

# Quantum Mechanics 3

## EPFL 2025-2026 学年第一学期课程笔记

X. D. H.

2026 年 1 月 2 日

### 摘要

这是 2025-2026 学年第一学期 EPFL Quantum Mechanics 3 课程的学习笔记，内容涵盖 WKB 近似方法，量子散射理论两个比较重要的内容。散射理论部分涵盖了大量量子力学的一般讨论，对于场论学习极其重要。WKB 近似则对于一维的 Schrodinger 以及类似的微分方程解法提供了很强的工具。

### 目录

<b>1</b>	<b>Lecture 1</b>	<b>3</b>
1.1	自由粒子与谐振子的量子经典对应 . . . . .	3
1.2	量子态的完备性条件和归一化的两种 convention . . . . .	4
1.3	Questions and thoughts . . . . .	5
<b>2</b>	<b>Lecture 2</b>	<b>6</b>
2.1	Coherent State 与经典谐振子对应 . . . . .	6
2.2	Questions and thoughts . . . . .	7
<b>3</b>	<b>Lecture 3: WKB 近似基础</b>	<b>9</b>
3.1	Take home messages . . . . .	9
3.2	Questions and thoughts . . . . .	10
<b>4</b>	<b>Lecture 4: WKB 近似以及 matching</b>	<b>11</b>
4.1	Take home messages . . . . .	11
4.2	Questions and thoughts . . . . .	13
<b>5</b>	<b>Lecture 5: WKB 近似各种应用</b>	<b>15</b>
5.1	WKB 近似的应用 . . . . .	15
5.1.1	应用 1: Planck Formula . . . . .	15
5.1.2	应用 2: 一般势垒隧穿 . . . . .	16
5.1.3	应用 3: metastable state 的 lifetime . . . . .	17
5.1.4	应用 4: Double Well potential 的本征态能级差 . . . . .	18
5.2	Questions and Thoughts . . . . .	19

<b>6</b>	<b>Lecture 6: 经典散射理论以及量子散射基础</b>	<b>20</b>
6.1	经典散射理论 . . . . .	20
6.1.1	经典散射理论基础 . . . . .	20
6.1.2	散射截面 . . . . .	21
6.1.3	粒子碰撞散射理论 . . . . .	23
6.2	量子散射理论基础 . . . . .	24
6.2.1	量子散射理论 set up . . . . .	24
6.2.2	S 矩阵 . . . . .	25
6.3	Questions and Thoughts . . . . .	26
<b>7</b>	<b>Lecture 7: 量子散射理论框架</b>	<b>27</b>
7.1	Interaction picture 对于 S 矩阵描述 . . . . .	27
7.2	Properties of Moller operators and S matrix . . . . .	27
7.3	Questions and thoughts . . . . .	31
<b>8</b>	<b>Lecture 8: S-Matrix 以及散射可观测量</b>	<b>32</b>
8.1	量子散射问题的 set up . . . . .	32
8.2	Differential Cross Section and Scattering Amplitude . . . . .	33
8.3	Optical Theorem . . . . .	34
8.4	数学技巧 . . . . .	36
8.4.1	Delta 函数使用 . . . . .	36
8.4.2	Green 函数使用 . . . . .	36
8.5	Questions and thoughts . . . . .	36
<b>9</b>	<b>Lecture 9: 散射 Green 函数方法与 Born 近似</b>	<b>37</b>
9.1	Moller Operator 的 Green Function 方法 . . . . .	37
9.2	Green 函数到 T 矩阵再到散射振幅 . . . . .	38
9.2.1	Green 函数的结构 . . . . .	38
9.2.2	T 矩阵与散射振幅 . . . . .	39
9.3	Born 近似 . . . . .	41
<b>10</b>	<b>Lecture 10: S 矩阵和散射振幅另一种表示</b>	<b>43</b>
10.1	Stationary Scattering State . . . . .	43
10.2	S 矩阵的 T Production 表示 . . . . .	45
<b>11</b>	<b>Lecture 11: Partial Wave Expansion</b>	<b>47</b>
11.1	Partial Wave Expansion 数学技巧 . . . . .	47
11.1.1	基本定义 . . . . .	47
11.1.2	自由粒子波函数的 Partial Wave Expansion . . . . .	48
11.1.3	散射 Hamiltonian 的 Partial Wave Expansion . . . . .	50
11.2	Stationary Scattering State 的 Partial Wave Expansion . . . . .	52
11.3	特殊函数性质 . . . . .	54

11.4 Questions and Thoughts . . . . .	54
<b>12 Lecture 12: Dirac Equation and Pauli Equation</b>	<b>55</b>
12.1 Relativistic Schrodinger Equation . . . . .	55
12.1.1 Failed Attempts . . . . .	55
12.1.2 Dirac Equation . . . . .	56
12.1.3 Dirac Equation 的能谱 . . . . .	57
12.2 Pauli Equation . . . . .	57
<b>13 Lecture 13: Pauli Equation and Introduction to QFT</b>	<b>60</b>
13.1 Pauli Equation II . . . . .	60
13.2 Relativistic Boson & Scalar Field . . . . .	61
13.3 Relativistic Fermion & Dirac Field . . . . .	61
<b>14 复习：留数积分技巧</b>	<b>62</b>

## 1 Lecture 1

{sec:Lect

### 1.1 自由粒子与谐振子的量子经典对应

#### 量子体系经典对应

- 自由粒子对应着一个波包！
  - 这玩意实在不是人算的，也没啥讨论意义
- 谐振子需要对应一个量子态，满足两个条件。
  - 对于动量和位置算符的期望值，满足经典谐振子的运动方程。
  - 对于能量值期望满足经典关系

这样的两个约束条件下，我们可以形式化的写出来是：

$$\langle \psi_{\alpha_0} | \hat{a} | \psi_{\alpha_0} \rangle = \alpha_0. \quad (1)$$

$$\langle \psi_{\alpha_0} | \hat{H} | \psi_{\alpha_0} \rangle = \hbar\omega \left( |\alpha_0|^2 + \frac{1}{2} \right). \quad (2)$$

我们之后推导这样的量子态的具体形式。

#### 一维量子系统的归一化定义

我们定义归一化是这样的，对于所有基态都是满足：

$$\int dx |x\rangle \langle x| = 1, \quad (3)$$

$$\int dp |p\rangle \langle p| = 1. \quad (4)$$

并且在此基础上我们根据动量算符的定义，解本征方程会给出：

$$-i\hbar \frac{d}{dx} \langle x|p \rangle = p \langle x|p \rangle. \quad (5)$$

解出：

$$\langle x|p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}. \quad (6)$$

所以我们有傅立叶变换正反变换的关系是：

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar} px}. \quad (7)$$

$$\tilde{\psi}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp \psi(p) e^{\frac{i}{\hbar} px} \quad (8)$$

接下来我们也可以定义合理的 delta 函数：

#### Remark:

注意！delta 函数的形式和我们选择的归一化没有任何关系！

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp e^{\frac{i}{\hbar} pz} = 2\pi\hbar \delta(z), \quad (9)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz \delta(z) = 1. \quad (10)$$

对于三维的情况我们也有：

$$\int d^3\mathbf{x} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{p})\cdot\mathbf{x}} = (2\pi)^3 \delta^3(\mathbf{k}-\mathbf{p}) \quad (11)$$

## 1.2 量子态的完备性条件和归一化的两种 convention

对于 QFT 和 QM 我们一般使用两个布艺样的动量本征态的定义，虽然两者仅仅差了一个系数，同时使用了不一样的归一化条件，导致是等价的，但我们下面列举其区别：

#### QM使用

项目	位置表象 $ \mathbf{x}\rangle$	动量表象 $ \mathbf{p}\rangle$
归一化条件	$\langle \mathbf{x} \mathbf{x}' \rangle = \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$	$\langle \mathbf{p} \mathbf{p}' \rangle = \delta^{(3)}(\mathbf{p} - \mathbf{p}')$
完备性条件	$\int d^3x  \mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}  = \mathbf{1}$	$\int d^3p  \mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p}  = \mathbf{1}$
本征态在另一个表象下的表示	$\langle \mathbf{x} \mathbf{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}$	$\langle \mathbf{p} \mathbf{x} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}$
空间表象下波函数 $\phi(\mathbf{x})$	$\phi(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} \phi \rangle$	$\phi(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3p e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} \tilde{\phi}(\mathbf{p})$
动量表象波函数 $\tilde{\phi}(\mathbf{p})$	$\tilde{\phi}(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3x e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} \phi(\mathbf{x})$	$\tilde{\phi}(\mathbf{p}) = \langle \mathbf{p} \phi \rangle$

表 1: 量子力学 (QM) 常用规范下位置与动量表象对照

项目	位置/场算符表象 $ \mathbf{x}\rangle / \phi(\mathbf{x})$	动量表象 $ \mathbf{p}\rangle / \tilde{\phi}(\mathbf{p})$
归一化条件	$\langle \mathbf{x}   \mathbf{x}' \rangle = \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$	$\langle \mathbf{p}   \mathbf{p}' \rangle = (2\pi)^3 \delta^{(3)}(\mathbf{p} - \mathbf{p}')$
完备性条件	$\int d^3x  \mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}  = \mathbf{1}$	$\int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}  \mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p}  = \mathbf{1}$
本征态在另一个表象下的表示	$\langle \mathbf{x}   \mathbf{p} \rangle = e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}}$	$\langle \mathbf{p}   \mathbf{x} \rangle = e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}}$
空间表象下波函数 or 场算符	$\phi(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x}   \phi \rangle$	$\phi(\mathbf{x}) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} \tilde{\phi}(\mathbf{p})$
动量表象下波函数 or 场算符	$\tilde{\phi}(\mathbf{p}) = \int d^3x e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} \phi(\mathbf{x})$	$\tilde{\phi}(\mathbf{p}) = \langle \mathbf{p}   \phi \rangle$

表 2: QFT 常用  $(2\pi)^3$  归一化规范下的位置/动量表象对照

### QFT使用

对于这两种 convention, 我们的 delta 函数的定义是完全一样的:

$$\int d^3\mathbf{x} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{p}) \cdot \mathbf{x}} = (2\pi)^3 \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{p}), \quad (12)$$

$$\int d^3\mathbf{p} e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{p}) \cdot \mathbf{x}} = (2\pi)^3 \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{p}). \quad (13)$$

## 1.3 Questions and thoughts

### Question 1.0 实正定矩阵有什么对角化性质, 有什么相似变换性质?

所有实正定矩阵都可以进行对角化, 对角化之后的矩阵是实对角矩阵, 并且所有的特征值都是正实数。并且将其对角化的矩阵是正交矩阵, 也就是满足:

$$\det Q = \pm 1 \quad Q^{-1} = Q^T \quad (14)$$

对角化不会改变矩阵的特征值捏!!

但是, 我们可以通过一个变换让所有对角元素都是 1. 就是两边乘上对角元素是  $\frac{1}{\sqrt{\lambda_i}}$  的矩阵, 但是这个已经不是对角化了捏!! 但是这是一个合理的坐标变换呀呀呀, 更具体的说, 其实就是一个 rescaling!!

□

## 2 Lecture 2

{sec:Lect

### 2.1 Coherent State 与经典谐振子对应

#### Coherent State 具体形式

我们试图解满足上面说到的两个条件的量子态的具体形式，我们得到这个约束条件：

$$\hat{a}|\psi_\alpha\rangle = \alpha|\psi_\alpha\rangle. \quad (15)$$

我们将态进行展开研究，带入上面的方程给出：

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} C_n |n\rangle. \quad (16)$$

$$C_n = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} C_0. \quad (17)$$

结合这两点我们可以写出 coherent state up to 一个归一化常数：

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} C_0 |n\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} C_0 \left[ \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle \right] = C_0 e^{\alpha \hat{a}^\dagger} |0\rangle. \quad (18)$$

最后得到下面的形式：

#### Important: Coherent State 标准形式

$$|\alpha\rangle = \exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha|^2 + \alpha \hat{a}^\dagger\right) |0\rangle. \quad (19)$$

对于求归一化系数的时候我们可以使用一个技巧：

#### Tip: Glauber' s formula

如果两个算符之间满足下面的关系：

$$[A, [A, B]] = 0, \quad [B, [A, B]] = 0, \quad (20)$$

那么这两个算符写在指数上面就会满足：

$$e^A e^B = e^{\frac{1}{2}[A, B]} e^{A+B}. \quad (21)$$

对于产生湮灭算符这个关系就很好用，因为产生湮灭算符的对易子是 1!!

#### Coherent State 的能量分布

下面计算 coherent state 这个态在不同能量上面的概率也就是能量分布  $\mathcal{P}_n = |\langle n|\alpha\rangle|^2$ 。很容易计算出来准确的结果是：

$$\mathcal{P}_n = |C_n|^2 = e^{-|\alpha|^2} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!}. \quad (22)$$

我们下面讨论这个分布在经典的行为，也就是当能量很大很大的时候， $\alpha$  很大很大时候的行为，我们使用下面的近似：

$$n! \sim n^n e^{-n} \sqrt{2\pi n}, \quad n \rightarrow \infty. \quad (23)$$

最后试图把所有的项写在指数上面结果就是：

$$\mathcal{P}_n \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi n}} e^{S(n)}, \quad (24)$$

$$S(n) = -n \log n + n + 2n \log |\alpha| - |\alpha|^2. \quad (25)$$

下面研究这个分布性质：

1. 最大值： $S'(n) = 0$ ，解出最大值在  $n = |\alpha|^2$  处。
2. 正好这个时候  $S(n) = 0$
3. 分布计算到二阶是：

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_n &\approx \frac{1}{\sqrt{2\pi \bar{n}}} \exp \left[ S(\bar{n}) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial n^2} S(n) \Big|_{n=\bar{n}} (n - \bar{n})^2 \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi |\alpha|^2}} \exp \left[ -\frac{(n - |\alpha|^2)^2}{2|\alpha|^2} \right]. \end{aligned} \quad (26)$$

计算动量，位置分布呜呜

没啥意义，看看作业算了！

Coherent State在位置表象下面

没什么技术含量，唯一的提醒就是请引入  $\hat{D}(\alpha) = \exp(\alpha \hat{a}^\dagger - \alpha^* \hat{a})$  进行辅助求解！

## 2.2 Questions and thoughts

**Tip: 关于 Coherent State 重要计算细节**

我们需要知道这个态的定义给出了  $a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$  但是从来没有说  $a^\dagger$  作用上去会发生什么!!!!  
所以正确处理的方法就是把所有 dagger 的部分都放在左边作用在 bra 上面!!!

### Question 2.1 空间平移算符是怎么推导出来的捏？

我们一种推导方式「之后我们推导 CFT 的所有生成元的算符形式也是这么推的」，就是寻找这个变换前后的函数之间的关系。每一个变换必然是有一个参数进行描述的，我们考虑这个参数在无限接近于 identity 时候的行为。

比如对于空间平移我们考虑  $a = 0 + \epsilon$  的行为我们有：

$$\psi(x - \delta a) \approx \psi(x) - \delta a \frac{d}{dx} \psi(x). \quad (\hat{T}(\delta a)\psi)(x) \approx \left(1 - \delta a \frac{d}{dx}\right) \psi(x). \quad (27)$$

$$\hat{T}(\delta a) \approx 1 - \frac{i}{\hbar} \delta a \hat{p}, \quad \hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}. \quad (28)$$

所以我们就有这个算符的无限小变换的形式。为了得到完整的算符，我们不妨搞一个指数映射，从而给出这个!! 给出的结论是：

$$\hat{T}(a) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}a\hat{p}\right). \quad (29)$$

$$\psi(x-a) = (\hat{T}(a)\psi)(x). \quad (30)$$

□

## Question 2.2 Heisenberg Picture 之中算符的演化计算？

复习一下就是：

$$|\psi_H\rangle = |\psi_S(0)\rangle, \quad A_H(t) = U^\dagger(t)A_S U(t), U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} \quad (31)$$

□

## Question 2.3 时间演化作用在一个大算符上面，一定等于分别作用在小算符上面吗？

注意!!! 这并不一定是正确的!!

$$(AB)_H(t) \neq A_H(t)B_H(t) \quad (32)$$

□

## Question 2.4 量子力学里面我们怎么计算一个巨大的指数上的算符演化一个算符呢？

也就是想问我们怎么算这种东西  $e^{-\hat{O}}\hat{b}e^{\hat{O}}$  我们对此使用 Baker-Campbell-Hausdorff (BCH) 展开进行处理！也就是：

$$e^{-\hat{O}}\hat{b}e^{\hat{O}} = \hat{b} + [\hat{b}, \hat{O}] + \frac{1}{2!}[[\hat{b}, \hat{O}], \hat{O}] + \frac{1}{3!}[[[\hat{b}, \hat{O}], \hat{O}], \hat{O}] + \dots \quad (33)$$

□



### 3 Lecture 3: WKB 近似基础

#### 3.1 Take home messages

##### WKB 近似基本定义

我们希望解决一个一维的 stationary schrodinger Equation, 保证势能是任意的, 并且得到一个合理的近似解应该怎么办捏? 我们对于波函数进行下面改写:

$$\psi(x, t) = e^{\frac{i}{\hbar} S(x, t)} \quad (34)$$

带入定态方程之后得到结果是:

$$-i \frac{\hbar}{2m} S'' + \frac{1}{2m} S'^2 = E - V. \quad (35)$$

这就意味着我们的  $S$  必然是包含  $\hbar$  的, 我们将  $S$  进行一个  $\hbar$  的级数展开:

$$S = \sum_{n=0}^{\infty} \left( \frac{\hbar}{i} \right)^n S_n. \quad (36)$$

展开之后对比阶数给出一系列方程:

##### 1. 0 阶方程

$$\frac{1}{2m} (S'_0)^2 = E - V. \quad (37)$$

这个方程解出来的结果是:

$$S_0 = \pm \int dx p(x), \quad p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))}. \quad (38)$$

##### 2. 1 阶方程

$$-i \frac{\hbar}{2m} S''_0 + \frac{\hbar}{i} \frac{1}{2m} 2S'_0 S'_1 = 0 \Rightarrow S'_1 = -\frac{S''_0}{2S'_0}. \quad (39)$$

最后结合一下前两阶近似给出的结果是:

$$\psi(x) = \frac{C_1}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int p(x) dx\right) + \frac{C_2}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int p(x) dx\right). \quad (40)$$

##### Remark:

我们一定要记住对于两个  $\int p dx$  务必选择同样的积分上下限!!

##### WKB 近似的适用条件

最重要的有两个方面的适用条件;

1. 前后项之间的差距很大  $\hbar^n S_{n+1}(x)$  远大于  $\hbar^{n-1} S_n(x)^2$ ,
2. 每一项都足够趋于 0, 因此  $\hbar^i S_{i+1}(x) \ll 1$ , for all  $i > k$

对于 LO Approximation 上面的条件可以写作【虽然我们一般仅仅验证后面两个，这个是最重要的！毕竟前两项都是要留下来的】：

$$|S_1| \ll |S_0/\hbar|, \quad |\hbar S_2| \ll |S_1|, \quad |\hbar S_2| \ll 1. \quad (41)$$

还有一个有直接物理意义的适用条件也就是，我们对比 1 阶和 0 阶的方程。如果能忽略一阶的方程那么就需要一阶方程远小于 0 阶的。我们找到 leading term 分别是  $S_0''$  和  $\hbar S_0'^2$ 。

所以如果近似合理，我们需要满足： $|\hbar S_0''| \gg |S_0'^2|$ 。这就意味着德布罗伊波长要变化不大！这给出了另一个重要的近似条件：

$$|\lambda(x)'| \ll 1 \quad (42)$$

### WKB近似在不同区域的求解

这里比较复杂的推导不进行说明，但是我们可以知道类似简单的定态方程的求解。WKB 近似给出：

1. 对于 classically allowed region  $E > V(x)$ ，可以有类似平面波的解，并且有两个待定的系数
2. 对于 classically forbidden region  $E < V(x)$ ，可以有类似指数衰减的解，并且有两个待定的系数；但是有一个系数必然是 0 因为可以通过物理不能爆炸来决定
3. 最后对于 turning point 的连接。我们这里不能适用 WKB 近似，但是可以适用线性势能近似。给出的结果就是 Airy Function。我们用这个方程连接两边，给出系数之间的关系。最后只剩下一个通过归一化待定的系数！！

## 3.2 Questions and thoughts

### Question 3.5 WKB 近似我们选择 $S_0$ 的积分区间是什么？我们似乎很随意??

一个事实就是我们考虑一个波函数是： $\psi(x, t) = e^{i/\hbar S(x, t)}$  所以我们积分上下限不同其实就是一个相位因子而已，而对于一个波函数来说差一个相位对于物理完全没有影响。

值得注意的是，有影响的是相位差。所以我们务必要保证所有出现的  $S_0$  选择同样的一个常数，也就是我们把积分上或者下限选择成了  $x$ ，另一个上或者下限务必选择成【同一个位置！】

一个很好的选择就是 turning point 的位置捏！！

□

## 4 Lecture 4: WKB 近似以及 matching

### 4.1 Take home messages

#### Turning Point的复分析处理方法

我们之前使用 Airy Function 处理了 turning point 附近的波函数连接问题。但是，这个方法比较复杂。下面介绍如何使用解析延拓的方法处理。

**Step 1:** 先考虑经典不允许区域的波函数，我们设置为：

$$\psi_{CF} = \frac{C}{2\sqrt{|p|}} \exp - \frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x dx' |p|, \quad (43)$$

**Step 2:** 线性势能近似。一般的势能很难进行研究，但是如果我们认为 turning point 附近是线性的，那么会很大程度简化。我们选择：

$$V(x) = E + \frac{dV}{dx}|_{x_0}(x - x_0) + \mathcal{O}((x - x_0)^2) \approx E + F(x - x_0). \quad (44)$$

所以对于动量我们有：

1. 对于经典允许区域  $x < x_0$ ，我们有  $p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))} = \sqrt{2mF(x_0 - x)}$ ；
2. 对于经典不允许区域  $x > x_0$ ，我们有  $p(x) = \sqrt{2m(V(x) - E)} = \sqrt{2mF(x - x_0)}$ 。

**Step 3:** 我们研究这个函数的解析情况，发现除了  $x = x_0$  的时候  $\sqrt{p} = 0$  存在一个不能消除的奇点之外，似乎解析延拓到复平面是没有问题的。我们进行一个替换  $x - x_0 \rightarrow z = \rho e^{i\phi}$ 。于是在线性近似前提下解析延拓后的波函数是：

$$\tilde{\psi}_{CF}(z) = \frac{C}{2} (2mF)^{-1/4} z^{-1/4} e^{-\frac{2}{3\hbar} (2mF)^{1/2} z^{3/2}}. \quad (45)$$

**Step 4:** 奇点的存在意味着我们需要进行割线选取。我们发现有两个选择【自然对应着经典允许区域解空间两个正交基】，一个是  $\phi = 0$  到  $\phi = \pi$ ，另一个是  $\phi = 0$  到  $\phi = -\pi$ 。

我们选择前者（正虚轴上的割线）作为割线。于是我们可以得到：

$$\tilde{\psi}_{CF}(\rho e^{-i\pi}) = \frac{C}{2(2mF)^{1/4}} \frac{1}{\rho^{1/4} e^{-i\pi/4}} \exp \left[ -\frac{2}{3\hbar} (2mF)^{1/2} \rho^{3/2} e^{-3i\pi/2} \right] \quad (46)$$

对于后者（负虚轴上的割线）

$$\tilde{\psi}_{CF}(\rho e^{i\pi}) = \frac{C}{2(2mF)^{1/4}} \frac{1}{\rho^{1/4} e^{i\pi/4}} \exp \left[ -\frac{2}{3\hbar} (2mF)^{1/2} \rho^{3/2} e^{3i\pi/2} \right] \quad (47)$$

**Step 5:** 计算经典允许区域的下面两个数值，并使用  $\rho$  进行代换：

$$\int_x^{x_0} p(x') dx' = \int_x^{x_0} \sqrt{2m(E - V(x'))} dx' = \sqrt{p(x)} \quad (48)$$

我们注意！！经典允许区域的动量积分什么的是没有绝对值的！！！一个更需要额外注意的事情是，在经典不允许区域  $\rho = x - x_0$  但是在经典允许区域  $\rho = -(x - x_0)$ ！！！这之间转了一个 180 度的角度！！！由于注意的地方比较 subtle 我们单独写开：

$$\int_x^{x_0} (2mF)^{1/2} (x_0 - x)^{1/2} = -(2mF)^{1/2} \frac{2}{3} (x_0 - x)^{3/2} \Big|_x^{x_0} = \frac{2}{3} (2mF)^{1/2} \rho^{3/2} \quad (49)$$

这里最关键的一点是我们使用的是对于  $(2mF)^{1/2} (x_0 - x)^{1/2}$  这个实数进行积分！！我们千万不要强行使用  $i(2mF)^{1/2} (x - x_0)^{1/2}$  进行积分，这样子积分很可能就掉进某一个多值分支里面了！！！！【面对多值函数，不要随便使用复数，会死的很惨！】

**Step 6:** 用  $\int p, \sqrt{p}$  代换  $\rho$  给出经典允许区域波函数：

$$\psi_1(x) = \frac{C}{2\sqrt{p}} \exp \left[ +\frac{i}{\hbar} \int_x^{x_0} p dx - \frac{i\pi}{4} \right], \quad (50)$$

$$\psi_2(x) = \frac{C}{2\sqrt{p}} \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \int_x^{x_0} p dx + \frac{i\pi}{4} \right]. \quad (51)$$

我们对比与经典区域的标准波函数的系数我们会发现系数满足关系：

$$C_1 = \frac{C}{2} e^{i\pi/4}, \quad C_2 = \frac{C}{2} e^{-i\pi/4}. \quad (52)$$

同时波函数也可以写作：

$$\psi_{CA} = \frac{C}{\sqrt{p}} \cos \left( \frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} p dx - \frac{\pi}{4} \right). \quad (53)$$

#### Important: Comment on 非经典区域约束经典区域

我们普通的量子力学解波函数的系数很多的是依靠边界条件的。但是我们这里是研究非经典区域对于经典区域的联通。其实这个也是一种边界条件的体现，我们选择的边界条件是在非经典区域波函数衰减到 0。然后通过解析延拓把这个边界条件传递到经典区域。

#### 复分析处理法的适用情况

显然复分析方法用了很多的近似，所以我们要考虑每一点的近似条件是什么：

1. 线性近似条件：也就是二阶展开要远小于一阶：

$$\left| \frac{1}{2} V''(x_0) (x - x_0)^2 \right| \ll |V'(x_0) (x - x_0)| \quad (54)$$

2. WKB 近似条件：也就是动量变化要远小于动量本身：

$$|\lambda'| \ll 1 \quad \rightarrow \quad \left| \frac{\hbar}{\sqrt{2m|V'(x_0)|}} \frac{1}{2} \frac{1}{(x - x_0)^{3/2}} \right| \ll 1. \quad (55)$$

综合上面两个条件我们有：

$$|V'(x_0)|^2 \gg \frac{\hbar}{\sqrt{m}} |V''(x_0)|^{3/2}. \quad (56)$$

### 半经典归一化条件

我们使用半经典的视角看看归一化条件，我们下面有很多个近似。首先，我们认为波函数只在经典允许区域有贡献，我们忽略不允许区域的波函数：

$$1 \approx \int |\psi_{\text{CA}}|^2 dx = \int_{x_1}^{x_2} dx \frac{C^2}{p} \cos^2 \left( \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p dx - \phi \right) \quad (57)$$

然后我们考虑半经典的情况，也就是考虑  $\hbar \ll 1$  的时候，震荡特别快，所以我们可以把  $\cos^2$  的平均值取为  $1/2$ ，于是我们有：

$$\approx \frac{1}{2} C^2 \int_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{|p|} = \frac{1}{2} C^2 \int_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{m dx/dt} = \frac{1}{2} C^2 \frac{1}{m} \frac{T}{2} . \quad (58)$$

其中也使用了经典的关系  $p = dx/dt$ 。并且其中  $T$  来自对于时间的积分，也就是周期：

$$C = 2\sqrt{\frac{m}{T}} . \quad (59)$$

最后给出上方的归一化系数，其中  $T$  是经典周期。

### Bohr-Sommerfield能级近似

对于 WKB 近似，如果我们考虑粒子处于一个束缚态，我们有两个 turning point  $x_1, x_2$ 。我们考虑经典允许区域的波函数，那么我们 match 系数有通过左边边界条件和右边边界条件两种。

但是由于是描述同一束缚态区域，所以我们存在一个约束条件：

$$\cos \left[ \frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p dx' - \frac{\pi}{4} \right] = \pm \cos \left[ \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p dx' - \frac{\pi}{4} \right] \quad (60)$$

这里存在  $\pm$  是因为我们不知道是选哪个割线的情况互相 match。我们简化上面的式子给出条件：

$$\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p dx' - \frac{\pi}{4} = \frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p dx' - \frac{\pi}{4} + \pi n, \text{ or } \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p dx' - \frac{\pi}{4} = - \left( \frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p dx' - \frac{\pi}{4} \right) + \pi n. \quad (61)$$

对于这两个条件其实只有第二个条件是可以成立的！【第一个条件不对所有  $x$  成立】。所以最终可以推出：

$$\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} p dx = \pi \left( n + \frac{1}{2} \right). \quad (62)$$

这个条件就是 Bohr-Sommerfield 能级量化条件。

## 4.2 Questions and thoughts

**Question 4.6** 为什么解析延拓结果是不唯一的，并且我需要叠加才能给出物理结果？

割线选取不同解析延拓结果必然不同。但是这里我们发现正好 correspond to 经典允许区域的两个正交基。所以我们需要把两个结果叠加才能给出物理结果。

这是一个纯属巧合的物理过程。但是我们不妨这么按照直觉这么算。 □

**Question 4.7** 我们解析延拓的时候是不是转了一圈之后我们需要令  $\rho = -(x - x_0)$  这样子才成了？但是因为我们取了模长，所以所有的符号都没了？

不对！我们计算的是 classically allowed 区域的波函数，所以对于动量应该必然是大于 0 的，所以我们并没有取模长！□

**Question 4.8** 习题在计算的时候会遇见一些特别奇怪的问题！因为复数方法涉及多值函数，所以可能会计算出特别诡异的结果，我们下面来讨论一下!!!

我们如果无脑进行计算的话!!! 可能会掉进一些多值函数的坑里面。比如我们计算：

$$(1)^{1/2} = ((-1)^{2k})^{1/2} = (-1)^k \quad (63)$$

这样子会!! 凭空产生相位!!! 我们该怎么避免这种不小心掉进各种奇奇怪怪的多值分支之中的情况呢？我们还要保证【永远用实数进行计算!!!】

这个comment极其的重要!!! 务必参考作业一同食用!!! 效果更佳!!!

## 5 Lecture 5: WKB 近似各种应用

### 5.1 WKB 近似的应用

#### 5.1.1 应用 1: Planck Formula

##### Bohr-Sommerfield的理解

当我们写出 Bohr-Sommerfield 能级条件的时候，我们其实存在一个 interpretation，我们考虑一个周期的运动的积分：

$$\oint p dx = 2\pi\hbar \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad (64)$$

这个其实是在说，我们的相空间的轨道并不是连续存在的，而是这个轨道包住的相空间的大小是量子化的。并且最小的一份是： $2\pi\hbar$

##### WKB近似给出能级差：Plank Formula

我们首先知道轨道包围相空间的大小正比于一些单位元。并且对于谐振子的计算，我们发现这个会告诉我们能量的条件。我们现在希望具体计算单位包住的相空间意味着多少能量。我们计算有：

$$\frac{\partial}{\partial E} \int_{x_1}^{x_2} p dx = p(x_2) \frac{\partial x_2}{\partial E} - p(x_1) \frac{\partial x_1}{\partial E} + \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial p}{\partial E} dx. \quad (65)$$

##### Remark:

很不常用所以几乎都忘了的公式：对于积分求导！我们需要对于上下限求导然后再加上对被积函数求导

然后我们知道 turning point 处动量为 0，所以第一个两项为 0。然后我们有：

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial E} \int_{x_1}^{x_2} p dx &= \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial}{\partial E} \sqrt{2m(E-V)} dx \\ &= \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{\frac{m}{2(E-V)}} dx. \end{aligned} \quad (66)$$

下面我们量子的不知道怎么做了，就使用经典的动量的定义进行一个换元：

$$m \frac{dx}{dt} = \sqrt{2m(E-V)} \Rightarrow dx = dt \sqrt{\frac{2(E-V)}{m}}. \quad (67)$$

于是我们给出了一个时间和能量相关的关系：

$$\frac{\partial}{\partial E} \oint p dx = T. \quad (68)$$

带入 Bohr-Sommerfield 能级条件我们有：

$$2\pi\hbar \frac{\partial n}{\partial E} = T \Rightarrow \Delta E = \hbar\omega \cdot \Delta n, \quad (69)$$

### 5.1.2 应用 2: 一般势垒隧穿

#### 一般势垒隧穿的概念

我们研究过方形的势垒的隧穿，现在希望通过 WKB 近似研究更一般的隧穿问题。下面在 WKB 近似语境下面考虑一些基本概念，我们研究下面这个图之中的一般势垒。

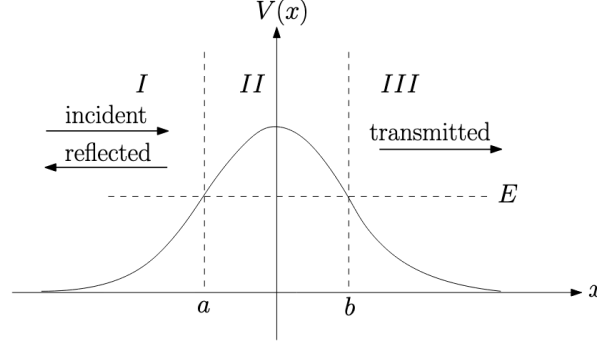


图 1: 一般势垒隧穿

{fig:barr

对于一般的势垒在远离势垒的情况我们可以认为是平面波的形式：

$$\psi_{x \rightarrow -\infty} = e^{\frac{i}{\hbar} p x} + R e^{-\frac{i}{\hbar} p x}, \quad \psi_{x \rightarrow \infty} = D e^{\frac{i}{\hbar} p x}. \quad (70)$$

- 注意，这个解的形式是我们考虑物理意义之后选择的，排除了没有 physical interpretation 的解。
- 对于系数的选择我们定义入射波的系数为 1，反射波的系数为  $R$ ，透射波的系数为  $D$ 。然后透射出来的概率就是  $|D|^2$ ，反射的概率是  $|R|^2$ 。并且我们有概率守恒条件：

$$|R|^2 + |D|^2 = 1. \quad (71)$$

#### WKB解析延拓方法求解系数关系

下面我们在一般讨论的基础上使用 WKB 近似条件研究 turning point 附近的行为从而对上这些系数之间的关系，求出反射和透射的概率。先对于  $x > b$  的区域我们设波函数是：

$$\psi_{III} = \frac{C}{\sqrt{p}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_b^x dx' p\right). \quad (72)$$

$$\int_b^x dx' p = \frac{2}{3} (-2mV'(b))^{1/2} (x - b)^{3/2}. \quad (73)$$

其中使用了线性近似的条件，并且注意我们的积分是要求对于实函数进行积分的。然后我们延拓到复平面并绕过  $b$  点研究  $x \in (a, b)$  区间之内的情况。得到【上半平面】延拓后的函数是：

$$\psi_{II} = \tilde{\psi}_{III}(x) \Big|_{x < b} = \exp\left(-\frac{i\pi}{4} \frac{C}{\sqrt{|p|}} e^{\frac{1}{\hbar} \int_x^b dx' |p|}\right) \quad (74)$$

#### Remark:

注意，我们不考虑下半平面转过去，只考虑上半平面转过去；是因为只有这个是 physical 的!! 是物理的!! 所以我们认为这个就是 II 区间的波函数。



然后我们希望把这个波函数延拓到 I 区间，这里我们玩了一个 trick：

$$\psi_{II}(x) = \exp\left(-\frac{i\pi}{4} \frac{C}{\sqrt{|p|}}\right) \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^b dx |p| e^{-\frac{1}{\hbar} \int_a^x dx' |p|}\right). \quad (75)$$

也就是积分分成两段，第一段给出了一个常数。第二段正是我们一般延拓的样子。然后我们继续绕过 a 点到达 I 区间：

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= \frac{2C}{\sqrt{p}} e^{-\frac{i\pi}{4}} e^{\frac{1}{\hbar} \int_a^b dx |p|} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^a dx p - \frac{\pi}{4}\right) \\ &= \frac{C}{\sqrt{p}} e^{\frac{1}{\hbar} \int_a^b dx |p|} \left( e^{\frac{i}{\hbar} \int_x^a dx p - \frac{i\pi}{4}} + e^{-\frac{i}{\hbar} \int_x^a dx p + \frac{i\pi}{4}} \right). \end{aligned} \quad (76)$$

### Match 系数

我们对一下 I, III 区间的波函数和远离势垒的波函数，我们给出的结论是，注意是我们使用统一的归一化导致的系数：

$$R = e^{\frac{i\pi}{2}}, \quad D = e^{\frac{i\pi}{2}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_a^b dx |p|}. \quad (77)$$

所以我们知道反射率就是 1 也就是几乎不可能存在透射的情况。但是透射的概率存在一个特别小的数值：

$$P = |D|^2 = e^{-\frac{2}{\hbar} \int_a^b dx |p|}. \quad (78)$$

### 近似适用条件

首先我们使用了 LOWKB 的近似，这也就是意味着我们动量变化要很小。同样的这也等价于意味着我们的透射概率特别特别小，因为下面两个条件基本一致：

$$\frac{1}{\hbar} \int_a^b dx |p| \gg 1, \quad \frac{b-a}{\lambda} \gg 1, \quad (79)$$

也就是说 potential barrier 需要足够宽远大于波长。

同时也注意到，我们的近似完全没有使用势能在无穷的 asymptotic condition，所以这个结果是非常 general 的。适用于在无穷各种趋近的方式的势垒（不包含趋近正无穷大的）

#### 5.1.3 应用 3: metastable state 的 lifetime

考虑一个束缚态的势阱，我们知道这个势阱有一个势垒，这个势垒允许粒子隧穿出去。我们希望计算这个束缚态的 lifetime。我们可以定义单位时间穿梭出去的概率：

$$\frac{dP}{dt} = \frac{|D|^2}{T}, \quad (80)$$

根据这个公式我们可以计算出来一个时间：

$$\tau = \frac{T}{|D|^2}, \quad (81)$$

Naively 使用能量数量级进行估算是特别不准确的  $\tau_{naive} \sim 1/V^{-1} \sim 10^{-21} \text{ s}$  , 于是我们可以假设下面的模型用 WKB 进行估算, 一波骚操作之后更准确了一点点但不多:

$$|D|^2 \approx \exp\left(-\frac{\pi\beta}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{E}}\right) = \exp\left(-\frac{2\pi\beta}{\hbar\nu}\right), \quad (82)$$

细节可以看讲义, 但我不觉得很好玩

#### 5.1.4 应用 4: Double Well potential 的本征态能级差

我们考虑下面的一个势能, 我们研究其对称和反对称解之间的能级差。

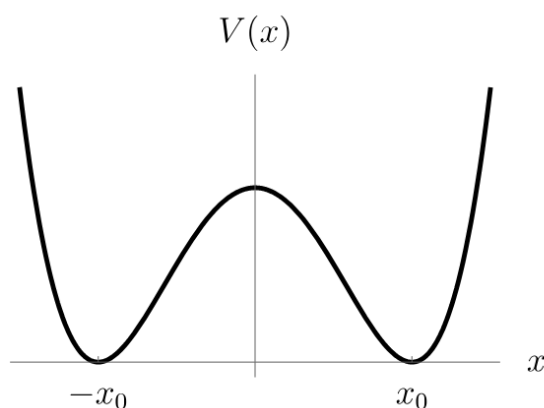


图 2: Double Well potential

{fig:doub

#### 波函数形式分析

显然一个自然的想法是分别考虑两个 well 的波函数。但是问题是, 在一维情况下, 不存在简并「可以数学证明」, 我们不可以简并的考虑两个 well 之中叠加, 务必整体的考虑。

并且根据对称性分析能量算符和 parity 算符对易, 我们选择共同对角化的基, 所以本征态是 parity 算符的本征态。所以由下面两种情况:

$$\psi(-x) = \psi(x), \text{ or odd } \psi(-x) = -\psi(x) \quad (83)$$

#### 基态附近的波函数形式

##### Remark:

这里我们才引入, 我们考虑的是基态, 前面的讨论都是一般的

下面我们希望研究【最低能量态的能级差】, 所以我们假设一个波函数是  $\psi_0(x)$  是一个类似于单个 well 基态波函数的函数 localized 在右边的 well, 我们物理上假设整体波函数是:

$$\psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_0(x) + \psi_0(-x)), \quad \psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_0(x) - \psi_0(-x)). \quad (84)$$

我们物理上, 根据函数形式的观察以及解 schrodinger 方程的经验[可以仔细讨论一下为什么是基态, 但是我懒]认为  $\psi_1$  是整体的基态波函数,  $\psi_2$  是第一激发态波函数。

### 定态薛定谔方程以及能级差

我们试图计算能级差，给出 schrodinger equation:

$$\psi_1'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E_1 - V)\psi_1 = 0, \quad \psi_2'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E_2 - V)\psi_2 = 0. \quad (85)$$

并且对其进行一个组合:

$$\psi_1''\psi_2 - \psi_2''\psi_1 + \frac{2m}{\hbar^2}(E_1 - E_2)\psi_1\psi_2 = 0. \quad (86)$$

然后进行一个积分。并且利用了  $\psi_0$  的归一化。一通计算我们使用  $\psi_0$  表示的结果是:

$$2\psi_0(0)\psi_0'(0) + \frac{m}{\hbar^2}(E_1 - E_2) = 0. \quad (87)$$

### WKB近似计算能级差

我们下面利用 WKB 近似计算  $\psi_0(0), \psi_0'(0)$ 。我们知道在 classical forbidden region 里面【考虑  $x \in (x, x_0)$  的区域】波函数是:

$$\psi_0(x) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi p}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_x^a dx |p|}, \quad (88)$$

#### Remark:

这里我们使用了之前计算的半经典的归一化条件，对于一个 well 内波函数进行归一化。同时我们选择  $a \in (0, x_0)$  就是  $\phi_0$  对应态的 turning point

最后得出结论:

$$E_2 - E_1 = \frac{\omega \hbar}{\pi} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^a dx |p|}. \quad (89)$$

## 5.2 Questions and Thoughts

## 6 Lecture 6: 经典散射理论以及量子散射基础

### 6.1 经典散射理论

散射理论主要研究的是粒子的 local interaction 在 global 的影响。我们主要关注两个问题：

- 确定入射的状态，以及相互作用，我们如何得到散射之后的出射状态
- 确定出射状态和入射状态，我们如何反推出相互作用

#### 6.1.1 经典散射理论基础

##### 经典散射问题的数学 set up

我们数学上 set up 这样的一个散射问题，并且使用经典力学的框架。

1. **相互作用**：我们使用一个势能进行相互作用的描述： $V(x)$ ，需要保证  $|x| \rightarrow \infty$  的时候  $V(x) \rightarrow 0$ 。
2. **入射状态**：我们使用经典粒子的初始位置和动量  $(x_0, p_0)$  进行描述。
3. **出射状态**：我们使用经典粒子的最终位置和动量  $(x_f, p_f)$  进行描述。

由于我们认为散射前后在无穷远的时候没有相互作用是自由的粒子，所以我们有：

$$\begin{aligned}\mathbf{x}(t \rightarrow -\infty) &= \mathbf{x}_{\text{in}} + \mathbf{v}_{\text{in}} t \\ \mathbf{x}(t \rightarrow +\infty) &= \mathbf{x}_{\text{out}} + \mathbf{v}_{\text{out}} t.\end{aligned}\tag{90}$$

第一个散射理论的问题就是，我们确定入射状态和相互作用，如何得到出射状态？我们使用下面的步骤：

1. **Step1: 求解经典运动方程**使用牛顿定律我们知道粒子运动方程是：

$$m\ddot{\mathbf{x}} = -\frac{dV}{d\mathbf{x}},\tag{91}$$

2. **Step2: 寻找合理轨迹**我们确定初始条件是：

$$\mathbf{x}(t \rightarrow -\infty) = \mathbf{x}_{\text{in}} + \mathbf{v}_{\text{in}} t,\tag{92}$$

3. **Step3: 计算出射状态**验证这个轨迹在  $t \rightarrow +\infty$  的时候是否满足：

$$\mathbf{x}(t \rightarrow +\infty) = \mathbf{x}_{\text{out}} + \mathbf{v}_{\text{out}} t,\tag{93}$$

这样的形式。如果满足可以通过对比系数给出出射状态。

##### 不可以用散射理论描述的情况

我们会发现上面的求解过程并不是总可以完成的，我们不能保证初始和最终轨迹一定是线性的自由粒子形式。下面有两种情况我们永远不能使用散射理论进行描述：

- **束缚态**：如果粒子被势阱束缚住了，那么粒子在做周期运动。
- **黑洞**：也就是粒子落入了一个洞出不来了，这样也不能散射描述。

### 6.1.2 散射截面

#### (Differential ) Cross Section set up

在经典散射理论中，我们通常使用 cross section 来描述散射的强弱。这个概念是完全依赖于一个固定的初始条件的，相当于我们固定了条件，用出射状态对于相互作用进行描述。

我们考虑下面的一个散射过程，图中很多均匀的粒子进行一个入射，经过相互作用进行散射。然后我们研究入射某一个单位面积的粒子出射到了那个单位立体角。

#### Remark:

这里我们经常使用的立体角的定义和常用的不一样，我们定义立体角是：

$$d\Omega = d\cos\theta d\phi, \quad (94)$$

这个定义似乎和之前定义的差了一个符号，但是其实是因为我们选择的积分上下限的不同。积分结果是一样的：

$$\int d\Omega = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin\theta d\theta = \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d(\cos\theta). \quad (95)$$

下面我们定义一些基本的物理量用于构造散射截面：

1. **入射流强度**：我们定义入射流强度  $n$  表示【单位面积】【单位时间】内入射的粒子数目。其单位是：

$$n = \text{const} \cdot \frac{1}{\text{cm}^2 \cdot \text{s}} \quad (96)$$

2. **出射角流强度**：我们定义  $\frac{dN}{dt}$  是【单位立体角】【单位时间】出射的粒子数目。其单位是：

$$\frac{dN}{dt} = \text{const} \cdot \frac{1}{\text{s}}, \quad (97)$$

#### Remark:

我们需要关注两个问题：

- 我们使用  $\frac{dN}{dt}$  来表示单位立体角单位时间出射的粒子数目。那么我们很容易知道  $N$  的物理意义是某个时间积分下单位立体角出射的粒子数目。
- 入射流强度和出射角流强度的单位是不同的，这是因为立体角是没有量纲的！！

#### 散射截面的定义

在上面的 set up 之下我们可以给出散射截面的定义：

**Definition 1. 微分散射截面**

给定一个上图之中的散射过程，入射流强度  $n$  和出射角流强度  $\frac{dN}{dt}$ ，微分散射截面定义为：

$$\frac{dN}{dt} = \frac{d\sigma}{d\Omega} n d\Omega . \quad (98)$$

其中我们定义  $\frac{d\sigma}{d\Omega}$  为微分散射截面，其单位是面积单位：

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \text{const} \cdot \text{cm}^2 . \quad (99)$$

所以我们把它理解为一个截面，是表征面积的量。

看公式形式我们可以知道一个直观的物理意义是：

- 单位立体角出射的粒子是之前多少单位面积入射的；微分的意思就是考虑的是单位立体角。

此外作为一个微分我们还可以进行一个对于立体角进行一个积分。得到的结果就是总散射截面：

**Definition 2. 总散射截面** 给定一个上图之中的散射过程，入射流强度  $n$  和出射角流强度  $\frac{dN}{dt}$ ，总散射截面定义为：

$$\sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega . \quad (100)$$

其中我们定义  $\sigma$  为总散射截面，其单位是面积单位：

$$\sigma = \text{const} \cdot \text{cm}^2 . \quad (101)$$

总散射截面的物理意义是：

- 整个球面被散射出来的粒子是来源于入射的时候多大面积的粒子。

**例子1: 钢球散射**

我们假设以 scattering centre 为中心放置一个半径为  $R$  的钢球。然后我们让粒子以入射流强度  $n$  进行入射。散射截面根据物理意义来说显然是：

$$\sigma = \pi R^2 , \quad (102)$$

因为只有能接触到钢球的粒子才会被散射。

[具体的计算可以回去补全，没那么重要]

**例子2: Rutherford散射**

这个就是平方反比力作用下面的散射我们下面进行计算。我们的势能是：

$$V(r) = \frac{\alpha}{r} , \quad (103)$$

[具体的计算作业里面有]

### 球对称散射怎么计算散射振幅

下面我们给出一套球对称计算散射振幅的操作：

- **Step 1 使用求坐标：**我们以 scattering centre 作为中心建立球坐标系。
- **Step 2 使用守恒量：**我们不进行运动方程的计算而是使用守恒量给出某一个轨道前后的位置关系，我们考虑  $b$  半径的一个单位环上面入射的粒子运动到哪里：

1. 角动量守恒：考虑一个从  $b$  为半径的环上入射的粒子计算角动量守恒给出其出射的角度  $\theta$ 。

$$f(b, \theta, p) = 0$$

2. 能量守恒：考虑一个从  $b$  为半径的环上入射的粒子计算能量守恒。  $f'(b, \theta, p) = 0$

这样的两个方程我们可以给出  $b$  和  $\theta$  的关系。

- **Step 3 计算散射截面：**我们最终给出  $\theta(b)$  的方程可以根据下面的公式进行计算微分散射截面：

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{b}{\sin \theta} \left| \frac{db}{d\theta} \right|, \quad (104)$$

#### Remark:

最后的公式的推导其实就是根据微分散射截面的物理意义进行计算的，微分散射截面是单位出射立体角对应着单位入射面积，如果我们考虑一个圆环那么面积就是：

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{dS}{d\Omega} = \frac{\pi d(r^2)}{2\pi \sin \theta d\theta} = \frac{b}{\sin \theta} \left| \frac{db}{d\theta} \right|. \quad (105)$$

其中分母的  $2\pi$  是我们对于  $\phi$  方向积分得到的。

### 6.1.3 粒子碰撞散射理论

我们上面考虑的是有一个固定的 potential 对于单个粒子的位置有作用，下面我们考虑如过 potential 是两个粒子相互作用给出的那么怎么研究散射理论。

- 其核心思想就是换一个参考系，考虑质心系那么又退化到之前的单粒子散射问题了。

下面一步步进行操作。

#### 质心系的运动分析

我们考虑两个粒子相互作用的散射问题，我们选择的 potential 是：

$$V(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = V(|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|), \quad (106)$$

下面我们换一个 coordinate system 使用下面的两个坐标来描述体系：

$$x = x_1 - x_2, \quad X = \frac{m_1 \mathbf{x}_1 + m_2 \mathbf{x}_2}{m_1 + m_2}, \quad (107)$$

在这个坐标系下，我们发现势能只和相对坐标  $x$  有关。并且 EoM 简化为：

$$m_{\text{eff}} \ddot{\mathbf{x}} = -\frac{\partial V}{\partial \mathbf{x}}, \quad \ddot{\mathbf{X}} = 0, \quad m_{\text{eff}} = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}. \quad (108)$$

### 微分散射截面的计算

我们会发现总散射截面是和参考系无关的。但是【微分散射截面是被参考系决定的】。我们一般研究下面两个参考系：

- **实验室参考系 Lab frame:** 其中一个粒子静止，另一个粒子入射。
- **质心参考系 CM frame:** 两个粒子以相同速度相向入射。

这两个参考系的微分散射截面的关系是：

$$\left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{lab}} = \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{cm}} \frac{(1 + 2\lambda \cos \theta_{\text{cm}} + \lambda^2)^{3/2}}{1 + \lambda \cos \theta_{\text{cm}}}, \quad (109)$$

其中参数  $\lambda = m_1/m_2$ ，并且  $\theta_{\text{cm}}$  是质心系下的散射角。

#### Remark:

我们之前微分散射截面都是对于一大群粒子进行定义的。我们下面说明一下这里的微分散射截面是什么意思!!

[回头补充，但是很重要的问题]

### Luminosity的定义

在粒子碰撞实验中，我们经常使用 Luminosity 来描述一个碰撞的性质。假设我们关注某一个反应下面生成的某一种粒子，在单位立体角单位时间生成的粒子数目是  $\frac{dN}{dt}$ ，那么我们定义 Luminosity 为：

$$\frac{dN}{dt} = L \cdot \sigma, \quad (110)$$

其中  $L$  是 Luminosity，其单位是：

$$L = \text{const} \cdot \frac{1}{\text{cm}^2 \cdot \text{s}}, \quad (111)$$

并且  $\sigma$  是该反应的总散射截面。

## 6.2 量子散射理论基础

### 6.2.1 量子散射理论 set up

#### 量子散射问题的set up

对于一个量子力学语境的散射问题，我们使用下面的 set up 来考虑：

1. **Hamiltonian 描述:** 我们使用一个 Hamiltonian 来描述散射过程：

$$H = H_0 + V, \quad (112)$$

其中  $H_0$  是自由粒子的 Hamiltonian， $V$  是相互作用的势能。并且相互作用需要满足：

$$V(\mathbf{x}) \rightarrow 0 \quad \text{as} \quad |\mathbf{x}| \rightarrow \infty, \quad (113)$$



2. **In and out state:** 我们使用两个量子态来描述我们的入射和出射的过程。也就是：

$$|\psi\rangle_{\text{in}}, \quad |\psi\rangle_{\text{out}}, \quad (114)$$

散射的过程我们认为系统可以通过一个量子态  $|\psi(t)\rangle$  进行描述。

### 量子态的时间演化描述

【我们使用 schrodinger picture 进行描述】也就是说这个量子态按照时间演化算符进行演化，我们考虑两种演化：

1. **相互作用演化：**我们定义某一个时刻描述量子态的量子态  $|\psi_0\rangle = |\psi(0)\rangle$ 。并且其他时刻的量子态可以通过时间演化算符进行计算。【使用「包含相互作用的 Hamiltonian」演化】这个是真实的演化

$$|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi_0\rangle, \quad U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} \quad (115)$$

2. **自由粒子演化：**有的时候在考虑无穷的时候我们认为粒子很像自由粒子所以我们使用自由粒子 Hamiltonian 进行演化：

$$U_0(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}, \quad (116)$$

### 散射过程量子态的描述

下面给出这个量子态的需要满足的行为

- **散射过程量子态：**我们定义某一个时刻描述散射过程的量子态  $|\psi_0\rangle = |\psi(t_0)\rangle$ 。并且其他时刻的量子态可以通过时间演化算符进行计算。

$$|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi_0\rangle, \quad (117)$$

- **散射边界条件：**我们希望散射过程在无穷远的时候和 In and Out state。【但是使用「自由粒子 Hamiltonian」演化】

$$|\psi(t)\rangle \rightarrow U_0(t)|\psi_{\text{in}}\rangle, \quad t \rightarrow -\infty \quad (118)$$

$$|\psi(t)\rangle \rightarrow U_0(t)|\psi_{\text{out}}\rangle, \quad t \rightarrow \infty \quad (119)$$

这里我们使用了一个概念就是一个量子态趋近于另一个量子态，我们下面给出严格的数学定义：

$$|\psi(t)\rangle \rightarrow |\phi(t)\rangle, t \rightarrow t_0 \Leftrightarrow \|\psi(t) - \phi(t)\| \rightarrow 0, t \rightarrow t_0. \quad (120)$$

## 6.2.2 S 矩阵

散射过程我们可以使用 S 矩阵进行描述。S 矩阵是一个把入射态映射为出射态的算符，也就是考虑某个相互作用下入态的边界条件是怎么变成出态的。

根据 set up 我们可以通过  $|\psi_0\rangle$  把 in state 和 out state 联系起来:

$$|\psi_0\rangle = U^\dagger(t)|\psi(t)\rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} U^\dagger(t)U_0(t)|\psi_{\text{out}}\rangle \equiv \Omega_-|\psi_{\text{out}}\rangle \quad (121)$$

$$|\psi_0\rangle = U^\dagger(t)|\psi(t)\rangle = \lim_{t \rightarrow -\infty} U^\dagger(t)U_0(t)|\psi_{\text{in}}\rangle \equiv \Omega_+|\psi_{\text{in}}\rangle. \quad (122)$$

这里我们使用了两个极限算符  $\Omega_\pm$  来表示入射和出射的联系, 我们称之为 Møller operators。

### Definition 3. $S$ 矩阵

给定一个量子散射过程, 入态  $|\psi\rangle_{\text{in}}$  和出态  $|\psi\rangle_{\text{out}}$ ,  $S$  矩阵定义为:

$$|\psi_{\text{out}}\rangle = \Omega_-^\dagger \Omega_+ |\psi_{\text{in}}\rangle \equiv S |\psi_{\text{in}}\rangle. \quad (123)$$

一个图描述这个过程:

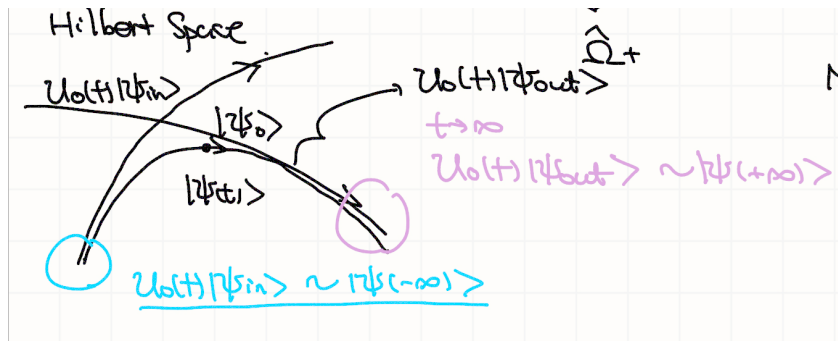


图 3:  $S$  矩阵示意图

{fig:smat

## 6.3 Questions and Thoughts

**Question 6.9** 怎么定义两个粒子散射的微分散射截面?? 这似乎没有给出定义啊??

我在正文内容给出补充了!!

□

## 7 Lecture 7: 量子散射理论框架

### 7.1 Interaction picture 对于 S 矩阵描述

我们考虑使用 Interaction Picture 来描述 S 矩阵。我们对于 Interaction Picture 的态矢量和算符的定义如下：

- **量子态定义**，我们把量子态定义为从 Heisenberg Picture 先进行正向  $H$  时间演化，再进行反向  $H_0$  时间演化的结果：

$$|\psi_I(t)\rangle = e^{iH_0t}|\psi(t)\rangle = e^{iH_0t}e^{-iHt}|\psi_0\rangle. \quad (124)$$

- **算符定义**，我们把算符定义为从 Schrodinger Picture 进行正向  $H_0$  时间演化的结果：

$$O_I = e^{iH_0t}O_se^{-iH_0t}. \quad (125)$$

这样定义之后，我们发现 in and out state 很自然的就是我们理论的量子态在  $t \rightarrow \mp\infty$  时候的 Interaction Picture 表示：

$$|\psi_{\text{in}}\rangle = \lim_{t \rightarrow -\infty} |\psi_I(t)\rangle, \quad |\psi_{\text{out}}\rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} |\psi_I(t)\rangle. \quad (126)$$

- **时间演化算符**：Interaction Picture 下的时间演化算符  $S(t_2, t_1)$ ，它满足下面的关系：

$$|\psi_I(t_1)\rangle = e^{iH_0t_1}e^{-iHt_1}e^{iHt_2}e^{-iH_0t_2}|\psi_I(t_2)\rangle \equiv S(t_1, t_2)|\psi_I(t_2)\rangle. \quad (127)$$

所以我们知道时间演化算符定义为：

$$S(t_1, t_2) = e^{iH_0t_1}e^{iH(t_2-t_1)}e^{-iH_0t_2}. \quad (128) \quad \text{\texttt{eq:inter}}$$

我们自然的发现 S 矩阵就是 Interaction Picture 下的时间演化算符在  $t \rightarrow \pm\infty$  时候的极限：

$$S = \lim_{t_1 \rightarrow +\infty} \lim_{t_2 \rightarrow -\infty} S(t_1, t_2). \quad (129)$$

- **in and out state 还有 S 矩阵其实就是 Interaction Picture 下面负无穷到正无穷的时间演化!!**

### 7.2 Properties of Moller operators and S matrix

#### Unitary Operator

对于一个线性空间  $\mathcal{H}$  我们定义 Unitary Operator  $U$  满足下面的三个性质：

1. 定义域是  $\mathcal{H}$  本身。  $D(U) = \mathcal{H}$ ;
2. 值域是  $\mathcal{H}$  本身。  $R(U) = \mathcal{H}$ ;
3. 保持内积不变。  $\langle U\psi|U\phi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle, \forall\psi, \phi \in \mathcal{H}$ .

如果只满足 1, 3 条件，这个 Operator 不是 Unitary 的，我们称之为 Isometric Operator。

#### Moller Operator是Isometry

我们下面给出一个很强的定理并进行证明。

**Theorem 1.** *Moller Operator*  $\Omega_{\pm}$  是 *Isometry*, 如果理论不存在 *bound state*, 那么  $\Omega_{\pm}$  是 *Unitary Operator*.

证明之前我们讨论一个引理以及其结果。

### Moller Operator 神秘转换

**Lemma 1.** 对于一个理论, *Hamiltonian* 是  $H = H_0 + V$ , 其中  $H_0$  是自由粒子 *Hamiltonian*。Moller Operator 对应:

$$H\Omega_{\pm} = \Omega_{\pm}H_0, \quad H_0\Omega_{\pm}^{\dagger} = \Omega_{\pm}^{\dagger}H. \quad (130)$$

证明可以使用下面的极限换元的 trick:

$$\begin{aligned} U^{\dagger}(\tau)\Omega_{\pm} &= U^{\dagger}(\tau) \lim_{t \rightarrow \mp\infty} U^{\dagger}(t)U_0(t) \\ &= \lim_{t \rightarrow \mp\infty} U^{\dagger}(\tau)U^{\dagger}(t)U_0(t)U_0(\tau)U_0^{\dagger}(\tau) \\ &= \lim_{t \rightarrow \mp\infty} U^{\dagger}(t+\tau)U_0(t+\tau)U_0^{\dagger}(\tau) \\ &= \Omega_{\pm}U_0^{\dagger}(\tau). \end{aligned} \quad (131)$$

我们给出下面的假设:

- **假设 1:** 动量本征态构成了 Hilbert Space 的完备基。
- **假设 2:** 完全不考虑 bound state 能量不小于 0 的情况, 认为存在 bound state 必然对应能量小于 0 的本征值。

### Remark:

我们知道, 一个自由粒子的理论, 如果存在能量小于 0 的态。必然是因为我们引入了一个势阱, 这个势阱会产生 bound state。

但是值得注意的是, 存在 bound state 并不意味着一定存在能量小于 0 的态。只是在散射理论里面我们不考虑这种情况。所以我们有假设 2

同时我们也在假设的基础上给出下面定理

**Theorem 2.** *Hamiltonian* 的连续谱与 Moller Operator 的作用

{thm:moll

Moller Operator 作用在任何自由粒子本征态  $|p\rangle$  上面, 都会得到 *Hamiltonian* 的连续谱对应的本征态:

$$H\Omega_{+}|p\rangle = \Omega_{+}H_0|p\rangle = E_p\Omega_{+}|p\rangle. \quad (132)$$

由于我们假设自由粒子动量本征态构成了一个 Hilbert 空间的完备基。但是 Moller Operator 作用之后只能映射到谱为正的 Hilbert 空间里面，所以证明了在不存在 bound state（根据假设 2 也就是等价于谱为正）的情况下，Moller Operator 是 Unitary 的；否则只是 Isometry。

**Remark:**

我们的定理2也说明了一个构造  $\mathcal{H}$  的本征态连续谱的方法，就是使用 Moller Operator 作用在自由粒子本征态上面!! 我们下面就使用这个方法重新展开 Hilbert Space!!

**不同时间的Hilbert Space的展开**

Hilbert Space 我们认为有两种展开的方式。对于 0 时间的研究 Moller Operator 的存在给我们了一种更方便进行研究的展开方式。我们选择

$$\mathcal{H} = R(\Omega_+) \oplus B, \quad (133)$$

其中两个子空间我们可以证明是正交的。因为，其是 Hamiltonian 的不同本征值对应的本征子空间，由于 Hamiltonian 是 Hermitian 的，所以不同本征值对应的本征子空间是正交的。我们把两种展开方式放在一起进行对比：

**Theorem 3.** 散射理论中 Hilbert Space 的结构

散射理论中 Hilbert Space 我们两种展开方式：

- 无穷过去与未来，Hilbert Space 使用自由粒子 Hamiltonian 本征态可以进行正交完备展开

1. 正交性关系：

$$\langle p' | p \rangle = \delta(p' - p). \quad (134)$$

2. 完备性关系：

$$\mathbb{1} = \int d^3p |p\rangle\langle p|. \quad (135)$$

- 散射时刻的 Hilbert Space 可以分解成 Bound State 以及 Scattering State 张成的两个子空间，是正交完备的！

1. 正交性关系：

$$\langle \mathbf{p}_+ | n \rangle = 0, \quad \langle \mathbf{p}'_+ | \mathbf{p}_+ \rangle = \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}), \quad \langle n | m \rangle = \delta_{nm}. \quad (136)$$

2. 完备性关系：

$$\mathbb{1} = \int d^3p |\mathbf{p}_+\rangle\langle \mathbf{p}_+| + \sum_n |n\rangle\langle n|. \quad (137)$$

其中散射态可以通过 Moller Operator 作用在自由粒子本征态上面得到：

$$|\mathbf{p}_+\rangle = \Omega_+ |p\rangle. \quad (138)$$

**Remark:**

上面的定理，相比于定理，更像是一种假设。我们觉得这个结构很合理，所以假设其成立！

**S矩阵作为Unitary Operator**

Moller Operator 是 Isometry，不意味着 S Matrix 也是。其实 S Matrix 可以是 Unitary 的!! 我们发现只要有：

$$R(\Omega_-) = R(\Omega_+), \quad (139)$$

那么 S 矩阵就是 Unitary 的。一个图可以帮助我们理解这个结论：

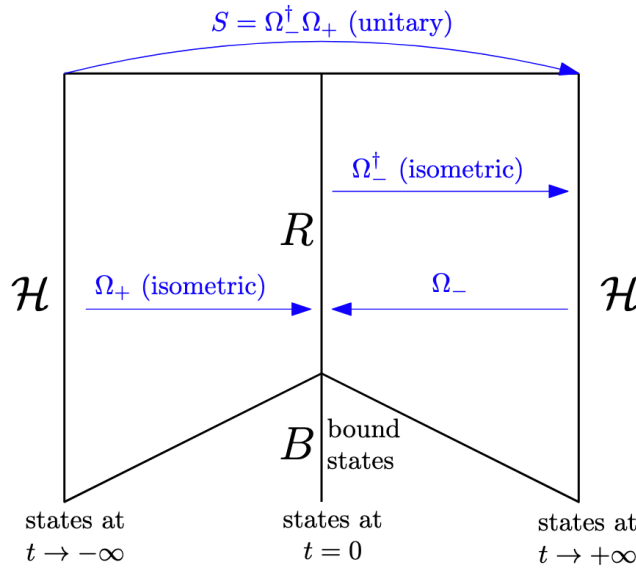


图 4: 不同时间的 Hilbert Space 结构示意图

{fig:hilb

**Remark:**

如何理解我们的三个 Hilbert Space 呢？真实的物理其实只有一个中间的 Hilbert Space。但是，我们考虑散射过程的时候，我们希望把 in and out state 容许存在的空间进行描述，然后把这个空间理解为无穷远时间的 Hilbert Space。

**S矩阵与“能量守恒”**

我们根据前面对于 Moller Operator 的引理可以推出下面的结论：

$$[H_0, S] = H_0 S - S H_0 = H_0 \Omega_-^\dagger \Omega_+ - \Omega_-^\dagger \Omega_+ H_0 = 0 \quad (140)$$

于是我们可以意识到：

- S 矩阵守恒自由粒子 Hamiltonian 的能量，也就是说两者可以同时对角化

这其实也说的是，一个散射过程里面，in and out state 的「自由粒子能量」是守恒的!!

$$\langle \psi_{\text{out}} | H_0 | \psi_{\text{out}} \rangle = \langle \psi_{\text{in}} | S^\dagger H_0 S | \psi_{\text{in}} \rangle = \langle \psi_{\text{in}} | H_0 | \psi_{\text{in}} \rangle. \quad (141)$$

### S矩阵的平面波表示

我们使用自由粒子动量本征态  $|p\rangle$  来展开 in and out state:

$$\psi_{\text{out}}(p') = \int d^3p \langle p'|S|p\rangle \psi_{\text{in}}(p) . \quad (142)$$

其中我们因为存在能量守恒, 所以有:

$$\langle p|[H_0, S]|p'\rangle = 0 \rightarrow (E_p - E_{p'}) \langle p|S|p'\rangle = 0 . \quad (143)$$

因此我们可以得出:

$$\langle p'|S|p\rangle = S(p', p) \delta(E_{p'} - E_p) . \quad (144)$$

下面我们考虑没有相互作用的极限  $S \rightarrow I$ , 所以 generally 我们可以把  $S$  写作  $S = 1 + R, [H_0, R] = 0$ 。有两种经典的集团分解方法:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p}'|S|\mathbf{p}\rangle &= \delta^{(3)}(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) - 2\pi i \delta(E_{p'} - E_p) t(\mathbf{p}' \leftarrow \mathbf{p}) \\ &= \delta^{(3)}(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) + \frac{i}{2\pi m} \delta(E_{p'} - E_p) f(\mathbf{p}' \leftarrow \mathbf{p}) . \end{aligned} \quad (145)$$

### 7.3 Questions and thoughts

**Question 7.10** 为什么不同时间的 Hilbert Space 可以不一样? 这个不同的 Hilbert Space 的意义是什么?

见正文捏

□

**Question 7.11** 为什么我们的 in and out state 可以用自由粒子态展开?

我目前的理解是这是一个假设, 我们认为自由粒子的态构成了一个完备基, 从而可以展开 in and out state。同时其实还假设了, in and out state 其实和自由粒子的态很像, 否则这个展开可能很复杂!

但是严格的散射理论应该可以把这个严格化!! 这里就留个空子捏!

[就是总觉得哪里不太对, 为什么我们可以用自由粒子态展开 in and out state 呢? 难道真的完备吗??? ]

## 8 Lecture 8: S-Matrix 以及散射可观测量

我们前面研究了量子散射理论的 set up, 下面我们讨论这样的理论是怎样给出可观测量的。

### 8.1 量子散射问题的 set up

在讨论之前, 我们需要 set up 量子散射问题来说明, 对于量子散射问题我们的可观测量是什么, 我们怎么从经典的散射截面的定义推广到量子力学的语境下。

一般 in state 对应 out state 的概率分布

- 一般 in state 给出 out state 在某个立体角的概率:

我们考虑一个一般的 in state  $|\psi_{\text{in}}\rangle$  其在动量空间的表示为  $\psi_{\text{in}}(p) = \langle p | \psi_{\text{in}} \rangle$ 。如果其出射到某个 out state 为  $|\psi_{\text{out}}\rangle$  其概率是:

$$\omega(d\Omega \leftarrow \psi_{\text{in}}) = d\Omega \int p^2 dp |\psi_{\text{out}}(\mathbf{p})|^2. \quad (146)$$

注意到 out state  $\psi_{\text{out}}(\mathbf{p})$  是和出射的大小和方向都有关系的, 我们仅仅是对于出射动量的大小进行积分, 所以  $\omega$  实际上包含了【出射动量的方向信息】【当然也包含了入射大小和方向的信息】

散射问题 set up

为了模拟经典情况, 我们考虑下面的情况散射问题 set up:

- 入射波包: 类比经典例子我们考虑一个 wave package, 其:
  - 其动量方向垂直与入射面;
  - 其动量大小集中在  $p_0$  附近
  - 其空间分布在 0 这个位置附近, 也就是入射面法线通过散射轴心的那个

我们可以先定义一个入射轴上面的态  $|\phi_0\rangle$  然后使用平移算符得到所有入射平面的态:

$$|\phi_a\rangle = e^{-ip_0 \cdot a} |\phi_0\rangle, \quad (147)$$

#### Remark:

这里我们平移算符认为就是一个相位, 这是因为我们考虑入射态集中在  $p_0$  附近, 所以我们直接使用  $p_0$  进行平移。

- 散射截面: 类比经典的情况, 我们把散射截面理解为【把每一个波包当作 in state】的情况下, out state 在某个立体角概率总和!

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \int d^2a \omega(d\Omega \leftarrow \phi_a). \quad (148)$$



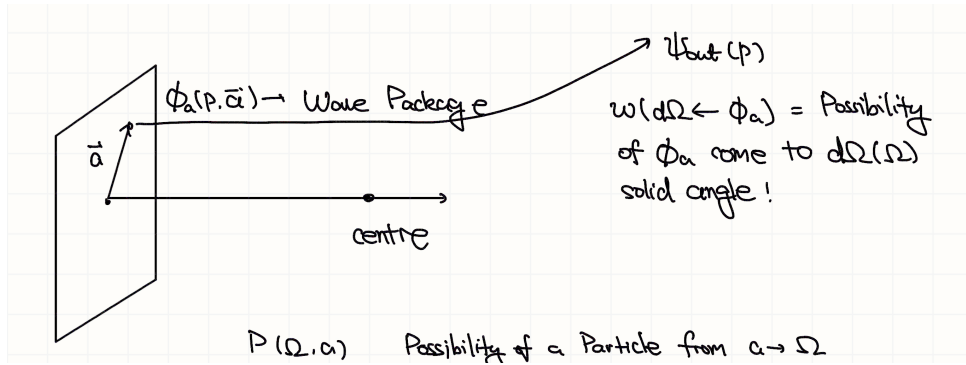


图 5: 量子散射问题 set up 示意图

{fig:scat

### • 散射截面的依赖

我们分析散射截面依赖什么，会发现其取决于下面三个信息：

- 入射动量大小
- 入射动量方向【我们确实可以 explicitly 这么想，但是只有选择垂直方向才能够给出和散射振幅的关系】
- 出射动量方向【也就是出射的立体角】

## 8.2 Differential Cross Section and Scattering Amplitude

### Theorem 4. 微分散射截面与散射振幅

对于一个量子理论来说，只考虑一群以  $p_0$  大小垂直入射的粒子，其出射动量在某个立体角内的微分散射截面为：

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\mathbf{p}_0, \Omega) = |f(\mathbf{p}, \mathbf{p}_0)|^2, \quad (149)$$

我们注意，散射振幅虽然仿佛 depend on 出射的动量大小以及方向，其实仅仅和出射方向有关，因为我们已经默认了弹性散射了！

在上面的 set up 之下我们发现这个关系可以通过计算证明。上面我们根据散射振幅的定义给出：

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \int d^2a \omega(d\Omega \leftarrow \phi_a). \quad (150)$$

我们的核心就是计算  $\omega(d\Omega \leftarrow \phi_a)$  是什么。下面给出计算。

### out put 概率计算

我们知道 out put state 和 in state 的关系是通过 S 矩阵给出的：

$$\begin{aligned} \psi_{\text{out}}(\mathbf{p}) &= \int d^3\mathbf{p}' \langle \mathbf{p} | S | \mathbf{p}' \rangle \psi_{\text{in}}(\mathbf{p}') \\ &= \psi_{\text{in}}(\mathbf{p}) + \frac{i}{2\pi m} \int d^3\mathbf{p}' \delta(E_p - E_{p'}) f(\mathbf{p} \leftarrow \mathbf{p}') \psi_{\text{in}}(\mathbf{p}'). \end{aligned} \quad (151)$$

如果我们认为考虑的出射动量和入射波包的动量大小完全不一样，那么我们有：

$$\psi_{\text{in}}(\mathbf{p}) \approx 0, \quad (152)$$

因此如果考虑入射态是  $\phi_a$  波包我们有：

$$\psi_{\text{out}}(\mathbf{p}) = \frac{i}{2\pi m} \int d^3\mathbf{p}' \delta(E_p - E_{p'}) f(\mathbf{p} \leftarrow \mathbf{p}') \phi_a(\mathbf{p}') \quad (153)$$

然后我们将这个结果带入计算。

#### 微分散射截面与散射振幅的关系计算

我们进行计算：

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{1}{(2\pi m)^2} \int d^2a \int p^2 dp \left[ \int d^3\mathbf{p}' \delta(E_p - E_{p'}) f(\mathbf{p} \leftarrow \mathbf{p}') e^{-i\mathbf{p}' \cdot \mathbf{a}} \phi_0(\mathbf{p}') \right. \\ &\quad \times \left. \int d^3\mathbf{p}'' \delta(E_p - E_{p''}) f^*(\mathbf{p} \leftarrow \mathbf{p}'') e^{i\mathbf{p}'' \cdot \mathbf{a}} \phi_0^*(\mathbf{p}'') \right] \end{aligned} \quad (154)$$

首先对于面积进行积分。我们意识到，这个通过下面关系会给出【垂直于入射方向的 delta 函数】

$$\int d^2a e^{-i\mathbf{a} \cdot \mathbf{p}' + i\mathbf{a} \cdot \mathbf{p}''} = (2\pi)^2 \delta^{(2)}(\mathbf{p}'_{\perp} - \mathbf{p}''_{\perp}). \quad (155)$$

然后进行海量 delta 函数的化简我们有：

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \int d^3\mathbf{p}' \frac{p'}{p_{\parallel}} |\phi(\mathbf{p}')|^2 |f(\mathbf{p} \leftarrow \mathbf{p}')|^2. \quad (156)$$

这个时候我们认为入射波包足够集中在  $p_0$  附近，并且入射方向垂直于入射面，所以我们有：

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\mathbf{p} \leftarrow \mathbf{p}_0)|^2, \quad (157)$$

### 8.3 Optical Theorem

这里我们会发现入射方向的散射振幅的虚部和总散射截面之间存在一个非常重要的关系，称为 Optical Theorem。我们下面给出定理。

#### Theorem 5. Optical Theorem:

对于一个入射动量为  $\mathbf{p}$  的平面波入射态，设其【入射方向】散射振幅为  $f(\mathbf{p}, \mathbf{p})$ 【也就是出射动量和入射动量方向都一样的散射振幅】，那么其总散射截面  $\sigma$  和入射方向散射振幅的虚部之间存在下面的关系：

$$\text{Im } f(\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p}) = \frac{p}{4\pi} \sigma(\mathbf{p}). \quad (158)$$

我们下面逐步讨论证明

#### S 矩阵的集团分解

对于 S 矩阵我们知道没有散射的时候就是单位矩阵，所以我们不妨认为是单位矩阵加上一个散射相关的部分：

$$S = 1 + R \quad (159)$$

我们分析  $R$  矩阵的性质：

- **Unitary 的结果**：由于我们 assume S 矩阵是 unitary 的，所以我们有：

$$R + R^\dagger + R^\dagger R = 0 . \quad (160) \quad \{\text{eq:unitary}\}$$

- **自由粒子 Hamiltonian 对易**：我们知道 S 矩阵和自由粒子 Hamiltonian 对易所以我们也有：

$$[R, H_0] = 0 . \quad (161)$$

这意味着我们可以使用平面波本征态作为 R 矩阵的共同本征态。

- **R 矩阵和散射振幅**：R 矩阵也可以用平面波展开所以我们对比 S 矩阵用平面波展开的结果以及散射振幅的定义可以知道：

$$\frac{i}{2\pi m} \delta(E_{p'} - E_p) f(\mathbf{p}', \mathbf{p}) = \langle \mathbf{p}' | R | \mathbf{p} \rangle . \quad (162) \quad \{\text{eq:Randf}\}$$

我们使用平面波展开 eq. (160) 式子可以得到：

$$\langle \mathbf{p}' | R | \mathbf{p} \rangle + \langle \mathbf{p} | R | \mathbf{p}' \rangle^* = - \int d^3 \mathbf{p}'' \langle \mathbf{p}' | R^\dagger | \mathbf{p}'' \rangle \langle \mathbf{p}'' | R | \mathbf{p} \rangle . \quad (163)$$

如果带入 R 矩阵和散射振幅的关系 eq. (162) 我们有：

$$\begin{aligned} & \delta(E_{\mathbf{p}} - E_{\mathbf{p}'} ) [f(\mathbf{p}' \leftarrow \mathbf{p}) - f^*(\mathbf{p} \leftarrow \mathbf{p}')] \\ &= \frac{i}{2\pi m} \int d^3 \mathbf{p}'' \delta(E_{\mathbf{p}'} - E_{\mathbf{p}''}) \delta(E_{\mathbf{p}''} - E_{\mathbf{p}}) f^*(\mathbf{p}'' \leftarrow \mathbf{p}') f(\mathbf{p}'' \leftarrow \mathbf{p}) . \end{aligned} \quad (164) \quad \{\text{eq:optical}\}$$

### 数学公式的使用

我们需要玩弄 delta 函数，下面存在两个会用到的 delta 函数的公式：

- **Delta 函数的传递**：delta 函数放在一起会有传递性：

$$\delta(E_{\mathbf{p}'} - E_{\mathbf{p}''}) \delta(E_{\mathbf{p}''} - E_{\mathbf{p}}) = \delta(E_{\mathbf{p}} - E_{\mathbf{p}'} ) \delta(E_{\mathbf{p}} - E_{\mathbf{p}''}) , \quad (165)$$

- **Delta 函数的复合**：如果 delta 函数和另一个函数复合了，我们存在关系：

$$\delta[f(x)] = \delta(x - x_0) / |f'(x_0)| \quad (166)$$

### Optical Theorem 的证明

我们将数学公式带入 eq. (164) 式子，可以把两个 delta 函数进行传递，然后使用 delta 函数的复合公式变成关于 p 的 delta 函数。我们把积分变成球坐标系的！

如果 **【我们只考虑入射方向  $p = p'$ 】**，我们有：

$$2i \text{Im} f(\mathbf{p} \leftarrow \mathbf{p}) = \frac{i}{2\pi m} \int d\Omega p''^2 dp'' \frac{m}{p} \delta(p - p'') |f(\mathbf{p}'' \leftarrow \mathbf{p})|^2 , \quad (167)$$

最后化简积分得到：

$$\text{Im} f(\mathbf{p} \leftarrow \mathbf{p}) = \frac{p}{4\pi} \int d\Omega |f(\mathbf{p} \leftarrow \mathbf{p})|^2 . \quad (168)$$

如果使用微分散射截面与散射振幅的关系，我们最终得到 Optical Theorem 的结果：

$$\text{Im} f(\mathbf{p} \leftarrow \mathbf{p}) = \frac{p}{4\pi} \sigma(\mathbf{p}) . \quad (169)$$

## 8.4 数学技巧

本章使用了很多数学上的特殊技巧，下面我们总结一下。

### 8.4.1 Delta 函数使用

[作业 8]

### 8.4.2 Green 函数使用

我们对于分母上面的复函数可以使用一个变形技巧：

$$\frac{1}{x + i\varepsilon} = -i\pi\delta(x) + \mathcal{P}\frac{1}{x}, \quad \varepsilon \rightarrow +0. \quad (170)$$

$$\frac{1}{x - i\varepsilon} = i\pi\delta(x) + \mathcal{P}\frac{1}{x}, \quad \varepsilon \rightarrow +0. \quad (171)$$

[作业 8]

## 8.5 Questions and thoughts

**Question 8.12** 散射振幅到底和什么有关系，为什么积分出射动量大小的时候可以不积分散射振幅里面的??

这是因为我们在讨论最初已经假设了弹性散射。所以，我们散射振幅其实只和【出射的方向】以及【入射的动量大小和方向】有关，所以我们对于出射动量大小进行积分的时候不会影响出射动量方向的信息!! □

**Question 8.13** 为什么散射截面会和动量有关系，到底是和动量的什么有关系大小还是方向??

我们的 set up 已经固定了一堆入射动量大小以及垂直于入射面的方向。散射截面的动量依赖其实就是表示我们散射 set up 入射动量大小的依赖!! □

**Question 8.14** 我们进行这个积分  $\int d^2a \omega(d\Omega \leftarrow \phi_a)$  ., 用它来对应一个立体角的散射截面，真的不会有归一化的问题吗？真的合法吗？

这样积分是完全合法的，我们观察这个式子：

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = N = \int d^2a \omega(d\Omega \leftarrow \phi_a). \quad (172)$$

两边对于立体角进行积分之后，我们可以得到右边正好是入射面积  $\pi a^2$ ，左边则是总散射截面。因此，这个式子在 interpretation 上是合法的! □

## 9 Lecture 9: 散射 Green 函数方法与 Born 近似

求解 S 矩阵十分困难，但是我们可以通过一个变形把求解的困难转化为对于一个成为 Green 函数的求解。进一步我们会发现，可以使用 Born 近似以微扰展开的方法处理整个散射的问题！

### 9.1 Moller Operator 的 Green Function 方法

有限时间Moller算子

对于有闲时间的 Moller 算符我们可以使用求导再进行定积分的方式进行改写：

$$U^\dagger(t)U_0(t) = 1 + \int_0^t dt' \frac{d}{dt'} [U^\dagger(t')U_0(t')] \quad (173)$$

我们带入时间演化算符的定义，然后进行形式化的求导计算可以得到：

$$U^\dagger(t)U_0(t) = 1 + i \int_0^t dt' U^\dagger(t') V U_0(t'). \quad (174)$$

Moller 算子作用在out state

我们考虑 Moller 算子作用在 out state 上面的形式：

$$|\psi_0\rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} U^\dagger(t)U_0(t)|\psi_{\text{out}}\rangle \quad (175)$$

$$= |\psi_{\text{out}}\rangle + i \int_0^\infty d\tau U^\dagger(\tau) V U_0(\tau) |\psi_{\text{out}}\rangle \quad (176)$$

上面的积分发散，所以我们需要使用一个数学 Trick：

- 在积分之中引入一个衰减因子，并认为只有这样处理才是物理的： $e^{-\epsilon\tau}$

于是我们得到：

$$|\psi_0\rangle = |\psi_{\text{out}}\rangle + \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int d^3\mathbf{p} \frac{1}{E_p - H - i\epsilon} V |\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p} | \psi_{\text{out}} \rangle. \quad (177)$$

其中我们虽然 H 写在了分母上面，我们的意思其实是这个算符的线性组合的逆算符，对于这样的算符我们称之为Green函数。

#### Definition 4. Green Function

给定一个 Hamiltonian  $H$ ，我们定义：

$$G(z) = \frac{1}{z - \hat{H}}. \quad (178)$$

$z$  是一个复数变量。我们称之为 Hamiltonian 对应的Green函数。

特别的对于自由粒子 Hamiltonian  $H_0$ ，我们定义：

$$G_0(z) = \frac{1}{z - \hat{H}_0}. \quad (179)$$

因此我们可以使用 Green Function 改写 Moller 算子。对于 out state 我们有：

$$|\psi_0\rangle = |\psi_{\text{out}}\rangle + \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int d^3\mathbf{p} G(E_p - i\varepsilon) V|\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p} | \psi_{\text{out}}\rangle. \quad (180)$$

类似的我们也可以得到 in state 的结果：

$$|\psi_0\rangle = |\psi_{\text{in}}\rangle + \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int d^3\mathbf{p} G(E_p + i\varepsilon) V|\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p} | \psi_{\text{in}}\rangle. \quad (181)$$

因此我们有结论：

**Theorem 6.** Moller Operator 的 Green 函数表示

两个 Moller Operator 可以使用 Green 函数表示为：

$$\Omega_{\pm} = 1 + \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int d^3\mathbf{p} G(E_p \pm i\varepsilon) V|\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p} |. \quad (182)$$

## 9.2 Green 函数到 T 矩阵再到散射振幅

### 9.2.1 Green 函数的结构

#### Green 函数的解析性质

根据之前 Hilbert Space 结构的讨论，我们可以使用第二种完备性关系对 Green 函数进行展开。我们知道 Hilbert Space 包含了两部分：

- 离散的束缚态谱： $E_n < 0$  对应  $|n\rangle$
- 连续的散射态谱： $E_p \geq 0$  对应  $|\mathbf{p}_+\rangle = \Omega_+ |\mathbf{p}\rangle$

所以，我们可以把 Green 函数进行本征展开：

$$G(z) = \sum_{n=1}^N \frac{|n\rangle \langle n|}{z - E_n} + \int d^3\mathbf{q} \frac{|\mathbf{q}_+\rangle \langle \mathbf{q}_+|}{z - E_q}. \quad (183)$$

观察函数形式，会发现这是一个复变函数，在实轴上面有一系列的极点以及割线：

- 束缚态极点： $z = E_n < 0$ ，并对应留数  $\text{res}_{z=E_n} G(z) = |n\rangle \langle n|$  .
- 散射态割线： $z \in [0, +\infty)$

同样的对于自由粒子 Hamiltonian  $H_0$ ，我们也可以得到类似的结果。只不过没有束缚态极点，只有散射态割线。通过这个分析我们有一个很重要的结论：

**Theorem 7.** Green 函数与 Spectrum

对于一个散射理论的 set up，如果我们清楚了 Green 函数的形式也就是知道了解析形式，那么就等价于我们知道了这个理论的 Hamiltonian 谱的信息。

所以我们研究散射理论可以把 Green 函数作为整个理论的核心对象。

### 自由粒子Green函数

求解 Green 函数十分困难，但是自由粒子的 Green Function 十分容易求解，我们不妨先分析自由粒子 Green 函数的性质：

- 自由粒子 Green 函数的本征展开：

$$G_0(z) = \int d^3\mathbf{q} \frac{|\mathbf{q}\rangle\langle\mathbf{q}|}{z - E_q} . \quad (184)$$

- 空间表象展开：自由粒子 Green 函数在空间表象下的形式为：

$$\langle\mathbf{x}|\hat{G}_0(z)|\mathbf{x}'\rangle = -\frac{m}{2\pi} \frac{e^{i\sqrt{2mz}|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} . \quad (185) \quad \text{\texttt{eq:free\_}}$$

所以我们发现自由粒子 Green 函数的形式是非常简单，可以解析的计算的。

### Lippmann-Schwinger方程

Green 函数本身十分复杂。但是我们会发现自由粒子 Green 函数和势能形式都很简单。所以一个求解思路就是使用自由粒子 Green 函数和势能线性的构造出完整的 Green 函数。这个可以通过 Lippmann-Schwinger 方程进行实现：

#### Theorem 8. Lippmann-Schwinger 方程

给定一个 Hamiltonian  $H = H_0 + V$ ，其对应的 Green 函数满足下面的方程：

$$G(z) = G_0(z) + G_0(z)VG(z) = G_0(z) + G(z)VG_0(z) . \quad (186)$$

证明使用了下面的数学公式并选择了特殊的算符  $A, B$ ：

$$A^{-1} = B^{-1} + B^{-1}(B - A)A^{-1} . \quad (187)$$

## 9.2.2 T 矩阵与散射振幅

### T矩阵改写Green函数

我们知道真正的可观测量是散射振幅，所以我们需要一个方法把 Green 函数和散射振幅联系起来。我们定义 T 矩阵：

#### Definition 5. T-Matrix

给定一个 Hamiltonian  $H = H_0 + V$ ，我们定义 T 矩阵为：

$$T(z) = V + VG(z)V . \quad (188)$$

同时有逆变换：

$$G(z) = G_0(z) + G_0(z)T(z)G_0(z) . \quad (189)$$

我们会发现这个函数和 Green 函数有一样的解析结构，因此其也包含了 Hamiltonian 的谱信息。同时我们类似的可以使用 Lippmann-Schwinger 方程对 T 矩阵进行改写。先引入两个恒等式，可以直接根据 T 矩阵的定义以及 Lippmann-Schwinger 方程得到：

$$G_0(z)T(z) = G(z)V, \quad (190) \quad \text{\texttt{eq:T_mat}}$$

$$T(z)G_0(z) = VG(z), \quad (191) \quad \text{\texttt{eq:T_mat}}$$

第一个恒等式加上 Lippmann-Schwinger 方程的形式我们可以得到拟变换。

- 我们知道 T 矩阵如同 Green 函数的一个变形改写，几乎包含了类似的信息。

所以我们同样可以构造一个类似的 Lippmann-Schwinger 方程：

**Theorem 9.** *T 矩阵的 Lippmann-Schwinger 方程*

给定一个 Hamiltonian  $H = H_0 + V$ ，其对应的 T 矩阵满足下面的方程：

$$T(z) = V + VG_0(z)T(z). \quad (192)$$

### S矩阵与T矩阵的关系

我们使用 T 矩阵等价的改写 Green 函数是因为其可以很好的和 S 矩阵联系起来。从而我们可以得到散射振幅的信息。回顾 S 矩阵的定义是：

$$S = \lim_{t \rightarrow \infty} e^{iH_0 t} e^{-2iHt} e^{iH_0 t}. \quad (193)$$

同样的我们可以使用求导再引入衰减因子再积分的技巧进行改写：

$$S = 1 - i \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \int_0^\infty dt e^{-\epsilon t} [e^{iH_0 t} V e^{-2iHt} e^{iH_0 t} + e^{iH_0 t} e^{-2iHt} V e^{iH_0 t}], \quad (194)$$

我们考虑如果一个散射 in and out 态是动量本征态  $|\mathbf{p}\rangle$ ，那么我们有：

$$\langle \mathbf{p}' | S | \mathbf{p} \rangle = \delta^{(3)}(\mathbf{p} - \mathbf{p}') - \frac{1}{2} \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \langle \mathbf{p}' | VG \left( \frac{E_{\mathbf{p}'} + E_{\mathbf{p}}}{2} + i\epsilon \right) + G \left( \frac{E_{\mathbf{p}'} + E_{\mathbf{p}}}{2} + i\epsilon \right) V | \mathbf{p} \rangle. \quad (195)$$

我们使用前面的恒等式将 Green 函数改写为 T 矩阵形式：

$$\langle \mathbf{p}' | S | \mathbf{p} \rangle = \delta^{(3)}(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) - \frac{1}{2} \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \langle \mathbf{p}' | T \left( \frac{E_{\mathbf{p}'} + E_{\mathbf{p}}}{2} + i\epsilon \right) | \mathbf{p} \rangle \left[ \frac{2}{E_{\mathbf{p}'} - E_{\mathbf{p}} + i\epsilon} + \frac{2}{E_{\mathbf{p}} - E_{\mathbf{p}'} + i\epsilon} \right] \quad (196)$$

这里我们使用一个极其重要的数学技巧处理分母上面的复变函数：

$$\frac{1}{x + i\epsilon} = \mathcal{P} \left( \frac{1}{x} \right) - i\pi\delta(x), \quad (197)$$

**Theorem 10.** *S 矩阵，T 矩阵和散射振幅的关系*

给定一个 Hamiltonian  $H = H_0 + V$ ，其对应的 S 矩阵和平面波本征态之间的关系为：

$$\langle \mathbf{p}' | S | \mathbf{p} \rangle = \delta^{(3)}(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) - 2\pi i \delta(E_{\mathbf{p}} - E_{\mathbf{p}'}) \langle \mathbf{p}' | T(E_{\mathbf{p}} + i\epsilon) | \mathbf{p} \rangle. \quad (198)$$

对于散射振幅以及 T 矩阵的关系为：

$$t(p' \leftarrow p) = \langle p' | T(E_p + i\epsilon) | p \rangle = -\frac{1}{(2\pi)^2 m} f(p' \leftarrow p), \quad \text{if } E_{p'} = E_p. \quad (199)$$



### On shell讨论

我们对于散射振幅， $t$  振幅的定义都是在 on shell 的基础上的，也就是说  $E_{p'} = E_p$ 。但是  $T$  矩阵的定义本身并没有这个限制，所以我们可以考虑  $T$  矩阵的 off shell 推广。然后使得对于一些能量的入射是 on shell 的。

## 9.3 Born 近似

$T$  矩阵以及散射振幅我们很难进行解析求解。所以我们会使用一个近似手段也就是 Born 近似进行处理。我们假设相互作用相对于自由粒子 Hamiltonian 来说是一个微扰，那么我们可以使用微扰论的方法处理。

### T矩阵的微扰展开

考虑系统的 Hamiltonian 呈现：

$$H = H_0 + \lambda V . \quad (200)$$

我们改写  $T$  矩阵的 Lippmann-Schwinger 方程：

$$T(z) = \lambda V + \lambda V G_0(z) T(z) \Rightarrow T(z) = (1 - \lambda V G_0(z))^{-1} \lambda V . \quad (201)$$

因此我们对于  $(1 - \lambda V G_0(z))^{-1}$  进行微扰展开：

$$T = \lambda V + \lambda^2 V G_0 V + \lambda^3 V G_0 V G_0 V + \dots \quad (202)$$

### 一阶Born近似

对于一阶的 Born 近似，我们只保留  $T$  矩阵展开的第一项：

$$T^{(1)} = \lambda V . \quad (203)$$

我们根据  $T$  矩阵和散射振幅的关系 theorem 10可以得到：

$$f^{(1)}(\mathbf{p}' \leftarrow \mathbf{p}) = -(2\pi)^2 m \langle \mathbf{p}' | V | \mathbf{p} \rangle \quad (204)$$

$$= -(2\pi)^2 m \int d^3 \mathbf{x} \langle \mathbf{p}' | V | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle \quad (205)$$

$$= -\frac{m}{2\pi} \int d^3 \mathbf{x} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}} V(\mathbf{x}) , \quad (206)$$

这里我们使用第一章的量子力学的 convention 进行计算：

$$\langle p' | V | p \rangle = \int d^3 x \langle p' | x \rangle \langle x | V | p \rangle = \int d^3 x \frac{e^{-ip' \cdot x}}{(2\pi)^{3/2}} V(x) \frac{e^{ip \cdot x}}{(2\pi)^{3/2}} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 x e^{-i(p' - p) \cdot x} V(x). \quad (207) \quad \{\text{eq:plane}$$

其中我们使用了  $\mathbf{q} = \mathbf{p}' - \mathbf{p}$  表示动量转移。注意，动量转移如果我们使用入射和散射角度表示的话，有：

$$|\mathbf{q}| = 2p \sin \left( \frac{\theta}{2} \right) . \quad (208)$$

如果是求解径向对称的势能  $V(\mathbf{x}) = V(r)$ ，我们可以很方便的得到散射振幅以及微分散射截面。

### 二阶Born近似

对于二阶的 Born 近似，我们保留  $T$  矩阵展开的前两项：

$$T^{(1)} + T^{(2)} = \lambda V + \lambda^2 V G_0 V , \quad (209)$$

第一项上面已经完成讨论，对于第二项我们有：

$$f^{(2)}(\mathbf{p}' \leftarrow \mathbf{p}) = -(2\pi)^2 m \langle \mathbf{p}' | V G_0 V | \mathbf{p} \rangle \quad (210)$$

$$= -(2\pi)^2 m \int d^3 \mathbf{q} \langle \mathbf{p}' | V | \mathbf{q} \rangle \langle \mathbf{q} | G_0(E_p + i\varepsilon) | \mathbf{q} \rangle \langle \mathbf{q} | V | \mathbf{p} \rangle \quad (211)$$

$$= -(2\pi)^2 m \int d^3 \mathbf{q} \langle \mathbf{p}' | V | \mathbf{q} \rangle \langle \mathbf{q} | V | \mathbf{p} \rangle \frac{1}{E_p - E_q + i\varepsilon} , \quad (212)$$

#### Remark:

注意，我们的  $t$ -振幅和散射振幅都需要  $E_p = E_p'$  成立才有意义，所以我们在这里默认这两个是一样的！

这里我们可以使用之前一阶结果 eq. (207) 进行进一步计算！

## 10 Lecture 10: S 矩阵和散射振幅另一种表示

### 10.1 Stationary Scattering State

#### 一维散射理论analogue

对于一维的散射理论我们一般使用了一种思路进行求解：

- 首先假设入射和出射都是平面波形式，并且存在反射和透射系数：

$$\begin{aligned}\psi &\rightarrow e^{ipx} + Re^{-ipx}, & x \rightarrow -\infty, \\ \psi &\rightarrow De^{ipx}, & x \rightarrow +\infty.\end{aligned}\tag{213}$$

- 将其作为边界条件，求解定态 Schrodinger 方程得到反射和透射系数。
- 得到一维的 S 矩阵以及散射振幅。注意，对于 1 维来说，由于入射和透射需要能量大小一样，所以方向其实只有两种可能  $p, -p$ ，因此 S 矩阵是一个  $2 \times 2$  的矩阵：

$$S = \begin{pmatrix} D & R \\ R & D \end{pmatrix}$$

#### 一般散射理论推广

我们对于一般的散射理论也可以使用类似方法求解，但是我们需要知道两个东西：

1. 类比经典散射理论，有什么类似  $p$  的标记能够展开所有的 stationary scattering state 吗？
2. stationary scattering state 的临界行为是什么？

下面我们分别回答这两个问题。

#### Scattering State的展开复习

这里我们再仔细回顾一下之前讨论的 Hilbert Space 的结构以及使用 Scattering State 和 Bound State 进行完备展开的内容。对于之前散射理论的讨论，我们存在假设：

- 整个 Hilbert Space 可以由自由粒子的波函数进行很好的展开。

因此对于一切 in state 我们都可以写作：

$$|\phi\rangle = \int d^3\mathbf{p} \phi(\mathbf{p})|\mathbf{p}\rangle. \tag{214}$$

然后我们知道在 0 时间的散射态可以通过 in state 作用上 Moller Operator 得到，所以我们有：

$$\Omega_+|\phi\rangle = \int d^3\mathbf{p} \phi(\mathbf{p})\Omega_+|\mathbf{p}\rangle = \int d^3\mathbf{p} \phi(\mathbf{p})|\mathbf{p}_+\rangle. \tag{215}$$

其中我们定义  $|\mathbf{p}_+\rangle = \Omega_+|\mathbf{p}\rangle$ 。这个态性质很好，恰好是 Hamiltonian 的本征值为  $p^2/2m$  的本征态。并且一切的 stationary scattering state 都可以通过不同的  $\phi(\mathbf{p})$  进行线性组合得到。因此我们可以使用  $\mathbf{p}$  来标记 stationary scattering state。我们下面讨论其性质：

- **Hamiltonian 本征态**: 由于 Moller Operator 的定义, 我们有

$$H|\mathbf{p}_+\rangle = H\Omega_+|\mathbf{p}\rangle = \Omega_+H_0|\mathbf{p}\rangle = \frac{p^2}{2m}|\mathbf{p}_+\rangle. \quad (216)$$

- **正交性**: 根据 Moller Operator 的性质, 我们有

$$\langle\mathbf{p}'_+|\mathbf{p}_+\rangle = \langle\mathbf{p}'|\Omega_+^\dagger\Omega_+|\mathbf{p}\rangle = \langle\mathbf{p}'|\mathbf{p}\rangle = \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}). \quad (217)$$

- **完备性**: 我们之前假设 Hilbert Space 在散射时刻可以使用 Moller Operator 像空间「散射态」; 以及 Bounded State 进行完备展开, 数学上写出来就是:

1. 对于无穷远时间, 我们有:

$$\mathbb{1} = \int d^3\mathbf{p} |\mathbf{p}\rangle\langle\mathbf{p}| \quad (218)$$

2. 对于  $t = 0$  时间:

$$\mathbb{1} = \int d^3\mathbf{p} |\mathbf{p}_+\rangle\langle\mathbf{p}_+| + \sum_n |n\rangle\langle n| \quad (219)$$

$$= \int d^3\mathbf{p} |\mathbf{p}_-\rangle\langle\mathbf{p}_-| + \sum_n |n\rangle\langle n| \quad (220)$$

#### Remark:

其实这个内容在 section 7 已经假设讨论了。这里只是总结强调一下。

#### Stationary Scattering State 的波函数渐进行为

所以我们就要讨论  $|\mathbf{p}_+\rangle$  的波函数形式的渐近行为。我们给出定理

#### Theorem 11. Stationary Scattering State 的波函数

对于散射理论, stationary scattering state 的波函数在远离散射中心时的渐近行为为:

$$\langle\mathbf{x}|\mathbf{p}_+\rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[ e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} + f\left(p, \frac{\mathbf{x}}{r} \leftarrow \mathbf{p}\right) \frac{e^{ipr}}{r} \right] \quad (221)$$

Proof: 可以使用 Moller Operator 的 Green 函数表示进行证明, 回顾 theorem 6, 我们带入:

$$|\mathbf{p}_+\rangle = |\mathbf{p}\rangle + G(E_p + i\varepsilon)V|\mathbf{p}\rangle. \quad (222)$$

然后我们使用 T 矩阵的特殊换位形式 eq. (190), 我们有:

$$\langle\mathbf{x}|\mathbf{p}_+\rangle = \langle\mathbf{x}|\mathbf{p}\rangle + \langle\mathbf{x}|G_0(E_p + i\varepsilon)T(E_p + i\varepsilon)|\mathbf{p}\rangle \quad (223)$$

代入 T 矩阵和散射振幅的关系我们有:

$$\langle\mathbf{x}|\mathbf{p}_+\rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[ e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} - \frac{1}{(2\pi)^2 m} \int d^3\mathbf{x}' d^3\mathbf{p}' e^{i\mathbf{p}'\cdot\mathbf{x}'} f(\mathbf{p}' \leftarrow \mathbf{p}) \langle\mathbf{x}|G_0(E_p + i\varepsilon)|\mathbf{x}'\rangle \right]. \quad (224)$$

这里我们使用自由粒子 Green 函数的形式 eq. (185), 可以得到:

$$\langle\mathbf{x}|G_0(E + i\varepsilon)|\mathbf{x}'\rangle = -\frac{m}{2\pi|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} e^{ip|\mathbf{x} - \mathbf{x}'| - \varepsilon|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}. \quad (225)$$

下面考虑  $r = |\mathbf{x}| \rightarrow \infty$  的渐近行为, 进行一波计算我们有:

$$\langle\mathbf{x}|\mathbf{p}_+\rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[ e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} - f\left(p, \frac{\mathbf{x}}{r} \leftarrow \mathbf{p}\right) \frac{1}{r} e^{ipr} \right], \quad (226)$$

## 10.2 S 矩阵的 T Production 表示

对于 S 矩阵我们有一种特殊的表示方法，称为 T Production 表示，结论是：

**Theorem 12.** *S 矩阵的 T Production 表示*

*S 矩阵可以被势能表示为：*

$$S = T \exp \left( -i \int_{-\infty}^{\infty} dt V(t) \right). \quad (227)$$

其中 *T Product* 的定义是：

$$TV(t_1)V(t_2) = \theta(t_1 - t_2)V(t_1)V(t_2) + \theta(t_2 - t_1)V(t_2)V(t_1) \quad (228)$$

也就是永远保持算符时间从右到左时间递减排列。

### S 矩阵的 Interacting Picture

我们回顾一下 S 矩阵使用 Interacting Picture 的定义。Interaction Picture 之中时间演化算符被定义为 eq. (128)，我们抄下来是：

$$S(t_1, t_2) = e^{iH_0 t_1} e^{iH(t_2 - t_1)} e^{-iH_0 t_2}. \quad (229)$$

S 矩阵其实是这个算符在  $t_1 \rightarrow +\infty, t_2 \rightarrow -\infty$  的极限。我们使用积分 Trick 进行计算这个算符，我们知道  $S(t_2, t_2) = 0$ ，所以时间演化算符可以写作：

$$S(t_1, t_2) = 1 + \int_{t_2}^{t_1} dt \frac{d}{dt} S(t, t_2). \quad (230)$$

计算右边的导数我们有：

$$\frac{\partial}{\partial t_1} S(t_1, t_2) = -iU_0^\dagger(t_1)(H - H_0)U_0(t_1)S(t_1, t_2) = -iV(t_1)S(t_1, t_2), \quad (231)$$

带入之后我们会有：

$$S(t_1, t_2) = 1 - i \int_{t_2}^{t_1} dt V(t) S(t, t_2). \quad (232)$$

我们发现右边积分里面又有  $S(t, t_2)$ ，所以我们可以继续迭代这个公式：

$$S = \sum_{n=0}^{\infty} S_n^2, \quad S_n = (-i)^n \int_{t_2}^{t_1} dt V(t) \int_{t_2}^t dt' V(t') \int_{t_2}^{t'} dt'' V(t'') \dots \quad (233)$$

并且由于我们的迭代，这些  $V$  算符的时间顺序是从右到左递减的。因此我们可以使用 T Product 的形式以及对于一个 cube 积分进行改写：

$$S_n = (-1)^n \frac{1}{n!} \int_{t_1}^{t_2} dt \int_{t_1}^{t_2} dt' \int_{t_1}^{t_2} dt'' \dots (TV(t)V(t')V(t'')\dots). \quad (234)$$

**Remark:**

注意！最后这个式子我们是对于  $\text{cube}$  进行积分，积分上下限制完全都是一样的。

## 11 Lecture 11: Partial Wave Expansion

Follow 上一 section 的思路，散射振幅可以通过求解 Stationary Schrodinger 方程，找到符合合理渐近行为的散射态波函数。从而通过渐近行为读出散射振幅。这个过程我们可以使用 partial wave 的数学技巧进行实现。并且得到一个意想不到的结论：

- 散射的势能的信息完全包含在各个 partial wave 的相位移中，并从中可以给出散射振幅

### Remark:

一个需要澄清的事实：

Partial Wave 是整个散射理论 Hamiltonian 的解空间的基；而 Stationary Scattering State 是「散射态」空间的基。后者的空间是前者的一个子空间，因此我们可以使用前者展开后者的。

### 11.1 Partial Wave Expansion 数学技巧

#### 11.1.1 基本定义

#### Partial Wave Expansion 基本思路

Partial Wave Expansion 本身是一个求解定态 Schrodinger 方程的数学技巧。在此我们使用求解散射 Hamiltonian 对应的定态 Schrodinger 方程。我们假设只考虑中心势场  $V(r)$ ，因此：

- Hamiltonian 在坐标表象的微分算符和角动量算符是对易的

这也就是说明：

- 在坐标表象下可以使用角动量微分算符的本征函数进行展开求解定态 Schrodinger 方程

#### Definition 6. 角动量微分算符

在坐标表象下，角动量算符的表示为：

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (235)$$

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left( \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \quad (236)$$

### Remark:

上面这些话虽然用的名词很物理，但是我们其实干的事情就是用一个数学技巧找到一个比较复杂的偏微分方程解空间的一个完备基底，然后使用这个完备基底进行展开求解而已。

于是我们发现定态 Schrodinger 方程的解空间呈现下面的结构：

#### Theorem 13. Partial Wave

对于中心势场  $V(r)$ ，定态 Schrodinger 方程的解空间可以使用角动量算符的本征函数进行展开。其函数基为：

$$\varphi_{klm}(\mathbf{r}) = R_{kl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi), \quad (237)$$

这个函数同时是 *Hamiltonian* 以及角动量算符  $\hat{L}^2, \hat{L}_z$  的共同本征函数, 满足:

$$H\varphi_{klm}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\varphi_{klm}(\mathbf{r}) \quad (238)$$

$$\hat{L}^2\varphi_{klm}(\mathbf{r}) = \hbar^2 l(l+1)\varphi_{klm}(\mathbf{r}) \quad (239)$$

$$\hat{L}_z\varphi_{klm}(\mathbf{r}) = \hbar m\varphi_{klm}(\mathbf{r}) \quad (240)$$

其中  $Y_l^m(\theta, \varphi)$  为球谐函数「函数形式完全固定」;  $R_{kl}(r)$  为径向函数「由势能  $V(r)$  具体形式决定」。并且  $R_{kl}(r)$  满足径向 *Schrodinger* 方程:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right] R_{kl}(r) = ER_{kl}(r) \quad (241)$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (242)$$

我们可以使用上面的函数基进行展开任意定态 *Schrodinger* 方程的解。我们下面将研究怎样展开散射解。

### 11.1.2 自由粒子波函数的 Partial Wave Expansion

#### 自由粒子Hamiltonian的Partial Wave

首先考虑没有势能的情况下 Partial Wave 的形式。我们已经知道球谐函数的形式, 待定的只有径向函数  $R_{kl}(r)$ 。在没有势能的情况下, 径向 *Schrodinger* 方程为:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right] R_{kl}(r) = ER_{kl}(r) \quad (243)$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (244)$$

一个基本技巧为, 我们定义  $u_{kl}(r) = rR_{kl}(r)$ , 那么上面的方程可以化为:

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2mE_{kl}}{\hbar^2} \right] u_{kl}(r) = 0, \quad (245)$$

通过数学技巧的计算我们得到:

#### Theorem 14. 自由粒子 Hamiltonian 的 Partial Wave

没有势能的情况下, 自由粒子定态 *Schrodinger* 方程的解空间的 Partial Wave 为:

$$\varphi_{klm}^0(\mathbf{r}) = R_{kl}(r)Y_m^l(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2k^2}{\pi}} j_l(kr)Y_m^l(\theta, \varphi). \quad (246)$$

其中  $j_l(kr)$  为第  $l$  阶的 *Spherical Bessel* 函数。定义为:

$$j_l(\rho) := (-1)^l \rho^l \left( \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \frac{\sin \rho}{\rho}, \quad (247)$$

#### 自由粒子Partial Wave的性质



- 正交完备情况

这一组函数满足正交完备关系：

$$\left[ \int_0^\infty r^2 dr R_{kl}(r) R_{k'l}(r) \right] \left[ \int d\Omega Y_l^{m*}(\Omega) Y_l^{m'}(\Omega) \right] = \delta(k - k') \delta_{ll'} \delta_{mm'}. \quad (248)$$

完备关系为：

$$\int_0^\infty dk \sum_{l=0}^\infty \sum_{m=-l}^l \varphi_{klm}^0(\mathbf{x}) (\varphi_{klm}^0(\mathbf{x}'))^* = \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (249)$$

我使用坐标表象 explicitly 写出来为了保证计算更加方便「毕竟我们在讨论具体的解微分方程的问题」

- 径向函数特殊情况

对于  $l = 0$  的情况，我们有：

$$\varphi_{k00}^0(r) = \sqrt{\frac{2k^2}{\pi}} \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{\sin(kr)}{kr}. \quad (250)$$

### Partial Wave 渐进形式

- 0 附近渐近行为

相比于波函数，我们更关心概率密度的渐进行为，我们知道一个微元内的概率密度为：

$$\frac{2(kr)^2}{\pi} |j_l(kr)|^2 |Y_m^l(kr)|^2 \sin \theta_0 \, dr d\theta d\varphi. \quad (251)$$

数学上 Spherical Bessel 函数在 0 附近的渐近行为为：

$$j_l(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow 0} \frac{\rho^l}{(2l+1)!!}. \quad (252)$$

这也就说明 0 附近概率密度十分的小，并且随着  $l$  的增大概率密度在 0 附近衰减的越快，速度大致为  $r^{2l+2}$ 。

- 无穷远处渐近行为 【十分重要】

为了研究散射态行为，更重要的是研究整个波函数在无穷远处的渐近行为。我们知道 Spherical Bessel 函数在无穷远处的渐近行为为：

$$j_l(\rho) \underset{\rho \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{\rho} \sin\left(\rho - l\frac{\pi}{2}\right). \quad (253)$$

于是我们有：

**Theorem 15.** 自由粒子 Partial Wave 无穷远处渐近行为

自由粒子 Partial Wave 在无穷远处的渐近行为为：

$$\varphi_{klm}^0(\mathbf{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} -\sqrt{\frac{2k^2}{\pi}} Y_l^m(\theta, \varphi) \frac{e^{-ikr} e^{il\frac{\pi}{2}} - e^{ikr} e^{-il\frac{\pi}{2}}}{2ikr}, \quad (254)$$

一个物理的理解就是无穷远附近 partial wave 解就是有相位差的一个入射波和出射波的叠加。

### 平面波的Partial Wave Expansion

一个和散射相关的具体例子，对于没有势能来说。我们 Stationary Scattering State 的波函数也就是平面波，我们不妨假设所有粒子都沿着  $z$  轴正方向入射，那么平面波为：

$$\langle r|k\rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{ikz} \quad (255)$$

下面我们使用 Partial Wave 进行展开。不妨先分析：

- 平面波形式和  $\varphi$  方向无关所以我们只需要考虑  $m = 0$  的情况

我们可以通过正交性关系给出展开系数

#### Theorem 16. 平面波的 Partial Wave Expansion

平面波可以使用 Partial Wave 进行展开，展开形式为：

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{4\pi(2l+1)} \sqrt{\frac{\pi}{2k}} \varphi_{klm}^0(\mathbf{r}) \quad (256)$$

$$= \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{4\pi(2l+1)} j_l(kr) Y_l^0(\theta) \quad (257)$$

$$= \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos \theta) \quad (258)$$

其中我们使用了 Legendre 多项式，其与球谐函数的关系为：

$$Y_l^0(\theta) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta). \quad (259)$$

### 平面波的无穷远处渐近行为

我们使用上面的展开式以及 Spherical Bessel 函数的无穷远处渐近行为，可以得到平面波在无穷远处的渐近行为为：

$$e^{ikz} \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} - \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{4\pi(2l+1)} Y_l^0(\theta, \varphi) \frac{e^{-ikr} e^{il\frac{\pi}{2}} - e^{ikr} e^{-il\frac{\pi}{2}}}{2ikr}, \quad (260)$$

这对于后面的散射态的无穷远处渐近行为分析十分重要。

### 11.1.3 散射 Hamiltonian 的 Partial Wave Expansion

#### 散射Hamiltonian的Partial Wave形式

下面我们考虑更一般的散射 Hamiltonian 的 Partial Wave 形式。我们假设势能形式为中心势场  $V(r)$ ，那么径向 Schrodinger 方程为：

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r) \right] u_{kl}(r) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} u_{kl}(r) \quad (261)$$

其中  $u_{kl}(r) = rR_{kl}(r)$ 。Partial Wave 形式为:

$$\varphi_{klm}(\mathbf{r}) = R_{kl}(r)Y_l^m(\theta, \varphi) = \frac{1}{r}u_{kl}(r)Y_l^m(\theta, \varphi), \quad (262)$$

### 散射 Hamiltonian 的 Partial Wave 无穷远处渐近行为

具体的求解会是 Model dependent 的, 但是如果我们只关心无穷远的渐近行为, 我们会发现有统一的形式。因为我们的  $l(l+1)/r^2$  项在无穷远处会消失, 势能也在无穷远处逐渐消失, 所以方程在无穷远处会化为下面的径向 Schrodinger 方程:

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} + k^2 \right] u_{kl}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} 0 \quad (263)$$

解也就是:

$$u_{kl}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} Ae^{ikr} + Be^{-ikr}. \quad (264)$$

我们分析:

- 在  $r = 0$  的时候, 我们认为势能趋近于无穷大, 因此波函数在  $r = 0$  附近满足边界条件  $|A| = |B|$

所以径向波函数在无穷远的渐近行为为:

$$u_{k,l}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} C \sin \left( kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l \right). \quad (265)$$

其中  $\delta_l$  为相位移。写作散射态 Partial Wave 的形式为:

**Theorem 17.** 散射 Hamiltonian 的 Partial Wave 无穷远处渐近行为

散射 Hamiltonian 的 Partial Wave 在无穷远处的渐近行为为:

$$\varphi_{klm}(\mathbf{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} C \frac{\sin(kr - l\pi/2 + \delta_l)}{r} Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (266)$$

$$\underset{r \rightarrow \infty}{\sim} -Ck Y_l^m(\theta, \varphi) \frac{e^{-ikr} e^{i(l\pi/2 - \delta_l)} - e^{ikr} e^{-i(l\pi/2 - \delta_l)}}{2ikr} \quad (267)$$

我们可以直接观察到这个和自由粒子 Partial Wave 的无穷远处渐近行为的区别就在于相位移  $\delta_l$ 。说明:

- 散射势能的信息完全包含在各个 Partial Wave 的相位移  $\delta_l$  中

为了方便散射的讨论, 我们可以选择 Partial Wave 的一个合适的归一化常数  $C$ , 使得:

**Theorem 18.** 散射 Hamiltonian 的 Partial Wave 无穷远处渐近行为 (归一化形式)

散射 Hamiltonian 的 Partial Wave 在无穷远处的渐近行为可以归一化为:

$$\tilde{\varphi}_{klm}(\mathbf{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} Y_l^m(\theta, \varphi) \frac{e^{-ikr} e^{i\pi/2} - e^{ikr} e^{-i\pi/2} e^{2i\delta_l}}{2ikr}. \quad (268)$$

## 11.2 Stationary Scattering State 的 Partial Wave Expansion

### Stationary Scattering State 的 Partial Wave Expansion

在上面准备的基础上我们可以讨论 Stationary Scattering State 的 Partial Wave Expansion。我们知道一个合理的 Stationary Scattering State 的波函数在无穷远处的渐近行为为：

$$\Psi_k^{scatt}(\mathbf{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} e^{ikr} + f_k(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (269)$$

考虑 Stationary Scattering State 的性质我们知道：

- 其为 Hamiltonian 的本征值为  $\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$  的本征态；同时与  $\varphi$  无关。因此我们可以使用 Partial Wave 进行展开  $k$  是固定的， $m = 0$  也是固定的。

也就是说我们仅仅需要对于  $l$  进行展开：

$$\Psi_k^{scatt}(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} c_l \tilde{\varphi}_{kl0}(\mathbf{r}). \quad (270)$$

- Stationary Scattering State 的无穷远处渐近行为可以知道第一项必须是平面波，为此我们知道  $c_l$  的形式也是固定的：

$$c_l = i^l \sqrt{4\pi(2l+1)} \quad (271)$$

Proof: 算一算就知道了，下面我会算。因此我们给出定理：

### Theorem 19. Stationary Scattering State 的 Partial Wave Expansion

Stationary Scattering State 的波函数可以使用 Partial Wave 进行展开，展开形式为：

$$\Psi_k^{scatt}(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{4\pi(2l+1)} \tilde{\varphi}_{kl0}(\mathbf{r}). \quad (272)$$

### Stationary Scattering State 的渐近行为

我们研究这个展开形式在无穷远处的渐近行为：

$$\Psi_k^{scatt}(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{4\pi(2l+1)} \tilde{\varphi}_{kl0}(\mathbf{r}) \quad (273)$$

$$\underset{r \rightarrow \infty}{\sim} - \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{4\pi(2l+1)} Y_l^0(\theta) \times \frac{1}{2ikr} \left[ e^{-ikr} e^{i\frac{l\pi}{2}} - e^{ikr} e^{-i\frac{l\pi}{2}} e^{2i\delta_l} \right]. \quad (274)$$

我们进行变形： $e^{2i\delta_l} = 1 + 2ie^{i\delta_l} \sin \delta_l$ ，因此上式可以写作：

$$\Psi_k^{scatt}(\mathbf{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} - \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{4\pi(2l+1)} Y_l^0(\theta) \left[ \frac{e^{-ikr} e^{i\pi/2} - e^{ikr} e^{-i\pi/2}}{2ikr} - e^{ikr} \frac{1}{k} e^{-i\frac{l\pi}{2}} e^{i\delta_l} \sin \delta_l \right]. \quad (275)$$

观察这个形式以及和平面波的 Partial Wave Expansion 的对比，我们会发现第一项正好就是平面波的无穷远处渐近行为

**Remark:**

这也证明了我们前面的展开系数是正确的!!

因此我们发现, Scattering State 的渐近行为可以使用 Partial Wave 的信息给出。并且散射振幅可以唯一的通过 Partial Wave 的相位移给出:

**Theorem 20.** Stationary Scattering State 的渐近行为 (Partial Wave 形式)

Stationary Scattering State 的波函数在无穷远处的渐近行为为:

$$\Psi_k^{scatt}(\mathbf{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} e^{ikz} + f_k(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (276)$$

其中:

$$f_k(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{4\pi(2l+1)} e^{i\delta_l} \sin \delta_l Y_l^0(\theta). \quad (277)$$

也就是我们的散射振幅

散射振幅, 截面与相位移的关系

我们改写一下上面的定理提取一下关键结论:

**Theorem 21.** 散射振幅与相位移的关系

散射振幅与各个 Partial Wave 的相位移的关系为:

$$f_k(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{4\pi(2l+1)} e^{i\delta_l} \sin \delta_l Y_l^0(\theta). \quad (278)$$

因此散射截面也可以通过相位移给出:

**Theorem 22.** 散射截面与相位移的关系

散射截面与各个 Partial Wave 的相位移的关系为:

$$\left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{\theta} = |f_k(\theta)|^2 = \frac{1}{k^2} \left| \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{4\pi(2l+1)} e^{i\delta_l} \sin \delta_l Y_l^0(\theta) \right|^2. \quad (279)$$

积分得到总截面为:

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l \quad (280)$$

散射问题

这个关系告诉我们正反两面:

- 正向：给定势能，我们可以通过求解微分方程比较无穷远的行为给出  $\delta_l$  进一步给出散射振幅
- 反向：通过实验测量散射截面，我们可以反推出各个  $\delta_l$ ，进而反推出势能的信息

### 11.3 特殊函数性质

球谐函数性质

Legendre多项式性质

### 11.4 Questions and Thoughts

## 12 Lecture 12: Dirac Equation and Pauli Equation

这一章介绍的是古人对于相对论和量子力学结合的早期探索。内容从现在的观点是错误的，dirac equation 是场方程而非波函数的 Schrodinger 方程。而真正本质的应该是相对论量子场论。

### 12.1 Relativistic Schrodinger Equation

#### 12.1.1 Failed Attempts

古人的理想是使用协变的语言书写量子力学。因此进行了一些尝试。但是一些 naive 的尝试都最终失败了！

##### 直接使用相对论粒子能量

我们知道对于相对论点粒子能量是  $E = \sqrt{p^2 + m^2}$ 。因此我们可以尝试直接将 Schrodinger 方程中的 Hamiltonian 替换为这个相对论的形式：

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = \sqrt{m^2 c^4 - \hbar^2 c^2 \nabla^2} \psi . \quad (281)$$

但遇到的问题是这个方程右手边可以改写为：

$$\sqrt{m^2 c^4 - \hbar^2 c^2 \nabla^2} \psi(x) = \int d^3 \mathbf{x}' F(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \psi(\mathbf{x}') \quad \text{where} \quad F(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \propto \int d^3 \mathbf{p} e^{i \mathbf{p} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4} . \quad (282)$$

这意味着波函数一点的时间演化会被整个空间的分布影响。这违反了相对论的 locality 原则！

##### Klein-Gordon Equation

由于上面的方程之中存在算符的平方根，很难处理。因此古人尝试将 Schrodinger 方程两边平方，得到：

$$-\square \psi = \frac{m^2 c^4}{\hbar^2} \psi \quad (283)$$

也就是 Klein-Gordon Equation。但是会发现这个方程存在两个问题：

- 负能量解：这个方程显然存在平面波解但是其能量为： $E = \pm \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4}$ 。这表示能量没有下界。
- 概率密度无法定义：普通的 Schrodinger Equation 的概率密度是守恒的也就是说：

$$\partial_t \int d^3 \mathbf{x} |\psi|^2 = 0 . \quad \text{with} \quad \psi^* \psi \geq 0 . \quad (284)$$

这是因为 Schrodinger 方程是 1 阶时间导数的方程。但是 Klein-Gordon Equation 是二阶方程，如果我们希望定义一个概率的 interpretation 必然不是  $|\psi|^2$  这个形式。因此我们需要重新定义概率密度。古人定义了：

$$\rho = \frac{i \hbar}{2m} (\psi^* \partial_t \psi - \psi \partial_t \psi^*) . \quad \text{satisfying} \quad \partial_t \int d^3 \mathbf{x} \rho = 0 . \quad (285)$$

但是这个密度并不是正定的，也就是说这个流并不是永远大于 0 的，因此不能作为概率密度来解释。

### 12.1.2 Dirac Equation

#### 强行构造「Hamiltonian」

为了强行构造一个协变的方程，另一个思路就是我们保留时间导数是一阶，但是强行要求 Hamiltonian 也是线性的，并且不要使用什么平方根的形式。也就是说我们要求：

$$H = c \sum_{i=1}^3 \alpha_i p^i + \beta mc^2. \quad \text{where } p^i = -i\hbar \partial_i \quad (286)$$

但为了能够和相对论量子力学匹配我们要求这个形式化的 Hamiltonian 的平方应该给出相对论的能量的平方。  $H^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$ 。

#### Remark:

这个构造就相当于严格的定义了什么叫「开平方」！

**给出 Hamiltonian 和经典力学合理：** 对于这个构造我们会发现如果  $\alpha_i, \beta$  是数字的话永远不能满足这个关系。因为我们计算会发现：

$$H^2 = c^2 \sum_{i,j} \alpha_i \alpha_j p_i p_j + mc^3 \sum_i (\alpha_i \beta + \beta \alpha_i) p_i + m^2 c^4 \beta^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4 \quad (287)$$

因此我们需要满足下面的关系：

$$\{\alpha_i, \alpha_j\} = 2\delta_{ij}, \quad \{\alpha_i, \beta\} = 0, \quad \beta^2 = 1, \quad (288)$$

**Hermite 条件：** 同时我们还需要满足 Hamiltonian 作为客观测量量应该是 Hermite 的。因此我们要求：

$$H = H^\dagger \Rightarrow \alpha_i = \alpha_i^\dagger, \quad \beta = \beta^\dagger. \quad (289)$$

#### Gamma Matrices

我们寻找有什么样子的结构满足上面的两条关系。首先一般复数完全不能满足反对易关系，我们需要寻找矩阵的描述。数学上其实我们在寻找 Clifford Algebra 的表示。我们发现四维 Clifford Algebra 的最小表示是 4 维的矩阵。因此我们需要 4 维的矩阵来表示  $\alpha_i, \beta$ 。我们发现下面的表示满足要求：

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \quad (290)$$

一般为了方便我们会定义另一组矩阵：

#### Definition 7. Gamma Matrices

$$\gamma^0 = \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}, \quad \gamma^i = \beta \alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ -\sigma_i & 0 \end{pmatrix}. \quad (291)$$



### Dirac Equation

这样我们把上面的结果带入 Schrodinger 方程我们就得到了 Dirac Equation:

$$i\frac{\partial\psi_D}{\partial t} = H_D\psi_D, \quad H_D = c\alpha_i p^i + \beta mc^2. \quad (292)$$

或者说更加标准的使用 gamma 矩阵的协变形式写作:

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\psi_D = 0. \quad (293)$$

#### Remark:

这么写出来我们已经用了  $(+, -, -, -)$  的 metric 了! 我们使用了  $p^i = -p_i = -i\partial_i$  以及  $p^0 = p_0 = i\partial_t$  的 convention。

我们对于波函数  $\psi_D$  现在有四个分量, 因此我们称之为 spinor。也就是其实描述了四种不同的粒子的态:

- 分别有两种自旋以及正反粒子!

并且我们这里可以定义一个概率密度:  $\rho = \psi_D^\dagger \psi_D \geq 0$ , 并且满足守恒条件  $\partial_t \int d^3\mathbf{x} \rho = 0$ 。虽然我们最终发现这个方程其实描述的是场而非单粒子的波函数, 这个 interpretation 其实也是错误的。

### 12.1.3 Dirac Equation 的能谱

#### 定态Schrodinger Equation

我们考虑 Dirac Hamiltonian 的定态 Schrodinger Equation:  $H_D\psi = E\psi$ 。我们发现如果使用平面波的形式假设  $\psi$  是某个向量  $\times e^{ikx}$  的话。我们会发现对角化之后矩阵存在两个本征值:

$$E_1 = +\sqrt{k^2 c^2 + m^2 c^4}, \quad E_2 = -\sqrt{k^2 c^2 + m^2 c^4}. \quad (294)$$

这就表示对于 Dirac Equation 描述的四个粒子, 存在两个正能量态和两个负能量态。在一个合理的 basis 下面, 作为向量上面两个分量的波函数给出了正能量态, 下面两个分量的波函数给出了负能量态。

#### Dirac Sea

Dirac 给了负能量态一个 interpretation。他认为这些负能量态都是被填满的, 而负能量态的 hole 是一个正能量态。但是 modern QFT 的观点下不存在 dirac sea 的概念。

### 12.2 Pauli Equation

在 Dirac Equation 的基础上, 我们可以给出一个等效的非相对论费米子在电磁场之中的波函数的运动方程。

#### 加入电磁场的Dirac Equation

我们从 Dirac Equation 出发, 如果希望在量子力学之中加入电磁场我们可以把动量算符替换为 canonical momentum:

$$p^\mu \rightarrow p^\mu - e/cA^\mu. \quad (295)$$

具体的分量写出来就是  $p^0 = i\partial_t \rightarrow \pi^0 = i\partial_t - e\Phi$  以及  $p^i = -i\nabla \rightarrow \pi^i = -i\nabla - e/c\mathbf{A}$ 。因此我们得到在电磁场之中的 Dirac Equation:

$$i\partial_t\psi = c\alpha_i\pi^i + \beta mc^2 + e\Phi\psi. \quad (296)$$

### Ansatz变形

我们研究这个方程的非相对论极限。也就是要求:

$$pc \ll mc^2, \quad e\Phi \ll mc^2, \quad |e\mathbf{A}| \ll mc^2. \quad (297)$$

对于非相对论极限, 我们选择下面的波函数作为我们的 ansatz:

$$\psi = e^{-imc^2/\hbar t} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix}. \quad (298)$$

将 ansatz 带入 Dirac Equation 我们得到两个耦合方程:

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = c\sigma^i\pi^i\chi + e\Phi\phi, \quad i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} = c\sigma^i\pi^i\phi - 2mc^2\chi + e\Phi\chi. \quad (299)$$

### Remark:

这里是真没办法所以两个上指标求和了呜呜呜呜 (((convention 迫不得已

### 非相对论极限 I: 下分量消去

由于我们考虑非相对论极限, 相比之下  $e\Phi$  的势能对于第二个方程来说是微小的, 因此我们可以忽略掉。给出变形的第二个方程我们得到:

$$\chi = \frac{c\sigma^i\pi_i}{2mc^2}\phi + \frac{\hbar}{i} \frac{1}{2mc^2} \frac{\partial \chi}{\partial t}. \quad (300)$$

我们考虑右边两项, 对于光速都是同一阶的, 但是对于 plank 常数来说第二项是高阶小量。因此对于第二项进行微扰:

$$\chi^{(0)} = \frac{c\sigma^i\pi_i}{2mc^2}\phi, \quad \chi^{(1)} = \frac{c\sigma^i\pi_i}{2mc^2}\phi + \frac{\hbar}{i} \frac{1}{2mc^2} \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{c\sigma^i\pi_i}{2mc^2}\phi \right) \quad (301)$$

我们会明显发现一阶的多出来的项是  $c^{-4}$  是高阶小量因此我们保留零阶近似:

$$\chi = \frac{c\sigma^i\pi_i}{2mc^2}\phi. \quad (302) \quad \text{\texttt{eq:chi-a}}$$

这里我们会得出结论  $\chi \ll \phi$ , 也就是说在非相对论极限下 Dirac spinor 的下分量远小于上分量。

### 非相对论极限 II: Pauli Equation

我们将上面的结果 eq. (302) 带入第一个方程我们得到:

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \phi}{\partial t} = \left( \frac{(\sigma \cdot \pi)(\sigma \cdot \pi)}{2m} + e\Phi \right) \phi \quad (303)$$

我们对于 pauli 矩阵的乘积可以使用恒等式:

$$(\sigma \cdot A)(\sigma \cdot B) = A \cdot B + i\sigma \cdot (A \times B) \quad (304)$$

因此我们得到 Pauli Equation:

**Theorem 23.** *Pauli Equation*

对于非相对论费米子在电磁场之中的运动方程为：

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \phi}{\partial t} = \left[ \frac{1}{2m} \left( \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 - \frac{e\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} + e\Phi \right] \phi \quad (305)$$

对于这个方程我们有下面的 comment：

- 本身  $\phi$  是一个二分量的 spinor，Pauli Equation 描述了两个粒子的波函数的耦合演化！

特别的对于动量我们使用的是  $p^i = -i\hbar \nabla^i$ 。

## 13 Lecture 13: Pauli Equation and Introduction to QFT

{sec:Lect

### 13.1 Pauli Equation II

我们会发现 Pauli Equation 很好的半经典的描述了电磁场和费米子的相互作用。

#### 磁场中的Pauli Equation

我们假设使用 Coulomb Gauge 进行研究,  $\mathbf{A} = 1/2\mathbf{B} \times \mathbf{r}$ , 我们考虑系统仅仅有磁场的存在, 并且仅仅展开到  $c^{-1}$  的一级。我们有:

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \phi}{\partial t} = \left[ \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \mu (\mathbf{L} + 2\mathbf{s}) \cdot \mathbf{B} \right] \phi. \quad (306)$$

其中  $\mathbf{p} = \{p^i\}$  而且  $\mu = e\hbar/2mc$  是玻尔磁子,  $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$  是轨道角动量算符,  $\mathbf{s} = \hbar/2\{\sigma^i\}$  是自旋算符。这很好的描述了波尔磁子的结果!!

#### 原子中的电子

我们的 Pauli Equation 也可以很好的描述原子中的电子行为的相对论修正。对于 Schrodinger 方程给出的结果为:

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \phi}{\partial t} = H\phi \quad H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r}. \quad (307)$$

如果我们考虑使用 Pauli Equation, 会需要使用 Foldy-Wouthuysen transformation 的方法进行相对论修正。考虑对于  $(mc^2)^{-1}$  的一阶展开, 我们得到:

$$H^1 = H + V_1 + V_2 + V_3 \quad (308)$$

我们给出每一个修正的表达式, 对于  $V(r) = -\frac{Ze^2}{r}$  我们有:

- $V_1$  是动能修正:  $V_1 = -\frac{1}{2mc^2} \frac{(\mathbf{p}^2)^2}{4m^2}$
- $V_2$  是自旋轨道耦合修正:  $V_2 = \frac{1}{2mc^2} \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \mathbf{s} \cdot \mathbf{L}$
- $V_3$  是 Darwin 项:  $V_3 = \frac{\hbar^2 \pi}{2m^2 c^2} Ze^2 \delta(x)$

这些修正项很好地解释了氢原子光谱中的精细结构。

#### 一阶近似的使用条件

对于上面的一阶近似, 我们需要满足很接近非相对论的条件。也就是说我们需要满足:

$$\frac{p^2}{2m} \ll mc^2. \quad (309)$$

由于我们粒子的动能和轨道有关系我们有  $p^2/2m \sim Ze^2/r$ , 根据量子力学不确定关系我们有  $r \sim \hbar/p$ , 因此我们得到:

$$p \sim Ze^2 m / \hbar. \quad (310)$$

因此我们的一阶近似关系要求:

$$Z \ll \frac{1}{\alpha} \approx 137. \alpha = \frac{e^2}{\hbar c}. \quad (311)$$

也就是说这个近似仅仅对于轻元素有效。

## **13.2 Relativistic Boson & Scalar Field**

## **13.3 Relativistic Fermion & Dirac Field**

对于这两部分我表示，会在 QFT 课程中进行详细的介绍，这里不再赘述。

## 14 复习：留数积分技巧

{sec: 复习

这里我们复习使用留数定理进行积分计算的技巧