

量子力学

Chapter 11. 弹性散射

杨焕雄

中国科学技术大学物理学院

hyang@ustc.edu.cn

December 25, 2023

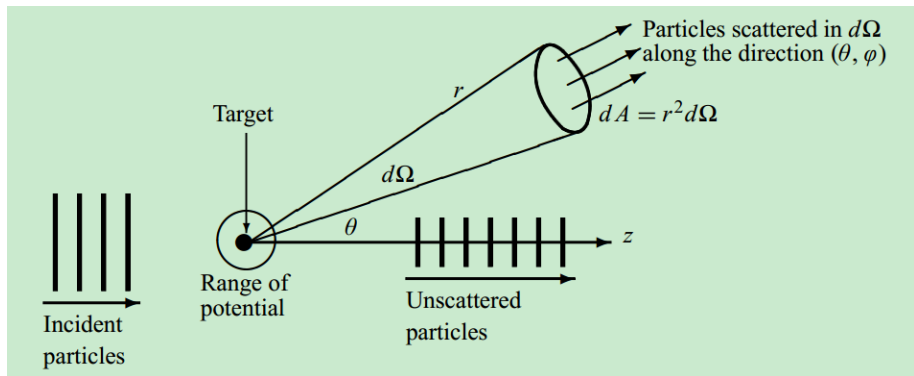
目录

- ① 弹性散射的一般性描述
 - 微分散射截面
- ② 分波法
 - 分波相移的近似计算公式
- ③ 李普曼-许温格方程
 - 弹性散射的格林函数
 - 玻恩近似
 - 库仑散射与卢瑟福微分散射截面
- ④ 相对论性量子力学简介
 - 正则量子化
 - Klein-Gordon 方程
 - Dirac 方程

一般性描述：

散射又称作量子碰撞。它是研究微观粒子运动规律、相互作用以及它们的内部结构的基础，在亚原子物理学的发展中占有举足轻重的地位。

在散射实验中，具有确定动量的粒子沿确定的方向射向靶粒子、受到靶粒子的作用后发生偏转。这就是散射的基本物理图像。



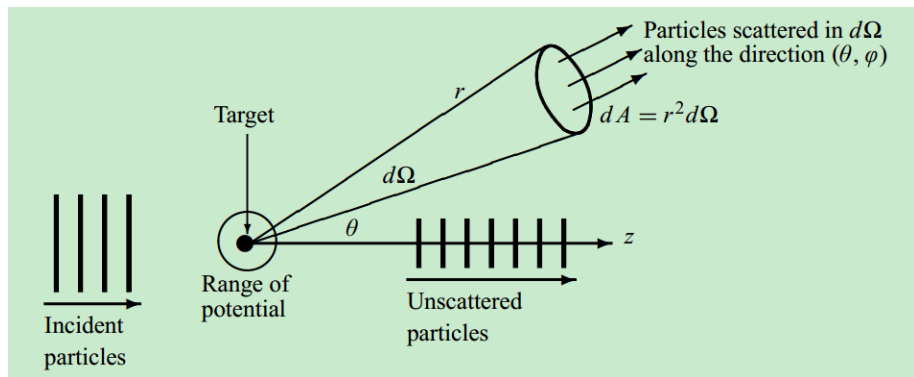
提醒：

- ❶ 入射粒子与靶粒子的相互作用只在空间一个小区域中才比较显著. 因此, 入射粒子与出射粒子均处于自由粒子态¹.
- ❷ 如果在散射过程中, 入射粒子和靶粒子之间没有发生能量的传递、因而二者的相对运动能量没有发生变化, 则称这种散射为弹性散射. 否则即为非弹性散射.

本课程仅考虑弹性散射.

¹ 散射过程实际上是由于空间小区域中的相互作用导致的粒子从一个自由粒子态向另一个自由粒子态的跃迁.

散射的实验资料:



取入射粒子的入射方向为 z 轴, 入射粒子的概率流密度矢量为:

$$\mathbf{J}_i = J_i \hat{k}$$

因为靶粒子的作用, 粒子将会沿各个方向被散射. 它在单位时间内沿 (θ, ϕ) 方向的立体角 $d\Omega$ 出射的概率

$$dP \sim J_i d\Omega$$

把上式写为等式, 即有:

$$dP = \sigma(\theta, \phi) J_i d\Omega$$

比例系数 $\sigma(\theta, \phi)$ 具有面积的量纲, 故散射理论中常称其为微分散射截面.

- ① $\sigma(\theta, \phi)$ 是散射实验的可观测物理量之一, 它就是散射问题中的实验资料.

设入射粒子的动能为 E , 其初态波函数为动量的本征函数:

$$\psi_i = e^{ikz}$$

此处 $k = \sqrt{2\mu E}/\hbar$.

进入到靶粒子势场 $V(r)$ 的有效力程之后, 出射粒子的行为由如下薛定谔方程决定 (弹性散射):

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

- ① 散射理论的重要任务之一就是要设法把散射截面等观测量与反映相互作用 $V(r)$ 及粒子内部结构的薛定谔方程的解 ψ 联系起来.

下面开始研究这种联系的具体形式.

- ① 实验上观测微分散射截面都是在远离靶粒子的地点进行的. 因此, $\sigma(\theta, \phi)$ 应由薛定谔方程在 $r = |\mathbf{r}| \rightsquigarrow \infty$ 极限下的渐近行为所决定.

设靶粒子提供的相互作用有效势能具有球对称性, $V(\mathbf{r}) = V(r)$, 且 $V(r)|_{r \rightarrow \infty} = 0$. 如此, 定态薛定谔方程的解可在球坐标系里表达为:

$$\psi = \mathcal{R}(r) \mathcal{Y}_{lm}(\theta, \phi)$$

其中径向波函数 $\mathcal{R}(r)$ 在 $r \rightsquigarrow \infty$ 情形下近似地满足

$$E\mathcal{R} \approx -\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\mathcal{R}}{dr} \right)$$

令 $\mathcal{R}(r) = u(r)/r$, 不难看到:

$$\frac{d^2 u}{dr^2} + k^2 u \approx 0, \quad \rightsquigarrow u(r) = Ae^{ikr} + Be^{-ikr}$$

计及散射问题的物理图像, 应取积分常数 $B = 0$.

因此, 薛定谔方程的散射解在 $r \rightsquigarrow \infty$ 处的渐近行为可表达为:

$$\boxed{\psi(r, \theta, \phi) \Big|_{r \rightarrow \infty} \sim e^{ikz} + f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r}}$$

理由:

- 若没有靶粒子的作用, 入射粒子将仍处在 $\psi_i = e^{ikz}$ 描写的动量本征态.
- 在有靶粒子存在的情形下, 靶粒子的作用将使得粒子在出射时改变方向, 从而出现散射概率波. 在远离靶粒子的地点, 散射波是球面波:

$$f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r}$$

其中 $f(\theta, \phi)$ 是沿 (θ, ϕ) 方向传播出去的散射波振幅, 称为 **散射振幅**.

评论:

首先思考两个问题:

- \mathcal{Q} : 怎样确定 $f(\theta, \phi)$ 的确切形式?
- \mathcal{Q} : 微分散射截面 $\sigma(\theta, \phi)$ 与散射振幅 $f(\theta, \phi)$ 有何联系?

显然, 只有通过求解薛定谔方程:

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

并求出它在 $r \rightsquigarrow \infty$ 处的渐近解, 才能最终确定散射振幅 $f(\theta, \phi)$ 的具体形式.

$r \rightsquigarrow \infty$ 处散射波波函数的渐近行为是:

$$\psi_s \Big|_{r \rightarrow +\infty} \sim f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r}$$

因此, $r \rightsquigarrow \infty$ 处的概率流密度矢量沿 (θ, ϕ) 方向的投影为:

$$\begin{aligned} J_s &= \frac{i\hbar}{2\mu} (\psi_s \partial_r \psi_s^* - \psi_s^* \partial_r \psi_s) \Big|_{r \rightarrow +\infty} \\ &= \frac{i\hbar}{2\mu} |f(\theta, \phi)|^2 \left(-\frac{ik}{r^2} - \frac{1}{r^3} - \frac{ik}{r^2} + \frac{1}{r^3} \right) = \frac{\hbar k}{\mu} \frac{|f(\theta, \phi)|^2}{r^2} \end{aligned}$$

注意到 J_s 的物理意义: 粒子在单位时间内沿 (θ, ϕ) 方向单位截面出射的概率, 因此, 出射粒子在单位时间内进入到 (θ, ϕ) 方向的立体角 $d\Omega$ 中的概率为:

$$dP = J_s ds = J_s r^2 d\Omega = \frac{\hbar k}{\mu} |f(\theta, \phi)|^2 d\Omega$$

此概率又可等价地写为:

$$dP = \sigma(\theta, \phi) J_i d\Omega$$

再注意到入射粒子的概率流密度矢量的大小是:

$$J_i = \frac{i\hbar}{2\mu} (\psi_i \partial_z \psi_i^* - c.c.) = \frac{\hbar k}{\mu}$$

把这几个公式相结合, 可得:

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

- 有了 $\sigma(\theta, \phi)$ 之后, 还可以进一步计算总的散射截面:

$$\begin{aligned}\sigma_T &= \int d\Omega \sigma(\theta, \phi) \\ &= \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi |f(\theta, \phi)|^2 \sin \theta d\theta\end{aligned}$$

- 真实的散射实验常设计的使出射粒子波函数服从轴对称的边界条件:

$$\psi(r, \theta, \phi) \Big|_{r \rightarrow \infty} \sim e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}$$

如此, 微分散射截面与总截面的计算公式简化为:

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2, \quad \sigma_T = 2\pi \int_0^\pi |f(\theta)|^2 \sin \theta d\theta$$

小结:

- ❶ 如果入射粒子与靶粒子之间的相互作用有效势能 $V(r)$ 已知, 则弹性散射问题中微分散射截面的计算最终归结为在边界条件

$$\psi(r, \theta, \phi) \Big|_{r \rightarrow \infty} \sim e^{ikz} + f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r}$$

成立的前提下通过求解薛定谔方程

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

确定散射振幅 $f(\theta, \phi)$. 这一程序俗称量子力学的正散射问题.

- ❷ 在中心力场情形下, $V(r) = V(r)$, 处理量子力学正散射问题的方法通常有两种:
- 分波法.
 - 玻恩近似.

分波法

②: 什么是分波法?

- ① 分波法, 简单地说, 就是在处理中心力场散射问题时采取了角动量表象.

粒子在中心力场 $V(r)$ 中运动时其哈密顿算符常具有形式:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(r)$$

不难看出:

$$[\hat{H}, \hat{L}] = [\hat{H}, \hat{L}^2] = [\hat{L}^2, \hat{L}] = 0$$

粒子的轨道角动量是守恒量且 $(\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_3)$ 形成了一组相容力学量算符的完全集合. 因此, 在试图通过求解薛定谔方程

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

确定散射振幅 $f(\theta)$ 时, 选择相容力学量算符 $(\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_3)$ 的共同函数系:

$$\psi_{lm}(r, \theta, \phi) = \mathcal{R}_l(kr) \mathcal{Y}_{lm}(\theta, \phi)$$

作为态矢量空间的基是方便的. 式中,

$$l = 0, 1, 2, \cdots; \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots, \pm l$$

常称此选择为采取了角动量表象. 这就是分波法的基础.

- 每一个确定 l 值的径向波函数 $\mathcal{R}_l(kr)$ 称为一个分波. 例如 $\mathcal{R}_0(kr)$ 称为 s 波 ($l=0$), $\mathcal{R}_1(kr)$ 称为 p 波 ($l=1$), $\mathcal{R}_2(kr)$ 称为 d 波 ($l=2$). 分波 $\mathcal{R}_l(kr)$ 服从径向薛定谔方程:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\mathcal{R}_l}{dr} \right) + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - U(r) \right] \mathcal{R}_l = 0$$

式中,

$$k^2 = 2\mu E/\hbar^2, \quad U(r) = 2\mu V(r)/\hbar^2.$$

分波 $\mathcal{R}_l(kr)$ 的具体形式依赖于相互作用势能 $V(r)$.

- $\mathcal{Y}_{lm}(\theta, \phi)$ 是球谐函数, 它们是 \hat{L}^2 与 \hat{L}_z 的共同本征函数:

$$\mathcal{Y}_{lm}(\theta, \phi) = (-1)^m \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!} \frac{2l+1}{4\pi}} \mathcal{P}_l^m(\cos \theta) e^{im\phi}$$

而 $\mathcal{P}_l^m(\cos \theta)$ 是所谓缔合勒让德多项式,

$$\mathcal{P}_l^m(x) = (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{1}{2^l l!} \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} (x^2-1)^l$$

$m=0$ 时的缔合勒让德多项式就是通常的勒让德多项式:

$$\mathcal{P}_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2-1)^l$$

显然,

$$\mathcal{Y}_{l0}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \mathcal{P}_l(\cos \theta)$$

- 平面波 e^{ikz} 在角动量表象中可展开为：

$$e^{ikz} = \exp(ikr \cos \theta) = \sum_{l=0}^{+\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) \mathcal{P}_l(\cos \theta)$$

此处 $j_l(kr)$ 是 l 阶的球 Bessel 函数,

$$j_l(x) = (-x)^l \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l \frac{\sin x}{x}$$

特别地,

$$j_0(x) = \frac{\sin x}{x}, \quad j_1(x) = \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x}.$$

$j_l(x)$ 在 $x \rightarrow 0$ 与 $x \rightarrow \infty$ 情形下的渐近行为分别是：

$$j_l(x) \Big|_{x \rightarrow 0} \approx \frac{x^l}{(2l+1)!!}$$

以及,

$$j_l(x) \Big|_{x \rightarrow \infty} \approx \frac{1}{x} \sin \left(x - \frac{l}{2} \pi \right)$$

以 $(\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_3)$ 的共同本征函数系

$$\psi_{lm}(r, \theta, \phi) = \mathcal{R}_l(kr) \mathcal{Y}_{lm}(\theta, \phi)$$

作为态矢量空间的基, 任一波函数均可以在此基底上展开. 特别地, 薛定谔方程

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

的任一解均可以表示为此基底的线性组合:

$$\psi(r, \theta, \phi) = \sum_{l=0}^{+\infty} \sum_{m=-l}^{+l} a_{lm} \mathcal{R}_l(kr) \mathcal{Y}_{lm}(\theta, \phi)$$

这就是分波法.

在散射问题中, 出射粒子波函数满足的边界条件常设定为具有轴对称性:

$$\psi(r, \theta, \phi) \Big|_{r \rightarrow \infty} \sim e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}$$

如此, 分波法的出发点还可以简化为:

$$\psi(r, \theta, \phi) = \sum_{l=0}^{+\infty} \mathcal{R}_l(kr) \mathcal{Y}_{l0}(\theta, \phi) = \sum_{l=0}^{+\infty} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \mathcal{R}_l(kr) \mathcal{P}_l(\cos \theta)$$

这里把叠加系数 a_{l0} 吸收到了分波 $\mathcal{R}_l(kr)$ 的表达式中. 分波法处理弹性散射问题的关键就在于求解 $\mathcal{R}_l(kr)$ 满足的径向薛定谔方程.

分波相移:

分波法中, 散射振幅 $f(\theta)$ 可以由出射粒子波函数的分波相移 δ_l 取代. 这一特点将极大地简化我们使用分波法研究散射问题的计算过程.

现在我们证明这一结论. 注意到:

$$e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta} = \sum_{l=0}^{+\infty} A_l j_l(kr) \mathcal{Y}_{l0}(\theta, \phi), \quad A_l := \sqrt{4\pi(2l+1)} i^l$$

以及,

$$j_l(kr) \Big|_{r \rightarrow \infty} \approx \frac{1}{kr} \sin(kr - l\pi/2) = \frac{1}{2ikr} \left[e^{i(kr - l\pi/2)} - e^{-i(kr - l\pi/2)} \right]$$

出射粒子波函数的边界条件可以等价地表为:

$$\begin{aligned} \psi(r, \theta, \phi) \Big|_{r \rightarrow \infty} &\approx e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \\ &\approx \frac{1}{2ikr} \sum_{l=0}^{+\infty} A_l \left[e^{i(kr - l\pi/2)} - e^{-i(kr - l\pi/2)} \right] \mathcal{Y}_{l0}(\theta, \phi) + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \\ &\approx \frac{1}{2ik} \left[2ikf(\theta) + \sum_{l=0}^{+\infty} A_l e^{-il\pi/2} \mathcal{Y}_{l0}(\theta, \phi) \right] \frac{e^{ikr}}{r} \\ &\quad - \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{+\infty} A_l e^{il\pi/2} \mathcal{Y}_{l0}(\theta, \phi) \frac{e^{-ikr}}{r} \end{aligned}$$

进一步把 $f(\theta)$ 在角动量表象中也按球谐函数展开:

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{+\infty} c_l A_l e^{-il\pi/2} \mathcal{Y}_{l0}(\theta, \phi)$$

其中 c_l 是展开系数，我们看到：

$$\psi(r, \theta, \phi) \Big|_{r \rightarrow \infty} \approx \frac{1}{2ikr} \sum_{l=0}^{+\infty} A_l \left[(1 + c_l) e^{i(kr - l\pi/2)} - e^{-i(kr - l\pi/2)} \right] \mathcal{Y}_{l0}(\theta, \phi)$$

注意到散射过程中粒子的角动量是守恒量，粒子处在 (\hat{L}^2, \hat{L}_z) 的任一共同本征态 $\mathcal{Y}_{l0}(\theta, \phi)$ 上的概率应在散射前后保持不变。把出射粒子波函数的上述边界条件与 $r \rightsquigarrow \infty$ 处入射粒子波函数的渐近表式

$$\begin{aligned} \psi_i = e^{ikz} \Big|_{r \rightarrow \infty} &\approx \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{+\infty} A_l \sin(kr - l\pi/2) \mathcal{Y}_{l0}(\theta, \phi) \\ &= \frac{1}{2ikr} \sum_{l=0}^{+\infty} A_l \left[e^{i(kr - l\pi/2)} - e^{-i(kr - l\pi/2)} \right] \mathcal{Y}_{l0}(\theta, \phi) \end{aligned}$$

相比较, 可知

$$|1 + c_l| = 1$$

亦即:

$$c_l = e^{2i\delta_l} - 1, \quad \delta_l \text{ 为某个实参数.}$$

所以, 散射后出射粒子波函数在 $r \rightsquigarrow \infty$ 处的渐近行为可表为:

$$\psi(r, \theta, \phi) \Big|_{r \rightarrow +\infty} \approx \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{+\infty} A_l e^{i\delta_l} \sin(kr - l\pi/2 + \delta_l) \mathcal{Y}_{l0}(\theta, \phi)$$

式中 $A_l = \sqrt{4\pi(2l+1)} i^l$. 与入射粒子波函数在 $r \rightsquigarrow +\infty$ 处的渐近行为

$$\psi_i \Big|_{r \rightarrow \infty} \approx \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{+\infty} A_l \sin(kr - l\pi/2) \mathcal{Y}_{l0}(\theta, \phi)$$

相比较, 散射只不过使得径向波函数 $\mathcal{R}_l(kr)$ 、即 l 分波发生了一个相移 δ_l . 证毕.

注意到 $c_l = e^{2i\delta_l} - 1$, $A_l = \sqrt{4\pi(2l+1)} i^l$ 以及 $e^{-il\pi/2} = i^{-l}$, 分波相移 δ_l 与散射振幅 $f(\theta)$ 有如下关系:

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{+\infty} A_l i^{-l} (e^{2i\delta_l} - 1) \mathcal{Y}_{l0}(\theta, \phi) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{+\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l \mathcal{P}_l(\cos \theta)$$

- ① 用分波法研究弹性散射问题时, 计算散射截面可以归结为直接计算各个分波的相移 δ_l , 不必预先计算散射振幅 $f(\theta)$:

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 = \frac{1}{k^2} \left\| \sum_{l=0}^{+\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l \mathcal{P}_l(\cos \theta) \right\|^2$$

勒让德多项式满足正交性公式,

$$\int_0^\pi \mathcal{P}_m(\cos \theta) \mathcal{P}_n(\cos \theta) \sin \theta d\theta = \frac{2}{2n+1} \delta_{mn}$$

由此知:

$$\sigma_T = 2\pi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \sigma(\theta) = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{+\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l$$

分波相移的计算

① 一般性原理：

从原则上讲, 分波相移 δ_l 必须通过求出径向薛定谔方程

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\mathcal{R}_l}{dr} \right) + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - U(r) \right] \mathcal{R}_l = 0$$

满足弹性散射边界条件

$$\mathcal{R}_l(kr) \Big|_{r \rightarrow +\infty} \approx \frac{1}{kr} \sin(kr - l\pi/2 + \delta_l)$$

的特解才能确定.

分波 $\mathcal{R}_l(kr)$ 满足的边界条件是散射后出射粒子波函数渐近行为

$$\psi(r, \theta, \phi) \Big|_{r \rightarrow \infty} \approx \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{+\infty} A_l e^{i\delta_l} \sin(kr - l\pi/2 + \delta_l) \mathcal{Y}_{l0}(\theta, \phi)$$

的逻辑推论, 它可以重新写为:

$$\begin{aligned}\mathcal{R}_l(kr) \Big|_{r \rightarrow \infty} &\approx \frac{1}{kr} [\sin(kr - l\pi/2) \cos \delta_l + \cos(kr - l\pi/2) \sin \delta_l] \\ &\approx j_l(kr) \cos \delta_l - n_l(kr) \sin \delta_l\end{aligned}$$

这里的 $j_l(kr)$ 与 $n_l(kr)$ 分别是 l 阶的球贝塞尔函数和 l 阶的球诺伊曼函数. 在写出最后一个等式时, 我们使用了渐近展开:

$$j_l(kr) \Big|_{r \rightarrow \infty} \approx \frac{1}{kr} \sin(kr - l\pi/2), \quad n_l(kr) \Big|_{r \rightarrow \infty} \approx -\frac{1}{kr} \cos(kr - l\pi/2)$$

由于:

$$j_l(x) \Big|_{x \rightarrow 0} \approx \frac{2^l l!}{(2l+1)!} x^l, \quad n_l(x) \Big|_{x \rightarrow 0} \approx -\frac{(2l-1)!}{2^{l-1}(l-1)!} x^{-l-1}$$

$n_l(kr)$ 在 $r \sim 0$ 区域内是发散的. 因此, 分波 $\mathcal{R}_l(kr)$ 在 r 取有限值的区域内不能写为 $j_l(kr)$ 与 $n_l(kr)$ 的线性组合.

δ_l 与 $\mathcal{R}_l(kr)$ 的关系:

现在设法把分波相移 δ_l 与分波波函数 $\mathcal{R}_l(kr)$ 直接联系起来.

分波 $\mathcal{R}_l(kr)$ 服从径向薛定谔方程:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\mathcal{R}_l}{dr} \right) + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - U(r) \right] \mathcal{R}_l = 0$$

此方程在 $U(r) = 0$ 情形下退化为球贝塞尔方程, 其在 r 的定义域 $0 \leq r < +\infty$ 内处处非奇异的解为 $j_l(kr)$:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dj_l}{dr} \right) + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] j_l = 0$$

不难验证, 以上二方程可以等价地表为:

$$\frac{d^2 u_l}{dr^2} + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - U(r) \right] u_l = 0, \quad u_l(r) := r \mathcal{R}_l(kr)$$

$$\frac{d^2}{dr^2} [r j_l(kr)] + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] [r j_l(kr)] = 0$$

结合以上二方程, 并利用数学恒等式²:

$$\alpha\beta'' - \alpha''\beta = (\alpha\beta' - \alpha'\beta)'$$

我们有:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dr} \left[u_l \frac{d}{dr}(rj_l) - (rj_l) \frac{d}{dr} u_l \right] &= u_l \frac{d^2(rj_l)}{dr^2} - (rj_l) \frac{d^2 u_l}{dr^2} \\ &= -u_l \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] (rj_l) + (rj_l) \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - U(r) \right] u_l \\ &= -U(r) u_l (rj_l)\end{aligned}$$

把上式在 $0 \leq r < \infty$ 区间上对 r 积分, 可得:

$$\begin{aligned}-\frac{2\mu}{\hbar^2} \int_0^{+\infty} rj_l(kr) u_l(r) V(r) dr &= \int_0^{\infty} dr \frac{d}{dr} \left[u_l \frac{d}{dr}(rj_l) - (rj_l) \frac{d}{dr} u_l \right] \\ &= \left[u_l \frac{d}{dr}(rj_l) - (rj_l) \frac{d}{dr} u_l \right] \Big|_{r \rightarrow \infty} - \left[u_l \frac{d}{dr}(rj_l) - (rj_l) \frac{d}{dr} u_l \right] \Big|_{r \rightarrow 0}\end{aligned}$$

²此处的思路类似于静电学中使用第二格林公式建立的格林函数方法, 杨注.

按照分波 $\mathcal{R}_l(kr)$ 与 $j_l(kr)$ 在 $r \rightarrow \infty$ 处的渐近行为,

$$j_l(kr) \Big|_{r \rightarrow \infty} \approx \frac{1}{kr} \sin(kr - l\pi/2), \quad u_l(r) \Big|_{r \rightarrow \infty} \approx \frac{1}{k} \sin(kr - l\pi/2 + \delta_l)$$

我们有:

$$\begin{aligned} & \left[u_l \frac{d}{dr}(rj_l) - (rj_l) \frac{d}{dr}u_l \right] \Big|_{r \rightarrow \infty} \\ & \approx \frac{1}{k} \left[\sin(kr - l\pi/2 + \delta_l) \cos(kr - l\pi/2) \right. \\ & \quad \left. - \sin(kr - l\pi/2) \cos(kr - l\pi/2 + \delta_l) \right] \\ & = \frac{1}{k} \sin[(kr - l\pi/2 + \delta_l) - (kr - l\pi/2)] = \frac{1}{k} \sin \delta_l \end{aligned}$$

另外, 根据 $u_l(0) = 0^3$ 与 $j_l(kr)$ 的近似表达式

$$krj_l(kr) \Big|_{r \rightarrow 0} \approx \frac{(kr)^{l+1}}{(2l+1)!!}, \quad (l = 0, 1, 2, \dots)$$

³这是必须的. 按照波函数的概率诠释, 径向波函数 $\mathcal{R}_l(kr) = u_l(r)/r$ 必须在 $r = 0$ 点处取有限值.

不难看出：

$$\left[u_l \frac{d}{dr}(rj_l) - (rj_l) \frac{d}{dr}u_l \right] \Big|_{r \rightarrow 0} = 0$$

所以，

$$\sin \delta_l = -\frac{2\mu k}{\hbar^2} \int_0^{\infty} rj_l(kr)u_l(r)V(r)dr$$

或者等价地：

$$\sin \delta_l = -\frac{2\mu k}{\hbar^2} \int_0^{\infty} V(r)\mathcal{R}_l(kr)j_l(kr)r^2dr$$

这是一个精确的关系式. 欲按照此式计算 l 分波的相移 δ_l , 须事先求出径向薛定谔方程在 $0 \leq r < \infty$ 整个区间上有意义的分波解 $\mathcal{R}_l(kr)$.

然而, 对于大多数散射问题中出现的 $V(r)$ 而言, 精确求解径向薛定谔方程基本上是一个不可能完成的任务.

相移 δ_l 的近似计算公式:

径向薛定谔方程

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\mathcal{R}_l}{dr} \right) + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - U(r) \right] \mathcal{R}_l = 0$$

在一般情形下很难精确求解. 量子物理的先驱们在实践上发展了微扰论可以求其近似解. 按照微扰论的精神, 我们把径向薛定谔方程重新写为:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\mathcal{R}_l}{dr} \right) + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \lambda U(r) \right] \mathcal{R}_l = 0, \quad (0 < \lambda \ll 1)$$

式中引入了微扰参数 λ (无量纲). 上式意味着我们把相互作用有效势能 $U(r) = 2\mu V(r)/\hbar^2$ 看成了微扰论意义下的一阶小量.

上述方程的微扰级数解可表为:

$$\mathcal{R}_l(kr) = \sum_{n=0}^{+\infty} \lambda^n \mathcal{R}_l^{(n)}(kr)$$

显然, l 分波的零级近似 $\mathcal{R}_l^{(0)}(kr)$ 满足的方程是标准的 l 阶球贝塞尔方程:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\mathcal{R}_l^{(0)}}{dr} \right) + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \mathcal{R}_l^{(0)} = 0$$

它在 $0 \leq r < \infty$ 整个区间上收敛的解为 $j_l(kr)$, 即:

$$\mathcal{R}_l^{(0)}(kr) = j_l(kr)$$

所以, 在取分波波函数 $\mathcal{R}_l(kr)$ 的零级近似的情形下, l 分波的相移 δ_l 可以有如下近似计算公式:

$$\sin \delta_l \approx -\frac{2\mu k}{\hbar^2} \int_0^{+\infty} V(r) [j_l(kr)]^2 r^2 dr$$

如果 $V(r) > 0$ (斥力), $\delta_l < 0$. 如果 $V(r) < 0$ (引力), $\delta_l > 0$.

- ① 如果 $V(r)$ 只在 $0 \leq r \leq a$ 的有限范围内不显著为零, 并且入射粒子的能量很低, $ka \ll 1$, 则 $j_l(kr)$ 可近似写作:

$$j_l(kr) \approx \frac{(kr)^l}{(2l+1)!!}$$

相移的计算公式因此进一步简化为:

$$\sin \delta_l \approx -\frac{2\mu k^{2l+1}}{[(2l+1)!!]^2 \hbar^2} \int_0^a V(r) r^{2(l+1)} dr$$

显然,

$$\sin \delta_l \sim (2\mu a^2 / \hbar^2) (ka)^{2l+1}$$

随着 l 的增加, δ_l 下降的很快. 故通常只需计算 l 值较小的 s 分波 ($l=0$) 和 p 分波 ($l=1$) 的相移即可.

李普曼-许温格方程

势场 $V(\mathbf{r})$ 对于动量为 $\hbar\vec{k}$ 、能量为 $E = \hbar^2\vec{k}^2/2\mu$ 的自由粒子的散射, 归结为求定态薛定谔方程

$$(\nabla^2 + k^2)\psi(\mathbf{r}) = \frac{2\mu}{\hbar^2} V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})$$

满足边界条件

$$\psi(\mathbf{r}) \Big|_{r \rightarrow \infty} \approx e^{i\vec{k} \cdot \mathbf{r}} + f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r}$$

的能量本征函数 $\psi(\mathbf{r})$. 通过格林函数法, 我们可以把边界条件与定态薛定谔方程结合在一起变成一个积分方程, 它就是著名的李普曼-许温格方程 (Lippman-Schwinger Equation).

格林函数:

弹性散射问题的格林函数 $G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ 按下式定义,

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

根据散射问题的物理图像, 应在三维无界空间中构造格林函数. 注意到狄拉克 δ 函数在三维无界空间中可表为:

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q \exp[i\vec{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')]]$$

再作 $G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ 的傅里叶展开:

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q \, G(\mathbf{q}) \exp[i\vec{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')]]$$

代回到格林函数的定义方程中, 即知:

$$\begin{aligned} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q \exp[i\vec{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')]] &= \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \\ &= (\nabla^2 + k^2) G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q \, G(\mathbf{q}) (\nabla^2 + k^2) \exp[i\vec{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')]] \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q \, G(\mathbf{q}) (-q^2 + k^2) \exp[i\vec{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')]] \end{aligned}$$

式中 $q^2 := \mathbf{q}^2$.

所以：

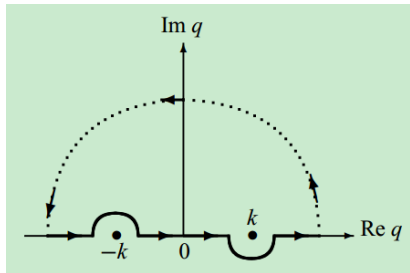
$$G(\boldsymbol{q}) = -\frac{1}{q^2 - k^2}, \quad \rightsquigarrow \quad G(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') = -\frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q \frac{e^{i\vec{q} \cdot (\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')}}{q^2 - k^2}$$

令 $s = r - r'$, 在 q -空间以 s 为极轴建立球坐标系. 如此,

$$\begin{aligned} G(s) &= -\frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q \frac{e^{i\vec{q} \cdot s}}{q^2 - k^2} \\ &= -\frac{1}{4\pi^2} \int_0^{+\infty} \frac{q^2}{q^2 - k^2} dq \int_0^\pi e^{iqs \cos \theta} \sin \theta d\theta \\ &= \frac{i}{4\pi^2 s} \int_0^{+\infty} \frac{q}{q^2 - k^2} (e^{iqs} - e^{-iqs}) dq = \frac{i}{4\pi^2 s} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{q e^{iqs}}{q^2 - k^2} dq \end{aligned}$$

$q = \pm k$ 是被积函数的两个一阶极点. 可以用复变函数论中的留数定理计算此积分, 为此, 须把 q 延拓到复平面上使得上述沿实轴的积分转化为复 q 平面上的围道积分. 上式的积分值与围道的选取有关, 它相当于选取波函数不同的边界条件.

散射问题中有物理意义的是从靶心向外传播的散射波. 它要求我们在复 q -空间里按左边的示意图选择积分围道 C , 使 C 仅包含 $q = k$ 这一个极点. 如此,



$$\begin{aligned}
 G(s) &= \frac{i}{4\pi^2 s} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{q e^{iqs}}{q^2 - k^2} dq \\
 &= \frac{i}{4\pi^2 s} \oint_C \frac{q e^{iqs}}{q^2 - k^2} dq \\
 &= \frac{i}{4\pi^2 s} \cdot 2\pi i \cdot \frac{1}{2} e^{iks} \\
 &= -\frac{e^{iks}}{4\pi s}
 \end{aligned}$$

所以:

$$G(r - r') = -\frac{\exp(ik|r - r'|)}{4\pi|r - r'|}$$

李普曼-许温格方程:

根据微分方程的数学理论, 定态薛定谔方程

$$(\nabla^2 + k^2)\psi(r) = \frac{2\mu}{\hbar^2} V(r)\psi(r)$$

的通解可以形式化地求解如下. 设 $\psi^{(0)}(r)$ 为齐次亥姆霍兹方程

$$(\nabla^2 + k^2)\psi^{(0)}(r) = 0$$

的任一解. 以 $(\nabla^2 + k^2)^{-1}$ 表示亥姆霍兹算符 $(\nabla^2 + k^2)$ 的逆算符, 则显见:

$$\begin{aligned}\psi(r) &= (\nabla^2 + k^2)^{-1}(\nabla^2 + k^2)\psi(r) \\ &= (\nabla^2 + k^2)^{-1}\left[(\nabla^2 + k^2)\psi(r) + (\nabla^2 + k^2)\psi^{(0)}(r)\right] \\ &= \psi^{(0)}(r) + \frac{2\mu}{\hbar^2}(\nabla^2 + k^2)^{-1}V(r)\psi(r) \\ &= \psi^{(0)}(r) + \frac{2\mu}{\hbar^2}(\nabla^2 + k^2)^{-1}\int d^3x' \delta^{(3)}(r-r') V(r')\psi(r')\end{aligned}$$

亦即：

$$\psi(r) = \psi^{(0)}(r) + \frac{2\mu}{\hbar^2} \int d^3x' (\nabla^2 + k^2)^{-1} \delta^{(3)}(r - r') V(r') \psi(r')$$

- ① 在散射问题中，按照散射的物理图像应把 $\psi^{(0)}(r)$ 取为入射粒子的波函数：

$$\psi^{(0)}(r) = e^{i\vec{k}\cdot r}$$

- ② 考虑到 $(\nabla^2 + k^2)G(r - r') = \delta^{(3)}(r - r')$ ，它是散射态格林函数必须服从的微分方程，我们有：

$$(\nabla^2 + k^2)^{-1} \delta^{(3)}(r - r') = G(r - r') = -\frac{\exp(ik|r - r'|)}{4\pi|r - r'|}$$

所以：

$$\psi(r) = e^{i\vec{k}\cdot r} - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^3x' \frac{\exp(ik|r - r'|)}{|r - r'|} V(r') \psi(r')$$

这是势散射问题薛定谔方程的形式解，称为李普曼-许温格方程。

由于上式右端第二项的被积函数涉及 $\psi(r')$, 李普曼-许温格方程严格说来并不是散射问题中定态薛定谔方程的解. 它实际上是一个积分方程.

- 李普曼-许温格方程显然具有如下叠代级数解:

$$\begin{aligned}\psi(r) &= e^{i\vec{k}\cdot r} - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^3x' \frac{e^{ik|r-r'|}}{|r-r'|} V(r') \psi(r') \\ &= e^{i\vec{k}\cdot r} - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^3x' \frac{e^{ik|r-r'|}}{|r-r'|} V(r') e^{i\vec{k}\cdot r'} \\ &\quad + \left(\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \iint d^3x' d^3x'' \frac{e^{ik|r-r'|}}{|r-r'|} V(r') \frac{e^{ik|r'-r''|}}{|r'-r''|} V(r'') e^{i\vec{k}\cdot r''} \\ &\quad + \dots\end{aligned}$$

这个叠代级数是严格的, 但其收敛性以及收敛的快慢未知.

如果入射粒子与靶粒子之间的相互作用势能 $V(r)$ 可以看作微扰, 则李普曼-许温格方程可以具有如下一级近似解:

$$\psi(r) \approx e^{i\vec{k}\cdot r} - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^3x' \frac{e^{ik|r-r'|}}{|r-r'|} V(r') e^{i\vec{k}\cdot r'}$$

通常称此式为势散射问题中定态薛定谔方程的玻恩近似解。

- 若想在玻恩近似基础上计算靶粒子对于入射粒子的散射振幅 $f(\theta, \phi)$ ，需要事先分析玻恩近似中粒子波函数 $\psi(r)$ 在 $r \rightarrow \infty$ 时的渐近行为。假设 $V(r')$ 具有有限力程，则有：

$$\frac{1}{|r-r'|} \approx \frac{1}{r}, \quad e^{ik|r-r'|} \approx \exp[ikr(1 - r \cdot r'/r^2)] \approx e^{ikr} e^{-i\vec{k}_f \cdot r'}$$

式中 $\vec{k}_f = k\vec{r}/r$ 为散射粒子的波矢量。

利用以上诸式，可把一级玻恩近似意义下出射粒子的波函数在 $r \rightarrow \infty$ 区域内进一步近似为：

$$\psi(r) \Big|_{r \rightarrow \infty} \approx e^{i\vec{k}\cdot r} - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int d^3x' V(r') e^{-i(\vec{k}_f - \vec{k}) \cdot \vec{r}'}$$

把上式与散射后出射粒子波函数的渐近行为

$$\psi(r, \theta, \phi) \Big|_{r \rightarrow \infty} \approx e^{ikz} + f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r}$$

做比较, 即得散射振幅 $f(\theta, \phi)$ 的玻恩一级近似解:

$$f(\theta, \phi) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^3x' V(\mathbf{r}') e^{-i(\mathbf{k}_f - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}'}$$

或者:

$$f(\theta, \phi) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^3x' V(\mathbf{r}') e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}'}$$

这里 $\mathbf{q} := \mathbf{k}_f - \mathbf{k}$, $\hbar\vec{q}$ 描写了散射前后粒子的动量转移. 对于弹性散射, $|\mathbf{k}_f| = |\mathbf{k}| = k$. 因为 \mathbf{k}_f 与 \mathbf{k} 之间的夹角恰为散射角 θ ,

$$q^2 = |\mathbf{q}|^2 = (\mathbf{k}_f - \mathbf{k})^2 = 2k^2 - 2\vec{k} \cdot \mathbf{k}_f = 2k^2(1 - \cos\theta) = 4k^2 \sin^2(\theta/2)$$

所以:

$$q = 2k \sin(\theta/2)$$

- 除了一个常系数 $-(\mu/2\pi\hbar^2)$ 外, 散射振幅 $f(\theta, \phi)$ 正是相互作用有效势能 $V(r)$ 的傅里叶变换. 因此, 若能通过某种途径获知散射振幅 $f(\theta, \phi)$ 的信息, 则入射粒子与靶粒子之间的相互作用有效势能可用如下公式估算:

$$V(r) = -\frac{\hbar^2}{4\pi^2\mu} \int d^3q f(\theta, \phi) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}$$

此式在弦理论唯象学研究中有着直接的应用.

对于中心力场 $V(r)$ 中的弹性散射, 在计算 $f(\theta, \phi)$ 中涉及的积分 $\int d^3x'$ 时, 可以选择 \mathbf{q} 方向作为 x'_3 轴建立一个辅助的球坐标系 (ρ, α, β) :

$$\begin{aligned} f(\theta, \phi) &= -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int_0^{+\infty} \rho^2 d\rho \int_0^{2\pi} d\beta \int_0^\pi V(\rho) e^{-iq\rho \cos\alpha} \sin\alpha d\alpha \\ &= -\frac{\mu}{\hbar^2} \int_0^{+\infty} V(\rho) \rho^2 d\rho \int_{-1}^1 e^{-iq\rho s} ds = -\frac{2\mu}{\hbar^2 q} \int_0^{+\infty} V(\rho) \sin(q\rho) \rho d\rho \end{aligned}$$

式中 $q = 2k \sin(\theta/2)$. 中心力场情形下, $f(\theta, \phi) = f(\theta)$, 微分散射截面的计算公式求得为:

$$\sigma(\theta) = \frac{4\mu^2}{\hbar^4 q^2} \left\| \int_0^{+\infty} V(\rho) \sin(q\rho) \rho d\rho \right\|^2$$

库仑散射:

库仑散射指的是入射粒子与靶粒子之间的相互作用势能可以表达为:

$$V(r) = \frac{\alpha}{r}$$

参数 $\alpha > 0$ 表示斥力, $\alpha < 0$ 表示引力. 精确到玻恩一级近似,

$$f(\theta) = -\frac{2\mu}{\hbar^2 q} \int_0^{+\infty} V(\rho) \sin(q\rho) \rho d\rho = -\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2 q} \int_0^{\infty} \sin(q\rho) d\rho$$

从而：

$$f(\theta) = -\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2 q^2} \int_0^{\infty} \sin x \, dx, \quad (x := q\rho)$$

按照高等数学，

$$\int_0^{\infty} \sin x \, dx = -\cos x \Big|_0^{\infty} = 1 - \cos(\infty)$$

这似乎暗示上述散射振幅不存在。不过从物理上讲，我们可以认为严格意义上的库仑场是不存在的。计入屏蔽效应后，库仑场或许可以从物理上理解为：

$$V(r) = \frac{\alpha}{r} \exp(-\beta qr) \Big|_{\beta \rightarrow 0^+}$$

如此，库仑散射情形下的散射振幅可以重新计算如下：

$$f(\theta) = -\frac{2\mu}{\hbar^2 q} \int_0^{\infty} V(\rho) \sin(q\rho) \rho d\rho = -\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2 q} \int_0^{\infty} \sin(q\rho) e^{-\beta q\rho} d\rho$$

亦即：

$$\begin{aligned} f(\theta) &= -\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2 q^2} \int_0^\infty \sin x e^{-\beta x} dx = -\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2 q^2} \operatorname{Im} \int_0^\infty e^{-(\beta-i)x} dx \\ &= -\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2 q^2} \operatorname{Im} \left(\frac{1}{\beta-i} \right) = -\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2 q^2} \operatorname{Im} \left(\frac{\beta+i}{\beta^2+1} \right) = -\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2 q^2} \frac{1}{\beta^2+1} \end{aligned}$$

最后令 $\beta \rightarrow 0^+$, 我们得：

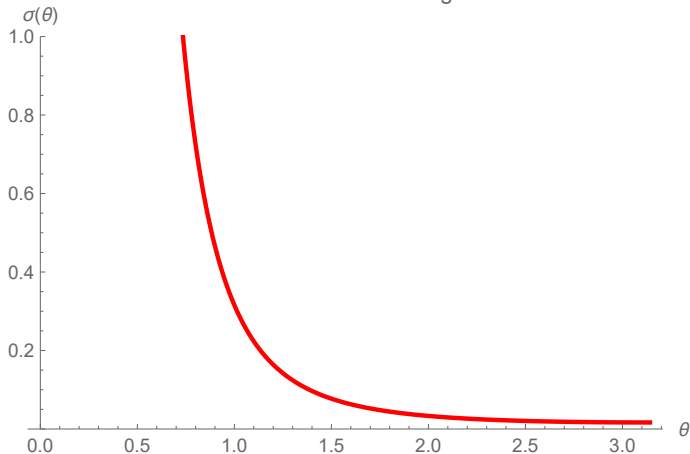
$$f(\theta) = -\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2 q^2} = -\frac{\mu\alpha}{2\hbar^2 k^2 \sin^2(\theta/2)}$$

库仑散射的微分散射截面为：

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 = \frac{\mu^2 \alpha^2}{4\hbar^4 k^4 \sin^4(\theta/2)} = \frac{\alpha^2}{4\mu^2 v^4 \sin^4(\theta/2)}$$

此处 $v = \hbar k / \mu$ 表示入射粒子的速度。上式恰为量子物理发展史上著名的**卢瑟福散射公式**，它标志着原子有核模型的诞生。

Rutherford Scattering



在卢瑟福散射中, 大角度散射 ($\theta \sim \pi$) 的截面虽然小、但并不为零. 卢瑟福据此猜测出原子结构的有核模型.

正则量子化

课程至此我们已经学习了非相对论性量子力学的基本内容。通常所说的量子力学，指的正是非相对论性量子力学。

- ① 量子力学的基本方程是自由粒子概率幅 $\psi(r, t)$ 满足的薛定谔方程：

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \psi$$

- ② 尽管薛定谔方程的建立过程颇为曲折且富有戏剧性，但作为后来者，我们看到经典力学向量子力学的过渡至少在形式上可以通过如下正则量子化步骤完成：

- 把经典力学体系纳入到哈密顿正则表述，使得

$$H = H(p, r)$$

- 默认 $E = H$ ，并在其中进行算符替代：

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}; \quad p \rightarrow -i\hbar \nabla \quad \rightsquigarrow \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} = \hat{H}(-i\hbar \nabla, r)$$

- 将此算符等式作用于波函数 $\psi(r, t)$ 上, 就得到了位置表象中的薛定谔方程:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(r, t)}{\partial t} = \hat{H}(-i\hbar \nabla, r) \psi(r, t)$$

对于自由粒子,

$$H = \frac{p^2}{2\mu}, \quad \rightsquigarrow \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2, \quad \rightsquigarrow \quad i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \psi$$

薛定谔方程的特点:

- ① 关于波函数 $\psi(r, t)$ 的线性方程.
- ② $\psi(r, t)$ 能够诠释为概率幅.
- ③ 非相对论情形下, 自由粒子的薛定谔方程必须具有伽利略变换的不变性.

非相对论量子力学建立起来之后(1925),人们一方面研究它的意义和应用,另一方面也开始探索建立相对论性量子力学的可能性. 众所周知,自由粒子的非相对论性哈密顿量

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu}$$

在狭义相对论力学中应修改为:

$$H = \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + \mu^2 c^4}$$

依照正则量子化步骤, 我们具有算符等式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} = \sqrt{-\hbar^2 c^2 \nabla^2 + \mu^2 c^4} \quad \rightsquigarrow \quad \hat{H} = \sqrt{-\hbar^2 c^2 \nabla^2 + \mu^2 c^4}$$

自由粒子的相对论性量子力学方程似乎就是:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \sqrt{-\hbar^2 c^2 \nabla^2 + \mu^2 c^4} \psi$$

2: 此方程靠谱吗?

① 倘若按

$$\sqrt{-\hbar^2 c^2 \nabla^2 + \mu^2 c^4} \psi = \sqrt{-\hbar^2 c^2 \nabla^2 \psi + \mu^2 c^4} \psi$$

理解候选哈密顿算符 $\hat{H} = \sqrt{-\hbar^2 c^2 \nabla^2 + \mu^2 c^4}$ 对于波函数的作用, 则 \hat{H} 是一个非线性算符. 换言之, 波函数的线性叠加不保证仍是波函数⁴, 这样的波函数是不能诠释为概率幅的.

② 倘若按

$$\hat{H} = \mu c^2 \sqrt{1 - \frac{\hbar^2}{\mu^2 c^2} \nabla^2} \approx \mu c^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 - \frac{\hbar^4}{8\mu^3 c^2} (\nabla^2)^2 + \mathcal{O}(\hbar^6)$$

理解 \hat{H} , 则 \hat{H} 是线性算符. 波函数诠释为概率幅的资格籍此可以保留. 不过, 候选的相对论性量子力学方程中明显地区别对待了时间参数和空间坐标, 很难相信它具有洛伦兹变换下的不变性.

⁴这里所说的波函数, 指的是它们都服从候选的相对论性量子力学方程.

Klein-Gordon 方程

1926 年, O. Klein 与 W. Gordon 走出了脱困的第一步, 他们建议: 对于一个静止质量为 μ 的相对论性自由粒子而言, 其量子力学方程式是

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi(r, t)}{\partial t^2} = -\hbar^2 c^2 \nabla^2 \psi(r, t) + \mu^2 c^4 \psi(r, t)$$

或者等价地,

$$\left(\square - \frac{\mu^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi = 0 \quad \Leftarrow \square \equiv -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \nabla^2$$

- 上述方程称为 Klein-Gordon 方程 (KG), 它是关于波函数 ψ 的线性方程. ψ 满足线性叠加原理, 暂时保留着其概率幅诠释的资格.
- $\square = \eta^{\mu\nu} \partial_\mu \partial_\nu$ 既是典型的波动算符、又是闵氏空间中著名的 4-标量算符. 所以, 只要波函数 ψ 本身构成 4-张量, KG 方程就具有洛伦兹变换下的不变性.

我们可以对 KG 方程的建立过程作如下猜测. 之前沿用正则量子化步骤写出的候选相对论性量子力学方程可重新表为:

$$\hat{\mathcal{A}}\psi = \hat{\mathcal{B}}\psi$$

式中,

$$\hat{\mathcal{A}} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}, \quad \hat{\mathcal{B}} = \sqrt{-\hbar^2c^2\nabla^2 + \mu^2c^4}$$

因为时间参数 t 在量子力学中不是力学量, $\hat{\mathcal{A}}$ 不是态矢量空间中的算符. 但 $\hat{\mathcal{B}}$ 是态矢量空间的算符. 因此,

$$[\hat{\mathcal{A}}, \hat{\mathcal{B}}] = 0$$

进而 $\hat{\mathcal{A}}\psi = \hat{\mathcal{B}}\psi$ 有推论:

$$\hat{\mathcal{A}}^2\psi = \hat{\mathcal{A}}[\hat{\mathcal{A}}\psi] = \hat{\mathcal{A}}[\hat{\mathcal{B}}\psi] = \hat{\mathcal{B}}[\hat{\mathcal{A}}\psi] = \hat{\mathcal{B}}[\hat{\mathcal{B}}\psi] = \hat{\mathcal{B}}^2\psi$$

即 $\hat{\mathcal{A}}^2\psi = \hat{\mathcal{B}}^2\psi$. 这正是 KG 方程.

2: Klein-Gordon 方程是合格的量子力学方程吗?

结论是: 非也.

- 负能困难.

引入具有频率量纲的正参数 ω ,

$$\omega = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + \mu^2 c^4} > 0$$

不难看出 KG 方程存在如下平面波解:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = A \cos(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} / \hbar - \omega t) = \frac{A}{2} \left[e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} / \hbar - i\omega t} + e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} / \hbar + i\omega t} \right]$$

亦即:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{A}{2} \left[e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} / \hbar - iE_+ t / \hbar} + e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} / \hbar - iE_- t / \hbar} \right] \quad \leftarrow \text{ } E_{\pm} = \pm \hbar \omega$$

$E_- = -\hbar \omega < 0$ 解的存在意味着 KG 粒子没有稳定的量子态.

● 负概率困难.

KG 方程乘以 ψ^* 给出:

$$\psi^* \left(\square - \frac{\mu^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi = 0 \quad \rightsquigarrow \quad \psi \left(\square - \frac{\mu^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi^* = 0$$

此二方程相减, 得:

$$\psi^* \square \psi - \psi \square \psi^* = 0 \quad \rightsquigarrow \quad \psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^* = \frac{1}{c^2} \left(\psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - \psi \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial t^2} \right)$$

或者等价地,

$$\nabla \cdot (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) = \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{1}{c^2} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) \right]$$

此式具有概率守恒定律的数学形式:

$$\boxed{\nabla \cdot \mathbf{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0} \quad \rightsquigarrow \quad \mathbf{j} = -\frac{i\hbar}{2\mu} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)$$

但是,

$$\rho = \frac{i\hbar}{2\mu c^2} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right)$$

- ❶ 因为 $\rho \neq |\psi|^2$, KG 粒子的波函数丧失了概率幅的物理诠释.
- ❷ 概率密度 ρ 的上述定义仅能保证其实数性, $\rho = \rho^*$, 无法保证其取值的非负性. 事实上, 因为 ρ 同时依赖于波函数及其一阶时间导数, ρ 即可大于等于零, 也可小于零.
- ❸ 考虑 KG 方程的负能平面波解,

$$\psi(r, t) = Ae^{-ip \cdot r / \hbar + i\omega t} \rightsquigarrow \rho = -A^2 \sqrt{1 + \frac{p^2}{\mu^2 c^2}} < 0$$

- ❹ 因为负概率困难的存在, 在 KG 理论中实际上难于把流守恒方程 $\nabla \cdot \mathbf{j} = -\partial_t \rho$ 诠释为概率守恒定律. KG 方程缺少概率诠释, 意味着它不是称职的量子力学方程.

Dirac 方程

KG 方程问世 (1926) 以后, 因为其存在负概率困难, Dirac 率先拒绝承认它是薛定谔方程的相对论性对应物. Dirac 坚持认为: 与非相对论性自由粒子的薛定谔方程类似, 相对论性自由粒子合法的量子力学方程式也只应包含波函数关于时间参数的一阶导数

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{\mathcal{H}} \psi$$

- ① 波函数仍是概率幅, $\rho = |\psi|^2 \geq 0$.
- ② $\hat{\mathcal{H}}$ 是相对论性自由粒子的哈密顿算符. 作为自由粒子的一个力学量, $\hat{\mathcal{H}}$ 必须是量子态空间中的线性厄米算符.
- ③ 按照狭义相对论中时空平等的特点与量纲分析, 可以把 $\hat{\mathcal{H}}$ 一般性地表为:

$$\hat{\mathcal{H}} = c\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \beta\mu c^2$$

待定系数 $\boldsymbol{\alpha}$ 和 β 无量纲且必须独立于时空坐标变量.

为了确定 α 和 β , Dirac 进一步假设 $\hat{\mathcal{H}}$ 可看作朴素的非线性候选哈密顿算符

$$\hat{H} = \sqrt{c^2 \hat{p}^2 + \mu^2 c^4}$$

的一种可能的线性化实现, 即 $\hat{\mathcal{H}}^2 = \hat{H}^2$. 换言之,

$$\begin{aligned} c^2 \hat{p}^2 + \mu^2 c^4 &= \hat{H}^2 = \hat{\mathcal{H}}^2 \\ &= (c\alpha_i \hat{p}_i + \beta \mu c^2) (c\alpha_j \hat{p}_j + \beta \mu c^2) \\ &= \frac{1}{2} c^2 \{\alpha_i, \alpha_j\} \hat{p}_i \hat{p}_j + \beta^2 \mu^2 c^4 + \{\alpha_i, \beta\} \mu c^3 \end{aligned}$$

比较两端, 知:

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

- 这些反对易括号是非平庸的, 它们不可能被普通的复数系数 α 和 β 所满足. 但确实可以找到 4 个彼此反对易的矩阵 α 和 β 满足这些对易关系, 这意味着 Dirac 方程中的 ψ 必须是矩阵波函数 \rightsquigarrow 自旋是一种相对论效应.

系数 α 和 β 可通过如下 4×4 厄米矩阵实现：

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

Dirac 波函数是 4-分量的列矩阵，称为双旋量。Dirac 方程在位置表象中可表为：

$$i\hbar \frac{\partial \psi(r, t)}{\partial t} = -i\hbar c \alpha \cdot \nabla \psi(r, t) + \beta \mu c^2 \psi(r, t)$$

或者：

$$\left(i\gamma^\mu \partial_\mu - \frac{\mu c}{\hbar} \right) \psi(r, t) = 0$$

这里已经采取了狭义相对论的时空观，把时空看成了 4 维闵氏空间， $x^\mu = (x^0 = ct, \mathbf{r})$ 。 γ^μ 称为 Dirac 矩阵，

$$\gamma^0 = \beta, \quad \gamma^i = \beta \alpha_i, \quad (i = 1, 2, 3)$$

不难验证其具有如下性质：

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = -2\eta^{\mu\nu}, \quad (\gamma^\mu)^\dagger = \gamma^0 \gamma^\mu \gamma^0$$

2: Dirac 方程有无负概率困难?

在位置表象中分别写出自由粒子的 Dirac 方程与其厄米共轭方程, 我们有:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -i\hbar c \alpha_i \frac{\partial \psi}{\partial x^i} + \beta \mu c^2 \psi, \quad -i\hbar \frac{\partial \psi^\dagger}{\partial t} = i\hbar c \frac{\partial \psi^\dagger}{\partial x^i} \alpha_i + \beta \mu c^2 \psi^\dagger$$

前者左乘 ψ^\dagger 减去后者右乘 ψ , 得:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\psi^\dagger \psi) = -i\hbar c \left[\psi^\dagger \alpha_i \frac{\partial \psi}{\partial x^i} + \left(\frac{\partial \psi^\dagger}{\partial x^i} \right) \alpha_i \psi \right] = -i\hbar c \partial_i (\psi^\dagger \alpha_i \psi)$$

这正是期望中的概率守恒定律,

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

式中 $\rho = \psi^\dagger \psi (\geq 0)$, $\mathbf{j} = c \psi^\dagger \boldsymbol{\alpha} \psi$. 所以, Dirac 方程没有负概率困难, 其中的波函数仍可诠释为概率幅.

Dirac 粒子的自旋:

采取海森堡图像, 研究 Dirac 粒子轨道角动量算符的时间演化⁵:

$$\frac{d\hat{L}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{L}, \hat{H}] = \frac{1}{i\hbar} [\hat{L}, c\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}}] = \frac{c}{i\hbar} \epsilon_i \alpha_j [\hat{L}_i, \hat{p}_j] = c\epsilon_{ijk} \epsilon_i \alpha_j \hat{p}_k = c\boldsymbol{\alpha} \times \hat{\mathbf{p}}$$

此式表明自由 Dirac 粒子的轨道角动量不是守恒量. 假设 Dirac 粒子携带非零的自旋角动量

$$\hat{\mathbf{S}} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\Sigma}$$

我们有:

$$\frac{d\hat{\mathbf{S}}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{\mathbf{S}}, \hat{H}] = \frac{1}{i\hbar} [\hat{\mathbf{S}}, c\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}}] = \frac{c}{2i} \epsilon_i \hat{p}_j [\hat{\Sigma}_i, \alpha_j]$$

倘若 Dirac 粒子的总角动量 $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \mathbf{S}$ 是守恒量, 则必有:

$$[\hat{\Sigma}_i, \alpha_j] = 2i\epsilon_{ijk} \alpha_k$$

⁵倘若取薛定谔图像, 则研究对象转换为 Dirac 粒子轨道角动量的系综平均值.

这个对易关系的解是存在的,其显示形式为:

$$\Sigma_i = \begin{pmatrix} \sigma_i & 0 \\ 0 & \sigma_i \end{pmatrix}$$

容易看出 $\Sigma^2 = 3$, 故 Dirac 粒子的自旋角动量角量子数为 $s = 1/2$.

Dirac 理论的负能困难:

考虑自由粒子 Dirac 方程的平面波解:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = Nu(\mathbf{p}) \exp[i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)/\hbar]$$

4-分量列矩阵 $u(\mathbf{p})$ 是粒子的自旋态波函数, 称为双旋量. 它服从如下方程:

$$(c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta\mu c^2)u(\mathbf{p}) = Eu(\mathbf{p})$$

设

$$u(\mathbf{p}) = \begin{bmatrix} \varphi(\mathbf{p}) \\ \chi(\mathbf{p}) \end{bmatrix}$$

我们有：

$$(E - \mu c^2) \varphi = c \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{p} \chi, \quad (E + \mu c^2) \chi = c \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{p} \varphi$$

联立求解此二方程，

$$\begin{aligned} (E + \mu c^2) \left[(E - \mu c^2) \varphi \right] &= (E + \mu c^2) \left[c \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{p} \chi \right] \\ &= c \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{p} \left[(E + \mu c^2) \chi \right] \\ &= c^2 (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{p})^2 \varphi \\ &= c^2 \boldsymbol{p}^2 \varphi \end{aligned}$$

亦即：

$$\left(E^2 - \mu^2 c^4 - c^2 \boldsymbol{p}^2 \right) \varphi(\boldsymbol{p}) = 0$$

故自由 Dirac 粒子能量本征值有两个取值：

$$E_{\pm} = \pm \sqrt{c^2 \boldsymbol{p}^2 + \mu^2 c^4}, \quad E_- = -E_+$$

- Dirac 理论同时允许正能解与负能解的存在. 自由粒子正负能量本征值之间的能隙为 $2\mu c^2$:

$$E_+ = \sqrt{c^2 p^2 + \mu^2 c^4} \geq \mu c^2, \quad E_- = -\sqrt{c^2 p^2 + \mu^2 c^4} \leq -\mu c^2$$

- 因为电子可以从高能级跃迁到低能级且对外发射光子, 故 Dirac 理论中的负能解不能简单地扔掉. 为了解决负能困难, Dirac 假设几乎所有的负能态都已被电子填满, 形成所谓费米子海⁶. 受泡利不相容原理的制约, 处于正能态上的电子不能向这些已被占据的负能态跃迁.
- 倘若费米子海里的某个负能电子因受激吸收跃迁到了正能级, 则费米子海中会出现一个空穴. 按照能量守恒与电荷守恒定律判断, 这样一个空穴表现为一个带正电的正能量粒子. 历史上, Dirac 就这样从理论上预言了正电子的存在.
- 1932 年安德森 (Anderson) 和赵忠尧等人在实验上发现了正电子.

⁶费米子海是 Dirac 理论中真空态, 其总能量为零.

小结:

尽管 Dirac 理论取得了极大的科学成就,但人们试图建立起一个以单粒子为研究对象的相对论性量子力学的努力却并没有获得成功.

1930 年代以来,人们逐渐认识到实现狭义相对论与量子物理相结合的最好的平台是量子场论 (QFT).

- ① QFT 的研究对象是量子化的场.
- ② 量子场本身是具有波粒二象性的. 量子场的粒子性表现为它的能量、动量和角动量等可观测量均为其量子的能量、动量和角动量之和.
- ③ 量子场的波动性则表现为若干单粒子态的叠加态.
- ④ 在 QFT 中,粒子之间的相互作用表现为相应量子场之间的耦合.