计算物理学 (A) 第一次大作业 第 4 题

截止日期：4 月 23 日

1 数值求解 Lippmann-Schwinger 方程

Lippmann-Schwinger 方程的形式为（见 Sakurai 书 [2]P390）

$$\left|\psi^{(+)}\right\rangle = |\boldsymbol{k}\rangle + \frac{1}{E_0 - H_0 + i\hbar\varepsilon} V \left|\psi^{(+)}\right\rangle \tag{1}$$

它与薛定谔方程等价，但更适合用来处理散射问题。式1中 $H_0 = \hat{p}^2/2m$ 是自由粒子的哈密顿量，$|\boldsymbol{k}\rangle$ 和 E_0 分别是 H_0 的本征态和和相应的本征值，V 为散射势，ϵ 是为了防止发散而引入的小量。散射微分截面可以表达为

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \sim \left|\left\langle \boldsymbol{k'}|V|\psi^{(+)}\right\rangle\right|^2 \tag{2}$$

它的物理意义是初始动量为 $\boldsymbol{k}$ 的平面波散射到 $\boldsymbol{k'}$ 方向的概率。我们也可以用 T 算符来表示微分截面，T 算符可以由如下式子来定义

$$T|\boldsymbol{k}\rangle = V\left|\psi^{(+)}\right\rangle \tag{3}$$

Lippmann-Schwinger 方程1由此可以写成关于 T 的算符方程

$$T = V + V\frac{1}{E_0 - H_0 + i\hbar\varepsilon}T \tag{4}$$

散射微分截面正比于 T 矩阵元的模方

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \sim |\langle \boldsymbol{k'}|T|\boldsymbol{k}\rangle|^2 \tag{5}$$

其矩阵元满足方程（以下均令 $\hbar = 1$）

$$\langle \boldsymbol{k'}|T|\boldsymbol{k}\rangle = \langle \boldsymbol{k'}|V|\boldsymbol{k}\rangle + \int \mathrm{d}^3p \frac{\langle \boldsymbol{k'}|V|\boldsymbol{p}\rangle\langle \boldsymbol{p}|T|\boldsymbol{k}\rangle}{E_0 - p^2/2m + i\varepsilon} \tag{6}$$

如果势函数 V 具有球对称性，可以将平面波用球面波展开。球面波在动量空间和坐标空间的形式为

$$\begin{aligned}\langle\mathbf{k}\mid E,l,m\rangle &= \tfrac{\hbar}{\sqrt{mk}}\delta\left(E-\tfrac{\hbar^2k^2}{2m}\right)Y_l^m(\hat{\mathbf{k}})\\ \langle\mathbf{x}\mid E,l,m\rangle &= \tfrac{i^l}{\hbar}\sqrt{\tfrac{2mk}{\pi}}j_l(kr)Y_l^m(\hat{\mathbf{r}})\end{aligned} \tag{7}$$

对于低能散射，S 波（即 $\mid E,0,0\rangle$ 态）占主要贡献。下面我们来计算 S 波的散射振幅，式6中只取 $|\boldsymbol{k}'\rangle$ 的 S 波分量，得到（为了书写简便，用 $|E\rangle$ 代替 $|E,0,0\rangle$）

$$\langle E'|T|\boldsymbol{k}\rangle = \langle E'|T|E_0\rangle = \langle E'|V|E_0\rangle + \int_0^\infty \mathrm{d}E''\frac{\langle E'|V|E''\rangle\langle E''|T|E_0\rangle}{E_0-E''+i\varepsilon} \tag{8}$$

对于其中的积分式可做如下处理

$$\begin{aligned}\langle E'|T|E_0\rangle &= \langle E'|V|E_0\rangle + \mathcal{P}\int_0^\infty \mathrm{d}E''\frac{\langle E'|V|E''\rangle\langle E''|T|E_0\rangle}{E_0-E''}\\ &- i\pi\langle E'|V|E_0\rangle\langle E_0|T|E_0\rangle\end{aligned} \tag{9}$$

利用高斯求积将积分化为求和，得到

$$\begin{aligned}\langle E'|T|E_0\rangle &= \langle E'|V|E_0\rangle + \sum_{j=1}^{N} w_j\frac{\langle E'|V|E_j\rangle\langle E_j|T|E_0\rangle}{E_0-E_j}\\ &- i\pi\langle E'|V|E_0\rangle\langle E_0|T|E_0\rangle\end{aligned} \tag{10}$$

令 $E_{N+1}=E_0$，让 E' 依次取 $E_1,E_2,\cdots,E_{N+1}$ 可以将式10写成 $N+1$ 个线性方程组。我们可以把方程组写成矩阵方程的形式，即形如 $Ax=b$. 为了达到这一目的，引入矢量 D，它的定义为

$$D_j = \begin{cases}\frac{w_j}{E_0-E_j} & \text{for } j=1,N\\ -i\pi & \text{for } i=N+1\end{cases} \tag{11}$$

用 T_{ij} 和 V_{ij} 表示算符 T,V 在 S 波基矢下矩阵元，即

$$T_{ij}=\langle E_i|T|E_j\rangle,\quad V_{ij}=\langle E_i|V|E_j\rangle \tag{12}$$

并由此定义 $[T]$ 矢量和 $[V]$ 矢量（$N_1\equiv N+1$）

$$[T]=\begin{pmatrix}T_{1,N_1}\\ T_{2,N_1}\\ \ddots\\ T_{N_1,N_1}\end{pmatrix}\quad [V]=\begin{pmatrix}V_{1,N_1}\\ V_{2,N_1}\\ \ddots\\ V_{N_1,N_1}\end{pmatrix} \tag{13}$$

于是方程10可以写成

$$F[T] = [V] \quad F_{ij} = \delta_{ij} - D_j V_{ij} \tag{14}$$

只需要将感兴趣的势函数在 S 波下展开，即可通过式14求出 $[T]$ 矢量，S 波的散射振幅正比于

$$\langle E_0|T|E_0\rangle = T_{N_1,N_1} \tag{15}$$

做为练习，我们来求"delta shell" 势的 S 波散射截面，"delta shell" 势形如

$$V(r) = \gamma\delta(r-a) \tag{16}$$

其中 $r = |\boldsymbol{x}|$，势能函数具有球对称性，在 S 波下的矩阵元为

$$V_{ij} = 4\gamma\frac{\sin k_i a \sin k_j a}{\sqrt{k_i k_j}} = 4\gamma\frac{\sin\sqrt{E_i}a\sin\sqrt{E_j}a}{(E_iE_j)^{1/4}} \tag{17}$$

为了方便计算，令 $2m = 1$，则 $E = k^2$. 试求：

1. 编写程序，求解矩阵方程14.
2. 改变 k_0 的值，画出 $|\langle E_0|T|E_0\rangle|^2$ 随 k_0 变化的曲线，判断在哪些地方发生了共振。
3. "delta shell" 势的 S 波散射具有解析结果 [1]

   $$e^{2i\delta_0} = \frac{1+\frac{2m\gamma}{\hbar^2 k}e^{-ika}\sin ka}{1+\frac{2m\gamma}{\hbar^2 k}e^{ika}\sin ka} \tag{18}$$

   其中 δ_0 是 S 波散射的相移，与 T 矩阵元的关系为

   $$-\pi\langle E_0|T|E_0\rangle = e^{i\delta_0}\sin\delta_0 \tag{19}$$

   用解析结果画出 $|\sin\delta_0|^2$ 随 k 变化的曲线，判断在哪些地方发生了共振。
4. 当 γ 很大时，共振点约为 $ka = n\pi$，验证这一结果。

参考文献

[1] Hitoshi Murayama. 221b lecture notes scattering theory iii. http://hitoshi.berkeley.edu/221B-S02/3.pdf.

[2] Jun John Sakurai and Eugene D Commins. Modern quantum mechanics, revised edition, 1995.