Задание по курсу «Квантовая механика II»

Автор заметок: Хоружий Кирилл

От: *7 мая 2022 г.*

Первое задание

T1

Линейное возмущение. Во-первых будем работать в представление операторов $\hat{a}$ и $\hat{a}^\dagger$:

$$\hat{x} = \frac{x_0}{\sqrt{2}}\left(\hat{a} + \hat{a}^\dagger\right), \qquad \hat{p} = \frac{p_0}{\sqrt{2}}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger), \qquad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \qquad p_0 = \frac{\hbar}{x_0}.$$

Рассмотрим возмущение, вида

$$\hat{V} = \alpha x,$$

Заметим, что в первом порядке

$$V_{nn} = \frac{\alpha x_0}{\sqrt{2}} \langle n|\hat{a} + \hat{a}^\dagger|n\rangle = 0.$$

Тогда для второго порядка рассмотрим

$$V_{kn} = \frac{\alpha x_0}{\sqrt{2}}\left(\langle k|\sqrt{n}|n-1\rangle + \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle\right) = \frac{\alpha x_0}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{n}\delta_{k,n-1} + \sqrt{n+1}\delta_{k,n+1}\right).$$

Теперь находим Δ_2:

$$\Delta_2 = \frac{\alpha x_0^2}{2}\left(\frac{n}{\hbar\omega} - \frac{n+1}{\hbar\omega}\right) = -\frac{\alpha^2}{2m\omega^2}.$$

Действительно, при замене переменных в $\hat{H}_0$ можем увидеть, что вторая поправка даёт точный ответ:

$$\hat{H} = \frac{m\omega^2}{2}\left(\hat{x} + \frac{\alpha}{m\omega^2}\right)^2 - \frac{\alpha^2}{2m\omega^2} + \frac{\hat{p}^2}{2m}.$$

Нелинейное возмущение. Рассмотрим возмущение вида

$$\hat{V} = Ax^3 + Bx^4.$$

Тогда первая поправка к энергии:

$$\Delta_1^B = V_{nn} = \frac{3B\hbar^2}{4m^2\omega^2}(2n^2 + 2n + 1), \qquad \Delta_1^A = 0.$$

Вторую поправку найдём через

$$V_{kn}^A = A\left(\frac{x_0}{\sqrt{2}}\right)^3\left(3\delta_{k,n-1}n\sqrt{n} + 3\delta_{k,n+1}(n+1)\sqrt{n+1} + \delta_{k,n+3}\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)} + \delta_{k,n-3}\sqrt{n(n-1)(n-2)}\right).$$

Тогда

$$\Delta_2^A = -\frac{A^2\hbar^2}{8m^3\omega^4}\left(30n^2 + 30n + 1\right), \qquad \Delta \approx \Delta_1^B + \Delta_2^A.$$

T2

Атом-ион. Рассмоотрим возмущение, вида

$$\hat{V} = -\boldsymbol{d}_{\text{ат}} \cdot \boldsymbol{E}_{\text{ион}}, \qquad \boldsymbol{E}_{\text{ион}} = \frac{Q\boldsymbol{r}}{r^3}, \qquad \boldsymbol{d}_{\text{ат}} = \sum_{i=1} e_i \boldsymbol{r}_i.$$

Живём в парадигме

$$\hat{\mathbb{P}}\,\psi_{\text{at}} = \lambda_p \psi_{\text{at}}, \qquad \lambda_p = \pm 1, \qquad \hat{\mathbb{P}}\,\hat{\boldsymbol{r}} = -\hat{\boldsymbol{r}}\hat{\mathbb{P}}, \qquad \hat{\mathbb{P}}^2 = \mathbb{1}.$$

Для начала заметим, что

$$\Delta_1 = \langle\psi_{\text{at}}|\hat{V}|\psi_{\text{at}}\rangle = -\boldsymbol{E}_{\text{ион}} \cdot \langle\boldsymbol{d}_{\text{ат}}\rangle = 0.$$

Для второй поправки

$$\Delta_2 \sim -\frac{1}{r^4}.$$

Атом-атом. Возмущение теперь вида
$$\hat{V} = -\frac{1}{r^3}\left(3(\boldsymbol{d}_1\cdot\boldsymbol{n})(\boldsymbol{d}_2\cdot\boldsymbol{n}) - \boldsymbol{d}_1\cdot\boldsymbol{d}_2\right), \qquad \boldsymbol{n} = \frac{\boldsymbol{r}}{r}.$$
Первая поправка как обычно
$$\Delta_1 = \langle\psi_1|d_1^\alpha|\psi_1\rangle\langle\psi_2|d_2^\beta|\psi_2\rangle\delta_{\alpha\beta} = 0.$$
Зато вторая поправка
$$\Delta_2 \sim -\frac{1}{r^6}.$$

T3

Рассмотрим процесс, вида
$${}^3_1\mathrm{H} \longrightarrow {}^3_2\mathrm{He} + e^- + \bar{\nu}_e.$$
Энкергия в основном состоянии
$$U_H = -\frac{e^2}{r}, \qquad U_{He} = -\frac{2e^2}{r}.$$
Волновые функции:
$$\psi_{100}^H = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}e^{-r/a}, \qquad \psi_{100}^{He} = \sqrt{\frac{2^3}{\pi a^3}}e^{-2r/a}.$$
При $n=2$: $l = 0, \pm 1$, тогда
$$\psi_{200}^{He} = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}e^{-r/a}\left(1 - \frac{r}{a}\right).$$
Заметим, что остальные функции можем игнорировать, но для этого на них нужно посмотреть:
$$\begin{aligned}\psi_{2,1,-1}^{He} &= \frac{2^{5/2}}{8a\sqrt{\pi a^3}}e^{-r/a}e^{-i\varphi}r\sin\theta;\\ \psi_{2,1,0}^{He} &= \frac{2^{5/2}}{4a\sqrt{2\pi a^3}}e^{-r/a}r\cos\theta;\\ \psi_{2,1,1}^{He} &= \bar{\psi}_{2,1,-1}^{He}.\end{aligned}$$
Тогда искомая вероятность
$$\begin{aligned}w_{100} &= |\langle\psi_{100}^{He}|\psi_{100}^H\rangle|^2 \approx 0.7,\\ w_{200} &= |\langle\psi_{200}^{He}|\psi_{100}^H\rangle|^2 \approx 0.25,\end{aligned}$$
с их отношением $w_{100}/w_{200} \approx 2.8$.

T4

Продолжаем работать с основным состоянием водорода, а значит
$$\langle\boldsymbol{r}|\psi\rangle = \psi_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}e^{-r/a}.$$

Электростатика. Вспоминаем, что
$$\Delta\varphi = -4\pi\rho_0, \qquad \frac{4\pi}{3}\rho_0 r^3 = -e > 0, \qquad r_0 \approx 10^{-13}\text{ см}.$$
Расписываем лапласиан в сферических координатах:
$$\Delta\varphi(r) = \nabla^2\varphi(r) = \varphi'' + \frac{2}{r}\varphi' = \frac{1}{r}(r\varphi)'', \qquad \Rightarrow \qquad r\varphi = -4\pi\rho_0\iint r,$$
а значит
$$\varphi = \frac{e}{r_0^3}\frac{r^2}{2} + C_1 + \frac{C_0}{r}.$$
Считая $\Delta\varphi$ понимаем, что $\delta(\boldsymbol{r})$ быть не должно, а значит $C_0 = 0$. По условиям сшивки находим, что
$$U = \begin{cases}-e^2/r, & r \geqslant r_0\\ e^2r^2/2r_0^3 + C_1 e, & r_1 \leqslant r_0\end{cases} \qquad \Rightarrow \qquad C_1 = -\frac{3}{2}\frac{e}{r_0}.$$

Итого, искомый потенциал

$$\varphi = \frac{e}{r_0^3}\frac{r^2}{2} - \frac{3}{2}\frac{e}{r_0}.$$

Кванты. Поправку можем найти, считая

$$-\frac{e^2}{r} \mapsto U(r), \qquad \Rightarrow \qquad \varphi_{\text{new}} - \varphi = \frac{e^2 r^2}{2r_0^3} - \frac{3e}{2r_0} - \left(-\frac{e^2}{r}\right), \quad r \leqslant r_0.$$

А значит, интегрируя, находим

$$\Delta_1 = \langle\psi|\hat{V}|\psi\rangle = \int_0^{r_0} r^2\,dr \int_{-1}^{1} d\cos\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \left(\frac{e^2r^2}{2r_0^3} - \frac{3}{2}\frac{e}{r_0} + \frac{e^2}{r}\right) = \frac{2e^2}{5a}\left(\frac{r_0}{a}\right)^2.$$

T5

Помним, что

$$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}e^{-r/a}, \qquad a = \frac{\hbar}{mc\alpha_{em}}.$$

Также помним, что

$$\boldsymbol{d} = e\boldsymbol{r}, \qquad \hat{V} = -\boldsymbol{d}\cdot\boldsymbol{E} = -eEr\cos\theta.$$

При этом мы знаем, что

$$\Delta = -\frac{1}{2}\alpha_{ij}E^iE^j,$$

где α_{ij} – тензор поляризуемости.

Замечаем, что всё также

$$\Delta_1 = \langle\psi_{100}|\hat{V}|\psi_{100}\rangle = 0.$$

Вторую поправку можем найти, как

$$\Delta_2 = \langle n^{(0)}|\hat{V}|n^{(1)}\rangle.$$

Поиск возмущения. Волновую функцию $\psi^{(1)}$ можем найти, как решение уравнения, вида

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{e^2}{r}\right)\psi^{(1)} = -\frac{e^2}{2a}\frac{1}{n^2}\psi^{(1)} + \frac{\varepsilon Er\cos\theta}{\sqrt{\pi a^3}}e^{-r/a}.$$

Ищем решение в виде

$$\psi^{(1)}(\boldsymbol{r}) = \sum_{l,m} R_l(r)Y_{l,m}(\theta,\varphi).$$

Подставляя, находим

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi_{l,m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}(rR_l)''Y_{l,m} + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}R_lY_{l,m}.$$

Так как $Y_{10} \sim \cos\theta$, то нам подходит только ψ_{10}, а значит

$$\psi^{(1)}(r) = \frac{eE}{\sqrt{\pi a^3}}e^{-r/a}\cos\theta\cdot f(r).$$

Подставляя это в модифицированное уравнение Шрёдингера, найдём $f(r)$. Так приходим к диффуру

$$\frac{f''}{2} + f'\left(\frac{1}{r} - \frac{1}{a}\right) - f\frac{1}{r^2} = -r\frac{1}{ae^2}.$$

Далее будем искать f в виде полинома второй степени: $f(r) = Ar + Br^2$. Тогда

$$A = \frac{a}{e^2}, \qquad B = \frac{1}{2e^2}, \qquad \Rightarrow \qquad f(r) = \frac{ra}{e^2} + \frac{r^2}{2e^2}.$$

А значит искомая функция

$$\psi^{(1)} = \frac{eE}{\sqrt{\pi a^3}}e^{-r/a}\cos\theta\cdot\frac{r}{e^2}\left(a + \frac{r}{2}\right).$$

Сдвиг по энергии. Интегрируя $\psi^{(1)}$, находим

$$\Delta_2 = \int_0^{\infty} r^2\,dr \int_{-1}^{1} d\cos\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{1}{\pi a^3}e^{-2r/a}\cos\theta\times(-eEr\cos\theta)\,\frac{ra}{e^2}\left(1 + \frac{r}{2a}\right) = -\frac{9}{4}E^2a^3.$$

Сопостовляя с поляризуемостью, находим

$$\alpha = \frac{9}{2}a^3.$$

T6

Теперь
$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} + \hat{V},$$
где $\hat{V} = -eE\hat{z}$. Известно, что $n = 2$, тогда вырождение $n^2 = 4$. Можем явно выписать несколько функций
$$|200\rangle = \frac{2}{\sqrt{4\pi}} \left(\frac{z}{2a}\right)^{3/2} e^{-r/2a} \left(1 - \frac{r}{2a}\right),$$
$$|210\rangle = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta \left(\frac{1}{2a}\right)^{3/2} e^{-r/2a} \frac{r}{\sqrt{3}a},$$
а для $|211\rangle$ и $|21-1\rangle$ важно только что есть фактор $e^{im\varphi}$.

Действительно,
$$\langle 21m|\hat{V}|21m'\rangle = 0, \qquad m,\, m' = \pm 1.$$
Осталось посчитать
$$\kappa \overset{\text{def}}{=} \langle 200|\hat{V}|210\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \ldots d^3\boldsymbol{r} = 3eE\frac{a}{z}.$$
Получилось матрица ненулевыми коэффициентами только в первом блоке 2 на 2:
$$\hat{V} = \begin{pmatrix} 0 & \kappa \\ \kappa & 0 \end{pmatrix}, \qquad \lambda_1 = \kappa, \quad \lambda_2 = -\kappa, \quad \lambda_3 = \lambda_4 = 0.$$
Решая секулярное уравнение, находим
$$E_2 = -\frac{\text{Ry}}{2^2}, \qquad \left[\hat{H} + \hat{V} - (E_2 \pm \kappa)\mathbb{1}\right]|\psi\rangle = 0, \qquad \Rightarrow \qquad \boldsymbol{c}_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(1,\, 1,\, 0,\, 0)\,, \qquad \boldsymbol{c}_- = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(1,\, -1,\, 0,\, 0)\,.$$
Энергии расщепления
$$E^+ = E_2^{(0)} + \kappa, \qquad E^- = E_2^{(0)} - \kappa.$$

T9+T10

И снова задача на решение нестационарного уравнения Шрёдингера. Пусть в невозмущенном варианте всё $\parallel z$, возмущением будет σ_+ поляризованная волна, падающая по Oz.

Гамильтониан систеы:
$$\hat{H} = -\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{H}, \qquad \boldsymbol{\mu} = \frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{s}g,$$
где $g = 2$. Магнитное поле
$$\boldsymbol{H} = \boldsymbol{H}_0 + \boldsymbol{e}_x h\cos(\omega t) + \boldsymbol{e}_y h\sin\omega t.$$
Тогда $\hat{H}$ перепишется в виде
$$\hat{H} = \frac{|e|H_0}{2mc}\hbar\sigma_z + \frac{|e|h}{2mc}\hbar\left(\sigma_x\cos(\omega t) + \sigma_y\sin(\omega t)\right).$$
введем обозначения
$$\Omega_0 \overset{\text{def}}{=} \frac{|e|H_0}{mc}, \qquad \Omega' = \frac{|e|h}{mc}.$$
Вводя $\sigma_\pm$ переходим к
$$\hat{H} = \frac{1}{2}\Omega_0\sigma_z + \frac{1}{2}\hbar\Omega'\left(\sigma_+ e^{-i\omega t} + \sigma_- e^{i\omega t}\right).$$
Далее будем решать нестационаное уравнение Шрёдингера
$$i\hbar\partial_t\chi = \hat{H}\xi, \qquad \chi(t) = \exp\left(-\frac{i}{2}\tilde{\Omega}t\sigma_z\tilde{\chi}(t)\right).$$
Подставляем и находим
$$i\hbar\partial_t\chi = \exp\left(-\frac{i}{2}t\tilde{\Omega}\sigma_z\right)\left(\frac{1}{2}\hbar\tilde{\Omega}\sigma_z + i\hbar\partial_t\right)\tilde{\chi},$$
которое в свою очередь равно
$$i\hbar\partial_t\chi = \hat{H}\exp\left(-\frac{i}{2}t\tilde{\Omega}\sigma_z\right)\tilde{\chi}.$$

Домножим это всё слева на $\exp\left(\frac{i}{2}\tilde{\Omega}t\sigma_z\right)$, так приходим к

$$\left(\frac{1}{2}\hbar\tilde{\Omega}\sigma_z + i\hbar\partial_t\right)\tilde{\xi} = \left(\frac{1}{2}\hbar\Omega_0\sigma_z + \frac{1}{2}\hbar\Omega'\left(\tilde{U}^+\sigma_+\tilde{U}e^{-i\omega t} + \tilde{U}^+\sigma_-\tilde{U}e^{i\omega t}\right)\right)\tilde{\chi}.$$

Введем обозначения

$$\sigma_\pm = e^{\frac{i}{2}\tilde{\Omega}t\sigma_z}\sigma_\pm e^{-\frac{i}{2}\tilde{\Omega}t\sigma_z}.$$

Помним коммутаторы для σ, получаем

$$\frac{d}{dt}\sigma_\pm(t) = \pm i\tilde{\Omega}\sigma_\pm(t),$$

где

$$\sigma_\pm(0) = \sigma_\pm, \quad \Rightarrow \quad \sigma_\pm(t) = \sigma_\pm e^{\pm i\tilde{\Omega}t}.$$

Замечаем, что наша жизнь становится лучше, если $\tilde{\Omega} = \omega$, а значит

$$i\hbar\partial_t\tilde{\chi} = \left(\frac{1}{2}\hbar\left(\Omega_0 - \omega\right)\sigma_z + \frac{1}{2}\hbar'\left(\sigma_+ + \sigma_-\right)\right)\tilde{\chi}.$$

Новый $\hat{\tilde{H}}$ можем переписать в виде

$$\hat{\tilde{H}} = \frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix}\Omega_0 - \omega & \Omega' \\ \Omega' & -(\Omega_0 - \omega)\end{pmatrix} \overset{\text{def}}{=} \begin{pmatrix}E_1 & V \\ V & -E_1\end{pmatrix}.$$

Перехоим к базису, диагонализирующем $\hat{\tilde{H}}$. Находим его собственные числа:

$$E_\pm = \pm\sqrt{V^2 + E_1^2}.$$

Считая, что $\Omega_0, \Omega' \gg \omega$ и $\Omega^2 = \Omega_0^2 + \Omega'^2$, можем получить

$$E_\pm \approx \pm\frac{\hbar}{2}\Omega\left(1 - \omega\frac{\Omega_0}{\Omega^2}\right).$$

Вспоминаем, что

$$\Omega_0 = \frac{|e|H_0}{mc}, \quad \Omega' = \frac{|e|h}{mc}, \quad \Omega = \frac{|e|H}{mc}, \quad \Rightarrow \quad \frac{\Omega_0}{\Omega} = \frac{H_0}{H} = \cos\theta.$$

Тогда

$$E_\pm = \pm\frac{\hbar}{2}\left(\Omega + \omega\cos\theta\right).$$

Теперь вводим собственные вектора

$$\left|\uparrow(t)\right\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_+t}\left|\uparrow\right\rangle, \qquad \left|\downarrow(t)\right\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}E_-t}\left|\downarrow\right\rangle.$$

Собственно, сами собственные векторы

$$\begin{pmatrix}E_1 - E_\pm & V \\ V & -E_1 - E_\pm\end{pmatrix}\boldsymbol{v} = 0, \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{v} = \frac{2}{\hbar}\begin{pmatrix}E_1 + E_\pm \\ V\end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix}\Omega_0 - \omega \pm (\Omega - \omega\cos\theta) \\ \Omega'\end{pmatrix}.$$

Тогда матрица перехода

$$S = \begin{pmatrix}\Omega_0 - \omega + \Omega - \omega\cos\theta & \Omega_0 - \omega - \Omega + \omega\cos\theta \\ \Omega' & \Omega'\end{pmatrix}.$$

Находим к ней обратную

$$S^{-1} = \frac{1}{2\Omega'(\Omega - \omega\cos\theta)}\begin{pmatrix}\Omega' & -\Omega_0 + \omega + \Omega - \omega\cos\omega t \\ -\Omega' & \Omega_0 - \omega + \Omega - \omega\cos\theta\end{pmatrix}.$$

Тогда

$$\tilde{\xi}(t) = S\begin{pmatrix}e^{\frac{i}{2}E_+t} & 0 \\ 0 & e^{-\frac{i}{2}E_-t}\end{pmatrix}S^{-1}\left|\chi(0)\right\rangle.$$

Перемножая, находим

$$\left|\tilde{\chi}(t)\right\rangle_1 = \cos\left(\frac{E_+t}{\hbar}\right) + i(\omega - \Omega_0)\sin\left(\frac{E_+t}{\hbar}\right), \left|\tilde{\chi}(t)\right\rangle_2 \qquad = \frac{i\Omega'\sin\left(\frac{E_+t}{\hbar}\right)}{\Omega - \omega\cos\theta},$$

а искомая величина будет

$$\left|\chi(t)\right\rangle = e^{-\frac{i}{2}\omega t\sigma_z}\left|\tilde{\chi}(t)\right\rangle.$$

Поляризация. Осталось найти

$$\boldsymbol{P} = \langle\xi(t)|\boldsymbol{\sigma}|\xi(t)\rangle,$$

которое считать и считать, а получится

$$
\begin{aligned}
P_x &= \sin\varphi\left(\cos\varphi(1-\cos\Omega t)\cos\omega t - \sin\Omega t\sin\omega t\right),\\
P_y &= \sin\varphi\left(\cos\varphi(1-\cos\Omega t)\sin\omega t + \sin\Omega t\cos\omega t\right),\\
P_z &= \cos^2\varphi + \sin^2\varphi\cos\Omega t,
\end{aligned}
$$

где было введено обозначение

$$
\sin\varphi = \frac{\Omega}{\Omega - \omega\cos\theta}, \qquad \cos\varphi = \frac{\omega - \Omega_0}{\Omega-\omega\cos\theta}.
$$

Next. Вообще

$$
\begin{pmatrix} P_x \\ P_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\omega t & -\sin\omega t \\ \sin\omega t & \cos\omega t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{P}_x \\ \tilde{P}_y \end{pmatrix},
$$

поэтому поляризаця «следует» за $\boldsymbol{H}$.

Фаза Берри. Её можно посчитать, как

$$
\Delta_c\gamma = \oint A_\mu\, da^\mu = \oint_0^{2\pi} A_\varphi\, d\varphi, \qquad\qquad A_\varphi = \langle\psi|\partial_\mu|\psi\rangle = i\langle\uparrow|\partial_\varphi|\uparrow\rangle.
$$

где a – адиабатически меняющийся параметр гамильтониана.

Знаем, что

$$
|\uparrow\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|+\rangle + e^{i\varphi}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|-\rangle.
$$

Тогда

$$
A_\varphi = -\sin^2\frac{\theta}{2} = \frac{1}{2}\left(\cos\theta - 1\right),
$$

тогда искомая фаза Берри

$$
\Delta_c\gamma = \pi\left(\cos\theta - 1\right).
$$

Связь с телесным углом можны найти, посчитав

$$
\Omega = \int_0^1 d\cos\theta' \int_0^{2\pi} d\varphi = 2\pi\left(1-\cos\theta\right),
$$

действительно пропорциональны.

T11

Матричный элемент. Найдём матричный элемент опратора эволюции для свободной частицы

$$
Z[0] = \langle q_N|U(t'',t')|q_0\rangle = \int \mathcal{D}q\ \mathcal{D}p\ e^{\frac{i}{\hbar}S} = \lim_{N\to\infty}\int \frac{dp_N}{2\pi\hbar}\prod_{k=1}^{N-1}\frac{dq_k\ dp_k}{2\pi\hbar}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\sum_{k=1}^{N}\left(p_k\dot{q}_k\, dt - \frac{p_k^2}{2m}\, dt\right)\right).
$$

Перепишем аргумент экспоненты в виде

$$
\sum_{k=1}^{N} p_k\dot{q}_k\, dt - \frac{p_k^2}{2m}\, dt = \sum_{k=1}^{N-1} q_k(p_k - p_{k+1}) + q_N p_N - q_0 p_1 - \sum_{k=1}^{N}\frac{p_k^2}{2m}\, dt
$$

Вспоминая, что

$$
\int_{\mathbb{R}} dt\ \delta(t) e^{i\omega t} = 1, \qquad \Rightarrow \qquad \int_{\mathbb{R}} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} = \delta(t),
$$

можем проинтегрировать по всем координатам и получить

$$
\int \exp\left(\frac{i}{\hbar} q_k(p_k - p_{k+1})\right) = 2\pi\hbar\,\delta(p_k - p_{k+1}), \qquad k = 1,\ldots,N-1.
$$

Теперь интегрирование по импульсу тривиально:

$$
Z[0] = \lim_{N\to\infty}\int\frac{dp_N}{2\pi\hbar}\exp\left(\frac{i}{\hbar}p_N(q_N - q_0) - \frac{p_N^2}{2m}\underbrace{N\, dt}_{t''-t'}\right) = \sqrt{\frac{-im}{2\pi\hbar(t''-t')}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2}\frac{(q''-q')^2}{t''-t'}\right),
$$

где мы воспользовались

$$
\int_{\mathbb{R}} e^{-ax^2+bx}\, dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}e^{b^2/4a}, \qquad \int_{\mathbb{R}} e^{\pm ix^2}\, dx = e^{\pm i\pi/4}\sqrt{\pi}.
$$

Уравнение Шрёдингера. Убедимся, что $Z[0] = \langle q|U(t,t')|q'\rangle$ удовлетворяет уравнению Шредингера

$$i\hbar\partial_t Z = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_q^2 Z.$$

Введем для удобства

$$\sqrt{\frac{-im}{2\pi\hbar(t''-t')}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2}\frac{(q''-q')^2}{t''-t'}\right) \overset{\text{def}}{=} \alpha e^{\beta}.$$

Тогда

$$\partial_t Z = \alpha\left(-\frac{1}{2}\frac{1}{t-t'} - \frac{im}{2\hbar}\frac{(q-q')^2}{(t-t')^2}\right)e^{\beta}, \qquad \partial_q Z = \alpha\frac{im}{\hbar}\frac{q-q'}{t-t'}e^{\beta}, \qquad \partial_q^2 Z = \frac{i\alpha m}{\hbar(t-t')}\left(1+\frac{im}{\hbar}\frac{(q-q')^2}{t-t'}\right)e^{\beta},$$

что и требовалось доказать.

T12

Как обычно

$$Z[j] = \mathcal{N}\int \mathcal{D}q\ \exp\left(\frac{i}{\hbar}S + \frac{i}{\hbar}\int_{t'}^{t''} j(t)q(t)\,dt\right).$$

Запишем в виде

$$q(t) = \tilde{q}(t) + G^{(1)}(t), \qquad \hat{\Gamma}G^{(1)}(t) = 0, \quad G^{(1)}(t') = q', \quad G^{(1)}(t'') = q''.$$

Тогда верно, что

$$\int q\hat{\Gamma}q\,dt = \int \tilde{q}\hat{\Gamma}\tilde{q}\,dt, \qquad \Rightarrow \qquad Z = \mathcal{N}e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t'}^{t''} j(t)G^{(1)}(t)\,dt}\int \mathcal{D}\tilde{q}\exp\left(\frac{i}{2\hbar}\int \tilde{q}\hat{\Gamma}\tilde{q}\,dt + \frac{i}{\hbar}\int j\tilde{q}\,dt\right).$$

Можем записать, что

$$\tilde{q}(t) = \bar{q}(t) - \hat{\Gamma}^{-1}j(t), \qquad \hat{\Gamma}^{-1}j(t_1) = -\int G^{(2)}(t_1-t_2)j(t_2)\,dt_2.$$

Подставляя $\bar{q}$, находим

$$\frac{1}{2}\int \tilde{q}\hat{\Gamma}\tilde{q}\,dt + \int j\tilde{q}\,dt = \frac{1}{2}\int\left(\bar{q}\hat{\Gamma}\bar{q} + \hat{\Gamma}^{-1}j\hat{\Gamma}\hat{\Gamma}^{-1}j - 2j\Gamma^{-1}j\right),$$

а значит

$$Z = \mathcal{N}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_{t'}^{t''} jG^{(1)}\,dt + \frac{1}{\hbar}\int G^{(2)}(t_1-t_2)j(t_1)j(t_2)\,dt_1\,dt_2\right)\int \mathcal{D}\bar{q}e^{\frac{i}{2\hbar}\int \bar{q}\hat{\Gamma}\bar{q}\,dt},$$

где $\int \bar{q}\hat{\Gamma}\bar{q}\,dt = e^{\frac{i}{\hbar}G_0}$, а значит

$$Z = \mathcal{N}e^{\frac{i}{\hbar}G[j]}, \qquad G[j] = G_0 + \int G^{(1)}j(t)\,dt + \frac{1}{2!}\int G^{(2)}(t_1-t_2)j(t_1)j(t_2)\,dt_1\,dt_2.$$

Второе задание

T29

Рассмотрим в борновском приближении два короткодейтсвующих потенциала. Амплитуда рассения может быть найдена в виде

$$f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int V(r)e^{-i\boldsymbol{q}\boldsymbol{r}}\,d^3\boldsymbol{r} = -\frac{2m}{\hbar^2 q}\int_0^\infty V(r)\sin(qr)r\,dr, \qquad \boldsymbol{q} \overset{\text{def}}{=} \boldsymbol{k}' - \boldsymbol{k}, \quad q = 2k\sin(\theta/2).$$

Полное сечение рассения находим интегрируя амплитуду рассеяния:

$$\sigma = \int |f(\theta)|^2\,d\Omega = 2\pi\int_0^\pi |f(\theta)|^2\sin\theta\,d\theta.$$

Условие применимости запишется в виде

$$\frac{m}{2\pi\hbar^2}\left|\int\frac{e^{ikr}}{r}V(r)e^{ikz}\,d^3r\right| \ll 1.$$

Потенциал Юкавы. Подставляя $V(r) = \frac{\alpha}{r}e^{-\kappa r}$, находим

$$f = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2(\kappa^2+q^2)}, \qquad \Rightarrow \qquad \sigma = \left(\frac{m\alpha}{\hbar^2\kappa}\right)^2\frac{4\pi}{4k^2+\kappa^2}, \qquad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}.$$

Условие применимости для любых энергий: $\alpha m/\kappa$
$ll\hbar^2$. Для быстрых частиц можем ослабить условие до $\alpha \ll \hbar \times \hbar k/m$.

Прямоугольная яма. Аналогично вычисляем

$$f = \frac{2mV_0 a}{\hbar^2 q^2}\left(\cos qa - \frac{\sin qa}{qa}\right), \quad \Rightarrow \quad \sigma = \frac{2\pi}{k^2}\left(\frac{mV_0 a^2}{\hbar}\right)^2\left(1 - \frac{1}{(2ka)^2} + \frac{\sin 4ka}{(2ka)^3} - \frac{\sin^2 2ka}{(2ka)^4}\right),$$

с условием применимости $\sqrt{2mV_0}a \ll \hbar$ и для быстрых частиц $\sqrt{2mV_0}a \ll \hbar\sqrt{ka}$.

T30

Для потенциала, вида

$$V(r) = \frac{\beta}{r^2}, \qquad \beta > 0,$$

найдём фазы рассеняи δ_l.

Запишем уравнение Шредингера для парциальной волны $u_l(r) = rR_l(r)$:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{1}{r^2}\left(l(l+1) + \frac{2m\beta}{\hbar^2}\right)\right)u_l(r) = 0.$$

Рассмотрим замену $u_l(r) = \sqrt{r}\varphi(r)$

$$\varphi'' + \frac{1}{r}\varphi' + \left(k^2 - \frac{1}{r^2}\left(\left(l+\frac{1}{2}\right)^2 + \frac{2m\beta}{\hbar^2}\right)\right)\varphi = 0,$$

решения которого знаем в виде функций Бесселя $J_{\pm\nu}(kr)$, где

$$\nu = \sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2 + \frac{2m\beta}{\hbar^2}}.$$

Требуя $u_l(0) = 0$, находим решение в виде

$$u_l(r) = c\sqrt{\frac{\pi kr}{2}}J_\nu(kr).$$

Полезно посмотреть асмиптотику на бесконечности, для которой

$$u_l(r) \sim c\sin\left(kr - \frac{\pi\nu}{2} + \frac{\pi}{4}\right) = c\sin\left(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l\right),$$

откуда находим искомые фазы рассеяния

$$\delta_l = -\frac{\pi}{2}\left(\sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2 + \frac{2m\beta}{\hbar^2}} - \left(l+\frac{1}{2}\right)\right).$$

Предельный случай. В пределе $2m\beta/\hbar^2 \ll 1$ получаем
$$\delta_l \approx -\frac{\pi}{2}\frac{m\beta}{\hbar^2(l+\frac{1}{2})},$$
откуда также получаем $|\delta_l| \ll 1$.

В таком случае можем просуммировать ряд
$$f(\theta) = \frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\left(e^{2i\delta_l}-1\right)P_l(\cos\theta) \approx \frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\delta_l P_l(\cos\theta) \approx -\frac{\pi m\beta}{\hbar^2 k}\sum_{l=0}^{\infty}P_l(\cos\theta).$$
Суммируя полиному Лежанда, находим
$$f(\theta) \approx -\frac{\pi m\beta}{2k\hbar^2\sin(\theta/2)},$$
аналогично тому, что получили бы в борновском приближении.

T31

Найдём сечение рассеяния для $ka \ll 1$, а значит доминирует s-рассеяние и p-рассеяние. Для потенциала
$$U(r) = \begin{cases} -U_0, & r \leqslant a, \\ 0, & r > a. \end{cases}$$
Теперь
$$R_{k0} = \frac{1}{r}u(r), \qquad u(0) = 0, \qquad -\frac{\hbar^2}{2m}u'' + Vu = Eu.$$
Для $r > a$ $u'' + k^2 u = 0$, тогда
$$u_{\mathrm{II}} = A\sin(kr + \delta_0).$$
Для $r \leqslant a$
$$u'' + (k^2 + \kappa^2)u = 0, \qquad \tilde{k}^2 \stackrel{\mathrm{def}}{=} k^2 + \kappa^2, \qquad U_0 = \frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}, \qquad \Rightarrow \qquad U_{\mathrm{I}} = B\sin(\tilde{k}r).$$
Сшиваем на границах:
$$\frac{U_{\mathrm{I}}'}{U_{\mathrm{I}}} = \frac{U_{\mathrm{II}}'}{U_{\mathrm{II}}}, \qquad \Rightarrow \qquad \mathrm{tg}(ka + \delta_0) = \frac{k}{\tilde{k}}\,\mathrm{tg}(\tilde{k}a), \qquad \Rightarrow \qquad \delta_0 = -ka + \mathrm{arctg}\left(\tfrac{k}{\tilde{k}}\,\mathrm{tg}(\tilde{k}a)\right).$$
Рассмотрим случай $\frac{k}{\tilde{k}}\,\mathrm{tg}(\tilde{k}a) \ll ka \ll 1$, а тогда $\delta_0 \approx -ka$, а значит $f_0 = \frac{1}{k}e^{i\delta_0}\sin\delta_0 \approx -a$.

Другой случай $\mathrm{tg}(\tilde{k}a) \to \infty$. Тогда $\delta_0 \approx \mathrm{arctg}(\infty) = \frac{\pi}{2}$, что ещё называют резонансным рассеянием, так как $\sin\delta_0 = 1$.

Наконец, посмотрим на $\frac{\mathrm{tg}(\tilde{k}a)}{\tilde{k}a} \approx 1$, тогда $\delta_0 \approx 0$, и получается $\tilde{k}a \ll 1$ и $f_0 \to 0$ – эффект Рамзаура.

При барьере $\tilde{k} \to i\tilde{k}$, получим уравнения
$$\delta_0 = -ka + \mathrm{arctg}\left(\frac{ka}{\tilde{k}a}\,\mathrm{th}(\tilde{k}a)\right).$$

T32

II. Для случая быстрых частиц $ka \gg 1$ рассмотрим «черную дыру», тогда для $l < ka$ получаем[1] $S_l = 0$ и для $l > ka$ будет $S_l = 1$.

Записываем оптическую теорему
$$\sigma_{\mathrm{tot}} = \frac{4\pi}{k}\sum_l \mathrm{Im}\, f_l.$$
Сохраняются f_l сохраняются
$$f_l = \frac{2l+1}{2ik}(S_l - 1).$$
Также помним, что нужно суммировать до $l = ka$, при больших l сечение обращается в 0. Итого получаем
$$\sigma_{\mathrm{tot}} = \frac{4\pi}{k}\sum_{l=0}^{ka}(2l+1)\frac{1}{2k} = \frac{2\pi}{k^2}(ka+1)^2 = 2\pi a^2.$$

[1] Вообще верно, что $\hbar k \cdot b = \hbar l$, где b – прицельный параметр.

I. Рассмотрим непроницаемую сферу

$$U(r) = \begin{cases} 0, & r \leqslant a, \\ \infty, & r > a. \end{cases}$$

Вспоминаем

$$R_{kl} \approx \frac{c_l}{r} \sin\left(kr - \tfrac{\pi l}{2} + \delta_l\right).$$

Верно, что $R_{kl}|_{r=a} = 0$:

$$ka - \frac{\pi l}{2} + \delta_l = \pi n \to 0, \qquad \Rightarrow \qquad \delta_l = \frac{\pi l}{2} - ka.$$

Находим сечение рассеяния:

$$f_l = \frac{2l+1}{k} e^{i\delta_l} \sin \delta_l.$$

Пользуемся оптической теоремой, находим

$$\operatorname{Im} f_l = \frac{2l+1}{2k} - \frac{2l+1}{2k} \cos\left(\pi l - 2ka\right).$$

Вклад от первого слагаемого дает половину $\sigma_{\text{geom}} = 4\pi a^2$. Для расчёта второго слагаемого рассмотрим четные/нечетные значения l:

$$\sigma_{\text{чёт}} = \frac{4\pi}{k} \sum_{m=0}^{ka/2} (2l+1) \frac{\cos(2ka)}{2k} = \frac{2\pi}{k^2} \cos(2ka)(ka+1)\frac{ka+1}{2}, \qquad l = 2m.$$

Теперь нечётный вклад $l = 2m+1$:

$$\sigma_{\text{нечет}} = \frac{2p}{k} \sum_{m=0}^{ka/2-1} (4m+3) \frac{\cos(2ka)}{2k} = \frac{2\pi}{k^2} \cos(2ka)(ka-1)\frac{ka}{2}.$$

Таким образом находим

$$\sigma_{\text{чёт}} - \sigma_{\text{неч}} = \frac{\pi}{k^2} \cos(2ka) \left(\frac{5}{2} ka + 2\right).$$

Однако в финальное выражение входит только первое слагаемое

$$\sigma_{\text{tot}}|_{ka \gg 1} = 2\pi a^2.$$

T33

Для двух тождественных частиц можем написать Ψ в виде

$$\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, s_1, s_2) = \Phi(\boldsymbol{R}) \psi(\boldsymbol{r}) \chi(s_1, s_2),$$

для приведенной массы $\mu = m/2$, $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2$, $\boldsymbol{R}$ – координанты центра масс.

***α*-частицы**. Спин α-частицы равен нулю, так что говорим про Ψ для бозонов, симметричную по перестановкам. Тогда асмиптотика на бесконечности имеет вид

$$\psi(\boldsymbol{r})|_{r \to \infty} \sim e^{i\boldsymbol{kr}} + e^{-i\boldsymbol{kr}} + \left(f(\theta) + f(\pi - \theta)\right) \frac{e^{ikrsv}}{r}.$$

Тогда сечение рассеяние может быть записано в виде

$$d\sigma = |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 \, d\Omega.$$

Протоны. Рассмотрим теперь случай фермионов с антисимметричной по перестановке Ψ. Для состояния с $s_1 + s_2 = S = 0$ χ антисимметрично, а значит ψ симметрична, то есть совпадает с рассмотренным случаем для α-частиц.

Для $S = 1$ спиновая функция χ симметрично, тогда ψ антисимметрична:

$$d\sigma_{S=1} = |f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2 \, d\Omega.$$

Считая состояния равновероятными $|\uparrow\rangle$ и $|\downarrow\rangle$, находим, что

$$\langle d\sigma \rangle_S = \frac{1}{4} |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 + \frac{3}{4} |f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2.$$

T34

Найдём сечение фотоэффекта для атома водорода. Рассмотрим реакцию

$$\gamma + H \longrightarrow p + e^-,$$

где считаем электрон свободной нерелятивистской частицей. По условию энергия γ-кванта $\hbar\omega \gg \mathrm{Ry}$. Рассматриваем основное состояние атома водорода

$$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}.$$

По определению

$$d\sigma = \frac{dw_{fi}}{j_{\text{in}}}.$$

С учётом нормировки

$$\langle \lambda', \boldsymbol{k}' | \lambda, \boldsymbol{k} \rangle = (2\pi)^3 \delta(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}') \delta_{\lambda\lambda'} 2\hbar\omega, \qquad \Rightarrow \qquad j_{\text{in}} = 2\hbar\omega c.$$

Из правила Ферми:

$$dw_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta\left(\sum E\right) |V_{fi}|^2 \, d\nu_{\text{f}}, \qquad d\nu_{\text{f}} = \frac{d^3 p_{\text{f}}}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{d^3 k_{\text{f}}}{(2\pi)^3}.$$

Рассматриваем переход из $|i\rangle = |\psi_{100}\rangle \, |\boldsymbol{k}_{\text{in}}, \lambda_{\text{in}}\rangle$ в $|f\rangle = |\boldsymbol{p}_{\text{f}}\rangle \, |0\rangle$ (фотон поглотился), где $\lambda_{\text{in}} = \{1, 2\}$ – возможные поляриацации, по которым впоследствие усредним.

Квантованное поле. Будем решать задачу в дипольном приближение:

$$\hat{V} = -\boldsymbol{d} \cdot \boldsymbol{E}, \qquad \boldsymbol{d} = -e\boldsymbol{r}.$$

Так как энергия поглощается из ЭМ поля, то рассматриваем

$$\hat{\boldsymbol{\mathcal{A}}}(t, \boldsymbol{r}) = \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{1}{2k_0} \sum_{\lambda=1,2} \left(\hat{a}_{\lambda,\boldsymbol{k}} \boldsymbol{\epsilon}_\lambda e^{-i\omega t + i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}} + \hat{a}^\dagger_{\lambda,\boldsymbol{k}} \boldsymbol{\epsilon}^*_\lambda e^{i\omega t - i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}} \right).$$

Для свободных полей

$$\hat{\boldsymbol{E}}(t, \boldsymbol{r}) = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \hat{\boldsymbol{\mathcal{A}}} = \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{i}{2} \left(\hat{a} \boldsymbol{\epsilon} e^{i\omega t + i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}} - \hat{a}^\dagger \boldsymbol{\epsilon}^* e^{i\omega t - i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}} \right).$$

Матричный элемент. Таким образом можем найти матричный элемент

$$V_{fi} = \langle f | -\hat{\boldsymbol{d}} \cdot \hat{\boldsymbol{E}} | i \rangle = \int d^3 r \; e^{-i\boldsymbol{k}_{\text{f}}\boldsymbol{r}} (-e\boldsymbol{r}) \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a} \cdot \langle 0 | \hat{\boldsymbol{E}} | \boldsymbol{k}_{\text{in}}, \lambda_{\text{in}} \rangle.$$

Так как для фотона итоговое состояние вакуум, то вклад будет только от $\hat{a}$:

$$\langle 0 | \hat{\boldsymbol{E}} | \boldsymbol{k}_{\text{in}}, \lambda_{\text{in}} \rangle = \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{i}{2} \left(\boldsymbol{\epsilon}_\lambda e^{-i\omega t + i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}} \langle 0 | \hat{a} | \boldsymbol{k}_{\text{in}}, \lambda_{\text{in}} \rangle + 0 \right),$$

где подставляя условие нормировки

$$\langle 0 | \hat{a} | \boldsymbol{k}_{\text{in}}, \lambda_{\text{in}} \rangle = \langle \boldsymbol{k}, \lambda | \boldsymbol{k}_{\text{in}}, \lambda_{\text{in}} \rangle = (2\pi)^3 \delta_{\lambda\lambda_{\text{in}}} \delta(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}_{\text{in}}) 2\hbar\omega,$$

находим выражение для матричного элемента поля

$$\langle 0 | \hat{\boldsymbol{E}} | \boldsymbol{k}_{\text{in}}, \lambda_{\text{in}} \rangle = i\hbar\omega_{\text{in}} \boldsymbol{\epsilon}_{\lambda_{\text{in}}} e^{-i\omega_{\text{in}} t + i\boldsymbol{k}_{\text{in}}\boldsymbol{r}}.$$

Подставляя это в матричный элемент V_{fi}, наконец приходим к выражению, вида

$$V_{fi} = -i\hbar\omega_{\text{in}} e \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} \int d^3 r \; e^{i\boldsymbol{q}\boldsymbol{r} - r/a} (\boldsymbol{\epsilon}_{\lambda_{\text{in}}} \cdot \boldsymbol{r}) = -\frac{ie\hbar\omega_{\text{in}}}{\sqrt{\pi a^3}} \left(\boldsymbol{\epsilon}_{\lambda_{\text{in}}} \cdot \boldsymbol{q} \right) \frac{32\pi a^5}{\left((qa)^2 + 1\right)^3} \approx \frac{ie\hbar\omega_{\text{in}}}{\sqrt{\pi a^3}} \left(\boldsymbol{\epsilon}_{\lambda_{\text{in}}} \cdot \boldsymbol{k}_{\text{f}} \right) \frac{32\pi a^5}{(k_{\text{f}} a)^6},$$

где ввели $\boldsymbol{q} \overset{\text{def}}{=} \boldsymbol{k}_{\text{in}} - \boldsymbol{k}_{\text{f}}$ и воспользовались приближением

$$\frac{(\hbar k_{\text{f}})^2}{2m} = \hbar\omega + (-W_{\text{ион}}) \approx \hbar\omega, \qquad k_{\text{in}} \ll k_{\text{f}}, \qquad \Rightarrow \qquad \boldsymbol{q} \approx -\boldsymbol{k}_{\text{f}}.$$

Усреднение. Вычислим усредненное по поляризациям значение

$$|(\boldsymbol{\epsilon}_{\lambda_{\text{in}}} \cdot \boldsymbol{k}_{\text{f}})|^2 = \frac{1}{2} \sum_{\lambda=1}^{2} \left(\boldsymbol{\epsilon}_{\lambda_{\text{in}}} \cdot \boldsymbol{k}_{\text{f}} \right) \left(\boldsymbol{\epsilon}^*_{\lambda_{\text{in}}} \cdot \boldsymbol{k}_{\text{f}} \right) = \frac{1}{2} k_{\text{f}}^\alpha k_{\text{f}}^\beta \sum \epsilon_\lambda^\alpha \bar{\epsilon}_\lambda^\beta = \frac{1}{2} k_{\text{f}}^\alpha k_{\text{f}}^\beta \left(\delta^{\alpha\beta} - \frac{k_{\text{in}}^\alpha k_{\text{in}}^\beta}{k_{\text{in}}^2} \right) = \frac{1}{2} (k_{\text{f}}^2 - \frac{(\boldsymbol{k}_{\text{f}} \cdot \boldsymbol{k}_{\text{in}})}{k_{\text{in}}^2}),$$

то есть просто часть, ортогональная $\boldsymbol{k}_{\text{in}}$, что можно было сказать с самого начала. Здесь воспользовались

$$\boldsymbol{\epsilon}_\lambda \boldsymbol{\epsilon}^*_\lambda = 1, \;\Rightarrow\; \epsilon_\lambda^\alpha \bar{\epsilon}_\lambda^\alpha = 2, \qquad \boldsymbol{\epsilon}_\lambda \perp \boldsymbol{k}_{\text{in}}.$$

Вводя сферические координаты с осью Oz вдоль $\boldsymbol{k}_{\text{in}}$, приходим к выражению

$$|(\boldsymbol{\epsilon}_{\lambda_{\text{in}}} \cdot \boldsymbol{k}_{\text{f}})|^2 = \frac{1}{2} k_{\text{f}}^2 (1 - \cos^2\theta).$$

Сечение рассеяния. Теперь подставляем вычисленный выражения в формулу для полного сечения:

$$\int d\sigma = \int \frac{dw_{fi}}{2\hbar\omega c} = \frac{1}{2\pi\hbar\omega c} \frac{2\pi}{\hbar} \int_0^\infty \frac{k_{\text{f}}^2 \, dk_{\text{f}}}{(2\pi)^3} 2\pi \int_{-1}^{1} d\cos\theta \; \delta\left(\hbar\omega - \tfrac{\hbar^2 k_{\text{f}}^2}{2m} \right) \frac{k_{\text{f}}^2}{2} \left(1 - \cos^2\theta\right) \left(\frac{32\pi a^5}{(k_{\text{f}} a)^6} \right)^2 \frac{(e\hbar\omega)^2}{\pi a^3},$$

откуда получаем выражения для σ_{tot}:

$$\sigma_{\text{tot}} = \int d\sigma = \frac{2^8}{3} 4\pi a^2 \left(\frac{W_{\text{ион}}}{\hbar\omega} \right)^{7/2}, \qquad W_{\text{ион}} = \text{Ry} = \frac{e^2}{2a}.$$