传播子与散射

squid

update : 2021 年 11 月 12 日

目录

1 传播子

1.1 时间演化算子

量子态按照薛定谔方程演化，模长保持不变，不同时刻的态矢可以通过一个幺正变换联系起来

$$|\psi(t)\rangle = U(t,t_0)\,|\psi(t_0)\rangle$$

$U(t,t_0)$ 即为时间演化算子。由此定义的时间演化算子显然满足：

$$U(t,t) = \mathbb{1},\ U(t,t_0) = U(t,t_1)U(t_1,t_0),$$

$$U^\dagger U = UU^\dagger = \mathbb{1},\ U^{-1}(t,t_0) = U(t_0,t)$$

将 $|\psi(t)\rangle$ 代入薛定谔方程得到传播子满足的方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t,t_0)\,|\psi(t_0)\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\,|\psi(t)\rangle = H\,|\psi(t)\rangle = HU(t,t_0)\,|\psi(t_0)\rangle$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t,t_0) = HU(t,t_0)$$

如果哈密顿量不显含时，则显然

$$U(t,t_0) = e^{-\frac{iHt}{\hbar}}$$

如果哈密顿量含时，则对上式积分可得

$$U(t,t_0) = \mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_n H(t_n)U(t_n,t_0)$$

显然 $U(t_n,t_0)$ 同样可以用上式代入，从而时间演化算子可写为如下 Dyson 序列：

$$U(t,t_0) = \mathbb{1} + \sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{(i\hbar)^n}\int_{t_0}^{t} dt_n\int_{t_0}^{t_n} dt_{n-1}\cdots\int_{t_0}^{t_2} dt_1 H(t_n)H(t_{n-1})\cdots H(t_1)$$

上式要求时序 $t_n > t_{n-1} > \cdot > t_1$。

引入时间排序算符 T 自动排序，即 $T[H(t_n)H(t_{n-1})\cdots H(t_1)]$ 自动按照从大到小的顺序分配时间参数。由于

$$\int_{t_0}^{t} dt_n\int_{t_0}^{t_n} dt_{n-1}\cdots\int_{t_0}^{t_2} dt_1 = \frac{t^n}{n!} = \frac{1}{n!}\int_{t_0}^{t} dt_n\int_{t_0}^{t} dt_{n-1}\cdots\int_{t_0}^{t} dt_1$$

从而 Dyson 序列形式上又可写为

$$\begin{aligned}U(t,t_0) &= \mathbb{1} + \sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n!(i\hbar)^n}\int_{t_0}^{t} dt_n\int_{t_0}^{t} dt_{n-1}\cdots\int_{t_0}^{t} dt_1 T[H(t_n)H(t_{n-1})\cdots H(t_1)]\\ &= T\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} d\tau H(\tau)\right]\end{aligned}$$

通常我们只考虑 $t > t_0$ 的情形，即 $U_F(t,t_0) = U(t,t_0)\theta(t-t_0)$。

1.2 U_F 在频率空间的表示

考虑一个积分

$$I(a)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}e^{-i\omega t}\frac{i}{\omega-a+i\epsilon}$$

当 $t>0$ 时，选取下半平面的环路，由留数定理得，此时 $I(a)=e^{-iat}$；当 $t<0$ 时，选取上半平面的环路，由留数定理得，此时 $I(a)=0$。于是 $I(a)=e^{-iat}\theta(t)$。

假设哈密顿量不含时，则

$$U_F(t,t_0)=e^{-i\frac{H(t-t_0)}{\hbar}}\theta(t-t_0)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dE}{2\pi}e^{-\frac{iE(t-t_0)}{\hbar}}\frac{i}{E-H+i\epsilon}$$

$$U_F(E)=\frac{i}{E-H+i\epsilon}$$

1.3 传播子

$U_F(t,t_0)$ 在坐标表象下的表示即为（费曼）传播子，

$$D_F(\vec{x},t;\vec{x}_0,t_0)=\langle\vec{x}|\,U_F(t,t_0)\,|\vec{x}_0\rangle=\langle\vec{x}|\,U(t,t_0)\,|\vec{x}_0\rangle\,\theta(t-t_0)$$

假设哈密顿量不含时，则

$$D_F(\vec{x},t;\vec{x}_0,t_0)=\langle\vec{x}|\,e^{-\frac{iH(t-t_0)}{\hbar}}\,|\vec{x}_0\rangle\,\theta(t-t_0)$$

由 $H\,|n\rangle=E_n\,|n\rangle$ 可得

$$\begin{aligned}D_F(\vec{x},t;\vec{x}_0,t_0)&=\sum_n\phi_n(\vec{x})e^{-\frac{iE_n(t-t_0)}{\hbar}}\phi_n(\vec{x}_0)\theta(t-t_0)\\&=\sum_n\phi_n(\vec{x},t)\phi_n(\vec{x}_0,t_0)\theta(t-t_0)\end{aligned}$$

容易发现传播子满足

$$\begin{aligned}\psi(\vec{x},t)&=\langle\vec{x}|\,|\psi(t)\rangle=\langle\vec{x}|\,U_F(t,t_0)\,|\psi(t_0)\rangle\\&=\int d^3x_0\,\langle\vec{x}|\,U_F(t,t_0)\,|\vec{x}_0\rangle\,\langle\vec{x}_0|\,|\psi(t_0)\rangle\\&=\int d^3x_0D_F(\vec{x},t;\vec{x}_0,t_0)\psi(\vec{x}_0,t_0)\end{aligned}$$

由于 $\psi(\vec{x},t)$ 是一种概率幅，故显然传播子 $D_F(\vec{x},t;\vec{x}_0,t_0)$ 描述的是 t_0 时刻 $\vec{x}_0$ 位置的粒子在未来 t 时刻位于 $\vec{x}$ 位置的概率幅。

这种看法在海森堡绘景下更容易看出来，作变换

$$\hat{A}\to U^\dagger(t,t_0)\hat{A}U(t,t_0),\ |\psi(t)\rangle\to U^\dagger(t,t_0)\,|\psi(t)\rangle\,,\ |\vec{x}\rangle\to U^\dagger(t,t_0)\,|\vec{x}\rangle\overset{def}{=}|\vec{x},t\rangle_H$$

由于 $U(t_0,t_0)=\mathbb{1}$，传播子可写为

$$\begin{aligned}D_F(\vec{x},t;\vec{x}_0,t_0)&=\langle\vec{x}|\,U(t,t_0)\,|\vec{x}_0\rangle\,\theta(t-t_0)=\langle\vec{x}|\,U(t,t_0)U^\dagger(t_0,t_0)\,|\vec{x}_0\rangle\,\theta(t-t_0)\\&={}_H\langle\vec{x},t|\vec{x}_0,t_0\rangle_H\,\theta(t-t_0)\end{aligned}$$

即一种跃迁振幅。

1.4 传播子与路径积分

路径积分的观点认为，上述振幅取决于从 $(\vec{x}_0,t_0)$ 到 $(\vec{x},t)$ 的全部可能路径，每条路径贡献相同模长的几率幅，但相位不同。不同路径的几率幅相位取决于这条路径的作用量。最终的跃迁振幅为所有路径对应几率幅的相干叠加。也就是

$$D_F(\vec{x},t;\vec{x}_0,t_0)=\sum_{\{\vec{x}(t)\}}Ce^{\frac{iS[\vec{x}(t)]}{\hbar}}$$

对全部可能路径求和。

事实上可以从传播子的定义出发得到形似的表达式。首先是相空间的路径积分。在默认 $t_N>t_0$ 的情况下

$$\begin{aligned}D_F(\vec{x}_N,t_N;\vec{x}_0,t_0)&=\langle\vec{x}|U(t_N,t_0)|\vec{x}_0\rangle\\&=\langle\vec{x}_N|U(t_N,t_{N-1})U(t_{N-1},t_{N-2})\cdots U(t_1,t_0)|\vec{x}_0\rangle\\&=\int d^3x_{N-1}\int d^3x_{N-2}\cdots\int d^3x_1\\&\quad\langle\vec{x}_N|U(t_N,t_{N-1})|\vec{x}_{N-1}\rangle\langle\vec{x}_{N-1}|U(t_{N-1},t_{N-2})|\vec{x}_{N-2}\rangle\cdots\langle\vec{x}_1|U(t_1,t_0)|\vec{x}_0\rangle\end{aligned}$$

其中 $t_n-t_{n-1}=\epsilon$ 为无穷小间隔。

$$U(t_n,t_{n-1})=e^{-\frac{i\epsilon H(t_n)}{\hbar}}$$

假设哈密顿量为

$$H(\hat{\vec{x}},\hat{\vec{p}},t)=T(\hat{\vec{p}},t)+V(\hat{\vec{x}},t)$$

由于

$$e^{\epsilon(\hat{A}+\hat{B})}=e^{\epsilon\hat{A}}e^{\epsilon\hat{B}}[1+O(\epsilon^2)]$$

故

$$U(t_n,t_{n-1})=e^{-\frac{i\epsilon H(t_n)}{\hbar}}=e^{-\frac{i\epsilon T(\hat{\vec{p}},t_n)}{\hbar}}e^{-\frac{i\epsilon V(\hat{\vec{x}},t_n)}{\hbar}}=e^{-\frac{i\epsilon V(\hat{\vec{x}},t_n)}{\hbar}}e^{-\frac{i\epsilon T(\hat{\vec{p}},t_n)}{\hbar}}$$

对于 $e^{-\frac{i\epsilon V(\hat{\vec{x}},t_n)}{\hbar}}e^{-\frac{i\epsilon T(\hat{\vec{p}},t_n)}{\hbar}}$，可以得到

$$\begin{aligned}\langle\vec{x}_n|U(t_n,t_{n-1})|\vec{x}_{n-1}\rangle&=\langle\vec{x}_n|e^{-\frac{i\epsilon V(\hat{\vec{x}},t_n)}{\hbar}}e^{-\frac{i\epsilon T(\hat{\vec{p}},t_n)}{\hbar}}|\vec{x}_{n-1}\rangle\\&=\int d^3p_n\langle\vec{x}_n|e^{-\frac{i\epsilon V(\hat{\vec{x}},t_n)}{\hbar}}|\vec{p}_n\rangle\langle\vec{p}_n|e^{-\frac{i\epsilon T(\hat{\vec{p}},t_n)}{\hbar}}|\vec{x}_{n-1}\rangle\\&=\int\frac{d^3p_n}{(2\pi\hbar)^3}e^{\frac{i\vec{p}_n\cdot(\vec{x}_n-\vec{x}_{n-1})}{\hbar}}e^{-\frac{i\epsilon(T(\vec{p}_n,t_n)+V(\vec{x}_n,t_n))}{\hbar}}\end{aligned}$$

而对于 $e^{-\frac{i\epsilon T(\hat{\vec{p}},t_n)}{\hbar}}e^{-\frac{i\epsilon V(\hat{\vec{x}},t_n)}{\hbar}}$，同理可有

$$\langle\vec{x}_n|U(t_n,t_{n-1})|\vec{x}_{n-1}\rangle=\int\frac{d^3p_n}{(2\pi\hbar)^3}e^{\frac{i\vec{p}_n\cdot(\vec{x}_n-\vec{x}_{n-1})}{\hbar}}e^{-\frac{i\epsilon\left(T(\vec{p}_n,t_n)+V(\vec{x}_{n-1},t_n)\right)}{\hbar}}$$

综合两者

$$\langle\vec{x}_n|U(t_n,t_{n-1})|\vec{x}_{n-1}\rangle=\int\frac{d^3p_n}{(2\pi\hbar)^3}e^{\frac{i\vec{p}_n\cdot(\vec{x}_n-\vec{x}_{n-1})}{\hbar}}e^{-\frac{i\epsilon\left(T(\vec{p}_n,t_n)+V\left(\frac{\vec{x}_{n-1}+\vec{x}_n}{2},t_n\right)\right)}{\hbar}}$$

代入传播子的表达式可得

$$\begin{aligned}D_F(\vec{x}_N,t_N;\vec{x}_0,t_0)&=\left(\prod_{n=1}^{N-1}\int d^3x_n\right)\left(\prod_{n=1}^{N}\int\frac{d^3p_n}{(2\pi\hbar)^3}\right)e^{\frac{i\mathcal{A}^N}{\hbar}}\\&\stackrel{def}{=}\int D'\vec{x}\int\frac{D\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}e^{\frac{i\mathcal{A}[\vec{p},\vec{x}]}{\hbar}}\\&\quad(\lim N\to\infty)\end{aligned}$$

其中

$$\mathcal{A}^N = \sum_{n=1}^{N}\left[p_n(x_n - x_{n-1}) - \epsilon H(p_n, \frac{x_n + x_{n-1}}{2}, t_n)\right]$$
$$\overset{N\to\infty}{=} \int_{t_0}^{t_N} dt[\vec{p}(t)\cdot\dot{\vec{x}}(t) - H(\vec{p}(t),\vec{x}(t),t)] = \mathcal{A}[\vec{p},\vec{x}]$$

$\mathcal{A}[\vec{p},\vec{x}]$ 看上去像拉氏量但其实不是，它定义在像空间上。
$D_F(\vec{x}_N,t_N;\vec{x}_0,t_0) = \int D'\vec{x}\int \frac{D\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}e^{\frac{i\mathcal{A}[\vec{p},\vec{x}]}{\hbar}}$ 即为像空间的路径积分公式。
若确定动能 $T(\hat{\vec{p}},t) = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}$，则

$$\begin{aligned}\langle\vec{x}_n|\,U(t_n,t_{n-1})\,|\vec{x}_{n-1}\rangle &= \int \frac{d^3p_n}{(2\pi\hbar)^3}e^{\frac{i\vec{p_n}\cdot(\vec{x}_n-\vec{x}_{n-1})}{\hbar}}e^{-\frac{i\epsilon\left(\frac{\vec{p}_n^2}{2m}+V\left(\frac{\vec{x}_{n-1}+\vec{x}_n}{2},t_n\right)\right)}{\hbar}}\\
&= \int \frac{d^3p_n}{(2\pi\hbar)^3}e^{-\frac{i\epsilon}{2m\hbar}\left(\vec{p}_n-\frac{\vec{x}_n-\vec{x}_{n-1}}{\epsilon}m\right)^2}e^{\frac{i\epsilon}{\hbar}\left(\frac{1}{2}m\left(\frac{\vec{x}_n-\vec{x}_{n-1}}{\epsilon}\right)^2-V\left(\frac{\vec{x}_{n-1}+\vec{x}_n}{2},t_n\right)\right)}\\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i\epsilon/m}^3}e^{\frac{i\epsilon}{\hbar}L(\vec{x}(t_n),\dot{\vec{x}}(t_n),t_n)}\end{aligned}$$

则容易看出

$$\begin{aligned}D_F(\vec{x}_N,t_N;\vec{x}_0,t_0) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i\epsilon/m}^3}\prod_{n=1}^{n=N-1}\int\frac{d^3x_n}{\sqrt{2\pi\hbar i\epsilon/m}^3}e^{\frac{i\epsilon}{\hbar}\sum_{n=1}^{N-1}L(\vec{x}(t_n),\dot{\vec{x}}(t_n),t_n)}\\
&\overset{N\to\infty}{=} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i\epsilon/m}^3}\int\frac{D'\vec{x}}{\sqrt{2\pi\hbar i\epsilon/m}^3}e^{\frac{i}{\hbar}S[\vec{x}(t)]}\\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i\epsilon/m}^3}\int\overline{D}'\vec{x}e^{\frac{i}{\hbar}S[\vec{x}(t)]}\end{aligned}$$

也就是费曼路径积分的形式。与之类似，对于 d 维空间有

$$D_F(\vec{x}_N,t_N;\vec{x}_0,t_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i\epsilon/m}^d}\int\overline{D}'\vec{x}e^{\frac{i}{\hbar}S[\vec{x}(t)]}$$

1.5 传播子求解

由定义和路径积分可以直接求解几种类型的传播子。

1.5.1 自由粒子传播子

自由粒子的传播子可以直接由定义求解

$$\begin{aligned}D_F^{(0)}(\vec{x},t;\vec{x}_0,t_0) &= \left\langle\vec{x}\left|\hat{U}^{(0)}(t,t_0)\right|\vec{x}_0\right\rangle = \left\langle\vec{x}\left|e^{-iH_0(t-t_0)}\right|\vec{x}_0\right\rangle\theta(t)\\
&= \theta(t)\int d^3p\,\langle\vec{x}\mid\vec{p}\rangle\,e^{-i\frac{\vec{p}^2}{2m\hbar}t}\langle\vec{p}\mid\vec{x}_0\rangle\\
&= \theta(t)\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i(t-t_0)/m}^3}e^{\frac{im}{2(t-t_0)\hbar}(\vec{x}-\vec{x}_0)^2}\end{aligned}$$

若为一维自由粒子，显然有

$$D_F^{(0)}(x,t;x_0,t_0) = \theta(t)\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i(t-t_0)/m}}e^{\frac{im}{2(t-t_0)\hbar}(x-x_0)^2}$$

注意到对于自由粒子，拉氏量 $L=\frac{m}{2}\left(\frac{\vec{x}-\vec{x}_0}{t-t_0}\right)^2$，于是经典作用量为

$$S[\vec{x}_{cl}(t)]=\frac{m(\vec{x}-\vec{x}_0)^2}{2(t-t_0)}$$

也就是说

$$D_F^{(0)}(x,t;x_0,t_0)=\theta(t)\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i(t-t_0)/m}}e^{\frac{i}{\hbar}S[x_{cl}(t)]}$$

1.5.2 平方型拉氏量系统的传播子

传播子中出现经典作用量对应的相因子对于平方型拉氏量系统来说其实是一种普遍现象。考虑如下拉氏量

$$L=a(t)\dot{q}^2(t)+b(t)q(t)\dot{q}(t)+c(t)q^2(t)+d(t)\dot{q}(t)+e(t)q(t)+f(t)$$

设 $q(t)=q_{cl}(t)+\eta(t)$, $\eta(t_0)=\eta(t_N)=0$。由于最高次为二次，故“展开至二阶”是精确的

$$\begin{aligned}L(q,\dot{q},t)=&L\left(q_{\mathrm{cl}},\dot{q}_{\mathrm{cl}},t\right)+\left.\frac{\partial L}{\partial\dot{q}}\right|_{\mathrm{cl}}\dot{\eta}+\left.\frac{\partial L}{\partial q}\right|_{\mathrm{cl}}\eta\\&+\left.\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2L}{\partial\dot{q}^2}\dot{\eta}^2+2\frac{\partial^2L}{\partial\dot{q}\partial q}\dot{\eta}\eta+\frac{\partial^2L}{\partial q^2}\eta^2\right)\right|_{\mathrm{cl}}\end{aligned}$$

由于 $\left.\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial\dot{q}}-\frac{\partial L}{\partial q}\right|_{cl}=0$，故上式第二项第三项可以化为全微分, 积分后为 0，从而

$$S[q(t)]=S[q_{cl}[t]]+\int dt[a(t)\dot{\eta}^2+b(t)\eta\dot{\eta}+c(t)\eta^2]\overset{def}{=}S[q_{cl}(t)]+\Delta S_f[\eta(t)]$$

于是可有

$$\begin{aligned}D_F(\vec{x}_N,t_N;\vec{x}_0,t_0)&=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i\epsilon/m}^d}\int\overline{D}'\vec{x}e^{\frac{i}{\hbar}S[x(t)]}=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i\epsilon/m}^d}\int\overline{D}'\vec{\eta}e^{\frac{i}{\hbar}\Delta S[\vec{\eta}(t)]}e^{\frac{i}{\hbar}S[x_{cl}(t)]}\\&=F(t_N,t_0)e^{\frac{i}{\hbar}S[x_{cl}(t)]}\end{aligned}$$

$F(t_N,t_0)$ 称为量子涨落因子。F 只有时间作为参数因为 η 的端点是固定为 0 的。

1.5.3 谐振子传播子

由于传播子的如上形式以及时间演化算子的性质 $U(t,t_0)=U(t,t_1)U(t_1,t_0)$，量子涨落因子的形式可以通过经典作用量确定下来。按照这种思路求解谐振子传播子

一维谐振子的经典路径为

$$x_{cl}(t_0)=A\sin\phi=x_0$$

$$x_{cl}(t)=A\sin(\omega(t-t_0)+\phi)=x$$

从而作用量为

$$\begin{aligned}S\left[x_{c1}(t)\right]&=\frac{1}{2}m\int_{t_0}^{t}dt'\left(\dot{x}_{cl}^2\left(t'\right)-\omega^2x_{cl}^2\left(t'\right)\right)\\&=\frac{1}{2}mA^2\omega^2\int_{t_0}^{t}dt'\left(\cos^2\left(\omega(t'-t_0)+\phi\right)-\sin^2\left(\omega t'+\phi\right)\right)\\&=\frac{1}{2}mA^2\omega^2\int_{t_0}^{t}dt'\cos\left(2\omega(t'-t_0)+2\phi\right)=\frac{m\omega}{4}A^2(\sin(2\omega(t-t_0)+2\phi)-\sin 2\phi)\end{aligned}$$

作用量需要用 x_0, x 表示出来，由于

$$\frac{x_0}{x} = \frac{\sin\phi}{\sin(\omega(t-t_0)+\phi)} = \frac{\sin\phi}{\sin\omega(t-t_0)\cos\phi + \cos\omega(t-t_0)\sin\phi}$$

解出 $\cos\phi$ 有

$$A\cos\phi = \frac{x}{\sin\omega(t-t_0)} - \frac{x_0\cos\omega(t-t_0)}{\sin\omega(t-t_0)}$$

从而

$$A^2\sin 2\phi = 2A\cos\phi\cdot A\sin\phi = 2x_0\left(\frac{x}{\sin\omega(t-t_0)} - \frac{x_0\cos\omega(t-t_0)}{\sin\omega(t-t_0)}\right)$$

$$\begin{aligned}
A^2\sin(2\omega(t-t_0)+2\phi) &= 2A^2\sin(\omega(t-t_0)+\phi)\cos(\omega(t-t_0)+\phi)\\
&= 2xA(\cos\omega(t-t_0)\cos\phi - \sin\omega(t-t_0)\sin\phi)\\
&= 2x\left(\cos\omega(t-t_0)\left(\frac{x}{\sin\omega(t-t_0)} - \frac{x_0\cos\omega(t-t_0)}{\sin\omega(t-t_0)}\right) - x_0\sin\omega(t-t_0)\right)\\
&= 2x\left(\frac{x\cos\omega(t-t_0)}{\sin\omega(t-t_0)} - \frac{x_0}{\sin\omega(t-t_0)}\right)
\end{aligned}$$

代入经典作用量得到

$$S[x_{cl}(t)] = \frac{m\omega}{2}\left[\left(x_0^2+x^2\right)\cot\omega(t-t_0) - 2x_0x\csc\omega(t-t_0)\right]$$

由传播子的性质

$$\begin{aligned}
\left\langle x\left|e^{-i\hat{H}(t-t_0)}\right|x_0\right\rangle &= \left\langle x\left|e^{-i\hat{H}(t-t_1)}e^{-i\hat{H}(t_1-t_0)}\right|x_0\right\rangle\\
&= \int_{-\infty}^{\infty}dx'\left\langle x\left|e^{-i\hat{H}(t-t_1)}\right|x'\right\rangle\left\langle x'\left|e^{-i\hat{H}(t_1-t_0)}\right|x_0\right\rangle
\end{aligned}$$

代入包含经典作用量的传播子表达式

$$\begin{aligned}
&F(t,t_0)\exp i\frac{m\omega}{2}\left[\left(x_0^2+x^2\right)\operatorname{ctn}\omega(t-t_0) - 2x_0x\csc\omega(t-t_0)\right]\\
&= F(t,t_1)F(t_1,t_0)\int_{-\infty}^{\infty}dx'\exp\frac{im\omega}{2}\left[\left(x^2+x'^2\right)\cot\omega\left(t-t_1\right)\right.\\
&\left.-2xx'\csc\omega\left(t-t_1\right)\right]\exp\frac{im\omega}{2}\left[\left(x_0^2+x'^2\right)\cot\omega(t_1-t_0) - 2x_0x'\csc\omega(t_1-t_0)\right]
\end{aligned}$$

要求的量子涨落因子与 x 无关，故取 $x_0 = x = 0$，上式可以简化为

$$\begin{aligned}
\frac{F(t,t_0)}{F(t,t_1)F(t_1,t_0)} &= \int_{-\infty}^{\infty}dx'\exp i\frac{m\omega}{2}\left(\operatorname{ctn}\omega\left(t-t_1\right)+\cot\omega(t_1-t_0)\right)x'^2\\
&= \sqrt{\frac{2\pi i}{m\omega}\frac{1}{\cot\omega\left(t-t_1\right)+\cot\omega(t_1-t_0)}}\\
&= \sqrt{\frac{2\pi i}{m\omega}\frac{\sin\omega\left(t-t_1\right)\sin\omega(t_1-t_0)}{\sin\omega(t_1-t_0)\cos\omega(t-t_1)+\cos\omega(t_1-t_0)\sin\omega(t-t_1)}}\\
&= \sqrt{\frac{2\pi i}{m\omega}\frac{\sin\omega\left(t-t_1\right)\sin\omega(t_1-t_0)}{\sin\omega(t-t_0)}}
\end{aligned}$$

由 t_1 的任意性，可以看出解为

$$F(t,t_0) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\sin\omega(t-t_0)}}$$

于是谐振子的传播子即为

$$D_F(x,t;x_0,t_0)=\theta(t-t_0)\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\sin\omega(t-t_0)}}e^{\frac{i}{\hbar}\frac{m\omega}{2}\left[\left(x_0^2+x^2\right)\cot\omega(t-t_0)-2x_0x\csc\omega(t-t_0)\right]}$$

量子涨落因子也可以通过“遍历所有路径”的原始定义来求解。

$$\begin{aligned}
D_F(x,t;x_0,t_0)=A\theta(t-t_0)e^{\frac{i}{\hbar}S[x_{cl}(t)]}&\int\overline{D}'\eta\exp\left\{\frac{i}{2\hbar}\int_{t_0}^{t}\,\mathrm{d}t\left(m\dot{\eta}^2-m\omega^2\eta^2\right)\right\}\\
&=\theta(t-t_0)\lim_{N\to\infty}\left(\frac{m}{2\pi ih\epsilon}\right)^{N/2}\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}S[x_{cl}(t)]}\int\mathrm{d}\eta_1\cdots\mathrm{d}\eta_{N-1}\\
&\exp\left\{\frac{i\epsilon}{2\hbar}\sum_{n=1}^{N}\left[m\left(\frac{\eta_n-\eta_{m-1}}{\epsilon}\right)^2-m\omega^2\left(\frac{\eta_m+\eta_{m-1}}{2}\right)^2\right]\right\}\\
&=\theta(t-t_0)\lim_{N\to\infty}\left(\frac{m}{2\pi ih\epsilon}\right)^{N/2}\left(\frac{2hc}{m}\right)^{(N-1)/2}\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}S[x_{cl}(t)]}\int\mathrm{d}\eta_1\cdots\mathrm{d}\eta_{N-1}\\
&\exp\left\{\mathrm{i}\sum_{n=1}^{N}\left[(\eta_n-\eta_{n-1})^2-\epsilon^2\omega^2\left(\frac{\eta_n+\eta_{n-1}}{2}\right)^2\right]\right\}
\end{aligned}$$

其中边界为 $\eta(t_0)=\eta(t_N)=0$。指数上的平方求和可以写为矩阵形式

$$B=\begin{pmatrix}2&-1&0&0&\cdots\\-1&2&-1&0&\cdots\\0&-1&2&-1&\cdots\\\vdots&\vdots&\vdots&\vdots&\ddots\end{pmatrix}-\frac{c^2\omega^2}{4}\begin{pmatrix}2&1&0&0&\cdots\\1&2&1&0&\cdots\\0&1&2&1&\cdots\\\vdots&\vdots&\vdots&\vdots&\ddots\end{pmatrix},\quad\eta=\begin{pmatrix}\eta_1\\\eta_2\\\vdots\\\eta_{N-1}\end{pmatrix}$$

$$\sum_{n=1}^{N}\left[(\eta_n-\eta_{n-1})^2-\epsilon^2\omega^2\left(\frac{\eta_n+\eta_{n-1}}{2}\right)^2\right]=\eta^TB\eta$$

由于 B 是实对称矩阵，故可以正交相似对角化，雅可比行列式为 1。于是

$$\begin{aligned}
\int d^{(N-1)}\eta e^{i\eta^TB_\eta}&=\int d^{(N-1)}\zeta\mathrm{e}^{i\zeta^TB_D\zeta}\\
&=\int d\zeta_1\cdots d\zeta_{N-1}\exp\left\{i\sum_{n=1}^{N-1}b_n\zeta_n^2\right\}\\
&=\prod_{n=1}^{N-1}\left(\frac{i\pi}{b_n}\right)^{1/2}=(\mathrm{i}\pi)^{(N-1)/2}[\det B]^{-1/2}
\end{aligned}$$

代入传播子得到

$$\begin{aligned}
D_F(x,t;x_0,t_0)&=\theta(t-t_0)\lim_{N\to\infty}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\epsilon}\right)^{N/2}\left(\frac{2hc}{m}\right)^{(N-1)/2}e^{\frac{i}{\hbar}S[x_{cl}(t)]}(\mathrm{i}\pi)^{(N-1)/2}[\det B]^{-1/2}\\
&=\theta(t-t_0)\lim_{\epsilon\to0}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\epsilon\det B}\right)^{1/2}e^{\frac{i}{\hbar}S[x_{cl}(t)]}
\end{aligned}$$

现求解 $\lim_{\epsilon\to0}\epsilon\det B$。对于同类型不同维数的三对角矩阵，其行列式满足如下规律

$$(I_{n+1})=\begin{pmatrix}&&&0\\&(I_n)&&\vdots\\&&&y\\0&\cdots&y&x\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}&&&0&0\\&(I_{n-1})&&\vdots&\vdots\\&&&y&0\\0&\cdots&y&x&y\\0&\cdots&0&y&x\end{pmatrix}$$

$$I_{n+1} = xI_n - y\det\begin{pmatrix} & & & 0 \\ & (I_{n-1}) & & \vdots \\ & & & 0 \\ 0 & \cdots & y & y \end{pmatrix} = xI_n - y^2 I_{n-1}$$

解递推数列的特征方程 $\lambda^2 - x\lambda + y^2 = 0$，得特征根

$$\lambda_{\pm} = \frac{x \pm \sqrt{x^2 - 4y^2}}{2}$$

由 $I_{-1} = 0, I_0 = 1, I_1 = x$ 可以定出递推公式

$$I_{n-1} = \frac{\lambda_+^n - \lambda_-^n}{\lambda_+ - \lambda_-}$$

代入具体的数值

$$x = 2\left(1 - \frac{\epsilon^2\omega^2}{4}\right), \quad y\left(1 + \frac{\epsilon^2\omega^2}{4}\right)$$

$$\begin{aligned}
\lambda_+ - \lambda_- = \sqrt{x^2 - 4y^2} &= \left[4\left(1 - \frac{\epsilon^2\omega^2}{4}\right)^2 - 4\left(1 + \frac{c^2\omega^2}{4}\right)^2\right]^{1/2} \\
&= \left(-4\epsilon^2\omega^2\right)^{1/2} = 2\mathrm{i}\epsilon \\
\lambda_{\pm}^N = \left(\frac{x \pm \sqrt{x^2 - 4y^2}}{2}\right)^N &= \left(1 \pm \mathrm{i}\epsilon\omega - \frac{\epsilon^2\omega^2}{4}\right)^N
\end{aligned}$$

略去 ϵ 高阶小可以得到

$$\begin{aligned}
&\lim_{N\to\infty} \epsilon I_{N-1} = \lim_{N\to 0} \epsilon \frac{1}{\lambda_+ - \lambda_-}\left(\lambda_+^N - \lambda_-^N\right) \\
&= \lim_{N\to\infty} \epsilon \frac{1}{2i\epsilon\omega}\left[(1 + i\epsilon\omega)^N - (1 - i\epsilon\omega)^N\right] \\
&= \lim_{N\to\infty} \frac{1}{2i\omega}\left[\left(1 + \frac{\mathrm{i}\omega(t - t_0)}{N}\right)^N - \left(1 - \frac{\mathrm{i}\omega(t - t_0)}{N}\right)^N\right] \\
&= \frac{1}{2\mathrm{i}\omega}\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega(t-t_0)} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-t_0)}\right) = \frac{\sin\omega(t - t_0)}{\omega}
\end{aligned}$$

代入传播子表达式同样得到

$$D_F(x, t; x_0, t_0) = \theta(t - t_0)\left(\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin\omega(t - t_0)}\right)^{1/2} e^{\frac{i}{\hbar}S[x_{cl}(t)]}$$

1.5.4 受迫振子传播子

对于受迫振子，$L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \frac{1}{2}m\omega^2x^2 + J(t)x$，与谐振子拉氏量的区别在一次项上。由于一次项系数不会影响 $\Delta S_f[\eta(t)]$，故受迫振子与谐振子有相同的量子涨落因子。两者区别仅在于经典作用量。

1.6 含时微扰

设哈密顿量 H_0 不显含时。对于微扰 $V(t)$，在相互作用绘景下，有

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle^I = V^I(t)|\psi(t)\rangle^I$$

同样可以有 Dyson 序列

$$
\begin{aligned}
U(t,t_0)^I =& \mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} d\tau_1 V^I\left(\tau_1\right) + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^{t} d\tau_1 \int_{t_0}^{\tau_1} d\tau_2 V^I\left(\tau_1\right) V^I\left(\tau_2\right) \\
&+ \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^3 \int_{t_0}^{t} d\tau_1 \int_{t_0}^{\tau_1} d\tau_2 \int_{t_0}^{\tau_2} d\tau_3 V^I\left(\tau_1\right) V^I\left(\tau_2\right) V^I\left(\tau_3\right) + \ldots
\end{aligned}
$$

$U(t,t_0)^I$ 是相互作用绘景下的时间演化算符，满足

$$
U\left(t,t_0\right)^I \left|\psi\left(t_0\right)\right\rangle^I = \left|\psi(t)\right\rangle^I = e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t}\left|\psi(t)\right\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t} U\left(t,t_0\right)\left|\psi\left(t_0\right)\right\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t} U\left(t,t_0\right) e^{-i\frac{i}{\hbar}H_0 t_0}\left|\psi\left(t_0\right)\right\rangle^I
$$

于是有 $U\left(t,t_0\right)^I = e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t} U\left(t,t_0\right) e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t_0}$。薛定谔绘景下的时间演化算符为

$$
\begin{aligned}
U(t,t_0) =& e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(t-t_0)} + e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}\frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} d\tau_1 V^I\left(\tau_1\right) e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t_0} \\
&+ e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^{t} d\tau_1 \int_{t_0}^{\tau_1} d\tau_2 V^I\left(\tau_1\right) V^I\left(\tau_2\right) e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t_0} \\
&+ e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^3 \int_{t_0}^{t} d\tau_1 \int_{t_0}^{\tau_1} d\tau_2 \int_{t_0}^{\tau_2} d\tau_3 V^I\left(\tau_1\right) V^I\left(\tau_2\right) V^I\left(\tau_3\right) e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t_0} + \ldots \\
&= e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(t-t_0)} + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} d\tau_1 e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(t-\tau_1)} V\left(\tau_1\right) e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(\tau_1-t_0)} \\
&+ \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^{t} d\tau_1 \int_{t_0}^{\tau_1} d\tau_2 e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(t-\tau_1)} V\left(\tau_1\right) e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(\tau_1-\tau_2)} V\left(\tau_2\right) e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(\tau_2-t_0)} \\
&+ \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^3 \int_{t_0}^{t} d\tau_1 \int_{t_0}^{\tau_1} d\tau_2 \int_{t_0}^{\tau_2} d\tau_3 \\
&\quad e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(t-\tau_1)} V\left(\tau_1\right) e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(\tau_1-\tau_2)} V\left(\tau_2\right) e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(\tau_2-\tau_3)} V\left(\tau_3\right) e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(\tau_3-t_0)} + \ldots
\end{aligned}
$$

由于时序的存在，上式各项中可以插入阶跃函数，使得积分限变为无穷而不改变结果。

$$
\begin{aligned}
U_F(t,t_0) =& e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(t-t_0)}\theta(t-t_0) + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} d\tau_1 e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(t-\tau_1)}\theta(t-\tau_1) V\left(\tau_1\right) e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(\tau_1-t_0)}\theta(\tau_1-t_0) \\
&+ \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^{t} d\tau_1 \int_{t_0}^{\tau_1} d\tau_2 e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(t-\tau_1)}\theta(t-\tau_1) V\left(\tau_1\right) \\
&\qquad e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(\tau_1-\tau_2)}\theta(\tau_1-\tau_2) V\left(\tau_2\right) e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(\tau_2-t_0)}\theta(\tau_2-t_0) \\
&+ \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^3 \int_{t_0}^{t} d\tau_1 \int_{t_0}^{\tau_1} d\tau_2 \int_{t_0}^{\tau_2} d\tau_3 e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(t-\tau_1)}\theta(t-\tau_1) V\left(\tau_1\right) e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(\tau_1-\tau_2)}\theta(\tau_1-\tau_2) V\left(\tau_2\right) \\
&\qquad e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(\tau_2-\tau_3)}\theta(\tau_2-\tau_3) V\left(\tau_3\right) e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(\tau_3-t_0)}\theta(\tau_3-t_0) \\
&+ \ldots \\
&= U_F^{(0)}(t,t_0) + \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} d\tau_1 U_F^{(0)}(t,\tau_1) V\left(\tau_1\right) U_F^{(0)}(\tau_1,t_0) \\
&+ \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\tau_1 \int_{-\infty}^{\tau_1} d\tau_2 U_F^{(0)}(t,\tau_1) V\left(\tau_1\right) U_F^{(0)}(\tau_1,\tau_2) V\left(\tau_2\right) U_F^{(0)}(\tau_2,t_0) \\
&+ \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^3 \int_{-\infty}^{\infty} d\tau_1 \int_{-\infty}^{\infty} d\tau_2 \int_{-\infty}^{\infty} d\tau_3 U_F^{(0)}(t,\tau_1) V\left(\tau_1\right) U_F^{(0)}(\tau_1,\tau_2) V\left(\tau_2\right) \\
&\qquad U_F^{(0)}(\tau_2,\tau_3) V\left(\tau_3\right) U_F^{(0)}(\tau_3,t_0) \\
&+ \ldots
\end{aligned}
$$

式中 $U_F^{(0)}(t,t_0)$ 表示哈密顿量 H_0 对应的时间演化算符 U_F。后面的项为高阶微扰，上式而可以写作

$$U_F(t,t_0) = U_F^{(0)}(t,t_0) + U_F^{(1)}(t,t_0) + U_F^{(2)}(t,t_0) + \cdots$$

$$U_F^{(n\geq 1)}(t,t_0) = \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^n \int_{-\infty}^{\infty} d\tau_1 \int_{-\infty}^{\infty} d\tau_2 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} d\tau_n U_F^{(0)}(t,\tau_1) V(\tau_1) \cdots V(\tau_n) U_F^{(0)}(\tau_n,t_0)$$

当 $\hat{V}$ 不显含时时，利用 U_F 在频率空间的表示，可以将上式从时间积分化到频率积分（能量积分）

$$U_F^{(0)}(t,t_0) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi} e^{-\frac{iE(t-t_0)}{\hbar}} \frac{i}{E-H_0+i\epsilon}$$

$$\begin{aligned}
U_F^{(n\geq 1)}(t,t_0) = &\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^n \int_{-\infty}^{\infty} d\tau_1 \int_{-\infty}^{\infty} d\tau_2 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} d\tau_n \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi} e^{-\frac{iE(t-\tau_1)}{\hbar}} \frac{i}{E-H_0+i\epsilon} V \\
&\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} e^{-\frac{iE_1(\tau_1-\tau_2)}{\hbar}} \frac{i}{E_1-H_0+i\epsilon} V \cdots V \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_n}{2\pi} e^{-\frac{iE_n(\tau_n-t_0)}{\hbar}} \frac{i}{E_n-H_0+i\epsilon} \\
= &\, i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{2\pi} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_n}{2\pi} e^{-\frac{iEt}{\hbar}} e^{\frac{iE_n t_0}{\hbar}} 2\pi\delta(E-E_1) 2\pi\delta(E_1-E_2) \cdots \\
&2\pi\delta(E_{n-1}-E_n) \frac{1}{E-H_0+i\epsilon} V \frac{1}{E_1-H_0+i\epsilon} V \cdots V \frac{1}{E_n-H_0+i\epsilon} \\
= &\, i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi} e^{-\frac{iE(t-t_0)}{\hbar}} \frac{1}{E-H_0+i\epsilon} \left(V \frac{1}{E-H_0+i\epsilon}\right)^n
\end{aligned}$$

容易看出，这对于 $n=0$ 同样成立，故

$$U_F^{(n)}(t,t_0) = i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi} e^{-\frac{iE(t-t_0)}{\hbar}} \frac{1}{E-H_0+i\epsilon} \left(V \frac{1}{E-H_0+i\epsilon}\right)^n$$

$$U_F(t,t_0) = i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi} e^{-\frac{iE(t-t_0)}{\hbar}} \frac{1}{E-H_0+i\epsilon} \sum_{n=0}^{+\infty} \left(V \frac{1}{E-H_0+i\epsilon}\right)^n$$

1.6.1 跃迁振幅与费曼图

跃迁振幅 $\mathrm{Amp}_{fi}(t,t_0)$ 描述的是初态 $|i\rangle$ 经过 $U_F(t,t_0)$ 演化后跃迁到末态 $|f\rangle$ 的概率幅。

$$\mathrm{Amp}_{fi}(t,t_0) = \langle f| U_F(t,t_0) |i\rangle = \sum_{n=0}^{+\infty} \langle f| U_F^{(n)}(t,t_0) |i\rangle = \sum_{n=0}^{+\infty} \mathrm{Amp}_{fi}^{(n)}(t,t_0)$$

记 $|\phi\rangle$ 是 H_0 定态薛定谔方程的解，$|f\rangle = |\phi_f\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_f t}$，$|i\rangle = |\phi_i\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_i t_0}$，此时振幅为

$$\mathrm{Amp}_{fi}^{(0)}(t,t_0) = \langle f \mid i\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_i(t-t_0)} = \langle \phi_f \mid \phi_i\rangle e^{\frac{i}{\hbar}(E_f-E_i)t} = \delta_{ij}$$

$$\begin{aligned}
\mathrm{Amp}_{fi}^{(1)}(t,t_0) &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} d\tau_1 e^{-\frac{i}{\hbar}E_f(t-\tau_1)} \langle f|V|i\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_i(\tau_1-t_0)} \\
&= -\frac{i}{i\left(E_f-E_i\right)} e^{-\frac{i}{\hbar}E_f t} e^{\frac{i}{\hbar}E_i t_0} \left(e^{\frac{i}{\hbar}\left(E_f-E_i\right)t} - e^{\frac{i}{\hbar}\left(E_f-E_i\right)t_0}\right) \langle f|V|i\rangle \\
&= \frac{1}{(E_f-E_i)} \left(e^{-\frac{i}{\hbar}E_f(t-t_0)} - e^{-\frac{i}{\hbar}E_i(t-t_0)}\right) \langle f|V|i\rangle \\
&= \frac{1}{(E_f-E_i)} \left(e^{\frac{i}{\hbar}(E_f-E_i)t_0} - e^{\frac{i}{\hbar}(E_f-E_i)t}\right) \langle \phi_f|V|\phi_i\rangle
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathrm{Amp}_{fi}^{(2)}(t,t_0) &= (-\frac{i}{\hbar})^2 \sum_a \int_{t_0}^{t} d\tau_1 \int_{t_0}^{\tau_1} d\tau_2 e^{-\frac{i}{\hbar}E_f(t-\tau_1)} \langle f|V|a\rangle \\
&\times e^{-\frac{i}{\hbar}E_a(\tau_1-\tau_2)} \langle a|V|i\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_i(\tau_2-t_0)} \\
&= \cdots
\end{aligned}$$

高阶的计算结果较为复杂，但如果取 $t\to\infty, t_0\to-\infty$，利用 U_F 在频率空间的表示，可以得到较为简洁的结果

$$
\begin{aligned}
\lim_{t\to\infty,t_0\to-\infty}\mathrm{Amp}_{fi}^{(n\geq1)}(t,t_0) &= \langle f|\,U_F^{(n\geq1)}(t,t_0)\,|i\rangle \\
&= \langle f|\,i\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dE}{2\pi}e^{-\frac{iE(t-t_0)}{\hbar}}\frac{1}{E-H_0+i\epsilon}\left(V\frac{1}{E-H_0+i\epsilon}\right)^n|i\rangle \\
&= i\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dE}{2\pi}e^{-\frac{iE(t-t_0)}{\hbar}}\frac{1}{E-E_f+i\epsilon} \\
&\qquad \langle f|\,V\left(\frac{1}{E-H_0+i\epsilon}V\right)^{n-1}|i\rangle\,\frac{1}{E-E_i+i\epsilon} \\
&= i\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dE}{2\pi}e^{-\frac{i(E-E_f)(t-t_0)}{\hbar}}\frac{1}{E-E_f+i\epsilon}e^{-\frac{iE_f(t-t_0)}{\hbar}} \\
&\qquad \langle f|\,V\left(\frac{1}{E-H_0+i\epsilon}V\right)^{n-1}|i\rangle\,\frac{1}{E-E_i+i\epsilon} \\
&= i\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dE}{2\pi}e^{-\frac{i(E-E_f)(t-t_0)}{\hbar}}\frac{1}{E-E_f+i\epsilon} \\
&\qquad \langle \phi_f|\,V\left(\frac{1}{E-H_0+i\epsilon}V\right)^{n-1}|\phi_i\rangle\,\frac{e^{\frac{i(E_f-E_i)t_0}{\hbar}}}{E-E_i+i\epsilon}
\end{aligned}
$$

对于积分

$$
\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dE}{2\pi}e^{-\frac{i(E-E_f)(t-t_0)}{\hbar}}\frac{1}{E-E_f+i\epsilon}f(E)
$$

由于 $t-t_0$ 很大，指数项对应的“矢量”旋转得很快，故最终结果中只有 $f(E_f)$ 起作用，因为分母有奇性。于是 $e^{-\frac{i(E-E_f)(t-t_0)}{\hbar}}\frac{1}{E-E_f+i\epsilon}$ 作为泛函应当正比于 $\delta(E-E_f)$。当 $f(E)=1$ 时，取下半平面的环路算得积分为

$$
\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dE}{2\pi}e^{-\frac{i(E-E_f)(t-t_0)}{\hbar}}\frac{1}{E-E_f+i\epsilon}=-i
$$

于是可知

$$
\lim_{t\to\infty,t_0\to-\infty}e^{-\frac{i(E-E_f)(t-t_0)}{\hbar}}\frac{1}{E-E_f+i\epsilon}=-2\pi i\delta(E-E_f)
$$

代入跃迁振幅中可得

$$
\lim_{t\to\infty,t_0\to-\infty}\mathrm{Amp}_{fi}^{(n\geq1)}(t,t_0)=\langle\phi_f|\,V\left(\frac{1}{E_f-H_0+i\epsilon}V\right)^{n-1}|\phi_i\rangle\,\frac{e^{\frac{i(E_f-E_i)t_0}{\hbar}}}{E_f-E_i+i\epsilon}
$$

再次利用上面的泛函相等，可以得到

$$
\lim_{t\to\infty,t_0\to-\infty}\mathrm{Amp}_{fi}^{(n\geq1)}(t,t_0)=-2\pi i\delta(E_f-E_i)\,\langle\phi_f|\,V\left(\frac{1}{E_i-H_0+i\epsilon}V\right)^{n-1}|\phi_i\rangle
$$

若只保留一阶振幅，称为玻恩近似。事实上利用时域积分的结果，取 $t_0=-t$，可有

$$
\begin{aligned}
\lim_{t\to+\infty}\mathrm{Amp}_{fi}^{(1)}(t,-t) &= \lim_{t\to+\infty}\frac{1}{(E_f-E_i)}\left(e^{-\frac{i}{\hbar}(E_f-E_i)t}-e^{\frac{i}{\hbar}(E_f-E_i)t}\right)\langle\phi_f|V|\phi_i\rangle \\
&= \lim_{t\to+\infty}-2i\frac{\sin\left(\frac{(E_f-E_i)t}{\hbar}\right)}{E_f-E_i}\langle\phi_f|V|\phi_i\rangle \\
&= -\frac{2\pi i}{\hbar}\delta\left(\frac{E_f-E_i}{\hbar}\right)\langle\phi_f|V|\phi_i\rangle \\
&= -2\pi i\delta(E_f-E_i)\langle\phi_f|V|\phi_i\rangle
\end{aligned}
$$

与上面得到的结果相符。

考虑到因子

$$\frac{1}{E_i - H_0 + i\epsilon} = \sum_l \frac{1}{E_i - E_l + i\epsilon} |\phi_l\rangle \langle\phi_l|$$

于是跃迁振幅可以写为

$$\begin{aligned}
\mathrm{Amp}_{fi}^{(1)} &= -2\pi i\delta(E_f - E_i)\langle\phi_f|V|\phi_i\rangle = -2\pi i\delta(E_f - E_i)V_{fi} \\
\mathrm{Amp}_{fi}^{(2)} &= -2\pi i\delta(E_f - E_i)\sum_l \langle\phi_f|V|\phi_l\rangle \frac{1}{E_i - E_l + i\epsilon}\langle\phi_l|V|\phi_i\rangle \\
&= -2\pi i\delta(E_f - E_i)\sum_l V_{fl}\frac{1}{E_i - E_l + i\epsilon}V_{li}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathrm{Amp}_{fi}^{(3)} &= \cdots \\
&= -2\pi i\delta(E_f - E_i)\sum_{lk} V_{fl}\frac{1}{E_i - E_l + i\epsilon}V_{lk}\frac{1}{E_i - E_k + i\epsilon}V_{ki}
\end{aligned}$$

费曼图可以和上式中的求和式一一对应：

由于 $\frac{1}{E-H_0+i\epsilon}$ 是频域下的传播子，故可以对求和式的意义作如下阐释：初态 i 与微扰势发生相互作用 V_{ki} 变成 k 态，以 k 态 $\frac{1}{E_i-E_k+i\epsilon}$ 传播，再与微扰势发生作用 V_{lk} 变成 l 态，以 l 态 $\frac{1}{E_i-E_l+i\epsilon}$ 传播... 一直继续下去直至变成末态。

1.6.2 路径积分视角下的含时微扰

从路径积分出发可以方便地得出含时微扰。由于路径积分是在处理标量，故可以对微扰势 V 直接展开

$$\begin{aligned}
D_F(\vec{x},t;\vec{x}_0,t_0) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i\epsilon/m}^3}\int \overline{D}'\vec{x}e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}dt_m(T-V(\vec{x}_m(t_m),t_m))} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i\epsilon/m}^3}\int \overline{D}'\vec{x}e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}dt_m T} \\
&\qquad \left(1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}dt_m V(\vec{x}_m(t_m),t_m) + \frac{1}{2!}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2\left(\int_{t_0}^{t}dt_m V(\vec{x}_m(t_m),t_m)\right)^2 + \cdots\right) \\
&= D_F^{(0)}(\vec{x},t;\vec{x}_0,t_0) - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}dt_m\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i\epsilon/m}^3}\int \overline{D}'\vec{x}e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}dt_m T}V(\vec{x}_m,t_m) + \cdots \\
&= D_F^{(0)}(\vec{x},t;\vec{x}_0,t_0) - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}dt_m\lim_{N\to\infty}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i\epsilon/m}^3}\prod_{n=1}^{n=m-1}\int\frac{d^3x_n}{\sqrt{2\pi\hbar i\epsilon/m}^3}e^{\frac{i\epsilon}{\hbar}\sum_{n=1}^{m-1}T(\dot{\vec{x}}(t_n))} \\
&\qquad \int d^3x_m\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i\epsilon/m}^3}\prod_{n=m+1}^{n=N-1}\int\frac{d^3x_n}{\sqrt{2\pi\hbar i\epsilon/m}^3}e^{\frac{i\epsilon}{\hbar}\sum_{n=m+1}^{N-1}T(\dot{\vec{x}}(t_n))}V(\vec{x}_m,t_m) + \cdots \\
&= D_F^{(0)}(\vec{x},t;\vec{x}_0,t_0) \\
&\quad - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}dt_m\int d^3x_m D_F^{(0)}(\vec{x},t;\vec{x}_m,t_m)V(\vec{x}_m,t_m)D_F^{(0)}(\vec{x}_m,t_m;\vec{x}_0,t_0) + \cdots
\end{aligned}$$

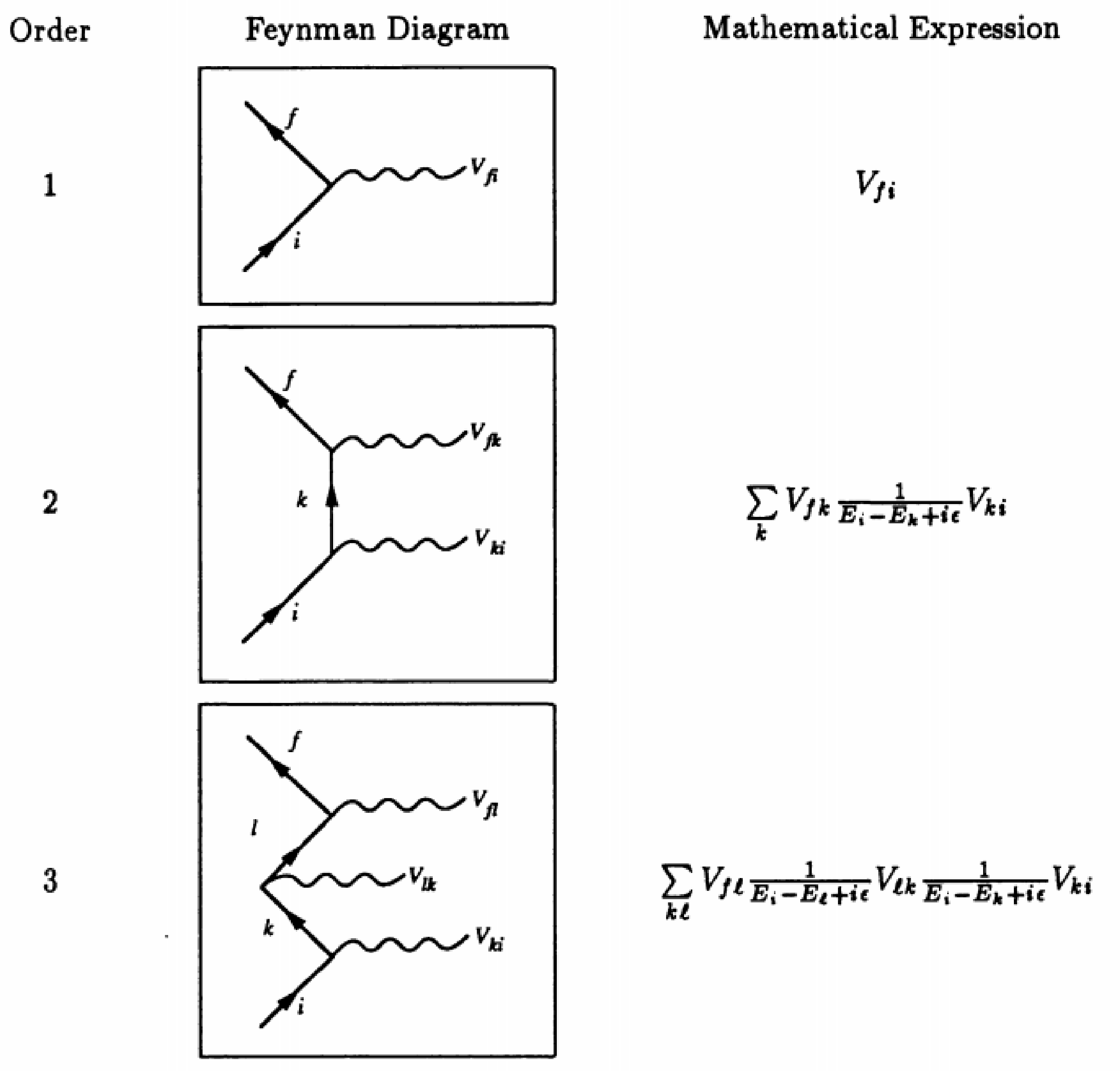
Order
Feynman Diagram
Mathematical Expression
1
f
i
V_{fi}
V_{fi}
2
f
k
i
V_{fk}
V_{ki}
$\sum_k V_{fk} \frac{1}{E_i - E_k + i\epsilon} V_{ki}$
3
f
l
k
i
V_{fl}
V_{lk}
V_{ki}
$\sum_{k\ell} V_{f\ell} \frac{1}{E_i - E_\ell + i\epsilon} V_{\ell k} \frac{1}{E_i - E_k + i\epsilon} V_{ki}$

图 1: 费曼图举例

其中再第三个等号交换了积分次序，$\vec{x}_m$ 变成与 t_m 无关。上式结果也就是

$$\begin{aligned}\langle\vec{x}|\,U_F(t,t_0)\,|\vec{x}_0\rangle &= \langle\vec{x}|\,U_F^{(0)}(t,t_0)\,|\vec{x}_0\rangle \\ &\quad - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} d\tau \int d^3x_m\,\langle\vec{x}|\,U_F^{(0)}(t,t_m)\,|\vec{x}_m\rangle\, V(\vec{x}_m,t_m)\,\langle\vec{x}_m|\,U_F^{(0)}(t_m,t_0)\,|\vec{x}_0\rangle + \cdots \\ &= \langle\vec{x}|\,U_F^{(0)}(t,t_0)\,|\vec{x}_0\rangle - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} d\tau\,\langle\vec{x}|\,U_F^{(0)}(t,t_m)V(t_m)U_F^{(0)}(t_m,t_0)\,|\vec{x}_0\rangle + \cdots\end{aligned}$$

更高阶的项可以通过定义时序改变积分区域消去阶乘项得到，与之前的结果相同。用费曼图的观点，它的意义是初态通过一定时间演化后与势相互作用，再经过一定时间演化后与势相互作用，直至末态。相互作用的次数、路径积分中路径的断点个数就是微扰的阶数。

2 散射

2.1 基本散射理论

2.1.1 散射截面

散射实验是, 有一定的入射粒子的动量 (能量), 沿着一定的方向射向靶粒子, 由于收到靶粒子作用发生偏转, 然后飞出的过程。散射实验就是要测定散射角分布 (散射截面), 能量 (以及角相关和极化)，以推断入射粒子与目标在碰撞中的相互作用力的性质和强度。

散射截面描述的是一种概率，它定义为单位时间内和靶粒子发生相互作用的入射粒子个数与入射粒子流密度（无相互作用多粒子概率流密度）的比值。

$$\sigma = \frac{n_{sc}}{J_{inc}n_t} = \frac{J_{sc}S_{probe}}{J_{inc}n_t}$$

其中 n_{sc} 是单位时间内被散射的入射粒子的个数，J_{sc}/J_{inc} 是散射/入射粒子概率流，n_t 是有效靶体积内靶粒子的个数（于是这样定义的散射截面是单个靶粒子的散射截面）。散射截面与入射截面的比值就是发生散射的概率。

由于实际实验中探测器安装在某一立体角上，故定义微分散射截面

$$d\sigma = \frac{n_{sc}d\Omega}{J_{inc}n_t} = R^2\frac{J_{sc}d\Omega}{J_{inc}n_t}$$

其中 n_{sc} 是单位时间单位立体角上被散射的入射粒子的个数。R 为从靶粒子中心到探测器的距离。

2.1.2 稳态 LS 方程

考虑稳定粒子流和固定的靶粒子情况，这就是简单的势散射情形，可用定态方程求解。

$$H_0\,|\phi_i\rangle = E_i\,|\phi_i\rangle$$

$$(H_0+V)\,|\psi_i^{(+)}\rangle = E_i\,|\psi_i^{(+)}\rangle$$

第二个式子减去第一个式子可得

$$(E_i - H_0)(|\psi_i^{(+)}\rangle - |\phi_i\rangle) = V\,|\psi_i^{(+)}\rangle$$

加上小虚部可得

$$(E_i - H_0 + i\epsilon)(|\psi_i^{(+)}\rangle - |\phi_i\rangle) = V\,|\psi_i^{(+)}\rangle$$

$$\Longrightarrow |\psi_i^{(+)}\rangle = |\phi_i\rangle + \frac{1}{E_i - H_0 + i\epsilon} V |\psi_i^{(+)}\rangle$$

当 V 取 0 时，上式即变为无微扰状态，符合实际。在坐标表象下，上式即为 Lippman-Schwinger 方程。容易看出它也可以写成类似于 Dyson 序列的式子

$$|\psi_i^{(+)}\rangle = |\phi_i\rangle + \frac{1}{E_i - H_0 + i\epsilon} V |\phi_i\rangle + \frac{1}{E_i - H_0 + i\epsilon} V \frac{1}{E_i - H_0 + i\epsilon} V |\phi_i\rangle + \cdots$$

其实在远离散射源的情况下，从 LS 方程我们可以得到 $\psi_i(\vec{x})^{(+)}$ 的大概模样。由于

$$\begin{aligned}\left\langle \vec{x} \left| \frac{1}{E_i - \hat{H}_0 + i\epsilon} \right| \vec{x}' \right\rangle &= \int d^3 p \langle \vec{r} \mid \vec{p} \rangle \frac{1}{E_i - \frac{\vec{p}^2}{2m} + i\epsilon} < \vec{p} \, |\vec{r}' \rangle \\ &= \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \left(\vec{x} - \vec{x}' \right)} \frac{1}{E_i - \frac{\vec{p}^2}{2m} + i\epsilon}\end{aligned}$$

定义 $E_i = \frac{p_i^2}{2m}$ 以及 $R = |\vec{x} - \vec{x}'|$，换用球坐标积分

$$\left\langle \vec{x} \left| \frac{1}{E_i - \hat{H}_0 + i\epsilon} \right| \vec{x}' \right\rangle = \frac{2m}{(2\pi\hbar)^2 iR} \int_0^\infty dk k \frac{e^{ikR} - e^{-ikR}}{k_i^2 - k^2 + i\epsilon}$$

其中已经作了变量代换 $\vec{p} = \hbar\vec{k}$。

由于被积函数是偶函数，故可以将积分限拓展到 $[-\infty, \infty]$。由留数定理可得

$$\begin{aligned}\left\langle \vec{x} \left| \frac{1}{E_i - \hat{H}_0 + i\epsilon} \right| \vec{x}' \right\rangle &= \frac{m}{(2\pi\hbar)^2 iR} \int_{-\infty}^\infty dk k \frac{e^{ikR} - e^{-ikR}}{k_i^2 - k^2 + i\epsilon} = \frac{m}{(2\pi\hbar)^2 iR} \frac{-2\pi i \times 2 e^{ik_i R}}{2} \\ &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2 R} e^{ik_i R}\end{aligned}$$

由此计算散射波函数

$$\begin{aligned}\left\langle \vec{x} \mid \psi_i^{(+)} \right\rangle &= \langle \vec{x} \mid \phi_i \rangle + \left\langle \vec{x} \mid \frac{1}{E_i - H_0 + i\epsilon} V \mid \psi_i^{(+)} \right\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}^3} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p}_i \cdot \vec{x}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3 x' \frac{e^{ik_i R}}{R} V(\vec{x}') \left\langle \vec{x}' \mid \psi_i^{(+)} \right\rangle\end{aligned}$$

在远离散射区域的情况下

$$R = \sqrt{x^2 - 2\vec{x} \cdot \vec{x}' + x'^2} \simeq x\sqrt{1 - 2\vec{x} \cdot \vec{x}'/x^2} \simeq x - \hat{x} \cdot \vec{x}'$$

则 $e^{ik_i R} \approx e^{ik_i x} \times e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{x}'}$ ，其中已经已经定义了 $\vec{k}_f = k_i \hat{x}$。于是散射波函数为

$$\begin{aligned}\left\langle \vec{x} \mid \psi_i^{(+)} \right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}^3} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p}_i \cdot \vec{x}} + \frac{1}{x} e^{\frac{i}{\hbar} p_i x} \left(-\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3 x' e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{x}'} V(\vec{x}') \left\langle \vec{x}' \mid \psi_i^{(+)} \right\rangle \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}^3} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p}_i \cdot \vec{x}} + \frac{e^{\frac{i}{\hbar} p_i x}}{\sqrt{2\pi\hbar}^3 x} \left(-\frac{m(2\pi\hbar)^3}{2\pi\hbar^2} \int d^3 x' \left\langle \phi_f \mid \vec{x}' \right\rangle V(\vec{x}') \left\langle \vec{x}' \mid V \mid \psi_i^{(+)} \right\rangle \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}^3} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p}_i \cdot \vec{x}} + \frac{e^{\frac{i}{\hbar} p_i x}}{\sqrt{2\pi\hbar}^3 x} \left(-4\pi^2 m\hbar \left\langle \phi_f \mid V \mid \psi_i^{(+)} \right\rangle \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}^3} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p}_i \cdot \vec{x}} + \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}^3} \frac{e^{\frac{i}{\hbar} p_i x}}{x} f(\theta, \phi)\end{aligned}$$

可见散射波函数是平面波和球面波的叠加，$f(\theta, \phi)$ 称为散射振幅，两个角向参数是 $\vec{x}$ 的方位角。在散射中通常定义一个参数 $\vec{k}$ 以及它对应的态矢 $|\vec{k}\rangle$，此时 $f(\theta, \phi)$ 为如下形式

$$f(\theta, \phi) = -4\pi^2 m\hbar \left\langle \phi_f |V| \psi_i^{(+)} \right\rangle = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \left\langle k_f |V| k_i^{(+)} \right\rangle$$

$\vec{k}$ 和 $|\vec{k}\rangle$ 的定义为

$$\vec{p}=\hbar\vec{k},\quad |\vec{k}\rangle=\hbar^{3/2}\,|\vec{p}\rangle$$

显然此时有

$$\int d^3k\,|\vec{k}\rangle\,\langle\vec{k}|=\int d^3p\,|p\rangle\,\langle p|=\mathbb{1}$$

$$\langle\vec{k}'|\vec{k}\rangle=\hbar^3\,\langle\vec{p}'|\vec{p}\rangle=\hbar^3\delta(\vec{p}'-\vec{p})=\delta(\vec{k}'-\vec{k})$$

即 $|\vec{k}\rangle$ 也是正交归一基。当然还有

$$\langle\vec{x}|\vec{k}\rangle=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$$

2.1.3 波包散射

上个小结对应的情形是恒定的入射粒子流的散射。对于单粒子散射，被散射的是一个波包，可以用稳态解叠加来表示。

$$\left\langle\vec{x}\mid\vec{k}_i^{(+)}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{2\pi}^3}e^{i\vec{k}_i\cdot\vec{x}}+\frac{1}{\sqrt{2\pi}^3}\frac{e^{ik_ix}}{x}f(\theta,\phi)$$

$$\psi^{(+)}(\vec{x},t=0)=\int d^3k\phi(\vec{k})e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}_0}\,\langle\vec{x}|\vec{k}^{(+)}\rangle$$

$t=0$ 时刻波包中心位于 $\vec{x}_0$。容易看出 t 时刻的波函数为

$$\begin{aligned}\psi^{(+)}(\vec{x},t)&=\frac{1}{\hbar^{3/2}}\int d^3k\phi(\vec{k})e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}_0-iE_kt}\,\langle\vec{x}\mid\vec{k}^{(+)}\rangle\\&\underset{x\to\infty}{=}\frac{1}{\hbar^{3/2}}\int\frac{d^3k}{(2\pi)^{3/2}}\phi(\vec{k})\left(e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{x}_0)-\frac{i}{\hbar}E_kt}+\frac{e^{ikx}}{x}e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}_0-\frac{i}{\hbar}E_kt}f_k(\theta,\phi)\right)\end{aligned}$$

采用稳相近似，即认为相位部分随 $\vec{k}$ 变化快，稳相附近的位置对波包的贡献最大

$$\frac{\partial}{\partial\vec{k}}\left(\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{x}_0)-\frac{\hbar k^2}{2m}t\right)=\vec{x}-\vec{x}_0-\frac{\hbar\vec{k}}{m}t=0$$

记这个稳相位置为 $\vec{k}_0'$

$$\vec{x}=\vec{x}_0+\frac{\hbar\vec{k}_0'}{m}t$$

若波包有恒定速度，稳相位置是固定的，积分可以近似在 $\vec{k}_0'$ 附近进行

$$\vec{k}=\vec{k}_0'+\Delta\vec{k}$$

$$\psi^{(+)}_{\text{plane-wave}}(\vec{x},t)=\frac{e^{i\vec{k}_0'\cdot(\vec{x}-\vec{x}_0)-i\frac{\hbar k_0'^2}{2m}t}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int d^3\Delta k\phi\left(\vec{k}_0'+\Delta\vec{k}\right)e^{i\Delta\vec{k}\cdot\left(\vec{x}-\vec{x}_0-\frac{\hbar\vec{k}_0'}{m}t\right)}$$

对于球面波的积分，相位为 $kx-\vec{k}\cdot\vec{x}_0-\frac{\hbar k^2}{2m}t$。由于我们认为波包有恒定速度，故 $\vec{k}_0'$ 和 $\vec{x}_0$ 方向相反

$$\vec{k}\cdot\vec{x}_0=kx_0\cos\theta=-kx_0\left(1+O\left(\frac{\Delta k}{k}\right)^2+\dots\right)$$

故保留一阶小量时

$$kx-\vec{k}\cdot\vec{x}_0-\frac{\hbar k^2}{2m}t=k_0'\left(x+x_0\right)-\frac{\hbar k_0'^2}{2m}t+\Delta k\left(x+x_0-\frac{\hbar k_0'}{m}t\right)+O\left(\Delta k^2\right)$$

代入积分可得

$$\psi^{(+)}_{\text{scattered}} \approx \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \frac{e^{ik_0'(x+x_0)-i\frac{\hbar k_0'^2}{2m}t}}{x} f_{\vec{k}_0'}(\theta,\phi) \int d^3\Delta k \phi\left(\vec{k}_0'+\Delta\vec{k}\right) e^{i\Delta k\left(x+x_0-\frac{\hbar k_0'}{m}t\right)}$$

可以看出，在稳态近似下，波包散射依然是原先的波包叠加上一个球面波。在 $\phi(\vec{k}) \to \delta(\vec{k}-\vec{k}_0')$ 的极限下，结果显然与上一小节相同。

2.1.4 S 矩阵和 T 矩阵

散射的过程就是 $t=-\infty$ 一个量子态在 $t=\infty$ 跃迁到另一个量子态的过程，故可以应用含时微扰的结论。跃迁振幅为

$$\begin{aligned}\lim_{t\to\infty,t_0\to-\infty} \mathrm{Amp}_{fi}(t,t_0) &= \sum_{n=0}^{+\infty} \lim_{t\to\infty,t_0\to-\infty} \mathrm{Amp}^{(n)}_{fi}(t,t_0) \\ &= \delta_{fi} - \sum_{n=1}^{\infty} 2\pi i \delta(E_f-E_i) \langle\phi_f| V \left(\frac{1}{E_i-H_0+i\epsilon} V\right)^{n-1} |\phi_i\rangle\end{aligned}$$

定义 S 矩阵为 $S=\lim_{t\to\infty,t_0\to-\infty} U_0(0,t)U(t,t_0)U(t_0,0)$，故

$$\langle\phi_f| S |\phi_i\rangle = \lim_{t\to\infty,t_0\to-\infty} \langle f| U(t,t_0) |i\rangle = \lim_{t\to\infty,t_0\to-\infty} \mathrm{Amp}_{fi}(t,t_0)$$

$$S = \mathbb{1} - 2\pi i\delta(E_f-E_i) \sum_{n=1}^{\infty} V\left(\frac{1}{E_i-H_0+i\epsilon}V\right)^{n-1}$$

后半部分的求和项定义为 T 矩阵

$$T = \sum_{n=1}^{\infty} V\left(\frac{1}{E_i-H_0+i\epsilon}V\right)^{n-1}$$

$$S = \mathbb{1} - 2\pi i\delta(E_f-E_i)T$$

而由定态方程的“Dyson 序列”

$$|\psi_i^{(+)}\rangle = |\phi_i\rangle + \frac{1}{E_i-H_0+i\epsilon} V |\phi_i\rangle + \frac{1}{E_i-H_0+i\epsilon} V \frac{1}{E_i-H_0+i\epsilon} V |\phi_i\rangle + \cdots$$

可知

$$\langle\phi_f| T |\phi_i\rangle = \langle\phi_f| V |\psi_i^{(+)}\rangle = -\frac{1}{4\pi^2 m\hbar} f(\theta,\phi), \quad \langle k_f|T|k_i\rangle = -\frac{\hbar^2}{4\pi^2 m} f(\theta,\phi)$$

2.1.5 跃迁速率

如果只在意散射的概率而不考虑散射的细节，显然由下式可以得到结果

$$\sum_f P_{f\neq i} = \sum_{f\neq i} \left|S_{fi}\right|^2 = \sum_{f\neq i} \left(2\pi\delta\left(E_f-E_i\right)\right)^2 \left|T_{fi}\right|^2$$

利用 δ 函数的一个泛函等式，上式可以写为

$$\begin{aligned}\sum_{f\neq i} P_{fi} &\cong \lim_{T\to\infty} \sum_{f\neq i} \frac{1}{\hbar} \int_{-T/2}^{T/2} dt e^{\frac{i}{\hbar}(E_f-E_i)t} 2\pi\delta\left(E_f-E_i\right) \left|T_{fi}\right|^2 \\ &= \lim_{T\to\infty} \sum_{f\neq i} \frac{1}{\hbar} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} dt 2\pi\delta(E_f-E_i) \left|T_{fi}\right|^2 = \lim_{T\to\infty} \sum_{f\neq i} T\frac{2\pi}{\hbar}\delta\left(E_f-E_i\right)\left|T_{fi}\right|^2\end{aligned}$$

故散射速率为

$$\sum_{f\neq i} R_{fi} = \sum_{f\neq i} \frac{1}{T} P_{fi} = \sum_{f\neq i} \frac{2\pi}{\hbar}\delta\left(E_f-E_i\right)\left|T_{fi}\right|^2$$

2.1.6 散射截面计算

首先可以用波函数的概率流直接计算散射截面

$$\left\langle \vec{x} \mid \psi_i^{(+)} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}^3} e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{x}} + \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}^3} \frac{e^{ik_i x}}{x} f(\theta, \phi)$$

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2im} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)$$

$$\vec{j}_{inc} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \frac{\hbar}{2im} (i\vec{k}_i + i\vec{k}_i) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \frac{\hbar \vec{k}_i}{m}$$

$$\begin{aligned}
\vec{j}_{sphere} &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \frac{\hbar}{2im} |f(\theta, \phi)|^2 (-\frac{1}{x^3} + \frac{ik_i}{x^2} + \frac{1}{x^3} + \frac{ik_i}{x^2}) \hat{x} + \cdots \hat{\theta} + \cdots \hat{\phi} \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \frac{\hbar k_i}{x^2 m} |f(\theta, \phi)|^2 \hat{x} + \cdots \hat{\theta} + \cdots \hat{\phi} \\
&= \vec{j}_{sc} + \cdots \hat{\theta} + \cdots \hat{\phi}
\end{aligned}$$

故微分散射截面为

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = x^2 \frac{j_{sc}}{j_{inc}} = |f(\theta, \phi)|^2$$

另一方面，按照截面的定义，

$$\sigma = \frac{\sum_{f \neq i} R_{fi}}{j_{inc}}$$

由于涉及求和，故在有限尺度中考虑，此时有

$$\vec{j}_{inc} = \frac{1}{L^3} \frac{\hbar \vec{k}_i}{m}$$

当 $L \to \infty$ 时，应看作无穷空间，要回到之前的结果，需要将 L 和 $2\pi\hbar$ 作替换。现对散射速率的计算作同样处理即

$$\frac{L^3}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3 p \to \int d^3 p$$

于是可以得到

$$\begin{aligned}
\sigma = \frac{\sum_{f \neq i} R_{fi}}{j_{inc}} &= \frac{(2\pi\hbar)^3}{\hbar k_i / m} \int d^3 p_f \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_f - E_i) | \langle p_f | T | p_i \rangle |^2 \\
&= \frac{(2\pi\hbar)^3}{\hbar k_i / m} \int d^3 k_f \frac{2\pi}{\hbar^4} \delta(E_f - E_i) | \langle k_f | T | k_i \rangle |^2 \\
&= \frac{(2\pi\hbar)^3}{\hbar k_i / m} \int d^3 k_f \frac{2\pi}{\hbar^4} \delta(E_f - E_i) | \langle k_f | T | k_i \rangle |^2 \\
&= \frac{m (2\pi\hbar)^3}{\hbar k_i} \int d^3 k_f \delta(E_f - E_i) \frac{1}{8\pi^3 m^2} |f(\theta, \phi)|^2 \\
&= \int d\Omega_f \, d\left(\frac{\hbar^2 k_f^2}{2m} \right) \delta(E_f - E_i) \frac{k_f}{k_i} |f(\theta, \phi)|^2 \\
&= \int d\Omega_f |f(\theta, \phi)|^2
\end{aligned}$$

从而同样可以得出微分散射截面

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta, \phi)|^2$$

2.1.7 光学定理

光学定理描述的是一个类似于光强衰减的过程，$I(x) = I_0 e^{-\alpha x}$。对于散射过程而言，假设粒子进入靶材 x 距离不被散射的几率为 P。则粒子到达 $x + dx$ 距离不被散射的几率是 P 乘上经过 dx 距离之后不被散射的几率

$$P(x + dx) = P(1 - n\sigma dx)$$

$$\Longrightarrow P = e^{-n\sigma x}$$

其中 n 为靶粒子数密度。

因为“不被散射”是比较经典的描述，量子力学中在某处是否探测到粒子是散射波叠加并与入射波干涉的结果。由于总波函数中有散射振幅，故散射振幅可以和散射截面联系起来。

假设靶材厚度为 L，探测器置于 Z 处，考虑到轴对称性，$f_k(\theta, \phi) = f_k(\theta)$，则靶材中 $z \sim z + dz$ 范围对散射波函数的贡献为

$$d\psi_{\text{sc}} = \frac{e^{ikz}}{\sqrt{2\pi\hbar}^3} n dz \int_0^\infty \frac{1}{r} e^{ikr} f_k(\theta) 2\pi\rho d\rho$$

其中 ρ, r 的定义如下所示：

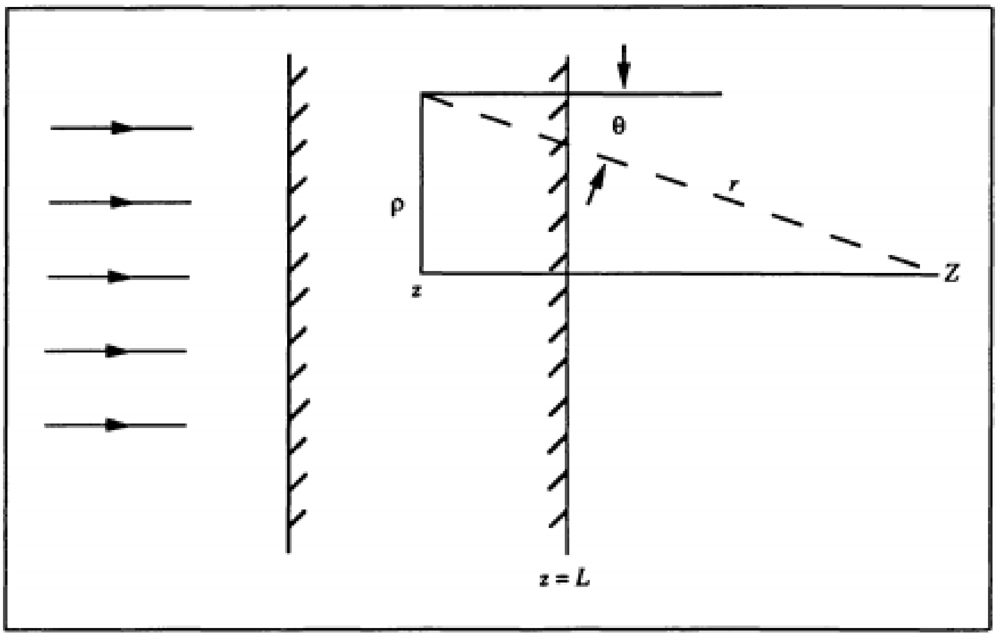

图 2: 概率衰减的探测

由于

$$r^2 = \rho^2 + (Z - z)^2 \quad \Longrightarrow \quad \rho d\rho = r dr$$

故有

$$\int_0^\infty d\rho \rho \frac{1}{r} e^{ikr} f_k(\theta) = \int_{Z-z}^\infty dr e^{ikr} f_k(\theta)$$

为了使积分收敛，被积函数乘上一项 $e^{-\epsilon r}$

$$\int_{Z-z}^\infty dr e^{ikr} f_k(\theta) = f_k(\theta) \frac{e^{ikr-\epsilon r}}{ik}\bigg|_{Z-z}^\infty - \frac{1}{ik} \int_{Z-z}^\infty dr e^{ikr-\epsilon r} \frac{df_k(\theta)}{dr}$$

考虑当 r 改变一个波长大小时，到 $f_k(\theta)$ 变化较慢，故略去上式第二项

$$\int_{Z-z}^{\infty} dre^{ikr}f_k(\theta) = \frac{i}{k}f_k(0)e^{-ik(Z-z)}$$

于是

$$\begin{aligned}\int d\psi_{\mathrm{sc}} &= \int_0^L 2\pi ndz\frac{i}{k}\frac{e^{ikz}}{\sqrt{2\pi\hbar}^3}f_k(0)e^{ik(Z-z)}\\ &= \int_0^L 2\pi in\frac{1}{k}dzf_k(0)\frac{e^{ikZ}}{\sqrt{2\pi\hbar}^3} = \frac{2\pi inL}{k}f_k(0)\frac{e^{ikZ}}{\sqrt{2\pi\hbar}^3} = \psi_{\mathrm{sc}}(Z)\end{aligned}$$

总波函数为

$$\psi(Z) = \frac{e^{ikZ}}{\sqrt{2\pi\hbar}^3}\left(1+\frac{2\pi inL}{k}f_k(0)\right) \approx \frac{e^{ikZ}}{\sqrt{2\pi\hbar}^3}e^{i\frac{2\pi nL}{k}f_k(0)}$$

从而有

$$|\psi(Z)|^2 = |\psi(Z)(L=0)|^2e^{-\frac{4\pi nL}{k}\operatorname{Im}f_\theta(0)} = |\psi(Z)(L=0)|^2e^{-n\sigma L}$$

也就是说

$$\sigma = \frac{4\pi}{k}\operatorname{Im}f_k(0)$$

光学定理也可以通过较严格的方法导出。

由于 S 矩阵定义为时间演化算子的无穷极限，为保证概率守恒，它也应具有幺正性 $SS^\dagger = S^\dagger S = \mathbb{1}$

$$\begin{aligned}\left\langle \vec{p}_c\left|S^\dagger S\right|\vec{p}_a\right\rangle &= \int d^3p_b\left\langle\vec{p}_c\left|S^\dagger\right|\vec{p}_b\right\rangle\langle\vec{p}_b|S|\vec{p}_a\rangle\\ &= \langle\vec{p}_c|\mathbb{1}|\vec{p}_a\rangle = \delta^3(\vec{p}_c-\vec{p}_a)\end{aligned}$$

由于

$$\begin{aligned}\langle\vec{p}_b|S|\vec{p}_a\rangle &= \delta^3(\vec{p}_b-\vec{p}_a) - 2\pi i\delta(E_b-E_a)\left\langle\vec{p}_b|\hat{V}|\psi_a^{(+)}\right\rangle\\ \left\langle\vec{p}_c\left|S^\dagger\right|\vec{p}_b\right\rangle &= \delta^3(\vec{p}_c-\vec{p}_b) + 2\pi i\delta(E_c-E_b)\left\langle\vec{p}_b|\hat{V}|\psi_c^{(+)}\right\rangle^*\end{aligned}$$

代入上式可得

$$\begin{aligned}0 = &-2\pi i\delta(E_c-E_a)\left\langle\vec{p}_c|\hat{V}|\psi_a^{(+)}\right\rangle + 2\pi i\delta(E_c-E_a)\left\langle\vec{p}_a|\hat{V}|\psi_c^{(+)}\right\rangle^*\\ &+\int d^3p_b2\pi\delta(E_a-E_b)2\pi\delta(E_b-E_c)\left\langle\vec{p}_b|\hat{V}|\psi_c^{(+)}\right\rangle^*\left\langle\vec{p}_b|\hat{V}|\psi_a^{(+)}\right\rangle\end{aligned}$$

对能量积分，得到

$$\begin{aligned}0 = &\, i\left(\left\langle\vec{p}_a|\hat{V}|\psi_c^{(+)}\right\rangle^* - \left\langle\vec{p}_c|\hat{V}|\psi_a^{(+)}\right\rangle\right)\\ &+2\pi pm\int\left\langle\vec{p}_b|\hat{V}|\psi_c^{(+)}\right\rangle^*\left\langle\vec{p}_b|\hat{V}|\psi_a^{(+)}\right\rangle d\Omega_b\end{aligned}$$

现取定 $\vec{p}_a = \vec{p}_c$，代入 $\left\langle\psi_f|\hat{V}|\psi_i^{(+)}\right\rangle = -\frac{1}{4\pi^2m\hbar}f(\theta,\phi)$，则得到

$$i4\pi^2m\hbar\left(f_k(0)^* - f_k(0)\right) = 2\pi pm\int d\Omega|f_k(\theta)|^2$$

从而有

$$\frac{4\pi}{k}\operatorname{Im}f_k(0) = \sigma$$

2.1.8 两体散射

在单粒子散射中，哈密顿量由自由粒子哈密顿量和加在背景上的微扰作用势组成；而在两体散射中，自由粒子哈密顿量对应于无相互作用的两体自由哈密顿量，两体之间的相互作用作为微扰。

用 $|\psi_1\psi r_2\rangle$ 表示直积态，相互作用势在位置表象和动量表象下的矩阵元为

$$\left\langle \vec{r}_1'\vec{r}_2'|\hat{V}|\vec{r}_1\vec{r}_2\right\rangle = \delta^3\left(\vec{r}_1'-\vec{r}_1\right)\delta^3\left(\vec{r}_2'-\vec{r}_2\right)V\left(\vec{r}_1-\vec{r}_2\right)$$

$$\begin{aligned}\left\langle \vec{p}_1^f\,\vec{p}_2^f|V|\vec{p}_1\vec{p}_2^i\right\rangle &= \int d^3r_1d^3r_2\left\langle \vec{p}_1^f\,\vec{p}_2^f\mid \vec{r}_1\vec{r}_2\right\rangle V\left(\vec{r}_1-\vec{r}_2\right)\left\langle \vec{r}_1\vec{r}_2\mid \vec{p}_1^i\vec{p}_2^i\right\rangle\\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^6}\int d^3r_1d^3r_2e^{\frac{1}{\hbar}\left(-i\vec{p}_1^f\cdot\vec{r}_1-i\vec{p}_2^f\cdot\vec{r}_2+i\vec{p}_1^i\cdot\vec{r}_1+i\vec{p}_2^i\cdot\vec{r}_2\right)}V\left(\vec{r}_1-\vec{r}_2\right)\end{aligned}$$

作如下变量代换

$$\vec{r}=\vec{r}_1-\vec{r}_2 \quad \text{and} \quad \vec{R}=\frac{m_1\vec{r}_1+m_2\vec{r}_2}{m_1+m_2}$$

容易验证雅可比行列式为 1，$d^3r_1d^3r_2=d^3rd^3R$，于是

$$\begin{aligned}\left\langle \vec{p}_1^f\,\vec{p}_2^f|\hat{V}|\vec{p}_1^i\vec{p}_2^i\right\rangle =& \frac{1}{(2\pi\hbar)^6}\int d^3R\exp i\frac{1}{\hbar}\vec{R}\cdot\left(\vec{p}_1^i+\vec{p}_2^i-\vec{p}_1'-\vec{p}_2^f\right)\\ &\times\int d^3rV(\vec{r})\exp i\frac{1}{\hbar}\vec{r}\cdot\left(\frac{m_2\vec{p}_1^i-m_1\vec{p}_2^i}{m_1+m_2}-\frac{m_2\vec{p}_1^f-m_1\vec{p}_2^f}{m_1+m_2}\right)\\ =&\frac{1}{(2\pi\hbar)^6}(2\pi\hbar)^3\delta\left(\vec{p}_1^i+\vec{p}_2^i-\vec{p}_1^f-\vec{p}_2^f\right)\int d^3rV(\vec{r})\\ &\times\exp i\frac{1}{\hbar}\vec{r}\cdot\left(\frac{m_2\vec{p}_1^i-m_1\vec{p}_2^i}{m_1+m_2}-\frac{m_2\vec{p}_1'-m_1\vec{p}_2^f}{m_1+m_2}\right)\end{aligned}$$

定义如下两个量

$$\vec{P}=\vec{p}_1+\vec{p}_2$$

$$\left(\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}\right)\vec{p}=\frac{1}{m_1}\vec{p}_1-\frac{1}{m_2}\vec{p}_2$$

则上式可以写为

$$\begin{aligned}\left\langle \vec{p}_1^f\,\vec{p}_2^f|\hat{V}|\vec{p}_1^i\vec{p}_2^i\right\rangle &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\delta\left(\vec{P}_i-\vec{P}_f\right)\int d^3re^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}_f\cdot\vec{r}}V(\vec{r})e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}_i\cdot\vec{r}}\\ &=\delta\left(\vec{P}_i-\vec{P}_f\right)\int d^3r\left\langle\vec{p}_f|\vec{r}\right\rangle V(\vec{r})\left\langle\vec{r}|\vec{p}_i\right\rangle\\ &=\delta\left(\vec{P}_i-\vec{P}_f\right)\left\langle\vec{p}_f|V|\vec{p}_i\right\rangle=\delta(\vec{P}_i-\vec{P}_f)V_{\vec{p}_f,\vec{p}_i}\end{aligned}$$

其中 $\langle\vec{p}_f|V|\vec{p}_i\rangle$ 表示以原点为场源的势能项 V 的单粒子 $\vec{p}_f,\vec{p}_i$ 矩阵元。δ 函数体现了动量守恒。

在前面的讨论中，散射振幅针对的是量子态，故可以以与单粒子散射相同的方式对两体散射进行处理，只需用到上面计算得到的矩阵元。

$$\mathrm{Amp}_{fi}^{(1)}=-2\pi i\delta(E_f-E_i)\left\langle\vec{p}_1^f\,\vec{p}_2^f|\hat{V}|\vec{p}_1^i\vec{p}_2^i\right\rangle=-2\pi i\delta(E_f-E_i)\delta(\vec{P}_i-\vec{P}_f)V_{\vec{p}_f,\vec{p}_i}$$

$$\begin{aligned}
\mathrm{Amp}^{(2)}_{fi} &= -2\pi i\delta(E_f-E_i)\int d^3p^l_1 d^3p^l_2 \left\langle \vec{p}^f_1\vec{p}^f_2|\hat{V}|\vec{p}^l_1\vec{p}^l_2\right\rangle \frac{1}{E_i-E_l+i\epsilon}\left\langle \vec{p}^l_1\vec{p}^l_2|\hat{V}|\vec{p}^i_1\vec{p}^i_2\right\rangle \\
&= -2\pi i\delta(E_f-E_i)\int d^3p^l_1 d^3p^l_2 \frac{\delta(\vec{P}_f-\vec{P}_l)\delta(\vec{P}_l-\vec{P}_i)V_{\vec{p}_f,\vec{p}_l}V_{\vec{p}_l,\vec{p}_i}}{\frac{P_i^2}{2M}+\frac{p_i^2}{2\mu}-\frac{P_l^2}{2M}-\frac{p_l^2}{2\mu}+i\epsilon} \\
&= -2\pi i\delta(E_f-E_i)\int d^3p_l d^3P_l \frac{\delta(\vec{P}_f-\vec{P}_l)\delta(\vec{P}_l-\vec{P}_i)V_{\vec{p}_f,\vec{p}_l}V_{\vec{p}_l,\vec{p}_i}}{\frac{P_i^2}{2M}+\frac{p_i^2}{2\mu}-\frac{P_l^2}{2M}-\frac{p_l^2}{2\mu}+i\epsilon} \\
&= -2\pi i\delta(E_f-E_i)\delta(\vec{P}_f-\vec{P}_i)\int d^3p_l \frac{V_{\vec{p}_f,\vec{p}_l}V_{\vec{p}_l,\vec{p}_i}}{\frac{p_i^2}{2\mu}-\frac{p_l^2}{2\mu}+i\epsilon} \\
\mathrm{Amp}^{(3)}_{fi} &= \cdots \\
&= -2\pi i\delta(E_f-E_i)\delta(\vec{P}_f-\vec{P}_i)\int d^3p_l d^3p_k \frac{V_{\vec{p}_f,\vec{p}_l}V_{\vec{p}_l,\vec{p}_k}V_{\vec{p}_k,\vec{p}_i}}{(\frac{p_i^2}{2\mu}-\frac{p_l^2}{2\mu}+i\epsilon)(\frac{p_i^2}{2\mu}-\frac{p_k^2}{2\mu}+i\epsilon)}
\end{aligned}$$

从而总的振幅为

$$\begin{aligned}
\mathrm{Amp}_{fi} &= \langle\vec{p}^f_1\vec{p}^f_2|\vec{p}^i_1\vec{p}^i_2\rangle - 2\pi i\delta(E_f-E_i)\delta(\vec{P}_i-\vec{P}_f)\left(V_{\vec{p}_f,\vec{p}_i}+\int d^3p_l\frac{V_{\vec{p}_f,\vec{p}_l}V_{\vec{p}_l,\vec{p}_i}}{\frac{p_i^2}{2\mu}-\frac{p_l^2}{2\mu}+i\epsilon}+\cdots\right) \\
&= \langle\vec{p}^f_1\vec{p}^f_2|\vec{p}^i_1\vec{p}^i_2\rangle - 2\pi i\delta(E_f-E_i)\delta(\vec{P}_i-\vec{P}_f)T_{fi}
\end{aligned}$$

S 矩阵和 T 矩阵为

$$S = \mathbb{1} - 2\pi i\delta E_f - E_i\delta(\vec{P}_i-\vec{P}_f)T$$
$$T_{fi} = \langle\vec{p}^f_1\vec{p}^f_2|T|\vec{p}^i_1\vec{p}^i_2\rangle = \langle\vec{p}_f|V+V\frac{1}{E_i-H+i\epsilon}V+\cdots|\vec{p}_i\rangle$$

由于有动量守恒的要求，在质心系中，可分辨两体散射也可以定义唯一的一个散射角，于是也可以定义（微分）散射截面、散射振幅。由之前对散射截面的讨论可知，此时散射截面的定义应为

$$\sigma = \frac{\sum_f R_{fi}}{\rho_1\rho_2|\vec{v}_1-\vec{v}_2|} \sim \int d\Omega|f(\theta,\phi)|^2 \sim \int d^3p^f_1 d^3p^f_2|\langle\vec{p}^f_1\vec{p}^f_2|T|\vec{p}^i_1\vec{p}^i_2\rangle|^2$$

其中 R_{fi} 为单位体积内的跃迁速率，ρ_1,ρ_2 为两种粒子的粒子数密度。

2.1.9 全同粒子两体散射

上一小节中的两体态直接采用了直积态，而对于全同粒子而言，多体态需要对称化或反对称化，而这会对散射截面造成影响：

$$\frac{\langle\vec{p}^f_1\vec{p}^f_2|+\langle\vec{p}^f_2\vec{p}^f_1|}{\sqrt{2}}T\frac{|\vec{p}^i_1\vec{p}^i_2\rangle+|\vec{p}^i_2\vec{p}^i_1\rangle}{\sqrt{2}} = f(\theta)+f(\pi-\theta)$$
$$\frac{\langle\vec{p}^f_1\vec{p}^f_2|-\langle\vec{p}^f_2\vec{p}^f_1|}{\sqrt{2}}T\frac{|\vec{p}^i_1\vec{p}^i_2\rangle-|\vec{p}^i_2\vec{p}^i_1\rangle}{\sqrt{2}} = f(\theta)-f(\pi-\theta)$$
$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2+|f(\pi-\theta)|^2\pm 2\mathrm{Re}f^*(\theta)f(\pi-\theta)$$

加号减号分别对应玻色子和费米子。不过费米子的散射通常带上自旋来考虑。假设粒子自旋 $\frac{1}{2}$，假设散射不改变自旋取向，则有两种情况——全同粒子自旋取向相同，或相反。对于自旋取向相同的情形，与上所述相同

$$\frac{d\sigma_{\uparrow\uparrow}}{d\Omega} = |f(\theta)-f(\pi-\theta)|^2,\quad \frac{d\sigma_{\downarrow\downarrow}}{d\Omega} = |f(\theta)-f(\pi-\theta)|^2$$

而对于自旋取向相反的情形，若散射过程不改变自旋取向，则原则上可以区分不同的粒子。这时若在探测时忽略掉自旋特征，微分散射截面应为两个相反方向微分散射截面的简单相加

$$\frac{d\sigma_{\uparrow\downarrow}}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 + |f(\pi-\theta)|^2, \quad \frac{d\sigma_{\downarrow\uparrow}}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 + |f(\pi-\theta)|^2$$

那么对于自旋非极化的粒子，简单认为上述几种情况等概率，则最终的散射截面是

$$\begin{aligned}\frac{d\sigma_{uppolarized}}{d\Omega} &= \frac{1}{4}\left(\frac{d\sigma_{\uparrow\uparrow}}{d\Omega} + \frac{d\sigma_{\downarrow\downarrow}}{d\Omega} + \frac{d\sigma_{\uparrow\downarrow}}{d\Omega} + \frac{d\sigma_{\downarrow\uparrow}}{d\Omega}\right) \\ &= |f(\theta)|^2 + |f(\pi-\theta)|^2 - \mathrm{Re} f^*(\theta) f(\pi-\theta)\end{aligned}$$

2.1.10 分波法

之前的讨论都是利用了 $t \to -\infty, t \to \infty$ 时不受散射势作用的平面波态，但如果散射势是有心势场，则角动量算符与哈密顿量对易，波函数在整个散射过程中可以用角动量本征波函数展开。这种方法称为分波法。

首先证明一个展开公式

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

其中 $j_l(kr)$ 是球贝塞尔函数，$P_l(\cos\theta)$ 是勒让德函数。证明如下：$e^{ikr\cos\theta}$ 用球面完备基展开为

$$e^{ikr\cos\theta} = \sum_{lm} C_l^m j_l(kr) Y_l^m(\theta,\phi)$$

这里没有包含球诺伊曼函数是因为球诺伊曼函数在零点有奇性。由于等式左边不含方位角 ϕ，由正交关系，积分后重新定义常数项可得

$$e^{ikr\cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty} C_l j_l(kr) Y_l^0(\theta,\phi) = \sum_{l=0}^{\infty} C_l j_l(kr) P_l(\cos\theta)$$

$$\int_0^\pi e^{ikr\cos\theta} P_l(\cos\theta)\sin\theta d\theta = \int_0^\pi \sum_{s=0}^{\infty} C_s j_s(kr) P_s(\cos\theta) P_l(\cos\theta)\sin\theta d\theta$$

$$\Longrightarrow \int_0^\pi e^{ikr\cos\theta} P_l(\cos\theta)\sin\theta d\theta = \frac{2}{2l+1} C_l j_l(kr)$$

由于球贝塞尔函数

$$\begin{aligned} j_l(x) &= (-x)^l \left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^l \frac{\sin x}{x} \\ &= (-x)^l \left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^l \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} x^{2n}\right) \\ &= (-x)^l \left(\frac{(-1)^l (2l)!!}{(2l+1)!} + \cdots x^2 + \cdots\right) \\ &= \frac{x^l 2^l l!}{(2l+1)!} + O(x^{l+2}) \end{aligned}$$

从而在 $x=0$ 处对 $j_l(x)$ 求 l 次导可有

$$\left(\frac{d}{dx}\right)^l j_l(x)\Big|_{x=0} = \frac{2^l (l!)^2}{(2l+1)!}$$

令 $x=kr$，将这个关系应用到之前的证明中，等式两边在 $x=0$ 处求 l 次导，于是得出

$$\int_0^\pi i^l \cos^l \theta P_l(\cos\theta)\sin\theta d\theta = \frac{2}{2l+1}C_l\frac{2^l(l!)^2}{(2l+1)!}$$

又由于勒让德多项式的性质，不同阶数的勒让德多项式正交，故有

$$\Longrightarrow \int_{-1}^1 i^l x^l P_l(x)dx = i^l\frac{2^l(l!)^2}{(2l)!}\int_{-1}^1 P_l(x)P_l(x)dx = 2i^l\frac{2^l(l!)^2}{(2l+1)!}$$

从而得到

$$C_l = i^l(2l+1)$$

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

对相互作用势不为零的散射波函数同样用球面波展开，由于此时不要求原点处没有奇性，故径向波函数为球贝塞尔函数和球诺伊曼函数的叠加

$$\psi(r,\theta,\phi) = \sum_{l=0}^{+\infty} A_l\left(\cos\delta_l j_l(kr) - \sin\delta_l n_l(kr)\right)P_l(\cos\theta)$$

没有相互作用势时，δ_l 取 0，回到之前的情况。考虑 $r\to+\infty$ 的渐近行为，由于

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

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

故 $x\to+\infty$ 时，分母上 x 幂次最少的项对结果贡献最大，这一项对应于导数算符均作用到分子三角函数上，从而容易看出

$$j_l(kr) \xrightarrow{r\to+\infty} \frac{\sin\left(kr-\frac{l}{2}\pi\right)}{kr}$$

$$n_l(kr) \xrightarrow{r\to+\infty} \frac{\cos\left(kr-\frac{l}{2}\pi\right)}{kr}$$

从而散射波函数可以写为

$$\psi(r,\theta,\phi) \xrightarrow{r\to+\infty} \sum_{l=0}^{+\infty} A_l\frac{\sin\left(kr-\frac{l}{2}\pi-\delta_l\right)}{kr}P_l(\cos\theta)$$

可以看出，散射势的作用表现为一个相移 δ_l，称为散射相移。三角函数可以用欧拉公式写为下面的形式

$$\psi(r,\theta,\phi) \xrightarrow{r\to+\infty} \sum_{l=0}^{+\infty}\frac{A_l}{2i}\left(e^{i(\delta_l-l\pi/2)}\frac{e^{ikr}}{kr} - e^{-i(\delta_l-l\pi/2)}\frac{e^{-ikr}}{kr}\right)P_l(\cos\theta)$$

现在由之前的讨论可知，在 $r\to+\infty$ 时，散射波函数可以写为平面波和球面波的叠加，于是应有如下等式

$$\begin{aligned}\psi(r,\theta,\phi) &\xrightarrow{r\to+\infty} e^{ikr\cos\theta} + f(\theta,\phi)\frac{e^{ikr}}{r}\\ &\xrightarrow{r\to+\infty} \frac{e^{ikr}}{r}\left[\sum_{l=0}^{+\infty}(2l+1)i^l\frac{1}{2ki}e^{-il\pi/2}P_l(\cos\theta) + f(\theta,\phi)\right] - \frac{e^{-ikr}}{r}\sum_{l=0}^{+\infty}(2l+1)i^l\frac{1}{2ki}e^{il\pi/2}P_l(\cos\theta)\end{aligned}$$

这个结果应与之前通过相移表达的结果相同，故

$$
\begin{aligned}
&\sum_{l=0}^{+\infty}\frac{A_l}{2i}\left(e^{i(\delta_l-l\pi/2)}\frac{e^{ikr}}{kr}-e^{-i(\delta_l-l\pi/2)}\frac{e^{-ikr}}{kr}\right)P_l(\cos\theta)\\
&=\frac{e^{ikr}}{r}\left[\sum_{l=0}^{+\infty}(2l+1)i^l\frac{1}{2ki}e^{-il\pi/2}P_l(\cos\theta)+f(\theta,\phi)\right]-\frac{e^{-ikr}}{r}\sum_{l=0}^{+\infty}(2l+1)i^l\frac{1}{2ki}e^{il\pi/2}P_l(\cos\theta)
\end{aligned}
$$

从中可知

$$
A_l=(2l+1)e^{i(\delta+l\pi/2)}
$$

$$
\begin{aligned}
f(\theta,\phi)&=-\sum_{l=0}^{+\infty}\left[(2l+1)i^l\frac{1}{2ki}e^{-il\pi/2}-\frac{A_l}{2ki}e^{i(\delta_l-l\pi/2)}\right]P_l(\cos\theta)\\
&=-\frac{1}{2ki}\sum_{l=0}^{+\infty}(2l+1)[1-e^{i2\delta_l}]P_l(\cos\theta)\\
&=\frac{1}{k}\sum_{l=0}^{+\infty}(2l+1)e^{i\delta_l}\sin\delta_l P_l(\cos\theta)
\end{aligned}
$$

从而微分散射截面为

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

对立体角积分得到总截面

$$
\begin{aligned}
\sigma&=2\pi\int_0^\pi|f(\theta)|^2\sin\theta d\theta\\
&=\frac{2\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{+\infty}\sum_{l'=0}^{+\infty}\int_0^\pi(2l+1)(2l'+1)e^{i\delta_l}e^{-i\delta_{l'}}\sin\delta_l\sin\delta_{l'}P_l(\cos\theta)P_{l'}(\cos\theta)\sin\theta d\theta\\
&=\frac{2\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{+\infty}(2l+1)^2\sin^2\delta_l\frac{2}{2l+1}=\frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{+\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l=\sum_{l=0}^{+\infty}\sigma_l
\end{aligned}
$$

$\sigma_l=\frac{4\pi}{k^2}(2l+1)\sin^2\delta_l$ 称为第 l 个分波的散射截面。通常将 $l=0$ 的分波称为 s 分波，对应的散射称为 s 波散射；将 $l=1$ 的分波称为 p 分波，对应的散射称为 p 波散射。从上述散射振幅和散射截面的公式可以方便地导出光学定理。由于勒让德多项式 $P_l(1)=1$，故

$$
f(0)=\frac{1}{k}\sum_{l=0}^{+\infty}(2l+1)e^{i\delta_l}\sin\delta_l
$$

$$
\mathrm{Im}f(0)=\frac{1}{k}\sum_{l=0}^{+\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l=\frac{k}{4\pi}\sigma\Longrightarrow\sigma=\frac{4\pi}{k}\mathrm{Im}f(0)
$$

在分波法的基础上可以有分波近似，也就是在计算总截面时，只计及少数几个贡献大的截面。假设相互作用势有一明显的作用范围 R，超出这个范围可以近似认为粒子不受散射势影响。$l=0$ 时，$j_l(kr)$ 的最大值在 $r=0$ 取到，由 $j_l(kr)$ 的渐近公式估计，l 每增加 1，最大值位置平移 1 的量级，故近似认为 $j_l(kr)$ 在 $kr=l$ 处取到最大值。

对于 $r=\frac{l}{k}>R$ 的分波，由于分波波函数最大值不在散射势作用范围内，故认为其受散射势影响较小。于是在计算总截面时，可以只计及 $l\le kR$ 的分波。

分波近似还可以通过一种经典图像来理解。对于 l 分波，它的角动量为 $l\hbar$，而它的动量为 $\hbar k$，故“碰撞参数” $b=\frac{l}{k}$，若 $b>R$，可以认为粒子不受散射势的作用。

2.2 多道散射

2.2.1 多道散射简述

微观粒子往往有内部自由度，如自旋。这个自由度可能在碰撞前后发生变化，如自旋发生了翻转。碰撞后复合系统一种可能的模式称为一个道。散射过程可以包含很多个道，但并不是每个道都允许出现，需要满足相应的守恒律。被允许的道称为是开的，否则称为是闭的。

2.2.2 莫勒算符

我们定义散射前和散射后总哈密顿量的散射态为进态出态，它们具有相同的能量

$$H\,|\phi^{in}\rangle = E\,|\phi^{in}\rangle, \quad H\,|\phi^{out}\rangle = E\,|\phi^{out}\rangle$$

$|\phi^{in}\rangle, |\phi^{out}\rangle$ 有不同的内部自由度，如不同的自旋组态。要注意的是，这里两次出现总哈密顿量是包含了内部自由度的哈密顿算符，它们是一样的。如果我们写下两个方程在位置空间的表示，两个哈密顿量是不一样的，因为此时它们是在各自内部自由度下的位置空间的哈密顿量，是总哈密顿量矩阵中的一个矩阵块，比如两个自旋同同向的全同粒子散射和两个自旋反向的全同粒子散射，它们的散射势是不一样的。

我们定义莫勒算符将总哈密顿量的散射态和自由哈密顿量的散射态联系起来

$$|\phi_i^{in}\rangle = \Omega^{(+)}\,|\phi_i\rangle, \quad |\phi_f^{out}\rangle = \Omega^{(-)}\,|\phi_f\rangle$$

由定义可以得到莫勒算符的如下谱表示

$$\Omega^{(+)} = \sum_i |\phi_i^{in}\rangle\langle\phi_i|, \quad \Omega^{(-)} = \sum_f |\phi_f^{out}\rangle\langle\phi_f|$$

考察其幺正性

$$(\Omega^{(+)})^\dagger\Omega^{(+)} = \sum_{i,j} |\phi_i\rangle\langle\phi_i^{in}|\,|\phi_j^{in}\rangle\langle\phi_j| = \sum_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i|$$

$$\Omega^{(+)}(\Omega^{(+)})^\dagger = \sum_{i,j} |\phi_j^{in}\rangle\langle\phi_j|\,|\phi_i\rangle\langle\phi_i^{in}| = \sum_i |\phi_i^{in}\rangle\langle\phi_i^{in}|$$

$$(\Omega^{(-)})^\dagger\Omega^{(-)} = \sum_{f,j} |\phi_f\rangle\langle\phi_f^{out}|\,|\phi_j^{out}\rangle\langle\phi_j| = \sum_f |\phi_f\rangle\langle\phi_f|$$

$$\Omega^{(-)}(\Omega^{(-)})^\dagger = \sum_{f,j} |\phi_j^{out}\rangle\langle\phi_j|\,|\phi_f\rangle\langle\phi_f^{out}| = \sum_f |\phi_f^{out}\rangle\langle\phi_f^{out}|$$

自由哈密顿量一般没有束缚态，故散射态构成完备

$$(\Omega^{(+)})^\dagger\Omega^{(+)} = (\Omega^{(-)})^\dagger\Omega^{(-)} = \mathbb{1}$$

于是

$$(\Omega^{(+)})^\dagger\,|\phi_i^{in}\rangle = |\phi_i\rangle, \quad (\Omega^{(-)})^\dagger\,|\phi_f^{out}\rangle = |\phi_f\rangle$$

而包含相互作用的总哈密顿量可能有束缚态，故

$$\Omega^{(+)}(\Omega^{(+)})^\dagger = \Omega^{(-)}(\Omega^{(-)})^\dagger = \mathbb{1} - \sum_b |\phi_b^B\rangle\langle\phi_b^B|$$

从而只有总哈密顿量也没有束缚态时，莫勒算符才是幺正的。但由束缚态和总哈密顿量散射态之间的正交性，我们有

$$(\Omega^{(-)})^\dagger\Omega^{(+)}(\Omega^{(+)})^\dagger\Omega^{(-)} = (\Omega^{(-)})^\dagger\left(\mathbb{1} - \sum_b |\phi_b^B\rangle\langle\phi_b^B|\right)\Omega^{(-)} = (\Omega^{(-)})^\dagger\Omega^{(-)} = \mathbb{1}$$

$$(\Omega^{(+)})^\dagger\Omega^{(-)}(\Omega^{(-)})^\dagger\Omega^{(+)} = (\Omega^{(+)})^\dagger\left(\mathbb{1} - \sum_b |\phi_b^B\rangle\langle\phi_b^B|\right)\Omega^{(+)} = (\Omega^{(+)})^\dagger\Omega^{(+)} = \mathbb{1}$$

可以看出

$$(\Omega^{(-)})^\dagger\Omega^{(+)}\left((\Omega^{(-)})^\dagger\Omega^{(+)}\right)^\dagger = \mathbb{1}$$

$$\left((\Omega^{(-)})^\dagger\Omega^{(+)}\right)^\dagger(\Omega^{(-)})^\dagger\Omega^{(+)} = \mathbb{1}$$

所以不论总哈密顿量是否从存在束缚态，$(\Omega^{(-)})^\dagger\Omega^{(+)}$ 总是幺正的。

由定义还可以得到莫勒算符在哈密顿量上的作用

$$H|\phi_{i,f}^{in,out}\rangle = H\Omega^{(+,-)}|\phi_{i,f}\rangle = E|\phi^{in,out}\rangle = \Omega^{(+,-)}E|\phi_{i,f}\rangle = \Omega^{(+,-)}H_0|\phi_{i,f}\rangle$$

也就是说有

$$H\Omega^{(\pm)} = \Omega^{(\pm)}H_0$$

2.2.3 莫勒算符与时间演化算符

考虑含时演化，总哈密顿量和自由哈密顿量的本征矢可以视为 $t = 0$ 时刻的态矢，系统的初态（$t \to -\infty$）为 $U_0(t,0)|\phi_i(0)\rangle$。我们应当要求相互作用是绝热地加上的，所以

$$\lim_{t\to-\infty}[U(t,0)|\phi_i^{in}\rangle - U_0(t,0)|\phi_i\rangle] = 0$$

现乘上 $U^{-1}(t,0)$ 再取极限

$$\lim_{t\to-\infty}U^{-1}(t,0)[U(t,0)|\phi_i^{in}\rangle - U_0(t,0)|\phi_i\rangle] = |\phi_i^{in}\rangle - \lim_{t\to-\infty}U(0,t)U_0(t,0)|\phi_i\rangle = 0$$

$$|\phi_i^{in}\rangle = U(0,-\infty)U_0(-\infty,0)|\phi_i\rangle$$

同理可有

$$|\phi_f^{out}\rangle = U(0,\infty)U_0(\infty,0)|\phi_f\rangle$$

莫勒算符因此可写为

$$\Omega^\pm = U(0,\mp\infty)U_0(\mp\infty,0)$$

2.2.4 S 算符与 T 算符

S 算符按照如下方式定义，它的矩阵元满足

$$\langle\phi_f|S|\phi_i\rangle = \langle\phi_f(\infty)|\phi_f^{out}(\infty)\rangle = \langle\phi_f|U_0(0,\infty)U(\infty,0)|\phi_f^{out}\rangle$$

如果我们认为内部自由度的改变蕴含在 $U(t,0)$, $\forall t > 0$ 中，比如 $U(t,0)$ 为通常的时间演化算符乘上一个关于内部自由度的有限维矩阵，则上式也可写为

$$\begin{aligned}\langle\phi_f|S|\phi_i\rangle &= \langle\phi_f|U_0(0,\infty)U(\infty,0)|\phi_f^{out}\rangle \\ &= \langle\phi_f|U_0(0,\infty)U(\infty,0)|\phi_i^{in}\rangle \\ &= \langle\phi_f|U_0(0,\infty)U(\infty,0)U(0,-\infty)U_0(-\infty,0)|\phi_i\rangle\end{aligned}$$

于是

$$S = U_0(0,\infty)U(\infty,0)U(0,-\infty)U_0(-\infty,0) = (\Omega^{(-)})^\dagger\Omega^{(+)}$$

从前面的小结我们知道 S 算符是幺正的

$$SS^\dagger = S^\dagger S = \mathbb{1}$$

现在，与之前类似，S 应当满足

$$S = \mathbb{1} - 2\pi i\delta(E_f - E_i)\sum_{n=1}^{\infty} V\left(\frac{1}{E_i - H_0 + i\epsilon}V\right)^{n-1} = \mathbb{1} - 2\pi i\delta(E_f - E_i)T$$

只不过这里的算符和态矢都包含了内部自由度。在实际计算矩阵元时，我们都是在一定的内部自由度下计算位置/动量空间的积分，那时的 V 会根据我们的内部自由度的选取的不同而有所不同。