高等量子力学作业

Clark

练习 设电子在没有电磁场时的 Hamilton 量为 $H_0 = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{x})$，其能量本征值 E_n 的本征波函数为 $\psi_n(\mathbf{x})$，满足定态 Schrodinger 方程 $H_0\psi_n(\mathbf{x}) = E_0\psi_n(\mathbf{x})$。现在该体系中加入静磁场 $\mathbf{B}(\mathbf{x})$，则系统 Hamilton 量变为（最小耦合）

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla - \frac{\mathrm{i}e}{\hbar c}\mathbf{A}(\mathbf{x})\right)^2 + V(\mathbf{x}), \tag{1}$$

其中磁矢势可以由磁场定义：$\mathbf{B}(\mathbf{x}) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{x})$。

(a) 证明：波函数 $\tilde{\psi}_n(\mathbf{x}) = \exp\left(\dfrac{\mathrm{i}e}{\hbar c}\displaystyle\int_{\mathbf{x}_0}^{\mathbf{x}} \mathrm{d}\mathbf{x}'\mathbf{A}(\mathbf{x}')\right)\psi_n(\mathbf{x})$ 是 Hamilton 量 H 的本征态，其本征值为 E_n。

(b) 波函数和磁矢势作局域规范变换：$\tilde{\psi}'_n(\mathbf{x}) = \mathcal{G}(\mathbf{x})\tilde{\psi}(\mathbf{x}) \equiv \exp\left(\dfrac{\mathrm{i}e\Lambda}{\hbar c}\right)\tilde{\psi}(\mathbf{x})$ 和 $\mathbf{A}'(\mathbf{x}) = \mathbf{A}(\mathbf{x}) + \nabla\Lambda(\mathbf{x})$，证明：$\tilde{\psi}'(\mathbf{x})$ 是 Hamilton 量 $H' = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla - \dfrac{\mathrm{i}e}{\hbar c}\mathbf{A}'(\mathbf{x})\right)^2 + V(\mathbf{x})$ 的本征态，相应的本征值仍然为 E_n。

(c) 证明：由 $\mathbf{A}'(\mathbf{x})$ 所得到的磁场 $\mathbf{B}(\mathbf{x})$ 规范不变。

解：

(a) 令 $\lambda = \dfrac{e}{\hbar c}$，$\chi(\mathbf{x}) = \dfrac{e}{\hbar c}\displaystyle\int_{\mathbf{x}_0}^{\mathbf{x}} \mathrm{d}\mathbf{x}'\mathbf{A}(\mathbf{x}')$。现在有波函数 $\tilde{\psi}_n(\mathbf{x}) = \exp\left(\mathrm{i}\chi(\mathbf{x})\right)\psi_n(\mathbf{x})$，和 Hamilton 量 $H = -\dfrac{\hbar^2}{2m}(\nabla - \mathrm{i}\lambda\mathbf{A}(\mathbf{x}))^2 + V(\mathbf{x})$。假设我们对 $\chi(\mathbf{x})$ 的梯度有，$\nabla\chi(\mathbf{x}) = \lambda\mathbf{A}(\mathbf{x})$，这在线积分路径独立时成立（即 $\nabla \times \mathbf{A} = 0$），在此形式地使用此关系。首先计算 $(\nabla - \mathrm{i}\lambda\mathbf{A}(\mathbf{x}))\tilde{\psi}_n(\mathbf{x})$：

$$\begin{aligned}
(\nabla - \mathrm{i}\lambda\mathbf{A}(\mathbf{x}))\,\tilde{\psi}_n(\mathbf{x}) &= \nabla(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\chi(\mathbf{x})}\psi_n(\mathbf{x})) - \mathrm{i}\lambda\mathbf{A}(\mathbf{x})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\chi(\mathbf{x})}\psi_n(\mathbf{x}) \\
&= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\chi(\mathbf{x})}\nabla\psi_n(\mathbf{x}) + \mathrm{i}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\chi(\mathbf{x})}(\nabla\chi(\mathbf{x}))\psi_n(\mathbf{x}) - \mathrm{i}\lambda\mathbf{A}(\mathbf{x})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\chi(\mathbf{x})}\psi_n(\mathbf{x}) \quad \text{带入}\nabla\chi(\mathbf{x}) = \lambda\mathbf{A}(\mathbf{x}) \\
&= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\chi(\mathbf{x})}\nabla\psi_n(\mathbf{x}) + \mathrm{i}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\chi(\mathbf{x})}(\lambda\mathbf{A}(\mathbf{x}))\psi_n(\mathbf{x}) - \mathrm{i}\lambda\mathbf{A}(\mathbf{x})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\chi(\mathbf{x})}\psi_n(\mathbf{x}) \\
&= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\chi(\mathbf{x})}\nabla\psi_n(\mathbf{x}).
\end{aligned} \tag{2}$$

进一步，计算 $(\nabla - \mathrm{i}\lambda\mathbf{A}(\mathbf{x}))^2\tilde{\psi}_n(\mathbf{x})$：

$$\begin{aligned}
(\nabla - \mathrm{i}\lambda\mathbf{A}(\mathbf{x}))^2\tilde{\psi}_n(\mathbf{x}) &= (\nabla - \mathrm{i}\lambda\mathbf{A}(\mathbf{x}))\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\chi(\mathbf{x})}\nabla\psi_n(\mathbf{x})\right) \\
&= \nabla\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\chi(\mathbf{x})}\nabla\psi_n(\mathbf{x})\right) - \mathrm{i}\lambda\mathbf{A}(\mathbf{x})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\chi(\mathbf{x})}\nabla\psi_n(\mathbf{x}) \\
&= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\chi(\mathbf{x})}\nabla^2\psi_n(\mathbf{x}) + \mathrm{i}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\chi(\mathbf{x})}(\nabla\chi(\mathbf{x}))\nabla\psi_n(\mathbf{x}) - \mathrm{i}\lambda\mathbf{A}(\mathbf{x})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\chi(\mathbf{x})}\nabla\psi_n(\mathbf{x}) \quad \text{带入}\nabla\chi(\mathbf{x}) = \lambda\mathbf{A}(\mathbf{x}) \\
&= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\chi(\mathbf{x})}\nabla^2\psi_n(\mathbf{x}) + \mathrm{i}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\chi(\mathbf{x})}(\lambda\mathbf{A}(\mathbf{x}))\nabla\psi_n(\mathbf{x}) - \mathrm{i}\lambda\mathbf{A}(\mathbf{x})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\chi(\mathbf{x})}\nabla\psi_n(\mathbf{x}) \\
&= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\chi(\mathbf{x})}\nabla^2\psi_n(\mathbf{x}).
\end{aligned} \tag{3}$$

最终我们得到

$$\begin{aligned} H\tilde{\psi}_n(\mathbf{x}) &= -\frac{\hbar^2}{2m}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\chi(\mathbf{x})}\nabla^2\psi_n(\mathbf{x}) + V(\mathbf{x})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\chi(\mathbf{x})}\psi_n(\mathbf{x}) \\ &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\chi(\mathbf{x})}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_n(\mathbf{x}) + V(\mathbf{x})\psi_n(\mathbf{x})\right) \\ &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\chi(\mathbf{x})}H_0\psi_n(\mathbf{x}) \\ &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\chi(\mathbf{x})}E_n\psi_n(\mathbf{x}) \\ &= E_n\tilde{\psi}_n(\mathbf{x}). \end{aligned} \tag{4}$$

于是我们证明了，$\tilde{\psi}_n(\mathbf{x})$ 是 H 的本征态，对应的本征值为 E_n。

(b) 沿用 (1) 的代换，于是有 $\tilde{\psi}'_n(\mathbf{x}) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\Lambda(\mathbf{x})}\tilde{\psi}_n(\mathbf{x})$，以及现在的 Hamilton 量 $H' = -\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla - \mathrm{i}\lambda\mathbf{A}'(\mathbf{x}))^2 + V(\mathbf{x})$。首先计算 $(\nabla - \mathrm{i}\lambda\mathbf{A}'(\mathbf{x}))\tilde{\psi}'_n(\mathbf{x})$：

$$\begin{aligned} (\nabla - \mathrm{i}\lambda\mathbf{A}'(\mathbf{x}))\,\tilde{\psi}'_n(\mathbf{x}) &= (\nabla - \mathrm{i}\lambda\mathbf{A}'(\mathbf{x}))\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\Lambda(\mathbf{x})}\tilde{\psi}_n(\mathbf{x})\right) \\ &= \nabla\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\Lambda(\mathbf{x})}\tilde{\psi}_n(\mathbf{x})\right) - \mathrm{i}\lambda\mathbf{A}'(\mathbf{x})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\Lambda(\mathbf{x})}\tilde{\psi}_n(\mathbf{x}) \\ &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\Lambda(\mathbf{x})}\nabla\tilde{\psi}_n(\mathbf{x}) + \mathrm{i}\lambda\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\Lambda(\mathbf{x})}(\nabla\Lambda(\mathbf{x}))\tilde{\psi}_n(\mathbf{x}) - \mathrm{i}\lambda\mathbf{A}'(\mathbf{x})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\Lambda(\mathbf{x})}\tilde{\psi}_n(\mathbf{x}) \\ &\qquad\qquad \text{带入}\mathbf{A}'(\mathbf{x}) = \mathbf{A}(\mathbf{x}) + \nabla\Lambda(\mathbf{x}) \\ &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\Lambda(\mathbf{x})}\nabla\tilde{\psi}_n(\mathbf{x}) + \mathrm{i}\lambda\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\Lambda(\mathbf{x})}(\nabla\Lambda(\mathbf{x}))\tilde{\psi}_n(\mathbf{x}) - \mathrm{i}\lambda(\mathbf{A}(\mathbf{x}) + \nabla\Lambda(\mathbf{x}))\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\Lambda(\mathbf{x})}\tilde{\psi}_n(\mathbf{x}) \\ &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\Lambda(\mathbf{x})}(\nabla - \mathrm{i}\lambda\mathbf{A}(\mathbf{x}))\,\tilde{\psi}_n(\mathbf{x}) \quad \text{带入(2)} \\ &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\Lambda(\mathbf{x})}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\chi(\mathbf{x})}\nabla\psi_n(\mathbf{x}) \\ &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\chi'(\mathbf{x})}\nabla\psi_n(\mathbf{x}). \end{aligned} \tag{5}$$

其中，$\chi'(\mathbf{x}) = \Lambda(\mathbf{x}) + \int_{\mathbf{x}_0}^{\mathbf{x}}\mathrm{d}\mathbf{x}'\mathbf{A}(\mathbf{x}')$。进一步，计算 $(\nabla - \mathrm{i}\lambda\mathbf{A}'(\mathbf{x}))^2\tilde{\psi}'_n(\mathbf{x})$：

$$\begin{aligned} (\nabla - \mathrm{i}\lambda\mathbf{A}'(\mathbf{x}))^2\tilde{\psi}'_n(\mathbf{x}) &= (\nabla - \mathrm{i}\lambda\mathbf{A}'(\mathbf{x}))\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\chi'(\mathbf{x})}\nabla\psi_n(\mathbf{x})\right) \\ &= \nabla\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\chi'(\mathbf{x})}\nabla\psi_n(\mathbf{x})\right) - \mathrm{i}\lambda\mathbf{A}'(\mathbf{x})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\chi'(\mathbf{x})}\nabla\psi_n(\mathbf{x}) \\ &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\chi'(\mathbf{x})}\nabla^2\psi_n(\mathbf{x}) + \mathrm{i}\lambda\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\chi'(\mathbf{x})}(\nabla\chi'(\mathbf{x}))\nabla\psi_n(\mathbf{x}) - \mathrm{i}\lambda\mathbf{A}'(\mathbf{x})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\chi'(\mathbf{x})}\nabla\psi_n(\mathbf{x}) \\ &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\chi'(\mathbf{x})}\nabla^2\psi_n(\mathbf{x}) + \mathrm{i}\lambda\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\chi'(\mathbf{x})}(\mathbf{A}'(\mathbf{x}))\nabla\psi_n(\mathbf{x}) - \mathrm{i}\lambda\mathbf{A}'(\mathbf{x})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\chi'(\mathbf{x})}\nabla\psi_n(\mathbf{x}) \\ &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\chi'(\mathbf{x})}\nabla^2\psi_n(\mathbf{x}). \end{aligned} \tag{6}$$

其中，$\nabla\chi'(\mathbf{x}) = \nabla\Lambda(\mathbf{x}) + \mathbf{A}(\mathbf{x}) = \mathbf{A}'(\mathbf{x})$。最终我们得到

$$\begin{aligned} H'\tilde{\psi}'_n(\mathbf{x}) &= -\frac{\hbar^2}{2m}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\chi'(\mathbf{x})}\nabla^2\psi_n(\mathbf{x}) + V(\mathbf{x})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\chi'(\mathbf{x})}\psi_n(\mathbf{x}) \\ &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\chi'(\mathbf{x})}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_n(\mathbf{x}) + V(\mathbf{x})\psi_n(\mathbf{x})\right) \\ &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\chi'(\mathbf{x})}H_0\psi_n(\mathbf{x}) \\ &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\chi'(\mathbf{x})}E_n\psi_n(\mathbf{x}) \\ &= E_n\tilde{\psi}'_n(\mathbf{x}). \end{aligned} \tag{7}$$

于是我们证明了，$\tilde{\psi}'_n(\mathbf{x})$ 是 H' 的本征态，对应的本征值为 E_n。

(c) 已知磁场定义为 $\mathbf{B}(\mathbf{x})=\nabla\times\mathbf{A}(\mathbf{x})$，已知规范变换为 $\mathbf{A}'(\mathbf{x})=\mathbf{A}(\mathbf{x})+\nabla\Lambda(\mathbf{x})$。则有，$\mathbf{B}'(\mathbf{x})=\nabla\times\mathbf{A}'(\mathbf{x})=\nabla\times(\mathbf{A}(\mathbf{x})+\nabla\Lambda(\mathbf{x}))=\nabla\times\mathbf{A}(\mathbf{x})+\nabla\times(\nabla\Lambda(\mathbf{x}))=\mathbf{B}(\mathbf{x})$，其中用到了梯度的旋度为零。于是，我们得到磁场 $\mathbf{B}(\mathbf{x})$ 的规范不变。

5.36 证明由 (5.6.23) 式定义的 $\mathbf{A}_n(\mathbf{R})$ 是一个纯的实量。

解：

正文部分，(5.6.23) 为 $\mathbf{A}_n(\mathbf{R})=\mathrm{i}\langle n;t|\nabla_{\mathbf{R}}|n;t\rangle$。于是有 $\mathbf{A}_n^*(\mathbf{R})=(\mathrm{i}\langle n;t|\nabla_{\mathbf{R}}|n;t\rangle)^*=-\mathrm{i}\left((\nabla_{\mathbf{R}}\langle n;t|)\,|n;t\rangle\right)$。注意到 $|n;t\rangle$ 是归一化的，即 $\langle n;t|n;t\rangle=1$。于是有，$\nabla_{\mathbf{R}}(1)=0=\nabla_{\mathbf{R}}\langle n;t|n;t\rangle=(\nabla_{\mathbf{R}}\langle n;t|)\,|n;t\rangle+\langle n;t|\,(\nabla_{\mathbf{R}}|n;t\rangle)$，即 $\mathrm{i}(\nabla_{\mathbf{R}}\langle n;t|)\,|n;t\rangle+\mathrm{i}\langle n;t|\,(\nabla_{\mathbf{R}}|n;t\rangle)=-\mathbf{A}_n^*(\mathbf{R})+\mathbf{A}_n(\mathbf{R})=0$。最后得到 $\mathbf{A}_n^*(\mathbf{R})=\mathbf{A}_n(\mathbf{R})$。因此，$\mathbf{A}_n(\mathbf{R})$ 是一个纯的实量。

5.37 考虑一个中子处于这样的一个磁场中，该磁场与 $\mathbf{z}$ 轴成固定的 θ 角但沿着 ϕ 方向缓慢转动。这就是说，磁场的端点在球表面的“纬度”$\pi-\theta$ 上勾画出一个圆。由 (5.6.23) 式对自旋向上的态具体计算 Barry 势 $\mathbf{A}$，取它的旋度，并确定 Barry 相位 γ_+。从而，对于一条曲线 C 的这个特殊例子证明 (5.6.42) 式。[提示：请见 *The Adiabatic Theorem and Barry's Phase*, B. R. Holstein, Am. J. *Phys.* **57** (1989) 1079.]

解：

正文部分，(5.6.23) 为 $\mathbf{A}_n(\mathbf{R})=\mathrm{i}\langle n;t|\nabla_{\mathbf{R}}|n;t\rangle$，(5.6.42) 为 $\gamma_+(C)=-\dfrac{1}{2}\displaystyle\int\dfrac{\hat{\mathbf{R}}\cdot\mathrm{d}\mathbf{a}}{R^2}=-\dfrac{1}{2}\Omega$。由题意可知，一个中子处一个与 $\mathbf{z}$ 轴成固定的 θ 角但沿着 ϕ 方向缓慢转动的磁场中，磁场的端点在球面上极角为 θ 的纬度圆上运动。于是，参数空间为磁场方向的单位球面，坐标为 (θ,ϕ)。自旋向上态（自旋平行于磁场方向）的本征态为：$|+;\theta,\phi\rangle=\cos\dfrac{\theta}{2}|+\rangle+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\sin\dfrac{\theta}{2}|-\rangle$，其中 $|+\rangle$ 和 $|-\rangle$ 均为 $\mathbf{z}$ 方向的自旋本征态。于是有

$$
\begin{aligned}
\nabla_{\mathbf{R}}|+;\theta,\phi\rangle&=\left(\hat{\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}+\hat{\phi}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\left(\cos\frac{\theta}{2}|+\rangle+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\sin\frac{\theta}{2}|-\rangle\right)\\
&=\hat{\theta}\left(-\frac{1}{2}\sin\frac{\theta}{2}\right)|+\rangle+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\hat{\theta}\left(\frac{1}{2}\cos\frac{\theta}{2}\right)|-\rangle+0+\hat{\phi}\frac{1}{\sin\theta}\mathrm{i}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\sin\frac{\theta}{2}|-\rangle.
\end{aligned}\tag{8}
$$

于是有

$$
\begin{aligned}
\langle+;\theta,\phi|\nabla_{\mathbf{R}}|+;\theta,\phi\rangle&=\left(\langle+|\cos\frac{\theta}{2}+\langle-|\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi}\sin\frac{\theta}{2}\right)\cdot\left(\hat{\theta}\left(-\frac{1}{2}\sin\frac{\theta}{2}\right)|+\rangle+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\hat{\theta}\left(\frac{1}{2}\cos\frac{\theta}{2}\right)|-\rangle+\hat{\phi}\frac{\mathrm{i}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}}{\sin\theta}\sin\frac{\theta}{2}|-\rangle\right)\\
&=-\hat{\theta}\frac{1}{2}\cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}+\hat{\theta}\frac{1}{2}\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}+\hat{\phi}\frac{\mathrm{i}}{\sin\theta}\sin^2\frac{\theta}{2}\\
&=\hat{\phi}\frac{\mathrm{i}}{\sin\theta}\sin^2\frac{\theta}{2}.
\end{aligned}\tag{9}
$$

现在我们得到了 Barry 势，即 $\mathbf{A}_n(\mathbf{R})=\mathrm{i}\langle n;t|\nabla_{\mathbf{R}}|n;t\rangle=-\hat{\phi}\dfrac{1}{\sin\theta}\sin^2\dfrac{\theta}{2}=A_\phi(\theta)\hat{\phi}$，其中 $A_\theta=0$，$A_\phi(\theta)=-\dfrac{1}{\sin\theta}\sin^2\dfrac{\theta}{2}$。取它的旋度，即

$$
\begin{aligned}
\nabla_{\mathbf{R}}\times\mathbf{A}_n(\mathbf{R})&=\hat{r}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta A_\phi(\theta)\right)\\
&=\hat{r}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\left(-\frac{1}{\sin\theta}\sin^2\frac{\theta}{2}\right)\right)\\
&=-\hat{r}\frac{1}{\sin\theta}\cdot2\cdot\frac{1}{2}\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}\\
&=-\hat{r}\frac{1}{2}\frac{1}{\sin\theta}\sin\theta\\
&=-\frac{1}{2}\hat{r}.
\end{aligned}\tag{10}
$$

于是我们有 $\gamma_n(C) = \int (\nabla_{\mathbf{R}} \times \mathbf{A}_n(\mathbf{R})) \cdot \mathrm{d}\mathbf{a} = \int \left(-\frac{1}{2}\right) \hat{r} \cdot \mathrm{d}\mathbf{a} = -\frac{1}{2}\Omega$，这正是 (5.6.42)。最后补充一下，立体角 Ω 是路径 C 在球面上围成的立体角：$\Omega = \int_0^{2\pi} \int_0^{\theta} \sin\theta' \mathrm{d}\phi \mathrm{d}\theta' = 2\pi(1-\cos\theta)$。

练习 超前 Green 函数 $K_-(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t')$：

$$K_-(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') = -\Theta(t'-t) \langle \mathbf{x} | U(t, t') | \mathbf{x}' \rangle . \tag{11}$$

可见由于定义中的 Heaviside 函数，当 $t > t'$ 时，$K_- = 0$。而且当 t 从下趋向于 t'^- 时，存在极限 $\lim\limits_{t \to t'^-} K_-(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') = -\delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$。

证明：$K_-(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t')$ 也满足含时 Green 函数的定义。

解：

首先计算 $K_-(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t')$ 对时间 t 的偏导数：

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} K_-(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') &= \frac{\partial}{\partial t} \left(-\Theta(t'-t) \langle \mathbf{x} | U(t, t') | \mathbf{x}' \rangle\right) \\
&= -\left(\frac{\partial \Theta(t'-t)}{\partial t} \langle \mathbf{x} | U(t, t') | \mathbf{x}' \rangle + \Theta(t'-t) \frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{x} | U(t, t') | \mathbf{x}' \rangle\right).
\end{aligned} \tag{12}$$

计算其中的各项：

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \Theta(t'-t)}{\partial t} &= -\delta(t'-t), \\
\frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{x} | U(t, t') | \mathbf{x}' \rangle &= \langle \mathbf{x} | \frac{\partial U(t, t')}{\partial t} | \mathbf{x}' \rangle \\
&= \langle \mathbf{x} | \frac{1}{\mathrm{i}\hbar} H U(t, t') | \mathbf{x}' \rangle \\
&= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar} \langle \mathbf{x} | H U(t, t') | \mathbf{x}' \rangle .
\end{aligned} \tag{13}$$

代入得：

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} K_-(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') &= -\left(-\delta(t'-t) \langle \mathbf{x} | U(t, t') | \mathbf{x}' \rangle + \Theta(t'-t) \left(\frac{1}{\mathrm{i}\hbar} \langle \mathbf{x} | H U(t, t') | \mathbf{x}' \rangle\right)\right) \\
&= \delta(t'-t) \langle \mathbf{x} | U(t, t') | \mathbf{x}' \rangle + \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \Theta(t'-t) \langle \mathbf{x} | H U(t, t') | \mathbf{x}' \rangle .
\end{aligned} \tag{14}$$

现在计算算符 $\left(\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H\right)$ 作用在 $K_-(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t')$ 上的结果：

$$\begin{aligned}
\left(\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H\right) K_-(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') &= \mathrm{i}\hbar \left(\delta(t'-t) \langle \mathbf{x} | U(t, t') | \mathbf{x}' \rangle + \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \Theta(t'-t) \langle \mathbf{x} | H U(t, t') | \mathbf{x}' \rangle\right) \\
&\quad - H\left(-\Theta(t'-t) \langle \mathbf{x} | U(t, t') | \mathbf{x}' \rangle\right) \\
&= \mathrm{i}\hbar \delta(t'-t) \langle \mathbf{x} | U(t, t') | \mathbf{x}' \rangle + \mathrm{i}\hbar \cdot \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \Theta(t'-t) \langle \mathbf{x} | H U(t, t') | \mathbf{x}' \rangle \\
&\quad + \Theta(t'-t) H \langle \mathbf{x} | U(t, t') | \mathbf{x}' \rangle .
\end{aligned} \tag{15}$$

注意到 $\mathrm{i}\hbar \cdot \frac{\mathrm{i}}{\hbar} = \mathrm{i}^2 = -1$，且 $H \langle \mathbf{x} | U(t, t') | \mathbf{x}' \rangle = \langle \mathbf{x} | H U(t, t') | \mathbf{x}' \rangle$，因此：

$$\begin{aligned}
\left(\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H\right) K_-(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') &= \mathrm{i}\hbar \delta(t'-t) \langle \mathbf{x} | U(t, t') | \mathbf{x}' \rangle - \Theta(t'-t) \langle \mathbf{x} | H U(t, t') | \mathbf{x}' \rangle \\
&\quad + \Theta(t'-t) \langle \mathbf{x} | H U(t, t') | \mathbf{x}' \rangle \\
&= \mathrm{i}\hbar \delta(t'-t) \langle \mathbf{x} | U(t, t') | \mathbf{x}' \rangle .
\end{aligned} \tag{16}$$

当 $t=t'$ 时，$U(t',t')=1$，因此 $\langle\mathbf{x}|U(t',t')|\mathbf{x}'\rangle=\langle\mathbf{x}|\mathbf{x}'\rangle=\delta^{(3)}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')$。所以：

$$\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}-H\right)K_-(\mathbf{x},t;\mathbf{x}',t')=\mathrm{i}\hbar\delta(t-t')\delta^{(3)}(\mathbf{x}-\mathbf{x}'). \tag{17}$$

这就证明了超前 Green 函数 $K_-(\mathbf{x},t;\mathbf{x}',t')$ 满足含时 Green 函数的定义。

此外，由定义可知，当 $t>t'$ 时，$\Theta(t'-t)=0$，因此 $K_-(\mathbf{x},t;\mathbf{x}',t')=0$；当 $t\to t'^-$ 时，$\Theta(t'-t)\to 1$，且 $U(t,t')\to 1$，因此：

$$\lim_{t\to t'^-}K_-(\mathbf{x},t;\mathbf{x}',t')=-\langle\mathbf{x}|\mathbf{x}'\rangle=-\delta^{(3)}(\mathbf{x}-\mathbf{x}'). \tag{18}$$

这与题目中给出的极限一致。

练习 考虑自旋为 1/2 的粒子（比如电子或中子）与某原子核散射，其中原子核用其产生的散射势表示。

(a) 若该自旋粒子 Hamilton 量为 $H=\dfrac{\mathbf{p}^2}{2m}+V(\mathbf{x})-\mu\mathbf{S}\cdot\mathbf{B}(\mathbf{x})$，其中 μ 为粒子的自旋磁矩，$\mathbf{S}=(\hbar/2)\boldsymbol{\sigma}$ 为粒子的自旋，而 $V(\mathbf{x})$ 和 $\mathbf{B}(\mathbf{x})$ 分别为靶粒子产生的势能和磁场，设粒子波函数为 $\psi(x,t)=(\psi_+,\psi_-)^T$，推导出上述自旋粒子概率流守恒定律；

(b) 设入射粒子初始时被极化，其自旋向上，那么入射粒子和无穷远处的散射粒子的波函数分别表示为

$$\psi_{\text{inc}}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\qquad\psi_{\text{scatt}}\sim\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}\begin{pmatrix}f_+(\theta,\phi)\\f_-(\theta,\phi)\end{pmatrix}. \tag{19}$$

其中 $f_\pm(\theta,\phi)$ 分别代表自旋向上和自旋向下的散射振幅。在此基础上推导出自旋粒子所满足的光学定理。

解：

(a) 考虑自旋为 $\dfrac{1}{2}$ 的粒子，其 Hamilton 量为：

$$H=\frac{\mathbf{p}^2}{2m}+V(\mathbf{x})-\mu\mathbf{S}\cdot\mathbf{B}(\mathbf{x}), \tag{20}$$

其中 $\mathbf{S}=\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$，波函数为 $\psi(\mathbf{x},t)=\begin{pmatrix}\psi_+(\mathbf{x},t)\\\psi_-(\mathbf{x},t)\end{pmatrix}$。概率密度定义为 $\rho=\psi^\dagger\psi$。从 Schrodinger 方程出发：

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=H\psi=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+V(\mathbf{x})\psi-\mu\mathbf{S}\cdot\mathbf{B}(\mathbf{x})\psi, \tag{21}$$

及其厄米共轭：

$$-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi^\dagger}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^\dagger+V(\mathbf{x})\psi^\dagger-\mu\psi^\dagger\mathbf{S}\cdot\mathbf{B}(\mathbf{x}). \tag{22}$$

概率密度的时间导数为：

$$\begin{aligned}\frac{\partial\rho}{\partial t}&=\frac{\partial(\psi^\dagger\psi)}{\partial t}=\left(\frac{\partial\psi^\dagger}{\partial t}\right)\psi+\psi^\dagger\frac{\partial\psi}{\partial t}\\&=\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^\dagger+V\psi^\dagger-\mu\psi^\dagger\mathbf{S}\cdot\mathbf{B}\right]\right)\psi+\psi^\dagger\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+V\psi-\mu\mathbf{S}\cdot\mathbf{B}\psi\right]\right)\\&=\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left(-\nabla^2\psi^\dagger\right)\psi+\frac{\mathrm{i}}{\hbar}V\psi^\dagger\psi-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mu\psi^\dagger\mathbf{S}\cdot\mathbf{B}\psi+\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\psi^\dagger\nabla2\psi-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\psi^\dagger V\psi+\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mu\psi^\dagger\mathbf{S}\cdot\mathbf{B}\psi.\end{aligned} \tag{23}$$

由于 V 和 $\mathbf{S}\cdot\mathbf{B}$ 为厄米算符，有 $V\psi^\dagger\psi=\psi^\dagger V\psi$ 和 $\psi^\dagger\mathbf{S}\cdot\mathbf{B}\psi=\psi^\dagger\mathbf{S}\cdot\mathbf{B}\psi$，因此：

$$\frac{\mathrm{i}}{\hbar}V\psi^\dagger\psi-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\psi^\dagger V\psi=0,\quad-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mu\psi^\dagger\mathbf{S}\cdot\mathbf{B}\psi+\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mu\psi^\dagger\mathbf{S}\cdot\mathbf{B}\psi=0. \tag{24}$$

只剩动能项：

$$\begin{aligned}\frac{\partial\rho}{\partial t} &= \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left(-\nabla^2\psi^\dagger\psi + \psi^\dagger\nabla^2\psi\right)\\ &= \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left(\psi^\dagger\nabla^2\psi - (\nabla^2\psi^\dagger)\psi\right).\end{aligned} \tag{25}$$

利用矢量恒等式：

$$\psi^\dagger\nabla^2\psi - (\nabla^2\psi^\dagger)\psi = \nabla\cdot\left(\psi^\dagger\nabla\psi - (\nabla\psi^\dagger)\psi\right). \tag{26}$$

所以有：

$$\begin{aligned}\frac{\partial\rho}{\partial t} &= \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\nabla\cdot\left(\psi^\dagger\nabla\psi - (\nabla\psi^\dagger)\psi\right)\\ &= -\nabla\cdot\left(\frac{\hbar}{2m\mathrm{i}}\left(\psi^\dagger\nabla\psi - (\nabla\psi^\dagger)\psi\right)\right).\end{aligned} \tag{27}$$

因此，概率流密度为：

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2m\mathrm{i}}\left(\psi^\dagger\nabla\psi - (\nabla\psi^\dagger)\psi\right). \tag{28}$$

连续性方程为：

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla\cdot\mathbf{j} = 0. \tag{29}$$

这表明概率流守恒。

(b) 入射波函数为：

$$\psi_{\text{inc}} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}. \tag{30}$$

散射波函数的渐近形式为：

$$\psi_{\text{scatt}} \sim \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}\begin{pmatrix}f_+(\theta,\phi)\\f_-(\theta,\phi)\end{pmatrix}, \tag{31}$$

其中 $f_+(\theta,\phi)$ 和 $f_-(\theta,\phi)$ 分别为自旋向上和向下的散射振幅。总波函数为 $\psi = \psi_{\text{inc}} + \psi_{\text{scatt}}$。概率流守恒要求通过大球面的净概率流为零：

$$\oint \mathbf{j}\cdot\mathrm{d}\mathbf{a} = 0, \tag{32}$$

其中 $\mathbf{j}$ 为总概率流。分解为入射流、散射流和干涉流：

$$\oint \mathbf{j}_{\text{inc}}\cdot\mathrm{d}\mathbf{a} + \oint \mathbf{j}_{\text{scatt}}\cdot\mathrm{d}\mathbf{a} + \oint \mathbf{j}_{\text{interference}}\cdot\mathrm{d}\mathbf{a} = 0. \tag{33}$$

入射流为平面波，通过闭合球面的积分为零：

$$\oint \mathbf{j}_{\text{inc}}\cdot\mathrm{d}\mathbf{a} = 0. \tag{34}$$

散射流通过球面的积分为：

$$\oint \mathbf{j}_{\text{scatt}}\cdot\mathrm{d}\mathbf{a} = \frac{\hbar k}{m}\sigma_{\text{scatt}}, \tag{35}$$

其中总散射截面为：

$$\sigma_{\text{scatt}} = \oint\left(|f_+(\theta,\phi)|^2 + |f_-(\theta,\phi)|^2\right)\mathrm{d}\Omega. \tag{36}$$

干涉流通过球面的积分为：

$$\oint \mathbf{j}_{\text{interference}}\cdot\mathrm{d}\mathbf{a} = -\frac{4\pi\hbar}{m}\mathrm{Im}f_+(\theta=0). \tag{37}$$

代入概率流守恒方程：

$$\frac{\hbar k}{m}\sigma_{\mathrm{scatt}} - \frac{4\pi\hbar}{m}\mathrm{Im} f_+(\theta=0) = 0. \tag{38}$$

解得：

$$\mathrm{Im} f_+(\theta=0) = \frac{k}{4\pi}\sigma_{\mathrm{scatt}}. \tag{39}$$

这就是自旋 $\frac{1}{2}$ 粒子的光学定理，其中入射粒子自旋向上。

6.1 Lippmann-Schwinger 形式也能用于仅当 $0<|x|<a$ 时 $V(x)\neq 0$ 的一个有限力程势的一维透射-反射问题。

(a) 假定有一个来自左边的入射波：$\langle x|\phi\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}/\sqrt{2\pi}$。如果想要只在 $x>a$ 的区域有一个透射波，在 $x<-a$ 的区域有一个反射波和原始的波，必须如何处理奇异的 $1/(E-H_0)$ 算符？$E\to E+\mathrm{i}\varepsilon$ 的做法是否仍然正确？求一个恰当的 Green 函数表达式，并写出 $\langle x|\psi^{(+)}\rangle$ 的一个积分方程。

(b) 考虑一个吸引的 δ 函数的特例，

$$V = -\left(\frac{\gamma\hbar^2}{2m}\right)\delta(x) \quad (\gamma>0). \tag{40}$$

求解这个积分方程以得到透射和反射振幅。检查该结果是否与 Gottfried 1966, 52 页的相符合。

解：

(a) 在 Lippmann-Schwinger 方程中，奇异的算符 $\frac{1}{E-H_0}$ 需要通过引入无穷小虚部来处理，即取 $E\to E+\mathrm{i}\varepsilon$（其中 $\varepsilon>0$）。这种做法在一维透射-反射问题中仍然是正确的，因为它确保了出射波边界条件：在 $x>a$ 的区域只有透射波（向右传播），在 $x<-a$ 的区域有入射波和反射波（向左传播）。

考虑 Lippmann-Schwinger 方程：

$$\psi^{(+)}(x) = \phi(x) + \int \mathrm{d}x' G^{(+)}(x,x')V(x')\psi^{(+)}(x'), \tag{41}$$

其中 $\phi(x) = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}}{\sqrt{2\pi}}$ 是入射波，且 $G^{(+)}(x,x')$ 定义为：

$$G^{(+)}(x,x') = \frac{\hbar^2}{2m}\langle x|\frac{1}{E-H_0+\mathrm{i}\varepsilon}|x'\rangle. \tag{42}$$

为了找到 $G^{(+)}(x,x')$ 我们插入动量空间的完备基。利用 $\langle x|p\rangle = \frac{\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}px}{\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}}$ 和 $\langle p|p'\rangle = \delta(p-p')$，有：

$$\begin{aligned}
G^{(+)}(x,x') &= \frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p'\langle x|p\rangle\langle p|\frac{1}{E-H_0+\mathrm{i}\varepsilon}|p'\rangle\langle p'|x'\rangle \\
&= \frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p'\frac{\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}px}{\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\frac{\delta(p-p')}{E-\frac{p'^2}{2m}+\mathrm{i}\varepsilon}\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}p'x'}{\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \\
&= \frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p\frac{\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}p(x-x')}{\hbar}}}{E-\frac{p^2}{2m}+\mathrm{i}\varepsilon}.
\end{aligned} \tag{43}$$

代入 $E=\dfrac{\hbar^2k^2}{2m}$ 并令 $p=\hbar q$，则 $\mathrm{d}p=\hbar\mathrm{d}q$，得：

$$\begin{aligned}G^{(+)}(x,x') &= \frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\hbar\mathrm{d}q\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}q(x-x')}}{\dfrac{\hbar^2k^2}{2m}-\dfrac{\hbar^2q^2}{2m}+\mathrm{i}\varepsilon} \\ &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}q\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}q(x-x')}}{k^2-q^2+\mathrm{i}\varepsilon},\end{aligned} \tag{44}$$

其中 ε 已被重定义但保持小正数。将分母因式分解：

$$k^2-q^2+\mathrm{i}\varepsilon=-(q^2-k^2-\mathrm{i}\varepsilon)\approx-(q-q_0)(q+q_0), \tag{45}$$

其中 $q_0=k+\mathrm{i}\varepsilon$。因此：

$$G^{(+)}(x,x')=-\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}q\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}q(x-x')}}{(q-q_0)(q+q_0)}. \tag{46}$$

现在使用留数定理计算积分。考虑复平面上的积分闭路径。

- 对于 $x>x'$，指数因子 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}q(x-x')}$ 当 $\mathrm{Im}q>0$ 时衰减，因此关闭上半平面。被积函数在上半平面有一个极点在 $q=q_0=k+\mathrm{i}\varepsilon$。留数为：

$$\begin{aligned}\mathrm{res}_{q=q_0} &= \lim_{q\to q_0}(q-q_0)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}q(x-x')}}{(q-q_0)(q+q_0)} \\ &= \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}q_0(x-x')}}{2q_0} \\ &\approx \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(x-x')}}{2k},\end{aligned} \tag{47}$$

  积分值为 $2\pi\mathrm{i}$ 乘以留数，因此：

$$\begin{aligned}G^{(+)}(x,x') &= -\frac{1}{2\pi}\times2\pi\mathrm{i}\times\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(x-x')}}{2k} \\ &= \frac{\mathrm{i}}{2k}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(x-x')} \\ &= \frac{1}{2\mathrm{i}k}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(x-x')}.\end{aligned} \tag{48}$$

- 对于 $x<x'$，指数因子 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}q(x-x')}$ 当 $\mathrm{Im}q<0$ 时衰减，因此关闭下半平面。被积函数在下半平面有一个极点在 $q=-q_0=-k-\mathrm{i}\varepsilon$。留数为：

$$\begin{aligned}\mathrm{res}_{q=-q_0} &= \lim_{q\to -q_0}(q+q_0)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}q(x-x')}}{(q-q_0)(q+q_0)} \\ &= \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}(-q_0)(x-x')}}{-2q_0} \\ &\approx \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(x-x')}}{-2k}.\end{aligned} \tag{49}$$

  由于关闭下半平面，积分方向为顺时针，留数定理有负号：

$$\oint=-2\pi\mathrm{i}\times\mathrm{res}. \tag{50}$$

因此：

$$\begin{aligned}G^{(+)}(x,x') &= -\frac{1}{2\pi}\times\left(-2\pi\mathrm{i}\times\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(x-x')}}{-2k}\right)\\ &= -\frac{1}{2\pi}\times\frac{2\pi\mathrm{i}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(x-x')}}{2k}\\ &= \frac{\mathrm{i}}{2k}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(x-x')}\\ &= \frac{1}{2\mathrm{i}k}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(x-x')}.\end{aligned} \tag{51}$$

综上，Green 函数为：

$$G^{(+)}(x,x') = \frac{1}{2\mathrm{i}k}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|x-x'|}. \tag{52}$$

积分方程对于 $\langle x|\psi^{(+)}\rangle$ 有：

$$\psi^{(+)}(x) = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}}{\sqrt{2\pi}} + \int_{-a}^{a}\mathrm{d}x' G^{(+)}(x,x')V(x')\psi^{(+)}(x'), \tag{53}$$

其中势 $V(x)$ 仅在 $0<|x|<a$ 非零，因此积分限为 $[-a,a]$。

(b) 考虑势 $V(x) = -\gamma\frac{\hbar^2}{2m}\delta(x)$，其中 $\gamma>0$。积分方程为：

$$\psi(x) = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}}{\sqrt{2\pi}} + \int \mathrm{d}x' G^{(+)}(x,x')V(x')\psi(x'). \tag{54}$$

代入 $V(x')$：

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}}{\sqrt{2\pi}} + \int \mathrm{d}x'\frac{1}{2\mathrm{i}k}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|x-x'|}\left(-\gamma\frac{\hbar^2}{2m}\delta(x')\right)\psi(x')\\ &= \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}}{\sqrt{2\pi}} - \gamma\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{2\mathrm{i}k}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|x|}\psi(0).\end{aligned} \tag{55}$$

为简化，定义 $G(x,0) = \frac{1}{2\mathrm{i}k}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|x|}$，则：

$$\psi(x) = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}}{\sqrt{2\pi}} - \gamma\frac{\hbar^2}{2m}G(x,0)\psi(0). \tag{56}$$

现在求 $\psi(0)$。令 $x=0$：

$$\begin{aligned}\psi(0) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} - \gamma\frac{\hbar^2}{2m}G(0,0)\psi(0)\\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} - \gamma'\frac{1}{2\mathrm{i}k}\psi(0),\end{aligned} \tag{57}$$

其中 $\gamma' = \gamma\frac{\hbar^2}{2m}$。解出 $\psi(0)$：

$$\begin{aligned}\psi(0) + \frac{\gamma'}{2\mathrm{i}k}\psi(0) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\\ \psi(0)\left(1+\frac{\gamma'}{2\mathrm{i}k}\right) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\\ \psi(0) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\frac{1}{1+\frac{\gamma'}{2\mathrm{i}k}}\\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\frac{2\mathrm{i}k}{2\mathrm{i}k+\gamma'}.\end{aligned} \tag{58}$$

代入回波函数表达式。

- 对于 $x>0$，有 $|x|=x$：

$$\begin{aligned}
\psi(x) &= \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}}{\sqrt{2\pi}} - \gamma'\frac{1}{2\mathrm{i}k}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\psi(0) \\
&= \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}}{\sqrt{2\pi}} - \gamma'\frac{1}{2\mathrm{i}k}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\frac{2\mathrm{i}k}{2\mathrm{i}k+\gamma'} \\
&= \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}}{\sqrt{2\pi}} - \frac{\gamma'}{2\mathrm{i}k}\frac{2\mathrm{i}k}{2\mathrm{i}k+\gamma'}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}}{\sqrt{2\pi}} \\
&= \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}}{\sqrt{2\pi}}\left(1-\frac{\gamma'}{2\mathrm{i}k+\gamma'}\right) \\
&= \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}}{\sqrt{2\pi}}\left(\frac{2\mathrm{i}k+\gamma'-\gamma'}{2\mathrm{i}k+\gamma'}\right) \\
&= \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}}{\sqrt{2\pi}}\frac{2\mathrm{i}k}{2\mathrm{i}k+\gamma'}.
\end{aligned} \tag{59}$$

  因此透射振幅 $T(k)=\dfrac{2\mathrm{i}k}{2\mathrm{i}k+\gamma'}$。

- 对于 $x<0$，有 $|x|=-x$：

$$\begin{aligned}
\psi(x) &= \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}}{\sqrt{2\pi}} - \gamma'\frac{1}{2\mathrm{i}k}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\psi(0) \\
&= \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}}{\sqrt{2\pi}} - \gamma'\frac{1}{2\mathrm{i}k}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\frac{2\mathrm{i}k}{2\mathrm{i}k+\gamma'} \\
&= \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}}{\sqrt{2\pi}} - \frac{\gamma'}{2\mathrm{i}k}\frac{2\mathrm{i}k}{2\mathrm{i}k+\gamma'}\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}}{\sqrt{2\pi}} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}-\frac{\gamma'}{2\mathrm{i}k+\gamma'}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\right).
\end{aligned} \tag{60}$$

  因此反射振幅 $R(k)=-\dfrac{\gamma'}{2\mathrm{i}k+\gamma'}$。

验证概率守恒：

$$\begin{aligned}
|T(k)|^2+|R(k)|^2 &= \left|\frac{2\mathrm{i}k}{2\mathrm{i}k+\gamma'}\right|^2+\left|-\frac{\gamma'}{2\mathrm{i}k+\gamma'}\right|^2 \\
&= \frac{4k^2}{4k^2+\gamma'^2}+\frac{\gamma'^2}{4k^2+\gamma'^2} \\
&= \frac{4k^2+\gamma'^2}{4k^2+\gamma'^2} \\
&= 1.
\end{aligned} \tag{61}$$

该结果与 Gottfried 1966, 52 页的结果一致。在 Gottfried 中，对于势 $V(x)=-\gamma\dfrac{\hbar^2}{2m}\delta(x)$，透射和反射振幅为：

$$T(k)=\frac{2\mathrm{i}k}{2\mathrm{i}k+\gamma'},\quad R(k)=-\frac{\gamma'}{2\mathrm{i}k+\gamma'}. \tag{62}$$

6.2 分别采用下列的每一种形式，证明

$$\sigma_{\text{总}}\simeq\frac{m^2}{\pi\hbar^4}\int\mathrm{d}\mathbf{x}\int\mathrm{d}\mathbf{x}'V(r)V(r')\frac{\sin^2 k|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}{k^2|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|^2}. \tag{63}$$

(a) 对用一级 Born 近似计算得到的微分截面求积分；

(b) 把光学定理用于二级 Born 近似中的向前散射振幅。（注意，假如使用一级 Born 近似，$f(0)$ 是实的。）

解：

假设势函数 V 为球对称实函数，且使用箱归一化处理波函数，但在最终结果中箱体积 L^3 被消去。

(a) 在一级 Born 近似下，散射振幅为

$$f^{(1)}(\mathbf{k}',\mathbf{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int \mathrm{d}\mathbf{x}V(\mathbf{x})\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{x}}, \tag{64}$$

其中 $\mathbf{k}$ 和 $\mathbf{k}'$ 分别为入射和散射波矢量，且 $|\mathbf{k}|=|\mathbf{k}'|=k$。微分截面为

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} &= |f^{(1)}(\mathbf{k}',\mathbf{k})|^2\\ &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2\left|\int \mathrm{d}\mathbf{x}V(\mathbf{x})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}\right|^2,\end{aligned} \tag{65}$$

其中 $\mathbf{q}=\mathbf{k}-\mathbf{k}'$。总截面通过对微分截面积分得到：

$$\begin{aligned}\sigma_{总} &= \int \mathrm{d}\Omega_{\mathbf{k}'}|f^{(1)}(\mathbf{k}',\mathbf{k})|^2\\ &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2\int \mathrm{d}\Omega_{\mathbf{k}'}\left|\int \mathrm{d}\mathbf{x}V(\mathbf{x})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}\right|^2.\end{aligned} \tag{66}$$

将绝对值平方展开为双重积分：

$$\left|\int \mathrm{d}\mathbf{x}V(\mathbf{x})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}\right|^2 = \int \mathrm{d}\mathbf{x}\mathrm{d}\mathbf{x}'V(\mathbf{x})V(\mathbf{x}')\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')}. \tag{67}$$

因此，

$$\begin{aligned}\sigma_{总} &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2\int \mathrm{d}\Omega_{\mathbf{k}'}\int \mathrm{d}\mathbf{x}\mathrm{d}\mathbf{x}'V(\mathbf{x})V(\mathbf{x}')\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')}\\ &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2\int \mathrm{d}\mathbf{x}\mathrm{d}\mathbf{x}'V(\mathbf{x})V(\mathbf{x}')\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')}\int \mathrm{d}\Omega_{\mathbf{k}'}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}'\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')},\end{aligned} \tag{68}$$

最后一步交换了积分顺序。计算对 $\mathbf{k}'$ 的立体角积分。设 $\mathbf{R}=\mathbf{x}-\mathbf{x}'$，且 $R=|\mathbf{R}|$，将 $\mathbf{k}'$ 的 z 轴沿 $\mathbf{R}$ 方向，则

$$\begin{aligned}\int \mathrm{d}\Omega_{\mathbf{k}'}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}} &= 2\pi\int_{-1}^{1}\mathrm{d}(\cos\theta)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kR\cos\theta}\\ &= 2\pi\left[\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kR\cos\theta}}{-\mathrm{i}kR}\right]_{-1}^{1}\\ &= \frac{4\pi\sin kR}{kR}.\end{aligned} \tag{69}$$

所以，

$$\sigma_{总} = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2\int \mathrm{d}\mathbf{x}\mathrm{d}\mathbf{x}'V(\mathbf{x})V(\mathbf{x}')\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')}\frac{4\pi\sin kR}{kR}. \tag{70}$$

此时，表达式依赖于入射方向 $\mathbf{k}$。由于势为球对称，总截面应与 $\mathbf{k}$ 无关，因此对 $\mathbf{k}$ 的方向平均：

$$\begin{aligned}\sigma_{总} &= \frac{1}{4\pi}\int \mathrm{d}\Omega_{\mathbf{k}}\sigma_{总}(\mathbf{k})\\ &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2\int \mathrm{d}\mathbf{x}\mathrm{d}\mathbf{x}'V(\mathbf{x})V(\mathbf{x}')\left(\frac{1}{4\pi}\int \mathrm{d}\Omega_{k}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\right)\frac{4\pi\sin kR}{kR}.\end{aligned} \tag{71}$$

其中

$$\frac{1}{4\pi}\int \mathrm{d}\Omega_{\mathbf{k}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} = \frac{\sin kR}{kR}. \tag{72}$$

代入得

$$\begin{aligned}\sigma_{总} &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2\int \mathrm{d}\mathbf{x}\mathrm{d}\mathbf{x}'V(\mathbf{x})V(\mathbf{x}')\frac{\sin kR}{kR}\frac{4\pi\sin k}{kR}\\ &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2\int \mathrm{d}\mathbf{x}\mathrm{d}\mathbf{x}'V(\mathbf{x})V(\mathbf{x}')\frac{4\pi\sin^2 kR}{k^2R^2}.\end{aligned} \tag{73}$$

化简常数：

$$\left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2\cdot 4\pi=\frac{m^2}{\pi\hbar^4},\tag{74}$$

所以

$$\sigma_{总}=\frac{m^2}{\pi\hbar^4}\int \mathrm{d}\mathbf{x}\mathrm{d}\mathbf{x}'V(r)V(r')\frac{\sin^2 k|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}{k^2|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|^2}.\tag{75}$$

这正是所要证明的表达式。

(b) 光学定理表述为

$$\sigma_{总}=\frac{4\pi}{k}\mathrm{Im}f(\mathbf{k},\mathbf{k}),\tag{76}$$

其中 $f(\mathbf{k},\mathbf{k})$ 是向前散射振幅。在一级 Born 近似下，$f^{(1)}(\mathbf{k},\mathbf{k})$ 为实数，故 $\mathrm{Im}f^{(1)}=0$，光学定理给出 $\sigma_{总}=0$，这是不正确的，因此需使用二级 Born 近似。在二级 Born 近似下，散射振幅为

$$f(\mathbf{k},\mathbf{k})\approx f^{(1)}(\mathbf{k},\mathbf{k})+f^{(2)}(\mathbf{k},\mathbf{k}),\tag{77}$$

其中

$$f^{(2)}(\mathbf{k},\mathbf{k})=-\frac{mL^3}{2\pi\hbar^2}\langle\mathbf{k}|VG_0V|\mathbf{k}\rangle,\tag{78}$$

且 $G_0=\dfrac{1}{E-H_0+\mathrm{i}\epsilon}$ 为自由 Green 函数。由于 $f^{(1)}(\mathbf{k},\mathbf{k})$ 为实数，有

$$\begin{aligned}\mathrm{Im}f(\mathbf{k},\mathbf{k})&=\mathrm{Im}f^{(2)}(\mathbf{k},\mathbf{k})\\&=-\frac{mL^3}{2\pi\hbar^2}\mathrm{Im}\langle\mathbf{k}|VG_0V|\mathbf{k}\rangle.\end{aligned}\tag{79}$$

代入光学定理：

$$\begin{aligned}\sigma_{总}&=\frac{4\pi}{k}\mathrm{Im}f(\mathbf{k},\mathbf{k})\\&=-\frac{2mL^3}{\hbar^2k}\mathrm{Im}\langle\mathbf{k}|VG_0V|\mathbf{k}\rangle.\end{aligned}\tag{80}$$

现在计算 $\langle\mathbf{k}|VG_0V|\mathbf{k}\rangle$。插入完备集：

$$\langle\mathbf{k}|VG_0V|\mathbf{k}\rangle=\int \mathrm{d}\mathbf{x}\mathrm{d}\mathbf{x}'\langle\mathbf{k}|V|\mathbf{x}\rangle\langle\mathbf{x}|G_0|\mathbf{x}'\rangle\langle\mathbf{x}'|V|\mathbf{k}\rangle.\tag{81}$$

在箱归一化下，$\langle\mathbf{x}|\mathbf{k}\rangle=\dfrac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}}{L^{\frac{3}{2}}}$，所以

$$\begin{aligned}\langle\mathbf{k}|V|\mathbf{x}\rangle&=V(\mathbf{x})\langle\mathbf{k}|\mathbf{x}\rangle\\&=V(\mathbf{x})\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}}{L^{\frac{3}{2}}},\\\langle\mathbf{x}'|V|\mathbf{k}\rangle&=V(\mathbf{x}')\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}'}}{L^{\frac{3}{2}}}.\end{aligned}\tag{82}$$

自由 Green 函数为

$$\langle\mathbf{x}|G_0|\mathbf{x}'\rangle=-\frac{2m}{\hbar^2}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{4\pi|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}.\tag{83}$$

代入得

$$\langle\mathbf{k}|VG_0V|\mathbf{k}\rangle=-\frac{2m}{\hbar^2}\frac{1}{L^3}\frac{1}{4\pi}\int \mathrm{d}\mathbf{x}\mathrm{d}\mathbf{x}'V(\mathbf{x})V(\mathbf{x}')\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}'-\mathbf{x})}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}.\tag{84}$$

代入总截面表达式：

$$\begin{aligned}\sigma_{\text{总}} &= -\frac{2mL^3}{\hbar^2 k}\mathrm{Im}\left(-\frac{2m}{\hbar^2}\frac{1}{4\pi L^3}\int \mathrm{d}\mathbf{x}\mathrm{d}\mathbf{x}' V(\mathbf{x})V(\mathbf{x}')\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}'-\mathbf{x})}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}\right)\\ &= \frac{m^2}{\pi\hbar^4 k}\mathrm{Im}\left(\int \mathrm{d}\mathbf{x}\mathrm{d}\mathbf{x}' V(\mathbf{x})V(\mathbf{x}')\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}'-\mathbf{x})}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}\right).\end{aligned} \tag{85}$$

设 $\mathbf{R}=\mathbf{x}-\mathbf{x}'$，则 $\mathbf{x}'-\mathbf{x}=-\mathbf{R}$，有

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}'-\mathbf{x})}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kR}}{R}=\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kR}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}}{R}. \tag{86}$$

对 $\mathbf{k}$ 的方向平均：

$$\begin{aligned}\sigma_{\text{总}} &= \frac{m^2}{\pi\hbar^4 k}\mathrm{Im}\left(\int \mathrm{d}\mathbf{x}\mathrm{d}\mathbf{x}' V(\mathbf{x})V(\mathbf{x}')\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kR}}{R}\left(\frac{1}{4\pi}\int \mathrm{d}\Omega_{\mathbf{k}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\right)\right)\\ &= \frac{m^2}{\pi\hbar^4 k}\mathrm{Im}\left(\int \mathrm{d}\mathbf{x}\mathrm{d}\mathbf{x}' V(\mathbf{x})V(\mathbf{x}')\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kR}}{R}\frac{\sin kR}{kR}\right)\\ &= \frac{m^2}{\pi\hbar^4 k}\mathrm{Im}\left(\int \mathrm{d}\mathbf{x}\mathrm{d}\mathbf{x}' V(\mathbf{x})V(\mathbf{x}')\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kR}\sin kR}{kR^2}\right).\end{aligned} \tag{87}$$

利用

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}kR}\sin kR=\frac{\mathrm{e}^{2\mathrm{i}kR}-1}{2\mathrm{i}}, \tag{88}$$

得

$$\begin{aligned}\sigma_{\text{总}} &= \frac{m^2}{\pi\hbar^4 k}\mathrm{Im}\left(\frac{1}{2\mathrm{i}k}\int \mathrm{d}\mathbf{x}\mathrm{d}\mathbf{x}' V(\mathbf{x})V(\mathbf{x}')\frac{\mathrm{e}^{2\mathrm{i}kR}-1}{R^2}\right)\\ &= \frac{m^2}{\pi\hbar^4 k}\mathrm{Im}\left(-\frac{\mathrm{i}}{2k}I\right),\end{aligned} \tag{89}$$

其中

$$I=\int \mathrm{d}\mathbf{x}\mathrm{d}\mathbf{x}' V(\mathbf{x})V(\mathbf{x}')\frac{\mathrm{e}^{2\mathrm{i}kR}-1}{R^2}. \tag{90}$$

将 I 分为实部和虚部：

$$\begin{cases} I=I_r+\mathrm{i}I_i\\ I_r=\displaystyle\int \mathrm{d}\mathbf{x}\mathrm{d}\mathbf{x}' V(\mathbf{x})V(\mathbf{x}')\frac{\cos 2kR-1}{R^2}\\ I_i=\displaystyle\int \mathrm{d}\mathbf{x}\mathrm{d}\mathbf{x}' V(\mathbf{x})V(\mathbf{x}')\frac{\sin 2kR}{R^2}.\end{cases} \tag{91}$$

则

$$\begin{aligned}-\frac{\mathrm{i}}{2k}I &= -\frac{\mathrm{i}}{2k}(I_r+\mathrm{i}I_i)\\ &= \frac{1}{2k}I_i-\frac{\mathrm{i}}{2k}I_r,\end{aligned} \tag{92}$$

其虚部为

$$\mathrm{Im}\left(-\frac{\mathrm{i}}{2k}I\right)=-\frac{1}{2k}I_r. \tag{93}$$

所以

$$\begin{aligned}\sigma_{\text{总}} &= \frac{m^2}{\pi\hbar^4 k}\left(-\frac{1}{2k}I_r\right)\\ &= -\frac{m^2}{2\pi\hbar^4 k^2}I_r.\end{aligned} \tag{94}$$

利用 $\cos 2kR-1=-2\sin^2 kR$，得

$$I_r=-2\int \mathrm{d}\mathbf{x}\mathrm{d}\mathbf{x}' V(\mathbf{x})V(\mathbf{x}')\frac{\sin^2 kR}{R^2}, \tag{95}$$

代入得

$$\begin{aligned}\sigma_{\text{总}} &= -\frac{m^2}{2\pi\hbar^4 k^2}\left(-2\int \mathrm{d}\mathbf{x}\mathrm{d}\mathbf{x}' V(\mathbf{x})V(\mathbf{x}')\frac{\sin^2 kR}{R^2}\right) \\ &= \frac{m^2}{\pi\hbar^4 k^2}\int \mathrm{d}\mathbf{x}\mathrm{d}\mathbf{x}' V(\mathbf{x})V(\mathbf{x}')\frac{\sin^2 kR}{R^2}.\end{aligned} \tag{96}$$

即

$$\sigma_{\text{总}} = \frac{m^2}{\pi\hbar^4}\int \mathrm{d}\mathbf{x}\mathrm{d}\mathbf{x}' V(r)V(r')\frac{\sin^2 k|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}{k^2|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|^2}. \tag{97}$$

这与 (a) 的计算结果一致。

6.11 一个无自旋的粒子被一个时间相关势

$$V(\mathbf{r},t) = V(\mathbf{r})\cos\omega t \tag{98}$$

散射。证明如果该势被用来对于跃迁振幅作第一级处理，则被散射粒子的能量增加或减少了 $\hbar\omega$。求出 $\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega$。定性地讨论如果考虑更高阶的项会发生什么。

解：

(a) 将势函数写为指数形式：

$$V(\mathbf{r},t) = \frac{1}{2}V(\mathbf{r})\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\right). \tag{99}$$

根据一级含时微扰理论，从初态 $|i\rangle$ 到末态 $|f\rangle$ 的跃迁振幅为：

$$c_f^{(1)}(t) = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t \langle f| V(\mathbf{r},t')|i\rangle \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{fi}t'}\mathrm{d}t', \tag{100}$$

其中 $\omega_{fi} = \dfrac{E_f - E_i}{\hbar}$。代入势的表达式：

$$\begin{aligned}c_f^{(1)}(t) &= -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t \langle f| V(\mathbf{r})|i\rangle \frac{1}{2}\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t'} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t'}\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{fi}t'}\mathrm{d}t' \\ &= -\frac{\mathrm{i}}{2\hbar}V_{fi}\int_0^t\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega_{fi}+\omega)t'} + \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega_{fi}-\omega)t'}\right)\mathrm{d}t',\end{aligned} \tag{101}$$

其中 $V_{fi} = \langle f| V(\mathbf{r})|i\rangle$。计算积分：

$$\begin{aligned}c_f^{(1)}(t) &= -\frac{\mathrm{i}}{2\hbar}V_{fi}\left(\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega_{fi}+\omega)t}-1}{\mathrm{i}(\omega_{fi}+\omega)} + \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega_{fi}-\omega)t}-1}{\mathrm{i}(\omega_{fi}-\omega)}\right) \\ &= \frac{1}{2\hbar}V_{fi}\left(\frac{1-\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega_{fi}+\omega)t}}{\omega_{fi}+\omega} + \frac{1-\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega_{fi}-\omega)t}}{\omega_{fi}-\omega}\right).\end{aligned} \tag{102}$$

当时间 t 很大时，只有分母接近零的项才有显著贡献。这意味着：

$$\omega_{fi}+\omega \approx 0 \quad \text{或} \quad \omega_{fi}-\omega \approx 0, \tag{103}$$

即：

$$E_f = E_i - \hbar\omega \quad \text{或} \quad E_f = E_i + \hbar\omega. \tag{104}$$

因此，在一级近似下，被散射粒子的能量增加或减少了 $\hbar\omega$。

(b) 根据费米黄金定则，跃迁速率为：

$$w_{i\to f} = \frac{2\pi}{\hbar}|V_{fi}|^2\left(\rho(E_f)\big|_{E_f=E_i+\hbar\omega} + \rho(E_f)\big|_{E_f=E_i-\hbar\omega}\right), \tag{105}$$

其中 $\rho(E_f)$ 是末态的态密度。采用箱归一化，平面波态为 $\langle\mathbf{x}|\mathbf{k}\rangle = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}}{L^{\frac{3}{2}}}$。态密度为：

$$\begin{aligned}\rho(E)\mathrm{d}E &= \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 k^2\mathrm{d}k\mathrm{d}\Omega \\ &= \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{mk}{\hbar^2}\mathrm{d}E\mathrm{d}\Omega,\end{aligned} \tag{106}$$

其中用到了 $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$，所以 $\mathrm{d}E = \frac{\hbar^2 k}{m}\mathrm{d}k$。入射流为：

$$j_i = \frac{\hbar k_i}{mL^3}. \tag{107}$$

微分截面由跃迁速率与入射流的比值给出：

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{w_{i\to f}}{j_i\mathrm{d}\Omega}. \tag{108}$$

代入可得：

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} &= \frac{1}{\frac{\hbar k_i}{mL^3}\mathrm{d}\Omega}\cdot\frac{2\pi}{\hbar}|V_{fi}|^2\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3\frac{m}{\hbar^2}\left(k_f^{(+)}+k_f^{(-)}\right)\mathrm{d}\Omega \\ &= \frac{mL^3}{\hbar k_i}\cdot\frac{2\pi}{\hbar}|V_{fi}|^2\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3\frac{m}{\hbar^2}\left(k_f^{(+)}+k_f^{(-)}\right) \\ &= \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4}\frac{1}{k_i}\left(k_f^{(+)}+k_f^{(-)}\right)|L^3V_{fi}|^2,\end{aligned} \tag{109}$$

其中 $k_f^{(+)}$ 和 $k_f^{(-)}$ 分别对应 $E_f = E_i + \hbar\omega$ 和 $E_f = E_i - \hbar\omega$。现在计算 L^3V_{fi}：

$$\begin{aligned}L^3V_{fi} &= L^3\langle\mathbf{k}_f|V(\mathbf{r})|\mathbf{k}_i\rangle \\ &= L^3\int\mathrm{d}\mathbf{x}\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}_f\cdot\mathbf{x}}}{L^{\frac{3}{2}}}V(\mathbf{x})\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}_i\cdot\mathbf{x}}}{L^{\frac{3}{2}}} \\ &= \int\mathrm{d}\mathbf{x}V(\mathbf{x})\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathbf{k}_i-\mathbf{k}_f)\cdot\mathbf{x}} \equiv \mathcal{V}(\mathbf{q}),\end{aligned} \tag{110}$$

其中 $\mathbf{q} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f$。由能量守恒：

$$\frac{\hbar^2 k_f^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m} \pm \hbar\omega, \tag{111}$$

可得：

$$k_f^{(+)} = \sqrt{k_i^2 + \frac{2m\omega}{\hbar}},\quad k_f^{(-)} = \sqrt{k_i^2 - \frac{2m\omega}{\hbar}}. \tag{112}$$

因此，微分截面为：

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4}\frac{1}{k_i}\left(\sqrt{k_i^2+\frac{2m\omega}{\hbar}}+\sqrt{k_i^2-\frac{2m\omega}{\hbar}}\right)|\mathcal{V}(\mathbf{q})|^2. \tag{113}$$

(c) 在二阶微扰理论中，跃迁振幅 $c_f^{(2)}(t)$ 将包含两个时间积分，分母中将出现 $\omega_{fi} \pm 2\omega$ 的项，这意味着能量变化为 $\pm 2\hbar\omega$。类似地，三阶微扰将导致能量变化 $\pm 3\hbar\omega$，依此类推。因此，高阶项会产生高次谐波，即粒子能量变化为 $\pm n\hbar\omega$（$n = 2, 3, \ldots$）的过程。

6.4 考虑一个势

$$V = 0 \quad 对 r > R. \quad V = V_0 = 常数 \quad 对 r > R. \tag{114}$$

其中的 V_0 可能是正的或负的。采用分波法，证明对 $|V_0| \ll E = \hbar^2k^2/2m$ 和 $kR \ll 1$，微分截面是各向同性的，并且总截面由

$$\sigma_{\text{总}} = \left(\frac{16\pi}{9}\right)\frac{m^2V_0^2R^6}{\hbar^4} \tag{115}$$

给出。假定能量稍稍增加。证明角分布能被写成

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = A + B\cos\theta. \tag{116}$$

求 B/A 的一个近似表达式。

解：

(a) 在 $r \leq R$ 区域，径向 Schrodinger 方程为：

$$\frac{\mathrm{d}^2u_l}{\mathrm{d}r^2} + \left(\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)u_l = 0, \tag{117}$$

其中 $u_l(r) = rA_l(r)$。令 $\kappa = \dfrac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$，则解为 $A_l(r) = j_l(\kappa r)$。在 $r = R$ 处的对数导数为：

$$\begin{aligned}\beta_l &= \frac{r}{A_l}\frac{\mathrm{d}A_l}{\mathrm{d}r}\bigg|_{r=R^-} \\ &= \frac{\kappa R j_l'(\kappa R)}{j_l(\kappa R)}.\end{aligned} \tag{118}$$

利用球 Bessel 函数的递推关系 $f_l'(x) = \dfrac{l}{x}f_l(x) - f_{l+1}(x)$，可得：

$$\beta_l = l - \kappa R\frac{j_{l+1}(\kappa R)}{j_l(\kappa R)}. \tag{119}$$

相移 δ_l 由下式给出，即 (6.4.54)：

$$\tan\delta_l = \frac{kRj_l'(kR) - \beta_l j_l(kR)}{kRn_l'(kR) - \beta_l n_l(kR)}. \tag{120}$$

利用递推关系，分子为：

$$kRj_l'(kR) - \beta_l j_l(kR) = \kappa R\frac{j_{l+1}(\kappa R)}{j_l(\kappa R)}j_l(kR) - kRj_{l+1}(kR), \tag{121}$$

分母为：

$$kRn_l'(kR) - \beta_l n_l(kR) = \kappa R\frac{j_{l+1}(\kappa R)}{j_l(\kappa R)}n_l(kR) - kRn_{l+1}(kR). \tag{122}$$

在 $kR \ll 1$ 和 $|V_0| \ll E = \dfrac{\hbar^2k^2}{2m}$ 条件下，利用小宗量近似：

$$j_l(x) \approx \frac{x^l}{(2l+1)!!}, \quad n_l(x) \approx -\frac{(2l-1)!!}{x^{l+1}}, \quad \frac{j_{l+1}(\kappa R)}{j_l(\kappa R)} \approx \frac{\kappa R}{2l+3}. \tag{123}$$

代入得：

$$\tan\delta_l \approx \frac{(kR)^{2l+1}}{(2l+3)!!(2l+1)!!}\left((\kappa R)^2 - (kR)^2\right). \tag{124}$$

由于 $\kappa^2 - k^2 = -\dfrac{2mV_0}{\hbar^2}$，有：

$$\tan\delta_l \approx -\frac{(kR)^{2l+1}}{(2l+3)!!(2l+1)!!}\cdot\frac{2mV_0R^2}{\hbar^2}. \tag{125}$$

对于 $l=0$，主导相移为：

$$\begin{aligned}\tan\delta_0 &\approx -\frac{kR}{3}\cdot\frac{2mV_0R^2}{\hbar^2}\\ &= -\frac{2mV_0kR^3}{3\hbar^2}.\end{aligned}\tag{126}$$

由于 δ_0 很小，有 $\tan\delta_0\approx\delta_0\approx\sin\delta_0$（注意，这里有 $\dfrac{\delta_0}{k}\approx-\dfrac{2mV_0R^3}{3\hbar^2}$，后续会直接用到）。微分截面为：

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}=|f(\theta)|^2=\left|\frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l}\sin\delta_l P_l(\cos\theta)\right|^2.\tag{127}$$

在低能情况下，仅 $l=0$ 项贡献，因此：

$$f(\theta)\approx\frac{1}{k}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_0}\sin\delta_0,\tag{128}$$

与 θ 无关，故微分截面各向同性。总截面为：

$$\begin{aligned}\sigma_{总} &= \int|f(\theta)|^2\mathrm{d}\Omega\\ &= 4\pi\frac{\sin^2\delta_0}{k^2}\\ &\approx 4\pi\frac{\delta_0^2}{k^2}\\ &\approx 4\pi\cdot\left(-\frac{2mV_0R^3}{3\hbar^2}\right)^2\\ &= \frac{16\pi}{9}\frac{m^2V_0^2R^6}{\hbar^4}.\end{aligned}\tag{129}$$

(b) 当能量稍增时，$l=1$ 分波开始贡献。对于 $l=1$：

$$\begin{aligned}\tan\delta_1 &\approx -\frac{(kR)^3}{15\cdot 3}\cdot\frac{2mV_0R^2}{\hbar^2}\\ &= -\frac{2mV_0R^2}{45\hbar^2}(kR)^3.\end{aligned}\tag{130}$$

由于 δ_1 很小，有 $\tan\delta_1\approx\delta_1\approx\sin\delta_1$。考虑 s 波和 p 波贡献，微分截面为：

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}=\frac{1}{k^2}\left|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_0}\sin\delta_0+3\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_1}\sin\delta_1\cos\theta\right|^2,\tag{131}$$

展开并忽略高阶小量：

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\approx\frac{1}{k^2}\left(\sin^2\delta_0+6\cos(\delta_0-\delta_1)\sin\delta_0\sin\delta_1\cos\theta\right).\tag{132}$$

令

$$A=\frac{\sin^2\delta_0}{k^2},\quad B=\frac{6\cos(\delta_0-\delta_1)\sin\delta_0\sin\delta_1}{k^2},\tag{133}$$

则角分布为 $\dfrac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}=A+B\cos\theta$。由于 $\delta_1\ll\delta_0\ll1$，有 $\cos(\delta_0-\delta_1)\approx1$，因此：

$$\begin{aligned}\frac{B}{A} &= \frac{6\sin\delta_1}{\sin\delta_0}\\ &\approx \frac{6\delta_1}{\delta_0}.\end{aligned}\tag{134}$$

代入 δ_0 和 δ_1 表达式：

$$\begin{cases}\delta_0\approx-\dfrac{2mV_0kR^3}{3\hbar^2},\\ \delta_1\approx-\dfrac{2mV_0R^2}{45\hbar^2}(kR)^3=-\dfrac{2mV_0k^3R^5}{45\hbar^2},\end{cases}\tag{135}$$

得：

$$\frac{\delta_1}{\delta_0} = \frac{1}{15}(kR)^2. \tag{136}$$

因此：

$$\begin{aligned}\frac{B}{A} &\approx 6 \cdot \frac{1}{15}(kR)^2 \\ &= \frac{2}{5}(kR)^2.\end{aligned} \tag{137}$$

6.9 (a) 证明

$$\frac{\hbar^2}{2m}\langle \mathbf{x}|\frac{1}{E-H_0+\mathrm{i}\varepsilon}|\mathbf{x}'\rangle = -\mathrm{i}k\sum_l\sum_m Y_l^m(\hat{\mathbf{r}})Y_l^{m*}(\hat{\mathbf{r}}')j_l(kr_<)h_l^{(1)}(kr_>), \tag{138}$$

其中 $r_<(r_>)$ 表示 r 和 r' 比较小（比较大）的那个。

(b) 对球对称势，Lippmann-Schwinger 方程能用球面波写成

$$|Elm(+)\rangle = |Elm\rangle + \frac{1}{E-H_0+\mathrm{i}\varepsilon}V\,|Elm(+)\rangle. \tag{139}$$

利用 (a)，证明在 $\mathbf{x}$ 表象写出这个方程时，导致径向函数 $A_l(k;r)$ 满足一个如下的方程：

$$A_l(k;r) = j_l(kr) - \frac{2mik}{\hbar^2}\times\int_0^\infty j_l(kr_<)h_l^{(1)}(kr_>)V(r')A_l(k;r')r'^2\mathrm{d}r'. \tag{140}$$

通过取 r 很大，还可得到

$$\begin{aligned}f_l(k) &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l}\frac{\sin\delta_l}{k} \\ &= -\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)\int_0^\infty j_l(kr)A_l(k;r)V(r)r^2\mathrm{d}r.\end{aligned} \tag{141}$$

解：

(a) 等式的左边是自由粒子的 Green 函数。在量子力学中，自由 Green 函数定义为：

$$G_0(\mathbf{x},\mathbf{x}') = \langle \mathbf{x}|\frac{1}{E-H_0+\mathrm{i}\varepsilon}|\mathbf{x}'\rangle. \tag{142}$$

对于能量 $E = \dfrac{\hbar^2k^2}{2m}$，已知：

$$G_0(\mathbf{x},\mathbf{x}') = -\frac{2m}{\hbar^2}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{4\pi|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}. \tag{143}$$

因此，

$$\frac{\hbar^2}{2m}\langle \mathbf{x}|\frac{1}{E-H_0+\mathrm{i}\varepsilon}|\mathbf{x}'\rangle = -\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{4\pi|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}. \tag{144}$$

令 $G(\mathbf{x},\mathbf{x}') = -\dfrac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{4\pi|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}$，则左边等于 $G(\mathbf{x},\mathbf{x}')$。注意到 $G(\mathbf{x},\mathbf{x}')$ 满足 Helmholtz 方程与 δ 函数的二阶线性偏微分方程：

$$(\nabla^2+k^2)G(\mathbf{x},\mathbf{x}') = \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}'). \tag{145}$$

这可以通过直接计算验证：对于 $r = |\mathbf{x}-\mathbf{x}'| \neq 0$，有 $(\nabla^2+k^2)G = 0$；对于 $r\to 0$，有 $G \to -\dfrac{1}{4\pi r}$，且积分 $\displaystyle\int \nabla^2 G\mathrm{d}\mathbf{x} = 1$，因此满足方程。由于球对称性，将 $G(\mathbf{x},\mathbf{x}')$ 展开为球谐函数：

$$G(\mathbf{x},\mathbf{x}') = \sum_l\sum_m g_l(r,r')Y_l^m(\hat{\mathbf{r}})Y_l^{m*}(\hat{\mathbf{r}}'), \tag{146}$$

其中 $g_l(r,r')$ 是径向 Green 函数。同时，δ 函数在球坐标下展开为：

$$\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}') = \frac{1}{r^2}\delta(r-r')\sum_l\sum_m Y_l^m(\hat{\mathbf{r}})Y_l^{m*}(\hat{\mathbf{r}}'). \tag{147}$$

将展开式代入 Helmholtz 方程，并利用球谐函数的正交性，得到 $g_l(r,r')$ 满足的径向方程：

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+\frac{2}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)g_l(r,r') = \frac{1}{r^2}\delta(r-r'). \tag{148}$$

对于 $r\neq r'$，这是球 Bessel 方程，其解为球 Bessel 函数的组合。考虑到边界条件（在 $r\to 0$ 处有限，在 $r\to\infty$ 处为出射波），解的形式为：

$$g_l(r,r') = C_l j_l(kr_<)h_l^{(1)}(kr_>), \tag{149}$$

其中 C_l 是待定常数。在 $r=r'$ 附近积分径向方程，利用球 Bessel 函数的 Wronskian 关系：

$$\mathcal{W}(j_l(z),n_l(z)) = z^{-2}, \tag{150}$$

其中 n_l 是球 Neumann 函数，且 $h_l^{(1)}(z)=j_l(z)+\mathrm{i}n_l(z)$ 是球 Hankel 函数。积分后可得：

$$C_l = -\mathrm{i}k. \tag{151}$$

因此，

$$g_l(r,r') = -\mathrm{i}kj_l(kr_<)h_l^{(1)}(kr_>), \tag{152}$$

代入展开式，得到：

$$\begin{aligned}G(\mathbf{x},\mathbf{x}') &= -\mathrm{i}k\sum_l\sum_m Y_l^m(\hat{\mathbf{r}})Y_l^{m*}(\hat{\mathbf{r}}')j_l(kr_<)h_l^{(1)}(kr_>)\\ &= -\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{4\pi|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}\\ &= \frac{\hbar^2}{2m}\langle\mathbf{x}|\frac{1}{E-H_0+\mathrm{i}\varepsilon}|\mathbf{x}'\rangle,\end{aligned} \tag{153}$$

证毕。

(b) i. 由于势能球对称，入射态和散射态可用球面波表示：

$$\begin{aligned}\langle\mathbf{x}|Elm\rangle &= j_l(kr)Y_l^m(\hat{\mathbf{r}}),\\ \langle\mathbf{x}|Elm(+)\rangle &= A_l(k;r)Y_l^m(\hat{\mathbf{r}}),\end{aligned} \tag{154}$$

其中 $A_l(k;r)$ 是待求的径向函数。将展开式代入 Lippmann-Schwinger 方程的坐标表象方程，左边为 $A_l(k;r)Y_l^m(\hat{\mathbf{r}})$，右边第一项为 $j_l(kr)Y_l^m(\hat{\mathbf{r}})$。右边第二项涉及 Green 函数：

$$\langle\mathbf{x}|\frac{1}{E-H_0+\mathrm{i}\varepsilon}|\mathbf{x}'\rangle = \frac{2m}{\hbar^2}G(\mathbf{x},\mathbf{x}'), \tag{155}$$

其中 $G(\mathbf{x},\mathbf{x}')$ 由 (a) 部分给出。因此第二项为：

$$\frac{2m}{\hbar^2}\int\mathrm{d}\mathbf{x}'G(\mathbf{x},\mathbf{x}')V(r')A_l(k;r')Y_l^m(\hat{\mathbf{r}}'). \tag{156}$$

代入 $G(\mathbf{x},\mathbf{x}')$ 的展开式：

$$G(\mathbf{x},\mathbf{x}') = -\mathrm{i}k\sum_{l'}\sum_{m'}Y_{l'}^{m'}(\hat{\mathbf{r}})Y_{l'}^{m'*}(\hat{\mathbf{r}}')j_{l'}(kr_<)h_{l'}^{(1)}(kr_>). \tag{157}$$

所以第二项变为：

$$\frac{2m}{\hbar^2}(-\mathrm{i}k)\sum_{l'}\sum_{m'}Y_{l'}^{m'}(\hat{\mathbf{r}})\int_0^\infty r'^2\mathrm{d}r'\int\mathrm{d}\Omega' Y_{l'}^{m'*}(\hat{\mathbf{r}}')j_{l'}(kr_<)h_{l'}^{(1)}(kr_>)V(r')A_l(k;r')Y_l^m(\hat{\mathbf{r}}'). \tag{158}$$

利用球谐函数的正交性：

$$\int\mathrm{d}\Omega' Y_{l'}^{m'*}(\hat{\mathbf{r}}')Y_l^m(\hat{\mathbf{r}}')=\delta_{ll'}\delta_{mm'}, \tag{159}$$

求和仅当 $l'=l$ 和 $m'=m$ 时贡献，因此：

$$\frac{2m}{\hbar^2}(-\mathrm{i}k)Y_l^m(\hat{\mathbf{r}})\int_0^\infty r'^2\mathrm{d}r' j_l(kr_<)h_l^{(1)}(kr_>)V(r')A_l(k;r'). \tag{160}$$

整体方程为：

$$A_l(k;r)Y_l^m(\hat{\mathbf{r}})=j_l(kr)Y_l^m(\hat{\mathbf{r}})-\frac{2m\mathrm{i}k}{\hbar^2}Y_l^m(\hat{\mathbf{r}})\int_0^\infty r'^2\mathrm{d}r' j_l(kr_<)h_l^{(1)}(kr_>)V(r')A_l(k;r'). \tag{161}$$

两边除以 $Y_l^m(\hat{\mathbf{r}})$（非零），得到径向方程：

$$A_l(k;r)=j_l(kr)-\frac{2m\mathrm{i}k}{\hbar^2}\int_0^\infty j_l(kr_<)h_l^{(1)}(kr_>)V(r')A_l(k;r')r'^2\mathrm{d}r'. \tag{162}$$

ii. 当 $r\to\infty$ 时，有 $r_<=r'$，$r_>=r$，因此：

$$A_l(k;r)=j_l(kr)-\frac{2m\mathrm{i}k}{\hbar^2}h_l^{(1)}(kr)\int_0^\infty j_l(kr')V(r')A_l(k;r')r'^2\mathrm{d}r'. \tag{163}$$

令 $I=\int_0^\infty j_l(kr')V(r')A_l(k;r')r'^2\mathrm{d}r'$，则：

$$A_l(k;r)=j_l(kr)-\frac{2m\mathrm{i}k}{\hbar^2}Ih_l^{(1)}(kr). \tag{164}$$

利用球 Bessel 函数和球 Hankel 函数的渐近形式（$r\to\infty$）：

$$\begin{aligned} j_l(kr)&\sim\frac{1}{2\mathrm{i}kr}\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr-l\frac{\pi}{2})}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(kr-l\frac{\pi}{2})}\right),\\ h_l^{(1)}(kr)&\sim\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr-l\frac{\pi}{2})}}{kr}, \end{aligned} \tag{165}$$

代入得：

$$\begin{aligned} A_l(k;r)&\sim\frac{1}{2\mathrm{i}kr}\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr-l\frac{\pi}{2})}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(kr-l\frac{\pi}{2})}\right)-\frac{2m\mathrm{i}k}{\hbar^2}I\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr-l\frac{\pi}{2})}}{kr}\\ &=\frac{1}{kr}\left(\left(\frac{1}{2\mathrm{i}}-\frac{2m\mathrm{i}k}{\hbar^2}I\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr-l\frac{\pi}{2})}-\frac{1}{2\mathrm{i}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(kr-l\frac{\pi}{2})}\right). \end{aligned} \tag{166}$$

在散射理论中，径向波函数的渐近形式为：

$$A_l(k;r)\sim\frac{1}{kr}\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr-l\frac{\pi}{2})}-S_l\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(kr-l\frac{\pi}{2})}\right), \tag{167}$$

其中 $S_l=\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta_l}$。比较系数：

$$\frac{1}{2\mathrm{i}}-\frac{2m\mathrm{i}k}{\hbar^2}I=1. \tag{168}$$

但这里归一化可能不同。与 Sakurai 教材的正文中的形式比较，渐近表达式可写为：

$$A_l(k;r)=\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}kr}{2}}}{2\mathrm{i}k}\left(\left(1-\frac{4m\mathrm{i}k}{\hbar^2}I\right)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}-\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(kr-l\pi)}}{r}\right). \tag{169}$$

与标准分波渐近形式比较，出射波系数应记为 $1+2\mathrm{i}kf_l(k)$，即：

$$1-\frac{4m\mathrm{i}k}{\hbar^2}I=1+2\mathrm{i}kf_l(k), \tag{170}$$

解得：

$$f_l(k)=-\frac{2m}{\hbar^2}I=-\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^\infty j_l(kr)V(r)A_l(k;r)r^2\mathrm{d}r. \tag{171}$$

又已知分波散射振幅与相移的关系，即 (6.4.39)：

$$f_l(k)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l}\frac{\sin\delta_l}{k}. \tag{172}$$

因此得证。