第二章、形式微扰理论

$ 2.0 表象理论

2.01 Schrödinger 表象

在通常情况下，我们所见到的势都是与时间无关的，例如库仑势。一个直接的后果是，体系的哈密顿量

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^{N}\nabla_i^2 + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \tag{1}$$

不依赖于时间。另一方面，根据量子力学的基本原理，体系状态随时间的改变由波函数来给出，即由方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_s(\mathbf{r}_1,\cdots,\mathbf{r}_N,\, t) = \hat{H}\psi_s(\mathbf{r}_1,\cdots,\mathbf{r}_N,\, t) \tag{2}$$

的解来决定。当哈密顿量 $\hat{H}$ 与时间无关时，它可以形式地写为

$$\psi_s(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)\right)\psi_s(t_0). \tag{3}$$

t_0 为一固定时间。这一表象称为 Schrödinger 表象。

2.02 Heisenberg 表象

若我们引入新的波函数

$$\psi_H(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\psi_s(t), \tag{4}$$

则有

$$\begin{aligned}\psi_H(t) &= \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t + \frac{i}{\hbar}\hat{H}t_0\right)\psi_s(t_0)\\ &= \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t_0\right)\psi_s(t_0) = \psi_H(t_0).\end{aligned} \tag{5}$$

因此，波函数 $\psi_H(t)$ 不随时间改变。实际上，直接的计算给出

$$\begin{aligned}i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_H(t) &= i\hbar\left(\frac{i}{\hbar}\right)\exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\hat{H}\psi_s(t) + \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\left(i\hbar\frac{\partial\psi_s(t)}{\partial t}\right)\\ &= -\exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\hat{H}\psi_s(t) + \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\hat{H}\psi_s(t)\\ &= 0.\end{aligned} \tag{6}$$

这一表象称为 Heisenberg 表象。

一个有趣的问题是，如何将 Heisenberg 表象中的算符与 Schrödinger 表象中的算符相联系。为此，我们要求

$$\langle\varphi_H(t)|\hat{O}_H|\psi_H(t)\rangle = \langle\varphi_s(t)|\hat{O}_s|\psi_s(t)\rangle \tag{7}$$

对于任何一对波函数 $\varphi_s(t)$ 和 $\psi_s(t)$ 都成立。

利用 φ_H 和 ψ_H 的定义，我们有

$$\langle\varphi_H(t)|\hat{O}_H|\psi_H(t)\rangle = \langle\varphi_s(t)|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{O}_H e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\psi_s(t)\rangle. \tag{8}$$

因此，若我们要求

$$\hat{O}_s = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{O}_H e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}, \tag{9}$$

或是

$$\hat{O}_H = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{O}_s e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}, \tag{10}$$

则方程 (7) 成立。一般来说， $\hat{O}_H(t)$ 是依赖于时间。它随时间的运动规律由下式给出

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{O}_H = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\frac{i}{\hbar}(\hat{H}\hat{O}_s - \hat{O}_s\hat{H})e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H},\, \hat{O}_H(t)\right]. \tag{11}$$

注意，在 Heisenberg 表象中， $\hat{H}$ 是一个特殊算符。我们有 $\hat{H}_H = \hat{H}_s = \hat{H}$ 。

引入 Heisenberg 表象的好处在于，现在我们只需要考虑算符的运动方程。这使得我们在处理多体体系时，可以引入种种近似方法。

值得注意的是，在 Heisenberg 表象中，仅在等时条件下，算符的对易关系可以明确加以计算。例如

$$\begin{aligned}
&\hat{C}_k(t)\hat{C}^\dagger_{k'}(t) + \hat{C}^\dagger_{k'}(t)\hat{C}_k(t) \\
=\;& e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{C}_k e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t)}\hat{C}^\dagger_{k'} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} + e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{C}^\dagger_{k'} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t)}\hat{C}_k e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \\
=\;& e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}(\hat{C}_k\hat{C}^\dagger_{k'} + \hat{C}^\dagger_{k'}\hat{C}_k)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = \delta_{kk'}e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \\
=\;& \delta_{kk'}.
\end{aligned} \tag{12}$$

但在不等时的情况下，上面的反对易关系并不成立。然而，在许多情况下，我们又需要计算时间不相等时的算符对易关系。为此，我们引入所谓相互作用表象。

2.03 相互作用表象

在这一表象中，我们取

$$\psi_I(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t\right)\psi_s(t). \tag{13}$$

粗略地讲，这里 $\hat{H}_0$ 取做 $\hat{H}$ 中没有相互作用的部分，或是单粒子算符部分。例如，对于

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^{N}\nabla_i^2 + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j), \tag{14}$$

我们取 $H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^{N}\nabla_i^2$ 。

在很多情况下， H_0 可以严格求解。例如，在自由粒子的例子中，单粒子态为

$$\varphi_{n_1n_2n_3} = \frac{1}{\sqrt{V}}\exp(ik_1x + ik_2y + ik_3z), \quad k_i = \frac{2\pi}{L}n_i,\ n_i = 0,\ \pm1,\ \pm2, \ldots \tag{15}$$

因此， $\hat{H}_0$ 可被写作

$$\hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}}\frac{\hbar^2k^2}{2m}\hat{C}_{\mathbf{k}}^{\dagger}\hat{C}_{\mathbf{k}}. \tag{16}$$

这样定义的 $\psi_I(t)$ 仍是时间的一个函数。实际上，我们有

$$\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_I(t) &= i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t}\psi_s(t)\right) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t}(-\hat{H}_0)\psi_s(t) + e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t}\hat{H}\psi_s(t) \\
&= e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t}(-\hat{H}_0)\psi_s(t) + e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t}\left(\hat{H}_0 + \hat{H}'\right)\psi_s(t) \\
&= e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t}\hat{H}'\psi_s(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t}\hat{H}'e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t}e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t}\psi_s(t) \\
&\equiv \hat{H}_I'(t)\psi_I(t).
\end{aligned} \tag{17}$$

即

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_I(t) = \hat{H}_I'\psi_I(t). \tag{18}$$

下面，让我们来看一下一般算符在相互作用表象中的表达式。从定义

$$\langle\varphi_I(t)|\hat{O}_I(t)|\psi_I(t)\rangle = \langle\varphi_s(t)|\hat{O}_s|\psi_s(t)\rangle \tag{19}$$

出发，我们可以得到

$$\hat{O}_I(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\hat{O}_s e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}. \tag{20}$$

因此，我们有

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}\hat{O}_I(t) &= \frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\hat{O}_s e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} + e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\hat{O}_s e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0\right) \\
&= \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}_0,\, \hat{O}_I(t)\right]. \qquad (21)
\end{aligned}$$

我们还是以 $\hat{C}_{\mathbf{k}I}(t)$ 为例。此时，我们有

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{C}_{\mathbf{k}I}(t) = \frac{i}{\hbar}\left[\sum_{\mathbf{k}_1}\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m}\hat{C}^\dagger_{\mathbf{k}_1 I}(t)\hat{C}_{\mathbf{k}_1 I}(t),\, \hat{C}_{\mathbf{k}I}(t)\right] = \frac{i}{\hbar}(-1)\frac{\hbar^2 k^2}{2m}\hat{C}_{\mathbf{k}I}(t). \tag{22}$$

因此，

$$\hat{C}_{\mathbf{k}I}(t) = \hat{C}_{\mathbf{k}I}(t_0)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\epsilon_{\mathbf{k}}(t-t_0)\right), \quad \epsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \tag{23}$$

同理，我们有

$$\hat{C}^\dagger_{\mathbf{k}I}(t) = \hat{C}^\dagger_{\mathbf{k}I}(t_0)\exp\left(\frac{i}{\hbar}\epsilon_k(t-t_0)\right). \tag{24}$$

由此，我们可得对易关系

$$\begin{aligned}
&\hat{C}_{\mathbf{k}I}(t)\hat{C}^\dagger_{\mathbf{k}'I}(t') + \hat{C}^\dagger_{\mathbf{k}'I}(t')\hat{C}_{\mathbf{k}I}(t) \\
=\ &\left(\hat{C}_{\mathbf{k}I}(t_0)\hat{C}^\dagger_{\mathbf{k}'I}(t_0) + \hat{C}^\dagger_{\mathbf{k}'I}(t_0)\hat{C}_{\mathbf{k}I}(t_0)\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\epsilon_{\mathbf{k}}(t-t_0) + \frac{i}{\hbar}\epsilon_{\mathbf{k}'}(t'-t_0)\right) \\
=\ &\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\epsilon_{\mathbf{k}}(t'-t)\right). \qquad (25)
\end{aligned}$$

$ 2.1 微扰的形式理论

在散射问题中，我们考虑如下的哈密顿量

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}. \tag{26}$$

这里， $\hat{H}_0$ 只具有行波形式的本征态 (这与一般的微扰论是不同的) 。它们表示在没有相互作用下的处于自由状态的入射粒子态以及散射粒子态。$\hat{V}$ 代表碰撞粒子之间的相互作用势。

在处理散射问题时，采用相互作用表象是比较方便的。在这一表象中，波函数和算符都是时间的函数，而 Schrödinger 方程则可以改写为

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_I(t) = \hat{V}_I(t)\psi_I(t). \tag{27}$$

这里

$$\hat{V}_I(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\hat{V}(x)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}. \tag{28}$$

令

$$\psi_I(t) = \hat{U}(t,\, t_0)\psi_I(t_0) \tag{29}$$

代入 Schrödinger 方程后，我们有

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_I(t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t,\, t_0)\psi_I(t_0) = \hat{V}_I(t)\hat{U}(t,\, t_0)\psi_I(t_0), \tag{30}$$

即

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t,\, t_0) = \hat{V}_I(t)\hat{U}(t,\, t_0). \tag{31}$$

为了解这一方程，我们必须对之加上初条件 $\hat{U}(t_0,\, t_0) = \hat{I}$ 。

2.1.1 算符 $\hat{U}(t,\, t_0)$ 的一般性质

(1) 根据 $\hat{U}(t,\, t_0)$ 的定义，我们有

$$\psi_I(t) = \hat{U}(t,\, t_1)\psi_I(t_1) = \hat{U}(t,\, t_1)\hat{U}(t_1,\, t_0)\psi_I(t_0) = \hat{U}(t,\, t_0)\psi_I(t_0). \tag{32}$$

因此，我们要求

$$\hat{U}(t,\, t_0) = \hat{U}(t,\, t_1)\hat{U}(t_1,\, t_0). \tag{33}$$

成立。

(2) 另一方面，由几率守恒，我们应有

$$\begin{aligned}\langle\psi_I(t)|\psi_I(t)\rangle &= \langle\hat{U}(t,\, t_0)\psi_I(t_0)|\hat{U}(t,\, t_0)\psi_I(t_0)\rangle \\ &= \langle\psi_I(t_0)|\hat{U}^\dagger(t,\, t_0)\hat{U}(t,\, t_0)\psi_I(t_0)\rangle = \langle\psi_I(t_0)|\psi_I(t_0)\rangle = 1.\end{aligned} \tag{34}$$

因此我们要求

$$\hat{U}^{\dagger}(t,\, t_0)\hat{U}(t,\, t_0) = \hat{I}. \tag{35}$$

2.1.2 $\hat{U}(t,\, t_0)$ 的形式解

形式地讲，$\hat{U}(t,\, t_0)$ 可以从 Schrödinger 方程中解出来。我们有

$$\hat{U}(t,\, t_0) = \hat{I} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, \hat{V}_I(t')\hat{U}(t',\, t_0). \tag{36}$$

但由于 $\hat{U}(t, t_0)$ 同时出现在方程的两边，因此这一形式解没有任何实际用途。在解决实际散射问题时，我们总可以将 $\hat{V}_I(t')$ 认为是一个微扰，而对上式做微扰展开。

(1) 首先取近似解 $\hat{U}^{(0)} = \hat{I}$ 。则我们得到

$$\hat{U}^{(1)}(t,\, t_0) \approx \hat{I} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, \hat{V}_I(t')\hat{U}^{(0)}(t',\, t_0) = \hat{I} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, \hat{V}_I(t'). \tag{37}$$

(2) 再将近似解 $U^{(1)}$ 代入上方程 (36) 后，我们得到

$$\begin{aligned}\hat{U}^{(2)}(t,\, t_0) &\approx \hat{I} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, \hat{V}_I(t')\hat{U}^{(1)}(t',\, t_0) \\ &= \hat{I} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, \hat{V}_I(t') + \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^{t} dt'\, \hat{V}_I(t') \int_{t_0}^{t'} dt''\, \hat{V}_I(t'').\end{aligned} \tag{38}$$

(3) 将此迭代进行无穷多次后我们得到

$$\begin{aligned}\hat{U}(t,\, t_0) &= \hat{I} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, \hat{V}_I(t') + \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^{t} dt'\, \hat{V}_I(t') \int_{t_0}^{t'} dt''\, \hat{V}_I(t'') \\ &- \left(\frac{i}{\hbar}\right)^3 \int_{t_0}^{t} dt'\, \hat{V}_I(t') \int_{t_0}^{t'} dt''\, \hat{V}_I(t'') \int_{t_0}^{t''} dt'''\, \hat{V}_I(t''') + \cdots \\ &= \hat{I} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, \hat{V}_I(t') + \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt''\, \hat{V}_I(t')\hat{V}_I(t'') \\ &- \left(\frac{i}{\hbar}\right)^3 \int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \int_{t_0}^{t''} dt'''\, \hat{V}_I(t')\hat{V}_I(t'')\hat{V}_I(t''') + \cdots\end{aligned} \tag{39}$$

在实际工作中，为了将上面的展开式写成一个更为紧凑的形式，我们引入所谓编时算符 $\hat{P}$ 。它定义如下

$$\hat{P}\left(\hat{V}_I(t_1)\cdots\cdots\hat{V}_I(t_n)\right) = \hat{V}_I(t_i)\hat{V}_I(t_j)\cdots\cdots\hat{V}_I(t_r). \tag{40}$$

这里 $t_i > t_j > \cdots\cdots > t_r$ ，即算符按时间先后从左到右排列。

先让我们看一个特例 (示意图见教科书 550 页)

$$
\begin{aligned}
& \hat{P}\int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t} dt'' \left(\hat{V}_I(t')\hat{V}_I(t'')\right) \\
= \ & \hat{P}\left\{\int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \left(\hat{V}_I(t')\hat{V}_I(t'')\right) + \int_{t_0}^{t} dt' \int_{t'}^{t} dt'' \left(\hat{V}_I(t')\hat{V}_I(t'')\right)\right\} \\
= \ & \int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt''\, \hat{V}_I(t')\hat{V}_I(t'') + \int_{t_0}^{t} dt' \int_{t'}^{t} dt''\, \hat{V}_I(t'')\hat{V}_I(t') \\
= \ & \int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt''\, \hat{V}_I(t')\hat{V}_I(t'') + \int_{t_0}^{t} dt'' \int_{t_0}^{t''} dt'\, \hat{V}_I(t'')\hat{V}_I(t') \\
= \ & 2\int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt''\, \hat{V}_I(t')\hat{V}_I(t'').
\end{aligned} \tag{41}
$$

实际上，我们可以证明

$$
\begin{aligned}
& \hat{P}\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t} dt_n\, \hat{V}_I(t_1)\hat{V}_I(t_2)\cdots\cdots\hat{V}_I(t_n) \\
= \ & n!\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n\, \hat{V}_I(t_1)\cdots\cdots\hat{V}_I(t_n).
\end{aligned} \tag{42}
$$

因此，我们可以将 $\hat{U}(t,\, t_0)$ 写作如下的形式

$$
\begin{aligned}
\hat{U}(t,\, t_0) &= \hat{I} - \left(\frac{i}{\hbar}\right)\hat{P}\int_{t_0}^{t} dt_1\, \hat{V}_I(t_1) + \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \frac{1}{2!}\hat{P}\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t} dt_2\, \hat{V}_I(t_1)\hat{V}_I(t_2) + \cdots \\
&= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \hat{P}\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t} dt_n\, \hat{V}_I(t_1)\cdots\hat{V}_I(t_n) \\
&\equiv \hat{P}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, \hat{V}_I(t')\right).
\end{aligned} \tag{43}
$$

我们上面推得的公式，实际上是微扰论的一个普遍表达式。有了这个表达式以后，我们形式地写出

$$
\psi_I(t) = \hat{U}(t,\, t_0)\psi_I(t_0). \tag{44}
$$

为了进一步简化问题，我们可以令 $t_0 \to -\infty$ 。这样， $\psi_I(-\infty)$ 就成为了与时间无关的初始波函数，并且有

$$
\psi_I(t) = \hat{U}(t, -\infty)\psi_I(-\infty). \tag{45}
$$

问题是如何选取 $\psi_I(-\infty)$ 。为此，让我们看一个散射问题。

我们知道，当 $t\to-\infty$ 时，两个粒子互相远离。此时，我们有 $V\sim 0$ 。这时，入射粒子可认为是自由的。因此，一个很自然的想法是取 $\psi_I(-\infty)$ 为 $\hat{H}_0$ 的一个本征态，即取 $\psi_I(-\infty)=\phi_\alpha=\frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\vec{k}_\alpha\cdot\vec{r}}$ 。它不含时间 t 。

那么对于一般的微扰问题，我们是否仍然可以这样做呢？答案是否定的。显然，对于谐振子体系加上微扰后，我们无法论证当 $t\to-\infty$ 时， $V\to 0$ 。因此也就无法取 $\psi_I(-\infty)$ 为 $\hat{H}_0$ 的本征态。为了克服这一困难，我们人为地引入一个因子 $e^{-s|t|}$ ，并令

$$\hat{V}_s(t)=\hat{V}(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)e^{-s|t|},\quad s>0. \tag{46}$$

需要强调的是，尽管 $\hat{V}_s(t)$ 显含时间，但它仍是 Schrödinger 表象中的算符。在相互作用表象中，它具有形式

$$\hat{V}_I(t)=e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t}\hat{V}_se^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t}=e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t}\hat{V}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t}e^{-s|t|}. \tag{47}$$

这样做了以后，我们看到，当 $t\to-\infty$ 时， $\hat{V}_s(t)\to 0$ 。而 $\hat{V}_s(t=0)=V$ 。换句话说，人们是在调节一个“旋钮”，将相互作用慢慢地引入体系。这一办法称为绝热近似。取了这一近似之后，我们现在可以取

$$\psi_I(t=-\infty)=\phi_\alpha \tag{48}$$

了。这里 ϕ_α 为单个谐振子波函数。

注：所谓绝热近似，是指当 $\hat{V}_s(t)$ 改变时，体系在每一时刻都处于平衡状态。更精确一点讲，就是体系不会由于“调节旋钮”的缘故而从体系的基态跃迁到一个激发态。我们知道，根据测不准关系

$$\delta E\cdot\delta t\sim\hbar, \tag{49}$$

当 δt 很小，即“调节”过快时， δE 会变得很大。因此，体系有一定的几率从原来的态跃迁到另外一个态去。为了减小这一几率，我们就要求 δt 尽可能得大，即变化速度尽可能得慢。从定义 $\hat{V}_s=Ve^{-s|t|}$ 来看，也就是要求 s 尽可

能地小。 s 称为绝热近似参数。在实际计算中，我们总是在计算的最后一步令 $s\to 0$ 。因此，在做了绝热近似后，我们现在有

$$\psi_I(t,s)\equiv \hat{U}(t,-\infty)\psi_I(-\infty). \tag{50}$$

而 $\psi_I(-\infty)$ 可取作 $\hat{H}_0$ 的本征态。

我们现在考察两个特例。

例 2.1: 散射问题

在这一问题中，我们主要关心的是散射后粒子远离散射中心后的渐近行为，即当 $t\to+\infty$ 时的波函数 $\psi_I(+\infty)$ 的行为。从物理意义考虑， $\psi_I(+\infty)$ 也应该为 $\hat{H}_0$ 的一个本征函数。而应研究的算符为

$$\hat{S}\equiv \hat{U}(+\infty,\,-\infty). \tag{51}$$

例 2.2: 一般微扰问题

此时，我们要将相互作用绝热地引进体系，并在 $t=0$ 时让它达到最大值。因此，我们感兴趣的波函数为

$$\psi_I(0,s)=\hat{U}(0,\,-\infty)\psi_I(-\infty). \tag{52}$$

而 $\psi_I(-\infty)$ 应取作 $\hat{H}_0$ 的本征波函数。

$ 2.2 **散射矩阵**

先让我们考虑有限力程的情况，即当 $r>R$ 时，有 $\hat{V}(r)=0$ 。在 $t\to-\infty$ 时，入射粒子与靶粒子相距很远，相互作用可以不用考虑。体系状态用 $|\psi(-\infty)\rangle$ 加以描述。同样，在两个粒子碰撞之后，彼此将远远离开，相互作用也不用考虑。体系状态用 $|\psi(t=+\infty)\rangle$ 描述。这两个态之间用算符 $\hat{U}(+\infty,\,-\infty)$ 联系，即

$$|\psi(+\infty)\rangle=\hat{U}(+\infty,\,-\infty)|\psi(-\infty)\rangle. \tag{53}$$

我们定义

$$\hat{S}=\hat{U}(\infty,\,-\infty)=\lim_{\substack{t\to+\infty\\ t_0\to-\infty}}\hat{U}(t,\,t_0) \tag{54}$$

为散射算符。所有有关这一散射过程的信息都应该被包含在这一算符中。

注：上面我们形式地定义了散射矩阵。实际上，这里涉及到一个数学上收敛的问题。在通常情况下，若不做特殊处理，当 $t_0 \to -\infty$ 及 $t \to +\infty$ 时，$\hat{U}(t, t_0)$ 是不收敛的。考虑到 $t \to \pm\infty$ 时，粒子离开很远，我们可以假设 $\hat{V}(t) \to 0$ 。因此，在形式上，我们也可以引入绝热近似，并将 $\hat{V}$ 写作 $\hat{V} \to \hat{V}e^{-s|t|}$ ，以避免计算过程中的困难。在计算的最后一步，我们令 $s \to 0^+$ 。

根据它的定义，散射算符显然也是一个酉正算符，即我们有

$$\hat{S}^\dagger \hat{S} = \hat{I}. \tag{55}$$

为了将散射算符写成一个矩阵的形式，我们取 $\hat{H}_0$ 的一组完备本征态。根据绝热假设，$|\psi_I(+\infty)\rangle$ 和 $|\psi_I(-\infty)\rangle$ 皆可依照这组完备本征态做展开。因此，我们有

$$|\psi(-\infty)\rangle = \sum_\alpha a_\alpha |\varphi_\alpha\rangle, \quad |\psi(+\infty)\rangle = \sum_\beta b_\beta |\varphi_\beta\rangle. \tag{56}$$

而关系式 $|\psi(+\infty)\rangle = \hat{S}|\psi(-\infty)\rangle$ 等价于

$$\sum_\beta b_\beta |\varphi_\beta\rangle = \sum_\alpha a_\alpha \hat{S}|\varphi_\alpha\rangle = \sum_\beta \sum_\alpha a_\alpha |\varphi_\beta\rangle\langle\varphi_\beta|\hat{S}|\varphi_\alpha\rangle. \tag{57}$$

令 $\langle\varphi_\beta|\hat{S}|\varphi_\alpha\rangle = S_{\beta\alpha}$ 为散射矩阵元，则上式可被写为

$$\sum_\beta b_\beta |\varphi_\beta\rangle = \sum_{\alpha\beta} S_{\beta\alpha} a_\alpha |\varphi_\beta\rangle. \tag{58}$$

因此，我们得到

$$b_\beta = \sum_\alpha S_{\beta\alpha} a_\alpha. \tag{59}$$

而 $|b_\beta|^2$ 给出末态处于 φ_β 的几率。

在实际的实验工作中，人们常常取初态 $|\psi(-\infty)\rangle$ 为 $\hat{H}_0$ 的一个本征态 φ_{α_0} 。即令 $a_\alpha = \delta_{\alpha,\alpha_0}$ 。此时，我们有

$$b_\beta = S_{\beta\alpha_0}. \tag{60}$$

所以，$|S_{\beta\alpha_0}|^2$ 代表从初态 φ_{α_0} 跳迁到末态 φ_β 的几率。按照几率守恒原理，我们应有

$$\sum_\beta |b_\beta|^2 = \sum_\beta |S_{\beta\alpha_0}|^2 = \sum_\beta S^*_{\beta\alpha_0} S_{\beta\alpha_0} = \sum_\beta S^\dagger_{\alpha_0\beta} S_{\beta\alpha_0} = 1. \tag{61}$$

这是 $\hat{S}$ 矩阵酉正性的具体表达式。

通常所指的跳迁几率，是指末态不同于初态时的情况。为此，我们定义跳迁算符为

$$\hat{T} = \hat{S} - \hat{I}. \tag{62}$$

当 $\beta \neq \alpha$ 时， $S_{\beta\alpha} = T_{\beta\alpha}$ 。所以跳迁几率也可以表示成

$$W_{\beta\alpha} = |S_{\beta\alpha}|^2 = |T_{\beta\alpha}|^2, \ \ \beta \neq \alpha. \tag{63}$$

\$ 2.3 $\hat{S}$ 矩阵的微扰论展开

形式上，我们可以把散射算符 $\hat{S}$ 表示为

$$\begin{aligned}\hat{S} &= \hat{U}(+\infty,\, -\infty) = \lim_{\substack{t_0\to-\infty\\ t\to+\infty}} \hat{U}(t,\, t_0) = \hat{P}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dt\, \hat{V}_I(t)\right)\\ &= \sum_{n=0}^{\infty} S^{(n)} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \hat{P}\int_{-\infty}^{\infty} dt_1\, \int_{-\infty}^{\infty} dt_2\, \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dt_n\, \hat{V}_I(t_1)\cdots\hat{V}_I(t_n).\end{aligned} \tag{64}$$

因此，散射矩阵元可以写作

$$S_{\beta\alpha} = \sum_{n=0}^{\infty} S^{(n)}_{\beta\alpha}. \tag{65}$$

下面，我们逐级求出散射矩阵。

对于零级近似，我们有 $S^{(0)} = \hat{I}$ 。因此

$$S^{(0)}_{\beta\alpha} = \delta_{\beta\alpha}. \tag{66}$$

对于一级近似，我们有

$$\begin{aligned}S^{(1)}_{\beta\alpha} &= -\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dt'\, \langle\varphi_\beta|\hat{V}_I(t')|\varphi_\alpha\rangle\\ &= -\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dt'\, \langle\varphi_\beta|e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t'}\hat{V}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t'}e^{-s|t'|}|\varphi_\alpha\rangle\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= -\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dt'\, e^{\frac{it'}{\hbar}(E_\beta-E_\alpha)-s|t'|}\langle\varphi_\beta|\hat{V}|\varphi_\alpha\rangle \\
&= -\frac{i}{\hbar}\langle\varphi_\beta|\hat{V}|\varphi_\alpha\rangle\left(\int_0^{\infty} e^{\frac{it'}{\hbar}(E_\beta-E_\alpha)-st'}dt' + \int_{-\infty}^{0} e^{\frac{it'}{\hbar}(E_\beta-E_\alpha)+st'}dt'\right) \\
&= -\frac{i}{\hbar}V_{\beta\alpha}\left(\left.\frac{e^{\frac{it'}{\hbar}(E_\beta-E_\alpha)-st'}}{\frac{i}{\hbar}(E_\beta-E_\alpha)-s}\right|_0^{\infty} + \left.\frac{e^{\frac{it'}{\hbar}(E_\beta-E_\alpha)+st'}}{\frac{i}{\hbar}(E_\beta-E_\alpha)+s}\right|_{-\infty}^{0}\right) \\
&= -\frac{i}{\hbar}V_{\beta\alpha}\left(-\frac{1}{\frac{i}{\hbar}(E_\beta-E_\alpha)-s}+\frac{1}{\frac{i}{\hbar}(E_\beta-E_\alpha)+s}\right) \\
&= -\frac{i}{\hbar}V_{\beta\alpha}\frac{2s}{s^2+\frac{(E_\beta-E_\alpha)^2}{\hbar^2}}.
\end{aligned}
\tag{67}
$$

从数学物理方法课程中，我们知道 (证明见本章后的附录一)

$$
\lim_{s\to 0}\frac{1}{\pi}\frac{s}{s^2+x^2}=\delta(x). \tag{68}
$$

因此，在取极限 $s\to 0^+$ 后，我们有

$$
S^{(1)}_{\beta\alpha} = -\frac{i}{\hbar}V_{\beta\alpha}2\pi\delta\left(\frac{E_\beta-E_\alpha}{\hbar}\right). \tag{69}
$$

又由于

$$
\delta(ax)=\frac{1}{a}\delta(x), \tag{70}
$$

我们最后得到

$$
S^{(1)}_{\beta\alpha} = -\frac{i}{\hbar}V_{\beta\alpha}2\pi\hbar\delta(E_\beta-E_\alpha) = -2\pi i V_{\beta\alpha}\delta(E_\beta-E_\alpha). \tag{71}
$$

同理，我们可计算 $S^{(2)}_{\beta\alpha}$ 。

$$
\begin{aligned}
S^{(2)}_{\beta\alpha} &= \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2\int_{-\infty}^{\infty}dt'\int_{-\infty}^{t'}dt''\,\langle\varphi_\beta|\hat{V}_I(t')\hat{V}_I(t'')|\varphi_\alpha\rangle \\
&= \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2\int_{-\infty}^{\infty}dt'\int_{-\infty}^{t'}dt''\,\langle\varphi_\beta|e^{i\hat{H}_0t'/\hbar}\hat{V}e^{-i\hat{H}_0t'/\hbar}e^{-s|t'|}e^{i\hat{H}_0t''/\hbar}Ve^{-i\hat{H}_0t''/\hbar}e^{-s|t''|}|\varphi_\alpha\rangle \\
&= \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2\int_{-\infty}^{\infty}dt'\int_{-\infty}^{t'}dt''\,\sum_\gamma e^{iE_\beta t'/\hbar-iE_\gamma t'/\hbar-s|t'|+iE_\gamma t''/\hbar-iE_\alpha t''/\hbar-s|t''|} \\
&\times\ \langle\varphi_\beta|\hat{V}|\varphi_\gamma\rangle\langle\varphi_\gamma|\hat{V}|\varphi_\alpha\rangle.
\end{aligned}
\tag{72}
$$

这里，对于 t'' 的积分，我们必须分下面两种情况予以考虑。

(1) 当 $t' \leq 0$ 时， $t'' \leq t' \leq 0$ 。此时我们有

$$\int_{-\infty}^{t'} dt''\, e^{\frac{it''}{\hbar}(E_\gamma - E_\alpha)+st''} = \left.\frac{e^{\frac{it''}{\hbar}(E_\gamma - E_\alpha)+st''}}{\frac{i}{\hbar}(E_\gamma - E_\alpha)+s}\right|_{-\infty}^{t'} = \frac{e^{\frac{it'}{\hbar}(E_\gamma - E_\alpha)+st'}}{\frac{i}{\hbar}(E_\gamma - E_\alpha)+s}. \tag{73}$$

(2) 当 $t' \geq 0$ 时，我们则有

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{t'} dt''\, e^{\frac{i}{\hbar}(E_\gamma - E_\alpha)t'' - s|t''|} \\ = & \int_{-\infty}^{0} dt''\, e^{\frac{i}{\hbar}(E_\gamma - E_\alpha)t'' + st''} + \int_{0}^{t'} dt''\, e^{\frac{i}{\hbar}(E_\gamma - E_\alpha)t'' - st''} \\ = & \frac{1}{\frac{i}{\hbar}(E_\gamma - E_\alpha)+s} + \frac{1}{\frac{i}{\hbar}(E_\gamma - E_\alpha)-s}\left(e^{\frac{i}{\hbar}(E_\gamma - E_\alpha)t' - st'} - 1\right). \end{aligned} \tag{74}$$

在第二项中，我们应用等式

$$\frac{1}{ix-\epsilon} - \frac{1}{ix+\epsilon} = -2\pi\delta(x), \tag{75}$$

后得到

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{t'} dt''\, e^{\frac{i}{\hbar}(E_\gamma - E_\alpha)t'' - s|t''|} \\ = & \frac{1}{\frac{i}{\hbar}(E_\gamma - E_\alpha)+s} + \frac{1}{\frac{i}{\hbar}(E_\gamma - E_\alpha)+s}\left(e^{\frac{i}{\hbar}(E_\gamma - E_\alpha)t' - st'} - 1\right) \\ - & 2\pi\delta\left(\frac{E_\gamma - E_\alpha}{\hbar}\right)\left(e^{\frac{i}{\hbar}(E_\gamma - E_\alpha)t' - st'} - 1\right). \end{aligned} \tag{76}$$

注意到，在最后一项中，δ 函数的存在要求 $E_\gamma - E_\alpha = 0$ 。因此，在极限 $s \to 0^+$ 的情况下，最后一项恒为零。我们得到

$$\int_{-\infty}^{t'} dt''\, e^{\frac{i}{\hbar}(E_\gamma - E_\alpha)t'' - s|t''|} = \frac{e^{\frac{it'}{\hbar}(E_\gamma - E_\alpha)-st'}}{\frac{i}{\hbar}(E_\gamma - E_\alpha)+s}. \tag{77}$$

将它们代入 $S_{\beta\alpha}^{(2)}$ 的表达式后有

$$\begin{aligned} S_{\beta\alpha}^{(2)} = & \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_\gamma \int_{-\infty}^{0} dt' \left(e^{\frac{it'}{\hbar}(E_\beta - E_\gamma)+st'}\right) \frac{e^{\frac{it'}{\hbar}(E_\gamma - E_\alpha)+st'}}{\frac{i}{\hbar}(E_\gamma - E_\alpha)+s} V_{\beta\gamma}V_{\gamma\alpha} \\ + & \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_\gamma \int_{0}^{\infty} dt' \left(e^{\frac{it'}{\hbar}(E_\beta - E_\gamma)-st'}\right) \frac{e^{\frac{it'}{\hbar}(E_\gamma - E_\alpha)-st'}}{\frac{i}{\hbar}(E_\gamma - E_\alpha)+s} V_{\beta\gamma}V_{\gamma\alpha} \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_\gamma \int_{-\infty}^{0} dt' \, \frac{e^{\frac{it'}{\hbar}(E_\beta - E_\alpha)+2st'}}{\frac{i}{\hbar}(E_\gamma - E_\alpha)+s} V_{\beta\gamma}V_{\gamma\alpha} \\
&+ \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_\gamma \int_{0}^{\infty} dt' \, \frac{e^{\frac{it'}{\hbar}(E_\beta - E_\alpha)-2st'}}{\frac{i}{\hbar}(E_\gamma - E_\alpha)+s} V_{\beta\gamma}V_{\gamma\alpha} \\
&= \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_\gamma \frac{V_{\beta\gamma}V_{\gamma\alpha}}{\frac{i}{\hbar}(E_\gamma - E_\alpha)+s} \left\{ \frac{1}{\frac{i}{\hbar}(E_\beta - E_\alpha)+2s} - \frac{1}{\frac{i}{\hbar}(E_\beta - E_\alpha)-2s} \right\} \\
&= \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_\gamma \left(\frac{V_{\beta\gamma}V_{\gamma\alpha}}{\frac{i}{\hbar}(E_\gamma - E_\alpha)+s} \right) \left(\frac{2(2s)}{\frac{1}{\hbar^2}(E_\beta - E_\alpha)^2+(2s)^2} \right) \\
&= \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_\gamma \frac{V_{\beta\gamma}V_{\gamma\alpha}}{\frac{i}{\hbar}(E_\gamma - E_\alpha)+s} 2\pi\delta\left(\frac{E_\beta - E_\alpha}{\hbar}\right) \\
&= \frac{(-1)}{\hbar^2}\cdot(i\hbar)\sum_\gamma \frac{V_{\beta\gamma}V_{\gamma\alpha}}{(E_\alpha - E_\gamma)+i\hbar s} 2\pi\delta(E_\beta - E_\alpha)\hbar \\
&= -2\pi i \sum_\gamma \langle\varphi_\beta|\hat{V}|\varphi_\gamma\rangle \frac{1}{E_\alpha - E_\gamma + i\epsilon} \langle\varphi_\gamma|\hat{V}|\varphi_\alpha\rangle \delta(E_\beta - E_\alpha). \qquad (78)
\end{aligned}
$$

利用单位分解公式

$$\hat{I} = \sum_\gamma |\varphi_\gamma\rangle\langle|\varphi_\gamma|, \qquad (79)$$

我们可以将上式改写作

$$S^{(2)}_{\beta\alpha} = -2\pi i\delta(E_\beta - E_\alpha)\left\langle \varphi_\beta \left| \hat{V}\frac{1}{E_\alpha - \hat{H}_0 + i\epsilon}\hat{V} \right| \varphi_\alpha \right\rangle. \qquad (80)$$

对于高阶项，我们亦可以类似地证明

$$S^{(n)}_{\beta\alpha} = -2\pi i\delta(E_\beta - E_\alpha)\left\langle \varphi_\beta \left| \hat{V}\frac{1}{E_\alpha - \hat{H}_0 + i\epsilon}\hat{V}\frac{1}{E_\alpha - \hat{H}_0 + i\epsilon}\hat{V}\cdots\cdots\hat{V} \right| \varphi_\alpha \right\rangle. \qquad (81)$$

因此，我们最后有

$$S_{\beta\alpha} = \delta_{\beta\alpha} - 2\pi i\delta(E_\beta - E_\alpha)\langle\varphi_\beta|\hat{t}|\varphi_\alpha\rangle. \qquad (82)$$

这里，

$$\hat{t} = \hat{V} + \hat{V}\frac{1}{E_\alpha - \hat{H}_0 + i\epsilon}\hat{V} + \hat{V}\frac{1}{E_\alpha - \hat{H}_0 + i\epsilon}\hat{V}\frac{1}{E_\alpha - \hat{H}_0 + i\epsilon}\hat{V} + \cdots \qquad (83)$$

而条件 $E_\beta = E_\alpha$ 称为“在壳” (on shell) 条件。

$ 2.4 **散射截面**

在散射过程中，从初态 φ_α 到末态 φ_β 的跳迁几率定义作

$$W_{\beta\alpha} = |T_{\beta\alpha}|^2 = (2\pi)^2|t_{\beta\alpha}|^2\delta^2(E_\beta - E_\alpha). \tag{84}$$

这一跳迁是从时刻 $t=-\infty$ 到 $t=+\infty$ 间隔内完成的。我们需要解释 $\delta^2(E_\beta - E_\alpha)$ 的意义。

按照定义，我们有

$$\begin{aligned}
& \delta^2(E_\beta - E_\alpha) = \delta(E_\beta - E_\alpha)\delta(E_\beta - E_\alpha) \\
= \;& \delta(E_\beta - E_\alpha)\lim_{s\to 0}\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dt\ \exp\left(\frac{i}{\hbar}(E_\alpha - E_\beta)t - s|t|\right) \\
= \;& \delta(E_\beta - E_\alpha)\lim_{s\to 0}\frac{1}{2\pi\hbar}\lim_{\tau\to\infty}\int_{-\tau}^{\tau} dt\ \exp\left(\frac{i}{\hbar}(E_\alpha - E_\beta)t - s|t|\right) \\
= \;& \delta(E_\beta - E_\alpha)\frac{1}{2\pi\hbar}\lim_{s\to 0}\lim_{\tau\to\infty}\int_{-\tau}^{\tau} dt\, e^{-s|t|} \\
= \;& \delta(E_\beta - E_\alpha)\frac{1}{2\pi\hbar}\lim_{\tau\to\infty}(2\tau).
\end{aligned} \tag{85}$$

将它代入公式 (84) 后，我们有

$$W_{\beta\alpha} = |T_{\beta\alpha}|^2 = (2\pi)^2|t_{\beta\alpha}|^2\delta(E_\beta - E_\alpha)\frac{1}{2\pi\hbar}\lim_{\tau\to\infty}2\tau. \tag{86}$$

由此，我们可以定义单位时间内的跳迁几率为

$$w_{\beta\alpha} = \lim_{\tau\to\infty}\frac{W_{\beta\alpha}}{(2\tau)} = \frac{(2\pi)^2}{2\pi\hbar}|t_{\beta\alpha}|^2\delta(E_\beta - E_\alpha) = \frac{2\pi}{\hbar}|t_{\beta\alpha}|^2\delta(E_\beta - E_\alpha). \tag{87}$$

这是散射理论的一个基本公式。特别是，当取 $\hat{t}\approx\hat{V}$ 时，我们得到玻恩近似公式

$$w_{\beta\alpha} = \frac{2\pi}{\hbar}|V_{\beta\alpha}|^2\delta(E_\beta - E_\alpha). \tag{88}$$

为了计算散射截面，我们需要求出从初态 φ_α 到散射末态的单位时间内的总散射几率。它被定义作将 $w_{\beta\alpha}$ 对于满足条件 $E_\alpha = E_\beta$ 的所有可能的末态求和。我们有

$$\begin{aligned}
& w_{fi} \equiv \sum_\beta w_{\beta\alpha} = \frac{2\pi}{\hbar}\sum_\beta |t_{\beta\alpha}|^2\delta(E_\beta - E_\alpha) \\
\cong \;& \frac{2\pi}{\hbar}|t_{fi}|^2\sum_\beta \delta(E_\beta - E_\alpha) = \frac{2\pi}{\hbar}|t_{fi}|^2\mathcal{R}(E_f).
\end{aligned} \tag{89}$$

这里，我们假设了，在公式 (89) 中，从初态 $\varphi_i = \varphi_\alpha$ 到所有末态的跳迁矩阵元 $t_{\beta\alpha}$ 都是相同的，并且等于 t_{fi} 。而 $\mathcal{R}(E_f)$ 则为满足能量守恒条件的所有末态的个数。

在散射问题中，人们感兴趣的是以一定动量 $\hbar\mathbf{k}_i$ 入射的粒子，被散射到以 $\mathbf{k}_f$ 方向为轴的立体角度 $d\omega$ 中去的几率。为此，人们将相关的散射截面定义作

$$d\sigma_{fi}(\mathbf{k}_i,\, \mathbf{k}_f) = \sum_\beta{}' \, d\sigma_{\beta\alpha}(\mathbf{k}_i,\, \mathbf{k}_f) = \sum_\beta{}' \, \frac{w_{\beta\alpha}}{j_i}. \tag{90}$$

这里， $\sum_\beta'$ 表示仅对于满足条件 $E_\beta = E_\alpha$ ，而 $\mathbf{k}_\beta$ 又处于以 $\mathbf{k}_f$ 为轴心的立体角为 $d\omega$ 的锥体内的末态求和。 $j_i = |\mathbf{j}_i|$ 则为入射粒子的流密度。利用自由粒子波函数的箱归一化形式

$$\varphi_{\mathbf{k}_i} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}_i\cdot\mathbf{r}}, \tag{91}$$

我们得到这一入射流密度

$$j_i = |\mathbf{j}_i| = \frac{1}{2\mu}\left|\varphi_i^* \frac{\hbar}{i}\nabla\varphi_i - \left(\frac{\hbar}{i}\nabla\varphi_i\right)^* \varphi_i\right| = \frac{2p_i}{2\mu V} = \frac{v_i}{V}. \tag{92}$$

在实际计算中，常将 $\mathbf{k}_i$ 的方向取作直角坐标系的 z 轴。

现在，我们要来计算公式 (90) 中的分子。不难看出，它应该等于

$$\sum_\beta{}' \, w_{\beta i} = w_{fi}\big|_{\Omega = \hat{\mathbf{k}}_f d\omega} = \frac{2\pi}{\hbar}|t_{fi}|^2 \mathcal{R}'(E_f). \tag{93}$$

这里，末态个数 $\mathcal{R}'(E_f)$ 由仅对于能量等于初态能量 E_i ，但出射方向局限在以 $\mathbf{k}_f$ 为轴心的立体角 $d\omega$ 的锥体内的末态求和给出。即我们有

$$\mathcal{R}'(E_f) = \sum_{\mathbf{k}_\beta\in\Omega} \delta(E_i - E_\beta). \tag{94}$$

将关系式 $E_i = \hbar^2 k_i^2/2\mu$ 和 $E_\beta = \hbar^2 k_\beta^2/2\mu$ 代入后，我们得到

$$\mathcal{R}'(E_f) = \sum_{\mathbf{k}_\beta\in\Omega} \delta\left(\frac{\hbar^2 k_i^2}{2\mu} - \frac{\hbar^2 k_\beta^2}{2\mu}\right) = \sum_{\mathbf{k}_\beta\in\Omega} \frac{1}{\hbar^2 k_i/\mu}\delta\left(k_i - k_\beta\right) = \sum_{\mathbf{k}_\beta\in\Omega} \frac{1}{\hbar v_i}\delta\left(k_i - k_\beta\right). \tag{95}$$

为了进一步简化上式，我们需要使用下面的恒等式

$$\lim_{V\to\infty}\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}}f(\mathbf{k})=\frac{1}{(2\pi)^3}\int d\mathbf{k}\,f(\mathbf{k}).\tag{96}$$

它的证明如下。

首先，我们有

$$\sum_{\mathbf{k}}f(\mathbf{k})=\sum_{\mathbf{k}}f(\mathbf{k})\frac{\Delta\mathbf{k}}{\Delta\mathbf{k}}.\tag{97}$$

这里， $\Delta\mathbf{k}=\Delta k_x\Delta k_y\Delta k_z=\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3$ 。将它代入上式，然后两边同除 $L^3=V$ ，我们得到

$$\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}}f(\mathbf{k})=\frac{1}{(2\pi)^3}\sum_{\mathbf{k}}f(\mathbf{k})\Delta\mathbf{k}.\tag{98}$$

现在令 $L\to\infty$(等价于 $\Delta\mathbf{k}\to 0$) ，既可得到所要的公式。

利用这一公式，我们可以将 $\mathcal{R}'(E_f)$ 进一步写作

$$\begin{aligned}\mathcal{R}'(E_f) &= V\,\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}_\beta\in\Omega}\frac{1}{\hbar v_i}\delta\left(k_i-k_\beta\right)=V\frac{1}{(2\pi)^3}\int_\Omega\frac{1}{\hbar v_i}\delta\left(k_i-k_\beta\right)d\mathbf{k}_\beta\\ &= V\frac{1}{(2\pi)^3}\int_0^\infty\frac{1}{\hbar v_i}\delta\left(k_i-k_\beta\right)k_\beta^2dk_\beta d\omega=V\frac{1}{(2\pi)^3}\frac{1}{\hbar v_i}k_i^2d\omega\\ &= V\frac{1}{(2\pi)^3}\frac{p_i^2}{\hbar^3v_i}d\omega.\end{aligned}\tag{99}$$

最后，将它代入 $w_{fi}|_\Omega$ 的表达式 (93) ，我们得到

$$w_{fi}|_\Omega=\frac{2\pi}{\hbar}|t_{fi}|^2V\frac{1}{(2\pi)^3}\frac{p_i^2}{\hbar^3v_i}d\omega.\tag{100}$$

因此，我们最后得到散射截面的表达式为

$$d\sigma(\mathbf{k}_i,\,\mathbf{k}_f)=\frac{2\pi}{\hbar}|t_{fi}|^2V\frac{1}{(2\pi)^3}\frac{p_i^2}{\hbar^3v_i}d\omega\left(\frac{v_i}{V}\right)^{-1}=\frac{\mu^2}{4\pi^2\hbar^4}|t_{fi}|^2V^2d\omega.\tag{101}$$

在上面的表达式中，因子 V^2 的出现似乎使得热力学极限成为不可能，实际上，这一问题可以很容易地加以解决。为此，让我们再仔细考察一下 t_{fi} 。按照定义，它可以被写作

$$t_{fi}=\int d\mathbf{r}\varphi^*_{\mathbf{k}_f}(\mathbf{r})\,\hat{t}\,\varphi_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r})=\int\frac{1}{\sqrt{V}}\exp\left(-i\mathbf{k}_f\cdot\mathbf{r}\right)\,\hat{t}\,\frac{1}{\sqrt{V}}\exp\left(i\mathbf{k}_i\cdot\mathbf{r}\right)d\mathbf{r}\equiv\frac{1}{V}\tilde{t}_{fi}.\tag{102}$$

因此，代入公式 (101) 后，我们最后得到

$$\frac{d\sigma}{d\omega}(\mathbf{k}_i,\ \mathbf{k}_f) = \frac{\mu^2}{4\pi^2\hbar^4}|\widetilde{t}_{fi}|^2. \tag{103}$$

它不再显含体积 V 。

§ 2.5 **中心力场中的散射截面**

在中心力场散射问题中，我们可以利用体系的球对称性进一步简化计算。为此，我们引入新的波函数

$$\varphi_{E\mathbf{n}}(\mathbf{r}) = c\cdot e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \tag{104}$$

而将它的归一化条件定义作

$$\int \varphi^*_{E'\mathbf{n}'}(\mathbf{r})\varphi_{E\mathbf{n}}(\mathbf{r})d\mathbf{r} = \delta(E-E')\delta(\mathbf{n}-\mathbf{n}'). \tag{105}$$

由此，我们可以定出系数 c 。首先，我们有

$$\begin{aligned}
&\int \varphi^*_{E'\mathbf{n}'}(\mathbf{r})\varphi_{E\mathbf{n}}(\mathbf{r})d\mathbf{r} = |c|^2\int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}}d\mathbf{r}\\
= \;& |c|^2\frac{(2\pi)^3}{(2\pi)^3}\int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}}d\mathbf{r} = |c|^2(2\pi)^3\delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}'),
\end{aligned} \tag{106}$$

即

$$|c|^2\delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}') = \frac{1}{(2\pi)^3}\delta(E-E')\delta(\mathbf{n}-\mathbf{n}'). \tag{107}$$

另一方面，按照定义，我们又有

$$\begin{aligned}
&\int \delta(E-E')\delta(\mathbf{n}-\mathbf{n}')dEd\mathbf{n} = 1 = \int \delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\,d\mathbf{k}\\
= \;& \int \delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}')k^2dkd\mathbf{n} = \int \delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}')k^2\frac{dk}{dE}dEd\mathbf{n}\\
= \;& \int \delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\frac{k\mu}{\hbar^2}dEd\mathbf{n}.
\end{aligned} \tag{108}$$

因此，我们得到

$$\delta(\mathbf{k}-\vec{\mathbf{k}}') = \left(\frac{\hbar^2}{k\mu}\right)\delta(E-E')\delta(\mathbf{n}-\mathbf{n}'). \tag{109}$$

代入 $|c|^2$ 的表达式后，我们最后有

$$|c|^2 = \frac{k\mu}{(2\pi)^3\hbar^2}. \tag{110}$$

现在，弹性散射截面可以写作

$$\frac{d\sigma}{d\omega} = \frac{\mu^2}{4\pi^2\hbar^4}\frac{1}{|c|^4}|\langle E_f\mathbf{n}_f|\hat{t}|E_i\mathbf{n}_i\rangle|^2 = \frac{(2\pi)^4}{k^2}|\langle E_f\mathbf{n}_f|\hat{t}|E_i\mathbf{n}_i\rangle|^2. \tag{111}$$

$ 2.6 **分波法**

为了利用体系的对称性来简化计算，人们常选取一组守恒量完全集的共同本征态构造散射矩阵。这样做的好处是，若其中一部分量子数对于哈密顿量 $\hat{H}$ 是好量子数的话，则散射矩阵对于这部分量子数是对角化的。例如，在中心力场中，粒子的轨道角动量是一个好量子数。若我们以 $\hat{l}^2$ 和 $\hat{l}_z$ 的本征态 $|l,\,m\rangle$ 作为基矢的话，我们可以得到如下形式的 $\hat{S}$ 矩阵

$$\langle r',\,l',\,m'|\hat{S}|r,\,l,\,m\rangle = \langle r',\,l|\hat{S}|r,\,l\rangle\delta_{l'l}\delta_{m'm} = S^{(l)}_{r'r}\delta_{l'l}\delta_{m'm}. \tag{112}$$

式中， r 表示除了 $(l,\,m)$ 之外的其它量子数，例如能量。这一结论的证明如下。

首先，我们注意到，若一个量子力学量 $\hat{F}$ 是守恒量，则它与体系的哈密顿量 $\hat{H}$ 是对易的。即我们有

$$\left[\hat{F},\,\hat{H}\right] = 0. \tag{113}$$

另一方面，我们又有

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}e^{-s|t|}. \tag{114}$$

因此，若我们令 $t \to \pm\infty$ ，则上式给出

$$\left[\hat{F},\,\hat{H}_0\right] = 0. \tag{115}$$

因此， $\left[\hat{F},\,\hat{V}\right] = 0$ 也成立。故我们得到

$$\begin{aligned}
&\left[\hat{F},\,\hat{V}_I(t)\right] = \left[\hat{F},\,e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t}\hat{V}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t}\right] \\
= \;& \left[\hat{F},\,e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t}\right]\hat{V}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t} + e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t}\left[\hat{F},\,\hat{V}\right]e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t} + e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t}\hat{V}\left[\hat{F},\,e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t}\right] \\
= \;& 0.
\end{aligned} \tag{116}$$

由此式进一步导致了 $\hat{F}$ 是与 $\hat{S}$ 算符对易的结果。这是由于后者可以被写作

$$
\begin{aligned}
\hat{S} &= \sum_{n=0}^{\infty} \hat{S}^{(n)} \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{-\infty}^{\infty} dt' \int_{-\infty}^{t'} dt'' \cdots\cdots \int_{-\infty}^{t^{(n-1)}} dt^{(n)}\, \hat{V}_I(t')\hat{V}_I(t'') \cdots\cdots \hat{V}_I(t^{(n)}). \qquad (117)
\end{aligned}
$$

由于 $\hat{F}$ 与其中的每一个算符 $\hat{V}_I(t^{(n)})$ 皆对易，故它与 $\hat{S}$ 对易。

现在任取算符 $\hat{F}$ 的两个本征态 $|F_m\rangle$ 和 $|F_n\rangle$ 。则我们有

$$
\begin{aligned}
0 &= \langle F_m| \left[\hat{F},\, \hat{S}\right] |F_n\rangle \\
&= \langle F_m| \left[\hat{F},\, \hat{S}\right] |F_n\rangle = \langle F_m|\hat{F}\hat{S}|F_n\rangle - \langle F_m|\hat{S}\hat{F}|F_n\rangle \\
&= (F_m - F_n)\, \langle F_m|\hat{S}|F_n\rangle. \qquad (118)
\end{aligned}
$$

因此，若 $F_m \neq F_n$ ，我们必有

$$\langle F_m|\hat{S}|F_n\rangle = 0. \qquad (119)$$

也就是说

$$\langle F_m|\hat{S}|F_n\rangle = \langle F_n|\hat{S}|F_n\rangle \delta_{mn} = S(F_n)\delta_{mn}. \qquad (120)$$

现在，我们回到弹性散射 $(r = r' = \alpha)$ 的情况。在此表象中，我们有

$$
\begin{aligned}
\langle E_\alpha \mathbf{n}'|\hat{S}|E_\alpha \mathbf{n}\rangle &= \sum_{l,m}\sum_{l',m'} \langle \mathbf{n}'|l',m'\rangle\langle l',m'|\hat{S}_{\alpha\alpha}(E_i)|l,m\rangle\langle l,m|\mathbf{n}\rangle \\
&= \sum_{l,m}\sum_{l',m'} Y_{l'm'}(\mathbf{n}')Y^*_{lm}(\mathbf{n})S^{(l)}_{\alpha\alpha}(E_i)\delta_{l'l}\delta_{m'm} \\
&= \sum_{l,m} Y_{lm}(\mathbf{n}')Y^*_{lm}(\mathbf{n})S^{(l)}_{\alpha\alpha}(E_i). \qquad (121)
\end{aligned}
$$

(关于 Legendre 多项式与球谐函数的知识，可以参考曾谨言著 “量子力学 (卷 I)”522 页上的附录四) 。利用球谐函数的求和法则

$$\sum_m Y_{lm}(\mathbf{n}')Y^*_{lm}(\mathbf{n}) = \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\cos(\widehat{\mathbf{n},\mathbf{n}'})), \qquad (122)$$

(见 “量子力学 (卷 I)”527 页上的 (A4.43) 式) 又可将上式改写为

$$\langle E_\alpha \mathbf{n}'|\hat{S}|E_\alpha \mathbf{n}\rangle = \sum_l \frac{2l+1}{4\pi} S^{(l)}_{\alpha\alpha}(E_i) P_l(\cos\theta), \quad \theta = (\widehat{\mathbf{n},\mathbf{n}'}). \qquad (123)$$

代入微分截面的表达式后有

$$\begin{aligned}\frac{d\sigma(\mathbf{n},\,\mathbf{n}')}{d\omega} &= \frac{(2\pi)^4}{k^2}\left|\langle E_f\mathbf{n}_f|\hat{t}|E_i\mathbf{n}_i\rangle\right|^2 = \frac{(2\pi)^4}{k^2}\left|\left\langle E_f\mathbf{n}_f\left|\frac{\hat{S}-\hat{I}}{2\pi i}\right|E_i\mathbf{n}_i\right\rangle\right|^2 \\ &= \frac{4\pi^2}{k^2}\left|\sum_l\frac{2l+1}{4\pi}S^{(l)}_{\alpha\alpha}(E_i)P_l(\cos\theta)-\delta(\mathbf{n}_f-\mathbf{n}_i)\right|^2. \end{aligned} \tag{124}$$

又由于

$$\begin{aligned}\delta(\mathbf{n}_f-\mathbf{n}_i) = \langle\mathbf{n}_f|\mathbf{n}_i\rangle &= \sum_{lm}\langle\mathbf{n}_f|lm\rangle\langle lm|\mathbf{n}_i\rangle \\ = \sum_{lm}Y_{lm}(\mathbf{n}_f)Y^*_{lm}(\mathbf{n}_i) &= \sum_l\frac{2l+1}{4\pi}P_l(\cos\theta),\end{aligned} \tag{125}$$

上式又可被改写为

$$\frac{d\sigma_e}{d\omega}(\mathbf{n}_f,\,\mathbf{n}_i) = \frac{1}{4k^2}\left|\sum_l(2l+1)\left(1-S^{(l)}_{\alpha\alpha}(E_i)\right)P_l(\cos\theta)\right|^2. \tag{126}$$

因此

$$\begin{aligned}\sigma_e &= \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\frac{\sin\theta\,d\theta\,d\varphi}{4k^2}\left|\sum_l(2l+1)\left(1-S^{(l)}_{\alpha\alpha}(E_i)\right)P_l(\cos\theta)\right|^2 \\ &= \sum_l\sum_{l'}\frac{1}{4k^2}\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\sin\theta d\theta d\varphi\,(2l+1)(2l'+1) \\ &\times \left(1-S^{(l)}_{\alpha\alpha}(E_i)\right)^*\left(1-S^{(l')}_{\alpha\alpha}(E_i)\right)P_l(\cos\theta)P_{l'}(\cos\theta) \\ &= \sum_l\sum_{l'}\frac{1}{4k^2}(2l+1)(2l'+1)\left(1-S^{(l)}_{\alpha\alpha}(E_i)\right)^*\left(1-S^{(l')}_{\alpha\alpha}(E_i)\right)\frac{4\pi}{2l+1}\delta_{ll'} \\ &= \frac{\pi}{k_i^2}\sum_l(2l+1)|1-S^{(l)}_{\alpha\alpha}(E_i)|^2.\end{aligned} \tag{127}$$

现在，我们可以定义反应 (非弹性) 截面 σ_r 为

$$\sigma_r = \frac{\pi}{k_i^2}\sum_l(2l+1)\sum_{E_\beta\neq E_\alpha(=E_i)}|S^{(l)}_{\beta\alpha}|^2. \tag{128}$$

利用关系式 (其证明我们将在本章末的附录二中给出)

$$\sum_{E_\beta\neq E_\alpha}|S^{(l)}_{\beta\alpha}|^2+|S^{(l)}_{\alpha\alpha}|^2 = 1, \tag{129}$$

我们又可将 σ_r 改写为

$$\sigma_r = \frac{\pi}{k_i^2}\sum_l (2l+1)(1-|S_{\alpha\alpha}^{(l)}(E_i)|^2) \equiv \sum_l \sigma_r^{(l)}. \tag{130}$$

这里

$$\sigma_r^{(l)} = \frac{\pi}{k_i^2}(2l+1)(1-|S_{\alpha\alpha}^{(l)}(E_i)|^2). \tag{131}$$

若 $|S_{\alpha\alpha}^{(l)}(E_i)|^2 = 1$ 则 $\sigma_r^{(l)} = 0$ 。在此情况下，我们有

$$S_{\alpha\alpha}^{(l)}(E_i) \equiv \exp\left(2i\delta_l(E_i)\right). \tag{132}$$

而相应的 l 分波弹性散射截面则为

$$\sigma_e^{(l)} = \frac{4\pi}{k_i^2}(2l+1)\sin^2\delta_l(E_i). \tag{133}$$

这是我们以前已经熟知的一个公式。

一般情况下， $|S_{\alpha\alpha}^{(l)}(E_i)| < 1$ 。此时， $\sigma_r^{(l)} \neq 0$ ，即非弹性散射出现。但由于 $|1 - S_{\alpha\alpha}^{(l)}(E_i)|$ 也不为零，弹性散射也会出现。也就是说，出现非弹性散射时，必会出现弹性散射。但反之则不对。

附录一：恒等式 $\delta(x) = \lim_{s\to 0^+}\frac{1}{\pi}\frac{s}{s^2+x^2}$ 的证明

为了简化证明，我们取一个在复平面上半平面解析的函数 $f(z)$ ，并取以实轴为直径的位于复平面上半平面半径为 R 的半园围道。因此，我们有

$$\begin{aligned}\int_{-R}^{R} f(x)\left(\frac{1}{\pi}\frac{s}{s^2+x^2}\right)\,dx &= \int_{-R}^{R} f(x)\frac{1}{2\pi i}\left(\frac{1}{x-is}-\frac{1}{x+is}\right)\,dx \\ = \quad & \frac{1}{2\pi i}\oint f(z)\left(\frac{1}{z-is}-\frac{1}{z+is}\right)\,dz - \frac{1}{2\pi i}\int_{C_R} f(z)\left(\frac{1}{z-is}-\frac{1}{z+is}\right)\,dz.\end{aligned} \tag{134}$$

上式右边的第一项为被积函数在上半平面的极点处的留数，它等于 $f(is)$ 。而第二项则在取极限 $R\to\infty$ 时趋向于零。因此，我们得到

$$\lim_{R\to\infty}\int_{-R}^{R} f(x)\left(\frac{1}{\pi}\frac{s}{s^2+x^2}\right)\,dx = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\left(\frac{1}{\pi}\frac{s}{s^2+x^2}\right)\,dx = f(is). \tag{135}$$

现在，我们令 $s\to 0^+$ 。因此，我们得到

$$\lim_{s\to 0^+}\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\left(\frac{1}{\pi}\frac{s}{s^2+x^2}\right)\,dx = \lim_{s\to 0^+} f(is) = f(0). \tag{136}$$

这就证明了我们所要得到的恒等式。

附录二：公式 (129) 的证明

从散射矩阵 $\hat{S}$ 的酉正条件 $\hat{S}^\dagger\hat{S}=\hat{I}$ 出发，并取初态 $|E_\alpha,\mathbf{n}_\alpha\rangle$ 作内积，我们有

$$\langle E_\alpha,\mathbf{n}_\alpha|\hat{S}^\dagger\hat{S}|E_\alpha,\mathbf{n}_\alpha\rangle=\langle E_\alpha,\mathbf{n}_\alpha|E_\alpha,\mathbf{n}_\alpha\rangle. \tag{137}$$

在等式的左边插入单位分解

$$\hat{I}=\sum_{E_\beta}\sum_{\mathbf{n}_\beta}|E_\beta,\mathbf{n}_\beta\rangle\langle E_\beta,\mathbf{n}_\beta| \tag{138}$$

后，我们得到

$$\begin{aligned}
&\sum_{E_\beta}\sum_{\mathbf{n}_\beta}\langle E_\alpha,\mathbf{n}_\alpha|\hat{S}^\dagger|E_\beta,\mathbf{n}_\beta\rangle\langle E_\beta,\mathbf{n}_\beta|\hat{S}|E_\alpha,\mathbf{n}_\alpha\rangle\\
=&\sum_{E_\beta\neq E_\alpha}\sum_{\mathbf{n}_\beta}\langle E_\alpha,\mathbf{n}_\alpha|\hat{S}^\dagger|E_\beta,\mathbf{n}_\beta\rangle\langle E_\beta,\mathbf{n}_\beta|\hat{S}|E_\alpha,\mathbf{n}_\alpha\rangle\\
+&\sum_{\mathbf{n}_\beta}\langle E_\alpha,\mathbf{n}_\alpha|\hat{S}^\dagger|E_\alpha,\mathbf{n}_\beta\rangle\langle E_\alpha,\mathbf{n}_\beta|\hat{S}|E_\alpha,\mathbf{n}_\alpha\rangle\\
=&\langle E_\alpha,\mathbf{n}_\alpha|E_\alpha,\mathbf{n}_\alpha\rangle.
\end{aligned} \tag{139}$$

再在上式两边插入按照角动量本征态的单位分解

$$\hat{I}=\sum_{l,m}|l,m\rangle\langle l,m|, \tag{140}$$

我们有

$$\begin{aligned}
&\sum_{E_\beta\neq E_\alpha}\sum_{\mathbf{n}_\beta}\sum_{l_1,m_1}\sum_{l_2,m_2}\sum_{l_3,m_3}\sum_{l_4,m_4}\langle E_\alpha,\mathbf{n}_\alpha|E_\alpha,l_1,m_1\rangle\langle E_\alpha,l_1,m_1|\hat{S}^\dagger|E_\beta,l_2,m_2\rangle\\
\times&\langle E_\beta,l_2,m_2|E_\beta,\mathbf{n}_\beta\rangle\langle E_\beta,\mathbf{n}_\beta|E_\beta,l_3,m_3\rangle\langle E_\beta,l_3,m_3|\hat{S}|E_\alpha,l_4,m_4\rangle\langle E_\alpha,l_4,m_4|E_\alpha,\mathbf{n}_\alpha\rangle\\
+&\sum_{\mathbf{n}_\beta}\sum_{l_1,m_1}\sum_{l_2,m_2}\sum_{l_3,m_3}\sum_{l_4,m_4}\langle E_\alpha,\mathbf{n}_\alpha|E_\alpha,l_1,m_1\rangle\langle E_\alpha,l_1,m_1|\hat{S}^\dagger|E_\alpha,l_2,m_2\rangle\\
\times&\langle E_\alpha,l_2,m_2|E_\alpha,\mathbf{n}_\beta\rangle\langle E_\alpha,\mathbf{n}_\beta|E_\alpha,l_3,m_3\rangle\langle E_\alpha,l_3,m_3|\hat{S}|E_\alpha,l_4,m_4\rangle\langle E_\alpha,l_4,m_4|E_\alpha,\mathbf{n}_\alpha\rangle\\
=&\sum_{l,m}\langle E_\alpha,\mathbf{n}_\alpha|E_\alpha,l,m\rangle\langle E_\alpha,l,m|E_\alpha,\mathbf{n}_\alpha\rangle.
\end{aligned} \tag{141}$$

利用关系式

$$\langle E_{\gamma'},l',m'|\hat{S}|E_\gamma,l,m\rangle=S^{(l)}_{\gamma'\gamma}\delta_{l'l}\delta_{m'm} \tag{142}$$

以及 $\langle E,\mathbf{n}|E,l,m\rangle = Y_{lm}(\theta,\varphi)$，我们可以将上式简化为

$$\begin{aligned}
& \sum_{E_\beta\neq E_\alpha}\sum_{\mathbf{n}_\beta}\sum_{l_1,m_1}\sum_{l_2,m_2}\sum_{l_3,m_3}\sum_{l_4,m_4} Y_{l_1m_1}(\theta_\alpha,\varphi_\alpha)\overline{S}^{(l_1)}_{\beta\alpha}\delta_{l_1l_2}\delta_{m_1m_2}Y^*_{l_2m_2}(\theta_\beta,\varphi_\beta) \\
\times\ & Y_{l_3m_3}(\theta_\beta,\varphi_\beta)S^{(l_3)}_{\beta\alpha}\delta_{l_3l_4}\delta_{m_3m_4}Y^*_{l_4m_4}(\theta_\alpha,\varphi_\alpha) \\
+\ & \sum_{\mathbf{n}_\beta}\sum_{l_1,m_1}\sum_{l_2,m_2}\sum_{l_3,m_3}\sum_{l_4,m_4} Y_{l_1m_1}(\theta_\alpha,\varphi_\alpha)\overline{S}^{(l_1)}_{\alpha\alpha}\delta_{l_1l_2}\delta_{m_1m_2}Y^*_{l_2m_2}(\theta_\beta,\varphi_\beta) \\
\times\ & Y_{l_3m_3}(\theta_\beta,\varphi_\beta)S^{(l_3)}_{\alpha\alpha}\delta_{l_3l_4}\delta_{m_3m_4}Y^*_{l_4m_4}(\theta_\alpha,\varphi_\alpha) \\
=\ & \sum_{E_\beta\neq E_\alpha}\sum_{\mathbf{n}_\beta}\sum_{l_1,m_1}\sum_{l_3,m_3} Y_{l_1m_1}(\theta_\alpha,\varphi_\alpha)\overline{S}^{(l_1)}_{\beta\alpha}Y^*_{l_1m_1}(\theta_\beta,\varphi_\beta)Y_{l_3m_3}(\theta_\beta,\varphi_\beta)S^{(l_3)}_{\beta\alpha}Y^*_{l_3m_3}(\theta_\alpha,\varphi_\alpha) \\
+\ & \sum_{\mathbf{n}_\beta}\sum_{l_1,m_1}\sum_{l_3,m_3} Y_{l_1m_1}(\theta_\alpha,\varphi_\alpha)\overline{S}^{(l_1)}_{\alpha\alpha}Y^*_{l_1m_1}(\theta_\beta,\varphi_\beta)Y_{l_3m_3}(\theta_\beta,\varphi_\beta)S^{(l_3)}_{\alpha\alpha}Y^*_{l_3m_3}(\theta_\alpha,\varphi_\alpha) \\
=\ & \sum_{l,m} Y_{lm}(\theta_\alpha,\varphi_\alpha)Y^*_{lm}(\theta_\alpha,\varphi_\alpha).
\end{aligned} \tag{143}$$

又由于按照定义，我们有

$$\begin{aligned}
& \sum_{\mathbf{n}_\beta} Y^*_{l_1m_1}(\theta_\beta,\varphi_\beta)Y_{l_3m_3}(\theta_\beta,\varphi_\beta) \\
=\ & \int_0^{2\pi} d\varphi_\beta \int_0^{\pi}\sin\theta_\beta d\theta_\beta\, Y^*_{l_1m_1}(\theta_\beta,\varphi_\beta)Y_{l_3m_3}(\theta_\beta,\varphi_\beta) = \delta_{l_1l_3}\delta_{m_1m_3},
\end{aligned} \tag{144}$$

故我们最后得到

$$\begin{aligned}
& \sum_{E_\beta\neq E_\alpha}\sum_{l_1,m_1}\sum_{l_3,m_3} Y_{l_1m_1}(\theta_\alpha,\varphi_\alpha)\overline{S}^{(l_1)}_{\beta\alpha}\delta_{l_1l_3}\delta_{m_1m_3}S^{(l_3)}_{\beta\alpha}Y^*_{l_3m_3}(\theta_\alpha,\varphi_\alpha) \\
+\ & \sum_{l_1,m_1}\sum_{l_3,m_3} Y_{l_1m_1}(\theta_\alpha,\varphi_\alpha)\overline{S}^{(l_1)}_{\alpha\alpha}\delta_{l_1l_3}\delta_{m_1m_3}S^{(l_3)}_{\alpha\alpha}Y^*_{l_3m_3}(\theta_\alpha,\varphi_\alpha) \\
=\ & \sum_{l_1,m_1}\left(\sum_{E_\beta\neq E_\alpha}\overline{S}^{(l_1)}_{\beta\alpha}S^{(l_1)}_{\beta\alpha}\right)Y_{l_1m_1}(\theta_\alpha,\varphi_\alpha)Y^*_{l_1m_1}(\theta_\alpha,\varphi_\alpha) \\
+\ & \sum_{l_1,m_1}\overline{S}^{(l_1)}_{\alpha\alpha}S^{(l_1)}_{\alpha\alpha}Y_{l_1m_1}(\theta_\alpha,\varphi_\alpha)Y^*_{l_1m_1}(\theta_\alpha,\varphi_\alpha) \\
=\ & \sum_{l,m} Y_{lm}(\theta_\alpha,\varphi_\alpha)Y^*_{lm}(\theta_\alpha,\varphi_\alpha).
\end{aligned} \tag{145}$$

比较两边系数后，我们有

$$\sum_{E_\beta\neq E_\alpha}|S^{(l)}_{\beta\alpha}|^2 + |S^{(l)}_{\alpha\alpha}|^2 = 1. \tag{146}$$

这就是我们要证明的关系式。从证明过程中我们也看到，无论是 $S^{(l)}_{\beta\alpha}$ 还是 $S^{(l)}_{\alpha\alpha}$ 都应该理解为“典型”矩阵元。

练习：

练习 2.1: (i) 从公式 $S_{\beta\alpha} = \delta_{\beta\alpha} - 2\pi i\delta(E_\beta - E_\alpha)t_{\beta\alpha}$ 出发，证明关系式

$$|S_{\beta\alpha}|^2 = |\langle\varphi_\beta|\varphi_\alpha\rangle|^2 + \left[\frac{2}{\hbar}\langle\varphi_\beta|\varphi_\alpha\rangle \mathrm{Im}t_{\beta\alpha} + \frac{2\pi}{\hbar}|t_{\beta\alpha}|^2\delta(E_\beta - E_\alpha)\right]\lim_{\tau\to\infty} 2\tau. \tag{147}$$

(ii) 对于指标 β 求和后，证明所谓光学定理

$$\sigma = \sum_\beta \sigma_{\beta\alpha} = -\frac{2\mu}{\hbar^2 k}\mathrm{Im}\widetilde{t}_{\alpha\alpha}. \tag{148}$$

练习 2.2: 考虑势函数

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & r < R; \\ 0, & r \geq R. \end{cases} \tag{149}$$

利用分波法，计算慢粒子的散射截面。

练习 2.3: 质量为 μ 的粒子在球壳势场 $V(r) = \gamma\delta(r-a)$ 中被散射。在高能散射的情况下，可用 Born 近似来计算其散射截面。证明当 $ka\theta \gg 1$ 时，得到的结果为

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 = \frac{4\mu^2\gamma^2 a^4}{\hbar^4}\frac{\sin^2(2ka\sin(\theta/2))}{4k^2a^2\sin^2(\theta/2)} \simeq \frac{1}{2}\left(\frac{\mu\gamma a}{\hbar^2 k\sin(\theta/2)}\right)^2. \tag{150}$$

练习 2.4: 证明，当相移 $\delta_0 \simeq \frac{\pi}{2}$ 时，散射截面可以近似地写作

$$\sigma_0(E) = \frac{4\pi}{k^2}\frac{\frac{\Gamma_0^2}{4}}{(E-E_0)^2 + \frac{\Gamma_0^2}{4}} \tag{151}$$

的形式。它被称为 Breit-Wigner 共振散射公式。