4 Fotoefekt

4.1 Fotoelektrický jev—plné řešení

Atom vodíku popsaný Hamiltoniánem

$$\hat{\mathsf{H}}_0 = \frac{1}{2m}\hat{\mathbf{p}}^2 - \frac{\gamma}{\hat{\mathsf{r}}},$$

je vystaven elektromagnetickému vlnění s vektorovým potenciálem

$$\boldsymbol{A}(\hat{\mathbf{r}}, t) = 2A_0\boldsymbol{\epsilon}\cos(\boldsymbol{\kappa}\cdot\hat{\mathbf{r}} - \omega t) \tag{4.1.1}$$

(jednotkový vektor $\boldsymbol{\epsilon}$ určuje polarizaci vln, $\boldsymbol{\kappa} = \boldsymbol{n}\omega/c$ je vlnový vektor určující směr postupu vlny) a skalárním potenciálem

$$\Phi(\hat{\mathbf{r}}, t) = 0.$$

1. Nalezněte interakční Hamiltonián.
2. Nalezněte hustotu pravděpodobnosti vztaženou na jednotku času (rychlost přechodu) jevu, kdy kdy atom vodíku nacházející se v základním stavu emituje elektron do oblasti prostorového úhlu $(\Omega, \Omega + \mathrm{d}\Omega)$ (fotoelektrický jev).
3. Určete diferenciální účinný průřez výše uvedeného jevu.

Řešení:

1. *Interakční Hamiltonián*

   Hamiltonián atomu vodíku, popisující interakci jeho elektronu s elektromagnetickým polem, je

   $$\hat{\mathsf{H}}_{(\mathrm{H}\leftrightarrow\mathrm{EM})} = \frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{p}}^2 - e\boldsymbol{A}(\hat{\mathbf{r}}, t)\right)^2 + e\,\Phi(\hat{\mathbf{r}}) - \frac{\gamma}{\hat{\mathsf{r}}}$$

   Počítáme ve speciální (Coulombické) kalibraci

   $$\nabla\cdot\boldsymbol{A} = 0\,, \qquad \Phi = 0\,.$$

   Hamiltonián v ní lze přepsat do tvaru

   $$\begin{aligned}\hat{\mathsf{H}}_{(\mathrm{H}\leftrightarrow\mathrm{EM})}(t) &= \hat{\mathsf{H}}_0 - \frac{e}{m}\,\boldsymbol{A}(\hat{\mathbf{r}}, t)\cdot\hat{\mathbf{p}} + \frac{e^2}{m}\,\boldsymbol{A}(\hat{\mathbf{r}}, t)\cdot\boldsymbol{A}(\hat{\mathbf{r}}, t) \approx \\ &\approx \hat{\mathsf{H}}_0 - \frac{e}{m}\,\boldsymbol{A}(\hat{\mathbf{r}}, t)\cdot\hat{\mathbf{p}},\end{aligned}$$

   kde jsme zanedbali člen úměrný $|\boldsymbol{A}(\hat{\mathbf{r}})|^2$. Označíme $\hat{\mathsf{H}}_{\mathrm{I}}(t) = -\frac{e}{m}\,\boldsymbol{A}(\hat{\mathbf{r}}, t)\cdot\hat{\mathbf{p}}$ a dosadíme za vektorový potenciál monochromatickou vlnu (4.1.1):

   $$\hat{\mathsf{H}}_{\mathrm{I}}(t) = -\frac{eA_0}{m}\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{\kappa}\cdot\hat{\mathbf{r}}-\omega t)} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{\kappa}\cdot\hat{\mathbf{r}}-\omega t)}\right]\boldsymbol{\epsilon}\cdot\hat{\mathbf{p}}\,. \tag{4.1.2}$$

   Nás bude zajímat excitace, stačí tedy brát pouze část

   $$\hat{\mathsf{H}}_{\mathrm{I}}(t) = \hat{\mathsf{h}}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}$$
   $$\hat{\mathsf{h}} = -\frac{eA_0}{m}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{\kappa}\cdot\boldsymbol{r}}\,\boldsymbol{\epsilon}\cdot\hat{\mathbf{p}}.$$

2. *Rychlost přechodu*

Vlnová funkce základního stavu atomu vodíku je rovna[5]

$$\psi_i(\boldsymbol{r}) = R_{10}(r)Y_{00}(\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}\,\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}\,,$$

kde a_0 je Bohrův poloměr. Vlnová funkce konečného stavu volného elektronu je ovlivněna Coulombickým polem jádra. Toto pole je však rychle odstíněno látkou, která se v okolí jádra vyskytuje, a proto budeme brát elektron jako volný, jehož vlnovou funkci vyjádříme jako

$$\psi_f(\boldsymbol{r}) \equiv \langle \boldsymbol{r}|\boldsymbol{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$$

kde $\boldsymbol{k}$ je vlnový vektor elektronu s energií E_e,

$$E_e = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$

Výpočet přechodu mezi spojitou a diskrétní částí spektra zjednodušíme tím, že budeme považovat elektron nikoliv za zcela volný, ale za uzavřený v krabici (nekonečně hluboké potenciálové jámě) o objemu V. Budeme předpokládat, že krabice je tak velká, že neovlivní příliš spektrum atomu vodíku (stačí, aby neovlivnila základní stav, se kterým počítáme). Nakonec provedeme limitu $V \to \infty$.

Vlnová funkce elektronu v krabici zní

$$\psi'_f(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\,.$$

V tomto případě je $\boldsymbol{k}$ důsledkem konečných rozměrů kvantovaná veličina,

$$E_{\boldsymbol{n}} = \frac{\hbar^2\boldsymbol{k}^2}{2m}\,, \qquad \boldsymbol{k} = \frac{2\pi}{L}\boldsymbol{n}\,, \qquad L = \sqrt[3]{V}\,, \qquad \boldsymbol{n} = (n_1, n_2, n_3)\,.$$

Pokud je však objem V dostatečně velký, lze s ní nadále počítat jako se spojitou.

Při výpočtu hustoty hladin volného elektronu vyjdeme ze vztahů (**??**) a (**??**). Objem fázového prostoru klasicky se pohybujícího volného elektronu v krabici je podle (**??**)

$$\begin{aligned}\Omega_{\mathrm{PS}}(E) &= \int_V \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\int \delta\left(E - \frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2\right)\mathrm{d}^3\boldsymbol{p} = \\ &= V\int_\Omega \mathrm{d}\Omega\int_0^\infty \delta\left(E - \frac{1}{2m}p^2\right)p^2\mathrm{d}p.\end{aligned}$$

Budeme se ptát po hustotě hladin s vlnovým vektorem mířícím do elementu pro-

[5] Jedná se o radiální i úhlovou část vlnové funkce, srovnej s (**??**) a s ní související poznámkou.

storového úhlu $\mathrm{d}\Omega$, tj.

$$
\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}\rho(E)}{\mathrm{d}\Omega} &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\frac{\mathrm{d}\Omega_{\mathrm{PS}}(E)}{\mathrm{d}\Omega} = \\
&= \frac{V}{(2\pi\hbar)^3}\int_0^\infty \delta\left(E - \frac{1}{2m}p^2\right) p^2 \mathrm{d}p = \\
&= \frac{V}{(2\pi\hbar)^3}\frac{2m}{2\sqrt{2mE}}\int_0^\infty \delta\left(p - \sqrt{2mE}\right) p^2 \mathrm{d}p = \\
&= \frac{V}{(2\pi\hbar)^3}\frac{2m}{2\sqrt{2mE}}\, 2mE = \\
&= \frac{V}{(2\pi\hbar)^3}\, m\sqrt{2mE}\,,
\end{aligned}
$$

či v závislosti na veličině k

$$
\frac{\mathrm{d}\rho(k)}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3}\,\hbar k m\,.
$$

K výpočtu pravděpodobnosti, resp. rychlosti přechodu použijeme Fermiho zlaté pravidlo (3.0.9). V něm se objevuje maticový element

$$
\begin{aligned}
h_{fi} &= \left\langle f \middle| \hat{\mathsf{h}} \middle| i \right\rangle = \\
&= -\frac{eA_0}{m}\int \psi_f'^*(\boldsymbol{r})\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{\kappa}\cdot\boldsymbol{r}}\, \boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{p}\, \psi_i(\boldsymbol{r}) \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \\
&= \frac{\mathrm{i}\hbar e A_0}{m\sqrt{\pi a_0^3 V}}\,\boldsymbol{\epsilon}\cdot\int \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{\kappa}-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{r}}\, \nabla\, \mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}\, \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \\
&= -\frac{\mathrm{i}\hbar e A_0}{m a_0\sqrt{\pi a_0^3 V}}\,\boldsymbol{\epsilon}\cdot\int \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}\, \frac{\boldsymbol{r}}{r}\, \mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}\, \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \\
&= -\frac{\mathrm{i}\hbar e A_0}{m a_0\sqrt{\pi a_0^3 V}}\,\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{I}(\boldsymbol{q})\,,
\end{aligned}
\tag{4.1.3}
$$

kde jsme označili $\boldsymbol{q} \equiv \boldsymbol{\kappa} - \boldsymbol{k}$.

Integrál $\boldsymbol{I}(\boldsymbol{q})$ vypočítáme následující úvahou. Jediný vektor, na kterém integrand integrálu závisí, je $\boldsymbol{q}$. To znamená, že integrál musí být možné vyjádřit jako

$$
\boldsymbol{I}(\boldsymbol{q}) = \boldsymbol{q} I(\boldsymbol{q})\,,
$$

kde $I(\boldsymbol{q})$ je skalární funkce. Budeme tedy počítat výraz

$$
\begin{aligned}
q^2 I(\boldsymbol{q}) &= \int \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}\,\frac{\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}{r}\,\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \\
&= \left|\begin{matrix}\text{Sférické souřadnice } (r,\theta,\phi) \\ \text{osa } z \text{ paralelní s vektorem } \boldsymbol{q}\end{matrix}\right| = \\
&= \int_0^\infty r\,\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}\,\mathrm{d}r \int_0^\pi \mathrm{e}^{\mathrm{i}qr\cos\theta}\,qr\cos\theta\sin\theta\,\mathrm{d}\theta \int_0^{2\pi}\mathrm{d}\phi = \\
&= \left|u=\cos\theta \quad \mathrm{d}u = -\sin\theta\,\mathrm{d}\theta\right| = \\
&= 2\pi q\int_0^\infty r\,\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}\,\mathrm{d}r\int_{-1}^1 \mathrm{e}^{\mathrm{i}qru}\,u\,\mathrm{d}u \overset{\text{Per partes}}{=} \\
&= 2\pi q\int_0^\infty r\,\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}\,\mathrm{d}r\left\{\left[\frac{1}{\mathrm{i}qr}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}qru}\,u\right]_{-1}^1 - \frac{1}{\mathrm{i}qr}\int_{-1}^1\mathrm{e}^{\mathrm{i}qru}\,\mathrm{d}u\right\} = \\
&= -2\pi q\mathrm{i}\int_0^\infty r\,\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}\,\mathrm{d}r\left\{\frac{1}{qr}\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}qr}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}qr}\right)+\frac{\mathrm{i}}{(qr)^2}\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}qr}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}qr}\right)\right\} = \\
&= -2\pi\mathrm{i}\int_0^\infty r\left\{\mathrm{e}^{-r\left(\frac{1}{a_0}+\mathrm{i}q\right)}+\mathrm{e}^{-r\left(\frac{1}{a_0}-\mathrm{i}q\right)}\right\}\mathrm{d}r - \\
&\qquad -\frac{2\pi}{q}\int_0^\infty\left\{\mathrm{e}^{-r\left(\frac{1}{a_0}+\mathrm{i}q\right)}-\mathrm{e}^{-r\left(\frac{1}{a_0}-\mathrm{i}q\right)}\right\}\mathrm{d}r = \\
&= -2\pi\mathrm{i}\,J_1 - \frac{2\pi}{q}\,J_2\,.
\end{aligned}
$$

Platí

$$
\begin{aligned}
\int_0^\infty \mathrm{e}^{-\alpha r}\,\mathrm{d}r &= \frac{1}{\alpha}\,, \\
\int_0^\infty r\,\mathrm{e}^{-\alpha r}\,\mathrm{d}r &= \frac{1}{\alpha}\int_0^\infty \mathrm{e}^{-\alpha r}\,\mathrm{d}r = \frac{1}{\alpha^2}
\end{aligned}
$$

(pro $\alpha > 0$), takže

$$
\begin{aligned}
J_1 &= \frac{1}{\left(\frac{1}{a_0}+\mathrm{i}q\right)^2}+\frac{1}{\left(\frac{1}{a_0}-\mathrm{i}q\right)^2} = a_0^2\frac{\left(1-\mathrm{i}qa_0\right)^2+\left(1+\mathrm{i}qa_0\right)^2}{\left(1+q^2a_0^2\right)^2} = \\
&= 2a_0^2\frac{1-q^2a_0^2}{\left(1+q^2a_0^2\right)^2}\,, \\
J_2 &= \frac{1}{\frac{1}{a_0}+\mathrm{i}q}-\frac{1}{\frac{1}{a_0}-\mathrm{i}q} = a_0\frac{1-\mathrm{i}qa_0-1-\mathrm{i}qa_0}{1+q^2a_0^2} = \\
&= -\frac{2\mathrm{i}qa_0^2}{1+q^2a_0^2}\,,
\end{aligned}
$$

a po dosazení dostaneme

$$
\begin{aligned}
q^2 I(\boldsymbol{q}) &= -4\pi \mathrm{i} a_0^2 \left[\frac{1 - a_0^2 q^2}{\left(1 + q^2 a_0^2\right)^2} - \frac{1}{1 + q^2 a_0^2} \right] = \\
&= -4\pi \mathrm{i} a_0^2 \frac{1 - a_0^2 q^2 - 1 - a_0^2 q^2}{\left(1 + q^2 a_0^2\right)^2} = \\
&= \frac{8\mathrm{i}\pi a_0^4 q^2}{\left(1 + q^2 a_0^2\right)^2} \,,
\end{aligned}
$$

neboli

$$
\boldsymbol{I}(\boldsymbol{q}) = \frac{8\mathrm{i}\pi a_0^4}{\left(1 + q^2 a_0^2\right)^2} \, \boldsymbol{q}.
$$

Maticový element je

$$
\begin{aligned}
h_{fi} &= \frac{\mathrm{i}\hbar e A_0}{m a_0 \sqrt{\pi a_0^3 V}} \frac{8\mathrm{i}\pi a_0^4}{\left(1 + q^2 a_0^2\right)^2} \, \boldsymbol{\epsilon} \cdot (\boldsymbol{\kappa} - \boldsymbol{k}) \\
&= -\frac{\mathrm{i}\hbar e A_0}{m a_0 \sqrt{\pi a_0^3 V}} \frac{8\mathrm{i}\pi a_0^4}{\left(1 + q^2 a_0^2\right)^2} \, \boldsymbol{\epsilon} \cdot \boldsymbol{k} \,,
\end{aligned}
$$

neboť $\boldsymbol{\epsilon} \cdot \boldsymbol{\kappa} = 0$, což plyne z vlastností Coulombické kalibrace.

Nyní již máme v rukou vše, co potřebujeme k použití Fermiho zlatého pravidla (3.0.9). Dosadíme do něj a dostaneme

$$
\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}w_{i\to f}}{\mathrm{d}\Omega} &= \frac{2\pi}{\hbar} \left|h_{fi}\right|^2 \frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}\Omega} = \\
&= \frac{2\pi}{\hbar} \left| \frac{\mathrm{i}\hbar e A_0}{m a_0 \sqrt{\pi a_0^3 V}} \frac{8\mathrm{i}\pi a_0^4}{\left(1 + q^2 a_0^2\right)^2} \, \boldsymbol{\epsilon} \cdot \boldsymbol{k} \right|^2 \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \hbar k m = \\
&= \frac{16}{\pi\hbar} \frac{(e A_0)^2}{m} \frac{\left(\boldsymbol{\epsilon} \cdot \boldsymbol{k}\right)^2 k a_0^3}{\left(1 + q^2 a_0^2\right)^4}
\end{aligned}
\tag{4.1.4}
$$

3. *Účinný průřez*

   Účinný průřez procesu je definován jako počet procesů $i \to f$ za jednotku času dělenou celkovým tokem částic. V našem případě je to absorbovaná energie za jednotku času dělená tokem energie dopadajícího elektromagnetického záření.

   Absorbovaná energie za jednotku času je dána součinem rychlosti přechodu (4.1.4) a energie, která se absorbuje a která je rovna $\hbar\omega$:

$$
\mathcal{U}_{i\to f} = \hbar\omega \frac{\mathrm{d}w_{i\to f}}{\mathrm{d}\Omega}
$$

   Tok energie Φ je součin rychlosti přenosu energie c a střední hustoty energie

$$
\langle w \rangle = \frac{\epsilon_0}{2} \left(\left\langle \boldsymbol{E}^2 \right\rangle + c^2 \left\langle \boldsymbol{B}^2 \right\rangle \right) \,,
$$

   kde vektory elektrické intenzity a magnetické indukce jsou

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{E} &= -\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} = -2A_0 \omega \boldsymbol{\epsilon} \sin\left(\boldsymbol{\kappa} \cdot \boldsymbol{r} - \omega t\right) \,, \\
\boldsymbol{B} &= \nabla \times \boldsymbol{A} = -2A_0 \boldsymbol{\epsilon} \times \boldsymbol{\kappa} \sin\left(\boldsymbol{\kappa} \cdot \boldsymbol{r} - \omega t\right) \,,
\end{aligned}
$$

takže

$$\left\langle \boldsymbol{E}^2 \right\rangle = 4\left|A_0\right|^2 \omega^2 \left\langle \sin^2\left(\boldsymbol{\kappa}\cdot\boldsymbol{r} - \omega t\right)\right\rangle = 2\left|A_0\right|^2 \omega^2 \,,$$
$$\left\langle \boldsymbol{B}^2 \right\rangle = 2\left|A_0\right|^2 \kappa^2 = 2\left|A_0\right|^2 \omega^2 \,.$$

Dostáváme tedy

$$\left\langle w\right\rangle = 2\epsilon_0\left|A_0\right|^2 \omega^2 \,, \qquad\qquad \Phi = c\left\langle w\right\rangle = 2c\epsilon_0\left|A_0\right|^2\omega^2$$

a po dosazení je účinný průřez

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_{i\to f}}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{\mathcal{U}_{i\to f}}{\Phi} = \frac{\hbar\omega}{2c\epsilon_0\omega^2\left|A_0\right|^2}\frac{\mathrm{d}w_{i\to f}}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{32\gamma}{mc\omega}\frac{\left(\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{k}\right)^2 k a_0^3}{\left(1+q^2a_0^2\right)^4} = \frac{32\alpha\hbar}{m\omega}\frac{\left(\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{k}\right)^2 k a_0^3}{\left(1+q^2a_0^2\right)^4}\,,$$

kde $\alpha = \gamma/(\hbar c)$ je konstanta jemné struktury.

Zaveďme ještě souřadnou soustavu tak, aby vektor polarizace $\boldsymbol{\epsilon}$ mířil do směru osy x a vlnový vektor dopadající vlny $\boldsymbol{\kappa}$ do směru osy z. Ve sférických souřadnicích dostaneme

$$\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{k} = k\sin\theta\cos\phi\,,$$
$$q^2 = k^2 - 2\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\kappa} + \kappa^2 = k^2 - 2k\frac{\omega}{c}\cos\theta + \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \,.$$

Při výpočtu jsme uvažovali, že Coulombické pole neovlivní pohyb vyraženého elektronu a ten se pohybuje jako volný. To platí pouze v případě, že $k \gg |E_0|$, kde E_0 je energie základního stavu atomu. Tuto aproximaci lze rozvést ještě dál. Energie, kterou získá vylétávající elektron, je díky tomuto přiblížení rovna energii dopadajících fotonů:

$$k = \frac{\sqrt{2mE_e}}{\hbar} = \frac{\sqrt{2m\hbar\omega}}{\hbar}.$$

Jelikož $\kappa = \omega/c$, dostáváme

$$\frac{\kappa}{k} = k\frac{\kappa}{k^2} = \frac{\hbar k}{2mc} = \frac{p}{2mc} = \frac{v}{2c}\,,$$

takže

$$q^2 \approx k^2 - \frac{v}{c}\cos\theta\,,$$

kde v je rychlost vylétnuvšího elektronu. Navíc můžeme zanedbat

$$1 + q^2a_0^2 \approx 1 + k^2a_0^2\left(1 - \frac{v}{c}\cos\theta\right) \approx$$
$$\approx k^2a_0^2\left(1 - \frac{v}{c}\cos\theta\right).$$

Diferenciální účinný průřez bude

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_{i\to f}}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{32\alpha\hbar}{m\omega\left(ka_0\right)^5}\frac{\sin^2\theta\cos^2\phi}{\left(1-\frac{v}{c}\cos\theta\right)^4}.$$

Ten nabývá maxima pro $\phi = 0$, tj. v rovině polarizace dopadající elektromagnetické vlny, a pro θ dané rovnicí

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\frac{\sin^2\theta}{\left(1-\frac{v}{c}\cos\theta\right)} = 0$$

$$2\sin\theta\cos\theta\left(1-\frac{v}{c}\cos\theta\right)^4 - 4\frac{v}{c}\sin^2\theta\sin\theta\left(1-\frac{v}{c}\cos\theta\right)^3 = 0$$

$$2\cos\theta - 2\frac{v}{c}\cos^2\theta - \frac{v}{c}\sin^2\theta = 0$$

a tedy

$$\cos\theta = \frac{-1\pm\sqrt{1+8\left(\frac{v}{c}\right)^2}}{2\frac{v}{c}} \approx \frac{c}{2v}\left[-1\pm 1\pm 4\left(\frac{v}{c}\right)^2\right] \approx \begin{cases}\dfrac{c}{v} \\ 2\dfrac{v}{c}\end{cases} .$$

První řešení nevyhovuje, pravá strana je větší než 1. Maximální pravděpodobnost emise je tedy do směru

$$\theta = \frac{\pi}{2} - 2\frac{v}{c}\,, \qquad\qquad \phi = 0\,.$$

Poznámka:

Integrál (4.1.3) lze vypočítat též jiným způsobem. V p-reprezentaci budeme posunovat operátor ∇ vlevo. Posunutí skrz člen $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{\kappa}\cdot\boldsymbol{r}}$ lze provést přímo díky Coulombické kalibraci (směr šíření elektromagnetické vlny je kolmý na polarizaci). Posunutí skrz člen $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$ provedeme pomocí integrace Per partes. Povrchový příspěvek je 0 a gradient po zapůsobení na tento člen dá pouze faktor $-\mathrm{i}\boldsymbol{k}$, který je možné vytknout před integrál. Integrujeme tedy nakonec

$$h_{fi} = -\frac{\hbar e A_0}{m c a_0\sqrt{\pi a_0^3 V}}\,\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{k}\int \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}\,\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r},$$

což je vlastně Fourierova transformace vlnové funkce základního stavu atomu vodíku.

4.2 Fotoelektrický jev v dipólové aproximaci

Uvažujte stejný systém jako v předchozím případě.

1. Nalezněte interakční Hamiltonián v dipólové (E1) aproximaci.
2. V této aproximaci spočítejte diferenciální rychlost přechodu a účinný průřez.
3. Určete, pro jakou energii vylétávajícího elektronu je rychost přechodu (diferenciální účinný průřez) největší.
4. Srovnejte obecné řešení z předchozí úlohy a řešení v dipólové aproximaci.

Řešení:

1. *Interakční Hamiltonián v dipólové aproximaci*

   Vyjdeme z vyjádření interakčního Hamiltoniánu (4.1.2)

$$\hat{\mathsf{H}}_{\mathrm{I}}(t) = -\frac{eA_0}{mc}\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{\kappa}\cdot\hat{\mathbf{r}}-\omega t)} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{\kappa}\cdot\hat{\mathbf{r}}-\omega t)}\right]\boldsymbol{\epsilon}\cdot\hat{\mathbf{p}}.$$

Je-li vlnová délka vlny mnohem větší než rozměry atomu, z rozvoje exponenciály

$$\mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}\boldsymbol{\kappa}\cdot\hat{\mathbf{r}}} \approx 1 \pm \mathrm{i}\boldsymbol{\kappa}\cdot\hat{\mathbf{r}} + \cdots$$

vezmeme jen první člen.

V 1. řádu nestacionární poruchové teorie počítáme amplitudy přechodu $\left\langle f \middle| \hat{\mathsf{H}}_{\mathrm{I}}(t) \middle| i \right\rangle$, kde $|i\rangle$ je počáteční stav, $|i\rangle$ koncový stav, oba vlastní stavy neporušeného Hamiltoniánu $\hat{\mathsf{H}}_0$. V našem případě

$$\begin{aligned}
\left\langle f \middle| \hat{\mathsf{H}}_{\mathrm{I}}(t) \middle| i \right\rangle &= -\frac{eA_0}{m}\boldsymbol{\epsilon}\cdot\langle f|\hat{\mathbf{p}}|i\rangle\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\right) = \\
&= \left| \text{platí } \left[\hat{\mathbf{r}},\hat{\mathsf{H}}_0\right] = \mathrm{i}\hbar\,\frac{\hat{\mathbf{p}}}{m} \right| = \\
&= -\frac{eA_0}{m}\boldsymbol{\epsilon}\cdot\left\langle f \middle| \frac{m}{\mathrm{i}\hbar}\left[\hat{\mathbf{r}},\hat{\mathsf{H}}_0\right] \middle| i \right\rangle 2\cos\omega t = \\
&= 2\mathrm{i}eA_0\frac{E_f^{(0)}-E_i^{(0)}}{\hbar}\boldsymbol{\epsilon}\cdot\langle f|\hat{\mathbf{r}}|i\rangle\cos\omega t = \\
&= \langle f|2\mathrm{i}eA_0\,\omega_{fi}\cos\omega t\,\boldsymbol{\epsilon}\cdot\hat{\mathbf{r}}|i\rangle\ .
\end{aligned}$$

Pro poruchu harmonicky závisející na čase s úhlovou frekvencí ω a pro dostatečně dlouhé časy platí podle (3.0.8)

$$\omega \simeq \pm\omega_{fi}.$$

Dostáváme tedy

$$\hat{\mathsf{H}}_{\mathrm{I}}(t) = 2\mathrm{i}eA_0\omega\,\boldsymbol{\epsilon}\cdot\hat{\mathbf{r}}\cos\omega t\,,$$

což můžeme ještě přepsat pomocí intenzity elektrického pole

$$\boldsymbol{E}(t) = -\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial t} = 2A_0\omega\,\boldsymbol{\epsilon}\sin\left(\boldsymbol{\kappa}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t\right) \approx -2E_0\boldsymbol{\epsilon}\sin\omega t$$

a vhodnou volbou fází do tvaru

$$\boxed{\hat{\mathsf{H}}_{\mathrm{I}}(t) = -\boldsymbol{E}(t)\cdot\hat{\mathbf{d}}}\,,$$

kde $\hat{\mathbf{d}} = -e\hat{\mathbf{r}}$ je dipólový operátor. Takto zapsaný interakční Hamiltonián pro harmonickou poruchu vyjadřuje interakci dipólu atomu vodíku s proměnným elektrickým polem. To objasňuje, proč se aproximace nazývá dipólová.

2. *Rychlost přechodu*

   Budeme postupovat ve zcela stejných krocích jako v předchozím příkladě, tj. využijeme Fermiho zlaté pravidlo (3.0.9).

   Označíme-li $\hat{\mathsf{h}} = eE_0\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{r}$, dává maticový element příspěvek

$$\begin{aligned}
h_{fi} &= \left\langle f \middle| \hat{\mathsf{h}} \middle| i \right\rangle = \\
&= eE_0\int \psi_f'^{*}(\boldsymbol{r})\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{r}\psi_i(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \\
&= eE_0\frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3 V}}\boldsymbol{\epsilon}\cdot\int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\,\boldsymbol{r}\,\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \\
&= eE_0\frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3 V}}\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{I}(\boldsymbol{k})
\end{aligned}$$

a integrál vypočteme opět stejnou úvahou jako dříve:

$$\begin{aligned}
k^2 I(\boldsymbol{k}) &= \int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\,\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}\,\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \\
&= 2\pi\mathrm{i}\int_0^\infty r^2\left\{\mathrm{e}^{-r\left(\frac{1}{a_0}+\mathrm{i}k\right)}+\mathrm{e}^{-r\left(\frac{1}{a_0}-\mathrm{i}k\right)}\right\}\mathrm{d}r+ \\
&\qquad + \frac{2\pi}{k}\int_0^\infty r\left\{\mathrm{e}^{-r\left(\frac{1}{a_0}+\mathrm{i}k\right)}-\mathrm{e}^{-r\left(\frac{1}{a_0}-\mathrm{i}k\right)}\right\}\mathrm{d}r = \\
&= 2\pi\mathrm{i}\,J_1 + \frac{2\pi}{k}\,J_2\,.
\end{aligned}$$

Platí

$$\int_0^\infty r^2\,\mathrm{e}^{-\alpha r}\,\mathrm{d}r = \frac{2}{\alpha}\int_0^\infty r\,\mathrm{e}^{-\alpha r}\,\mathrm{d}r = \frac{2}{\alpha^3}\,,$$

neboli

$$\begin{aligned}
J_1 &= \frac{2}{\left(\frac{1}{a_0}+\mathrm{i}k\right)^3}+\frac{2}{\left(\frac{1}{a_0}-\mathrm{i}k\right)^3} = 2a_0^3\frac{(1-\mathrm{i}ka_0)^3+(1+\mathrm{i}ka_0)^3}{(1+k^2a_0^2)^3} = \\
&= 4a_0^3\frac{1-3k^2a_0^2}{(1+k^2a_0^2)^3}\,, \\
J_2 &= \frac{1}{\left(\frac{1}{a_0}+\mathrm{i}k\right)^2}+\frac{1}{\left(\frac{1}{a_0}-\mathrm{i}k\right)^2} = a_0^2\frac{(1-\mathrm{i}ka_0)^2-(1+\mathrm{i}ka_0)^2}{(1+k^2a_0^2)^2} = \\
&= -\frac{4\mathrm{i}ka_0^3}{(1+k^2a_0^2)^2}\,,
\end{aligned}$$

a po dosazení dostaneme

$$\begin{aligned}
k^2 I(\boldsymbol{k}) &= 8\pi\mathrm{i}a_0^3\left[\frac{1-3a_0^2k^2}{(1+k^2a_0^2)^3}-\frac{1}{(1+k^2a_0^2)^2}\right] = \\
&= 8\pi\mathrm{i}a_0^3\frac{1-3a_0^2k^2-1-a_0^2k^2}{(1+k^2a_0^2)^3} = \\
&= -\frac{32\mathrm{i}\pi a_0^5k^2}{(1+k^2a_0^2)^3}\,.
\end{aligned}$$

Samotný integrál je

$$\boldsymbol{I}(\boldsymbol{k}) = -\frac{32\mathrm{i}\pi a_0^5}{(1+k^2a_0^2)^3}\,\boldsymbol{k}$$

což dá maticový element

$$h_{fi} = -\frac{eE_0}{\sqrt{\pi a_0^3 V}}\frac{32\mathrm{i}\pi a_0^5}{(1+k^2a_0^2)^3}\,\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{k}\,.$$

Pro rychlost přechodu dostáváme výraz

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}w_{i\to f}}{\mathrm{d}\Omega} &= \frac{2\pi}{\hbar}\,|h_{fi}|^2\,\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}\Omega} = \\
&= \frac{2\pi}{\hbar}\left| -\frac{eE_0}{\sqrt{\pi a_0^3 V}}\,\frac{32\mathrm{i}\pi a_0^5}{\left(1+k^2a_0^2\right)^3}\,\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{k}\right|^2 \frac{\hbar k m}{(2\pi\hbar)^3} = \\
&= \frac{256 m a_0^4 (eA_0\omega)^2}{\pi\hbar^3}\,\frac{\left(\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{k}\right)^2 k a_0^3}{\left(1+k^2a_0^2\right)^6} \\
&= \frac{1024\gamma\epsilon_0 m a_0^4 (A_0\omega)^2}{\pi\hbar^3}\,\frac{\left(\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{k}\right)^2 k a_0^3}{\left(1+k^2a_0^2\right)^6}
\end{aligned}$$

a diferenciální účinný průřez je

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_{i\to f}}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{512\gamma m a_0^4\omega}{\pi\hbar^2 c}\,\frac{\left(\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{k}\right)^2 k a_0^3}{\left(1+k^2a_0^2\right)^6} = \frac{512\alpha m a_0^4\omega}{\pi\hbar}\,\frac{\left(\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{k}\right)^2 k a_0^3}{\left(1+k^2a_0^2\right)^6}\,.$$

3. *Extrémy rychlosti přechodu*

   Vidíme, že $\mathrm{d}w_{i\to f}/\mathrm{d}\Omega \sim (\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{k})^2$, což znamená, že elektrony jsou s největší pravděpodobností emitovány ve směru polarizace dopadající elektromagnetické vlny. Velikost vlnového vektoru, pro který je rychlost emise elektronu nejvyšší, spočítáme z rovnice

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}k}\left(\frac{\mathrm{d}w_{i\to f}}{\mathrm{d}\Omega}\right) &= 0 \\
3k^2\left(1+k^2a_0^2\right)^6 - 6\left(1+k^2a_0^2\right)^5 2ka_0^2k^3 &= 0 \\
3k^2\left(1+k^2a_0^2\right) - 12a_0^2k^4 &= 0 \\
3 - 9k^2a_0^2 &= 0\,,
\end{aligned}$$

   což dává

$$k_\mathrm{m} = \frac{1}{\sqrt{3}}\frac{1}{a_0} = \frac{mc\alpha}{\hbar^2\sqrt{3}}\,.$$

   Energie je pro tuto hodnotu vlnového vektoru rovna

$$E_\mathrm{m} = \frac{1}{6\hbar^2} mc^2\alpha^2\,.$$