi\rho\right)$$

$$v^* = C^* \cdot F\left(l + 1 + \frac{i}{\phi}, 2l + 2, 2i\phi\rho\right)$$

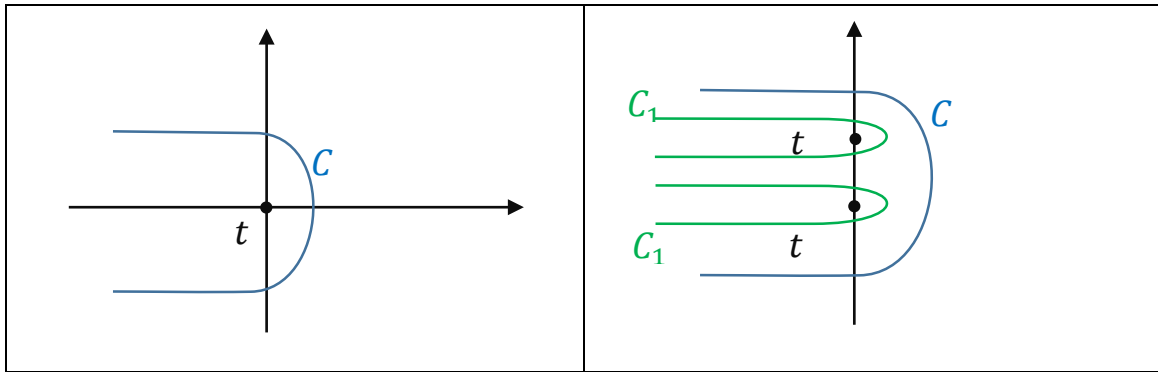
$F(a, b, z)$ – вырожденная гипергеометрическая функция.

$$F(a, b, z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a(a+1) \dots (a+n)}{b(b+1) \dots (b+n)n!} z^n$$

$$F(a, b, z) = \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)\Gamma(b-a)} \int_0^1 e^{tz} t^{a-1} (1-t)^{b-a-1} dt$$

2.1.2. Нормировка

Для нормировки необходимо знать асимптотику $F(a, b, z)$ при $z \rightarrow \infty$ с точностью до $O(z^{-1})$.



Упражнение (асимптотика)

1) Интеграл по контуру C дает

$$\frac{1}{\Gamma(s)} = \frac{1}{2\pi i} \int_C e^t t^{-s} dt$$

2) Если число b в $F(a, b, z)$ больше нуля, то из формулы для вронскиана (*) для F

$$W = e^{-\int \frac{b-z}{z} dz} = C e^z z^{-b}$$

следует, что одно из решений дифура будет иметь особенность в нуле, однако $F(a, b, z)$ – регулярна в нуле. А значит любое регулярное решение (*) пропорционально F .

3) Проверить, что следующий интеграл является решением (*)

$$V(z) = \frac{\Gamma(b)}{2\pi i} \int_C e^t t^{a-b} (t-z)^{-a} dt$$

Поскольку контур на концах экспоненциально стремится к нулю, то после прямой подстановки в уравнение (*) и интегрирования по частям получается ноль.

Так как $V(z)$ – регулярна в нуле и $V(0) = 1 = F(a, b, 0)$, то $V(z) = F(a, b, z)$

4) Интегрирование по контуру C разбиваем на интегралы по C_1 и C_2 .

$$V_1(z) = \frac{\Gamma(b)}{2\pi i} \int_C e^{t+z} (t+z)^{a-b} (t)^{-a} dt = z^{a-b} e^z \frac{\Gamma(b)}{2\pi i} \int_C e^t \left(\frac{t}{z} + 1\right)^{a-b} (t)^{-a} dt$$

При больших z скобка в интеграле раскладывается в ряд

$$\left(\frac{t}{z} + 1\right)^{a-b} = 1 + (a-b) \frac{t}{z} + \frac{(a-b)(a-b-1)}{2} \left(\frac{t}{z}\right)^2 + \dots$$

$$V_1(z) \approx z^{a-b} e^z \Gamma(b) \cdot \left(\frac{1}{\Gamma(a)} + \frac{(a-b)}{\Gamma(a-1)} \cdot \frac{1}{z} + \dots \right)$$

$$V_2(z) = \frac{\Gamma(b)}{2\pi i} \int_C e^t t^{a-b} (t-z)^{-a} dt = (-z)^{-a} \frac{\Gamma(b)}{2\pi i} \int_C e^t \left(-\frac{t}{z} + 1\right)^{-a} t^{a-b} dt$$

$$V_2(z) \approx (-z)^{-a} \Gamma(b) \cdot \left(\frac{1}{\Gamma(b-a)} + \frac{a}{\Gamma(b-a-1)} \cdot \frac{1}{z} + \dots \right)$$

$$R_{E'l}(\rho) = C\rho^l e^{i\phi\rho} v(\rho) =$$

$$C\rho^l e^{i\phi\rho} \Gamma(2l+2) \left(\frac{(-2i\phi\rho)^{-l-1-\frac{i}{\phi}} e^{-2i\phi\rho}}{\Gamma\left(l+1-\frac{i}{\phi}\right)} + \frac{(2i\phi\rho)^{-l-1+\frac{i}{\phi}}}{\Gamma\left(l+1+\frac{i}{\phi}\right)} + O\left(\frac{1}{z}\right) \right) =$$

$$\delta = \arg\left(\Gamma\left(l+1-\frac{i}{\phi}\right)\right)$$

$$C\rho^{-1} \frac{\Gamma(2l+2)}{\left|\Gamma\left(l+1-\frac{i}{\phi}\right)\right|} \frac{1}{(2i\phi)^{l+1}} \cdot \left((2i\phi\rho)^{\frac{i}{\phi}} e^{i\phi\rho+i\delta} + \text{к. с.} \right) =$$

$$C\rho^{-1} \frac{\Gamma(2l+2)}{\left|\Gamma\left(l+1-\frac{i}{\phi}\right)\right|} \frac{1}{(2i\phi)^{l+1}} \cdot \left((2i\phi\rho)^{\frac{i}{\phi}} e^{i\phi\rho+i\delta} + \text{к. с.} \right) =$$

$$i^{i/\phi} = (-i)^{-i/\phi} = e^{i\ln(i)/\phi} = e^{i(i\pi/2\phi)} = e^{-\pi/2\phi}$$

$$C\rho^{-1} \frac{\Gamma(2l+2)}{\left|\Gamma\left(l+1-\frac{i}{\phi}\right)\right|} \frac{e^{-\frac{\pi}{2\phi}}}{(2i\phi)^{l+1}} (e^{i\phi\rho+i\delta+\frac{i}{\phi}\ln 2\phi\rho} + \text{к. с.})$$

$$R_{E'l}(\rho) = \rho^{-1} \cos(\phi\rho + \ln 2\phi\rho + \delta) \cdot C \frac{\Gamma(2l+2)}{\left|\Gamma\left(l+1-\frac{i}{\phi}\right)\right|} \frac{2e^{-\frac{\pi}{2\phi}}}{(2i\phi)^{l+1}}$$

Учитывая, что

$$\int_0^\infty \cos(kx + \delta) \cdot \cos(k'x + \delta) dx = \frac{1}{2} \int_a^R (\cos((k+k')x + \delta + \delta') + \cos((k-k')x + \delta - \delta')) dx =$$

$$\frac{1}{2} R(1 + o(1)) \text{ при } R \rightarrow \infty = \frac{2\pi}{4} \delta(k - k')$$

Таким образом для правильной нормировки

$$C = \frac{\Gamma\left(l+1-\frac{i}{\phi}\right)}{\Gamma(2l+2)} (2\phi)^{l+1} e^{\frac{\pi}{2\phi}}$$

2.2. Вычисление момента

$$I(E') = \int \rho^3 d\rho R_{E'1}(\rho) R_0(\rho) = \frac{\Gamma(b)C^*}{\Gamma(a)\Gamma(b-a)} \int_0^1 \int_0^\infty d\rho 2e^{-\rho} \rho^{l+3} e^{2i\phi\rho t} t^{a-1} (1-t)^{b-a-1} dt =$$

$$\frac{\Gamma(b)C^*}{\Gamma(a)\Gamma(b-a)} = \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)\Gamma(b-a)} \frac{\Gamma(b-a)}{\Gamma(b)} (2\phi)^{l+1} e^{\frac{\pi}{2\phi}}$$

$$\frac{(2\phi)^{l+1} e^{\frac{\pi}{2\phi}}}{\Gamma\left(l+1-\frac{i}{\phi}\right)} \int_0^1 \frac{2(l+3)!}{(1-2i\phi t)^{l+4}} t^{a-1} (1-t)^{b-a-1} dt$$

$$a = l + 1 + \frac{i}{\phi}, \quad b = 2l + 2$$

Интеграл в формуле берется аналитически. При $l = 1$ он равен

$$\int_0^1 \frac{1}{(1-2i\phi t)^5} t^p (1-t)^{2-p} dt =$$

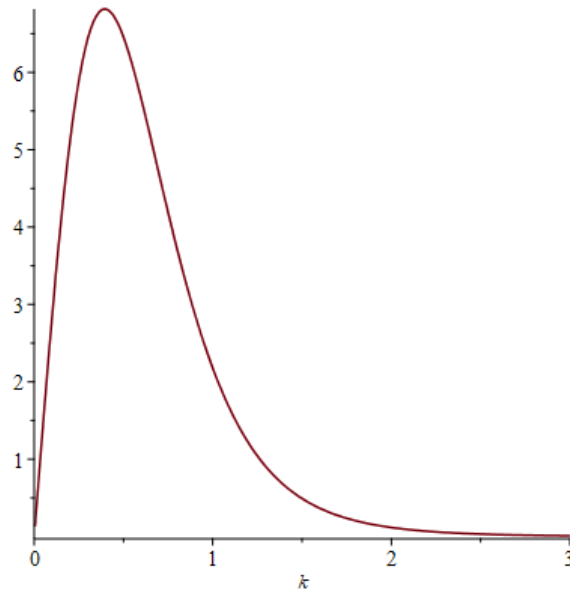
$$p = 1 + i/\phi$$

$$\frac{\left(\frac{2\phi+i}{\phi}\right)^{-1-\frac{i}{\phi}}(-i\phi)^{-1-\frac{i}{\phi}}\pi(\phi^2+1)}{12\phi^3\sin\left(\frac{\pi(\phi+i)}{\phi}\right)(2\phi+i)}=$$

Можно сокращать все фазовые множители, так как они не влияют на модуль квадрата.

$$I(\phi) = 16\Gamma\left(1 - \frac{i}{\phi}\right)e^{\frac{\pi}{2\phi}}\frac{\phi(\phi-i)(1+ik)^{\frac{i}{k}}(1-ik)^{-\frac{i}{k}}}{(\phi^2+1)^3}$$

График $|I(\phi)|^2$



Также для проверки отметим, что

$$I_{ion} = \int \frac{d\phi}{2\pi} |I(\phi)|^2 = 0.8502357153$$

Для эффекта Мигдала (переход с нулевого уровня на уровень n ($l = 1$)) фактор подавления будет аналогичным

$$\frac{s}{\sqrt{3}}I(n)$$

$$I(n) = 16 \frac{n^4}{(n^2-1)^2} \cdot \frac{1}{\sqrt{n(n^2-1)}} \left(\frac{n-1}{n+1}\right)^n$$

Сумма для проверки равна

$$I_{mgd} = \sum_{n=2}^{\infty} I(n)^2 = 2.149763352$$

Проверим верность формул с помощью выражения

$$1 = \langle 0 | r^2 \cos^2 \theta | 0 \rangle = \sum_E \langle 0 | r \cos \theta | E \rangle \langle E | r \cos \theta | 0 \rangle = \frac{1}{3} (I_{mgd} + I_{ion}) = 0.9999997$$

При $n \rightarrow \infty$ Сумма по уровням приближается интегралом

$$I^2(n)dn = I^2(x) \frac{dn}{dx} dx = \frac{1}{2} \left(\frac{I(x)}{x^{\frac{3}{4}}} \right)^2 dx, \quad x = \frac{1}{n^2}$$

$$\left(\frac{n-1}{n+1} \right)^n \rightarrow \exp \left(-2 - \frac{2}{3}x \right)$$

$$\frac{I(x)}{x^{\frac{3}{4}}} = \frac{16}{(1-x)^2} e^{-2-\frac{2}{3}x} \sqrt{\frac{1}{1-x}}$$

$$E = \frac{\alpha^2 m_e}{2} x$$

$$I^2(n)dn = 128 e^{-4-\frac{4}{3}x} \cdot \frac{dx}{(1-x^2)^5}$$

Все сходится.

3. Формула для сечения

$$\frac{d^2 \sigma(q)}{d\Omega} = \frac{d\sigma(q)}{d\Omega} \cdot \frac{s^2}{3} |I(\phi')|^2 \frac{d\phi'}{2\pi}$$

$$\phi' = r_B p_e, \quad s = q r_B \frac{m_e}{M}$$

Из ЗСЭ и ЗСИ

$$\frac{m_\chi v_{CM}'^2}{2} + \frac{p'^2}{2M} + \frac{\phi'^2}{2m_e r_B^2} = \frac{m_\chi v_{CM}^2}{2} + \frac{p^2}{2M} + E_0$$

$$m_\chi v_{CM}' = p'$$

$$\frac{m_\chi v_{CM}'^2}{2} \left(1 + \frac{m_\chi}{M} \right) + \frac{\phi'^2}{2m_e r_B^2} = \frac{m_\chi v_{CM}^2}{2} \left(1 + \frac{m_\chi}{M} \right) + E_0$$

$$\phi' = \sqrt{2m_e r_B^2 \cdot \left(\frac{m_\chi}{2} \left(1 + \frac{m_\chi}{M} \right) (v_{CM}^2 - v_{CM}'^2) + E_0 \right)}$$

$$d\phi' = dv'_{CM} \cdot \frac{v'_{CM}}{\phi'} m_e m_\chi r_B^2 \left(1 + \frac{m_\chi}{M}\right) = v'_{CM} dv'_{CM} \sqrt{\frac{m_e m_\chi r_B^2 \left(1 + \frac{m_\chi}{M}\right)}{\left(v_{CM}^2 - v_{CM}'^2 + 2 \left(1 + \frac{m_\chi}{M}\right)^{-1} \frac{E_0}{m_\chi}\right)}}$$

$$\frac{d^2\sigma(q)}{d\Omega} = \frac{d\sigma(q)}{d\Omega} \cdot \frac{\left(q r_B \frac{m_e}{M}\right)^2}{3} |I(\phi')|^2 \frac{dv'_{CM}}{2\pi} \sqrt{\frac{m_e m_\chi r_B^2 \left(1 + \frac{m_\chi}{M}\right) v_{CM}'^2}{\left(v_{CM}^2 - v_{CM}'^2 + 2 \left(1 + \frac{m_\chi}{M}\right)^{-1} \frac{E_0}{m_\chi}\right)}}$$

$$\frac{d^2\sigma_\gamma(q)}{d\Omega} = \frac{d\sigma(q)}{d\Omega} \cdot \frac{32\alpha \left(\frac{q}{m_\chi}\right)^2 v_{CM}'^2}{3(v_{CM}^2 - v_{CM}'^2)v_{CM}} \frac{dv'_{CM}}{2\pi}$$