《高等量子力学》第 18 讲

6.分波法　　求中心势场$V(r)$中的散射问题。

1) 思想

对于入射的平面波Ae^{ikz}，动量有确定值$p_z=\hbar k$，$p_x=p_y=0$，角动量分量L_z有确定值$L_z=xp_y-yp_x=0$，能量有确定值$E=\hbar^2k^2/2m$。但进入势场后，$\left[\hat{\vec{p}},\hat{H}\right]\neq 0$，$\vec{p}$不是守恒量，故平面波不是势散射问题的守恒力学量的本征态，不便于直接描述散射前后态的关系。

分波法：对于中心场，守恒力学量组是$\{\hat{H},\hat{L}^2,\hat{L}_z\}$。考虑$\hat{\vec{L}}^2$的本征态$Y_{l0}(\theta)\sim P_l(\cos\theta)$（分波）的散射，$m=0$意味着在散射过程中$L_z=0$是守恒的，如果取分波的波矢为$k$，则能量也是守恒的，即分波是守恒力学量组$\{\hat{H},\hat{L}^2,\hat{L}_z\}$的本征态。因此**在中心场中可以将平面波散射变成分波散射之和。**

2）入射平面波的分波展开

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

l阶球 Bessel 函数　　$$j_l(kr)\xrightarrow{r\to\infty}\frac{1}{kr}\sin\left(kr-\frac{l}{2}\pi\right)$$

$$e^{ikz}\to\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l\frac{1}{kr}\sin\left(kr-\frac{l}{2}\pi\right)P_l(\cos\theta),$$

得到标准渐进解的分波展开形式

$$\begin{aligned}\lim_{r\to\infty}\psi(\vec{r})&=Ae^{ikz}+Af(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}\\&=A\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l\frac{1}{kr}\sin\left(kr-\frac{l}{2}\pi\right)P_l(\cos\theta)+Af(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}.\end{aligned}$$

3）中心场中散射态的分波展开

中心场中定态 *Schroedinger* 方程满足能量守恒（$E=\hbar^2k^2/2m$）和 L_z 守恒（$L_z=0$）的特解是 $R_l(r)P_l(\cos\theta)$，$R_l(r)$ 由径向方程决定

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR_l}{dr}\right)+\left(k^2-\frac{2m}{\hbar^2}V(r)-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)R_l=0\ ,$$

一般解是

$$\psi(r,\theta)=\sum_{l=0}^{\infty}B_lR_l(r)P_l(\cos\theta)\ 。$$

当 $r\to\infty$ 时，$V(r)\to0$，径向方程为

$$\frac{d^2(rR_l)}{dr^2}+k^2(rR_l)=0\ ,$$

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

两个待定常数 C_l 和 δ_l，与具体中心场 $V(r)$ 有关，$-l\pi/2$ 是为了下面计算方便引入的。故渐进解为

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

为了下面计算方便引入了归一化常数 A。与标准渐进解相比较，有

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

利用 $\sin x=\left(e^{ix}-e^{-ix}\right)/2i$，有

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

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

对任意的 r 均成立的条件是 e^{ikr} 和 e^{-ikr} 前面的系数分别为零，即

$$A_l=(2l+1)i^{l}e^{i\delta_l}$$

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

散射振幅只与 δ_l 有关，而 δ_l 由径向方程的渐进解决定。定义分波散射振幅

$$f_l(\theta)=\frac{1}{k}(2l+1)P_l(\cos\theta)e^{i\delta_l}\sin\delta_l$$

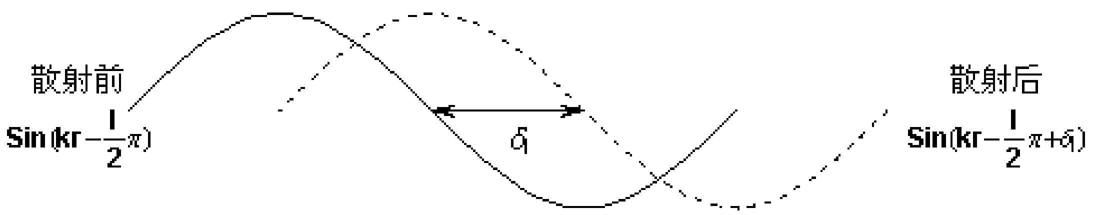
总散射振幅是分波散射振幅之和 $\quad f(\theta)=\sum_{l=0}^{\infty}f_l(\theta)$,

微分散射截面 $\quad \sigma(\theta)=\left|\sum_{l=0}^{\infty}f_l(\theta)\right|^2$ 。

1）将 $V(r)$ 代入径向方程，得到 $R_l(r)$,

2）将 $\lim_{r\to\infty}R_l(r)$ 与 $\frac{C_l}{kr}\sin\left(kr-\frac{l}{2}\pi+\delta_l\right)$ 相比得到 δ_l，$f_l(\theta)$，$f(\theta)$，$\sigma(\theta)$。

δ_l 的物理意义：散射前分波 $\frac{1}{kr}\sin\left(kr-\frac{l}{2}\pi\right)$，散射后分波 $\frac{1}{kr}\sin\left(kr-\frac{l}{2}\pi+\delta_l\right)$



可见，散射前后是同一分波，只是有一总体的**相移** δ_l 。

4）收敛性

求和收敛性的半经典估计：角动量 $L \approx pr$。设 $V(r)$ 的有效半经为 a，$L < pa$ 时才有散射，即只有 $\sqrt{l(l+1)} < ka$ 时，才有贡献。当入射能量 $E(k)$ 较小时，可只取低次分波的贡献，例如 S 分波。

结论：**低能中心场散射适合用分波法**。

例：低能粒子被球对称势阱的散射。

$$V(r)=\begin{cases} -V_0 & r \le a \\ 0 & r > a \end{cases}$$

径向方程

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR_l}{dr}\right)+\left(k^2-\frac{2m}{\hbar^2}V(r)-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)R_l=0$$

只考虑 S 分波 $(l=0)$，则

$$\begin{cases} \dfrac{d^2(rR_0)}{dr^2}+k'^2(rR_0)=0 & r \le a \\ \dfrac{d^2(rR_0)}{dr^2}+k^2(rR_0)=0 & r > a \end{cases} \qquad k'^2=k^2+\frac{2m}{\hbar^2}V_0$$

解为

$$R_0(r)=\begin{cases} \dfrac{C_0'}{k'r}\sin(k'r+B_0') & r \le a \\ \dfrac{C_0}{kr}\sin(kr+B_0) & r > a \end{cases}$$

要求 $r=0$ 时，$R_0(r)$ 有限，故 $B_0'=0$，又要求 $r=a$ 时 $R_0(r),\dfrac{dR_0(r)}{dr}$ 连续，有

$$B_0=\arctan\left(\frac{k}{k'}\tan k'a\right)-ka, \qquad C_0'=C_0\text{。}$$

将

$$R_0(r)=\frac{C_0}{kr}\sin(kr+B_0) \qquad r>a$$

与中心势的标准渐进式

$$\lim_{r\to\infty}R_0(r)=\frac{C_0}{kr}\sin(kr+\delta_0)$$

比较，有 S 波相位移

$$\delta_0=B_0,$$

由于 $$P_0(\cos\theta)=1,$$

$$f_0(\theta)=\frac{1}{k}e^{i\delta_0}\sin\delta_0,$$

$$\sigma(\theta)=|f_0(\theta)|^2=\frac{\sin^2\delta_0}{k^2}\text{。}$$

低能时，$k\to 0$，

$$\arctan\left(\frac{k}{k'}\tan k'a\right)\to\frac{k}{k'}\tan k'a, \qquad k'^2\to\frac{2\mu}{\hbar^2}V_0$$

$$\delta_0=\frac{k}{k'}\tan k'a-ka=ka\left(\frac{\tan k'a}{k'a}-1\right),$$

$$\sigma(\theta)=\frac{\sin^2\delta_0}{k^2}=\frac{\delta_0{}^2}{k^2}=a^2\left(\frac{\tan k'a}{k'a}-1\right)^2\text{。}$$

由于只考虑了 S 分波，σ 与 θ 无关。

总散射截面

$$\sigma_{tot}=\int\sigma(\theta)d\Omega=4\pi a^2\left(\frac{\tan k'a}{k'a}-1\right)^2\text{。}$$