

第十二章 散射理论

§12.1 散射实验和散射截面

12.1.1 散射截面的实验定义

“散射”和“碰撞”在这里是同义语。

第二章中已经指出：量子系统的状态主要地可以分为两大类。一类是束缚态，它的能级是分立的，波函数在无穷远处趋近于 0，所以可以有限地归一。另一类是非束缚态，它的能级是连续的，波函数在无穷远处并不趋近于 0，所以不能有限地归一。对于前一种状态，量子力学的基本问题是求出允许的能级，同时解出波函数。而对于后一种状态，能量可以在一定范围内任意地给定，问题变为求跃迁几率、散射几率等等。这一章就来处理三维散射问题。

研究粒子和粒子的碰撞是研究物质的结构和相互作用的重要手段。在历史上，卢瑟福 Rutherford 的 α 粒子散射实验发现了原子的核式结构；弗兰克-赫兹 Frank-Hertz 实验证实了原子的分立能量状态；许多“基本”粒子都是在碰撞过程中被发现的。人们还在不断地建造越来越大的粒子加速器以产生能量越来越高的粒子“炮弹”去“轰击”物质，以期求得对更深的物质层次的了解。此外，在气体放电、分子溅射、固体中的巡游电子与杂质原子或声子的相互作用等问题中，也离不开对碰撞的研究。

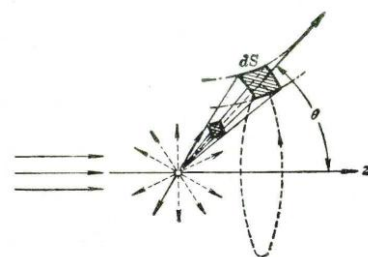
碰撞问题的特点是：初态有两个自由的粒子，末态也是两个（或者更多个）自由的粒子。但由于粒子间的相互作用，原先的粒子的动量方向和大小发生了变化，还可能同时伴随着它们的内部能量状态的变化，甚至有时候原先的粒子消失了，出现了新的粒子。所以，从实验角度看来，碰撞过程基本上可以分成两大类：弹性碰撞和非弹性碰撞。如果在碰撞过程中粒子只有动量和动能的变化，其内部状态没有改变，也没有新粒子产生，就叫做弹性碰撞，否则为非弹性碰撞。本课只处理弹性碰撞。这时可以认为两个粒子间的相互作用由势能来描写（所以又称为势散射）：

$$V = V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2),$$

并且在它们相距很远时没有相互作用

$$V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \xrightarrow{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| \rightarrow \infty} 0.$$

在实验上碰撞过程通常是这样安排和观察的。把一个粒子经过某种加速过程达到一定的动能 E 后，射向另一个静止不动的粒子。前者常称为子弹，后者常称为靶。由于相互作用，子弹粒子就与靶粒子发生碰撞，即散射，改变了自己的运动方向。我们就在不同的方向上安排子弹粒子的探测器来测量它在这个方向上发生散射的几率。通常把入射方向选为 Z 轴，所以散射方向可由球坐标中的角度 (θ, φ) 来描写，而散射几率是 (θ, φ) 的函数。现在 (θ, φ) 称为散射角。



怎样用数量来描写这个几率呢？实验上是用入射粒子流轰击一块靶物质。定义

粒子的流密度 ϕ = 垂直于粒子运动方向的单位面积上单位时间内穿过的粒子数，

所以 ϕ 的量纲是 $[1/\text{面积} \cdot \text{时间}]$ 。设靶物质内共有 N 个靶粒子（即 N 个散射中心）。在 (θ, φ) 方向上放置一个探测器，它相对于散射中心张成一个立体角元 $d\Omega$ 。粒子在这个角度上散射的几率越大，探测器接收到的粒子数就越多。设探测器在单位时间内测得的粒子数为 dn （这个量称为探测器的计数率，其量纲是 $[1/\text{时间}]$ ），那么显然

$$dn \text{ 正比于 } N\phi d\Omega,$$

其比例系数就代表了在这方向上散射的几率。把这比例系数记为 $\sigma(\theta, \varphi)$ ，那么

$$dn = \sigma(\theta, \varphi) N \phi d\Omega,$$

或者说

$$\sigma(\theta, \varphi) = \frac{dn}{N\phi d\Omega}.$$

$\sigma(\theta, \varphi)$ 的量纲是

$$[\sigma(\theta, \varphi)] = \frac{[1/\text{时间}]}{[1/\text{面积} \cdot \text{时间}]} = [\text{面积}].$$

所以 $\sigma(\theta, \varphi)$ 被称为微分散射截面。把 $\sigma(\theta, \varphi)$ 对 4π 立体角积分得

$$\sigma_t = \int \sigma(\theta, \varphi) d\Omega = \int \sigma(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi,$$

称为**总散射截面**。注意，这些公式是实验处理公式，其中 $dn, N, \phi, d\Omega$ 都是实验安排的或测量的，因此 $\sigma(\theta, \varphi)$ 是实验的测出量。通常靶粒子比子弹粒子重得多，所以在初步近似之下认为靶粒子是不动的。

12.1.2 计算散射截面的方法 散射振幅

现在问：理论上如何从给定的相互作用算出微分截面？在这里，理论的处理方法不止一种，本课将采用定态形式的处理，它的要点如下。

假设一个质量为 μ 的粒子从 $z = -\infty$ 的地方射来，其能量（动能）为 E ，相应的波矢量（大小）为

$$k = \frac{\sqrt{2\mu E}}{\hbar},$$

这就形成了一个入射的平面波。粒子进入散射中心附近的区域以后要受到 $V(\vec{r})$ 对它的作用，产生散射波。在三维情况下，散射波是一个球面波。入射波与散射波合在一起，构成了总的波函数 $\psi(\vec{r})$ ，这个波函数应该服从定态薛定谔方程

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

引入上面的 k 以及新的“势能”

$$U(\vec{r}) = \frac{2\mu}{\hbar^2} V(\vec{r}),$$

那么就有

$$\nabla^2 \psi + [k^2 - U(\vec{r})] \psi = 0,$$

其中 $U(\vec{r})$ 满足要求

$$|\vec{r}| U(\vec{r}) \xrightarrow{|\vec{r}| \rightarrow \infty} 0.$$

这个要求比 $V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \xrightarrow{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| \rightarrow \infty} 0$ 更强一些。这样，在无穷远处，方程就化为

$$\nabla^2 \psi + k^2 \psi = 0.$$

而在无穷远处存在着入射的平面波和散射的球面波。描写入射波的是

$$\psi_1 = e^{ikz},$$

（归一化因子取作 1），描写球面波的是

$$\psi_2 = f(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r}.$$

ψ_1 显然满足自由粒子方程，同时也很容易证明：不论 $f(\theta, \varphi)$ 是 (θ, φ) 的何种函数， ψ_2 在 $r \rightarrow \infty$ 时也满足自由粒子方程。因此，我们的假设是：

$$\psi \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \psi_1 + \psi_2 = e^{ikz} + f(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r}.$$

现在入射波的几率流密度是

$$J_z = \frac{i\hbar}{2\mu} \left(\psi_1 \frac{\partial \psi_1^*}{\partial z} - \psi_1^* \frac{\partial \psi_1}{\partial z} \right) = \frac{\hbar k}{\mu} = v,$$

其中 v 是粒子的（经典力学）速度。注意到

$$\nabla \varphi = \vec{e}_r \frac{\partial \varphi}{\partial r} + \vec{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial \varphi}{\partial \theta} + \vec{e}_\varphi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial \varphi}{\partial \theta},$$

可以算出散射波在 (θ, φ) 方向上的几率流密度：

$$J_r = \frac{i\hbar}{2\mu} \left(\psi_2 \frac{\partial \psi_2^*}{\partial r} - \psi_2^* \frac{\partial \psi_2}{\partial r} \right) = \frac{i\hbar}{2\mu} |f(\theta, \varphi)|^2 \left(-\frac{ik}{r^2} - \frac{ik}{r^2} \right) = \frac{v}{r^2} |f(\theta, \varphi)|^2.$$

所以在 (θ, φ) 方向上穿过小面积 ds 的几率流是

$$dw(\theta, \varphi) = J_r ds = v |f(\theta, \varphi)|^2 \frac{ds}{r^2} = v |f(\theta, \varphi)|^2 d\Omega.$$

对比实验上的定义 $\sigma(\theta, \varphi) = \frac{1}{\phi} \frac{dn}{d\Omega}$ ，把 $dw(\theta, \varphi)$ 除以入射几率流 $J_z (= v)$ ，就得到在这个方向上的微分散射几率，也就是微分散射截面：

$$\sigma(\theta, \varphi) = \frac{1}{J_z} \frac{dw}{d\Omega} = |f(\theta, \varphi)|^2.$$

所以 $f(\theta, \varphi)$ 被称为**散射振幅**。

现在把计算微分散射截面 $\sigma(\theta, \varphi)$ 的方法再总结一下。

写下 $\psi(\vec{r})$ 满足的方程：

$$\nabla^2 \psi + [k^2 - U(\vec{r})] \psi = 0,$$

其中

$$k = \frac{\sqrt{2\mu E}}{\hbar}, \quad U(\vec{r}) = \frac{2\mu}{\hbar^2} V(\vec{r}),$$

假设 $\psi(\vec{r})$ 在无穷远处的渐近形式是

$$\psi(\vec{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{ikz} + f(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r},$$

代入方程，求出 $f(\theta, \varphi)$ ，那么就有

$$\sigma(\theta, \varphi) = |f(\theta, \varphi)|^2.$$

散射截面在实验与理论之间搭起了一座桥梁，用它可以检验理论上所假设的粒子之间的相互作用是否正确。

*12.1.3 全同粒子的散射问题

第五章第3节中指出：全同粒子系统的波函数必须满足交换对称或反对称的要求，这就使得全同粒子的散射（子弹粒子和靶粒子是全同粒子）不同于非全同粒子的散射。

如果粒子的自旋是0，那么在质心系中看，两个粒子互相交换就是 $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$ ，所以波函数交换对称等于说波函数有正的宇称，因而波函数的对称化导致

$$\sigma(\theta, \varphi) = |f(\theta, \varphi) + f(\pi - \theta, \pi + \varphi)|^2.$$

如果互相碰撞的粒子是自旋为1/2的全同费米子，那么就要区分两种不同的情形。第一种情形是两个粒子的总自旋为0，那么它们的自旋波函数就是交换反对称的，因而空间波函数是交换对称的，这就和玻色子的情况一样，因而有

$$\sigma(\theta, \varphi) = |f(\theta, \varphi) + f(\pi - \theta, \pi + \varphi)|^2.$$

另一种情形是两个粒子的总自旋为1，那么它们的自旋波函数是交换对称的，因而空间波函数是交换反对称的，所以

$$\sigma(\theta, \varphi) = |f(\theta, \varphi) - f(\pi - \theta, \pi + \varphi)|^2.$$

§12.2 中心势场中的分波法

12.2.1 分波法的一般公式和适用范围

现在假设势场为中心势场 $V = V(r)$ ，那么方程就变为

$$\nabla^2 \psi + [k^2 - U(r)] \psi = 0. \quad \left(U(r) = \frac{2\mu}{\hbar^2} V(r) \right)$$

显然，这时 $f(\theta, \varphi)$ 变成了 $f(\theta)$ ， $\psi(r, \theta, \varphi)$ 变成了 $\psi(r, \theta)$ ，而且 L^2 是守恒量，所以不妨假设

$$\psi(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} R_l(r) P_l(\cos \theta),$$

也就是把 ψ 分解为不同轨道角动量的叠加，上式中的每一项（也就是一个确定的角动量成分）称为一个**分波**(partial wave)。代入方程，发现 $R_l(r)$ 满足

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR_l}{dr} \right) + \left(k^2 - U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R_l = 0.$$

让

$$R_l(r) = \frac{u_l(r)}{kr},$$

那么 $u_l(r)$ 就满足方程：

$$\frac{d^2 u_l}{dr^2} + \left(k^2 - U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u_l = 0,$$

以及边界条件

$$u_l(r=0) = 0.$$

在 $r \rightarrow \infty$ 时，方程是

$$\frac{d^2 u_l}{dr^2} + k^2 u_l = 0,$$

它的一般解是

$$u_l(r) = A_l \sin \left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l \right), \quad (r \rightarrow \infty)$$

这里为了以后分析问题的方便，把初位相写成了 $-(l\pi/2) + \delta_l$ ，其中的 δ_l 当然无法从渐近方程定出，必须在求出了严格的方程的解以后再取 $r \rightarrow \infty$ 的极限才能发现。所以在 $r \rightarrow \infty$ 时有

$$\psi(r, \theta) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sum_l A_l \frac{1}{kr} \sin \left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l \right) P_l(\cos \theta).$$

我们应该拿这个 $\psi(r, \theta)$ 与散射波函数的一般形式

$$\psi(r, \theta) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}$$

对比，得到 $f(\theta)$ 的表达式。为此，我们必须把 $e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta}$ 也按 $P_l(\cos \theta)$ 展开。这个展开式是一个很有名的公式（这是严格的结果）：

$$e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta} = \sum_l (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \theta),$$

其中 $j_l(kr)$ 是球 Bessel 函数。球 Bessel 函数 $j_l(x)$ 满足方程

$$\frac{d^2 j_l}{dx^2} + \frac{2}{x} \frac{dj_l}{dx} + \left(1 - \frac{l(l+1)}{x^2} \right) j_l = 0, \quad (l=0, 1, 2, \dots)$$

并且在 $x=0$ 处有限。当 $r \rightarrow \infty$ 时， $j_l(kr)$ 的渐近公式是

$$j_l(kr) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{kr} \sin \left(kr - \frac{l\pi}{2} \right),$$

所以（这是渐进表达式）

$$e^{ikz} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sum_l (2l+1) i^l \frac{1}{kr} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) P_l(\cos\theta).$$

我们知道, 如果 $U(r) \equiv 0$, 那么 $\psi(r, \theta) = e^{ikz}$, 而它有如上的渐近表达式。拿 $U(r) \neq 0$ 的 $\psi(r, \theta)$ 与它对比, 我们发现最大的区别就是出现了 δ_l , 所以 δ_l 称为第 l 阶相移。把解得的 $\psi(r, \theta)$ 的渐近结果与假设的渐近形式对比, 就得:

$$\sum_l (2l+1) i^l \frac{1}{kr} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) P_l(\cos\theta) + \frac{f(\theta)}{r} e^{ikr} = \sum_l A_l \frac{1}{kr} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right) P_l(\cos\theta).$$

利用 $\sin\alpha = (e^{i\alpha} - e^{-i\alpha})/2i$ 把各项都化为 e^{ikr} 和 e^{-ikr} 的线性组合, 方程成为

$$\begin{aligned} & \left[2ik f(\theta) + \sum_l \left((2l+1) i^l - A_l e^{i\delta_l} \right) e^{-il\pi/2} P_l(\cos\theta) \right] e^{ikr} \\ & - \left[\sum_l \left((2l+1) i^l - A_l e^{-i\delta_l} \right) e^{il\pi/2} P_l(\cos\theta) \right] e^{-ikr} = 0, \end{aligned}$$

所以

$$\begin{cases} 2ik f(\theta) = -\sum_l \left((2l+1) i^l - A_l e^{i\delta_l} \right) e^{-il\pi/2} P_l(\cos\theta), \\ 0 = \sum_l \left((2l+1) i^l - A_l e^{-i\delta_l} \right) e^{il\pi/2} P_l(\cos\theta). \end{cases}$$

第二式给出

$$A_l = (2l+1) i^l e^{i\delta_l},$$

把它代入第一式就得:

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_l (2l+1) i^l (e^{2i\delta_l} - 1) e^{-il\pi/2} P_l(\cos\theta) = \frac{1}{k} \sum_l (2l+1) \sin\delta_l e^{i\delta_l} P_l(\cos\theta).$$

所以一旦各阶相移 δ_l 求出来了, $f(\theta)$ 也就知道了。 $f(\theta)$ 的各项

$$f_l(\theta) = \frac{1}{k} (2l+1) \sin\delta_l e^{i\delta_l} P_l(\cos\theta)$$

称为**分波振幅**, 其中的 Legendre 多项式 $P_l(\cos\theta)$ 是完全定义好了的函数, 例如

$$\begin{aligned} P_0(\cos\theta) &= 1, \\ P_1(\cos\theta) &= \cos\theta, \\ P_2(\cos\theta) &= \frac{1}{2}(3\cos^2\theta - 1), \dots \end{aligned}$$

所以 $\sin\delta_l e^{i\delta_l}$ 是确定这个分波的大小的决定性部分。这样给出的微分截面是:

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 = \frac{1}{k^2} \left| \sum_l (2l+1) \sin\delta_l e^{i\delta_l} P_l(\cos\theta) \right|^2.$$

注意这里有交乘项出现, 不可以认为 $\sigma(\theta) = \sum_l |f_l(\theta)|^2$ 。但是如果求总截面, 交乘项是不出现的:

$$\begin{aligned} \sigma_t &= \int \sigma(\theta) d\Omega = 2\pi \int \sigma(\theta) \sin\theta d\theta \\ &= \frac{2\pi}{k^2} \sum_{l, l'} (2l+1)(2l'+1) \sin\delta_l \sin\delta_{l'} e^{i(\delta_l - \delta_{l'})} \int P_l(\cos\theta) P_{l'}(\cos\theta) d(\cos\theta) \\ &= \frac{2\pi}{k^2} \sum_{l, l'} (2l+1)(2l'+1) \sin\delta_l \sin\delta_{l'} e^{i(\delta_l - \delta_{l'})} \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'} \\ &= \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \sin^2\delta_l. \end{aligned}$$

以上是分波法的一般形式。它的严格表达式是一个无穷级数, 其中要求解出所有的 δ_l , 这实际上是

不可能的。如果随着 l 的增加 δ_l 很快地减小，那么这级数就很快地收敛，有可能只计算前几项就能得到好的近似。那么对于给定的问题，究竟需要考虑到多大的 l 就够了呢？让我们从经典的图像来估算一下。设相互作用 $V(r)$ 是短程的，即只有在 $r < a$ 的范围内作用是明显的， $r > a$ 时的作用可以忽略， a 称为相互作用的**力程** (range)。再设粒子以动量 p 入射，而瞄准距离为 b 。容易算出，这时它的角动量是 $L = pb$ 。显然，如果 $b > a$ ，则散射的几率很小，所以，发生显著的散射的条件是

$$b \leq a.$$

由于 $b = L/p$ ，而在量子力学中 $p = \hbar k$ 并且近似有 $L = l\hbar$ ，所以散射条件化为

$$b = \frac{l}{k} \leq a.$$

这就表明，只有满足

$$l \leq ka$$

的那些分波才会有显著的贡献。因此我们的结论是：分波法适用于**短程**相互作用(a 小)和**低能**(k 小)的情形。在极端情况下

$$ka \ll 1,$$

那么只有一个分波需要考虑，就是

$$l = 0.$$

这称为 S 波散射。下边我们就将处理这种情形。

12.2.2 球方势垒的 S 波散射

球方势垒指的是

$$V(r) = \begin{cases} V_0 (> 0), & (r < a) \\ 0, & (r > a) \end{cases}$$

在 a 很小 E 很低的情况下 $ka \ll 1$ ，只需考虑 S 波散射，此时总可以假设 $E < V_0$ 。现在的方程是

$$\frac{d^2 u}{dr^2} + (k^2 - U(r))u = 0, \quad \left(k = \sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}}, \quad U(r) = \frac{2\mu}{\hbar^2} V(r) \right)$$

边界条件是

$$u(r=0) = 0,$$

需要从中解出 $u(r)$ 并与 $u(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sin(kr + \delta_0)$ 对比找出 δ_0 ，即可得到散射振幅

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sin \delta_0 e^{i\delta_0},$$

(这个散射振幅实际上与 θ 无关即散射是各向同性的)，以及微分截面

$$\sigma(\theta) = \frac{1}{k^2} \sin^2 \delta_0,$$

和总截面

$$\sigma_t = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0.$$

具体地说，代入 $V(r)$ 后方程成为

$$\begin{cases} \frac{d^2 u}{dr^2} - \alpha^2 u = 0, & \left(r < a, \alpha = \sqrt{\frac{2\mu(V_0 - E)}{\hbar^2}} \right) \\ \frac{d^2 u}{dr^2} + k^2 u = 0, & \left(r > a, k = \sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}} \right) \end{cases}$$

它的解是：

$$u(r) = \begin{cases} A \sinh \alpha r, & (r < a) \\ B \sin(kr + \delta_0), & (r > a) \end{cases}$$

其中已经考虑到了边界条件 $u(0) = 0$ 。让 $[\ln u(r)]'$ 在 $r = a$ 处连续，得

$$\frac{1}{\alpha} \tanh \alpha a = \frac{1}{k} \tan(ka + \delta_0),$$

所以相移是

$$\delta_0 = \arctan\left(\frac{ka}{\alpha a} \tanh \alpha a\right) - ka.$$

这是一个准确的表达式，但是太复杂，而且没有必要，因为我们本来假设了 $ka \ll 1$ ，所以可以把它按小量 ka 展开，在最低阶近似下只保留到 ka 的一次项。在 $ka \rightarrow 0$ 时，

$$\alpha a = \sqrt{\frac{2\mu(V_0 - E)a^2}{\hbar^2}} \xrightarrow{ka \rightarrow 0} \sqrt{\frac{2\mu V_0 a^2}{\hbar^2}} = \beta a, \quad \left(\beta = \sqrt{\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}}\right)$$

并可注意总有 $0 < \tanh x/x \leq 1$ ，所以还可以利用 $\arctan x \approx x$ ，于是

$$\delta_0 \xrightarrow{ka \ll 1} ka \left(\frac{1}{\beta a} \tanh \beta a - 1\right).$$

还可以认为

$$\sin \delta_0 \cong \delta_0,$$

所以微分截面成为

$$\sigma(\theta) = \frac{1}{k^2} \sin^2 \delta_0 = a^2 \left(\frac{1}{\beta a} \tanh \beta a - 1\right)^2,$$

而总截面为

$$\sigma_t = 4\pi a^2 \left(\frac{1}{\beta a} \tanh \beta a - 1\right)^2. \quad \left(\beta a = \sqrt{\frac{2\mu V_0 a^2}{\hbar^2}}\right)$$

实际上这是 $ka \rightarrow 0$ 时 σ_t 的极限值。注意：在 $ka \rightarrow 0$ 的时候 δ_0 也 $\rightarrow 0$ ，但截面并不 $\rightarrow 0$ ，因为截面的表达式中还有一个 $1/k$ 。如果 $V_0 \rightarrow \infty$ ，那么 $\beta a \rightarrow \infty$ ，因而 $\tanh \beta a / \beta a \rightarrow 0$ ，所以

$$\sigma_t \rightarrow 4\pi a^2.$$

$V_0 \rightarrow \infty$ 相当于一个半径为 a 的“完全硬球”。从经典图像看来，它的截面应该是 $\sigma_t = \pi a^2$ ，但量子截面却是它的 4 倍，这是粒子的波动性的结果。

还可以注意：由于 $(\tanh x/x) - 1 < 0$ ，所以 $\delta_0 < 0$ ，这是因为势垒代表排斥作用。一般地说，排斥作用的 $\delta_0 < 0$ ，而吸引作用的 $\delta_0 > 0$ 。这个结论除去可以用解析的方法证明以外，也可以从散射波的直观图像中看出。此外，对于低能散射还经常定义**散射长度**

$$a_0 = -\frac{1}{k} \tan \delta_0,$$

（这是普遍采用的 a_0 的定义，注意其中有负号，所以对于**排斥**作用而言 $a_0 > 0$ ），如果 $\delta_0 \ll 1$ ，那么可以近似取 $\sin \delta_0 = \tan \delta_0$ ，所以有

$$\sigma_t = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0 = 4\pi a_0^2.$$

不难看出对于球方势垒，

$$0 < a_0 = a \left(1 - \frac{1}{\beta a} \tanh \beta a\right) < a.$$

而在 $V_0 \rightarrow \infty$ 时 $a_0 = a$ 。

*12.2.3 球方势阱的共振散射

把势垒换成势阱，则 V_0 从 > 0 变为 < 0 ，波函数相应地变为

$$u(r) = \begin{cases} A \sin k'r, & (r < a, k' = \sqrt{2\mu(E + |V_0|)}/\hbar) \\ B \sin(kr + \delta_0), & (r > a, k = \sqrt{2\mu E}/\hbar) \end{cases}$$

所以相移是（未做近似）

$$\delta_0 = \arctan\left(\frac{ka}{k'a} \tan k'a\right) - ka.$$

注意到 $(\tan x/x) > 1$, $\arctan x (x > 0)$ 又是 x 的增函数, 所以 $\delta_0 > 0$, 这表明吸引作用的相移 > 0 而散射长度 < 0 , 恰好和排斥作用相反。仍然取 $ka \rightarrow 0$ 的极限, 那么

$$k'a = \sqrt{\frac{2\mu(E + |V_0|)a^2}{\hbar^2}} \xrightarrow{ka \rightarrow 0} \sqrt{\frac{2\mu|V_0|a^2}{\hbar^2}} = k_0a. \quad \left(k_0 = \sqrt{\frac{2\mu|V_0|}{\hbar^2}}\right)$$

但是要注意, 现在 δ_0 与 $\tan k_0a$ 有关, 而事实上有这样的可能性存在, 那就是参数 V_0, a 的值使得

$$k_0a \approx \frac{\pi}{2} \quad \left(\text{或 } \frac{3\pi}{2}, \frac{5\pi}{2}, \dots\right).$$

这时候 $|\tan k_0a/k_0a|$ 就变得很大, 上面的近似就不能用了。事实上, 如果 k_0a 恰好 $= \pi/2, 3\pi/2, \dots$, 那么在 $ka \rightarrow 0$ 的时候 δ_0 也 $\rightarrow \pi/2, 3\pi/2, \dots$, 因而散射截面会 $\rightarrow \infty$, 这就是所谓的“共振散射”。类似的情形我们在一维散射问题中也看到过了。在目前的问题中, 共振散射出现的原因是: 在上述条件下, 球方势阱中恰好存在着“零能束缚态”, 也就是能量小于但无限接近于 0 的束缚态。

§12.3 Born 近似

12.3.1 Green 函数方法和 Lippman-Schwinger 方程

三维空间中的 Schrödinger 方程是

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

记

$$k = \sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}}, \quad U(\vec{r}) = \frac{2\mu}{\hbar^2} V(\vec{r}),$$

它又可以写为

$$(\nabla^2 + k^2) \psi = U\psi.$$

方程

$$(\nabla^2 + k^2) \psi_0 = 0$$

称为亥姆霍兹 Helmholtz 方程，而方程

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

称为非齐次的 Helmholtz 方程，或带源项的 Helmholtz 方程， $S(\vec{r})$ 称为源项。

解这种方程可以用**格林 Green 函数**方法，那就是先解方程

$$(\nabla^2 + k^2) G(\vec{r}, \vec{r}') = \delta^3(\vec{r} - \vec{r}'),$$

其中 $G(\vec{r}, \vec{r}')$ 称为 Green 函数。注意：这里被微分的变量是 \vec{r} ，而 \vec{r}' 在其中是参量。把 $G(\vec{r}, \vec{r}')$ 求出来以后，它就（借助于积分）给出了非齐次 Helmholtz 方程的一个特解：

$$\psi(\vec{r}) = \int G(\vec{r}, \vec{r}') S(\vec{r}') d^3\vec{r}',$$

所以它的一般解是：

$$\psi(\vec{r}) = \psi_0(\vec{r}) + \int G(\vec{r}, \vec{r}') S(\vec{r}') d^3\vec{r}',$$

其中 $\psi_0(\vec{r})$ 是齐次 Helmholtz 方程的一般解。

那么 Green 函数 $G(\vec{r}, \vec{r}')$ 是什么样的函数呢？不难证明：对于 Helmholtz 方程，

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|}.$$

事实上，我们只要验证

$$G(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \quad (r = |\vec{r}|)$$

满足

$$(\nabla^2 + k^2) G(\vec{r}) = \delta^3(\vec{r})$$

就够了。在 $r \neq 0$ 时，直接的微分就可证明 $G(\vec{r})$ 满足

$$(\nabla^2 + k^2) G(\vec{r}) = 0. \quad (r \neq 0)$$

计算如下：

$$\begin{aligned} \nabla^2 \left(\frac{e^{ikr}}{r} \right) &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{e^{ikr}}{r} \right) \right) = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (ikr e^{ikr} - e^{ikr}) \\ &= \frac{1}{r^2} (ik e^{ikr} - k^2 r e^{ikr} - ik e^{ikr}) = -k^2 \frac{e^{ikr}}{r}. \end{aligned}$$

然后需要再验证一下

$$\int_{\varepsilon} (\nabla^2 + k^2) G(\vec{r}) d^3\vec{r} = 1,$$

其中 ε 代表一个以 O 点为球心，半径 $\varepsilon \rightarrow 0$ 的球体的内部。计算中需要利用 Gauss 定理：

$$\int_{\varepsilon \rightarrow 0} (\nabla^2 + k^2) G(\vec{r}) d^3\vec{r} = \int_{\varepsilon \rightarrow 0} \nabla^2 G(\vec{r}) d^3\vec{r} = \int_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(-\frac{1}{4\pi} \right) \nabla^2 \left(\frac{e^{ikr}}{r} \right) d^3\vec{r} = -\frac{1}{4\pi} \int_{\varepsilon \rightarrow 0} \nabla^2 \left(\frac{1}{r} \right) d^3\vec{r}$$

$$= -\frac{1}{4\pi} \oint_{\varepsilon \rightarrow 0} \nabla \left(\frac{1}{r} \right) \cdot \vec{ds} = -\frac{1}{4\pi} \oint_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(-\frac{1}{r^2} \right) r^2 d\Omega = \frac{1}{4\pi} \oint d\Omega = 1.$$

然后我们再来看 Schrödinger 方程。容易看到，此时

$$S(\vec{r}) = U(\vec{r})\psi(\vec{r}),$$

所以我们有

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}) &= \psi_0(\vec{r}) + \int G(\vec{r}, \vec{r}') U(\vec{r}') \psi(\vec{r}') d^3\vec{r}' \\ &= \psi_0(\vec{r}) - \frac{1}{4\pi} \int \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} U(\vec{r}') \psi(\vec{r}') d^3\vec{r}'. \end{aligned}$$

这个方程称为 Lippman-Schwinger 方程。注意，这并不意味着我们“解出”了 $\psi(\vec{r})$ ，因为右边的积分中仍含有 $\psi(\vec{r})$ ，所以这是一个关于 $\psi(\vec{r})$ 的积分方程，它与微分形式的 Schrödinger 方程是等价的。

12.3.2 Born 近似及其适用条件

积分方程这种形式的好处在于它含有 $\psi_0(\vec{r})$ ，而这一项可以用来体现边界条件，所以它等于是把微分方程和边界条件集于一身表现出来了。对于散射问题。我们要求 $\psi(\vec{r})$ 的边界条件是

$$\psi(\vec{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{ikz} + f(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r}.$$

所以，我们应该在积分方程中令

$$\psi_0(\vec{r}) = e^{ikz}.$$

它确实是齐次 Helmholtz 方程的解，而且在 $U(\vec{r}) = 0$ 时 $f(\theta, \varphi) = 0$ 。所以我们要解方程

$$\psi(\vec{r}) = e^{ikz} - \frac{1}{4\pi} \int \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} U(\vec{r}') \psi(\vec{r}') d^3\vec{r}'.$$

严格地解它还是困难的，我们来利用微扰近似。既然在 $U(\vec{r}) = 0$ 时 $\psi = \psi_0 = e^{ikz}$ ，我们就在方程右方的被积式里用 $\psi_0(\vec{r}')$ 代替 $\psi(\vec{r}')$ （在数学上这叫做迭代法），得到

$$\psi(\vec{r}) = e^{ikz} - \frac{1}{4\pi} \int \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} U(\vec{r}') e^{ikz'} d^3\vec{r}'.$$

对于散射问题，我们还需在其中令 $r \rightarrow \infty$ 并且和渐近形式进行对比。在 $r \rightarrow \infty$ 时，可以取

$$\frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{r}.$$

但是在指数上不能这样近似，因为 e^{ix} 是 x 的振荡函数。这时我们应取

$$|\vec{r}-\vec{r}'| \approx r - r' \cos \theta = r - \vec{r}' \cdot \vec{e}_r.$$

所以

$$-\frac{1}{4\pi} \int \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} U(\vec{r}') e^{ikz'} d^3\vec{r}' \xrightarrow{r \rightarrow \infty} -\frac{e^{ikr}}{r} \frac{1}{4\pi} \int e^{-ik\vec{r}' \cdot \vec{e}_r} e^{ikz'} U(\vec{r}') d^3\vec{r}'.$$

注意到

$$\begin{cases} kz' = k \vec{e}_z \cdot \vec{r}' = \vec{k} \cdot \vec{r}', & (\vec{k} = k \vec{e}_z) \\ k \vec{e}_r \cdot \vec{r}' = \vec{k}' \cdot \vec{r}', & (\vec{k}' = k \vec{e}_r) \end{cases}$$

其中 \vec{k} 是入射粒子波矢量， \vec{k}' 是出射粒子波矢量，再对比散射振幅的一般定义，我们就得到：

$$f(\theta, \varphi) = -\frac{1}{4\pi} \int e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{r}} U(\vec{r}) d^3\vec{r}. \quad \left(U(\vec{r}) = \frac{2\mu}{\hbar^2} V(\vec{r}) \right)$$

这里已经把积分变量从 \vec{r}' 换记为 \vec{r} ，所以 (θ, φ) 就变成了 \vec{k}' 相对于 \vec{k} 的方向角。上式就是散射振幅的 **Born 近似公式**。

这个公式可以应用于任何的位能函数 $V(\vec{r})$ ，但若 V 与方向无关，则公式还可以再简化。这时记

$$\vec{q} = \vec{k}' - \vec{k}, \quad (\hbar \vec{q} = \vec{p}' - \vec{p})$$

或者说

$$\vec{k}' = \vec{k} + \vec{q}, \quad (\vec{p}' = \vec{p} + \hbar\vec{q})$$

所以 $\hbar\vec{q}$ 称为**动量传输**。事实上， \vec{q} 的大小是（参见右图）

$$q = |\vec{q}| = 2k \sin \frac{\theta}{2},$$

其中 θ 正是散射角。所以我们得到

$$f(\theta) = -\frac{1}{4\pi} \int e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} U(r) d^3\vec{r}.$$

这个积分以 \vec{q} 为参数，但实际上只是 $q = |\vec{q}| = 2k \sin(\theta/2)$ 的函数，所以它也就是 θ 的函数。为了计算它的值，我们可以取任何坐标系。为方便起见，选 \vec{q} 沿着新的 Z' 轴，所以

$$\begin{aligned} f(\theta) &= -\frac{1}{4\pi} \int e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} U(r) d^3\vec{r} = -\frac{1}{4\pi} \int e^{iqr \cos \theta'} U(r) r^2 dr \sin \theta' d\theta' d\phi' \\ &= -\frac{1}{4\pi} 2\pi \int_0^\infty \left(e^{iqr \cos \theta'} \right) \Big|_{\theta'=0}^{\theta'=\pi} \left(\frac{i}{qr} \right) U(r) r^2 dr = -\frac{2\mu}{\hbar^2 q} \int_0^\infty \sin(qr) V(r) r dr. \end{aligned}$$

总之，现在 $f(\theta)$ 实际上是变量 q 的函数，而 $q = 2k \sin \frac{\theta}{2} = \sqrt{\frac{8\mu E}{\hbar^2}} \sin \frac{\theta}{2}$ 。这是一级 Born 近似独有的特征。

关于 Born 近似适用的条件，我们在此只是指出它是：

$$ka \cdot \frac{V_0}{E} \ll 1,$$

其中 a 是势场的力程， V_0 是势场的最大强度。由于 $k \propto \sqrt{E}$ ，所以这个比值 $\propto 1/\sqrt{E}$ 。这表明，**能量越高**，Born 近似越好。但是当势场为吸引势场时，Born 近似对于低能情况也是好的。

12.3.3 屏蔽 Coulomb 场的 Rutherford 散射

设一个带电荷 $Z'e$ 的粒子（如 α 粒子）被一个原子散射。可以假设 $Z'e$ 受到的势场是屏蔽 Coulomb 场

$$V(r) = k_1 \frac{Z'Ze^2}{r} e^{-r/a},$$

其中 Z 是核电荷数， $e^{-r/a}$ 是屏蔽因子， a 是某种“原子半径”。这时 Born 近似给出

$$f(q) = -\frac{2\mu}{\hbar^2 q} \int_0^\infty \sin(qr) V(r) r dr = -\frac{2\mu}{\hbar^2 q} k_1 Z'Ze^2 \int_0^\infty \sin(qr) e^{-r/a} dr = -\frac{2\mu k_1 Z'Ze^2}{\hbar^2} \frac{a^2}{1+a^2 q^2}.$$

所以微分散射截面是

$$\sigma(\theta) = |f(q)|^2 = \left(\frac{2\mu k_1 Z'Ze^2}{\hbar^2} \right)^2 \frac{a^4}{(1+a^2 q^2)^2}.$$

让我们观察高能（ k 很大）而且散射角也很大的情形，这时可以认为

$$aq = 2ka \sin \frac{\theta}{2} \gg 1,$$

所以

$$\sigma(\theta) \approx \left(\frac{2\mu k_1 Z'Ze^2}{\hbar^2 q^2} \right)^2 = \left(\frac{k_1 Z'Ze^2}{4E} \right)^2 \frac{1}{\sin^4(\theta/2)},$$

其中 E 是入射粒子的动能。这个公式称为卢瑟福 Rutherford 公式，正是依据这个公式，Rutherford 在实验上证明了原子有核式结构。但是他导出这个公式时用的是经典力学，而且没有考虑外层电子的屏蔽效应。不妨注意，虽然我们的计算用的是量子力学，但是上面这个公式中既不包含 \hbar 也不包含 a ，也就是说，在上述条件下 Born 近似与经典力学是一致的。但 Rutherford 当时就发现，在 $\theta = 0$ 附近这个公式与实验并不太符合，其原因现在来看很明显，因为在 θ 比较小的区域中，量子力学效应和屏蔽效应不可以忽略。

