《高等量子力学》第 16 讲

7．相互作用绘景与微扰论

1）相互作用绘景

先回顾 *Schroedinger* 绘景与 *Heisenberg* 绘景。

Schroedinger 绘景：

态与时间 t 有关， $|\alpha,t\rangle_S = \hat{U}(t)|\alpha,0\rangle_S$ ，$\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$

力学量与时间无关， $\hat{A}_S$

动力学方程， $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha,t\rangle_S = \hat{H}|\alpha,t\rangle_S$

Heisenberg 绘景：

态与时间无关， $|\alpha\rangle_H$

力学量与时间有关，$\hat{A}_H(t) = \hat{U}^+(t)\hat{A}_H(0)\hat{U}(t)$

动力学方程， $\frac{d\hat{A}_H(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A}_H(t),\hat{H}\right]$。

现在引入相互作用绘景。将 $\hat{H}$ 分成两部分，

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{H}^{(I)},$$

相互作用绘景是通过它与 *Schroedinger* 绘景的联系来定义的：

$$|\alpha,t\rangle_I = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}^{(0)}t}|\alpha,t\rangle_S,$$

由力学量 $\hat{O}$ 的平均值与绘景无关，

$${}_I\langle\alpha,t|\hat{O}_I|\alpha,t\rangle_I = {}_S\langle\alpha,t|\hat{O}_S|\alpha,t\rangle_S = {}_I\langle\alpha,t|e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}^{(0)}t}\hat{O}_S e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}^{(0)}t}|\alpha,t\rangle_I$$

有相互作用绘景与 Schroedinger 绘景中力学量的联系：

$$\hat{O}_I = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}^{(0)}t}\hat{O}_S e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}^{(0)}t}。$$

由此看出，$\hat{H}^{(0)}$在 Schroedinger 绘景与相互作用绘景一样，不含时间。

相互作用绘景中态和力学量都与时间有关。态的运动方程

$$
\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha,t\rangle_I &= -\hat{H}^{(0)}e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}^{(0)}t}|\alpha,t\rangle_S + e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}^{(0)}t}i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha,t\rangle_S \\
&= -e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}^{(0)}t}\hat{H}^{(0)}|\alpha,t\rangle_S + e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}^{(0)}t}\hat{H}_S|\alpha,t\rangle_S \\
&= e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}^{(0)}t}\hat{H}_S^{(I)}|\alpha,t\rangle_S \\
&= e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}^{(0)}t}\hat{H}_S^{(I)}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}^{(0)}t}e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}^{(0)}t}|\alpha,t\rangle_S \\
&= \hat{H}_I^{(I)}|\alpha,t\rangle_I
\end{aligned}
$$

相互作用绘景中力学量的运动方程

$$
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{O}_I = -\hat{H}^{(0)}\hat{O}_I + \hat{O}_I\hat{H}^{(0)} = \left[\hat{O}_I,\ \hat{H}^{(0)}\right]。
$$

在相互作用绘景中虽然态和力学量都与时间有关（*Schroedinger* 绘景中只有态与时间有关，*Heisenberg* 绘景中只有力学量与时间有关），但**态的演化只与 $\hat{H}^{(I)}$ 有关，力学量的演化只与 $\hat{H}^{(0)}$ 有关**。

2）微扰展开

设相互作用绘景中的态的时间演化

$$
|\alpha,t\rangle_I = \hat{U}(t,t_0)|\alpha,t_0\rangle_I \quad ,
$$

由相互作用绘景中的态的运动方程 $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha,t\rangle_I = \hat{H}_I^{(I)}|\alpha,t\rangle_I$ 有

$$
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t,t_0) = \hat{H}_I^{(I)}\hat{U}(t,t_0) \quad ,
$$

满足 $\hat{U}(t_0,t_0)=1$ 的形式解是

$$
\hat{U}(t,t_0) = 1 + \frac{-i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\hat{H}_I^{(I)}(t')\hat{U}(t',t_0) \quad 。
$$

用迭代方法，零级近似

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

一级近似

$$\hat{U}(t,t_0)=1+\frac{-i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}dt'\hat{H}_I^{(I)}(t'),$$

二级近似

$$\hat{U}(t,t_0)=1+\frac{-i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}dt'\hat{H}_I^{(I)}(t')+\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2\int_{t_0}^{t}dt'\hat{H}_I^{(I)}(t')\int_{t_0}^{t'}dt''\hat{H}_I^{(I)}(t''),$$

等等。由于

$$\begin{aligned}
&\int_{t_0}^{t}dt'\int_{t_0}^{t'}dt''\hat{H}_I^{(I)}(t')\hat{H}_I^{(I)}(t'')\\
&=\frac{1}{2!}\left(\int_{t_0}^{t}dt'\int_{t_0}^{t'}dt''\hat{H}_I^{(I)}(t')\hat{H}_I^{(I)}(t'')+\int_{t_0}^{t}dt''\int_{t_0}^{t''}dt'\hat{H}_I^{(I)}(t'')\hat{H}_I^{(I)}(t')\right)\\
&=\frac{1}{2!}\left(\int_{t_0}^{t}\int_{t_0}^{t}dt'dt''\hat{H}_I^{(I)}(t')\hat{H}_I^{(I)}(t'')\theta\left(t'-t''\right)+\int_{t_0}^{t}\int_{t_0}^{t}dt'dt''\hat{H}_I^{(I)}(t'')\hat{H}_I^{(I)}(t')\theta\left(t''-t'\right)\right)\\
&=\frac{1}{2!}\int_{t_0}^{t}\int_{t_0}^{t}dt'dt''\left(\hat{H}_I^{(I)}(t')\hat{H}_I^{(I)}(t'')\theta\left(t'-t''\right)+\hat{H}_I^{(I)}(t'')\hat{H}_I^{(I)}(t')\theta\left(t''-t'\right)\right)\\
&\equiv\frac{1}{2!}\int_{t_0}^{t}\int_{t_0}^{t}dt'dt'T\left(\hat{H}_I^{(I)}(t')\hat{H}_I^{(I)}(t'')\right),
\end{aligned}$$

时间演化算符的解可以写成

$$\hat{U}(t,t_0)=\sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n\frac{1}{n!}\int_{t_0}^{t}dt_1dt_2...dt_nT\left(\hat{H}_I^{(I)}(t_1)\hat{H}_I^{(I)}(t_2).....\hat{H}_I^{(I)}(t_n)\right)$$

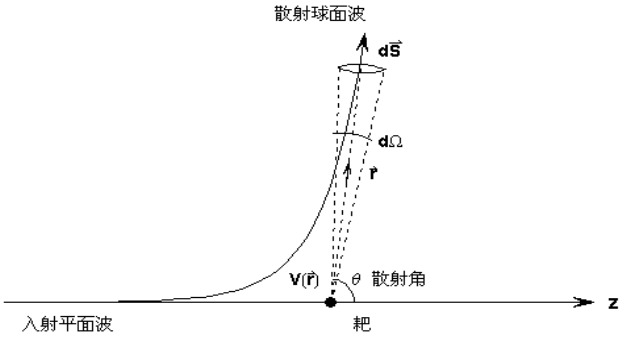
这就是在**相互作用绘景中态的演化算符的微扰展开，是量子力学和量子场论的微扰基础。**

第五章(*Sakurai* 书第 7 章)：散射理论

讨论连续谱的定态微扰论。连续谱对应的物理问题是散射。

1. 散射问题

1）微分散射截面



由无穷远处入射的自由粒子（平面波）在靠近靶时，与靶有相互作用。如果相互作用强，会改变粒子的性质，例如能量发生改变，甚至产生新粒子。称为非弹性散射。如果相互作用前后粒子的能量不改变，只改变粒子运动的方向，称为弹性散射。在非相对论量子力学中只讨论弹性散射。

问题：**求一个入射粒子（平面波）被散射到Ω方向（球面波）单位立体角内的几率**$\sigma(\theta,\varphi)$。$\sigma(\theta,\varphi)$与相互作用和靶的性质相关。通过测量$\sigma(\theta,\varphi)$来了解靶粒子的内部结构和发现新粒子。

在靶粒子的静止坐标系中入射平面波为$\psi_1(\vec{r}) = Ae^{ikz}$，入射几率流密度（单位时间内穿过单位面积的几率）为

$$J_z = \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi_1 \frac{\partial \psi_1^*}{\partial z} - \psi_1^* \frac{\partial \psi_1}{\partial z}\right) = \frac{\hbar k}{m}|A|^2,$$

在单位时间内散射到$d\Omega$方向的几率为$dN = J_z \sigma(\theta,\varphi) d\Omega$。分析$\sigma$的量纲：

$$[dN] = \frac{1}{T}, \quad [J_z] = \frac{1}{L^2 T}, \quad [d\Omega] = 1, \quad [\sigma] = L^2$$

$\sigma(\theta,\varphi)$为面积量纲，故称为**微分散射截面**。

2）计算$\sigma(\theta,\varphi)$的一般方法

当$r\to\infty$，$V(\vec{r})\to 0$，$\psi(\vec{r})$包含两部分：没受相互作用影响沿 Z 方向传播的入射平面波$\psi_1(\vec{r})$和沿$\vec{r}$ 方向向外传播的散射球面波$\psi_2(\vec{r})$，

$$\psi(\vec{r}) \underline{\underline{r\to\infty}} \psi_1(\vec{r})+\psi_2(\vec{r})=Ae^{ikz}+Af(\theta,\varphi)\frac{e^{ikr}}{r}\text{。}$$

注意: 1）球面波与θ,φ有关，可调节$f(\theta,\varphi)$使得ψ_2与ψ_1有相同常数A，$f(\theta,\varphi)$的具体形式由相互作用决定。2）弹性散射，能量不变，波矢k大小不变，但方向变化。

散射几率流密度

$$J_r=\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi_2\frac{\partial\psi_2^*}{\partial r}-\psi_2^*\frac{\partial\psi_2}{\partial r}\right)=\frac{\hbar k}{m}|A|^2\frac{|f(\theta,\varphi)|^2}{r^2}=J_z\frac{|f(\theta,\varphi)|^2}{r^2},$$

单位时间内散射到$d\Omega$内的几率为

$$dN=J_r dS=J_r r^2 d\Omega=J_z|f(\theta,\varphi)|^2 d\Omega,$$

与微分散射截面的定义式

$$dN=J_z\sigma(\theta,\varphi)d\Omega$$

比较，得

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

$f(\theta,\varphi)$称为**散射振幅**。

结论：计算$\sigma(\theta,\varphi)$的一般方法：

1）求解具体的势$V(\vec{r})$对应的 *Schroedinger* 方程得到$\psi(\vec{r})$；

2）将其渐进解$(r\to\infty)$与标准渐进解$\psi(r\to\infty)=Ae^{ikz}+Af(\theta,\varphi)\frac{e^{ikr}}{r}$比较，得到$f(\theta,\varphi)$，$\sigma(\theta,\varphi)=|f(\theta,\varphi)|^2$。

2. 用 *Green* 函数方法求解 Schroedinger 方程

1）积分方程

定态 *Schroedinger* 方程

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2+V(\vec{r})\right)\psi(\vec{r})=E\psi(\vec{r})\text{。}$$

对于弹性散射，能量守恒，E 是入射能量，已知，只求$\psi(\vec{r})$。（束缚态问题中是利用束缚条件确定 E 的取值。）

令 $$k^2=\frac{2mE}{\hbar^2},\quad U(\vec{r})=\frac{2m}{\hbar^2}V(\vec{r}),$$

有 $$\left(\vec{\nabla}^2+k^2\right)\psi(\vec{r})=U(\vec{r})\psi(\vec{r}),$$

是一个非齐次方程，具有连续源（势）$U(\vec{r})$。

Green 函数方法的思想是先求解点源$\delta(\vec{r}-\vec{r}\,')$对应的定态方程

$$\left(\vec{\nabla}_r^2+k^2\right)G(\vec{r},\vec{r}')=\delta(\vec{r}-\vec{r}'),$$

得到 Green 函数$G(\vec{r},\vec{r}')$，再求解定态方程

$$\begin{aligned}\left(\vec{\nabla}^2+k^2\right)\psi(\vec{r})&=U(\vec{r})\psi(\vec{r})\\ &=\int d^3\vec{r}'U(\vec{r}')\psi(\vec{r}')\delta(\vec{r}-\vec{r}\,')\\ &=\int d^3\vec{r}'U(\vec{r}')\psi(\vec{r}')\left(\vec{\nabla}_r^2+k^2\right)G(\vec{r},\vec{r}')\\ &=\left(\vec{\nabla}^2+k^2\right)\int d^3\vec{r}'U(\vec{r}')\psi(\vec{r}')G(\vec{r},\vec{r}')\end{aligned}$$

所以非齐次方程的一个解是

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

考虑到齐次方程 $$\left(\vec{\nabla}^2+k^2\right)\psi(\vec{r})=0$$

的解是 $$\psi(\vec{r})=Ae^{i\vec{k}\cdot\vec{r}},$$

故非齐次方程的通解为 $$\psi(\vec{r})=Ae^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}+\int d^3\vec{r}'U(\vec{r}')\psi(\vec{r}')G(\vec{r},\vec{r}'),$$

满足要求 $$\lim_{V\to 0}\psi(\vec r)=Ae^{i\vec k\cdot\vec r}$$ 。

这是一个**关于$\psi(\vec r)$的积分方程，与定态方程的微分形式完全等价**。

积分方程有其优点：1）边界条件已包含在方程中；2）可用迭代法求解。

2）*Green* 函数

将 *Fourier* 变换

$$G(\vec r,\vec r')=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d^3\vec k'}{(2\pi)^3}g(\vec k',\vec r')e^{i\vec k'\cdot\vec r}$$

$$\delta(\vec r-\vec r')=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d^3\vec k'}{(2\pi)^3}e^{i\vec k'\cdot(\vec r-\vec r')}$$

代入$G(\vec r,\vec r')$满足的方程 $$\left(\vec\nabla_r^2+k^2\right)G(\vec r,\vec r')=\delta(\vec r-\vec r'),$$

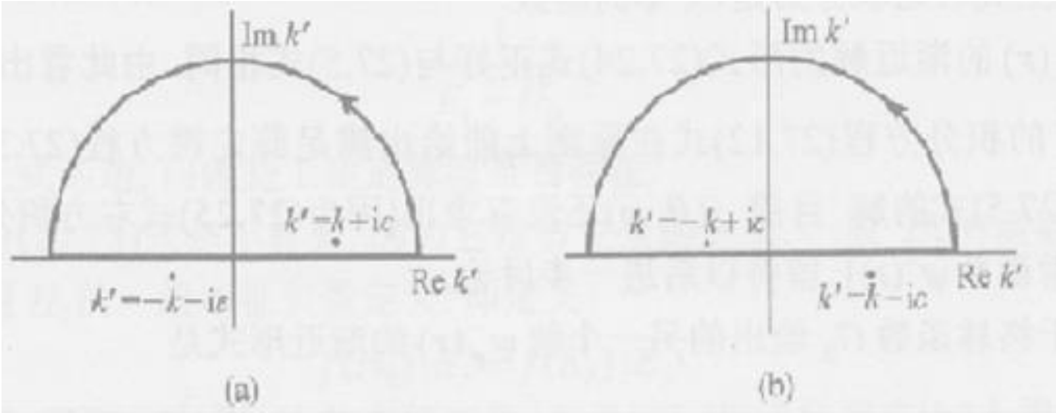
得到 $$g(\vec k',\vec r')=\frac{e^{-i\vec k'\cdot\vec r'}}{k^2-k'^2}$$

故 $$G(\vec r,\vec r')=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d^3\vec k'}{(2\pi)^3}\frac{e^{i\vec k'\cdot(\vec r-\vec r')}}{k^2-k'^2}=G(\vec r-\vec r')$$

只与$\vec r-\vec r'$有关。取$\vec r-\vec r'$为极轴，对角度积分后有

$$\begin{aligned}G(\vec r-\vec r')&=\frac{1}{4\pi^2}\frac{1}{|\vec r-\vec r'|}\int_{-\infty}^{\infty}dk'\frac{k'}{k^2-k'^2}\sin\left(k'|\vec r-\vec r'|\right)\\&=\frac{1}{4\pi^2 i}\frac{1}{|\vec r-\vec r'|}\int_{-\infty}^{\infty}dk'\frac{k'}{k^2-k'^2}e^{ik'|\vec r-\vec r'|}\\&=\frac{-1}{4\pi^2 i}\frac{1}{2|\vec r-\vec r'|}\int_{-\infty}^{\infty}dk'\left(\frac{e^{ik'|\vec r-\vec r'|}}{k'-k}+\frac{e^{ik'|\vec r-\vec r'|}}{k'+k}\right)\end{aligned}$$

第二个等式考虑到了$\cos k'|\vec r-\vec r'|$是k'的偶函数。上式积分有两个奇点$k'=\pm k$。以下用复变函数中的回路积分来处理。



先考虑只有一个奇点$k'=k$。在k'的复平面上，构造图左的围路。在半园上，$e^{ik'|\vec{r}-\vec{r}'|}=e^{i\mathrm{Re}\left(k'|\vec{r}-\vec{r}'|\right)}e^{-\mathrm{Im}\left(k'|\vec{r}-\vec{r}'|\right)}$，因为在上半平面$\mathrm{Im}k'>0$，故当$|\vec{r}-\vec{r}'|\to\infty$时，即考虑散射问题的解时，$e^{ik'|\vec{r}-\vec{r}'|}\to 0$，利用留数定理，有

$$G^{+}\left(\vec{r}-\vec{r}'\right)=\frac{-1}{4\pi^{2}i}\frac{1}{2|\vec{r}-\vec{r}'|}\int_{-\infty}^{\infty}dk'\frac{e^{ik'|\vec{r}-\vec{r}'|}}{k'-(k+i\varepsilon)}=-\frac{1}{4\pi}\frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|},$$

称为推迟 *Green* 函数。再考虑另一个奇点$k'=-k$。取图右的回路，

$$G^{-}\left(\vec{r}-\vec{r}'\right)=\frac{-1}{4\pi^{2}i}\frac{1}{2|\vec{r}-\vec{r}'|}\int_{-\infty}^{\infty}dk'\frac{e^{ik'|\vec{r}-\vec{r}'|}}{k'+(k-i\varepsilon)}=-\frac{1}{4\pi}\frac{e^{-ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|},$$

称为超前 Green 函数。如果把两个奇点都考虑，得到的 *Green* 函数称为因果 *Green* 函数。都是方程$\left(\vec{\nabla}_{r}^{2}+k^{2}\right)G\left(\vec{r},\vec{r}'\right)=\delta\left(\vec{r}-\vec{r}'\right)$的解，具体取哪一个由物理问题来决定。例如取

$$G^{\pm}\left(\vec{r}-\vec{r}'\right)=-\frac{1}{4\pi}\frac{e^{\pm ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|},$$

$\psi\left(\vec{r}\right)$的积分方程为

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