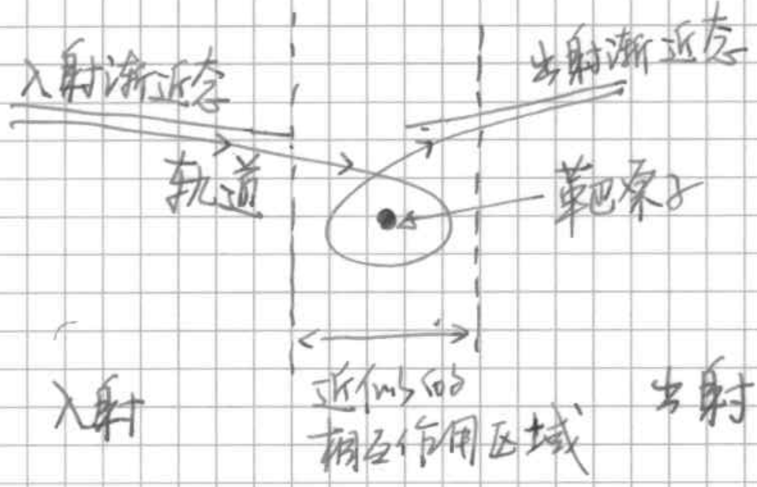
经典散射

散射与时间相关。考虑如下图所示的电子和靶原子的散射



此散射过程可分解为三个过程:

1) 电子以直线入射，逐渐进入相互作用区域

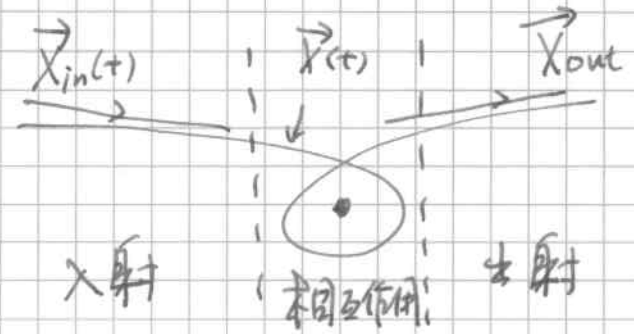
2) 在相互作用区域中电子和靶原子之间发生非常复杂的散射
但相互作用区域非常小（在原子尺度上），我们无法直接观测
相互作用区域内的电子轨迹。

注：散射实验的目的正是通过初末态的比较来
确定未知的相互作用区域内的物理机制

3) 电子脱离相互作用区域，沿着某条近直线轨迹出射

因为我们关心的物理过程的相互作用时间很短（$\tau \sim 10^{-10}s$）.

$\Longrightarrow$ 我们可以将入射、出射和相互作用区域分离开，
只讨论渐近轨道之间的相互关系



用 $\vec{X}(t)$ 来表示电子轨迹. 在经典物理中

$$\vec{X}(t) \xrightarrow[t\to -\infty]{} \vec{X}_{in}(t) \equiv \vec{a}_{in} + \vec{v}_{in}\cdot t$$

$$\vec{X}(t) \xrightarrow[t\to +\infty]{} \vec{X}_{out}(t) \equiv \vec{a}_{out} + \vec{v}_{out}\cdot t$$

其中 $\vec{X}_{in}(t)$ 和 $\vec{X}_{out}(t)$ 满足自由电子的运动方程,
是真实轨迹的入射和出射的渐近态

从观测角度来看, 如果知道散射轨迹的两个渐近态,
那么我们就可以确定散射轨迹。

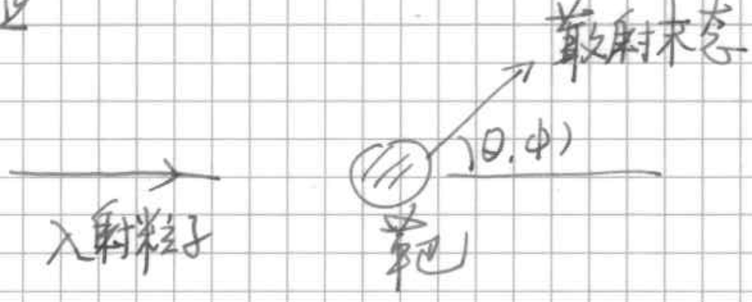
$$\vec{X}_{in}(t) \longrightarrow \underset{\text{散射轨迹}}{\vec{X}(t)} \longrightarrow \vec{X}_{out}(t)$$

(要求势能满足一定条件
从而不形成束缚态)

散射初步:

*) 束缚态 — 不同能级之间的跃迁来得到不同能级谱间关系

*) 散射实验



3维空间中散射

$$j^{(3)}_{inc} \equiv \frac{dN_{inc}}{dt\,dA}$$: 单位时间单位面积内的入射粒子数

$$j^{(3)}(\vec{r},t) = -\frac{i\hbar}{2m}\left[\psi^*\nabla\psi - (\nabla\psi^*)\,\psi(\vec{r},t)\right]$$

+) 粒子散射到 (θ,ϕ) 的小立体角内数目为

$$j^{(3)}_{scatter}(\theta,\phi) = \frac{dN_{scatter}}{dt\,d\Omega}$$

+) 散射事件几率

$$\frac{j^{(3)}_{scatter}}{j^{(3)}_{inc}} = \frac{\frac{dN_{scatter}}{dt\,d\Omega}}{\frac{dN_{inc}}{dt\,dA}} \equiv \frac{d\sigma(\theta,\phi)}{d\Omega}$$

其中σ为散射截面 具有面积量纲

2维空间中散射

$$\frac{j^{(2)}_{scatter}}{j^{(2)}_{inc}} = \frac{\frac{dN_{scatter}}{dt\,d\theta}}{\underbrace{\frac{dN_{inc}}{dt\,dx}}_{\text{单位长度}}} \equiv \underbrace{\frac{d\rho(\theta)}{d\theta}}_{\text{有效“宽度”}}$$

1维空间中散射

只有两个方向，正方向和反方向

$\Rightarrow$ 入射粒子只能反射或透射

$$j^{(1)}_{inc} = \frac{dN_{inc}}{dt}$$ ：单位时间入射粒子数

$$j^{(1)}_{ref} = \frac{dN_{ref}}{dt}$$ ：——……反射——

$$j^{(1)}_{trans} = \frac{dN_{trans}}{dt}$$ ：……透射——

故而 $\underbrace{\frac{j^{(1)}_{ref}}{j_{inc}}}_{\text{此比值无量纲}}$ = 类似于散射截面或长度
(3d) (2d)

*) 在量子力学中，我们使用波包来描述一定域粒子。但散射问题之却可用平面波近似来描述。

$\Rightarrow$ 平面波如何归一化？散射几率是否依赖于归一化？

解：设平面波为

$$\psi(x,t) = A e^{i(\pm px - \frac{p^2 t}{2m})/\hbar} = A e^{i(\pm kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t)}$$

其几率流通量为

$$j(x,t) = \pm \frac{\hbar k}{m} |A|^2$$

采用箱归一化方案，$\Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{L}} \Rightarrow A^2 = \frac{1}{L}$

$[A^2] = (长度)^{-1}$

$$\frac{\hbar k}{m} \sim v = \frac{L}{T}$$

$$\Rightarrow [j(x,t)] \sim \frac{L}{T} \cdot \frac{1}{L} = \frac{1}{T} \quad (与归一化无关)$$

(单位时间内粒子数)

我们选取

$$j(x,t) \equiv j_{ref}, \quad j_{inc} \quad 或 \quad j_t$$

反射几率通量　入射几率通量　透射几率通量

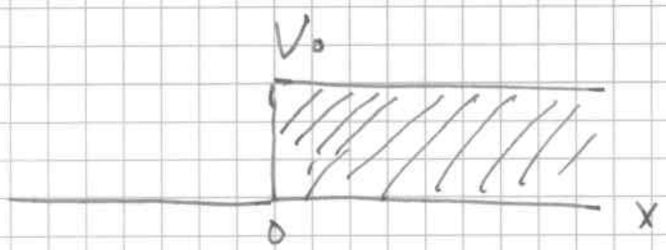
定义：反射系数 $\frac{j_{ref}}{j_{inc}}$ 和透射系数 $\frac{j_t}{j_{inc}}$

与归一化无关

而且实验上我们只能测量这个比值

一维定态问题 —— 散射解

(*) 最简单的势函数 —— 阶跃函数



定态薛定谔方程为

$$\begin{cases} -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2}{dx^2}\psi(x) + V_0\psi(x) = E\psi(x) \quad , & x>0 \\ -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2}{dx^2}\psi(x) = E\psi(x) \quad , & x<0 \end{cases}$$

下面我们求解 T.I.S.E. 的定态波函数

(1) $\underline{\underline{E < V_0}}$

$$\begin{cases} \dfrac{d^2}{dx^2}\psi(x) = K^2\psi(x) \quad , & x>0 \\ \dfrac{d^2}{dx^2}\psi(x) = -k^2\psi(x) \quad , & x<0 \end{cases}$$

$$K^2 = \frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2} \quad , \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

通解为

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad , & x<0 \\ Ce^{Kx} + De^{-Kx} \quad , & x>0 \end{cases}$$

在无穷远处波函数的有界条件是要求 $C=0$

在 $x=0$ 处边界条件给出

$$\begin{aligned} A+B &= D \\ ik(A-B) &= -KD \end{aligned} \Longrightarrow \begin{cases} B = A\dfrac{k-iK}{k+iK} \\ D = A\dfrac{2k}{k+iK} \end{cases}$$

故 $E<V_0$ 时的定态本征函数为

$$\psi(x) = \begin{cases} A e^{ikx} + A\dfrac{k-iK}{k+iK} e^{-ikx}, & x<0 \\ A\dfrac{2k}{k+iK} e^{-Kx}, & x>0 \end{cases}$$

另一种表述方式为

$$\begin{cases} A = \dfrac{D}{2}\left(1+i\dfrac{K}{k}\right) \\ B = \dfrac{D}{2}\left(1-i\dfrac{K}{k}\right) \end{cases}$$

$$\psi(x) = \begin{cases} \dfrac{D}{2}\left(1+i\dfrac{K}{k}\right) e^{ikx} + \dfrac{D}{2}\left(1-i\dfrac{K}{k}\right) e^{-ikx}, & x<0 \\ D e^{-Kx}, & x>0 \end{cases}$$

定义 $\tan\alpha = \dfrac{K}{k}$，则有

$$\psi(x) = \begin{cases} D\left(\cos kx - \dfrac{K}{k}\sin kx\right) = D\sqrt{1+\left(\dfrac{K}{k}\right)^2}\cos(kx+\alpha) & (x<0) \\ D e^{-Kx} \end{cases}$$

(2) $E > V_0$

$$\begin{cases} \left(\frac{d^2}{dx^2} + k^2\right)\psi(x) = 0, & x<0 \qquad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \\ \left(\frac{d^2}{dx^2} + k^2\right)\psi(x) = 0, & x>0 \qquad k^2 = \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2} \end{cases}$$

其一般解为

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, & (x<0) \\ Ce^{ikx} + De^{ikx}, & (x>0) \end{cases}$$

有四个未知系数，但只有 $x=0$ 处两个边界条件

$\longrightarrow$ 无法求解

但幸运的是，当E给定时 设初态波函数为从左向右传播

那么从物理上要求，$x>0$ 区域内没有自右向左传播的波函数

即 e^{-ikx} 分量为0

（在 $x>0$ 区间，没有其他势作用（障碍物），所以出射波不可能发生动量反转 — 动量守恒）

小结，$\psi_{inc} \sim e^{ikx}$ 时，

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + B^{-ikx}, & x<0 \\ Ce^{ikx}, & x>0 \end{cases}$$

在 $x=0$ 边界处

$$\begin{aligned} A+B &= C \\ k(A-B) &= KC \end{aligned} \Rightarrow B = A\frac{k-K}{k+K},\quad C = A\frac{2k}{k+K}$$

故，

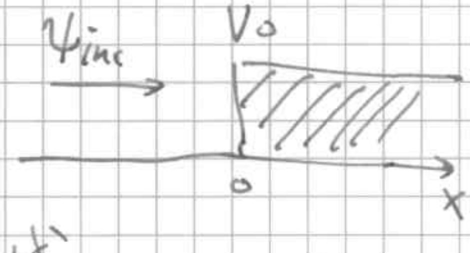
$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + A\dfrac{k-K}{k+K}e^{-ikx}, & x<0 \\ A\dfrac{2k}{k+K}e^{iKx}, & x>0 \end{cases}$$

*) 定态法 — 散射态

我们在一维问题中做近似，假设散射过程在非常短的时间内发生，问散射末态和初态的差异？

$\Rightarrow$ 体系初态（自由粒子）按照 $\hat{H} = \hat{T} + V$ 的本征函数展开

例如：$\psi_{inc} = e^{ik_0 x}$



在 $t=0$ 时刻 ψ_{inc} 进入相互作用区域.

在 1d 情况下，量子(电子)仅能发生透射(T)或反射(R)

问电子反射和透射的几率为何？

我们可以将这个过程视作为测量过程.

$\Longrightarrow$ 对自由电子初态, 在 $t=0$ 时刻测 $\hat{H}=\hat{T}+V$.

由测量假设可知, $\hat{H}$ 作用后将得 $\hat{H}$ 的本征函数 $\psi_E(x)$

$$\psi_{inc}(x) = \int C(E)\, \psi_E(x)\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\, dE$$

① 不妨设 $E_0 < V_0$, 则有 $\quad E_0 = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m}$

$$C(E) = \int \psi_E^* \psi_{inc}\, dx = \int \psi_E^* e^{ik_0 x} dx$$

$$= A\int_{-\infty}^{0} e^{-ikx} e^{ik_0 x} dx + A\frac{k-iK}{k+iK}\int_{-\infty}^{0} e^{+ikx} e^{ik_0 x} d$$

$$+ A\frac{2k}{k+iK}\int_0^{\infty} e^{-Kx} e^{ik_0 x} dx$$

$$= A\,\delta(k-k_0)$$

所以 $\hat{H}$ 作用之后(或测量之后), 初态波函数变为

$$\psi_{k_0}(x) = \begin{cases} A e^{ik_0 x} + A\frac{k_0 - iK_0}{k_0 + iK_0} e^{-ik_0 x}, & (x<0) \\ A\frac{2k_0}{k_0+iK_0} e^{-K_0 x}, & (x>0) \end{cases}$$

简记为

$$\psi_k(x) = \begin{cases} A e^{ikx} + A\frac{k-iK}{k+iK} e^{-ikx}, & (x<0) \\ A\frac{2k}{k+iK} e^{-Kx} & (x>0) \end{cases}$$

按照物理图像，

$$\psi_{k_0}(x) = \begin{cases} \underbrace{A e^{ik_0 x}}_{\text{入射波 } \psi_i} + \underbrace{A \dfrac{k_0 - ik_0}{k_0 + ik_0} e^{-ik_0 x}}_{\text{反射波 } \psi_r}, & (x<0) \\ \underbrace{A \dfrac{2k_0}{k_0 + ik_0} e^{-k_0 x}}_{\text{透射波 } \psi_t} & (x>0) \end{cases}$$

在采用平面波近似情况下，我们无法问具体的粒子数，只能讨论相对几率变化。

$$j_i = Re\left(\psi_i^* \frac{\hat{P}_x}{m} \psi_i^*\right) = \frac{\hbar k_0}{m} |A|^2$$

$$j_r = Re\left(\psi_r^* \frac{\hat{P}_x}{m} \psi_r\right) = -\frac{\hbar k_0}{m} |A|^2 \left|\frac{k_0 - ik_0}{k_0 + ik_0}\right|^2$$

$$= -\frac{\hbar k_0}{m} |A|^2$$

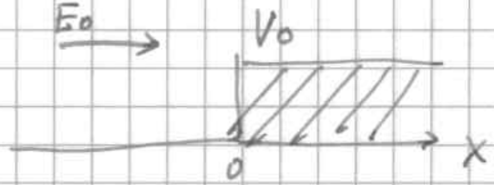
$$j_t = Re\left(\psi_t^* \frac{\hat{P}_x}{m} \psi_t\right) = 0$$

（没有几率通量流入到 $x>0$ 区域）

定义 反射份额 $R = \dfrac{|j_R|}{|j_i|} = 1$

透射份额 $T = \dfrac{|j_t|}{|j_i|} = 0$

② 再考虑 $E_0 > V_0$



重复刚才计算~~可得~~.

$$\psi_{inc} = \int C(E)\, \psi_E(x)\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\, dE$$

可得:

$$\psi_{k_0}(x) = \begin{cases} A e^{ik_0x} + A \dfrac{k_0-K_0}{k_0+K_0} e^{-ik_0x}, & x<0 \\ A \dfrac{2k_0}{k_0+K_0} e^{iK_0x}, & x>0 \end{cases}$$

$$k_0^2 = \frac{2mE_0}{\hbar^2} \qquad K_0^2 = \frac{2m(E_0-V_0)}{\hbar^2}$$

并且

$$j_i = \frac{\hbar k_0}{m}|A|^2$$

$$j_r = -\frac{\hbar k_0}{m}|A|^2 \left|\frac{k_0-K_0}{k_0+K_0}\right|^2$$

$$j_t = \frac{\hbar K_0}{m}|A|^2 \left|\frac{2k_0}{k_0+K_0}\right|^2$$

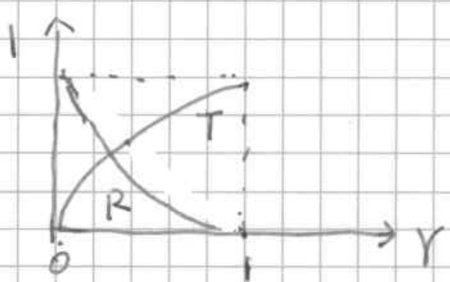
反射份额:

$$R = \frac{|j_R|}{|j_i|} = \left(\frac{k_0-K_0}{k_0+K_0}\right)^2 = \frac{(1-r)^2}{(1+r)^2}$$

$$r = \frac{K_0}{k_0} = \sqrt{1-\frac{V_0}{E}} \leq 1$$

透射份额

$$T = \left(\frac{2k_0}{k_0+K_0}\right)^2 = \frac{4r^2}{(1+r)^2}$$



⊛ $R+T=1$

⊛ $R\neq 0$ 与经典物理不同.