

# 高等量子力学 (第六章)

## 散射理论初步

孙昌璞

中物院研究生院/北京计算科学研究中心

Beijing Computational Science Research Center (CSRC)



# 第6章：散射理论初步

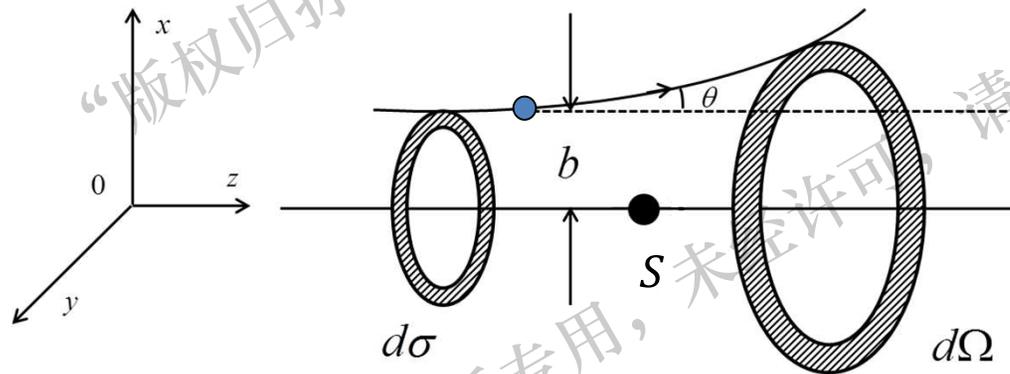
---

- 6.1 散射问题的一般讨论
- 6.2 一维散射的平面波处理
- 6.3 离散系统的单粒子散射
- 6.4 一维散射的波包处理
- 6.5 形式散射理论：入态与出态
- 6.6 Lippman-Schwinger 方程与玻恩近似
- 6.7 分波法与低能散射

“寇享学术传播”用，未经许可，请勿转载！

# 6.1 散射问题的一般讨论

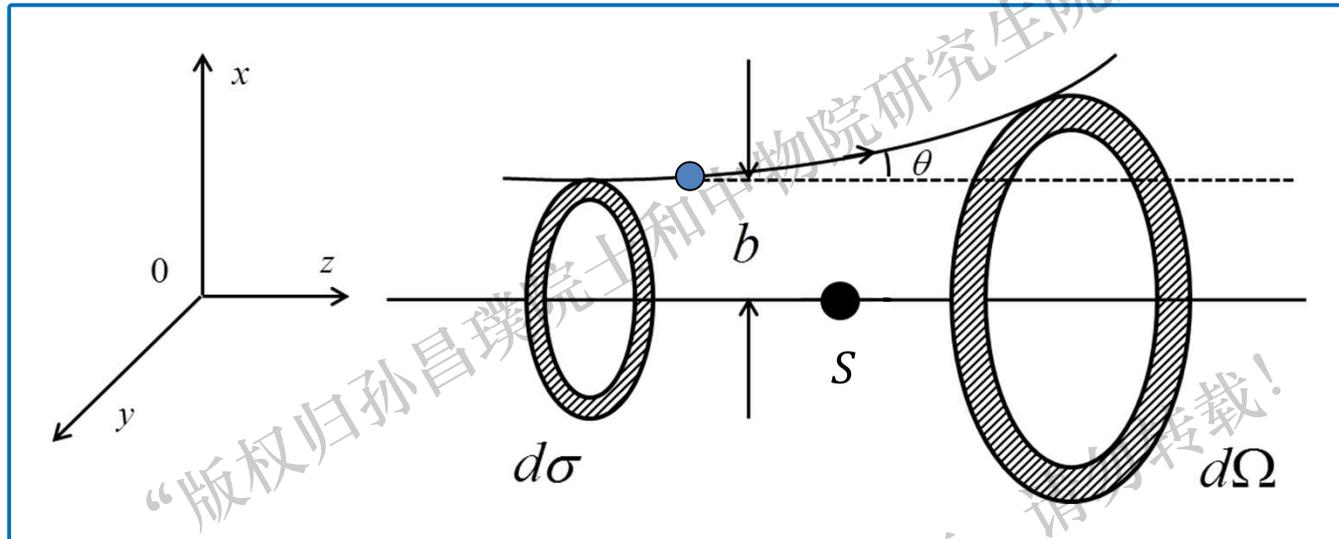
相对运动坐标系 —— 靶的坐标固定  $\vec{r}_s = 0$   
固定中心势 ——  $V = V(\vec{r})$   
弹性碰撞 —— 散射前后粒子能量  $E$  不变



入射粒子初始方向： $z$ -轴

入射粒子与靶在垂直 $z$ 方向距离： $b$

## 6.1 散射问题的一般讨论



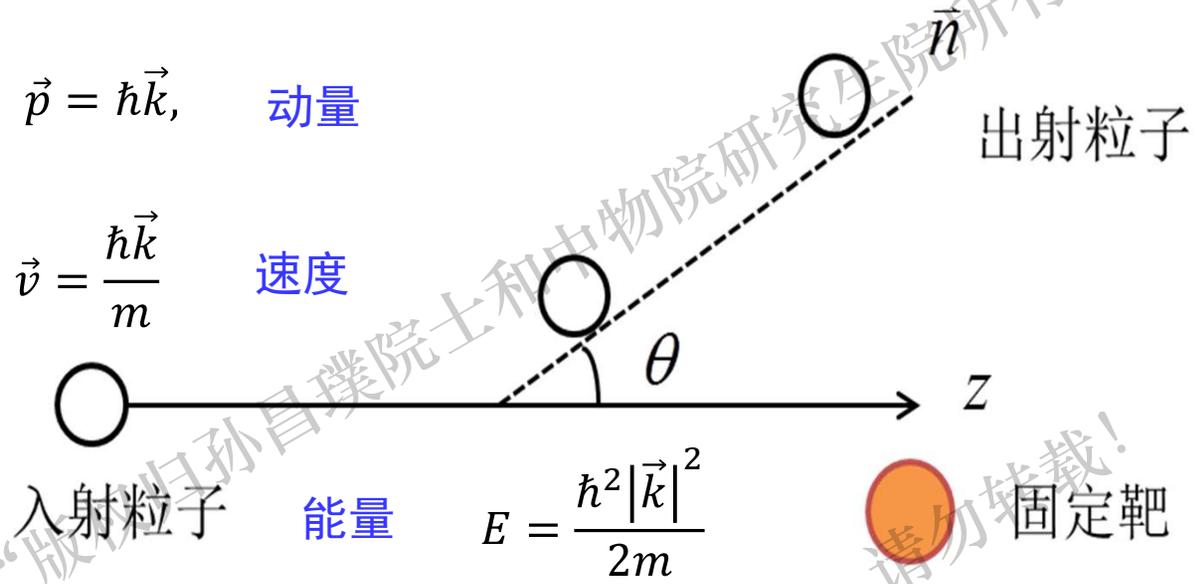
散射后 ( $t \rightarrow \infty$ ) 运动方向与  $z$  轴夹角 (方向改变)

$$\theta = \theta(b, E)$$

粒子散射到  $\theta$  到  $\theta + d\theta$  的几率正比于散射截面

$$d\sigma = 2\pi b(\theta)db$$

# 6.1 散射问题的一般讨论



入射态  $\psi_i$  为平面波:

$$\psi_i = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

出射态  $\psi_f$  在远处为球面波:

$$\psi_f(r \rightarrow \infty) = \psi_i + \psi_s = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left( e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \right)$$

# 6.1 散射问题的一般讨论

波包 $\psi$ 描述的粒子流

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi)$$

满足几率流守恒方程

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla \cdot \vec{j} = 0$$

$$\rho = |\psi|^2$$

速度为 $v$ 的粒子对应的入射流

$$\vec{j}_i = \frac{i\hbar}{2m} (\psi_i \nabla \psi_i^* - \psi_i^* \nabla \psi_i) = \vec{v} = |\vec{v}| \hat{e}_z$$

## 6.1 散射问题的一般讨论

$$\vec{j}_i = \frac{i\hbar}{2m} (\psi_i \nabla \psi_i^* - \psi_i^* \nabla \psi_i) = \vec{v} = |\vec{v}| \hat{e}_z$$

散射粒子对应的流

$$\vec{j}_s = \frac{i\hbar}{2m} (\psi_s \nabla \psi_s^* - \psi_s^* \nabla \psi_s) = \frac{|f(\theta)|^2}{r} |\vec{v}| \hat{n}$$

$\hat{e}_z$  和  $\hat{n}$  分别为入射和出射方向对应的单位矢量。

散射振幅  $|f(\theta)|^2$  描述了  $\hat{n}$  方向上单位立体角单位时间内通过的粒子数

## 6.1 散射问题的一般讨论

讨论

计算出射态对应的流，应该使用整体波函数

$$\psi_f(r \rightarrow \infty) = \psi_i + \psi_s$$

存不存在 $\psi_i$ 和 $\psi_s$ 交叉项的干涉效应。

解释

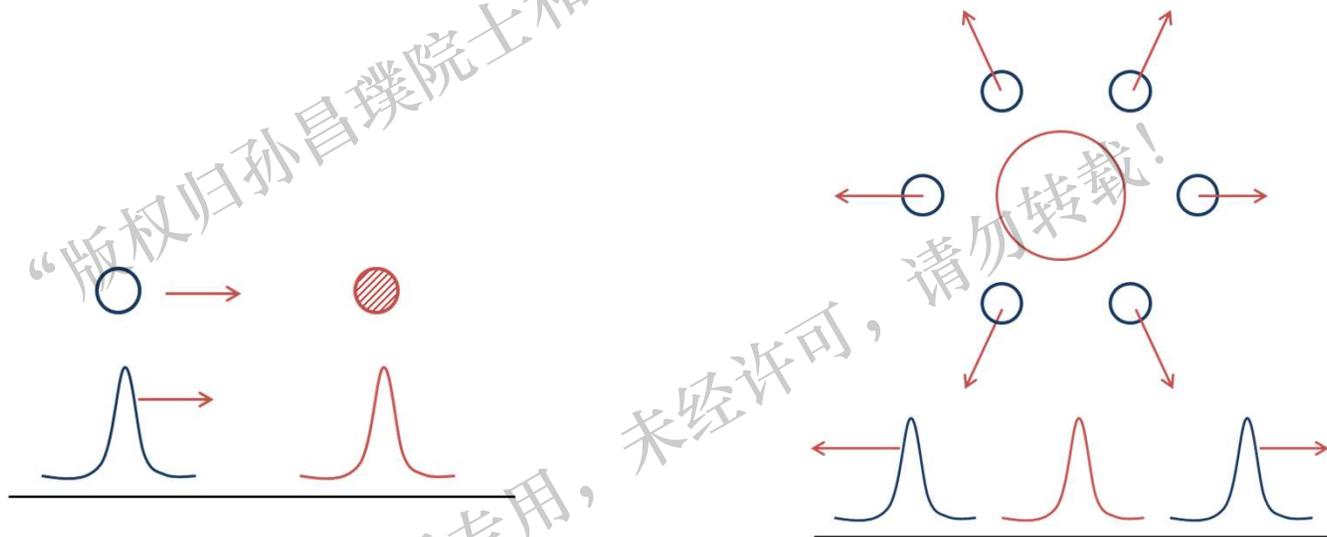
在行进方向上，粒子波函数是一个横向波包；  
在 $r$ 很大时，入射波包与出射波包不交叠。

用波包的图像描述散射更合适！

## 6.1 散射问题的一般讨论

散射直  
观图像：

一个向散射中心运动的波包在中心场中运动，考察其在远离散射中心时的行为。



用波包的图像描述一维散射问题

## 6.1 散射问题的一般讨论

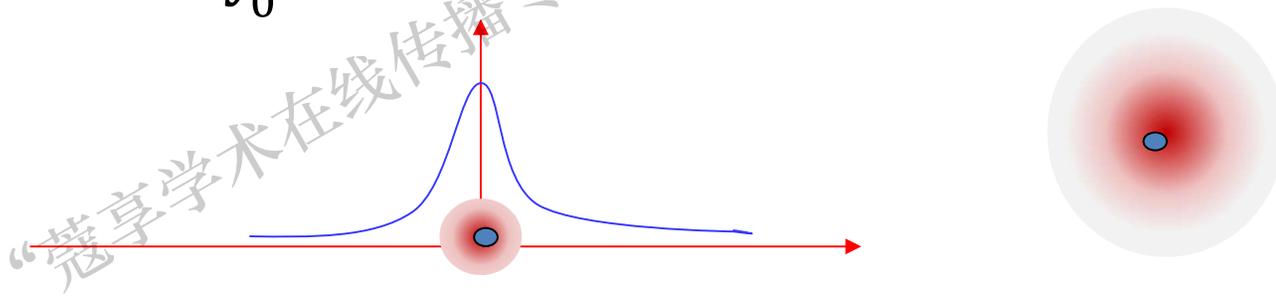
系统哈密顿量  $H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) = H_0 + V(\vec{r})$

要求势函数球对称，在无穷远处不发散：

$$V(\vec{r}) = V(r), \quad \lim_{r \rightarrow \infty} V(r) = 0 \left( \frac{1}{r^3} \right)$$

用波包  $\psi(\vec{r}, t) = \langle \vec{r} | \psi(t) \rangle$  描述，初态不发散

$$\int_0^\infty d^3\vec{r} |\psi(\vec{r}, t=0)|^2 < \infty$$



## 6.1 散射问题的一般讨论

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) = H_0 + V(\vec{r})$$

自由粒子的本征方程：

$$H_0 |\vec{k}\rangle = E_{\vec{k}} |\vec{k}\rangle, \quad E_{\vec{k}} = \frac{\vec{k}^2}{2m}$$

每一个  $|\vec{k}\rangle$  对应一个散射态  $|\vec{k} + \rangle$ ：

$$H |\vec{k} + \rangle = E_{\vec{k}} |\vec{k} + \rangle, \\ \psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}) \equiv \langle \vec{r} | \vec{k} + \rangle$$

## 6.1 散射问题的一般讨论

对于中心力场, 要求出射边界条件:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[ e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + f_{\vec{k}}(\hat{r}) \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{r} + o\left(\frac{1}{r}\right) \right]$$

$f_{\vec{k}}(\hat{r})$  及其模方分别对应散射振幅与微分散射截面:

$$\sigma(\hat{r}) = |f_{\vec{k}}(\hat{r})|^2$$

## 6.2 一维散射的平面波处理

为什么散射问题通过定态问题来求解？

定态薛定谔方程

$$H|K_{\pm}\rangle = E|K_{\pm}\rangle, \quad \psi_K^{\pm}(x) = \langle x|K_{\pm}\rangle$$

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + g\delta(x) \right) \psi_K^{\pm}(x) = E\psi_K^{\pm}(x)$$

$x < 0^-$  或  $x > 0^+$  时

$$0^{\pm} = \pm \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \varepsilon$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_K^{\pm}(x) = E\psi_K^{\pm}(x)$$

## 6.2 一维散射的平面波处理

$$\psi(k, x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, & x < 0 \\ Ce^{ikx} + De^{-ikx}, & x > 0 \end{cases}$$

$|k\rangle$ 代表“入射”粒子向左或向右传播：

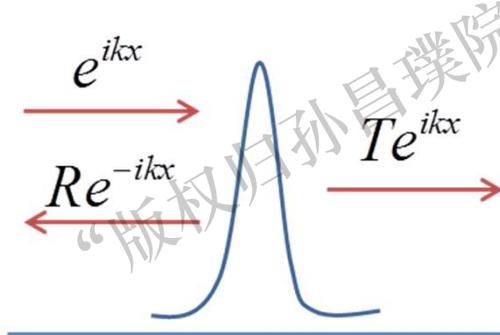
$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

## 6.2 一维散射的平面波处理

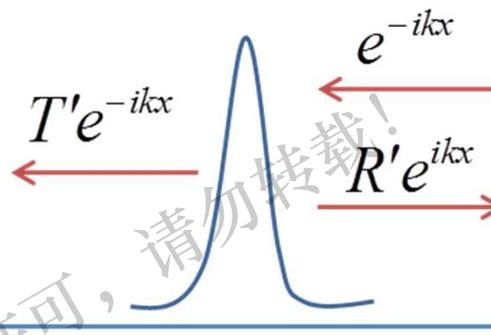
向右传播的 $\psi(K_+, x)$ 对应 $D = 0, A = 1$

向左传播的 $\psi(K_-, x)$ 对应 $B = 0, C = 1$

$$k > 0$$



$|K_+\rangle$ : 向右传播



$|K_-\rangle$ : 向左传播

$$\psi(K_+, x) = \begin{cases} e^{ikx} + Be^{-ikx}, & x < 0 \\ Ce^{ikx}, & x > 0 \end{cases}$$

$$\psi(K_-, x) = \begin{cases} e^{-ikx}, & x < 0 \\ Ce^{ikx} + De^{-ikx}, & x > 0 \end{cases}$$

## 6.2 一维散射的平面波处理

波函数处处连续可微

$$\Rightarrow \psi(K_{\pm}, 0^+) = \psi(K_{\pm}, 0^-)$$

对定态薛定谔方程在0附近积分

$$\int_{0^-}^{0^+} dx \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + g\delta(x) \right) \psi(K_{\pm}, x) = \int_{0^-}^{0^+} dx E\psi(K_{\pm}, x)$$

$$\Rightarrow \psi'(K_{\pm}, 0^+) - \psi'(K_{\pm}, 0^-) = \frac{2mg}{\hbar^2} \psi(K_{\pm}, 0)$$

## 6.2 一维散射的平面波处理

两个连续条件代入波函数表达式，得到

$$\begin{aligned}C - D &= (1 + 2i\alpha)A - (1 - 2i\alpha)B \\C + D &= A + B\end{aligned}$$

记  $\alpha = -\frac{mg}{k\hbar^2}$

$$S = \begin{pmatrix} 1 + i\alpha & i\alpha \\ -i\alpha & 1 - i\alpha \end{pmatrix}$$

则有

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}, \quad SS^\dagger = S^\dagger S = I$$

后面将证明， $S$ 正是散射矩阵

## 6.2 一维散射的平面波处理

定义

$$T \triangleq \frac{1}{1 - i\alpha}, \quad R \triangleq \frac{-i\alpha}{1 - i\alpha}$$

$$\psi(K_+, x) = \begin{cases} e^{ikx} + R e^{-ikx}, & x < 0 \\ T e^{ikx}, & x > 0 \end{cases}$$

$$\psi(K_-, x) = \begin{cases} T e^{-ikx}, & x < 0 \\ e^{-ikx} + R e^{ikx}, & x > 0 \end{cases}$$

$$|R|^2 + |T|^2 = 1$$

$\{\psi(K_{\pm}, x)\}$  在箱归一化的意义下是完备的

## 6.3 离散系统的单粒子散射: 耦合共振腔链

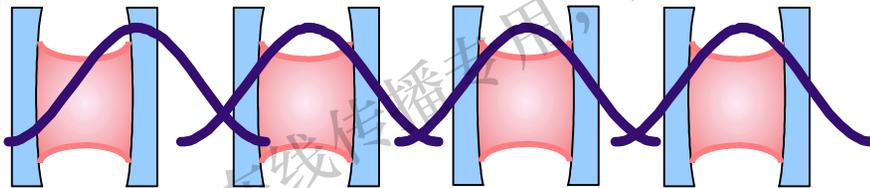
$$H_C = \sum_j \omega a_j^\dagger a_j - \xi \sum_j (a_{j+1}^\dagger a_j + a_j^\dagger a_{j+1})$$



光学谐振腔



耦合腔光波导

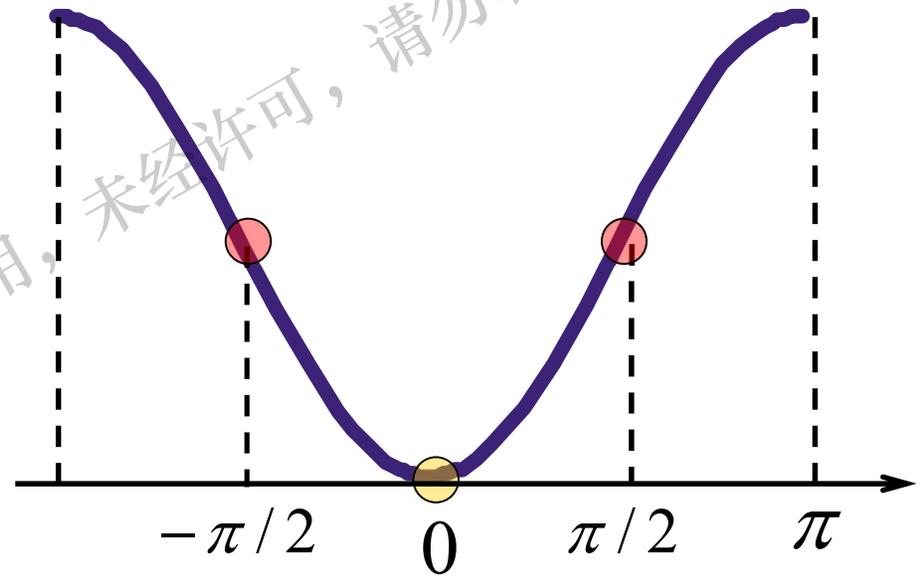
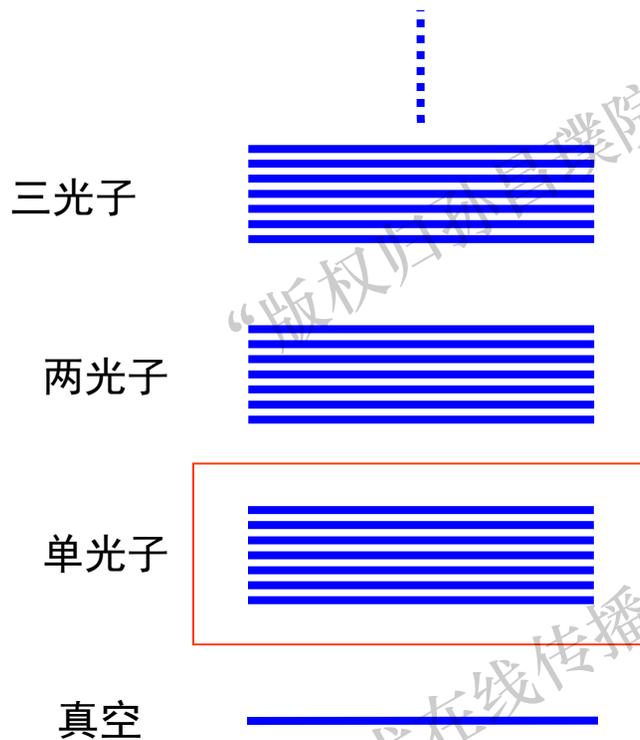


尾波耦合

## 6.3 离散系统的单粒子散射

耦合腔波导的带状结构

$$\omega_k = \omega - 2\xi \cos kl$$



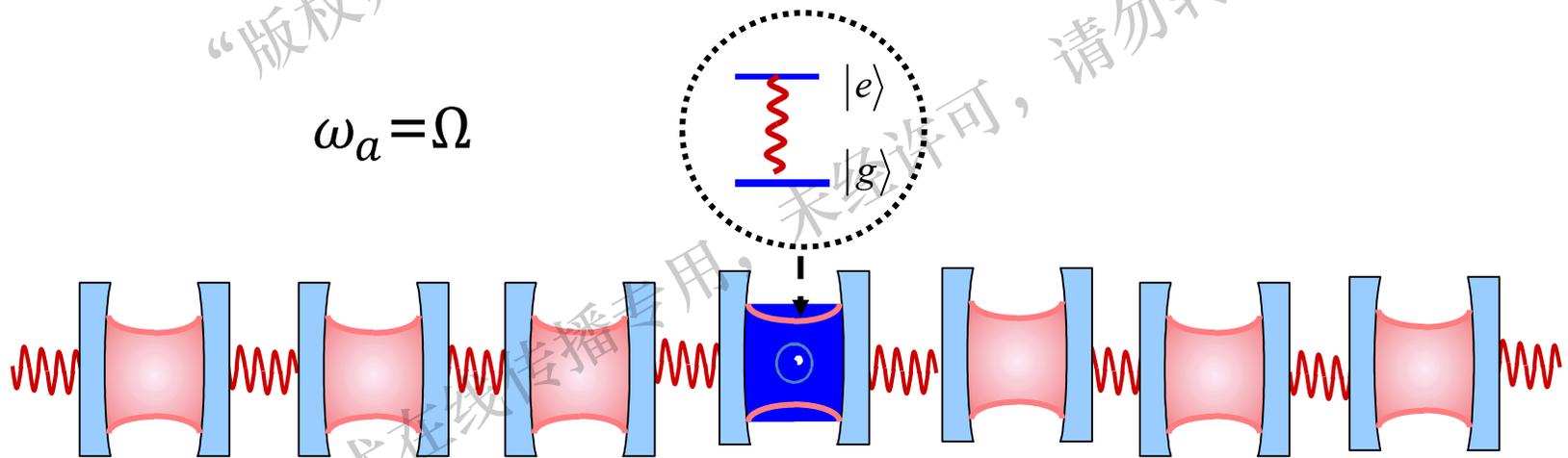
## 6.3 离散系统的单粒子散射

在耦合腔链中的某个腔中放入一个二能级系统

$$H_C = \sum_j \omega a_j^\dagger a_j - \xi \sum_j (a_{j+1}^\dagger a_j + a_j^\dagger a_{j+1})$$

$$H_I = \omega_a |e\rangle\langle e| + g(a_0^\dagger |g\rangle\langle e| + \text{h.c.})$$

$$\omega_a = \Omega$$



Zhou, Gong, Liu, *CPS*, F. Nori, *Phys. Rev. Lett* 101, 100501 (2008)

## 6.3 离散系统的单粒子散射

本征态

$$|\Omega_k\rangle = \sum_j u_k(j) a_j^\dagger |0, g\rangle + u_{ke} |0, e\rangle$$

单光子几率幅

腔场中的真空态

激发态的几率幅

离散坐标

$$H|\Omega_k\rangle = E_k|\Omega_k\rangle$$

光子在腔链中的运动方程

$$[E_k - \omega - V_j(E_k)]u_k(j) = -\xi[u_k(j+1) + u_k(j-1)]$$

局域的色散共振势

$$V_j(E_k) = \frac{g^2 \delta_{j,0}}{E_k - \omega_e}$$

## 6.3 离散系统的单粒子散射

本征态

$$|\Omega_k\rangle = \sum_j u_k(j) a_j^\dagger |0, g\rangle + u_{ke} |0, e\rangle$$

单光子几率幅

腔场中的真空态

激发态的几率幅

离散坐标

$$H|\Omega_k\rangle = E_k|\Omega_k\rangle$$

光子在腔链中的运动方程

$$[E_k - \omega - V_j(E_k)]u_k(j) = -\xi[u_k(j+1) + u_k(j-1)]$$

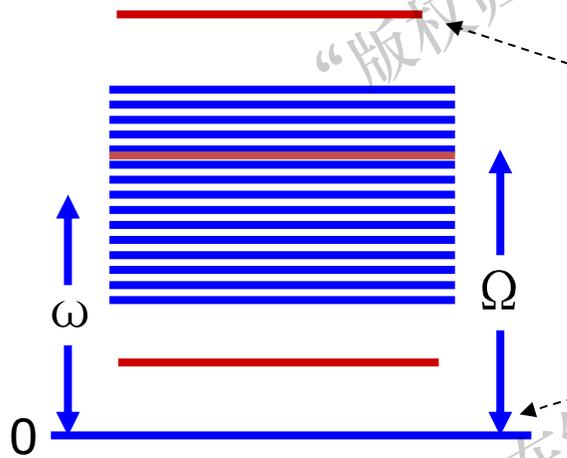
局域的色散共振势

$$V_j(E_k) = \frac{g^2 \delta_{j,0}}{E_k - \omega_e}$$

## 6.3 离散系统的单粒子散射

带状结构中的跃迁能量

$\Omega$



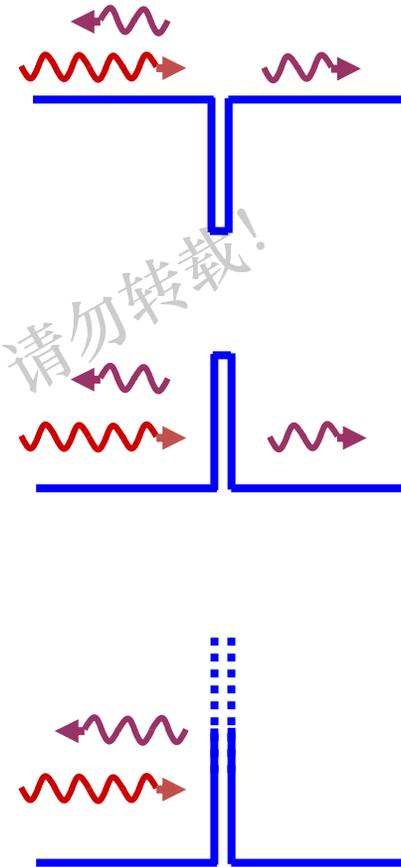
两个束缚态

$$E_k < \Omega$$

$$E_k > \Omega$$

$$E_k = \Omega$$

势垒随能量变化



“版权归孙昌璞院士和中科院研究生院所有”  
“寇享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

## 6.3 离散系统的单粒子散射

### 散射态边界条件

$$j < 0 \quad u_{Lk}(j) = e^{ikj} + r e^{-ikj}$$

$$j > 0 \quad u_{Rk}(j) = s e^{ikj}$$

$r$ : 反射系数

$s$ : 透射系数

$$r = \frac{J^2}{2i\xi \sin k(\omega - \Omega - 2\xi \cos k) - J^2}$$

## 6.3 离散系统的单粒子散射

线性区域，有效  
场理论导出的反  
射系数

$$r = -\frac{iJ^2}{2\xi(\omega_\pi - \Omega \pm 2\xi k) + iJ^2}$$

$$\omega_\pi = \omega - \pi\xi$$

$$\sin k \approx \pm 1$$

$$\cos k \approx \frac{\pi}{2} \pm k$$

将sine和cosine在  
 $k=\pi/2$ 点展开

$$r = \frac{J^2}{2i\xi \sin k (\omega - \Omega - 2\xi \cos k) - J^2}$$

$$\cos k \approx 1 - k^2/2$$

$$\sin k \approx k$$

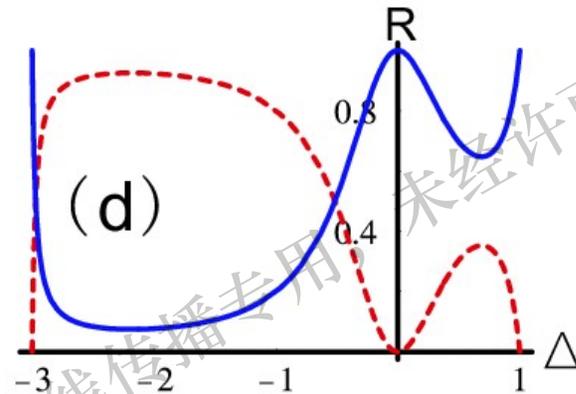
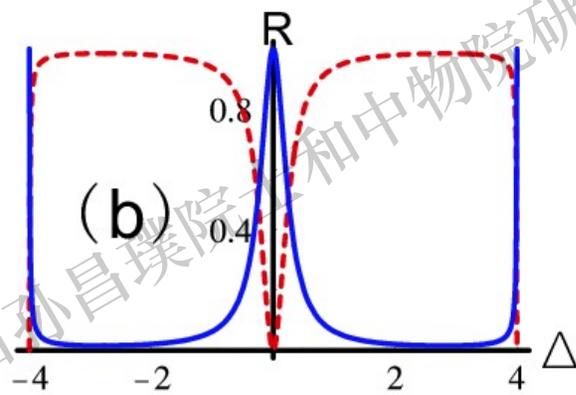
将sine和cosine在  
 $k=0$ 点展开

二次型区域，有效  
场理论导出的反  
射系数

$$r = -\frac{iJ^2}{2k\xi(\xi k^2 + \omega - \Omega - 2\xi) + iJ^2}$$

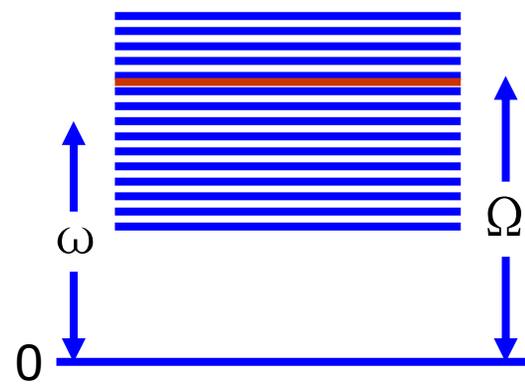
## 6.3 离散系统的单粒子散射

— 反射  
 - - - 透射



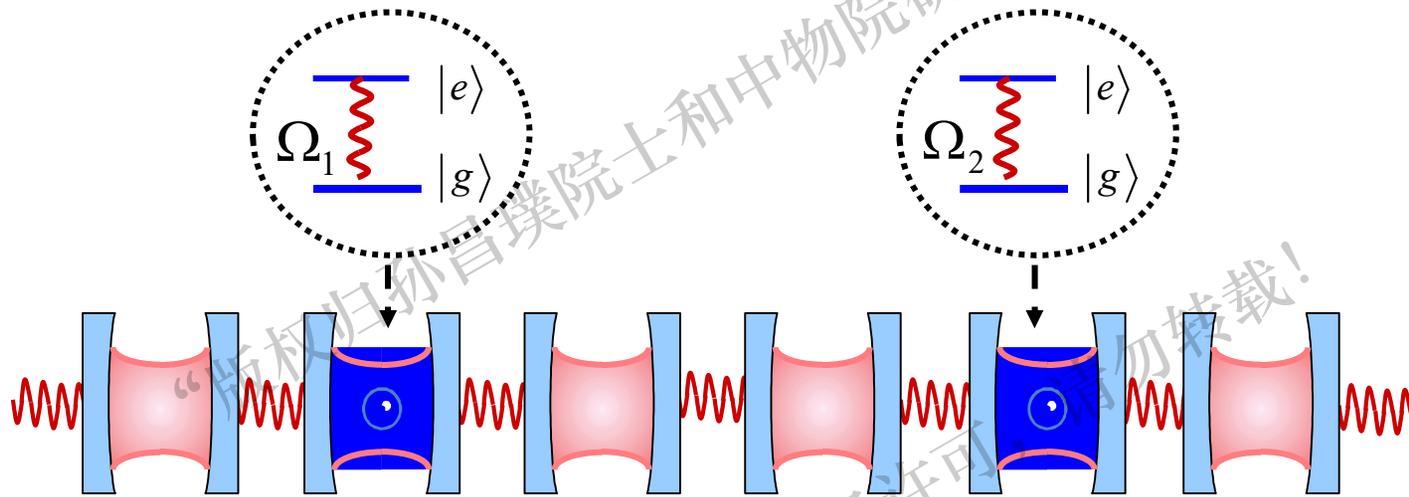
在原子与光子的失谐量 $\Delta=0$ 时，反射系数 $R=1$ ，此时从原子左边入射的光子被全反射

$$\Delta = \omega - \Omega - 2\xi \cos k$$



$$r = \frac{J^2}{2i\xi \sin k (\omega - \Omega - 2\xi \cos k) - J^2}$$

## 6.3 离散系统的单粒子散射

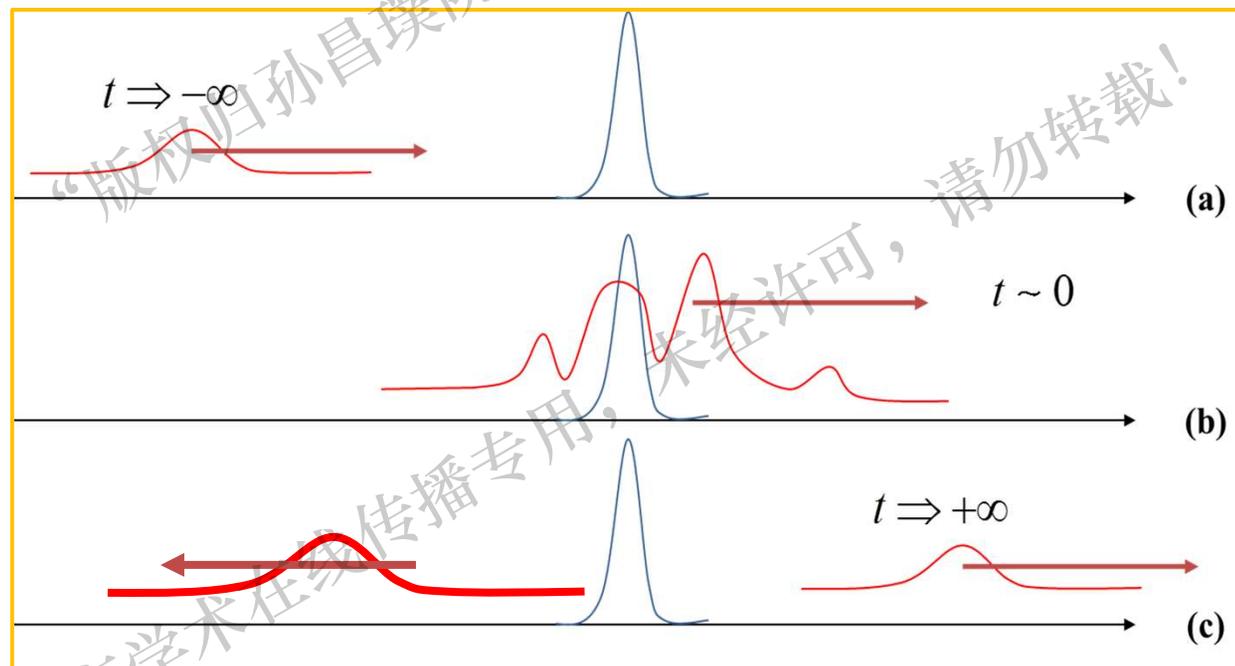


Lan Zhou, H. Dong, Yu-xi Liu, C. P. Sun, and Franco Nori, *Phys. Rev. A*, 78, 063827 (2008).

显然共振产生的全反射将形成以二能级系统为镜面的腔中腔，而二能级系统跃迁频率在带外时，不存在因共振而引起的全反射，是否也能构成腔中腔。为此首先讨论单光子的传输特性

## 6.4 一维散射的波包处理

- $t \rightarrow -\infty$ , 初态是远离散射中心, 向右传播的波包  $\varphi_i(x)$
- $t \sim 0$ , 与散射中心相互作用, 波包可能发生畸变
- $t \rightarrow \infty$ , 末态再次远离散射中心



## 6.4 一维散射的波包处理

假设初态是高斯波包，用平面波展开

$$\begin{aligned}\varphi_i(x) &= \left(\frac{1}{2\pi a^2}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left[ik_0(x-x_0) - \frac{(x-x_0)^2}{4a^2}\right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \phi_i(k) e^{ikx}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\phi_i(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \varphi_i(x) e^{-ikx} \\ &= \left(\frac{2a^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \exp[ikx_0 - a^2(k-k_0)^2]\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\varphi_i(x \geq 0) &\sim 0, \\ \phi_i(k < 0) &\sim 0\end{aligned}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\alpha^2 x^2 + 2i\beta x} = \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha} e^{-\frac{\beta^2}{\alpha^2}}$$

## 6.4 一维散射的波包处理

初态用本征态波函数展开 ( $k > 0$ )

$$\psi(K_+, x) = \begin{cases} e^{ikx} + R e^{-ikx}, & x < 0 \\ T e^{ikx}, & x > 0 \end{cases}$$

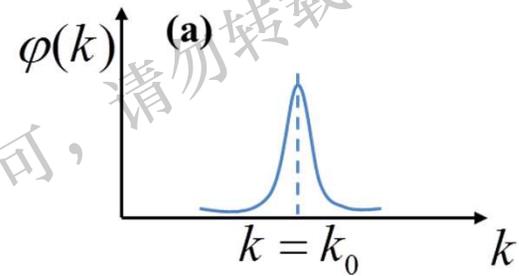
$$\varphi_i(x \geq 0) \sim 0$$

$$\phi_i(k < 0) \sim 0$$

$$\tilde{\phi}_i(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \varphi_i(x) \psi(K_+, x)^*$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left[ \int_{-\infty}^0 dx \varphi_i(x) (e^{-ikx} + R^* e^{ikx}) + \int_0^{\infty} dx \varphi_i(x) T e^{-ikx} \right]$$

$$\simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^0 dx \varphi_i(x) (e^{-ikx} + R^* e^{ikx}) = \phi_i(k) + R^* \phi_i(-k) \simeq \phi_i(k)$$



## 6.4 一维散射的波包处理

对于一个定域在远离散射中心的左侧，以较大速率向右行进的波包，它在能量本征态上的展开系数与它在动量空间上的展开系数是一样的。

$$\tilde{\phi}_i(k) \simeq \phi_i(k)$$

“寇享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载”

## 6.3 一维散射：平面波态的散射（定态散射）

入态：
$$\psi_{in}(k, x) = e^{ikx}$$

出态：
$$\psi_{out}(k > 0, x) = Re^{-ikx} + Te^{ikx}$$

$$\psi_{out}(k < 0, x) = -R^*e^{-ikx} + T^*e^{ikx}$$

Moller算符与“中间态”：

$$\psi_k(x) = \hat{\Omega}_+ \psi_{in}(k, x) = \hat{\Omega}_- \psi_{out}(k, x)$$

对于  $k > 0$ , 记

$$\hat{\Omega}_+ e^{ikx} = \begin{cases} e^{ikx} + Re^{-ikx}, & x < 0 \\ Te^{ikx}, & x > 0 \end{cases}$$

$$\hat{\Omega}_- e^{ikx} = \begin{cases} T^* e^{ikx}, & x < 0 \\ e^{ikx} + R^* e^{-ikx}, & x > 0 \end{cases}$$

## 6.3 一维散射问题

平面波态的散射（定态散射）

记

$$\hat{S} = \hat{\Omega}_-^\dagger \hat{\Omega}_+$$

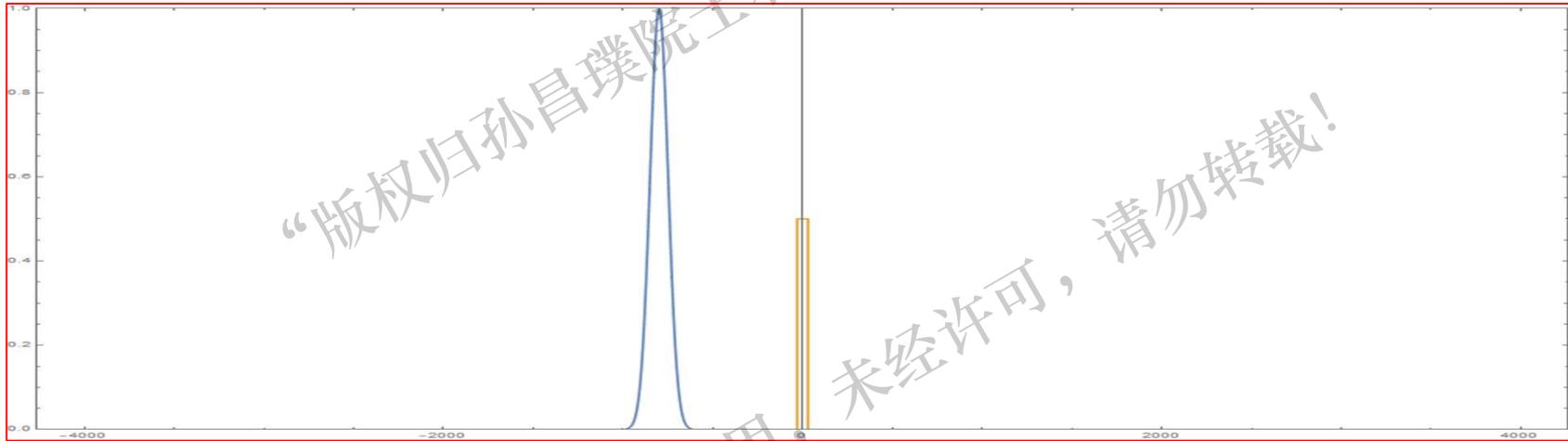
$$\hat{S}\psi_{in}(k, x) = \psi_{out}(k, x)$$

矩阵表示

$$\hat{S} = \begin{pmatrix} T & -R^* \\ R & T^* \end{pmatrix} \begin{matrix} e^{-i|k|x} & e^{i|k|x} \\ e^{-i|k|x} & e^{i|k|x} \end{matrix}$$

Moller算符及出入态的一般讨论将在之后给出

## 6.4 一维散射的波包处理



“寇享学术在线传播专用”

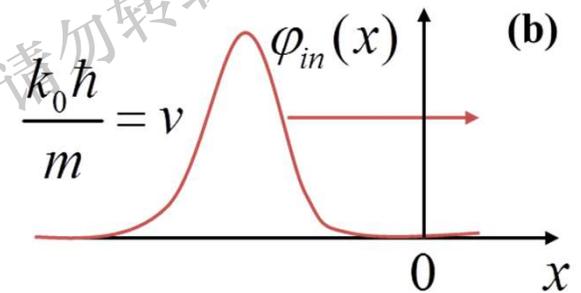
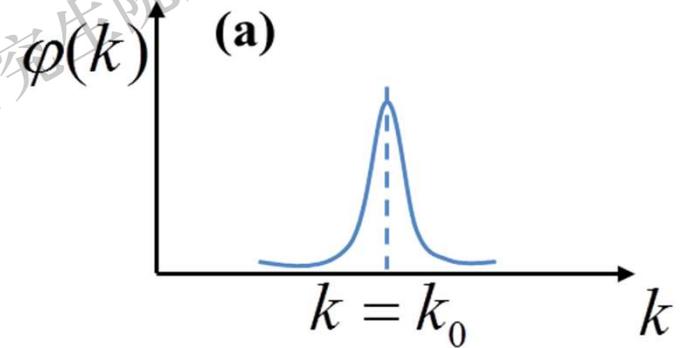
## 6.4 一维散射的波包处理

远离散射中心且向中心运动的初始波包

$$\varphi_i(x) = \int_0^{\infty} dk \phi_i(k) \psi(K_+, x)$$

经过时间 $t$ 的演化，假定其尚未发生散射

$$\psi(x, t) = \int_0^{\infty} dk \phi(k) \psi(K_+, x) e^{-i \frac{\hbar^2 k^2}{2m} t}$$
$$= \begin{cases} \text{(I)} \int_0^{\infty} dk \phi(k) e^{ikx} e^{-i \frac{\hbar^2 k^2}{2m} t} \\ \text{(II)} +R \int_0^{\infty} dk \phi(k) e^{-ikx} e^{-i \frac{\hbar^2 k^2}{2m} t}, \\ \text{(III)} T \int_0^{\infty} dk \phi(k) e^{ikx} e^{-i \frac{\hbar^2 k^2}{2m} t}, \end{cases} \left. \vphantom{\int_0^{\infty}} \right] \begin{matrix} x < 0 \\ \\ x > 0 \end{matrix}$$



入射波包定域于实空间  $x < 0$  区域

## 6.4 一维散射的波包处理

$|t|$ 很大时，结果(I), (II), (III)均是快速振荡函数的积分

$$I(x) = \int dk f(k) e^{i\Phi(k)} \quad \Phi(k) = \pm kx - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} t$$

$t \rightarrow -\infty$ 时， $e^{-itk^2/2m}$ 是快速振荡因子。仅当位相有极值点时，积分不为零

$$\frac{\partial}{\partial k} \Phi = 0$$



$$\begin{aligned} x - \frac{\hbar k}{m} t &= 0 \\ x + \frac{\hbar k}{m} t &= 0 \end{aligned}$$

入射波包中心运动的经典轨迹

# “证明” 一个积分近似为零

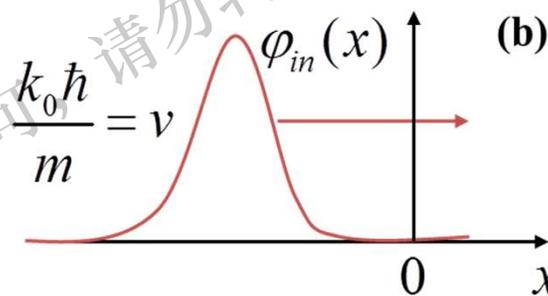
对于反射波函数(II)

$$R \int_0^{\infty} dk \phi(k) (e^{-ikx}) e^{-i\frac{\hbar^2 k^2}{2m}t}, x < 0$$

除了积分中位相的极小值点，快速振荡因子将使得积分为零，积分中位相的极小值点确定为

$$x = x_c = \frac{\hbar k}{m} |t|$$

它不在左面区域——这个波函数中反射部分可忽略。



同理，透射波函数(III)

$$T \int_0^{\infty} dk \phi(k) e^{ik} e^{-i\frac{\hbar^2 k^2}{2m}t}$$

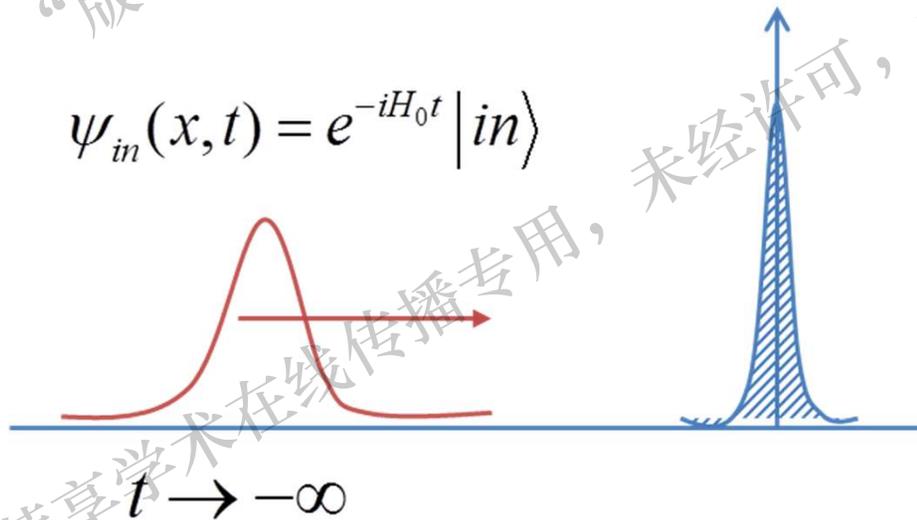
稳相位点不在右边区域。

## 6.4 一维散射的波包处理

稳相位近似后， $t$ 时刻的演化结果中仅留下一项(I)：

$$\begin{aligned}\psi(x, t) &= \int_0^{\infty} dk \phi(k) \psi(K_+, x) e^{-i\frac{\hbar^2 k^2}{2m}t} \\ &\simeq \int_0^{\infty} dk \phi(k) e^{ikx} e^{-i\frac{\hbar^2 k^2}{2m}t} = e^{-iH_0 t} \Psi_{in}(x)\end{aligned}$$

$$\psi_{in}(x, t) = e^{-iH_0 t} |in\rangle$$



相当于自由粒子的演化

## 6.4 一维散射的波包处理

接下来讨论  $t \rightarrow +\infty$  时的演化。仿照之前的讨论，稳相位近似后，演化结果剩下(II) (III)两项：

$$\begin{aligned}\psi(x, t) &= \int_0^{\infty} dk \phi(k) \psi(K_+, x) e^{-i\frac{\hbar^2 k^2}{2m}t} \\ &\simeq \begin{cases} R \int_0^{\infty} dk \varphi(k) e^{-ikx} e^{-i\frac{\hbar^2 k^2}{2m}t}, & x < 0 \\ T \int_0^{\infty} dk \varphi(k) e^{ikx} e^{-i\frac{\hbar^2 k^2}{2m}t}, & x > 0 \end{cases}\end{aligned}$$

## 6.4 一维散射的波包处理：精确解

入射波包为高斯波包

$$\varphi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} e^{-\frac{(k-k_0)^2}{2\sigma^2}}$$

定义中向左、向右运动的波包

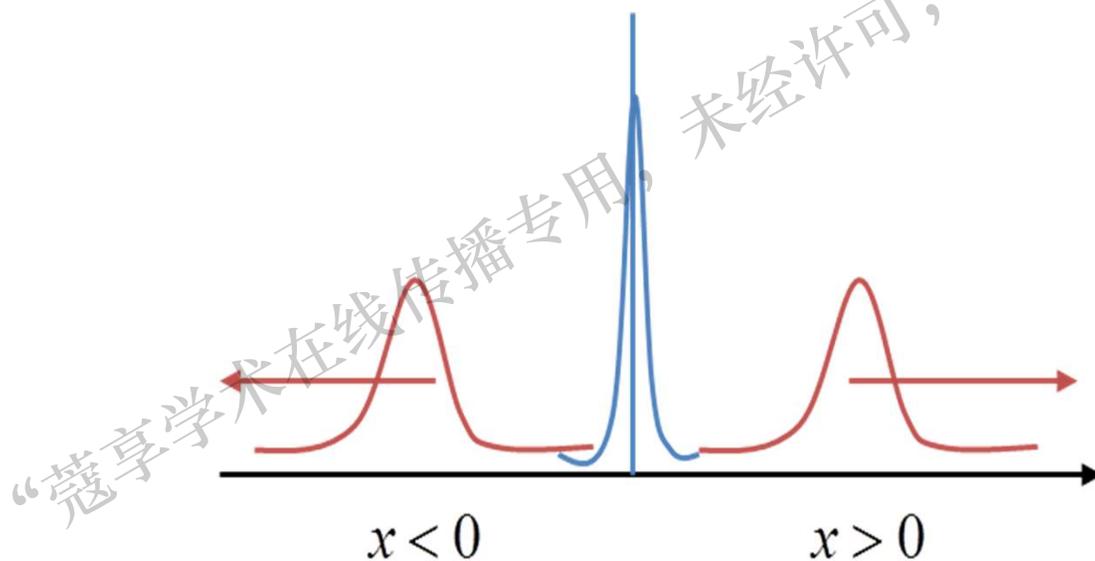
$$\begin{aligned}\psi_{\pm}(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \int dk e^{-\frac{(k-k_0)^2}{2\sigma^2}} e^{\pm ikx + i\frac{\hbar^2}{2m}k^2|t|} \\ &= \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{i\hbar\sigma^2|t|}{m}}} \exp \left[ \frac{-\sigma^2 x^2 \pm 2ik_0|x| + \frac{i\hbar k_0^2|t|}{m}}{2 \left( 1 - \frac{i\hbar\sigma^2|t|}{m} \right)} \right] \\ &\sim \exp \left[ \frac{-\sigma^2 \left( x \pm \frac{\hbar k_0|t|}{m} \right)^2}{2 \left( 1 + \frac{\hbar^2\sigma^4 t^2}{m^2} \right)} \right] \exp \left[ \frac{i \left( -\frac{x^2 \hbar|t|\sigma^4}{m} \pm 2k_0 x + \frac{\hbar k_0^2|t|}{m} \right)}{2 \left( 1 + \frac{\hbar^2\sigma^4 t^2}{m^2} \right)} \right]\end{aligned}$$

## 6.4 一维散射的波包处理

演化结果：对称的出射和反射两个扩散波包

波包宽度

$$\Delta x = \frac{1}{\sigma} \sqrt{1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2} \sigma^4} = \Delta x_0 \sqrt{1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 \Delta x_0^4}}$$

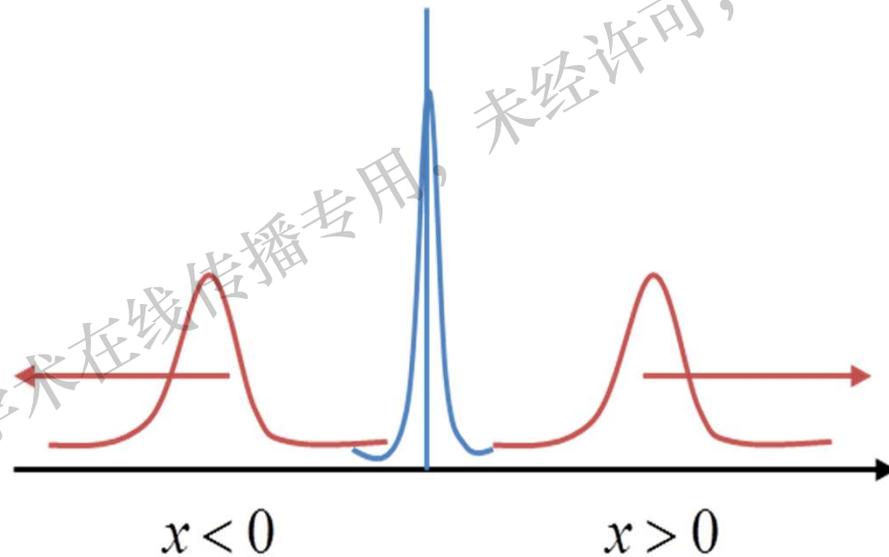


## 6.4 一维散射的波包处理

以上分析表明： $t \rightarrow \infty$ 时波包分裂为向左右传播的两个波包，几率幅正比于反射与透射系数 $R$ 与 $T$ ：

$$\psi(x, t) = T\psi_+(x, t) + R\psi_-(x, t)$$

波包演化的图象与定态散射相一致！



## 6.5 形式散射理论：入态与出态

薛定谔表象下， $t$ 时刻的粒子态

$$|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle$$

对于 $t \rightarrow -\infty$ ，有入射渐进态（入态）：

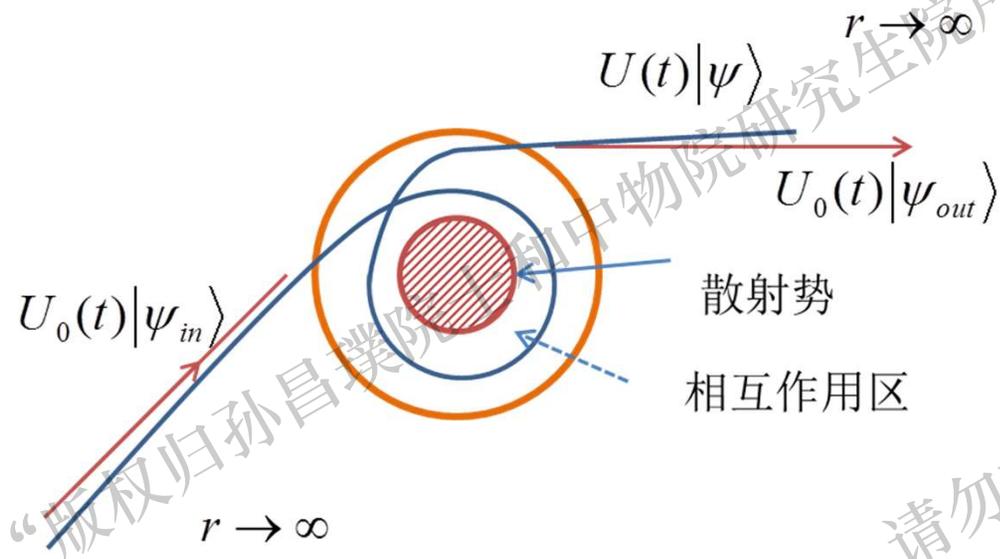
$$U_0(t) = \exp\left(-i\frac{p^2}{2m}t\right)$$
$$U(t)|\psi(0)\rangle \xrightarrow{t \rightarrow -\infty} U_0(t)|\psi_{\text{in}}\rangle$$

$t \rightarrow +\infty$ 时，有出射渐进态（出态）：

$$U(t)|\psi(0)\rangle \xrightarrow{t \rightarrow +\infty} U_0(t)|\psi_{\text{out}}\rangle$$

入态 =  $|\psi_{\text{in}}\rangle$       出态 =  $|\psi_{\text{out}}\rangle$       中间态 =  $|\psi\rangle = |\psi(0)\rangle$

## 6.5 形式散射理论：入态与出态



只要入态  $|\psi_{in}\rangle$  和出态  $|\psi_{out}\rangle$  在边界上（橙色圆上）的值与真实粒子态  $|\psi(t)\rangle$  一致，

边界外的粒子行为可以完全由  $|\psi_{in}\rangle$  和  $|\psi_{out}\rangle$  来描述。

## 6.5 形式散射理论：入态与出态

需要证明对任意  $|\psi_{\text{in}}\rangle$ , 存在  $|\psi\rangle$  使得

$$U(t)|\psi\rangle \xrightarrow{t \rightarrow -\infty} U_0(t)|\psi_{\text{in}}\rangle$$

$$U(t)|\psi\rangle \xrightarrow{t \rightarrow +\infty} U_0(t)|\psi_{\text{out}}\rangle$$

证明思路

证明以下极限存在：

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} U^\dagger(t)U_0(t)|\psi_{\text{in}}\rangle$$

定义

$$W(t) = U^\dagger(t)U_0(t) \Rightarrow \frac{dW}{dt} = iU^\dagger(t)VU_0(t)$$

## 6.5 形式散射理论：入态与出态

那么有

$$\begin{aligned}\lim_{t \rightarrow -\infty} U^\dagger(t)U_0(t)|\psi_{\text{in}}\rangle &= \lim_{t \rightarrow -\infty} W(t)|\psi_{\text{in}}\rangle \\ &= |\psi_{\text{in}}\rangle - i \int_{-\infty}^0 dt \left( U^\dagger(t)VU_0(t) \right) |\psi_{\text{in}}\rangle\end{aligned}$$

此极限收敛，则要求

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^0 dt \|U^\dagger(t)VU_0(t)|\psi_{\text{in}}\rangle\| &< \infty \\ \Rightarrow \int_{-\infty}^0 dt \|VU_0(t)|\psi_{\text{in}}\rangle\| &< \infty\end{aligned}$$

$$\| |a\rangle \|^2 \equiv \langle a|a\rangle$$

## 6.5 形式散射理论：入态与出态

$|\psi_{\text{in}}\rangle$  是一维高斯波包（例）：

$$\langle x|\psi_{\text{in}}\rangle = \left(\frac{1}{\pi\sigma^2}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left[-\frac{(x-a)^2}{2\sigma^2}\right]$$

$$\Rightarrow |\langle x|U_0(t)|\psi_{\text{in}}\rangle|^2 = \left(\frac{1}{\pi\sigma^2}\right)^{\frac{1}{2}} \left(1 + \frac{t^2}{m^2\sigma^4}\right)^{-\frac{3}{2}} \exp\left[-\frac{(x-a)^2}{\sigma^2 + t^2/(m^2\sigma^2)}\right]$$



$$\|VU_0(t)|\psi_{\text{in}}\rangle\|^2 = \left(\frac{1}{\pi\sigma^2}\right)^{\frac{1}{2}} \left(1 + \frac{t^2}{m^2\sigma^4}\right)^{-\frac{3}{2}} \int dx |V|^2 \exp\left[-\frac{(x-a)^2}{\sigma^2 + t^2/(m^2\sigma^2)}\right]$$

$$\leq \left(\frac{1}{\pi\sigma^2}\right)^{\frac{1}{2}} \left(1 + \frac{t^2}{m^2\sigma^4}\right)^{-\frac{3}{2}} \int dx |V|^2$$

## 6.5 形式散射理论：入态与出态

任意时刻的波函数 $|\psi(t)\rangle$ 都对应某个入态 $|\psi_{\text{in}}\rangle$

$$|\psi(0)\rangle = \lim_{t \rightarrow -\infty} U^\dagger(t) U_0(t) |\Psi_{\text{in}}\rangle \triangleq \Omega_+ |\Psi_{\text{in}}\rangle$$

及出态 $|\Psi_{\text{out}}\rangle$

$$|\psi(0)\rangle = \lim_{t \rightarrow +\infty} U^\dagger(t) U_0(t) |\Psi_{\text{out}}\rangle \triangleq \Omega_- |\Psi_{\text{out}}\rangle$$

Moller算符:  
(么正)

$$\Omega_{\pm} = \lim_{t \rightarrow \mp\infty} U^\dagger(t) U_0(t)$$

## 6.5 形式散射理论：入态与出态

$$|\Psi_{\text{out}}\rangle = \Omega_-^\dagger |\psi(0)\rangle = \Omega_-^\dagger \Omega_+ |\Psi_{\text{in}}\rangle = S |\Psi_{\text{in}}\rangle$$

给出了散射矩阵

$$S = \Omega_-^\dagger \Omega_+$$

它包含了散射实验能够得到的全部信息。

么正性：

$$SS^\dagger = S^\dagger S = I$$

## 6.5 形式散射理论：入态与出态

从微扰论角度，记

$$\tilde{V}(t) \equiv \lim_{\eta \rightarrow 0} e^{\frac{\eta t}{\hbar}} \hat{V}, \quad \eta > 0$$

则波包的演化方程：

$$\left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0 \right) |\psi(t)\rangle = \tilde{V}(t) |\psi(t)\rangle$$

引入Green函数  $G_+(t, t')$ ：

$$\left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0 \right) G_+(t, t') = \delta(t - t')$$

$$G_+(t, t') = 0, \quad t < t' \quad (\text{因果性})$$

$$\Rightarrow G_+(t, t') = -\frac{i}{\hbar} \theta(t - t') e^{-iH_0(t-t')/\hbar}$$

## 6.5 形式散射理论：入态与出态

得到波包的一个形式解

$$|\psi^+(t)\rangle = |\phi(t)\rangle + \int_{-\infty}^{+\infty} G_+(t, t') \tilde{V}(t') |\psi^+(t')\rangle dt'$$

记

$$H_0 |\phi(t)\rangle = E |\phi\rangle e^{-iEt/\hbar}$$

$$H |\psi^+(t)\rangle = E |\psi^+\rangle e^{-iEt/\hbar}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow |\psi^+\rangle &= |\phi\rangle - \frac{i}{\hbar} \lim_{\eta \rightarrow 0} \int_0^{+\infty} e^{-i(H_0 - E - i\eta)\tau/\hbar} V |\psi^+\rangle d\tau \\ &= |\phi\rangle + \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{1}{H_0 - E - i\eta} \lim_{\tau' \rightarrow +\infty} (e^{-i(H_0 - E)\tau'/\hbar} e^{-\eta\tau'/\hbar} - 1) V |\psi^+\rangle \\ &= |\phi\rangle - G_+(E) V |\psi^+\rangle \end{aligned}$$

$$G_+(E) = \frac{1}{H_0 - E - i\eta}, \quad \eta = 0^+$$

## 6.5 形式散射理论：入态与出态

### Lippman-Schwinger方程

$$|\psi^+\rangle = |\phi\rangle - \hat{G}_+(E)\hat{V}|\psi^+\rangle$$

势能的开关：

暗含运动窄波包自动地打开与关闭相互作用；

因果性：

暗含波包需要“窄”

—宽波包几率层面上破坏因果性

“寇享学术在物传播专用，未经许可，请勿转载！”

## 6.6 Lippman-Schwinger 方程与玻恩近似

设  $H_0 = \frac{p^2}{2m}$  的本征态为  $|\phi\rangle$ ，本征方程为

$$H_0|\phi\rangle = E|\phi\rangle$$

总哈密顿量  $H = H_0 + V$  的本征值问题

$$(H_0 + V)|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

弹性散射下, 上述两个方程本征值是一样的, 且

$$|\psi\rangle \rightarrow |\phi\rangle, \quad V \rightarrow 0$$

## 6.6 Lippman-Schwinger 方程与玻恩近似

满足上述渐近条件的形式解

$$|\psi\rangle = \frac{1}{E - H_0} V |\psi\rangle + |\phi\rangle$$

这是关于  $|\psi\rangle$  的积分方程

由迭代得显式解

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= |\phi\rangle + \frac{1}{E - H_0} V (|\phi\rangle + \frac{1}{E - H_0} V |\psi\rangle) \\ &= |\phi\rangle + \frac{1}{E - H_0} V |\phi\rangle + \frac{1}{E - H_0} V \frac{1}{E - H_0} V |\phi\rangle + \dots \end{aligned}$$

## 6.6 Lippman-Schwinger 方程与玻恩近似

但是,  $\frac{1}{E-H_0}$  存在奇点, 由于  $E$  取实值, 可定义无奇点格林函数

$$G_{\pm}(E) = \frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon}, (\epsilon \geq 0)$$

用  $G_{\pm}(E)$  代替  $\frac{1}{E-H_0}$ , 得到 Lippman-Schwinger 方程

$$|\psi_{\pm}\rangle = G_{\pm}(E)V|\psi_{\pm}\rangle + |\phi\rangle$$

以及形式解

$$|\psi_{\pm}\rangle = |\phi\rangle + G_{\pm}(E)V|\phi\rangle + G_{\pm}(E)V G_{\pm}(E)V|\phi\rangle + \dots$$

## 6.6 Lippman-Schwinger 方程与玻恩近似

Lippman-Schwinger 方程的坐标表示

记  $\psi_{\pm}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \psi_{\pm} \rangle$ , 则

$$\psi_{\pm}(\mathbf{r}) = \phi(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r}' G_{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \psi_{\pm}(\mathbf{r}')$$

其中

$$\begin{aligned} G_{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \langle \mathbf{r} | \frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon} | \mathbf{r}' \rangle \\ &= \iint \langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle \langle \mathbf{k} | \frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon} | \mathbf{k}' \rangle \langle \mathbf{k}' | \mathbf{r}' \rangle d^3 k d^3 k' \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \frac{1}{E - \hbar^2 k^2 / (2m) \pm i\epsilon} d^3 k \end{aligned}$$

## 6.6 Lippman-Schwinger 方程与玻恩近似

可以证明  $G_{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  满足亥姆霍兹方程

$$(\nabla^2 + k_0^2)G_{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = 2m \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

$\pm$  对应不同的边界条件, 即

$$G_{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{m \exp(\pm i k_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{2\pi |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$$

也可由  $G_{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  的积分表达式得到, 记  $E = \hbar^2 k_0^2 / (2m)$ , 令  $\rho = |\mathbf{k}|$

$$G_{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^{\infty} \rho^2 d\rho \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^1 \frac{e^{i\rho|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|\zeta/\hbar}}{k_0^2 - \rho^2 \pm i\epsilon_0} d\zeta$$

## 6.6 Lippman-Schwinger 方程与玻恩近似

$$\begin{aligned} &= \frac{im}{2\pi^2 \hbar^4 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \int_0^\infty \rho d\rho \frac{e^{-i\rho|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} - c.c.}{k_0^2 - \rho^2 \pm i\epsilon_0} \\ &= -\frac{m \exp(\pm ik_0|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{2\pi |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \end{aligned}$$

由中心力场格林函数，对应入态波矢为  $\mathbf{k}$  的散射态  $|\mathbf{k}+\rangle$ ，有积分表达式

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \int d\mathbf{r}' G_+(\mathbf{r}, \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}')$$

其中  $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \mathbf{k} + \rangle$

## 6.6 Lippman-Schwinger 方程与玻恩近似

证明:

$$(\nabla^2 + k^2)\exp(ik \cdot r) = 0$$

$$(\nabla^2 + k^2) \int d\mathbf{r}' G_+(\mathbf{r}, \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \psi_k^{(+)}(\mathbf{r}')$$

$$= \int d\mathbf{r}' (\nabla^2 + k^2) G_+(\mathbf{r}, \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \psi_k^{(+)}(\mathbf{r}')$$

$$= 2m \int d\mathbf{r}' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \psi_k^{(+)}(\mathbf{r}')$$

$$= 2m V(\mathbf{r}) \psi_k^{(+)}(\mathbf{r})$$

→  $(E_k - H_0) \psi_k^{(+)}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_r^2 + k^2) \psi_k^{(+)}(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r}) \psi_k^{(+)}(\mathbf{r})$

即满足  $H \psi_k^{(+)}(\mathbf{r}) = E_k \psi_k^{(+)}(\mathbf{r})$

## 6.6 Lippman-Schwinger方程与玻恩近似

其次，若 $V(\mathbf{r})$ 满足“当 $r > b$ ,  $V(\mathbf{r}) = 0$ ”， $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})$ 满足出射边界条件

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + \frac{e^{ikr}}{r} \int_{r' < b} d\mathbf{r}' g(\hat{\mathbf{r}}, \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}')$$

引入散射振幅  $f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = -\sqrt{2\pi m} \int d\mathbf{r}' e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}')$

因此 $r \rightarrow \infty$ 极限

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[ e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \frac{e^{ikr}}{r} \right] + o\left(\frac{1}{r}\right)$$

综上， $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})$ 的积分表达满足定态薛定谔方程，自动满足出射边界条件。

## 6.6 Lippman-Schwinger 方程与玻恩近似

由Lippman-Schwinger 方程的递推解

$$|\psi_{\pm}\rangle = (1 + G_{\pm}V + G_{\pm}VG_{\pm}V + \dots)|\phi\rangle$$

定义转移矩阵 $T$

$$V|\psi_{+}\rangle = T|\phi\rangle$$

Lippman-Schwinger 方程改写为

$$T|\phi\rangle = V|\phi\rangle + VG_{+}T|\phi\rangle$$

转移矩阵的玻恩级数解

$$T = V + VG_{+}T = V + VG_{+}V + VG_{+}VG_{+}V + \dots$$

## 6.6 Lippman-Schwinger 方程与玻恩近似

定义  $\mathfrak{F} = -(2\pi)^3 2m / (4\pi\hbar^2)$ , 散射振幅可写为

$$f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = \mathfrak{F} \langle \mathbf{k}' | \hat{T} | \mathbf{k} \rangle$$

散射振幅的玻恩级数

$$f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = \sum_{n=1}^{\infty} f^{(n)}(\mathbf{k}', \mathbf{k})$$

其中

$$f^{(1)}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = \mathfrak{F} \langle \mathbf{k}' | \hat{V} | \mathbf{k} \rangle$$

$$f^{(2)}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = \mathfrak{F} \langle \mathbf{k}' | \hat{V} \hat{G}_+ \hat{V} | \mathbf{k} \rangle$$

...

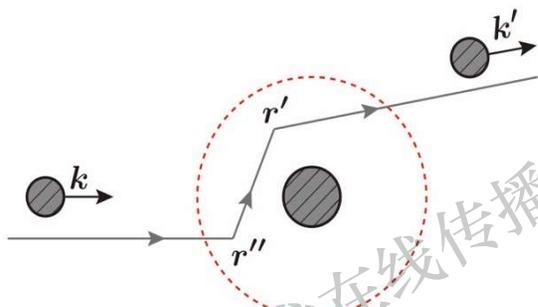
通常  $f^{(1)}$  简称为玻恩近似

## 6.6 Lippman-Schwinger 方程与玻恩近似

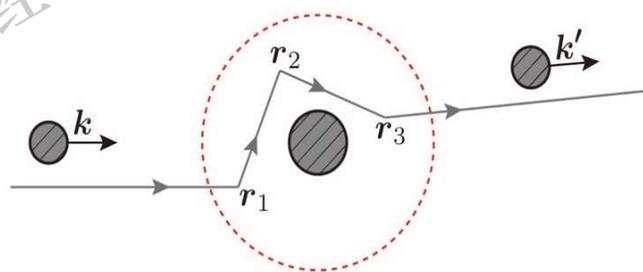
格林函数起着传播子的作用

二阶玻恩振幅

$$\begin{aligned} f^{(2)}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) &= \mathfrak{T} \int d\mathbf{r}' \int d\mathbf{r}'' \langle \mathbf{k}' | \mathbf{r}' \rangle V(\mathbf{r}') \langle \mathbf{r}' | G_+ | \mathbf{r}'' \rangle V(\mathbf{r}'') \langle \mathbf{r}'' | \mathbf{k} \rangle \\ &= \frac{\mathfrak{T}}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{r}' \int d\mathbf{r}'' e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') G(\mathbf{r}', \mathbf{r}'') V(\mathbf{r}'') e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}''} \end{aligned}$$



二阶散射振幅:  $\mathbf{r}$  和  $\mathbf{r}'$  的有效积分区域是势的作用范围, 有二次内部散射步骤



三阶散射振幅: 有三次内部散射步骤

## 6.6 Lippman-Schwinger 方程与玻恩近似

### 一阶振幅计算

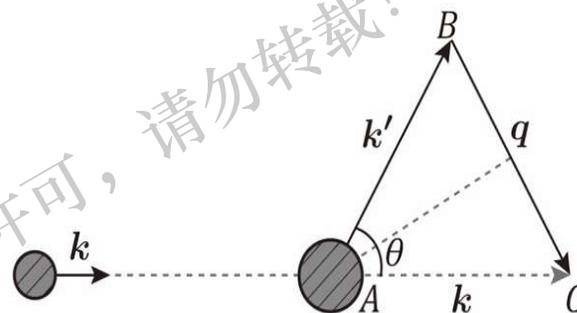
$$f^{(1)} = \mathfrak{F} \int d\mathbf{r}' e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}'} V(\mathbf{r}')$$

对于弹性散射,  $|\mathbf{k}'| = |\mathbf{k}| = k$ , 定义矢量  $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$

则  $q = 2k \sin \theta / 2$

于是

$$f^{(1)}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \equiv f^{(1)}(\theta)$$



弹性散射图示

$$= \mathfrak{F} \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty r^2 e^{i2kr \sin \theta / 2} V(r) dr$$

## 6.6 Lippman-Schwinger 方程与玻恩近似

$$= -4\pi\mathfrak{F} \frac{1}{q} \int_0^{\infty} rV(r) \sin qr dr$$

对库仑势  $V(r) = \frac{ZZ'e^2}{r}$

$Ze$ 和 $Z'e$ 分别为散射粒子和散射中心的电量, 则

$$f^{(1)}(\theta) = \frac{2mZZ'e^2}{\hbar^2 q^2}$$

微分散射截面

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 = \frac{m^2 Z^2 Z'^2 e^4}{4\hbar^4 k^4 \sin^4 \theta / 2}$$

## 6.6 Lippman-Schwinger 方程与玻恩近似

代入  $v = \hbar k/m$ ，得到著名的卢瑟福散射公式

$$\sigma(\theta) = \frac{Z^2 Z'^2 e^4}{4m^2 v^4 \sin^4 \theta/2}$$

玻恩级数的收敛条件：

1.  $E_k$  足够大（动能足够大）
2.  $V$  足够弱（势能  $V$  成为微扰）

## 6.7 分波法与低能散射

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

Born近似适用于高能散射 ( $k$  很大) ;  
散射粒子能量较低时, 采用分波法(记  $\mathbf{k}$  的方向为  $z$  方向):

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} c_l P_l(\cos \theta) \rho_l(r)$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left[ r^2 \frac{d}{dr} \rho_l(r) \right] + \left[ \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \rho_l(r) = 0$$

$c_l$  由边界条件确定:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{ikz} + f(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r}$$

## 6.7 分波法与低能散射

$r \rightarrow \infty$ 时,  $V(r) \rightarrow 0$ , 径向波函数有自由粒子的行为:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left[ r^2 \frac{d}{dr} \rho_l(r) \right] + \left[ \frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \rho_l(r) = 0$$

$$\Rightarrow \rho_l(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 2k [A j_l(kr) + B n_l(kr)] \quad |A|^2 + |B|^2 = 1$$

其中球Bessel函数有渐进形式

$$j_l(kr) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{kr} \cos \left( kr - \frac{1}{2}(l+1)\pi \right)$$

$$n_l(kr) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{kr} \sin \left( kr - \frac{1}{2}(l+1)\pi \right)$$

$$\Rightarrow \rho_l(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{r} \sin \left( kr - \frac{l}{2}\pi + \delta_l \right) \quad \delta_l \text{称为} l \text{分波的相移}$$

## 6.7 分波法与低能散射

为方便对比，将边界条件中的平面波部分展开：

$$e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \theta)$$
$$e^{ikz} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2ikr} [e^{ikr} + (-1)^{l+1} e^{-ikr}] P_l(\cos \theta)$$

为了看得更清楚，将  $\rho_l(r)$  的渐进形式改写：

$$\rho_l(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{r} \sin \left( kr - \frac{l}{2} \pi + \delta_l \right)$$
$$= \frac{(-i)^l}{2ir} e^{-i\delta_l} [e^{ikr} + (-1)^{l+1} e^{-ikr} + (e^{2i\delta_l} - 1) e^{ikr}]$$

结合

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} c_l P_l(\cos \theta) \rho_l(r), \quad \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{ikz} + f(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r}$$

## 6.7 分波法与低能散射

比较可得

$$c_l = i^l \frac{2l+1}{k} e^{i\delta_l}$$

$$f(\theta) \equiv f(\theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2ik} (e^{2i\delta_l} - 1) P_l(\cos \theta)$$

总截面

$$\begin{aligned} \rho_l(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sigma &= \int_0^\pi |f(\theta)|^2 \sin \theta d\theta \\ &= \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l \end{aligned}$$

$$\int_0^\pi P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) \sin \theta d\theta = \frac{2}{2l+1} \delta_{l,l'}$$

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l$$

称为 $l$ 分波的散射界面

## 6.7 分波法与低能散射

$$P_l(1) = 1$$

$$\begin{aligned}\Rightarrow f(\theta = 0) &= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2ik} (e^{2i\delta_l} - 1) \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2k} [\sin 2\delta_l + i(1 - \cos 2\delta_l)]\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \sigma = \frac{4\pi}{k} \text{Im} f(0) \quad \text{光学定理}$$

“版权归孙昌璞院士和中国科学院研究生院所有”  
“寇享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载”