## 第十一章散射

前面两章我们讨论的含时或者不含时微扰理论,这些公式都只适用于分立能级的情况。当然在引入 态密度的概念后,分立能级也是可以扩展到连续谱。量子力学不仅处理分立能级,对连续谱的情况同样 适用,如在一维定态问题中的势垒的透射和反射问题。从另外一个角度可以理解为粒子被力场所散射, 粒子的能量是连续的。本质上,这类问题能够精确求解的情况很少,很多时候同样需要利用微扰方法求 解。本章我们研究这类散射问题。

散射实验在近代物理学的发展中起了特别重要的作用。原子和分子物理,原子核物理以及粒子物理的建立和发展,都离不开散射实验及其理论分析。著名的Rutherford 的α粒子对原子的散射实验(大角度偏转),肯定了原子有一个核,即原子核,从此揭开了人类研究原子结构的新领域。弹性中子散射(Elastic neutron scattering)和非弹性中子散射(Inelastic neutron-scattering)技术在现代物理中广泛应用于研究材料自旋响应等性质。

大家熟悉的散射现象是碰撞,这个在经典力学中已经有了很好的描述,其最基本的关系是动量守恒。如果是弹性碰撞,动能也守恒。如果是非弹性碰撞,动能转化为其他能量。实际上散射要比碰撞更为广义,除了碰撞以外,还包括了由于存在相互作用,即使没有发生碰撞,也会发生散射现象。表征散射强度的物理量是散射截面。我们下面先给出它的一般描述。我们这里只讨论弹性散射的问题。

## 11.1 散射现象的一般描述

如图 1所示,我们考虑一束粒子流(如电子、中子流等)沿着z轴向靶粒子A(如原子) 射来,其中A为散射中心,由于粒子流与靶粒子A之间有相互作用,即使不接触(碰撞),粒子流的方向也有可能发生改变。取两体的相互作用为 $V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ ,两体问题可以简化为单体运动,其中质心坐标与散射问题无关,相对

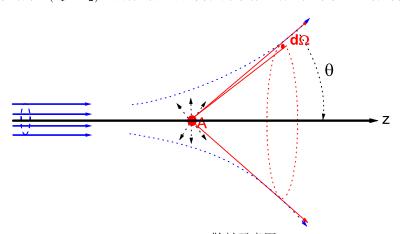


Figure 1: 散射示意图.

坐标系与散射相关。即相当于一个质量为 $\mu$ 的粒子的相对运动,其中 $\mu = mM/(m+M)$ 。或者是靶粒子A的质量远大于粒子流中粒子的质量,此时我们可以认为粒子A保持不动(如晶格中的原子)。由于我们只考虑弹性散射,因此入射粒子的内部状态保持不变(即能量、动量的大小),发生改变的是入射粒子流的方向和流密度的大小。

假定入射粒子束的流密度(单位时间穿过垂直入射方向单位面积的粒子数)为 $j_i$ ,则单位时间内散射到面积元ds上的粒子数dn应当与ds成正比,而与ds到A的距离的平方成反比,即

$$dn = \sigma(\theta, \varphi) ds/r^2 = \sigma(\theta, \varphi) j_i d\Omega$$

其中 $d\Omega$ 是ds对A所张的立体角,比例系数 $\sigma(\theta,\varphi)$ 应当与角度 $\theta$ (散射角)和 $\varphi$ 有关,称为微分散射截面,即我们定义微分散射截面为

$$\sigma\left(\theta,\varphi\right) = \frac{1}{j_i} \frac{dn}{d\Omega}$$

而总的散射截面为

$$\sigma_{t} = \int \sigma(\theta, \varphi) d\Omega = \int_{0}^{\pi} \int_{0}^{2\pi} \sigma(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi$$

之所以称 $\sigma(\theta,\varphi)$ 为散射截面,是因为其量纲恰好具有面积的量纲。 $[dn] = 1/T, [j_i] = 1/(L^2T)$ 。

上面关于微分散射截面和总散射截面对于经典力学和量子力学都是成立的。现在我们来研究如何从薛定谔方程来计算散射截面。薛定谔方程可以写为

$$\left[-\frac{\hbar^{2}}{2\mu}\nabla^{2}+V\left(\mathbf{r}\right)\right]\left|\psi_{k}\left(\mathbf{r}\right)\right\rangle =E_{k}\left|\psi_{k}\left(\mathbf{r}\right)\right\rangle$$

其中

$$\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k} \qquad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$$

现在我们来考察波函数的渐近行为,假定在离开散射中心足够远的地方来观察被散射的粒子,即 当 $r\to\infty$ 时 $|\psi_k\rangle$ 的行为。在无穷远处,可以认为势场V(r)=0,即在无穷远处,相互作用为零。因 此波函数应当有两部分组成,一是描写入射粒子的平面波 $\psi_i=e^{ikz}$ ,二是描写散射粒子的球面散射 波 $\psi_s=f(\theta,\varphi)\frac{e^{ikr}}{r}$ ,由于是弹性散射,所以k保持不变,即波函数可以写成

$$\psi_k(r \to \infty) = \psi_i + \psi_s = e^{ikz} + f(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r}$$

其中 $f(\theta,\varphi)$ 是散射振幅,将由具体求解薛定谔方程并要求在时解具有上式的形式来得到。

由几率流密度方程知道

入射波: 
$$j_i = \frac{i\hbar}{2\mu} \left[ \psi_i \frac{\partial \psi_i^*}{\partial z} - \psi_i^* \frac{\partial \psi_i}{\partial z} \right] = \frac{i\hbar}{2\mu} \left[ -ik\psi_i \psi_i^* - ik\psi_i^* \psi_i \right] = \frac{\hbar k}{\mu}$$
 散射波:  $j_s = \frac{i\hbar}{2\mu} \left[ \psi_s \frac{\partial \psi_s^*}{\partial r} - \psi_s^* \frac{\partial \psi_s}{\partial r} \right] = \frac{\hbar k}{\mu} \frac{|f(\theta, \varphi)|^2}{r^2}$ 

显然,

$$dn = j_s ds = j_s r^2 d\Omega = \frac{\hbar k}{\mu} |f(\theta, \varphi)|^2 d\Omega$$

因此得到

$$\sigma\left(\theta,\varphi\right) = \frac{1}{j_{i}}\frac{dn}{d\Omega} = \frac{1}{j_{i}}\frac{\hbar k}{\mu}\left|f\left(\theta,\varphi\right)\right|^{2} = \left|f\left(\theta,\varphi\right)\right|^{2}$$

可见知道了散射振幅就可以求出散射截面了。因此问题归结为如如何计算散射振幅,这正是我们接下来要讲述的内容。

## 11.2 分波法

在中心力场中,势场 $V(\mathbf{r})$ 只与r的大小有关,与r的方向无关。薛定谔方程

$$\left[ -\frac{\hbar^{2}}{2\mu} \nabla^{2} + V(r) \right] \psi_{k}(\mathbf{r}) = E_{k} \psi_{k}(\mathbf{r})$$

波函数可以变量分离为

$$\psi_k(\mathbf{r}) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

得到径向方程

$$\left[\frac{1}{r}\frac{d^{2}}{dr^{2}}r+k^{2}-\frac{l\left(l+1\right)}{r^{2}}-\frac{2\mu}{\hbar^{2}}V\left(r\right)\right]R_{nl}\left(r\right)=0$$

如前图 1所示,取沿粒子入射方向并且通过散射中心的轴线为z轴,由于关于z轴旋转对称,因此波函数 $\psi$ 和散射振幅 $f(\theta,\varphi)$ 应当与 $\varphi$ 无关,或者说, $L_z$ 是个守恒量,表征 $\varphi$ 的量子数m=0。作为一般解的波函数,是所有可能lm的线性叠加,可以进一步写为

$$\psi_k(\mathbf{r}) = \sum_{lm} R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \Longrightarrow \psi_k(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} R_l(kr) P_l(\cos \theta) = \psi_k = \sum_{l=0}^{\infty} \psi_l(kr, \theta)$$

上面展式中每一项称为一个分波, $\psi_l(kr,\theta) = R_l(kr) P_l(\cos\theta)$ 称为第l个分波,这些分波都满足薛定谔方程。按照l=0,1,2,...,把对应的分波分别称为s,p,d,f,...。实际情况中,l也只是有限的几个值,一般s,p,d,f就足够了。

波函数的渐近行为是

$$\psi_k(r \to \infty) = \psi_i + \psi_s = e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}$$

而 $V(r \to \infty) \to 0$ , 令 $u_l(kr) = rR_l(kr)$ ,  $r \to \infty$ 时径向方程写为

$$\frac{d^2u_l(kr)}{dr^2} + k^2u_l(kr) = 0$$

则

$$u_l(kr) = A'_l \sin(kr + \delta'_l) = \frac{A_l}{k} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right) \qquad (r \to \infty)$$

为了讨论方便, 我们引入了 $A_l = kA'_l$ ,  $\delta_l = \delta'_l + \frac{l\pi}{2}$ 

$$R_l(kr) = \frac{A_l}{kr} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right) \qquad (r \to \infty)$$

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

另一方面,

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

其中 $j_l(kr)$ 是球Bessel函数,它与Bessel函数 $J_{l+\frac{1}{2}}(kr)$ 的关系以及它的渐近表示式为

$$j_{l}\left(kr\right) = \sqrt{\frac{\pi}{2kr}} J_{l+\frac{1}{2}}\left(kr\right) \xrightarrow[r \to \infty]{} \frac{1}{kr} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)$$

代入到波函数的渐近行为表示式中有

$$\sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^{l} j_{l}(kr) P_{l}(\cos \theta) + \frac{f(\theta)}{r} e^{ikr}$$

$$= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{A_{l}}{kr} \sin \left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_{l}\right) P_{l}(\cos \theta)$$

利用公式

$$\sin \alpha = \frac{1}{2i} \left( e^{i\alpha} - e^{-i\alpha} \right)$$

即

$$\frac{f(\theta)}{r}e^{ikr} + \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)i^{l} \frac{1}{2i} \frac{1}{kr} \left[ e^{i\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)} - e^{-i\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)} \right] P_{l}(\cos \theta)$$

$$= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{A_{l}}{kr} \frac{1}{2i} \left[ e^{i\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_{l}\right)} - e^{-i\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_{l}\right)} \right] P_{l}(\cos \theta)$$

$$0 = \left\{ 2ikf(\theta) + \sum_{l=0}^{\infty} \left[ (2l+1)i^l e^{-\frac{il\pi}{2}} - A_l e^{i\left(\delta_l - \frac{l\pi}{2}\right)} \right] P_l(\cos\theta) \right\} e^{ikr}$$
$$-\sum_{l=0}^{\infty} \left[ (2l+1)i^l e^{\frac{il\pi}{2}} - A_l e^{i\left(\frac{l\pi}{2} - \delta_l\right)} \right] P_l(\cos\theta) e^{-ikr}$$

可知

$$A_{l} = (2l+1) i^{l} e^{i\delta_{l}}$$

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

其中, $i^l=e^{\frac{i l \pi}{2}}$ 。上面表述中,可以看出 $\left(kr-\frac{l \pi}{2}\right)$ 是入射波第l个分波的位相,而 $\left(kr-\frac{l \pi}{2}+\delta_l\right)$ 是散射波第l个分波的位相,因此, $\delta_l$ 就是入射波经过散射后第l个分波的位相移动,简称为相移。其具体数值由径向方程决定。

微分散射截面为

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

总散射截面为

$$\sigma_{t} = \int \sigma\left(\theta\right) d\Omega = 2\pi \int_{0}^{\pi} \sigma\left(\theta\right) \sin\theta d\theta = \frac{4\pi}{k^{2}} \sum_{l=0}^{\infty} \left(2l+1\right) \sin^{2} \delta_{l} = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_{l}$$

计算过程中利用了Legendre多项式的正交性

$$\int_{0}^{\pi} P_{l}(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) \sin \theta d\theta = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'}$$

其中

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} \left( 2l + 1 \right) \sin^2 \delta_l$$

是第1个分波的散射截面。

本质上,上面的讨论并不包括 $\theta=0$ 的情况,因为此时无法区分入射波和散射波(会产生量子干涉现象),但我们总是可以取 $\theta\to0$ 的情况延拓到 $\theta=0$ 。当 $\theta=0$ 时, $P_{\ell}(1)=1$ ,

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

其虚部满足

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

由此可见,仅由向前散射振幅的虚部即可决定散射截面。由于这一关系式最初是在研究光的散射时发现的,故称为光学定理。实际上,任意力场(不一定是中心力场)的散射,包括非弹性散射,都满足这个规律。根本原因是粒子流的守恒,射向散射中心的粒子流与离开散射中心的粒子流是相等的,亦即入射球面波与出射球面波可归一化为同一个结果。上面的关系式表明一部分粒子从入射波中移出去,使入射方向( $\theta=0$ )的散射波幅减弱。因此,总截面是入射波减弱的一种度量( $\sigma_t$ 越大,入射波的减弱越大),而这种减弱是由于入射波和(同方向的)朝前散射波相消干涉的结果。于是,朝前散射波的波幅越大,这种相消干涉也越大,减弱也越多,总截面也就越大。

可见计算散射截面关键在于计算相移 $\delta_l$ 。原则上讲,分波法是个严格的处理方法,但实际应用中,我们不可能计算所有分波的贡献。如果 $f(\theta)$ 表达式中级数收敛的很快,只需要计算前面几个分波即可,这也是我们前面所说的可能只需要s,p,d,f。否则的话,分波法就不是一个好的计算方法,这个意义上讲,分波法也是一种近似方法。一般来说,分波法适用于低能散射,即入射粒子能量很小的情况,假定散射势的作用范围是以散射中心为球心,以a为半径的球内,r>a时,可以忽略V(r),那么相移只在这个范围内产生。我们只要计算从l=0到 $l\sim ka$ 的分波的相移。特别是在很低能的时候, $ka\ll 1$ ,只需要计算l=0的相移就可以了。

Example: 考虑低能粒子对球方势阱的散射。

$$V\left(r\right) = \left\{ \begin{array}{cc} -V_0 & r < a \\ 0 & r > a \end{array} \right|$$

解:对于低能粒子,入射粒子能量很小,其波长比势场作用范围大得多,此时 $ka \ll 1$ ,所以只要讨论s分波(l=0)就足够了。即径向方程中取l=0,

$$\left[\frac{1}{r}\frac{d^{2}}{dr^{2}}r+k^{2}-\frac{l\left(l+1\right)}{r^{2}}-\frac{2\mu}{\hbar^{2}}V\left(r\right)\right]R_{nl}\left(r\right)=0$$

或者令u(r) = rR(r)得到

$$\begin{cases} \frac{d^2u}{dr^2} + k'^2u = 0 & r < a \\ \frac{d^2u}{dr^2} + k^2u = 0 & r > a \end{cases}$$

其中 $k^2 = 2\mu E/\hbar^2$ ,  $k'^2 = 2\mu (E + V_0)/\hbar^2$ , 方程的解为

$$u(r) = \begin{cases} A' \sin(k'r + \delta'_0) & r < a \\ A \sin(kr + \delta_0) & r > a \end{cases}$$

由径向方程的渐近性要求u(0) = 0得到 $\delta'_0 = 0$ 。在由波函数的在r = a处的连续性条件知道

波函数连续:  $A'\sin(k'a) = A\sin(ka + \delta_0)$ 

波函数导数连续:  $A'k'\cos(k'a) = Ak\cos(ka + \delta_0)$ 

$$\tan(ka + \delta_0) = \frac{k}{k'} \tan(k'a)$$

解得相移

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

因此总散射截面

$$\sigma_t \approx \sigma_0 = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0 = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \left[ \arctan \left( \frac{k}{k'} \tan k' a \right) - ka \right]$$

对于低能极限,  $k \ll k' \sim k_0 = \sqrt{2\mu V_0}/\hbar$ ,

$$\tan \delta_0 = \frac{\frac{k}{k'} \tan (k'a) - \tan ka}{1 + \frac{k}{k'} \tan (k'a) \tan ka} \approx ka \left(\frac{\tan (k_0 a)}{k_0 a} - 1\right) \ll 1$$

总散射截面为

$$\sigma_t = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0 \approx \frac{4\pi}{k^2} \tan^2 \delta_0 = 4\pi a^2 \left( \frac{\tan(k_0 a)}{k_0 a} - 1 \right)^2$$

如果换成方势垒,相当于作变换 $k_0 = i\kappa_0$ ,得到

$$\sigma_t = 4\pi a^2 \left(\frac{\tanh\left(\kappa_0 a\right)}{\kappa_0 a} - 1\right)^2$$

对于刚球,  $V_0 \to \infty$ ,  $\kappa_0 \to \infty$ ,

$$\sigma_t = 4\pi a^2$$

正是刚球的表面积。物理上可以理解为: 在低能极限下 $(k \to 0, \lambda \to \infty)$ , 入射波可以发生衍射,而s波是各向同性的,因此刚球表面各处都对散射有同等的贡献。

在经典的情况下,总散射截面就是作为散射中心的刚球的最大截面,因此 $\sigma_t = \pi a^2$ 。因此两者是不同的,关键在于低能情况, $\lambda \to \infty$ ,入射波产生衍射现象,这是量子效应,经典物理无法体现。

## 11.3 势散射的时间相关描述—— Born近似

分波法实际应用中适合于低能粒子,这样可以取有限的几个分波就可以给出散射截面了。但现代物理中,我们更经常用高能粒子去轰击靶,此时分波法尽管从理论上讲也是可以计算的,但实际上无法操作。对于高能粒子的运动,动能项远大于相互作用,因此我们可以把相互作用V当成微扰处理。

假定 $t_0 = 0$ 粒子入射,在 $t \to \infty$ 散射到无穷远处。为了方便描述,我们假定相互作用势场是定域势,在|r| > a时V(r) = 0,即表示为

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

由运动方程

$$i\hbar\frac{\partial\psi\left(\mathbf{r},t\right)}{\partial t}=\left[-\frac{\hbar^{2}}{2\mu}\nabla^{2}+V\left(\mathbf{r}\right)\right]\psi\left(\mathbf{r},t\right)$$

入射(自由):

$$E_{i} = \frac{\hbar^{2}k_{i}^{2}}{2\mu} \quad \phi_{i} = \frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\mathbf{k}_{i}\cdot\mathbf{r}} = \frac{1}{\sqrt{V}}e^{ikz} ( 箱坦一化)$$

$$j_{i} = -\frac{i\hbar}{2\mu}\left(\phi_{i}^{*}\frac{\partial\phi_{i}}{\partial z} - \phi_{i}\frac{\partial\phi_{i}^{*}}{\partial z}\right) = \frac{\hbar k}{\mu}$$

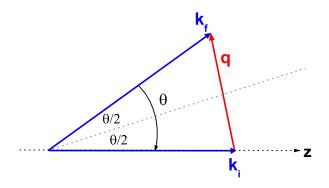


Figure 2: 动量变化.

末态:

$$\phi_f = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{r}} \qquad |\mathbf{k}_f| = |\mathbf{k}_i| = k = \frac{\sqrt{2\mu E_i}}{\hbar}$$

因此初末态之间的量子跃迁速率(但在一定的角度范围内)(参见黄金规则)

$$dw_{fi}(\theta,\varphi) = \frac{2\pi}{\hbar} \rho(E_f) \left| \langle \phi_f | V(\mathbf{r}) | \phi_i \rangle \right|^2$$

因此

$$\sigma\left(\theta\right) = \frac{1}{j_i} \frac{dw_{fi}\left(\theta, \varphi\right)}{d\Omega} = \left(\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \left| \int e^{i(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f) \cdot \mathbf{r}} V\left(\mathbf{r}\right) d\mathbf{r} \right|^2$$

$$q^{2} = 2k^{2} - 2k^{2}\cos\theta = 4k^{2}\sin^{2}\frac{\theta}{2}$$

上式的积分部分可以表示为

$$\begin{split} \int e^{i(\mathbf{k}_{i}-\mathbf{k}_{f})\cdot\mathbf{r}}V\left(\mathbf{r}\right)d\mathbf{r} &= 2\pi\int V\left(\mathbf{r}\right)e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}d\mathbf{r} = \int_{0}^{\infty}V\left(r\right)r^{2}dr\int_{0}^{\pi}e^{-iqr\cos\theta'}\sin\theta'd\theta' \\ &= \frac{4\pi}{q}\int_{0}^{\infty}rV\left(r\right)\sin\left(qr\right)dr \end{split}$$

因此散射截面的Born公式表示为

$$\sigma(\theta) = \left| f(\theta) \right|^2 = \frac{4\mu^2}{q^2\hbar^4} \left| \int_0^\infty rV(r)\sin(qr) dr \right|^2$$

其中

$$f\left(\theta\right) = -\frac{2\mu}{q\hbar^{2}} \int_{0}^{\infty} rV\left(r\right) \sin\left(qr\right) dr$$

最后我们不作证明,但稍微提一下此式适用的条件,至少要求下列三个条件之一满足: 1) 势 $V(\mathbf{r})$ 足够弱; 2) 势 $V(\mathbf{r})$ 虽然不够弱,但其分布的区域足够局域; 3) 入射粒子能量足够高。

Example: 考虑库仑散射的情况。

此时V(r) = A/r,

$$f\left(\theta\right)=-\frac{2\mu}{q\hbar^{2}}\int_{0}^{\infty}rV\left(r\right)\sin\left(qr\right)dr=-\frac{2\mu A}{q\hbar^{2}}\int_{0}^{\infty}\sin\left(qr\right)dr$$

采用小技巧, 写为

$$f(\theta) = -\frac{2\mu A}{q\hbar^2} \lim_{\alpha \to 0} \int_0^\infty e^{-\alpha r} \sin(qr) \, dr = -\frac{2\mu A}{q\hbar^2} \lim_{\alpha \to 0} \frac{q}{\alpha^2 + q^2} = -\frac{2\mu A}{q^2\hbar^2}$$
$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 = \frac{4\mu^2 A^2}{q^4\hbar^4} = \frac{A^2}{4\mu^2 v^4 \sin^4 \frac{\theta}{2}}$$

此即Lutherford散射公式,结果的特点:散射集中于小角度;截面反比于入射粒子能量的平方。

Appendix: 下面我们给出这种情况下的态密度表达式。末态是自由粒子采用箱归一化的动量的本征函数,即

$$\phi_f = \frac{1}{L^{3/2}} e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/\hbar}$$

因为约束在箱内, 所以动量的本征值为

$$p_{x,y,z} = \frac{2\pi\hbar n_{x,y,z}}{L}$$

其中 $n_{x,y,z}$ 是整数,每一组 $\{n_x,n_y,n_z\}$ 的值确定一个态,因此动量在 $p_x\to p_x+dp_x,\ p_y\to p_y+dp_y,\ p_z\to p_z+dp_z$ 范围内态的数目为

$$\left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3 dp_x dp_y dp_z$$

变换到极坐标系,则动量大小和方向在 $p \to p + dp, \theta \to \theta + d\theta, \varphi \to \varphi + d\varphi$ 范围内的态的数目为

$$\left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3 p^2 dp \sin\theta d\theta d\varphi$$

能量为 $E_f$ 的末态有很多,这些态动量大小相同,但方向不同,以 $\rho(E_f)dE$ 表示上式范围内的状态数,则

$$\rho(E_f) dE = \left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3 p^2 dp \sin\theta d\theta d\varphi$$

因为

$$E_f = \frac{p^2}{2\mu} \qquad dE = \frac{p}{\mu}dp$$

所以

$$\rho(E_f) = \left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3 \mu p \sin\theta d\theta d\varphi$$

就是动量大小为p,方向在立体角 $d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$ 内末态的态密度。

本章拟用4 (2×2) 课时