ans1_1

第一题：

我们可以得到自由粒子的平面波解：

$$\hat{H}_0|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

$$\text{其中} \qquad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} > 0.$$

$$\hat{H}_0 \psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\psi$$

$$\psi = e^{\pm i\vec{k}*\vec{r}} = e^{\pm ikr\cos\theta}$$

同样我们可以使用分离变量法我们可以得到分波下的解

$$\Psi_k(x) = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} C_{lm} j_t\left(k_r\right) Y_m^l(x,\varphi).$$

$$\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} C_{lm} j_l(kr) Y_m^l(\theta,\varphi) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = e^{ikr\cos\theta}.$$

为简化问题，我们假设平面波的方向是z轴方向，这样可以发现与ϕ无关，即m=0，那么球谐函数可以化简成

$$Y_{l,0}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos\theta).$$

$$e^{ikr\cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty} C_l j_l\left(k_r\right) P_l(\cos\theta)\cdot\sqrt{\frac{2L+1}{4\pi}}$$

$$\text{其中使得} x = \cos\theta$$

$$e^{ikr\cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty} C_l j_l\left(k_r\right) P_l(\cos\theta)\cdot\sqrt{\frac{2L+1}{4\pi}}$$

利用勒让德函数的正交性，在两边同时乘以勒让德函数

$$\sum_{i=v}^{\infty} e^{ikrx} P_{l'}(x) = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{l'=0}^{\infty} C_l j_l(kr) P_l(x) P_{l'}(x)\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}$$

$$\sum_{l=0}^{\infty}\int e^{ibx} P_{l'}(x)dx = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{l'=0}^{\infty} C_l j_l\left(kr\right)\frac{2}{2l+1}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\cdot\delta_{l,l'}$$

$$\sum_{i=d}^{\infty} e^{ikrx} P_l(x)dx = \sum_{i=0}^{\infty} C_l j_l\left(kr\right)\frac{1}{\sqrt{\pi(2l+1)}}$$

$$C_l j_l(kr) = \sqrt{\pi(2l+1)}\int_{-1}^{1} e^{ikrx} P_l(x)\cdot dx.$$

选择对e^{ikrx}进行泰勒展开，则

$$C_l j_l(kr) = \sqrt{\pi(2l+1)}\int_{-1}^{1}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(ikr)^n}{n!}x^n P_l(x)dx$$

这样问题就变成了如何计算$\int_{-1}^{1} x^n P_l(x) dx$，这里由于篇幅有限，直接给出其结果，可以参考《数学物理方法》（第三版）汪德新习题6.3.1。

$$\int_{-1}^{1} x^n P_l(x) dx == \frac{(l+2m)!}{2^l (2m)!} \frac{\Gamma\left(m+\frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(l+m+\frac{1}{2}+1\right).}$$

其中$m = 2n + l$，同时联想到贝塞尔函数可以用Γ函数表示为

$$j_l = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m!\Gamma\left(m+l+\frac{3}{2}\right)} \left(\frac{kr}{2}\right)^{2m+l}$$

结合上面几个式子我们可以将其

$$\frac{\sqrt{\pi}}{2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m C_l \cdot (kr)^{2m+l}}{2^{2m+l}\Gamma\left(m+c+\frac{3}{2}\right)} = \sqrt{\pi(2l+1)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(ikr)^n (1+2m)!\Gamma\left(m+\frac{1}{2}\right)}{2^l (2m)!\Gamma\left(m+l+\frac{3}{2}\right)}$$

$$\text{我们考虑每一个}m\text{的系数一一对应}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{(-1)^m C_l (kr)^{2m+l}}{m!} &= \sqrt{\pi(2l+1)} \frac{(2kr)^{l+2m}}{(l+2m)!} \frac{(l+2m)!}{2^l (2m)!} \Gamma\left(m+\frac{1}{2}\right) \\
C_l &= 2\sqrt{2l+1} \frac{i^{l+2m}}{i^{2m}} \frac{m! \cdot 2^{2m+l} \cdot \pi\left(m+\frac{1}{2}\right)}{2^2 (2m)!} \\
&= 2\sqrt{2l+1} i^l \frac{2^{2m}(2m-1)!!\sqrt{\pi}}{m! 2^m \cdot (2m-1)!! 2^m} \\
C_l &= 2\sqrt{(2L+1)\pi} \quad i^l.
\end{aligned}$$

综上所述我们获得了平面波函数展开的形式

$$\begin{aligned}
\psi_k(x) &= \sum_{l=0}^{\infty} 2\sqrt{(2l+1)\pi} i^l \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} j_l(kr) P_l(\cos\theta). \\
&= \sum_{i=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos\theta).
\end{aligned}$$

第二题

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi + (U(r) + iW(r))\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}.$$

得到其共轭方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu\nu}\nabla^2\psi+(U(r)+iW(r))\psi=i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$$
$$\frac{\hbar^2}{2\pi}\nabla^2\psi^*-(U(r)-iW(r))\psi=i\hbar\frac{\partial\psi^*}{\partial t}.$$
$$\frac{\partial\psi\cdot\psi^*}{\partial t}=\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}+\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}$$
$$\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}+\frac{\psi\partial\psi^*}{\partial t}\right)i\hbar=-\left(\frac{\psi^*\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi-\frac{\hbar^2}{2\mu}\psi\nabla^2\psi^*\right)+2iW(r)\psi\psi^*$$
$$\frac{\partial\left(\varphi\psi^*\right)}{\partial t}=\frac{i\hbar}{2\mu}\left(\nabla\left(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*\right)\right)+\frac{2}{\hbar}W(r)\psi\psi^*$$
$$\frac{\partial}{\partial t}\int dr^3|\psi|^2=\frac{2}{\hbar}\int W(r)|\psi|^2dr^3-\frac{\hbar}{2\mu}\int\nabla\left(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*\right)dr^3.$$
$$\frac{\partial}{\partial t}\int dr^3|\psi|^2=\frac{2}{\hbar}\int W(r)|\psi|^2dr^3-\frac{\hbar}{2\mu}\int\left(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*\right)dA.$$
$$\frac{\partial}{\partial t}\int dr^3|\psi|^2=\frac{2}{\hbar}\int W(r)|\psi|^2dr^3-\frac{1}{2\mu}\int\left(\psi^*\hat{p}\psi-\psi\hat{p}\psi^*\right)dA$$
$$\frac{\partial}{\partial t}\int dr^3|\psi|^2+\frac{\hbar}{2\mu}\int\left(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*\right)dA=\frac{2}{\hbar}\int W(r)|\psi|^2dr^3$$

与守恒的连续性方程比较

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\rho\nabla*\vec{v}=0$$

可以发现当W为负的时候，整体的粒子成减少趋势，即为被吸收现象的解释。

对于无限远处渐进行为

$$\psi(x)=f(\theta,\varphi)\frac{e^{ikr}}{r}$$
$$\begin{aligned}\vec{J}&=\frac{\hbar}{2i\mu}\left[\left(f(\theta,\varphi)\frac{e^{ikr}}{r}\right)^*\nabla\left(f(\theta,\varphi)\frac{e^{ikr}}{r}\right)-\left(f(\theta,\varphi)\frac{e^{ikr}}{r}\right)\nabla\left(f(\theta,\varphi)\frac{e^{ikr}}{r}\right)^*\right]\\&=\frac{1}{\mu}Re[\psi^*\frac{\hbar}{i}\nabla\psi]\end{aligned}$$

球面波也可以用这样的展开

$$\psi(r,\theta)=\sum_{l=0}^{\infty}a_lP_l(\cos\theta)R_{kl}(r)$$

对于径向方程，设

$$\chi(r)=rR(r)$$

将径向方程可以化为，这里可以注意到无论V取什么值都不影响渐进解得形式，就算是其是复数。（也就是其实可以看做其包含吸收）

$$\frac{d^2\chi}{dr^2}+\left(k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}-\frac{2\mu}{\hbar^2}V\right)\chi=0.$$

当$kr\rightarrow\infty$时

$$\frac{d^2\chi}{dr^2}+k^2\chi=0.$$

不难解得

$$\chi = \sin\left(kr + \alpha\right)$$

为了与平面波作区别里面加上相位因子

$$\chi(r) = 2\sin\left(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l\right)$$

这样

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

从这里分离出平面波波函数

$$\psi = \sum_{i=0}^{\infty} a_l\left(\frac{(-i)^l e^{-i\delta_l}}{ir}\left[(-1)^{l+1}e^{-ikr} + e^{ikr}\right]P_l(\cos\theta) + \frac{(-i)^l e^{-i\delta_l}}{ir}\left(e^{2\delta_l i} - 1\right)e^{ikr}P_l(\cos\theta)\right)$$

$$\text{平面波.}\ \psi_{\text{plane}} = \sum_{l=0}^{\infty}\frac{(2l+1)}{2ikr}((-i)^{l+1}e^{-ikr} + e^{ikr})P_l(\cos\theta).$$

$$a_l = \frac{2l+1}{2le}i^l e^{i\delta_l}$$

这样我们可以分离出两个部分，

$$\psi = e^{ikr} + \frac{e^{ikr}}{r}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{2l+1}{2ki}\left(1 - e^{2\delta i}\right)P_l(\cos\theta)$$

$$f(\theta) = \sum(2l+1)\left(1 - e^{2\delta i}\right)P_l(\cos\theta)\cdot\frac{1}{2ki}$$

$$\sigma_t = |f(\theta)|^2\, d\Omega = 2\pi\int_0^{2\pi}\frac{1}{4k^2}\left(\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\left(e^{i2s} - 1\right)P_l(\cos\theta)\right)^2\sin\theta d\theta$$

$$= \frac{4\pi}{k^2}\sum_{0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l$$

当$\theta = 0$我们可以证明其光学定理，物理上解释就是球面波与平面波的干涉项。

$$f(\theta) = \sum\left((2l+1)\left(e^{2\delta i} - 1\right)P_l(1)\right)\frac{1}{2ki} = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\left(e^{2\delta i} - 1\right)\frac{1}{2ki}$$

$$= \sum_{l=0}^{\infty}\frac{1}{2ki}(2l+1)(\cos 2\delta + i\sin 2\delta - 1)$$

$$\operatorname{Im} f(\theta) = \sum_{i=0}^{\infty}\frac{2l+1}{2k}(\cos 2\delta - 1) = \sum_{i=0}^{\infty}\frac{(2l+1)}{2k}\left(\sin^2\delta_l\right)$$

与其相对的我们继续将这个问题，向深挖掘，这里面有个相位因子$e^{i\delta_l}$，当δ_l为实数时其的模一直为1，可以看作为粒子数守恒，但是如果是复数的话，他的模就不一定是一了，所以我们用这个来定义吸收现象。

$$\eta_l = e^{2i\delta_l}$$
$$|\eta_l| \leq 1$$

对于弹性散射问题并没有什么不同，与上面一致将其代换即可

$$\sigma_{el} = \frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)|1 - \eta_l|^2$$

得到弹性散射截面后，现在需要定义一下什么是吸收有效截面σ_{abs}，我们设其为单位时间内被吸收的粒子总数与入射粒子的比值。从粒子流的角度思考这个问题，就是计算在一个足够即计算在一个足够大的球内粒子的通量变化，显而易见的是这是一个负值

$$\Delta P = -\int_{(S)} \vec{J} \cdot \mathrm{dS}$$

其中$\vec{J}$在上面定义过了，显而易见的是在吸收过程中只有径向分量对其有贡献

$$\Delta P = -\int_{r=R_0} J_r r^2 \, \mathrm{d}\Omega$$

将分波展开的波函数带入其中经过积分（与上面过程没有什么大的不同就是将$\eta_l = e^{2i\delta_l}$其带入计算积分）

$$\Delta P = \frac{\hbar k}{\mu} \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left[1 - |\eta_l|^2\right]$$

而入射流概率可以由平面波的形式$e^{i\vec{k}\vec{r}}$来直接得出为$\frac{\hbar k}{\mu}$，则吸收截面为

$$\sigma_{\text{abs}} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left[1 - |\eta_l|^2\right]$$

而总截面为弹性与非弹性相加

$$\begin{aligned} \sigma_{tot} &= \sigma_{el} + \sigma_{abs} \\ &= \frac{2\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left(1 - \mathrm{Re}\, \eta_l\right) \end{aligned}$$

我们再回过头注意到用$\eta_l = e^{2i\delta_l}$来表示$f(\theta)$的形式

$$\begin{aligned} f(0) &= \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left(1 - e^{2\delta i}\right) \frac{1}{2ki} \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{2ki} (2l+1)(1 - \eta_l) \\ \mathrm{Im} f(0) &= \sum_{i=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2k} (1 - Re\ \eta_l) \end{aligned}$$

则光学定理为

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k} \mathrm{Im}\, f_k(0)$$

在伴随吸收现象的散射问题中也是有效的。