Eksamen i Anvendt kvantemekanikk, fag SIF 4047
Lørdag 12. mai 2001
Løsninger

1) (Dette er et adskillig mer utførlig svar på oppgaven enn det som forlanges til eksamen.) Felles for alle fire metodene er at forventningsverdien av den ytre potensielle energien avhenger bare av elektrontettheten $n(\vec{r})$, slik:

$$\langle V \rangle = \int \mathrm{d}^3\vec{r}\; n(\vec{r})\, V(\vec{r}) \; .$$

Forskjellen ligger i at forventningsverdiene av T, den totale kinetiske energien, og W, den totale vekselvirkningsenergien, behandles forskjellig.

a) Thomas–Fermi-metoden var først, den kan utledes ved at en tar $\langle T \rangle$ til å være gitt entydig av elektrontettheten $n(\vec{r})$. Den presise sammenhengen som postuleres, er at

$$\langle T \rangle = \int \mathrm{d}^3\vec{r}\; \frac{3h^2}{40m_\mathrm{e}} \left(\frac{3}{\pi}\right)^{\frac{2}{3}} n(\vec{r})^{\frac{5}{3}} \; .$$

Det viktige med denne formelen, for eksamensvarets skyld, er at den er eksakt i det tilfellet at elektrontettheten er konstant (innenfor et endelig volum, for ellers divergerer integralet). De som husker eller kan utlede potensen 5/3 av elektrontettheten, kan fortjene et lite pluss. Den samme typen approksimasjon i Kohn–Sham-ligningene kalles lokaltetthets-approksimasjonen.
I Thomas–Fermi-metoden tas $\langle W \rangle$ til å være den klassiske vekselvirkningsenergien for en kontinuerlig ladningsfordeling som vekselvirker med seg selv:

$$\langle W \rangle = \frac{1}{2} \int \mathrm{d}^3\vec{r} \int \mathrm{d}^3\vec{r}\,'\; \frac{e^2\, n(\vec{r})\, n(\vec{r}\,')}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r} - \vec{r}\,'|} \; .$$

Ladningstettheten tas til å være $-en(\vec{r})$, og faktoren $1/2$ foran integralet kompenserer for dobbelttelling.
I Thomas–Fermi-metoden gjør vi altså spesielle tilnærminger for forventningsverdiene $\langle T \rangle$, $\langle V \rangle$ og $\langle W \rangle$, slik at de er gitt eksplisitt som funksjonaler av $n(\vec{r})$. Grunntilstandsenergien finner vi etterpå ved å minimalisere $\langle T + V + W \rangle$ med hensyn på $n(\vec{r})$, samtidig som vi passer på å oppfylle normeringsbetingelsen, som sier at antallet elektroner er N,

$$\int \mathrm{d}^3\vec{r}\; n(\vec{r}) = N \; .$$

b) I Hartree-metoden finner vi eksakte uttrykk for $\langle T \rangle$ og $\langle W \rangle$ (og selvfølgelig for $\langle V \rangle$) under den forutsetningen (som beviselig er gal) at N-elektronbølgefunksjonen er et produkt, av formen

$$\Psi(\vec{r}_1,\sigma_1;\vec{r}_2,\sigma_2;\ldots;\vec{r}_N,\sigma_N) = \psi_1(\vec{r}_1,\sigma_1)\,\psi_2(\vec{r}_2,\sigma_2)\,\cdots\,\psi_N(\vec{r}_N,\sigma_N) \; .$$

Her er $\sigma_1,\sigma_2,\ldots,\sigma_N$ spinnvariable. Deretter kan vi minimalisere med hensyn på enpartikkelbølgefunksjonene $\psi_i(\vec{r},\sigma)$. Det gir N Schrödingerligninger for de N funksjonene

ψ_i, med et potensial som er det ytre potensialet $V(\vec{r})$ pluss Coulomb-potensialet fra *de andre* elektronene,

$$V_{\text{Hartree}}(\vec{r}) = V(\vec{r}) + \sum_{k\neq i} \int \mathrm{d}^3\vec{r}\,' \; \frac{e^2\,|\psi_k(\vec{r}\,')|^2}{4\pi\epsilon_0|\vec{r}-\vec{r}\,'|} \;.$$

c) Hartree–Fock-metoden er en forbedring (men ikke forenkling!) av Hartree-metoden, der en bruker en Slater-determinant i stedet for en produktbølgefunksjon. Det gir en mer komplisert kopling mellom de N enpartikkel-Schrödingerligningene.

d) Kohn–Sham-metoden skal i prinsippet kunne være eksakt, men der også må en (selvfølgelig) gjøre tilnærminger til slutt. Prinsippet er å finne minimum av $\langle T+V+W\rangle$ i to steg. Først minimaliserer en $\langle T+W\rangle$ med den føringen at elektrontettheten $n(\vec{r})$ er konstant, det gir minimumsverdien G som en funksjonal $G[n]$. Etterpå minimaliserer en $\langle T+V+W\rangle$ over alle mulige elektrontettheter $n(\vec{r})$.
I praksis blir metoden ikke eksakt, fordi en ikke er i stand til å finne eksakte uttrykk for $G[n]$.

2a) Vi har at $[p_y,H]=0$ og $[p_z,H]=0$, fordi H ikke avhenger av hverken y eller z.
H har derimot en x-avhengighet, slik at $[p_x,H]\neq 0$.

2b) Med den oppgitte elektronbølgefunksjonen Ψ har vi at $p_y\Psi=\hbar k_y\Psi$ og $p_z\Psi=\hbar k_z\Psi$. Når vi setter inn ansatsen $\Psi=\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k_y y+k_z z)}\,\chi(x)$ i egenverdiligningen $H\Psi=E\Psi$, kan vi forkorte bort faktoren $\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k_y y+k_z z)}$, så vi får ligningen

$$\left(-\mathrm{i}\hbar c\alpha_1\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}+(\hbar ck_y+ceBx)\alpha_2+\hbar ck_z\alpha_3+mc^2\beta\right)\chi(x)=E\chi(x)\;.$$

Når vi setter inn eksplisitt for 4×4-matrisene $\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3$ og β, skal vi få den oppgitte ligningen.

2c) Vi har at

$$\begin{aligned}[b,b^\dagger] &= \left[\frac{1}{2}\,\kappa x+\frac{1}{\kappa}\left(k_y+\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)\,,\,\frac{1}{2}\,\kappa x+\frac{1}{\kappa}\left(k_y-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)\right]\\ &= \left[\frac{1}{2}\,\kappa x\,,\,-\frac{1}{\kappa}\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right]+\left[\frac{1}{\kappa}\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\,,\,\frac{1}{2}\,\kappa x\right]=-\frac{1}{2}\left[x\,,\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right]+\frac{1}{2}\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\,,\,x\right]=1\;.\end{aligned}$$

Ligningen $b\,\phi_n(x)=\sqrt{n}\,\phi_{n-1}(x)$ beviser vi ved induksjon. Vi observerer at den er trivielt oppfylt for $n=0$. Anta så at den holder for $n=k-1$, dvs. at

$$b\,\phi_{k-1}(x)=\sqrt{k-1}\,\phi_{k-2}(x)\;.$$

Da holder den for $n=k$, fordi

$$\begin{aligned}b\,\phi_k(x) &= \frac{1}{\sqrt{k}}\,bb^\dagger\,\phi_{k-1}(x)=\frac{1}{\sqrt{k}}\,([b,b^\dagger]+b^\dagger b)\,\phi_{k-1}(x)=\frac{1}{\sqrt{k}}\,(1+b^\dagger b)\,\phi_{k-1}(x)\\ &= \frac{1}{\sqrt{k}}\,(\phi_{k-1}(x)+b^\dagger(\sqrt{k-1}\,\phi_{k-2}(x)))\\ &= \frac{1}{\sqrt{k}}\,(\phi_{k-1}(x)+(k-1)\phi_{k-1}(x)))=\sqrt{k}\,\phi_{k-1}(x)\;.\end{aligned}$$

Når vi bruker at $b\,\phi_k(x) = \sqrt{k}\,\phi_{k-1}(x)$ og $b^\dagger\phi_{k-1}(x) = \sqrt{k}\,\phi_k(x)$, samt at egenverdiligningen $H\Psi = E\Psi$ kan omskrives slik:

$$\begin{pmatrix} mc^2 & 0 & \hbar ck_z & -\mathrm{i}\hbar c\kappa b \\ 0 & mc^2 & \mathrm{i}\hbar c\kappa b^\dagger & -\hbar ck_z \\ \hbar ck_z & -\mathrm{i}\hbar c\kappa b & -mc^2 & 0 \\ \mathrm{i}\hbar c\kappa b^\dagger & -\hbar ck_z & 0 & -mc^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi_1(x) \\ \chi_2(x) \\ \chi_3(x) \\ \chi_4(x) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \chi_1(x) \\ \chi_2(x) \\ \chi_3(x) \\ \chi_4(x) \end{pmatrix},$$

så kan vi bare sette inn

$$\begin{pmatrix} \chi_1(x) \\ \chi_2(x) \\ \chi_3(x) \\ \chi_4(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \eta_1\phi_{n-1}(x) \\ \eta_2\phi_n(x) \\ \eta_3\phi_{n-1}(x) \\ \eta_4\phi_n(x) \end{pmatrix}$$

for $n \geq 0$, med $\phi_{-1}(x) = 0$, og få ligningen $A\eta = E\eta$ der

$$A = \begin{pmatrix} mc^2 & 0 & \hbar ck_z & -\mathrm{i}\hbar c\kappa\sqrt{n} \\ 0 & mc^2 & \mathrm{i}\hbar c\kappa\sqrt{n} & -\hbar ck_z \\ \hbar ck_z & -\mathrm{i}\hbar c\kappa\sqrt{n} & -mc^2 & 0 \\ \mathrm{i}\hbar c\kappa\sqrt{n} & -\hbar ck_z & 0 & -mc^2 \end{pmatrix}.$$

2d) Hvis $A\eta = E\eta$, så er $A^2\eta = A(A\eta) = A(E\eta) = EA\eta = E^2\eta$. Siden

$$A^2 = (m^2c^4 + \hbar^2c^2(k_z^2 + n\kappa^2)) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

så følger det at

$$E = \pm\sqrt{m^2c^4 + \hbar^2c^2(k_z^2 + n\kappa^2)} = \pm\sqrt{m^2c^4 + \hbar^2c^2k_z^2 + 2n\hbar c^2eB}\,.$$

Enhver 4×4-matrise har 4 egenverdier. Hver av de 4 egenverdiene til matrisen A kan være $\pm\sqrt{m^2c^4 + \hbar^2c^2k_z^2 + 2n\hbar c^2eB}$, det står derfor igjen bare å finne ut hvor mange egenverdier som er positive og negative. Svaret er at A har like mange positive og negative egenverdier, det beviser vi f.eks. ved å regne ut at $\mathrm{Tr}\,A = 0$. Trasen til en matrise er summen av diagonalelementene, men er også lik summen av egenverdiene (hvorfor?). Nå kan vi finne den etterspurte degenerasjonen til energinivåene for det relativistiske elektronet i et konstant magnetfelt. De kanoniske impulsoperatorene $p_y = -\mathrm{i}\hbar(\partial/\partial y)$ og $p_z = -\mathrm{i}\hbar(\partial/\partial z)$ har egenverdier lik henholdsvis $\hbar k_y$ og $\hbar k_z$, der bølgetallene k_y og k_z kan ta vilkårlige reelle verdier. For enhver gitt verdi av k_y og av k_z, og for enhver $n = 1, 2, 3, \ldots$, finnes det to positive og to negative energiegenverdier

$$E = \pm\sqrt{m^2c^4 + \hbar^2c^2k_z^2 + 2n\hbar c^2eB}\,.$$

Unntaket er $n = 0$, da må $\eta_1 = \eta_3 = 0$, og det betyr at det da finnes bare en positiv og en negativ energiegenverdi. (Hva blir egenspinoren η for hver egenverdi når $n = 0$?) Siden energiegenverdiene er uavhengige av k_y, er hvert energinivå uendelig degenerert.

2e) Vi tar nå for oss de positive energiegenverdiene. I den ikke-relativistiske grensen gir hvilemassen det dominerende bidraget til energien, slik at vi kan rekkeutvikle:

$$\begin{aligned} E &= mc^2\sqrt{1+\frac{\hbar^2k_z^{\,2}+2n\hbar eB}{m^2c^2}} = mc^2\left(1+\frac{\hbar^2k_z^{\,2}+2n\hbar eB}{2m^2c^2}+\cdots\right) \\ &= mc^2+\frac{\hbar^2k_z^{\,2}}{2m}+\frac{n\hbar eB}{m}+\cdots\ . \end{aligned}$$

Når vi trekker fra hvileenergien mc^2, stemmer ikke dette helt med det ikke-relativistiske resultatet

$$E=\left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{\hbar eB}{m}+\frac{\hbar^2k_z^{\,2}}{2m}\ , \qquad n=0,1,2,\ldots .$$

For å få de to resultatene til å stemme overens må vi korrigere det ikke-relativistiske resultatet med spinnbidraget $-\vec{\mu}\cdot\vec{B}$, der

$$\vec{\mu}=-g_S\,\frac{e}{2m}\,\vec{S}=-g_S\,\frac{e\hbar}{4m}\begin{pmatrix}\vec{\sigma} & 0\\ 0 & \vec{\sigma}\end{pmatrix}.$$

Tar vi f.eks. for oss grunntilstanden, med $k_z=0$ og $n=0$, så er $\eta_1=\eta_3=\eta_4=0$, og vi kan velge $\eta_2=1$, slik at

$$\begin{pmatrix}\chi_1(x)\\ \chi_2(x)\\ \chi_3(x)\\ \chi_4(x)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\ \phi_0(x)\\ 0\\ 0\end{pmatrix}.$$

I denne tilstanden har vi at

$$-\vec{\mu}\cdot\vec{B}=g_S\,\frac{e}{2m}\,S_zB=-g_S\,\frac{eB\hbar}{4m}\ .$$

Denne spinnkorreksjonen til den ikke-relativistiske energien uten spinn gir den korrekte energien med spinn når $g_S=2$.

2f) Den ikke-relativistiske teorien, med spinnbidraget $-\vec{\mu}\cdot\vec{B}$, er gyldig dersom for det første

$$\frac{\hbar^2k_z^{\,2}}{2m}\ll mc^2\ ,$$

og for det andre

$$\frac{n\hbar eB}{m}\ll mc^2\ .$$

Siden k_z kan varieres kontinuerlig, kan vi alltid velge den liten nok til at den første betingelsen er oppfylt.
Men kvantetallet n tar heltallige verdier, og derfor kan ikke den andre betingelsen oppfylles bare ved at vi velger n liten. Vi må forlange at

$$\frac{\hbar eB}{m}\ll mc^2\ .$$

Det vil si at

$$B \ll \frac{m^2c^2}{\hbar e} = \frac{(9,1 \times 10^{-31}\,\mathrm{kg}\;3,0 \times 10^{8}\,\mathrm{m/s})^2}{1,1 \times 10^{-34}\,\mathrm{J\,s}\;1,6 \times 10^{-19}\,\mathrm{C}} = 4,2 \times 10^{9}\ \mathrm{T}\ .$$

I en MR-maskin med $B = 1\,\mathrm{T}$ kan vi altså trygt behandle et elektron som ikke-relativistisk.
På overflaten av en nøytronstjerne, med $B = 10^8$ T, nærmer vi oss grensen der splittingen mellom Landau-nivåene blir like stor som hvileenergien til elektronet.

3a) Siden energien er bevart, trengs det minst ett foton som kan bære vekk den energien som elektronet gir fra seg når det fanges inn.
Sannsynligheten for ett foton er større enn sannsynligheten for to eller flere fotoner grovt sett fordi hvert nytt foton gir en ny faktor lik finstrukturkonstanten $\alpha = 1/137$ i tverrsnittet.
Prosesser med to eller flere fotoner er mulige i høere ordens perturbasjonsteori, eller i første ordens perturbasjonsteori når vi bruker $H_2 = e^2\vec{A}^2/(2m)$.

3b) Vi har, som oppgitt, at

$$V_{sb} = \langle \Psi_s|\, H_1\, |\Psi_b\rangle\ ,$$

med

$$H_1 = \frac{e}{m}\,\vec{A}(\vec{r}) \cdot \vec{p} = \sum_{\vec{k}'} \sum_{\lambda'=1}^{2} \frac{e}{m} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0 ck'\mathcal{V}}} \left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}'\cdot\vec{r}}\, a_{\vec{k}'\lambda'} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}'\cdot\vec{r}}\, a^{\dagger}_{\vec{k}'\lambda'} \right) (\vec{\epsilon}_{\vec{k}'\lambda'} \cdot \vec{p})\ .$$

Begynnelsestilstanden $|\Psi_b\rangle$ har ett elektron i en tilstand ψ_b og ingen fotoner, vi kan skrive f.eks.

$$|\Psi_b\rangle = |\psi_b, 0\rangle\ ,$$

der "0" betyr "null fotoner".
Slutt-tilstanden $|\Psi_s\rangle$ har ett elektron i en tilstand ψ_s og ett foton i moden $\vec{k}, \lambda$, vi kan skrive f.eks.

$$|\Psi_s\rangle = a^{\dagger}_{\vec{k}\lambda} |\psi_s, 0\rangle\ .$$

Det gir at

$$V_{sb} = \langle \psi_s, 0|\, a_{\vec{k}\lambda}\, H_1\, |\psi_b, 0\rangle\ .$$

Når vi summerer over $\vec{k}'$ og λ' i uttrykket for $a_{\vec{k}\lambda} H_1$, for å beregne matriseelementet V_{sb}, så får vi ingen bidrag fra ledd av formen $a_{\vec{k}\lambda} a_{\vec{k}'\lambda'}$, fordi

$$a_{\vec{k}'\lambda'}\, |\psi_b, 0\rangle = 0\ .$$

Dersom enten $\vec{k}' \neq \vec{k}$ eller $\lambda' \neq \lambda$, så gjelder at

$$a_{\vec{k}\lambda}\, a^{\dagger}_{\vec{k}'\lambda'}\, |\psi_b, 0\rangle = a^{\dagger}_{\vec{k}'\lambda'}\, a_{\vec{k}\lambda}\, |\psi_b, 0\rangle = 0\ .$$

Det eneste bidraget til V_{sb} får vi med $\vec{k}' = \vec{k}$ og $\lambda' = \lambda$, for da er

$$a_{\vec{k}\lambda}\, a^{\dagger}_{\vec{k}'\lambda'}\, |\psi_b, 0\rangle = (1 + a^{\dagger}_{\vec{k}'\lambda'}\, a_{\vec{k}\lambda})\, |\psi_b, 0\rangle = |\psi_b, 0\rangle\ .$$

Det gir at

$$V_{sb} = \frac{e}{m}\sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0 ck\mathcal{V}}}\int \mathrm{d}^3\vec{r}\;\psi_s(\vec{r})\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}\,(\vec{\epsilon}_{\vec{k}\lambda}\cdot\vec{p})\,\psi_b(\vec{r})\ .$$

Som skulle vises. Innsatt $\psi_b(\vec{r}) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}_b\cdot\vec{r}}/\sqrt{\mathcal{V}}$ gir det at

$$V_{sb} = \frac{e}{m}\sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0 ck\mathcal{V}}}\,\frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}}\,\hbar\vec{\epsilon}_{\vec{k}\lambda}\cdot\vec{k}_b\int \mathrm{d}^3\vec{r}\;\psi_s(\vec{r})\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\vec{k}-\vec{k}_b)\cdot\vec{r}}\ .$$

3c) Først beregner vi integralet som inngår i matriseelementet V_{sb}.
Impulsoverføringen fra det innkommende elektronet til det utgående fotonet er

$$\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}_b\ .$$

Integralet blir, med denne notasjonen, og med den oppgitte slutt-tilstanden for elektronet,

$$\mathcal{I} = \int \mathrm{d}^3\vec{r}\;\psi_s(\vec{r})\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{q}\cdot\vec{r}} = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}\int \mathrm{d}^3\vec{r}\;\mathrm{e}^{-r/a}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{q}\cdot\vec{r}}\ .$$

Hvis vi måler polarvinkler θ og φ ut fra $\vec{q}$, så blir

$$\begin{aligned}
\mathcal{I} &= \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}\int_0^\infty r^2\,\mathrm{d}r\;\mathrm{e}^{-r/a}\int_{-1}^{1}\mathrm{d}(\cos\theta)\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\;\mathrm{e}^{-\mathrm{i}qr\cos\theta}\\
&= \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}\int_0^\infty r^2\,\mathrm{d}r\;\mathrm{e}^{-r/a}\;\frac{2\pi}{-\mathrm{i}qr}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}qr\cos\theta}\Big|_{\cos\theta=-1}^{1}\\
&= \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}\,\frac{2\pi}{\mathrm{i}q}\int_0^\infty r\,\mathrm{d}r\;\mathrm{e}^{-r/a}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}qr}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}qr})\\
&= \frac{2}{\mathrm{i}q}\sqrt{\frac{\pi}{a^3}}\left(\frac{1}{\left(\frac{1}{a}-\mathrm{i}q\right)^2}-\frac{1}{\left(\frac{1}{a}+\mathrm{i}q\right)^2}\right)\\
&= \frac{2}{\mathrm{i}q}\sqrt{\pi a}\left(\frac{1}{(1-\mathrm{i}qa)^2}-\frac{1}{(1+\mathrm{i}qa)^2}\right)\\
&= \frac{2}{\mathrm{i}q}\sqrt{\pi a}\left(\frac{1}{1-q^2a^2-2\mathrm{i}qa}-\frac{1}{1-q^2a^2+2\mathrm{i}qa}\right)\\
&= \frac{2}{\mathrm{i}q}\sqrt{\pi a}\;\frac{4\mathrm{i}qa}{(1-q^2a^2)^2+4q^2a^2}\\
&= \frac{8\sqrt{\pi a^3}}{(1+q^2a^2)^2}\ .
\end{aligned}$$

Dernest beregner vi overgangssannsynligheten pr. tid,

$$\begin{aligned}
w_{b\to s} &= \frac{2\pi}{\hbar}\,|V_{sb}|^2\,\delta(E_s-E_b) = \frac{2\pi}{\hbar}\,\frac{e^2}{m^2}\,\frac{\hbar}{2\epsilon_0 ck\mathcal{V}^2}\,\hbar^2(\vec{\epsilon}_{\vec{k}\lambda}\cdot\vec{k}_b)^2\,\mathcal{I}^2\,\delta(E_s-E_b)\\
&= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c}\,\frac{4\pi^2\hbar^3}{m^2k\mathcal{V}^2}\,(\vec{\epsilon}_{\vec{k}\lambda}\cdot\vec{k}_b)^2\,\frac{64\pi a^3}{(1+q^2a^2)^4}\,\delta(E_s-E_b)\ .
\end{aligned}$$

Denne overgangssannsynligheten skal summeres over polarisasjonsretningene, når vi ikke måler polarisasjon, det gir at

$$\sum_{\lambda=1}^{2}(\vec{\epsilon}_{\vec{k}\lambda}\cdot\vec{k}_b)^2 = k_b^2(1-\cos^2\theta) = k_b^2\sin^2\theta\ ,$$

der θ nå er spredningsvinkelen, dvs. vinkelen mellom det innkommende elektronet og det utgående fotonet.
Den skal også summeres over fotonbølgetall, og for å beregne det differensielle tversnittet begrenser vi oss til fotonbølgetall innenfor et romvinkelelement $\mathrm{d}\Omega$. Vi får likevel et integral over $k = |\vec{k}|$, dvs. over fotonenergien $\hbar ck$. Beregningen går som følger:

$$\begin{aligned} W_{b\to s} &= \sum_{\vec{k},\lambda} w_{b\to s} = \sum_{\lambda} \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3}\,\mathrm{d}\Omega \int_0^\infty k^2\mathrm{d}k\; F\,\delta(\hbar ck + E_s^{\mathrm{el}} - E_b^{\mathrm{el}}) \\ &= \sum_{\lambda} \frac{\mathcal{V}k^2}{(2\pi)^3\hbar c}\,F\,\mathrm{d}\Omega\;. \end{aligned}$$

Her er E_s^{el} og E_b^{el} de uperturberte elektronenergiene, og vi setter
$w_{b\to s} = F\,\delta(\hbar ck + E_s^{\mathrm{el}} - E_b^{\mathrm{el}})$.
Deltafunksjonen $\delta(\hbar ck + E_s^{\mathrm{el}} - E_b^{\mathrm{el}})$ krever at energien er bevart, slik at fotonenergien fastlegges til å være $\hbar ck = E_b^{\mathrm{el}} - E_s^{\mathrm{el}}$.
For å få tverrsnittet $\mathrm{d}\sigma$ må vi dividere med den innkommende fluksen av elektroner, $j = |\vec{j}|$, der

$$\vec{j} = \mathrm{Re}\left(\psi_b^*\frac{\hbar}{\mathrm{i}m}\,(\nabla\psi_b)\right) = \frac{\hbar\vec{k}_b}{m\mathcal{V}}\;.$$

Alt i alt gir det

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{m\mathcal{V}}{\hbar k_b}\,\frac{\mathcal{V}k^2}{8\pi^3\hbar c}\,\frac{256\pi^3\alpha\hbar^3a^3}{m^2k\mathcal{V}^2(1+q^2a^2)^4}\,{k_b}^2\sin^2\!\theta = \frac{32\alpha\hbar k_b k a^3\sin^2\!\theta}{mc(1+q^2a^2)^4}\;.$$

For å kunne anta at den planbølgetilstanden ψ_b som vi starter med, er (i hvert fall tilnærmet) en egentilstand for H_0, må vi forutsette at den har en energi E_b^{el} som er mye større enn bindingsenergien i grunntilstanden, altså at

$$E_b^{\mathrm{el}} = \frac{\hbar^2{k_b}^2}{2m} \gg -E_s^{\mathrm{el}} = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\;.$$

Det betyr at vi må forutsette at

$$k_b \gg \frac{1}{a} = \frac{Z}{a_0}\;.$$

Samtidig må vi forutsette at

$$E_b^{\mathrm{el}} = \frac{\hbar^2{k_b}^2}{2m} \ll mc^2\;,$$

eller

$$k_b \ll \frac{\sqrt{2}mc}{\hbar} = \frac{194}{\alpha a_0}\;,$$

for at vi skal kunne regne ikke-relativistisk. Regningen vår er altså gyldig bare i et forholdsvis begrenset energiområde for elektronet. I dette energiområdet er

$$q^2 = k^2 + {k_b}^2 - 2kk_b\cos\theta = (k^2 + {k_b}^2)\left(1 - \frac{2kk_b}{k^2+{k_b}^2}\,\cos\theta\right) \gg \frac{1}{a^2}\;,$$

unntatt for ganske små verdier av spredningsvinkele θ. Over en ganske stor del av vinkelområdet gjelder derfor at $1 + q^2a^2 \approx q^2a^2$. Med denne tilnærmingen er

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} \approx \frac{32\alpha\hbar k_b k \sin^2\theta}{mcq^8a^5} = \frac{32\alpha Z^5 \hbar k_b k \sin^2\theta}{mca_0^5(k^2 + k_b^2)^4 \left(1 - \dfrac{2kk_b}{k^2 + k_b^2} \cos\theta\right)^4} .$$

Bortsett fra framoverretningen, $\theta = 0$, der $\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega$ godt kan bli stort til tross for faktoren $\sin^2\theta$, så er tverrsnittet maksimalt for en spredningsvinkel litt mindre enn 90°. Det skyldes at fotonet er transverst polarisert, og derfor ikke kan sendes ut rett framover, for eksempel (faktoren $\vec{\epsilon} \cdot \vec{k}_b$ i matriseelementet V_{sb} er lik null hvis fotonimpulsen $\vec{k}$ har samme retning som elektronimpulsen $\vec{k}_b$).
Tverrsnittet er proporsjonalt med Z^5: jo sterkere Coulomb-felt, jo lettere blir elektronet fanget inn. Og den konklusjonen virker svært så rimelig.