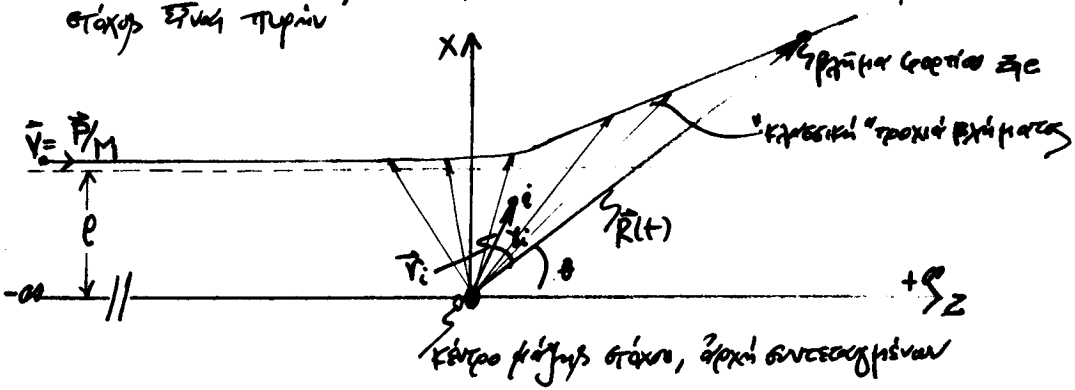
3. Διέγερση κατά Coulomb

Θά ἐφαρμόσουμε τώρα τά ἀποτελέσματα τῆς χρονικῶς ἐξαρτημένης θεωρίας διαταράξεως (καί εἰδικώτερα τῶν σχέσεων (Δ9')) γιά νά μελετήσουμε τά ἀποτελέσματα "πλήρους" πεδίου Coulomb ἐπί δεσμίου συστήματος φορτισμένων σωματιδίων, π.χ. πυρήνος ἤ ἀτόμου ἤ καί μορίου. Θεωροῦμε σωματίδιο φορτίου Z_1e (βλῆμα) ὁρμῆς $\vec{P}$ καί παραμέτρου "εἰσόδου" ρ (impact parameter, βλ. σχῆμα), τό ὁποῖο πλησιάζει στόχο ἀποτελούμενο ἀπό N φορτισμένα σωματίδια φορτίου e καί συνολικοῦ φορτίου $Ne=Z_2e$, ὅπου Z_2 ὁ ἀτομικός ἀριθμός τοῦ στόχου στήν περίπτωση ὅπου ὁ στόχος εἶναι πυρήν



Καθώς τό φορτισμένο σωματίδιο πλησιάζει τόν στόχο, ἐκδηλώνεται λόγω τῶν δυνάμεων Coulomb (ἠλεκτροστατικῶν δυνάμεων, ἕλξεων ἤ ἀπώσεων), ἀναγκάζοντας ὁρμῆς ὁ πυρήνας (ἤ τό ἄτομο) διεγείρεται λόγω τοῦ μεταβαλλομένου ἠλεκτρικοῦ πεδίου τό ὁποῖο δημιουργεῖ τό βλῆμα κατά τήν διέλευσή του. Τό ἀποτέλεσμα εἶναι ἡ διέγερση τοῦ συστήματος ἀπό κάποια κατάσταση s (π.χ. τήν θεμελιώδη) σέ κάποια κατάσταση μ, ἤ ἄτομο καί ἀντίστοιχός του στόχου (στήν περίπτωση μορίου συστήματος). Ἡ διέγερση τοῦ τύπου αὐτοῦ καλεῖται "διέγερση κατά Coulomb" καί διακρίνεται ἀπό τήν κατά "κεφαλήν" σύγκρουση βλήματος στόχου, ὅπου (λόγω πλήρους ἐνεργείας τοῦ βλήματος) τό δύο σωματίδια πλησιάζουν τόσο, ὥστε νά ἐπικρατοῦν πλέον "πυρηνικές" δυνάμεις, δηλ. δυνάμεις μικροῦ ἠλεκτρομαγνητικοῦ χαρακτῆρος. Ὁ μηχανισμός Coulomb εἶναι ἡ κυρίως αἰτία

πεδίου φορτισμένων σωματιδίων εντός της ύλης. Το βήμα θά θεωρηθεί άνευ δομής (π.χ. $\bar{e}$, p, σωματίδια α κ.τ.λ.), θά διαφορίσουμε δέ μιά τών τύχη του βήματος, π.χ. τήν ανατόρευση μείωση ενεργείας του κατά τήν διέλευση του στόχου.

Εχουμε

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 \pm \sum_{i=1}^{N=Z_2} \frac{Z_1 e^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}(t)|} \qquad (54)$$

όπου, $\hat{\mathcal{H}}_0$ ο Χαμιλτονιανός του αδιατάρακτου συστήματος (στόχος μέ τό βήμα σέ $-\infty$), $\partial\hat{\mathcal{H}}_0/\partial t = 0$. $\vec{R}(t)$ τό διάνυσμα τροχιάς του βήματος και $\{\vec{r}_i\}_i^N$ τά διανύσματα "θέσεως" των σωματιδίων του στόχου. Προφανώς

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \hat{\mathcal{H}}_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots \vec{r}_i, \dots \vec{r}_N, \vec{p}_1, \dots \vec{p}_N) \quad \text{και}$$

$$\hat{\mathcal{H}}_0 \Phi_\mu^{(0)}(\{\vec{r}_i\}) = E_\mu^{(0)} \Phi_\mu^{(0)}(\{\vec{r}_i\}) \qquad (55)$$

Το πεδίο + ή − εξαρτάται από τά φασικά φορτία των σωματιδίων. Είναι κατανοητό πιθανώς ότι τό διάνυσμα τροχιάς $\vec{R}$ εξαρτάται από τόν χρόνο t και από ένα εισέρχεται σ' χρονική εξάρτηση της διαταρακτικής

$$V(\vec{r}, t) \equiv \hat{\mathcal{H}} - \hat{\mathcal{H}}_0 .$$

Υποθέτουμε ότι για κάθε χρονική στιγμή t, $|\vec{r}_i| \ll \vec{R}(t)$, ή ότι οι διαστάσεις του στόχου ($\simeq \langle \vec{r}_i \rangle$) είναι πολύ μικρότερες της παραμέτρου εισόδου ρ, μπορούμε νά γράψουμε

$$\frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{R}|} = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{r_i^j}{R^{j+1}} P_j(\cos\gamma_i) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{r_i^j}{R^{j+1}} P_j(\hat{r}_i \cdot \hat{R}) \qquad (56)$$

όπου $\hat{r}_i$, $\hat{R}$ μοναδιαία διανύσματα κατά μήκος των διανυσμάτων $\vec{r}_i$ και $\vec{R}(t)$ αντιστοίχως. $P_j(\cos\gamma_i)$ τά σημά πολυώνυμα Legendre ($j = 0, 1, 2, 3 \dots$) και γ_i τό γωνία μεταξύ του $\vec{R}(t)$ και του $\vec{r}_i$ (βλ. σχήμα). Υπενθυμίζουμε ότι $P_0 = 1$, $P_1 = \cos\gamma$, $P_2 = 1/2(3\cos^2\gamma - 1)$, $P_3 = 1/2(5\cos^3\gamma - 3\cos\gamma), \dots$. Τήν σχέση (56) θ' δεχόμαστε μέ τόν μορφή αυτή μόνον σέν περίπτωση $r_i \ll R$ τόν θεωρούμε δεδομένη. Χρησιμοποιώντας τώρα τόν (56) στόν (19') παίρνουμε:

$$C_\ell(t) = \pm \frac{Z_a e^2}{i\hbar} \sum_{j=0}^{\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dt' e^{i\omega_{\ell s} t'} \frac{\langle \Phi_\ell^{(0)} | \sum_{i=1}^{N=Z_a} r_i^j P_j(\hat{r}_i \cdot \hat{R}(t')) | \Phi_s^{(0)} \rangle}{(R(t'))^{j+1}} \qquad (57)$$

Τώρα $\sum_{j=0}^{\infty} \frac{\langle \Phi_\ell^{(0)} | \sum_{i=1}^{Z_a} r_i^j P_j(\cos\gamma_i) | \Phi_s^{(0)} \rangle}{(R(t))^{j+1}}$

$$= \frac{\langle \Phi_\ell^{(0)} | \sum_{i=1}^{Z_a} r_i^0 P_0(\cos\gamma_i) | \Phi_s^{(0)} \rangle}{(R(t))^1} + \frac{\langle \Phi_\ell^{(0)} | \sum_{i=1}^{Z_a} r_i^1 P_1(\cos\gamma_i) | \Phi_s^{(0)} \rangle}{(R(t))^2}$$

$$+ \frac{\langle \Phi_\ell^{(0)} | \sum_{i=1}^{Z_a} r_i^2 P_2(\cos\gamma_i) | \Phi_s^{(0)} \rangle}{(R(t))^3} + \cdots \qquad (58)$$

Αλλά $\sum_{i=1}^{Z_a} r_i^0 P_0(\cos\gamma_i) = Z_a$, άρα οι πρώτοι δύο όροι στο δεξιό μέλος της (58) ισούται με $Z_a/R(t) \langle \Phi_\ell^{(0)} | \Phi_s^{(0)} \rangle = 0$ λόγω ορθογωνικότητας των καταστάσεων ℓ, s ($\ell \neq s$) του ολοκληρώματος αλληλεπίδρασης $H_{\ell 0}$. Μεταπτώσεις ηλεκτρόνιου στα μη μηδενισμό των μικροσκοπικών σε σύστημα προκύπτουν από τη τιμή του $j = 0, 1, 2, 3, \ldots$ ονομάζονται μεταπτώσεις (ηλεκτρικού) "μονοπόλου", "διπόλου", "τετραπόλου", ... 2^j-πόλου αντιστοίχως. Εύκολα βλέπουμε ότι οι μεταπτώσεις μονοπόλου είναι πάντοτε μηδέν και επειδή $r_i^0/R(t) \ll 1$; $i = 1, 2 \ldots Z_a$ για κάθε t μπορούμε να θεωρήσουμε ότι μεταπτώσεις με $j > 1$ είναι πρακτικώς μηδέν δίδει $\left(\frac{r_i}{R}\right)^j \frac{1}{R}$ διότι $j > 1 \simeq 0$. Άρα θεωρώντας μόνον μεταπτώσεις ηλεκτρικού διπόλου, έχουμε

$$C_\ell(t) = \pm \frac{Z_a e^2}{i\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt' e^{i\omega_{\ell s} t'} \frac{\langle \Phi_\ell^{(0)} | \sum_{i=1}^{Z_a} r_i P_1(\cos\gamma_i) | \Phi_s^{(0)} \rangle}{(R(t'))^2} \qquad (59)$$

Θεωρώντας τώρα ότι το βλήμα κινείται επί του επιπέδου xz ($y=0$), δηλ. σκίδαση, μπορούμε να γράψουμε

$$r_i P_1(\cos\gamma_i) = r_i \cos\gamma_i = \vec{r}_i \cdot \frac{\vec{R}(t)}{R(t)} = \vec{r}_i \cdot \frac{\hat{e}_x R \sin\theta + \hat{e}_z R \cos\theta}{R}$$

$$= (\hat{e}_x x_i + \hat{e}_y y_i + \hat{e}_z z_i) \cdot (\hat{e}_x R(t) \sin\theta(t) + \hat{e}_z R(t) \cos\theta(t)) / R(t)$$

$$= x_i \sin\theta(t) + z_i \cos\theta(t) . \qquad (60)$$

$\theta = \theta(t)$ είναι η χρονικώς εξαρτημένη πολική γωνία του βλήματος.

Αντικαθιστώντας τὸν (60) στὸν (59) παίρνουμε

$$C_\ell(t) = \pm \frac{Z_1 e^2}{i\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} dt' e^{i\omega_{\ell s}t'} \frac{1}{R(t')^2} \langle \Phi_\ell^{(0)} | \sum_{i=1}^{Z_2} (x_i \sin\theta(t') + z_i \cos\theta(t')) | \Phi_s^{(0)} \rangle$$

$$= \pm \frac{Z_1 e^2}{i\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} dt' e^{i\omega_{\ell s}t'} \frac{1}{R(t')^2} \left\{ \sin\theta(t') \langle \Phi_\ell^{(0)} | \sum_{i=1}^{Z_2} x_i | \Phi_s^{(0)} \rangle + \cos\theta(t') \langle \Phi_\ell^{(0)} | \sum_{i=1}^{Z_2} z_i | \Phi_s^{(0)} \rangle \right\}$$

ἢ

$$C_\ell(t) = \pm \frac{Z_1 e^2}{i\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} dt' \frac{e^{i\omega_{\ell s}t'}}{R(t')^2} \left(x_{\ell s} \sin\theta(t') + z_{\ell s} \cos\theta(t') \right) \qquad (61)$$

ὅπου, $e x_{\ell s}$ καὶ $e z_{\ell s}$ εἶναι δύο συνιστῶσες τοῦ ἠλεκτροστοιχείου διπολικῆς ροπῆς

$$e\vec{r}_{\ell s} = e \langle \Phi_\ell^{(0)} | \sum_{i=1}^{Z_2} \vec{r}_i | \Phi_s^{(0)} \rangle$$

$$= e \left\{ \hat{e}_x \langle \Phi_\ell^{(0)} | \sum_{i=1}^{Z_2} x_i | \Phi_s^{(0)} \rangle + \hat{e}_y \langle \Phi_\ell^{(0)} | \sum_{i=1}^{Z_2} y_i | \Phi_s^{(0)} \rangle + \hat{e}_z \langle \Phi_\ell^{(0)} | \sum_{i=1}^{Z_2} z_i | \Phi_s^{(0)} \rangle \right\}$$

ἢ

$$e\vec{r}_{\ell s} = e \left\{ \hat{e}_x x_{\ell s} + \hat{e}_y y_{\ell s} + \hat{e}_z z_{\ell s} \right\} \qquad (62)$$

Ὑποθέτοντας ὅτι ὁ πύραυλος δημιουργεῖ σεληνιακό δυναμικό, δηλ. ἐπί τοῦ βλήματος δὲν ἀσκεῖται ροπή, οἱ (ἀδιάστατοι) στροφορμή τῆς τροχιᾶς τοῦ βλήματος διατηρεῖται

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = \frac{d}{dt}\left(\vec{R}(t) \times \vec{P} \right) = 0$$

Ὑπολογίζουμε τὸ μέτρο τῆς στροφορμῆς σὲ δύο σημεῖα τῆς τροχιᾶς

$$|\vec{R}(t) \times \vec{P}| = |\vec{R}(t) \times M\vec{v}| = \rho M v \qquad (63)$$

ὅπου ρ οἱ παράμετρος ἐξόδου, M οἱ μάζα τοῦ βλήματος καὶ $v = |\vec{v}|$. Ἐπίσης

$$\vec{R}(t) = \hat{e}_x R(t) \sin\theta + \hat{e}_z R(t) \cos\theta$$

ἢ

$$\vec{v} = \frac{d\vec{R}}{dt} = \hat{e}_x \left(\frac{dR}{dt} \sin\theta + \dot{\theta} R \cos\theta \right) + \hat{e}_z \left(\frac{dR}{dt} \cos\theta - \dot{\theta} \sin\theta \, R \right)$$

ὅπου $\dot{\theta} \equiv \frac{d\theta}{dt}$

Χρησιμοποιώντας τὴν τελευταία σχέση στὸν ὑπολογισμὸ τοῦ μέτρου τῆς $\mathbf{L}$ παίρνουμε

$$|\vec{R}\times M\vec{v}| = |\vec{R}\times\vec{v}|M = MR^2\frac{d\theta}{dt}$$

Ἐξίσωση τῆς προηγουμένης μὲ τὴν (63) παρέχει

$$\rho \cancel{M} v = \cancel{M} R^2\frac{d\theta}{dt} \Rightarrow R(t)^{-2} = \frac{1}{\rho v}\frac{d\theta}{dt}$$

Ἀντικατάσταση τῆς $R(t)^{-2}$ στὴν (61) δίνει

$$c_\ell(t) = \pm\frac{Z_1e^2}{i\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega_{\ell s}t'}dt'\frac{1}{\rho v}\frac{d\theta}{dt'}\left(X_{\ell s}\sin\theta(t') + Z_{\ell s}\cos\theta(t')\right)$$

ἢ ἀλλάζοντας καὶ τὰ ὅρια τῆς ὁλοκληρώσεως

$$c_\ell(t) = \pm\frac{Z_1e^2}{i\hbar\rho v}\int_{-\pi}^{\theta(\rho)} e^{i\omega_{\ell s}t'}\left(X_{\ell s}\sin\theta(t') + Z_{\ell s}\cos\theta(t')\right)d\theta$$

Ἄρα συμπεραίνουμε ὅτι ὁλοκληρώνουμε ἀπὸ τὴν κατεύθυνση τοῦ πρὸς τὴν γωνίας μέχρι τῆς ἀσυμπτωτικῆς γωνίας $\theta(\rho)$ ἡ ὁποία εἶναι συνάρτηση τῆς παραμέτρου ἐπιδράσεως ρ. Τὰ μικροσκοπικὰ $X_{\ell s}$ καὶ $Z_{\ell s}$ εἶναι ἀνεξάρτητα τῆς μεταβλητῆς $\theta(t)$, ἄρα

$$c_\ell(t) = \pm\frac{Z_1e^2}{i\hbar\rho v}\left\{X_{\ell s}\int_{-\pi}^{\theta(\rho)} d\theta\, e^{i\omega_{\ell s}t'}\sin\theta(t') + Z_{\ell s}\int_{-\pi}^{\theta(\rho)} d\theta\, e^{i\omega_{\ell s}t'}\cos\theta(t')\right\} \quad (64)$$

Τὰ ὁλοκληρώματα τῆς ἐξ. (64) ἔχουν ἐπίσης ἐνδιαφέρον ἀφ' ἑαυτοῦ ἀφ' ἑνὸς ὅτι ὁ χρόνος $t' = t'(\theta)$ εἶναι πολύπλοκη συνάρτηση τῆς γωνίας θ καὶ ἡ ὁλοκλήρωση ὡς πρὸς θ μπορεῖ νὰ ἐπιτελεσθῆ μόνον ἐὰν ἡ τροχιὰ τοῦ βλήματος εἶναι γνωστή. Ἡ τελευταία ἐξαρτᾶται ἀπὸ τὴν "ἰδιοσυγκρασία" τοῦ συστήματος βλήματος-στόχου. Ἐπὶ παραδείγματι στὴν περίπτωση ποὺ ὁ στόχος εἶναι πυρηνικὸς ἡ τροχιὰ εἶναι ἀπηχάστερη ἀπὸ τὴν περίπτωση ποὺ ὁ στόχος εἶναι ἄτομο. Ἡ ἐξίσωση (64) εἶναι καὶ ἡ τελικὴ ἐξίσωση ὡς πρὸς τὸ $c_\ell(t)$ ἐὰν ἡ τροχιὰ εἶναι γνωστὴ ἢ ἐὰν δὲν ἐπικαλεσθοῦμε κάποια προσέγγιση. Θὰ κάνουμε τὸ δεύτερο

Εἶναι

$$e^{i\omega_{\ell s}t} = 1 + i\omega_{\ell s}t + \frac{(i\omega_{\ell s}t)^2}{2!} + \dots$$

Ὑπενθυμίζουμε ὅτι $\omega_{\ell s} = \frac{E_\ell^{(\omega)} - E_s^{(0)}}{\hbar}$. Ἐὰν τώρα ὁ δραστικὸς χρόνος ἀλληλεπιδράσεως τοῦ βλήματος μὲ τὸν στόχο εἶναι μικρὸς ἐν σχέσει μὲ τὸν χρόνο (περίοδο) $\omega_{\ell s}^{-1}$, δηλ. ἐὰν $\omega_{\ell s}t \simeq 0$, τότε μποροῦμε νὰ γράψουμε ὅτι

$e^{i\omega_{\ell s}t} \simeq 1$, ὅπότε ἡ (64) γράφεται

$$c_\ell(t) = \pm \frac{Z_1 e^2}{i\hbar\rho v}\left\{ X_{\ell s}\int_{-\pi}^{\theta(\rho)} d\theta \sin\theta + Z_{\ell s}\int_{-\pi}^{\theta(\rho)} d\theta \cos\theta \right\}$$

$$= \pm \frac{Z_1 e^2}{i\hbar\rho v}\left\{ X_{\ell s}\left[-\cos\theta\right]_{-\pi}^{\theta(\rho)} + Z_{\ell s}\left[\sin\theta\right]_{-\pi}^{\theta(\rho)} \right\}$$

ἢ

$$c_\ell(t) = \mp \frac{Z_1 e^2}{i\hbar\rho v}\left\{ X_{\ell s}\left(\cos\theta(\rho) + 1\right) - Z_{\ell s}\sin\theta(\rho) \right\} \qquad (65)$$

Στὴν περίπτωση μικρῶν γωνιῶν ἐκτροπῆς $\theta(\rho) \simeq 0$ ἡ (65) γράφεται

$$c_\ell(t) = \mp \frac{Z_1 e^2}{i\hbar\rho v} \cdot 2 \cdot X_{\ell s}$$

ἢ

$$c_\ell(t) = \pm \frac{2i Z_1 e^2}{\hbar v \rho} X_{\ell s} \qquad (66)$$

Ὁρίζουμε τώρα τὴν "μέση ἀπώλεια ἐνεργείας" T ἀπὸ σύγκρουση

$$T = \sum_\ell (E_\ell^{(\omega)} - E_s^{(0)})|c_\ell|^2 = \frac{4Z_1^2 e^4}{\rho^2 v^2 \hbar^2}\sum_\ell |X_{\ell s}|^2 (E_\ell^{(\omega)} - E_s^{(\omega)}) \qquad (67)$$

ὅπου ἀθροίζουμε ὡς πρὸς ὅλες τὶς διηγερμένες καταστάσεις τοῦ ἀδιαταράκτου συστήματος. Στὴν σχέση (67) ἐφαρμοσμένη ἡ (66)

$$T = \left(\frac{2Z_1 e^2}{\rho v \hbar}\right)^2 S_s \quad \text{ὅπου } S_s = \sum_\ell |X_{\ell s}|^2 (E_\ell^{(\omega)} - E_s^{(\omega)}) \qquad (68)$$

Η εξίσωση (68) μπορεί ν' απαλοιφθεί αν εκφραστεί. Θεωρούμε τον μεταθέτη

$$\frac{1}{2}[[\hat{x},\hat{\mathcal{H}}_0],\hat{x}] = \frac{1}{2}\left\{[(\hat{x}\hat{\mathcal{H}}_0-\hat{\mathcal{H}}_0\hat{x}),\hat{x}]\right\}$$

$$=\frac{1}{2}\left\{[\hat{x}\hat{\mathcal{H}}_0,\hat{x}]-[\hat{\mathcal{H}}_0\hat{x},\hat{x}]\right\}=\frac{1}{2}\left\{[\hat{x},\cancelto{0}{\hat{x}}]\hat{\mathcal{H}}_0+\hat{x}[\hat{\mathcal{H}}_0,\hat{x}]-\right.$$

$$\left.-\hat{\mathcal{H}}_0[\hat{x},\cancelto{0}{\hat{x}}]-[\hat{\mathcal{H}}_0,\hat{x}]\hat{x}\right\}=\frac{1}{2}\left(\hat{x}\hat{\mathcal{H}}_0\hat{x}-\hat{x}^2\hat{\mathcal{H}}_0-\hat{\mathcal{H}}_0\hat{x}^2+\hat{x}\hat{\mathcal{H}}_0\hat{x}\right)$$

$$=\hat{x}\hat{\mathcal{H}}_0\hat{x}-\frac{1}{2}x^2\hat{\mathcal{H}}_0-\frac{1}{2}\hat{\mathcal{H}}_0x^2 \qquad (69)$$

Τώρα πραγματικά ισχύουν μέ τον προϋπόθεση ότι ο τελεστής $\hat{\mathcal{H}}_0$ είναι της μορφής $P_x^2/2m+V(x)$. Η εκφρασμένη εμπρός της εξίσωσης (69) με πρόβλεψη την ονομάσουμε $\Phi_s^{(0)}$ τα ανηγμένο κ διαστατικό ανοιχτό είναι

$$\frac{1}{2}\langle\Phi_s^{(0)}|[[\hat{x},\hat{\mathcal{H}}_0],\hat{x}]|\Phi_s^{(0)}\rangle=\langle\Phi_s^{(0)}|\hat{x}\hat{\mathcal{H}}_0x|\Phi_s^{(0)}\rangle-$$

$$-\frac{1}{2}\langle\Phi_s^{(0)}|x^2\hat{\mathcal{H}}_0|\Phi_s^{(0)}\rangle-\frac{1}{2}\langle\Phi_s^{(0)}|\hat{\mathcal{H}}_0x^2|\Phi_s^{(0)}\rangle$$

$$=\langle\Phi_s^{(0)}|\hat{x}\hat{\mathcal{H}}_0\hat{x}|\Phi_s^{(0)}\rangle-E_s^{(0)}\langle\Phi_s^{(0)}|x^2|\Phi_s^{(0)}\rangle$$

$$=\sum_\ell\langle\Phi_s^{(0)}|x|\Phi_\ell^{(0)}\rangle\langle\Phi_\ell^{(0)}|\hat{\mathcal{H}}_0\hat{x}|\Phi_s^{(0)}\rangle-$$

$$-E_s^{(0)}\sum_\ell\langle\Phi_s^{(0)}|\hat{x}|\Phi_\ell^{(0)}\rangle\langle\Phi_\ell^{(0)}|\hat{x}|\Phi_s^{(0)}\rangle$$

$$=\sum_\ell\left\{\langle\Phi_s^{(0)}|\hat{x}|\Phi_\ell^{(0)}\rangle E_\ell^{(0)}\langle\Phi_\ell^{(0)}|\hat{x}|\Phi_s^{(0)}\rangle-E_s^{(0)}\langle\Phi_s^{(0)}|\hat{x}|\Phi_\ell^{(0)}\rangle\langle\Phi_\ell^{(0)}|\hat{x}|\Phi_s^{(0)}\rangle\right.$$

$$=\sum_\ell(E_\ell^{(0)}-E_s^{(0)})|X_{s\ell}|^2 \qquad (70)$$

Σύγκριση των (68) και (70) παρέχει

$$\varrho_s=\frac{1}{2}\langle\Phi_s^{(0)}|[[\hat{x},\hat{\mathcal{H}}_0],\hat{x}]|\Phi_s^{(0)}\rangle \qquad (71)$$

Είναι και $[\hat{x},\hat{\mathcal{H}}_0]=[\hat{x},\frac{\hat{P}^2}{2m}]=\frac{1}{2m}[x,\hat{P}_x]\hat{P}_x+\frac{1}{2m}\hat{P}_x[\hat{x},\hat{P}_x]$

$$\hat{H}\,[\hat{x}, \hat{\mathcal{H}}_0] = \tfrac{1}{2m}(i\hbar\hat{P}_x + \hat{P}_x i\hbar) = \frac{i\hbar}{m}\hat{P}_x \quad \text{καί}$$

$$\tfrac{1}{2}[[\hat{x}, \hat{\mathcal{H}}_0], \hat{x}] = \tfrac{1}{2}\left[\frac{i\hbar}{m}\hat{P}_x, \hat{x}\right] = \tfrac{1}{2}(-i\hbar)\frac{i\hbar}{m} = \frac{\hbar^2}{2m}\hat{1}$$

ἤ

$$\frac{2m}{\hbar^2}\,\delta_{s} = 1 \quad \text{ἤ}$$

$$\frac{2m}{\hbar^2}\sum_{\ell}|x_{\ell s}|^2\left(E_\ell^{(0)} - E_s^{(0)}\right) = 1 \qquad (72)$$

Ἐάν τώρα ὁ τελεστὴς θέσεως $\hat{x}$ ἀντικατασταθῇ στὴν ἀρχικὴ ταυτότητα (βλ. (69)) μὲ τὸν x-συνιστῶσα τῆς ὀλικῆς διπολικῆς ροπῆς $\hat{x}_1 + \hat{x}_2 + \dots + \hat{x}_Z$ γιὰ Z ἠλεκτρόνια (Z_2 στὴν προκειμένη περίπτωση) ἡ (72) γράφεται

$$\frac{2m}{\hbar^2}\sum_{\ell}|x_{\ell s}|^2\left(E_\ell^{(0)} - E_s^{(0)}\right) = Z \qquad (73)$$

Οἱ ποσότητες $\frac{2m}{\hbar^2}|x_{\ell s}|^2\left(E_\ell^{(0)} - E_s^{(0)}\right) \equiv f_{\ell s}$ (74)

καλοῦνται «δυνάμεις ταλαντωτοῦ» (oscillator strength). Συνδυασμὸς τῶν (73) καὶ (74) δίνει

$$\sum_{\ell} f_{\ell s} = Z \qquad (75)$$

Ἡ (75) ὀνομάζεται καὶ προσθετικὸς κανὼν τῶν Thomas-Reiche-Kuhn. Συνδυασμὸς τῶν (73) καὶ (67) δίνει

$$T = \frac{4Z_1^2 e^4}{\rho^2\omega^2\hbar^2}\cdot\frac{\hbar^2 Z_2}{2m} = \frac{2Z_1^2 Z_2 e^4}{m\omega^2\rho^2} \qquad (76)$$

Ἡ (76) εἶναι καὶ τὸ ταχὺ ἀποτέλεσμα τῆς μέσης ἀρμονικῆς ἐνεργείας τῶν ἐπιφανειακῶν «ταλαντῶν» σφαιρικοῦ φορτίου $Z_1 e$ ὅταν συμπροσέτεται μὲ ἄτομο Z_2 ἠλεκτρονίων καὶ ἔχουν ἀκτίνα μικρῶν γωνιῶν. Ἀπὸ τὸν (76) παρατηροῦμε ὅτι ἡ T εἶναι ἀνεξάρτητη ἀνάλογη τῆς κινητικῆς ἐνεργείας τοῦ φωτονίου $E_\gamma = \frac{1}{2}m\omega^2$, κάτι τὸ ὁποῖο ἀναμένεται.