第九章、量子跳迁和散射理论初步

$ 9.1 含时微扰论

量子体系在某种外相互作用下，可以在两个定态之间发生跳迁。此时，人们需要计算其跳迁几率。

设在无相互作用时，体系的哈密顿量为 $\hat{H}_0$ 。我们将包括 $\hat{H}_0$ 在内的一组力学量完全集 F 的共同本征态集合记作 $\{\psi_n\}$ 。当外界相互作用 $\hat{H}'(t)$ 加上之后，体系总的哈密顿量为

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}'(t). \tag{1}$$

这里， λ 是一个引进的小参数。在计算过程的最后一步，我们令 $\lambda = 1$ 。而 Schrödinger 方程的解则可写作

$$\psi(\mathbf{r},\, t) = \sum_n C_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \psi_n(\mathbf{r}). \tag{2}$$

注意，此时系数 $C_n(t)$ 一般不是常数。同时，我们假定体系在 $t=0$ 时处于一个定态

$$\psi(t=0) = \psi_k. \tag{3}$$

将 $\psi(\mathbf{r},\, t)$ 代入 Schrödinger 方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(t) = \hat{H}(t)\psi(t) \tag{4}$$

后，我们得到

$$\begin{aligned} & i\hbar \sum_n \dot{C}_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\psi_n(\mathbf{r}) + \sum_n C_n(t) E_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\psi_n(\mathbf{r}) \\ = \ & \sum_n C_n(t) E_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\psi_n(\mathbf{r}) + \lambda \sum_n C_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\hat{H}'(t)\psi_n(\mathbf{r}), \end{aligned} \tag{5}$$

或是

$$i\hbar \sum_n \dot{C}_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\psi_n(\mathbf{r}) = \lambda \sum_n C_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\hat{H}'(t)\psi_n(\mathbf{r}). \tag{6}$$

将这一方程与 $\psi_{k'}$ 做内积后，我们得到

$$i\hbar\dot{C}_{k'}(t) = \lambda\sum_n C_n(t)e^{\frac{i}{\hbar}(E_{k'}-E_n)t}\langle\psi_{k'}|\hat{H}'(t)|\psi_n\rangle. \tag{7}$$

按照微扰论的思路，我们令

$$C_n(t) = \delta_{nk} + \lambda c_n(t). \tag{8}$$

将之代入方程 (7) 并仅保留 λ 的一次幂项后，我们得到

$$i\hbar\dot{c}_{k'}(t) \approx \sum_n e^{\frac{i}{\hbar}(E_{k'}-E_n)t}\delta_{nk}\langle\psi_{k'}|\hat{H}'(t)|\psi_n\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}(E_{k'}-E_k)t}\langle\psi_{k'}|\hat{H}'(t)|\psi_k\rangle. \tag{9}$$

解此方程，当 $k'\neq k$ 时，我们得到

$$C_{k'}(t) = c_{k'}(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt'\, e^{\frac{i}{\hbar}(E_{k'}-E_k)t'}\langle\psi_{k'}|\hat{H}'(t')|\psi_k\rangle. \tag{10}$$

而按照波函数的几率解释，其模平方

$$P_{k'k}(t) \equiv |C_{k'}(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^t dt'\, e^{\frac{i}{\hbar}(E_{k'}-E_k)t'}\langle\psi_{k'}|\hat{H}'(t')|\psi_k\rangle\right|^2 \tag{11}$$

则被视作在时刻 t 时，体系从初始态 ψ_k 跳迁到末态 $\psi_{k'}$ 的几率。同理，我们定义

$$w_{k'k} = \frac{d}{dt}P_{k'k}(t) \tag{12}$$

为体系在单位时间内，从初始态 ψ_k 跳迁到末态 $\psi_{k'}$ 的跳迁速率。需要强调一点的是，由于上面的推导是基于微扰理论的，故仅当 $w_{k'k}\ll 1$ 成立时才有意义。

例 9.1: 考虑一个一维谐振子。假设它具有电荷 q ，并在 $t=-\infty$ 时处于基态。之后，引入一个均匀但场强随时间改变的电场 $\mathbf{E}=\mathcal{E}\exp(-t^2/\tau^2)\mathbf{e}_x$ 。由此导致的微扰哈密顿量可以写作

$$\hat{H}'(t) = -q\mathcal{E}xe^{-\frac{t^2}{\tau^2}}. \tag{13}$$

求当 $t\to\infty$ 时，体系跳迁到第一激发态去的几率。

解: 我们需要计算的量是

$$P_{10} = |c_1(-\infty,\ \infty)|^2. \tag{14}$$

为此，我们先计算

$$\langle\psi_1|\hat{H}'(t)|\psi_0\rangle = -q\mathcal{E}\langle\psi_1|x|\psi_0\rangle e^{-\frac{t^2}{\tau^2}}. \tag{15}$$

利用厄密多项式的定义，我们有

$$\langle\psi_1|x|\psi_0\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ \psi_1^*(x) x \psi_0(x) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}. \tag{16}$$

因此，我们得到

$$\begin{aligned} c_1(-\infty,\ \infty) &= \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dt'\ e^{\frac{i}{\hbar}(E_1-E_0)t'}\langle\psi_1|\hat{H}'(t')|\psi_0\rangle \\ &= \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dt'\ e^{\frac{i}{\hbar}(E_1-E_0)t'}\left(-q\mathcal{E}e^{-\frac{t'^2}{\tau^2}}\right)\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}\frac{(-q\mathcal{E})}{i\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dt'\ e^{\frac{i}{\hbar}(E_1-E_0)t'-\frac{t'^2}{\tau^2}} \\ &= \frac{iq\mathcal{E}}{\sqrt{2\hbar m\omega_0}}\sqrt{\pi}\tau e^{-\frac{\omega_0^2\tau^2}{4}}. \end{aligned} \tag{17}$$

因此，我们所要求的跳迁几率为

$$P_{10} = |c_1(-\infty,\ \infty)|^2 = \frac{q^2\mathcal{E}^2}{2\hbar m\omega_0}\pi\tau^2 e^{-\frac{\omega_0^2\tau^2}{2}}. \tag{18}$$

特别是当 $\tau\to\infty$ ，即微扰相互作用是十分缓慢地加进来时， $P_{10}\to 0$ 。也就是说，体系仍然保持在基态。

例 9.2: 假设微扰哈密顿量具有形式

$$\hat{H}'(t) = \hat{V}(\hat{\mathbf{r}})\left[\theta\left(t+\frac{T}{2}\right)-\theta\left(t-\frac{T}{2}\right)\right]. \tag{19}$$

这里， $\hat{V}(\hat{\mathbf{r}})$ 是一个不依赖于时间的算符，而

$$\theta(t) = \begin{cases} 0, & t<0; \\ 1, & t>0, \end{cases} \tag{20}$$

是所谓阶梯函数。利用含时微扰论计算体系的跳迁几率速率。

按照含时微扰公式，我们有

$$\begin{aligned} c_{k'}(t) &= \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt'\, e^{\frac{i}{\hbar}(E_{k'}-E_k)t'} H'_{k'k}(t') \\ &= -\frac{e^{\frac{i}{\hbar}(E_{k'}-E_k)t}}{E_{k'}-E_k} H'_{k'k}(t) + \int_{-\infty}^{t} dt'\, \frac{\partial H'_{k'k}(t')}{\partial t'} \frac{e^{\frac{i}{\hbar}(E_{k'}-E_k)t'}}{E_{k'}-E_k}. \end{aligned} \tag{21}$$

当 $t > \frac{T}{2}$ 时，上式的第一项为零。因此，我们有

$$\begin{aligned} c_{k'}(t) &= \int_{-\infty}^{t} dt'\, V_{k'k} \left[\delta\left(t' + \frac{T}{2}\right) - \delta\left(t' - \frac{T}{2}\right)\right] \frac{e^{\frac{i}{\hbar}(E_{k'}-E_k)t'}}{E_{k'}-E_k} \\ &= \frac{V_{k'k}}{E_{k'}-E_k}\left[e^{-\frac{i}{2\hbar}(E_{k'}-E_k)T} - e^{\frac{i}{2\hbar}(E_{k'}-E_k)T}\right], \end{aligned} \tag{22}$$

或是

$$P_{k'k}(t) = \frac{|V_{k'k}|^2}{\hbar^2} \frac{\sin^2\left(\frac{E_{k'}-E_k}{2\hbar}T\right)}{\left(\frac{E_{k'}-E_k}{2\hbar}\right)^2}. \tag{23}$$

下面，让我们来分别考虑两种极限情况。

(1) 首先，我们令 $T \to \infty$ 。利用 δ 函数的表达式 (当 $\alpha \to \infty$ 时成立)

$$\frac{\sin^2 \alpha x}{x^2} \to \pi\alpha\delta(x), \tag{24}$$

我们得到

$$\frac{\sin^2\left(\frac{E_{k'}-E_k}{2\hbar}T\right)}{\left(\frac{E_{k'}-E_k}{2\hbar}\right)^2} \to \pi T \delta\left(\frac{E_{k'}-E_k}{2\hbar}\right) = 2\pi\hbar T\delta(E_{k'}-E_k). \tag{25}$$

将之代入 $P_{k'k}(t)$ 的表达式后，我们得到

$$P_{k'k}(t) = \frac{2\pi}{\hbar}|V_{k'k}|^2\delta(E_{k'}-E_k)T. \tag{26}$$

由此，我们得到所要求的跳迁速率为

$$w_{k'k} = \frac{P_{k'k}(t)}{T} = \frac{2\pi}{\hbar}|V_{k'k}|^2\delta(E_{k'}-E_k). \tag{27}$$

上式表明，若常相互作用只在一段时间 T 内起作用，且 T 足够大时，则跳迁速率与时间无关。同时，由于函数 $\delta(E_{k'}-E_k)$ 的存在，这一公式描述的是弹性跳迁过程。

考虑到末态的能量可能是连续的，这一公式又可以进一步写作

$$w_{fi} \equiv \int dE_{k'}\, \rho(E_{k'}) w_{k'k} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{k'k}|^2 \rho(E_k). \tag{28}$$

这里， $\rho(E_k)$ 为能量 E_k 处的态密度函数。此公式被称为 Fermi 的黄金规则。

(2) 接下来，我们再考虑 $T \sim 0$ 的情况。此时，含时微扰 $\hat{H}'(t)$ 既可以解释作一个经典仪器对于一个量子客体在时间间隔 T 内的测量，也可以解释作两个量子客体之间在时间间隔 T 内发生相互作用的哈密顿量。无论是哪种过程，从跳迁几率

$$P_{k'k}(t) = \frac{|V_{k'k}|^2}{\hbar^2} \frac{\sin^2\left(\frac{E_{k'}-E_k}{2\hbar} T\right)}{\left(\frac{E_{k'}-E_k}{2\hbar}\right)^2} = \frac{|V_{k'k}|^2}{\hbar^2} T^2 \frac{\sin^2\left(\frac{E_{k'}-E_k}{2\hbar} T\right)}{\left(\frac{E_{k'}-E_k}{2\hbar} T\right)^2} \tag{29}$$

的图形 (见教科书 393 页上图 12.3 。需要注意的是，图形中的水平轴应为无量纲数 $(E_{k'} - E_k)T/2\hbar$) ，我们可以看到，只有在体系末态的能量 $E_{k'}$ 与初态能量 E_k 之差满足条件

$$\frac{|E_{k'} - E_k|}{2\hbar} T \leq \frac{1}{2} \tag{30}$$

时，过程发生的几率才会明显有别于零。这一事实导致了如下的结果。

假想在引入相互作用势 $\hat{V}(\mathbf{r})$ 之前，我们测量了一次体系的能量，得到读数 $E_k^{(0)}$ ，并使得体系处于一个确定的能量本征态 ψ_k 。而在关闭相互作用 $\hat{V}(\mathbf{r})$ 之后，我们又一次测量体系的能量 (自然，此次测量使得体系的波函数塌缩到一个能量本征态，即末态 $\psi_{k'}$) 。那么，上述事实告诉我们，最有可能得到的能量读数是位于区间 $\left(E_k^{(0)} - \frac{\hbar}{T}, E_k^{(0)} + \frac{\hbar}{T}\right)$ 内的值。这是由于体系跳迁到具有如此能量的末态 $\psi_{k'}$ 几率较大的缘故。换句话说，两次测量所得到的能量之差满足关系式 $\Delta E \cdot \Delta t = \Delta E \cdot T \leq \hbar$ 的几率较大。在文献中，这一结论常用下式

$$\Delta E \cdot \Delta t \sim \hbar \tag{31}$$

表达，并被称为能量测不准关系。正是由于它的存在，使得量子力学特有的所谓虚过程得以发生。有关这一现象的更为详细的讨论，可阅读 Landau 和 Lifschitz 著 “Quantum Mechanics” 一书的第 44 节。

$ 9.2 **散射理论初步**

在三维空间中，一个沿某一方向入射的粒子，在受到一个 “靶子” 所施与的相互作用后，会沿着另外一个方向出射，这就是所谓散射过程。在经典力学中，一旦知道了入射粒子的初始条件，则其出射轨迹也是一定的。但在量子力学中，即使入射粒子的动量是确定的，由于测不准原理，其人们也仅能确定其沿一个给定方向出射的概率分布。具体一点讲，假设入射的粒子具有一个确定的动量 $\mathbf{p}$ 。那么其出射动量为 $\mathbf{p}'$(这里， $|\mathbf{p}'| = |\mathbf{p}|$) 的散射过程的几率分布是由与散射势 $V(\mathbf{r})$ 对应的 Schrödinger 方程的解来决定的。换句话说，这是一个在常相互作用下，初态为 $|\psi_{\mathbf{p}}\rangle$ ，而末态为 $|\psi_{\mathbf{p}'}\rangle$ 的量子跳迁过程。

$ 9.2.1 Born **近似公式**

为了更清晰地解释散射过程中各个物理量的意义，我们先考虑 $V(\mathbf{r})$ 很弱，因此可以视作微扰的情况。此时，我们可以利用 Fermi 的黄金规则公式。

首先，我们有

$$\begin{aligned} H_{\mathbf{p}'\mathbf{p}} &= \langle\psi_{\mathbf{p}'}|\hat{V}|\psi_{\mathbf{p}}\rangle = \int_\Omega \left(\frac{1}{\sqrt{V_\Omega}} e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}'\cdot\mathbf{r}}\right) V(\mathbf{r}) \left(\frac{1}{\sqrt{V_\Omega}} e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}\right) d\mathbf{r} \\ &= \frac{1}{V_\Omega}\int_\Omega V(\mathbf{r}) e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r} \equiv \frac{1}{V_\Omega} V(\mathbf{p}-\mathbf{p}'). \end{aligned} \tag{32}$$

这里，我们使用了箱归一化。在此归一化下，具有动量 $\mathbf{p}'$ 的粒子的态密度函数由下式

$$\rho(E_{\mathbf{p}'})dE_{\mathbf{p}'} = \frac{V_\Omega}{(2\pi\hbar)^3} d\mathbf{p}' = \frac{V_\Omega}{(2\pi\hbar)^3} p'^2 dp' d\Omega \tag{33}$$

来决定。对于自由粒子，我们有 $dE_{\mathbf{p}'} = v'dp'$ 。故粒子的态密度函数为

$$\rho(E_{\mathbf{p}'}) = \frac{V_\Omega p'^2}{v'(2\pi\hbar)^3} d\Omega. \tag{34}$$

代入 Fermi 的黄金规则公式，我们得到

$$w_{\mathbf{p}'\mathbf{p}} = \frac{2\pi}{\hbar}|H_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}|^2 \rho(E_{\mathbf{p}'}) = \frac{2\pi}{\hbar}|V_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}|^2 \frac{p'^2}{v' V_\Omega (2\pi\hbar)^3} d\Omega. \tag{35}$$

在散射理论中，粒子的散射截面被定义作

$$w_{\mathbf{p}'\mathbf{p}} \equiv j_{\text{in}} \sigma(\theta) d\Omega. \tag{36}$$

这里，

$$j_{\text{in}} = \left| -\frac{i\hbar}{2mV_\Omega}\left(\psi_{\mathbf{p}}^*\nabla\psi_{\mathbf{p}} - \psi_{\mathbf{p}}\nabla\psi_{\mathbf{p}}^*\right)\right| = \left| -\frac{i\hbar}{2mV_\Omega}\left(2\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\right)\right| = \frac{p}{mV_\Omega} = \frac{v}{V_\Omega}, \tag{37}$$

是入射粒子的流密度。比较公式 (35) 和 (36) 后，我们得到散射截面的表达式

$$\sigma(\theta) = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4}|V(\mathbf{p}-\mathbf{p}')|^2 = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4}\left|\int e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\cdot\mathbf{r}}V(\mathbf{r})d\mathbf{r}\right|^2. \tag{38}$$

这一公式在文献中被称为计算散射截面的 Born 近似公式。它仅在散射相互作用势可以被作为微扰处理的情况下是成立的。

例 9.3: Yukawa 势的 Born 散射截面。 Yukawa 势可以写作

$$V(r) = \frac{Ze^2}{r}\exp(-\alpha r). \tag{39}$$

其 Fourier 变换为

$$V(\mathbf{p}-\mathbf{p}') = \int_\Omega \exp\left(\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\cdot\mathbf{r}\right)\frac{Ze^2}{r}\exp(-\alpha r)\,d\mathbf{r}. \tag{40}$$

令 $\mathbf{p}-\mathbf{p}'=\hbar\mathbf{q}$ 并取 $\mathbf{q}$ 的方向为 z 轴的方向，则我们得到

$$\begin{aligned}
V(\mathbf{q}) &= \int_0^\infty r^2\,dr\int_0^\pi \sin\theta\,d\theta\int_0^{2\pi}d\varphi\,\frac{Ze^2}{r}e^{iqr\cos\theta}e^{-\alpha r}\\
&= 2\pi\int_0^\infty dr\,r^2\cdot\frac{Ze^2}{r}\cdot e^{-\alpha r}\left(-\frac{e^{iqr\cos\theta}}{iqr}\right)\Bigg|_0^\pi\\
&= \frac{2\pi Ze^2}{iq}\int_0^\infty dr\left(e^{-\alpha r+iqr}-e^{-\alpha r-iqr}\right)\\
&= \frac{2\pi Ze^2}{iq}\left(\frac{e^{-\alpha r+iqr}}{-\alpha+iq}\Bigg|_0^\infty - \frac{e^{-\alpha r-iqr}}{-\alpha-iq}\Bigg|_0^\infty\right)\\
&= \frac{2\pi Ze^2}{iq}\left(\frac{(-1)}{-\alpha+iq}-\frac{(-1)}{-\alpha-iq}\right)\\
&= -\frac{2\pi Ze^2}{iq}\cdot\frac{(-2iq)}{\alpha^2+q^2} = \frac{4\pi Ze^2}{\alpha^2+q^2}.
\end{aligned} \tag{41}$$

因此， Yukawa 势的 Born 散射截面为

$$\sigma(\theta) = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4}|V(\mathbf{q})|^2 = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4}\cdot\frac{16\pi^2Z^2e^4}{(\alpha^2+q^2)^2} = \frac{4m^2Z^2e^4}{\hbar^4}\cdot\frac{1}{(\alpha^2+q^2)^2}. \tag{42}$$

特别是当 $\alpha \to 0$ 时，我们得到著名的 Rutherford 散射公式

$$\begin{aligned}\sigma(\theta) &= \frac{4m^2Z^2e^4}{\hbar^4}\cdot\frac{1}{q^4} = \frac{4m^2Z^2e^4}{\hbar^4}\cdot\frac{1}{\left(\frac{p^2+p'^2}{\hbar^2}-\frac{2\mathbf{p}\cdot\mathbf{p}'}{\hbar^2}\right)^2} \\ &= \frac{4m^2Z^2e^4}{p^4}\cdot\frac{1}{16\sin^4\frac{\theta}{2}} = \frac{Z^2e^4}{16E^2}\cdot\frac{1}{\sin^4\frac{\theta}{2}}. \end{aligned} \tag{43}$$

$ 9.2.2 **分波法**

当散射势很强，不能再当作微扰处理时，我们必须回到 Schrödinger 方程的解，从第一性原理出发，计算散射截面。

为此，我们将空间分为三个区，即粒子入射区 (I 区) ，相互作用区 (II 区) 以及粒子出射区 (III 区) 。我们假设在 I 区和 III 区，入射粒子与靶粒子之间的相互作用可以略去不计。特别是在 I 区，为了确定起见，我们可以取入射粒子的动量方向为坐标的 z 轴方向。因此，入射粒子的波函数可以写作

$$\psi_{\rm in} = \psi_{\mathbf{p}} = \frac{1}{\sqrt{V_\Omega}}e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} = \frac{1}{\sqrt{V_\Omega}}e^{ikz}. \tag{44}$$

从特殊函数理论我们得知，这一函数可以按照球谐函数展开并有如下的渐近行为

$$\begin{aligned}\psi_{\rm in} &= \frac{1}{\sqrt{V_\Omega}}e^{ikz} = \frac{1}{\sqrt{V_\Omega}}e^{ikr\cos\theta} = \frac{1}{\sqrt{V_\Omega}}\sum_{l=0}^{\infty}\sqrt{4\pi(2l+1)}\, i^l j_l(kr)Y_{l0}(\cos\theta) \\ &\xrightarrow{r\to\infty} \frac{1}{\sqrt{V_\Omega}}\sum_{l=0}^{\infty}\sqrt{4\pi(2l+1)}\, i^l\frac{1}{2ikr}\left[e^{i(kr-l\pi/2)}-e^{-i(kr-l\pi/2)}\right]Y_{l0}(\cos\theta). \end{aligned} \tag{45}$$

(有关函数 $j_l(kr)$ 的渐近展开表达式的讨论，可见教科书 528 页上的式 (A6.27)) 。其中，与 $\frac{1}{r}\exp[i(kr-l\pi/2)]$ 成正比的部分称为外向传播球面波，记作 $\psi_l^{\rm ex}$ (这里，上标 “ex” 为 “explosion” 的缩写) 。类似地，与 $\frac{1}{r}\exp[-i(kr-l\pi/2)]$ 成正比的部分称为内向转播球面波，记作 $\psi_l^{\rm im}$ (这里，上标 “im” 为 “implosion” 的缩写) 。我们看到，实际上粒子的入射波函数是两者的等权重线性叠加。

在 III 区，经过势场散射以后的出射波函数则可以写作

$$\psi_{\rm out} = \psi_{\rm in} + \psi_{\rm sc} = \frac{1}{\sqrt{V_\Omega}}e^{ikz} + \psi_{\rm sc}. \tag{46}$$

其中， $\psi_{\rm sc}$ 代表散射波函数。对于这一波函数，我们期待它在 $r\to\infty$ 时，具有如下的渐近形式

$$\psi_{\rm sc}\approx\sum_{l=0}^{\infty}C_l\frac{1}{r}e^{i(kr-l\pi/2)}Y_{l0}(\cos\theta), \tag{47}$$

即它完全由外向传播球面波叠加而成。其中， C_l 为叠加系数。为了与入射波 $\psi_{\rm in}$ 相比较，我们可以将其写作

$$C_l=\frac{1}{\sqrt{V_\Omega}}\sqrt{4\pi(2l+1)}\,i^l\,\frac{1}{2ik}\,a_l. \tag{48}$$

其中， a_l 为新定义的展开系数。将之代入 $\psi_{\rm out}$ 的表达式 (46) 后，我们得到

$$\begin{aligned}
&\psi_{\rm out}=\psi_{\rm in}+\psi_{\rm sc}\\
\stackrel{r\to\infty}{\longrightarrow}\quad&\frac{1}{\sqrt{V_\Omega}}\sum_{l=0}^{\infty}\sqrt{4\pi(2l+1)}\,i^l\,\frac{1}{2ikr}\left[e^{i(kr-l\pi/2)}-e^{-i(kr-l\pi/2)}\right]Y_{l0}(\cos\theta)\\
+\quad&\frac{1}{\sqrt{V_\Omega}}\sum_{l=0}^{\infty}\sqrt{4\pi(2l+1)}\,i^l\,a_l\,\frac{1}{2ikr}e^{i(kr-l\pi/2)}Y_{l0}(\cos\theta)\\
=\quad&\frac{1}{\sqrt{V_\Omega}}\sum_{l=0}^{\infty}\sqrt{4\pi(2l+1)}\,i^l\,\frac{1}{2ikr}\left[(1+a_l)e^{i(kr-l\pi/2)}-e^{-i(kr-l\pi/2)}\right]Y_{l0}(\cos\theta).
\end{aligned}\tag{49}$$

因此，为了保证几率流守恒，下面的等式

$$|1+a_l|=1 \tag{50}$$

对于任何轨道角动量量子数 l 都应该成立 (这是由于在中心势场中，粒子的轨道角动量是一个守恒量。不同角动量的状态在散射过程中不会混合在一起) 。也就是说， $1+a_l$ 应该是一个模为 1 的复数。我们将之记作 $e^{2i\delta_l}$ ，或是

$$a_l=e^{2i\delta_l}-1=2ie^{i\delta_l}\sin\delta_l. \tag{51}$$

这样，我们有

$$\psi_{\rm sc}(r,\,\theta)\stackrel{r\to\infty}{\longrightarrow}\frac{1}{\sqrt{V_\Omega}}\sum_{l=0}^{\infty}\sqrt{4\pi(2l+1)}\,i^l\frac{1}{2ikr}2ie^{i\delta_l}\sin\delta_l e^{i(kr-l\pi/2)}Y_{l0}(\cos\theta). \tag{52}$$

对于这一波函数，其沿矢径方向的几率流密度函数为

$$\begin{aligned}
j^r_{\rm sc}(\theta)\quad&=\quad-\frac{i\hbar}{2m}\left[\psi^*_{\rm sc}\frac{\partial}{\partial r}\psi_{\rm sc}-\psi_{\rm sc}\frac{\partial}{\partial r}\psi^*_{\rm sc}\right]\\
&\stackrel{r\to\infty}{\longrightarrow}\quad\frac{\hbar}{mV_\Omega}\left|\sum_{l=0}^{\infty}\sqrt{(2l+1)}e^{i\delta_l}\sin\delta_l Y_{l0}(\cos\theta)\right|^2\frac{4\pi}{kr^2}.
\end{aligned}\tag{53}$$

现在，我们可以来计算散射截面了。为此，让我们将公式 (36) 改写作

$$\sigma(\theta) = \frac{1}{j_{\rm in}} \frac{w_{\mathbf{p}',\mathbf{p}}}{d\Omega}. \tag{54}$$

另一方面，又根据几率流的定义，我们可以将 $w_{\mathbf{p}',\mathbf{p}}$ 写作

$$w_{\mathbf{p}',\mathbf{p}} = j_{\rm sc}^r r^2 d\Omega = \frac{\hbar}{mV_\Omega} \left| \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{4\pi(2l+1)}\, e^{i\delta_l} \sin\delta_l Y_{l0}(\cos\theta) \right|^2 \frac{4\pi}{k} d\Omega. \tag{55}$$

将它与公式 (54) 联立，并将 $j_{\rm in} = \frac{v_{\rm in}}{V_\Omega} = \frac{\hbar k}{mV_\Omega}$ 代入后，我们得到

$$\sigma(\theta) = \frac{1}{j_{\rm in}} \frac{w_{\mathbf{p}',\mathbf{p}}}{d\Omega} = \frac{4\pi}{k^2} \left| \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{4\pi(2l+1)} e^{i\delta_l} \sin\delta_l Y_{l0}(\cos\theta) \right|^2. \tag{56}$$

由于散射截面被写成了对于来自不同角动量 l 的贡献的求和，它被称为散射截面的分波求和公式。公式中的 δ_l 称为 l 分量的相移。这样，求一个粒子的微分散射截面的问题现在被转化成了求相移 δ_l 的问题了。

为了求得 δ_l，我们需要考虑粒子在 II 区运动所满足的 Schrödinger 方程

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}r^2\frac{dR_l}{dr} + k^2 R_l - \frac{l(l+1)}{r^2}R_l - \frac{2mV(r)}{\hbar^2}R_l = 0 \tag{57}$$

的解。当 $r\to\infty$ 时，这一方程退化为

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}r^2\frac{dR_l}{dr} + k^2 R_l - \frac{l(l+1)}{r^2}R_l \approx 0. \tag{58}$$

它应该有两个线性无关的解。而任何一个通解都是这两个线性无关解的叠加，也就是说，它含有两个待定常数。这两个常数是由波函数在 $r\to\infty$ 的渐近行为来决定的。对于散射问题，通过上面的讨论我们知道，在 III 区，其渐近形式应该为

$$\begin{aligned} R_l(kr) &\stackrel{r\to\infty}{\longrightarrow} D_l \frac{1}{2ikr}\left[(1+a_l)e^{i(kr-l\pi/2)} - e^{-i(kr-l\pi/2)}\right] \\ &= D_l \frac{1}{2ikr}\left[e^{2i\delta_l}e^{i(kr-l\pi/2)} - e^{-i(kr-l\pi/2)}\right], \end{aligned} \tag{59}$$

或是

$$R_l(kr) \stackrel{r\to\infty}{\longrightarrow} \widetilde{D}_l \frac{1}{kr}\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right). \tag{60}$$

其中， $\widetilde{D}_l$ 和 δ_l 为两个常数。不难看出，这里的 δ_l 既是我们要求的相移。

最后，在通过具体举例来讲解如何求解相移之前，让我们利用球谐函数所满足的正交关系

$$\int Y_{l'0}^*(\theta,\,\phi)Y_{l0}(\theta,\,\phi)\,d\Omega = \delta_{l'l}, \tag{61}$$

给出粒子散射总截面的表达式

$$\sigma_{\rm tot} = \int \sigma(\theta)\,d\Omega = \frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l. \tag{62}$$

这一公式在文献中经常会被提到。

例 9.4: 刚性球的散射截面。假设散射势具有如下的形式

$$V(r) = \begin{cases} \infty, & r<a; \\ 0, & r>a. \end{cases} \tag{63}$$

则它被称为刚球势。我们现在利用分波法来求它的散射截面。

在球对称势中，单粒子的径向波函数 $R_l(r)$ 所满足的 Schrödinger 方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}R_l(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}R_l(r) + V(r)R_l(r) = ER_l(r). \tag{64}$$

当 $r>a$ 时，上式退化为

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}R_l(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}R_l(r) + \frac{2mE}{\hbar^2}R_l(r) = 0, \tag{65}$$

或是

$$\frac{d^2R_l(r)}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR_l(r)}{dr} + \frac{2mE}{\hbar^2}R_l(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}R_l(r) = 0. \tag{66}$$

令 $\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}r = kr = x$ ，我们进一步得到

$$\frac{d^2R_l(x)}{dx^2} + \frac{2}{x}\frac{dR_l(x)}{dx} + \left(1 - \frac{l(l+1)}{x^2}\right)R_l(x) = 0. \tag{67}$$

这一方程的解为所谓的球 Bessel 函数 (见教科书 524 页上的附录六) 。可以被写作

$$j_l(x) = (-1)^l x^l\left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^l\frac{\sin x}{x}, \quad n_l(x) = (-1)^{l+1}x^l\left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^l\frac{\cos x}{x}. \tag{68}$$

而方程的通解则为它们的一个线性组合

$$R_l(x) = R_l(kr) = C_1 j_l(kr) + C_2 n_l(kr). \tag{69}$$

利用边条件

$$R_l(ka) = 0 = C_1 j_l(ka) + C_2 n_l(ka), \tag{70}$$

我们可得

$$\begin{aligned} & R_l(kr) = C\left[n_l(ka) j_l(kr) - j_l(ka) n_l(kr)\right] \\ = \; & C\sqrt{n_l^2(ka) + j_l^2(ka)}\left(\frac{n_l(ka)}{\sqrt{n_l^2(ka) + j_l^2(ka)}} j_l(kr) - \frac{j_l(ka)}{\sqrt{n_l^2(ka) + j_l^2(ka)}} n_l(kr)\right) \\ = \; & D_l\left[\cos\theta_l j_l(kr) - \sin\theta_l n_l(kr)\right]. \end{aligned} \tag{71}$$

另一方面，当 $r \to \infty$ 时，我们有如下的渐近表达式

$$j_l(kr) \approx \frac{1}{kr}\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right), \quad n_l(kr) \approx -\frac{1}{kr}\cos\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right). \tag{72}$$

代入方程通解的表达式后，我们可得其渐近形式为

$$R_l(kr) \approx \frac{D_l}{kr}\left[\cos\theta_l \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) + \sin\theta_l \cos\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)\right] = D_l \frac{\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \theta_l\right)}{kr}. \tag{73}$$

与方程 (60) 进行比较后，我们得到 $\delta_l = \theta_l$ 。因此，我们有

$$\tan\delta_l = \frac{\sin\delta_l}{\cos\delta_l} = \frac{j_l(ka)}{n_l(ka)}, \tag{74}$$

或是

$$\sin^2\delta_l = \frac{j_l^2(ka)}{j_l^2(ka) + n_l^2(ka)}. \tag{75}$$

将其代入方程 (62) 后，我们得到刚球散射的总截面为

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\frac{j_l^2(ka)}{j_l^2(ka) + n_l^2(ka)}. \tag{76}$$

例 9.5: 有限深方势阱的势可以写作

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & r < r_0; \\ 0, & r > r_0. \end{cases} \tag{77}$$

利用分波法来求一个慢粒子的散射截面。

解：对于慢粒子，我们仅需考虑其 s 波散射截面。当粒子的角动量 $l=0$ 时，其在 $r<r_0$ 区域内的 Schrödinger 方程可以写作

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}r^2\frac{dR_0(r)}{dr}-V_0R_0(r)=ER_0(r). \tag{78}$$

并要求其在 $r=0$ 处的值，即 $R_0(0)$ 为一有限数值。

令 $R_0(r)=\frac{\chi(r)}{r}$ ，则上式可以被改写作

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\chi''(r)-V_0\chi(r)=E\chi(r), \tag{79}$$

或是

$$\chi''(r)+\frac{2m}{\hbar^2}(E+V_0)\chi(r)=0. \tag{80}$$

这一方程的解为

$$\chi(r)=C_1e^{iKr}+C_2e^{-iKr}, \quad K^2=\frac{2m}{\hbar^2}(E+V_0). \tag{81}$$

显然，为了使得 $R_0(0)$ 为一有限数值， $\chi(0)=0$ 必须成立。因此，在势阱内，我们有

$$R_0(r)=\frac{1}{r}\chi(r)=C\frac{\sin Kr}{r}. \tag{82}$$

另一方面,势阱外 $(r>r_0)$ 区域中解的形式应该为 $\widetilde{R}_0(r)=D_1\frac{e^{ikr}}{r}+D_2\frac{e^{-ikr}}{r}, k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$ 。又由于在这一区域内相互作用为零，我们可以将它视作区域 III ，即粒子的散射区。因此，根据渐近表达式 (60) ， $\widetilde{R}_0(r)$ 应该可以被写作

$$\widetilde{R}_0(r)=G\frac{\sin(kr+\delta_0)}{kr}=\widetilde{G}\frac{\sin(kr+\delta_0)}{r}. \tag{83}$$

为此，我们只需要取 $D_1=\widetilde{G}e^{i\delta_0}/2i, D_2=-\widetilde{G}e^{-i\delta_0}/2i$ 即可。而相移 δ_0 则需要通过波函数在势阱边界处的连接条件

$$R_0(r_0)=\widetilde{R}_0(r_0), \quad R_0'(r_0)=\widetilde{R}_0'(r_0) \tag{84}$$

来定出。利用 $R_0(r)$ 和 $\widetilde{R}_0(r)$ 的具体形式，我们得到

$$C\sin Kr_0=\widetilde{G}\sin(kr_0+\delta_0), \quad CK\cos Kr_0=\widetilde{G}k\cos(kr_0+\delta_0), \tag{85}$$

或是

$$K\,\mathrm{ctg}Kr_0 = k\,\mathrm{ctg}(kr_0+\delta_0). \tag{86}$$

令 $D = K\mathrm{ctg}Kr_0$，则上式可以写作

$$\frac{k}{D} = \tan(kr_0+\delta_0) = \frac{\tan kr_0 + \tan\delta_0}{1-\tan kr_0 \tan\delta_0}. \tag{87}$$

从此方程，我们得到

$$\frac{k}{D} - \frac{k}{D}\tan kr_0 \tan\delta_0 = \tan kr_0 + \tan\delta_0, \tag{88}$$

或是

$$\frac{k}{D} - \tan kr_0 = \left(1+\frac{k}{D}\tan kr_0\right)\tan\delta_0. \tag{89}$$

由此，我们解得

$$\tan\delta_0 = \frac{\frac{k}{D}-\tan kr_0}{1+\frac{k}{D}\tan kr_0}, \tag{90}$$

或是

$$\delta_0 = \arctan\frac{\frac{k}{D}-\tan kr_0}{1+\frac{k}{D}\tan kr_0}. \tag{91}$$

因此，有限深势阱的 s 波散射截面为

$$\sigma_s = \frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0 = \frac{4\pi}{k^2}\sin^2\left(\arctan\frac{\frac{k}{D}-\tan kr_0}{1+\frac{k}{D}\tan kr_0}\right). \tag{92}$$

当 $kr_0 \ll 1$ 时，上式可进一步化为

$$\sigma_s \approx \frac{4\pi}{k^2}\sin^2\left(\frac{k}{D}-\tan kr_0\right) \approx \frac{4\pi}{k^2}\sin^2\left[kr_0\left(\frac{\tan Kr_0}{Kr_0}-1\right)\right]. \tag{93}$$

从 S- 波微分散射截面的表达式 (92)，我们立刻可得的一个结论是，当

$$\frac{k}{D} - \tan kr_0 = 0 \tag{94}$$

或是

$$k\,\mathrm{ctg}kr_0 = K\mathrm{ctg}Kr_0 \tag{95}$$

成立时，$\sigma_s = 0$。即当入射粒子的能量使得这一条件满足时，势阱对它的散射消失了。这一现象称为 Ramsauer 效应，由 Ramsauer 在 1921 年观察到。他用能量为 0.7 电子伏的慢电子轰击 Ar, Kr, Xe 等惰性气体时，发现散射非常微弱。这是由于这些惰性气体的原子核的库仑势被满壳层分布的电子云所屏蔽，衰减很快，可以有效地用一个短程方势阱加以描述的缘故。显然，Ramsauer 效应是无法用经典物理学加以解释的。

当取极慢速极限 $k \to 0$ 后，我们得到

$$\lim_{k\to 0} \sigma_s = 4\pi \lim_{k\to 0} \frac{\sin^2 \delta_0}{k^2} = 4\pi \left(\frac{\tan K_0 r_0}{K_0} - r_0 \right)^2 . \tag{96}$$

这里，$K_0 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} V_0}$。显然，括号中的量

$$a = r_0 - \frac{\tan K_0 r_0}{K_0} = \lim_{k\to 0} \left(-\frac{\delta_0}{k} \right) \tag{97}$$

具有长度的量纲，称为散射长度 (见 Landau 和 Lifschitz 著 “Quantum Mechanics” 一书 544 页上的 (132.9) 式)。当吸引势 $V_0 \neq 0$ 时，这一长度是负数。同时，我们也看到，σ_s 是经典截面 $\sigma_0 \approx \pi a^2$ 的 4 倍。这是由于粒子分布几率幅的叠加干涉引起的。

练习：习题集 13.1， 13.2， 13.6， 14.2。