《高等量子力学》第 17 讲

3. Born 级数

1）散射振幅

考虑到散射球面波向外传播，选择推迟 Green 函数 G^{+}，

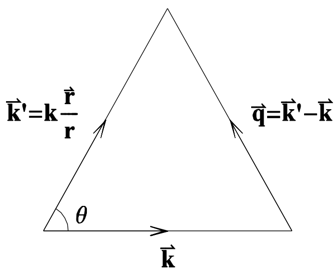
$$\psi(\vec{r})=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}-\frac{1}{4\pi}\int d^{3}\vec{r}'U(\vec{r}')\psi(\vec{r}')\frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|}\text{。}$$

考虑渐进解。由于 $U(\vec{r}')$ 的有效区域有限，当 $r\to\infty$ 时，$r'/r\to 0$，有

$$|\vec{r}-\vec{r}'|=\sqrt{(\vec{r}-\vec{r}')^{2}}=\left(r^{2}+r'^{2}-2\vec{r}\bullet\vec{r}'\right)^{1/2}\approx r\left(1-2\frac{\vec{r}\bullet\vec{r}'}{r^{2}}\right)^{1/2}\approx r-\frac{\vec{r}\bullet\vec{r}'}{r}$$

$$\psi(\vec{r})\ \underline{\underline{r\to\infty}}\ \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}-\frac{1}{4\pi}\frac{e^{ikr}}{r}\int d^{3}\vec{r}'e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}'}U(\vec{r}')\psi(\vec{r}')$$

相位中 $|\vec{r}-\vec{r}'|$ 保留到一级近似，分母中 $|\vec{r}-\vec{r}'|$ 只保持到零级，$\vec{k}'=k\dfrac{\vec{r}}{r}$ 是散射波矢，$|\vec{k}'|=k$。



与标准渐进解

$$\psi(\vec{r})=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}+\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}f(\theta,\varphi)\frac{e^{ikr}}{r}$$

比较，得散射振幅

$$f(\theta,\varphi)=-\frac{(2\pi)^{3}}{4\pi}\int d^{3}\vec{r}'\frac{e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}'}}{(2\pi)^{3/2}}U(\vec{r}')\psi(\vec{r}')\text{。}$$

2）一级 Born 近似

若势能$V(\vec r)$是一个弱势（入射能量$E \gg V(\vec r)$），用迭代法求解。零级近似

$$\psi^{(0)}(\vec r)=\frac{e^{i\vec k\cdot\vec r}}{(2\pi)^{3/2}},$$

$$f^{(0)}(\theta,\varphi)=-\frac{(2\pi)^3}{4\pi}\int d^3\vec r'\frac{e^{-i\vec k'\cdot\vec r'}}{(2\pi)^{3/2}}U(\vec r')\frac{e^{i\vec k\cdot\vec r'}}{(2\pi)^{3/2}}=-\frac{1}{4\pi}\int d^3\vec r' e^{i(\vec k-\vec k')\cdot\vec r'}U(\vec r')$$

对于低能散射，

$$\left|\vec k-\vec k'\right|=\sqrt{k^2+k'^2-2kk'\cos\theta}=\sqrt{4k^2\sin^2\frac{\theta}{2}}=2k\sin\frac{\theta}{2}$$

很小，相位在有效相互作用范围内是一个缓变函数，可看成一个常数，提到$f^{(0)}(\theta,\varphi)$的积分号外，对σ无贡献，

$$f^{(0)}(\theta,\varphi)=-\frac{1}{4\pi}\int d^3\vec r' U(\vec r')。$$

例题：考虑低能散射势$V(r)=\begin{cases}V_0, & r\le a\\ 0, & r>a\end{cases}$，

$$f^{(0)}(\theta,\varphi)=-\frac{mV_0}{2\pi\hbar^2}\int_{r\le a}d^3\vec r=-\frac{mV_0}{2\pi\hbar^2}\frac{4}{3}\pi a^3$$

$$\sigma(\theta,\varphi)=|f(\theta,\varphi)|^2=\left(\frac{2mV_0a^3}{3\hbar^2}\right)^2$$

总截面

$$\sigma_{tot}=\int\sigma(\theta,\varphi)d\Omega=4\pi\left(\frac{2mV_0a^3}{3\hbar^2}\right)^2。$$

对于一般非低能散射，如果为中心势场 $V(\vec r)=V(r)$，

$$f^{(0)}(\theta,\varphi)=-\frac{1}{4\pi}\int_0^\infty dr'r'^2U(r')\int_0^\pi d\theta'\sin\theta' e^{-iqr'\cos\theta'}\int_0^{2\pi}d\varphi'$$
$$=-\frac{1}{q}\int_0^\infty dr'U(r')r'\sin qr'$$

注意：**使用 Born 近似的条件是弱势散射**。

3）**Born 级数**

$$\psi(\vec r)=\psi^{(0)}(\vec r)+\int d^3\vec r'\psi(\vec r')U(\vec r')G(\vec r,\vec r')。$$

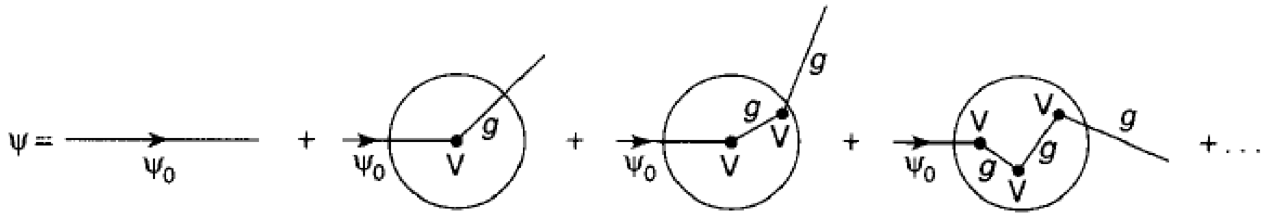
零级近似： $\psi^{(0)}(\vec r)=Ae^{i\vec k\cdot\vec r}$

一级近似： $\psi^{(1)}(\vec r)=\psi^{(0)}(\vec r)+\int d^3\vec r'\psi^{(0)}(\vec r')U(\vec r')G(\vec r,\vec r')$

二级近似：

$$\begin{aligned}\psi^{(2)}(\vec r)&=\psi^{(0)}(\vec r)+\int d^3\vec r'\psi^{(1)}(\vec r')U(\vec r')G(\vec r,\vec r')\\&=\psi^{(0)}(\vec r)+\int d^3\vec r'\psi^{(0)}(\vec r')U(\vec r')G(\vec r,\vec r')\\&+\int d^3\vec r'd^3\vec r''\psi^{(0)}(\vec r')U(\vec r')G(\vec r'',\vec r')U(\vec r'')G(\vec r,\vec r'')\end{aligned}$$

上面级数展开可以用下面的图形来表示，



Green 函数是传播两点之间相互作用的函数。

4. *Lippmann—Schwinger 方程*

讨论以上积分方程的一般形式（不进入表象）。

1） *Lippmann—Schwinger 方程*

定态方程

$$\hat H|\psi\rangle=(\hat H_0+\hat V)|\psi\rangle=E|\psi\rangle,\qquad (E-\hat H_0)|\psi\rangle=\hat V|\psi\rangle$$

用算符 $\dfrac{1}{E-\hat H_0}$ 作用，有

$$|\psi\rangle=\frac{1}{E-\hat H_0}\hat V|\psi\rangle$$

满足边界条件 $\lim\limits_{V\to0}|\psi\rangle=|\vec k\rangle$（$\hat H_0|\vec k\rangle=E|\vec k\rangle$）的形式解是

$$\left|\psi\right\rangle=\left|\vec{k}\right\rangle+\frac{1}{E-\hat{H}_0}\hat{V}\left|\psi\right\rangle。$$

尝试**将能量扩展到复平面，以避免方程在态$\left|\vec{k}\right\rangle$的发散**，把形式解写成

$$\left|\psi^{\pm}\right\rangle=\left|\vec{k}\right\rangle+\frac{1}{E-\hat{H}_0\pm i\eta}\hat{V}\left|\psi^{\pm}\right\rangle。$$

为了看出引入复平面的意义，进入坐标表象，

$$\left\langle\vec{r}\middle|\psi^{\pm}\right\rangle=\left\langle\vec{r}\middle|\vec{k}\right\rangle+\int d^3\vec{r}\,'\langle\vec{r}|\frac{1}{E-\hat{H}_0\pm i\eta}|\vec{r}\,'\rangle\langle\vec{r}\,'|\hat{V}\left|\psi^{\pm}\right\rangle$$

其中

$$\langle\vec{r}|\frac{1}{E-\hat{H}_0\pm i\eta}|\vec{r}\,'\rangle=\int d^3\vec{p}\,'d^3\vec{p}\,''\langle\vec{r}|\vec{p}\,'\rangle\langle\vec{p}\,'|\frac{1}{E-\hat{H}_0\pm i\eta}|\vec{p}\,''\rangle\langle\vec{p}\,''|\vec{r}\,'\rangle$$

由于

$$\langle\vec{p}\,'|\frac{1}{E-\hat{H}_0\pm i\eta}|\vec{p}\,''\rangle=\frac{\delta\left(\vec{p}\,'-\vec{p}\,''\right)}{E-E'\pm i\eta},\qquad\langle\vec{r}|\vec{p}\,'\rangle=\frac{e^{i\vec{p}\,'\cdot\vec{r}/\hbar}}{\left(2\pi\hbar\right)^{3/2}},$$

故 $$\langle\vec{r}|\frac{1}{E-\hat{H}_0\pm i\eta}|\vec{r}\,'\rangle=\int\frac{d^3\vec{p}\,'}{\left(2\pi\hbar\right)^3}\frac{e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\,'\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')}}{E-E'\pm i\eta}=\int\frac{d^3\vec{k}\,'}{\left(2\pi\right)^3}\frac{e^{i\vec{k}\,'\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')}}{E-E'\pm i\eta}。$$

考虑到可以把推迟和超前 Green 函数写成

$$G^{\pm}\left(\vec{r}-\vec{r}'\right)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d^3\vec{k}\,'}{\left(2\pi\right)^3}\frac{e^{i\vec{k}\,'\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')}}{(k\pm i\varepsilon)^2-k'^2}=\frac{\hbar^2}{2m}\int\frac{d^3\vec{k}\,'}{\left(2\pi\right)^3}\frac{e^{i\vec{k}\,'\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')}}{E-E'\pm i\eta}$$

则 $$\langle\vec{r}|\frac{1}{E-\hat{H}_0\pm i\eta}|\vec{r}\,'\rangle=\frac{2m}{\hbar^2}G^{\pm}\left(\vec{r}-\vec{r}\,'\right),$$

则在坐标表象的形式解为

$$\left\langle\vec{r}\middle|\psi^{\pm}\right\rangle=\left\langle\vec{r}\middle|\vec{k}\right\rangle+\int d^3\vec{r}\,'G^{\pm}(\vec{r}-\vec{r}\,')\langle\vec{r}\,'|\hat{U}\left|\psi^{\pm}\right\rangle。$$

由于

$$\langle \vec{r}\,'|\hat{U}|\psi^{\pm}\rangle = \int d^3\vec{r}\,''\langle \vec{r}\,'|\hat{U}|\vec{r}\,''\rangle\langle \vec{r}\,''|\psi^{\pm}\rangle = U(\vec{r}\,')\langle \vec{r}\,'|\psi^{\pm}\rangle$$

故得到坐标表象的积分方程

$$\psi^{\pm}(\vec{r}) = \psi^{(0)}(\vec{r}) + \int d^3\vec{r}'\psi^{\pm}(\vec{r}')U(\vec{r}')G(\vec{r},\vec{r}'),$$

是 **Lippmann－Schwinger 方程**

$$|\psi^{\pm}\rangle = |\vec{k}\rangle + \frac{1}{E-\hat{H}_0 \pm i\eta}V|\psi^{\pm}\rangle$$

在坐标表象的形式。

2）Dyson 方程

由 $$\langle \vec{r}|\frac{1}{E-\hat{H}_0 \pm i\eta}|\vec{r}\,'\rangle = \frac{2m}{\hbar^2}G^{\pm}(\vec{r}-\vec{r}\,'),$$

定义自由 *Green* 算符（只与 $\hat{H}_0$ 有关）

$$\hat{G}_0^{\pm} = \frac{1}{E-\hat{H}_0 \pm i\eta}。$$

引入完全 *Green* 算符（与 $\hat{H}$ 相关）

$$\hat{G}^{\pm} = \frac{1}{E-\hat{H} \pm i\eta},$$

由

$$\left(E-\hat{H} \pm i\eta\right)\hat{G}^{\pm} = 1,$$

$$\left(E-\hat{H}_0 \pm i\eta\right)\hat{G}^{\pm} - V\hat{G}^{\pm} = 1$$

两边用 $\hat{G}_0^{\pm}$ 作用，有

$$\hat{G}^{\pm} = \hat{G}_0^{\pm} + \hat{G}_0^{\pm}V\hat{G}^{\pm},$$

称为 **Dyson 方程，描述自由 Green 算符和完全 Green 算符的关系，在量子统计和量子场论中有重要的应用。**

5. 光学定理

因为

$$\langle \vec{k}'|\hat{U}|\psi^{\pm}\rangle=\int d^3\vec{r}'d^3\vec{r}''\langle \vec{k}'|\vec{r}'\rangle\langle \vec{r}'|\hat{U}|\vec{r}''\rangle\langle \vec{r}''|\psi^{\pm}\rangle=\int d^3\vec{r}'\frac{e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}'}}{(2\pi)^{3/2}}U(\vec{r}')\psi^{\pm}(\vec{r}')$$

有

$$f(\theta,\varphi)=-\frac{(2\pi)^3}{4\pi}\int d^3\vec{r}'\frac{e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}'}}{(2\pi)^{3/2}}U(\vec{r}')\psi^{+}(\vec{r}')=-\frac{(2\pi)^3}{4\pi}\langle \vec{k}'|\hat{U}|\psi^{+}\rangle$$

考虑向前散射振幅的虚部，$\theta=0$，即 $\vec{k}'=\vec{k}$，

$$\mathrm{Im}\, f(0,\varphi)=-\frac{(2\pi)^3}{4\pi}\mathrm{Im}\langle \vec{k}|\hat{U}|\psi^{+}\rangle。$$

由 *Lippmann*－*Schwinger* 方程，

$$\langle \vec{k}|=\langle\psi^{+}|-\langle\psi^{+}|\hat{V}\frac{1}{E-\hat{H}_0-i\eta},$$

有 $$\langle \vec{k}|\hat{V}|\psi^{+}\rangle=\langle\psi^{+}|\hat{V}|\psi^{+}\rangle-\langle\psi^{+}|\hat{V}\frac{1}{E-\hat{H}_0-i\eta}\hat{V}|\psi^{+}\rangle$$

利用柯西公式 $$\frac{1}{E-\hat{H}_0-i\eta}=\mathrm{Pr}.\frac{1}{E-\hat{H}_0}+i\pi\delta(E-\hat{H}_0),$$

并注意到 V，$V\left(\mathrm{Pr}.\frac{1}{E-\hat{H}_0}\right)V$ 为厄米算符，平均值为实数，有

$$\begin{aligned}\mathrm{Im}\langle \vec{k}|\hat{V}|\psi^{+}\rangle&=-\pi\langle\psi^{+}|\hat{V}\delta(E-\hat{H}_0)\hat{V}|\psi^{+}\rangle\\&=-\pi\int d^3\vec{k}'\langle\psi^{+}|\hat{V}|\vec{k}'\rangle\langle\vec{k}'|\delta(E-\hat{H}_0)\hat{V}|\psi^{+}\rangle\\&=-\pi\int d^3\vec{k}'\left|\langle\vec{k}'|\hat{V}|\psi^{+}\rangle\right|^2\delta\left(E-\frac{\hbar^2k'^2}{2m}\right)\end{aligned}。$$

将k'积分掉，并利用

$$f(\theta,\varphi)=-\frac{(2\pi)^3}{4\pi}\left\langle\vec{k}'\middle|\hat{U}\middle|\psi^+\right\rangle$$

有，

$$\begin{aligned}\operatorname{Im}\left\langle\vec{k}\middle|\hat{V}\middle|\psi^+\right\rangle&=-\frac{\pi mk}{\hbar^2}\int d\Omega'\left|\left\langle\vec{k}'\middle|\hat{V}\middle|\psi^+\right\rangle\right|^2\\&=-\frac{\hbar^2k}{4^2\pi^3m}\int d\Omega'\left|f(\theta,\varphi)\right|^2\\&=-\frac{\hbar^2k}{4^2\pi^3m}\int d\Omega'\sigma(\theta,\varphi)\\&=-\frac{\hbar^2k}{4^2\pi^3m}\sigma_{tot}\end{aligned}$$

故向前散射振幅的虚部

$$\operatorname{Im}f(0,\varphi)=-\frac{(2\pi)^3}{4\pi}\operatorname{Im}\left\langle\vec{k}\middle|\hat{U}\middle|\psi^+\right\rangle=\frac{k}{4\pi}\sigma_{tot}\quad。$$

这就是光学定理，描述向前散射振幅与总截面的关系。