Задание по курсу «Квантовая механика II»

Автор заметок: Хоружий Кирилл

От: *13 мая 2022 г.*

T15

По определению
$$W^\mu = -\frac{1}{2}\varepsilon^{\mu\nu\lambda\rho}p_\nu S_{\lambda\rho}, \qquad S_{ik} = \hbar\varepsilon_{ikl}s^l.$$
Тогда подставляя $\mu = 0$, находим
$$W^0 = -\frac{1}{2}\varepsilon^{0ijk}p_i\hbar\varepsilon_{jkn}s^n = -\hbar p_i s^i = \hbar\left(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{s}\right).$$
Теперь, с учетом $S_{0i} = i\,\mathrm{sign}(\mathfrak{s})s^i\hbar$, находим
$$\begin{aligned} W^i &= -\tfrac{1}{2}\varepsilon^{i0jk}p_0 S_{jk} - \varepsilon^{ij0k}p_j S_{0k} = \tfrac{1}{2}\varepsilon^{0ijk}p_0\hbar\varepsilon_{jkn}s^n - i\,\mathrm{sign}(\mathfrak{s})\varepsilon^{oijk}p_j s_k\hbar = \\ &= \hbar\left(p_0 s^i - i\,\mathrm{sign}(\mathfrak{s})\left[\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{s}\right]^i\right). \end{aligned}$$

T22

Уровни Ландау. Для частицы в постоянном магнитном поле гамильтониан запишется в виде
$$\hat{H} = \frac{\hat{\boldsymbol{\mathcal{P}}}^2}{2m} - \frac{\mu}{s}\hat{s}_z\mathcal{H} + \cancel{eA_0}, \qquad \hat{\mathcal{P}}^\alpha = -i\hbar\partial_\alpha - \frac{e}{c}A_\alpha.$$
Удобно зафиксировать калибровку в виде
$$A_x = -\mathcal{H}y, \quad A_y = A_z = 0.$$
Тогда гамильтониан можем записать в виде
$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\hat{p}_x + \frac{e\mathcal{H}}{c}y\right)^2 + \frac{\hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2}{2m}.$$
Так как $[\hat{s}_z,\, H] = 0$, то может рассмотреть собственные состояния $\hat{s}_z$ и не думать про это:
$$\hat{H}\psi = E\psi, \quad \Rightarrow \quad \psi = e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_z z)}\chi(y),$$
так как $[\hat{p}_x,\, \hat{H}] = [\hat{p}_z,\, \hat{H}] = 0$. Движение вдоль поля «не квантуется».

Подставляя предполагаемые вид функции в уравнение Шредингера, получаем дифференциальное уравнение на χ
$$\chi'' + \frac{2m}{\hbar^2}\left(\underbrace{\left(E + \tfrac{\mu\sigma}{s}\mathcal{H} - \tfrac{1}{2m}p_z^2\right)}_{E_{\text{osc}} = \hbar\omega_{\mathcal{H}}(n+1/2)} - \tfrac{m}{2}\omega_{\mathcal{H}}^2(y-y_0)^2\right)\chi = 0,$$
где введены
$$y_0 \overset{\text{def}}{=} -\frac{cp_x}{e\mathcal{H}}, \qquad \omega_{\mathcal{H}} \overset{\text{def}}{=} \frac{|e|\mathcal{H}}{mc}.$$
Таким образом для уровней энергии частицы находим
$$E = \left(n + \tfrac{1}{2}\right)\hbar\omega_{\mathcal{H}} + \frac{p_z^2}{2m} - \frac{\mu\sigma}{s}\mathcal{H},$$
что и называют уровнями Ландау. Подставляя $\mu/s = -|e|\hbar/mc$, можем написать уровни в виде
$$E = \left(n + \tfrac{1}{2} + \sigma\right)\hbar\omega_{\mathcal{H}} + \frac{p_z^2}{2m}.$$
Собственные функции можем написать в терминах полиномов Эрмита:
$$\chi_n(y) = \frac{1}{\sqrt{a_H\sqrt{\pi}2^n n!}}\exp\left(-\frac{(y-y_0)^2}{2a_H^2}\right)H_n\left(\frac{y-y_0}{a_H}\right), \quad a_H = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_{\mathcal{H}}}}.$$

Кратность вырождения уровней. Пусть движение в плоскости xy ограничено большой, но конечной площадью $S = L_x L_y$. Тогда число различных дискретных значений p_x в интервале Δp_x можно найти в виде
$$N_{p_x}(\Delta p_x) = \frac{L_x}{2\pi\hbar}\Delta p_x.$$

Считая $0 < y_0 < L_y$ можем найти связь $\Delta p_x = eHl_y/c$, а значит число состояний для заданных n и p_z:

$$N_{n,p_z} = \frac{e\mathcal{H}S}{2\pi\hbar c}.$$

Добавляя ограничение по z в размере L_z, получаем число состояний в интервале Δp_z:

$$N_n = \frac{e\mathcal{H}V}{4\pi^2\hbar^2 x}\Delta p_z.$$

T23

Найдём уровни энергии и волновые функции стационарных состояний двух невзаимодействующих тождественных частиц в потенциальном ящике

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a, \\ \infty, & x < 0,\ x > a. \end{cases}$$

Для одной частицы знаем, что

$$\psi_k(x) \sim \sin(k_n x), \qquad k_n = \frac{\pi n}{a},$$

с характерной энергией $E_0 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$.

Фермионы. Рассмотрим $s = \frac{1}{2}$, тогда суммарный спин $S = \{0,\, 1\}$. Полная волновая функция антисимметрична:

$$\Psi_{n_1 n_2} = \psi_\pm \times \chi_\mp (2S = 1 \pm 1), \tag{1}$$

где $\pm$ соответсвует симметричной и антисимметричной функции.

Энергию при $n_1 \neq n_2$ можем найти в виде

$$E_{n_1 n_2} = E_0\left(n_1^2 + n_2^2\right).$$

При $n_1 = n_2$ невозможно состояние с $S = 1$, поэтому энергия запищется в виде

$$E_{nn} = E_0 n^2.$$

Для поиска энергии основного состояния N-частиц, задача сводится к сумме квадратов

$$\sum_{n=1}^{m} n^2 = \frac{1}{6}m(m+1)(2m+1), \qquad \Rightarrow \qquad E_N = \frac{E_0}{12}(N+1)(N^2 + 2N + 3\cdot(N \bmod 2)),$$

С учетом (1), волновую функцию можем записать в виде

$$\psi_F^S(x_1,\, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2) + (-1)^S\psi_{n_1}(x_2)\psi_{n_2}(x_1)\right),$$

где $\psi(x_1,\, x_2)$ обращается в $\equiv 0$ при $n_1 = n_2$ и $S = 1$.

Бозоны. Энергия представима в виде

$$E_{n_1 n_2} = E_0(n_1^2 + n^2).$$

Энергия основного состояния для N бозонов не зависит от спина и равна

$$E_N = E_0\ N.$$

Для частиц с нулевым спином полная волновая функция может быть только симметричной, значит представима в виде ψ_F^0. Для частиц с единчиным спином Ψ симметрична, поэтому

$$\Psi_{n_1 n_2} = \psi_\pm \times \chi_\pm(S).$$

а значит $S = 1$ соотвествует ψ_+ и $S = \{0,\, 2\}$ соответсвует ψ_-.

T26

Кремний. По правилам Хунда конфигурация незаполненой части 2p^2 будет вида: $\boxed{}\ \boxed{\uparrow}\ \boxed{\uparrow}$, а значит можем найти $J = |L - S| = 0$.

$$\text{Si}:\ 1\text{s}^2\, 2\text{s}^2\, 2\text{p}^6\, 3\text{s}^2\, 3\text{p}^2, \qquad \text{основное состояние}:\ {}^3\text{P}_0.$$

Сера. Незполненой явлеется оболочка 2p^4, для которой (S: 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4) находим основное состояние ^{3}P$_0$ в силу конфигурации $\boxed{\uparrow}\ \boxed{\uparrow}\ \boxed{\uparrow\downarrow}$.

Все термы. Найдём все термы для p^2, $l = 1$, тогда $L = \{0,\, 1,\, 2\}$ и $S = \{0,\, 1\}$. Для $S = 1$ и $L = 1$ возможны конфигурации ^{3}P$_{0,1,2}$. Для $S = 0$ и $L = \{0, 2\}$ получим ^{1}S$_0$, ^{1}D$_2$, аналогичные рассуждения будут верны для p^4.

Фосфор. Для фосфора p^3 основным состоянием будет ^{4}S$_{3/2}$. Состоянию с $M_s = \frac{1}{2}$ соответсвует конфигурация $\boxed{}\ \boxed{\uparrow}\ \boxed{\uparrow\downarrow}$, и ^{2}D$_{3/2,5/2}$. Для $M_L = 1$ возможны конфигурации $\boxed{}\ \boxed{\uparrow\downarrow}\ \boxed{\uparrow}$ и $\boxed{\uparrow}\ \boxed{}\ \boxed{\uparrow\downarrow}$ с обозначениями

${}^2\mathrm{P}_{1/2,\,3/2}$. Наконец, для $M_L = 0$ возможны конфигурации $\boxed{\uparrow}\ \boxed{\uparrow}\ \boxed{\downarrow}$, $\boxed{\uparrow}\ \boxed{\downarrow}\ \boxed{\uparrow}$, $\boxed{\downarrow}\ \boxed{\uparrow}\ \boxed{\uparrow}$, не приводящие к новым независимым состояниям.

Ванадий. V: $\ldots 3\mathrm{d}^3$ и конфигурация $\boxed{}\ \boxed{}\ \boxed{\uparrow}\ \boxed{\uparrow}\ \boxed{\uparrow}$ с обозначением ${}^4\mathrm{F}_{3/2}$.

Кобальт. Co: $\ldots 3\mathrm{d}^7$ и конфигурация ${}^4\mathrm{F}_{9/2}$.

Церий. Ce: $\ldots 6\mathrm{s}^2\, 5\mathrm{d}^4$ в конфигурации ${}^3\mathrm{H}_4$ с $S_{\max} = 1$ и $L_{\max} = 5$, хотя на самом деле ${}^1\mathrm{G}_4$ и конфигурация $4\mathrm{f}^1\, 5\mathrm{d}^1\, 6\mathrm{s}^2$, является исключением из правил Хунда.

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 $r \leqslant a$

$$u'' + (k^2+\varkappa^2)u = 0, \qquad \tilde{k}^2 \overset{\mathrm{def}}{=} k^2 + \varkappa^2, \qquad U_0 = \frac{\hbar^2\varkappa^2}{2m}, \qquad \Rightarrow \qquad U_{\mathrm{I}} = B\sin(\tilde{k}r).$$

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

$$f_l = \frac{2l+1}{2ik}(S_l - 1).$$

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

Также помним, что нужно суммировать до $l = ka$, при больших l сечение обращается в 0. Итого получаем
$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k}\sum_{l=0}^{ka}(2l+1)\frac{1}{2k} = \frac{2\pi}{k^2}(ka+1)^2 = 2\pi a^2.$$

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 $R_{kl}|_{r=a} = 0$:
$$ka - \frac{\pi l}{2} + \delta_l = \pi n \to 0, \quad \Rightarrow \quad \delta_l = \frac{\pi l}{2} - ka.$$
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
$$\sigma_{\text{tot}}|_{ka \gg 1} = 2\pi a^2.$$

Т33

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 $\mu = m/2$, $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2$, $\boldsymbol{R}$ – координаты 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
$$\langle d\sigma\rangle_S = \frac{1}{4}|f(\theta) + f(\pi-\theta)|^2 + \frac{3}{4}|f(\theta) - f(\pi-\theta)|^2.$$

Т34

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 поляриzации, 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:

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

откуда получаем выражения для σ_tot:

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