量子力学

第九章：散射

杨焕雄

中国科学技术大学物理学院近代物理系

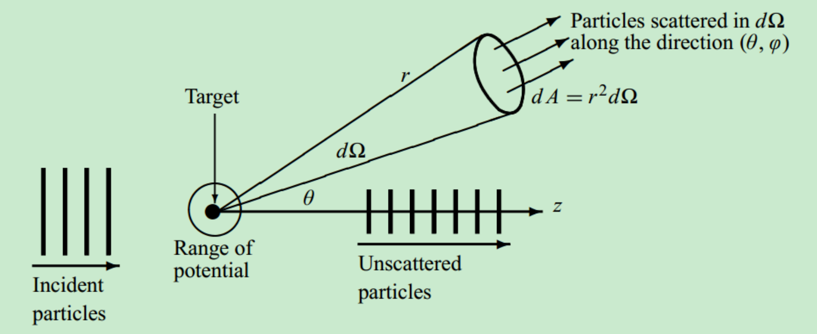
hyang@ustc.edu.cn

December 27, 2018

一般性描述：

散射又称作量子碰撞。它是研究微观粒子运动规律、相互作用以及它们的内部结构的基础，在亚原子物理学的发展中占有举足轻重的地位。

在散射实验中，具有确定动量的粒子沿确定的方向射向靶粒子、受到靶粒子的作用后发生偏转。这就是散射的基本物理图像。

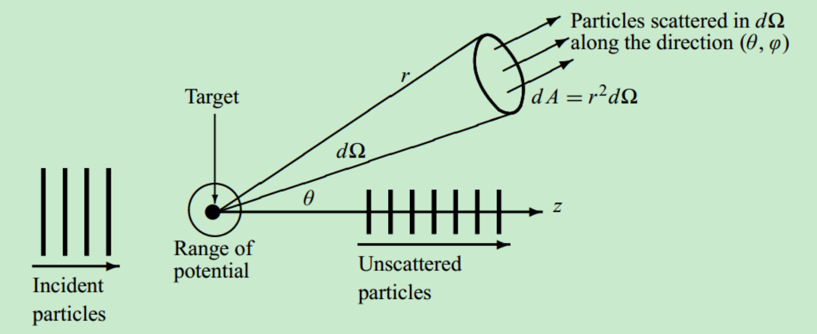


警告：

1. 入射粒子与靶粒子的相互作用只在空间一个小区域中才比较显著. 因此，入射粒子与出射粒子均处于自由粒子态[1].
2. 如果在散射过程中，入射粒子和靶粒子之间没有发生能量的传递、因而二者的相对运动能量没有发生变化，则称这种散射为弹性散射. 否则即为非弹性散射. 本课程仅考虑弹性散射.

[1]散射过程实际上是由于空间小区域中的相互作用导致的粒子从一个自由粒子态向另一个自由粒子态的跃迁.

散射的实验资料:



取入射粒子的入射方向为 z 轴，入射粒子的概率流密度矢量为:

$$\vec{J}_i = J_i \hat{k}$$

因为靶粒子的作用，粒子将会沿各个方向被散射．它在单位时间内沿 (θ, ϕ) 方向的立体角 $d\Omega$ 出射的概率

$$dP \sim J_i d\Omega$$

把上式写为等式，即有：

$$\boxed{dP = \sigma(\theta,\phi) J_i d\Omega}$$

比例系数 $\sigma(\theta,\phi)$ 具有面积的量纲，故散射理论中常称其为微分散射截面.

1. $\sigma(\theta,\phi)$ 是散射实验的可观测物理量之一，它就是散射问题中的实验资料.

设入射粒子的动能为 E，其初态波函数为动量的本征函数：

$$\psi_i = e^{ikz}$$

此处 $k = \sqrt{2\mu E}/\hbar$. 进入到靶粒子势场 $V(\vec{r})$ 的有效力程之后，出射粒子的行为由如下薛定谔方程决定：

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(\vec{r})\right]\psi = E\psi$$

散射理论的重要任务之一就是要设法把散射截面等观测量与反映相互作用 $V(\vec{r})$ 及粒子内部结构的薛定谔方程的解 ψ 联系起来.

下面开始研究这种联系的具体形式.

实验上观测微分散射截面都是在远离靶粒子的地点进行的. 因此, $\sigma(\theta, \phi)$ 应由薛定谔方程在 $r = |\vec{r}| \rightsquigarrow +\infty$ 极限下的渐近行为所决定.

设靶粒子提供的相互作用有效势能具有球对称性, $V(\vec{r}) = V(r)$, 且:

$$V(r)\Big|_{r\to+\infty} = 0$$

如此, $r \rightsquigarrow +\infty$ 情形下的薛定谔方程的解可在球坐标系里近似地表为:

$$\psi = \mathscr{R}(r)\mathscr{Y}_{lm}(\theta, \phi)$$

式中,

$$E\mathscr{R} = \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(r)\right]\mathscr{R} \approx -\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d\mathscr{R}}{dr}\right)$$

令 $\mathscr{R}(r) = u(r)/r$, 不难看到:

$$\frac{d^2u}{dr^2} + k^2u \approx 0, \qquad \rightsquigarrow \quad u(r) = Ae^{ikr} + Be^{-ikr}$$

计及散射问题的物理图像，应取积分常数 $B = 0$. 因此，薛定谔方程的散射解在 $r \rightsquigarrow +\infty$ 处的渐近行为可表达为:

$$\boxed{\psi(r,\theta,\phi)\Big|_{r\to+\infty} \sim e^{ikz} + f(\theta,\phi)\frac{e^{ikr}}{r}}$$

理由:

- 若没有靶粒子的作用，入射粒子将仍处在 $\psi_i = e^{ikz}$ 描写的动量本征态.
- 在有靶粒子存在的情形下，靶粒子的作用将使得粒子在出射时改变方向，从而出现散射概率波. 在远离靶粒子的地点，散射波是球面波:

$$f(\theta,\phi)\frac{e^{ikr}}{r}$$

其中 $f(\theta,\phi)$ 是沿 (θ,ϕ) 方向传播出去的散射波振幅，称为散射振幅.

评论:

首先思考两个问题:

- $\mathcal{Q}$: 怎样确定 $f(\theta,\phi)$ 的确切形式?
- $\mathcal{Q}$: 微分散射截面 $\sigma(\theta,\phi)$ 与散射振幅 $f(\theta,\phi)$ 有何联系?

显然, 只有通过求解薛定谔方程:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+V(r)\right]\psi=E\psi$$

并求出它在 $r\rightsquigarrow+\infty$ 处的渐近解, 才能最终确定散射振幅 $f(\theta,\phi)$ 的具体形式.

$r\rightsquigarrow+\infty$ 处散射波波函数的渐近行为是:

$$\psi_s\Big|_{r\rightarrow+\infty}\sim f(\theta,\phi)\frac{e^{ikr}}{r}$$

因此，$r \rightsquigarrow +\infty$ 处的概率流密度矢量沿 (θ,ϕ) 方向的投影为：

$$\begin{aligned} J_s &= \frac{i\hbar}{2\mu}\left(\psi_s\partial_r\psi_s^* - \psi_s^*\partial_r\psi_s\right)\Big|_{r\to+\infty} \\ &= \frac{i\hbar}{2\mu}|f(\theta,\phi)|^2\left(-\frac{ik}{r^2}-\frac{1}{r^3}-\frac{ik}{r^2}+\frac{1}{r^3}\right) = \frac{\hbar k}{\mu}\frac{|f(\theta,\phi)|^2}{r^2} \end{aligned}$$

注意到 $\vec{J}_s$ 的物理意义：粒子在单位时间内沿 (θ,ϕ) 方向单位截面出射的概率，因此，出射粒子在单位时间内进入到 (θ,ϕ) 方向的立体角 $d\Omega$ 中的概率为：

$$dP = J_s ds = J_s r^2 d\Omega = \frac{\hbar k}{\mu}|f(\theta,\phi)|^2\, d\Omega$$

此概率又可等价地写为：

$$dP = \sigma(\theta,\phi)J_i d\Omega$$

再注意到入射粒子的概率流密度矢量的大小是：

$$J_i = \frac{i\hbar}{2\mu}\left(\psi_i\partial_z\psi_i^* - c.c.\right) = \frac{\hbar k}{\mu}$$

把这几个公式相结合，可得：

$$\boxed{\sigma(\theta,\phi)=|f(\theta,\phi)|^2}$$

- 有了 $\sigma(\theta,\phi)$ 之后，还可以进一步计算总的散射截面：

$$\begin{aligned}\sigma_T &= \int d\Omega\,\sigma(\theta,\phi)\\ &= \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} |f(\theta,\phi)|^2 \sin\theta d\theta\end{aligned}$$

- 真实的散射实验常设计的使出射粒子波函数服从轴对称的边界条件：

$$\psi(r,\theta,\phi)\Big|_{r\to+\infty} \sim e^{ikz}+f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}$$

如此，微分散射截面与总截面的计算公式简化为：

$$\sigma(\theta)=|f(\theta)|^2, \quad \sigma_T=2\pi\int_0^{\pi}|f(\theta)|^2\sin\theta d\theta$$

小结：

1. 如果入射粒子与靶粒子之间的相互作用有效势能 $V(\vec{r})$ 已知，则求微分散射截面的问题最终归结为在边界条件

$$\psi(r,\theta,\phi)\Big|_{r\to+\infty} \sim e^{ikz} + f(\theta,\phi)\frac{e^{ikr}}{r}$$

成立的前提下通过求解薛定谔方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(\vec{r})\right]\psi = E\psi$$

确定散射振幅 $f(\theta,\phi)$. 这一程序俗称量子力学的正散射问题.

2. 在中心力场情形下，$V(\vec{r}) = V(r)$，处理量子力学正散射问题的方法通常有两种：分波法；玻恩近似.

Q: 什么是分波法？

分波法，简单地说，就是在处理中心力场散射问题时采取了角动量表象。

粒子在中心力场 $V(r)$ 中运动时其哈密顿算符常具有形式：

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(r)$$

不难看出：

$$[\hat{H},\ \hat{\vec{L}}] = [\hat{H},\ \hat{\vec{L}}^2] = [\hat{\vec{L}}^2,\ \hat{\vec{L}}] = 0$$

粒子的轨道角动量是守恒量且 $\{\hat{H},\ \hat{\vec{L}}^2,\ \hat{L}_z\}$ 形成了一组对易力学量算符的集合。因此，在试图通过求解薛定谔方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(\vec{r})\right]\psi = E\psi$$

确定散射振幅 $f(\theta)$ 时，选择 $\{\hat{H}, \hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_z\}$ 的共同函数系：

$$\psi_{lm}(r, \theta, \phi) = \mathscr{R}_l(kr)\mathscr{Y}_{lm}(\theta, \phi)$$

作为 Hilbert 空间的基是方便的，式中，

$$l = 0,\ 1,\ 2, \cdots;\quad m = 0,\ \pm 1,\ \pm 2,\ \cdots,\ \pm l$$

常称此选择为采取了角动量表象. 这就是分波法的基础.

- 每一个确定 l 值的径向波函数 $\mathscr{R}_l(kr)$ 称为一个分波. 例如 $\mathscr{R}_0(kr)$ 称为 s 波 ($l = 0$)，$\mathscr{R}_1(kr)$ 称为 p 波 ($l = 1$)，$\mathscr{R}_2(kr)$ 称为 d 波 ($l = 2$). 分波 $\mathscr{R}_l(kr)$ 服从径向薛定谔方程：

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d\mathscr{R}_l}{dr}\right) + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - U(r)\right]\mathscr{R}_l = 0$$

式中，

$$k^2 = 2\mu E/\hbar^2,\quad U(r) = 2\mu V(r)/\hbar^2.$$

显然，分波 $\mathscr{R}_l(kr)$ 的具体形式依赖于相互作用势能 $V(r)$.

- $\mathscr{Y}_{lm}(\theta,\phi)$ 是球谐函数，它们是 $\hat{\vec{L}}^2$ 与 $\hat{L}_z$ 的共同本征函数：

$$\mathscr{Y}_{lm}(\theta,\phi) = (-1)^m \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\frac{2l+1}{4\pi}}\mathcal{P}_l^m(\cos\theta)e^{im\phi}$$

而 $\mathcal{P}_l^m(\cos\theta)$ 是所谓缔合勒让德多项式，

$$\mathcal{P}_l^m(x) = (1-x^2)^{\frac{m}{2}}\frac{1}{2^l l!}\frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}}(x^2-1)^l$$

$m=0$ 时的缔合勒让德多项式就是通常的勒让德多项式：

$$\mathcal{P}_l(x) = \frac{1}{2^l l!}\frac{d^l}{dx^l}(x^2-1)^l$$

显然，

$$\mathscr{Y}_{l0}(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\mathcal{P}_l(\cos\theta)$$

- 平面波 e^{ikz} 在角动量表象中可展开为:

$$e^{ikz}=\exp(ikr\cos\theta)=\sum_{l=0}^{+\infty}(2l+1)i^l j_l(kr)\mathcal{P}_l(\cos\theta)$$

此处 $j_l(kr)$ 是 l 阶的球 Bessel 函数,

$$j_i(x)=(-x)^l\left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^l\frac{\sin x}{x}$$

特别地,

$$j_0(x)=\frac{\sin x}{x},\quad j_1(x)=\frac{\sin x}{x^2}-\frac{\cos x}{x}.$$

$j_l(x)$ 在 $x\rightarrow 0$ 与 $x\rightsquigarrow +\infty$ 情形下的渐近行为分别是:

$$j_l(x)\Big|_{x\rightarrow 0}\approx\frac{x^l}{(2l+1)!!}$$

以及,

$$\boxed{j_l(x)\Big|_{x\rightarrow +\infty}\approx\frac{1}{x}\sin\left(x-\frac{l}{2}\pi\right)}$$

以 $\{\hat{H},\, \hat{\vec{L}}^2,\, \hat{L}_z\}$ 的共同本征函数系

$$\psi_{lm}(r,\theta,\phi) = \mathscr{R}_l(kr)\mathscr{Y}_{lm}(\theta,\phi)$$

作为 Hilbert 空间的基底，则 Hibert 空间中的任一波函数均可以在此基底上展开. 特别地，薛定谔方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(\vec{r})\right]\psi = E\psi$$

的任一解均可以表示为此基底的线性组合:

$$\psi(r,\theta,\phi) = \sum_{l=0}^{+\infty}\sum_{m=-l}^{+l} a_{lm}\,\mathscr{R}_l(kr)\mathscr{Y}_{lm}(\theta,\phi)$$

这就是分波法.

在散射问题中，出射粒子波函数满足的边界条件常设定为具有轴对称性:

$$\psi(r,\theta,\phi)\Big|_{r\to+\infty} \sim e^{ikz} + f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}$$

如此，分波法的出发点还可以简化为：

$$\psi(r,\theta,\phi)=\sum_{l=0}^{+\infty}\mathscr{R}_l(kr)\mathscr{Y}_{l0}(\theta,\phi)=\sum_{l=0}^{+\infty}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\mathscr{R}_l(kr)\mathcal{P}_l(\cos\theta)$$

这里把叠加系数 a_{l0} 吸收到了分波 $\mathscr{R}_l(kr)$ 的表达式中。分波法处理弹性散射问题的关键就在于求解 $\mathscr{R}_l(kr)$ 满足的径向薛定谔方程。

分波相移：

分波法中，散射振幅 $f(\theta)$ 可以由出射粒子波函数的分波相移 δ_l 取代。这一特点将极大地简化我们使用分波法研究散射问题的计算过程。

现在我们证明这一结论。注意到：

$$e^{ikz}=e^{ikr\cos\theta}=\sum_{l=0}^{+\infty}A_l\, j_l(kr)\mathscr{Y}_{l0}(\theta,\phi),\qquad A_l:=\sqrt{4\pi(2l+1)}\ i^l$$

以及，

$$j_l(kr)\Big|_{r\to+\infty} \approx \frac{1}{kr}\sin(kr - l\pi/2) = \frac{1}{2ikr}\left[e^{i(kr-l\pi/2)} - e^{-i(kr-l\pi/2)}\right]$$

出射粒子波函数的边界条件可以等价地表为：

$$\begin{aligned}
\psi(r,\theta,\phi)\Big|_{r\to+\infty} &\approx e^{ikz} + f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r} \\
&\approx \frac{1}{2ikr}\sum_{l=0}^{+\infty} A_l\left[e^{i(kr-l\pi/2)} - e^{-i(kr-l\pi/2)}\right]\mathscr{Y}_{l0}(\theta,\phi) + f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r} \\
&\approx \frac{1}{2ik}\left[2ikf(\theta) + \sum_{l=0}^{+\infty} A_l\, e^{-il\pi/2}\mathscr{Y}_{l0}(\theta,\phi)\right]\frac{e^{ikr}}{r} \\
&\quad - \frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{+\infty} A_l\, e^{il\pi/2}\mathscr{Y}_{l0}(\theta,\phi)\,\frac{e^{-ikr}}{r}
\end{aligned}$$

进一步把 $f(\theta)$ 在角动量表象中也按球谐函数展开：

$$2ikf(\theta) = \sum_{l=0}^{+\infty} c_l A_l e^{-il\pi/2} \mathscr{Y}_{l0}(\theta, \phi)$$

其中 c_l 是展开系数，我们看到：

$$\psi(r, \theta, \phi)\bigg|_{r\to+\infty} \approx \frac{1}{2ikr} \sum_{l=0}^{+\infty} A_l \left[(1 + c_l)e^{i(kr-l\pi/2)} - e^{-i(kr-l\pi/2)}\right] \mathscr{Y}_{l0}(\theta, \phi)$$

注意到散射过程中粒子的角动量是守恒量，粒子处在 $(\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_z)$ 的任一共同本征态 $\mathscr{Y}_{l0}(\theta, \phi)$ 上的概率应在散射前后保持不变。把出射粒子波函数的上述边界条件与 $r \rightsquigarrow +\infty$ 处入射粒子波函数的渐近表式

$$\psi_i = e^{ikz}\bigg|_{r\to+\infty} \approx \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{+\infty} A_l \sin(kr - l\pi/2) \mathscr{Y}_{l0}(\theta, \phi)$$

$$= \frac{1}{2ikr} \sum_{l=0}^{+\infty} A_l \left[e^{i(kr-l\pi/2)} - e^{-i(kr-l\pi/2)}\right] \mathscr{Y}_{l0}(\theta, \phi)$$

相比较，可知：$|1+c_l|=1$，亦即：

$$c_l = e^{2i\delta_l} - 1, \qquad \delta_l \text{ 为某个实参数.}$$

所以，散射后出射粒子波函数在 $r \rightsquigarrow +\infty$ 处的渐近行为可表为：

$$\boxed{\psi(r,\theta,\phi)\Big|_{r\to+\infty} \approx \frac{1}{kr}\sum_{l=0}^{+\infty} A_l\, e^{i\delta_l}\ \sin(kr - l\pi/2 + \delta_l)\mathscr{Y}_{l0}(\theta,\phi)}$$

式中 $A_l = \sqrt{4\pi(2l+1)}\ i^l$. 与入射粒子波函数在 $r \rightsquigarrow +\infty$ 处的渐近行为

$$\psi_i\Big|_{r\to+\infty} \approx \frac{1}{kr}\sum_{l=0}^{+\infty} A_l\ \sin(kr - l\pi/2)\mathscr{Y}_{l0}(\theta,\phi)$$

相比较，散射只不过使得径向波函数 $\mathscr{R}_l(kr)$、即 l 分波发生了一个相移 δ_l. 证毕.

注意到 $c_l = e^{2i\delta_l} - 1$，$A_l = \sqrt{4\pi(2l+1)}\, i^l$ 以及 $e^{-il\pi/2} = i^{-l}$，分波相移 δ_l 与散射振幅 $f(\theta)$ 有如下关系：

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{+\infty} A_l\, i^{-l}\,(e^{2i\delta_l} - 1)\mathscr{Y}_{l0}(\theta,\phi) = \frac{1}{k}\sum_{l=0}^{+\infty}(2l+1)\, e^{i\delta_l}\ \sin\delta_l\, \mathcal{P}_l(\cos\theta)$$

1. 用分波法研究弹性散射问题时，计算散射截面可以归结为直接计算各个分波的相移 δ_l，不必预先计算散射振幅 $f(\theta)$：

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 = \frac{1}{k^2}\left\| \sum_{l=0}^{+\infty}(2l+1)\, e^{i\delta_l}\ \sin\delta_l\, \mathcal{P}_l(\cos\theta)\right\|^2$$

勒让德多项式满足正交性公式，

$$\int_0^{\pi}\mathcal{P}_m(\cos\theta)\mathcal{P}_n(\cos\theta)\sin\theta d\theta = \frac{2}{2n+1}\delta_{mn}$$

由此知：

$$\sigma_T = 2\pi\int_0^{\pi}\sin\theta d\theta\, \sigma(\theta) = \frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{+\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l$$

分波相移的计算:

1. 一般性原理:

   从原则上讲，分波相移 δ_l 必须通过求出径向薛定谔方程

   $$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d\mathscr{R}_l}{dr}\right)+\left[k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}-U(r)\right]\mathscr{R}_l=0$$

   满足弹性散射边界条件

   $$\mathscr{R}_l(kr)\Big|_{r\to+\infty}\approx\frac{1}{kr}\sin(kr-l\pi/2+\delta_l)$$

   的特解才能确定.

分波 $\mathscr{R}_l(kr)$ 满足的边界条件是散射后出射粒子波函数的渐近行为

$$\psi(r,\theta,\phi)\Big|_{r\to+\infty}\approx\frac{1}{kr}\sum_{l=0}^{+\infty}A_l\,e^{i\delta_l}\sin(kr-l\pi/2+\delta_l)\mathscr{Y}_{l0}(\theta,\phi)$$

的逻辑推论，它可以重新写为：

$$
\begin{aligned}
\mathscr{R}_l(kr)\Big|_{r\longrightarrow+\infty} &\approx \frac{1}{kr}\Big[\sin(kr-l\pi/2)\cos\delta_l+\cos(kr-l\pi/2)\sin\delta_l\Big] \\
&\approx j_l(kr)\ \cos\delta_l - n_l(kr)\ \sin\delta_l
\end{aligned}
$$

这里的 $j_l(kr)$ 与 $n_l(kr)$ 分别是 l 阶的球贝塞尔函数和 l 阶的球诺伊曼函数．在写出最后一个等式时，我们使用了渐近展开：

$$
j_l(kr)\Big|_{r\longrightarrow+\infty} \approx \frac{1}{kr}\sin(kr-l\pi/2), \quad n_l(kr)\Big|_{r\longrightarrow+\infty} \approx -\frac{1}{kr}\cos(kr-l\pi/2)
$$

由于：

$$
j_l(x)\Big|_{x\longrightarrow 0} \approx \frac{2^l l!}{(2l+1)!}x^l, \quad n_l(x)\Big|_{x\longrightarrow 0} \approx -\frac{(2l-1)!}{2^{l-1}(l-1)!}x^{-l-1}
$$

$n_l(kr)$ 在 $r\sim 0$ 区域内是发散的．因此，分波 $\mathscr{R}_l(kr)$ 在 r 取有限值的区域内不能写为 $j_l(kr)$ 与 $n_l(kr)$ 的线性组合．

δ_l 与 $\mathscr{R}_l(kr)$ 的关系:

现在设法把分波相移 δ_l 与分波波函数 $\mathscr{R}_l(kr)$ 直接联系起来.

分波 $\mathscr{R}_l(kr)$ 服从径向薛定谔方程:

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d\mathscr{R}_l}{dr}\right)+\left[k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}-U(r)\right]\mathscr{R}_l=0$$

此方程在 $U(r)=0$ 情形下退化为球贝塞尔方程, 其在 r 的定义域 $0\leqslant r<+\infty$ 内处处非奇异的解为 $j_l(kr)$:

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dj_l}{dr}\right)+\left[k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]j_l=0$$

不难验证, 以上二方程可以等价地表为:

$$\frac{d^2u_l}{dr^2}+\left[k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}-U(r)\right]u_l=0, \qquad u_l(r):=r\,\mathscr{R}_l(kr)$$

$$\frac{d^2}{dr^2}[rj_l(kr)]+\left[k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right][rj_l(kr)]=0$$

结合以上二方程，并利用数学恒等式[2]:

$$\alpha\beta'' - \alpha''\beta = (\alpha\beta' - \alpha'\beta)'$$

我们有:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dr}\left[u_l\frac{d}{dr}(rj_l) - (rj_l)\frac{d}{dr}u_l\right] &= u_l\frac{d^2(rj_l)}{dr^2} - (rj_l)\frac{d^2u_l}{dr^2} \\
&= -u_l\left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right](rj_l) + (rj_l)\left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - U(r)\right]u_l \\
&= -U(r)u_l\,(rj_l)
\end{aligned}$$

把上式在 $0 \leqslant r < +\infty$ 区间上对 r 积分，可得:

$$\begin{aligned}
-\frac{2\mu}{\hbar^2}\int_0^{+\infty} rj_l(kr)u_l(r)V(r)\,dr &= \int_0^{+\infty} dr\frac{d}{dr}\left[u_l\frac{d}{dr}(rj_l) - (rj_l)\frac{d}{dr}u_l\right] \\
&= \left[u_l\frac{d}{dr}(rj_l) - (rj_l)\frac{d}{dr}u_l\right]\Bigg|_{r\to+\infty} - \left[u_l\frac{d}{dr}(rj_l) - (rj_l)\frac{d}{dr}u_l\right]\Bigg|_{r\to 0}
\end{aligned}$$

[2] 此处的思路类似于静电学中使用第二格林公式建立的格林函数方法，杨注.

按照分波 $\mathscr{R}_l(kr)$ 与 $j_l(kr)$ 在 $r \rightsquigarrow +\infty$ 处的渐近行为，

$$j_l(kr)\Big|_{r\to+\infty} \approx \frac{1}{kr}\sin(kr - l\pi/2), \quad u_l(r)\Big|_{r\to+\infty} \approx \frac{1}{k}\sin(kr - l\pi/2 + \delta_l)$$

我们有：

$$\begin{aligned}
&\left[u_l\frac{d}{dr}(rj_l) - (rj_l)\frac{d}{dr}u_l\right]\Big|_{r\to+\infty} \\
&\approx \frac{1}{k}\Big[\sin(kr - l\pi/2 + \delta_l)\cos(kr - l\pi/2) \\
&\qquad - \sin(kr - l\pi/2)\cos(kr - l\pi/2 + \delta_l)\Big] \\
&= \frac{1}{k}\sin\left[(kr - l\pi/2 + \delta_l) - (kr - l\pi/2)\right] = \frac{1}{k}\sin\delta_l
\end{aligned}$$

另外，根据 $u_l(0) = 0$[3] 与 $j_l(kr)$ 的近似表达式

$$krj_l(kr)\Big|_{r\to 0} \approx \frac{(kr)^{l+1}}{(2l+1)!!}, \quad (l = 0,\ 1,\ 2,\ \cdots)$$

---

[3]这是必须的. 按照波函数的概率诠释，径向波函数 $\mathscr{R}_l(kr) = u_l(r)/r$ 必须在 $r = 0$ 点处取有限值.

不难看出：

$$\left[u_l\frac{d}{dr}(rj_l)-(rj_l)\frac{d}{dr}u_l\right]\Bigg|_{r\to 0}=0$$

所以，

$$\sin\delta_l=-\frac{2\mu k}{\hbar^2}\int_0^{+\infty} rj_l(kr)u_l(r)V(r)dr$$

或者等价地：

$$\boxed{\sin\delta_l=-\frac{2\mu k}{\hbar^2}\int_0^{+\infty} V(r)\mathscr{R}_l(kr)j_l(kr)r^2dr}$$

这是一个精确的关系式．欲按照此式计算 l 分波的相移 δ_l，须事先求出径向薛定谔方程在 $0\leqslant r<+\infty$ 整个区间上有意义的分波解 $\mathscr{R}_l(kr)$．然而，对于大多数散射问题中出现的 $V(r)$ 而言，精确求解径向薛定谔方程基本上是一个不可能完成的任务．

相移 δ_l 的近似计算公式:

径向薛定谔方程

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d\mathscr{R}_l}{dr}\right)+\left[k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}-U(r)\right]\mathscr{R}_l=0$$

在一般情形下很难精确求解. 量子物理的先驱们在实践上发展了微扰论可以求其近似解. 按照微扰论的精神, 我们把径向薛定谔方程重新写为:

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d\mathscr{R}_l}{dr}\right)+\left[k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}-\lambda U(r)\right]\mathscr{R}_l=0,\qquad (0<\lambda\ll 1)$$

式中引入了微扰参数 λ (无量纲). 上式意味着我们把相互作用有效势能 $U(r)=2\mu V(r)/\hbar^2$ 看成了微扰论意义下的一阶小量.

上述方程的微扰级数解可表为:

$$\mathscr{R}_l(kr)=\sum_{n=0}^{+\infty}\lambda^n\mathscr{R}_l^{(n)}(kr)$$

显然，l 分波的零级近似 $\mathscr{R}_l^{(0)}(kr)$ 满足的方程是标准的 l 阶球贝塞尔方程：

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d\mathscr{R}_l^{(0)}}{dr}\right)+\left[k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\mathscr{R}_l^{(0)}=0$$

它在 $0\leqslant r<+\infty$ 整个区间上收敛的解为 $j_l(kr)$，即：

$$\mathscr{R}_l^{(0)}(kr)=j_l(kr)$$

所以，在取分波波函数 $\mathscr{R}_l(kr)$ 的零级近似的情形下，l 分波的相移 δ_l 可以有如下近似计算公式：

$$\boxed{\sin\delta_l\approx-\frac{2\mu k}{\hbar^2}\int_0^{+\infty}V(r)\left[j_l(kr)\right]^2r^2dr}$$

如果 $V(r)>0$（斥力），$\delta_l<0$. 如果 $V(r)<0$（引力），$\delta_l>0$.

1. 如果 $V(r)$ 只在 $0 \leqslant r \leqslant a$ 的有限范围内不显著为零，并且入射粒子的能量很低，$ka \ll 1$，则 $j_l(kr)$ 可近似写作：

$$j_l(kr) \approx \frac{(kr)^l}{(2l+1)!!}$$

相移的计算公式因此进一步简化为：

$$\sin\delta_l \approx -\frac{2\mu k^{2l+1}}{[(2l+1)!!]^2\hbar^2}\int_0^a V(r)r^{2(l+1)}dr \sim (2\mu a^2/\hbar^2)(ka)^{2l+1}$$

随着 l 的增加，δ_l 下降的很快. 故通常只需计算 l 值较小的 s 分波 $(l=0)$ 和 p 分波 $(l=1)$ 的相移即可.

作业：

格里菲斯《量子力学概论》

Page266: 11.4; Page268: 11.5, 11.7

李普曼-许温格方程:

势场 $V(\vec{r})$ 对于动量为 $\hbar\vec{k}$、能量为 $E=\hbar^2\vec{k}^2/2\mu$ 的自由粒子的散射，归结为求定态薛定谔方程

$$(\nabla^2+k^2)\psi(\vec{r})=\frac{2\mu}{\hbar^2}V(\vec{r})\psi(\vec{r})$$

满足边界条件

$$\psi(\vec{r})\Big|_{r\to+\infty}\approx e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}+f(\theta,\phi)\frac{e^{ikr}}{r}$$

的能量本征函数 $\psi(\vec{r})$. 通过格林函数法，我们可以把边界条件与定态薛定谔方程结合在一起变成一个积分方程，它就是著名的李普曼 (Lippman)-许温格 (Schwinger) 方程.

格林函数:

在散射问题中，定态薛定谔方程相应的格林函数 $G(\vec{r}-\vec{r}')$ 按下式定义，

$$(\nabla^2+k^2)G(\vec{r}-\vec{r}')=\delta(\vec{r}-\vec{r}')$$

根据散射问题的物理图像，应在三维无界空间中构造格林函数. 注意到狄拉克 δ 函数在三维无界空间中可表为:

$$\delta(\vec{r}-\vec{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3q\ \exp[i\vec{q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')]$$

再作 $G(\vec{r}-\vec{r}')$ 的傅里叶展开:

$$G(\vec{r}-\vec{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3q\, G(\vec{q})\exp[i\vec{q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')]$$

代回到格林函数的定义方程中，即知:

$$\begin{aligned}\frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3q\ \exp[i\vec{q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')] &= \delta(\vec{r}-\vec{r}')\\ &= (\nabla^2+k^2)G(\vec{r}-\vec{r}')\\ &= \frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3q\, G(\vec{q})\,(\nabla^2+k^2)\exp[i\vec{q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')]\\ &= \frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3q\, G(\vec{q})\,(-q^2+k^2)\exp[i\vec{q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')]\end{aligned}$$

式中 $q^2 := \vec{q}^2$.

所以：

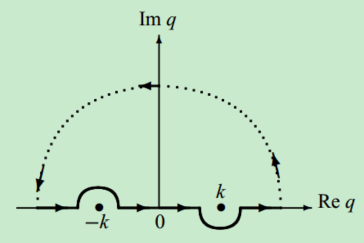
$$G(\vec{q}) = -\frac{1}{q^2-k^2}, \qquad \rightsquigarrow \quad G(\vec{r}-\vec{r}') = -\frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3q\, \frac{e^{i\vec{q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}}{q^2-k^2}$$

令 $\vec{s}=\vec{r}-\vec{r}'$，在 q-空间以 $\vec{s}$ 为极轴建立球坐标系．如此，

$$\begin{aligned}
G(\vec{s}) &= -\frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3q\, \frac{e^{i\vec{q}\cdot\vec{s}}}{q^2-k^2} \\
&= -\frac{1}{4\pi^2}\int_0^{+\infty}\frac{q^2}{q^2-k^2}dq\int_0^{\pi} e^{iqs\cos\theta}\sin\theta d\theta \\
&= \frac{i}{4\pi^2 s}\int_0^{+\infty}\frac{q}{q^2-k^2}(e^{iqs}-e^{-iqs})dq = \frac{i}{4\pi^2 s}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{q\,e^{iqs}}{q^2-k^2}
\end{aligned}$$

$q=\pm k$ 是被积函数的两个一阶极点．可以用复变函数论中的留数定理计算此积分，为此，须把 q 延拓到复平面上使得上述沿实轴的积分转化为复 q 平面上的围道积分．上式的积分值与围道的选取有关，它相当于选取波函数不同的边界条件．

散射问题中有物理意义的是从靶心向外传播的散射波. 它要求我们在复 q-空间里按左边的示意图选择积分围道 C, 使 C 仅包含 $q=k$ 这一个极点. 如此,



$$
\begin{aligned}
G(\vec{s}) &= \frac{i}{4\pi^2 s}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{q\, e^{iqs}}{q^2-k^2} \\
&= \frac{i}{4\pi^2 s}\oint_C \frac{q\, e^{iqs}}{q^2-k^2} \\
&= \frac{i}{4\pi^2 s}\cdot 2\pi i\cdot \frac{1}{2}e^{iks} \\
&= -\frac{e^{iks}}{4\pi s}
\end{aligned}
$$

所以:

$$
G(\vec{r}-\vec{r}') = -\frac{\exp(ik|\vec{r}-\vec{r}'|)}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}'|}
$$

李普曼-许温格方程:

根据微分方程的数学理论，定态薛定谔方程

$$(\nabla^2 + k^2)\psi(\vec{r}) = \frac{2\mu}{\hbar^2} V(\vec{r})\psi(\vec{r})$$

的通解可以形式化地求解如下. 设 $\psi^{()}(\vec{r})$ 为齐次亥姆霍兹方程

$$(\nabla^2 + k^2)\psi^{(0)}(\vec{r}) = 0$$

的任一解. 以 $(\nabla^2 + k^2)^{-1}$ 表示亥姆霍兹算符 $(\nabla^2 + k^2)$ 的逆算符，则显见:

$$\begin{aligned}
\psi(\vec{r}) &= (\nabla^2 + k^2)^{-1}(\nabla^2 + k^2)\psi(\vec{r}) \\
&= (\nabla^2 + k^2)^{-1}\Big[(\nabla^2 + k^2)\psi(\vec{r}) + (\nabla^2 + k^2)\psi^{(0)}(\vec{r})\Big] \\
&= \psi^{(0)}(\vec{r}) + \frac{2\mu}{\hbar^2}(\nabla^2 + k^2)^{-1} V(\vec{r})\psi(\vec{r}) \\
&= \psi^{(0)}(\vec{r}) + \frac{2\mu}{\hbar^2}(\nabla^2 + k^2)^{-1} \int d^3x'\, \delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{r}')\, V(\vec{r}')\psi(\vec{r}')
\end{aligned}$$

亦即：

$$\psi(\vec{r}) = \psi^{(0)}(\vec{r}) + \frac{2\mu}{\hbar^2}\int d^3x' (\nabla^2 + k^2)^{-1}\delta^{(3)}(\vec{r}-\vec{r}')\ V(\vec{r}')\psi(\vec{r}')$$

1. 在散射问题中，按照散射的物理图像应把 $\psi^{(0)}(\vec{r})$ 取为入射粒子的波函数：
$$\psi^{(0)}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

2. 考虑到 $(\nabla^2 + k^2)G(\vec{r}-\vec{r}') = \delta^{(3)}(\vec{r}-\vec{r}')$，它是散射态格林函数必须服从的微分方程，我们有：
$$(\nabla^2 + k^2)^{-1}\delta^{(3)}(\vec{r}-\vec{r}') = G(\vec{r}-\vec{r}') = -\frac{\exp(ik|\vec{r}-\vec{r}'|)}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}'|}$$

所以：

$$\boxed{\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int d^3x' \frac{\exp(ik|\vec{r}-\vec{r}'|)}{|\vec{r}-\vec{r}'|}\ V(\vec{r}')\psi(\vec{r}')}$$

这是势散射问题薛定谔方程的形式解，称为李普曼-许温格方程.

由于上式右端第二项的被积函数涉及 $\psi(\vec{r}')$，李普曼-许温格方程严格说来并不是散射问题中定态薛定谔方程的解. 它实际上是一个积分方程.

- 李普曼-许温格方程显然具有如下叠代级数解:

$$
\begin{aligned}
\psi(\vec{r}) &= e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int d^3x' \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} V(\vec{r}')\psi(\vec{r}') \\
&= e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int d^3x' \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} V(\vec{r}')e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}'} \\
&\quad + \left(\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \iint d^3x' d^3x'' \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} V(\vec{r}') \frac{e^{ik|\vec{r}'-\vec{r}''|}}{|\vec{r}'-\vec{r}''|} V(\vec{r}'')e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}''} \\
&\quad + \cdots
\end{aligned}
$$

这个叠代级数是严格的，但其收敛性以及收敛的快慢未知.

如果入射粒子与靶粒子之间的相互作用势能 $V(\vec{r})$ 可以看作微扰，则李普曼-许温格方程可以具有如下一级近似解:

$$\boxed{\psi(\vec{r}) \approx e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int d^3x' \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} V(\vec{r}')e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}'}}$$

通常称此式为势散射问题中定态薛定谔方程的玻恩近似解.

- 若想在玻恩近似基础上计算靶粒子对于入射粒子的散射振幅 $f(\theta, \phi)$，需要事先分析玻恩近似中粒子波函数 $\psi(\vec{r})$ 在 $r \rightsquigarrow +\infty$ 时的渐近行为. 假设 $V(\vec{r}')$ 具有有限力程，则有:

$$\frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \approx \frac{1}{r}, \qquad e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|} \approx \exp\left[ikr(1-\vec{r}\cdot\vec{r}'/r^2)\right] \approx e^{ikr}e^{-i\vec{k}_f\cdot\vec{r}'}$$

式中 $\vec{k}_f = k\vec{r}/r$ 为散射粒子的波矢量.

利用以上诸式，可把一级玻恩近似意义下出射粒子的波函数在 $r \rightsquigarrow +\infty$ 区域内进一步近似为:

$$\psi(\vec{r})\Big|_{r\to+\infty} \approx e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{ikr}}{r}\int d^3x' V(\vec{r}')e^{-i(\vec{k}_f-\vec{k})\cdot\vec{r}'}$$

把上式与散射后出射粒子波函数的渐近行为

$$\psi(r,\theta,\phi)\Big|_{r\to+\infty} \approx e^{ikz} + f(\theta,\phi)\frac{e^{ikr}}{r}$$

做比较，即得散射振幅 $f(\theta,\phi)$ 的玻恩一级近似解：

$$f(\theta,\phi) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int d^3x'\, V(\vec{r}')e^{-i(\vec{k}_f-\vec{k})\cdot\vec{r}'}$$

或者：

$$\boxed{f(\theta,\phi) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int d^3x'\, V(\vec{r}')e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}'}}$$

这里 $\vec{q} := \vec{k}_f - \vec{k}$，$\hbar\vec{q}$ 描写了散射前后粒子的动量转移.对于弹性散射，$|\vec{k}_f| = |\vec{k}| = k$.因为 $\vec{k}_f$ 与 $\vec{k}$ 之间的夹角恰为散射角 θ，

$$q^2 = |\vec{q}|^2 = (\vec{k}_f - \vec{k})^2 = 2k^2 - 2\vec{k}\cdot\vec{k}_f = 2k^2(1-\cos\theta) = 4k^2\sin^2(\theta/2)$$

所以：

$$q = 2k\sin(\theta/2)$$

- 除了一个常系数 $-(\mu/2\pi\hbar^2)$ 外，散射振幅 $f(\theta,\phi)$ 正是相互作用有效势能 $V(\vec{r})$ 的傅里叶变换. 因此，若能通过某种途径获知散射振幅 $f(\theta,\phi)$ 的信息，则入射粒子与靶粒子之间的相互作用有效势能可用如下公式估算:

$$\boxed{V(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{4\pi^2\mu}\int d^3q\, f(\theta,\phi)e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}}$$

  此式在弦理论唯象学研究中有直接的应用.

对于中心力场 $V(r)$ 中的弹性散射，在计算 $f(\theta,\phi)$ 中涉及的积分 $\int d^3x'$ 时，可以选择 $\vec{q}$ 方向作为 x'_3 轴建立一个辅助的球坐标系 (ρ,α,β):

$$f(\theta,\phi) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int_0^{+\infty}\rho^2 d\rho\int_0^{2\pi}d\beta\int_0^{\pi}V(\rho)e^{-iq\rho\cos\alpha}\sin\alpha d\alpha$$

$$= -\frac{\mu}{\hbar^2}\int_0^{+\infty}V(\rho)\rho^2 d\rho\int_{-1}^{1}e^{-iq\rho s}ds = -\frac{2\mu}{\hbar^2 q}\int_0^{+\infty}V(\rho)\sin(q\rho)\rho d\rho$$

式中 $q = 2k\sin(\theta/2)$. 中心力场情形下，$f(\theta, \phi) = f(\theta)$，微分散式截面的计算公式求得为:

$$\boxed{\sigma(\theta) = \frac{4\mu^2}{\hbar^4 q^2}\left\|\int_0^{+\infty} V(\rho)\sin(q\rho)\rho d\rho\right\|^2}$$

库仑散射:

库仑散射指的是入射粒子与靶粒子之间的相互作用势能可以表述为:

$$V(r) = \frac{\alpha}{r}$$

参数 $\alpha > 0$ 表示斥力，$\alpha < 0$ 表示引力. 精确到玻恩一级近似，

$$f(\theta) = -\frac{2\mu}{\hbar^2 q}\int_0^{+\infty} V(\rho)\sin(q\rho)\rho d\rho = -\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2 q}\int_0^{+\infty}\sin(q\rho)d\rho$$

从而：

$$f(\theta) == -\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2 q^2}\int_0^{+\infty}\sin x\,dx, \qquad (x := q\rho)$$

按照高等数学，

$$\int_0^{+\infty}\sin x\,dx = -\cos x\Big|_0^{+\infty} = 1 - \cos(\infty)$$

这似乎暗示上述散射振幅不存在. 不过从物理上讲，我们可以认为严格意义上的库仑场是不存在的. 计入屏蔽效应后，库仑场或许可以从物理上理解为：

$$V(r) = \frac{\alpha}{r}\exp(-\beta q r)\Big|_{\beta\to 0^+}$$

如此，库仑散射情形下的散射振幅可以重新计算如下：

$$f(\theta) = -\frac{2\mu}{\hbar^2 q}\int_0^{+\infty}V(\rho)\sin(q\rho)\rho d\rho = -\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2 q}\int_0^{+\infty}\sin(q\rho)e^{-\beta q\rho}d\rho$$

亦即：

$$f(\theta) = -\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2 q^2}\int_0^{+\infty} \sin x e^{-\beta x} dx = -\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2 q^2}\Im\int_0^{+\infty} e^{-(\beta-i)x} dx$$

$$= -\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2 q^2}\Im\left(\frac{1}{\beta - i}\right) = -\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2 q^2}\Im\left(\frac{\beta + i}{\beta^2 + 1}\right) = -\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2 q^2}\frac{1}{\beta^2 + 1}$$

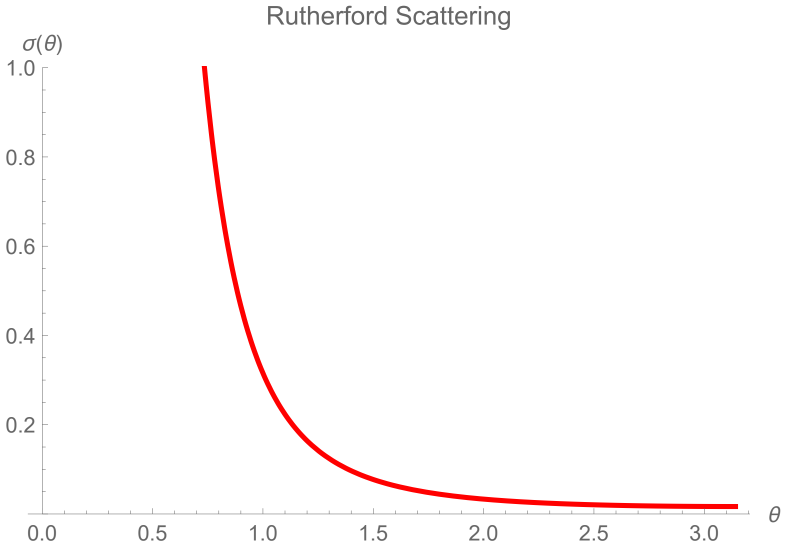
最后令 $\beta \rightsquigarrow 0^+$，我们得：

$$f(\theta) = -\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2 q^2} = -\frac{\mu\alpha}{2\hbar^2 k^2 \sin^2(\theta/2)}$$

库仑散射的微分散射截面为：

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 = \frac{\mu^2\alpha^2}{4\hbar^4 k^4 \sin^4(\theta/2)} = \frac{\alpha^2}{4\mu^2 v^4 \sin^4(\theta/2)}$$

此处 $v = \hbar k/\mu$ 表示入射粒子的速度．上式恰为量子物理发展史上著名的卢瑟福散射公式，它标志着原子有核模型的诞生．



在卢瑟福散射中，大角度散射 $(\theta \sim \pi)$ 的截面虽然小、但并不为零．卢瑟福据此猜测出原子结构的有核模型．

作业:

格里菲斯《量子力学概论》

Page271: 11.8; Page274: 11.11, 11.13